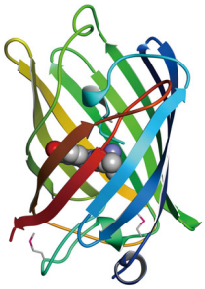
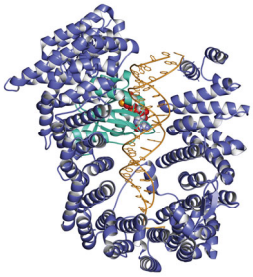
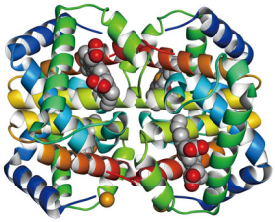
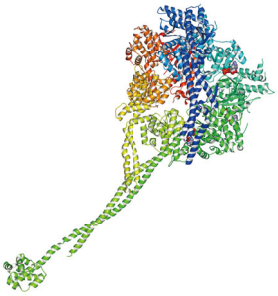
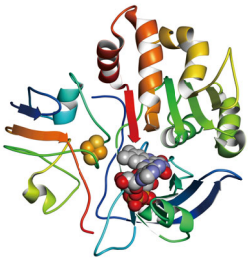
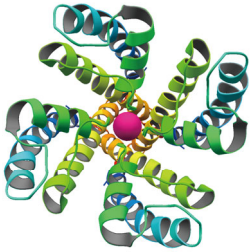
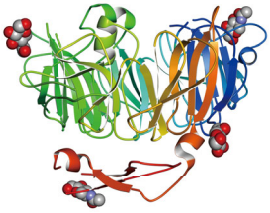
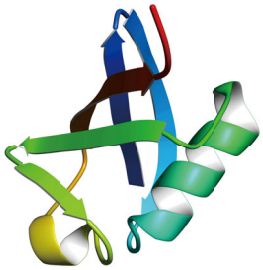
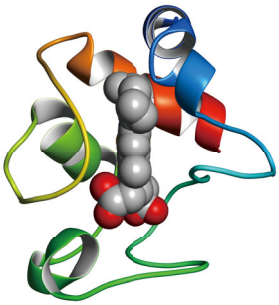



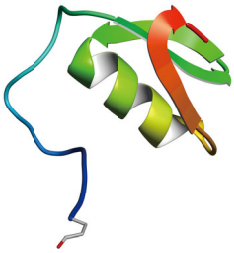
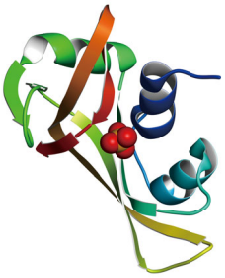
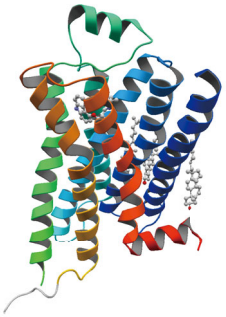
PDBj Newsletter

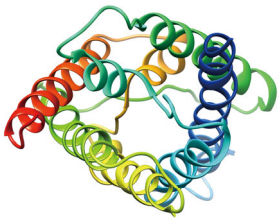
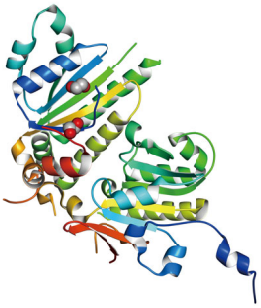
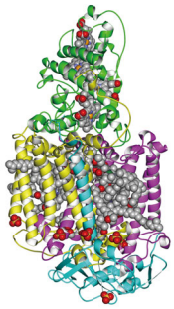
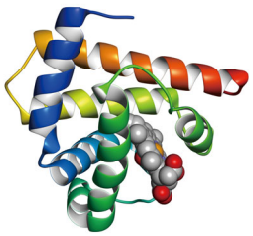
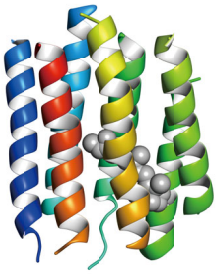
2020年9月

