

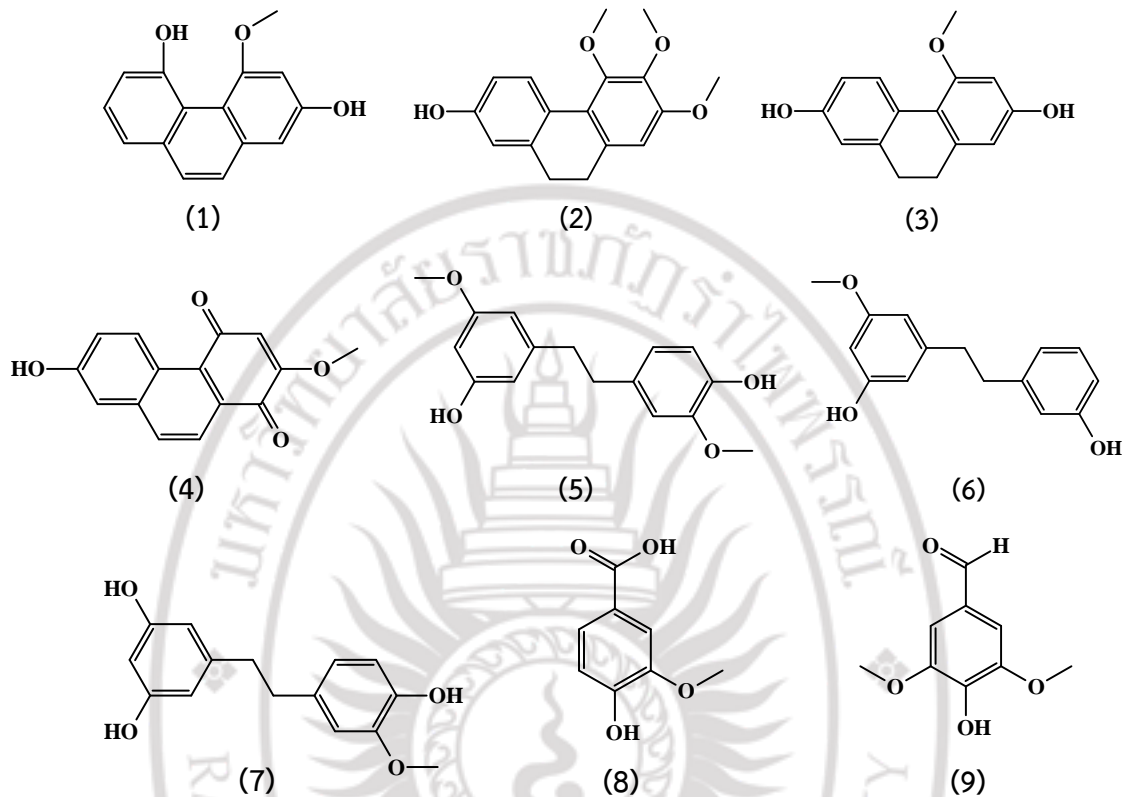
บทที่ 4

ผลการวิจัย

องค์ประกอบทางเคมีของสารผลิตภัณฑ์ธรรมชาติเป็นสารอินทรีย์ที่มีโครงสร้างซับซ้อนและมีหลายหมู่ฟังก์ชัน (Functional group) จึงทำให้มีความเป็นไปได้ที่จะมีฤทธิ์ทางชีวภาพมากพอที่จะนำไปพัฒนาเป็นยารักษาโรคใช้เป็นสารตั้งต้นในการสังเคราะห์ยาหรือสังเคราะห์สารที่มีโครงสร้างคล้ายคลึงกัน เพื่อใช้ในการค้นหาชนิดใหม่ ๆ การกำหนดโมเลกุลเป้าหมาย (Single macromolecular target) เป็นขั้นตอนแรกของกระบวนการค้นหาชนิดใหม่มีหลายงานวิจัยยืนยันว่าการใช้เครื่องมือและโปรแกรมคอมพิวเตอร์ทำให้อัตราความสำเร็จในการหายารักษาโรคมียุคสูงขึ้นมากหนึ่งในเครื่องมือที่นั่นคือ Virtual screening (VS) ที่เพิ่มประสิทธิภาพและประสิทธิผลในการค้นพบโครงสร้างที่น่าจะเป็นยา (Lead structures) (Rollinger et al., 2009) โดย ลิแกนด์สเก๊าท์ ซี ฟาร์แมปเปอร์ พาส เอนโดคราน ดิสรับโทม สวิสทาร์เกตพีดีคชัน เป็นเครื่องมือที่ถูกนำมาใช้ในงานวิจัยชิ้นนี้

Chen และคณะ (2008 : P.169-173) รายงานว่ามีสารอินทรีย์ 9 ชนิด ถูกแยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตชนิดสิงโตหลอดไฟหรือสิงโตโคมไฟ (*B. odoratissimum*) ดังนี้ โมสคาทิน (Moscatin, 1) 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟenantrene, 2), โคโลนิน (Coelonin, 3) เดนซิฟลอรอลบี (Densiflorol B, 4) จิเกนทอล (Gigantol, 5) บาตาทาสิน 3 (Batatasin III, 6) ทริสติน (Tristin, 7) กรดวานิลลิก (Vanillic acid, 8) และไซลิ่งแอลดีไฮด์ (Syringaldehyde, 9) โดยสารเดนซิฟลอรอลบีเป็นสารที่มีฤทธิ์ทางชีวภาพสูงสุด ด้วยค่ายับยั้งร้อยละห้าสิบ (IC₅₀) 0.08-3.52 ไมโครกรัม/มิลลิกรัม ในการต้านการเจริญเติบโตของเซลล์มะเร็งเม็ดเลือดขาวในมนุษย์ชนิด K562 และ HL-60 (Human leukaemia cell lines K562 and HL-60) เซลล์มะเร็งปอดของมนุษย์ชนิด A549 (Human lung adenocarcinoma A549 cell line) เซลล์มะเร็งตับชนิด BEL-7402 (human hepatoma BEL-7402 cell line) และเซลล์มะเร็งกระเพาะอาหารชนิด SGC-7901 (Human stomach cancer SGC-7901 cell line)

จากข้อมูลข้างต้นคณะผู้วิจัยจึงวาดโครงสร้างของสารอินทรีย์ด้วยโปรแกรมเคมีดรอพ (Chemdraw) และเคมีสเก็ต (Chemsketch) จากชื่อสารประกอบอินทรีย์ที่ได้มีการรายงานในวารสารวิชาการดังกล่าว

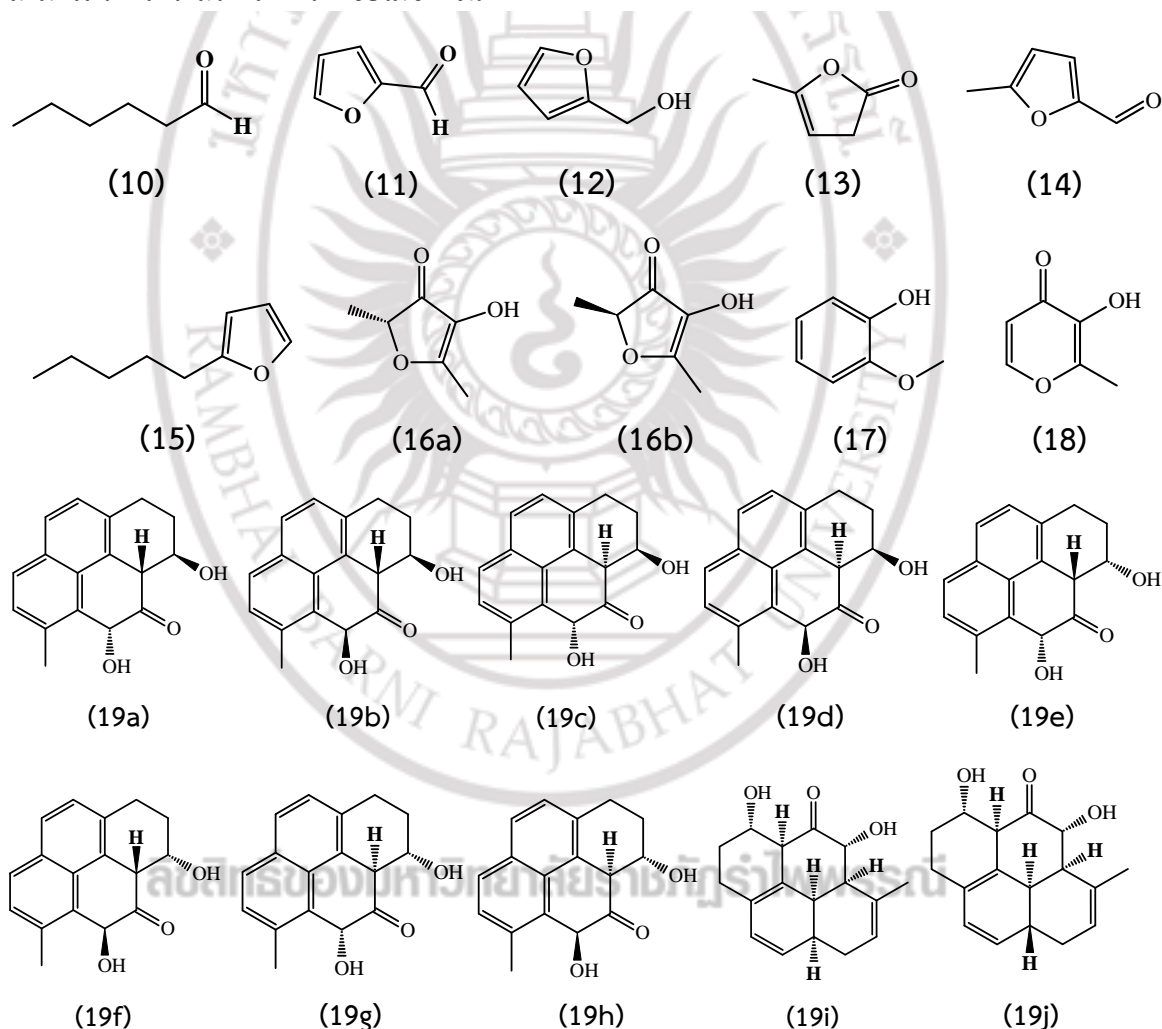


ภาพที่ 4.1 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากสิ่งโตหลอดไฟจากงานของ Chen และคณะ
ที่มา : (Chen et al., 2008 : P.169-173)

da Silva และคณะ (1999) ระบุว่ามีน้ำมันหอมระเหยทั้ง 28 ชนิดถูกแยกได้จากกล้วยไม้สามชนิดที่ไม่มีชื่อไทย นั่นคือ *B. involutum*, *B. ipanemense* และ *B. weddellii* โดยใช้เครื่อง GC/MS และไม่มี การรายงานฤทธิ์ชีวภาพใด ๆ ของน้ำมันหอมระเหยทั้ง 28 ชนิด ดังนี้ เฮกซานัล (Hexanal, 10) ฟอร์ฟูแรล (Furfural, 11) 2-ฟูรานโนเมทานอล (2-Furanomethanol, 12) 5-เมทิล-2(3เฮซ)-ฟูรานโนน (5-Methyl-2(3H)-furanone, 13) 5-เมทิลฟูรารอล (5-Methyl-furfural, 14) 2-เพนทิลฟูแรน (2-Pentyl-furan, 15) 2,3-ไดไฮโดร-4-ไฮดรอกซิล-2,5-ไดเมทิล-3-ฟูรานโนน (2,3-Dihydro-4-hydroxy-2,5-dimethyl-3-furanone, 16) 2-เมทอกซีฟีนอล (2-Methoxy-phenol, 17) มัลทอล (Maltol, 18) 2,3-ไดไฮโดร-3,5-ไดไฮดรอกซี-6-เมทิล-4H-ไพรีน-4-ไอน (2,3-Dihydro-3,5-dihydroxy-6-methyl-4H-pyrene-4-one, 19) 1,2-เบนซีนไดออล (1,2-Benzenediol, 20) (อี,แซด)-2,4-เดคาไดอีแนล ((E,Z)-2,4-decadienal, 21) 5-ไฮดรอกซีเมทิล-2-ฟูแรนคาร์บอกซีอัลดีไฮด์ (5-Hydroxymethyl-2-furan-carboxyaldehyde, 22) 2,3,5,6-เตตระเมทิลฟีนอล (2,3,5,6-Tetramethylphenol, 23) ไตรดีคานอล (Tridecanol, 24) (อี,อี)-2,4-ดีคาไดอีแนล ((E,E)-2,4-decadienal, 25) 2,6-ไดเมทอกซีฟีนอล (2,6-Dimethoxyphenol, 26) 4-ไฮดรอกซี เมทิลเบนโซเอท (4-Hydroxy methyl benzoate, 27) ไตรดีคานอน (Tridecanone,

