



PDBj
Protein Data Bank Japan



PDBの最近の動向

大阪大学蛋白質研究所
栗栖源嗣

運営体制 (2021年現在)



PDBアーカイブ (X線, NMR, 3DEM)



BMRBアーカイブ (NMR実験データ)



EMDBアーカイブ (電顕3Dマップ)



EMPIARアーカイブ (電顕2次元画像)



BSMaアーカイブ (計算科学モデル)



XRDaアーカイブ (X線回折像)

統括責任者

栗栖 源嗣 (大阪大学蛋白質研究所・教授)

PDBj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)

五十嵐 令子 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)

PDBj国際的な運営高度化グループ

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)

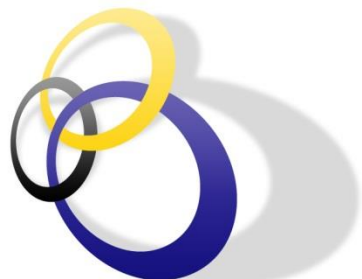
EMPIARグループ

川端 猛 (蛋白質研究奨励会・研究員)

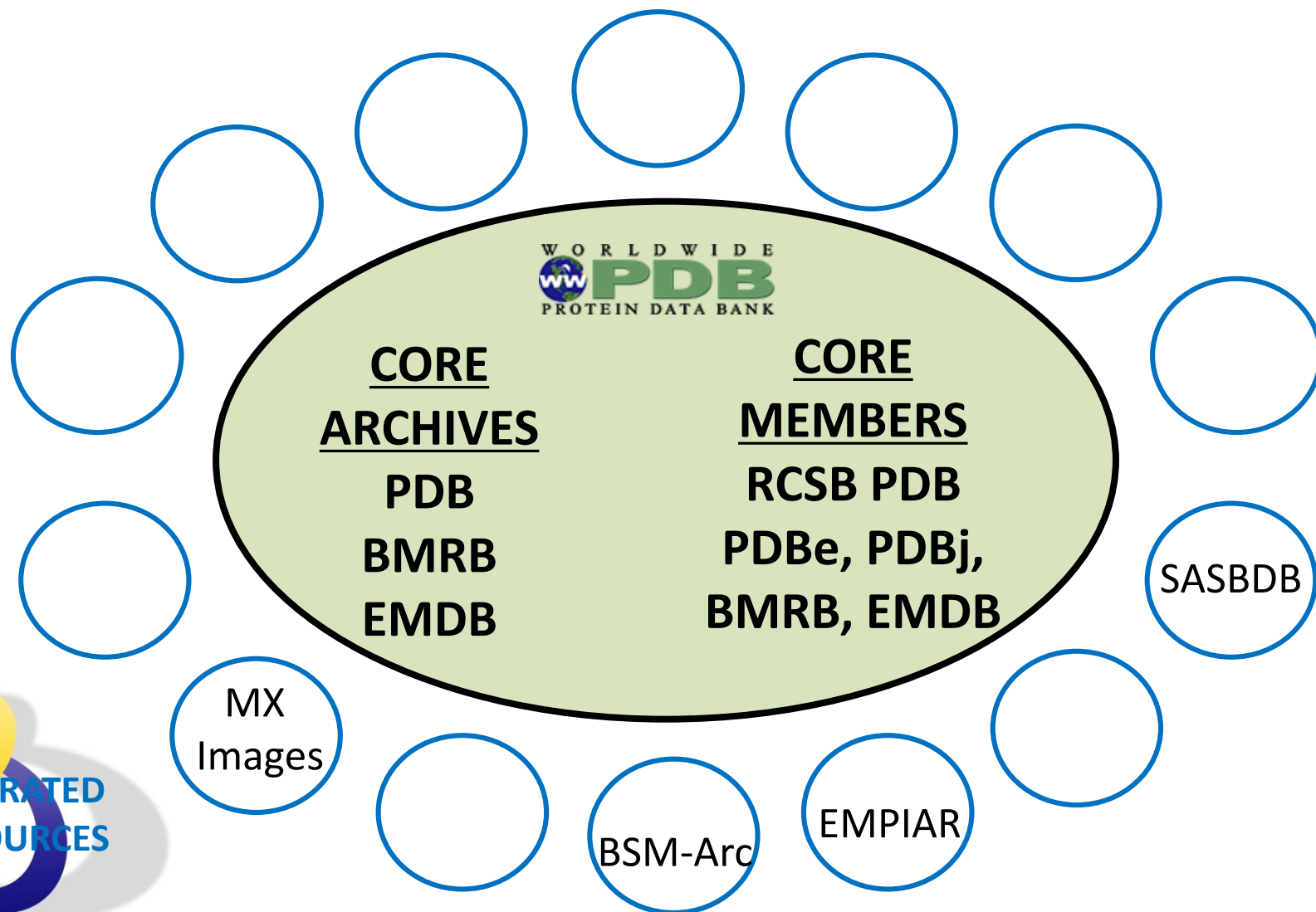
常住 規代 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)

