

PDBjのサービス・使い方紹介

統合データベース講習会: AJACS本郷11

2012/3/2

大阪大学蛋白質研究所 工藤 高裕



概要

1. PDBについて
組織とデータの概要
2. PDBのデータについて
具体的データの紹介
3. PDBj Mineによる検索
検索をやってみましょう

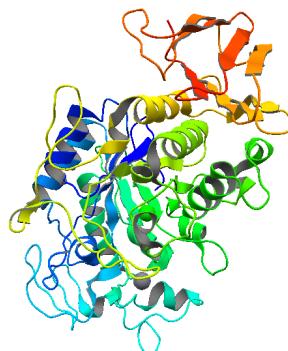
⟨#⟩



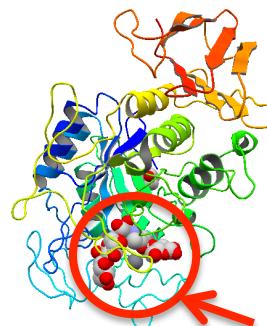
1. PDBについて

Q: PDB(蛋白質構造データバンク)とは

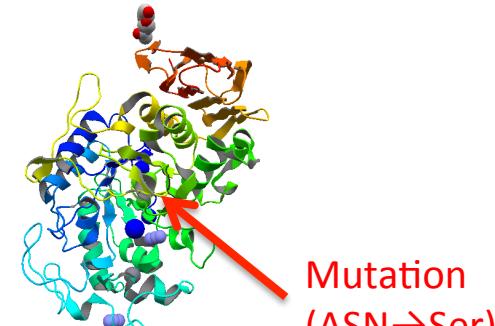
A: 主に蛋白質、核酸の分子立体構造データを収めたデータバンク
1つの蛋白質でもリガンドの有無などの違いで複数のエントリーが登録されていることがある。現在エントリ一数は約80,000。



α-amylase
(PDB:1c8q)



α-amylase
+inhibitor
(PDB:1c8q)



α-amylase
N298S mutant
(PDB:3bax)

1. PDBについて

Q: PDBのデータはどうやって決めたもの？

A: X線結晶解析、NMR、電子顕微鏡等を使った「実験」に基づいて決定されたもの
(昔は理論モデルも含まれていた)



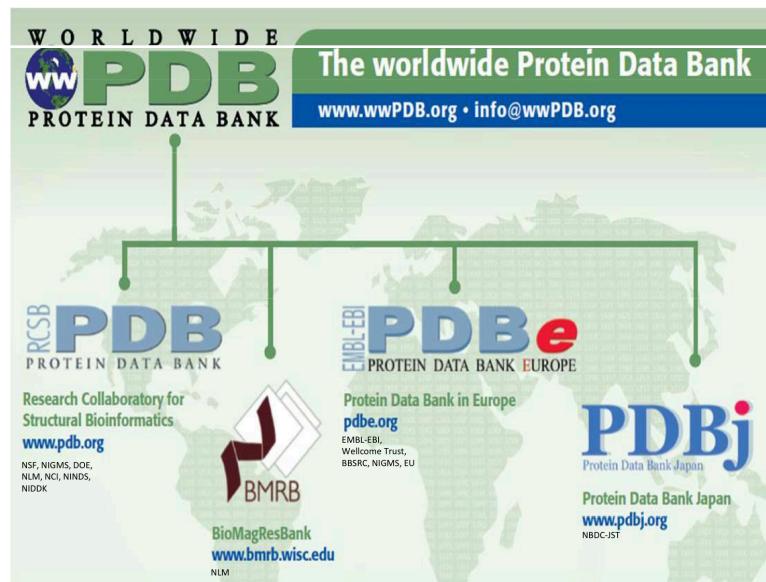
⟨#⟩

PDBj
Protein Data Bank Japan

1. PDBについて

Q: PDBは誰が運営している？

A: wwPDB(世界蛋白質構造データバンク)。米国のRCSB-PDB、欧州のPDBe、日本PDBjの3部局+米国BMRB(NMR関係)の4極で協同して運営。
登録業務は分担して実施。
公開データは同一だが、これに基づき各極独自にサービスや二次データベースを提供。



〈#〉

PDBj
Protein Data Bank Japan

1. PDBについて

Q: PDBjの国内での位置づけ

A: JST-NBDCと大阪大学の支援を受けて運営。



National Bioscience Database Center



⟨#⟩

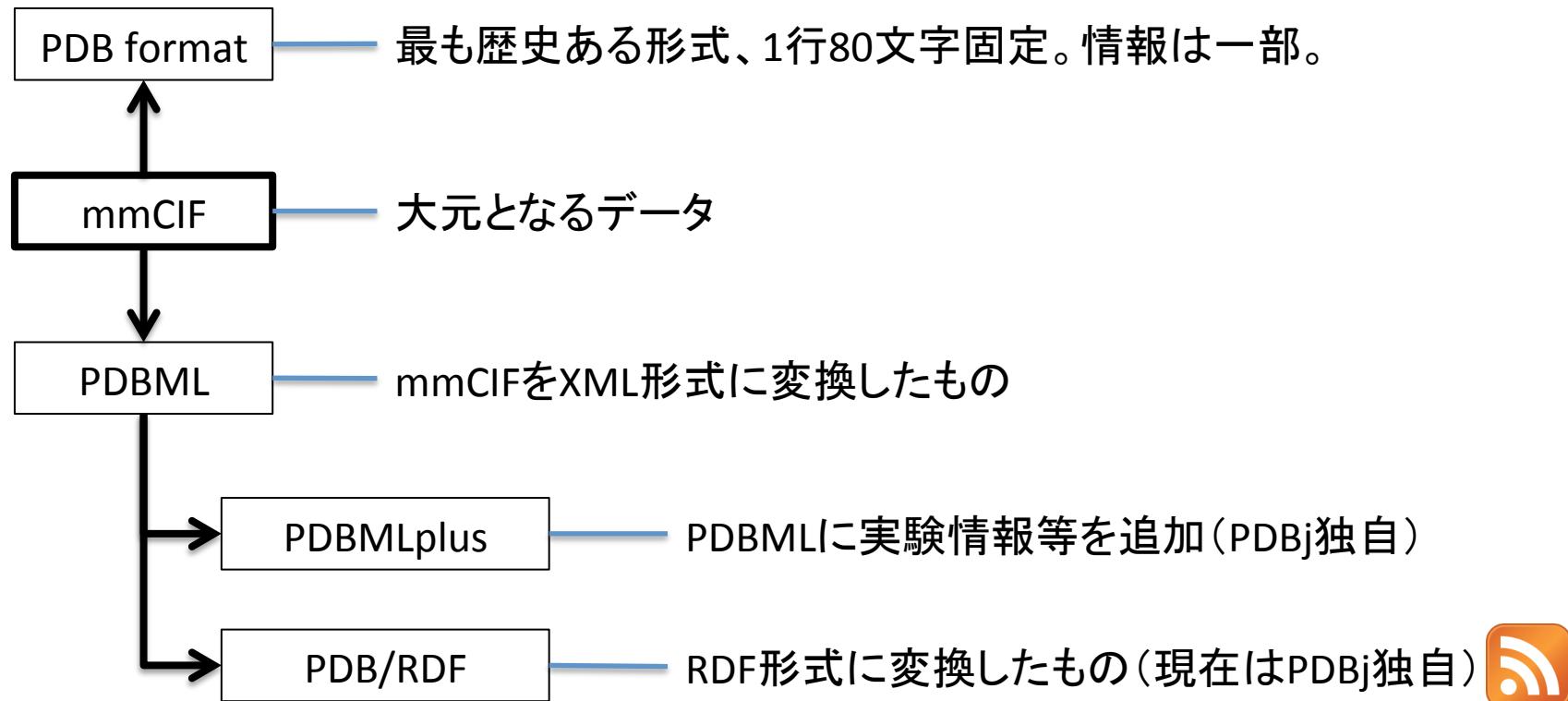
1. PDBについて

Q: PDBjのやっていること

A:

1. 国際蛋白質構造データバンク(wwPDB)の運営
2. 蛋白質立体構造データベース登録作業
3. 蛋白質構造情報の記述フォーマット(v3.2, 4.0, mmCIF, PDBML, PDB/RDF)の開発とその応用
4. 蛋白質構造解析実験情報、蛋白質機能に関する文献情報の付加(PDBMLplus)
5. 蛋白質立体構造に関する新規二次データベース構築、解析ツールの開発

2. PDBデータについて



いずれもテキストデータ(エディタで読める)

mmCIF: [macromolecular Crystallographic Information File](#)
RDF: [Resource Description Framework](#)



3. PDBj Mineによる検索

PDBj の検索サービス「PDBj Mine」で「 α アミラーゼ」を検索をしてみましょう。

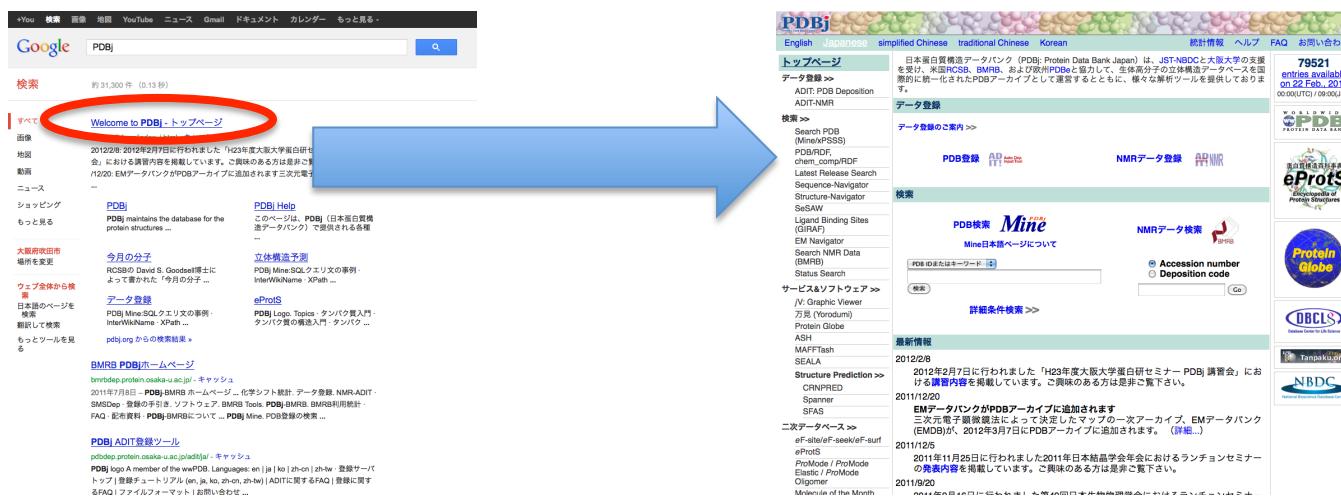
同一IDのPDBのデータは3極どこで見ても同じ。
但しPDBjだと日本語でも検索可能。

