

万見 (Yorodumi) で 3次元構造を眺める

PDBj講習会

2013-08-23

大阪大学中之島センター

鈴木博文

PDBj / 大阪大学蛋白質研究所

- 「**万見 (Yorodumi)** 」と「**EM Navigator**」というウェブサイトの紹介
- これらのウェブサイトを使って、生体分子・組織の「3次元構造を眺めること」を体験
- 想定する聴衆：
生体分子構造研究の経験がない、少ないユーザー

※ 講習会では、この資料の半分程度までの実習となります。ご了承ください。

実習 1:

タミフルの働きを見してみる
（「万見」を使ってみる）

タミフルについて知りたくなった・・・

シナリオ：インフルエンザ治療薬、タミフルについて知りたくなった

→ Googleで「タミフル」を検索 → Wikipediaの「オセルタミビル」がヒット、以下の情報を得られる

-「タミフル」は商品名で、有効成分名は「オセルタミビル」

-「ノイラミニダーゼ」というタンパク質を阻害する

→ PDBjのページ (<http://pd bj.org/>) で「オセルタミビル」を検索

「オセルタミビル」と入力

The screenshot shows the PDBj homepage. At the top, there's a navigation bar with language options (English, 日本語, 简体中文, 繁體中文, 한국어) and a search bar. A red arrow points to the search bar, which contains the text 'オセルタミビル'. Below the search bar, there's a sidebar on the left with links like 'ホーム', 'データ登録', and '検索'. The main content area has a '初めての利用者のためのガイド' (Guide for first-time users) and a '最新情報' (Latest information) section. On the right, there's a '今月の分子' (Molecule of the month) section featuring the 4LGS Serotonin Receptor structure.

ノイラミニダーゼ と オセルタミビル

93043
件が利用できます (2013-08-14 00:00 UTC / 09:00 JST)

PDBj
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search pdbj.org

4IYH

検索結果

PDB: 20 件 ウェブページ: 1 件 ステータス検索: 3 件

オセルタミビル

変換クエリ: (oseltamivir)

3CLO
N1 NEURAMINIDASE H274Y + OSELTAMIVIR

分子名称: Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)

著者: Collins, P.J., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.

登録日: 2008-03-18

公開日: 2008-05-20

最終更新日: 2011-07-13

Crystal structures of oseltamivir-resistant influenza virus neuraminidase mutants.

引用文献: Nature, 453, 2008
[PubMed: 18480754](#)
[DOI: 10.1038/nature06956](#)

3CL2
N1 NEURAMINIDASE N294S + OSELTAMIVIR

分子名称: Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)

著者: Collins, P.J., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.

登録日: 2008-03-18

公開日: 2008-05-20

最終更新日: 2011-07-13

Crystal structures of oseltamivir-resistant influenza virus neuraminidase mutants.

引用文献: Collins, P.J., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.
Crystal structures of oseltamivir-resistant influenza virus neuraminidase mutants.
Nature, 453:1258-1261, 2008
[PubMed: 18480754](#)
[DOI: 10.1038/nature06956](#)
[Import into Mendeley](#)

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.2 Å)

他の静止画像 (非対称単位)

Copyright © 2013 PDBj. All Rights Reserved.

生物学的単位を表示

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDB形式 (全ての情報)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- mmCIF

他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- UniProt (Q6DPL2)
- KEGG (3.2.1.18)
- eF-site
- PISA

データの概要
(A型インフルエンザウイルス由来の
ノイラミニダーゼとオセルタミビル)

ページ右側「Yorodumi」というリンクをクリック

「万見」で見るノイラミニダーゼ

Yorodumi 万見

設定 English

PDB-3cl0 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ーについての概要が表示されます。

データベースID PDB-3cl0

タイトル N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir
Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)

登録構造: 結晶学的非対称単位, ポリマー数:1

集合体 生物学的単位:
1: 著者・ソフトウェアによる定義 (PISA) (4 分子, tetrameric, identity operation + crystal symmetry operation) ダウンロード

著者 Collins, P., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.

表示

ビュー全体の表示様式 (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

マウス操作で
自由な方向に向けられる

このページはいったい何？ → 右上の「ヘルプ」をクリック

「万見は、生体分子の3次元構造を気軽に眺めて、見て、動かして、回して、学んで、楽しむためのウェブページです。」

オセルタミビルはどこ？

Yoro-dumi 万見

設定 English

PDB-3cl0 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

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
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、その配列に対応する
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 中心

L型ポリ
ペプチド chain-A Neuraminidase / 由来: [Influenza A virus](#) UniProt:Q

非ポリマ
G39 (4R,5S)-4-(ACETYLAMINO)-5-AMINO-3-(PENTAN-
OXYLIC ACID / OSELTAMIVIR CARBOXYLATE
[G39](#) [LigandBox](#)

非ポリマ
CA CALCIUM ION / Ca / 1 分子 [CA](#) [LigandBox](#)

右上の「構成要素」ボタンをクリックすると「構成要素」パネルが現れる
G39というボタンを押すと、左のパネルの中でオセルタミビルが光る

集まって働く

PDBに登録されているのは「非対称単位」という単位構造
実際に働くときの「生物学的単位」とは違う場合が多い

The screenshot shows the Yocedumi 万見 web interface. The main window displays a 3D ribbon model of a protein complex (PDB-3cl0) in the Jmol viewer. The top navigation bar includes buttons for 'データ' (Data), '開く' (Open), '構成要素' (Components), '表示' (Display), 'スタイル' (Style), and 'ヘルプ' (Help). A red arrow points to the 'データ' button. Below the navigation bar, a 'データ' panel is open, showing details for PDB-3cl0. The panel includes a table with the following information:

データベース・ID	タイトル	登録構造	生物学的単位	著者
PDB-3cl0	N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)	結晶学的非対称単位, ポリマー数:1	1: 著者・ソフトウェアによる定義 (PISA) (4 分子, tetrameric, identity operation + crystal symmetry operation)	Collins, P., Haire, L.F., Lin, Y.P., Liu, J., Russell, R.J., Walker, P.A., Skehel, J.J., Martin, S.R., Hay, A.J., Gamblin, S.J.

A red arrow points to the '1' button in the '生物学的単位' (Biological Unit) section.

右上の「データ」ボタンをクリックすると「データ」パネルが現れる
生物学的単位の 1 というボタンを押すと、「生物学的単位」が見られる

表示スタイルを変えてみる

標準では、リボンモデル（カートゥーンリボンモデル）という模式的なモデルで表示される

The screenshot shows the YoroDumi 万見 Jmol interface. On the left, a protein structure (PDB-3cl0) is displayed in a space-filling representation. The top bar includes the logo, a language dropdown set to 'English', and navigation buttons: 'データ' (Data), '開く' (Open), '構成要素' (Components), '表示' (Display), 'スタイル' (Style), and '? ヘルプ' (Help). The 'スタイル' button is highlighted with a red arrow. Below the main view, the 'スタイル' panel is open, showing options for '原子モデル' (Atom Model) and '表面モデル' (Surface Model). The '原子モデル' section has buttons for 'リセット' (Reset), '光らせる' (Highlight), and '他を隠す' (Hide others). The 'おまかせスタイル' (Default Style) section includes buttons for '小さい分子用 #1' (Small molecule #1), '一般的なタンパク質用 #1' (General protein #1), '大きな複合体用 #1' (Large complex #1), and 'スタイルのリセット' (Reset style). A red arrow points to the '一般的なタンパク質用 #1' button. The 'データ' panel at the bottom shows the current data entry: 'PDB-3cl0' and 'N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir'.

右上の「スタイル」ボタンをクリックすると「スタイル」パネルが現れる
ボタンを押すと、それぞれの表示スタイルに切り替わる

解説 1 :

「万見」とは？

「万見」ってなに？

- 「3次元構造を見る」ことを主題としたウェブサイト
- 複雑な構造やそのデータの意味を、簡単な操作でわかりやすく、見たり知ったりできるページを目指した
- PDBとEMDBのほとんどの構造を見られる

The screenshot displays the Yorodumi beta1 web interface. The main window shows a 3D ribbon diagram of a protein structure (PDB-3icj) with a yellow and green color scheme. The interface includes several panels:

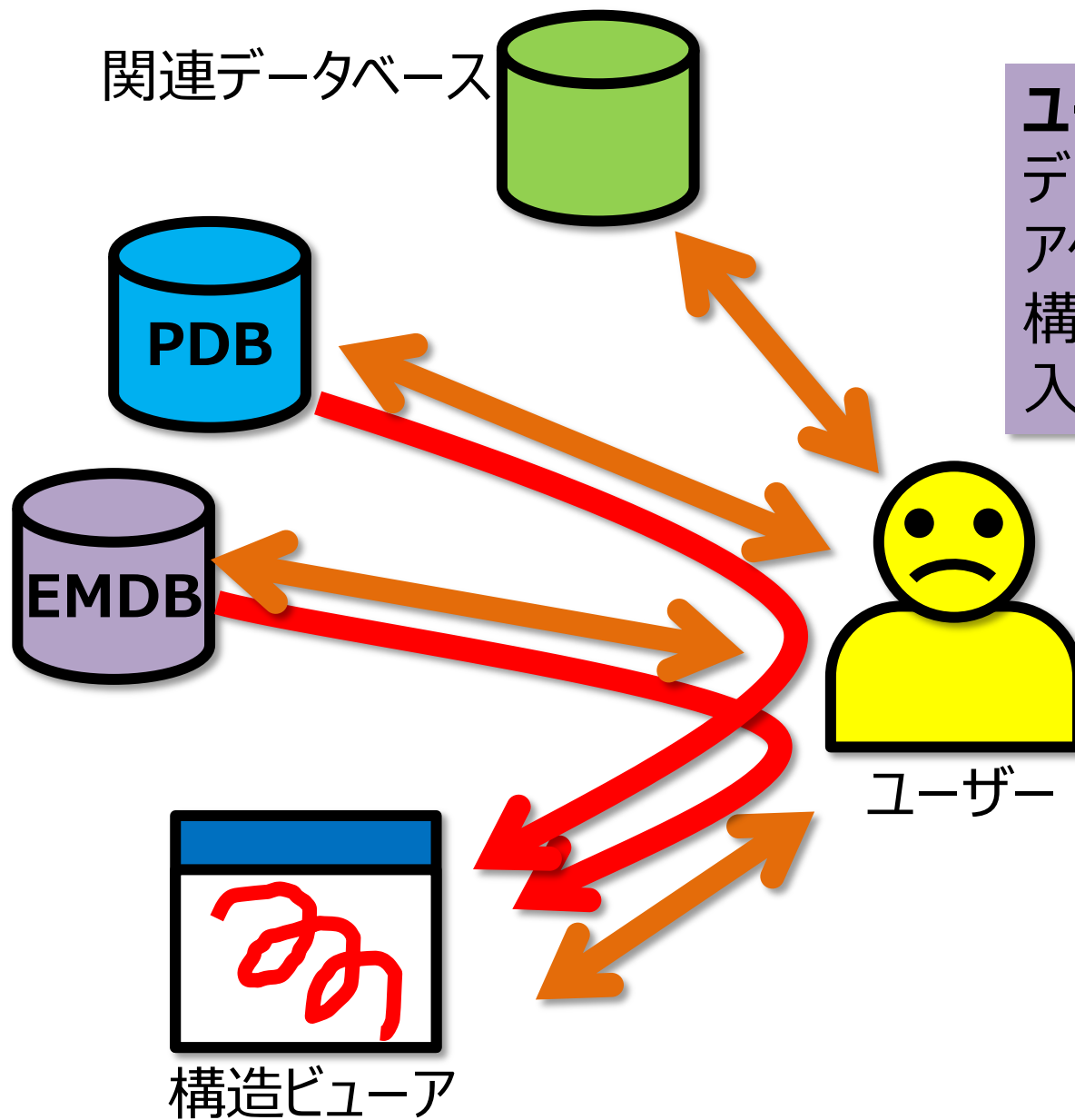
- Header:** "万見 (Yorodumi) beta1" with a "設定" (Settings) button and a "En" button.
- Left Panel:** Contains metadata for the structure, including "データベース-ID" (PDB-3icj), "タイトル" (Crystal structure of a pyroglutamate hydrolase), "手法" (X-ray diffraction, 1.95 Å), "著者・ソフトウェア" (Protein Data Bank, Jmol), "機能部位" (Active site), "結合部位" (Binding site), and "PROSITE" (family signature 1).
- Right Panel:** Contains a "構成要素" (Components) section with a list of amino acids (e.g., RALEESRKII, NEKILTVKDY, KHYIESAQEH, LLSLGVHSVG) and a "非ポリマー" (Non-polymer) section with "ZINC ION" and "water".
- Bottom Panel:** Contains a "色" (Color) section with a color palette and a "透明度" (Transparency) slider.

EMDBは、PDBとは別のデータベース

データベース名	データ	特徴
PDB	種々の手法（主にX線結晶学）による原子モデル	原子レベルの分解能 部分構造が多い
EMDB	電子顕微鏡による3次元マップ	低分解能なデータが多い 複雑な分子、大きな分子などの全体構造など

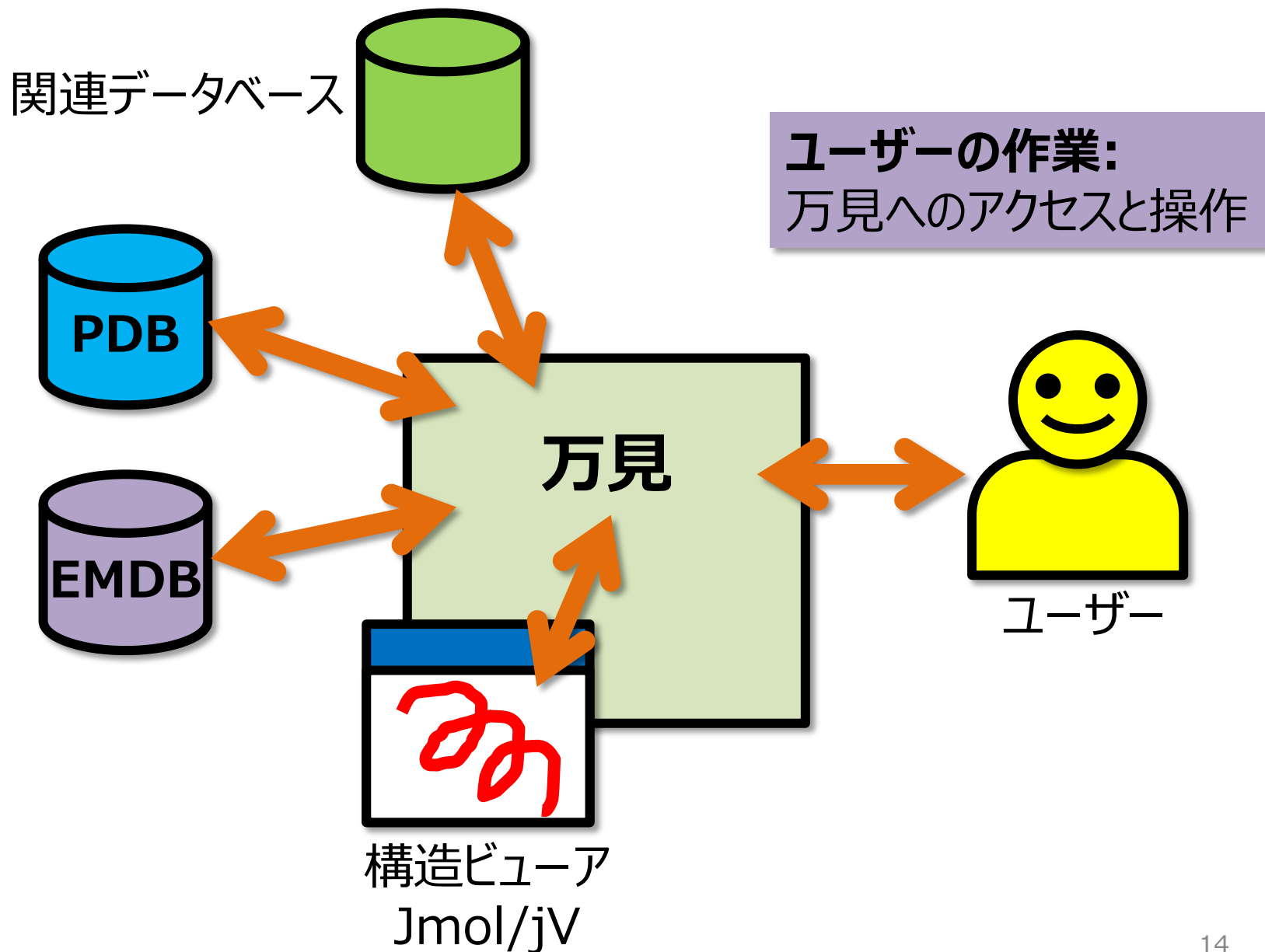
万見は、両方のデータを見ることができる

「万見」がないとき...