Vol.21 No.2



PDBj COVID-19

PDBjでは新型コロナウイルス感染症(COVID-19)に関係する情報をまとめた特集ページを作成しています。

新型コロナウイルス特集ページを開設

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

世界中の研究者が構造解析した蛋白質の構造情報は，必ず日米欧のいずれかのサイトで事前にデータベースに登録する約束になっています。新型コロナウイルスがもつタンパク質の構造が登録された場合，創薬研究の加速を期待して，アジア地区からの登録に関しては日本のデータセンターである日本蛋白質構造データバンク(PDBj)が，個別に登録者(研究者)に連絡をとり，論文発表を待たずに即時公開することを強く勧めています。

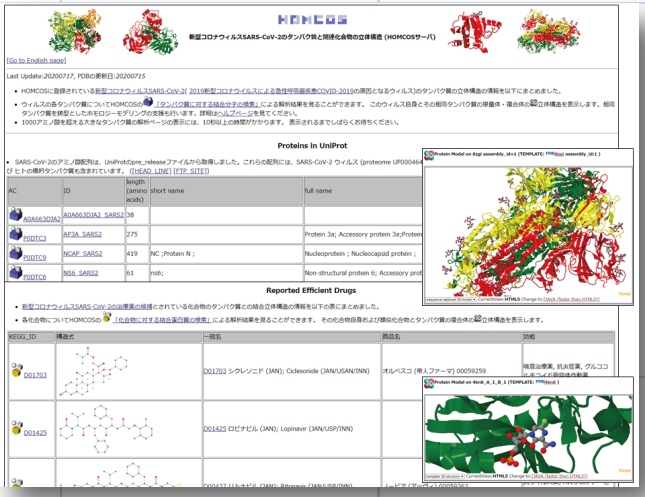
また欧米の他のデータセンターと連携して，新型コロナウイルスのタンパク質構造を集約しデータを迅速に公開しています。データは毎週水曜日に日米欧のデータを全て併せて一斉に公開しています。SARSやMERSなどの紛らわしい類縁ウイルスの情報をフィルターし，新型コロナウイルス感染症(COVID-19)に関連した構造情報データのみを正確に集約した特集ページを作成し情報発信しています。

このページでは非専門家向けの解説ページ「今月の分子」へのリンクも掲載しています。

HOMCOSのコロナウイルス特設ページ

http://homcos.pdbj.org/?LANG=ja

HOMCOSは複合体構造の検索・モデリングの鋳型提供のためのデータベースです。パンデミックの緊急性を鑑み，コロナウイルス関連のタンパク質・化合物を集めた特集ページをHOMCOSに開設しました。既に構造解析されたデータに加え，相同タンパク質，類似化合物の構造情報についてもまとめられています。最新のPDBデータに対応するように毎週更新されています。コロナウイルスの構造生物学的な研究にご活用ください。



