

Introduction to PDBj services for searching and exploring the PDB

IIBMP2018, 2018-09-20

Gert-Jan Bekker

Protein Data Bank Japan
Institute for Protein Research
Osaka University

Services offered by PDBj (I)

- PDBj Mine (search & explore entries)
 - Search by PDB/EMDB/comp_id
 - Search PDB/chem_comp/BIRD by keywords
 - Advanced search for filtering
 - SQL search
- Sequence Navigator (PDB BLAST)
- Structure Navigator (structure comparison)
- Downloading structures (FTP/HTTP)

Services offered by PDBj (II)

- Deposition of structures via OneDep
 - Uniform across wwPDB members
- EM Navigator / Omokage search
 - For searching EMDB (keyword & shape)
- Promode Elastic
 - Protein dynamics database (NMA)
- Molecule of the Month
 - Japanese translation of RCSB's MotM by David S. Goodsell

PDBj top page

144211

件公開中 (2018-09-12
00:00 UTC / 09:00 JST)

Latest release info

PDBj

Protein Data Bank Japan
Worldwide Protein Data Bank Foundation

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)

Search for
- Entries by ID/keywords
- Help/info pages
- MoM
- Services

Newly released structures

Latest MoM entry

Detailed explanation of PDBj's services

Latest news

Various settings

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDIと共同で、米国 RCSB、EMBL、BMRB 等の国際的なデータベースを統合的に提供し、最新の PDB アーカイブとして運営されています。

初めての利用者のためのガイド

このサイトは主に研究者向けのコンテンツを提供しています。一般向けの内容は古いウェブブラウザでこのサイトにアクセスすると、機能制限モードで表示される場合があります。このサイトの機能について詳しくは [対話型チュートリアル](#) もご覧ください。

必要なサービスを探す

探しているサービスに関連するキーワードを以下の語句一覧から選択するか、または検索ボックスに入力して下さい。該当す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] にキーワードを入力して、語句一覧で絞り込んだ結果を更に絞り込むこともできます。

<input type="radio"/> PDB	<input type="radio"/> BMRB	<input type="radio"/> EMDB	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
<input type="radio"/> 検索	<input type="radio"/> 登録	<input type="radio"/> ビューア	<input type="radio"/> 教育/啓蒙	<input type="radio"/>
<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"/>
<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"/>
<input type="radio"/> 結合部位	<input type="radio"/> 表面構造	<input type="radio"/> 立体構造	<input type="radio"/> ゲノム	<input type="radio"/>

全サービスを表示

例) モチーフ、分子表面 ...

リセット

最新情報

- 2018-09-12 [\[wwPDB\] PDBは、信頼できるデジタルリポジトリの認定を受けました。](#)
- 2018-09-12 [170件のPDBエントリーが新たに公開されました。\(9月12日付\)](#)
- [生命医薬情報学連合大会 \(IIBMP2018\) にて、PDBjランチョンセミナーを開催します](#)
- [第56回日本生物物理学会年會にて、PDBjランチョンセミナーを開催します](#)
- [\[wwPDB\] OneDepからの登録時に、研究者ID番号 \(ORCID\) が必須になりました](#)
- [7/10 \(火\) AJACS筑波4にてPDBjからも講演を行います](#)

設定
ヘルプ
パネル設定
その他設定

設定を初期状態に戻す
ジョブマネージャー

6GFG

最新公開エントリー

今月の分子
[225: フィターゼ \(Phytase\)](#)

今月の分子のリスト

WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

BMRB検索

[PDBj-BMRB](#)

Accession number / Deposition code

Try the omni-search bar!

Search

パートナー

[IBIportal](#)
Japan alliance for Bioscience Information

[DBCLS](#)
Database Center for Life Science

[DDBI](#)

Molecule of the Month (I)

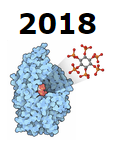
- ホーム
 - トップページ
 - 統計情報
 - ヘルプ
 - FAQ
 - お問い合わせ
 - PDBの引用
 - リンク集
- データ登録 (OneDep)
 - ヘルプ
 - PDB, EMDB, BMRBへの登録
- ダウンロード
 - PDBアーカイブからのデータダウンロード
- 新フォーマット
 - PDBx/mmCIFについて
 - フォーマット変換
- クイックリンク
 - ヘルプ
 - 巨大構造エントリー
 - グループ登録エントリー
 - 化合物一覧
 - 最新エントリー
- 検索サービス
 - ヘルプ
 - PDB検索 (PDB Mine)
 - PDB詳細検索
 - 化合物検索 (Chemie)
 - BMRB検索
 - Sequence-Navigator
 - Structure-Navigator
 - EM Navigator

公開の新しい順 アルファベット順 カテゴリ別 五十音順

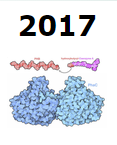
今月の分子

このサイトは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。社会で話題となっている内容に関わる分子を蛋白質構造データバンク (PDB) から選び、機能と構造に関して解説しています。転載・引用については[利用規約](#)をご覧ください。

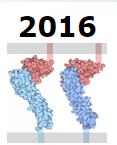
[2018](#) [2017](#) [2016](#) [2015](#) [2014](#) [2013](#) [2012](#) [2011](#) [2010](#) [2009](#) [2008](#) [2007](#) [2006](#) [2005](#) [2004](#) [2003](#) [2002](#) [2001](#) [2000](#)



- 225: フィターゼ (Phytase)
 - 224: レグメイン (Legumain)
 - 223: ピエゾ1機械受容チャネル (Piezo1 Mechanosensitive Channel)
 - 222: タンパク質とナノ粒子 (Proteins and Nanoparticles)
 - 221: ヒトパピローマウイルスとワクチン (Human Papillomavirus and Vaccines)
 - 220: 脱ハロゲン酵素 (Dehalogenases)
 - 219: 液胞型ATPアーゼ (Vacuolar ATPase)
 - 218: EPSP合成酵素と除草剤 (EPSP Synthase and Weedkillers)
 - 217: オピオイド受容体 (Opioid Receptors)
- [ページのトップへ](#)



- 216: 生分解性プラスチック (Biodegradable Plastic)
 - 215: アスパラギン酸カルバモイル転移酵素 (Aspartate Transcarbamoylase, ATCアーゼ)
 - 214: キメラ抗原受容体 (Chimeric Antigen Receptors)
 - 213: サーチュイン (Sirtuins)
 - 212: グルタチオン転移酵素 (Glutathione Transferases)
 - 211: 線毛機械 (Pilus Machine)
 - 210: アデニンリボスイッチの動き (Adenine Riboswitch in Action)
 - 209: 組織グルタミン転移酵素とセリアック病 (Tissue Transglutaminase and Celiac Disease)
 - 208: グルコース輸送体 (Glucose Transporters)
 - 207: 光活動性黄色タンパク質 (Photoactive Yellow Protein)
 - 206: グロビンの進化 (Globin Evolution)
 - 205: 核膜孔複合体 (Nuclear Pore Complex)
- [ページのトップへ](#)



- 204: PD-1 (PD-1, プログラム細胞死タンパク質1)
- 203: アミノペプチダーゼ1とオートファジー (Aminopeptidase 1 and Autophagy)
- 202: シペプチジルペプチダーゼ4 (Dipeptidyl Peptidase 4)
- 201: イソプレン合成酵素 (Isoprene Synthase)
- 200: 正二十面体型ウイルスの準対称性 (Quasisymmetry in Icosahedral Viruses)
- 199: モネリン (Monellin)
- 198: β -ガラクトシダーゼ (Beta-galactosidase)

Molecule of the Month (II)

ホーム

トップページ

統計情報

ヘルプ

FAQ

お問い合わせ

PDBjの引用

リンク集

データ登録 (OneDep)

ヘルプ

PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

クイックリンク

ヘルプ

巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

検索サービス

ヘルプ
PDB検索 (PDBj Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemie)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
EM Navigator

225: フィターゼ (Phytase)

このページはRCSBのDavid S. Goodsell博士による「Molecule of the Month」2018年9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)



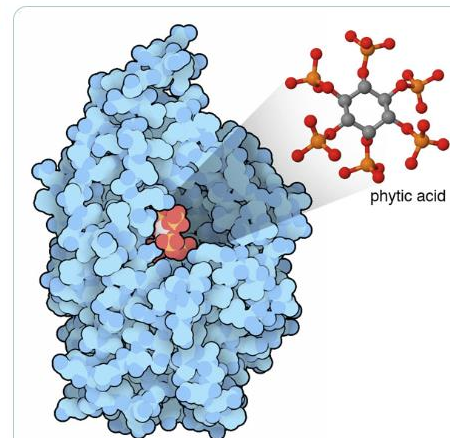
競争がある生態系では、使えるリンの量によって成長に制約が生じるのは珍しいことではなく、生き物はそれを分け合う方法を見つけてきた。我々は食物からリンを摂取しているが、それはヌクレオチドやリン酸イオンなどの役に立つ分子の中うまく取り込まれている。植物は手元にくっついてくる資源だけでやっていく必要があり、フィチン酸 (phytic acid, 専門的にはイノシトール6リン酸 inositol hexakisphosphate) と呼ばれる珍しい分子にリンを貯蔵していることがよくある。この分子は安定で、有用な分子へと分解する適当な酵素がない限りほとんど消化されない。このことは農業において特別な問題を引き起こす。

飼料に含まれるリン

家畜には大豆など植物中心の飼料が与えられることがよくあるが、これにはフィチン酸が豊富に含まれている。多くの胃を持つウシは、フィチン酸を分解し栄養として使えるリン酸分子にしてくれる細菌を持っている。一方、ブタやニワトリは胃を一つしか持っていないで、ほとんどのフィチン酸は素通りしてしまう。この制約によって2つの問題が生じる。一つは動物の生育に他のリン酸源が必要になることである。そしてもう一つは、肥料に含まれるフィチン酸が環境中に放出されると有毒な藻類が繁殖してしまうなどの問題を引き起こしてしまうことである。この二つの問題を解決するため、家畜の飼料には酵素の **フィターゼ (phytase)** がよく添加されている。この酵素は動物の胃でフィチン酸を分解してくれる。

