

# Base de dades de metabolòmica SBASE 1-2-2

L'any 2007 el SeRMN va sol·licitar un ajut per la compra d'un base de dades de metabonòmica a la convocatòria de [l'Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca \(AGAUR\)](#) per a atorgar [ajuts per a equipament i infraestructura destinats a la recerca \(PEIR - DGR 2007\)](#). La petició es va resoldre favorablement amb la concessió de l'ajut PEIR07-B-00010-50. L'any 2008 es va executar la compra a l'empresa Bruker Española, S.A., compra que va incloure,

- la base de dades BBIOREFCODE 2-0-0
- una llicència flotant del programa [Amix](#), i
- una llicència del programa [PERCH Tools for BRUKER Software](#).

La llicència de l'AMIX inclou una llicència de la base de dades SBASE 1-1-2 que hi ha al DVD del Topspin 2.5.

## SBASE 1-1-2

### Organització de la base de dades

El contingut de la base de dades s'organitza en carpetes de la següent forma,

```
sbase-1-1-2
```

```
504 directories
```

on

- les carpetes **docu** i **info** no contenen cap fitxer,
- la carpeta **pat** conté els següents fitxers,
  1. 1D.med
  2. cosygs.med
  3. invchlr.med
  4. invch.med
  5. invchmod.txt
  6. jresa.med
  7. pattern1.med
  8. pattern\_file.txt
  9. pattern\_hasc.med
  10. tocsyph.med
- i la carpeta **ref** conté 500 carpetes, cadascuna de les quals conté les **dades espectroscòpiques** d'un dels 500 metabòlits que componen la base de dades.

### Compostos a la base de dades

Aquest és l'informe generat per l'AMIX del contingut de la base de dades:

SBASE statistics

Thu May 28 12:00:11 2009

host : C2-135AR08

user : sermnuab

spectra base : C:/SBASE-1-1-2/

compounds : 107

compressed 1D spectra : 422 (total size = 1.60 Mb, originally 76.8 Mb)

crypted 1D spectra : 422

compressed 2D spectra : 256 (total size = 2.94 Mb, originally 375.5 Mb)

crypted 2D spectra : 256

list of compounds (1D 2D MOL)

adipicacid	4	5	1	C6H1004	146.06
adipicacid-2-amino	6	0	1	C6H1104N	161.07
adrenaline-r	4	5	1	C9H1303N	183.09
alanine	4	3	1	C3H702N	89.05
anthranilicacid-3-hydroxy	2	0	1	C7H703N	153.04
arabitol-d	4	5	1	C5H1205	152.07
arginine	8	3	1	C6H1402N4	174.11
ascorbicacid	4	5	1	C6H806	176.03
butyricacid-3-hydroxy	4	3	1	C4H803	104.05
butyricacid-4-amino	6	6	0		
choline	4	4	1	C5H140N	104.11
citrulline	11	2	1	C6H1303N3	175.10
cysteicacid	1	0	0		
cystine-d,l	7	3	1	C6H1204N2S2	240.02
erythritol	4	3	1	C4H1004	122.06
ethanol-2-amino	4	6	1	C2H70N	61.05
ethionine	3	0	1	C6H1302NS	163.07
folicacid	2	0	1	C19H2105N7	427.16
fructose	3	2	6	C6H1206	180.06
fucose	2	2	0		
fucose-d	0	1	2	C6H1205	164.07
fucose-l	0	1	2	C6H1205	164.07
fumarate	3	0	2	C4H204Na2	159.97
galactopyranoside-b-D-1-o-methyl	8	6	3	C6H1206	180.06
galactosamine-d+	4	3	0		
galactose	4	1	0		
glucono-1,5-lacton-l	0	2	1	C6H1006	178.05
glucopyranose-D-3-o-methyl	4	1	4	C6H1206	180.06
glucose	4	5	2	C6H1206	180.06
glucuronicacid	8	4	2	C6H1007	194.04

