

演習問題解答(5-8)

大阪大学蛋白質研究所

くどう たかひろ

工藤 高裕



演習課題5

PDBjのトップページから、今週の更新情報を調べる。

- 今週新規に追加されたエントリーは何件あるか?
- いくつか例を眺めてみる。
- 今週更新されたエントリーは何件あるか?
- いくつか例を眺めてみて、何度更新されたかを調べる。
 - 「database_PDB_rev」カテゴリをみるとわかる。
- どこが更新されたかを調べる。
 - 「database_PDB_rev_record」カテゴリをみると(だいたい) わかる。







2013/01/09新規公開は127件

し、JST-NBDOC人阪人子の支援を支 り立体構造データベースを国際的に統

トップペーシ データ登録 >>

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。

最新の更新/廃止されたエントリ (1) [IDリスト | Mineで表示]

全ての更新/廃止されたエントリ (1909) [IDリスト | Mineで表示]

● 更新されたエントリ (190) [IDリスト | Mineで表示

ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>

Search PDB (PDBj Mine)

wwPDB/RDF

Latest Release Search

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

SeSAW

Ligand Binding (GIRAF) EM Navigator

2013/01/09更新は190件

横造因子エン▶✓

PDB/EMDB 最新情報

PDBエントリ

Search NMR Data (BMRB)

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

NMR距離制限情報エントリ

- 。新規公開されたエントリ (8) [IDリスト]
- 。更新されたエントリ (0) [IDリスト]

。収録エントリ (87279) **プ**Dリスト]

- 。 収録エントリ (7056) [IDリスト]
- 更新/廃止されたエントリー最新のIDリスト

・NMR化学シブー覧を見るには「Mineで表示」をクリック

Jスト(1) / 全てのID リスト(1104)I

- 。更新されたエントリ (0) [IDリスト]
- 。収録エントリ (815) [IDリスト]
- 。 更新/廃止されたエントリ [最新のIDリスト(0) / 全てのIDリスト(2)]
- EMDBエントリ
 - 。新規公開されたマップエントリ (11) [IDリスト I EM Navigatorで表示]
 - 。更新されたマップエントリ (18) [IDリスト I EM Navigatorで表示]
 - 。新規公開されたヘッダエントリ (3) [IDリスト | EM Navigatorで表示]
 - 。収録エントリ (1688) [IDリスト | EM Navigatorで表示]