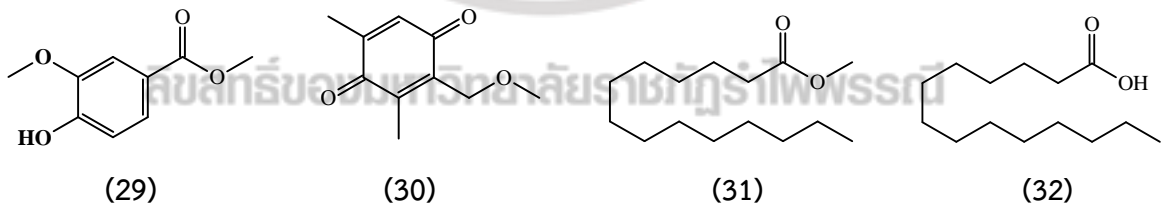
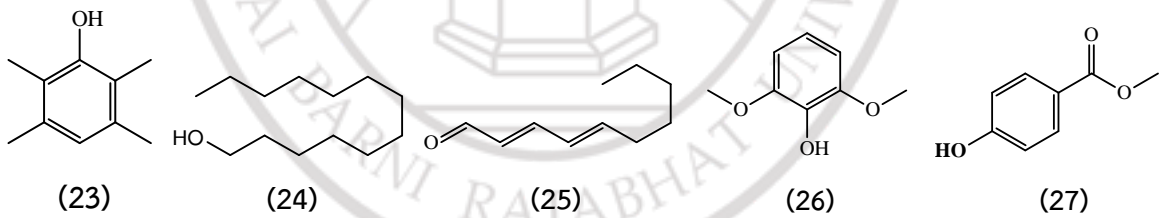
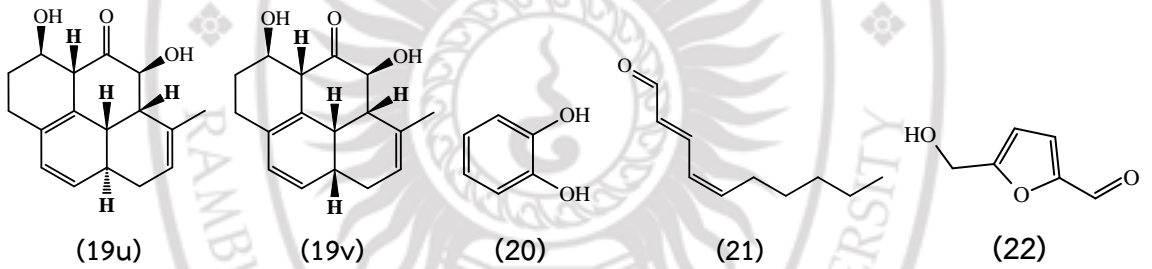
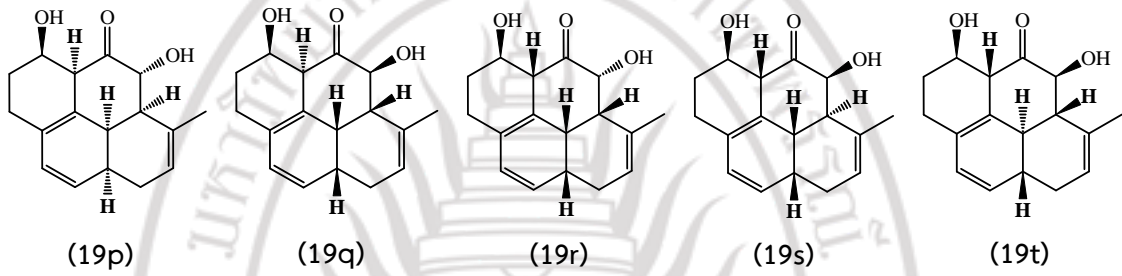
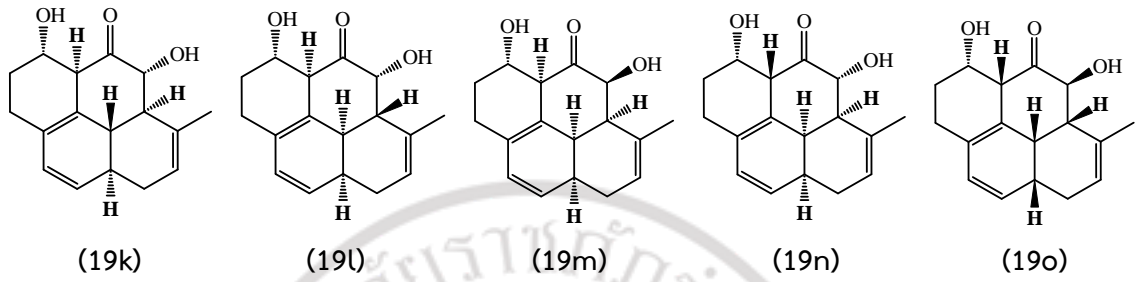
28) 4-ไฮดรอกซี-3-เมทอกซีเมทิลเบนโซเอต (4-Hydroxy-3-methoxy methyl benzoate, 29) 2,6-ไดเมทิล-3-เมทอกซีเมทิล-พารา-เบนโซควิโนน (2,6-Dimethyl-3-methoxymethyl-*p*-benzoquinone, 30) เมทิลเตตระเดคาโนเอต (Methyl tetradecanoate, 31) กรดเตตระเดคาโนอิก (Tetradecanoic acid, 32) กรดเพนตะเดคาโนอิก (Pentadecanoic acid, 33) 14-เมทิลเมทิลเพนตะเดคาโนเอต (14-Methyl methylpentadecanoate, 34) กรด 9-เฮกซาดีซีนอิก (9-Hexadecenoic acid, 35) กรดเฮกซาดีซีนอิก (Hexadecanoic acid, 36) และเอทิลเฮกซาดีคาโนเอต (Ethyl hexadecanoate, 37)

เนื่องจากไม่มีโครงสร้างระบุไว้ในวารสารวิชาการข้างต้นคณะผู้วิจัยจึงวาดโครงสร้างของสารอินทรีย์ที่เป็นไปได้ด้วยโปรแกรมเคมิดรอพ (Chemdraw) และเคมส์เกต (Chemsketch) ทั้งนี้โครงสร้างที่ 28 ไม่สามารถวาดโครงสร้างได้เพราะชื่อไม่ชัดเจน



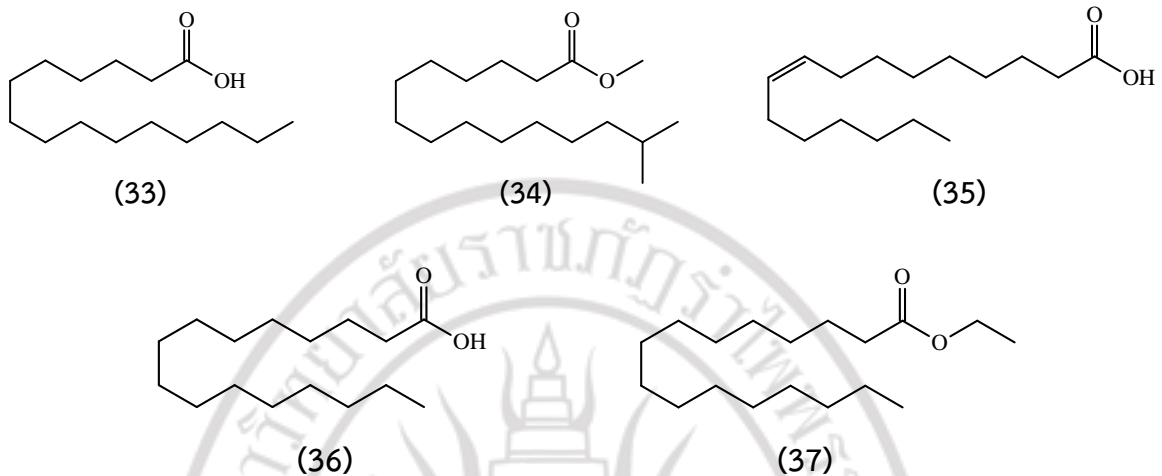
ภาพที่ 4.2 โครงสร้างที่เป็นไปได้ขององค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ da Silva และคณะ

ที่มา : (da Silva et al., 2008 : P.31-34)



ภาพที่ 4.2 (ต่อ)

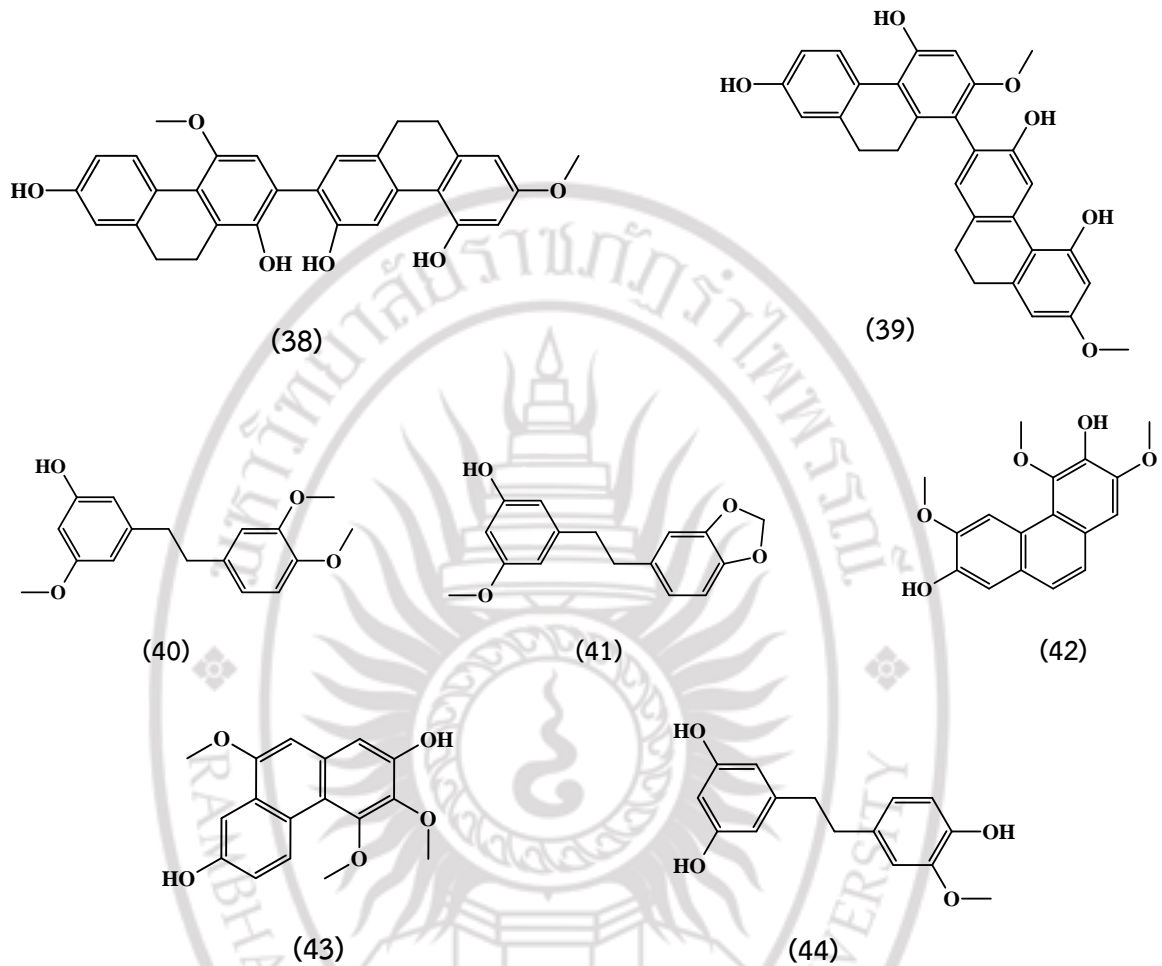
ที่มา : (da Silva et al., 2008 : P.31-34)



ภาพที่ 4.2 (ต่อ)

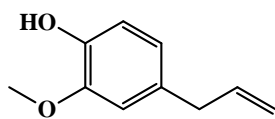
ที่มา : (da Silva et al., 2008 : P.31-34)

Hossain (2011 : P.102-140) ได้รายงานการใช้กล้วยไม้เป็นยาแผนโบราณโดยระบุว่ากล้วยไม้สกุลสิงโตชนิดที่ไม่มีในไทยชื่อ *B. cariniflorum* Rchb. f. ใช้ในการทำแท้งสำหรับผู้ที่มียุครรภ์ 2-3 เดือน ส่วนกล้วยไม้สกุลสิงโตที่มีในไทยชนิด *B. lilacinum* Ridl ใช้แก้เมื่อยล้าและทำให้ร่างกายสดชื่น กล้วยไม้ชนิด *B. neilgherrense* Wight ใช้เป็นยาชูกำลัง *B. maximum* ใช้ป้องกันเวทมนต์ กล้วยไม้ชนิดสิงโตหนวดยาว (*B. vaginatum*) ใช้ดื่มกับน้ำผลไม้แก้อาการปวดหู นอกจากนี้กล้วยไม้ชนิดสิงโตหลอดไฟ (*B. odoratissimum* (Sm.) Lindl.) พบบูลโบไฟทรินเอ (Bulbophytrin A, **38**) และบูลโบไฟทรินบี (Bulbophytrin B, **39**) ส่วนกล้วยไม้ชนิด *B. kwangtungense* Schltr. พบ คุมูลาทิน (Cumulatin, **40**) และเดนซิฟลอรอล (Densiflorol A, **41**) กล้วยไม้ชนิดสิงโตหลอดไฟพบ 3,7-ไดไฮดรอกซี-2,4,6-ไตรเมทอกซีฟีแนนทริน (3,7-Dihydroxy-2,4,6-trimethoxyphenanthrene, **42**) กล้วยไม้ *B. gymopus* Hook. f. พบยิมโนปูซิน (Gymnopusin, **43**) และกล้วยไม้สิงโตช่อทับทิม (*B. triste* Rchb. f.) พบทริสติน (Tristin, **44**)

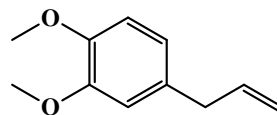


ภาพที่ 4.3 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Hossain
ที่มา : (Hossain, 2011 : P.102-140)

Irwin และคณะ (2014 : P.7335-7344) ได้รายงานว่ กล้วยไม้สกุลสิงโตที่เป็นพันธุ์พื้นเมืองในเอเชียตะวันออกเฉียงใต้โดยไม่ระบุชื่อกล้วยไม้ ว่ากล้วยไม้กลุ่มนี้สามารถดึงดูดแมลงผสมเกสรของผลไม้ได้โดยกล้วยไม้มีสารฟีนอลโพรโอนอยด์ 2 ชนิด ได้แก่ ซิงเจอโรน (Zingerone, 45) และ เมทิลยูจีนอล (Methyleugenol, 46) โดยแมลงเพศชายจะไม่สามารถห้ามตัวเองได้เพราะโครงสร้างสารเหล่านี้มีโครงสร้างเหมือนกับฟีโรโมน



(45)

