



BRENDA – Was Sie schon immer über Enzyme wissen wollten

Keine Sorge, BRENDA dürfen Sie ruhig in Ihr Adressbuch übernehmen – dahinter verbirgt sich keine zwielichtige Gestalt, sondern ein ehrenwertes Unterfangen: Die Datenbank BRENDA (BRaunschweig ENzyme DAtabase) wurde 1987 von Dietmar Schomburg in Braunschweig gegründet und wird heute an der Uni Köln weitergeführt.^[1] BRENDA ist eine umfassende Sammlung von Daten über Enzyme, wie sie in der Primärliteratur niedergelegt sind – eine Art digitales Lexikon der Enzyme. Bei dem großen Umfang dieser Gruppe von Proteinen und der Datenflut aus der biomedizinischen Forschung ist das eine wahre Herkulesaufgabe. Dementsprechend ist die Datenmenge von beeindruckender Größe: Derzeit enthält BRENDA Daten zu den funktionellen und molekularen Eigenschaften von über 40000 individuellen Enzymen aus bald 5000 verschiedenen Organismen zu über 4000 Enzym-Nummern (IUBMB-Enzymnomenklatur). Hier sind die jeweils katalysierten Reaktionen aufgeführt, aber auch Parameter wie das pH- und Temperaturoptimum, die chemische und thermische Stabilität oder Details zu Reinigung und Kristallisation. Diese Daten sind aus mehr als 50000 Literaturstellen entnommen. Weiterhin ist eine große Menge von Enzym-Ligand-Wechselwirkungen verzeichnet (438000 Einträge zu Substraten, Inhibitoren, Aktivatoren und Kofaktoren); die Liganden sind mit ihrem Namen gespeichert, aber auch als SMILES und Molfiles, also in einer Form, die strukturelle Information enthält. So kann man sich zum einen die 2D-Strukturformeln anzeigen lassen, zum anderen besteht seit kurzem auch die Mög-

Nomenclature	Reaction & Specificity	Functional Parameters
Enzyme Names EC Number Common/ Recommended Name Systematic Name Synonyms CAS Registry Number	Catalyzed Reaction Reaction Type Natural Substrates Substrates and Products Inhibitors Cofactors Metabolons Activating Compounds Ligands	K _m Value K _i Value Turnover Number Specific Activity pH Optimum pH Range Temperature Optimum Temperature Range
Isolation & Preparation	Purification Cloned Renatured Crystallization	Organism Source Tissue Localization
Stability	pH Stability Temperature Stability General Stability Organic Solvent Stability Oxidation Stability Storage Stability	Disease References
		Application & Engineering
		Engineering Application

Abbildung 1. BRENDA: Eine Quelle für Enzym- und Stoffwechseldaten.

lichkeit der Substruktur-Suche, bei welcher man ausgehend von einer molekularen Teilstruktur Liganden finden kann, die diese Strukturkomponenten enthalten. Nicht zuletzt gibt es zu fast 1000 Enzymen auch Informationen zu Krankheiten, mit denen sie in Zusammenhang stehen. Die Primärliteratur wird derzeit noch manuell ausgewertet, aber an einer automatischen Datenextraktion wird gearbeitet.

BRENDA ist eine relationale Datenbank, d.h. alle Daten sind in Tabellen organisiert, die miteinander verknüpft sind. Alle einzelnen Datenfelder sind direkt von der Hauptseite aus aufrufbar (siehe Abbildung 1). Die einzelnen Enzym-Einträge sind direkt mit den jeweiligen Sequenzeinträgen in der Sequenzdatenbank SWISS-Prot/TREMBL und den 3D-Strukturen in PDB verknüpft, die Literaturzitate sind mit den Einträgen in PubMed verlinkt. Nach bestimmten Enzymen suchen kann man am einfachsten über EC-Nummern, Enzymnamen oder Organismen, aber auch kombinierte Abfragen („Advanced Search“) sind möglich.

In punkto Nutzerfreundlichkeit lässt BRENDA leider noch in vielen Details zu wünschen übrig. Besonders zur Handhabung der Textfelder und der numerischen Felder bei der erweiterten Suche fehlt eine Hilfe. Ein weiterer Schwachpunkt ist das Fehlen einer grafischen Darstellung der Stoffwechselwege, in denen die jeweiligen Enzyme auftreten. Über den Anspruch, eine

allumfassende Datensammlung unter einer Oberfläche zu bieten, lässt sich generell streiten. Eine einheitliche Darstellung kommt einerseits dem Nutzer entgegen, doch andererseits werden die Vorteile, die das Internet bietet, dabei auch preisgegeben. So würde ich mir eine direktere Verknüpfung zu anderen, auf bestimmte Enzymgruppen wie Kinasen oder Hydrolasen spezialisierten Datenbanken wünschen – und zwar direkt von den jeweiligen Einträgen aus und nicht nur in Form einer allgemeinen Linkliste im Abspann. Nichtsdestoweniger ist BRENDA ein sinnvoller Einstieg, wenn man sich zu einem bestimmten Enzym schlau machen will. Für akademische Zwecke ist BRENDA frei zugänglich, kommerzielle Nutzer benötigen eine Lizenz (www.sciencefactory.com).

Christoph Weise
Institut für Chemie-Biochemie
der Freien Universität Berlin

[1] I. Schomburg, A. Chan, O. Hofmann, C. Ebeling, F. Ehrentreich, D. Schomburg, *Trends Biochem Sci.* **2002**, 27, 54–56.

 Für weitere Informationen besuchen Sie:
<http://www.brenda.uni-koeln.de/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
D.Schomburg@uni-koeln.de