

# タンパク質立体構造データベース(PDBj)

---

統合データベース講習会：AJACS筑波4

物質・材料研究機構 つくば市

2018-07-10

鈴木 博文 (大阪大学蛋白質研究所)

## 自己紹介

---

- 鈴木 博文
- 大阪大学 蛋白質研究所に所属、PDBjのスタッフ
- 昔の仕事: 電子顕微鏡を使った立体構造解析
- 今の仕事: PDBjのサービス、ツールの開発 (電子顕微鏡データ)
- 「万見」の作者、UCSF-Chimeraは単なるユーザー
- **ウイルス学、薬学は専門外**
- 「先生」ではない

## 概要

---

1. PDBjのウェブサイトをさわってみる
2. wwPDBとPDBj
3. 「万見」で詳しく構造を見る
4. 生データを見てみる
5. UCSF-Chimeraでもっと詳しく構造を見てみる

## この演習・この資料について

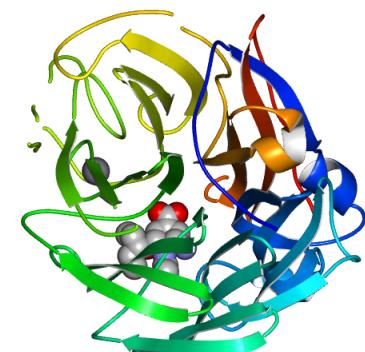
---

- 方向性
  - X 具体的な知識・技能を得る
  - ○ まずは触ってみる・感触を得る
- 所要時間が不明、最後まで実施できない可能性がある
- アイコン
  - : 実施する手順
  - : 確認すること

## 「タミフル」がテーマ

---

- インフルエンザ治療薬・タミフルを、主題とする
- 「タミフル」(成分名 オセルタミビル)は構造生物学の成果とされている
- 「ノイラミニダーゼ」というタンパク質に作用する
- 今回見るデータ: PDB-IDが「3cl0」のエントリ
  - オセルタミビルがついたノイラミニダーゼの構造
  - タミフル耐性変異 (リレンザ非耐性)、N1型のインフルエンザウイルス由来
  - 構造解析の論文はnatureに掲載



# 1. PDBjのウェブページをさわってみる

---

# PDBjトップページ

- ① 「pdbj」を検索、あるいは [pdbj.org]とアドレスバーに入力
- ② ページを確認
  - ウィンドウの大きさによって表示が異なる
  - 左メニューが表示されていない場合は、左上にメニューボタン"≡"
- ③ 上部に検索ボックス

The screenshot shows the Protein Data Bank Japan (PDBj) homepage. At the top, there is a search bar with the number '141415' and the date '(2018-06-20)'. Below the search bar, there are language links: English, 日本語, 简体中文, 繁體中文, and 한국어. A navigation menu includes links for www.PDB, RCSB PDB, PDBer, BMRB, Adv. Search, and Search help. On the right side, there is a molecular visualization labeled '6EMX' and a link to '最新公開データベース'. Below the main search area, there is a section titled '初めての利用者のためのガイド' (Guide for New Users) with text about the site's purpose and usage. To the right, there is a sidebar with sections for '今月の分子' (Molecule of the Month) showing '222: タンパク質とナノ粒子 (Proteins and Nanoparticles)' and a molecular visualization, and 'WORLDWIDE PROTEIN DATA BANK' and 'BMRB検索' links.

# 検索してみる

- ④ 検索ボックスに「インフルエンザ」と入力

(実際には、データは英語のみなので、英語での検索のほうが確実)



- ⑥ 検索結果を見てみる
  - ヒットしたエントリを見てみる
  - 「PDB」というタブ以外の内容も見てみる
- ④ タブ[ウェブページ]の「113: インフルエンザ ノイラミニダーゼ」をクリック

PDB: 1159 件 ウェブページ: 17 件 ステータス検索: 55 件 化合物検索: 0 件

変換クエリ: (influenza | grippe)

3BT6 CRYSTAL STRUCTURE OF INFLUENZA B VIRUS HEMAGGLUTININ

分子名称: 2-(ACETYLAMINO)-2-DEOXY-A-D-GLUCOPYRANOSE, Inf (HA), N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE, ...  
著者: Wang, Q., Cheng, F., Lu, M., Tian, X., Ma, J.  
登録日: 2007-12-27  
公開日: 2008-05-27  
最終更新日: 2011-07-13  
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.8 Å)  
主引用文献: Crystal structure of unliganded influenza B virus. J.Viro., 82, 2008

2RFT CRYSTAL STRUCTURE OF INFLUENZA B VIRUS

# ノイラミニダーゼの解説ページ

## 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、転載・引用については[利用規約](#)をご覧ください。

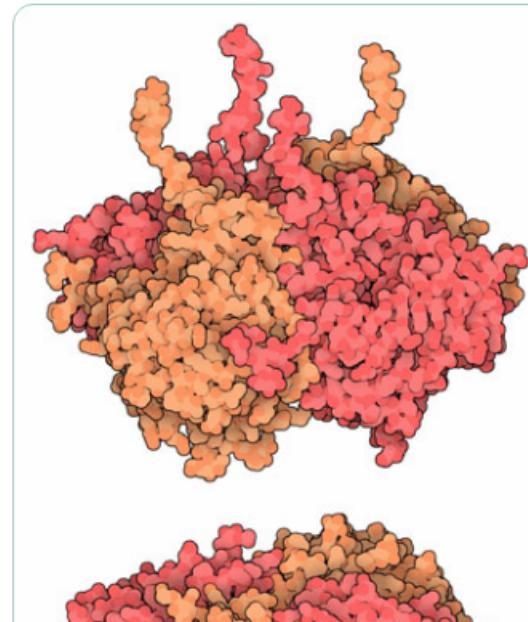
[「今月の分子」一覧に戻る](#) / [この記事のRCSBオリジナルサイト（英語）を見る](#)

：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(ヘマグルチニン、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。

### 糖の切断

右図上部に示したのはノイラミニダーゼ(PDBエントリー [1nn2](#))で、4つの同じサブユニットが四角く並んでいる。ウイルス表面は通常長いタンパク質の柄でつながっているが、ここに示した構造ではその部分が取り除かれている。なぜならその部分は非常に柔軟性が高く結晶構造が決定できないからである。活性部位は上側表面の深い窪みの中にある。ノイラミニダーゼは多糖鎖に結合し、末端の糖を切り取る。ノイラミニダーゼの表面はいくつかの多糖鎖で修飾されている



- 「今月の分子」のノイラミニダーゼの記事
  - ノイラミニダーゼ: 宿主細胞の糖鎖を切断する酵素
  - オセルタミビルなど: 酵素の活性部をブロックしてウイルスの増殖を抑制

# ノイラミニダーゼのPDBデータを見てみる

- ① ページ上部の検索ボックスに「3cl0(さん・シー・エル・ゼロ)」を入力
- ② PDBエントリ「3cl0」が表示される
  - 上部にタブがある、[概要]タブが選択されている
- ③ このデータの概要を見てみる

