

发掘 Internet 上的中草药信息资源

天津大学材料科学与工程学院(300072) 崔元璐* 沈 锋 姚康德

摘 要 介绍了 Internet 上中草药专业网站指南,与中草药有关的数据库,专业期刊网络版和专业软件,并通过在 Internet 上解析红外光谱和蛋白质及核酸序列分析,介绍了网上辅助中草药鉴定的方法。

关键词 Internet 中草药 信息资源

中药研究手段的进步是中药现代化最重要的组成部分。19 世纪 50 年代以来计算机技术迅猛发展,并交叉渗透到各学科领域,成为科学研究现代化的重要工具之一。Internet 网络的发展,更加快了信息传递的速度,它不仅为全球范围内快速传递信息提供了手段,而且其本身已经构成了人类有史以来最大的资源和信息系统。我国 Internet 入网数已经超过了 280 万,而且仍在迅速地增长着。Internet 上有极其丰富的中草药相关资源,中草药研究工作者不仅可以联网检索各种数据库获得丰富的文献资料,还可以进行有关中草药学问题讨论、网上中药鉴定、网上核酸与蛋白质序列分析等工作。但是,Internet 上的信息资源浩如烟海,怎样才能快速有效地找到我们所需要的资源呢?笔者拟简要介绍 Internet 上的中草药相关信息资源及查找方法,并给出各网站的网址 URL,以便上网查询。

1 Internet 上的专业网站指南

在 Internet 上很多医药专业网站都提供了指南性的网页,搜集了大量的相关专业网址链接提供给读者,中草药工作者可以很方便地通过这些专业网站指南访问感兴趣的网络资源,不再需要借助于搜索引擎和其它软件,节省了时间和网络资源。主要的中草药网

站指南有:

1.1 中国中医药信息网(<http://www.cintcm.ac.cn>):中国中医药信息网是一个指南性的网站,主要栏目有:科研机构、学术团体、数据库、电子刊物、图书馆、国内传统医学院校、国外传统医学院校、中药生产厂家等,各栏目中提供了丰富的与中草药有关的链接,可以方便地找到需要的网页。

1.2 新健康网络(<http://www.newhealth.com.cn/framl.htm>):新健康网络是深圳市卫生局与深圳市医学信息所共同创办的医药专业网站,每天更新。其中与中草药相关的有:卫生行政、政策法规、医药行业、医学刊物、医科大学、医学组织等栏目,在这些栏目中提供了许多与中医药有关的链接,访问速度也非常快。另外,其中的 GMP 栏目,提供了有关 GMP 认证的内容,都是近期的资料。

1.3 刘伯宇的医药资料大全(<http://www.netease.com/~liuboyu/index.htm>):这是一个非常有专业水平的个人主页,其中的栏目有管理机构、专业协会、政策法规、资源查找、图书馆、文献检索、医药期刊、医学专业、医药信息、研究所、医科大学等,分门别类地介绍了许多与中草药和医药相关的网址,很有参考价值。

2 Internet 上与中草药相关的数据库

* 崔元璐 男,1995 年毕业于天津中医学院中药系,获医学学士学位。现在天津大学材料科学与工程学院生物医学工程专业攻读硕士学位。

Internet 上有许多大型的专业数据库,可通过网络免费使用,这为我们从事中草药研究工作提供了极大的方便。我们可在 Web 上进行查询,提出自己感兴趣的一个或几个关键词,并使用逻辑检索方法,通过逻辑运算符 and、or、not 等对关键词进行限制与组合,从而获得令人满意的返回结果。下面将介绍几个比较权威并可免费使用的数据库系统。

2.1 科学数据库系统 (<http://www.sdb.ac.cn>):科学数据库系统(SDB)是在中科院“七·五”,“八·五”和“九·五”期间的重点工程项目“科学数据库及其信息系统工程”的指导下建设的,由二十几个学科,近百个子库所组成,与中草药相关的数据库有中国植物中草药数据库、植物基本信息数据库、植物异名数据库、中药信息数据库、中药有效成分数据库、中成药数据库等。该数据库系统分类详细、内容丰富,非常便于专业人员使用。目前这个系统可以免费查询。

2.2 中国生物医学文献数据库 (<http://flower.imicams.ac.cn>):中国生物医学文献数据库是中国医学科学院医学信息研究所开发研制的面向生物医学领域的检索系统。这个数据库收录了 1983 年以来近千种中国生物医学期刊以及会议论文的文献题录,总计约 108 万篇;内容涉及基础医学、临床医学、预防医学、药理学、中医学及中药学,以及医院管理等生物医学的各个领域。中国生物医学文献数据库目前可通过 Web 界面免费进行查询。

2.3 万方数据 (<http://www.chinainfo.gov.cn>):万方数据系统(ChinaInfo)目前有 60 多个数据库供用户检索,一部分数据库是免费的,另外一部分数据库收费,非授权用户可以检索收费数据库全库,也可以看到所有检出的记录,但看到的只是这些记录的部分字段,如果想查询它的全部,可以交费注册,取得授权。与中草药研究有关的数据库有如下几个:1)中国科技成果数据库,收录数据记录 14 万条,是国家指定的科研成果查新数据

