

工藤 高裕

大阪大学蛋白質研究所

○工藤高裕¹⁾、Gert-Jan Bekker¹⁾、山下鈴子¹⁾、鈴木博文²⁾、横地政志¹⁾、由良敬³⁾、栗栖源嗣¹⁾

1)大阪大学蛋白質研究所 2)早稲田大学先進理工学部 3)お茶の水女子大学

蛋白質構造データバンク (PDB)



蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank, PDB)とは

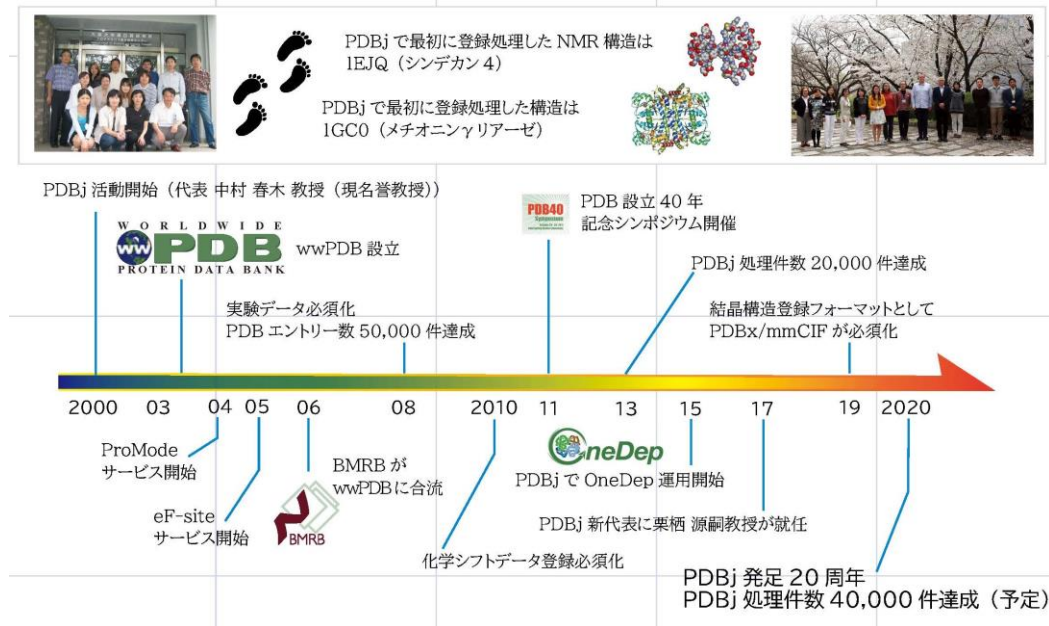
- 生体高分子の構造データを集めた世界で唯一のデータアーカイブ。
- 1971年に7つの構造から始まり、2020年2月現在では160,000件以上のデータを提供している。
- PDBはPDBを維持するための国際組織「国際蛋白質構造データバンク」(worldwide Protein Data Bank、**wwPDB**)の下、4つのメンバー(米国の**RCSB PDB**と**BMRB**、欧州の**PDBe**、日本の**PDBj**)が協力して運営している。
- 各メンバーの運営費用は各国の政府機関による研究費用でまかなわれている。



日本蛋白質構造データバンク (PDBj)

日本蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank Japan、PDBj)は

- 2000年7月にPDBのパートナーとして活動を開始。
- ProMode(基準振動解析)、eF-site(分子表面形状)などの二次データベースサービスを展開。
- 新フォーマットやツールの開発
 - PDBMLPlus(追加アノテーション情報)
 - wwPDB/RDF(PDBデータをRDF形式に変換したもの)
 - Molmil(ブラウザ上で動作する分子ビューア)
 - MagRO(NMR解析ツール)



PDBjの検索・ツール

調べたい内容	サービス名	入力	出力
PDBエントリー	PDBj Mine	キーワードなど	PDBIDなど
似た配列を持つ構造	Sequence Navigator	FASTA形式配列情報、またはPDBID + ChainID	PDBID+ChainID
似た形を持つ構造（鎖単位）	Structure Navigator	PDBファイル、またはPDBID + ChainID	PDBID+ChainID
似た形を持つ構造（集合体単位）	Omokage検索	PDBファイル、またはPDBID	PDB/EMDB/SASBDBのID
アミノ酸配列から構造を予測	Spanner / SFAS	FASTA形式配列情報	PDBIDなど

