

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
Ligand:1M17	-6.6	Ligand:1M17	สารยับยั้งไทโรซีนไคเนส(TKI) โดยออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์ไทโรซีนไคเนส เอนไซม์ TKI ช่วยควบคุมการทำงานของเซลล์ รวมถึงการส่งสัญญาณและการเจริญเติบโตของเซลล์ รวมถึงความถี่ในการแบ่งตัวของเซลล์ สารยับยั้งไทโรซีนไคเนสบางชนิดใช้ในการรักษามะเร็ง โดย TKI ออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์และป้องกันไม่ให้เซลล์มะเร็งเติบโต
247	-3.3	Betaine	1) สารยับยั้งแคเทปซิน บี (cathepsin B) ลดการเคลื่อนที่ของเซลล์เนื้องอกในการย่อยสลาย ECM ซึ่งทำให้เซลล์เนื้องอกเคลื่อนที่ได้ยากขึ้น 2) สารยับยั้งโคลีนเอสเทอเรส เพิ่มระดับอะเซทิลโคลีนในสมอง โดยการยับยั้งการทำงานของเอนไซม์โคลีนเอสเทอเรส ซึ่งสามารถนำมาใช้ในการรักษาหลายโรค เช่น โรคอัลไซเมอร์ (Alzheimer's Disease) โรคมัยอัสเทเนีย (Myasthenia Gravis) แต่การเพิ่มปริมาณอะเซทิลโคลีนที่สามารถใช้ได้โดยรวม อาจมีอาการของการกระตุ้นมากเกินไปของระบบประสาทพาราซิมพาเทติก เช่น การเคลื่อนไหวมากเกินไป การหลั่งสารมากเกินไป หัวใจเต้นช้า กล้ามเนื้อตาดเล็ก ท้องเสีย และความดันโลหิตต่ำ
305	-3.2	Choline	ไม่พบสารยับยั้งโปรตีน Choline เป็นสารอาหารที่มีบทบาทสำคัญในการผลิตอะเซทิลโคลีน (Acetylcholine) ซึ่งเป็นสารสื่อประสาทที่สำคัญในระบบประสาทและการทำงานของสมอง
555	-4.4	1,1-Dimethylpyrrolidin-1-ium-2-carboxylic acid	ไม่พบสารยับยั้งโปรตีน
1780	-5.8	5,8,11,14-Eicosatetraynoic acid (ETYA)	1) สารยับยั้งโปรตีน 5-Lipoxygenase (5-LOX) สามารถลดหรือบล็อกการทำงานของเอนไซม์ 5-LOX ซึ่งมีบทบาทในการผลิต leukotrienes ที่สามารถกระตุ้นการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง เช่น ช่วยลดการแพร่กระจายของเซลล์ PC3 และลดการอักเสบต่างๆ 2) สารยับยั้งโปรตีน CCL2/MCP-1 ลดการอักเสบและการตอบสนองภูมิคุ้มกันที่เกี่ยวข้อง โดยการบล็อกการทำงานของ CCL2/MCP-1 หรือการควบคุมตัวรับ
14328	-5	3',4'-Dimethoxyacetophenone	สารยับยั้งโคลีนเอสเทอเรส เพิ่มระดับอะเซทิลโคลีนในสมอง โดยการยับยั้งการทำงานของเอนไซม์โคลีนเอสเทอเรส ซึ่งสามารถนำมาใช้ในการรักษาหลายโรค เช่น โรคอัลไซเมอร์ (Alzheimer's Disease) โรคมัยอัสเทเนีย (Myasthenia Gravis) แต่การเพิ่มปริมาณอะเซทิลโคลีนที่สามารถใช้ได้โดยรวม อาจมีอาการของการกระตุ้นมากเกินไปของระบบประสาทพาราซิมพาเทติก เช่น การเคลื่อนไหวมากเกินไป การหลั่งสารมากเกินไป หัวใจเต้นช้า กล้ามเนื้อตาดเล็ก ท้องเสีย และความดันโลหิตต่ำ

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
71034	-7.4	2-Methoxy-9H-xanthen-9-one	1) สารยับยั้งไทโรซิเนส (Tyrosinase) ซึ่งเป็นเอนไซม์ที่มีบทบาทสำคัญในการสร้างเมลานินในเซลล์ผิวหนัง การยับยั้งไทโรซิเนสจะส่งผลให้การผลิตเมลานินลดลง ซึ่งมีประโยชน์ในด้านการควบคุมสีผิวและการรักษาปัญหาผิวพรรณต่าง ๆ 2) สารยับยั้ง Sphingomyelinase จะลดการผลิต ceramide ซึ่งอาจมีผลกระทบต่อกระบวนการที่เกี่ยวข้องกับการตายของเซลล์ (apoptosis) และการควบคุมการเจริญเติบโตของเซลล์
