



MNPD

微生物天然产物数据库

Solutions for Innovation.

信息化建设领导者

MNPD

微生物天然产物数据库

产品简介

微生物天然产物数据库 (Microbial Natural Products Database, MNPD) 是创腾科技有限公司和中国医学科学院医药生物技术研究联合开发的综合性天然产物数据库。MNPD 是基于先进的化学信息管理系统 ISIS/Base & Draw 构建的, 在数据库设计和数据采集上借鉴了多个已发布的天然产物数据库的经验, 数据内容涵盖了微生物天然产物的来源、制备、理化性质、化学结构、生物活性以及原始文献等各方面信息, 形成了数据全面、可满足多种功能需求的综合性的化学信息数据库。

开发背景

微生物与药物研究

20 世纪 40 年代青霉素的研究和临床应用, 以及链霉素、氯霉素、金霉素等的发现开创了一个崭新的抗生素时代。西方科学家甚至将抗生素的发现评为二十世纪十大科学发现之一。抗生素的应用, 彻底改变了细菌感染随时可能导致死亡的局面, 因而挽救了数以亿计的生命。抗生素是微生物药物的典型代表, 是一类应用最广泛的药物, 不仅用于临床, 也用于农业和畜牧业。同时, 抗生素还是遗传学、微生物学及分子生物学研究的重要工具。随着生命科学和医药学的发展, 另一类微生物次级代谢产物——生理活性物质也在不断地被发现, 如受体拮抗剂和激动剂、酶抑制剂和诱导剂、免疫调节剂等。其中最具有代表性的是二十世纪八十年代开发利用的 HMG-CoA 还原酶抑制剂 Lovastatin。由此发展起来的高效降血脂药——他汀类 (statins) 药物。他汀类药物的广泛使用大大降低了心血管疾病的发病和死亡率。另外, 以环孢菌素 A (cyclosporine A) 为代表的免疫抑制剂在临床的成功使用, 大大提高了器官移植的成功率、病人的存活率和生活质量。据统计, 到二十世纪末, 由微生物次级代谢产物及衍生物发展起来的药物已经占了整个市场份额的三分之一。

微生物次级代谢产物的化学结构所具有的一些特点, 也使之非常适合作为药物使用:

- 微生物次级代谢产物的分子量主要在 150~5000 之间
- 微生物次级代谢产物的化学结构中除了 C、H 两种基本元素外, 一般还含有 O、N 等元素, 很多结构都含有 S、P 和卤素元素
- 微生物次级代谢产物的化学结构中一般含有羟基、羧基、羰基、氨基等官能团, 其结构形式有脂肪族、脂环族、芳香族、杂环、碳水化合物及多肽等多种形式

微生物次级代谢产物的特点还在于其化学结构的多样性上, 其结构的特点有别于来源于动、植物的天然产物。微生物次级代谢产物的结构类型可以划分为二十多个大类和四十多个小类, 见附表。

因此, 人们认为微生物次级代谢产物的结构具有“类药性 (drug-like)”, 是新型药物来源的主要天然资源化合物库。在微生物药物筛选的实践中, 也证明了这一点, 几乎所有的新药筛选模型都能从微生物天然产物中筛选到活性物质, 因此微生物天然产物也成为目前寻找活性先导化合物和新药研发的一个重要领域。

MNPD 数据库的特点

中国医学科学院医药生物技术研究所是国内最早从事微生物药物研究与开发工作的研究机构。自 20 世纪 80 年代起开始收集整理微生物来源的抗生素及其他生理活性物质的文献研究资料，逐步建立了国内唯一的微生物数据管理系统 (MPMS)。随着计算机技术的迅速发展和 Windows 操作系统的广泛应用，中国医学科学院医药生物技术研究所考察和借鉴了国内外多个天然产物数据库的基础上，和创腾科技有限公司进行合作，选用了业界领先的 ISIS 化学信息管理系统作为开发平台，移植并改进了原有数据库，形成了新一代的微生物天然产物数据库 MNPD。

MNPD 实现了从形式到内容上对 MPMS 的更新换代。首先，ISIS 化学信息管理系统拥有其独特的优势，能够方便的建立、管理和检索化学信息数据库，并且可以利用通用接口十分方便的与其他系统如 BIOVIA 公司提供的分子模拟及分子设计软件 Discovery Studio 配合使用。使用者无需计算机专业知识，只需进行简单培训即可对数据库进行检索、浏览和维护。另外，据不完全统计，迄今已从各种微生物发酵产物中分离得到 20000 多种代谢产物纯品，其中具有生物活性的代谢产物达 16000 多种。而 MNPD 收集了近几十年来主要相关专业文献、专利及专著中的微生物代谢产物共 **15000 多个**，其中有确切化学结构式的共 **10000 多个**。这些多样性的结构完全覆盖了附表中所列出的所有微生物次级代谢产物的类别。

MNPD 收集的信息包括以下各个方面的内容：

- 基本信息：微生物天然产物的俗名、别名、IUPAC 命名、分子式、分子量、化合物类型、CAS 登记号等
- 物化性质和谱图信息：微生物天然产物的颜色、晶型、熔点、旋光度、溶解性、紫外和红外特征吸收峰等
- 结构信息：已确定的微生物天然产物的二维分子结构式及利用分子力学方法优化得到的三维分子结构
- 来源和生物活性：微生物产物的产生菌、制备方法及生物活性测试结果
- 原始参考文献及专利信息