BSM-Arcでのコロナウイルス関連のデータ登録

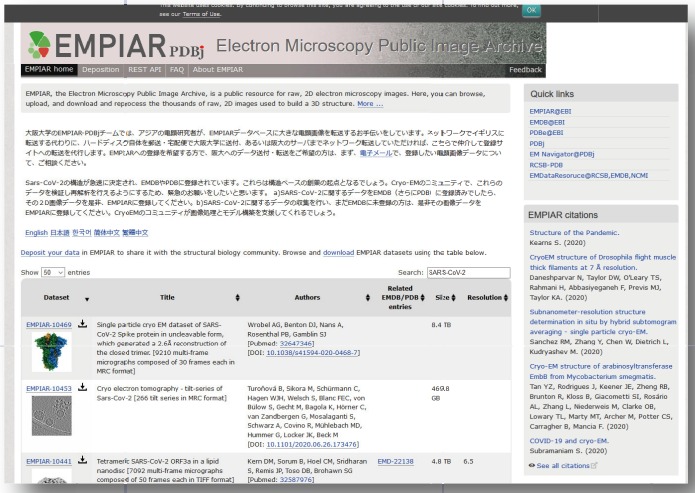
https://bsma.pdbj.org/featured/covid-19

BSM-Arc(Biological Structure Model Archive)は，分子動力学法，ホモロジーモデリング法などで得られた分子構造のデータベースです。BSM-Arcは，原則として，査読論文として出版された研究データのみを受け付けていますが，新型コロナウイルス研究の緊急性を考え，査読前のデータでもRTPI(research topics of paramount importance)というカテゴリを設けて，例外的にデータを先行公開することにしました。既に38個の原子座標を含む2件のデータを受け付けて公開しています(2020年7月6日現在)。

EMPIAR-PDBjのHDD送付による登録支援

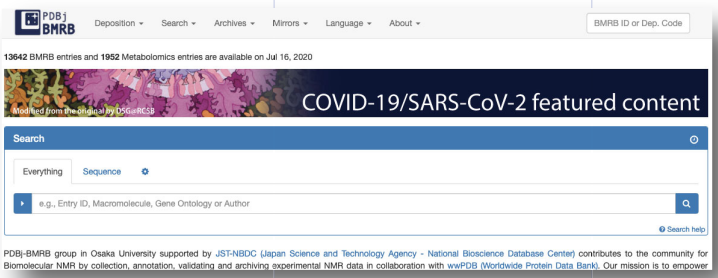
https://empiar.pdbj.org/

EMPIARは，電子顕微鏡の2D生画像のデータベースです。PDBjではそのミラーサイトEMPIAR-PDBjの運営を行っており，HDD受付によるアジアからの登録支援も行っています。昨今のパンデミックを受けて，スパイクタンパク質やRNAポリメラーゼなど多くの新型コロナウイルスのタンパク質の構造が電子顕微鏡で決定され，EMDBとPDBに登録されてきています。EMPIARにも既に8件の新型コロナウイルス関係のデータが登録されています（2020年7月31日現在）。電顕の3DマップをEMDBに登録した方は，EMPIARへの登録も是非行っていただくようお願い申し上げます。



PDBj-BMRBの新型コロナウイルス特設ページ

https://bmrbdep.pdbj.org/

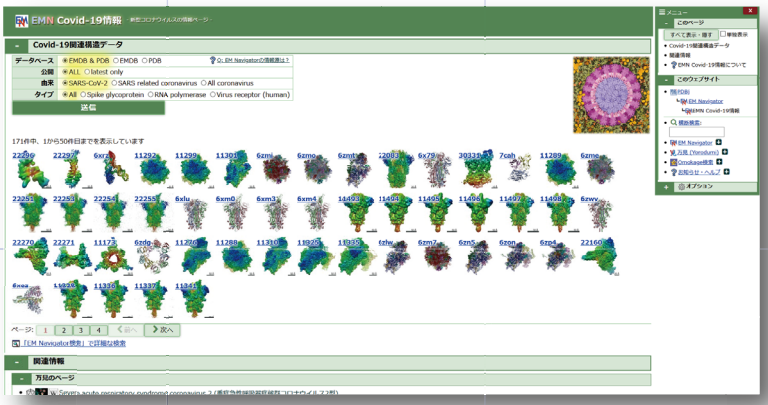


BMRBは生体高分子のNMR実験情報のデータベースです。PDBj-BMRBグループでは，新型コロナウイルスに関する特設ページを開設しました。BMRBへと登録された新型コロナウイルスのエントリ情報に加えて，独自開発したBMRB/PDB/EMDB/UniProtのデータベース間横断検索機能を利用した検索例も提供しています。

EM Navigatorの新型コロナウイルス特設ページ

https://pdbj.org/emnavi/covid19.php

「EM Navigator」は，電子顕微鏡によって得られた三次元電子密度マップのデータベースEMDBのデータをみるためのウェブサービスです。ここでも新型コロナウイルスに関するデータを集めたページを提供しています。



