

ウェブブラウザと分子構造ビューアで 生体分子の立体構造を見る

PDBj講習会

2015-02-20 大阪大学蛋白質研究所

鈴木博文

PDBj / 大阪大学蛋白質研究所

- ウェブブラウザの確認
FirefoxかChromeが望ましい
- Java実行環境のインストール（可能であれば）
万見で利用
（Javaがないと、動作が遅い）
- UCSF-Chimeraのインストール
Chimeraは非営利的な利用のみフリー

- 生体分子の「3次元構造を眺めること」を体験
 1. 「万見（Yorodumi）」で基本的な構造観察
 2. UCSF-Chimeraを使って、少し高度な構造観察
- 知識取得・情報収集ではなく、構造を見て操作する体験
- インフルエンザウイルス由来のノイラミニダーゼを主題とする
- 想定する聴衆：生体分子構造研究の経験がない、少ない人

※ 講習会では時間の都合で、この資料のすべてを実施できない可能性があります。ご了承ください。

鈴木博文

- 蛋白質研究所 PDBj のスタッフ
- 以前は、電子顕微鏡による構造解析をやっていた
- 現在は電子顕微鏡構造のデータベースに関する仕事
(電子顕微鏡による構造生物学としてはマイナーな存在)
- X線結晶学、ウイルス学、薬学は専門ではない
- 万見の開発・管理者
- UCSF-Chimeraのヘビーユーザー
(以前の仕事でも、データベースの仕事でも)

実習 1:

**タミフルの働きを見してみる
（「万見」を使ってみる）**

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」を検索し、Wikipediaの「オセルタミビル」のページから、以下の情報を得た

- 成分の名称は「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

→ タンパク質ならPDBということで・・・

手順：

- PDBjのページ (<http://pdbj.org/>) で「オセルタミビル」を検索（入力ボックスにカタカナで入力）

→PDBに42件、ウェブページに1件のヒット

- まずは、「ウェブページ」タブの「113: インフルエンザ ノイラミニダーゼ・・・」項目をクリック

→「今月の分子」のページへ



「オセルタミビル」と入力

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

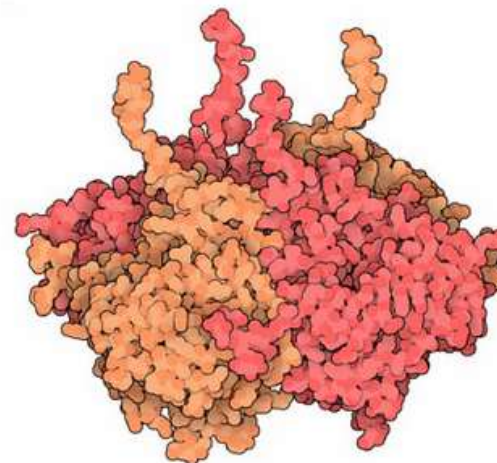
このページはRCSB の David S. Goodsell博士による「[Molecule of the Month](#)」2009年5月の記事を日本語に訳したものです。転載・引用については[利用規約](#)をご覧ください。



[「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](#)

: 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。



読んで得た情報：

- ノイラミニダーゼは「糖鎖の末端を切断する」タンパク質
「ウイルスが細胞から離れるときに」「細胞表面に引っかかってしまわないように」
- オセルタミビルはその邪魔をする
- 4サブユニットからなる

手順：

- ブラウザの戻るボタンで検索結果ページに戻る
- 3cl0をクリック
→3cl0の概要ページが表示される



検索結果

チェック：

- 由来：A型インフルエンザウイルス由来
- N1型のノイラミニダーゼ

手順：（万見を開く）

- ページ右下の「他のデータベース」ボックスの中の3つ目「Yorodumi」をクリック



3cl0の概要

他のデータベース情報

RCSB-PDB [RCSB-PDB](#)
PDBe [PDBe](#)
Yorodumi [Yorodumi](#)
CATH [CATH](#)
ESSD [ESSD](#)

ページ右下の
ボックス



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 他のデータ

タイトル N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir
Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)
由来: Influenza A virus

登録構造 : 結晶学的非対称単位, ポリマー数:1
Omokage検索

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 Omokage検索

マウス操作で
自由な方向に向けられる (マウスホイールで拡大縮小)

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。」

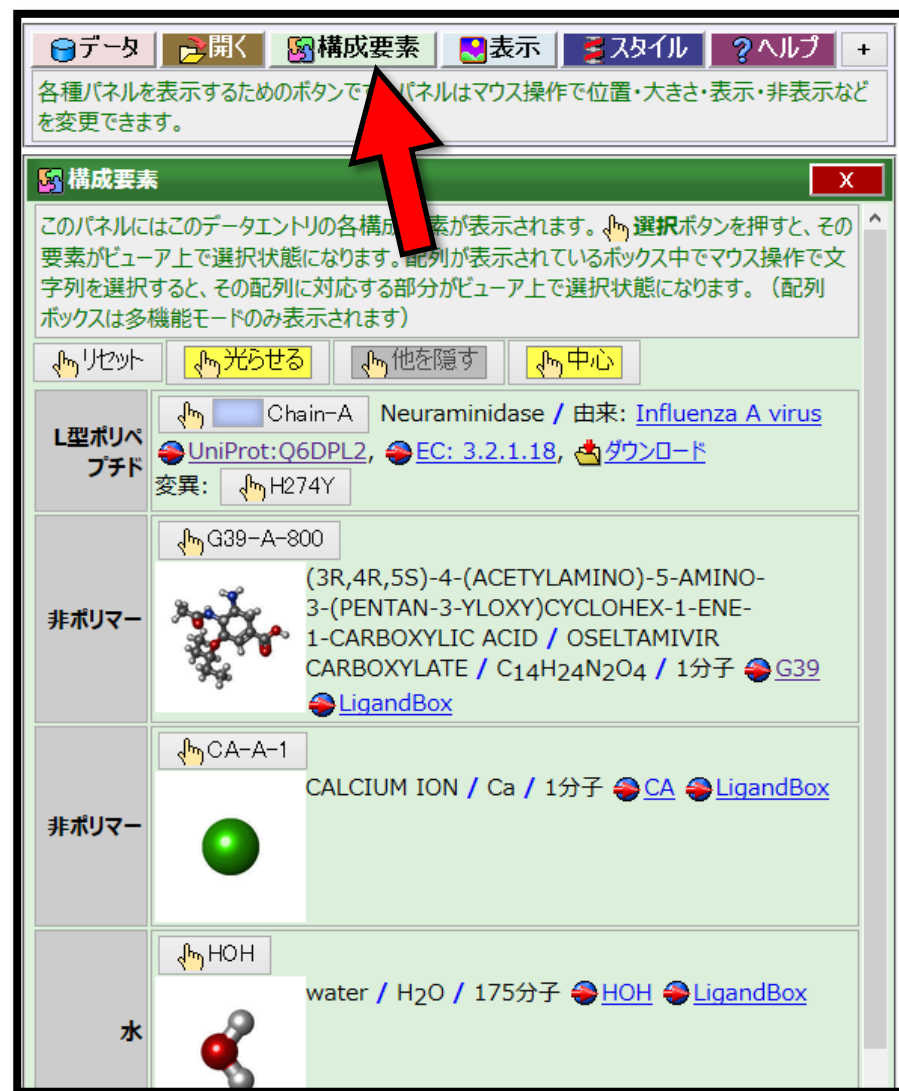
手順：

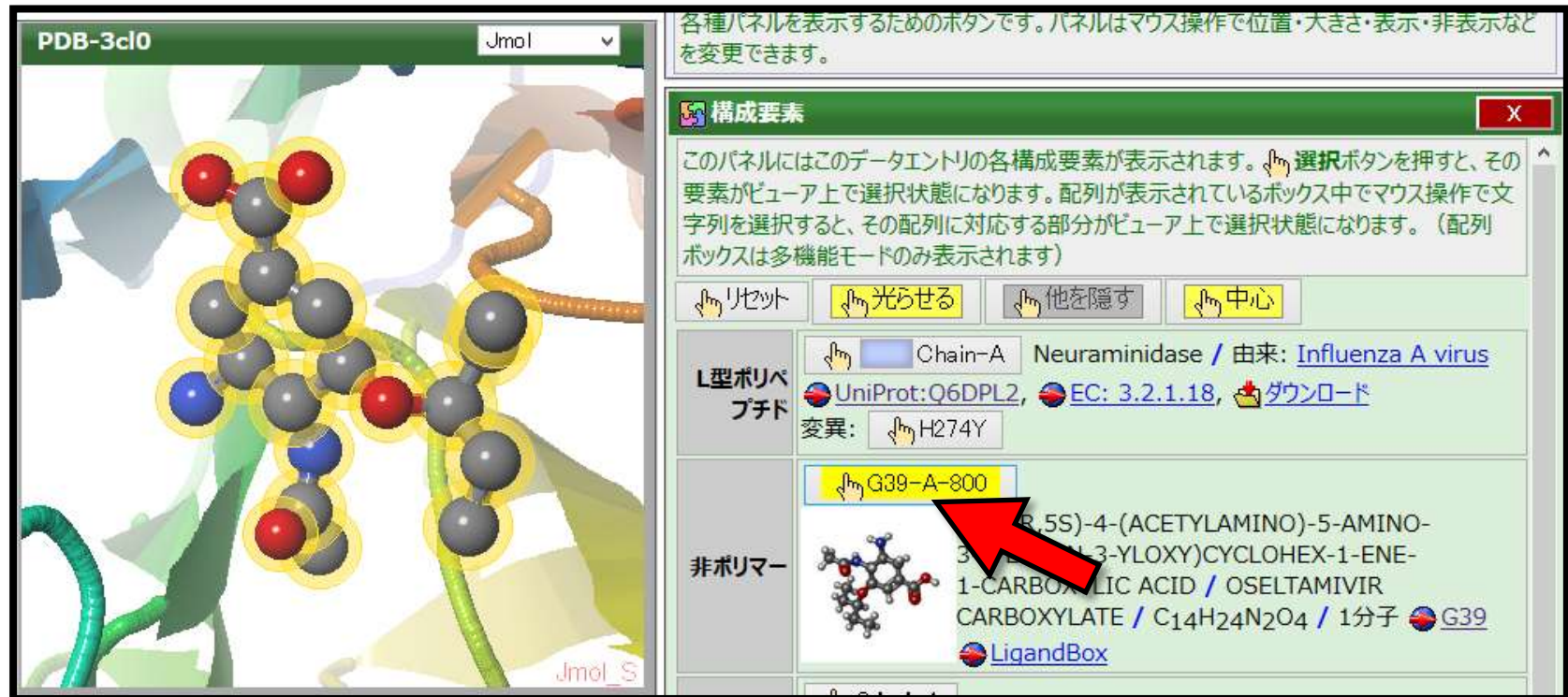
- 右上パネルの「構成要素」ボタンをクリック

→構成要素パネルが開く

チェック：

- 構成要素は4種類
 - ノイラミニダーゼ
 - G39 (これがオセルタミビル)
 - カルシウムイオン
 - 水





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 中心

L型ポリペプチド Chain-A Neuraminidase / 由来: [Influenza A virus](#)
[UniProt:Q6DPL2](#), [EC: 3.2.1.18](#), [ダウンロード](#)
変異: [H274Y](#)

非ポリマー **G39-A-800**

3-(4-AMINO-5-((3-METHOXY-4-(ACETYLAMINO)-5-AMINO-3-PHENYLOXY)CYCLOHEX-1-ENE-1-CARBOXYLIC ACID / OSELTAMIVIR CARBOXYLATE / C₁₄H₂₄N₂O₄ / 1分子 [G39](#)
[LigandBox](#)

[G39-A-800]ボタンを押すと、左のパネルの中でオセルタミビルが
選択され光る
マウスで見やすい方向に向ける

- G39は、このオセルタミビルの化合物ID (PDBによる管理ID)
- A-800は、チェーンAの残基800という意味

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

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... 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

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-3cl0 他のデータ

タイトル N1 Neuraminidase H274Y + oseltamivir
Neuraminidase (E.C.3.2.1.18)
由来: Influenza A virus

