

「既存データベースを活用したタンパク質実験・構造データの探し方」

[2. コンピュータでタンパク質を観察する] 補足資料

2013/11/6

理化学研究所 情報基盤センター 統合データベース特別ユニット センター研究員

西方 公郎

1. タンパク質の形の情報が登録されているデータベースにアクセスする。

データベースの名前: Protein Data Bank Japan

URL: <http://pdbj.org/>



2. 観察したいタンパク質を調べる。

i) キーワード (例. 「insulin」) を入力する。



ii) 検索結果が表示される。

92689
件が利用できます (2013-07-31 00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search pdbj.org

wwPDB RCSB PDB BMRB PDBe JST-NBDC IPR 産学連携 Share

PDB: 2598 件 ウェブページ: 10 件 ステータス検索: 12 件

insulin

1GUJ **INSULIN AT PH 2: STRUCTURAL ANALYSIS OF THE CONDITIONS PROMOTING INSULIN FIBRE FORMATION.**

分子名称: INSULIN
著者: Whittingham, J.L., Scott, D.J., Chance, K., Wilson, A., Finch, J., Brange, J., Dodson, G.G.
登録日: 2002-01-28
公開日: 2002-03-08
最終更新日: 2009-02-24

Insulin at Ph2: Structural Analysis of the Conditions Promoting Insulin Fibre Formation
J.Mol.Biol., 318, 2002
PubMed: 12051853
PubMed: 10489447
DOI: 10.1016/S0022-2836(02)00021-9
DOI: 10.1107/S0907444999008562

引用文献

3P2X **INSULIN FIBRILLATION IS THE JANUS FACE OF INDUCED FIT. A CHIRAL CLAMP STABILIZES THE NATIVE STATE AT THE EXPENSE OF ACTIVITY**

分子名称: Insulin
著者: Hua, Q.X., Wan, Z.L., Huang, K., Hu, S.Q., Phillip, N.F., Jia, W.H., Whittingham, J., Dodson, G.G., Katsoyannis, P.G., Weiss, M.A.
登録日: 2010-10-04
公開日: 2011-11-23

Insulin fibrillation is the Janus face of induced fit. A chiral clamp stabilizes the native state at the expense of activity
To be Published, 0
PubMed: 15794638
PubMed: 14596591
PubMed: 15610006
PubMed: 2905485
PubMed: 2648161
DOI: 10.1021/bi047585k
DOI: 10.1021/bi034430o
DOI: 10.1021/bi048223f
DOI: 10.1098/rstb.1988.0058
DOI: 10.1038/338594a0

引用文献

検索結果
全ヒット件数: 2598
表示件数: 25
表示順: 関連性が高い順
Auto-pager: ☐
結果をダウンロード

表示順

iii) どれか一つ(例. 1GUJ)をクリックしてみる。

タンパク質の名前、特徴や、由来する生物種、形(構造)の情報などが記載されている。

92689
件が利用できます (2013-07-31 00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search pdbj.org

wwPDB RCSB PDB BMRB PDBe JST-NBDC IPR 産学連携 Share

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 リソース

1GUJ

INSULIN AT PH 2: STRUCTURAL ANALYSIS OF THE CONDITIONS PROMOTING INSULIN FIBRE FORMATION.

1GUJの概要

関連構造のPDB ID	1A7F 1A10 1A1Y 1B9E 1BEN 1HIQ 1HIS 1HIT 1HLS 1HTV 1HUJ 1IOG 1IOH 1J73 1JCA 1JCO 1K3M 1LPH 1MHI 1MHJ 1OIY 1OIZ 1OJ0 1SJT 1SJJ 1TRZ 1TYL 1TYM 1VKS 1VKT 1XDA 1XGL 1ZEG 1ZEH 1ZNU 2AIY 2HIU 3AIY 4AIY 5AIY
分子名称	INSULIN
機能のキーワード	HORMONE, METABOLIC ROLE, LOW PH, SULPHATE IONS
由来する生物種	HOMO SAPIENS (HUMAN)
ポリマー鎖の合計数	4
分子量の合計	11827.48
著者	Whittingham, J.L., Scott, D.J., Chance, K., Wilson, A., Finch, J., Brange, J., Dodson, G.G. (登録日: 2002-01-28, 公開日: 2002-03-08, 最終更新日: 2009-02-24)
引用文献	Whittingham, J.L., Scott, D.J., Chance, K., Wilson, A., Finch, J., Brange, J., Dodson, G.G.

構造
非対称単位を表示

生物学的単位を表示

ダウンロード
Sequence (fasta)
PDB形式 (全ての情報)
PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
mmCIF

他のデータベース情報
RCSB-PDB
PDBe

3. タンパク質のファイル(PDB ファイル)をダウンロードする。

「ダウンロード」の「PDB 形式(全ての情報)」をクリックする。

[LS](#) [1HTV](#) [1HUI](#) [1IOG](#) [1IOH](#) [1J73](#) [1JCA](#) [1JCO](#) [1K3M](#) [1LPH](#)
[TYL](#) [1TYM](#) [1VKS](#) [1VKT](#) [1XDA](#) [1XGL](#) [1ZEG](#) [1ZEH](#) [1ZNJ](#)

TE IONS

1, A., Finch, J., Brange, J., Dodson, G.G. (登録日:
009-02-24)

生物学的単位を表示

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDB形式 (全ての情報)**
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- mmCIF

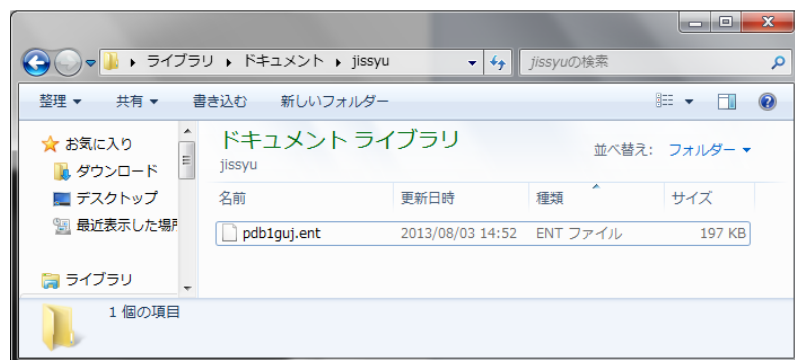
他のデータベース情報

RCSB-PDB

ダウンロードしたファイル(圧縮形式)を解凍する。

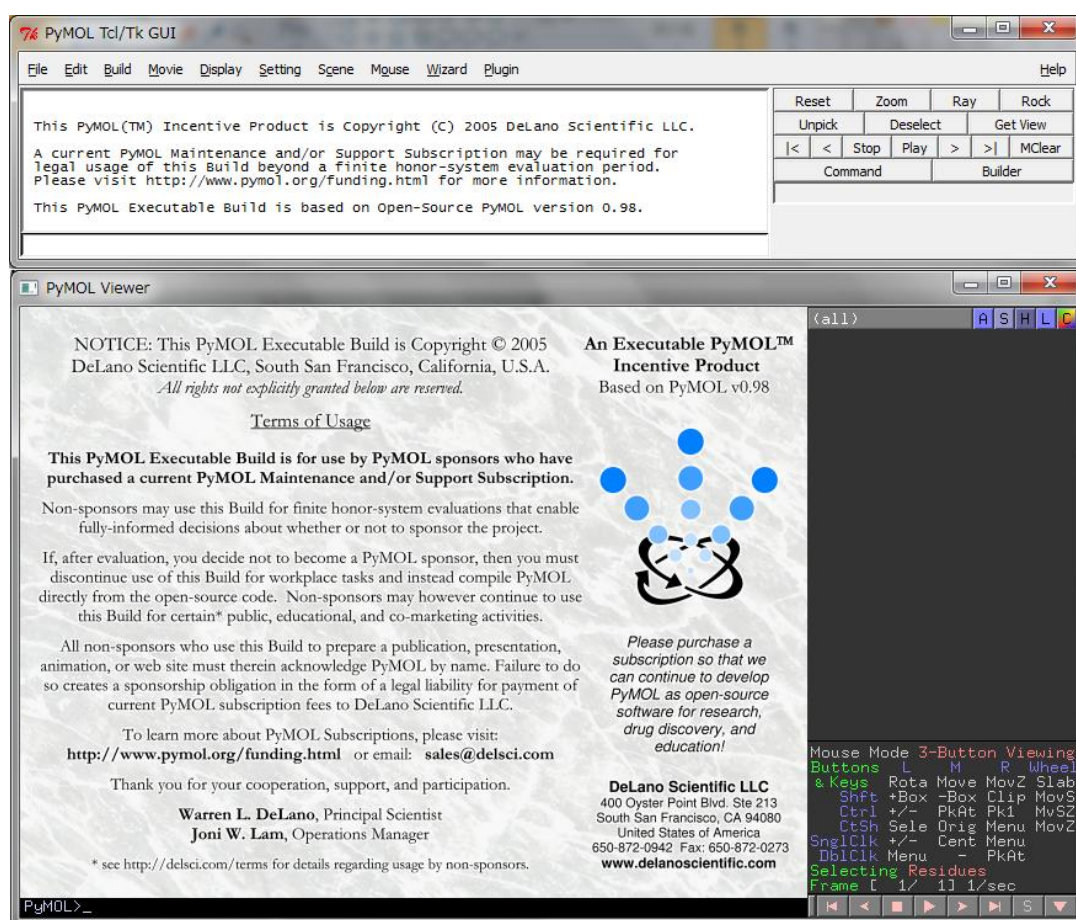
```
~/WinMyDoc/jissyu  
Koro _NISHIKATA@koro_PC ~/WinMyDoc/jissyu  
$ gunzip pdb1guj.ent.gz
```