188274	-5.8	4,7,10,13-Eicosatetraynoic acid	1) สารยับยั้ง Lipoxygenase เป็นเกล็ดเลือดลิพอกซิเจเนส (Platelet Lipoxygenase) เอนไซม์ที่เกี่ยวข้องกับการทำให้เกิดแข็งตัวของ Platelet Lipoxygenase จะลดการผลิต leukotrienes ซึ่งมีผลในการลดการอักเสบและการตอบสนองของระบบภูมิคุ้มกัน 2) สารยับยั้ง cyclooxygenase (COX) มีบทบาทสำคัญในการสร้าง prostaglandins ซึ่งเป็นสารประกอบที่มีบทบาทสำคัญในกระบวนการอักเสบ บวมแดง และเจ็บปวด, การควบคุมความดันโลหิต, และกระตุ้นการทำงานของกล้ามเนื้อ เช่นการบีบตัวของกล้ามเนื้อตลก 4,7,10,13-eicosatetraynoic ยับยั้ง cyclooxygenase (COX) (โดยเปลี่ยนกรดไขมันอาราคิโดนิก (arachidonic acid) ซึ่งเป็นสารตั้งต้นหลักในการสร้าง prostaglandins) จะมีผลในการลดการสร้าง prostaglandins และ thromboxanes ซึ่งส่งผลต่อการควบคุมกระบวนการอักเสบและการทำให้เกิดแข็งตัวของเลือด
445638	-5.3	Palmitoleic Acid	สารยับยั้งคาร์บอกซิเอสเทอร์ส โดยควบคุมการเผาผลาญ การกระจาย และความเป็นพิษของสารที่ผ่านกระบวนการไฮโดรไลซิสด้วยเอนไซม์
637563	-4.9	Anethole	1) ยับยั้งโปรตีน IKKBK ส่งผลให้การส่งสัญญาณของ NF-KB ลดลงและมีผลต่อการตอบสนองต่อการอักเสบในเซลล์ นอกจากนี้ Anethole ยังมีฤทธิ์ต้านการอักเสบและต้านอนุมูลอิสระ 2) สารยับยั้งโปรตีน aquaporin 1 เป็นโปรตีนช่องน้ำที่ช่วยให้ของเหลวไหลผ่านเยื่อหุ้มเซลล์ได้ ซึ่งมีความสำคัญต่อการรักษาสมดุลของสภาพแวดล้อมของเนื้อเยื่อและการเคลื่อนตัวของเซลล์ การยับยั้ง AQP1 จะลดการอพยพและการบุกรุกของเซลล์มะเร็งลำไส้ใหญ่ได้

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
2822141	-8.7	N1-(3-chlorophenyl)-2-[2-(trifluoromethyl)-4-quinolylo]hydrazine-1-carboxamide	ไม่พบสารยับยั้งโปรตีน
5280373	-7.6	Biochanin A	1) สารยับยั้งอะโรมาเตส (AI) ลดการผลิตเอสโตรเจนในร่างกาย โดยการยับยั้งการทำงานของเอนไซม์อะโรมาเตส ซึ่งเป็นเอนไซม์ที่เปลี่ยนแอนโดรเจนให้กลายเป็นเอสโตรเจน สารยับยั้งอะโรมาเตสมีการใช้อย่างกว้างขวางในการรักษามะเร็งเต้านม โดยเฉพาะในผู้หญิงที่มีฮอร์โมนบวก (ER-positive) และใช้ในการรักษาภาวะที่มีเอสโตรเจนสูงเกินไป 2) ยับยั้งโปรตีน AKR1C3 เป็นเอนไซม์ที่มีบทบาทสำคัญในกระบวนการเมแทบอลิซึมของฮอร์โมนสเตียรอยด์, เช่น การเปลี่ยนแปลงของเอสโตรเจนและเทสโทสเตอโรน การยับยั้ง AKR1C3 สามารถมีผลต่อการเปลี่ยนแปลงของฮอร์โมนและสามารถใช้ในการรักษามะเร็งที่เกี่ยวข้องกับฮอร์โมน 3) สารยับยั้งโปรตีน BCL2 เป็นโปรตีนที่มีบทบาทสำคัญในการควบคุมการตายของเซลล์ (apoptosis) ซึ่งการยับยั้ง BCL2 สามารถส่งเสริมการตายของเซลล์ที่ผิดปกติหรือเซลล์มะเร็ง 4) สารยับยั้งไทโรซีนไคเนส (TKI) โดยออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์ไทโรซีนไคเนส เอนไซม์ TKI ช่วยควบคุมการทำงานของเซลล์ รวมถึงการส่งสัญญาณและการเจริญเติบโตของเซลล์ รวมถึงความถี่ในการแบ่งตัวของเซลล์ สารยับยั้งไทโรซีนไคเนสบางชนิดใช้ในการรักษามะเร็ง โดย TKI ออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์และป้องกันไม่ให้เซลล์มะเร็งเติบโต
