

PDBjの検索インタフェース 『PDBj Mine』の紹介と実習

バイオインフォマティクス講習会

2012/8/9

大阪大学蛋白質研究所 工藤 高裕

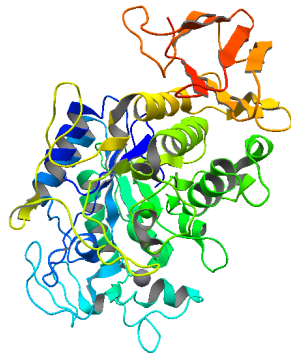
概要

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

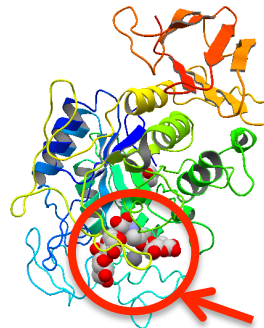
1. PDBについて

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。エントリー数は83,627(2012/08/08現在)。

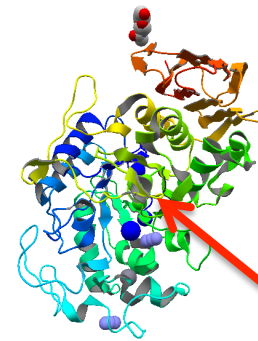


α -amylase
(PDB:1c8q)



inhibitor
(acarbose)

α -amylase
+inhibitor
(PDB:1b2y)



Mutation
(ASN→Ser)

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？

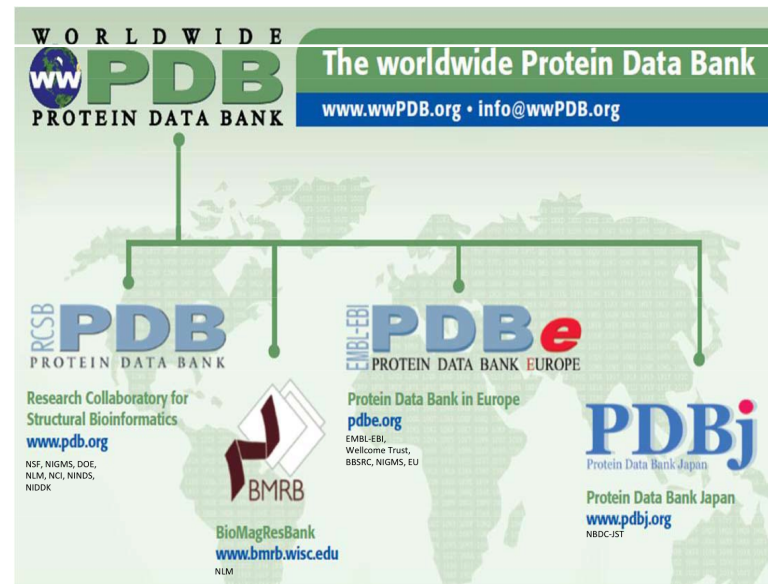
**A: X線結晶解析、NMR、電子顕微鏡等を使った「実験」に基づいて決定されたもの
(昔は理論モデルも含まれていた)**



