

สัปดาห์ที่แล้ว เราได้รู้จักฐานข้อมูลโครงสร้างสามมิติของโปรตีน ซึ่งได้จากการวิเคราะห์
โครงสร้างของโปรตีน โดยใช้รังสีเอ็กซ์เป็นหลัก

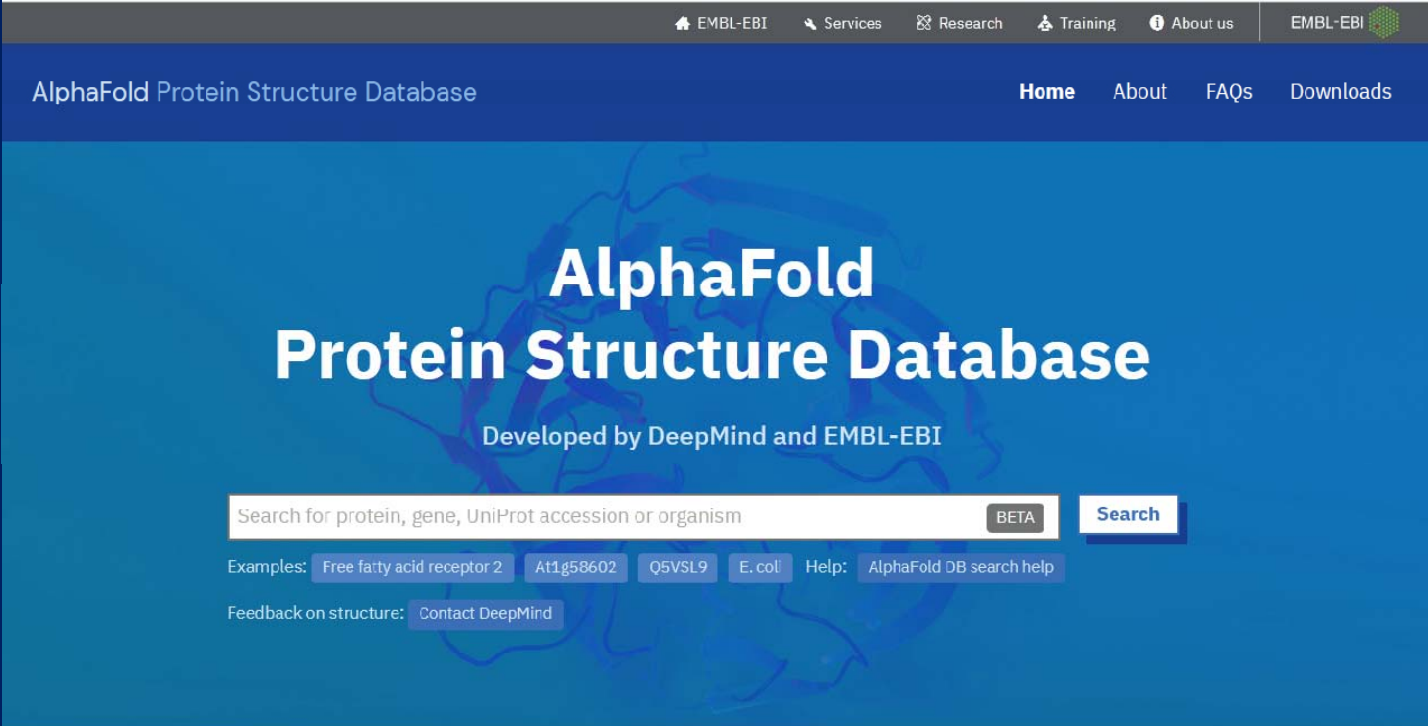
การศึกษาโครงสร้างด้วยวิธีนี้ ใช้เวลา แรงงาน และทักษะขั้นสูง บางครั้งโปรตีนก็ไม่มี
ปริมาณมากพอ หรือทำให้เป็นผลึกได้ยาก

จึงมีความพยายามใช้คอมพิวเตอร์เพื่อจำลองโครงสร้างสามมิติของโปรตีน โดยไม่
จำเป็นต้องใช้โปรตีนจริง ๆ เพียงแต่รู้ลำดับของกรดอะมิโน แล้วใช้ปัญญาประดิษฐ์ (AI =
Artificial Intelligence) เพื่อเรียนรู้หลักการจากโครงสร้างของโปรตีนที่รู้อยู่แล้ว นำไป
ทำนายความเป็นไปได้ว่าโครงสร้างโปรตีนจะเป็นอย่างไร ถ้ามีการเรียงตัวของกรดอะมิโน
แบบนั้นแบบนี้ ซึ่งถ้าทำได้จริง ก็จะประหยัดเวลา แรงงาน ในการศึกษาโครงสร้างโปรตีน
ไปได้ สามารถนำไปออกแบบยา วัคซีน ฯลฯ ต่อไปได้

