

### wwPDB諮問委員会

wwPDB の運営諮問委員会は毎年秋に wwPDB のパートナーが順番にホストを務めて開催されます。第 20 回の wwPDB 諮問委員会は、EMDB がホストとして 2023 年 10 月 27 日に開催されました。wwPDB の PI は EMBL-EBI の Hinxton キャンパスから on-site で参加し、アドバイザーの委員はオンラインで参加するハイブリッド形式で実施されました。PDBj からは代表の栗栖に加えて、専門部会の千田俊哉委員 (KEK PF) と蕭傳鑑委員 (中央研究院・台湾) に部会を代表して出席していただきました。wwPDB 各サイトの運営状況や OneDep システムの開発状況、ウクライナ戦争に伴うオープンサイエンスへの脅威や、BMRB 運営研究費の継続問題、さらに wwPDB AC メンバーの任期や職掌について話し合われました。委員のみなさんには、時差の関係で日本を含む一部の方には大変遅い時間の開催にもかかわらず、専門的かつ建設的なご意見を頂戴し大変感謝申し上げます。2024 年は 5 年ぶりに PDBj が wwPDB AC 会議を主催する順番です。



### OneDep Summit 2023



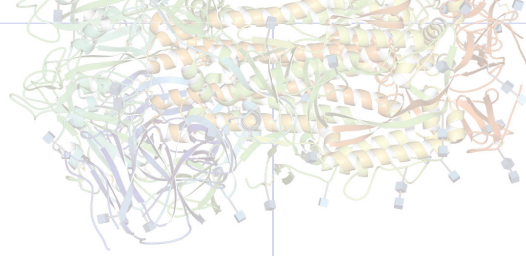
OneDep Summit が、2023 年 10 月 29 日(日)から 10 月 30 日(月)まで、英国 Hinxton の Genome Campus で開催されました。この年に一度の会議では、OneDep の開発者とバイオキュレータが一堂に会し、OneDep の長期的な開発目標の設定やアノテーションの指針、将来の課題について議論しました。現在、PDB では、エントリー処理数の増加や電頭マップ等のデータの巨大化、多数エントリーの登録時の煩雑さが問題となっています。開発者の会議では、各 PDB サイト間のデータ交換方法の刷新、OneDep の信頼性及び処理速度の向上、使いやすさの改善に関する議論が行われました。また、バイオキュレータの会議では、アノテーションの効率化や複数エントリーの一括登録についての意見が交わされました。この OneDep Summit での決定事項は、今後の OneDep 開発の指針として機能し、具体的な実装方法に関する議論が継続して行われています。

すさの改善に関する議論が行われました。また、バイオキュレータの会議では、アノテーションの効率化や複数エントリーの一括登録についての意見が交わされました。この OneDep Summit での決定事項は、今後の OneDep 開発の指針として機能し、具体的な実装方法に関する議論が継続して行われています。

