

## 蛋白组学分析软件一览

### 蛋白组学分析软件

#### StartFragment

**ProtParam** 瑞士蛋白质专家分析系统中的子程序,适用于蛋白质序列的物理-化学参数(氨基酸、原子组成,等电点,消光系数等)

**MultiIdent** 瑞士蛋白质专家分析系统中的子程序,适用于通过等电点、分子量、氨基酸组成、序列标签、肽指纹数据等识别蛋白

**AACompSim** 瑞士蛋白质专家分析系统中的子程序,该程序将登录在 **Swiss-Prot** 数据库的蛋白质氨基酸组成与其它登录蛋白质进行对比分析

**AACompIdent** 瑞士蛋白质专家分析系统中的子程序,该程序用于通过氨基酸组成识别蛋白质

**3D Protein Display and Sequence Analysis for the PC (UIUC)** 蛋白质三维构象展示。

**3D-PSSM** 借助序列、三维结构的序列轮廓,结合二级结构、溶剂势信息,基于网络的迅捷蛋白质折叠识别方法。

**Align3** 在微机 DOS 操作系统中运行的核酸、蛋白质三序列分析软件,该软件的优点在于易学、易懂,缺点是仅能进行三序列的对比分析。

**ALP3**——蛋白质三序列的对比分析。

AMBER 蛋白质同源模建。

Analyze 利用 EDMC 方法通过球形构象分析：

[1]探讨蛋白质构象特性：分子内、分子间氢键；相对于参考构象的均方根位移（RMS）；官能团间、质子间的距离；

[2]分析蛋白质整体构象的电学性质—平均化玻尔兹曼分布；

[3]利用提供的直角坐标计算二面角；

[4]构型调整、构象优化；

[5]建立适当的构象统计权重，获得理论预测与实验核磁 NOE 谱、耦合常数匹配的分析信息；

ANTHEPROT Protein Sequence and 3D Structure Analysis (France)

蛋白质序列和三维构象分析。

ARP 处理、阐明生物大分子的电子密度图，构建、修正大分子模型。

---

ASC 蛋白质分子表观性质分析软件，即通过计算蛋白质分子表面性质探讨分子作用机理模式。该程序涉及：

[1]利用范德华表面或溶剂可及性表面方法探讨蛋白质截断球面性质；

[2]利用双立方格子方法数值化蛋白质表面、表面体积；

[3]计算分子组装及各组分表面能量、亲疏水性表面

**BIOSIM A BIOlogically oriented neural network SIMulator**

面向分子生物学的神经网络模拟软件

**Blast and Fasta Scripts (Stanford)** 蛋白质序列分析。

**Catalyst** 药物设计操作平台。简易设计分子结构模型的操作平台，提供先进的信息检索、信息分析、功能模拟访问相关的数据库，设计假设化合物及相关模型，解释构效关系；进行组化合物的结构、功能对比，设计特定药效基团；筛选特定结构化合物。

**Cerius2** 材料科学、化学领域的分子构效分析的操作平台。依托于 UNIX 图形工作站，用于构间分子模型、结构优化，进而结合组合化学数据库进行结构功能分析，借助该操作平台提供的大量的回归、分析技术，利用现有的活性数据、获得的回归方程预测、设计全新活性化合物。该操作平台为 **Gaussian** 程序提供了方便、简洁的链接，并为计算结果进行图形分析。

DELILA Sequence analysis system(NCI/FCRDC)

序列分析。

FASTA 基于网络的借助数据库主要进行蛋白质的序列对比分析。

FLEX 3D from The Scripps Institute 蛋白质空间构象分析。

FoldIt (light) - Molecular Graphics - Macintosh 蛋白三维折叠结构分析。

GCG 基于 PC 和工作站的分析蛋白质和核酸序列功能软件集合。具有支持网络操作的功能，可以完成数百种分析功能。面向分子生物学、生物信息学进行序列对比、数据库检索、进化分析、序列拼接、基因模式识别、酶切位点、PCR 引物设计、蛋白质功能位点分析、蛋白质与核酸对译以及二级结构分析。

Gene Explorer 面向分子生物学的分析操作平台。面向分子生物学，将分子模拟技术、生物信息学、数据分析集中于一体的操作界面。包含：核酸、蛋白质同源检索，蛋白质空间构象预测，蛋白质突变体设计，线性酶切位点分析。