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。



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。

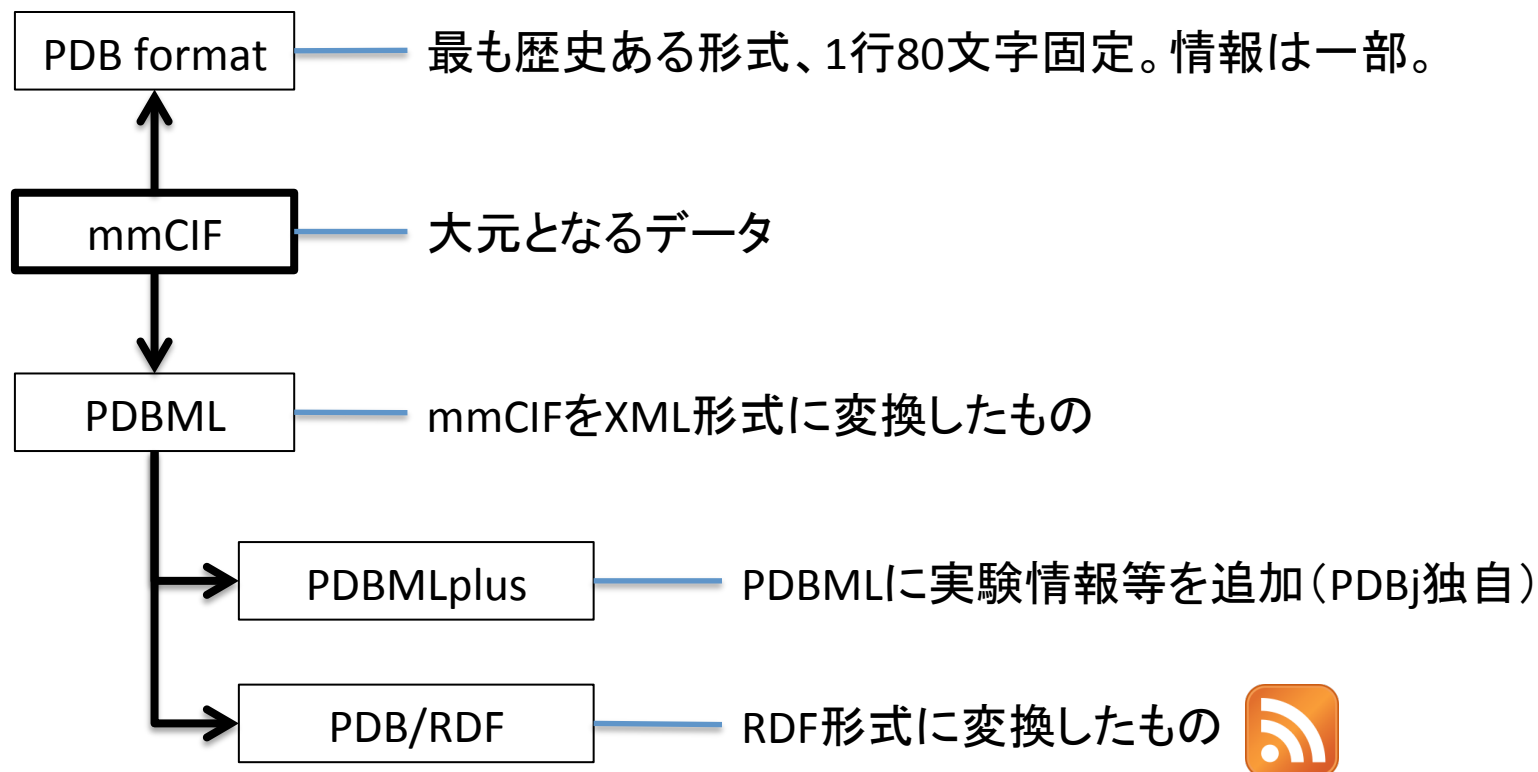


1. PDBについて

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。

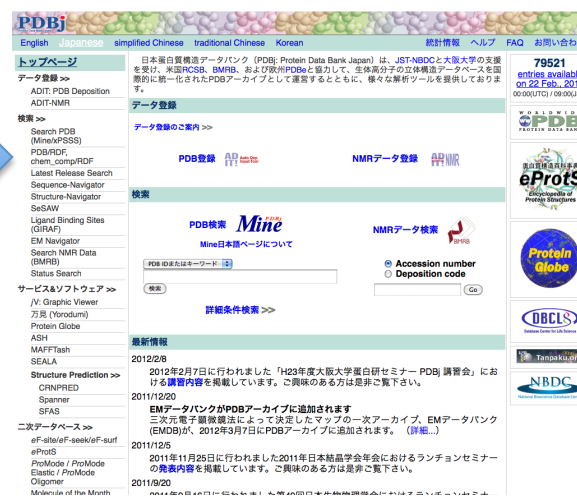
同一IDのPDBのデータは3極どこで見ても同じ。
但しPDBjだと日本語でも検索可能。

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。

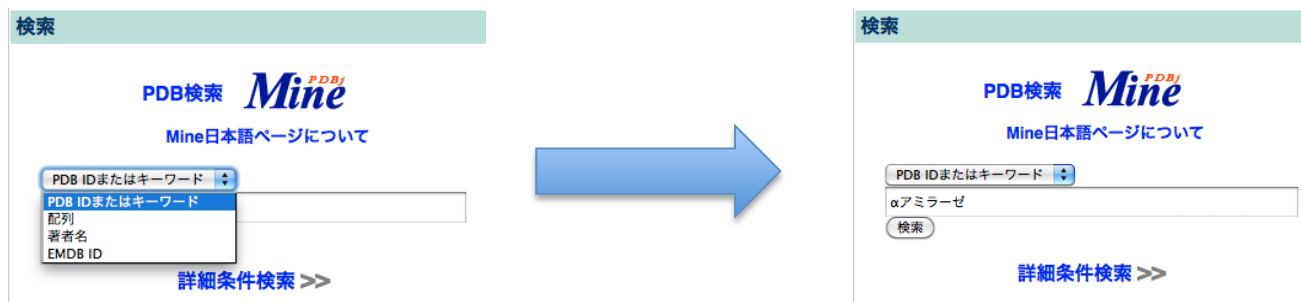
または直接 <http://pdbj.org/> にアクセス。



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。

PDBj
Mine

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:

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)

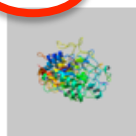
英語に自動変換して検索

リセット

検索

個別エントリーページへ

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

ダウンロード

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

ダウンロード

1pif



分子名称	: ALPHA-AMYLASE
タイトル	: PIG ALPHA-AMYLASE
著者	: Machius, M., Vertesy, L., Huber, R., Wiegand, G.
実験手法	: X-RAY DIFFRACTION
登録日	: 1996-06-15

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。

PDBj
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>

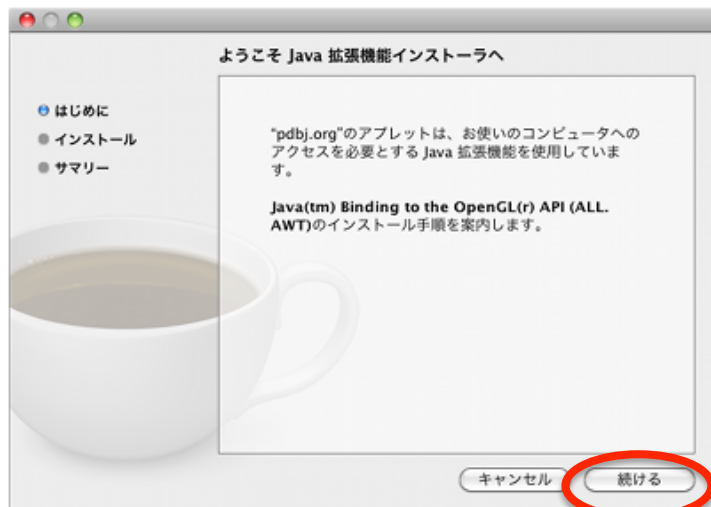


他の静止画像を見る マウスで動かせる画像

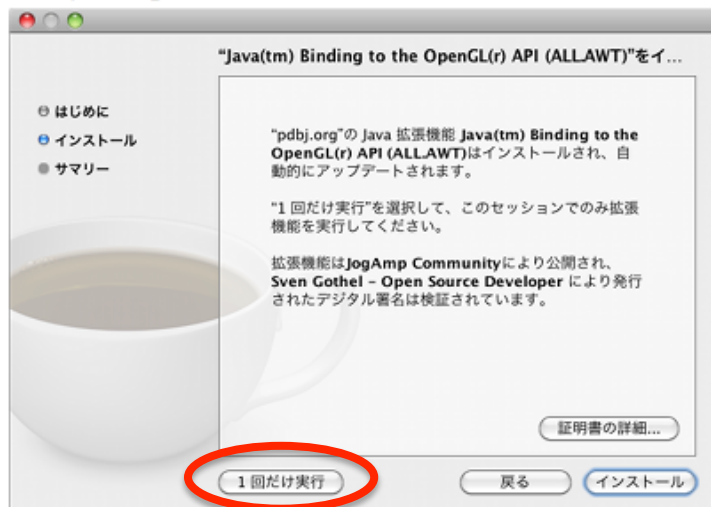
3次元構造ビューア
(jV4 / Jmol) で見る *1

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)
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。