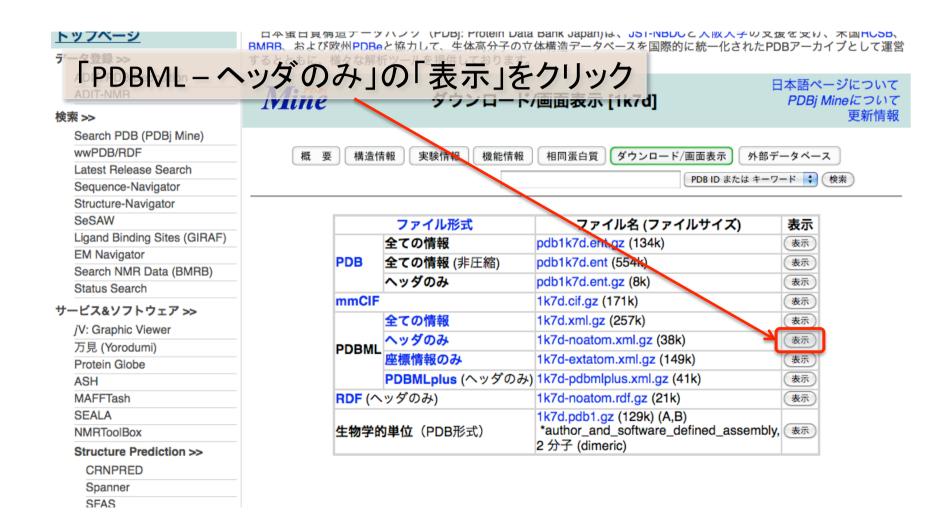




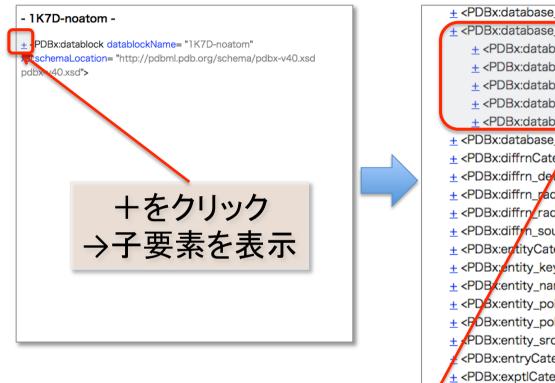












database_PDB_rev 要素が5つ →公開+4回の更新

```
+ <PDBx:database_PDB_matrixCategory>
 <PDBx:database_PDB_revCategory>
   + <PDBx:database PDB rev num= "1">
   + <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 recordCategory>
+ <PDBx:diffrnCategory>
+ <PDBx:diffrn_detectorCategory>
+ <PDBx:diffrn_radiationCategory>
+ <PDBx:diffrn radiation_wavelengthCategory>
+ <PDBx:diff_n_sourceCategory>
+ <PDBx:entityCategory>
+ <PDBx:entity_keywordsCategory>
+ <PDB :entity_name_comCategory>
± <PDBx:entity_polyCategory>
+ <PDBx:entity poly segCategory>
+ PDBx:entity_src_genCategory>
 <PDBx:entryCategory>
+ <PDBx:exptlCategory>
+ <PDBx:exptl_crystalCategory>
+ <PDBx:exptl_crystal_growCategory>
+ <PDBx:pdbx_database_relatedCategory>
```



```
+ <PDBx:database_PDB_matrixCategory>
    + <PDBx:database_PDB_revCategory>
     <PDBx:database PDB rev recordCategory>
       - <PDBx:database_PDB_rev_record rev_num= "2" type= "JRNL">
       - <PDBx:database PDB rev record rev num= "3" type=
       "COMPND">
       - <PDBx:database_PDB_rev_record rev_num= "4" type=
       "VERSN">
       - <PDBx:database_PDB_rev_record rev_num= "5" type= "TITLE">
       - <PDBx:database PDB rev_record rev_num= "5" type=
       "VERSN">
    + <PDBx:diffrnCategory>
    + <PDBx:diffrn_detectorCategory>
    + <PDBx:diffrn radiationCategory>
    + <PDBx:diffrn_radiation_wavelengthCategory
    + <PDBx:diffrn_sourceCategory>
    + <PDBx:entityCategory>
database_PDB_rev_record
1回目(rev_num=2):JRNL(文献情報)
     <PDBx:entity_poly_seqCategory>
± <PDBx:entity_src_genCategory>
```



演習課題6

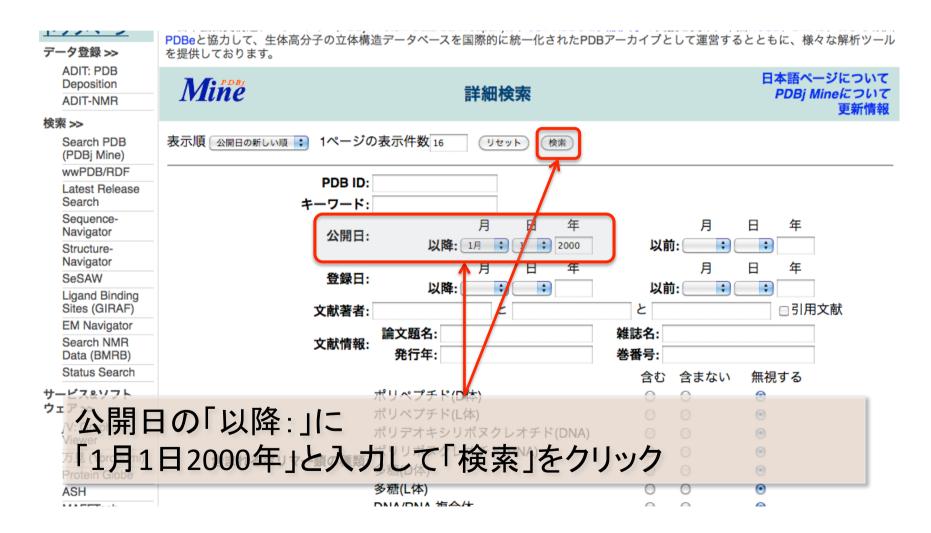
詳細検索(Advanced Search)を用いて以下のことを調べる。

- 「公開日」(Release date)が2000年1月1日以 降のエントリーは何件あるか?
- 「公開日」が1999年12月31日以前のエントリーは何件あるか?

