

5. สรุปผล

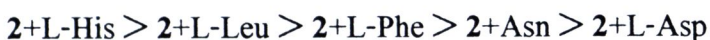
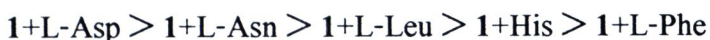
Conclusion

แมงโกสทิน α -mangostin, **1** และอนุพันธ์ tetrahydro- α -mangostin, **2** และ 3,6-dimethoxy- α -mangostin, **3** ถูกคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมและศึกษาการจับกับแอล-แอสพาราจีน (L-Asn) แอล-กรดแอสปาร์ติก (L-Asp) แอล-ฮิสติดีน (L-His) แอล-ลิวซีน (L-Leu) และแอล-ฟีนิลอะลานีน (L-Phe) โดยการคำนวณ เปรียบเทียบกับการศึกษาทางเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ไฮโดรเจน (NMR titration) ในตัวทำละลาย dimethylsulfoxide- d_6 (DMSO- d_6) ไฮโดรเจน **1**, **2** และ **3** กับเกลือเตตระบิวทิลแอมโมเนียมของ L-Asn, L-Asp, L-His, L-Leu และ L-Phe สังเกตค่า chemical shift ของโปรตอนตำแหน่งไฮดรอกซีที่ติดอยู่กับคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 (C1) ซึ่งเปลี่ยนแปลงไปเมื่อเพิ่มความเข้มข้นของกรดอะมิโนขณะทำการไฮโดรเจน และนำผลที่ได้มาหาค่าคงที่การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน (K) โดยใช้โปรแกรม EQNMR ได้ลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้



อย่างไรก็ตามเราไม่สามารถคำนวณหาค่าคงที่การเกิดสารประกอบเชิงซ้อนของกรดอะมิโนเหล่านี้กับ **3** ได้ เนื่องจากเนื่องจากสเปกตรัมของโปรตอนดังกล่าวหายไปขณะทำการทดลอง

เมื่อวิเคราะห์โครงสร้างที่เหมาะสมของสารประกอบเชิงซ้อนของแมงโกสทินและอนุพันธ์ **1**, **2** และ **3** กับ L-Asn, L-Asp, L-His, L-Leu และ L-Phe ที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) และ ZPVE correction ในสถานะก๊าซ มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้



$$3+\text{L-His} > 3+\text{L-Leu} > 3+\text{L-Asn} > 3+\text{Phe} > 3+\text{L-Asp}$$

เมื่อจำแนกตามชนิดของกรดอะมิโนพบว่า L-Asn มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้

$$1+\text{L-Asn} > 3+\text{L-Asn} > 2+\text{L-Asn}$$

L-Asp มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้

$$1+\text{L-Asp} > 2+\text{L-Asp} > 3+\text{L-Asp}$$

L-His มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้

$$2+\text{L-His} > 3+\text{L-His} > 1+\text{L-His}$$

L-Leu มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้

$$3+\text{L-Leu} > 2+\text{L-Leu} > 1+\text{L-Leu}$$

L-Phe มีลำดับของการเกิดสารประกอบเชิงซ้อนเป็นดังนี้

$$2+\text{L-Phe} > 3+\text{L-Phe} > 1+\text{L-Phe}$$