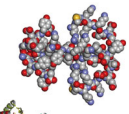
PDBj

PDBj 20 周年

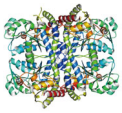
PDBj 20 Year Anniversary

日本蛋白質構造データバンク（PDBj: Protein Data Bank Japan）は 2020 年 7 月で設立 20 周年を迎えました。JST-BIRD（当時）の支援を受けて最初の PDB エントリーの登録処理を行ったのが 2000 年 7 月 6 日です。2000 年には，わずか 157 件であった PDBj でのデータ登録処理数は，RCSB PDB の協力も得て軌道に乗り，2001 年には 376 件，2002 年には 602 件の登録を行いました。2003 年に RCSB PDB と PDBe と共に wwPDB を組織し，アジア・オセアニア地区の全データ登録に責任を持つまでに成長しました。その後，中国からのデータ登録数が急増したことにより，2016 年からは責任地域をアジア・中東地区に修正して現在に至っています。この間，eF-site や ProMode などの 2 次データベース構築や，PDBMLplus，RDF など新規フォーマットの導入，Molmil や MagRO など関連ツール類の開発を進めてきました。これは偏に，登録者，利用者の皆様や文部科学省，JST や AMED をはじめとする関係機関による継続的なご支援の賜物です。PDBj は，これからも引き続き蛋白質構造データバンクのアジア・中東地区拠点として頑張ってまいりますので，変わらぬご支援を賜りますようお願い申し上げます。

