



PDBの最近の動向

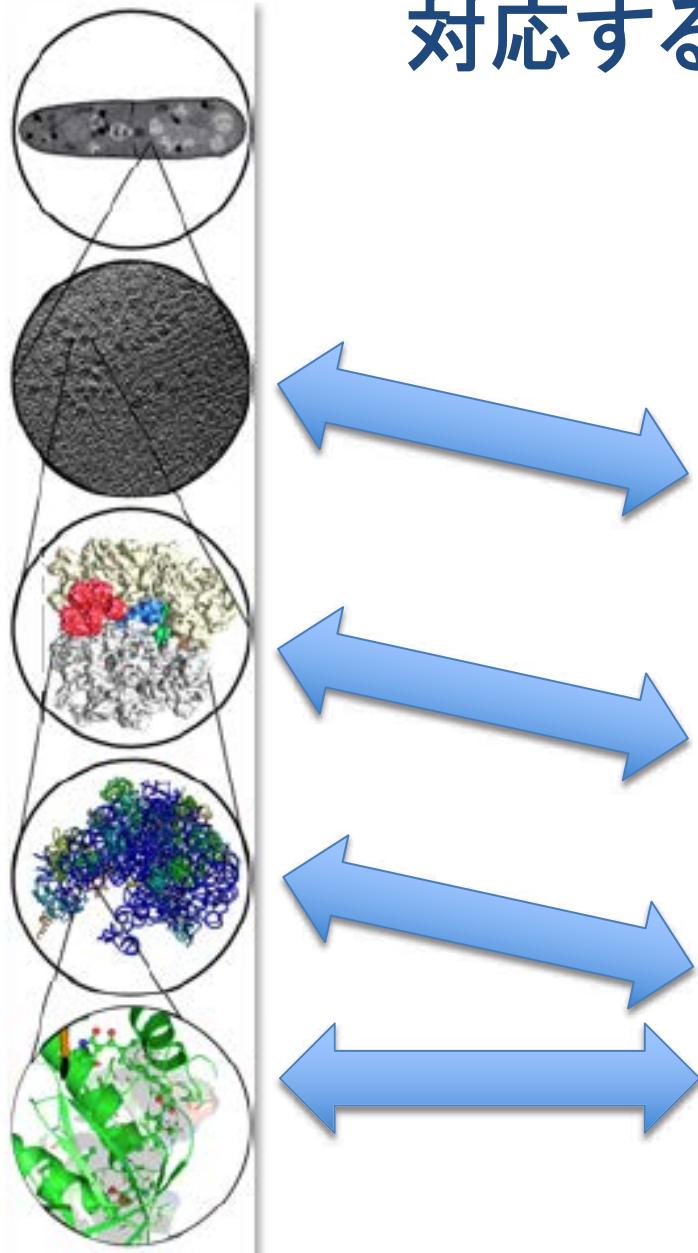
大阪大学蛋白質研究所

栗栖源嗣



wwpdb.org

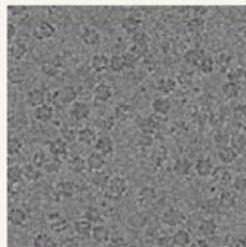
生物の階層構造と 対応する構造データ



MODELLING IN ICE

In cryo-electron microscopy (cryo-EM), thousands of raw EM images are collected and computationally analysed to build up a density map that reflects the shape of the protein.

RAW IMAGE



Where to share data

Electron Microscopy Public Image Archive (EMPIAR)



MAP

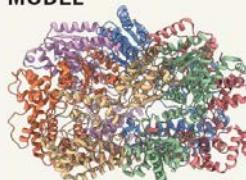


Electron Microscopy Data Bank (EMDB)



This map is then combined with the known protein sequence to create a final model showing the placement of atomic groups.

MODEL

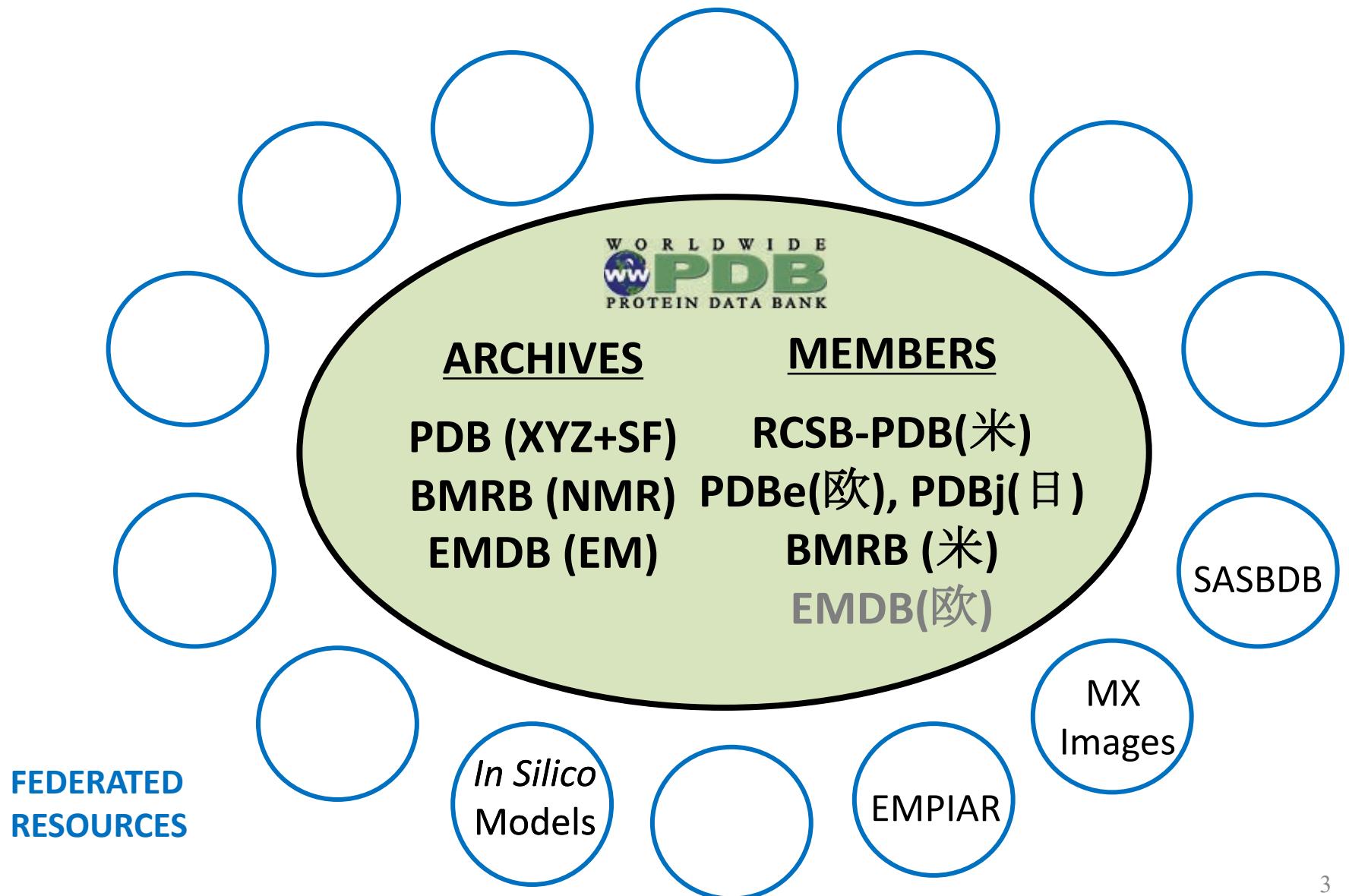


Protein Data Bank (PDB)