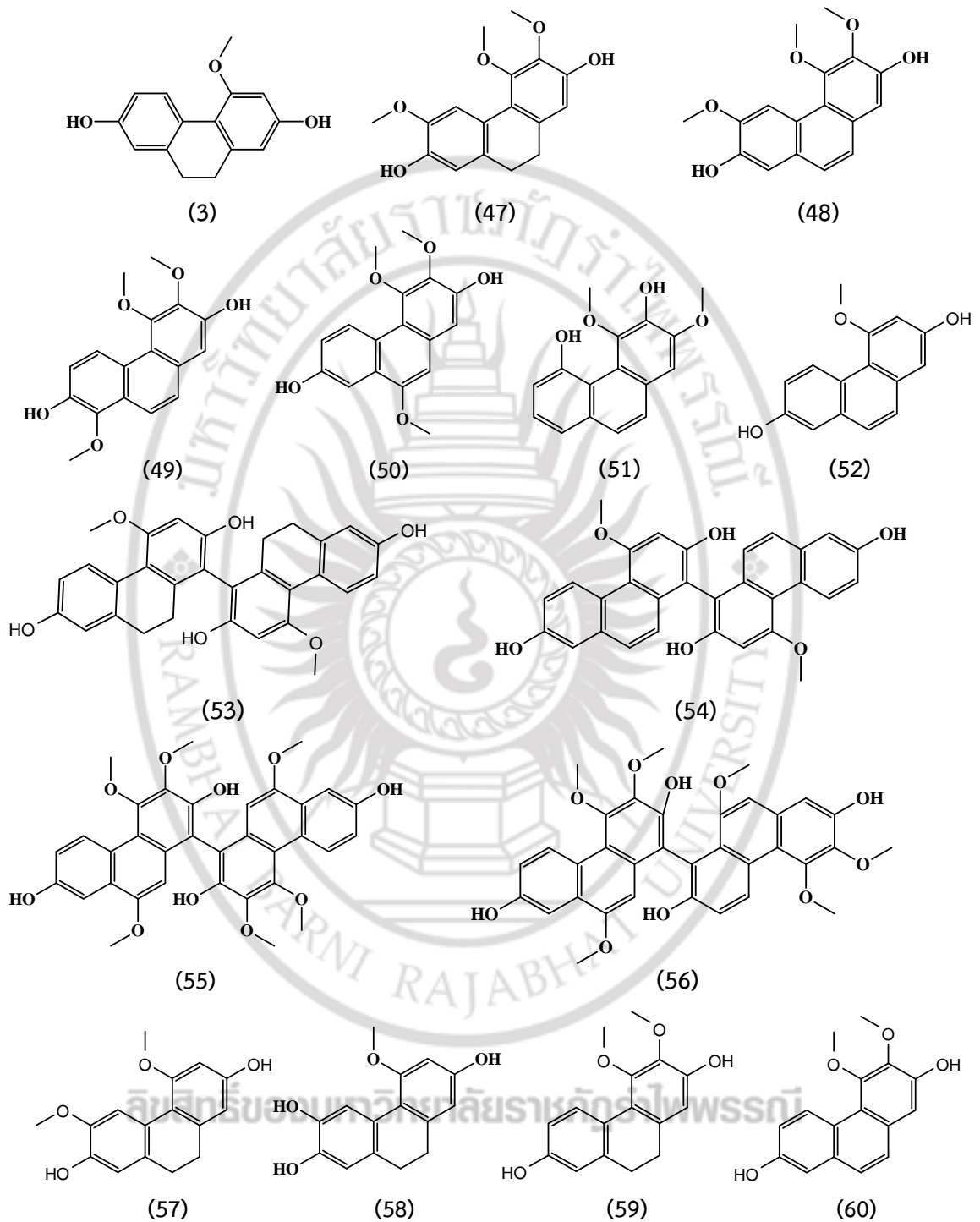


(46)

ภาพที่ 4.4 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Irwin และคณะ
ที่มา : (Irwin et al., 2014 : P.7335-7344)

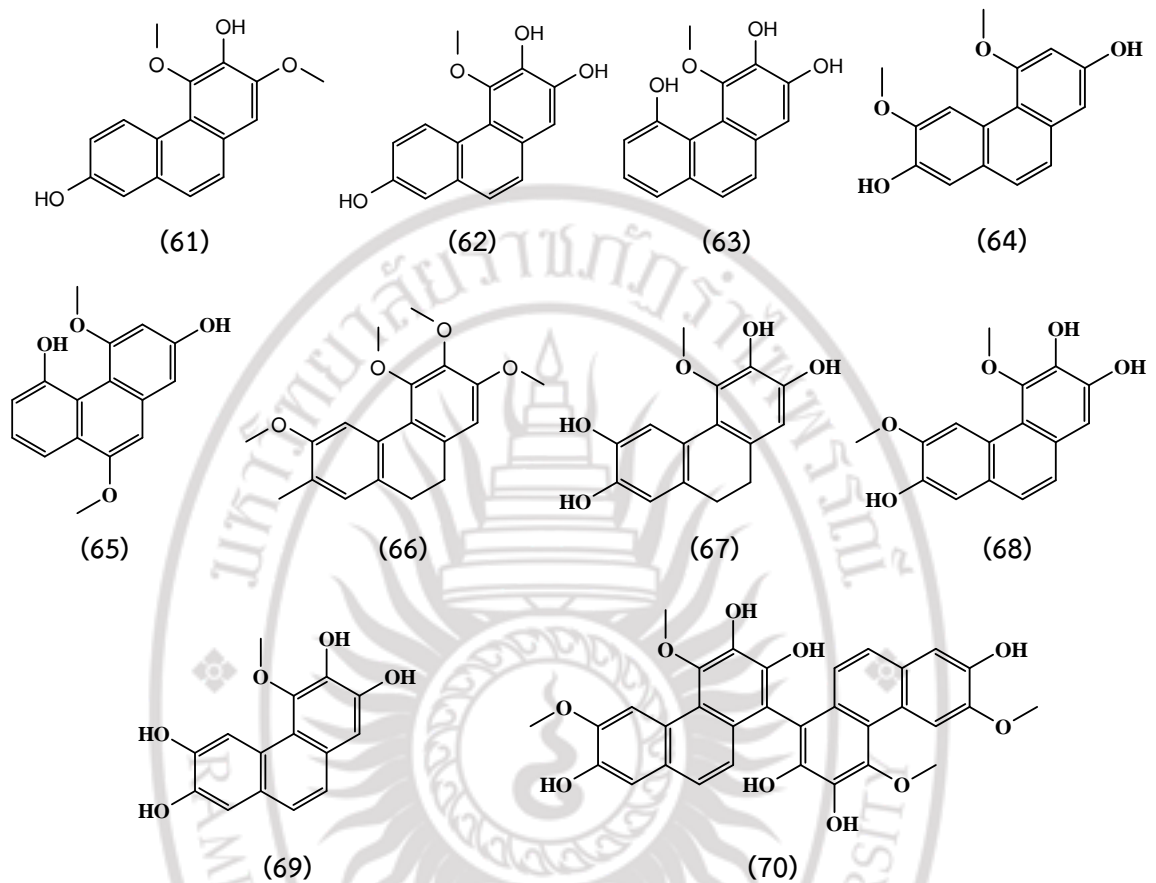
Kovács และคณะ (2008 : P.1084-1110) ได้รายงานว่าพบสารประกอบในกลุ่มฟิแนนทีน (Phenanthrenes) ในกล้วยไม้สกุลสิงโต ดังนี้ บียิมโนบุส (*B. gymnopus*) พบสารประกอบในกลุ่มฟิแนนทีน 4 ชนิด นั่นคือสาร (47) (48) คอนฟูซาริน (Confusarin, 49) และ ยิมโนพูซิน (Gymnopusin, 50) ส่วนต้นปีลีโอพาเดียม (*B. leopardium*) พบสารประกอบในกลุ่มฟิแนนทีน 1 ชนิด นั่นคือ บลูโบฟิวเลนทริน (Bulbophyllanthrin, 51) นอกจากนี้ต้นปีรีพเทนส์ (*B. reptans*) พบสารประกอบในกลุ่มฟิแนนทีน 10 ชนิด นั่นคือ โคโลนิน (Coelonin, 3) (47) (48) คอนฟูซาริน (Confusarin, 49) ยิมโนพูซิน (Gymnopusin, 50) ฟลาวานทรินิน (Flavanthrinin, 52) ฟลาวานทริน (Flavanthrin, 53) เซอร์โรพีทาลันทริน (Cirrhopetalanthrin, 54) เรปทันทริน (Reptanthrin, 55) และไอโซเรปทันทริน (Isoreptanthrin, 56) ส่วนต้นสิงโตหนวดยาว (*B. vaginatum*) พบสารประกอบในกลุ่มฟิแนนทีน 18 ชนิด นั่นคือ โคโลนิน (Coelonin, 3) (47) (48) ฟลาวานทรินิน (Flavanthrinin, 52) 6-เมทอกซีโคโลนิน (6-Methoxycoelonin, 57) (58) อีรานทรินิน (Erianthridin, 59) นูดอล (Nudol, 60), (61) (62) ฟิมบริโอล บี (Fimbriol B, 63) (64) (65) (66) (67) (68) (69) และ (70)

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏรำไพพรรณี



ภาพที่ 4.5 โครงสร้างที่เป็นไปได้ขององค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Kovács และคณะ

ที่มา : (Kovács et al., 2008 : P.1084-1110)

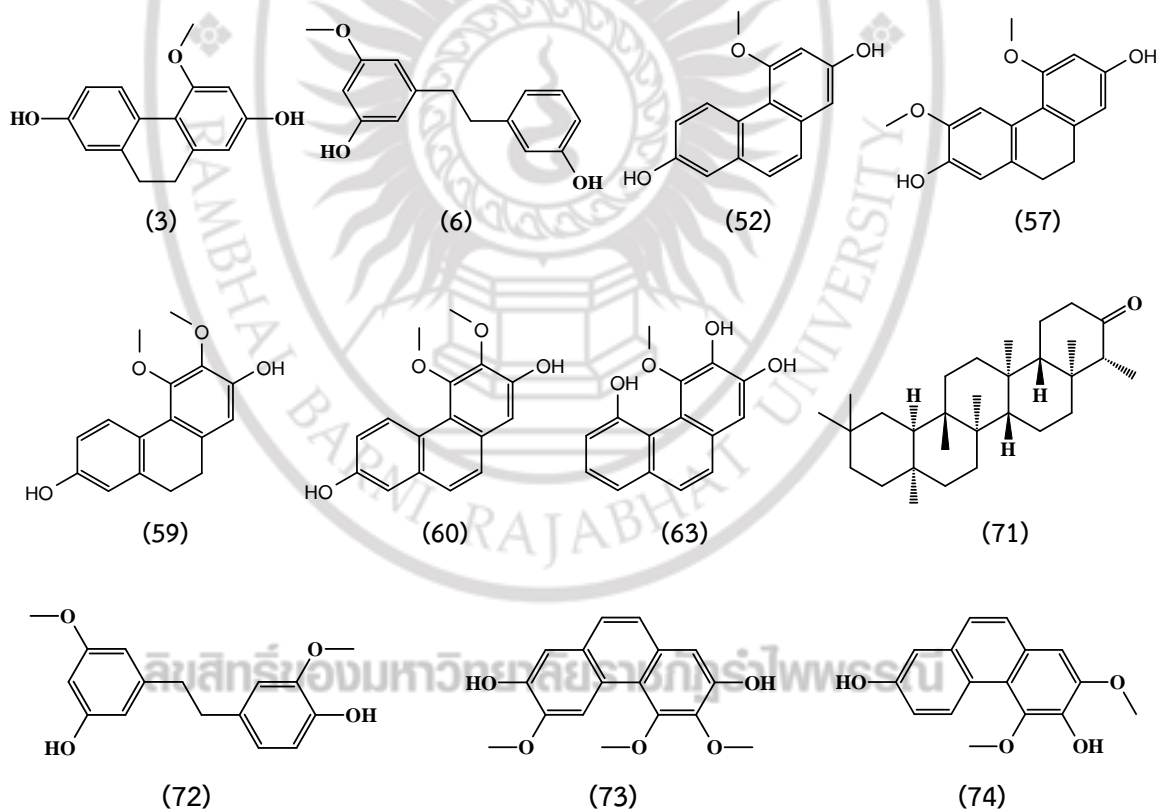


ภาพที่ 4.5 (ต่อ)

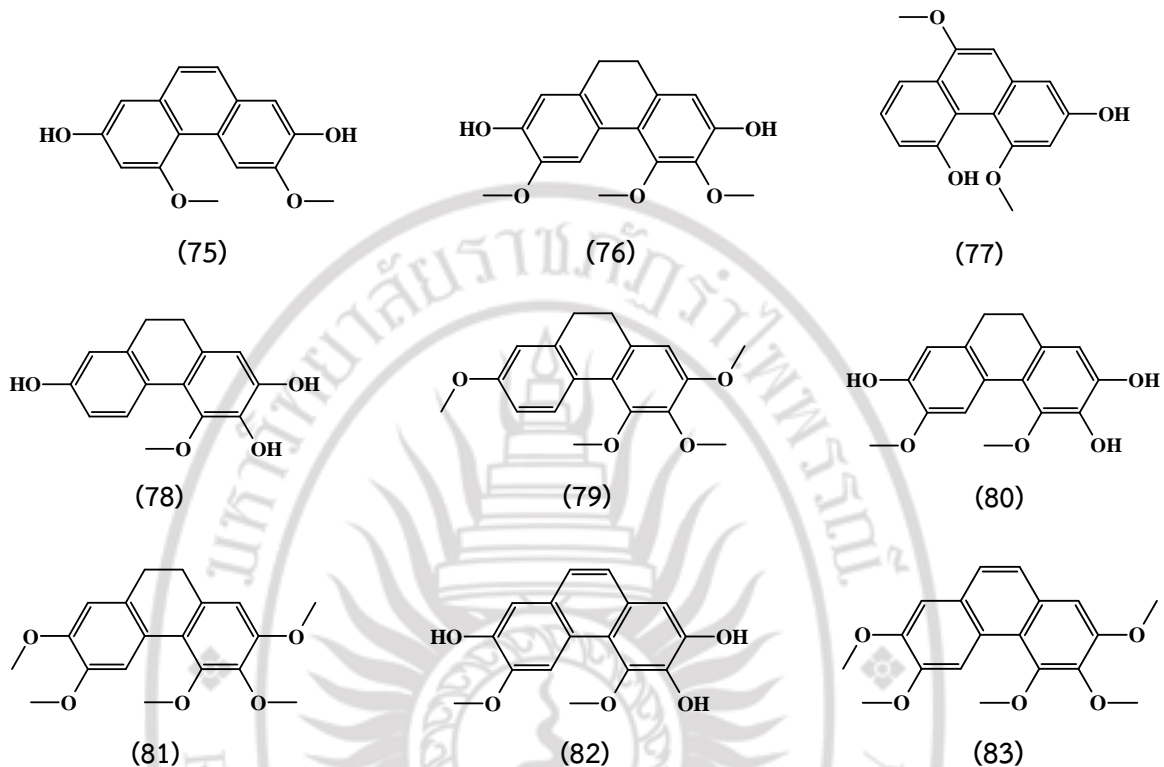
ที่มา : (Kovács et al., 2008 : P.1084-1110)

