



## 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 21 回の wwPDB 諮問委員会は、PDBj がホストとして 2024 年 10 月 18 日に開催しました。2024 年 10 月 16, 17, 18 日に、OneDep 会議と Biocurator



会議を合わせた wwPDB サミットを PDBj が主催し、wwPDB サミットの最終日の夜（日本時間、18 日 21:00～24:00）に運営諮問会議は開催しました。運営諮問委員会は完全オンラインで開催され、PI は宿泊している千里阪急ホテルから、そしてアドバイザーの各委員は自国から参加されました。PDBj からは代表の栗栖に加えて、蛋白質立体構造データベース専門部会の千田俊哉委員（KEK PF）と Kyeong Kyu Kim 委員（成均館大学校医科大学・韓国）に部会を代表して出席していただきました。wwPDB core archive の状況や OneDep システムの開発状況、PDB China の Core Membership への移行計画や、各拠点の慢性的な運営研究費不足問題、さらに wwPDB core archive からのエントリー取り下げ手順の策定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。wwPDB サミットと AC 会議は JST-NBDC と（一財）蛋白質研究奨励会の財政的支援により主催することができました。紙面を借りて感謝申し上げます。2025 年は米国の BMRB が wwPDB サミットを 5 月に AC 会議を 10 月に主催する予定です。

## wwPDB Summit 2024

2024 年 10 月 16 日から 18 日まで、千里ライフサイエンスセンターにおいて wwPDB サミットが開催しました。OneDep 開発者と PDB バイオキュレータが、OneDep システムの課題、データ登録の効率化、ソフトウェアの開発管理の見直しについて議論しました。特に、データ登録の際に、複数エントリー間で共通するメタデータの入力の煩雑さを解消することは喫緊の課題で

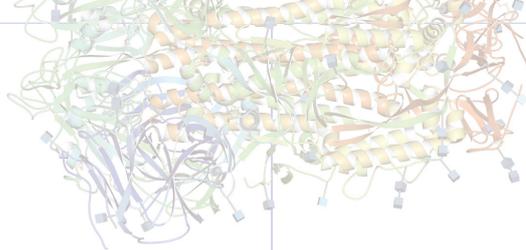


あり、引き続き対応を議論することになりました。その他、OneDep システムをクラウド環境での稼働を可能にするために現在の開発スタイルの見直しや、各サイト間でのアノテーションの質の均質化および効率化についての検討を行いました。

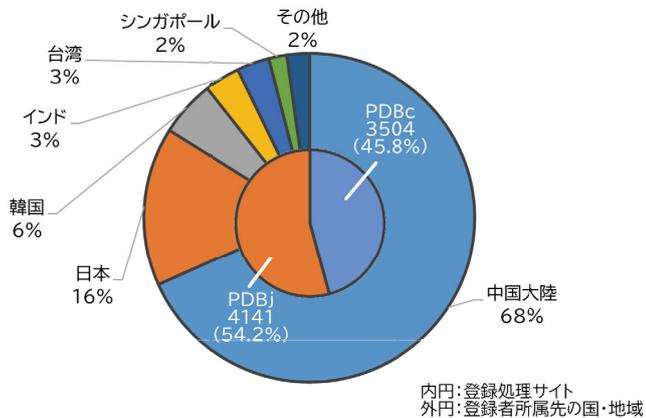
## 蛋白質立体構造データベース専門部会(2023年度,2024年度)

【2023 年度】2024 年 3 月 13 日の 13 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、伊藤総括を含む 3 名の方に陪席していただきました。部会では、2023 年度の活動報告と次年度の活動計画が報告されました。2023 年は PDB China の活動が順調にスタートし、PDBj が継続的に PDB China の立ち上げを支援していることが報告されました。その他に、wwPDB 設立 20 周年を記念して日本生物物理学会で優秀学生発表の表彰を PDBj が主導したことや、PDBj が独自に進めている EMPIAR-PDBj の活動内容や、BMRBj の活動についても詳細が説明されました。最後に、この諮問委員会の委員について、次年度から台湾中央研究院の Chwan-Deng Hsiao 博士に代わり、国立台湾大学医学部教授の Nei-Li Chan 博士に交替することが報告されました。Hsiao 委員のこれまでの貢献に謝辞が述べられました。詳細は [pdbj.org](http://pdbj.org) に掲載している議事要旨をご覧ください。