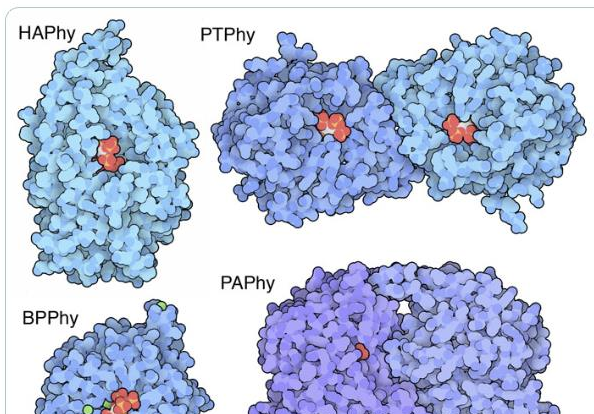
フィターゼ

フィターゼは小さく酸に対し安定な酵素で、フィチン酸から徐々にリン酸基を取り出す。飼料への添加物としてよく使われるのは主に次の2種類である。互いに似ているが一方は細菌由来でここに示すのはPDBエントリー [1dkq](#) の構造、もう一つはカビ由来でここに示すのはPDBエントリー [1ihp](#) の構造である。バイオテクノロジーの業界ではより熱に安定で活性の高いフィターゼを作り出し、より大規模に農業で利用できるようにする懸命な努力が続けられている。



フィターゼと原子種別に色分けして描いたフィチン酸。

さまざまなタイプのフィターゼ



非常に多くの生き物が植物を食べるので、さまざまな種類のフィターゼが進化してきたことは別に驚くようなことではない。研究者は構造に基づいてこれらを4つのグループに分類した。ヒスチジン酸フィターゼ(Histidine Acid Phytase, HAPhy)は飼料に添加されるフィターゼに似ていて、反応を行うヒスチジンを持っている。β-プロペラフィターゼ(Beta-Propeller Phytase, BPPhy, PDBエントリー [3amr](#))はその珍しい折りたたみ様式から名づけられた。PDBエントリー [3mmj](#) のようなPTPhyフィターゼはタンパク質のチロシン脱リン酸化酵素(Protein Tyrosine phosphatase)と似ている。紫色酸性フィターゼ(Purple Acid Phytase, PAPHy, PDBエントリー [4kbp](#))は金属イオンを含んでおり、紫色をしている。

Searching by PDBj Mine (I)

- For simple searches, simply type your query in the search bar at the top of PDBj's home page

The screenshot shows the PDBj website interface. At the top, there is a search bar with the text "Search pdbj.org" and a magnifying glass icon, highlighted with a red rectangle. Below the search bar, the results are displayed for the query "influenza virus". The results are organized into three main entries, each with a PDB ID, a title, and detailed information:

- 1AA7 INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0**
Descriptor: INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN
Authors: [Sha, B.](#), [Luo, M.](#)
Deposit date: 1997-01-24
Release date: 1998-01-28
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.08 Å)
Structure of a bifunctional membrane-RNA binding protein, influenza virus matrix protein M1.
Cite: Nat.Struct.Biol., 4, 1997
- 1INF INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE COMPLEXED WITH BANA113 INHIBITOR**
Descriptor: 4-(ACETYLAMINO)-3-GUANIDINOBENZOIC ACID, CALCIUM ION, INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE, ...
Authors: [Jedrzejcjas, M.J.](#), [Luo, M.](#)
Deposit date: 1995-07-07
Release date: 1996-08-17
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)
Structure-based inhibitors of influenza virus sialidase. A benzoic acid lead with novel interaction.
Cite: J.Med.Chem., 38, 1995
- 1IVB STRUCTURES OF AROMATIC INHIBITORS OF INFLUENZA VIRUS NEURAMINIDASE**
Descriptor: 4-(ACETYLAMINO)-3-HYDROXY-5-NITROBENZOIC ACID, CALCIUM ION, INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE, ...
Authors: [Jedrzejcjas, M.J.](#), [Luo, M.](#)
Deposit date: 1994-12-12
Release date: 1995-03-31
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)
Structures of aromatic inhibitors of influenza virus neuraminidase.
Cite: Biochemistry, 34, 1995

On the right side of the page, there is a "Search results info" panel showing: Total results: 1032, Displayed results: 25, Sorted by: Hit score (from highest), and buttons for "Download results" and "Go to Advanced search". Below this is a "Sort by" panel with options: Hit score (from highest), PDBID ascending, PDBID descending, Deposition date (from oldest), Deposition date (from newest), Release date (from oldest), Release date (from newest), and Resolution (from highest).

Searches various components of the PDBj website, including IDs of various services

Searching by PDBj Mine (I)

- PDBj Mine can also search in Japanese (via translation of the query):

The screenshot shows the PDBj Mine website interface. At the top, there is a search bar with the text "pdbj.org 全体を検索 (日本語or)" and a search button. Below the search bar, there are navigation links for "English", "日本語", "简体中文", "繁體中文", and "한국어". The main content area displays search results for the query "インフルエンザウイルス". The results are listed in a table-like format, with each entry including a PDB ID, a molecular model icon, and detailed information about the structure.

PDB ID	分子名称	著者	登録日	公開日	最終更新日	実験手法	主引用文献
1AA7	INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0	Shi, B., Luo, M.	1997-01-24	1998-01-28	2011-07-13	X-RAY DIFFRACTION (2.08 Å)	Structure of a bifunctional membrane-RNA binding protein, influenza virus matrix protein M1. Nat.Struct.Biol., 4, 1997
2VIU	INFLUENZA VIRUS HEMAGGLUTININ	Bizebard, T., Fleury, D., Gigant, B., Wharton, S.A., Skehel, J.J., Knossow, M.	1997-12-22	1998-04-29	2011-07-13	X-RAY DIFFRACTION (2.5 Å)	Antigen distortion allows influenza virus to escape neutralization. Nat.Struct.Biol., 5, 1998
1INF	INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE COMPLEXED WITH BANA113 INHIBITOR	Jedrzejewski, M.J., Luo, M.	1995-07-07	1996-08-17	2011-07-13	X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)	

The sidebar on the left contains navigation menus for "ホーム", "データ登録 (OneDep)", "ダウンロード", "新フォーマット", "クイックリンク", and "検索サービス". The sidebar on the right contains search filters for "検索結果" and "表示順".

Explore PDB entries (I)

Summary

The image shows a screenshot of the PDB entry page for 1AA7. The page is divided into several sections:

- Navigation:** Home, Data Deposition (OneDep), Downloads, New Formats, Quick Links, Search Services.
- Summary:** Entry ID (1AA7), Title (INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0), and a 'Download' button.
- 1AA7 の概要 (Summary):** A table of key information including molecule name, keywords, organism, location, polymer count, molecular weight, and authors.
- Links to external resources:** A box pointing to links for PubMed, DOI, and Mendeley.
- Visualization:** A 3D ribbon diagram of the protein structure, with a 'Visualize (Molmil)' button.
- Validation report:** A bar chart showing quality metrics: Rfree (0.413), Clashscore, Ramachandran outliers (3.8%), and RSZR outliers (41.3%).
- Downloads:** Options for downloading data in various formats (Sequence, PDBx/mmCIF, PDBML, PDB format, and Checksum report).
- Other Database Information:** Links to RCSB-PDB, PDBe, Yorodumi, CATH, FSSP, VAST, SCOP, PISA, UniProt, PFam, eF-site, and wwPDB/RDF.

Metric	Percentile Ranks	Value
Rfree		0.413
Clashscore		
Ramachandran outliers		3.8%
Sidechain outliers		
RSZR outliers		41.3%

Explore PDB entries (II)

Structural details

ホーム

- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- リンク集

データ登録 (OneDep)

- ヘルプ
- PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

- PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

クイックリンク

- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

検索サービス

- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- EM Navigator
- Omokae検索

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

1AA7

INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

Links to databases related to chain

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	エンティティの一般名
A, B	INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN	polymer	158	17402.2	2	UniProt (P03485) Pfam (PF00598)	unidentified influenza virus	
	water	water		18.0	86	HOH		

配列ビューア

Display chain: **A (INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN)**

M S L I T E V E T Y V L S I I P S G P L K A E T A O R I E D D V F A G K N T D L E V L M E W L K T R P I L I S P L T K G L I G F V F I L T V E S E R G L Q R R R E V O N A L N G N G D P E N N M D K A V K L Y R K L R

非対称単位の内容

	鎖の数	
ポリマー	2	
	分子量合計	34804.4
非ポリマー*	分子数	0
	分子量合計	0.0
全て*	分子量合計	34804.4

*水分子は含んでいません

ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBx/mmCIF
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- 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 (AU = BU)

他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt
- Pfam ([PF00598](#))
- eF-site ([1aa7-A](#), [1aa7-AB](#), [1aa7-B](#))
- 電子密度マップ (EDM) (molmil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

Explore PDB entries (III)

Experimental details

- ホーム
- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- リンク集

- データ登録 (OneDep)
- ヘルプ
- PDB, EMDB, BMRBへの登録

- ダウンロード
- PDBアーカイブからのデータダウンロード

- 新フォーマット
- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

- クイックリンク
- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

- 検索サービス
- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- EM Navigator
- Omokage検索

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

1AA7

INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

精密化の統計情報

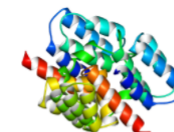
実験手法:	X-RAY DIFFRACTION (2.08 Å)		
格子定数 [Å]	66.170	66.170	135.300
格子定数 [度]	90.00	90.00	120.00
空間群	P 31 2 1		
分解能 [Å] (低 - 高)	8.00 - 2.08		
最も高い分解能シェルの値	2.200 - 2.080		
R因子	0.208		
R-work	0.20800		
最も高い分解能シェルの値	0.259		
R-free	0.28000		
最も高い分解能シェルの値	0.282		
結合長の平均二乗偏差(RMSD) [Å]	0.011		
結合角の平均二乗偏差(RMSD) [度]	1.462 (18.146°)		

回折データの統計情報

分解能 [Å] (低 - 高)	30.00 - 2.08
最も高い分解能シェルの値	-
独立反射数	20779
Rmerge_I_obs	0.048
最も高い分解能シェルの値	0.025
完全性 [%]	94.7

- ダウンロード
- Sequence (fasta)
- PDBx/mmCIF
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- 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 (AU = BU)



- 他のデータベース情報
- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt
- PFam
- PF00598
- eF-site
- 1aa7-A
- 1aa7-AB
- 1aa7-B
- 電子密度マップ (EDM) (molmil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

Explore PDB entries (IV)

Functional details

▼ ホーム

トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
リンク集

▼ データ登録 (OneDep)

ヘルプ
PDB、EMDB、BMRBへの登録

▼ ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

▼ 新フォーマット

PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

▼ クイックリンク

ヘルプ
巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

▼ 検索サービス

ヘルプ
PDB検索 (PDBj Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemie)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
EM Navigator
Omokade検索

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

1AA7

INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

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
S1	5	RNA-BINDING SITE.