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

## 3CL0

### N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir

#### 3CL0 の概要

関連するPDBエントリー [3CKZ](#) [3CL2](#)

分子名称 Neuraminidase, (3R,4R,5S)-4-(acetylamino)-5-amino-3-(pentan-3-yloxy)cyclohex-1-ene-1-carboxylic acid, CALCIUM ION, ... ([4 entities in total](#))

機能のキーワード n1, neuraminidase, h274y, oseltamivir, glycosidase, hydrolase, membrane, transmembrane, virion, viral protein

由来する生物種 Influenza A virus

ポリマー鎖数 1

# 分子構造ビューアを使ってみる

① 画面右側の分子構造の画像(「非対称単位」の下)をクリック

→ Molmilという分子構造ビューアが表示される

② 構造ビューアを操作してみる

- マウスのドラッグで分子の回転、ホイール回転(または右ボタンドラッグ)で拡大縮小、など

③ 分子の表示を変えてみる

- 上部の[表示様式]と[配色]のメニューを操作し、表示様式を変更してみる

④ 「生物学的単位」を表示してみる

- 元のウインドウの「生物学的単位」の下の画像をクリック
- Molmilのウインドウの中身が切り替わる
- このページでも、表示の切り替えが可能



## 「構造情報」タブの内容

⌚ 元のウインドウ、構造情報タブをクリック

⌚ 「エンティティ」という情報(構成要素の情報が表示されている)

- このデータの場合は、ノイライニダーゼ、長い名前の化合物、カルシウムイオン、水の項目がある
- 一つのデータエントリに複数の要素が含まれる、タンパク質以外の要素も

▼ エンティティ	
鎖名	A
説明	Neuraminidase
種類	polymer
鎖長	385
分子量	42209.9
分子数	1
	UniProt ( <a href="#">Q6DPL2</a> ) Pfam ( <a href="#">PF00064</a> )
	Influenza A virus
エンティティの一般名	
鎖名	
説明	(3R,4R,5S)-4-(acetylamino)-5-amino-3-(pentan-3-yloxy)cyclohex-1-ene-1-carboxylic acid
種類	non-polymer
鎖長	
分子量	284.4
分子数	1
	<a href="#">G39</a>
エンティティの一般名	
鎖名	

⌚ 「配列ビューア」を見てみる

- アミノ酸配列と2次構造、結合部位の情報など

# 実験情報タブの情報

① [実験情報]タブをクリック

② 実験情報を見てみる

- X-RAY DIFFRACTION (X線回折)という方法で解析されたデータである
- このPDBというデータベースは実験結果のデータベース
  - 同じタンパク質・同じ試料でも、別の実験から得られたデータは別エントリ

精密化の統計情報			
実験手法:			X-RAY DIFFRACTION (2.2 Å)
格子定数 [Å]	115.066	115.066	63.321
格子定数 [度]	90.00	90.00	90.00
空間群			P 4 21 2
分解能 [Å] (低 - 高)	20.00	- 2.20	
最も高い分解能シェルの値			2.256 - 2.200
R因子	0.19561		
R-work	0.19323		
最も高い分解能シェルの値			0.272
R-free	0.24030		
最も高い分解能シェルの値			0.343
結合長の平均二乗偏差 (RMSD) [Å]	0.009		
結合角の平均二乗偏差 (RMSD) [度]	1.152		
回折データの統計情報			

## 2. wwPDBとPDBj

---

## 2つの側面

---

PDBは...

### 世界でたったひとつのデータベース

- 厳重に秘匿
- 厳格に管理

### 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

# PDBとは



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

ログインしていません トーク 投稿記録 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

Wikipedia内を検索



## 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
  - 2.1 統計情報

## PDBの歴史

---

年	出来事
1971	設立 ブルックヘブン国立研究所(米)
1998	RCSB(米)へ移管
2003	wwPDB設立 (RCSB-PDB/BMRB(米), PDBe(欧), PDBj(日))

- 非常に古くからある
  - インターネット・データベースの「黎明期」
- 運営組織の移管を経ている

## データの受け入れ (登録・検証・品質管理)

- 世界中の研究者から集める
  - PDBへの登録は事実上、義務
- 登録受付・検証・品質管理はPDBの3拠点で**分担**
  - 共通ルール・専任のアノテーターによる注釈付など
  - 全拠点で**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
  - 競争が激しい研究テーマが多い



## PDBへの登録が義務

nature誌が論文を受理する条件

DATA SOURCE	DATA SOURCE
Macromolecular structure	<a href="#">Worldwide Protein Data Bank (wwPDB)</a>
	<a href="#">Biological Magnetic Resonance Data Bank (BMRB)</a>
	<a href="#">Electron Microscopy Data Bank (EMDB)</a>

<http://www.nature.com/authors/policies/availability.html> より

他の多くの論文ジャーナルも同様の条件

→ PDBにデータを登録しないと、論文発表できない

## データの公開

---

- 世界同時公開
  - 毎週水曜0:00 (日本時間9:00)
- 公開後は**パブリックドメイン**
  - 使途は問わない、人類の財産
- 各拠点独自
  - 独自のツール・独自のUI



## いろいろな「PDB」

---

実態	名称
データベース名 (アーカイブ名)	PDB (Protein Data Bank)
ファイル形式 (旧・公式フォーマット)	PDB
組織名	wwPDB, PDBj, RCSB-PDB, PDBe