登録構造 : 結晶学的非対称単位, ポリマー数: 1

Omokage検索

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 Omokage検索

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]ボタンを押すと、「生物学的単位」が見られる

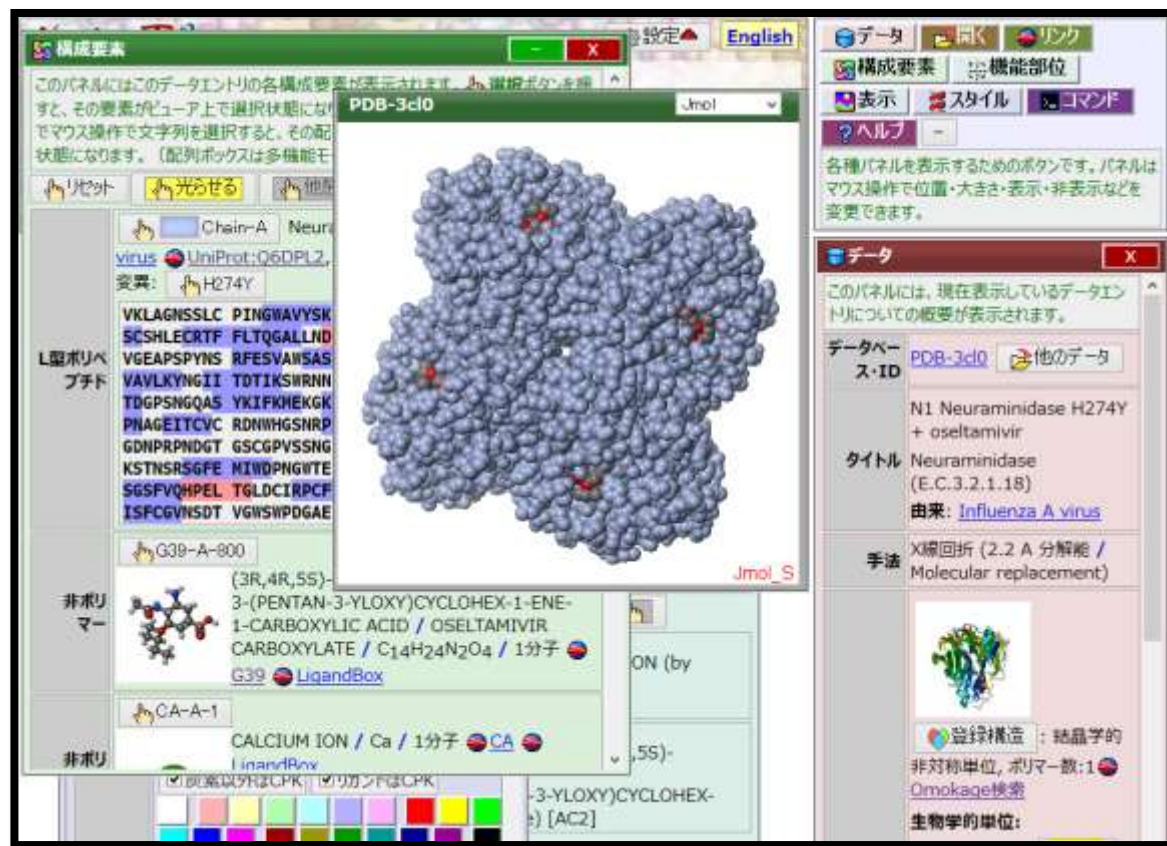
標準では、リボンモデル（カートゥーンリボンモデル）という模式的なモデルで表示される

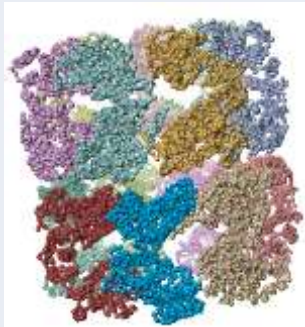
右上の「スタイル」ボタンをクリックすると「スタイル」パネルが現れる
ボタンを押すと、それぞれの表示スタイルに切り替わる

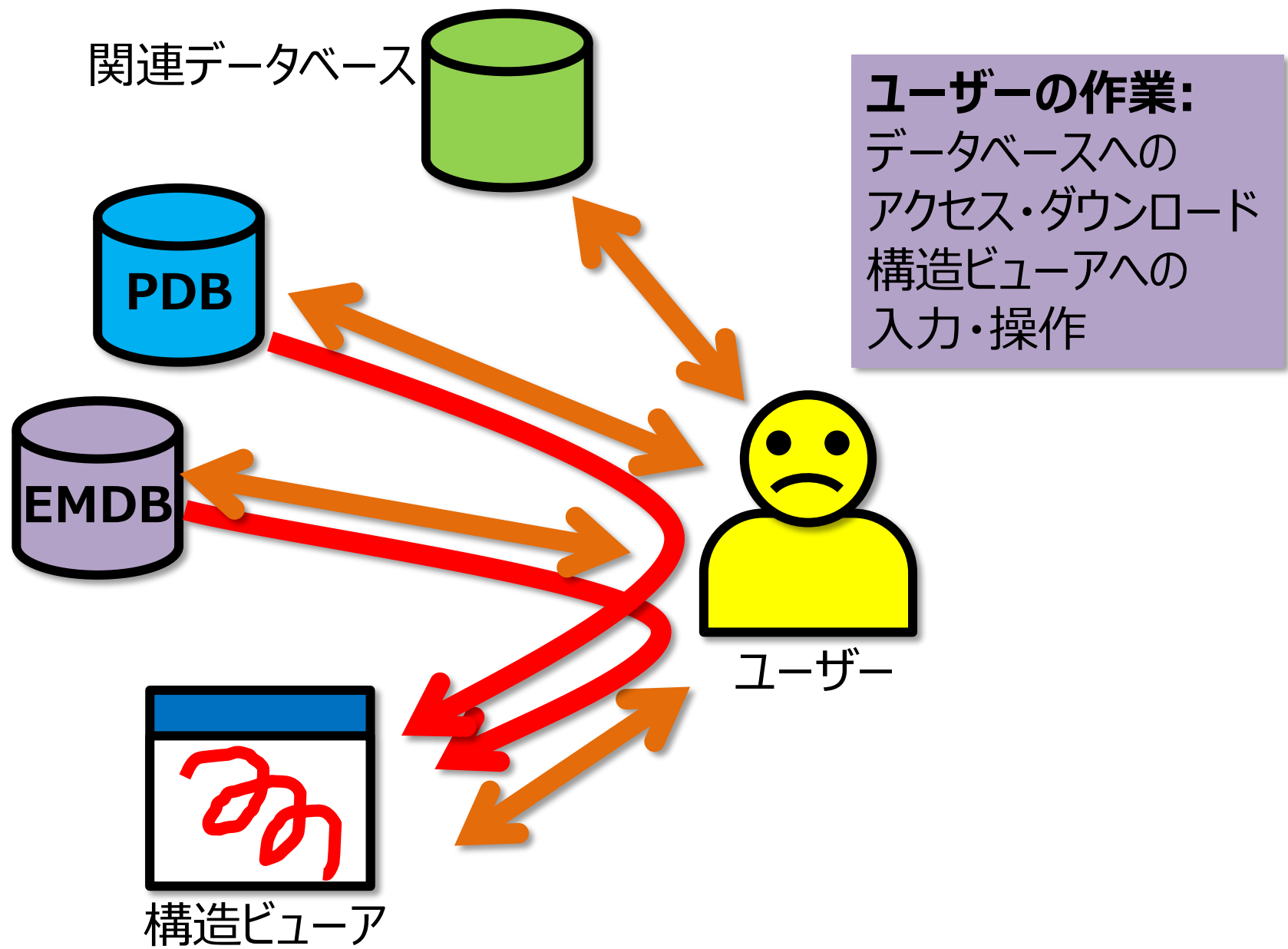
解説 1 :

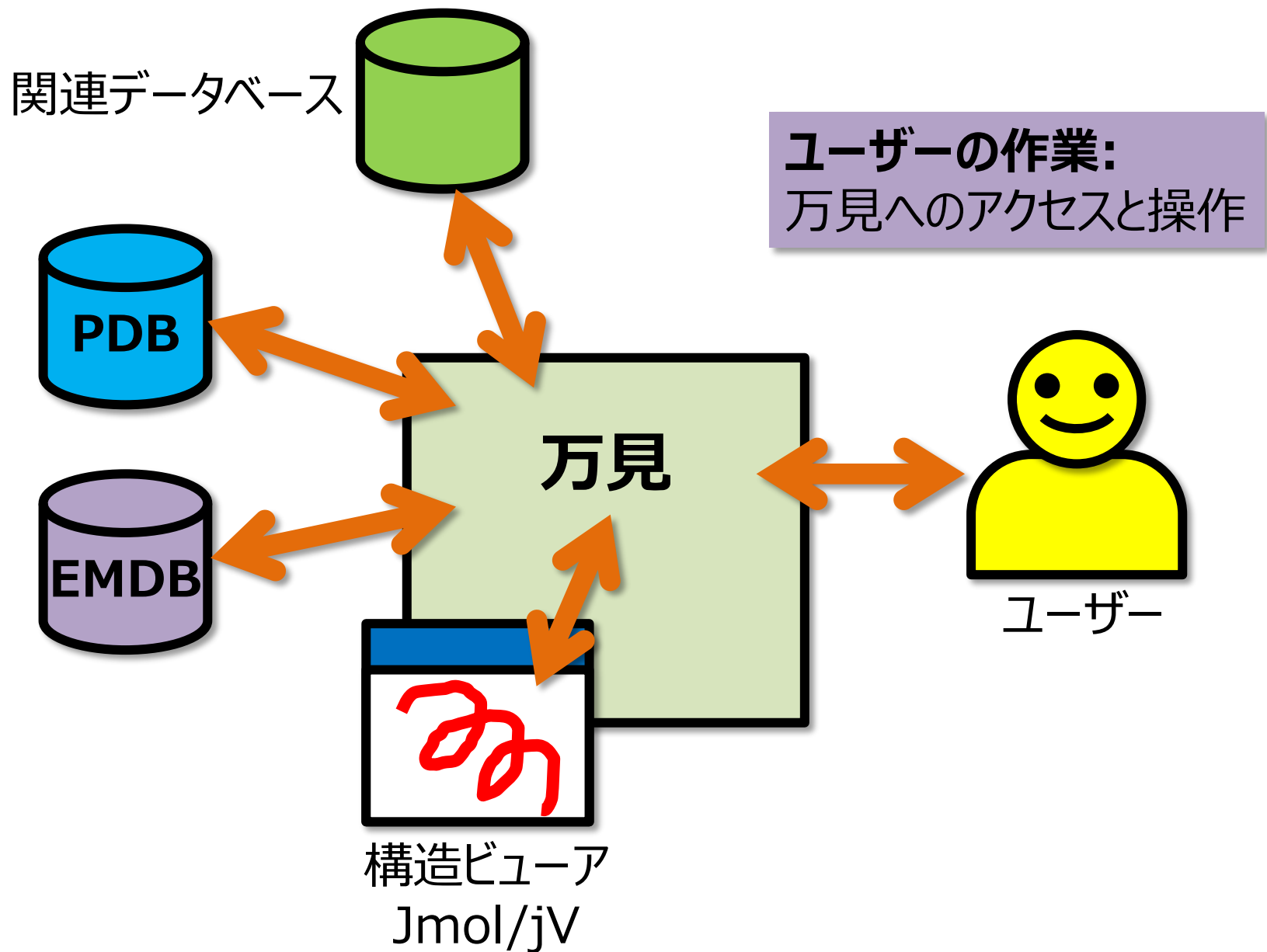
「万見」とは？

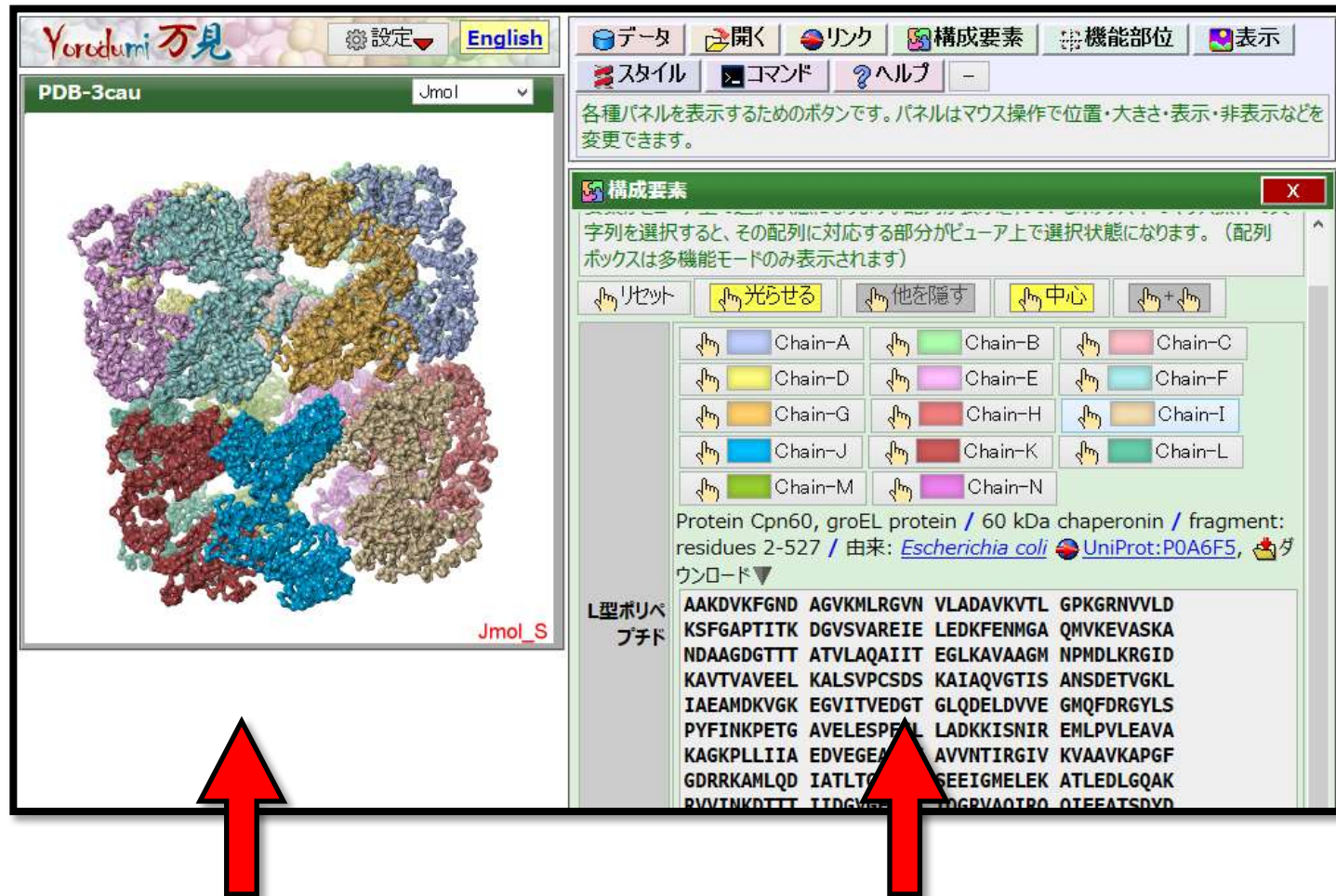
- 「3次元構造を見る」ことを主題としたウェブサイト
- 複雑な構造やそのデータの意味を、簡単な操作でわかりやすく、見たり知ったりできるページを目指した
- PDBとEMDBのほとんどの構造を見られる



