

การศึกษาอันตรกิริยาของ 8-oxodG และ ดีเอ็นเอแอฟตาเมอร์โดยการจำลองแบบพลวัตเชิงโมเลกุลเพื่อการประยุกต์ด้านเซนเซอร์เชิงชีวภาพ

Insight into the Interaction of 8-oxodG and DNA Aptamer by Molecular Dynamics Simulation for the Application in Biosensor

Cherdpong Choodet (เชิดพงศ์ ชูเดช)* Theerapong Puangmali (ธีระพงษ์ พวงมะลิ)**

บทคัดย่อ

แอฟตาเมอร์สารชีวโมเลกุลจำพวกโอลิโกนิวคลีโอไทด์ (ดีเอ็นเอ หรือ อาร์เอ็นเอ) ที่มีคุณสมบัติผูกพันกับโมเลกุลเป้าหมายที่เฉพาะเจาะจง โดยปกติแล้วจะอยู่ที่ประมาณ 15-60 เบสแพ เนื่องจากมีสมบัติผูกพันเฉพาะเจาะจงกับ โมเลกุลเป้าหมายดังนั้นดีเอ็นเอแอฟตาเมอร์ จึงถูกใช้กันอย่างแพร่หลายในการตรวจหา ตัวบ่งชี้ทางชีวภาพ 8-oxo-2'-deoxyguanosine (8-oxodG) เป็น ตัวบ่งชี้ทางชีวภาพ ที่บ่งบอกถึงความเสี่ยงต่อการเป็นมะเร็งเช่นมะเร็งท่อน้ำดี ในงานวิจัยนี้ปฏิสัมพันธ์ระหว่างดีเอ็นเอแอฟตาเมอร์ และ 8-oxodG ได้รับการศึกษาโดยการจำลองแบบพลวัตเชิงโมเลกุลพบว่า 8-oxodG จะเปลี่ยน โครงสร้างของแอฟตาเมอร์ จาก random coil เป็น G-quadruplex อีกทั้งศึกษาผลของความเข้มข้น 8-oxodG ต่อการเปลี่ยนแปลง โครงสร้างดีเอ็นเอ ผลการจำลองแบบพลวัตเชิงโมเลกุลของเรามีประโยชน์สำหรับการพัฒนาความสามารถของไบโอเซนเซอร์ให้มีขีดจำกัดที่สูงขึ้น

ABSTRACT

Aptamers are oligonucleotide molecule (DNA or RNA) that binds to a specific target molecule. They are typically around 15-60 nucleotide bases. Due to a specific binding of the target molecule and DNA aptamer, they are widely used to detect biomarker. 8-oxo-2'-deoxyguanosine (8-oxodG) is the biomarker that indicates the risk of cancer such as bile duct cancer. In this work, the interaction between DNA aptamer and 8-oxodG was studied by molecular dynamics simulation. It was found that 8-oxodG changes the structure of the aptamer from random coil to G-quadruplex. The effect of 8-oxodG concentration on the change of the DNA structure was also elucidated. Our simulation results are useful for the development of high selectivity and low limit of detection of the biosensors.

คำสำคัญ: แอฟตาเมอร์ ตัวบ่งชี้ทางชีวภาพ แปร-ออกโซดีจี

Keywords: Aptamers, Biomarker, 8-oxodG

* Student, Master of Science Program in Physics, Faculty of Science, Khon Kaen University

** Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Khon Kaen University