库,它包含中央部委和各省市申报的重大成果适用技术及星火计划成果。2)中国学术会议论文数据库,收录数据记录 17 万条,内容为在国家级学术会议上发表的学术论文。3)中国学位论文数据库,收录数据记录 14.5 万条,内容为我国博士、博士后及硕士研究生论文。4)中国科技论文与引文数据库,收录数据记录 90 万条,是中国科技信息研究所历年在开展科技论文统计的基础上开发的大型数据库。数据来源于国内 1 250 种主要科技期刊。

2.4 金纬达网络信息检索系统 (<http://gwd.si.net.cn>):由福建省海峡信息科技中心制作的金纬达网络信息检索系统拥有非常丰富的数据库资源,目前已上网的大型中文数据库有 60 多个。其中,科技类共有 39 个数据库,与中草药研究相关的有中国专利库、学术会议文库、学位论文数据库、生物学文献库、生物医学文献库、医学文献库、中文科技期刊库、科技论文库、科技论文与引文库、科技成果库、农林文献库、种植业文献库等。台湾系列共 25 个数据库,与中草药研究相关的是台湾制药产业库、台湾医药卫生文献数据库、台湾中医药教育库、台湾中医药图书库、台湾中医药科研库、台湾中医药学位论文库、台湾中医药期刊库等。这些数据库的数据类型多样,来源权威,既有文本数据,又有多媒体和超文本数据,具有相当高的学术参考价值。目前海峡信息向用户提供免费服务,只需在“新用户登记”中认真填写有关各项,就可得到一个免费帐号,进行各类数据库查询。

2.5 MEDLINE 数据库: MEDLINE 数据库是美国国家医学图书馆 MEDLARS 系统中规模最大、权威性最高的著名医药学数据库,它收录了 1966 年至今全世界 70 多个国家出版的医学相关期刊 3 800 多种,另外还有图书专著等其它文献,目前已有 920 万条文献^[1]。其中收录的中草药相关文献虽然不多,但都是一些较有影响的刊物上刊登的文章,很有参考价值。MEDLINE 数据库可以通过许多网站进行免费查询,向用户提供英文文

摘。可免费访问 MEDLINE 的网站网址为:

<http://igm.nlm.nih.gov>;

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>;

<http://www.healthworld.com>。

2.6 化学文摘(<http://www.cas.org/web-search.html>)^[2]:这是美国化学会的化学文摘(Cheical Abstracts Service of the American Chemical Society)网站,化学文摘对药学者来说都非常熟悉。

2.7 日本特许厅(<http://210.141.236.195/index.e.html>):中草药研究工作者经常会检索日本专科信息,日本特许厅在网站上提供日语和英语两种语言的网页,在这里读者可以方便地获得日本专利的文摘。

3 专业期刊网络版

为了适应科学技术的高速发展和快速传递信息的需求,越来越多的专业期刊都在 Internet 上向读者提供网络版和电子版免费阅读和查询,影响比较大的有如下几个:

3.1 万方数据(ChinaInfo)的网上科技期刊(<http://www.chinainfo.gov.cn>):在这个网页上收录了包涵 10 多个科技门类的 100 多种核心期刊,同步报道公开发行的期刊全文内容。在其中的医药卫生栏目中,收录了全部的中华医学系列刊物,以及中国药学杂志、中草药、中国药师、中国药物依赖性通报、中国中西医结合杂志等医药专业刊物。另外,网页还配有高效的文章查询检索系统,可以检索 1995 年至今所收录期刊上发表的论文文摘。

3.2 科学(Science)杂志(<http://china.sciencemag.org>):《科学》是一个世界性的刊物,每周发表来自世界各地最重要的原始研究论文,以及科学界普遍感兴趣的新闻报道和新闻分析,其中与医药相关的内容占有很大比例。《科学》电子版已经在中国设立服务器,并提供一些中文导航和文摘。除了印刷版上的全部内容以外,读者还可以用关键字或作者姓名来检索 1995 年 10 月以来的期刊,浏览过刊,或浏览按主题分类的论文集。参考文献在 Medline 中收录的文章,可以联通查询。

3.3 自然(Nature)杂志(<http://www.nature.com>):《自然》也是一个影响很大的生物学方面的杂志,有很多关于医药方面的论文报道,它的电子版经过注册之后也可免费阅读全文,并提供查询服务。

4 Internet 上可供免费使用的专业软件

在 Internet 上有许多专业软件可提供免费下载使用,令中草药研究工作者的日常工作变得轻松。

4.1 绘制化学结构式样的帮手 ACD/Chem Sketch(下载网址:<http://www.acdlabs.com>):这个软件可绘制非常复杂的化学结构式,并提供丰富的模板,包括链模板、环模板、基团模板和常见基团表,使用十分方便。

4.2 观察分子结构的窗口 RasMol(下载网址:<http://www.umass.edu/microbio/ras-mol/>):RasMol 是用来显示分子三维结构的软件,可以用来阅读从 PDB 检索得到的分子坐标文件,更加直观地了解蛋白质、核酸与糖的三维结构。

