

○岩田武史¹、横地政志¹、池川恭代¹、宮ノ入洋平¹、児嶋長次郎^{1 2}、藤原敏道¹、栗栖源嗣¹

1. 大阪大学蛋白質研究所、2. 横浜国立大学大学院工学研究院



日本蛋白質構造データバンク (PDBj)



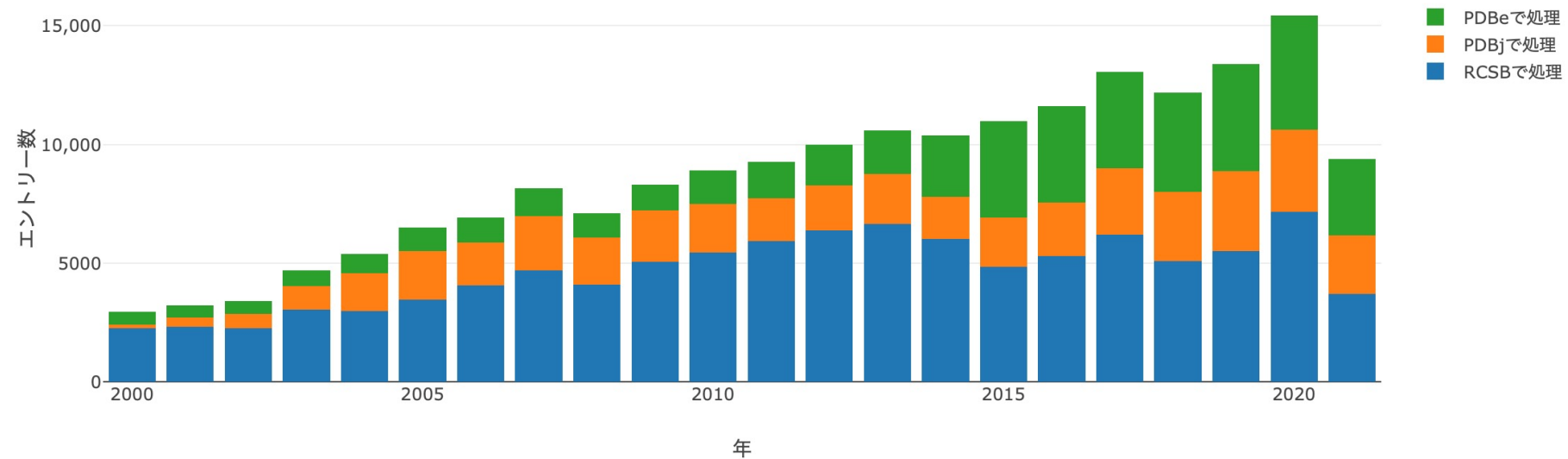
蛋白質構造データバンク (Protein Data Bank、PDB) とは生体高分子の構造データを集めた世界で唯一のデータアーカイブであり。日本では大阪大学蛋白質研究所のPDB j がアジア地域のデータ登録受付および処理を行っている。



