

PDBj・創薬等支援技術プラットフォーム事業講習会
2015/06/13 @JST東京本部別館

PDBjからの構造情報の取得 PDBj Mineの使い方



大阪大学蛋白質研究所

くどう たかひろ
工藤 高裕

概要

1. 自己紹介
2. PDBj Mineによる検索
 1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
 2. 詳細検索・演習
 3. SQL検索
 4. その他（RESTサービス、化合物検索）

1. 自己紹介

2. PDBj Mineによる検索

1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
2. 詳細検索・演習
3. SQL検索
4. その他 (RESTサービス、化合物検索)

自己紹介

- 蛋白研・PDBjのスタッフ
- 大学では生物をかじっていましたが、構造生物学・バイオインフォマティクスなどは専門にやっていません
- これまでIT企業勤務、中学校の教員、IT系インストラクターなど
- 現在はPDBj公開系サーバの管理、今月の分子の翻訳、一部ウェブサービスの開発

1. 自己紹介

2. PDBj Mineによる検索

1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
2. 詳細検索・演習
3. SQL検索
4. その他 (RESTサービス、化合物検索)

PDBjトップページ

http://pdbj.org/

PDBj 検索

109274
件が利用できます (2015-06-03 00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

PDBj Protein Data Bank Japan

PDBjウェブ全体 PDBID/キーワード 著者 化合物 配列 ?

pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)

wwPDB RCSB PDB PDBe BMRB Legacy

4XJG 最新公開エントリー

ホーム
トップページ
新着情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
リンク集

サービス一覧

新フォーマット
PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

検索
ヘルプ

日本語

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、[JST-NBDC](#) と [大阪大学蛋白質研究所](#) の支援を受け、米国 [RCSB](#)、[BMRB](#)、および欧州 [PDBe](#) と協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

初めての利用者のためのガイド

新しいウェブインターフェースを初めてご利用の方は、[PDBjのウェブインターフェースについて](#)をご覧ください。PDBjウェブサイトの様々な機能についての説明は、[初級ユーザーガイド](#)をご覧ください。

新しいPDBj ウェブサイトは、[PDBjのウェブインターフェースについて](#)をご覧ください。PDBjウェブサイトの様々な機能についての説明は、[初級ユーザーガイド](#)をご覧ください。

各パネルはドラッグして配置変更可能

サービスを探索

以下のサービス関連語句の中から、必要なもの/興味のあるものを選択すると、あなたが探しているサービスの一覧が表示されます。

- ・[全サービスを表示する]ボタンを押すと、全サービスの概要が表示されます。
- ・[キーワードボックス]に、他の関連語句を入力して検索したり、絞り込み検索をすることも可能です。

| | | |
|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|
| <input type="radio"/> PDB | <input type="radio"/> BMRB | <input type="radio"/> EMDB |
| <input type="radio"/> 検索 | <input type="radio"/> 登録 | <input type="radio"/> ビューア |
| <input type="radio"/> 教育/辞典 | | |
| <input type="radio"/> NMR | <input type="radio"/> 電子顕微鏡 | <input type="radio"/> 二次構造 |
| <input type="radio"/> 配列 | <input type="radio"/> 類似性 | <input type="radio"/> 機能予測 |
| <input type="radio"/> 化合物 | <input type="radio"/> 構造予測 | <input type="radio"/> 結合部位 |
| <input type="radio"/> 表面構造 | <input type="radio"/> 立体構造 | |

全サービスを表示する

例) モチーフ、分

リセット

186: 終末糖化産物受容体 (Receptor for Advanced Glycation End Products, RAGE)

今月の分子

今月の分子のリスト

ヘルプ

お問い合わせ

キーワード検索

PDBjでは日本語検索可能！

「ピロリ菌」
と入力して  をクリック(またはEnter入力)



キーワード検索 - 検索結果

検索結果 ?

全ヒット件数: 398

表示件数: 25

表示順 関連性が高い順

Auto-pager:

結果をダウンロード

表示順

- 関連性が高い順
- PDBID
- PDBID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
- 分解能

ヒット数は398件
(2015年6月12日現在)

表示順を変更可能

キーワード検索 - 検索結果

109457
件が利用できます (2015-06-10 00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

PDBj
Protein Data Bank Japan

PDBjウェブ全体 PDBID/キーワード 著者 化合物 配列 ?

pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)

wwPDB RCSB_PDB PDBe BMRB Legacy

PDB: 399 件 **ウェブページ: 4 件** ステータス検索: 44 件 化合物検索: 0 件

ピロリ菌

変換クエリ: ("ピロリ菌") | ("helicobacter pylori")

158: プロトン開閉型尿素チャネル (Proton-Gated Urease Channel) from Helicobacter pylori

... 助けるだけでなく細菌による感染から守る役割も持っている。しかし細菌の一種である「ヘリコバクター・ピロリ」(**Helicobacter pylori**、通称**ピロリ菌**)は胃の中の酸性環境下でも生きることができる。ピロリ菌感染は最もよくある細菌感染の一つで、世界中の人の約半数が感染している。この細菌は胃に継続的 ...

Theoretical models

... S-TRANSFERASE P K.BEESETTI,A.DASH,K.GAYATHRI 画面表示 ダウンロード 11x3 THEORETICAL MODEL OF DIHYDROOROTATE DEHYDROGENASE FROM **HELI-COBACTER PYLORI**. K.PRASHANTH 画面表示 ダウンロード 11x9 PLASMODIUM FALCIPARUM ORNITHINE AMINOTRANSFERASE A.DASH 画面表示 ...

035: フェリチンとトランスフェリン (Ferritin and Transferrin)

... 給ではない。これらは細菌から細胞を守る役割をしている。遊離状態の鉄イオンを取り除くことにより、細菌の生命維持に必要なも ... ていたジヒドロ葉酸フェリチンとトランスフェリンの構造一覧を こちらのリスト に掲載しています。 フェリチンとトランスフェリンについて ... Structure of the Neutrophil-Activating Protein from **Helicobacter Pylori** G.Zanotti, E.Papinutto, W.G.Dundon, R.Battistutta ...

057: カタラーゼ (Catalase)

... まずいごとに、細胞内にある遊離鉄イオンは過酸化水素をヒドロキシルラジカルに変換してしまうことがある。このような致

検索結果
全ヒット件

表示順
関連性が高い順
作成日
作成日の新しい順
最終更新日
最終更新日の新しい順

カテゴリ別表示
全て
ヘルプページ
今月の分子
ニュース記事

ヘルプページなどの PDBj サイト内検索も可能

キーワード検索 - 概要

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

3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin

3BVK の概要

関連構造のPDB ID [3BVF](#) [3BVF](#) [3BVI](#) [3BVI](#)

分子名称 Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin

機能のキーワード iron storage, Metal-binding, Oxidoreductase, Oxidoreductase

由来する生物種 Helicobacter pylori

細胞内の位置 Cytoplasm (By similarity) [Q9ZL11](#)

ポリマー鎖の合計数 6

分子量の合計 [126804.02](#)

著者 Kim, K.H., Cho, K.J., Lee, J.H., Shin, H.J., Yang, I.S. (登録日: 2008-01-07, 公開日: 2009-01-13, 最終更新日: 2011-07-13)

引用文献 Kim, K.H., Cho, K.J., Lee, J.H., Shin, H.J., Yang, I.S. **Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin** *To be Published*.