©nature

構造データベースの構成と区分



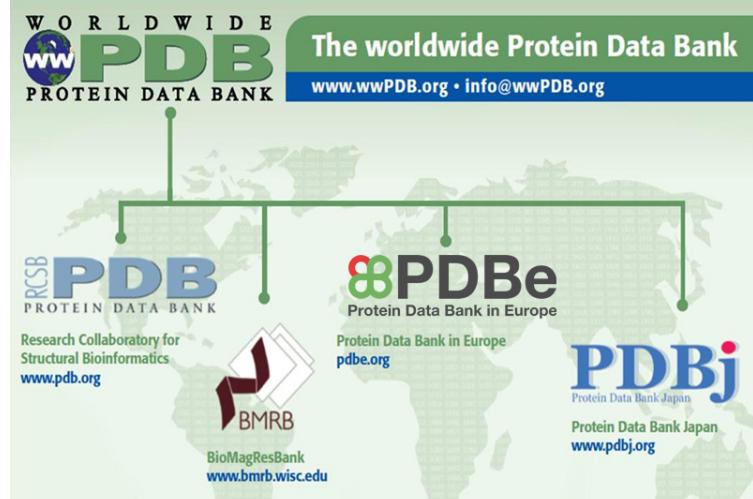
国際蛋白質構造データバンク

(worldwide Protein Data Bank: wwPDB)

<https://wwpdb.org>

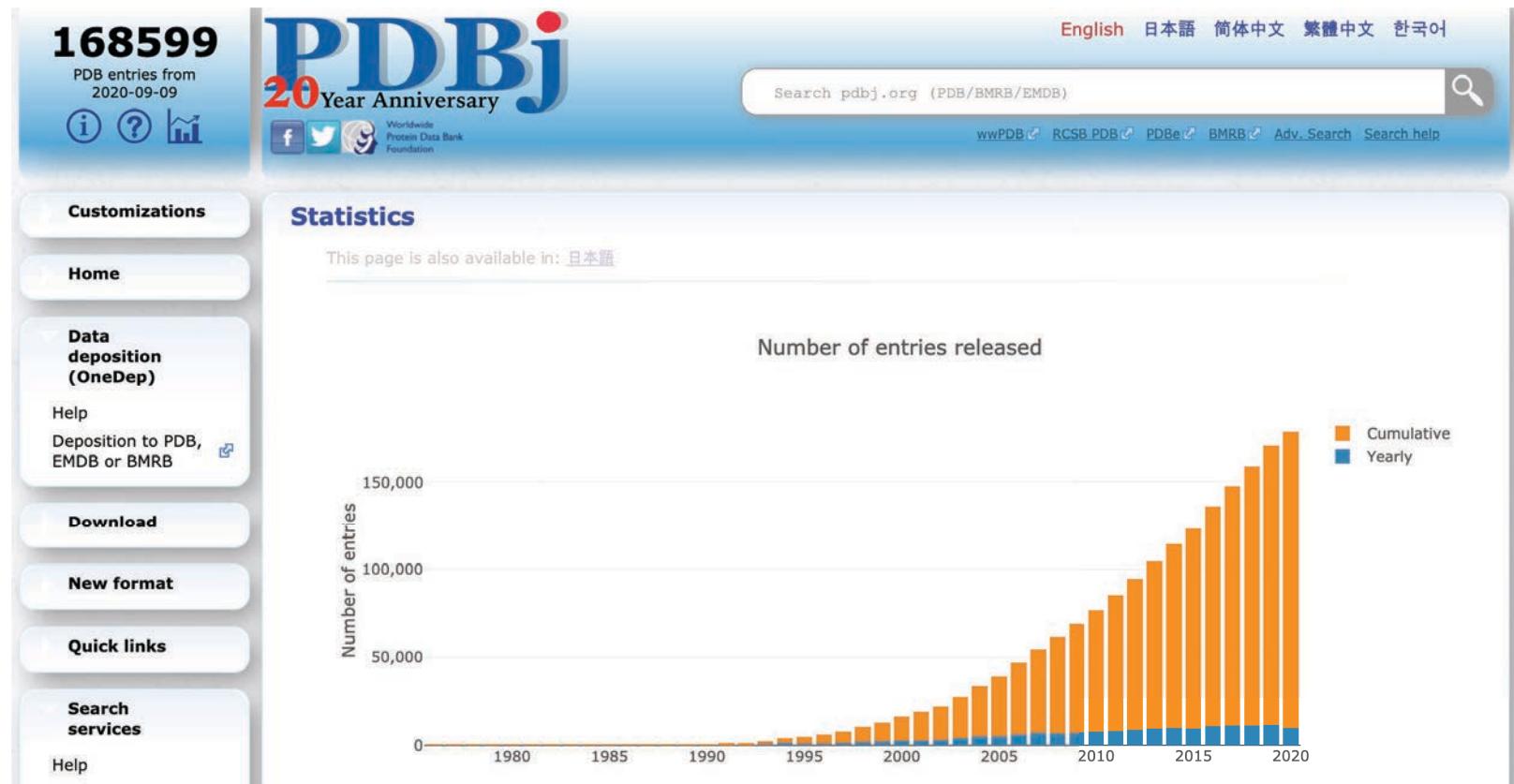
生体高分子の立体構造情報を集めた
世界で唯一のデータベース

1971年に米国で始まったデータベースで
情報は無償で利用できる。2000年に日欧
も個別に活動を開始し、2003年からは国
際組織wwPDBを組織して共同で運営して
いる（日本のPDBjは創立メンバー）。

