

บทคัดย่อ

บทนำ การคัดกรองสารออกฤทธิ์จากชีวภาพได้มีการพัฒนาเทคนิควิธีการการวิเคราะห์ที่มีความรวดเร็วและถูกต้องมากขึ้น โดยอาศัยความรู้ทางเคมี เกษษวิทยา และคอมพิวเตอร์มาช่วยลดงบประมาณ เวลา และสารเคมี โมเลกุลลาร์ดอกก็งถูกนำมาใช้กันอย่างแพร่หลายในงานวิจัยทางด้านการศึกษาการจับกันของลิแกนด์กับโปรตีน ในงานวิจัยนี้ได้คำนวณค่าพลังงานการจับกันของสารเชิงซ้อนโดยใช้โปรแกรม AutoDock Vina ช่วยคัดกรองสารออกฤทธิ์ในการยับยั้งการทำงานของโปรตีนที่สนใจ

วิธีการ การคัดกรองสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพจากพืชท้องถิ่นบนที่สูงโดยใช้โปรแกรม AutoDock Vina ได้ศึกษาการวางตัวและคำนวณหาพลังงานการคำนวณความสามารถในการจับกันของสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพจากพืชท้องถิ่นบนพื้นที่สูงที่มีในฐานข้อมูลของสถาบัน จำนวน 500 ชนิด กับกลุ่มเชื้อที่เป็นสาเหตุโรคพืช ได้แก่ *Colletotrichum lupini* และกลุ่มเชื้อสาเหตุโรคที่เกิดในคนและสัตว์ ได้แก่ *Candida albicans* *Corynebacterium* sp. *Escherichia coli* *Propionibacterium acnes* *Staphylococcus aureus* *Streptococcus mutans* *Streptococcus pneumonia* *Bacillus cereus* และ *Vibrio cholera*

สรุป ผลการคัดกรองสารออกฤทธิ์ทางชีวภาพจากพืชบนพื้นที่สูงกับกลุ่มเชื้อที่เป็นสาเหตุโรคพืช *Colletotrichum lupini* พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ มะขาม (*Tamarindus indica* L.) โทงเทง (*Physalis angulata* L.) ทับทิม (*Punica granatum* L. var. *granatum*) หูกไก่ (*Phyllanthus urinaria* L.) มะขามป้อม (*Phyllanthus emblica* L.) ม้าสามต้น (*Asparagus filicinus* Buch.-Ham.) เจียวกู่หลาน (*Gynostemma pentaphyllum* (Thunb) Makino) และ น่องยางขาว (*Antiaris toxicaria* Lesch.)

กลุ่มเชื้อสาเหตุโรคที่เกิดในคนและสัตว์ *Candida albicans* พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ ทับทิม (*Punica granatum* L. var. *granatum*) มะขาม (*Tamarindus indica* L.) หูกไก่ (*Phyllanthus urinaria* L.) H.Ohashi (*Lespedeza virgata* (Thunb.) DC.) พลุช้าง (*Rhaphidophora peepla* (Roxb.) Schott) หูกไก่ (*Euphorbia heterophylla* L.) เจียวกู่หลาน (*Gynostemma pentaphyllum* (Thunb) Makino) บุนนาค (*Mesua ferrea* L.) และ โทงเทง (*Physalis angulata* L.)

Corynebacterium sp. พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ กาหลง (*Bauhinia acuminata* L.) หูกไก่ (*Phyllanthus urinaria* L.) H.Ohashi (*Lespedeza virgata* (Thunb.) DC.) พลุช้าง (*Rhaphidophora peepla* (Roxb.) Schott) มะขามป้อม (*Phyllanthus emblica* L.) พุ่มพวง (*Clerodendrum paniculatum* L.) และ มะเขือพวง (*Solanum torvum* Sw.)

