

บทคัดย่อ

ได้สังเคราะห์และวิเคราะห์ พอลิแลคไทด์-พอลิเอธิลีนไกลคอล-พอลิแลคไทด์ (PLA-PEG-PLA) ไตรบล็อกโคพอลิเมอร์ในการใช้เป็นสารละลายไมเซลล์โดยมีเป้าหมายเพื่อประยุกต์เป็นระบบนำส่งและควบคุมการปล่อยยา งานวิจัยนี้เริ่มจากใช้เทคนิคการจำลองเชิงโมเลกุลเพื่อออกแบบโครงสร้าง PLA-PEG-PLA ไตรบล็อกโคพอลิเมอร์ที่เหมาะสมในการเกิดไมเซลล์และการจับกับยา โดยพิจารณาจากมีการเอ็ตราส่วนมอนอเมอร์ LA/EG ก่อนทำการสังเคราะห์จริง โดยใช้การจำลองด้วยคอมพิวเตอร์ระดับ Mescale ได้แก่ เทคนิค MesoDyn เพื่อทำนายแผนภาพเฟสของสารละลายโคพอลิเมอร์ที่ความเข้มข้นต่างๆ และเทคนิค Dissipative Particle Dynamic (DPD) เพื่อศึกษาพฤติกรรมเฟส ค่า critical micelle concentration (cmc) และอัตราเร็วในการเกิดไมเซลล์ จากนั้นจึงเป็นการสังเคราะห์และวิเคราะห์สมบัติของ PLA-PEG-PLA ไตรบล็อกโคพอลิเมอร์รวมทั้งลักษณะการเกิดไมเซลล์ด้วยเทคนิค Fluorescence Spectroscopy และ Light Scattering ผลการทดลองที่ได้พบว่าค่อนข้างสอดคล้องกับผลการทำนายจากเทคนิคการจำลองโมเลกุลด้วยคอมพิวเตอร์ คือ จะมีเพียงบางค่าของอัตราส่วน LA/EG ที่เหมาะสมเท่านั้นที่สามารถเตรียมให้เกิดไมเซลล์ที่มีรูปร่างทรงกลมตามต้องการได้ และบล็อกโคพอลิเมอร์ที่มีอัตราส่วน LA/EG ที่สูงขึ้นจะสามารถจับโมเลกุลยาได้ในปริมาณที่มากกว่า



Abstract

The synthesis and characterization of poly lactide - poly ethylene glycol - poly lactide triblock (PLA-PEG-PLA) copolymer in micellar solution was performed with an aim to apply this copolymer as a target for controlled-release drug delivery systems . This research started from molecular modeling techniques to design the suitable molecular structure of PLA-PEG-PLA triblock copolymers , which can form micelle in solution and encapsulate drugs by considering the LA/EG ratio prior to actual synthesis . By using mesoscale simulation techniques, MesoDyn was employed to predict the phase diagram of the copolymers solution at various concentrations and Dissipative Particle Dynamic (DPD) simulation was used to study the critical micelle concentration (cmc) and the rate of micelle formation. Then synthesis and characterization of PLA-PEG-PLA were performed by experiments , including the nature of micelle and cmc by fluorescence spectroscopy and light scattering. Experimental results were found to be quite consistent with the prediction from computational molecular modeling such that only certain values of the LA/ EG ratio were appropriated to prepare the micelle with spherical shape and block copolymers with higher LA/EG ratio can encapsulate larger quantities of drug.