実験手法 X-RAY DIFFRACTION (1.5 Å)

構造検証レポート

| Metric | Percentile Ranks | Value |
|-----------------------|------------------|-------|
| Rfree | | 0.193 |
| Clashscore | | 1 |
| Ramachandran outliers | | 0.2% |
| Sidechain outliers | | 1.2% |
| RSRZ outliers | | 3.9% |

■ Percentile relative to all X-ray structures

 □ Percentile relative to X-ray structures of similar resolution

[検証レポート\(詳細版\)](#) をダウンロード

他の静止画像 (非対称単位)

Copyright © 2013-2015 日本蛋白質構造データバンク

3D Viewer

非対称単位

生物学的単位

キーワード検索-3D Viewer



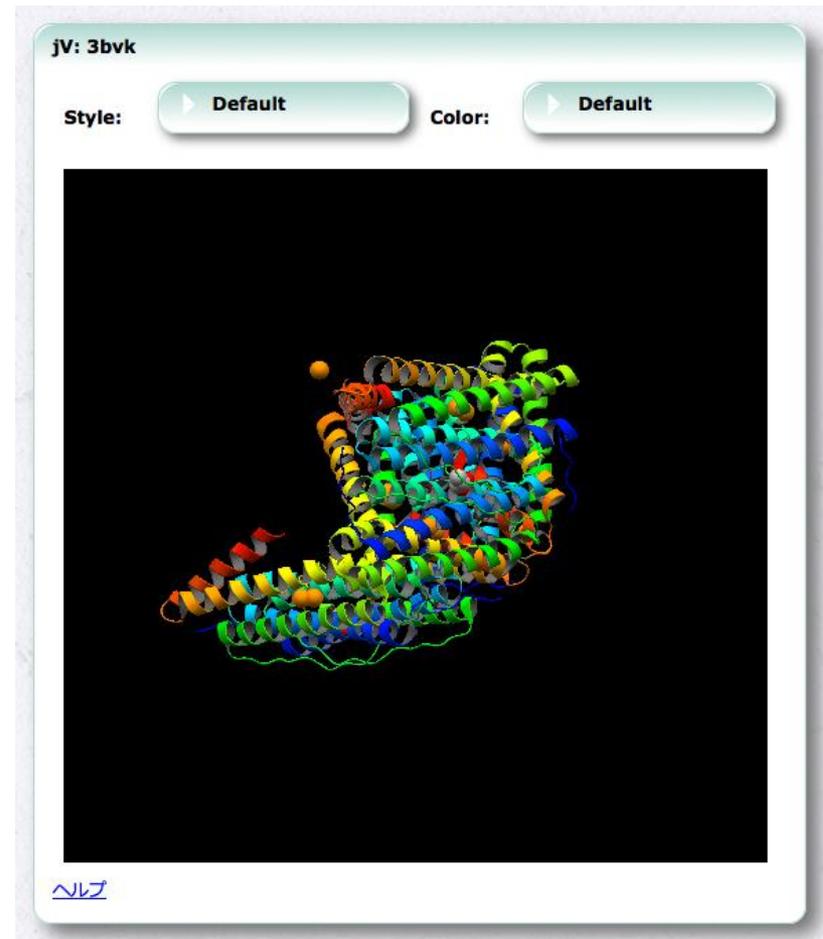
| ソフト名 | 開発 | 備考 |
|--------|---------|--------------------------------------|
| jV | PDBj | Java環境(JRE)が必要 |
| molmil | PDBj | WebGLが動作する環境が必要 (最近のブラウザ、Javaは不要) |
| Jmol | オープンソース | Java環境が必要 |
| JSmol | オープンソース | JmolのJavaScript移植版(Java不要) |

キーワード検索-3D Viewer

jVの場合



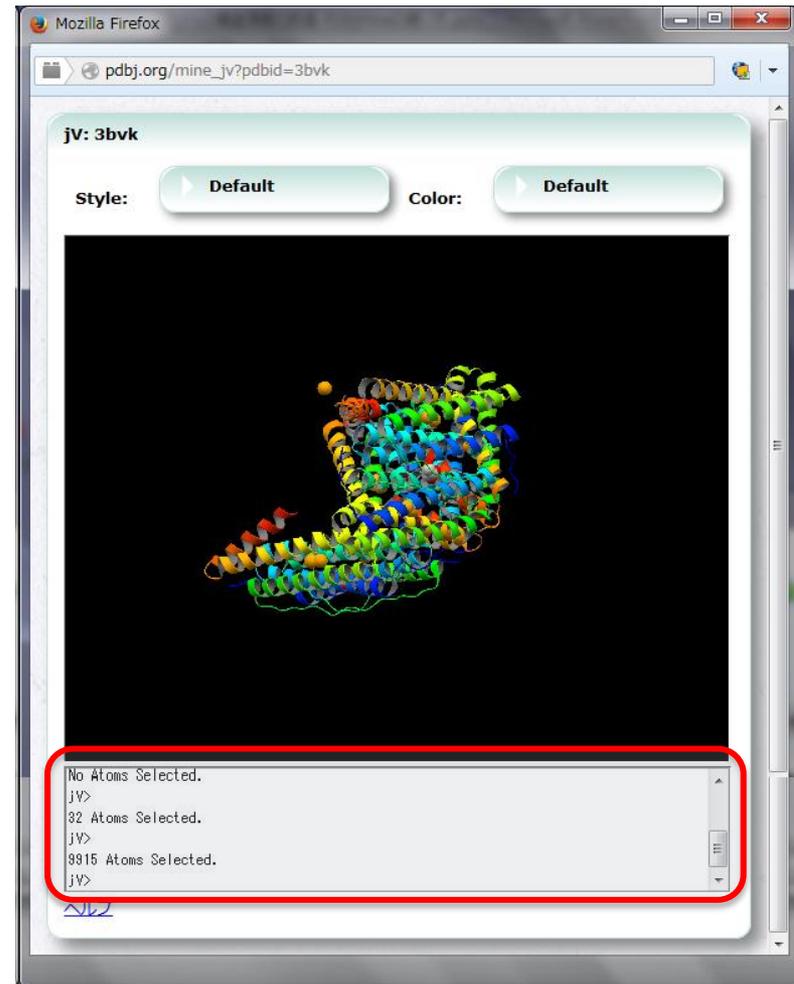
「許可」等（環境により語句は異なる）をクリック（静止画像をローカルに保存する機能などを有効にするため）



