

Introduction to PDBj services for searching and exploring the PDB

CrSJ2018, 2018-11-11

Gert-Jan Bekker

Protein Data Bank Japan
Institute for Protein Research
Osaka University

PDBj top page

144211

作中 (2018-09-12)
00:00 UTC / 09:00 JST



English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdbj.org 全体を検索 (日本語ca)

Latest release info

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

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)

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、JST-NBDI
高分子の立体構造データベースを国際的に統一されたPDBアーカイブとして運営

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このサイトの機能について詳しくは[利用チュートリアル](#)をご覧ください。

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]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"/> 検索	<input type="radio"/> 登録	<input type="radio"/> ビューア	<input type="radio"/> 教育/研	
<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"/> 表型構造	<input type="radio"/> 立体構造	<input type="radio"/> ゲノム	

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 [\[newPDB\] 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。\(9月12日付\)](#)

[生命産業情報学連合大会 \(IIBMP2018\) 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会にて、PDBjランチョンセミナーを開催します](#)

[\[newPDB\] 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発表4にてPDBjからも講演を行います](#)

9979

最新
公開
日付

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 cross-search bar!

Search

パートナー

JBIportal
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 (PDBj Mine)
PDB詳細検索
化合物検索 (Chemil)
BMRB検索
Sequence-Navigator
Structure-Navigator
FM 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. Gootsell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

2018



- 225: フィターゼ (Phytase)
- 224: レグマイン (Legumain)
- 223: ピエゾ1機械感受性チャネル (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](#)

2017



- 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: 煙草機械 (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](#)

2016



- 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

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

225: フィターゼ (Phytase)

このページはRCSB PDB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 工藤基祐 (PDBj)

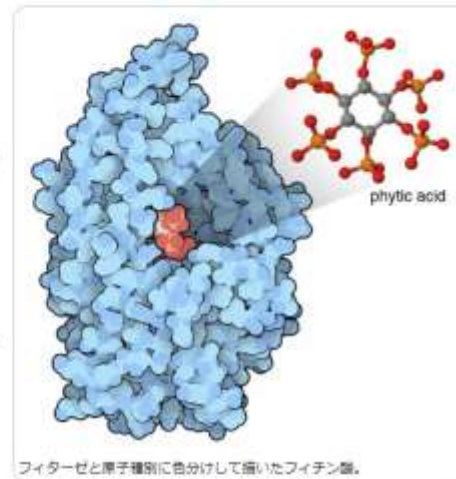
競争がある生態系では、使えるリンの量によって成長に制約が生じるのは珍しいことではなく、生き物はそれを分け合う方法を見つけてきた。我々は食物からリンを摂取しているが、それはスクレオチドやリン酸イオンなどの塩に立つ分子の中うまく取り込まれている。植物は平元にくっついてくる資源だけでやっていく必要があり、フィチン酸 (phytic acid, 専門的にはイノシトールリン酸 inositol hexakisphosphate) と呼ばれる珍しい分子にリンを貯蓄していることがよくある。この分子は安定で、有用な分子へと分解する適当な酵素がない限りほとんど消化されない。このことは農業において特別な問題を引き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

飼料に含まれるリン

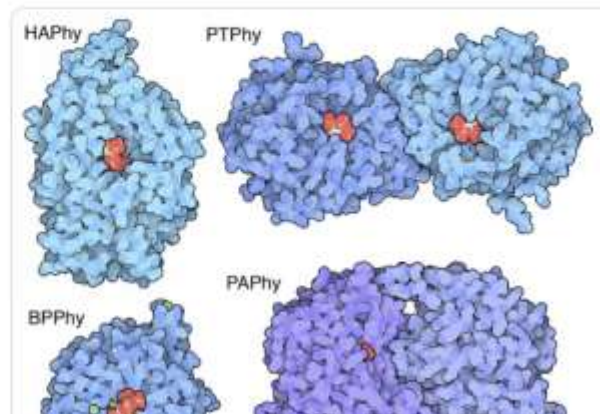
畜畜には大豆など植物中心の飼料が与えられることがよくあるが、これにはフィチン酸が豊富に含まれている。多くの育を持つウシは、フィチン酸を分解し栄養として使えるリン酸分子にしてくれる細菌を持っている。一方、ブタやニワトリは育を一つしか持っていないで、ほとんどのフィチン酸は無通りしてしまう。この制約によって2つの問題が生じる。一つは動物の生質に他のリン酸源が必要になることである。そしてもう一つは、飼料に含まれるフィチン酸が環境中に放出されると有毒な環境が蔓延してしまうなどの問題を引き起こしてしまうことである。この二つの問題を解決するため、畜畜の飼料には酵素の **フィターゼ (phytase)** がよく添加されている。この酵素は動物の育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、フィチン酸から様々な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。互いに依っ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 [1dkj](#) 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 [1lho](#) 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。



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残基リン酸化酵素 (Protein Tyrosine phosphatase) と依っている。紫色酸性フィターゼ (Purple Acid Phytase, PAPHy, PDBエントリー [4kko](#)) 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 left, the number '136594' is displayed. The PDBj logo is in the top center. A search bar at the top right contains the text 'Search PDBj.org' and is highlighted with a red rectangle. Below the search bar, the search results are displayed for the query 'influenza'. The results are organized into three entries:

- 1AA7 INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0**
Descriptor: INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN
Author: [Sha, D., Luo, M.](#)
Deposit date: 1997-01-24
Release date: 1998-01-28
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.08 Å)
Title: Structure of a bifunctional membrane-RNA binding protein, influenza virus matrix protein M1. *Nat.Struct.Mol.* 4, 1997.
- 1INF INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE COMPLEXED WITH BANA113 INHIBITOR**
Descriptor: 4-(ACETYLAMINO)-3-OXANDITHIONEACID, CALCIUM ION, INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE, ...
Author: [Nishida, M., Luo, M.](#)
Deposit date: 1995-07-07
Release date: 1996-08-17
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)
Title: Structure-based inhibitors of influenza virus sialidase. A benzic acid lead with novel interaction. *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, ...
Author: [Nishida, M., Luo, M.](#)
Deposit date: 1994-12-12
Release date: 1995-03-31
Last modified: 2011-07-13
Method: X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)
Title: Structures of aromatic inhibitors of influenza virus neuraminidase. *Biochemistry*, 34, 1995.

On the right side of the page, there is a 'Search results info' panel showing 'Total results: 1033', 'Displayed results: 25', and 'Sorted by: Hit score (from highest)'. Below this is a 'Download results' button and a 'Go to Advanced search' button. At the bottom of the page, there is a pagination bar with numbers 1 through 15 and a right arrow.

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

Searching by PDBj Mine (II)

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

The screenshot shows the PDBj Mine search results page. The search query 'インフルエンザウイルス' (Influenza virus) has been translated to '【influenza virus】 | influenza virus'. The results show three entries:

- 1AA7 INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0**
分子名称: INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN
著者: [Sha, B., Liu, M.](#)
登録日: 1997-01-24
公開日: 1998-01-28
最終更新日: 2011-07-13
実験手法: 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**
分子名称: BETA-D-MANNOSE, HEMAGGLUTININ, N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE
著者: [Kobayashi, T., Fleury, D., Ogami, S., Wharton, S.A., Sakurai, J.J., Knossow, M.](#)
登録日: 1997-12-22
公開日: 1998-04-29
最終更新日: 2011-07-13
実験手法: 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**
分子名称: 4-(ACETYLAMINO)-3-OUANIDINOBENZOIC ACID, CALCIUM ION, INFLUENZA VIRUS B/LEE/40 NEURAMINIDASE, ...
著者: [Jendryaszek, M.J., Liu, M.](#)
登録日: 1995-07-07
公開日: 1996-08-17
最終更新日: 2011-07-13
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.4 Å)

Explore PDB entries (I)

Summary

The screenshot displays the PDB entry page for 1AA7. The main title is "INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0". The page is divided into several sections:

- Navigation:** Tabs for Overview, Structure Information, Experimental Information, Model Information, Related Proteins, and Downloads.
- Download:** A red box labeled "Download" points to the "ダウンロード" (Downloads) section, which includes options for Sequence (FASTA), PDBx/mmCIF, PDBHL, PDB format, and Model Report.
- Visualize (Molmil):** A red box labeled "Visualize (Molmil)" points to a 3D molecular model of the protein structure.
- Links to external resources:** A red box labeled "Links to external resources" points to the "他のデータベース情報" (Other database information) section, which lists various databases like RCSB-PDB, PDBE, Yorodumi, CATH, PSSP, SCOP, VAST, PISA, UniProt, Pfam, eIF-site, and wwPDB/RDF.
- Validation report:** A red box labeled "Validation report" points to the "構造検証レポート" (Structure Validation Report) section, which shows a bar chart of metrics and percentile ranks.

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

Explore PDB entries (II)

Structural details

1AA7


INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0

Links to databases related to chain

名前	説明	種類	長さ	分子量	分子数	データベース名(アクセス番号)	出典する生物種	エンティティの一意名
A, B	INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN	polymer	158	17402.2	2	UniProt (P03495) Pfam (PF01328)	unidentified influenza virus	
	water	water		18.0	86	RCSB		

配列ビューア

Display chain: A (INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN)



非対称単位の内容

ポリマー	鎖の数	
	2	
ポリマー	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](#) [AF00598](#)
- eF-site [1aa7-A](#) [1aa7-AB](#) [1aa7-B](#)
- 電子密度マップ (EDM) ([molmap](#)) [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 (PDB 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 検定情報 相関蛋白質 高度 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		
最も高い分解能シエルの値	2.200 - 2.080		
R因子	0.208		
R-work	0.20800		
最も高いR-workシエルの値	0.259		
R-free	0.28000		
最も高いR-freeシエルの値	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		
最も高い分解能シエルの値	-		
独立反射数	20779		
Rmerge _{I_obs}	0.048		
最も高いRmerge _{I_obs} シエルの値	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)
- 検定レポート (PDF)
- Max...

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
- Jaa7-A
- Jaa7-AB
- Jaa7-B
- 電子密度マップ (EDM) (MolMil)
- wwPDB/RDF
- Promote Elastic

Explore PDB entries (IV)

Functional details

The screenshot displays the PDB website interface for entry 1AA7. The main content area shows the entry title and a table of site information. The table has the following data:

site_id	残基数	詳細
S1	5	RNA-BINDING SITE.

Navigation menus on the left include: 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, タウンロード, 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.

Navigation menus on the right include: ダウンロード (Sequence (fasta), PDBx/mmCIF, PDBHL (ヘッダのみ (no-atom)), PDB形式 (全ての情報), 検証レポート (PDF), Stats...), 構造 (表列特単位を表示 (AU = BU)), 他のデータベース情報 (RCSB-PDB, PDBe, Yorodumi, CATH, FSSP, SCOP, VAST, PISA, UniProt, Pfam, PF00598, eIF-site, Jaa7-A, Jaa7-AB, Jaa7-B, 電子密度マップ (EDM) (molmil), wwPDB/RDF, Promote Elastic).