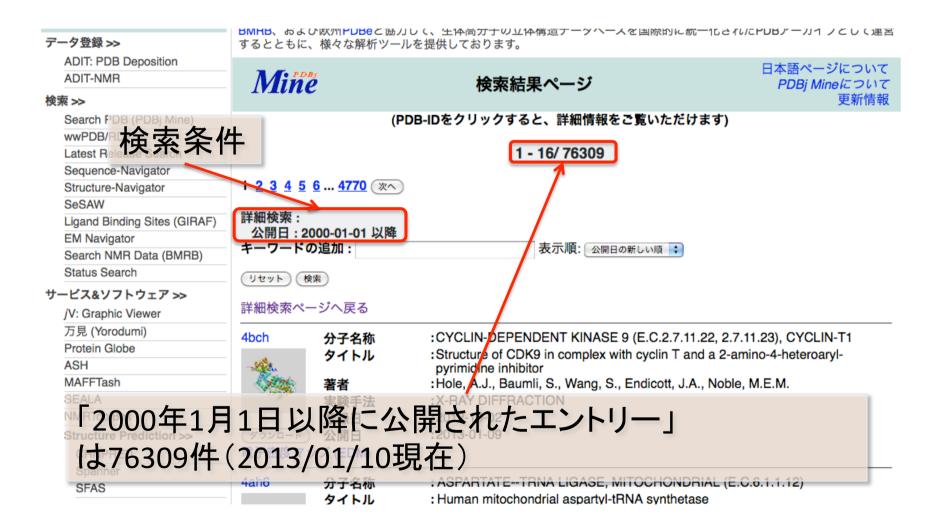














1.11.	PDBeと協力して、生体高分子の立体構	造データベースを国際的に統一化されたPDB	アーカイブとして運営する	とともに、様々な解析ツール
データ登録 >>	を提供しております。	27 7 7 6 2 13 13 13 13 13 13 13 13 13 13 13 13 13	, ,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	
ADIT: PDB Deposition ADIT-NMR	Minë	詳細検索		日本語ページについて PDBj Mineについて 更新情報
検索 >>				X-MI INTX
Search PDB (PDBj Mine)	表示順 公開日の新しい順 * 1ページの	D表示件数 16 リセット 検索		
wwPDB/RDF	DDD ID.	7		
Latest Release Search	PDB ID: キーワード:			
Sequence- Navigator	公開日:	月年	月	日 年
Structure- Navigator		月 日 年	以前: 12月 🕏	日 年
SeSAW	登録日:	以降:	以前:	H T
Ligand Binding Sites (GIRAF)	文献著者:		NH.	□引用文献
EM Navigator		論文題名:	雑誌名:	
Search NMR Data (BMRB)	文献情報:	発行年:	巻番号:	
Status Search			含む 含まない	無視する
サービス&ソフト		ポリペプチド(D本)	0 0	•
ウェル門口	の「以前・ルー	ポリペプチド(L体) ポリデオキシリボヌクレオチド(DNA)		•
iV: グンロカリト Viewer		ポリデオキシリボヌクレオチド(DNA)		0
712月	31日1999年 レブ	し力して「検索」を	クリック	•
Protein Globe		7 NA(CIT)		0
ASH		多糖(L体)	0 0	0







演習課題7

詳細検索(Advanced Search)を用いて、引用文献に関して調べてみる。

- 「Walker, J.E.」を著者に含むエントリーは何件あるか?
- ヒットしたものの中には、一見して「Walker, J.E.」を含まないように見えるものもある。なぜか?
- 「Primary」(引用文献)ボタンをチェックして、同じ検索をしてみる。結果はどう変わるか?
- ・ 雑誌「Nature」に掲載されたエントリーは何件あるか?
- ・ 雑誌「Science」に2005年に掲載されたエントリーはいく つあるか?

ヒント: audit_author, citation, citation_author







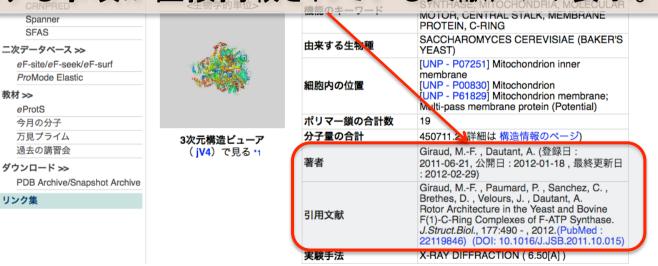




Structure-Navigator
SeSAW
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search NMR Data (BMRB)
Structure-Navigator

ステントリーID (PDB ID)
ファイルのダウンロード
関連構造のPDB ID
ファイルのダウンロード
フwpd, 2xok, 1go1

構造の著者(登録者)にも引用文献にも「Walker, J.E.」が見当たらないエントリーもある(例:3zry) →引用文献には「primary」(一次引用文献、PDBエントリーに関する事項が直接掲載されている文献)のみ表示。





```
- CPUDX.CITATION AUTHOR CITATION IO 3 MAINE STOCK, D.
   ordinal= "20">
   - <PDBx:citation author citation id= "3" name= "Leslie, A.G.W."
   ordinal= "21">
   - <PDBx:citation author citation id= "3" name= "Walker, J.E."
   ordinal= "22">
   - <PDBx:citation author citation id= "4" name= "Kabaleeswaran,
   V." ordinal= "23">
   - <PDBx:citation author citation id= "4" name= "Puri, N."
   ordinal= "24">
   - <PDBx:citation author citation id= "4" name= "Walker, J.E."
   ordinal= "25">
   - <PDBx:citation author citation id= "4" name= "Leslie, A.G."
   ordinal= "26">
   - <PDBx:citation author citation id= "4" name= "Mueller, D.M."
   ordinal= "27">
+ <PDBx:computingCategory>
+ <PDBx:database_2Category>
+ <PDBx:database_PDB_matrixCategory>
```

