



BindingDB: A Protein-Ligand Database for Drug Discovery

George Nicola, Tiqing Liu, Linda Hwang, and Michael Gilson

Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, University of California San Diego



www.BindingDB.org

Introduction:

The large and growing body of experimental data on biomolecular binding is of enormous value in developing a deeper understanding of molecular biology, in developing new therapeutics, and in various molecular design applications. However, most of these data are found only in the published literature and are therefore difficult to access and use. BindingDB is a public web-accessible database of measured binding affinities for various molecular types. The BindingDB allows queries based upon a range of criteria, including chemical similarity or substructure, sequence homology, numerical criteria and reactant names. The data specification includes significant experimental detail.

The Binding Database

Home Info Download About us Email us

BindingDB News

February, 2011. Users can save their own list of Targets on their personalized myBindingDB page.

January, 2011. Users can now download all data for a given Target as an SDfile, at the Target Names page.

December, 2010. Users can now enter publicly viewable comments on curated ligand-protein validation sets.

October, 2010. Expansion of host-guest data sets.

September, 2010. Consensus ligand-protein series curated for use in validating computational methods.

March, 2010. First incorporation of 462,466 CHEMBL data with defined molecular targets, including 207,522 new small molecules.

Get help

myBindingDB logout

Search and Browse

Target

- Sequence Name & KI IC50 Kd EC50 AG* TAS* pH (Enzymatic Assay) pH (ITC) Substrate or Competitor Compound Mol_Wt Chemical Structure Monomer List in cys Het List in SDF

Compound

- FDA Drugs Chemical Structure Batch Structures Name SMILES Number of Data / Targets

Data Source

- Author Journal Institution Pubmed PubChem BioAssay

BindingDB contains 800,000 binding data, for 6,000 protein targets and 350,000 small molecules.

References

- Liu,T., Lin,Y., Wen,X., Jorissen,R.N. and Gilson,M.K. *BindingDB: a web-accessible database of experimentally determined protein-ligand binding affinities* Nucleic Acids Research 35:D198-D201 (2007).
- Chen,X., Lin,Y. and Gilson,M.K. *The Binding Database: Overview and User's Guide* Biopolymers Nucleic Acid Sci. 61:127-141 (2002).
- Chen,X., Lin,Y., Liu,M. and Gilson,M.K. *The Binding Database: Data Management and Interface Design* Bioinformatics 18:130-139(2002).
- Chen,X., Liu,M., and Gilson,M.K. *Binding DB: A web-accessible molecular recognition database* J. Combi. Chem. High-Throughput Screen 4:719-725 (2001).

Utilities and Features

Chemical Similarity

BindingDB provides users the ability to run a chemical similarity search with one of three methods:

1. Maximum similarity
2. Binary Kernel Discrimination (BKD)
3. Support Vector Machine (SVM)

Linking Affinity and Structure

Each affinity data is showcased in a separate page, and bidirectional links to the PDB are shown if available.

PDB

3OLB: CRYSTAL STRUCTURE OF ESTROGEN RECEPTOR BETA LIGAND BINDING DOMAIN (100% identity) with "17beta-estradiol (E2)" (exact match)

Journal: (2010) Chembiochem 11:2251-2254
DOI: 10.1002/cbic.201000322
PubMed: 21018921

Abstract: No abstract available... Read More > Search PubMed Abstracts

Molecular Description

Polymer 1: Ligand: Estradiol
Polymer 2: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 3: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 4: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 5: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 6: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 7: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 8: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 9: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 10: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 11: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 12: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 13: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 14: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 15: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 16: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 17: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 18: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 19: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 20: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 21: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 22: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 23: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 24: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 25: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 26: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 27: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 28: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 29: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 30: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 31: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 32: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 33: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 34: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 35: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 36: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 37: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 38: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 39: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 40: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 41: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 42: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 43: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 44: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 45: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 46: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 47: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 48: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 49: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 50: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 51: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 52: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 53: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 54: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 55: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 56: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 57: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 58: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 59: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 60: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 61: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 62: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 63: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 64: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 65: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 66: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 67: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 68: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 69: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 70: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 71: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 72: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 73: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 74: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 75: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 76: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 77: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 78: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 79: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 80: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 81: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 82: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 83: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 84: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 85: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 86: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 87: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 88: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 89: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 90: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 91: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 92: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 93: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 94: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 95: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 96: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 97: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 98: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 99: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 100: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 101: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 102: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 103: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 104: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 105: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 106: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 107: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 108: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 109: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 110: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 111: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 112: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 113: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 114: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 115: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 116: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 117: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 118: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 119: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 120: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 121: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 122: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 123: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 124: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 125: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 126: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 127: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 128: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 129: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 130: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 131: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 132: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 133: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 134: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 135: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 136: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 137: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 138: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 139: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 140: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 141: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 142: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 143: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 144: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 145: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 146: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 147: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 148: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 149: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 150: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 151: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 152: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 153: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 154: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 155: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 156: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 157: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 158: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 159: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 160: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 161: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 162: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 163: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 164: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 165: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 166: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 167: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 168: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 169: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 170: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 171: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 172: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 173: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 174: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 175: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 176: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 177: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 178: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 179: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 180: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 181: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 182: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 183: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 184: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 185: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 186: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 187: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 188: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 189: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 190: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 191: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 192: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 193: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 194: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 195: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 196: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 197: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 198: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 199: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 200: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 201: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 202: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 203: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 204: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 205: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 206: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 207: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 208: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 209: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 210: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 211: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 212: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 213: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 214: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 215: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 216: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 217: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 218: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 219: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 220: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 221: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 222: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 223: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 224: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 225: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 226: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 227: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 228: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 229: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 230: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 231: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 232: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 233: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 234: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 235: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 236: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 237: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 238: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 239: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 240: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 241: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 242: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 243: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 244: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 245: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 246: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 247: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 248: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 249: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 250: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 251: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 252: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 253: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 254: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 255: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 256: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 257: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 258: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 259: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 260: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 261: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 262: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 263: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 264: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 265: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 266: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 267: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 268: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 269: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 270: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 271: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 272: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 273: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 274: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 275: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 276: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 277: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 278: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 279: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 280: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 281: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 282: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 283: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 284: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 285: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 286: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 287: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 288: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 289: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 290: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 291: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 292: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 293: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 294: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 295: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 296: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 297: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 298: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 299: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 300: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 301: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 302: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 303: Ligand: 17beta-estradiol
Polymer 304: Ligand: 17beta