	PDB (Protein Data Bank)	EMDB (Electron Microscopy Databank)
解析手法	種々の手法（主にX線結晶学）	3次元電子顕微鏡
主データ	原子モデル	3次元マップ
特徴	結晶化しやすいものが中心 →部分構造が多い	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
万見での表示例	   3cau 重ねあわせ 5001	







構造ビューア :

- Jmol/JSmol
- jV(機能は限定的)

付随情報 :

- 構造データに付随する情報
- スタイルの変更など

“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



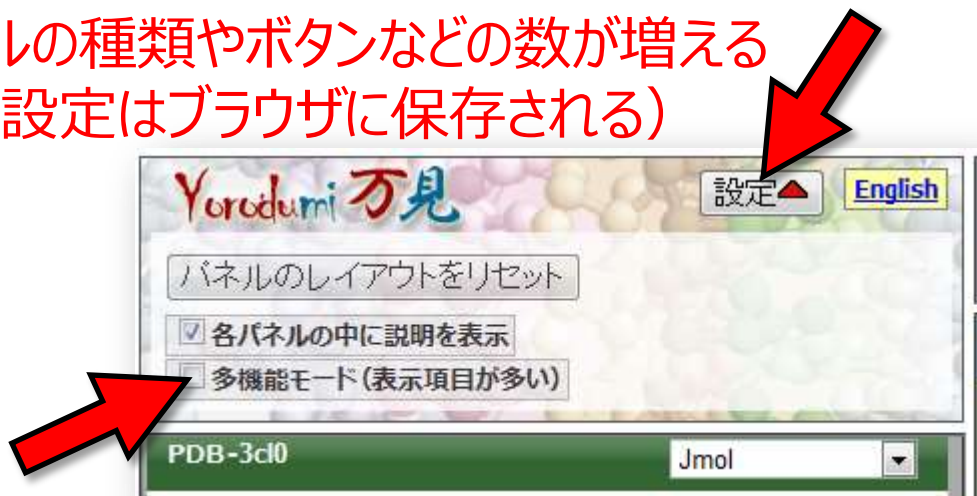
URL <http://pdbj.org/yorodumi/>

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

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、「原子」行、「棒」ボタンを押す

→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

（断面スライダーはツマミが2個、それぞれ手前と奥の断面の位置）

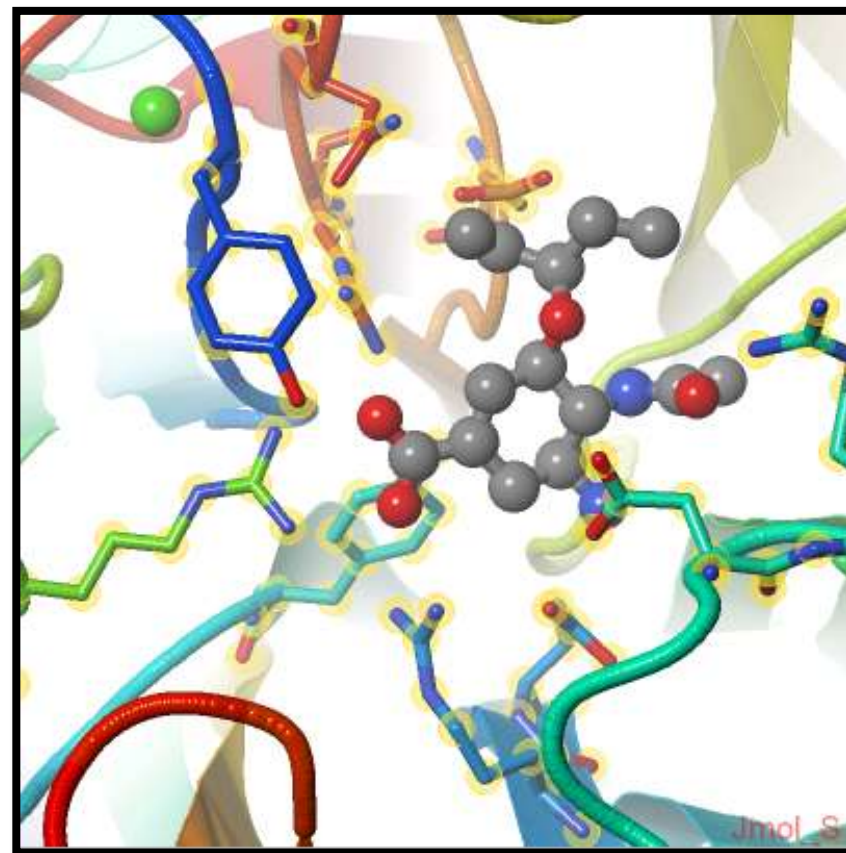


構造ビューアの基本

多くの分子構造ビューアでは、「選択」→「操作」が主な作業のパターン

ワードプロセッサで文字列を選択し、太字にしたりする操作と似ている

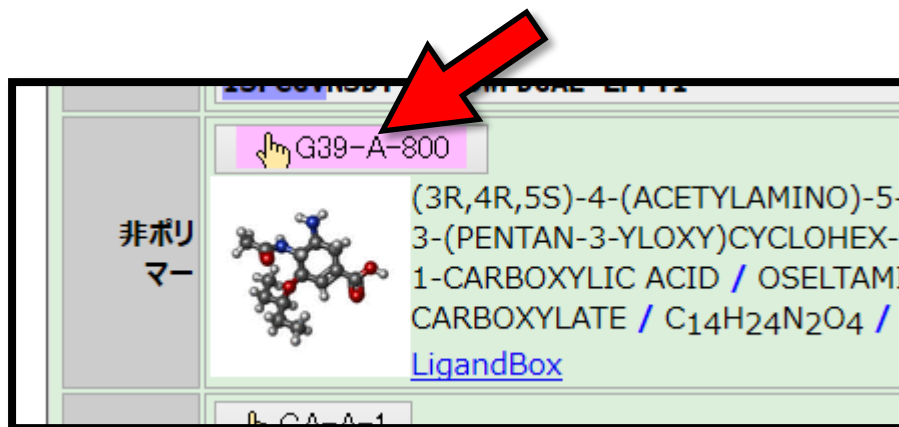
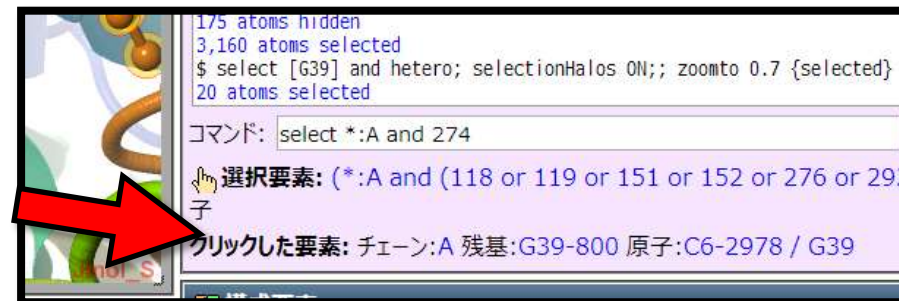
万見ではアイコンで、「選択」のツールと状態を表現している



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



手順:

- 「構成要素」パネルの「L型ポリペプチド」列の変異: [H247Y]というボタンを押す

→変異残基が選択される

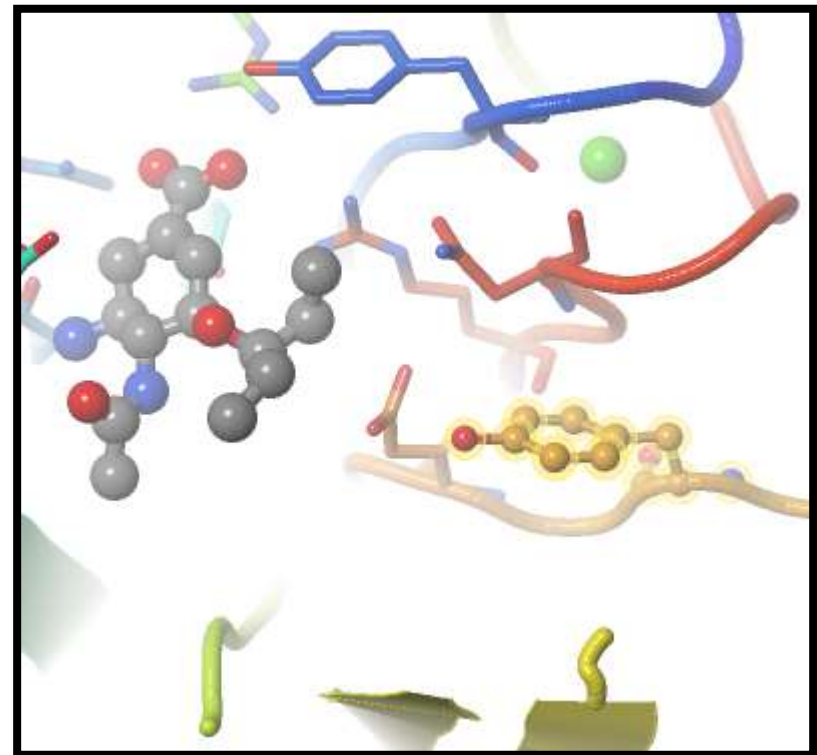
変異は His274 → Tyr

実はタミフル耐性の変異タンパク質

- 「スタイル」パネル、「原子」行、「球と棒」ボタンを押す

→スタイルが変更される

(オセルタミビルと直接相互作用しているとはいにくい位置にあることがわかる)





The screenshot shows the Jmol software interface. On the left, a 3D molecular model of a protein surface is displayed, with a small molecule (ligand) bound in a pocket. The surface is colored in shades of red, blue, and white. On the right, the 'Style' panel is open, showing various options for displaying the model. A red arrow points to the 'chain-A' checkbox in the 'eF-site surface model' section, which is currently checked. The 'Style' panel also includes tabs for '原子モデル' (Atom Model) and '表面モデル' (Surface Model), and a '表示' (Display) section at the bottom.

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

- 「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

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

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-(acetylamino)-5-amino-3-(pentan-carboxylic acid
 タイプ: non-polymer (HETAD)
 Synonym: Oseltamivir carboxylate

ChemComp-G39

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

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

[リセット](#) [先らせる](#) [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-ETHYLPROPOXY)-1-CYCLOHEXENE-1-CARBOXYLIC ACID
 TERN N9 INFLUENZA VIRUS NEURAMINIDASE
 NEURAMINIDASE, 5-N-ACETYL-3-(1-ETHYLPROPYL)-1-CARBOXYLIC ACID

[G39 #1](#)

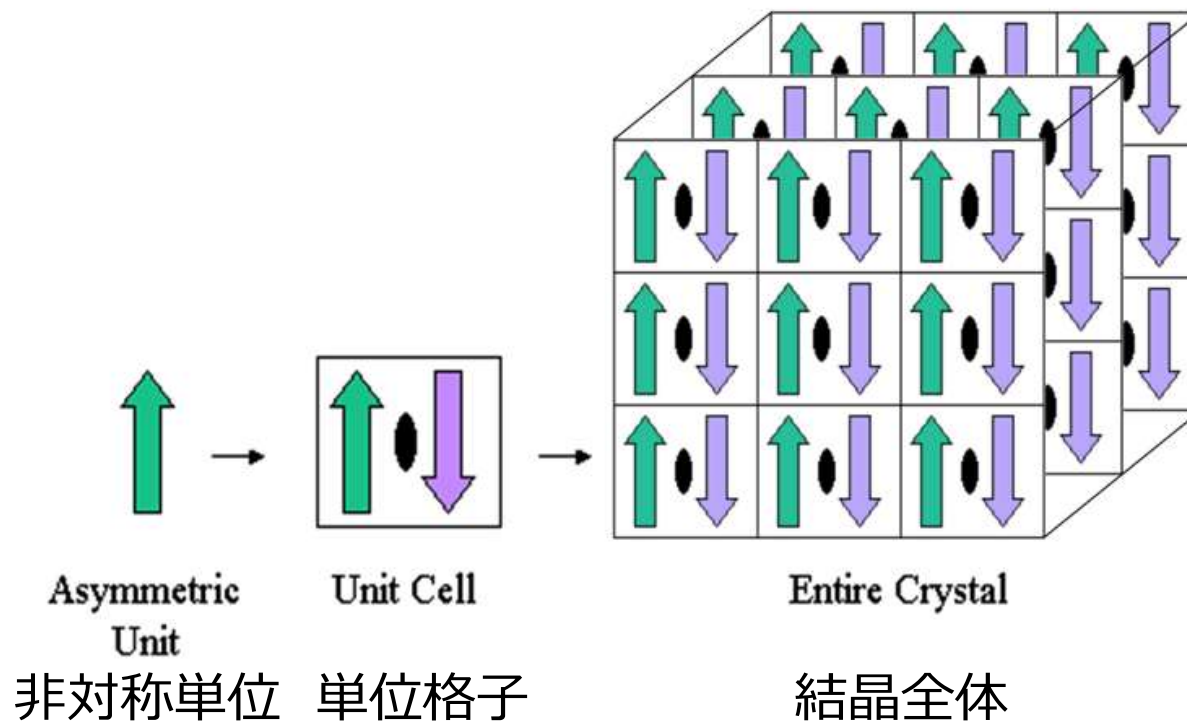
データ

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。

解説 2 :