事務職員

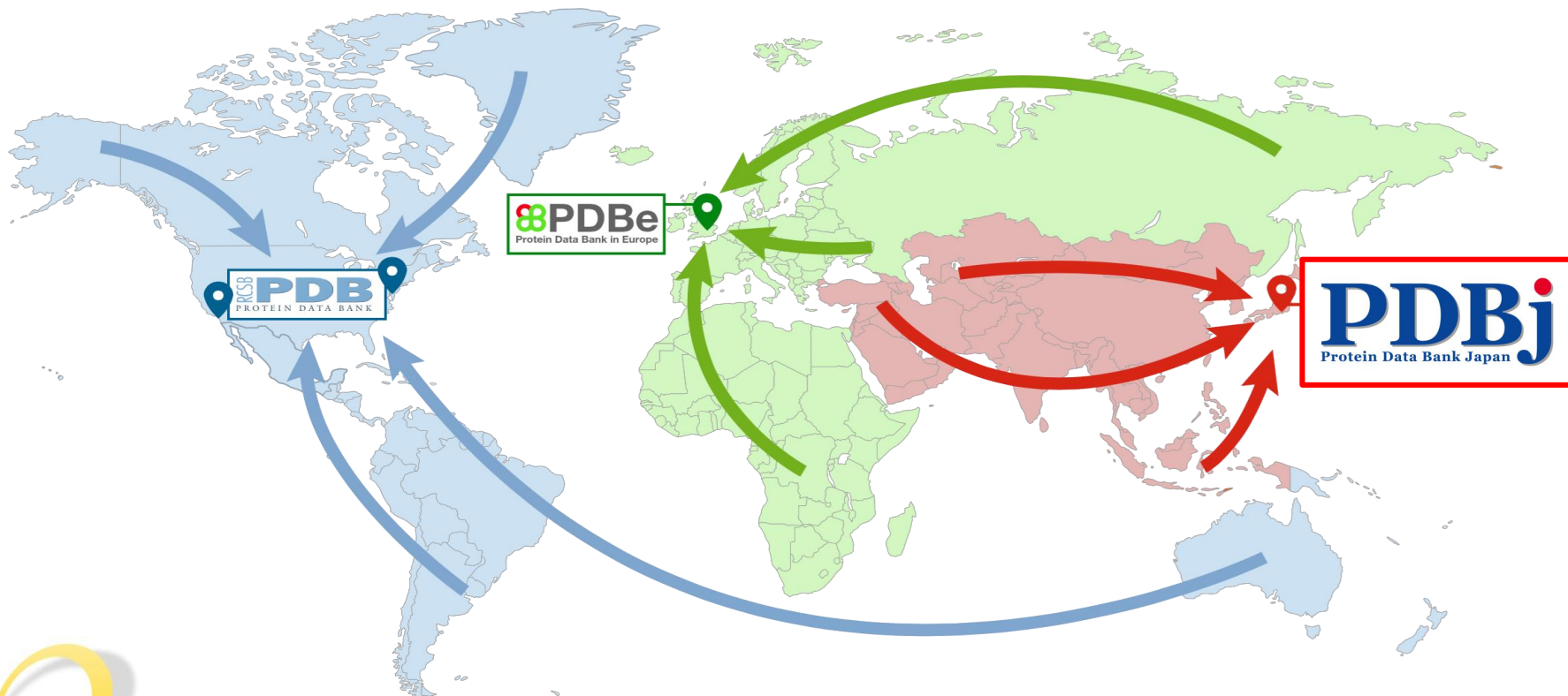
佐久間 量子 (大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員)