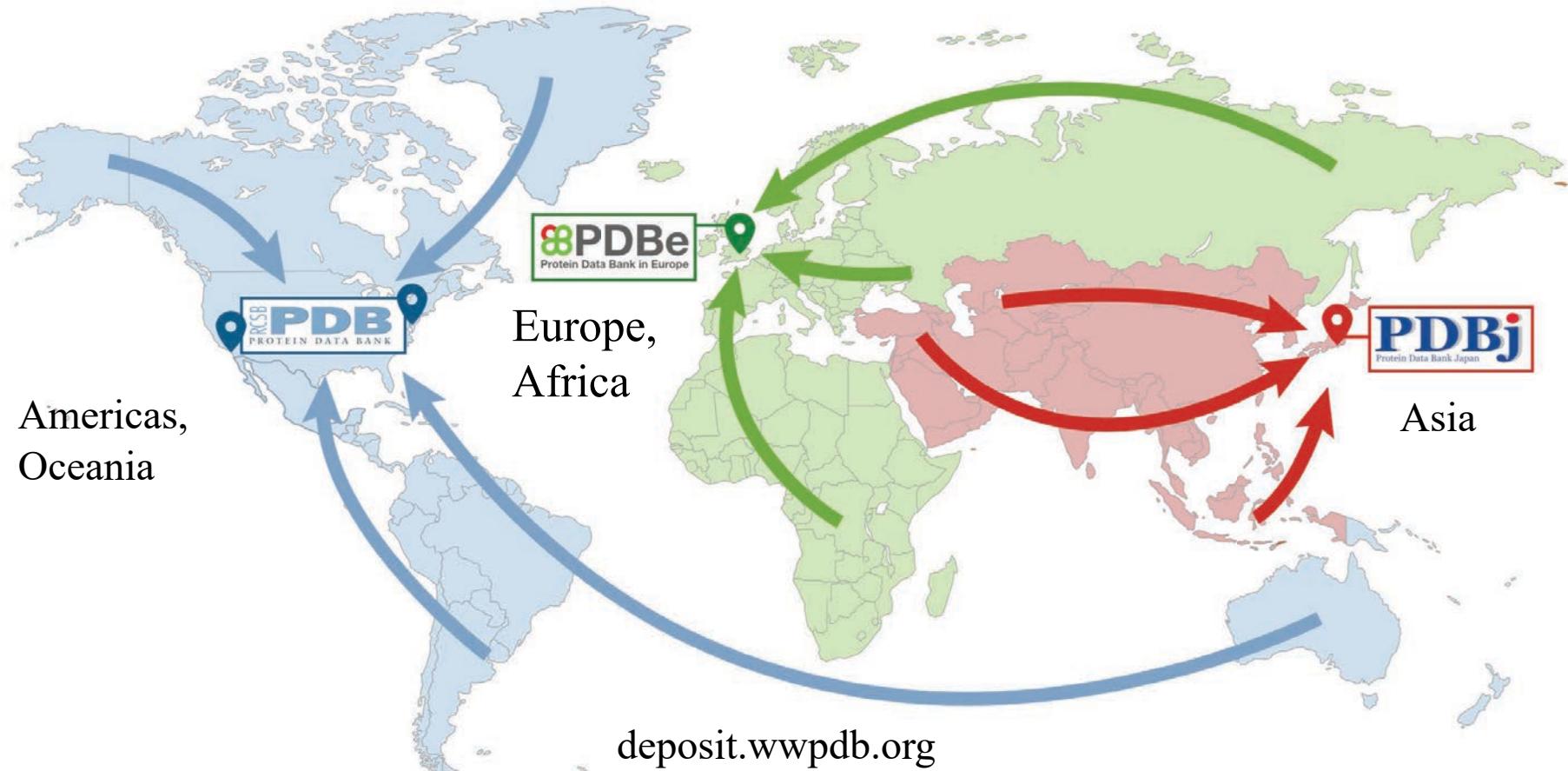


Data-inの活動（共通のシステム）

- 日米欧の各拠点がTV会議を頻繁に行い、共通の品質管理基準を設定して、登録作業を効率化（データ増に対応）

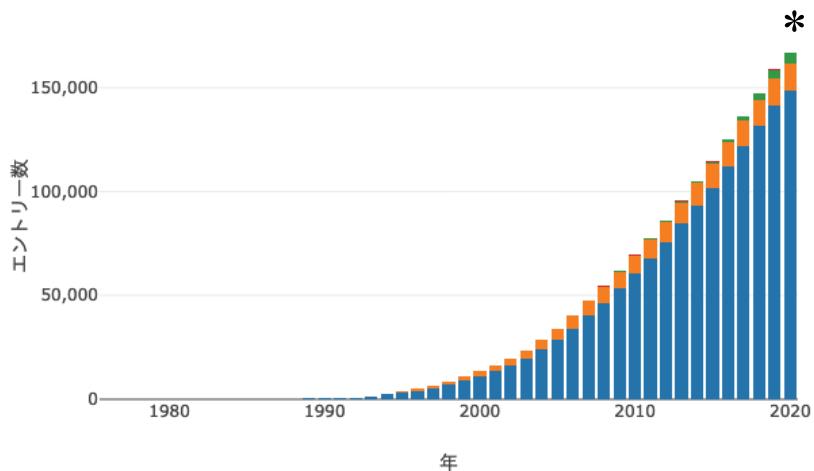


国際協調で運営されている

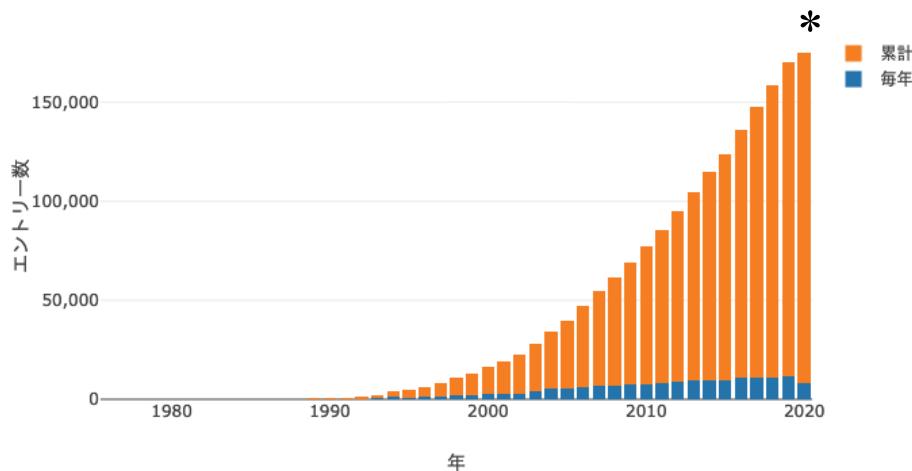


各サイトのデータ処理数

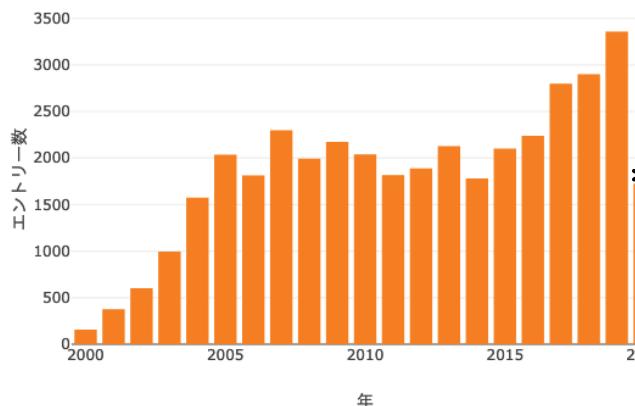
実験手法別の公開PDBエントリー数



