

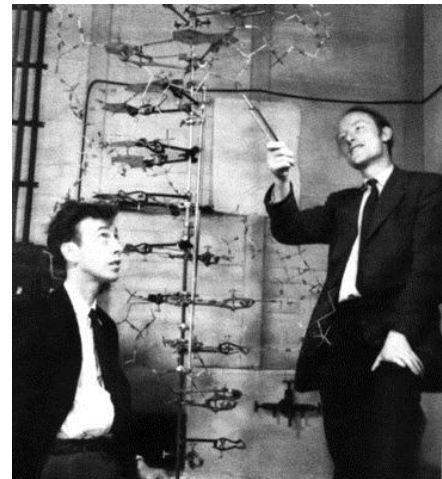
การทดลองที่ 14 แบบจำลองของสารชีวโมเลกุล

อ. ดร. พุทธพร ส่องศรี

- วัตถุประสงค์
1. เพื่อศึกษาประเภท รูปแบบ ลักษณะของแบบจำลองสารชีวโมเลกุล
 2. สามารถใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อสร้างแบบจำลองโมเลกุลอย่างง่ายได้
 3. สามารถนำองค์ความรู้ที่ได้ไปใช้ประกอบในการศึกษาทางเคมีและวิทยาศาสตร์ชีวภาพสาขาต่าง ๆ ต่อไป

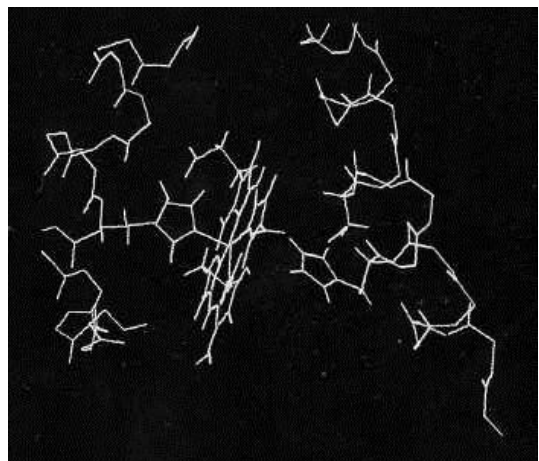
ชีวเคมี เป็นวิชาที่ศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้างและหน้าที่ ปฏิกริยาระหว่างกันของสารที่เป็นองค์ประกอบของสิ่งมีชีวิต ตลอดจนกระบวนการต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นภายในเซลล์ ดังนั้นการที่จะเข้าใจและเห็นภาพสิ่งที่เล็กมากในระดับโมเลกุลเช่นนี้ได้ดีนั้น จะต้องมีแบบจำลอง เพื่อใช้แสดงแทนของจริงที่ไม่สามารถมองเห็นได้ด้วยตาเปล่า

ในอดีต แบบจำลองโมเลกุล ใช้วัสดุที่หาได้ง่ายมาจัดทำ เช่น อะตอมก็ใช้ลูกปิงปองแทน พันธะเคมีก็ใช้แท่งไม้หรือพลาสติก แบบจำลองลักษณะนี้เรียกว่า แบบจำลองกายภาพ (physical model) ซึ่งเหมาะสำหรับการศึกษาวิชาเคมีอินทรีย์และชีวเคมี เนื่องจากสามารถมองเห็นโครงสร้างของสารเป็นแบบสามมิติได้อย่างชัดเจนและจับต้องได้ แต่ข้อเสียก็มีอยู่ นั่นคือหากเป็นโครงสร้างของสารชีวโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่จะมีราคาแพง ประกอบยาก ใช้เวลานาน และเปราะบาง เคลื่อนย้ายได้ยาก