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**) が協力して行っている。

近年データ登録数の増加が顕著

処理サイト別のPDBエントリー数

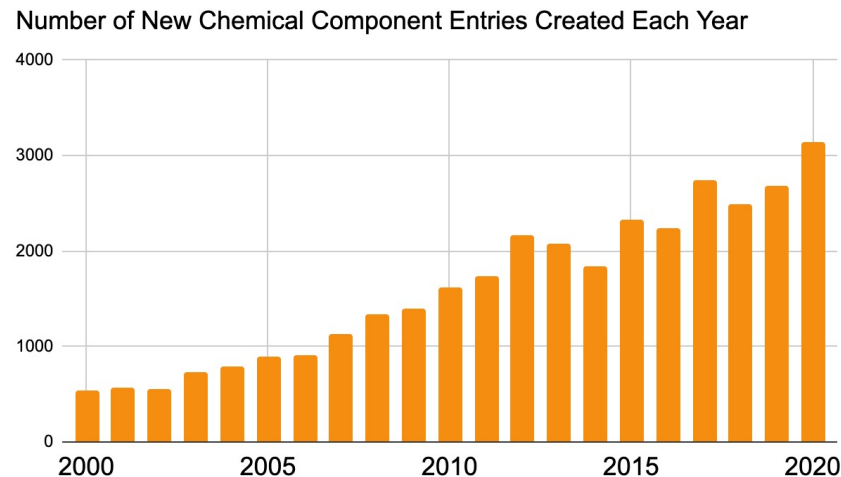


昨年は年間処理数が15,000件を超え、2021年も引き続き多くの登録が寄せられている。

PDBおよびCCD（化合物辞書、Chemical Component Dictionary） ID枯渇への対応

PDBエントリーは4文字、CCDエントリーは3文字の英数字で識別されてきました。
現在の増加率で想定するとPDBは本年、CCDは3-4年で枯渇することが予想されています。

そのためwwPDBではそれぞれ8文字と4文字への拡張の準備を進めています。



wwPDBではPDB IDの長さを8文字に拡張し、先頭に「PDB」を付けています（例：`pdb_00001abc`）。

拡張されたPDB/CCD IDを含むエントリーは、従来のPDBファイルフォーマットではサポートされません。

PDBjのアノテータがwwPDB初の1万件データ処理達成



wwPDBの見学有美子さんが処理した**PDB**エントリーが10,000件に到達しました。

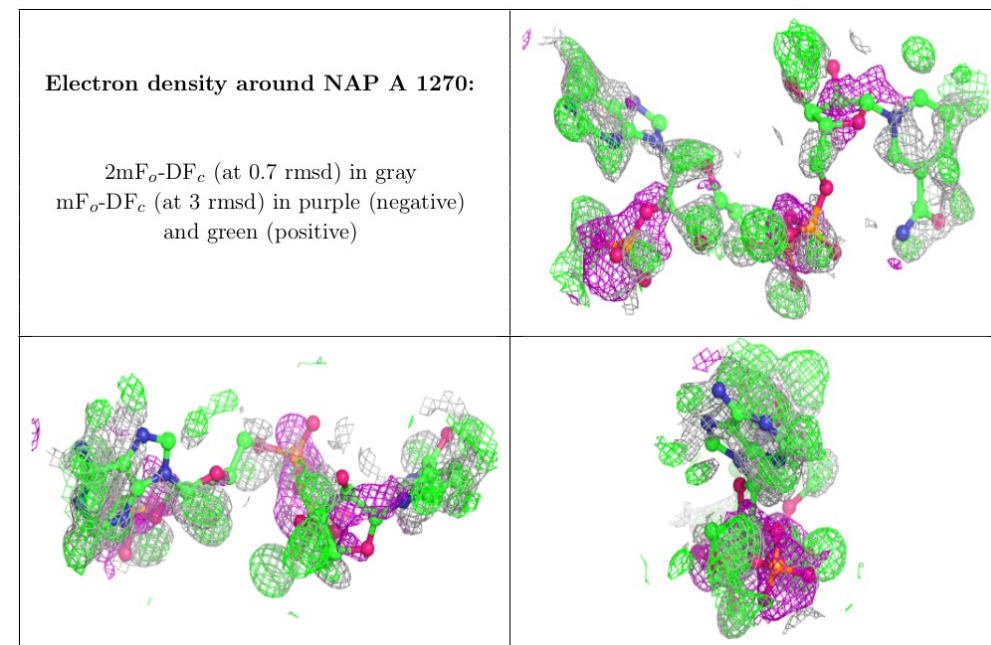
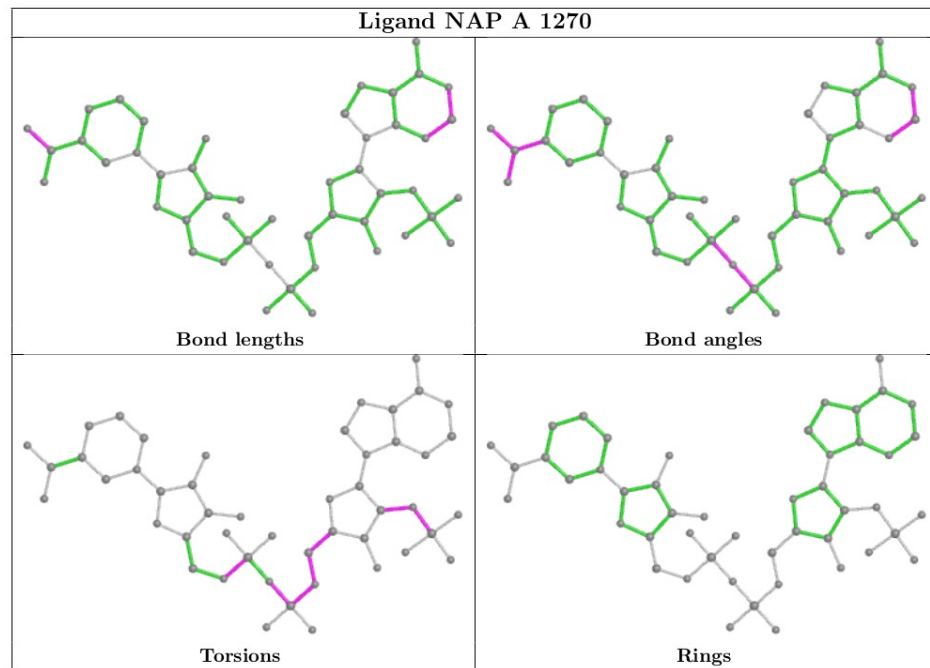
見学さんは**PDBj**の設立メンバーとして、母校である大阪大学にて2000年に業務を開始されました。今年4月に10,000件以上の構造を処理した最初の**wwPDB**研究員となりました。多くのアジア地区の構造生物学者は、彼女の名前をよくご存知と思います。見学さんは**PDB**の編集作業を通じて、20年以上にわたり多くの**PDB**登録者とともに、高精度エントリーのタイムリーなリリースに貢献しています。