MNPD 数据库的应用前景

MNPD 可以为从事药物化学、微生物学、生物化学、药理学、新药筛选、天然产物研发、药物设计、组合化学、化学信息学等领域的科研人员提供极大的帮助，例如：

- 微生物天然产物的检索、查新和排重。对每项内容均可进行精确或模糊查询，可利用 Query Builder 任意组合字段构建联合查询式，提供独特的二维和三维分子结构或子结构查询功能
- 微生物天然产物的主要来源、化学结构类型、各种生物活性种类的总结性检索
- 与药物设计软件和计算化学软件结合，利用微生物天然产物的三维结构进行药物分子设计和药物虚拟筛选研究
- 对微生物天然产物的结构及活性信息进行定量或定性的分析，研究某类产物的构效关系，为新药研究提供系统和有价值的信息
- 由于微生物天然产物的结构多样性，可为组合化学和组合生物学提供有价值的起始结构和微生物产生菌信息

附表、微生物次级代谢产物的结构分类

一级分类	二级分类
β- 内酰胺类 beta-lactam	青霉素类 penicillin
	头孢菌素类 cephalosporin
	碳青霉烯 carbapenem
	青霉烯 penem
	单环 β- 内酰胺 monobactam
大环内酯类 macrolide	多烯大环内酯 polyene macrolide
	多羟基大环内酯 polyol macrolide
肽类 peptide	酯肽, 缩酚酞 depsipeptide
	糖肽 glycopeptide
	核苷肽 nucleoside peptide
	脂肽 lipopeptide
	寡肽 oligopeptide
	多肽 polypeptide
氨基糖甙类 aminoglycoside	氨基环醇 aminocyclitol
	氨基糖 aminosugar
氯霉素类 chloramphenicol	
苯环型化合物 benzenoid	酚类 phenol
	酚醛类 phenolic aldehyde
	酚羧酸 phenolic acid
	酚硫酸酯 phenolic sulfuric ester
	苯基酮衍生物 phenone
	苯基羧酸衍生物 benzene carboxylic acid
四环素类 tetracycline	
蒽环类 anthracycline	
色霉酮苷类 chromomycinone glycoside	
醌类 quinone	苯醌 (包括喹啉醌) benzoquinone
	萘醌 aphthoquinone
	蒽醌 anthraquinone
	菲醌 phenanthraquinone
安莎类 ansamycins	三烯安莎霉素 Triene ansamycins

核苷类 nucleoside	嘌呤类 purine
	嘧啶类 pyrimidine
聚醚类 polyether	
脂(肪)族化合物 aliphatics	脂肪酸及其衍生物 aliphatic acid
	长脂链氨基酸 aliphatic amino acid
	脂肪酸苷 aliphatic acid anhydride
	脂链偶氮与偶氮化合物 azo compound
	多烯类 polyene
脂环类 alicyclics	环戊烷衍生物 cyclopentane derivative
	环己烷衍生物 cyclohexane derivative
	甾体类 steroid
杂环类 heterocycle	含氮杂环 nitrogen heterocycle
	含硫杂环 sulfur heterocycle
	含氧杂环 oxygen heterocycle
	含两种以上杂原子的杂环
烯二炔类 enediyne	
烯炔类 eneyne	
氨基酸类 amino acid	萜类 terpene
糖类 saccharide	单糖 monosaccharide
	寡糖 oligosaccharide
	多糖 polysaccharide
其它	托酚酮, 环庚三烯酚酮 tropolone
	萜类 terpene



创腾科技有限公司成立于2000年初，是业界领先的面向生命科学和材料科学领域提供综合研发、过程、检测、生产信息化平台及咨询服务的高新技术企业。创腾科技的业务总部设在北京，在上海设有研发中心。

作为一家业界领先的信息技术公司，创腾科技可以为材料科学和生命科学的用户，提供包括计算模拟与数据建模、科技创新信息化两大平台的综合解决方案和服务，提升这些用户在研发、过程、检测、生产等领域的管理、决策和创新能力。创腾科技与国际上在业界领先的著名信息技术公司拥有长期而紧密的合作关系，并拥有业界最先进的开发平台和较强的研发能力，能够为中国的企业和科研机构提供当前世界上最先进的信息技术解决方案和服务。

作为一家高科技企业，创腾科技拥有一支具有专业背景和IT背景的高素质复合型人才队伍，以及经验丰富的管理团队，能够保证向用户提供一流的技术支持和服务。现在，在中国已有超过500家的单位得到了创腾科技所提供的产品和服务，其中包括国内最大的制药企业，最大的新药研发外包企业、最大的石化企业以及主要的高校和科研单位等。

为客户提供持续一流的产品和服务，不断为客户创造价值，是创腾科技努力的目标。创腾科技愿意为提高中国科研机构和企业的创新能力与核心竞争能力，做出自己的贡献。

创腾科技有限公司

NeoTrident Technology LTD.

北京办公室

北京市中关村科学院南路2号融科资讯中心C座南楼1512室 (100190)
电话：+86 10 82676188
传真：+86 10 82677178

上海办公室

上海市浦东新区张江达尔文路88号半岛科技园11栋4楼 (201203)
电话：+86 21 51821768
传真：+86 21 51821758

苏州办公室

江苏省苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301室 (215028)
电话：+86 512 67509707
传真：+86 516 67509705

创腾官网：www.neotrident.com

创腾学院：training.neotrident.com



官方微信