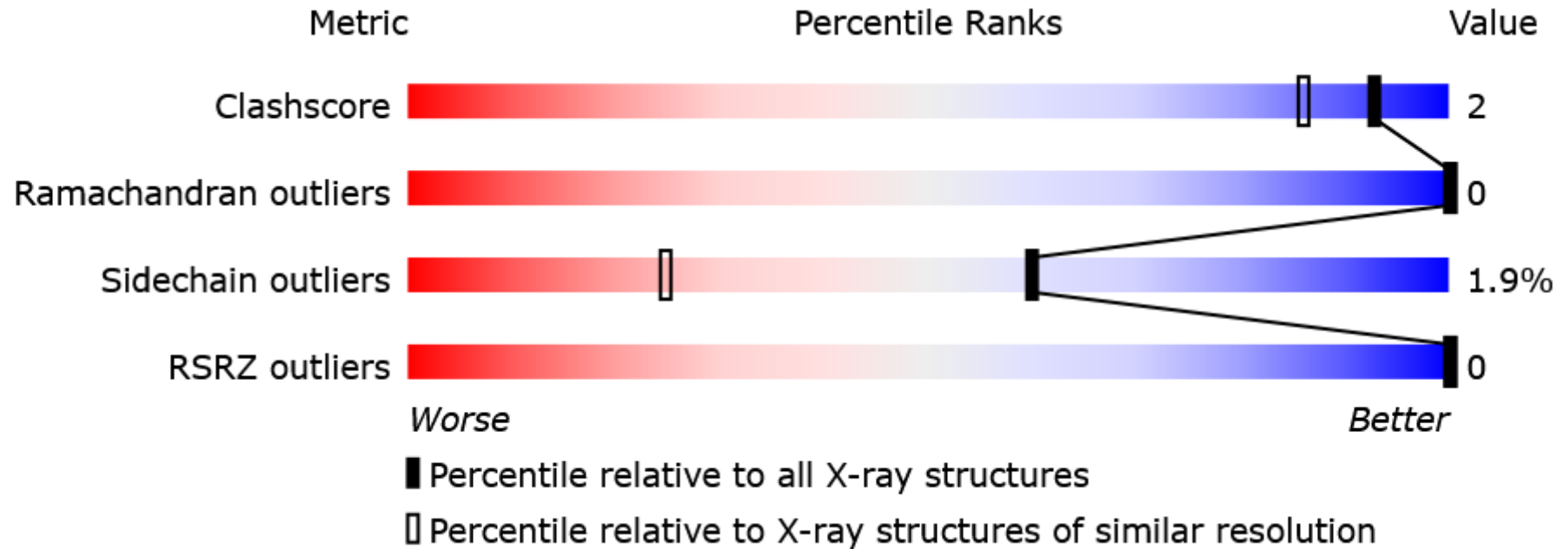
PDBjのツール

調べたい内容	サービス名	概要
構造を見る	万見	PDB/EMDB/SASBDBの構造データを見るためのウェブサービス
分子の表面構造情報を得る	eF-site	PDBに登録されている構造の機能部位に関する分子表面形状データベース。ユーザの構造データを同様に計算するサービス(eF-surf)や、似た形状を持つPDBエントリーを検索するサービス(eF-seek)も提供。
分子の基準振動に関する情報を得る	ProMode	PDBに登録されている分子のゆらぎ(基準振動)に関する情報が得られる。

PDBjのツール

調べたい内容	サービス名	概要
分子を見る	Molmil	ウェブブラウザ上で動作する分子ビューア
結合する分子、構造がわかっていない複合体の立体構造予測	HOMCOS	アミノ酸配列や化学構造から、PDB内から複合体の立体構造が解けている他の分子を探したり、PDBに登録されている構造を鋳型にして複合体立体構造を予測する。

PDB検証レポート



構造の品質を評価する検証レポート(Validation Report)の内容についてもXML、RDF化し機械的な処理がしやすいようにしている。

新型コロナウイルス情報

The screenshot shows the PDBj homepage with a special section for COVID-19. The main content area is titled "新型コロナウイルスの構造情報" (Structural Information of COVID-19). It includes a summary of the virus's structure and a list of related PDB entries. On the right side, there are links to "NMR データ (BMRB archive)", "EM マップ (EMDB archive)", and "in Silico モデル (BSM archive)".

新型コロナウイルスの構造情報

このページの他言語版もあります: [English](#) [简体中文](#) [繁體中文](#) [한국어](#)

最近、新型コロナウイルス感染症 (Novel Coronavirus disease 2019: **COVID-19**) の拡大が世界中で深刻な問題となっています。早急にこの新型コロナウイルス (Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2: **SARS-CoV-2**) を理解し有効な薬を開発するため、関連するタンパク質の構造研究は既に始まっています。そして、解明された構造はPDBに登録されています。PDBjでは利用者の利便を図るため、新型コロナウイルス特集ページを作成しました。新たなエントリが毎週水曜日の週次更新で公開されると、同時にこのページにも追加されます。

またこのウイルスのタンパク質に関する解説記事を以下の「今月の分子」ページに掲載しています。

- 242: コロナウイルスプロテアーゼ (Coronavirus Proteases)
- 246: SARSコロナウイルス2 スパイク (SARS-CoV-2 Spike)
- 249: SARSコロナウイルス2 RNA依存性RNAポリメラーゼ (SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA Polymerase)

「全エントリ」のタブでは、同じ著者によるグループ登録のエントリも全て区別し、すべてのPDB IDを省略せず表示しています。「代表構造」タブには最も分解能の高い代表構造のみを表示しており、アミノ酸配列が100%同じPDBエントリはリガンドが異なるものも含め除外してあります。「最新のエントリ」のタブは、今週公開された最も新しいエントリです。

作成日: 2020-03-11 (最終更新日: 21 hours ago)

6XF6

CRYO-EM STRUCTURE OF A BIOTINYLATED SARS-COV-2 SPIKE PROBE IN THE PREFUSION STATE (1 RBD UP)

分子名称: Spike glycoprotein, 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose, 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose

著者: Cerutti, G., Gorman, J., Kwong, P.D., Shapiro, L.

登録日: 2020-06-15

公開日: 2020-09-02

実験手法: ELECTRON MICROSCOPY (4 Å)

主引用文献: Cryo-EM structure of a biotinylated SARS-CoV-2 spike probe in the prefusion state (1 RBD up) To Be Published

新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)の情報を集約したページを作成し情報発信中。

<https://pdbj.org/featured/covid-19>