3. PDBj Mineによる検索

Step 1: PDBj トップページを開く

Google等の検索サイトで、キーワード「PDBj」で検索。

または直接 <http://pdbj.org/> にアクセス。

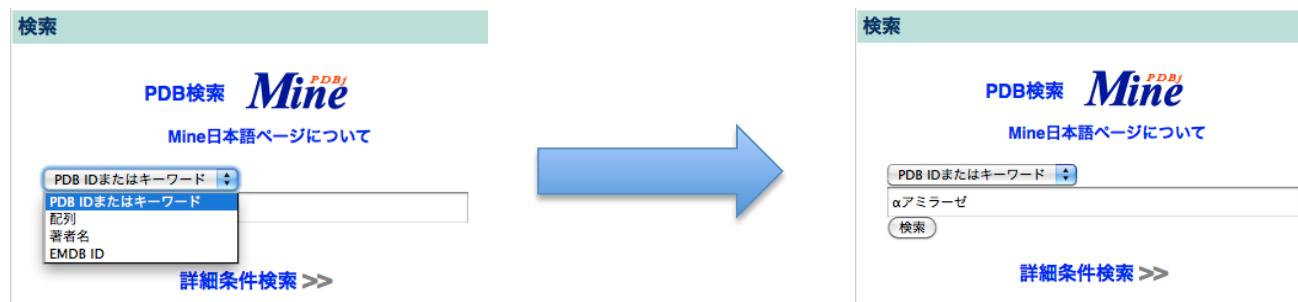


PDBj
Protein Data Bank Japan

3. PDBj Mineによる検索

Step 2: キーワードを入力して「検索」

ページ中央にあるテキストボックスにキーワードを入力(日本語OK)。



アミノ酸1文字表記での配列、著者名、電子顕微鏡データベースIDでの検索指定も可能。

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)PDB/RDF,
chem_comp/RDF

Latest Release Search

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

SeSAW

Ligand Binding Sites
(GIRAF)

EM Navigator

Search NMR Data
(BMRB)

Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer

万見 (Yorodumi)

Protein Globe

ASH

MAFFTash

SEALA

Structure Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf

eProtS

ProMode / ProMode

Elastic / ProMode

Oligomer

Molecule of the Month

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

**検索結果ページ**日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

(PDB-IDをクリックすると、詳細情報をご覧いただけます)

1 - 16/ 310

1 2 3 4 5 6 ... 20 次へ

クエリ : αアミラーゼ

PDB ID または キーワード

表示順:

一致件数

変換クエリ : (alpha amylase) | (alfa amylase)



英語に自動変換して検索

リセット

検索

1clv



分子名称

: ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE INHIBITOR

タイトル

: YELLOW MEAL WORM ALPHA-AMYLASE IN COMPLEX WITH THE AMARANTH ALPHA-AMYLASE INHIBITOR

著者

: Pereira, P.J.B., Lozanov, V., Patthy, A., Huber, R., Bode, W., Pongor, S., Strobl, S.

実験手法

: X-RAY DIFFRACTION

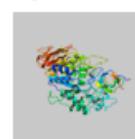
登録日

: 1999-05-04

公開日

: 2000-05-03

1bvn



分子名称

: PROTEIN (ALPHA-AMYLASE) (3.2.1.1)

タイトル

: PIG PANCREATIC ALPHA-AMYLASE IN COMPLEX WITH THE PROTEINACEOUS INHIBITOR TENDAMISTAT

著者

: Machius, M., Wiegand, G., Epp, O., Huber, R.

実験手法

: X-RAY DIFFRACTION

登録日

: 1998-09-16

公開日

: 1998-09-23

1pif



分子名称

: ALPHA-AMYLASE

タイトル

: PIG ALPHA-AMYLASE

著者

: Machius, M., Vertes, L., Huber, R., Wiegand, G.

実験手法

: X-RAY DIFFRACTION

登録日

: 1996-06-15

個別エントリーページへ

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

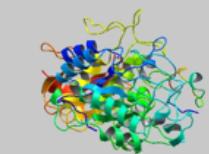
日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

**概要[1clv]**

[日本語ページについて](#)
[PDBj Mineについて](#)
[更新情報](#)

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 ダウンロード/画面表示 外部データベース
 PDB IDまたはキーワード

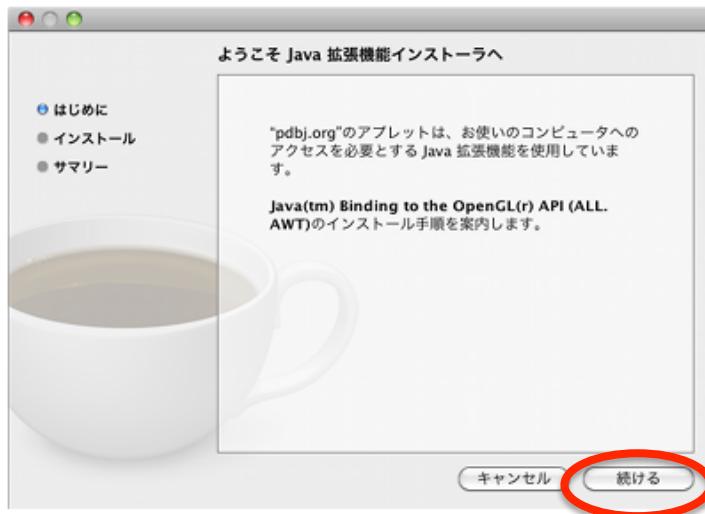
<非対称単位>
= <生物学的単位>



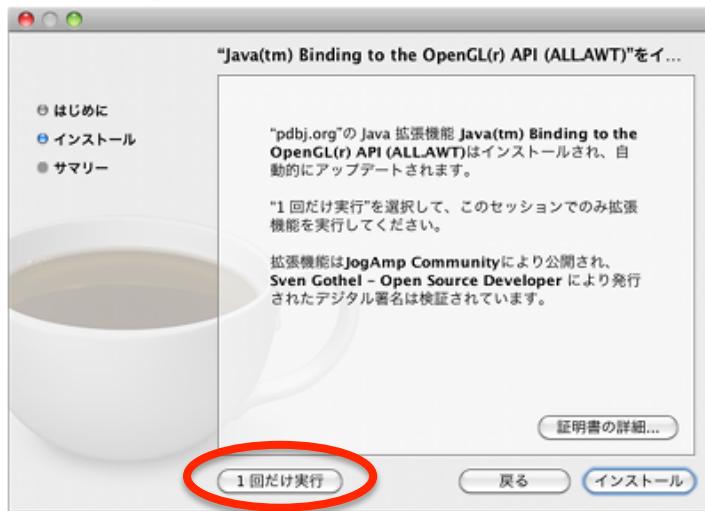
他の静止画像を見る
3次元構造ビューア
(JV4 / Jmol) で見る *1

エントリーID (PDB ID)	1clv 配列情報 (FASTA形式) PDBファイルのダウンロード
分子名称	ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE INHIBITOR
タイトル	YELLOW MEAL WORM ALPHA-AMYLASE IN COMPLEX WITH THE AMARANTH ALPHA-AMYLASE INHIBITOR
機能のキーワード	INSECT ALPHA-AMYLASE INHIBITOR, AMARANTHUS HYPOCHONDRIACUS, YELLOW MEAL WORM, KNOTTIN, HYDROLASE
由来する生物種	Tenebrio molitor (yellow mealworm)
由来する組織	[UNP - P80403] Seed
ポリマー鎖の合計数	2
分子量の合計	54934.3 (詳細は 構造情報のページ) Pereira, P.J.B., Lozanov, V., Patthy, A., Huber, R., Bode, W., Pongor, S., Strobl, S. (登録日: 1999-05-04, 公開日: 2000-05-03)
著者	Pereira, P.J., Lozanov, V., Patthy, A., Huber, R., Bode, W., Pongor, S., Strobl, S. Specific inhibition of insect alpha-amylases: yellow meal worm alpha-amylase in complex with the amaranth alpha-amylase inhibitor at 2.0 Å resolution. <i>Structure Fold.Des.</i> , 7:1079 - 1088, 1999. (PubMed : 10508777) (DOI: 10.1016/S0969-2126(99)80175-0)
引用文献	
実験手法	X-RAY DIFFRACTION (2.00[Å])
他のデータベース情報	万見(Yorodumi), CATH, CE, FSSP, SCOP, VAST, UniProt (P56634 , P80403), eF-site, KEGG (EC 3.2.1.1), ProTherm, EzCatDB, PISA, PQS, PDB/RDF
NMR情報	BMRB

*1) JV4 と Jmol にはJava(TM)Plug-in 1.5以上が必要です。
現在一部のMac OS X ではJVアプレットが表示できません。詳しくは[こちら](#)をご覧ください。