- データのファイルフォーマットについては後述

## wwPDBの「諮問委員会」

---

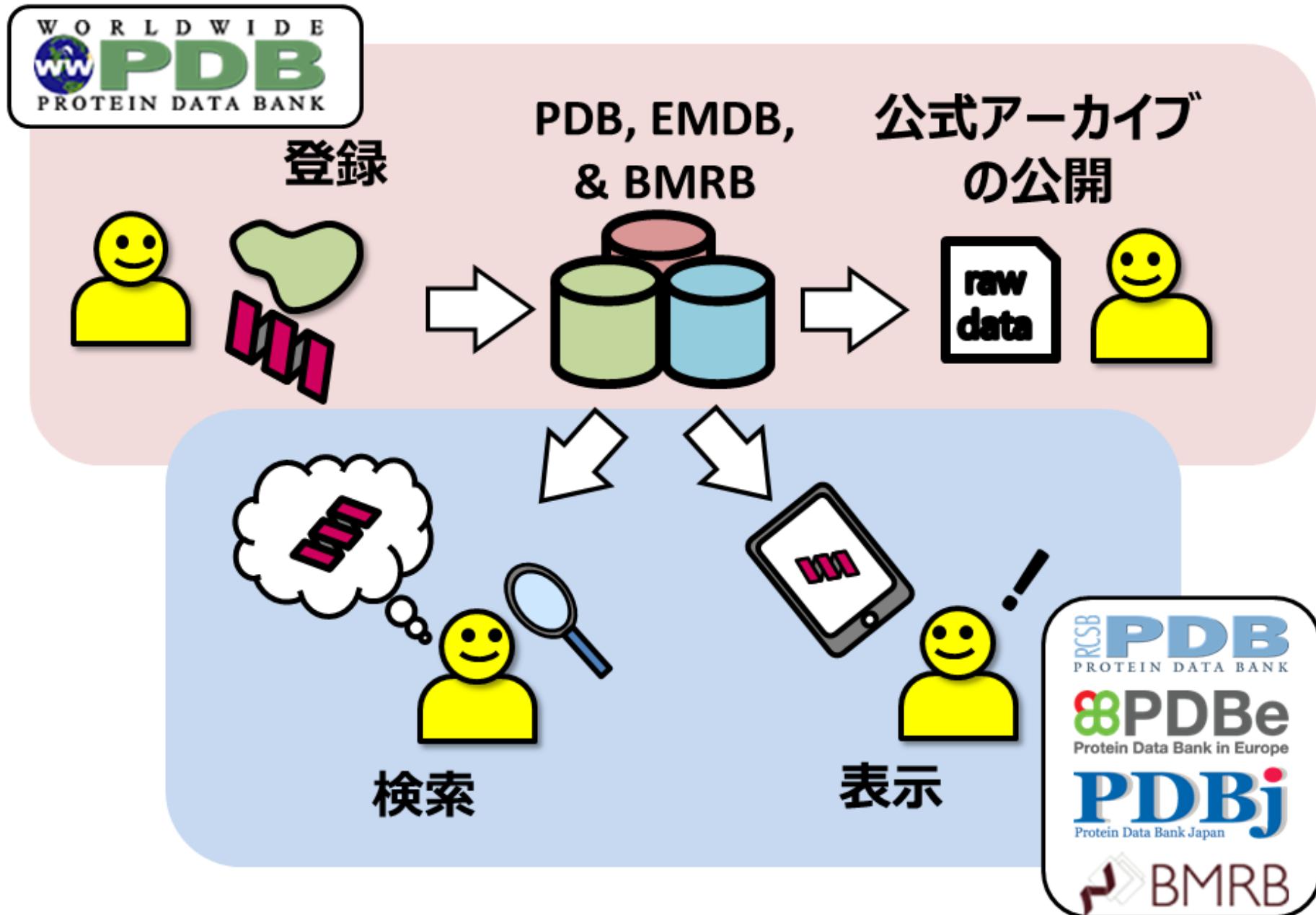


wwPDB Advisory Committee Meetings 2014

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の運営



## 2つの側面

---

PDBは...

### 世界でたったひとつのデータベース

- 厳重に秘匿
- 厳格に管理

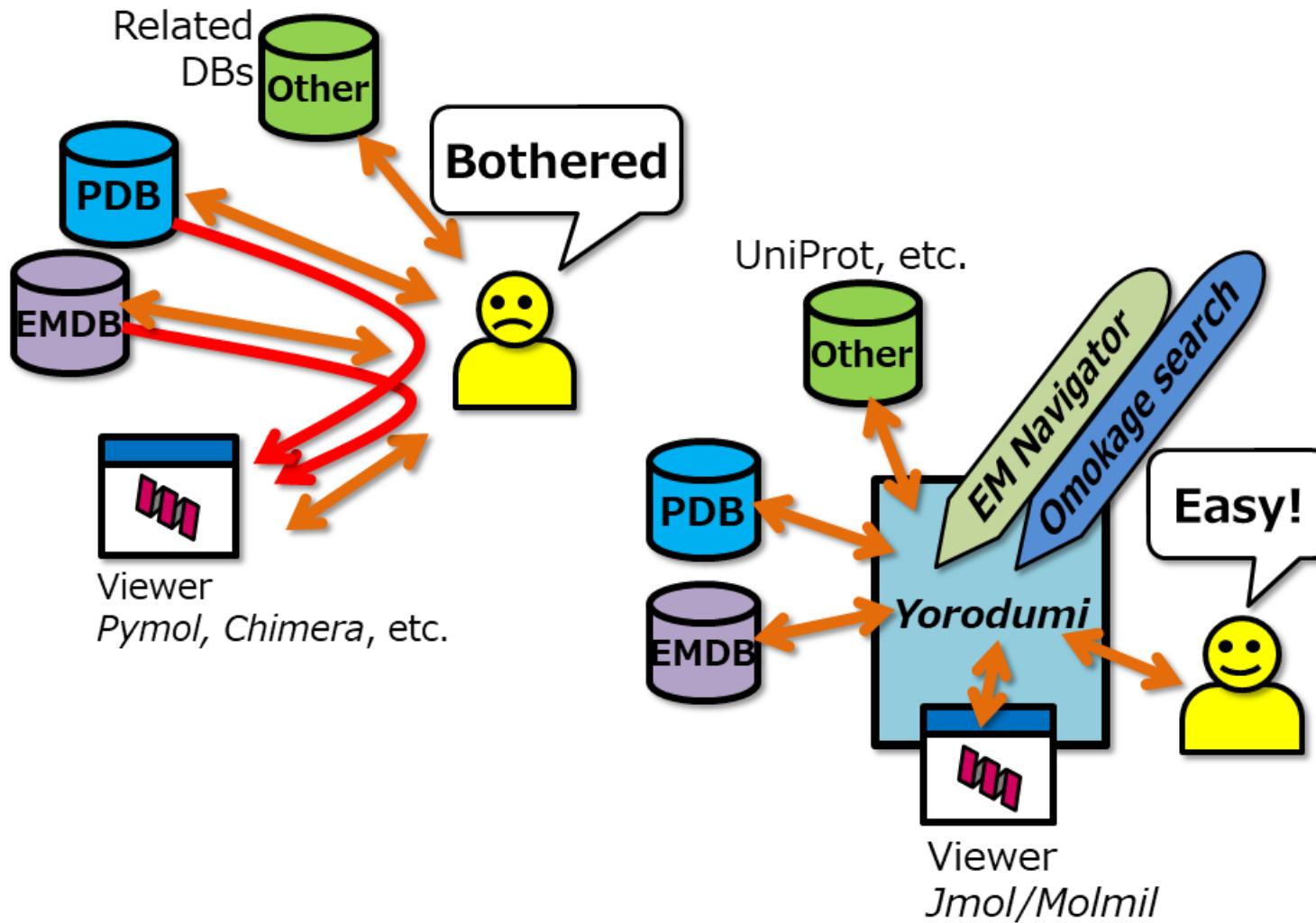
### 世界中にたくさんあるデータベース

- 容易に入手
- 自由に利用
- 勝手に公開

### 3. 「万見」で詳しく構造を見る

---

# 「万見」とは



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

# 「万見」でオセルタミビルのエントリを見てみる

① 「万見」のページを開く

- PDBエントリ3cl0のページに戻る
  - 閉じてしまった場合は、アドレスバーに "pdbj.org/pdb/3cl0"
- ページ右側の[他のデータベース情報]のボックスの中の3つめ、[Yorodumi]をクリック