สำหรับวิชานี้ ขอปิดท้ายเรื่อง Bioinformatics ด้วยฐานข้อมูลโครงสร้างสามมิติของ
โปรตีน ที่ได้จากการจำลองด้วย AI คือ ฐานข้อมูล AlphaFold ของ EMBL-EBI ร่วมมือ
กับบริษัท DeepMind

AlphaFold เข้าใช้งานได้ที่ <https://alphafold.ebi.ac.uk/>

EMBL-EBI ย่อมาจาก European Molecular Biology Laboratory - European Bioinformatics Institute (ห้องปฏิบัติการชีววิทยาโมเลกุลยุโรป – สถาบันชีวสารสนเทศยุโรป ตั้งอยู่ที่ประเทศอังกฤษ)



AlphaFold Protein Structure Database

Home About FAQs Downloads

AlphaFold Protein Structure Database

Developed by DeepMind and EMBL-EBI

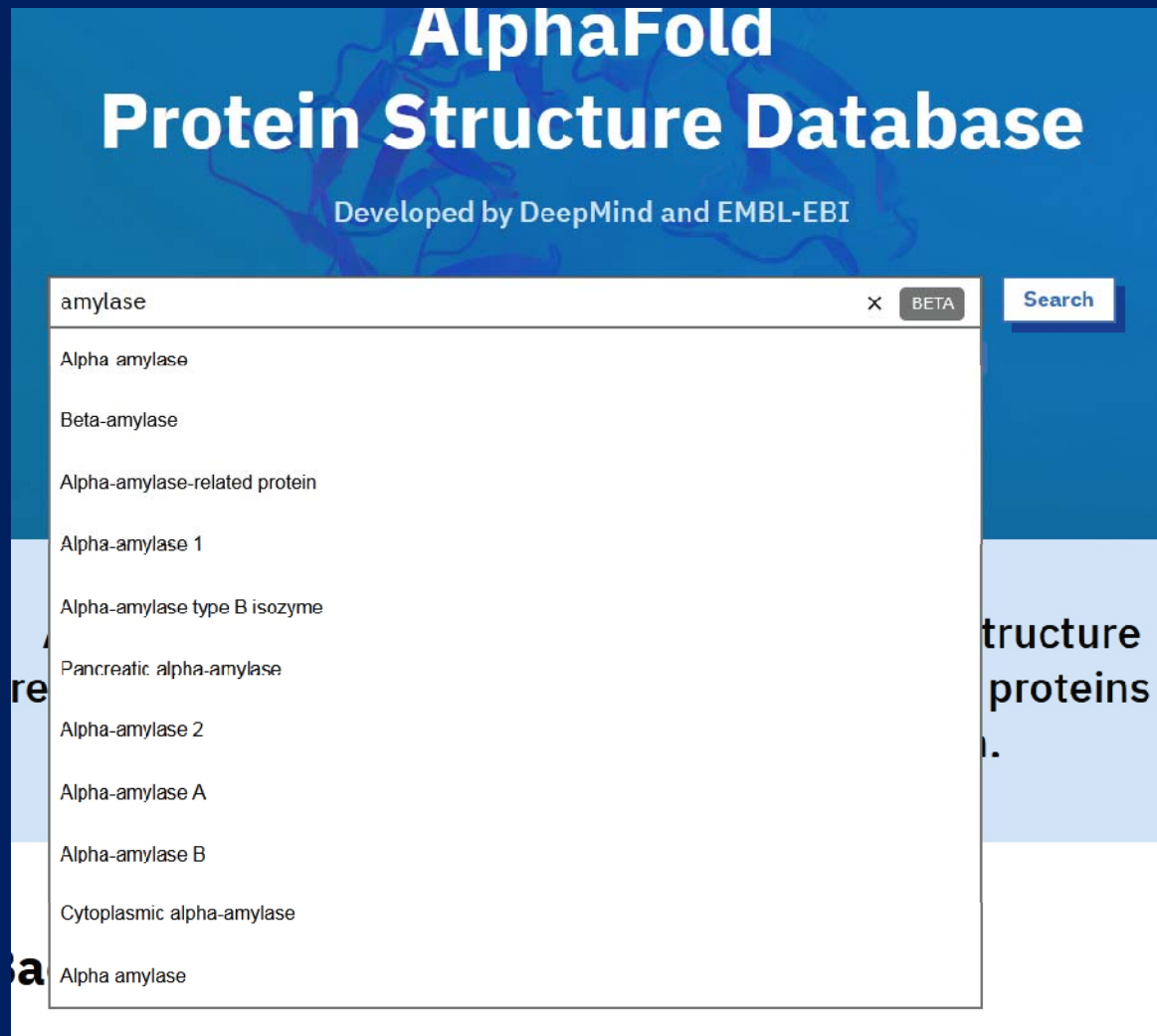
Search for protein, gene, UniProt accession or organism BETA Search