ユーザーの作業:
データベースへの
アクセス・ダウンロード
構造ビューアへの
入力・操作

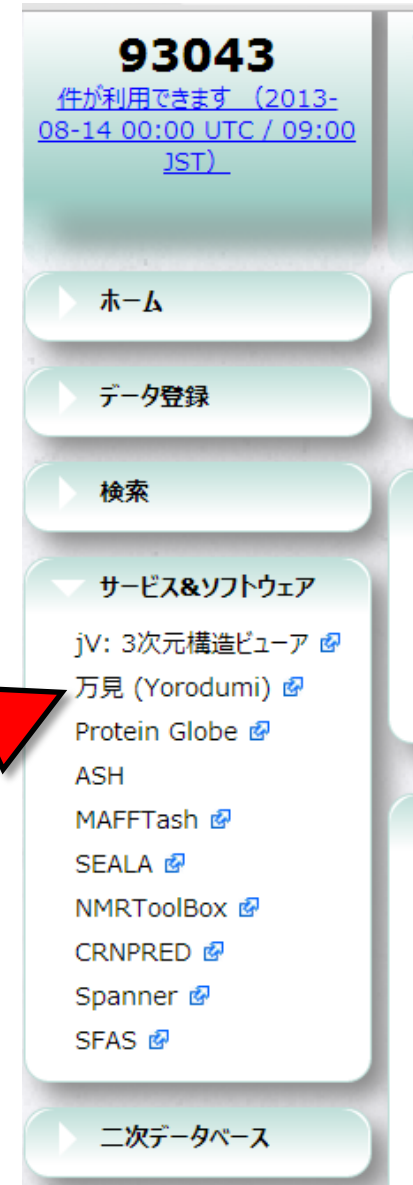
「万見」があるとき...



“Yorodumi” か “万見” を検索



あるいは、PDBjのトップページの
左メニューのリンクから



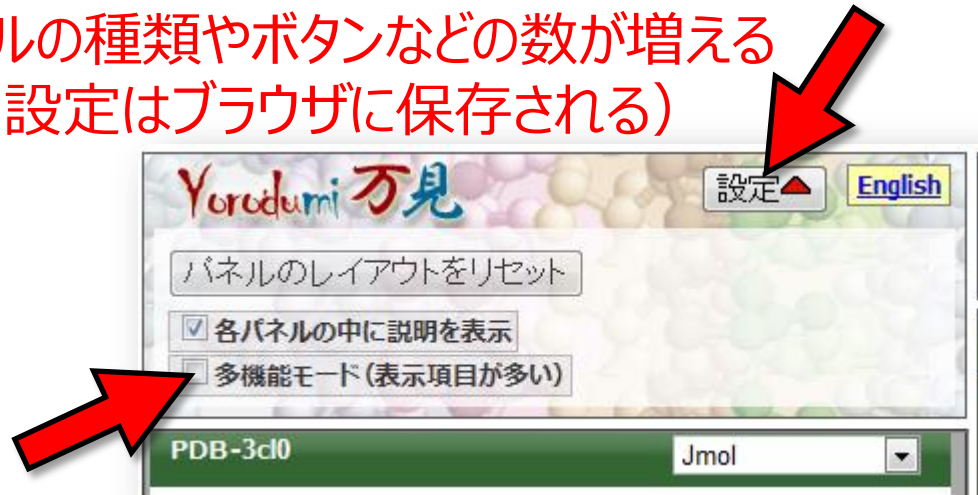
URL <http://pdbj.org/yorodumi/>

実習 2：

**タミフルの結合部位を見してみる
（より高度な利用）**

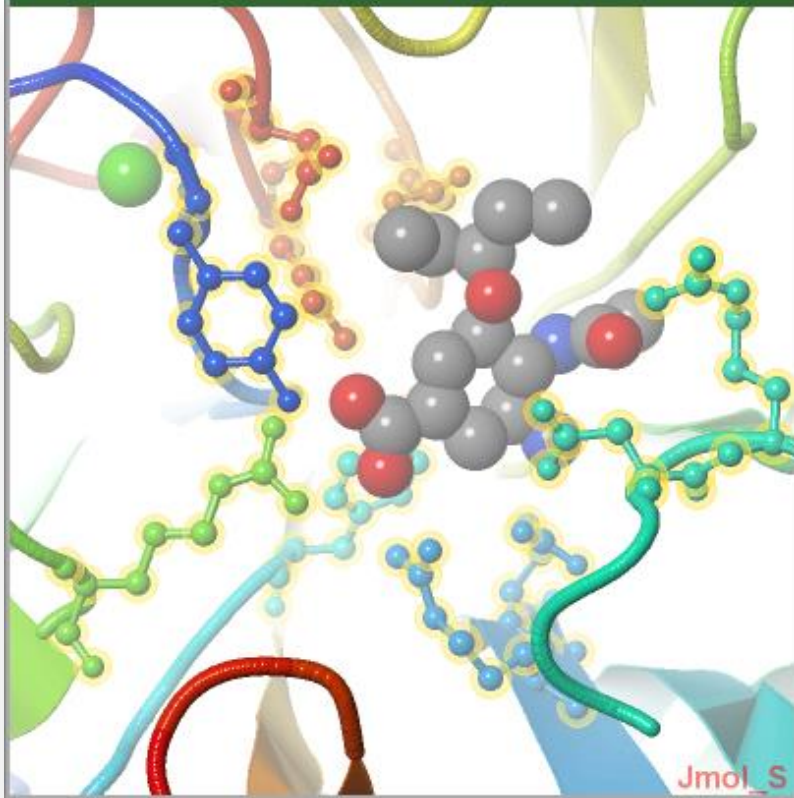
手順

- 現在のページを再読込（WindowsならF5キー）
（別のデータを開いていたら、3cl0を開き直す）
→表示が初期状態に戻る
- 左上の「万見」ロゴの右の「設定」ボタンを押し、「多機能モード」にチェック
→パネルの種類やボタンなどの数が増える
（設定はブラウザに保存される）



- ビューアの表示が遅い場合は、「表示」パネル、「ビューア」行、の「高画質（低速）」のチェックを外す

結合部位を見る

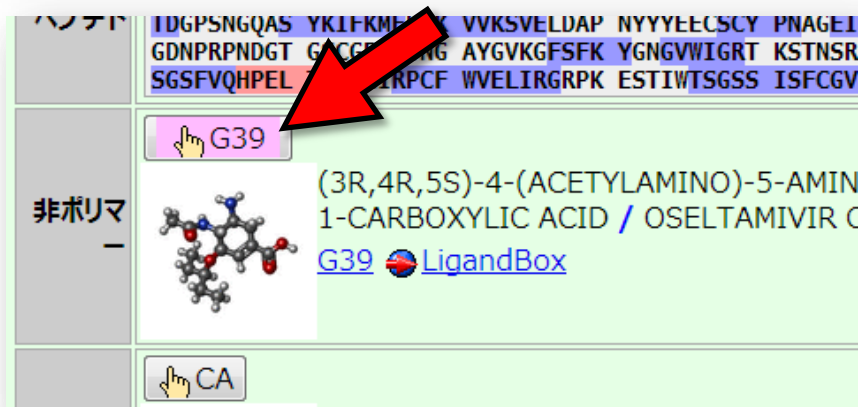
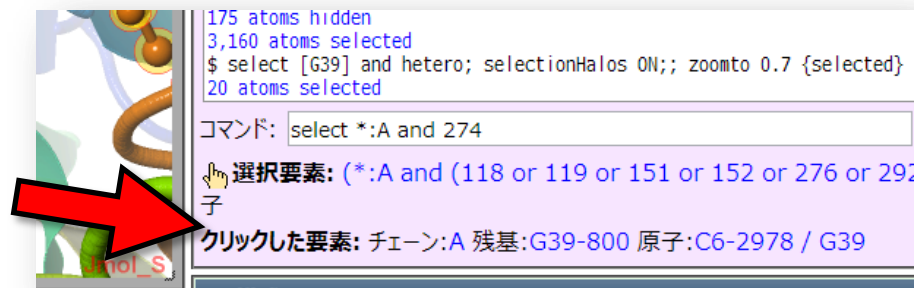


手順

- 「機能部位」パネル、2行目
(G39...) の「部位」ボタンを押す
→オセルタミビルの結合部位が選択される
- 「スタイル」パネル、「チェーン」行、「カートゥーンとB&S」ボタンを押す
(「カートゥーン」ボタンにマウスを会わせると出てくるボタン)
→結合部位の側鎖が表示される
- 「表示」パネルの、「ズーム」スライダーと「断面」スライダーを調節し、結合部位がよく見えるようにする

オセルタミビル結合部位

その他の操作



- ビューア内で構造要素をクリックすると、「コマンドパネル」に原子名が表示される

- クリックした要素に該当する「構成要素」パネルの選択ボタンの色が変わる

- ダブルクリックで任意の原子間の距離を測定

- アミノ酸配列が表示されているボックスで文字列を選択すると、該当する部分が選択状態になる

結合部位の表面構造を見る

PDB-3cl0 Jmol

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を移動できます。

スタイル

構造データの色・表示方式などのスタイルを操作するパネルです。
選択状態にしてから操作してください。

原子モデル 表面モデル

表面 VDW表面モデルの作成 分子表面

eF-site表面モデル ☒ chain-A [eF-siteのページ](#)

現在のモデル eF-site chain-A 表示 隠す

表面のスタイル ☒ 塗りつぶし ☐ メッシュ ☐ 点

色 白 赤 黄 緑 青 紫 黒 透明

透明度 不透明

表示

ビュー全体を表示するボタンです。ビューはマウス操作で位置を移動できます。

手順

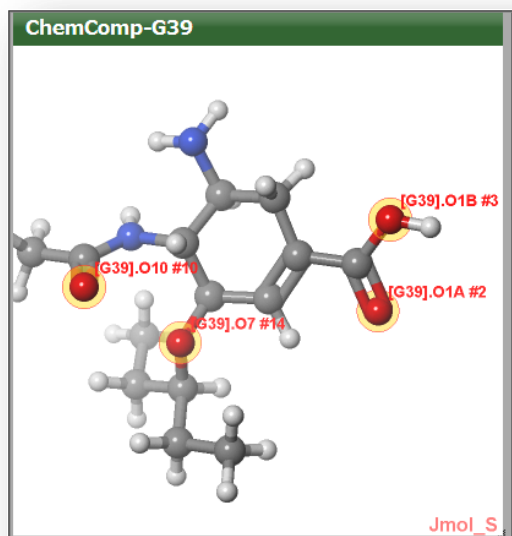
- 「スタイル」パネル、「表面モデル」タブをクリック
- 「eF-site表面モデル」列の「リストを取得」ボタンをクリック
- 現れた「chain-A」のチェックボックスをクリック

注意：環境によっては、処理に時間を要します

オセルタミビルページ

- 「構成要素」パネルのG39の画像部分をクリックすると、化合物G39のページが開かれる
- この化合物の詳細情報、理論的構造、別のPDBデータ中での構造などが見られる

ChemComp-G39

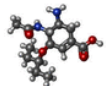


各種パネルを表示するためのボタンです。パネルはマウス操作で位置・大きさ・表示・非表示などを

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 Chemical Components - G39 [他のデータ](#)

データ:  (3R,4R,5S)-4-(acetlamino)-5-amino-3-(pentan-carboxylic acid)
タイプ: non-polymer (HETAD)
Synonym: Oseltamivir carboxylate

For

ChemComp-G39


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

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

[リセット](#) [光らせる](#) [他を隠す](#) [中心](#) [+](#) [-](#)

モデル	2ht7	2ht8	2hu0	2hu4	2qwh	2qwk
	3k3a	3ti6	4b7j	4b7r	4gzp	4gzt

 THE X-RAY STRUCTURE OF A COMPLEX OF 5-N-ACETYL-1-ETHYLPROPOXY)-1-CYCLOHEXENE-1-CARBOXYLIC ACID
TERN N9 INFLUENZA VIRUS NEURAMINIDASE
NEURAMINIDASE, 5-N-ACETYL-3-(1-ETHYLPROPYL)-1-CARBOXYLIC ACID

[G39 #1](#)

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。

Describe

Ident

Jmol_S

ノイラミニダーゼについて、詳しくは・・・

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。

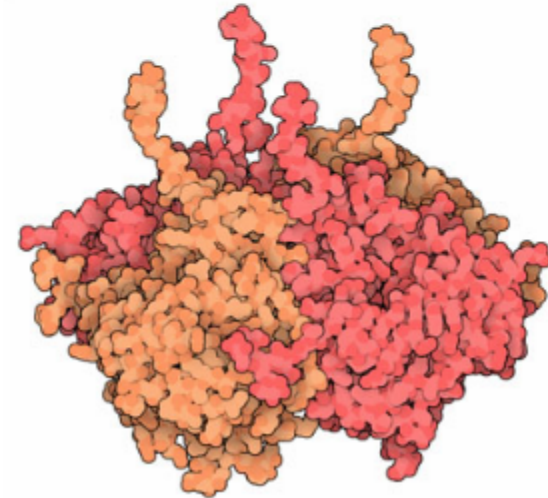
[「今月の分子」一覧に戻る](#) / [この記事のRCSBオリジナルサイト\(英語\)を見る](#)

2009 / 05: No. 113

インフルエンザ ノイラミニダーゼ (Influenza Neuraminidase)

:翻訳 工藤高裕 (PDBj)

インフルエンザウイルス (influenza virus) は継続的に変化し、10年程度ごとに危険な新種が現れて公衆衛生を脅威にさらす。今年、ブタインフルエンザ (swine flu) としてより知られるH1N1型インフルエンザの新種が流行している。H1N1という名前はウイルス表面を覆う2つの分子～**赤血球凝集素** (ヘマグルチニン、hemagglutinin) とノイラミニダーゼ (neuraminidase) ～を意味している。これら2つの分子が協力してウイルスの感染を制御している。赤血球凝集素はウイルスが細胞に侵入する時に中心的な役割を果たしており、細胞表面にある多糖鎖に結合してウイルスゲノムを細胞内へと注入する。一方、ノイラミニダーゼはウイルスが感染した細胞から離れる時に重要な役割を果たす。ノイラミニダーゼはこの糖鎖の末端を切断することによって細胞表面に引っかかってしまわないようにしている。



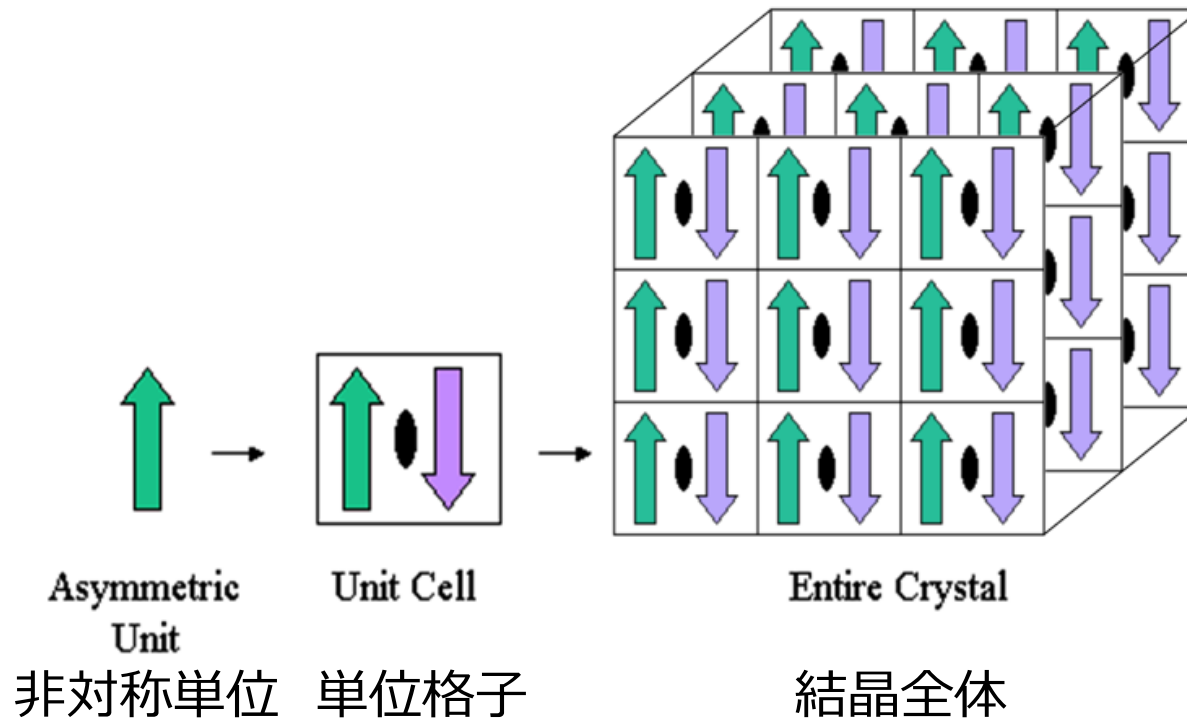
<http://pd bj.org/mom/index.php?p=113>

解説 2 :

