

タンパク質構造データバンク



PDBj
<https://pdbj.org/>

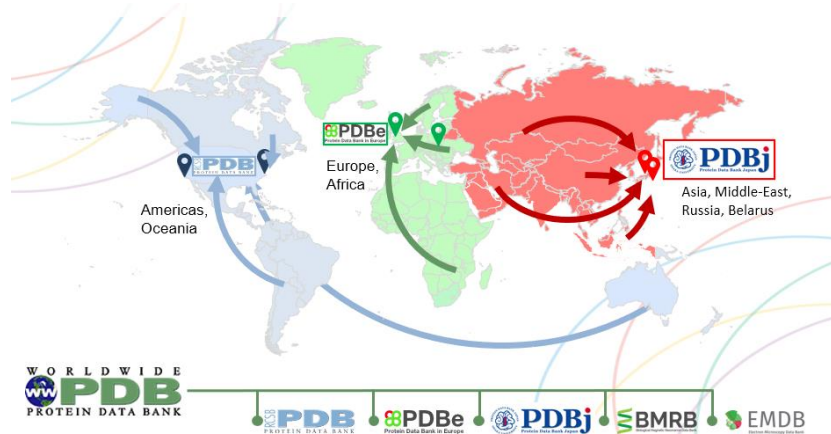


日本蛋白質構造データバンク（PDBj: Protein Data Bank Japan）（<https://pdbj.org/>）は、日米欧3極で構成するWorldwide Protein Data Bank（wwPDB）の主要メンバーとして、PDB（タンパク質構造データバンク）とBMRB（NMR実験情報データバンク）を構築しています。データ公開件数はwwPDB全体として、240,291件（X線結晶構造 196,681件、NMR構造 14,571件、クライオ電顕構造 28,335件、その他 704件）にのぼります（2025年8月現在）。この中で、PDBjは主にアジア地域からのデータ登録を分担しており、wwPDBに登録されているデータの約3割がPDBjから登録されています。

PDBj独自の活動として、全実験手法の登録データ品質検証レポートの統合化を実施してwwPDBに提供しているほか、タンパク質立体構造データを検索、可視化、解析するための独自のサービスやツールを開発・提供しており、構造生物学データ利用の高度化に寄与しています。

実験データのレファレンスとしても広く使われており、基礎生物学のみならず、創薬などの応用分野においても広く活用されています。

Worldwide Protein Data Bank (wwPDB)



利活用状況

・直近4年間の月間平均アクセス数

（PDBjサイトおよびBMRBjサイトの訪問数）

2021年度：約12万件、2022年度：約17万件、2023年度：約26万件、2024年度：約102万件

2024年9月にJohn M. Jumper博士らがノーベル化学賞を受賞後、AlphaFoldの学習データにされたPDBのデータを収載するPDBjへのアクセスが急増。

・論文数と論文被引用件数（2025年8月現在 Scopusで調査）

当該データベースに関する2002年度～2025年度の論文発表数はwwPDB、BMRBとして48報、それらの論文の被引用数はのべ7,545報にのぼる。

・活用事例

1) 非天然新規タンパク質のデザイン

たくさんの既知のタンパク質の立体構造から構造ルールを明らかにすることで、これまでに自然界では観察されていない全く新しい立体構造を持つタンパク質を設計することができる。大阪大学の古賀教授らは、PDBデータからこれまでに組み合わせのない全く新しい $\alpha\beta$ -foldを持つ新規タンパク質を人工的にデザインし、実際にそのタンパク質を合成してNMR構造を決定した（Nature Struct. Mol. Biol. 2023）。

2) AlphaFold2の開発

「タンパク質構造予測に関する研究」でノーベル化学賞を受賞したJohn M. Jumper博士らは、PDBのデータを学習させたAlphaFold2をさらにPDBのデータを用いて発展させ、タンパク質複合体の予測技術を高めたAlphaFold3を開発した（Nature 2024）。

PDBjは、統合化推進プログラムの研究開発課題「蛋白質構造データバンクのデータ駆動型研究基盤への拡張」（研究代表者 栗栖 源嗣 大阪大学 蛋白質研究所 教授）の一環で開発・提供しています。



国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）
情報事業部 NBDC事業推進室

Tel: 03-5214-8491 E-mail: nbdc-dicp@jst.go.jp



Creative Commons 表示4.0国際ライセンス

（2026年4月）

タンパク質ごとの立体構造と変異情報や相互作用情報をまとめた統合サイト



PDBj UniProtポータル

<https://pdbj.org/uniprot>



世界中の研究グループによって解析されたさまざまな生体高分子の立体構造データは、国際的な連携組織、蛋白質構造データバンク（Protein Data Bank: PDB）に登録され、全世界に公開されています。これらの立体構造データは、基礎生物学のみならず、創薬などの応用分野においても盛んに活用されています。PDBj (<https://pdbj.org/>)は、米国、欧州の各拠点と連携し、全PDBデータの公開およびアジア地区で解析されたタンパク質立体構造データの登録処理をおこなうとともに、タンパク質立体構造データを検索、可視化、解析するための独自のサービスとツールを開発・提供しています。

