

БАЗА ДАННЫХ «ИНТЕРМЕДИАТЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В АКТИВНЫХ ЦЕНТРАХ БЕЛКОВ»

Хренова М.Г.^{1,2}, Фирсов Д.А.¹

¹ФИЦ Биотехнологии РАН, Москва, Ленинский проспект, 33, стр. 2

²МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Ленинские Горы, 1

В рамках данной работы разрабатывается уникальная база данных интермедиатов химических реакций в активных центрах белков. Существующий к ней веб-интерфейс позволяет сравнивать и анализировать как трехмерные структуры, так и карты электронных плотностей, полученные по данным рентгеноструктурного анализа или в результате квантово-химических расчётов. Он находится по адресу <https://lcc.chem.msu.ru/dbdens/>.

Разработанный веб-интерфейс обладает адаптивным дизайном, что делает его привлекательным не только при использовании на ПК, но и на мобильных устройствах (планшетах и телефонах). Веб-интерфейс интегрирован с механизмом дискретных идентификаторов объектов (DOI, стандарт обозначения представленной в сети информации об объекте ГОСТ Р ИСО 26324-2015), позволяющим эффективно хранить и представлять информацию, в частности, о научных публикациях. Таким образом, пользователь имеет возможность при необходимости ознакомиться с исходным источником информации о конкретной реакции или структуре. По этой причине предусмотрен поиск реакции по различным атрибутам (названия или аббревиатуры веществ, участвующих в реакции, идентификатор (ID) в банке данных PDB и пр.), при этом предусмотрено расширение списка атрибутов для поиска с развитием БД.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-13006).

