

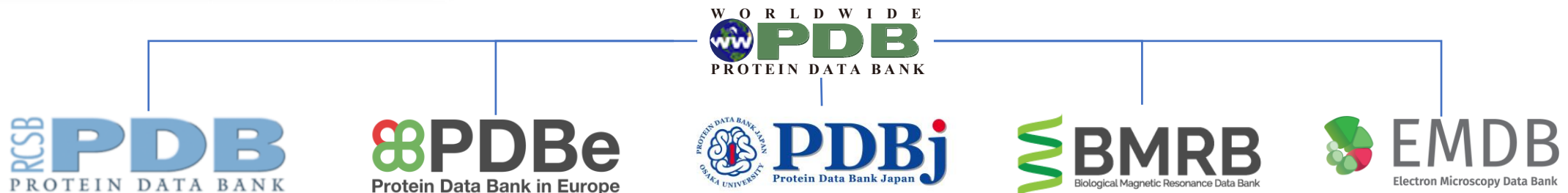
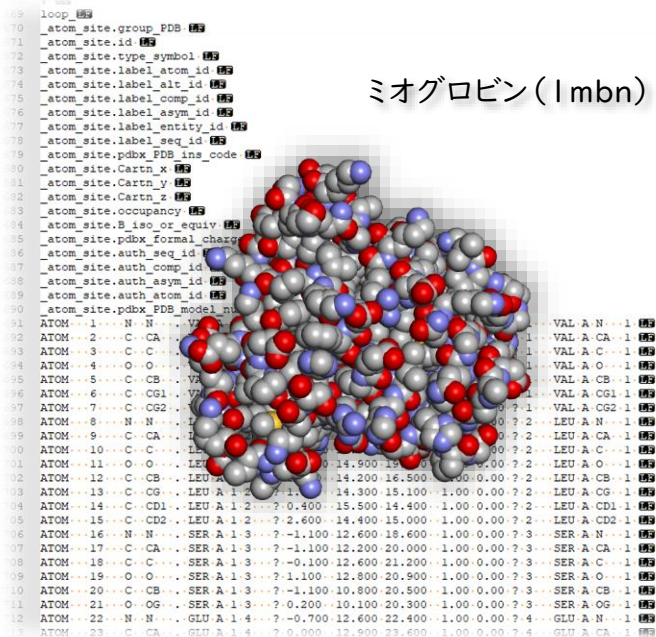
○工藤 高裕¹、池川 恭代¹、Bekker Gert-Jan¹、山下 鈴子¹、岩田 武史¹、横地 政志¹、宮ノ入 洋平¹、児嶋 長次郎^{1,2}、藤原 敏道¹、栗栖 源嗣^{1,3}