Leong และคณะ (1997 : P.157-165) ได้รายงานว่าสามารถแยกสารกลุ่มไบเบนซิล ฟิแนนทริน และอนุพันธ์ของ 9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน (9,10-dihydrophenanthrene) จากส่วนสกัดหยาบเฮกเซน ดังนี้ เฟรเดลิลิน (Friedelin, **71**) 3,4'-ไดไฮดร็อกซี-5,5'-ไดเมท็อกซีไบเบนซิล (3,4'-Dihydroxy-5,5'-dimethoxy bibenzyl, **72**) 3,3'-ไดไฮดร็อกซี-5-เมท็อกซีไบเบนซิลหรือบาทาตาสิน 3 (3,3'-Dihydroxy-5-methoxybibenzyl หรือ Batatasin III, **6**) 3,4,6-ไตรเมทเทอแซนทริน-2,7-ไดออล (3,4,6-Trimethenanthrene-2,7-diol, **73**) 3,4-ไดเมท็อกซีฟิแนนทริน-2,7-ไดออลหรือนูดอล (3,4-Dimethoxyphenanthrene-2,7-diol หรือ Nudol, **60**) 2,4-ไดเมท็อกซีฟิแนนทริน (2,4-Dimethoxy phenanthrene-3,7-diol, **74**) 3,5-ไดเมท็อกซีฟิแนนทริน (3,5-Dimethoxyphenanthrene-2,7-diol, **75**) 4-เมท็อกซีฟิแนนทริน-2,3,5-ไตรออลหรือฟิมบริโอลบี (4-Methoxyphenanthrene-2,3,5-triol หรือ Fimbriol B, **63**) 4-เมท็อกซีฟิแนนทริน-2,7-ไดออล (4-Methoxyphenanthrene-2,7-diol หรือ Flavanthrinin, **52**) 3,4,6-ไตรเมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,7-ไดออล (3,4,6-Trimethoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,7-diol, **76**) 4-เมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,7-ไดออลหรือโคโลนิน

(4-Methoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,7-diol หรือ Coelonin, **3**) 3,5-ไดเมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,7-ไดออล หรือ 6-เมท็อกซีโคลอนิน (3,5-Dimethoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,7-diol หรือ 6-methoxycoelonin, **57**) 3,4-ไดเมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,7-ไดออลหรืออีรานทริดิน (3,4-Dimethoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,7-diol หรือ Erianthridin, **59**) 4,9-เมท็อกซีฟิแนนทริน-2,5-ไดออล (4,9-dimethoxyphenanthrene-2,5-diol, **77**) 4-เมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,3,7-ไตรออล (4-Methoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,3,7-triol, **78**) 2,3,4,7-เตตระเมท็อกซีไดไฮโดรฟิแนนทริน-9,10- (2,3,4,7-tetramethoxy-9,10-dihydrophenanthrene, **79**) 4,6-ไดเมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน-2,3,7-ไตรออล (4,6-Dimethoxy-9,10-dihydrophenanthrene-2,3,7-triol, **80**) 2,3,4,6,7-เพนตะเมท็อกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทริน (2,3,4,6,7-pentamethoxy-9,10-dihydrophenanthrene, **81**) 4,6-ไดเมท็อกซีฟิแนนทริน-2,3,7-ไตรออล (4,6-Dimethoxyphenanthrene-2,3,7-triol, **82**) และ 2,3,4,6,7-เพนตะเมท็อกซีฟิแนนทริน (2,3,4,6,7-pentamethoxyphenanthrene, **83**)



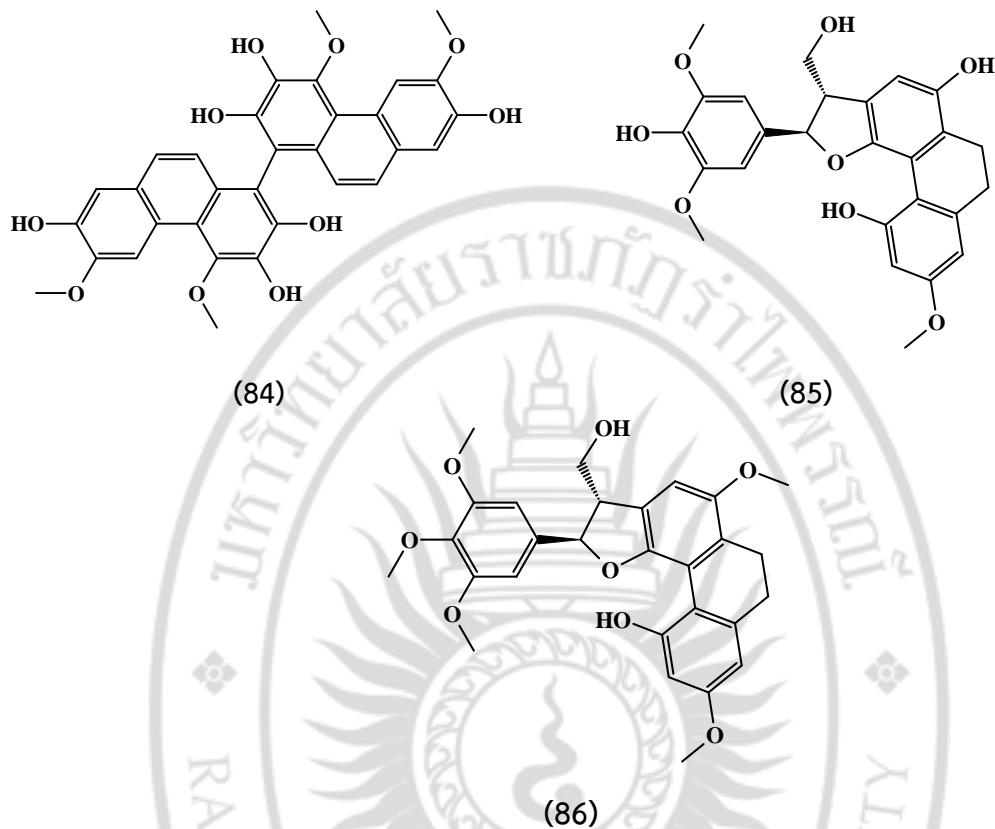
ภาพที่ 4.6 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Leong และคณะ
ที่มา : (Leong et al., 2008 : P.1084-1110)



ภาพที่ 4.6 (ต่อ)

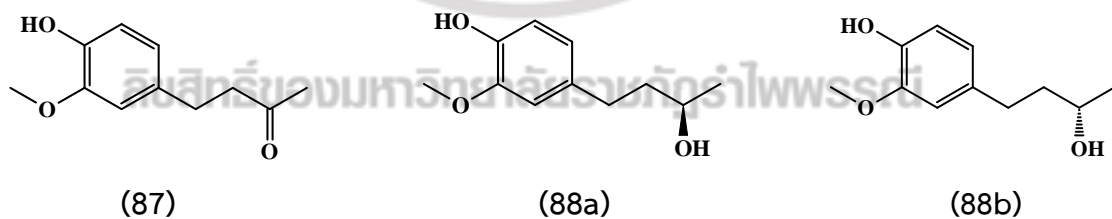
ที่มา : (Leong et al., 2008 : P.1084-1110)

Leong และ Harrison (2004 : P.1601-1603) พบสารในกลุ่มไบฟีแนนทริน (Biphenanthrene) และสารที่เป็นอนุพันธ์ของฟีแนนโท[4,3-*b*] ฟิวเรน (Phenanthro[4,3-*b*]furan derivative) จากต้นกล้วยไม้สิงโตหนวดยาว (*B. vaginatum*) นั่นคือ 4,4',6,6'-เตตระเมท็อกซี-[1,1'-ไบฟีแนนทริน]-2,2',3,3',7,7'-เฮกซอล (4,4',6,6'-Tetramethoxy-[1,1'-biphenanthrene]-2,2',3,3',7,7'-hexol, **84**) และ (2อาร์*,3เอส*)-3-ไฮดร็อกซีเมทิล-9-เมท็อกซี-2-(4'-ไฮดร็อกซี-3',5'-ไดเมท็อกซีฟีนิล)-2,3,6,7-เตตระไฮดรอกฟีแนนโทร [4,3-*b*] ฟิวเรน-5,11-ไดออล ((2R*,3S*)-3-hydroxymethyl-9-methoxy-2-(4'-hydroxy-3',5'-dimethoxyphenyl)-2,3,6,7-tetrahydrophenanthro[4,3-*b*]furan-5,11-diol, **85**) ส่วนสารที่ **86** เป็นสารที่ได้จากการสังเคราะห์โดยการนำสาร **85** มาทำปฏิกิริยาเมทิลเลชัน (Methylation)



ภาพที่ 4.7 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโต จากงานของ Leong และ Harrison
ที่มา : (Leong and Harrison, 2004 : P.1601-1603)

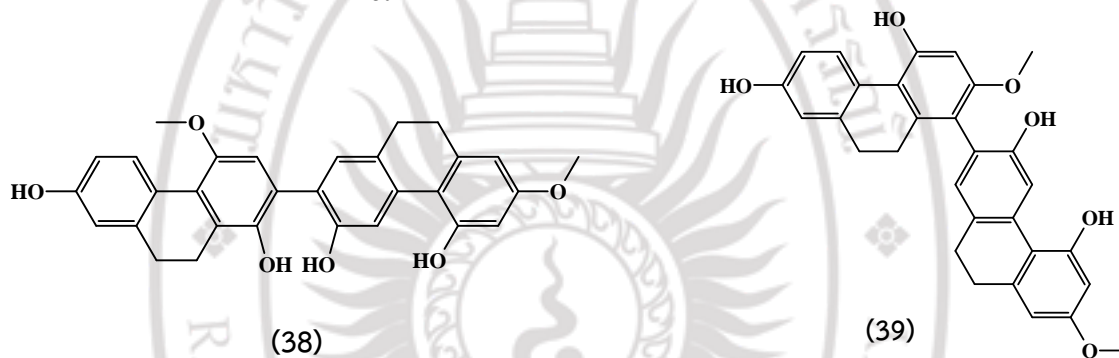
Tan และ Nishida (2007 : P.334-341) รายงานว่ามีสารอินทรีย์ในกลุ่มฟีนอลิกถูกแยกจากดอกกล้วยไม้สกุลสิงโตที่ไม่มีในไทยชื่อปีไบลีย์อี (*B. baileyi*) นั่นคือ ซิงเจอโรน (Zingerone, 87) และซิงเจอร์อล (Zingerol, 88) โดยแมลงผลไม้ตัวผู้ (Male fruit flies) ชนิดแบคโทรซีรา (*Bactrocera*) ถูกดึงดูดด้วยสารซิงเจอโรนที่ถูกสร้างในพืชชนิดนี้ ทั้งนี้เพื่อให้แมลงมาผสมเกสร



ภาพที่ 4.8 โครงสร้างที่เป็นไปได้ขององค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ
Tan และ Nishida

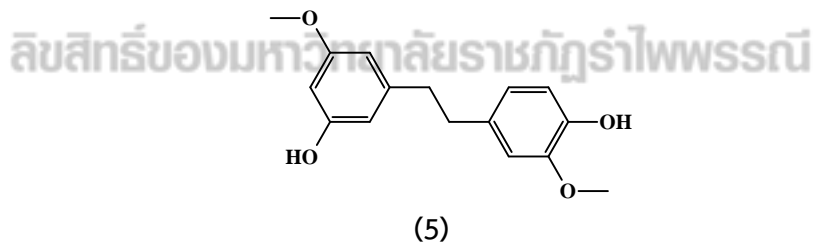
ที่มา : (Tan and Nishida, 2007 : P.334-341)

Xu และคณะ (2009 : P.381-384) ได้รายงานว่าพบสารในกลุ่มไดเมอร์ฟิแนนทริน (Dimeric phenanthrenes) ชื่อ Bulbophythrins A (38) และ B (39) จากกล้วยไม้ชนิดสิงโตหลอดไฟ (*B. odoratissimum*) และเมื่อนำไปทดสอบฤทธิ์การต้านการเจริญเติบโตของเซลล์ลูคีเมียในมนุษย์ (Human leukemia cell lines K562 และ HL-60) เซลล์มะเร็งปอดของมนุษย์ (Human lung adenocarcinoma A549) เซลล์มะเร็งตับ (Human hepatoma BEL-7402) และเซลล์มะเร็งกระเพาะอาหาร (Human stomach cancer SGC-7901) ในห้องปฏิบัติการสารทั้ง 2 ชนิด ให้ฤทธิ์ความเป็นพิษต่อเซลล์ที่ดีโดยบูลโบไฟทรินเอบีบียังเซลล์ลูคีเมียในมนุษย์ (HL-60 และ BEL-7402) ที่ค่ายับยั้งครึ่งหนึ่ง (IC_{50}) 1.27×10^{-3} และ 1.22×10^{-3} ไมโครโมล/มิลลิลิตร ตามลำดับ ส่วนโดยบูลโบไฟทรินบีบีบียังเซลล์มะเร็งปอดของมนุษย์ (A549) ด้วยค่ายับยั้งครึ่งหนึ่ง (IC_{50}) 1.18×10^{-3} ไมโครโมล/มิลลิลิตร



