



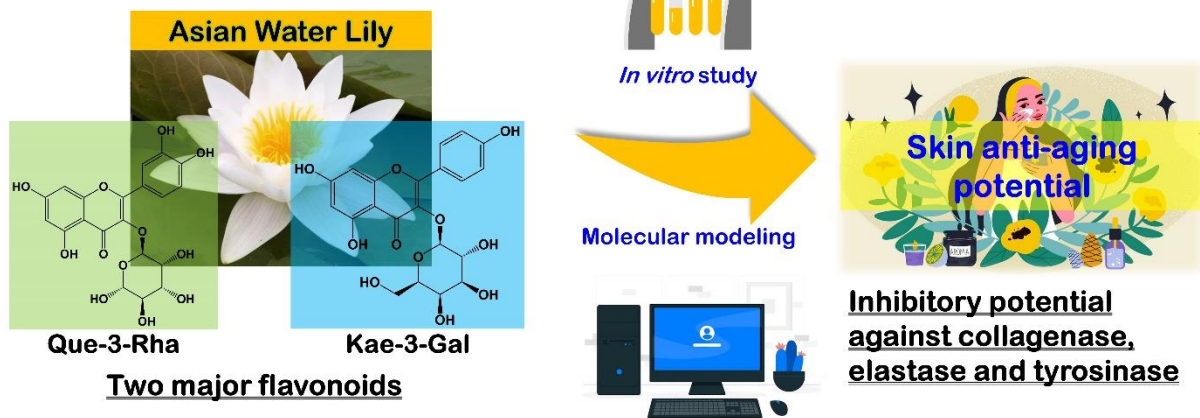
Department of Pharmacology, Faculty of Science
Mahidol University

Anti-Aging Potential of the Two Major Flavonoids Occurring in Asian Water Lily Using *In Vitro* and *In Silico* Molecular Modeling Assessments

Our previous study examined the major flavonoids and antioxidant potential of Asian water lily (*Nymphaea lotus* L.) stamens and perianth extracts. Quercetin-3-O-rhamnoside (Que-3-Rha) and kaempferol-3-O-galactoside (Kae-3-Gal) were identified as the key flavonoids. Despite the known skin anti-aging effects of many flavonoids, Que-3-Rha and Kae-3-Gal had not been evaluated for inhibiting skin-aging enzymes. This study aimed to assess their enzyme inhibitory activity and investigate their interactions with collagenase, elastase and tyrosinase. *In vitro* assays showed that both flavonoids had moderate to good inhibitory activity. Computational predictions suggested favorable skin permeability and no severe toxicity. Molecular dynamic simulations revealed stable complexes over 200 ns, with structural analyses and binding free energy calculations supporting their inhibitory potential. This study highlights the anti-aging potential of these flavonoids, paving the way for further development of cosmeceutical and phytopharmaceutical applications.

ฤทธิ์ชะลอวัยของสารฟลาโวนอยด์หลักสองชนิดที่พบในบัวสายโดยการทดสอบในหลอดทดลองและการใช้แบบจำลองทางคอมพิวเตอร์

งานวิจัยก่อนหน้านี้ได้ตรวจสอบสารฟลาโวนอยด์หลักและฤทธิ์ต้านอนุมูลอิสระที่ได้จากสารสกัดจากเกสรและกลีบของบัวสาย (*Nymphaea lotus* L.) ซึ่งพบว่าสารที่มีชื่อว่า Quercetin-3-O-Rhamnoside (Que-3-Rha) และ Kaempferol-3-O-Galactoside (Kae-3-Gal) จัดเป็นฟลาโวนอยด์หลักในพืชชนิดนี้ แม้ว่าจะมีรายงานผลของฟลาโวนอยด์หลายชนิดในการชะลอวัยของผิวหนัง แต่ยังไม่เคยมีการศึกษาของสารทั้งสองตัวนี้ในการยับยั้งเอนไซม์ที่เกี่ยวข้องกับการเสื่อมสภาพของผิวหนัง งานวิจัยนี้จึงมุ่งประเมินศักยภาพในการยับยั้งเอนไซม์และอันตรกิริยาที่เกิดขึ้นกับเอนไซม์คอลลาจีเนส อีลาสเทส และไทโรซิเนส การทดสอบในหลอดทดลองแสดงให้เห็นว่า ฟลาโวนอยด์ทั้งสองชนิดสามารถยับยั้งเอนไซม์ได้ในระดับปานกลางถึงดี การทำนายทางคอมพิวเตอร์ชี้ให้เห็นถึงการซึมผ่านของผิวที่ดีและไม่มีพิษที่รุนแรง นอกจากนี้ การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลแสดงให้เห็นว่าสารเชิงซ้อนระหว่างโปรตีนและสารฟลาโวนอยด์ยังคงเสถียรตลอดการจำลอง 200 นาโนวินาที การวิเคราะห์โครงสร้างและการคำนวณพลังงานการยึดจับยังสนับสนุนศักยภาพในการยับยั้งของฟลาโวนอยด์ทั้งสองชนิด ดังนั้น การศึกษานี้แสดงถึงศักยภาพในการชะลอวัยของฟลาโวนอยด์เหล่านี้ ซึ่งจะเป็แนวทางในการพัฒนาผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางและผลิตภัณฑ์จากสมุนไพรในอนาคต



Reference:

Nutho B, Tungmunnithum D. Anti-Aging Potential of the Two Major Flavonoids Occurring in Asian Water Lily Using In Vitro and In Silico Molecular Modeling Assessments. *Antioxidants*. 2024;13(5): 601. DOI: <https://doi.org/10.3390/antiox13050601>



ความเชื่อมโยงกับเป้าหมาย SDGs:
เป้าหมายที่ 3: การมีสุขภาพและความเป็นอยู่ที่ดี