การพัฒนาฐานข้อมูลเพปไทด์ซียู

นายแกล้วกล้า แก้วไทย

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาชีวเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2539

ISBN 974-636-411-1

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I17139016

DEVELOPMENT OF CU PEPTIDE DATABASE

Mr. Klaewkla Kaewthai

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science in Biochemistry

Department of Biochemistry
Graduate School
Chulalongkorn University

Academic Year 1996

ISBN 974-636-411-1

Thesis Title	Development of CU Peptide Database
By	Mr. Klaewkla Kaewthai
Department	Biochemistry
Thesis advisor	Lerson Tanasugarn, Ph.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree.

.....Dean of Graduate School
(Professor Supawat Chutivongse, Ph.D.)

Thesis Committee

.....Chairman
(Assistant Professor Tipaporn Limpaseni, Ph.D.)

.....Thesis advisor
(Lerson Tanasugarn, Ph.D.)

.....Member
(Associate Professor Bhinyo Panijpan, Ph.D.)

.....Member
(Assistant Professor Suganya Soontaros, Ph.D.)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

แกล้วกล้า แก้วไทย : การพัฒนาฐานข้อมูลเพปไทด์ซียู (DEVELOPMENT OF CU PEPTIDE DATABASE) อ. ที่ปรึกษา : ดร. เลอสรร ธนสุกาญจน์ 195 หน้า ISBN 974-636-411-1

ฐานข้อมูลเพปไทด์ซียูได้รับการพัฒนาขึ้นเพื่อใช้เป็นเครื่องมือสำหรับนักชีวเคมีในการคำนวณและทำนายสมบัติเบื้องต้นของเพปไทด์ เช่น น้ำหนักโมเลกุล ประจุสุทธิของเพปไทด์ที่ความเป็นกรดเป็นด่างต่างๆ pI และ hydropathic index ฐานข้อมูลเพปไทด์ซียูถูกสร้างให้สามารถเข้าถึงโดยผ่านระบบอินเตอร์เน็ต โดยสร้างบนเครื่อง Power Macintosh 7100/66 AV และใช้ซอฟท์แวร์ในการสร้าง 4 ซอฟท์แวร์ ได้แก่ FileMaker Pro 3.0, WEB FM, WEBSTAR และ Netscape Navigator ฐานข้อมูลเพปไทด์ซียูประกอบด้วย 971 เรคคอร์ดซึ่งบรรจุข้อมูลของเพปไทด์ทั้ง 971 ชนิด เว็บเพจของฐานข้อมูลนี้มี 4 หน้า คือ Introductory page, Search Form page, Results page และ Details page ในหน้า Search Form page ผู้ใช้สามารถสืบค้นเพปไทด์อย่างซับซ้อนได้โดยใช้ search operator และค้นหลาย field พร้อมกัน ในหน้า Details page นั้นนอกจากแสดงข้อมูลของเพปไทด์แล้ว ยังมีส่วนที่ใช้ในการคำนวณ น้ำหนักโมเลกุล ประจุสุทธิ และ pI อีกด้วย ซึ่งสามารถคำนวณสมบัติดังกล่าวของเพปไทด์ใดก็ได้ไม่จำเป็นต้องเป็นเพปไทด์ที่อยู่ในฐานข้อมูลนี้ถ้าเพปไทด์นั้นทราบลำดับกรดอะมิโน การคำนวณน้ำหนักโมเลกุลและประจุสุทธิใช้เวลาน้อยกว่า 1 วินาที แต่การคำนวณ pI ใช้เวลา 1 ถึง 10 วินาที ขึ้นอยู่กับขนาดของเพปไทด์ ฐานข้อมูลเพปไทด์ซียูถูกใช้ในการคำนวณ hydropathic index ของเพปไทด์ 3 ตัวเพื่อใช้เปรียบเทียบกับตำแหน่งของลำดับกรดอะมิโนที่ได้จากการสังเกตภาพโครงสร้างสามมิติบนโปรแกรม Rasmol ซึ่งภาพสามมิติเหล่านี้ได้จากการทำ x-ray diffraction ของเพปไทด์