PDBjは欧米拠点と分業で PDB/BMRB/EMDBを構築



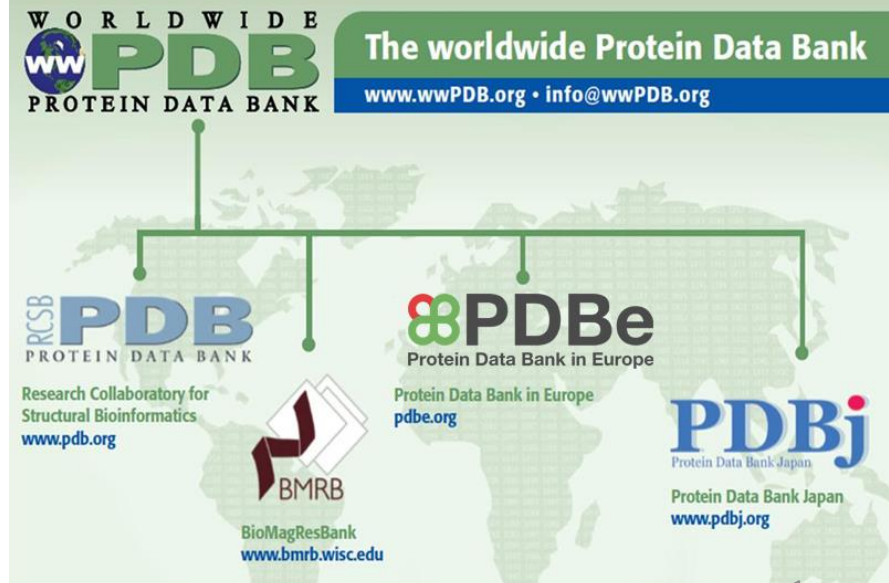
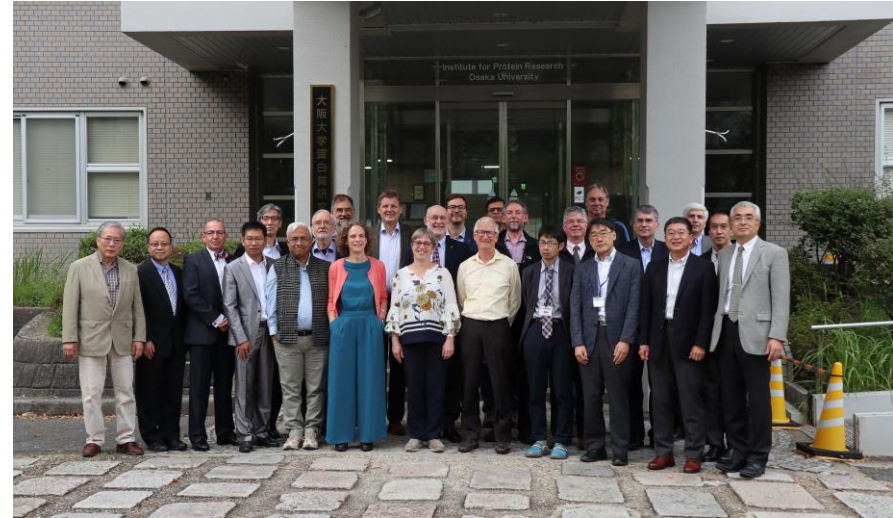
Protein Data Bank Japan : **PDBj** アジアの蛋白質構造データセンターです