「非対称単位」と「生物学的単位」

非対称単位とは？

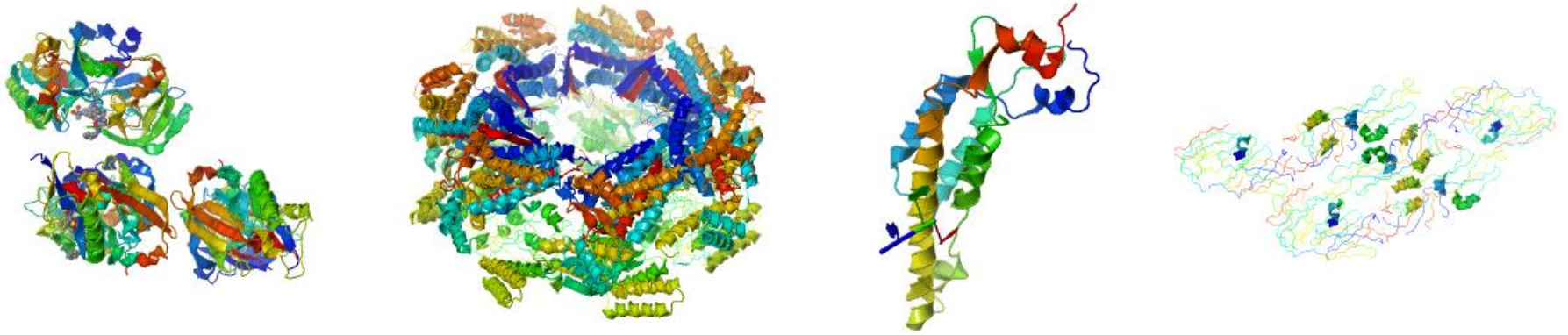
PDBに登録されているデータは、
非対称単位 (Asymmetric unit)
という単位の構造データ



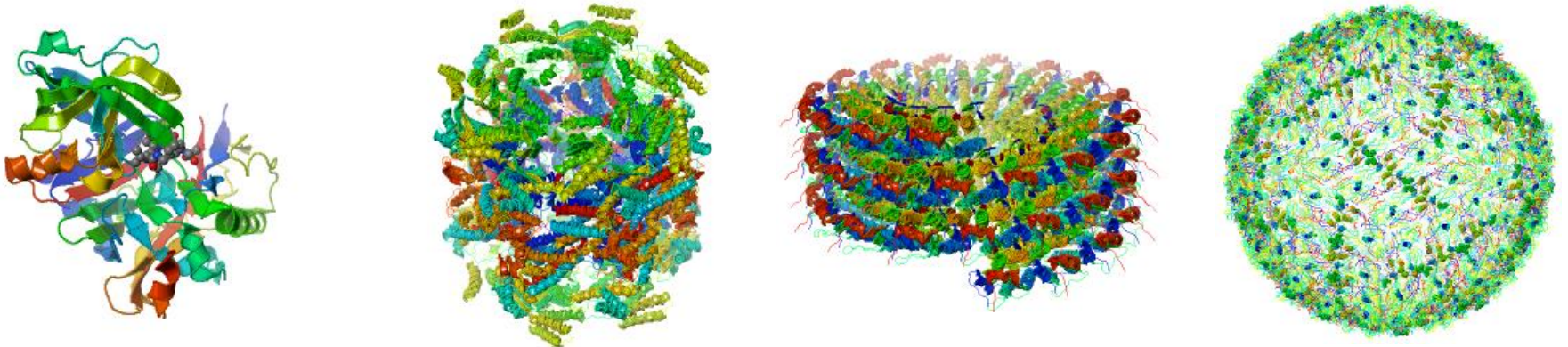
http://www.pdb.org/pdb/static.do?p=education_discussion/Looking-at-Structures/bioassembly_tutorial.html

「非对称单位」は「生物学的」じゃない？

非对称单位



生物学的単位（生物学的集合体）



PDB-3ixk
3mer/1mer

PDB-1oel
7mer/14mer

PDB-2xea
らせん対称

PDB-1thd
正二十面体対称

実習 3 :

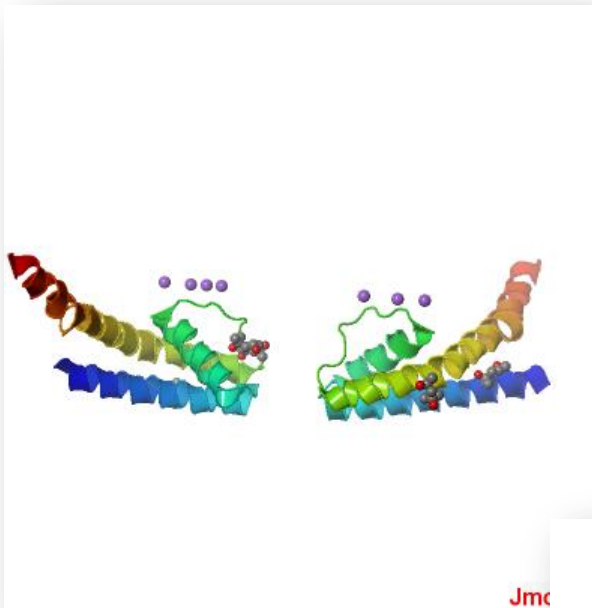
「生物学的集合体」をしてみる

生物学的集合体を見してみる

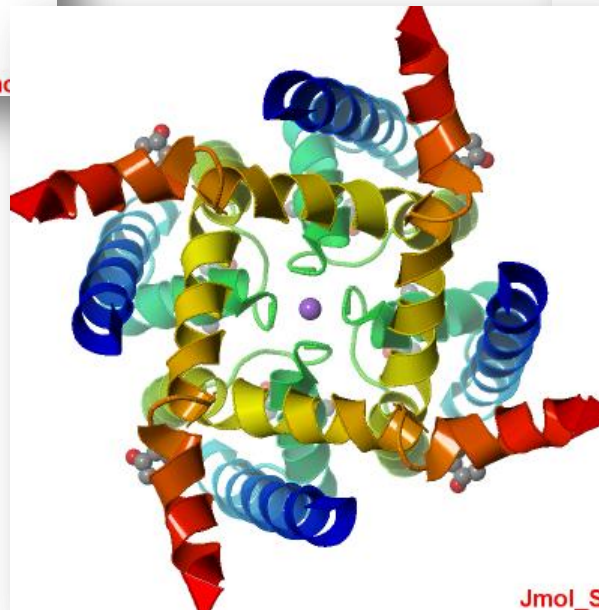
手順

- 「万見」でPDB-3ixkを開く
「開く」パネル、「IDを指定」行の入力ボックスに
「3ixk」と入力し、Enterキーを押す
→Beta-secretase 1 の構造が表示される
- 構成要素パネル・L型ポリペプチドを確認
→同じポリペプチド3本からなっていることが分かる
- データパネル・集合体の各ボタンを押してみる
→表示される構造を確認
(クリックすると該当する構成要素のボタンの色が変わる)
- 同様のことを「3k0g」で試してみる

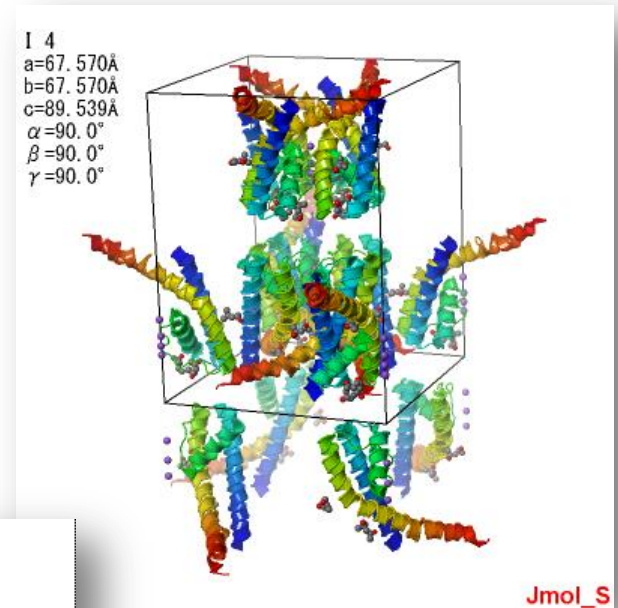
3k0gの生物学的集合体



登録構造
(非対称単位)



生物学的単位 #1



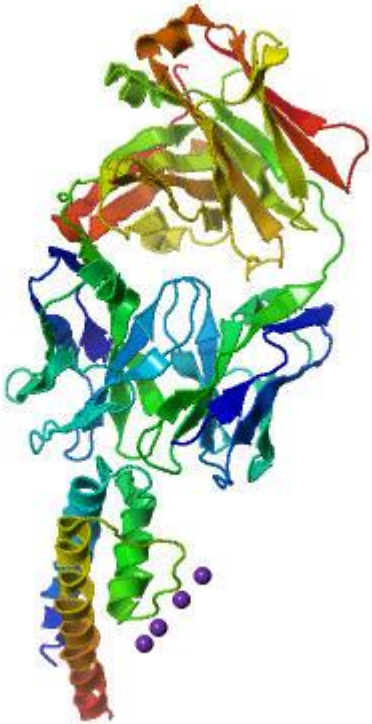
単位格子

邪魔者を取り除く

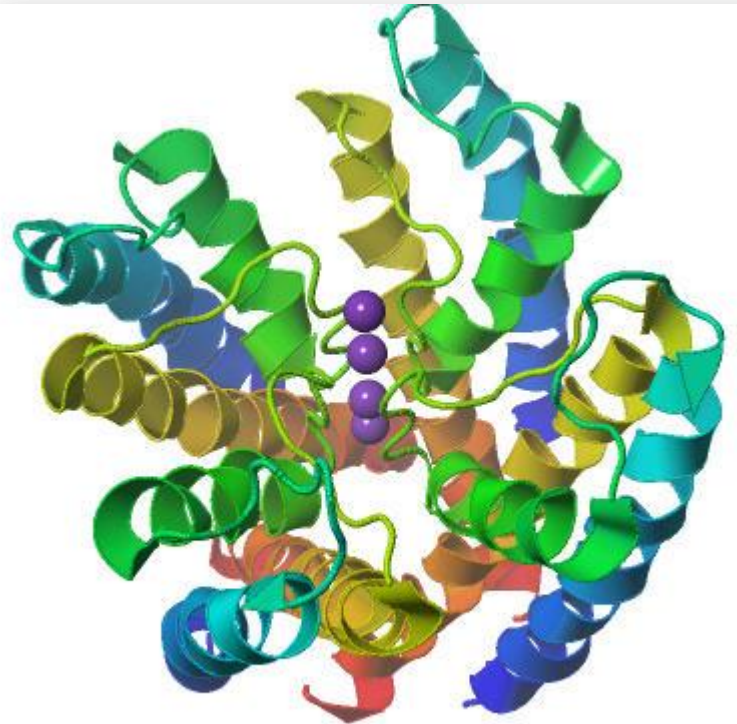
手順

- 「万見」でPDB-3f7yを開く
→カリウムチャネル KcsA の構造が表示される
 - 構成要素パネルの確認、集合体を表示
→抗体Fabフラグメントが結合している
 - 抗体の部分を隠す
 - 構成要素パネルでchain-Aを選択
 - 「スタイル」パネルで「選択したものを隠す」ボタンを押す
 - chain-Bも同様にして隠す
 - chain-Cを選択し「表示」パネルで、「中心-選択したもの」
 - 「表示」パネル「ズーム」で拡大
 - 「機能部位」パネルで、カリウムの結合部位や、膜貫通ヘリックスを確認
- 表示される構造を確認

3f7yの生物学的集合体



登録構造
(非対称単位)
KcsAと抗体



生物学的単位
抗体を隠した

実習 4 :

複数モデルのデータを見てみる

NMRアンサンブル構造を試みる

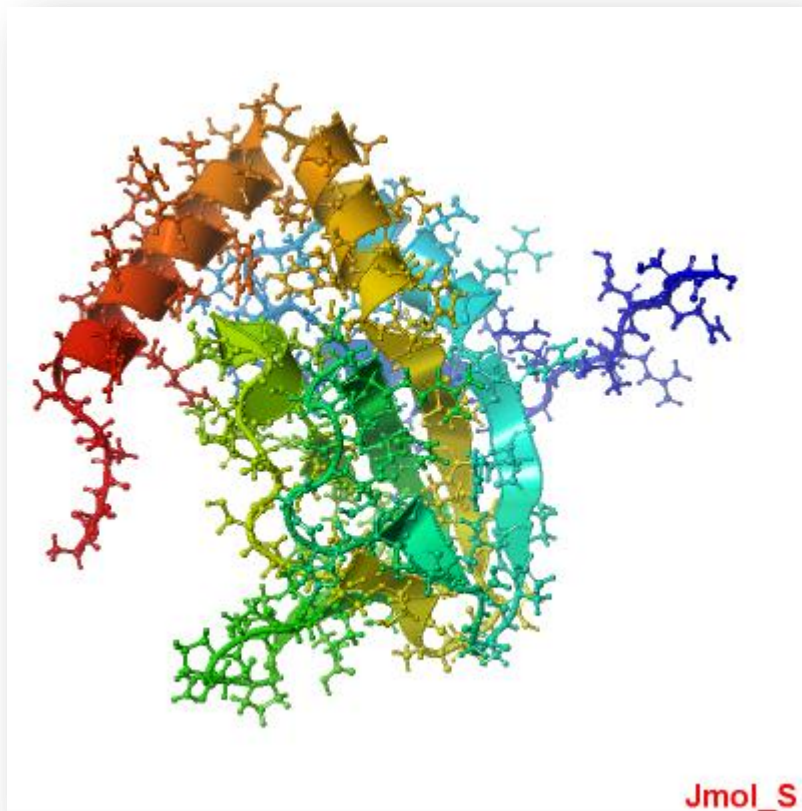
手順

- 「万見」で2kx1を開く
→Cyclic nucleotide-gated potassium ... の構造が表示される
- 複数（15個）のモデルが重なって表示されていることを確認

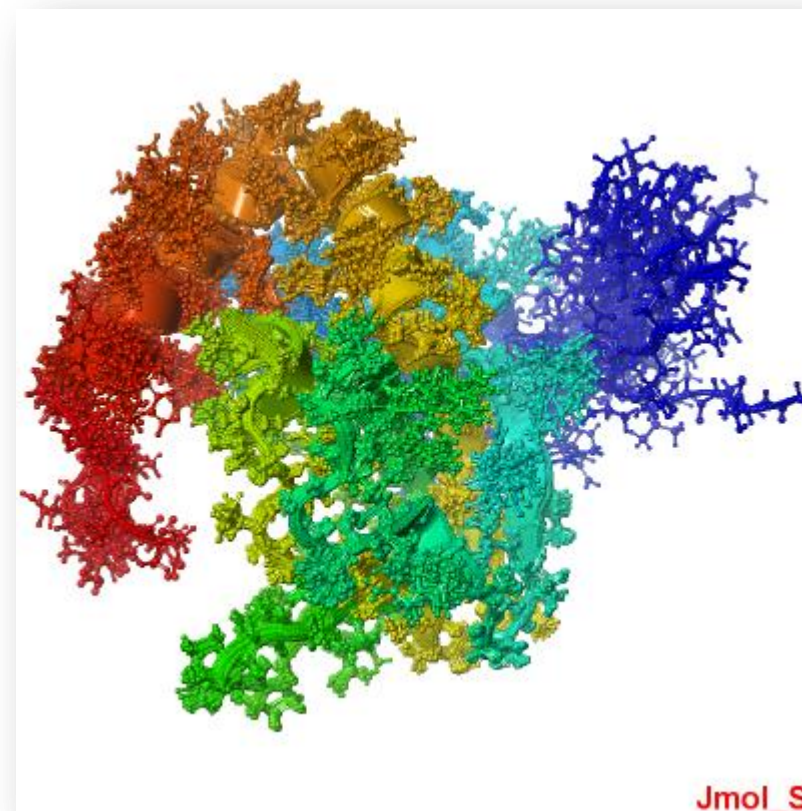
※ 解析手法（主にNMR）によっては、複数通りの構造モデルとして登録されている

- 「データパネル」・NMRアンサンブルの各ボタンを押してみる
→表示される構造を確認
- 「スタイル」パネル、「カートゥーンとB&S」ボタンで側鎖を表示し、「データパネル」、NMRアンサンブルの「アニメーションとして再生」を押す
→静止画だと側鎖のアンサンブルは見にくい、アニメーションなら見やすい