キーワード検索-3D Viewer

jVの場合

非Mac環境 (Windows、Linux)
ではコマンド入力欄が表示され、より細かい操作が可能

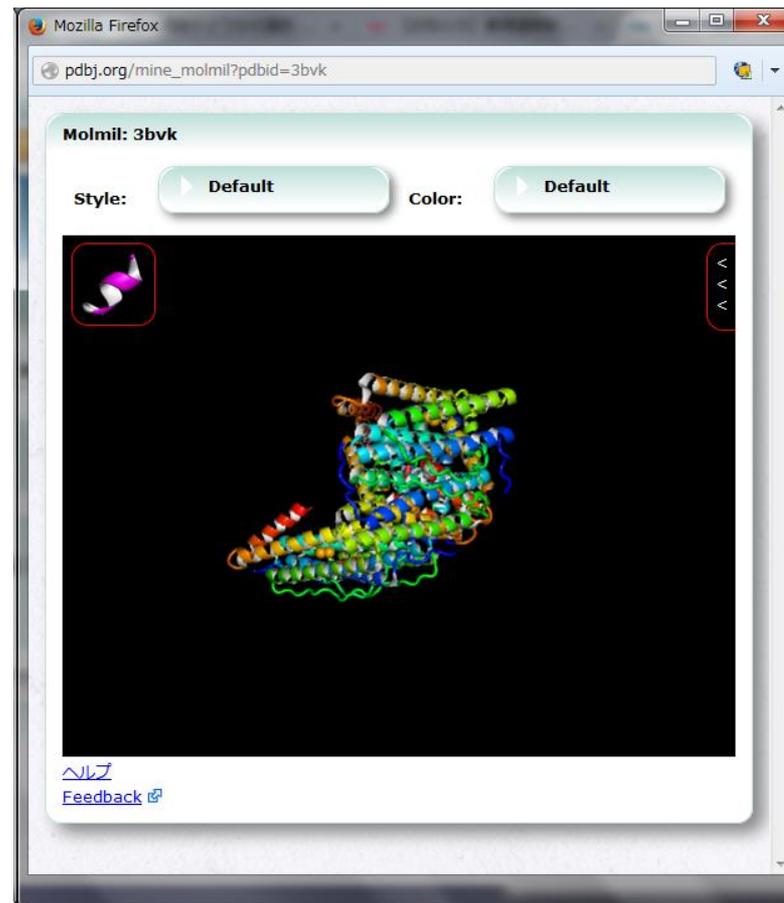


キーワード検索-3D Viewer

molmilの場合



- Javaのインストール不要で操作が軽快
- 古い環境(例: Mac OS 10.6)では利用不可
- 操作はマウスとメニューのみ(コマンドラインIFは未実装)



キーワード検索 - 配列情報

▼ ダウンロード

-  Sequence (fasta)
-  PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
-  PDBx/mmCIF
-  構造レポート (PDF)
- [More...](#)

▼ 構造

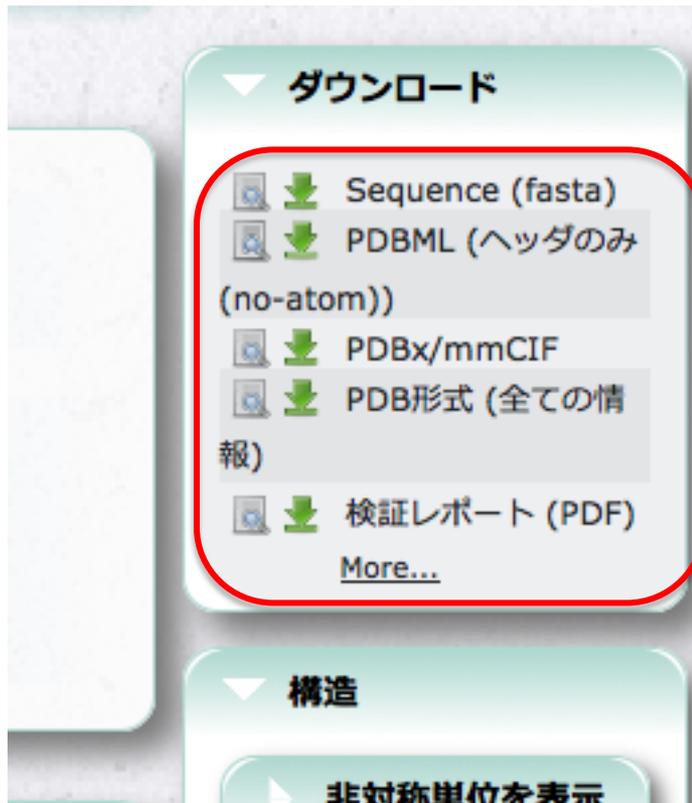
▶ 非対称単位を表示

画面表示ボタン
をクリック

Sequence (fasta): 3bvk

```
>3BVKA:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
>3BVBK:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
>3BVKC:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
>3BVKD:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
>3BVKE:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
>3BVKF:Ferritin
MGSSHHHHHSQDPMLSKDIIKLLNEQVNKEMNSSNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDH
AAEEYEHAKKLIIFLNENNVPVQLTISISAPEHKFEGLTQIFQKAYEHEQHISESINNIVD
HAIKSKDHATFNFLQWYVAEQHEEEVLFKDILDKIELIGNENHGLYLADQYVKGIAKSRK
S
```

キーワード検索 - データdownload



 ブラウザの別窓で表示

 ファイルをダウンロード

ここには主要なデータのみ表示
全データは中央列「ダウンロード」タブへ(後述)

キーワード検索 - 構造情報

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

3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of *Helicobacter pylori* ferritin

▼ エンティティ

| 鎖名 | 説明 | 種類 | 鎖長 | 分子量 | 分子数 | データベース名(アクセス番号) | 由来する生物種の一般名 | エンティティの一般名 |
|--------------------|----------|-------------|-----|---------|------|---|-------------------------------------|------------|
| A, B, C, D, E, ... | Ferritin | polymer | 181 | 20957.6 | 6 | UniProt (Q9ZL11) Pfam (PF00210) | Helicobacter pylori | |
| FE (III) ION | | non-polymer | | 55.8 | 14 | FE | | |
| GLYCEROL | | non-polymer | | 92.1 | 3 | GOL | | |
| water | | water | | 18.0 | 1053 | HOH | | |

▼ 配列ビューア

Display chain: **A, B, C, D, E, F (Ferritin)**

M G S S H H H H H S Q D F M L S K D I I K L L N E Q V N K E M N S S N L Y M S M S S M C Y T H S L D C A G L F L F D H A A E E Y I

▼ 非対称単位の内容

| ポリマー | 鎖の数 | 分子量の合計 |
|--------|--------|----------|
| ポリマー | 6 | 125745.9 |
| 非ポリマー* | 分子数 | 分子量の合計 |
| | 17 | 1058.1 |
| 全て* | 分子量の合計 | 126804.0 |

*水分子は含んでいません

Copyright © 2013-2015 日本蛋白質構造データバンク

▼ ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)
- More...

▼ 構造

非対称単位を表示

生物学的単位を表示

他のデータベース情報

- CSB-PDB
- DBe
- Prodomi
- SSP
- COP
- FAST
- ISA
- UniProt [Q9ZL11](#)
- KEGG [1.16.3.1](#)

各鎖の説明、他データベースへのリンク、由来生物種など

配列、二次構造、結合部位などの情報

分子数・分子量

キーワード検索 - 実験情報

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

3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of *Helicobacter pylori* ferritin

精密化の統計情報

| | | | |
|-----------------------|---------------|---------|---------|
| 格子定数 [Å] | 128.454 | 128.454 | 165.334 |
| 格子定数 [度] | 90.00 | 90.00 | 90.00 |
| 空間群 | I 4 | | |
| 分解能 [Å] (低 - 高) | 23.61 - 1.50 | | |
| 最も高い分解能シエルの値 | 1.540 - 1.501 | | |
| R因子 | 0.175 | | |
| R-work | 0.17400 | | |
| 最も高い分解能シエルの値 | 0.210 | | |
| R-free | 0.19400 | | |
| 最も高い分解能シエルの値 | 0.240 | | |
| 結合長の平均二乗偏差 (RMSD) [Å] | 0.006 | | |
| 結合角の平均二乗偏差 (RMSD) [度] | 1.191 | | |

回折データの統計情報

| | |
|-----------------|--------------|
| 分解能 [Å] (低 - 高) | 50.00 - 1.50 |
| 最も高い分解能シエルの値 | - |
| 独立反射数 | 208376 |
| Rmerge_obs | 0.088 |
| 最も高い分解能シエルの値 | 0.472 |
| 完全性 [%] | 98.0 |

結晶化条件

| 結晶ID | 方法 | pH | pHの範囲 | 温度 | 単位 |
|------|-------------------------------|-----|-------|-----|----|
| 1 | VAPOR DIFFUSION, HANGING DROP | 7.5 | | 295 | |

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- PDBx/mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF) More...