→ 「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



→ 「実行」をクリック

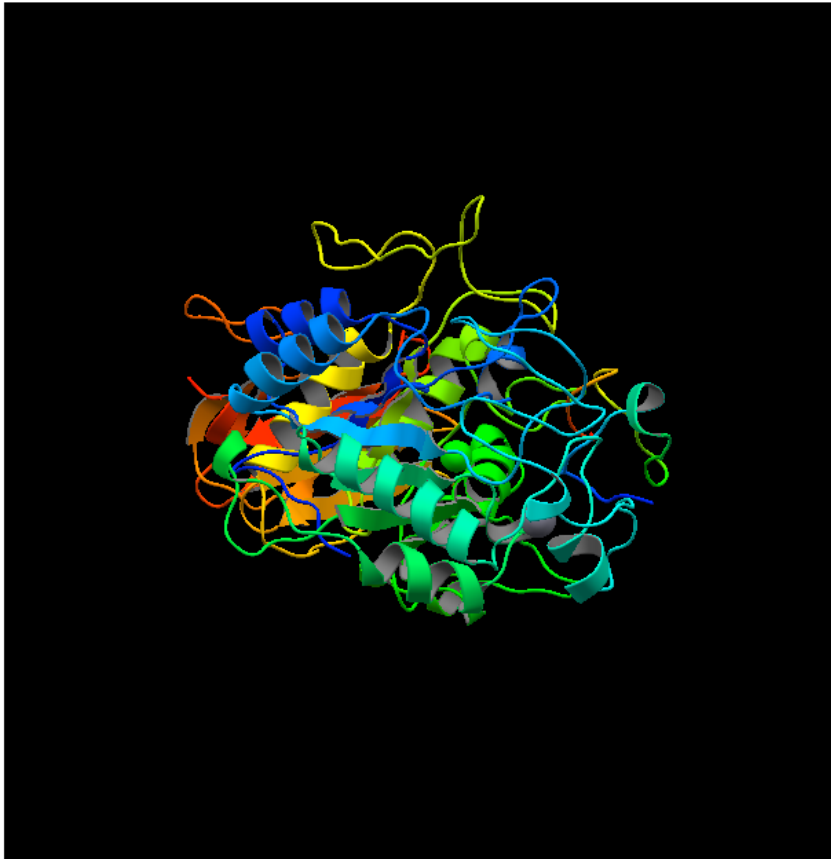
↑Windowsの場合

- JOGL (Java OpenGL) をローカル環境インストールする
- 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

→ 「許可」をクリック

PDBj Mine jV4 (JNLP) : 1clv
 service.pdbj.org/mine/Detail2?PDBID=1clv&PAGEID=Interactive1

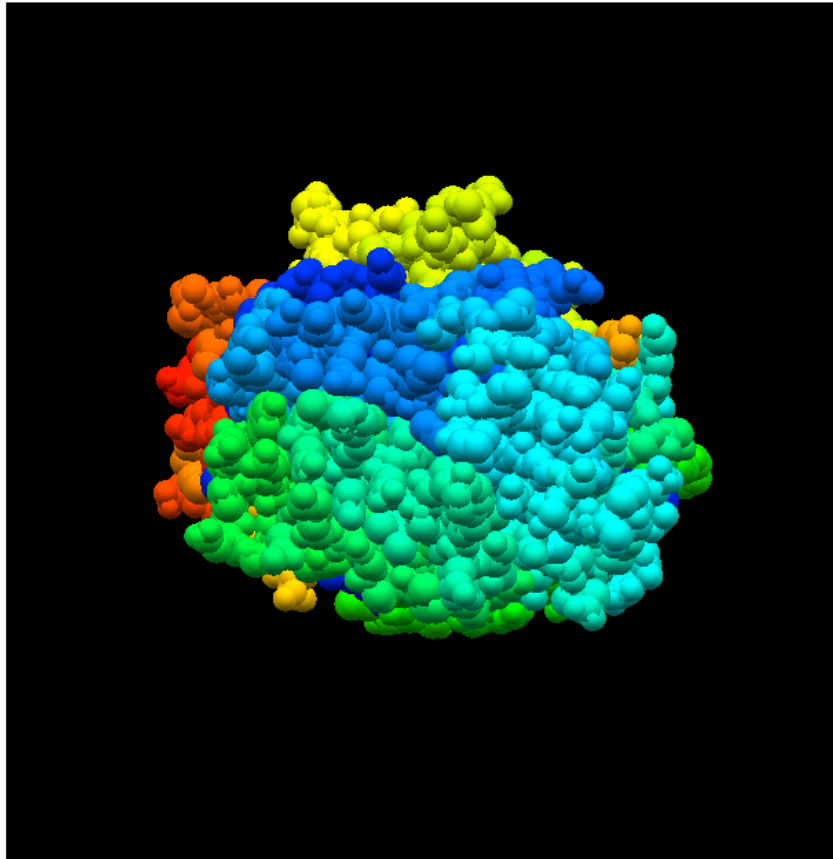


jV version 4 JNLP(JRE1.6以降 / Mac OS X 10.6以降)バージョン

スタイル: ☒ Default ☐ Cartoon ☐ Wireframe ☐ CPK_without_water ☐ CPK
 色: ☒ Default ☐ group ☐ chain ☐ atom

画像表示にエラーが出た場合は、上のプルダウン・メニューから
 "JNLP(JRE1.6以降 / Mac OS X 10.6以降)バージョン"か、"アプレットランチャー(JRE1.6以降 / Mac
 OS X 10.6以降)バージョン"あるいは"アプレットランチャー(JRE1.4または1.5 / Mac OS X 10.4また
 は10.5)バージョン"を選択しなおしてください。
 それでも問題が解決しない場合には、[既知の問題](#)を参照してください。

PDBj Mine jV4 (JNLP) : 1clv
 service.pdbj.org/mine/Detail2?PDBID=1clv&PAGEID=Interactive1



jV version 4 JNLP(JRE1.6以降 / Mac OS X 10.6以降)バージョン

スタイル: ☐ Default ☐ Cartoon ☐ Wireframe ☒ CPK_without_water ☐ CPK
 色: ☐ Default ☒ group ☐ chain ☐ atom

