

# Uniprot数据库

我们能在Uniprot数据库中查到酶的来源、序列，及可能与之发生反应的蛋白质

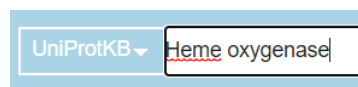
## 搜索

A screenshot of the Uniprot search bar. It features a dropdown menu on the left labeled 'UniProtKB' with a downward arrow. To the right of the dropdown is a text input field. Further right is a label 'Advanced' with a downward arrow, and a 'Search' button with a magnifying glass icon.

在UniProt中的首行输入UniprotID(我们如果能找到的话，这个具有唯一性)、基因名、关键字来查询蛋白质（酶）的数据。

例子：

血红素加氧酶 Heme oxygenase

A screenshot of the Uniprot search bar with the text 'Heme oxygenase' entered into the input field. The dropdown menu is still set to 'UniProtKB'.

左侧可查询蛋白质属物种

### Popular organisms

Human (39)

A. thaliana (37)

Mouse (20)

Bovine (17)

Zebrafish (15)

Other organisms

## 相关信息

进入蛋白质的详情页面后也可以查询到蛋白质的相关信息

下面提供了可能会有用的模块信息---来源、酶的相关反应、序列、相似蛋白

## 来源

[Names & Taxonomy<sup>i</sup>](#)

这一部分展示的蛋白质的命名和来源种属信息

## 反应

[Interaction<sup>i</sup>](#)

Interaction部分展示了与Heme oxygenase有相互作用的蛋白质，并给出了几个常用的蛋白互作的数据库

### Protein-protein interaction databases

BioGRID <sup>i</sup>	109405, 116 interactors
IntAct <sup>i</sup>	P09601, 57 interactors
MINT <sup>i</sup>	P09601
STRING <sup>i</sup>	9606.ENSP00000216117

同时在STRING这个数据库，在这个数据库里输入蛋白名称即可以显示出与之可能有相互作用的蛋白质

## 序列

### Sequence (1+)<sup>i</sup>

在sequence模块中提供了蛋白的序列信息（可能会用于酶的相似度比对？）

## 相似蛋白

### Similar proteins<sup>i</sup>

提供了几种与查找的酶的几种相似蛋白

## 参考

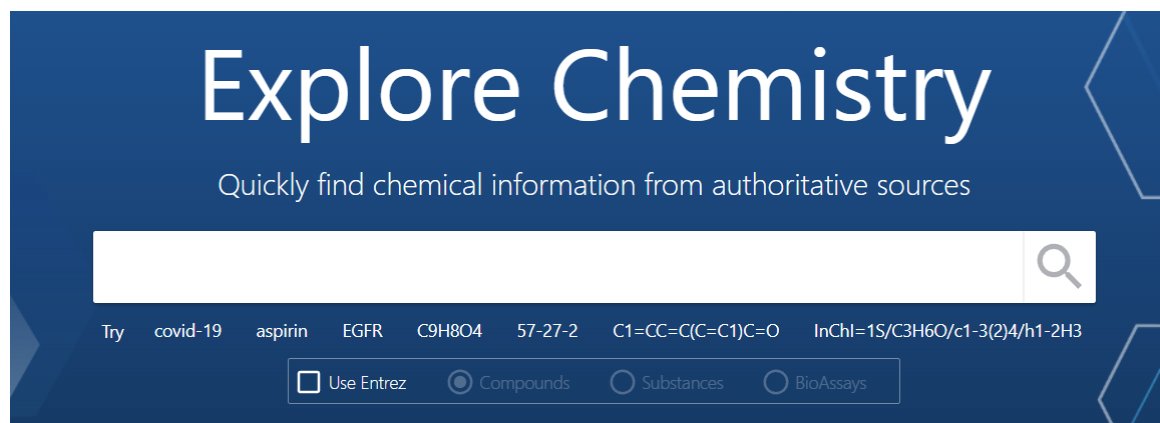
- [一文极速读懂 Uniprot 蛋白质数据库 - 知乎 \(zhihu.com\)](#)
- [蛋白百科全书Uniprot入门 - 知乎 \(zhihu.com\)](#)

## PuChem数据库

pubchem数据库是针对化学结构检索有机物信息的数据库，但也可以通过有机物名称查询其化学式

以Heme oxygenase为例

## 搜索



## 信息

Heme oxygenase

Treating this as a text search.

Compounds (3) Substances (15) Genes (31) Proteins (102) BioAssays (1,012) Literature (18,418) Patents (187)


Searching chemical names and synonyms including IUPAC names and InChIKeys across the compound collection. Note that annotations text from compound summary pages is not searched. [Read More...](#)

3 results Filters SORT BY Relevance Download


Search in Entrez

ACTIONS ON RESULTS WITH ID TYPE: Compounds

Push to Entrez Save for Later Linked Data Sets

 **Heme Oxygenase-1-IN-2; HY-115713**  
Compound CID: 162640598  
MF: C<sub>19</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>3</sub>O MW: 339.8g/mol  
IUPAC Name: N-[(4-chlorophenyl)-phenylmethyl]-2-imidazol-1-yl-N-methylacetamide  
Isomeric SMILES: CN(C(C1=CC=CC=C1)C2=CC=C(C(=C2)Cl)C(=O)CN3C=CN=C3  
InChIKey: ABNHVFNELHVLN-UHFFFAOYSA-N  
InChI: InChI=1S/C19H18ClN3O/c1-22(18(24)13-23-12-11-21-14-23)19(15-5-3-2-4-6-15)16-7-9-17(20)10-8-16/h2-12,14,19H,13H2,1H3  
Source: MedChemexpress MCE  
Create Date: 2022-03-14

Summary Similar Structures Search Related Records

 **HO-1-IN-1; 1093058-52-6; 1-[4-(4-Bromophenyl)Butyl]-1H-Imidazole; CHEMBL4456149; ...; Heme Oxygenase-1-IN-1; ...**

点击Compounds目录下第一条可以查看详情。首先是aspirin信息概览，包括**PubChem CID**、**化合物结构**、**化学安全分类**、**分子式 (MF)**、**同义词**、**分子量和数据更新时间**

但是在当前界面就可以看到Heme oxygenase的化学式即**MF (Molecular Formula)**

但是对于一些有机物而言，它没有compounds部分，而在其他模块下我没有找到数据库提供的化学式

## 参考

- [药物信息综合数据库PubChem完全使用指南数据库使用指南实用技巧 科研星球 \(51xxziyuan.com\)](#)