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

▼ ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBx/mmCIF
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- 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 (AU = BU)



▼ 他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSPP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt
- PFam
- PF00598
- eF-site
- 1aa7-A
- 1aa7-AB
- 1aa7-B
- 電子密度マップ (EDM) (molmil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

Explore PDB entries (V)

Sequence navigator (PDB BLAST)

ホーム
トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
PDBの引用
リンク集

データ登録 (OneDep)
ヘルプ
PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード
PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット
PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

クイックリンク
ヘルプ
巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

検索サービス
ヘルプ
PDB検索 (PDB Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemie)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
EM Navigator

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

1AA7

INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

Sequence navigator - 1aa7: Chain A,B

1aa7A 完全一致: [1aa7B](#) [1ea3A](#) [1ea3B](#) [5cqeA](#) [5cqeB](#)

5cqeA

Sequence identity:	100%
Sequence Positives:	100%
E-value:	3.58032e-117
Score:	843
Query coverage:	100%

Compound: Matrix protein 1, CHLORIDE ION, 2-AMINO-2-HYDROXYACETIC ACID

[1aa7A](#) 1 MSLLTEVETVYVLSIIPSGPLKAEIAQRLEDVDFAGKNTDLEVLMEWLKTRPILSPLTRK
[5cqeA](#) 25 MSLLTEVETVYVLSIIPSGPLKAEIAQRLEDVDFAGKNTDLEVLMEWLKTRPILSPLTRK

5cqeA 完全一致: [1aa7A](#) [1aa7B](#) [1ea3A](#) [1ea3B](#) [5cqeB](#)

4pusA

Sequence identity:	99%
Sequence Positives:	100%
E-value:	1.10843e-115
Score:	831
Query coverage:	99%

Compound: Matrix protein 1, water

[1aa7A](#) 2 SLLTEVETVYVLSIIPSGPLKAEIAQRLEDVDFAGKNTDLEVLMEWLKTRPILSPLTKG
[4pusA](#) 8 SLLTEVETVYVLSIIPSGPLKAEIAQRLEDVDFAGKNTDLEVLMEWLKTRPILSPLTKG

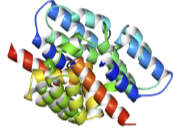
4pusA 完全一致: [4pusB](#)

ダウンロード

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

構造

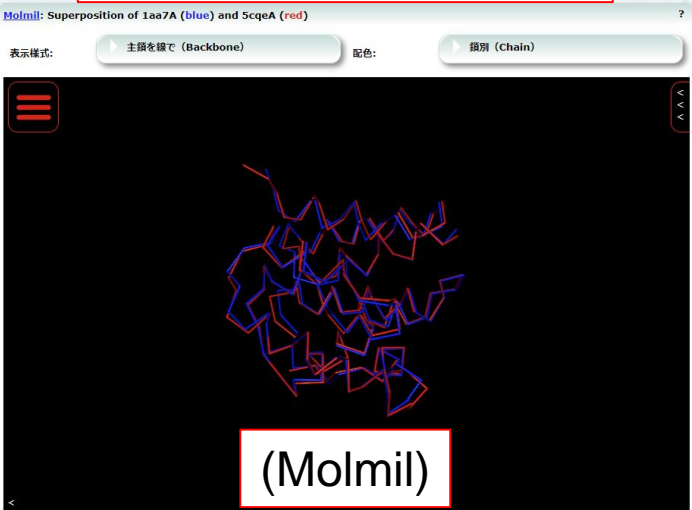
非対称単位を表示 (AU = BU)



Perform & visualize superposition between query and hit
Also supports large structures

Molmil: Superposition of 1aa7A (blue) and 5cqeA (red)

表示様式: 配色:



(Molmil)

データベース情報

- B-PDB
- e
- rdumi
- H
- P
- T
- A
- Prot
- m
- 00598
- ite
- 7-A
- 7-AB
- 7-B
- 密度マップ (EDM) (molmil)
- PDB/RDF
- Protonide Elastic

Explore PDB entries (VI)

History

▼ ホーム

- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- リンク集

▼ データ登録 (OneDep)

- ヘルプ
- PDB, EMDB, BMRBへの登録

▼ ダウンロード

- PDBアーカイブからのデータダウンロード

▼ 新フォーマット

- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

▼ クイックリンク

- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

▼ 検索サービス

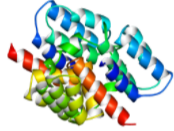
- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- EM Navigator
- Omokae検索

▼ ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBx/mmCIF
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- 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 (AU = BU)



▼ 他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt
- PFam
- PF00598
- eF-site
- 1aa7-A
- 1aa7-AB
- 1aa7-B
- 電子密度マップ (EDM) (molmil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

▼ 概要

1AA7


INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

▼ 履歴

PDBのバージョン管理については、[ヘルプページ](#)をご覧ください。

バージョン	日付	タイプ	
1-0	1998-01-28	Initial release	ファイルはありません
1-1	2008-03-24	Version format compliance	ファイルはありません
1-2	2011-07-13	Version format compliance	ファイルを表示

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク



All major and the minor versions of the latest major version are stored

Explore PDB entries (VII)

Download & view files

Home | トップページ | 統計情報 | ヘルプ | FAQ | お問い合わせ | リンク集

▼ データ登録 (OneDep) | ヘルプ | PDB, EMDB, BMRBへの登録

▼ ダウンロード | PDBアーカイブからのデータダウンロード

▼ 新フォーマット | PDBx/mmCIFについて | フォーマット変換

▼ クイックリンク | ヘルプ | 巨大構造エントリー | グループ登録エントリー | 化合物一覧 | 最新エントリー

▼ 検索サービス | ヘルプ | PDB検索 (PDBj Mine) | PDB詳細検索 | 化合物検索 (Chemie) | BMRB検索 | Sequence-Navigator | Structure-Navigator | EM Navigator | Omokae検索

概要 | 構造情報 | 実験情報 | 機能情報 | 相同蛋白質 | 履歴 | ダウンロード

1AA7

INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

Download files | Display file content

▼ リソース

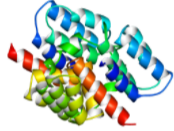
ファイル形式	ファイル名 (ファイルサイズ)	
PDB	全ての情報	pdb1aa7.ent.gz (67.27 KB) 画面表示
	全ての情報 (非圧縮)	pdb1aa7.ent (283.82 KB) 画面表示
		pdb1aa7.ent.gz (4.67 KB) 画面表示
	ヘッダのみ	画面表示
PDBx/mmCIF	1aa7.cif.gz (81.34 KB) 画面表示	
PDBML	全ての情報	1aa7.xml.gz (110.35 KB) 画面表示
	ヘッダのみ	1aa7-noatom.xml.gz (14.88 KB) 画面表示
	座標情報のみ	1aa7-extatom.xml.gz (70.55 KB) 画面表示
	全ての情報	1aa7-plus.xml.gz (112.63 KB) 画面表示
PDBMLplus	ヘッダのみ	1aa7-plus-noatom.xml.gz (17.16 KB) 画面表示
	付加情報のみ	1aa7-add.xml.gz (2.28 KB) 画面表示
RDF		1aa7.rdf.gz (31.38 KB) 画面表示

▼ ダウンロード

- Sequence (fasta)
- PDBx/mmCIF
- PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
- 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 (AU = BU)



▼ 他のデータベース情報

- RCSB-PDB
- PDBe
- Yorodumi
- CATH
- FSSP
- SCOP
- VAST
- PISA
- UniProt
- PFam
- PF00598
- eF-site
- 1aa7-A
- 1aa7-AB
- 1aa7-B
- 電子密度マップ (EDM) (molmil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

File content visualization

PDBx/mmCIF: 1aa7 - 日本蛋白質構造データバンク - Google Chrome
Secure | https://pdbj.org/displayMMCIFTree?pdbid=1aa7

```
PDBx/mmCIF: 1aa7
- data_1AA7
  + entry
  + audit_conform
  + database_2
  + pdbx_database_status
  + audit_author
  + citation
  + citation_author
  + cell
  + symmetry
  + entity
  + entity_poly
  + entity_poly_seq
  + entity_src_nat
  + struct_ref
  + struct_ref_seq
  + chem_comp
  + exptl
  + exptl_crystal
  + exptl_crystal_grow
  + diffn
  + diffn_detector
  + diffn_radiation
  + diffn_radiation_wavelength
  + diffn_source
  + reflns
  + reflns_shell
  + refine
  + refine_analyze
  + refine_hist
  + refine_ls_restr
  + refine_ls_restr_ncs
  + refine_ls_shell
  + pdbx_xplor_file
  + struct_ncs_dom
  + struct_ncs_ens
  + struct
  + struct_keywords
  + struct_asym
  + struct_biol
  + struct_conf
  + struct_conf_type
  + struct_site
  + struct_site_gen
  + database_PDB_matrix
  + atom_sites
  + atom_type
  + atom_site
  + pdbx_poly_seq_scheme
  + pdbx_struct_assembly
  + pdbx_struct_assembly_gen
  + pdbx_struct_oper_list
  + pdbx_audit_revision_history
  + pdbx_audit_revision_details
  + pdbx_audit_revision_group
  + software
```

Interactive tree
format

PDBx/mmCIF: 1aa7 - Protein Data Bank Japan - Google Chrome
Secure | https://pdbj.org/displayMMCIF?pdbid=1aa7

```
PDBx/mmCIF: 1aa7
data_1AA7
#
_entry.id 1AA7
#
_audit_conform.dict_name mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version 5.281
_audit_conform.dict_location http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/mmcif_pdbx.dic
#
loop
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB 1AA7
WWPDB D_1000170585
#
_pdbx_database_status.status_code REL
_pdbx_database_status.entry_id JAA7
_pdbx_database_status.recvd_initial_deposition_date 1997-01-24
_pdbx_database_status.deposit_site ?
_pdbx_database_status.process_site BNL
_pdbx_database_status.status_code_sf REL
_pdbx_database_status.status_code_mr ?
_pdbx_database_status.SG_entry ?
_pdbx_database_status.pdb_format_compatible Y
_pdbx_database_status.status_code_cs ?
#
loop
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Sha, B.' 1
'Luo, M.' 2
#
_citation.id primary
_citation.title 'Structure of a bifunctional membrane-RNA binding protein, influenza virus matrix protein M1.'
_citation.journal_abbrev Nat.Struct.Biol.
_citation.journal_volume 4
_citation.page_first 239
_citation.page_last 244
_citation.year 1997
_citation.journal_id_ASTH NSBIEW
_citation.country US
_citation.journal_id_ISSN 1072-8368
_citation.journal_id_CSD 2024
_citation.book_publisher ?
_citation.pdbx_database_id_PubMed 9164466
_citation.pdbx_database_id_DOI 10.1038/nsb0397-239
#
loop
_citation_author.citation_id
_citation_author.name
_citation_author.ordinal
primary 'Sha, B.' 1
primary 'Luo, M.' 2
#
_cell.entry_id 1AA7
_cell.length_a 66.170
_cell.length_b 66.170
_cell.length_c 135.300
_cell.angle_alpha 90.00
_cell.angle_beta 90.00
_cell.angle_gamma 120.00
_cell.Z_PDB 12
_cell.pdbx_unique_axis ?
#
```