glutamicacid	3	2	2	C5H9O4N	147.05
glutaricacid	2	1	1	C5H8O4	132.04
guanidinoaceticacid	1	0	0		
guanidinosuccinicacid	6	0	0		
histamin2HCl	2	0	1	C5H9N3	111.08
histidine	9	3	2	C6H9O2N3	155.07
homoarginine	4	0	0		
hydroxyproline	9	2	0		
hypoxanthine	2	0	0		
indoxylsulfate-3	4	0	0		
inositol-myo	4	5	0		
isobutyricacid-a-amino	6	2	0		
isocitricacid-d,l	6	6	1	C6H8O7	192.03
isoleucine-d,l	6	1	0		
isovalericacid-d,l-2-hydroxy	6	6	0		
kynurenine-d,l	2	0	0		
lactate	2	3	0		
leucine	9	2	0		
lysine	2	2	0		
lysine-5-hydroxy-d,l	6	6	0		
lyxose-d	6	2	0		
malate	2	0	0		
malicacid-d,l	4	4	1	C4H6O5	134.02
maltotriose	6	6	0		
mandelicacid-m-hydroxy-d,l	2	0	0		
mannitol-d	3	5	0		
mannoheptulose-d	4	4	0		
mannose-d	4	3	0		
methionine	6	3	0		
methylamine	2	0	0		
mevalonicacid	2	1	0		
nicotinamide-1-methyl	10	2	0		
nicotinuricacid	2	0	0		
norleucine	5	1	0		
phenylaceticacid-m-OH	2	0	0		
phenylaceticacid-o-OH	1	0	0		
phenylaceticacid-p-OH	8	2	0		
phenylalanine	6	3	0		
phenyllacticacid-d,l-p-OH	8	2	0		
picolinicacid	6	2	0		
piperidine	4	4	0		
proline	10	2	0		
pyridoxine	2	0	0		
rhamnose-d,l	4	5	0		
ribitol	4	5	0		
ribofuranose-a	0	1	0		
ribofuranose-b	0	1	0		
ribopyranose-a	0	1	0		
ribopyranose-b	0	1	0		
ribose	2	4	0		
saccharicacid-d	6	0	0		

saccharose	4	5	0		
sebacicacid	2	0	0		
serine	4	3	0		
shikimicacid	2	0	0		
sorbitol-d	4	5	0		
spermidine	3	4	0		
spermine	3	4	0		
succinicacid	2	0	0		
tartaricacid	2	1	0		
taurine	6	6	0		
threonine	9	3	0		
thymine	2	0	0		
trimethylamine-n-oxide	2	0	0		
tryptamine	0	1	0		
tryptophane	4	3	0		
tyramine	8	6	0		
tyrosene	4	4	0		
uracil	4	4	0		
valine	11	3	1	C5H11O2N	117.08
vitamin-b12	1	2	0		
xanthine	1	0	0		
xanthurenicacid	4	6	0		
xylitol	2	3	0		
xylopyranose-a-d	0	1	0		
xylopyranose-b-d	0	1	0		
xylose	4	5	0		

## AMIX

Aquest programa fa servir el mateix software gestor de llicències que el Topspin, és per això que es va demanar una llicència flotant que permet executar el programa AMIX a qualsevol ordinador autoritzat (caldrà comprovar com restringir l'accés al servidor de llicències).

## PERCH Tools for BRUKER Software

Al lloc web de l'empresa desenvolupadora trobareu una [descripció breu del programa](#) i unes senzilles [instruccions d'instal·lació](#) on s'explica com obtenir la llicència d'ús del programa.

<note important> Aquest programa només està disponible per Windows i la llicència només és vàlida per l'ordinador en que s'instal·la. </note>

Sortosament, hi ha una versió gratuïta "The LITE-Edition covering most of the features of previous version is now FREEWARE for academic users." Per més informació consulta [la pàgina de vendes](#) o la pàgina que compara les [característiques de les versions disponibles](#).

## Ordinador DataAnalysis/AMIX

Els programes AMIX, Perch Tools i les bases de dades BBIOREFCODE i SBASE s'han instal·lat en un ordinador disponible pels usuaris del SeRMN. La [configuració d'aquest ordinador](#) es pot consultar a la Intranet del SeRMN.

From:

<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:

<https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=sbase112&rev=1243504890>

Last update: **2009/05/28 12:01**