1.大阪大学蛋白質研究所 2.横浜国立大学 3.蛋白質研究奨励会

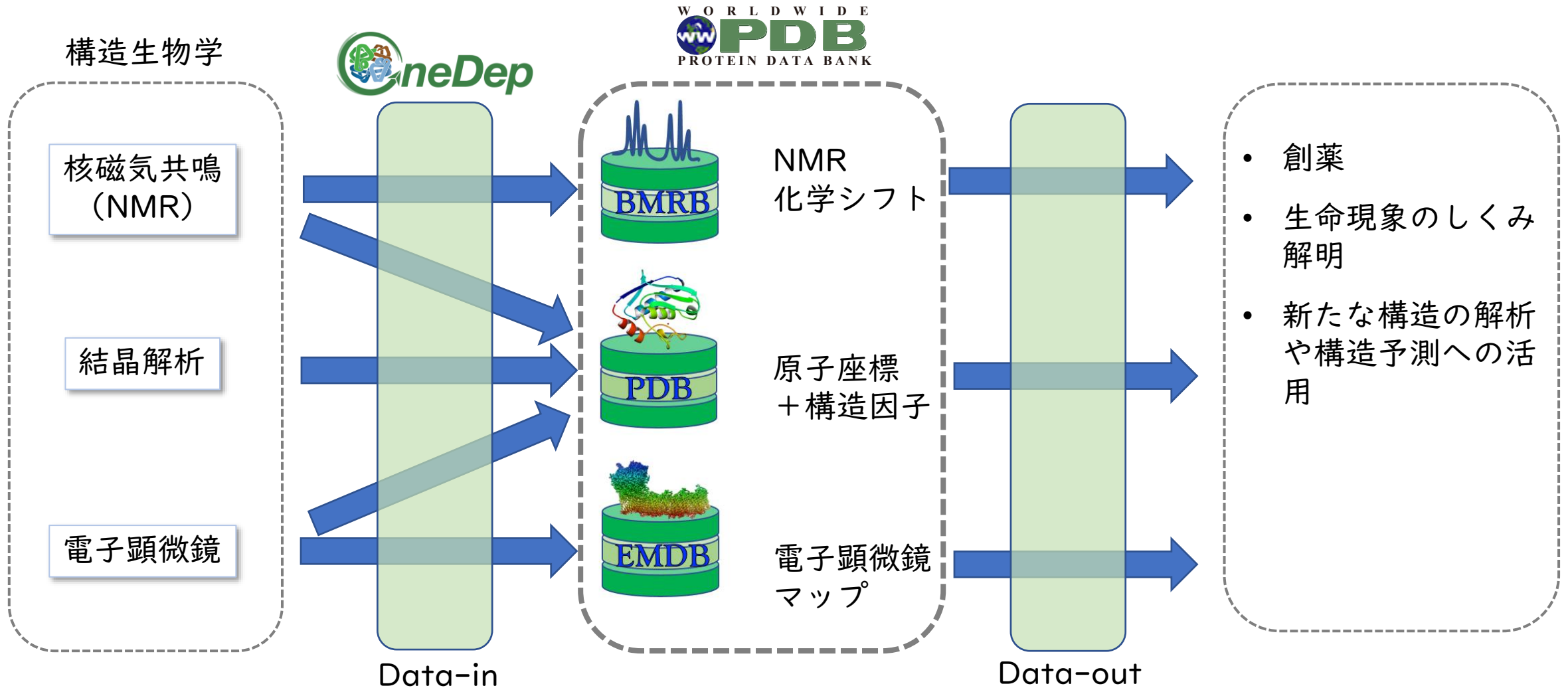
蛋白質構造データバンク (PDB) とは

蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank、**PDB**)とは

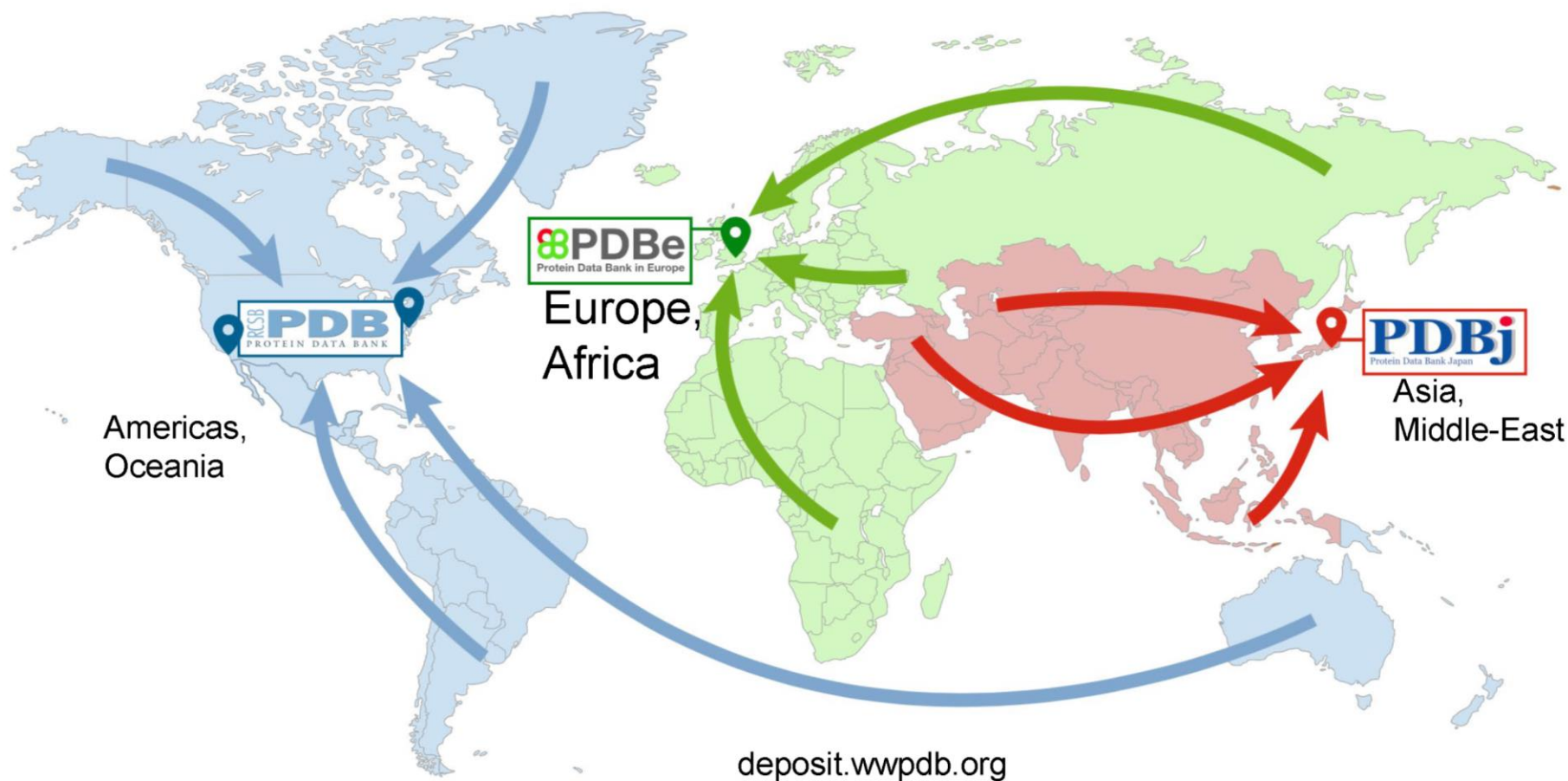
- 生体高分子の分子構造データを集めた世界で唯一のデータアーカイブ。
- 1971年に発足、2022年8月現在19万件以上のデータを提供。
- PDBはPDBを維持するための国際組織「国際蛋白質構造データバンク」(worldwide Protein Data Bank、wwPDB)の下、5つのメンバーが協力して運営している**国際プロジェクト**。
- 各メンバーの運営費用は各国の政府機関による研究費用でまかなわれている。



