



**PDBj**  
Protein Data Bank Japan

**2021年9月30日 BINDS-PDBj講習会**  
**「PDBから見てわかるタンパク質の最新研究」**

UCSF Chimeraを用いて電顕マップを見てみよう

大阪大学大学院生命機能研究科  
日本電子YOKOGUSHI協働研究所

特任助教

藤田 純三

Fujita Junso

# Chimeraを用いた実習(GroEL)

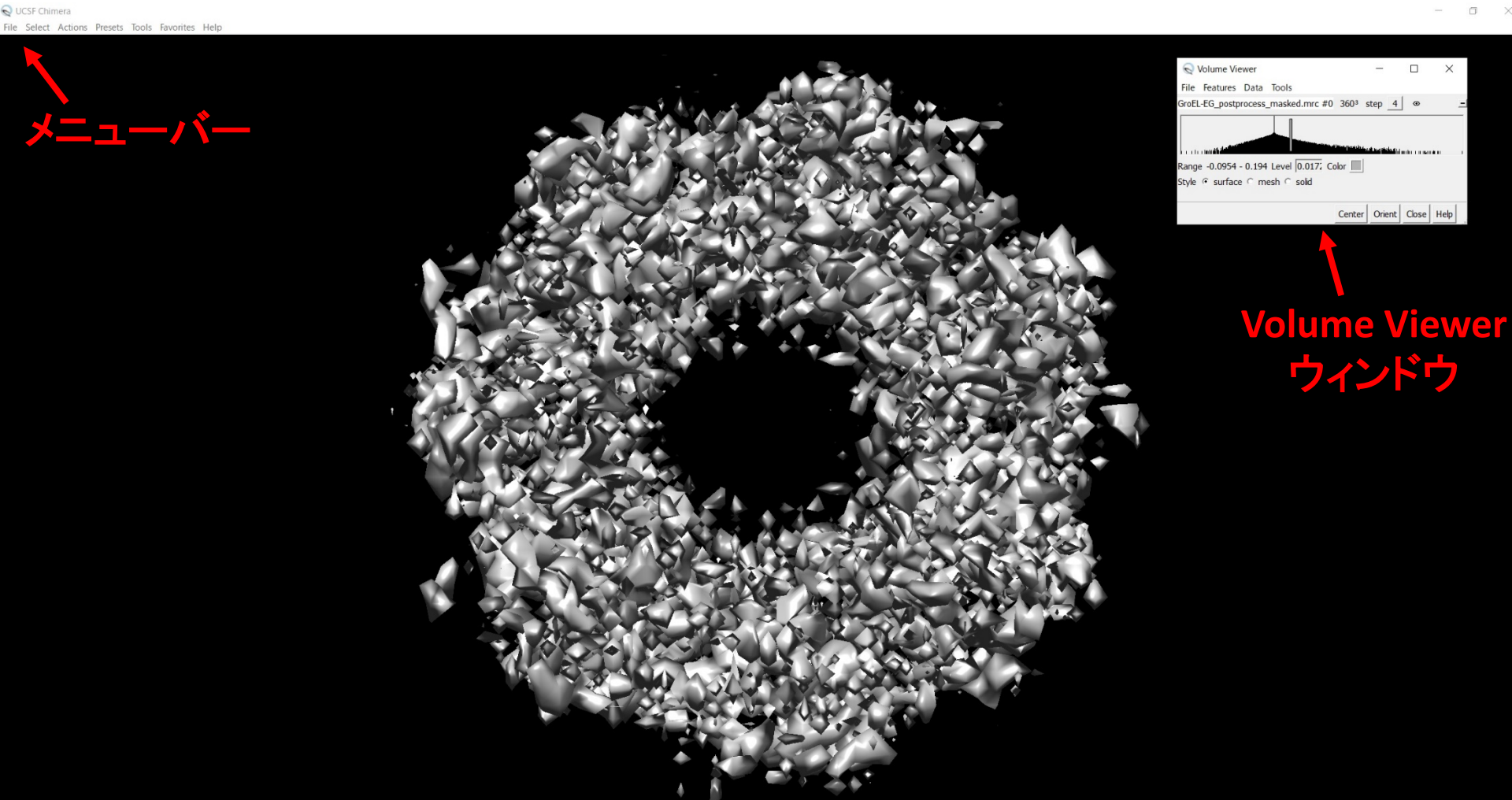
## 使用するマップ

- GroEL-EG\_postprocess\_masked (178 MB)
- Apoferritin-EG\_postprocess\_masked (513 MB)

