

タンパク質立体構造データベース

利用実習

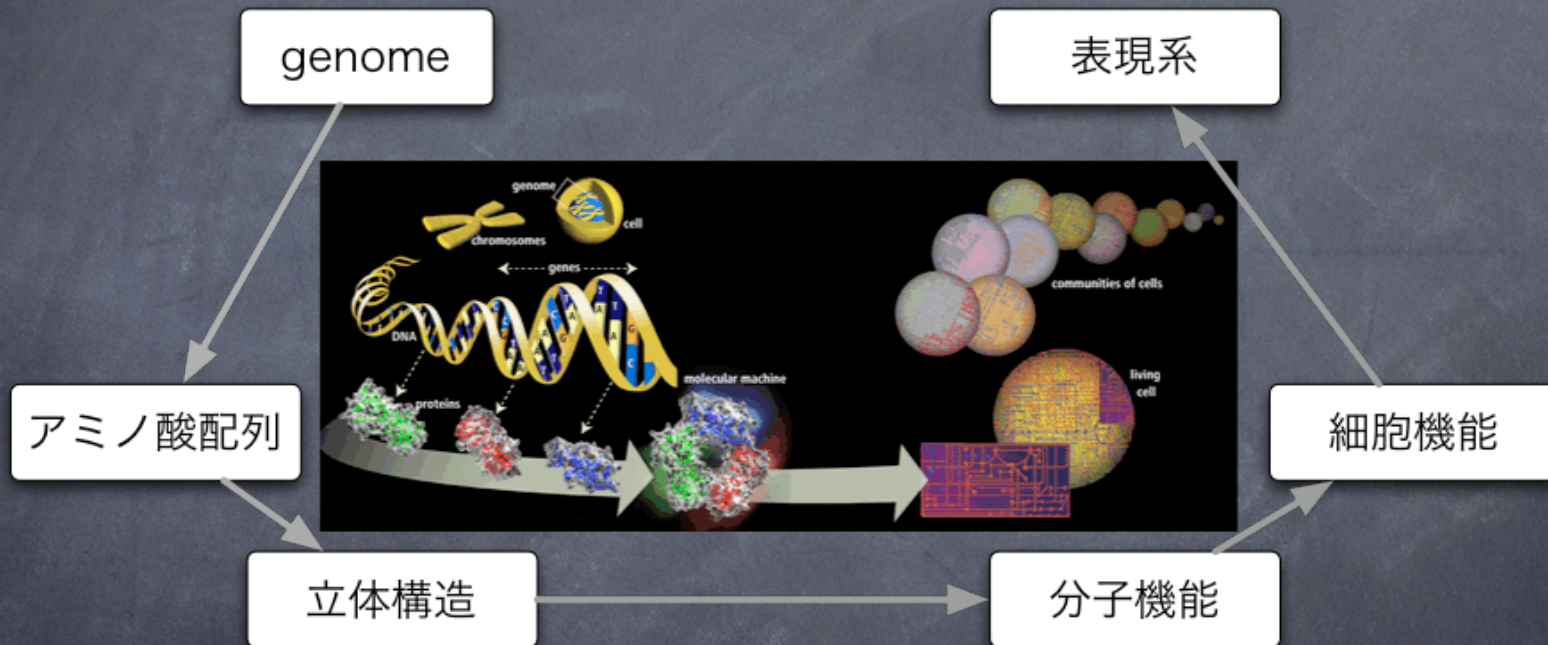
木下賢吾

東大医科研

Today's topics

- 最初に背景を少し
- PDBjを使ってみる
- PDBに関連するDBを少し紹介

生物における情報の流れ



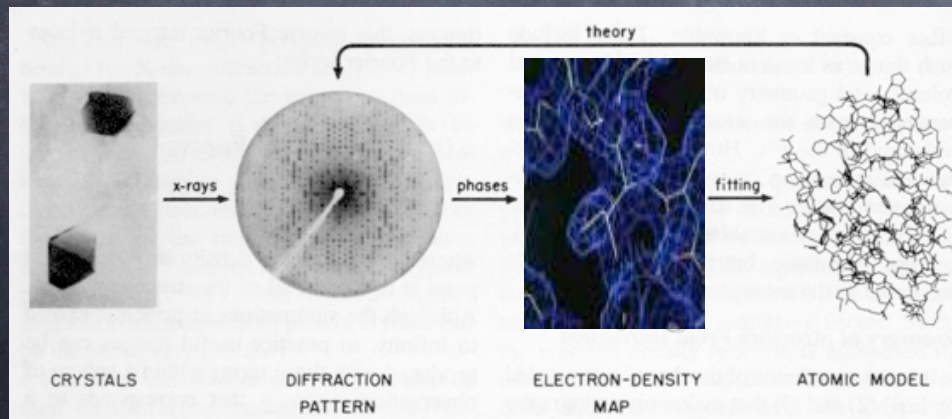
Protein Informatics
計算機を利用した蛋白質の機能解明

アミノ酸配列の解析
蛋白質立体構造の解析
構造機能相関の解析

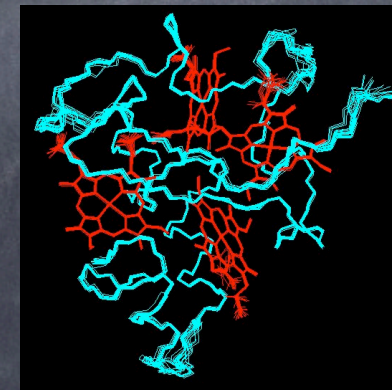
タンパク質の立体構造決定

- 1959年 Kendrewによるミオグロビンでの初の構造解析
- X線：タンパク質を結晶化して構造解析

X線結晶構造解析

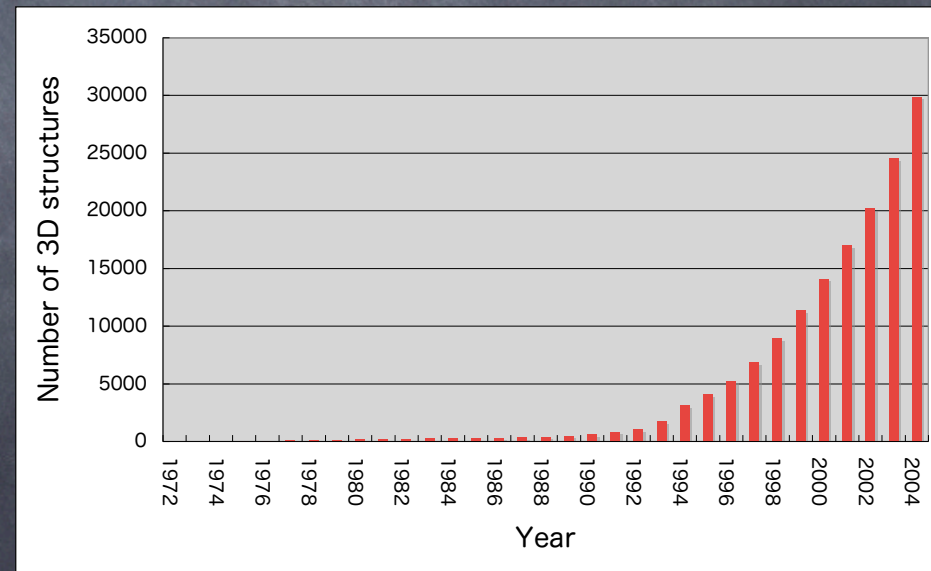


NMR法



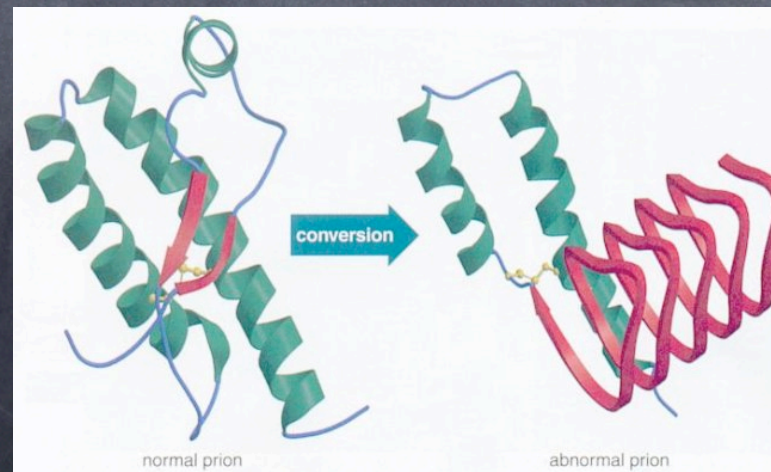
立体構造情報の急激な増加

- 90年代以降急激な勢いで立体構造が解析されている
 - 高輝度X線元（放射光施設）の確保
 - 大量発現技術の発達
 - 計算機の高速化
- 構造ゲノムプロジェクト
 - たんぱく3000



立体構造の重要性

- 立体構造と病気 (conformational disease)
 - 狂牛病：異常プリオンタンパク質の蓄積
 - アルツハイマー病やアミロイドーシスなど
正常型（X線構造）と異常型（モデル）のプリオン



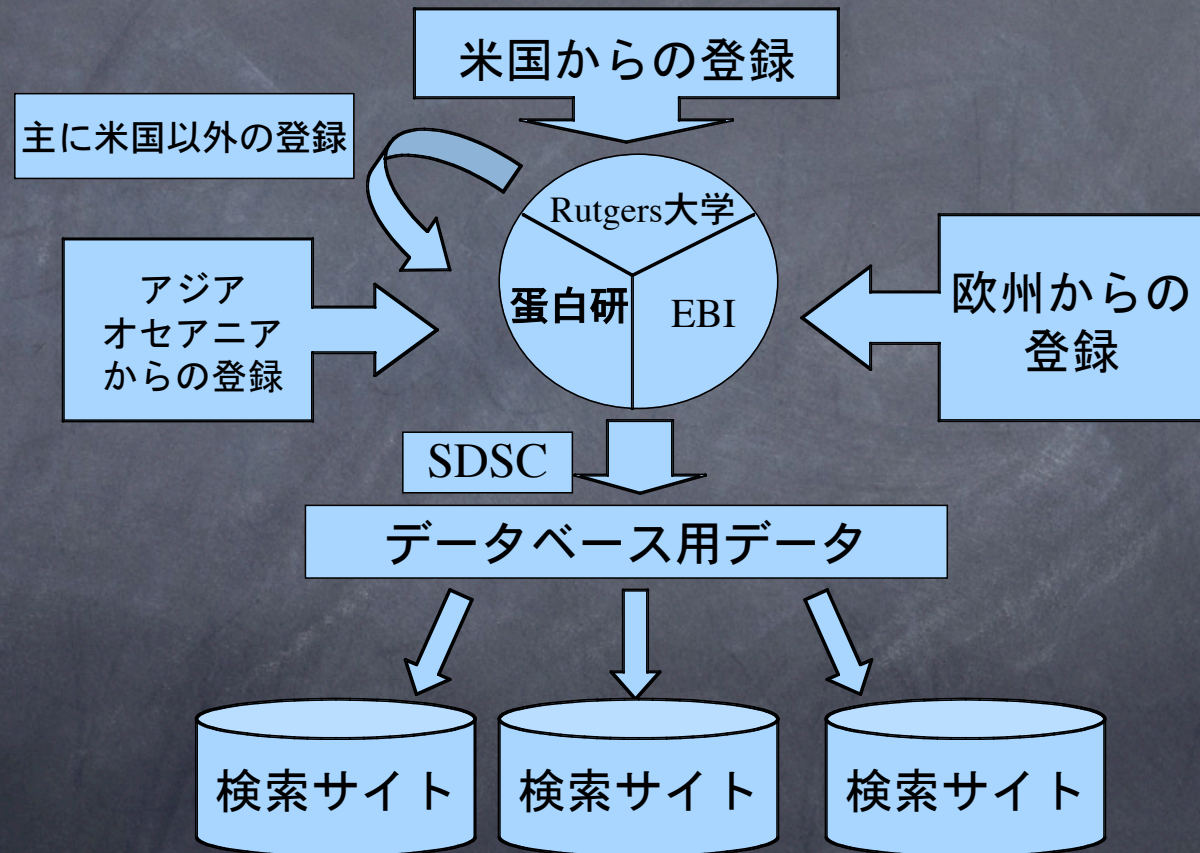
What is PDB? (1)

- Protein Data Bank
 - タンパク質の立体構造データベース
 - 元々は米国の Brookhaven 国立研究所
 - 現在は
 - RCSB (Rutgers大学を中心とした研究組織)
 - Research Collaboratory for Structural Bioinformatics
 - EMBL-EBI
 - European Bioinformatics Institute
 - 阪大蛋白研

What is PDB? (2)



What is PDB? (3)



* rutgers + SDSC = RCSB

実習：PDBjを使ってみる

- 最初に下準備
- アメリカのPDBをちょっと覗いてみる
- PDBjから目的のタンパク質を捜す
- 見つけたタンパク質の構造を見て見る
- 見つけたタンパク質の関連情報を見る

PDBj: PDB Japan

http://www.pdbj.org



Protein Data Bank Japan
日本蛋白質構造データバンク

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、蛋白質・核酸・糖などの生体高分子の立体構造データベースです。PDBjは、米国・構造バイオインフォマティクス研究共同体(RCSB)、欧州分子生物学研究所(EMBL)の欧州バイオインフォマティクス研究所-高分子構造データベース(MSD-EBI)とwwPDBを設立して、データベースの運営を行っています。三種の機関では、データの登録・処理・提供の責任を共有することを合意しています。

English

ニュース

ニュース (2006年10月18日): native XML-DBを用いて運用しておりますxPSSS (xml-based Protein Structure Search Service) では、従来のXPathに加え、XQueryによる検索サービスを開始致しました。

ニュース (2006年10月14日): PDBjでは、Gridの最新技術であるOpal-OPを利用し、Structure Navigator-RT 新version のWebサービス運用を開始致しました。

Worldwide PDB



RCSB PDB



MSD-EBI



タンパク 3000 プロジェクト



謝辞

蛋白質立体構造データバンク(PDBj)は、独立行政法人科学技術振興機構 バイオインフォマティクス推進センターの支援により運営しています。

PDB 構造検索

xPSSS
(xml-based Protein Structure Search Service)

PDB ID

Keyword

[Advanced Search >>](#)

PDB 登録

ADIT 

BioMagResBank
生体分子 NMR データベース

BMRB 

関連データベース

- 蛋白質の基準振動解析データベース **ProMode**
- 蛋白質表面形状データベース **eF-site**

サービス

- 蛋白質配列検索 **Sequence-Navigator**
- 蛋白質の類似構造の検索 **Structure-Navigator**
- 蛋白質の相同性解析 **ASH**
- グラフィック・ビューア **jV version 3** 
- 蛋白質構造百科事典 **eProtS**

- ステイタス
- サーチ
- ニュースレター
- チュートリアル
- リンク
- スタッフ
- 問い合わせ
- 人材募集

1: 下準備

PDBjを快適に見るための準備 JOGLのインストール

PDBjViewer

▶ English

jV version 3

分子構造と分子表面の可視化は、「jV version 3」と呼ばれるJavaアプレットプログラムで実行されます。「jV version 3」プログラムは、日本蛋白質構造データバンク (PDBj) の活動の一つとして、独立行政法人科学技術振興機構・バイオインフォマティクス推進センター (BIRD-JST) の支援を受けて、木下賢吾 (東京大学医科学研究所助教授) と中村春木 (大阪大学蛋白質研究所教授) によって開発されたものです。「jV version 3」プログラムは、このWEBページから自由に配布されます。

jVの概要

jVは、蛋白質やニカルなXML記述も利用できます。移動などの操作とができます。同様に、このポリゴンは可能ですが、アプレットは、

プログラムの操作法

jV Version 3 プログラムは、マウス操作とコマンドのライン入力によって操作されます。[入力コマンド](#) は、ほぼ [Rasmol](#) に準拠しています。また、マウス操作は、次のようになっています。

操作	Windows, Linux	Mac OS X
x, y軸回りの回転	マウス左ボタンのドラッグ	マウスによるドラッグ
z軸回りの回転	シフト+右ボタンのドラッグ	シフト+コマンド+マウス
x, y軸に沿った並進	右ボタンのドラッグ	コマンド+マウスドラッグ
z軸に沿った並進	シフト+左ボタンのドラッグ	シフト+マウスドラッグ

ここからJOGLをダウンロードしてインストール

jV を利用したシステム

- [eF-site \(electrostatic surface of Functional-site\)](#)
- [PreDs \(Prediction of DNA-binding site\)](#)
- [xPSSS \(xml-based Protein Structure Search Service\)](#)
- [P-cats \(Prediction of CATalytic residueS in proteins\)](#)
- [eProtS \(Encyclopedia of Protein Structures\)](#)

jVの以前のバージョン

- [PDBjViewer\(version 1\), jV version 2](#)

ダウンロード

- jVのダウンロード [[binary](#) , [source code](#)]
- jV Manual英語版のダウンロード(jV3.3) [[pdf](#)]
- JOGL API 1.0のダウンロード [[Windows](#) , [Mac OS X](#) , [Linux](#)].
- JOGL API 1.1.1のダウンロード [[Windows](#) , [Mac OS X](#) , [Linux](#)].
- ユーザーズガイド(英語)のダウンロード [[pdf](#)].
- アプレット設定資料のダウンロード(pdf) [[Windows](#)—[NEW](#) [2006.1.24], [Mac OS X](#)—[NEW](#) [2006.1.24], [Linux](#)].

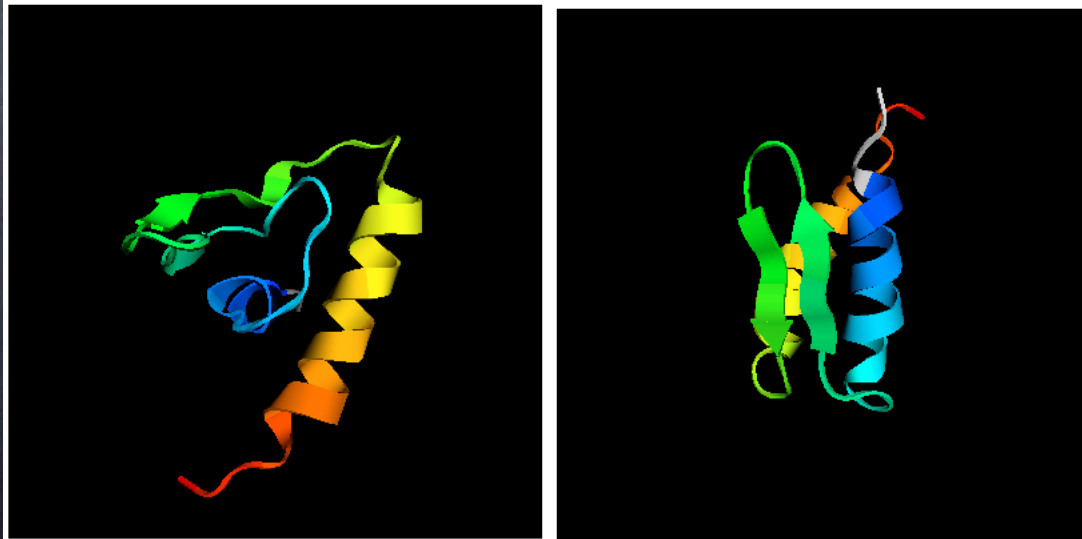
インストールできたか確認

● http://p-cats.hgc.jp/~kinoshita/pdb_alert/77/2/

にアクセスしてみる

こういう画面が出たらOK

- New Fold: 2d46 (A:)
- similar fold in SCOP: 1hywa_
- aligned region: 3 - 61 vs 5 - 58



PDBj: PDB Japan

http://www.pdbj.org

PDBj
Protein Data Bank Japan
日本蛋白質構造データバンク

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、蛋白質・核酸・糖などの生体高分子の立体構造データベースです。PDBjは、米国・構造バイオインフォマティクス研究共同体(RCSB)、欧州分子生物学研究所(EMBL)の欧州バイオインフォマティクス研究所-高分子構造データベース(MSD-EBI)とwwPDBを設立して、データベースの運営を行っています。三種の機関では、データの登録・処理・提供の責任を共有することを合意しています。

English

ニュース

ニュース (2006年10月18日): native XML-DBを用いて運用をしておりますxPSSS (xml-based Protein Structure Search Service) では、従来のXPathに加え、XQueryによる検索サービスを開始致しました。

ニュース (2006年10月14日): PDBjでは、Gridの最新技術であるOpal-OPを利用し、Structure Navigator-RT 新version のWebサービス運用を開始致しました。

Worldwide PDB
WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

RCSB-PDB
RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

MSD-EBI
EMBL-EBI

タンパク 3000 プロジェクト
文部科学省 タンパク3000 プロジェクト

謝辞
蛋白質立体構造データベース(PDB)は、独立行政法人科学技術振興機構 バイオインフォマティクス推進センターの支援により運営しています。

PDB 構造検索
xPSSS
2: 米国
Advanced Search >>

PDB 登録
ADIT Auto Dep Input Tool

BioMagResBank
生体分子 NMR データベース

BMRB

関連データベース
ProMode
eF-site

サービス

- 蛋白質配列検索
Sequence-Navigator
- 蛋白質の類似構造の検索
Structure-Navigator
- 蛋白質の相同性解析
ASH
- グラフィック・ビューア
jV version 3
- 蛋白質構造百科事典
eProtS

- ステータス
- サーチ
- ニュースレター
- チュートリアル
- リンク
- データ利用について
- スタッフ
- 問い合わせ
- 人材募集

RCSB PDB

RCSB PDB
PROTEIN DATA BANK

A MEMBER OF THE **PDB**
An Information Portal to Biological Macromolecular Structures

As of Tuesday Nov 21, 2006 there are 40261 Structures | PDB Statistics

Contact Us | Help | Print Page

PDB ID or keyword Author **SEARCH** | Advanced Search

Home Search

- Home
- Tutorial About This Site
- Getting Started
- Download Files
- Deposit and Validate
- Structural Genomics
- Dictionaries & File Formats
- Software Tools
- General Education
- BioSync
- General Information
- Acknowledgments
- Frequently Asked Questions
- Known Problems
- Report Bugs/Comments

Welcome to the RCSB PDB

The **RCSB** PDB provides a variety of tools and resources for studying the structures of biological macromolecules and their relationships to sequence, function, and disease.

The RCSB is a member of the **wwPDB** whose mission is to ensure that the PDB archive remains an international resource with uniform data.

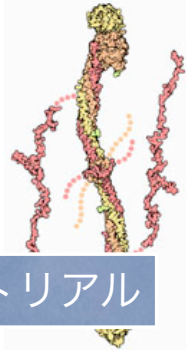
This site offers tools for browsing, searching, and reporting that utilize the data resulting from ongoing efforts to create a more consistent and comprehensive archive.

Information about compatible browsers can be found [here](#).

A **narrated tutorial** illustrates how to search, navigate, browse, generate reports and visualize structures using this new site. [This requires the Macromedia Flash player download.]

Comments? info@rcsb.org

Molecule of the Month: Fibrin



When you cut yourself, you bleed, but the bleed stops. Blood has a built-in emergency repair system that quickly blocks any damage to the circulatory system with a temporary patch that allows time for more permanent repairs. Three basic mechanisms are at work. First, platelets (small fragments of blood cells that circulate in the blood) clump at the site of the wound, forming a weak plug. Second, neighboring blood vessels constrict, reducing the amount of blood flowing into the area. Finally, the protein fibrin assembles into a tough network that clots the blood and forms an insoluble blockage. Together, these methods stop the loss of blood and create a sturdy scab to protect the area as you heal.

- More ...
- Previous Features

NEWS

- Complete News
- Newsletter
- Discussion Forum

21-November-2006
RCSB PDB Focus: Depositing New Chemical Components (Ligands)

To deposit new ligands, check Ligand Depot to see if the ligand, drug, ion, non-standard residue, modified residue, group, etc. is present in our chemical component dictionary. If the ligand is present, please make sure that the 3 letter code for the ligand in your file matches the one used in the dictionary.

21-November-2006
RCSB PDB Focus: External Links

Structure Summary pages for all structures in the PDB now offer a set of external links. These links provide further information about the structure, such as biochemical pathway information,

flashを利用したチュートリアル

ここから簡単なサーチができる

PDBj: PDB Japan

http://www.pdbj.org



日本蛋白質構造データバンク

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、蛋白質・核酸・糖などの生体高分子の立体構造データベースです。PDBjは、米国・構造バイオインフォマティクス研究共同体(RCSB)、欧州分子生物学研究所(EMBL)の欧州バイオインフォマティクス研究所-高分子構造データベース(MSD-EBI)とwwPDBを設立して、データベースの運営を行っています。三種の機関では、データの登録・処理・提供の責任を共有することを合意しています。

English

ニュース

[ニュース \(2006年10月18日\)](#): native XML-DBを用いて運用しておりますxPSSS (xml-based Protein Structure Search Service) では、従来のXPathに加え、XQueryによる検索サービスを開始致しました。
[ニュース \(2006年10月14日\)](#): PDBjでは、Gridの最新技術であるOpal-OPを利用し、Structure Navigator-RT 新version のWebサービス運用を開始致しました。

- Worldwide PDB

- RCSB-PDB

- MSD-EBI

- タンパク 3000 プロジェクト


謝辞
蛋白質立体構造データバンク(PDBj)は、独立行政法人科学技術振興機構バイオインフォマティクス推進センターの支援により運営しています。

PDB 構造検索 **3: 探す** サービス

xPSSS
(xml-based Protein Structure Search Service)

PDB ID GO

Keyword GO

[Advanced Search >>](#)

PDB 登録


BioMagResBank
生体分子 NMR データベース

BMRB


関連データベース

- 蛋白質の基準振動解析データベース
ProMode
- 蛋白質表面形状データベース
eF-site

- ステータス サーチ
- ニュースレター
- チュートリアル
- リンク
- データ利用について
- スタッフ
- 問い合わせ
- 人材募集

- 蛋白質配列検索
Sequence-Navigator
- 蛋白質の類似構造の検索
Structure-Navigator
- 蛋白質の相同性解析
ASH
- グラフィック・ビューア
Jv version 3

- 蛋白質構造百科事典
eProtS

PDBjから目的のタンパク質を捜す

PDBj Protein Data Bank Japan

xPSSS
(xml-based Protein Structure Search Service)

[RCSB Snapshot Mirror](#)

[About xPSSS](#)
[Update Information](#)

Quick Search

Enter a PDB ID: Display size per page

Enter a keyword : Display size per page

Advanced Search

[click here](#)

XQuery / XPath Search

What is the structure of pdbML? ...[An explanation is here!](#)
What do categories and items mean? ...[The mmCIF dictionary is here!](#)
About the structure of pdbMLplus...[pdbMLplus schema file](#)
xPSSS Soap Service...[Example Page](#)
Sample programs to handle pdbML...[Download Page](#)

XQuery

How can you make an XQuery? ...[Samples are here!](#)

Display size per page

XPath

How can you make an XPath? ...[Samples are here!](#)

mail to pdbj-master

- PDB ID
(ex) 3chy
- Keyword
(ex) your name
- wild card (*) とand検索も可能
- Advanced search
(次のページ)
- XQuery/XPath search
(次の次のページ)

Advanced Search

PDBj xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)
Protein Data Bank Japan

Advanced Search

Perform an exact word match

PDB ID: Search theoretical model

Release Date: after month day year
before month day year

Citation Author: 1 and
2 and
3 Authors of primary citation only!
e.g.: Ito, N.

Journal: Title
Name
Year
Volume

Contains Chain Type: Yes No ignore
 polypeptide(L)
 polypeptide(D)
 polydeoxyribonucleotide
 polyribonucleotide
 polysaccharide(D)

Compound Information:
Title:
EC Number:

Ligands and Prosthetic groups:

Number of Chains and Chain length:

Number		Length	
min	max	min	max
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Experimental Technique:

Resolution: smaller than or equal to Å
larger than or equal to Å

Source:

Host Species:

Display size per page

細かい条件を指定して
検索を行える

XQuery/XPath search

- PDB-MLに対する検索
- Advanced Searchより、より柔軟な検索が可能
- ただしちょっと難しい
- Sampleに使いそうなのを探す
or
Create XPathの利用を検討

長さ10残基以上のヘリックスを持つエントリー

```
/datablock[struct_confCategory/struct_conf/  
pdbx_PDB_helix_length>="10"]/@datablock
```

基本形： /datablock[検索条件]/出力アイテム

PDBj xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)

Quick Search

Enter a PDB ID: search Display size per page 16

Enter a keyword: search Display size per page 16

Advanced Search [click here](#)

XQuery / XPath Search

[What is the structure of pdbML? ...An explanation is here!](#)
[What do categories and items mean? ...The mmCIF dictionary is here!](#)
[About the structure of pdbMLplus...pdbMLplus schema file](#)
[xPSSS Soup Service...Example Page](#)
[Sample programs to handle pdbML...Download Page](#)

XQuery Display size per page 16

[How can you make an XQuery? ...Samples are here!](#)

Send Query Reset

XPath Display size per page 16

[How can you make an XPath? ...Samples are here!](#)

Send Query Reset Create XPath

[mail to pdbj-master](#)

Search Results



xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)

input keyword

Result Page

(More information appears when each PDB-ID code is clicked.)

1 - 16 / 46

見つかった個数

Query
keyword : [kinoshita]
next
Return to xPSS Top

PDB ID

[1C7K](#)
descriptor : ZINC ENDOPROTEASE (E.C.3.4.24.-)
title : CRYSTAL STRUCTURE OF THE ZINC PROTEASE
authors : Kurisu, G., Harada, S., Kai, Y.,
exp.method : X-RAY DIFFRACTION
deposition date : 2000-02-19
release date : 2001-04-25

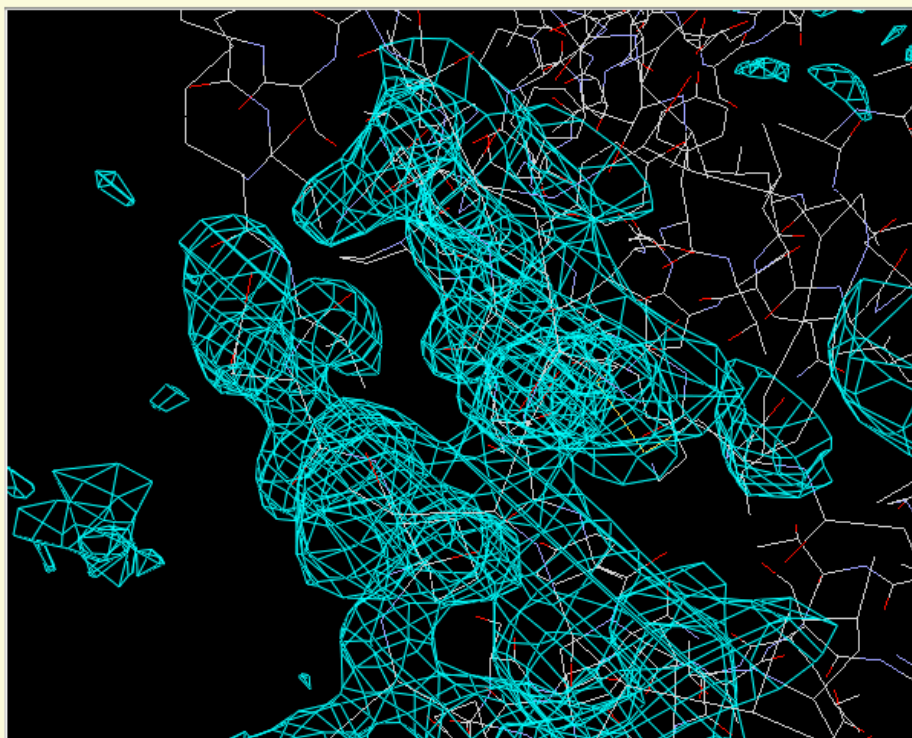
[1HEI](#)
descriptor : ALDOSE REDUCTASE(E.C.1.1.1.21), NADP NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE PHOSPHATE, [3-(4-BROMO-2-FLUORO-BENZYL)-7-CHLORO-2,4-DIOXO-3,4-DIHYDRO-2H-QUINAZOLIN-1-YL]-ACETIC ACID
title : CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN ALDOSE REDUCTASE COMPLEXED WITH THE INHIBITOR ZENARESTAT.
authors : Kinoshita, T., Miyake, H., Fujii, T., Takakura, S., Goto, T.,
exp.method : X-RAY DIFFRACTION
deposition date : 2001-04-09
release date : 2002-04-10
[Electron density map is available to be displayed from the Experimental Details page.](#)

電子密度マップが見られることもある

[1KRM](#)
descriptor : ADENOSINE DEAMINASE(E.C.3.5.4.4)/6-HYDROXY-1,6-DIHYDRO PURINE NUCLEOSIDE/ZINC ION

電子密度マップ

[1hyx] Electron Density Map Page (EDM)



```
jV>  
Atom: CA 3144 Residue: SER 186 Chain: H File: 1  
jV>  
Atom: OG1 3209 Residue: THR 194 Chain: H File: 1  
jV>  
Atom: ND2 2928 Residue: ASN 155 Chain: H File: 1  
jV>
```

jV version 3

create option

download the map

Electron Density Map (EDM) Create Option Page

- contour map iso surface
 atom nearest to the center of the map
- Chain Residue Atom
- Atom ID: H , 155 , ND2
- coordinates: (x , y , z)
- map size: 10 Å
- contour level: 1 σ
- color: R 0.0 G 1.0 B 1.0
- isosurface transparency level: 0.5

submit

reset

Search Results



xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)

input keyword

Result Page

(More information appears when each PDB-ID code is clicked.)

1 - 16 / 46

見つかった個数

Query
keyword : [kinoshita]

PDB ID

[1C7K](#)

descriptor : ZINC ENDOPROTEASE (E.C.3.4.24.-)
title : CRYSTAL STRUCTURE OF THE ZINC PROTEASE
authors : Kurisu, G., Harada, S., Kai, Y.,
exp.method : X-RAY DIFFRACTION
deposition date : 2000-02-19
release date : 2001-04-25

[1IEI](#)

descriptor : ALDOSE REDUCTASE(E.C.1.1.1.21), NADP NICOTINAMIDE-ADENINE-DINUCLEOTIDE PHOSPHATE, [3-(4-BROMO-2-FLUORO-BENZYL)-7-CHLORO-2,4-DIOXO-3,4-DIHYDRO-2H-QUINAZOLIN-1-YL]-ACETIC ACID
title : CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN ALDOSE REDUCTASE COMPLEXED WITH THE INHIBITOR ZENARESTAT.
authors : Kinoshita, T., Miyake, H., Fujii, T., Takakura, S., Goto, T.,
exp.method : X-RAY DIFFRACTION
deposition date : 2001-04-09
release date : 2002-04-10

[Electron density map is available to be displayed from the Experimental Details page.](#)

電子密度マップ

[1KRM](#)

descriptor : ADENOSINE DEAMINASE(E.C.3.5.4.4)/6-HYDROXY-1,6-DIHYDRO PURINE NUCLEOSIDE/ZINC ION

各エントリーのサマリー画面

PDB IDをクリックしたあと

PDBj Protein Data Bank Japan **xPSSS** (xml-based Protein Structure Search Service)

Summary Page

[Structural Details](#) [Experimental Details](#) [Functional Details](#) [Sequence Neighbor](#) [Download/Display](#) [Link](#)

PDB ID : 1C7K [sequence information \(FASTA format\)](#)

Descriptor : ZINC ENDOPROTEASE (E.C.3.4.24.-)

Title : CRYSTAL STRUCTURE OF THE ZINC PROTEASE

Functional Keywords : alpha and beta protein, METALLOPROTEINASE
: HYDROLASE

Biological source : STREPTOMYCES CAESPITOSUS

Cellular location : [SWS - SNPA_STRCS] Secreted protein

Total number of polymer chains : 1

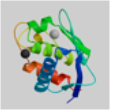
Total molecular weight : 14501 (the details in [Structural Details Page](#))

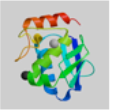
Authors : Kurisu, G. , Harada, S. , Kai, Y. (deposition date : 2000-02-19, release date : 2001-04-25)

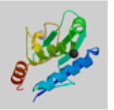
Primary citation : Kurisu, G. , Kai, Y. , Harada, S.
Structure of the zinc-binding site in the crystal structure of a zinc endoprotease from Streptomyces caespitosus at 1 Angstroms resolution.,
J.Inorg.Biochem., 82:225 - 228, 2000. ([PubMed : 11132632](#))

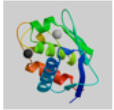
Other Database Information : [CATH](#) , [CE](#) , [FSSP](#) , [SCOP](#) , [VAST](#) , UniProt ([SWS - P56406](#)) , [eF-site](#) , KEGG ([EC 3.4.24.77](#))

Structure Images

 normal position [250X250](#) [500X500](#)

 rotated about x by 90° [250X250](#) [500X500](#)

 rotated about y by 90° [250X250](#) [500X500](#)

 viewer [PDBjViewer jV version3](#)

構造はここから見る

[PDBjViewer and jV version3](#) is used with Java(TM)Plug-in1.4 and Java3D 1.3(PDBjViewer) or JOGL library 1.0(jV version3).

Structural Details

[1C7K] Structural Details Page

[Summary](#)
[Experimental Details](#)
[Functional Details](#)
[Sequence Neighbor](#)
[Download/Display](#)
[Link](#)

Entity

Entity ID	DB Name	DB Accession	Type	Description	Formula weight	Number of molecules	Descriptive key words
1	SWS	P56406	polymer	ZINC ENDOPROTEASE sequence information (FASTA format)	14395.5	1	<ul style="list-style-type: none"> • EXTRACELLULAR SMALL NEUTRAL PROTEASE • EC 3.4.24.- • SCNP • Hydrolase • Metalloprotease • Zinc • 3D-structure • EC 3.4.24.77 • Snapalysin • NCNP
2			non-polymer	ZINC ION	65.4	1	
3			non-polymer	CALCIUM ION	40.1	1	
4			water	water	18.0	116	

Contents of the asymmetric unit

Polymers	Number of Chains	1
	Total molecular weight	14395.5
Non-Polymers*	Number of Molecules	2
	Total molecular weight	105.5
All*	Total molecular weight	14501.0

*Water molecules are not included.

← 水以外の分子の分子量

Experimental Details

Unit Cell / Resolution

<i>Cell axes [Å]</i>	55.103	55.199	37.243
<i>Cell angles</i>	90.00	90.00	90.00
<i>Spacegroup</i>	P 21 21 21		
<i>Experimental method</i>	X-RAY DIFFRACTION		
<i>Resolution limits [Å]</i>	55.00	1.00	
<i>Overall isotropic B</i>			

<i>R_factor (Number of Observation)</i>	work	0.15 ^{*(2005-05-30)} (51419) ^{*(2005-05-30)}
	free	0.17 ^{*(2005-05-30)} (344)

Diffraction

<i>Diffraction id</i>	<i>Diffraction source</i>	<i>Diffraction type</i>	<i>wave length</i>
1	ROTATING ANODE	RIGAKU RU300	0.71069

解像度

R factor

データの善し悪しの基準

Crystallization Conditions

<i>crystal id</i>	<i>crystal growth method</i>	<i>crystal growth pH</i>	<i>crystal growth temp</i>
1	'Batch method' ^{*(2005-05-30)}	7.0	4 ^{*(2005-05-30)}

Crystallization Reagents

<i>Reagent id</i>	<i>crystal id</i>	<i>crystal reagent details</i>	<i>crystal reagent name</i>	<i>crystal reagent volume</i>
1			calcium acetate ^{*(2005-05-30)}	
2			protein ^{*(2005-05-30)}	
3			acetone ^{*(2005-05-30)}	

Annotated Information is extracted from : Literature Info

- Harada, S., (1991) J.BIOCHEM.(TOKYO), 110, 46.

* annotated at PDBj (date)

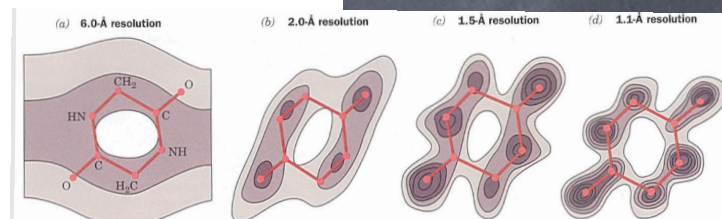


FIGURE 8-37 Sections through the electron density map of diketopiperazine calculated at the indicated resolution levels. Hydrogen atoms are not apparent in this map because of their low electron density. [After Hodgkin, D.C., *Nature* 188, 445 (1960).]

Functional Details

- 様々なDBでの機能情報のポータル

[1C7K] Functional Details Page

[about Functional Details Page](#)

Summary Structural Details Experimental Details Sequence Neighbor Download/Display Link

Functional Information from GO Data

Chain	GOid	Aspect	contents
A	0006508	biological process	proteolysis

Functional Information from PDB Data

site_id: ZIN

type	SITE
Number of Residues	4
Details	ZINC COORDINATION

Chain	Residue
A	HIS83
A	HIS87
A	ASP93
'	HOH202

Functional Information from SwissProt/UniProt

site_id: SWS_FT_F11

type	enzyme active site(ACT_SITE)
Number of Residues	1
Details	

Chain	Residue
A	GLU84

site_id: SWS_FT_F13

type	metal binding site(METAL)
Number of Residues	2
Details	Calcium

Chain	Residue
A	ASP76
A	THR78

詳しくはココ

Sequence Navigator

Query ID: [1C7K]
Query Chain: [A]
Default Clustering Option: [E-value <= 1]
Comment: Using Chain A

Results (1-50) / 56 [next](#)

Seq. Identity: 54% Seq. Positives: 62% E-value: 5.2 Score: 25 Compound: COLLAGENASE 3
[New Search \[1ZTQA\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 75 24 YDSTRVTAHETGHVGLGLPDHYQGP
[1ZTQA](#) 108 24 YNLFVAAHEFGHSLGL-DHDKDP

Seq. Identity: 38% Seq. Positives: 55% E-value: 1.4 Score: 27 Compound: RIBONUCLEASE F1(E.C.3.1.27.3)
[New Search \[1FUS\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 33 36 QL RAGNADFSYIEGNDSTRGS--YAQTDGHRGYIF
[1FUS](#) 15 36 QVRAANAACQYYQNDTAGSSTYPHTYNNYEGDFD

Seq. Identity: 31% Seq. Positives: 50% E-value: 8.9 Score: 25 Compound: CYTOCHROME C PEROXIDASE
[New Search \[1ZZHA\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 8 32 PSNAPSFQQEIANAAQIWNSSVRNVQLRAGN
[1ZZHA](#) 70 32 PRNAPTALNAVFNVAQFWDGRAPDLAAQAMNN

Seq. Identity: 26% Seq. Positives: 38% E-value: 3.1 Score: 26 Compound: COLLAGENASE-3
[New Search \[1CXVA\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 4 115 VTYDPSNAPS-FQQEIANAAQIWNSSVRNVQLRAGNADFSYIEGNDSTRGSYAQTDG-----HGRGYIFLDYQ-
[1CXVA](#) 20 115 VNYTPDMHSEVEKAFKAFKFWSDVTPLNFTRIYDGTADIMISFGTKEHGDYFPDGPGLLAHAFPPGPNYGGDAHFDDDET
1CXVA Exact Matches: [1CXVB](#)

Seq. Identity: 32% Seq. Positives: 45% E-value: 5.2 Score: 25 Compound: STROMELYSIN-1 PRECURSOR
[New Search \[1G05B\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 39 59 NADFSYIEGNDSTRGSYAQTDGHC-RGYIFLDYQQNQYDSTR----VTAHETGHVGLGL
[1G05B](#) 69 59 HGDYFPDGPVLAHAYAPGPGINGDAHFDDDEQWTKDITGTNLFLVAAHEIGHSLGL

Seq. Identity: 32% Seq. Positives: 45% E-value: 5.2 Score: 25 Compound: STROMELYSIN-1 PRECURSOR
[New Search \[1G05A\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 39 59 NADFSYIEGNDSTRGSYAQTDGHC-RGYIFLDYQQNQYDSTR----VTAHETGHVGLGL
[1G05A](#) 69 59 HGDYFPDGPVLAHAYAPGPGINGDAHFDDDEQWTKDITGTNLFLVAAHEIGHSLGL

Seq. Identity: 38% Seq. Positives: 54% E-value: 1.4 Score: 27 Compound: DI-HAEM CYTOCHROME C PEROXIDASE
[New Search \[2C1VB\]](#) [Structural Superposition](#)
[1C7KA](#) 8 31 PSNAPSFQQEIANAAQIWNSSVRNVQLRAGN
[2C1VB](#) 88 31 PRNAPTMLNAIFNAAQFWDGRAADLAEQAKG
2C1VB Exact Matches: [2C1VA](#)

構造比較

PDBにある似た配列をもつタンパク質をリストアップ

Structural Superposition

Superposition between 1C7KA (Query) and 1HV5E (Template)

Number of Aligned Residues = 77

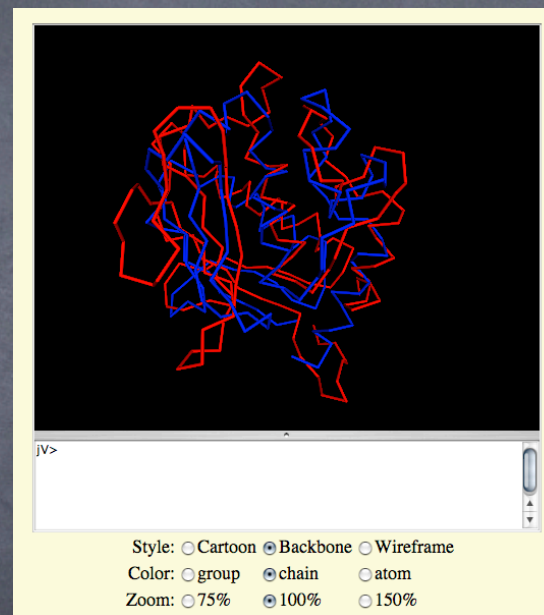
RMSD Superposition:

CA RMSD = 6.82A [\[PDB File\]](#) [\[PDBjViewer\]](#) [\[jV version3\]](#)

```

1C7KA -----TVTVTYDPSNAPS--F-Q--QEIA-NAAQIWN--SS-VRNVQLRAG-GN
1C7KA      CEEEEEEEEHHH H H HHHH HHHHHHH HH HCCEEEEC CC
1HV5E MFVLSGGRWEKTDL-TYRILR-FPWQLVREQV--RQTVAEALQVWSEVTPL-TFTEVHEG
1HV5E CEEECCEEEECCE EEECC CCCCCHHHH HHHHHHHHHHHHCCCC EEECCCC
NER Similarity 00000000007480455877089000020090050754456300550583044556077
1C7KA AD--FSYIEGN-----DS--RG-SYAQTDG--HGRGYIFLD-YQQN-----QYDS
1C7KA CC EEEEC CC CC CEEEC CCEEEEEE HHHH HHHH
1HV5E RADIMIDFARYWHGDNLPFDGPGGILAHAFPKTHREG-DVHFDYDETWTIGDNQG-TDL
1HV5E CCEEEECCECCCCCCCCCCCCCEEECCCEEECCCE EEEECCECECCCCC EEH
NER Similarity 83006496671000000082004908765720000550666870650200000040478
1C7KA TRVTAHETGHVGLGLFDHYQGPCSELMSGGPGPST-NPYP---NAQERSRVNALWANG
1C7KA HHHHHHHHHHHHCCCCCCCCCHHHHCCCCCCCC CCCC HHHHHHHHHHHHCCC
1HV5E LQVAHEFGHVLGLQ-HTAAKA-LMSPF--YTFRYPL-SLSPDRRGIQHLYG--RPQ
1HV5E HHHHHHHHHHHHCCC CCCCCC CCCCC CCCCC CCHHHHHHHHHHHH CCC
NER Similarity 99987886777878708044676078848003845304033000698689449100000
    
```

似ている度合い。小さいほどよく似ている。



Download/Display

formatの違い

file format		file name	Display	Download
PDB format	all	pdb1c7k.ent.Z(55k)	display	download
		pdb1c7k.ent(196k)	display	download
	header only	pdb1c7k.ent.Z(3k)	display	download
mmCIF		1c7k.cif.Z(79k)	display	download
XML	all	1c7k.xml.gz(90k)	display	download
	no-atom	1c7k-noatom.xml.gz(11k)	display	download
	ext-atom	1c7k-extatom.xml.gz(26k)	display	download
Struct Factor		r1c7ksf.ent.Z(541k)	display	download

構造因子 (実験データ)

画面に表示

Download

PDB: http://www.rcsb.org/pdb/docs/format/pdbguide2.2/guide2.2_frame.html

mmCIF: <http://mmcif.pdb.org/>

XML: <http://pdbjs3.protein.osaka-u.ac.jp/xPSSS/pdbml.html>

Link to Other DB

<1C7K>

- [RCSB-PDB](#)(Protein Data Bank)
- [MSD-EBI](#) (Macromolecular Structure Database)
- [CATH](#)(Class, Architecture, Topology and Homologous superfamily)
- [CE](#)(Combinatorial Extension of the optimal path)
- [eF-site](#)(electrostatic surface of Functional-site)
- [FSSP](#)(Fold classification based on Structure-Structure alignment of Proteins)
- [SCOP](#)(Structural Classification Of Proteins)
- [UniProt](#)(the universal protein resource) ([SWS - P56406](#))
- [VAST](#)(Vector Alignment Search Tool)
- [KEGG](#) (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) ([EC 3.4.24.77](#))

立体構造の
分類DB

構造比較のサーバ

分子表面のDB

タンパク質の機能情報DB

立体構造の分類DB

手動

- SCOP

- Alexey G. Murzinらによる手動分類

- CATH

- SSAPを使った自動分類と目で見た分類の融合

- FSSP

自動

- Daliを使った完全自動分類

SCOP vs. CATH

- SCOPでの分類

- SCCS (SCOP Concise Classification Strings)

- (ex) 2shk → c.37.1.2

- c: Class (α / β class)

- 37: Fold (P-loop containing fold)

- 1: Superfamily (P-loop containing)

- 2: Family (Shikimate Kinase)

- CATHでの分類

- CATH code

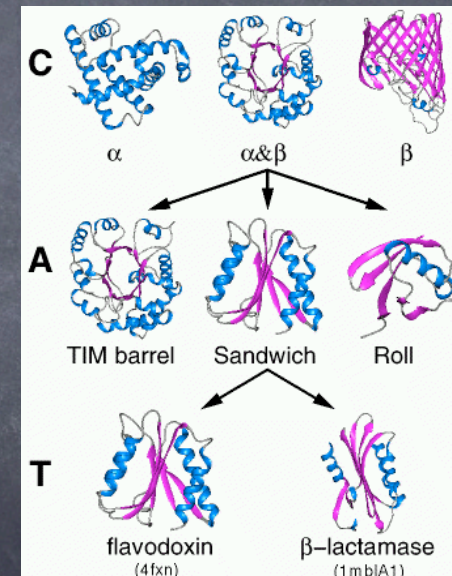
- (ex) 2shk → 3.40.50.300.29

- 3: Class (α & β)

- 40: Architecture (3-layer sandwich)

- 50: Topology (Rossmann Fold)

- 300: Homologous Superfamily (P-loop containing)



Link to Other DB

<1C7K>

- [RCSB-PDB](#)(Protein Data Bank)
- [MSD-EBI](#) (Macromolecular Structure Database)
- [CATH](#)(Class, Architecture, Topology and Homologous superfamily)
- [CE](#)(Combinatorial Extension of the optimal path)
- [eF-site](#)(electrostatic surface of Functional-site)
- [FSSP](#)(Fold classification based on Structure-Structure alignment of Proteins)
- [SCOP](#)(Structural Classification Of Proteins)
- [UniProt](#)(the universal protein resource) ([SWS - P56406](#))
- [VAST](#)(Vector Alignment Search Tool)
- [KEGG](#) (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) ([EC 3.4.24.77](#))

立体構造の
分類DB

構造比較のサーバ

分子表面のDB

タンパク質の機能情報DB

UniProtKB/Swiss-Prot

Basic Extended		Viewers: Fasta Flat File XML ExPASy SRS PIR	
General information about the UniProtKB/Swiss-Prot entry			
Entry name	SNPA_STRCS		
Primary accession number	P56406		
Integrated into UniProtKB/Swiss-Prot	15-JUL-1998		
Sequence was last modified	15-JUL-1998, version 1		
Entry was last modified	31-OCT-2006, version 47		
Protein description			
Protein name	Extracellular small neutral protease		
EC	EC 3.4.24.77		
Synonyms	Snapalysin SCNP		
Origin of the protein			
Gene	Gene name	snpA	
From	Streptomyces caespitosus[TaxID:53502]		
Taxonomy	Bacteria; Actinobacteria; Actinobacteridae; Actinomycetales; Streptomycineae; Streptomycetaceae; Streptomyces.		
References			
[1]	PROTEIN SEQUENCE. MEDLINE=96067714; PubMed: Harada S., Kinoshita T., Kasai N "Complete amino acid sequence caespitosus."; Eur. J. Biochem. 233:683-686(
[2]	X-RAY CRYSTALLOGRAPHY (1.6		

いろいろなviewerが利用できる

タンパク質の機能情報DBとしては最も信頼性が高い

manual curation

現在はUniProt (universal protein resource)の一部

SRS@EBI

General information

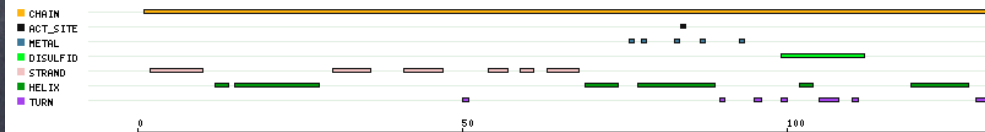
Entry name	SNPA_STRCS
Accession number	P56406
Integrated	15-JUL-1998, UniProtKB/Swiss-Prot.
Sequence update	15-JUL-1998, sequence version 1
Annotation update	31-OCT-2006, entry version 47
UniSave	P56406

Description and origin of the Protein

Description	Extracellular small neutral protease (EC 3.4.24.77) (Snapalysin) (SCNP).
Gene name(s)	SNPA
Organism source	Streptomyces caespitosus.
Taxonomy	Bacteria; Actinobacteria; Actinobacteridae; Actinomycetales; Streptomycineae; Streptomycetaceae; Streptomyces.
NCBI TaxID	53502

Features

[Features compressed](#) | [Features expanded](#)



Key	Begin	End	Length	Description
CHAIN	1	132	132	Extracellular small neutral protease. /FTId= PRO_0000078176 .
ACT_SITE	84	84	1	
METAL	76	76	1	Calcium.
METAL	78	78	1	Calcium.
METAL	83	83	1	Zinc (catalytic).
METAL	87	87	1	Zinc (catalytic).
METAL	93	93	1	Zinc (catalytic).
DISULFID	99	112	14	
STRAND	2	10	9	
HELIX	12	14	3	
HELIX	15	28	14	
STRAND	30	36	7	
STRAND	41	47	7	

- UniProtKBのViewerの一つ
- EBIで公開
- Featuresが見やすい

Link to Other DB

<1C7K>

- [RCSB-PDB](#)(Protein Data Bank)
- [MSD-EBI](#) (Macromolecular Structure Database)
- [CATH](#)(Class, Architecture, Topology and Homologous superfamily)
- [CE](#)(Combinatorial Extension of the optimal path)
- [eF-site](#)(electrostatic surface of Functional-site)
- [FSSP](#)(Fold classification based on Structure-Structure alignment of Proteins)
- [SCOP](#)(Structural Classification Of Proteins)
- [UniProt](#)(the universal protein resource) ([SWS - P56406](#))
- [VAST](#)(Vector Alignment Search Tool)
- [KEGG](#) (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) ([EC 3.4.24.77](#))

立体構造の
分類DB

構造比較のサーバ

分子表面のDB

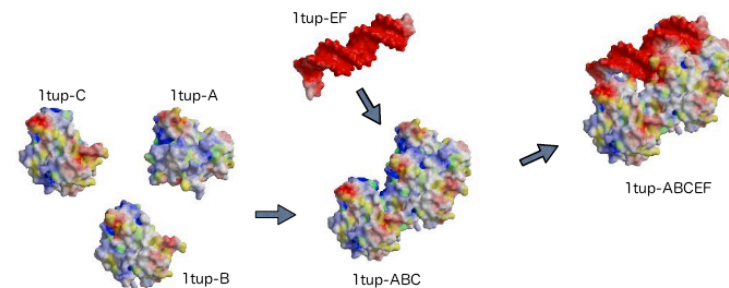
タンパク質の機能情報DB

分子表面DB: eF-site

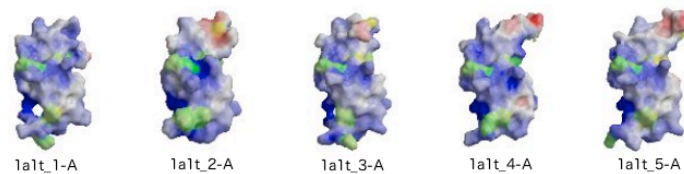
- タンパク質分子表面のDB
- 静電ポテンシャルと疎水性度に応じて色づけ

The screenshot shows the eF-site website interface. At the top left is the PDBj logo (Protein Data Bank Japan). The main title is "eF-site" in large blue font, with the subtitle "electrostatic surface of Functional-site" below it. A navigation bar contains links for "About eF-site", "Tools", "References", "Links", "Acknowledgements", and "Feedback". Below this, it states "226687 Entries, Last Update: 25-Nov-2006". There are two search sections: "Keyword Search" with a text input field and radio buttons for "PDB code only", "and", and "or"; and "Category Search" with a list of categories: Antibody, Prosite, Active Site, Membrane, and Binding Site. Search and Reset buttons are located at the bottom of the search sections.

Examples of molecular surface



For all pdb entries, molecular surfaces are generated for individual subunits of proteins and the complex of proteins. In addition, when double strands DNA is included in the entry, a molecular surface for each dsDNA is also stored.



PDBj: PDB Japan

http://www.pdbj.org



Protein Data Bank Japan
日本蛋白質構造データバンク

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、蛋白質・核酸・糖などの生体高分子の立体構造データベースです。PDBjは、米国・構造バイオインフォマティクス研究共同体(RCSB)、欧州分子生物学研究所(EMBL)の欧州バイオインフォマティクス研究所-高分子構造データベース(MSD-EBI)とwwPDBを設立して、データベースの運営を行っています。三種の機関では、データの登録・処理・提供の責任を共有することを合意しています。

English

ニュース

ニュース (2006年10月18日): native XML-DBを用いた運用しておりますxPSSS (xml-based Protein Structure Search Service) では、従来のXPathに代えて、XQueryによる検索サービスを開始致しました。

ニュース (2006年10月14日): PDBjでは、Gridの最新技術であるOpal-OPを利用し、Structure Navigator-RT 新version のWebサービス運用を開始致しました。

Worldwide PDB



RCSB-PDB



MSD-EBI



タンパク 3000 プロジェクト



謝辞

蛋白質立体構造データベース(PDBj)は、独立行政法人科学技術振興機構 バイオインフォマティクス推進センターの支援により運営しています。

PDB 構造検索

xPSSS
(xml-based Protein Structure Search Service)

PDB ID GO

Keyword GO

Advanced Search >>

PDB 登録

ADIT 

BioMagResBank
生体分子 NMR データベース

BMRB 

関連データベース

- 蛋白質の基準振動解析データベース **ProMode**
- 蛋白質表面形状データベース **eF-site**

サービス

- 蛋白質配列検索 **Sequence-Navigator**
- 蛋白質の類似構造の検索 **Structure-Navigator**
- 蛋白質の相同性解析 **ASH**
- グラフィック・ビューア **JV version 3** 
- 蛋白質構造百科事典 **eProtS**

サーチ

4: 探す2

- ニュースレター
- チュートリアル
- リンク
- データ利用について
- スタッフ
- 問い合わせ
- 人材募集

Sequence Navigator

- アミノ酸配列の似たタンパク質をPDBから探す
- たくさん見つかったときにはクラスタリングしてくれる

To Enter Navigator, Input a PDB ID and (optional) Chain ID

アミノ酸配列を入力

OR Input an AA Sequence

Find All Homologs

Clear Form

Clustering Options

Seq. Identity >= 20% >= 50% >= 90%

Seq. Positives >= 20% >= 50% >= 90%

E-value <= Exp(-1) <= Exp(-6) <= Exp(-12)

Score >= 10 >= 100 >= 200

No Clustering

配列の一致度

配列の類似度

統計的有意度

PDBj: PDB Japan

http://www.pdbj.org

PDBj
Protein Data Bank Japan
日本蛋白質構造データバンク

日本蛋白質構造データバンク(PDBj)は、蛋白質・核酸・糖などの生体高分子の立体構造データベースです。PDBjは、米国・構造バイオインフォマティクス研究共同体(RCSB)、欧州分子生物学研究所(EMBL)の欧州バイオインフォマティクス研究所-高分子構造データベース(MSD-EBI)とwwPDBを設立して、データベースの運営を行っています。三種の機関では、データの登録・処理・提供の責任を共有することを合意しています。

English

ニュース

- ニュース (2006年10月18日): native XML-DBを用いた運用しておりますxPSSS (xml-based Protein Structure Search Service) では、従来のXPathに代えて、XQueryによる検索サービスを開始致しました。
- ニュース (2006年10月14日): PDBjでは、Gridの最新技術であるOpal-OPを利用し、Structure Navigator-RT 新version のWebサービス運用を開始致しました。

Worldwide PDB
WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

RCSB-PDB
RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

MSD-EBI
EMBL-EBI

タンパク 3000 プロジェクト
文部科学省 タンパク3000 プロジェクト

謝辞
蛋白質立体構造データベース(PDBj)は、独立行政法人科学技術振興機構 バイオインフォマティクス推進センターの支援により運営しています。

PDB 構造検索

xPSSS
(xml-based Protein Structure Search Service)

PDB ID GO

Keyword GO

Advanced Search >>

PDB 登録

ADIT Auto Dep Input Tool

BioMagResBank
生体分子 NMR データベース

BMRB

関連データベース

- 蛋白質の基準振動解析データベース ProMode
- 蛋白質表面形状データベース eF-site

サービス

- 蛋白質配列検索 Sequence-Navigator
- 蛋白質の類似構造の検索 Structure-Navigator
- 蛋白質の相同性解析 ASH
- グラフィック・ビューア JN version 3
- 蛋白質構造百科事典 eProtS

ステイタス サーチ

ニュースレター

リンク

データ利用について

スタッフ

問い合わせ

人材募集

5: 探す3

Structure Navigator

[About PDBj Structure Navigator](#)

[Whats New](#)

[Structure Navigator Soap Service](#)

[Structure Navigator-RT](#)

[Structure Navigator-RT \(Opal-OP\)](#)

To Enter Navigator, Input a PDB ID and (optional) Chain ID

NER Cutoff \geq (absolute) \geq (relative)

Sequence Homology Filter

- Skip Sequence-Homologous Templates
- Skip Non-Homologous Templates
- Dont Skip Any Templates

PDB File: ファイルが選択されていません

Depth of Search
 1 2 3 4 5
Faster.....Slower

Return Only Sequence Representatives









立体構造での類似性検索

構造での類似性検索

- DALI, VAST, MATRASあたりがメジャー
- Foldレベルでの類似性検索

MATRAS
Protein 3D Structure Comparison
MATRAS : MARKovian TRAnSition of Structure evolution

[\[Japanese page\]](#)

	Pairwise 3D Alignment	Calculation of a structural alignment for two chains
	Self 3D Alignment	Detection of structurally similar regions in one chain
	Multiple 3D Alignment	Calculation of multiple structural alignment for 3-10 chains
	3D Library Search	Comparison of one structure vs library structures. The library is weekly updated.
	Sequence Search vs PDB	Comparison of amino acid sequence vs library structures.
	Taxonomy of Domains	Dendrogram of SCOP domains by MATRAS comparison
	PDB information	Show information about each PDB entry
	Help page	

EMBL-EBI::PDBsum

- リガンドとの相互作用などがわかりやすい

PDBsum: A database of the known 3D structures of proteins and nucleic acids

35,203 entries Includes 785 superseded entries

Browse

- PDB codes
- Het Groups
- Ligands
- Enzymes
- PROSITE
- Species
- Generate
- Highlights

Enter PDB code (4 characters) Find Reset

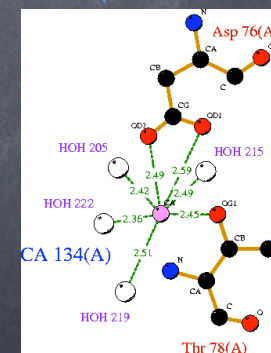
Search string Search

To search all TITLE, HEADER, COMPND and SOURCE records in the PDB (eg to find a given protein by name), type the search-string above and click on Search. For more information on searching, click [here](#).

To search by SWISS-PROT/UniProt code or by protein sequence, go to [SAS](#)

NEW! Links to PDB's Molecule of the Month (1/10/2005).

- Full PROCHECK analysis can now be run for any protein (19/7/2005).



PDB IDかキーワードで目的のタンパク質を捜す