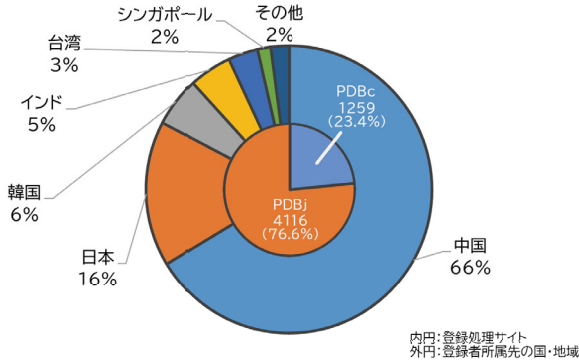
### 蛋白質立体構造データベース専門部会

2023 年 3 月 6 日の 10 時から約 2 時間、PDBj のアドバイザー会議に相当する共同利用・共同研究委員会の蛋白質立体構造データベース専門部会が Zoom オンライン会議システムを用いて開催されました。主たる運営資金を提供して下さっている JST NBDC からも、伊藤総括を含む 5 名の方にも陪席していただきました。部会では、2022 年度の活動報告と次年度の活動計画が報告されました。2022 年は PDB China の活動がスタートし、PDBj が 2 名の PDB China のアノテータを現場でトレーニングしたことが報告されました。トレーニング終了後に、2 名のアノテータは上海に戻って、中国からのエントリーの一部処理を開始したことが実際の数字とともに報告されました。その他に、PDBj が独自に進めている EMPIAR-PDBj の活動内容や、結晶解析の回折イメージのアーカイブ XRDa、計算科学の計算結果を保存する BSM-Arc の活動についても詳細が説明されました。最後に、この諮問委員会の企業委員について、次年度から協和発酵キリンの齋藤純一博士に代わり、Axcelead Drug Discovery Partners 株式会社主任研究員の曾我部 智氏に交替することが報告されました。齋藤委員のこれまでの貢献に謝辞が述べられました。

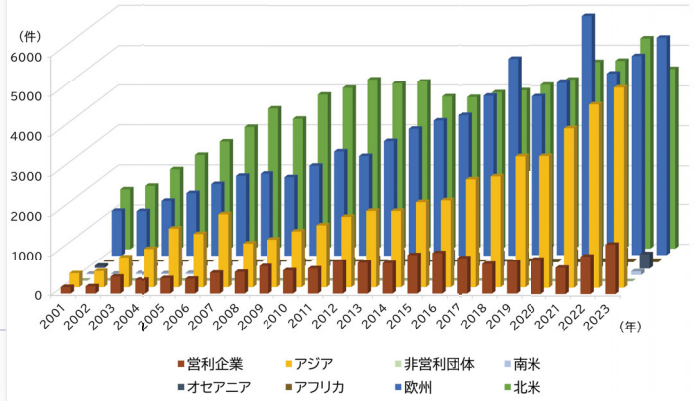




PDBj+PDBcが登録処理した PDBエントリーの国・地域分布 (2023年)



wwPDB全体での地域別PDB登録数



2023年には16,000件以上のPDBエントリーが新たに公開されました。そのうち約30%がアジア地区からの登録です。このうち、中国から登録されたエントリーの一部については、PDB Chinaに担当を割り振って登録処理を行いました。

PDB登録処理10000件達成

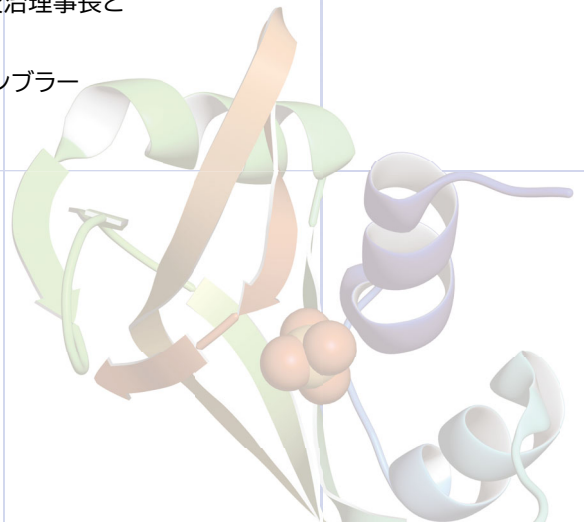


2007年よりPDBアノテーションを担当してきたPDBjの張羽澄(Minyu Chen)さんが登録処理したPDBエントリーの件数が10000件に達しました。この記録を達成したバイオキュレーターはPDBjでは見学有美子さんに続いて2人目、wwPDB全体では5人目となります。

(2024年2月13日)



(上) 蛋白質研究奨励会の長谷俊治理事長と張羽澄博士  
(左) 張博士に贈られた記念のタンブラー



## モデルCIF:計算で求めた構造データ用フォーマット

計算で求めた構造用の記述フォーマット「モデル CIF」がモデル CIF 作業部会によって開発されています。これは、実験により決定された分子構造データの記述フォーマットであり、PDBの標準フォーマットにもなっている「PDBx/mmCIF」を拡張したものです。

