

# Structure クイックスタート

このミニコースでは、NCBIから提供されているCn3Dを用いてどのようにタンパク質の立体構造を可視化や注釈付けを行うか、さらにはタンパク質内で保存されているドメインの確認の方法、同様のドメインを持っている他のタンパク質の探索方法、3Dモデリングのテンプレートとなるタンパク質の見つけ方、BLASTでは認識できないような非常に離れたホモログの検出方法について学びます。

## 課題. 1

この課題では、以下のステップに従って学習していきます。

1. タンパク質内に保存されているドメインを調べます。
2. 同じドメインを含む他のタンパク質を探します。
3. 問い合わせ配列に適した3Dモデリング用のテンプレートを探します。
4. BLASTでは認識できないような非常に離れたホモログを探します。

"NCBI Conserved Domain Search"を使うことによって、問い合わせとなるアミノ酸配列と既知なタンパク質間で保存されているドメインのライブラリとの間での比較が可能となります。また、この結果を用いてマルチプルアライメントを作成したり、問い合わせ配列用の3Dモデリングテンプレートを探したりすることができます。

### ■ Step. 1-1

[CDD](#)へと移動してください。そして、CD-Searchのテキストボックスに以下のアミノ酸配列を貼り付けて探索を開始してください。

探索用アミノ酸配列

```
MDPIALTAAGVADLLGDGRPETLWLIGTLLMLIGTFYFIVKGWGVTDKEAREYYSTIT  
LVPGIASAAYL  
SMFFGIGLTEVQVGSEMLDIYYARYADWLFTTPLLLLALLAKVDRVSIGTLVGVDAL  
MIVTGLVGALS  
HTPLARYTWWLFSTICMIVVLYFLATSLRAAKERGPEVASTFNTLTALVLVLWTAYPI  
LWIIGTEGAGV  
VGLGIETLLFMVLDVTAKVGFILLRSRAILGDTAEPSPSAGAEASAAD
```

このタンパク質に含まれるドメインにはどのようなものがありますか？また、得られたドメインに関するより詳しい情報を [NCBI's Bookshelf](#) から調べてください。

### ■ Step. 1-2

CD-Searchの検索結果ページに戻ってください。"Search for similar domain architectures"ボタンをクリックして、今見つかったのと同様のドメインを持つタンパク質のリストを得てください。リストを得るために、配列へのリンクをクリックして、さらに"Look up Sequences in Entrez"をクリックしてください。その後で表示オプションを"Summary"から"FASTA"に変更し、配列を表示してください。

### ■ Step. 1-3

CD-Searchの検索結果ページに戻ってください。ドメインを示している図中の四角をクリックすることで、そのドメインを代表する10本のアミノ酸配列によるマルチプルアライメントが表示されます。

"Row Display"プルダウンメニューから"Up to 5"を選択して配列アライメントを再描画してください。上部にある"Structure"メニューをクリックして開いてください。さらに、"Show Structure"ボタンをクリックして、問い合わせ配列を含むマルチプルアライメントの結果を3次元モデルのテンプレート上でCn3Dを利用して確認表示してください。

Halobacterium salinarumのhalorhodopsinをテンプレートとし（今のversionでは1GU8 : Sensory Rhodopsin がテンプレートとなります）、問い合わせ配列を含むアライメントが表示されています。主鎖を見やすくするために、側鎖をすべて非表示にしてください。（StyleオプションからEdit global style, Protein side chainsを選択し非表示にします。）

問い合わせ配列は、バクテリオロドプシンの特徴配列である(FMVLVDVTAKVGF)を持っています。中でもK(リジン)はレチナールの結合部位となっています。問い合わせ配列中のこれらの残基を確認して、halorhodopsin上で（今のVersionではSensory Rhodopsin）対応するリジン残基をハイライト表示させてください。

この残基の側鎖を表示させてください。（StyleオプションからAnnotate, New, Edit Style を選択します。）

protein backbone RenderingをTubeに、Color SchemeをUser SelectionにさらにUser Colorを目立つ色例えは黄色に変更します。同様な手順をProtein Sidechainsにも施して、Protein Sidechainsをオンにして見てください。最後にDoneボタンをクリックします。)ズームインするためにキーボードのzボタンを押してください。リジン残基近くに位置する補酵素を確認してください。

#### ■ Step. 1-4

halorhodopsinタンパク質（今のバージョンではSensory Rhodopsinタンパク質）に類似の構造を得るために、まずCD-Browserで表示されている 1E12\_A（今のバージョンでは1GU8\_A）をクリックしてください。表示された1E12\_A（今のバージョンでは1GU8\_A）エントリの右上に示されたLinksをクリックすると表示されるプルダウンメニューからStructureを表示してください。

（ここから先はエントリが課題設定当初と変わったため、回答が存在しません。）

そして1E12をクリックし、次に表示される画面から図中chainAをクリックしてください。

すると1E12\_Aに類似構造をとるタンパク質の一覧が表示されます。見たいものをいくつか選択し、チェックボックスをオンにし、"View 3D Alignment"をクリックすると Cn3Dにこれらの構造が重ねて表示されます。

### 課題. 2

この課題では、以下のステップに従って学習していきます。

1. タンパク質内に保存されているドメインを調べます。
2. 同じドメインを含む他のタンパク質を探します。
3. 問い合わせ配列に適した3Dモデリング用のテンプレートを探します。
4. BLASTでは認識できないような非常に離れたホモログを探します。

"NCBI Conserved Domain Search"を使うことによって、問い合わせとなるアミノ酸配列と既知なタンパク質間で保存されているドメインのライブラリとの間での比較が可能となります。また、この結果を用いてマルチプルアライメントを作成したり、問い合わせ配列用の 3Dモデリングテンプレートを探したりすることができます。

#### ■ Step. 2-1

CDDへと移動してください。そして、CD-Searchのテキストボックスに以下のアミノ酸配列を貼り付けて探索を開始してください。

探索用アミノ酸配列

```
>gi|2851597|sp|P25848|PHY1_CERPU Light-sensor Protein  
kinase  
MSATKKYSSTTSAKSKHSVRVAQTTADAALAEAVYEMSGDSDGDSFDYSKSVGQSAESVP  
AGAVTAYLQRMM  
QREGLIQNFQCMVAVEEPNFCVIAYSENASEFLDLIPQAVPSMGEMDVLGIGTDIRTLF  
TPSSSAALEKA  
AATQDISLLNPITVHCRRSGKPLYAIAHRIDIGIVIDFEAVKMIDVPVSAAAGALQSHK  
LAARAITRLQA  
LPGGDIELLCDTIVEEVRELTYDRVMMAFKFHEDEHGEVVAEIRRMDLEPYMGLHYPAT  
DIPQASRFLMM
```

このタンパク質に含まれるドメインにはどのようなものがありますか？"Full Result"ボタンを押すことすべてのドメインを表示することができます。おそらく、その中でセリン/スレオニンキナーゼドメインに興味を持つことでしょう。このドメインに関するより詳しい情報を [NCBI's Bookshelf](#) から調べてください。

#### ■ Step. 2-2

CD-Searchの検索結果ページに戻ってください。"Search for similar domain architectures"ボタンをクリックして、今見つかったのと同様のドメインを持つタンパク質のリストを得てください。リストを得るために、配列へのリンクをクリックして、さらに"Look up Sequences in Entrez"をクリックしてください。その後で表示オプションを"Summary"から"FASTA"に変更し、配列を表示してください。

#### ■ Step. 2-3

CD-Searchの検索結果ページに戻ってください。ドメインを示している図中の四角から serine/threonine kinase domain(CDD|00180)をクリックすることで、そのドメインを代表する10本のアミノ酸配列によるマルチプルアライメントが表示されます。

"Row Display"プルダウンメニューから"Up to 5"を選択して配列アライメントを再描画してください。さら

に、"Show Structure"ボタンをクリックして、問い合わせ配列を含むマルチプルアライメントの結果を3次元モデルのテンプレート上でCn3Dを利用して確認表示してください。

一番上に表示された構造のみを表示するために、下矢印キーを押してください。主鎖を見やすくするために、側鎖をすべて非表示にしてください。(StyleオプションからEdit global style, Protein side chainsを選択し非表示にします。)

問い合わせ配列は、セリン/スレオニン キナーゼ活性部位の特徴配列である(I IHRDLKSMNILV)を持っています。中でもK(リジン)はATPの結合部位となっています。問い合わせ配列中のこれらの残基を確認して、対応するリジン残基をハイライト表示させてください。

この残基の側鎖を表示させてください。(StyleオプションからAnnotate, New, Edit Styleを選択します。protein backbone RenderingをTubeに、Color SchemeをUser SelectionにさらにUser Colorを目立つ色例えれば黄色に変更します。同様な手順をProtein Sidechainsにも施して、Protein Sidechainsをオンにして見てください。最後にDoneボタンをクリックします。)ズームインするためにキーボードのzボタンを押してください。リジン残基近くに位置するheterogenを確認してください。

#### ■ Step. 2-4

セリン/スレオニン キナーゼタンパク質に類似の構造を得るために、まずCD-Browserで表示されている 1JNKをクリックしてください。

(ここから先はNCBI側のデータ構造が課題設定当初と変わったため、回答が存在しません。)

表示された1JNKエントリの右上に示されたLinksをクリックすると表示されるプルダウンメニューからStructureを表示してください。そして1JNKをクリックし、次に表示される画面から図中chainをクリックしてください。

すると1JNKに類似構造をとるタンパク質の一覧が表示されます。見たいものをいくつか選択し、チェックボックスをオンにし、"View 3D Alignment"をクリックすると Cn3Dにこれらの構造が重ねて表示されます。

#### 解答・解説

#### ■ 解答1-1

#### CD-Searchの利用

問題に示されたリンクあるいは、NCBIのトップページ上部にあるメニューから Structure(図中赤四角)を選択し、

NCBI HomePage

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

National Center for Biotechnology Information

National Library of Medicine National Institutes of Health

PubMed All Databases BLAST OMIM Books TaxBrowser **Structure**

Search All Databases for Go

SITE MAP  
Alphabetical List  
Resource Guide

About NCBI  
An introduction to NCBI

GenBank  
Sequence submission support and software

Literature databases  
PubMed, OMIM, Books, and PubMed Central

Molecular databases  
Sequences, structures, and taxonomy

Genomic biology  
The human genome, whole genomes, and related resources

Tools  
Data mining

Research at NCBI  
People, projects, and seminars

Software engineering  
Tools, R&D, and

**What does NCBI do?**

Established in 1988 as a national resource for molecular biology information, NCBI creates public databases, conducts research in computational biology, develops software tools for analyzing genome data, and disseminates biomedical information - all for the better understanding of molecular processes affecting human health and disease. [More about NCBI...](#)

**Hot Spots**

- ▶ Clusters of orthologous groups
- ▶ Coffee Break, Genes & Disease, NCBI Handbook
- ▶ Electronic PCR
- ▶ Entrez Home
- ▶ Entrez Tools
- ▶ Gene expression omnibus (GEO)
- ▶ Human genome resources
- ▶ Influenza Virus Resource
- ▶ Map Viewer
- ▶ dbMHC
- ▶ Mouse genome resources
- ▶ My NCBI
- ▶ ORF finder
- ▶ Rat genome resources
- ▶ Reference sequence project

**Genome Reference Consortium**

The [Genome Reference Consortium](#) (GRC) has been formed to continue the improvement of the human and mouse genome reference assemblies. The goal of the GRC is to fix the small number of loci that may be misrepresented in the reference assembly, fill the remaining gaps, and to produce alternate representations of complex loci.

**PubMed Central**

[PubMed Central](#) is an archive of biomedical and life sciences journals.

- Free full text
- Over 1,500,000 articles from over 450 journals
- Linked to PubMed and fully searchable

Use of PubMed Central requires no registration or fee. Access it from any computer with an Internet connection.

その次のページからCDD(図中赤四角)を選択することで、

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure

Search Structure for  Go Clear

About Entrez Entrez Structure Help | FAQ

Structure Research The NCBI Structure group

MMDB About Entrez's structure database

CDD Conserved Domain Database

PDBeast Taxonomy in MMDB

Cn3D NEW 3D-structure viewer

VAST Structure comparisons

VAST Search Submit structure database searches

Research Structure Group research projects

Your browser version may not work well with NCBI's Web applications. More information [here](#).

**Hints on Finding a Structure**

- To search by [keyword](#), like "aconitase"
- To search by [protein](#) sequence
- To search by [nucleotide](#) sequence

**New structure viewer** [About the Database](#)

**Cn3D** is NCBI's 3D structure viewer. As a helper application for your Web browser, it allows you to interactively view 3D structures, sequences, and sequence alignments. Cn3D is available for Windows, MacOS, and Unix. [More...](#)

The Molecular Modeling Database (MMDB) contains 3D macromolecular structures, including proteins and polynucleotides. MMDB contains over 40,000 structures and is linked to the rest of the NCBI databases, including sequences, bibliographic citations, taxonomic classifications, and sequence and structure neighbors.

CDDのトップ画面に移動します。

NCBI Conserved Domain ... ×

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/cdd.shtml

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI Conserved Domains

Search across Entrez databases

CDTree **NOW**

A Conserved Domain Database and Search Service, v2.16

CD help

NCBI Handbook

CD-Search

CDART

Pfam

SMART

COG

Find CDs

in Entrez:

Structure

MMDB

Cn3D

VAST

Research

CDD FTP site

Last Revised  
12/11/08

Proteins often contain several modules or domains, each with a distinct evolutionary origin and function. NCBI's Conserved Domain Database is a collection of multiple sequence alignments for ancient domains and full-length proteins. The CD-Search service may be used to identify the conserved domains present in a protein query sequence:

送信 Search Database CDD v2.16 - 27096 PSSMs

Enter a Protein query as Accession, GI, or Sequence in FASTA format:

Read about the FASTA format description. Click here for advanced options.

Computational biologists define conserved domains based on recurring sequence patterns or motifs. The un-curated section of CDD contains domains imported from SMART, Pfam and COGs. The source databases also provide descriptions and links to citations. Because conserved domains correspond to compact structural units, CDS are linked to 3D structure when possible. The NCBI-curated section of CDD attempts to group ancient domains related by common descent into family hierarchies.

To identify conserved domains in a protein sequence, the CD-Search service uses the reverse position-specific BLAST algorithm. The query sequence is compared to a position-specific score matrix prepared from the underlying conserved domain alignment. Hits may be displayed as a pairwise alignments of the query sequence with representative domain sequences, or as multiple alignments. CD-Search now is run by default in parallel with protein BLAST searches. Although the user waits for the BLAST queue to further process the request, the domain architecture of the query may already be studied.

Run CDART, the Conserved Domain Architecture Retrieval Tool, to search for proteins with similar domain architectures. CDART uses pre-computed CD-Search results to quickly identify proteins with a set of domains similar to that of the query.

Read more about CDD:

Marchler-Bauer A, Anderson JB, Chitsaz F, Derbyshire MK, DeWeese-Scott C, Fong JH, Geer LY, Gonzales NR, Gwadz M, He S, Hurwitz DI, Jackson JD, Ke Z, Lanczycki CJ, Liebert CA, Liu C, Lu F, Lu S, Marchler GH, Mullokandov M, Song JS, Tasneem A, Thanki N, Yamashita RA, Zhang D, Zhang N,

CDD(Consered Domain Database)とはタンパク質間で共通に見られるドメインに関するデータベースであり、SMART, Pfamなどで作られているモチーフデータベースを変換したものとなっています。これらから各ドメインに共通する配列のプロファイルを作成し、そのプロファイルに対しての検索をrpsblastを用いて実現することで、問い合わせ配列中に含まれるドメイン情報を比較的高速に得ることが可能となっています。上部のテキストボックスに課題中に示されたアミノ酸配列を入力し、ドメイン探索を実行します。

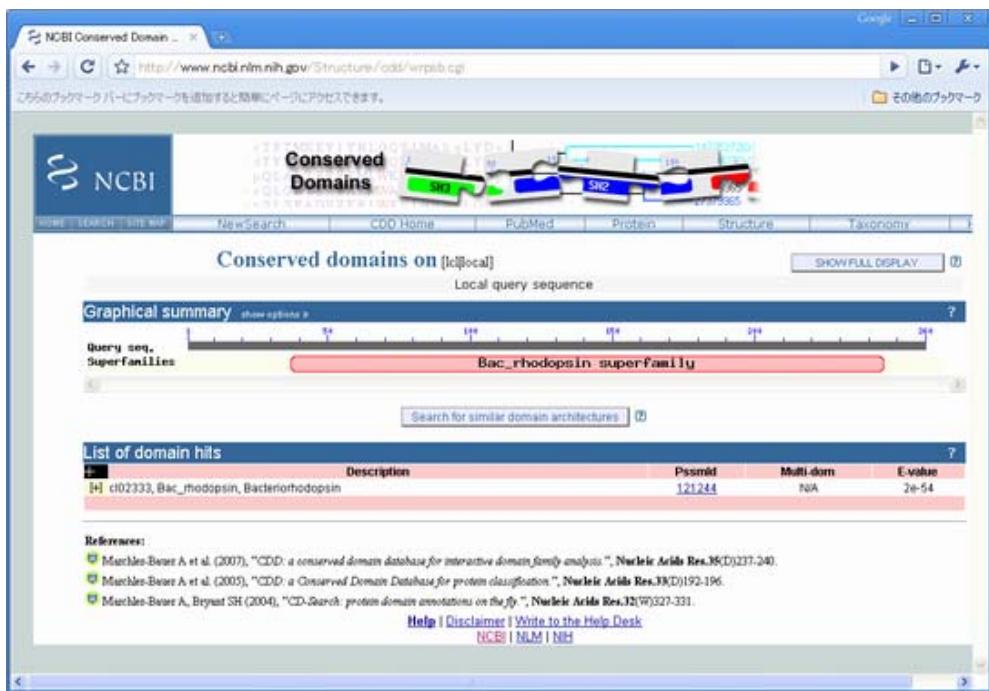
送信 Search Database CDD v2.16 - 27036 PSSMs

Enter a Protein query as Accession, GI, or Sequence in FASTA format:

```
SMFFGIGLTEVQVGSEMLDIYIARYADWLFITPLLLLLDLALLAKVDRVSIGTLVGVDALMIVTGLVGVLS
HTPLARYTWWLFSTICMIWVLYFLATSLRAAAKERGPVESTFNTLTALVLVLWTAYPILWIIGTEGAGV
VGLGIETLLFMVLDVTAKVGFGLLRSRAILGDTAPEPSAGAEASAAD
```

Read about the FASTA format description. Click here for advanced options.

