



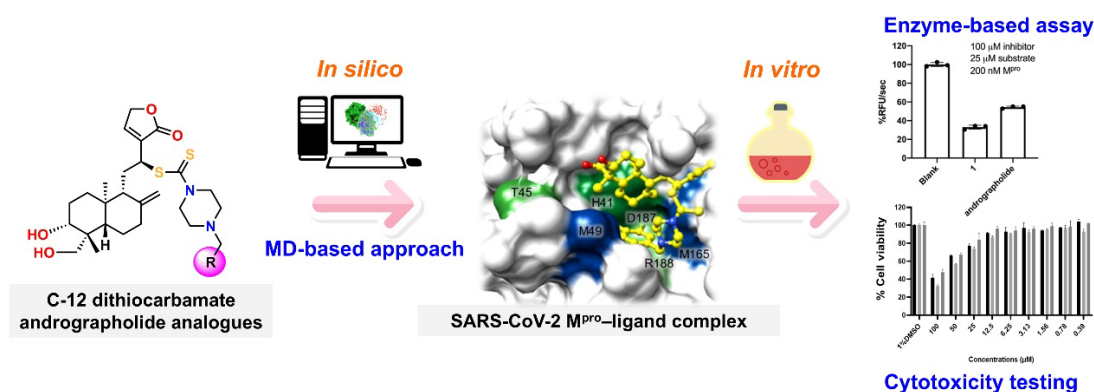
Department of Pharmacology, Faculty of Science Mahidol University

Design and evaluation of andrographolide analogues as SARS-CoV-2 main protease inhibitors: Molecular modeling and in vitro studies

In the global fight against COVID-19, this study introduces a new molecule derived from andrographolide, a natural compound in *Andrographis paniculata*, designed to block the virus's main protease (M^{pro}), a key enzyme essential for viral replication. Using advanced computer simulations and lab testing, the team created compound **1**, which achieved ~70% inhibition of SARS-CoV-2 M^{pro} activity. Impressively, its performance is comparable to existing antiviral drugs, with low to moderate toxicity in key human cell lines. This breakthrough brings us closer to natural product-based COVID-19 treatments and may pave the way for broader antiviral therapies in the future.

การออกแบบและประเมินอนุพันธ์ของแอนโดรกราโฟไลด์ในฐานะตัวยับยั้งเอนไซม์โปรตีเอสของไวรัส SARS-CoV-2: การศึกษาด้วยแบบจำลองระดับโมเลกุลและการทดสอบในหลอดทดลอง

งานวิจัยนี้ได้พัฒนาโมเลกุลใหม่จากสารแอนโดรกราโฟไลด์ในฟ้าทะลายโจร เพื่อยับยั้งเอนไซม์โปรตีเอสหลักของไวรัสก่อโรคโควิด-19 ที่มีบทบาทสำคัญในการเพิ่มจำนวนไวรัส โดยใช้เทคนิคทางคอมพิวเตอร์และการทดลองในห้องปฏิบัติการ คณะผู้วิจัยสามารถออกแบบและทดสอบ compound **1** ที่ยับยั้งการทำงานของเอนไซม์ได้ถึง 70% และไม่เป็นพิษต่อเซลล์มนุษย์มากนัก ความสำเร็จนี้เปิดทางสู่การพัฒนาต้านไวรัสจากสารธรรมชาติ และอาจใช้รับมือกับโรคระบาดในอนาคตได้อีกด้วย



Reference:

Suriya U, Intamalee P, Saeeng R, Wilasluck P, Deetanya P, Wangkanont K, Kanjanasirirat P, Wongwitayasombat C, Nutho B*. Design and evaluation of andrographolide analogues as SARS-CoV-2 main protease inhibitors: Molecular modeling and in vitro studies. Drug Des Devel Ther. 2025;19:3907-24. DOI: <https://doi.org/10.2147/dddt.s514193>



ความเชื่อมโยงกับเป้าหมาย SDGs:

เป้าหมายที่ 3: การมีสุขภาพและความเป็นอยู่ที่ดี