処理件数1万件を達成した見学さん。
wwPDBからの記念品を栗栖教授から授与されました。

データ登録の機能強化1 wwPDBの検証レポートの改良

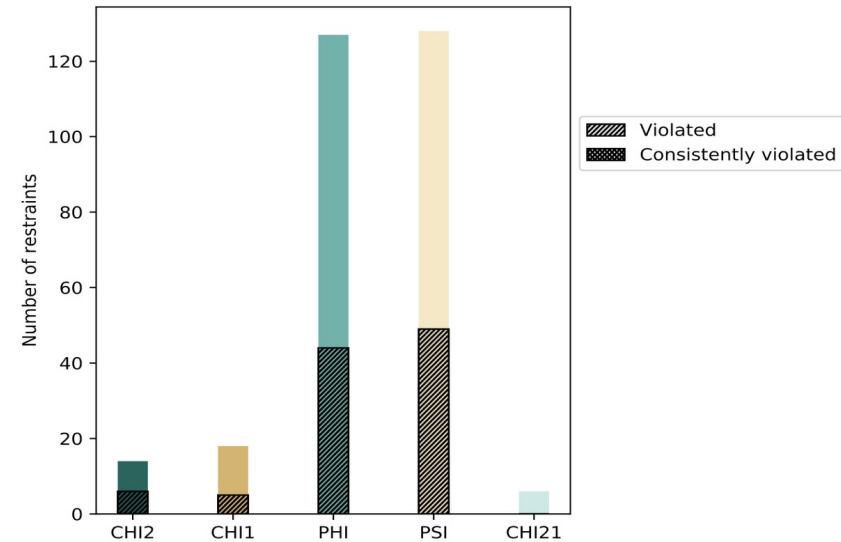
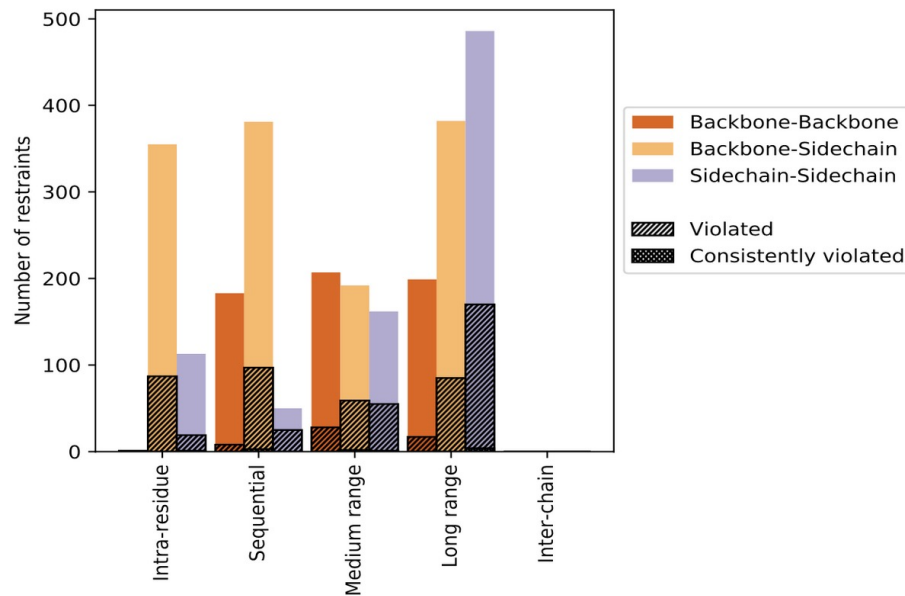
リガンドの検証結果と電子密度マップを可視化