→ 「続ける」をクリック



→ 「1回だけ実行」または「インストール」をクリック



→ 「許可」をクリック

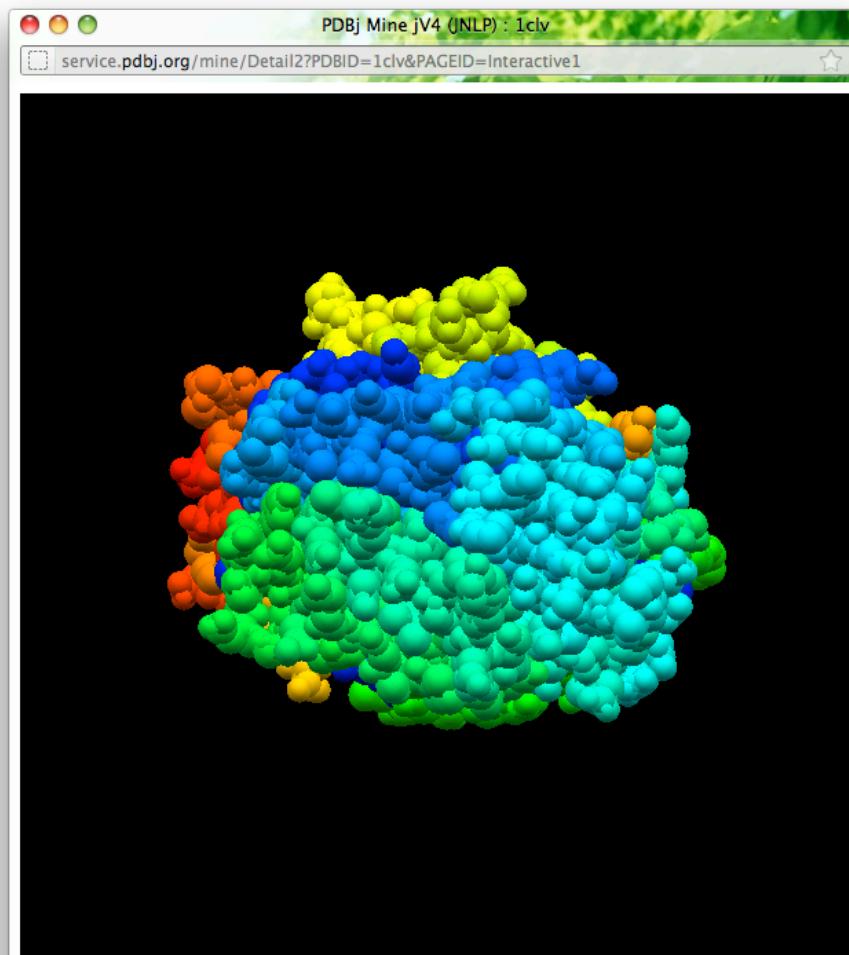
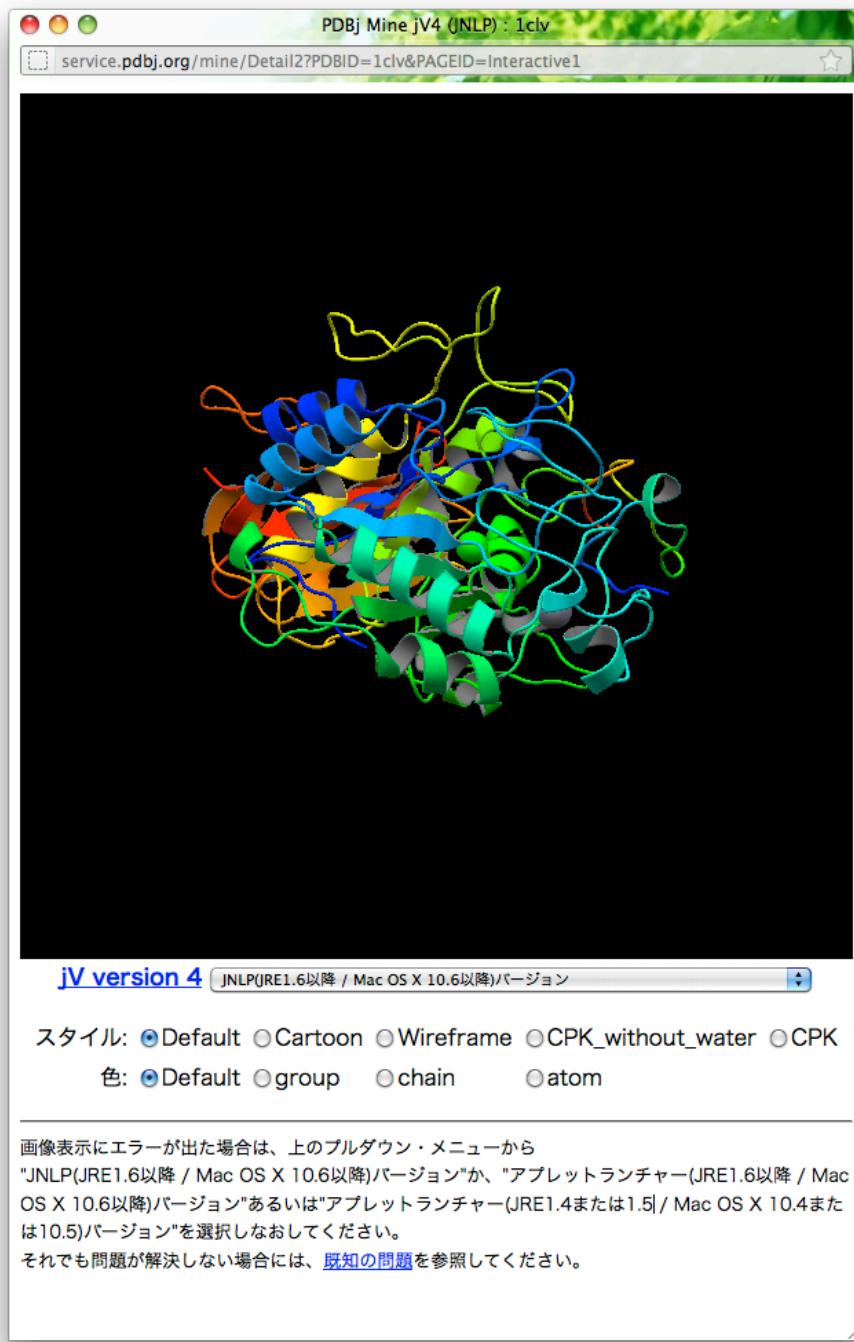


→ 「実行」をクリック

↑Windowsの場合

Javaの拡張機能(分子画像をローカルに保存する機能)を有効化する

←Mac OS 10.6 の場合



トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV:

万葉

Pro

AS

MA

SE

str

C

S

S

S

二次元

eF

eP

Pro

Pro

Mo

ダウン

PD

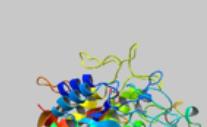
リンク集

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

Mine**概要[1clv]**
[日本語ページについて](#)
[PDBj Mineについて](#)
[更新情報](#)

概要	構造情報	実験情報	機能情報	相同蛋白質	ダウンロード/画面表示	外部データベース
PDB IDまたはキーワード						検索

<非対称単位>
= <生物学的単位>



エントリーID (PDB ID)	1clv 配列情報 (FASTA形式)	PDBファイルのダウンロード
分子名称	ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE INHIBITOR	
タイトル	YELLOW MEAL WORM ALPHA-AMYLASE IN COMPLEX WITH THE AMARANTH ALPHA-AMYLASE	
機能のキーワード	INSECT ALPHA-AMYLASE INHIBITOR, AMARANTHUS HYPOCHONDRIACUS, YELLOW MEAL WORM, KOMIINI HYPOCHONDRIACUS	
由来する生物種	Tenebrio molitor (yellow mealworm)	

配列情報
アミノ酸・ヌクレオチド1文字表記による

```
>1CLVA:PROTEIN (ALPHA-AMYLASE)
EKDANFASGRNSIVHLFEWKWNDDIADECERFLQPQGFGGVQISPPNEYLVADGRPWWERY
QPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTGSSADHDGMNY
PAVPYGSGDFHSPCEVNYYQDADNVRNCELVGLRDLNQGSDYVRGVVLIDYMNHMIDLGV
GFRVDAAKHMSPGDLSVIFSGLKNLNTDYGFADGARPFYQEVIDLGGEAIISKNEYTGFG
CVLEFQFGVSLGNNAFQGGNQLKNLANWGPEWGLLEGDAVVFDNDQGPPQDGSGNLISPGINDDNTCSNGYVC
NPKPYKMAIAFMLAHPYGTTRIMSSFDFTDNDQGPPQDGSGNLISPGINDDNTCSNGYVC
EHRWRQVYGMVGFRNAVEGTQVENWWNSDDNQIAFSRGSGQFVAFTNGGDLNQNLNTGLP
AGTYCDVISGELSGGSCTGKSVDNGSADISLGSAAEDDGVLAIHVNAKL
>1CLVI:PROTEIN (ALPHA-AMYLASE INHIBITOR)
CIPKWNRCPKMDGVPCCEPYTCTSDYYGNCS
```

このページ
Patthy, A., Huber, R., Bode, W., Pongor, S., 2000-05-04, 公開日 : 2000-05-03
Patthy, A., Huber, R., Bode, W., Pongor, S., alpha-amylases: yellow meal worm alpha-amylase inhibitor at 2.0 Å
9 - 1088, 1999. (PubMed : 10508777) (DOI: 0175-0)
00[Å])
E, FSSP, SCOP, VAST, UniProt (P56634, EC 3.2.1.1), ProTherm, EzCatDB, PISA,

*1) jV4 と Jmol にはJava(TM)Plug-in 1.5以上が必要です。
現在一部のMac OS X ではjVアプレットが表示できません。詳しくは[こちら](#)をご覧ください。

© 2007 PDBj. All Rights Reserved.



PDBj

Japanese

統計情報 ヘルプ FAQ お問い合わせ

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA

Structure Prediction >>

CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

Mine

実験情報 (X線結晶解析) [1clv]

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

概要 構造情報 実験情報 (選択)
機能情報 相同蛋白質 ダウンロード/画面表示 外部データベース
PDB ID または キーワード 検索

精密化の統計情報

格子定数 [Å]	119.250	119.250	64.780
格子定数 [度]	90.00	90.00	120.00
空間群	P 61		
分解能 [Å] (低 - 高)	8.00 - 2.00		
最も高い分解能シェルの値	2.03 - 2.00		
R-work	0.161		
最も高い分解能シェルの値	0.2577		
R-free	0.19		
最も高い分解能シェルの値	0.2435		
結合長の平均二乗偏差(RMSD) [Å]	0.007		
結合角の平均二乗偏差(RMSD) [度]	1.778		

回折データの統計情報

分解能 [Å] (低 - 高)	20.0 - 2.00
最も高い分解能シェルの値	2.05 -
独立反射数	33598
観測反射数	279403
R-merge(I)	0.135
最も高い分解能シェルの値	0.339
完全性 [%]	94.4
最も高い分解能シェルの値	68.3
冗長性	8.3

結晶化条件

結晶ID	方法	pH	pHの範囲	温度	単位
1	Vapor diffusion, hanging drop	5.4		23	°C

文献の結晶化試薬*

ID	結晶ID	溶液	試薬名	濃度 (単位)	詳細
1	1	drop	sodium acetate	5(mM)	
2	1	drop	CaCl2	0.1(mM)	
3	1	drop	protein	10(mg/ml)	
4	1	reservoir	PEG1000	12(%(w/v))	
5	1	reservoir	PEG8000	12(%(w/v))	

(* PDBjによる注釈付記)

© 2007 PDBj. All Rights Reserved.

