
“实用生物信息技术”课程小组讨论总结报告

组：G1 次：R1 组长：薛林蕾 执笔：薛林蕾，吴鸿珍，江浩燊

1. 时间

2026.3.17

2. 方式

线上会议讨论

3. 主题

课后复习与拓展

4. 内容

A: 关于 Evolution101 网站的学习与思考

A1: 该网站内容和写作风格有什么特点？

Evolution 101 被公认为互联网上最权威、最易懂的进化论教育资源之一。它的内容和写作风格具有非常鲜明的教学色彩，旨在让复杂的生物学概念变得人人可及。

内容特点：

从基础到前沿的阶梯式结构：内容涵盖了进化的定义、机制（自然选择、遗传漂变等）、模式（物种形成）、宏观进化以及进化的证据。

纠错意识：设有误区解答板块。

强调证据与方法的统一：通过化石记录、DNA 序列、发育生物学和地理分布等多个维度，展示科学家是如何得出这些结论的，体现了严谨的科学素养教育。

写作风格：

去术语化的表达：写作风格非常平易近人，尽量避免使用晦涩的生僻词，或者在引入专业术语时会给出清晰的类比。它的受众定位在高中生到大学生以及对科学感兴趣的普通公众。

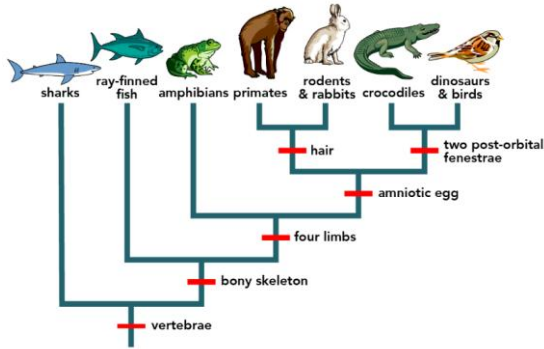
模块化与交互性：每一篇章的长度都经过精心控制，通常几分钟就能读完一个模块。文字排版清爽，大量使用层级标题、短段落和加粗关键词，非常适合屏幕阅读和快速检索。

客观且中立的叙述：尽管探讨的是在某些文化背景下有争议的话题，但其叙述方式完全基于实证科学，不带感情色彩，语气坚定且专业。

A2: 认真阅读分析该网站最后 Big Issue 图片，说明为什么关于演化地位的梯子模型不正确，而树枝模型正确。

首先从进化速度来看，现存生物自共同祖先进化到当前物种，经历的时间是相同的，细菌在分子层面的进化速度往往比脊椎动物快得多，进化没有快慢之分，只是适应环境的不同策略。其次进化并非越来越复杂，有些生物为了适应极端环境会简化自己的器官。进化是物种为了生存，利用现有的基因突变去应对环境的变化，从而不断产生新的物种的过程。它并非是梯子模型那样线性，具有等级制度的，而是像树枝模型那样平等的网状结构。

A3: 下载该网站中 7 个代表性脊椎动物的图片，写出它们的名称和特点（从左到右）。



1. 鲨鱼类代表最早分化的一支典型脊椎动物谱系之一。它们已经具备真正的脊柱，但骨骼主要由软骨构成，没有演化出完善的硬骨系统。这种结构让身体更轻、更灵活，适合高速捕食。它们完全适应水生环境，繁殖和生活都依赖水体，体现了早期脊椎动物以海洋生态位为核心的进化状态。

2. 辐鳍鱼类在进化上比鲨鱼类更进一步，关键创新是形成了真正的硬骨骨骼系统。这种骨骼不仅提高了身体支撑能力，还促进了更精细的运动控制和多样化体型演化。

同时，辐鳍结构的鱼鳍极大增强了游动效率，使这一类群成为现存脊椎动物中物种数量最多的一支，标志着水生脊椎动物的高度适应性辐射。

3. 两栖动物是脊椎动物从水生向陆生过渡的重要阶段。它们首次演化出四肢，使身体能够在陆地上支撑和移动，这是动物登陆史上的关键突破。但它们的繁殖仍依赖水环境，皮肤呼吸和湿润体表说明其对水分的依赖性依然很强。因此，两栖动物体现的是一种“过渡型适应”，即陆地生活能力增强但尚未完全摆脱水体限制。

