

演習問題解答(1-4)

大阪大学蛋白質研究所

くどう たかひろ
工藤 高裕

解答の探し方 (PDBj Mine)

[illegible]

解答の探し方 (PDB format)

ADIT: PD
ADIT-NM

検索 >>

Search F
wwPDB/
Latest R
Sequenc
Structure
SeSAW
Ligand B
EM Navig
Search M
Status S

サービス&ソ
JV: Grap
万見 (Yo
Protein G
ASH
MAFFTas
SEALA
NMRTToo
Structur
CRNP
Spanner
SFAS

二次データベース >>

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

ダウンロード >>

PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

```

HEADER          HYDROLASE                      31-AUG-03  1UKP
TITLE           CRYSTAL STRUCTURE OF SOYBEAN BETA-AMYLASE MUTANT
TITLE           SUBSTITUTED AT SURFACE REGION
COMPND          MOL_ID: 1;
COMPND          2 MOLECULE: BETA-AMYLASE;
COMPND          3 CHAIN: A, B, C, D;
COMPND          4 SYNONYM: 1,4-ALPHA-D-GLUCAN MALTOHYDROLASE;
COMPND          5 EC: 3.2.1.2;
COMPND          6 ENGINEERED: YES;
COMPND          7 MUTATION: YES
SOURCE          MOL_ID: 1;
SOURCE          2 ORGANISM_SCIENTIFIC: GLYCINE MAX;
SOURCE          3 ORGANISM_COMMON: SOYBEAN;
SOURCE          4 ORGANISM_TAXID: 3847;
SOURCE          5 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE          6 EXPRESSION_SYSTEM_TAXID: 562;
SOURCE          7 EXPRESSION_SYSTEM_STRAIN: JM105;
SOURCE          8 EXPRESSION_SYSTEM_VECTOR_TYPE: PLASMID;
SOURCE          9 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PKK233-2
KEYWDS          (ALPHA/BETA)8 BARREL, HYDROLASE
EXPDTA          X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR          Y.N.KANG,M.ADACHI,B.MIKAMI,S.UTSUMI
REVDAT          2 24-FEB-09 1UKP 1 VERSN
REVDAT          1 10-FEB-04 1UKP 0
JRNL            AUTH Y.N.KANG,M.ADACHI,B.MIKAMI,S.UTSUMI
JRNL            TITL CHANGE IN THE CRYSTAL PACKING OF SOYBEAN
JRNL            TITL 2 BETA-AMYLASE MUTANTS SUBSTITUTED AT A FEW SURFACE
JRNL            TITL 3 AMINO ACID RESIDUES
JRNL            REF  PROTEIN ENG. V. 16 809 2003
JRNL            REFN ISSN 0269-2139
JRNL            PMID 14631070
JRNL            DOI  10.1093/PROTEIN/GZG109
REMARK          1
REMARK          2
REMARK          2 RESOLUTION. 2.10 ANGSTROMS.
REMARK          3
REMARK          3 REFINEMENT.
REMARK          3 PROGRAM : CNS 1.1
REMARK          3 AUTHORS : BRUNGER,ADAMS,CLORE,DELANO,GROS,GROSSE-
REMARK          3 KUNSTLEVE,ITANG,KUSZEWSKI,NILGES,PANNU
  
```

3次元構造ビューア (jv4) で見える *1

電子密度マップ (EDM)

概要[1ukp]

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

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

エントリーID (PDB ID)	1ukp 配列情報 (FASTA形式) PDBファイルのダウンロード
関連構造のPDB ID	1bya, 1byb, 1byc, 1byd, 1bfn, 1fa2, 1uko
分子名称	beta-amylase(E.C.3.2.1.2)
タイトル	Crystal structure of soybean beta-amylase mutant substituted at surface region
機能のキーワード	(alpha/beta)8 barrel, hydrolase
由来する生物種	Glycine max (soybean)
ポリマー鎖の合計数	4
分子量の合計	226057.2 (詳細は 構造情報のページ)
著者	Kang, Y.N. , Adachi, M. , Mikami, B. , Utsumi, S. (登録日 : 2003-08-31, 公開日 : 2004-02-10, 最終更新日 : 2009-02-24)
引用文献	Change in the crystal packing of soybean beta-amylase mutants substituted at a few surface amino acid residues <i>Protein Eng.</i> , 16:809 - 817, 2003.(PubMed : 14631070) (DOI: 10.1093/protein/gzg109)
実験手法	X-RAY DIFFRACTION (2.10[Å])
他のデータベース情報	万見(Yorodumi) , CATH , FSSP , SCOP , VAST , UniProt (P10538) , eF-site , KEGG (EC 3.2.1.2) , PISA , PQS , wwPDB/RDF

解答の探し方 (mmCIF)

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR
検索 >>

```

data_1UKP
#
_entry.id      1UKP
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    4.007
_audit_conform.dict_location    http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB      1UKP
RCSB      RCSB005935
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.replaces
_database_PDB_rev.mod_type
1 2004-02-10 2003-08-31 ? 1UKP 0
2 2009-02-24 ? ? 1UKP 1
#
_database_PDB_rev_record.rev_num      2
_database_PDB_rev_record.type          VERSN
_database_PDB_rev_record.details      ?
#
loop_
_pdbx_database_related.db_name

```

ダウンロード/画面表示 [1ukp]

[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

検索

	ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	表示
PDB	全ての情報	pdb1ukp.ent.gz (341k)	表示
	全ての情報 (非圧縮)	pdb1ukp.ent (1405k)	表示
	ヘッダのみ	pdb1ukp.ent.gz (10k)	表示
mmCIF		1ukp.cif.gz (416k)	表示
PDBML	全ての情報	1ukp.xml.gz (642k)	表示
	ヘッダのみ	1ukp-noatom.xml.gz (72k)	表示
	座標情報のみ	1ukp-extatom.xml.gz (390k)	表示
	PDBMLplus (ヘッダのみ)	1ukp-pdbmlplus.xml.gz (75k)	表示
RDF (ヘッダのみ)		1ukp-noatom.rdf.gz (27k)	表示
構造因子		r1ukpsf.ent.gz (1218k)	表示
生物学的単位 (PDB形式)		1ukp.pdb1.gz (88k) (A) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
		1ukp.pdb2.gz (88k) (B) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
		1ukp.pdb3.gz (88k) (C) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
		1ukp.pdb4.gz (87k) (D) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示

解答の探し方(PDBML)

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (PDBj Mine)
wwPDB/RDF

ダウンロード/画面表示 [1ukp]

[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](#)

ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	表示
全ての情報	pdb1ukp.ent.gz (341k)	表示
PDB 全ての情報 (非圧縮)	pdb1ukp.ent (1405k)	表示
ヘッダのみ	pdb1ukp.ent.gz (10k)	表示
mmCIF	1ukp.cif.gz (416k)	表示
全ての情報	1ukp.xml.gz (642k)	表示
PDBML ヘッダのみ	1ukp-noatom.xml.gz (72k)	表示
座標情報のみ	1ukp-extatom.xml.gz (390k)	表示
PDBMLplus (ヘッダのみ)	1ukp-pdbmlplus.xml.gz (75k)	表示
RDF (ヘッダのみ)	1ukp-noatom.rdf.gz (27k)	表示
構造因子	r1ukpsf.ent.gz (1218k)	表示
生物学的単位 (PDB形式)	1ukp.pdb1.gz (88k) (A) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
	1ukp.pdb2.gz (88k) (B) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
	1ukp.pdb3.gz (88k) (C) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示
	1ukp.pdb4.gz (87k) (D) *author_defined_assembly, 1 分子 (monomeric)	表示

- 1UKP-noatom -

```

± <PDBx:datablock datablockName= "1UKP-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>
  ± <PDBx:entityCategory>
  
```

PDBMLplusにしかない情報もある
(xxx_pdbmlplusCategoryなど)

演習課題1

エントリー「101d」を検索して、以下のことを調べる。

- 発表された論文は？
- 実験手法は？
- 含まれる分子種は？
- 解像度(もしあれば)は？

ヒント: citation, exptl, entity, refine

解答例1 (PDBj Mine)

Search PDB (PDBj Mine)

wwPDB/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

NMRToolBox

Structure Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/e

ProMode Elastic

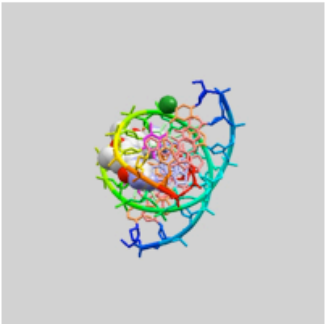
教材 >>

eProtS

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

3次元構造ビューア
([iV4](#) / [Jmol](#)) で見る ¹

エントリーID (PDB ID)	101d 配列情報 (FASTA形式) PDBファイルのダウンロード
分子名称	5'-D>(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*(CBR)P*GP*CP*G)-3', NETROPSIN, RE-REFINEMENT
タイトル	REFINEMENT OF NETROPSIN BOUND TO DNA: BIAS AND FEEDBACK IN ELECTRON DENSITY MAP INTERPRETATION
機能のキーワード	B-DNA, DOUBLE HELIX, COMPLEXED WITH DRUG, MODIFIED, DNA
ポリマー鎖の合計数	2
分子量の合計	7939.4 (詳細は 構造情報のページ)
著者	Goodsell, D.S. , Kopka, M.L. , Dickerson, R.E. (登録日: 1994-12-14, 公開日: 1995-02-27, 最終更新日: 2009-02-24)
引用文献	Goodsell, D.S. , Kopka, M.L. , Dickerson, R.E. Refinement of netropsin bound to DNA: bias and feedback in electron density map interpretation. <i>Biochemistry</i> , 34:4983 - 4993, 1995. (PubMed : 7711020) (DOI: 10.1021/bi00015a009)
実験手法	X-RAY DIFFRACTION (2.250[Å])
他のデータベース情報	万見 (Yorodumi) , CATH , FSSP , SCOP , VAST , eF-site , PISA , PQS , wwPDB/RDF