Flat format

mmCIF format

- PDB flat-format has been deprecated
 - 99999 atoms
 - 62 chains
- Replaced by PDBx:mmCIF
 - No such limits
 - Clear formatting

```
data_1AA7
#
_entry.id 1AA7
#
_audit_conform.dict_name mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version 5.281
_audit_conform.dict_location http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/mmcif_pdbx.dic
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB 1AA7
WNPDB D_1000170585
#
_pdbx_database_status.status_code REL
_pdbx_database_status.entry_id 1AA7
_pdbx_database_status.recvd_initial_deposition_date 1997-01-24
_pdbx_database_status.deposit_site ?
_pdbx_database_status.process_site BNL
_pdbx_database_status.status_code_sf REL
_pdbx_database_status.status_code_mr ?
_pdbx_database_status.SG_entry ?
_pdbx_database_status.pdb_format_compatible Y
_pdbx_database_status.status_code_cs ?
#
loop_
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Sha, B.' 1
'Luo, M.' 2
#
_citation.id primary
_citation.title 'Structure of a bifunctional membrane-RNA binding p
_citation.journal_abbrev Nat.Struct.Biol.
_citation.journal_volume 4
_citation.page_first 239
_citation.page_last 244
_citation.year 1997
_citation.journal_id_ASTM NSBIEW
_citation.country US
_citation.journal_id_ISSN 1072-8368
_citation.journal_id_CSD 2024
_citation.book_publisher ?
_citation.pdbx_database_id_PubMed 9164466
_citation.pdbx_database_id_DOI 10.1038/nsb0397-239
#
loop_
_citation_author.citation_id
_citation_author.name
_citation_author.ordinal
primary 'Sha, B.' 1
primary 'Luo, M.' 2
#
_cell.entry_id 1AA7
_cell.length_a 66.170
_cell.length_b 66.170
_cell.length_c 135.300
_cell.angle_alpha 90.00
_cell.angle_beta 90.00
_cell.angle_gamma 120.00
_cell.Z_PDB 12
_cell.pdbx_unique_axis ?
#
```

mmJSON format

- mmCIF is difficult to parse
- mmJSON is easy to parse in modern languages
- Typing of data is included in the mmJSON format

```
1  {
2  "data_1AA7": {
3    "entry": {
4      "id": ["1AA7"]
5    },
6    "audit_conform": {
7      "dict_name": ["mmcif_pdbx.dic"],
8      "dict_version": ["5.281"],
9      "dict_location": ["http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/mmcif_pdbx.dic"]
10   },
11   "database_2": {
12     "database_id": ["PDB", "WWPDB"],
13     "database_code": ["1AA7", "D_1000170585"]
14   },
15   "pdbx_database_status": {
16     "status_code": ["REL"],
17     "entry_id": ["1AA7"],
18     "recvd_initial_deposition_date": ["1997-01-24"],
19     "deposit_site": [null],
20     "process_site": ["BNL"],
21     "status_code_sf": ["REL"],
22     "status_code_mr": [null],
23     "SG_entry": [null],
24     "pdb_format_compatible": ["Y"],
25     "status_code_cs": [null]
26   },
27   "audit_author": {
28     "name": ["Sha, B.", "Luo, M."],
29     "pdbx_ordinal": [1, 2]
30   },
31   "citation": {
32     "id": ["primary"],
33     "title": ["Structure of a bifunctional membrane-RNA binding protein, influenz
34     "journal_abbrev": ["Nat.Struct.Biol."],
35     "journal_volume": ["4"],
36     "page_first": ["239"],
37     "page_last": ["244"],
38     "year": [1997],
39     "journal_id_ASTM": ["NSBIEW"],
40     "country": ["US"],
41     "journal_id_ISSN": ["1072-8368"],
42     "journal_id_CSD": ["2024"],
43     "book_publisher": [null],
44     "pdbx_database_id_PubMed": [9164466],
45     "pdbx_database_id_DOI": ["10.1038/nsb0397-239"]
46   },
47   "citation_author": {
48     "citation_id": ["primary", "primary"],
49     "name": ["Sha, B.", "Luo, M."],
```

Chemie search (I)

ホーム

トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
PDBJの引用
リンク集

データ登録 (OneDep)

ヘルプ
PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

クイックリンク

ヘルプ
巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

検索サービス

ヘルプ
PDB検索 (PDB Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemie)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
FM Navigator

PDB: 58 件 ウェブページ: 1 件 ステータス検索: 0 件 化合物検索: 2 件 BIRD: 0 件

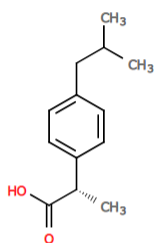
変換クエリ:

(ibuprofen)

簡易検索:

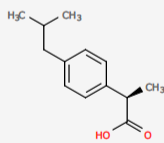
イブプロフェン

化合物検索へ



IBP

表記: IBUPROFEN
組成式: C₁₃ H₁₈ O₂
SMILES: O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C
InChi: InChi=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)/t10-/m0/s1
別名: 2-(4-ISOBUTYLPHENYL)PROPIONIC ACID
定義日: 2000-04-10
最終更新日: 2011-06-04
識別子 (ID): (2S)-2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid



IZP

表記: (2R)-2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid
組成式: C₁₃ H₁₈ O₂
SMILES: O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C
InChi: InChi=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)/t10-/m1/s1
別名: (R)-Ibuprofen
定義日: 2010-11-15
最終更新日: 2011-07-07
識別子 (ID): (2R)-2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid

検索結果

全ヒット件数: 2
表示件数: 2
表示順: 関連性が高い順
Auto-pager:

表示順

関連性が高い順
Comp ID昇順 (0→9,a→z)
Comp ID降順 (z→a,9→0)
定義日の古い順
定義日の新しい順
更新日の古い順
更新日の新しい順

Advanced search version (including SMILES)



Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

Chemie search (II)

- ホーム
 - トップページ
 - 統計情報
 - ヘルプ
 - FAQ
 - お問い合わせ
 - PDBjの引用
 - リンク集
- データ登録 (OneDep)
 - ヘルプ
 - PDB、EMDB、BMRBへの登録
- ダウンロード
 - PDBアーカイブからのデータダウンロード
- 新フォーマット
 - PDBx/mmCIFについて
 - フォーマット変換
- クイックリンク
 - ヘルプ
 - 巨大構造エントリー
 - グループ登録エントリー
 - 化合物一覧
 - 最新エントリー
- 検索サービス
 - ヘルプ
 - PDB検索 (PDBj Mine)
 - PDB詳細検索
 - 化合物検索 (Chemie)**
 - BMRB検索
 - Sequence-Navigator
 - Structure-Navigator
 - FM Navigator

概要 配置情報 関連するPDBエントリー

IBP

概要

表記: IBUPROFEN
別名: 2-(4-ISOBUTYLPHENYL)PROPIONIC ACID
組成式: C13 H18 O2
電荷: 0
分子量: 206.281 Da
分子種別: NON-POLYMER

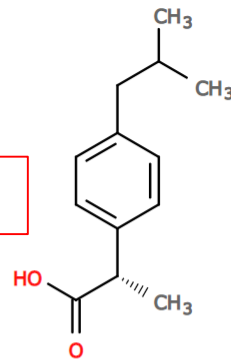
化合物名

プログラム	バージョン	表記
ACDLabs	10.04	(2S)-2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid
OpenEye OEToolkits	1.5.0	(2S)-2-[4-(2-methylpropyl)phenyl]propanoic acid

化合物記述子 (線形表記)


種別	プログラム	バージョン	表記
SMILES	ACDLabs	10.04	O=C(O)C(c1ccc(cc1)CC(C)C)C
SMILES_CANONICAL	CACTVS	3.341	CC(C)Cc1ccc(cc1)[C@H](C)C(=O)=O
SMILES	CACTVS	3.341	CC(C)Cc1ccc(cc1)[CH](C)C(=O)=O
SMILES_CANONICAL	OpenEye OEToolkits	1.5.0	CC(C)Cc1ccc(cc1)[C@H](C)C(=O)O
SMILES	OpenEye OEToolkits	1.5.0	CC(C)Cc1ccc(cc1)C(C)C(=O)O
InChI	InChI	1.03	InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H
InChIKey	InChI	1.03	HEFNWSXXWATRW-JTQLQIEISA-N

平面表示



2D

立体表示



JSmolで表示

Interactive 3D viewer (Molmil)

Facebook Twitter PDB Worldwide Protein Data Bank Foundation

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

エントリー情報

定義日: 2000-04-10
最終更新日: 2011-06-04
公開状態: REL
登録処理サイト: RCSB

ダウンロード

Download & display files

Chemie search (III)

- ホーム
 - トップページ
 - 統計情報
 - ヘルプ
 - FAQ
 - お問い合わせ
 - PDBJの引用
 - リンク集
- データ登録 (OneDep)
 - ヘルプ
 - PDB, EMDB, BMRBへの登録
- ダウンロード
 - PDBアーカイブからのデータダウンロード
- 新フォーマット
 - PDBx/mmCIFについて
 - フォーマット変換
- クイックリンク
 - ヘルプ
 - 巨大構造エントリー
 - グループ登録エントリー
 - 化合物一覧
 - 最新エントリー
- 検索サービス
 - ヘルプ
 - PDB検索 (PDBj Mine)
 - PDB詳細検索
 - 化合物検索 (Chemie)**
 - BMRB検索
 - Sequence-Navigator
 - Structure-Navigator
 - FM Navigator

概要 配置情報 関連するPDBエントリー

IBP

10 PDBエントリー

1EQG



THE 2.6 ANGSTROM MODEL OF OVINE COX-1 COMPLEXED WITH IBUPROFEN

分子名称: PROSTAGLANDIN H2 SYNTHASE-1, N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE, B-OCTYLGLUCOSIDE, ...
著者: [Loll, P.J.](#), [Selinsky, B.S.](#), [Gupta, K.](#), [Sharkey, C.T.](#)
登録日: 2000-04-04
公開日: 2001-04-11
最終更新日: 2018-02-28
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.61 Å)
主引用文献: **Structural analysis of NSAID binding by prostaglandin H2 synthase: time-dependent and time-independent inhibitors elicit identical enzyme conformations.**
Biochemistry, 40, 2001