「非対称単位」と「生物学的単位」

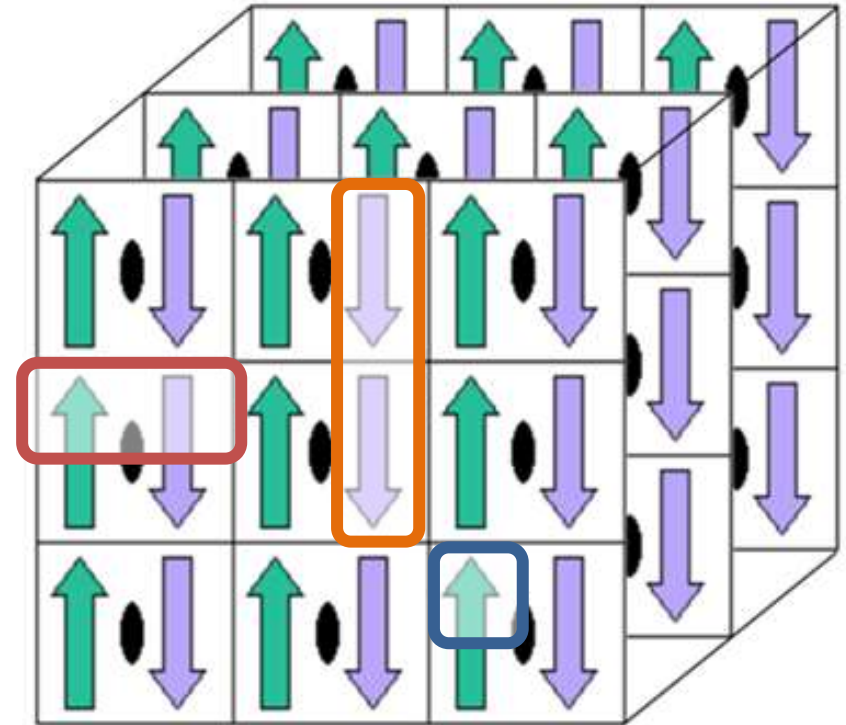
PDBに登録されているデータのほとんどは**結晶構造**
結晶構造は、**非対称単位 (Asymmetric unit)** が登録されている

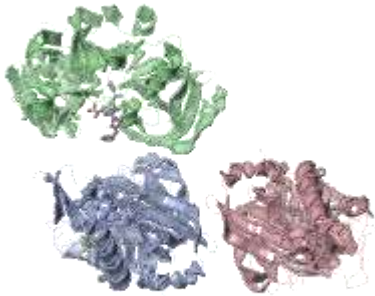
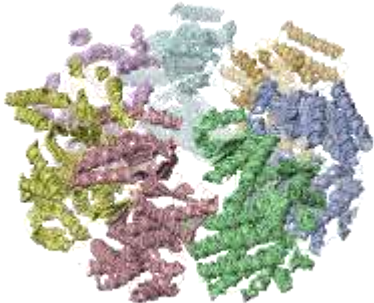
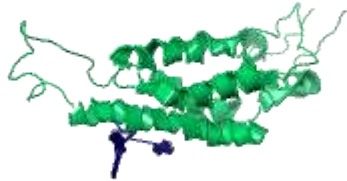
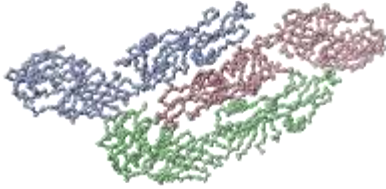
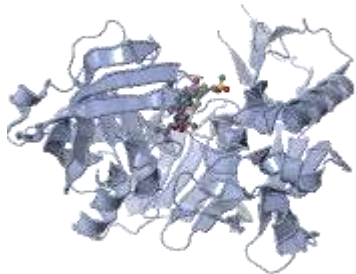
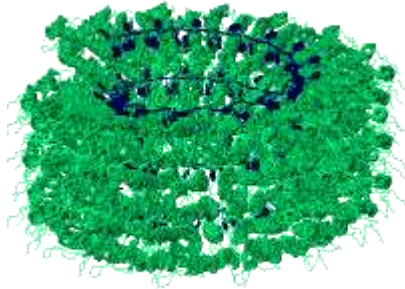
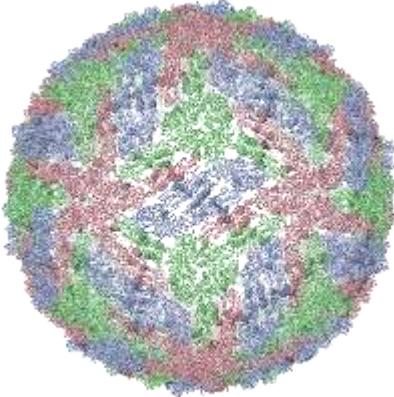


http://www.pdb.org/pdb/static.do?p=education_discussion/Looking-at-Structures/bioassembly_tutorial.html

生物学的単位:

- 生体内での構造や溶液構造に**近い**と考えられる構造単位を、結晶構造から切り出したもの
- データ登録者が定義したものと、計算によって見積もられたものが登録されている
- 非対称単位との関係（大きい・小さい）は、データごとに異なる



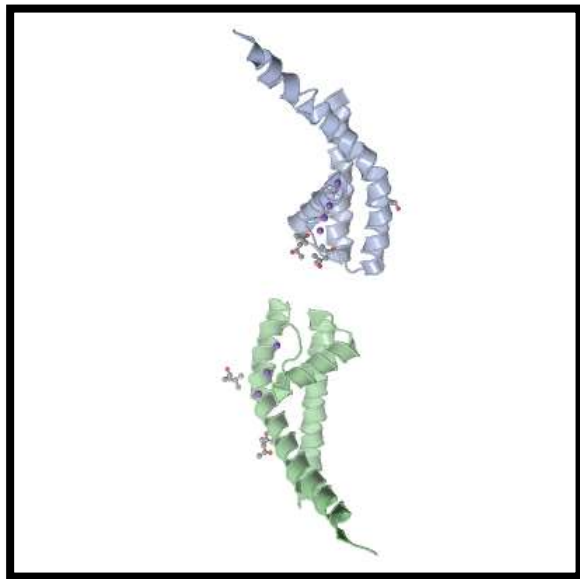
	3ixk	1oel	2xea	1thd
非対称単位	 3量体	 7両体	 らせん対称の 非対称単位	 正二十面体対称の 非対称単位
生物学的単位	 単量体	 14量体	 らせん集合体	 正二十面体集合体

実習 3 :

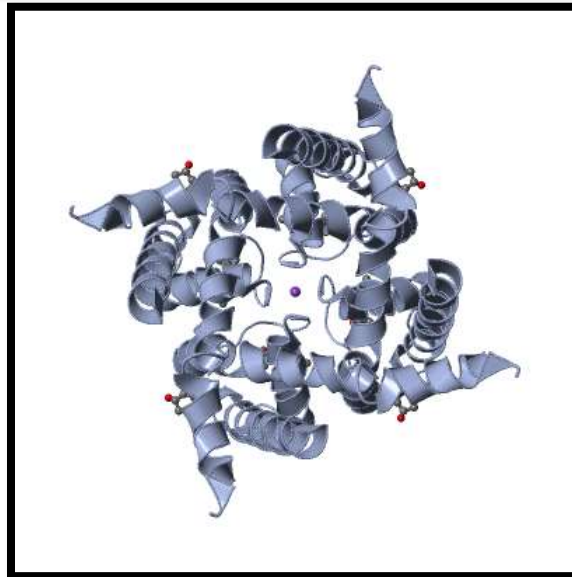
「生物学的集合体」をしてみる

手順

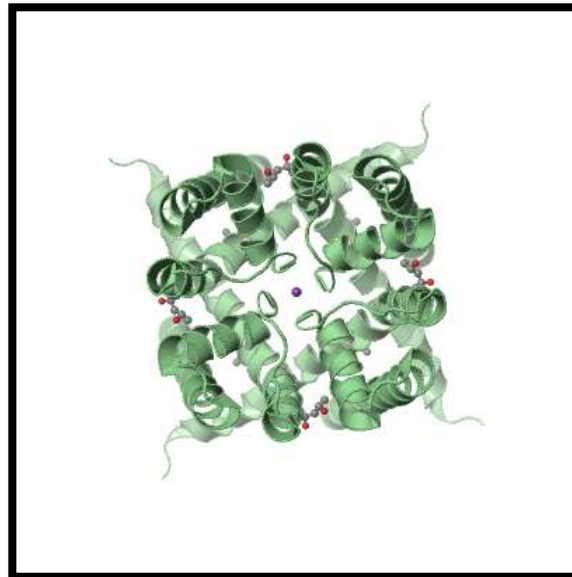
- 「万見」でPDB-3ixkを開く
「開く」パネル、「IDを指定」行の入力ボックスに
「3ixk」と入力し、Enterキーを押す
→Beta-secretase 1 の構造が表示される
- 構成要素パネル・L型ポリペプチドを確認
→同じポリペプチド3本からなっていることが分かる
- データパネル・集合体の各ボタンを押してみる
→表示される構造を確認
(クリックすると該当する構成要素のボタンの色が変わる)
- 同様のことを「3k0g」で試してみる