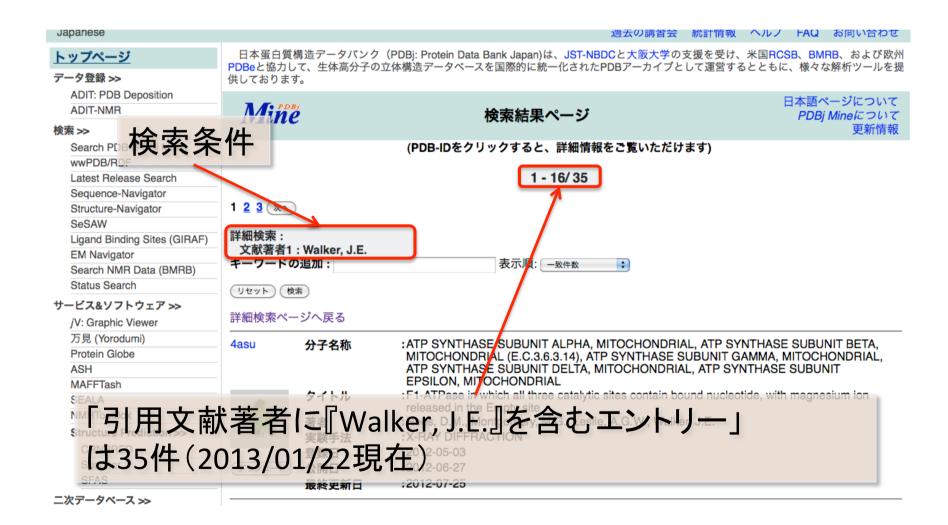
詳細検索の文献著者はPrimaryではない文献も検索対象となる(例:3zry、id="4"の文献にWalker,J.E.がある)

DDD wdiffer radiation wavelength Catagoria



1.11.	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PD	DBアーカイブとして運営する	とともに、様々な解析ツール
データ登録 >>	を提供しております。		77,700(20,70	
ADIT: PDB Deposition ADIT-NMR	Mine	詳細検索		日本語ページについて PDBj Mineについて 更新情報
検索 >>				X-WI IN TA
Search PDB (PDBj Mine)	表示順 公開日の新しい順 ・ 1ページの	D表示件数 16 リセット 検索		
wwPDB/RDF	PDB ID:			
Latest Release Search	キーワード:			
Sequence- Navigator	公開日:	月日年	月	日 年
Structure- Navigator		以降:	以前: 月	日年
SeSAW	登録日:	以降: ;	以前:	+
Ligand Binding Sites (GIRAF)	文献著者:		以前:	□引用文献
EM Navigator		論文題名:	雑誌名:	
Search NMR Data (BMRB)	文献情報:	発行年:	卷番号:	
Status Search			含む 含まない	無視する
サービス&ソフト		ポリペプチド(D体)	0 0	•
引用	文献」のチェック	をONにして検索で	すると、	⊙⊙
idが「F	rimary」である文	「献のみが検索対	付象となる。	⊕⊕
ASH		多糖(L体)	0 0	•
		DNIA/DNIA 指合体	0 0	

