### 蛋白質構造データバンク (PDBj) の高度化 と統合的運用

〇池川恭代1)、Gert-Jan Bekker1)、工藤高裕1)、山下鈴子1)、鈴木博文2)、川端猛4)5)、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 4)蛋白質研究奨励会 5)大阪大学生命機能研究科





## 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、2021年8月現在では180,000 件以上のデータを提供している。
  - 国際組織「国際蛋白質構造データバンク」(worldwide Protein Data Bank、wwPDB)の下、5つのメンバー(米国のRCSB PDB、欧州のPDBe、日本のPDBj、NMRのBMRB、電顕のEMDB)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。









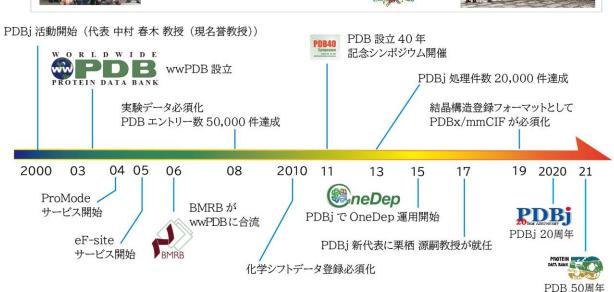






## 日本蛋白質構造データバンク (PDBj)





**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

- pdb.jplus(PDB.jで作成された各種データ)
- 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 quick search	キーワード、一定の 項目値など	PDBエントリー等
PDBエントリー	RDB Query builder + SQL Search (詳細 検索)	多種	多種
似た配列を持つ構造	<u>Sequence</u> <u>Navigator</u>	FASTA形式配列情報、 またはPDBID+ ChainID	PDBID+ChainID
似た形を持つ構造 (集合体単位)	Omokage検索	EMDB/PDB/SASB DBのIDあるいは PDBファイルや密度 マップファイル	PDB/EMDB/SASB DBのID



# PDBjのツール

調べたい内容	サービス名	概要
構造を見る	<u>万見</u>	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	<u>eF-site</u>	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	<u>ProMode</u>	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
複合体の立体構造の検索とモデリング	HOMCOS	問い合わせアミノ酸配列に相同なタンパク質の複合体構造をPDBから検索、それを鋳型にした立体構造のモデリングを行う。化合物の化学構造からも同様に複合体の検索・モデリングが可能。
密度マップ・立体構造の重ね合わせ	gmfit	電顕3D密度マップに立体構造(原子モデル)を重ね合わせる。剛体フィッティング。マップどうし、構造どうしの重ね合わせも可能。