アンサンブル構造をしてみる



代表モデル
モデル #1



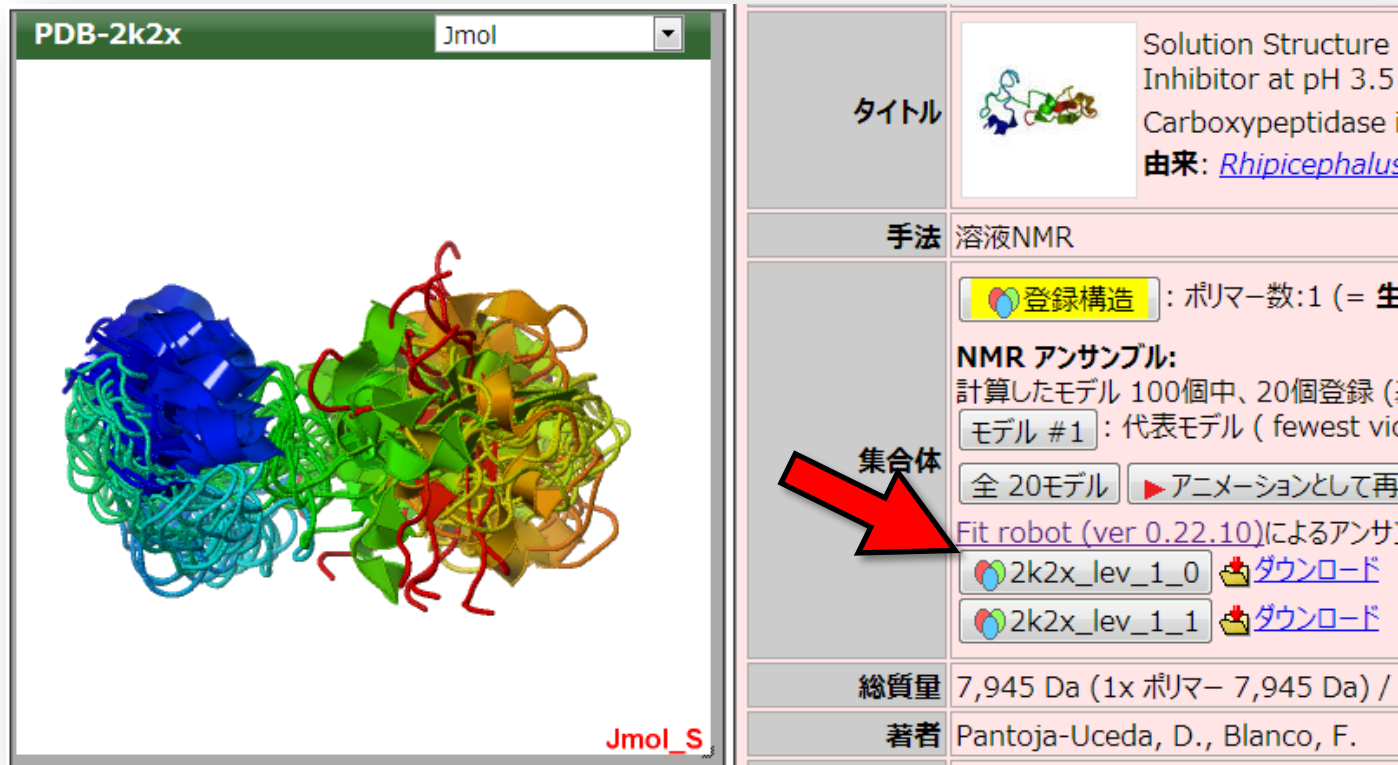
全15モデル
重ね合わせ

アンサンブル構造の重ね方


手順

- 「万見」で2k2xを開く
- 「データ」パネル、「Fit robot (ver 0.22.10)によるアンサンブルの配置:」の下ボタンを押して見る

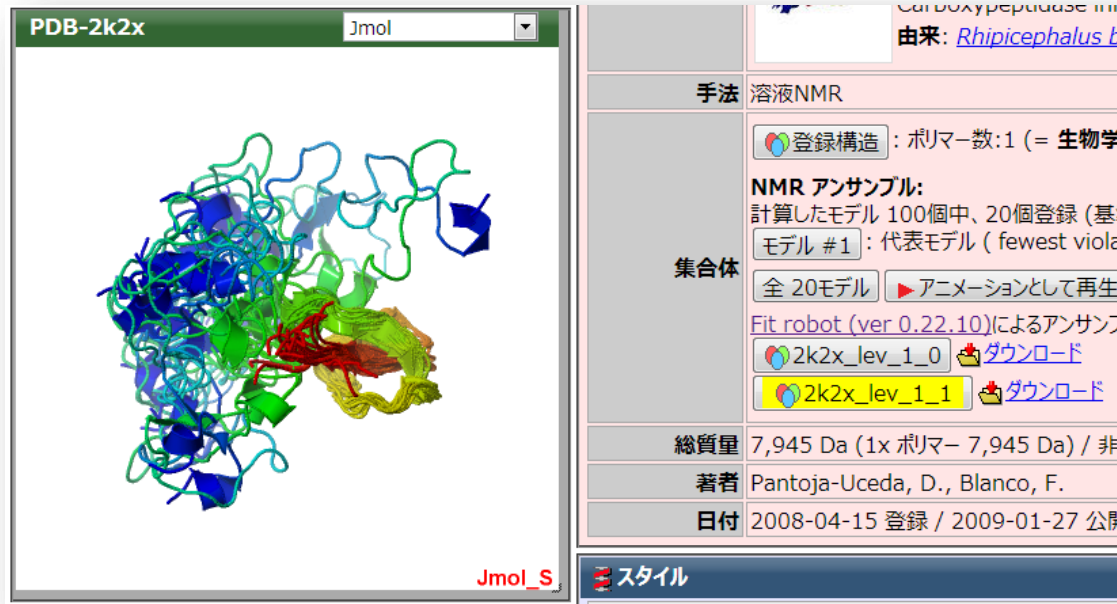
#Fit robotの詳細については、リンク先を参照



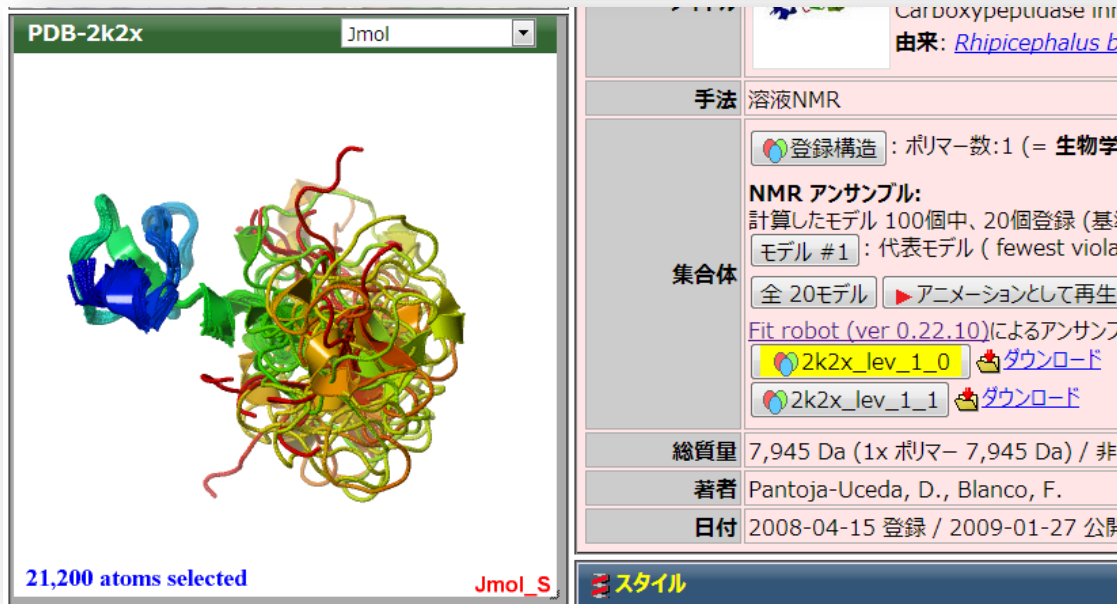
The screenshot displays the PDB-2k2x Jmol interface. On the left, a 3D ribbon diagram of a protein structure is shown, colored in blue, green, and red. The right panel contains metadata and a list of models. A red arrow points to the 'Fit robot (ver 0.22.10)によるアンサンブル' section, which lists two models: '2k2x_lev_1_0' and '2k2x_lev_1_1', each with a download icon.

タイトル	 Solution Structure Inhibitor at pH 3.5 Carboxypeptidase 由来: Rhipicephalus
手法	溶液NMR
登録構造	: ポリマー数:1 (= 生)
NMR アンサンブル:	計算したモデル 100個中、20個登録 (3)
モデル #1	: 代表モデル (fewest vic
全 20モデル	▶ アニメーションとして再
Fit robot (ver 0.22.10)によるアンサ	
2k2x_lev_1_0	📄 ダウンロード
2k2x_lev_1_1	📄 ダウンロード
総質量	7,945 Da (1x ポリマー 7,945 Da) /
著者	Pantoja-Uceda, D., Blanco, F.

アンサンブル構造の重ね方



配置 0



配置 1

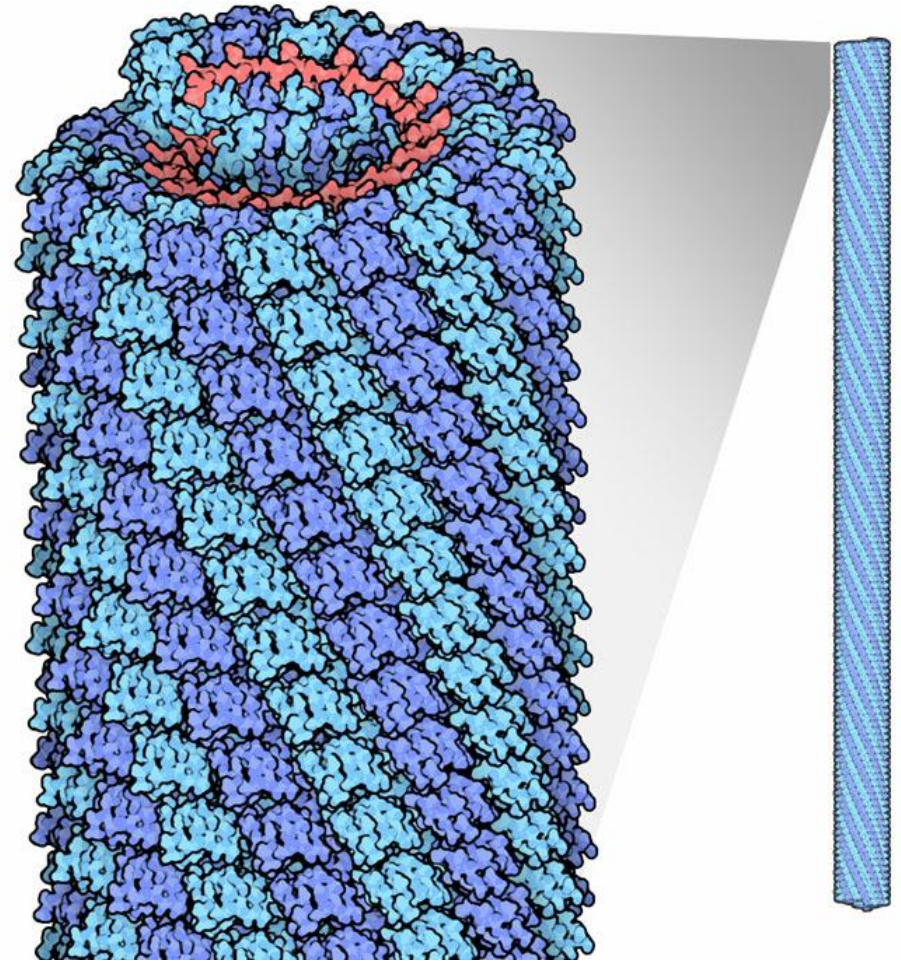
実習 5 :

最も単純なウイルス
タバコモザイクウイルス (TMV) を
見てみる

タバコモザイクウイルス(TMV)

タバコモザイクウイルス : TMV

- タバコなどの植物に感染する
- もっとも単純なウイルスのひとつ
- 長さ約300 nm、直径約18 nm
- 1本のRNA鎖と、 2130個の1種類のタンパク質からなる



画像: 今月の分子 (Molecule of the Month)
<http://pd bj.org/mom/index.php?p=109>

どれがタンパク質？ どれがRNA？

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、その配列に対応する部分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 UniProt:P03570
非ポリマー	CA	CALCIUM ION CA
水	water	water HOH

[Mine](#) 構造情報 列 [Sequence view](#)

スタイル

構造データの色・表示方式などのスタイルを操作するパネルです。特定の部分のみスタイルを変更するには、あらかじめその部分を選択状態にしてから操作してください。

構成要素パネルの各ボタンを押してみる

集合体構造を見る

The screenshot shows the YoroDumi 万見 web application interface. On the left, a 3D ribbon diagram of the Tobacco Mosaic Virus (PDB-2tmv) is displayed in a Jmol viewer. The top navigation bar includes buttons for 'データ' (Data), '開く' (Open), '構成要素' (Components), '表示' (Display), 'スタイル' (Style), and 'ヘルプ' (Help). Below the navigation bar, a text box explains that various panels can be shown or hidden using mouse operations. The 'データ' panel is active, showing details for PDB-2tmv. A red arrow points to the '生物学的単位: 1' button in the '集合体' (Assembly) section. The '構成要素' panel is partially visible at the bottom.

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。

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ー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)

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 Lubbs, G., Pattanayek, R., Namba, K.