2024年11月、PDBjでは新たにUniProt統合ポータルを公開しました。このポータルサイトでは、UniProtに登録されたアミノ酸配列(UniProt ID)ごとにPDBの立体構造データと、jMorp (Japanese Multi Omics Reference Panel)やMGenD (Medical Genomics Japan Variant Database)などに由来する遺伝子変異情報、相互作用情報などがまとめられており、任意のタンパク質の立体構造に関するさまざまな情報を包括的に閲覧することができます。

このポータルページでは、立体構造データごとに評価された独自の品質評価スコアが示されており、一つのタンパク質について複数の構造データが登録されている場合は、その利用目的に応じてどの構造データを選べば良いかを判断する際の参考にすることができます。

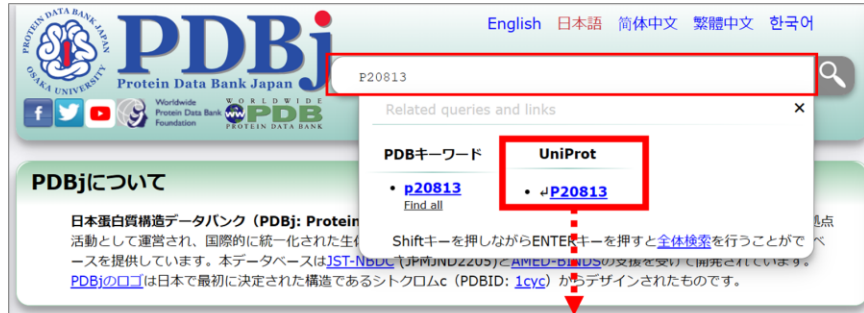
また、アミノ酸配列ビューアでは遺伝子変異情報が表示され、任意のアミノ酸残基を選べると立体構造ビューアでその位置を確認することができます。そのため、例えば、疾患に関わる遺伝子変異がタンパク質の機能に与える影響の推測などに役立てることができます。

UniProt統合ポータルへのアクセス方法

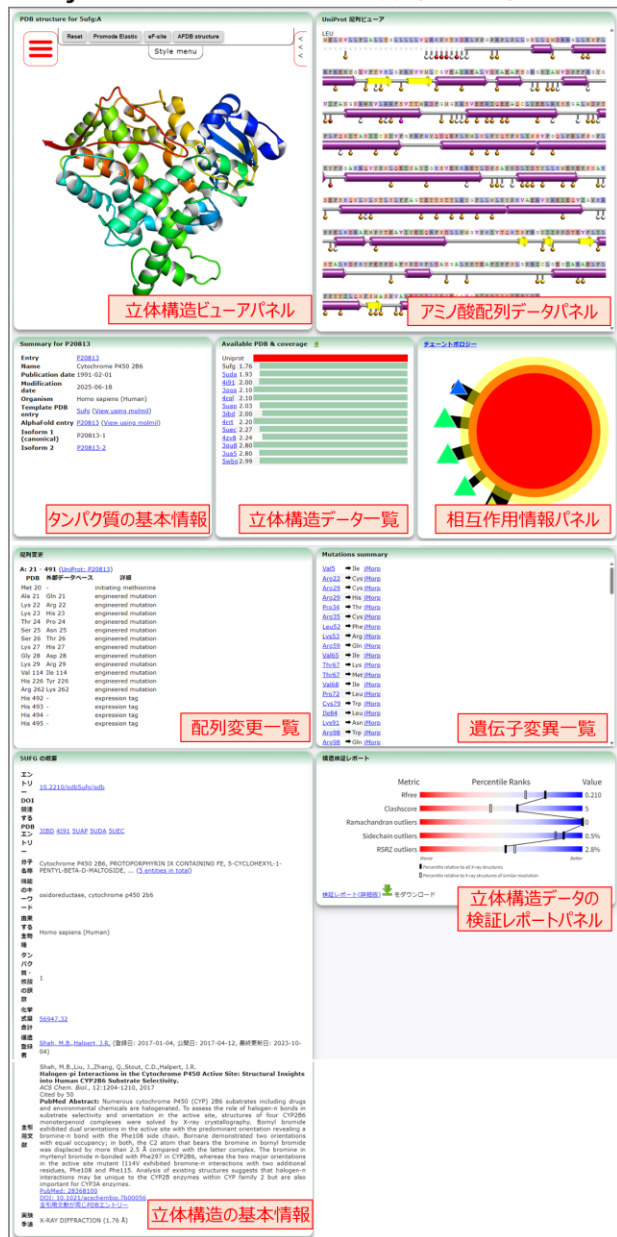
調べたいタンパク質のUniProtIDをPDBjトップページの検索窓に入力し、「UniProt」の下に示されたリンクをクリックするとUniProt統合ポータルのページが表示されます。

参考文献

Gert-Jan Bekker et al., Protein Data Bank Japan: Improved tools for sequence-oriented analysis of protein structures. Protein Science 2025 (<https://doi.org/10.1002/pro.70052>)



PDBj UniProt Portalのページの一例 (P20813)



国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST) 情報事業部 NBDC事業推進室

Tel: 03-5214-8491 E-mail: nbdc-dicp@jst.go.jp



Creative Commons 表示4.0国際ライセンス

(2026年4月)