

# タンパク質の構造と機能

清水謙多郎

[shimizuk@fc.jwu.ac.jp](mailto:shimizuk@fc.jwu.ac.jp)

# MolViewの利用

- **MolView**: 分子の構造式や立体構造を描画するためのソフトウェア
- <https://molview.org/>

The screenshot shows the MolView web application interface. A central dialog box compares the 'New MolView' (left) and 'Old app' (right). The 'New MolView' section lists features like sketching small molecules, a redesigned sketcher, 3D synchronization, multiple structures side-by-side, and Lewis structures. The 'Old app' section lists protein viewing and Jmol integration. A red circle highlights the 'Continue to old app' button in the 'Old app' section. Below this, a red text overlay reads '旧バージョン(無料)を選択して下さい' (Please select the old version (free)). The background shows a chemical structure editor with a toolbar and a search bar.

**Start using the new MolView!**

- ✓ Sketch and view small molecules
- ✓ Fully redesigned sketcher and viewer
- ✓ Live 3D synchronization while sketching
- ✓ Multiple structures side by side
- ✓ Lewis structures and reaction diagrams

Complete list of features [here](#)

[Start](#) [View tutorials](#)

Developed **2024 – present**

- **New foundation** for more awesome chemistry education software
- **Premium features** to support sustainable development ([learn more](#))

**Old app**

- ✓ Protein viewer
- ✓ Jmol integration (MEP surfaces)

Detailed comparison [here](#)

[Continue to old app](#)

By closing this popup and using MolView, you agree to the [Terms of Use](#).

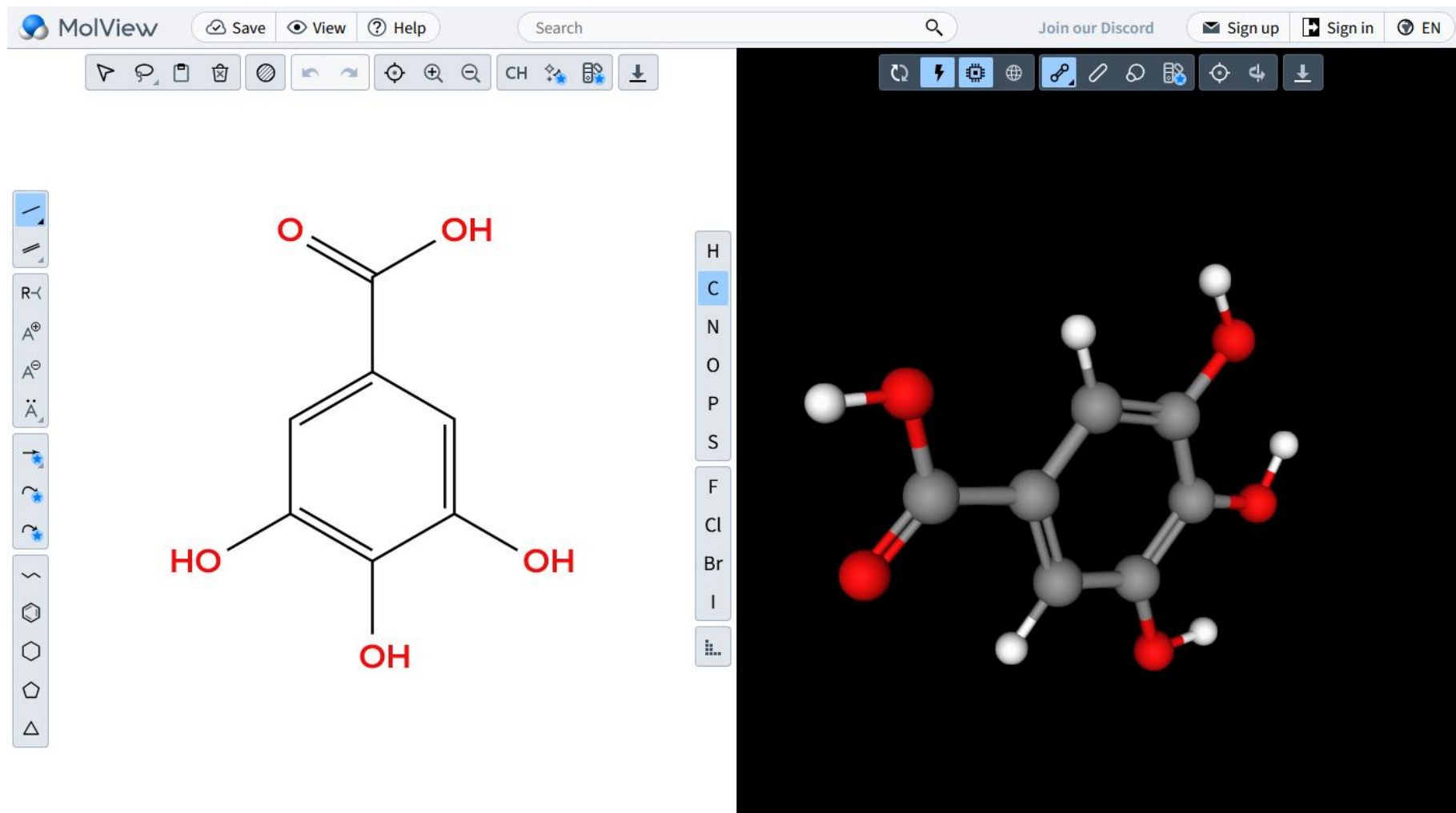
**旧バージョン(無料)を選択して下さい**

Developed **2012 – 2015** as a side project in high school

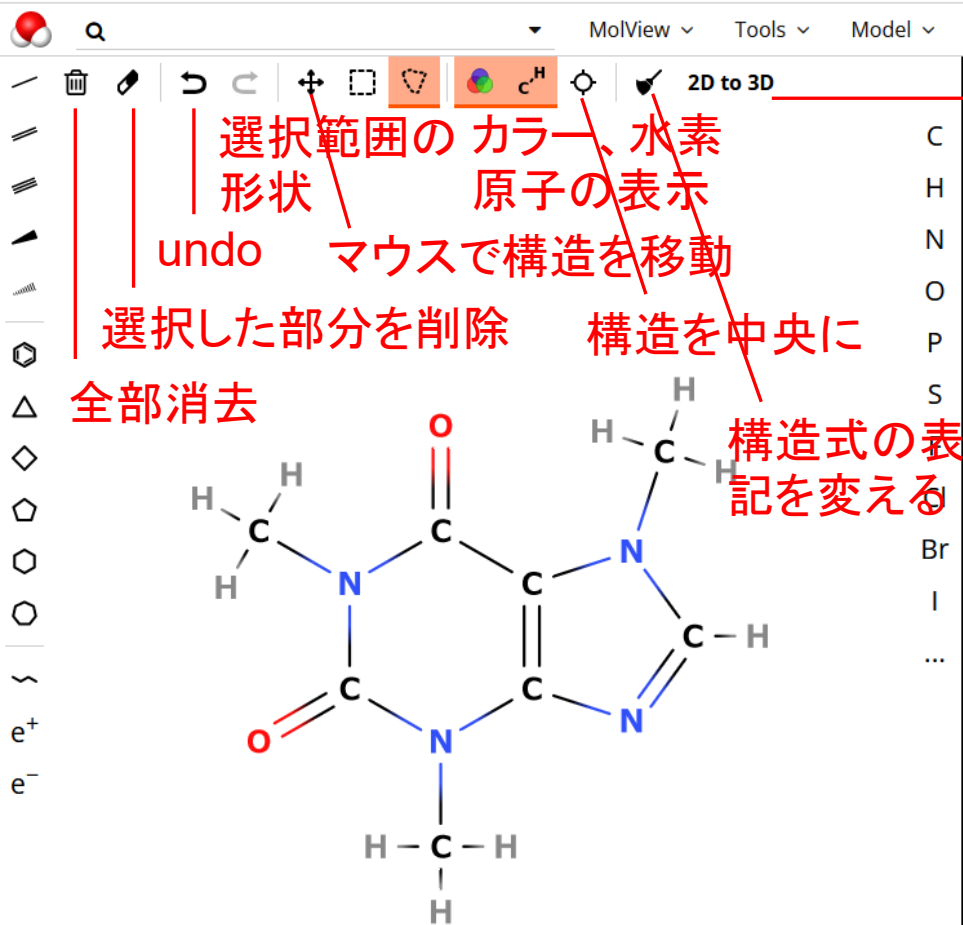
- **Deprecated** with only critical bug fixes
- **Remains available** to leverage the Jmol integration

# MolView

新バージョン(有料)では、没食子酸(3,4,5-トリヒドロキシ安息香酸)の構造式と立体構造が表示されている

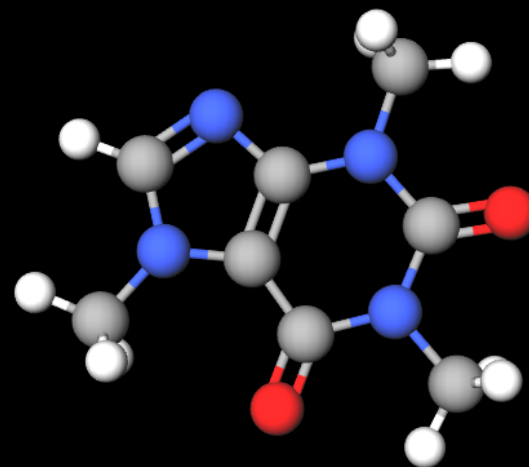


# MolViewの利用



3D構造を生成

無料版ではカフェインが表示される



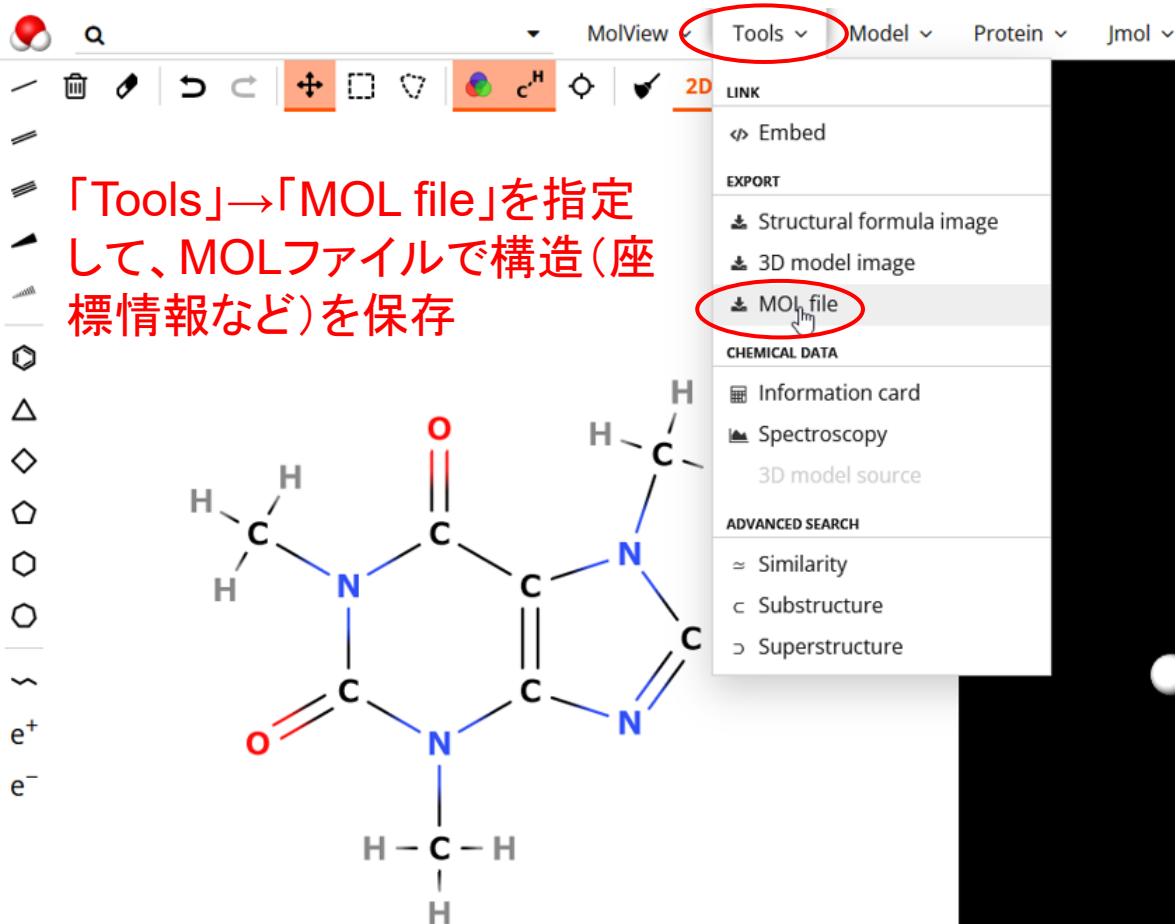
# MolViewの利用

The screenshot displays the MolView web application. On the left, a 2D chemical structure of caffeine is shown. The top toolbar includes various icons for file operations and a '2D to 3D' button. A red arrow points from the '2D to 3D' button to the 3D model on the right. The right panel shows the 'Model' dropdown menu with options for representation (Ball and Stick, Stick, van der Waals Spheres, Wireframe, Line), background (Black, Gray, White), engine (GLmol, Jmol, ChemDoodle), and crystallography (Load unit cell, Load 2x2x2 supercell, Load 1x3x3 supercell). The 'Ball and Stick' representation is selected, and the 'GLmol' engine is highlighted with a red box. The 3D model on the right shows the caffeine molecule in a ball-and-stick representation, with carbon atoms in gray, nitrogen in blue, oxygen in red, and hydrogen in white.

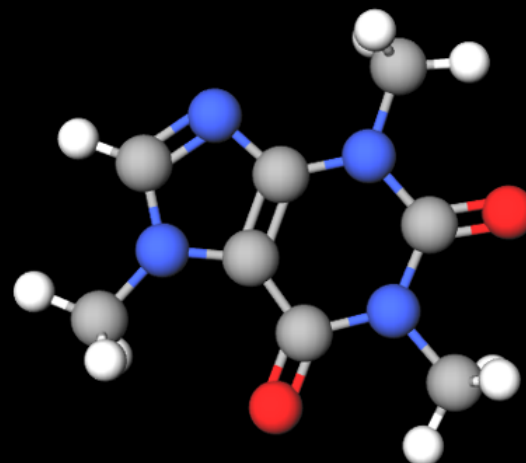
表示方法を変える

グラフィックスソフトによって、表示も変わる

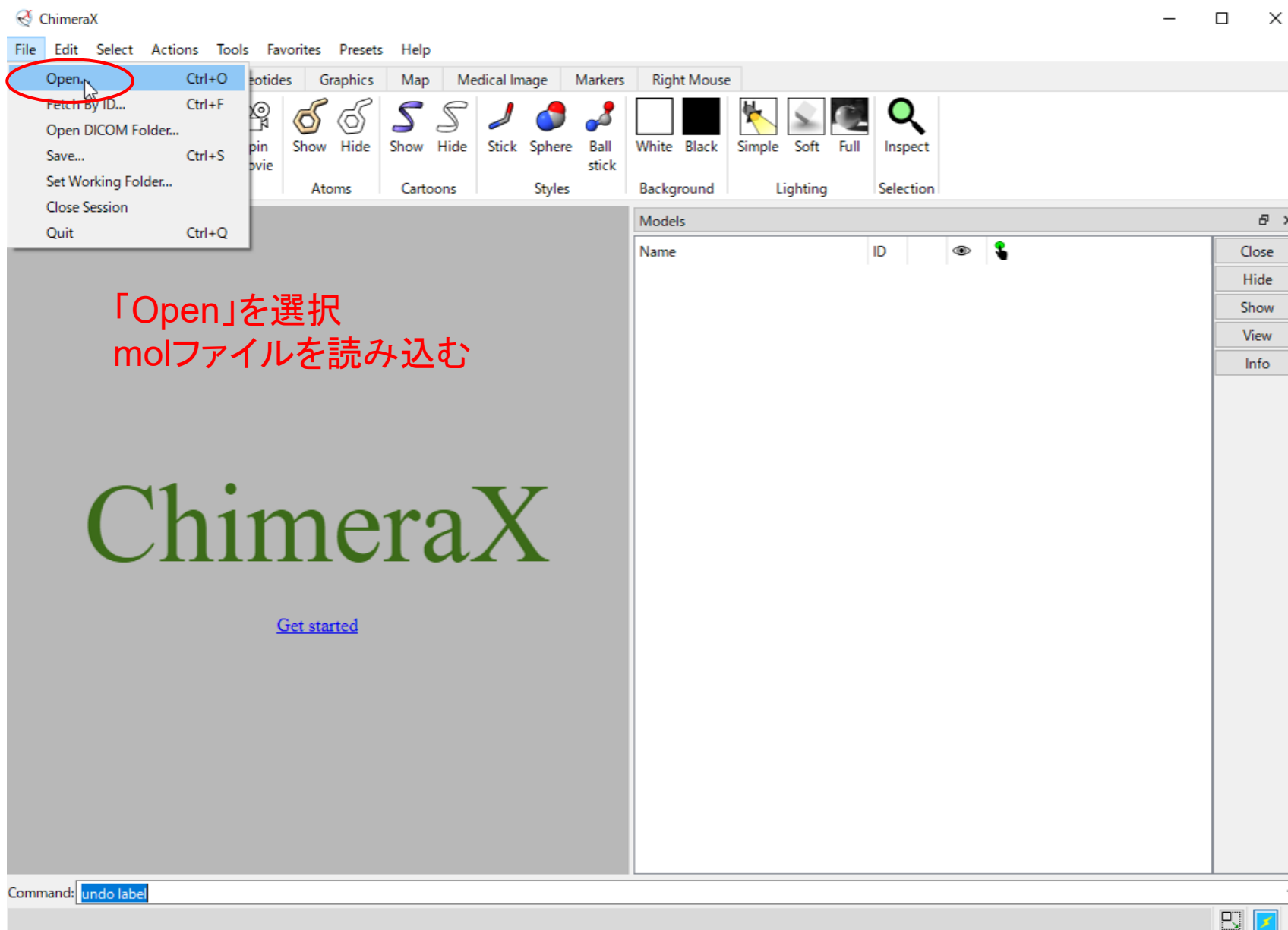
# MolViewの利用



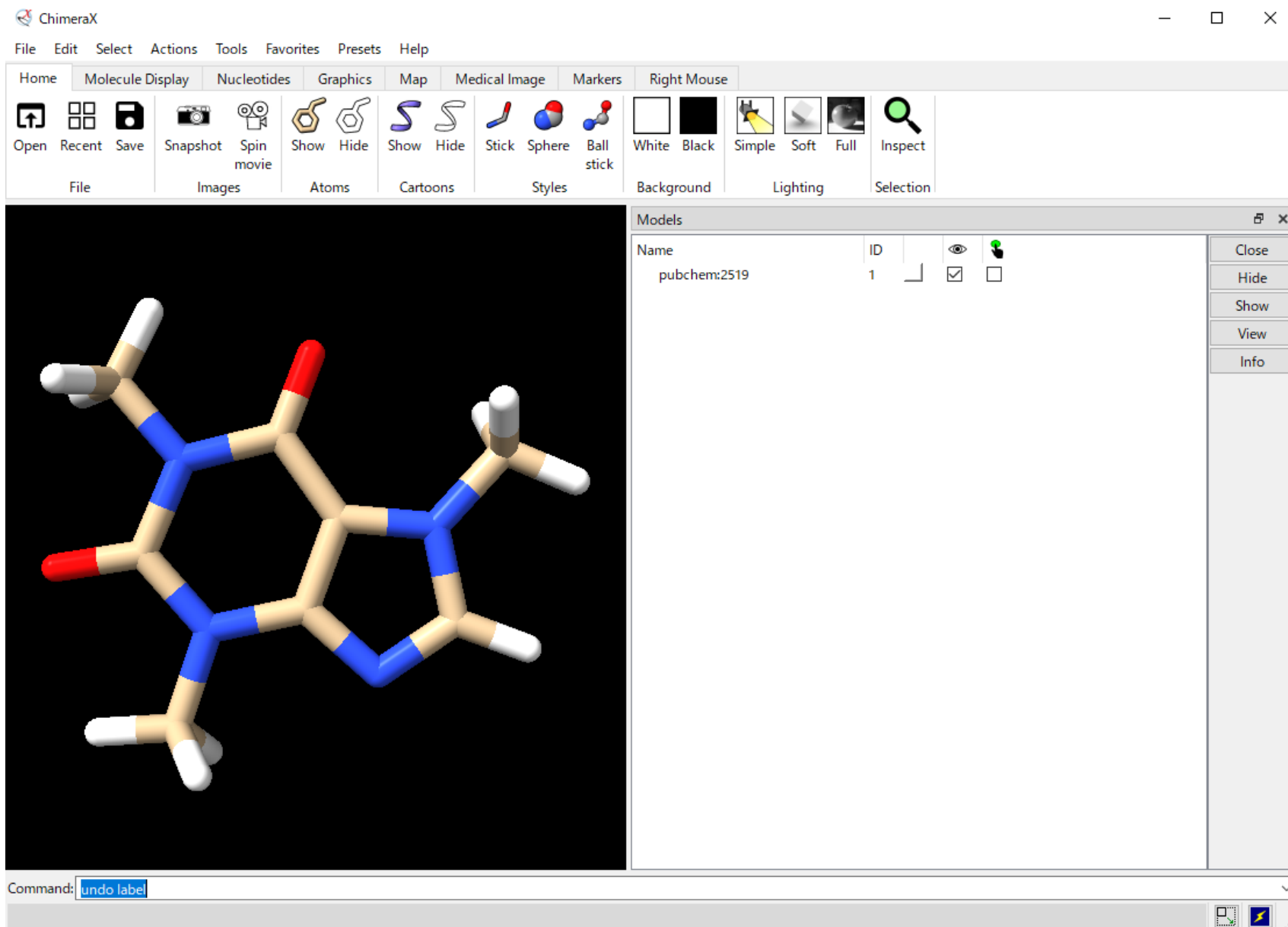
デフォルトで「MolView.mol」という名前のファイルが保存される



# ChimeraXに読み込む



# ChimeraXに読み込む



# PubChem

- **PubChem**: NCBIの化合物データベース
- 広範なデータ収集: 化学物質、化学反応、生物活性などの情報を提供
- 分子名、分子式、SMILES、InChIKeyによる検索
- 化学構造の描画検索も可能
- 様々な形式によるデータのダウンロードが可能 → SDF、CSV、XML、JSON
- <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

# PubChemの検索

## Explore Chemistry

「caffeine」を検索してみよう

Quickly find chemical information from authoritative sources

caffeine



### Compound

caffeine  
Caffeine citrate  
Caffeine benzoate  
Caffeine-d9  
Caffeine monohydrate  
Caffeine sodium salicylate  
Caffeine-trimethyl-13C3  
Caffeine salicylate  
Caffeine, Citrated  
Caffeine, synthetic

### Gene

caffeine susceptibility  
caffeine metabolism QTL 1  
caffeine metabolism QTL 2  
caffeine metabolism QTL 3  
Caffeine, calcium, zinc sensitivity 1  
carminine  
cysteine-3  
cysteine-9  
cysteine-11  
cysteine-12

### Taxonomy

Ribes affine  
Colon affine  
Mezium affine  
Zodion affine  
Aizoon affine  
Allium affine  
Eocuma affine  
Agonum affine  
Exacum affine  
Percnon affine

入力途中で、  
ヒットする化合  
物が表示される

119M Compounds

326M Substances

295M Bioactivities

42M Literature

51M Patents

1019 Data Sources

# PubChemの検索

SEARCH FOR

caffeine

Treating this as a text search.

BEST MATCH



「BEST MATCH」のものをクリック

caffeine; 58-08-2; Guanine; 1,3,7-Trimethylxanthine; Methyltheobromine; Theine; Thein; Cafeina; ...

Compound CID: 2519

MF:  $C_8H_{10}N_4O_2$  MW: 194.19g/mol

IUPAC Name: 1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

Isomeric SMILES: CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C

InChIKey: RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N

InChI: InChI=1S/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3

Create Date: 2004-09-16

[Summary](#) [Similar Structures Search](#) [Related Records](#) [PubMed \(MeSH Keyword\)](#)

**Compounds**  
(275)

**Substances**  
(1,690)

**Genes**  
(6)

**Proteins**  
(34)

**Pathways**  
(23)

**BioAssays**  
(594)

**Literature**  
(39,408)

**Patents**  
(3,121)

Searching chemical names and synonyms including IUPAC names and InChIKeys across the compound collection. Note that annotations text from compound summary pages is not searched.  
[Read More...](#)

275 results

Filters

SORT BY Relevance



Download

# PubChemの検索

さまざまな形式でダウンロード

COMPOUND SUMMARY

## Caffeine

PubChem CID	2519
Structure	<div> 2D</div> <div> 3D</div> <div> Crystal</div>
Chemical Safety	<div> Irritant</div> <div>刺激性物質</div> <div>Laboratory Chemical Safety Summary (LCSS) Datasheet</div>
Molecular Formula	$C_8H_{10}N_4O_2$
Synonyms	caffeine 58-08-2 Guaranine 1,3,7-Trimethylxanthine Methyltheobromine <a href="#">View More...</a>
Molecular Weight	194.19 g/mol

Cite

Download

### CONTENTS

#### Title and Summary

- 1 Structures
- 2 Names and Identifiers
- 3 Chemical and Physical Properties
- 4 Spectral Information
- 5 Related Records
- 6 Chemical Vendors
- 7 Drug and Medication Information
- 8 Food Additives and Ingredients
- 9 Agrochemical Information
- 10 Pharmacology and Biochemistry
- 11 Use and Manufacturing
- 12 Identification
- 13 Safety and Hazards
- 14 Toxicity
- 15 Associated Disorders and Diseases
- 16 Literature
- 17 Patents
- 18 Interactions and Pathways
- 19 Biological Test Results
- 20 Taxonomy
- 21 Classification

# PubChemの検索

PubChem Caffeine (Compound)



## 1 Structures 構造

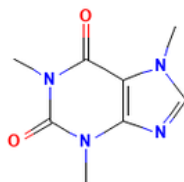


### 1.1 2D Structure



Structure Search Get Image Download Coordinates

Chemical Structure Depiction



PubChem

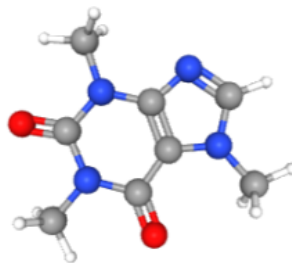
### 1.2 3D Conformer



Structure Search Get Image Download Coordinates

Interactive Chemical Structure Model

- ☒ Ball and Stick
- ☐ Sticks
- ☐ Wire-Frame
- ☐ Space-Filling
- ☒ Show Hydrogens
- ☐ Animate



Cite

Download

#### CONTENTS

Title and Summary

1 Structures

2 Names and Identifiers

3 Chemical and Physical Properties

4 Spectral Information

5 Related Records

6 Chemical Vendors

7 Drug and Medication Information

8 Food Additives and Ingredients

9 Agrochemical Information

10 Pharmacology and Biochemistry

11 Use and Manufacturing

12 Identification

13 Safety and Hazards

14 Toxicity

15 Associated Disorders and Diseases

16 Literature

17 Patents

18 Interactions and Pathways

19 Biological Test Results

20 Taxonomy

21 Classification

22 Information Sources

# PubChemの検索

PubChem Caffeine (Compound)



## 名前とID

### 2 Names and Identifiers



#### 2.1 Computed Descriptors



##### 2.1.1 IUPAC Name



1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

Computed by Lexichem TK 2.7.0 (PubChem release 2021.10.14)

▶ PubChem

##### 2.1.2 InChI



InChI=1S/C8H10N4O2/c1-10-4-9-6-5(10)7(13)12(3)8(14)11(6)2/h4H,1-3H3

Computed by InChI 1.0.6 (PubChem release 2021.10.14)

▶ PubChem

##### 2.1.3 InChIKey



RYYVLZVUVIUVGH-UHFFFAOYSA-N

Computed by InChI 1.0.6 (PubChem release 2021.10.14)

▶ PubChem

##### 2.1.4 SMILES



CN1C=NC2=C1C(=O)N(C(=O)N2C)C

Computed by OEChem 2.3.0 (PubChem release 2021.10.14)

▶ PubChem

### 2.2 Molecular Formula



C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>

Computed by PubChem 2.2 (PubChem release 2021.10.14)

Cite

Download

#### CONTENTS

Title and Summary

1 Structures

2 Names and Identifiers

3 Chemical and Physical Properties

4 Spectral Information

5 Related Records

6 Chemical Vendors

7 Drug and Medication Information

8 Food Additives and Ingredients

9 Agrochemical Information

10 Pharmacology and Biochemistry

11 Use and Manufacturing

12 Identification

13 Safety and Hazards

14 Toxicity

15 Associated Disorders and Diseases

16 Literature

17 Patents

18 Interactions and Pathways

19 Biological Test Results

20 Taxonomy

21 Classification

22 Information Sources

# 化合物の表現

- SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System): 化学構造をテキスト形式で表現する記法で、分子の構造や接続情報を簡潔に記述できる
  - 水 (H<sub>2</sub>O) O
  - エタノール CCO
  - カフェイン Cn1cnc2c1c(=O)n(c(=O)n2C)C
- InChIKey (International Chemical Identifier Key): 化学物質を一意に識別するための固定長の文字列で、InChI (国際化学識別子) をハッシュ値として生成したもの
  - 水 XLYOFNOQVPJJNP-UHFFFAOYSA-N
  - エタノール XLYOFNOQVPJJNP-UHFFFAOYSA-N
  - カフェイン RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N

# PubChemの検索

- PubChemで、タミフル（Tamiflu）を検索してみよう
  - 抗インフルエンザウイルス剤、タミフルは商品名で、化合物名は、オセルタミビルリン酸塩
  - オセルタミビルをリン酸塩にすることで水溶性が向上し、経口投与に適するようになる
- PubChemで、カテキン（catechin）を検索してみよう
  - ポリフェノールの一種で、緑茶の苦み・渋みの主成分
  - 抗酸化成分として知られる

# MolViewによる解析

- MolViewで、水 ( $\text{H}_2\text{O}$ )、エタン ( $\text{C}_2\text{H}_6$ )、アンモニウムイオン ( $\text{NH}_4^+$ )、エタノール ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ )、アセトアルデヒド ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ) の分子構造を作って表示してみよう
  - Jmol表示で、分子静電ポテンシャル「MEP」、電荷「Charge」、結合ごとの双極子モーメント「Bond dipoles」、全体の双極子モーメント「Overall dipole」を表示したり、エネルギー最小化「Energy Minimization」を実行したりしてみよう

アルコール脱水素酵素 ADHによる反応



アセトアルデヒド脱水素酵素 ALDHによる反応



NADは、生体内で電子と水素を受け渡しする補酵素（脱水素反応に必要）

# MolViewによる解析

The screenshot displays the MolView web application interface. At the top, there are navigation tabs: MolView, Tools, Model, Protein, and Jmol. Below these, a toolbar contains a settings icon, a brush icon, and a button labeled "2D to 3D". To the left of the main workspace, a vertical list of chemical elements is shown: C, H, N, O, P, S, F, Cl, Br, and I. The Jmol menu is open, revealing two main sections: "CALCULATIONS" and "MEASUREMENT".

Menu Item	Description
High Quality	
Clear	
<b>CALCULATIONS</b>	
MEP surface lucent	分子静電ポテンシャル(半透明)
MEP surface opaque	分子静電ポテンシャル(不透明)
Charge	電荷
Bond dipoles	結合の双極子
Overall dipole	全体の双極子
Energy minimization	エネルギー最小化
<b>MEASUREMENT</b>	
Distance	
Angle	
Torsion	

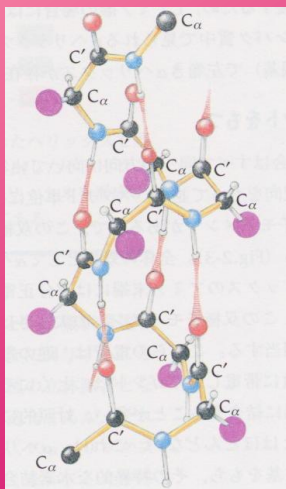
Chimeraをインストールします

# タンパク質の二次構造とグラフィックス表示

## タンパク質の二次構造

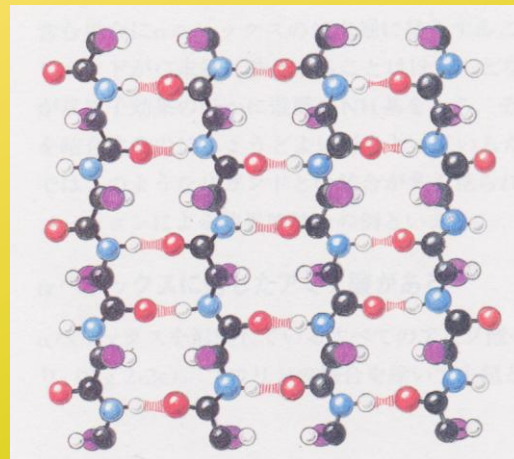
### $\alpha$ ヘリックス

アミノ酸の鎖が規則正しくらせん状に巻いた構造

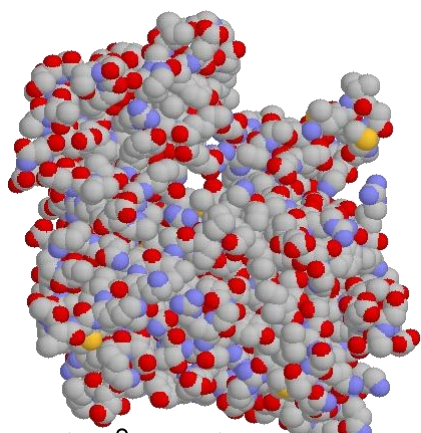


### $\beta$ シート

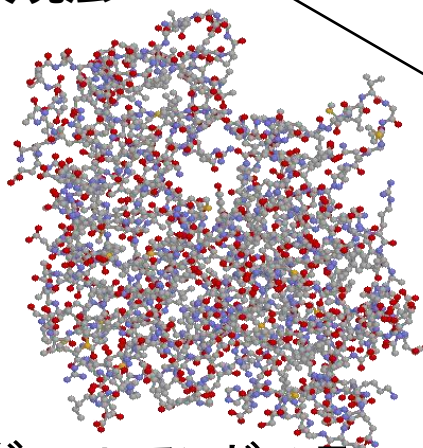
2本の伸びた状態のアミノ酸の鎖が平行に並んだ構造



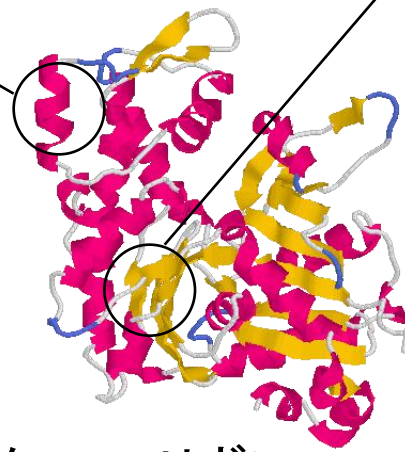
## 分子グラフィックスの表現法



スペースフィル



ボールアンドスティック

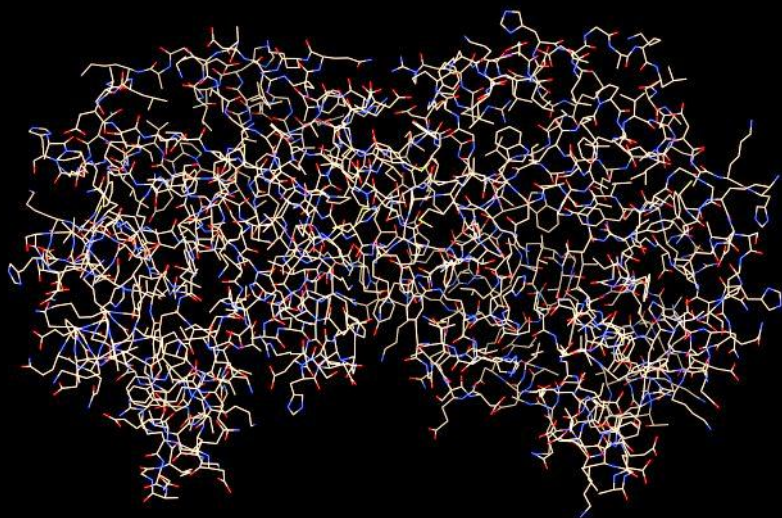


リボン

# 分子グラフィックスの表示例（1）

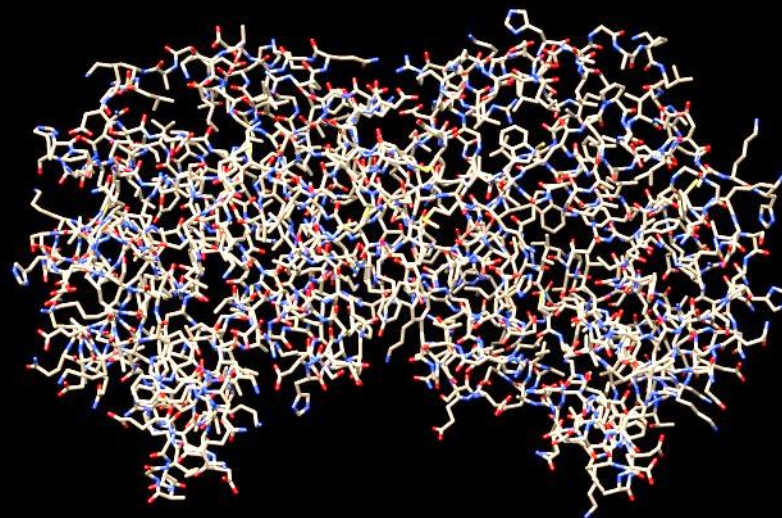
トリオースリン酸異性化酵素（1TIM）をChimeraで表示

Wire frame



原子間の共有結合を線分で結んで表示する簡易な方法

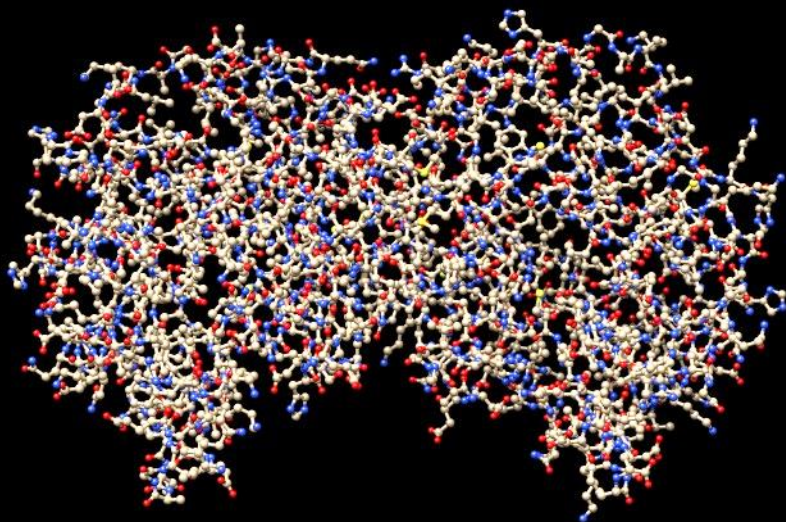
Sticks



Wire frameの線分を棒として太くし、原子を小さな球で表示  
複雑な有機分子の立体配置がわかりやすい

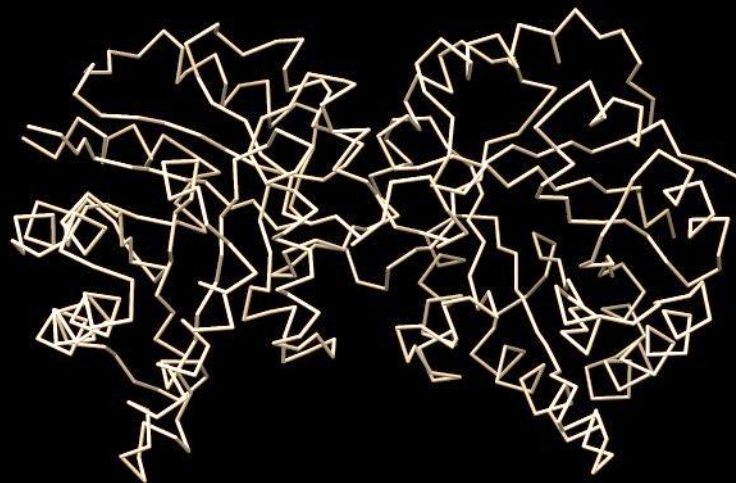
## 分子グラフィックスの表示例（2）

Ball and stick



各原子をファンデルワールス半径より小さい半径をもつ球、結合を棒で表示  
原子サイズをある程度表現、結合角・立体配置も見やすい

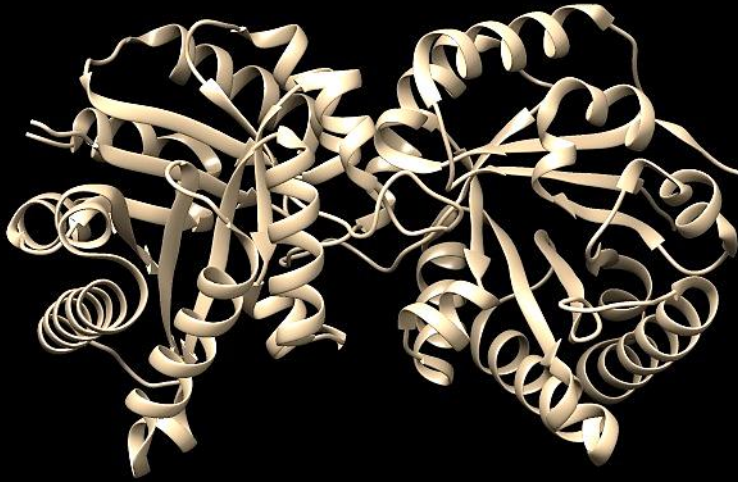
Backbone



分子の骨格を表示、 $C_{\alpha}$ 原子を線分で結んだもの

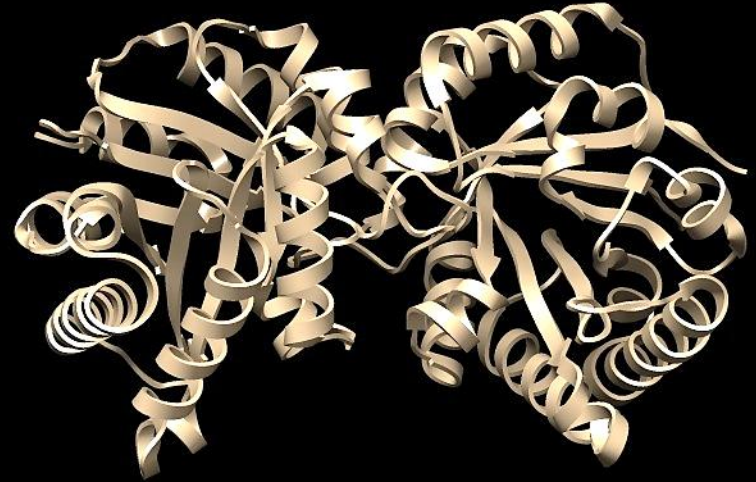
# 分子グラフィックスの表示例（3）

Ribbons



タンパク質の 二次構造の骨格を滑らかなリボン状の曲面で表示（帯状・矢印・らせん）、原子は省略される二次構造を表すのに適する

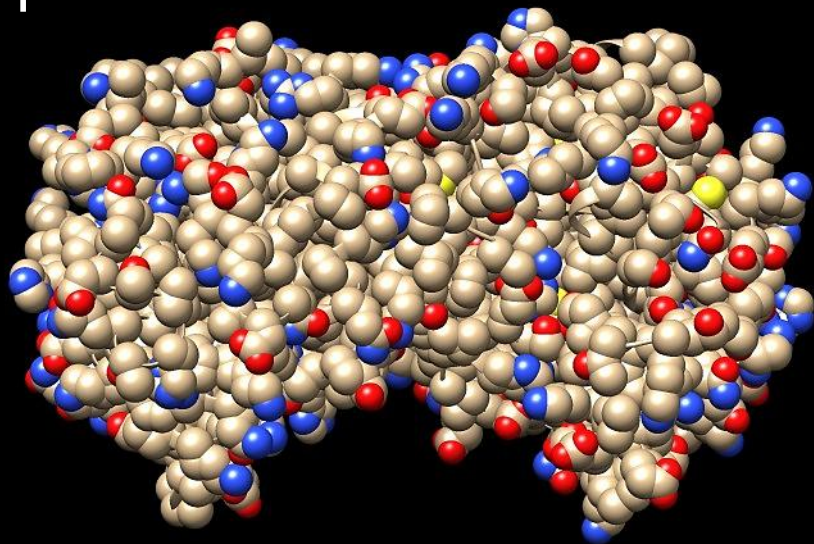
Ribbons (edged)



角張ったリボン表示

# 分子グラフィックスの表示例（4）

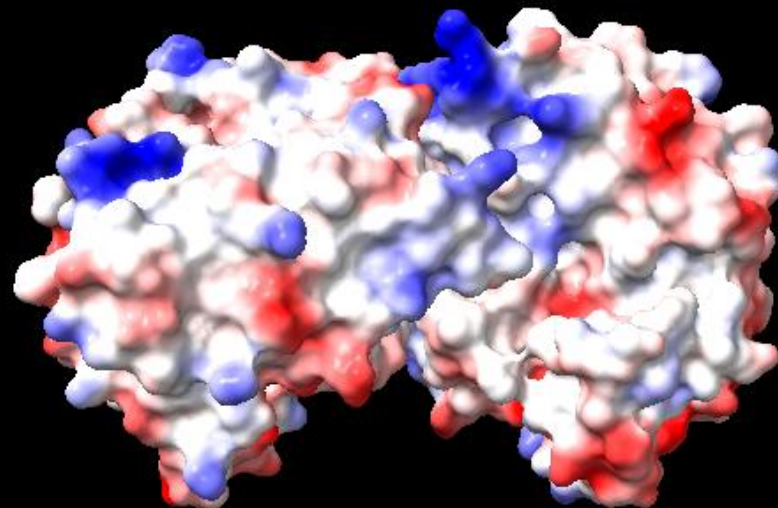
Spacefill



各原子をファンデルワールス半径の球とし、その表面で表示  
原子の「実際の大きさ」を最も忠実に表示、分子表面の凹凸が分かる

**ファンデルワールス半径:** 原子は電子雲を持つため、他の原子が近づくと電子同士が反発する。その「これ以上近づけない距離」をファンデルワールス半径 (van der Waals radius) という

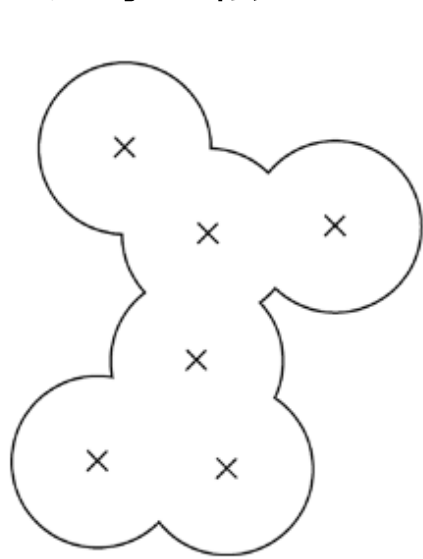
Surface



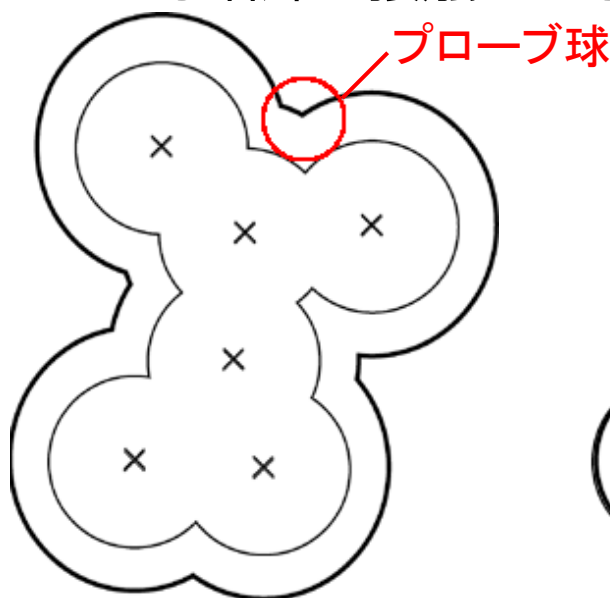
分子の表面を3Dの実体面、メッシュ、ドットで表示する  
分子の凹凸や結合ポケットがはっきり見える

# 分子表面の表現

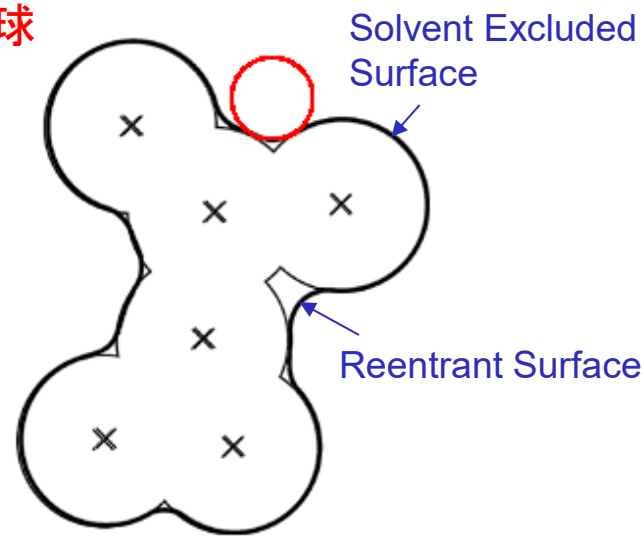
- ファンデルワールス表面: 原子をファンデルワールス半径の球とみなし、分子表面は、これらの球の表面をつなげたものとして定義される
- 溶媒接触表面 (Solvent Accessible Surface, SA): ファンデルワールス表面上に一定の半径のプローブ球を転がしたとき、その中心の軌跡が形成する表面
  - vdW表面を、プローブ球の半径の分だけ拡大したもの
  - プローブ球: 例えば、水分子の半径として1.4 Åを仮定
- 分子表面 (Molecular Surface, MA): ファンデルワールス表面上にプローブ球を転がしたときできる溶媒が接触できるなめらかな表面



vdW表面



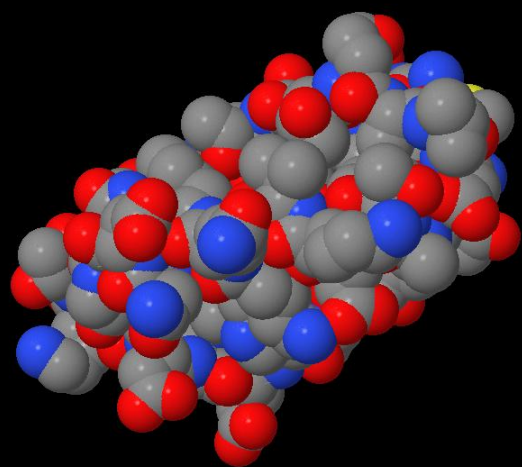
溶媒接触表面



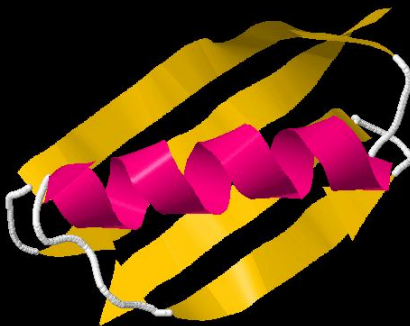
分子表面

# 分子表面の表示例

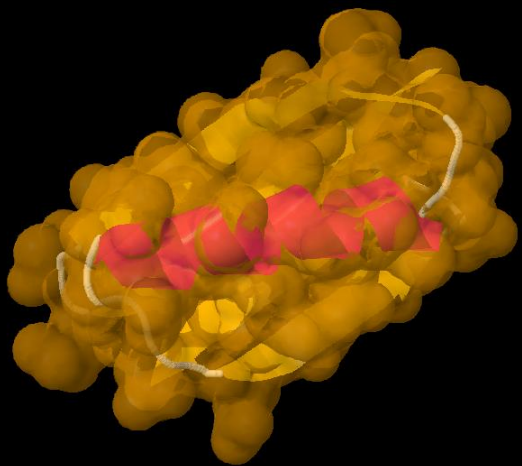
Protein G Immunoglobulin  
binding domain (PDBID: 1pgb)



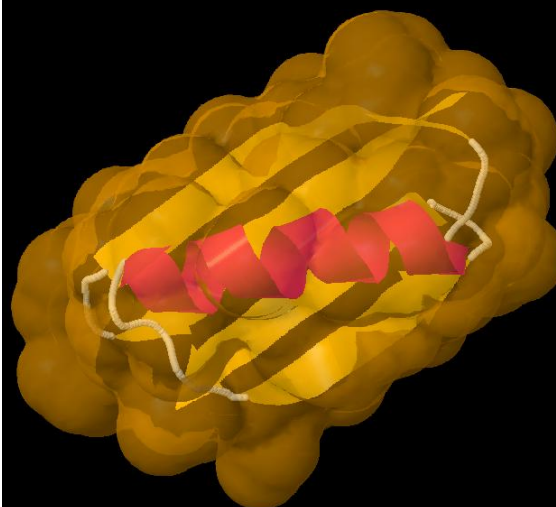
Spacefill表示



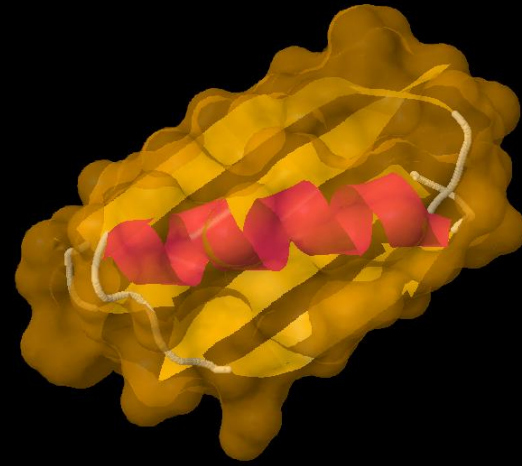
Cartoon表示



vdW表面



溶媒接触表面



分子表面

# タンパク質構造データベースを使ってみる

- タンパク質データバンク (Protein Data Bank, PDB)
  - タンパク質の構造を中心に、関連するさまざまな情報を登録したデータベース
  - <https://www.rcsb.org/>

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19 Help Contact us MyPDB

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK

246,045 Structures from the PDB archive

1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

Enter search term(s), Ligand ID or sequence

Include CSM ?

Advanced Search | Browse Annotations

PDB-101 PDB EMDatResource NAKB wwPDB Foundation PDB-IHM

Redesigned PDB Statistics Support Enhanced Functionality Explore Statistics

Welcome

Deposit

Search

Visualize

Analyze

Download

Learn

RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) enables breakthroughs in science and education by providing access and tools for exploration, visualization, and analysis of:

- Experimentally-determined 3D structures from the Protein Data Bank (PDB) archive
- Integrative 3D Structures from the PDB Archive
- Computed Structure Models (CSM) from AlphaFold DB and ModelArchive

NEW Explore Integrative Structures

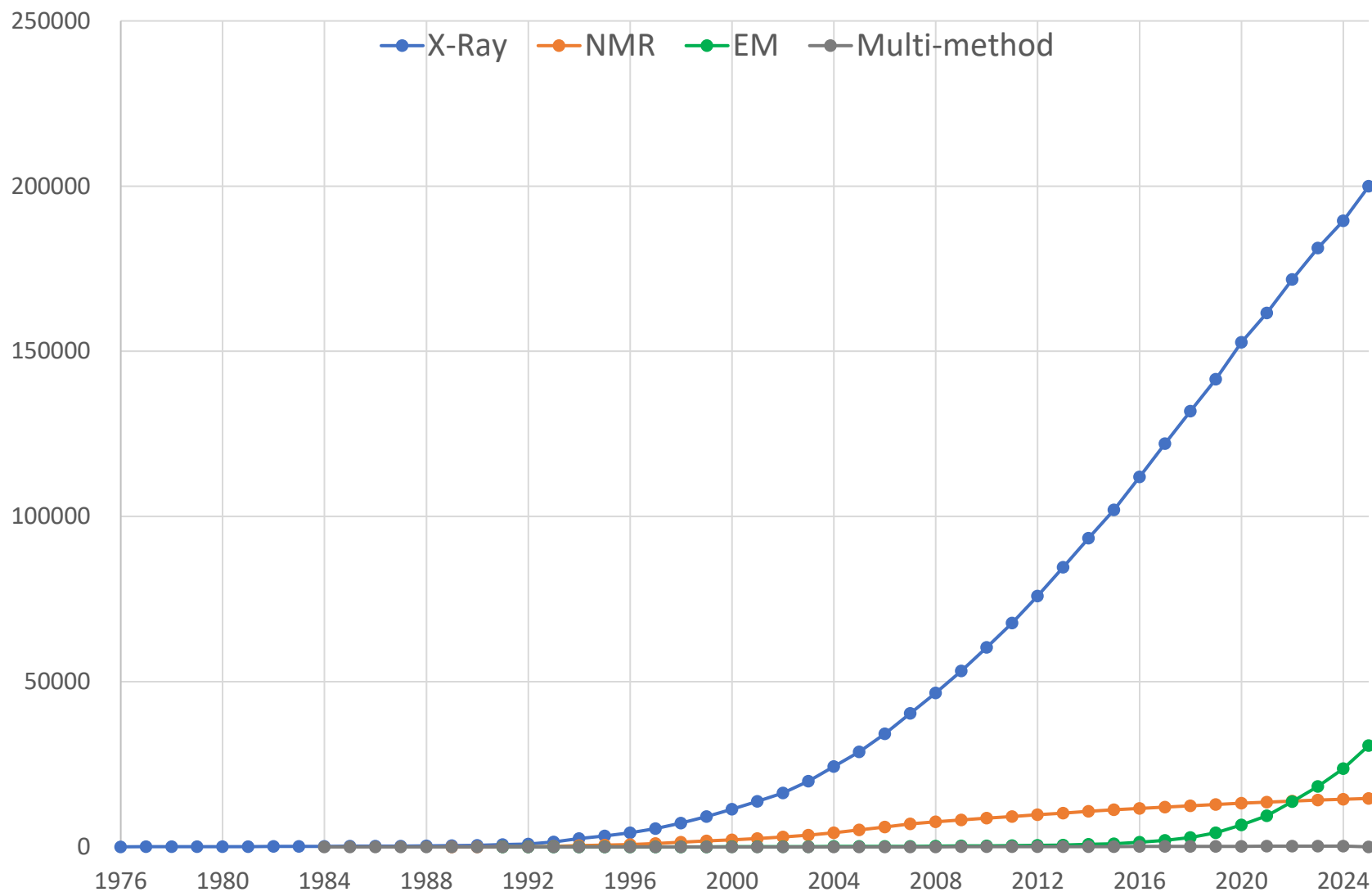
PDB-101 Training Resources

December Molecule of the Month

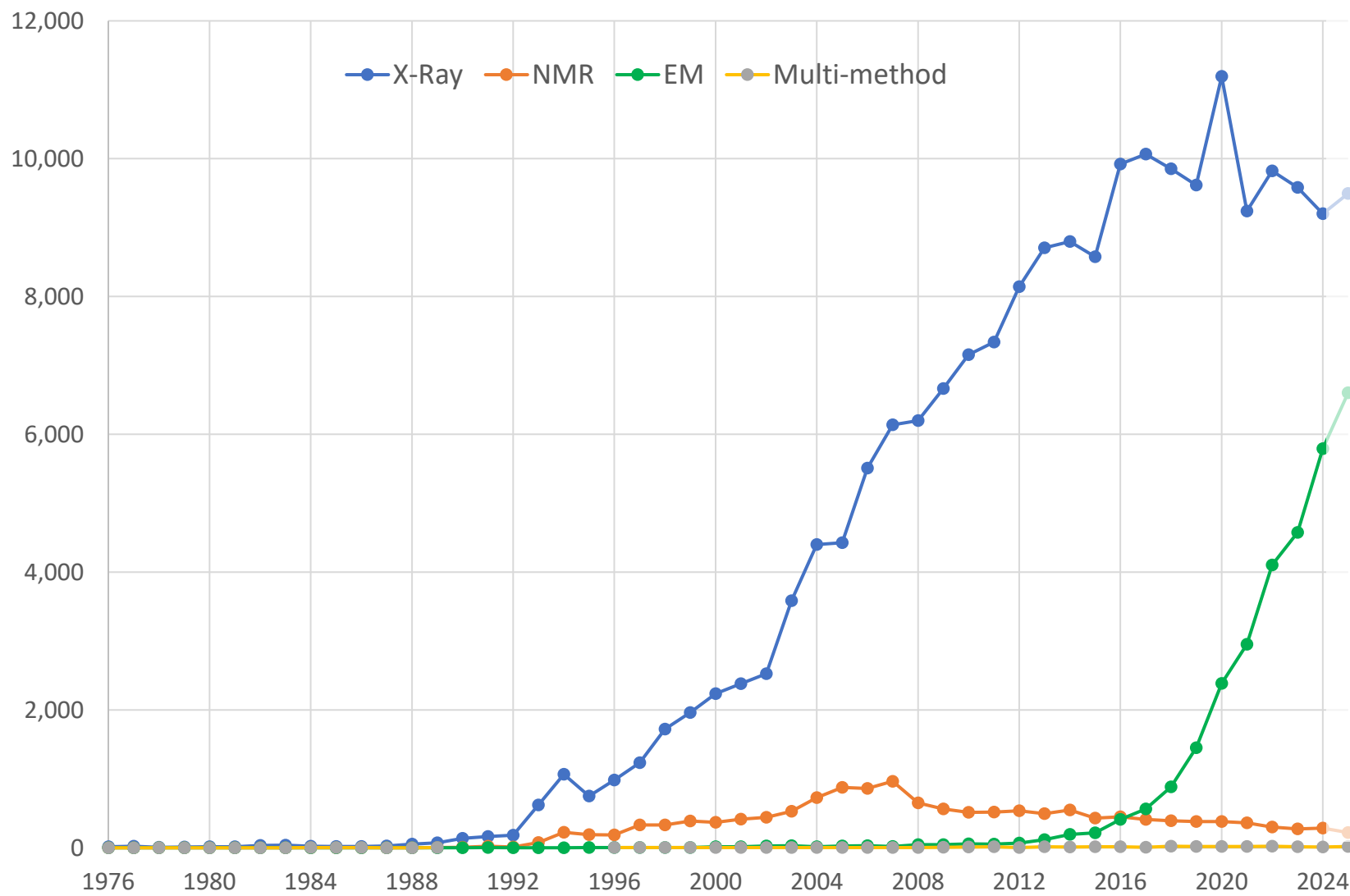
FOXP3

Latest Entries As of Wed Dec 03 2025 Features & Highlights News Publications

# 登録数の推移と構造決定手法



# 構造決定手法の各年の登録数



2025年は12月2日までのデータ

# PDBの検索 (1)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19 Help Contact us MyPDB

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK 227,933 Structures from the PDB 1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

<https://www.rcsb.org/>

Enter search term(s), Entry ID(s), or sequence Include CSM ?

Advanced Search | Browse Annotations Help

PDB-101 PDB EMDDataResource NAKB wwPDB Foundation PDB-Dev

Access Computed Structure Models (CSMs) of available model organisms Learn more

Welcome

Deposit — 構造の登録

Search — 構造の探索(配列、リガンド、機能など)

Visualize — 構造のグラフィックス表示

Analyze — 構造の解析(アラインメント、対称性など)、統計

Download — 構造のダウンロード

Learn — 分子の構造と機能の説明、教育的リソース

RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) enables breakthroughs in science and education by providing access and tools for exploration, visualization, and analysis of:

Explore PDB Features

November Molecule of the Month

Malaria Parasite

毎月、主な構造を取り上げて解説

Latest Entries As of Tue Nov 26 2024

最新の構造

Features & Highlights

Access SDF/MOL formatted CCD files from the PDB archive

Chemical Component Dictionary files with ideal geometries in SDF/MOL format are now available

News

Publications

December 1: World AIDS Day

Watch the documentary *Target Zero* to learn about the challenge and emotional complexity of the fight to control HIV infection

# PDBの検索 (2)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19

Help Contact us MyPDB

RCSB  
PDB  
PROTEIN DATA BANK

227,933 Structures from the PDB

1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

4HHB

Include CSM



Help

PDB IDで検索 → PDB ID「4HHB」の例

PDB ID → 一意の識別子、  
数字1文字と英数字3文字

PDB-101

PDB

EMDataResource

NAKB

wwPDB Foundation

PDB-Dev

Facebook Twitter YouTube LinkedIn

Access Computed Structure Models (CSMs) of available model organisms

Learn more

Welcome

Deposit

Search

Visualize

Analyze

Download

Learn

RCSB Protein Data Bank (RCSB PDB) enables breakthroughs in science and education by providing access and tools for exploration, visualization, and analysis of:

Experimentally-determined 3D structures from the **Protein Data Bank (PDB)** archive

**Computed Structure Models (CSM)** from AlphaFold DB and ModelArchive

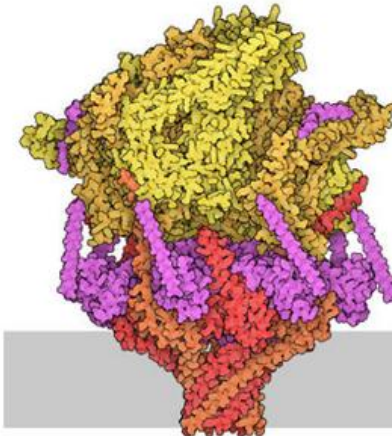
These data can be explored in context of external annotations providing a structural view of biology.

Explore  
NEW  
Features



PDB-101  
Training  
Resources

November Molecule of the Month



Malaria Parasite PTEX

Latest Entries

As of Tue Nov 26 2024

Features & Highlights

News

Publications



Access SDF/MOL formatted CCD files from the PDB archive



December 1: World AIDS Day

Watch the documentary *Target Zero* to

2017年、新しいPDB IDの導入が発表される「pdb\_00001abc」(00001の部分は数字5桁)  
IDにはバージョンも付加、テキストマイニングの容易化

# PDBの検索 (3)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19

Help Contact us MyPDB

RCSB PDB  
PROTEIN DATA BANK



246,045  
Structures  
from the  
PDB archive



1,068,577  
Computed  
Structure  
Models  
(CSM)

Enter search term(s), Ligand ID or sequence

Include CSM ?



Advanced Search | Browse Annotations

Help

PDB-101

PDB

EMDataResource

NAKB

wwPDB Foundation

PDB-IHM



Structure Summary

Structure

Annotations

Experiment

Sequence

Genome

Versions

ファイルのダウンロード

グラフィックス表示

ファイルの表示

Display Files

Download Files

Data API



4HHB | pdb\_00004hnb

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN DEOXYHAEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4HHB/pdb> Entry: 4HHB supersedes: 1HHB

Classification: OXYGEN TRANSPORT

Organism(s): Homo sapiens

Mutation(s): No

Deposited: 1984-03-07 Released: 1984-07-17

Deposition Author(s): Fermi, G., Perutz, M.F.

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION

Resolution: 1.74 Å

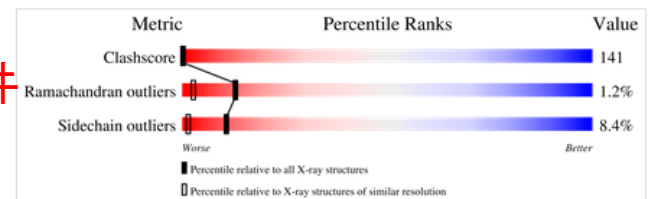
R-Value Work:

0.135 (Depositor)

wwPDB Validation

3D Report

Full Report



実験条件

一次文献情報  
(アブストラクト)

Explore in 3D: Structure | Sequence Annotations | Validation Report | Ligand Interaction (HEM)

Global Symmetry: Cyclic - C2 (Explore in 3D)

Global Stoichiometry: Hetero 4-mer - A2B2

Pseudo Symmetry: Dihedral - D2 (Explore in 3D)

Pseudo Stoichiometry: Homo 4-mer - A4

This is version 4.2 of the entry. See complete history

# PDBの検索 (4)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19

MyPDB

Contact us

RCSB PDB  
PROTEIN DATA BANK

212,303 Structures from the PDB  
1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

3D Structures

Enter search term(s), Entry ID(s), or sequence

Include CSM

Q

Advanced Search | Browse Annotations

Help

PDB-101

wwPDB

EMDataResource

NAKB

wwPDB Foundation

PDB-Dev

f t y g

Structure Summary

Structure

Annotations

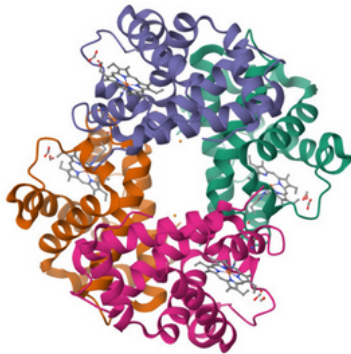
Experiment

Sequence

Genome

Versions

Biological Assembly 1



FASTA形式の配列  
PDBファイル全体

4HHB

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN HEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4HHB/pdb> Entry

Classification: **OXYGEN TRANSPORT**

Organism(s): *Homo sapiens*

Mutation(s): No

Deposited: 1984-03-07 Released: 1984-07-17

Deposition Author(s): Fermi, G., Perutz, M.F.

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION

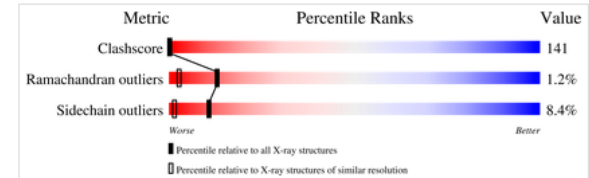
Resolution: 1.74 Å

R-Value Work: 0.135

wwPDB Validation

3D Report

Full Report



This is version 4.1 of the entry. See complete [history](#).

Literature

Download Primary Citation

下を見ると...

# ヘモグロビンの構造

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19

Help Contact us MyPDB

RCSB  
PDB  
PROTEIN DATA BANK



246,045  
Structures  
from the  
PDB archive



1,068,577  
Computed  
Structure  
Models  
(CSM)

Enter search term(s), Ligand ID or sequence

Include CSM



Advanced Search | Browse Annotations

Help

PDB-101

PDB

EMDataResource

NAKB

wwPDB  
Foundation

PDB-IHM

f X t v i n

Structure Summary

Structure

「Structure」を選択

Annotations

Experiment

Sequence

Genome

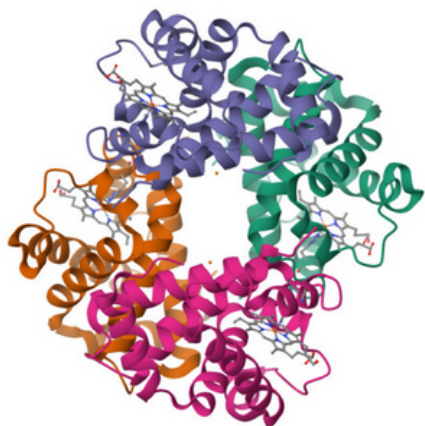
Versions

Display Files

Download Files

Data API

Biological Assembly 1



Explore in 3D: Structure | Sequence Annotations | Validation Report | Ligand Interaction (HEM)

Global Symmetry: Cyclic - C2 (Explore in 3D)

Global Stoichiometry: Hetero 4-mer - A2B2

Pseudo Symmetry: Dihedral - D2 (Explore in 3D)

Pseudo Stoichiometry: Homo 4-mer - A4

4HHB | pdb\_00004hbb

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN DEOXYHAEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb4HHB/pdb> Entry: 4HHB supersedes: 1HHB

Classification: OXYGEN TRANSPORT

Organism(s): Homo sapiens

Mutation(s): No

Deposited: 1984-03-07 Released: 1984-07-17

Deposition Author(s): Fermi, G., Perutz, M.F.

Experimental Data Snapshot

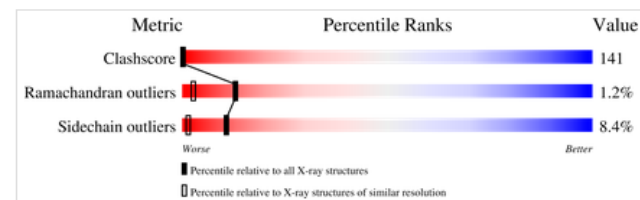
Method: X-RAY DIFFRACTION

Resolution: 1.74 Å

R-Value Work:  
0.135 (Depositor)

wwPDB Validation

3D Report Full Report



This is version 4.2 of the entry. See complete history.

# ヘモグロビンの構造

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Careers COVID-19

Help

Contact us

MyPDB

RCSB PDB  
PROTEIN DATA BANK

246,413  
Structures from the  
PDB archive

1,068,577  
Computed Structure  
Models (CSM)

Enter search term(s), Ligand ID or sequence

Include CSM



Advanced Search | Browse Annotations

Help

PDB-101 PDB EMDatResource NAKB wwPDB Foundation PDB-IHM

f x t v o in

Structure Summary

Structure

Annotations

Experiment

Sequence

Genome

Versions

Display Files

Download Files

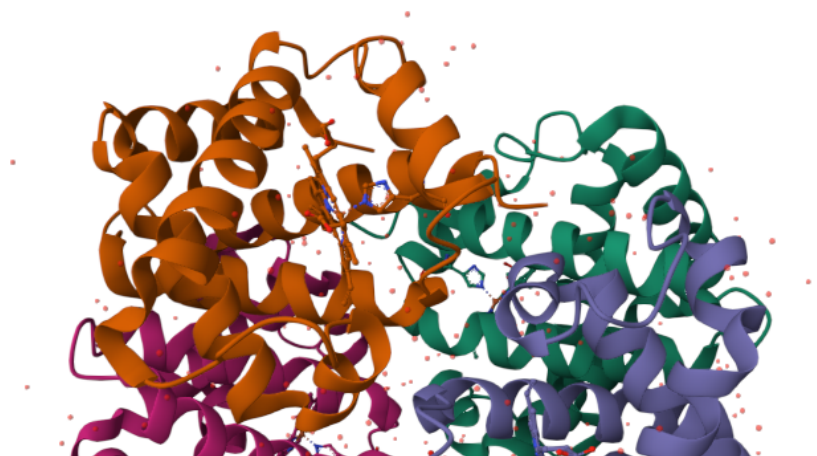
4HHB | pdb\_00004hhb

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN DEOXYHAEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

Help

Sequence of 4HHB | THE C... Chain 1: Hemoglobi... A  
1 11 21 31 41 51 61 71 81 91 101 111 121 131 141  
VLSPADKTNVKAAGKVGAAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDSLHGSAQVKGHGKGVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLAHAKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTSKYR

ペプチド鎖ごとに色が付けられている



Structure

4HHB | THE CRYSTAL STRUCTURE OF...

Type Assembly

Asm Id 1: Author And Software ...

Dynamic Bonds X Off

Nothing Focused

Measurements

Structure Motif Search

Components

4HHB

Preset + Add

Polymer Cartoon

Ligand Ball & Stick

Water Ball & Stick

Ion Ball & Stick

Unit Cell P 1 21 1

# ヘモグロビンの構造

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19

MyPDB

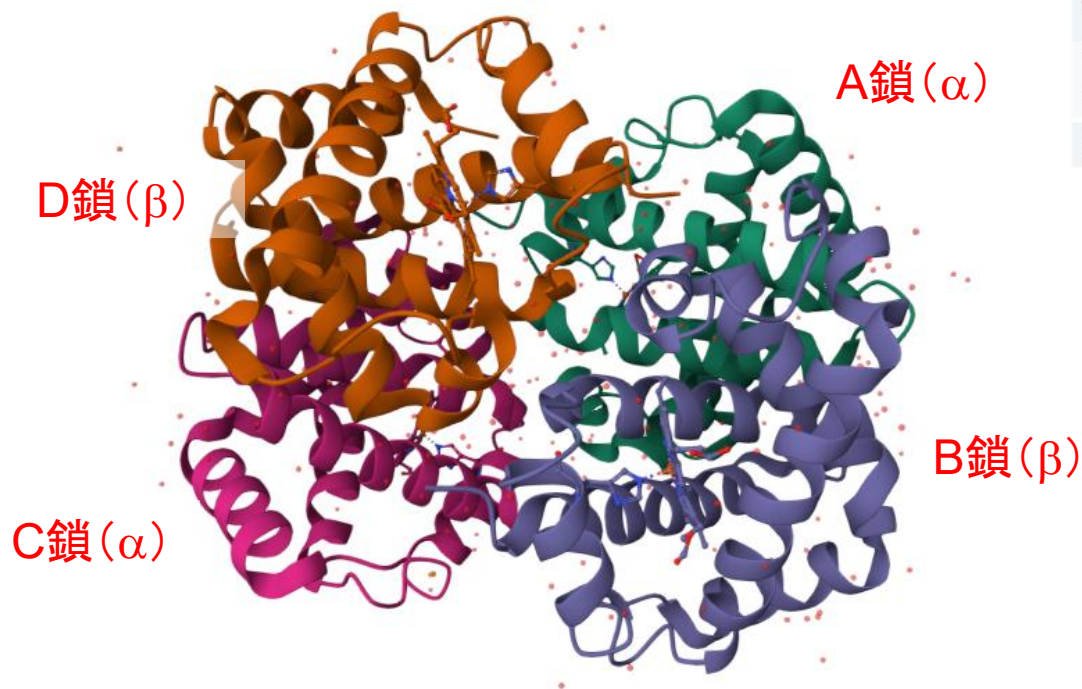
Contact us

Help

Sequence of 4HHB | THE C... Chain 1: Hemoglobi... A

1 11 21 31 41 51 61 71 81 91 101 111  
VLSPADKTNVKAANGKVGAAHAGEYGAEALERMFSLFTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLRVDPFNFKLLSHCLLVTLAAHLPL  
121 131 141  
AEFTPAVHASLDKFLASVSTIVLTSKYR

アミノ酸配列  
(構造のグラフィックスと連動している)



Structure

4HHB | THE CRYSTAL STRUCTURE OF...

Type	Assembly
Asm Id	1: Author And Software ...
Dynamic Bonds	× Off

Nothing Focused

Measurements

Structure Motif Search

Components 4HHB

Preset	+ Add	≡	🗑
Polymer	Cartoon	👁	🗑
Ligand	Ball & Stick	👁	🗑
Water	Ball & Stick	👁	🗑
Ion	Ball & Stick	👁	🗑

Unit Cell P 1 21 1

Density

Quality Assessment

Assembly Symmetry

Export Models

Export Animation

Export Geometry

「Water」「Ion」は  
見えなくすることが  
できる

# PDBの検索 (5)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19

MyPDB

Contact us

## Macromolecules

Find similar proteins by: [Sequence](#) (by identity cutoff) | [3D Structure](#)

### Entity ID: 1

Molecule	Chains <sup>i</sup>	Sequence Length	Organism	Details	Image
Hemoglobin subunit alpha	A, C	141	<a href="#">Homo sapiens</a>	Mutation(s): 0 <sup>i</sup> Gene Names: <a href="#">HBA1</a> , <a href="#">HBA2</a>	

チェーンに関する情報

### UniProt & NIH Common Fund Data Resources

Find proteins for [P69905](#) (*Homo sapiens*)

Explore [P69905](#) <sup>i</sup>

Go to UniProtKB: [P69905](#)

PHAROS: [P69905](#)

### Entity Groups <sup>i</sup>

類似配列のクラスター

Sequence Clusters

[30% Identity](#)

[50% Identity](#)

[70% Identity](#)

[90% Identity](#)

[95% Identity](#)

[100% Identity](#)

UniProt Group

[P69905](#)

### Sequence Annotations

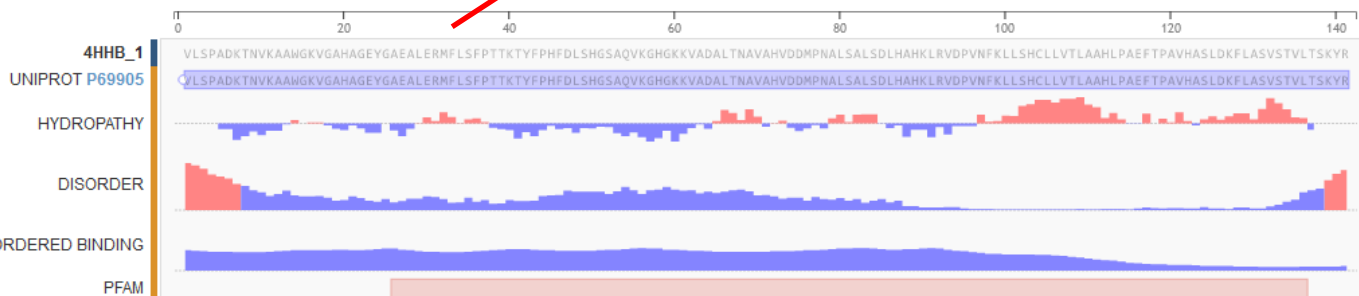
タンパク質の特徴の表示

[Expand](#)

Reference  
Sequence

4HHB\_1

UniProtKBの配列とのアラインメント 「Expand」を指定



6

# PDBの検索 (6)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19

MyPDB

Contact us

Structure Summary

Structure

Annotations

Experiment

Sequence

Genome

Versions

「Sequence」タブの内容が表示される

4HHB

Display Files

Download Files

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN DEOXYHAEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

Help

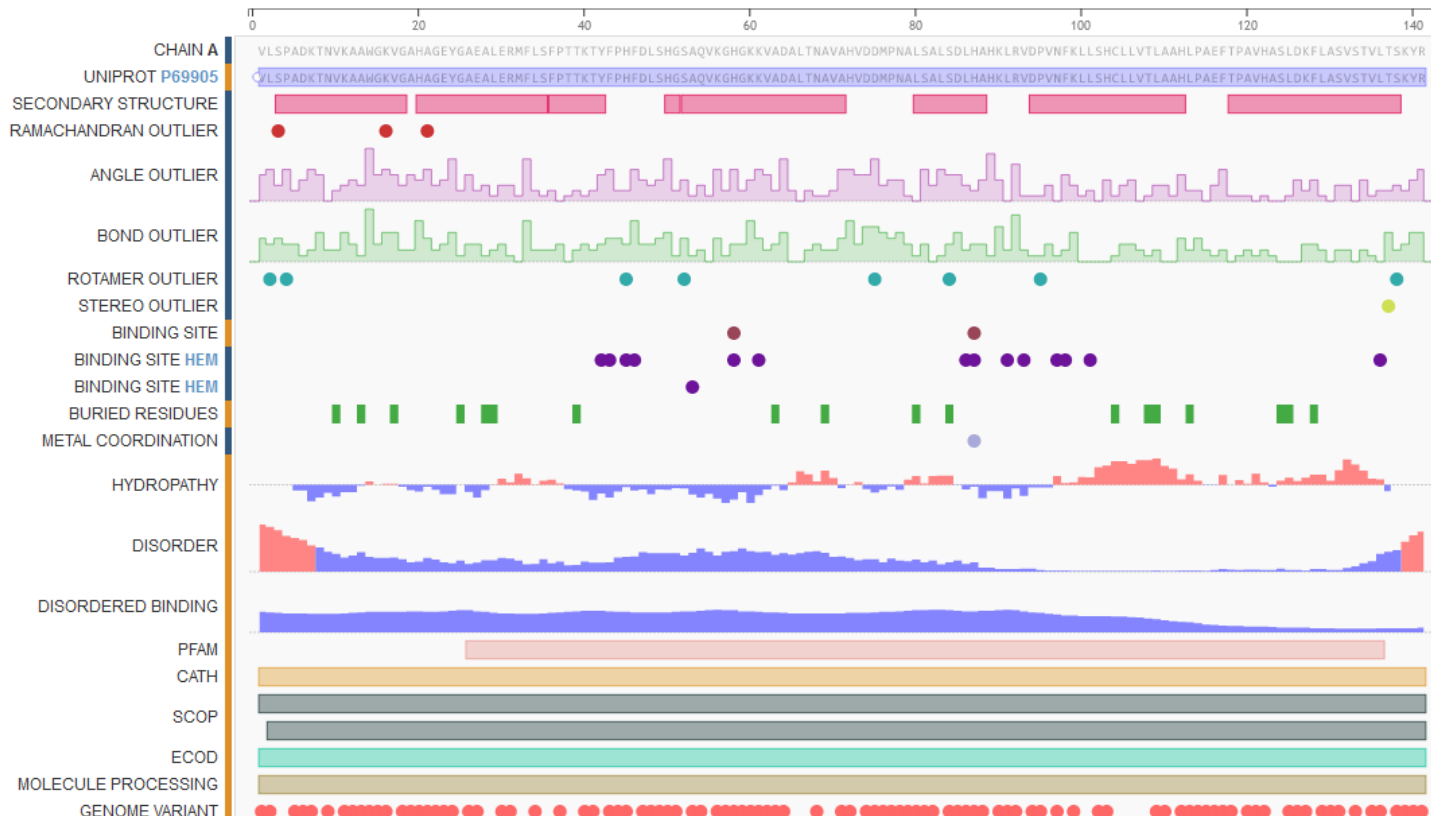
UniProtKBのアノテーション情報

CHAIN

A

Hemoglobin subunit alpha - Homo sapiens

Explore Sequence Annotations in 3D



# PDBの検索 (7)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19

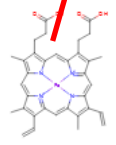
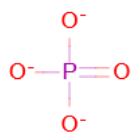
MyPDB Contact us

リガンド化合物

HEM: ヘム(プロトポルフィリンIXに鉄が配位したもの)

Small Molecules

Ligands 2 Unique

ID	Chains	Name / Formula / InChI Key	2D Diagram	3D Interactions
<p>HEM</p> <p><a href="#">Query on HEM</a></p> <p>Download Ideal Coordinates CCD File</p> <p>Download Instance Coordinates</p>	<p>E [auth A], G [auth B], H [auth C], J [auth D]</p>	<p><b>PROTOPORPHYRIN IX CONTAINING FE</b></p> <p>C<sub>34</sub> H<sub>32</sub> Fe N<sub>4</sub> O<sub>4</sub></p> <p>KABFMIBPWCXCRK-RGGAHWMASA-L</p>		<p>Interactions</p>
<p>PO4</p> <p><a href="#">Query on PO4</a></p> <p>Download Ideal Coordinates CCD File</p> <p>Download Instance Coordinates</p>	<p>F [auth B], I [auth D]</p>	<p><b>PHOSPHATE ION</b></p> <p>O<sub>4</sub> P</p> <p>NBIIXVUZAF LBC-UHFFFAOYSA-K</p>		<p>Interactions</p>

リガンド相互作用  
Aチェーンを指定



## Experimental Data & Validation

### Experimental Data

Method: X-RAY DIFFRACTION

Resolution: 1.74 Å

R-Value Work: 0.135

Space Group: [P 1 2<sub>1</sub> 1](#)

### Unit Cell:

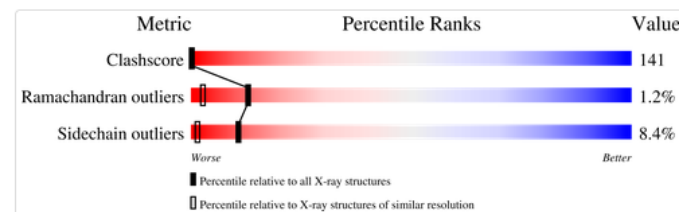
Length ( Å )	Angle ( ° )
a = 63.15	α = 90
b = 83.59	β = 99.34
c = 53.8	γ = 90

[View more in-depth experimental data](#)

### Structure Validation

[View Full Validation Report](#)

構造の妥当性確認



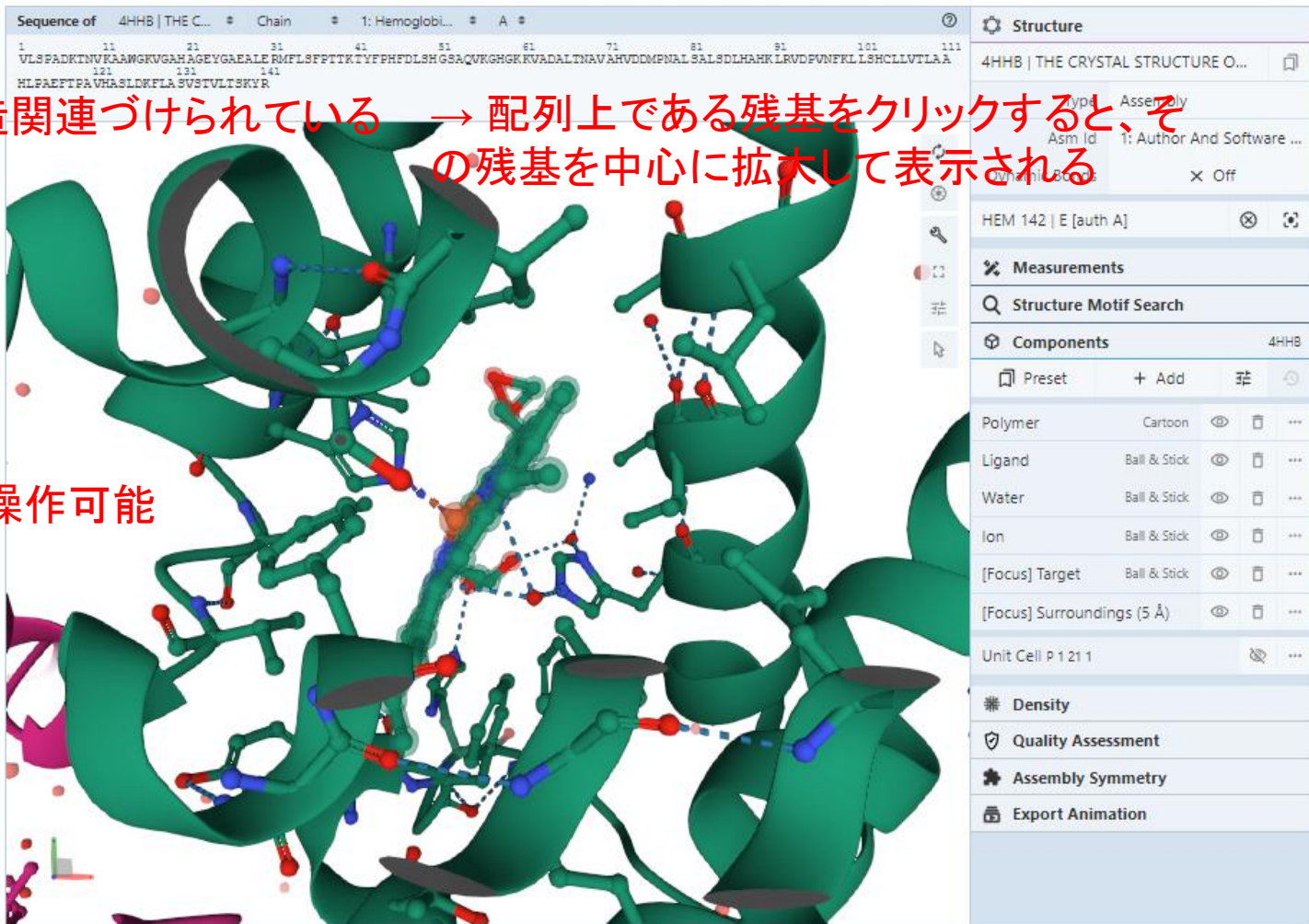
# PDBの検索 (8)

THE CRYSTAL STRUCTURE OF HUMAN DEOXYHAEMOGLOBIN AT 1.74 ANGSTROMS RESOLUTION

指定されたリガンドの結合部位の構造が表示される

配列と構造関連づけられている → 配列上である残基をクリックすると、その残基を中心に拡大して表示される

Web上で操作可能



分子グラフィックスの表示を選択できる

# PDB形式

- 1行（1レコード）80文字の単位で情報を記録
- 1970年代から使われている古い形式
- 記述が統一されていないという問題がある
- ただし、現在もグラフィックス表示など、いろいろなところで使われている
  - <http://www.wwpdb.org/documentation/format33/v3.3.html>

## レコード名

## レコードの内容

## レコードの並び

```

HEADER      KINASE
TITLE       N-ACETYL-L-GLUTAMATE KINASE FROM
TITLE       2 WITH ITS SUBSTRATE N-ACETYLGLUTAMATE
TITLE       3 ANALOG AMPPNP
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: ACETYLGLUTAMATE KINASE
COMPND      3 CHAIN: A;
COMPND      4 SYNONYM: NAG KINASE, AGK, N-ACETYLGLUTAMATE
COMPND      5 PHOSPHOTRANSFERASE;
COMPND      6 EC: 2.7.2.8;
COMPND      7 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
SOURCE      2 ORGANISM_SCIENTIFIC: ESCHERICHIA COLI
SOURCE      3 STRAIN: BL21 (DE3);
SOURCE      4 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI
SOURCE      5 EXPRESSION_SYSTEM STRAIN: BL21
SOURCE      6 EXPRESSION_SYSTEM PLASMID: PET21A
SOURCE      7 OTHER_DETAILS: NOVAGEN
KEYWDS      ACETYLGLUTAMATE KINASE, CARBAMIDYL
KEYWDS      2 ARGININE BIOSYNTHESIS, PHOSPHOTRANSFERASE
KEYWDS      3 CRYSTALLOGRAPHY
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR      S.RAMON-MAIQUES,A.MARINA,F.GIL
REVDAT      1 16-MAY-02 1GS5 0
JRNL        AUTH  S.RAMON-MAIQUES,A.MARINA
JRNL        TITL  STRUCTURE OF ACETYLGLUTAMATE KINASE
JRNL        TITL 2 FOR ARGININE BIOSYNTHESIS
JRNL        TITL 3 AMINO ACID KINASE ENZYME
JRNL        REF   STRUCTURE
JRNL        REFN  ASTM STRUE6 UK ISSN 0959-7809
REMARK      1
REMARK      2
  
```



Main Index

Atomic Coordinate Entry Format Version 3.3

### Protein Data Bank Contents Guide:

#### Atomic Coordinate Entry Format Description

Version 3.3

#### Introduction

#### Title Section

- |          |          |           |
|----------|----------|-----------|
| • HEADER | • SOURCE | • AUTHOR  |
| • OBSLTE | • KEYWDS | • REVDAT  |
| • TITLE  | • EXPDTA | • SPRSDE  |
| • SPLT   | • NUMMDL | • JRNL    |
| • CAVEAT | • MDLTYP | • REMARKS |
| • COMPND |          |           |

#### Primary Structure Section

- |                           |          |          |
|---------------------------|----------|----------|
| • DBREF (standard format) | • SEQADV | • MODRES |
| • DBREF1 / DBREF2         | • SEQRES |          |

#### Heterogen Section

- |          |          |          |
|----------|----------|----------|
| • HET    | • HETNAM | • HETSYN |
| • FORMUL |          |          |

#### Secondary Structure Section

- |         |         |
|---------|---------|
| • HELIX | • SHEET |
|---------|---------|

#### Connectivity Annotation Section

- |          |        |          |
|----------|--------|----------|
| • SSBOND | • LINK | • CISPEP |
|----------|--------|----------|

# レコードの継続 (10カラム目)

そのレコードに  
記載されている  
情報の種類(先  
頭の6カラム)

ヘッダ(IDと簡単  
な説明)  
タイトル

分子の内容

由来

文献情報

実験に関  
する詳細

```

HEADER      28-DEC-01   1GS5
TITLE       N-ACETYL-L-GLUTAMATE KINASE FROM ESCHERICHIA COLI COMPLEXED
TITLE       2 WITH ITS SUBSTRATE N-ACETYLGLUTAMATE AND ITS SUBSTRATE
TITLE       3 ANALOG AMPPNP
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: ACETYLGLUTAMATE KINASE;
COMPND      3 CHAIN: A;
COMPND      4 SYNONYM: NAG KINASE, AGK, N-ACETYL-L-GLUTAMATE 5-
COMPND      5 PHOSPHOTRANSFERASE;
COMPND      6 EC: 2.7.2.8;
COMPND      7 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
SOURCE      2 ORGANISM_SCIENTIFIC: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE      3 STRAIN: BL21 (DE3);
SOURCE      4 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE      5 EXPRESSION_SYSTEM_STRAIN: BL21 (DE3);
SOURCE      6 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PET-15B;
SOURCE      7 OTHER_DETAILS: NOVAGEN
KEYWDS      ACETYLGLUTAMATE KINASE, CARBAMATE KINASE, AMINO ACID KINASE,
KEYWDS      2 ARGININE BIOSYNTHESIS, PHOSPHORYL GROUP TRANSFER, PROTEIN
KEYWDS      3 CRYSTALLOGRAPHY
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR      S.RAMON-MAIQUES,A.MARINA,F.GIL-ORTIZ,I.FITA,V.RUBIO
REVDAT      1   16-MAY-02 1GS5   0
JRNL        AUTH  S.RAMON-MAIQUES,A.MARINA,F.GIL-ORTIZ,I.FITA,V.RUBIO
JRNL        TITL  STRUCTURE OF ACETYLGLUTAMATE KINASE, A KEY ENZYME
JRNL        TITL  2 FOR ARGININE BIOSYNTHESIS AND A PROTOTYPE FOR THE
JRNL        TITL  3 AMINO ACID KINASE ENZYME FAMILY, DURING CATALYSIS.
JRNL        REF   STRUCTURE V. 10 329 2002
JRNL        REFN  ASTM STRUE6 UK ISSN 0969-2126
REMARK      1
REMARK      2
REMARK      2 RESOLUTION. 1.50 ANGSTROMS.
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT.
REMARK      3 PROGRAM : REFMAC
REMARK      3 AUTHORS : MURSHUDOV,VAGIN,DODSON
REMARK      3
REMARK      3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 1.50
REMARK      3 RESOLUTION RANGE LOW (ANGSTROMS) : 50.00
REMARK      3 DATA CUTOFF (SIGMA(F)) : 0.000
REMARK      3 COMPLETENESS FOR RANGE (%) : 99.9
  
```

分子の名前  
チェーンのIDの別

遺伝子工学により生成したもの  
生物の学名と通称名

X線の場合は解像度  
精密化の手法

タンパク質の構造

座標データ

原子名 チェイン名					x,y,z座標			occupancy(座標位置を占める割合)			
原子の番号 残基名 残基番号								B-factor(X線結晶構造のみ)			
ATOM	1	N	MET	A	1	24.253	42.093	39.424	0.80	37.50	N
ATOM	2	CA	MET	A	1	23.934	40.679	39.655	0.80	43.15	C
ATOM	3	C	MET	A	1	24.107	40.294	41.120	0.80	24.96	C
ATOM	4	O	MET	A	1	25.075	40.676	41.786	0.80	28.17	O
ATOM	5	CB	MET	A	1	24.818	39.772	38.781	0.80	31.53	C
ATOM	6	CG	AMET	A	1	24.292	38.366	38.581	0.40	29.84	C
ATOM	7	CG	BMET	A	1	24.165	38.481	38.333	0.40	29.84	C
ATOM	8	SD	AMET	A	1	24.778	37.899	36.733	0.40	27.07	S
ATOM	9	SD	BMET	A	1	25.130	37.601	37.081	0.40	27.07	S
ATOM	10	CE	AMET	A	1	23.236	37.515	35.913	0.40	16.85	C
ATOM	11	CE	BMET	A	1	26.787	37.868	37.699	0.40	16.85	C
ATOM	12	N	MET	A	2	22.989	39.586	41.607	1.00	30.55	N
ATOM	13	CA	MET	A	2	23.062	38.897	42.951	1.00	28.36	C
ATOM	14	C	MET	A	2	24.073	37.739	42.978	1.00	31.79	C
ATOM	15	O	MET	A	2	24.506	37.338	41.905	1.00	32.49	O
ATOM	16	CB	MET	A	2	21.681	38.351	43.319	1.00	29.60	C
ATOM	17	CG	MET	A	2	20.594	39.436	43.403	1.00	38.10	C
ATOM	18	SD	MET	A	2	18.988	38.752	43.793	1.00	31.47	S
ATOM	19	CE	MET	A	2	19.305	37.947	45.377	1.00	35.42	C
ATOM	20	N	ASN	A	3	24.447	37.287	44.182	1.00	29.54	N
ATOM	21	CA	ASN	A	3	25.336	36.087	44.249	1.00	24.06	C
ATOM	22	C	ASN	A	3	24.464	35.025	43.632	1.00	25.04	C
ATOM	23	O	ASN	A	3	23.330	34.850	43.983	1.00	26.15	O
ATOM	24	CB	ASN	A	3	25.612	35.734	45.711	1.00	27.62	C
ATOM	25	CG	ASN	A	3	26.550	36.708	46.402	1.00	25.05	C
ATOM	26	OD1	ASN	A	3	26.421	36.918	47.625	1.00	38.75	O
ATOM	27	ND2	ASN	A	3	27.446	37.342	45.705	1.00	26.17	N
ATOM	28	N	PRO	A	4	25.095	34.110	42.829	1.00	19.86	N
ATOM	29	CA	PRO	A	4	24.259	33.092	42.262	1.00	19.79	C
ATOM	30	C	PRO	A	4	23.906	32.006	43.282	1.00	17.56	C
ATOM	31	O	PRO	A	4	24.511	31.965	44.390	1.00	20.62	O
ATOM	32	CB	PRO	A	4	25.207	32.403	41.231	1.00	19.65	C
ATOM	33	CG	PRO	A	4	26.327	33.332	41.045	1.00	21.41	C
ATOM	34	CD	PRO	A	4	26.446	34.227	42.242	1.00	22.15	C
ATOM	35	N	LEU	A	5	22.980	31.173	42.921	1.00	17.70	N
ATOM	36	CA	LEU	A	5	22.707	29.926	43.672	1.00	18.00	C

■ ■ ■

# mmCIFとPDBML/XML

## mmCIF (Macromolecular Crystallographic Information Framework)

国際結晶学会 (IUCr) 主導のもとで開発された Crystallographic Information Format (CIF) を生体高分子用に拡張したもの

```
data_1GS5
#
_entry.id      1GS5
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version   1.0670
_audit_conform.dict_location
http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/mmcif_pdbx.dic
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB 1GS5
EBI EBI-9174
#
loop_
_database_PDB_rev.num
_database_PDB_rev.date
_database_PDB_rev.date_original
_database_PDB_rev.status
_database_PDB_rev.replaces
_database_PDB_rev.mod_type
1 2002-05-16 2001-12-28 ? 1GS5 0
2 2009-02-24 ? ? 1GS5 1
#
_database_PDB_rev_record.rev_num      2
_database_PDB_rev_record.type         VERSN
_database_PDB_rev_record.details      ?
#
_pdbx_database_status.status_code     REL
_pdbx_database_status.entry_id        1GS5
_pdbx_database_status.deposit_site    EBI
_pdbx_database_status.process_site    EBI
_pdbx_database_status.SG_entry        .
```

nameとvalueの対

いろいろな情報の構造を  
整理して、統一的な形式  
で記述する

## PDBML/XML (The Protein Data Bank Markup Language)

XMLは、ユーザが独自のタグを指定できるようにしたマークアップ言語で広く一般に用いられている

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
tagとcontentの対
<PDBx:datablock datablockName="1GS5"
  xmlns:PDBx="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-v32.xsd"
  xmlns:xsi="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance"
  xsi:schemaLocation="http://pdbml.pdb.org/schema/pdbx-
  <PDBx:atom_siteCategory>
    <PDBx:atom_site id="1">
      <PDBx:B_iso_or_equiv>37.50</PDBx:B_iso_or_equiv>
      <PDBx:B_iso_or_equiv_esd xsi:nil="true" />
      <PDBx:Cartn_x>24.253</PDBx:Cartn_x>
      <PDBx:Cartn_x_esd xsi:nil="true" />
      <PDBx:Cartn_y>42.093</PDBx:Cartn_y>
      <PDBx:Cartn_y_esd xsi:nil="true" />
      <PDBx:Cartn_z>39.424</PDBx:Cartn_z>
      <PDBx:Cartn_z_esd xsi:nil="true" />
      <PDBx:auth_asym_id>A</PDBx:auth_asym_id>
      <PDBx:auth_atom_id>N</PDBx:auth_atom_id>
      <PDBx:auth_comp_id>MET</PDBx:auth_comp_id>
      <PDBx:auth_seq_id>1</PDBx:auth_seq_id>
      <PDBx:group_PDB>ATOM</PDBx:group_PDB>
      <PDBx:label_alt_id></PDBx:label_alt_id>
      <PDBx:label_asym_id>A</PDBx:label_asym_id>
      <PDBx:label_atom_id>N</PDBx:label_atom_id>
      <PDBx:label_comp_id>MET</PDBx:label_comp_id>
      <PDBx:label_entity_id>1</PDBx:label_entity_id>
      <PDBx:label_seq_id>1</PDBx:label_seq_id>
      <PDBx:occupancy>0.80</PDBx:occupancy>
      <PDBx:occupancy_esd xsi:nil="true" />
      <PDBx:pdbx_PDB_ins_code xsi:nil="true" />
      <PDBx:pdbx_PDB_model_num>1</PDBx:pdbx_PDB_model
      <PDBx:pdbx_formal_charge xsi:nil="true" />
      <PDBx:type_symbol>N</PDBx:type_symbol>
    </PDBx:atom_site>
```

# タンパク質の構造解析

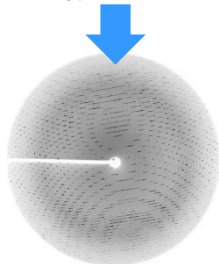
## X線結晶構造解析

試料



結晶化

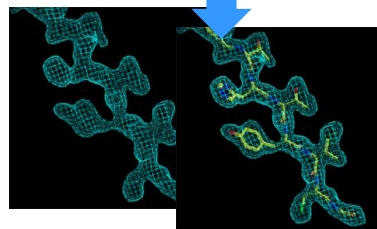
データ測定



X線照射 → X線回折

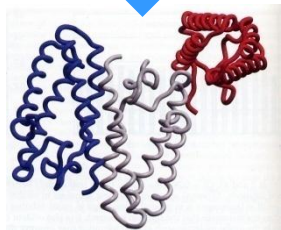
構造計算

X線回折の強度は電子密度のフーリエ変換の大きさに対応



分子置換法などで位相を解決、電子密度マップを構築

立体構造

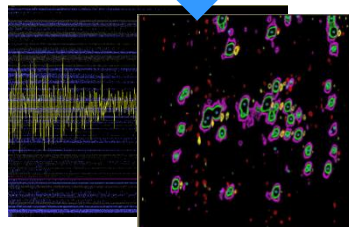


## 核磁気共鳴(NMR)

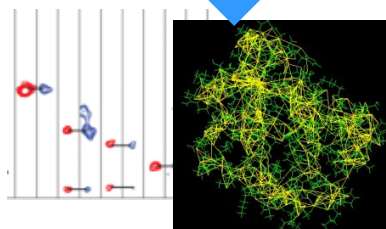
溶液状態



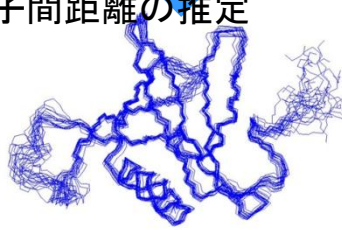
強磁場中で電磁波を当てる  
→ 核磁気共鳴



励起された核スピンの元に戻るときに発生する電磁波(シグナル)を検出



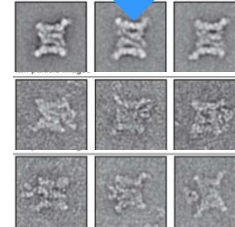
シグナル帰属、原子核どうしの相互作用 → 原子間距離の推定



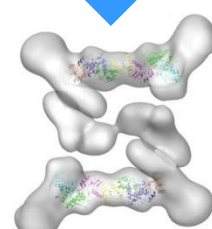
## 電子顕微鏡(EM)



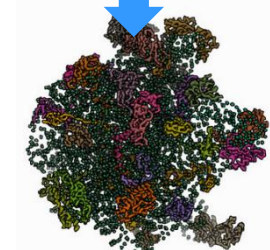
タンパク質溶液を 負染色 または急速凍結



電子線を試料に照射 → 多方向からの2D画像群の撮影



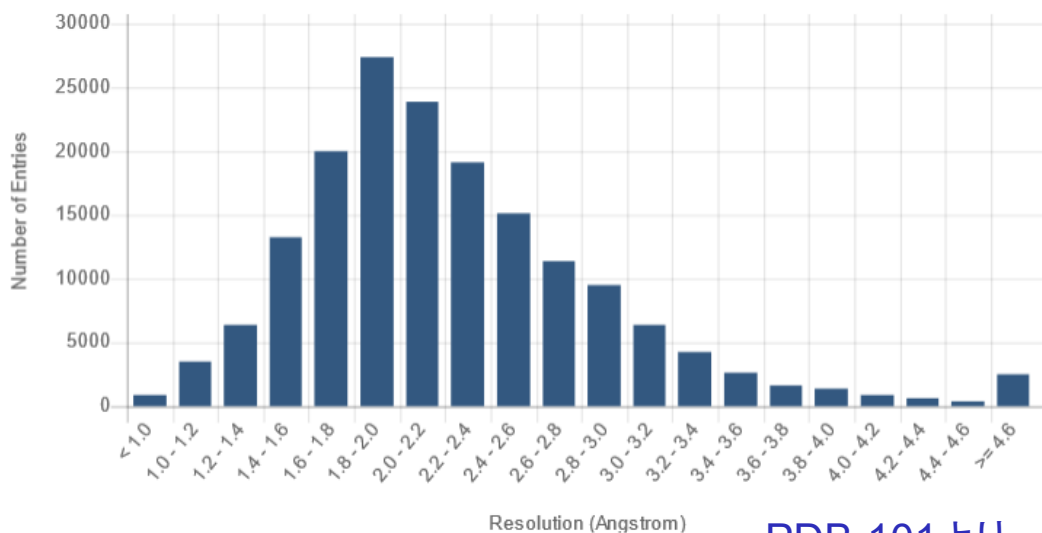
単粒子解析などによる電子密度マップを構築



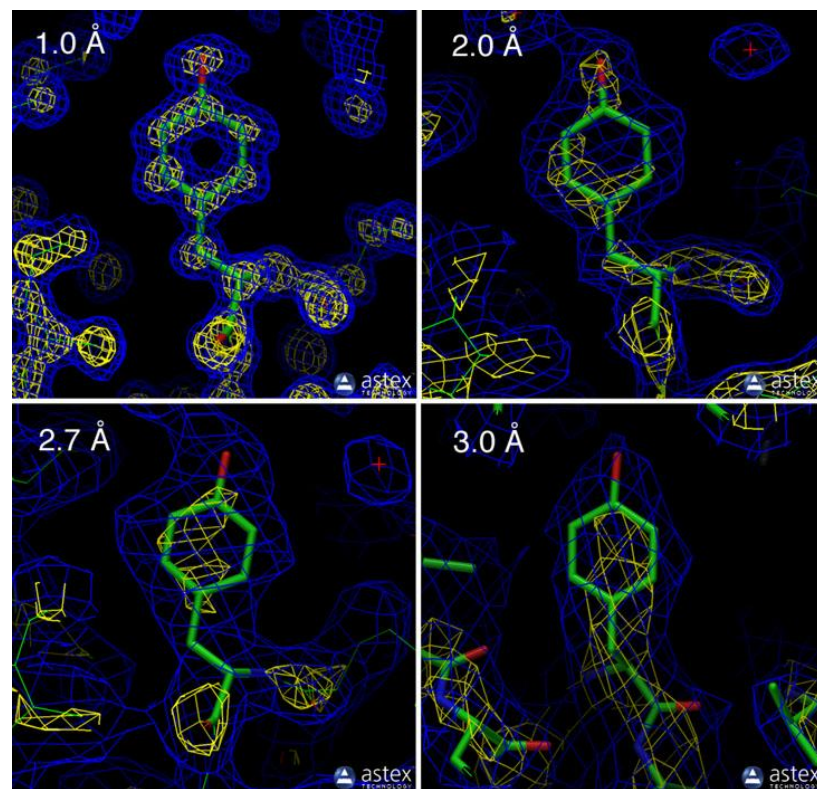
# X線結晶構造の分解能

- **電子密度マップ**: 分子内で電子がどこにどの程度存在しているかを示した三次元的な分布
- X線が結晶に当たると、原子中の電子によって散乱する → 散乱波の干渉パターン（回折データ）を解析することで、電子密度の分布を計算することができる
- 分解能（resolution）
  - 近接した2個の原子が分離して見える限界の距離

結晶構造がそろっていて、原子の動きが小さいほど、精密な回折パターンが得られ、精度の高い電子密度マップが得られる

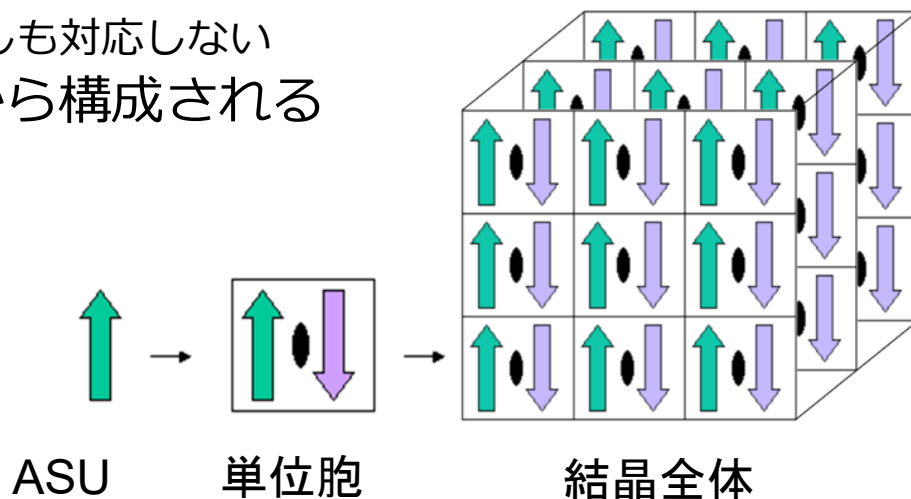


PDB-101より



# X線結晶構造の単位

- 単位胞 (Unit cell)
  - 結晶内に現れる繰り返し構造の単位、結晶構造の一周期
- 非対称単位 (Asymmetric unit, ASU)
  - 対称操作を適用することによりUnit Cellを形成することのできる最小単位
    - 回転、平行移動、らせん軸 (回転と平行移動の組み合わせ)
  - PDBには、通常、ASUの原子座標と、ASU間の対称関係が登録される
- Biological unit (Biological molecule)
  - 生物学的に機能し得る最小限の分子構成
    - ASU、Unit Cellは機能と必ずしも対応しない
  - 1つまたは複数のチェーンから構成される
- 結晶構造に由来する X 線回折像から、結晶の周期性が解析され、単位胞とその対称性 (空間群) が決定される。空間群が定まることで、非対称単位 (ASU) が定義される
- そのため、同一の分子であっても、結晶条件が異なれば、異なる単位胞や ASU を持つ結晶が得られることがある



PDB-101より

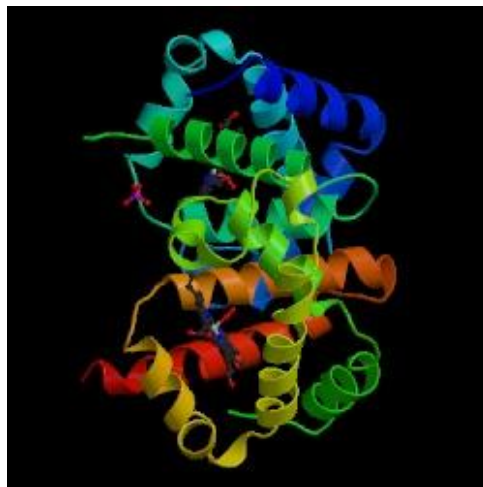
# X線結晶構造の単位

1つのASUが1つのBiological Unitに対応



ヘモグロビン1分子(4チェーン)に対応する2hhb

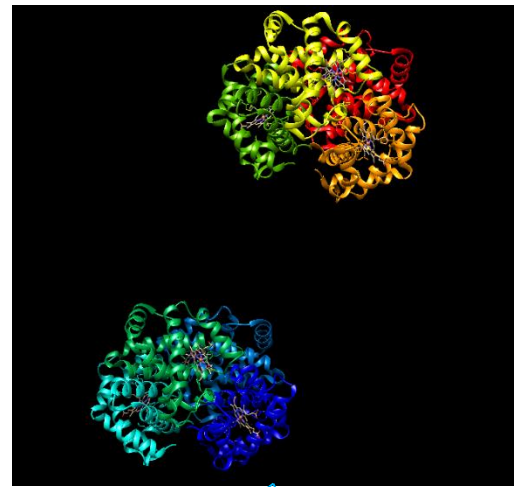
1つのASUがBiological Unitの一部に対応



ヘモグロビン分子の半分(2チェーン)に対応する1hho

2回対称軸によって、4チェーンからなるヘモグロビン分子が生成される

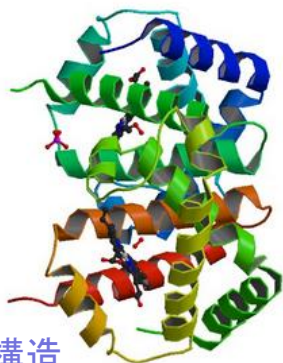
1つのASUが2つのBiological Unitに対応



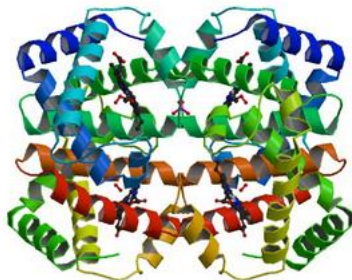
ヘモグロビン分子2つからなる1fl

2つの分子が異なるため、1つのASUに含まれる

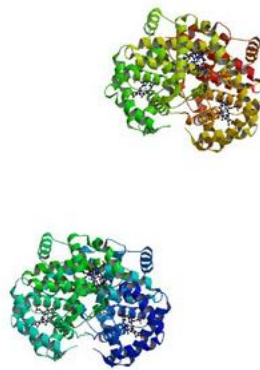
< Asymmetric Unit >



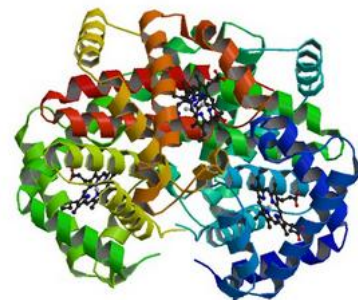
< Biological Assembly 1 ? >



< Asymmetric Unit >



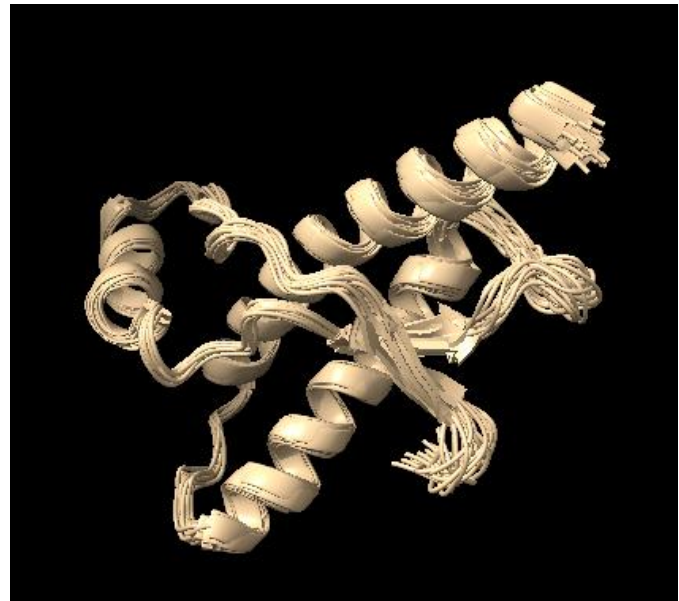
< Biological Assembly 1 ? >



# NMR

- **NMR（核磁気共鳴法, Nuclear Magnetic Resonance）**
- 溶液中の分子に磁場をかけ、原子核（主に $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ）が発する信号を解析して構造を決定
- 溶液NMRは溶液中の構造を解析する
- 一般に複数のモデル構造を含む
- 構造決定できるのは比較的小さなタンパク質

ヒトのプリオンタンパク質  
PDB ID: 1qlz



# 構造解析手法の比較

	X線結晶構造解析	NMR	電子顕微鏡
解析対象	結晶化できるサンプル	溶液が生成できるサンプル	解析時の氷包埋ができれば可能、サンプル調製が他と比較して容易
解析対象の大きさ	解析可能な分子量の幅は広い	分子量40～50 kDa	150 kDa～
精度の指標	分解能	複数構造のばらつき	分解能
利点	他と比べて精度が高い、成熟した技術、解析可能な分子量の幅は広い、他と比べてモデル構築が容易	溶液中の構造が得られる、動的構造の解析が可能	他と比べて、サンプル調整が容易、サンプル量が少なくてよい、天然状態に近い構造、巨大分子が解析可能
課題	結晶化、解析作業、微結晶の化合物は解析できない	試料の純度、計算による原子座標決め	装置のコスト、装置に依存した解析法
解析される状態	静的な結晶構造	溶液中の構造	天然状態に近い構造
水素原子	超高分解能でないと見えない	見える	X線よりも低い分解能でも見ることができる

# ChimeraXでタンパク質の構造を見る

The screenshot shows the ChimeraX application window. The 'File' menu is open, and the 'Fetch by ID...' option is highlighted with a red circle. A red text box with white text says: 「Fetch by ID」を選択  
その後で「PDB」

The main window displays two molecular models: '1QLZ' (a ribbon representation of a protein structure) and 'MolView.mol' (a ball-and-stick model of a molecule). The 'Log' panel on the right shows the following information:

© 2016-2023 Regents of the University of California. All rights reserved.  
[How to cite UCSF ChimeraX](#)

[open](#) 1QLZ from Database pdb format mmCIF

Summary of feedback from opening 1QLZ fetched from pdb

note	Fetching compressed mmCIF 1qlz from <a href="http://files.rcsb.org/download/1qlz.cif">http://files.rcsb.org/download/1qlz.cif</a>
------	--

1qlz title:  
Human prion protein [\[more info...\]](#)

Chain information for 1qlz		
Chain	Description	UniProt
<a href="#">1.1/A</a> <a href="#">1.2/A</a> <a href="#">1.3/A</a> <a href="#">1.4/A</a> <a href="#">1.5/A</a> <a href="#">1.6/A</a> <a href="#">1.7/A</a> <a href="#">1.8/A</a> <a href="#">1.9/A</a> <a href="#">1.10/A</a> <a href="#">1.11/A</a> <a href="#">1.12/A</a> <a href="#">1.13/A</a> <a href="#">1.14/A</a> <a href="#">1.15/A</a> <a href="#">1.16/A</a> <a href="#">1.17/A</a> <a href="#">1.18/A</a> <a href="#">1.19/A</a> <a href="#">1.20/A</a>	<a href="#">PRION PROTEIN</a>	<a href="#">PRIO_HUMAN</a> <a href="#">23-230</a>

[close session](#)

Models

Name	ID	View

Command: [undo label](#)

# ChimeraXでタンパク質の構造を見る

ChimeraX

File Edit Select Actions Tools Favorites Presets Help

Home Molecule Display Nucleotides Graphics Map Medical Image Markers Right Mouse

Open Recent Save Snapshot Spin movie Show Hide Show Hide Stick Sphere Ball White Black Simple Soft Full Inspect

File Images Atoms Cartoons

1QLZ MolView.mol

Fetch By ID

Choose database:

Database	Example IDs
AlphaFold	p29474
EDS (2Fo-Fc)	1a0m
EDS (Fo-Fc)	1a0m
EMDB	5625
EMDB & fit PDBs	1048
ESMFold	MGYP000542242899
IUPAC	acetic acid
<b>PDB</b>	2GBP
PDB (biounit)	6ts0
PDB Chemical Component	FMN
PubChem	12123
SMILES	c1ccccc1
UniProt	P01138 NGF_HUMAN

Enter PDB ID: 4HHB

☐ Ignore cached fetches

**Fetch** Close Help

「4HHB」と入力

of the University of California. All rights reserved.  
neraX

base pdb format mmCIF

feedback from opening 1QLZ fetched from pdb

ssed mmCIF 1qlz from  
rg/download/1qlz.cif

[more info...]

Chain information for 1qlz

Chain	Description	UniProt
4/A 1.5/A 1.6/A 1.7/A 1.11/A 1.12/A 1.13/A 1.17/A 1.18/A 1.19/A 0/A	PRION PROTEIN	PRIO_HUMAN 23-230

# ChimeraXでタンパク質の構造を見る

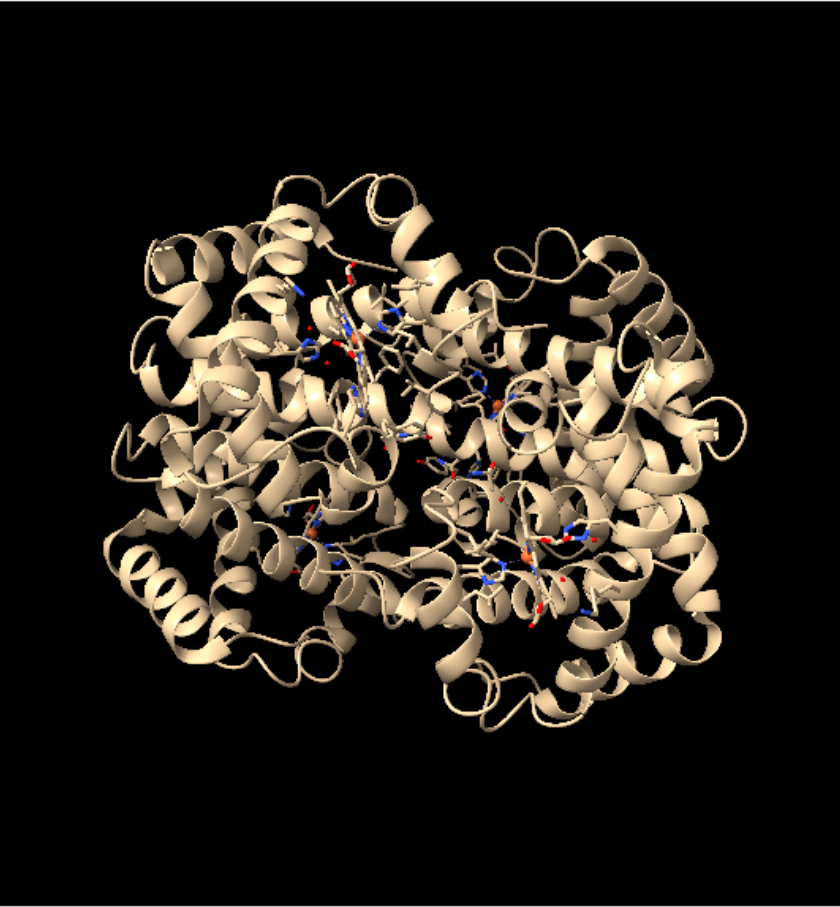
ChimeraX

File Edit Select Actions Tools Favorites Presets Help

Home Molecule Display Nucleotides Graphics Map Medical Image Markers Right Mouse

Open Recent Save Snapshot Spin movie Show Hide Show Hide Stick Sphere Ball stick White Black Simple Soft Full Inspect

File Images Atoms Cartoons Styles Background Lighting Selection



Log

Summary of feedback from opening 4HHB fetched from pdb

*note* Fetching compressed mmCIF 4hhb from <http://files.rcsb.org/download/4hhb.cif>

4hhb title:  
The crystal structure of human deoxyhaemoglobin At 1.74 angstroms resolution [\[more info...\]](#)

Chain information for 4hhb #1

Chain	Description	UniProt
<a href="#">A C</a>	<a href="#">Hemoglobin subunit alpha</a>	<a href="#">HBA_HUMAN 1-141</a>
<a href="#">B D</a>	<a href="#">Hemoglobin subunit beta</a>	<a href="#">HBB_HUMAN 1-146</a>

Non-standard residues in 4hhb #1

[HEM](#) — [protoporphyrin IX containing Fe](#) (HEME)  
[PO4](#) — [phosphate ion](#)

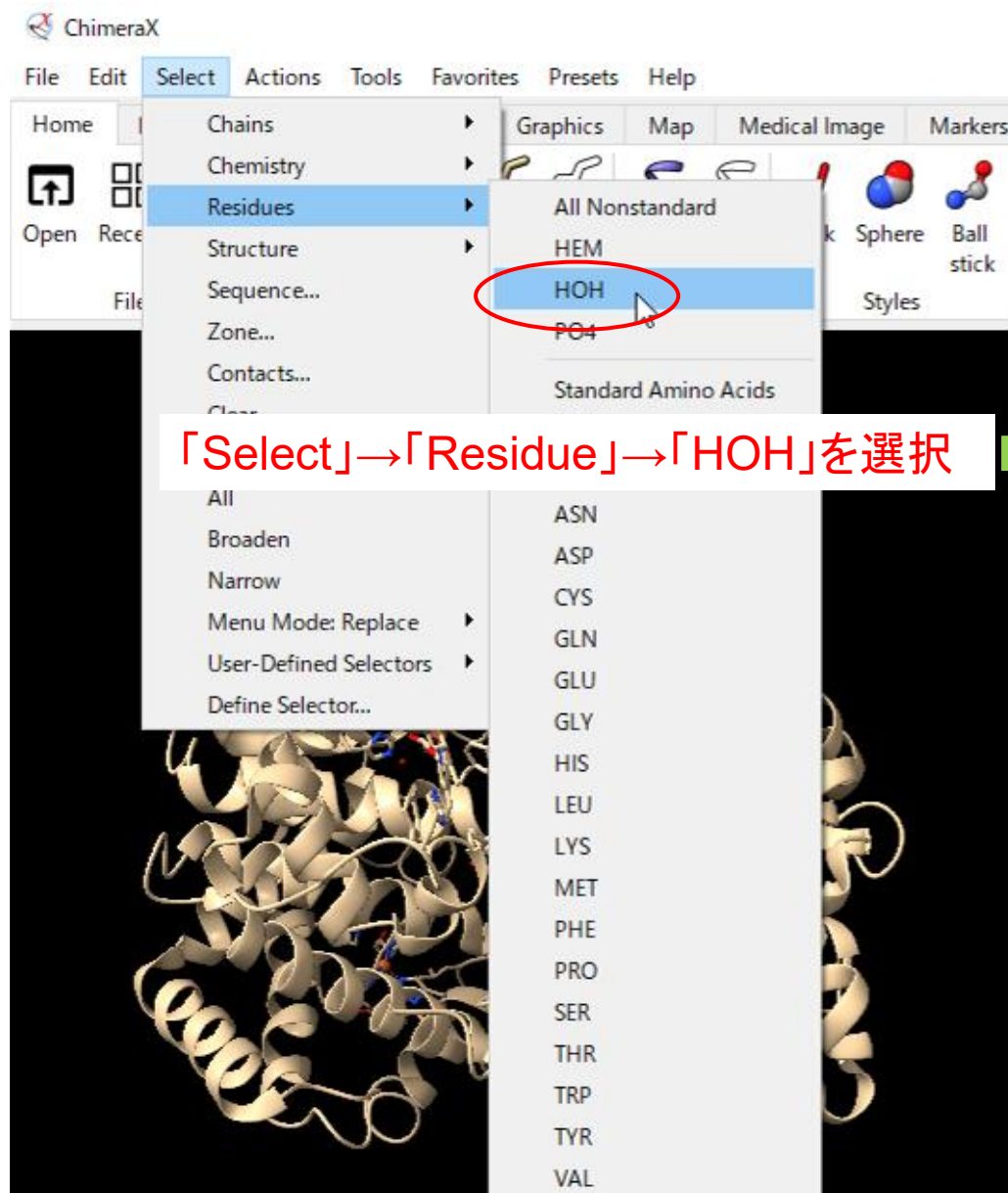
Models

Name	ID			
> 4hhb	1		<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

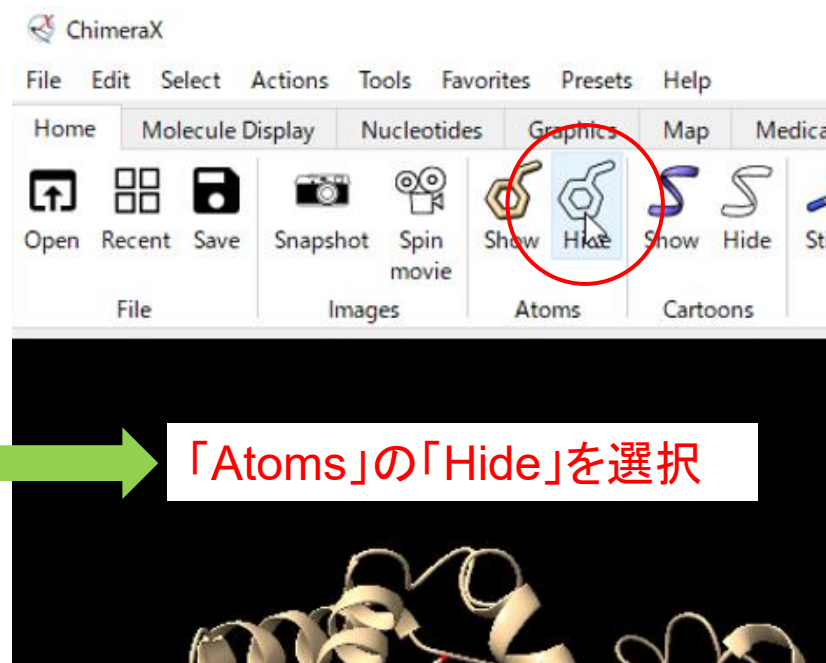
Close  
Hide  
Show  
View  
< >

Command:

# 指定した原子と一定の距離内にある原子を表示



「Select」→「Residue」→「HOH」を選択



「Atoms」の「Hide」を選択

結晶水: 結晶構造に登録されている水分子、特定の位置に規則的に配置されることで、X線回折から電子密度として観測・モデル化される水分子

結晶水は構造や機能に重要な場合もあるが、ここでは主にタンパク質主鎖・全体構造の理解を目的とするため、一旦削除する

# 指定した原子と一定の距離内にある原子を表示

The image illustrates the process of selecting a specific residue in ChimeraX and visualizing atoms within a certain distance. The left panel shows the ChimeraX interface with the 'Select' menu open, highlighting 'Residues' and 'HEM'. A red circle highlights the 'HEM' option. A green arrow points from the 'HEM' selection to the right panel, which shows the protein structure with the selected residue highlighted in green and its atoms in blue and red.

ChimeraX

File Edit **Select** Actions Tools Favorites Presets Help

Home Open Recent

Chains  
Chemistry  
**Residues**  
Structure  
Sequence...  
Zone...  
Contacts...  
Clear  
Invert  
All  
Broaden  
Narrow  
Menu Mode: Replace  
User-Defined Selectors  
Define Selector...

Graphics Map Medical Image Markers

All Nonstandard  
**HEM**  
HCA  
PO4

Standard Amino Acids

ALA  
ARG  
ASN  
ASP  
CYS  
GLN  
GLU  
GLY  
HIS  
LEU  
LYS  
MET  
PHE  
PRO  
SER  
THR  
TRP  
TYR  
VAL

「Select」→「Residue」→「HEM」を選択

タンパク質の構造

# 指定した原子と一定の距離内にある原子を表示

The image shows the ChimeraX software interface. The 'Select' menu is open, and the 'Zone' option is highlighted with a red circle. A green arrow points from 'Zone' to the 'Select Zone' dialog box. In the dialog box, the 'Select' dropdown is set to 'atoms', and the distance is set to 5.000 Å. The 'OK' button is also highlighted with a red circle. A green arrow points from the 'OK' button to the resulting protein structure visualization. The visualization shows a protein structure with a central region highlighted in green, representing the atoms within the specified distance of the selected atoms.

ChimeraX

File Edit **Select** Actions Tools Favorites Presets Help

Home Open Recent

Chains  
Chemistry  
Residues  
Structure  
Sequence...  
**Zone**  
Contacts...  
Clear  
Invert  
All  
Broaden  
Narrow  
Menu Mode: Replace  
User-Defined Selectors  
Define Selector...

Graphics Map Medical Image Markers

Show Hide Show Hide Stick Sphere Ball stick

Select Zone

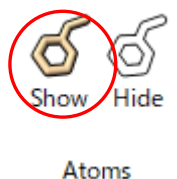
Select atoms :  
< 5.000 Å from the currently selected atoms  
[ ] > 5.000 Å from the currently selected atoms  
☐ Also deselect current selection

OK Close Apply Help

タンパク質の構造

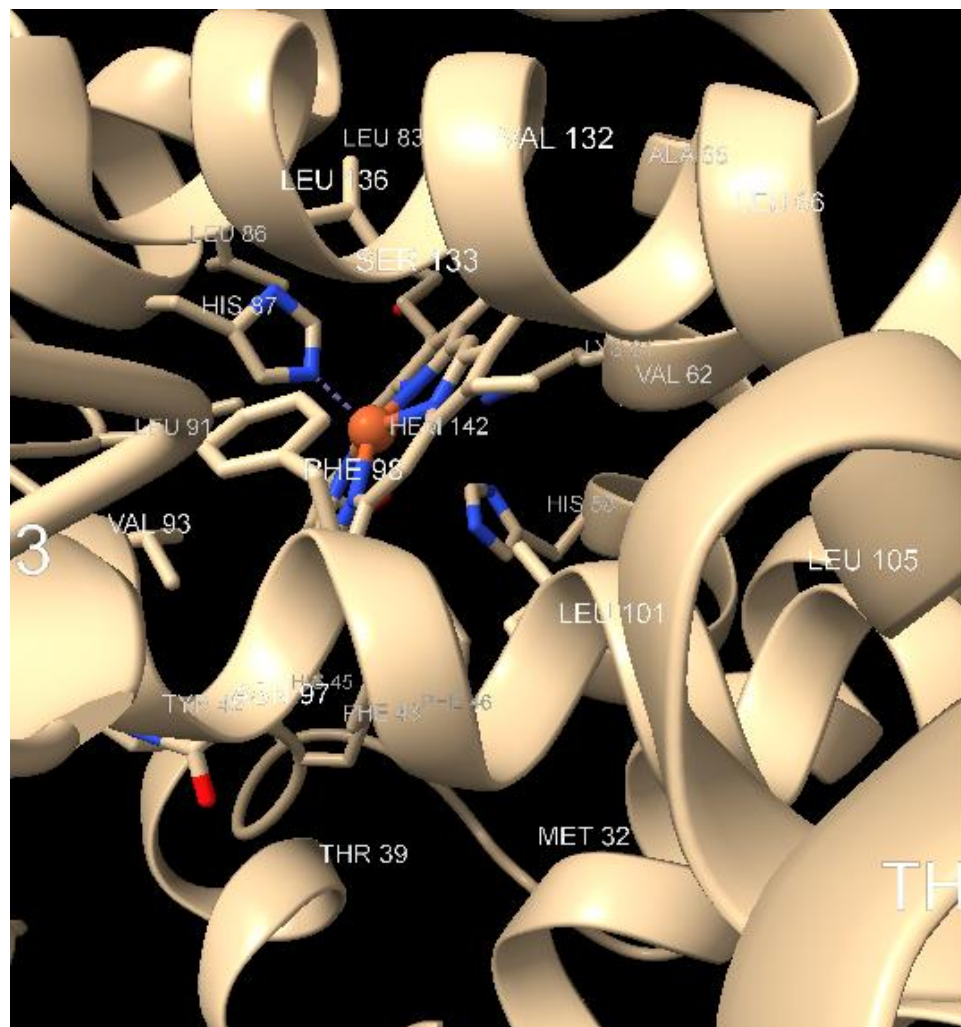
# 指定した原子と一定の距離内にある原子を表示

「Atoms」の「Show」を選択して、ヘムに  
近接するアミノ酸残基を表示する



「Actions」→「Label」→「Residues」→  
「Name and Number」を選択  
アミノ酸残基の番号とアミノ酸名(3文字表  
記)を表示

適当に拡大、移動をしてヘムの周辺を表  
示してみよう



# ChimeraXのマウス操作

操作	マウス操作	備考
回転	左ボタン + ドラッグ	画面内で回転
拡大縮小	ホイールスクロール	ズームイン/アウト
平行移動	中ボタン + ドラッグ	パン(移動)
回転中心変更	Ctrl + Shift + 左ボタン	任意の場所を中心に設定

# 表示領域の調整

The image shows the ChimeraX software interface. The main window displays a 3D molecular model of a protein structure, with various amino acid residues labeled (e.g., GLY 42, THR 41, GLY 69, HYP 68, THR 11, LEU 10, GLY 9, GLY 86, PRO 37, GLY 30, HYP 35, HYP 8, HYP 65, PRO 64, GLY 6, HYP 5, GLY 63, GLY 33, PRO 34, PRO 61, HYP 62, PRO 31, HYP 2, GLY 3). The interface includes a menu bar (File, Edit, Select, Actions, Tools, Favorites, Presets, Help) and a toolbar with tabs for Home, Molecule Display, Nucleotides, Graphics, Map, Medical Image, Markers, and Right Mouse. The Graphics tab is selected, and the 'Side view' button is highlighted with a red circle. The 'View selected' and 'View all' buttons are also highlighted with red circles. A red text overlay on the right side of the interface reads: 「Graphics」→「Side view」を選択 さらに、「View selected」、「View all」で、それぞれ、現在、選択されている部分、全体が表示される. The bottom right panel shows the 'Side View' window with a 3D model of the protein structure. The 'clip' section at the bottom has checkboxes for 'near' and 'far'.

ChimeraX

File Edit Select Actions Tools Favorites Presets Help

Home Molecule Display Nucleotides Graphics Map Medical Image Markers Right Mouse

White Gray Black Background

Simple Soft Full Flat Shadow Silhouettes

Lighting & Effects

Side view View selected View all

Camera

Models

Name

> 1bkv

1

Close Hide Show View Info

Side View

clip: ☐ near ☐ far

Command:

# アミノ酸配列の表示

- アミノ酸配列を表示し、構造と対応づけることができる

The image illustrates the steps to display the amino acid sequence in ChimeraX. It shows the main interface with a protein structure, the 'Tools' menu, and the 'Show Chain Sequence' dialog box.

**Tools Menu Path:**

- Tools
- Sequence
- Show Sequence Viewer

**Show Chain Sequence Dialog:**

- Chain: /A: AMYLASE
- ☒ Group identical sequences
- Show

**Sequence Viewer:**

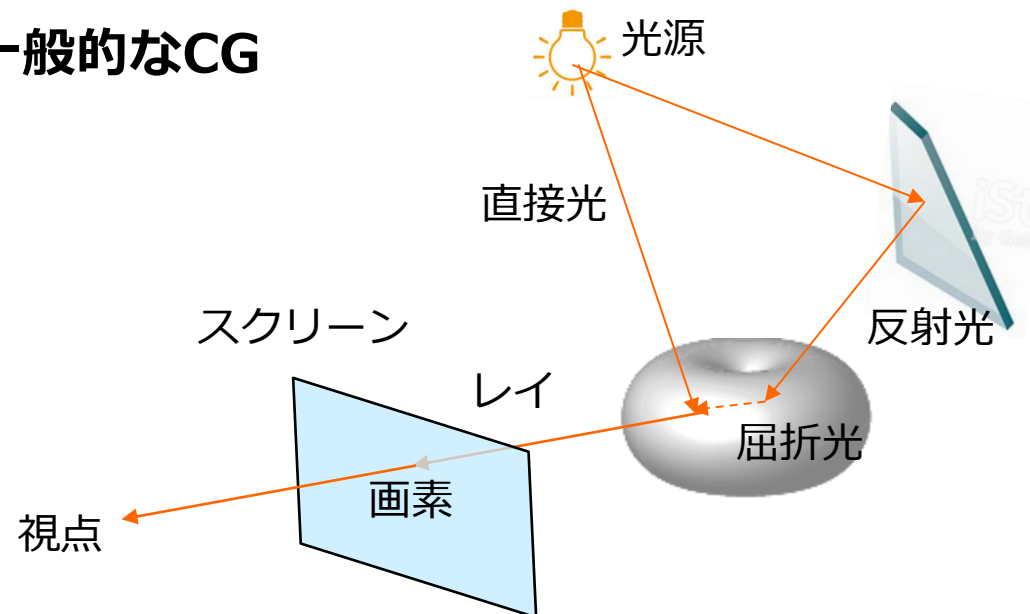
AMYLASe (1smd (F1) Chain A) [ID: 1/A]

chain A	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27				
chain A	1	X	Y	S	S	N	T	Q	Q	G	R	T	S	I	V	H	L	F	E	W	R	W	V	D	I	A	L	E	C	E	R
chain A	31	Y	L	A	P	K	G	F	G	G	V	Q	S	P	P	N	E	N	V	A	I	H	N	P	F	R	P	W	E		
chain A	61	R	Y	Q	P	V	S	Y	K	L	C	T	R	S	G	N	E	D	E	F	R	N	M	V	T	R	C	N	N	V	G
chain A	91	V	R	I	Y	D	A	V	I	N	H	M	C	G	N	A	V	S	A	G	T	S	S	T	C	G	S	Y	F	N	
chain A	121	P	G	S	R	D	F	P	A	V	P	Y	S	G	W	D	I	N	D	G	K	C	K	T	G	S	G	D	I	E	N
chain A	151	Y	N	D	A	T	O	V	R	D	C	R	L	S	G	L	L	D	L	A	L	G	K	D	Y	V	R	S	K	I	A
chain A	181	E	Y	M	N	H	L	I	D	I	G	V	A	G	F	R	I	D	A	S	K	H	M	W	P	G	D	I	K	A	I
chain A	211	L	D	K	L	H	N	L	N	S	N	W	F	P	E	G	S	K	P	F	I	Y	Q	E	V	I	D	L	G	E	
chain A	241	P	I	K	S	S	D	Y	F	G	N	G	R	V	T	E	F	K	Y	G	A	K	L	G	T	V	I	R	K	W	N
chain A	271	G	E	K	M	S	Y	L	K	N	W	G	E	G	W	G	F	M	P	S	D	R	A	L	V	F	V	D	N	H	D

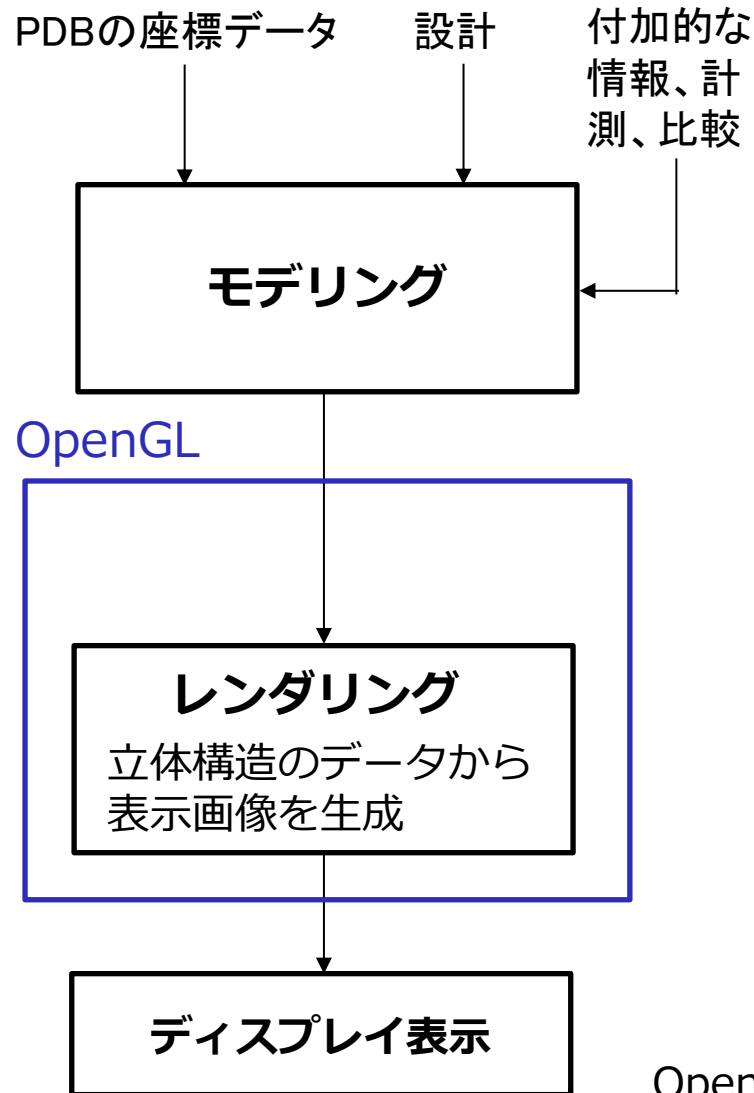
# 分子グラフィックス

- 一般のコンピュータグラフィックス（CG）と分子グラフィックスの違い
  - － 物体は分子構造（座標データ）に限られる
  - － その立体構造や相互作用を理解することが目的 → 光源は簡略化
    - 全体を一様に明るくする
    - 拡散反射 → 表面の向きによって明るさが変わる、凸凹を強調
    - 鏡面反射 → つや、立体感を出す
  - － 構造を強調するための非物理的な表現 → 分子特有の表現

## 一般的なCG



# 分子グラフィックスの技術



ボールアンドスティック、リボン、分子表面など

色分け

- CPK (Corey, Pauling, Koltin) 配色 (color scheme)
  - 炭素 (灰色)、酸素 (赤)、窒素 (青)、硫黄 (黄)、...
  - wire frame や sticks では、結合の一部も着色
- タンパク質のチェーン
- 二次構造 ( $\alpha$ ヘリックス、 $\beta$ シート、その他)
- 残基種
- 温度因子、疎水性、N末→C末のレインボー表示など
  - 選択可能なものがある

付加的な情報

- 水素結合、ジスルフィド結合、疎水性相互作用など
- 生体膜
- 静電ポテンシャル

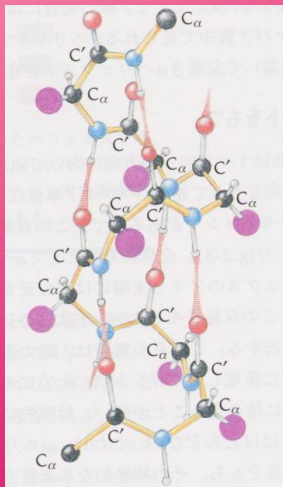
OpenGL: さまざまな機種ハードウェア、OSなどに対応した標準規格のグラフィックスライブラリ (GL)

# タンパク質の二次構造

## タンパク質の二次構造

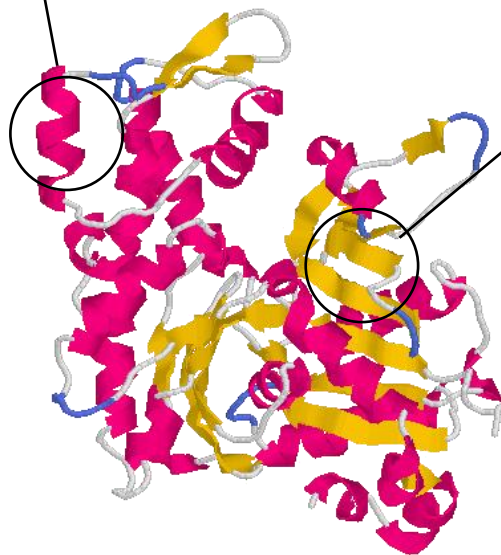
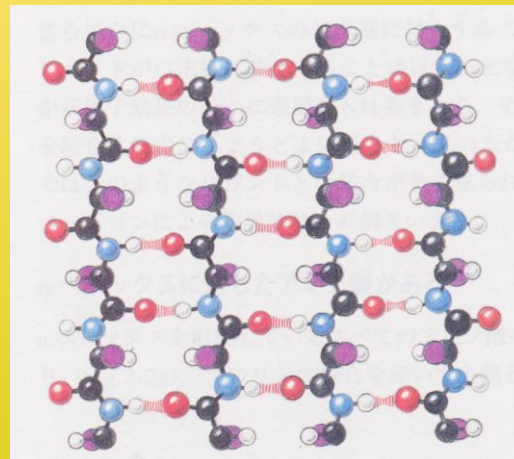
### $\alpha$ ヘリックス

アミノ酸の鎖が規則正しくらせん状に巻いた構造



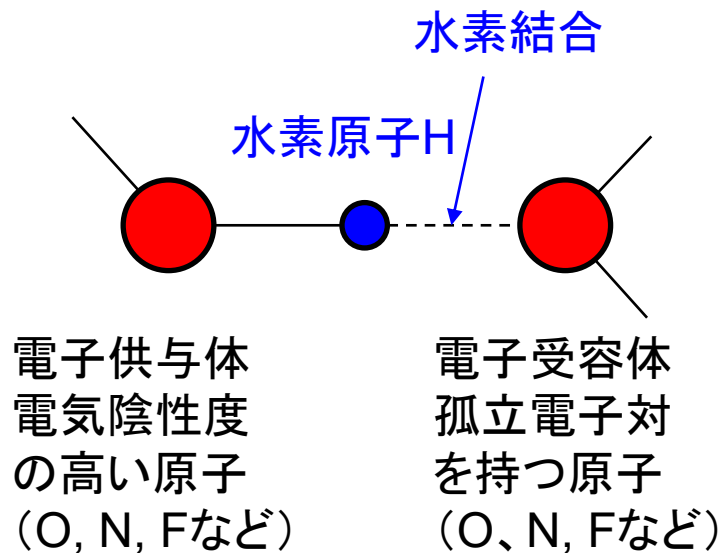
### $\beta$ シート

2本の伸びた状態のアミノ酸の鎖が平行に並んだ構造



# 水素結合

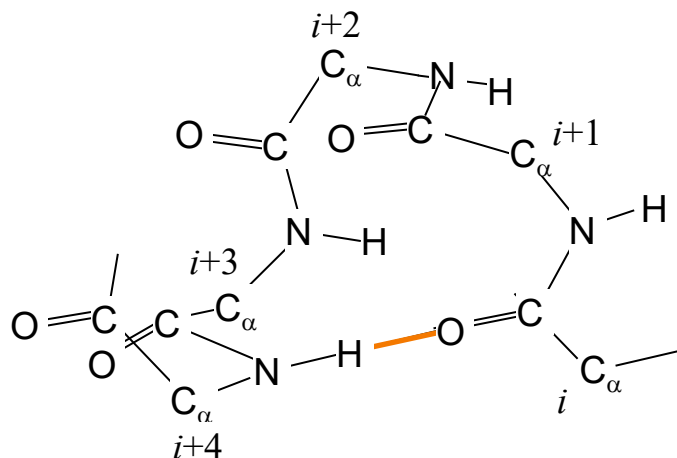
- **水素結合**: 電気陰性度の大きい原子 (O, N, F) に共有結合した 水素原子 (H) が別の分子のO, N, Fと弱く引き合う相互作用
  - 共有結合より弱い、ファンデルワールス力より強い



- 水分子 ( $\text{H}_2\text{O}$ ) どうしの結合
- DNA の塩基対 ( $\text{A}=\text{T}$ ,  $\text{G}\equiv\text{C}$ )
- タンパク質の $\alpha$ ヘリックス・ $\beta$ シートの形成

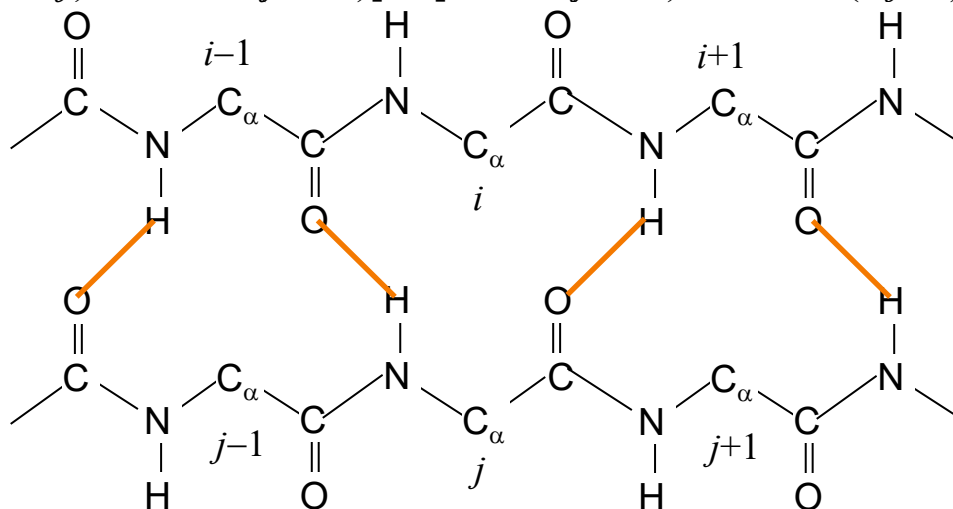
# 水素結合のパターン

$$4\text{-turn}(i) = \text{Hbond}(i, i+4)$$



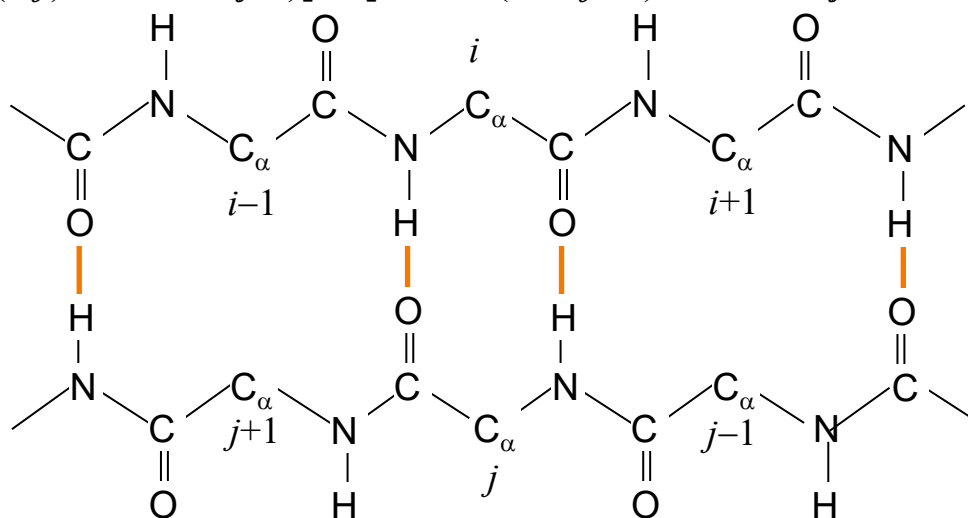
parallel bridge( $i, j$ )

$$= [\text{Hbond}(i-1, j) \wedge \text{Hbond}(j, i+1)] \vee [\text{Hbond}(j-1, i) \wedge \text{Hbond}(i, j+1)]$$



antiparallel bridge( $i, j$ )

$$= [\text{Hbond}(i, j) \wedge \text{Hbond}(j, i)] \vee [\text{Hbond}(i-1, j+1) \wedge \text{Hbond}(j-1, i+1)]$$



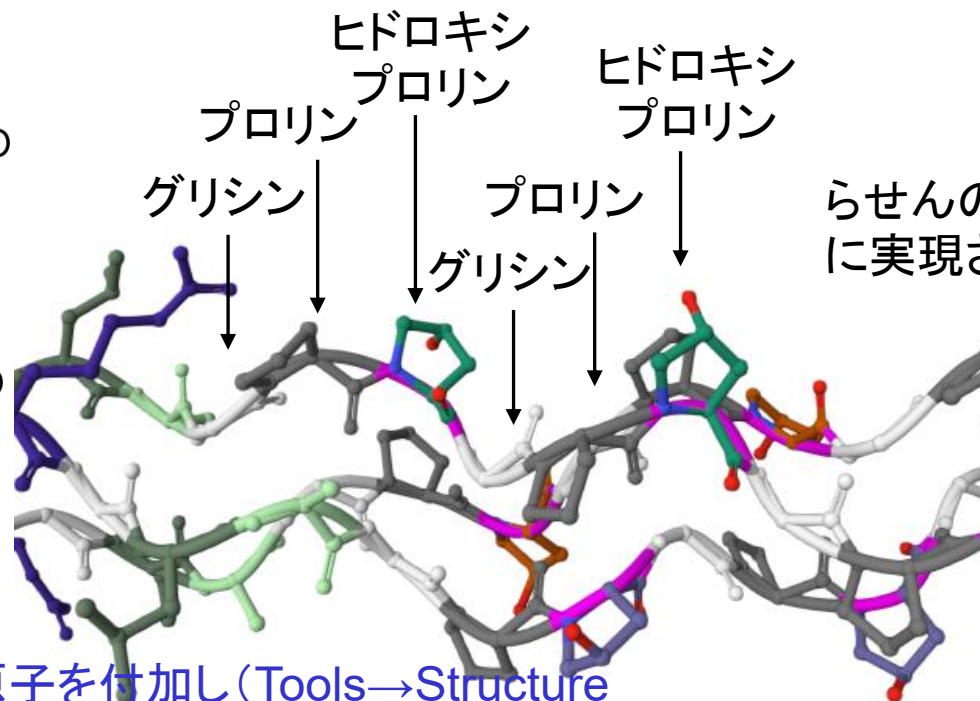
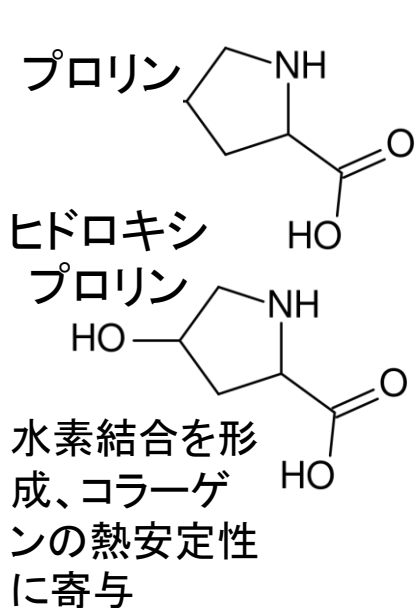
分子グラフィックスでは、  
こうした水素結合のパ  
ターンを定義し、リボン  
表示などに利用している

# コラーゲン

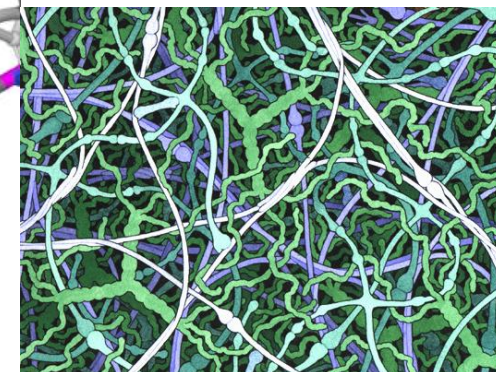
コラーゲン PDB ID: **1BKV**

皮膚や腱・軟骨などを構成する繊維状のタンパク質で、人体のタンパク質全体の約30%を占める

Gly-Pro-Hypモチーフの繰り返し



らせんの屈曲がどのように実現されているか



Chimeraで水素原子を付加し(Tools→Structure Editing→Add Hydrogens)、水素結合を表示させてみよう(Tools→ Structure Analysis→H-bonds)

[PDB-101](#)

# アミラーゼ

## αアミラーゼ PDB ID: 1SMD 糖鎖やデンプンを分解する酵素

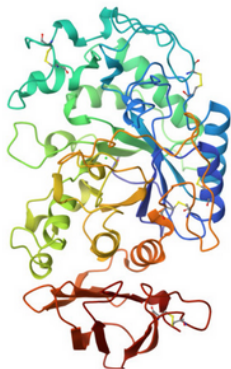
RCSB PDBDepositSearchVisualizeAnalyzeDownloadLearnAboutCareersCOVID-19HelpContact usMyPDB

Models (CSM)Advanced Search | Browse AnnotationsHelp

PDB-101PDBEMDataResourceNAKBwwPDB FoundationPDB-Dev

Structure SummaryStructureAnnotationsExperimentSequenceGenomeVersions

Biological Assembly 1 ?



Explore in 3D: Structure | Sequence Annotations | Electron Density | Validation Report | Ligand Interaction (CA)

Global Symmetry: Asymmetric - C1 ⓘ  
Global Stoichiometry: Monomer - A1 ⓘ

Find Similar Assemblies

Biological assembly 1 assigned by authors.

Macromolecule Content

1SMD

HUMAN SALIVARY AMYLASE

PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb1SMD/pdb>

Classification: **HYDROLASE (O-GLYCOSYL)**

Organism(s): *Homo sapiens*

Mutation(s): No ⓘ

Deposited: 1996-01-24 Released: 1996-07-11





Deposition Author(s): Ramasubbu, N.

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION  
Resolution: 1.60 Å  
R-Value Work: 0.184

wwPDB Validation ⓘ

3D ReportFull Report

Metric	Percentile Ranks	Value
Clashscore		7
Ramachandran outliers		0.6%
Sidechain outliers		2.4%
RSRZ outliers		0.6%

Worse

Better

■ Percentile relative to all X-ray structures

■ Percentile relative to X-ray structures of similar resolution

This is version 2.1 of the entry. See complete [history](#).

Literature

Download Primary Citation ▾

下の方を見ると...

Structure of human salivary alpha-amylase at 1.6 Å resolution: implications for its role in the

# アミラーゼ

UniProt & NIH Common Fund Data Resources

Find proteins for [P0DUB6](#) (*Homo sapiens*) Explore [P0DUB6](#) Go to UniProtKB: [P0DUB6](#)

GTEx: [ENSG00000237763](#)

Entity Groups ⓘ

Sequence Clusters 30% Identity 50% Identity 70% Identity 90% Identity 95% Identity 100% Identity

UniProt Group [P0DUB6](#)

Sequence Annotations Expand

Reference Sequence 1SMD\_1

配列データベースUniProtKBのIDは「P0DUB6」



「P0DUB6」のリンクをクリックすると、配列上の重要な位置と、この配列の他のPDB構造が表示される  
ここでは、UniProtデータベースの[P0DUB6のページ](#)にアクセス

## Function

## Names & Taxonomy

### Subcellular Location

## Disease & Variants

## PTM/Processing

### Expression

## Interaction

## Structure

## Family & Domains

## Sequence

### Similar Proteins

📄 P0DUB6 · AMY1A\_HUMAN

Protein <sup>i</sup>	Alpha-amylase 1A
Protein <sup>i</sup>	Alpha-amylase 1A

**Amino acids** | [511 \(go to sequence\)](#)

Gene<sup>i</sup> | AMY1A

Protein existence <sup>i</sup>	Evidence at protein level
Confirmed	1
Probable	2
Truncated	3
Fragment	4
Not confirmed	5
Not identified	6

**Status<sup>i</sup>**  UniProtKB reviewed (Swiss-Prot)

Annotation score<sup>i</sup> | 5/5Organism<sup>i</sup> | Homo sapiens (Human)

[Entry](#)
[Variant viewer](#)
[160](#)
[Feature viewer](#)
[Genomic coordinates](#)
[Publications](#)
[External links](#)
[History](#)

Tools ▾ Download Add Add a publication Entry feedback

## Function<sup>i</sup>

Calcium-binding enzyme that initiates starch digestion in the oral cavity (PubMed:12527308).

Catalyzes the hydrolysis of internal (1->4)-alpha-D-glucosidic bonds, yielding a mixture of maltose, isomaltose, small amounts of glucose as well as small linear and branched oligosaccharides called dextrins (PubMed:[12527308](#)).  1 Publication

**⚠ Caution**

Three distinct genes (AMY1A, AMY1B and AMY1C), located in a gene cluster on 1p21, encode proteins sharing the same peptidic sequence.  Curated

### Catalytic activity<sup>i</sup>

Endohydrolysis of (1->4)-alpha-D-glucosidic linkages in polysaccharides containing three or more (1->4)-alpha-linked D-glucose units.

1 Publication

EC:3.2.1.1 ([UniProtKB](#) | [ENZYME](#) | [Rhea](#) )

### Cofactor<sup>i</sup>

Protein has several cofactor binding sites

下の方を見ると...

UniProt BLAST Align Peptide search ID mapping SPARQL UniProtKB Advanced | List Search

Function Names & Taxonomy Subcellular Location Disease & Variants PTM/Processing Expression Interaction Structure Family & Domains Sequence Similar Proteins

Entry Variant viewer 160 Feature viewer Genomic coordinates Publications External links History

Features  
Showing features for binding site<sup>i</sup>, active site<sup>i</sup>, site<sup>i</sup>.

1 50 100 150 200 250 300 350 400 450 500 511

TYPE ID POSITION(S) DESCRIPTION

-- Select --

▶ Binding site	115	Ca <sup>2+</sup> (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Binding site	173	Ca <sup>2+</sup> (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Binding site	182	Ca <sup>2+</sup> (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Binding site	210	chloride (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Active site	212	Nucleophile	
▶ Binding site	216	Ca <sup>2+</sup> (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Active site	248	Proton donor	
▶ Binding site	313	chloride (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources
▶ Site	315	Transition state stabilizer	By Similarity
▶ Binding site	352	chloride (UniProtKB   ChEBI)	2 Publications Combined Sources

GO annotations<sup>i</sup>  
Access the complete set of GO annotations on QuickGO

Expand table

Feedback Help

https://www.uniprot.org

- Asp212(197): 基質のグリコシド結合を攻撃する求核剤として作用 → 糖どうしの結合を切る
- Glu248(233): プロトン供与体として、加水分解反応を促進 → 結合を切るのに必要な水を活性化
- Asp315(300): 遷移状態を安定化させ、反応の効率を高める → 上記の反応は本来不安定だが、これを安定化

# アミラーゼ

ChimeraX

File Edit Select Actions Tools Favorites Presets Help

Home Molecule Display Nucleotides Graphics Map Medical Image Markers Right Mouse

Open Recent Save Snapshot Spin movie Show Hide Show Hide Stick Sphere Ball stick White Black Simple Soft Full Inspect

File Images Atoms Cartoons Styles Background Lighting Selection

Models

Name ID 1smd 1

AMYLAZE (1smd (#1) Chain A) [ID: 1/A]

chain A 1 XYSSNTQQGR T SIVHL FEWR VVDIALE CER  
chain A 31 YLAPKGF GGVQS PPNENVA IHNPFRPWWE  
chain A 61 RYQPVS YKLCTRSGN EDEFNMVTRC NNVG  
chain A 91 VRIYVDAVIN HMC GNAVS AGTSSSTCGSYFN  
chain A 121 PGS RDFPAVPYS GWD FNDG KCKTGSGDIEN  
chain A 151 YNDATQVRDCR LSGLLD LALGKDYVRSKIA  
chain A 181 EYMNHLIDIGVAGFRIDASKHMPGDIKAI  
chain A 211 LDKLHNLNSNWFPEGSKPFIYQEVIDLGGE  
chain A 241 PIKSSDYFGNGRVT EFKYGA LGLTVIRKWN  
chain A 271 GEKMSY LKNWGEGWGFMP SDRALVFVDNHD

阻害剤アセタロアミド (PCA)

アミラーゼの活性部位には、デンプンやグリコーゲンなどの多糖類が結合し、これらの加水分解が行われ、マルトースやグルコースなどの小さな糖に分解されるアセタロアミドは、アミラーゼの活性を阻害する類似した化合物が、糖尿病治療薬(α-グルコシダーゼ阻害剤)やダイエット補助食品として研究されている

# トリプシン

- ウシのトリプシン PDB ID: 2PTC

- 主に膵臓から分泌される消化酵素
- 小腸内で活性化され、食物中のタンパク質をペプチドやアミノ酸に分解する



トリプシンイン  
ヒビター

トリプシン

- トリプシンは膵臓内で非活性型のトリプシノーゲンとして合成され、この段階では酵素活性を持たないため、臓器の自己消化を防いでいる
- さらに、万が一トリプシンが膵臓内で活性化された場合でも、膵臓トリプシンインヒビター（PTI）がトリプシンに結合してその活性を抑制し、自己消化を防ぐ仕組みが働いている

# トロンビンの阻害剤

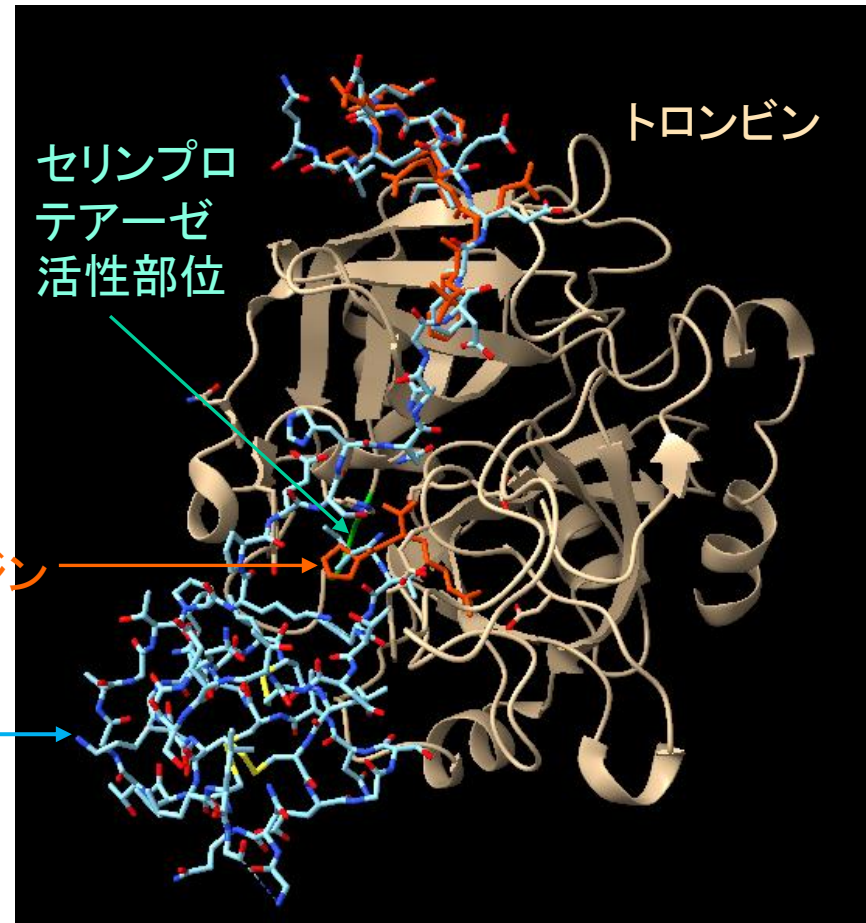
## • トロンビンとヒルログ

- ヒルログは、ヒルがもつ天然タンパク質ヒルジン由来の阻害剤
- 血液凝固で中心的な役割を果たすトロンビンの働きを抑制する抗血液凝固剤（抗血栓薬）として用いられる

阻害剤ビバリルジン

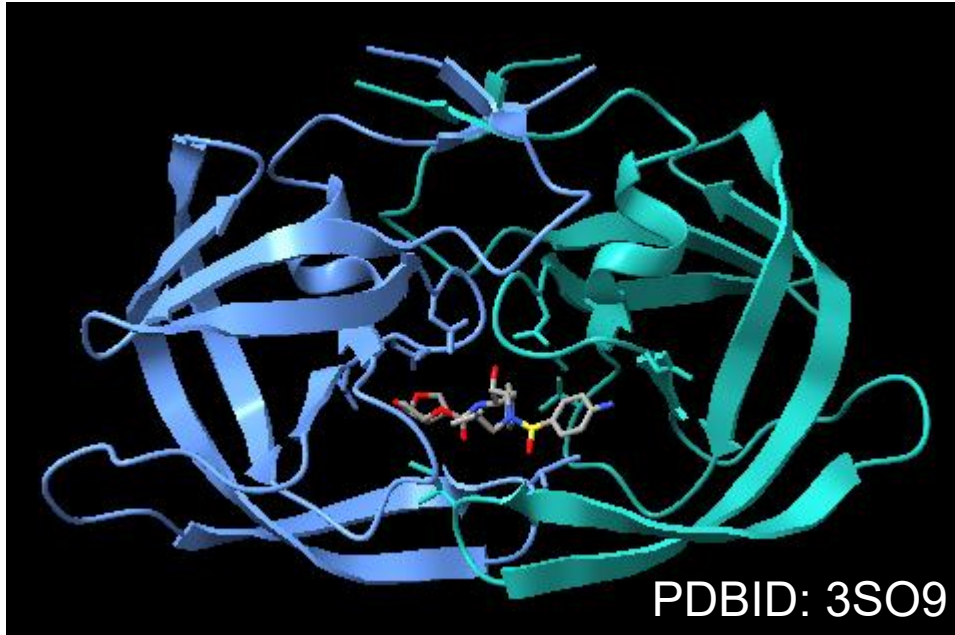
ヒルジン

4HTCと3VXEの重ね合わせ



# HIVプロテアーゼ

- HIV-1 プロテアーゼと抗HIV薬ダルナビル（Darunavir）の複合体構造

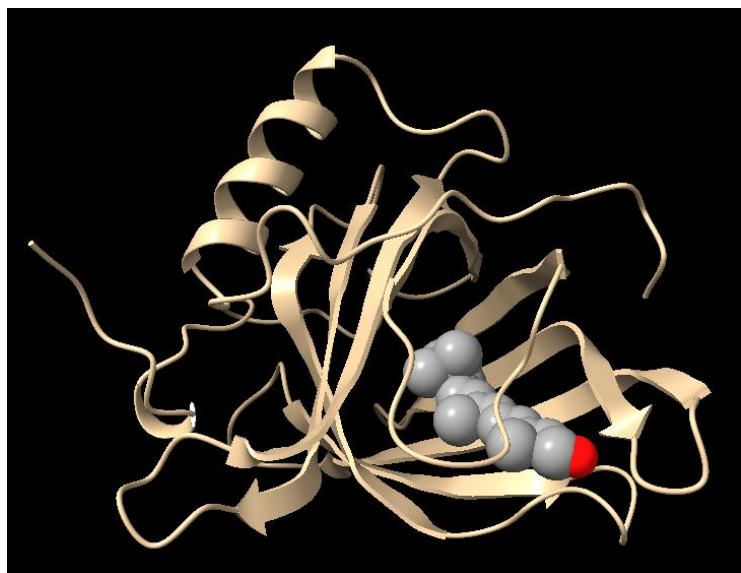


HIV-1プロテアーゼは、ウイルスのポリプロテインを特定の位置で切断し、ウイルスの成熟および増殖に必要な機能性タンパク質を生成する酵素

プロテアーゼ分子の中央に形成された活性部位のくぼみにダルナビルが結合。ダルナビルは、この活性部位に結合することで、ポリプロテインの切断反応を阻害し、ウイルスの成熟を停止させる。この阻害剤は、基質となるタンパク質の切断部位や反応の遷移状態を模倣した構造を持つペプチドミメティック阻害剤として設計されている。ダルナビルは、酵素の活性部位には強く結合する一方で、実際には切断されない安定な化学構造を持つため、プロテアーゼの触媒反応を効果的に阻害する。さらに、ダルナビルは活性部位周辺の複数の残基と広範な水素結合ネットワークを形成することで、変異を持つHIV-1プロテアーゼに対しても阻害活性を維持しやすいという特徴を持つ。ダルナビルは、HIV-1プロテアーゼの立体構造と反応機構に基づいて合理的に設計された。

# 輸送タンパク質の例

## レチノール結合タンパク質 (RBP)



1RBP

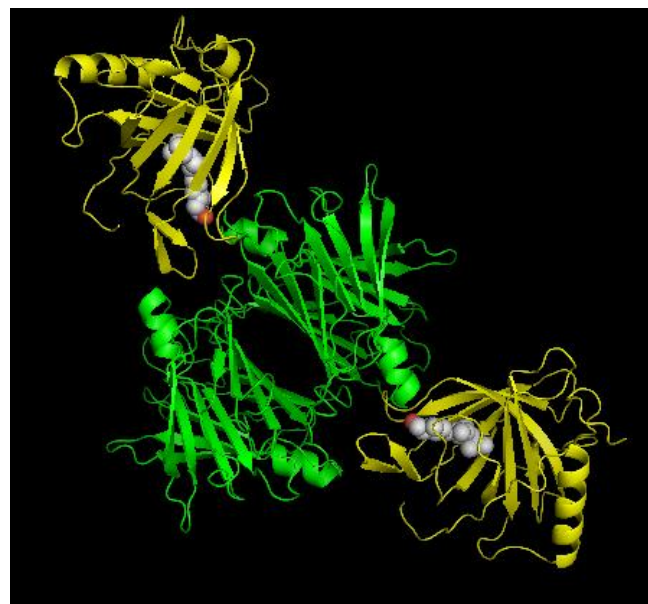
レチノール=ビタミンA (不溶性)

βシートが筒状に閉じたβバレル構造の典型的な例

ストランドの数によって、バレルの大きさが変化し、その内腔の大きさによって、中に入るリガンドが異なる

レチノール → レチナールに変換され、ロドプシンの構成成分として暗所視に必須

## RBPとトランスサイレチン (TTR) の複合体



1RLB

RBPは、別な輸送タンパク質TTRと複合体を形成し、レチノール輸送の補助

TTRは、不溶性の甲状腺ホルモン、チロキシンを運ぶ

# PDBの構造を分子グラフィックスで見てみよう

## カルモジュリン

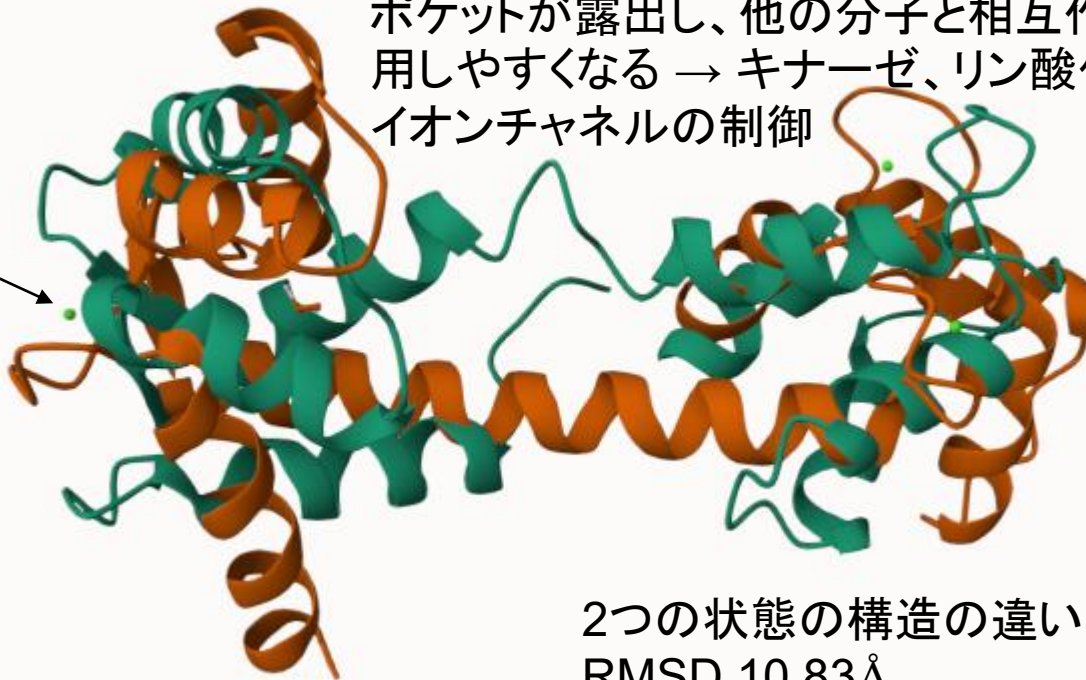
カルシウムが結合しない状態 PDB ID: **1CFD**

カルシウムが結合している状態 PDB ID: **1CLL**

体内のカルシウム濃度を検知し、さまざまなカルシウム感受性酵素、イオンチャネルなどのタンパク質へ信号を伝える仲介タンパク質として働く

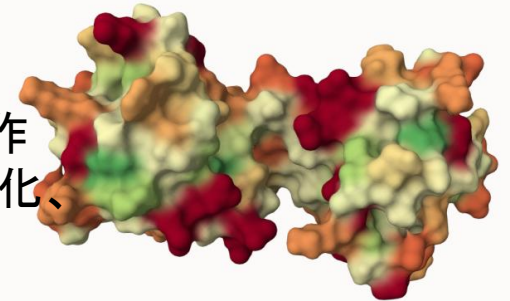
カルシウムが結合すると、疎水性のポケットが露出し、他の分子と相互作用しやすくなる → キナーゼ、リン酸化、イオンチャネルの制御

カルシウム  
イオン

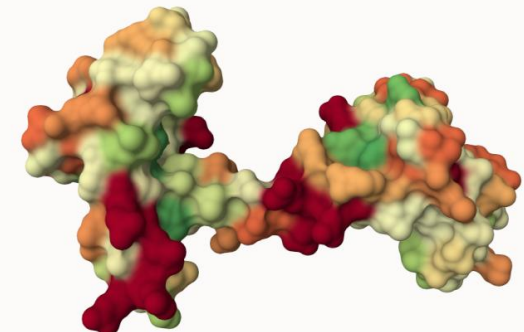


2つの状態の構造の違い  
RMSD 10.83Å

カルシウムが結合  
していない状態

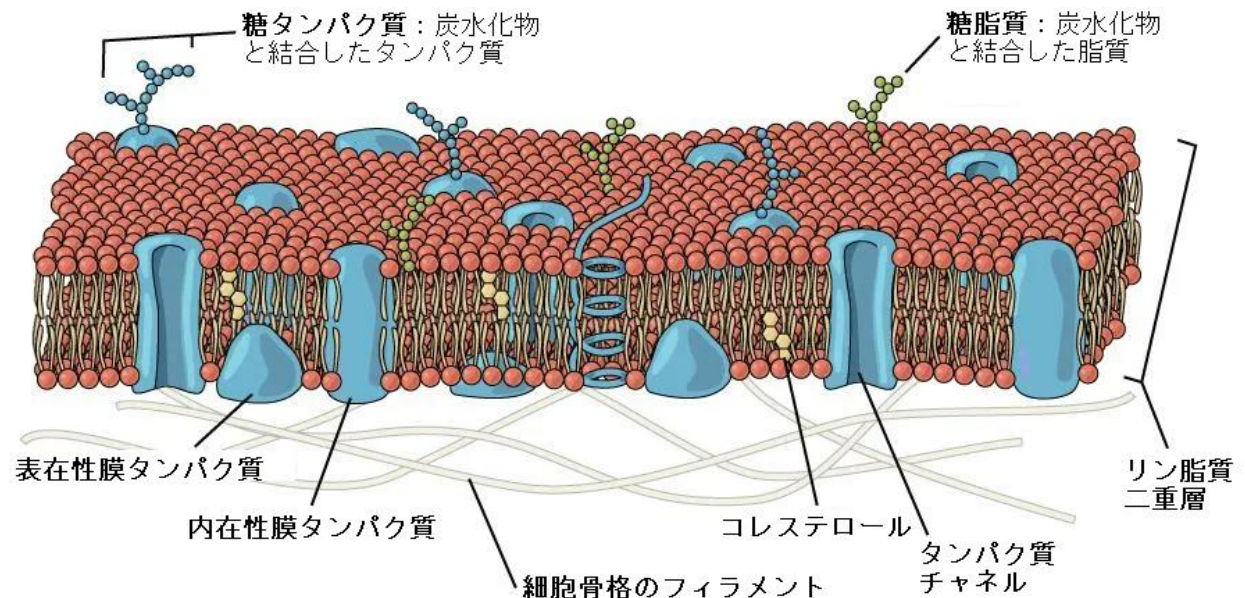


カルシウムが結合  
している状態



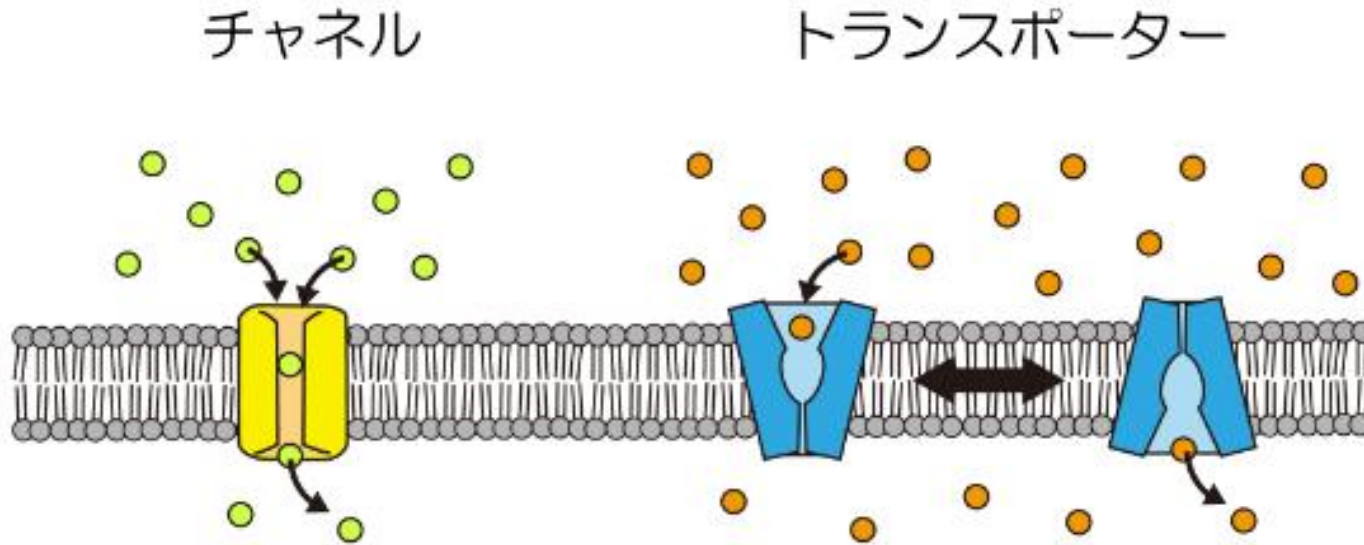
# 膜タンパク質

- **膜タンパク質** (membrane protein) : 細胞や細胞内小器官の膜の中で働くタンパク質
- 外界からの物質の取り込み、排出、情報伝達、エネルギー合成といった重要な機能を担っている
- 真核・原核生物とも全タンパク質の約20～30%を占める
- 開発中の薬剤のターゲットの半数は膜タンパク質



Biology 2e, 生物学 第2版

# 膜タンパク質の様式



生化学 88, 5, 639–642 (2016)

膜に通路を形成し、物質が比較的自由に移動できる

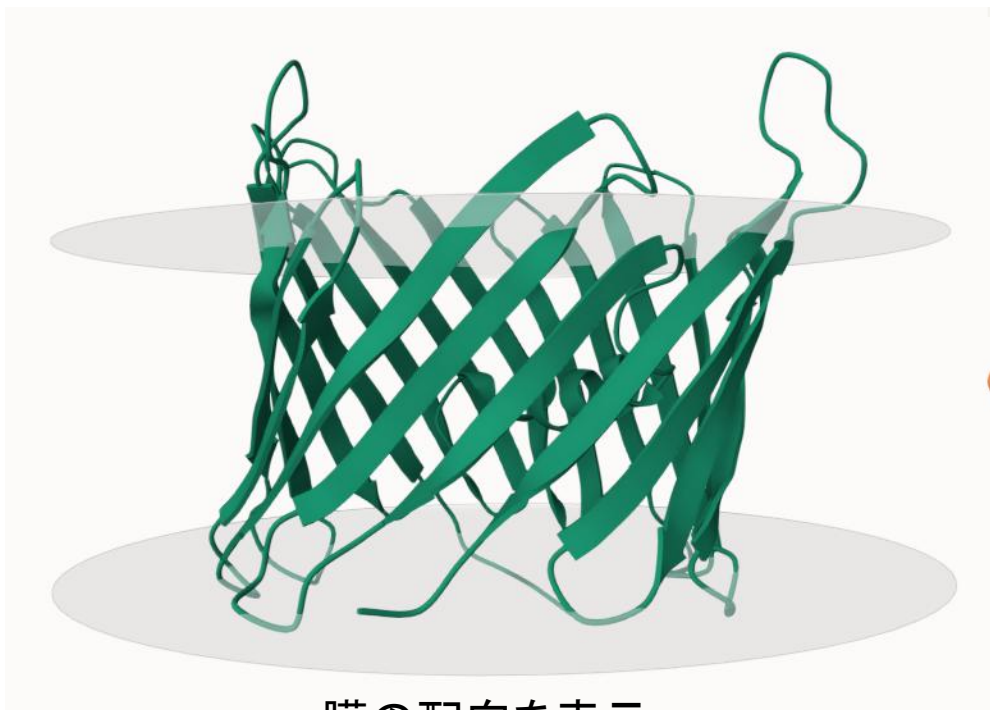
物質を特定の部位に結合させ、構造変化を伴って移動させる

# 膜タンパク質（イオンチャネルの例）

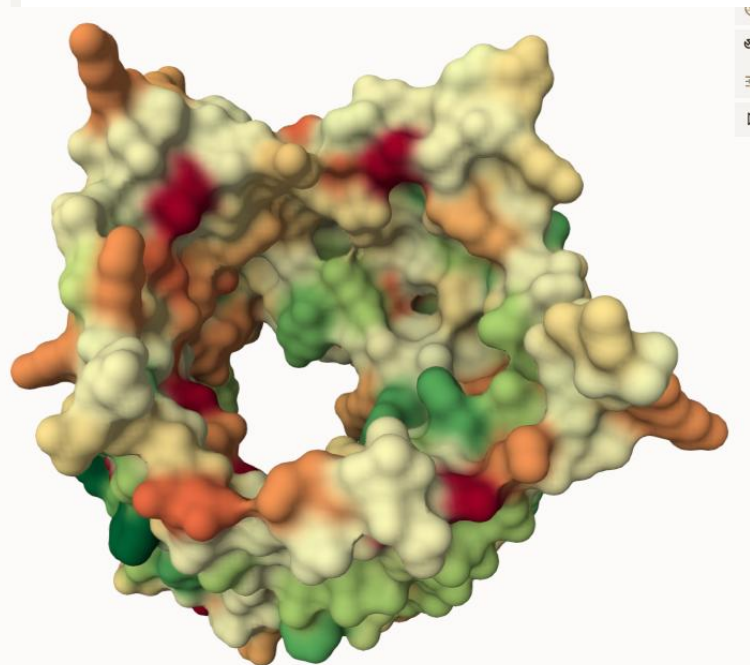
## イオンチャネル PDB ID: 2JK4

膜電位の変化によって開閉が制御されているイオンチャネル

膜タンパク質構造データベース[OPM](#)にアクセスし、膜の表面も合わせた構造を取得して、表示してみよう

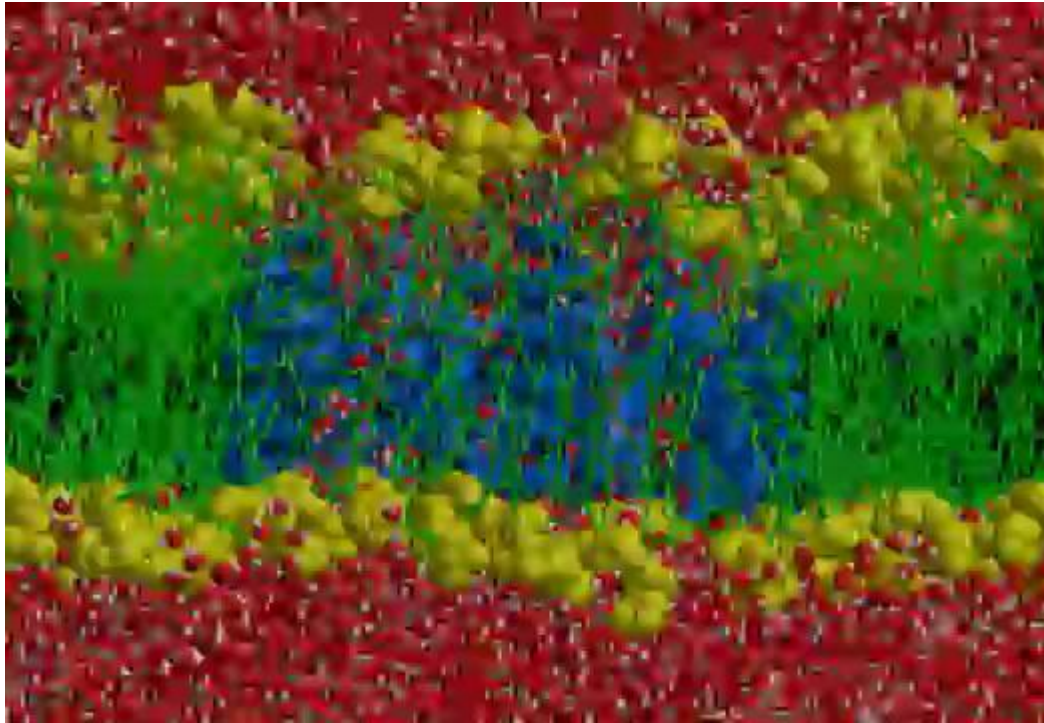


膜の配向を表示



イオンを通す内側には親水性のアミノ酸が比較的多く存在

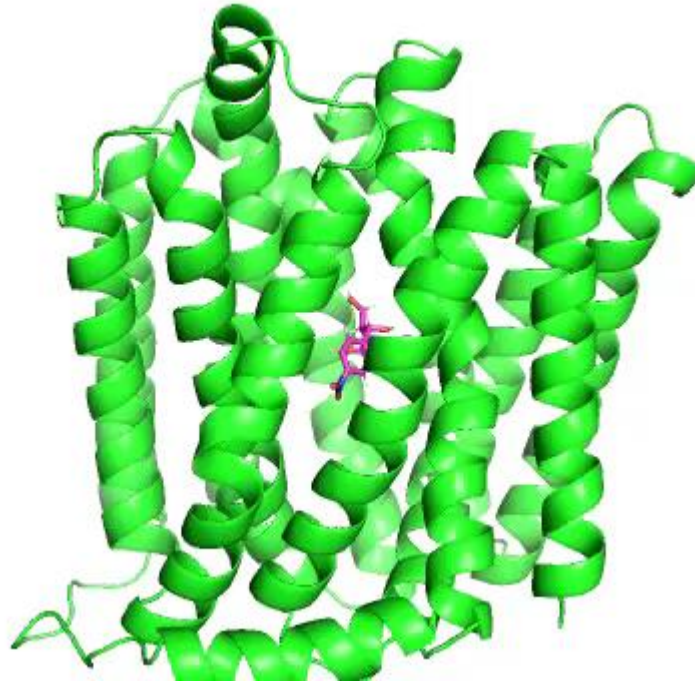
# 膜タンパク質の動き



アクアポリンの分子シミュレーション  
Prashant Bhargava

チャネルの例

# 膜タンパク質の動き



## 多剤排出トランスポーターの分子シミュレーション

多剤排出トランスポーター: 異なる種類の薬剤を細胞膜を介して細胞外へ輸送する膜タンパク質  
細菌が抗生物質に対する耐性を獲得する主要なメカニズム

# 膜タンパク質構造データベース

- OPM (Orientations of proteins in membranes)
  - 生体膜中のタンパク質の配向を登録したデータベース
  - <https://opm.phar.umich.edu/>

orientations of (OPM) database  
proteins in membranes

UNIVERSITY OF MICHIGAN | COLLEGE OF PHARMACY | LOMIZE GROUP

Search proteins by PDB ID or name

HOME

ABOUT OPM

BIOLOGICAL MEMBRANES

SEARCH

DOWNLOAD OPM FILES

CONTACT US

PPM

TMPFOLD SERVER

Protein Classification

Types (3)  
Classes (11)  
Superfamilies (530)  
Families (1090)  
Species (1056)  
Localizations (24)  
Proteins (8915)

Assembly

Superfamilies (9)  
Families (19)  
Localizations (8)  
Assemblies (205)

Protein Links

PDB Sum [PDB](#) [MPKS](#) [MPDB](#)

PPM Server

TMPfold Server

**Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database**

OPM provides spatial arrangements of membrane proteins with respect to the hydrocarbon core of the lipid bilayer.

OPM includes all unique experimental structures of transmembrane proteins and some peripheral proteins and membrane-active peptides ([Features](#)).

Each protein is positioned in a lipid bilayer of adjustable thickness and curvature by minimizing its transfer energy from water to the membrane ([Methods](#)).

OPM provides structural classification and sorting according to different criteria ([Classification](#)).

OPM also provides a few preliminary results of our [computational analysis](#) of transmembrane  $\alpha$ -helix association in experimental structures of selected polytopic proteins ([Assembly pages](#)).

For more information on single-spanning transmembrane proteins please see our [Membranome database](#)

In citing the Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database please refer to Lomize MA, Pogozheva ID, Joo H., Mosberg HI, Lomize AL (2012) OPM database and PPM web server: resources for positioning of proteins in membranes. *Nucleic Acids Res.* **40** (Database issue), D370-D376. [PDF PubMed](#)


For an explanation of our method please refer to Lomize AL, Pogozheva ID, Lomize MA, Mosberg HI (2006) Positioning of proteins in membranes: A computational approach. *Protein Science.* **15**, 1318-1333. [PDF PubMed](#)

Lomize AL, Pogozheva ID, Mosberg HI (2011) Anisotropic solvent model of the lipid bilayer. 2. Energetics of insertion of small molecules, peptides, and proteins in membranes. *J Chem Inf Model.* **51**, 930-946. [PDF PDF \(supplementary\) PubMed](#)

For a new version of our method please refer to Lomize AL, Todd SC, Pogozheva ID. (2022) Spatial arrangement of proteins in planar and curved membranes by PPM 3.0. *Protein Sci.* **31**: 930-946. [PDF PubMed](#)

Structure Statistics (distinct protein structures/PDB entries)

Type: Transmembrane - (6477/10312)  
Class: Alpha-helical polytopic - (5450/8167)  
Class: Bitopic proteins - (568/1433)  
Class: Beta-barrel transmembrane - (459/712)  
Type: Monotopic/peripheral - (1666/5247)  
Class: All alpha monotopic/peripheral - (366/1269)  
Class: All beta monotopic/peripheral - (634/1990)  
Class: Alpha/Beta monotopic/peripheral - (372/1384)  
Class: Alpha + Beta monotopic/peripheral - (294/604)  
Type: Peptides - (772/1314)



Tcr-cD3 complex (CS) pdb-7fjf

Download File: 7fjf.pdb

構造と機能

82

# 膜タンパク質構造データベースの検索

PDB IDを入力

(例えば、2JK4)

UNIVERSITY OF MICHIGAN | COLLEGE OF PHARMACY | LOMIZE GROUP

Search proteins by PDB ID or name

search



HOME	ABOUT OPM	BIOLOGICAL MEMBRANES	SEARCH	DOWNLOAD OPM FILES	CONTACT US	PPM	TMFOLD SERVER
------	-----------	----------------------	--------	--------------------	------------	-----	---------------

## Protein Classification

**Types** (3)  
**Classes** (11)  
**Superfamilies** (530)  
**Families** (1090)  
**Species** (1056)  
**Localizations** (24)  
**Proteins** (8915)

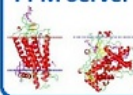
## Assembly

**Superfamilies** (9)  
**Families** (19)  
**Localizations** (8)  
**Assemblies** (205)

## Protein Links

PDB Sum [PDB](#), [MPKS](#),  
[MPDB](#)

## PPM Server



## TMFold Server



## Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database

OPM provides spatial arrangements of membrane proteins with respect to the hydrocarbon core of the lipid bilayer.

OPM includes all unique experimental structures of transmembrane proteins and some peripheral proteins and membrane-active peptides ([Features](#)).

Each protein is positioned in a lipid bilayer of adjustable thickness and curvature by minimizing its transfer energy from water to the membrane ([Methods](#)).

OPM provides structural classification and sorting according to different criteria ([Classification](#)).

OPM also provides a few preliminary results of [our computational analysis](#) of transmembrane  $\alpha$ -helix association in experimental structures of selected polytopic proteins ([Assembly pages](#)).

*For more information on single-spanning transmembrane proteins please see our [Membranome database](#)*

**In citing the Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database please refer to**

Lomize MA, Pogozheva ID, Joo H., Mosberg HI, Lomize AL (2012) OPM database and PPM web server: resources for positioning of proteins in membranes. *Nucleic Acids Res.* **40** (Database issue), D370-D376. [PDF](#) [PubMed](#)

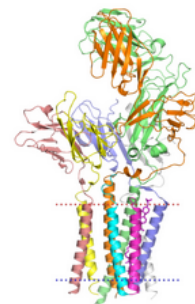
**For an explanation of our method please refer to**

Lomize AL, Pogozheva ID, Lomize MA, Mosberg HI (2006) Positioning of proteins in membranes: A computational approach. *Protein Science.* **15**, 1318-1333. [PDF](#) [PubMed](#)

Lomize AL, Pogozheva ID, Mosberg HI (2011) Anisotropic solvent model of the lipid bilayer. 2. Energetics of insertion of small molecules, peptides, and proteins in membranes. *J Chem Inf Model.* **51**, 930-946. [PDF](#) [PDF \(supplementary\)](#) [PubMed](#)

**For a new version of our method please refer to**

Lomize AL, Todd SC, Pogozheva ID. (2022) Spatial arrangement of proteins in planar and curved membranes by PPM 3.0. *Protein Sci.* **31**: 930-946. [PDF](#) [PubMed](#)



Tcr-cD3 complex (CS) pdb-7fjf

[Download File: 7fjf.pdb](#)

## Structure Statistics (distinct protein structures/PDB entries)

**Type: Transmembrane - (6477/10312)**

**Class: Alpha-helical polytopic - (5450/8167)**

**Class: Bitopic proteins - (568/1433)**

**Class: Beta-barrel transmembrane - (459/712)**

**Type: Monotopic/peripheral - (1666/5247)**

**Class: All alpha monotopic/peripheral - (366/1269)**

**Class: All beta monotopic/peripheral - (634/1990)**

**Class: Alpha/Beta monotopic/peripheral - (372/1384)**

**Class: Alpha + Beta monotopic/peripheral - (294/604)**

**Type: Peptides - (772/1314)**

# 膜タンパク質構造データベースの検索

orientations of  
proteins in membranes (OPM) database



UNIVERSITY OF MICHIGAN | COLLEGE OF PHARMACY | LOMIZE GROUP

Search proteins by PDB ID or name

search

HOME

ABOUT OPM

BIOLOGICAL MEMBRANES

SEARCH

DOWNLOAD OPM FILES

CONTACT US

PPM

TMPFOLD SERVER

## Protein Classification

Types (3)

Classes (11)

Superfamilies (530)

Families (1090)

Species (1056)

Localizations (24)

Proteins (8915)

## Assembly

Superfamilies (9)

Families (19)

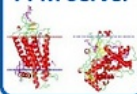
Localizations (8)

Assemblies (205)

## Protein Links

PDB Sum [PDB](#) [MPKS](#) [MPDB](#)

## PPM Server



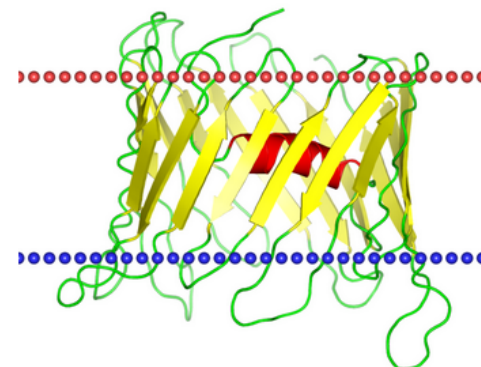
## TMPfold Server



## 2jk4 » VDAC-1 channel, structure 1

- Type: Transmembrane (3 classes)
- Class: Beta-barrel transmembrane (36 superfamilies)
- Superfamily: Mitochondrial and plastid porins (4 families) 1.B.8 (TCDB) [PF01459](#) [PDBsum](#)
- Family: Voltage-dependent anion channel (VDAC) porin (n=19,S=20) (14 proteins) 1.B.8 (TCDB) [PF01459](#) [IPR001925](#) [PDBsum](#)
- Species: Homo sapiens (2659 proteins)
- Localization: Mitochondrial outer membrane (69 proteins)

2jk4 » VDAC-1 channel, structure 1	
Hydrophobic Thickness or Depth	23.4 Å
Tilt Angle	0°
$\Delta G_{transfer}$	-40.0 kcal/mol
Links to 2jk4	<a href="#">PDB Sum</a> <a href="#">PDB</a> <a href="#">MSD</a> <a href="#">MMDB</a>
Topology	subunit A (N terminus intermembrane space)
Resolution	4.1
Primary PDB representation	2jk4
Other PDB entries representing this structure	none
Number of TM secondary structures	19
Membranome	none
Uniprot	VDAC1_HUMAN

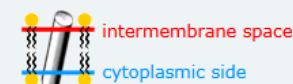


「Download OPM File: 2jk4.pdb」

Download OPM File: 2jk4.pdb

[PDB Sum](#) [PDB](#)

Topology in Mitochondrial outer membrane



3D view in [GLMol](#) | [LiteMol](#) | [Jmol](#) | [iCn3D](#)

Comments: Derived from X-ray diffraction and NMR data. Forms a dimer in crystal.

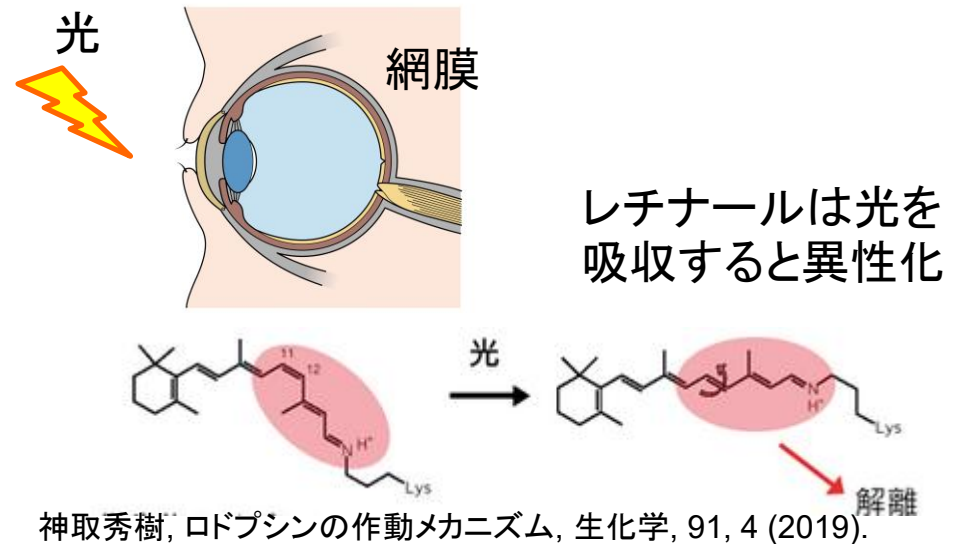
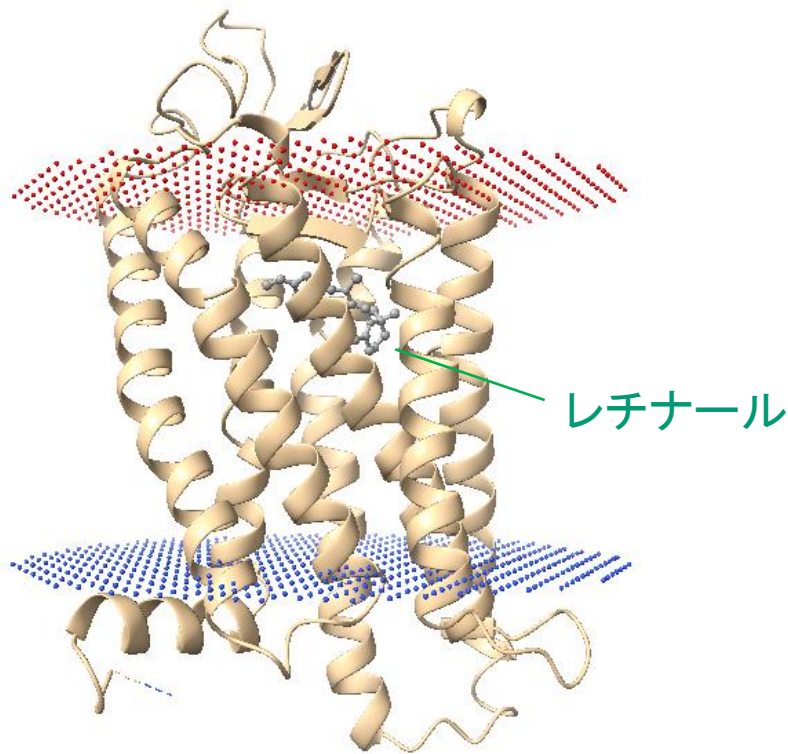
## Subunits: 1

A - Tilt: 6 - TM segments: 1(29-36),2(42-51),3(58-65),4(72-79),5(84-90),6(98-105),7(115-122),8(126-134),9(141-148),10(152-160),11(170-176),12(182-187),13(193-199),14(206-213),15(222-228),16(235-241),17(246-252),18(258-266),19(277-285)

# ロドプシン

ロドプシン: 主に光を感知して信号を伝達する役割を持つ視覚関連の膜タンパク質

PDB ID: 1GZM



これによりロドプシンが構造変化を起こし、Gタンパク質を活性化 → 脳に信号が伝わる(見えると感じる)  
ロドプシンは、アントシアニンの助けを借りて再合成される

膜は、DUM (Dummy atom) で定義されているので、ChimeraXのSelect → Residues → DUMで選択してatomの「Show」を指定

# 膜タンパク質の性質

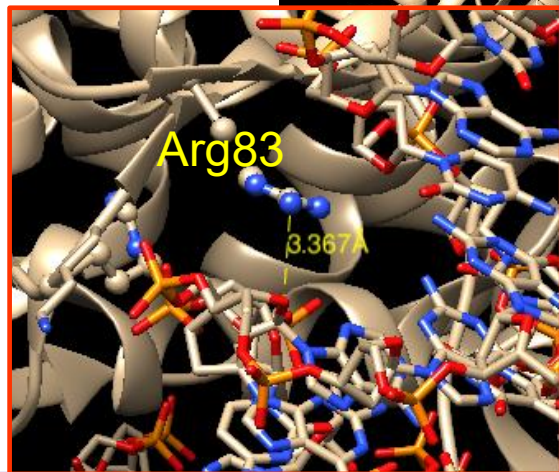
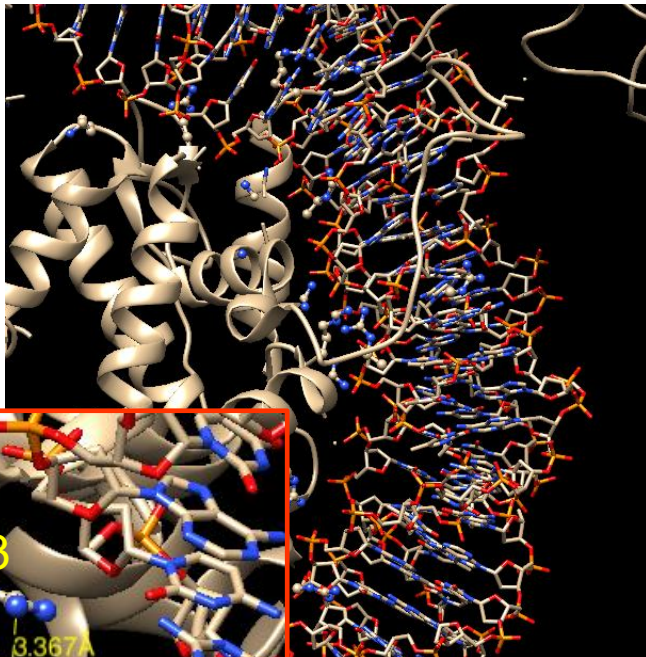
- 細胞膜の厚さは、8～10nm程度
- 脂質二重層に接する部分は、疎水性（水を嫌う性質）のアミノ酸が多い
- 細胞膜の脂質二重層を貫通している部分は、 $\alpha$ ヘリックスや $\beta$ シートが筒状になったバレル構造をとる
- $\alpha$ ヘリックス型膜貫通領域の性質
  - 20～30個程度のアミノ酸で構成され、その長さは約3nm程度
  - ヘリックス全体が疎水性
    - ただし、水溶性タンパク質（膜タンパク質ではないタンパク質）の内部の $\alpha$ ヘリックスに比べて、それほど疎水性は高くない
  - 極性の強い残基（リジン、アルギニン、ヒスチジン、グルタミン酸、グルタミン）、極性が弱くても側鎖の大きな残基（トリプトファン、チロシン）が膜表面付近に存在する傾向

# ヌクレオソーム

ヌクレオソームは、DNAをコンパクトに折りたたんで収納するための基本構造

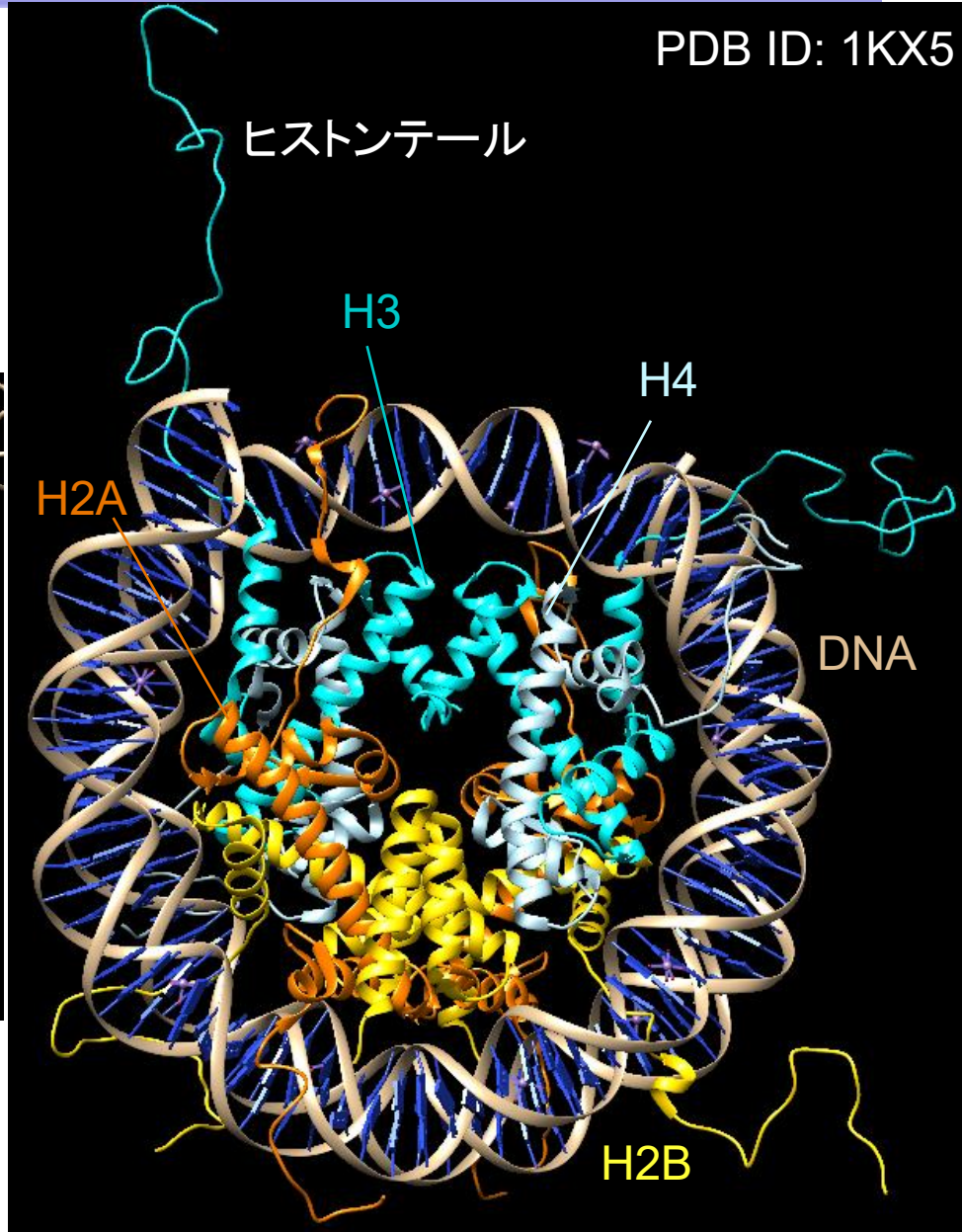
DNAはヒストンというタンパク質の集合体（8量体、H2A-H2B 2量体 2個、H3-H4 4量体）に巻き付く

H3およびH4のArgまたはLysで、DNAから4Å以内の原子を表示



ヒストンH3の Arg83の周辺構造: 水素結合は形成が困難、静電相互作用、van der Waals相互作用、CH- $\pi$ 相互作用

PDB ID: 1KX5



# リボソーム

## リボソームの全体構造

クライオ電子顕微鏡による構造（分解能3.6Å）

tRNAがA-site, P-site, E-siteに結合

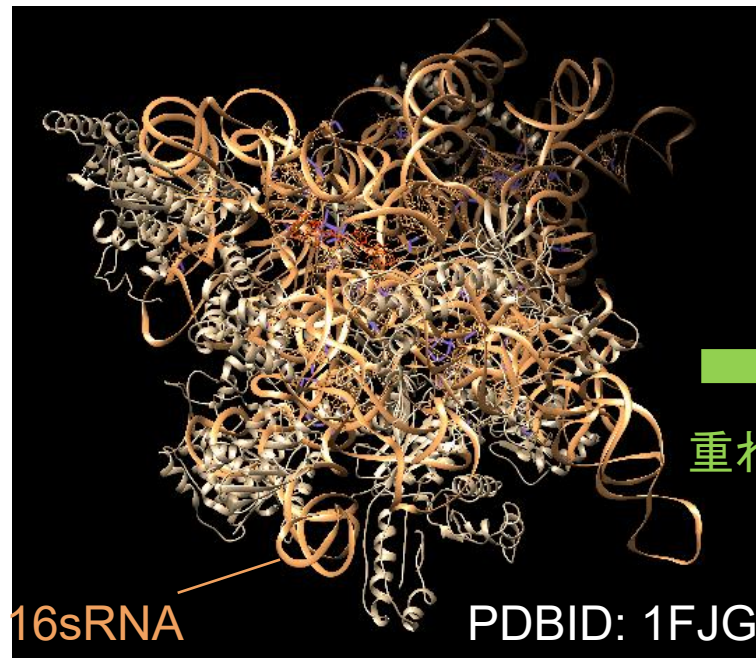
Arenz, S. et al. Nat Commun 7 (2016).

tRNA は A → P → E の順番で移動し、  
その過程でアミノ酸がつながっていく

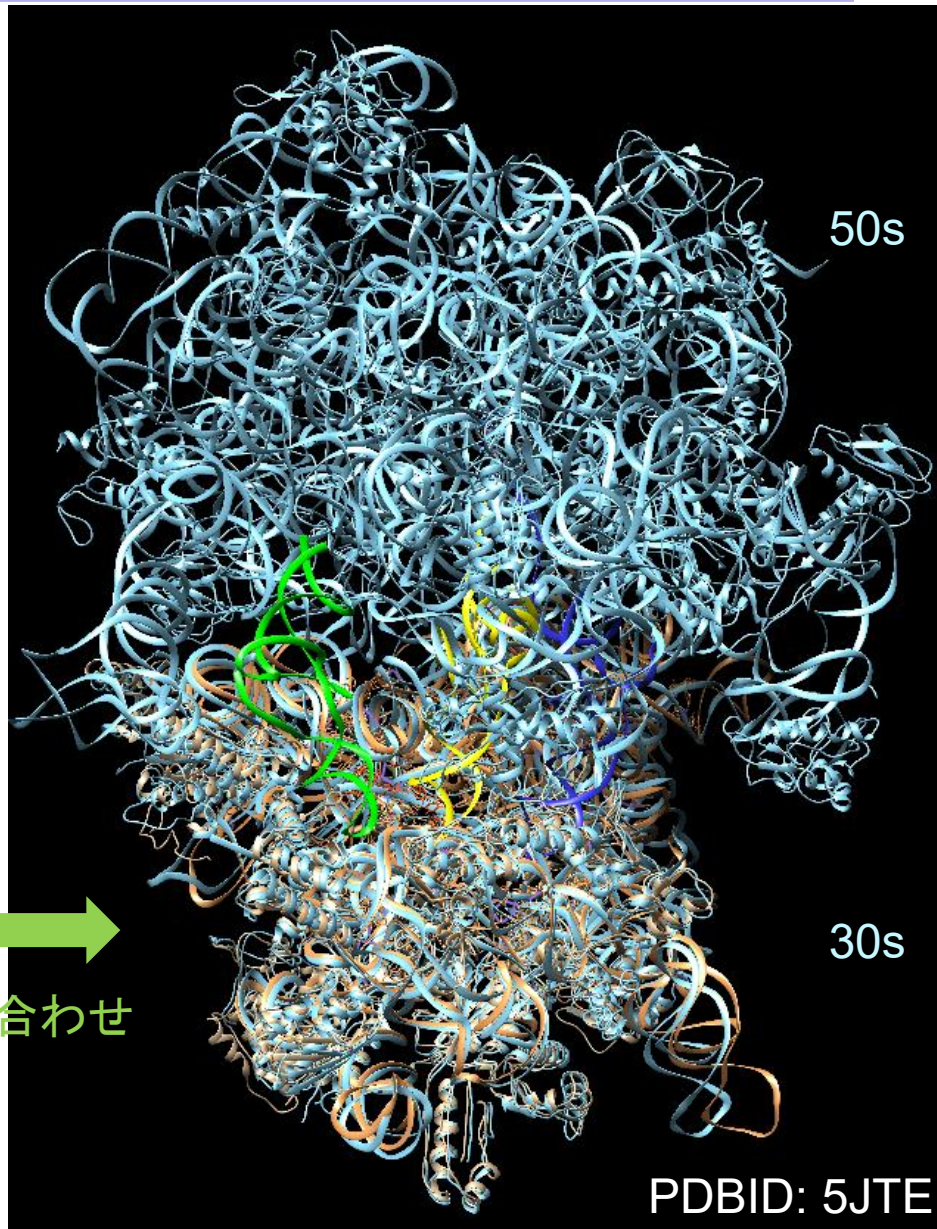
## 30sサブユニット、最初のX線結晶構造

Carter, A.P. et al. Nature 407 (2000).

V. Ramakrishnanのグループ（ノーベル化学賞）



重ね合わせ

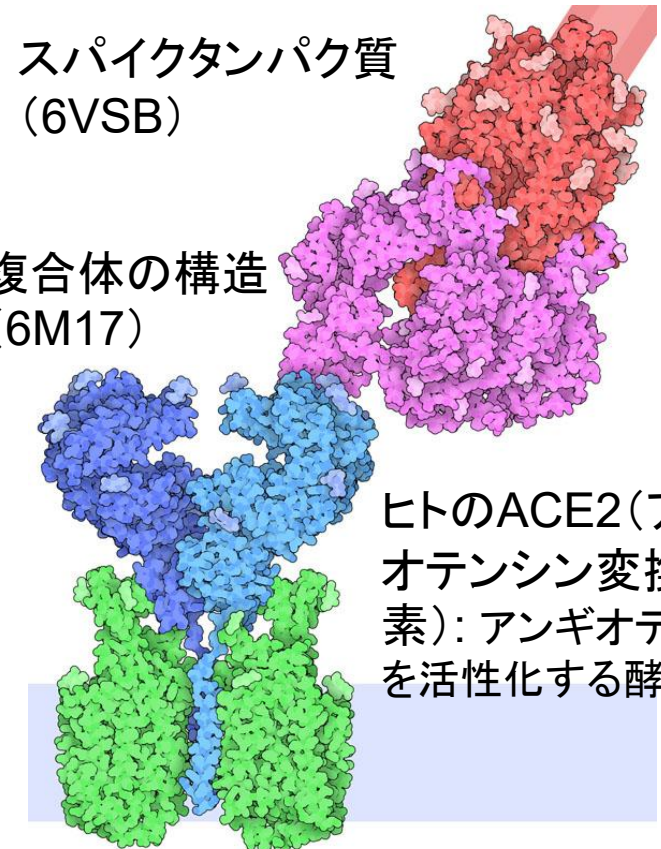
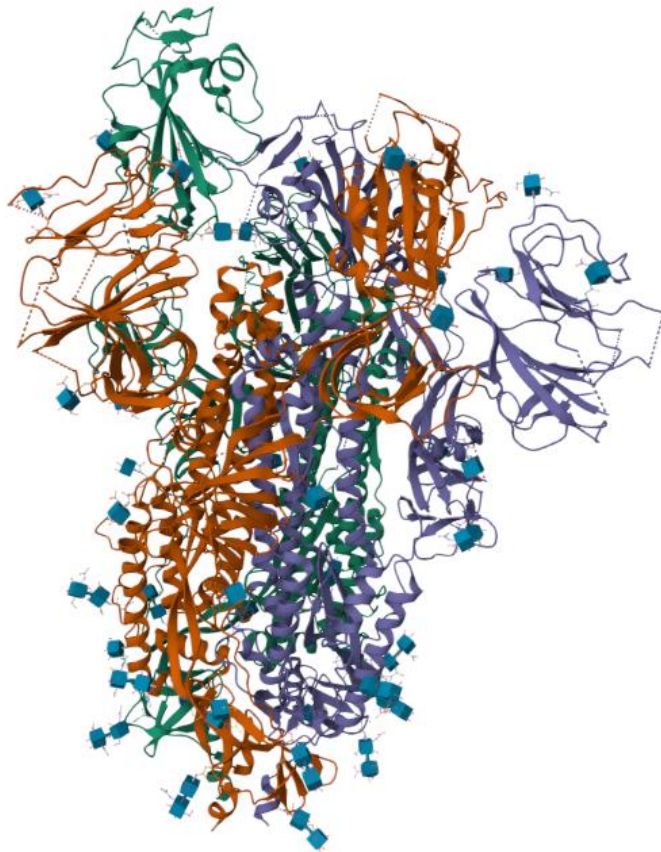


# PDBの構造を分子グラフィックスで見てみよう

## SARS-CoV-2スパイクタンパク質 PDB ID: 6VSB

スパイクタンパク質がヒト細胞受容体に結合した後、  
ウイルス膜はヒト細胞膜と融合し、ウイルスのゲノムがヒト細胞に入り、感染を開始できるようになる

ウイルスのトゲ  
ヒトの受容体を認識



スパイクタンパク質  
(6VSB)

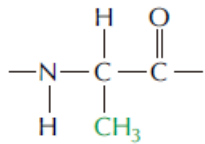
複合体の構造  
(6M17)

ヒトのACE2(アンギオテンシン変換酵素): アンギオテンシンを活性化する酵素

# 20種類のアミノ酸

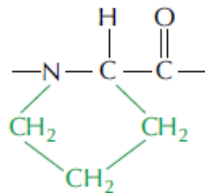
アラニン

(Ala, or A)



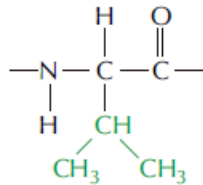
プロリン

(Pro, or P)



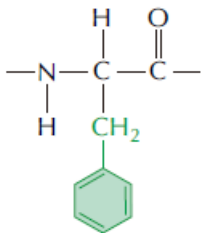
バリン

(Val, or V)



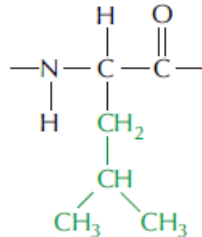
フェニルアラニン

(Phe, or F)



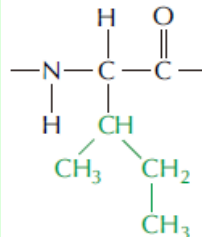
ロイシン

(Leu, or L)



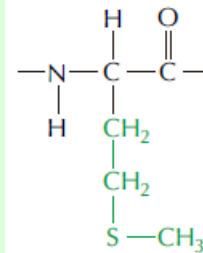
イソロイシン

(Ile, or I)



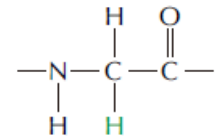
メチオニン

(Met, or M)



グリシン

(Gly, or G)



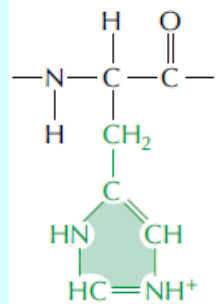
水を嫌うもの(疎水性)

水になじむもの

(親水性)

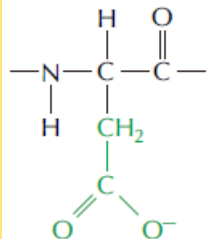
ヒスチジン

(His, or H)



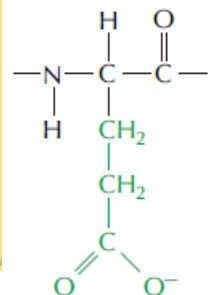
アスパラギン酸

(Asp, or D)



グルタミン酸

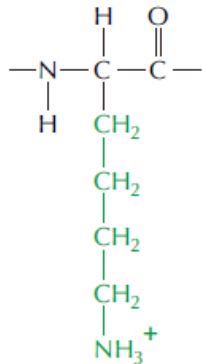
(Glu, or E)



電荷をもつもの

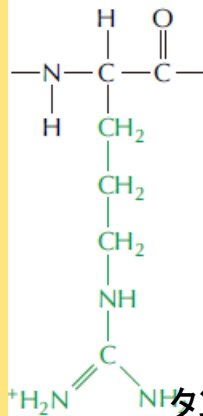
リジン

(Lys, or K)



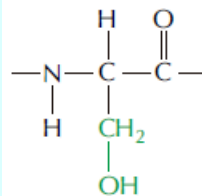
アルギニン

(Arg, or R)



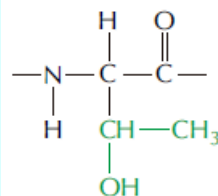
セリン

(Ser, or S)



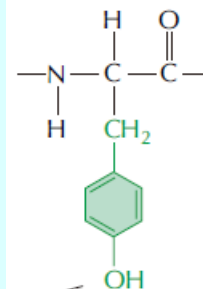
トレオニン

(Thr, or T)



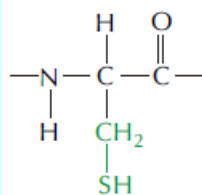
トリプトファン

(Tyr, or Y)



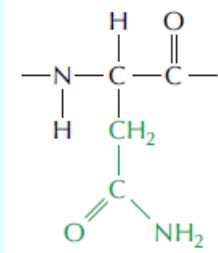
システイン

(Cys, or C)



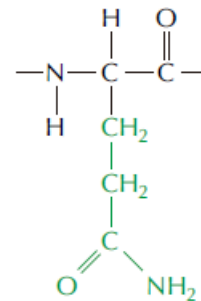
アスパラギン

(Asn, or N)



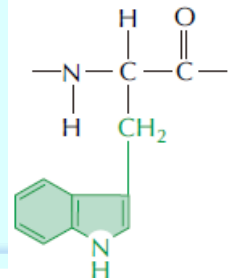
グルタミン

(Gln, or Q)



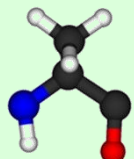
トリプトファン

(Trp, or W)

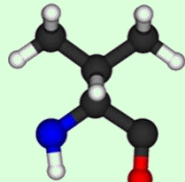


タンパク質の構造

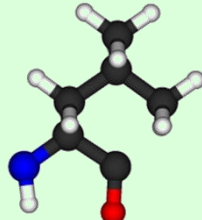
# 20種類のアミノ酸



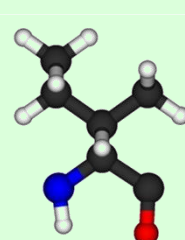
アラニン, A



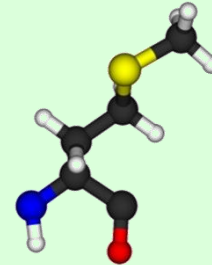
バリン, V



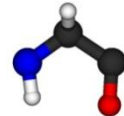
ロイシン, L



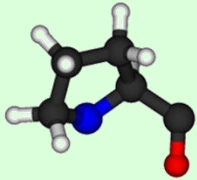
イソロイシン, I



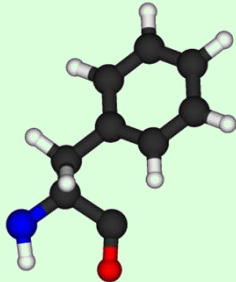
メチオニン, M



グリシン, G



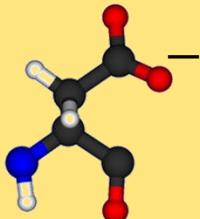
プロリン, P



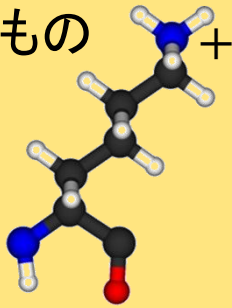
フェニルアラニン, F

疎水性

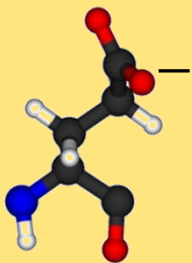
電荷をもつもの



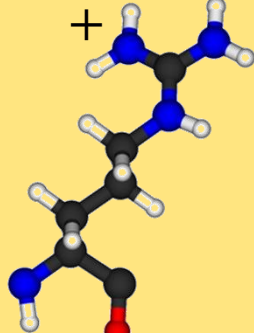
アスパラギン酸, D



リシン, K

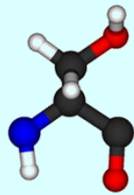


グルタミン酸, E

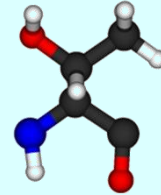


アルギニン, R

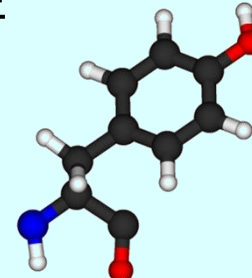
親水性



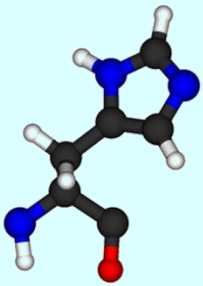
セリン, S



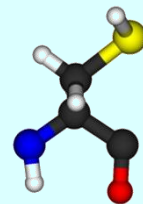
トレオニン, T



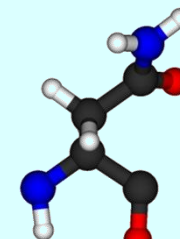
チロシン, Y



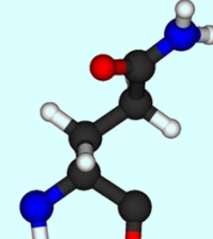
ヒスチジン, H



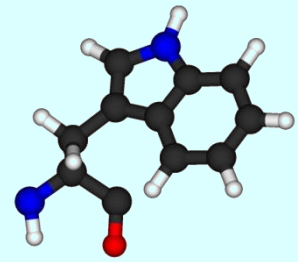
システイン, C



アスパラギン, N



グルタミン, G



トリプトファン, W