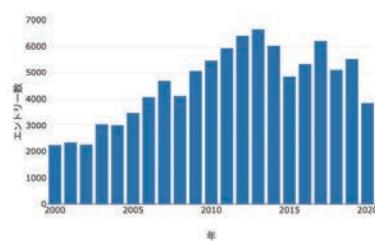
公開されたPDBエントリー数



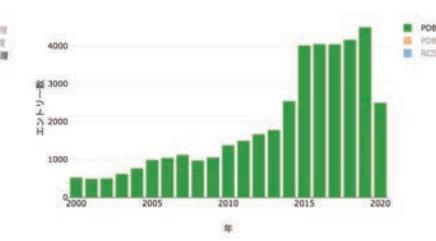
処理サイト別のPDBエントリー数



処理サイト別のPDBエントリー数

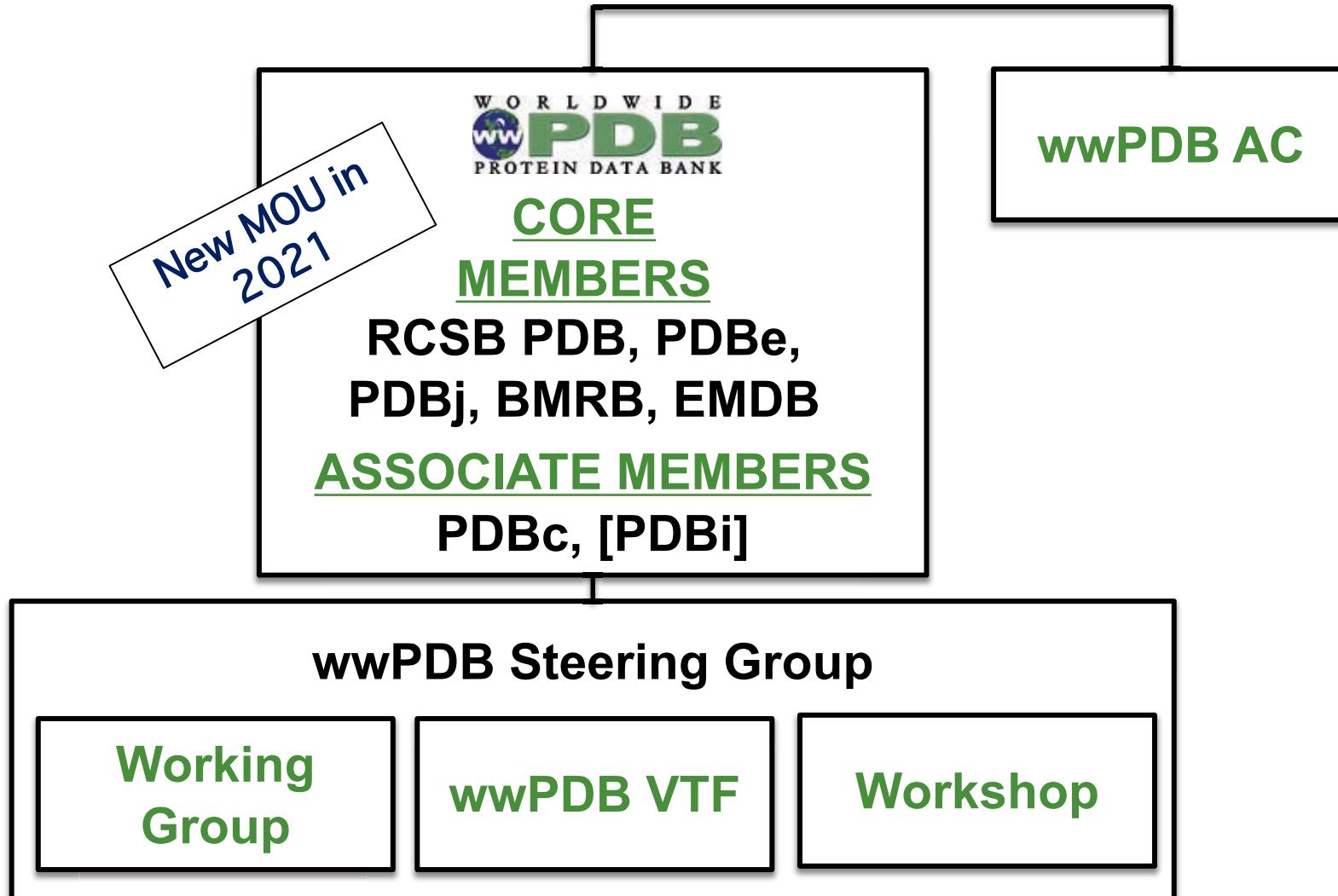


処理サイト別のPDBエントリー数

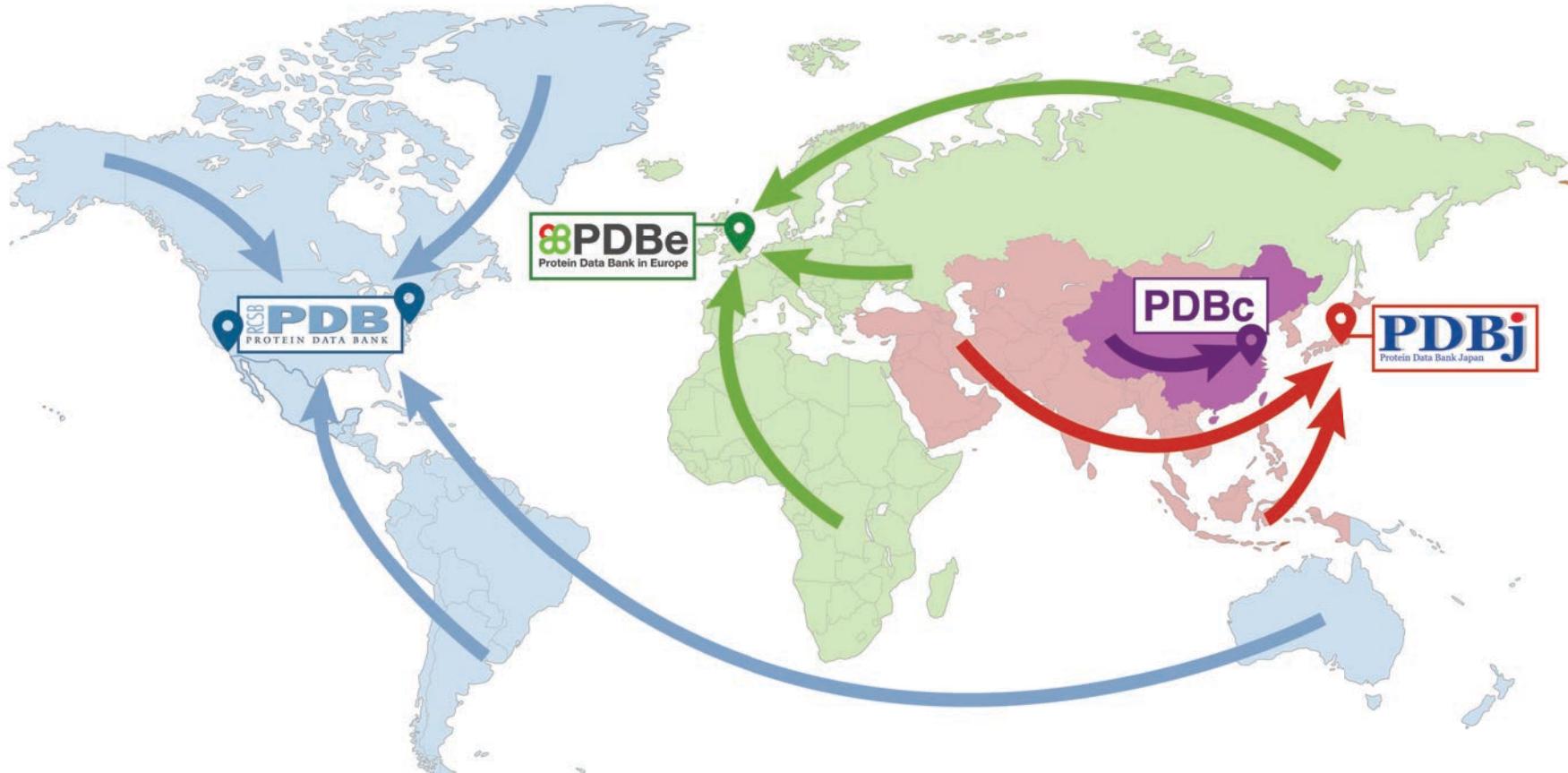


* As of 1 Aug 2020

新しいwwPDBの組織(2021~)



