

## การศึกษาเชิงลึกเกี่ยวกับกลไกระดับโมเลกุลของแอปตาเซนเซอร์ชนิดเปลี่ยนสีได้ที่ใช้อนุภาคนาโนทอง สำหรับการตรวจวัดโอคราทอกซิน เอ โดยวิธีพลวัตเชิงโมเลกุล

### Insight into the Molecular Mechanisms of AuNP-based Aptasensor for Colorimetric Detection of Ochratoxin A: A Molecular Dynamics Approach

วิทวัส พันชัย (Witthawat Phanchai)\* ชีระพงษ์ พวงมะลิ (Theerapong Puangmali)\*\*

#### บทคัดย่อ

โอคราทอกซิน เอ เป็นหนึ่งในสารปนเปื้อนระดับไมโครในอาหาร ทางด้านการตรวจวัดสารปนเปื้อนเหล่านี้เป็นสิ่งสำคัญอย่างยิ่ง แอปตาเซนเซอร์ชนิดเปลี่ยนสีได้ จากการกระจายตัวของนาโนทองที่ถูกเหนี่ยวนำให้เข้ามาเกาะกลุ่มกันด้วยเกลือ เป็นเซนเซอร์ที่มีความหวังทางด้านการตรวจวัด การเกาะกลุ่มกันของอนุภาคนาโนทองที่เกิดจากโอคราทอกซิน เอ จะนำไปสู่การเปลี่ยนสีของสารละลายที่สามารถสังเกตได้ด้วยตาเปล่า อย่างไรก็ตามกลไกระดับโมเลกุลที่ซับซ้อนของแอปตาเมอร์และโอคราทอกซิน เอ ยังไม่สามารถเข้าใจได้อย่างลึกซึ้ง ในที่นี้การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลใช้ในการศึกษาอันตรกิริยาของดีเอ็นเอสายเดี่ยวแอปตาเมอร์ และ โอคราทอกซิน เอ เราศึกษาการทำพันธะระหว่างแอปตาเมอร์และโอคราทอกซิน เอ และพัฒนาแอปตาเซนเซอร์ขึ้นโดยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล พบว่าความเข้มข้นของแมกนีเซียมไอออน มีบทบาทสำคัญต่อการสร้างพันธะระหว่างโมเลกุล การศึกษาของเรายังเปิดกว้างสำหรับการออกแบบไบโอเซนเซอร์แบบใหม่

#### ABSTRACT

Ochratoxin A (OTA) is one of the abundant food-contaminating mycotoxins. On-side detection is vitally important. Colorimetric aptasensor based upon disassembly of salt-induced gold nanoparticles (AuNPs) aggregation is a promising sensor probe for the on-side detection. The assembly of the AuNPs, induced by OTA, leads to the change of the color of the solution which can be observed by naked-eyes. However, the molecular mechanisms of the aptamer-OTA complex is far from being fully understood. Herein, the molecular dynamics (MD) simulation was used to investigate the interaction of ssDNA aptamer and OTA during binding. We studied aptamer-OTA binding and developed aptasensor by MD simulations. It was found that the  $Mg^{2+}$  concentration plays a vital role on the intermolecular binding. Our study also opens the door for the design of novel biosensors.

**คำสำคัญ:** อนุภาคนาโนทอง พลวัตเชิงโมเลกุล ไบโอเซนเซอร์

**Keywords:** AuNP, Molecular dynamics, Biosensor

\* นักศึกษา หลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

\*\* ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ภาควิชาฟิสิกส์ สาขาวิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น