Examples: [Free fatty acid receptor 2](#) [A11g58602](#) [Q5VSL9](#) [E. coli](#) Help: [AlphaFold DB search help](#)

Feedback on structure: [Contact DeepMind](#)

AlphaFold DB provides open access to protein structure predictions for the human proteome and other key proteins of interest, to accelerate scientific research.

ใส่คำที่ต้องการค้นหาลงในช่อง Search พยายามใส่เฉพาะชื่อโปรตีน โปรแกรมจะค้นหา คำที่สอดคล้องและมีอยู่ในฐานข้อมูลให้โดยอัตโนมัติ (auto complete) เช่น จะดู โครงสร้างของอะไมเลสของคน ก็พิมพ์แค่ amylase ก็พอ ไม่ต้องขึ้นต้นด้วย Human



เลือกคำที่ขึ้นมาให้ คือ Alpha-amylase ก็พบมากถึง 170 results
ก็ดูซ้ายมือจะมีตัวกรองตามชนิดสิ่งมีชีวิตให้ ถ้าจะเลือกโปรตีนจากข้าว ก็ ติ๊กตรง *Oryza sativa* ซึ่งเป็นชื่อวิทยาศาสตร์ของข้าว แต่ถ้าเลือกคน ก็ติ๊กตรง *Homo sapiens*

Alpha-amylase

Examples: Free fatty acid receptor 2 At1g58602 Q5VSL9 E. coli

Showing all search results for Alpha-amylase

1 - 20 of 170 results

Filter by:

Organism

- Oryza sativa subsp. japonica (10)
- Hordeum vulgare (8)
- Homo sapiens (5)
- Madurella mycetomatis (5)
- Schizosaccharomyces pombe (strain 972 / ATCC 24843) (5)
- Triticum aestivum (5)
- Zea mays (5)
- Arabidopsis thaliana (3)
- Cladophialophora carrionii (3)
- Danio rerio (3)
- Delonix regia (3)

Alpha-amylase

A0A132YZ91 (A0A132YZ91_ENTFC)

Protein Alpha-amylase

Gene AWT83_12510

Source Organism Enterococcus faecium [search this organism](#)

UniProt A0A132YZ91 [go to UniProt](#)

Alpha-amylase

A0A175W7U3 (A0A175W7U3_9PEZI)

Protein Alpha-amylase

Gene MMYC01_204550

Source Organism Madurella mycetomatis [search this organism](#)

UniProt A0A175W7U3 [go to UniProt](#)

เลือก Homo sapiens ก็ขึ้นมา 5 results ก็เลือกตัวแรกก็ได้ เพื่อดูเป็นตัวอย่าง

Showing all search results for Alpha-amylase

1 - 5 of 5 results

Filter by:

Organism

Homo sapiens (5)

Alpha-amylase 1A

PODUB6 (AMY1A_HUMAN)

Protein Alpha-amylase 1A

Gene AMY1A

Source Organism Homo sapiens [search this organism](#)

UniProt PODUB6 [go to UniProt](#)

PDBe-KB 13 PDB structures for PODUB6 [go to PDBe-KB](#)

Alpha-amylase 2B

P19961 (AMY2B_HUMAN)

Protein Alpha-amylase 2B

Gene AMY2B

Source Organism Homo sapiens [search this organism](#)

UniProt P19961 [go to UniProt](#)

Alpha-amylase 1B

PODTE7 (AMY1B_HUMAN)