4. 灵长类属于哺乳动物中较晚分化的一支，其进化特点集中在神经系统和行为复杂性的提升。它们拥有更大的大脑、更发达的视觉系统以及灵活的手部结构，促进了抓握能力和精细操作的发展。这些特征为复杂社会行为、学习能力和环境适应能力提供了基础，代表了哺乳动物向认知优势方向演化的趋势。

5. 啮齿类和兔形类同样属于哺乳动物分支，其进化优势主要体现在高繁殖效率和多样化生态适应能力上。哺乳动物共同具有体毛和恒温能力，这使它们可以在更广泛的气候条件下生存。与此同时，羊膜结构的出现意味着祖先已经摆脱了必须在水中繁殖的限制，这是脊椎动物完全适应陆地生活的重要里程碑。

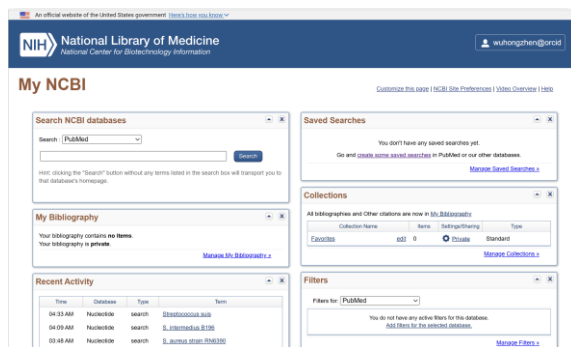
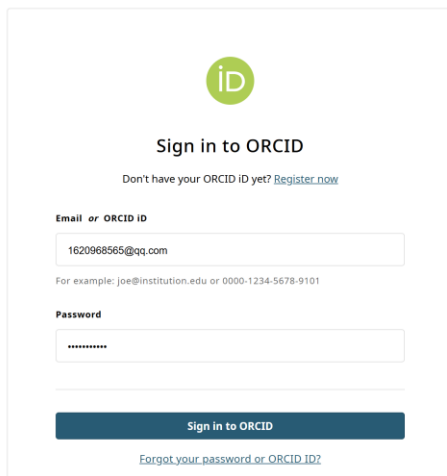
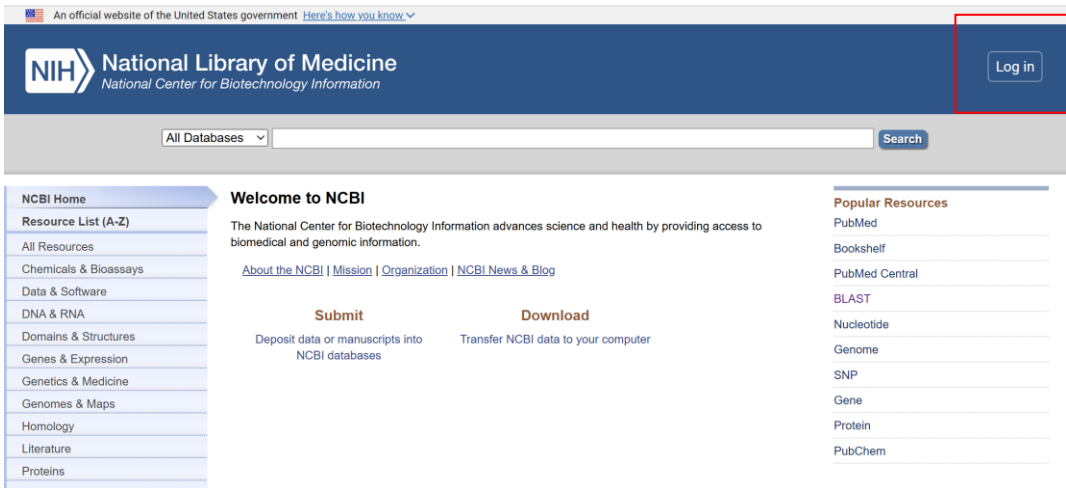
6. 鳄类属于主龙类动物的一支，其进化特点体现在头骨结构的改变，例如双颞孔结构为强大的咬合肌肉提供了附着空间，从而增强捕食能力。它们在生态上表现为半水生顶级捕食者，并且身体结构在长期地质时期内变化较小，体现了一种“成功但稳定”的进化策略，即通过高效的生存模式维持形态保守。