PDBj で最初に登録処理した NMR 構造は
1EJQ（シンデカン 4）



PDBj で最初に登録処理した構造は
1GC0（メチオニンγリアーゼ）



PDBj 活動開始（代表 中村 春木 教授（現名誉教授））

wwPDB 設立

実験データ必須化
PDB エントリー数 50,000 件達成

PDB 設立 40 年
記念シンポジウム開催

PDBj 処理件数 20,000 件達成

結晶構造登録フォーマットとして
PDBx/mmCIF が必須化

2000 03 04 05 06 08 2010 11 13 15 17 19 2020

ProMode
サービス開始

eF-site
サービス開始

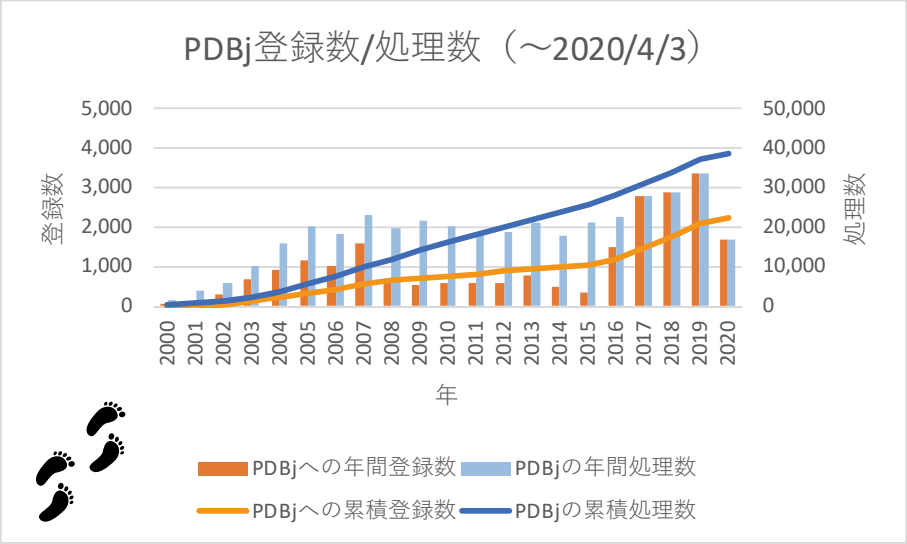
BMRB が
wwPDB に合流

化学シフトデータ登録必須化

PDBj で OneDep 運用開始

PDBj 新代表に栗栖 源嗣教授が就任

PDBj 発足 20 周年
PDBj 処理件数 40,000 件達成（予定）



データ元：https://www.wwpdb.org/stats/deposition

第１位

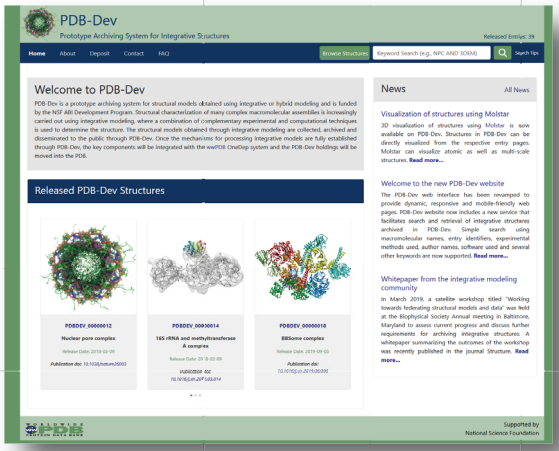
PDBj には wwPDB の中で最もたくさんのエントリーを処理したアノテータが在籍しています。9,800 件以上を処理して，もうすぐ 10,000 件。すごい！

表彰

PDBj Latest News

1 PDB-Devサイトの改良

PDBでは結晶解析，NMR，電顕の3手法で決定された構造のみを受け付けますが，様々な実験手法（架橋剤質量分析，2D電顕画像，FRET，SAXSなど）を組み合わせて作成した構造については，PDB-Dev（http://pdb-dev.wwpdb.org/）への登録をお願いします。Webページが一新され，検索機能が強化されました。学術雑誌からデータの公開を求められたときにご活用ください。
https://pdbj.org/news/20200410

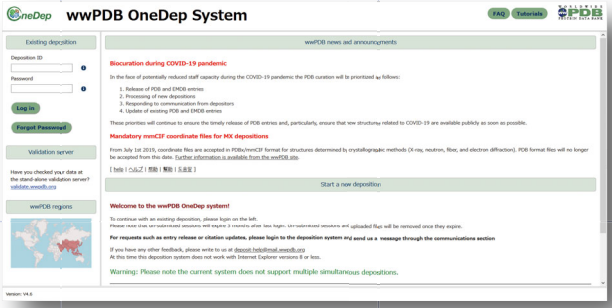


2 EMDBのメタデータ先行公開を取りやめます

EMDBにおいて，これまでは一次マップデータ等よりも先にメタデータのみを公開することを認めてきましたが，2020年4月15日以降はそれができなくなりました。この方針変更は，EMDBの運営方針をwwPDBの方針に合わせる一環で行われるものです。
https://pdbj.org/news/20200408

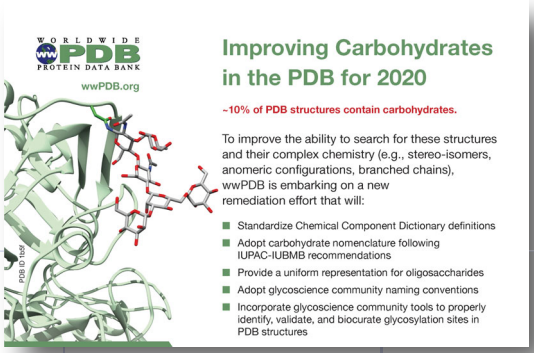
3 PDBの原子座標更新について

現行のPDB登録システム（OneDep）で登録されたPDBエントリーだけではなく，旧登録システム（ADITやAutodep等）を使って2019年8月より前に登録されたPDBエントリーについてもPDBIDを維持したまま原子座標を更新できるようになりました。
https://pdbj.org/news/20200219



4 PDBにおける糖鎖の表現方法を改善

PDBに登録された構造に含まれる糖鎖の表現方法を改善しました。IUPAC-IUBMBが推奨する命名法や，糖鎖科学で使われる名称，オリゴ糖の構造を一意に特定できるような表現方法などを採用しています。
https://pdbj.org/news/20200226