構造

非対称単位を表示

生物学的単位を表示

他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt Q9ZL11
- KEGG 1.16.3.1
- PFam PF00210

PDBjで独自に追加した情報 (PDBMLadd 由来、値に水色の*を付けた項目) も含まれる

キーワード検索 - 機能情報

3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of *Helicobacter pylori* ferritin

GO (遺伝子オントロジー) 由来の情報

PDデータベースに由来する情報

| site_id | 残基数 | 詳細 |
|---------|-----|------------------------------------|
| AC1 | 7 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE A1006 |
| AC2 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE A1007 |
| AC3 | 7 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE B1006 |
| AC4 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE D1007 |
| AC5 | 6 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE C1006 |
| AC6 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE C1007 |
| AC7 | 6 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE D1006 |
| AC8 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE D1007 |
| AC9 | 6 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE E1006 |
| BC1 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE E1007 |
| BC2 | 6 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE F1006 |
| BC3 | 5 | BINDING SITE FOR RESIDUE FE F1007 |
| BC4 | 7 | BINDING SITE FOR RESIDUE GOL F1008 |
| BC5 | 7 | BINDING SITE FOR RESIDUE GOL B1008 |
| BC6 | 9 | BINDING SITE FOR RESIDUE GOL C1008 |

「HETATM」原子の座標から抽出されたリガンド結合部位

| site_id | 残基数 | 詳細 |
|-----------------|-----|-----------------------|
| GOL_3bvk_F_1008 | 8 | GLYCEROL binding site |
| GOL_3bvk_B_1008 | 8 | GLYCEROL binding site |
| GOL_3bvk_C_1008 | 7 | GLYCEROL binding site |

分子の機能に関する情報 (リガンドなどの結合部位、関係するGene Ontologyの用語、など)

△クリックでパネルが開閉

キーワード検索 - 相同蛋白質

検索

- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)
- PDB詳細検索
- 巨大構造エントリー
- 化合物検索
- BMRB検索
- Sequence-Navigator**
- Structure-Navigator
- EM Navigator
- Omokage検索
- wwPDB/RDF
- SeSAW
- Ligand Binding Sites (GIRAF)
- 最新の公開エントリー

概要 構造情報 実験情報 機能情報 **相同蛋白質**

3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin

Sequence navigator - 3bvk: Chain A,B,C,D,E,F

Copyright © 2013-2015 日本蛋白質構造

似た配列を持つ他のエントリーを検索 (=Sequence Navigator)

クリックで開閉



3BVK

Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin

Sequence navigator - 3bvk: Chain A,B,C,D,E,F

3bvkA 配列-1: 3bvk 2bvk 3bvkC 3bvkD 3bvkE 3bvkF 3bvkG 3bvkH 3bvkI 3bvkJ 3bvkK 3bvkL 3bvkM 3bvkN 3bvkO 3bvkP 3bvkQ 3bvkR 3bvkS 3bvkT 3bvkU 3bvkV 3bvkW 3bvkX 3bvkY 3bvkZ

3bvkA

Sequence Identity: 100%
Sequence Positives: 100%
E-value: 3.95137e-98
Score: 905
Query coverage: 100%
Compound: Ferritin (E.C.1.16.3.1)

3jgmA

Sequence Identity: 100%
Sequence Positives: 100%
E-value: 5.11803e-98
Score: 904
Query coverage: 100%
Compound: Ferritin (E.C.1.16.3.1)

3lrvA

Sequence Identity: 63%
Sequence Positives: 81%
E-value: 1.9991e-50
Score: 580
Query coverage: 97%
Compound: Ferritin

3qz3A

Sequence Identity: 48%
Sequence Positives: 69%
E-value: 1.71479e-42
Score: 425

キーワード検索 - 相同蛋白質

3bvka (クエリ) と 1krqa (テンプレート)の重ね合わせ

赤で示される残基は、NER値が大きく（9以上）、立体構造が良く保存されていることを示します。

3D Viewer (jV) で見る

整列した残基数 = 154

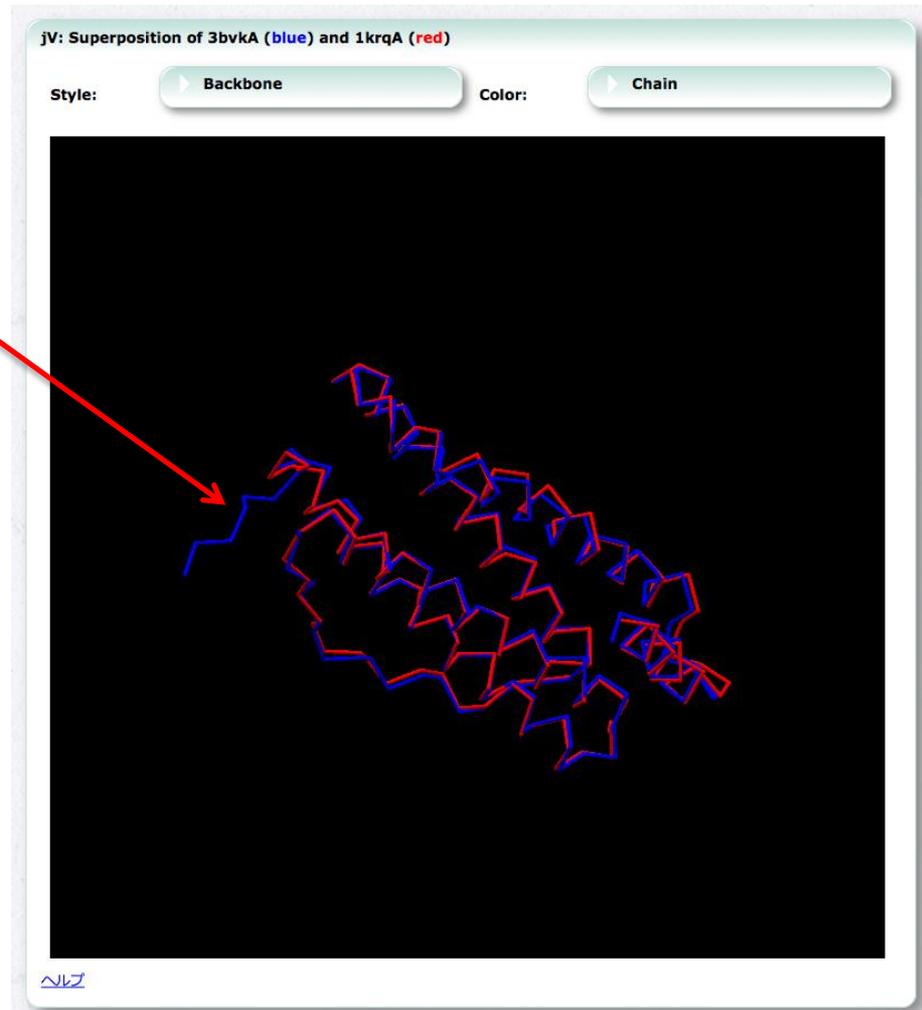
RMSD 重ね合わせ:

CA RMSD = 0.62 [\[PDB File\]](#)

| | |
|----------------|--|
| 3bvka | HHSQDPMLSKDIIKLLNEQV-KEMN-SNLYMSMSSWCYTHSLDGAGLFLFDHAAEEYEHA |
| 3bvka | CCCCCCHHHHHHHHHHHHH HHHH HHHHHHHHHHHHHCHHHHHHHHHHHHHHHHHHH |
| 1krqa | -----MLSKEVVKLLNEQINKEMYAANLYLSMSSWCYENSLDGAGAFLEFAHASEESDHA |
| 1krqa | CCHHH |
| NER Similarity | 000000999889999999999909999099999999999999999999999999999999999999 |
| | |
| 3bvka | KKLIIFLNENNVPVQL--ISAPEHKFEGLTQIF--AYEHEQ-ISESINNIVD-AIKSKDH |
| 3bvka | HHHHHHHHHHCCCCC CCCCCCCHHHHHH HHHHHH HHHHHHHHHH HHHHCHH |
| 1krqa | KKLITYLNETDSHVELQEVKQPEQNFKSLLDVFEKTYEHEQFITKSINTLVEHMLTHKDY |
| 1krqa | HHHHHHHHHHCCCCC CCCCCCCHHHHHH HHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHHH |
| NER Similarity | 99 |
| | |
| 3bvka | ATFNFLQWYVAEQH-EEVLFKDILD-IELIGNENHGLYLADQYVKGIA-SRK |
| 3bvka | HHHHHHHHHHHHHH HHHHHHHHHH HHHHHCCCHHHHHHHHHHHHHHH HHC |
| 1krqa | STFNFTLQWYVSEQHREERATFRGTVDKTKTIGRHGNGLYTADQYTKNTATSR- |

キーワード検索 - 相同蛋白質

構造の異なる箇所



キーワード検索 - download

3BVK
Structural basis for the iron uptake mechanism of Helicobacter pylori ferritin

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDB/mmCIF (no-atom)
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)

構造

非対称単位を表示

生物学的単位を表示

データベース情報

RCSB PDB
PDB
Yorokumi
CAT
EGS
SCOP
VAST
PI-S
UniProt
Q9ZL11
KEGG
1.16.3.1
PFam
PF00210
eF-site
3bv-k-A
3bv-k-ABCDEF
3bv-k-B
3bv-k-C
3bv-k-D
3bv-k-E
3bv-k-F
電子密度マップ (EDM) (V)
電子密度マップ (EDM) (molmil)
wwPDB/RDF

| ファイル形式 | ファイル名 (ファイルサイズ) | 画面表示 |
|----------------|---|------|
| 全ての情報 | pdb3bv-k.ent.gz (380.67 KB) | 画面表示 |
| 全ての情報 (非圧縮) | pdb3bv-k.ent (1.6 MB) | 画面表示 |
| ヘッダのみ | pdb3bv-k.ent.gz (8.1 KB) | 画面表示 |
| PDBx/mmCIF | 3bv-k.cif.gz (459.62 KB) | 画面表示 |
| 全ての情報 | 3bv-k.xml.gz (720.74 KB) | 画面表示 |
| ヘッダのみ | 3bv-k-noatom.xml.gz (47.75 KB) | 画面表示 |
| 座標情報のみ | 3bv-k-xtatom.xml.gz (229.99 KB) | 画面表示 |
| 全ての情報 | 3bv-k-plus.xml.gz (723.18 KB) | 画面表示 |
| ヘッダのみ | 3bv-k-plus-noatom.xml.gz (50.19 KB) | 画面表示 |
| 付加情報のみ | 3bv-k-add.xml.gz (2.44 KB) | 画面表示 |
| RDF | 3bv-k.rdf.gz (22.31 KB) | 画面表示 |
| 構造因子 | 3bv-kf.ent.gz (3.17 MB) | 画面表示 |
| 生物学的単位 (PDB形式) | 3bv-k.pdb1.gz (1.46 MB) (A,F,B,E,C,...) *author and software defined assembly, 24 molecule(s) (24-meric) | 画面表示 |
| PDF | 3bv-k_validation.pdf.gz (239.59 KB) | 画面表示 |
| PDF-full | 3bv-k_full_validation.pdf.gz (243.02 KB) | 画面表示 |
| 検証レポート | XML: 3bv-k_validation.xml.gz (49.39 KB) | 画面表示 |
| | PNG: 3bv-k_multipercentile_validation.png.gz (153.02 KB) | 画面表示 |
| | SVG: 3bv-k_multipercentile_validation.svg.gz (951 B) | 画面表示 |

「ダウンロード」をクリック

PDB format
全/ヘッダのみ

mmCIF

PDBML
全/ヘッダのみ/座標のみ

PDBMLplus
全/ヘッダのみ/座標のみ

RDF

キーワード検索 - download

概要 構造情報 実験情報 機能情報 ダウンロード

1VVJ

Crystal Structure of Frameshift Suppressor tRNA SufA6 bound to Codon CCC-G on the Ribosome

これは巨大構造です。

Resources

| ファイル形式 | ファイル名 (ファイルサイズ) | |
|--------------------------------|---|------|
| PDB Bundle | 1vvi-pdb-bundle.tar.gz (4.95 MB) | |
| PDBx/mmCIF | 1vvi.cif.gz (6.62 MB) | |
| PDBML | 全ての情報 1vvi.xml.gz (10.2 MB) | |
| | ヘッダのみ 1vvi-neatom.xml.gz (1.36 MB) | 画面表示 |
| | 座標情報のみ 1vvi-extatom.xml.gz (5.68 MB) | |
| PDBMLplus | 全ての情報 1vvi-plus.xml.gz (10.21 MB) | |
| | ヘッダのみ 1vvi-plus-neatom.xml.gz (1.37 MB) | 画面表示 |
| | 付加情報のみ 1vvi-add.xml.gz (9.02 KB) | 画面表示 |
| RDF | 1vvi.rdf.gz (1.27 MB) | 画面表示 |
| 構造因子 | r1vvis.ent.gz (7.6 MB) | 画面表示 |
| Biological unit (mmCIF format) | 1vvi-assembly1.cif.gz (3.34 MB) (QA,QB,QC,QD,QE,...) <small>*author defined assembly, 55 molecule(s) (55-meric)</small> | 画面表示 |
| | 1vvi-assembly2.cif.gz (3.36 MB) (XA,XB,XC,XD,XE,...) <small>*author defined assembly, 55 molecule(s) (55-meric)</small> | 画面表示 |
| PDF | 1vvi_validation.pdf.gz (812.02 KB) | 画面表示 |
| PDF-full | 1vvi_full_validation.pdf.gz (2.54 MB) | 画面表示 |
| 検証レポート | 1vvi_validation.xml.gz (836.43 KB) | 画面表示 |
| PNG | 1vvi_multipercentile_validation.png.gz (243.9 KB) | 画面表示 |
| SVG | 1vvi_multipercentile_validation.svg.gz (1.04 KB) | 画面表示 |

巨大構造

(1つの構造が1つのPDBフォーマットで書ききれないような巨大分子)の場合



構造を分割し、複数のPDBファイルで提供 (PDB Bundle)

他のデータベース情報

- RCSB-PDB [↗](#)
- PDBe [↗](#)
- Yorodumi [↗](#)
- CATH [↗](#)
- FSSP [↗](#)
- SCOP [↗](#)
- VAST [↗](#)
- PISA [↗](#)
- UniProt
- P80371 [↗](#)
- P80372 [↗](#)
- P80373 [↗](#)
- Q5SHQ5 [↗](#)
- Q5SLP8 [↗](#)
- P17291 [↗](#)
- Q5SHQ2 [↗](#)
- P80374 [↗](#)
- Q5SHN7 [↗](#)
- P80376 [↗](#)
- Q5SHN3 [↗](#)
- P80377 [↗](#)
- Q5SHQ1 [↗](#)
- Q5S176 [↗](#)
- Q5S1H3 [↗](#)

キーワード検索 - 外部リンク

ctor

PDB形式 (全10の月報)
検証レポート (PDF)
More...