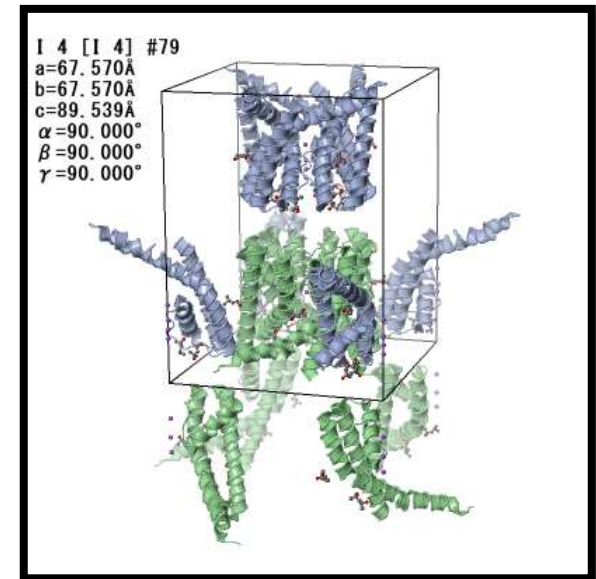
登録構造
=結晶学的非対称単位



生物学的単位 #1



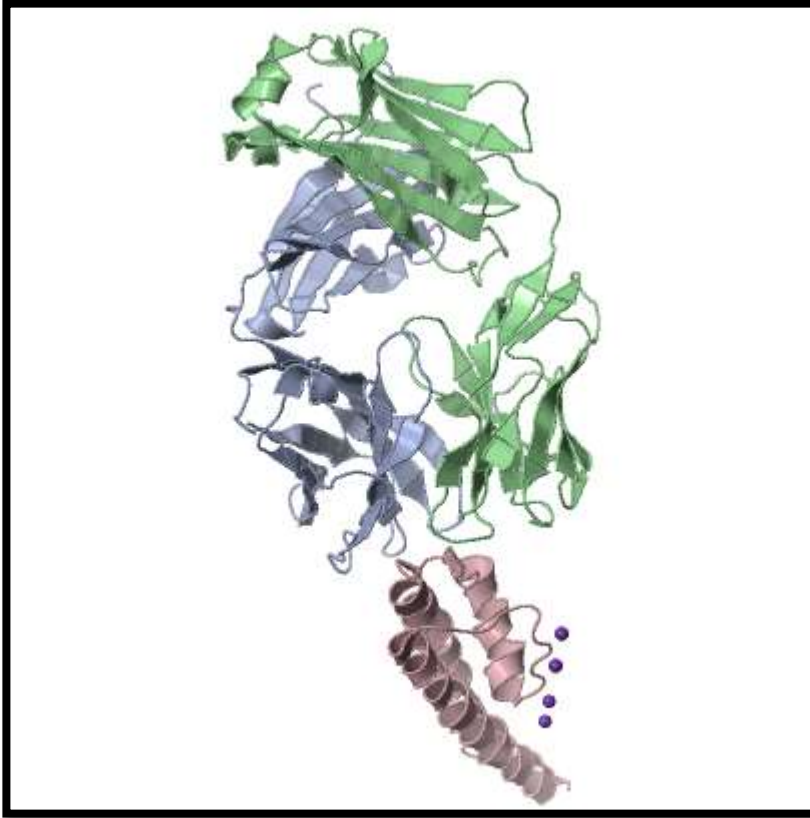
生物学的単位 #2



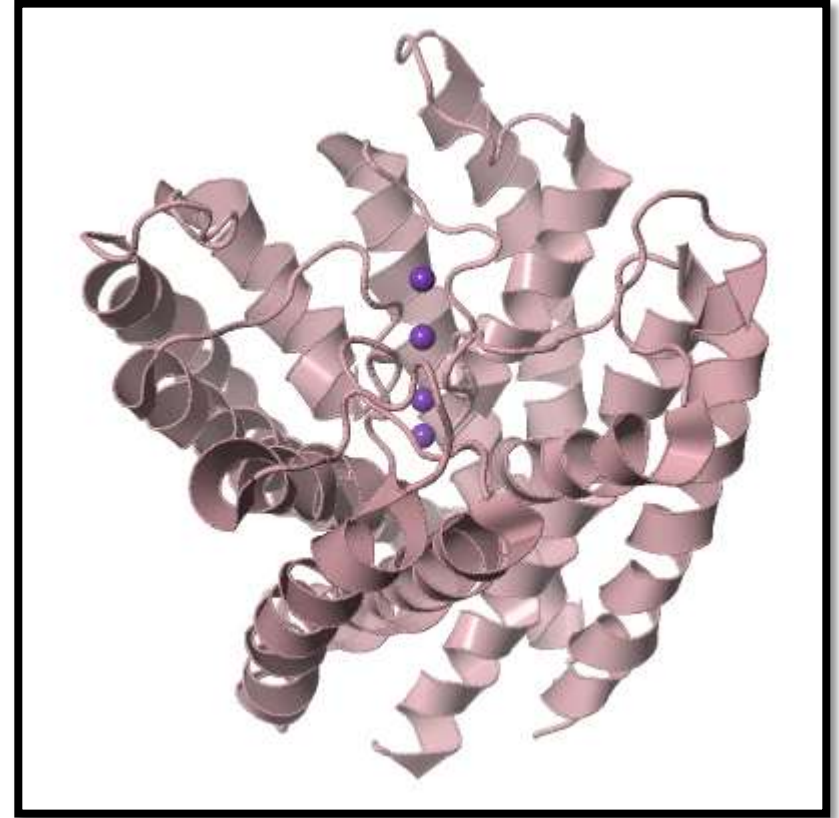
単位格子

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



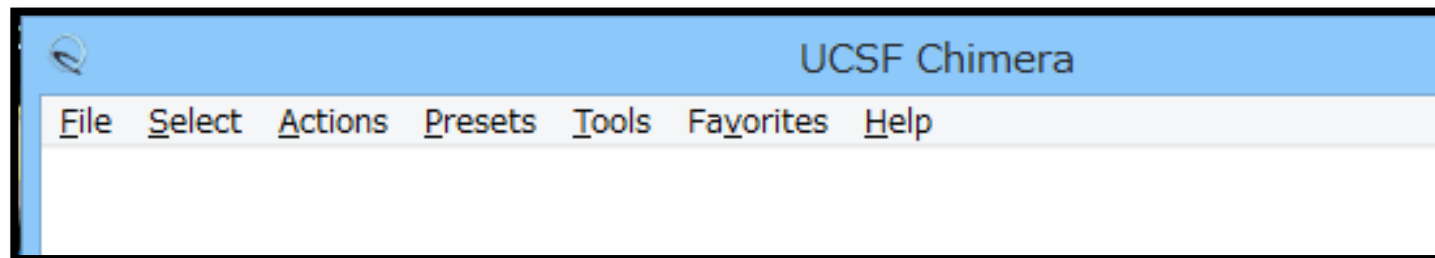
登録構造
(非対称単位)
KcsAと抗体



生物学的単位
抗体を隠した状態

実習 4 :

UCSF Chimeraを使ってみる

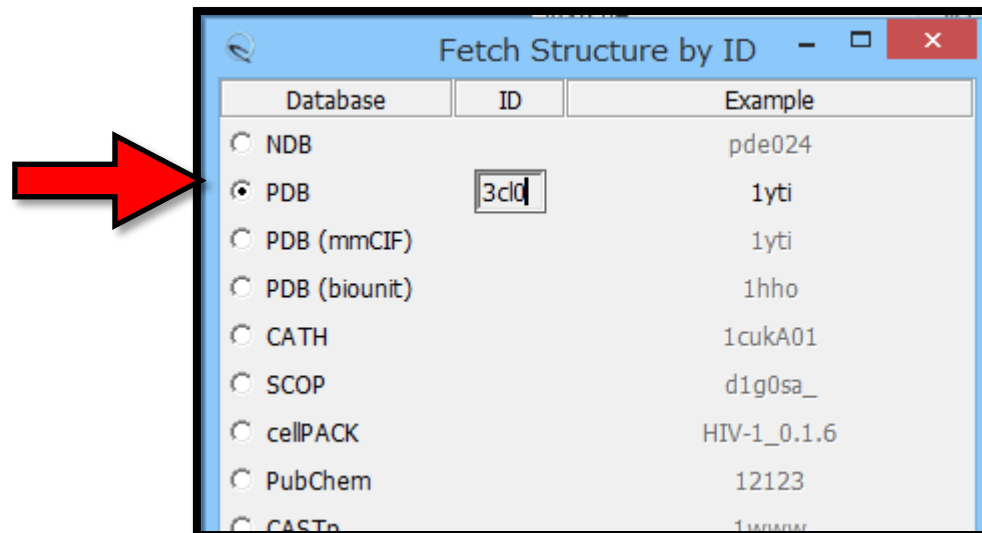


メニュー項目	おおまかな内容
File	一般的なソフトと同じ データを開く、終了など
Select	「選択」に関する項目
Action	「選択」している要素に対する「アクション」 色やスタイルの変更、計測など
Presets	表示スタイルのプリセット いくつかのおすすめスタイルが登録されている
Tools	その他のツール
Favorites	お気に入り デフォルトで開発者のおすすめ機能が入っている
Help	一般的なソフトと同じ

手順

- Chimeraを起動
- メニュー[File]-[Fetch by ID...]
→"FETCH structure by ID"パネルが出現
- [PDB]をクリックし、入力ボックスに"3cl0"を入力し、エンター
→構造データがダウンロードされ、構造モデルが表示される

やり直すには：メニュー [File]-[Close session]

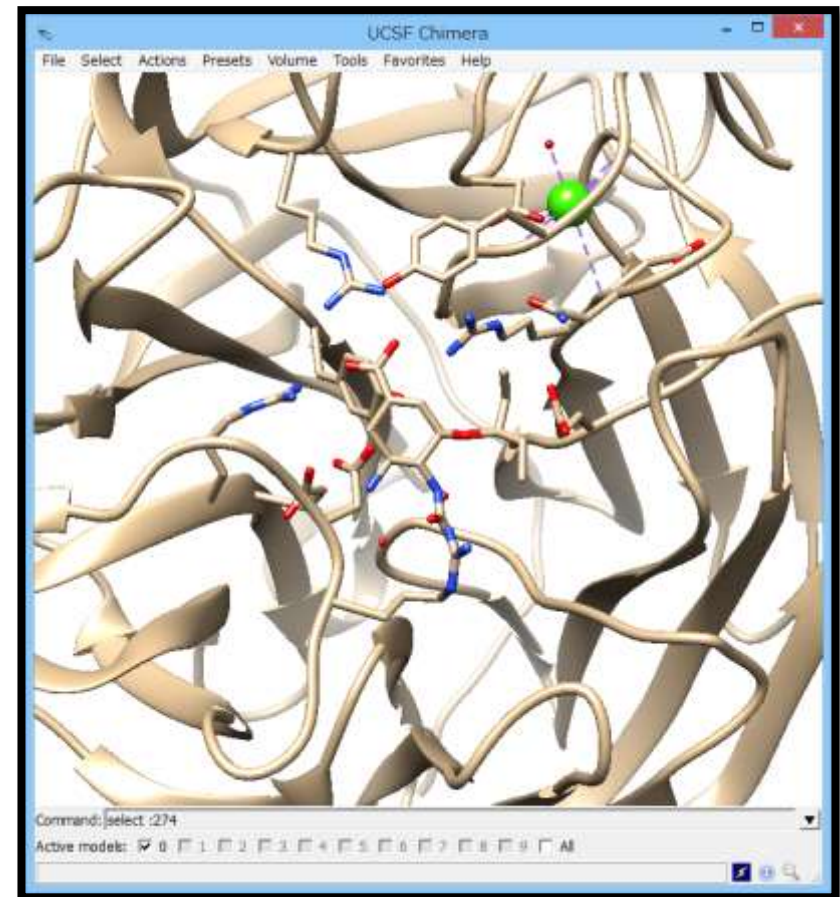


手順

- マウスで構造を動かしてしてみる
(マウス操作は先程のJmolとよく似ている。中ボタンのドラッグで平行移動ができる)
- オセルタミビルの結合部位の観察
(Chimeraはデフォルトで、構造データを開くとリガンドとその結合部位の側鎖を表示する仕様)

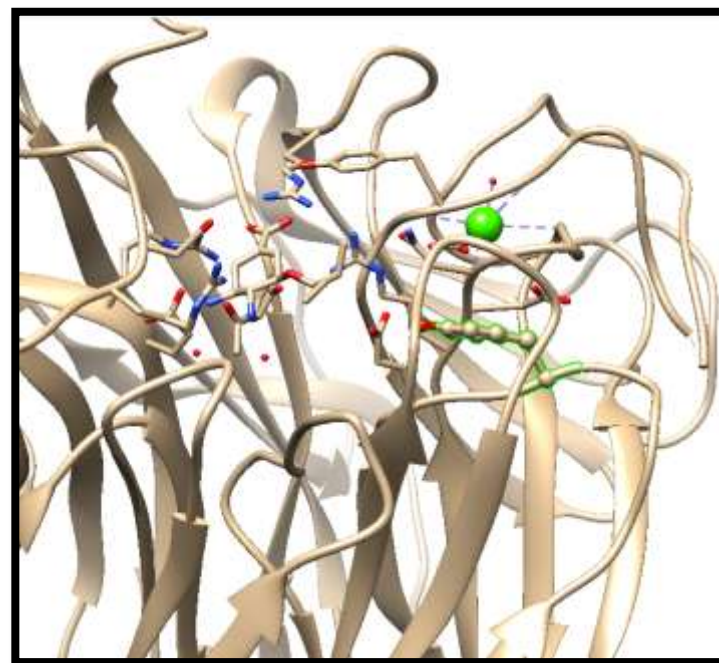
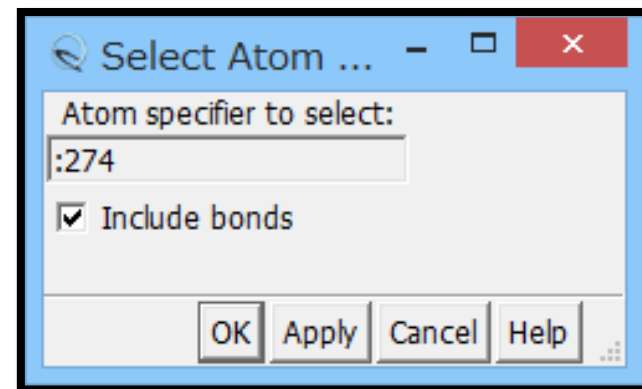
※背景はプレゼン資料として見やすいように白にしてある

