

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ



248658



รายงานการวิจัย

สมบัติการจับกับแอสพาราจีน กรดแอสปาร์ติก ฮีสติดีน ลิวซีน
และฟีนิลอะลานีน ของอนุพันธ์แมงโกสติน

Asparagine, Aspartic acid, Histidine, Leucine and
Phenylalanine Binding Properties of Mangostin Derivatives

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. กรกฏ นวคุณ

Assistant Professor Dr. Korakot Navakhun

มหาวิทยาลัยรามคำแหง

พฤษภาคม พ.ศ. 2554

600255499

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ



248658



รายงานการวิจัย

สมบัติการจับกับแอสพาราจีน กรดแอสปาร์ติก ฮีสติดีน ลิวซีน
และฟีนิลอะลานีน ของอนุพันธ์แมงโกสทิน

Asparagine, Aspartic acid, Histidine, Leucine and
Phenylalanine Binding Properties of Mangostin Derivatives

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. กรกฏ นวคุณ

Assistant Professor Dr. Korakot Navakhun

มหาวิทยาลัยรามคำแหง

พฤษภาคม พ.ศ. 2554

α -Mangostin **1**, and its two derivatives tetrahydro- α -mangostin, **2** and 3,6-dimethoxy- α -mangostin, **3** were computed their geometry optimizations and studied their L-Asparagine, L-Aspartic acid, L-Histidine, L-Leucine, and L-Phenylalanine binding properties at the B3LYP/6-31G(d) level with ZPVE correction in gas phase. It has been found that **1** bind L-Asp, **2** bind L-His and **3** bind L-Leu as the best results. These compounds were studied their binding properties with tetrabutylammonium salt of L-Asn, L-Asp, L-His, L-Leu, and L-Phe using the nuclear magnetic resonance spectroscopy titration technique in dimethylsulfoxide- d_6 . Changes of chemical shifts of the protons during addition of amino acid concentration were observed and investigated their complexation formation constants (K) using EQNMR program. The results show that **2** binds TBA•L-Asp selectively.

แมงโกสติน α -mangostin, 1 และอนุพันธ์สองชนิด ได้แก่ tetrahydro- α -mangostin, 2 และ 3,6-dimethoxy- α -mangostin, 3 ถูกคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมและศึกษาการจับกับแอล-แอสพาราจีน แอล-กรดแอสปาร์ติก แอล-ฮิสติดีน แอล-ลิวซีน และแอล-ฟีนิลอะลานีนโดยใช้ทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) และ ZPVE correction ในสถานะก๊าซ พบว่า 1 จับกับ L-Asp 2 จับกับ L-His และ 3 จับกับ L-Leu ได้ดีที่สุด เมื่อเปรียบเทียบกับการศึกษาทางเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ไฮโดรเจนในตัวทำละลาย dimethylsulfoxide- d_6 ซึ่งไฮโดรเจนของอนุพันธ์แมงโกสตินเหล่านี้กับเกลือเตตระบิวทิลแอมโมเนียมของ L-Asn, L-Asp, L-His, L-Leu และ L-Phe สังเกตค่า chemical shift ของโปรตอนที่เปลี่ยนแปลงไปเมื่อเพิ่มความเข้มข้นของกรดอะมิโนขณะทำการไฮเดรต และนำผลที่ได้มาหาค่าคงที่การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน (K) โดยใช้โปรแกรม EQNMR พบว่า 2 จับกับ TBA·L-Asp ได้อย่างจำเพาะ

คำขอบคุณ

ผู้วิจัยขอขอบคุณ ศาสตราจารย์ ดร.อภิชาติ สุขสำราญ ที่ปรึกษาโครงการวิจัย
รองศาสตราจารย์ ดร.สุนิตย์ สุขสำราญ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัย
ศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร ที่ให้การสนับสนุนสารอนุพันธ์แมงโกสทิน และรอง
ศาสตราจารย์ ดร.วิทยา เรืองพรวิสุทธิ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์
มหาวิทยาลัย ที่ให้คำปรึกษาทางด้านเคมีคำนวณ ขอขอบคุณ ทูวิจัยประเภทการวิจัย
มหาวิทยาลัย ประจำปีงบประมาณ 2553 มหาวิทยาลัยรามคำแหง ที่ให้การสนับสนุนด้าน
เงินทุนวิจัย และขอขอบคุณ ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ และสถาบันวิจัยและพัฒนา
มหาวิทยาลัยรามคำแหง ที่อำนวยความสะดวกในการทำงานวิจัยครั้งนี้จนสำเร็จลุล่วงไป
ด้วยดี

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.กรกฎ นวคุณ

ผู้วิจัย

สารบัญ

Content

1. บทนำ	1
2. วรรณกรรมที่เกี่ยวข้อง	4
3. วิธีดำเนินการวิจัย	6
4. ผลของการวิจัยและอภิปรายผล	9
5. สรุปผล	51
6. เอกสารอ้างอิง	53
7. ประวัติผู้วิจัย	57