すると下図のような検索結果が得られます。バクテリオロドプシンのドメインが問い合わせ配列に含まれていることが確認できます。



### NCBI Bookshelfの利用

このバクテリオロドプシンに関するより詳しい情報をNCBI Bookshelfを使って調べましょう。問題に示されたリンクあるいは、NCBIのトップページ左にあるメニューから Literature databases(図中赤四角)を選択し、

The screenshot shows the NCBI homepage with a sidebar on the left containing various links. One link, 'Literature databases' (PubMed, OMIM, Books, and PubMed Central), is highlighted with a red rectangular box.

**National Center for Biotechnology Information**  
National Library of Medicine    National Institutes of Health

PubMed All Databases BLAST OMIM Books TaxBrowser Structure

Search All Databases for Go

**SITE MAP**

- Alphabetical List
- Resource Guide
- About NCBI
- An introduction to NCBI
- GenBank
- Sequence submission support and software
- Literature databases
- Molecular databases
- Sequences, structures, and taxonomy
- Genomic biology
- The human genome, whole genomes, and related resources
- Tools
- Data mining
- Research at NCBI
- People, projects, and seminars

**What does NCBI do?**

Established in 1988 as a national resource for molecular biology information, NCBI creates public databases, conducts research in computational biology, develops software tools for analyzing genome data, and disseminates biomedical information - all for the better understanding of molecular processes affecting human health and disease. [More about NCBI...](#)

**Hot Spots**

- ▶ Clusters of orthologous groups
- ▶ Coffee Break, Genes & Disease, NCBI Handbook
- ▶ Electronic PCR
- ▶ Entrez Home
- ▶ Entrez Tools
- ▶ Gene expression omnibus (GEO)
- ▶ Human genome resources
- ▶ Influenza Virus Resource
- ▶ Map Viewer
- ▶ dbMHC
- ▶ Mouse genome resources
- ▶ My NCBI
- ▶ ORF finder
- ▶ Rat genome resources

**dbGaP: NCBI's Genome Wide Association Database**

NCBI's dbGaP (database of Genotype and Phenotype) provides data from Genome Wide Association (GWA) studies, which are helping elucidate the link between genes and disease. For each study, users have access to detailed information about the phenotypic variables measured and pre-computed associations between subjects' phenotypes and genotypes. For more about dbGaP, see:

- dbGaP [press release](#)
- NCBI's [GWA resource page](#)

**PubMed Central**

PubMed Central is an archive of biomedical and life sciences journals.

- Free full text
- Over 1,500,000 articles from over 450

その次のページからBookshelf(図中赤四角)を選択することで、

NCBI Conserved Domain × NCBI Literature Databases ×

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Literature/ その他のブックマーク

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

# NCBI Literature Databases

PubMed Entrez BLAST OMIM Books TaxBrowser Structure

Search Entrez for Go

**Databases**

- PubMed (MEDLINE)
- PubMed Central
- Bookshelf**
- OMIM
- OMIA
- Journals Database
- NLM Catalog
- MeSH

**Highlights**

- The NCBI Handbook
- Genes and Disease
- Coffee Break

**Tools**

- Single Citation Matcher
- Batch Citation Matcher
- My NCBI
- NLM Journal DTDs
- NLM PubMed DTD
- NLM Book DTD

## Reading and Reference

**Books.** Look for background information or research new topics with freely accessible, online biomedical textbooks.

**Research Articles.** Through PubMed, you can search 16,000,000 biomedical journal abstracts. PubMed Central is a database that contains whole research articles from over 300 research journals.

**New Books**

New books this month include: *Dynamics of Cancer, Immunology and Evolution of Infectious Disease*.

## What Journals are Covered in PubMed?

All the Journals covered in PubMed are listed in the [Journals](#) database. If you want to search PubMed for articles in a particular journal, Use the "Search by Journal" function on the [PubMed Limits](#) page, which has an automatic prompt to complete the journal name as you type.

## What's in the National Library of Medicine

NCBI Bookshelfのトップページに移動します。

The screenshot shows the NCBI Bookshelf search interface. At the top, there's a navigation bar with links to All Databases, PubMed, Nucleotide, Protein, Genome, Structure, PMC, and Taxonomy. Below this is a search bar with dropdown menus for 'Search' and 'Books', followed by a search term input field containing 'for |' and a 'Go' button. A red box highlights the search term 'Bacteriorhodopsin' in the input field. To the right of the search bar are 'Clear' and 'Clipboard' buttons.

The main content area displays a message about browser compatibility and a section titled 'New on the Bookshelf:' with four book entries:

- Animal Models of Cognitive Impairment**  
Frontiers in Neuroscience Series  
Levin, Edward D.; Buccafusco, Jerry J., editors  
Boca Raton (FL): CRC Press, Taylor & Francis Group; c2006
- Baculovirus Molecular Biology [Internet]**  
Rohrmann, George F.  
Bethesda (MD): National Library of Medicine (US); NCBI; 2008
- Defining and Detecting the Intolerable Burden of Malaria III: Progress and Perspectives**  
Brennan, Joel G.; Allio, Martin S.; and White, Nicholas J.; editors  
Northbrook (IL): The American Society of Tropical Medicine and Hygiene; 2007
- The Intolerable Burden of Malaria: A New Look at the Numbers**  
Brennan, Joel G.; Egan, Andrés; Keusch, Gerald T., editors  
Northbrook (IL): The American Society of Tropical Medicine and Hygiene; c2001

Below this, a section titled 'Book List' shows two more book entries:

- Advances in Patient Safety: From Research to Implementation**  
Henriksen, Karen; Battles, James B.; Marks, Eric S.; Lewin, David I., editors  
Rockville (MD): Agency for Healthcare Research and Quality (US); c2005
- AHFS Consumer Medication Information**  
American Society of Health-System Pharmacists  
Bethesda (MD): American Society of Health-System Pharmacists, Inc.; c2007

The status bar at the bottom of the browser window shows the URL: [www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=books](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=books).

上部の検索ボックスに"Bacteriorhodopsin"と入力し探索を実行してください。

This screenshot shows the same NCBI Bookshelf interface as above, but the search term 'Bacteriorhodopsin' has been entered into the search bar. A red box highlights the search term 'Bacteriorhodopsin' in the input field. The search results page is displayed below the search bar.

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI Conserved Domain -> Bacteriorhodopsin - Book... -> http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez

NCBI Bookshelf

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxonomy

Search Books for Bacteriorhodopsin Go Clear Save

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Books Show 20 Send to

All: 43 Figures: 17

**11 items in Molecular Biology of the Cell**  
Alberts, Bruce; Johnson, Alexander; Lewis, Julian; Raff, Martin; Roberts, Keith; Walter, Peter  
New York and London: [Garland Science](#); c2002

**8 items in Biochemistry**  
Berg, Jeremy M.; Tymoczko, John L.; and Stryer, Lubert.  
New York: [W. H. Freeman and Co.](#); c2002

**6 items in Molecular Cell Biology**  
Lodish, Harvey; Berk, Arnold; Zipursky, S. Lawrence; Matsudaira, Paul; Baltimore, David; Darnell, James E.  
New York: [W. H. Freeman & Co.](#); c1999

**2 items in Immunobiology**  
Janeway, Charles A.; Travers, Paul; Walport, Mark; Shlomchik, Mark  
New York and London: [Garland Science](#); c2001

**1 item in Medical Microbiology**  
Baron, Samuel, editor.  
Galveston (TX): [University of Texas Medical Branch](#); c1996

**1 item in Basic Neurochemistry: Molecular, Cellular, and Medical Aspects**  
Siegel, George J.; Agranoff, Bernard W.; Albers, R. Wayne; Fisher, Stephen K.; Uhler, Michael D., editors  
Philadelphia: [Lippincott Williams & Wilkins](#); c1999

Your browsing history

6書籍にBacteriorhodopsinに関する記載があることが確認できます。

“Molecular Biology of the Cell”の横の11itemsをクリックして、書籍内部のBacteriorhodopsinに関する記載を見てみましょう。

まずは、11件の一覧が表示されます。

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。 [その他](#)

NCBI Conserved Domain [Bacteriorhodopsin AND mboc4\[book\]](#)

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=books&doctomld=DocSum&term=Bacteriorhodopsin AND mboc4[book]

Search Books for Bacteriorhodopsin AND mboc4[book] Go Clear Save Search

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Summary Show 20 Send to

All: 11 Figures: 6

Items 1 - 11 of 11 One page.

1: [Bacteriorhodopsin Is a Proton Pump That Traverses the Lipid Bilayer as Seven Alpha Helices](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Structure → Membrane Proteins

2: [Drawing of the archaean \*Halobacterium salinarum\* showing the patches of purple membrane that contain bacteriorhodopsin molecules](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Structure → Membrane Proteins

3: [The three-dimensional structure of a bacteriorhodopsin molecule](#)

**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Structure → Membrane Proteins

4: [A general model for H pumping](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Energy Conversion: Mitochondria and Chloroplasts → Electron-Transport Chains and Their Proton Pumps

5: [Band 3 of the Red Blood Cell Is a Multipass Membrane Protein That Catalyzes the Coupled Transport of Anions](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Structure → Membrane Proteins

6: [Membrane-bound Enzymes That Synthesize ATP Are Transport ATPases Working in Reverse](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Transport of Small Molecules and the Electrical Properties of Membranes → Carrier Proteins and Active Membrane Transport

7: [Cells Can Confine Proteins and Lipids to Specific Domains Within a Membrane](#)  
**Molecular Biology of the Cell** → Internal Organization of the Cell → Membrane Structure → Membrane Proteins

Recent Activity

Your browsing activity

一件目をクリックしてその内容を見てみましょう。

NCBI Conserved Domain    Membrane Proteins

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

A plasma membrane transport protein for which such detail is known is **bacteriorhodopsin**, a protein that serves as a light-activated proton ( $H^+$ ) pump in the plasma membrane of certain archaea. The structure of bacteriorhodopsin is similar to that of many other membrane proteins, and it merits a brief digression here. [TOP](#)

**Bacteriorhodopsin Is a Proton Pump That Traverses the Lipid Bilayer as Seven  $\alpha$  Helices**

The “purple membrane” of the archaean *Halobacterium salinarum* is a specialized patch in the plasma membrane that contains a single species of protein molecule, **bacteriorhodopsin** (Figure 10–36). Each bacteriorhodopsin molecule contains a single light-absorbing group, or chromophore (called *retinal*), which gives the protein its purple color. Retinal is vitamin A in its aldehyde form and is identical to the chromophore found in *rhodopsin* of the photoreceptor cells of the vertebrate eye (discussed in Chapter 15). Retinal is covalently linked to a lysine side chain of the bacteriorhodopsin protein. When activated by a single photon of light, the excited chromophore changes shape and causes a series of small conformational changes in the protein that results in the transfer of one  $H^+$  from the inside to the outside of the cell (Figure 10–37). In bright light, each bacteriorhodopsin molecule can pump several hundred protons per second. The light-driven proton transfer establishes an  $H^+$  gradient across the plasma membrane, which in turn drives the production of ATP by a second protein in the cell’s plasma membrane, as well as other processes that use the energy stored in the  $H^+$  gradient. Thus, bacteriorhodopsin is part of a solar energy transducer that provides energy to the bacterial cell.

To understand the function of a multipass transmembrane protein in molecular detail, it is necessary to locate each of its atoms precisely, which generally requires x-ray diffraction studies of well-ordered three-dimensional crystals of the protein. But because of their amphipathic nature, these proteins are soluble only in detergent solutions and are difficult to crystallize. The numerous bacteriorhodopsin molecules in the purple membrane, however, are arranged as a planar two-dimensional crystal. The regular packing has made it possible to determine the three-dimensional structure and orientation of bacteriorhodopsin in the membrane to high resolution (3 Å) by an alternative approach, which uses a combination of electron microscopy and electron diffraction analysis. This procedure, known as **electron crystallography**, is analogous to the study of three-dimensional crystals of soluble proteins by x-ray diffraction analysis. The structure obtained by electron crystallography was later confirmed and extended to higher resolution by x-ray crystallography. These studies showed that each bacteriorhodopsin molecule is folded into seven closely packed  $\alpha$  helices (each containing about 25 amino acids), which pass through the lipid bilayer at slightly different angles (see Figure 10–37). By freezing the protein crystals at very low temperatures, it has been possible to solve the structures of some of the intermediate conformations the protein goes through during its pumping cycle.

## ■ 解答1-2

### 同じドメインを持つ配列の取得

CD-Searchの結果画面に戻り、“Search for similar domain architectures”（図中赤四角）をクリックし、

Conserved domains on [local]  
Local query sequence  
Graphical summary  
Query seq.  
Superfamilies Bac\_rhodopsin superfamily  
Search for similar domain architectures

| Description                                 | PssmID | Multi-dom | E-value |
|---|--------|-----------|---------|
| [H] 07235, Bac_rhodopsin, Bacteriorhodopsin | 123244 | N/A       | 2e-54   |

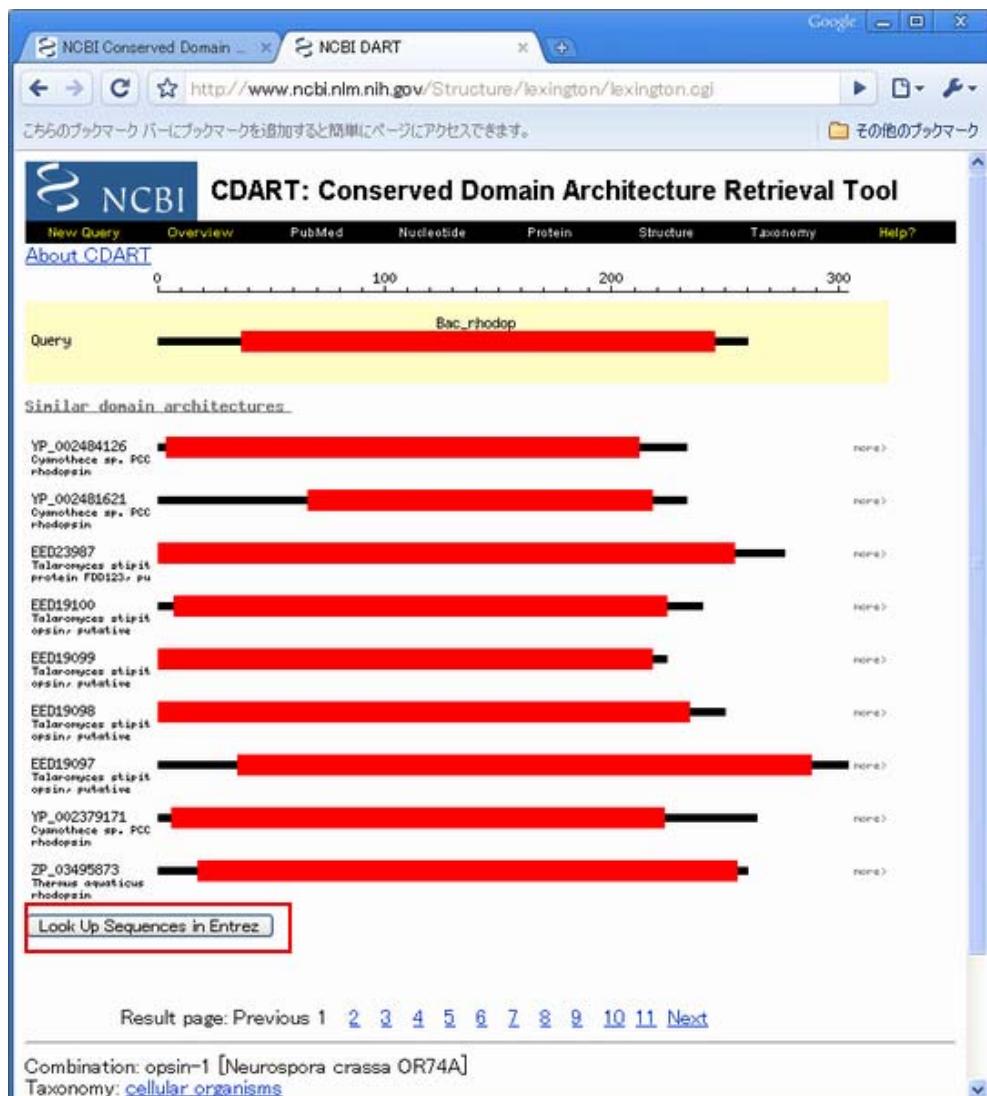
References:  
 • Marchler-Bauer A et al. (2007), "CDD: a conserved domain database for interactive domain family analysis", *Nucleic Acids Res.* 35(D):237-240.  
 • Marchler-Bauer A et al. (2005), "CDD: a Conserved Domain Database for protein classification", *Nucleic Acids Res.* 33(D):192-196.  
 • Marchler-Bauer A, Bryant SH (2004), "CD-Search: protein domain annotations on the fly", *Nucleic Acids Res.* 32(W):327-331.  
 Help | Disclaimer | Write to the Help Desk  
 NCBI | NLM | NIH

この問い合わせ配列と同様なドメインを持つ配列を取得してください。

CDART: Conserved Domain Architecture Retrieval Tool  
About CDART  
Query Bac\_rhodop  
問い合わせ配列に含まれるドメイン  
Similar domain architectures  
2 Sequences Chlamydomonas reinhardtii chloroplastidial beta  
786 Sequences cellular organisms  
問い合わせ配列に含まれるドメインを持つ構造は2種類

この画面では問い合わせ配列に含まれると同様なドメインを持つ配列が模式図として示されています。それらをまとめると2種類に大別でき、一つ目の構造を持つ配列は2本ですが、バクテリオロドプシンのドメインのみを持つ配列が786本あることが確認できます。

この786 Sequencesをクリックすると786配列分の模式図が表示されます。



さらに画面の左下にある“Look Up Sequences in Entrez”（画面赤四角）を押すとこの786本分の配列情報をEntrezから得ることができます。

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI Conserved Domain ... 786 selected items - Protein

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?cmd=HistorySearch&query\_key=

All Databases Published Nucleotide Protein Genome Structure PMC

Search Protein for Go Clear

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Your browser version may not work well with NCBI's Web applications. More information [here...](#)

Display Summary Show 20 Sort by Relevance Send to

All: 786 Bacteria: 482 RefSeq: 106 Related Structures: 717

Items 1 - 20 of 786 Page 1 of 40 Next

1: [YP\\_002484126 Reports](#) Conserved Domains, Links  
rhodopsin [Cyanothec sp. PCC 7425]  
gi|220908815|ref|YP\_002484126.1||220908815]

2: [YP\\_002481621 Reports](#) Conserved Domains, Links  
rhodopsin [Cyanothec sp. PCC 7425]  
gi|220906310|ref|YP\_002481621.1||220906310]

3: [EED23987 Reports](#) Conserved Domains, Links  
protein FDD123, putative [Talaromyces stipitatus ATCC 10500]  
gi|218724570|gb|EED23987.1||218724570]

4: [EED19100 Reports](#) Conserved Domains, Links  
opsin, putative [Talaromyces stipitatus ATCC 10500]  
gi|218719681|gb|EED19100.1||218719681]

5: [EED19099 Reports](#) Conserved Domains, Links  
opsin, putative [Talaromyces stipitatus ATCC 10500]  
gi|218719680|gb|EED19099.1||218719680]

6: [EED19098 Reports](#) Conserved Domains, Links  
opsin, putative [Talaromyces stipitatus ATCC 10500]  
gi|218719679|gb|EED19098.1||218719679]

7: [EED19097 Reports](#) Conserved Domains, Links  
opsin, putative [Talaromyces stipitatus ATCC 10500]

▼ Top Orga  
uncultured ba  
Halobacterium  
uncultured mi  
uncultured Ha  
archaeon (25,  
uncultured org  
All other taxa  
More...

Recent Activ

Your browsi

最後にDisplayオプションのプルダウンメニューを"FASTA"にすることで、

Display Summary Show 20 Sort by Relevance Send

All: 786 Related Structures: 717

Items Page 1 of 40 Next

1: [YP\\_002484126 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|220908815|ref|YP\_002484126.1||220908815]

2: [YP\\_002481621 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|220906310|ref|YP\_002481621.1||220906310]

3: [EED23987 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|218724570|gb|EED23987.1||218724570]

4: [EED19100 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|218719681|gb|EED19100.1||218719681]

5: [EED19099 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|218719680|gb|EED19099.1||218719680]

6: [EED19098 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|218719679|gb|EED19098.1||218719679]

7: [EED19097 Reports](#) Conserved Domains, Links  
gi|218719678|gb|EED19097.1||218719678]

▼ Display Options  
Summary  
Brief  
Summary  
ASN.1  
**FASTA**  
XML  
GenPept  
GI List  
Graphics  
TinySeq XML  
INSDSeq XML  
LinkOut  
Related Sequences  
Identical Proteins  
Protein (UniProtKB)  
Protein (RefSeq)  
Conserved Domain Links  
Concise Conserved Domain Links  
3D Domain Links  
Gene Links  
Genome Links

アミノ酸配列を表示することができます。

NCBI Conserved Domain ... NCBI Sequence Viewer v2.0

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

My NCBI [Sign In] [Register]

PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxonomy OMIM Books

Search Protein for Go Clear

Display FASTA Show 20 Send to page 1 of 40 Previous Next

Item 1 - 20 of 786

**□1: YP\_002484126 Reports rhodopsin [Cyanothec...[gi|220908815]**

>gi|220908815|ref|YP\_002484126.1| rhodopsin [Cyanothecace sp. PCC 7425] MIVFWLWLGFVGMSTGAVLFGRAAAYKAKTEQWQILLLNFFICLIATTLYLAMILQGFINAYDRPIYL, RYLTWGLSTPLILLVITRLGGSSLLTASLIIGADLFMIATGYVAASPVVPINFIWVLVSCCAFVALFYLL LRPyRvQAIQHGPRAKKAIQDQLSVQALATLTPIVWILSKTFGNLLNPTELTTISYTLLDLAAKVGFGEF ALATLRKGERLOEMPORLEQWLR

**□2: YP\_002481621 Reports rhodopsin [Cyanothec...[gi|220906310]**

>gi|220906310|ref|YP\_002481621.1| rhodopsin [Cyanothecace sp. PCC 7425] MLAQSFVIFYAGLEIAIWVYLAQLSRSPIVGPROFYQOLAIIGISLWSQLMAVLLALGAGOWELGGQVISI, RYLDCLIAATPGVWLLSLOCWTGMILTLRREKHLIHALLGMAGWVMSVSGDLSSTSACRYLYVANSVAFGAI MKVVVWGLRETAQLOQSHPLMPSFYDCLAAYLTWSWGGYALVVMGSAGWVWIDPTQEAFLFCLLSFAGQT GFLLFNLYGLRRLNQDRLRSLAR

**□3: EED23987 Reports protein FDD123, p. [gi|218724570]**

>gi|218724570|gb|EED23987.1| protein FDD123, putative [Talaromyces st MEIFPRGNDALNVNPVGVTEALSOHGSDULWAVTAIYIVAFFFTLIPCFITPESDRVFHYLLTMILLY, SVTYFAQASDLGWISLEDNTROIFYARYVINWAVLFPSPWALALGLLSGVSWTTIIINIFCAWVWLTYL VCALVSTDYKNGFTFGTFAVITLAMSTLNESREAAERLGIVRDYMTLSVIVWVWVVICVPIAFLGLSDGGN VIRVTGGFVFFGVLDVLLGPVACSLFVVMTRKWDYKKLNLAISEARYPLPETAKEPALIEGARTEA

**□4: EED19100 Reports opsin, putative [...] [gi|218719681]**

>gi|218719681|gb|EED19100.1| opsin, putative [Talaromyces stipitatus MNADVEQQSRLLHTLTALITTVSFLSYLAMATGEGVTVKHSIVHHPHKHVPDTHEYLE, ITTPLLNLINALLGGNGANLVVAISADLIMFAAGLTATFSHDERRWWVYTIIIAFLTVGFOVGVNGAR SVRRGADQHRAFLTSFGAGANLLVFLYPIILAAASPLSORISDAETVAWAIHDILTQGIFGYWLLGHDS SETGQFLVDGFWSNGINHEGAIRVGENDGV

**□5: EED19099 Reports opsin, putative [...] [gi|218719680]**

>gi|218719680|gb|EED19099.1| opsin, putative [Talaromyces stipitatus MAISALAFYTLAARVRVQSRLLHTLTALITTVSFLSYLAMATGEGVTVKHSIVHHPHKHVPDTHEYLE,

## ■ 解答1-3

### 同じドメインを持つ配列の立体構造表示

CD-Searchの検索結果ページに戻り、ドメインを示している図中の赤四角をクリックしてください。

Conserved domains on [cl|local] Local query sequence

Graphical summary (show options)

Query seq. Superfamilies

Bac\_rhodopsin superfamily

Search for similar domain architectures

|           | Description                      | Pssmid | Multi-dom | E-value |
|-----------|----------------------------------|--------|-----------|---------|
| H cl02333 | Bac_rhodopsin, Bacteriorhodopsin | 121244 | 385       | 2e-54   |

References:

- Marchler-Bauer A et al. (2007), "CDD: a conserved domain database for interactive domain family analysis.", *Nucleic Acids Res.* 35(D):237-240.
- Marchler-Bauer A et al. (2005), "CDD: a Conserved Domain Database for protein classification", *Nucleic Acids Res.* 33(D):192-196.
- Marchler-Bauer A, Bryant SH (2004), "CD-Search: protein domain annotations on the fly", *Nucleic Acids Res.* 32(W):327-331.

Help | Disclaimer | Write to the Help Desk  
NCBI | NLM | NIH

すると、今クリックしたドメインの詳細な情報が表示されます。表示されていた "Bacteriorhodopsin" は Superfamily で、その下のクラスとして pfam01036 と COG5524 が含まれることが分かります。

cl02333: Bac\_rhodopsin, with user query added Super-family

Bacteriorhodopsin

Links ?

Taxonomy: cellular organisms  
PubMed: 1 link  
Protein: Related Protein  
Related Structure

Superfamily ?

pfam01036 COG5524

Statistics ?

Accession: cl02333  
PSSM Id: 121244  
Name: Bac\_rhodopsin  
Created: 8-Feb-2008  
Updated: 25-Nov-2008

pfam01036 をクリックしてください。

これにより、pfam01036 ドメインを含んだ代表的な10本のアミノ酸配列と問い合わせ配列のマルチプルアライメントが表示されます。

(注：本来はこの際にユーザが投入した問い合わせ配列が引数として以下のページに渡されるはずですが、現在渡らない状況となっています。この解説では、渡されたものとして各ページを紹介していきます。)

NCBI CDD pfam01036

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

**Conserved Domains**

Bacteriorhodopsin

PubMed References

Electron-crystallographic refinement of the structure of bacteriorhodopsin. *J Mol Biol* 1995 Jun 16; 259(2):393-427

pfam01036 is a member of the superfamily cl02333.

Sequence Alignment

Reformat Format: Hypertext Row Display: up to 10 Color Bits: 2.0 bit Type Selection: top listed sequences

|             | 10 | 20                     | 30          | 40                        | 50              | 60              | 70        | 80  | 90    | 100  | 110     | 120   | 130 | 140 | 150 | 160 |      |     |
|-------------|----|------------------------|-------------|---------------------------|-----------------|-----------------|-----------|-----|-------|------|---------|-------|-----|-----|-----|-----|------|-----|
| 1GU8_A      | 4  | LTTLFWLGAIGMLVGTLAFAWA | RDAGSGERR   | -YYVTLVGISGIAAVAVYVVMALGV | PV              | AER             |           |     |       |      |         |       |     |     |     |     | TV   | 68  |
| query       | 21 | etlwlgigtllmigt        | FYFIVK      | wGVTDEKEAr                | eYSITILVPGIASAA | YLSMFFGI        |           |     |       |      |         |       |     |     |     |     |      | 90  |
| gi_1168614  | 4  | ITTFITLG               | LLGELLGTAVL | YGF                       | PEETRKRY        | LLIAIPGIAIVAYAL | MALGF     |     |       |      |         |       |     |     |     |     | AV   | 65  |
| gi_114812   | 4  | VATAYLGGAVALIVGV       | AFVWLLy     | RSLDGSPHQs                | ALAPLAII        | IPVFAGLSYVG     | MAYDI     |     |       |      |         |       |     |     |     |     | N    | 63  |
| TNO_B       | 9  | EWWLALGTALMGLGT        | LYFLVK      | gMGVSDPDAKK               | FYAITT          | LVPPIAFT        | MYLSMLLGY |     |       |      |         |       |     |     |     |     | P    | 78  |
| gi_60391839 | 21 | ETLWLGITGLLML          | 1GT         | FYK                       | gWV             | TKEAR           | YV        | SIT | TLVPG | ASAA | LSMFFGI | ALTEV |     |     |     |     | G    | 90  |
| gi_2493837  | 14 | EDFLWVGTAGHFLM         | LN          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | YF  | A    | 83  |
| gi_2493836  | 7  | EAIWLLGTLGTMFL         | GM          | YI                        | YI              | YI              | YI        | YI  | YI    | YI   | YI      | YI    | YI  | YI  | YI  | YI  | P    | 76  |
| gi_461609   | 34 | LASSWVINIALLAGES       | LL          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | YF  | Paa  | 109 |
| gi_2493833  | 28 | LNESWVINIALAGYVLL      | YF          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | YF  | paag | 104 |

"Row Display" プルダウンメニューを操作し、"up to 5"を選択して表示されるアライメントを5本にします。

Sequence Alignment

Reformat Format: Hypertext Row Display: up to 10 Color

Reformat Format: Hypertext Row Display: up to 5 Color

|             | 10 | 20                     | 30          | 40                        | 50              | 60              | 70        | 80  | 90    | 100  | 110     | 120   | 130 | 140 | 150 | 160  |     |    |
|-------------|----|------------------------|-------------|---------------------------|-----------------|-----------------|-----------|-----|-------|------|---------|-------|-----|-----|-----|------|-----|----|
| 1GU8_A      | 4  | LTTLFWLGAIGMLVGTLAFAWA | RDAGSGERR   | -YYVTLVGISGIAAVAVYVVMALGV | PV              | AER             |           |     |       |      |         |       |     |     |     |      | TV  | 68 |
| query       | 21 | etlwlgigtllmigt        | FYFIVK      | wGVTDEKEAr                | eYSITILVPGIASAA | YLSMFFGI        |           |     |       |      |         |       |     |     |     |      | 90  |    |
| gi_1168614  | 4  | ITTFITLG               | LLGELLGTAVL | YGF                       | PEETRKRY        | LLIAIPGIAIVAYAL | MALGF     |     |       |      |         |       |     |     |     |      | AV  | 65 |
| gi_114812   | 4  | VATAYLGGAVALIVGV       | AFVWLLy     | RSLDGSPHQs                | ALAPLAII        | IPVFAGLSYVG     | MAYDI     |     |       |      |         |       |     |     |     |      | N   | 63 |
| TNO_B       | 9  | EWWLALGTALMGLGT        | LYFLVK      | gMGVSDPDAKK               | FYAITT          | LVPPIAFT        | MYLSMLLGY |     |       |      |         |       |     |     |     |      | P   | 78 |
| gi_60391839 | 21 | ETLWLGITGLLML          | 1GT         | FYK                       | gWV             | TKEAR           | YV        | SIT | TLVPG | ASAA | LSMFFGI | ALTEV |     |     |     |      | G   | 90 |
| gi_2493837  | 14 | EDFLWVGAGHFLM          | LN          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | A    | 83  |    |
| gi_2493836  | 7  | EAIWLLGTLGTMFL         | GM          | YI                        | YI              | YI              | YI        | YI  | YI    | YI   | YI      | YI    | YI  | YI  | YI  | P    | 76  |    |
| gi_461609   | 34 | LASSWVINIALLAGES       | LL          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | Paa  | 109 |    |
| gi_2493833  | 28 | LNESWVINIALAGYVLL      | YF          | YF                        | YF              | YF              | YF        | YF  | YF    | YF   | YF      | YF    | YF  | YF  | YF  | paag | 104 |    |

The screenshot shows the NCBI CDD (Conserved Domains Database) page for pfam01036. At the top, there's a navigation bar with links to HOME, SEARCH, SITE MAP, Entrez, CDD, Structure, and Protein. A prominent feature is a 3D ribbon diagram of the protein structure with labeled domains: S4G (green), S4H (blue), and S4L (red). Below the ribbon, a sequence logo for "Bacteriorhodopsin" is shown. On the left, there's a sidebar with sections for Links, Statistics, and Structure, which includes a "Structure View" button. The main content area displays a sequence alignment table with columns for amino acid positions (10 to 230) and rows for various entries (1GU8\_A, query, gi\_114812, TTNO\_B, gi\_60391839). The alignment shows conservation of residues across different sequences. To the right of the alignment, there's a section titled "PubMed References" with a link to a specific paper: "Electron-crystallographic refinement of the structure of bacteriorhodopsin. J. Mol. Biol. 1996, 259(3):393-421".

続いて、上部の”Strcuture”と書かれた箇所の横にある”+”をクリックしてメニューを表示させてください。

This screenshot shows the expanded "Structure" menu from the previous page. The "Structure View" button is highlighted with a blue rectangle. Other options in the menu include "Program: Cn3D", "Drawing: All Atoms", and "Aligned Rows: up to 5". Below the menu, the same sequence alignment table is visible, with the "Structure View" button now highlighted.

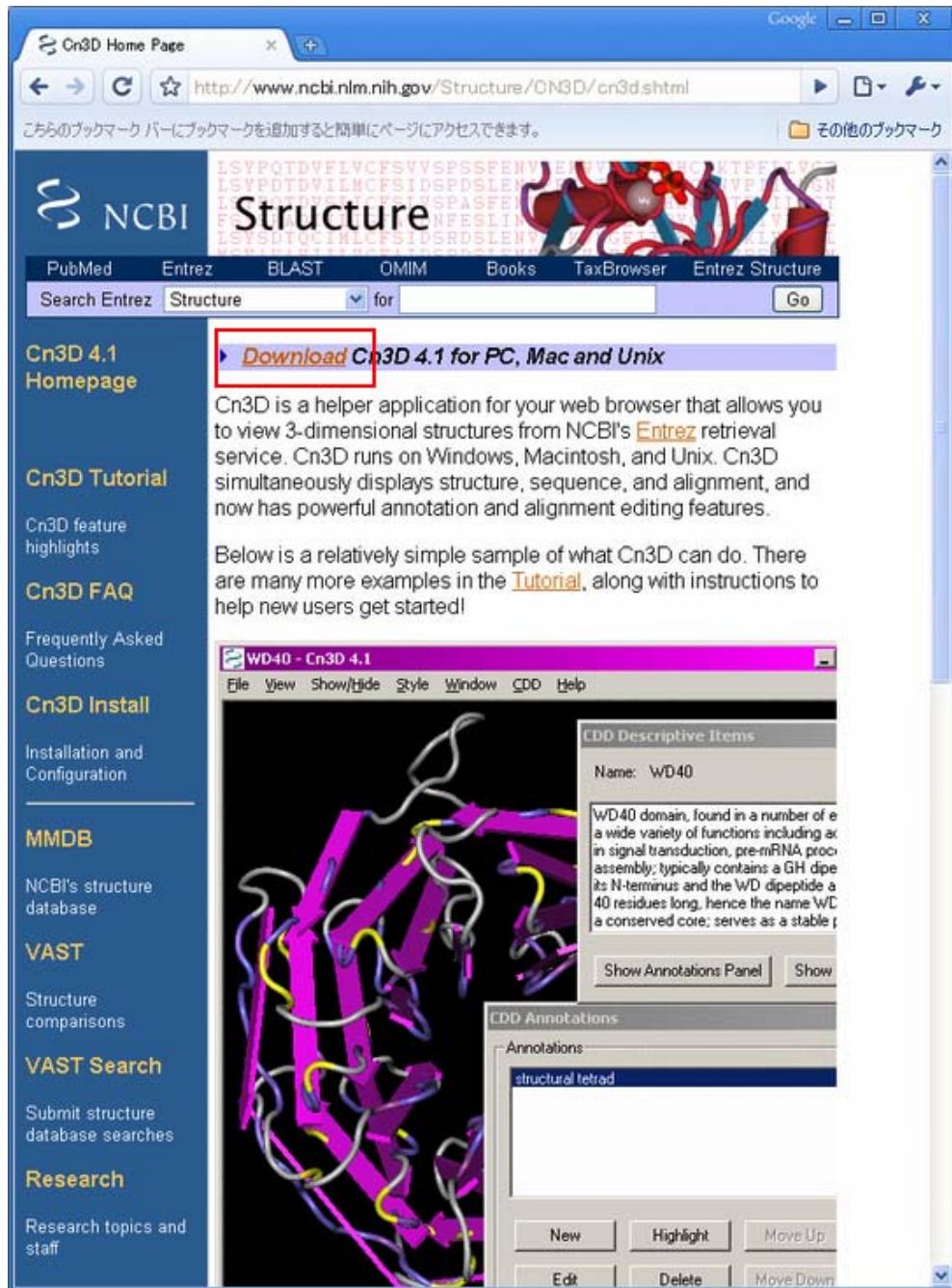
"Structure View"ボタンをクリックしてください（図中青四角）。

この際、Cn3Dがインストールされていない場合には正しく表示することができないのでまずCn3Dをインストールする必要があります。インストールされている人はこの部分は読み飛ばしてください。

[Cn3Dのインストール](#)

まず、Download Cn3Dと書かれた箇所をクリックします。

すると、NCBI Structureのページへ移動します。



上部にある"Download"Cn3D 4.1と書かれた箇所をクリックして Cn3Dのダウンロード画面へ移動します。

Google

NCBI Structure Viewer Ins... ×

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/Cn3D/cn3dinstall.shtml

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI Structure

PubMed Entrez BLAST OMIM Books TaxBrowser Entrez Structure

Search Entrez Structure for Go

Cn3D 4.1 Homepage

Cn3D Tutorial Cn3D feature highlights Cn3D FAQ Frequently Asked Questions Cn3D Install Installation and Configuration

MMDB NCBI's structure database

VAST Structure comparisons VAST Search Submit structure database searches

Research Research topics and staff

Installing the Cn3D 3-D Structure Viewer

Select your operating system:

- Windows
- Macintosh
- Unix

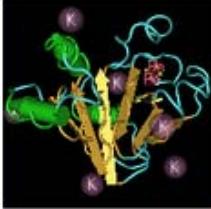
該当するOSを選択

Once you have installed the program files for your platform, follow the instructions below to set up your browser to launch Cn3D from the NCBI web pages (if not already done by the installer).

Configuring Your Browser

NCBI's web servers send data to Cn3D using the MIME type **chemical/ncbi-asn1-binary**. So in order to launch Cn3D properly, you need to configure your browser so that it knows where Cn3D is and that it should use Cn3D when it receives a file of type **chemical/ncbi-asn1-binary**. General instructions on setting this up in the common web browsers follow below.

To test whether your configuration is working, click on the image below, which should launch Cn3D 4.1 and should show a structure and viewpoint very like what's shown in this image:



Click here to test Cn3D 4.1!

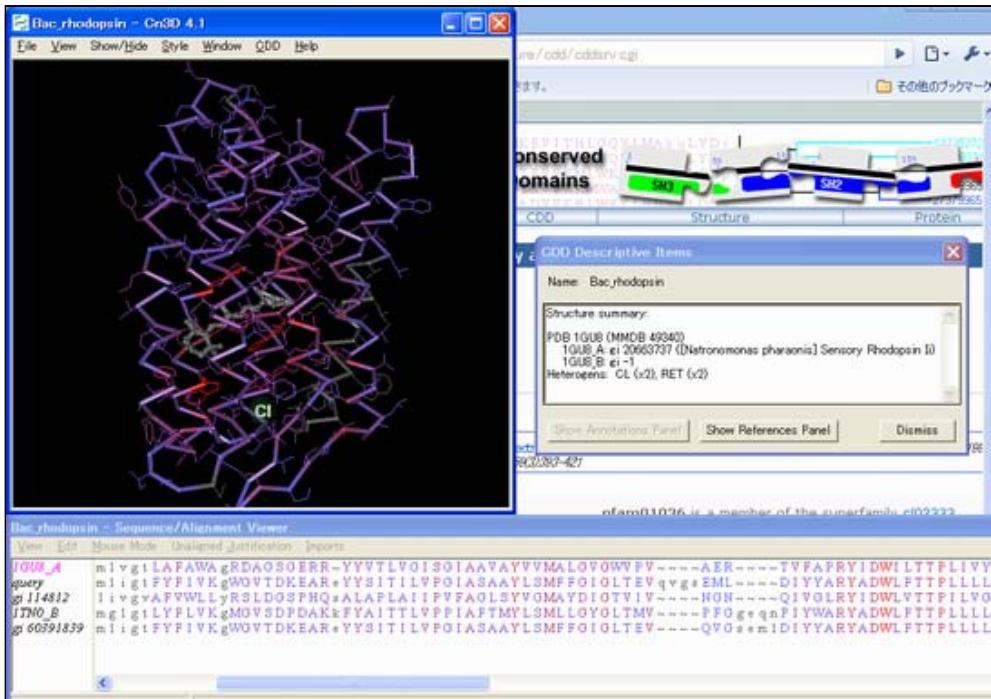
Self-Configuration

Some browsers will let you choose an application when opening up a new MIME type. To clicking on the image above, and if your

するとインストールするコンピュータのOSを聞かれますので、該当するOSの部分をクリックし、その先はOSごとに書かれた指示に従ってCn3Dをインストールしてください。

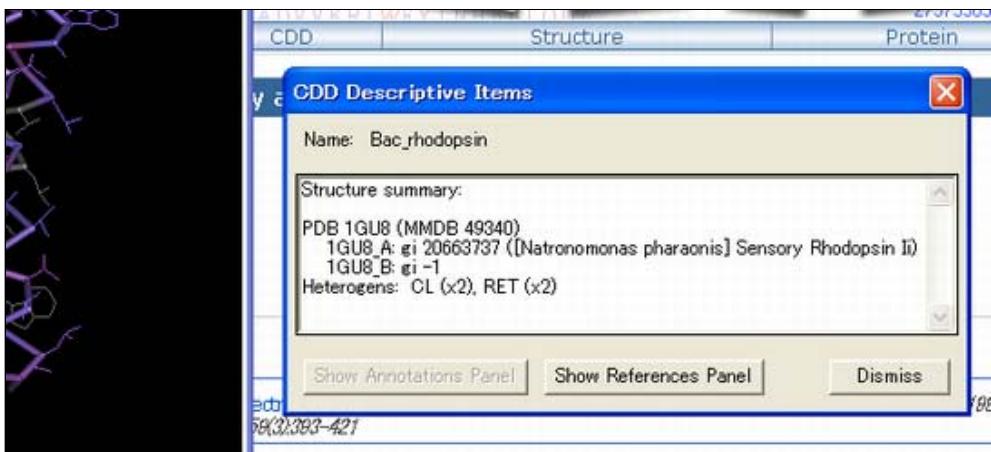
### Cn3Dを用いた立体構造の表示

正しくCn3Dがインストールされている場合には、問い合わせ配列を含むマルチプルアライメントの結果が3次元モデルのテンプレート上に重ねられた形で表示されます。

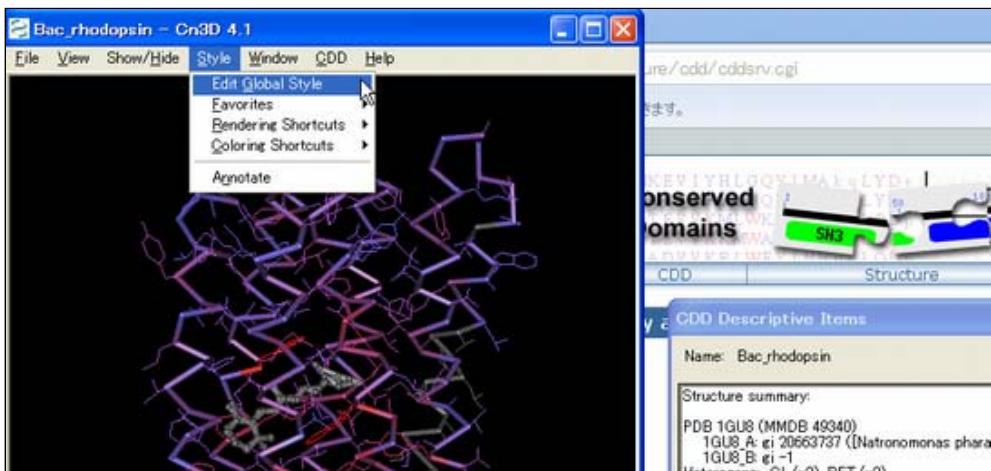


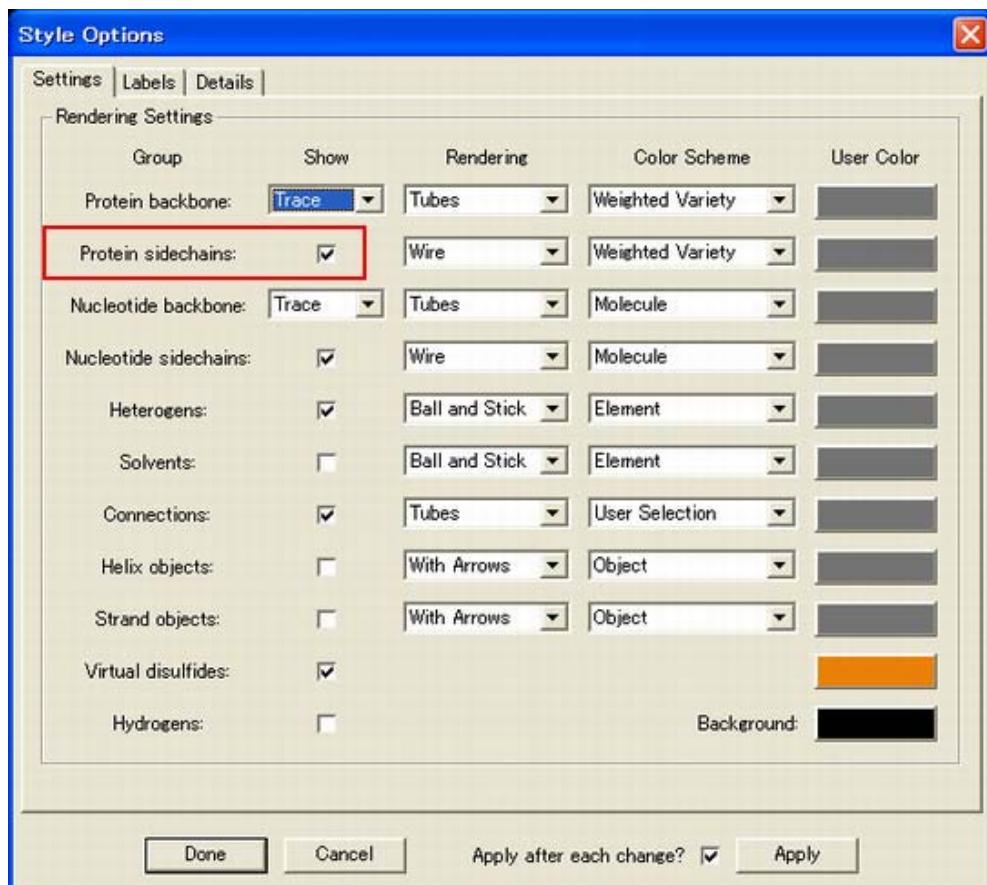
図中紫で太く示されているのがテンプレートとなっている配列で Sequence/Alignment Viewerの一一番上に示されている1GU8\_Aであることがわかります。

このエントリに関する詳細な情報は、CDD Descriptive Itemsという別画面に表示されていて、それによるとPDBに1GU8として登録されている Natronomonas pharaonisのSensory Rhodoosinであることがわかります。

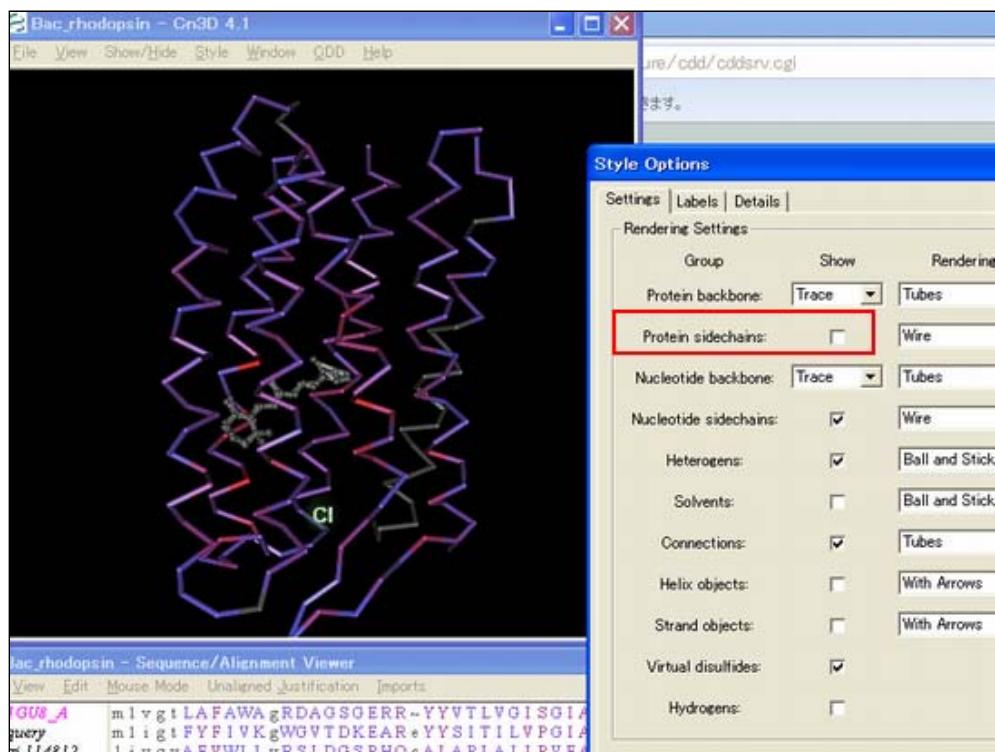


見やすくするためにStyleからメニューでEdit Global Styleを選んで表示オプション画面を表示させてください。



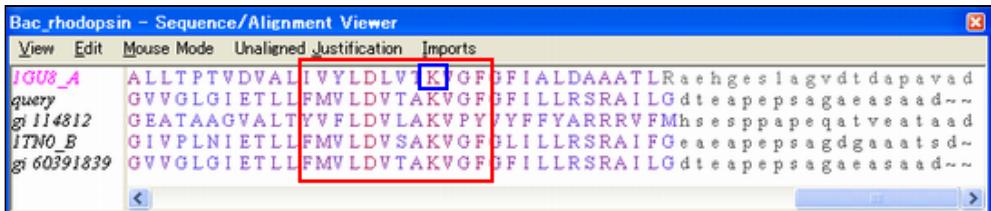


その中からProtein sidechainsの表示に関するチェックボックスを外すことで側鎖の表示を消してください。

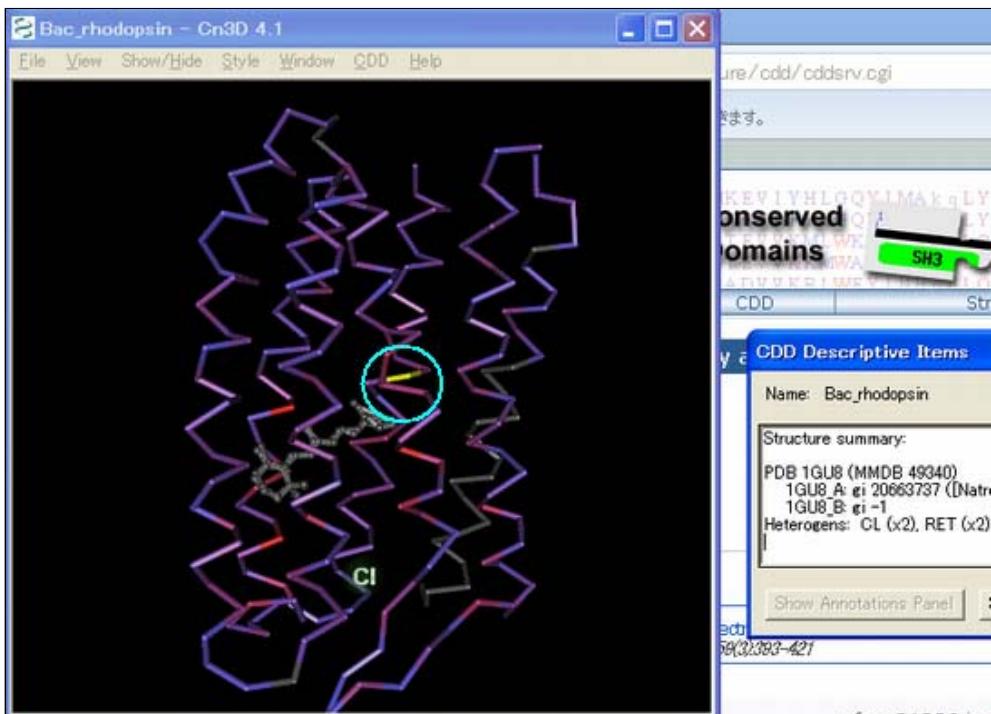


主鎖だけが表示されるようになります。

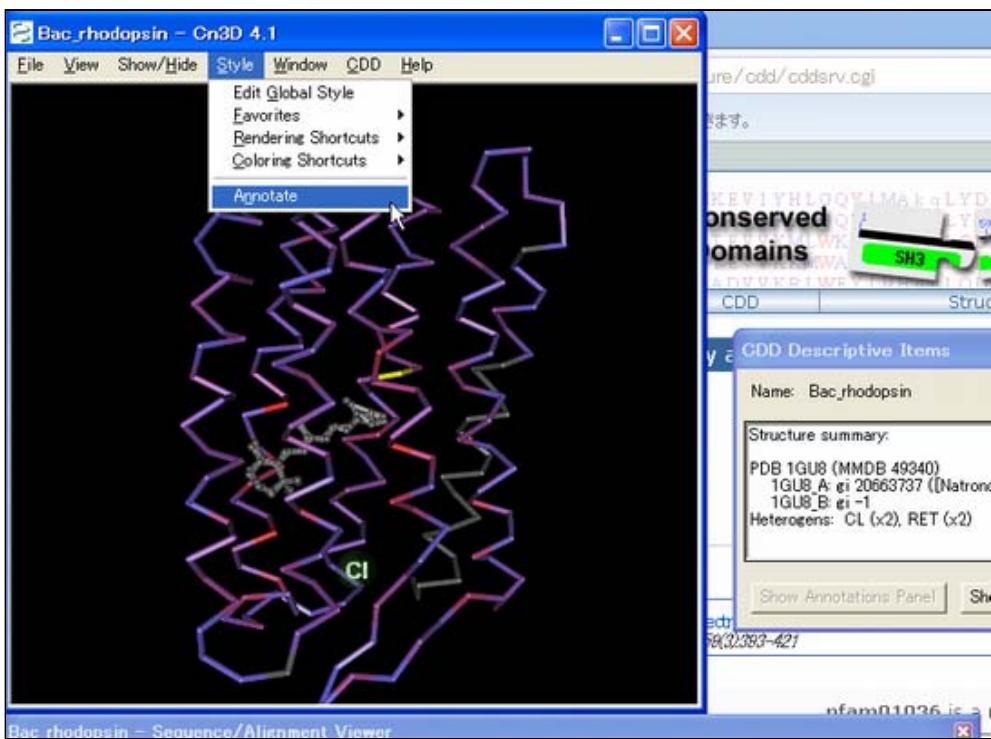
下図中赤で囲んだ領域に示されるようにこれらの配列の下流部分には、 FMVLDVTAKVGFというバクテリオロドブシンに共通な配列部分が存在します。



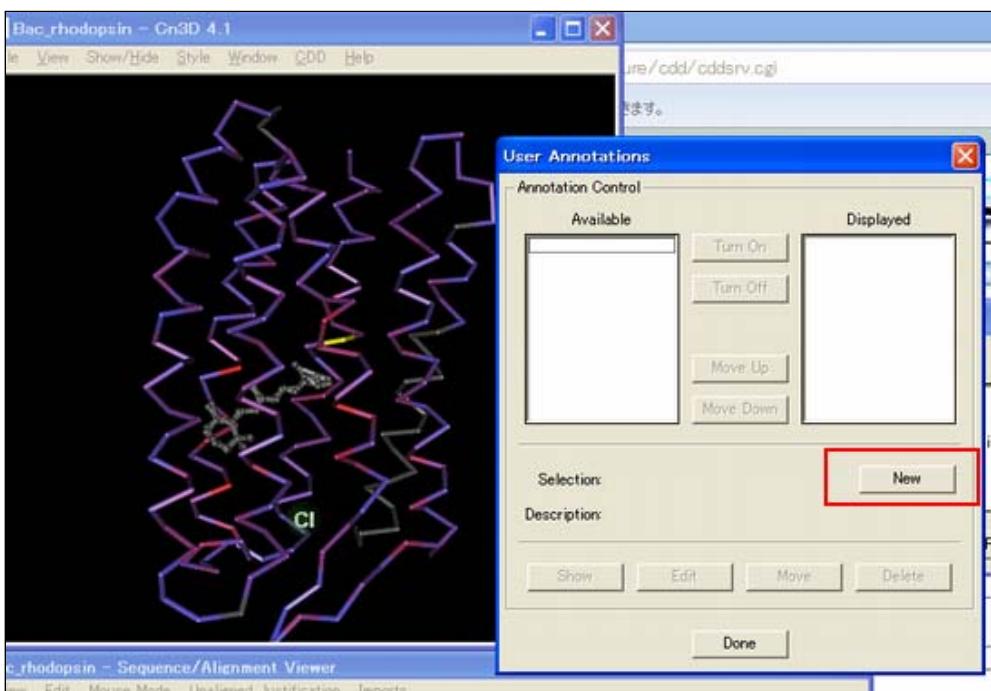
レチナール結合部位であるリジン(K)を3次元構造上で確かめるためにテンプレートとなっている1GU8\_A上のKをダブルクリックしてください。(図中青四角で示しています。)すると3次元構造ビューア上で黄色くハイライトされていることが確認できます(図中水色の○で囲まれた箇所)。



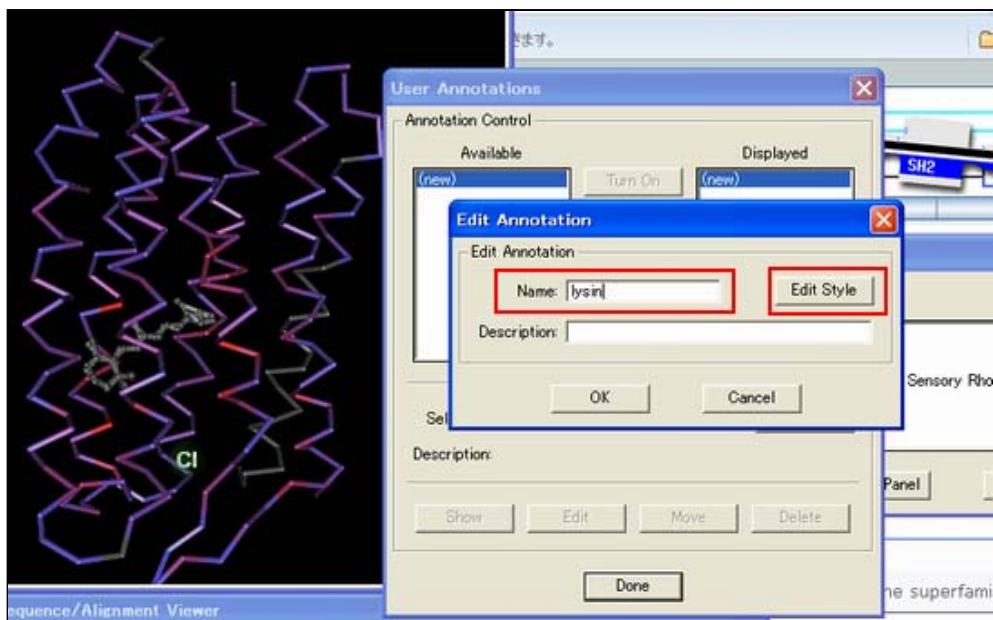
この残基をより目立たせるために側鎖を含めてハイライト表示させることにしましょう。まず、メニューからStyleを選択し、その中のAnnotateを選択します。



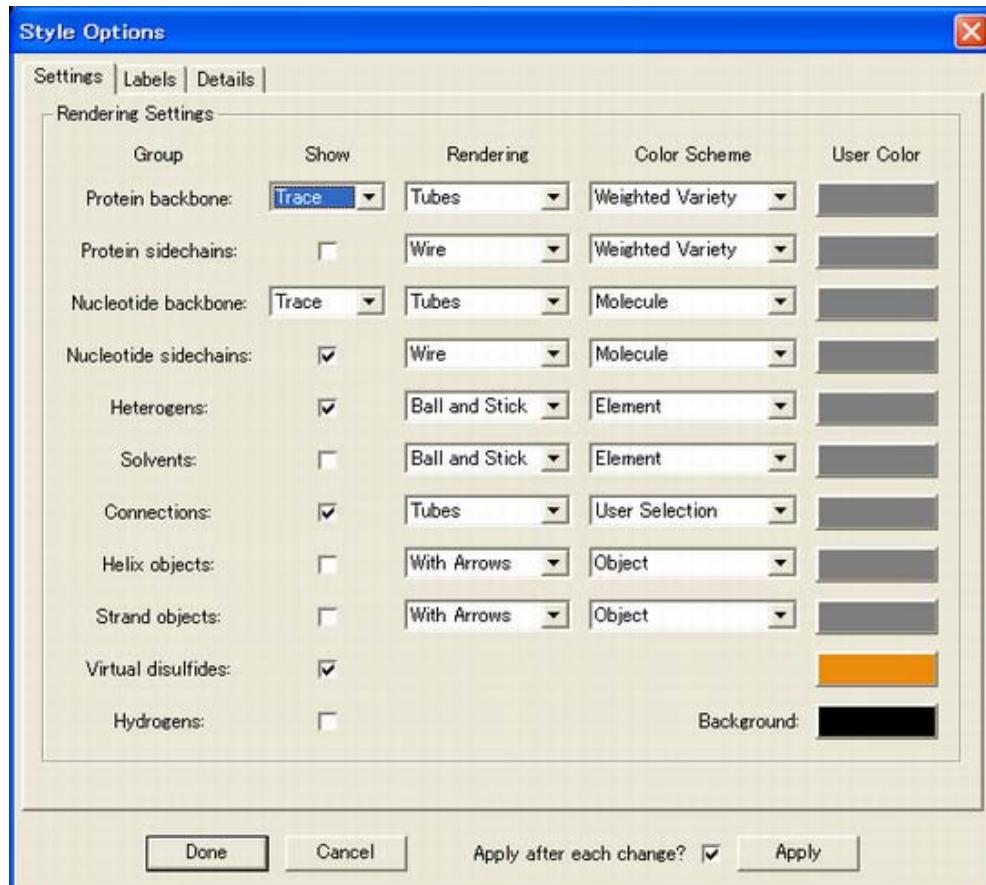
するとユーザ定義に基づいた表示オプションの設定画面が立ち上りますのでその中からNewを選択して新しく定義づけを行います。



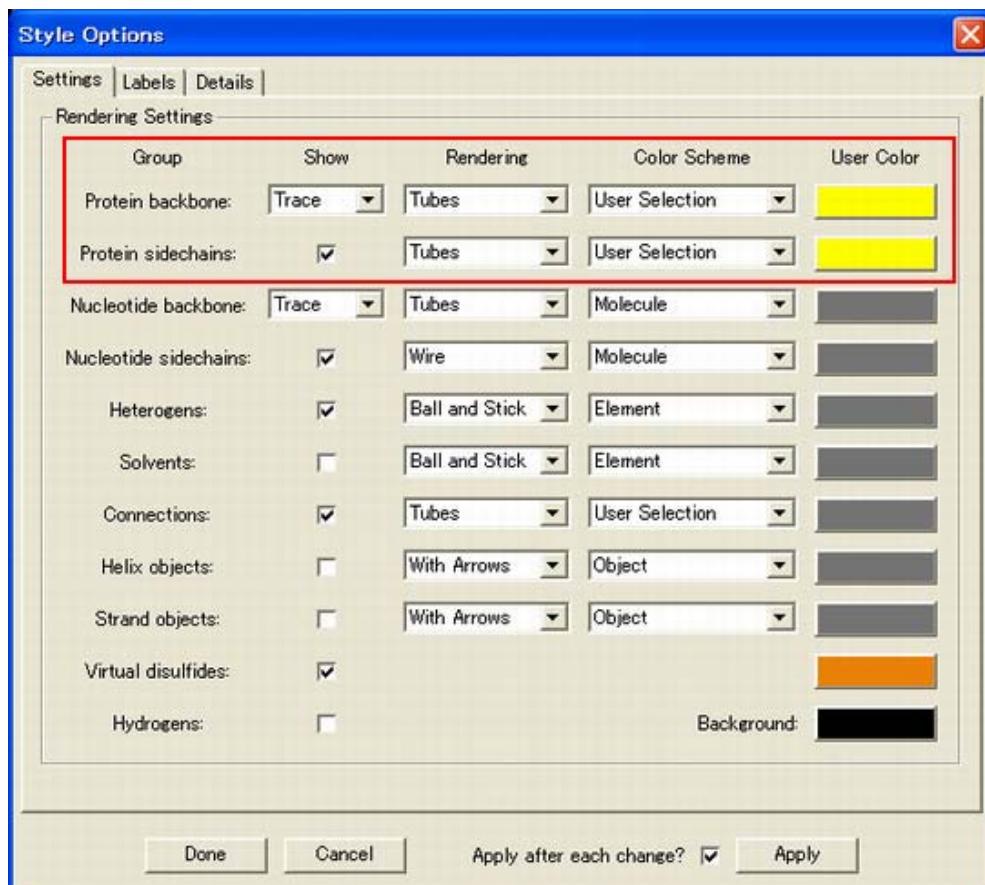
新しく設定する定義に名前をつけるように促されますので適当な名前（ここではlysinとしました）をつけて、Edit Styleボタンをクリックします。



Style設定画面が立ち上ります。

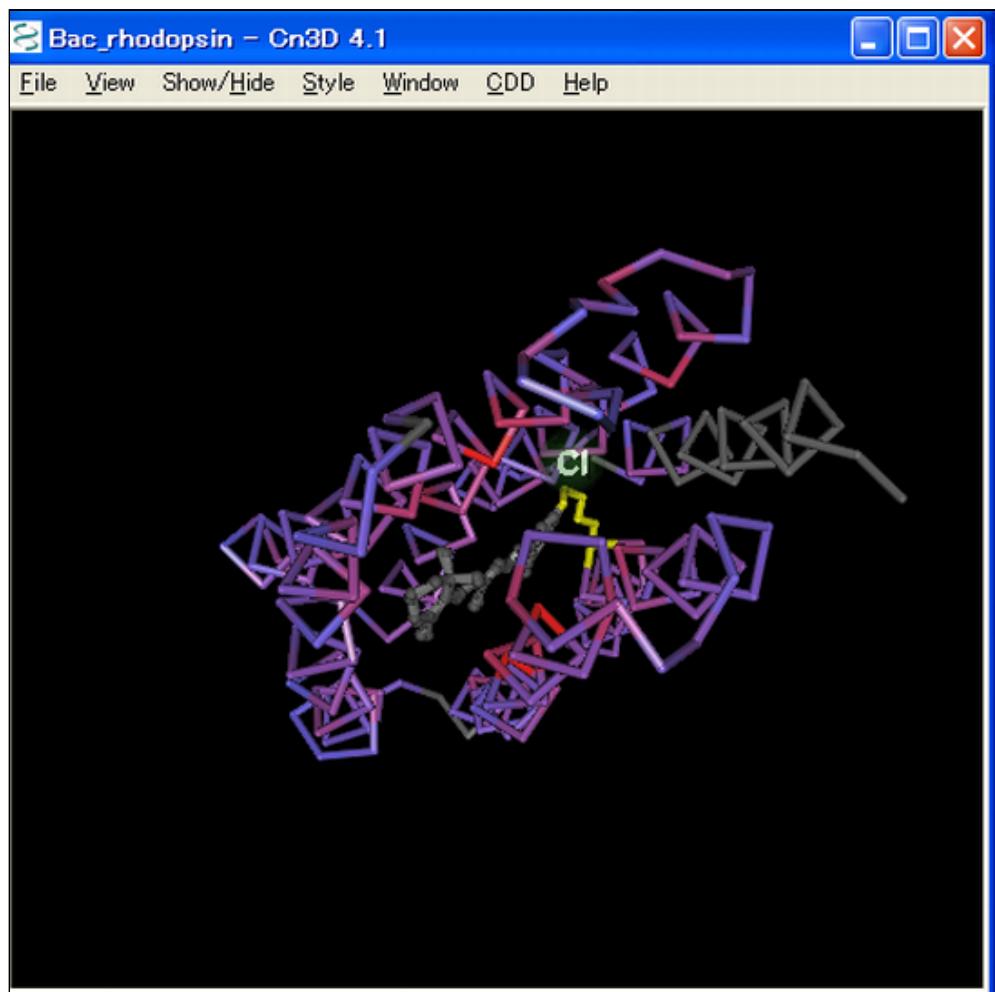


残基の主鎖および側鎖をハイライトさせるためにProtein back boneについてRenderingをTubes、Color SchemeをUser Selection、User Colorを黄色に、同様にProtein sidechainsも設定し Showをチェックします。

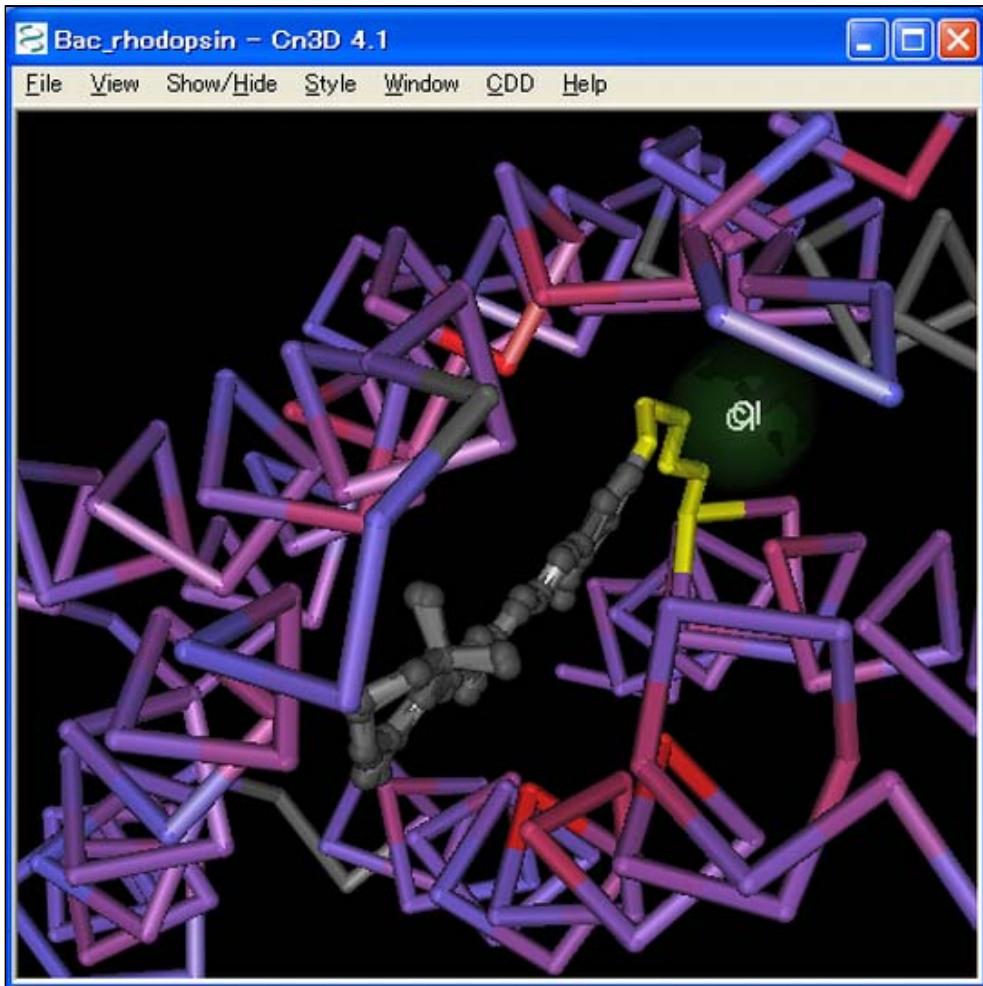


最後にDoneを押してこの画面を閉じ、Edit Annotation, User Annotationの画面も閉じます。

3次元ビューアでこのリジンがハイライトされていることがわかります。



キーボードのzを押してズームインしてその構造をよく確認してください。そのリジンのそばにCで表されたCL分子があることが確認できます。



■ 解答1-4

データベースに含まれる配列と類似構造の配列を取得する

CD-Browserで表示されている1GU8\_Aをクリックしてください。

Sequence Alignment

|             | Reformat | Format:                                       | Hypertext   | Row Display: | up to 5        | Color            |
|-------------|----------|---|-------------|--------------|----------------|------------------|
| 1GU8_A      |          |   |             |              |                |                  |
| query       |          |   |             |              |                |                  |
| gi 114812   |          |   |             |              |                |                  |
| 1TNO_B      |          |   |             |              |                |                  |
| gi 60391839 |          |   |             |              |                |                  |
| 1GU8_A      |          |   |             |              |                |                  |
|             |          | 10  | 20          | 30           | 40             | 50               |
|             |          | ....*   | ....*       | ....*        | ....*          | ....*            |
|             |          | 4 LTTLFWLGAIGMLVGT                            | LAFAWA      | gRDAGSGERR   | -YYVTLVG       | IISGIAAAVAYVMALG |
|             |          | 21 etlwlgigtllmigt                            | FYFIVK      | gWGVTDKEARE  | YYSITILVPG     | IASAAAYLSMFFG    |
|             |          | 4 VATAYLGGAVALIVGV                            | AFVWLL      | yRSLDGSPHQs  | ALAPLAIIPVFAGL | SYVGMAYD         |
|             |          | 9 EWIWLALGTALMGLGT                            | LYFLVK      | gMGWSDPDAKK  | FYAITT         | LVPPIAFTMYLSMLLG |
|             |          | 21 ETLWLGI                                    | GTL         | LMGLIGT      | FYFIVK         | gWGVTDKEARE      |
|             |          |   |             |              | YYSITILVPG     | IASAAAYLSMFFG    |
|             |          |   |             |              |                |                  |
|             |          | 90  | 100         | 110          | 120            | 130              |
|             |          | ....*   | ....*       | ....*        | ....*          | ....*            |
|             |          | DWILTTPLIVYFLGLLAGLDSREFGIVITLNTVVMLAGFAGAMVP | -GIERYALFGN |              |                |                  |
|             |          | 75  |             |              |                |                  |

表示された1GU8\_Aエントリの右上に示されたLinksをクリックし（赤○）、表示されるプルダウンメニューから"Related Structure"（青四角）を選択してください。

PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxonomy OMIM Books

Search Protein for 1GU8A Go Clear

Display GenPept Show 20 Send to

Range: from begin to end Features: COD Refresh

**1: 1GU8\_A. Reports Chain A, Sensory ... [gi|20663737]**

**Comment Features Sequence**

LOCUS 1GU8\_A 239 aa linear BCT 17-JUL-2008

DEFINITION Chain A, Sensory Rhodopsin II.

ACCESSION 1GU8\_A

VERSION 1GU8\_A GI:20663737

DBSOURCE pdb: molecule 1GU8, chain 65, release Jan 24, 2002; deposition: Jan 24, 2002; class: Photoreceptor; source: Mol\_id: 1; Organism\_scientific: Natronomonas Pharaonis; Organism\_common: Natronobacterium Pharaonis; Expression\_system: Escherichia Coli; Exp. method: X-Ray Diffraction.

KEYWORDS .

SOURCE Natronomonas pharaonis

ORGANISM [Natronomonas pharaonis](#) Archaea; Euryarchaeota; Halobacteria; Halobacteriales; Halobacteriaceae; Natronomonas.

REFERENCE 1 (residues 1 to 239)

AUTHORS Edman,K., Royant,A., Nollert,P., Maxwell,C.A., Pebay-Peyroula,E., Navarro,J., Neutze,R. and Landau,E.M.

TITLE Early structural rearrangements in the photocycle of an integral membrane sensory receptor

JOURNAL Structure (Camb) 10 (4), 473-482 (2002)

PUBMED [11937052](#)

REFERENCE 2 (residues 1 to 239)

AUTHORS Edman,K., Royant,A., Nollert,P., Maxwell,C.A., Pebay-Peyroula,E., Navarro,J., Neutze,R. and Landau,E.M.

BLINK, Conserved Domains Links  
 Identical Proteins  
 Related Structures  
 Related Sequences  
 Domain Relatives  
 PubMed  
 Taxonomy  
 LinkOut

1GU8と類似の立体構造既知の配列が表示されていることが確認できます。

NCBI Related structure search

http://structure.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cblast/cblast.cgi?clstr=infra&query=1GU8\_A

こちらのマークバーにマークを追加すると簡単にアクセスできます。

## Related Structures

Structures related to [gi|20663737] [pdb|1GU8\_A]  
 Chain A, Sensory Rhodopsin II

5 Low redundancy structures identified

View Low redundancy sequences, sort by BLAST E-value and display as graphic at 20 sequences per page Go

Query seq Protein Families Superfamilies Bac\_rhodopsin superfamily

| Structures | E-value |
|------------|---------|
| 1GU8_A     | 1e-125  |
| 2F93_A     | 1e-125  |
| 3C0C_A     | 1e-27   |
| 3C0D_A     | 1e-26   |
| 1C3E_A     | 1e-24   |

References:

画面中1GU8と書かれた左横の絵をクリックしてください。（現状、図がうまく表示されていないようです）

1GU8に含まれる構造ドメインの情報が表示されているのが確認できます。

(ここより先の課題は、エントリが課題設定当初と変わってしまったために回答が存在しません。)

## 解答・解説2

### ■ 解答2-1

#### CD-Searchの利用2

問題に示されたリンクあるいは、NCBIのトップページ上部にあるメニューから Structureを選択し、その次のページからCDDを選択することで、CDDのトップ画面に移動します。 上部のテキストボックスに課題中に示されたアミノ酸配列を入力し、ドメイン探索を実行します。

すると下図のような検索結果が得られます。

NCBI Conserved Domain ...

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/wrpsb.cgi

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI

Conserved Domains

Home Search Site Map NewSearch CDD Home PubMed Protein Structure Taxonomy Help

Conserved domains on [gi|2851597|sp|P25848|PHY1\_CERPU]

Local query sequence

SHOW FULL DISPLAY

Graphical summary

Query seq.

Specific hits

Superfamilies

Multi-domains

COG4251

Phytochrome, phytochrome domain

PTKc

Pkc-like superfamily

Pkinase

Search for similar domain architectures

List of domain hits

|     | Description   | Pssmid | Multi-dom | E-value |
|-----|---|--------|-----------|---------|
| [+] | C000192, PTKc, Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, catalytic domain. This PTK family is part...     | 68314  | no        | 2e-49   |
| [+] | pfam00360, Phytochrome, Phytochrome region  | 109420 | N/A       | 8e-107  |
| [+] | C004251, COO4251, Bacteriophytochrome (light-regulated signal transduction histidine kinase) [Signal] | 23974  | yes       | 1e-87   |
| [+] | pfam00089, Pkinase, Protein kinase domain   | 109137 | yes       | 5e-80   |

References:

- Marchler-Bauer A et al. (2007), "CDD: a conserved domain database for interactive domain family analysis", *Nucleic Acids Res.* 35(D):237-240.
- Marchler-Bauer A et al. (2005), "CDD: a Conserved Domain Database for protein classification", *Nucleic Acids Res.* 33(D):192-196.
- Marchler-Bauer A, Bryant SH (2004), "CD-Search: protein domain annotations on the fly", *Nucleic Acids Res.* 32(W):W327-331.

Help | Disclaimer | Write to the Help Desk  
NCBI | NLM | NIH

このエントリには多くのドメインが含まれますが、右上部の”Show Full Display”ボタンを選択することですべてのドメインが表示されます。

The screenshot shows a window titled "NCBI Conserved Domain". The URL is <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/wrpsb.cgi>. The main area displays a protein sequence with various domains highlighted in different colors. A legend on the right identifies the colors: light blue for Superfamilies, pink for multi-domains, and grey for PMS. A specific domain, "Phosphotyrosine\_invariant", is highlighted in yellow. The top navigation bar includes links for "Search", "Help", and "Logout". The bottom of the window has a search bar and a "List of domain hits" section.

| Description   | Psmid | Multi-dom | E-val |
|---|-------|-----------|-------|
| [H]cd00192, PTKc; PTKc: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, catalytic domain. This PTKc family is part...             | 88314 | no        | 2e-4  |
| [H]cd00189, S-TKc; Serine/Threonine protein kinases, catalytic domain. Phosphotransferases of the serine...             | 29142 | yes       | 2e-4  |
| [H]cd05034, PTKc_Src_like; PTKc_Src_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Src kinase subfamily; catalytic (c).    | 88317 | no        | 1e-3  |
| [H]cd05068, PTKc_Frk_like; PTKc_Frk_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Human Frn-related kinase (Frk) and...   | 88351 | yes       | 1e-3  |
| [H]cd05148, PTKc_Srm_Btk; PTKc_Srm_Btk: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Src-relates kinase lacking C...           | 88400 | yes       | 2e-3  |
| [H]cd05060, PTKc_Byk_like; PTKc_Byk_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Spleen Tyrosine Kinase (Syk).           | 88343 | no        | 5e-3  |
| [H]cd05028, PTKc_Jak_rpt2; PTKc_Jak_rpt2: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Janus kinase (Jak) subfamily...         | 88321 | yes       | 1e-3  |
| [H]cd05044, PTKc_C-rost; PTKc_C-rost: Protein Tyrosine Kinases (PTK) family, C-rost and Drosophila Sevenless...         | 88327 | yes       | 1e-3  |
| [H]cd05059, PTKc_Tec_like; PTKc_Tec_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Tec subfamily; catalytic (c).           | 88347 | yes       | 2e-3  |
| [H]cd05057, PTKc_EGFR_like; PTKc_EGFR_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Epidermal Growth Factor Receptor (... | 88340 | yes       | 2e-3  |
| [H]cd05041, PTKc_Fes_like; PTKc_Fes_like: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Fes subfamily; catalytic (c).           | 88324 | yes       | 5e-3  |
| [H]cd05036, PTKc_ALK_LTK; PTKc_ALK_LTK: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Anaplastic lymphoma kinase (ALK).         | 88319 | yes       | 2e-2  |
| [H]cd05067, PTKc_Lck_Blk; PTKc_Lck_Blk: Protein Tyrosine Kinase (PTK) family, Lck and Blk kinases; catalytic (c).       | 88350 | no        | 3e-2  |

セリン/スレオニン キナーゼを初めとして多くのドメインが問い合わせ配列に含まれていることが確認できます。

## NCBI Bookshelfの利用2

このセリン/スレオニン キナーゼに関するより詳しい情報をNCBI Bookshelfを使って調べましょう。問題に示されたリンクあるいは、NCBIのトップページ左にあるメニューから Literatureを選択し、その次のページから Bookshelfを選択することで、NCBI Bookshelfのトップページに移動します。上部の検索ボックスに"Serine/Threonine protein kinases"と入力し探索を実行してください。その結果をクリックしていくことで書籍内部のSerine/Threonine protein kinasesに関する記載を読むことができるようになります。

Google Serine/Threonine protein k... ×

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。 その他のブックマーク

NCBI Bookshelf

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxo

Search Books for Serine/Threonine protein kinases Go Clear Save

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Books Show 20 Send to

All: 152 Figures: 7

**42 Items in Eurekah Bioscience Collection**  
Chapters taken from the Eurekah Bioscience database.  
[Eurekah.com](#) and [Landes Bioscience](#); c2003

**26 Items in Molecular Biology of the Cell**  
Alberts, Bruce; Johnson, Alexander; Lewis, Julian; Raff, Martin; Roberts, Keith; Walter, Peter  
New York and London: [Garland Science](#); c2002

**13 Items in WormBook: The Online Review of C. elegans Biology**  
The C. elegans Research Community, editors  
Pasadena (CA): [WormBook](#); c2005

**13 Items in Cancer Medicine**  
Kufe, Donald W.; Pollock, Raphael E.; Welchelbaum, Ralph R.; Bast, Robert C., Jr.; Gansler, Ted S.; Holland, James F.; Frei, Emil, editors.  
Hamilton (Canada): [BC Decker Inc.](#); c2003

**8 Items in Molecular Cell Biology**  
Lodish, Harvey; Berk, Arnold; Zipursky, S. Lawrence; Matsudaira, Paul; Baltimore, David; Darnell, James E.  
New York: [W. H. Freeman & Co.](#); c1999

**6 Items in Retroviruses**  
Coffin, John M.; Hughes, Stephen H.; Varmus, Harold E.  
Plainview (NY): [Cold Spring Harbor Laboratory Press](#); c1997

**6 Items in Immunobiology**  
Janeway, Charles A.; Travers, Paul; Walport, Mark; Shlomchik, Mark

Serine/Threonine protein k... ×

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?db=books&doptcmdl=DocSum&

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。 | その他のブックマーク

NCBI Bookshelf

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxonomy

Search Books for Serine/Threonine protein kinases AND mboc4[book] Go Clear Save

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Summary Show 20 Send to

All: 20 Figures: 4

Items 1 - 20 of 20 One page.

Recent Activity

□ 1: [The Regulation of Cdk and Src Protein Kinases Shows How a Protein Can Function as a Microchip](#)  
**Molecular Biology of the Cell** -> Introduction to the Cell -> Proteins -> Protein Function

□ 2: [Receptor Serine/Threonine Kinases Function as Cell-Surface Receptors in Plants](#)  
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling in Plants

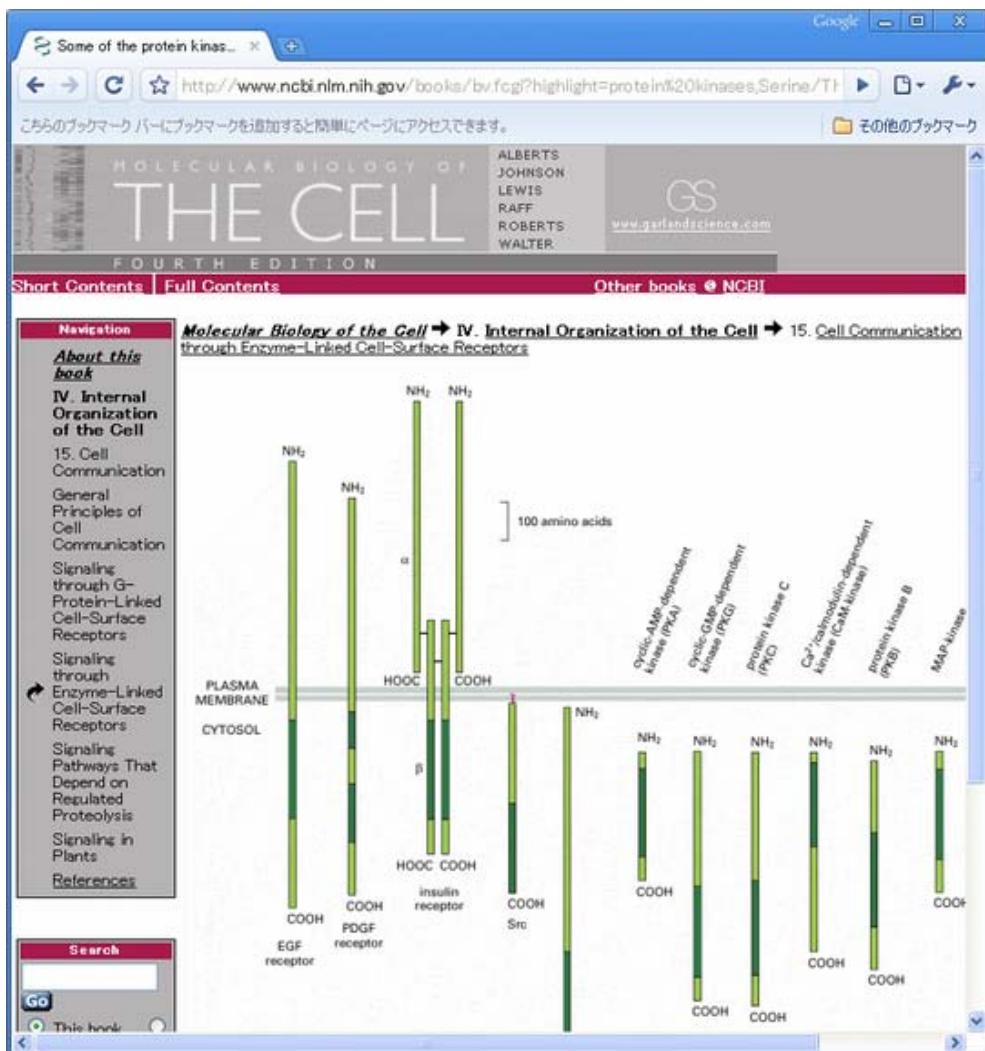
□ 3: [Some of the protein kinases discussed in this chapter](#)   
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling through Enzyme-Linked Cell-Surface Receptors

□ 4: [Signal Proteins of the TGF-Beta Superfamily Act Through Receptor Serine/Threonine Kinases and Smads](#)  
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling through Enzyme-Linked Cell-Surface Receptors

□ 5: [Protein Phosphatases Make the Effects of PKA and Other Protein Kinases Transitory](#)  
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling through G-Protein-Linked Cell-Surface Receptors

□ 6: [A hypothetical model for CLV1 receptor serine/threonine kinase regulation of cell proliferation and/or differentiation in the shoot meristem](#)   
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling in Plants

□ 7: [Summary](#)  
**Molecular Biology of the Cell** -> Internal Organization of the Cell -> Cell Communication -> Signaling through Enzyme-Linked Cell-Surface Receptors

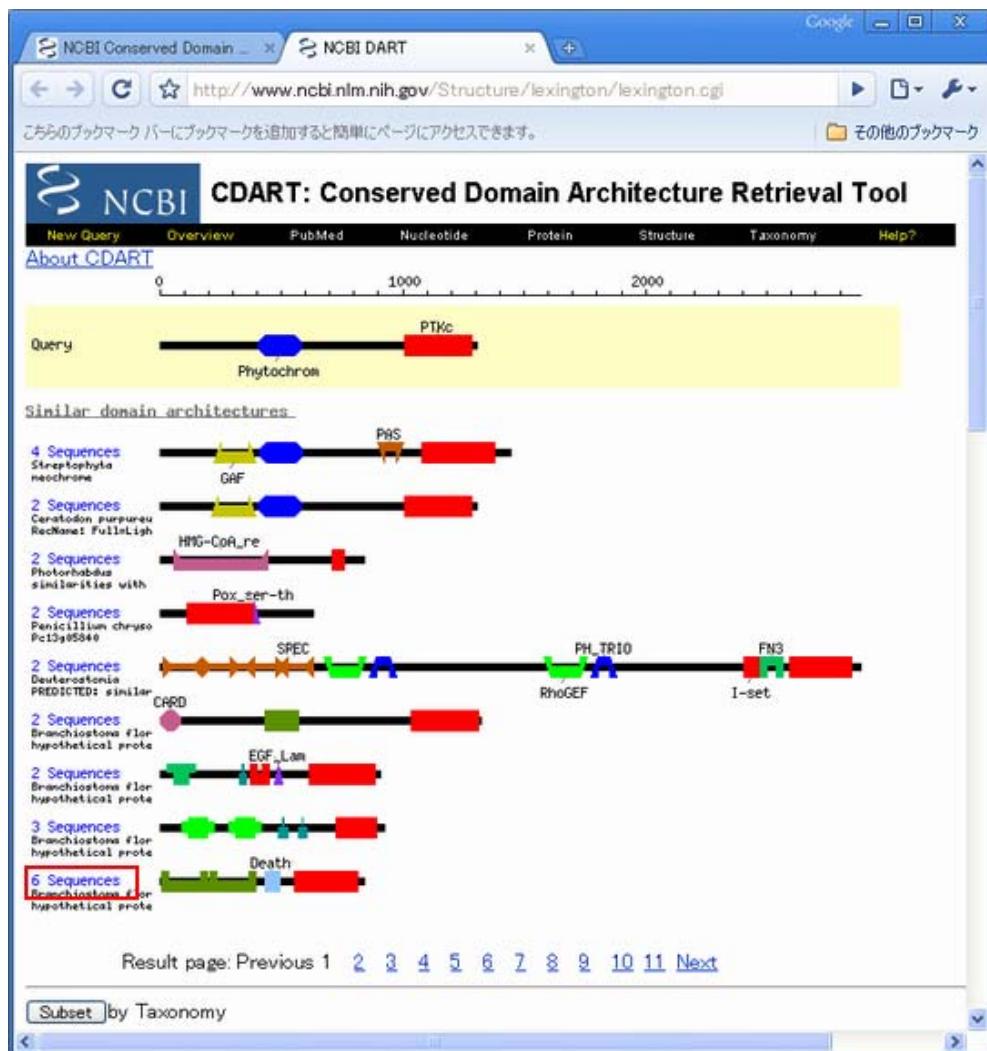


## ■ 解答2-2

### 同じドメインを持つ配列の取得2

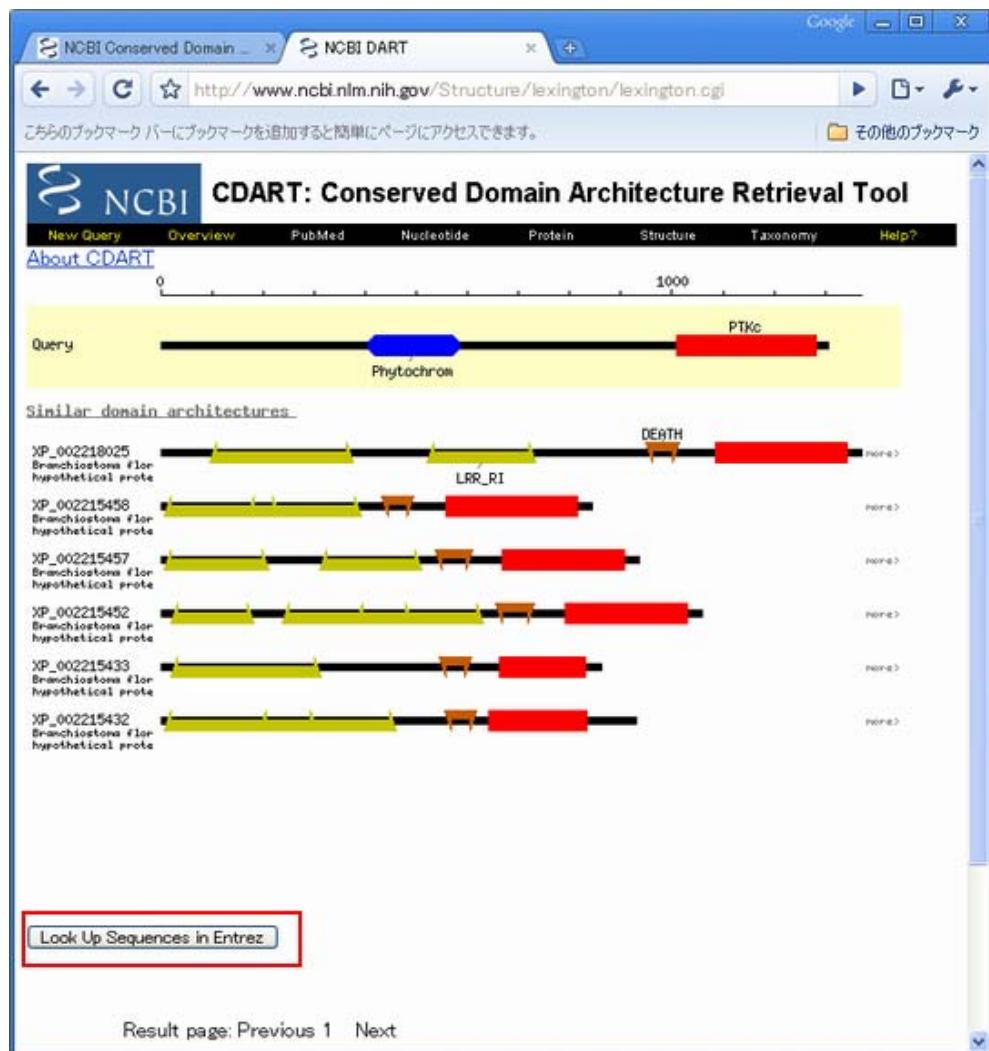
CD-Seacrhの結果画面に戻り、"Search for similar domain architectures"をクリックしこの問い合わせ配列と同様なドメインを持つ配列を取得してください。

まずクリックすると問い合わせ配列に含まれると同様なドメインを持つ配列が模式図として示されます。



それらは非常に多くの種類に大別され、さらにはそれぞれが、4本、2本といった配列を含んだクラスタであることがわかります。

例えば上から9つ目の模式図として示されている構造には6本の配列が含まれており、この6Sequencesをクリックすると6本分の模式図が表示されます。



さらに画面の左下にある"Look Up Sequences in Entrez"を押すとこの6本分の情報を Entrezから得ることができます。

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

NCBI Conserved Domain... 6 selected items - Protein... http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez?cmd=HistorySearch&query\_key=6

Entrez Protein

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC

Search Protein for | Go Clear

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Summary Show 20 Sort by Relevance Send to

All: 6 Bacteria: 0 RefSeq: 6 Related Structures: 0

Items 1 - 6 of 6 One page.

Recent Activity

XP\_002218025 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_80224 [Branchiostoma floridae]  
gi|219440510|ref|XP\_002218025.1|[219440510]

XP\_002215458 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_77827 [Branchiostoma floridae]  
gi|219435357|ref|XP\_002215458.1|[219435357]

XP\_002215457 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_77826 [Branchiostoma floridae]  
gi|219435355|ref|XP\_002215457.1|[219435355]

XP\_002215452 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_77821 [Branchiostoma floridae]  
gi|219435345|ref|XP\_002215452.1|[219435345]

XP\_002215433 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_77808 [Branchiostoma floridae]  
gi|219435307|ref|XP\_002215433.1|[219435307]

XP\_002215432 Reports Conserved Domains, Links  
hypothetical protein BRAFLDRAFT\_77807 [Branchiostoma floridae]  
gi|219435305|ref|XP\_002215432.1|[219435305]

最後にDisplayオプションのプルダウンメニューを"fasta"にすることで、

All Databases PubMed Nucleotide Protein Genome Structure

Search Protein for | Go Clear

Limits Preview/Index History Clipboard Details

Display Summary Show 20 Sort by Relevance Send to

All: 6 Items: 0 Related Structures: 0

Items 1 - 6 of 6 One page.

Recent Activity

1: Brief Conserved Domains, Links  
Summary 224 [Branchiostoma floridae]  
ASN.1 440510

2: Related Sequences Conserved Domains, Links  
GenPept 827 [Branchiostoma floridae]  
GI List 435357

3: Identical Proteins Conserved Domains, Links  
Protein (UniProtKB) 826 [Branchiostoma floridae]  
Protein (RefSeq) 435355

4: Conserved Domain Links Concise Conserved Domain Links  
3D Domain Links Gene Links

アミノ酸配列を表示することができます。

### ■ 解答2-3

## 同じドメインを持つ配列の立体構造表示2

CD-Searchの検索結果ページに戻り、

Conserved domains on [g]2851597[sp|P25848|PHY1\_CERPU]

Graphical summary

Query seq. Local query sequence

Specific hits

Non-specific hits

Phytochrome

PTKc

- PTKc\_src\_like
- PTKc\_Frk\_like
- PTKc\_Sra\_Brk
- PTKc\_Syk\_like
- PTKc\_Jak\_rpt2
- PTKc\_c-ros
- PTKc\_Tec\_like
- PTKc\_EGFR\_like
- PTKc\_Fes\_like
- PTKc\_ALK\_LTK
- PTKc\_Lck\_BIK
- PTKc\_FnhR

serine/threonine kinase ドメインを示している”S\_TKc”と書かれた図中の四角（赤く囲まれている部分）をクリックしてください。

同様のドメインが集められたSuperfamilyに関する情報が記載されたページへと移動します。

NCBI CDD c09925

Conserved Domains

Protein Kinases, catalytic domain

The protein kinase superfamily is mainly composed of the catalytic domains of serine/threonine-specific and tyrosine-specific kinases. It also includes RIO kinases, which are atypical serine protein kinases, aminoglycoside phosphotransferases, and kinases. These proteins catalyze the transfer of the gamma-phosphoryl group from ATP to hydroxyl groups in specific substrates: serine, threonine, or tyrosine residues of proteins.

Links

Taxonomy: root  
PubMed: 1681 links  
Book: 441 links  
Protein: Related Protein  
Related Structure

Statistics

Accession: c09925  
PSSM Id: 127277  
Name: PKc\_like  
Created: 2-Apr-2008  
Updated: 25-Nov-2008

Superfamily

Curated CD Hierarchy

Imported CD

Citing CDD

Marchler-Bauer A, Anderson JB, Derbyshire MK, DeWeese-Scott C, Gonzales NR, Gwadz M, Hao L, He S, Hurwitz D, Jackson JD, Ke Z, Krylov D, Lanczycki CJ, Liebert CA, Liu C, Lu F, Lu S, Marchler GH, Mullokandov M, Song JS, Thanki N, Yamashita RA, Yin JJ, Zhang D, Bryant SH. (2007) CDD: a conserved domain database for interactive domain family analysis. *Nucleic Acids Res.* 35: D237-40.

Disclaimer | Privacy statement

この中からドメインの一つである”cd00180”（図中青く囲んだ領域）をクリックしてください。

これにより、cd00180 ドメインを含んだ代表的な10本のアミノ酸配列と問い合わせ配列のマルチプルアライメントが表示されます。

（注：本来はこの際にユーザが投入した問い合わせ配列が引数として以下のページに渡されるはずですが、現在渡らない状況となっています。この解説では、渡されたものとして各ページを紹介していきます。）

NCBI CDD cd00180

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

**Representatives**

Superfamily: d09925

**Statistics**

PSSM-ID: 29142  
View PSSM: cd00180  
Aligned: 255 rows  
Created: 1-Nov-2000  
Updated: 10-Jan-2006

**Structure**

Program: On3D  
Drawing: All Atoms  
Aligned Rows: up to 10  
Download Cn3D

**Hierarchy**

Interactive Display  
Add Query Sequence:   
Download CDTree

**cd00180 is part of a hierarchy of related CD models.**  
Use the graphical representation to navigate this hierarchy.  
**cd00180 is a member of the superfamily d09925.**

**cd00180 Sequence Cluster**      **Sub-family Hierarchy**

Zoom In      Detailed View      Interactive Display with CDTree

**Sequence Alignment:**

Reformat Format: Hypertext Row Display: up to 10 Color Bits: 2.0 bit Type Selection: top listed sequences

| Feature   | Start | End  | Sequence   |
|-----------|-------|------|--|
| 1.JNK     | 63    | 122  | RVNQNLK...IGSAGGIVCAAYDav...dRNAVAKQLSpfnnq...thakraYRELVLNKKVH...HN         |
| query     | 1008  | 1057 | ...LGSgg-SATIEXAVNLGI...PVAKKTFYGrnnne...dk-EVELLAELCHo---NIT                |
| 1DAW_A    | 32    | 87   | DYEVVRx-VGRGQSYEVFEGINvn...nnEKC1IK1LKovvk...kREKILC...-gPN                  |
| IFSW_C    | 21    | 78   | KTRFEX-1GQAGTVYTAMDva...-1gCEVIRGMNIqqq...-kkI INELILVMREN...-NPN            |
| 1IGI_A    | 11    | 74   | YDTEGE-e-LGGPQAVVYKQCEExs...-tLQYAANFTKgrtkksr...rgvssred EREVSILKEIg...-HPN |
| 1TKI_A    | 6     | 62   | KMIAEd-dLQRIEFQIVHRQExs...-pKTYMAFKYKvkgtd...-qvlKRETSILNTA...-HN            |
| 2PK_A     | 5     | 72   | NIEPKI-LGRGIVSVRRQCHip...-tcKEYAVHIIIDvtagsfsaaevalerealKEVDILRIVs...-gPN    |
| ei 127299 | 160   | 222  | QEETIMrIYNGTfGHVLTNskeredevcyheENYAVKIIKik...-nkDKEARILLQd...-HPN            |
| ei 729073 | 4     | 63   | RYERLQK-IQEGSTGVNTFRAdvt...-tgTIVAVVRR1Rlekeee...-gypctaTREISILKEI...-HEN    |
| ei 765068 | 31    | 98   | EYRLGP1-LIKQGFGTIVFAsrhvt...-drQVAIKV18rrnrvlg...-tvsdsvtcPLEVALLWIVzezmaHPg |

"Row Display" プルダウンメニューを操作し、"up to 5"を選択して表示されるアライメントを5本にします。

NCBI CDD cd00180

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/cddsrvc.cgi

こちらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

Created: 1-Nov-2000  
Updated: 10-Jan-2006

cd00180 is a member of the superfamily d09925.

**cd00180 Sequence Cluster Sub-famil**

**Structure**

Structure View (Red Box)

Program: Cn3D  
Drawing: All Atoms  
Aligned Rows: up to 5  
Download Cn3D

**Hierarchy**

Interactive Display  
Add Query Sequence:   
Download CDTree

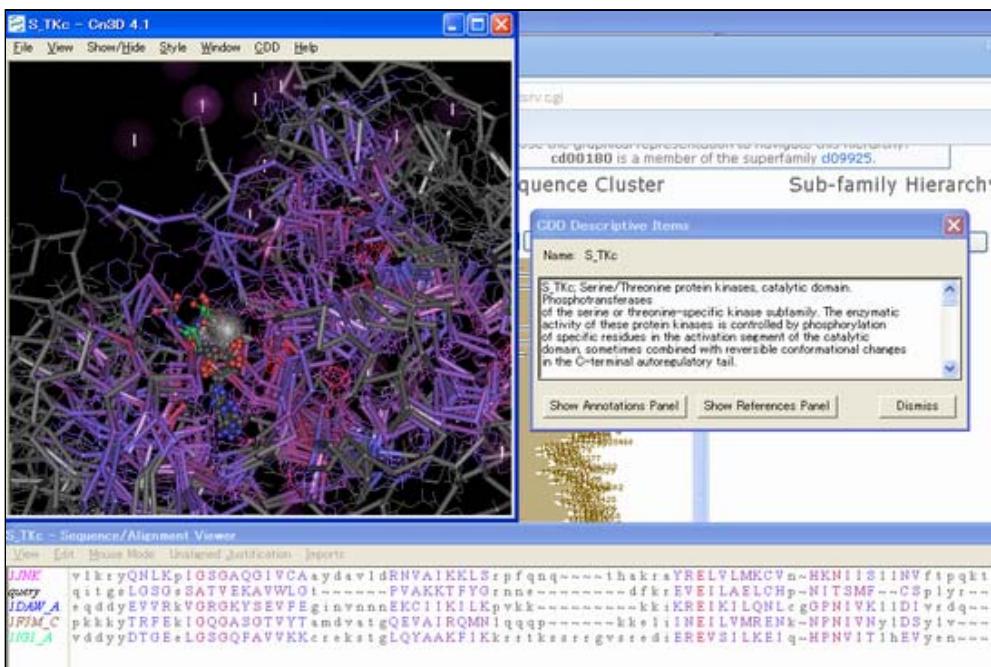
**Sequence Alignment**

Reformat Format: Hypertext Row Display: up to 5 Color Bits: 2.0 bit Type Selection: top

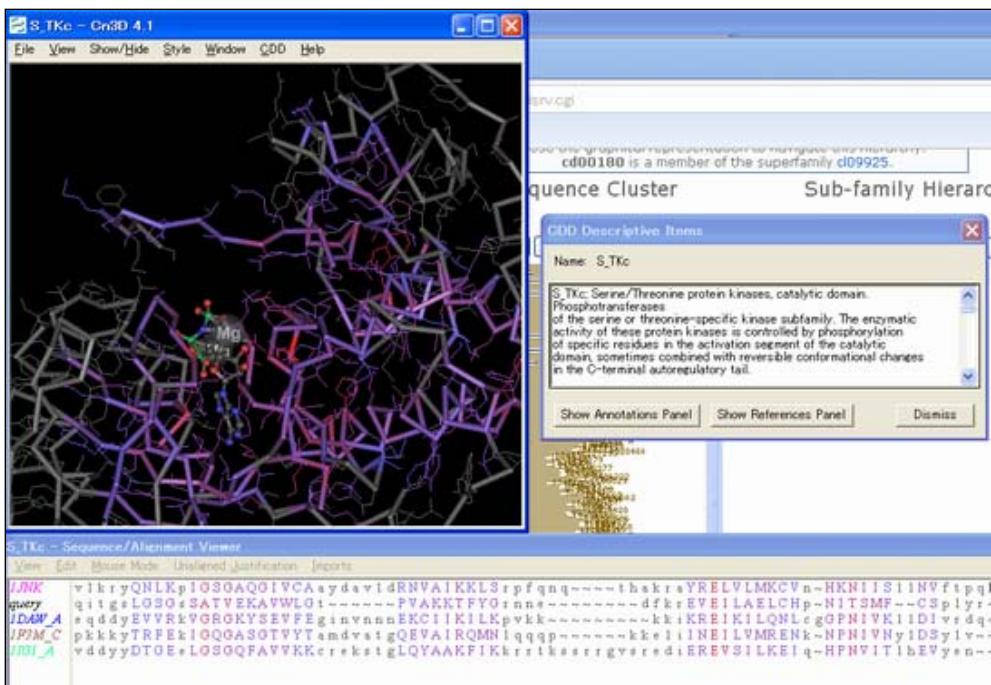
|           | 10  | 20                                  | 30         | 40         | 50         | 60         | 70         | 80         |
|-----------|---|-------------------------------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| Feature 1 | .....*  | .....*                              | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     |
| IJNK      | 63 RYQNLKoIGSGaQGTVCAAYDavidIRNVAINKLsrpfqna---   | thakravRELVLMKVN-HKNIISLLNVFTpkktie | 137        |            |            |            |            |            |
| query     | 1008 gsLGSgsATVEKAVLGL-----PVAKKTTFYGrnne-----dfkryEVEILAELOMo-NITSMF--CSpIyr-----        | 1066                                |            |            |            |            |            |            |
| IDAV_A    | 32 DTEVVHKVGGRGKSEVFEGINvnmeEKCIKIKLkvkk-----kkIKREIKIKLQNLcggPNIVKLLDIVRdqh-----         | 99                                  |            |            |            |            |            |            |
| IF3M_C    | 21 KVTRFEKIGGGASGTVTAMdatgEVAIQRMNlqqap-----kkelIINEILVMRENK-NPNIVNYLDsYlgv-----          | 89                                  |            |            |            |            |            |            |
| IIIG_I_A  | 11 YYDTGEeLGSGFCAVVKKREkstgLYAAKFTIKkrktksrrgysred EREVSILKEia-HPWIWITLHEVEnk-----        | 85                                  |            |            |            |            |            |            |
|           | 90 .....*   | 100 .....*                          | 110 .....* | 120 .....* | 130 .....* | 140 .....* | 150 .....* | 160 .....* |
| Feature 1 | .....*  | .....*                              | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     |
| IJNK      | 138 efqdVYLVMELM-DANLQCVIqm---eLDHERMSYLLOMLCGIKHLHSAGIIHRLKPSNIVWks-----dCTLKILDf-----   | 208                                 |            |            |            |            |            |            |
| query     | 1087 rkcsINELMDg-DLLALMQRrldrneDHDSPPFcILEVVDIILQTSSEGmNYLHEKGIIHRDLKSM-----ILVKSWKt----- | 1141                                |            |            |            |            |            |            |
| IDAV_A    | 100 -skLPSLFEYVnNTDFKVLYp-----LTIDYDITYIYIELLLKALDYCHSGCIMHHRVWPHNWmDne-----TRKLRLDf----- | 170                                 |            |            |            |            |            |            |
| IF3M_C    | 90 --deJWVMEYLagQSLTDVWte--tcMDEQIAAVDRCGQIALEFLHSNOVtHRIK3DNILLQ-----GSVXLIOf-----       | 160                                 |            |            |            |            |            |            |
| IIIG_I_A  | 86 --tdVILILELVAGGELFDFLaek-esLTEEEATEFLKQILNGVYLYLHSLOIAHFOLPKENIMLLdrnvpkPRIKIOf-----   | 161                                 |            |            |            |            |            |            |
|           | 170 .....*  | 180 .....*                          | 190 .....* | 200 .....* | 210 .....* | 220 .....* | 230 .....* | 240 .....* |
| Feature 1 | .....*  | .....*                              | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     | .....*     |
| IJNK      | 209 -----GLARTAGTsf-nMTPVYVTVBYYRAPEVILem-gYKErVdI-----#SVGCIMGeMvr-hKIL-----             | 262                                 |            |            |            |            |            |            |
| query     | 1142 kseigvhVWVADFGLsktkDSSTRYNOTBNGTNRnna-aPEV!NLGVestageisfdgkvpVYPLKSDVYsf-g-mVCY----- | 1219                                |            |            |            |            |            |            |
| IDAV_A    | 171 -----GLAEFYKpgh-oYNRVWASRYFKGPPELLVdIqdYDVsLDM-----WLGOMFAGMifriEPF-----              | 228                                 |            |            |            |            |            |            |
| IF3M_C    | 161 -----GFCAGQTPeaskRSTWVGTpYBMAPEVWTrk-aYGPkVdI-----SLSGJMAIEml-eEP-----                | 215                                 |            |            |            |            |            |            |
| IIIG_I_A  | 162 -----GLAHKIDfgn-eFKNIFGTPEFVAPEIVNve-pLGLeADM-----S1GIVITYJlls-s-JASP-----            | 215                                 |            |            |            |            |            |            |

続いて、"Structure View"ボタン（図中赤四角）をクリックしてください。正しくCn3Dがインストールされている場合には、問い合わせ配列を含むマルチプルアライメントの結果が3次元モデルのテンプレート上に重ねられた形で表示されます。

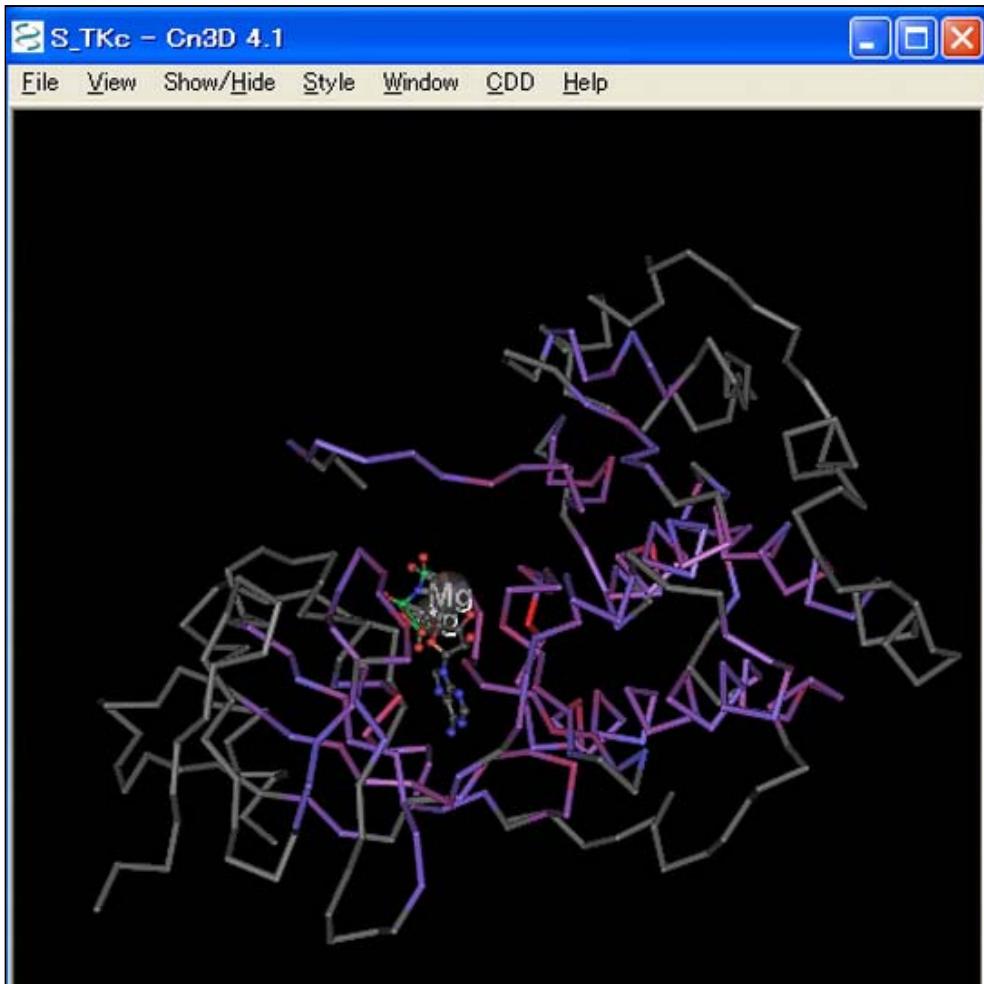
## Cn3Dを用いた立体構造の表示2



一番上に表示された構造のみを表示するために、下矢印キーを押してください。



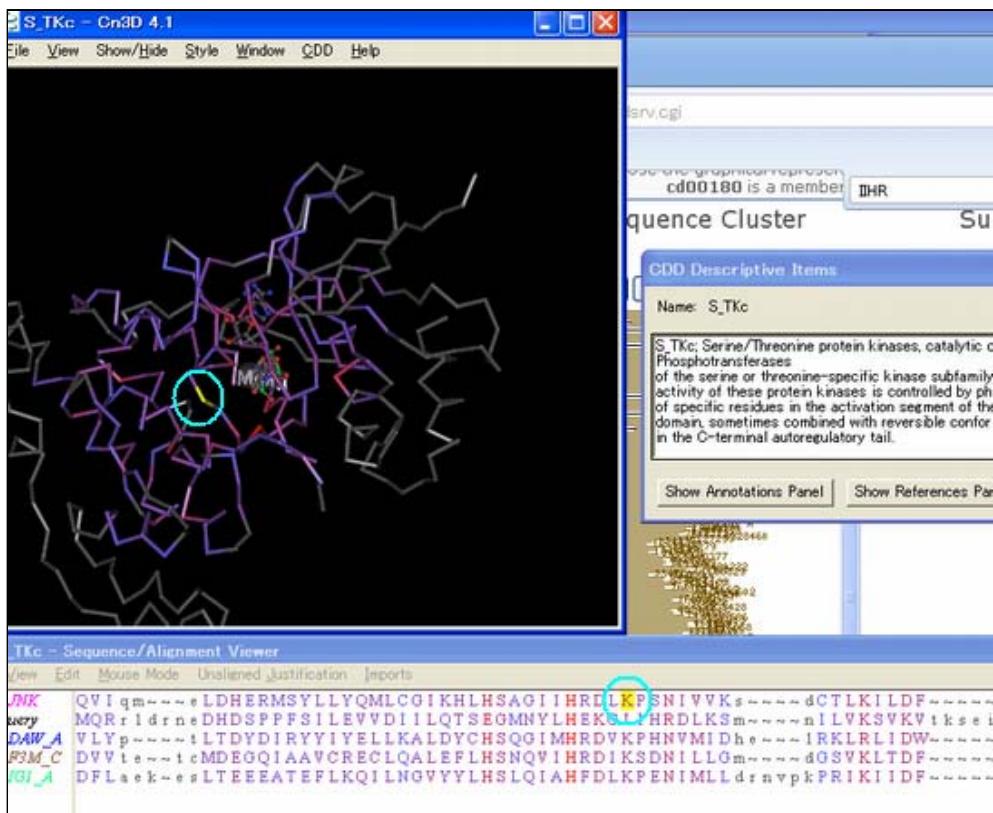
StyleからメニューでEdit Global Styleを選んで表示オプション画面を表示させてください。その中からProtein sidechainsの表示に関するチェックボックスを外すことで側鎖の表示を消してください。主鎖だけが表示されるようになります。



下図中赤で囲んだ領域に示されるようにこれらの配列の下流部分に I I H R D L K S M N I L V というセリン/スレオニン キナーゼ活性部位に共通な配列部分が存在します。

| S_TKc - Sequence/Alignment Viewer |  |
|-----------------------------------|--|
|                                   | View Edit Mouse Mode Unaligned Justification Imports<br>1JNK QVI qm~~~~eLDHERMSYLLYQMLCGIKHLHSAGIIHRDI[K]SNIIVV[...]<br>query MQR r i d r n eDHDSPPFSILEVVVDIILQTSSEGMMYLHEKGIIHRDLK[...]<br>1DAW_A VLY p~~~~~tLTDYDIRYYIYELLKALDYCHSQGIMHRDVKPHNVMI[...]<br>1F3M_C DVV t e~~~tcMDEGQIAAVCRECLQALEFLHSNOV[...]<br>1IG1_A DFL a k ~esLT EEE EATEFLKQILNGVYYLHSLQIAHFDLKPE[NML][...] |
| 1JNK                              | QVI qm~~~~eLDHERMSYLLYQMLCGIKHLHSAGIIHRDI[K]SNIIVV[...]  |
| query                             | MQR r i d r n eDHDSPPFSILEVVVDIILQTSSEGMMYLHEKGIIHRDLK[...]  |
| 1DAW_A                            | VLY p~~~~~tLTDYDIRYYIYELLKALDYCHSQGIMHRDVKPHNVMI[...]  |
| 1F3M_C                            | DVV t e~~~tcMDEGQIAAVCRECLQALEFLHSNOV[...]   |
| 1IG1_A                            | DFL a k ~esLT EEE EATEFLKQILNGVYYLHSLQIAHFDLKPE[NML][...]  |

ATP結合部位であるリジン(K)を3次元構造上で確かめるためにテンプレートとなっている1JNK上のKをダブルクリックしてください。 (図中青四角で示す。)すると3次元構造ビューア上で黄色くハイライトされます。



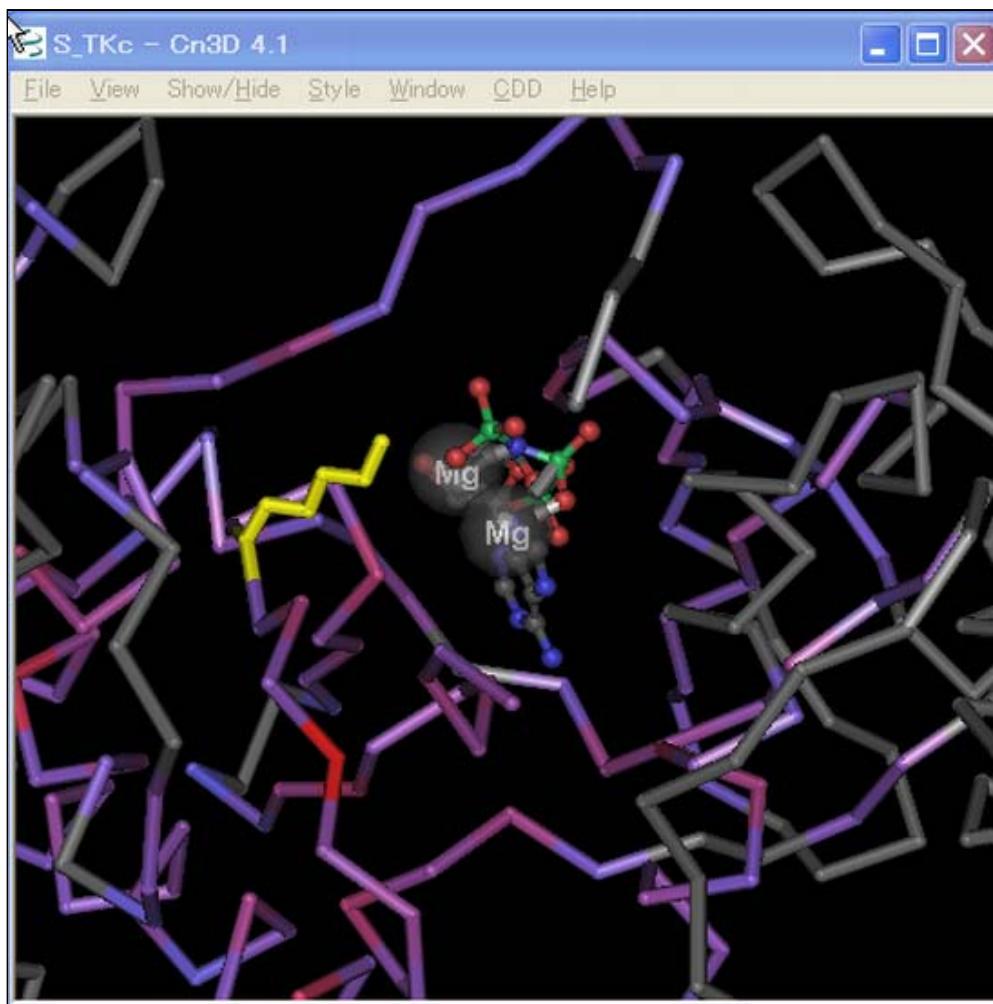
この残基をより目立たせるために側鎖を含めてハイライト表示させます。まず、メニューからStyleを選択し、その中のAnnotateを選択します。

するとユーザ定義に基づいた表示オプションの設定画面が立ち上がりますのでその中からNewを選択して新しく定義づけを行います。

新しく設定する定義に名前をつけるように促されますので適当な名前をつけて、Edit Styleボタンをクリックします。

Style設定画面が立ち上がりますので、この残基の主鎖および側鎖をハイライトさせるためにProtein back boneについてRenderingをTubes、Color SchemeをUser Selection、User Colorを黄色に、同様にProtein sidechainsも設定し Showをチェックします。最後にDoneを押してこの画面を閉じます。

3次元ビューアでこのリジンがハイライトされています。キーボードのzを押してズームインしてその構造をよく確認してください。そのリジンのそばにMg分子があることが確認できます。



■ 解答2-4

[データベースに含まれる配列と類似構造の配列を取得する2](#)

CD-Browserで表示されている1JNKをクリックしてください。

NCBI CDD cd00180

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/cdd/cddsrvc.cgi

これらのブックマークバーにブックマークを追加すると簡単にページにアクセスできます。

My NCBI [Sign In] [Registered]

PubMed Nucleotide Protein Genome Structure PMC Taxonomy OMIM Books

Search Protein for 1JNK Go Clear

Display GenPept Show 20 Send to

Range: from begin to end Features: CDD + Refresh

**□ 1: 1JNK.. Reports ...[gi:5542282] Chain renamed from (blank) to A during PDB remediation 2007**

**Comment Features Sequence**

LOCUS 1JNK 422 aa linear PRI 03-JUN-1998  
 DEFINITION The C-Jun N-Terminal Kinase (Jnk3s) Complexed With Mgamp-Pnp.  
 ACCESSION 1JNK  
 VERSION 1JNK GI:5542282  
 DBSOURCE pdb: molecule 1JNK, chain 32, release Jun 3, 1998;  
 deposition: Jun 3, 1998;  
 class: Transferase;  
 source: Mol\_id: 1; Organism\_scientific: Homo Sapiens;  
 Organism\_common: Human; Expression\_system: Escherichia Coli;  
 Exp. method: X-Ray Diffraction.

KEYWORDS  
 SOURCE Homo sapiens (human)  
 ORGANISM Homo sapiens  
 Eukaryota; Metazoa; Chordata; Craniata; Vertebrata; Euteleostomi;  
 Mammalia; Eutheria; Euarchontoglires; Primates; Haplorrhini;  
 Catarrhini; Hominoidea; Homo.  
 REFERENCE 1 (residues 1 to 422)  
 AUTHORS Xie,X., Gu,Y., Fox,T., Coll,J.T., Fleming,M.A., Markland,B.,  
 Caron,P.R., Wilson,K.P. and Su,M.S.  
 TITLE Crystal structure of JNK3: a kinase implicated in neuronal  
 apoptosis  
 JOURNAL Structure 6 (8), 983-991 (1998)  
 PUBMED 9739089  
 REFERENCE 2 (residues 1 to 422)  
 AUTHORS Xie,X. and Su,M.S.S.  
 TITLE Direct Submission  
 JOURNAL Submitted (03-JUN-1998)  
 COMMENT Revision History:  
 JUN 8 99 Initial Entry.  
 FEATURES Location/Qualifiers  
 source 1..422  
 /organism="Homo sapiens"  
 /db\_xref="taxon:9606"  
 Region join(1..148,372..422)  
 /region\_name="Domain 1"  
 /note="NCBI Domains"  
 SecStr 47..54  
 /sec\_str\_type="sheet"  
 /note="strand 1"  
 SecStr 55..62  
 /sec\_str\_type="sheet"  
 /note="strand 2"  
 Region 63..359  
 /region\_name="S\_TKc"  
 /note="Serine/Threonine protein kinases, catalytic domain.  
 Phosphotransferases of the serine or threonine-specific  
 kinase subfamily. The enzymatic activity of these protein  
 kinases is controlled by phosphorylation of specific  
 residues in the activation...; cd00180"  
 /db\_xref="CDD:29142"

(ここより先の課題は、NCBIのデータ構造が課題設定当初と変わってしまったために回答が存在しません。)

---

原文更新日：2006年3月28日 日本語版更新日：2009年1月20日

---

All Rights Reserved, Copyright(C) 1997-2009 Japan Science and Technology Agency(JST)