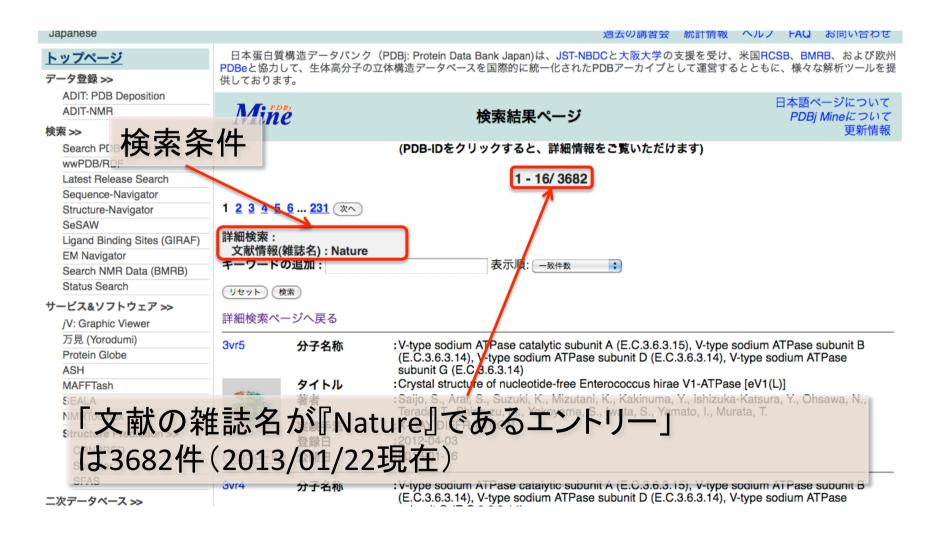




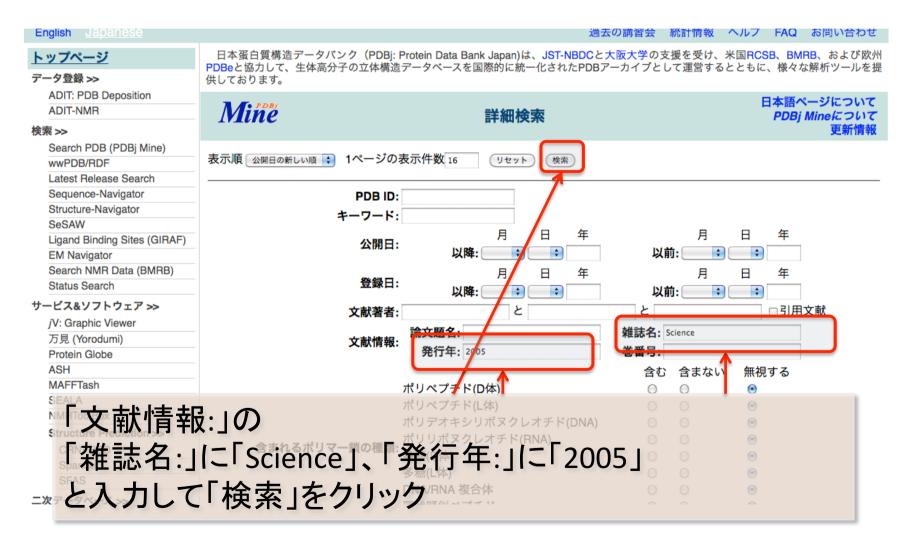




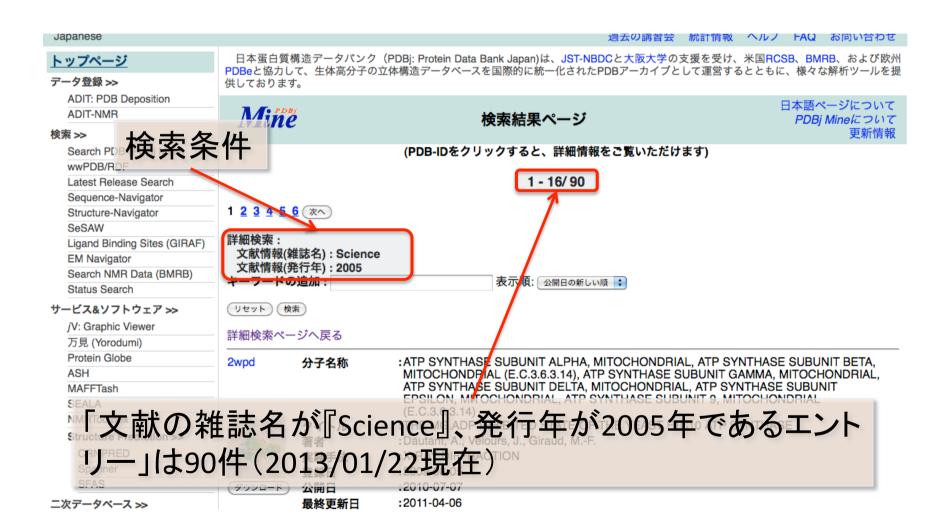














演習課題8

詳細検索(Advanced Search)を用いて、以下のことを調べる。

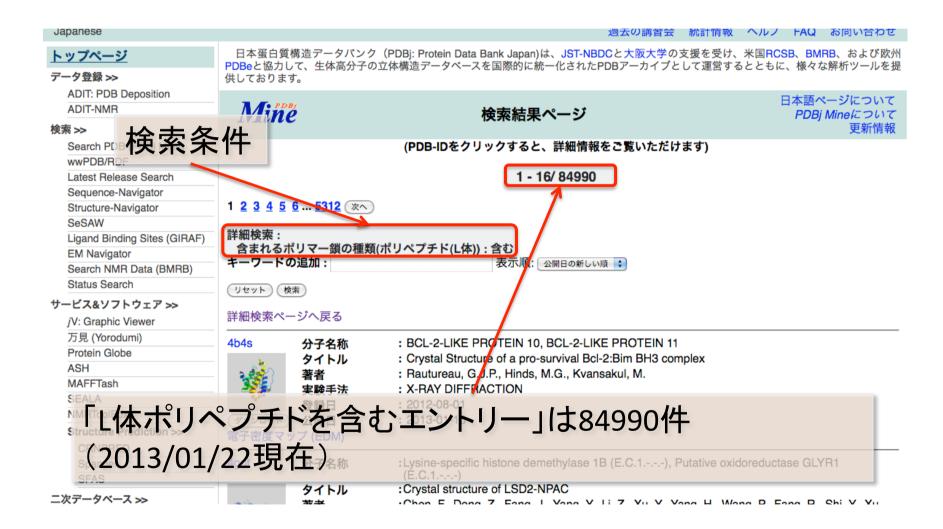
- 「polypeptide(L)」(通常の蛋白質)を含むエントリーは何件あるか?
- 「polypeptide(D)」のみを含むエントリーを検索するにはどう すればよいか?
- 蛋白質とDNAの複合体を検索するにはどうすればよいか?
- 蛋白質、DNA、RNAを含むエントリーは何件あるか?
- RNAと「polysaccharide(D)」の両方を含むエントリーはあるか?
- その他色々な組み合わせを試してみる。

ヒント: entity_poly, entity



TANK FF		ALL III THE					
Search PDB (PDBj Mine)	+= NT						
wwPDB/RDF	表示順 公開日の新しい順 ・ 1ページの表示件数 16 リセット 検索						
Latest Release Search							
Sequence-Navigator	PDB ID:						
Structure-Navigator	キーワード:						
SeSAW							
Ligand Binding Sites (GIRAF)	公開日: 月 年	月 日 <u>年</u>					
EM Navigator	以降: 以節:	•					
Search NMR Data (BMRB)	月 日 年	月 日 年					
Status Search	登録日: 以降: 以前:						
サービス&ソフトウェア >>	文献著者:	□引用文献					
jV: Graphic Viewer							
万見 (Yorodumi)	文献情報:						
Protein Globe	発行年: 巻番号:						
ASH	술한 술	まない 無視する					
MAFFTash	#1107710/4	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •					
SEALA	ポリペプチド(上体)						
NMRToolBox		_					
Structure Prediction >>	ポリンポスクレオチド(RNA)						
CRNPRED	今まれるボリマー鎖の補類・ 、 ′						
Spanner	多糖(D体)						
SFAS	多糖(L体)	0					
二次データベース >>	DNA/RNA 合体 O O						
aE sita/aE acak/aE aurf	環状疑似・プチド	•					
含まれるポリマー鎖の種類:」の「ポリペプチド(L体)」で含む」を選択して「検索」をクリック他の種類のポリマーは含まれていても含まれていなくても							