利用規約・プライバシーポリシー | ニュースレター | 過去の講習会 | PDBjメンバー | 出版物

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

J/V: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASHMAFFTash
SEALAStructure Prediction >>
CRNPREDSpanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

概要 構造情報 実験情報 **機能情報** 相同蛋白質 ダウンロード/画面表示 外部データベース

PDB ID または キーワード 検索

機能情報のページについて

機能情報

GO (ジーン・オントロジー) に由来する情報

鎖名	GOid	名前空間	
A	0004556	molecular_function	alpha-amylase ac
I	0004866	molecular_function	endopeptidase in
A	0005975	biological_process	carbohydrate met
I	0015066	molecular_function	alpha-amylase in
A	0046872	molecular_function	metal ion binding

(GO情報の詳細)

PDBデータベースに由来する情報

site_id	種類	残基数	
ACS	SITE	3	CATALYTIC SITE
AC1	SITE	7	BINDING SITE FOR RESIDUE CA A 601
AC2	SITE	3	BINDING SITE FOR RESIDUE CL A 602

(PDB情報の詳細)

詳細表示

SwissProt/UniProtに記載されている蛋白質分子機能情報

site_id	種類	残基数	
SWS_FT_FI1	enzyme active site(ACT_SITE)	1	Proton do
SWS_FT_FI2	enzyme active site(ACT_SITE)	1	Nucleophi
SWS_FT_FI3	metal binding site(METAL)	2	Calcium
SWS_FT_FI4	metal binding site(METAL)	2	Calcium; v
SWS_FT_FI5	binding site(BINDING)	3	Chloride.
SWS_FT_FI6	other interesting site(SITE)	1	Transition

(UniProt情報の詳細)

CSAにおける酵素触媒機能の情報

site_id	種類	残基数	詳細
CSA1	catalytic site	2	PsiBLAST alignment on 1amy by CSA
CSA2	catalytic site	3	PsiBLAST alignment on 2cpu by CSA
CSA3	catalytic site	3	PsiBLAST alignment on 1uok by CSA

(CSA情報の詳細)

<前
© 2007 PDBj. All Rights Reserved.

利用規約 · プライバシーポリシー · ニュースレター · 過去の講習会 · PDBjメンバー · 出版物



トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

Mine

相同蛋白質 [1clv]

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

概要	構造情報	実験情報	機能情報	相同蛋白質	ダウンロード/画面表示	外部データベース
----	------	------	------	--------------	-------------	----------

PDB ID または キーワード

検索

エンティティを選択してください。

配列が似ているPDBエントリー

>1CLV A PROTEIN (ALPHA-AMYLASE) Entity#:1
ERKANEASGRNSIVHLFEWKWNDAEDECERELQTQGFGGGVQISPPNEYLVADGRPWWERYQPVPSYIINTRSGDESAFTDM
TRRCNDAGVR1YVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPAVPYGSGDFHSPCEVNYYQDADNVRNCELGLRDLNQGS
DYVRGVVLIDYMHMIDLGVAGFRVDAAKHMSPGDLSVIFSLKLNLTDYGFADGARPFIYQEVIDLGGEAIKNEYTGFG
CVLEFQFGVSLGNNAFQGGNQLKLNLANWGPEWGLLEGGLDAVVFDNHDNQRTGGSQILTYKNPKPYKMAIAFMLAHPYGT
RIMSSFDFTDNDQGPPQDGSGNLISPGINDDNTCSNGYVCEHRWRQRQVYGMVGFRNAVEGTQVENWSNDDNQIAFSRGSQ
GFVAFTNGGDLNQNLTGLPAGTYCDVISEGELSGGSCTGKSVTGDNGSADISLGSAEADDGVLAHVNAKL

>1CLV I PROTEIN (ALPHA-AMYLASE INHIBITOR) Entity#:2
CIPKWNRCGPMDGVPCCPYTCTSYYGNCS

鎖が複数あるエントリーでは
どの鎖を対象とするか聞かれ
る(1本の場合は直接結果リス
トページへ)

Sequence Navigator と同じ

トップページ

データ登録 >>

[ADIT: PDB
Deposition](#)
[ADIT-NMR](#)

検索 >>

[Search PDB
\(Mine/xPSSS\)](#)[PDB/RDF,
chem_comp/RDF](#)[Latest Release
Search](#)[Sequence-
Navigator](#)[Structure-
Navigator](#)[SeSAW](#)[Ligand Binding
Sites \(GIRAF\)](#)[EM Navigator](#)[Search NMR
Data \(BMRB\)](#)[Status Search](#)サービス&ソフト
ウェア >>[J/V: Graphic
Viewer](#)[万見 \(Yorodumi\)](#)[Protein Globe](#)[ASH](#)日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、[JST-NBDC](#)と[大阪大学](#)の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造を収集・蓄積・配布するデータベースです。

相同蛋白質 [1clv]

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報[概要](#)[構造情報](#)[実験情報](#)[機能情報](#)[相同蛋白質](#)[ダウンロード/画面表示](#)[外部データベース](#)PDB ID またはキーワード 検索結果 (1-50) / 74 [次へ](#)1clvA 完全一致: [1jaeA](#) [1tmqA](#)**Seq.Identity:100% Seq Positives:100% E-value:0 Score:2514 Query Coverage:100% Compound:PROTEIN (ALPHA-AMYLASE) (3.2.1.1)**[新規検索 \[1tmqA\]](#) 構造の重ね合わせ

1clvA 1 471 QKDANFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGFGGVQISPPNEYLVADGRPWWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPAVP

1tmqA 1 471 QKDANFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGF GG VQISPPNEYLVADGRPWWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPAVP

1tmqA 完全一致: [1jaeA](#) [1clvA](#)**Seq.Identity:99% Seq Positives:100% E-value:0 Score:2499 Query Coverage:100% Compound:ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE-INHIBITOR**[新規検索 \[1viwA\]](#) 構造の重ね合わせ

1clvA 1 471 QKDANFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGFGGVQISPPNEYLVADGRPWWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPAVP

1viwA 1 471 QKDANFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGF GG VQISPPNEYLVADGRPWWERYQPVSYIINTRSGNESAFDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPAVP

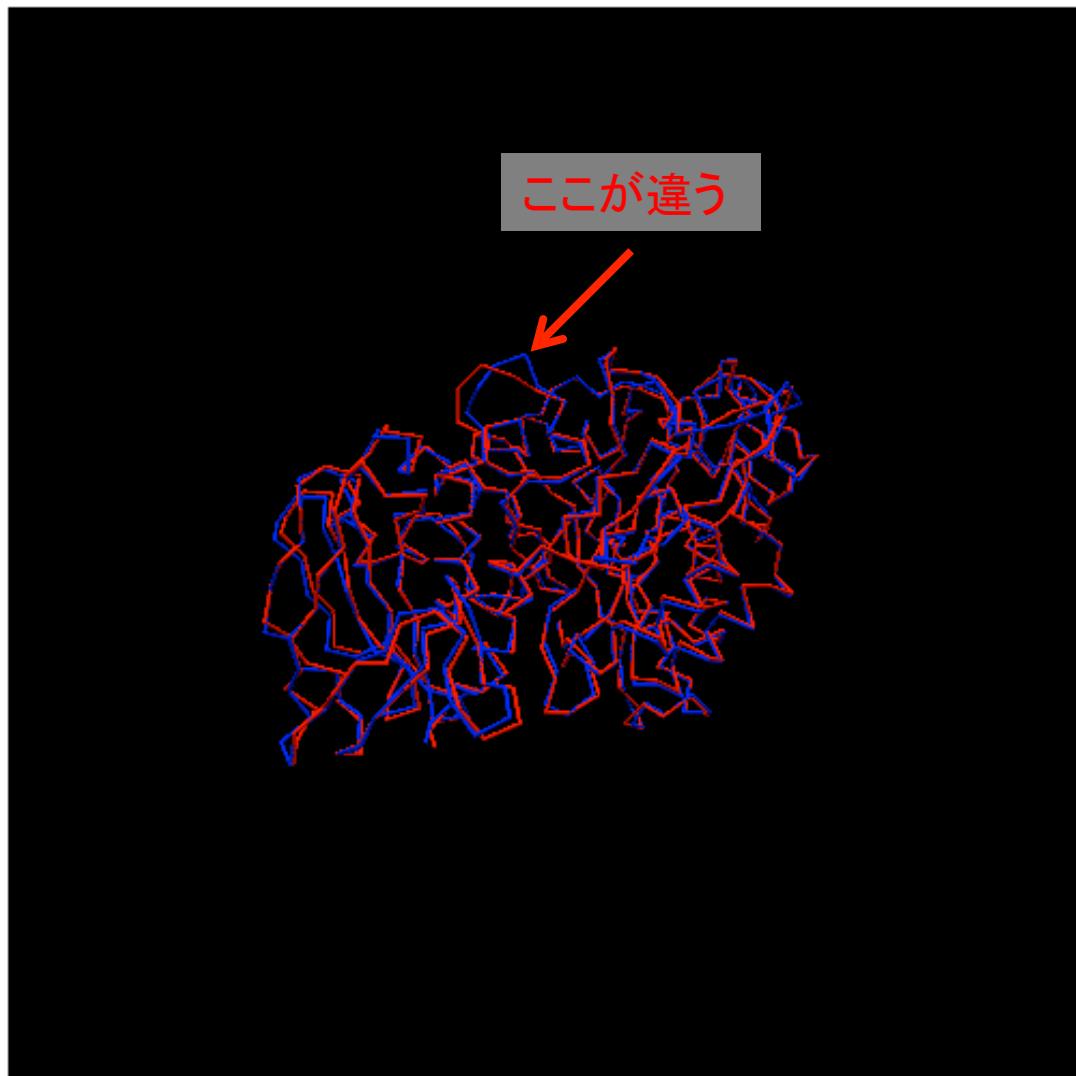
Seq.Identity:53% Seq Positives:67% E-value:6.85224e-142 Score:1286 Query Coverage:104% Compound:alpha-amylase, pancreatic (E.C.3.2.1.1)/antibody V[新規検索 \[1kxqa\]](#) 構造の重ね合わせ

1clvA 8 490 SGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGF GG VQISPPNEYLVAD--GRPWWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTG---MNGVTS-GSSADHDGMNYPAVP

1kxqa 8 490 SGRTSIVHLFEWRWVDIALECERYLGPKGF GG VQSVPPNENIVVTNPSRPWWERYQPVSYKLCTRSGNEFRDMVTRCNNVGVRIVYVDAVINHMC GSGAAAGTTCGSYCNPGSREFPAV

<#>

Superposition of 1clvA (blue) and 1viwA (red)



Style: Cartoon Backbone Wireframe

Color: group chain atom

Zoom: 75% 100% 150%

PDBj
Protein Data Bank Japan

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA

Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

Mine

ダウンロード/画面表示 [1clv]

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

概要

構造情報

実験情報

機能情報

相同蛋白質

ダウンロード/画面表示

外部データベース

PDB ID またはワード 検索

分子名

PDB format 1行80列固定 (フラットファイル)

・配列情報

• 原子座標

```

data_1CLV
#
_entry.id    1CLV ← データが1つだけの場合
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version   4.007
_audit_conform.dict_location  http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB 1CLV
RCSB RCSB001000
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.places
_atom_site.Cartn_x
_atom_site.Cartn_y
_atom_site.Cartn_z
_atom_site.occupancy_esd
_atom_site.B_iso_or_equiv_esd
_atom_site.pdbx_formal_charge
_atom_site.auth_seq_id
_atom_site.auth_comp_id
_atom_site.auth_asym_id
_atom_site.auth_atom_id
_atom_site.pdbx_PDB_model ← 鎖ID(label_asym_id) ...auth_asym_id(著者が定義した鎖ID)
ATOM  1   N   N   . PCA A 1 1   ? 29.020 7.713 8.323  1.00 17.69 ? ?
ATOM  2   C   CA  . PCA A 1 1   ? 30.380 8.263 8.128  1.00 16.55 ? ?
ATOM  3   C   CB  . PCA A 1 1   ? 31.390 7.193 8.612  1.00 16.19 ? ?
ATOM  4   C   CG  . PCA A 1 1   ? 30.495 5.943 8.987  1.00 16.93 ? ?
ATOM  5   C   CD  . PCA A 1 1   ? 29.101 6.476 8.787  1.00 19.39 ? ?
ATOM  6   O   OE  . PCA A 1 1   ? 28.089 5.796 9.037  1.00 22.92 ? ?
ATOM  7   C   C   . PCA A 1 1   ? 30.667 8.643 6.676  1.00 13.70 ? ?
ATOM  8   O   O   . PCA A 1 1   ? 31.514 9.493 6.417  1.00 14.12 ? ?
ATOM  9   N   N   . LYS A 1 2   ? 29.983 7.994 5.735  1.00 14.51 ? ?
ATOM 10   C   CA  . LYS A 1 2   ? 30.178 8.269 4.313  1.00 13.28 ? ?
ATOM 11   C   C   . LYS A 1 2   ? 28.999 8.963 3.640  1.00 16.12 ? ?
ATOM 12   O   O   . LYS A 1 2   ? 30.027 8.324 3.425  1.00 17.54 ? ?

```

mmCIF
行長可変
(STAR形式)
現在はこれが大元

鎖ID(label_asym_id) ...auth_asym_id(著者が定義した鎖ID)
と異なる場合もある

原子座標

mmCIF: macromolecular Crystallographic Information File



```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>

<PDBx: datablock datablockName="1CLV"
  xmlns:PDBx="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40.xsd"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40.xsd pdbx-v40.xsd">

  <PDBx:atom_siteCategory>
    <PDBx:atom_site id="1">
      <PDBx:B_iso_or_equiv>17.69</PDBx:B_iso_or_equiv>
      <PDBx:Cartn_x>29.020</PDBx:Cartn_x>
      <PDBx:Cartn_y>7.713</PDBx:Cartn_y>
      <PDBx:Cartn_z>8.323</PDBx:Cartn_z>
      <PDBx:auth_asym_id>A</PDBx:auth_asym_id>
      <PDBx:auth_atom_id>N</PDBx:auth_atom_id>
      <PDBx:auth_comp_id>PCA</PDBx:auth_comp_id>
      <PDBx:auth_seq_id>1</PDBx:auth_seq_id>
      <PDBx:group_PDB>ATOM</PDBx:group_PDB>
      <PDBx:label_alt_id xsi:nil="true" />
      <PDBx:label_asym_id>A</PDBx:label_asym_id>
      <PDBx:label_atom_id>N</PDBx:label_atom_id>
      <PDBx:label_comp_id>PCA</PDBx:label_comp_id>
      <PDBx:label_entity_id>1</PDBx:label_entity_id>
      <PDBx:label_seq_id>1</PDBx:label_seq_id>
      <PDBx:occupancy>1.00</PDBx:occupancy>
      <PDBx:pdbx_PDB_model_num>1</PDBx:pdbx_PDB_model_num>
      <PDBx:type_symbol>N</PDBx:type_symbol>
    </PDBx:atom_site>
    <PDBx:atom_site id="2">
      <PDBx:B_iso_or_equiv>16.55</PDBx:B_iso_or_equiv>
```

PDBML mmCIFから変換

(#)

- 1CLV-noatom -

```
± <PDBx: datablock datablockName= "1CLV-noatom"
  xsi:schemaLocation= "http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40.xsd
  pdbx-v40.xsd">
  ± <PDBx: atom_sitesCategory>
  ± <PDBx: atom_typeCategory>
  ± <PDBx: audit_authorCategory>
  ± <PDBx: audit_conformCategory>
  ± <PDBx: cellCategory>
  ± <PDBx: chem_compCategory>
  ± <PDBx: citationCategory>
  ± <PDBx: citation_authorCategory>
  ± <PDBx: computingCategory>
  ± <PDBx: database_2Category>
  ± <PDBx: database_PDB_matrixCategory>
  ± <PDBx: database_PDB_revCategory>
  ± <PDBx: database_PDB_rev_recordCategory>
  ± <PDBx: diffrrnCategory>
  ± <PDBx: diffrrn_detectorCategory>
  ± <PDBx: diffrrn_radiationCategory>
  ± <PDBx: diffrrn_radiation_wavelengthCategory>
  ± <PDBx: diffrrn_sourceCategory>
```

PDBML(noatom)

原子座標(atom_site)部分の
情報量が多いのでその部分を
除外したものも提供。

⟨#⟩

```

<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>

<PDBx: datablock datablockName="1CLV-extatom"
  xmlns:PDBx="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40-ext.xsd"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40-ext.xsd pdbx-v40-ext.xsd">

<PDBx:category_atom_record>
  <PDBx:atom_record id="1"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA N N N 29.020 7.713 8.323 1.00 17.69
  <PDBx:atom_record id="2"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C CA CA 30.380 8.263 8.128 1.00 16.
  <PDBx:atom_record id="3"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C CB CB 31.390 7.193 8.612 1.00 16.
  <PDBx:atom_record id="4"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C CG CG 30.495 5.943 8.987 1.00 16.
  <PDBx:atom_record id="5"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C CD CD 29.101 6.476 8.787 1.00 19.
  <PDBx:atom_record id="6"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C D D 30.601 5.039 5.796 9.037 1.00 22.
  <PDBx:atom_record id="7"> ATOM 1 A A 1 1 ? . PCA PCA C E E 31.141 9.493 5.411 1.00 14.12
  <PDBx:atom_record id="8"> ATOM 1 A A 1 1 ? . LYS LYS N NZ NZ 23.983 7.994 5.775 1.00 14.51
  <PDBx:atom_record id="9"> ATOM 1 A A 2 1 ? . LYS LYS O O O 29.027 9.224 2.435 1.00 17.54
  <PDBx:atom_record id="10"> ATOM 1 A A 2 2 ? . LYS LYS C CA CA 30.178 8.269 4.213 1.00 13.
  <PDBx:atom_record id="11"> ATOM 1 A A 2 2 ? . LYS LYS C CG CG 31.991 6.365 4.059 1.00 16.12
  <PDBx:atom_record id="12"> ATOM 1 A A 2 2 ? . LYS LYS C CD CD 32.140 5.082 3.331 1.00 17.
  <PDBx:atom_record id="13"> ATOM 1 A A 2 2 ? . LYS LYS C CE CE 33.340 4.422 3.957 1.00 17.
  <PDBx:atom_record id="14"> ATOM 1 A A 2 2 ? . LYS LYS N NZ NZ 33.629 3.104 3.340 1.00 20.
  <PDBx:atom_record id="15"> ATOM 1 A A 2 3 ? . ASP ASP N N N 27.961 9.255 4.417 1.00 14.81
  <PDBx:atom_record id="16"> ATOM 1 A A 2 3 ? . ASP ASP C CA CA 26.789 9.956 3.901 1.00 14.
  <PDBx:atom_record id="17"> ATOM 1 A A 3 3 ? . ASP ASP C C C 27.016 11.410 4.299 1.00 12.41
  <PDBx:atom_record id="18"> ATOM 1 A A 3 3 ? . ASP ASP O O O 27.160 11.710 5.485 1.00 12.28
  <PDBx:atom_record id="19"> ATOM 1 A A 3 3 ? . ASP ASP C CB CB 25.513 9.426 4.569 1.00 17.
  <PDBx:atom_record id="20"> ATOM 1 A A 3 3 ? . ASP ASP C CG CG 24.239 10.003 3.964 1.00 20.

```

PDBML(extatom)

逆に原子座標(atom_site)部分のみを圧縮して収めたものも提供。

<#>

Home**Data Deposition >>**

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

Search >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF

Latest Release Search

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

SeSAW

Ligand Binding Sites (GIRAF)

EM Navigator

Small NMR Database (NMRB)

Structural Bioinformatics

PDB/RDF**Service and Software >>**

JmolApplet
Yorodumi

Protein GL

AlphaFold

MAFFT

SEAL

Structure Prediction

CRNPRED

Spanner

SToP

Derived database >>

eMolSurf/eF-surf
eProtS

Protein Data Bank (PDB)

Molecule of the Month

Download >>

PDB Archive/Snapshot Archive

Links**PREFIX**

- rdf: <<http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>>
- rdfs: <<http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>>
- PDBo: <<http://pdbj.org/schema/pdbx-v40.owl#>>
- PDBr: <<http://pdbj.org/rdf/>>

Search PDB/RDF, chem-comp/RDF

ID:	<input type="text"/>	(e.g., '7RSA')	<input type="button" value="PDB ID"/>
property:	<input type="text"/>	(e.g.,	
		'PDBo:entity.pdbx_description')	
keywords:	<input type="text"/>	(e.g., 'alcohol')	
<input type="button" value="submit"/> <input type="button" value="reset"/>			

Subject: <http://pdbj.org/rdf/1CLV>

<i>Predicate</i>	<i>Object</i>
PDBo:datablockName	1CLV-noatom
PDBo:has_atom_sitesCategory	PDBr:1CLV/atom_sitesCategory
PDBo:has_atom_typeCategory	PDBr:1CLV/atom_typeCategory
PDBo:has_audit_authorCategory	PDBr:1CLV/audit_authorCategory
PDBo:has_audit_conformCategory	PDBr:1CLV/audit_conformCategory
PDBo:has_citationCategory	PDBr:1CLV/citationCategory
PDBo:has_citation_authorCategory	PDBr:1CLV/citation_authorCategory
PDBo:has_computingCategory	PDBr:1CLV/computingCategory
PDBo:has_database_2Category	PDBr:1CLV/database_2Category
PDBo:has_database_PDB_matrixCategory	PDBr:1CLV/database_PDB_matrixCategory
PDBo:has_database_PDB_revCategory	PDBr:1CLV/database_PDB_revCategory
PDBo:has_database_PDB_rev_recordCategory	PDBr:1CLV/database_PDB_rev_recordCategory
PDBo:has_diffrn_detectorCategory	PDBr:1CLV/diffrn_detectorCategory
PDBo:has_diffrn_radiationCategory	PDBr:1CLV/diffrn_radiationCategory
PDBo:has_diffrn_radiation_wavelengthCategory	PDBr:1CLV/diffrn_radiation_wavelengthCategory
PDBo:has_diffrn_sourceCategory	PDBr:1CLV/diffrn_sourceCategory
PDBo:has_entityCategory	PDBr:1CLV/entityCategory
PDBo:has_entity_keywordsCategory	PDBr:1CLV/entity_keywordsCategory
PDBo:has_entity_name_comCategory	PDBr:1CLV/entity_name_comCategory
PDBo:has_entity_polyCategory	PDBr:1CLV/entity_polyCategory
PDBo:has_entity_src_natCategory	PDBr:1CLV/entity_src_natCategory
PDBo:has_entrvCategory	PDBr:1CLV/entrvCategory

<#>

Home

Data Deposition >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

Search >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

Service and Software >>

JV: Graphic Viewer
Yorodumi
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

Derived database >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

Download >>

PDB Archive/Snapshot Archive

Links

PREFIX

- rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>
- rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#>
- PDBo: <http://pdbj.org/schema/pdbx-v40.owl#>
- PDBr: <http://pdbj.org/rdf/>

Search PDB/RDF, chem-comp/RDF

ID:	<input type="text"/>	(e.g., '7RSA')	PDB ID
property:	<input type="text"/>	(e.g.,	
	'PDBo:entity.pdbx_description')		
keywords:	<input type="text"/>	(e.g., 'alcohol')	
<input type="button" value="submit"/> <input type="button" value="reset"/>			

Subject: http://pdbj.org/rdf/1CLV/chem_compCategory

Predicate	Object
PDBo:of_datablock	PDBr:1CLV
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/ALA
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/ARG
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/ASN
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/ASP
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/CA
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/CL
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/CYS
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/GLN
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/GLU
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/GLY
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/HIS
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/HOH
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/ILE
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/LEU
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/LYS
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/MET
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/PCA
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/PHE
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/PRO
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/SER
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/THR
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/TRP
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/TYR
PDBo:has_chem_comp	PDBr:1CLV/chem_comp/VAL
rdf:type	http://pdbj.org/schema/pdbx-v40.owl#chem_compCategory

含まれるアミノ酸やリガンドの
3文字以内での表記記号のリ
スト

3者の特色、長所と短所

	形式	標準化組織	データの完全性	人間が読みやすいか	計算機が読みやすいか	冗長性	検証	ファイルサイズ
PDB	(flat file)	wwPDB	×	◎	×	×	×	小
mmCIF	STAR	IUCr, wwPDB	○	○	○	×	△	中
PDBML	XML	W3C, wwPDB	○	×	◎	◎	◎	大

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JView: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALAStructure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

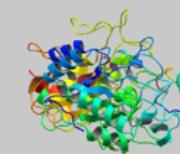
PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

Mine**概要[1clv]**
[日本語ページについて](#)
[PDBj Mineについて](#)
[更新情報](#)

概要	構造情報	実験情報	機能情報	相同蛋白質	ダウンロード/画面表示	外部データベース
						DB ID または キーワード
<input type="button" value="検索"/>						

<非対称単位>
=<生物学的単位>

他の静止画像を見る
3次元構造ビューア
([jV4](#) / [Jmol](#)) で見る ^{*1}

エントリーID (PDB ID)	1clv 配列情報 (FASTA形式)
分子名称	ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE INHIBITOR
タイトル	YELLOW MEAL WORM ALPHA-AMYLASE IN COMPLEX WITH THE AMARANTH ALPHA-AMYLASE INHIBITOR
機能のキーワード	INSECT ALPHA-AMYLASE INHIBITOR, AMARANTHUS HYPOCHONDRIACUS, YELLOW MEAL WORM, KNOTTIN HYDROLASE
由来する生物種	Tenebrio molitor (yellow meal worm)
由来する組織	[UNP - P80403] Seed
ポリマー鎖の合計数	2
分子量の合計	54934.3 (詳細は 構造情報のページ)
著者	Pereira, P.J.B. , Lozanov, V. , Patthy, A. , Huber, R. , Bode, W. , Pongor, S. , Strobl, S. (登録日 : 1999-05-04, 公開日 : 2000-05-03)
引用文献	Pereira, P.J. , Lozanov, V. , Patthy, A. , Huber, R. , Bode, W. , Pongor, S. , Strobl, S. Specific inhibition of insect alpha-amylases: yellow meal worm alpha-amylase in complex with the amaranth alpha-amylase inhibitor at 2.0 Å resolution. <i>Structure Fold.Des.</i> , 7:1079 - 1088, 1999.(PubMed : 10508777) (DOI: 10.1016/S0969-2126(99)80175-0)
実験手法	X-RAY DIFFRACTION (2.00[Å])
他のデータベース情報	万見(Yorodumi), CATH, CE, FSSP, SCOP, VAST, UniProt (P56634, P80403), eF-site, KEGG (EC 3.2.1.1), ProTherm, EzCatDB, PISA, PQS, PDB/RDF
NMR情報	BMRB

*1) jV4 と Jmol にはJava(TM)Plug-in 1.5以上が必要です。
現在一部のMac OS X ではjVアプレットが表示できません。詳しくは[こちら](#)をご覧ください。

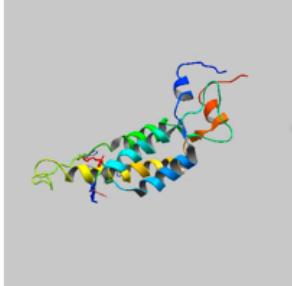
トップページと同じ簡易検索を行ったためのBox
「2tmv」と入力して「検索」

Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search
サービス&ソフトウェア >>
jV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALA
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS
二次データベース >>
eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode Elastic /
ProMode Oligomer
Molecule of the Month
ダウンロード >>
PDB Archive/Snapshot Archive
リンク集

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 ダウンロード/画面表示 外部データベース

PDB ID または キーワード 検索

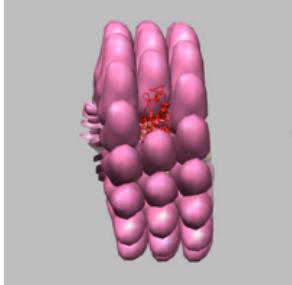
<非対称単位>



他の静止画像を見る

3次元構造ビューア
(jV4 / Jmol) で見る *1

<生物学的単位>



他の静止画像を見る *2

3次元構造ビューア
(jV4) で見る *1

エントリーID (PDB ID)	2tmv 配列情報 (FASTA形式) PDBファイルのダウンロード
分子名称	INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS (FIBER DIFFRACTION STUDY)
タイトル	VISUALIZATION OF PROTEIN-NUCLEIC ACID INTERACTIONS IN A REFINED STRUCTURE OF INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS AT 2.9 ANGSTROMS: RESOLUTION BY X-RAY FIBER DIFFRACTION
キーワード	Viruses, RNA viruses, Tobacco mosaic virus, Protein-nucleic acid interactions, X-ray fiber diffraction
由来する生物種	Tobacco mosaic virus
ポリマー鎖の合計数	2
分子量の合計	18504.4 (詳細は 構造情報のページ)
著者	Stubbs, G. , Pattanayek, R. , Namba, K. (登録日 : 1988-09-15, 公開日 : 1989-01-09)
引用文献	Namba, K. , Pattanayek, R. , Stubbs, G. Visualization of protein-nucleic acid interactions in a virus. Refined structure of intact tobacco mosaic virus at 2.9 Å resolution by X-ray fiber diffraction. <i>J.Mol.Biol.</i> , 208:307 - 325, 1989.(PubMed : 2769760) (DOI: 10.1016/0022-2836(89)90391-4)
実験手法	FIBER DIFFRACTION (2.9 Å)
他のデータベース情報	Protein Data Bank Japan (FASTA), UniProt (P69687), Protein Data Bank (Jmol)

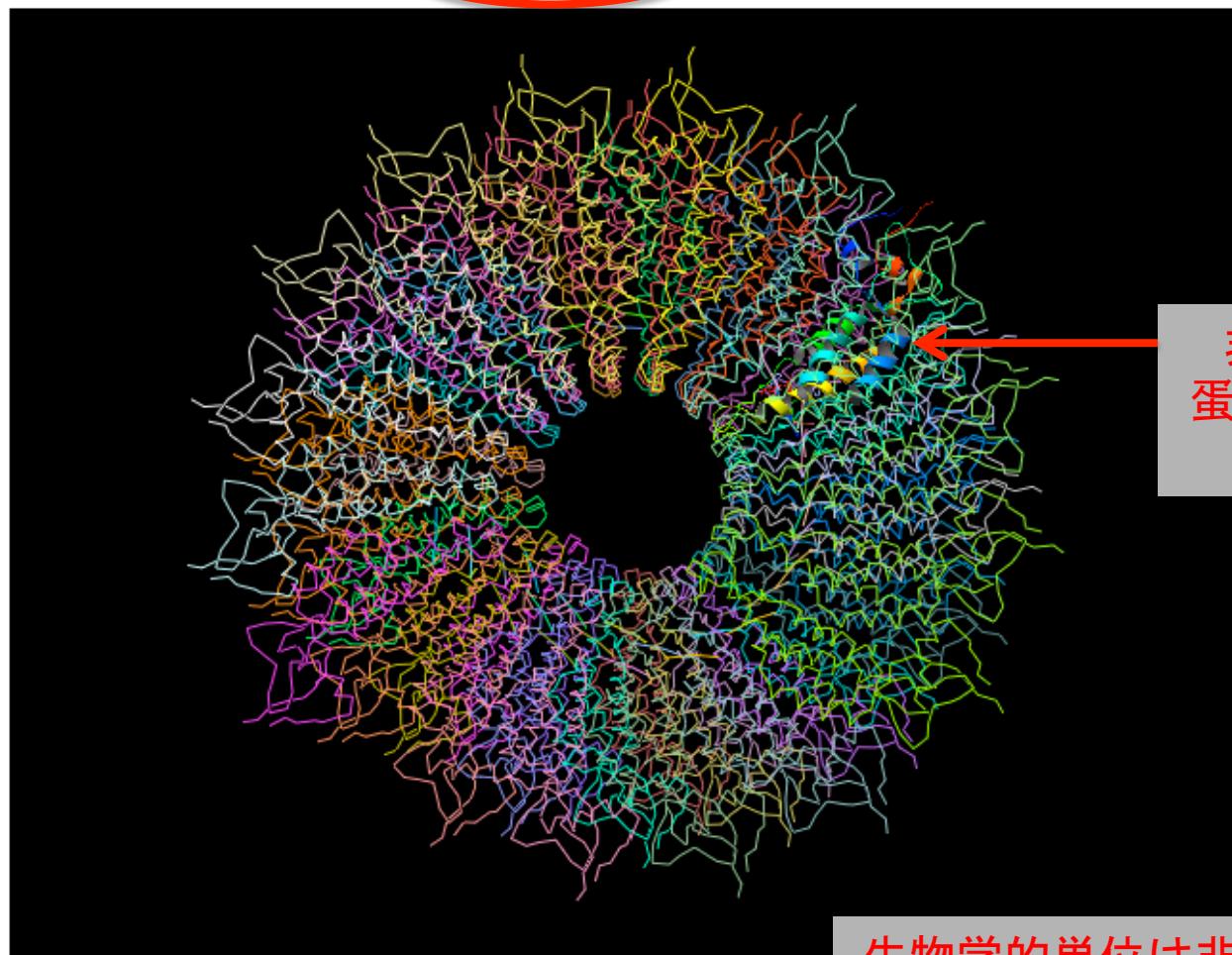
登録されている座標データは最低限の繰り返し単位 (非対称単位)