PDBjがPDB Chinaの始動にも責任

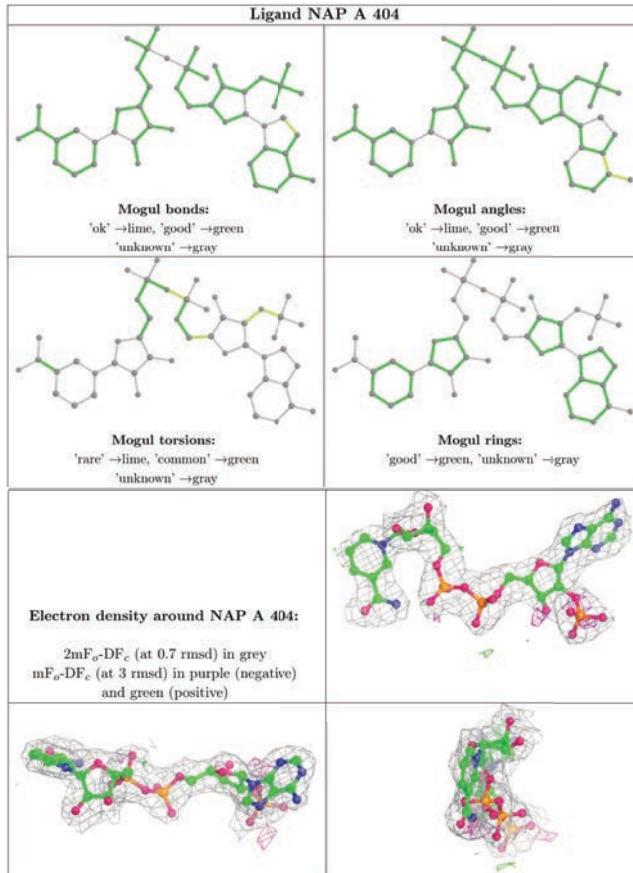


deposit.wwpdb.org

検証レポートの充実

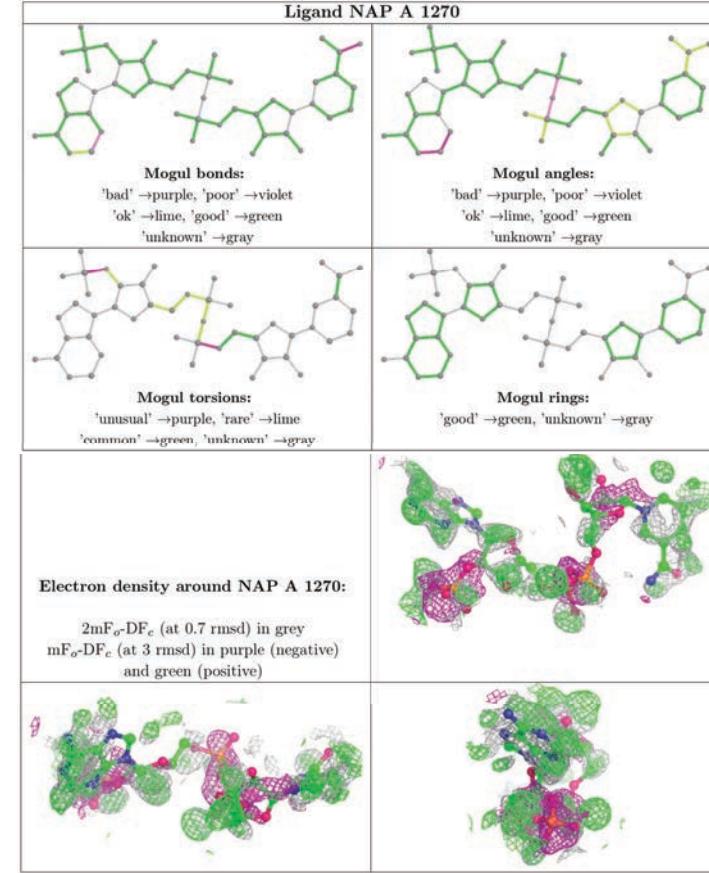
— 実験データが重要 —

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
3	NAP	A	404	48/48	0.96	0.14	31,43,66,70	0



PDB entry 5zix (Better data quality)

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
3	NAP	A	1270	48/48	-0.06	0.67	87,96,100,100	0



PDB entry 1zk4 (Worse data quality)

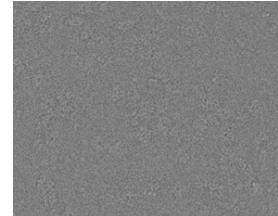
State of the Structural Biology Data Archive

▪ Cryo Electron Microscopy

2D Images



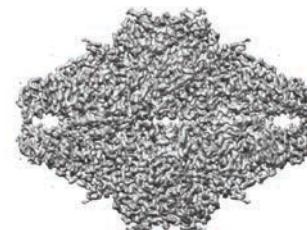
Raw 2D images of Cryo-EM
including motion correction
movies (~5 TB/entry)



3D Maps

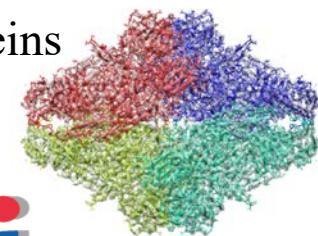


Electron Microscopy Data Bank



Coordinates

Core Archives with the metadata
including the links to other
databases, experimental condition
& source of proteins



Mirror site of EMPIAR in Japan

<https://empiar.pdbj.org>

The screenshot shows the EMPIAR homepage with a search result for dataset 10204. The search results table includes columns for Dataset ID, Title, Description, Resolution, and Size. The first entry is for dataset 10204, which contains cryo micrographs of yeast exocyst complex. The second entry is for dataset 10205, which contains cryo micrographs of cowpea mosaic virus.

Dataset	Title	Description	Resolution	Size
EMPIAR-10204	Cryo micrographs of yeast Exocyst complex	[Pubmed: 29335562] [DOI: 10.1038/s41594-017-0016-2]	5yfp	1.4 TB
EMPIAR-10205	Combining high-resolution cryo-electron microscopy and mutagenesis to develop cowpea mosaic virus for bionanotechnology	Meshcheriakova Y, Durrant A, Hesketh EL, Ranson NA, Lomonossoff GP [Pubmed: 29101307] [DOI: 10.1042/BST20160312]	EMD-3952	351.5 GB

EMPIAR-10204
The first reconstruction of beta-galactosidase solved by cryoARM200

Publication: First data of beta-galactosidase for validation of the state-of-the-art-cryo EM, named CRYOARM200
Kato T, Terahara N, Namba K
[EMD-6840](#)
2018-08-01

Related EMDB entry: EMD-6840
Deposited: 2018-08-01
Released: 2018-08-15
Last modified: 2018-08-17
Dataset size: 321.4 GB

Dataset DOI: [10.6019/EMPIAR-10204](#)

Contains: micrographs

PDBe
PDBj
EMDataBank
EM Navigator

EMPIAR: Quick tour

EMPIAR citations
Searching for 3D structural models from a library of biological shapes using a few 2D experimental images.
Tiwari SP, Tama F, Miyashita O. (2018)
Sub-2 Å Ewald curvature corrected structure of an AAV2 capsid variant.
Tan YZ, Aiyer S, Mietzsch M, Hull JA, McKenna R, Grieger J, Samulski RJ, Baker TS, Agbandje-McKenna M, Lyumkis D. (2018)