発表論文

実験手法

解像度

解答例1 (PDBj Mine)

ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB

wwPDB/RD

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

NMRTToolBox

Structure Prediction >>

CRNPRED

Spanner

SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf

ProMode Elastic

教材 >>

eProtS

ヘルプ

構造情報[101d]

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

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,B	DNA (5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*(CBR)P*GP*CP*G)-3') 配列情報 (FASTA形式)	polymer		3742.3	2		
	NETROPSIN	non-polymer	PDBChem (NT) Chem.Comp.(NT) LigandBox (NT)	430.5	1		
	MAGNESIUM ION	non-polymer	PDBChem (MG) Chem.Comp.(MG)	24.3	1		
	water	water	PDBChem (HOH) Chem.Comp.(HOH) LigandBox (HOH)	18.0	36		

Display chain - A, [B](#), [All](#) (in new window)

Chain-A: [polydeoxyribonucleotide] DNA (5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*(CBR)P*GP*CP*G)-3')

Number: 1

Sequence: CGCGAATTCGCG

Structure:

11

8

解答例 1 (PDB format)

分子種
COMPND

実験手法
EXPDTA

発表論文
JRNL

解像度
REMARK 2

```

HEADER      DNA                               14-DEC-94   101D
TITLE       REFINEMENT OF NETROPSIN BOUND TO DNA: BIAS AND FEEDBACK IN
TITLE       2 ELECTRON DENSITY MAP INTERPRETATION
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: DNA (5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*(CBR)
COMPND      3 P*GP*CP*G)-3');
COMPND      4 CHAIN: A, B;
COMPND      5 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
SOURCE      2 SYNTHETIC: YES
KEYWDS      B DNA, DOUBLE HELIX, COMPLEXED WITH DRUG, MODIFIED
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR      D.S.GOODSELL,M.L.KOPKA,R.E.DICKERSON
REVDAT      2 24-FEB-09 101D 1 VERSN
REVDAT      1 27-FEB-95 101D 0
JRNL        AUTH D.S.GOODSELL,M.L.KOPKA,R.E.DICKERSON
JRNL        TITL REFINEMENT OF NETROPSIN BOUND TO DNA: BIAS AND
JRNL        TITL 2 FEEDBACK IN ELECTRON DENSITY MAP INTERPRETATION.
JRNL        REF  BIOCHEMISTRY V. 34 4983 1995
JRNL        REFN                                ISSN 0006-2960
JRNL        PMID  7711020
JRNL        DOI   10.1021/BI00015A009
REMARK      1
REMARK      1 REFERENCE 1
REMARK      1 AUTH  M.L.KOPKA,C.YOON,D.S.GOODSELL,P.PJURA,R.E.DICKERSON
REMARK      1 TITL  BINDING OF AN ANTITUMOR DRUG TO DNA. NETROPSIN AND
REMARK      1 TITL 2 C-G-C-G-A-A-T-T-BRC-G-C-G
REMARK      1 REF   J.MOL.BIOL. V. 183 553 1985
REMARK      1 REFN                                ISSN 0022-2836
REMARK      2
REMARK      2 RESOLUTION. 2.25 ANGSTROMS.
REMARK      3
  
```

解答例 1 (mmCIF)

発表論文
_citation

```

_pdbx_database_status.SG_entry .
#
loop_
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Goodsell, D.S.' 1
'Kopka, M.L.' 2
'Dickerson, R.E.' 3
#
loop_
_citation.id
_citation.title
_citation.journal_abbrev
_citation.journal_volume
_citation.page_first
_citation.page_last
_citation.year
_citation.journal_id_ASTM
_citation.country
_citation.journal_id_ISSN
_citation.journal_id_CSD
_citation.book_publisher
_citation.pdbx_database_id_PubMed
_citation.pdbx_database_id_DOI
primary 'Refinement of netropsin bound to DNA: bias and feedback in elec
4993 1995 BICHAW US 0006-2960 0033 ? 7711020 10.1021/bi00015a009
1 'Binding of an Antitumor Drug to DNA. Netropsin and C-G-C-G-A-A-'
563 1985 JMOBAK UK 0022-2836 0070 ? ? ?
#
loop_
_citation_author.citation_id
_citation_author.name
..

```

解答例 1 (mmCIF)

実験手法

_exptl. method

```

uct_ref_seq.db_align_end
uct_ref_seq.pdbx_auth_seq_align_beg
uct_ref_seq.pdbx_auth_seq_align_end
101D A 1 ? 12 ? 101D 1 12 1 12
101D B 1 ? 12 ? 101D 13 24 13 24
#
loop_
  _chem_comp.id
  _chem_comp.type
  _chem_comp.mon_nstd_flag
  _chem_comp.name
  _chem_comp.pdbx_synonyms
  _chem_comp.formula
  _chem_comp.formula_weight
DC 'DNA linking' y "2'-DEOXYCYTIDINE-5'-MONOPHOSPHATE" ? 'C9 H
DG 'DNA linking' y "2'-DEOXYGUANOSINE-5'-MONOPHOSPHATE" ? 'C10
DA 'DNA linking' y "2'-DEOXYADENOSINE-5'-MONOPHOSPHATE" ? 'C10
DT 'DNA linking' y "THYMIDINE-5'-MONOPHOSPHATE" ? 'C10
CBR 'DNA linking' n "5-BROMO-2'-DEOXY-CYTIDINE-5'-MONOPHOSPHATE" ? 'C9 H
NT NON-POLYMER . NETROPSIN ? 'C18
MG NON-POLYMER . 'MAGNESIUM ION' ? 'MG 2
HOH NON-POLYMER . WATER ? 'H2 O
#
_exptl.entry_id 101D
_exptl.method 'X-RAY DIFFRACTION'
_exptl.crystals_number ?
#
_exptl_crystal.id 1
_exptl_crystal.density_meas ?
_exptl_crystal.density_Matthews 2.00
_exptl_crystal.density_percent_sol 38.45
_exptl_crystal.description ?
#

```


解答例 1 (mmCIF)

実験手法
解像度
_refine

```
#
_refine.entry_id 1010
_refine.ls_number_reflns_obs 2430
_refine.ls_number_reflns_all ?
_refine.pdbx_ls_sigma_I ?
_refine.pdbx_ls_sigma_F 2.000
_refine.pdbx_data_cutoff_high_absF ?
_refine.pdbx_data_cutoff_low_absF ?
_refine.pdbx_data_cutoff_high_rms_absF ?
_refine.ls_d_res_low 8.000
_refine.ls_d_res_high 2.250
_refine.ls_percent_reflns_obs ?
_refine.ls_R_factor_obs 0.163
_refine.ls_R_factor_all ?
_refine.ls_R_factor_R_work ?
_refine.ls_R_factor_R_free 0.252
_refine.ls_R_factor_R_free_error ?
_refine.ls_R_factor_R_free_error_details ?
_refine.ls_percent_reflns_R_free ?
_refine.ls_number_reflns_R_free ?
_refine.ls_number_parameters ?
_refine.ls_number_restraints ?
_refine.occupancy_min ?
_refine.occupancy_max ?
_refine.B_iso_mean ?
_refine.aniso_B[1][1] ?
_refine.aniso_B[2][2] ?
_refine.aniso_B[3][3] ?
_refine.aniso_B[1][2] ?
_refine.aniso_B[1][3] ?
_refine.aniso_B[2][3] ?
_refine.solvent_model_details ?
_refine.solvent_model_param_ksol ?
_refine.solvent_model_param_bsol ?
_refine.pdbx_ls_cross_valid_method ?
_refine.details ?
_refine.pdbx_starting_model ?
_refine.pdbx_method_to_determine_struct ?
_refine.pdbx_isotropic_thermal_model ?
_refine.pdbx_stereochemistry_target_values ?
_refine.pdbx_stereochem_target_val_spec_case ?
_refine.pdbx_R_free_selection_details ?
_refine.pdbx_overall_ESU_R ?
_refine.pdbx_overall_ESU_R_free ?
_refine.overall_SU_ML ?
_refine.overall_SU_B ?
_refine.pdbx_refine_id 'X-RAY DIFFRACTION'
_refine.pdbx_diffn_id 1
#
```

解答例 1 (mmCIF)

