

ウェブブラウザで複雑な3次元構造を気軽に眺める

鈴木博文
大阪大学 蛋白質研究所・PDBj

2011年 蛋白質科学会
ランチョンセミナー

1

残念なシナリオ

- 1. 面白そうな構造解析の論文を発見！
- 2. 構造の説明がよく分からぬ
- 3. 構造データをダウンロードして、見てみることにした
- 4-1. どうやって見るのか分からぬ…
どのソフトで見る？使い方は？
- 4-2. 論文の図とは、なんだか違うカタチ…
非対称単位、分割されたデータなど
- 4-3. 目的の部位がどこだか分からぬ…
結合部位、アミノ酸配列との対応など
- 4-4. データがマニアックな物だった
電子顕微鏡構造とか…
- 5. あきらめた ヽ(｀Дゝ)ノ

2

うれしいシナリオ

その1

- 1. 面白そうな構造解析の論文を発見！
- 2. 構造の説明がサッパリ分からぬ
- 3-1. 「万見」で見たらよく分かった！ ヽ(^o^)ノ
- 3-2. 「EM Navigator」で見たらよく分かった！ ヽ(^▽^)ノ

その2

- 1-1. 暇なので、あてもなく「万見」を開いた
- 1-2. 暇なので、あてもなく「EM Navigator」を開いた
- 2. 色々なデータをさわってみた
- 3. 構造アレルギーが治った！ ヽ(´▽`ʃƪ)

3

概要

#1. 「EM Navigator」の紹介

電子顕微鏡データを見るためのサイト

#2. 「万見（Yorodumi）」の紹介

3次元構造を見るためのサイト

4

#1 「EM Navigator」の紹介

5

EM Navigator



EM Navigator
3次元電子顕微鏡データナビゲーター | English | 日本語

データを見る 詳しく

• カテゴリー: (ポーラー / PDB ID / PDB ID) [検索]

• 例: ヒトのミトコンドリア [検索] [戻る] [戻す] [戻す]

ムービースクリプト 再生 方向 シャッフル [再生] [方向] [シャッフル] [スクリプト]

情報

EM Navigatorとは?

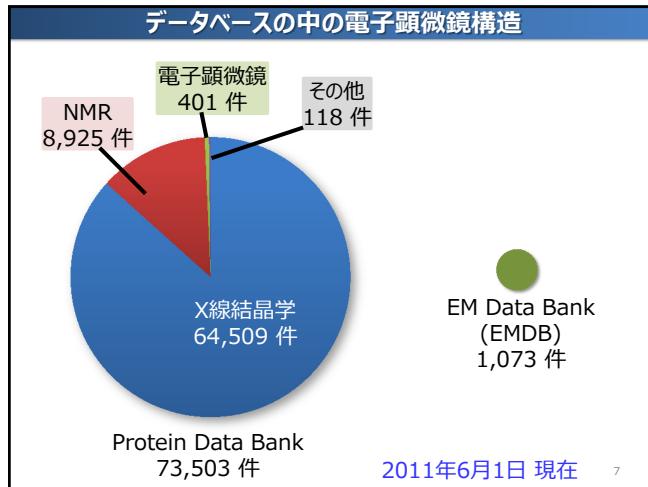
- 生体分子や生体組織の3次元電子顕微鏡データを、気軽にわざわざする気分なくカクフリできます。
- EMDBとPDBデータを利用しています (注: 直接)

お問い合わせ

- 2010-09-08: 新規公開データ

● 電子顕微鏡の構造データを見るサイト
● EMDBとPDBのデータを利用
● 特徴はムービー

6



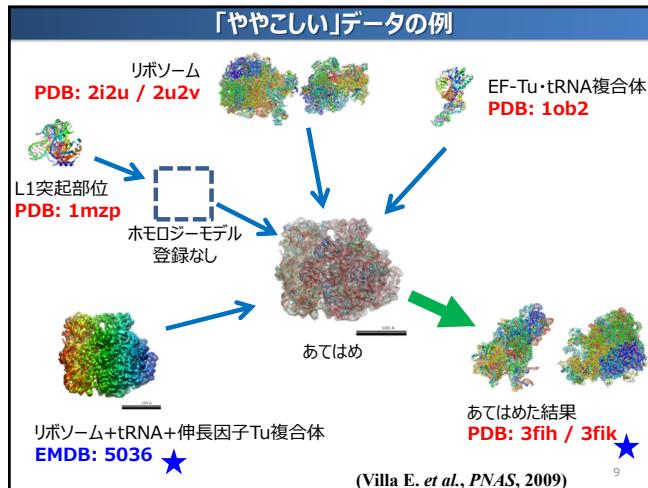
電子顕微鏡データは「ややこしい」

構造自体が「ややこしい」
結晶化が難しい試料（巨大、複雑、柔軟）
全体構造を見るのが難しい（ウイルスなど）
「3次元マップデータ」を見るのが難しい

データの関係が「ややこしい」
2種類のデータバンクに登録
分割登録データ（リボソーム、ウイルス）
ハイブリッド解析（3次元あてはめ）

既存のウェブサイト・インターフェースでは、
わかりにくい

8



EM Navigatorの目指すところ

そこで…

構造自体が「ややこしい」
簡単に3次元構造を見られる仕組み
- 普通のウェブブラウザだけで見られる
- ムービー、分子構造ビューア

データの関係が「ややこしい」
データ間の関係を調査・表示する仕組み
類似する構造を探すインターフェース

10

EMDBエントリのページ

ムービー

ムービーの操作と説明

関連データとその説明

11

PDBエントリのページ

構造ビューア

関連データとその説明

12

EM Navigatorへのアクセス

PDBjのページの左のリンクから

"em navigator"を検索

Google検索結果

検索語: em navigator

検索結果数: 2,440,000件 (0.23秒)

検索オプション

検索結果リスト

13

#2 「万見」の紹介

14

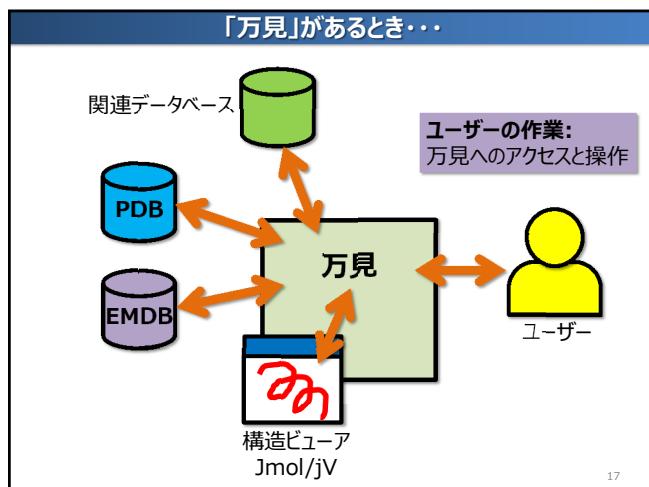
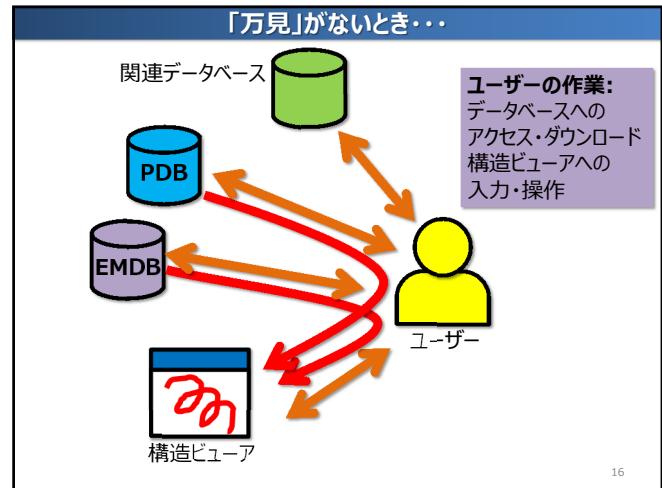
「万見」ってなに？

- ・3次元構造を見るためのサイト
- ・ウェブブラウザで見られる（インストール・ダウンロード不要）
- ・「ややこしい」データを、カンタンに見ることができるページを目指した
- ・PDBとEMDBのほぼ全ての構造を見られる