5280378	-7.3	Formononetin	1) สารยับยั้ง Cyclooxygenase-2 (COX-2) ลดการสร้าง Prostaglandin E2 (PGE2) ซึ่งเป็นสารที่มีบทบาทสำคัญในการกระตุ้นการอักเสบ, ความเจ็บปวด, และการตอบสนองของระบบภูมิคุ้มกัน 2) สารยับยั้ง THBS1 (Thrombospondin-1) ลดการสร้างหลอดเลือดใหม่ในเนื้องอก ซึ่งช่วยลดการเจริญเติบโตและการแพร่กระจายของมะเร็ง
5283387	-5.3	Oleamide	สารยับยั้งโปรตีนฟอสโฟไลเปส A2 (PLA2) ซึ่งมีบทบาทสำคัญในการผลิตสารที่เกี่ยวข้องกับการอักเสบ เช่น โปรสตาแกลนดินส์ (prostaglandins) และลิโคโทรอินส์ (leukotrienes) การยับยั้ง PLA2 ด้วย Oleamide สามารถทำให้ระดับของสารอักเสบเช่น โปรสตาแกลนดิน (prostaglandins) ลดลง ซึ่งอาจช่วยลดอาการอักเสบและบรรเทาอาการที่เกี่ยวข้อง

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
5318650	-7.3	Isorhapontigenin (ISO)	<p>1) สารยับยั้งโปรตีนไซคลิน D1 (Cyclin D1) ทำงานโดยการบล็อกกิจกรรมของ CDK4/6 ที่ทำงานร่วมกับ Cyclin D1 ซึ่งมีผลในการกระตุ้นการตายของเซลล์และลดการเจริญเติบโตของเซลล์มะเร็ง 2) สารยับยั้งสฟิงโกซีนไคเนส (Sphingosine Kinases) โดย ISO ควบคุมการเกิดฟอสโฟลิพิดของทูบูลินและการเติบโตของเซลล์มะเร็งโดยควบคุมการหยุดวงจรเซลล์ที่เกิดจาก MAPK/PI3K ในเซลล์ MCF7 และทำให้ยับยั้ง SPHK1/2 ส่งผลให้เกิดความเครียดออกซิเดชันและการตายของเซลล์ และความไม่เสถียรของทูบูลินในเซลล์ MCF7 ซึ่งแสดงให้เห็นว่าผลต่อต้านมะเร็งของ ISO สามารถควบคุมได้โดยวิธีการทำให้ไม่เสถียรของ SPHK/ทูบูลิน 3) ยับยั้งโปรตีน Androgen Receptor (AR) เป็นโปรตีนที่เกี่ยวข้องกับการควบคุมการเจริญเติบโตของเซลล์ที่ได้รับผลกระทบจากฮอร์โมนแอนโดรเจน โดยเฉพาะในมะเร็งต่อมลูกหมาก (prostate cancer) ที่มักมีการกระตุ้นจาก AR โดย ISO จะยับยั้งการแสดงออกของยีน AR และกระตุ้นกระบวนการยูบิกวิตินชันและการย่อยสลายของโปรตีน AR ในโปรตีโอสอม (proteasome) ซึ่งเป็นกลไกสำคัญในการควบคุมระดับของโปรตีน AR ในเซลล์</p>
5319484	-9.3	Apigenin 7-glucuronide	<p>1) สารยับยั้งไทโรซีนไคเนส (TKI) โดยออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์ไทโรซีนไคเนส เอนไซม์ TKI ช่วยควบคุมการทำงานของเซลล์ รวมถึงการส่งสัญญาณและการเจริญเติบโตของเซลล์ รวมถึงความถี่ในการแบ่งตัวของเซลล์ สารยับยั้งไทโรซีนไคเนสบางชนิดใช้ในการรักษามะเร็ง โดย TKI ออกฤทธิ์โดยการบล็อกเอนไซม์และป้องกันไม่ให้เซลล์มะเร็งเติบโต 2) สารยับยั้งโปรตีนอัลฟา-กลูโคซิเดส (α-glucosidase) ซึ่งเป็นเอนไซม์ที่ช่วยย่อยสลายคาร์โบไฮเดรตให้เป็นน้ำตาลกลูโคส การยับยั้งเอนไซม์นี้จะช่วยลดการดูดซึมน้ำตาลเข้าสู่กระแสเลือด ซึ่งส่งผลให้ระดับน้ำตาลในเลือดลดลง จึงสามารถใช้เป็นแนวทางหนึ่งในการควบคุมระดับกลูโคสในผู้ป่วยเบาหวานได้ 3) สารยับยั้ง Aldo-keto reductase family 1 member B1 (AKR1B1) ซึ่งเป็นเอนไซม์ที่เกี่ยวข้องกับการเกิดภาวะแทรกซ้อนจากโรคเบาหวาน เช่น โรคทางตา (เช่น เบาหวานขึ้นตา) และปัญหาทางระบบประสาท การยับยั้ง AKR1B1 ช่วยลดการเกิดสารที่เป็นพิษจากการสะสมของน้ำตาลกลูโคสในเซลล์ ทำให้ลดความเสี่ยงของภาวะแทรกซ้อนเหล่านี้ได้</p>