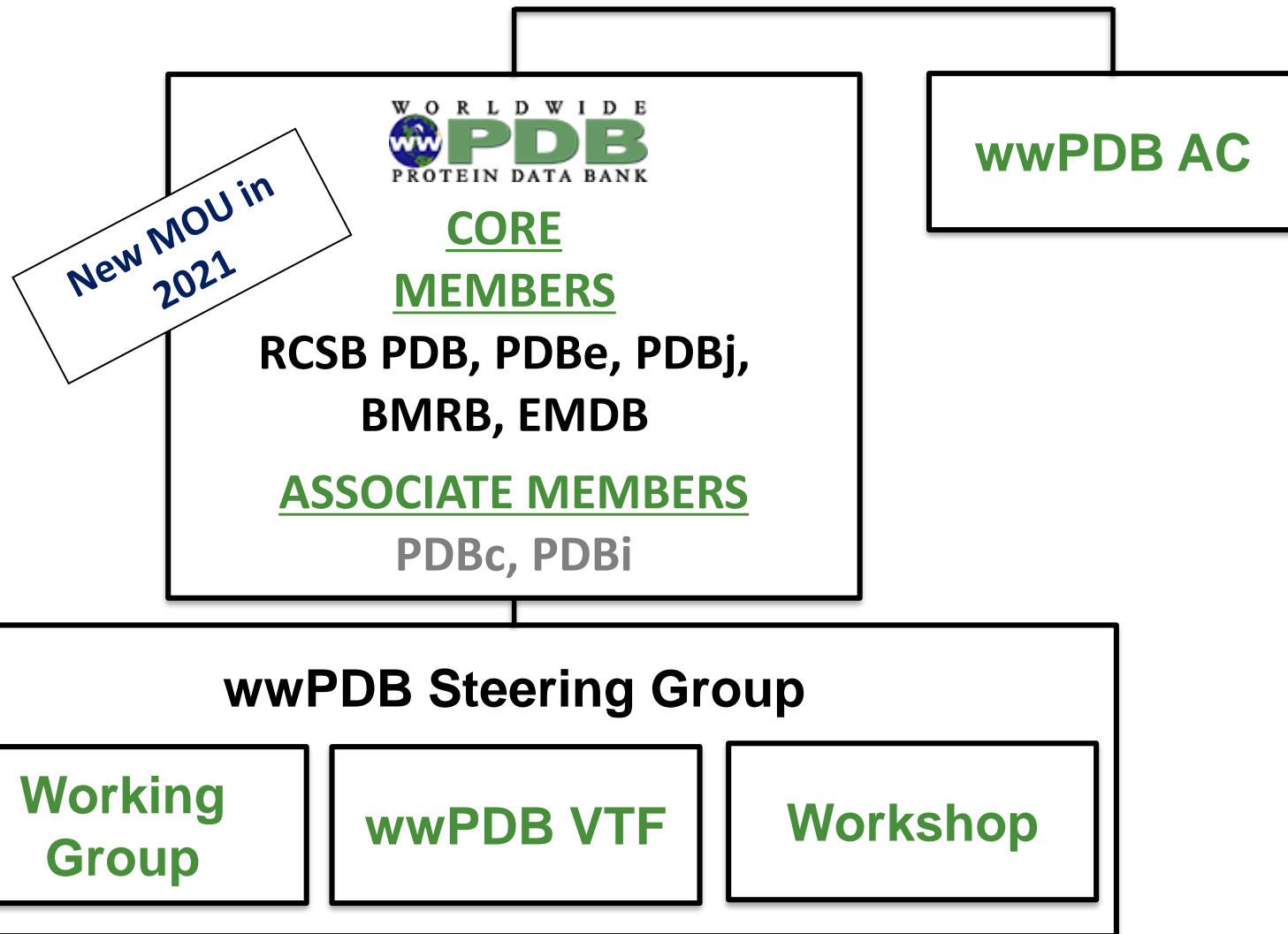
wwPDBとの関係

生体高分子の3次元構造に関する情報を集めた国際的データベース

1971年からのデータが集積され、情報は無償で利用できる。運営は各国(米国, 欧州, 日本)の政府機関による研究費用でまかなわれている。2003年からは国際組織wwPDBとして活動している(PDBjは創立メンバー)。



新しいwwPDBの組織 (2021～)