ก็จะได้ภาพโครงสร้างสามมิติออกมาแบบเดียวกับสัปดาห์ที่แล้ว (RCSB PDB)
เราสามารถดาวน์โหลดโครงสร้างเก็บไว้ได้เป็นไฟล์นามสกุล PDB (มาจาก Protein Data Bank ไม่ใช่ PDF นะครับ ระวังสับสน)

Alpha-amylase 1A

AlphaFold structure prediction

Download [PDB file](#) [mmCIF file](#) [Predicted aligned error](#)

NEW Feedback on structure [Looks great](#) [Could be improved](#)

Information

Protein	Alpha-amylase 1A
Gene	AMY1A
Source organism	Homo sapiens (Human) go to search
UniProt	PODUB6 go to UniProt
Experimental structures	13 structures in PDB for PODUB6 go to PDB-KE
Biological function	Calcium-binding enzyme that initiates starch digestion in the oral cavity (PubMed:12527308). Catalyzes the hydrolysis of internal (1->4)-alpha-D-glucosidic bonds, yielding a mixture of maltose, isomaltose, small amounts of glucose as well as small linear and branched oligosaccharides called dextrans (PubMed:12527308). go to UniProt

3D viewer


Model Confidence:

- Very high (pLDDT > 90)
- Confident (90 > pLDDT > 70)
- Low (70 > pLDDT > 50)
- Very low (pLDDT < 50)

AlphaFold produces a per-residue confidence score (pLDDT) between 0 and 100. Some regions below 50 pLDDT may be unstructured in isolation.

Sequence of AF-PODUB6... 1: Alpha-am... A

```
1 MKLFWLLFTI GFCWAQYSSN IQQGRISIVH LFEWRWVDIA LECERYLAPK GPGGVQVSPF NENVAIHNPF RPWNERVQPV SYKLCTRSQH EDEFNRMVTR CINVGVRIYV DAV
2 INHMCQH AVSAGTSSTC GSYFNPGRSRD PFAVPPYSWD FNDGCKTGS GDIENYNDAT QVRDRLSGL LQALALGKDYV RSKIAEVMNH LIDIGVAGFR IDASKHWPQ DIKAIL
3 DKLH NLNSNWFPEG SKPFIYQEV I DLGSEPIKSS DYPGNGRVTI FKYGAKLQTV IRKWNQEKMS YLENWSEGWG FMPSDRALVF VDNHDMQRSH GAGGASILTF WDAALYKMA
```



ไฟล์ PDB ที่ดาวน์โหลดเก็บไว้ มีประโยชน์คือ สามารถนำไปเปิดด้วย PDB Viewer ที่เว็บ RCSB PDB ได้ โดยเข้าที่ <https://www.rcsb.org/3d-view> เข้ามาได้แล้ว ก็เลือก Open Files แล้ว Select files นามสกุล PDB ที่เราเซฟไว้แล้ว แล้วกด Apply

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn More Documentation Careers MyPDB

RCSB PDB 187170 Biological Macromolecular Structures Enabling Breakthroughs in Research and Education

PDB Archive

Advanced Search Browse Annotations Help

3D View

Sequence No structure available

- Import
 - Open Files
 - Select files...
 - Format Auto
 - Visuals On
 - Apply
 - Download Structure
- Session
- Structure
 - Nothing Loaded
 - Nothing Focused
- Measurements
- Structure Motif Search
- Components
 - Preset + Add
- Export Models
- Export Geometry
- Export Animation

ก็จะได้โครงสร้างสามมิติที่ดาวน์โหลดมาจาก AlphaFold มาอยู่ใน 3D Viewer ของ RCSB PDB ที่เอาเมาส์จับหมุนโครงสร้าง หรือซูมดูใกล้ ๆ ที่ละครดอะมีโนก็ได้อีก และมุม ขวาล่าง ก็สามารถ Export Animation ได้เหมือนคราวที่แล้วครับ จบเรื่อง Bioinformatics เพียงเท่านี้ครับ พรุ่งนี้ขึ้นเรื่องใหม่

The screenshot shows the RCSB PDB website's 3D View interface. At the top, the RCSB PDB logo and navigation links are visible. The main area displays a 3D ribbon model of a protein structure in green. To the right of the model is a sidebar menu with various options. A pink arrow points to the 'Export Animation' option at the bottom of the sidebar. Another pink arrow points to the 'Help' link at the top right of the sidebar. The sequence of the protein is visible at the top of the 3D view area.