wwPDBの検証レポートの計算でつかうBuster (Global Phasing社) による係数で統一して提供



リガンドの幾何学的な検証情報の追加。X線結晶構造のPDBエントリーに対しては、リガンドとその周辺の電子密度マップを表す画像をwwPDBの検証レポートに表示

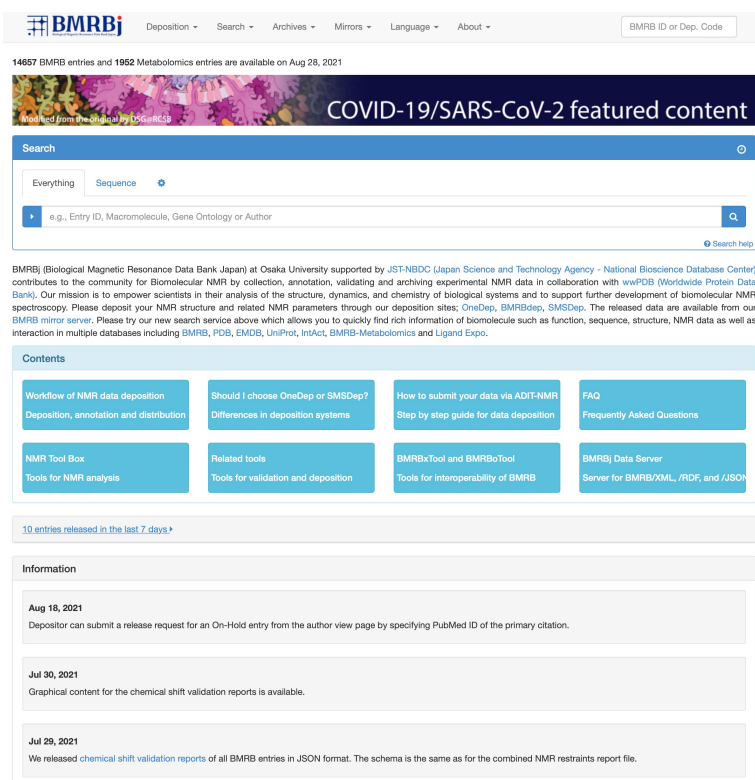
データ登録の機能強化 2 NMR制限情報の検証結果をwwPDB検証レポートに追加



wwPDB検証レポートの制限情報解析は、構造的な束縛を伴う制限情報の統計、制限情報と原子座標モデルの間の違反、各モデルの距離制限及び二面角制限違反の平均出現数、各モデル及び各アンサンブルに対する距離制限及び二面角制限違反の分布解析を含み、グラフまたは表形式で表現されます。



BMRBj(Biological Magnetic Resonance Data Bank Japan)