7,035 atoms selected

Jmol S

15



データベースの付随情報と運動

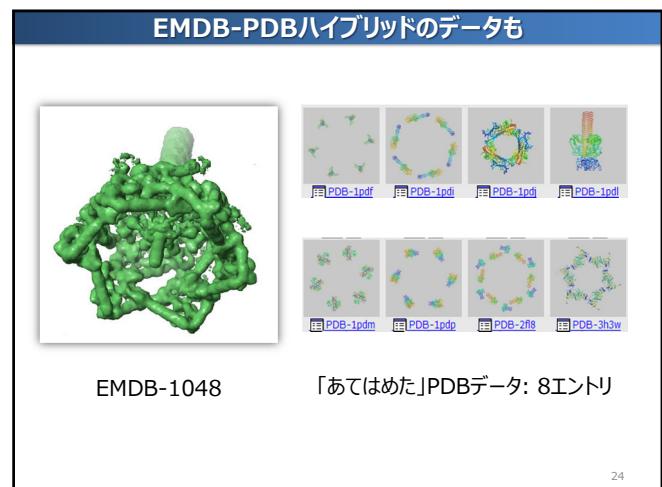
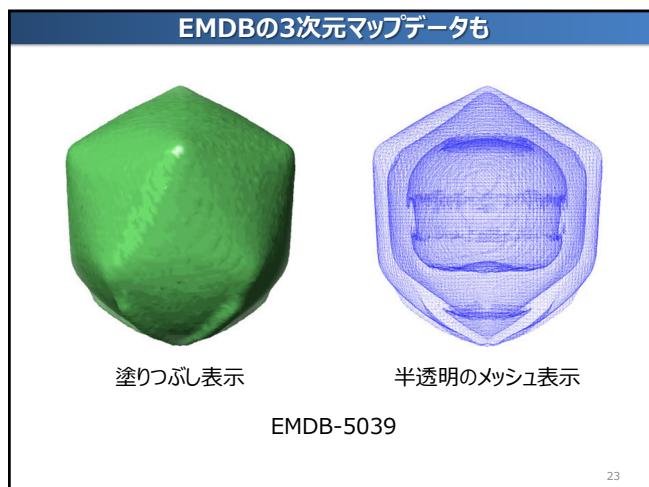
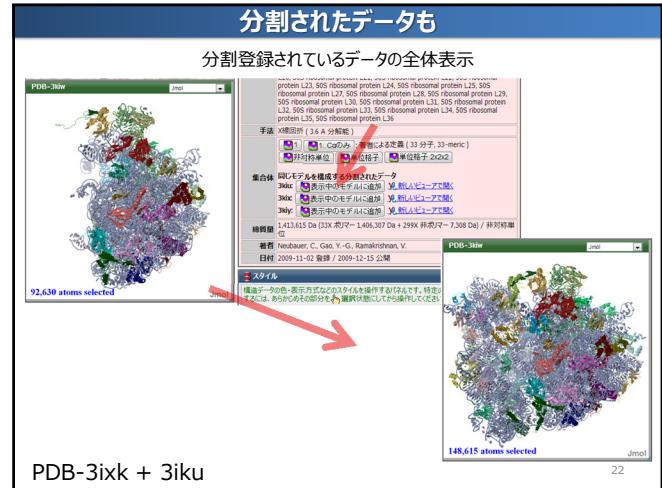
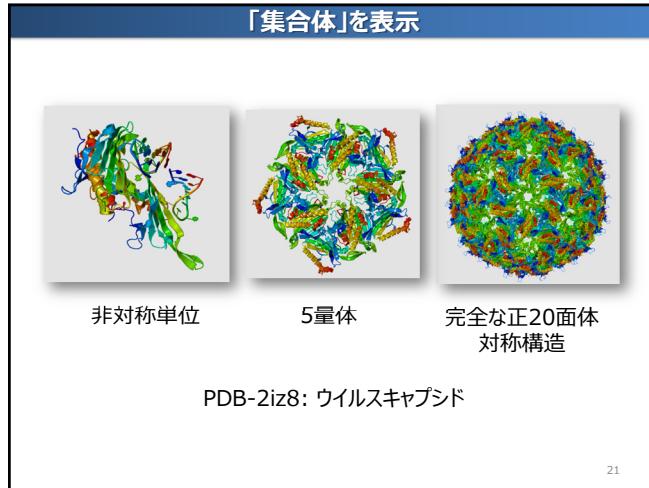
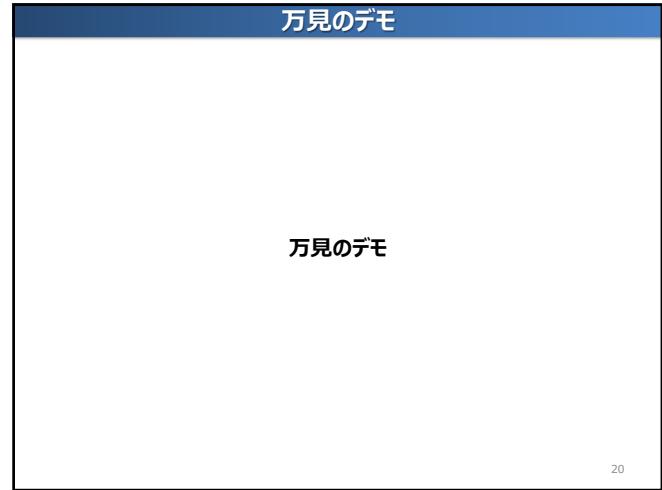
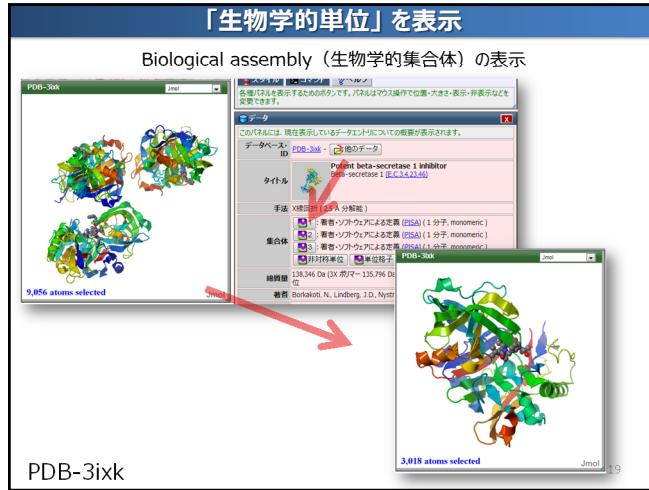
(アミノ酸配列・基質結合部位情報など)