4.3 数据分析、科技绘图的必备工具 Microcal Origin:Microcal origin 是 Windows 平台下用于数据分析、工程绘图的软件。它的功能强大,在各国科技工作者中使用较为普遍。大家可以在 Microcal 公司的主页(<http://www.microcal.com>)下载其 Demo 版。

5 网上辅助中草药鉴定

随着仪器分析、分子生物学等现代研究方法被引入到中草药的研究之中,传统的中药鉴定向定量化和准确化迈进了一大步。Internet 的发展,使网上化合物谱图解析和蛋白质及核酸序列分析成为可能,这为网上辅助中草药鉴定提供了极大的方便。

5.1 解析红外光谱:未知成分结构解析在中草药研究中有极其重要的作用,不管是基础研究还是应用研究都需要鉴定未知物的结构。作为中草药研究工作者,经常会遇到各种未知成分的样品需要进行分析。由于中草药的成分复杂或研究者缺乏经验,谱图的识别

比较困难。中国科学院上海有机化学研究所 (<http://www.sioc.ac.cn>) 的红外光谱数据库和天然产物数据库都可以通过 Internet 进行网上未知化合物结构解析。研究工作者只需取样测定红外谱图,通过有机所提供的格式转换软件(在网页上可以免费下载)转换成红外光谱数据库所需的提问,通过红外光谱数据库的匹配检索,找到了谱型基本一致的候选化合物,再从文献中找到这一候选化合物的其它谱图,分析谱图的一致性,很快就可确定未知物的结构。

5.2 进行蛋白质及核酸序列分析:当一个新的蛋白质或核酸序列被测定出来后,通常要作的第一件事是对序列数据库的类似性检索,以发现是否有与之相同或相似的序列存在,这是研究新鉴定基因及其编码蛋白质的功能、结构和进化的强有力的方法。因此,进行序列数据库的类似检索成为 Internet 在分子生物学中的第一项应用。在 Internet 上有许多网站和服务器都可直接或间接地进行几乎所有的蛋白质与核酸的序列分析作业,包括理化特性分析、氨基酸组成和分子量分析、序列统计学分析、序列类似性检索、双重和多重序列对排、模式和位点分析、多重算法对二级结构的预测以及跨膜区和蛋白质定向的预测等。此外,还可以进行二维凝胶电泳(2DPAGE)图分析和蛋白质结构同源性建模等复杂的预测分析。这里介绍两个相关的网

站:

5.2.1 ExPASy Molecular Biology Server (<http://www.expasy.ch/>):瑞士日内瓦大学开发的分子生物学服务器,拥有最全面的分析蛋白质与核酸序列和结构的软件工具。

5.2.2 Protein Data Bank (<http://www.pdb.bnl.gov>):由美国 Brookhaven 国家实验室维护的收集生物大分子(蛋白质、核酸和糖)三维结构的数据库。中国镜像站点位于北京大学,网址 <http://ipc.pku.edu.cn>。

6 结语

Internet 的重要特征之一就是它的动态性,其信息资源日见更新。中草药工作者应该充分利用这个特点,及时了解新的信息,把握现代医药学发展的方向和研究热点。Internet 的另一个重要特征就是它的交互性,用户不仅是信息的使用者,也是信息的提供者。希望中草药工作者能够将更多的信息资源充实到 Internet 上,让全球的药学工作者都了解中草药,共同发掘这个巨大的宝库。相信随着 Internet 在中国的普及发展,一定会使中草药学这个古老的学科焕发新出的青春光彩。

参考文献

- 1 陈荔子,等. 实用医学文献检索. 北京:北京医科大学中国协和医科大学联合出版社,1997:194
- 2 李晓霞,等. 化工进展,1996,3:28
- 3 夏云,等. Internet 实用技术与生物医学应用. 北京:军事医学科学出版社,1997:341

(1999-02-09 收稿)

中药材 GAP 起草小组扩大会议在天津召开

由国家药品监督管理局主持召开的中药材 GAP 起草小组扩大会议于 1999 年 5 月 9 日~10 日在天津市举行,会议由天士力制药集团有限公司承办。国家药品监督管理局副局长任德权出席会议并作重要讲话,国家科技部、农业部、中医药局都派员参加会议。中药材 GAP 起草专家组全体成员和来自全国 49 个单位的 75 名代表参加了会议。天士力制药集团有限公司、康莱特药业集团公司和江苏银杏生化集团公司等企业代表作了大会发言。与会代表对《中药材 GAP》初稿逐章逐条地进行了讨论和修改,提出了许多宝贵意见。最后周荣汉教授作了总结发言。

(聂荣海)

第四届全国动物药学术研究会将于 1999 年 10 月在上海召开

由中国药学会动物药专业组主办,第二军医大学药学院、全军中药及天然药物专业组承办的“第四届全国动物药学术研讨会”将于 1999 年 10 月 23 日~10 月 26 日在上海市第二军医大学招待所召开。欲参会者请与长春中医学院动物药教研室张辉、李建平两同志联系(联系电话:0431-5968227 邮编:130021)