7. 鸟类在进化上源自兽脚类恐龙，是脊椎动物适应空中生态位的重要成果。羽毛最初可能用于保温或展示，后来被用于飞行，这种功能转化推动了飞行能力的形成。高度发达的呼吸系统和较高代谢水平使鸟类能够进行长时间、高强度活动，从而实现全球范围的扩散，体现了脊椎动物在结构和生理层面高度整合的进化结果。

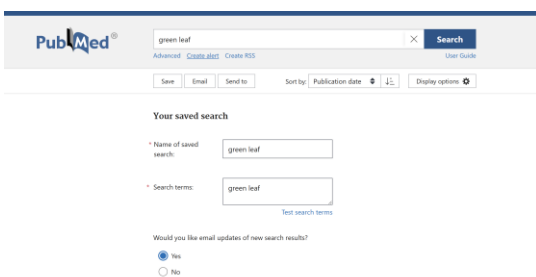
B: MyNCBI 的学习使用

B1: 注册 MyNCBI

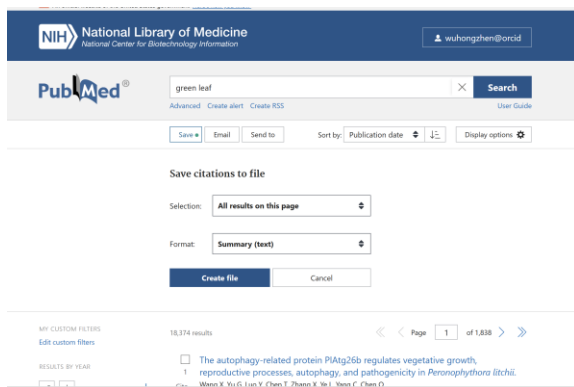
通过 orcid 注册登录 MyNCBI



B2: 保存检索结果
 点击搜索框下的 create alert



B3: 导出检索结果
 点击搜索框下的 save



B4: 自动获取更新文献

点击搜索框下的 create alert, 往下拉有个 email, 选择提醒更新文献的时间

Email: **1620968565@qq.com** (change)

Frequency: Monthly

Which day? The first Sunday

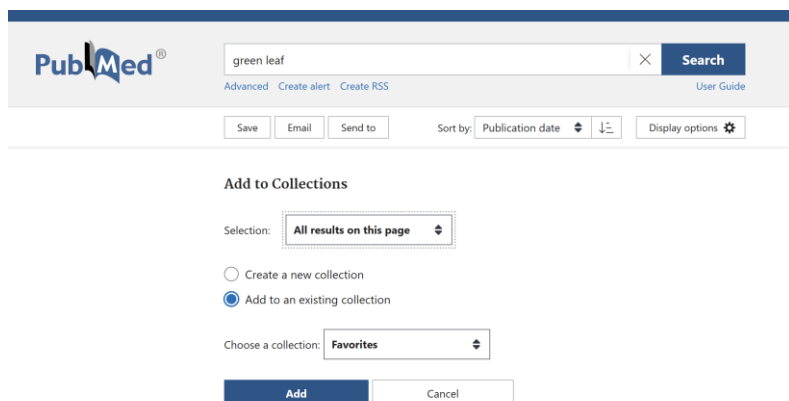
Report format: Summary

Send at most: 5 items

Send even when there aren't any new results

B5: 保存文献集 (Collection)

