

การจำลองเชิงโมเลกุลของแอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์และการทำพันธะของอนุภาคนาโนทองที่ถูกเคลือบด้วยซิสเทียร์มีนสำหรับเซ็นเซอร์ที่มองเห็นได้ด้วยตาเปล่า

Molecular Dynamics Simulation of Anti-8-oxodG aptamer and Cysteamine-capped Gold Nanoparticles Binding for Naked-eye Biosensor

ภกวัต ทุมจิน (Pakawat Toomjeen)* ดร.ธีระพงษ์ พวงมะลิ (Dr.Theerapong Puangmali)**

บทคัดย่อ

การศึกษาด้วยการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลมีความสำคัญในการพัฒนาและออกแบบวิธีการรักษาโรคมะเร็งโดยใช้ความรู้ทางด้านฟิสิกส์หรือกฎของนิวตันเพื่อใช้อธิบายการเคลื่อนที่ของโมเลกุล ซึ่งในงานวิจัยนี้เราทำการศึกษาพฤติกรรมของไดเมอร์ของอนุภาคนาโนทองที่ถูกเคลือบด้วยซิสเทียร์มีน ซึ่งทำหน้าที่เป็นตัวป้องกันการเกาะกลุ่มกันของอนุภาคนาโนทอง ซึ่งสมบัติของอนุภาคนาโนทองสามารถทำให้สารละลายเปลี่ยนสีได้ตามขนาดและระยะห่างระหว่างอนุภาค โดยเราต้องการนำไดเมอร์ของอนุภาคนาโนทองเหล่านี้ไปทำการตรวจวัดโมเลกุลแปดออกโซดีจี ซึ่งเป็นโมเลกุลบ่งชี้ของการเป็นมะเร็ง และมันจะมีอันตรกิริยากับสายดีเอ็นเอที่มีลำดับเฉพาะตัว ซึ่งมีชื่อเรียกว่า แอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์ ผลการศึกษาพบว่า ในสารละลายที่มีอนุภาคนาโนทองที่ถูกเคลือบด้วยซิสเทียร์มีน, แปดออกโซดีจีและแอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์อยู่ โดยมีแปดออกโซดีจีปริมาณน้อยจะทำให้สารละลายมีสีม่วง แต่ในขณะเดียวกันหากมีปริมาณที่มาก สารละลายจะเป็นสีแดง เนื่องจากอันตรกิริยาระหว่าง แปดออกโซดีจีกับแอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์จะไปลดแรงทางไฟฟ้าระหว่างแอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์กับอนุภาคนาโนทอง ทำให้อนุภาคนาโนทองกระจายตัว ซึ่งเราได้ข้อสรุปว่าปริมาณของแปดออกโซดีจีเป็นตัวกำหนดการทำงานของเซ็นเซอร์ชนิดเปลี่ยนแปลงด้วยสี

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation has played an important role in developing and designing therapeutic methods by using the knowledge of physics or the laws of Newton. In this work, we investigated the behavior of cysteamine-capped gold nanoparticle (AuNP) dimer which resists AuNPs aggregation. The properties of AuNPs cause the color of solution change which depends on the size and gap between the particles. We need to bring these dimers to the system which including of 8-oxodG and specifically molecules as called anti-8-oxodG aptamer. The study indicated that, the solution containing all these molecules by low concentration of 8-oxodG. The color of solution is purple. But at the same time, if there are high concentration of 8-oxodG. The color of solution will be red because interactions between of 8-oxodG and anti-8-oxodG aptamer reduce the electrostatic force between anti-8-oxodG aptamer and AuNPs. The AuNPs are not moving close together. We concluded that the quantity of 8-oxodG affects color of solution.

คำสำคัญ: พลวัตเชิงโมเลกุล อนุภาคนาโนทอง แอนติแปดออกโซดีจีแอฟตาเมอร์

Keywords: Molecular dynamics, Gold nanoparticle, Anti-8-oxodG aptamer

* นักศึกษา หลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวัสดุศาสตร์และนาโนเทคโนโลยี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

** ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ภาควิชาฟิสิกส์ สาขาวิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น