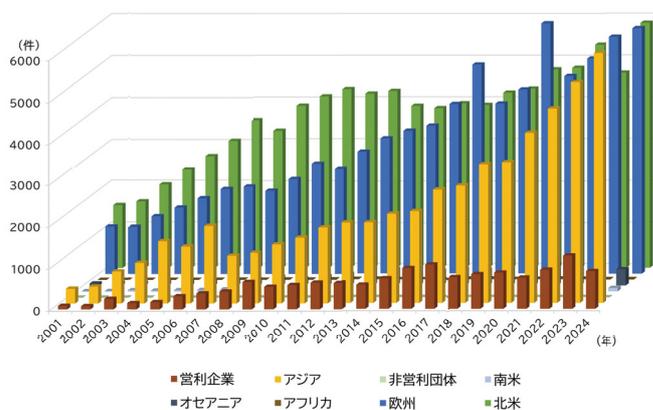
【2024 年度】2025 年 2 月 13 日の 13 時から約 2 時間、PDBj のアドバイザー会議に相当する共同利用・共同研究委員会の蛋白質立体構造データベース専門部会が Zoom オンライン会議システムを用いて開催されました。主たる運営資金を提供して下さっている JST NBDC から、伊藤総括を含む 3 名の方に陪席していただきました。部会では、2024 年度の活動報告と次年度の活動計画が報告されました。2024 年は Data-out の活動成果として UniProt ID をベースとした配列情報との統合利用ポータルのリリースや、新しい Sequence Navigator Pro の公開についてされました。その他に、12 月にマレーシアで開催されたアジア結晶学会で展示ブースを出したり、優秀学生ポスター賞の表彰を主導したりしたことが説明されました。2025 年度の活動計画として PDB China が無事に立ち上がると、より Data-out の活動にリソースを割けるであろうという見通しも議論されました。



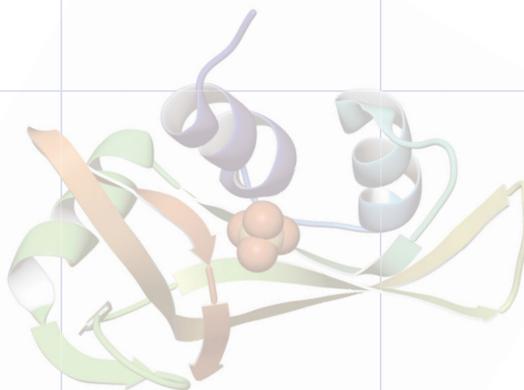
PDBj+PDBcが登録処理した  
PDBエントリーの国・地域分布 (2024年)



wwPDB全体での地域別PDB登録数



アジア地区から登録される PDB エントリーはまず PDBj で受け付け、そのうち中国大陸からの登録については PDBc に登録処理を振り分けています。2024 年中に PDBj へ登録された PDB エントリーの約 46% (中国大陸からの登録のうち約 66%) が、PDBc アノテーションによって処理されました。



### 理想座標をSDF/MOL形式で記した化合物データファイルの提供の開始

理想的な原子配座を SDF/MOL 形式で記したデータファイルの提供を始めました。各ファイルは PDB アーカイブからダウンロードすることができます。URL は以下の通りです。

wwPDB [https://files.wwpdb.org/pub/pdb/refdata/chem\\_comp/](https://files.wwpdb.org/pub/pdb/refdata/chem_comp/)

PDBj [https://files.pdbj.org/pub/pdb/refdata/chem\\_comp/](https://files.pdbj.org/pub/pdb/refdata/chem_comp/)

また、各化合物のファイルを連結して一つにまとめたファイルも提供しています。URL は以下の通りです。

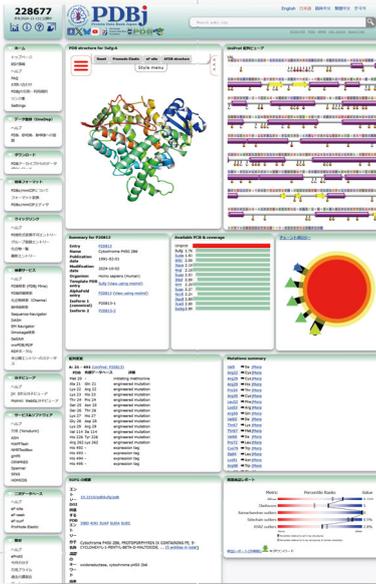
wwPDB <https://files.wwpdb.org/pub/pdb/data/monomers/components-pub.sdf.gz>

PDBj <https://files.pdbj.org/pub/pdb/data/monomers/components-pub.sdf.gz>

(2024 年 11 月 28 日)



## 遺伝子変異情報とタンパク質の配列・立体構造情報をつなぐ新しいポータルサイトを公開



大阪大学蛋白質研究所・PDBj と東北大学 東北メディカル・メガバンク機構 (ToMMo) は、日本人遺伝子変異情報とタンパク質配列・立体構造情報をつなぐポータルサイトを構築し、PDBj の新しいサービスとして公開しました。