点击搜索框下的 send to, 然后选择 collection



B6: 将个人文献集与他人共享

Sharing Collections

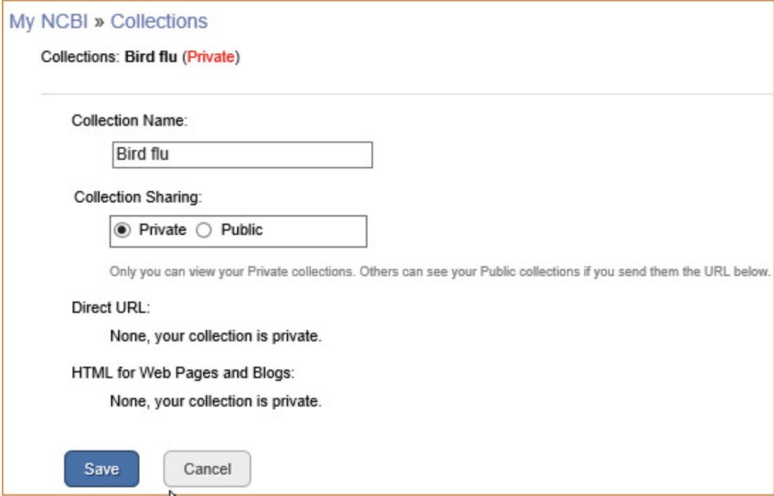
Go to: 

My NCBI collections are set as Private by default. However, a collection can be set as Public to be shared with others. To change a collection from Private to Public:

1. Sign In to My NCBI and go to **Collections**.
2. Under the "Settings/Sharing" column, click the Private link for the collection you wish to share.



3. Click the radio button for Public. A URL and HTML code will be provided. You can use the URL to share with others and the HTML code to post onto a web page. Click Save.



My NCBI » Collections

Collections: **Bird flu (Private)**

Collection Name:

Collection Sharing:
 Private Public

Only you can view your Private collections. Others can see your Public collections if you send them the URL below.

Direct URL:
None, your collection is private.

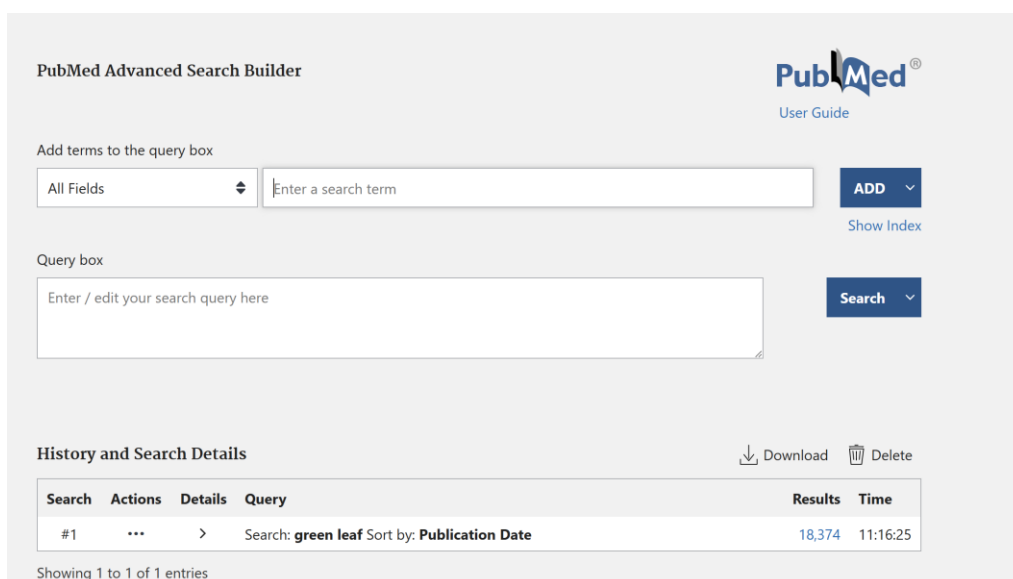
HTML for Web Pages and Blogs:
None, your collection is private.