Footer information includes: Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク.

Explore PDB entries (V)

Sequence navigator (PDB BLAST)

The screenshot displays the PDB BLAST interface for entry 1AA7. The main panel shows the title "INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0" and the "Sequence navigator - 1aa7: Chain A,B" section. It lists two query sequences: 1aa7A and 5cqeA, both with 100% sequence identity and 100% sequence coverage. The 5cqeA entry is highlighted with a red box and a red arrow pointing to the "構造の重ね合わせ" (Superposition) button. Below the search results, a "4pusA" entry is also shown with 99% sequence identity and 99% sequence coverage. A red box highlights the "構造の重ね合わせ" button for 4pusA. On the right side, a "ダウンロード" (Download) section offers various file formats like Sequence (fasta), PDBx/mmCIF, PDBML, PDB形式, and 構造レポート. Below that, a "構造" (Structure) section shows a 3D ribbon model of the protein structure. At the bottom, a "Molmil: Superposition of 1aa7A (blue) and 5cqeA (red)" window displays a 3D superposition of the two structures, with a red box highlighting the "(Molmil)" label. The left sidebar contains navigation links such as "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", and "EM Navigator".

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

(Molmil)

Explore PDB entries (VI)

History

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

The screenshot shows the PDB website interface for entry 1AA7. The main title is "INFLUENZA VIRUS MATRIX PROTEIN CRYSTAL STRUCTURE AT PH 4.0". The page is divided into several sections:

- Navigation:** Home, Top Page, Statistics, Help, FAQ, Contact, Links.
- Data Deposition (OneDep):** Help, PDB, EMDB, BMRB links.
- Downloads:** PDB Archive data download.
- New Formats:** PDBx/mmCIF format conversion.
- Quick Links:** Help, Large structure entries, Group entries, Chemical structures, BMRB entries, Latest entries.
- Search Services:** Help, PDB search (PDBj Mine), PDB detailed search, Chemical structures (Chemie), BMRB search, Sequence-Navigator, Structure-Navigator, EM Navigator, Omokage search.
- Download:** Sequence (fasta), PDBx/mmCIF, PDBHL (headers only), PDB format (all details), Checksum report (PDF), Stats...
- Structure:** Show serial units (AU = BU).
- Other Database Information:** RCSB-PDB, PDBe, Yorodumi, CATH, FSSP, SCOP, VAST, PISA, UniProt, Pfam, eIF-site, Jaa7-A, Jaa7-AB, Jaa7-B, Electron density map (EDM), wwPDB/RDF, Promote Elastic.

The main content area shows a table of resources with columns for file format, filename (with size), and a "Show" button. Two red boxes with arrows point to the "Download files" and "Display file content" actions.

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

File content visualization

Interactive tree format

```
- 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
+ esptl
+ esptl_crystal
+ esptl_crystal_group
+ diffn
+ diffn_detector
+ diffn_radiation
+ diffn_radiation_maxlength
+ diffn_source
+ refine
+ refine_cell
+ refine
+ refine_analyze
+ refine_hkl
+ refine_hk_restr
+ refine_ls_restr_hcs
+ refine_ls_shel
+ pdbx_voxel_file
+ struct_ncs_dom
+ struct_ncs_sma
+ struct
+ struct_keywords
+ struct_asym
+ struct_biol
+ struct_conf
+ struct_conf_type
+ struct_site
+ struct_site_gen
+ database_PDB_matrix
+ ptm_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
```

Flat format

```
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 1AA7
_database_2.database_code PDB_1AA7
_MAFDB_0_3000170001
#
_pdbx_database_status.status_code REL
_pdbx_database_status.entry_id 1AA7
_pdbx_database_status.rcsd_initial_deposition_date 1997-01-24
_pdbx_database_status.deposit_site ?
_pdbx_database_status.process_site NWL
_pdbx_database_status.status_code_sf REL
_pdbx_database_status.status_code_sr ?
_pdbx_database_status.SO_entry ?
_pdbx_database_status.pdb_format_compatible Y
_pdbx_database_status.status_code_cs ?
#
loop_
_audit_author.name
_audit_author.pdbx_ordinal
'Sha, H.' 1
'Lu, H.' 2
#
citation.id primary
citation.title 'Structure of a bifunctional serine-threonine kinase protein, influenza virus matrix protein M1,'
citation.journal_abbrev Int.Struct.Biol.
citation.journal_volume 4
citation.page_first 239
citation.page_last 244
citation.year 1997
citation.journal_id_ASTM 56216
citation.country US
citation.journal_id_ISSN 1072-8368
citation.journal_id_CSD 2024
citation.book_publisher ?
citation.pdbx_database_id_PubMed 916666
citation.pdbx_database_id_DOC 10.1038/nbt0307-239
#
loop_
_citation_author.citation_id
_citation_author.name
_citation_author.ordinal
primary 'Sha, H.' 1
primary 'Lu, H.' 2
#
_cell.entry_id 1AA7
_cell.length_a 66.279
_cell.length_b 86.376
_cell.length_c 123.500
_cell.angle_alpha 90.00
_cell.angle_beta 90.00
_cell.angle_gamma 120.00
_cell.i_PDB 12
_cell.pdbx_unique_axis ?
#
```

mmCIF format

- PDB flat-format has been deprecated
 - 99999 atoms
 - 62 chains
 - REMARK fields
- Replaced by PDBx:mmCIF
 - No such limits
 - Clear formatting
 - <https://mmcif.pdbj.org/>
- PDBj uses PDBx:mmJSON format internally
 - PDBj Mine, Molmil
 - <https://pdbj.org/help/mmjson>

```
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        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 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_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
#
```

data item = name + value

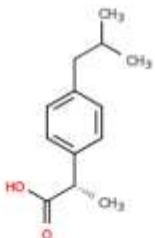
Chemie search

PDB: 56 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

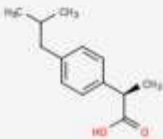
[化合物検索へ](#)

