

เคมีคอมพิวเตอร์กับสารออกฤทธิ์ในสมุนไพรไทย

ณัฐจันทน์ จงกล*

บทคัดย่อ

การสร้างแบบจำลองทางเคมีคอมพิวเตอร์ โดยใช้การจำลองโมเลกุล (molecular modeling) ด้วยโปรแกรม AutoDock ได้มีบทบาทอย่างมากต่อการอธิบายถึงความสัมพันธ์เชิงโครงสร้างของลิแกนด์กับโปรตีนที่สนใจ บทความนี้ได้สนใจศึกษาสารออกฤทธิ์ในสมุนไพรที่มีสรรพคุณทางยาและฤทธิ์ทางเภสัช ในกลุ่ม diarylheptanoids จากสมุนไพรว่านชักมดลูก (*Curcuma comosa* Roxb.) วงศ์ Zingiberaceae กับเอนไซม์ ER- β estrogenic receptor และสารในกลุ่ม 1-naphthol analogs จากสมุนไพรทองพันชั่ง (*Rhinacanthus nasutus* Kurz) วงศ์ Acanthaceae กับเอนไซม์ COX-1 และ COX-2 โดยข้อมูลที่ได้จากการทดลอง การจัดวางตัวของสารในโพรงการจับของเอนไซม์หรือบริเวณตำแหน่งออกฤทธิ์ และค่าพลังงานอันตรกิริยาของการจับ สามารถนำมาอธิบายข้อมูลเชิงโครงสร้างของสารออกฤทธิ์ในสมุนไพรเพื่อนำไปสู่ความเข้าใจและการพัฒนาเป็นสารชนิดใหม่ที่มีสรรพคุณทางยาและฤทธิ์ทางเภสัช เพื่อดำเนินโรคอื่นๆ ให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น

คำสำคัญ : สมุนไพรไทย, ว่านชักมดลูก, ทองพันชั่ง, โมเลกุลาร์ดอกกิ่ง

Computational approach: an application on Thai medicinal herbs

Nathjanan Jongkon *

Abstract

Computational modeling has been widely used to gain a better understanding of ligand-protein complex. In this study, molecular modeling program such as AutoDock has been exploited to gain an insight of some compounds isolated/synthesized from Thai medicinal herbs: *Curcuma comosa* Roxb. and *Rhinacanthus nasutus* Kurz. The aim of the study was to understand the three-dimensional aspects of diarylheptanoids from *Curcuma comosa* on ER- β estrogenic receptor and the synthesized 1-naphthol analogs on cyclooxygenase-I (COX-1) and cyclooxygenase-II (COX-2). Information of the binding alignment and the free energy of binding obtained from the program could help us to design a promising compound and could be applied in rational drugs design for further searchings of new compounds from Thai medicinal herbs to treat other diseases.

Keywords : Thai medicinal herbs, *Curcuma comosa* Roxb., *Rhinacanthus nasutus* Kurz, molecular docking

Department of Applied Science and Social, College of Industrial Technology, King Mongkut University of Technology North Bangkok.

* Corresponding author, E-mail: nathjananj@kmutnb.ac.th, njongkon@gmail.com Received 17 July 2014,

Accepted 20 November 2014