分子種
_entity

```

_cell.angle_beta      90.00
_cell.angle_gamma     90.00
_cell.Z_PDB           8
_cell.pdbx_unique_axis ?
#
_symmetry.entry_id      1010
_symmetry.space_group_name_H-M 'P 21 21 21'
_symmetry.pdbx_full_space_group_name_H-M ?
_symmetry.cell_setting  ?
_symmetry.Int_tables_number ?
#
loop_
_entity.id
_entity.type
_entity.src_method
_entity.pdbx_description
_entity.formula_weight
_entity.pdbx_number_of_molecules
_entity.details
1 polymer      syn
;DNA (5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*(CBR)P*GP*CP*G)-3')
;
3742.318 2 ?
2 non-polymer syn NETROPSIN
3 non-polymer syn 'MAGNESIUM ION'
4 water      nat water
#
_entity_poly.entity_id      1
_entity_poly.type           polydeoxyribonucleotide
_entity_poly.nstd_linkage   no
_entity_poly.nstd_monomer   yes

```

解答例1 (PDBML)

発表論文

/datablock/citationCategory/citation@primary

```

± <PDBx:audit_conformCategory>
± <PDBx:cellCategory>
± <PDBx:chem_compCategory>
± <PDBx:citationCategory>
  ± <PDBx:citation id= "primary">
    - <PDBx:country> US
    - <PDBx:journal_abbrev> Biochemistry
    - <PDBx:journal_id_ASTM> BICHAW
    - <PDBx:journal_id_CSD> 0033
    - <PDBx:journal_id_ISSN> 0006-2960
    - <PDBx:journal_volume> 34
    - <PDBx:page_first> 4983
    - <PDBx:page_last> 4993
    - <PDBx:pdxb_database_id_DOI> 10.1021/bi00015a009
    - <PDBx:pdxb_database_id_PubMed> 7711020
    - <PDBx:title>
      Refinement of netropsin bound to DNA: bias and feedba
    - <PDBx:year> 1995
  ± <PDBx:citation id= "1">
+ <PDBx:citation authorCategory>
  
```

解答例1 (PDBML)

実験手法

/datablock/exptlCategory/exptl@method

```

± <PDBx:database_PDB_rev_recordCategory>
± <PDBx:diffractionCategory>
± <PDBx:entityCategory>
± <PDBx:entity_polyCategory>
± <PDBx:entity_poly_seqCategory>
± <PDBx:entryCategory>
± <PDBx:exptlCategory>
  - <PDBx:exptl entry_id= "101D" method= "X-RAY
    DIFFRACTION">
± <PDBx:exptl_crystalCategory>
± <PDBx:ndb_struct_conf_naCategory>
± <PDBx:ndb_struct_na_base_pairCategory>
± <PDBx:ndb_struct_na_base_pair_stepCategory>
± <PDBx:pdbe_database_statusCategory>
± <PDBx:pdbe_entity_nonpolyCategory>
± <PDBx:pdbe_nonpoly_schemeCategory>
± <PDBx:pdbe_poly_seq_schemeCategory>
± <PDBx:pdbe_struct_assemblyCategory>
± <PDBx:pdbe_struct_assembly_genCategory>
± <PDBx:pdbe_struct_mod_residueCategory>
± <PDBx:ndb_struct_oper_listCategory>

```

解答例1 (PDBML)

実験手法、解像度

/datablock/refineCategory/refine

```

± <PDBx:pdxb_struct_oper_listCategory>
± <PDBx:pdxb_validate_rmsd_angleCategory>
± <PDBx:pdxb_validate_rmsd_bondCategory>
± <PDBx:pdxb_versionCategory>
± <PDBx:refineCategory>
  ± <PDBx:refine entry_id= "101D" pdbx_refine_id= "X-RAY
    DIFFRACTION">
    - <PDBx:ls_R_factor_R_free> 0.252
    - <PDBx:ls_R_factor_obs> 0.163
    - <PDBx:ls_d_res_high> 2.250
    - <PDBx:ls_d_res_low> 8.000
    - <PDBx:ls_number_reflns_obs> 2430
    - <PDBx:pdxb_diffn_id> 1
    - <PDBx:pdxb_ls_sigma_F> 2.000
  ± <PDBx:refine_B_isoCategory>
  ± <PDBx:refine_histCategory>
  ± <PDBx:refine_ls_restrCategory>
  ± <PDBx:refine_occupancyCategory>
  ± <PDBx:softwareCategory>
  ± <PDBx:structCategory>
  ± <PDBx:struct_asymCategory>
  
```

解答例1 (PDBML)

分子種

/datablock/entityCategory/entity

```

± <PDBx:database_PDB_rev_recordCategory>
± <PDBx:diffractionCategory>
± <PDBx:entityCategory>
  ± <PDBx:entity id= "1">
    - <PDBx:formula_weight> 3742.318
    - <PDBx:pdxb_description>
      DNA (5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*TP*TP*
      (CBR)P*GP*CP*G)-3')
    - <PDBx:pdxb_number_of_molecules> 2
    - <PDBx:src_method> syn
    - <PDBx:type> polymer
  ± <PDBx:entity id= "2">
    - <PDBx:formula_weight> 430.469
    - <PDBx:pdxb_description> NETROPSIN
    - <PDBx:pdxb_number_of_molecules> 1
    - <PDBx:src_method> syn
    - <PDBx:type> non-polymer
  ± <PDBx:entity id= "3">
  ± <PDBx:entity id= "4">
± <PDBx:entity_polyCategory>

```

演習課題2

キーワード検索で「アルデヒド脱水素酵素」(aldehyde dehydrogenase)を入力にして、以下のことを調べる。

- 何件のエントリーがヒットするか？
- 公開日(Release date)が最も古いエントリーはどれか？
- その論文は何年に発表されたか？
- そのエントリーは何年にPDBからリリースされたか？
- その由来する生物種は何か？
- その活性残基はどれか？

ヒント: citation, database_PDB_rev, entity_src_gen, struct_site

解答例2

ヒット件数は231件(2012/12/25現在)

Japanese 過去の講習会 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 (PDBj Mine)
wwPDB/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
NMRTolBox

Structure Prediction >>

CRNPRED
Spanner
SFAS

二次データベース >>

eF-site/eF-seek/eF-surf
ProMode Elastic

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

検索結果ページ

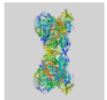
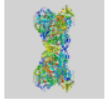
(PDB-IDをクリックすると、詳細情報をご覧いただけます)

1 - 16/ 231

クエリ: アルデヒド脱水素酵素 PDB ID または キーワード 表示順: 一致件数

変換クエリ: (aldehyde dehydrogenase) | (aldehyde dehydrase)

リセット 検索

1o05	分子名称 タイトル 著者 実験手法 登録日 公開日 最終更新日	: Aldehyde dehydrogenase (E.C.1.2.1.3) : Apo form of human mitochondrial aldehyde dehydrogenase : Hurley, T.D., Perez-Miller, S., Breen, H. : X-RAY DIFFRACTION : 2003-02-20 : 2003-03-04 : 2009-02-24
	ダウンロード	
1nzx	分子名称 タイトル 著者 実験手法 登録日 公開日 最終更新日	: Aldehyde dehydrogenase (E.C.1.2.1.3) : Human mitochondrial aldehyde dehydrogenase complexed with NAD+ in the presence of low Mg2+ : Perez-Miller, S.J., Hurley, T.D. : X-RAY DIFFRACTION : 2003-02-20 : 2003-06-24 : 2009-02-24
	ダウンロード	

解答例2

表示順で「公開日(の古い順)」を選択して「検索」

「1977/02/17」が最も古い公開日
(PDB ID 1gpd)

Japanese 過去の講習会 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 (PDBj Mine)

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 検索結果ページ
(PDB-IDをクリックすると、詳細情報をご覧いただけます)

日本語ページについて
PDBj Mineについて
更新情報

1 - 16/ 231

または キーワード (hyd dehydrase) 表示順: 一致件数
PDB ID
PDB IDの降順
登録日
登録日の新しい順
公開日
公開日の新しい順

検索 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
NMRTolBox
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS
二次データベース >>
eF-site/eF-seek/eF-surf
DnModa Elastic
www.pdbj.org からデータを転送しています...