(2023年1月31日)

## CCD5桁化に伴うPDBフォーマットでのデータ提供終了について

PDBのデータを記述する上で化合物を識別するために規定している化合物辞書 (Chemical Component Dictionary, CCD)のIDはこれまで3文字以内で定義していますが、IDリソースが枯渇したため、今後は5文字の英数字コードを発行します (PDB IDとの混同を避けるため、4文字のコードは使用しません)。PDBフォーマットでは5文字のCCD IDを記述できないため、5文字のCCD IDを含むPDBエントリーのデータはPDBフォーマットでは提供しません。

(2023年3月8日、9月14日、12月14日)

## ORCID認証によるOneDep利用について

OneDepを使ってPDBのデータ登録を行う際、ORCID認証を使って登録・閲覧ができるようになりました。これまでは登録セッションごとの認証が必要でしたが、ORCID認証を使うと、セッションごとに認証しなおす必要はなくなり、すべての登録セッションを一覧で参照することができます。

(2023年3月28日、12月20日)

## wwPDB設立20周年

2003年7月、RCSB PDB、PDBe、PDBjが協力して設立したwwPDBは今年で20周年を迎えました。その後BMRB、EMDBもメンバーとして加わり今に至ります。



(2023年7月9日)

## PDBx/mmCIF形式のEMDBメタデータ配布開始

EMDBメタデータはこれまでXML形式で配布してきましたが、新たにPDBx/mmCIF形式での配布も開始しました。これによりPDBデータとEMDBデータを相互運用しやすくなること期待できます。

(2023年10月4日)

## PDBに登録されたNMR実験データの標準化

wwPDBは、過去にPDBに登録されたNMR構造の実験データ (化学シフトと制限情報) を、ソフトウェア固有形式からNMRコミュニティが支持するNMR-STARとNEFの両形式に変換したアーカイブを公開しました。将来的には、wwPDBはNMR実験データの登録において、NMR-STARまたはNEF形式いずれかの単一ファイルのみを受け入れ、ソフトウェア固有形式への対応を廃止する予定です。

(2023年6月14日)

## PDB次世代アーカイブの公開

PDBの次世代アーカイブ「NextGen」を公開しました。

これは、これまでPDBメインアーカイブで提供してきた構造モデルの情報に加え、UniProt, SCOP2, Pfamなどの外部データベースリソースの情報も加えた拡張版PDBアーカイブです。NextGenは以下の場所からアクセスできます。

<https://ftp-nextgen.pdbj.org>

またこれには分子内結合情報が追加されています。

(2023年2月7日、7月5日)

## 初期モデルの情報改善

新たに以下のPDBx/mmCIFカテゴリを導入し、X線、電子顕微鏡、NMR法の開始モデルに関する情報を改善しました。

`pdbx.initial.refinement.model`

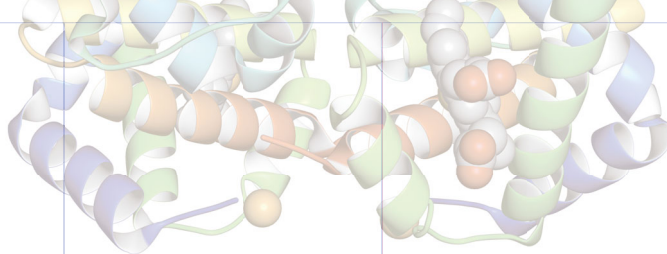
これにより、初期モデルの情報源 (PDB, AlphaFoldDB, RoseTTAFoldなど) が明確となり、実験的に得られたモデルと計算で得られたモデルが区別しやすくなります。

(2023年2月1日)

## 化合物辞書(CCD)におけるペプチド残基の情報改良について

化合物辞書 (Chemical Component Dictionary, CCD) において、ペプチドの主鎖を構成する原子を示すデータ項目を追加し、原子の命名法を標準化しました。

(2023年7月27日、11月15日)