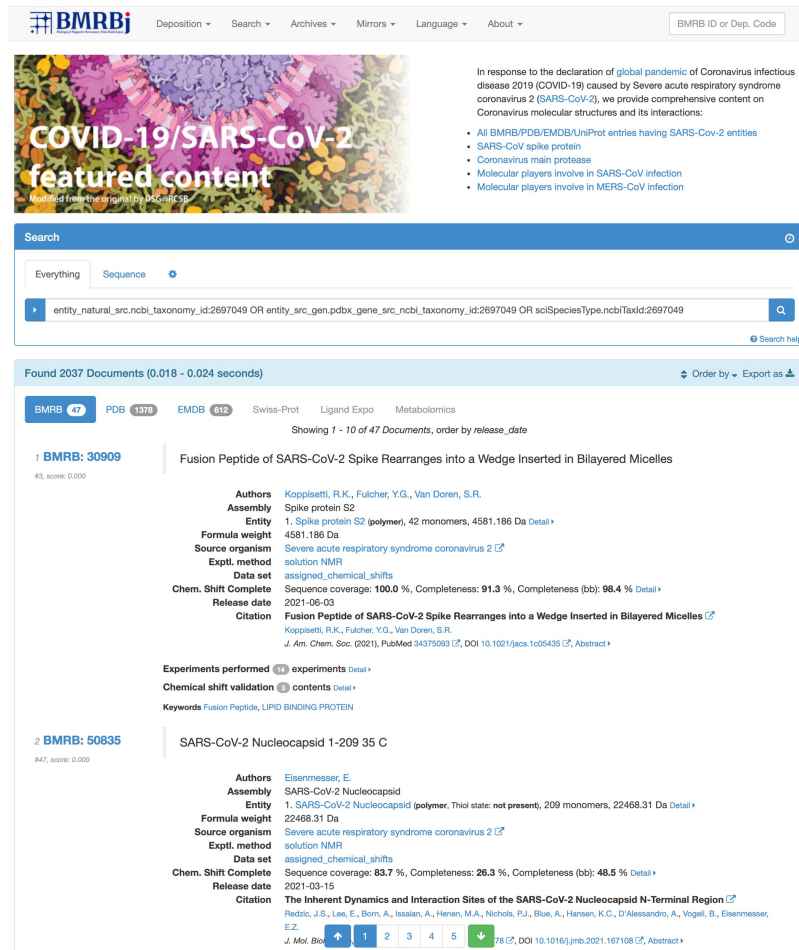
The screenshot shows the BMRBj website with a navigation bar at the top containing links for Deposition, Search, Archives, Mirrors, Language, and About. A search bar is also present. Below the navigation bar, a banner for COVID-19/SARS-CoV-2 featured content is displayed. The main content area includes a search section with a dropdown menu for 'Everything' and a search button. Below this, a 'Contents' section lists various resources such as 'Workflow of NMR data deposition', 'Should I choose OneDep or BMSDep?', 'How to submit your data via ADIT-NMR', 'FAQ', 'NMR Tool Box', 'Related tools', 'BMRBxTool and BMRBoTool', and 'BMRBj Data Server'. A section titled '10 entries released in the last 7 days' is also visible, followed by an 'Information' section with dates and updates.

生体高分子のNMR実験情報データベースであるBMRBを米コネチカット大学の研究グループとともに運営している。

本年よりグループ名をBMRBjと改名し、これまで1500件超のデータ処理実績を活かしてNMRデータ登録者とのコミュニケーションの円滑化、NMR実験データの可視化を推進しています。

wwPDBと連携を行いながら、PDB登録システムOneDepのNMR登録インターフェイス及びNMRのための検証レポートの機能拡張に携わっています。

COVID-19エントリ特集ページ



BMRB Deposition Search Archives Mirrors Language About BMRB ID or Dep. Code

COVID-19/SARS-CoV-2 featured content
Modified from the original by BMRB/CCSB

In response to the declaration of [global pandemic](#) of Coronavirus infectious disease 2019 (COVID-19) caused by Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), we provide comprehensive content on Coronavirus molecular structures and its interactions:

- All BMRB/PDB/EMDB/UniProt entries having SARS-CoV-2 entities
- SARS-CoV spike protein
- Coronavirus main protease
- Molecular players involve in SARS-CoV infection
- Molecular players involve in MERS-CoV infection