コマンド(命令)を打ち込んで、
解凍する方法。

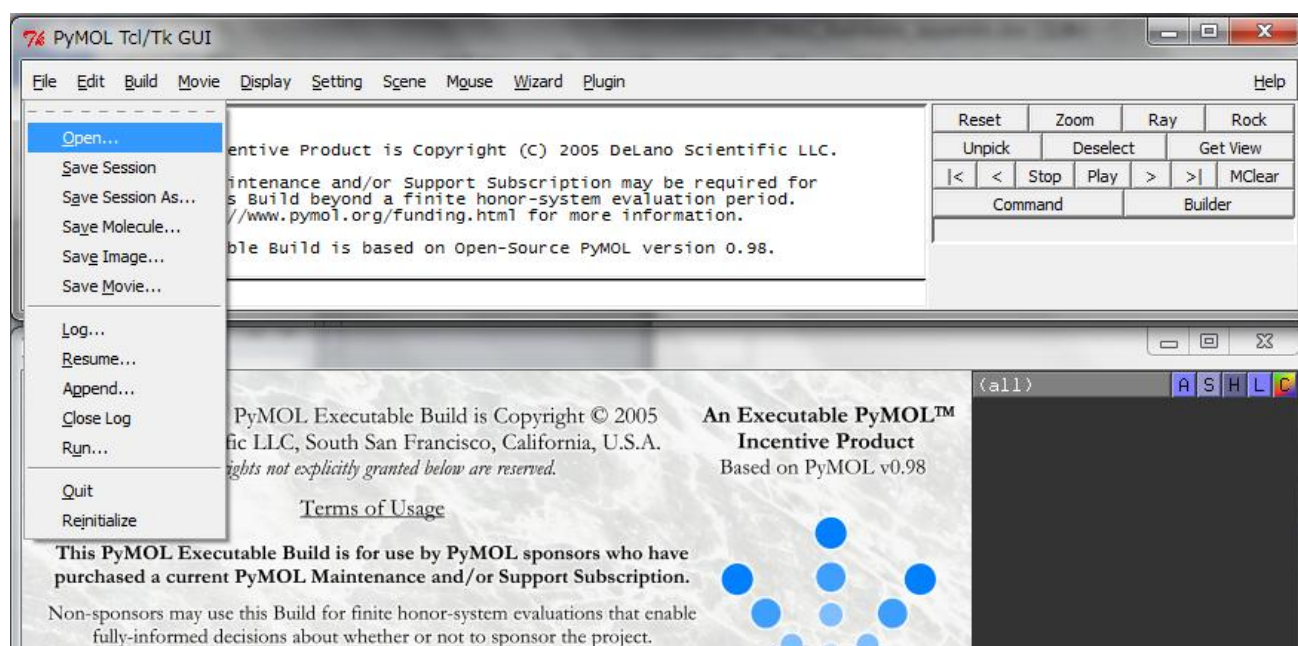


+Lhaca 解凍ソフトを使用して
圧縮ファイルを解凍する方法。

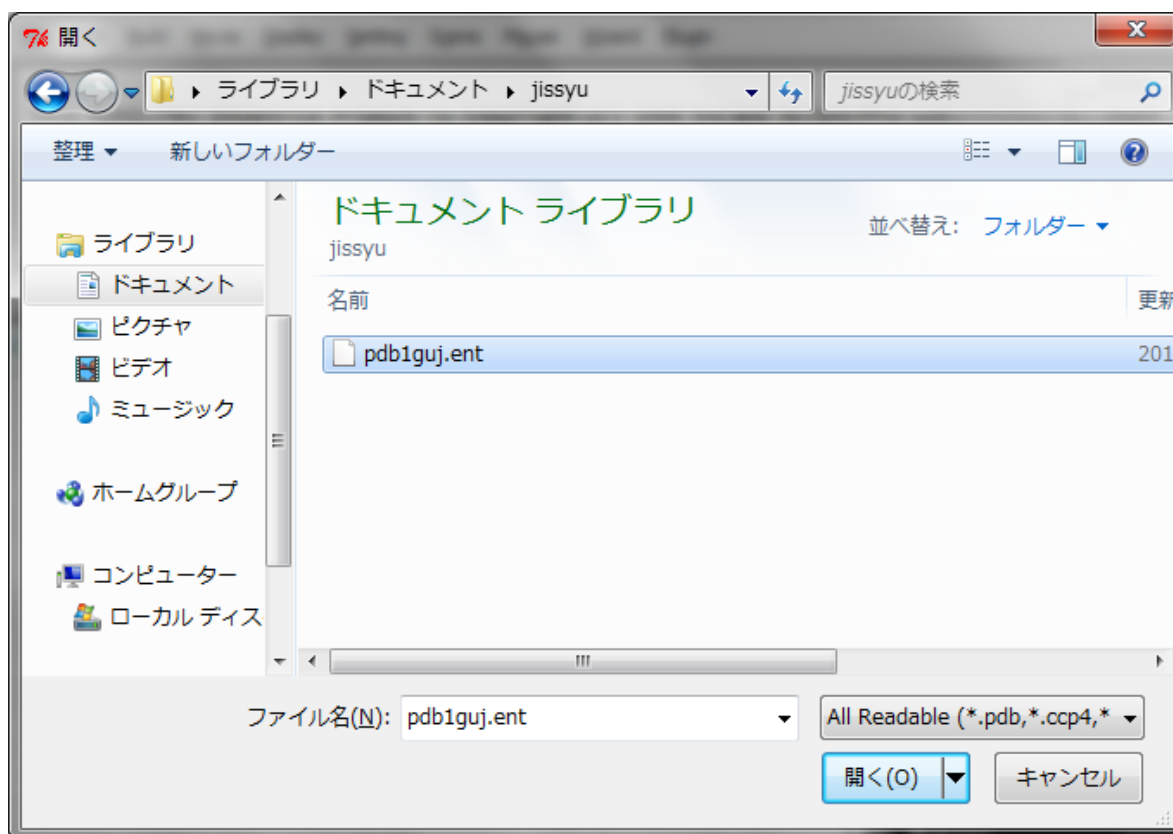
4. ソフトウェアを起動する。(例. PyMol を起動した画面。)



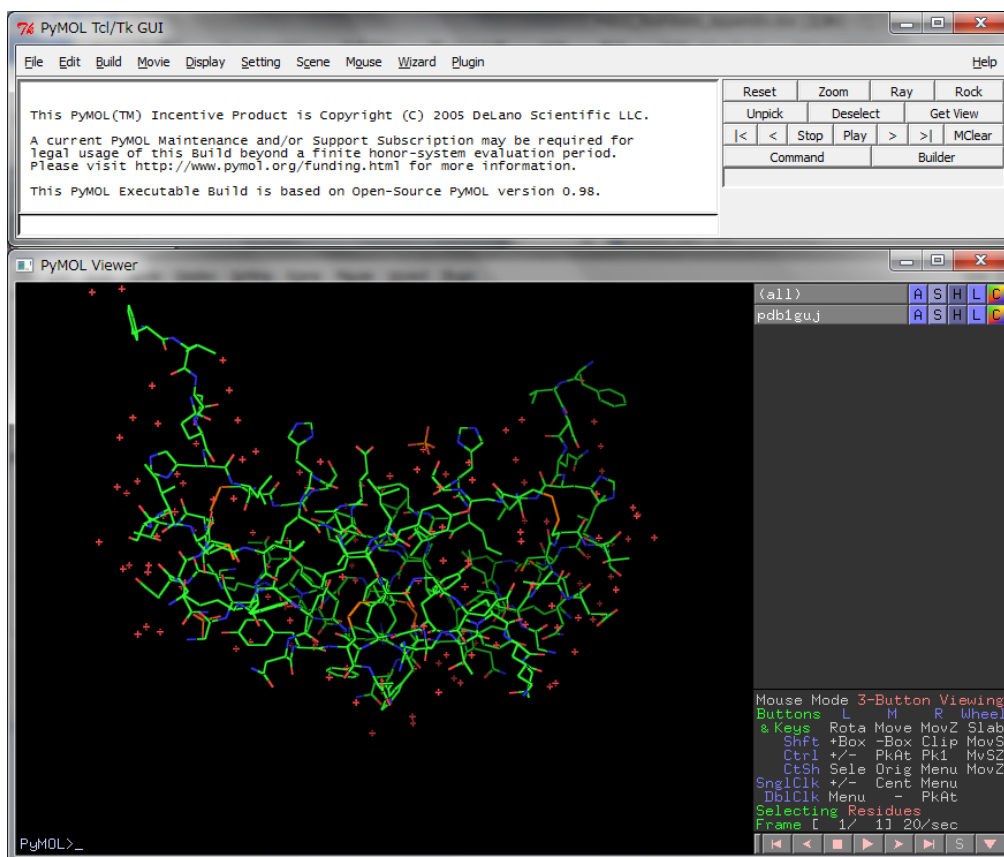
5. 3. でダウンロードした PDB ファイルを読み込む。



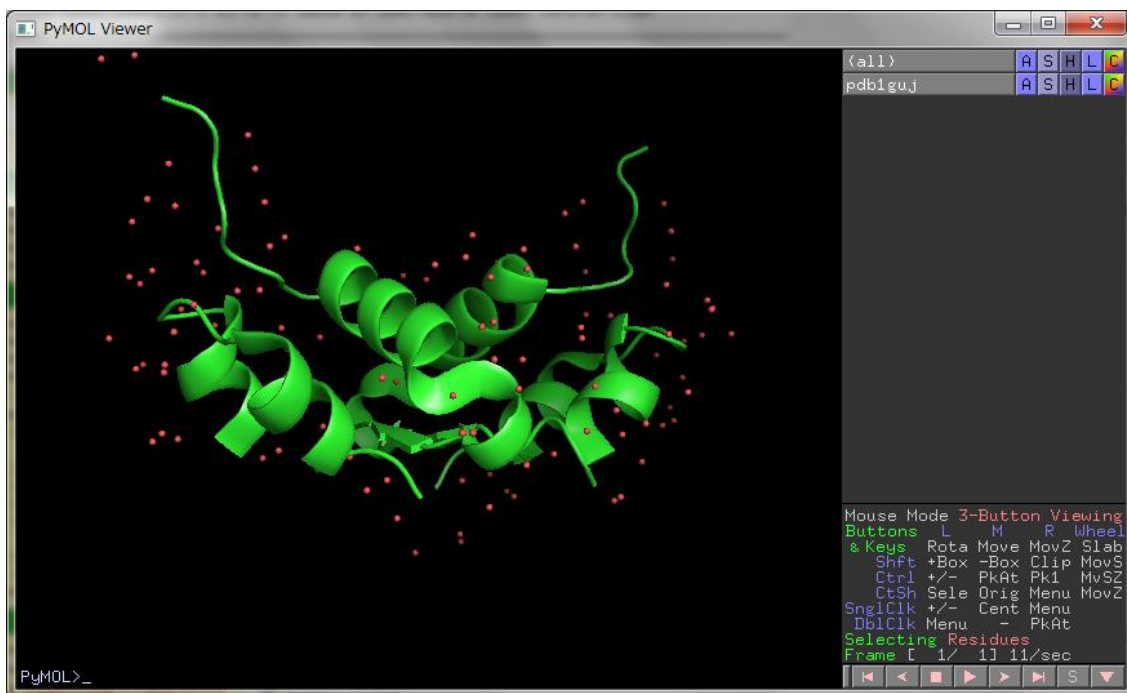
↓



6. タンパク質の形が表示されます！ マウスを使って動かしたり、色々な場所を観察しましょう。

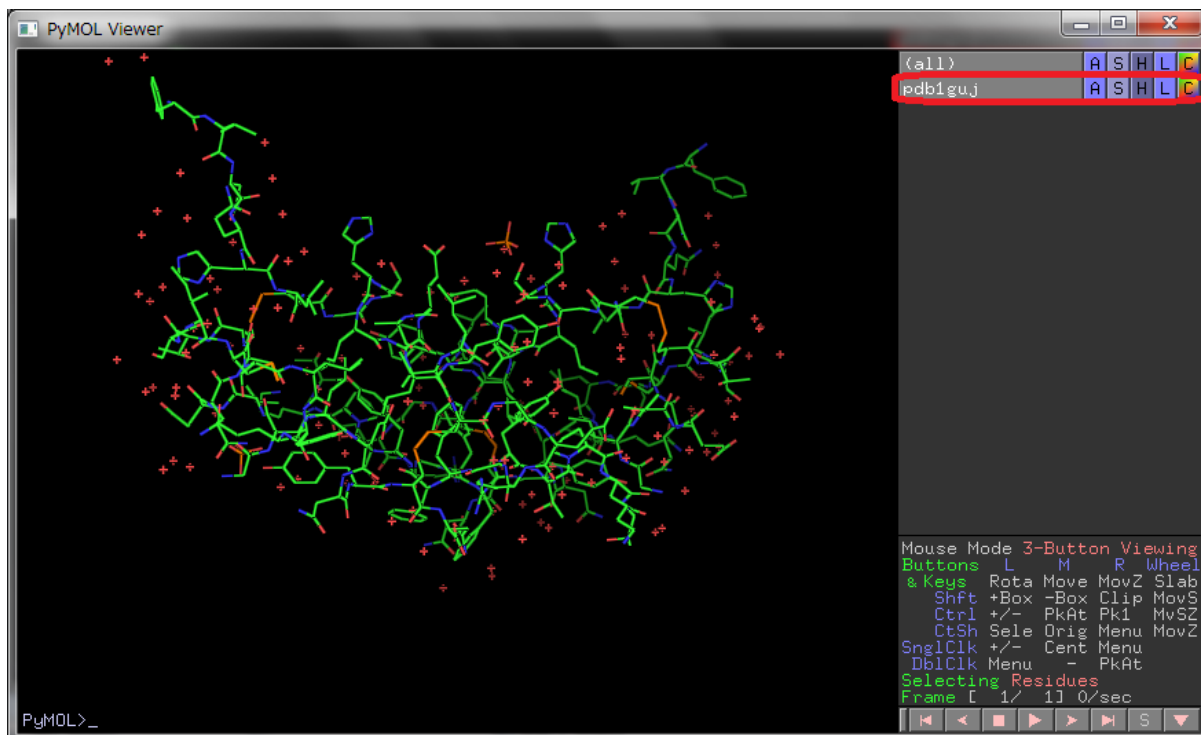


こんな図を作ることができます。



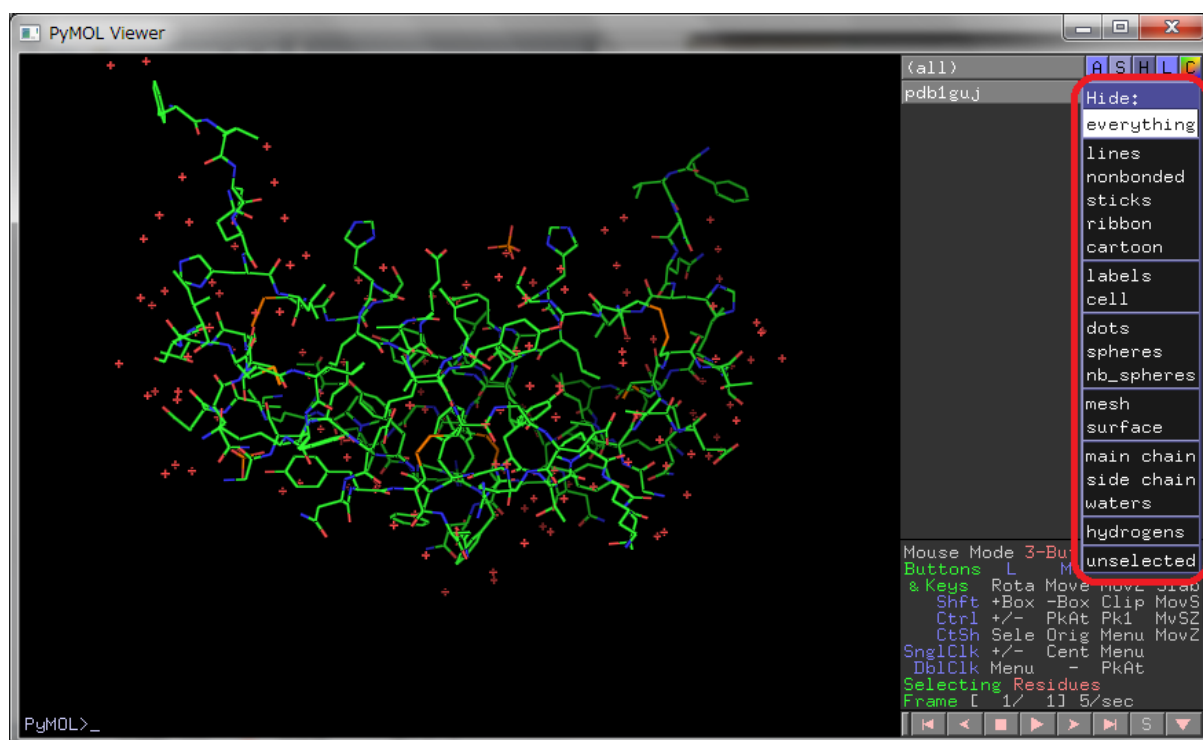
(作り方)

赤枠部分の「H」をクリックする。



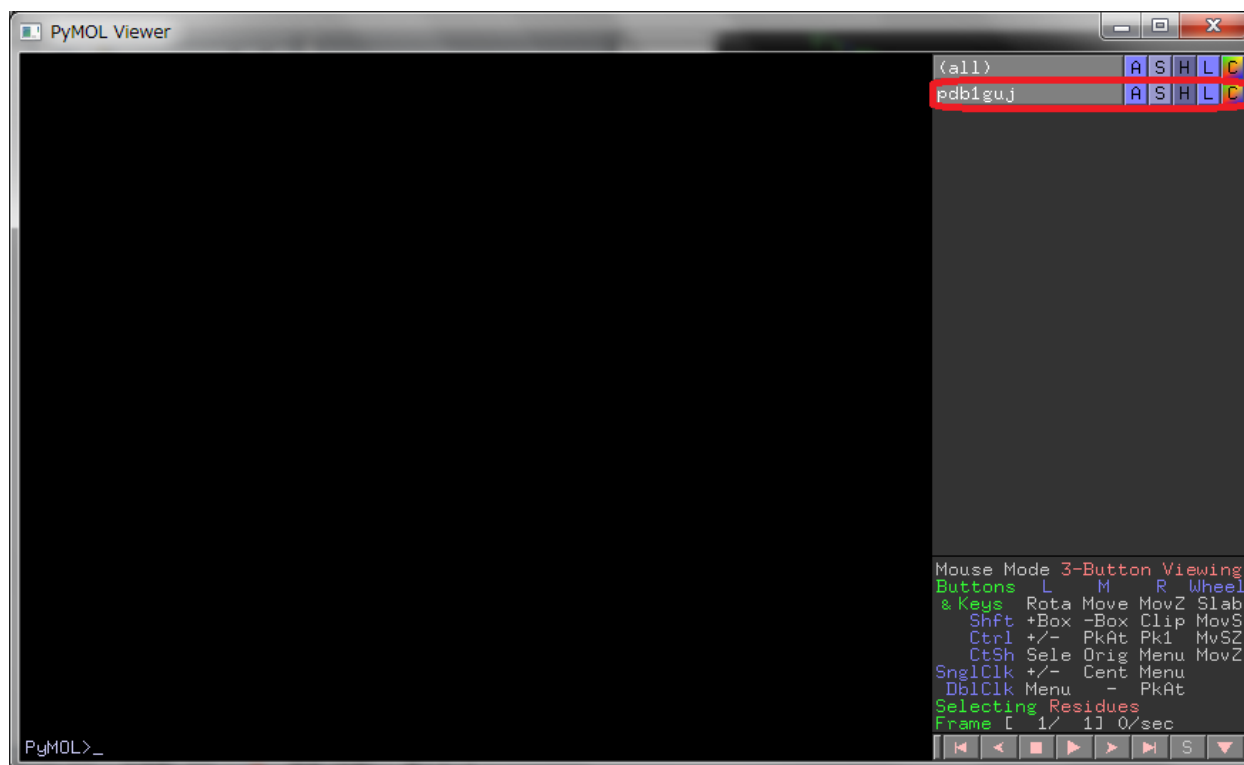
↓

「Hide:」というプルダウンメニューが現れるので、「everything」をクリックする。



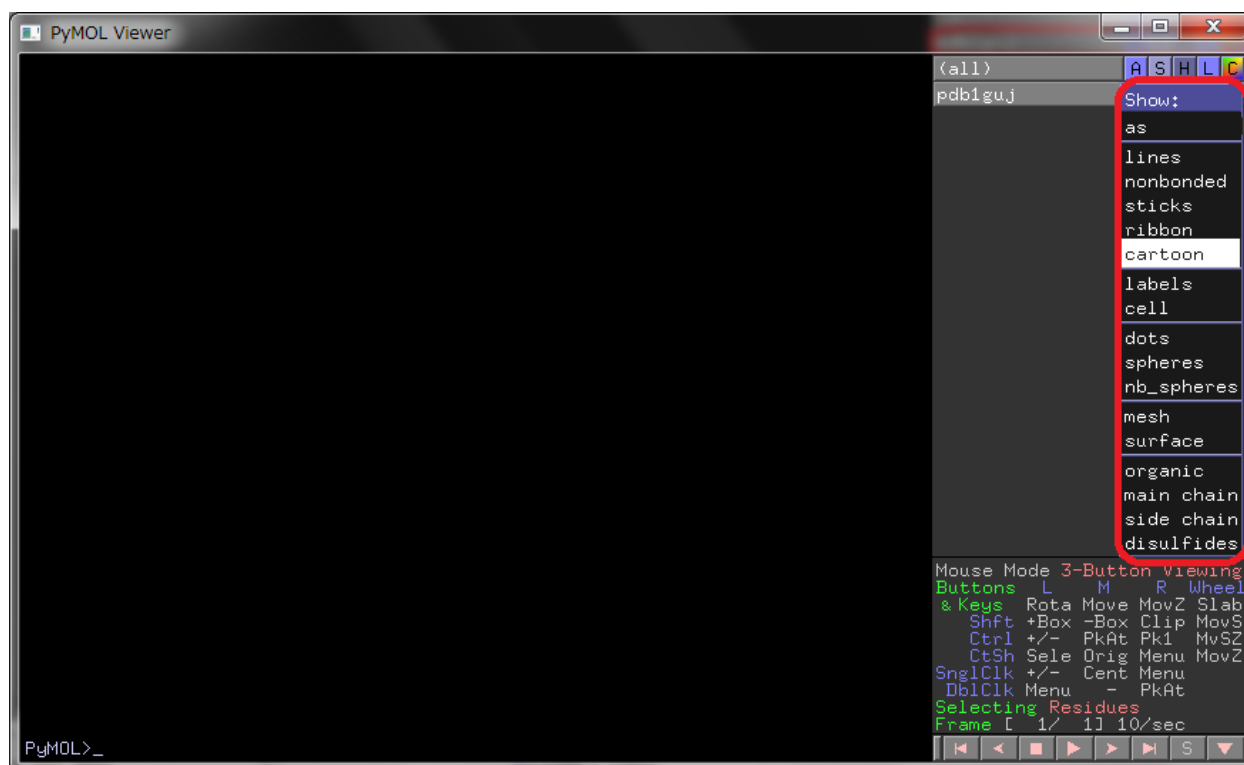
何も見えなくなった。

赤枠部分の「S」をクリックする。



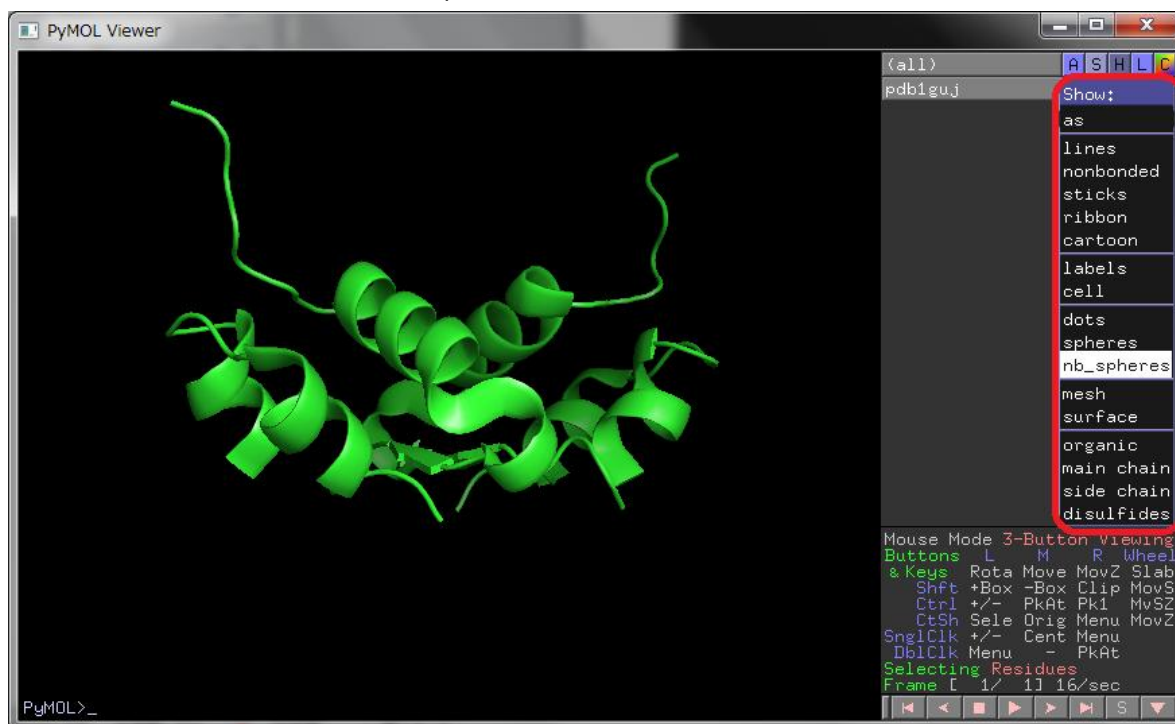
↓

「Show:」というプルダウンメニューで、「cartoon」を選択する。



タンパク質がリボン図で表示された。

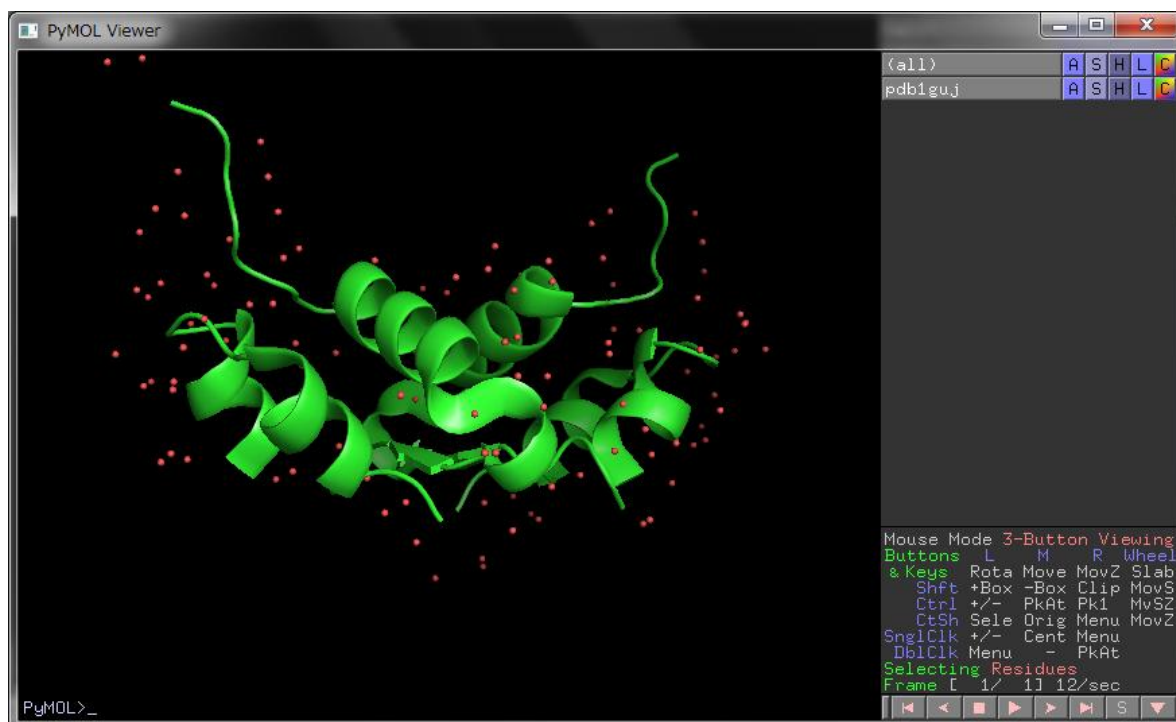
「Show:」というプルダウンメニューで、「nb_spheres」を選択する。



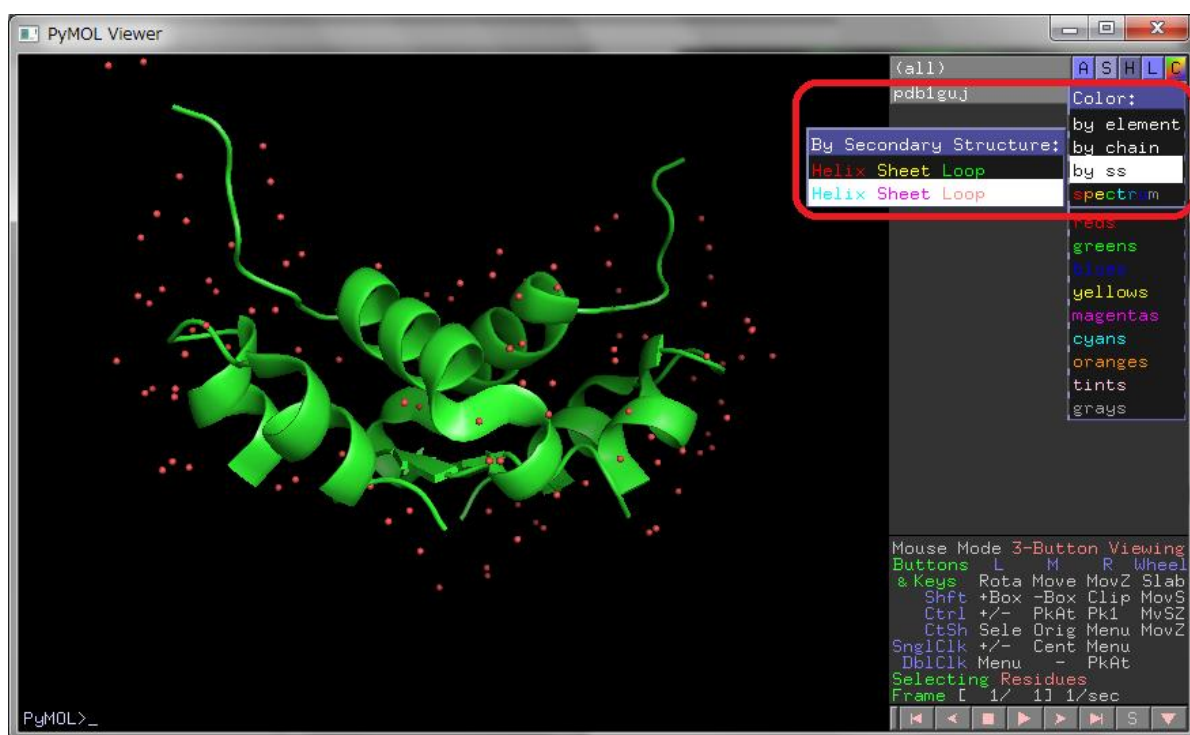
↓

水分子が球で表示された。

完成！



(応用編 1) 色を変えることもできます。

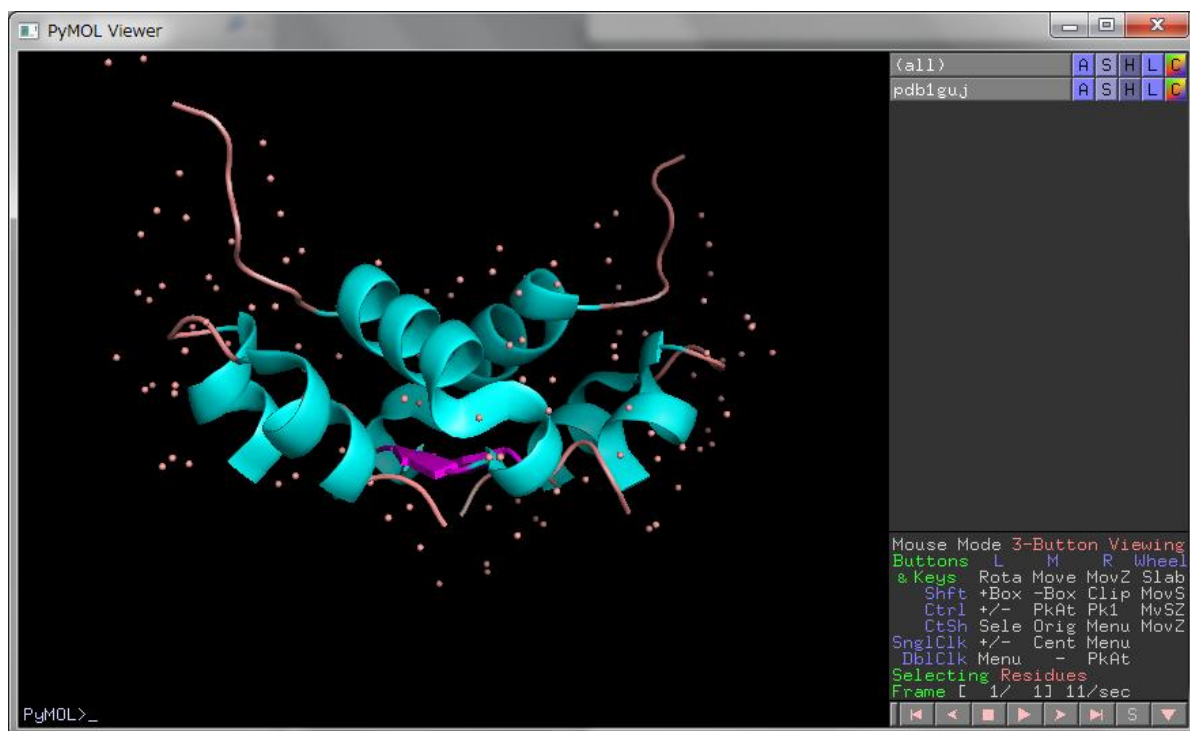


「C」をクリックすると、「Color」というプルダウンメニューが現れます。