Escherichia coli พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ หญ้าไต้ใบ (*Phyllanthus urinaria* L.) มะขาม (*Tamarindus indica* L.) บุนนาค (*Mesua ferrea* L.) บาดายวายป่า (*Clerodendrum garrettianum* Craib) ป้างขาว (*Clerodendrum glandulosum* Lindl.) ป้างดำไก่อ (*Clerodendrum japonicum* (Thunb.) Sweet) ฝรั่ง (*Psidium guajava* Linn.) หมอนน้อย (*Vernonia cinerea* (L.) Less) หญ้าฮ่อมเกี้ยว (*Eclipta prostate* (L.) L.) และ มะขามป้อม (*Phyllanthus emblica* L.)

Propionibacterium acnes พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ ดั่งโอ (*Chrysanthemum coronarium* L.) สับเสือ (*Stephania pierrei* Diels) ตาลเหล็ก (*Ochna integerrima* (Lour.) Merr.) มะกรูด (*Citrus hystrix* DC.) มะนาว (*Citrus aurantiifolia* (Christm) Swingle) พลุ (*Piper betle* Linn.) กาหลง (*Bauhinia acuminata* L.) สะค้าน (*Piper interruptum* Opiz) และ สับดำ (*Jatropha curcas* L.)

Staphylococcus aureus พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ กาหลง (*Bauhinia acuminata* L.) หญ้าคอตุง (*Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi) ดีปลี (*Piper chaba* Hunt) และ หม่อนหลวง (*Morus macroura* Miq.)

Streptococcus mutans พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ สีสันคนทา (*Harrisonia perforate* (Blanco) Merr.) หม่อนหลวง (*Morus macroura* Miq.) กระโดน (*Careya arborea* Roxb.) พิลังกาสา (*Ardisia polycephala* Wall.) ทับทิม (*Punica granatum* L. var. *granatum*) พุ่มมวก (*Clerodendrum paniculatum* L.) จั๊อ้ายปู้เจ้า (*Terminalia nigrovenulosa* Pierre) มะขาม (*Tamarindus indica* L.) และ หญ้ายาง (*Euphorbia heterophylla* L.)

Streptococcus pneumonia พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ หญ้าคอตุง (*Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi) ขมหอม (*Toona ciliate* M.Roem.) (*Lespedeza virgate* (Thunb.) DC.) ดีปลี (*Piper chaba* Hunt) มะเดื่ออุทุมพร (*Ficus racemosa* L.) หม่อนหลวง (*Morus macroura* Miq.) และ ว่านหอมแดง (*Eleutherine bulbosa* (Mill.) Urb.)

Bacillus cereus พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ หญ้าคอตุง (*Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi) จักรอก (*Urena lobata* L.) หมอนน้อย (*Vernonia cinerea* (L.) Less.) หม่อนหลวง (*Morus macroura* Miq.) ตาลเหล็ก (*Ochna integerrima* (Lour.) Merr.) โทงเทง (*Physalis angulate* L.) สับดำ (*Jatropha curcas* L.) และ ม้าสามต้น (*Asparagus filicinus* Buch.-Ham.)

Vibrio cholera พืชที่มีศักยภาพ ได้แก่ ดีปลี (*Piper retrofractum* Vahl) กระเจี๊ยบมอญ (*Abelmoschus esculentus* (L.) Moench) โทงเทง (*Physalis angulate* L.) หญ้ายาง (*Euphorbia heterophylla* L.) ผักลาวทอง (*Houttuynia cordata* Thunb.) (*Uncaria rhynchophylla* (Miq.) Jacks.) หม่อนหลวง (*Morus macroura* Miq.) มะขามป้อม (*Phyllanthus emblica* L.) และ กาหลง (*Bauhinia acuminata* L.)

Abstract

Background: Virtual screening of bioactive compounds has been faster and more accurately developed in analytical techniques based on knowledge of chemistry, pharmacology and computer science. Virtual screening was reduced a number of compounds to be tests as a way to control costs, save time, and reduce the volume of waste materials. Molecular docking has been widely used in protein-ligand docking research. This study calculate the binding affinity of complexes by using AutoDock Vina program to select compounds active against protein targets of interest.