Search

Everything Sequence

entity_natural_src_ncbi_taxonomy_id:2697049 OR entity_src_pdbx_gene_src_ncbi_taxonomy_id:2697049 OR sciSpeciesType.ncbiTaxid:2697049

Found 2037 Documents (0.018 - 0.024 seconds)

Order by Export as

BMRB 17 PDB 1378 EMD 112 Swiss-Prot Ligand Expo Metabolomics

Showing 1 - 10 of 47 Documents, order by release_date

1 **BMRB: 30909**
#3, score: 0.000

Fusion Peptide of SARS-CoV-2 Spike Rearranges into a Wedge Inserted in Bilayered Micelles

Authors Kopplsett, R.K., Fulcher, Y.G., Van Doren, S.R.
Assembly Spike protein S2
Entity 1. Spike protein S2 (polymer), 42 monomers, 4581.186 Da [Detail](#)
Formula weight 4581.186 Da
Source organism Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 [Detail](#)
Exptl. method solution NMR
Data set assigned_chemical_shifts
Chem. Shift Complete Sequence coverage: 100.0 %, Completeness: 91.3 %, Completeness (bb): 98.4 % [Detail](#)
Release date 2021-06-03
Citation [Fusion Peptide of SARS-CoV-2 Spike Rearranges into a Wedge Inserted in Bilayered Micelles](#)
Kopplsett, R.K., Fulcher, Y.G., Van Doren, S.R.
J. Am. Chem. Soc. (2021), PubMed 34375093 [Detail](#), DOI 10.1021/jacs.1c05435 [Detail](#), Abstract

Experiments performed [experiments](#) [Detail](#)
Chemical shift validation [contents](#) [Detail](#)
Keywords Fusion Peptide, LIPID BINDING PROTEIN

2 **BMRB: 50835**
#47, score: 0.000

SARS-CoV-2 Nucleocapsid 1-209 35 C

Authors Eisenmesser, E.
Assembly SARS-CoV-2 Nucleocapsid
Entity 1. SARS-CoV-2 Nucleocapsid (polymer, Thiol state: not present), 209 monomers, 22468.31 Da [Detail](#)
Formula weight 22468.31 Da
Source organism Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 [Detail](#)
Exptl. method solution NMR
Data set assigned_chemical_shifts
Chem. Shift Complete Sequence coverage: 83.7 %, Completeness: 26.3 %, Completeness (bb): 46.5 % [Detail](#)
Release date 2021-03-15
Citation [The Inherent Dynamics and Interaction Sites of the SARS-CoV-2 Nucleocapsid N-Terminal Region](#)
Redzio, J.S., Lee, E., Born, A., Issalan, A., Henen, M.A., Nichols, P.J., Blue, A., Hansen, K.C., D'Alessandro, A., Vogel, B., Eisenmesser, E.Z.
J. Mol. Biol. [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [78](#) [Detail](#), DOI 10.1016/j.jmb.2021.167108 [Detail](#), Abstract

BMRBへと登録されたCOVID-19関連エントリをBMRBj独自の検索エンジンを用いて表示。DB間の横断検索機能を活かしてPDB, EMDのエントリも併せてBMRBj特設サイト内で閲覧できる。

データ登録の機能強化3 BMRBjのオーサービューページ

BMRBj Deposition Search Archives Mirrors Language About BMRB ID or Dep. Code

NMR data deposition: D_1300021720, BMRB ID: 36419, PDB ID: 7ELY

Please respond to BMRBj annotator's comments in the return mail and check that the data content here is correct.
Major NMR data issues must be done via the OneDep system.

PMID of the primary citation:

[Release BMRB entry 36419 with citation update](#)

❗ You can submit a release request for this entry using the button above, only if the entry status is [On Hold](#). Please respond to the BMRBj annotator's comments at first.
❗ To release your entry **without PMID**, you need to contact us directory through the return mail from BMRBj annotator.

BMRB: 36419 A peptide with high affinity for B-Cell lymphoma2(Bcl-2)



7ELY

Dep_release_code	HOLD FOR 4 WEEKS
Entry status	rel - Released!
Entry authors	Fan, S., Zha, J., Wu, C.
Submission date	2021-04-12
Accession date	2021-07-14
Author return date	2021-08-17
Onhold date	2021-08-18 (Released)
Release date	2021-08-20
Citation (in preparation)	Designed Disulfide-Rich Peptide Scaffolds Amenable to Sequence Randomization and Peptide Library Design and Screening Zha, J., Li, J.

従来のメールアドレスのやりとりに加えて、専用ページを使ってBMRBjアノテータが処理・整形した登録内容を確認できます。
引用論文のPubMed IDを使って、エントリーの公開を簡単に行うことができます。

データ登録の機能強化4 アノテーション処理で見つかった問題の一覧表示

Validation of NMR data	
Found total 8 warnings in NMR data.	
Warning: Missing content, Total: 2	
File name	Description
File name: D_1300021720_mr-upload_P1.cns.V2	Constraint type of the NMR restraint file (CNS) could not be identified. Tips for CNS restraints: 'assign (segid \$ and resid # and name \$) (segid \$ resid # and name \$) #.#.#.#' pattern must be present in the file. Did you accidentally select the wrong format?
File name: D_1300021720_mr-upload_P2.cns.V2	Constraint type of the NMR restraint file (CNS) could not be identified. Tips for CNS restraints: 'assign (segid \$ and resid # and name \$) (segid \$ resid # and name \$) #.#.#.#' pattern must be present in the file. Did you accidentally select the wrong format?
Warning: Anomalous chemical shift, Total: 5	
Row/Category/Saveframe	Description
Row of Comp_index_ID: 22, Comp_ID: GLU, Entity_assembly_ID: 1, Atom_ID: CG, Category: Atom_chem_shift, Saveframe: assigned_chemical_shifts_1	Verify chemical shift value for 1:22:GLU:CG (29.94 ppm, 5.18 sigma), which is outside of expected range (42.04 ~ 30.15 ppm, avg 36.098, std 1.189, min 25.074, max 50.278). Neither aromatic ring nor paramagnetic/ferromagnetic atom were found in the vicinity.
Row of Comp_index_ID: 7, Comp_ID: ASP, Entity_assembly_ID: 1, Atom_ID: CB, Category: Atom_chem_shift, Saveframe: assigned_chemical_shifts_1	Verify chemical shift value for 1:7:ASP:CB (35.154 ppm, 3.55 sigma), which is outside of expected range (48.91 ~ 32.82 ppm, avg 40.87, std 1.609, min 27.48, max 54.947). Neither aromatic ring nor paramagnetic/ferromagnetic atom were found in the vicinity.
Saveframe: assigned_chemical_shifts_1	Rotameric state trans of 1:4:ILE can not be verified with the assigned chemical shift values (CD1 10.462 ppm, rotameric_state_pred gauche+ 1.0 (%), trans 20.1 (%), gauche- 78.9 (%)).
Saveframe: assigned_chemical_shifts_1	Rotameric state gauche+ of 1:6:LEU can not be verified with the assigned chemical shift values (CD1 22.491 ppm, CD2 20.77 ppm, rotameric_state_pred gauche+ 32.8 (%), trans 67.2 (%), gauche- 0.0 (%)).
Saveframe: assigned_chemical_shifts_1	Rotameric state trans of 1:10:ILE can not be verified with the assigned chemical shift values (CD1 10.575 ppm, rotameric_state_pred gauche+ 1.1 (%), trans 22.1 (%), gauche- 76.8 (%)).
Warning: Unusual data, Total: 1	