## 学会など

学会などで PDB の最新動向や今後の活動方針、OneDep 登録システムなどについて紹介を行いました。

2023/5/18	第 27 回届生物物理研討會 (台湾 花蓮慈濟大學)	セミナー
2023/6/25-7/1	BioHackathon 2023 (かがわ国際会議場)	開発者会議
2023/7/5	第 23 回日本蛋白質科学会年会 (名古屋国際会議場)	ランチョンセミナー
2023/8/22-29	第 26 回 国際結晶学連合会議 (メルボルン会議展示センター)	ブース出展
2023/9/8	IIBMP2023 (柏の葉カンファレンスセンター)	ランチョンセミナー
2023/10/5	トーゴーの日シンポジウム 2023 (日本科学未来館)	口頭発表・ポスター発表
2023/10/29	日本結晶学会 2023 年度年会 (山口大学常盤キャンパス)	ランチョンセミナー・ブース出展
2023/11/2	第 96 回日本生化学会大会 (福岡国際会議場)	セミナー
2023/11/15	第 61 回 日本生物物理学会年会 (名古屋国際会議場)	ランチョンセミナー

## 一般向けイベント

下記の一般向けイベントを開催し、赤青めがねによる立体視なども使ってタンパク質分子とその機能について解説を行いました。

2023/7/6	さくらサイエンスプログラム 2023 (大阪大学蛋白質研究所)
2023/7/8	大阪大学共創 DAY@EXPOCITY (ららぽーと EXPOCITY)
2023/7/29	高校生向け蛋白研セミナー (大阪大学蛋白質研究所)
2023/8/1	高校生向け蛋白研セミナー (大阪大学蛋白質研究所)

## 日本生物物理学会 wwPDB優秀学生賞



2023 年 11 月に名古屋国際会議場で行われた第 61 回日本生物物理学会において、優秀な学生による口頭発表 3 件に対し、PDB 優秀学生賞を授与しました。これは、2023 年の国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) 設立 20 周年を記念したものです。受賞者とその演題は以下の通りです。

笠原 慶亮さん (東京大学大学院工学系研究科 バイオエンジニアリング専攻 津本研究室 博士課程 2 年)

「可変領域スーパーチャージ抗体-抗原相互作用の熱力学的解析と相互作用パラメータの制御」

南 克彦さん (総合研究大学院大学 先端学術院 遺伝学コース 博士課程 5 年 国立遺伝学研究所 遺伝メカニズム研究系 ゲノムダイナミクス研究室)

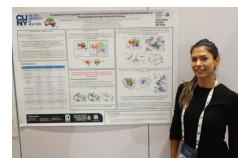
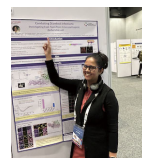
「Replication-dependent histone (Repli-Histo) labeling revealed that chromatin motion can determine DNA replication timing」

Kyle Ian Peter Le Huray さん (英国・リーズ大学)

「Harnessing the power of machine learning and high-throughput molecular dynamics simulations to predict protein-lipid interactions」

## IUCr wwPDB生体高分子ポスター賞

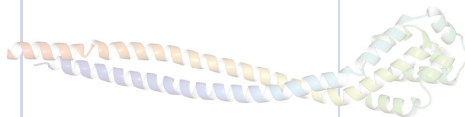
2023 年 8 月 22 日 (火) ~ 29 日 (火) にオーストラリアのメルボルンで開催された第 26 回国際結晶学連合会議 (26th Conference of the International Crystallographic Association, IUCr2023) において、ブース出展と優秀な学生へのポスター賞授与を行いました。受賞者は以下の通りです。



Akila Pilapitiya, Lilian Hor, Jason Paxman, Begoña Heras, “The crystal structure of the toxin EspC from enteropathogenic Escherichia coli reveals approaches to combat diarrheal infections”, La Trobe University

Liliana Guerrero (1), Ali Ebrahim (1), Blake T. Riley (1), Minyoung Kim (1,2), Qingqiu Huang (3), Aaron D. Finke (3), Daniel A. Keedy (1,4)