Note:

- Any time someone uses the public collection URL/HTML to see a collection; the retrieval will include all the items currently included in the collection. Adding or deleting items in the collection does not require an update to the public URL or HTML
- If a collection is changed back to Private, the collection URL/HTML will no longer work

B7:设置文献属性筛选条件 (Filter)

点击搜索框下的 **advanced**



B8:MyNCBI 的特点和用途

特点 用途与优势

个性化与中心 化

将所有文献相关的活动（检索历史、文献集、筛选偏好）集中在同一个账户下，形成个人专属的科研信息门户。

自动化与及时 性

通过“**保存检索并邮件推送**”功能，无需人工重复操作，系统自动将领域内最新研究成果推送到邮箱，保持科研前沿同步。

高效管理与组 织

利用“**文献集 (Collection)**”功能，可以对海量文献进行分类、标注和整理，构建个人知识库，告别本地文件杂乱无章的状态。

协作与共享

通过“**共享链接**”功能，可以轻松实现文献资源的团队共享，方便导师指导学生、课题组成员同步阅读进度，促进学术交流。

精准筛选与定 制

利用“**筛选条件 (Filter)**”功能，可以预设个性化的过滤规则，快速定位高质量或特定类型的文献，极大提高检索效率。

数据备份与迁 移

结合“**导出**”功能，个人文献集可与 EndNote 等外部软件互通，既能在云端在线管理，又能导出到本地备份或撰写论文时使用，数据安全灵活。

C：化学小分子月报（Molecule of the Month）的学习与探索

C1：与生物大分子月报相比，该网站的文章内容和写作风格有何特点？

与同样由 RCSB PDB 出品的生物大分子月报（Molecule of the Month）相比，化学小分子月报的侧重点发生了明显转变：前者聚焦蛋白质、核酸、多糖等生物大分子的三维折叠结构与构象变化，而面向化学小分子时，文章更多地从“化学工具”的视角切入，着重介绍小分子如何作为辅因子、底物或抑制剂参与生化反应，且更多讨论其被人体摄入、代谢或作用于靶蛋白的过程。

内容特点:

以功能驱动叙事,而非以结构驱动叙事:对于维生素等小分子,文章首先回答"它有什么用",再解释"它如何通过结构特征实现这个功能",与大分子文章中从三维结构出发的逻辑有所不同。

进化与营养学视角:针对维生素,网站特别探讨了为什么人体无法自行合成这些分子——从进化压力的角度解释基因功能的丢失,赋予化学事实以宏观生物学意义。

连接临床与历史:每篇文章都会提及某种维生素缺乏症的历史案例(如坏血病与维生素 C、夜盲症与维生素 A),将干燥的化学知识嵌入生动的医学与历史叙事之中。

写作风格:

图文结合,以图佐文:每篇文章配有 David Goodsell 或 Janet Iwasa 创作的精美彩色手绘插图,将小分子及其作用的蛋白质结构以通俗直观的方式呈现,这种风格是整个 Molecule of the Month 系列的核心传统。

严格控制技术门槛:遇到专业术语时,文章会用生活化类比辅助解释(如把 B 族维生素比作"传递化学基团的快递员"),目标受众为高中生至大学生及科学爱好者。

短小精悍、模块化:每篇文章分为若干小节,每节数百字,读者可在 5-10 分钟内读完,结尾附有"拓展话题"和相关 PDB 条目链接,供进阶探索。

C2: 如何查看某个特定分子?