Methodology: The Virtual screening of bioactive compounds from highland plant by using AutoDock Vina program. AutoDock Vina was able to study ligand conformation and calculate a binding affinity between bioactive compounds from highland plant, which estimate 500 species with protein targets. Viral diseases of plants (*Colletotrichum lupini*) and viral diseases of humans and animals (*Candida albicans*, *Corynebacterium* sp., *Escherichia coli*, *Propionibacterium acnes*, *Staphylococcus aureus*, *Streptococcus mutans*, *Streptococcus pneumonia*, *Bacillus cereus* and *Vibrio cholera*) were investigated to protein targets.

Conclusions: Virtual screening results show that bioactive compounds from highland plants have high potential agiants viral disaeases of palnts: *Colletotrichum lupini* related with *Tamarindus indica* L., *Physalis angulata* L., *Punica granatum* L. var. *granatum*, *Phyllanthus urinaria* L., *Phyllanthus emblica* L., *Asparagus filicinus* Buch.-Ham., *Gynostemma pentaphyllum* (Thunb) Makino and *Antiaris toxicaria* Lesch.

Bioactive compounds from highland plants have high potential agiants viral disaeases of humans and animals: *Candida albicans* related with *Punica granatum* L. var. *granatum*, *Tamarindus indica* L., *Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi, *Lespedeza virgata* (Thunb.) DC., *Rhaphidophora peepla* (Roxb.) Schott, *Euphorbia heterophylla* L., *Gynostemma pentaphyllum* (Thunb) Makino, *Mesua ferrea* L. and *Physalis angulate* L.

Corynebacterium sp. related with *Bauhinia acuminata* L., *Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi, *Rhaphidophora peepla* (Roxb.) Schott, *Phyllanthus emblica* L., *Clerodendrum paniculatum* L. and *Solanum torvum* Sw.

Escherichia coli related with *Phyllanthus urinaria* L., *Tamarindus indica* L., *Mesua ferrea* L., *Clerodendrum garrettianum* Craib, *Clerodendrum glandulosum* Lindl., *Clerodendrum japonicum* (Thunb.) Sweet, *Psidium guajava* Linn., *Vernonia cinerea* (L.) Less, *Eclipta prostate* (L.) L. and *Phyllanthus emblica* L.

Propionibacterium acnes related with *Chysanthemum coronarium* L., *Stephania pierrei* Diels, *Ochna integririma* (Lour.) Merr., *Citrus hystrix* DC., *Citrus aurantiifolia* (Christm) Swingle, *Piper betle* Linn., *Bauhinia acuminata* L., *Piper interruptum* Opiz and *Jatropha curcas* L.

Staphylococcus aureus related with *Bauhinia acuminata* L., *Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi, *Piper chaba* Hunt and *Morus macroura* Miq.

Streptococcus mutans related with *Harrisonia perforate* (Blanco) Merr., *Morus macroura* Miq., *Careya arborea* Roxb., *Ardisia polycephala* Wall., *Punica granatum* L. var. *granatum*, *Clerodendrum paniculatum* L., *Terminalia nigrovenulosa* Pierre, *Tamarindus indica* L. and *Euphorbia heterophylla* L.

Streptococcus pneumonia related with *Tadehagi triquetrum* (L.) H.Ohashi, *Toona ciliate* M.Roem., *Lespedeza virgate* (Thunb.) DC., *Piper chaba* Hunt, *Ficus racemosa* L., *Morus macroura* Miq. and *Eleutherine bulbosa* (Mill.) Urb.

Bacillus cereus related with *Tedehagi triquetrum* (L.) H.Ohshi, *Urena lobata* L., *Vernonia cinerea* (L.) Less., *Morus macroura* Miq., *Ochna integerrima* (Lour.) Merr., *Physalis angulate* L., *Jatropha curcus* L. and *Asparagus filicinus* Buch.-Ham.

Vibrio cholera related with *Piper retrofractum* Vahl, *Abelmoschus esculentus* (L.) Moench, *Physalis angulate* L., *Euphorbia heterophylla* L., *Houttuynia cordata* Thunb., *Uncaria rhynchophylla* (Miq.) Jacks., *Morus macroura* Miq., *Phyllanthus emblica* L. and *Bauhinia acuminata* L.