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ชีวเคมี ลายมือชื่อนิสิต แกล้วกล้า แก้วไทย

สาขาวิชา ชีวเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา เลอสร ธนสุกาญจน์

ปีการศึกษา 1996 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

คำชี้แจงการพิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์

ให้ปฏิบัติดังนี้

1. พิมพ์บทคัดย่อวิทยานิพนธ์ ความยาวไม่เกิน 1 หน้า ลงในกรอบสีเขียวด้านหลังของกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อฯ ที่บัณฑิตวิทยาลัยจะมอบให้เพียงแผ่นเดียวเท่านั้น (ดูตัวอย่างข้างล่าง)
2. ถ่ายสำเนาบทคัดย่อฯ ที่พิมพ์เสร็จแล้ว ทั้งภาษาไทยและภาษาอังกฤษ เรียงไว้หน้าบทคัดย่อของต้นฉบับวิทยานิพนธ์ฉบับสมบูรณ์ทุกเล่ม
3. ส่งกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อฯ (ซึ่งได้พิมพ์บทคัดย่อฯ เรียบร้อยแล้ว) พร้อมด้วยสำเนา 1 ชุด ที่งานมาตรฐานการศึกษา บัณฑิตวิทยาลัย ในวันส่งต้นฉบับวิทยานิพนธ์ฉบับสมบูรณ์

ข้อแนะนำ

1. เพื่อป้องกันการผิดพลาดหรือชำรุด นิสิตควรทดลองพิมพ์ บทคัดย่อฯ ในกระดาษ A4 ซึ่งตีกรอบเท่าตัวอย่างให้ถูกต้องก่อนพิมพ์ลงด้านหลังของกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อ
2. การพิมพ์ ชื่อผู้วิจัย ชื่อเรื่องภาษาไทย-อังกฤษ ชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา จำนวนหน้า การเว้นระยะ การเว้นบรรทัด ให้ดูตัวอย่างข้างล่าง (ชื่อ ยศ ให้พิมพ์ต่อท้ายชื่อสกุลของผู้วิจัยคั่นด้วยเครื่องหมายจุลภาค ",")

ตัวอย่างการพิมพ์บทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภาษาไทย

สรัญยา ณ ลำปาง : การขยายพันธุ์โกงกางใบเล็ก *Rhizophora apiculata* Blume. ด้วยวิธีเพาะเลี้ยงเนื้อเยื่อและการปักชำ (PROPAGATION OF *Rhizophora apiculata* Blume. BY TISSUE CULTURE AND HYPOCOTYL CUTTING TECHNIQUES) อ. ที่ปรึกษา : ผศ. ดร. พิพัฒน์ พัฒนผลไพบูลย์, อ. ที่ปรึกษาร่วม : รศ. ดร. ประสาทพร สมิตะมาน , 90 หน้า. ISBN 974-634-954-6.

การเพาะเลี้ยงเนื้อเยื่อจากส่วนยอด, ข้อ, เอมบริโอ, ไฮโปคอทิล และใบของโกงกางใบเล็กบนอาหารสังเคราะห์สูตร Gauthere (1942), สูตร Hildebrandt, Riker & Dauggar (1946) สูตร Heller (1953), สูตร Nitsch & Nitsch (1956) และสูตร Murashige & Skoog (1962) เสริมด้วยสารควบคุมการเจริญเติบโต 2 ชนิด คือ ออกซิน (IAA, IBA, NAA, 2,4-D) และไซโตไคนิน (BAP, Kinetin) ระดับความเข้มข้น 4 ระดับคือ 0, 2, 5 และ 10 มก./ล. พบว่าเมื่อเพาะเลี้ยงบนอาหารทุกสูตรให้ผลใกล้เคียงกันคือ เนื้อเยื่อเกิดสีน้ำตาลอย่างรวดเร็ว จึงยังไม่สามารถตอบสนองต่อการพัฒนาเป็นแคลลัสและเจริญเปลี่ยนแปลงต่อไปได้ วิธีที่ดีที่สุดที่ช่วยชะลอการเกิดสีน้ำตาลให้ช้ากว่าปกติคือ การเลี้ยงเนื้อเยื่อพืชในอาหารเหลว MS ที่เสริม 0.5% PVP โดยเลี้ยงบนเครื่องเขย่า 75 รอบต่อนาที จากนั้นย้ายเนื้อเยื่อพืชไปเลี้ยงบนอาหารกึ่งแข็ง MS และเปลี่ยนอาหารทุกวัน ซึ่งพบว่ามีการพัฒนาของใบจากส่วนยอด แต่ไม่สามารถเจริญเติบโตต่อไปได้

การศึกษาการใช้ออกซินและระดับความเข้มข้นต่างๆต่อการกระตุ้นการสร้างรากและยอดพืชเพื่อขยายพันธุ์โกงกางใบเล็ก กระทำโดยนำฝักโกงกางใบเล็กมาตัดออกเป็น 3 ส่วนคือ ส่วนยอด ส่วนกลาง และส่วนโคน หลักจากนั้นนำปลายของแต่ละส่วนมาจุ่มในออกซิน 3 ชนิด คือ IAA, IBA และ NAA ที่ระดับความเข้มข้น 500, 1,000, 2,000, 4,000 และ 6,000 มก./ล. และใช้ชิ้นส่วนชนิดเดียวกันที่ไม่จุ่มออกซินเป็นชุดควบคุม พบว่า IAA และ IBA มีผลต่อการพัฒนาของยอด

แนวกรอบสี่เหลี่ยมสำหรับพิมพ์ข้อความ

แนวพิมพ์ชื่อผู้วิจัย ชื่อวิทยานิพนธ์ อาจารย์ที่ปรึกษา จำนวนหน้า และ ISBN

เว้นระยะ 2 บรรทัด

แนวย่อหน้าเริ่มพิมพ์ข้อความ

เว้นระยะ 1 บรรทัด

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

C625937 : MAJOR BIOCHEMISTRY
KEY WORD: PEPTIDE / DATABASE / THE INTERNET

KLAEWKLA KAEWTHAI : DEVELOPMENT OF CU PEPTIDE DATABASE. THESIS ADVISOR : LERSON TANASUGARN, Ph.D. 195 pp. ISBN 974-636-411-1.

CU Peptide Database was developed as a tool for biochemists for calculating and predicting some peptide properties such as molecular weight, net charge, isoelectric point and hydropathic index. The CU Peptide Database was created to be accessed via the Internet. It is based on the Power Macintoch 7100/66 AV involving 4 software i.e. FileMaker Pro 3.0, WEB FM, WEBSTAR and Netscape Navigator. The database is composed of 971 records containing peptide information. The CU Peptide Database web page, written in HTML and JavaScript, consists of four pages i.e. Introductory page, Search Form page, Results page and Details page. The Search Form page allows users to search for peptides using a variety of criteria with search operators and multiple fields. The Details page has a calculation facility for finding molecular weight, net charge and pI of any peptides including unknown peptide with known sequence. The calculations of molecular weight and net charge were rapid, taking less than one second in processing. The calculation of pI takes 1 to 10 seconds depending on the size of the peptides. The CU Peptide Database was used to perform the calculation of hydropathic indexes for three peptides in order to make comparison with spatial position of amino acid residues obtained from observations of x-ray diffraction images of these peptides (PDB file) on Rasmol, a molecular visualization program.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา Biochemistry ลายมือชื่อนิสิต แกล้วกล้า แก้วไทย

สาขาวิชา Biochemistry ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Lerson Tanasugarn

ปีการศึกษา 1996 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

คำชี้แจงการพิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์

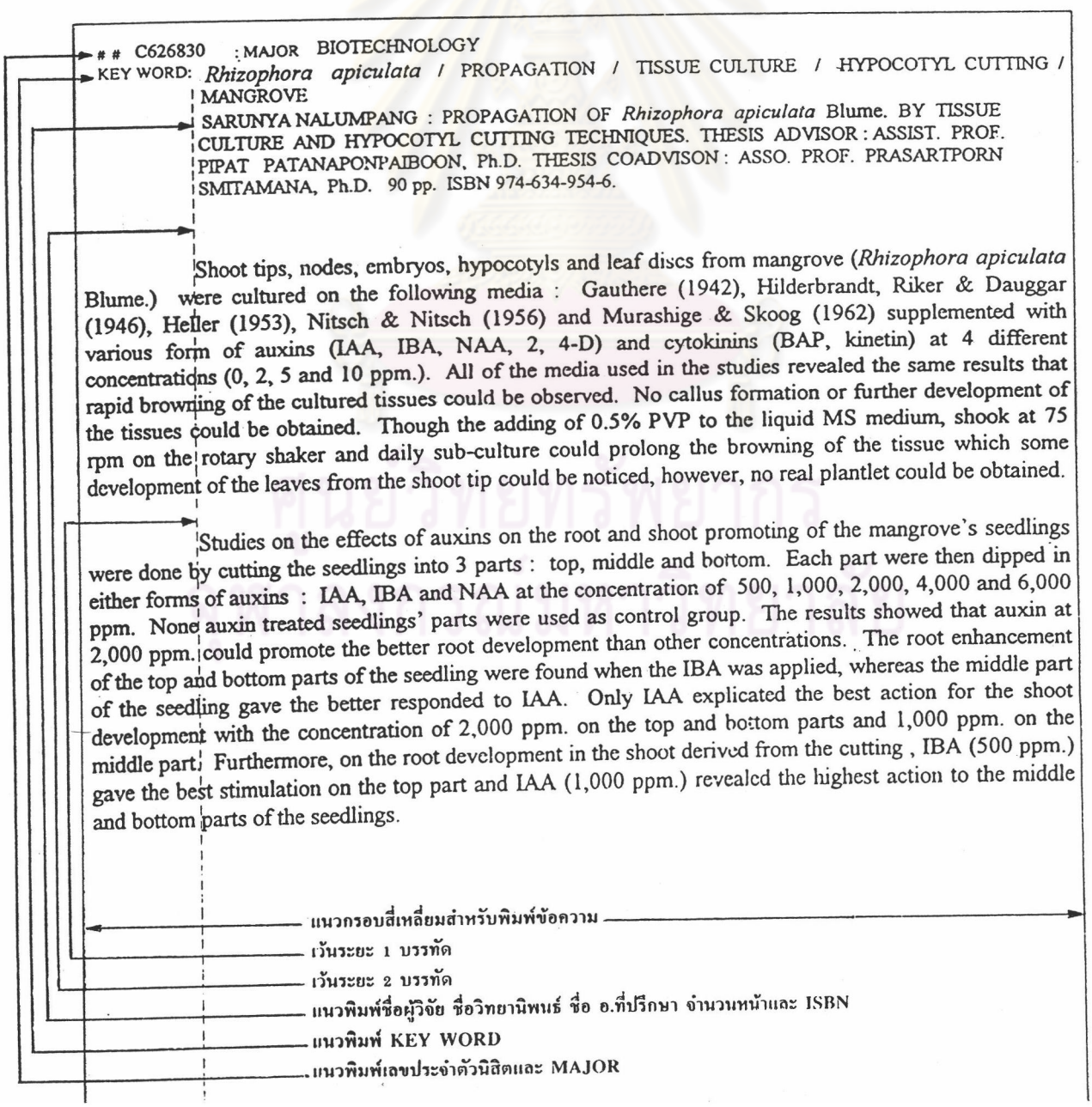
ให้ปฏิบัติดังนี้

1. พิมพ์บทคัดย่อวิทยานิพนธ์ ความยาวไม่เกิน 1 หน้า ลงในกรอบสีเขียวด้านหลังของกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อฯ ที่บัณฑิตวิทยาลัยจะมอบให้เพียงแผ่นเดียวเท่านั้น (ดูตัวอย่างข้างล่าง)
2. ถ่ายสำเนาบทคัดย่อฯ ที่พิมพ์เสร็จแล้ว ทั้งภาษาไทยและภาษาอังกฤษ เรียงไว้หน้าบทคัดย่อของต้นฉบับวิทยานิพนธ์ฉบับสมบูรณ์ทุกเล่ม
3. ส่งกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อฯ (ซึ่งได้พิมพ์บทคัดย่อฯ เรียบร้อยแล้ว) พร้อมด้วยสำเนา 1 ชุด ที่งานมาตรฐานการศึกษา บัณฑิตวิทยาลัย ในวันส่งต้นฉบับวิทยานิพนธ์ฉบับสมบูรณ์

ข้อแนะนำ

1. เพื่อป้องกันการผิดพลาดหรือชำรุด นิสิตควรทดลองพิมพ์ บทคัดย่อฯ ในกระดาษ A4 ซึ่งตีกรอบเท่าตัวอย่างให้ถูกต้องก่อนพิมพ์ลงด้านหลังของกระดาษแบบพิมพ์บทคัดย่อ
2. การพิมพ์ ชื่อผู้วิจัย ชื่อเรื่องภาษาไทย-อังกฤษ ชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา จำนวนหน้า การเว้นระยะ การเว้นบรรทัด ให้ดูตัวอย่างข้างล่าง (ชื่อ ยศ ให้พิมพ์ต่อท้ายชื่อสกุลของผู้วิจัยคั่นด้วยเครื่องหมายจุลภาค ",")

ตัวอย่างการพิมพ์บทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภาษาอังกฤษ



ACKNOWLEDGMENT

I would like to express my deepest gratitude and appreciation to Dr. Lerson Tanasugarn, my advisor for his excellent guidance, encouragement, suggestions and discussion throughout this research.

My appreciation is also expressed to Asst. Prof. Dr. Tipaporn Limpaseni and Assoc. Prof. Dr. Bhinyo Panijpan for serving as thesis committee. Special thanks go to Asst. Prof. Dr. Suganya Soontaros for serving as thesis committee and giving me the appliance supports throughout this research.

I would like to thank Biofile Co., Ltd. for financial supports and Pink electronic for computer support.

I wish to express my sincere thanks to all teachers and friends in the department of Biochemistry for their sincerity and friendship.

Finally, the greatest indebtedness is expressed to my parents and my family for their tender love, understanding and encouragement.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