进入 pdb101.rcsb.org 后,有以下几种方式找到特定分子的文章:

关键词搜索:在页面右上角的搜索框中输入分子名称(如"vitamin C"或"aspirin"),搜索结果的"News & PDB-101 Articles"标签下会列出所有相关的 Molecule of the Month 文章;

按日期浏览:点击顶部菜单中的"Molecule of the Month → By Date",可查看自 2000 年以来每月的文章列表;

按主题分类浏览:点击"By Category",文章被分为免疫系统、能量代谢、健康与疾病等多个主题板块,方便根据兴趣定向查找;

直接输入 PDB 编号:如果已知某个分子的 PDB 条目号(如维生素 C 对应配体代码 ASC),可直接在 rcsb.org 的搜索框中输入编号查看其结构页面及相关教育资源。

C3: 该网站收录的维生素有哪些? 各有什么功能?

RCSB PDB 的 Vitamins 专题文章(2023 年 12 月)和 PDB 配体系统共收录了人体必需的 13 种维生素, PDB 配体编码分别为: RET (A)、VIB (B1)、RBF (B2)、NIO (B3)、PAU (B5)、UEG (B6)、BTN (B7)、FOL (B9)、B12 (B12)、ASC (C)、VD3 (D)、VIV (E)、PQN (K)。

维生素	名称	主要功能
维生素 A	视黄醇	专一性感光分子,与视蛋白(视紫红质)结合,使眼睛能够感知光线;也参与细胞分化调控 pdb101.rcsb
维生素 B1	硫胺素	糖代谢辅因子,参与丙酮酸脱氢酶复合体反应;其硫唑环的合成需要"自杀酶"完成,人体无法自行合成 pdb101.rcsb

维生素	名称	主要功能
维生素 B2	核黄素	转化为 FAD 后，是电子传递链中的电子载体，参与能量代谢 pdb101.rcsb
维生素 B3	烟酸 (尼克酸)	合成 NAD/NADH，是糖酵解、柠檬酸循环中的核心电子载体；人体可由色氨酸低效合成 pdb101.rcsb
维生素 B5	泛酸	辅酶 A 的组成成分，参与脂肪酸代谢和乙酰化反应 pdb101.rcsb
维生素 B6	吡哆醇	参与氨基酸转氨反应，是多种氨基酸代谢酶的辅因子 pdb101.rcsb
维生素 B7	生物素	羧化酶辅因子，参与脂肪酸合成和糖异生 pdb101.rcsb
维生素 B9	叶酸	一碳单位转运，参与核苷酸合成和 DNA 甲基化，对细胞分裂至关重要 pdb101.rcsb
维生素 B12	钴胺素	最大的维生素，辅助甲基丙二酰辅酶 A 变位酶催化碳骨架重排，参与氨基酸降解和支链脂肪酸代谢 pdb101.rcsb
维生素 C	抗坏血酸	强抗氧化剂，保护细胞免受氧化损伤；辅助胶原蛋白脯氨酸羟化酶维持铁离子正确氧化态 pdb101.rcsb
维生素 D	胆钙化醇	作为激素前体，调节全身钙、磷代谢及骨骼矿化；皮肤在阳光下可由胆固醇合成 pdb101.rcsb+1
维生素 E	生育酚	脂溶性抗氧化剂，保护细胞膜磷脂不被氧化；由生育酚转运蛋白在血液中运输 pdb101.rcsb
维生素 K	叶绿醌/甲萘醌	辅助凝血相关蛋白（如 Factor X）中谷氨酸残基的 γ -羧化，使其能与细胞表面结合；在植物中以"叶绿醌"的形式参与光系统 I 的电子传递 pdb101.rcsb