構造

他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- eF-site
- PISA
- wwPDB/RDF
- UniProt
Q9Z0X1
- PFam
PF07992
PF00070
PF14721
- 電子密度マップ (EDM)
(jV)
- 電子密度マップ (EDM)
(molmil)
- Promode Elastic

eus,

このPDBエントリーに関連する他のデータベースへのリンク

万見 (よろづみ) ページへのリンクもあります

Promode Elastic ページへのリンクもあります

演習1

- キーワード「アルコール脱水素酵素」で検索
 - 何件ヒットするか？
 - 公開日が最も古いエントリーは？
 - その公開日は？
 - そのエントリーの論文は何年に発表された？
 - その分子の由来生物種は？
 - そのリガンド結合部位となる残基は？

演習1 解答例

The image shows a two-step process of a search on the PDBj website. On the left, the search bar contains the text 'アルコール脱水素酵素' (Alcohol dehydrogenase). A red circle highlights the search icon, with a blue arrow pointing to the right. On the right, the search results page is shown. The search bar contains the same text, and the search results sidebar on the right shows '全ヒット件数: 314' (Total number of hits: 314), which is highlighted with a red box. A red arrow points from this box to a text box at the bottom of the slide.

314件ヒット
(2015年6月12日現在)

演習1 解答例

▼ 検索結果 ?

全ヒット件数: 314

表示件数: 25

表示順: 関連性が高い順

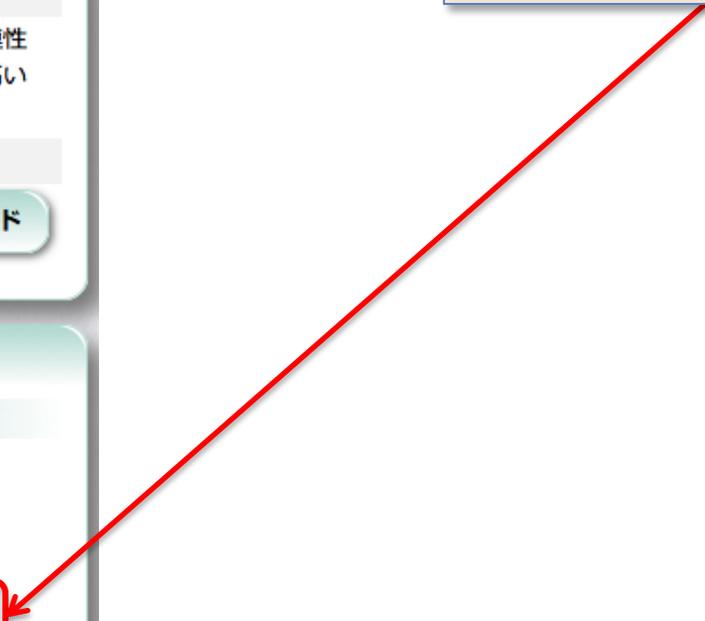
Auto-pager:

結果をダウンロード

▼ 表示順

- 関連性が高い順
- PDBID
- PDBID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
- 分解能

公開日の(古い)順に
並べ替え



演習1 解答例

PDB: 292 件 ウェブページ: 7 件 ステータス検索: 9 件 Ligand search: 1 件

アルコール脱水素酵素

変換クエリ: ("alcohol dehydrogenase" | adh)

5ADH

INTERDOMAIN MOTION IN LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE. STRUCTURAL AND ENERGETIC ANALYSIS OF THE HINGE BENDING MODE

分子名称: APO-LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE (E.C.1.1.1.1) COMPLEX WITH ADP-RIBOSE

著者: Eklund, H., Jones, T.A.

登録日: 1984-01-16

公開日: 1984-07-18

最終更新日: 2011-07-13

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.9 Å)

引用文献: Interdomain motion in liver alcohol dehydrogenase. Structural and energetic analysis of the hinge bending mode. J.Biol.Chem., 261, 1986

5ADHが最も公開日が古いエントリー

公開日: 1984年7月18日

論文発表年: 1986年

検索結果 ?

Auto-pager:

結果をダウンロード

表示順

PDBID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

分解能

< 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 >

演習1 解答例

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

5ADH

INTERDOMAIN MOTION IN LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE. STRUCTURAL AND ENERGETIC ANALYSIS OF THE HINGE BENDING MODE

ダウンロード

- mmCIF
- PDB形式 (全ての情報)
- 検証レポート (PDF)
- More...

由来生物種:
Equus caballus (horse)
(ウマ)

論文発表年: 1986年

5ADH の概要

| | |
|-----------|---|
| 分子名称 | APO-LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE (E.C.1.1.1.1) COMPLEX WITH ADP-RIBOSE |
| 機能のキーワード | OXIDOREDUCTASE (NAD(A)-CHOH(D)) |
| 由来する生物種 | Equus caballus (horse) |
| 細胞内の位置 | Cytoplasm |
| 由来する組織 | Liver |
| ポリマー鎖の合計数 | 1 |
| 分子量の合計 | 40661.88 |
| 著者 | Eklund, H., Jones, T.A. (登録日: 1984-01-16, 公開日: 1984-07-18, 最終更新日: 2011-07-11) |
| 引用文献 | Colonna-Cesari, F., Perahia, D., Karplus, M., Eklund, H., Braden, G.L., Tapia, O. Interdomain motion in liver alcohol dehydrogenase. Structural and energetic analysis of the hinge bending mode. <i>J. Biol. Chem.</i> , 261:15273-15280, 1986 PubMed: 3771574 Import into Mendeley |
| 実験手法 | X-RAY DIFFRACTION (2.9 Å) |

他の静止画像 (非対称単位)

他のデータベース情報

演習1 解答例

[概要](#)
[構造情報](#)
[実験情報](#)
[機能情報](#)
[同蛋白質](#)
[ダウンロード](#)

5ADH

INTERDOMAIN MOTION IN LIVER ALCOHOL DEHYDROGENASE. STRUCTURAL AND ENERGETIC ANALYSIS OF THE HINGE BENDING MODE

GO (遺伝子オントロジー) 由来の情報 ?