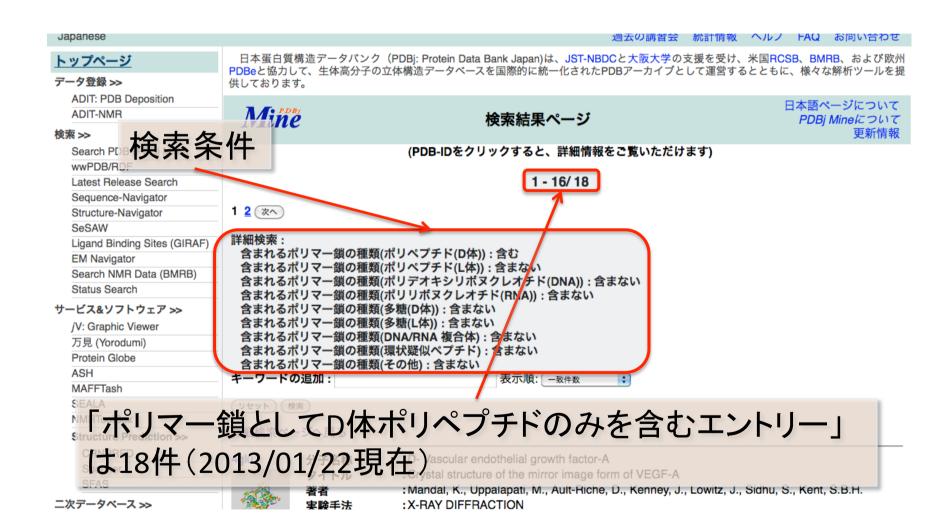






検索 >>						更新情報
Search PDB (PDBj Mine)	±= W5 (N # = /# ##				
wwPDB/RDF	表示順 公開日の新しい順 💲 1ページの	D表示件数 16 リセット 検索				
Latest Release Search						
Sequence-Navigator	PDB ID	0:				
Structure-Navigator	キーワード	:				
SeSAW		月日年		月	日 年	
Ligand E A	るポリマー鎖の	り種類・1の	以前		+	
Search NMR Data (BMRB)	るインター製の	ノイ里 天只・」 リノ	×AB:			
				月	日 年	
Status Sea Chi	プチド(D体)」で		以前	j: 🔷 🗘	A V	
リーピス&ソフトソエア >>		<u>L</u>	2	_	□引用文	煎
jV: Grap インター イナー	ナ 今主だしいる	選択して「検索」	をク			
	8. D 8. 8 6 7 7 6	とうべして「大木」	ALDO T	111		
Protein Giobe		党行 节:	苍雷亏.			
ASH			含む	含まない	無視する	
MAFFTash		ポリペプチド(D体)	•	0	0	
SEALA		ポリペプチド(L体)	0	•	0	
NMRToolBox		ポリデオキシリボヌクレオチド(DNA)	0	•	0	
Structure Prediction >>	0 + 1 = 1°11 - N/ 0 7 7 7	ポリリボヌクレオチド(RNA)	0	•	0	
CRNPRED	含まれるポリマー鎖の種类	: 多糖(D体)	0	•	0	
Spanner		多糖(L体)	0	•	0	
SFAS		DNA/RNA 複合体	0	•	0	
二次データベース >>		環状疑似ペプチド	0	•	0	
eF-site/eF-seek/eF-surf		その他	0		0	
ProMode Elastic	// A 44-140 ±5	4.10			0	
教材 >>	化合物情報					
eProtS	エントリーのタイトル	·:				
今月の分子	外部データベース	: ID:				
下日 プニンル	リガンドと補欠分子協					

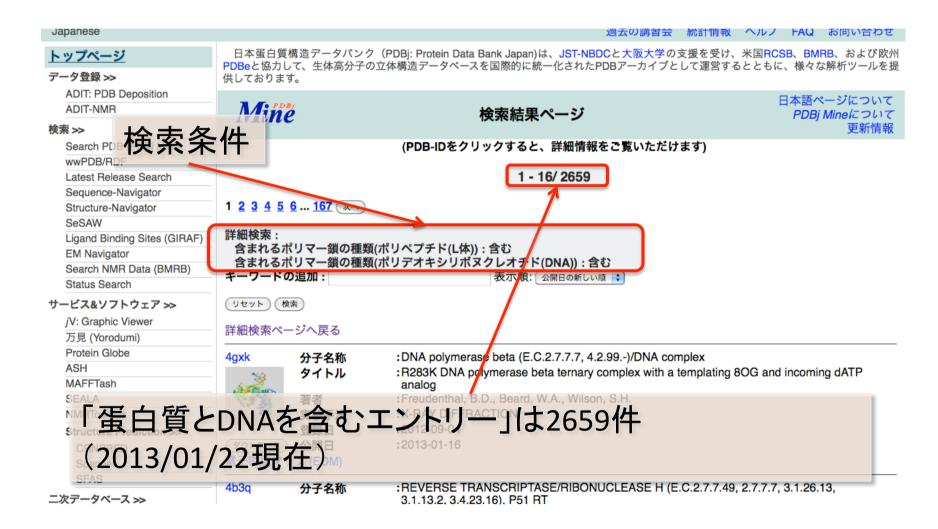






検索 >>						更新情報
Search PDB (PDBj Mine) wwPDB/RDF Latest Release Search		表示件数 16 リセット 検索				
Sequence-Navigator	PDB ID:					
蛋白質+DN「ポリペプチトの両方を「含	ヾ(L体)」と「ポリ ・	デオキシリボヌク	レガ		‡	
ロノーリンプでする	文献著者:	٤	٤		日引用文	
万見 (Yorodumi)	文献情報:	誦又起答 :	雜誌名:			
Protein Globe	2 312 112 12	発行年:	巻番号:			
ASH			含む	含まない	無視する	
MAFFTash	_	ポリペプチド(D体)	0	0	•	
SEALA		ポリペプチド(L体)	•	0	0	
NMRToolBox		ポリデオキシリボヌクレオチド(DNA)	•	0	0	
Structure Prediction >>		ポリリボヌクレオチド(RNA)	0	0	<u> </u>	
CRNPRED	含まれるポリマー鎖の種類:	多糖(D体)	0	0	•	
Spanner		多糖(L体)	0	0	•	
SFAS		DNA/RNA 複合体	0	0	•	
二次データベース >>		環状疑似ペプチド	0	0	•	
eF-site/eF-seek/eF-surf		その他	0	0	•	
ProMode Elastic	化合物情報:		1	0		
教材 >>						
eProtS	エントリーのタイトル:					
今月の分子	外部データベース:	ID :				
七日 サニノル	リガンドと補欠分子族・					