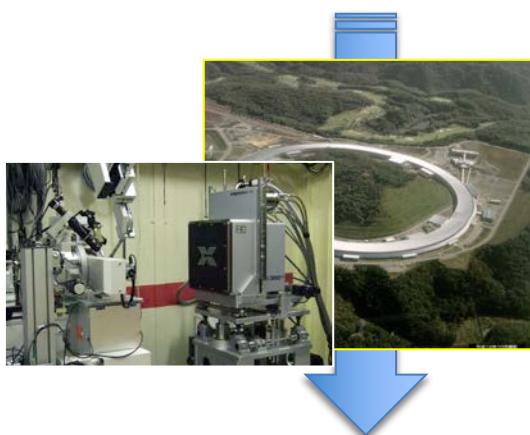
EMPIAR-10204 (3710x3828 pixels) x 49枚 x 1338ファイル → 321.4 GB

Further/on-going development

- 1) High speed data download system using Aspera
- 2) Data backup using Cold-storage system
- 3) Online deposition through high speed network

State of the Structural Biology Data Archive

▪ X-ray Crystallography



2D raw images →



Structure Factors → Coordinates (XYZ)

PDB Core Archive with the metadata
including the links to other databases,
experimental condition & source of proteins



- o ProteinDiffraction.org - <https://proteindiffraction.org>
- o SBGrid - <https://sbgrid.org>
- o CXIDB - <http://www.cxidb.org>

No public database for X-ray images available in Asia

New Archive for X-ray Diffraction Images

<https://xrda.pdbj.org>

XRD-Arc English 日本語 Login using ORCID Help Browse

Welcome to XRD-Arc
The X-Ray Diffraction Archive (XRD-Arc for short) top page.

We welcome depositions of raw X-ray diffraction images corresponding to PDB entries.

If you have any questions, please [contact us](#).
Please note that this archive is still under development and thus we appreciate any feedback you might have.

2020-04-09 (last edited: 4 months ago)

Latest entries

6KUM: Ferredoxin I from C. reinhardtii, low X-ray dose
Structure resolution: 1.40 Å
Onishi, Y., Kurisu, G., Tanaka, H.
DOI: [10.1093/jbm/mvaa045](https://doi.org/10.1093/jbm/mvaa045)
Deposition date: 2020-05-13
Release date: 2020-05-20

6KV0: Ferredoxin I from C. reinhardtii, high X-ray dose
Structure resolution: 1.40 Å
Onishi, Y., Kurisu, G., Tanaka, H.
DOI: [10.1093/jbm/mvaa045](https://doi.org/10.1093/jbm/mvaa045)
Deposition date: 2020-05-03
Release date: 2020-05-20

6L4P: Crystal structure of the complex between the axonemal outer-arm dynein light chain-1 and microtubule binding domain of gamma heavy chain
Structure resolution: 1.70 Å
Toda, A., Nishikawa, Y., Tanaka, H., Yagi, T., Kurisu, G.
DOI: [10.1074/jbc.RA119.011541](https://doi.org/10.1074/jbc.RA119.011541)
Deposition date: 2020-05-02
Release date: 2020-05-02

6LK1: Ultrahigh resolution X-ray structure of Ferredoxin I from C. reinhardtii
Structure resolution: 0.90 Å
Onishi, Y., Kurisu, G., Tanaka, H.
DOI: [10.1093/jbm/mvaa045](https://doi.org/10.1093/jbm/mvaa045)
Deposition date: 2020-05-03
Release date: 2020-05-27

Copyright © 2020 X-Ray Diffraction Archive

XRD-Arc English 日本語 Login using ORCID Help Browse

6L4P: Crystal structure of the complex between the axonemal outer-arm dynein light chain-1 and microtubule binding domain of gamma heavy chain

Authors: Toda, A., Nishikawa, Y., Tanaka, H., Yagi, T., Kurisu, G.
R-work: 0.17250
R-free: 0.21390
Unit cell edges (Å): 44.55 x 73.028 x 94.564
Unit cell angles (°): 90, 90, 90
Resolution: 39.69 Å - 1.7 Å
Space group: P 21 21 21
Primary citation
[PDBJ website for 6L4P](#)
[Download everything](#)

Dataset check02_000###.img

Number of frames	180
Distance (mm)	200
Oscillation width (°)	1
Wavelength (Å)	0.9
Equipment	RAYONIX MX300HE
Beamline	SPRING-8 BEAMLINE BL44XU
Data	Download

File manager
Path: /

Name	Description	Size	Changed
LC1+MTBD	Full data from one crystal	23.98 KB	2020/4/11 17:52:00
check02_000001.jpg			

Copyright © 2020 X-Ray Diffraction Archive

Data-outの活動(3極とも同じデータ)

- 日本の提案した新たな標準フォーマット等が採用されている (PDB/RDF, BMRB/RDF)

Year	Total	Total FTP Archive	Total Website
2019	838,269,170	512,463,111	325,806,059
2018	749,356,769*	N/A	N/A
2017	679,421,200	454,723,083	224,698,117
2016	591,876,087	366,677,897	225,198,190
2015	534,339,871	368,244,766	166,095,105
2014	512,227,251	339,193,721	173,033,530
2013	441,262,210	296,176,290	145,085,920
2012	376,944,070	255,837,735	121,106,335
2011	383,131,048	276,952,286	106,178,762
2010	294,326,976	213,180,966	81,146,010
2009	328,362,536	271,116,934	57,245,602

More than 2.3 million/day!
N.B.: Some 2018 data estimated due to GDPR.



Geographic Origins of FTP downloads; 2012-2015

PDBjのData-outサービス

168599
件を2020-09-09に公開中

PDBj
20 Year Anniversary
Worldwide Protein Data Bank

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) は、大阪大学蛋白質研究所の共同利用・共同研究拠点活動として運営され、米国RCSB PDB 、BMRB 、および欧州PDBe と協力して、国際的に統一化された生体高分子の立体構造データベースを運営するとともに、解析ツールや関連データベースを提供しています。JST-NBDC とAMED-BINDS の支援を受けて活動しています。

English 日本語 簡体中文 繁體中文 한국어

wwwPDB RCSB PDB PDBe BMRB Adv. Search Search help

6SOX

最新公開 ニュース

249: SARSコロナウイルス2 RNA依存性RNAポリメラーゼ (SARS-CoV-2 RNA-Dependent RNA Polymerase)

今月の分子

新型コロナウイルス 最新構造情報

WORLDWIDE PROTEIN DATA BANK

BMRB検索

PDBj-BMRB

Accession number / Deposition code

Try the conii-search bar!