## 使用するモデル

- PDB: 5w0s
- PDB: 6v21

UCSF Chimeraを開き、メニューバーのFile → OpenからGroEL-EG\_postprocess\_maskedを選択

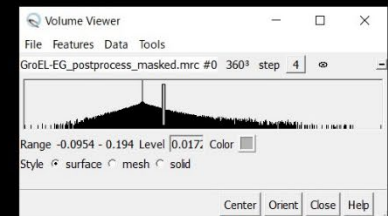
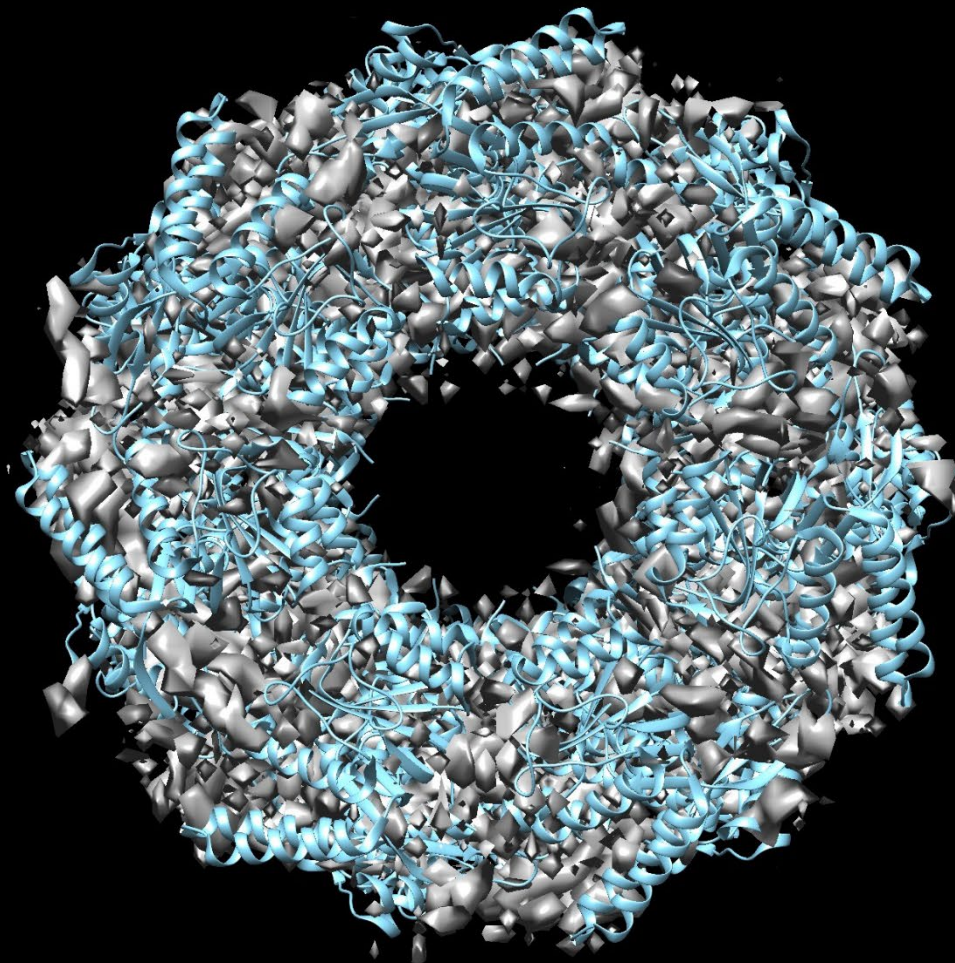