リセット 検索

1gpd 分子名称 :D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE (E.C.1.2.1.12)
タイトル :STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE
著者 :Moras, D., Olsen, K.W., Sabesan, M.N., Buehner, M., Ford, G.C., Rossmann, M.G.
実験手法 :X-RAY DIFFRACTION
登録日 :1975-07-01
公開日 :1977-02-17
最終更新日 :2011-07-13

ダウンロード

3gpd 分子名称 :D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE (E.C.1.2.1.12)
タイトル :TWINNING IN CRYSTALS OF HUMAN SKELETAL MUSCLE D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE
著者 :Watson, H.C., Campbell, J.C.
実験手法 :X-RAY DIFFRACTION
登録日 :1983-06-20
公開日 :1983-10-27

ダウンロード

解答例2(PDBj Mine)

PDBj
English Japanese 過去の講習会 統計情報

トップページ

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

検索 >>
Search PDB (PDBj Mine)
wwPDB/RDF
Latest Release Search
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
SeSAW

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan)は、JST-NBDCと大阪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するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

Mine 概要[1gpd]

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

<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

エントリーID (PDB ID) 1gpd 配列情報 (FASTA形式)
PDBファイルのダウンロード

分子名称 D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE (E.C.1.2.1.12)

タイトル STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE

機能のキーワード OXIDOREDUCTASE(ALDEHYDE/DONOR,NAD /ACCP), OXIDOREDUCTASE(ALDEHYDE-DONOR,NAD /ACCP) COMPLEX, OXIDOREDUCTASE

由来する生物種 Homarus americanus (American lobster)

細胞内の位置 [UNP - P00357] Cytoplasm

ポリマー鎖の合計数 2

分子量の合計 20576.2 (詳細は 構造情報 を参照)

著者 Moras, D., Olsen, K.W., Sabesan, M.N., Buehner, M., Ford, G.C., Rossmann, M.G. (登録日: 1975-07-01, 公開日: 1977-02-17, 最終更新日: 2011-07-13)

引用文献 Moras, D., Olsen, K.W., Sabesan, M.N., Buehner, M., Ford, G.C., Rossmann, M.G. Studies of asymmetry in the three-dimensional structure of lobster D-glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase. J.Biol.Chem., 250:9137 - 9162, 1975.(PubMed : 127793)

実験手法 X-RAY DIFFRACTION (2.0 Å)

他のデータベース情報 万見(Yorodumi), CATH, FSSP, SCOP, VAST, UniProt (P00357), eF-site, KEGG (EC 1.2.1.12), PISA, PQS, wwPDB/RDF

ダウンロード >>
PDB Archive/Snapshot Archive

リンク集

*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JV4プレットが表示できません。詳しくはこちらをご覧ください。

© 2007 PDBj. All Rights Reserved.
利用規約・プライバシーポリシー | ニュースレター | 過去の講習会 | PDBjメンバー | 出版物

「由来する生物種」
Homarus americanus
(American lobster)

「著者」の公開日欄
に記載(1977-02-17)

「引用文献」中に
記載(1975年)

解答例2 (PDBj Mine)

機能情報

PDBデータベース に由来する情報

PDBj Mine

機能情報 (lapd)

GO (ジーン・オントロジー) に由来する情報

PDBデータベースに由来する情報

site_id: ABG

種類	残基数	詳細
サイト	6	RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENINE BASE OF THE COFACTOR

site_id: ABR

種類	残基数	詳細
サイト	6	RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENINE BASE OF THE COFACTOR

site_id: ARG

種類	残基数	詳細
サイト	3	RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENOSINE RIBOSE OF THE NAD COFACTOR

UniProtにおけるモーター・データベースPROSITEからの機能情報

site_id	種類	残基数	詳細
PS00071	prosite	16	Glyoxalase 3-phosphate dehydrogenase active site (ASV)-S-CNTY-C(S)-L(L)

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	詳細
SWS_FT_F10	enzyme active site(ACT_SITE)	1	Nucleophila
SWS_FT_F12	binding site(BINDING)	2	Glyoxaldehyde 3-phosphate (by similarity)
SWS_FT_F13	binding site(BINDING)	1	NAD, via carbonyl oxygen
SWS_FT_F14	binding site(BINDING)	2	NAD
SWS_FT_F15	other interesting site(SITE)	1	Activates thiol group during catalysis
SWS_FT_F16	Nucleotide phosphate binding region(NP_LING)	2	NAD
SWS_FT_F17	enzyme active site(ACT_SITE)	1	Nucleophila
SWS_FT_F18	binding site(BINDING)	2	Glyoxaldehyde 3-phosphate (by similarity)
SWS_FT_F19	binding site(BINDING)	1	NAD, via carbonyl oxygen
SWS_FT_F20	binding site(BINDING)	2	NAD
SWS_FT_F21	other interesting site(SITE)	1	Activates thiol group during catalysis
SWS_FT_F22	Nucleotide phosphate binding region(NP_LING)	2	NAD

CSAにおける酵素活性機能の情報

site_id	種類	残基数	詳細
CSA1	catalytic site	2	Publ.AST alignment on list by CSA
CSA2	catalytic site	2	Publ.AST alignment on list by CSA

CSA実用化機能の情報

各部位を構成する
残基一覧など詳細
な情報は別ページ
に記載

解答例2(PDB format)

```

COMPND 2 MOLECULE: D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDR
COMPND 3 CHAIN: G, R;
COMPND 4 EC: 1.2.1.12;
COMPND 5 ENGINEERED: YES
SOURCE 1 MOL_ID: 1;
SOURCE 2 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMARUS AMERICANUS;
SOURCE 3 ORGANISM_COMMON: AMERICAN LOBSTER;
SOURCE 4 ORGANISM_TAXID: 6706
KEYWDS 1 OXIDO-REDUCTASE(ALDEHYDE/DONR,NAD/ACCPT), OXIDU-REDUCTASE(ALDE
KEYWDS 2 DONR,NAD-ACCPT) COMPLEX, OXIDOREDUCTASE
EXPDTA X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,M.G.ROSSMANN
REVDAT 12 13-JUL-11 1GPD 1 VERSN
REVDAT 11 24-FEB-09 1GPD 1 VERSN
REVDAT 10 15-JUL-92 1GPD 1 COMPND
REVDAT 9 30-SEP-83 1GPD 1 REVDAT
REVDAT 8 01-MAR-82 1GPD 1 REMARK
REVDAT 7 20-APR-81 1GPD 3 SEQRES ATOM
REVDAT 6 31-DEC-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT 5 01-OCT-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT 4 05-FEB-79 1GPD 1 SITE
REVDAT 3 20-JUL-78 1GPD 2 CONECT
REVDAT 2 01-NOV-77 1GPD 1 COMPND SOURCE AUTHOR JRNL
REVDAT 2 2 1 REMARK FORMUL
REVDAT 1 17-FEB-77 1GPD 0

```

由来する生物種
SOURCE
Homarus americanus
(American lobster)

公開日
REVDAT
(17-FEB-77)

文献
発表年
JRNL
(1975)

```

JRNL AUTH D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,
JRNL AUTH 2 M.G.ROSSMANN
JRNL TITL STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTU
JRNL TITL 2 LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE.
JRNL REF J.BIOL.CHEM. V. 250 9137 1975
JRNL REFN ISSN 0021-9258
JRNL PMID 127793
REMARK 1

```

解答例2(PDB format)

活性残基
SITE

```

SHEET 7 RC2 9 THR R 303 ASP R 312 -1
SHEET 8 RC2 9 SER R 290 ASP R 293 -1
SHEET 9 RC2 9 LEU R 271 TYR R 273 1
LINK C ACE G 0 N SER G 1 1555 1555
LINK C ACE R 0 N SER R 1 1555 1555
LINK CH3 ACE R 0 CH3 ACE G 0 3555 1555
LINK CH3 ACE R 0 CH3 ACE G 0 1555 3545
LINK SG CYS R 149 C4N NAD R 339 1555 1555
SITE 1 ABG 6 ASN G 6 ASN G 31 ASP G 32 PHE G 34
SITE 2 ABG 6 THR G 96 PHE G 99
SITE 1 ABR 6 ASN R 6 ASN R 31 ASP R 32 PHE R 34
SITE 2 ABR 6 THR R 96 PHE R 99
SITE 1 ARG 3 GLY G 7 ASP G 32 PRO R 188
SITE 1 ARR 4 GLY R 7 PHE R 8 ASP R 32 PRO G 188
SITE 1 APG 2 ARG G 10 ALA G 180
SITE 1 APR 2 ARG R 10 ALA R 180
SITE 1 NPG 1 ILE G 11
SITE 1 NPR 1 ILE R 11
SITE 1 NRG 4 THR G 96 GLY G 97 SER G 119 ALA G 120
SITE 1 NRR 4 THR R 96 GLY R 97 SER R 119 ALA R 120
SITE 1 NBG 4 ILE G 11 CYS G 149 ASN G 313 TYR G 317
SITE 1 NBR 4 ILE R 11 CYS R 149 ASN R 313 TYR R 317
SITE 1 AC3 11 GLY G 7 PHE G 8 GLY G 9 ARG G 10
SITE 2 AC3 11 ILE G 11 ASP G 32 PHE G 34 ILE G 35
SITE 3 AC3 11 PHE G 99 SER G 119 GLU G 314
SITE 1 AC4 10 PHE R 8 ARG R 10 ASP R 32 THR R 96
SITE 2 AC4 10 PHE R 99 SER R 119 ALA R 120 CYS R 149
SITE 3 AC4 10 ASN R 313 TYR R 317
SITE 1 AC7 1 THR R 179
SITE 1 AC8 3 THR R 150 THR R 208 GLY R 209
CRYST1 149.000 139.100 80.700 90.00 90.00 90.00 P 21 21 16
ORIGX1 1.000000 0.000000 0.000000 0.000000
ORIGY1 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000
ORIGZ1 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000