Search

BSM-Arc Biological Structure Model Archive

EMPIAR PDBj

パートナー

ホーム

データ登録 (OneDep)

ダウンロード

新フォーマット

クリックリンク

検索サービス

ヘルプ

PDB検索 (PDBj Mine)

PDB詳細検索

化合物検索 (Chemie)

BMRB検索

Sequence-Navigator

Structure-Navigator

EM Navigator

Omokage検索

wwPDB/RDF

SeSAW

未公開エントリーのステータス

分子ビューア

サービス&ソフトウェア

二次データベース

教材

PDBjについて

設定

初めての利用者のためのガイド

このサイトは主に研究者向けのコンテンツを提供しています。一般向けの内容はPDBj入門 をご覧ください。古いウェブブラウザでこのサイトにアクセスすると、機能制限モードで表示される場合があります。すべての機能を利用するための要件について詳しくは動作要件をご覧ください。このサイトの機能について詳しくは対話型チュートリアルもご覧ください。

必要なサービスを探す

探しているサービスに関連するキーワードを以下の語句一覧から選択するか、または検索ボックスに入力して下さい。該当するサービスの一覧が表示されます。

- 【全サービスを表示する】ボタンを押すと、全サービスの概要が表示されます。
- 【キーワードボックス】にキーワードを入力して、語句一覧で絞り込んだ結果を更に絞り込むこともできます。

<input type="radio"/> PDB	<input type="radio"/> BMRB	<input type="radio"/> EMDB	<input type="radio"/> 全サービスを表示
<input type="radio"/> 検索	<input type="radio"/> 登録	<input type="radio"/> ビューア	例) モデル、分子表面 ... <input type="text"/> <input type="button" value="検索"/>
<input type="radio"/> NMR	<input type="radio"/> 電子顕微鏡	<input type="radio"/> 二次構造	<input type="radio"/> リセット
<input type="radio"/> 配列	<input type="radio"/> 類似性	<input type="radio"/> 機能予測	
<input type="radio"/> 化合物	<input type="radio"/> 構造予測	<input type="radio"/> 結合部位	
<input type="radio"/> 表面構造	<input type="radio"/> 立体構造	<input type="radio"/> ゲノム	

最新情報

- 2020-09-09 243件のPDBエントリーが新たに公開されました。(9月9日付)
- 2020-08-17 9/16~9/18に日本生物物理学会年会でPDBjオンライン展示会を開催します
- 2020-07-29 [wwPDB] 蛋白分子の表現を改善したPDBデータを公開しました
- 2020-07-28 PDBj FTPサイトから、PDBj Mineの旧RDBデータファイル群の提供を終了します
- 2020-07-15 PDBjは2020年7月に20周年を迎えました
- 2020-07-08 [wwPDB] 7月29日に糖鎖分子の表現を改善したPDBデータを公開します
- 2020-04-27 PDBj支援基金へのご支援をお願いします
- 2020-04-10 [wwPDB] PDB-Devのウェブサイトを更新しました
- 2020-04-08 令和2年度科学技術分野の文部科学大臣表彰科学技術賞(振興部門)の受賞
- 2020-04-08 [wwPDB] EMDBのマップエントリー公開過程の合理化について

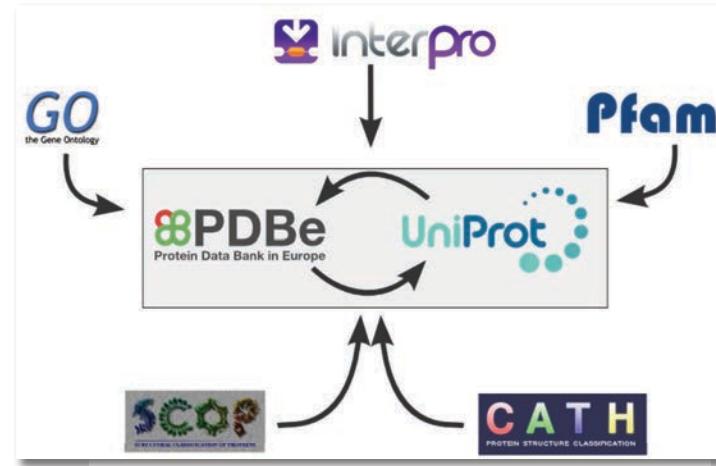
全てのニュース

ヘルプ コンタクト 利用規約 個人情報

他データベースとのリンク

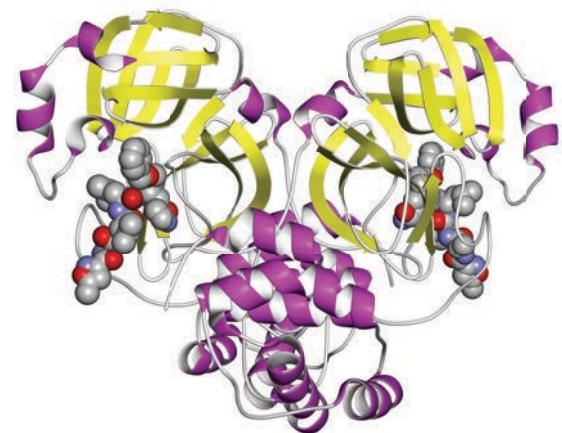
SIFTS – EMBL-EBI

- Central to linking “structure” and “sequence” information
- Shared between all the wwPDB partners
- PDBj implemented RDF



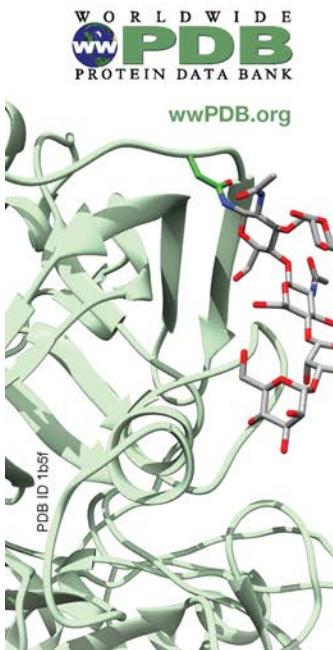
Molmil

- Common library and set of tools for macromolecular data visualization and analysis
- Web based viewer for molecular and meso-scale visualization



PDB ID: 6LU7

糖鎖構造記述の改善



Implementation

Improving Carbohydrates in the PDB for 2020

~10% of PDB structures contain carbohydrates.

To improve the ability to search for these structures and their complex chemistry (e.g., stereo-isomers, anomeric configurations, branched chains), wwPDB is embarking on a new remediation effort that will:

- Standardize Chemical Component Dictionary definitions
- Adopt carbohydrate nomenclature following IUPAC-IUBMB recommendations
- Provide a uniform representation for oligosaccharides
- Adopt glycoscience community naming conventions
- Incorporate glycoscience community tools to properly identify, validate, and biocurate glycosylation sites in PDB structures

New sequence descriptions will be included in PDB structure data files:

Condensed IUPAC:

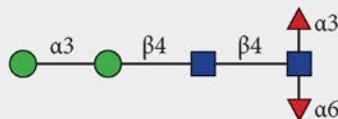
LFucpa1-6[DManpa1-3DManpb1-4DGlcNAcb1-4][LFucpa1-3]DGlcNAcb1-ASN

LINUCS:

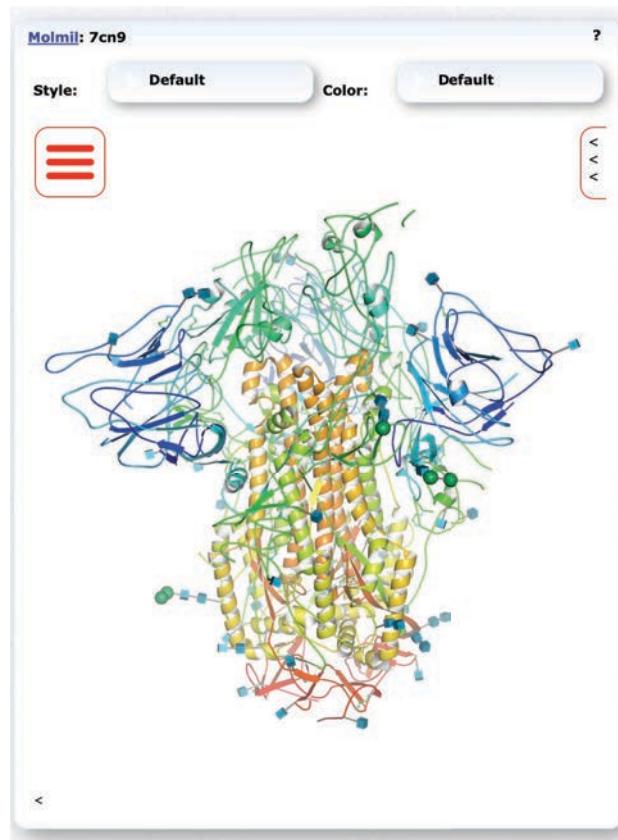
[[ASN][(4+1)][b-D-GlcNAc][(3+1)][a-L-Fucp]]((4+1)[b-D-GlcNAc][(4+1)][b-D-Manp][(3+1)][a-D-Manp]])(6+1)[a-L-Fucp]]}}

