



การศึกษาความสามารถในการเข้าจับของสาร Tinocrisposide ต่อโปรตีนเป้าหมายที่เกี่ยวข้องกับมะเร็ง ปอดชนิด Non-small cell ด้วยวิธี Molecular Docking

กชพรรณ เสี่ยมพงษ์¹, สรัสวดี วี^{1*}, วิภาวี ศรีหามันท์¹, ภูมิภัทร ใจแก้ว², พชรวรรณ นิลคำ³

¹ โรงเรียนวิทยาศาสตร์จุฬารามราชวิทยาลัย สฟบุรี, ตำบลห้วยโป่ง, อำเภอโคกสำโรง, จังหวัดลพบุรี 15120, ประเทศไทย

² ภาควิชาเทคโนโลยีชีวภาพ คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์

ศูนย์รังสิต อำเภอคลองหลวง จังหวัดปทุมธานี 12121

³ โรงพยาบาลสถาบันโรคไตภูมิราชนครินทร์ ถนนพญาไท แขวงทุ่งพญาไท เขตราชเทวี กรุงเทพมหานคร 10400

*E-mail: 05436@pcccl.ac.th¹

บทคัดย่อ

โครงการนี้ศึกษาฤทธิ์ยับยั้งเซลล์มะเร็งปอดชนิด Non-Small Cell ของสาร Tinocrisposide โดยใช้วิธี Molecular Docking มีวัตถุประสงค์เพื่อจำลองการจับระหว่างสาร Tinocrisposide กับโปรตีนเป้าหมายที่เกี่ยวข้องกับการเกิดมะเร็งปอดชนิดดังกล่าว การศึกษานี้ได้เตรียมโครงสร้างโปรตีน Heat shock protein 90 ซึ่งเป็นเป้าหมายที่สัมพันธ์กับเซลล์มะเร็งปอดชนิด Non-small cell กับ สาร Tinocrisposide และสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพในอวัยวะชนิดอื่นๆ รวมทั้งสิ้น 7 ชนิด จากฐานข้อมูลที่เกี่ยวข้อง จากนั้นกำหนดตำแหน่งการจับและดำเนินการจำลองการจับด้วยวิธี Molecular Docking เพื่อประเมินค่าพลังงานการยึดเกาะระหว่างสารกับโปรตีนเป้าหมาย พร้อมวิเคราะห์อันตรกิริยาโดยเปรียบเทียบกับยามาตรฐานอ้างอิง ผลการศึกษาพบว่าสาร Tinocrisposide มีค่าพลังงานการยึดเกาะกับโปรตีนเป้าหมายเทียบเคียงกับยามาตรฐานอ้างอิง แสดงให้เห็นถึงศักยภาพในการจับกับโปรตีนเป้าหมายและอาจมีฤทธิ์ทางชีวภาพใกล้เคียงกับยาอ้างอิง นอกจากนี้ ผลการศึกษายังแสดงให้เห็นว่าวิธี Molecular Docking สามารถใช้เป็นแนวทางเบื้องต้นในการคัดเลือกสารที่มีศักยภาพในการพัฒนายาต้านมะเร็ง และช่วยลดต้นทุนรวมถึงระยะเวลาในการพัฒนายาในระยะเริ่มต้น

คำสำคัญ: มะเร็งปอดชนิดไม่ใช้เซลล์ขนาดเล็ก, Tinocrisposide, โมเลกุลาร์ด็อกกิ้ง, ค่าพลังงานการยึดเกาะ