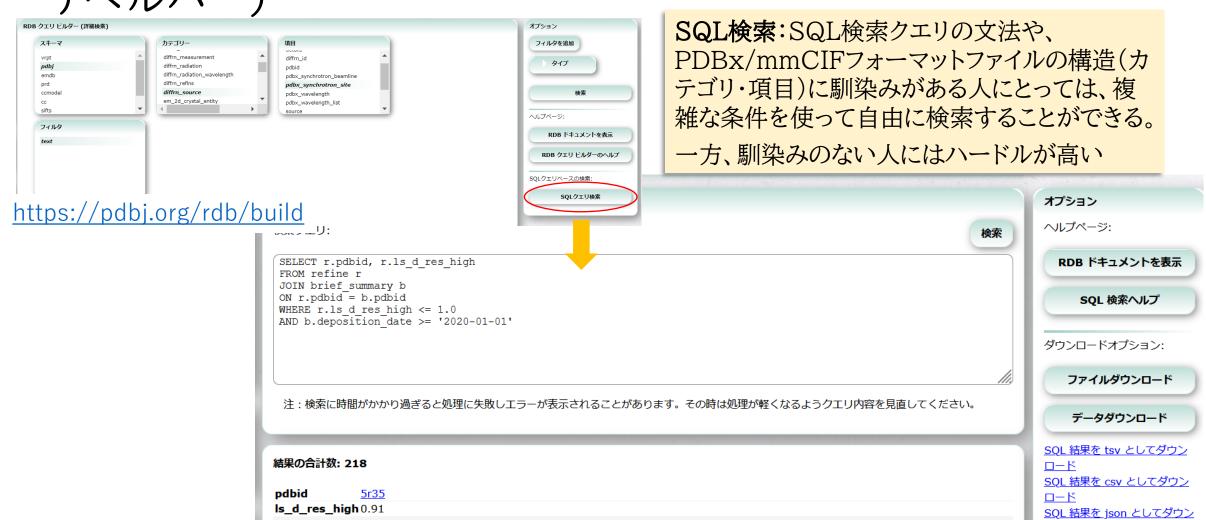


# 検索方法 (I)簡単な検索 (旧サイトの詳細検索に相当)

PDB filters		
検索クエリ:		
タイトル:		
公開日:	年/月/日 🗂 - 年/月/日 🗂	Options
登録日:	年/月/日 🗂 - 年/月/日 🗂	件: 181535
最終更新日:	年/月/日 🗂 - 年/月/日 🗂	結果を表示
登録者:		フィルタをリセット
文献著者:		
論文題名:		
雑誌名:		
発行年:		
<del>巻番号</del> :		
主引用文献のみ:		一定の項目については、条件を指
含まれるポリマー類の種類:	ボリベプチド(D体): どちらでもよい  ボリベプチド(L体): どちらでもよい  ボリテオキシリボヌクレオチド(DNA): どちらでもよい  ボリリボヌクレオチド(RNA): どちらでもよい  DNA/RNA 複合体: どちらでもよい  環状疑似ベプチド: どちらでもよい  その他: どちらでもよい	定して、簡単に検索できる。 表示項目以外は指定できず、次の SQL検索等を利用する必要がある
分子名称:		
外部データベース:		
リガンドと補欠分子族:		
ポリマー鎖の数:	•	https://pdbj.org/search/pdb-filte
ポリマー鎖の長さ:		ittps://pabj.org/scarcil/pab into



# 検索方法 (2)SQL検索と(3)RDBビルダNew (クエリヘルパー)





## 検索方法 (3) RDBビルダ (クエリヘルパー)





## (3)一括ダウンロード

検索結果の一覧をファイルでダウンロード できる

対象エントリーのファイルを各種フォーマッ トで一括ダウンロードできる

PDB: 317 件

Filter by keyword

1A3G

BRANCHED-CHAIN AMINO ACID AMINOTRANSFERASE FROM ESCHERICHIA COLI BRANCHED-CHAIN AMINO ACID AMINOTRANSFERASE, PYRIDOXAL-5'-PHOSPHATE

分子名称:

著者 登録日

Okada, K, Hirotsu, K, Sato, M, Hayashi, H, Kagamiyama, H.

1998-01-21 公開日 1998-05-27 最終更新日 2011-07-13

実験手法 X-RAY DIFFRACTION (2.5 Å)

Three-dimensional structure of Escherichia coli branched-chain amino acid aminotransferase at 2.5

主引用文献 A resolution.

J.Biochem.(Tokyo), 121, 1997

1AKL

#### ALKALINE PROTEASE FROM PSEUDOMONAS AERUGINOSA IFO3080

分子名称: ALKALINE PROTEASE, CALCIUM ION, ZINC ION

著者 Miyatake, H, Hata, Y, Fujii, T, Hamada, K, Morihara, K, Katsube, Y.

登録日 1995-09-16 公開日 1996-03-08 最終更新日 2017-10-11

**談手法** X-RAY DIFFRACTION (2 Å)

Crystal structure of the unliganded alkaline protease from Pseudomonas aeruginosa IFO3080 and

拉文田汽车 its conformational changes on ligand hinding



### 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



pub/

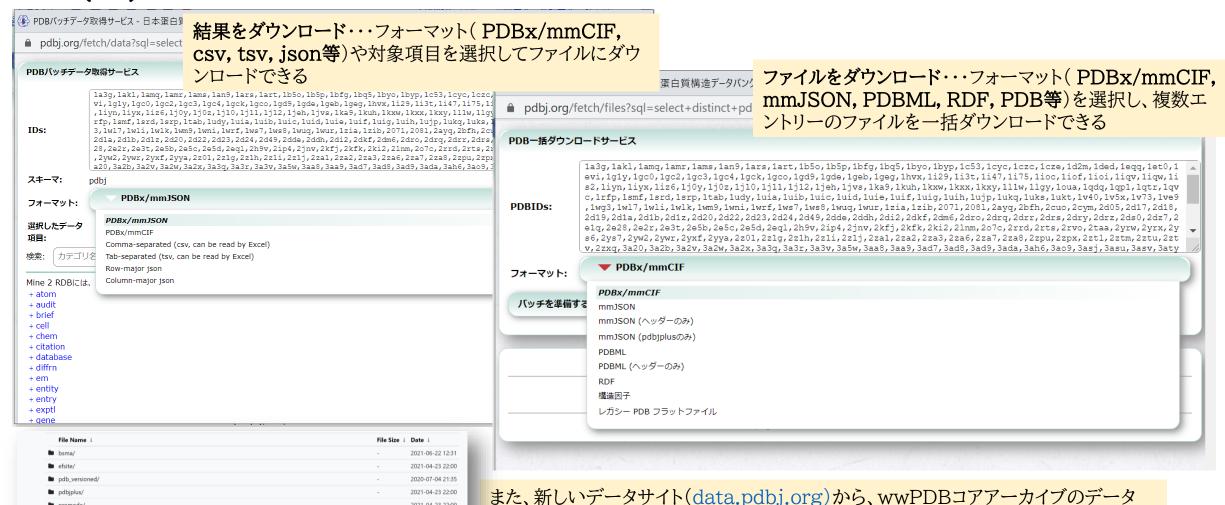
xrda/

## (3)一括ダウンロード(続き)

2021-04-23 22:00

2021-03-21 20:50

2021-08-19 16:51



(pdb. emdb)に加え、PDBi独自作成データを利用できる



## 新型コロナウイルス情報 https://pdbj.org/featured/covid-19

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引き続き情報発信中。

より高分解能の構造情報の利用を助言するパネルを追加