アップロードしたファイルのチェック結果をエラー、ワーニングに分けて内容と共に表示。登録者が修正が必要となる箇所を把握しやすくなり、データ品質の向上が期待される。

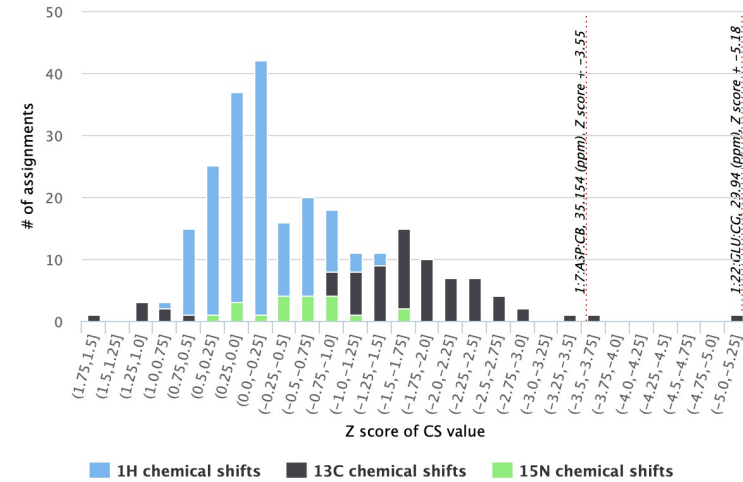
データ登録の機能強化5 化学シフトデータの検証レポート

- Redox state of CYS
 - 1:2:CYS, CA: 52.872 (ppm), CB: 38.032 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False
 - 1:12:CYS, CA: 50.229 (ppm), CB: 39.221 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False
 - 1:14:CYS, CA: 52.039 (ppm), CB: 37.678 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False
 - 1:20:CYS, CA: 50.25 (ppm), CB: 39.841 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False
 - 1:25:CYS, CA: 52.317 (ppm), CB: 39.803 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False
 - 1:26:CYS, CA: 53.064 (ppm), CB: 39.716 (ppm)
 - Redox_state (pred. by CS): oxidized
 - Disulfide_bond (coordinates): True, Other_bond (coordinates): False

- Peptide bond of PRO
 - 1:13:PRO, CB: 29.063 (ppm), CG: 24.196 (ppm)
 - Peptide_bond (pred. by CS): trans
 - Peptide_bond (coordinates): trans
 - 1:17:PRO, CB: 29.206 (ppm), CG: 24.791 (ppm)
 - Peptide_bond (pred. by CS): trans
 - Peptide_bond (coordinates): trans
 - 1:21:PRO, CB: 28.888 (ppm), CG: 24.753 (ppm)
 - Peptide_bond (pred. by CS): trans
 - Peptide_bond (coordinates): trans

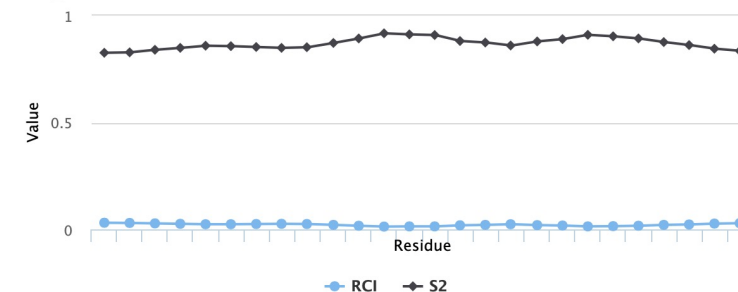
- Rotameric state of ILE, LEU, and VAL
 - 1:4:ILE, CD1: 10.462 (ppm)
 - Rotameric_state (pred. by CS): gauche+ 1.0 (%), trans 20.1 (%), gauche- 78.9 (%)
 - Rotameric_state (coordinates): trans
 - 1:5:LEU, CD1: 22.435 (ppm), CD2: 20.855 (ppm)
 - Rotameric_state (pred. by CS): gauche+ 34.2 (%), trans 65.8 (%), gauche- 0.0 (%)
 - Rotameric_state (coordinates): trans
 - 1:6:LEU, CD1: 22.491 (ppm), CD2: 20.77 (ppm)
 - Rotameric_state (pred. by CS): gauche+ 32.8 (%), trans 67.2 (%), gauche- 0.0 (%)
 - Rotameric_state (coordinates): gauche+

Histogram of normalized assigned chemical shifts



Random coil index and derived parameters (S^2 and NMR RMSD)

- Chain_ID: 1



アップロードした化学シフトファイルにBMRBjで統計情報も用いて検証した結果を登録者ページに視覚化して表示する機能を実装した。