# Chimeraを用いた実習(GroEL)

メニューバーのFile → Fetch by ID →  
PDBのところに5w0sと入力しFetch

左ドラッグ：回転  
右ドラッグ or ホイール回転：拡大/縮小  
ホイールドラッグ：移動

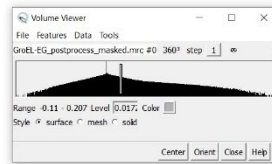
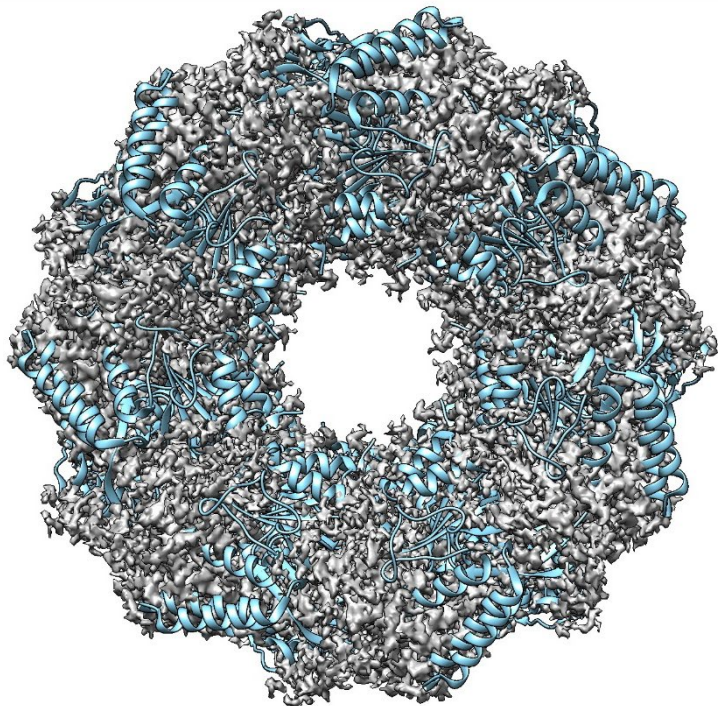
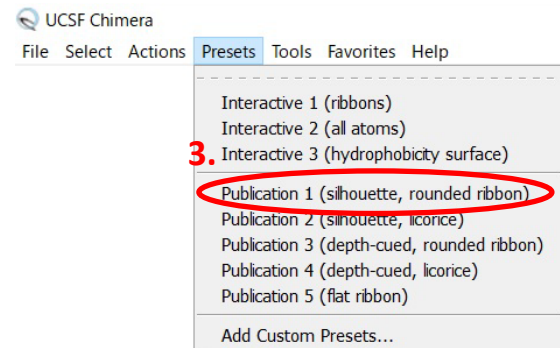
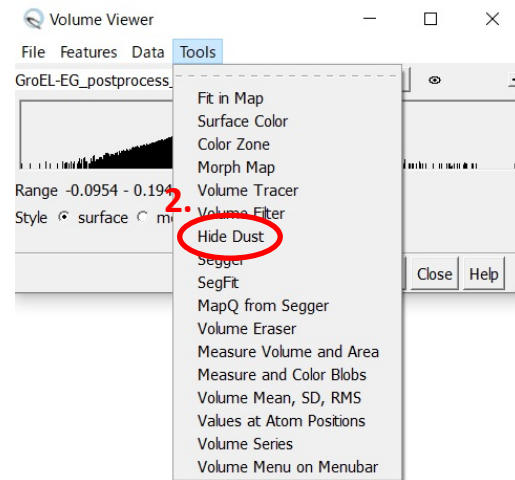
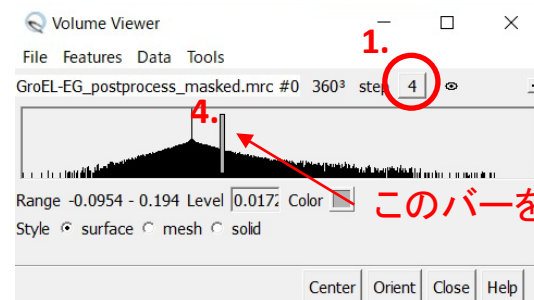
UCSF Chimera  
File Select Actions Presets Tools Favorites Help



# Chimeraを用いた実習(GroEL)

## ①マップの表示を変える

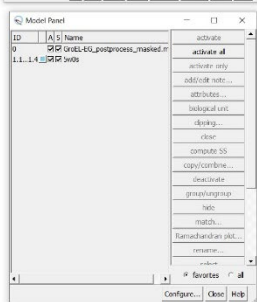
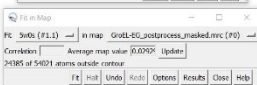
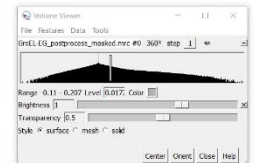
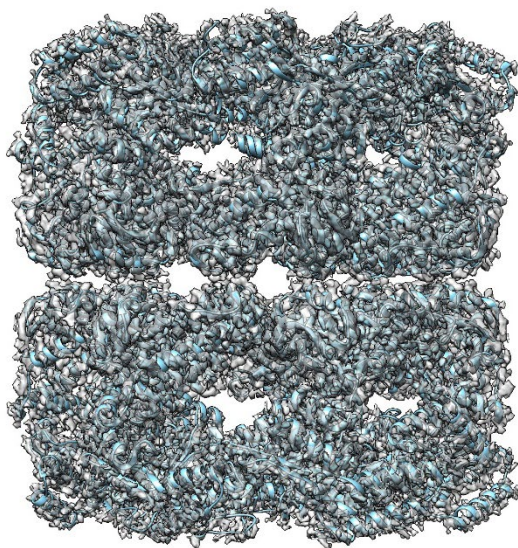
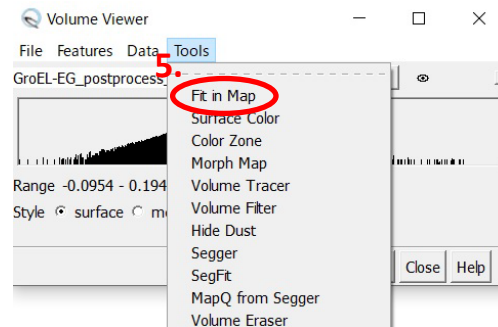
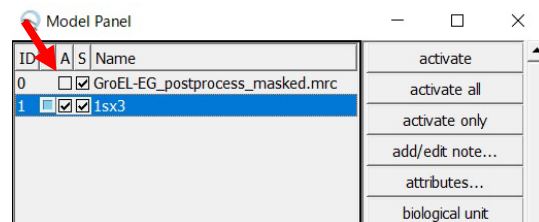
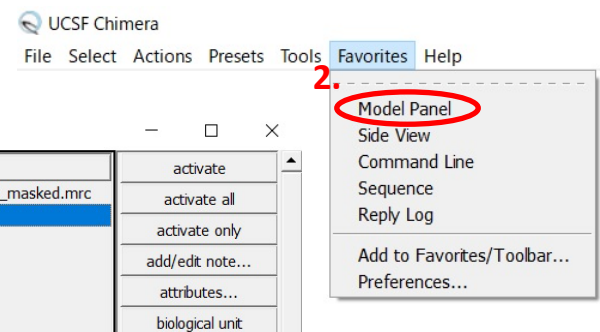
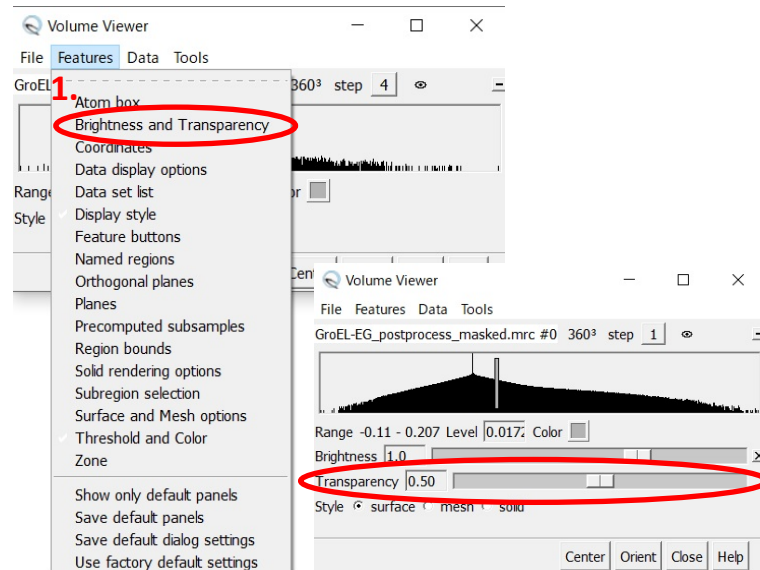
1. Volume ViewerウィンドウのStepを4から1に
2. Tools → Hide Dust → Sizeを5にしてHide
3. メニューバーのPresets → Publication 1を選択(お好みで)
4. Volume ViewerウィンドウでThresholdやStyleを変えてみる



# Chimeraを用いた実習(GroEL)

## ②モデルをマップに重ね合わせる

1. Volume ViewerウィンドウのFeatures → Brightness & Transparencyを選択、Transparencyを0.5程度に
2. メニューバーのFavorites → Model Panelを選択  
マップファイルのAのチェックを解除(画面下部からも出来る)
3. ホイールドラッグして重ね合わせる
4. マップファイルのAのチェックを入れ、左ドラッグで90°回転  
Aのチェックを外してまた重ね合わせる
5. 十分重なったらAのチェックを入れ  
Volume ViewerウィンドウのTools → Fit in Mapを選択しFit



# Chimeraを用いた実習(GroEL)

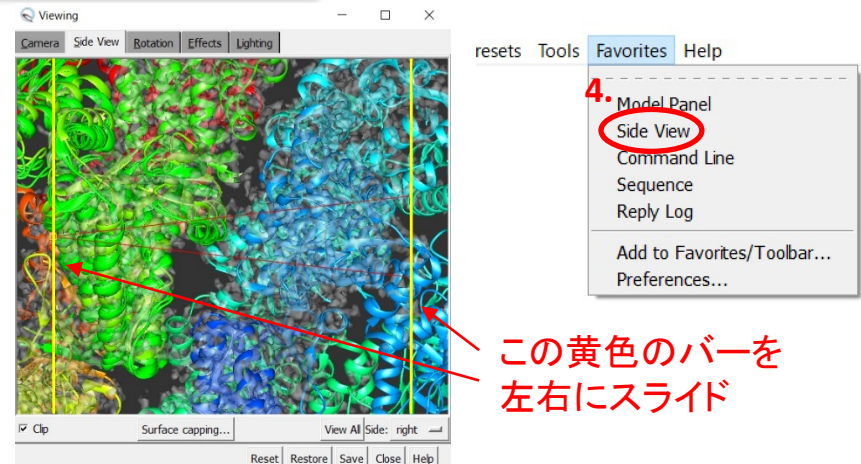
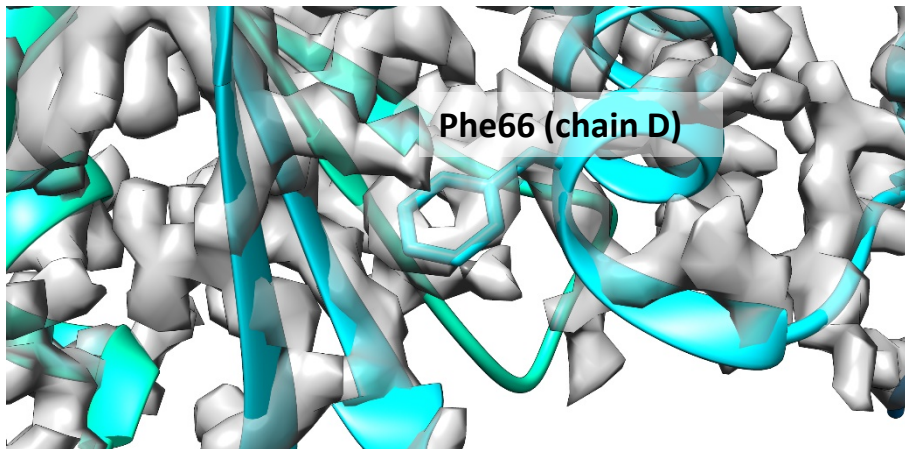
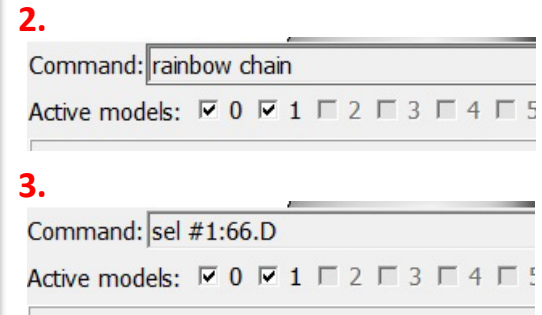
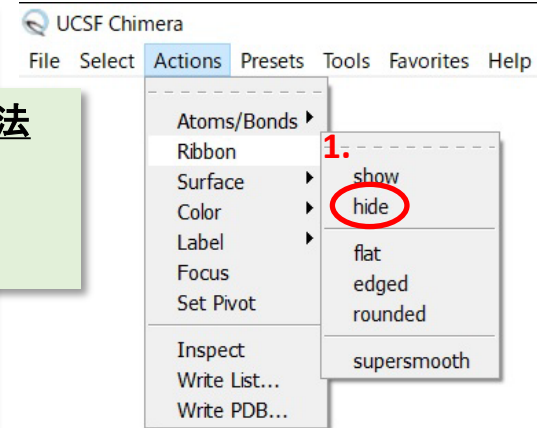
## ③モデルの表示を変える

モデルの一部を選択し、そこだけの表示を変更したい

1. メニューバーのActions → Ribbon → hide  
Volume ViewerウィンドウでThresholdを0.04程度に
2. メニューバーのFavorites → Command Line  
画面下部に出現したCommand: の部分に  
rainbow chainと入力しenter(chainごとに色分け)  
メニューバーのActions → Color → by heteroatom(炭素以外の色を変更)
3. メニューバーのSelect → Chain → Dと選択し、Actions → Atoms/Bonds → show  
コマンドでsel #1:66.D と入力しenter(モデル#1のchain Dのresidue 66を選択)  
メニューバーのActions → Atoms/Bonds → show only  
メニューバーのSelect → Clear Selectionした後、Actions → Ribbon → show
4. メニューバーのFavorites → Side View  
黄色のバーを左右に動かすことで表示する奥行きを変更可能

### 原子の指定方法

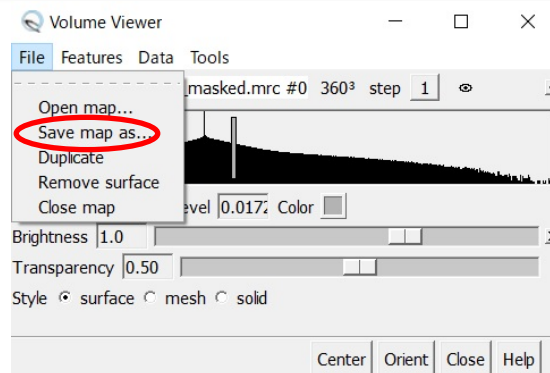
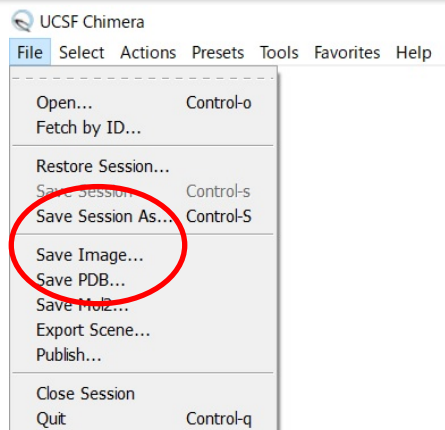
```
#model  
:residue.chain  
@atom
```



# Chimeraを用いた実習(GroEL)

## ④保存

メニューバーのFiles → Save Session As... (状態の保存)、Save Image (画像の保存)、Save PDB (モデルの保存)  
マップの保存はVolume ViewerウィンドウのFile → Save map as...



## ⑤その他Tips

**Volume Viewerウィンドウを閉じてしまった**

Tools → Volume Data → Volume Viewer

**モデル同士を重ね合わせたい**

Tools → Structure Comparison → MatchMaker

**段々と見たい部位にフォーカスしていく動画が作りたい**

Tools → Utilities → Animation

**複数のモデルやマップを並べて見比べたい**

Tools → Structure Comparison → Tile Structures

**マップの一部を消したい**

Tools → Volume Data → Volume Eraser

**マップの手系(Handedness)を変更したい**

コマンドで `vop zflip #model`

# Chimeraを用いた実習(Apoferritin)

同様にApoferritin-EG\_postprocess\_maskedと6v21を開く(重いので注意)  
Thresholdを0.03程度にするとはっきり原子が見える  
見やすい表示に変えた後、モデルをマップに重ね合わせてみる

## 注意点

- ・Apoferritinは対称性が高いため、上手く重ね合わせるのが難しい
- ・位置を合わせた後、表面のPhe, Tyr等分かりやすい残基を目印にして重ねると良い  
メニューバーのActions → Ribbon → hideで全て消した後、  
Select → Residue → TYR, Actions → Atoms/Bonds → showでTyrのみを表示し、  
Favorites → Model PanelからマップファイルのAのチェックを外して回転させる
- ・Fit in Mapを行う際には、Select → select allでモデル全体を選択した後、  
Selected atomsに対して行うこと