```


解答例2(mmCIF)

```

'Ford, G.C.' 5
'Rossmann, M.G.' 6
#
loop_
_citation.id
_citation.title
_citation.journal_abbrev
_citation.journal_volume
_citation.page_first
_citation.page_last
_citation.year
_citation.journal_id_ASTM
_citation.country
_citation.journal_id_ISSN
_citation.journal_id_CSD
_citation.book_publisher
_citation.pdbx_database_id_PubMed
_citation.pdbx_database_id_DOI
primary 'Studies of asymmetry in the three-dimensional structure of lobster D-glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase.'
J.Biol.Chem. 250 9137 9162 1975 JBCHA3 US 0021-9258 0071 ?
1 'Anion Binding Sites in the Active Center of D-Glyceraldehyde-3-Phosphate Dehydrogenase' J.Mol.Biol. 107 571 ?
JMOBAK UK 0022-2836 0070 ? ? ?
2 'Studies on the Anion Binding Site of Glyceraldehyde-3-Phosphate Dehydrogenase' J.Mol.Biol. 107 577 ? 1976 JMOBAK UK
0022-2836 0070 ?
3
'A Comparison of the Binding and Function of NAD with Respect to Lactate Dehydrogenase and Glyceraldehyde-3-Phosphate Dehy
;STRUCTURE AND CONFORMATION OF NUCLEIC ACIDS AND PROTEIN-NUCLEIC ACID INTERACTIONS : PROCEEDINGS OF THE FOURTH ANNUAL HARR
;
? 353 ? 1975 32VBAT US 0-8391-0764-1 0092 'University Park Press,Baltimore,Md.' ? ?
4 'Sequence Variability and Structure of D-Glyceraldehyde-3-Phosphate Dehydrogenase' J.Biol.Chem. 250 9313 ? 1975

```

文献発表年
_citation.year
(1975)

_citation.id = 'primary' のもの

解答例2(mmCIF)

```
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    4.007
_audit_conform.dict_location   http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
#
_database_2.database_id       PDB
_database_2.database_code     1GPD
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.replaces
_database_PDB_rev.mod_type
1 1977-02-17 1975-07-01 ? 1GPD 0
2 1977-11-01 ? ? 1GPD 1
3 1978-07-20 ? ? 1GPD 2
4 1979-02-05 ? ? 1GPD 1
5 1980-10-01 ? ? 1GPD 1
6 1980-12-31 ? ? 1GPD 1
7 1981-04-20 ? ? 1GPD 3
8 1982-03-01 ? ? 1GPD 1
9 1983-09-30 ? ? 1GPD 1
10 1992-07-15 ? ? 1GPD 1
11 2009-02-24 ? ? 1GPD 1
12 2011-07-13 ? ? 1GPD 1
#
loop_
_database_PDB_rev_record.rev_num
_database_PDB_rev_record.type
```

公開日

_database_PDB_rev.date
(1977-02-17)

_database_PDB_rev.num=1
=最古の改訂
=最初の公開

解答例2(mmCIF)

```
1 326 LYS n
1 327 HIS n
1 328 MET n
1 329 GLN n
1 330 LYS n
1 331 VAL n
1 332 ASP n
1 333 SER n
1 334 ALA n
```

由来する生物種

_entity_src_gen

Homarus americanus(学名)

American lobster(一般名)

```
#
_entity_src_gen.entity_id          1
_entity_src_gen.gene_src_common_name 'American lobster'
_entity_src_gen.gene_src_genus      Homarus
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_gene  ?
_entity_src_gen.gene_src_species    ?
_entity_src_gen.gene_src_strain      ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue      ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue_fraction ?
_entity_src_gen.gene_src_details     ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_fragment ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name 'Homarus americanus'
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_ncbi_taxonomy_id 6706
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_variant ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell_line ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_atcc ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organ ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organelle ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cellular_location ?
_entity_src_gen.host_org_common_name ?
_entity_src_gen.pdbx_host_org_scientific_name ?
```

解答例2(mmCIF)

```
#
loop_
_struct_site.id
_struct_site.details
_struct_site.pdbx_evidence_code
ABG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENINE BASE OF THE COFACTOR'
ABR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENINE BASE OF THE COFACTOR'
ARG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENOSINE RIBOSE OF THE NAD COFACTOR'
ARR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENOSINE RIBOSE OF THE NAD COFACTOR'
APG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE PHOSPHATE OF THE ADENOSINE NUCLEOTIDE OF THI
APR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE PHOSPHATE OF THE ADENOSINE NUCLEOTIDE OF THI
NPG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE PHOSPHATE OF THE NICOTINAMIDE NUCLEOTIDE OF
NPR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE PHOSPHATE OF THE NICOTINAMIDE NUCLEOTIDE OF
NRG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE RIBOSE OF THE NICOTINAMIDE NUCLEOTIDE OF THI
NRR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE RIBOSE OF THE NICOTINAMIDE NUCLEOTIDE OF THI
NBG 'RESIDUES INTERACTING WITH THE NICOTINAMIDE BASE OF THE NAD COFACTOR'
NBR 'RESIDUES INTERACTING WITH THE NICOTINAMIDE BASE OF THE NAD COFACTOR'
AC3 'BINDING SITE FOR RESIDUE NAD G 335'
AC4 'BINDING SITE FOR RESIDUE NAD R 339'
AC7 'BINDING SITE FOR RESIDUE P04 R 337'
AC8 'BINDING SITE FOR RESIDUE P04 R 338'
```

```
#
loop_
_struct_site_gen.id
_struct_site_gen.site_id
_struct_site_gen.pdbx_num_res
_struct_site_gen.label_comp_id
_struct_site_gen.label_asym_id
_struct_site_gen.label_seq_id
_struct_site_gen.pdbx_auth_ins_code
_struct_site_gen.auth_comp_id
_struct_site_gen.auth_asym_id
_struct_site_gen.auth_seq_id
_struct_site_gen.label_atom_id
_struct_site_gen.label_alt_id
_struct_site_gen.symmetry
_struct_site_gen.details
1 ABG 6 ASN A 7 ? ASN G 6 . . 1_555 ?
2 ABG 6 ASN A 31 ? ASN G 31 . . 1_555 ?
3 ABG 6 ASP A 32 ? ASP G 32 . . 1_555 ?
4 ABG 6 PHE A 34 ? PHE G 34 . . 1_555 ?
5 ABG 6 THR A 96 ? THR G 96 . . 1_555 ?
6 ABG 6 PHE A 99 ? PHE G 99 . . 1_555 ?
7 ABR 6 ASN B 7 ? ASN R 6 . . 1_555 ?
```

活性残基

_struct_site(概要)

_struct_site_gen(詳細)

解答例2(PDBML)

文献発表年

/datablock/citationCategory/citation[@id='primary']/year

id属性値="primary"となっているcitation要素の子要素となっているyear要素の値
(1975)

```

± <PDBx:chem_compCategory>
± <PDBx:citationCategory>
  ± <PDBx:citation id= "primary">
    - <PDBx:country> US
    - <PDBx:journal_abbrev> J.Biol.Chem.
    - <PDBx:journal_id_ASTM> JBCHA3
    - <PDBx:journal_id_CSD> 0071
    - <PDBx:journal_id_ISSN> 0021-9258
    - <PDBx:journal_volume> 250
    - <PDBx:page_first> 9137
    - <PDBx:page_last> 9162
    - <PDBx:pdxb_database_id_PubMed> 127793
    - <PDBx:title> Studies of asymmetry in the three-
      dimensional structure of lobster D-glyceraldehyde-
      3-phosphate dehydrogenase.
    - <PDBx:year> 1975
  ± <PDBx:citation id= "1">

```

解答例2(PDBML)

- 1GPD-noatom -

公開日

/datablock/database_PDB_revCategory

/database_PDB_rev[@num='1']/date

num属性値が1であるdatabase_PDB_rev要素の子要素であるdate要素の値
(1977-02-17)

```

± <PDBx:citationCategory>
± <PDBx:citation_authorCategory>
± <PDBx:citation_editorCategory>
± <PDBx:database_2Category>
± <PDBx:database_PDB_matrixCategory>
± <PDBx:database_PDB_revCategory>
  ± <PDBx:database_PDB_rev num="1">
    - <PDBx:date> 1977-02-17
    - <PDBx:date_original> 1975-07-01
    - <PDBx:mod_type> 0
    - <PDBx:replaces> 1GPD
  ± <PDBx:database_PDB_rev num="2">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num="3">
  
```

解答例2(PDBML)

由来する生物種

/datablock/entity_src_genCategory/entity_src_gen

/gene_src_scientific_name (Homarus americanus、学名)

/gene_src_common_name (American lobster、一般名)

```

± <PDBx:database_PDB_rev_recordCategory>
± <PDBx:diffractionCategory>
± <PDBx:diffraction_radiationCategory>
± <PDBx:diffraction_wavelengthCategory>
± <PDBx:entityCategory>
± <PDBx:entity_keywordsCategory>
± <PDBx:entity_polyCategory>
± <PDBx:entity_poly_seqCategory>
± <PDBx:entity_src_genCategory>
  ± <PDBx:entity_src_gen entity_id="1">
    - <PDBx:gene_src_common_name> American lobster
    - <PDBx:gene_src_genus> Homarus
    - <PDBx:pdxb_gene_src_ncbi_taxonomy_id> 6706
    - <PDBx:pdxb_gene_src_scientific_name>
      Homarus americanus
  ± <PDBx:entryCategory>
  