生物学的に意味のある単位(生物学的単位)は異なる場合がある

生物学的単位用ページ

PDBID : 2tmv ([PDBj Mine](#) · [万見\(Yorodumi\)](#))

より多機能な「万見」(よろづみ)



非対称単位はここ
蛋白質1鎖、RNA 1鎖
計2鎖

生物学的単位は非対称単
位が49セット(98鎖)

表示単位^{*1} (鎖数^{*2})

生物学的単位 (98)

表示対象・配色 (非対称単位 - それ以外)^{*3}

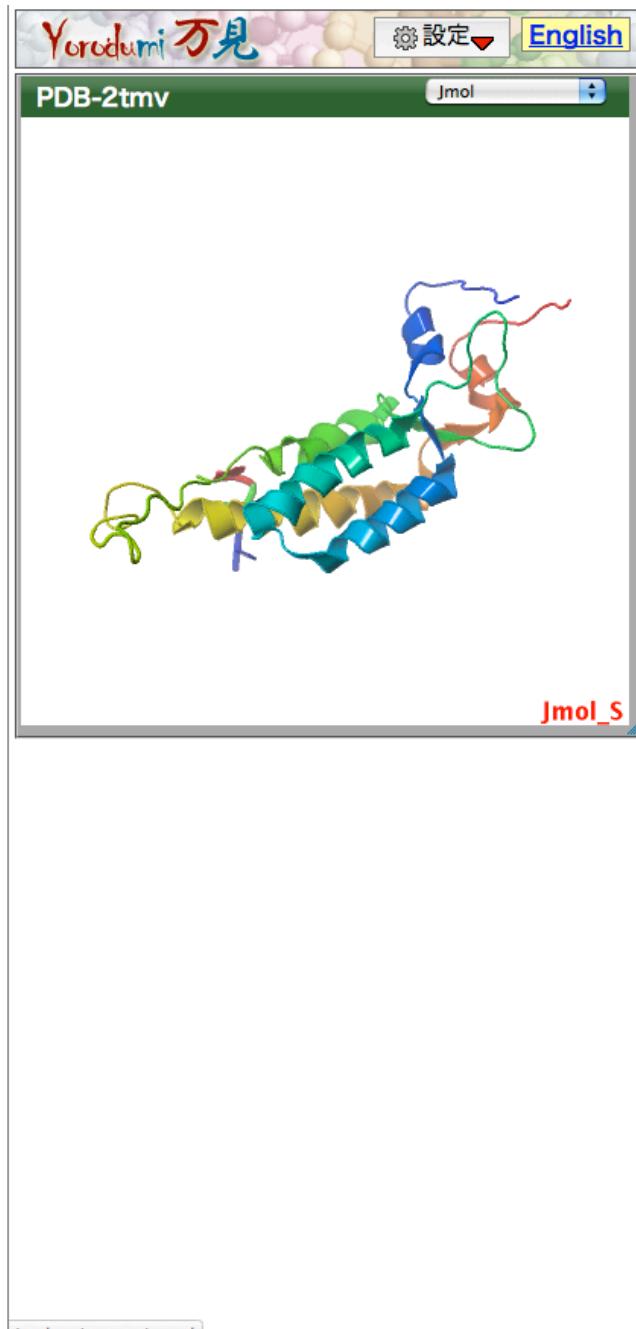
デフォルト - α 炭素リンのみ・全鎖塗り分け

使用するアプレットランチャーの選択^{*4}

次世代Java Plug-in newt バージョン (JRE 1.6以降、Mac用)

<#>

PDBj
Protein Data Bank Japan



データ 開く 構成要素 表示 スタイル ヘルプ

各種パネルを表示するためのボタンです。パネルはマウス操作で位置・大きさ・表示・非表示などを変更できます。

データ

このパネルには、現在表示しているデータエントリについての概要が表示されます。

データベース・ID	PDB-2tmv
タイトル	VISUALIZATION OF PROTEIN-NUCLEIC ACID INTERACTIONS IN A VIRUS. REFINED STRUCTURE OF INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS AT 2.9 ANGSTROMS RESOLUTION BY X-RAY FIBER DIFFRACTION INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS (FIBER DIFFRACTION STUDY) 由来: Tobacco mosaic virus
集合体	<input checked="" type="checkbox"/> 登録構造: らせん対称性の非対称単位、ポリマー数:2 生物学的単位:  1 transform to helical frame) ダウンロード
著者	Stubbs, G., Pattanayek, R., Namba, K.

生物学的単位の表示に切り替え

表示

ビューア全体の表示様式（見る方向や大きさなど）を操作するパネルです。構造データの表示スタイルを操作するには、[スタイルパネル](#)を利用してください。

ビューア	<- サイズ -> <input checked="" type="checkbox"/> 高画質(低速)
ズーム	小 大
断面	手前 奥
保存	画像を保存 現在の状態（スクリプト）を保存 状態を復元（スクリプトを開く）

PDB-2tmv - 万見 (Yorodumi)

PDBj Mine 概要ページ : 2tmv × PDB-2tmv - 万見 (Yorodumi) × 109:タバコモザイクウイルス (Tob... × +

Yorodumi 万見 設定 English

PDB-2tmv Jmol

Jmol_S

データ 開く 構成要素 表示 スタイル ヘルプ

各種パネルを表示するためのボタンです。パネルはマウス操作で位置・大きさ・表示・非表示などを変更できます。

「構成要素」パネルを出す

データ
データベース・ID PDB-2tmv ▼

タイトル
VISUALIZATION OF PROTEIN-NUCLEIC ACID
INTERACTIONS IN A VIRUS. REFINED STRUCTURE OF
INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS AT 2.9 ANGSTROMS
RESOLUTION BY X-RAY FIBER DIFFRACTION
INTACT TOBACCO MOSAIC VIRUS (FIBER DIFFRACTION STUDY)
由来: Tobacco mosaic virus

集合体
登録構造: らせん対称性の非対称単位, ポリマー数: 2
生物学的単位:
1: 主鎖のみ: らせん対称集合体 (98 分子, helical, transform to helical frame) ダウンロード

著者 Stubbs, G., Pattanayek, R., Namba, K.

表示
ビューア全体の表示様式（見る方向や大きさなど）を操作するパネルです。構造データの表示スタイルを操作するには、 スタイルパネルを利用してください。

ビューア <- サイズ -> 高画質(低速)

ズーム 小 大

断面 手前 奥

保存 画像を保存 現在の状態(スクリプト)を保存
状態を復元(スクリプトを開く)

Jmol script terminated





トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)PDB/RDF,
chem_comp/RDF

Latest Release Search

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

SeSAW

Ligand Binding Sites
(GIRAF)

EM Navigator

Search NMR Data (BMRB)

Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer

万見 (Yorodumi)

Protein Globe

ASH

MAFFTash

SEALA

Structure Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf

eProtS

ProMode / ProMode

Elastic / ProMode

Oligomer

Molecule of the Month

ダウンロード

PDB Archive/Snapshot
Archive

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

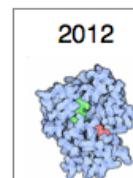
今月の分子 (Molecule of the Month)

このサイトはRCSBの David S. Goodsell博士による「Molecule of the Month」を日本語に訳したものです。社会で話題となっている内容に関わる分子を蛋白質構造データバンク (PDB) から選び、機能と構造に関して解説しています。転載・引用については利用規約をご覧下さい。

ja:日本語翻訳版 (PDBj) en:英文オリジナル版 (RCSB)

一覧: 公開の新しい順 アルファベット順 五十音順 カテゴリ別

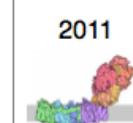
2012 2011 2010 2009 2008 2007 2006 2005 2004 2003 2002 2001 2000



146 [ja|en] :2012/02:アミノグリコシド系抗生物質 (Aminoglycoside Antibiotics、アミノ配糖体系抗生物質)

145 [ja|en] :2012/01:伝令RNAのキャップ形成 (Messenger RNA Capping)

109 タバコモザイクウイルス(2009年)



144 [ja|en] :2011/12:複合体I (Complex I、NADH:キノン酸化還元酵素)

143 [ja|en] :2011/11:Toll様受容体 (Toll-like Receptors)

142 [ja|en] :2011/10:PDBの先駆者たち (PDB Pioneers)

141 [ja|en] :2011/09:O-GlcNAc転移酵素 (O-GlcNAc Transferase、O結合型β-N-アセチルグルコサミン転移酵素)

140 [ja|en] :2011/08:ロンボイドプロテアーゼGlpG (Rhomboid Protease GlpG)

139 [ja|en] :2011/07:DNAメチルトランスフェラーゼ (DNA Methyltransferase、DNAメチル基転移酵素)

138 [ja|en] :2011/06:グルカン分解酵素 (Glucansucrase)

137 [ja|en] :2011/05:シトクロムbc₁ (Cytochrome bc₁)

136 [ja|en] :2011/04:ナノボディ (Nanobodies、単一ドメイン抗体)

135 [ja|en] :2011/03:インテグラーゼ (Integrase)

134 [ja|en] :2011/02:インテグリン (Integrin)