画像表示にエラーが出た場合は、上のプルダウン・メニューから
 "JNLP(JRE1.6以降 / Mac OS X 10.6以降)バージョン"か、"アプレットランチャー(JRE1.6以降 / Mac
 OS X 10.6以降)バージョン"あるいは"アプレットランチャー(JRE1.4または1.5 / Mac OS X 10.4また
 は10.5)バージョン"を選択しなおしてください。
 それでも問題が解決しない場合には、[既知の問題](#)を参照してください。

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PDB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

構造情報[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

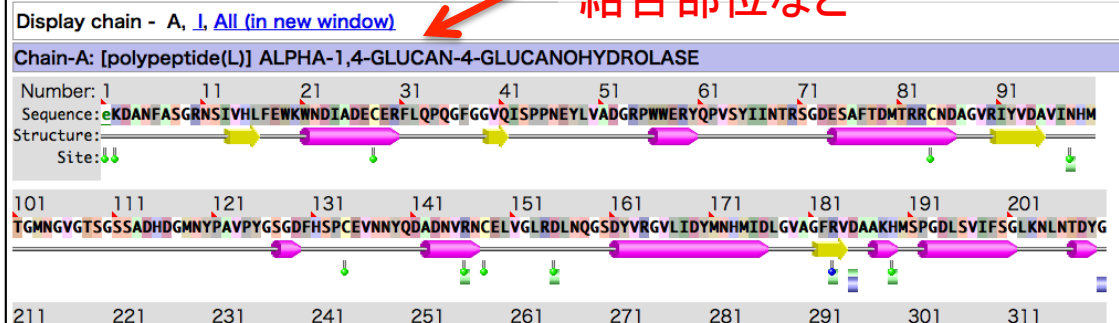
PDB ID または キーワード 検索

エンティティ

構造情報

鎖名	説明	種類	データベース名(アクセス番号)	分子量	分子数	由来する生物種	エンティティの一般名
A	PROTEIN (ALPHA-AMYLASE) 配列情報 (FASTA形式)	polymer	UniProt (P56634)	51263.6	1	Tenebrio molitor (yellow mealworm)	• ALPHA-1,4-GLUCAN-4-GLUCANOHYDROLASE
I	PROTEIN (ALPHA-AMYLASE INHIBITOR) 配列情報 (FASTA形式)	polymer	UniProt (P80403)	3595.1	1		
	CALCIUM ION	non-polymer	PDBChem (CA) Chem.Comp.(CA)	40.1	1		
	CHLORIDE ION	non-polymer	PDBChem (CL) Chem.Comp.(CL)	35.5	1		
	water	water	PDBChem (HOH) Chem.Comp.(HOH)	18.0	1		

二次構造、ジスルフィド結合、結合部位など



非対称単位の内容

ポリマー	鎖の数	2
	分子量の合計	54858.7
非ポリマー	分子数	2
	分子量の合計	75.6
全て	分子量の合計	54934.3

*水分子は含んでいません

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PDB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

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 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

実験情報

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

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PDB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

機能情報 [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

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)

内容

PDBデータベースに由来する情報

site_id: ACS

種類 サイト
残基数 3
詳細 CATALYTIC SITE

鎖名>	残基>
A	ASP185
A	GLU222
A	ASP287

site_id: AC1

種類 サイト
残基数 7
詳細 BINDING SITE FOR RESIDUE CA A 601

鎖名>	残基>
A	ASN98
A	ARG146
A	ASP155
A	HIS189
A	HOH611
A	HOH619
A	HOH628

site_id: AC2

種類 サイト
残基数 3
詳細 BINDING SITE FOR RESIDUE CL A 602

鎖名>	残基>
A	ARG183
A	LEU243
A	ARG321

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

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PDBと協力して、生体高分子の立体構

PDBj
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

結果 (1-50) / 74 次へ

1clvA 完全一致: 1jaeA 1tmqA

Seq.Identity:100% Seq.Positives:100% E-value:0Score:2514Query 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 QKDNFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGGGVQISPPNEYLVADGRPWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPVP
1tmqA 1 471 QKDNFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGGGVQISPPNEYLVADGRPWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPVP
1tmqA 完全一致: 1jaeA 1clvA

Seq.Identity:99% Seq.Positives:100% E-value:0Score:2499Query Coverage:100% Compound:ALPHA-AMYLASE, ALPHA-AMYLASE-INHIBITOR