```

解答例2(PDBML)

```
± <PDBx:struct_siteCategory>
  ± <PDBx:struct_site id= "ABG">
    - <PDBx:details>
      RESIDUES INTERACTING WITH THE ADENINE BASE OF T
    - <PDBx:pdxb_evidence_code> AUTHOR
  ± <PDBx:struct_site id= "ABR">
  ± <PDBx:struct_site id= "ARG">
  ± <PDBx:struct_site id= "ARR">
```

```
± <PDBx:struct_site_genCategory>
  ± <PDBx:struct_site_gen id= "1" site_id= "ABG">
    - <PDBx:auth_asym_id> G
    - <PDBx:auth_comp_id> ASN
    - <PDBx:auth_seq_id> 6
    - <PDBx:label_alt_id xsi:nil= "true">
    - <PDBx:label_asym_id> A
    - <PDBx:label_atom_id xsi:nil= "true">
    - <PDBx:label_comp_id> ASN
    - <PDBx:label_seq_id> 7
    - <PDBx:pdxb_num_res> 6
```

活性残基

/datablock/struct_siteCategory/struct_site (概要)

/datablock/struct_site_genCategory/struct_site_gen (詳細)

演習課題3

PDB formatとmmCIFを比較してみる。

- PDB, mmCIFで、公開日はそれぞれどこに書かれているか？
- PDB, mmCIFで、登録者名はそれぞれどこに書かれているか？
- PDB, mmCIFで、実験手法はそれぞれどこに書かれているか？
- PDB, mmCIFで、由来する生物種(biological species)はそれぞれどこに書かれているか？
- PDBの「ATOM」行はmmCIFのどこにどう対応するか？？

ヒント: database_PDB_rev, audit_author, exptl,
entity_src_gen, atom_site

解答例3(mmCIF/PDB)

```
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    4.007
_audit_conform.dict_location   http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
#
_database_2.database_id       PDB
_database_2.database_code     1GPD
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.replaces
_database_PDB_rev.mod_type
1 1977-02-17 1975-07-01 ? 1GPD 0
2 1977-11-01 ? 1GPD 1
3 1978-07-20 ? 1GPD 2
4 1979-02-05 ? 1GPD 1
5 1980-10-01 ? 1GPD 1
6 1980-12-31 ? 1GPD 1
7 1981-04-20 ? 1GPD 3
8 1982-03-01 ? 1GPD 1
9 1983-09-30 ? 1GPD 1
10 1992-07-15 ? 1GPD 1
```

```
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR       D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,M.G.ROSSMANN
REVDAT 12    13-JUL-11 1GPD 1    VERSN
REVDAT 11    24-FEB-09 1GPD 1    VERSN
REVDAT 10    15-JUL-92 1GPD 1    COMPND
REVDAT 9     30-SEP-83 1GPD 1    REVDAT
REVDAT 8     01-MAR-82 1GPD 1    REMARK
REVDAT 7     20-APR-81 1GPD 3    SEQRES ATOM
REVDAT 6     31-DEC-80 1GPD 1    REMARK
REVDAT 5     01-OCT-80 1GPD 1    REMARK
REVDAT 4     05-FEB-79 1GPD 1    SITE
REVDAT 3     20-JUL-78 1GPD 2    CONECT
REVDAT 2     01-NOV-77 1GPD 1    COMPND SOURCE AUTHOR JRNL
REVDAT 2 2    1    1    REMARK FORMUL
REVDAT 1     17-FEB-77 1GPD 0
JRNL         AUTH D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,
JRNL         AUTH 2 M.G.ROSSMANN
JRNL         TITL STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF
JRNL         TITL 2 LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE.
JRNL         REF J.BIOL.CHEM. V. 250 9137 1975
JRNL         REFN ISSN 0021-9258
```

公開日

[mmCIF]

_database_PDB_rev.id=1である_database_PDB_rev.dateの値

[PDB]

REVDATの1番(2番以降は改訂日)

解答例3(mmCIF/PDB)

```
_pdbx_database_status.status_code REL
_pdbx_database_status.entry_id 1GPD
_pdbx_database_status.deposit_site ?
_pdbx_database_status.process_site ?
_pdbx_database_status.SG_entry .
```

```
#
loop_
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Moras, D.' 1
'Olsen, K.W.' 2
'Sabesan, M.N.' 3
'Buehner, M.' 4
'Ford, G.C.' 5
'Rossmann, M.G.' 6
```

```
#
loop_
_citation.id
_citation.title
_citation.journal_abbrev
_citation.journal_volume
_citation.page_first
_citation.page_last
_citation.year
_citation.journal_id_ASTM
_citation.country
_citation.journal_id_ISSN
_citation.journal_id_CSD
```

```
EXPDTA X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,M.G.ROSSMANN
REVDAT 12 13-JUL-11 1GPD 1 VERSN
REVDAT 11 24-FEB-09 1GPD 1 VERSN
REVDAT 10 15-JUL-92 1GPD 1 COMPND
REVDAT 9 30-SEP-83 1GPD 1 REVDAT
REVDAT 8 01-MAR-82 1GPD 1 REMARK
REVDAT 7 20-APR-81 1GPD 3 SEQRES ATOM
REVDAT 6 31-DEC-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT 5 01-OCT-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT 4 05-FEB-79 1GPD 1 SITE
REVDAT 3 20-JUL-78 1GPD 2 CONECT
REVDAT 2 01-NOV-77 1GPD 1 COMPND SOURCE AUTHOR JRNL
REVDAT 2 2 1 REMARK FORMUL
REVDAT 1 17-FEB-77 1GPD 0
JRNL AUTH D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,
JRNL AUTH 2 M.G.ROSSMANN
JRNL TITL STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF
JRNL TITL 2 LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE.
JRNL REF J.BIOL.CHEM. V. 250 9137 1975
JRNL REFN ISSN 0021-9258
JRNL PMID 127793
REMARK 1
REMARK 1 REFERENCE 1
REMARK 1 AUTH K.W.OLSEN,R.M.GARAVITO,M.N.SABESAN,M.G.ROSSMANN
REMARK 1 TITL ANION BINDING SITES IN THE ACTIVE CENTER OF
REMARK 1 TITL 2 D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE
```

登録者名

[mmCIF] _audit_author.name

[PDB] AUTHOR

解答例3(mmCIF/PDB)

```

P04 NON-POLYMER      . 'PHOSPHATE ION'          ? '04 P -3'
NAD NON-POLYMER      . NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE ? 'C21 H27 N
#
_exptl.entry_id      1GPD
_exptl.method         'X-RAY DIFFRACTION'
_exptl.crystals_number ?
#
_exptl_crystal.id      1
_exptl_crystal.density_meas ?
_exptl_crystal.density_Matthews ?
_exptl_crystal.density_percent_sol ?
_exptl_crystal.description ?
#
_diffn.id             1
_diffn.crystal_id      1
#
_diffn_radiation.diffn_id      1
_diffn_radiation.wavelength_id 1
_diffn_radiation.pdbx_monochromatic_or_laue_m_l ?
_diffn_radiation.monochromator ?
_diffn_radiation.pdbx_diffn_protocol ?
_diffn_radiation.pdbx_scattering_type x-ray
#
_diffn_radiation_wavelength.id 1
_diffn_radiation_wavelength.wavelength .
_diffn_radiation_wavelength.wt 1.0
#
_refine.entry_id      1GPD

```

```

KEYWDS  OXIDO-REDUCTASE(ALDEHYDE/DONR,NAD/ACCPT), OXIDO-REDUCTASE(ALDE
KEYWDS  2 DONR,NAD-ACCPT) COMPLEX, OXIDOREDUCTASE
EXPDTA  X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR  D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,M.G.ROSSMANN
REVDAT  12 13-JUL-11 1GPD 1 VERSN
REVDAT  11 24-FEB-09 1GPD 1 VERSN
REVDAT  10 15-JUL-92 1GPD 1 COMPND
REVDAT  9 30-SEP-83 1GPD 1 REVDAT
REVDAT  8 01-MAR-82 1GPD 1 REMARK
REVDAT  7 20-APR-81 1GPD 3 SEQRES ATOM
REVDAT  6 31-DEC-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT  5 01-OCT-80 1GPD 1 REMARK
REVDAT  4 05-FEB-79 1GPD 1 SITE
REVDAT  3 20-JUL-78 1GPD 2 CONECT
REVDAT  2 01-NOV-77 1GPD 1 COMPND SOURCE AUTHOR JRNL
REVDAT  2 2 1 REMARK FORMUL
REVDAT  1 17-FEB-77 1GPD 0
JRNL AUTH D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,
JRNL AUTH 2 M.G.ROSSMANN
JRNL TITL STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTU
JRNL TITL 2 LOBSTER D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE.
JRNL REF J.BIOL.CHEM. V. 250 9137 1975
JRNL REFN ISSN 0021-9258
JRNL PMID 127793
REMARK 1
REMARK 1 REFERENCE 1