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

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: 10

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

Explore Chemie entries (I)

Home | 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

概要 | 記述情報 | 関連するPDBエントリー

IBP

概要

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

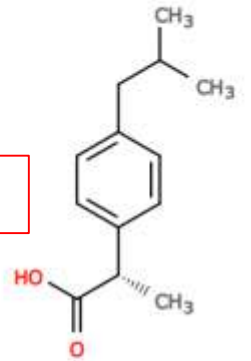
化合物名

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	HEFNWWSXXWATRW-JTQLQIEISA-N

2D



Interactive 3D viewer (Molmil)



Download & display files

平面表示 | 立体表示

ヘルプ | JSmol | 表示

エントリー情報

登録日: 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

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

Explore Chemie entries (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 (PDB) 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
 


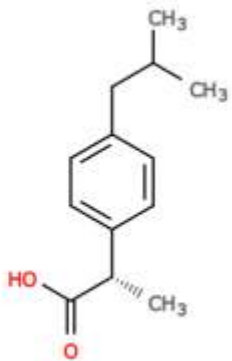
THE 2.6 ANGSTROM MODEL OF OVINE COX-1 COMPLEXED WITH IBUPROFEN
分子名称: PROSTAGLANDIN H2 SYNTHASE-1, N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE, B-OCTYLGLUCOSIDE, ...
著者: [Loll, P.J., Selinsky, B.S., Gupta, K., Sharkey, C.T.](#)
登録日: 2000-04-04
公開日: 2001-04-11
最終更新日: 2018-02-28
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.61 Å)
主引用文献: **Structural 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., Zunszain, P.A., Petitpas, J., Bhattacharva, 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, M., 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

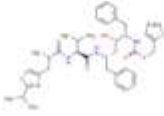
エントリー情報
登録日: 2000-04-10
最終更新日: 2011-06-04
公開状態: REL
登録処理サイト: RCSB

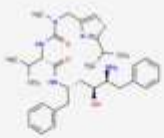
ダウンロード

BIRD/PRD search

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]carbamoyl)-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)

Copyright © 2013-2018 日本蛋白質構造データバンク

Explore BIRD/PRD entries (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 | 記述情報 | 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

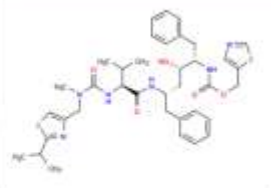
1N49 VIABILITY OF A DRUG-RESISTANT HIV-1 PROTEASE VARIANT: STRUCTURAL INSIGHTS FOR BETTER ANTI-VIRAL THERAPY

分子名称: Protease, RITONAVIR
著者: [Prabu-levabalan, M., Nallivaika, 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: [Bezackova, P., Brevda, 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 1800px



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

21

Searching by PDBj Mine (III)

Advanced search

136594
注: 観牛 (2018-01-02 08:00 UTC / 05:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

pdbj:mim 全体を検索 (日本語=ja)

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: - -

文献番号:

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)

ポリペプチド(L体)

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
文献番号
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
外部データベース
リカンドと補欠分子鎖
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
親主生物種

詳細条件を選択して下さい

含む 含まない **どちらでもよい**

含む 含まない **どちらでもよい**

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)

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

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

- ダウンロード
- PDxアーカイブからのデータダウンロード

- 新フォーマット
- PDx/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
- PDx検索 (PDx Mine)**
- PDx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。

```
SELECT e.*, r.is_d_wse_high as isdg,
       IEROTH(p.pdbx_seq_one_letter_code_can) as seq,
       ('>' || e.pdbid || e.obain) as header,
       r.pdbx_seq_one_letter_code_can as aaseq
FROM afte.pdbx_chain_pfam e
JOIN refine r on e.pdbid = r.pdbid
JOIN entry_poly p on p.pdbid = e.pdbid
AND e.obain = ANY(segexp_split_to_array(p.pdbx_strand_ord, ','))
WHERE pfam_id = 'PF00171'
AND r.is_d_wse_high < 2.0
ORDER BY seq, seq, e.obain
```

Total number of results: 369

5jry
chain: A

sp_primary: A0A0H3KPC8

pfam_id: PF00171

coverage: 1

reso: 1.2

len: 491

header: >5jryA

aaseq:
MAHHHSHHMLKETYPPYLLANAAYVANTDLEVTDKYSGKVATRVALADAKAIDAIAJGAADVATKPMRELPAKQRQAVLDHC
VARFRERFDELAELCEAGKPNDAKGEVTRLDITFRVASEEAVRIDGEVLNLEISARAQGYGTRRVPVIGPCSFISP
FNFLNLAAHKVAPALAAAGCPFLPKASRTPVGLIIGEVLAETDLPKGFVSLPAHRDGDALFTTDDRFRLSFTGSPA
VGVWALKEKAGKVKVLELGGNAAIIVDADQLDRLDYVVDRLAFGAFYQSGQSCIGVQRILAHADYDALRDKLIAKTRSL
KMGDPKDPSTFVGPMTISESESRRLSGWMAAIVAAGAKIVAGGKVDGAMFEATLLENVGRDQDLYRKEAFGPIAILEKFDL
FDDALARVNDSDFGVLAQVFTDSLHTQQAWDELEVGGVINDVPSFRVDNMPYGGVKDGLGREGIRYAIEDMTEPRLL 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 >

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

Mine 2 RDB Search (III)

The screenshot displays the Mine 2 RDB Search interface. The main content area shows the results of a search for phenylmethanol compounds with a specific CSD ID. The search criteria are defined in the SQL query:

```
SELECT p.pdbid, p.id, p.name, z.db_code  
FROM pdb1_shen_comp p  
JOIN comodel.pdbx_shen_comp_model m ON m.comp_id = p.id  
JOIN comodel.pdbx_shen_comp_model_reference r ON r.model_id = m.model_id  
WHERE r.de_name = 'csp' AND r.db_code = 'YARXEW'
```

The search results show a total of 143 results. The first few results are:

- 2ama**
id: 010
name: phenylmethanol
db_code: YARXEW
- 2bob**
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
db_code: YARXEW

The search criteria are highlighted in a red box on the right side of the image:

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

The interface also includes a sidebar with navigation options, a search bar, and a download button. The search bar contains the text "検索" (Search).

Mine 2 RDB Search (IV)

The screenshot displays the Mine 2 RDB Search interface. On the left, there are navigation menus for Home, Data Entry (OneDep), Downloads, New Formats, Quick Links, and Search Services. The main area is titled "SQL 検索" (SQL Search) and contains a search box with a SQL query. Below the query, it shows "Total number of results: 23" and a list of results, each with a PDB ID and name. A red box highlights the search criteria in the SQL query and the corresponding text in the search results.

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

Total number of results: 23

PDB ID	Name
4v9p	Womycin
4v9a	Womycin
4v7d	Womycin
3kti	ADEP1
3ktj	ADEP2
3ktk	ADEP2
3mt6	ADEP1
4jna	Dimethyl FK228
4u0g	ADEP-285Me

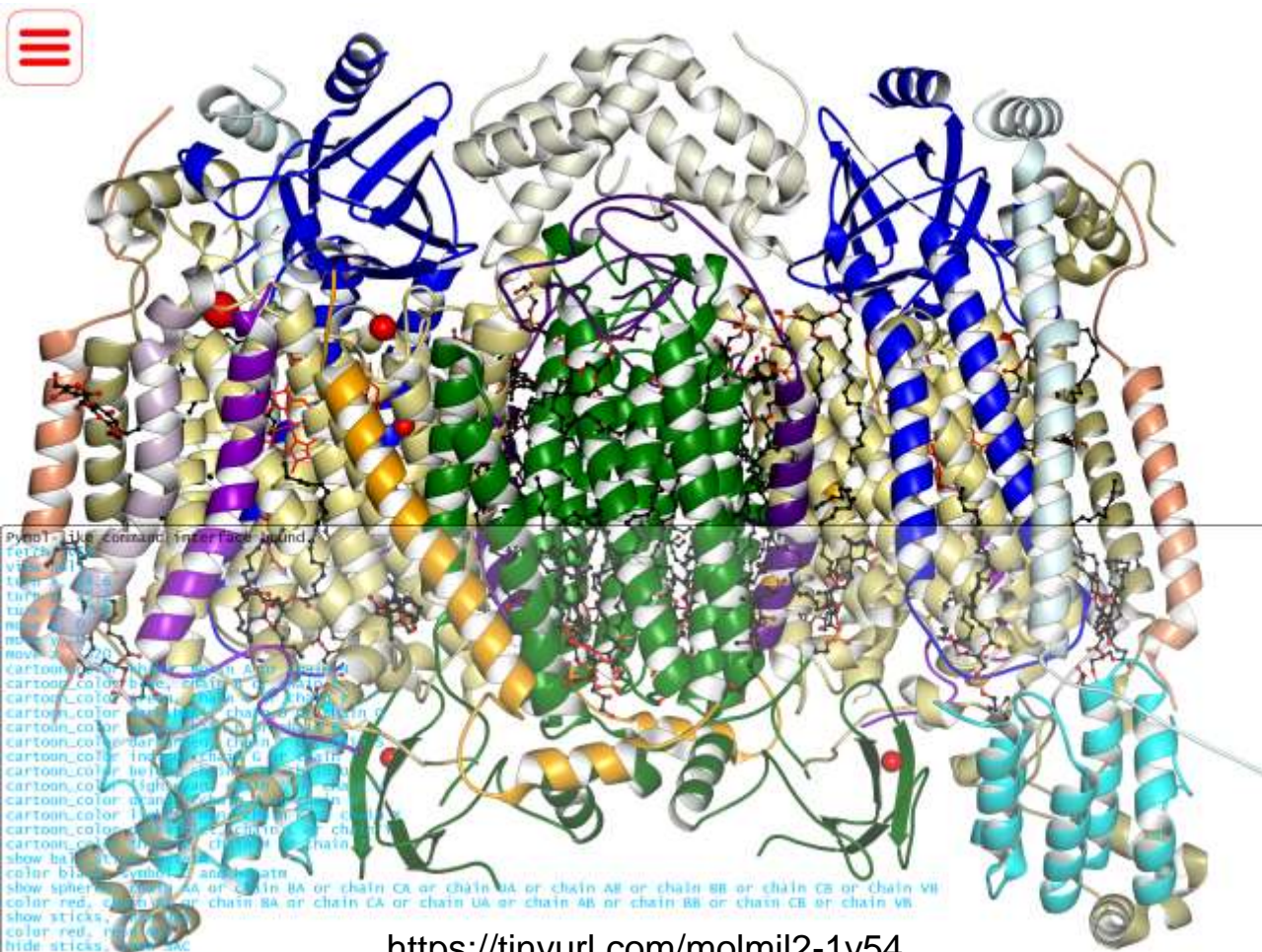
Searches for PDB entries that contain compounds of a specific class (antibiotic) and a molecular weight less than 1 kD

Search Services:

- 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

Visualization using Molmil (I)

<https://pd bj.org/molmil2/>



<https://tinyurl.com/molmil2-1v54>

Pymol commands

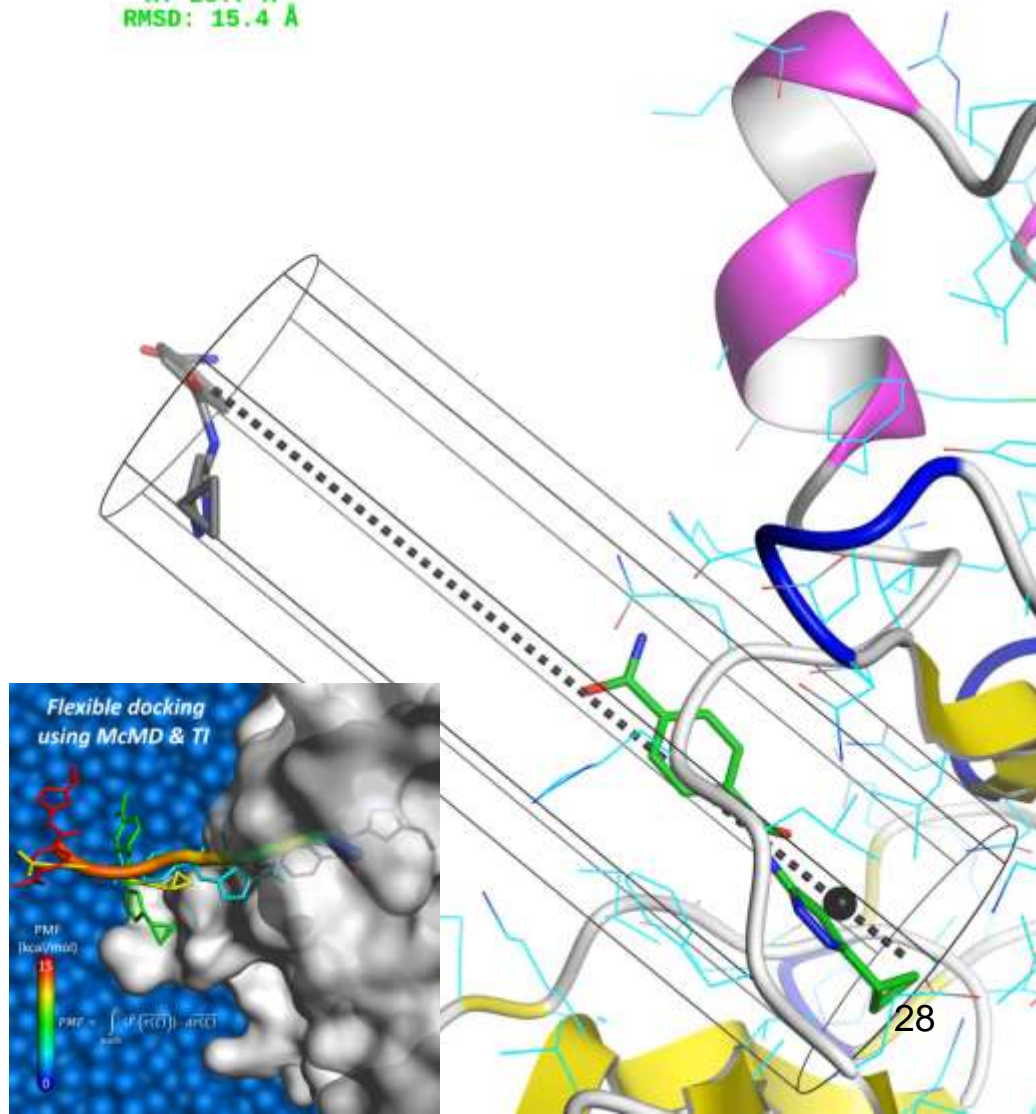
- **select** (select sc12, resi 12 and sidechain)
- **color** (color cyan, model #1 and symbol C)
- **cartoon_color** (cartoon_color cyan, model #1)
- **set_color** (set_color mycolor 12 12 12)
- **show** (show sticks, sidechain)
- **hide** (hide cartoon, model #1)
- **turn** (turn x, 90)
- **move** (move x, 90)
- **fetch** (fetch 1crn)
- **fetch-cc** (fetch-cc hem)
- **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)
- **view** (view test, store)
- **findseq** (findseq ACDEF, model #1, my_seq)
- **delete** (delete chain A)
- **edmap** (edmap hetatm, 5)
- **frame** (frame 2)

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)
- Embed commands in URLs:
 - <https://pd bj.org/molmil2/#fetch 3atg>
- High quality image & movies

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

Bekker et al, 2017

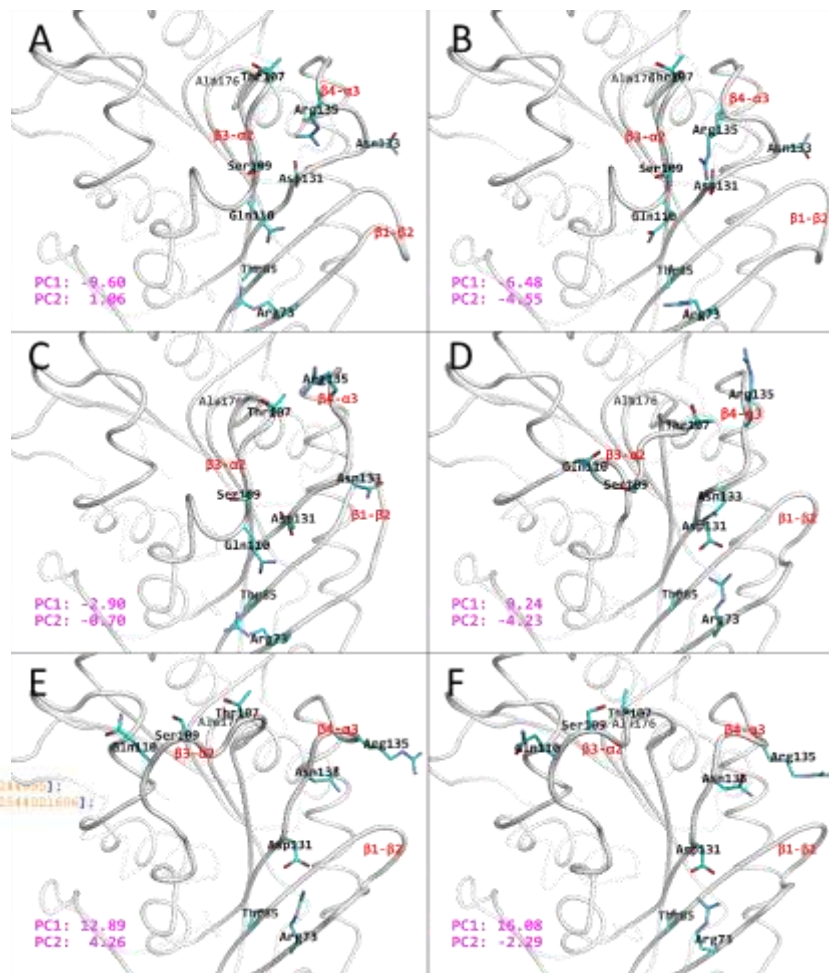


Visualization using Molmil (III)

```

1 set orthographic, off;
2 set depth cue, 0;
3 bg_color white;
4 set label_size, 30;
5
6 load first.gro;
7 load traj.xtc;
8
9 show tube;
10 cartoon_color white, all;
11 color cyan, symbol C;
12
13 show sticks, resi 73 and sidechain;
14 show sticks, resi 85 and sidechain;
15 show sticks, resi 110 and sidechain;
16 show sticks, resi 131 and sidechain;
17 show sticks, resi 133 and sidechain;
18 show sticks, resi 135 and sidechain;
19
20 origin resi 73 or resi 85 or resi 110 or resi 131 or resi 133 or resi 135;
21
22 show sticks, resi 107 and sidechain;
23 show sticks, resi 109 and sidechain;
24 show sticks, resi 176 and sidechain;
25
26 turn y, 135;
27 turn x, 60;
28
29 move z, 100;
30 move y, -1;
31
32 set label_color, black;
33 label resi 73, Arg73;
34 label resi 85, Thr85;
35 label resi 107, Thr107;
36 label resi 109, Ser109;
37 label resi 110, Gln110;
38 label resi 131, Asp131;
39 label resi 133, Asn133;
40 label resi 135, Arg135;
41 label resi 176, Ala176;
42
43 set label_color, red;
44 label resi 135-133,  $\beta$ 3- $\alpha$ 2;
45 label resi 132-129,  $\beta$ 4- $\alpha$ 3;
46 label resi 76-82,  $\beta$ 1- $\beta$ 2;
47
48 set label_color, magenta;
49
50 cli_soup.renderer.customFogRange = [77, 100];
51
52 var pcl = [-0.929441860976135], [-0.447903740800164], [-0.2896483775301247], [0.3235040902164274], [1.2093149021752686], [1.4075018004244495];
53 var pc2 = [0.125552169427048014], [-0.458244541188125], [-0.0656020778947309], [-0.4202403534412344], [0.4304255401234436], [-0.22030602544021680];
54
55 var data = molmil.calcCenter(molmil.quickSelect("resi 73 or resi 85 or resi 110 or resi 131 or resi 133 or resi 135"));
56 var xyz = data[:];
57
58 var settings = {xyz, fontSize: 30, dx: -20, dy: -10};
59 var infoLabel = molmil.addLabel("", settings, cli_soup), labelText = "%PC1: %PC1\n%PC2: %PC2";
60
61 @cli_soup.animation.frameAction = function() {
62   var pc1val = pcl[this.frameNo]*100.toFixed(2);
63   var pc2val = pc2[this.frameNo]*100.toFixed(2);
64   if (pc1val >= 50 || pc1val <= 10) pc1val = "" + pc1val;
65   if (pc2val >= 50 || pc2val <= 10) pc2val = "" + pc2val;
66   molmil.addLabel(labelText.replace(/%PC1/g, pc1val).replace(/%PC2/g, pc2val), (1), infoLabel);
67 };
68
69 set movie_mode, swing;
70 replay;

```



Numoto et al., 2018; OC-II-04

<https://pd bj.org/contact>

<https://pd bj.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

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.

Staff

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

- **Head**
 - [Kurusu Genji, Ph. D.](#) (Prof., IPR, Osaka Univ.)
- **Group for PDB Database Curation**
 - [Nakagawa Atsushi, Ph. D.](#) (Group Leader, Prof., IPR, Osaka Univ.)
 - Kengaku, Yumiko (IPR, Osaka Univ.)
 - Cho, Hasumi, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
 - Ikegawa, Yasuyo (IPR, Osaka Univ.)
 - Sato, Junko (IPR, Osaka Univ.)
 - Kim, Ju Yaen (IPR, Osaka Univ.)
- **Group for Development of new tools and services**
 - [Tob, Hiroyuki, Ph. D.](#) (Prof., Kwansai Gakuin Univ.)
 - Yamashita, Reiko (IPR, Osaka Univ.)
 - Kudou, Takahiro (IPR, Osaka Univ.)
 - Bekker, Gert-Jan, Ph. D. (Assist. Prof., IPR, Osaka Univ.)
- **Group for BMRB**
 - Fujiwara, Toshimichi, Ph. D. (Group Leader, Prof. Osaka Univ.)
 - [Kojima, Chojiro](#), Ph. D. (Prof., Yokohama National Univ.)
 - Miyanoiri, Youhei, Ph. D. (Assoc. Prof., IPR, Osaka Univ.)
 - Kobayashi, Naohiro, Ph. D. (Assoc. Prof., IPR, Osaka Univ.)
 - Iwata, Takeshi (IPR, Osaka Univ.)
 - Yokochi, Masashi (IPR, Osaka Univ.)
- **Collaboratory Researchers**
 - Nakamura, Haruki, Ph. D. (Prof. Emer., IPR, Osaka Univ.)
 - [Kinjo, Akira B., Ph. D.](#) (Assoc. Prof., Universiti Brunei Darussalam)
 - Yura, Kei, Ph. D. (Prof., Waseda Univ.) for [EM Navigator](#)
 - Suzuki, Hirofumi, Ph. D. (Waseda Univ.) for [EM Navigator](#)
 - [Wako, Hiroshi, Ph. D.](#) (Prof., Waseda Univ.) for ProMode
 - [Endo, Shigeno, Ph. D.](#) (Assoc. Prof., Kitasato Univ.) for ProMode
 - Ito, Nobutoshi, Ph. D. (Prof., Tokyo Medical and Dental Univ.)
 - [Kinoshita, Ken-go, Ph. D.](#) (Prof., Tohoku Univ.) for eF-site
 - Standley, Daron, Ph. D. (Prof., RIMD, Osaka Univ.) for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, and ASH
 - Katoh, Kazutaka, Ph. D. (Assoc. Prof., RIMD, Osaka Univ.) for MAFFTash
- **Secretary**
 - Shimizu, Tomoko (IPR, Osaka Univ.)

Cite Us

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

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 (PDB Mine)	pdb.org/mine	(29) (30)
Chemie search	pdb.org/chemie-search	(29) (30)
Search BMRB	bmrbdb.pdb.org	(20)
Sequence Navigator	pdb.org/seq-nav	-
Structure Navigator	pdb.org/struc-nav	(10)
EM Navigator	pdb.org/emnav	(29)
Omokage search	pdb.org/omokage	(26) (30)
wePDB/SDP	cif.wepdb.org	(19)
SeSAW	pdb.org/seesaw	(15)
Ligand Binding Site (GIRAF)	pdb.org/giraf	(8) (11) (14) (18)
JV - Graphic Viewer	pdb.org/jv	(3)
Molvis: WebGL Molecular Viewer	pdb.org/molvis	(25)
Yorodumi	pdb.org/yorodumi	(29)
ASH	pdb.org/ash	(5) (18) (11)
MAFFTash	pdb.org/mafftash	(11)
INRToolBox	bmrbdb.pdb.org/inr-tool_box.html	(7) (17) (23)
gnft	pdb.org/gnft	(12)
CRNPRED	pdb.org/crnpred	(4) (6)
Spinner	pdb.org/spinner	(16)
SPAS	pdb.org/spas	-
HGMCOG	hgmco.pdb.org	(24)
eF-site	pdb.org/efsite	(1) (4)
eF-seek	pdb.org/efseek	(22)
eF-surf	pdb.org/efsurf	-
ProMode Elastic	pdb.org/promode-elastic	(2) (21) (28)
hgTOP	pdb.org/hgtop_db	-
eProts	pdb.org/eprorts	-

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: 1O2L
D. W. Heinz, W.A. Baase, F.W. Dahlquist, S.W. Matthews (1993) How Amino-Acid Insertions are Allowed in an Alpha-Helix of T4 Lysozyme Nature 361:563.

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

PDB ID: 1C3D
W. Shi, D.A. Ostrov, S.E. Gerchman, V. Graziano, H. Kyica, B. Studier, S.C. Almo, S.K. Burley, New York Structural Genomic Research Consortium (NYSGRIC). The Structure of PNP Oxidase from *S. cerevisiae*

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

10.2210/pdb10000/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