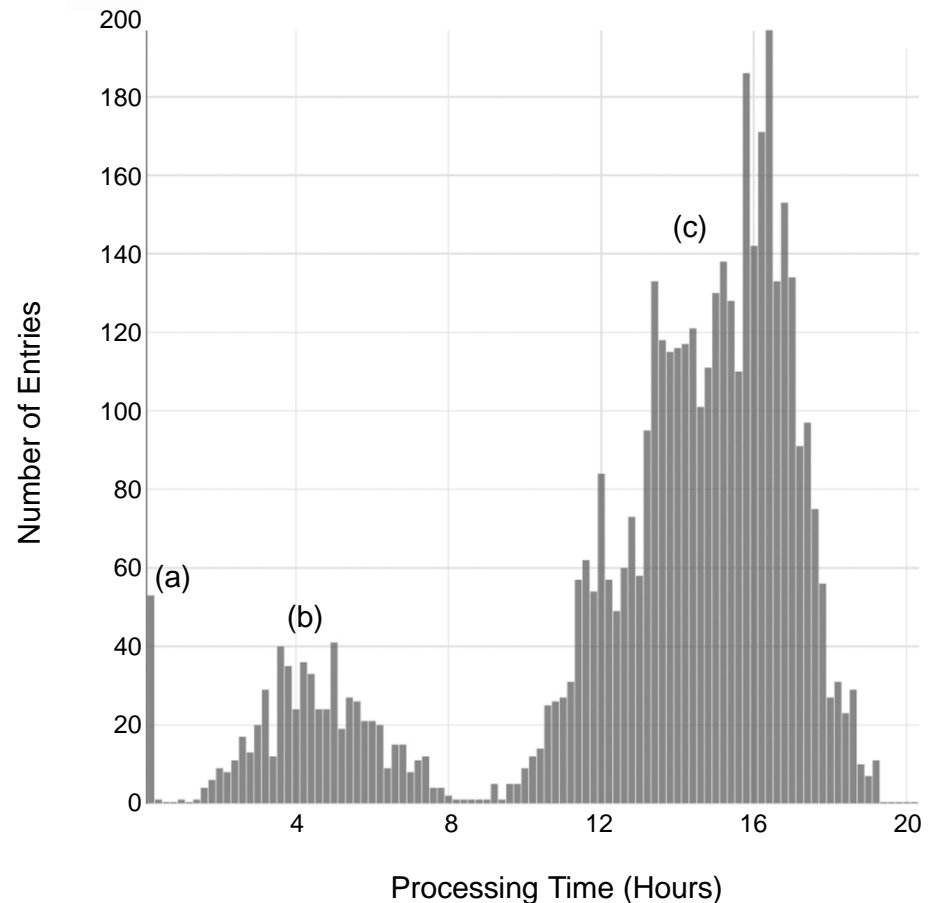
構造データ1件を登録するのに要する時間

アノテーションに要する時間

(a) ~1hr: 修正依頼の必要
ない単純な構造

(b) ~4 hrs: 修正依頼を必要
としない複合体などの複雑な
構造

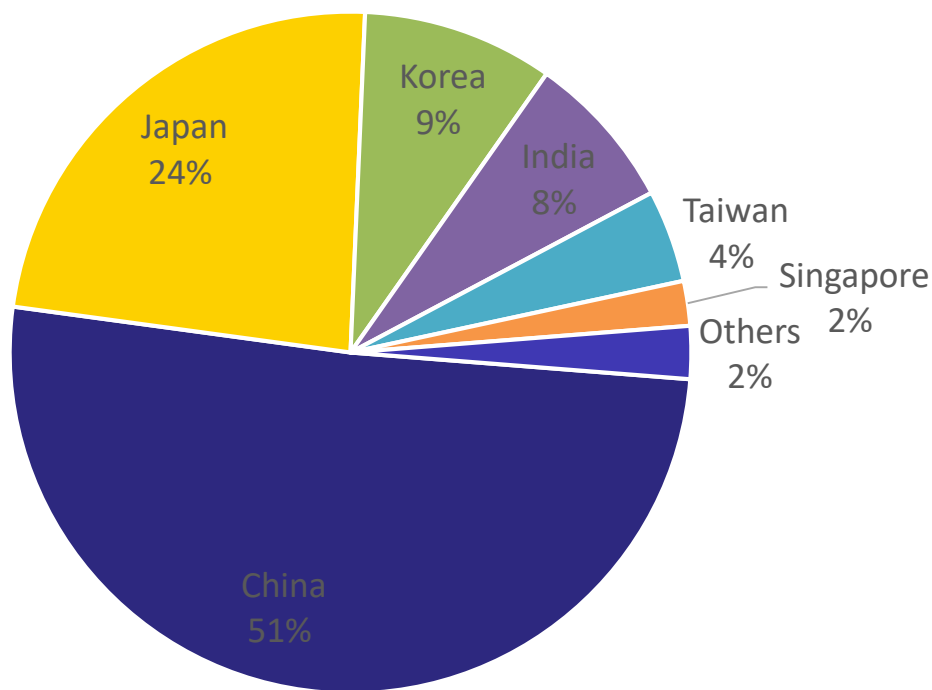
(c) ~15 hrs:登録者からの
修正を必要とする構造



蛋白質構造データは解析方法が多様で豊富な情報を持つがゆえに、品質を担保しながらDB化するのに多くのリソースを必要としています

2020年のPDB登録数 (PDBj処理分 ÷ 全世界の1/4)

