# DrugBank数据库处理数据库字段说明

## 数据存储时每个数据表各个字段的名称（含义）

（1）药物数据表

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 字段 | 含义 | 类型 |
| Version | 入库版本 | String |
| Creation Date | 创建条目的日期/时间 | String |
| Update Date | 上次更新条目的日期/时间 | String |
| DrugBank ID (Primary Accession Number) | 唯一的DrugBank入库编号,由2字母前缀(DB)和5数字后缀组成。此ID用于通过 URL访问药物输入。如果一个条目被删除,它的DrugBank ID将不会被再次使用 | String |
| Secondary Accession Number | DrugBank发布1.0的入库编号由4字母前缀和一个5数字后缀组成。每个加入号码是唯一的药物的通用名称。4字母后缀 (APRD, EXPT, BIOD, NUTR) 表明药物的类型(APRD=批准的小分子药物, EXPT=实验药物,BIOD=生物技术药物,NUTR=保健或天然产品) | String |
| Name | 药品制造商提供的药品标准名称 | String |
| Type | 可以是一个小分子或生物技术 | String |
| Groups | 可以是一个或多个：批准，兽医批准，保健，非法，撤回，研究和实验。 | String |
| Description | 描述一般事实、成分或制剂的药物。 | String |
| Kingdom | 有机或无机 | String |
| Classes | 药物类别是分类系统的主要组成部分，同一类别的药物在结构上被认为是相似的。 | String |
| Substructures and Functional Groups | 从药物的结构计算所有的子结构和功能组，这是类的超集 | String |
| Synonyms | 药物的替代名称 | String |
| Brand Names | 不同制造商的品牌名称 | String |
| Brand Mixtures | 含有特定药物的混合物的品牌名称和成分 | String |
| Manufacturers | 已知的制造商生产的药物 | String |
| Packaging Companies | 包装和销售给定药品的公司 | String |
| Prices | 单位药价（以美元计价） | String |
| Patents | 药品专利 | String |
| Chemical IUPAC Name | 药物的 IUPAC 或标准化学名称 | String |
| Chemical Formula | 描述原子或元素组成的化学公式 | String |
| Average Molecular Weight | 由分子式或序列确定的分子量（g / mol） | String |
| Monoisotopic Molecular Weight | 一个分子中原子质量的总和，使用每个元素的原子（最丰富）同位素的未结合基态静止质量来代替同位素平均质量 | String |
| Structure | 对于小分子药物,二维化学结构包括下载和查看各种格式的结构的链接；  对于生物技术药物, 三维结构的图像和链接来查看结构查看器中的三维结构 | String |
| SMILES | 与药物结构相对应的异构SMILES链 | String |
| InChI | 标准 InChI 标识符 | String |
| InChI Key | 标准 InChI 键 | String |
| CAS Registry Number | 化学文摘服务标识编号 | String |
| KEGG Drug ID | 京都的基因和染色体组药物识别号 (如果分子在 KEGG中) | String |
| KEGG Compound ID | 《京都基因与染色体大全》复合识别号 (如果分子在 KEGG中) | String |
| PubChem Compound ID | NCBI 的 PubChem 数据库复合识别号 | String |
| PubChem Substance ID | NCBI 的 PubChem 数据库物质识别号 | String |
| ChemSpider ID | ChemSpider 识别号 | String |
| BindingDB ID | BindingDB 识别号 | String |
| ChEBI ID | EBI 的生物兴趣鉴定编号 (如果药物在ChEBI 中) | String |
| ChEMBL ID | ChEMBL 识别号 | String |
| Stitch ID | Stitch 识别号 | String |
| Therapeutic Targets Database (TTD) ID | 治疗目标数据库识别号 | String |
| PharmGKB ID | 药物基因组学知识库识别编号(如果分子在 PharmGKB) | String |
| HET ID | Pdb编号(如果分子在pdb、ChemPDB 或配体集中) | String |
| UniProt ID/Name | UniProt数据库编号 | String |
| GenBank ID | GenBank数据库编号 | String |
| Drug Product ID | 药品数据库药物识别号 | String |
| RxList Link | 链接到给定药物的RxList条目(如果存在) | String |
| Drugs.com Link | 链接到Drugs.com为给定的药物(如果它存在) | String |
| PDRhealth Link | 链接到给定药物的PDRhealth条目(如果存在) | String |
| Wikipedia Link | 链接到维基百科词条为特定药物(如果它存在) | String |
| FDA Label | 食品药品监督管理局批准标签(如果存在) | String |
| Material Safety Data Sheet | 材料安全数据表(MSDS)(如果存在) | String |
| Synthesis Reference | 药物合成说明的参考或专利号 | String |
| State | 物理状态(固体、液体、气体) | String |
| Melting Point | 熔点（摄氏度） | String |
| Boiling Point | 沸点（摄氏度） | String |
| Experimental Water Solubility | 水溶性（mg/mL或g/L） | String |
| Predicted Water Solubility | 预测的水溶性（mg/ml） | String |
| Experimental LogP/Hydrophobicity | 如果是蛋白质/肽，水/辛醇分配系数（如果小分子）或疏水性评分（Gravy 评分） | String |
| Predicted LogP/Hydrophobicity | 预测水/辛醇分配系数 | String |
| Predicted LogS | 预测记录(水溶性) | String |
| Experimental LogS | 实验记录(水溶性) | String |
| Experimental Caco2 Permeability | Caco-2渗透系数 | String |
| pKa/Isoelectric Point | 如果小分子，蛋白质没有电荷的pH（如果蛋白质药物）的解离常数（pKa） | String |
| Mass Spectrum | 药物的EI质谱图像 (如果存在) | String |
| Experimental PDB Entries | pdb中存在药物结构的pdb标识号 | String |
| Category | 治疗类或一般类药物(抗惊厥药，抗菌药等) | String |
| ATC Codes | 世卫组织药物分类系统(ATC)标识符 | String |
| AHFS Codes | AHFS药物信息标识符 | String |
| Indication | 药物用于治疗的疾病的描述或常见名称 | String |
| Pharmacodynamics | 药物在临床或生理层面上的工作原理描述 | String |
| Mechanism of Action | 药物的工作原理和分子水平的描述 | String |
| Absorption | 描述药物的多少或如何容易的药物是由身体采取 | String |
| Toxicity | 来自测试动物的致死剂量LD 50）值，人类所见的副作用和毒性作用的描述 | String |
| Protein Binding | 在血浆蛋白中结合的药物的百分比 | String |
| Metabolism | 药物被中和的机构或器官位置 | String |
| Half Life | 药物在体内的半衰期，以小时或天数计量 | String |
| Route of Elimination | 清除药物的路线，药物主要由肝脏和肾脏清除 | String |
| Volume of Distribution | 分布的表观体积是流体的理论体积，总药物必须被稀释以产生血浆​​中的浓度 | String |
| Clearance | 清除是一个描述性的术语，用来评估药物从体内清除的效率 | String |
| Dosage Forms | 如何配发药物 (片剂、胶囊、溶液等) | String |
| Drug Interactions | 在服用这种药物时，已知的相互作用、干扰或引起不良反应的药物 | String |
| Food Interactions | 当服用这种药物时，已知的相互作用、干扰或引起不良反应的食物 | String |
| Pathways | 药物通路中所涉及的药物 | String |
| Organisms Affected | 药物最有效的生物体名称 | String |
| General References | 一般在线参考有关药物的其他细节 | String |