基質結合部位の選択

アミノ酸配列で選択

PDB-3cl0

18



NMRのアンサンブルデータも



代表モデル
モデル #1

Imol_S



重ね合わせ

Imol_S

タイトル
 Solution structure of a bacterial cyclic nucleotide-activated K⁺ channel binding domain in the unliganded state
 Cyclic nucleotide-gated potassium channel mK2421

手法 溶液NMR

集合体

NMR アンサンブル
 モデル #1: 代表構造 (fewest violations)

全 14モデル [] >アノニモ化して再生

■ 停止 [] →

総質量: 14,983 Da (ホモマー: 14,983 Da) / 非対称単位

著者 Schunke, S., Stödt, M., Willbold, D.

日付 2010-05-10 登録 / 2011-04-20 公開

PDB-2kxl

「万見画廊」

いくつかの表示例とチュートリアル

万見トップページ:<http://pdbj.org/emnavi/viewtop.php>

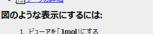


万見画廊

RNAがせん削除

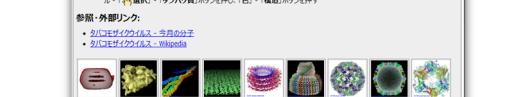
タゴロザイクルムの核糖体構造
データエンタリ: PDB: 2mV
Y: 1.5 Å
■ ニュース&特集

図のよう表示するには:

- ターゲットを1mVにする

- からん初回集合を表示するには: ■ データ(分子)
[集合体] [1]ボタンを押す
- RNAのスタイルを変更するには: ■ スタイル(分子)「[RNA]」ボタンを押す
[選択範囲]ボタンを押す。[色] - 青いカラボ押す
- ターゲットのスタイルを変更するには: ■ スタイル(分子)「[色]」- 緑色ボタンを押す

参考: 外部リンク:

- タゴロザイクルム - 古月の分子
- タゴロザイクルム - Wikipedia



万見へのアクセス

“Yorodumi” か “万見” を検索

Google 検索結果

万見 (20 組)

すべて
映画
動画
心地見る

ワゴン車から世界
日本の本へ戻る
モバイルツール

pro1.emnavi.org/Yorodumi で万見を検索する - 「EM Navigator」と「...」
[リンク] PDF Acrobat Reader [リンク]
[リンク] EM Navigator [リンク] EM Navigator [リンク] EM Navigator [リンク] EM Navigator [リンク]
[リンク] フォトギャラリー [リンク] フォトギャラリー [リンク] フォトギャラリー [リンク]
[リンク] ブログ [リンク] ブログ [リンク] ブログ [リンク] ブログ [リンク]
[リンク] フォト [リンク] フォト [リンク] フォト [リンク] フォト [リンク]
万見 (Yorodumi) [リンク] Protein Globe [リンク]
www.pdbj.org/pdbj.org/万見の蛋白質構造を表示する [リンク]

PDBj English Japanese simplified Chinese

トップページ
データ登録
ADIT/PDB Deposition
ADIT-NMR

検索 >>
Search PDB (Mine/PSSS)
Latest Released Sequence
Sequence Navigator
Structure Navigator
SiSA
Ligand Binding Sites (GIRAF)
EM Navigator
Search MMR Data (BMRB)
Status Search

サービスリンクアソシエイト >>
J/G Graphic View
万見 (Yorodumi)
Protein Globe
SEALA
M4FTask
SEALA
Structure Prediction >>
CRNPRED
Spanner
SFAS
SFAS

二次データベース >>
e-site/e-File/e-Seek/e-File-eSurf
eProtS