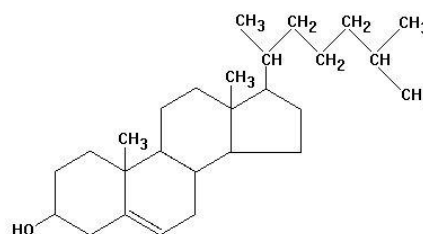
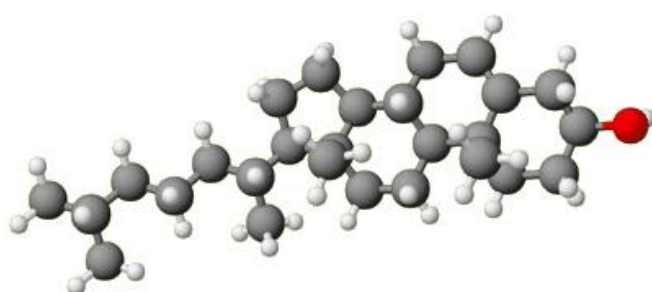
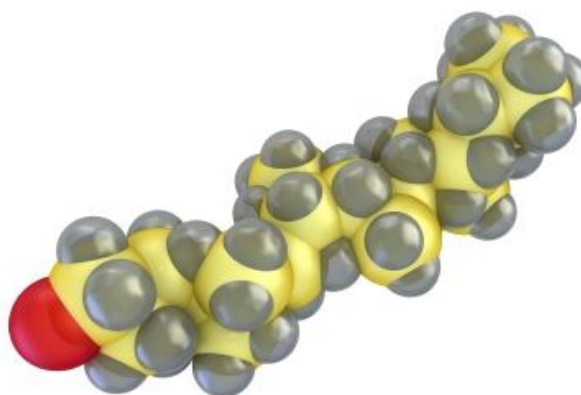
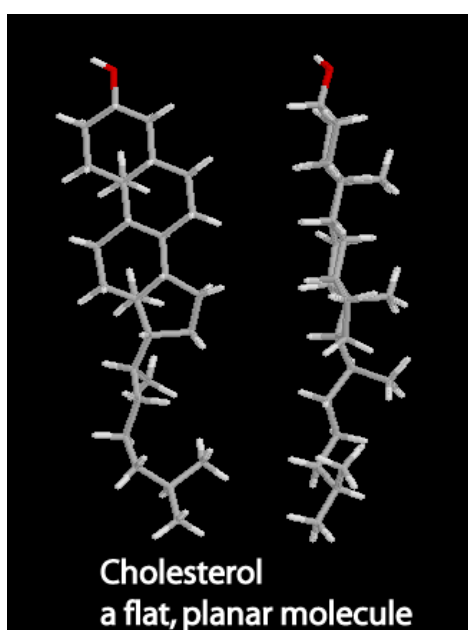
เมื่อเทคโนโลยีของคอมพิวเตอร์กราฟิกส์พัฒนาไปมากจนสามารถจัดทำแบบจำลองสามมิติของโมเลกุลที่มีความสลับซับซ้อน เช่น ดีเอ็นเอ โปรตีนได้อย่างสะดวกรวดเร็ว ความนิยมในการศึกษาสารชีวโมเลกุลโดยการใช้แบบจำลองจากหน้าจอคอมพิวเตอร์ก็เพิ่มมากขึ้นอย่างรวดเร็ว ดังจะเห็นได้จากตำราวิชาชีวเคมีในระยะหลังมักจะมีภาพประกอบเกี่ยวกับโครงสร้างโมเลกุลของสารต่าง ๆ ในลักษณะแบบจำลองคอมพิวเตอร์แทบทั้งสิ้น

การทดลองบทนี้ นิสิตจะได้ศึกษาชนิด ลักษณะของแบบจำลอง และการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อแสดงแบบจำลองของสารชีวโมเลกุลต่างๆ โดยจะเน้นเลือกใช้โปรแกรมที่ใช้งานง่าย ใช้เป็นเร็ว และเป็นโปรแกรมชนิด Freeware สามารถดาวน์โหลดได้จากอินเทอร์เน็ตโดยไม่มีค่าใช้จ่ายและเงื่อนไขผูกมัด