wwPDBメンバーの活動

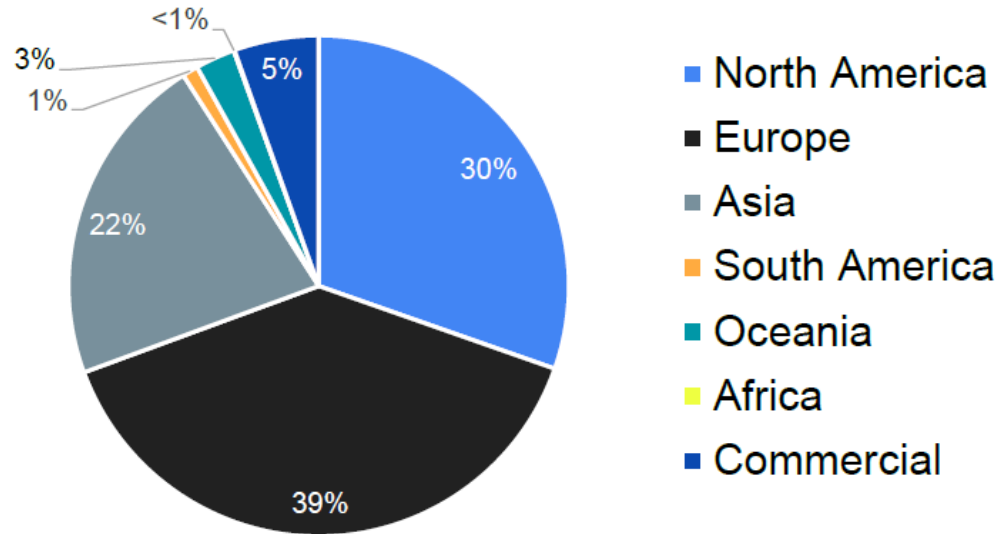


Data-inは地域ごとに分担

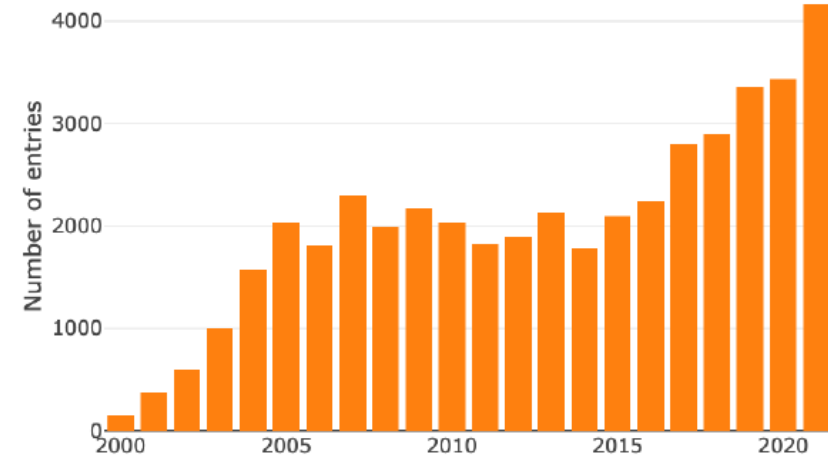


近年アジアからの登録データが増加

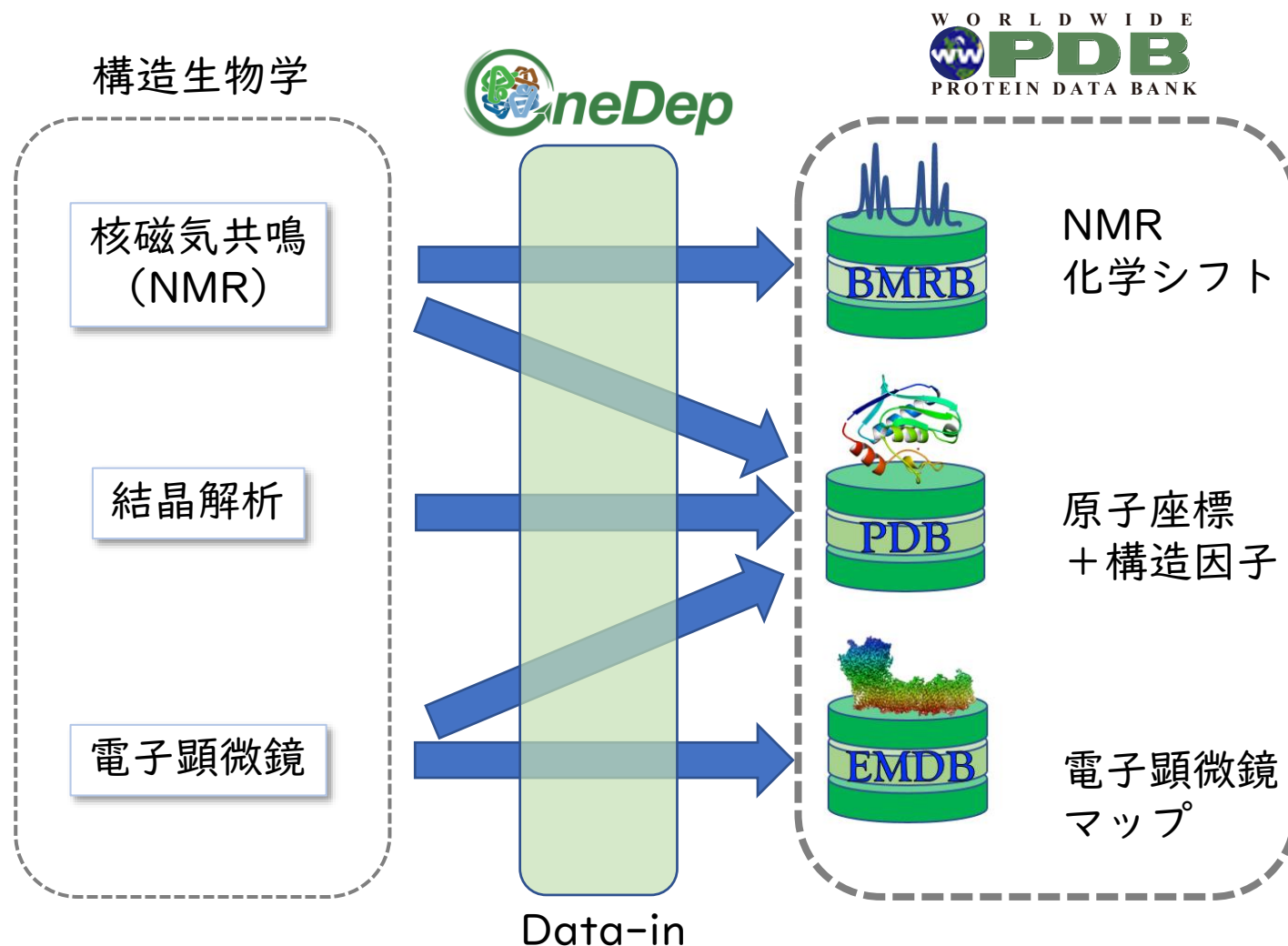
全18万件エントリーの地域内訳



PDBjで処理したエントリー数の推移