133 [ja|en] :2011/01:一酸化窒素合成酵素 (Nitric Oxide Synthase、NO合成酵素)

132 [ja|en] :2010/12:アデノウイルス (Adenovirus)

131 [ja|en] :2010/11:インテイン (Intein)

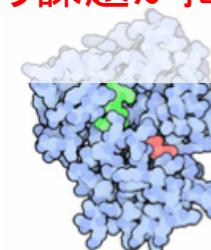


理解を深めるためのトピックス

- アミノグリコシドに修飾を加える酵素が他にも多数PDBに登録されています。酵素単独の構造、そして抗生物質や補因子と結合した構造を探してみて下さい。
- 現在、アミノグリコシドに修飾を加える酵素の働きを妨げる阻害剤を開発し、抗生物質耐性に対抗する試みが行われています。この阻害剤を見つけるにはまずキーワード「aminoglycoside inhibitor」でPDBデータを検索してみて下さい。

参考文献

- 最近の「今月の分子」では、「理解を深めるためのトピックス」という課題が掲載されている。
- M. S. Ramirez and M. E. Tolmasky (2010) "Aminoglycoside-modifying enzymes." *Drug Resistance Update* **13**, , 151-154.
 - S. B. Vakulenko and S. Mobashery (2003) "Versatility of aminoglycosides and prospects for their future." *Clinical Microbiology Reviews* **16**, , 430-450.
 - J. M. Ogle, D. E. Brodersen, W. M. Clemons Jr., M. J. Tarry, A. P. Carter and V. Ramakrishnan (2001) "Recognition of cognate transfer RNA by the 30S ribosomal subunit." *Science* **292**, , 897-902.
 - G. D. Wright (1999) "Aminoglycoside-modifying enzymes." *Current Opinion in Microbiology* **2**, , 499-503.



代表的な構造

3frh: 16S rRNA メチラーゼ (methylase、メチル基転移酵素 methyltransferase)

この酵素は細菌のリポソーム中にあるヌクレオチドの1つをメチル化し、ある種のアミノグリコシド系抗生物質に対する耐性を生み出す。

3pb3: 16S rRNA メチラーゼ

この酵素は細菌のリポソーム中にあるヌクレオチドの1つをメチル化し、ある種のアミノグリコシド系抗生物質に対する耐性を生み出す。

1l8t: アミノグリコシド 3'-ホスホトランスクレオチダーゼ (3'-phosphotransferase、3'-リン酸基転移酵素)

これは薬剤耐性細菌が作る酵素で、アミノグリコシド系抗生物質にリン酸基を付加し抗生物質の作用を妨げる。

1bo4: アミノグリコシド 3-N-アセチル基転移酵素 (acetyltransferase)

これは薬剤耐性細菌が作る酵素で、アミノグリコシド系抗生物質にアセチル基を付加し抗生物質の作用を妨げる。

1kny: カナマイシン (kanamycin) ヌクレオチド転移酵素 (nucleotidyltransferase)

これは薬剤耐性細菌が作る酵素で、アミノグリコシド系抗生物質にヌクレオチドを付加し抗生物質の作用を妨げる。

1ibk: パロモマイシンが結合した30Sリポソーム

この構造はアミノグリコシド系抗生物質の小サブユニットにアミノグリコシド系抗生物質の一種であるパロモマイシン (paromomycin) が結合したものである。

[「今月の分子」一覧に戻る](#)

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)PDB/RDF,
chem_comp/RDF

Latest Release Search

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

SeSAW

Ligand Binding Sites
(GIRAF)

EM Navigator

Search NMR Data (BMRB)

Status Search

サービス&ソフトウェア >>

jV: Graphic Viewer

万見 (Yorodumi)

Protein Globe

ASH

MAFFTash

SEALA

Structure Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf

eProtS

ProMode / ProMode

Elastic / ProMode

Oligomer

Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot
Archive

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

データ登録

データ登録のご案内 >>

PDB登録 ADIT Auto Dep Input Tool

NMRデータ登録 APR NMR

検索

PDB検索 Mine

Mine日本語ページについて

PDB IDまたはキーワード

検索

詳細条件検索 >>

最新情報

2012/3/1

明日3/2(金)、「統合データベース講習会」
ひご参加ください。 (詳細...)

2012/2/28

EMデータバンクがPDBアーカイブに追加
三次元電子顕微鏡法によって決定したマ
が、2012年3月7日にPDBアーカイブに追

2012/2/8

2012年2月7日に行われました「H23年度
る講習内容」を掲載しています。ご興味のあ

2011/12/5

2011年11月25日に行われました2011年日本
発表内容」を掲載しています。ご興味のあ

2011/9/20

PDBj

English Japanese

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)

PDB/RDF,

chem_comp/RDF

Latest Release Search

Sequence-

Navigator

Structure-

Navigator

SeSAW

Ligand Binding Sites

(GIRAF)

EM Navigator

Search NMR

Data (BMRB)

Status Search

サービス&ソフトウェア >>

jV: Graphic

Viewer

万見 (Yorodumi)

Protein Globe

ASH

MAFFTash

SEALA

Structure

Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-

seek/eF-surf

eProtS

ProMode /

ProMode

Elastic /

ProMode

Oligomer

Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB

Archive/Snapshot

Archive

リンク集

79697

entries available
on 29 Feb., 2012

00:00(UTC) / 09:00(JST)



PDBj

English Japanese

統計情報 ヘルプ FAQ お問い合わせ

日本語ページについて

PDBj Mineについて

更新情報

表示順

公開日の新しい順

1ページの表示件数 16 リセット 検索

PDB ID:

キーワード:

月 日 年

以降:

月 日 年

以前:

月 日 年

登録日:

以降:

月 日 年

以前:

月 日 年

文献著者:

文献情報:

著年:

著者名:

著番号:

合算:

含まない

無視する

その他

化合物情報:

エンタリーのタイトル:

外部データベース:

ID:

リガンドと補欠分子族:

ポリマー鎖の数:

(最小)

(最大)

ポリマー鎖の長さ:

(最小)

(最大)

実験手法:

分解能:

(最小)

(最大)

由来する生物種:

宿主生物種:

表示順

公開日の新しい順

リセット

検索

© 2007 PDBj. All Rights Reserved.

利用規約

プライバシーポリシー

ニュースレター

過去の講習会

PDBjメンバー

出版物

PDBj Protein Data Bank Japan

English Japanese simplified Chinese traditional Chinese Korean 統計情報 ヘルプ FAQ お問い合わせ

トップページ

データ登録 >> ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >> Search PDB (Mine/xPSSS)
PDB/RDF, chem_comp/RDF

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

データ登録

データ登録のご案内 >>

PDB登録 AD IT! Auto Dep Input Tool NMRデータ登録 AP NMR

PDBj Help

Topics

- 基本的な使い方
- PDBデータの書き方
- IV (分子Viewer)
- Sequence Navigator
- Structure Navigator
- ASH
- eF-site
- eF-surf
- eF-seek
- eProtS
- Protein Globe
- SOAP API
- ADIT
- サイトマップ
- 講習会資料

English version:PDBj Help

このページは、PDBj（日本蛋白質構造データバンク）で提供される各種サービスの解説とチュートリアルをまとめたものです。PDBjのサービスには以下のようなものがあります。

- エントリー情報の取得
- キーワード検索
- 詳細条件検索
- 配列相同性検索
- 立体構造相同性検索

など。PDBjで提供している基本的なサービスの利用方法についてはPDBj MineやPDBj Mineの使い方を紹介した動画をご覧下さい。動画はYouTubeでもご覧になれます。

なお、過去の講習会の記録も参考にしてください。

各サービスの紹介などが掲載されているヘルプページ

データ検索 BMRB

Accession number Deposition code Go

ます。ご興味のある方はぜひ

、EMデータバンク(EMDB)…

ナー PDBj 講習会」におけるランチョンセミナーの。

79697 entries available on 29 Feb., 2012 00:00(UTC) / 09:00(JST)

WORLDWIDE PROTEIN DATA BANK

eProtS Encyclopedia of Protein Structures

Protein Globe

DBCLS Database Center for Life Science

Tanpaku.org

NBDC National Bioscience Database Center

j

トップページ

データ登録 >>

ADIT: PDB Deposition

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)PDB/RDF,
chem_comp/RDF

Latest Release Search

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

データ登録

データ登録のご案内 >>

PDB登録 AD IT!

NMRデータ登録 AP NMR

トップページ

データ登録 >>
ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB
(Mine/xPSSS)
PDB/RDF,
chem_comp/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites
(GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Status Search

サービス&ソフトウェア >>

JV: Graphic Viewer
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
ASH
MAFFTash
SEALAStructure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
eProtS
ProMode / ProMode
Elastic / ProMode
Oligomer
Molecule of the Month

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot
ArchivePDB Archive/Snapshot
Archive

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDCと大阪大学の支援を受け、米国RCSB、BMRB、および欧州PDBeと協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

PDBj管理者へメール送信

FAQページもご覧下さい。お探しの情報が見つからない場合、下記アドバイスからお問い合わせ下さい。

PDB登録・編集に関するお問い合わせには、

- 座標、構造因子/回折強度、NMR距離制限情報、ADITについては、「[ADIT登録・編集に関するお問い合わせ](#)」をご利用ください
- NMR実験データ、ADIT-NMRについては、「[BMRB登録・編集に関するお問い合わせ](#)」をご利用ください

すべての入力項目が必須です。

URLを入力される場合、"http://"は入力しないでください。入力チェックがかかり、エラーになります。

お名前:

メールアドレス:

件名: (64文字以内)

お問い合わせ内容:

電子メールアドレスが正しいことをご確認ください。「メール送信」ボタンを押して送信戴くと、お問い合わせ内容が送信者に電子メールで送信されます。お問い合わせ内容メールが届か

2011/9/20

このページは、蛋白質構造データベースを統合するための日本語版です。



随时質問を受け付けております。
お気軽にご質問下さい。

79697
entries available
on 29 Feb., 2012
00:00(UTC) / 09:00(JST)

WORLDWIDE
OPDB
PROTEIN DATA BANK



DBCLS
Database Center for Life Science



NBDC
National Bioscience Database Center

されます。ご興味のある方はぜひ

イブ、EMデータバンク(EMDB)
[詳細...](#)

セミナー PDBj 講習会」における
ランチョンセミナー

におけるランチョンセミナーの
セミナー

79697

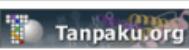
entries available
on 29 Feb., 2012
00:00(UTC) / 09:00(JST)

WORLDWIDE
OPDB
PROTEIN DATA BANK

eProtS
Encyclopedia of
Protein Structures



DBCLS
Database Center for Life Science



NBDC
National Bioscience Database Center