新規検索 [1viwA] 構造の重ね合わせ

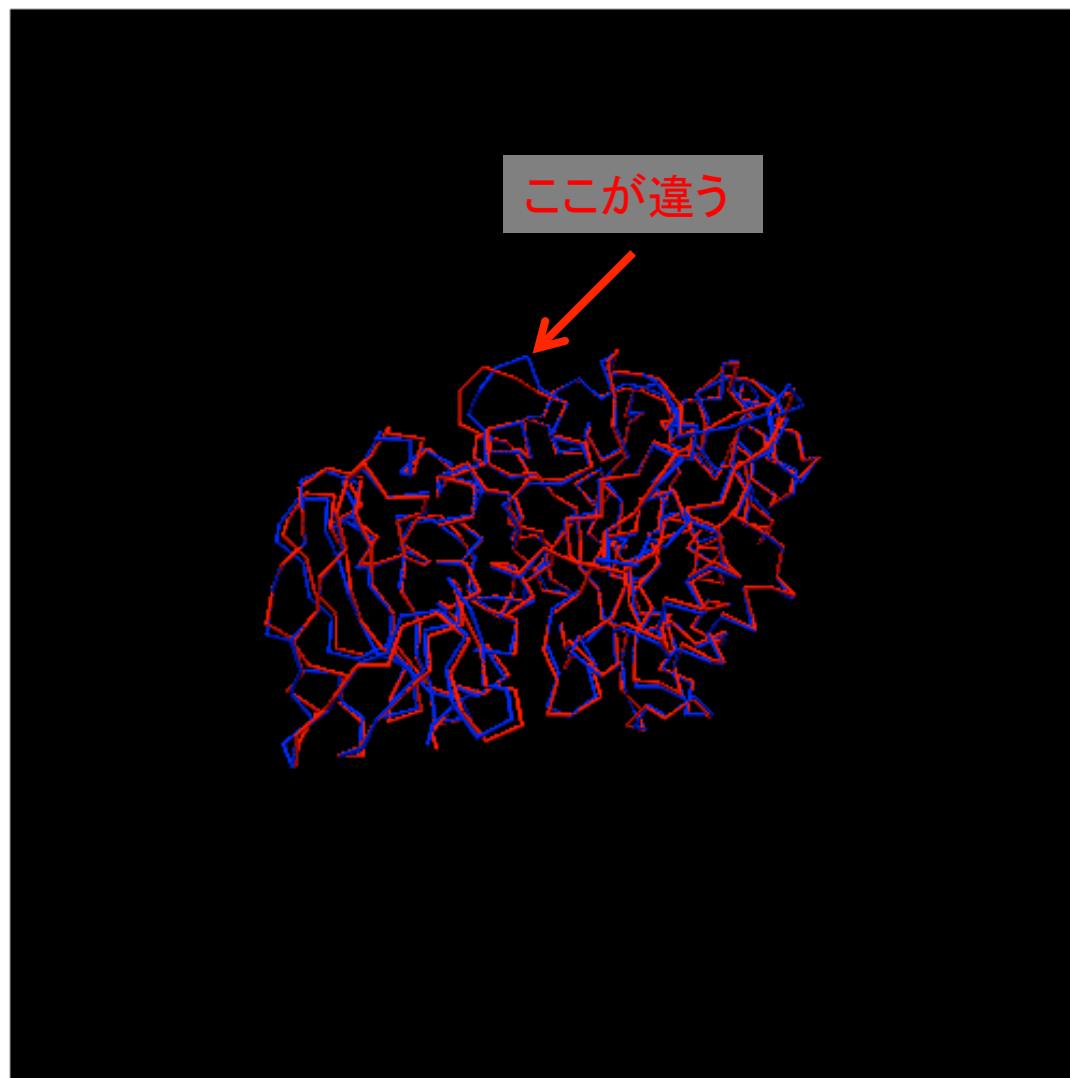
1clvA 1 471 QKDNFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGGGVQISPPNEYLVADGRPWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPVP
1viwA 1 471 QKDNFASGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGGGVQISPPNEYLVADGRPWERYQPVSYIINTRSGNEAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTGMNGVGTSGSSADHDGMNYPVP

Seq.Identity:53% Seq.Positives:67% E-value:6.85224e-142Score:1286Query 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 SGRNSIVHLFEWKWNDIADECERFLQPQGGGVQISPPNEYLVAD--GRPWERYQPVSYIINTRSGDESAFTDMTRRCNDAGVRIYVDAVINHMTG---MNGVGTSGSSADHDGMNYPVP
1kxqA 8 490 SGRTSIVHLFEWRWDIADECERYLGPKGFGGVQVSPNENIVVTNPSRPWERYQPVSYKLCTRSNGNEFRDMVTRCANNVGVRIYVDAVINHMTGCGSAAAGTGTTGCSYCNPGSREFPVPY

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



Style: ☐ Cartoon ☒ Backbone ☐ Wireframe

Color: ☐ group ☒ chain ☐ atom

Zoom: ☐ 75% ☒ 100% ☐ 150%

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PDB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
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 キーワード 検索

各種データのダウンロード

ファイル形式		ファイル名	画面表示	ダウンロード
PDB形式	全ての情報	pdb1clv.ent.gz(88k)	表示	ダウンロード
		pdb1clv.ent(364k)	表示	ダウンロード
	ヘッダのみ	pdb1clv.ent.gz(7k)	表示	ダウンロード
mmCIF		1clv.cif.gz(111k)	表示	ダウンロード
XML	全ての情報	1clv.xml.gz(171k)	表示	ダウンロード
	ヘッダのみ (no-atom)	PDBML 1clv-noatom.xml.gz(27k)	表示	ダウンロード
		PDBMLplus 1clv-pdbmlplus.xml.gz(30k)	表示	ダウンロード
	座標情報のみ (ext-atom)	1clv-extatom.xml.gz(96k)	表示	ダウンロード
	RDF	1clv-noatom.rdf.gz(18k)	表示	ダウンロード
生物学的単位 (PDB形式)		1clv.pdb1.gz(84k) *author_defined_assembly, 2 分子 (dimeric)	表示	ダウンロード


```
data_1CLV
#
_entry.id 1CLV
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    4.007
_audit_conform.dict_location   http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
```

← データが1つだけの場合

```
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
_database_PDB_rev.type
_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_id
```

← データが2つ以上ある場合

mmCIF

行長可変

(STAR形式)

現在はこちらが大元

```
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 C C . LYS A 1 2 ? 28.027 8.224 3.435 1.00 17.54 ? ?
```

