

NBDCフォーラム：生命科学のデータベース活用法2019

# Protein Data Bank Japan (PDBj)

大阪大学蛋白質研究所

工藤 高裕 (KUDOU Takahiro)

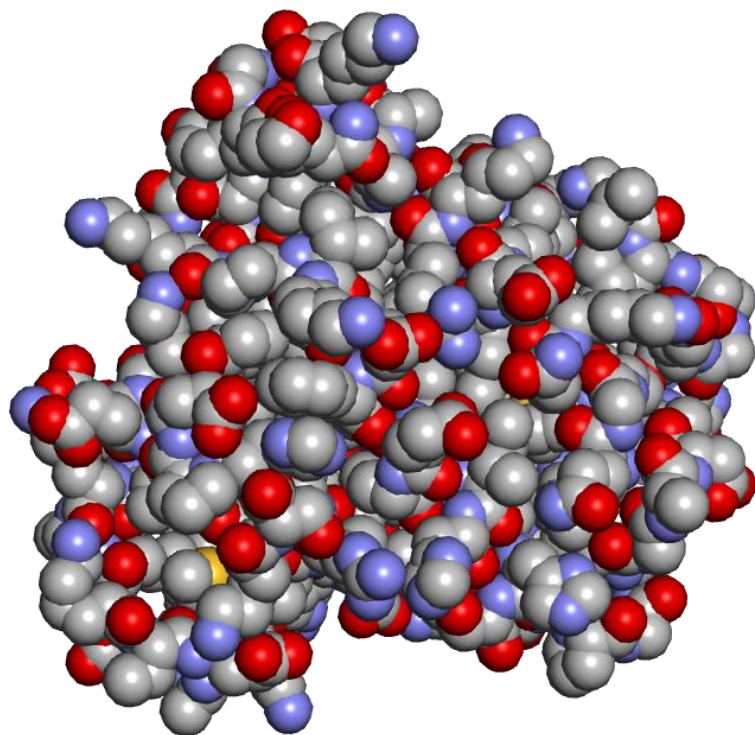
2019年12月3日 (火)

# Protein Data Bank Japan (PDBj)

1. PDBとは

2. PDBjのサービス紹介

# I. PDBとは



ミオグロビン(1mbn)

タンパク質などの分子の  
「かたち」に関する情報を集めた  
データベース  
蛋白質構造データバンク  
(Protein Data Bank)

# 1. PDBとは

データはテキスト形式

PDBx/mmCIF (現行型式、可変長)

PDBフォーマット (旧型式、固定長)

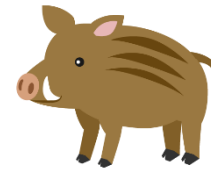
```
data_1MBN
#
_entry.id      1MBN
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version    5.287
_audit_conform.dict_location
http://mmcif.pdb.org/dictionaries/ascii/mmcif_pdbx.dic
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
PDB      1MBN
WWPDB    D_1000174928
...
```

```
HEADER      OXYGEN STORAGE                                05-APR-73      1MBN
TITLE       THE STEREOCHEMISTRY OF THE PROTEIN MYOGLOBIN
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: MYOGLOBIN;
COMPND      3 CHAIN: A;
COMPND      4 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
...
ATOM        1  N   VAL A   1      -2.900  17.600  15.500  1.00  0.00      N
ATOM        2  CA  VAL A   1      -3.600  16.400  15.300  1.00  0.00      C
ATOM        3  C   VAL A   1      -3.000  15.300  16.200  1.00  0.00      C
ATOM        4  O   VAL A   1      -3.700  14.700  17.000  1.00  0.00      O
```