PDBデータベースに由来する情報 ?

| site_id | 残基数 | 詳細 |
|---------|-----|------------------------------------|
| AC1 | 4 | BINDING SITE FOR RESIDUE ZN A 375 |
| AC2 | 4 | BINDING SITE FOR RESIDUE ZN A 376 |
| AC3 | 20 | BINDING SITE FOR RESIDUE APR A 377 |
| AC4 | 6 | BINDING SITE FOR RESIDUE MPD A 378 |

「HETATM」原子の座標から抽出されたリガンド結合部位 ?

| site_id | 残基数 | 詳細 |
|----------------|-----|--|
| APR_Sadh_A_377 | 11 | ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE binding site |

| 鎖名 | 残基 | ligand |
|----|---------------|----------------------------------|
| A | ARG47 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | HIS51 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | THR178 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | GLY199-GLY204 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | VAL222-ASN225 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | LYS228 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | PRO243 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | VAL268-ARG271 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | ASP273-THR274 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | VAL292-PRO295 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |
| A | ARG369 | APR: ADENOSINE-5-DIPHOSPHORIBOSE |

MPD_Sadh_A_378 7 (4S)-2-METHYL-2,4-PENTANEDIOL binding site

UniProtにおけるモチーフ・データベースPROSITEからの機能情報 ?

| site_id | 残基数 | 詳細 |
|---------|-----|----|
|---------|-----|----|

5ADHの機能情報ページ

ATPの結合部位はA鎖のARG47、HIS51など

1. 自己紹介

2. PDBj Mineによる検索

1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
2. 詳細検索・演習
3. SQL検索
4. その他 (RESTサービス、化合物検索)

より凝った検索 - 詳細検索

103557
件が利用できます (2014-09-24
00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

PDBjウェブ全体 PDBID/キーワード 著者 化合物 配列 ?

pdbj.org 全体を検索

wwPDB RCSB PDB PDBe BMRB Legacy

▼ 検索

ヘルプ

PDB検索 (PDBj-Mine)

PDB詳細検索

巨大構造エントリー

化合物検索

BMRB検索

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

EM Navigator

Omokage検索

wwPDB/RDF

SeSAW

Ligand Binding Sites (GIRAF)

最新の公開エントリー

未公開エントリーのステータス

Mine: 詳細条件検索

PDBID:

キーワード:

タイトル:

公開日:

以降: - -

以前: - -

登録日:

以降: - -

以前: - -

文献著者: 引用文献

Copyright © 2013-2014 日本蛋白質構造データバンク

▼ 詳細条件を選択して下さい

全て

PDBID

キーワード

タイトル

公開日

登録日

最終更新日

文献著者

論文題名

雑誌名

発行年

巻番号

含まれるポリマー鎖の種類

化合物情報

外部データベース

リガンドと補欠分子族

ポリマー鎖の数

ポリマー鎖の長さ

実験手法

分解能

由来する生物種

宿主生物種

▼ ホーム

トップページ

統計情報

ヘルプ

FAQ

お問い合わせ

より凝った検索 - 詳細検索

Mine: 詳細条件検索
?

PDBID:

キーワード:

タイトル:

公開日: 以降: - -

以前: - -

登録日: 以降: - -

以前: - -

文献著者:

分解能: -

▼ 詳細条件を選択して下さい

全て

- PDBID**
- キーワード
- タイトル
- 公開日
- 登録日
- 最終更新日
- 文献著者
- 論文題名
- 雑誌名
- 発行年
- 巻番号
- 引用文献
- 含まれるポリマー鎖の種類
- 分子名称
- 外部データベース
- リガンドと補欠分子族
- ポリマー鎖の数
- ポリマー鎖の長さ
- 実験手法
- 分解能**
- 由来する生物種
- 宿主生物種

クリックで項目の表示を
ON/OFF

演習2

- 以下の条件で検索
 - キーワード「リボソーム」
 - 由来生物種に「ヒト」を含む
 - L体ペプチド鎖とRNA鎖の両方を含む
 - 2010年以降に公開
- ヒット数は？
- どんな鎖で構成されているか？

1. 自己紹介

2. PDBj Mineによる検索

1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
2. 詳細検索・演習
3. SQL検索
4. その他 (RESTサービス、化合物検索)

もっと凝った検索 - SQL検索

The screenshot shows the PDBj Mine website interface. On the left is a navigation menu with categories: ホーム (Home), データ登録 (Data Registration), 検索 (Search), サービス&ソフトウェア (Services & Software), 二次データベース (Secondary Databases), 教材 (Materials), and PDBjについて (About PDBj). The '検索' (Search) category is expanded, and 'Search PDB (PDBj Mine)' is highlighted with a red box. The main content area is titled 'PDBj Mine (PDBエントリの検索)' and contains several search sections: '最新情報の検索' (Search for latest information) with buttons for '新規公開されたエントリ' (Newly published entries) and '更新されたエントリ' (Updated entries); '更新/廃止された情報の検索' (Search for updated/removed information) with buttons for '最新の更新/廃止されたエントリ' (Latest updated/removed entries) and '全ての更新/廃止されたエントリ' (All updated/removed entries); '巨大構造エントリ検索' (Search for large structure entries) with a button for 'すべての巨大構造エントリ' (All large structure entries); and 'XPath Search' with a search box and buttons for 'XPathを作成する' (Create XPath), '検索する' (Search), and 'リセット' (Reset). Below these is the 'SQL Search' section, which is highlighted with a red border. It has a search box and buttons for '検索する' (Search) and 'リセット' (Reset). A red arrow points from a text box to the 'SQL Search' link.

「SQL Search」をクリック
→クエリ事例

もっと凝った検索 - SQL検索

SQL Search ?

検索クエリを入力してください: 検索

```
SELECT DISTINCT e1.entity_id,
e2.asym_id AS label_asym_id,
e2.pdb_strand_id AS auth_asym_id FROM entity_poly e1
LEFT JOIN pdbx_poly_seq_scheme e2 ON e1.pdbid=e2.pdbid
AND e1.entity_id=e2.entity_id
WHERE e1.pdbid='1a14'
ORDER BY e1.entity_id ASC
```

Total number of results: 3

entity_id:
1

label_asym_id:
A

auth_asym_id:
N

entity_id:
2

label_asym_id:
B

auth_asym_id:
H

entity_id:
3

label_asym_id:
C

auth_asym_id:
L

例:

PDBID 1a14 に含まれる各ポリマー鎖のIDについて下記3つの対応情報を得る

- entity_id (鎖、分子ごとの識別ID)
- label_asym_id (PDBで系統的に定義したChainID)
- auth_asym_id (構造登録者が定義したChainID)

1. 自己紹介

2. PDBj Mineによる検索

1. キーワード検索と各結果ページの紹介・演習
2. 詳細検索・演習
3. SQL検索
4. その他 (RESTサービス、化合物検索)

URLで直接情報取得 - RESTサービス

- URL中で欲しい内容や結果取得フォーマットを指定することができる
- ブラウザのアドレス欄に入力して利用できる他、curlコマンドなどを使ってプログラム/スクリプトで情報を取得できる
- 詳しくは下記ページを参照下さい
<http://pdbj.org/help/rest-interface>

検索サービス > PDBj Menu > RESTインタフェース

PDBjの新しいウェブインタフェースでは様々なサービスでRESTインタフェースを利用することができます。このRESTインタフェースは[英語](#)と[日本語](#)の下、誰でも利用できます。[詳細](#)も合わせてご参照下さい。

