

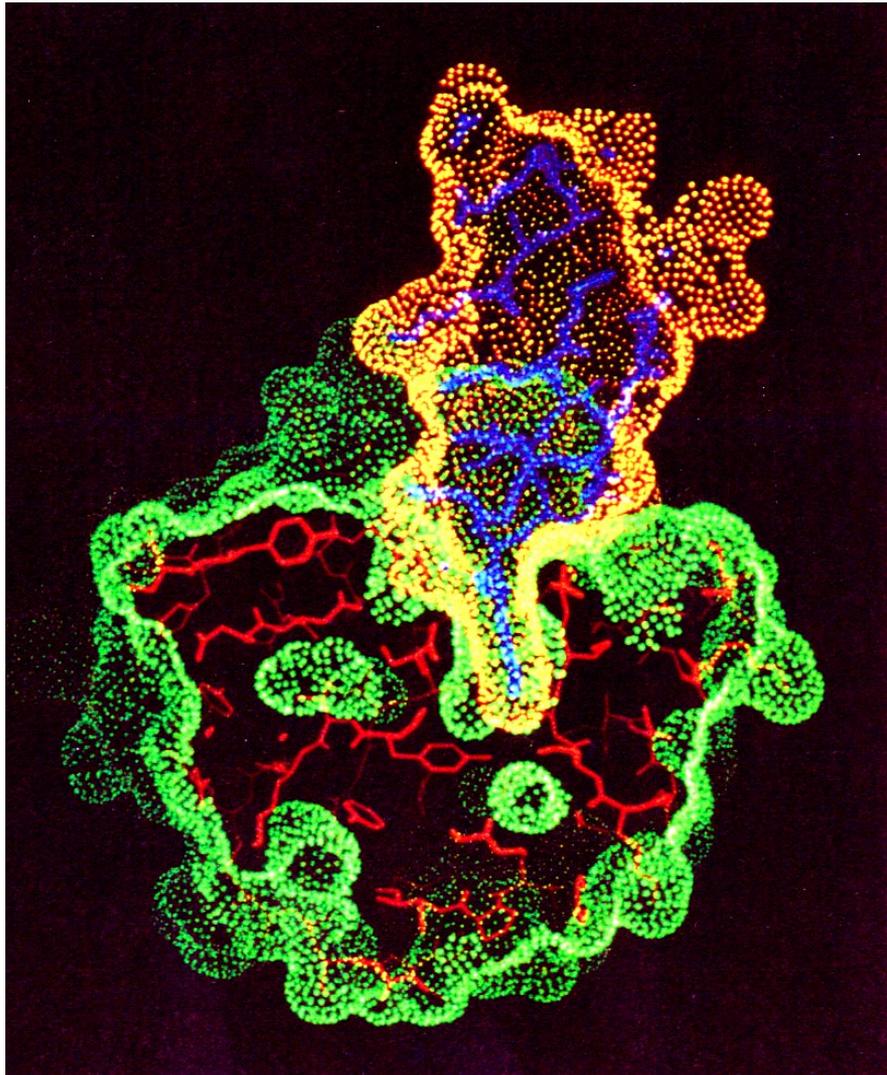
PDBj と wwPDB における 蛋白質構造データ統合化

代表研究者: 中村 春木
分担研究者: 藤原 敏道
(大阪大学蛋白質研究所・教授)



Institute for Protein Research
大阪大学蛋白質研究所

蛋白質の形と働き



蛋白質の特異的な
分子の認識

鍵と鍵穴モデル
(Key and Lock
model)

トリプシン(緑)と、その阻害蛋白質(オレンジ)との複合体構造
(PDB-ID: 2ptc)

蛋白質の形から創薬へ

蛋白質の形に基づく創薬

(SBDD: Structure Based Drug Design
SGDD: Structure Guided Drug Development)

Viracept: アグロン社, **Agenerase:** Vertex社 & USA-Kissei
AIDS タミフル/ノイラミニダーゼ (2qwk)

AIDS

標的分子: HIV-1 プロテアーゼ

Gleevec: ノバルティス ファーマ社

慢性骨髄性白血病

標的分子: Bcr-Abl、Tyrキナーゼ

Iressa: アストラゼネカ社

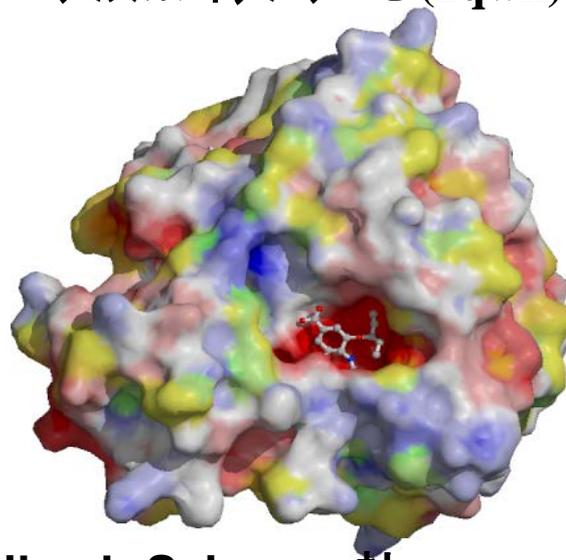
肺がん

標的分子: EGFR、Tyrキナーゼ

Tamiflu: スイスF.Hoffmann-La Roche社、米国Gilead Sciences社

インフルエンザ

標的分子: 糖分解酵素



2012年ノーベル化学賞

GPCR: G蛋白質共役型受容体の構造と機能



Nature, August 2011

It's all about the structure

For more than 20 years, Brian Kobilka worked to create a portrait of a key cell receptor. Sometimes, the slow, steady approach wins.

BY LIZZIE BUCHEN

FEATURE NEWS

Brian Kobilka was exhausted when he stepped off the 12-hour red-eye flight from China to San Francisco, California, last May. But after a quick nap at home, he headed straight back to the airport and crammed his long frame into another plane, this time bound for Chicago, Illinois. Once there, he drove to the Advanced Photon Source at Argonne National Laboratory, a source of powerful X-ray beams used for analyzing protein structures. Kobilka, a biochemist at Stanford University in California, was desperate to see the latest data from his lab's effort to make the first atomic-scale, three-dimensional image of a key cell-surface receptor locked with its protein partner. The image marked the last leg of an intellectual journey that he had started some 20 years before.

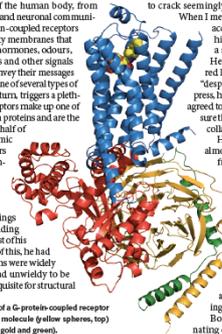
Nearly every function of the human body, from sight and smell to heart rate and neuronal communication, depends on G-protein-coupled receptors (GPCRs). Lodged in the fatty membranes that surround cells, they detect hormones, odors, chemical neurotransmitters and other signals outside the cell, and then convey their messages to the interior by activating one of several types of G protein. The G protein, in turn, triggers a plethora of other events. The receptors make up one of the largest families of human proteins and are the targets of one-third to one-half of drugs. Working out their atomic structure will help researchers to understand how this central cellular-communication system works, and could help drug-makers to design more effective treatments.

The structure and workings of GPCRs have been overriding obsessions of Kobilka for most of his professional life. For much of this, he had little company, as the proteins were widely considered too complex and unwieldy to be stabilized as crystals, a prerequisite for structural analysis by X-ray crystallography. But his determination has finally started to pay off. In 2007, his team solved the first high-resolution structure of a GPCR that binds to a hormone¹; in January this year he did the same for the receptor poised to activate its G-protein², and last month, he published the results from Chicago, the first structure of any GPCR in the act of turning on its G protein³.

The latest accomplishment has many in the field buzzing about a Nobel prize. "But if they do give it to him, it'll be the devil to get him to Stockholm," says Henry Bourne, a professor emeritus at the University of California, San Francisco, who worked on G proteins and has known Kobilka since the 1980s. Kobilka loathes the limelight, and is renowned as much for his shy modesty as his ability to crack seemingly impossible protein structures.

When I met Kobilka at his Stanford office, he accepted a quick handshake, averting his eyes, and reluctantly offered me a seat across from him at his desk. He stared anxiously at the glowing red light on my voice recorder. He is "desperately fearful" of talking to the press, he says, his voice breaking, and only agreed to talk because he "wanted to make sure that the contributions of my lab and collaborators are recognized."

He is so fearful, in fact, that it is almost impossible to draw much out of him. When asked why he is so captivated by GPCRs, Kobilka struggles for an answer. "I'm just inherently fascinated by these proteins. I don't know. I just want to know how they work," he says. The only time he becomes animated is when describing the conformation of the receptor gripping its G protein. "It's fantastic structure," he says, a grin across his face. "It's just amazing. I really enjoy talking about it." Bourne says that "Brian is a fascinating character. He's so driven, and ▶

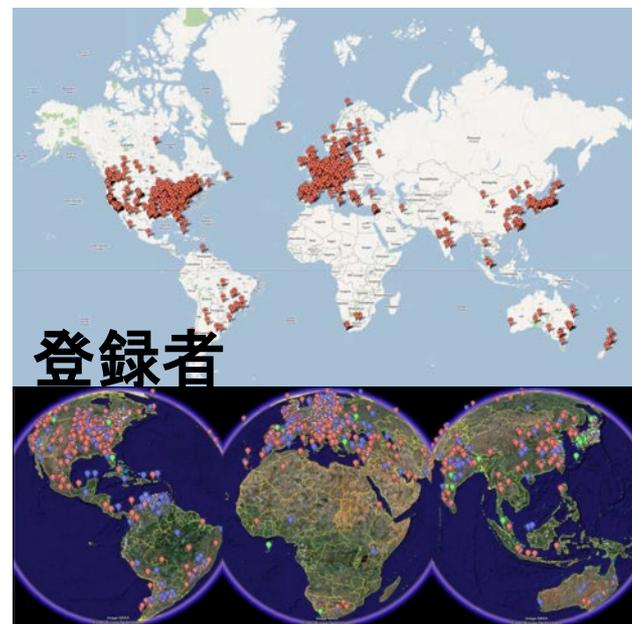


A fine figure: a molecular view of a G-protein-coupled receptor (blue) turned on by a signalling molecule (yellow sphere, top) and activating a G protein (red, gold and green).

PDBID
3sn6

蛋白質の形のデータバンク:PDB

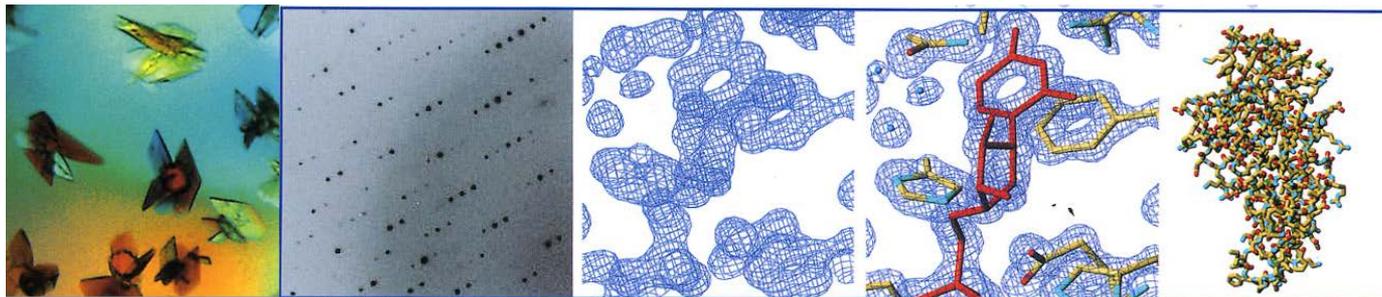
- ・ 生体高分子の構造(形)に関する全ての情報を集めた国際的データベース:**データバンク方式**
- ・ 情報は、研究者・教育者・学生・企業を問わず**無償で利用**される
- ・ 運営は各国(米国、欧州、日本)の**研究費用**でまかなわれている



利用者
(2012年には3億8千万件のダウンロード)

蛋白質の形のデータバンク:PDB

X線結晶回折実験

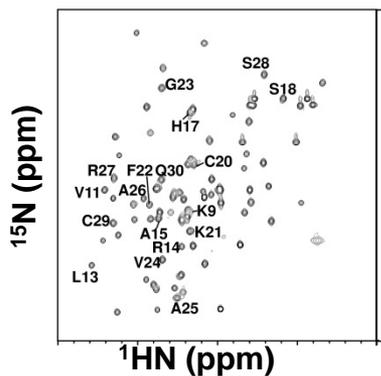


結晶作成 → X線回折像 → 電子密度マップ → 原子モデル作成



SPring-8
放射光施設

核磁気共鳴(NMR)法



超高磁場
NMR装置

超低温電子顕微鏡

蛋白質の形のデータバンク:PDB

PDBの歴史

1960年代: 蛋白質結晶学が始まる

ミオグロビン、ヘモグロビン、
リゾチームなど



マックス ペルーツ &
ジョン ケンドリュー(1962
年ノーベル化学賞)

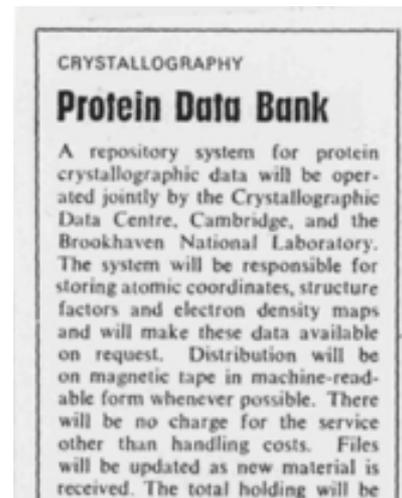
1970年代: PDB 開始 **7件** (1971年10月)

米国ブルックヘブン国立研究所

大阪大学蛋白質研究所においても

シトクロムCの構造を決定→登録

磁気テープを配布



蛋白質の形のデータバンク:PDB

**1980年代: データ登録の急増 (国際結晶学会:
データ登録が論文投稿の必須条件)**

1990年代: RCSB-PDB (米国) が運営を開始

2000年代: wwPDB が設立され国際化

構造ゲノム科学による構造急増

X線・NMR実験情報(BMRB)の登録が必須に

2010年代: 新規の手法が開発、EM-DBとの連携

94,000件ほどのデータ公開

ビッグ・データの時代へ

蛋白質の形のデータバンク:PDB

WORLDWIDE
wwPDB
PROTEIN DATA BANK

The worldwide Protein Data Bank

www.wwPDB.org • info@wwPDB.org



Kleywegt, G Markley, JL
Berman, HM Nakamura, H

RCSB **PDB**
PROTEIN DATA BANK

Research Collaboratory for
Structural Bioinformatics
www.pdb.org



BioMagResBank
www.bmrwisc.edu

EMBL-EBI **PDB**e
PROTEIN DATA BANK EUROPE

Protein Data Bank in Europe
pdbe.org

PDBj
Protein Data Bank Japan

Protein Data Bank Japan
www.pdbj.org

PDBj @ 大阪大学蛋白質研究所

Protein Data Bank Japan

日本蛋白質構造データバンク

<http://pdbj.org/>

2001年度から、(独)科学技術振興機構(JST-NBDC:バイオサイエンスデータベースセンター)の支援を受けて活動中

The screenshot shows the PDBj homepage with a navigation menu on the left, a search bar at the top, and a main content area with news and a 'Molecule of the Month' section. The news section includes updates about the May 1, 2013 release of 90,000 entries and the release of the latest version of JV, JM4.3.

PDBj トップページ(日英中韓)

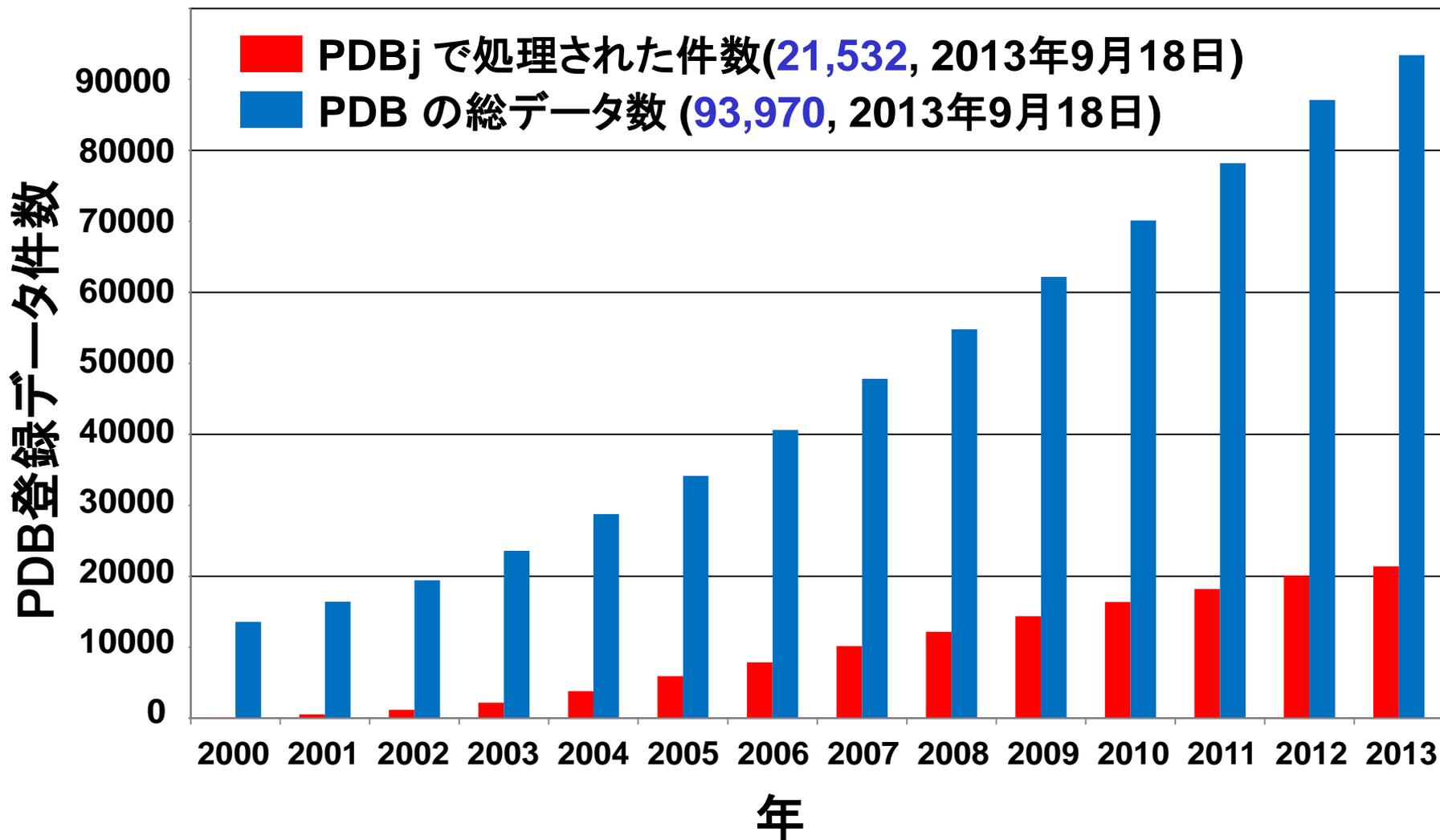


PDBj スタッフ(2013年4月)

PDBjの活動

- 1) “Data-in” の活動: wwPDBの一員として
 - ・品質管理がなされた登録作業の実施
 - ・新たな統一的登録システムの開発
 - ・新たな共通フォーマットの開発(XML, RDF)
- 2) “Data-out” の活動: 共通データの
 - ・ダウンロードサイト(毎週アップデート)の運営
 - ・種々のサービスや二次データベースの提供
 - ・データベース統合化環境の開発・提供
 - ・上記環境での配列→構造→機能の同定・推定

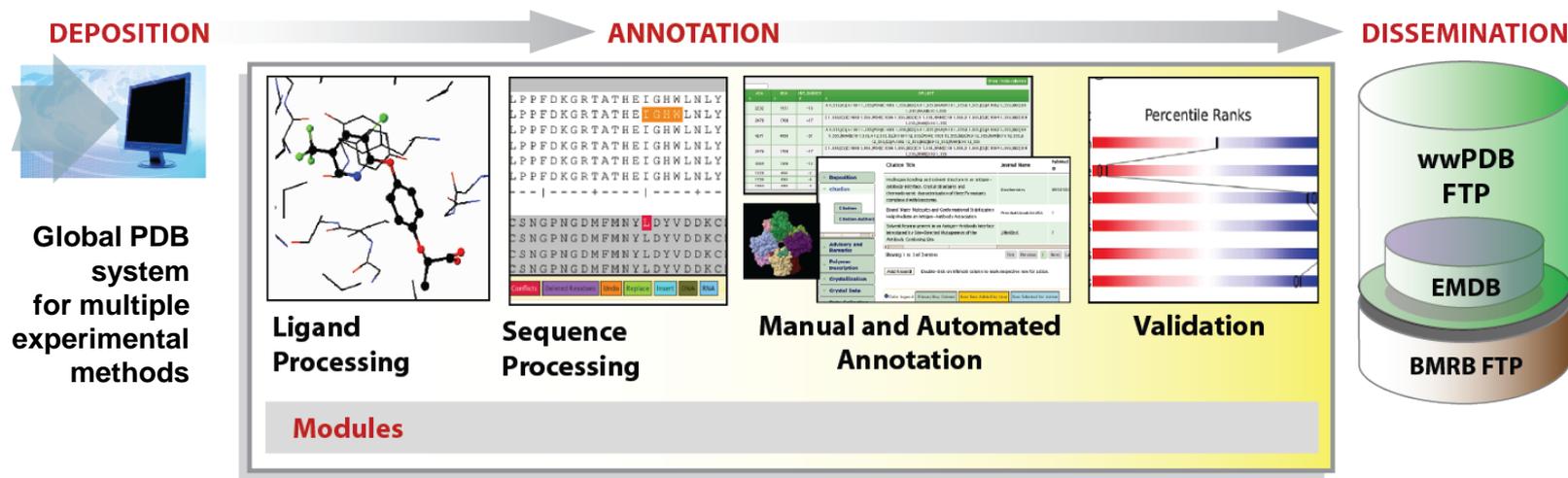
PDBjのData-inの活動



世界中で決定された構造の約1/4の登録処理をPDBjで実施

新しいデータ処理システムの開発

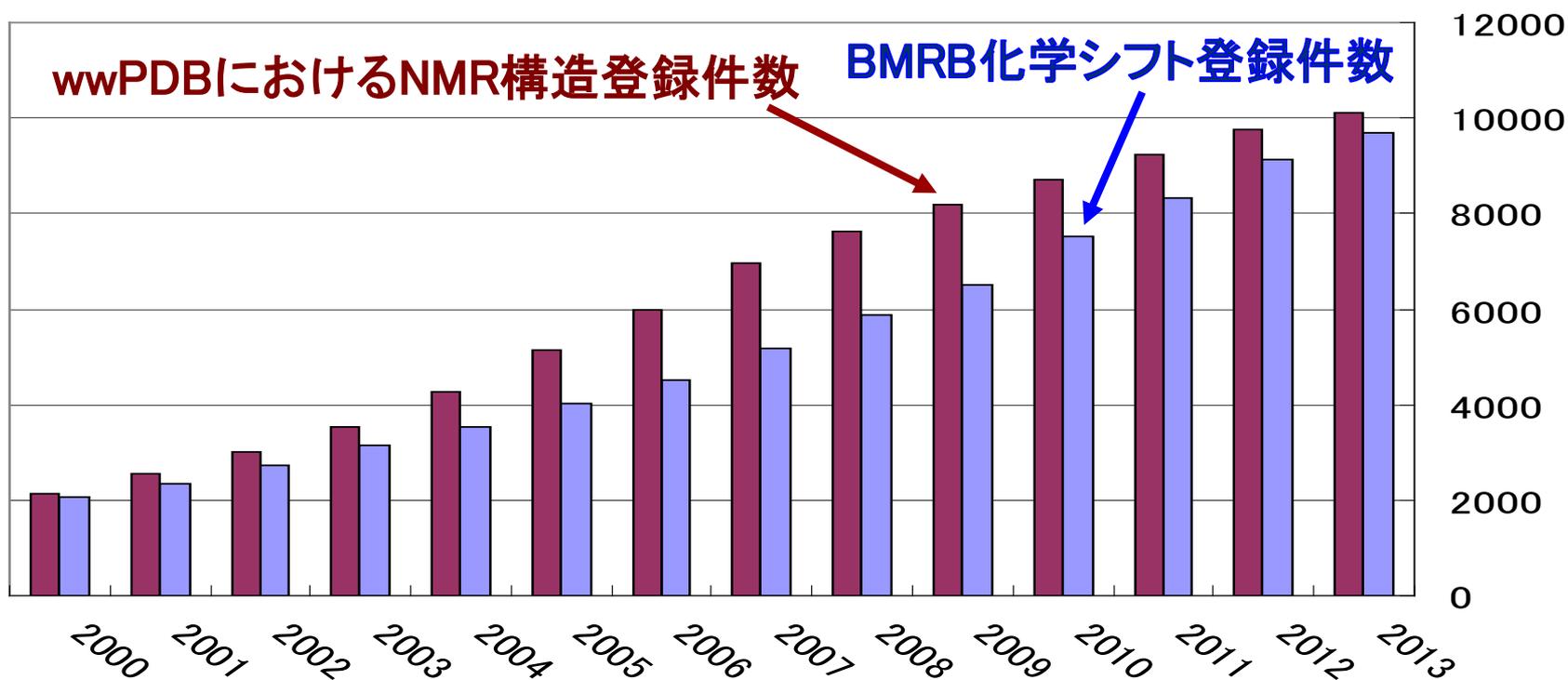
データ増大・高品質化に対処



- Enables workload balancing and increased **productivity**
- Better quality assurance of **ligand** chemistry and **polymer sequences**
- **PDBx/mmCIF** is the master file format
- **Validation suites** based on recommendations from expert task forces; X-ray validation pipeline is available as a stand-alone server
- System will support **all accepted experimental methods**

PDBj-BMRBのData-inの活動

BMRB(化学シフト), wwPDB(原子座標)の登録総数の年次推移



PDBj, PDBj-BMRBのData-out活動

<http://pdbj.org/>

93970
 件が利用できます (2013-09-18 00:00 UTC / 09:00 JST)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search:

wwPDB RCSB PDB BMRB PDBe JST-NBDC IPB 従来版 Share

日本語白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、[JST-NBDC](#) と [大阪大学](#) の支援を受け、米国 [RCSB](#)、[BMRB](#)、および欧州 [PDBe](#) と協力して、生体高分子の立体構造データベースを国際的に統一化されたPDBアーカイブとして運営するとともに、様々な解析ツールを提供しております。

初めての利用者のためのガイド

新しいウェブインターフェースを初めてご利用の方は、[PDBjのウェブインターフェースについて](#)をご覧ください。PDBjウェブサイトの様々な説明は、[対話型チュートリアル](#)をご覧ください。

新しいPDBj ウェブサイトが、**5月23日より、正式なPDBjウェブサイトになりました**。更なる改良のために、[ご意見・ご要望を頂ければ](#) PDBj ウェブサイトは、下記URLから引き続きご利用頂けます。<http://legacy.pdbj.org/>

メンテナンスのお知らせ

9月25日(水)の午前11時から午前11時半の間、システム保守作業のため、[ProMode Elastic](#)サービスがご利用頂けません。ご不便をおかけし間罪を覚悟してご利用頂きますようお願い致します。

最新情報

ニュース (2013年9月6日)
 wwPDBのNMR検証作業チームの提言をまとめた論文が公開されました

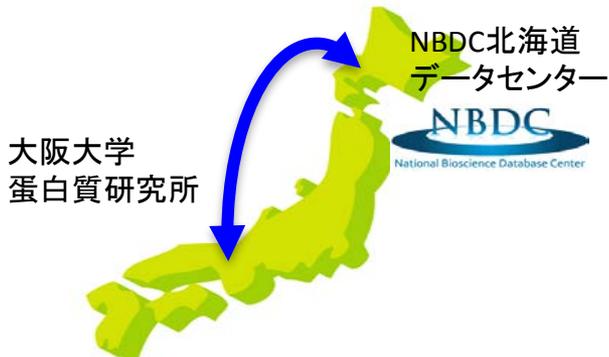
ニュース (2013年9月6日)
 論文が公開されました「How Community Has Shaped the Protein Data Bank」

ニュース (2013年8月26日)
 2013年8月23日 (金)、大阪中之島にてPDBj 講習会を開催しました。発表内容を[講習会ページ](#)に掲載しました。

ニュース (2013年8月5日)
 構造の登録者、ならびに雑誌編集者や論文査読者を支援するため、wwPDBでは新たなX線構造検証レポートを発行します

検索
 Search PDB (PDBj Mine)
 Search PDB (詳細検索)
 Large Structures
 Search BMRB
 Sequence-Navigator
 Structure-Navigator
 EM Navigator
 wwPDB/RDF
 SeSAW
 Ligand Binding Sites (GIRAF)
 最新の公開エントリー
 未公開エントリーのステータス

サービス&ソフトウェア
 二次データベース
 教材
 PDBjについて
 カスタマイズ



ポータルを二重化

PDBj-BMRB

English

PDBj BMRB

PDBj-BMRBでは生体高分子のNMR実験データの登録受付・公開をPDBjグループの一員として行っています。

BRMB Search
 Retrieve entry by BMRB accession No.

 Accession number Deposition code
 登録後の状態もAccNoで検索すると可能です。
 Retrieve by keywords (Google)

 BMRB Database wwPDB

Deposit Data
ADIT-NMR **AP-NMR**
 生体高分子のNMR実験データの登録はこちら。
SMS-Dep **SMSDep**
 低分子生体高分子のNMR実験データと電子密度データ登録

BRMB Database
Osaka site
 BMRB
 BMRBウェブサイトはこちら。
PDBj
BMRB
PDB
NBDC
INSTITUTE FOR PROTEIN RESEARCH

Contents

Over view of the Submission Process BMRB(データバンク)へデータ登録の流れ	Submitting data 登録サイトADIT-NMR/D 使い方、登録深目	ADIT-NMR or SMS-Dep どちらに登録するべきか	FAQ よく寄せられるご質問をまとめています
NMR Tool BOX 漏算解析ツール	BMRBxTool データベース連携ツール	Tool List Validation Tool Deposit Tool FDJ-QMRR Tool	Contact us お問い合わせ

Information

Feb. 04-2013 2013年2月6日以降にADIT-NMRにてPDBに登録される座標と実験データは、同じ公開条件(ステータス)に従います。(リンク)

PDBjへのアクセス

<http://pd bj.org/>

Amino acid sequence (FASTA)

91761
articles available on 2013-06-26
02.02.UTR / 09.02.JET

PDBj
Protein Data Bank Japan

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어
Advanced search

Search pd bj.org

wwwPDB RCSB BMRB PDBe JST-NBDC IPR Leasys Share

Home
Top Page
Statistics
Help
FAQ
Contact us
Links
Download PDB archive / snapshot archive

Data deposition
ADIT: PDB Deposition
ADIT-NMR
Data Deposition Information

Search

Services & Software

Derived database

Educational service

About PDBj

Customizations
Configure panels
Configure customizations
Reset all customizations
Job manager

Summary Structural details Experimental details Functional details Sequence Neighbor Resources

1GOF

NOVEL THIOETHER BOND REVEALED BY A 1.7 ANGSTROMS CRYSTAL STRUCTURE OF GALACTOSE OXIDASE

Structures
Asymmetric unit
= Biological unit

View with JV
View with Jmol

Downloads
Sequence (PDB)
PDB format (Full)
PDB format (nonatom)
PDB format (non-H)
PDB format (non-H)

Database information
RCSB-PDB
PDBE
Protein Data Bank
CATH
PDB-RE
SCOP
VAST
UniProt (Q01743)
K020 (1.1.3.9)
eF-site
PISA
wwPDB/RF
Electron Density Map
Promote Elastic
BzCatDB (T00008)
PQS

Descriptor GALACTOSE OXIDASE (E.C.1.1.3.9) (PH 4.5)

Functional Keywords OXIDOREDUCTASE(OXYGEN(A))

Biological source Hypomyces rosellus

Cellular location **Secreted**

Total number of polymer chains 1

Total molecular weight **68785.89**

Authors Ito, N., Phillips, S.E.V., Knowles, P.F. (deposition date: 1993-09-30, release date: 1994-01-31, modification date: 2011-07-13)

Primary citation Ito, N., Phillips, S.E., Stevens, C., Ogel, Z.B., McPherson, M.J., Keen, J.N., Yadav, K.D., Knowles, P.F. *Nature*, 350: 87-90, 1991
DOI: 10.1038/350087a0

Experimental method X-RAY DIFFRACTION (1.7 Å)

More Asymmetric unit images

Copyright © 2013 PDBj. All Rights Reserved.

```
>1GOF: GALACTOSE OXIDASE
ASAPIGSAISRNNNAVTCDSAGSGNECKAIKGNKDTFHTFYFANGDKPKFHTYITDMK
TQNVNGLSMLFRQDGNQNGMIGRIEVLVSDGTNNGSPVAGSFWADSTTKYSNFETRP
ARTYRLVAITEANGQFWSIAEINVFOASSTYAPQGLGRGQPTDLDLIVFAAAAEIPTS
GRVLRHSYRNDAPGSGPGITLTSMPDSTGVISDRVTYVTRHDMPCGIDSDNGQGLV
VTCGNDARKSLSDSSGWIPODMQVARGVQSSATMSDQVFTIGQSSWGGVFNENGE
VYSPSKTWTSLPNAKVNFMFLADKQGLYRSDNHAMLFQKKGSGVQFAGPSTAMNHYTS
GSGDYSAGKRGSHRGVAPDMCGNAVYDVGKILTFGSGPDYQSDATTNAHIITLG
EPGTSFNTVFASNGLIFARTFHTSVLFDGSGTFIQQGQACIIPFEDSTFFPELIVPQD
DTFYKQNSIVRVRYSISLLPQGRVFPQGGGLCGCTTTFPDQIIFPFLYNSNGSL
ATRPFKTRTSTQSVKVGGRITISTDSSISKASLIYGYATHTVHTDQRRIPLLTNNNGH
SYSFQVPSDSGVALPGYVMLFVMSAGVPSVASTIRVQ
```

eF-site Structure: IgoF-A

Default CPK Default without hetero atoms

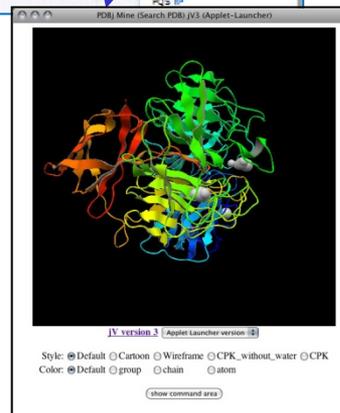
Functional site focus & details

Residue	on/off
1) A:495	<input type="checkbox"/>
2) A:272	<input type="checkbox"/>
3) A:495	<input type="checkbox"/>
4) A:496	<input type="checkbox"/>
5) A:581	<input type="checkbox"/>
6) A:228	<input type="checkbox"/>
7) A:290	<input type="checkbox"/>
8) A:272	<input type="checkbox"/>
9) A:495	<input type="checkbox"/>
10) A:75-87	<input type="checkbox"/>
11) A:194	<input type="checkbox"/>
12) A:227-228	<input type="checkbox"/>
13) A:272	<input type="checkbox"/>

Residue	ACT, SITE
A:495	Y
description	Proton acceptor.
source	Swiss-Prot: 1

Data viewer at PDBj

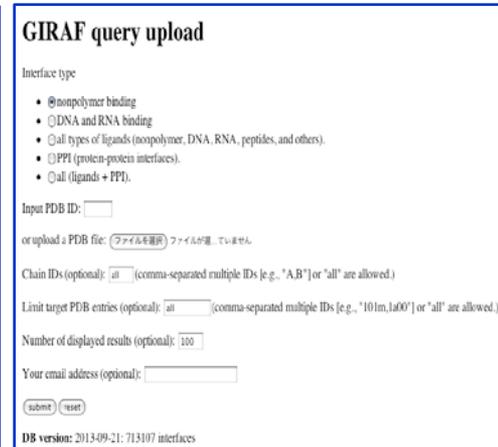
Graphic viewer: jV
<http://pd bj.org/jV/>



Molecular surface DB: eF-site
<http://ef-site.hgc.jp/eF-site/>

Kinjo et al. NAR 40, D453 (2012)

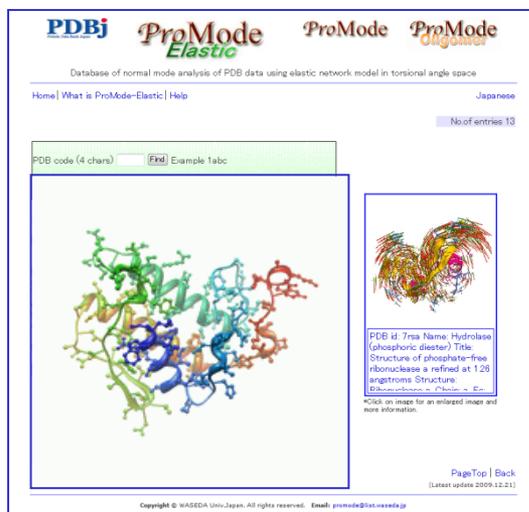
PDBjのサービス・ツール



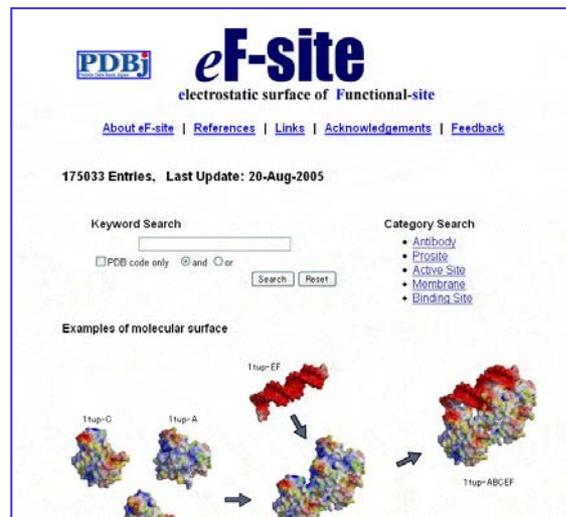
EM Navi: 電子顕微鏡画像EMDB

Yorodumi: PDBとEMDBの統合化

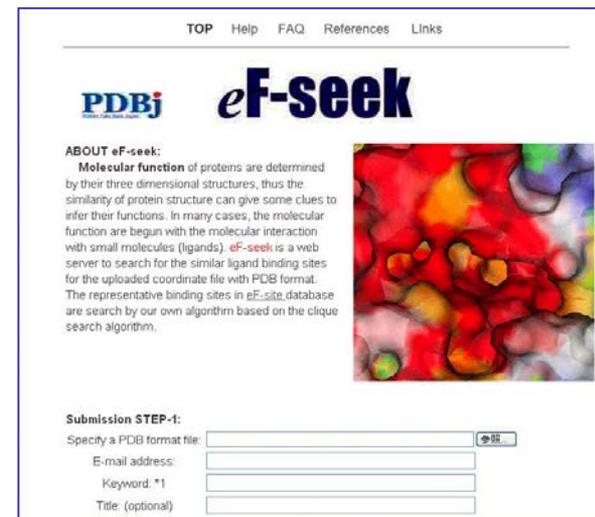
GIRAF: 類似リガンド結合部位



ProMode: 基準振動解析



eF-site: 分子表面DB



eF-seek: 類似分子表面検索

PDBの新たなフォーマット: PDBx/mmCIF

- 問題点: PDBフォーマットは **40年前**に開発されたものであり、現代科学の要求には適合できなくなっている
 - 記述における現実的な限界
 - **最大 62 の高分子鎖**
 - **最大 99,999 の原子数**
 - 低分子リガンドにおける結合次数や光学活性を特定できない
 - NMR, EM(電子顕微鏡), それらの融合法の記載が困難
 - メタデータの記載が厄介で柔軟性がない
- 
- **backward compatibility** をできるだけ保持
 - これまでの **PDB フォーマット data**を作れるWeb site
 - **2013年中**にスタートの予定

ATOM	ID	Element	Chain	Res	X	Y	Z	Occupancy	B-factor	Type
ATOM	1	N	GLN	A 39	24.690	-27.754	24.275	1.00	60.76	N
ATOM	2	CA	GLN	A 39	23.581	-26.768	24.416	1.00	60.98	C
ATOM	3	C	GLN	A 39	23.990	-25.379	23.905	1.00	59.98	C
ATOM	4	O	GLN	A 39	25.070	-25.209	23.330	1.00	60.25	O
ATOM	5	CB	GLN	A 39	23.136	-26.685	25.878	1.00	60.69	C
ATOM	6	N	VAL	A 40	23.115	-24.395	24.122	1.00	59.58	N
ATOM	7	CA	VAL	A 40	23.342	-23.010	23.690	1.00	57.26	C
ATOM	8	C	VAL	A 40	24.000	-22.152	24.778	1.00	56.00	C

PDB

PDBx/mmCIF

```

loop_
  _atom_site.group_PDB
  _atom_site.id
  _atom_site.auth_atom_id
  _atom_site.type_symbol
  _atom_site.auth_comp_id
  _atom_site.auth_asym_id
  _atom_site.auth_seq_id
  _atom_site.Cartn_x
  _atom_site.Cartn_y
  _atom_site.Cartn_z
  _atom_site.pdbx_PDB_model_num
  _atom_site.occupancy
  _atom_site.pdbx_auth_alt_id
  _atom_site.B_iso_or_equiv
  
```

ATOM	1	N	N	GLN	A	39	24.690	-27.754	24.275	1	1.00	.	60.76
ATOM	2	CA	C	GLN	A	39	23.581	-26.768	24.416	1	1.00	.	60.98
ATOM	3	C	C	GLN	A	39	23.990	-25.379	23.905	1	1.00	.	59.98
ATOM	4	O	O	GLN	A	39	25.070	-25.209	23.330	1	1.00	.	60.25
ATOM	5	CB	C	GLN	A	39	23.136	-26.685	25.878	1	1.00	.	60.69
ATOM	6	N	N	VAL	A	40	23.115	-24.395	24.122	1	1.00	.	59.58
ATOM	7	CA	C	VAL	A	40	23.342	-23.010	23.690	1	1.00	.	57.26
ATOM	8	C	C	VAL	A	40	24.000	-22.152	24.778	1	1.00	.	56.00

機能情報と構造情報との統合化システムの開発 (1)

SFAS: Sequence to Function Annotation Service

<http://sysimm.ifrec.osaka-u.ac.jp/sfas2/>

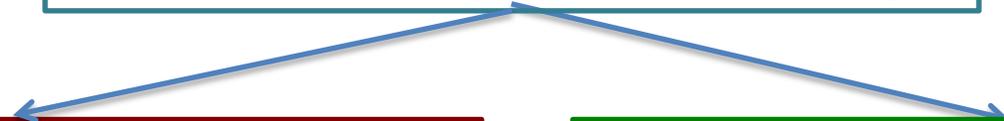
Intrinsic Disorder (DISOPRED, IUPred)



Secondary Structure (PSIPred)



Domain boundaries (based on above)



Composition-based Function prediction:
:**IDD Navigator** (Teraguchi et al. 2010;
Patil et al. 2011)

Threading (HHPred, FFAS, Forte,
PSI-BLAST, BLAST)



3D Modeling: **Spanner** (Lis et al. 2011)



Structure-based function prediction:
SeSAW (Standley et al. 2010)

Structure & Function Prediction Pipeline

This web service is currently in *BETA* testing, your [feedback](#) is important

- Input
- Progress
- 2D Predictions
- Alignments
- View Structure
- Spanner
- Summary
- About

Query Sequence

```

>sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=1 SV=2
MAARVVLEDEFTAPAEGAALLERSRGRIEALFGVGLAVLALGAEELPARIWLQLRGAQE
AVHSAKEYIKGICEPELEEKECYPKAMHCIFVGAQSLFLKSLIQDTCADLCVLDLDTGLLGI
RGSAAEAVVMARSHIQQFVKLFESNENLPSNQRESEIKREFRQFVEAHADSYTMDLLILPT
SLKKEKLLSLTQGEESLFETDDDDVITVGDVDPPEYTSAAATGPSSARDEVVVQEDSRNKAR
TPVSELTKHMDTVFSSSPDVLFPVNGLSPDEDALSKDRVCHKRRSSDTEERHTKKQFSL
ENVPEGELLDPDGKGSAGNEVIDLSDPASNSTNLSPDGKDTTEEMEYNILVNFCKTMGYSQ
EIVEKVIREYGPSTEPLLLLLEEIEKENKRLQEDRDFPCTVYPDASQSRNAGVGSSTNEL
TADSTPKKAQSHTEQSMVERFSQLPFKSKHCTSNCKVNSFRTVPVGQKQEIWGSKQNSS
CTVDLETDGHSASAASASPKDISFVSRGASGHQQRNPAFPENGFQQQTEPLLPNNTKPAC
EKRSKSSPQPKPNYPPLSPPLPQLLPVTEARLGGSSDHIDSSVTGVQRFRTDLKI
PYKLELKNPGRADLKHIVIDGSNVAITHGLKFFSCRGIAIAVEYFWKLGNRNITVFPV
QWRTRRDPNITEQHF LTQLQELGILSLTPARMVFGERIAASHDRFLLHLADKTGGIIVTN
    
```

Job id (optional)

Action 2D Prediction ▾

If your query contains multiple domains, or if you are unsure of the domain boundaries, we recommend performing a **2D prediction** at the first step

2D prediction

- IUPred disorder domain prediction
- disopred2 disorder domain prediction
- PSIPRED secondary structure prediction
- Jpred 3 secondary structure prediction

Run !

2D View

Intrinsic Disorder

Predicted Secondary Structure

Structure & Function Prediction Pipeline

This web service is currently in "BETA" testing, your [feedback](#) is important

[Input](#) | [Progress](#) | **[2D Predictions](#)** | [Alignments](#) | [View Structure](#) | [Spanner](#) | [Summary](#) | [About](#)

Available Results: [\[spi\]Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus CN=N4bp1 PE=1 SV=2\[\[disopred\] disordered domain prediction](#) [Load this result](#)

[\[spi\]Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=1 SV=2\[\[disopred\] disordered domain prediction](#)

Disorder domain prediction score and secondary structure prediction
Select your sequence range by dragging your mouse on the graph, you can also drag the borders to re-adjust your selection

Quick selection (according to disorder prediction data / click to select)

Overview

Range [615 - 778] update

auto expand

Selected Sequence

LKHIVIDGSDVAITHGLKKFFSCRGIAIAVEYFMKLGRRNITVFVPPQWRTRDRPNITEQHFLLTQLQELGILSLTPARVMFGERIASHDDRFLHLADKTGGIINDN...EFSS...EETITSR...QYFVQ...TFVMDPPLCRNGRR...FLRKEAFLR...

submit your query to [3D prediction pipeline](#)

Sequence alignment

Alignment methods

- HHPred
- ifas
- forte
- psi-blast
- blast

[Run!](#) [feedback](#)

2D Alignment View

Select an alignment to view or build

Structure & Function Prediction Pipeline

This web service is currently in *BETA* testing, your [feedback](#) is important

[sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=1 SV=2:615-778] HHPred Alignment calculation

Score	Template	%id	Align view	Actions
			LKHIVIDGSNVAITHGLKFFSFCRGIAIAVEYFVKLGNRNITVFPVQWRTRRDNPNITEQHFLTQLQELGILSLTPARMVFGERIAHSHDRFLLHADTKGGIIVTNDNFREFVTEVSWS	
41.6	1bgx:T	23.36	.RVLLVDGHLAYFHALKGLTTSRGEPSLLKALKKEDGDVIVVFGYKAGRAPTPEDALIKELVDLLGLARLEVPG-----YEADDVLAASLAKKAEVRIITADK.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
40.2	3h7i:A	16.82	.GICLIDFSQIALSTALVRHLILNSIKFNVKAKTLGYTAIVLCIDNRRDRGKAREEKVIDELKAYMPYIVMDIDK-----YEANDHIAVLVKKFSILITSSD.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
38.3	1exn:A	14.02	.NLMIVDGTNLGFKHNSKPPASSYVSTIQSLAKSYSARTTIVLPEYKGNRDEKYAQRTEEEKLCKTTFPIFTIRG-----VEADDMAAYIVKLLIGVWLITSDG.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
35.4	3q8k:A	15.09	.RKVAIDASMSIYQPEGETTSHLMGMPYRTIRMMENGIKPVYVFLAKRSERRAEAKQLECKHLLSLMGIPLYDAPS-----EAEASCAALVKAGKVYAATSD.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
34.9	3ory:A	15.09	.KIIVIDGYNALYQFNGRITSHLSGLFYRTINIVEAGIKPVYVFIERRKAVKEEAAKYKAEKLLDAMGIPWVQAPA-----EGEAQAAYIVKKDAYASASQD.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
34.7	3i8o:A	17.65AKS-----GEIDAMIRKVAKETNSILLETSDW.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
34.5	2izo:A	15.09	.KRVSIDGYNALYQFQGRVTSHLSGLFYRTINILEEGVPIYVFLERRRKAKEEAERKLESKLLRAMGIPIVQAPS-----EGEAEEAYLNKGLLWAAASQD.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
33.2	1o4w:A	40.00TESEGDFSLIEAAEKYGCILITNDK.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
33.1	1b5p:A	9.65VTPEETIVTVG-----GSQALFNLFOAILDPGDE-VIVLSPYVWSYPGFVPDPERVRRAITPRTKALVNSPNNPTGAVYKVEVLELARLAVHDFYLVSDIEYEHLLYEGE	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
33.0	1bw0:A	15.45IVKDNVVLCSG-----GSHGILMAITACDAGDY-ALVPQPGFPHYENDWEADLDEIRRLKDDKLLIVTNPSPNCGSNFSRKHVEDIVRLABELRPLFSDIEYAGMVFK..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
32.6	2aip:A	15.38	...ILVDVQNVYITCREAYRSNFD-YNQFYVATQEQE---VVSAKAYAIASNDPKQRQFHHILRGVGEVMLKPYIQRRRGSAKGDWDVGTITLDAIEIAVILVSGD.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
32.3	3ix7:A	45.00DEKLLFLARLEAALVTNDH.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
31.9	1j32:A	11.94YGADNIVLTNG-----GKQSIPLNMLAMIEPGDE-VIIPAPFVWSYPTQFKVSPSEQIRQAITPKLLVFNTPSNPTGMVYTPDEVRAIAQVAVEAGLWVLSDEIYEKILYDDA	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
31.9	3qe9:Y	15.09	.QVVAVDTYCWLHKKGEPTDRYVGFCKMFFVNMLLSHGIKPILVFLPSKKEVERRRERRQAIAKARSQGVDCVLVAPY-----EADAQLAYLNKAGIQAIITED.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
31.2	3b46:A	12.69LKAENVTVTTG-----ANEGILSCLMGLLNAGDE-VIVPEFPFDQYIEEWTIDFEQPEKAITSKAVIINTPHNPIGKVFTREELTLGNIQVKNHVVIISDEVYEHLYFTAT	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
31.1	3qi7:A	7.95AEERGVLAERSKEMGAKAFIHYATDDLKDVNIAKRLEMIKETCKNIGLQVNTPNI-----NTEEDKNVKQFKDINPQVNEYM.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
30.9	1d2f:A	11.82IDSQTVVYGPS-----VIYMVSELIRQWSETGEG-VVIHTPAYDAFYDGNFCMDGKLEAVLAKPIMLLCSQNPQTKGVWTCDELEIMADLCERHGVRSIISDEIHMVMVWG..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
30.7	3dbo:B	19.23DLWIAVAASRALPVITQD--DDFAA..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
30.6	1w8i:A	17.24SYTDAISEVVAEELKLLISYD--SRFSL..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
30.0	3h87:A	20.69SIPDLLIAATAEISGLTIVLHVD--KDFDA..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
29.7	1qd9:A	10.43	...ADPKTEIMVLLG-----ANQAFMLGLSAFLKDGEE-VLIPTPAFVSYADEFRNLVDELKKYVTDKALIIINSPCNPTGAULTKKLLEEIADFVVEHDLIVISDEVYEHFIYDDA	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
29.6	1c1x:A	20.00	...FLTDDLKVTWDAKKIGMR-FMTAPPYYEMEGRLPDHGEVVDLQARGIILDGSSV-----EGDKRLLQI.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
29.4	2lca:A	34.78SKADIEVLALAYELKGEIFSDDY.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
29.2	1t47:A	15.38	...LNTGDIVETVRTMRAAGVQ-FLDTPDSYYDTGEVWGDTRVPVDTLRELKILA..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.8	2r5w:A	15.38FNSNDAVRAVKALSERGVE-FLKTPGAYYDLGERITITLQTHSLDLDRATNVLA..	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.8	1c7n:A	12.39	...IQTDWIINTAG-----VVPVAVNAVREFTKPGDG-VIITTPVYVFFGYTIDFQKLERLSKDRALLFCSPHNPVGRVWKKDELQIKIDIVLKSIDLMLWSDEIHFDLIMPGY	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.4	1fg7:A	12.69	...VKPEQVLVSRG-----ADEGIELLRAPCEPKDAIILYCPFTYGYMSDNWQLDQGISDKLDGKVVVYVCSFNPNPTGQLINPQDFRTLELRGKAVVADEAYIEFCPQLA	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.2	3tnd:A	36.36GPFQMIAGHARSRGLIVTNN.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.1	3zvk:A	22.73GNNDLLIASHAIAENATLVTNN.....	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>
28.1	1jye:A	12.79NNDYGVHUYATAG-OTALLAEDEKSCSABEITAGYKVIITENYQVTEDEGQWCMGCGQVMMVMEATYUETMLVMMNM	<input type="button" value="View"/> <input type="button" value="Build"/>

Results : 41

[feedback](#)

3D Alignment View

Structure & Function Prediction Pipeline

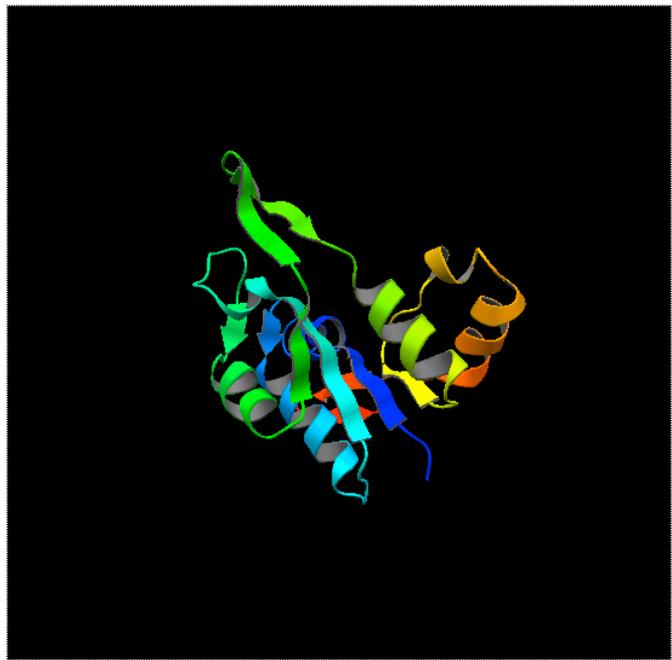
Build the model with Spanner

This web service is currently in *BETA* testing, your [feedback](#) is important

[Input](#)
[Progress](#)
[2D Predictions](#)
[Alignments](#)
[View Structure](#)
[Spanner](#)
[Summary](#)
[About](#)

[[sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=1 SV=2:615-778] FFAS Alignment calculation] [[3v33_A](#)][Alignment]

[switch to Preview](#)
[Build model with Spanner](#)



[Download template file](#)

```

>3v33A
LRPVVIDGSNVAMSHGNKEVFSRCGILLAVNWFLERGHDTITVFVPSWRKEQPRPDVPI TDQHILRELEKKILVFTPSRRVGGKRVVCYDDRFIVKLAYE
SDGIVVSNDTYRDLQGERQEWKRFIEERLLMYSFVNDKFMP-----
>sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE
LKHIVIDGSNVAITHGLKKFFSRCGIAIAVEYFWKLGNRNITVFVPQWRTRRDP---
NITEQHFLTQLQELGILSLTPARMVFGERIAASHDDRFLLHLADKGGIIVTNDNFREFVTESVSWREIITKRLLQYTFVGDIFMVPDDPLGRNGPRLEEF
RKEA
    
```

Query residues mapped on Template

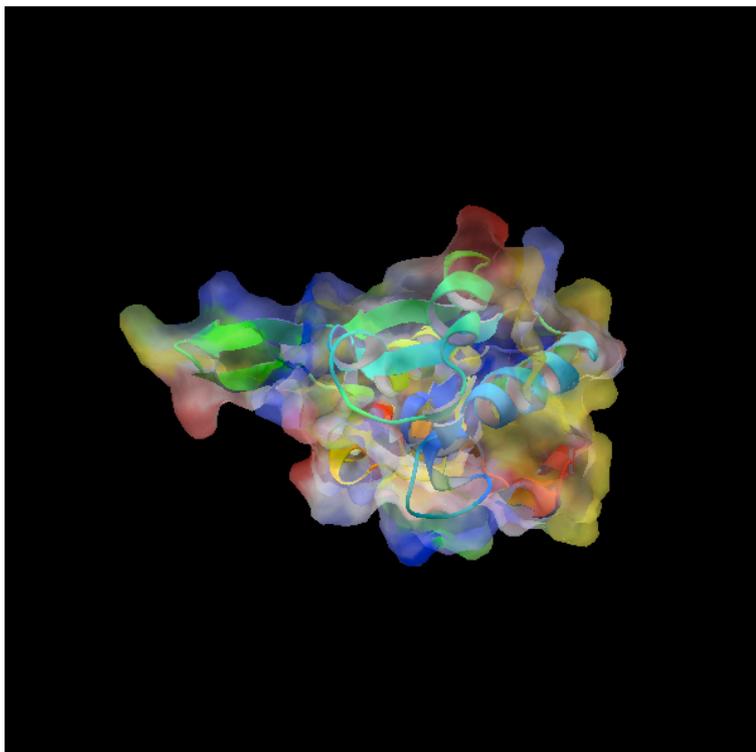
3D Model View

Structure & Function Prediction Pipeline

This web service is currently in *BETA* testing, your [feedback](#) is important

[Input](#) [Progress](#) [2D Predictions](#) [Alignments](#) [View Structure](#) **[Spanner](#)** [Summary](#) [About](#)

[sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=1 SV=2][ffas]
[3v33A] Model Creation



Spanner model with electrostatic potential mapped on molecular surface

[Close Interactive Applet](#)

Download

- [alignment](#)
- [template pdb](#)
- [output](#)
- [computed electrostatic surface](#)

[Submit to SeSaw](#)

Submit to SeSAW

Structure & Function Prediction Pipeline

This web service is currently in *BETA* testing, your [feedback](#) is important

[Input](#)
[Progress](#)
[2D Predictions](#)
[Alignments](#)
[View Structure](#)
[Spanner](#)
[SeSaw](#)
[Summary](#)
[About](#)

[616-779] [sp|Q6A037|N4BP1_MOUSE NEDD4-binding protein 1 OS=Mus musculus GN=N4bp1 PE=]

template	score	identity	coverage	domain	alignment	superposition
3v33A_PDP_A	617.942	49	100	-	view	view
3v33B_PDP_A	617.614	49	99	-	view	view
3v34B_PDP_A	591.746	49	96	-	view	view
3v34A_PDP_A	588.199	49	96	-	view	view
3v32B_PDP_A	583.877	50	95	-	view	view
3v32A_PDP_A	583.841	50	95	-	view	view
1tauA_SCOP_B	114.599	17	73	SCOP:c.120.1.2	view	view
1taqA_SCOP_B	92.843	16	72	SCOP:c.120.1.2	view	view
1xo1A_SCOP_B	90.241	9	70	SCOP:c.120.1.2	view	view
1xo1B_SCOP_B	90.005	9	71	SCOP:c.120.1.2	view	view
1o4wA_SCOP_A	86.553	19	66	SCOP:c.120.1.1	view	view
3r5hB_PDP_A	77.799	17	54	-	view	view
1ut5B_SCOP_B	75.760	10	71	SCOP:c.120.1.2	view	view
2goyC_PDP_A	75.568	20	59	-	view	view
1exnA_SCOP_B	74.332	11	70	SCOP:c.120.1.2	view	view
3dfzB_PDP_A	73.891	14	56	-	view	view
3fcaA_PDP_B	71.523	19	52	-	view	view
3qffA_PDP_A	71.137	17	56	-	view	view
1ut5A_SCOP_B	71.133	9	69	SCOP:c.120.1.2	view	view

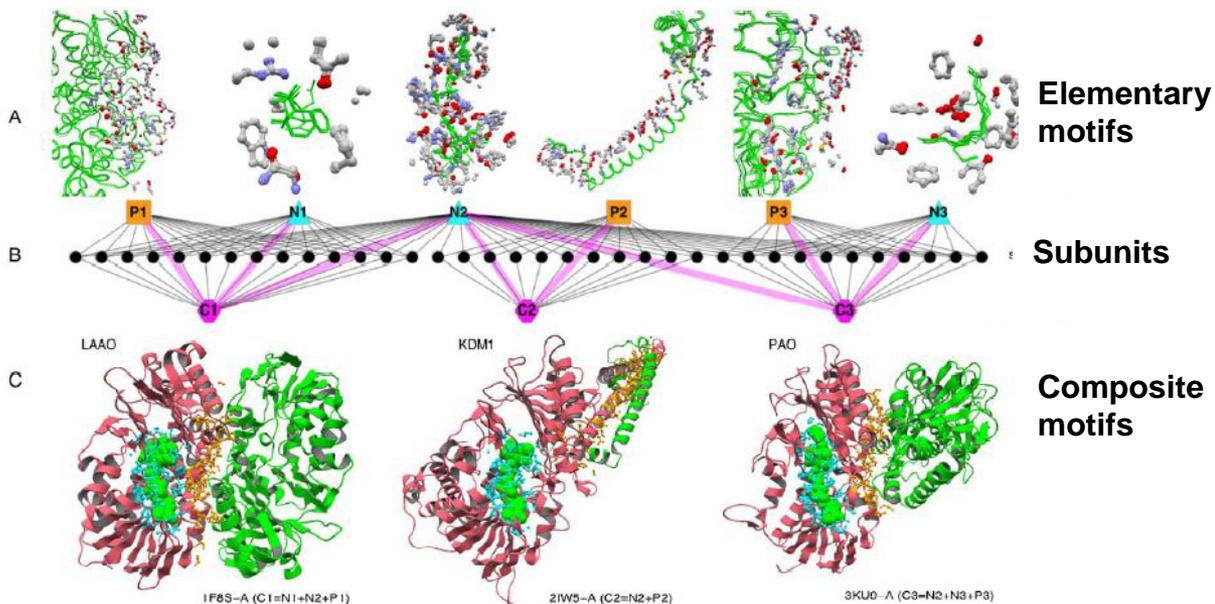
機能情報と構造情報との統合化システムの開発 (2)

蛋白質相互作用部位データベースの改良とPDBデータとの統合化: 原子レベルでの蛋白質相互作用を記述するオントロジーを定義し、相互作用部位をRDFで記述する。これにより、原子レベル→残基レベル→分子レベル→分子複合体レベルへつなげて、高次生命機能情報へ、原子レベルの情報を統合化できる環境を整える。

Composite Structural Motifs of Binding Sites for Delineating Biological Functions of Proteins

Akira R. Kinjo*, Haruki Nakamura
 Institute for Protein Research, Osaka University, Suita, Osaka, Japan

PLoS ONE (2012) 7 (2), e31437



Atomレベルでのstructural motifとして、低分子リガンド結合モチーフ (Ligand binding) と蛋白質間相互作用モチーフ(PPI)があり、それら複数のモチーフ(elementary motifs)の固有の組み合わせ(composite motif)によって、蛋白質の固有の高次生命機能が、より明確に整理される。

Compotif

<http://ipproo.protein.osaka-u.ac.jp/compotif/>

Compotif

A database of elementary and composite structural motifs of proteins

Keyword search

Search!

Search by amino acid sequence (FASTA format)

Search!

Compotif search results

23 [composite motifs](#)

and

92 [elementary motifs](#)

found for query: **calmodulin**

Composite motifs

23 hits

id	motif type	cluster size	labels
P5673:0	composite motif 14		calmodulin polypeptide
N0:30	composite motif 25		kinesin motor ned like microtubule
P1078:0	composite motif 24		calmodulin sensitive adenylate cyclase yb
P7548:0	composite motif 10		body pole spindle calmodulin polypeptide
N0:251	composite motif 22		myosin heavy actinin fused chain
P1009:0,P1359:1,P1424:0,P2163:0	composite motif 19		skeletal myosin muscle ii actin
N2125:0,P1078:0	composite motif 12		calmodulin sensitive adenylate cyclase mg
N47:0,N49:1,N50:1,N56:0,P56:0	composite motif 11		nitric oxide synthase endothelial brain
N5381:0,P1236:0,P1535:0,P1539:0	composite motif 10		cam kinase calmodulin calcium gamma
N1262:1,P1078:0	composite motif 10		calmodulin sensitive adenylate cyclase yb
P1359:0,P1424:0,P4355:0	composite motif 11		skeletal myosin muscle ii actin
P2953:0,P4338:0	composite motif 5		myosin striated adductor muscle heavy
N0:1030,N0:189,N0:270,N4159:0	composite motif 10		myosin non muscle heavy chain
P1236:0,P1535:0,P1539:0	composite motif 16		calmodulin calcium dependent kinase ii
N0:483	composite motif 15		glycogen kinase synthase beta division
N4306:0,P1236:0,P6623:0,P6737:0,P6793:0	composite motif 12		linker calmodulin calcium dependent type
N0:1197	composite motif 11		calmodulin calcium dependent type kinase
N47:0,N49:0,N50:1,N56:1,P56:0	composite motif 11		nitric oxide brain synthase h4b
N0:110,N0:199,N0:223,P1092:0	composite motif 30		calmodulin ca calcium ion sensitive
N0:94	composite motif 61		27b rab ras related gtp
N1262:0,N2125:1,P1078:0	composite motif 10		calmodulin sensitive adenylate cyclase cmp
N0:189,N0:270	composite motif 15		myosin ie vi heavy va
N1912:0,P1236:0,P1535:2,P1539:0	composite motif 14		calmodulin delta calcium dependent type

Elementary motifs

92 hits

id	motif type	cluster size	labels
N0:267	elementary motif (nonpolymer)	34	calmodulin parvalbumin s100a6 thymic migration
P7348:0	elementary motif (ppi)	10	calcium activated conductance potassium channel
N0:1022	elementary motif (nonpolymer)	13	ak1 calcium isoform coelenterazine b"
N0:1055	elementary motif (nonpolymer)	13	calmodulin programmed endoglucanase death mg
N0:1078	elementary motif (nonpolymer)	12	calmodulin green fluorescent myosin chimera
N0:1080	elementary motif (nonpolymer)	12	calmodulin hands kinase ef myosin
N0:110	elementary motif (nonpolymer)	60	calmodulin calcineurin fused domain calcium
N0:1110	elementary motif (nonpolymer)	12	migration inhibitory calcium kv related
N0:115	elementary motif (nonpolymer)	58	calmodulin calcineurin fused calcium domain
N0:119	elementary motif (nonpolymer)	57	calmodulin recoverin calcium binding calcineurin
N0:1197	elementary motif (nonpolymer)	12	calmodulin calcium dependent type kinase
N0:1231	elementary motif (nonpolymer)	11	tropoin calexcitin calgranulin cardiac deficiency
N0:1243	elementary motif (nonpolymer)	11	calmodulin calcineurin calerythrin isoform ca

Composite motif: N0:30

(25 members)

Labels

[kinesin motor ned like microtubule](#)

UniProt/keywords

Biological process [Cell cycle](#) [Cell division](#) [Meiosis](#) [Mitosis](#)
Cellular component [Cell junction](#) [Cell projection](#) [Cilium](#) [Cytoplasm](#)
Molecular function [Motor protein](#) [Repressor](#)
Ligand [ATP-binding](#) [Calmodulin-binding](#) [Nucleotide-binding](#)
Disease [Bardet-Biedl syndrome](#) [Ciliopathy](#) [Disease mutation](#) [Joubert syndrome](#) [Mental retardation](#) [Obesity](#)

Elementary motifs

ID **labels**
[N0:30](#) kinesin kif11 like protein motor [\[Search\]](#)

Related composite motifs

cmotif **common elementary motifs**
[N0:30,P0:134](#) [N0:30](#)
[N0:30,N557:1](#) [N0:30](#)
[N0:30,N557:0](#) [N0:30](#)

Interacting composite motifs

Composite motif [Interacting pairs of elementary motif](#)

PDB subunit

Description MICROTUBULE MOTOR PROTEIN NCD



PDB [1CZ7](#)

PDB/RDF [1CZ7/struct/1CZ7](#) [1CZ7/pdbx_struct_assembly/1](#) [1CZ7/struct_asym/A](#) [auth_asym/A](#) [1CZ7/entry/1](#)

UniProt [P20480](#)

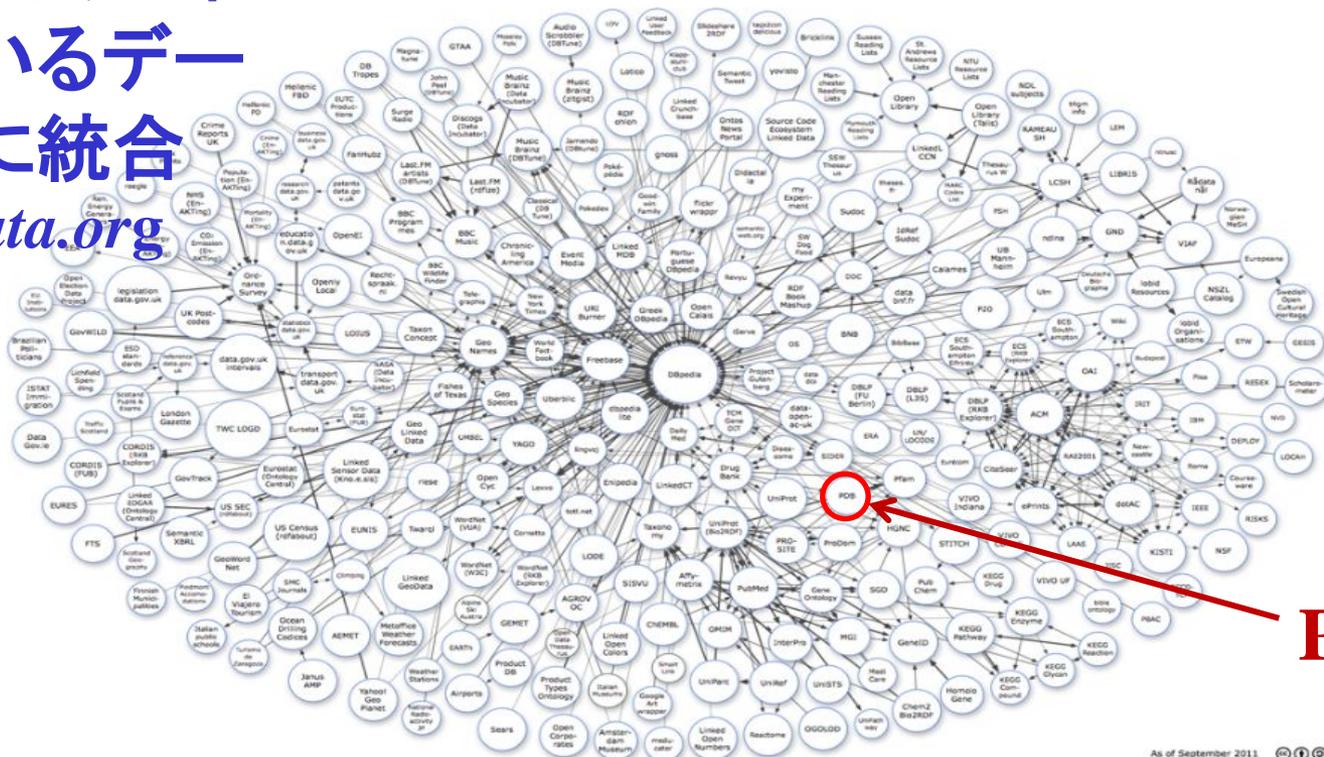
eF-site [1CZ7-A](#)

ビッグデータ: データ主導の科学

- ・“セマンティック ウェブ” (マシンが自動的に読んで解釈できるウェブの仕組み)の技術を活用
- ・ウェブ上の情報間の関係性(オントロジー)が記載

Linked Data: ネット中に分散しているデータを自動的に統合

<http://linkeddata.org>



PDB

データベースの統合化

PDB/RDF format for Semantic Web (wwPDBの標準仕様に採用)

Service from wwPDB by Akira R. Kinjo (PDBj) & Tom Oldfield (PDBe)

<http://rdf.wwpdb.org/>

Kinjo et al. (2012) Nucl. Acids Res. 40, D453-D460.

WORLDWIDE PDB
PROTEIN DATA BANK

Welcome to the Worldwide Protein Data Bank

PDB/RDF About PDB/RDF
PDB/RDF , chem_comp/RDF

PDB ID: (e.g., '7RSA')

property: (e.g., 'PDBo:entity.pdbx_description')

keywords: (e.g., 'alcohol')

Download XSLT stylesheet for converting PDBML to RDF: [PDBML2rdf.xsl.gz](#) (gzipped 22KB)

In UniProt RDF:

```
<rdf:Description rdf:about="http://rdf.wwpdb.org/pdb/1BY4">  
  <rdf:type rdf:resource="http://purl.uniprot.org/core/Structure_Resource"/>  
  <database rdf:resource="http://purl.uniprot.org/database/PDB"/>  
  <method rdf:resource="http://purl.uniprot.org/core/X-Ray_Crystallography"/>  
  <resolution rdf:datatype="http://www.w3.org/2001/XMLSchema#float">2.10</resolution>  
</rdf:Description>
```

Subject: <http://rdf.wwpdb.org/pdb/1GOF>

Predicate	Object
PDBo:datablockName	1GOF-noatom
PDBo:has_atom_sitesCategory	PDBr:1GOF/atom_sitesCategory
PDBo:has_atom_sites_footnoteCategory	PDBr:1GOF/atom_sites_footnoteCategory
PDBo:has_atom_typeCategory	PDBr:1GOF/atom_typeCategory
PDBo:has_audit_authorCategory	PDBr:1GOF/audit_authorCategory
PDBo:has_audit_conformCategory	PDBr:1GOF/audit_conformCategory
PDBo:has_cellCategory	PDBr:1GOF/cellCategory
PDBo:has_chem_compCategory	PDBr:1GOF/chem_compCategory
PDBo:has_citationCategory	PDBr:1GOF/citationCategory
PDBo:has_citation_authorCategory	PDBr:1GOF/citation_authorCategory
PDBo:has_computingCategory	PDBr:1GOF/computingCategory
PDBo:has_database_2Category	PDBr:1GOF/database_2Category
PDBo:has_database_PDB_matrixCategory	PDBr:1GOF/database_PDB_matrixCategory
PDBo:has_database_PDB_revCategory	PDBr:1GOF/database_PDB_revCategory
PDBo:has_database_PDB_rev_recordCategory	PDBr:1GOF/database_PDB_rev_recordCategory
PDBo:has_diffractionCategory	PDBr:1GOF/diffractionCategory
PDBo:has_diffraction_radiationCategory	PDBr:1GOF/diffraction_radiationCategory
PDBo:has_diffraction_radiation_wavelengthCategory	PDBr:1GOF/diffraction_radiation_wavelengthCategory
PDBo:has_entityCategory	PDBr:1GOF/entityCategory
PDBo:has_entity_keywordsCategory	PDBr:1GOF/entity_keywordsCategory
PDBo:has_entity_polyCategory	PDBr:1GOF/entity_polyCategory

PDB/RDF example

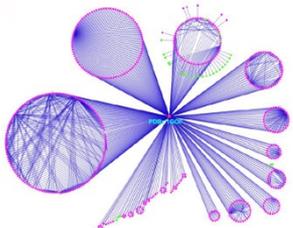
By accessing <http://rdf.wwpdb.org/pdb/1GOF>, a list of category holders for the PDB entry 1GOF can be retrieved in the RDF/XML format. Then, a list of category elements can be retrieved (again in the RDF/XML format). Finally, a particular category element, the list of properties of that element is retrieved.

Subject: <http://rdf.wwpdb.org/pdb/1GOF/entityCategory>

Predicate	Object
PDBo:has_entity	PDBr:1GOF/entity/1
PDBo:has_entity	PDBr:1GOF/entity/2
PDBo:has_entity	PDBr:1GOF/entity/3
PDBo:has_entity	PDBr:1GOF/entity/4
PDBo:has_entity	PDBr:1GOF/entity/5
rdf:type	http://rdf.wwpdb.org/schema/pdbx-v40

Subject: <http://rdf.wwpdb.org/pdb/1GOF/entity/1>

Predicate	Object
PDBo:of_datablock	PDBr:1GOF
PDBo:entity_formula_weight	68579.250
PDBo:entity.id	1
PDBo:entity.pdbx_description	GALACTOSE OXIDASE
PDBo:entity.pdbx_ec	1.1.3.9
PDBo:entity.pdbx_number_of_molecules	1
PDBo:entity_src_method	man
PDBo:entity.type	polymer
PDBo:link_to_enzyme	http://purl.uniprot.org/enzyme/1.1.3.9
PDBo:referenced_by_entity_keywords	PDBr:1GOF/entity_keywords/1
PDBo:referenced_by_entity_poly	PDBr:1GOF/entity_poly/1
PDBo:referenced_by_entity_src_gen	PDBr:1GOF/entity_src_gen/1
PDBo:referenced_by_struct_asym	PDBr:1GOF/struct_asym/A
PDBo:referenced_by_struct_ref	PDBr:1GOF/struct_ref/1
rdf:type	http://rdf.wwpdb.org/schema/pdbx-v40.owl#entity



The network of RDF resources for the PDB entry 1GOF.

BMRB: NMR-STARフォーマットからのXML化とRDF化

NMR-STAR v3

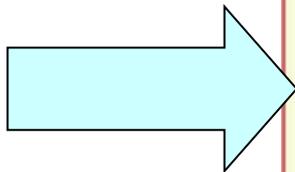
```

#####
# Entry information #
#####

save_entry_information
  _Entry.Sf_category          entry_information
  _Entry.Sf_framecode        entry_information
  _Entry.ID                   15400
  _Entry.Title
;
Backbone and side chain chemical shift assignments of the F1
53-to-5-fluorotryptophan mutant of human cardiac troponin C
;
  _Entry.Version_type        new
  _Entry.Submission_date     2007-07-20
  _Entry.Accession_date      2007-07-20
  _Entry.Last_release_date   .
  _Entry.Original_release_date
  _Entry.Origination         author
  _Entry.NMR_STAR_version    3.0.8.100
  _Entry.Original_NMR_STAR_version
  _Entry.Experimental_method NMR
  _Entry.Experimental_method_subtype solution
  _Entry.Details             .
  _Entry.BMRB_internal_directory_name .
  
```

bmr15400.str

BMRBxTool



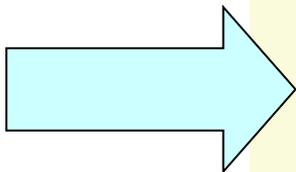
BMRB/XML

```

<BMRBx:entryCategory>
  <BMRBx:entry_id="15440">
    <BMRBx:accession_date>2006-12-08+09:00</BMRBx:accession_date>
    <BMRBx:bmr_internal_directory_name xsi:nil="true"/>
    <BMRBx:details xsi:nil="true"/>
    <BMRBx:experimental_method>NMR</BMRBx:experimental_method>
    <BMRBx:experimental_method_subtype>SOLUTION</BMRBx:experimental_method_subtype>
    <BMRBx:last_release_date xsi:nil="true"/>
    <BMRBx:nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBx:nmr_star_version>
    <BMRBx:original_nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBx:original_nmr_star_version>
    <BMRBx:original_release_date xsi:nil="true"/>
    <BMRBx:origination>author</BMRBx:origination>
    <BMRBx:sf_category>entry_information</BMRBx:sf_category>
    <BMRBx:sf_framecode>entry_information</BMRBx:sf_framecode>
    <BMRBx:submission_date>2006-12-08+09:00</BMRBx:submission_date>
    <BMRBx:title>1H, 13C and 15N resonance assignments of the C-terminal domain of H
    asB from Serratia marcescens</BMRBx:title>
    <BMRBx:version_type>original</BMRBx:version_type>
  </BMRBx:entry>
</BMRBx:entryCategory>
  
```

BMRB/RDF

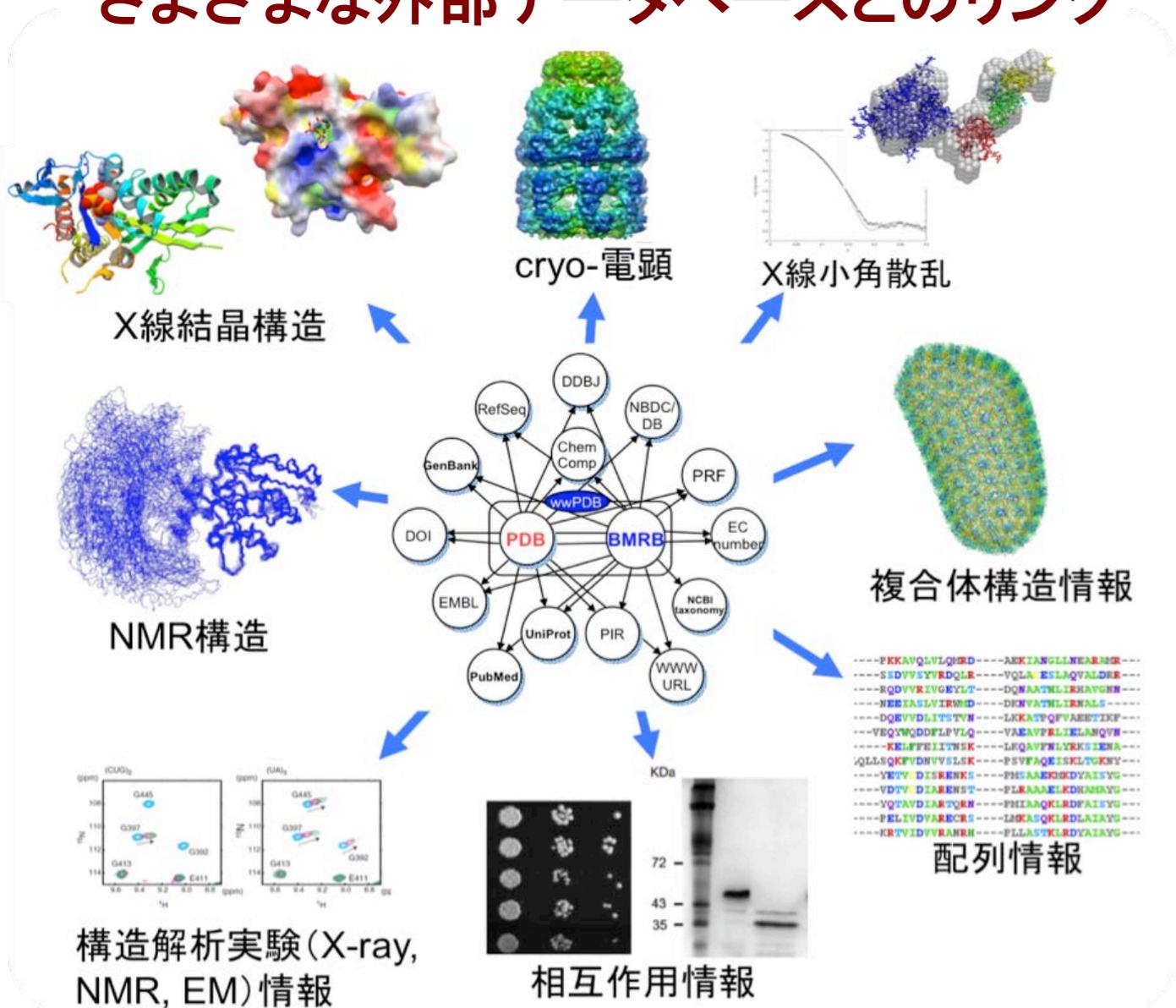
BMRBoTool



```

<BMRBo:has_entryCategory>
  <BMRBo:entryCategory rdf:about="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400/entryCategory">
    <BMRBo:has_entry>
      <BMRBo:entry rdf:about="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400/entry/15400">
        <BMRBo:of_datablock rdf:resource="http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp/rdf/bmr15400"/>
        <BMRBo:entry.id>15400</BMRBo:entry.id>
        <BMRBo:entry.accession_date>2006-12-07+09:00</BMRBo:entry.accession_date>
        <BMRBo:entry.experimental_method>NMR</BMRBo:entry.experimental_method>
        <BMRBo:entry.experimental_method_subtype>SOLUTION</BMRBo:entry.experimental_method_subtype>
        <BMRBo:entry.nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBo:entry.nmr_star_version>
        <BMRBo:entry.original_nmr_star_version>3.0.8.100</BMRBo:entry.original_nmr_star_version>
        <BMRBo:entry.origination>author</BMRBo:entry.origination>
        <BMRBo:entry.sf_category>entry_information</BMRBo:entry.sf_category>
        <BMRBo:entry.sf_framecode>entry_information</BMRBo:entry.sf_framecode>
        <BMRBo:entry.submission_date>2006-12-07+09:00</BMRBo:entry.submission_date>
        <BMRBo:entry.title>Backbone and side chain chemical shift assignments of the F153-to-5-fluoro
        tryptophan mutant of human cardiac troponin C</BMRBo:entry.title>
        <BMRBo:entry.version_type>original</BMRBo:entry.version_type>
      </BMRBo:entry>
    </BMRBo:has_entry>
  </BMRBo:entryCategory>
</BMRBo:has_entryCategory>
  
```

RDF化されたPDBおよびBMRBエントリーと さまざまな外部データベースとのリンク



リンク数の統計

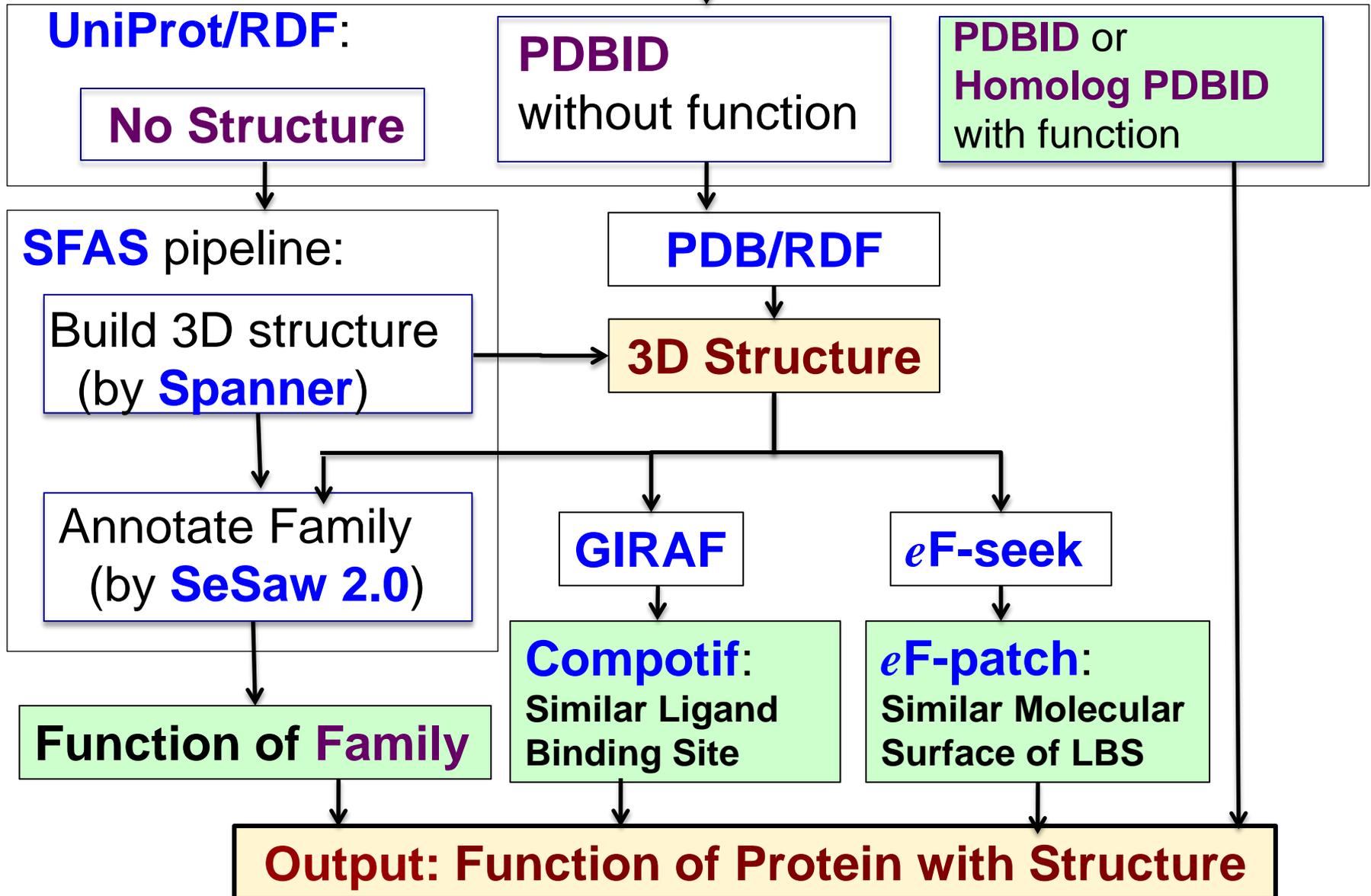
PDB/RDF

Database	Link Counts
PDB/RDF	341,737
chem_comp	2,040,958
PDBML (all)	93,970
PDBML (noatom)	93,970
PDBML (extatom)	93,970
UniProt	120,634
PubMed	83,469
GenBank	2,710
Enzyme	50,156
DOI	86,186
Taxonomy	207,433
Total	3,215,193

BMRB/RDF

Database	Link Counts
PDB/RDF	146668
BMRB/RDF	29650
GenBank	28969
NCBI RefSeq	22052
DDBJ	13614
UniProt	12943
EMBL	12401
NCBI Taxonomy	11457
BMRB/XML (sources)	10532
PubMed	7349
Chem_comp	4546
PRF	2652
PIR	458
Enzyme	322
DOI	69
Total	303,682

Input: Amino acid Sequence of Protein



低分子結合部の表面データベース

- **eF-site** で利用可能な蛋白質表面から低分子結合分子表面 (パッチ) の抽出
- パッチの類似性に基づくクラスタリング
- PDB/RDF, UniProt, CATH, SCOP等の外部データベースへのリンク
- **eF-see** からのリンク

Patch ID による検索



PDB ID による検索



PDB/RDF

SCOP
CATH

UniProt
Keywords

eF-site

eF-patch Search Results for 1vi2_B_300

PDB/RDF

summary (PDB): 1VI2
 struct: 1VI2
 pdbx_struct_assembly: 1
 struct_asym: B

auth_comp_id: NAD
 auth_asym_id: B
 auth_seq_id: 300
 label_asym_id: F
 label_entity_id: 3

UniProtKeywords

UniProt ID: P0A6D6

biological process: KW-0028 KW-0057
 cellular component: n/a
 coding sequence diversity: n/a
 developmental stage: n/a
 disease: n/a
 domain: n/a
 ligand: KW-0520
 molecular function: KW-0590
 PTM: n/a
 technical term: n/a

External Domain Annotations

SCOP: 100728 d1vi2b1 c.2.1.7
 100729 d1vi2b2 c.58.1.5

CATH: 1vi2B01 3.40.192.10
 1vi2B02 3.40.50.720

External Links eF-site: 1VI2-B

Similar Patches in Representative and Family levels

(2 representative patches)

Patch	summary (PDB)	struct	pdbx_struct_assembly	struct_asym	auth_comp_id	auth_asym_id	auth_seq_id	label_asym_id	label_entity_id	SCOP	CATH	UniProt	eF-site
(5) 1vi2_B_300	1VI2	1VI2	1	B	NAD	B	300	F	3	100728 c.2.1.7 100729 c.58.1.5	1vi2B01 3.40.192.10 1vi2B02 3.40.50.720	P0A6D6	1VI2-B
(3) 2ofp_A_304	2OFP	2OFP	1	A	NAP	A	304	D	3	139052 a.100.1.7 139053 c.2.1.6	2ofpA01 3.40.50.720 2ofpA02 1.10.1040.10	Q07704	2OFP-A

類似するパッチ

Similar Patches in Representative and Family levels for 1vi2

Group 1, level = c3606 (2 representative patches)

Patch	summary (PDB)	struct	pdbx_struct_assembly	struct_asym	auth_comp_id	auth_asym_id	auth_seq_id	label_asym_id	label_entity_id	SCOP	CATH	UniProt	eF-site
(5) 1vi2_B_300	1VI2	1VI2	1	B	NAD	B	300	F	3	100728 c.2.1.7 100729 c.58.1.5	1vi2B01 3.40.192.10 1vi2B02 3.40.50.720	P0A6D6	1VI2-B
(3) 2ofp_A_304	2OFP	2OFP	1	A	NAP	A	304	D	3	139052 a.100.1.7 139053 c.2.1.6	2ofpA01 3.40.50.720 2ofpA02 1.10.1040.10	Q07704	2OFP-A
1i36_A_1350	1I36	1I36	1	A	NAP	A	1350	C	2	71108 a.100.1.8 71109 c.2.1.6	1i36A01 3.40.50.720 1i36A02 1.10.1040.10	Q27779	1I36-A
1i36_B_1750	1I36	1I36	1	B	NAP	B	1750	D	2	71110 a.100.1.8 71111 c.2.1.6	1i36B01 3.40.50.720 1i36B02 1.10.1040.10	Q27779	1I36-B
1y3q_A_501	1Y3Q	1Y3Q	1	A	NAP	A	501	D	3	123459 a.100.1.7 123460 c.2.1.6	1y3qA01 3.40.50.720 1y3qA02 1.10.1040.10	P0A924	1Y3Q-A

Group 2, level = c3767 (4 representative patches)

Patch	summary (PDB)	struct	pdbx_struct_assembly	struct_asym	auth_comp_id	auth_asym_id	auth_seq_id	label_asym_id	label_entity_id	SCOP	CATH	UniProt	eF-site
(5) 1aiq_A_302	1AIQ	1AIQ	1	A	CO3	A	302	C	3	42707 e.3.1.1	1aiqA00 3.40.710.10	E00807	1AIQ-A
(16) 3hli_A_2	3HIL	3HIL	1	A	HO3	A	2	D	3	n/a	n/a	E21709	3HIL-A
(811) 1i1bq_A_126	1IBG	1IBG	1	A	SO4	A	126	D	2	27282 d.5.1.1	1i1bqA00 3.10.130.10	E00669	1IBG-A
(730) 1i1bq_B_136	1IBG	1IBG	1	B	SO4	B	136	J	2	27283 d.5.1.1	1i1bqB00 3.10.130.10	E00669	1IBG-B

Semantic Webによる機能推定

SeSAW 2.0

COMPOTIF

eF-patch

PDBj

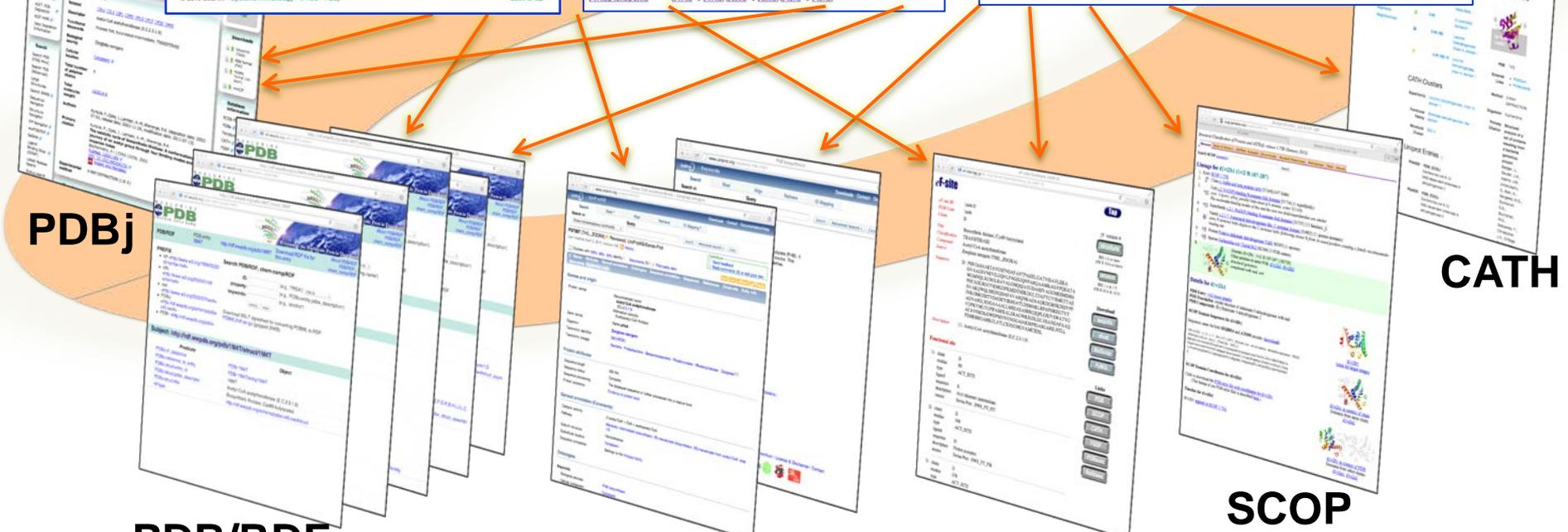
PDB/RDF

UniProt / Keywords

eF-site

SCOP

CATH



アウトリーチ活動(2012年10月13日大阪梅田)

13:30-14:00
 中村春木(大阪大学・蛋白質研究所)
 「生命科学における蛋白質構造データベース(PDB)の役割」

14:00-15:00
 Stephen Kevin Bailey(カリフォルニア大学サンディエゴ校)
 「最新のPDBデータバンクのインパクト」(日本語翻訳)

15:00-15:20
 休憩

15:30-16:20
 講演者1(大阪大学・生命情報研究所)
 「最先端を支える球状分子構構 - ナノテクノロジーを結ぶからに起る大規模構造設計」

16:20-16:30
 質疑応答、閉幕

一般社会人・学生(高校生以上)向け講演会
PDB データバンク:
 タンパク質のかたちが支える生命科学と創薬への応用

2012年10月13日(土)
 13:30-16:30(13:00受付開始)

会場 ハートンホール毎日新聞ビルB1
 〒530-4001 大阪市北区梅田3-4-5

主催者 wwPDB Foundation
 (国際蛋白質構造データベース財団)

協賛者 (左) 科学技術振興機構
 J-POSS(バイオサイエンスデータベースセンター)
 大阪大学蛋白質研究所
 大阪大学生命情報研究所
 日本生物物理学会
 日本蛋白質科学会
 大阪医薬協会

参加費無料・事前申込不要

Protein Data Bank Japan 事務局 (東京)
 Tel: 03-5861-4311
 Email: info@pdb.org/japan Osaka U. JP
 http://pdb.org/pdbj_contact.html

wwPDB Outreach講演会 -in 大阪-
 (2012年10月13日(土)、梅田・ハートンホール毎日新聞ビル)

- 「生命科学における蛋白質構造データベース(PDB)の役割」(pdf 4.8MB) Video
 講師: 中村 春木(大阪大学蛋白質研究所)

wwPDBAC meeting (2012年
 10月12日 阪大蛋白研で開催)

wwPDB and wwPDBAC members
 at IPR, Osaka U, on Oct. 12 2012



PDBjの社会的活動

eProtS: 日本語と英語による蛋白質構造の解説



Protein Data Bank Japan

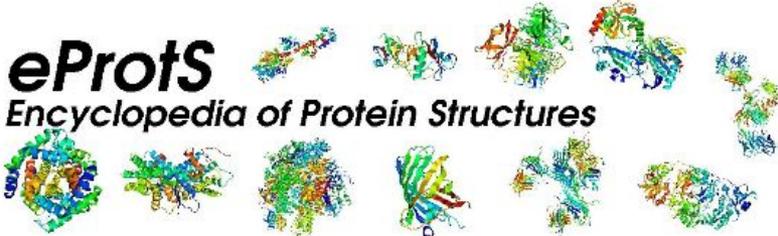
[一覧](#) [最近の更新](#)



Topics

- [タンパク質入門](#)
- [タンパク質の構造入門](#)
- [タンパク質リスト](#)
- [オリジナルeProtSの分類](#)
- [生物学的機能による分類](#)
- [生化学的機能による分類](#)
- [サイトマップ](#)
- [お問い合わせ](#)
- [RSS](#)
- [用語解説](#)
- [Molecule of the Month](#)
- [リンク集](#)
- [エントリーの追加・編集](#)

[English version: Topics](#)



eProtS
Encyclopedia of Protein Structures

[English version: eProtS](#)

eProtS: タンパク質構造百科事典

eProtS(タンパク質構造百科事典)とは、生物学的に重要なタンパク質を選び、その立体構造を表示するとともに、タンパク質の構造と機能についてわかりやすく解説したものです。タンパク質構造の専門家でない方にも利用しやすいように、日本語版と英語版を用意しています。|v という表示ソフトを使えるシステムでは、マウスによるタンパク質分子の回転・移動・拡大縮小操作をリアルタイムで行うこともできます。(IE 5.0 or NN 6.0 以上推奨)

目次

- [eProtS: タンパク質構造百科事典](#)
 - [目次](#)
 - [一般の読者の方へ](#)
 - [構造生物学の専門家の方へ](#)
- [タンパク質入門](#)
- [タンパク質の構造入門](#)
- [タンパク質リスト](#)
- [オリジナルeProtSの分類](#)
- [生物学的機能による分類](#)
- [生化学的機能による分類](#)
- [用語解説](#)
- [エントリーの追加・編集](#)

[一般の読者の方へ](#)

Search

Recent Changes

- [PDB:3p0c](#)
- [PDB:2vad](#)
- [PDB:2ic8](#)
- [PDB:3aek](#)
- [生物学的機能による分類](#)
- [生化学的機能による分類](#)
- [オリジナルeProtSの分類](#)
- [PDB:1eag](#)
- [PDB:3irs_3iq](#)
- [PDB:2roe](#)
- [PDB:3a6m](#)
- [PDB:3a18](#)
- [PDB:3aag](#)
- [PDB:3a8r](#)
- [PDB:2efd](#)
- [PDB:3kir](#)
- [エントリーの追加・編集](#)
- [PDB:2h10](#)
- [PDB:2EY4](#)
- [PDB:2P3E](#)

タンパク質名

ミオグロビン

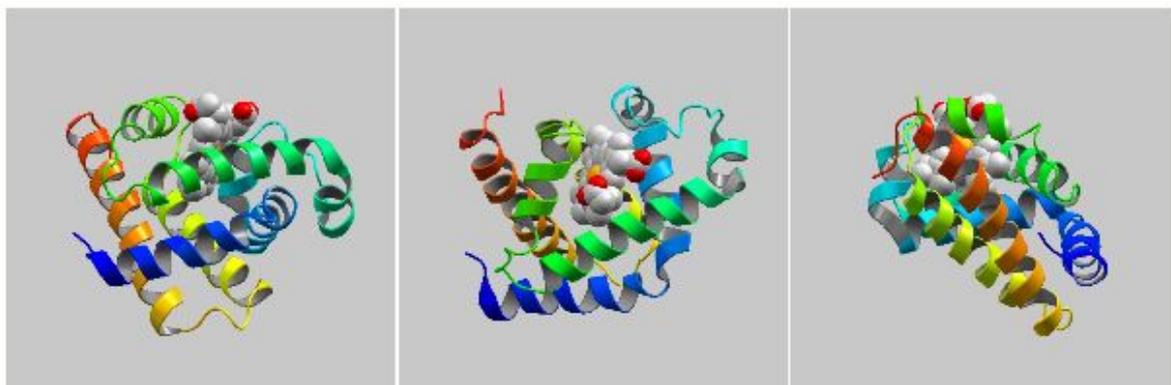
生物種

マッコウクジラ

生物学的役割

酸素がなくても生育できる生物もいれば、酸素がない中で起こる生命活動もある。嫌気性細菌や嫌氣的代謝がその例である。しかしながら、大多数の生物にとって酸素は生命活動には必要不可欠な要素である。哺乳動物ではヘモグロビンが酸素を肺から末梢器官にまで運んでいる。しかし、時によっては酸素を蓄積しておくことができなくてはならないこともある。たとえば、鯨のような海生哺乳類は一度水面に酸素補給に来るとその後は酸素補給なしで水中にもぐっていられる。このような行動のために自然はミオグロビンという蛋白質を作り出したのである。ミオグロビンは主に筋肉組織に分布している。ミオグロビンはその構造が解かれた2番目の蛋白質であり、そのときのミオグロビンはマッコウクジラの筋肉組織からとったものであった。ミオグロビンは単量体の単一ポリペプチド鎖でできた蛋白質で、ヘモグロビンβサブユニットに非常に似ている。ミオグロビンはヘモグロビンと同じように酸素を結合する。中央に酸素を結合する鉄原子を持つプロトポルフィリン(ヘム)グループが分子にくっついている。ヘモグロビン内のヘムのように、ミオグロビンのヘムも一酸化炭素、二酸化炭素、シアン化物のような酸素以外の分子を結合することができる。一酸化炭素やシアン化物への親和性は酸素への親和性よりも大きいので、これらによる酸素結合の阻害により死に至ることもある。

立体構造の特徴



ミオグロビンは円盤のような形をしている。その厚さは約20 Å (1 Åは100億分の1メートル)で直径は約35 Åである。ヘムグループは2つのヘリックスでできている表面ポケットの中に円盤の平面に対して約90°の角度で入り込んでいる。ヘモグロビンで酸素結合による効果として見られる現象がミオグロビンでは見られないものもある。ミオグロビンは単量体であるので、酸素結合の際にサブユニット間での共同化がみられない。ヘモグロビンは四量体であり、おのおのサブユニットがヘムグループを持っているのでこういった共同化がみられる。ヘモグロビンでもミオグロビンでもいわゆる末端ヒスチジンと呼ばれるヒスチジン残基がヘムグループの近くにある。しかしながら、象のミオグロビンではこのヒスチジンがグルタミンに置き換わっており、隣のロイシンがフェニルアラニンに置き換わっている(PDBMine:1EMY)。そのように置き換わっているにも関わらず酸素結合特性は通常のミオグロビンと非常に似ている。

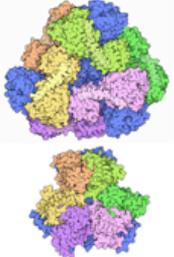
PDBjの社会的活動

MoM (Molecule of the Month): 今月の分子 RCSB-PDBの記事を日本語で同時配信

公開の新しい順 アルファベット順 カテゴリ別 五十音順

2013 2012 2011 2010 2009 2008 2007 2006 2005 2004 2003 2002 2001 2000

2013



2013/09: (165) 人工設計された蛋白質製の籠 (Designed Protein Cages)

2013/08: (164) セロトニン受容体 (Serotonin Receptor)

2013/07: (163) HIVカプシド (HIV Capsid)

2013/06: (162) ダームシジン (Dermcidin)

2013/05: (161) リシン (Ricin)

2013/04: (160) アクチノマイシン (Actinomycin)

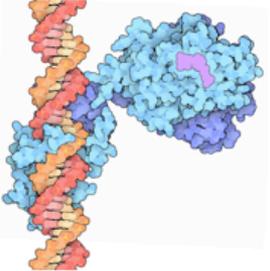
2013/03: (159) エリスロクルオリン (Erythrocrucorin)

2013/02: (158) プロトン開閉型尿素チャネル (Proton-Gated Urea Channel)

2013/01: (157) 転移伝令RNA (Transfer-Messenger RNA)

[ページのトップへ](#)

2012



2012/12: (156) ABO式血液型糖転移酵素 (ABO Blood Type Glycosyltransferases)

2012/11: (155) ビタミンD受容体 (Vitamin D Receptor)

2012/10: (154) クエン酸回路 (Citric Acid Cycle)

2012/09: (153) ビルビン酸脱水素酵素複合体 (Pyruvate Dehydrogenase Complex)

2012/08: (152) 環状AMP依存性蛋白質リン酸化酵素 (cAMP-dependent Protein Kinase)

2012/07: (151) ヒポキサンチン-グアニン ホスホリボシル基転移酵素 (Hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase)

2012/06: (150) スライディングクランプ (Sliding Clamps)

2012/05: (149) レプチン (Leptin)

2012/04: (148) Ras蛋白質 (Ras Protein)

2012/03: (147) ロドプシン (Rhodopsin)

2012/02: (146) アミノグリコシド系抗生物質 (Aminoglycoside Antibiotics)

2012/01: (145) 伝令RNAのキャップ形成 (Messenger RNA Capping)

[ページのトップへ](#)

2013/09: (165) 人工設計された蛋白質製の籠 (Designed Protein Cages)

このページは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。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)

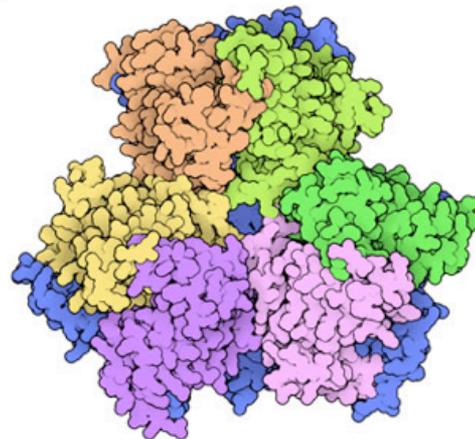
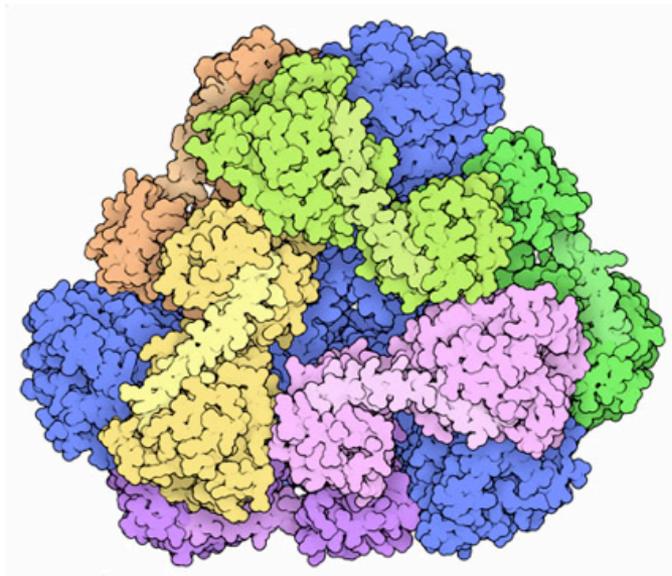
科学者は蛋白質をいじくり回すことに長けていて、驚くべきことに、おもちゃのブロックのように蛋白質を扱うことができる。細胞内で見られる天然の蛋白質は、安定で折り畳まれた構造をとるよう進化してきたが、現在の科学者たちはこれらの安定な蛋白質を合成できるだけでなく、新たな機能を持たせるような変更を加えることさえできるようになっている。この「新たな機能」の対象として、新たな酵素の設計、医薬としてより良い特性を持つよう蛋白質を改変すること、そして希望する形と大きさを持つ大きな複合体を設計すること、などが挙げられる。

蛋白質の籠

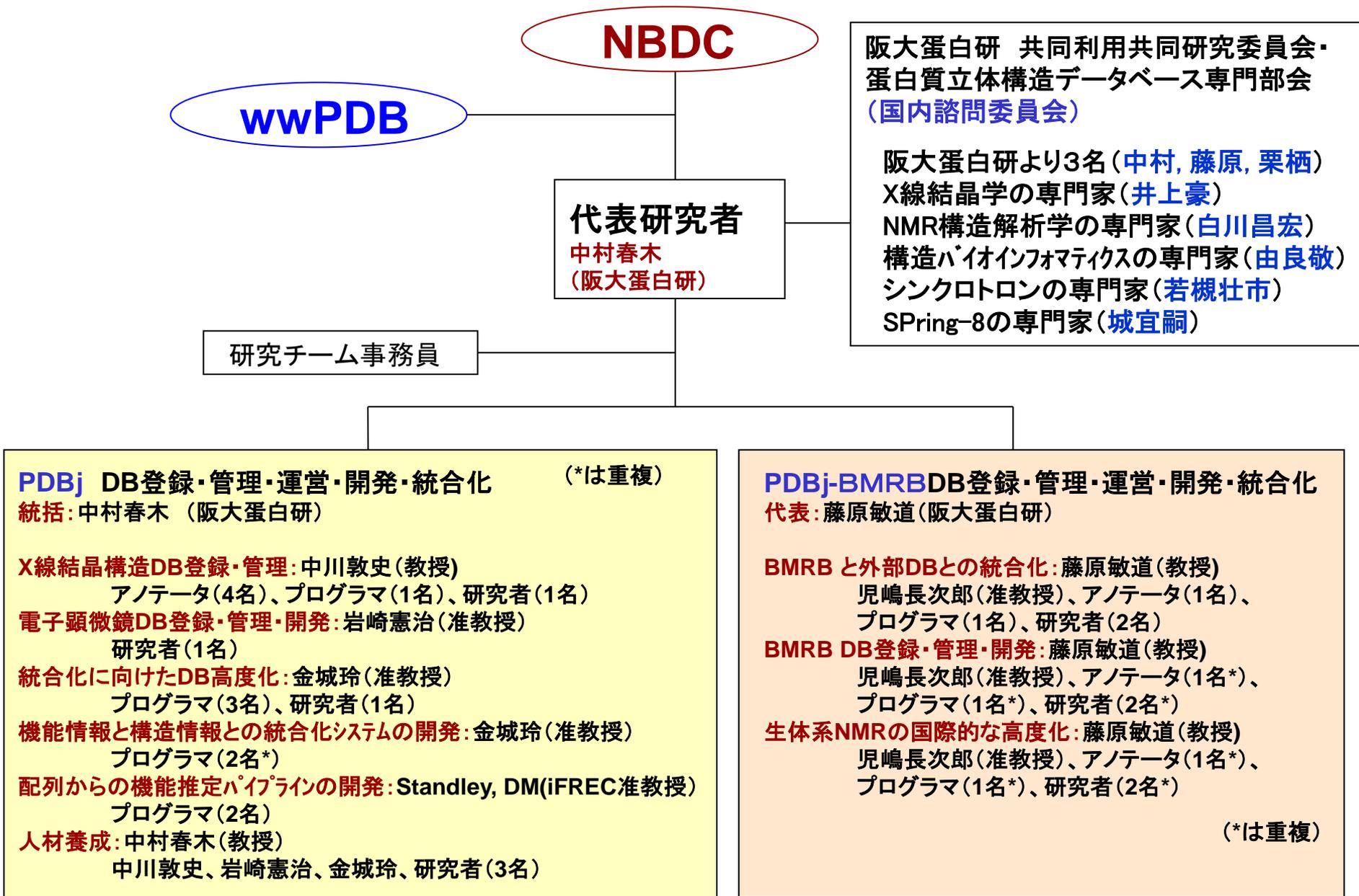
新たな目的のため天然の蛋白質に手を加えて作られた産物の例をここに示す。トッド・イエーツ (Todd Yeates)らは、自然に集まってナノメートルサイズの籠を作るような改変蛋白質の設計に挑んだ。最終目標は「四面体」という明確な対称性を持った複合体を作ること、薬剤を体内の目的とする場所に送り届けるなどのナノテクノロジーに応用することを目指したものであった。四面体型の対称構造を作るには、各構成部品に2種類の境界面が必要となる。頂点では3つが集まって形成される対称構造、辺では2つが集まって形成される対称構造が要求される。ここに示す分子は2種類の異なる方法で設計され作られたものである。

天然物を完璧につなぐ

最初の方法は、頂点と辺どちらの境界面も天然物に頼る、という方法で進められた。プロモペルオキシダーゼ (bromoperoxidase、過酸化物を使って臭化物イオンを付加する反応を触媒する酵素)は通常3量体として存在するが、これを頂点部分に利用した。またM1ウイルスの基質蛋白質は通常2量体であることを利用し辺の部分に用いた。そして次に、この2つの蛋白質を正確に適切な対称性を持ってつなぐ必要があった。これは、2つの蛋白質の間に連続した α らせんを作り、両者が適切な配置で固定されるようにした融合蛋白質を設計することにより成し遂げられた。この蛋白質は、合成すると自発的に集まって中央に空洞がある籠のような形の蛋白質ができる。右図上に示す構造(PDBエントリ [3vdx](#))がその一例である。なお、各蛋白質サブユニット中において2つの蛋白質をつないでいる長い α らせんは、図中で少し色を薄くして表示し区別できるようにしてある。



PDBjの体制



結語

ビッグデータを活用した生命科学研究

- ・さまざまなデータ(さまざまな階層, 実験手段, 生物種)を統合した研究

→ **新たな知識発見へ**

- ・品質管理されたデータの提供
(専門家による国際的Annotation組織)
- ・安心して使えるデータベースの運営
(Science Societyによる支援)