แบบจำลองคอมพิวเตอร์ของสารเคมีและสารชีวโมเลกุล มีหลายรูปแบบ ดังนี้

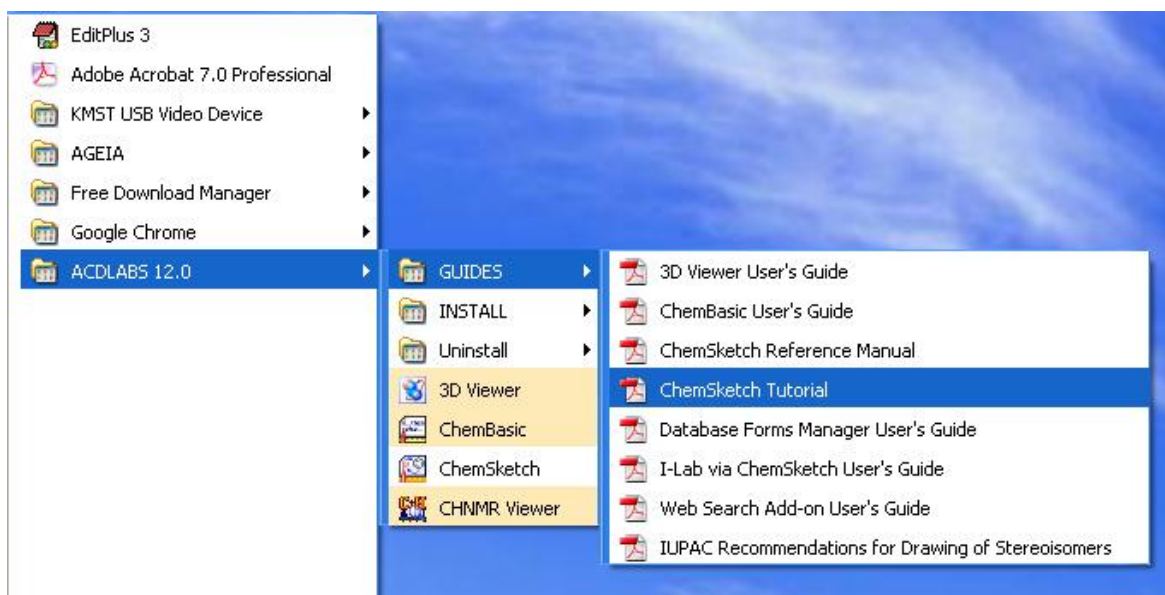
1. **Wireframe** (โครงลวด) มีการแสดงผลเป็นเส้นเหมือนลวด โดยให้สีที่แตกต่างกันสำหรับอะตอมของธาตุต่างๆ เช่น C = ขาวหรือเทา N = น้ำเงิน O = แดง S = เหลือง Halides = เขียวอ่อน H = ขาวหรือฟ้า อยู่บนพื้นหลังสีดำ
2. **Rods or Sticks** (แท่ง) คล้ายแบบ Wireframe แต่เพิ่มขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของแท่งให้ใหญ่ขึ้น ช่วยให้มองเห็นชัดเจนขึ้น
3. **Balls and Sticks** แสดงอะตอมเป็นรูปทรงกลม ต่อกันกับแท่งที่แสดงพันธะ สำหรับสีก็ใช้แบบเดียวกับ Wireframe
4. **Spacefilling** แสดงโมเลกุลเป็นทรงกลม มีขนาดของอะตอมเล็กใหญ่ตามสัดส่วนรัศมีของ van der Waals



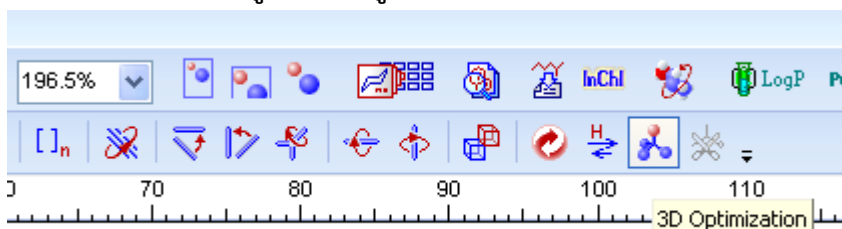
จากภาพข้างบนนี้ เป็นโครงสร้างแบบใดบ้าง และแบบไหนสะดวกในการใช้งานและเหมาะสำหรับศึกษาการทำงานของสารชีวโมเลกุลมากกว่ากัน

โปรแกรม ChemSketch ver.12

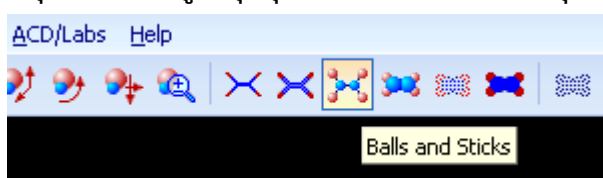
1. ให้นักศึกษานำไฟล์โปรแกรม ChemSketch ver.12 (ไฟล์ติดตั้งมีขนาด 39 MB) ได้ที่ biochem.flas.kps.ku.ac.th/chemsk12.exe
2. เมื่อติดตั้งเสร็จแล้ว ลองตรวจสอบดูใน start → All Programs จะเห็นแบบนี้