PDBjのRESTサービスは /rest/ 以下URLで利用できます。

各種検索

| | |
|-----|--|
| URL | http://pdbj.org/rest/quick_search |
| 入力 | <ul style="list-style-type: none"> • query: 検索クエリ (文字列、必須) • fields: 検索対象フィールド (文字列、任意、指定しない場合は全フィールドが検索対象) |
| 返り値 | 各フィールド (カテゴリ) ごとの結果一覧 (json形式) |
| 備考 | PDBjの全データベースから代表的な項目 (ID、タイトルなど) を取り出した簡易データベースに対する検索 (簡易検索) を行います。 |
| URL | http://pdbj.org/rest/webSearch |
| 入力 | <ul style="list-style-type: none"> • query: 検索クエリ (文字列、必須) • limit: 取得結果数の上限 (自然数、任意) • offset: 取得開始位置の指定 (自然数、任意、limitと組み合わせて利用) • sortBy: 並び替え方法 (1~8の自然数、任意、指定がない場合は以下の通り、1: ヒットスコア、2: PDBIDの昇順、3: PDBIDの降順、4: 登録日の古い順、5: 登録日の新しい順、6: 公開日の古い順、7: 公開日の新しい順、8: 任意順の順、9) • lang: 言語の指定 (文字列、任意、指定がない場合は既定値は [lang=en] (英語)、ja (日本語) を指定した場合に限り、日本語を英語に翻訳したキーワードも併せて検索される) • format: 返り値の形式を指定 (指定できる値はjson、csv、tsv、jsonpのいずれか一つ、任意、指定がない場合は既定値は [format=json]、jsonp(json形式のAPIを返すことを意味する、その他は既定形式の文字列を返す)) |
| 返り値 | 指定形式で書かれたメタデータ (結果数など) と結果一覧 (検索limitの指定がある場合のみ) |
| 備考 | PDBj Menuの簡易検索に相当 |
| URL | http://pdbj.org/rest/ligandSearch |
| 入力 | <ul style="list-style-type: none"> • query: 検索クエリ (文字列、必須) • limit: 取得結果数の上限 (自然数、任意) • offset: 取得開始位置の指定 (自然数、任意) • sortBy: 取得開始位置の指定 (自然数、任意、limitと組み合わせて利用) |

URLで直接情報取得 - RESTサービス

例:PDBID 3bvkのデータをmmCIF形式でダウンロード
<http://pd bj.org/rest/downloadPDBfile?id=3bvk&format=mmcif>

化合物検索

いずれかのPDBエントリーに登場する分子およびポリマー構成要素(アミノ酸・ヌクレオチド・単糖)



wwPDBで全て3文字以内のコードを定義
(例:ATP、G39=オセルタミビル)

PDBエントリーのデータにも座標情報などが含まれているが、化合物単独の情報(代表的な構造)も別途用意している。

化合物検索

例: ATP

The screenshot shows the PDBj website interface. At the top, there are language options: English, 日本語, 简体中文, 繁體中文, and 한국어. Below this is a search bar with a dropdown menu showing 'ATP' and 'Related queries and links'. The search results are categorized into 'PDB keywords' and 'PDB Ligands'. Under 'PDB keywords', there are links for 'atpa', 'atpase', and 'atpases'. Under 'PDB Ligands', there is a link for 'ATP'. The 'ATP' link is highlighted with a red box. To the right of the search results, there is a section titled '今月の分子' (Molecule of the Month) featuring a 3D molecular model of a protein structure. The sidebar on the left contains navigation links such as 'ホーム', 'データ登録', and 'ダウンロード'. The top left corner displays '109457' items available as of 2015-06-10.

化合物検索

Summary
Geometry
Related PDB entries

ATP

Summary

Name: ADENOSINE-5'-TRIPHOSPHATE
Formula: C10 H16 N5 O13 P3
Formal charge: 0
Molecular weight: 507.181 Da
Component type: NON-POLYMER

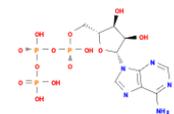
Chemical Identifiers

| Program | Version | Name |
|--------------------|---------|---|
| ACDLabs | 10.04 | adenosine 5'-(tetrahydrogen triphosphate) |
| OpenEye OEToolkits | 1.5.0 | [[[(2R,3S,4R,5R)-5-(6-aminopurin-9-yl)-3,4-dihydroxy-oxolan-2-yl]methoxy-hydroxy-phosphoryl] phosphono hydrogen phosphate |

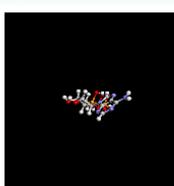
Chemical Descriptors

| Type | Program | Version | Descriptor |
|------------------|--------------------|---------|---|
| SMILES | ACDLabs | 10.04 | <chem>O=P(O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)OCC3OC(n2cnc1c(ncnc12)N)C(O)C3O</chem> |
| SMILES_CANONICAL | CACTVS | 3.341 | <chem>Nc1ncnc2n(cnc12)[C@@H]3O[C@H](CO[P@](O)(=O)O[P@@](O)(=O)O[P](O)(O)=O)[C@@H](O)[C@H]3O</chem> |
| SMILES | CACTVS | 3.341 | <chem>Nc1ncnc2n(cnc12)[CH]3O[CH](CO[P](O)(=O)O[P](O)(=O)O[P](O)(O)=O)[CH](O)[CH]3O</chem> |
| SMILES_CANONICAL | OpenEye OEToolkits | 1.5.0 | <chem>c1nc(c2c(n1)n(cn2)[C@@H]3[C@@H]([C@@H]([C@@H](O3)CO[P@@](=O)(O)O[P@@](=O)(O)OP(=O)(O)O)O)N</chem> |
| SMILES | OpenEye OEToolkits | 1.5.0 | <chem>c1nc(c2c(n1)n(cn2)C3C(C(C(O3)COP(=O)(O)OP(=O)(O)OP(=O)(O)O)O)N</chem> |
| InChI | InChI | 1.03 | <chem>InChI=1S/C10H16N5O13P3/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(17)6(16)4(26-10)1-25-30(21,22)28-31(23,24)27-29(18,19)20/h2-4,6-7,10,16-17H,1H2,(H,21,22)(H,23,24)(H2,11,12,13)(H2,18,19,20)/t4-,6-,7-,10-/m1/s1</chem> |
| InChIKey | InChI | 1.03 | ZKHQWZAMYRWXGA-KQYNXXCUSA-N |
| SMILES | Open Babel | 2.3.2 | <chem>P(=O)(O)O[P@@](=O)(O)O[P@](=O)OC[C@H]1O[C@H]([C@@H]([C@@H]1O)O)n1cnc2c(N)ncnc12</chem> |
| SMILES_CANONICAL | Open Babel | 2.3.2 | <chem>O[C@@H]1[C@@H]([C@@H]([C@@H]([C@@H](O1)O)O)O)O[C@@H]([C@@H]1O)n1cnc2c1ncnc2N</chem> |
| InChI | Open Babel | 2.3.2 | <chem>InChI=1S/C10H16N5O13P3/c11-8-5-9(13-2-12-8)15(3-14-5)10-7(17)6(16)4(26-10)1-25-30(21,22)28-31(23,24)27-29(18,19)20/h2-4,6-7,10,16-17H,1H2,(H,21,22)(H,23,24)(H2,11,12,13)(H2,18,19,20)/t4-,6-,7-,10-/m1/s1</chem> |

2D representation



3D interactive representation



[molで表示](#)

Entry information

Release date: 1999-07-08
Modification date: 2011-06-04
Release status: REL
Processing member: EBI

External information

[PDBChem](#) [Chem.Comp](#) [Yorodumi](#) [chem.comp/RDF](#) [LigandBox](#)