This screenshot displays the PDB entry page for 3cl0. At the top, it shows the title "万見 - PDB-3cl0: N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir -". Below this is a navigation bar with a plus sign (+), a "データを開く" (Open Data) button, and a minus sign (-). The main content area is titled "基本情報" (Basic Information). It contains several tables:

- エントリ情報:** Shows the database as PDB / ID: 3cl0, with buttons for "構造の表示" (View Structure) and "ダウンロードリンク" (Download Link).
- タイトル:** N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir.
- 構成要素:** Neuraminidase (with a "詳細" (Details) button).
- キーワード:** A list of biological terms including VIRAL PROTEIN, HYDROLASE, N1, neuraminidase, H274Y, oseltamivir, Glycosidase, Hydrolase, Membrane, Transmembrane, and Virion (ウイルス).
- 機能・相同性:** A list of enzyme and protein families including Sialidase, Influenza viruses A/B, Glycoside hydrolase, family 34, Sialidase superfamily, Neuraminidase, exo-a-sialidase, exo-alpha-(2->3)-sialidase activity, exo-alpha-(2->6)-sialidase activity, exo-alpha-(2->8)-sialidase activity, and several membrane-related processes.

万見の3cl0のページ

## 「生物学的」集合体(構造単位)の確認

① 画面を「集合体」の部分まで下にスクロール

② 各種集合体の詳しい情報が表示される

- 「登録構造単位」と「1」の情報を確認

③ [ビューアーで表示]ボタンをクリックすると  
Molmilで表示される

- 双方の構造を表示してみる

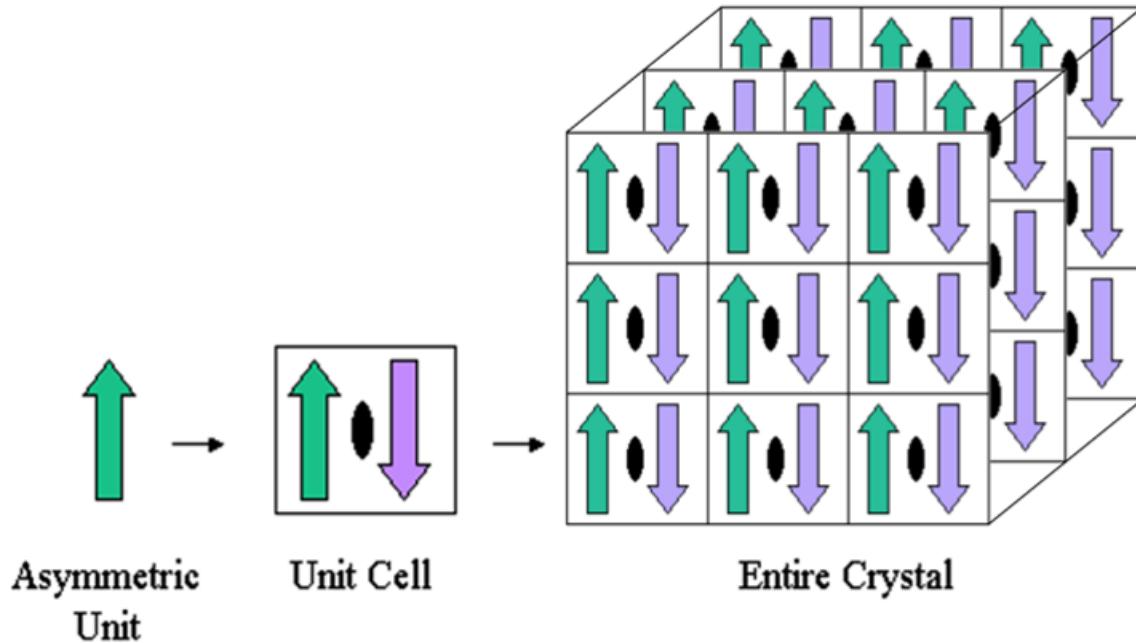
The screenshot shows the 'Collection' (集合体) interface with the following details:

- Top Panel:** Buttons for 'Viewer' (ビューアーで表示), 'Summary' (概要), and 'Detailed Components' (構成要素の詳細). It also displays '42.5 kDa, 1 polypeptide' and a link to 'Omokage search'.
- Second Panel:** Shows a 3D molecular model and a button for 'Viewer' (ビューアーで表示).
- Third Panel:** Shows another 3D molecular model and a button for 'Viewer' (ビューアーで表示). Below it, a table provides structural parameters:

登録者・ソフトウェアが定義した集合体
170 kDa, 4 polypeptides
構造データをダウンロード
Omokage検索でこの集合体の類似形状データを探す (詳細)
- Bottom Panel:** A small 3D model of a molecule and a table with crystallographic data:

Length a, b, c (Å)	115.066, 115.066, 63.321
Angle α, β, γ (deg.)	90.00, 90.00, 90.00
Int Tables number	90
Space group name H-M	P 4 21 2

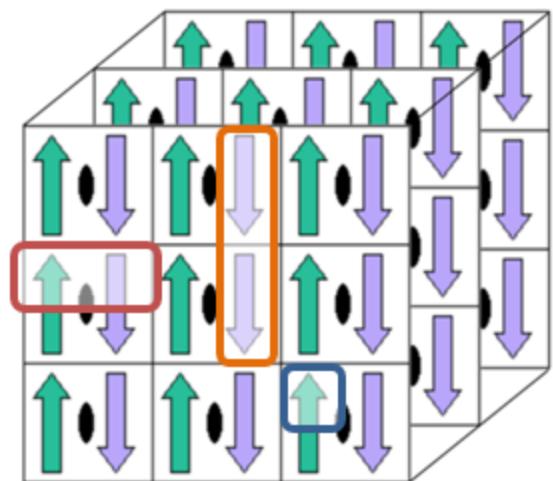
# 非対称単位



- PDBに登録されているデータのほとんどは結晶構造
- 結晶構造では非対称単位 (Asymmetric unit)の原子配置とその対称性情報が登録されている
- らせん対称や、正20面体型対称など、結晶学以外の非対称単位もある