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

このサイトには、ToMMo が構築している日本人多層オミックス参照パネル (jMorp) に収録された遺伝子変異情報へのリンクを記載し、また変異をタンパク質の立体構造上に簡単に表示するツールも実装しています。遺伝子変異とタンパク質の立体構造の対応づけは、煩雑な作業が必要ですが、今回開発したポータルサイトにより、簡単に対応関係を調べることができるようになりました。

(2024年11月1日)

(左) PDBj で公開された日本人遺伝子変異情報と蛋白質の配列・構造をつなぐ新しいポータルサイト (例 UniProt ID: P20813)

## wwPDBサイトでのFTPプロトコルを使ったダウンロードサービスの終了

現在の主要ウェブブラウザは FTP プロトコルでのダウンロードをサポートしなくなったことを受け、wwPDB サイト (<ftp.wwpdb.org>) では FTP プロトコルでのダウンロードサービスを廃止します。なお PDBj サイト (<ftp.pdbj.org>) では当面の間、FTP プロトコルでのサービスを継続します。

(2024年10月31日)

## 2024年ノーベル化学賞

2024年のノーベル化学賞は、計算によるタンパク質の設計と構造予測に関する功績に対して授与されました。PDB のデータは今回の受賞で認められたタンパク質の設計や立体構造の予測法を開発するためのトレーニングセットとして活用されています。

(2024年10月18日)

## プレプリントが公開されるとPDBエントリーも公開します

wwPDB では登録された PDB エントリーの公開ポリシーとして、「論文が公開されたらそれに対応する PDB エントリーも公開する」という方針を定めていましたが、この公開された論文の対象として bioRxiv のプレプリントも含めることにしました。

(2024年10月17日)

## PDBデータ中のタンパク質修飾に関する記述法を標準化

PDB データにおいて、これまでまちまちであったタンパク質の化学修飾 (PCM) や翻訳後修飾 (PTM) に関する記述方法を標準化しました。これにより検索性などの向上が期待できます。既存の公開エントリーについて、今後順次この変更を反映していきます。

(2024年10月9日)

## PDB Archive内でIHMにより決定された構造のデータ公開を始めました

複数の実験手法や計算手法を組み合わせた「統合的ハイブリッド構造決定法」(Integrative and Hybrid structure determination Method, IHM)を用いて解かれた構造データはこれまで PDB-IHM(元 PDB-Dev)で公開してきましたが、PDB アーカイブ内 ([https://files.wwpdb.org/pub/pdb\\_ihm/](https://files.wwpdb.org/pub/pdb_ihm/)) での公開も開始しました。

また各 PDB エントリーのランディングページに、関連する PDB-IHM ページへのリンクも追加しました。

(2024年10月3日)

## PDBx/mmCIFフォーマットデータのユーザガイドを公開

PDBx/mmCIF フォーマットのユーザガイドを新たに公開しました。URL は以下の通りです。

<https://mmcif.wwpdb.org/docs/user-guide/guide.html>

このフォーマットを扱う際、合わせてご活用ください。

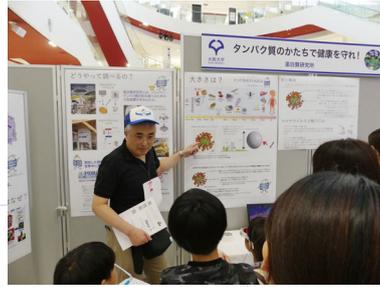
(2024年6月20日)

## 活動一覧

	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。	
2024/6/13	第 24 回日本蛋白質科学会年会 (札幌コンベンションセンター)	ランチョンセミナー ブース出展
2024/6/24-28	IUPAB 2024 (国立京都国際会館)	ランチョンセミナー ポスター発表
2024/8/22	ICMRBS 2024 (Coex, Seoul, Korea)	ポスター発表
2024/10/5	トーゴーの日シンポジウム 2024 (品川ザ・グランドホール)	ランチョンセミナー ポスター発表
2024/10/22-23	第 22 回 IPR リトリート (大阪大学銀杏会館)	ランチョンセミナー ポスター発表
2024/10/24	APBJC2024 (那覇文化芸術劇場なはーと)	ランチョンセミナー ポスター発表
2024/11/10	日本結晶学会 2024 年度年会 (名古屋大学東山キャンパス)	ランチョンセミナー ポスター発表
2024/12/1-6	第 18 回 アジア結晶学会 (マレーシア サンウェイ大学)	ランチョンセミナー ブース出展, ポスター賞

## 一般向けイベント

2024 年 6 月 29 日 (土), ららぽーと EXPOCITY で開催された「大阪大学共創 DAY@EXPOCITY」にブース出展を行い, 赤青めがねによる立体視やペーパーモデル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。



## AsCAポスター賞

PDBj は wwPDB 財団の活動の一部として, 2024 年 12 月にマレーシア・クアラルンプールで開催されたアジア結晶学連合会議 (AsCA2024) において, 次の 3 人の方にポスター賞を授与しました。賞状は AsCA から, 副賞は wwPDB 財団から送られました。審査員を務めてくださった AsCA 実行委員会の皆様, 大変ありがとうございます。

### Salma Dienta Salsabila

(Gwangju Institute of Science and Technology)  
for Structural Mechanistic Insights into the Function of Phosphatidylethanolamine N-Methyltransferase PmtA Mediating Bacterial Phosphatidylcholine Synthesis



### Se-Young Son

(Ewha Womans University)  
for Structural Investigation of the Docking Domain Assembly from Trans-At Polyketide Synthases



### Yeon-Ju Jung

(Ewha Womans University)  
for Unveiling Thermostable sPLA2 from Sciscionella Marina: Enhanced Stability and Biotransformation for Industrial Applications



## ブース展示(IUPAB2024, AsCA2024)



PDBj は 2024 年 6 月に京都で開催された国際生物物理学会 (IUPAB2024) と 2024 年 12 月にマレーシア・クアラルンプールで開催されたアジア結晶学連合会議でブース展示を行いました。展示ブースでは, PDBj のパンフレットを使った活動紹介の他, wwPDB の活動について紹介しました。

左: IUPAB2024 のブースにて wwPDB 運営諮問委員の Juha Huiskonen 教授 (University of Helsinki, Finland) と PDBj 代表の栗栖教授,

右: AsCA2024 のブースにて PDB 登録者である韓国・梨花女子大学の Sun-Shin Cha 教授と PDBj 代表の栗栖教授



## 2024年ノーベル化学賞

2024年のノーベル化学賞は、デイヴィッド・ベイカー教授（ワシントン大学）、デミス・ハサビス CEO（DeepMind 社）、ジョン・ジャンパー博士（DeepMind 社）の3名に送られました。ご存知の通り、計算によるタンパク質分子設計とタンパク質構造予測への貢献が受賞対象となっています。革新的な分子設計や構造予測の手法の学習データとして活用されている PDB の関係者として、この度のノーベル化学賞受賞をお祝い申し上げます。自由に利活用できる Open Data として PDB を整備し公開することの重要性が改めて認識されたのではないのでしょうか。私自身はタンパク質分子設計や構造予測の専門家ではありません。しかし、受賞対象となったお仕事のインパクトがいかに大きかったかは、同時代に生きる関連分野の研究者として切に感じるところです。ジャンパー博士は、Nature 誌の News 記事の中で “It’s humbling every time we train [AlphaFold] on years of effort. Each data point is years of effort from someone.” と述べておられます\*1。また RCSB PDB の前代表の Helen M. Berman 教授も同号の Nature 誌でのインタビューで “Does it speak to the importance of experimental data for powering AI breakthroughs in science?” と尋ねられて、“Yes, 100%. People will say, ‘Oh, well the PDB data are really special.’ But we actually know why they’re special. It took a long, long time to figure out how to handle the data, how to represent the data, how to collect the data. We as a community, the PDB community, know how to do this.” と答えられています\*2。受賞対象の業績が、既存の実験構造生物学の手法と相まって詳細かつ広範にタンパク質分子を動的に記述する新しいタンパク質科学を加速するのではないのでしょうか。今回の受賞対象となった計算科学の発展を見据えて、wwPDB は結晶解析、NMR、クライオ電顕の3手法以外の手法を相補的に活用した相関構造解析（PDB-IHM）を重視しています。今回のノーベル賞化学賞を契機に、PDB-IHM を含むより一層データ駆動型研究が展開することを期待しています。

\*1 Callaway, E. *Nature*, **634**, 525, 2024

\*2 Callaway, E. *Nature* **634**, 1028, 2024

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）  
張 羽澄（陳 昱瑜）（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）  
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）  
横地 政志（大阪大学蛋白質研究所・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）  
見学 有美子（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）  
佐藤 純子（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）  
工藤 高裕（(財)蛋白質研究奨励会・特任研究員）

#### 秘書

小林 宏美（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

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）

#### EMPIAR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（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（東京科学大学 教育研究組織 総合研究院・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）  
加藤 和貴（大阪大学微生物病研究所・准教授）

### 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