

# 1. インターネットから蛋白質の構造データ(PDB データ)を取ってくる。

1. 「[http://www.pdbj.org/index\\_j.html](http://www.pdbj.org/index_j.html)」にアクセスする。

The screenshot shows the PDBj homepage with several annotations:

- Annotation 1:** A yellow box highlights the search input field with the text: "PDB IDが分かっている場合(1QHO)は、PDB IDを入力する。" (When the PDB ID is known (1QHO), enter the PDB ID).
- Annotation 2:** A yellow box highlights the search button with the text: "複数のキーワードで探す場合、Bacillus and stearothermophilus and amylase のようにand を使う。" (When searching with multiple keywords, use 'and' like 'Bacillus and stearothermophilus and amylase').

The website content includes:
 

- Logo: PDBj Protein Data Bank Japan
- Navigation: ニュース, English
- Search Tools: xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service), Keyword search (example: "Bacillus and stearoth..."), Advanced Search, PDB登録, ADIT, BioMagResBank, BMRB, ProMode, eF-site.
- Other Services: Sequence-Navigator, Structure-Navigator, ASH / GASH, jV version 3, eProtS.
- Footer: 謝辞 (Acknowledgments), 当サイトのデータ・文章・画像は、無料で自由にご利用いただけますが、転載・引用いただく際には、引用元として「日本蛋白質構造データバンク(PDBj)」(日本語の場合)「Protein Data Bank Japan (PDBj)」(英語の場合)を明記いただくことをお願い致します。

## 2. 検索結果を注意深く読む

*B. stearothermophilus* の $\alpha$ -アミラーゼマルトース、アカボースとの共結晶構造 1QHO, 1QHPのPDB ファイル名で登録されている。

The screenshot shows the search results page for the query "[Bacillus and stearothermophilus and amylase]".

**Query keyword:** [Bacillus and stearothermophilus and amylase]

**Results:**

PDB ID	descriptor	title	authors	exp.method	deposition date	release date
1QHO	: ALPHA-AMYLASE (E.C.3.2.1.133)	: FIVE-DOMAIN ALPHA-AMYLASE FROM BACILLUS STEAROTHERMOPHILUS, MALTULOSE/ACARBOSE COMPLEX	: Dauter, Z., Dauter, M., Brzozowski, A.M., Christensen, S., Borchert, T.V., Baier, L., Wilson, K.S., Davies, G.J.,	: X-RAY DIFFRACTION	: 1999-05-25	: 2000-05-31
1QHP	: ALPHA-AMYLASE (E.C.3.2.1.133)	: FIVE-DOMAIN ALPHA-AMYLASE FROM BACILLUS STEAROTHERMOPHILUS, MALTULOSE COMPLEX	: Dauter, Z., Dauter, M., Brzozowski, A.M., Christensen, S., Borchert, T.V., Baier, L., Wilson, K.S., Davies, G.J.,	: X-RAY DIFFRACTION	: 1999-05-25	: 2000-05-31

Annotations from the text point to the descriptor and title fields for both 1QHO and 1QHP.

**xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)**

**Summary Page**

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

**PDB ID** : 1QHP  
**Descriptor** : ALPHA-AMYLASE (E.C.3.2.1.133)  
**Title** : FIVE-DOMAIN ALPHA-AMYLASE FROM BACILLUS STEAROTHERMOPHILUS, MALTOSE COMPLEX  
**Functional Keywords** : AMYLASE, GLYCOSIDE HYDROLASE, STARCH DEGRADATION  
**Biological source** : BACILLUS STEAROTHERMOPHILUS  
**Total number of polymer chains** : 1  
**Total molecular weight** : 76526.3 (the details in [Structural Details Page](#))  
**Authors** : Dauter, Z., Dauter, M., Brazowski, A.M., Christensen, S., Borchert, T.V., Beier, L., Wilson, K.S., Davies, G.J. (deposition date: 1999-05-23, release date: 2000-05-31)  
**Primary citation** : Dauter, Z., Dauter, M., Brazowski, A.M., Christensen, S., Borchert, T.V., Beier, L., Wilson, K.S., Davies, G.J. X-ray structure of Neovamyli, the five-domain "maltogenic" alpha-amylase from Bacillus stearothermophilus: maltose and acarbose complexes at 1.7Angstroms resolution. *Biochemistry*, 38:8385 - 8392, 1999. ([PubMed - 10387084](#))  
**Other Database Information** : [CATH](#), [CF](#), [ESSP](#), [SCOPE](#), [VAST](#), [eF-site](#), [KEGG \( EC 3.2.1.133 \)](#), [GDB](#)

**Structure Images**

normal position | rotated about x by 90° | rotated about y by 90° | viewer  
[250X250 500X500](#) | [250X250 500X500](#) | [250X250 500X500](#) | [PDBViewer \[V version3\]](#)  
PDBViewer and [V version3] is used with Java(TM)Plug-in 1.4 and Java3D 1.3(PDBViewer) or JOGL library 1.0(jv version3).

3. 1QHPをクリックすると、さらに詳しいデータの概要(Summary Page)が示される。とにかく構造座標データが欲しいので

Download / Display

の項目をクリックする。

**xPSSS (xml-based Protein Structure Search Service)**

**[1QHP] Download Page**

[Summary](#) | [Structural Details](#) | [Experimental Details](#) | [Functional Details](#) | [Sequence Neighbor](#)  
[Link](#)

4. これをクリック

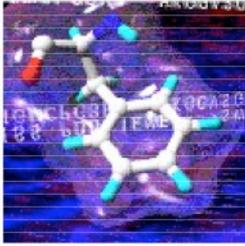
file format	file name	Display	Download
<b>PDB format</b>	<b>all</b>	<a href="#">pdb1qhp.ent.Z(146k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>
	<b>header only</b>	<a href="#">pdb1qhp.ent(562k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>
<b>mmCIF</b>	<a href="#">1qhp.ent.Z(6k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>	
<b>XML</b>	<b>all</b>	<a href="#">1qhp.cif.Z(216k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>
	<b>no-atom</b>	<a href="#">1qhp.xml.gz(253k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>
	<b>ext-atom</b>	<a href="#">1qhp-noatom.xml.gz(38k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>
<b>Struct Factor</b>	<a href="#">1qhp-extatom.xml.gz(148k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>	
	<a href="#">r1qhpsf.ent.Z(711k)</a>	<a href="#">display</a>   <a href="#">download</a>	

[\[Back\]](#) | [\[Top\]](#) | [\[PDBj Home\]](#)

概要と座標データすべて含む

概要のみ。構造を見ることは出来ない

5. PDBファイルをテキストデータ形式で自分のパソコンに保存する。拡張子を.txtから.pdbに変える。これによりSwiss PDB viewerが認識してファイルを開くことが出来る。



Swiss PDB Viewerはフリーウェアとしてダウンロードできます。  
<http://au.exspasy.org/spdbv/text/getmac.htm>

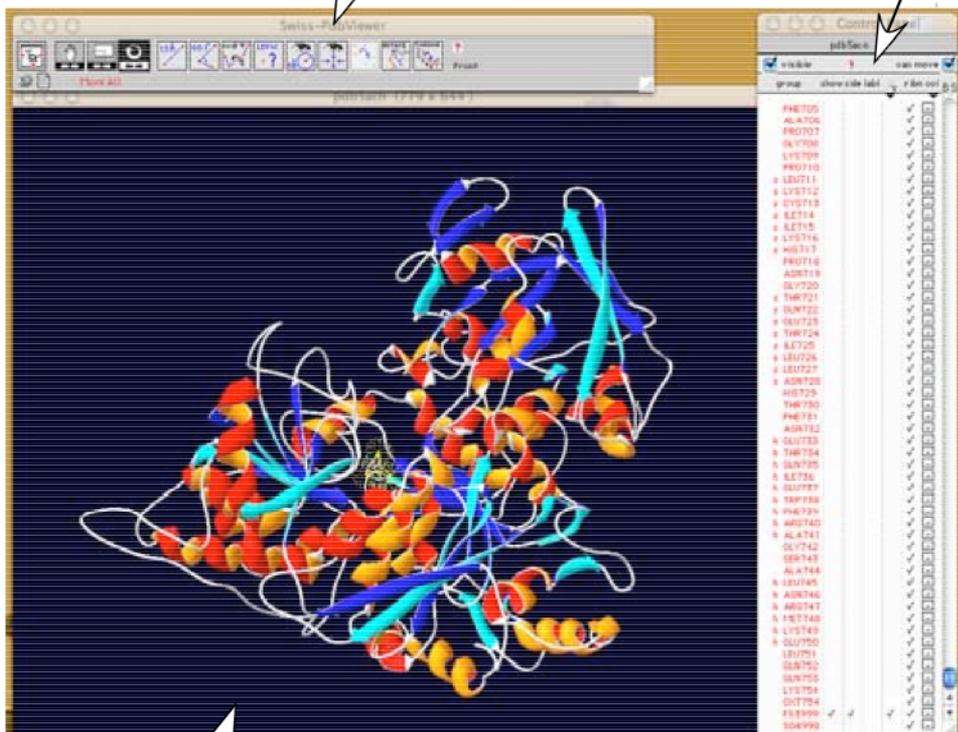
PDB Viewer について日本語解説サイトは多くはありませんが、  
<http://www2.ncc.u-tokai.ac.jp/okamoto/info/SPDBV/>  
 などがあります。

## 1. 起動画面

「File」メニューのOpen PDB File...から見たい蛋白質のPDBファイルを開く。

メインウィンド

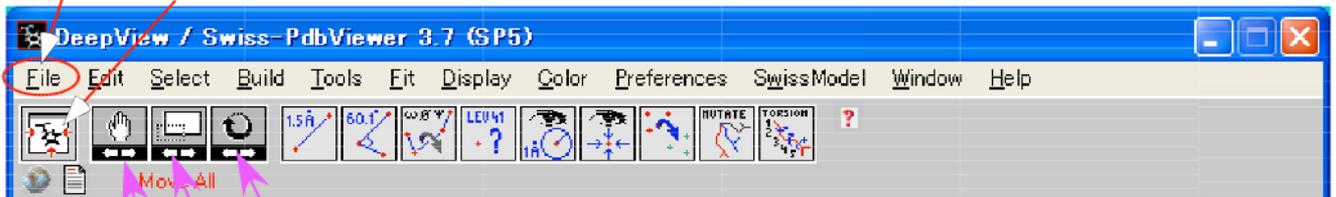
コントロールパネル



表示ウィンド

File→Open PDB file

分子の大きさを表示ウィンドに合わせる



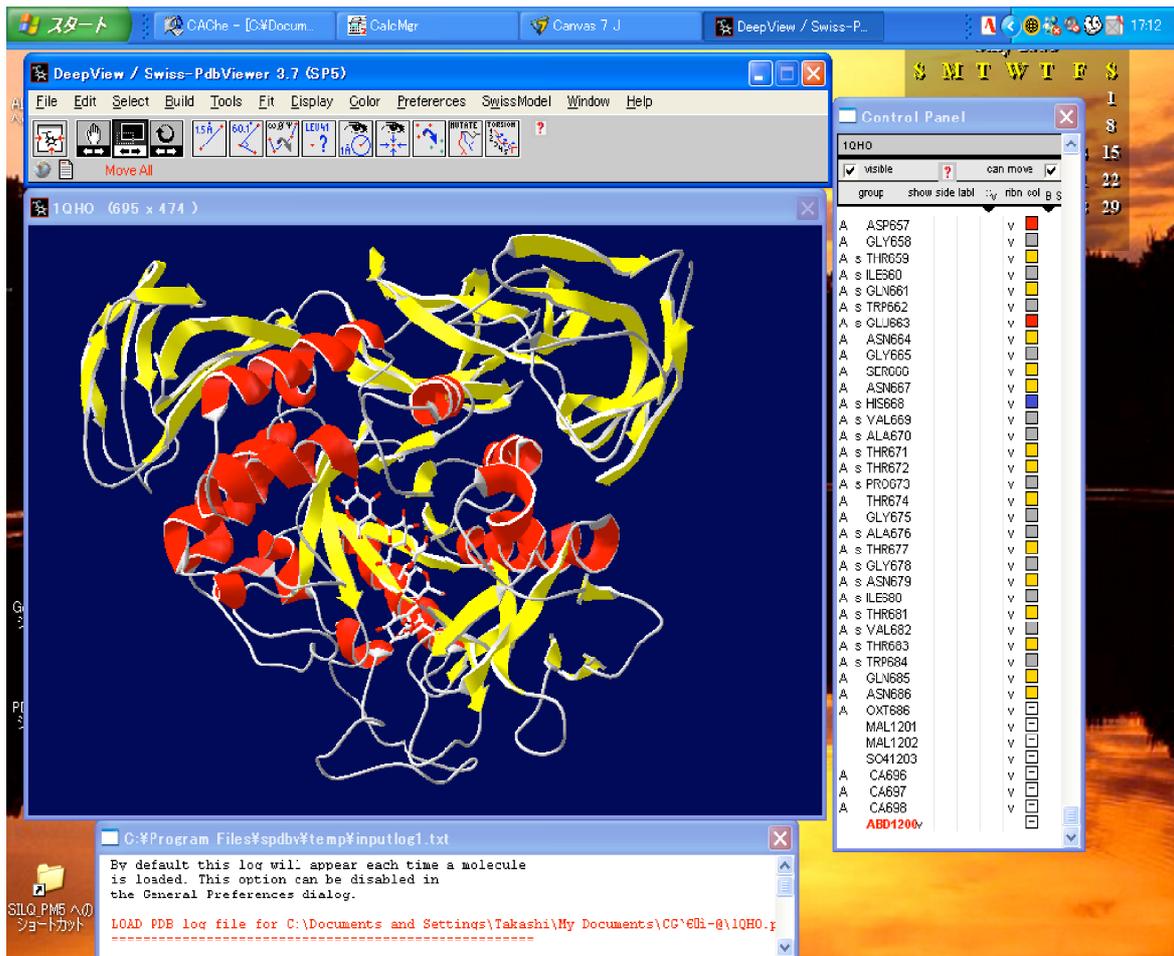
マウスで分子を回転する  
 マウスで分子を拡大・縮小する  
 マウスで分子を移動する

メインウィンドウには、よく使われる  
 指令がアイコンとして並んでいます。



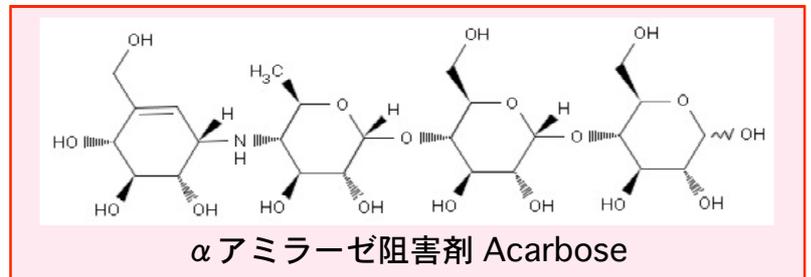
### 3. $\alpha$ アミラーゼ-Acarbose複合体を美しく表示してみよう。

完成品



#### 1. Control Panel

ribn; 右クリックですべて表示。  
side; 右クリックですべて消す。  
show; 右クリックですべて消す。  
labelと電子雲; 非表示のまま。



2. プルダウンメニュー; Color  
Color→act on Ribbon  
Color→by Secondary Structure

(今から色塗りするのはリボン表示の構造)  
(ヘリクスとストランドで自動色分け)

3. プルダウンメニュー; Display  
Display→Use OpenGL Rendering

(チェック有 → リボン構造のなめらか表示)

4. 再び, Control Panel

一番下にアカボース「ABD1200」がある。show 左クリックでABDだけ表示する。

5. プルダウンメニュー; Display

Display→Render in Solid 3D (チェック有 → 表示選択分子のなめらか表示)

$\alpha$ アミラーゼ分子内に結合したABDがはっきり見えるので, これを正面に置く。  
拡大, 回転, 移動, 画面フィットなどを駆使して自分が納得のゆく配置にする。