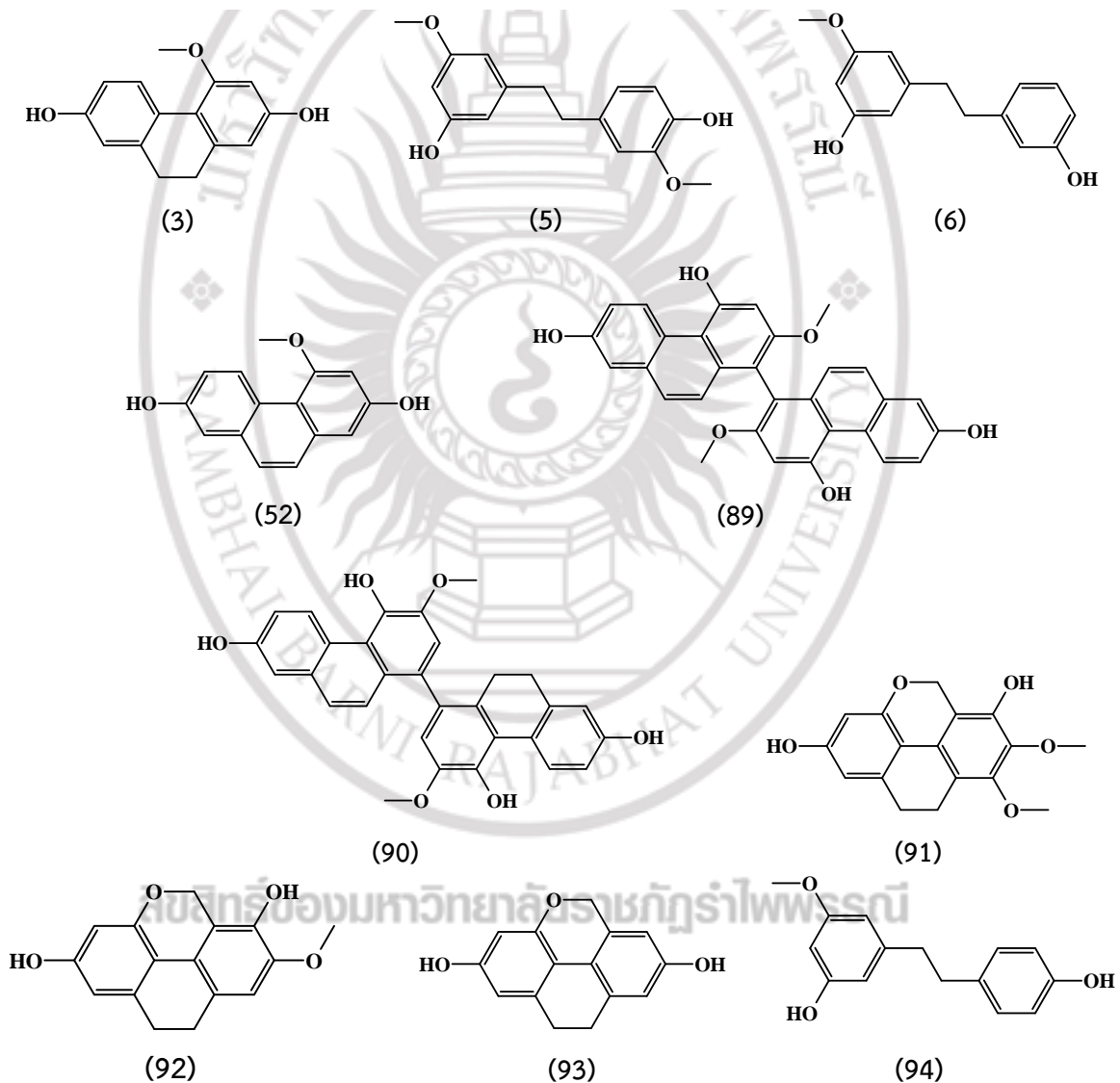
ภาพที่ 4.9 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Xu และคณะ
ที่มา : (Xu et al., 2009 : P.381-384)

Yang และคณะ (2006 : P.230-237) ได้หาวิธีการตรวจสอบสารอินทรีย์กลุ่มฟีนอล (Phenol) 11 สาร ซึ่งประกอบไปด้วยสารที่อยู่ในกลุ่มไบเบนซิล (Bibenzyl) 5 สาร ฟิแนนทริน 3 สาร และฟลูออรีน (Fluorenone) 3 สาร ด้วยเครื่องแฮชพีแอลซี (High-performance liquid chromatography, HPLC) โดยใช้พืช 3 สกุล (*Pholidota*, *Flickingeria* and *Bulbophyllum*) จากการตรวจสอบพบว่ากล้วยไม้ปีแพรแทน (*B. reptans*) พบสารอินทรีย์กลุ่มฟีนอลเพียงชนิดเดียวที่มีชื่อว่าจิกานทอล (Gigantol, 5)

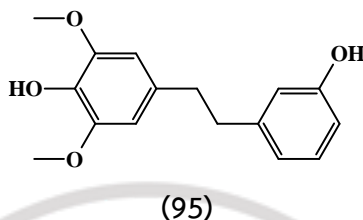


ภาพที่ 4.10 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Yang และคณะ
ที่มา : (Yang et al., 2006 : P.230-237)

Zhao และคณะ (2015 : P.285-287) ได้รายงานถึงสารอินทรีย์ 11 สาร ที่ถูกแยกจากสารสกัดหยาบเมทานอลของกล้วยไม้สกุลสิงโตที่ไม่มีในประเทศไทยที่ชื่อป้อมาร์จินาตุม (*B. emarginatum*) ดังนี้ มอนบาร์บาเทน (Monbarbatin A, **89**) โฟชินนิน (Phochinenin B, **90**) ฟลาวานทรินิน (Flavanthrinin, **52**) โคโลนิน (Coelonin, **3**) โคโลจิน (Coelogenin, **91**) แพลคซิดิน (Flaccidin, **92**) ฟลาวิดิน (Flavidin, **93**) บาตาทาซิน 3 (Batatasin III, **6**) 3,4'-ไดไฮดรอกซี-5-เมทอกซีไบเบนซิล (3,4'-dihydroxy-5-methoxybiphenyl, **94**) จิแกนทอล (Gigantol, **5**) และอะโลยฟอล 1 (Aloifol I, **95**) โดยไม่มีกรรายงานฤทธิ์ชีวภาพใด ๆ



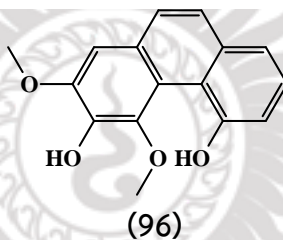
ภาพที่ 4.11 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Zhao และคณะ
ที่มา : (Zhao et al., 2015 : P.285-287)



ภาพที่ 4.11 (ต่อ)

ที่มา : (Zhao et al., 2015 : P.285-287)

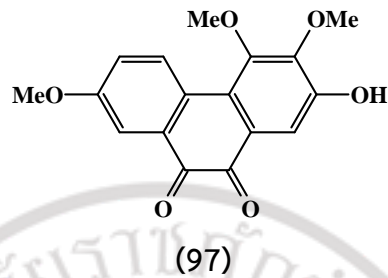
Carreras และคณะ (2013 : P.18815-18823) รายงานวิธีการสังเคราะห์สารบูลโบไฟเลนทริน (Bulbophylantrin, **96**) ซึ่งเป็นสารที่สามารถแยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตชนิดที่ไม่มีอยู่ในประเทศไทยที่ชื่อปิลิโอพาเดียม (*B. leopardium*) นอกจากนี้ยังได้แสดงวิธีสังเคราะห์ของสารในกลุ่มนี้โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นทอง (Au) และลิแกนด์ที่มีประจุ



ภาพที่ 4.12 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Carreras และคณะ

ที่มา : (Carreras et al., 2013 : P.18815-18823)

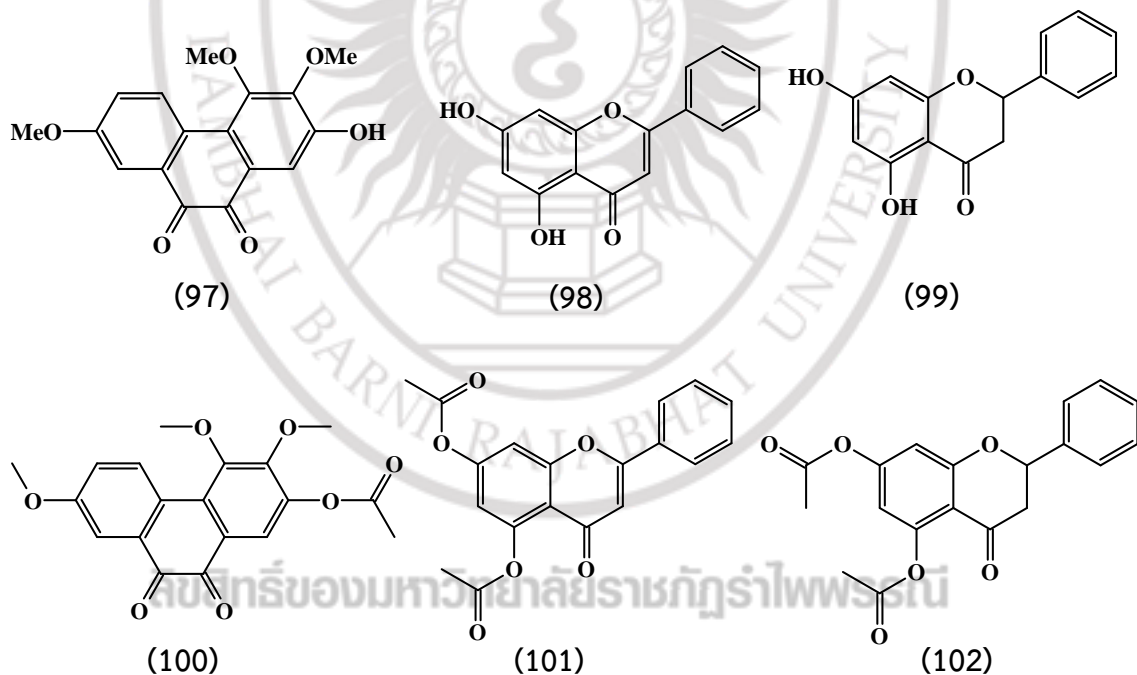
Trosien และ Waldvogel (2012 : P. 2976-2979) รายงานว่า สารบูลโบไฟเลนทริน (2-Hydroxy-3,4,7-trimethoxy-9,10-phenanthrenequinone หรือ Bulbophyllanthrone, **97**) พบในกล้วยไม้ชนิดสิงโตหลอดไฟ (*B. odoratissimum*) เป็นสารที่มีความเป็นพิษต่อเซลล์มะเร็งเม็ดเลือดขาวเป็นอย่างมาก (P388 murine leukemia และ BSC cell lines) นอกจากนี้เขายังเสนอวิธีการสังเคราะห์สารในกลุ่ม 9,10-ฟีแนนทรินควิโนน (9,10-Phenanthrenequinones) โดยใช้โมลิบดีนัมเพนตะคลอไรด์ (Molybdenum pentachloride) โดยปฏิกิริยานี้ให้ร้อยละผลผลิตสูงจึงเป็นอีกแนวทางหนึ่งในการสังเคราะห์ 9,10-ฟีแนนทรินควิโนน โดยไม่ต้องทำการแยกสารกลุ่มนี้จากกล้วยไม้สิงโตหลอดไฟ



ภาพที่ 4.13 องค์ประกอบทางเคมีที่แยกได้จากกล้วยไม้สกุลสิงโตจากงานของ Trosien และ Waldvogel

ที่มา : (Trosien and Waldvogel, 2012 : P. 2976-2979)

คุณ Majumder และคณะ (1991 : P.2092-2094) ได้ทำการแยกองค์ประกอบทางเคมี 3 สารนั้น คือ สารบลูโปไฟเลนโทรน (2-Hydroxy-3,4,7-trimethoxy-9,10-phenanthrenequinon หรือ Bulbophyllanthrone, 97) สารคริซีน (Chrysin, 98) และพินอแบงค์ซิน (Pinobanksin, 99) แล้ววนสารที่ได้ทั้งสามมายืนยันโครงสร้างด้วยปฏิกิริยาอะเซทิลเลชัน (Acetylation) จึงทำให้ได้อนุพันธ์ 100-102

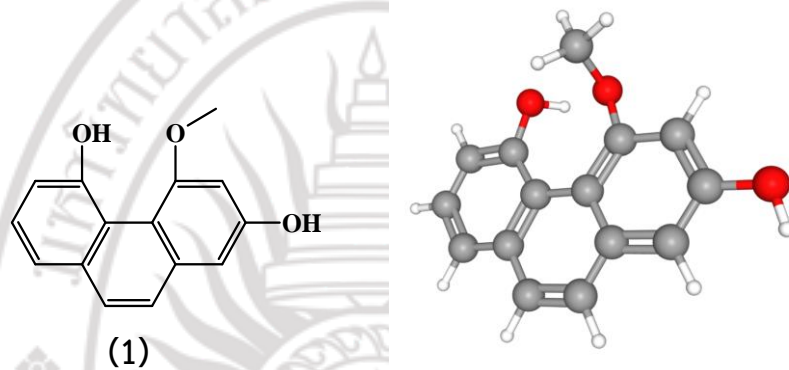


ภาพที่ 4.14 องค์ประกอบทางเคมีและการสังเคราะห์จากงานของ Majumder และคณะ

ที่มา : (Majumder et al., 1991 : P.2092-2094)

ในการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของสารอินทรีย์จะต้องใช้โปรแกรมทำนายแล้วได้ผลออกมาในรูปแบบของไฟล์เอกเซล (Excel) ซึ่งมีข้อมูลจำนวนมาก ทั้งนี้คณะผู้วิจัยได้ทำการรวบรวมแล้วบันทึกไฟล์ไว้ในแผ่นซีดีเพื่อเป็นการประหยัดพื้นที่ภายในเล่มรายงานผลการวิจัย แต่จะขอแสดงผลการวิเคราะห์สารเพียงบางส่วนดังต่อไปนี้

การทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาติน



ภาพที่ 4.15 โครงสร้าง 2 และ 3 มิติ ของโมสคาติน

ที่มา : (National Center for Biotechnology Information, 2020)

โมสคาติน (Moscatin) มีอีกชื่อว่า Plicatol B, 4-Methoxy-2,5-Phenanthrenediol และ 4-Methoxy-2,5-dihydroxyphenanthrene โดยโมสคาตินมีน้ำหนักโมเลกุล 240.25 กรัม/โมล โดยโมสคาตินมีฤทธิ์ต้านเกล็ดเลือด (Antiplatelet activity against washed rabbit platelet assessed as inhibition of arachidonic acid-induced platelet) (Chen et al., 1994 : P.1271)

ตารางที่ 4.1 ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาติน

ผลการทดสอบ	ฤทธิ์ทางชีวภาพ	เอกสารอ้างอิง
มีฤทธิ์ (Active)	aggregation preincubated for 3 mins by turbidimetric method	
ไม่มีฤทธิ์ (Inactive)	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง Primary qHTS to identify gynecologic anti-cancer compounds using libraries of approved drugs and bioactive compounds	(National center for biotechnology information, 2020)

ตาราง 4.1 (ต่อ)

ผลการทดสอบ	ฤทธิ์ทางชีวภาพ	เอกสารอ้างอิง
ไม่จำเพาะ เจาะจง (Unspecified)	ต้านเชื้อรา Antifungal activity against <i>Pestalotzia theae</i> after 4 to 14 days by serial dilution method	(Zhou et al., 2016 : P.1791)
ไม่จำเพาะ เจาะจง (Unspecified)	ต้านรา Antifungal activity against <i>Alternaria citri</i> after 4 to 14 days by serial dilution method	(Zhou et al., 2016 : P.1791)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยลิแกนด์สเก๊าท์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยโปรแกรมลิแกนด์สเก๊าท์ พบว่าโมสคาทินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจ เนื่องจากฤทธิ์ทางชีวภาพในหน่วยไมโครโมลาร์ยังไม่ถือว่าเป็นยาที่ดี

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยซี

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยโปรแกรมซี ดังตารางที่ 4.2 พบว่าโมสคาทินไม่มีความคล้ายคลึงกับยาที่ใช้ในปัจจุบันและไม่มีความคล้ายคลึงกับโครงสร้างของสารในร่างกายที่มีฤทธิ์ทางชีวภาพ แต่มีโอกาสที่โมสคาทินมีฤทธิ์ทางชีวภาพในการเป็นสารตั้งต้นของสารสื่อประสาท ยารักษาผู้ป่วยทางสมอง โรคมะเร็ง จึงควรทำงานทดลองสารโมสคาทินกับฤทธิ์ทางชีวภาพดังกล่าว

ตารางที่ 4.2 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยโปรแกรมซี

ยีนเป้าหมาย	ค่าสัมประสิทธิ์ของทานิโมโต้	ฤทธิ์ทางชีวภาพ
DYR1A ของหนู	0.4000	เกี่ยวข้องกับกรดอะมิโนที่ชื่อไทโรซีน (Dual specificity tyrosine-phosphorylation-regulated kinase 1A) โดยไทโรซีน เป็นสารตั้งต้นของสารสื่อประสาทได้แก่ 1.โดปามีน ทำหน้าที่ควบคุมการเคลื่อนไหวต่ออารมณ์ของบุคคล ช่วยให้มีสติตื่นตัว กระฉับกระเฉง มีสมาธิมากขึ้น ไวต่อสิ่งกระตุ้นต่าง ๆ รอบตัว

ตารางที่ 4.2 (ต่อ)

ยีนเป้าหมาย	ค่าสัมประสิทธิ์ของทานิโมโต้	ฤทธิ์ทางชีวภาพ
		2. นอร์เอพิเฟริน (นอร์อะดรีนาลีน) ทำหน้าที่เพิ่มอัตราการเต้นของหัวใจ
		3. เพิ่มการหายใจเร็วขึ้น ทำให้ออกซิเจนไปเลี้ยงร่างกายและสมองมากขึ้น ทำให้ร่างกายและสมองทำงานได้ดีกว่าปกติ และหยุดกระบวนการบางอย่างของร่างกายเช่น กระบวนการย่อยอาหาร 4. เอพิเนเฟริน (อะดรีนาลีน) ทำหน้าที่คล้าย นอร์เอพิเฟริน เนื่องจาก ไทโรซีน เป็นสารตั้งต้นของสารต่างๆ ที่กล่าวมาข้างต้น จึงมีการนำ ไทโรซีน มาเป็นผลิตภัณฑ์เสริมอาหาร โดยมีการศึกษาวิจัยพบว่า ช่วยกระตุ้นสมอง ลดความเครียด ลดอาการซึมเศร้า
ABCG2 ของมนุษย์	0.3725	เกี่ยวกับพลังงานชีวเคมี (ATP-binding cassette sub-family G member 2)
A4 ของมนุษย์	0.3659	โปรตีนแอมิลอยด์บีตา เอ4 (Amyloid beta A4 protein) เป็นสายเพปไทด์ขนาด 39–43 กรดอะมิโนซึ่งเป็นองค์ประกอบหลักของคราบแอมิลอยด์ พลาแก (Amyloid plaque) ในสมองของผู้ป่วยโรคอัลไซเมอร์ พลาแกดังกล่าวยังพบได้ในโรคสมองเสื่อมบางชนิดเช่น Lewy body dementia บางชนิด และโรคกล้ามเนื้ออักเสบเช่น Inclusion body myositis แอมิลอยด์ บีต่ายังรวมกลุ่มคลุมรอบหลอดเลือดสมองในโรค Cerebral amyloid angiopathy พลาแกหรือคราบดังกล่าวประกอบด้วยเส้นใยโปรตีนยุ่งเหยิงที่ลำดับการเรียงตัวปกติเรียกว่า เส้นใยแอมิลอยด์ (Amyloid fibers) ซึ่งเป็นการม้วนพับของโปรตีนที่ผิดปกติเช่นเดียวกับในเพปไทด์อื่นๆ เช่นพรีออน
PGFRA ของหนู	0.3529	การสร้างเกล็ดเลือด (Platelet-derived growth factor receptor alpha) จริง ๆ แล้วกระบวนการนี้เกี่ยวข้องกับไทโรซีน โดยตัวรับปัจจัยการเจริญเติบโตของเกล็ดเลือดคือตัวรับไทโรซีนไคนเนสของเซลล์ผิวสำหรับสมาชิกของตระกูลปัจจัยการเจริญเติบโตของเกล็ดเลือด PDGF subunits -A และ -B

ตารางที่ 4.2 (ต่อ)

ยีนเป้าหมาย	ค่าสัมประสิทธิ์ของทานิโมโต้	ฤทธิ์ทางชีวภาพ
		เป็นปัจจัยสำคัญที่ควบคุมการเพิ่มจำนวนเซลล์การแยกเซลล์ การเจริญเติบโตของเซลล์การพัฒนาและโรคต่าง ๆ รวมถึงโรคมะเร็ง
CAH7 ของมนุษย์	0.3488	คาร์บอนิกแอนไฮเดรส (Carbonic anhydrase 7) เป็นกลุ่มโลหะสังกะสีขนาดใหญ่ (Zinc metalloenzymes) ที่เร่งปฏิกิริยาการคายน้ำของคาร์บอนไดออกไซด์ที่ผันกลับได้ มีส่วนร่วมในกระบวนการทางชีวภาพที่หลากหลาย รวมถึงการหายใจ การสร้างแคลเซียม สมดุลกรดเบส การสลายตัวของกระดูก และการสร้างของเหลว น้ำไขสันหลัง น้ำลาย และกรดในกระเพาะอาหาร คาร์บอนิกแอนไฮเดรสแสดงฤทธิ์ทางชีวภาพที่หลากหลาย การกระจายตัวของเนื้อเยื่อและในการเปลี่ยนแปลงเฉพาะเซลล์ โปรตีนไซโตไซลิกที่เข้ารหัสโดยยีนนี้ส่วนใหญ่แสดงออกในต่อมน้ำลาย การเข้ารหัสในแต่ละตำแหน่งส่งผลให้ตัวแปรการถอดเสียงหลายตัวเข้ารหัสไอโซฟอร์มต่างกัน
TBB1 ของมนุษย์	0.3256	ต้านมะเร็ง (Tubulin beta-1 chain)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยฟาร์แมปเปอร์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์ ดังตารางที่ 4.3 พบว่าโมสคาทินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ

ตารางที่ 4.3 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์

ความพอดีของโมเดล	ชื่อเอนไซม์หรือรีเซปเตอร์	หน้าที่	สำหรับโรค
2.972	359aa long hypothetical alcohol dehydrogenase	เกี่ยวข้องกับ การต่อกับ ไอออนของสังกะสี	ไม่มี
2.969	Delta-aminolevulinic acid dehydratase	การขนส่งโคเอนไซม์ และการเผาผลาญพลังงาน	ไม่มี
2.955	Major urinary protein 1	เกี่ยวกับพีโรโมนที่ถูกปล่อยออกมาจาก ปัสสาวะของเพศชาย ซึ่งพีโรโมนเหล่านี้มีผล ต่อพฤติกรรมทางเพศ ของเพศหญิง	ไม่มี
2.889	Odorant-binding protein	โปรตีนชนิดนี้พบได้ใน เยื่อจมูกและการ จับกับสารเคมีที่ เกี่ยวข้องกับกลิ่น	ไม่มี
2.877	Monomeric sarcosine oxidase	การขนส่งกรดอะมิโน และการเผาผลาญพลังงาน	ไม่มี
2.836	Bone morphogenetic protein 2	กระตุ้นการสร้างกระดูกอ่อนและกระดูก	การบาดเจ็บของกระดูก โรคกระดูกและ กล้ามเนื้อ โรคปริทันต์ และโรคกระดูกพรุน
2.820	Quinohaemoprotein ethanol dehydrogenase type-1	การขนส่ง คาร์โบไฮเดรตและการ เผาผลาญ	ไม่มี
2.807	Oxygen-insensitive NAD(P)H nitroreductase	การขนส่งไขมันและการ เผาผลาญ	เพื่อบรรเทาอาการของ ผู้ป่วยที่เป็นโรค กระเพาะปัสสาวะ อักเสบ

ตารางที่ 4.3 (ต่อ)

ความพอดีของโมเดล	ชื่อเอนไซม์หรือรีเซปเตอร์	หน้าที่	สำหรับโรค
2.406	Prothrombin	มีหน้าที่รักษาสภาวะสมดุลของเลือด การอักเสบ และการรักษาบาดแผล	โรคหลอดเลือดสมองตีบ การเกิดอุบัติเหตุที่กระทบต่อหลอดเลือดสมองหรือกล้ามเนื้อสมอง โรคสมองขาดเลือดเฉียบพลัน
2.93	Complement factor D	การขาดสารนี้มีแนวโน้มที่จะทำให้เกิดโรคไขกาทหลังแอ่น	โรคไขกาทหลังแอ่น โรคแพ้ภูมิตัวเอง การเสื่อมของเซลล์
2.905	cAMP-specific 3,5-cyclic phosphodiesterase 4D	ควบคุมระดับของ cAMP ในเซลล์	โรคหลอดเลือดสมอง
2.901	Pyruvoyl-dependent arginine decarboxylase	เกี่ยวข้องกับกิจกรรมของเอนไซม์อาร์จินีน ดีคาร์บอกซิลเลส	ไม่มี
3.136	Parathion hydrolase	มีความจำเพาะของสารตั้งต้นที่ผิดปกติสำหรับไตรเอสเทอร์ออร์กาโนฟอสเฟตสังเคราะห์และฟอสฟอร์ฟลูออไรด์ ฟอสเฟตไตรเอสเทอร์ทั้งหมดที่พบว่าเป็นสารตั้งต้นเป็นสารประกอบสังเคราะห์	ไม่มี
3.287	Beta-lactoglobulin	เกี่ยวข้องกับการจับเรตินอยด์	ไม่มี
3.236	Alcohol dehydrogenase class-3	เร่งปฏิกิริยาออกซิเดชันของแอลกอฮอล์หลักสายยาวและการออกซิเดชันของกลูตาไธโอน S- (ไฮดรอกซีเมทิล)	

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยพาส

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยพาสดังตารางที่ 4.4 พบว่าโมสคาทินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ

โปรแกรมพาสแบบออนไลน์จะให้ผลทำนายที่เป็นจำนวนตัวบ่งชี้ทางเคมีทั้งหมดของซัพเตรท (Chemical descriptors of the substance) และบอกจำนวนของตัวบ่งชี้ (Descriptors)

ถ้า $Pa > 0.7$ แสดงว่า สารโครงสร้างนั้น (Substance) มีแนวโน้มที่จะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่ทดสอบสูง และมีโอกาสที่สารนั้นจะเป็นยาที่ถูกใช้ในปัจจุบันแล้วสูงด้วย

ถ้า $0.5 < Pa < 0.7$ แสดงว่า สารโครงสร้างนั้นมีแนวโน้มที่จะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่ทดสอบ แต่มีโอกาสที่สารนั้นจะเป็นยาที่ถูกใช้ในปัจจุบัน

ถ้า $Pa < 0.5$ แสดงว่า สารโครงสร้างนั้นมีแนวโน้มที่จะไม่มีฤทธิ์ทางชีวภาพที่ทดสอบ อย่างไรก็ตามถ้ามีการทดลองยืนยันว่าสารนี้มีฤทธิ์ทางชีวภาพนั้น ก็อาจเป็นตัวยาตัวใหม่หรือยาที่มีกลไกใหม่ได้ (Lagunin et al., 2000 : P.747-748)