（2）目标/酶/转运蛋白/载体数据库

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 字段 | 含义 | 类型 |
| Name | 蛋白质或大分子（或其他小分子）的名称 | String |
| Gene Name | 基因名称 | String |
| Synonyms | 替代名称（蛋白名称，缩写等） | String |
| Protein Sequence | 氨基酸序列 | String |
| Number of Residues | 蛋白质序列中的氨基酸数量 | String |
| Molecular Weight (Daltons) | 以道尔顿或g/mol给出的分子量 | String |
| Theoretical pI | 理论等电位点 | String |
| GO Classification | 基因本体分类包括功能，细胞过程和定位 | String |
| General Function | 简短的3-4个字的主要功能总结 | String |
| Specific Function | 详细30-40字的具体功能总结 | String |
| Pathways | 关键路径或过程（来自SMPD）给定分子参与 | String |
| Reaction | 给定分子参与的反应 | String |
| Pfam Domain Function | PFAM域的名称和ID号 | String |
| Signals | 信号肽或其他定位信号在序列中的位置 | String |
| Transmembrane Regions | 跨膜螺旋的数量和位置 | String |
| Essentiality | 就没有它的生物体的生存能力而言，它的重要性或本质性 | String |
| GenBank ID Protein | GenBank蛋白质编号（如果存在） | String |
| UniProt ID/Name | UniProt编号（如果存在） | String |
| PDB ID | PDB编号（如果存在） | String |
| Cellular Location | 给定的蛋白质或大分子在细胞内或细胞周围的位置（细胞质，细胞核，膜等） | String |
| Gene Sequence | 给定分子的DNA序列（来自cDNA） | String |
| GenBank ID Gene | GenBank数据库基因标识符和链接 | String |
| GeneCards ID | GeneCards数据库标识符和链接 | String |
| GenAtlas ID | GenAtlas数据库标识符和链接 | String |
| HGNC ID | HGNC数据库标识符和链接 | String |
| Chromosome Location | 分子在23个人类染色体中的任何一个上的位置（如果分子是细菌，则不给定位置） | String |
| Locus | 基因染色体位置的更详细的位置 | String |
| References | Pubmed参考 | String |
| Drug References | 给定的药物协会的具体参考 | String |