These descriptions can be translated into **Symbolic** representations used by glycoscientists:

Symbolic:

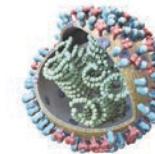


Example based on PDB Entry 6cmg



PDB ID: 7CN9

PDBjの新型コロナウイルス特集



PDBj
20 Year Anniversary
World's Best Protein Data Bank Foundation

168095
エントリー
(2020-08-26)

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어
www.pdbj.org 全体を検索 (PDB/BMRB/EMDB, 日本語OK)
www.PDBj.org RCSB PDB PDBe BMRB Adv. Search Search help

新型コロナウイルスの構造情報

このページの他言語版もあります: English 日本語 简体中文 繁體中文 韩国语

最近、新型コロナウイルス感染症 (Novel Coronavirus disease 2019: COVID-19) の拡大が世界中で深刻な問題となっています。早急にこの新型ウイルス (Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2: SARS-CoV-2) を理解し有効な薬を開発するため、関連するタンパク質の構造研究は既に始まっています。そして、解明された構造はPDBに登録されています。PDBjでは利用者の利便を図るため、新型コロナウイルス特集ページを作成しました。新たなエントリーが毎週水曜日の週次更新で公開されると、同時にこのページにも追加されます。

またこのウイルスのタンパク質に関する解説記事を以下の「今月の分子」ページに掲載しています。

- 242: コロナウイルスプロテアーゼ (Coronavirus Proteases) ↗
- 246: SARSコロナウイルス スパイク (SARS-CoV-2 Spike) ↗

「全エントリー」のタブでは、同じ著者によるグループ毎のエントリーも全て区別し、すべてのPDB IDを省略せず表示しています。「代表構造」タブには最も分解能の高い代表構造のみを表示しており、アミノ酸配列が100%同じPDBエントリーはリンクが異なるものも含め除外してあります。「最新のエントリー」のタブは、今週公開された最も新しいエントリーです。

作成日: 2020-03-11 [最終更新日: 3 weeks ago]

全エントリー (342) 代表構造 (133) 最新のエントリー (14)

7JIB

ROOM TEMPERATURE CRYSTAL STRUCTURE OF NSP10/NSP16 FROM SARS-COV-2 WITH SUBSTRATES AND PRODUCTS OF 2'-O-METHYLATION OF THE CAP-1

分子名称: 2'-O-methyltransferase, Non-structural protein 10, CHLORIDE ION, ...
著者: Willamowski, M., Minasov, G., Kim, Y., Sherrell, D.A., Shuvailova, L., Lavens, A., Chard, R., Rosas-Lemus, M., Mal'tseva, N., Jedrzejczak, R., Michalska, K., Satchell, K.J.F., Joachimiak, A., Center for Structural Genomics of Infectious Diseases (CSGID)
登録日: 2020-07-23
公開日: 2020-08-26
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.65 Å)
主引用文献: Room Temperature Crystal Structure of Nsp10/Nsp16 from SARS-CoV-2 with Substrates and Products of 2'-O-methylation of the Cap-1
To Be Published

7JR3

SARS-COV-2 3CL PROTEASE CRYSTALLIZED UNDER REDUCING CONDITIONS

分子名称: 3C-like proteinase
著者: de Oliveira, R.R., Nascimento, A.F.Z., Zeri, A.C.M., Trivella, D.B.B.
登録日: 2020-08-11
公開日: 2020-08-26
実験手法: X-RAY DIFFRACTION (1.55 Å)
主引用文献: SARS-CoV-2 3CL protease crystallized under reducing conditions.
To Be Published

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 >

- 1月26日に中国から最初のSARS-CoV-2の蛋白質構造がPDBjに登録された。
- wwwPDB内で直ぐに検討し、論文発表前の公開を直接著者に依頼。2月6日に最初の構造を公開。
- 今まで継続して著者に即時公開を依頼して、創薬研究の1日でも早い進展を期待。
- 3月11日からは、特集ページを整備して、PDB, BMRB, EMDB, BSMaの各データベースの新型コロナウイルスのデータだけを厳密に選択してデータ提供。

PDBj 構成員と協力者

- 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)

- 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)

- 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)

- 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 暢聰 (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

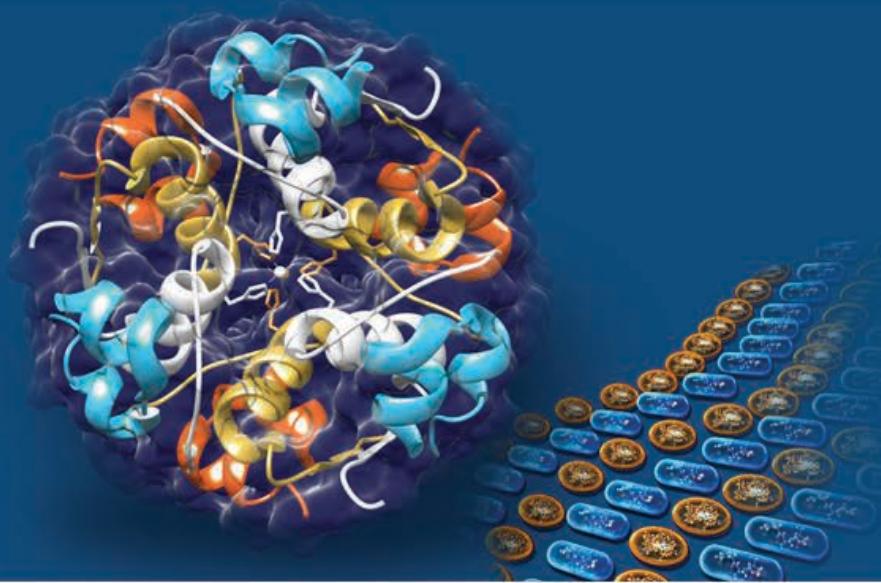
- 事務職員

- 佐久間 量子 (大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員)



国際プロジェクトProtein Data Bankは、主に日米欧の政府系研究資金により支えられていますが、資金は十分ではありません。

活動をサポートしていただける場合は、国際財団 **wwPDB Foundation**、もしくは **PDBj支援基金**へご寄付ください。



国際財団wwPDB Foundation

PayPal <https://foundation.wwpdb.org/>

本財団への寄付は、米国の免税措置の対象となります



PDBj支援基金（大阪大学未来基金）

<https://www.miraikikin.osaka-u.ac.jp/916/>

本基金への寄付は、日本の免税措置の対象となります



Acknowledgements