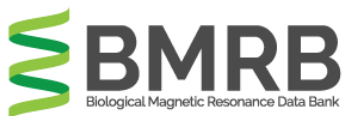


wwPDBでは3つのデータアーカイブを運営

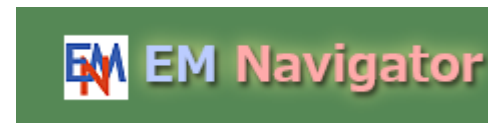


BMRB と EMDB

核磁気共鳴
(NMR)



電子顕微鏡
(EM)



PDBjの活動

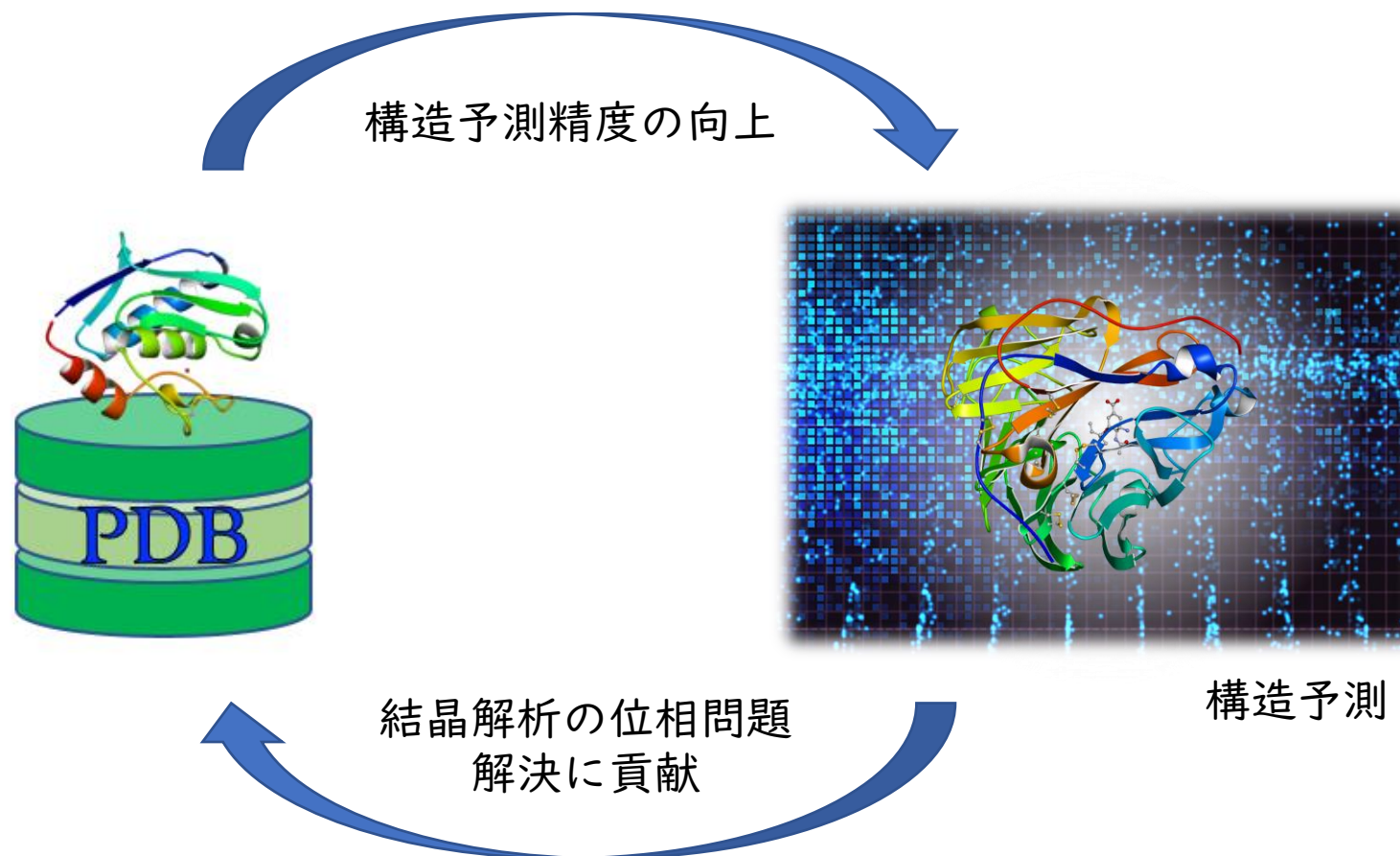
日本蛋白質構造データバンク (Protein Data Bank Japan, PDBj) は