```

実験手法

[mmCIF] _exptl.method

[PDB] EXPDTA

解答例3(mmCIF/PDB)

```
#
_entity_src_gen.entity_id 1
_entity_src_gen.gene_src_common_name 'American lobster'
_entity_src_gen.gene_src_genus Homarus
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_gene ?
_entity_src_gen.gene_src_species ?
_entity_src_gen.gene_src_strain ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue_fraction ?
_entity_src_gen.gene_src_details ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_fragment ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name 'Homarus americanus'
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_ncbi_taxonomy_id 6706
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_variant ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell_line ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_atcc ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organ ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organelle ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cellular_location ?
_entity_src_gen.host_org_common_name ?
_entity_src_gen.pdbx_host_org_scientific_name ?
```

```
HEADER OXIDOREDUCTASE 01-JUL-75 1GPD
TITLE STUDIES OF ASYMMETRY IN THE THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF LOB
TITLE 2 GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE
COMPND MOL_ID: 1;
COMPND 2 MOLECULE: D-GLYCERALDEHYDE-3-PHOSPHATE DEHYDROGENASE;
COMPND 3 CHAIN: G, R;
COMPND 4 EC: 1.2.1.12;
COMPND 5 ENGINEERED: YES
SOURCE MOL_ID: 1;
SOURCE 2 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMARUS AMERICANUS;
SOURCE 3 ORGANISM_COMMON: AMERICAN LOBSTER;
SOURCE 4 ORGANISM_TAXID: 6706
KEYWDS OXIDO-REDUCTASE (ALDEHYDE/DONR,NAD/ACCPT), OXIDO-REDUCTASE (ALDE
KEYWDS 2 DONR,NAD-ACCPT) COMPLEX, OXIDOREDUCTASE
EXPDTA X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR D.MORAS,K.W.OLSEN,M.N.SABESAN,M.BUEHNER,G.C.FORD,M.G.ROSSMANN
REVSTAT 12 13-JUL-11 1GPD 1 VERSN
REVSTAT 11 24-FEB-09 1GPD 1 VERSN
```

由来する生物種

[mmCIF]

_entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name (学名)

_entity_src_gen.pdbx_gene_src_common_name (一般名)

[PDB] SOURCE

解答例3(mmCIF/PDB)

```
#
loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.label_atom_id
_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.Cartn_x_esd
_atom_site.Cartn_y_esd
_atom_site.Cartn_z_esd
_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_num
ATOM 1 C C . ACE A 1 1 ? -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 0 ACE G C 1
ATOM 2 O O . ACE A 1 1 ? -10.550 34.338 21.904 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 0 ACE G O 1
ATOM 3 C CH3 . ACE A 1 1 ? -9.623 34.001 19.701 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 0 ACE G CH3 1
ATOM 4 N N . SER A 1 2 ? -11.052 32.419 20.827 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 1 SER G N 1
ATOM 5 C CA . SER A 1 2 ? -11.888 31.910 21.923 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 1 SER G CA 1
ATOM 6 C C . SER A 1 2 ? -11.066 31.847 23.211 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 1 SER G C 1
```

```
MTRIX1 3 -1.000000 0.000000 0.000000 0.000000
MTRIX2 3 0.000000 -1.000000 0.000000 0.000000
MTRIX3 3 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000
HETATM 1 C ACE G 0 -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00
HETATM 2 O ACE G 0 -10.550 34.338 21.904 1.00 0.00
HETATM 3 CH3 ACE G 0 -9.623 34.001 19.701 1.00 0.00
ATOM 4 N SER G 1 -11.052 32.419 20.827 1.00 0.00
ATOM 5 CA SER G 1 -11.888 31.910 21.923 1.00 0.00
ATOM 6 C SER G 1 -11.066 31.847 23.211 1.00 0.00
ATOM 7 O SER G 1 -11.098 32.774 24.034 1.00 0.00
ATOM 8 CB SER G 1 -12.426 30.536 21.586 1.00 0.00
ATOM 9 OG SER G 1 -13.172 29.976 22.663 1.00 0.00
ATOM 10 N LYS G 2 -10.341 30.754 23.367 1.00 0.00
ATOM 11 CA LYS G 2 -9.509 30.565 24.563 1.00 0.00
ATOM 12 C LYS G 2 -9.786 29.107 24.937 1.00 0.00
ATOM 13 O LYS G 2 -10.804 28.795 25.572 1.00 0.00
ATOM 14 CB LYS G 2 -9.890 31.546 25.667 1.00 0.00
ATOM 15 CG LYS G 2 -11.095 31.134 26.492 1.00 0.00
ATOM 16 CD LYS G 2 -11.929 32.349 26.886 1.00 0.00
ATOM 17 CE LYS G 2 -13.092 31.960 27.786 1.00 0.00
ATOM 18 NZ LYS G 2 -14.214 32.915 27.640 1.00 0.00
ATOM 19 N ILE G 3 -8.877 28.238 24.536 1.00 0.00
ATOM 20 CA ILE G 3 -9.025 26.804 24.824 1.00 0.00
ATOM 21 C ILE G 3 -7.819 25.871 24.946 1.00 0.00
ATOM 22 O ILE G 3 -6.677 26.266 24.665 1.00 0.00
ATOM 23 CB ILE G 3 -9.860 26.084 23.736 1.00 0.00
```

各原子の情報
[mmCIF] _atom_site
[PDB] ATOM

解答例3(mmCIF/PDB)

mmCIF

ATOM 1 C C . ACE A 1 1 ? -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? 0 ACE G C 1

PDB側で定義(mmCIFのみ)

label_asym_id
(鎖id=A)

label_seq_id
(残基番号=1)

登録者が定義(mmCIF/PDB)

auth_asym_id
(鎖id=G)

auth_seq_id
(残基番号=0)

PDB format

HETATM 1 C ACE G 0 -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00

演習課題4

mmCIFとPDBMLを比較してみる。

- 演習課題3と同じことをmmCIFとPDBMLで行う。
- http://service.pdbj.org/mine/pdbml_image.htmlも参照。
- PDBMLには原子座標の部分だけを簡略化した「extatom」と呼ばれる形式もある。PDBjのサイトで、これとmmCIFと対応する部分を比較せよ。

ヒント: database_PDB_rev, audit_author, exptl, entity_src_gen, atom_site

解答例4(mmCIF/PDBML)

```
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    4.007
_audit_conform.dict_location   http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/m
#
_database_2.database_id       PDB
_database_2.database_code     1GPD
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.replaces
_database_PDB_rev.mod_type
1 1977-02-17 1975-07-01 ? 1GPD 0
2 1977-11-01 ? ? 1GPD 1
3 1978-07-20 ? ? 1GPD 2
4 1979-02-05 ? ? 1GPD 1
5 1980-10-01 ? ? 1GPD 1
6 1980-12-31 ? ? 1GPD 1
7 1981-04-20 ? ? 1GPD 3
8 1982-03-01 ? ? 1GPD 1
9 1983-09-30 ? ? 1GPD 1
10 1992-07-15 ? ? 1GPD 1
```

```
± <PDBx:database_2Category>
± <PDBx:database_PDB_matrixCategory>
± <PDBx:database_PDB_revCategory>
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "1">
    - <PDBx:date> 1977-02-17
    - <PDBx:date_original> 1975-07-01
    - <PDBx:mod_type> 0
    - <PDBx:replaces> 1GPD
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "2">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "3">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "4">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "5">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "6">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "7">
  ± <PDBx:database_PDB_rev num= "8">
```

公開日

[mmCIF]

_database_PDB_rev.id=1である_database_PDB_rev.dateの値

[PDBML]

/datablock/database_PDB_revCategory/database_PDB_rev[@num='1']/date
(num属性値が1であるdatabase_PDB_rev要素の子要素であるdate要素の値)

解答例4(mmCIF/PDBML)

```
_pdbx_database_status.status_code REL
_pdbx_database_status.entry_id 1GPD
_pdbx_database_status.deposit_site ?
_pdbx_database_status.process_site ?
_pdbx_database_status.SG_entry .
```

```
#
loop_
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Moras, D.' 1
'Olsen, K.W.' 2
'Sabesan, M.N.' 3
'Buehner, M.' 4
'Ford, G.C.' 5
'Rossmann, M.G.' 6
#
```

```
loop_
_citation.id
_citation.title
_citation.journal_abbrev
_citation.journal_volume
_citation.page_first
_citation.page_last
_citation.year
_citation.journal_id_ASTM
_citation.country
_citation.journal_id_ISSN
_citation.journal_id_CSD
```

```
± <PDBx:atom_typeCategory>
```

```
± <PDBx:audit_authorCategory>
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "1">
```

```
- <PDBx:name> Moras, D.
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "2">
```

```
- <PDBx:name> Olsen, K.W.
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "3">
```

```
- <PDBx:name> Sabesan, M.N.
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "4">
```

```
- <PDBx:name> Buehner, M.
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "5">
```

```
- <PDBx:name> Ford, G.C.
```

```
± <PDBx:audit_author pdbx_ordinal= "6">
```

```
- <PDBx:name> Rossmann, M.G.
```

```
± <PDBx:audit_confCategory>
```

```
± <PDBx:cellCategory>
```

```
± <PDBx:chem_compCategory>
```

```
± <PDBx:citationCategory>
```

登録者名

[mmCIF] _audit_author.name

[PDBML]