, “Drugging the Undruggable: Unveiling the Conformational Landscape and Ligandability of Phosphatases through Structural Biology”, 1) Structural Biology Initiative, CUNY Advanced Science Research Center 2) Department of Molecular Biology, Princeton University 3) Cornell High Energy Synchrotron Source (CHESS), Cornell University 4) Department of Chemistry and Biochemistry, City College of New York



## 私も昔はアノテータだった？



8月にオーストラリア・メルボルンで開催された国際結晶学連合会議（IUCr）で非常に懐かしい人と再会した。National Institute of Allergy & Infectious Diseases の Jiansheng Jiang 博士である（写真）。1998年に、当時阪大蛋白研の助手だった私は京極好正所長に「阪大でPDBの活動を始めるので Brookhaven National Laboratory にある BNL-PDB に出張し PDB のエントリー処理について習得してくるよう」と指示された。そして1999年に3ヶ月間、New York の Long Island にある BNL-PDB に出張した。そこで直接 PDB のエントリー処理を教えてくださいましたのが Jiang 博士であった。Jiang 博士と同じ部屋に机をもらい、実際に幾つかのエントリーを処理した（写真）。その後すぐに PDB の拠点は BNL から Rutgers 大学へと移り、BNL と阪大との関係は途切れてしまったが、私と PDB との関係を考える出発点であることは間違いない。メルボルンの IUCr 会場で偶然 Jiang 博士が私を見つけてくださり、暫く懐かしい話をするのができ大変嬉しく感じた。その3ヶ月後、福岡で開催された日本生化学会のシンポジウムで PDBj に関する講演をする機会をいただいた。オーガナイザーは JST-NBDC の統合化プロジェクト研究総括の伊藤先生で、「実験科学者である皆さんが、どういう思いで DB を始められたのか、データ駆動型研究に対するお考えや目指すところを紹介してほしい」とのご依頼であった。夏に Jiang 博士と再会したこともあってシンポジウムでは「若い頃から PDB は私の身近にあり PDB のない蛋白研は考えられない」という意識が DB に携わるようになったきっかけであり、「データ駆動型研究を支えるデータベースとして今後は AI も駆使しながら、質の高さを担保していく必要がある」という考えを述べさせて頂いた。この1年は、私自身と PDB の出会いを振り返り将来を考える大変良い機会となった。

大阪大学蛋白質研究所 栗栖源嗣

## 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）  
于 健（大阪大学蛋白質研究所・特任准教授）  
見学 有美子（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）  
丹羽 智美（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）  
多久和 綾子（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

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）

#### EMPIARデータベース管理グループ

中根 崇智（大阪大学蛋白質研究所・特任准教授）  
常住 規代（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）

#### PRF分室

栗栖 源嗣（(財)蛋白質研究奨励会・招へい研究員）  
磯山 正治（(財)蛋白質研究奨励会・情報室長）  
張 羽澄（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）  
横地 政志（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）

#### PDB/EMDBデータベース高度化グループ

水口 賢司（大阪大学蛋白質研究所・教授）  
Gert-Jan, BEKKER（大阪大学蛋白質研究所・特任講師）  
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・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 EMPIAR-PDBj  
藤 博幸（関西学院大学 生命環境学部・教授）  
川端 猛（東北大学大学院 情報科学研究科・特任准教授）  
for HOMCOS.gmfit.EMPIAR-PDBj  
鈴木 博文（元 大阪大学蛋白質研究所）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・名誉教授）for ProMode  
猿渡 茂（大阪大学・招へい准教授）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  
Daron M. STANDLEY（大阪大学微生物病研究所・教授）  
for SeqNavi, DASH, 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

#### 秘書

佐久間 量子（大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員）  
正木 理香（大阪大学蛋白質研究所・事務補佐員）

### Contact

PDBj 事務局 Tel: (06)6879-4311

PDBj 登録事務局 Tel: (06)6879-8634

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



〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2 大阪大学蛋白質研究所内