- 2000年7月に活動開始。
- 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)



PDBはもう要らない? → No

PDBと構造予測は
相互に補完し合う関係

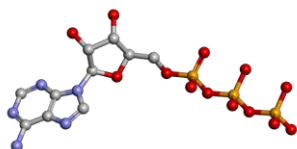


PDBの化合物IDが3文字から5文字に

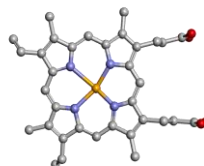
PDBの「化合物ID」(現在3文字)
が2年程度で枯渇



枯渇後新たに発行される
化合物IDは5文字に

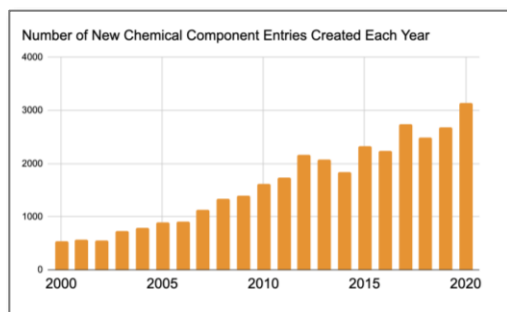


ATP



HEM

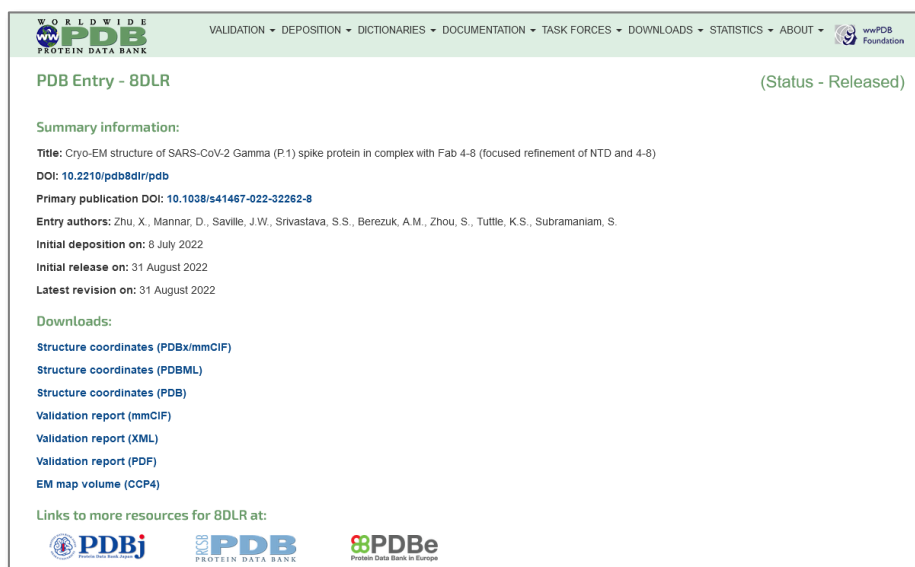
5文字の化合物IDを持つデータは
PDBx/mmCIFでのみ提供



PDB IDが4文字から8文字へ

4文字のPDBIDもいずれ枯渇  既に8文字に対応したID体系の運用が始まっています。

例： https://www.wwpdb.org/pdb?id=pdb_00008dlr



PDB Entry - 8DLR (Status - Released)

Summary information:

Title: Cryo-EM structure of SARS-CoV-2 Gamma (P.1) spike protein in complex with Fab 4-8 (focused refinement of NTD and 4-8)

DOI: [10.2210/pdb8dlr/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb8dlr/pdb)

Primary publication DOI: [10.1038/s41467-022-32262-8](https://doi.org/10.1038/s41467-022-32262-8)

Entry authors: Zhu, X., Mannar, D., Saville, J.W., Srivastava, S.S., Berezuk, A.M., Zhou, S., Tuttle, K.S., Subramaniam, S.

Initial deposition on: 8 July 2022

Initial release on: 31 August 2022

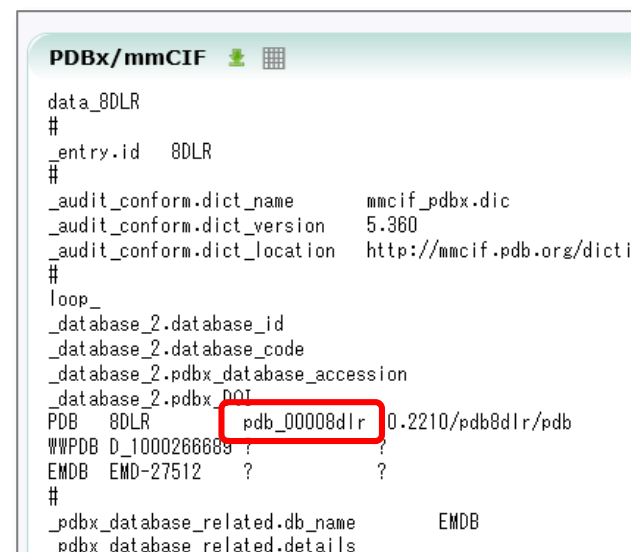
Latest revision on: 31 August 2022

Downloads:

- [Structure coordinates \(PDBx/mmCIF\)](#)
- [Structure coordinates \(PDBML\)](#)
- [Structure coordinates \(PDB\)](#)
- [Validation report \(mmCIF\)](#)
- [Validation report \(XML\)](#)
- [Validation report \(PDF\)](#)
- [EM map volume \(CCP4\)](#)

Links to more resources for 8DLR at:

[PDBj](#) [PDB](#) [PDBe](#)

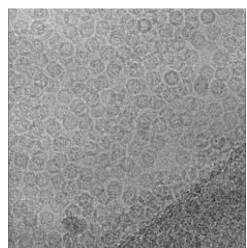


```

data_8DLR
#
_entry.id      8DLR
#
_audit_conform.dict_name      mmcif_pdbx.dic
_audit_conform.dict_version   5.360
_audit_conform.dict_location  http://mmcif.pdb.org/diction
#
loop_
_database_2.database_id
_database_2.database_code
_database_2.pdbx_database_accession
_database_2.pdbx_DOI
PDB      8DLR      pdb_00008dlr      0.2210/pdb8dlr/pdb
WWPDB    D_1000268689 ?
EMDB     EMD-27512   ?
#
_pdbx_database_related.db_name      EMDB
_pdbx_database_related.details
  
```

「元データ」のデータベース

2D電子顕微鏡画像

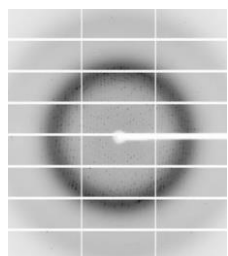


EMPIAR-10248



<https://empiar.pdbj.org/>

X線回折像

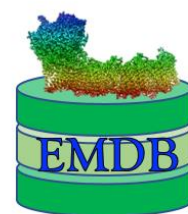


XRD-00047

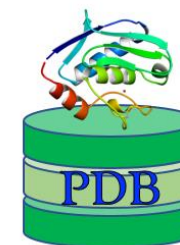


<https://xrda.pdbj.org/>

ポスター29をご覧ください



3D電子顕微鏡マップ



3D原子モデル