データパネル生物学的単位 1 のボタンを押す
→ 構成要素パネルのボタンを押して見る

表示スタイルを変えてみる

手順

- スタイルパネル・選択・「タンパク質」ボタンを押し、色・紫色のボタンを押し、透明度のスライダーをいちばん右へ移動

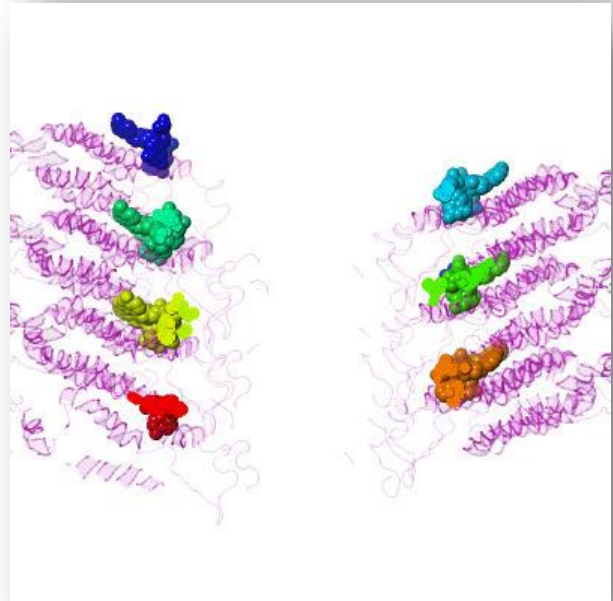
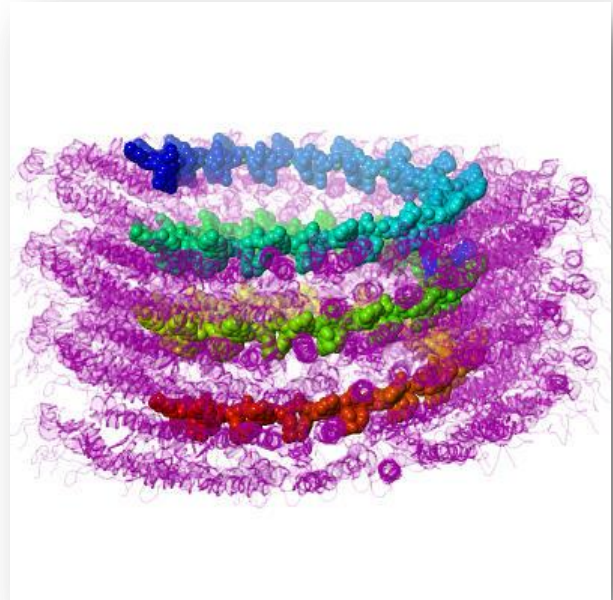
→タンパク質部分が半透明の紫色になる

- スタイルパネル・選択・DNA/RNAを押し、原子・「空間充填」ボタンを押し、色・虹色・「グループ」ボタンを押す

→RNAが目立つ

- 選択リセットボタンを押し、選択状態をリセット

- 「表示」パネル、「断面」スライダーを調節、



実習 6 :

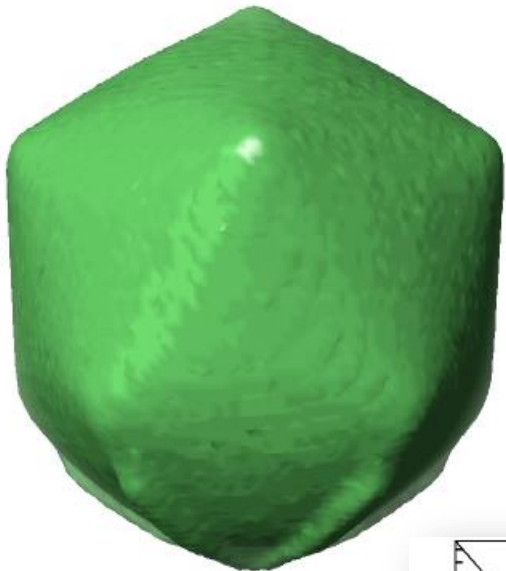
**巨大なウイルス
ミミウイルスを試みる**

巨大ウイルスの中身を見してみる

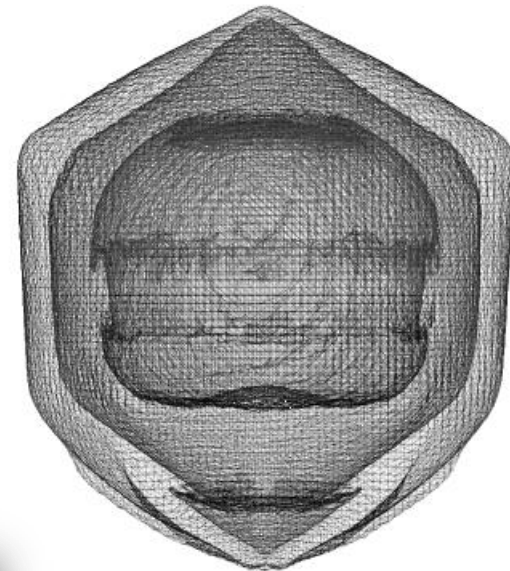
手順

- EMDB-5039をひらく（「開く」パネル、「IDを指定」行の入力ボックスに「5039」と入力し、Enterキーを押す）
→ミニウイルスの構造が表示される
- 「スタイル」パネル、「表面のスタイル」行の、「塗りつぶし」のチェックを外し、「メッシュ」をチェックし、「透明度」スライダーを調節
→中に構造体があることがわかる
- 「表示」パネル、「スケール」行の、「1000A」のボタンをクリック
→スケール付きのフレームが表示される

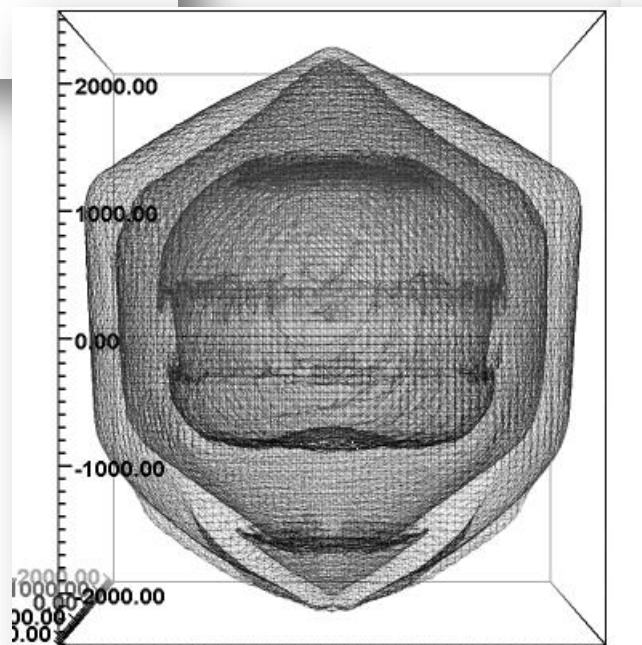
巨大ウイルスの中身を見てみる



塗りつぶし表示



半透明のメッシュ表示



スケールを表示

実習 7 :

EM Navigatorを開いてみる

EM Navigator を開く

手順 : キーワード「em navigator」でWeb検索
または、PDBjトップページの左フレーム、
「検索」の中の「EM Navigator」をクリック

EM Navigatorとは？

チェック

- ページ全体
英語版と日本語版がある、今回は日本語で利用
- ページ上部「データを見る」
データベースサイトによくある検索ボックスなど
- ページ中「ムービースロット」
EM Navigatorの最大の特徴は、このムービー
- ページ左下「EM Navigator とは？」

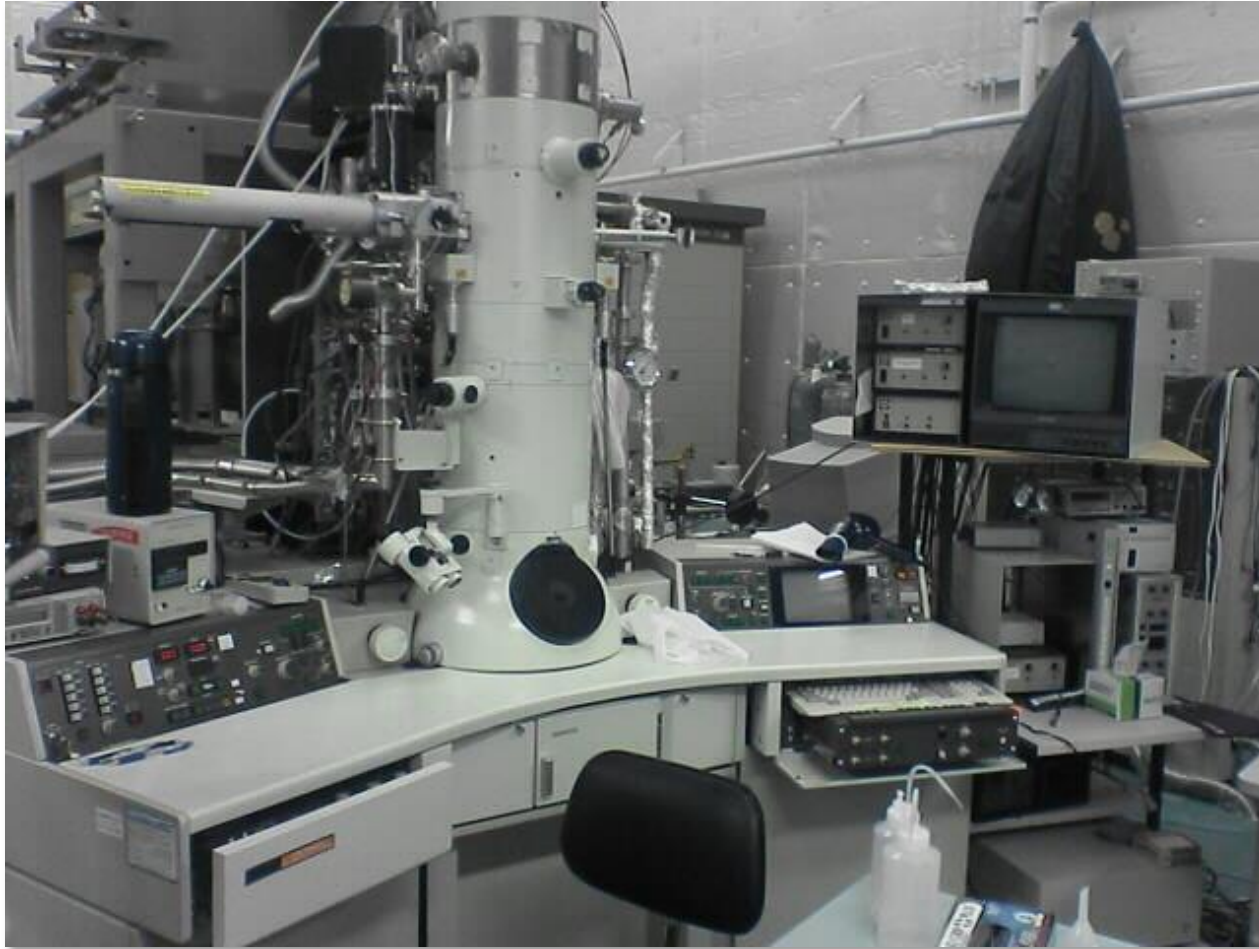
「生体分子や生体組織の**3次元電子顕微鏡**データを、気軽にわかりやすく眺めるためのウェブサイトです

EMDB と *PDB* のデータを利用しています」

解説 4 :

「3次元電子顕微鏡」とは？

電子顕微鏡ってなに？



電子顕微鏡（電顕・EM）

透過型電子顕微鏡（「影絵」を見るタイプ）

分子・原子レベルの分解能・定量性

「生命のカラクリ」を直接見たい！

- 生命現象の担い手（生体組織・生体分子）は
とても小さい
- 「光」では見るできない
(分解能は100nm程度)
- 「電子線」なら原子も見える
(原理的には1 Å よりも高分解能)

「光」を「電子線」におきかえた顕微鏡：
電子顕微鏡 (Electron Microscopy: EM)

3次元電子顕微鏡とは？

電子顕微鏡写真の問題点

- ・ ノイズが強い
- ・ 2次元（3次元で見たい！）

その対策（画像解析などのコンピュータ処理）

- ・ 「電子線トモグラフィー」
- ・ 「単粒子解析」
- ・ 「電子線結晶学」
など

これらの総称が、3次元電子顕微鏡（3D-EM）

欠点：分解能が低い

「3次元化」と「ノイズ低減」で分解能が犠牲
原子モデル作成は難しい

利点：「生き生きとした」姿を見ることができる

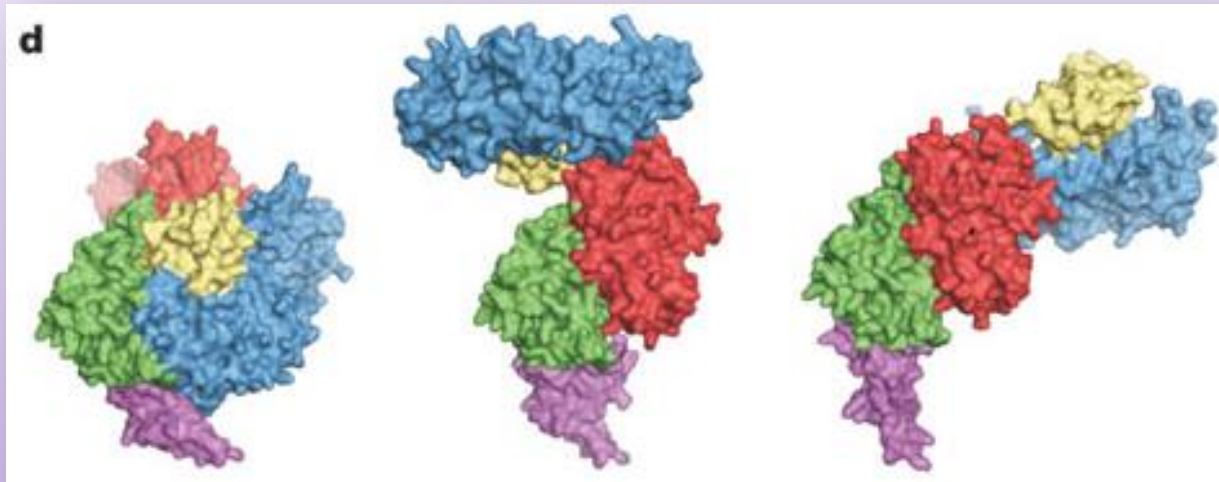
試料調整のハードルが低い（一般に）
コンピュータの中での「抽出・精製」も可能
大きな試料が得意

X線結晶学・NMRとは真逆で相補的

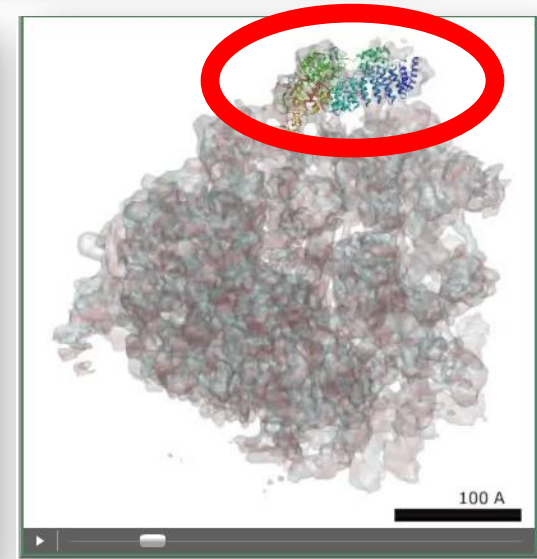
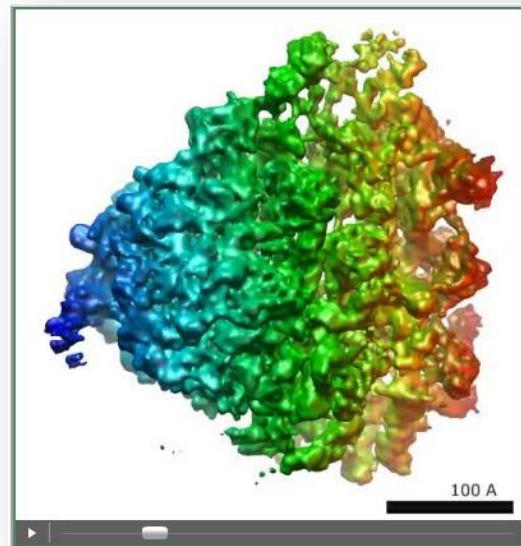
「生き生きとした」構造

eEF3の構造 <Andersen *et al.*, Nature 2006>

X線結晶学 X線溶液散乱 電子顕微鏡



EMDB-1233
と
PDB-2ix8



電子顕微鏡：

光の代わりに電子を使った顕微鏡

3次元電子顕微鏡：

電子顕微鏡像から3次元構造を得る手法

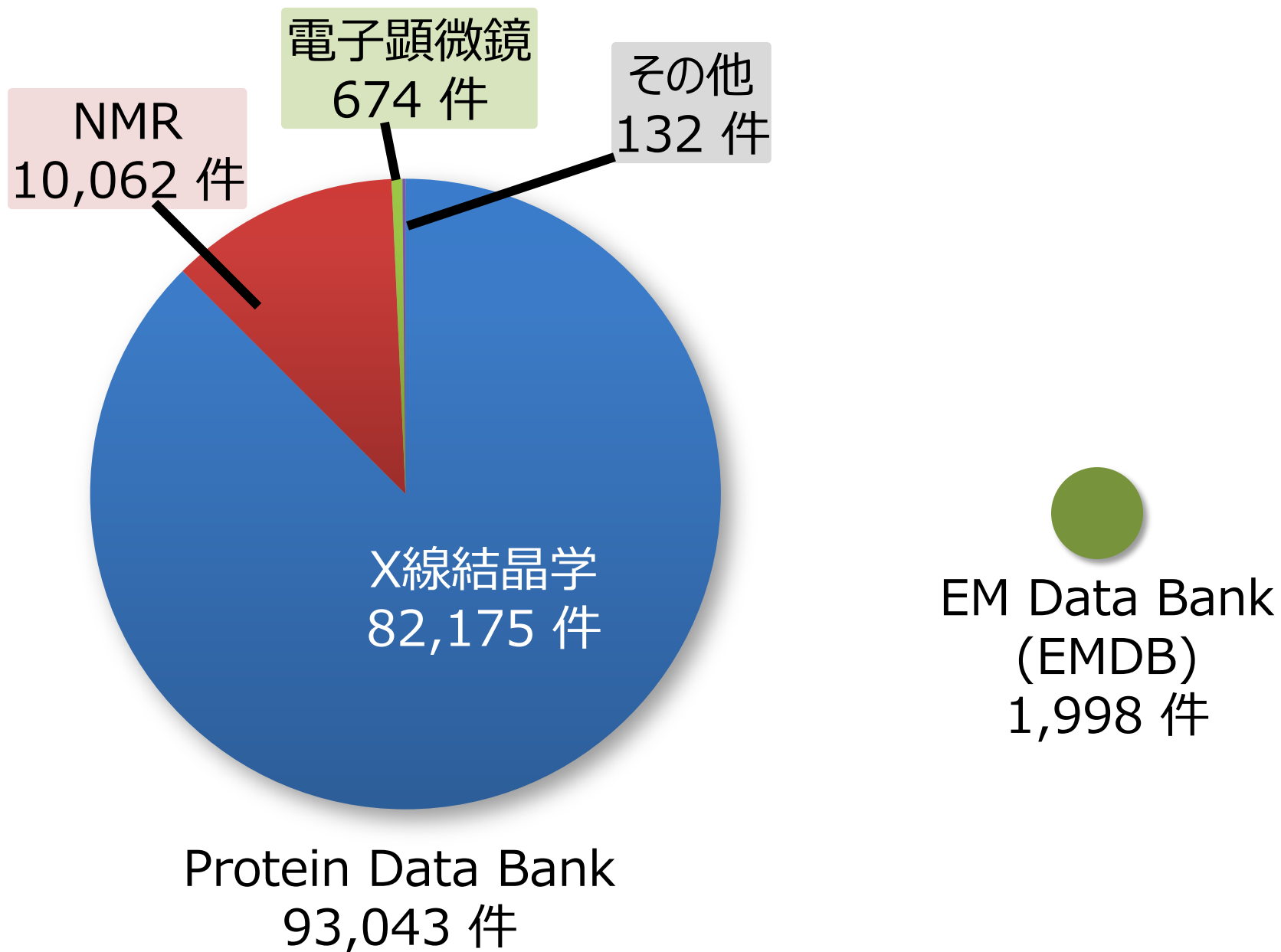
欠点と利点：

分解能は低いが、
「生き生きとした」構造を見ることができる

解説 5 :