ตารางที่ 4.4 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยพาส

Pa	ผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพ
0,951	ยับยั้งเอนไซม์ในตระกูลทรานเฟอร์เรสโดยเฉพาะที่ถ่ายโอนหมู่แอลิลหรืออัลคิล (Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor)
0,939	มีฤทธิ์เผาผลาญกรดไลโนเลอิก ยับยั้งโรคการเผาผลาญกลูโคส โรคโลหิตจางชนิดเดียว (CYP2C12 substrate)
0,935	ยับยั้งเอนไซม์ที่อยู่ในตระกูลของออกซิโดเทสโดยเฉพาะที่ทำหน้าที่ในกลุ่ม CH-OH ของผู้บริจาดที่มี NAD + หรือ NADP + เป็นตัวรับ (Chlordecone reductase inhibitor)
0,924	ตัวเร่งความสมบูรณ์ของเมมเบรน (Membrane integrity agonist)
0,912	ยับยั้งการเจริญเติบโตของ JAK2 ที่พบในมะเร็งทรวงอก (JAK2 expression inhibitor)
0,903	ยับยั้งไซโทโครมซีของสัตว์เลี้ยงลูกด้วยนมยีสต์และพืช (Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor)
0,891	ยับยั้งแอลดีไฮด์ออกซิเดส ส่งผลต่อการเผาผลาญของยาและซิโนไบโอติกที่แตกต่างกันซึ่งบางชนิดได้รับการออกแบบมาเพื่อต่อต้านเอนไซม์เมตาบอลิซึมอื่น ๆ ในตับ (Aldehyde oxidase inhibitor)
0,887	ยับยั้งการผิวหนังอักเสบของต่อมไขมัน (Antiseborrheic)
0,872	ยับยั้งเอนไซม์ที่เร่งปฏิกิริยาการสลายตัวของไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์ให้เป็นน้ำ (Peroxidase inhibitor)

ตารางที่ 4.4 (ต่อ)

Pa	ผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพ
0,868	ยับยั้งตัวควบคุมการตอบสนองของเซลล์ต่อภาวะขาดออกซิเจน (HIF1A expression inhibitor)
0,855	ยับยั้งการซึมผ่านของเมมเบรน (Membrane permeability inhibitor)
0,834	ยับยั้งเอนไซม์ทอรีนดีไฮโดรจีเนส (Taurine dehydrogenase inhibitor) ทอรีนเป็นกรดอะมิโนชนิดหนึ่งที่พบได้มากในเซลล์ประสาท กล้ามเนื้อหัวใจ จอตา สมอง และเซลล์เม็ดเลือดที่เรียกว่าเกล็ดเลือด
0,827	ยับยั้งเอนไซม์ฮิสทีดีนไคเนส (Histidine kinase inhibitor) ที่เป็นประโยชน์
0,823	ยับยั้งเอนไซม์ที่เป็นประโยชน์ (Tetrahydroxynaphthalene reductase inhibitor)
0,829	ยับยั้งเอนไซม์ที่เป็นประโยชน์ (Feruloyl esterase inhibitor)
0,815	UGT1A9 substrate หรือเอ็นไซม์ Glucuronosyl transferase subtype UGT1A9 เปนสารที่ไม่มีฤทธิ์ (inactive metabolite)
0,811	เป็นตัวเร่ง CYP1A (CYP1A inducer) ยีน CYP1A มีหน้าที่หลักในการเปลี่ยนสารเคมีที่ได้รับจากแหล่งภายนอก เช่น สารในกลุ่ม Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) ที่ปนเปื้อนในแหล่งอาศัยไปเป็นสารประกอบที่ละลายน้ำและสามารถขับออกจากร่างกายได้ง่าย
0,808	UGT2B12 substrate อยู่ในตับ เกี่ยวกับการกำจัดของเสียและสารพิษออกจากร่างกาย
0,812	ยับยั้งเอนไซม์ที่เป็นประโยชน์ (Gluconate 2-dehydrogenase (acceptor) inhibitor)
0,798	ยับยั้งพินัน (Pin1 inhibitor) การควบคุม Pin1 มีส่วนเกี่ยวข้องกับมะเร็งบางชนิดและการควบคุม Pin1 ที่ลดลงมีส่วนเกี่ยวข้องกับโรคอัลไซเมอร์ สารยับยั้ง Pin1 อาจมีผลในการรักษาโรคมะเร็ง และความผิดปกติของระบบภูมิคุ้มกัน
0,797	เพิ่มการแสดงออก TP53 (TP53 expression enhancer) ยีนนี้ยับยั้งเนื้องอก การกลายพันธุ์ของยีนนี้เกี่ยวข้องกับมะเร็งในมนุษย์หลายชนิดรวมถึงมะเร็งที่ถ่ายทอดทางพันธุกรรม
0,788	UGT1A6 substrate
0,787	ยับยั้งปฏิกิริยาออกซิเดชัน (4-Methoxybenzoate monooxygenase (O-demethylating) inhibitor)
0,783	ตัวยับยั้งไนเตรตรีดักเตส (ไนโตรโคโรม) (Nitrate reductase (cytochrome) inhibitor) เอนไซม์ไนเตรตรีดักเตสเป็นเอนไซม์ที่ควบคุมปฏิกิริยาการนำไนเตรตไปใช้
0,774	สารกระตุ้นแคสเปส 3 (Caspase 3 stimulant) เอนไซม์แคสเปสทำหน้าที่ทำให้เซลล์เสื่อมสภาพ โดยส่วนปลายด้านคาร์บอกซีของโมเลกุลตัวรับ Ptc1 ซึ่งอยู่ภายในเซลล์จะถูกตัดโดยเอนไซม์แคสเปส-3 (caspase-3) ซึ่งจะเสนอโดเมนที่กระตุ้นกระบวนการอะพอพโทซิส (apoptosis-producing domain)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยเอนโดครานดิสรีบโทม

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยเอนโดครานดิสรีบโทมดังตารางที่ 4.5 พบว่าโมสคาทินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ โดยโปรแกรมทำนายว่าโมสคาทินมีผล AR an.: -8.9 หมายความว่าโมสคาทินน่าจะต่อกับแอนโดรเจนรีเซปเตอร์ (Androgen receptor, AR) ด้วยค่า IC₅₀ หรือ EC₅₀ น้อยกว่า 1 ไมโครเมตร

ตารางที่ 4.5 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยเอนโดครานดิสรีบโทม

เป็นไปได้สูง	เป็นไปได้	เป็นไปได้น้อย	เป็นไปได้น้อยมาก
AR an.: -8.9		AR : -8.1	ER α an.: -7.8
		ER α : -8.4	ER β an.: -8.2
		ER β : -8.4	GR an.: -7.8
		GR: -8.2	LXR α : -8.5
		TR α : -8.8	LXR β : -9.5
		TR β : -8.4	PPAR α : -8.1
			PPAR β : -8.0
			PPAR γ : -7.8
			RXR α : -8.2

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยสวิตาร์เกตพีดีคชัน

สวิตาร์เกตพีดีคชันทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพและผลข้างเคียง โดยใช้โมเดลของสิ่งมีชีวิต 5 ชนิด นั่นคือ คน (*Homo sapiens*) หนูหริ่งบ้าน (*Mus musculus*) หนูบ้าน (*Rattus norvegicus*) โคสายพันธุ์ยุโรป (*Bos Taurus*) และ ม้า (*Equus caballus*) โดยมีผลดังนี้

ตารางที่ 4.6 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาทินด้วยสวิตาร์เกตพีดีคชัน

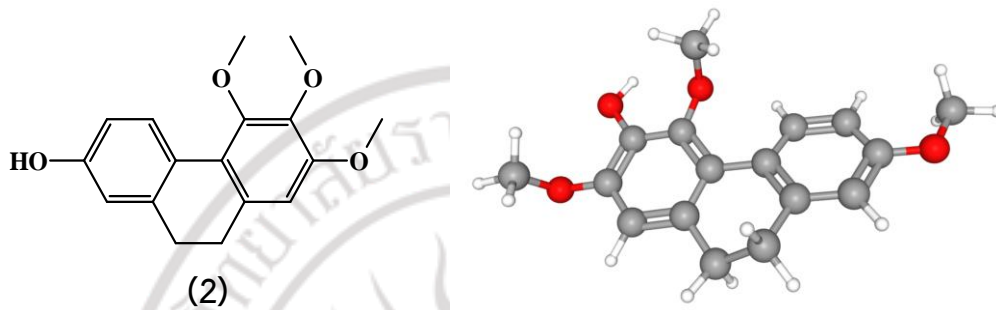
เป้าหมาย	ชนิด	ความเป็นไปได้
คน (<i>Homo sapiens</i>)		
Dual specificity tyrosine-phosphorylation-regulated kinase 1A	Ser_Thr_Tyr Kinase	0.59
Amine oxidase [flavin-containing] A	Enzyme	0.59

ตารางที่ 4.4 (ต่อ)

เป้าหมาย	ชนิด	ความเป็นไปได้
Amine oxidase [flavin-containing] B	Enzyme	0.59
Complex	Ser_Thr Kinase &Ser_Thr Kinase	0.55
หนูหริ่งบ้าน (<i>Mus musculus</i>)		
Dual specificity tyrosine-phosphorylation-regulated kinase 1A	Ser_Thr_Tyr Kinase	0.59
Amine oxidase [flavin-containing] A	Enzyme	0.59
Amine oxidase [flavin-containing] B	Enzyme	0.59
หนูบ้าน (<i>Rattus norvegicus</i>)		
Dual specificity tyrosine-phosphorylation-regulated kinase 1A	Enzyme	0.59
Dual-specificity tyrosine-(Y)-phosphorylation regulated kinase 1b (Predicted)	4 Enzymes	Yes
Amine oxidase [flavin-containing] B	Enzyme	0.59
Monoamine oxidase A	Enzyme	0.59
Carbonic anhydrase 9 (Predicted)	4 Enzymes	Yes
โคสายพันธุ์ยุโรป (<i>Bos Taurus</i>)		
<i>Uncharacterized protein</i>	Enzyme	0.59
<i>Amine oxidase [flavin-containing] A</i>	Enzyme	0.59
<i>Amine oxidase [flavin-containing] B</i>	Enzyme	0.59
ม้า (<i>Equus caballus</i>)		
<i>Uncharacterized protein</i>	Enzyme	0.59
Monoamine oxidase B	Enzyme	0.59
Amine oxidase [flavin-containing] A	Enzyme	0.59

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโมสคาตินด้วยสวิตเซอร์เกตฟีดคั้งตารางที่ 4.4 พบว่าโมสคาตินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ

การทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีน



ภาพที่ 4.16 โครงสร้าง 2 และ 3 มิติ ของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีน
ที่มา : (National Center for Biotechnology Information, 2020)

7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีน (7-Hydroxy-2,3,4-trimethoxy-9,10-dihydrophenanthrene) มีน้ำหนักโมเลกุล 286.32 กรัม/โมล ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีน คือมีฤทธิ์ความเป็นพิษต่อเซลล์ต่อเซลล์มะเร็งเม็ดเลือดขาว (Leukemia, HL60) ของเซลล์มนุษย์ ด้วยค่า IC_{50} 31.8 ไมโครโมลาร์ เมื่อทดสอบด้วยวิธี WST8 เป็นเวลา 72 ชั่วโมง ถึงสารนี้จะมีฤทธิ์ทางชีวภาพแต่มีหน่วยไมโครโมลาร์ ซึ่งถือว่าฤทธิ์ทางชีวภาพน้อย จึงไม่เหมาะที่จะนำมาทำยา

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีนด้วยลิแกนด์สเก๊าท์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีนด้วยโปรแกรมลิแกนด์สเก๊าท์ พบว่า 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟิแนนทีนไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจ เนื่องจากฤทธิ์ทางชีวภาพในหน่วยไมโครโมลาร์ยังไม่ถือว่าเป็นยาที่ดี

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยซี

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยโปรแกรมซี ดังตารางที่ 4.7 พบว่า 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนน่าจะมีฤทธิ์ต้านมะเร็ง

ตารางที่ 4.7 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยโปรแกรมซี

ยีนเป้าหมาย	ค่าสัมประสิทธิ์ของทานิโมโต้	ฤทธิ์ทางชีวภาพ
TBA1A ของหมู	0.6341	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง (Tubulin alpha-1A chain)
TBB2B ของวัว	0.4706	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง (Tubulin beta-2B chain)
TBB1 ของมนุษย์	0.4561	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง (Tubulin beta-1 chain)
NROB1 ของมนุษย์	0.4286	NROB1 (Nuclear receptor subfamily 0 group B member 1) เป็นสื่อกลางโดยตัวรับกรดเรติโนอิก โปรตีนนี้ยังทำหน้าที่เป็นยีนต่อต้านอัมพา การกลายพันธุ์ของยีนนี้ส่งผลให้เกิดภาวะบกพร่อง ต่อมหมวกไตพิการ
Q862F3 ของวัว	0.4464	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง (Similar to alpha-tubulin isoform 1)
S22A3 ของมนุษย์	0.4464	ยีน S22A3 (Solute carrier family 22 member 3) ตัวขนส่งไอออนบวกอินทรีย์เฉพาะทางในตับไตลำไส้และอวัยวะอื่น ๆ มีความสำคัญอย่างยิ่งต่อการกำจัดไอออนบวกอินทรีย์ขนาดเล็กจำนวนมากจากภายนอกรวมทั้งยาและสารพิษจากสิ่งแวดล้อมหลายชนิด
TPPP ของวัว	0.4464	ฤทธิ์ต้านมะเร็ง (Tubulin polymerization-promoting protein)

ทูบูลิน (Tubulin) เป็นโปรตีนทรงกลมซึ่งมักพบในเซลล์ยูคาริโอตซึ่งมีหลายรูปแบบซึ่งทั้งหมดมีบทบาทสำคัญในโครงสร้างและหน้าที่ของเซลล์