蛋白质同源检索——借助不同的检索技术，建立有效的检索方法，对蛋白质序列进行同源检索；同时分析结构信息，从而将检索方法扩展。

**InsightII** 生命科学领域分子模拟系统的图形操作平台。依托于 UNIX 图形工作站，对生物大分子，特别是蛋白质分子的空间构象给予图形界面化。同时，集成常用的、具有共性的分子操作工具，如空间构象显示模式、几何参数计算、分子结构单元的定义和操作、计算数据的图形处理等。该操作平台为 AMPAC/MOPAC、TURBERMOL、DMOL 等应用软件提供了链接。

**InsightII** 操作平台涉及的常用应用模块包括：**Builder**、**Homology**、**Discover**、**Delphi**、**Docking**、**Analysis** 等。**Builder** 是构建分子（有机分子、生物分子、金属配合物等）模型、赋予初始结构的工具，可以进行分子中键长、键级、原子的力场参数等的修改；**Homology** 是蛋白质同源模建的核心模块，该模块通过目标蛋白的序列在蛋白质结构数据库（PDB）中搜索同源蛋白，依据获得的同源蛋白为模板预测目标蛋白的空间构象，该模块能够进行蛋白质及核酸的序列联配、蛋白质空间结构叠合、非保守区（Loop）构象搜索及模建、二级结构预测及分析、蛋白质亲疏水性分析、结构修正、结构模型合理评估、结构参数检测等；**Discover** 是分子力学优化、分子动力学动态模拟操作平台，是有机小分子、生物大分子结构优化、动力学模拟的必备应用模块，可以进行包括最陡下降、共轭梯度、牛顿力学等多种分子力学极小化和分子动力学模拟，同时也可以进行高温模拟淬火搜索能量稳定点；**Delphi** 程序通过求解泊松—玻尔兹曼方程进而分析蛋白分子、有机分子的静电分布，有效的模拟蛋白质分子间的相互作用；**Docking** 程序是基于结构的药物设计的应用模块，既可以进行受体—配基间的分子对接，进而分析作用能量、分子间氢键分布、反应自由能等，又可以结合分子生物学实验确定的受体结合靶点进行对接过程中的动态模拟；**Analysis** 是分子动力学动态模拟结果的图示分析程序，对动态模拟结果给出图形、表格分析，通过选取某一特定构型、某一特定时间的分子构象，重现分子动力学动态模拟过程中的动态变化，并对动力学分析过程中产生的分子构象进行聚类分析。

膜蛋白结构和拓扑学分析。

**MolViewer Molecule viewing program for NeXT (Rice)**

蛋白三维结构浏览器。

**PDB 3D-coordinates of Proteins (Brookhaven)** 蛋白质三维结构分析。

**Quanta** 蛋白质结构分析操作平台。结合 **Charmm** 力场同源模建蛋白质空间构象，预测活性位点，为蛋白质工程实验提供新的突变体；结合 **NMR**、**X-射线衍射** 数据进行蛋白质结构进一步修正。

**SAPS Statistical Analysis of Protein Sequences (Stanford)**

蛋白质序列的统计分析。

**STANDEN** 类似于 **GCG** 功能的软件包，但不支持网络操作功能。

**Xerion Neural Network simulator (Toronto)**

神经网络模拟软件。

---

## XYLEM & FSAP Molecular database and Analysis packages (Manitoba)

分子数据库构建和分析软件包。

蛋白质组相关设备及试剂:

### [色谱系统](#)

[液相 HPLC 系统](#) | [毛细管 LC 系统](#) | [气相色谱系统](#) |

[自动固相萃取系统](#) | [联用色谱系统](#) | [更多...](#)

### [质谱系统](#)

[飞行质谱](#) | [四极杆质谱](#) | [离子阱质谱](#) | [等离子质谱](#) |

[磁质谱](#) | [液质联用系统](#) | [气质联用系统](#) | [更多...](#)

### [基因组/蛋白组设备](#)

[DNA 测序仪](#) | [基因分型系统](#) | [双向电泳系统](#) |

[蛋白质分析系统](#) | [蛋白质斑点切取系统](#) | [更多](#)

### [蛋白纯化](#)

[蛋白提取](#) | [蛋白透析](#) | [蛋白定量](#) | [蛋白稳定](#) | [蛋白纯化](#) | [蛋白浓缩](#) | [蛋白体分](#)

[离](#) | [亲和标记纯化](#) | [融合标记移除](#) | [病毒移除](#) | [脂移除](#) | [分馏试剂盒](#) | [更](#)

[多...](#)

### [蛋白分析](#)

[PAGE 凝胶制备](#) | [蛋白电泳试剂](#) | [预制蛋白凝胶](#) |

[蛋白标准品](#) | [蛋白凝胶染色](#) | [蛋白检测试剂盒](#) | [更多...](#)