- 背景色の変更は、メニュー[Favorite]-[Preference]-[Background]で



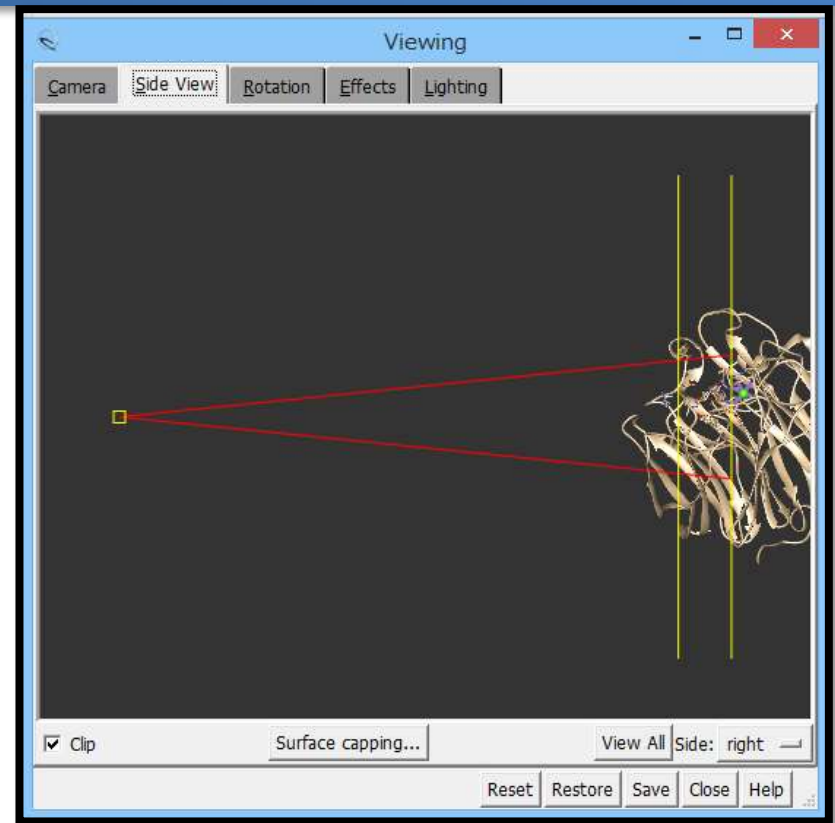
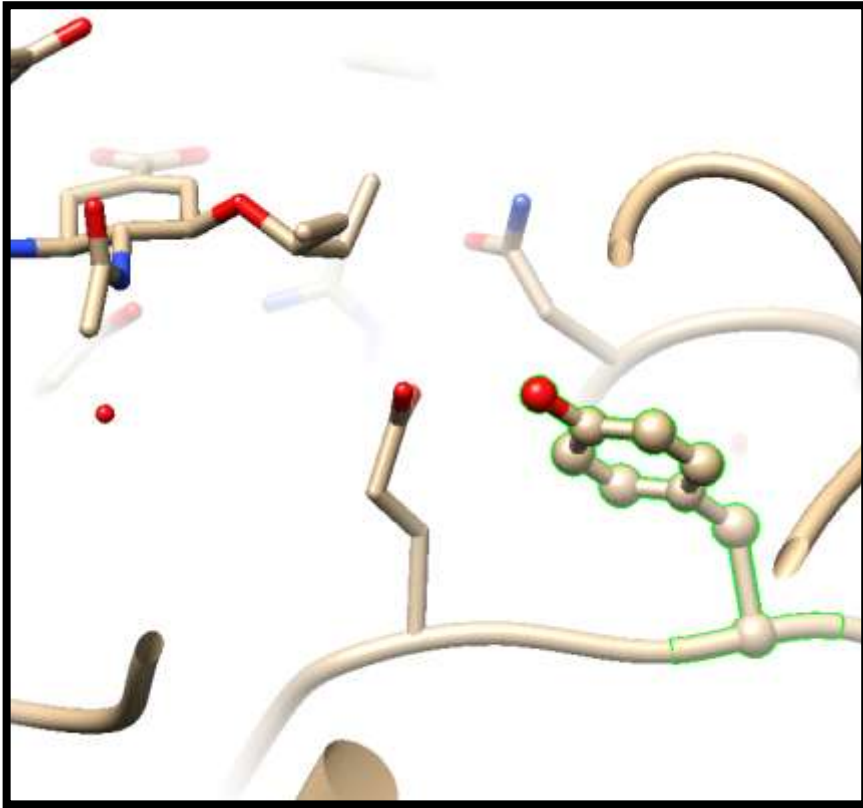
手順

- [Select]-[Atom Specifier...]
→"Select atom"パネルが出現
- 入力ボックスに":274"を入力し、エンター
→残基番号274に含まれる原子が選択される
- [Action]-[Atoms/Bonds]-[Show]
- [Action]-[Atoms/Bonds]-[Ball & stick]
→247に含まれる原子が表示され、「球と棒」のスタイルに



手順

- [Favorite]-[Side view]
→ "Viewing" パネルのサイドビューウィンドウが出現
- 2本の黄色い線をマウスで移動させ、
見たい部分をよく見えるようにする



サイドビュー

左の□: カメラの位置

赤い線: 上下の視野

黄色い線: 前後の切断面

実習5:

複数の構造を重ねて比べる

PDB-ID	変異	結合している化合物
3cl0	His274Tyr オセルタミビル耐性 ザナミビル感受性	オセルタミビル
3ckz	同上	ザナミビル
2hu4	野生型	オセルタミビル



ザナミビル
(リレンザ)



オセルタミビル
(タミフル)

手順: (以下は先と同じ操作で3ckzを開く)

- メニュー[File]-[Fetch by ID...]
- [PDB]をクリックし、入力ボックスに"3ckz"を入力し、エンター

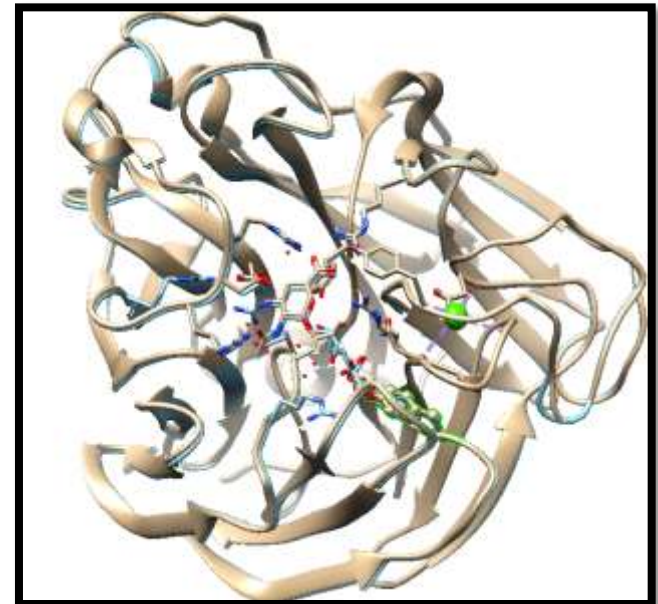
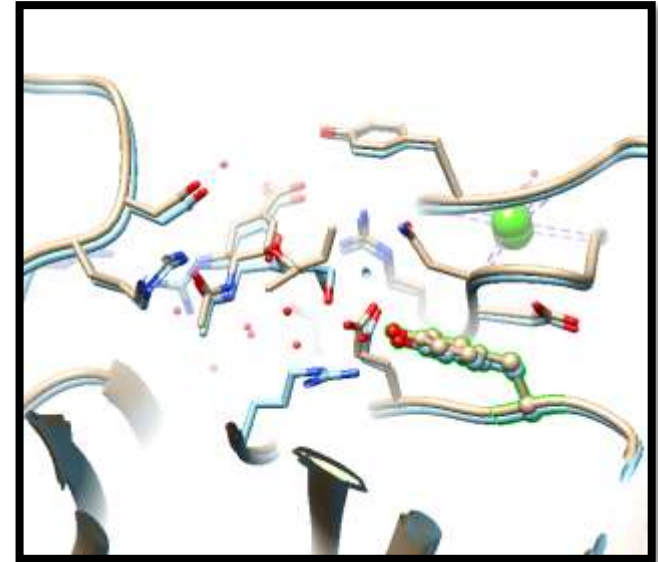
→Chimeraは、「追加読み込み」がデフォルト

→新しく開いたモデルは水色

- メニュー[Select]-[Atom Specifier...]で原子選択パネルを開き、入力ボックスに":274"を入力し、変異残基を選択

- [Action]-[Atoms/Bonds]-[Show]
- [Action]-[Atoms/Bonds]-[Ball & stick]

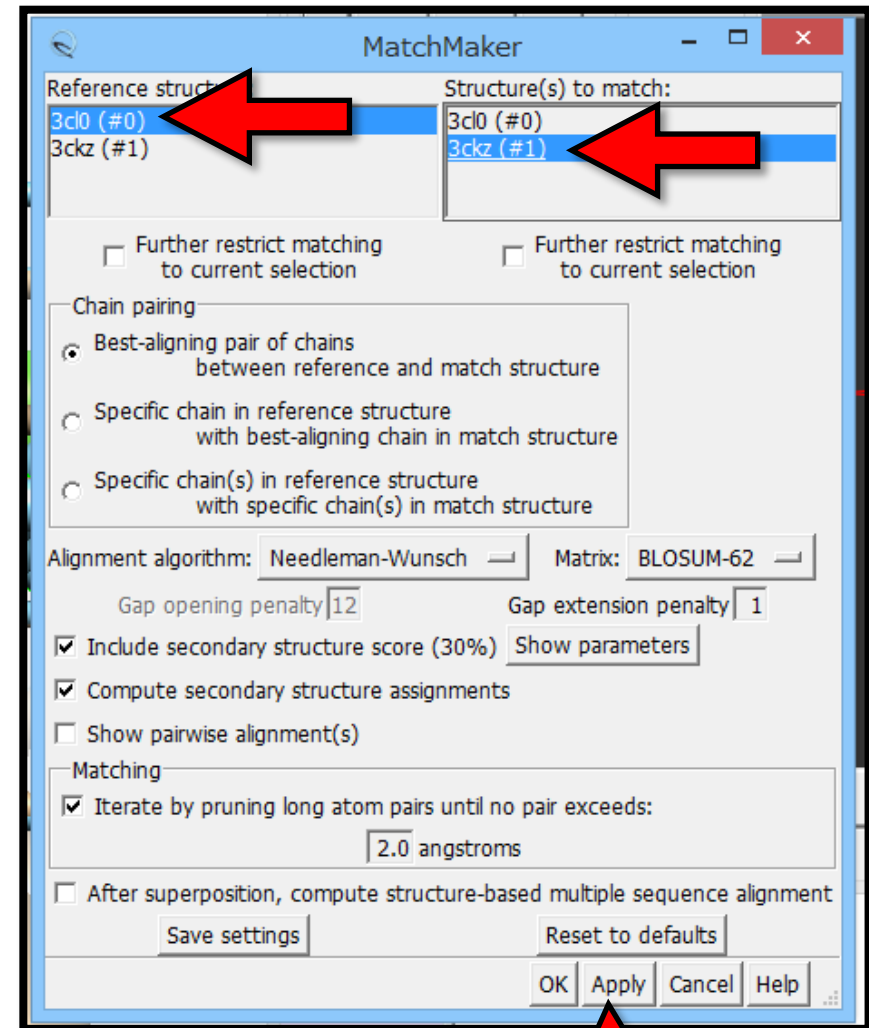
→両データの変異残基の表示

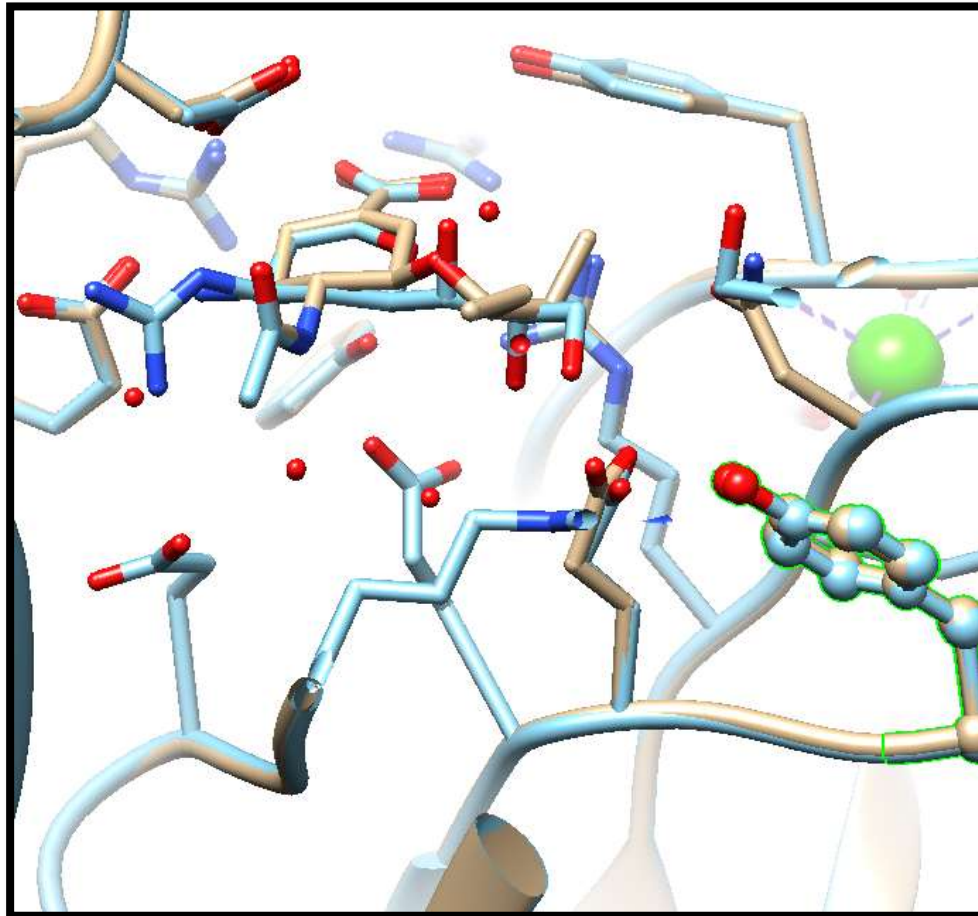


2つのデータは同じ結晶系で解析されたため、ほぼ重なるが、わずかにずれている
→比較するには厳密に重なる必要がある

手順:

- メニュー[Tools]-[Structure comparison]-[MatchMaker]
→MatchMakerパネルが現れる
- [Reference structure]と
[Structure(s) to match]をそれぞれ
選択し[Apply]
→両データがぴったり重なる





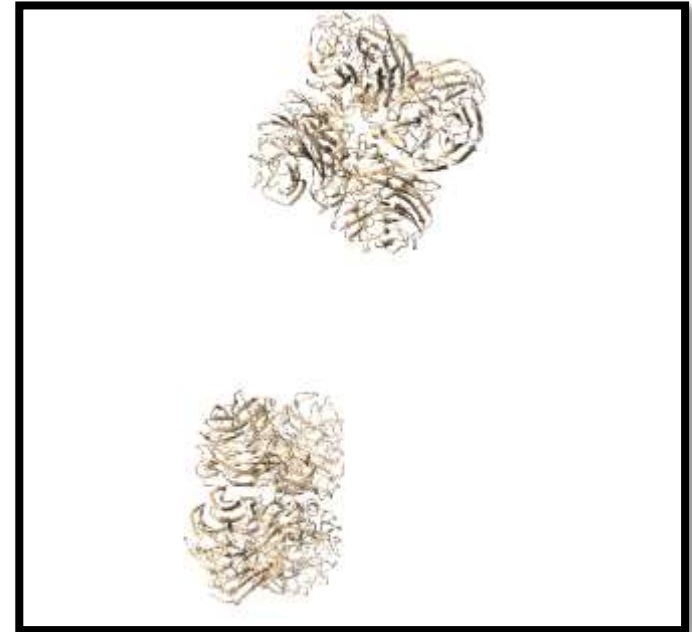
ノイラミニダーゼの構造は、ほぼ同一
変異残基の近傍に位置する部位の構造が、
オセルタミビルとザナミビルでは違う

手順: データをクリアし2hu4を開く

- メニュー[File]-[Close session]
→いったんデータをクリアする
- 先程と同様の操作で"2hu4"を開く
→2hu4には4量体が2個入っていることが
わかる

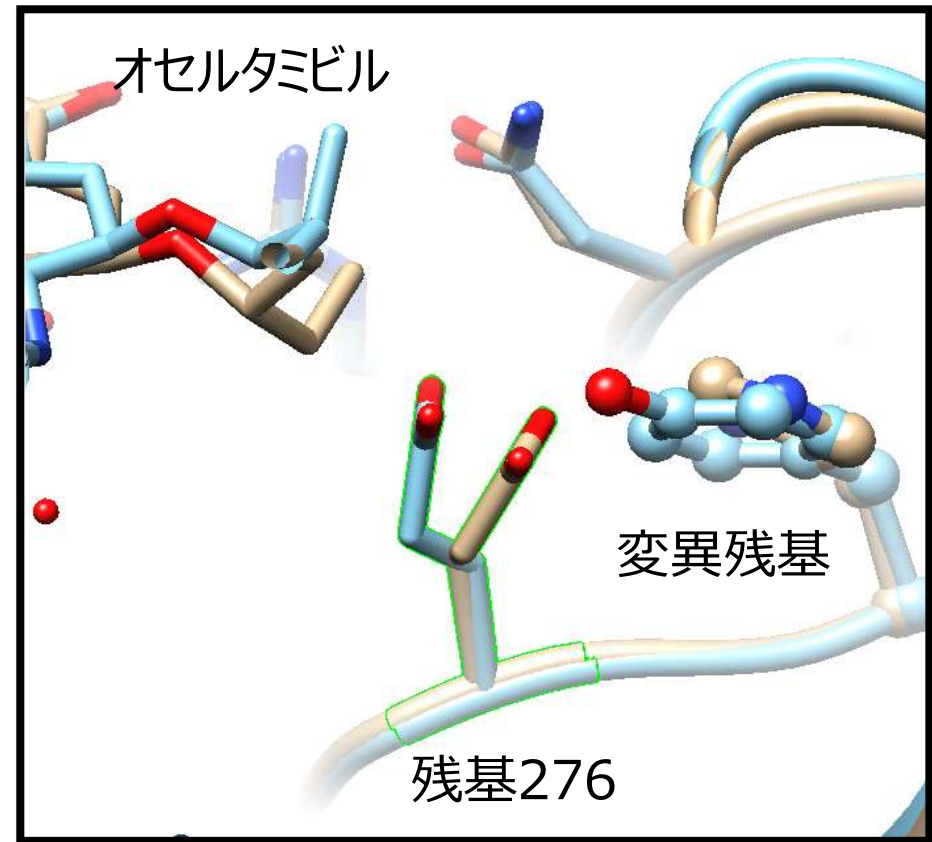
手順: A鎖以外を消す

- [Select]-[Chain]-[A]
- [Select]-[Invert (selected models)]
→A鎖以外が選択される
- [Action]-[Atoms/Bonds]-[delete]
→A鎖以外が消える



手順: 先と同様に以下を実行

- 先程と同様の操作で"3cl0"を追加読み込み
 - MatchMakerで両者を重ねる
 - 変異残基274を表示させる
 - 変異残基の近傍を観察
- 野生型データでは残基276が表示されていない
- 残基276も表示させる



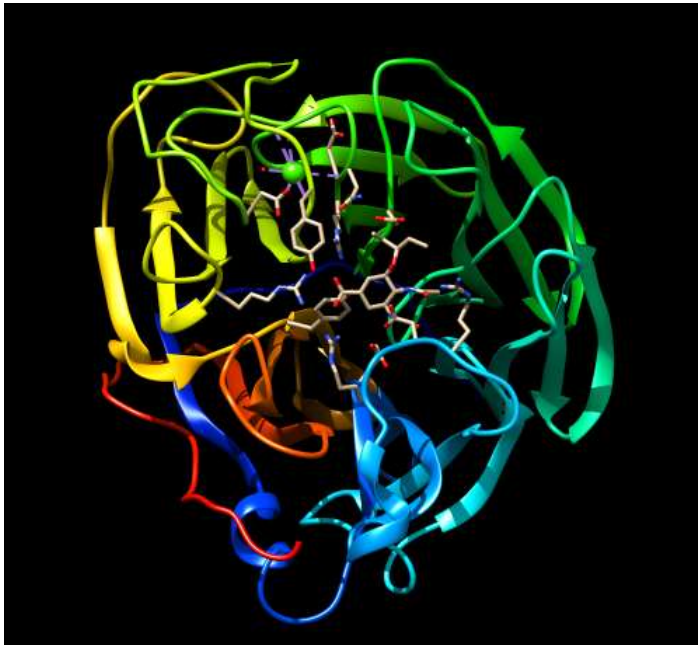
ベージュ：野生型

水色：変異型

絵の描き方

リアル調

- 明暗で立体感を出す、光線の方向を工夫
- デプスキュー（遠くの物の色が薄くなる）効果は、立体感を増す
- レイトレース（光線追跡）すると、影がついて、さらにリアルになる



アニメ調の場合

- 特殊なアルゴリズムで輪郭を描く
- 明暗による立体感の表現はしない
- 条件によっては、こちらのほうがわかりやすいことも

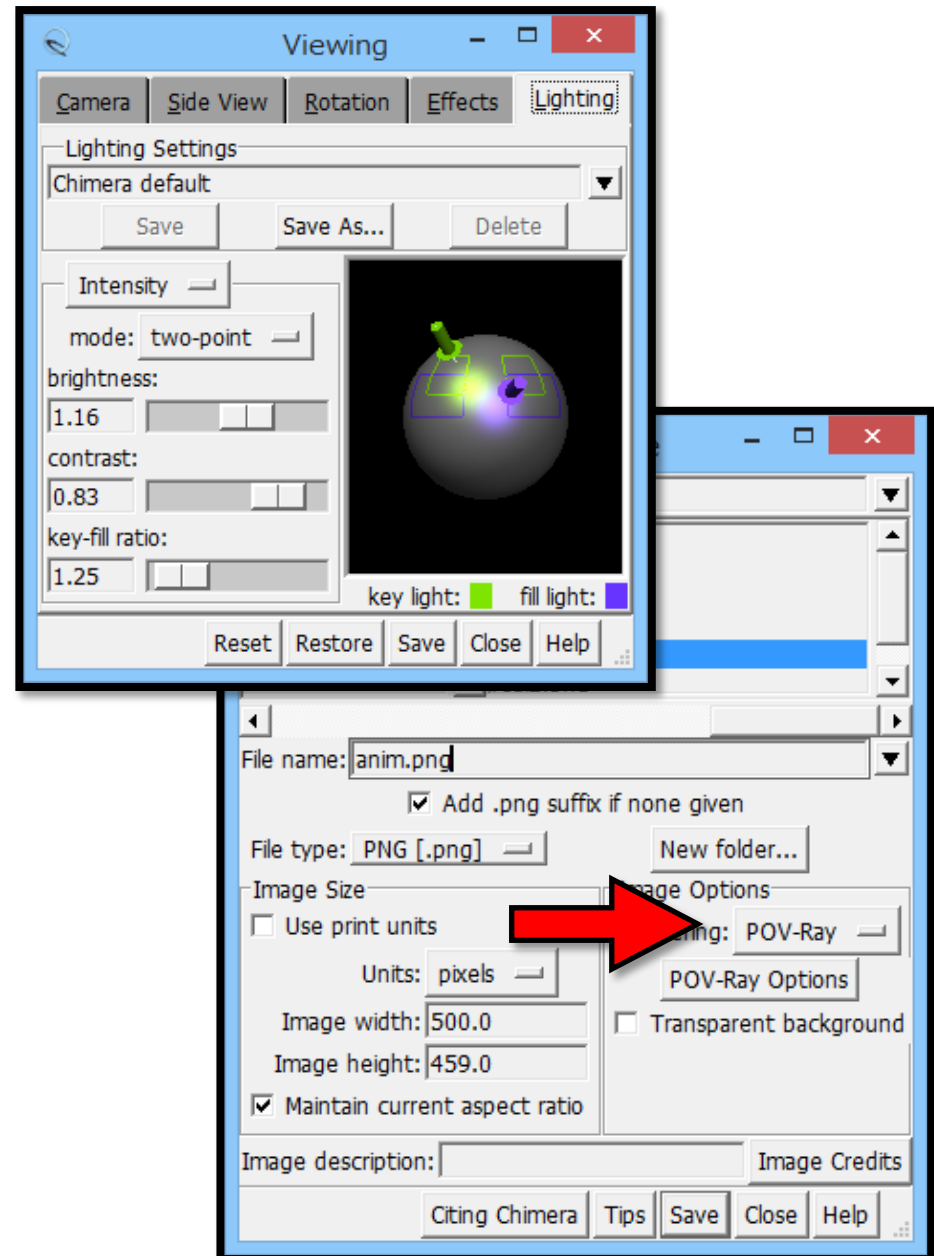


照明、効果などの設定

- “Viewing”パネル(Side viewで使ったパネル) -[Lighting]タブ
- 各項目で照明の条件設定

画像の保存

- メニュー[File]-[Save Image...]
- 画像の保存パネルが現れる
- “Image Options”(右下ボックス)のImagingで“POV-Ray”を選択
- 画像保存の際にレイトレース



照明、効果などの設定

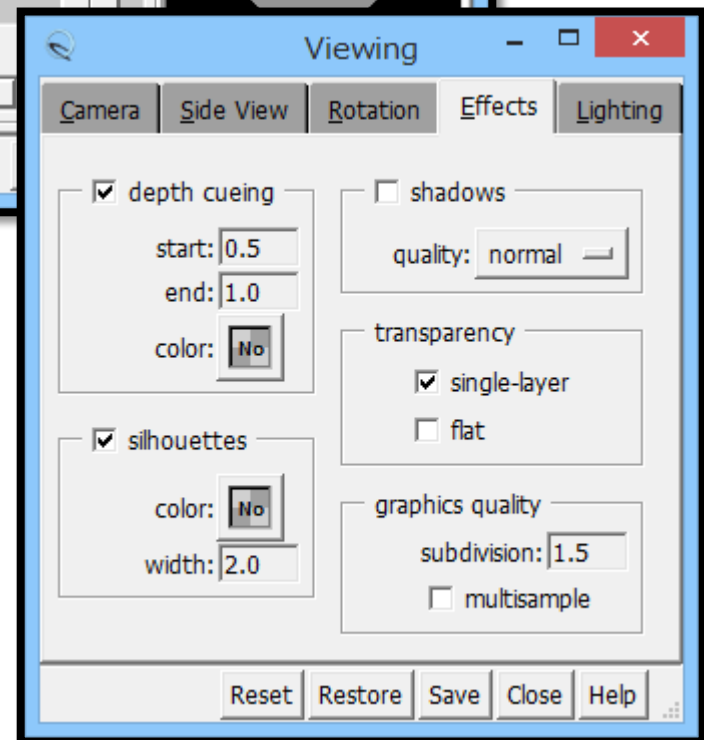
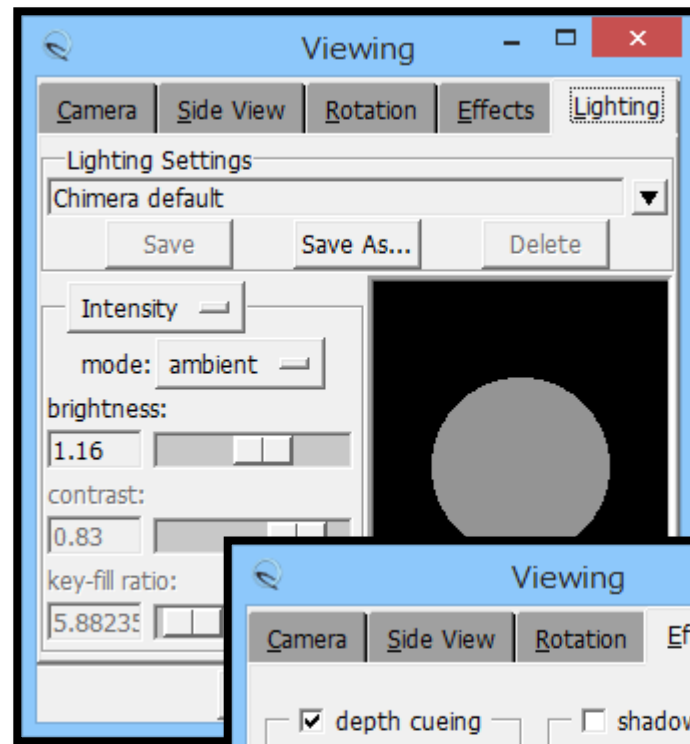
- [Viewing]パネル -[Lighting]タブ -
[Intensity]の"mode"で"ambient"
を選択