5 NMRデータの一括登録

OneDepへのNMR構造登録機能を拡張して，新しくNEFまたはNMR-STAR形式の単一ファイルを用いたNMRデータの登録ができるようになりました。今後，NMRデータ保管，配布，再利用がより簡単にできるようになります。
https://pdbj.org/news/20200115

PDBj

PDBj Award @AsCA2019

PDBj では，PDBj が登録に責任を持つアジア・中東地区の学会で優秀な学生発表に対して 2018 年より PDBj ポスター賞を授与しています。2019 年 12 月 17 日～ 20 日にシンガポール国立大学で開催された第 16 回 アジア結晶学連合（AsCA2019）では第 2 回 PDBj ポスター賞受賞者を表彰しました。

受賞者は Prashant Kumar SINGH（All India Institute of Medical Sciences, India）氏で，ポスター発表のタイトルは「Structural basis of activation of mammalian heme peroxidases」です。表彰状と，副賞として wwPDB の PI が編集した本「Integrative Structural Biology with Hybrid Methods（Editors: Haruki Nakamura, Gerard Kleywegt, Stephen K. Burley, John L. Markley）」を授与しました。

選考は AsCA2019 の実行委員会が委嘱した選考委員によって行われました。現地実行委員会と選考委員の皆さんに感謝申し上げます。

公的機関からの研究費ではまかなえない広報活動を充実・整備することを目的とした PDBj への寄付窓口を大阪大学未来基金に開設しました。寄付金は所得税や住民税の控除対象となります。詳しくはウェブサイトをご覧ください。
https://www.miraikikin.osaka-u.ac.jp/916/

Protein Data Bank Japan

Staff

統括責任者 栗栖 源嗣（大阪大学蛋白質研究所・教授）

PDB/EMDBデータベース構築グループ

中川 敦史　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
見学 有美子（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
張 羽澄　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
池川 恭代　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
佐藤 純子　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
金 宙妍　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

BMRBデータベース管理運営グループ

藤原 敏道　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
児嶋 長次郎（横浜国立大学工学部・教授）
宮ノ入 洋平（大阪大学蛋白質研究所・准教授）
岩田 武史　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
横地 政志　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

EMPIARデータベース管理グループ

川端 猛　（大阪大学蛋白質研究所・特任准教授）
常住 規代　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

秘書 佐久間 量子（大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員）

PDB/EMDBデータベース高度化グループ

藤 博幸　（関西学院大学理工学部・教授）
水口 賢司　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
Bekker, Gert-Jan（大阪大学蛋白質研究所・特任助教）
長尾 知生子（大阪大学蛋白質研究所・助教）
山下 鈴子　（大阪大学蛋白質研究所・技術専門職員）
工藤 高裕　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

研究協力者

中村 春木　（大阪大学蛋白質研究所・名誉教授）
由良 敬　（お茶の水女子大学 教授 / 文理融合AI・データサイエンスセンター 副センター長）for EM Navigator
鈴木 博文　（早稲田大学先進理工学部・次席研究員）for EM Navigator
小林 直宏　（理化学研究所横浜放射光科学研究センター・上級研究員）
輪湖 博　（早稲田大学社会科学総合学術院・教授）for ProMode
猿渡 茂　（北里大学理学部・准教授）for ProMode
伊藤 暢聡　（東京医科歯科大学大学院・教授）
木下 賢吾　（東北大学大学院情報科学研究科・教授）for eF-site
Standley, M.Daron（大阪大学微生物病研究所・教授）
for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, ASH, MAFFTash, Spanner and SFAS
加藤 和貴　（大阪大学微生物病研究所・准教授）for MAFFTash

Contact

PDBj 事務局　Tel: (06)6879-4311
PDBj 登録事務局　Tel: (06)6879-8634
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2
大阪大学蛋白質研究所 附属蛋白質解析先端研究センター内

ご質問やご要望は
ウェブページ左にある「お問い合わせ」
https://pdbj.org/contact
から常時受け付けています

2020年9月 発行