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยฟาร์แมปเปอร์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์ ดังตารางที่ 4.8 พบว่า 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ

ตารางที่ 4.8 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์

ความพอดีของโมเดล	ชื่อเอนไซม์หรือรีเซปเตอร์	หน้าที่	สำหรับโรค
3.873	Tetrahydroxynaphthalene reductase	Lipid transport and metabolism	ไม่มี
3.795	3-keto-L-gulonate-6-phosphate decarboxylase ulaD	Carbohydrate transport and metabolism	ไม่มี
3.758	Choloylglycine hydrolase	Cell wall/membrane/envelope biogenesis	ไม่มี
3.709	Aldo-keto reductase family 1 member C2	Works in concert with the 5-alpha/5-beta-steroid reductases to convert steroid hormones into the 3-alpha/5-alpha	ไม่มี
3.698	Cobalt-precorrin-4 C(11)-methyltransferase	Cobalt-precorrin-4 C(11)-methyltransferase	ไม่มี
3.640	Fucolectin	Acts as a defensive agent. Recognizes blood group fucosylated oligosaccharides including A, B, H and Lewis B-type	ไม่มี

ตารางที่ 4.3 (ต่อ)

ความพอดีของโมเดล	ชื่อเอนไซม์หรือรีเซปเตอร์	หน้าที่	สำหรับโรค
3.638	Deoxycytidylate deaminase	Nucleotide transport and metabolism	ไม่มี
3.538	Glucose-6-phosphate isomerase	Carbohydrate transport and metabolism	ไม่มี
3.531	Dihydrofolate reductase	Coenzyme transport and metabolism	ไม่มี
2.875	Macrophage migration inhibitory factor	The expression of MIF at sites of inflammation suggest a role for the mediator in regulating the function of macrophage in host defense. Also acts as a phenylpyruvate tautomerase.	เบาหวานชนิดที่พึ่งพาอินซูลิน (Insulin dependent diabetes) มะเร็ง (Cancer) โรคภูมิคุ้มกัน (Autoimmune disease และ Immune disorder)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยพาส

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยพาสดังตารางที่ 4.9 พบว่า 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนน่าจะมีฤทธิ์ในการรักษาโรคมะเร็งทางโลหิตวิทยา โรคอัลไซเมอร์ โรคจิตเภท และต้านอาการทางจิต

ตารางที่ 4.9 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยพาส

Pa	ผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพ
0,940	น่าจะใช้บำบัดโรคมะเร็งทางโลหิตวิทยา (JAK2 expression inhibitor)
0,914	น่าจะใช้รักษาโรคอัลไซเมอร์ (Alzheimer's Disease) และโรคจิตเภท (Schizophrenia) (Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor)
0,910	ยาต้านอาการทางจิต (Aldehyde oxidase inhibitor)
0,898	ต้านแอนติบอดี (CYP2C12 substrate)
0,866	น่าจะใช้บำบัดโรคมะเร็งต่อมลูกหมาก (Chlordecone reductase inhibitor)
0,859	น่าจะใช้บำบัดกล้ามเนื้อหัวใจตายเฉียบพลัน (Membrane permeability inhibitor)
0,840	รักษารังแค (Antiseborrheic)
0,834	ต้านสเตอรอยด์ชนิดหนึ่ง (Steroid N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยเอนโดครานดิสรีบโทม

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยเอนโดครานดิสรีบโทมดังตารางที่ 4.10 พบว่า 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจเป็นพิเศษ โดยโปรแกรมทำนายว่าโมเสคาทินมีผล AR an.: -8.7 หมายความว่าโมเสคาทินน่าจะต่อกับแอนโดรเจนรีเซปเตอร์ (Androgen receptor, AR) ด้วยค่า IC₅₀ หรือ EC₅₀ น้อยกว่า 1 ไมโครเมตร

ตารางที่ 4.10 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรฟีแนนทีนด้วยเอนโดครานดิสรีบโทม

เป็นไปได้สูง	เป็นไปได้	เป็นไปได้น้อย	เป็นไปได้น้อยมาก
AR an.: -8.7	AR : -8.5	ER α : -8.4	ER α an.: -6.7
		ER β : -8.1	ER β an.: -7.5
		GR: -8.3	GR an.: -7.2
			LXR α : -8.1
			LXR β : -9.0
			PPAR α : -7.9
			PPAR β : -7.6
			PPAR γ : -7.7
			RXR α : -8.2
			TR α : -7.2
			TR β : -7.0

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรพีแนนนทีนด้วยสวิตาร์เกตพีดิคชัน

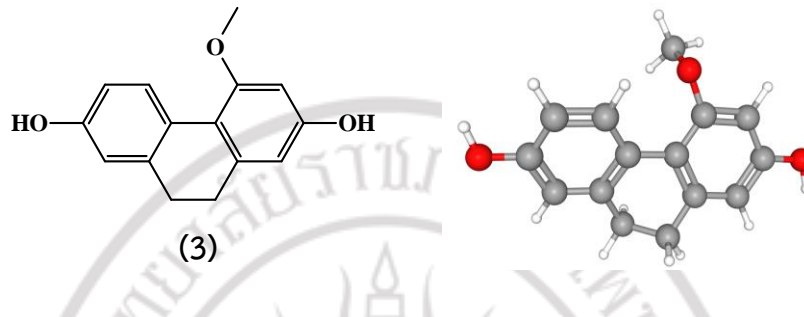
สวิตาร์เกตพีดิคชันทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพและผลข้างเคียง โดยใช้โมเดลของสิ่งมีชีวิต 5 ชนิด นั่นคือ คน (*Homo sapiens*) หนูหริ่งบ้าน (*Mus musculus*) หนูบ้าน (*Rattus norvegicus*) โคสายพันธุ์ยุโรป (*Bos Taurus*) และ ม้า (*Equus caballus*) โดยมีผลดังนี้

ตารางที่ 4.11 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของ 7-ไฮดรอกซี-2,3,4-ไตรเมทอกซี-9,10-ไดไฮโดรพีแนนนทีนด้วยสวิตาร์เกตพีดิคชัน

เป้าหมาย	ชนิด	ความเป็นไปได้
คน (<i>Homo sapiens</i>)		
Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	เอนไซม์	0.62
หนูหริ่งบ้าน (<i>Mus musculus</i>)		
Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	เอนไซม์	0.62
หนูบ้าน (<i>Rattus norvegicus</i>)		
Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	เอนไซม์	0.62
โคสายพันธุ์ยุโรป (<i>Bos Taurus</i>)		
Uncharacterized protein	เอนไซม์	0.62
ม้า (<i>Equus caballus</i>)		
Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1	เอนไซม์	0.62

ไทโรซิล ดีเอนเอ ฟอสโฟไดเอทาเทอเรส 1 (Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1) เป็นเอนไซม์ที่เข้ารหัสโดยยีน TDP1 ซึ่งเกี่ยวข้องกับโรคสูญเสียการทรงตัวหรือโรคกล้ามเนื้อเสียการประสานงานจากสมองน้อยและไขสันหลัง (Spinocerebellar Ataxia) โรคระบบประสาทที่เกิดจากยีนด้อย (Autosomal Recessive With Axonal Neuropathy 1) และพยาธิสภาพหลักที่เส้นประสาท (Axonal Neuropathy)

การทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนิน



ภาพที่ 4.17 โครงสร้าง 2 และ 3 มิติ ของโคโลนิน

ที่มา : (National Center for Biotechnology Information, 2020)

โคโลนิน (Coelonin) มีฤทธิ์ต้านการอักเสบ (Antiinflammatory activity in human neutrophils assessed as inhibition of FMLP/cytochalasin B-induced superoxide anion generation by measuring superoxide dismutase-inhibitable reduction of ferricytochrome c preincubated for 5 mins followed by FMLP/cytochal) ด้วยค่า $IC_{50} = 0.4$ ไมโครโมลาร์ (National Center for Biotechnology Information, 2020) นอกจากนี้ยังมีรายงานว่าโคโลนินมีฤทธิ์ต้านการอักเสบและป้องกันการเกิดพังผืดในปอด (Anti-pulmonary fibrosis) (Jiang et al., 2019) อย่างไรก็ตามฤทธิ์ทางชีวภาพในหน่วยไมโครโมลาร์ยังไม่ถือว่าเป็นยาที่ดี

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยลิแกนด์สเก๊าท์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยโปรแกรมลิแกนด์สเก๊าท์โคโลนินไม่น่าจะมีฤทธิ์ทางชีวภาพที่น่าสนใจ เนื่องจากฤทธิ์ทางชีวภาพในหน่วยไมโครโมลาร์ยังไม่ถือว่าเป็นยาที่ดี

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยซี

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยโปรแกรมซี ดังตารางที่ 4.12 พบว่าโคโลนินไม่มีความคล้ายคลึงกับยาที่ใช้ในปัจจุบันและไม่มีความคล้ายคลึงกับโครงสร้างของสารในร่างกายนที่มีฤทธิ์ทางชีวภาพ ดังนั้นโอกาสที่โมเสคาทินมีฤทธิ์ทางชีวภาพค่อนข้างน้อย

ตารางที่ 4.12 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยโปรแกรมซี

ยีนเป้าหมาย	ค่าสัมประสิทธิ์ของทานิโมโต้	ฤทธิ์ทางชีวภาพ
ESR1 ของมนุษย์	0.4500	ตัวรับเอสโตรเจน (Estrogen receptor) การทำงานที่ผิดปกติของเอสโตรเจนหรือตัวรับทั้ง 2 ชนิดอาจนำไปสู่การพัฒนาของโรคหลายชนิดได้แก่ โรคมะเร็ง โรคที่เกี่ยวกับเมตาบอลิซึม โรคในระบบไหลเวียนเลือด โรคที่เกี่ยวกับความเสื่อมของระบบประสาท การอักเสบ และโรคกระดูกพรุน
ESR2 ของมนุษย์	0.4500	การทำงานที่ผิดปกติของตัวรับเอสโตรเจน (Estrogen receptor beta) ก่อให้เกิดโรคมะเร็ง โรคที่เกี่ยวกับเมตาบอลิซึม โรคในระบบไหลเวียนเลือด โรคที่เกี่ยวกับความเสื่อมของระบบประสาท การอักเสบ และโรคกระดูกพรุน
TBA1A ของหนู	0.4222	ต้านมะเร็ง (Tubulin alpha-1A chain)

ข้อมูลผลการทดสอบฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยฟาร์แมปเปอร์

จากการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์ ดังตารางที่ 4.13 พบว่าโคโลนินอาจจะมีฤทธิ์รักษาโรคหลอดเลือดสมอง

ตารางที่ 4.13 ตัวอย่างข้อมูลผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของโคโลนินด้วยโปรแกรมฟาร์แมปเปอร์

ความพอดีของโมเดล	ชื่อเอนไซม์หรือรีเซปเตอร์	หน้าที่	สำหรับโรค
3.764	cAMP-specific 3,5-cyclic phosphodiesterase 4D	Regulates the levels of cAMP in the cell.	โรคหลอดเลือดสมอง (Stroke)
3.682	Streptavidin	ไม่มีข้อมูลที่ชัดเจน	ไม่มี
3.650	Deoxycytidine kinase	ต้านไวรัส (Antiviral) และเคมีบำบัด (Chemothera)	ไม่มี

ทั้งนี้ข้อมูลฉบับเต็มของการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของสารทุกชนิดอยู่ในซีดีแนบ

ในการคัดกรองซีลีโคจะดำเนินการสำหรับสารประกอบทั้งหมดและผลจากการวิเคราะห์จึงได้ข้อมูลขนาดใหญ่มาดังในข้อมูลดิบในซีดี วิธีการรวมกลุ่มความคล้ายคลึงกัน (SEA) เกี่ยวข้องกับเภสัชวิทยาของโปรตีนตามความคล้ายคลึงกันทางเคมีที่กำหนดไว้ของแกนดของพวกมัน 6 โดยรวมแล้วมีการคาดการณ์เป้าหมาย 1035 เป้าหมาย เป้าหมายที่มีแนวโน้ม 5 อันดับแรก คือ ยีน CQSS ของแบคทีเรียแกรมลบ, O77823 ของหนู, PA24A ของวัว, ERN1 และ TBB1 ของมนุษย์

ยีน CQSS สามารถก่อโรคอหิวาตกโรค โรคลำไส้เฉียบพลัน

ยีน O77823 ยีนเหล่านี้เกี่ยวข้องกับการอักเสบหลายชนิด เช่น โรคหอบหืด

โรคปอดอุดกั้นเรื้อรัง และโรคข้ออักเสบรูมาตอยด์

ยีน PA24A ควบคุมการอักเสบในปอดระหว่างการพัฒนา

ยีน ERN1 ช่วยภาวะหัวใจเต้นผิดปกติที่เกิดจากโรคหัวใจ (Arrhythmogenic right ventricular dysplasia) อากาการบวกระดูก (Epiphyseal dysplasia) และโรคเบาหวาน (With early-onset diabetes mellitus)

ยีน TBB1 เกี่ยวกับโรคมะเร็ง

นอกจากนี้ 10 อันดับแรกของเป้าหมายที่โปรแกรมทำนาย คือ Q49PX0_9POXV, Q25270_LEIDO, Q3I4V7_CRYNV, TBB1, CP1B1, TBB3, CAH7, ABCG2 ของมนุษย์ TBB2B และ Q862F3 ของวัว จึงทำให้ทำนายได้ว่าสารที่แยกได้จากพืชสกุลสิงโตน่าจะจับกับโปรตีน TBB1 หรือสายเบต้าทูบูลินได้ดี ดังนั้นสารอินทรีย์ดังกล่าวอาจขัดขวางการแบ่งตัวของเซลล์และเป็นสารประกอบต้านมะเร็งที่น่าสนใจ จึงควรทำงานทดลองด้านองค์ประกอบทางเคมีจากพืชสกุลสิงโตกับฤทธิ์ต้านมะเร็งเพื่อนำมายืนยันผลการคำนวณจากงานวิจัยชิ้นนี้

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏรำไพพรรณี