

# 生体分子の立体構造データに 触れてみる

統合データベース講習会・AJACS津軽  
2015-09-03弘前大学 総合情報処理センター

鈴木博文  
PDBj / 大阪大学蛋白質研究所

- ウェブブラウザの確認  
Firefoxが望ましい  
最新版であれば、IEでもOK
- Java実行環境のインストール（可能であれば）  
「万覧」で利用  
(Javaがないと、動作が遅い)

- PDBとPDB"j"の紹介
- PDBjのウェブサイトを実際に使ってみる  
「万見（Yorodumi）」で基本的な構造観察
- 知識取得・情報収集ではなく、ブラウザを操作して調べたり、構造を見たりする体験
- 想定する聴衆：生体分子構造研究の経験がない、少ないかた

※ 講習会では時間の都合で、この資料のすべてを実施できない可能性があります。ご了承ください。

## 鈴木博文

- 蛋白質研究所 PDBj のスタッフ
- 以前は、電子顕微鏡による構造解析をやっていた
- 現在は電子顕微鏡構造のデータベースに関する仕事
- X線結晶学、ウイルス学、薬学は専門ではない
- 「先生」ではない
- 万見の開発・管理者

# **PDBとPDBjについて**

PDBは、

- 世界で**たったひとつ**のデータベース

厳重に秘匿

厳密に管理

- 世界中に**たくさんある**データベース

容易に入手・自由に利用

勝手に公開

Google 検索結果  
検索語: pdb

ウェブ 画像 ショッピング ニュース 動画 もっと見る▼ 検索ツール

約 18,400,000 件 (0.48 秒)

**アメリカのPDB**

RCSB Protein Data Bank - RCSB PDB  
[www.rcsb.org/](http://www.rcsb.org/) このページを訳す  
Archive of experimentally-determined, biological macromolecule 3-D structures from the Brookhaven National Laboratory. Also includes newsletters and a description of the PDB file format.  
Search PDB Statistics - About RCSB PDB - Carbonic Anhydrase - Hemoglobin  
このページに複数回アクセスしています。前回のアクセス: 15/07/28

**日本のPDB**

日本蛋白質構造データバンク - PDB Japan - PDBj  
[pdbj.org/?lang=ja](http://pdbj.org/?lang=ja)  
Protein Data Bank Japan maintains the database for experimentally determined protein structures: the PDB. PDBj annotates deposited structures, provides additional annotations and offers various services to search for and analyze deposited ...  
今月の分子 - PDBj Mine - jV - サービス&ソフトウェア

# Wikipediaの“PDB”のページ



アカウント作成 ログイン

ページ ノート 閲覧 編集 履歴表示 検索

## 蛋白質構造データバンク

**蛋白質構造データバンク**（たんぱくしつこうぞうデータバンク、PDB; Protein Data Bank）は、蛋白質（タンパク質）と核酸の3次元構造の構造座標（立体配座）を蓄積している国際的な公共のデータベースである。PDBに蓄積されている構造データは、X線結晶解析法、NMR法（核磁気共鳴法）などによって実験的に決定されたデータである。なお、理論的な予測（蛋白質構造予測）で推定されたデータは蓄積していない。

世界中の生物学者や生化学者たちが、PDBに構造データを登録する。PDBに登録されたデータはパブリックドメインのもとで公開され、誰もが無償でアクセスすることができる。日本では大阪大学蛋白質研究所にその支所がある。

PDBは、生物学的構造データの中心的なデータベースである。構造生物学の研究で欠かせない情報源であり、また近年では構造ゲノミクスの研究でも重要なデータベースである。バイオインフォマティクスの研究でも、PDBに代表される3次元分子構造データベースは重要な研究対象である。PDBから派生したデータベースとプロジェクトは非常に多く、蛋白質の構造、機能、進化のそれぞれの側面から、PDBの構造データの統合や分類を行っている。

目次 [非表示]
1 歴史
1.1 構造データの増加
2 構造データの内容

ウィキペディア  
フリー百科事典

メインページ  
コミュニティ・ポータル  
最近の出来事  
新しいページ  
最近の更新  
おまかせ表示  
練習用ページ  
アップロード (ウィキメディア・コモンズ)

ヘルプ  
ヘルプ  
井戸端  
お知らせ  
バグの報告  
寄付  
ウィキペディアに関するお問い合わせ

## 歴史 [編集]

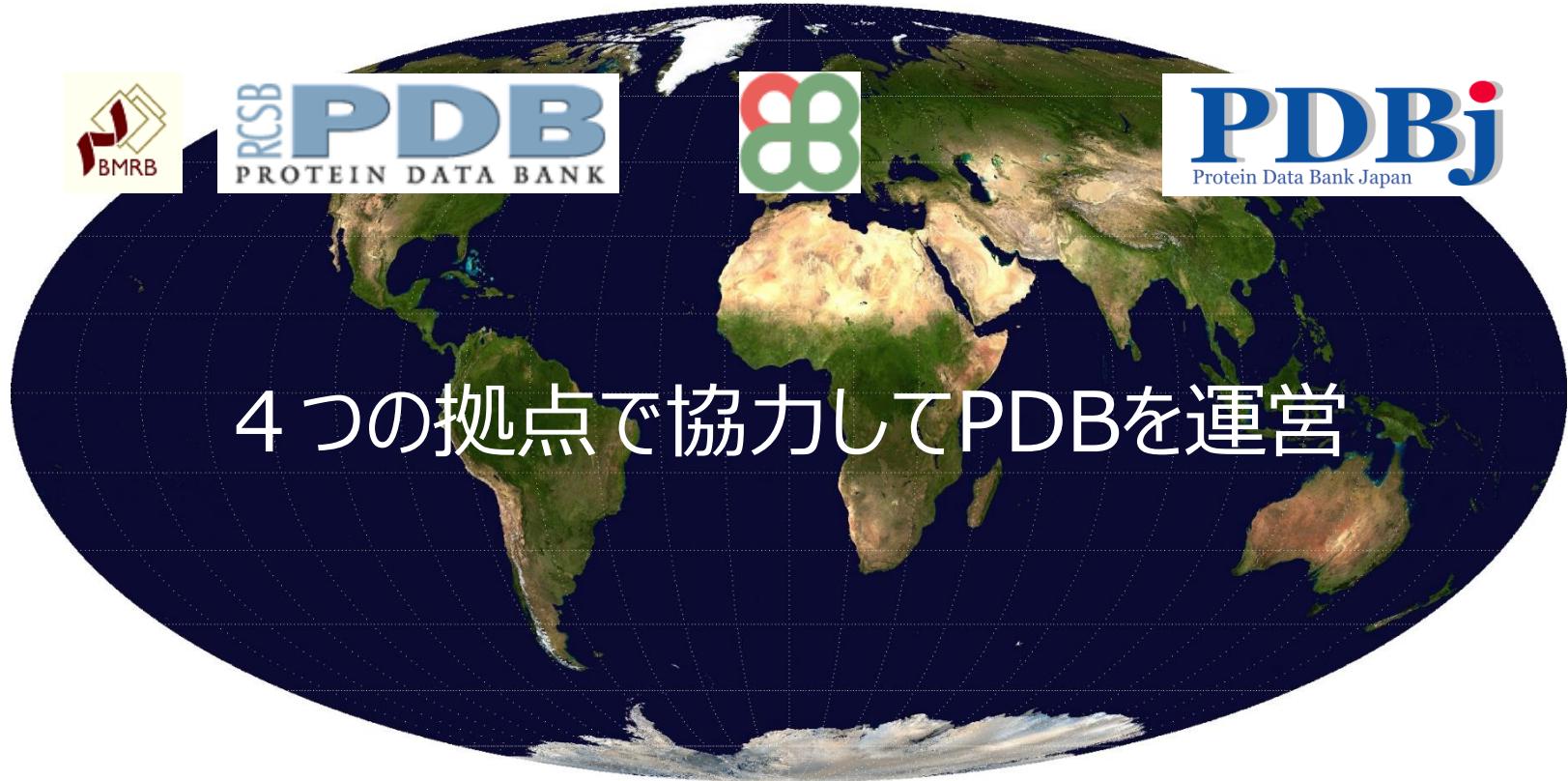
1971年に、アメリカ合衆国のブルックヘブン国立研究所がPDBを設立した。1998年に、PDBの管理は同研究所から構造バイオインフォマティクス研究共同体（RCSB; Research Collaboratory for Structural Bioinformatics）に移管され、同研究共同体（RCSB）のプロジェクトの一つとなった。

2003年、RCSBを含む次の3つの研究組織により、Worldwide Protein Data Bank（wwPDB）が結成され、PDBのデータの登録、データの処理、配布を行っている。

- 日本：日本蛋白質構造データバンク（PDBj）
- 米国：構造バイオインフォマティクス研究共同体（RCSB PDB）
- 英国：欧州蛋白質構造データバンク（PDBe）

wwPDBの役割は、PDBの生体高分子の3次元構造を蓄積した単一のデータベースの保守と、PDBデータベースを世界中の研究者コミュニティに無償で公開し利用できるようにすることである。

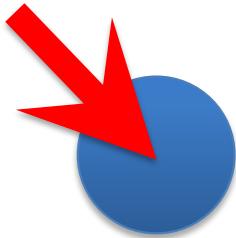
# Worldwide PDB (wwPDB)



4つの拠点で協力してPDBを運営

～ wwPDBの役割は、PDBの生体高分子の3次元構造を蓄積した単一のデータベースの保守と、PDBデータベースを世界中の研究者コミュニティに無償で公開し利用できるようにすることである。 Wikipediaより～

## データ受け入れ（登録・検証・品質管理）



- 世界中の研究者から集める  
(研究資金、ジャーナルなどによっては義務)
- 登録・検証・品質管理は各拠点で**分担**
- **共通**のデータベースを作成
- 新規データは**非公開**、公開日まで厳重に管理  
(特別の部屋、専門のスタッフのみ)

## データ公開



- **世界同時公開**  
毎週水曜0:00 (日本時間9:00)
- **パブリックドメイン**  
使途を問わない、人類の財産
- 各拠点**独自**のツールやユーザーインターフェース
- PDBデータに付随する、各拠点**独自の注釈**

[wwPDB](#)  [RCSB PDB](#)  [PDBe](#)  [BMRB](#)  [Legacy](#)   
[Adv. Search](#) [Search help](#)

## ダウンロード

このページの他言語版もあります: [English](#)

### [PDBアーカイブ]

PDBアーカイブは [wwPDB FTPサイト](#) の完全なミラーである [ftp.pdbj.org](#) からrsyncまたはFTPプロトコルを使用して入手できます。

以下にダウンロード方法の概要を示します。ディレクトリ構成の詳細については[アーカイブの詳細をご覧下さい。](#)

#### FTPプロトコルを使用する場合

お好みのFTPクライアントソフトウェアを使って、<ftp://ftp.pdbj.org/> にアクセスしてください。

#### rsyncプロトコルを使用する場合

rsyncプロトコルは、PDBアーカイブの全体/一部のミラーリングを行う際に便利です。以下のコマンドを実行することで、エンタリー・ポイントを確認することができます。

```
$ rsync ftp.pdbj.org:::  
Welcome to PDBj FTP site.  
  
ftp          Top level of pdb data ftp tree approximately 145 GB ( /pub  
ftp_data    Data directory within ftp archive approximately 144 GB ( /  
ftp_derived Derived data directory within ftp archive approximately 13  
[...]
```

まとめてダウンロードする方法 <http://pdbj.org/info/archive>

～ PDBから派生したデータベースとプロジェクトは非常に多く、蛋白質の構造、機能、進化のそれぞれの側面から、PDBの構造データの統合や分類を行っている。Wikipediaより～



wwPDB Advisory Committee Meetings 2014  
メンバーは世界中の構造解析・バイオインフォマティクスの専門家  
<http://www.wwpdb.org/about/advisory>

# **PDB “j” のウェブサイトを使ってみる 基本操作と検索**

# PDBj のトップページ

**110471**  
件公開中 (2015-07-15  
00:00 UTC / 09:00 JST)

**PDBj**  
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

www.pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)

wwPDB RCSB-PDB PDBe BMRB Legacy Adv. Search Search help

4RR7   
最新  
公開  
エントリー

**ホーム**

- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- リンク集

**データ登録**

- ヘルプ
- PDBへの登録
- ADIT-NMR
- データ登録について

**ダウンロード**

- PDBアーカイブからのデータダウンロード

**新フォーマット**

- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

**検索**

**初めての利用者のためのガイド**

日本蛋白質構造データバンク (PDBj; Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDC と大阪大学蛋白質研究所 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。

**必要なサービスを探す**

探しているサービスに関するキーワードを以下の語句一覧から選択するか、または検索ボックスに入力して下さい。該当するサービスの一覧が表示されます。

- [全サービスを表示] ボタンを押すと、全サービスの概要が表示されます。
- [キーワードボックス] にキーワードを入力して、語句一覧で絞り込んだ結果を更に絞り込むこともできます。

<input type="radio"/> PDB	<input type="radio"/> BMRB	<input type="radio"/> EMDB	<b>全サービスを表示</b>
<input type="radio"/> 検索	<input type="radio"/> 登録	<input type="radio"/> ビューア	例) モチーフ、分子!
<input type="radio"/> 教育/辞典			<b>リセット</b>
<input type="radio"/> NMR	<input type="radio"/> 電子顕微鏡	<input type="radio"/> 二次構造	
<input type="radio"/> 配列	<input type="radio"/> 類似性	<input type="radio"/> 機能予測	

**今月の分子**

187: ニューデリー・メタロβラクタマーゼ (New Delhi Metallo-β-Lactamase, NDM-1)

今月の分子のリスト

**WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK**

**BMRB検索**

PDBj-BMRB   
 Accession number  
 Deposition code  
 Try the omni-search

<http://pdbj.org/>

# 幅が狭い→メニューが隠れる

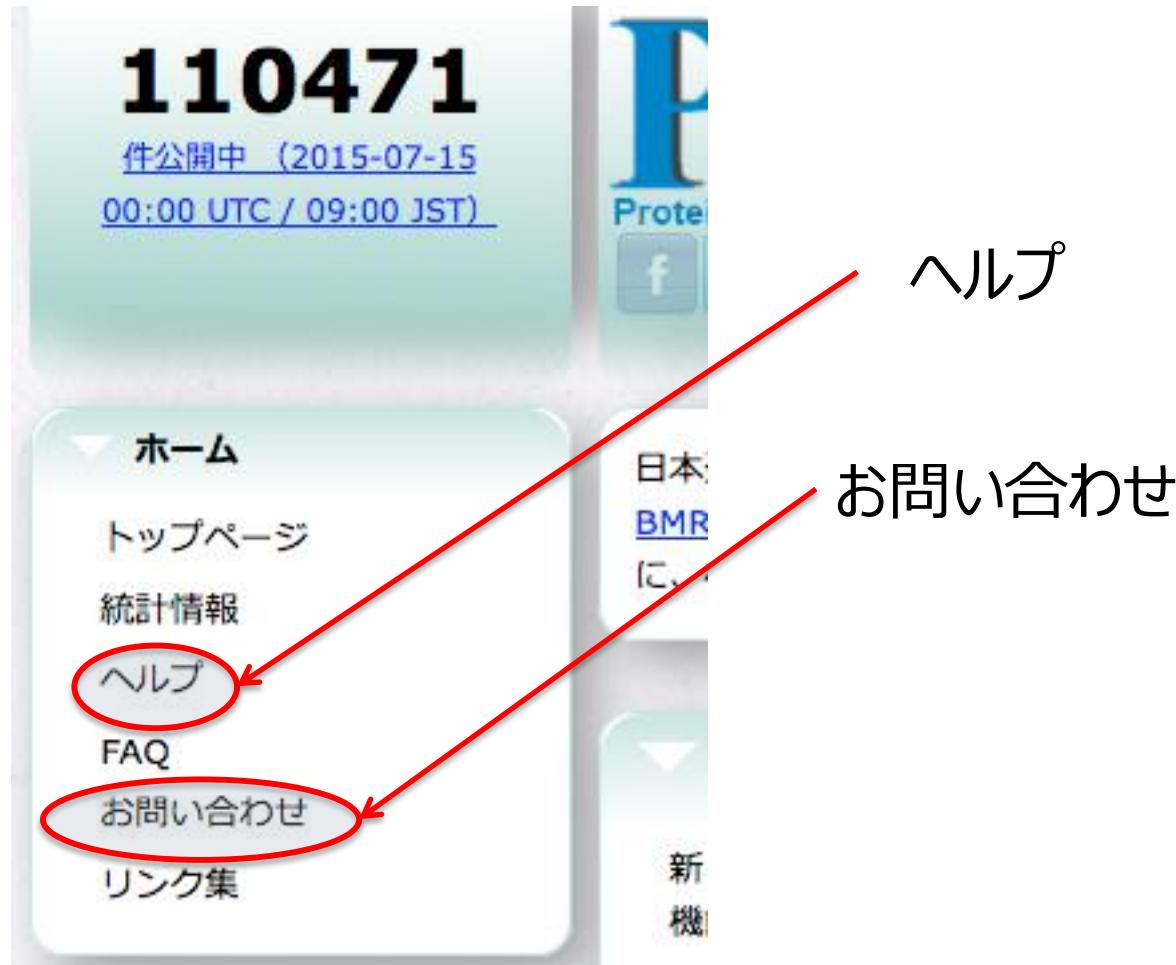
The image shows two side-by-side screenshots of the PDBj (Protein Data Bank Japan) website. Both screenshots have a red circle highlighting the top navigation bar.

**Left Screenshot (Narrow Layout):**

- The top navigation bar is partially cut off at the right edge.
- The main content area includes a search bar, a protein structure visualization, and a sidebar for '月初の分子' (Molecule of the Month).
- A large red arrow points from the top of the left screenshot towards the right screenshot.

**Right Screenshot (Wide Layout):**

- The top navigation bar is fully visible without being cut off.
- The sidebar for '月初の分子' is also fully visible.
- The overall layout is wider than the left screenshot.



ヘルプ

お問い合わせ

The image shows two versions of the Protein Data Bank (PDB) homepage side-by-side, illustrating a design change. The left version, labeled 'パネル' (Panel), has several sidebar sections (Home, Data Submission, New Format, Download, Search) that are separate from the main content area. A large red arrow points upwards from the bottom of the search section towards the top of the page, indicating the movement of these panels. The right version, labeled '→配置変更可能' (Configuration Changeable), shows that these sidebar sections have been moved directly onto the main content area, becoming part of the header and main body.

**左側 (パネル):**

- ホーム
- データ登録
- 新フォーマット
- ダウンロード
- 検索

**右側 (→配置変更可能):**

- ホーム
- 検索

Both sides include the following content:

- Protein Data logo and social media links (Facebook, Twitter)
- 日本蛋白質構造国 RCSB 運営
- 初めて (Newbie)
- サービス (Services)
- 検索 (Search)

PDBjでは

- 日本語検索可能
- 横断検索可能

PDB、化合物、サイト内



# キーワード検索 – 検索結果

**110471**  
件公開中 (2015-07-15  
00:00 UTC / 09:00 JST)

**PDBj**  
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)

wwwPDB RCSB PDB PDBe BMRB Legacy Adv. Search Search help

ホーム データ登録 ダウンロード 新フォーマット 検索

PDB: 1569 件 ウェブページ: 8 件 ステータス検索: 68 件 化合物検索: 0 件

レンサ球菌

変換クエリ: (streptococcal | streptococcus)

**1BXT**

**STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES**

分子名称: PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)  
著者 Sundberg, E., Jardetzky, T.  
登録日 1998-10-08  
公開日 1998-10-14  
最終更新日 2009-02-24  
実験手法 X-RAY DIFFRACTION (1.85 Å)  
引用文献 **Structural basis for HLA-DQ binding by the streptococcal superantigen SSA.**  
Nat.Struct.Biol., 6, 1999

**2ICI**

**CRYSTAL STRUCTURE OF STREPTOCOCCAL PYROGENIC EXOTOXIN I**

分子名称: Streptococcal Pyrogenic Exotoxin I  
著者 Gunther, S., Varma, A.K., Sundberg, E.J.  
登録日 2006-09-12  
公開日 2007-03-27

最終更新日 2009-02-24

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 >

検索結果 ?

全ヒット件数: 1569  
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

関連性が高い順  
PDBID昇順 (0→9,a→z)  
PDBID降順 (z→a,9→0)  
登録日の古い順  
登録日の新しい順  
公開日の古い順  
公開日の新しい順  
分解能の高い順

1文字目

「1-9」の数字

2~4文字目

「0-9」の数字か「a-z」の英字  
(大文字小文字の区別なし)

取り得るPDBIDの最大数は

$$9 \times 36^3 = 419,904$$

自動で英語変換！



PDBエントリー（2015年7月15日現在1569件）

PDB: 1569 件

ウェブページ: 8 件

ステータス検索: 68 件

化合物検索: 0 件

レンサ球菌

変換クエリ: (streptococcal | streptococcus)



結果ダウンロードも可  
(csv、tsv、json)

The screenshot shows a user interface for keyword search results. At the top right is a button labeled "結果をダウンロード". Below it is a section titled "表示順" (Display Order) which is expanded. This section contains several sorting options, each preceded by a small downward arrow icon:

- 関連性が高い順 (High relevance)
- PDBID昇順 (0→9, a→z) (PDBID ascending order)
- PDBID降順 (z→a, 9→0) (PDBID descending order)
- 登録日の古い順 (Old registration date)
- 登録日の新しい順 (New registration date)
- 公開日の古い順 (Old publication date)
- 公開日の新しい順 (New publication date)
- 分解能の高い順 (High resolution)

A red box highlights the "表示順" section. A red arrow points from the text "表示順を変更可能" (Display order can be changed) to the red box.

SSA.  
IN

表示順を変更可能

# キーワード検索 – 検索結果

PDB: 1569 件 ウェブページ: 8 件 ステータス検索: 68 件 化合物検索: 0 件

レンサ球菌 

変換クエリ: (streptococcal | streptococcus)

**1BXT**  

**STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES**

分子名称: PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)  
 著者: Sundberg, E., Jardetzky, T.  
 登録日: 1998-10-08  
 公開日: 1998-10-14  
 最終更新日: 2009-02-24  
 実験手法: X-RAY DIFFRACTION (1.85 Å)  
 引用文献: Structural basis for HLA-DQ binding by the streptococcal superantigen SSA. *Nat. Struct. Biol.* 5, 911-916 (1998).

**2ICI**  

**CRYSTAL STRUCTURE OF STREPTOCOCCAL PYROGENIC EXOTOXIN I**

分子名称: Streptococcal Pyrogenic Exotoxin I  
 著者: Gunther, S., Varma, A.K., Sundberg, E.J.  
 登録日: 2006-09-12  
 公開日: 2007-03-27  
 最終更新日: 2009-02-24

クリック → 個別エントリーのページへ

検索結果

- 全ヒット件数: 1569
- 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

- 関連性が高い順
  - PDBID昇順 (0→9,a→z)
  - PDBID降順 (z→a,9→0)
  - 登録日の古い順
  - 登録日の新しい順
  - 公開日の古い順
  - 公開日の新しい順
  - 分解能の高い順

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 >

## ウェブサイト (2015年7月14日現在8件)

PDB: 1569 + ウェブページ: 8 件 ステータス検索: 68 件 化合物検索: 0 件

レンサ球菌  ウェブページ: 8 件

変換クエリ: ("レンサ球菌") | ((streptococcal | streptococcus))

**156: ABO式血液型糖転移酵素 (ABO Blood Type Glycosyltransferases)**  
...て、多くの生物に應用される。ここにいくつかの事例を示す。上図左の分子はマメ類の種子から得られたレクチン(lactin) PDBエンタリー 1lu1 )で、糖鎖結合部位を4つ持っている。上図に示す構造にはいずれも糖(緑色)がいるようである。中央(PDBエンタリー 2j1u )と右(PDBエンタリー 2obs )に示すタンパク質は、レンサ球菌とウイルス(ノロウイルス)由来するタンパク質で、感染する過程に関わる。

- ヘルプ
- ニュース
- 今月の分子

**062: 主要組織適合性複合体 (Major Histocompatibility Complex)**  
...の分子」一覧に戻る / この記事のRCSBオリジナルサイト（英語）を見る : 翻訳  
ごが多い。さまざまな折りたたみの型 多くの免疫機構タンパク質は似 ... 類のMHC法は、異なるペプチドと ... The third IgG-binding domain from **streptococcal Streptococcus Pyogenes** ...

**063: T細胞受容体 (T-Cell Receptor)**  
...さい。「今月の分子」一覧に戻る / この記事のRCSBオリジナルサイト（英語）を見る : 翻訳 工藤高裕 (PDBj) ウィルス(virus) ... に、提示ペプチドは中央部に球で示されている。T細胞受容体は、ペプチドおよびMHCタンパク質の上部表面と相互作用 ... 15240887 1igc The third IgG-binding domain from **streptococcal** protein G. An analysis by X-ray crystallography of ...

**029: ペニシリン結合タンパク質 (Penicillin-binding Proteins)**  
...ペニシリンはこうして発見されたのである。1928年、アレクサンダー・フレミング(Alexander Fleming)は、細菌培地の中でペニシリウム属のカビ(アオカビ)が細菌の感染を寄せ ... of the Penicillin Binding Protein 2X from **Streptococcus pneumoniae** and its

検索結果  
全ヒット件数: 8  
表示件数: 8  
表示順 関連性が高い順  
Auto-pager:

ヘルプページ  
今月の分子  
ニュース記事

エントリー全体

鎖（分子）ごと

実験条件

各書式データダウンロード

類似配列検索

機能部位



# 個別PDBエントリーページ – 概要

**1BXT**

**STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES**

**1BXT の概要**

**分子名称** PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)

**機能のキーワード** BACTERIAL SUPERANTIGEN, MHC CLASS II INTERACTION, T CELL ACTIVATION, TOXIC SHOCK-LIKE SYNDROME, IMMUNE SYSTEM, IMMUNE SYSTEM

**由来する生物種** Streptococcus pyogenes

**ポリマー鎖の合計数** 2

**分子量の合計** 559,694

**著者** Sundberg, E., Jardetzky, T. / 登録日: 1998-06-03, 最終更新日: 2009-02-24

**引用文献** Sundberg, E., Jardetzky, T.S. **Structural basis for HLA-DQ binding by the streptococcal superantigen SSA.** *Nat.Struct.Biol.*, 6:123-129, 1999  
PubMed: 10048922 DOI: 10.1038/5809 Import into Mendeley

**実験手法** X-RAY DIFFRACTION (1.85 Å)

**構造検証レポート**

Metric	Percentile Ranks	Value
Clashscore	16	Worse
Ramachandran outliers	0.2%	Worse
Sidechain outliers	2.7%	Better

Percentile relative to all X-ray structures  
Percentile relative to X-ray structures of similar resolution

**検証レポート(詳細版)** をダウンロード

**他の静止画像 (非対称単位)**

**ダウンロード**

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)

**構造**

非対称単位を表示 (AU = BU)

**他のデータベース情報**

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt Q54971
- PFam PF01123 PF02876
- eF-site 1bxt-A 1bxt-AB 1bxt-B
- wwPDB/RDF Promote Elastic

主な書式データの  
ダウンロード

分子構造  
閲覧ページ

関連データベース  
へのリンク

構造の品質

# **構造ビューアを使ってみる**



登録座標（非対称単位）  
≠  
機能する時の単位（生物学的単位）  
の時もあります。

PDB:  
3e6s

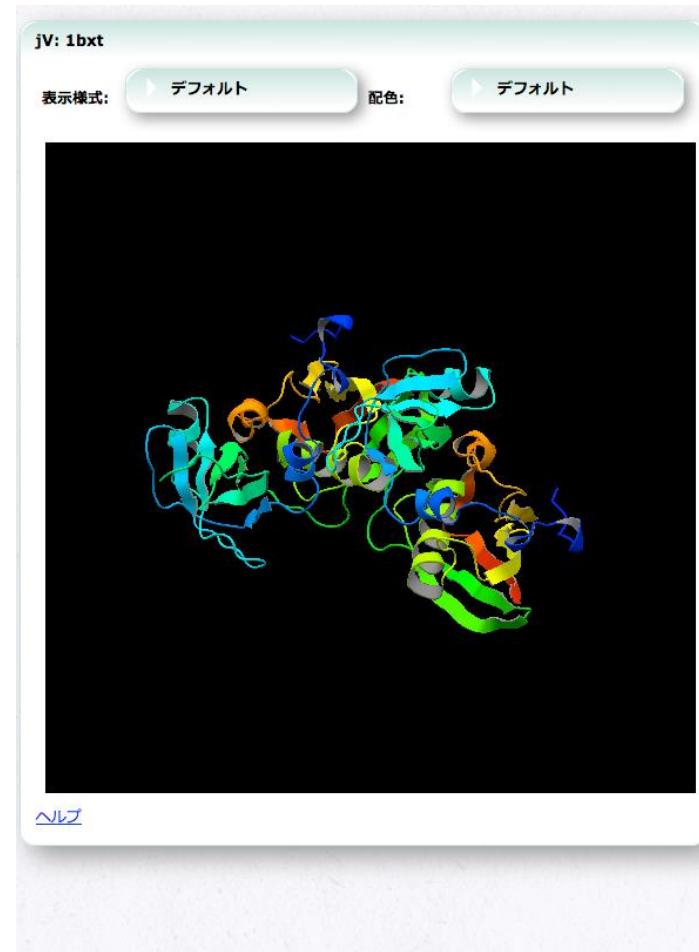


ソフト名	開発	備考
jV	PDBj	Java環境 (JRE) が必要
molmil	PDBj	Javaは不要、WebGLが動作する環境 (最近のブラウザ) が必要
Jmol	オープンソース	Java環境が必要
JSmol	オープンソース	Java不要 (JmolのJavaScript移植版)

# 個別PDBエントリーページ – jV



「許可」等（環境により語句は異なる）をクリック（静止画像をローカルに保存する機能などを有効にするため）



# 個別PDBエントリーページ – jV

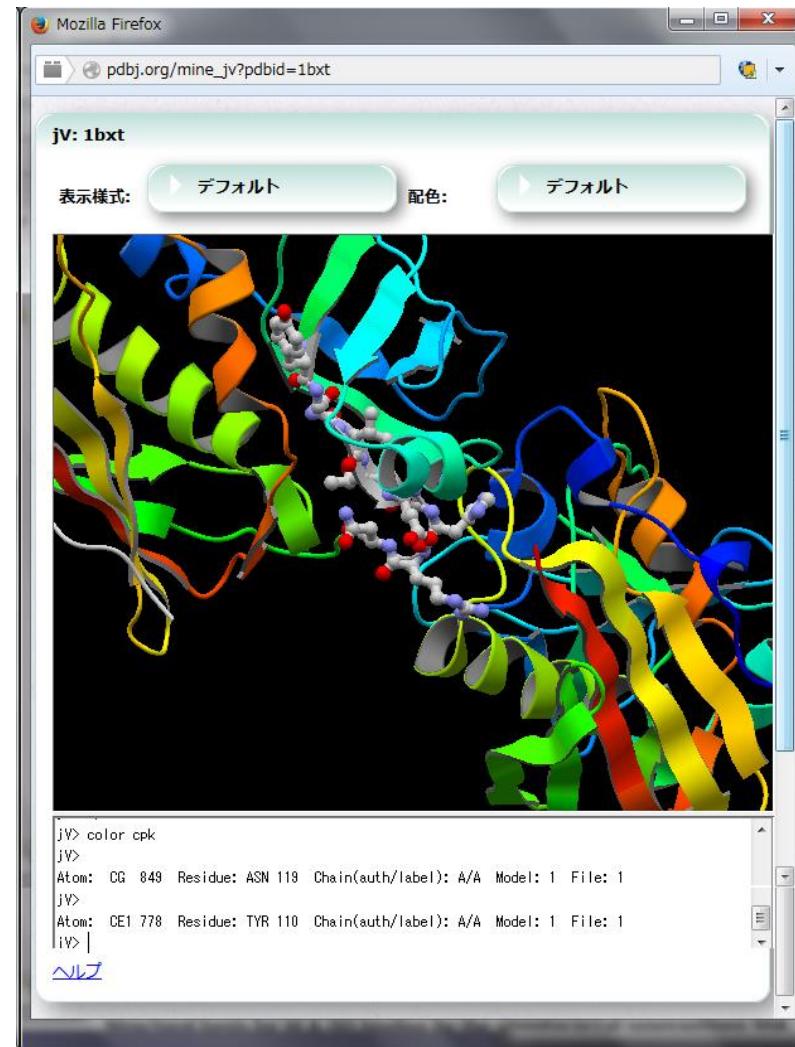
Windows、Linux  
→コマンド操作可能

Mac  
→Stand alone版であればコマ  
ンド操作も可能



コマンドエリアがあると

- 細かい表示操作が可能
- クリックで原子情報表示



The image shows two screenshots of the Molmil PDB entry page. The left screenshot displays a dropdown menu under the '構造' (Structure) section, specifically the '非対称単位を表示 (AU = BU)' (Show Asymmetric Unit) option. Within this menu, the 'molmilで表示' (Display in molmil) button is highlighted with a red box and a red arrow points from it to the right screenshot. The right screenshot shows the 3D ribbon diagram of the protein structure, labeled 'Molmil: 1bxt'. The diagram is composed of colored ribbons (blue, green, yellow, orange, red) representing the protein's secondary structure. The interface includes buttons for '表示様式' (View Style) and '配色' (Coloring), and navigation arrows on the right.

- Java環境不要で操作が軽快
- 古い環境（例：Mac OS 10.6）では利用不可
- 操作はマウスとメニューのみ  
(コマンドラインIFは未実装)

# **より高度な情報**



wwPDB他局

万見（よろづみ）

構造分類 (CATH、SCOP、Pfam)

配列情報 (UniProt)

表面構造情報 (eF-site)

基準振動解析  
(Promode)

The screenshot shows the 'Download' section of a PDB entry page. A red circle highlights the 'Sequence (fasta)' option, which is connected by a red arrow to the sequence details on the right. The sequence is presented in FASTA format:

```
>1BXTA:PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)
SSQPDPTPEQLNKSSQFTGVMGNLRCLYDNHFVEGTNVRSTGQLLQHDLIFPIKDLKLKN
YDSVKTEFNSKDLATKYKNKDVDIFGSNYYYYNCYYSEGNCKNAKKTCMYGGVTEHRNQ
IEGKFPNITVKVYEDNENILSFDTTNKKQVTQELDCKTRKILVSRKNLYEFNNSPYET
GYIKFIESSGDSWYDMMPAPGAIFDQSKYLMLYNDNKTVSSSAIAIEVHLTAK
>1BXTB:PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)
SSQPDPTPEQLNKSSQFTGVMGNLRCLYDNHFVEGTNVRSTGQLLQHDLIFPIKDLKLKN
YDSVKTEFNSKDLATKYKNKDVDIFGSNYYYYNCYYSEGNCKNAKKTCMYGGVTEHRNQ
IEGKFPNITVKVYEDNENILSFDTTNKKQVTQELDCKTRKILVSRKNLYEFNNSPYET
GYIKFIESSGDSWYDMMPAPGAIFDQSKYLMLYNDNKTVSSSAIAIEVHLTAK
```

The screenshot shows the 'Download' section of a PDB entry page. A red box highlights the following options:

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)

Below these options is a link labeled "More...".

At the bottom of the section is a button labeled "構造" (Structure) with an arrow pointing right, and a button labeled "非対称単位を表示" (Show asymmetric unit).

ブラウザで表示

ファイルをダウンロード

# 個別PDBエントリーページ – 構造情報

**構造情報** ボタンが赤枠で囲まれています。

**1BXT**

**STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES**

**エンティティ**

鎖名	説明	種類	鎖番	分子量	分子数	データベース名(アクセス番号)	由来する生物種	エンティティの一命名
A, B	PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN)	polymer	234	26954.5	2	UniProt (Q54971) Pfam (PF01123) Pfam (PF02876)	Streptococcus pyogenes	
	water	water		18.0	374	H2O		

**配列ビューア**

Display chain: A (PROTEIN (STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN))

**非対称単位の内容**

ポリマー	鎖の数	
ポリマー	鎖の数	2
	分子量の合計	53908.9
非ポリマー*	分子数	0
	分子量の合計	0.0
全て*	分子量の合計	53908.9

\*水分子は含んでいません

Copyright © 2013-2015 日本蛋白質構造データバンク

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)
- More...

構造

非対称単位を表示 (AU = BU)

他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt Q54971
- Pfam PF01123  
PF02876
- eF-site 1bxt-A  
1bxt-AB  
1bxt-B
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

各鎖の説明、他データベースへのリンク、由来生物種など

配列、二次構造、結合部位などの情報

分子数・分子量

[mmPDB](#) [RCSB\\_PDB](#) [PDBx](#) [BMRB](#) [Legacy](#) [Adv. Search](#) [Search help](#)

**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**

**1BXT**

**STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES**

**精密化の統計情報**

格子定数 [Å]	81.900	84.550	144.010
格子定数 [度]	90.00	90.00	90.00
空間群	C 2 2 21		
分解能 [Å] (低 - 高)	10.00	- 1.85	
最も高い分辨率シエルの値			
R因子	0.237		
R-work	0.23700		
R-free	0.26300		
結合長の平均二乗偏差(RMSD) [Å]	0.008		
結合角の平均二乗偏差(RMSD) [度]	1.676		

**回折データの統計情報**

分解能 [Å] (低 - 高)	10.00 - 1.85
最も高い分辨率シエルの値	
独立反射数	35601
鏡面反射数	150778 <sup>*</sup>
Rmerge_I_1obs	0.083
最も高い分辨率シエルの値	
完全性 [%]	83.0
最も高い分辨率シエルの値	
欠陥性	4.2
最も高い分辨率シエルの値	
4.2	

**結晶化条件**

結晶ID	方法	pH	pHの範囲	温度	単位
1	Vapor diffusion, hanging drop <sup>*</sup>	6.5	4 <sup>*</sup>	4 <sup>*</sup>	℃

**文献の結晶化試験**

ID	結晶ID	溶媒	試薬名	濃度 (単位) (単位)	詳細
1	1	drop	protein	10 (mg/ml)	
2	1	reservoir	sodium cacodylate	100 (mM)	
3	1	reservoir	PEG8000	15-23 (%)	
4	1	reservoir	magnesium acetate	50-200 (nM)	

**ダウンロード**

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)
- More...

**構造**

非対称単位を表示  
(AU = BU)

**他のデータベース情報**

- RCSB-PDB [↗](#)
- PDB [↗](#)
- Yorobiumi [↗](#)
- CATH [↗](#)
- FSRP [↗](#)
- SCOP [↗](#)
- VAST [↗](#)
- PISA [↗](#)
- Uniprot [↗](#)
- Q54971 [↗](#)
- Pfam [↗](#)
- PF01123 [↗](#)
- PF02876 [↗](#)
- eF-site  
1bxt-A [↗](#)
- 1bxt-AB [↗](#)
- 1bxt-B [↗](#)
- wwPDB/RDF [↗](#)
- Promote Elastic

水色の\*

=

PDBMLadd  
(PDBjで独自に追加)

分子の機能に関する情報  
(リガンドなどの結合部位、関係する  
Gene Ontologyの用語、など)

wwwPDB RCSB PDB

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

1BXT

STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES

GO (遺伝子オントロジー) 由来の情報

△クリックでパネルが開閉

鎖名	GO (遺伝子オントロジー) id	名前空間	内容
A	<a href="#">0005576</a>	cellular_component	extracellular region
A	<a href="#">0009405</a>	biological_process	pathogenesis
B	<a href="#">0005576</a>	cellular_component	extracellular region
B	<a href="#">0009405</a>	biological_process	pathogenesis

UniProtにおけるモチーフ・データベースPROSITEからの機能情報

site_id	残基数	詳細
PS00278	2	Staphylococcal enterotoxin/Streptococcal pyrogenic exotoxin signature 2. K-x(2)-[LIVF]-x(4)-[LIVF]-D-x(3)-R-x(2)-L-x(5)-[LIV]-Y
PS00277	2	Staphylococcal enterotoxin/Streptococcal pyrogenic exotoxin signature 1. Y-G-G-[LIV]-T-{I}-{N}-x(2)-N

PDBML (ヘッダのみ (no-atom))  
PDBx/mmCIF  
PDB形式 (全ての情報)  
検証レポート (PDF)  
More...

構造  
非対称単位を表示 (AU = BU)

他のデータベース情報  
RCSB-PDB  
PDBe  
Yorodumi  
CATH  
FSSP

# 個別PDBエントリーページ – 相同蛋白質

## 類似配列検索 (=Sequence Navigator)

検索  
ヘルプ  
PDB検索 (PDBj Mine)  
PDB詳細検索  
巨大構造エントリー<sup>1</sup>  
化合物検索  
BMRB検索  
Sequence-Navigator  
Structure-Navigator  
EM Navigator  
Omokage検索  
wwPDB/RDF  
SeSAW  
Ligand Binding Sites (GIRAF)  
最新の公開エントリー  
未公開エントリーのステータス

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

**1BXT**

STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCCUS PYOGENES

▼クリックで開閉

Sequence navigator - 1bxt: Chain A,B

1bxtA 完全一致: [1bxtB](#)

1i4qA 新規検索 **構造の重ね合わせ**

Sequence identity: 63%  
Sequence Positives: 81%  
E-value: 1.6486e-80  
Score: 755  
Query coverage: 100%  
Compound: ENTEROTOXIN TYPE C-2

```
1bxtA 2 SQPDPTPEQLNKSSQFTGVGMGNLRCLYDNHFVEGTNVRSTGQLLQHDLIFPIKDLKLKNYDSVKTIFNSKDLATKYKNKDVDIFGSNNYYNC---
1i4qA 2 SQPDPTPDELHKSSSEFTGTMGNMKLYDDHYVSATKVMVDKFLAHDLIYNISDKKLKNYDKVTELLNEDLAKKYKDEVVDVYGSNNYYVCYFS
```

1i4qA 完全一致: [1cqvA](#) [1i4pA](#) [1i4rA](#) [1i4xA](#) [1se2A](#) [1steA](#) [1unsA](#)

3bvgA 新規検索 構造の重ね合わせ

Sequence identity: 63%  
Sequence Positives: 80%  
E-value: 1.96431e-80  
Score: 754

ダウンロード  
Sequence (fasta)  
PDBML (ヘッダのみ (no-atom))  
PDB/mmCIF  
PDB形式 (全ての情報)  
検証レポート (PDF)  
More...

構造  
非対称単位を表示 (AU = BU)

他のデータベース情報  
RCSB-PDB  
PDBe  
Yorodumi  
CATH  
FSSP  
SCOP  
VAST  
PISA  
UniProt  
Q54971  
PFam  
PF01123

## 1bxtA (クエリ) と 1i4qA (テンプレート) の重ね合わせ

NER値は0から9の整数で示され、値が大きいほど立体構造が良く保存されていることを意味します。ここではNER値が大きい残基ほど赤く、小さい残基ほど青く表示しています。

整列した残基数 = 221

### RMSD 重ね合わせ:

CA RMSD = 0.82 [\[PDB File\]](#)

jVで表示

molmilで表示

1bxtA SSQPDPTPEQLNKSSQFTGVMGNLRCLYDNHFVEGTNVRSTGQLLQHDLIFPIKDLKLKN

1bxtA CCCCCCCCCHHHCCCHHHCCCCHHHHHHCCCCCEEECCCCCCCCCCCCCEEECCCCCCCC

1i4qA ESQPDPTPDELHKSSSEFTGTMGNMKLYDDHYVSATKVMMSVDKFLAHDLIYNISDKKLKN

1i4qA CCCCCCCCCCCCCCHHHCCCHHHHHHHCCCCCEEECCCCCCCCCCCCCEEECCCCCCCC

NER Similarity 9999998898999999999999999999969999999999899999999989999

1bxtA YDSVKTEFNSKDLATKYKNKDVDIFGSNYYNC-----KTCMYGGVTEHHRNQIEG

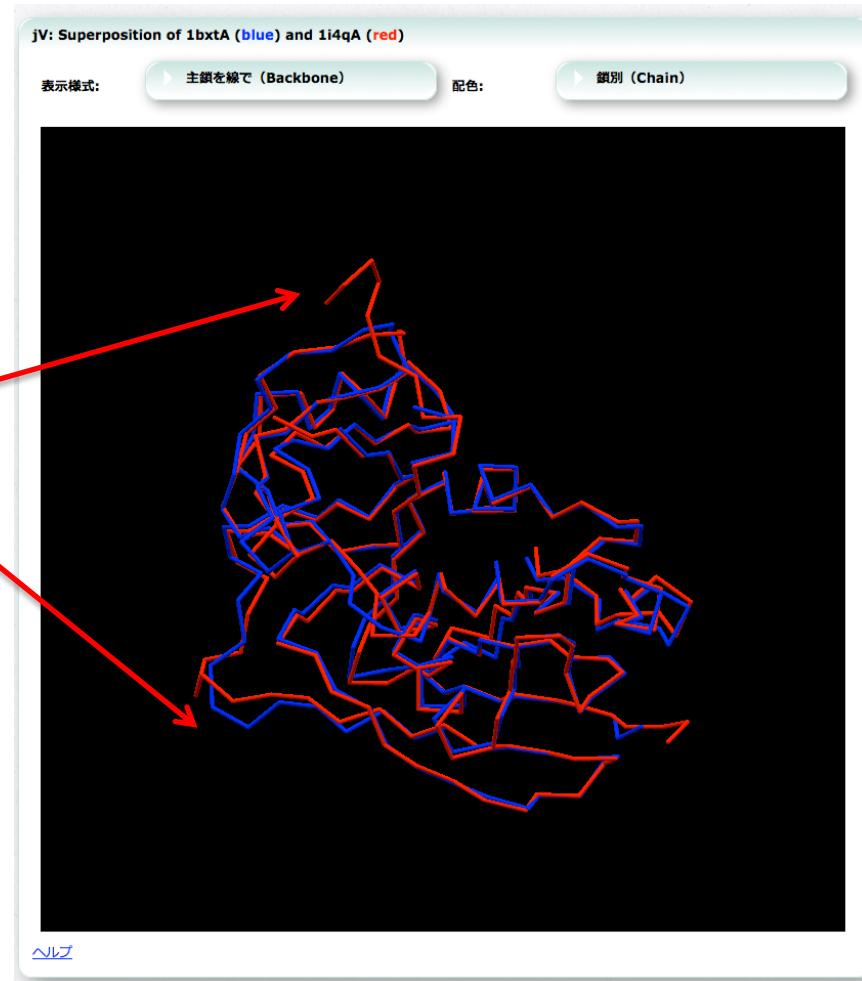
1bxtA CCCEEEECCCHHHHHHHCCCCEEEECCCCCCCC CEEEEECCCEEECCCCCCCC

1i4qA YDKVKTELLNEDLAKKYKDEVVDVYGSNYYVNCYFSSKDNGGKTCMYGGITKHEGNHFDN

1i4qA CEEEEEECCHHHHHHCCCCEEEEEECCCCCCCCCCCCCEEEEEEECCCCCCCC

NER Similarity 99999999999999999999999999999800000000009999999999997746

構造の異なる  
箇所



# 個別PDBエントリーページ – ダウンロード

「ダウンロード」をクリック

PDB format

mmCIF

PDBML

PDBMLplus

RDF

The screenshot shows the PDB entry page for 1BXT. At the top, there's a navigation bar with tabs like '概要', '構造情報', '実験情報', '機能情報', '相同蛋白', and 'ダウンロード'. A red arrow points from the 'ダウンロード' tab to a callout box labeled '「ダウンロード」をクリック'. Below the navigation bar, the protein name 'STREPTOCOCCAL SUPERANTIGEN (SSA) FROM STREPTOCOCUS PYOGENES' is displayed. The main content area is titled 'Resources' and lists download links for different file formats:

- PDB**: 全ての情報 (pdblbxt.ent.gz, 85.65 KB), 全ての情報 (非圧縮) (pdblbxt.ent, 354.3 KB), ヘッダのみ (pdblbxt.ent.gz, 6.28 KB)
- PDBx/mmCIF**: 1bxt.cif.gz (105.12 KB)
- PDBML**: 全ての情報 (1bxt.xml.gz, 162.02 KB), ヘッダのみ (1bxt-noatom.xml.gz, 25.41 KB), 実験情報のみ (1bxt-extatom.xml.gz, 92.52 KB)
- PDBMLplus**: 全ての情報 (1bxt-plus.xml.gz, 163.79 KB), ヘッダのみ (1bxt-plus-noatom.xml.gz, 27.18 KB), 付加情報のみ (1bxt-add.xml.gz, 1.76 KB)
- RDF**: 1bxt.rdf.gz (17.25 KB)
- 生物学的単位 (PDB形式)**: 1bxt.pdb1.gz (80.58 KB) (A,B), \*author defined assembly, 2 molecule(s) (dimeric)
- PDF**: 1bxt\_validation.pdf.gz (181.67 KB)
- PDF-full**: 1bxt\_full\_validation.pdf.gz (192.15 KB)
- 検証レポート XML**: 1bxt\_validation.xml.gz (12.11 KB)
- PNG**: 1bxt\_multipercentile\_validation.png.gz (118.92 KB)
- SVG**: 1bxt\_multipercentile\_validation.svg.gz (813 B)
- Sequence (fasta)**: 1bxt\_seq.txt

Each link has a '画面表示' (View in browser) button next to it. Red arrows point from each callout box to its corresponding file type section in the resource list.

# 個別PDBエントリーページ - ダウンロード

**概要** **構造情報** **実験情報** **機能情報** **ダウンロード**

**1VVI**

Crystal Structure of Frameshift Suppressor tRNA SufA6 bound to Codon CCC-G on the Ribosome

これは巨大構造です。

**Resources**

ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)
PDB Bundle	<a href="#">1vvi-pdb-bundle.tar.gz</a> (4.95 MB)
PDBx/mmCIF	<a href="#">1vvi.cif.gz</a> (6.62 MB)
PDBML	<a href="#">全ての情報</a> <a href="#">1vvi.xml.gz</a> (10.2 MB) <a href="#">ヘッダのみ</a> <a href="#">1vvi-noatom.xml.gz</a> (1.36 MB) <a href="#">座標情報のみ</a> <a href="#">1vvi-extatom.xml.gz</a> (5.68 MB)
PDBMLplus	<a href="#">全ての情報</a> <a href="#">1vvi-plus.xml.gz</a> (10.21 MB) <a href="#">ヘッダのみ</a> <a href="#">1vvi-plus-noatom.xml.gz</a> (1.37 MB) <a href="#">付加情報のみ</a> <a href="#">1vvi-add.xml.gz</a> (9.02 KB)
RDF	<a href="#">1vvi.rdf.gz</a> (1.27 MB)
構造因子	<a href="#">r1vvjsf.ent.gz</a> (7.6 MB)
Biological unit (mmCIF format)	<a href="#">1vvi-assembly1.cif.gz</a> (3.34 MB) (QA,OB,QC,OD,QE,...) *author defined assembly, 55 molecule(s) (55-meric) <a href="#">1vvi-assembly2.cif.gz</a> (3.36 MB) (XA,XB,XC,XD,XE,...) *author defined assembly, 55 molecule(s) (55-meric)
PDF	<a href="#">1vvi_validation.pdf.gz</a> (812.02 KB)
PDF-full	<a href="#">1vvi_full_validation.pdf.gz</a> (2.54 MB)
検証レポート	<a href="#">XML</a> <a href="#">1vvi_validation.xml.gz</a> (836.43 KB) <a href="#">PNG</a> <a href="#">1vvi_multipercentile_validation.png.gz</a> (243.9 kB) <a href="#">SVG</a> <a href="#">1vvi_multipercentile_validation.svg.gz</a> (1.04 kB)

巨大構造  
(1つの構造が1つのPDBフォーマットで書ききれないような巨大分子) の場合  
↓  
構造を分割し、複数のPDBファイルで提供 (PDB Bundle)

他のデータベース情報

- RCSB-PDB [↗](#)
- PDBe [↗](#)
- Yorodumi [↗](#)
- CATH [↗](#)
- FFSP [↗](#)
- SCOP [↗](#)
- VAST [↗](#)
- PISA [↗](#)
- UniProt
- P60371 [↗](#)
- P60372 [↗](#)
- P60373 [↗](#)
- Q5SHQ5 [↗](#)
- Q5SLP8 [↗](#)
- P17291 [↗](#)
- Q5SHQ2 [↗](#)
- P60374 [↗](#)
- Q5SHN7 [↗](#)
- P60376 [↗](#)
- Q5SHN3 [↗](#)
- P60377 [↗](#)
- Q5SHQ1 [↗](#)
- Q5SJ76 [↗](#)
- Q5SH3 [↗](#)

# タミフルの働きを見てみる （「万見」を使ってみる）

# タミフルについて知りたくなった…

- シナリオ：**インフルエンザ治療薬、タミフルについて知りたくなった  
 → Googleで「タミフル」を検索し、Wikipediaの「オセルタミビル」のページから、以下の情報を得た
- 成分の名称は「オセルタミビル」
  - 「ノイラミニダーゼ」というタンパク質を阻害する
- タンパク質ならPDBということで…

## 手順：

- PDBjのページ (<http://pdbj.org/>) で「オセルタミビル」を検索（入力ボックスにカタカナで入力）

→PDBに42件、ウェブページに1件のヒット

- まずは、「ウェブページ」タブの「113: インフルエンザ ノイラミニダーゼ…」項目をクリック  
 →「今月の分子」のページへ



The screenshot shows the PDBj homepage with a search bar at the top containing the text 'オセルタミビル'. To the left, there's a sidebar with navigation links like 'ホーム', 'データ登録', and 'ダウンロード'. The main content area has sections for '初めての利用者のためのガイド' and 'サービスを探す', both with descriptive text and links. On the right, there's a sidebar titled '今月の分子' featuring a molecular model of the Insulin receptor.

「オセルタミビル」と入力

# 「今月の分子」でノイラミニダーゼを調べる

## 113: インフルエンザ ノイラミニダーゼ (Influenza Neuraminidase)

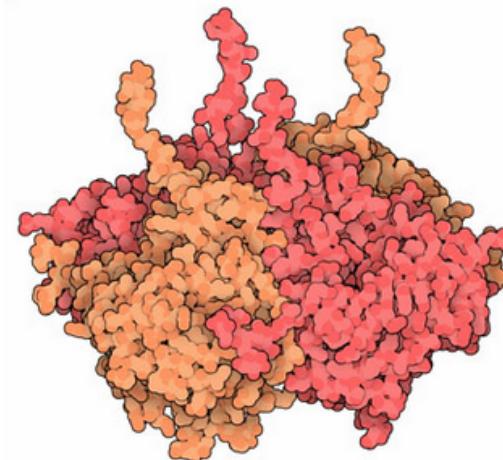
このページはRCSB [の](#) David S. Goodsell博士による「[Molecule of the Month](#)」2009年5月の記事を日本語に訳したものです。転載・引用については[利用規約](#)をご覧下さい。

[\[今月の分子\]一覧に戻る](#) / [この記事のRCSBオリジナルサイト（英語）を見る](#)



: 翻訳 工藤高裕 (PDBj)

インフルエンザウイルス(influenza virus)は継続的に変化し、10年程度ごとに危険な新種が現れて公衆衛生を脅威にさらす。今年、ブタインフルエンザ(swine flu)としてより知られるH1N1型インフルエンザの新種が流行している。H1N1という名前はウイルス表面を覆う2つの分子～[赤血球凝集素](#)(hemagglutinin)とノイラミニダーゼ(neuraminidase)～を意味している。これら2つの分子が協力してウイルスの感染を制御している。赤血球凝集素はウイルスが細胞に侵入する時に中心的な役割を果たしており、細胞表面にある多糖鎖に結合してウイルスゲノムを細胞内へと注入する。一方、ノイラミニダーゼはウイルスが感染した細胞から離れる時に重要な役割を果たす。ノイラミニダーゼはこの糖鎖の末端を切断することによって細胞表面に引っかかってしまわないようにしている。



## 読んで得た情報：

- ノイラミニダーゼは「糖鎖の末端を切断する」タンパク質  
「ウイルスが細胞から離れるときに」「細胞表面にひっかかってしまわないように」
- オセルタミビルはその邪魔をする
- 4サブユニットからなる

# PDB-3cl0 概要のページを見てみる

## 手順：

- ブラウザの戻るボタンで検索結果ページに戻る

- 3cl0をクリック

→3cl0の概要ページが表示される

STRUCTURE OF THE NEURAMINIDASE FROM THE B/BRISBANE /60/2008 VIRUS IN COMPLEX WITH OSELTAMIVIR

**4CPM**

分子名称: NEURAMINIDASE (E.C.3.2.1.18)  
Vachieri, S.G., Collins, P.J., Escuret, V., Casalegno, J.S., Cattle, N., Ferraris, O., Sabater, M., Robert, E., Caro, V., Skehel, J.J., Gamblin, S.J., Valla, F., Valette, M., Ottmann, M., McCauley, J.W., Daniels, R.S., Lina, B., ,

若者:

登録日: 2014-02-07  
公開日: 2014-05-14  
最終更新日: 2014-10-08  
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.75 Å)  
引用文献: A Novel I221 L Substitution in Neuraminidase Confers High Level Resistance to Oseltamivir in Influenza B Viruses. J.Infect.Dis., 210, 2014

**3CL0**

N1 NEURAMINIDASE H274Y + OSELTAMIVIR

分子名称: Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)  
Collins, P., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.

若者:

登録日: 2008-03-18

検索結果

## チェック：

- 由来: A型インフルエンザウイルス由来
- N1型のノイラミニダーゼ

## 手順：(万見を開く)

- ページ右下の「他のデータベース」ボックスの中の3つ目「Yorodumi」をクリック

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

**3CL0**

N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir

**3CL0 の概要**

関連構造のPDB ID	<a href="#">3CKZ</a> <a href="#">3CL2</a>
分子名称	Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)
機能のキーワード	N1, neuraminidase, H274Y, oseltamivir, Glycos Transmembrane, Virion, VIRAL PROTEIN, VIRA
由来する生物種	Influenza A virus
ポリマー鎖の合計数	1
分子量の合計	<a href="#">42534.74</a>

**他のデータベース 情報**

- [RCSB-PDB](#)
- [PDBe](#)
- [Yorodumi](#)
- [CATH](#)
- [ESPD](#)

3cl0の概要

ページ右下の  
ボックス

# 万覧で見るノイラミニダーゼ



マウス操作で  
自由な方向に向けられる（マウスホイールで拡大縮小）

このページはいったい何？ → 右上の「ヘルプ」をクリック  
「万見は、生体分子の3次元構造を気軽に眺めて、見て、動かして、回して、学んで、楽しむためのウェブページです。」

# 構成要素をチェック

## 手順：

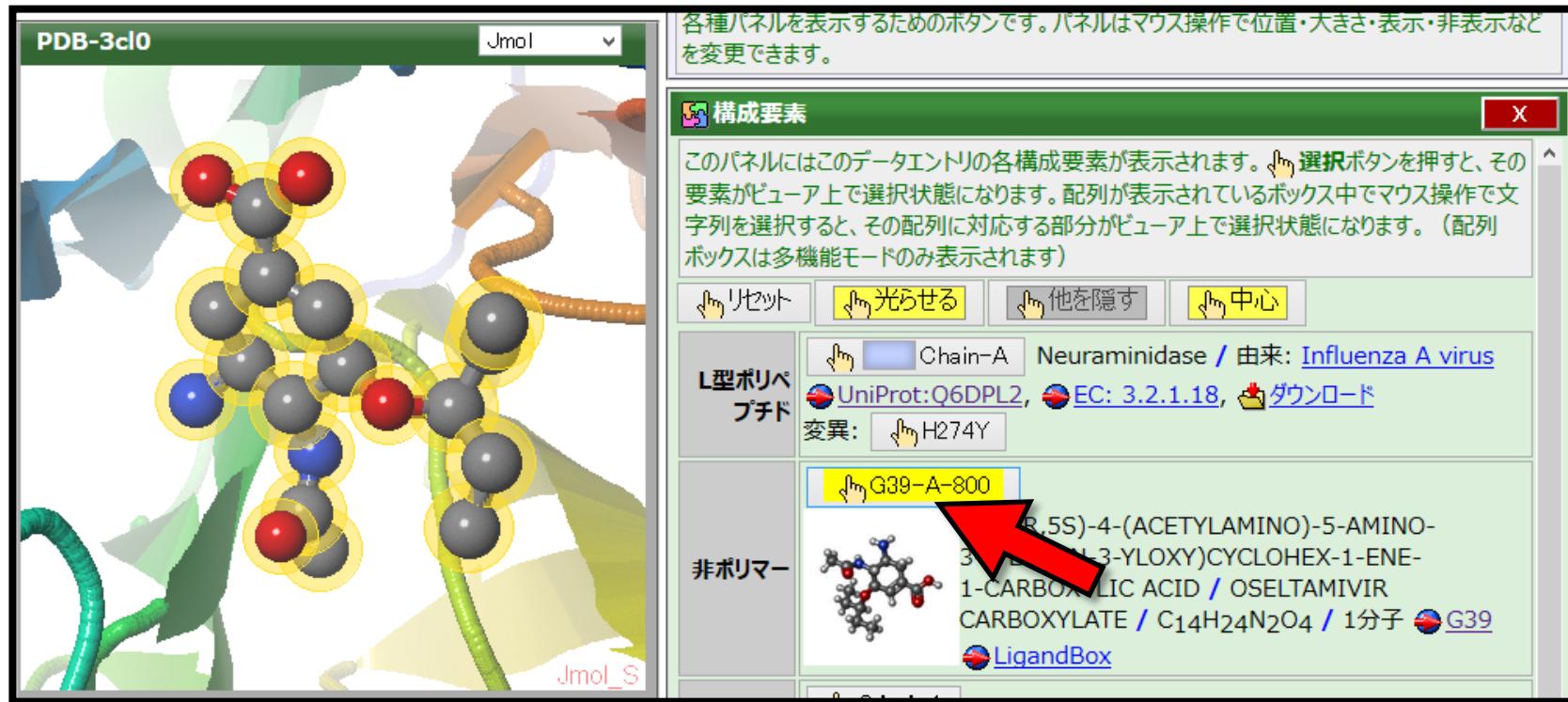
- 右上パネルの「構成要素」ボタンをクリック  
→構成要素パネルが開く

## チェック：

- 構成要素は4種類
  - ノイラミニダーゼ
  - G39 (これがオセルタミビル)
  - カルシウムイオン
  - 水



# タミフルはどこ？



[G39-A-800]ボタンを押すと、左のパネルの中でオセルタミビルが選択され光る  
 マウスで見やすい方向に向ける

- G39は、このオセルタミビルの化合物ID（PDBによる管理ID）
- A-800は、A鎖の残基800という意味

# 集まって働くタンパク質

PDBに登録されているのは「非対称単位」という構造単位  
実際に働くときの「生物学的単位」とは違う場合が多い

The screenshot shows the Yorodumi View software interface. On the left, a 3D ribbon model of a protein structure (PDB-3cl0) is displayed. On the right, a detailed database panel titled 'データ' (Data) is shown, overlaid with red arrows pointing to specific sections.

**Top Bar:** データ (Data), 開く (Open), 構成要素 (Components), 表示 (View), スタイル (Style), ヘルプ (Help).

**Data Panel Headers:**

- データベース・ID: PDB-3cl0, 他のデータ
- タイトル: N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir, Neuraminidase (E.C.3.2.1.18), 由来: Influenza A virus
- 集合体 (Collection): 登録構造 (Registered Structure): 結晶学的非対称単位, ポリマー数: 1, Omokage検索 (Omokage search)
- 生物学的単位 (Biological Unit): [1] (著者・ソフトウェアによる定義 (PISA) (4 分子, tetrameric, identity operation + crystal symmetry operation)), ダウンロード (Download), Omokage検索 (Omokage search)

右上の「データ」ボタンをクリックすると「データ」パネルが現れる  
生物学的単位の[ 1 ]ボタンを押すと、「生物学的単位」が見られる

# 表示スタイルを変えてみる

標準では、リボンモデル（カートゥーンリボンモデル）という模式的なモデルで表示される

The screenshot shows the Jmol interface with a protein structure labeled "PDB-3cl0" on the left. The main window displays a blue-grey space-filling model of the protein. At the top, there's a menu bar with "Yorodumi 万見" (Yorodumi Wanmin), "設定" (Settings), "English", "データ" (Data), "開く" (Open), "構成要素" (Components), "表示" (View), "スタイル" (Style), "ヘルプ" (Help), and a plus sign icon.

A red arrow points to the "スタイル" (Style) button in the top menu bar. Another red arrow points to the "スタイル" tab in the "スタイル" panel, which is currently active. This panel contains instructions about changing styles and buttons for "原子モデル" (Atom Model) and "表面モデル" (Surface Model), along with buttons for "リセット" (Reset), "光らせる" (Shade), "他を隠す" (Hide others), and "中心" (Center). It also lists style categories: "おまかせスタイル" (Automatic Style), "小さい分子用 #1", "一般的なタンパク質用 #1", and "大きな複合体用 #1". A "スタイルのリセット" (Reset Style) button is also present.

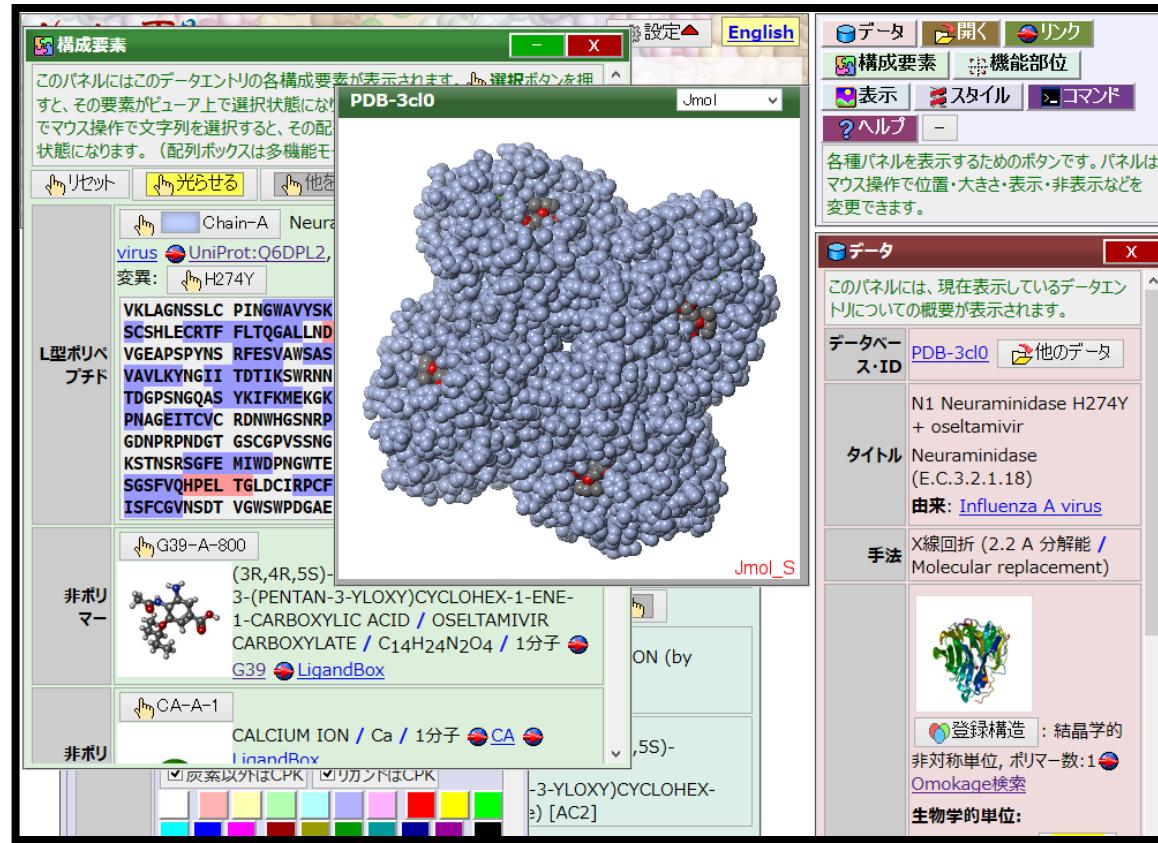
Below the "スタイル" panel is the "データ" (Data) panel, which shows "PDB-3cl0" and "他のデータ" (Other Data) buttons. The entire interface is in Japanese.

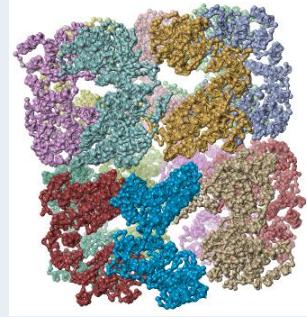
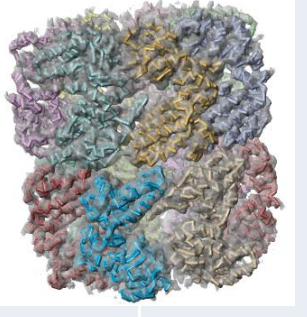
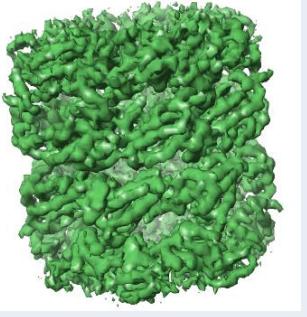
右上の「スタイル」ボタンをクリックすると「スタイル」パネルが現れる  
ボタンを押すと、それぞれの表示スタイルに切り替わる

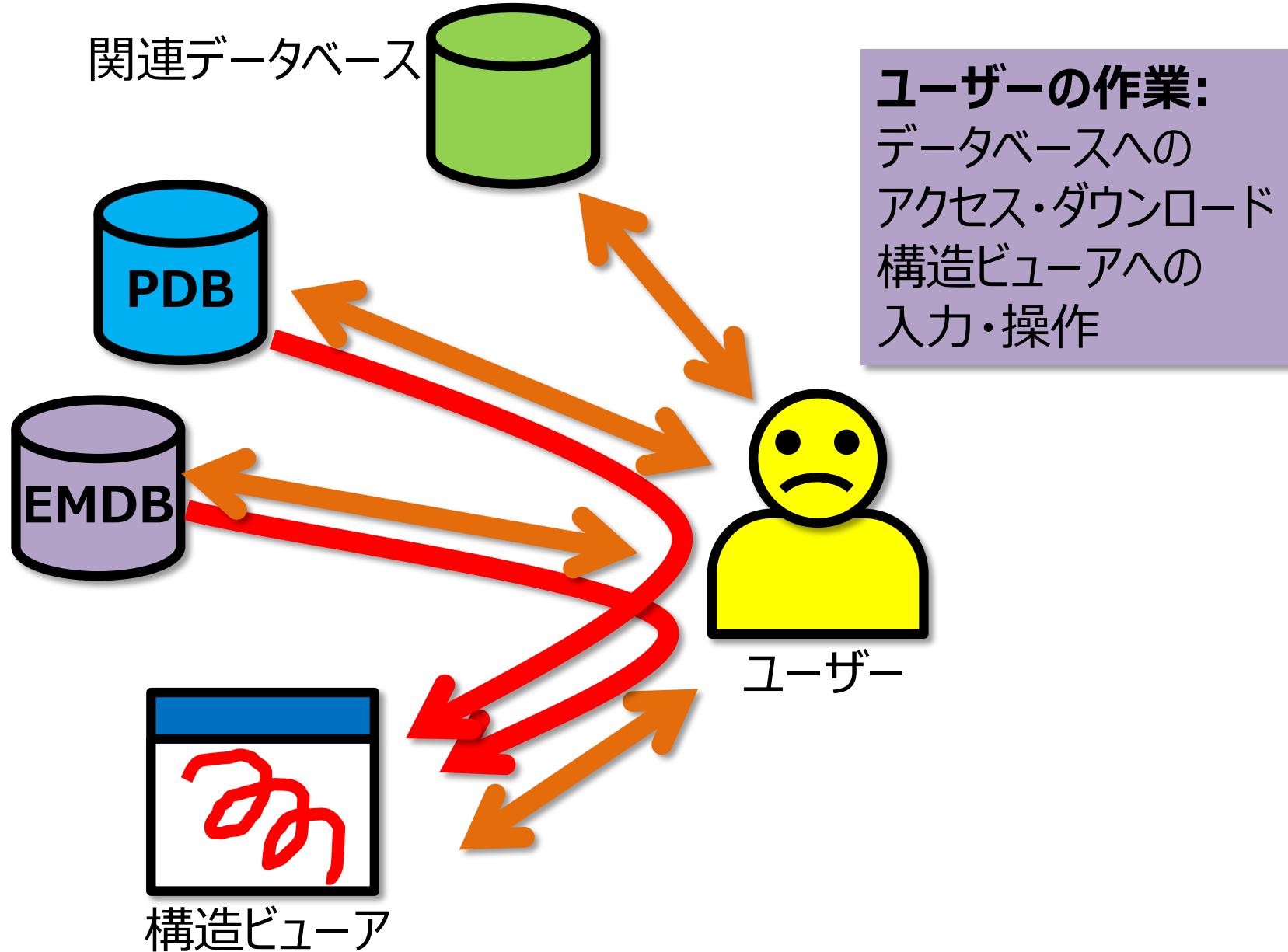
**「万見」とは？**

# 「万見」ってなに？

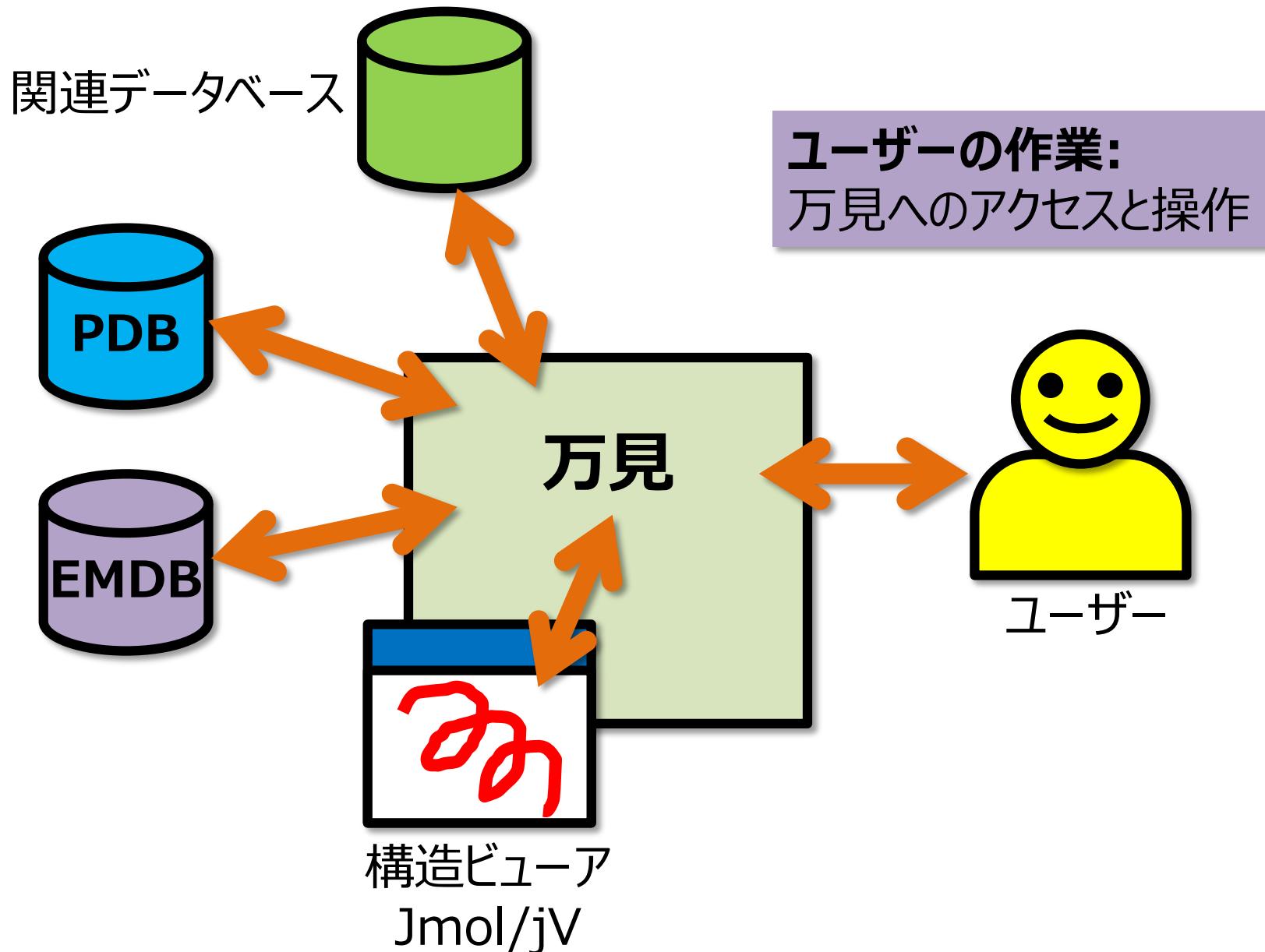
- ・「3次元構造を見る」ことを主題としたウェブサイト
- ・複雑な構造やそのデータの意味を、簡単な操作でわかりやすく、見たり知ったりできるページを目指した
- ・PDBとEMDBのほとんどの構造を見られる



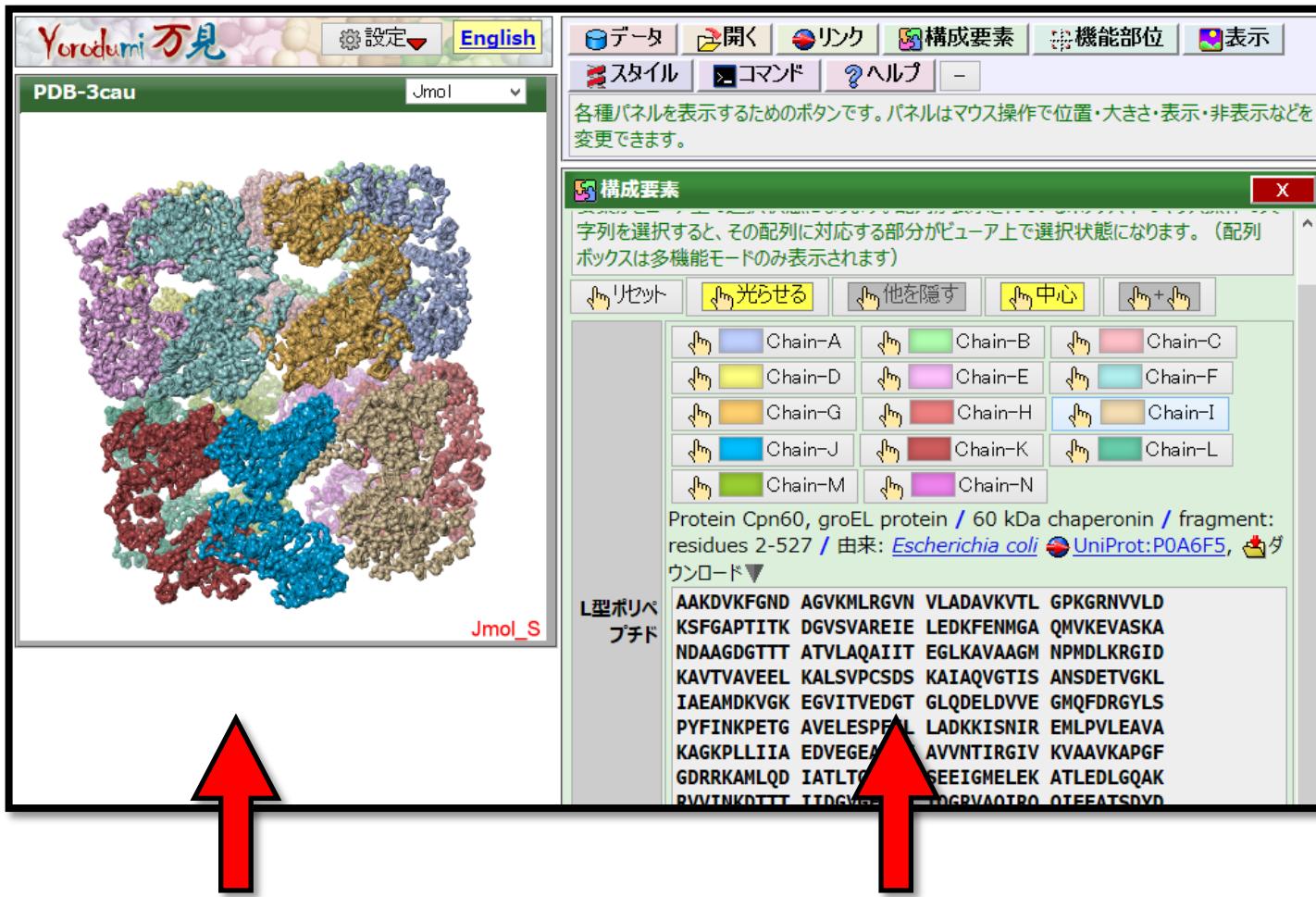
	PDB (Protein Data Bank)	EMDB (Electron Microscopy Databank)	
解析手法	種々の手法（主にX線結晶学）	3次元電子顕微鏡	
主データ	原子モデル	3次元マップ	
特徴	結晶化しやすいものが中心 →部分構造が多い	低分解能なデータが多い 複雑な分子、大きな分子などの全体構造など	
万覧での表示例	 3cau	 重ねあわせ	 5001



# 万見があるとき…



# 「構造ビューア」と「付随情報」



## 構造ビューア :

- Jmol/JSmol
- jV(機能は限定的)

## 付随情報 :

- 構造データに付随する情報
- スタイルの変更など

## “Yorodumi” か “万見” を検索



Google 検索結果 (85 件 (0.19 秒))

**万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわろう ☆**

ヘルプ. 万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわろう. 万見は、生体分子の3次元構造を気軽に眺めて、見て、動かして、回して、学んで、楽しむためのウェブページです。Protein Data Bank (PDB) と EM Data Bank (EMDB) のデータを利用しています。...  
[www.pdbj.org/emnavi/view.php?id=1491&lang=ja](http://www.pdbj.org/emnavi/view.php?id=1491&lang=ja) - キャッシュ

**[PDF] EM NavigatorとYorodumiで3次元構造を眺める - 「EM Navigator」と ... ☆**

ファイルタイプ: PDF/Adobe Acrobat - HTMLバージョン  
 「EM Navigator」と「万見 (Yorodumi)」というウェブサイトの紹介. •これらのウェブサイトを使って、生体分子・組織の「3次元構造を眺めること」を体験. •想定する対象: 生体分子構造研究の経験がない・少ないユーザー ...  
[www.pdbj.org/workshop/201008/Suzuki.pdf](http://www.pdbj.org/workshop/201008/Suzuki.pdf)

[\[+\] www.pdbj.org の他の検索結果を表示する](#)

あるいは、PDBjのトップページの  
左メニューのリンクから

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



93043  
 件が利用できます (2013-08-14 00:00 UTC / 09:00 JST)

▶ ホーム  
 ▶ データ登録  
 ▶ 検索

▼ サービス&ソフトウェア

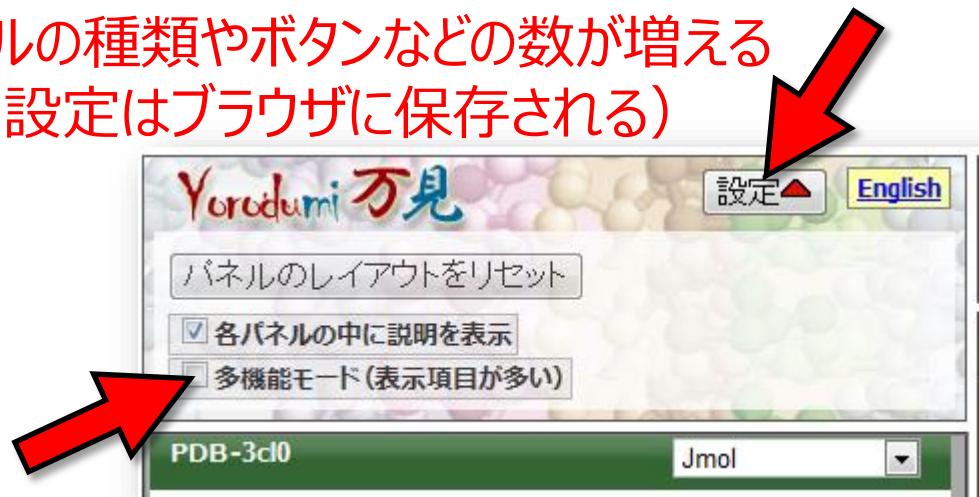
- jV: 3次元構造ビューア
- 万見 (Yorodumi)
- Protein Globe
- ASH
- MAFFTash
- SEALA
- NMRToolBox
- CRNPRED
- Spanner
- SFAS

▶ 二次データベース

# タミフルの結合部位を見てみる (より高度な利用)

## 手順

- 現在のページを再読込（WindowsならF5キー）  
 （別のデータを開いていたら、3dIOを開き直す）  
 →表示が初期状態に戻る
- 左上の「万見」ロゴの右の「設定」ボタンを押し、「多機能モード」にチェック  
 →パネルの種類やボタンなどの数が増える  
 （設定はブラウザに保存される）



- ビューアの表示が遅い場合は、「表示」パネル、「ビューア」行、  
 の「高画質（低速）」のチェックを外す

# 結合部位を見る

## 手順

- 「機能部位」パネル、2行目 (G39…)

の「部位」ボタンを押す

→オセルタミビルの結合部位が選択される

- 「スタイル」パネル、「原子」行、「棒」ボタンを押す

→結合部位の側鎖が表示される

- 「表示」パネルの、「ズーム」スライダーと「断面」スライダーを調節し、結合部位がよく見えるようにする

(断面スライダーはツマミが2個、それぞれ手前と奥の断面の位置)



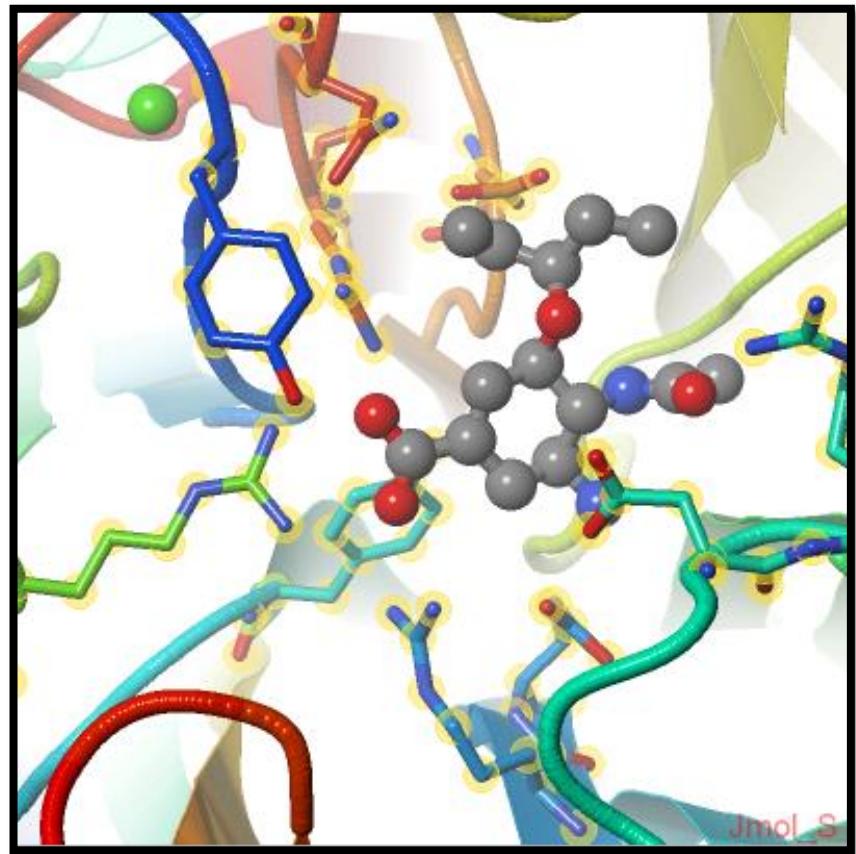
# 「選択」して「操作」する

## 構造ビューアの基本

多くの分子構造ビューアでは、「選択」  
→「操作」が主な作業のパターン

ワードプロセッサーで文字列を選択し、  
太字にしたりする操作と似ている

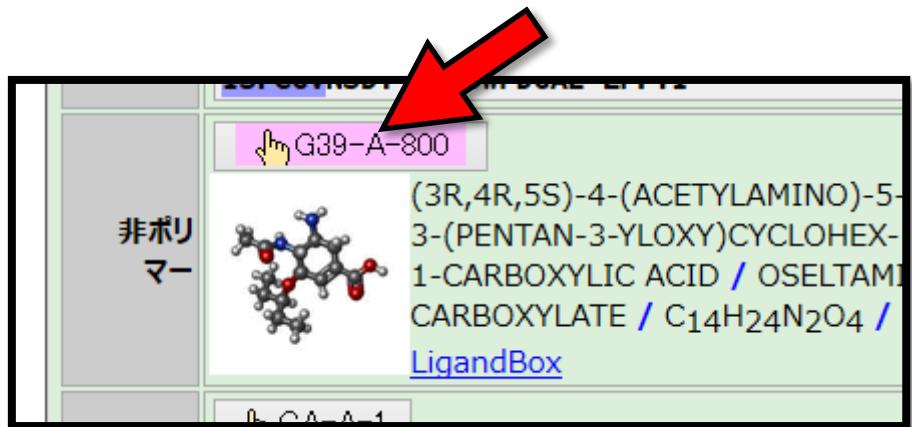
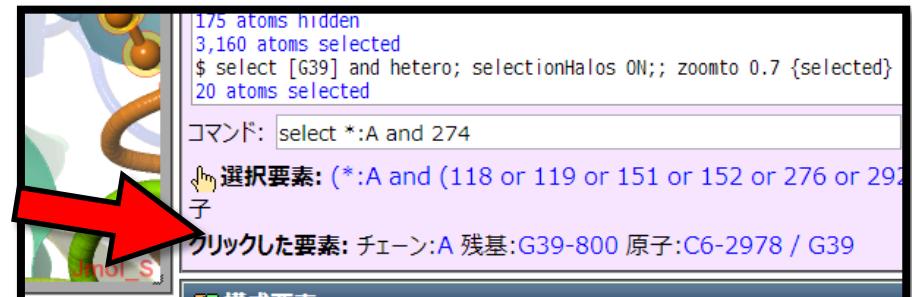
万見ではアイコンで、「選択」の  
ツールと状態を表現している



オセルタミビル結合部位

## その他の操作

- ビューア内で構造要素をクリックすると、「コマンド」パネルに原子名が表示される
- クリックした要素に該当する「構成要素」パネルの選択ボタンの色が変わる
- ダブルクリックで任意の原子間の距離を測定
- アミノ酸配列が表示されているボックスで文字列を選択すると、該当する部分が選択状態になる



# 変異残基を見る

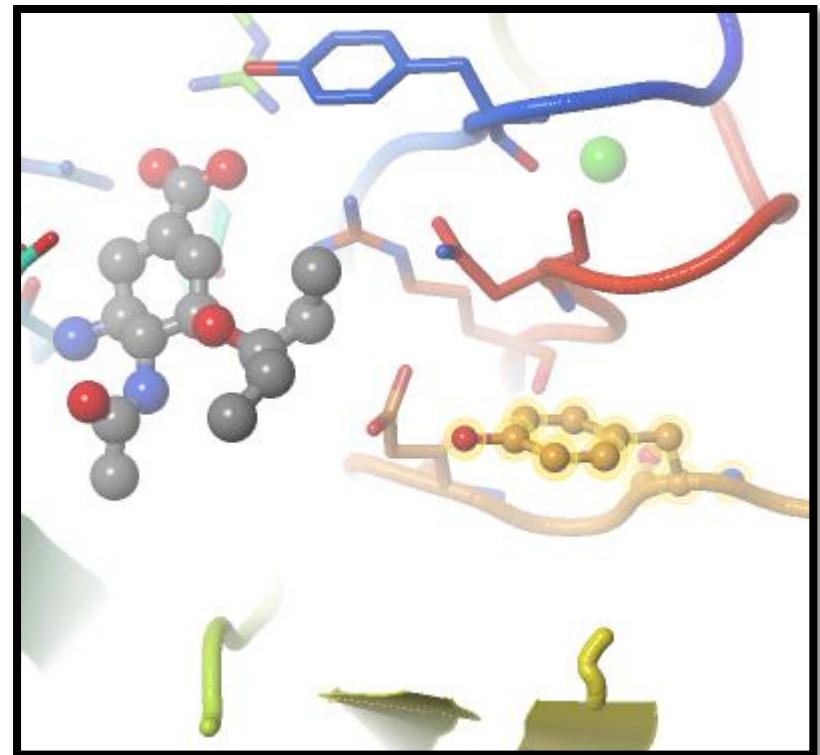
## 手順:

- 「構成要素」パネルの「L型ポリペプチド」列の変異: [H247Y]というボタンを押す  
→変異残基が選択される

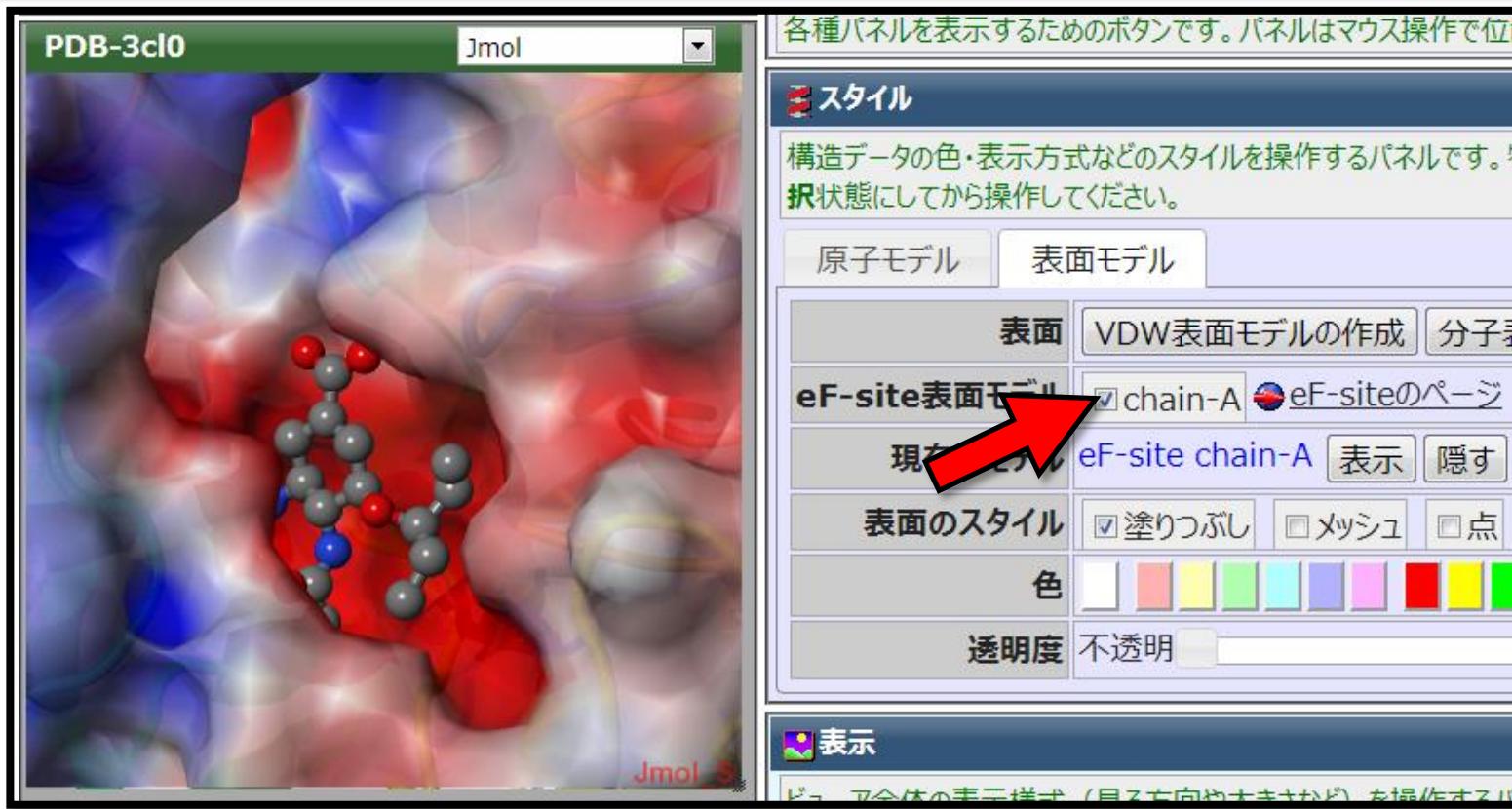
変異は His274 → Tyr

実はタミフル耐性の変異タンパク質

- 「スタイル」パネル、「原子」行、「球と棒」ボタンを押す  
→スタイルが変更される  
(オセルタミビルと直接相互作用しているといいにくい位置にあることがわかる)



# 表面構造を見る



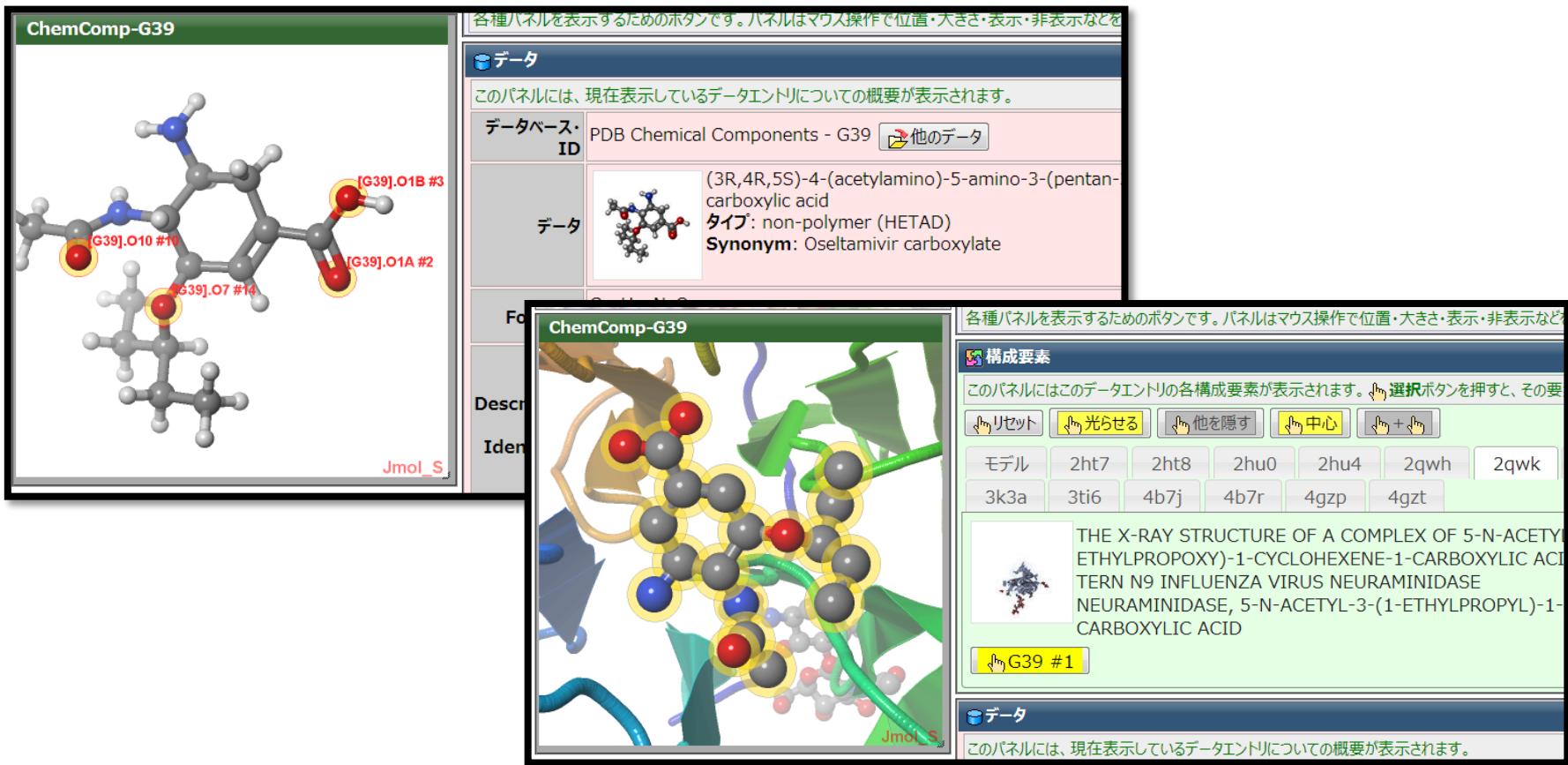
## 手順

- 「スタイル」パネル、「表面モデル」タブをクリック
- 「eF-site表面モデル」列の「リストを取得」ボタンをクリック
- 現れた「chain-A」のチェックボックスをクリック

**注意:** 環境によっては、処理に時間を要します

# オセルタミビルのページ

- 「構成要素」パネルのG39の画像部分をクリックすると、化合物G39のページが開かれる
- この化合物の詳細情報、理論的構造、別のPDBデータ中での構造などが見られる

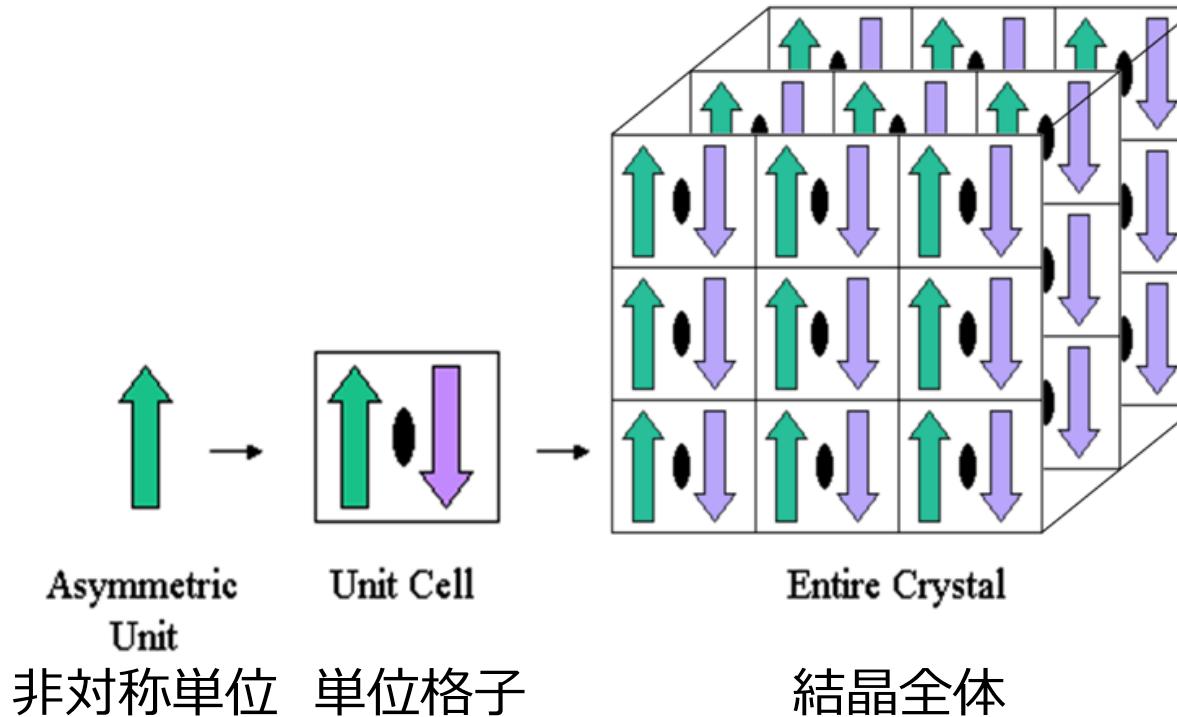


# 「非対称単位」と「生物学的単位」

# 「非対称単位」とは？

PDBに登録されているデータのほとんどは**結晶構造**

結晶構造は、**非対称単位 (Asymmetric unit)** が登録されている

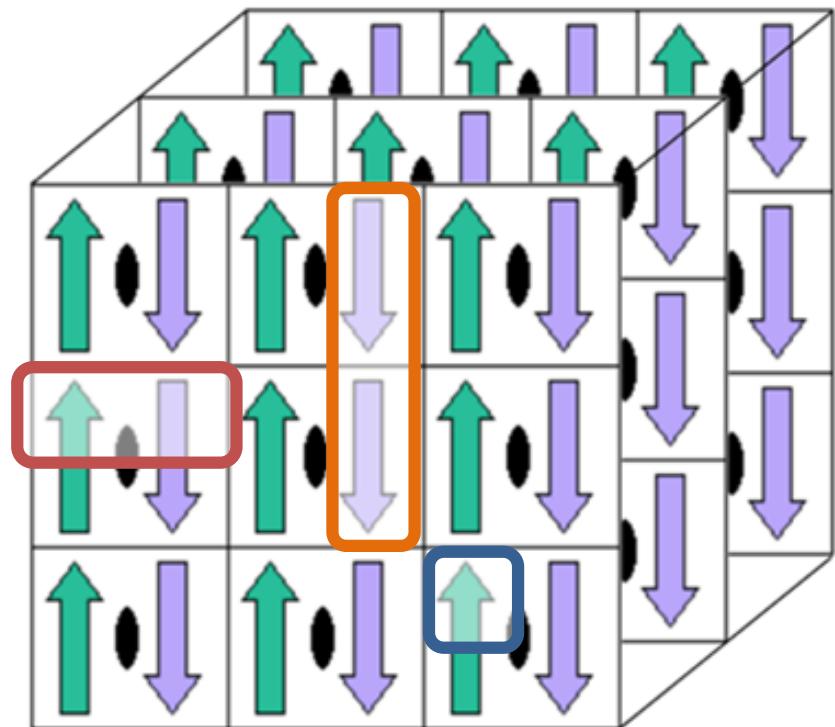


[http://www.pdb.org/pdb/static.do?p=education\\_discussion/Looking-at-Structures/bioassembly\\_tutorial.html](http://www.pdb.org/pdb/static.do?p=education_discussion/Looking-at-Structures/bioassembly_tutorial.html)

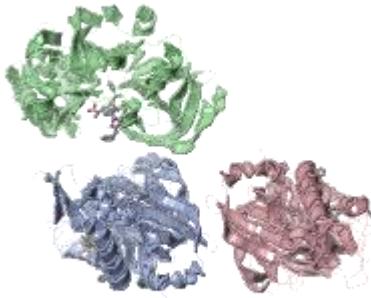
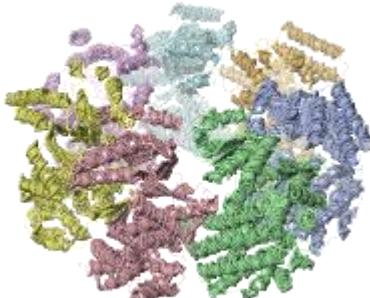
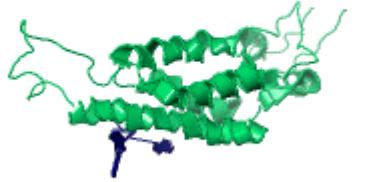
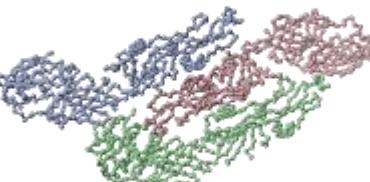
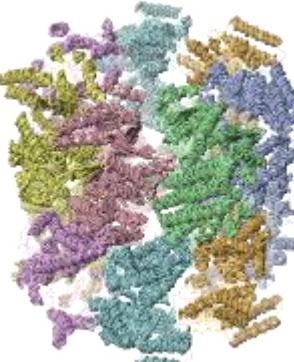
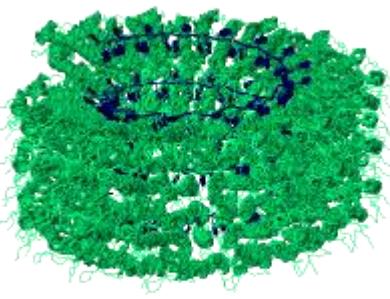
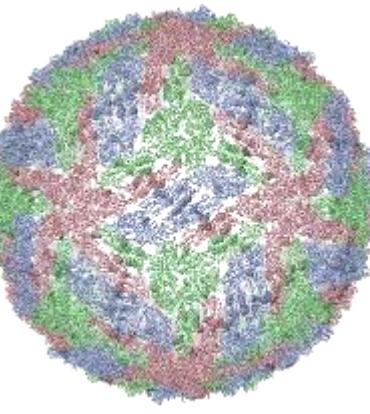
# 「生物学的単位」とは？

## 生物学的単位:

- 生体内での構造や溶液構造に近いと考えられる構造単位を、結晶構造から切り出したもの
- データ登録者が定義したものと、計算によって見積もられたものが登録されている
- 非対称単位との関係（大きい・小さい）は、データごとに異なる



# いろいろな生物学的単位

	3ixk	1oel	2xea	1thd
非対称単位				
生物学的単位				

単量体

14量体

らせん集合体

正二十面体集合体

らせん対称の  
非対称単位正二十面体対称の  
非対称単位

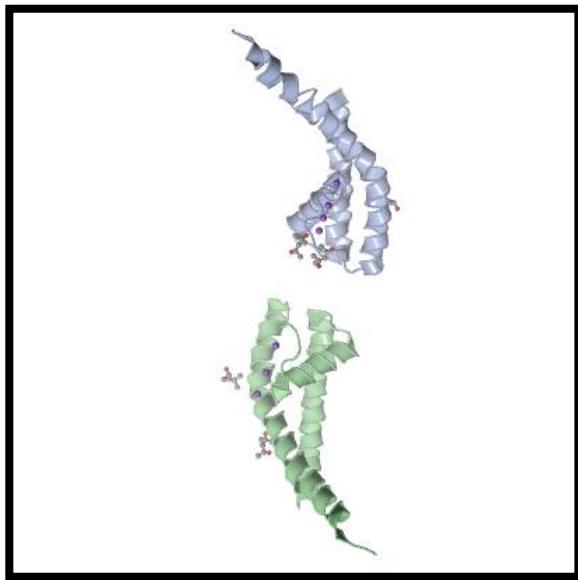
## 実習 3：

「生物学的集合体」を見てみる

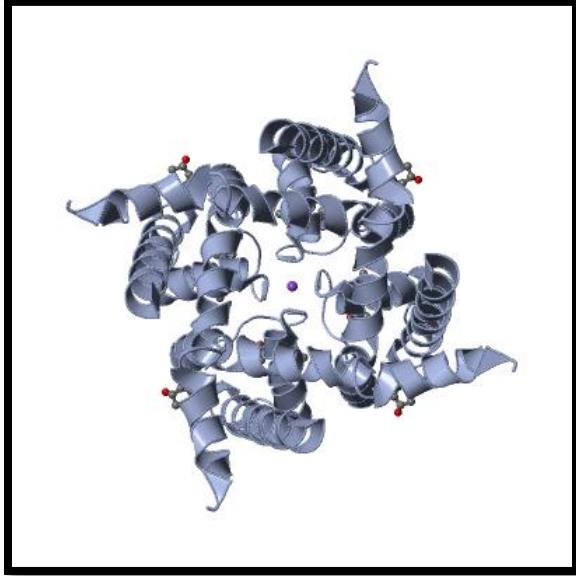
## 手順

- 「万見」でPDB-3ixkを開く  
「開く」パネル、「IDを指定」行の入力ボックスに  
「3ixk」と入力し、Enterキーを押す  
→Beta-secretase 1 の構造が表示される
- 構成要素パネル・L型ポリペプチドを確認  
→同じポリペプチド3本からなっていることが分かる
- データパネル・集合体の各ボタンを押してみる  
→表示される構造を確認  
(クリックすると該当する構成要素のボタンの色が変化する)
- 同様のことを「3k0g」で試してみる

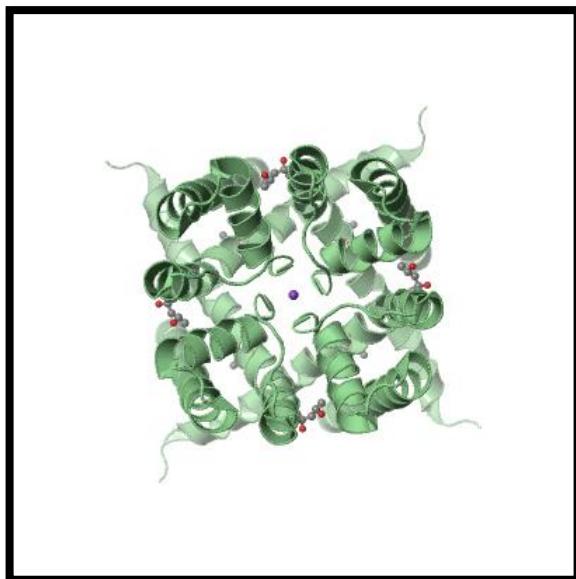
# PDB-3k0gの場合



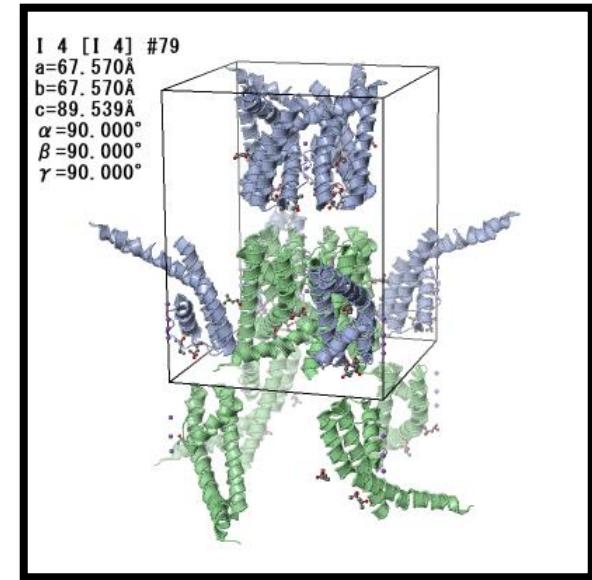
登録構造  
=結晶学的非対称単位



生物学的単位 #1



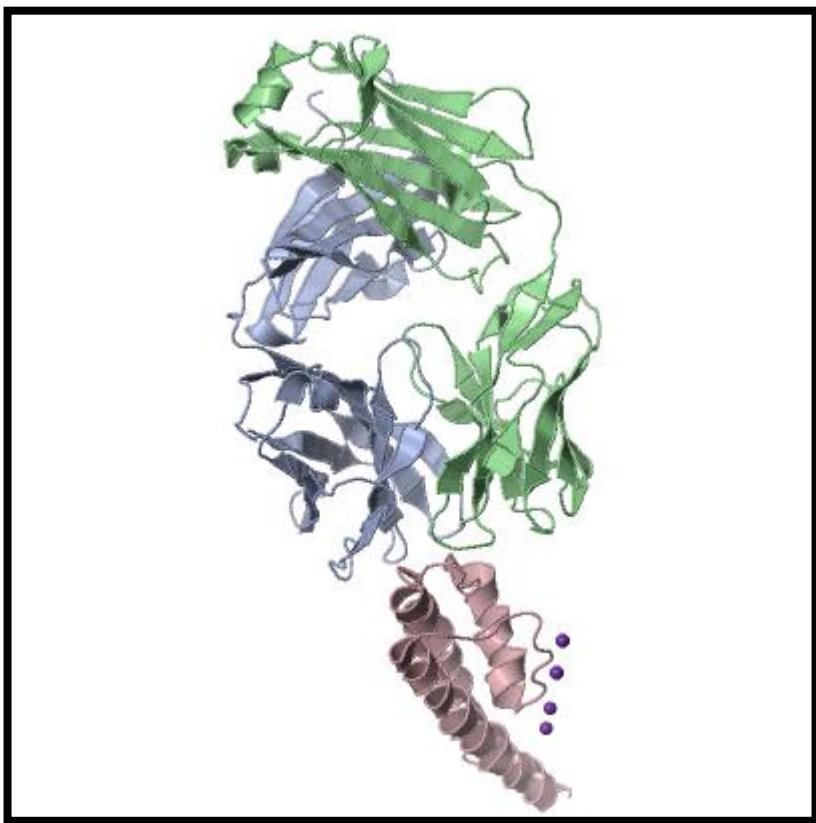
生物学的単位 #2



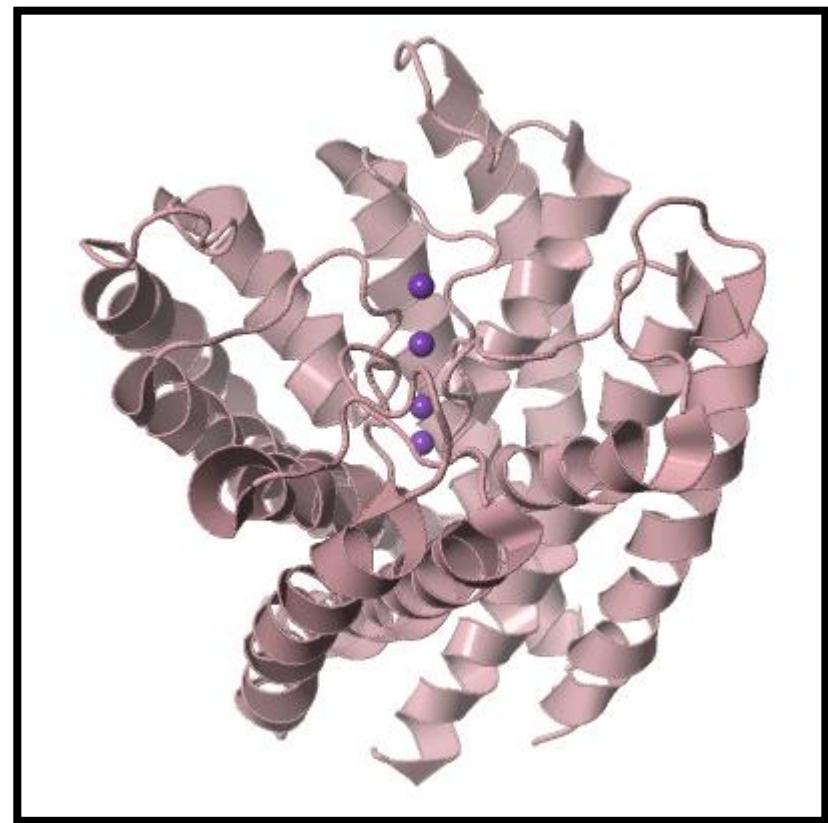
単位格子

## 手順

- 「万見」でPDB-3f7yを開く  
→カリウムチャネル KcsA の構造が表示される
  - 構成要素パネルの確認、集合体を表示  
→抗体Fabフラグメントが結合している
  - 抗体の部分を隠す
    - 構成要素パネルでchain-Aを選択
    - 「スタイル」パネルで「選択したものを隠す」ボタンを押す
    - chain-Bも同様にして隠す
    - chain-Cを選択し「表示」パネルで、「中心-選択したもの」
    - 「表示」パネル「ズーム」で拡大
    - 「機能部位」パネルで、カリウムの結合部位や、膜貫通ヘリックスを確認
- 表示される構造を確認



登録構造  
(非対称単位)  
KcsAと抗体



生物学的単位  
抗体を隠した状態

**最後に**

## 構造データを利用する権利

- PDBデータはパブリック（人類の財産！）自由に使える

## 画像の著作権

- PDBデータを使ってあなたが作った絵の著作権は、あなたのもの
- PDBjの画像などを使った場合は、「日本蛋白質構造データバンク(PDBj)」（日本語の場合）と表記することをお願いしている
- 「今月の分子」の絵と文章はもう少し厳しい規約がある

## 科学者としてのマナー

- PDB-IDを明記

## ソフトウェアの利用条件

- Chimeraなどは、ソフトウェア名を書く必要がある
- 引用する文献も決められている

# 動画による解説

2010-08-02 国

IE8][タンパク質][可視化][二次構造] 万見(Yorodumi)の使い方～基本と連携～

万見(よろづみと読みます)は日本蛋白質データバンク(PDB)が提供するタンパク質構造解析サービスです。万見は立体構造を見て楽しむことをコンセプトとしています。また、Uniprotとの連携により、詳細なデータを得ることも出来ます。

今日は万見によるシアノバクテリア *Synechocystis* sp. PCC 6803由来Heme oxygenase-1(ヘムの脱鉄を行う酵素)の立体構造データをサンプルとしています。

*Synechocystis*由来Heme oxygenase-1の  
立体構造が表示されました！

PDB-1wel Jmol

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-1wel - 他のデータ

タイトル Crystal structure of heme oxygenase-1 from cyanobacterium *Synechocystis* sp. PCC6803 in complex with heme Heme oxygenase 1(E.C.1.14.99.3)

1 著者による定義 (1分子, monomeric)  
2 著者による定義 (1分子, monomeric)  
著者による定義 (1分子, monomeric)

01:28 04:43

Generated by CAMTASIA STUDIO 6  
この作品は、クリエイティブ・コモンズ・ライセンスの下でライセンスされています  
原著作者はライフサイエンス統合データベースセンターです (cc) BY

万見(Yorodumi)の使い方～基本と連携～ 統合TV  
制作：統合データベースセンター  
<http://togotv.dbcls.jp/20100802.html>

Yorodumi 万見

万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわろう [English / 日本語]

**トピック**

- 万見をはじめる
- 万見とは?
- 万見画廊
- 関連情報・リンク
- すべて表示

**万見画廊**

### 口蹄疫ウイルスの鑑

口蹄疫ウイルスキャブシドの正20面体対称構造  
データエントリ: PDB-1bbt

- 万見で見る
- データの詳細

表示方法:

- ビューアをJmolにする
- 正20面体対称集合体を表示するには: 「データ」パネル - 「集合体」 - 「Caのみ」(完全な正20面体集合体)ボタンを押す
- タンパク質の色を変更するには: 「スタイル」パネル - 「色」 - 「チェーン」ボタンを押す

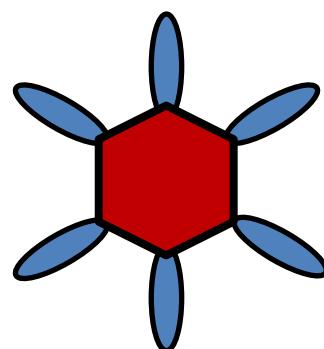
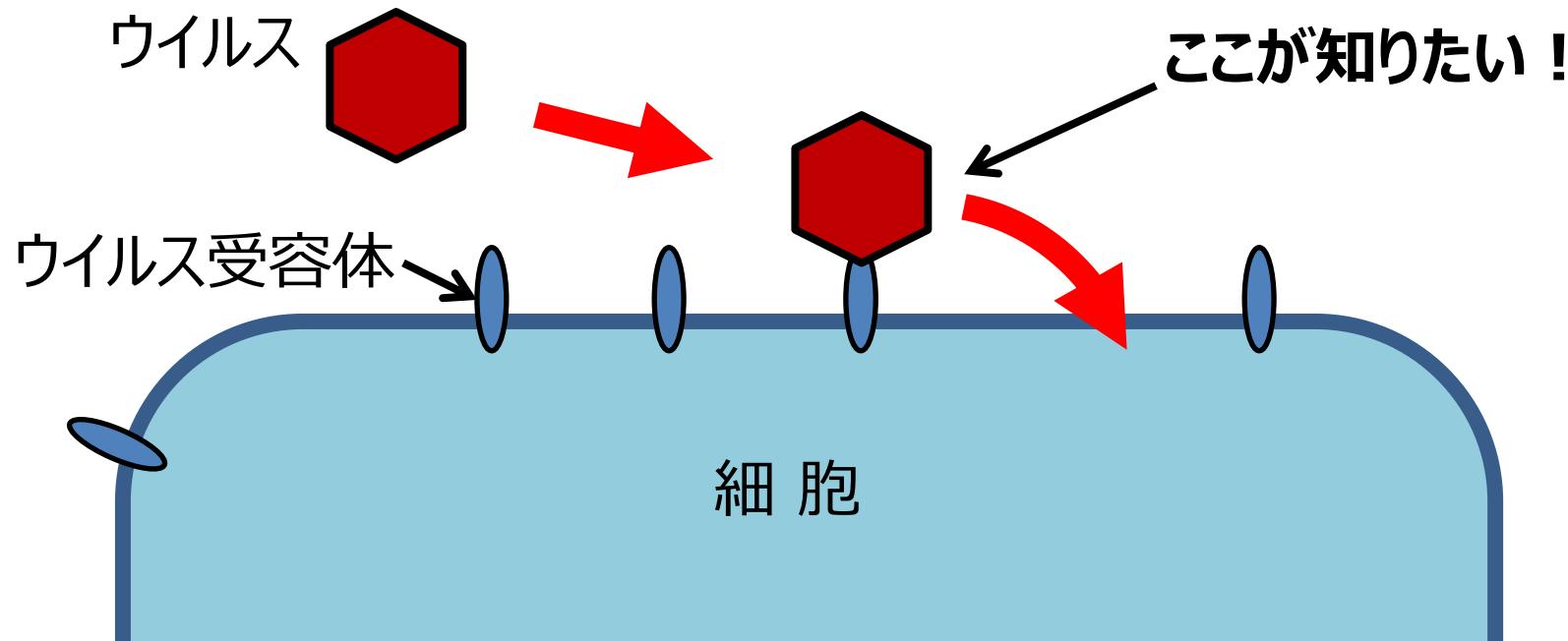
39,720 atoms selected

表示例とチュートリアル

万見トップページ:<http://pdbj.org/yorodumi/>

過去の講習会から

ウイルスの細胞侵入の  
メカニズムを見る

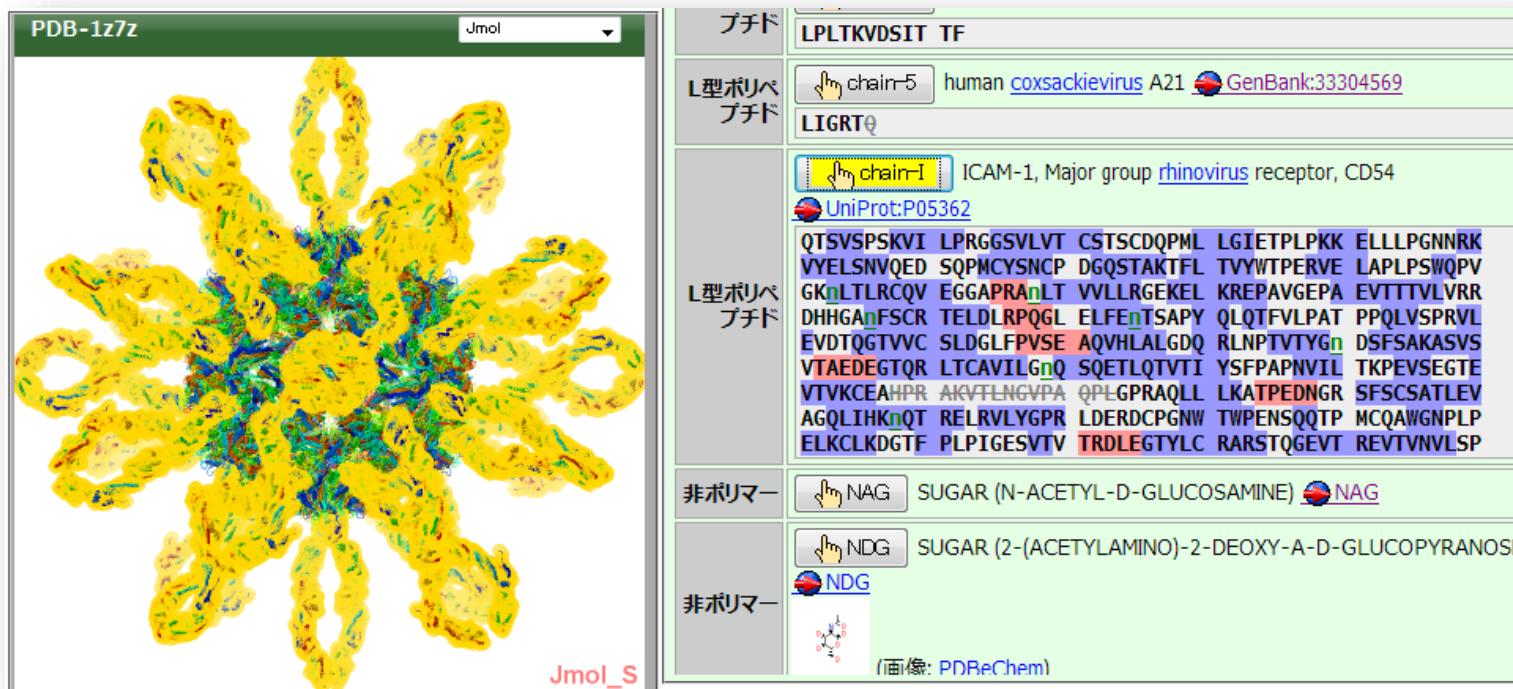


受容体で飽和した  
ウイルスを構造解析

# コクサッキーウィルスの例

## 手順

- PDB-1z7zをひらく
  - 「データ」パネル、「集合体」行、「1 :主鎖のみ」ボタンを押す  
→正20面体対称構造が表示される
  - 「構成要素」パネル、「chain-I」の選択ボタンを押す  
→ウィルス受容体が選択状態になる
- ※ 球状のウイルスのまわりに、長い受容体分子が結合している



# EMDBデータとの重ね合わせ

## 手順

- 「データパネル」、「登録構造」ボタンを押す  
→もとの表示に戻る
- 「データパネル」、「EMDBのマップデータ」の「表示」をチェック  
→対応するEMDBデータが、重ねて表示される
- 「表示」パネルタの、「ズーム」と「断面」のスライダーを調節し、結合部分を見やすくする  
→重なり具合がよくわかるようになる