2BXG



HUMAN SERUM ALBUMIN COMPLEXED WITH IBUPROFEN

分子名称: SERUM ALBUMIN, IBUPROFEN
著者: [Ghuman, J.](#), [Zunzain, P.A.](#), [Petitpas, J.](#), [Bhattacharya, A.A.](#), [Curry, S.](#)
登録日: 2005-07-26
公開日: 2005-09-22
最終更新日: 2011-07-13
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.7 Å)
主引用文献: **Structural Basis of the Drug-Binding Specificity of Human Serum Albumin.**
J.Mol.Biol., 353, 2005

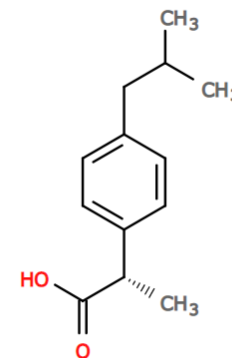
2PWS



CRYSTAL STRUCTURE OF THE COMPLEX FORMED BETWEEN PHOSPHOLIPASE A2 AND 2-(4-ISOBUTYL-PHENYL)-PROPIONIC ACID AT 2.2 Å RESOLUTION

分子名称: Phospholipase A2 VRV-PL-VIIIa, IBUPROFEN
著者: [Kumar, S.](#), [Singh, N.](#), [Sharma, S.](#), [Kaur, P.](#), [Singh, T.P.](#)
登録日: 2007-05-13
公開日: 2007-05-22
最終更新日: 2011-07-13
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.21 Å)
主引用文献: **Crystal structure of the complex formed between phospholipase A2 and 2-(4-isobutyl-phenyl)-propionic acid at 2.2 resolution**
To be Published

平面表示



立体表示



[ヘルプ](#)
[JSmolで表示](#)

エントリー情報

定義日: 2000-04-10
最終更新日: 2011-06-04
公開状態: REL
登録処理サイト: RCSB

ダウンロード

BIRD/PRD search (I)

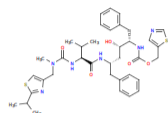
PDB: 43 件 ウェブページ: 1 件 ステータス検索: 1 件 化合物検索: 2 件 BIRD: 2 件

変換クエリ:

(ritonavir | rtv)

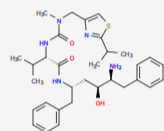
Quick search:

リトナビル



PRD_001001

Name: RITONAVIR
Formula: C37 H48 N6 O5 S2
Definition date: 2012-12-12
Last modified: 2012-12-12



PRD_001003

Name: N-[(2S,4S,5S)-5-amino-4-hydroxy-1,6-diphenylhexan-2-yl]-N~2~-((methyl)[2-(propan-2-yl)-1,3-thiazol-4-yl]methyl)carbonyl-L-valinamide
Formula: C32 H45 N5 O3 S
Definition date: 2012-12-12
Last modified: 2012-12-12

検索結果

全ヒット件数: 2
表示件数: 2
表示順: Hit score (from highest)
Auto-pager:

表示順

Hit score (from highest)
PRD ID
PRD ID descending
Definition date (from oldest)
Definition date (from newest)
Modification date (from oldest)
Modification date (from newest)

ホーム

トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
PDBの引用
リンク集

データ登録 (OneDep)

ヘルプ
PDB、EMDB、BMRBへの登録

ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

クイックリンク

ヘルプ
巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

検索サービス

ヘルプ
PDB検索 (PDBj Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemie)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
FM Navigator



Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

BIRD/PRD search (II)

ホーム

- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- PDBの引用
- リンク集

データ登録 (OneDep)

- ヘルプ
- PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

- PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

クイックリンク

- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

検索サービス

- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- FM Navigator

概要 配置情報 関連するPDBエントリー

PRD_001001

概要

名称: RITONAVIR
別名: A-84538
組成式: C37 H48 N6 O5 S2
電荷: 0
分子量: 720.944
分子種別: peptide-like
ポリマー配列: [013](#), [015](#), [VAL](#), [019](#)
非ポリマー要素:
BIRDクラス: Inhibitor
PDB中の表現: single molecule
化合物の詳細:
表記:

プログラム	バージョン	名称
ACDLabs	12.01	N-[(2S,4S,5S)-4-hydroxy-1,6-diphenyl-5-[[[(1,3-thiazol-5-ylmethoxy)carbonyl]amino]hexan-2-yl]-N~2~-(methyl[[2-(propan-2-yl)-1,3-thiazol-4-yl]methyl]carbamoyl)-L-valinamide
OpenEye OEToolkits	1.7.0	1,3-thiazol-5-ylmethyl N-[(2S,3S,5S)-3-hydroxy-5-[[[(2S)-3-methyl-2-[[methyl-[(2-propan-2-yl-1,3-thiazol-4-yl)methyl]carbamoyl]amino]butanoyl]amino]-1,6-diphenyl-hexan-2-yl]carbamate

種別	プログラム	バージョン	表記
SMILES	ACDLabs	12.01	<chem>O=C(O[Cc1scnc1]NC(Cc2ccccc2)C(O)CC(NC(=O)C(NC(=O)N(Cc3nc(sc3)C(C)C)C(C)C)Cc4cccc4</chem>
SMILES_CANONICAL	CACTVS	3.370	<chem>CC(C)[C@H](NC(=O)N(C)Cc1csc(n1)C(C)C)C(=O)N[C@H](C[C@H](O)[C@H](Cc2ccccc2)NC(=O)C</chem>
SMILES	CACTVS	3.370	<chem>CC(C)[CH](NC(=O)N(C)Cc1csc(n1)C(C)C)C(=O)N[CH](C[CH](O)[CH](Cc2ccccc2)NC(=O)C</chem>
SMILES_CANONICAL	OpenEye OEToolkits	1.7.0	<chem>CC(C)c1nc(cs1)CN(C)C(=O)N[C@@H](C(C)C)C(=O)N[C@H](Cc2ccccc2)C[C@@H]([C@</chem>
SMILES	OpenEye OEToolkits	1.7.0	<chem>CC(C)c1nc(cs1)CN(C)C(=O)NC(C(C)C)C(=O)NC(Cc2ccccc2)CC(C(Cc3ccccc3)NC(=O)OCc4</chem>
InChi	InChi	1.03	<chem>InChi=1S/C37H48N6O5S2/c1-24(2)33(42-36(46)43(5)20-29-22-49-35(40-29)25(3)4)34(44)31(17-27-14-10-7-11-15-27)41-37(47)48-21-30-19-38-23-50-30/h6-15,19,22-25,28,31-33,44H,16-18,20-21H2,1-5H3,(H,3,9,45)(H,41,47)(H,42,46)/t28-,31-,32-,33-/m/s1</chem>
InChIKey	InChI	1.03	<chem>NCDNCNXCDXHOMX-XGKFQTDJSA-N</chem>

2D

平面表示



立体表示



Interactive 3D viewer (Molmil)

Download & display files

エントリー情報

公開日: 2012-12-12
最終更新日: 2012-12-12
登録処理サイト: RCSB

構成化合物: [013](#), [015](#), [VAL](#), [019](#)

ダウンロード
画面表示

23

BIRD/PRD search (III)

- ホーム
 - トップページ
 - 統計情報
 - ヘルプ
 - FAQ
 - お問い合わせ
 - PDBjの引用
 - リンク集
- データ登録 (OneDep)
 - ヘルプ
 - PDB, EMDB, BMRBへの登録
- ダウンロード
 - PDBアーカイブからのデータダウンロード
- 新フォーマット
 - PDBx/mmCIFについて
 - フォーマット変換
- クイックリンク
 - ヘルプ
 - 巨大構造エントリー
 - グループ登録エントリー
 - 化合物一覧
 - 最新エントリー
- 検索サービス
 - ヘルプ
 - PDB検索 (PDBj Mine)
 - PDB詳細検索
 - 化合物検索 (Chemie)
 - BMRB検索
 - Sequence-Navigator
 - Structure-Navigator
 - FM Navigator

概要 配置情報 関連するPDBエントリー

PRD_001001

16 PDBエントリー

1HXW



HIV-1 PROTEASE DIMER COMPLEXED WITH A-84538

分子名称: HIV-1 PROTEASE, RITONAVIR
著者: [Park, C.H.](#), [Nienaber, V.](#), [Kong, X.P.](#)
登録日: 1997-01-24
公開日: 1998-02-04
最終更新日: 2013-02-27
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (1.8 Å)
主引用文献: **ABT-538 is a potent inhibitor of human immunodeficiency virus protease and has high oral bioavailability in humans.**
Proc.Natl.Acad.Sci.USA, 92, 1995

1N49



VIABILITY OF A DRUG-RESISTANT HIV-1 PROTEASE VARIANT: STRUCTURAL INSIGHTS FOR BETTER ANTI-VIRAL THERAPY

分子名称: Protease, RITONAVIR
著者: [Prabu-Jeyabalan, M.](#), [Nalivaika, E.A.](#), [King, N.M.](#), [Schiffer, C.A.](#)
登録日: 2002-10-30
公開日: 2003-01-07
最終更新日: 2017-10-11
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.2 Å)
主引用文献: **Viability of a Drug-Resistant Human Immunodeficiency Virus Type 1 Protease Variant: Structural Insights for Better Antiviral Therapy**
J.VIROL., 77, 2003

1RL8

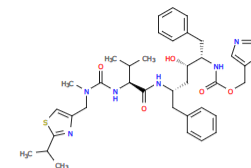


CRYSTAL STRUCTURE OF THE COMPLEX OF RESISTANT STRAIN OF HIV-1 PROTEASE(V82A MUTANT) WITH RITONAVIR

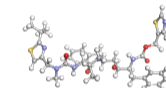
分子名称: protease RETROPEPSIN, RITONAVIR
著者: [Rezacova, P.](#), [Brynda, J.](#), [Sedlacek, J.](#), [Konvalinka, J.](#), [Fabry, M.](#), [Horejsi, M.](#)
登録日: 2003-11-25
公開日: 2005-04-19
最終更新日: 2013-02-27
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2 Å)
主引用文献: **Crystal structure of the complex of resistant strain of hiv-1 protease(v82a mutant) with ritonavir**
To be Published, 2005

平面表示

1920px x 1080px



立体表示



エントリー情報

公開日: 2012-12-12
最終更新日: 2012-12-12
登録処理サイト: RCSB

構成化合物: [013](#)
[015](#)
[VAL](#)
[019](#)