/datablock/audit_authorCategory/audit_author/name

解答例4(mmCIF/PDBML)

```

P04 NON-POLYMER      . 'PHOSPHATE ION'          ? '04 P -3'
NAD NON-POLYMER      . NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE ? 'C21 H27 N
#
_exptl.entry_id      1GPD
_exptl.method        'X-RAY DIFFRACTION'
_exptl.crystals_number ?
#
_exptl_crystal.id      1
_exptl_crystal.density_meas ?
_exptl_crystal.density_Matthews ?
_exptl_crystal.density_percent_sol ?
_exptl_crystal.description ?
#
_diffn.id            1
_diffn.crystal_id    1
#
_diffn_radiation.diffn_id      1
_diffn_radiation.wavelength_id 1
_diffn_radiation.pdbx_monochromatic_or_laue_m_l ?
_diffn_radiation.monochromator ?
_diffn_radiation.pdbx_diffn_protocol ?
_diffn_radiation.pdbx_scattering_type x-ray
#
_diffn_radiation_wavelength.id 1
_diffn_radiation_wavelength.wavelength .
_diffn_radiation_wavelength.wt 1.0
#
_refine.entry_id      1GPD

```

```

± <PDBx:entity_keywordsCategory>
± <PDBx:entity_polyCategory>
± <PDBx:entity_poly_seqCategory>
± <PDBx:entity_src_genCategory>
± <PDBx:entryCategory>
± <PDBx:exptlCategory>
  - <PDBx:exptl entry_id= "1GPD" method= "X-RAY
    DIFFRACTION">
± <PDBx:exptl_crystalCategory>
± <PDBx:pdbx_database_remarkCategory>
± <PDBx:pdbx_database_statusCategory>
± <PDBx:pdbx_entity_nonpolyCategory>
± <PDBx:pdbx_nonpoly_schemeCategory>
± <PDBx:pdbx_poly_seq_schemeCategory>
± <PDBx:pdbx_struct_assemblyCategory>
± <PDBx:pdbx_struct_assembly_genCategory>
± <PDBx:pdbx_struct_assembly_propCategory>
± <PDBx:pdbx_struct_oper_listCategory>
± <PDBx:pdbx_unobs_or_zero_occ_atomsCategory>

```

実験手法

[mmCIF] _exptl.method

[PDBML] /datablock/exptlCategory/exptl@method

(exptl要素のmethod属性値)

解答例4(mmCIF/PDBML)

```

1 334 _entity_src_gen.entity_id 1
#
_entity_src_gen.gene_src_common_name 'American lobster'
_entity_src_gen.gene_src_genus Homarus
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_gene ?
_entity_src_gen.gene_src_species ?
_entity_src_gen.gene_src_strain ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue ?
_entity_src_gen.gene_src_tissue_fraction ?
_entity_src_gen.gene_src_details ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_fragment ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name 'Homarus americanus'
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_ncbi_taxonomy_id 6706
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_variant ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell_line ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_atcc ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organ ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_organelle ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cell ?
_entity_src_gen.pdbx_gene_src_cellular_location ?
_entity_src_gen.host_org_common_name ?
_entity_src_gen.pdbx_host_org_scientific_name ?

```

```

± <PDBx:entity_poly_seqCategory>
± <PDBx:entity_src_genCategory>
  ± <PDBx:entity_src_gen entity_id= "1">
    - <PDBx:gene_src_common_name> American lobster
    - <PDBx:gene_src_genus> Homarus
    - <PDBx:pdbx_gene_src_ncbi_taxonomy_id> 6706
    - <PDBx:pdbx_gene_src_scientific_name>
      Homarus americanus
  ± <PDBx:entryCategory>
  ± <PDBx:exptlCategory>
  ± <PDBx:exptl_crystalCategory>
  ± <PDBx:pdbx_database_remarkCategory>
  ± <PDBx:pdbx_database_statusCategory>
  ± <PDBx:pdbx_entity_nonpolyCategory>

```

由来する生物種

[mmCIF]

_entity_src_gen.pdbx_gene_src_common_name (一般名)

_entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name (学名)

[PDBML]

/datablock/entity_src_genCategory/entity_src_gen/gene_src_common_name(一般名)

/datablock/entity_src_genCategory/entity_src_gen/gene_src_scientific_name(学名)

解答例4(mmCIF/PDBML)

```
#
loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.label_atom_id
_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.Cartn_x_esd
_atom_site.Cartn_y_esd
_atom_site.Cartn_z_esd
_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_num
ATOM 1 C C . ACE A 1 1 ? -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 0 ACE G C 1
ATOM 2 O O . ACE A 1 1 ? -10.550 34.338 21.904 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 0 ACE G O 1
ATOM 3 C CH3 . ACE A 1 1 ? -0.623 34.001 19.701 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 0 ACE G CH3 1
ATOM 4 N N . SER A 1 2 ? -11.052 32.419 20.827 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 1 SER G N 1
ATOM 5 C CA . SER A 1 2 ? -11.888 31.910 21.923 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 1 SER G CA 1
ATOM 6 C C . SER A 1 2 ? -11.066 31.847 23.211 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 1 SER G C 1
```

xsi:schemaLocation="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v40.xsd pdbx-v40

```
<PDBx:atom_siteCategory>
<PDBx:atom_site id="1">
  <PDBx:B_iso_or_equiv>0.00</PDBx:B_iso_or_equiv>
  <PDBx:Cartn_x>-10.457</PDBx:Cartn_x>
  <PDBx:Cartn_y>33.593</PDBx:Cartn_y>
  <PDBx:Cartn_z>20.916</PDBx:Cartn_z>
  <PDBx:auth_asym_id>G</PDBx:auth_asym_id>
  <PDBx:auth_atom_id>C</PDBx:auth_atom_id>
  <PDBx:auth_comp_id>ACE</PDBx:auth_comp_id>
  <PDBx:auth_seq_id>0</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>C</PDBx:label_atom_id>
  <PDBx:label_comp_id>ACE</PDBx:label_comp_id>
  <PDBx:label_entity_id>1</PDBx:label_entity_id>
  <PDBx:label_seq_id>1</PDBx:label_seq_id>
  <PDBx:occupancy>1.00</PDBx:occupancy>
  <PDBx:pdbx_PDB_model_num>1</PDBx:pdbx_PDB_model_num>
  <PDBx:type_symbol>C</PDBx:type_symbol>
</PDBx:atom_site>
<PDBx:atom_site id="2">
  <PDBx:B_iso_or_equiv>0.00</PDBx:B_iso_or_equiv>
  <PDBx:Cartn_x>-10.550</PDBx:Cartn_x>
```

各原子の情報

[mmCIF] _atom_site

[PDBML-all] /datablock/atom_siteCategory/atom_site

※この情報は「全ての情報(all)」に掲載(「ヘッダのみ」にはない)

解答例4(mmCIF/PDBML)

```
#
loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.label_atom_id
_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.Cartn_x_esd
_atom_site.Cartn_y_esd
_atom_site.Cartn_z_esd
_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_num
ATOM 1 C C . ACE A 1 1 ? -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? ACE G C 1
ATOM 2 O O . ACE A 1 1 ? -10.550 34.338 21.904 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? ACE G O 1
ATOM 3 C CH3 . ACE A 1 1 ? -9.623 34.001 19.701 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? ACE G CH3 1
ATOM 4 N N . SER A 1 2 ? -11.052 32.419 20.827 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? SER G N 1
ATOM 5 C CA . SER A 1 2 ? -11.888 31.910 21.923 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? SER G CA 1
ATOM 6 C C . SER A 1 2 ? -11.066 31.847 23.211 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? SER G C 1
ATOM 7 C O . SER A 1 2 ? -11.098 32.774 24.034 1.00 0.00 ? ? ? ? ? ? ? ? SER G C 1
ATOM 8 C CB . SER A 1 2 ? -12.426 30.536 21.586 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 9 C OG . SER A 1 2 ? -13.172 29.976 22.663 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 10 N N . LYS A 1 3 ? -10.341 30.754 23.367 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 11 C CA . LYS A 1 3 ? -9.509 30.565 24.563 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 12 C C . LYS A 1 3 ? -9.786 29.107 24.937 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 13 C O . LYS A 1 3 ? -10.804 28.795 25.572 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 14 C CB . LYS A 1 3 ? -9.890 31.546 25.667 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 15 C CG . LYS A 1 3 ? -11.095 31.134 26.492 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 16 C CD . LYS A 1 3 ? -11.929 32.349 26.886 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
ATOM 17 C CE . LYS A 1 3 ? -13.092 31.960 27.786 1.00 0.00 1 ? ? </PDBx:atom_record>
```

各原子の情報

[mmCIF] _atom_site

[PDBML-extatom] /datablock/category_atom_record/atom_record

※原子情報だけを取り出し、各原子の情報を1つの要素にまとめた「extatom」形式のPDBMLでも各原子の情報は確認できる

解答例4(mmCIF/PDBML)

mmCIF

ATOM 1 C C . ACE A 1 1 ? -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 ? ? ? ? ? 0 ACE G C 1

PDB側で定義

label_asym_id
(鎖id=A)

label_seq_id
(残基番号=1)

登録者が定義

auth_asym_id
(鎖id=G)

auth_seq_id
(残基番号=0)

PDBML-extatom

<PDBx:atom record id="1">

ATOM 1 A G 1 0 ? . ACE ACE C C C -10.457 33.593 20.916 1.00 0.00 1 ?

</PDBx:atom record>

※mmCIFとPDBML-extatomは書式は似ているが順序が異なる