## 生物学的単位（生物学的集合体）

- 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



## 構成要素を確認

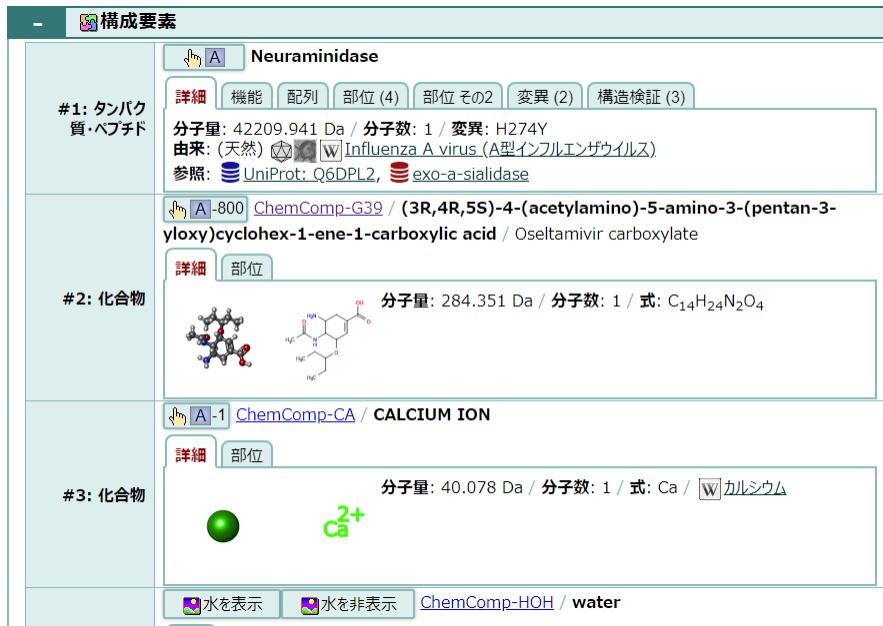
① 画面を「構成要素」の部分まで下にスクロール

② 各種構成要素の情報を確認

- 要素#2がオセルタミビル、「G39」というIDを持つ化合物

③ 各要素の選択ボタンを押して、位置を確認

- 指アイコンのついたボタンは、ビューア上でその要素を選択するボタン
- 「選択」された要素は黄色く光る



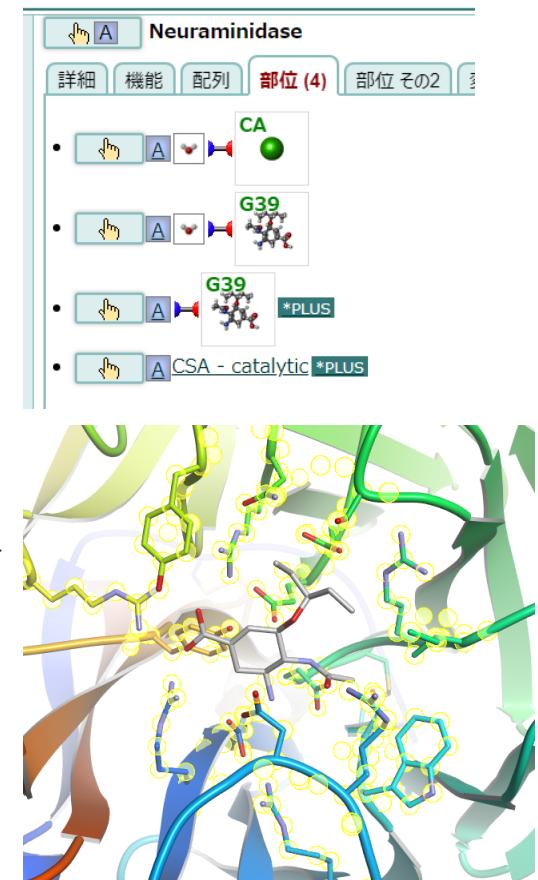
# オセルタミビルの結合部位

① ノイラミニダーゼ(Neuraminidase)の[配列]タブをクリック

- 配列ビューアが表示される
- 配列の一部をマウスで選択すると、対応する部位がビューアでフォーカスされる

② ノイラミニダーゼの結合部位を観察

- ノイラミニダーゼの[部位]タブをクリック  
(PDBデータに登録されている活性部位などの情報が表示されるタブ)
- G39の選択ボタンをクリック → 結合部位の残基の側鎖が表示される
- ビューア中の原子を右クリックすると、原子の情報とスタイルのコントロールメニューが表示される



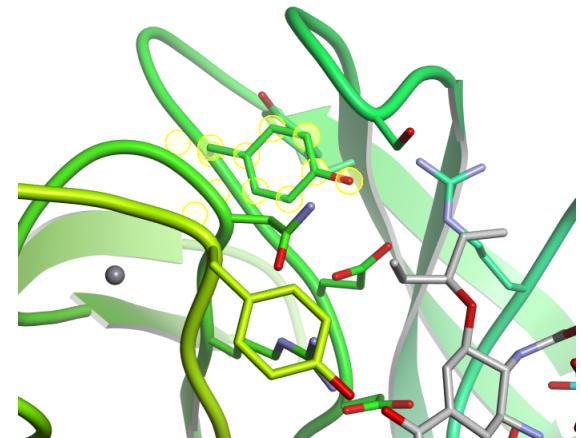
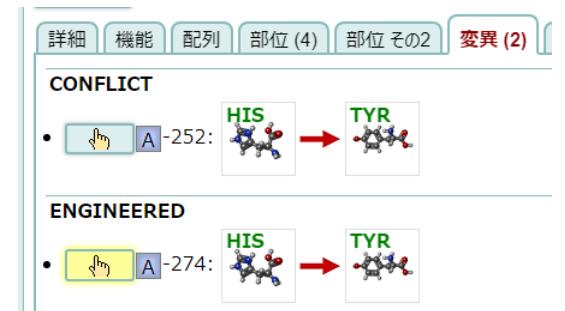
## 変異残基を確認

⌚ タミフル耐性の変異を引き起こした残基を確認

- 要素ノイラミニダーゼの[変異]タブをクリック  
(2つの変異が登録されているが、上はCONFLICT(配列データベースとの相違))
- 「ENGINEERED」と書かれている残基274の選択ボタンをクリック

👀 ビューア中での位置を確認

- 変異残基は結合残基には含まれていない、オセルタミビルから少し離れている



## 4. 生データを見てみる

---

# ダウンロードできるファイル

The screenshot shows a download interface for the PDB entry 3cl0. It includes sections for 'リソース' (Resources), 'ファイル形式' (File Format), and 'PDB' and 'PDBx/mmCIF'. Under 'PDB', there are three options: '全ての情報' (All information) with a file size of 69.57 KB, '全ての情報(非圧縮)' (All information (uncompressed)) with a file size of 291.81 KB, and 'ヘッタのみ' (Only header) with a file size of 7.05 KB. Each option has a '画面表示' (View in browser) button. Under 'PDBx/mmCIF', there is one option: '3cl0.cif.gz' (87.16 KB) with a '▶ 画面表示' (View in browser) button.

ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	操作
全ての情報	<a href="#">pdb3cl0.ent.gz</a> (69.57 KB)	画面表示
PDB	<a href="#">pdb3cl0.ent</a> (291.81 KB)	
ヘッタのみ	<a href="#">pdb3cl0.ent.gz</a> (7.05 KB)	画面表示
PDBx/mmCIF	<a href="#">3cl0.cif.gz</a> (87.16 KB)	▶ 画面表示

## ① ダウンロードタブ

- PDBエントリ3cl0のページに戻る
  - 閉じてしまった場合は、アドレスバーに"[pdbj.org/pdb/3cl0](http://pdbj.org/pdb/3cl0)"
- [ダウンロード]タブをクリック

## ② 多くの種類のファイルがある、PDBとPDBx/mmCIFに注目

- ファイル形式名がその定義のページへのリンクになっている
- ファイル名をクリックでダウンロード
- [画面表示]ボタンでブラウザ内の表示

## PDB形式

---

### 特徴

- テキスト形式、行ごとのデータ区切り、文字数で情報内容を定義
- 以前の公式フォーマット、段階的に廃止していく予定

### 利点

- コンパクト
- 読み込みやすい

### 欠点

- 複雑な情報は表記できない
- 巨大な構造が表記できない (分子数、原子数に制限がある)
- 不完全な情報

# PDBファイルを見てみる

- ① PDBの行、[全ての情報]の[画面表示]ボタンをクリック
- ② ブラウザに表示されるテキストファイルを確認

- スクロールさせながらざっと眺める
- 行の先頭が、その行の内容を定義
- ファイルの前の方は"REMARK"などのメタ情報(構造データの付随情報)
- その後、殆どは"ATOM"という単語で始まる原子座標の情報

ATOM	747	CE2	TRP	A	178	-28.573	-65.728	10.661	1.00	16.97	C
ATOM	748	CE3	TRP	A	178	-28.822	-63.356	11.119	1.00	16.48	C
ATOM	749	CZ2	TRP	A	178	-29.867	-66.006	11.136	1.00	17.08	C
ATOM	750	CZ3	TRP	A	178	-30.103	-63.625	11.591	1.00	15.26	C
ATOM	751	CH2	TRP	A	178	-30.612	-64.946	11.602	1.00	17.35	C
ATOM	752	N	SER	A	179	-26.140	-61.689	13.002	1.00	17.78	N
ATOM	753	CA	SER	A	179	-26.798	-60.641	13.776	1.00	17.83	C
ATOM	754	C	SER	A	179	-26.204	-60.739	15.172	1.00	18.02	C
ATOM	755	O	SER	A	179	-25.941	-61.842	15.652	1.00	18.22	O
ATOM	756	CB	SER	A	179	-28.317	-60.833	13.796	1.00	17.95	C
ATOM	757	OG	SER	A	179	-28.969	-59.763	14.473	1.00	17.70	O
ATOM	758	N	ALA	A	180	-25.961	-59.595	15.809	1.00	18.06	N
ATOM	759	CA	ALA	A	180	-25.153	-59.563	17.025	1.00	18.49	C
ATOM	760	C	ALA	A	180	-25.458	-58.430	18.002	1.00	18.93	C
ATOM	761	O	ALA	A	180	-26.024	-57.401	17.637	1.00	18.74	O
ATOM	762	CB	ALA	A	180	-23.651	-59.561	16.664	1.00	18.19	C
ATOM	763	N	SER	A	181	-25.071	-58.653	19.250	1.00	19.53	N
ATOM	764	CA	SER	A	181	-25.019	-57.626	20.275	1.00	20.54	C
ATOM	765	C	SER	A	181	-23.834	-57.940	21.191	1.00	20.88	C
ATOM	766	O	SER	A	181	-23.350	-59.076	21.215	1.00	20.41	O
ATOM	767	CB	SER	A	181	-26.319	-57.596	21.080	1.00	20.99	C
ATOM	768	OG	SER	A	181	-26.343	-56.466	21.937	1.00	22.51	O
ATOM	769	N	ALA	A	182	-23.356	-56.933	21.926	1.00	21.38	N
ATOM	770	CA	ALA	A	182	-22.237	-57.115	22.853	1.00	22.01	C
ATOM	771	C	ALA	A	182	-22.223	-56.016	23.899	1.00	22.80	C
ATOM	772	O	ALA	A	182	-22.582	-54.872	23.607	1.00	22.97	O
ATOM	773	CB	ALA	A	182	-20.914	-57.139	22.106	1.00	21.87	C
ATOM	774	N	CYS	A	183	-21.827	-56.367	25.123	1.00	23.40	N
ATOM	775	CA	CYS	A	183	-21.589	-55.378	26.174	1.00	23.83	C
ATOM	776	C	CYS	A	183	-20.773	-55.950	27.331	1.00	23.42	C
ATOM	777	O	CYS	A	183	-20.618	-57.166	27.458	1.00	23.61	O
ATOM	778	CB	CYS	A	183	-22.904	-54.767	26.673	1.00	23.92	C
ATOM	779	SG	CYS	A	183	-24.149	-55.962	27.209	1.00	27.49	S
ATOM	780	N	HIS	A	184	-20.264	-55.056	28.172	1.00	22.82	N
ATOM	781	CA	HIS	A	184	-19.398	-55.411	29.288	1.00	21.91	C
ATOM	782	C	HIS	A	184	-20.060	-54.993	30.605	1.00	21.88	C
ATOM	783	O	HIS	A	184	-20.484	-53.834	30.758	1.00	21.63	O
ATOM	784	CB	HIS	A	184	-18.056	-54.704	29.106	1.00	21.42	C

# PDBx/mmCIF形式

---

## 特徴

- テキスト形式、STAR形式(空白区切り、表ベース)をベースにしたCIF形式をさらに拡張したもの
- **STAR (Self-defining Text Archive and Retrieval)**: ひとつのテキストファイルにたくさんの中身を記述 (PDBでは各々のエントリに約60個のテーブルが入っている)
- **CIF**は"Crystallographic Information File"、**mm**は "macro molecule"(巨大分子)
- 現在の公式フォーマット、多くのソフトウェアが対応済み

## 利点

- 関係データベースのような使い方で、複雑な情報を厳密に記述可能

## 欠点

- STARは普及している形式ではない、プログラムを自作する場合は面倒
- 開発の止まったソフトウェアでは対応していない -> コンバーターはある

# PDBx/mmCIF形式のファイルを見てみる

① PDBx/mmCIFの行、[全ての情報]の[画面表示]ボタンをクリック、メニューの"flat file"をクリック  
② ブラウザに表示されるテキストファイルを確認