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 Cystallographic
Information File

```

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

<PDBx:datablock datablockName="1CLV"
  xmlns:PDBx="http://pdml.pdb.org/schema/pdbx-v40.xsd"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://pdml.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:pdex_PDB_model_num>1</PDBx:pdex_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:diffractionCategory>  
± <PDBx:diffraction_detectorCategory>  
± <PDBx:diffraction_radiationCategory>  
± <PDBx:diffraction_radiation_wavelengthCategory>  
± <PDBx:diffraction_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	CE	CE	30.089	5.796	9.037	1.00	22.
<PDBx:atom_record id=	"7">	ATOM	1	A	A	1	1	?	.	PCA	PCA	C	CA	CA	30.007	8.643	6.676	1.00	13.70
<PDBx:atom_record id=	"8">	ATOM	1	A	A	1	1	?	.	PCA	PCA	C	CB	CB	31.511	8.493	6.417	1.00	14.12
<PDBx:atom_record id=	"9">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CA	CA	29.009	7.994	5.775	1.00	14.51
<PDBx:atom_record id=	"10">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CB	CB	30.178	8.259	4.213	1.00	13.
<PDBx:atom_record id=	"11">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CG	CG	31.829	6.365	4.059	1.00	16.12
<PDBx:atom_record id=	"12">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CD	CD	29.027	9.224	2.435	1.00	17.54
<PDBx:atom_record id=	"13">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CE	CE	30.534	6.982	3.574	1.00	13.
<PDBx:atom_record id=	"14">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CG	CG	31.829	6.365	4.059	1.00	14.
<PDBx:atom_record id=	"15">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CD	CD	32.140	5.082	3.331	1.00	17.
<PDBx:atom_record id=	"16">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	C	CE	CE	33.340	4.422	3.957	1.00	17.
<PDBx:atom_record id=	"17">	ATOM	1	A	A	2	2	?	.	LYS	LYS	N	NZ	NZ	33.629	3.104	3.340	1.00	20.
<PDBx:atom_record id=	"18">	ATOM	1	A	A	3	3	?	.	ASP	ASP	N	N	N	27.961	9.255	4.417	1.00	14.81
<PDBx:atom_record id=	"19">	ATOM	1	A	A	3	3	?	.	ASP	ASP	C	CA	CA	26.789	9.956	3.901	1.00	14.
<PDBx:atom_record id=	"20">	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=	"21">	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=	"22">	ATOM	1	A	A	3	3	?	.	ASP	ASP	C	CB	CB	25.513	9.426	4.569	1.00	17.
<PDBx:atom_record id=	"23">	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。

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

ID: (e.g., '7RSA') PDB ID

property: (e.g.,
'PDBo:entity.pdbx_description')

keywords: (e.g., 'alcohol')

Predicate	Object
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_audit_noteCategory	PDBr:1CLV/audit_noteCategory
PDBo:has_biochemCategory	PDBr:1CLV/biochemCategory
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_diffractionCategory	PDBr:1CLV/diffrnCategory
PDBo:has_diffraction_detectorCategory	PDBr:1CLV/diffrn_detectorCategory
PDBo:has_diffraction_radiationCategory	PDBr:1CLV/diffrn_radiationCategory
PDBo:has_diffraction_radiation_wavelengthCategory	PDBr:1CLV/diffrn_radiation_wavelengthCategory
PDBo:has_diffraction_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_entryCategory	PDBr:1CLV/entryCategory



PDB/RDF
PDB entry : 1CLV
<http://pd bj.org/rdf/1CLV>
Download RDF file for this entry
About PDB/RDF
PDB/RDF , chem_comp/RDF

[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://pd bj.org/schema/pdbx-v40.owl#>>
- PDBr: <<http://pd bj.org/rdf/>>

Search PDB/RDF, chem-comp/RDF
ID: (e.g., '7RSA') PDB ID
property: (e.g., 'PDBo:entity.pdbx_description')
keywords: (e.g., 'alcohol')

Subject: http://pd bj.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://pd bj.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 >>

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。

PDBj
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

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) (PDBjファイルダウンロード)
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)
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

トップページと同じ簡易検索を行うための入力Box
↓
「2tmv」と入力して「検索」

*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。

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

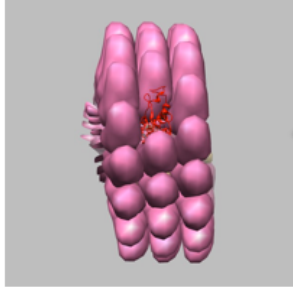
<非対称単位>



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 TOBACCO MOSAIC VIRUS AT 2.9 ANGSTROMS RESOLUTION BY X-RAY FIBER DIFFRACTION
キーワード	Virus/RNA
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 A 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	FASTA, PDB, CAS, CL, PSS, SCOP, VAST, UniProt (P69687), eF-site, eF-seek, eF-surf, eProtS, ProMode, ProMode Elastic, ProMode Oligomer

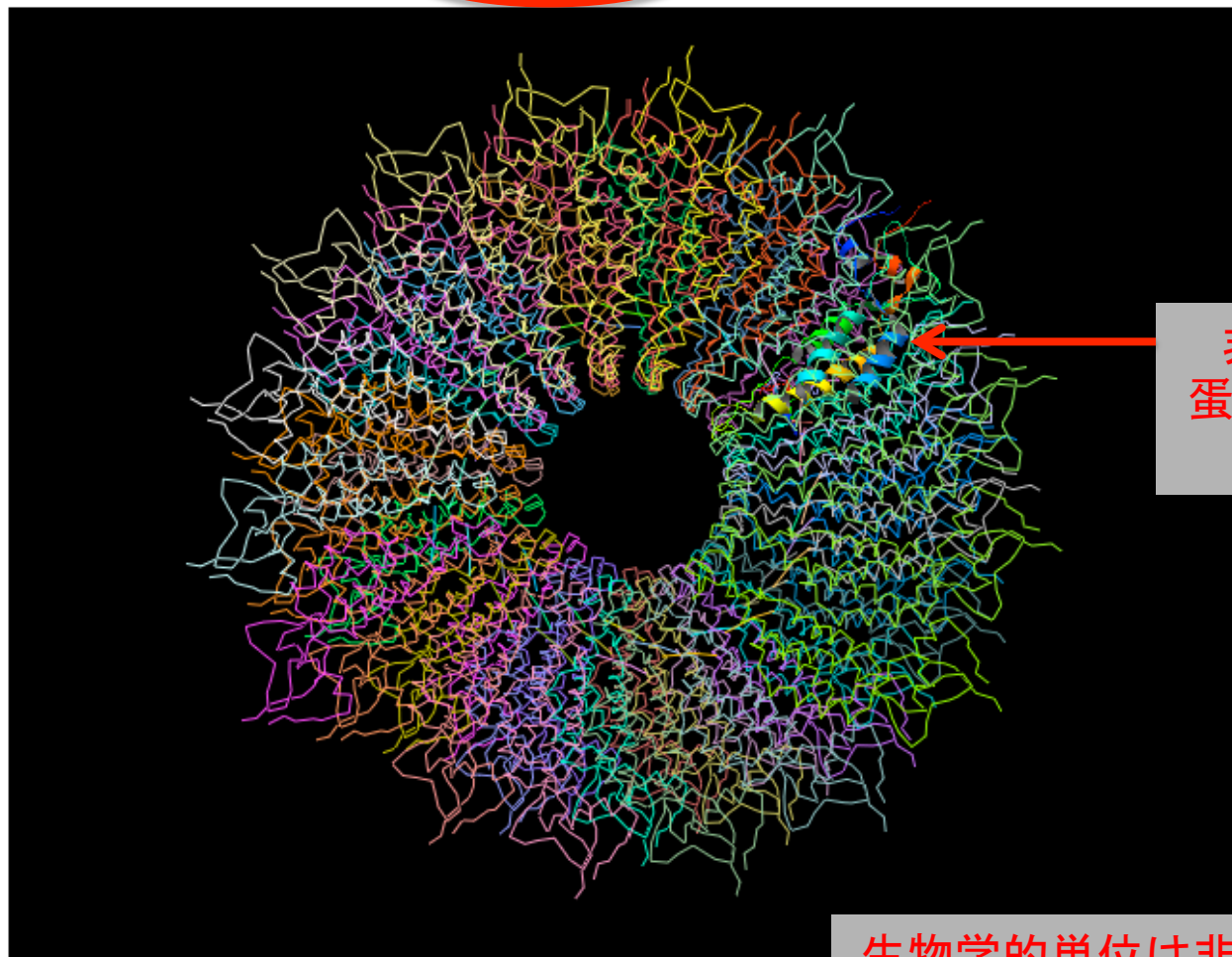
登録されている座標データは最低限の繰り返し単位 (非対称単位)

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)

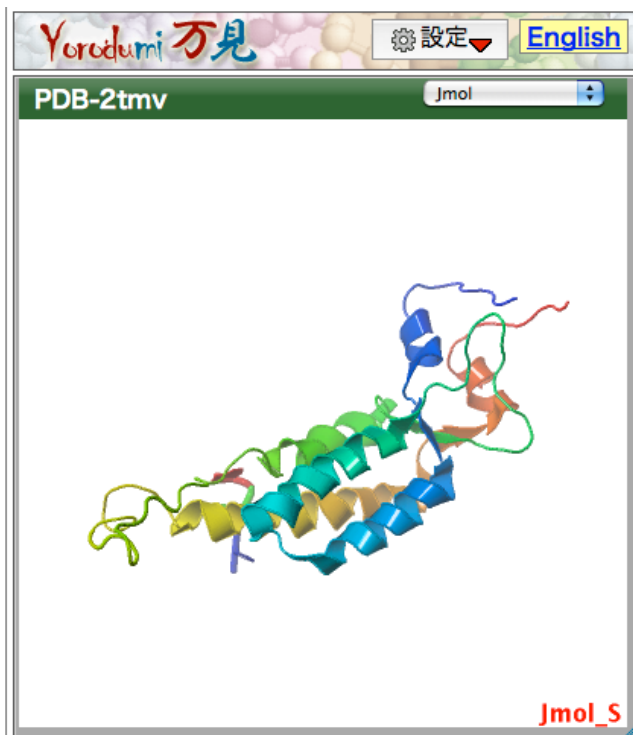
生物学的単位 (98)

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)



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](#)

登録構造 : らせん対称性の非対称単位, ポリマー数:2

集合体 生物学的単位:
1 1. 主鎖の... (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 -> ☒ 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)

PDB 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...

pdj.org/emnavi/view.php?id=2tmv 東京大学工学部12号館

Yorodumi 万見 設定 English

PDB-2tmv Jmol

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

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](#)

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 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

Protein Data Bank Japan

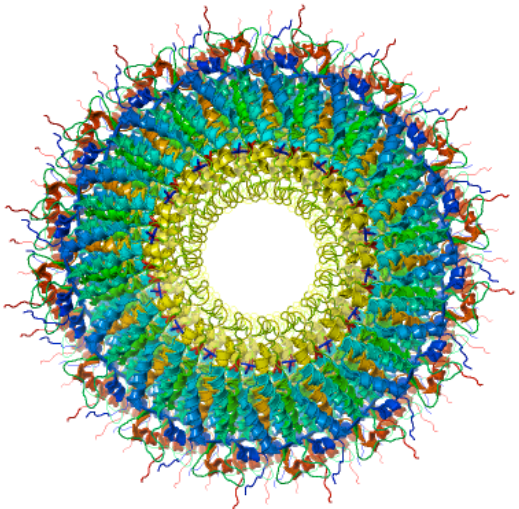
PDB-2tmv - 万見 (Yorodumi)

PDB 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...

pdj.org/emnavi/view.php?id=2tmv 東京大学工学部12号館

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

このパネルにはこのデータエントリの各構成要素が表示されます。選択ボタンを押すと、その要素がビューア上で選択状態になります。配列が表示されているボックス中でマウス操作で文字列を選択すると、その要素がビューア上で選択状態になります。(配列ボックスは多機能モードのみ表示されます)

リセット 光らせる 他を隠す

RNA chain-R RNA (5'-R(P*GP*AP*A)-3')

L型ポリペプチド chain-P TMV COAT PROTEIN / 由来: [Tobacco mosaic virus](#) UniProt:P03570

非ポリマー CA CALCIUM ION / Ca^{+2} / 1 分子 CA

水 HOH water / H_2O / 74 分子 HOH

Mine 構造情報 列 [Sequence view](#)

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](#)

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:

集合体 1 1・主鎖のみ: らせん対称集合体 (98 分子 helical

Jmol script terminated

Protein Data Bank Japan

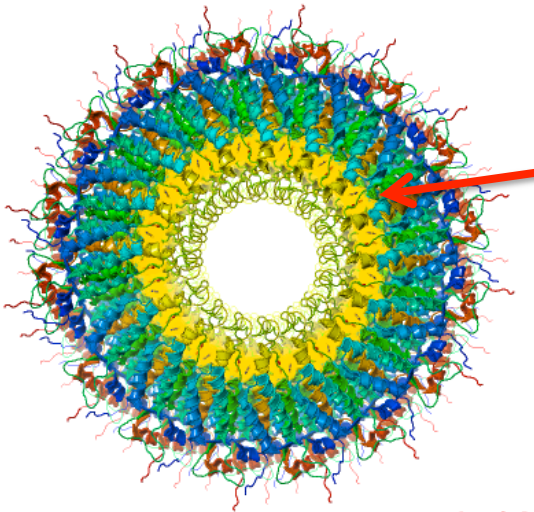
PDB-2tmv - 万見 (Yorodumi)

PDB 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... ×

pd bj.org/emnavi/view.php?id=2tmv ☆ 東京大学工学部12号館

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

このパネルにはこのデータエントリの各構成要素が表示されます。選択ボタンを押すと、その要素がビューア上で選択状態になります。配列が表示されているボックス内でマウス操作で選択することも可能です。配列ボックスは多機能モードのみ表示されます。

リセット 光らせる 他を隠す

RNA	chain-R	RNA (5'-R(P*GP*AP*A)-3')
L型ポリペプチド	chain-P	TMV COAT PROTEIN / 由来: Tobacco mosaic virus UniProt:P03570
非ポリマー	CA	CALCIUM ION / Ca^{+2} / 1 分子 CA
水	HOH	water / H_2O / 74 分子 HOH

Mine 構造情報 列 [Sequence view](#)

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	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

Jmol script terminated

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 >>

J/V: 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。

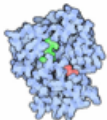
今月の分子 (Molecule of the Month)

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ください。

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)
	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 (Rhomoid 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 (Glucanase) 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:インティン (Inteins)

109 タバコモザイクウイルス(2009年)

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

今月の分子 (Molecule of the Month)

このページは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。転載・引用については[利用規約](#)をご覧ください。

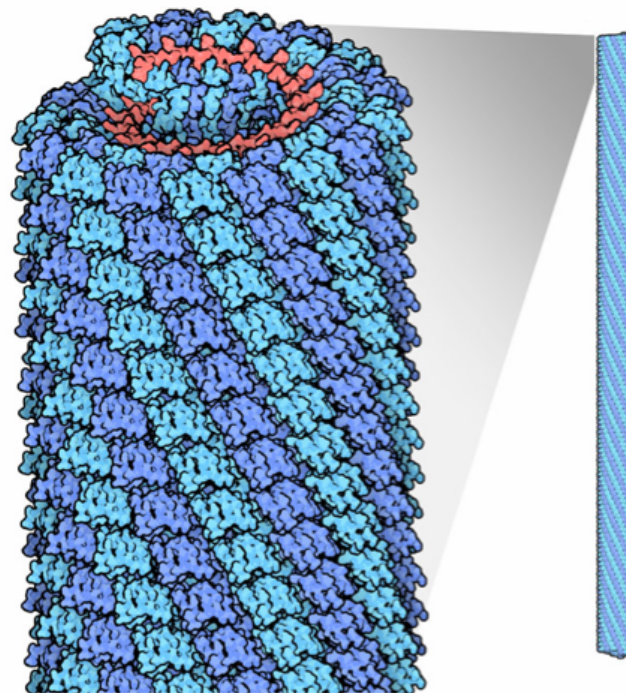
[「今月の分子」一覧に戻る](#) / [この記事のRCSBオリジナルサイト \(英語\) を見る](#)

2009 / 01: No. 109

タバコモザイクウイルス (Tobacco Mosaic Virus)

: 翻訳 工藤高裕 (PDBj)

タバコモザイクウイルス (tobacco mosaic virus, TMV) は百年以上前に発見されて以来、ウイルス研究の中心となっている。TMVは最初に発見されたウイルスである。19世紀末、小さく感染性のある病原体が発見された。これは細菌とするには小さすぎる、たばこ植物の病気を引き起こしている病原体であった。この不思議な病原体の性質が明らかになるまでに30年の年月を要した。ウェンデル・スタンリー (Wendell Stanley) は、ノーベル賞を受賞した研究において、ウイルスを結晶化させることに成功し、このウイルスは主に蛋白質からできていることを発見した。また他の研究者がすぐに、ウイルスにはRNAも含まれていることを発見した。そして、J. D. バーナル (J. D. Bernal)、ロザリンド・フランクリン (Rosalind Franklin)、ジェームス・ワトソン (James Watson) など多くの有名な構造研究者は、ウイルスの構造を解明するのにX線結晶回折と電子顕微鏡を使った。最終的に、アーロン・クルーグ (Aaron Klug) がノーベル賞を受賞した仕事の一部として、ウイルスの原子構造を決定した。



らせんウイルス

PDBデータベースにはタバコモザイクウイルス全体の構造がいくつか登録されていて、線維状結晶のX線回折によって解かれたPDBエントリ [2tmv](#) や、より最近になって多数の電子顕微鏡写真の解析によって解かれたPDBエントリ [6agc](#) などを見ることが出来る。ウイルスは、蛋白質の長い「棒」の中に含まれた1

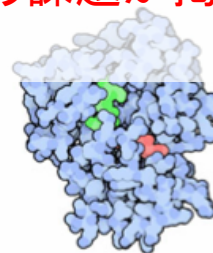
理解を深めるためのトピックス

1. 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ください。
2. 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ください。

参考文献

- 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.

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。



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ボ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ボ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。

118t: アミノグリコシド 3'-ホスホトランスフェラーゼ (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リボソーム

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

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PDB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  Auto Dep
Input Tool

NMRデータ登録 

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

WORLDWIDE
PDB
PROTEIN DATA BANK

蛋白質構造百科事典
eProtS
Encyclopedia of
Protein Structures

**Protein
Globe**

DBCLS
Database Center for Life Science

Tanpaku.org

NBDC
National Bioscience Database Center

PDBj
Protein Data Bank Japan

Topics

- 基本的な使い方
- PDBデータの書式
- 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ください。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。

Search

Search

Recent Changes

- PDBj Mine:SQLクエリ文の事例
- InterWikiName
- XPath
- XQuery
- SOAP API
- サービス&ソフトウェア
- EDM viewer
- xPSSS
- GIRAF
- PDBjについて
- 事例紹介(1uan)
- PDBj:基本演習2
- 検索サービス

- ・ PDBjについて
- ・ データ登録
- ・ 検索サービス
- ・ サービス&ソフトウェア
 - 立体構造予測
- ・ 二次データベース
- ・ データのダウンロード

お問い合わせ

forPDBjMember

PDBj Help

データ検索



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

けるランチョンセミナーの

各サービスの紹介な
どが掲載されている
ヘルプページ

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 AP! Auto Dep Input Tool

NMRデータ登録 AP! NMR

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

WORLDWIDE
PDB
PROTEIN DATA BANK

蛋白質構造百科事典
eProtS
Encyclopedia of
Protein Structures

Protein
Globe

DBCLS
Database Center for Life Science

Tanpaku.org

NBDC
National Bioscience Database Center

PDBj English 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

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。

お問い合わせ

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、下記フォーム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「[PDB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:

メール送信 リセット

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載くと、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

随時質問を受け付けております。
お気軽にご質問下さい。

MRデータ検索



Accession number
Deposition code

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
下さい。

におけるランチョンセミナーの
さい。