Thesis Title	Molecular Dynamic Simulations of Ion Bombardment Effects on DNA	
Author	Mr. Chanisorn Ngaojampa	
Degree	Master of Science (Chemistry)	
Thesis Advisory Committee	Dr. Vannajan Sanghiran Lee	Chairperson
	Asst. Prof. Dr. Piyarat Nimmanpipug	Member

ABSTRACT

To study the behaviour of DNA strands after bombarded by low-energy ion beams, the 3D structure of green-fluorescent protein plasmid (pGFP) from *Escherichia coli* was construct, optimized and equilibrated in water at 323 K in Discovery Studio 1.7 software package. Then, the sites of preference for N^+ ions on DNA strand were specified using Adsorption Locator modules in Materials Studio 4.2. Afterwards, the molecular dynamics (MD) simulations of N^+ ions moving towards DNA strands were performed in AMBER 9. The results from Adsorption Locator indicated that the N^+ ions tended to be adsorbed at phosphate oxygens and backbone oxygens. The MD simulations showed that the DNA moved violently after the collision with N^+ following by DNA deformation and bond breakages. In this study, it was found that the bond type most sensitive to the collision was oxygen-phosphorus single bonds. Furthermore, it was also found that increasing energy of bombardment did not always result in larger amount of bond breakages. However, an optimum energy causing maximum bond breakages was suggested to exist.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์	การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลของผลการระดมยิงด้วยไอออนบนดีเอ็นเอ
ผู้เขียน	นายชนิสร เหง้าจำปา
ปริญญา	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (เคมี)
คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	ดร.วรรณจันทร์ แสงหิรัญ ลี ประธานกรรมการ ผศ.ดร.ปิยรัตน์ นิมมานพิภักดิ์ กรรมการ

บทคัดย่อ

เพื่อศึกษาพฤติกรรมของสายดีเอ็นเอที่ถูกระดมยิงด้วยไอออนพลังงานต่ำ โครงสร้างสามมิติของ-พลาสมิดที่ผลิตโปรตีนเรืองแสงจาก *Escherichia coli* ได้ถูกสร้างขึ้น แล้วหาโครงสร้างที่เหมาะสมและปล่อยให้อยู่ในสมดุลในสารละลายที่ 323 องศาสัมบูรณ์ ด้วยโปรแกรม Discovery Studio 1.7 โครงสร้างดังกล่าว ได้นำไปใช้ในการหาตำแหน่งที่เหมาะสำหรับการดูดซับของไอออนไนโตรเจน (N^+) โดยใช้โมดูล Adsorption Locator ในโปรแกรม Materials Studio 4.2 จากนั้นจึงมีการจำลองพลวัตของการยิงไอออนไนโตรเจนลงบนสายดีเอ็นเอโดยใช้โปรแกรม AMBER 9 ผลการคำนวณหาตำแหน่งที่เหมาะสมสำหรับการดูดซับ N^+ พบว่า N^+ ส่วนมากจะถูกดูดซับที่ออกซิเจนในหมู่ฟอสเฟตและออกซิเจนบนน้ำตาลของสายดีเอ็นเอ สำหรับผลการจำลองพลวัตพบว่าดีเอ็นเอบริเวณที่ถูกยิงด้วย N^+ จะมีการเคลื่อนไหวที่รุนแรงและตามด้วยการคลายเกลียวและการแตกพันธะในสายดีเอ็นเอ โดยพันธะที่ไวต่อการชนของ และมีแนวโน้มที่จะแตกพันธะมากที่สุดได้แก่ พันธะเดี่ยวระหว่างออกซิเจนกับฟอสฟอรัส นอกจากนี้ยังพบอีกว่าการเพิ่มพลังงาน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

การระดมยิงไม่ได้ทำให้เกิดการแตกพันธะเพิ่มขึ้นเสมอไป แต่มีค่าพลังงานที่เหมาะสมอยู่ค่าหนึ่งที่ทำให้การแตกพันธะเกิดได้มากที่สุด

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved