บทที่ 3
วิธีดำเนินการวิจัย

โปรแกรมคอมพิวเตอร์หรือฐานข้อมูลที่ใช้ในการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพ

(1) ลิแกนด์สเก๊าท์ (LigandScout)
(2) ซี (Similarity Ensemble Approach, SEA)
(3) ฟาร์แมปเปอร์ (PharmMapper server)
(4) พาส (Prediction of Activity Spectra for Substances, PASS)
(5) เอนโดคราน ดิสรับโทม (Endocrine disruptome)
(6) สวิสทาร์เกตพีดิคชัน (SwissTargetPrediction)
(7) โปรแกรมเค็มดรอพ (Chemdraw)
(8) เค็มสเกต (ACD/ChemSketch)
(9) ไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล (Microsoft Excel)

วิธีการดำเนินการวิจัย

(1) นำโครงสร้างที่เป็นไปได้ทั้งหมดของสารอินทรีย์ 128 ชนิด ที่สืบค้นจากวารสารทางวิชาการมาวาดเป็นไฟล์โครงสร้าง (Chemdraw files, CS ChemDraw หรือ ไฟล์ .cdx)

(2) นำโครงสร้างที่เป็น 2 มิติ ไปเปลี่ยนเป็น สมายโค้ด (Smile code) และโครงสร้าง 3 มิติ (.sdf) โดยใช้โปรแกรมเค็มดรอพ (Chemdraw) และ เค็มสเกต (ChemSketch)

(3) นำโครงสร้าง 3 มิติ ที่บันทึกไฟล์เป็น .sdf ของสารอินทรีย์ (ทำครั้งละ 1 โครงสร้าง) มาสร้างเป็นฟาร์มาโคฟอร์เพื่อวิเคราะห์การจับกับโปรตีนในโปรแกรมลิแกนด์สเก๊าท์ (Wolber and Langer, 2005, p. 160-169) แล้วบันทึกผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของสารชนิดนั้นด้วยโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล (Microsoft Excel)

(4) นำสมายโค้ด (Smile code) ของสารอินทรีย์ (ทำครั้งละ 1 โครงสร้าง) มาวิเคราะห์ฤทธิ์ทางชีวภาพของสารนั้นโดยใช้โปรแกรมซี (Keiser and others, 2007, p. 197-206) บันทึกผลการทดลองในโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล

(5) นำโครงสร้าง 3 มิติ ที่บันทึกไฟล์เป็น .sdf ของสารอินทรีย์ มาวิเคราะห์ฤทธิ์ทางชีวภาพของสารนั้นในเซิร์ฟเวอร์ฟาร์มแมปเปอร์ (Liu and others, 2010, p. w609-w614) บันทึกผลการทดลองในโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล ทั้งนี้จะทำได้เพียงครั้งละ 1 โครงสร้างของสารอินทรีย์

(6) นำโครงสร้าง 3 มิติ ที่บันทึกไฟล์เป็น .sdf ของสารอินทรีย์ มาวิเคราะห์ฤทธิ์ทางชีวภาพของสารนั้น โดยใช้โปรแกรมพาสออนไลน์ (Lagunin and others, 2000, p. 747-748) บันทึกผลการทดลองในโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล

(7) วาดโครงสร้าง 3 มิติ ของสารอินทรีย์ในโปรแกรมเอนโดคราน ดิสรับโทม (Kolšek and others, 2014, p. 1254-1267) หรือใช้สมายโค้ดของสารอินทรีย์นั้น ตรวจสอบโครงสร้างและผลการวิเคราะห์ฤทธิ์ทางชีวภาพ โดยบันทึกผลการทดลองในโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล

(8) วาดโครงสร้าง 3 มิติ ของสารอินทรีย์ในโปรแกรมสวิสทาร์เกตพีดิกชัน (Gfeller and others, 2014, p. w32-w38) หรือใช้สมายโค้ดของสารอินทรีย์นั้น ตรวจสอบโครงสร้างและผลการวิเคราะห์ฤทธิ์ทางชีวภาพ โดยบันทึกผลการทดลองในโปรแกรมไมโครซอฟท์เอ๊กซ์เซล

(9) เปรียบเทียบฤทธิ์ทางชีวภาพของสารอินทรีย์โครงสร้างนั้น ๆ ที่ถูกทำนายโดยโปรแกรมลิแกนด์สเก๊าท์, ซี, ฟารม์แมปเปอร์, พาสออนไลน์, เอนโดคราน ดิสรับโทม และ สวิสทาร์เกตพีดิกชัน

(10) วิเคราะห์ผลการทำนายฤทธิ์ทางชีวภาพของสารอินทรีย์ 128 ชนิด ด้วยโปรแกรมเฉพาะของกลุ่มวิจัยของ Prof. Dr. Daniela Schuster (In-house program)

(11) สรุปผลการวิเคราะห์ข้อมูลและวิจารย์ผลการวิจัย

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏรำไพพรรณี