

# PDB数据库

## 1.访问官网

1.1 在浏览器中复制网址（<https://www.rcsb.org/>），进入PDB数据库官网

## 2.查找蛋白

2.1 搜索栏输入“NINJ1”，点击“Search”或键盘回车，出现该蛋白的详细信息

## 3.蛋白结构

3.1 根据解析方法和分辨率选择蛋白结构，进入页面，了解蛋白结构信息，下载蛋白结构（pdb格式）

## 4.蛋白配体

4.1 页面往下，在“Small Molecules”可了解该蛋白的配体相关信息，包括结合的链条位置及2D平面化学结构

## 5.蛋白注释

5.1 选择“Annotations”，页面从上到下的内容依次为该蛋白的基因产物注释，蛋白质家族分类等

## 6.解析实验

6.1 选择“Experiment”，则出现与该蛋白结构解析相关的实验数据

## 7.蛋白序列

7.1 选择“Sequence”，根据左边区域内容了解蛋白序列相关信息

# 常见问题解析

## 1. PDB ID检索失败怎么办？

可能原因涉及ID输入错误、数据尚未公开或已被删除，可通过检查ID是否准确（4字符代码），或使用关键词检索替代；联系PDB管理员确认数据状态来解决。

## 2. 下载文件无法打开或格式不兼容怎么办？

确认下载格式（如PDB/CIF），使用专用软件（如PyMOL、Chimera）或格式转换工具。

## 3. 结构数据缺失关键信息怎么办？

可能表现为氢原子、重原子或末端残基缺失，可通过使用PDBFixer修复，或选择其他高完整性结构，以及参考实验报告补充缺失部分。

## 4. 高级检索操作复杂，如何简化？

利用RCSB PDB的“Advanced Search”功能，按分辨率、实验方法、复合物类型等逐步过滤。

## 5. 非标准残基影响模拟怎么办？

通过PDBFixer或手动编辑文件，移除实验添加的非天然成分，保留模拟所需部分。

## 6. 数据解析精度不足怎么办？

分辨率 $>2.5 \text{ \AA}$ 可能影响模拟准确性，优先选择高分辨率结构，或结合多结构平均方法提升精度。