3 次元電子顕微鏡と データベース

データベースの中の3次元電子顕微鏡構造



PDBでは原子座標が主データ（必須）

→多くの3次元電子顕微鏡データは**対象外**

2002年に欧州のEBIがEM Data Bank(EMDB)を設立
(現在は米国RCSB・NCMIとともに運営)

EMDBでは「**3次元マップ**」が主データ

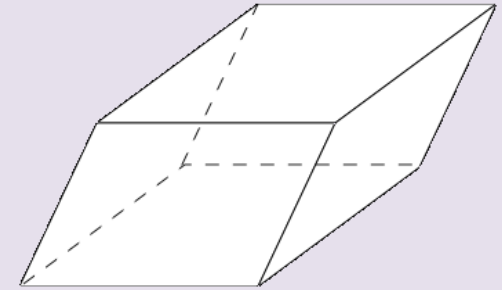
PDBと同様、試料や実験条件などの付随情報も

3次元マップってなに？

- 3次元空間の中の密度（濃い・薄い）の分布

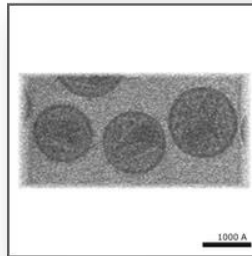
- カタチを表しているのではない

形状は平行6面体（多くは立方体）で、
その中に「濃い」部分と「薄い」部分がある

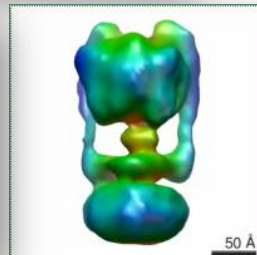
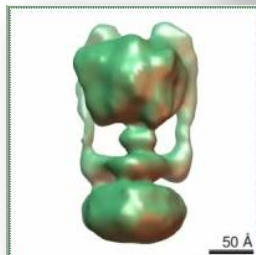


- X線結晶学での「電子密度マップ」に相当

「電子密度」ではなく「静電ポテンシャル」に関係
ただし、この違いが意味をもつことは少ない

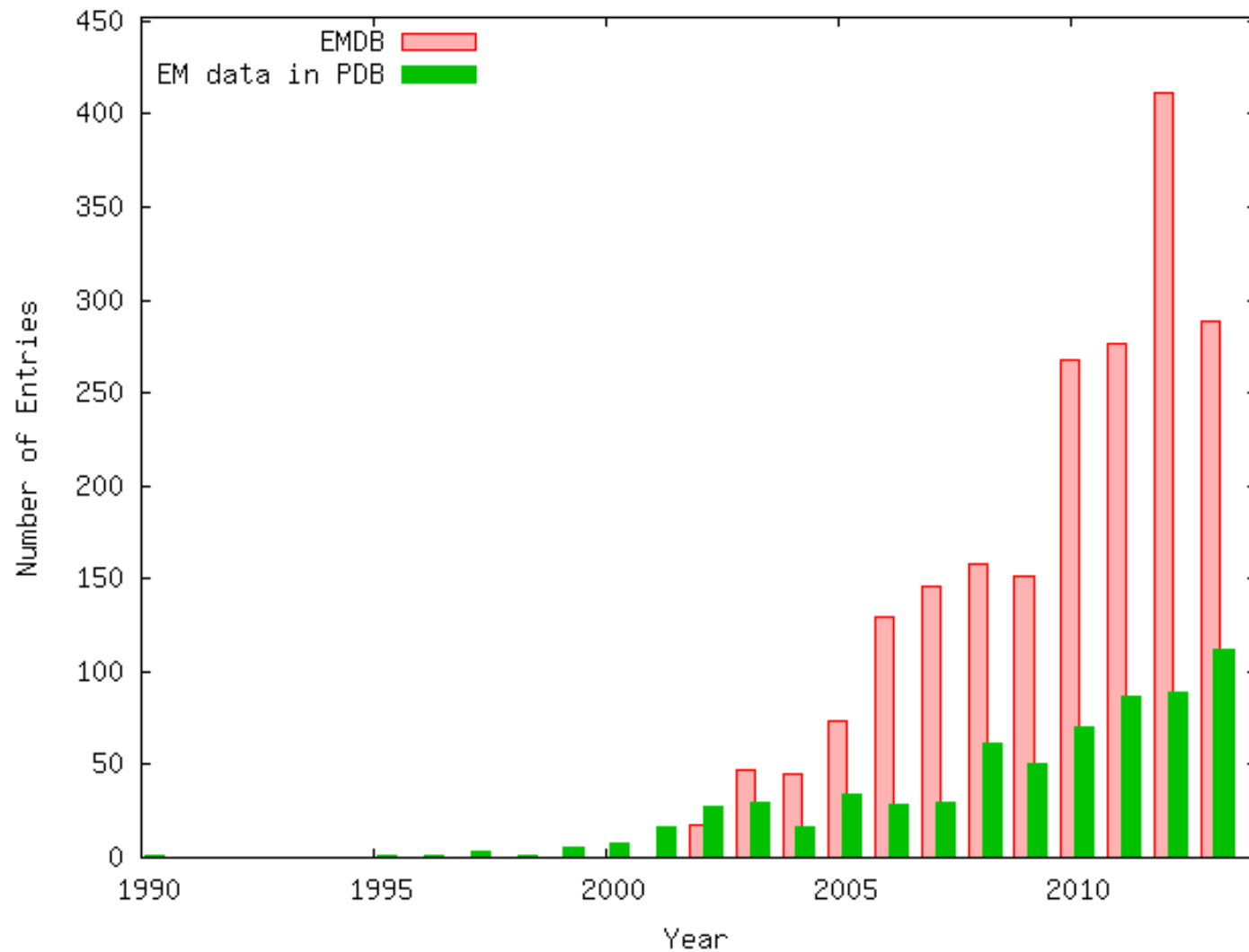


半透明のグレーの図（ソリッド図）：
ノイズが強いデータで利用
色の濃さで密度を表現



当数値面図（等高面図）：
色は、左が断面の「密度」、
右はある点・直線・面からの距離を表現

データ登録数の推移



EMDB と **PDB(電子顕微鏡データ)** の登録数の推移

高分解能（～4 Å以上）の場合

原子モデルの直接構築が可能

（アミノ酸配列・立体化学などの情報を利用）

低分解能の場合

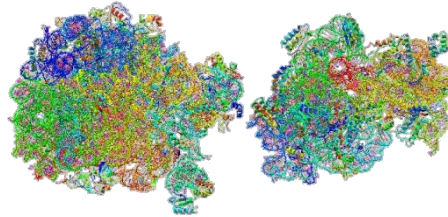
既知の原子モデルを使えば、限定的に可能

（原子モデルのあてはめ）

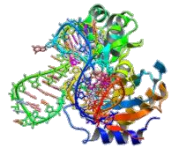
PDBには、両タイプのデータが登録されている

ハイブリッド構造解析とデータベース

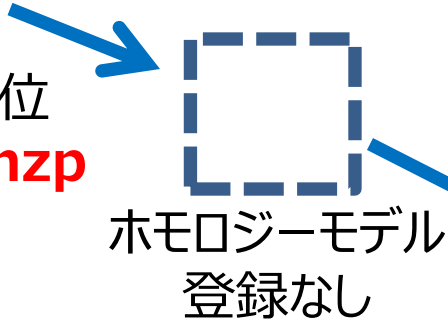
リボソーム
PDB: 2i2u / 2u2v



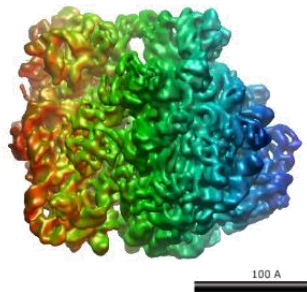
EF-Tu・tRNA複合体
PDB: 1ob2



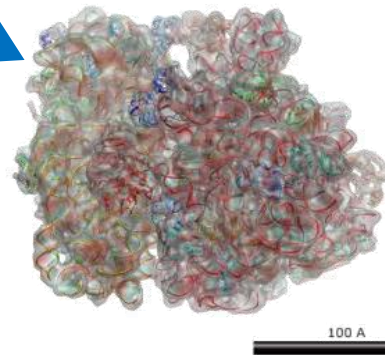
L1突起部位
PDB: 1mzp



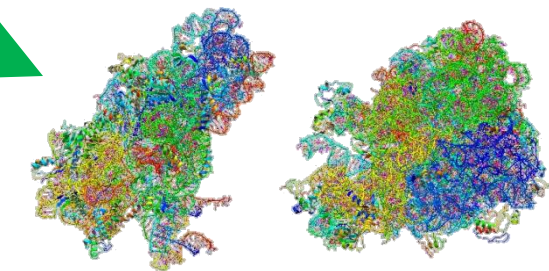
ホモロジーモデル
登録なし



リボソーム+tRNA+伸長因子Tu複合体
EMDB: 5036 ★



あてはめ



あてはめた結果
PDB: 3fih / 3fik ★

(Villa E. *et al.*, *PNAS*, 2009)

- EMDBは3次元電子顕微鏡データのデータベース
- PDBの主データが**原子座標**であるのに対し、EMDBの主データは、「**3次元マップ**」
- 登録数は増加傾向、低分解能でも注目すべきデータもある
- 低分解能データでも、ハイブリッドな手法で、原子モデルの構築が可能

実習 8 :

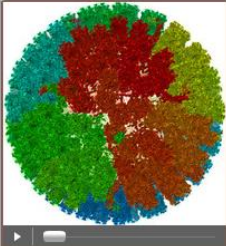
PDBとEMDBのデータを見してみる

PDBのデータを見てみる

手順： トップページ上部の入力ボックスにIDを入力
IDの例：3gzu, 2ix8など

PDB-3gzuの詳細ページ

VP7タンパク質で再被覆した ロタウイルス 2重層粒子
手法: 電子顕微鏡 / 3.8 Å分解能



ムービー

表: 個別 すべて


- エントリ情報
- 文献
- 構成要素
- 試料
- 電子顕微鏡
- 解析
- ダウンロード

関連するエントリ


エントリ情報

データベース名・ID	PROTEIN DATA BANK (PDB) / 3gzu
タイトル	VP7タンパク質で再被覆した ロタウイルス 2重層粒子 VP7 reoated rotavirus DLP
記述子	Inner capsid protein VP2, Intermediate capsid protein VP6
著者	Chen, J.Z., Settembre, E.C., Harrison, S.C., Grigorieff, N.

再生 小 中 大 X オフ ムービー



#1: 生物学的単位 - 完全な正20面体対称集合体
#2: 生物学的単位 - 正20面体対称構造中の5量体部位
#3: 生物学的単位 - 正20面体対称構造中の6量体部位
#4: 登録構造単位



80Sリボソームに結合した eEF3 (真核 伸長因子3) のモデル
手法: 電子顕微鏡 / 9.9 Å分解能



ムービー

表: 個別 すべて

- エントリ情報
- 文献
- 構成要素
- 試料
- 電子顕微鏡
- 解析
- ダウンロード

関連するエントリ

エントリ情報

データベース名・ID	PROTEIN DATA BANK (PDB) / 2ix8
タイトル	80Sリボソームに結合した eEF3 (真核 伸長因子3) のモデル MODEL FOR EEF3 BOUND TO AN 80S RIBOSOME
記述子	ELONGATION FACTOR 3A
著者	Andersen, C.B.F., Becker, T., Blau, M., Anand, M., Halic, M., Balar, B., Mielke, T., Pedersen, J.S., Spahn, C.M.T., Kinzy, T.G., Andersen, G.R., Beckmann, R.

再生 小 中 大 X オフ ムービー



#1: 登録構造単位
#2: EMマップデータ(EMDB-1233)の単純化した表面モデルとの重ね合わせ
#3: EMマップデータ(EMDB-1233)との重ね合わせ



PDB-2ix8の詳細ページ

チェック

- ページ上部：タイトルなど
- ページ左上：分子構造のムービー
登録構造の他に、生物学的集合体、他のデータと重ね合わせた表示など
- ページ左下：詳細情報のナビゲーションパネル
- ページ右側：詳細情報
PDBjMineの詳細ページと同じ趣旨だが、
独特の付随情報（解析手法など）を表示
関連するエントリを画像付きで表示
（電子顕微鏡データの事情）

EMDBのデータを見る

手順 1 : トップページ→入力ボックスに IDを入力
IDの例 : 1155, 1542, 1604

EM Navigator 3次元電子顕微鏡データナビゲーター [English / 日]

トップ ギャラリー リスト 表 お問い合わせ ?

PDBj > EM Navigator > 詳細ページ - EMDB-1155

HIV-1 (ヒト免疫不全ウイルス1型) ウイルス粒子
「単独構造」状態

エントリ情報

データベース名・ID EM DATA BANK (EMDB) / 1155

試料名・マップの注釈 HIV-1 (ヒト免疫不全ウイルス1型) ウイルス粒子
HIV-1 virions
Tomographic reconstruction of HIV-1 virions

著者 Briggs JA, Grunewald K, Glass B, Forster F, Krauss

ムービー

EMDBの登録画像

更新日 2005-08-30

マップデータの公開日 2006-01-16

EBI EMDB Atlas page Summary Visualisation Experiment Pro

EMDB-1542

EM Navigator 3次元電子顕微鏡データナビゲーター [English / 日]

トップ ギャラリー リスト 表 お問い合わせ ?