- スクロールさせながらざっと眺める
- "\_"で始まる文字列がデータの種類を定義(表のヘッダのようなもの)
- 表敬式になっている部分は、定義された情報の繰り返し
- 同じく、殆どは"ATOM"という單語で始まる原子座標の情報

```
_atom_site.label_alt_id
_atom_site.label_comp_id
_atom_site.label_asym_id
_atom_site.label_entity_id
_atom_site.label_seq_id
_atom_site.pdbx_PDB_ins_code
_atom_site.Cartn_x
_atom_site.Cartn_y
_atom_site.Cartn_z
_atom_site.occupancy
_atom_site.B_iso_or_equiv
_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_num
ATOM 1 N N . VAL A 1 1 ? -15.199 -55.103 39.829 1.00 39.20 ? 83 VAL A N 1
ATOM 2 C CA . VAL A 1 1 ? -16.505 -54.611 40.373 1.00 39.21 ? 83 VAL A CA 1
ATOM 3 C C . VAL A 1 1 ? -17.424 -54.194 39.214 1.00 38.72 ? 83 VAL A C 1
ATOM 4 O O . VAL A 1 1 ? -16.955 -53.671 38.199 1.00 38.68 ? 83 VAL A O 1
ATOM 5 C CB . VAL A 1 1 ? -16.309 -53.459 41.435 1.00 39.66 ? 83 VAL A CB 1
ATOM 6 C CG1 . VAL A 1 1 ? -17.629 -52.738 41.767 1.00 39.48 ? 83 VAL A CG1 1
ATOM 7 C CG2 . VAL A 1 1 ? -15.665 -54.008 42.725 1.00 39.71 ? 83 VAL A CG2 1
ATOM 8 N N . LYS A 1 2 ? -18.726 -54.430 39.395 1.00 37.86 ? 84 LYS A N 1
ATOM 9 C CA . LYS A 1 2 ? -19.740 -54.244 38.361 1.00 36.89 ? 84 LYS A CA 1
ATOM 10 C C . LYS A 1 2 ? -20.042 -52.785 38.025 1.00 35.58 ? 84 LYS A C 1
ATOM 11 O O . LYS A 1 2 ? -19.997 -51.912 38.888 1.00 35.42 ? 84 LYS A O 1
ATOM 12 C CB . LYS A 1 2 ? -21.040 -54.964 38.759 1.00 37.26 ? 84 LYS A CB 1
ATOM 13 C CG . LYS A 1 2 ? -20.899 -56.476 39.033 1.00 38.99 ? 84 LYS A CG 1
ATOM 14 C CD . LYS A 1 2 ? -20.489 -57.276 37.782 1.00 41.28 ? 84 LYS A CD 1
ATOM 15 C CE . LYS A 1 2 ? -20.485 -58.799 38.053 1.00 42.37 ? 84 LYS A CE 1
ATOM 16 N NZ . LYS A 1 2 ? -21.853 -59.410 38.036 1.00 42.26 ? 84 LYS A NZ 1
ATOM 17 N N . LEU A 1 3 ? -20.348 -52.543 36.753 1.00 34.20 ? 85 LEU A N 1
ATOM 18 C CA . LEU A 1 3 ? -20.848 -51.254 36.288 1.00 32.93 ? 85 LEU A CA 1
ATOM 19 C C . LEU A 1 3 ? -22.211 -50.980 36.925 1.00 31.89 ? 85 LEU A C 1
ATOM 20 O O . LEU A 1 3 ? -23.153 -51.754 36.756 1.00 31.63 ? 85 LEU A O 1
ATOM 21 C CB . LEU A 1 3 ? -20.948 -51.240 34.758 1.00 32.86 ? 85 LEU A CB 1
ATOM 22 C CC . IGL A 1 2 ? -10.022 -50.611 22.002 1.00 22.02 ? 85 IGL A CC 1
```

## 5. UCSF-Chimeraで詳しく構造を見る

---

# UCSF Chimeraとは

**Quick Links**

- [Documentation](#)
- [Getting Started](#)
- [User's Guide](#)
- [Command Index](#)
- [Tutorials and Videos](#)
- [Guide to Volume Data](#)
- [Release Notes](#)
- [Download](#)
- [What's New in Daily Builds](#)
- [Map of Download Locations](#)
- [Galleries](#)
- [Image Gallery](#)
- [Animation Gallery](#)
- [Publications and Talks](#)
- [Related Databases and Software](#)
- [Citing Chimera](#)
- [Contact Us](#)

**Recent Citations**

Co-evolution of HIV envelope and annexin-targeting neutralizing

**UCSF CHIMERA**  
an Extensible Molecular Modeling System

UCSF Chimera is a highly extensible program for interactive visualization and analysis of molecular structures and related data, including density maps, supramolecular assemblies, sequence alignments, docking results, trajectories, and conformational ensembles. High-quality images and animations can be generated. Chimera includes complete documentation and several tutorials, and can be downloaded free of charge for academic, government, nonprofit, and personal use. Chimera is developed by the Resource for Biocomputing, Visualization, and Informatics (RBVI), supported in part by the National Institutes of Health (NIGMS P41 GM103311).

UCSF ChimeraX (or simply ChimeraX) is the next-generation molecular visualization program from the RBVI, following UCSF Chimera.

**Chimera Search**

Go Google™ Search

**News**

**June 2, 2018**  
A production release candidate (version 1.13) is [available](#); please try it and report any problems. See the [release notes](#) for what's new.

**October 24, 2017**  
Chimera production release 1.12 is now [available](#) (64-bit builds for Windows, Mac, and Linux). See the [release notes](#) for details.

**September 12, 2017**  
A production release candidate (version 1.12) is [available](#); please try it and report any problems. See the [release notes](#) for what's new.  
([Previous news...](#))

**Feature Highlight**

**Multiscale Models**

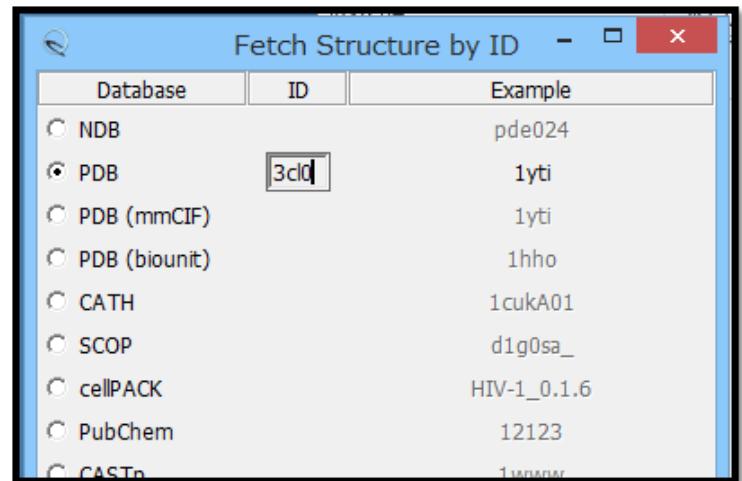
The [Multiscale Models](#) extension allows Chimera to display large complexes such as [virus capsids](#), [ribosomes](#), and [chromatin](#). It displays the quaternary structure of PDB models and allows subunits to be selected and shown in atomic detail.