C4: 阅读维生素 C 的文章：分子结构、功能及发现过程、后续研究

分子结构：

维生素 C（抗坏血酸，Ascorbic Acid）的分子式为 $C_6H_8O_6$ ，分子量 176.12 g/mol。其核心结构是一个五元内酯环（ γ -丁内酯环），在 2 位和 3 位碳之间存在一个稳定的烯二醇结构（enediol），这一结构赋予了

它强烈的还原性与抗氧化性。天然活性形式为 L-抗坏血酸，具有手性，2 位和 3 位碳为特定的立体构型。分子中含有四个羟基 (-OH)，使其高度水溶性，pKa 约为 4.2，呈弱酸性。

功能：

维生素 C 在人体中的核心功能是作为强效抗氧化剂和酶促反应辅因子。

胶原蛋白合成：维生素 C 是胶原脯氨酸羟化酶 (collagen prolyl 4-hydroxylase) 的关键辅助分子。该酶将脯氨酸转化为羟脯氨酸，后者对胶原纤维的紧密堆积与稳定至关重要。催化过程中酶中的铁硫簇偶尔被误氧化而失活，维生素 C 作为还原剂将铁离子恢复到正确价态，使酶重新激活。缺乏维生素 C 时，胶原合成受阻，引发坏血病 (皮肤出血、牙龈溃烂、骨骼脆弱)。

抗氧化保护：维生素 C 的烯二醇结构使其能够捐出电子，清除自由基和活性氧，保护 DNA、蛋白质和脂质免受氧化损伤。

铁吸收促进：通过将食物中的三价铁 (Fe^{3+}) 还原为更易吸收的二价铁 (Fe^{2+})，促进非血红素铁的肠道吸收。

发现过程：

坏血病困扰水手数百年，其与饮食的关联在 18 世纪已经有所察觉，但其分子本质直到 20 世纪才被揭示。

1920 年代，匈牙利生物化学家**阿尔伯特·圣捷尔吉 (Albert Szent-Györgyi) 在英国剑桥大学研究生物氧化时，从肾上腺皮质中分离出一种能抑制食物褐变的酸性物质，将其命名为"己糖醛酸" (hexuronic acid)。当时他怀疑这就是防治坏血病的活性物质，但缺乏足够的材料进行动物实验。1930 年他回到匈牙利塞格德大学后，与曾师从维生素 C 研究者查尔斯·金 (Charles King) 的美国化学家约瑟夫·斯维尔贝利 (J.L. Svirbely) **合作，以豚鼠 (与人类一样不能自行合成维生素 C) 进行实验：一组豚鼠喂食煮沸食物 (破坏维生素 C)，另一组喂食富含己糖醛酸的食物。结果前一组出现坏血病症状并死亡，后一组完全健康。实验确认己糖醛酸即是维生素 C，随即被更名为"抗坏血酸" (ascorbic acid，源自拉丁语"anti-scurvy"，即抗坏血病)。1933 年，圣捷尔吉又从辣椒中大量提取纯品，化学结构也由英国化学家沃尔特·哈沃思 (Walter Haworth) 同年完成解析。圣捷尔吉因此于 1937 年获得诺贝尔生理学或医学奖，哈沃思也同年获得诺贝尔化学奖。

后续研究：

维生素 C 的发现之后，研究并未停步。在结构生物学层面，研究者借助 X 射线晶体学和冷冻电镜，解析了维生素 C 作用靶酶的精确三维结构，如 PDB ID 7zsc 和 4bta 对应的胶原脯氨酸羟化酶结构，从原子尺度揭示了维生素 C 如何"救活"失活铁离子的分子机制。2023 年，中国科学技术大学研究团队通过冷冻电镜，解析了哺乳动物钠依赖维生素 C 转运体 (SVCT1) 与维生素 C 结合的结构，揭示了细胞摄取维生素 C 的"电梯机制" (elevator mechanism)，阐明了维生素 C 在体内分布的分子基础 (PDB ID 7ytw)。在进化研究方面，2024 年发表于《自然通讯》的工作系统比较了动植物维生素 C 合成途径中关键酶的进化历程，解释了人类等灵长类如何在进化中丢失了 GULO 基因 (gulonolactone oxidase)，从而成为必须从食物中获取维生素 C 的物种。

