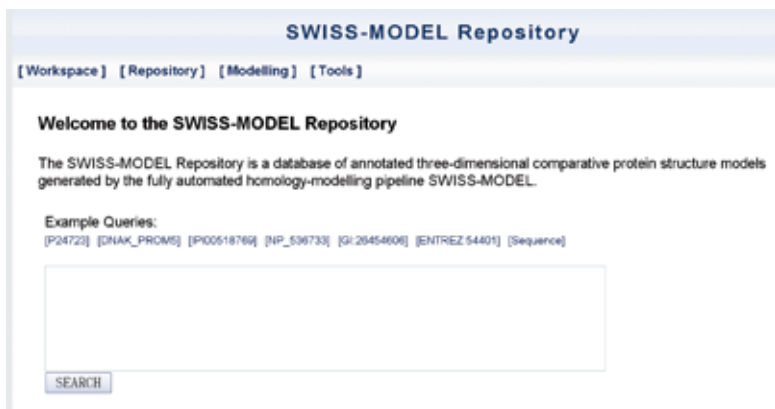


七 结构数据库

蛋白结构数据库SWISS-MODEL



图片来源: SWISS-MODEL

SWISS-MODEL数据库 (<http://swissmodel.expasy.org/repository/>) 是一个蛋白质3D结构数据库, 库中收录的蛋白质结构都是使用SWISS-MODEL同源建模方法 (homology-modelling) 得来的。建立SWISS-MODEL数据库的主要目的就是为了给全世界的科研工作者提供一个最新的蛋白质3D注释结构信息平台。SWISS-MODEL数据库中的记录都是对Swiss-Prot数据库和其它相关模式生物数据库中的序列进行自动同源建模分析之后得来的。SWISS-MODEL数据

库保持定期更新也保证了收录数据的全面性和准确性。

至2008年9月, SWISS-MODEL数据库共收录数据340万条, 覆盖了UniProt数据库中270万种不同的蛋白质序列。SWISS-MODEL数据库允许用户对数据库中的模型质量进行评价, 允许用户搜索另一种可变模板结构 (alternative template structures), 用户还可以使用SWISS-MODEL工作平台 (<http://swissmodel.expasy.org/workspace/>) 构建模型。

对结构模型的注释信息包括功能信息以及与其它数据库的交叉链接, 这些数据库包括PSI Structural Genomics Knowledge Base下的Protein Model Portal (<http://www.proteinmodelportal.org>)。通过这些链接, 用户就可以在蛋白质序列数据库和结构数据库之间自由切换。

原文检索: *Nucleic Acids Research*, 2009, Vol. 37, Database issue D387–D392

筱玥/编译

小分子结构数据库MMsINC

MMsINC (<http://mms.dsfarm.unipd.it/MMsINC/search>) 是一个非冗余的、有丰富注释信息的、与生物医学领域相关的化学结构数据库。

MMsINC数据库首先要保证的就是每一条记录的高质量性和唯一性。其次, MMsINC数据库会给每一条记录补充化学性质分析信息, 例如离子化过程信息、互变异构化 (tautomerization) 过程信息, 以及

利用计算机对在生物化学方面非常重要的24种分子特性进行预测的结构信息等。因此, MMsINC实际上是一个输入不同的化学信息学数据进行筛选的应用程序。而且MMsINC还支持用不同类型的条件进行搜索, 例如子结构搜索 (substructure queries) 和最新的分子剪切搜索 (molecular scissoring query)。MMsINC可以与其它PubChem、Protein Data Bank (PDB)、FDA药品数据库和ZINC等数据库对接。



图片来源: MMsINC

原文检索: *Nucleic Acids Research*, 2009, Vol. 37, Database issue D284–D290

筱玥/编译