

ชื่อเรื่อง การทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของสารที่ได้จากกล้วยไม้สกุล *Bulbophyllum* โดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์

ชื่อผู้วิจัย วชิรี วรจรรย์กุล, พิมใจ สุวรรณวงศ์ และ เดือนเต็ม ทองเผือก

หน่วยงาน คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏรำไพพรรณี

ปีงบประมาณ 2561

บทคัดย่อ

จากการรวบรวมข้อมูลทางวิชาการของกล้วยไม้สกุลสิงโตจำนวน 25 ชนิดซึ่งมีองค์ประกอบทางเคมีมากกว่า 128 ชนิด (สารกลุ่มฟีนานทริน ไบเบนซิล เบนนิล สายยาว พิวเรน และอื่น ๆ) ในงานวิจัยนี้ โปรแกรมลิแกนด์สเกิร์ท, ซี, ฟาร์มแมปเปอร์, พาสออนไลน์, เอนโดครานดิสรึบโทม และสวิตาร์เกตพีดีคชันถูกนำมาใช้ในการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพขององค์ประกอบทางเคมีทั้งหมด ตามแนวทางของการวิเคราะห์ในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ วิธีการรวมความคล้ายคลึงกัน (SEA) เกี่ยวข้องกับเภสัชวิทยาของโปรตีนโดยอาศัยความคล้ายคลึงกันทางเคมีของลิแกนด์ ทำให้ทำนายเป้าหมายได้ 1035 เป้าหมายเป้าหมายที่มีแนวโน้มเป็น 5 อันดับแรก คือ CQSS_VIBCH, O77823 ของหนู, PA24A ของวัว, ERN1 และ TBB1 ของมนุษย์ นอกจากนี้ 10 อันดับแรกของเป้าหมายที่โปรแกรมทำนาย คือ Q49PX0_9POXV, Q25270_LEIDO, Q3I4V7_CRYNV, TBB1, CP1B1, TBB3, CAH7, ABCG2 ของมนุษย์ TBB2B และ Q862F3 ของวัว ตามลำดับ การทดลองหลายครั้งของสารอินทรีย์ที่คาดว่าจะเป็ยา (Hits) ทำนายว่ามีฤทธิ์ทางชีวภาพ จากการเปรียบเทียบเป้าหมาย (Target) ของสารอินทรีย์เหล่านั้นพบว่าเป็โปรตีน TBB1 ในมนุษย์ ข้อมูลข้างต้นทำให้เห็นว่าเป้าหมายระดับโมเลกุลคือสายเบต้าทูบูลิน (tubulin beta chain) ดังนั้นองค์ประกอบทางเคมีจากกล้วยไม้สกุลสิงโตน่าจะขัดขวางการแบ่งตัวของเซลล์ จึงทำให้เป็สารต้านมะเร็งที่น่าสนใจ อย่างไรก็ตามควรทำการทดลองในห้องปฏิบัติการเพื่อยืนยันการคำนวณเหล่านี้

คำสำคัญ: การทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพ, การคัดสรรโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์, กล้วยไม้สกุลสิงโต, กล้วยไม้

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏรำไพพรรณี

Title Prediction of the biological activities from chemical constituents of *Bulbophyllum* genus using *in silico* screening

Researchers Watcharee Waratchareeyakul, Pimjai Suwannawong and Dueantem Thongphueak

Organization Faculty of Science and Technology, Rambhai Barni Rajabhat University

Year 2018

Abstract

Compilation of the *Bulbophyllum* database of 25 publications, more than 128 chemical constituents (phenanthrenes, bibenzyl, benyl, long chain, furan and other compound classes) were collected. In this research, LigandScout, SEA, PharmMapper, PASS-Online, Endocrine disruptome and SwissTargetPrediction were performed for all compounds and within all *in silico* profiling platforms. Similarity ensemble approach (SEA) is relating protein pharmacology based on the set-wise chemical similarity of their ligands. In total, 1035 target were predicted. The top 5 promising target were CQSS_VIBCH, O77823_PIG, PA24A_BOVIN, ERN1_HUMAN and TBB1_HUMAN. Top 10 of frequently predicted targets were Q49PX0_9POXV, TBB1_HUMAN, CP1B1_HUMAN, TBB3_HUMAN, TBB2B_BOVIN, Q25270_LEIDO, CAH7_HUMAN, Q3I4V7_CRYNV, ABCG2_HUMAN, and Q862F3_BOVIN, respectively. Hits predicted very often and with high confidentiality will be considered for biological evaluation of the extract. A comparison of the predicted target yields TBB1_HUMAN as common protein. This points towards the tubulin beta chain as a molecular target. Thereby, the compounds may block cell division and be therefore interesting anticancer compounds. Subsequent, experimental work has to confirm these calculations.

Keywords: Prediction of biological activity, *in silico* screening, *Bulbophyllum*, Orchid