「by ss」→「Helix Sheet Loop」という順に選択していきます。

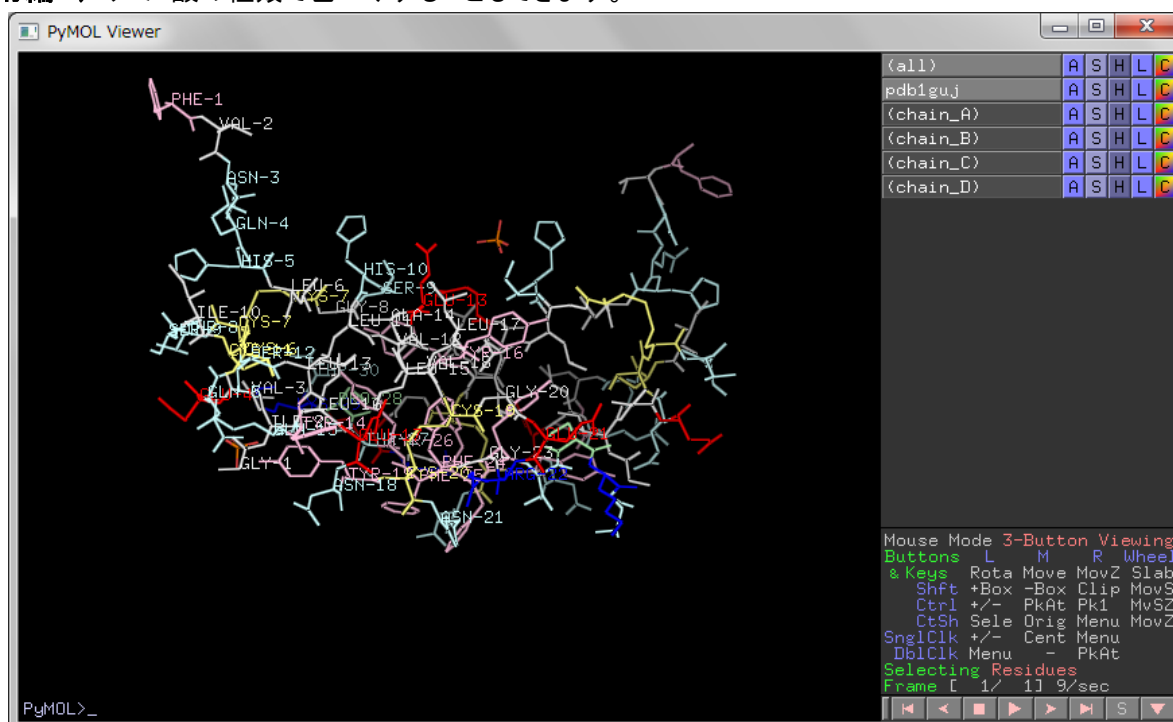


すると、タンパク質の色付けが変わりました。



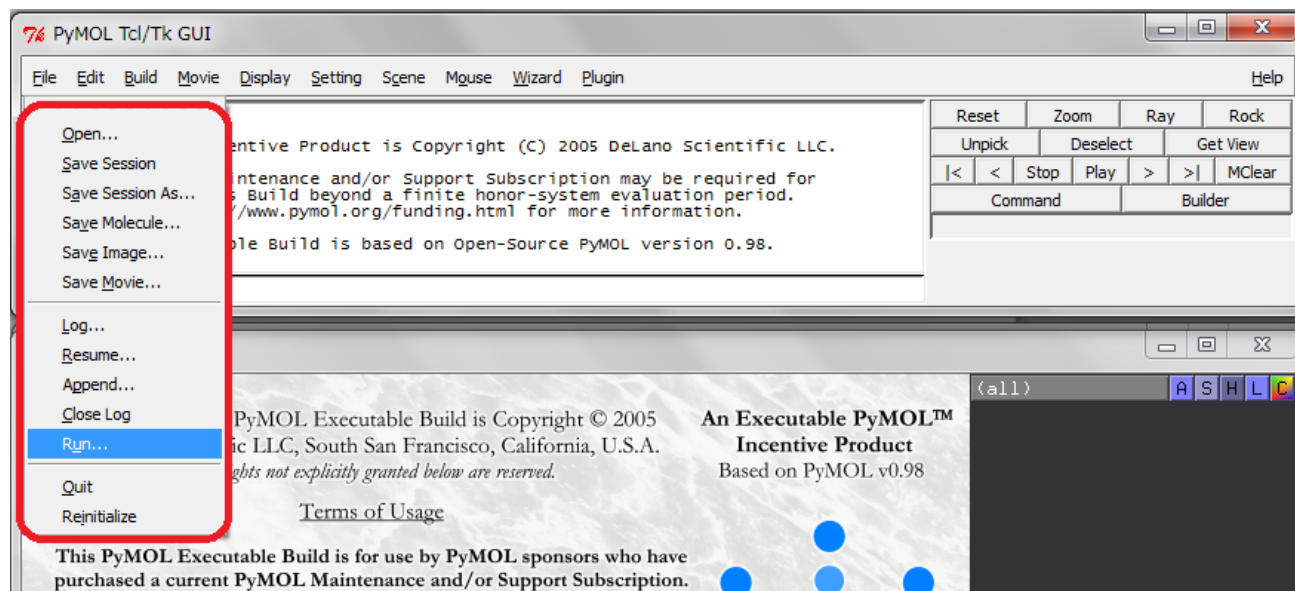
水色部分は「ヘリックス」、紫色部分は「シート」、ピンク色部分は「ループ」と呼びます。

(応用編 2) アミノ酸の種類で色づけすることもできます。

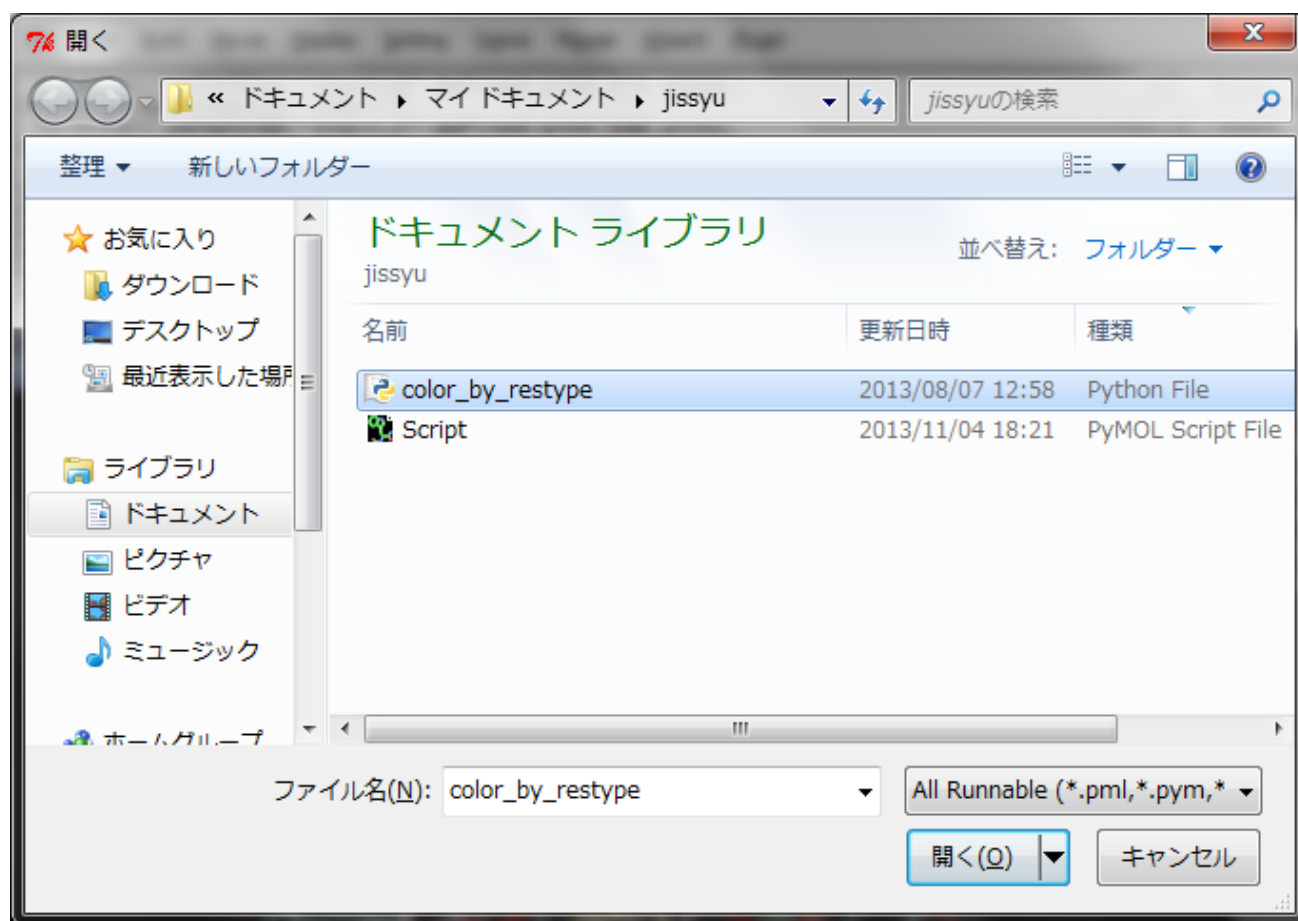


(作り方)