書いてあることは、各原子の三次元座標 (XYZ) のほか  
登録者、文献、実験手法、由来生物種など

# 1. PDBとは

- 1971年発足（現在48歳）



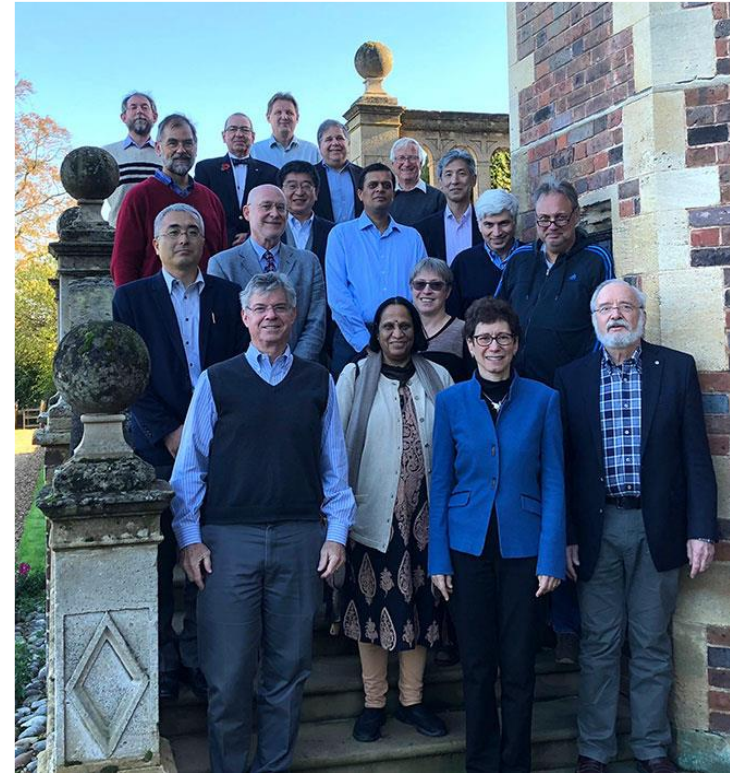
- 世界で唯一

- 現在は世界で4つのグループが協力して運営



# I. PDBとは

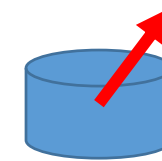
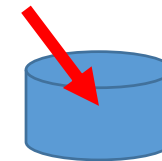
毎年構造解析・バイオイン  
フォマティクスの専門家  
を招いて諮問委員会を開  
催し運営方針を検討



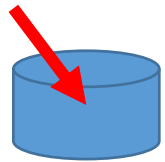
# 1. PDBとは

主な業務は

- 構造データの登録受付 (Data-in)
- データの公開 (Data-out)

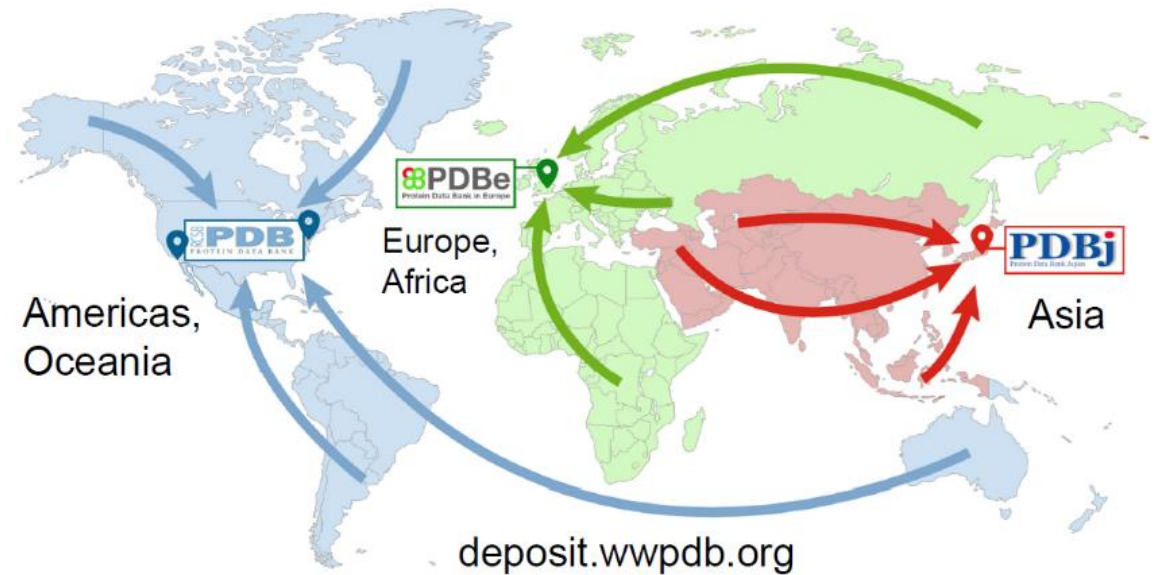


# 1. PDBとは



Data-in

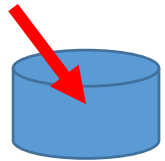
データ登録は各拠点で分担  
(PDBjはアジア地区担当)