C5: 阅读感兴趣的化学小分子：阿司匹林 (Aspirin, 乙酰水杨酸)

在众多化学小分子中，阿司匹林无疑是最有故事的一个。PDB-101 的第 17 期 Molecule of the Month 专门介绍了它与靶酶环氧化酶 (Cyclooxygenase) 的关系。

分子结构特点:

阿司匹林（乙酰水杨酸，Acetylsalicylic acid）分子式 $C_9H_8O_4$ ，结构上由水杨酸（苯环连接一个羟基和一个羧基）与一个乙酰基组成。其关键的功能基团是乙酰基（ $-COCH_3$ ）：它能与靶蛋白上特定丝氨酸残基的羟基发生不可逆的共价乙酰化反应，永久封堵酶的活性位点。水杨酸部分则在乙酰化完成后留在蛋白活性位点附近，其本身也具有一定的抑制作用。

功能特点:

阿司匹林的药理核心是不可逆抑制环氧化酶（COX-1 和 COX-2）。COX 酶负责将花生四烯酸（arachidonic acid）转化为前列腺素（prostaglandins）——一类参与炎症反应、疼痛信号和血小板凝集的脂质信号分子。阿司匹林与 COX 活性位点通道中的**第 530 位丝氨酸（Ser530）**发生乙酰化，在通道中形成立体障碍，使花生四烯酸无法进入，从而阻断前列腺素的合成，实现镇痛、消炎和抑制血小板凝集（抗血栓）的效果。

COX-1 和 COX-2 虽然功能相似，但结构上 COX-2 的活性位点通道略宽，这一差异被用于开发"选择性 COX-2 抑制剂"（如塞来昔布），以减少阿司匹林因抑制 COX-1 导致的胃肠道副作用。此外，阿司匹林还被发现可能具有降低某些癌症风险的潜力，这为其"百年老药"增添了新的研究价值。

从 PDB 结构来看，PDB ID 1PTH 展示了阿司匹林类似物乙酰化后的前列腺素 H2 合酶结构，原子层面上清晰可见乙酰基团附着在 Ser530 上，堵塞活性位点通道的全部细节。

5. 问题

Q1: evolution101 网站中的 image library 根据物种名称查找图片时经常显示无结果，怎样更高效地找到物种的图片？

如果想要找到相对应的图片需要在全局查找中找到原文，然后从原文中找到图片，如果设置只筛选图片资源也显示无结果，因为许多图片没有命名或者命名中并不包含物种名称。

Q2: 怎么高效使用 MyNCBI 检索阅读文献？

熟练使用 advanced 和自动获取更新文献，可以精准及时的获取阅读文献。

Q3: Molecule of the Month 网站同时收录了生物大分子（蛋白质、核酸）和以维生素为代表的小分子。为什么维生素文章只有少数几篇，而蛋白质文章却占绝大多数？

这一现象是由网站的定位和数据库性质共同决定的。RCSB PDB 是蛋白质数据库（Protein Data Bank）的教育门户，其核心存档的是具有确定三维结构的生物大分子。维生素等化学小分子体积过小，无法独立产生 X 射线衍射或冷冻电镜信号，因此 PDB 中一般只能看到它们与蛋白质结合时的复合物结构。换言之，维生素在 PDB 中的"戏份"往往依附于蛋白质，是作为配体（ligand）出现的，而非主角。因此，Molecule of the Month 中涉及小分子的文章，通常是以"某个蛋白质 + 其配体小分子"为主题来讲述，例如"维生素 D 受体"（第 155 期）而非"维生素 D 本身"，而合并综述所有维生素的文章（第 288 期）也是特例而非常态。