PDBj > EM Navigator > 詳細ページ - EMDB-1542

A1Ao ATP合成酵素 - *Pyrococcus furiosus*(高度好熱性 古細菌) 由来
「単粒子」状態 / 23 Å分解能

エントリ情報

データベース名・ID EM DATA BANK (EMDB) / 1542

試料名・マップの注釈 A1Ao ATP合成酵素 - *Pyrococcus furiosus*(高度好熱性 古細菌) 由来
A1Ao ATP synthase from *Pyrococcus furiosus*
volume of *Pyrococcus furiosus* A-type ATP synthase

著者 Vonck J, Pisa KY, Morgner N, Brutschy B, Mueller V

ムービー

EMDBの登録画像

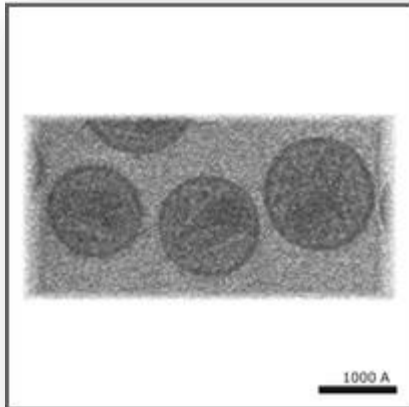
更新日 2009-06-15

EMDB-1155

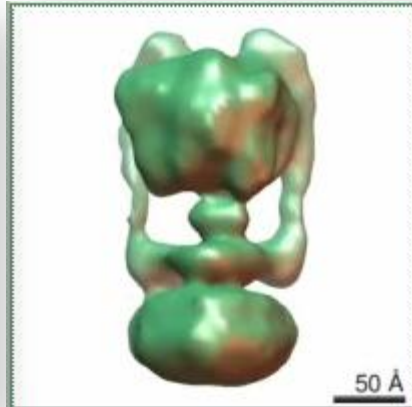
EMDBのデータを見る

チェック

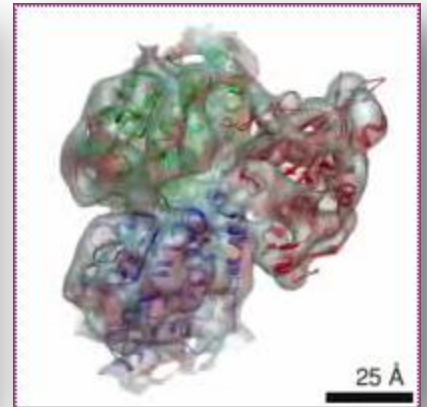
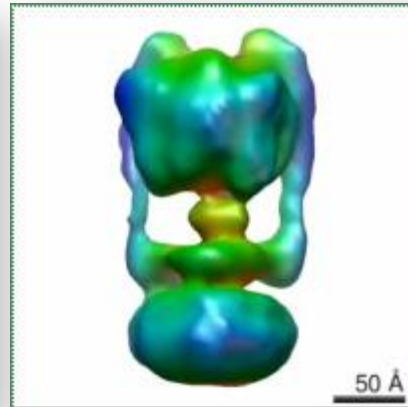
- **ページ全体**
PDBデータのページとほぼ同じ
- **ムービー**
クリックで再生、スライダーでシーク、回転・断面表示など
「ムービー」の画像クリックで、ムービーの種類が切り替わる
- **ムービーにはいくつかの種類がある**
グレーの半透明のもの、単色・グラデーションの表面図、
原子モデルとの重ね合わせ



EMDB-1155



EMDB-1542



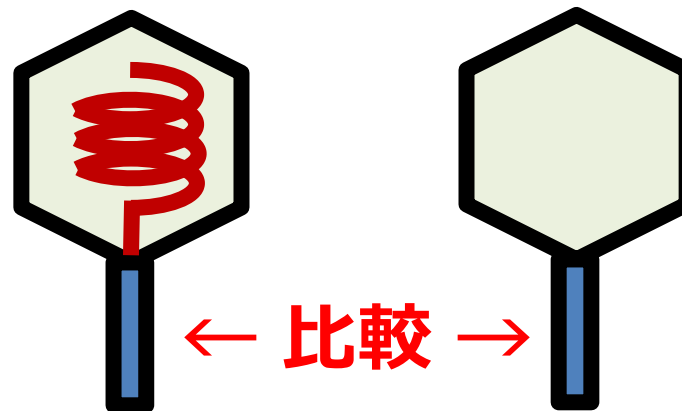
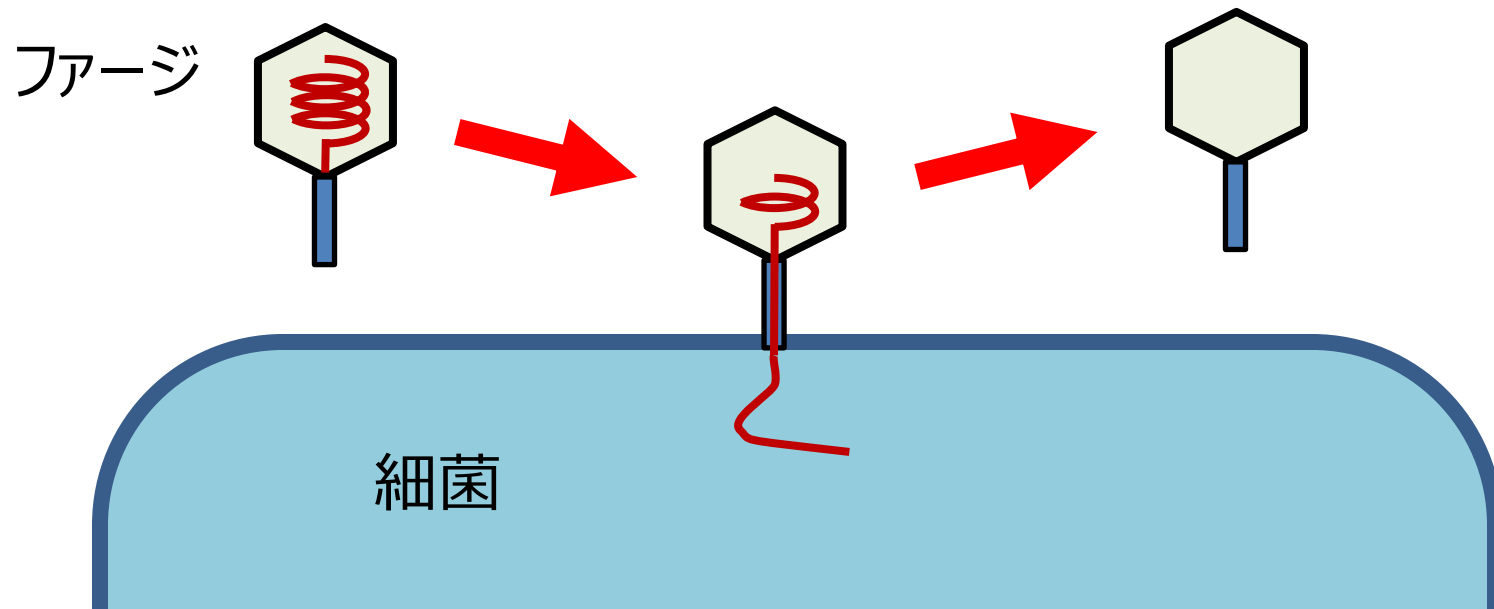
EMDB-1604 66

実習 9 :

フージ尾部の構造変化を見る

目的 : ムービーで構造を比較してみる

バクテリオファージDNAの注入



ムービーページ

ムービーページ：

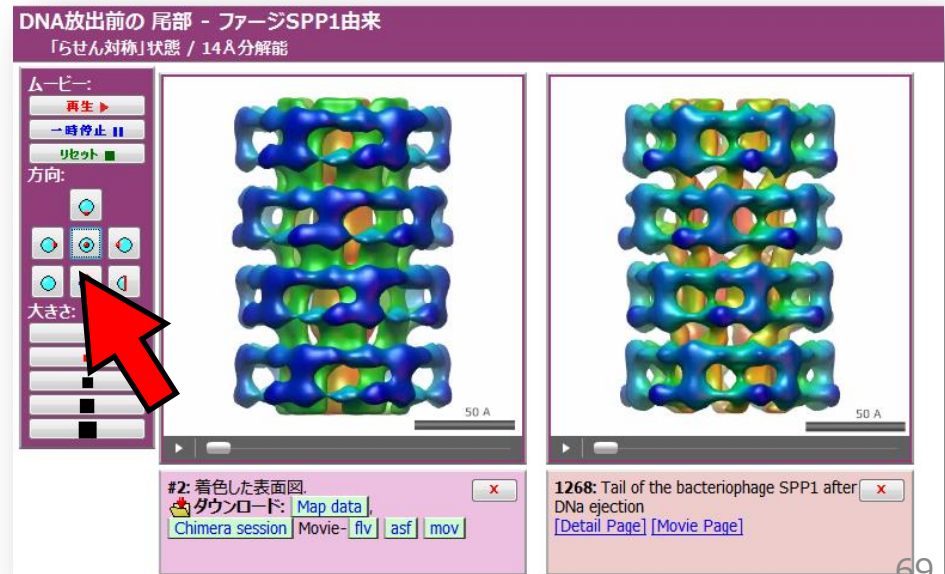
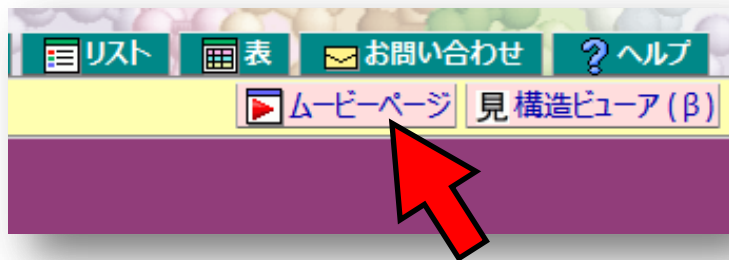
詳細ページよりも高解像度のムービーが見られる
他のエントリのムービーとの比較も可能

手順 1： EMDB-1267の詳細ページで、ページ右上部の「ムービーページ」というリンクをクリック → **ムービーページが開かれる**

手順 2： ページ下部、ムービーの追加パネル、関連するデータの[1268]ボタンをクリック → **箱の中に画像が出てくる**

手順 3： カラフルな方をクリック → **新しいムービーが出てくる**

手順 4： ページ左側のコントロールパネルで、見る方向を選択し、観察



ファージ尾部の構造変化

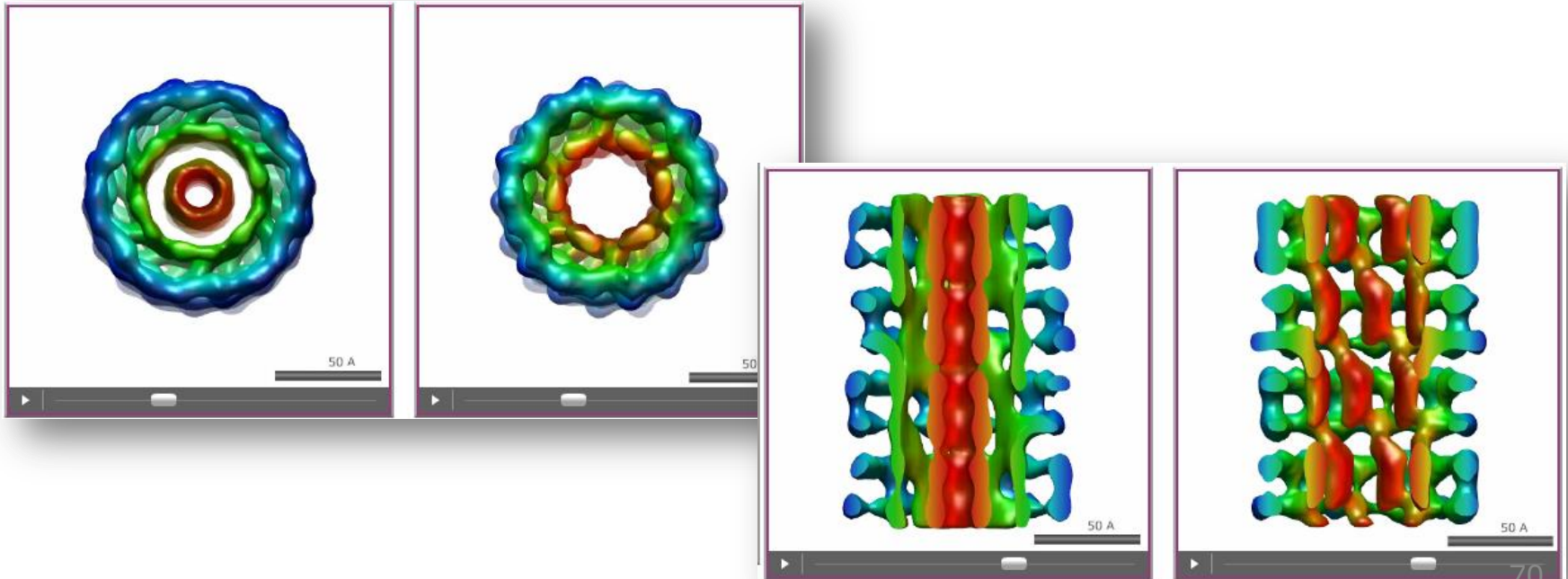
チェック

- ムービー

ムービーの操作パネルでは、再生や一時停止のほかに、見る方向や、ムービーのサイズを操作できる

- ファージ尾部の構造比較

外から見てもよく分からないが、上から見たり断面を見たりすると、中心部分の構造変化がよく分かる



実習 10:

哺乳類由来リボソームを見してみる

EMDBとPDBのデータを合わせてみる

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。

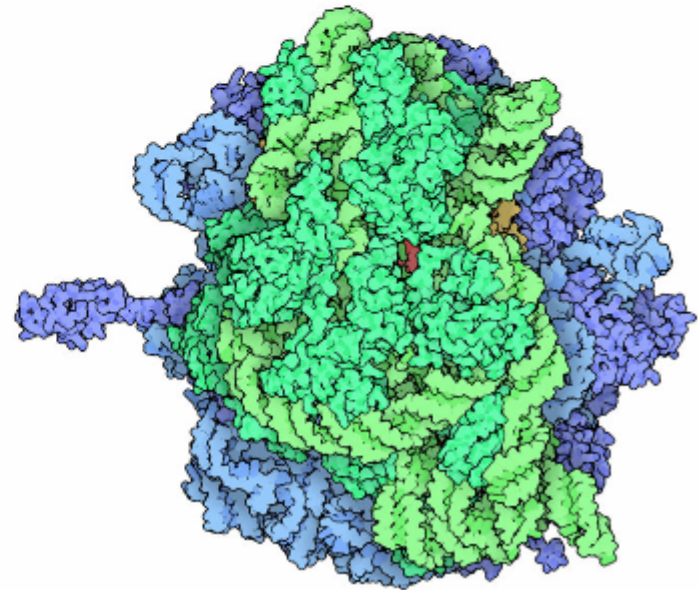
[「今月の分子」一覧に戻る](#) / [この記事のRCSBオリジナルサイト\(英語\)を見る](#)

2010 / 01: No. 121

70Sリボソーム (70S Ribosomes)

:翻訳 工藤高裕 (PDBj)

リボソーム (ribosome) は細胞世界における不思議の一つであり、PDBにおいて自身で探索できる様々な不思議のうちの一つでもある。2000年、構造生物学者のヴェンカトラマン・ラマクリシュナン (Venkatraman Ramakrishnan)、トーマス・A・スタイツ (Thomas A. Steitz)、エイダ・E・ヨナス (Ada E. Yonath) はPDBで利用できる最初のリボソームのサブユニット (ribosomal subunits) の構造を解き、2009年彼らはこの功績によってノーベル化学賞を受賞した。転移RNA (transfer RNA) や伸長因子 (elongation factor) を含む蛋白質合成に関わる他の分子についても、その多くが構造を利用できるようになっている。これらの構造に基づき、現在では何百種類もの完全なリボソームの構造がPDBで利用できるようになり、それによって蛋白質合成に関する多くの重要な段階の原子レベルでの詳細が明らかになった。



今月の分子 : 「70Sリボソーム」

万見でEMDBのデータを見てみる

万見の「開く」パネルのID欄に「1480」と入力

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。

開く

他のデータエントリを万見(このページ)で開くためのパネルです。

IDを指定 PDB/EMDB ID: 1480 Open

ランダム選択 PDBの新規登録から New! Yoredumi 万見 設定 English

EMDB-1480



Jmol_S

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。データサイズ縮小のため、閲覧用のマップデータは加工されている場合があります。

データベース-ID EMD-1480

データ

3D structure of the canine 80S ribosome
80Sリボソーム - イヌ由来
「単粒子」状態、8.7 Å 分解能
3D volume of the canine 80S ribosome determined at 8.7 Å resolution (Fsc 0.5), within the context of a ribosome-channel complex from ER membranes.