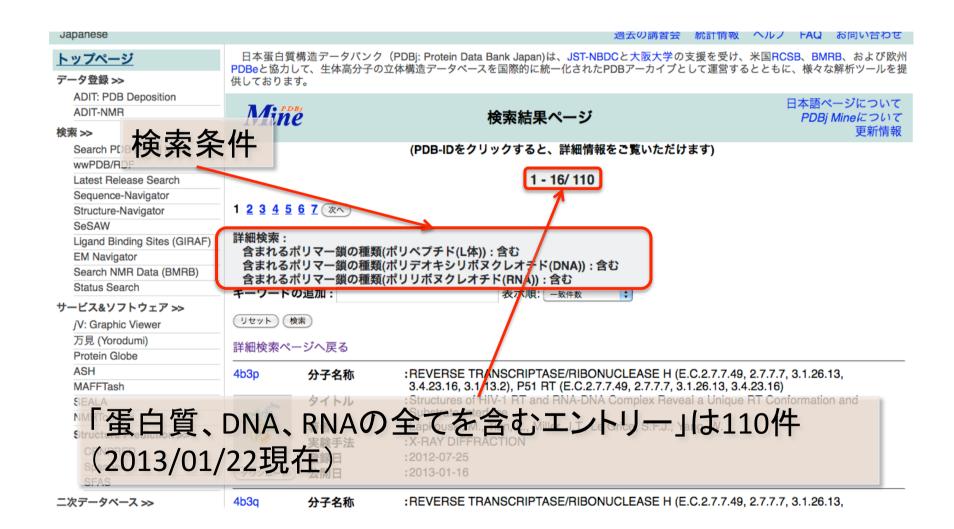






検索 >>							更新情報
Search PDB (PDBj Mine) wwPDB/RDF Latest Release Search	表示順 公開日の新しい順 ・ 1ページの	表示件数 16 リセット	検索				
Sequence-Navigator	PDB ID:						
	ヾ(L体)」「ポリデ:				F(DI	H A	
イボリリボヌク N: Graphic Viewer	フレオチド(RNA)		「含む」				文献
万見 (Yorodumi)	文献情報:	論又起答:		雜誌名:			
Protein Globe		発行年:		巻番号:			
ASH		7		含む	含まない	無視する	
MAFFTash		ポリペプチド(D体)		0	0	•	
SEALA		ポリペプチド(L体)		•	0	0	
NMRToolBox		ポリデオキシリボヌクレ	オチド(DNA)	•	0	0	
Structure Prediction >>		ポリリボヌクレオチド(P	NA)	•	0	0	
CRNPRED	ウェルムホリ マー和の類称	多糖(D体)	,	0	0	0	
Spanner		多糖(L体)		0	0	•	
SFAS		DNA/RNA 複合体		0	0	•	
二次データベース >>		環状疑似ペプチド		0	0	•	
eF-site/eF-seek/eF-surf		その他		0	0	0	
ProMode Elastic		C 00 16			0	0	
教材 >>	化合物情報:						
eProtS	エントリーのタイトル:						
今月の分子	外部データベース:	; ID:					
マロザニノI.	リガンドと補欠分子族・						







検索 >>							史新情報
Search PDB (PDBj Mine)	表示順 公開日の新しい順 ・ 1ページの	表示件数 16 リセッ	/ト 検索				
wwPDB/RDF	2人が成一公開日の新しい頃 ▼ 1. ()の	KANITEK 16	快来				
Latest Release Search Sequence-Navigator	PDD ID						
Structure-Navigator	PDB ID:						
RNA十多糖(D体) = ^{‡-ワード:}	月	日 年		月	日 年	
「ポリリボヌク	フレオチド(RNA)	」「多糖(D	体)」の	151 444		含む」	
サービス&ソフトウェア>>>	文献著者:	以阵:	<u> </u>	と		□引用文	r 南f
jV: Graphic Viewer	人的有 1.					031/132	
万見 (Yorodumi)	文献情報:	論文題名:		雑誌名:			
Protein Globe		発行年:		巻番号:			
ASH		1		含む	含まない	無視する	
MAFFTash		ポリペプチド(D体)		0	0	•	
SEALA		ポリペプチド(L体)		0	0	•	
NMRToolBox		ポリデオキシリボスク	1 + 7 1° (5 1A)	0	0	0	
Structure Prediction >>		ポリリボヌクレオチド	(RNA)	•	0	0	
CRNPRED	今まれるポリマー絹の種類・	多糖(D体)	(,	•	0	0	
Spanner		多糖(L体)		0	0	<u> </u>	
SFAS		DNA/RNA 複合体		0	0	<u> </u>	
二次データベース >>		環状疑似ペプチド		0	0	•	
eF-site/eF-seek/eF-surf		その他		0	0	•	
ProMode Elastic	11 . A 4L 14-47	て の 個				•	
教材 >>	化合物情報:						
eProtS	エントリーのタイトル:						
今月の分子	外部データベース:	; ID:					
〒日プニノル	リガンドと補欠分子族・						