ダウンロード

画面表示

Searching by PDBj Mine (II)

Advanced search

136594

件公開中 (2018-01-03
00:00 UTC / 09:00 JST)

PDBj
Protein Data Bank Japan



English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)



wwPDB RCSB PDB PDBj BMRB Adv. Search Search help

ホーム

トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
リンク集

データ登録 (OneDep)

ヘルプ
PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換

クイックリンク

ヘルプ
巨大構造エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

検索サービス

ヘルプ
PDB検索 (PDBj Mine)
PDB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: - -

最終更新日: 以降: - -
以前: - -

文献著者:

論文題名:

雑誌名:

発行年:

巻番号:

主引用文献のみ:

ポリペプチド(D体)

含む

含まない

どちらでもよい

ポリペプチド(L体)

含む

含まない

どちらでもよい

詳細条件を選択して下さい

デフォルト

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
主引用文献のみ
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

Mine 2 RDB Search (I)

- Very flexible way to search all metadata (i.e. excluding coordinates) of the PDB
- All PDB data is stored in an RDB (Relational Data Base)
 - Table structure is the same as in the mmCIF format
- SQL (Structured Query Language) is used to query the RDB
- Dump files: <http://ftp.pdbj.org/mine2/>

Mine 2 RDB Search (II)

SQL 検索

検索クエリを入力してください:

注: 検索に時間がかかり過ぎると処理に失敗しエラーが表示されることがあります。その時は処理が軽くなるようクエリ内容を見直してください。

```
SELECT s.*, r.ls_d_res_high as reso,
       LENGTH(p.pdbx_seq_one_letter_code_can) as len,
       ('>' || s.pdbid || s.chain) as header,
       p.pdbx_seq_one_letter_code_can as aaseq
FROM sifts.pdb_chain_pfam s
JOIN refine r on s.pdbid = s.pdbid
JOIN entity_poly p on s.pdbid = s.pdbid
AND s.chain = ANY(regexp_split_to_array(p.pdbx_strand_id, ','))
WHERE pfam_id = 'PF00171'
AND r.ls_d_res_high < 2.0
ORDER BY reso, len, s.chain
```

Total number of results: 369

[5jry](#)
chain: A

sp_primary: A0A0H3KPC8

pfam_id: PF00171

coverage: 1

reso: 1.2

len: 491

header: >5jryA

aaseq:
MAHHHHHMLKETYPYLANAAVYANTDLEVTDKYSGKVATRVADAKAIDAAGAATKPMRELPAKQAVLDHC
VARFRERFDELAECIEAGKPNDAKGEVTRLIDTFRVASEEAVRIDGEVNLLEISARAQGYTYTRRVPICGSFIS
FNFPLNLAHKVAPALAAAGCPFLKPSASRTPVGLIIGVLAETDLPKGFVSLPAHRDGADLFTTDDRFRLLSFTGSPA
VGMWALKEKAGKKVVLLEGGNAAIVDADQLDRLDYVDRDLAFGAFYQSGQSCIGVQRILAHADYDALRDKLIAKTRSL
KMGDPKDPSTFVGPIMISESERLLSGWMDAAVAAGAKIVAGGKVDGAMFEATLLENVGRDQDLYRKEAFGPIALEKFRD
FDDALARVNDSDFGQLAQGVFTDSLHTQQAWDELEVGGVINDVPSFRVDNMPYGGVKDGLGREGIRYAIEDMTEPRLL VVRRR

[4e3x](#)
chain: A

sp_primary: Q8CHT0

pfam_id: PF00171

coverage: 1

reso: 1.24

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 >

Download

検索

Searches for
PDB entries
with Pfam ID
"PF00171" and
a resolution
better than 2 Å

ホーム

トップページ

統計情報

ヘルプ

FAQ

お問い合わせ

PDBの引用

リンク集

データ登録 (OneDep)

ヘルプ

PDB, EMDB, BMRBへの登録

ダウンロード

PDBアーカイブからのデータダウンロード

新フォーマット

PDBx/mmCIFについて

フォーマット変換

クイックリンク

ヘルプ

巨大構造エントリー

グループ登録エントリー

化合物一覧

最新エントリー

検索サービス

ヘルプ

PDB検索 (PDB Mine)

PDB詳細検索

化合物検索 (Chemie)

BMRB検索

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

FM Navigator

Mine 2 RDB Search (III)

- ホーム
- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- PDBjの引用
- リンク集

- データ登録 (OneDep)
- ヘルプ
- PDB、EMDB、BMRBへの登録 [外部リンク](#)

- ダウンロード
- PDBアーカイブからのデータダウンロード

- 新フォーマット
- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換 [外部リンク](#)

- クイックリンク
- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

- 検索サービス
- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)**
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索 [外部リンク](#)
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- FM Navigator [外部リンク](#)

SQL 検索 ?

検索クエリを入力してください:

注: 検索に時間がかかり過ぎると処理に失敗しエラーが表示されることがあります。その時は処理が軽くなるようクエリ内容を見直してください。

[検索](#)

```
SELECT p.pdbid, p.id
FROM pdbj.chem_comp p
JOIN cc.pdbx_chem_comp_descriptor cc ON cc.comp_id = p.id
WHERE cc.type = 'InChIKey'
AND cc.descriptor = 'ZKHQWZAMYRWXGA-KQYNXXCUSA-N'
```

Searches for PDB entries that contain compounds with a specific InChIKey

- Download
- Custom XML format
- Comma-separated values
- Tab-separated values
- TSV (unescaped special characters)

Total number of results: 1172

5ld1 id: ATP
1h8h id: ATP
5vc7 id: ATP
3rte id: ATP
5i9e id: ATP
4aar id: ATP
4akh id: ATP
4akg id: ATP
4btj id: ATP

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 >

Mine 2 RDB Search (IV)

- ホーム
- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- PDBjの引用
- リンク集

- データ登録 (OneDep)
- ヘルプ
- PDB, EMDB, BMRBへの登録 [🔗](#)

- ダウンロード
- PDBアーカイブからのデータダウンロード

- 新フォーマット
- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換 [🔗](#)

- クイックリンク
- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

- 検索サービス
- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)**
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索 [🔗](#)
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- FM Navigator [🔗](#)

SQL 検索

検索クエリを入力してください:

注: 検索に時間がかかり過ぎると処理に失敗しエラーが表示されることがあります。その時は処理が軽くなるようクエリ内容を見直してください。

検索

```
SELECT p.pdbid, p.id, p.name, r.db_code
FROM pdb1.chem\_comp p
JOIN ccmodel.pdbx\_chem\_comp\_model m ON m.comp_id = p.id
JOIN ccmodel.pdbx\_chem\_comp\_model\_reference r ON r.model_id = m.model_id
WHERE r.db_name = 'CSD' AND r.db_code = 'YARXEW'
```

Total number of results: 143

2amq
id: 010
name: phenylmethanol
db_code: YARXEW
2hob
id: 010
name: phenylmethanol
db_code: YARXEW
2q6f
id: 010
name: phenylmethanol
db_code: YARXEW
3d23
id: 010
name: phenylmethanol
db_code: YARXEW
3iwm
id: 010
name: phenylmethanol

1 2 3 4 5 6 >

Searches for PDB entries that contain compounds with a specific CSD ID

Download

- Custom XML format
- Comma-separated values
- Tab-separated values
- TSV (unescaped special characters)

Mine 2 RDB Search (V)

- ホーム
- トップページ
- 統計情報
- ヘルプ
- FAQ
- お問い合わせ
- PDBjの引用
- リンク集

- データ登録 (OneDep)
- ヘルプ
- PDB、EMDB、BMRBへの登録

- ダウンロード
- PDBアーカイブからのデータダウンロード

- 新フォーマット
- PDBx/mmCIFについて
- フォーマット変換

- クイックリンク
- ヘルプ
- 巨大構造エントリー
- グループ登録エントリー
- 化合物一覧
- 最新エントリー

- 検索サービス
- ヘルプ
- PDB検索 (PDBj Mine)**
- PDB詳細検索
- 化合物検索 (Chemie)
- BMRB検索
- Sequence-Navigator
- Structure-Navigator
- FM Navigator

SQL 検索

検索クエリを入力してください:

注: 検索に時間がかかり過ぎると処理に失敗しエラーが表示されることがあります。その時は処理が軽くなるようクエリ内容を見直してください。

検索

```
SELECT mf.pdbid, rm.name
FROM pdbj.pdbx_molecule_features mf
JOIN prd.pdbx_reference_molecule rm ON rm.prd_id = mf.prd_id
WHERE rm.class = 'Antibiotic'
AND rm.formula_weight < 1000.0
```

Total number of results: 23

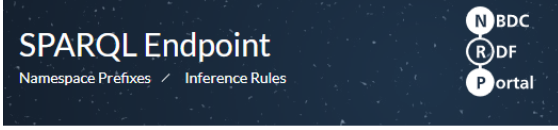
4v9p	name: Viomycin
4v9o	name: Viomycin
4v7d	name: Viomycin
3kti	name: ADEP1
3ktj	name: ADEP2
3ktk	name: ADEP2
3mt6	name: ADEP1
4jna	name: Dimethyl FK228
4u0g	name: ADEP-2B5Me

Download

- Custom XML format
- Comma-separated values
- Tab-separated values
- TSV (unescaped special characters)

Searches for PDB entries that contain compounds of a specific class (antibiotic) and a molecular weight less than 1 kD

RDF & SPARQL



- <https://rdf.wwpdb.org/>
- <http://ftp.pdbj.org/RDF/>
- Integrated search: <https://integbio.jp/rdf/sparql>
- <https://integbio.jp/rdf/?view=detail&id=pdbj>

```
Query:
#####
# Find source organisms and links to taxonomy.
#

PREFIX PDBO: <https://rdf.wwpdb.org/schema/pdbx-v50.owl#>

SELECT ?entity ?src ?name ?tax
FROM <http://rdf.integbio.jp/dataset/pdbj>
WHERE {
  { ?entity PDBO:referenced_by_entity_src_gen ?src .
    ?src PDBO:entity_src_gen.pdbx_gene_src_scientific_name ?name ;
      PDBO:link_to_taxonomy_source ?tax .
  }
  UNION
  { ?entity PDBO:referenced_by_entity_src_nat ?src .
    ?src PDBO:entity_src_nat.pdbx_organism_scientific ?name ;
      PDBO:link_to_taxonomy_source ?tax .
  }
}
```

Results Format:

WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

PDB entry: 1AA7 <https://rdf.wwpdb.org/pdb/1AA7> Download RDF file for this entry

Search PDB/RDF, chem-comp/PDBF

Submit Reset

All wwPDB/RDF files (RDF/XML format) can be downloaded at <ftp://ftp.pdbj.org>.