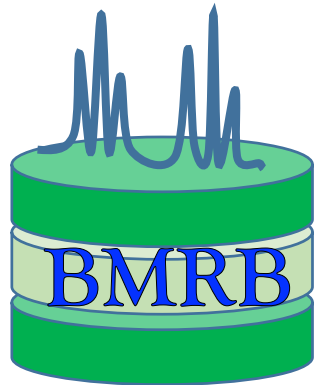


# 1. PDBとは

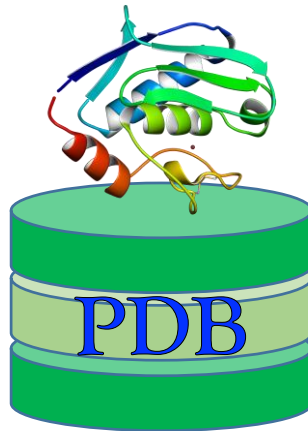
PDBへの登録には実験の根拠が必須  
多くの論文雑誌はPDB登録が必須



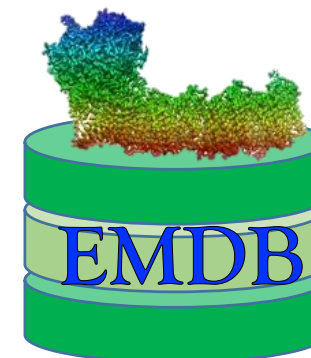
NMR  
実験データ



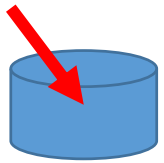
原子  
座標



電子顕微鏡  
電子密度マップ



# 1. PDBとは



Data-in

- 新規データは非公開、公開日まで厳重に管理  
(入室管理された部屋で専門スタッフが処理)

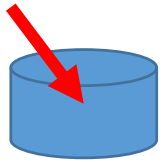


電子錠つきの部屋



専門スタッフが登録・検証作業を実施

# 1. PDBとは



Data-out

- 全拠点で同時公開（毎週水曜 日本時間9:00）
- 利用は無償・登録不要 人類の財産
- 拠点ごとに独自のツール・サービスを提供

# 2. PDBjのサービス紹介

## 簡易検索(キーワード検索)

日本語OK!

The screenshot shows the PDBj website interface. At the top, there is a search bar with the text "pdbj.org 全体を検索 (日本語OK)". Below the search bar, there are several search results listed in Japanese. The first result is for "4CCT DENGUE 1 CRYO-EM RECONSTRUCTION" with a red arrow pointing to the search bar and the text "日本語も英語に変換して検索". The second result is for "4C11 DENGUE VIRUS RNA DEPENDENT RNA POLYMERASE WITH RESIDUES FROM THE NSS LINKER REGION". The third result is for "4UIF CRYO-EM STRUCTURE OF DENGUE VIRUS SEROTYPE 2 IN COMPLEX WITH ANTIGEN-BINDING".

# 2. PDBjのサービス紹介

## 簡易検索の検索結果例

PDBエントリー検索

PDBjサイト検索

未公開エントリー状態検索

化合物検索

BIRD検索

検索結果

全ヒット件数: 211  
表示件数: 25  
表示順: 関連性が高い順  
Auto-pager:   
結果をダウンロード  
詳細検索ページへ戻る

表示順

関連性が高い順  
PDBID昇順 (0→9,a→z)  
PDBID降順 (z→a,9→0)  
登録日の古い順  
登録日の新しい順  
公開日の古い順  
公開日の新しい順  
分解能の高い順

4CCT **DENGUE 1 CRYO-EM RECONSTRUCTION**  
分子名称: DENGUE VIRUS 1 E PROTEIN, DENGUE VIRUS 1 M PROTEIN  
著者: Kostyuchenko\_V.A., Zhang\_Q., Tan\_J.L., Ng\_T.S., Lok\_S.M.  
登録日: 2013-10-28  
公開日: 2013-11-06  
最終更新日: 2017-08-30  
実験手法: ELECTRON MICROSCOPY (4.5 Å)  
主引用文献: Immature and Mature Dengue Serotype 1 Virus Structures Provide Insight Into the Maturation Process. J.Virol., 87, 2013

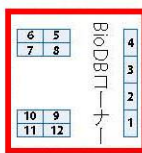
4C11 **DENGUE VIRUS RNA DEPENDENT RNA POLYMERASE WITH RESIDUES FROM THE NSS LINKER REGION**  
分子名称: DENGUE VIRUS TYPE 3 RNA DEPENDENT RNA POLYMERASE, ZINC ION  
著者: Lim\_S.P., Lescar\_J.  
登録日: 2013-08-09  
公開日: 2013-08-21  
最終更新日: 2018-04-04  
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.6 Å)

# 2. PDBjのサービス紹介

## 詳細検索で絞り込み

The image displays two screenshots of the PDBj website. The left screenshot shows search results for the keyword 'デング熱' (Dengue fever). It lists three entries: 4CCT (DENGUE 1 CRYO-EM RECONSTRUCTION), 4C11 (DENGUE VIRUS RNA DEPENDENT RNA POLYMERASE WITH RESIDUES FROM REGION), and 4UIF (CRYO-EM STRUCTURE OF DENGUE VIRUS SEROTYPE 2 IN COMPLEX WITH A...). The right screenshot shows the 'Mine: 詳細条件検索' (Mine: Detailed Search) interface, where the keyword 'デング熱' is entered. The search criteria include PDBID, Keyword, Title, Publication Date, Registration Date, and Literature Reference. The search results summary shows 211 hits and 25 displayed items.





BioDBコーナー  
12番ブース