3. ฝึกสามารถเปิดอ่านคู่มือเพื่อฝึกใช้งานโปรแกรมได้ที่ ChemSketch Tutorial ส่วนตัวโปรแกรม ให้เปิดที่ ChemSketch
4. ลองเปิดโปรแกรม Chemscketch คลิกปุ่มต่างๆตามที่มี popup ขึ้นมา จนเข้าสู่โปรแกรม ซึ่งจะเป็นหน้าจอว่าง ๆ
5. เข้าเมนู Templates → Template Window... หรือกดปุ่ม F5 ก็ได้
6. ตรงเมนูที่เป็นกรอบดาวนลิสต์ ทดลองเลือก Amino Acids
7. คลิกเลือกกรดอะมิโนที่ต้องการ เช่น Alanine แล้วลากมาวางบนหน้าขาว ๆ ของโปรแกรม
8. จะได้โครงสร้างของกรดอะมิโน Alanine อยู่บนหน้าขาว ๆ จากนั้นให้กดปุ่ม 3D Optimization ซึ่งจะทำให้โครงสร้างเปลี่ยนไปอยู่ในแบบที่ถูกต้องใน 3 มิติ

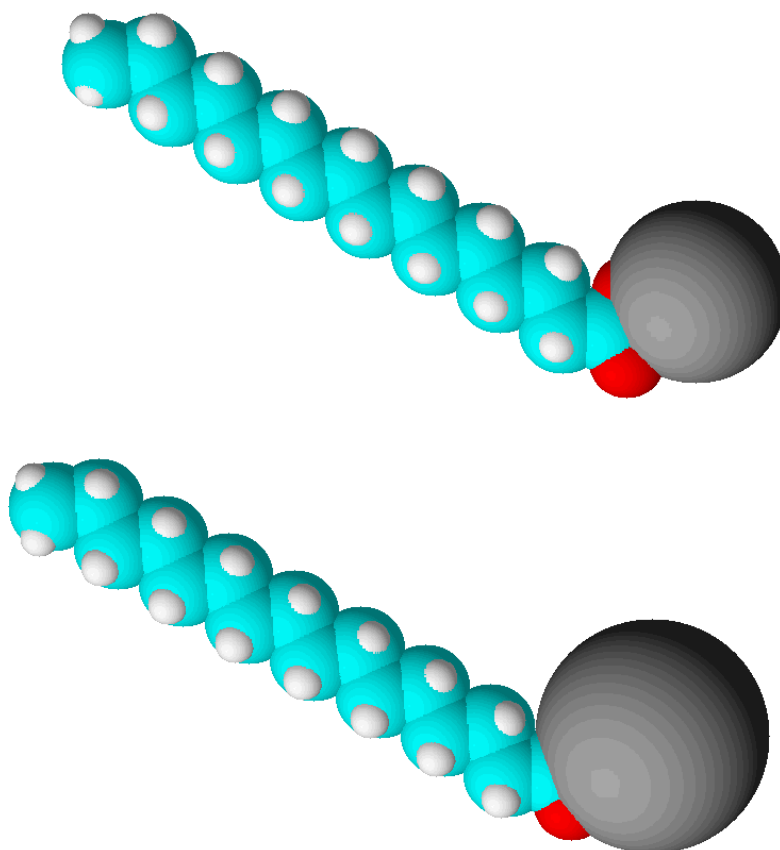


9. กดปุ่ม 3D Viewer ที่อยู่ด้านบนของปุ่ม 3D Optimization จะเห็นโครงสร้าง 3 มิติบนพื้นดำปรากฏขึ้น
10. กดปุ่ม Balls and Sticks จะเห็นโครงสร้างสามมิติของกรดอะมิโน Alanine อย่างสวยงาม สามารถใช้เมาส์หมุนโครงสร้างดูได้ทุกมุม หรือจะให้โปรแกรมหมุนให้โดยอัตโนมัติก็ได้



แบบฝึกหัด

ให้นัก์สทดลองวาดโครงสร้างของสบูโปแทสเซียมและสบูโซเดียม โดยใช้โปรแกรม ChemSketch แล้วเปิดดูด้วย 3D viewer ซึ่งจะได้โครงสร้างคล้ายกับภาพข้างล่างนี้



คำถาม

1. แบบจำลองสามมิติข้างบนนี้ เป็นแบบใด (Rods, Ball and Stick หรือ Spacefilling)
2. โมเลกุลบนกับล่าง โมเลกุลไหนเป็นสบูโปแทสเซียม โมเลกุลไหนเป็นสบูโซเดียม ทราบได้อย่างไร
3. จากแบบจำลองที่ได้ นำมาอธิบายเหตุผลที่สบูโปแทสเซียมมีลักษณะอ่อนเหลว ขณะที่สบูโซเดียมมีความแข็งกว่าได้หรือไม่ อย่างไร
4. นิสิตนำความรู้เรื่องการใช้โปรแกรม ChemSketch ไปใช้ประโยชน์กับการเรียนวิชาเอกของนิสิตได้หรือไม่ อย่างไร