→環境光のみになり、立体感がなくなる

- [Viewing]パネル -[Effect]タブ -
で、"depth cueing"をoff
に、"silhouettes"をonなど

→遠近の視覚効果がなくなり、輪郭線が
現れる

輪郭線は太めにするのがコツ



構造データを利用する権利

- PDBデータはパブリック（人類の財産！）自由に使える

画像の著作権

- PDBデータを使ってあなたが作った絵の著作権は、あなたのもの
- PDBjの画像などを使った場合は、「日本蛋白質構造データバンク (PDBj)」 （日本語の場合）と表記することをお願いしている
- 「今月の分子」の絵と文章はもう少し厳しい規約がある

科学者としてのマナー

- PDB-IDを明記

ソフトウェアの利用条件

- Chimeraなどは、ソフトウェア名を書く必要がある
- 引用する文献も決められている

最後に

2010-08-02 木

[[EB]]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 (ハ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。

万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわるう - Windows Internet Explorer

Synechocystis由来Heme oxygenase-1の立体構造が表示されました！

PDB-1we1 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・大きさ・表示・非表示などを変更できます。

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-1we1 - 他のデータ

タイトル: Crystal structure of heme oxygenase-1 from cyanobacterium *Synechocystis* sp. PCC6803 in complex with heme. Heme oxygenase 1 (E.C.1.14.99.3)

1 著者による定義 (1 分子, monomeric)

2 著者による定義 (1 分子, monomeric)

01:28 04:43

Generated by CAMTASIA STUDIO 5
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
原著作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

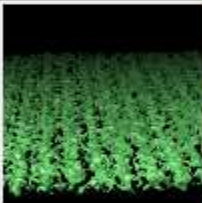
万見(Yorodumi)の使い方～基本と連携～ 統合TV
制作：統合データベースセンター
<http://togotv.dbcls.jp/20100802.html>

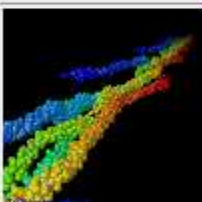
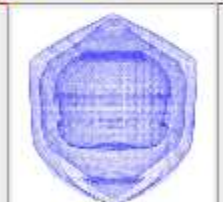


万見 (Yorodumi) - 生命のカラクリにさわる [English / 日本語]

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](#)

[お問い合わせ](#)

万見画廊

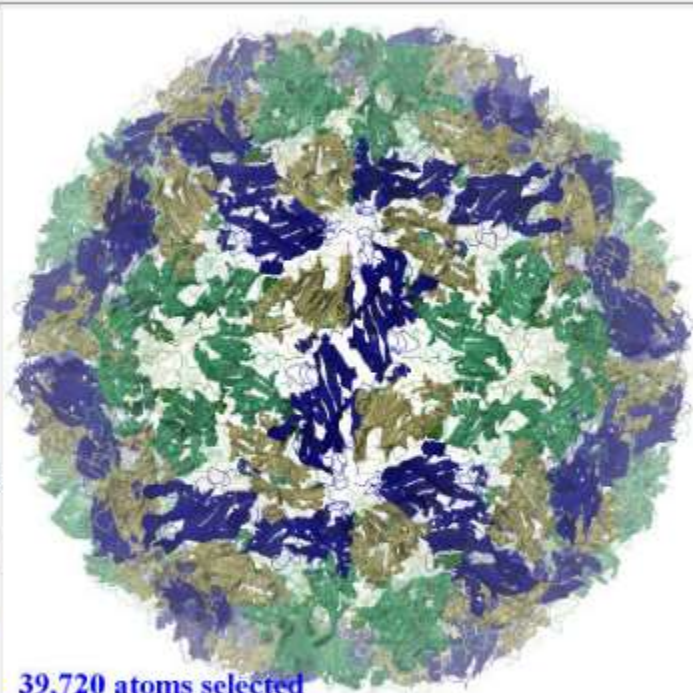
口蹄疫ウイルスの鎧

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](#)

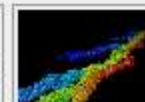
表示方法:

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: Ca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







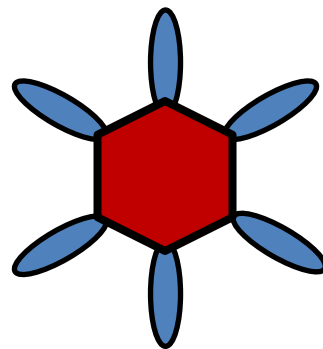
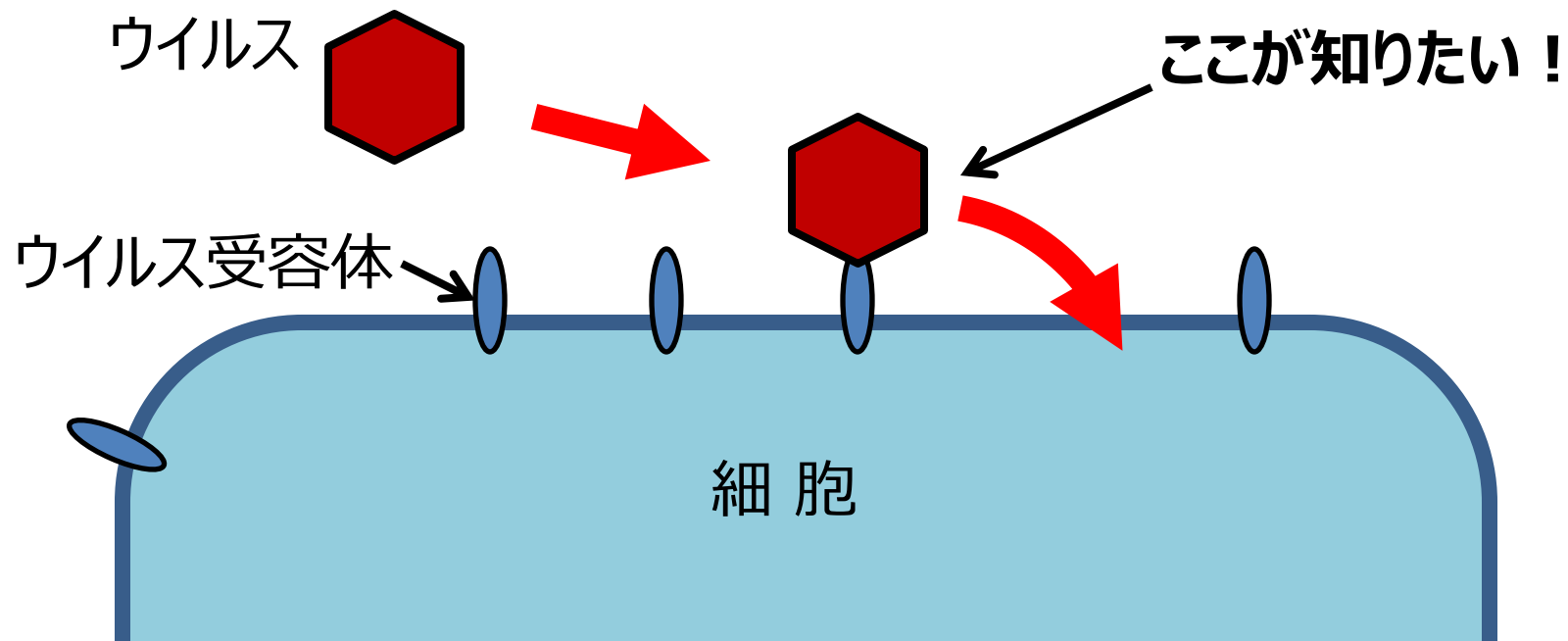


表示例とチュートリアル

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

過去の講習会から

**ウイルスの細胞侵入の
メカニズムを見る**



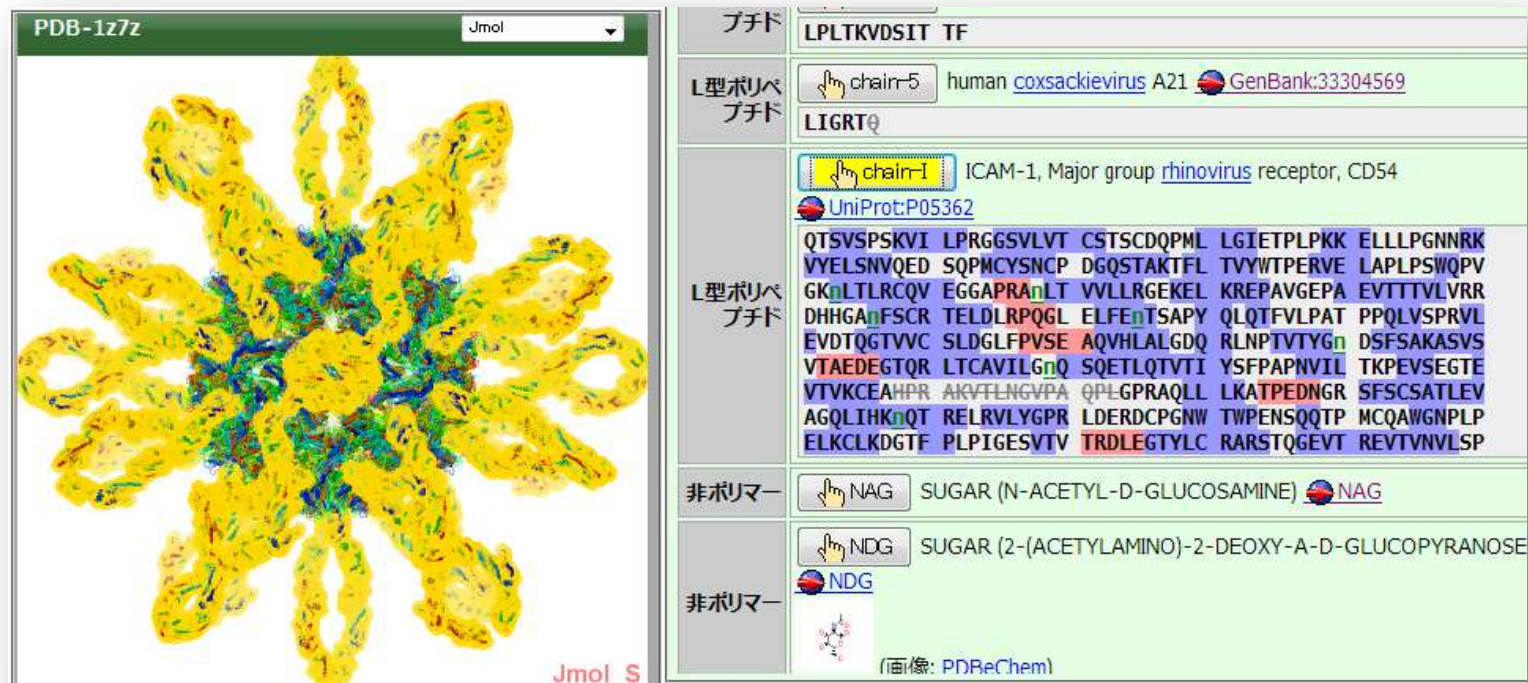
受容体で飽和した
ウイルスを構造解析

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
→ウイルス受容体が選択状態になる

※ 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



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

PDB-1z7z Jmol

ビューア全体を表示様式(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を操作するには、**スタイルパネル**を利用してください。

ビューア <- サイズ -> ☒ 高画質(低速) 背景:

奥行の色表現 - オ 立体視 - オ

方向 ▶ X回転 ▶ Y回転 || 停止

中心 原子モデル 選択したもの EMマップデータ

ズーム 小 大
240 % リセット

断面 手前 奥
☐ 中心を固定 ☐ 厚さを固定 リセット

スケール ☐ Off ☐ 10A ☐ 50A ☐ 100A ☒ 500A ☐ 1000A

保存 画像を保存 現在の状態(スクリプト)を保存
状態を復元(スクリプトを開く)

- 表示様式のリセット