- <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>
- 極めて多機能な立体構造ビューア
- 非営利利用なら無償で利用可能
- 巨大な構造の表示、電子顕微鏡データに便利

# Chimeraで3cl0を開く

## 手順

- Chimeraを起動
- メニュー[File]-[Fetch by ID...]  
→"FETCH structure by ID"パネルが出現
- [PDB]をクリックし、入力ボックスに"3cl0"を  
入力し、エンター  
→構造データがダウンロードされ、構造モデ  
ルが表示される
- やり直すには：メニュー [File]-[Close session]



## オセルタミビルの結合部位

⑥マウスで構造を動かして見てみる

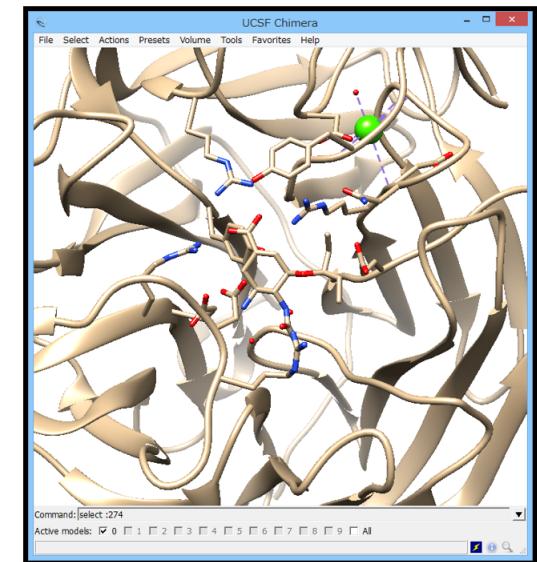
(マウス操作は先程のMolmilと似ている。右ボタンのドラッグでズーム、中ボタンのドラッグで平行移動など)

⑦オセルタミビルの結合部位の観察

(Chimeraはデフォルトで、リガンドとその結合部位の側鎖が表示される仕様)

※背景はプレゼン資料として見やすいように白にしてある

- 背景色の変更は、メニュー[Favorite]-[Preference]-[Background]で



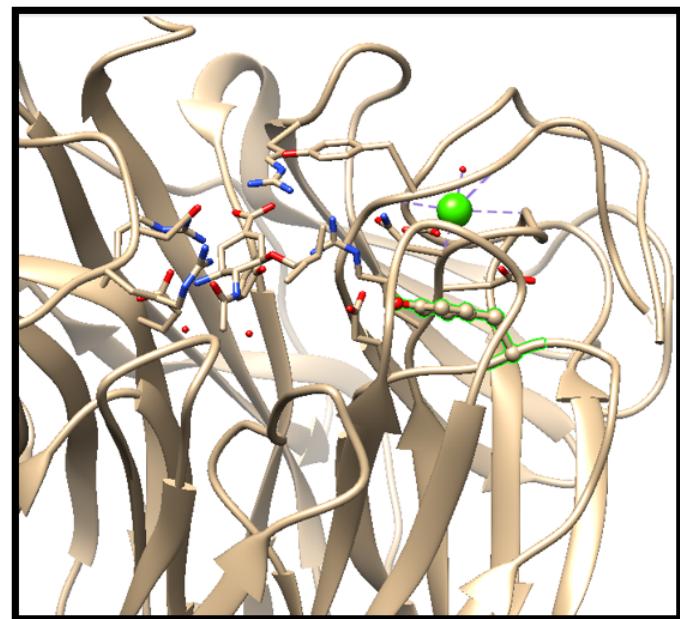
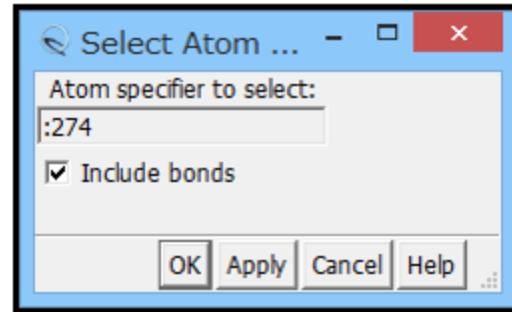
# 変異残基の表示

## 手順

- [Select]-[Atom Specifier...]  
→ "Select atom" パネルが出現
- 入力ボックスに":274"を入力し、エンター  
→ 残基番号274に含まれる原子が選択される
- [Actions]-[Atoms/Bonds]-[Show]
- [Actions]-[Atoms/Bonds]-[Ball & stick]  
→ 247に含まれる原子が表示され、「球と  
棒」のスタイルに

[Ok] と [Apply] の違い

- [Ok] 実行したあとパネルが消える
- [Apply] 実行するがパネルは残る



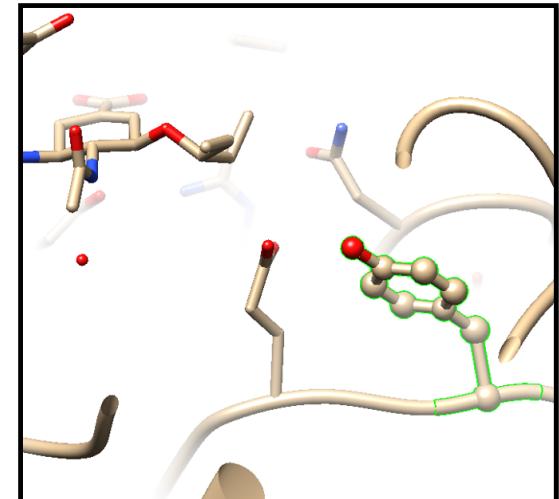
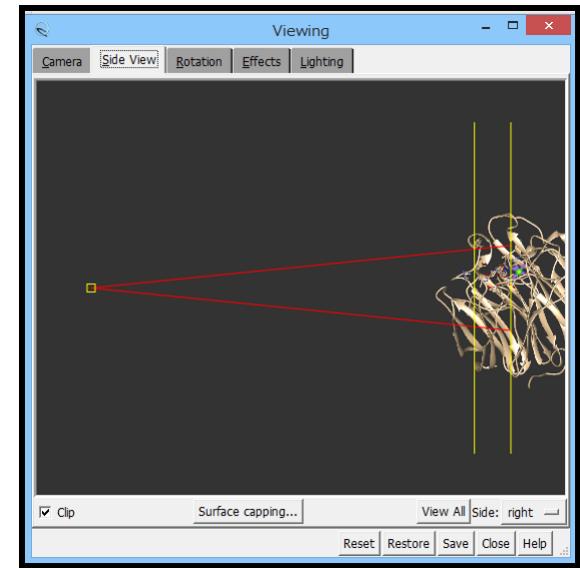
# 横から見てみる

## 手順

- [Favorites]-[Side View]  
→ "Viewing" パネルのサイドビューウィンドウが出現
- 2本の黄色い線をマウスで移動させ、見たい部分をよく見えるようにする

## サイドビュー

- 左の□: カメラの位置
- 赤い線: 上下の視野
- 黄色い線: 前後の切断面



## 続きは・・・

---

- 過去の講習会の資料 <https://pdbj.org/info/previous-workshop>
- 「タンパク質の立体構造を見る」 2016-03 @ 阪大  
<https://pdbj.org/workshop/20160315/suzuki.pdf>
  - 今回と同じデータ、ノイラミニダーゼのデータを扱った
  - 現行の「万見」とは違うので、前半はあまり参考にならない
  - 後半のChimeraを利用した演習で、「野生型との構造比較」「ザナミビル」との構造比較を実施
- 電子顕微鏡データを利用した講習会  
<https://pdbj.org/workshop/20160315/suzuki.pdf>