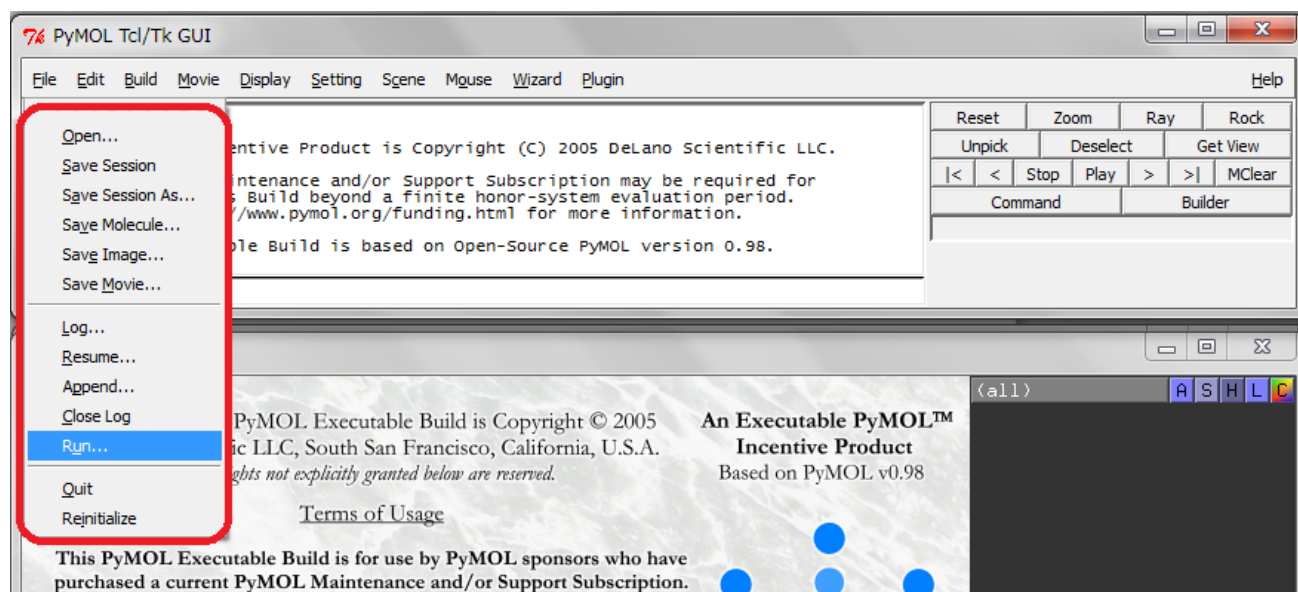
「File」→「Run」を選択する。



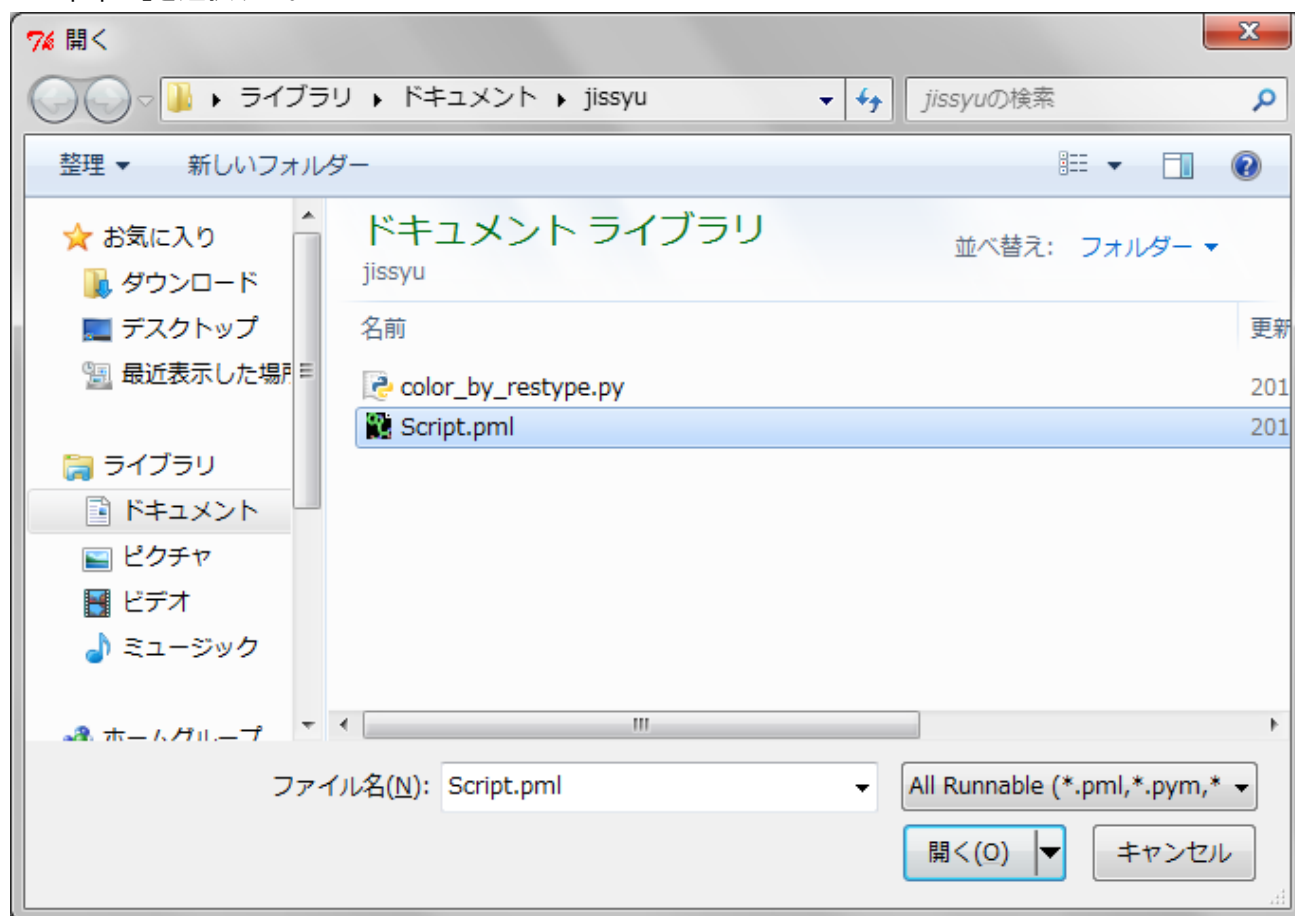
「color_by_restyle.py」を選択する。



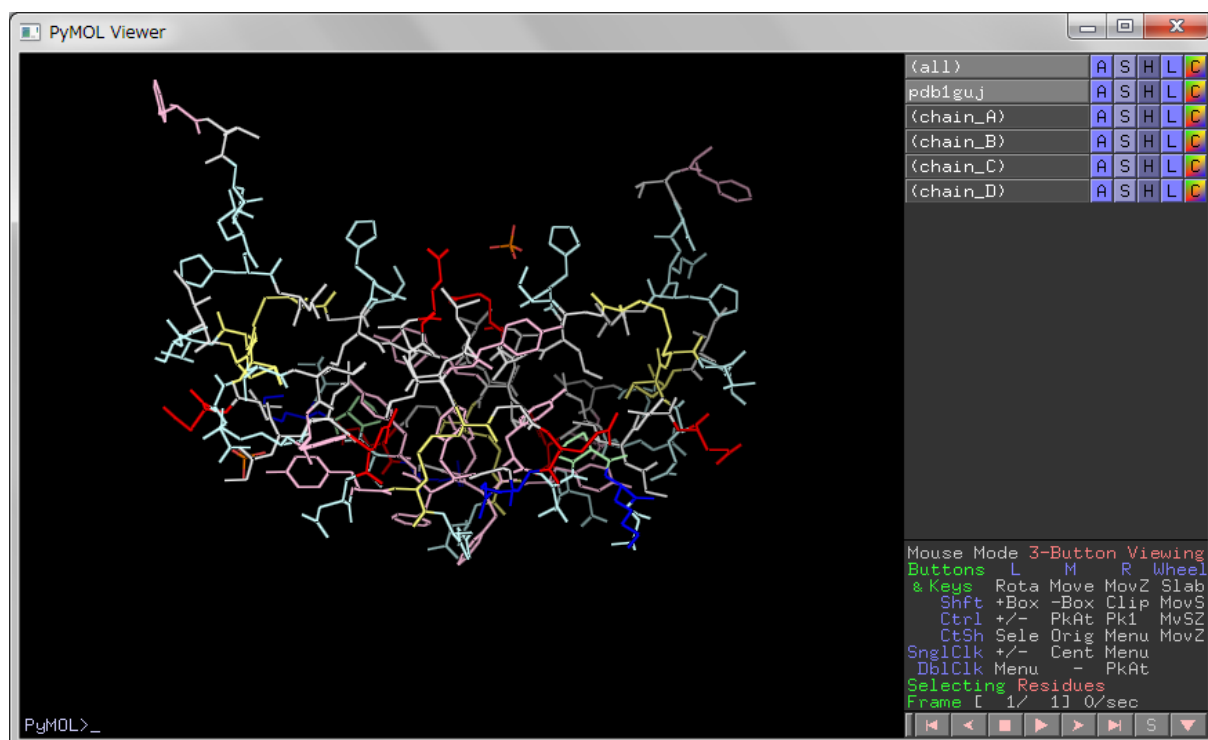
「File」→「Run」を選択する。



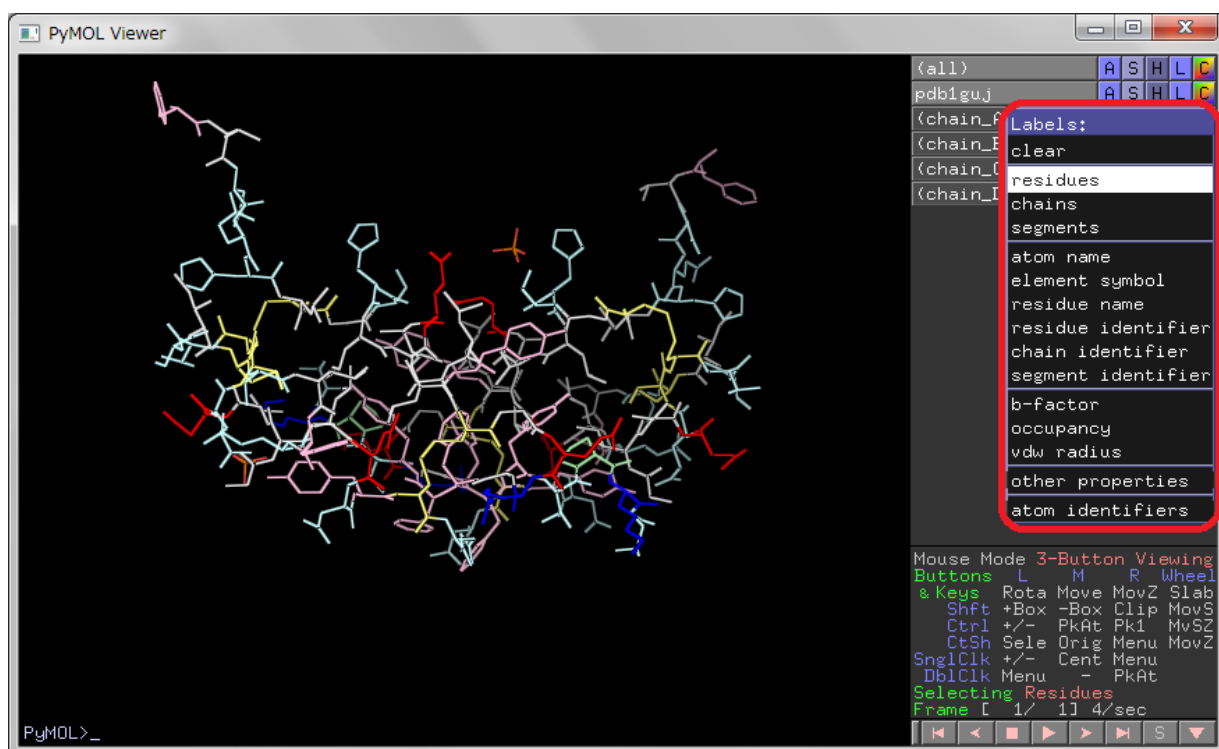
「Script.pml」を選択する。



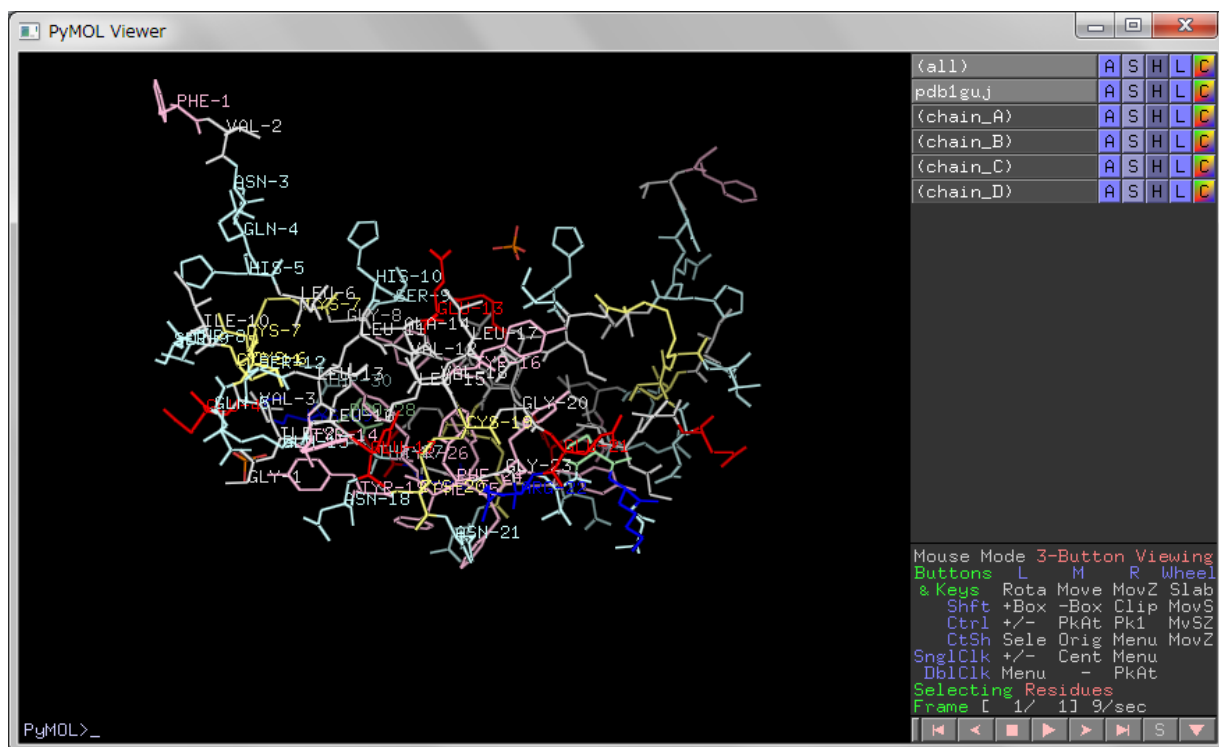
アミノ酸の種類で色づけされた！



「L」をクリックし、「Lables:」というプルダウンメニューで「residues」を選択する。



アミノ酸の名前が表示される。



それぞれのアミノ酸は以下の様に色付けされています、

白いアミノ酸は油に溶けやすい性質(疎水性)、水色のアミノ酸は水に溶けやすい性質(親水性)、青色のアミノ酸はプラスの電荷を持っていて(塩基性)、赤色のアミノ酸はマイナスの電荷(酸性)を持っています。

アミノ酸	色付け
ALA(アラニン), GLY(グリシン), ILE(イソロイシン), LEU(ロイシン), MET(メチオニン), PRO(プロリン), VAL(バリン)	白
CYS(システイン)	黄
HIS(ヒスチジン), ASN(アスパラギン), GLN(グルタミン), SER(セリン), THR(スレオニン)	水色
LYS(リジン), ARG(アルギニン)	青
ASP(アスパラギン酸), GLU(グルタミン酸)	赤
PHE(フェニルアラニン), TRP(トリプトファン), TYR(チロシン)	ピンク