The SPARQL endpoint for wwPDB/RDF (along with many other databases) is available at the NBDC RDF portal: <http://integbio.jp/?view=detail&id=pdbj>

Download XSLT stylesheet for converting PDBML to RDF: [PDBML2rdf.xsl.gz](https://integbio.jp/rdf/xsl/gz) (zipped 20Kb)

Subject: <https://rdf.wwpdb.org/pdb/1AA7>

Predicate	Object
dcterms:identifier	1AA7
skos:altLabel	1AA7
dc:title	INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0
PDBo:link_to_pdbml_natom	ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/data/structures/all/XML/1aa7.xml.gz
PDBo:link_to_pdbml_extatom	ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/data/structures/all/XML/extatom1aa7_extatom.xml.gz
owl:sameAs	https://rdf.wwpdb.org/pdb/1aa7
rdfs:seeAlso	https://pdbj.org/pdb/1AA7
rdfs:seeAlso	https://www.ebi.ac.uk/ebidirect/explora.do?structureid=1AA7
PDBo:databaseName	1AA7:nomat
PDBo:has_atom_siteCategory	PDB:1AA7/atom_siteCategory
PDBo:has_atom_typeCategory	PDB:1AA7/atom_typeCategory
PDBo:has_authr_authorCategory	PDB:1AA7/authr_authorCategory
PDBo:has_authr_confomrCategory	PDB:1AA7/authr_confomrCategory
PDBo:has_cellCategory	PDB:1AA7/cellCategory
PDBo:has_chem_compCategory	PDB:1AA7/chem_compCategory
PDBo:has_clatationCategory	PDB:1AA7/clatationCategory
PDBo:has_clatation_authrCategory	PDB:1AA7/clatation_authrCategory
PDBo:has_database_2Category	PDB:1AA7/database_2Category
PDBo:has_database_PDB_matrixCategory	PDB:1AA7/database_PDB_matrixCategory
PDBo:has_diffmCategory	PDB:1AA7/diffmCategory
PDBo:has_diffm_detectorCategory	PDB:1AA7/diffm_detectorCategory
PDBo:has_diffm_radiationCategory	PDB:1AA7/diffm_radiationCategory
PDBo:has_diffm_radiation_wavelengthCategory	PDB:1AA7/diffm_radiation_wavelengthCategory
PDBo:has_diffm_sourceCategory	PDB:1AA7/diffm_sourceCategory
PDBo:has_entityCategory	PDB:1AA7/entityCategory
PDBo:has_entity_polyCategory	PDB:1AA7/entity_polyCategory

REST APIs

- PDBj website = REST + JS interface
- Download files (mmCIF, PDBML, PDB, mmJSON, etc)
- Perform search queries (Quick, Advanced, SQL, etc)
- <https://pd bj.org/help/rest-interface>
- <https://pd bj.org/help/rest-interface-examples>

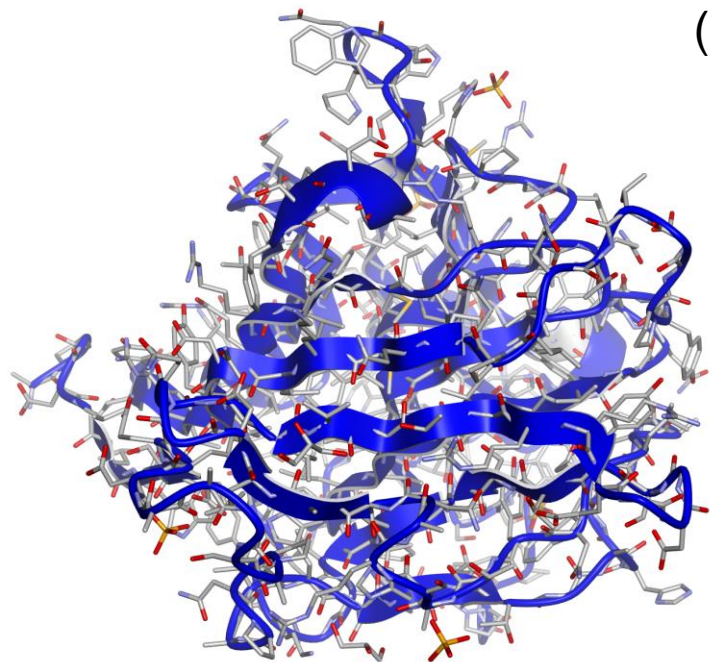
```
1 import urllib2
2
3 try: import json
4 except: import simplejson as json
5
6 url = "https://pd bj.org/rest/advancedSearch"
7 params = "r_date_year_after=2014&r_date_month_after=1&r_date_day_after=1&method=1&res_max=1.8&sortBy=8&field=pdbid&field=struct_title&field=resolution"
8
9 json_data = urllib2.urlopen(url+"?" +params).read()
10 data = json.loads(json_data)
11
12 total = data["total"]
13 results = data["results"]
14 print "Total number of results:", total
15 print "Printing the first 10 results:"
16 for i in xrange(10): print results[i][0], results[i][1], results[i][2]
```

Visualization using Molmil (I)



https://pd bj.org/molmil_beta/

Active for services via
<https://pd bj.org/appCustomizations>
(slide #4)



Pymol commands

- **select** (select sc12, resi 12 and sidechain)
- **color** (color cyan, model #1 and symbol C)
- **cartoon_color** (cartoon_color cyan, model #1)
- **set_color** (set_color mycolor 12 12 12)
- **show** (show sticks, sidechain)
- **hide** (hide cartoon, model #1)
- **turn** (turn x, 90)
- **move** (move x, 90)
- **fetch** (fetch 1crn)
- **load** (load
https://pd bj.org/rest/displayPromodeEfile?format=anm&id=1u bq_1, format=pdb)
- **mplay**
- **mstop**
- **origin** (origin chain A)
- **set** (stick_radius f, depth_cue 1/0, orthoscopic on/off, cartoon_smooth_loops 0/2)
- **bg_color** (bg_color cyan)
- **label** (label resi 12 and sidechain, Res12)
- **save** (save filename.pdb, model #1 and name CA, 0, pdb)
- **viewport** (viewport 500, 500)
- **findseq** (findseq ACDEF, model #1, my_seq)

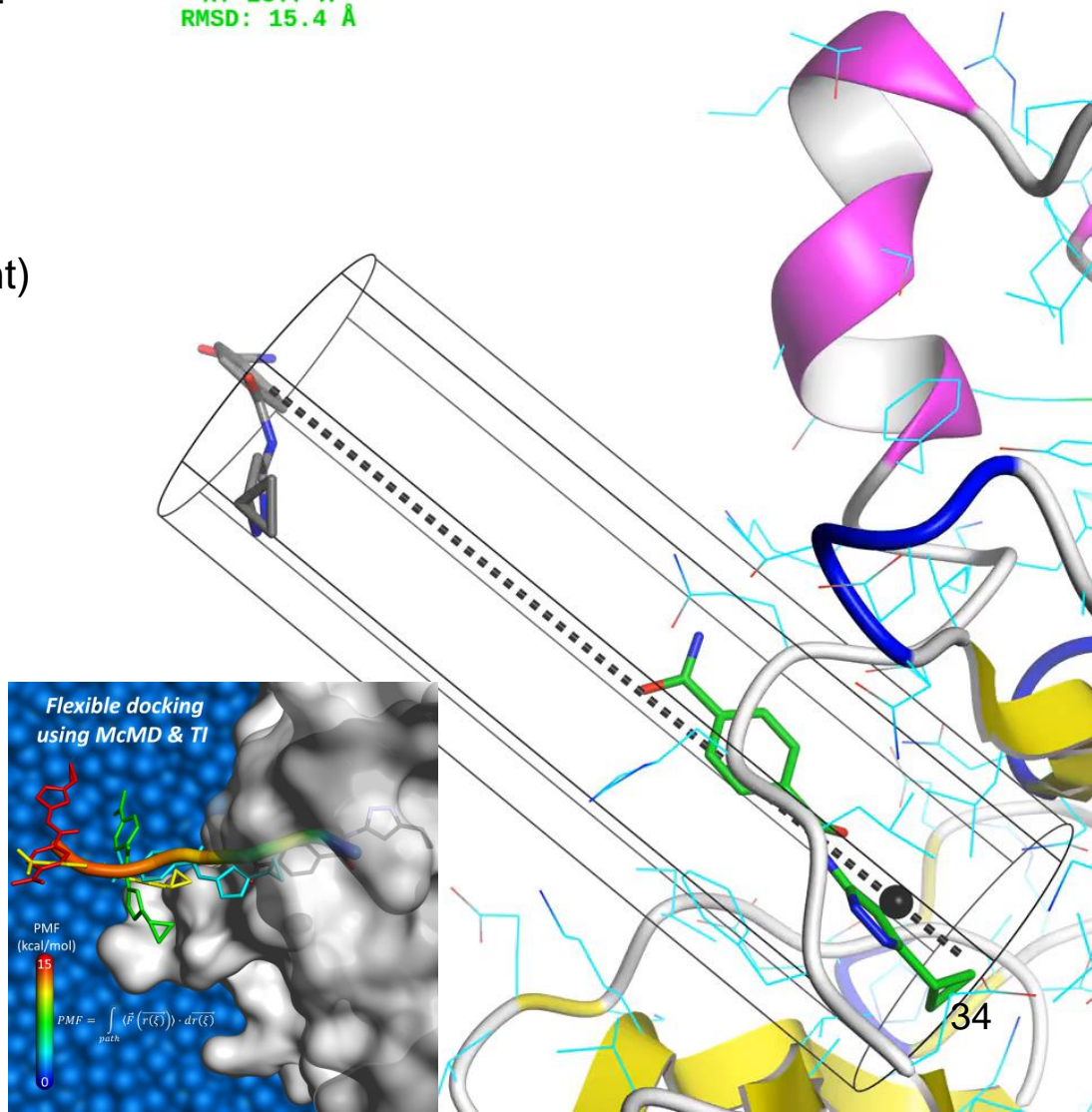
```
Pymol-like command interface bound.  
fetch 3atg  
show sticks, all  
cartoon_color blue, model #1  
turn y, -40  
>
```


Visualization using Molmil (II)