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
5708351	-7.4	14-Deoxy-11,12-didehydroandrographolide	สารยับยั้ง cytochrome P450s ในเซลล์มะเร็งตับ HepG2 ลดการทำงานของเอนไซม์ ซึ่งส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงในระดับของยาในเลือดและสารพิษในร่างกาย
9543603	-5.8	4,8,11,14-Eicosatetraynoic acid	สารยับยั้ง Neutrophil phospholipase A2 ลดการผลิตกรดอะราชิโดนิก ซึ่งเป็นสารตั้งต้นสำหรับการผลิตสารที่ทำให้เกิดการอักเสบ เช่น โพรสตาแกลนดินส์ (prostaglandins) และลูโคไตรอินส์ (leukotrienes) การยับยั้งนี้ส่งผลให้การตอบสนองทางภูมิคุ้มกันและการอักเสบลดลง
9911823	-8.3	CID 9911823	สารยับยั้ง Inositol hexakisphosphate kinases (IP6Ks) ลดปฏิกิริยาฟอสโฟสเฟอเรสของอินอซิทอลเฮกซากิสฟอสเฟต (IP6) ให้เป็นอินอซิทอล 5-ไดฟอสโฟ-1,2,3,4,6-เพนตาคิสฟอสเฟต (IP7) ซึ่งเกี่ยวข้องกับหลายด้านของสรีรวิทยาของเซลล์ รวมถึงการรักษาสมดุลของกลูโคส การแข็งตัวของเลือด และการพัฒนาระบบประสาท การยับยั้ง IP6Ks อาจมีประสิทธิผลในการรักษาโรคเบาหวานชนิดที่ 2 โรคอ้วน ภาวะแทรกซ้อนจากการเผาผลาญ การเกิดลิ่มเลือด และความผิดปกติทางจิตเวช
23786390	-8.2	(1S,4aS,7aS)-7-[[[E]-3-phenylprop-2-enoyl]oxymethyl]-1-[[[2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-1,4a,5,7a-tetrahydrocyclopenta[c]pyran-4-carboxylic acid	ไม่พบสารยับยั้งโปรตีน

รหัส	Binding energy (kcal/mol)	ชื่อสาร	คุณสมบัติการยับยั้ง
129651991	-5.4	14-Eicosatetraynoic acid (14-HETE)	สารยับยั้งโปรตีน 5-Lipoxygenase (5-LOX) สามารถลดหรือบล็อกการทำงานของเอนไซม์ 5-LOX ซึ่งมีบทบาทในการผลิต leukotrienes ที่สามารถกระตุ้นการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง เช่น ช่วยลดการแพร่กระจายของเซลล์ PC3 และลดการอักเสบต่างๆ
346864890	-9.7	305333-89-5	สารยับยั้งโปรตีน 5-Lipoxygenase (5-LOX) สามารถลดหรือบล็อกการทำงานของเอนไซม์ 5-LOX ซึ่งมีบทบาทในการผลิต leukotrienes ที่สามารถกระตุ้นการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง เช่น ช่วยลดการแพร่กระจายของเซลล์ PC3 และลดการอักเสบต่างๆ
NP-003294	-7.4		ไม่พบสารยับยั้งโปรตีน
NP-006862	-7.5		สารยับยั้ง SMYD3 ซึ่งเป็นโปรตีนที่มีบทบาทสำคัญในการควบคุมการแสดงออกของยีนที่เกี่ยวข้องกับการแบ่งตัวและการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง การยับยั้ง SMYD3 จะทำให้เกิดการลดการแสดงออกของยีนที่เกี่ยวข้องกับการแบ่งตัวและการแพร่กระจายของเซลล์มะเร็ง ซึ่งช่วยชะลอการเจริญเติบโตของเซลล์มะเร็งได้ นอกจากนี้ยังมีผลต่อการตายของเซลล์มะเร็ง (apoptosis)
NP-009051	-6.9		สารยับยั้งการทำงานของโปรตีน IL1RL1 (หรือที่เรียกว่า ST2) บล็อกการทำงานของ IL-33 ซึ่งเป็นลิแกนด์ของ IL1RL1 มีผลในการลดการผลิตของสารที่เกี่ยวข้องกับการอักเสบ เช่น cytokines และ chemokines