CONTENTS

PAGE

ENGLISH ABSTRACT i

THAI ABSTRACT ii

ACKNOWLEDGEMENT iii

CONTENTS iv

LIST OF TABLES viii

LIST OF FIGURES ix

CHAPTER I INTRODUCTION 1

1.1 Review of Key Concepts 1

1.1.1 Peptide 1

1.1.1.1 Peptide Bonds 1

1.1.1.2 Acid-Base Properties 2

1.1.1.3 Peptide Stability 2

1.1.2 Database 3

1.1.3 Biochemical Database 4

1.1.4 The Internet 5

1.1.4.1 Definition 5

1.1.4.2 Internet Protocols 6

1.1.4.3 World Wide Web (WWW) 7

1.1.4.4 CGI Applications 9

1.2 CU Peptide Database Concept 10

1.3 Objectives of the Research 11

CHAPTER II MATERIALS AND METHODS 12

2.1 Materials 12

2.1.1 Chemical Catalogue 12

2.1.2 Protein Database 12

2.1.3 Computer Hardware 12

2.1.4 Computer Software 12

2.1.4.1 Database Management Software 13

2.1.4.2 HTTP Server 13

2.1.4.3 CGI Application 13

2.1.4.4 Internet Browser 13

2.1.4.5 Molecular visualization 13

2.2 Methods 14

2.2.1 System Analysis 14

2.2.2 CU Peptide Database Construction 15

2.2.2.1 Peptide Data Collection 16

2.2.2.2 Creation of CU Peptide Database 16

2.2.3 CU Peptide Database Web Page Construction 20

2.2.3.1 CU Peptide Database Introductory Page 20

2.2.3.2 Search Form Page 20

2.2.3.3 Results Page 20

2.2.3.4 Details Page 20

2.2.4 Primary Test of CU Peptide Database 21

2.2.5 Comparison of the Result from the CU Peptide Database with Data Derived from Experimental Studies 21

CHAPTER III RESULTS **22**

3.1 System Analysis Result **22**

3.1.1 System Analysis of Biochemical Requirements 22

3.1.2 System Analysis of CU Peptide Database Web Pages 23

3.2 CU Peptide Database Web Pages **24**

3.2.1 Introductory Page 25

3.2.2 Search Form Page 26

3.2.3 Results Page 30

3.2.4 Details Page 31

3.3 Primary Test of CU Peptide Database **34**

3.4 Comparison of the Result from the CU Peptide Database with Data Derived from Experimental Studies **34**

3.4.1 Charybdotoxin 35

3.4.2 Echistatin 37

3.4.3 Glucagon 39

CHAPTER IV DISCUSSION **42**

4.1 Technical Change in CU Peptide Database **42**

4.2 Advantaged and Disadvantages of the CU Peptide Database **43**

4.3 Precision of Calculating Script **44**

4.4 Comparison of the Result from the CU Peptide Database with Data Derived from Experimental Studies **45**

4.5 Maintenance of the Database **46**

4.6 Limitations of CU Peptide Database **46**

CHAPTER V CONCLUSIONS 47

REFERENCES 48

APPENDIX A PEPTIDE AND AMINO ACIDS INFORMATION 51

APPENDIX B FILEMAKER PRO SCRIPTS FOR CALCULATING PEPTIDE PROPERTIES 134

APPENDIX C WEB PAGE SCRIPT 148

BIOGRAPHY 190

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF TABLES

TABLE **PAGE**

2-1 Specifications of Computer Software Used in this Research 14

2-2 Field Attribute 17

3-1 Result of observing inside and outside residue of Charybdotoxin 36

3-2 Result of observing inside and outside residue of Echistatin 38

3-3 Result of observing inside and outside residue of Glucagon 40

A-1 Some properties of standard amino acids 49

A-2 List of peptides in the CU Peptide Database 50

C-1 Introductory Page script 148

C-2 Search Form Page script 151

C-3 Results Page script 163

C-4 Details Page (with calculation part) script 165

C-5 Details Page (without calculation part) script 188

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
1-1	Hypertext Link	9
1-2	Communication Among Client, Server, Cgi Application And Database Program	11
2-1	Overall Structure Of The Cu Peptide Database	15
2-2	Fields For Storing Peptide Data Created In Filemaker Pro 3.0	17
3-1	Introductory Page	25
3-2	Search Form Page	28
3-3	Results Page	29
3-4	Details Page Of A Peptide That Consists Of Non-Standard Amino Acid Residue	31
3-5	Details Page Of Peptide With All Standard Amino Acid Residues	32
3-6	Hydropathy profile of Charybdotoxin	35
3-7	Three dimensional structure of Charybdotoxin used in the observation	35
3-8	Hydropathy profile of Echistatin	37
3-9	Three dimensional structure of Echistatin used in the observation	37
3-10	Hydropathy profile of Glucagon	39
3-11	Three dimensional structure of Glucagon used in the observation	39