- Drag-and-drop multiple files
- Load in user-specified files of various formats:
 - PDB (.pdb/.ent)
 - mmCIF (.cif)
 - GROMACS (.gro, .trr, .xtc)
 - myPRESTO (.cod, .cor, .mnt)
 - CCP4 (.ccp4)
 - MOL MDL (.mdl, .mol, .sdl)
 - MOL2 (.mol2)
 - XYZ (.xyz)
 - efvet (.efvet)
 - MPBF (.mpbf)
 - MJS (.mjs)
- Embedding of Molmil
- Scripting of Molmil (.mjs & pymol-like commands)
- High quality image & movies

Time: 0.00 ns
Energy: -62347 kcal/mol
 λ : 23.7 Å
RMSD: 15.4 Å

Bekker et al, 2017

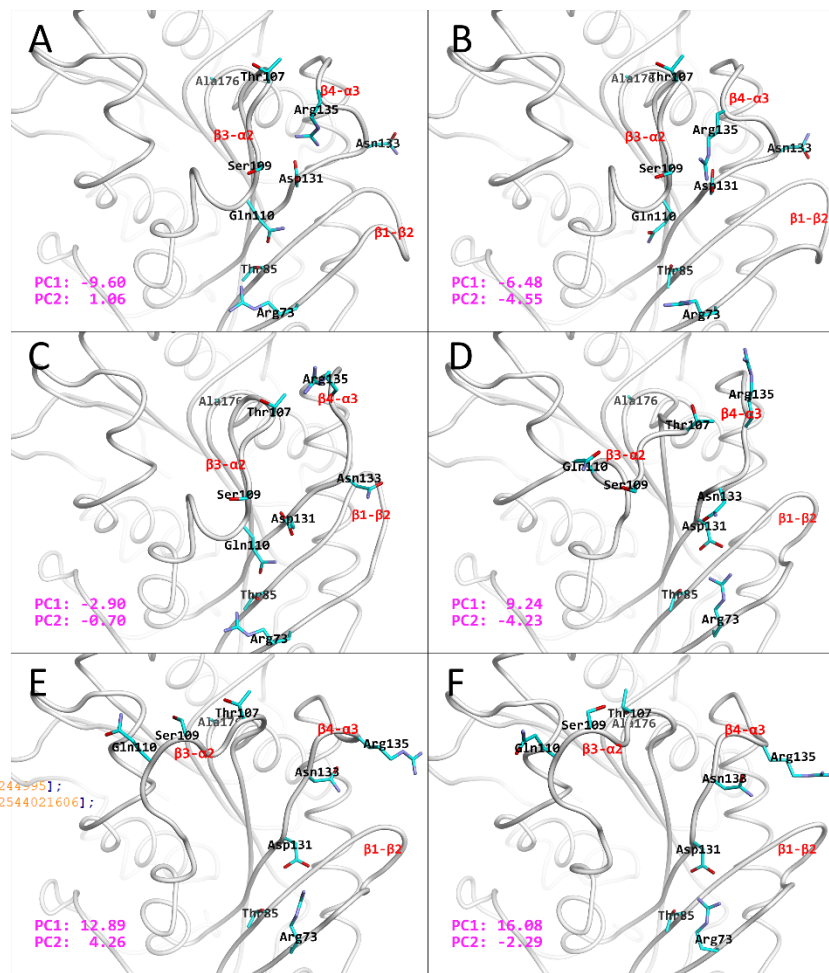


Visualization using Molmil (III)

```

1 set orthoscopic, off;
2 set depth_cue, 1;
3 bg_color white;
4 set label_size, 30;
5
6 load first.gro;
7 load traj.xtc;
8
9
10 show tube;
11 cartoon_color white, all;
12 color cyan, symbol C;
13
14 show sticks, resi 73 and sidechain;
15 show sticks, resi 85 and sidechain;
16 show sticks, resi 110 and sidechain;
17 show sticks, resi 131 and sidechain;
18 show sticks, resi 133 and sidechain;
19 show sticks, resi 135 and sidechain;
20
21 origin resi 73 or resi 85 or resi 110 or resi 131 or resi 133 or resi 135;
22
23 show sticks, resi 107 and sidechain;
24 show sticks, resi 109 and sidechain;
25 show sticks, resi 176 and sidechain;
26
27 turn y, 135;
28 turn x, 60;
29
30 move z, 100;
31 move y, -3;
32
33 set label_color, black;
34 label resi 73, Arg73;
35 label resi 85, Thr85;
36 label resi 107, Thr107;
37 label resi 109, Ser109;
38 label resi 110, Gln110;
39 label resi 131, Asp131;
40 label resi 133, Asn133;
41 label resi 135, Arg135;
42 label resi 176, Ala176;
43
44 set label_color, red;
45 label resi 105-113,  $\beta$ 3- $\alpha$ 2;
46 label resi 132-130,  $\beta$ 4- $\alpha$ 3;
47 label resi 76-82,  $\beta$ 1- $\beta$ 2;
48
49 set label_color, magenta;
50
51 cli_soup.renderer.customFogRange = [71, 100];
52
53 var pc1 = [-0.9596410989761353, -0.6479037404060364, -0.2896493375301361, 0.9235408902168274, 1.2893149852752686, 1.6075838804244951];
54 var pc2 = [0.10558268427848816, -0.4552445411682129, -0.0695020779967308, -0.4226403534412384, 0.42642560601234436, -0.229399025440216061];
55
56
57 var data = molmil.calcCenter(molmil.quickSelect("resi 73 or resi 85 or resi 110 or resi 131 or resi 133 or resi 135"));
58 var xyz = data[0];
59
60 var settings = {xyz, fontSize: 38, dx: -20, dy: -8};
61 var infoLabel = molmil.addLabel("", settings, cli_soup), labelText = "PC1: %PC1|nPC2: %PC2";
62
63 cli_soup.animation.frameAction = function() {
64   var pc1val = (pc1[this.frameNo]*10).toFixed(2);
65   var pc2val = (pc2[this.frameNo]*10).toFixed(2);
66   if (pc1val > 0 && pc1val < 10) pc1val = "" + pc1val;
67   if (pc2val > 0 && pc2val < 10) pc2val = "" + pc2val;
68   molmil.addLabel(labelText.replace(/%PC1/g, pc1val).replace(/%PC2/g, pc2val), {}, infoLabel);
69 };
70
71
72
73
74 set movie_mode, swing;
75 mplay;

```



Numoto et al., 2018

https://pdbj.org/contact

https://pdbj.org/info/cite-us

- Home
 - Top Page
 - Statistics
 - Help
 - FAQ
 - Contact Us
 - Cite Us
 - Links
- Data deposition (OneDep)
 - Help
 - Deposition to PDB, EMDB or BMRB
- Download
 - Download PDB archive / snapshot archive
- New format
 - PDBx/mmCIF Resources
 - Format Conversion
- Quick links
 - Help
 - Large Structures
 - Group Depositions
 - Chemical Component entries
 - Latest entries
- Search services
 - Help

PDBj-master PDBj annotation staff

Please refer to the [FAQ page](#). If you cannot find the answers to your questions, please contact us using the question form below. Please include the **service name** in your Message or Subject if you have any problems or questions about PDBj services.

Name:


Email:

Subject:

Message:

Send

Please make sure your email address is valid. After submitting inquiry by clicking "Send Mail" button above, you will receive a receipt via email. If you don't get a receipt, you may mistype your email address or your receipt may be filed in the spam/junk folder.

 Worldwide Protein Data Bank Foundation

Copyright © 2013-2018 Protein Data Bank Japan

Cite Us

This page is also available in: [日本語](#)

Please cite PDBj or PDBj services with the following references listed below. Please also refer to [Terms and Conditions](#) on using contents in PDBj site. Also see "Cite a PDB structure entry" to cite an individual PDB entry.

- [Cite PDBj](#)
- [Cite a PDBj service](#)
- [Cite a PDB structure entry](#)

Cite PDBj

Please cite "PDBj" with references (29) (30) in the list of publications.

Cite a PDBj service

Please cite "a PDBj service" with its corresponding references. When no reference is available, please cite the service with its URL.

Service	URL	citations
Search PDB (PDBj Mine)	pdbj.org/mine	(29) (30)
Chemie search	pdbj.org/chemie-search	(29) (30)
Search BMRB	bmrdbco.pdbj.org	(30)
Sequence-Navigator	pdbj.org/seq-navi	-
Structure-Navigator	pdbj.org/struc-navi	(10)
EM Navigator	pdbj.org/emnavi	(29)
Omokage search	pdbj.org/omokage	(26) (30)
wwPDB/RDF	rdf.wwpdb.org	(19)
SeSAW	pdbj.org/sesaw	(15)
Ligand Binding Sites (GIRAF)	pdbj.org/giraf	(8) (13) (14) (18)
JV : Graphic Viewer	pdbj.org/jv	(3)
Molmil: WebGL Molecular Viewer	pdbj.org/molmil	(25)
Yorodumi	pdbj.org/yorodumi	(29)
ASH	pdbj.org/ash	(5) (10) (11)
MAFFTash	pdbj.org/mafftash	(11)
NMRToolBox	bmrdbco.pdbj.org/en/nmr_tool_box.html	(7) (17) (23)
gmfit	pdbj.org/gmfit	(12)
CRNPRED	pdbj.org/crnpred	(4) (6)
Spanner	pdbj.org/spanner	(16)
SFAS	pdbj.org/sfas	-
HOMCOS	homcos.pdbj.org	(24)
eF-site	pdbj.org/efsite	(1) (3)
eF-seek	pdbj.org/efseek	(22)
eF-surf	pdbj.org/efsurf	
ProMode Elastic	pdbj.org/promode-elastic	(2) (21) (28)
hGTOP	ford.info/hGTOP_db	-
eProtS	pdbj.org/eprotS	-

Cite a PDB structure entry

Please cite a PDB structure entry using the following information.

- An entry with a published primary citation (PDB ID and primary citation)

PDB ID: 102L
D.W. Heinz, W.A. Baase, F.W. Dahlquist, B.W. Matthews (1993) How Amino-Acid Insertions are Allowed in an Alpha-Helix of T4 Lysozyme Nature 361:561.

- An entry without a published primary citation (PDB ID, author names, and title)

PDB ID: 1CI0
W. Shi, D.A. Ostrov, S.E. Gerchman, V. Graziano, H. Kycia, B. Studier, S.C. Almo, S.K. Burley, New York Structural Genomix Research Consortium (NYSGXRC). The Structure of PNP Oxidase from *S. cerevisiae*

- An entry may also be referenced using its Digital Object Identifier (DOI).

10.2210/pdbXXXX/pdb (where XXXX is replaced with the PDB ID)
e.g.) 10.2210/pdb4hhb/pdb
The DOI can be used as part of a URL: doi.org/10.2210/pdb4hhb/pdb