

สายฝน อาชนะชัย คอห์นฮอว์สต์ : การศึกษาโครงสร้างทางซูปราโมเลคิวลาร์ในระบบแบบจำลองสารสีมาลาเรีย (SUPRAMOLECULAR STRUCTURAL STUDIES ON MALARIA PIGMENT MODEL SYSTEMS) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.เค็นเนท เจ. แสเลออร์, 100 หน้า.

มาลาเรียเป็นโรคติดต่อที่เกิดขึ้น โดยมีพาหะนำโรคชนิดโปรโตซัว *Plasmodium falciparum*, ซึ่งเข้าไปอาศัยอยู่ในเม็ดเลือดแดง โปรโตซัวย่อยสลายฮีโมโกลบินของเม็ดเลือดแดงเป็นอาหารและลดการเป็นพิษของฮีโมโกลบินโดยการตกตะกอนเรียกว่าสารสีมาลาเรีย นอกจากนี้ได้มีการศึกษาระบบแบบจำลองของสารสีมาลาเรียใหม่ซึ่งเรียกว่า คลอโรโอรอน(สาม) ออกตะเอทิลพอไพร์ริน Fe(OEP)Cl 5-โคออร์ดิเนต สปินสูง ด้วยเครื่องมือยิงผลึกเดี่ยว โดยผลที่ได้จากศึกษาทางด้านผลึกเดี่ยว ที่อุณหภูมิ 100 องศาเคลวิน ผลึกที่ได้จำแนกอยู่ในกลุ่ม triclinic *P*-1 และประกอบด้วย 2 อะซิมเมตริก ยูนิต ความหนาแน่นเท่ากับ 1.287 กรัมต่อลูกบาศก์เซนติเมตรเมื่อทำการวิเคราะห์โครงสร้างด้วยเครื่องมือยิงผลึกเดี่ยว พบว่า โครงสร้างของ triclinic Fe(OEP)Cl ประกอบด้วย ความยาวพันธะของ Fe—N มีค่า 2.071(2) อังสตรอม และความยาวพันธะของ Fe—Cl มีค่าเป็น 2.220(8) อังสตรอม ในขณะที่อะตอมของเหล็กอยู่เหนือระนาบของวงพอไพร์รินเป็น 0.51(7) อังสตรอม โครงสร้างของวงพอไพร์รินที่ไม่มีหมู่แทนที่มีลักษณะเป็นคลื่นและจากการคำนวณหาค่าเฉลี่ยของอะตอมที่อยู่ในและนอกระนาบของวงพอไพร์รินทั้ง 24 อะตอมมีค่าเท่ากับ 0 อังสตรอม แสดงให้เห็นว่าวงพอไพร์รินอยู่ในแนวแบนราบ นอกจากนี้ยังได้มีการรายงานภาวะที่มีหลายรูปแบบชนิดใหม่ของ Fe(OEP)Cl พบว่าโครงสร้างในการศึกษาครั้งนี้หมู่เอทิล 4 หมู่ ชี้ขึ้นด้านบน และหมู่เอทิลอีก 4 หมู่ ชี้ลงด้านล่าง ซึ่งการเรียงตัวของหมู่เอทิลเป็นผลมาจากการเกิดสเตอริก และนำไปสู่การเชื่อมต่อกันของโมเลกุลแบบไม่แข็งแรงซึ่งพบในโครงสร้างนี้ นอกจากนี้ยังมีหลายปัจจัยที่ยับยั้งการเชื่อมต่อกันระยะสั้นของผลึก ซึ่งจากการศึกษาโครงสร้างซูปราโมเลคิวลาร์ในระบบแบบจำลองสารสีมาลาเรียนี้ ความยาวพันธะของ C—H...Cl ยับยั้งการเกิดอันตรกิริยาแบบสั้นระหว่างวงพอไพร์รินสองวง ดังนั้นการเกิดโครงสร้างทางซูปราโมเลคิวลาร์ในสารสีมาลาเรียอาจจะเกิดขึ้นโดยอันตรกิริยาของ van der Waals และเนื่องจากความหนาแน่นน้อยจึงมีความเสถียรต่ำ

สาขาวิชาชีวเคมี
ปีการศึกษา 2555

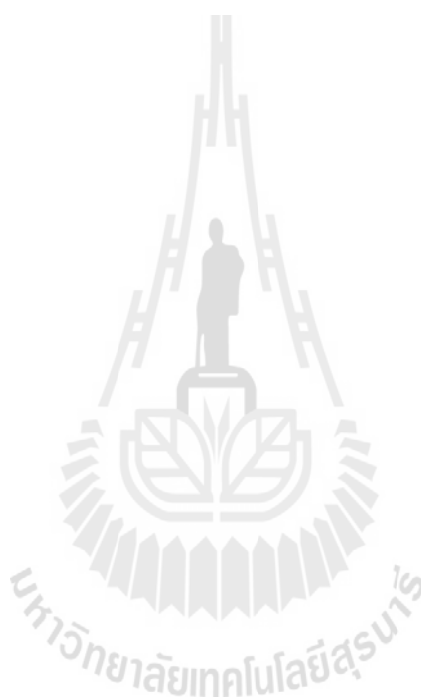
ลายมือชื่อนักศึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

SAIFON ARCHANACHAI KOHNHORST : SUPRAMOLECULAR
STRUCTURAL STUDY ON MALARIA PIGMENT MODEL SYSTEMS
THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. KENNETH J. HALLER, Ph.D.
100 PP.

MALARIA PIGMENT/ MODEL SYSTEMS/ HEME/IRON
PORPHYRINS/SUPRAMOLECULAR INTERACTIONS/ PORPHYRINS

Malaria is an infectious disease caused by the parasite, *Plasmodium falciparum*, invading red blood cells. Toxic free heme released by the parasites destruction of hemoglobin is detoxified by conversion to malaria pigment. A new polymorph of malaria pigment model systems is reported in this study, chloroiron(III) octaethylporphyrin, Fe(OEP)Cl five-coordinated high-spin was determined by single-crystal X-ray diffraction at 100 K. The crystallographic structure result demonstrated that the crystal belongs to the triclinic, *P*-1 space group and contains two asymmetric per unit cell. The density of the triclinic, Fe(OEP)Cl is 1.287 Ggm⁻³. The Fe–N bond distance is 2.071(2) Å and Fe–Cl distance is 2.220(8) Å, and the Fe atom is displacement out of the 24-atom mean plane of the porphyrin ring by 0.51(7) Å. The porphyrin core exhibited the wave shape, while the porphyrin core is nearly planar with the average displacement of the 24 atoms of the porphyrin core of nearly 0 Å. A new polymorphism of Fe(OEP)Cl in this study is reported with the four ethyl groups “up”/ “down” which resulted by steric effects of the methyl groups on the periphery, which favors the staggered conformation. The crystal packing is in a slipped parallel arrangement, which indicate that the weak supramolecular interactions are stabilizing

in this structure. Several factors inhibit the close contact in the crystal packing. In this study, the C–H...Cl interaction is preventing the close contact between two porphyrin rings and the supramolecular interactions in malaria pigment model systems may occurred by van der Waals interactions. Thus, these results suggested that malaria pigment may be form by van der Waals interactions.



School of Biochemistry

Academic Year 2012

Student's Signature _____

Advisor's Signature _____