あてはめられたモデル

表示 新しいページで開く
PDB-2zkg: ほ乳類 80Sリボソームの構造中の40Sサブユニット - 8.7 Å 分解能の低温電子顕微鏡マップとタンパク質・RNAのホモロジーモデルのドッキングによる

表示 新しいページで開く
PDB-2zkr: ほ乳類 80Sリボソームの構造中の60Sサブユニット - 8.7 Å 分解能の低温電子顕微鏡マップとタンパク質・RNAのホモロジーモデルのドッキングによる

著者 P. Chandramouli, M. Topf, J. F. Menetret, N. Eswar, J. J. Cannone, R. Gutell, A. Sali, C. W. Akey

EMDB-1480のページ

ハイブリッドなデータ

2種類のデータベース、合計3種類のデータを重ねて表示

The screenshot shows the Yocodumi 万見 web interface. The main window displays a 3D model of the canine 80S ribosome, labeled "EMDB-1480". The sidebar on the right contains the following information:

- データ** (Data) section: A button to open the data panel.
- データ** (Data) section: A summary of the data entry, including the title "3D structure of the canine 80S ribosome" and the resolution "8.7 Å".
- あてはめたモデル** (Associated Models) section: Two entries for associated models, each with a "表示" (Show) checkbox and a link to the PDB entry. Red arrows point to these checkboxes.
- 著者** (Authors) section: A list of authors: P. Chandramouli, M. Topf, F. Menetret, N. Eswar, J. J. Cannone, R. Gutell, A. Sali, C. W. Akey.

「あてはめたモデル」の2つの「表示」チェックボックスをチェック

蛋白質工場は、何でできているか？

Yorodumi 万見

設定 English

EMDB-1480

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/非表示のボタンです。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

データ

このパネルには、現在表示されているデータのサイズ縮小のため、データの一部が省略されています。

データベースID EMD-1480

データ channel co

あてはめられたモデル

著者 P. Chandra Gutell, A. S.

モデル #1

構成要素:

- A RNA: 18S Ribosomal RNA
- B RNA: RNA Expansion segment ES3
- C RNA: RNA Expansion segment ES4
- D RNA: RNA Expansion segment ES6 part I
- E RNA: RNA Expansion segment ES6 part II
- F RNA: RNA Expansion segment ES9
- G RNA: RNA helix
- H RNA: RNA helix
- a Polypeptide: 40S Ribosomal protein RACK1
- b Polypeptide: 40S Ribosomal protein SA
- c Polypeptide: 40S Ribosomal protein S3e
- d Polypeptide: 40S Ribosomal protein S9e
- e Polypeptide: 40S Ribosomal protein S2e
- g Polypeptide: 40S Ribosomal protein S5e
- h Polypeptide: 40S Ribosomal protein S15ae
- i Polypeptide: 40S Ribosomal protein S16e
- j Polypeptide: 40S Ribosomal protein S20e
- k Polypeptide: 40S Ribosomal protein S14e
- l Polypeptide: 40S Ribosomal protein S23e
- m Polypeptide: 40S Ribosomal protein S18e

Jmol_S

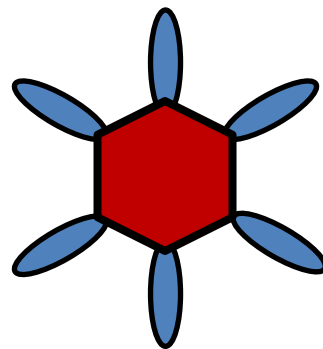
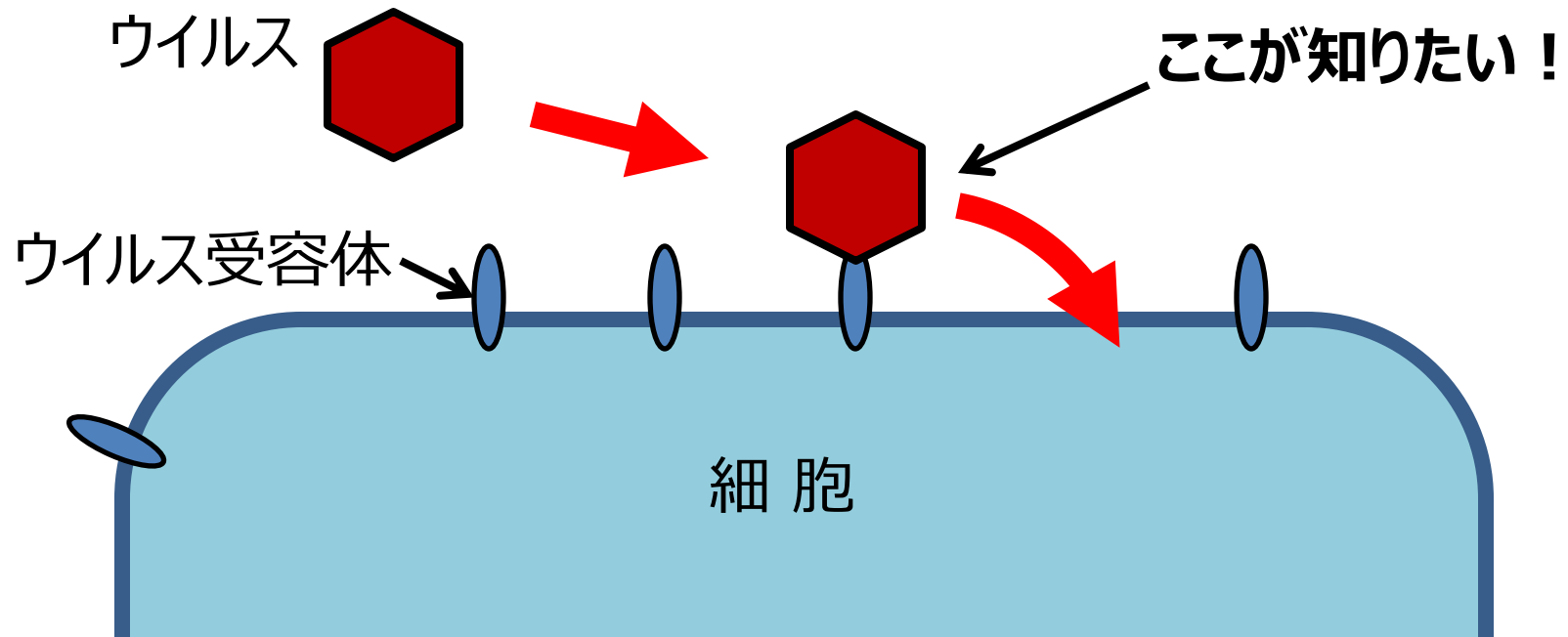
構成要素パネルを開く

リボソームにはRNAが多く含まれていることがわかる

実習 1 1 :

ウイルスの細胞侵入の メカニズムを見る

ウイルスと受容体の構造解析

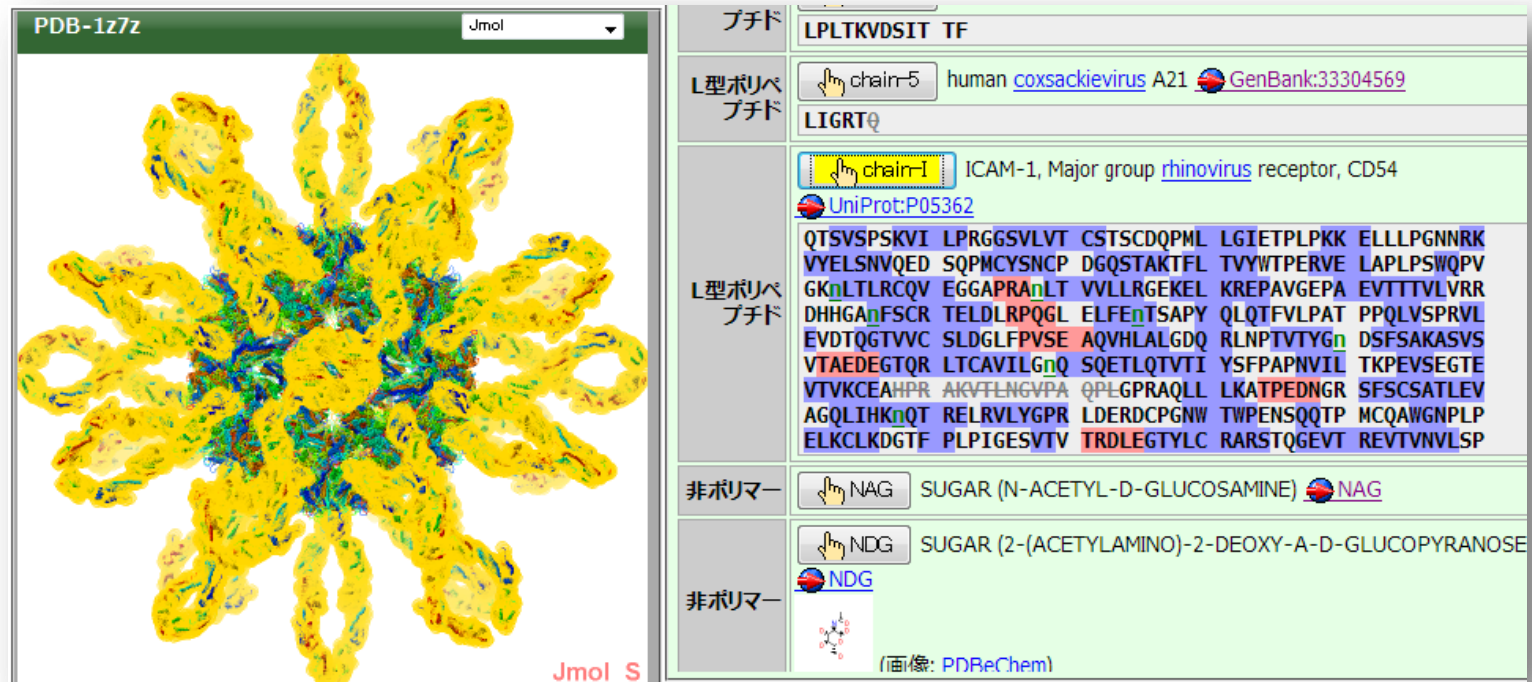


受容体で飽和した
ウイルスを構造解析

コクサッキーウイルスの例

手順

- PDB-1z7zをひらく
 - 「データ」パネル、「集合体」行、「1:主鎖のみ」ボタンを押す
→正20面体対称構造が表示される
 - 「構成要素」パネル、「chain-I」の選択ボタンを押す
→ウイルス受容体を選択状態になる
- ※ 球状のウイルスのまわりに、長い受容体分子が結合している



EMDBデータとの重ね合わせ

手順

- 「データパネル」、「登録構造」ボタンを押す
→もとの表示に戻る
- 「データパネル」、「EMDBのマップデータ」の「表示」をチェック
→対応するEMDBデータが、重ねて表示される
- 「表示」パネルタの、「ズーム」と「断面」のスライダーを調節し、結合部分を見やすくする
→重なり具合がよくわかるようになる



The screenshot displays the Jmol viewer interface. On the left, a 3D model of a protein structure (PDB-1z7z) is shown, overlaid with a grey electron density map. The top bar indicates 'PDB-1z7z' and 'Jmol'. The right panel contains various controls:

- ビューア**: Includes navigation buttons (left, right, zoom in, zoom out), a '高画質(低速)' checkbox, and background color selection.
- 方向**: Includes rotation buttons for X, Y, and Z axes, and a '停止' button.
- 中心**: Includes buttons for '原子モデル', '選択したもの', and 'EMマップデータ'.
- ズーム**: Includes a slider from '小' to '大' with a 'リセット' button.
- 断面**: Includes a slider from '手前' to '奥' and checkboxes for '中心を固定' and '厚さを固定'.
- スケール**: Includes radio buttons for 'Off', '10A', '50A', '100A', '500A' (selected), and '1000A'.
- 保存**: Includes buttons for '画像を保存', '現在の状態(スクリプト)を保存', and '状態を復元(スクリプトを開く)'.
- : Includes a '表示様式のリセット' button.

最後に

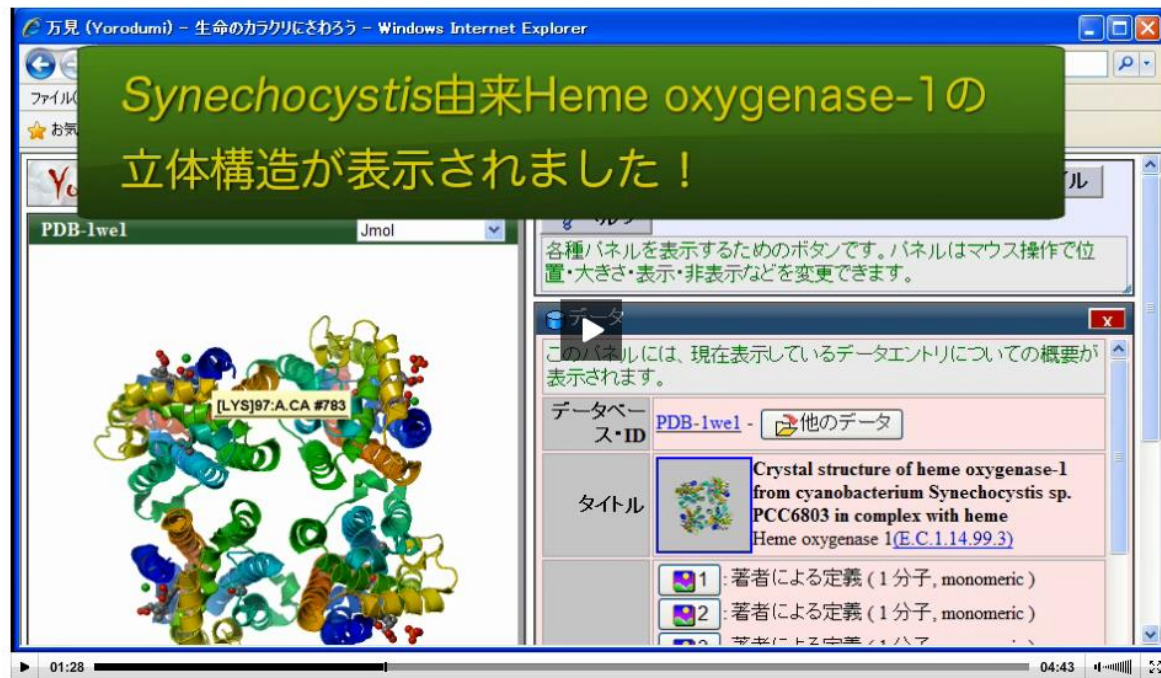
動画による解説

2010-08-02

[IE8][タンパク質][可視化][二次構造] 万見(Yorodumi)の使い方～基本と連携～

万見(よろずみと読みます)は日本蛋白質データバンク(PDB)が提供するタンパク質構造解析サービスです。万見は立体構造を見て楽しむことをコンセプトとしています。また、Uniprotとの連携により、詳細なデータを得ることも出来ます。

今回は万見によるシアバクテリア *Synechocystis* sp. PCC 6803由来Heme oxygenase-1(ヘムの脱鉄を行う酵素)の立体構造データをサンプルとしています。



The screenshot shows the Yorodumi web application interface. At the top, a green banner reads "Synechocystis由来Heme oxygenase-1の立体構造が表示されました！". Below this, the 3D structure of the protein is displayed in a Jmol viewer. The structure is a complex, multi-colored ribbon model. A label "[LYS]97:A:CA #783" is visible on the structure. To the right of the viewer, there is a sidebar with search results. The main panel shows the title "Crystal structure of heme oxygenase-1 from cyanobacterium Synechocystis sp. PCC6803 in complex with heme" and the PDB ID "PDB-1we1". Below the title, there are two entries for the structure, both labeled "著者による定義 (1 分子, monomeric)".

Generated by CAMTASIA STUDIO 6
この作品は、クリエイティブ・コモンズ・ライセンスの下でライセンスされています
原作者はライフサイエンス統合データベースセンターです (cc) BY

万見(Yorodumi)の使い方～基本と連携～ 統合TV
制作：統合データベースセンター
<http://togotv.dbcls.jp/20100802.html>

「万見画廊」ページ

Yorodumi 万見

万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわるう [\[English / 日本語\]](#)

トピック

- [万見をはじめる](#)
- [? 万見とは?](#)
- [万見画廊](#)
- [関連情報・リンク](#)
- [すべて表示](#)



[PDBj](#) [PDBj](#) [お問い合わせ](#)

万見画廊

口蹄疫ウイルスの鎧

口蹄疫ウイルスキャプシドの正20面体対称構造
データエントリ: PDB-1bbt

- [万見で見る](#)
- [データの詳細](#)

表示方法:

1. ビューアをJmolにする
2. 正20面体対称集合体を表示するには: 「 データ」パネル - 「集合体」 - 「 1: Cαのみ」(完全な正20面体集合体) ボタンを押す
3. タンパク質の色を変更するには: 「 スタイル」パネル - 「色」 - 「チェーン」ボタンを押す



39,720 atoms selected



表示例とチュートリアル

万見トップページ: <http://pd bj.org/yorodumi/>