Country/Region *2)	Depositions
China	1750
Japan	809
Korea	312
India	257
Taiwan	151
Singapore	73
Thailand	41
Hong Kong	34
Malaysia	5
Saudi Arabia	3
Turkey	2
Macao	1



*2) Country/Region a depositor selected on creating a session



https://pd bj.org/featured/covid-19

181780
件を2021-09-01に公開中

ホーム
トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
PDBjの引用・利用規約
リンク集
Settings

データ登録 (OneDep)
ヘルプ
PDB, EMBD, BMRBへの登録

ダウンロード
PDBアーカイブからのデータダウンロード

標準フォーマット
PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換
PDBx/mmCIFエディタ

クイックリンク
ヘルプ
PDB形式変換不可エントリー
グループ登録エントリー
化合物一覧
最新エントリー

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
DASH
EM Navigator
Omokage検索
SeSAW
wwPDB/RDF
NBDC RDFポータル
未公開エントリーのステータス

分子ビューア
ヘルプ

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search pd bj.org

wwPDB 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](#) [繁体中文](#) [한국어](#)

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。早急にこの新型コロナウイルス (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2 スパイク \(SARS-CoV-2 Spike\)](#)
- [249: SARSコロナウイルス2 RNA依存性RNAポリメラーゼ \(SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA Polymerase\)](#)

「全エントリー」のタブでは、同じ著者によるグループ登録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エントリーはリガンド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。

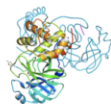
作成日: 2020-09-03 (最終更新日: 4 months ago)



コロナウイルス, 2020. David S. Goodsell@RCSB PDB による原画を修正

全エントリー (1436) 代表構造 (587) 最新のエントリー (14)

6LU7



The crystal structure of COVID-19 main protease in complex with an inhibitor N3

分子名称: 3C-like proteinase, N-[(5-METHYLISOXAZOL-3-YL)CARBONYL]ALANYL-L-VALYL-N¹~{(1R,2Z)-4-(BENZYOXY)-4-OXO-1-[[{(3R)-2-OXOPYRROLIDIN-3-YL]METHYL}BUT-2-ENYL]-L-LEUCINAMIDE

著者: [Liu, X, Zhang, B, Jin, Z, Yang, H, Rao, Z.](#)

登録日: 2020-01-26

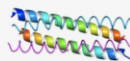
公開日: 2020-02-05

最終更新日: 2021-03-10

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.16 Å)

主引用文献: **Structure of Mpro from SARS-CoV-2 and discovery of its inhibitors.** Nature, 582, 2020

6LVN



Structure of the 2019-nCoV HR2 Domain

分子名称: Spike protein S2'

著者: [Zhu, Y, Sun, F.](#)

登録日: 2020-02-04

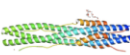
公開日: 2020-02-26

最終更新日: 2021-03-10

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.47 Å)

主引用文献: **Crystal structure of HR2 domain of 2019-nCoV S2 subunit** To Be Published

6LXT



Structure of post fusion core of 2019-nCoV S2 subunit

分子名称: Spike protein S2, TETRAETHYLENE GLYCOL, ZINC ION

著者: [Zhu, Y, Sun, F.](#)

登録日: 2020-02-11

公開日: 2020-02-26

最終更新日: 2020-05-06

実験手法: X-RAY DIFFRACTION (2.9 Å)

主引用文献: **Inhibition of SARS-CoV-2 (previously 2019-nCoV) infection by a highly potent inhibitor targeting its spike protein that harbors a high capacity to mediate** Cell Res., 30, 2020

検索結果

全ヒット件数: 1436
表示件数: 25
表示順: 公開日の古い順

表示順

PDBID昇順 (0→9,a→z)
PDBID降順 (z→a,9→0)
登録日の古い順
登録日の新しい順
公開日の古い順
公開日の新しい順
分解能の高い順

NMR データ (BMRB archive)

EM マップ (EMDB archive)

EMN Covid-19情報 - 新型コロナウイルスの情報ページ

EMN Covid-19情報

データベース: EMBD & PDB EMBD PDB Q. EM Navigatorの検索法は: Z

公開: ALL latest only

由来: SARS-CoV-2 SARS related coronavirus All coronavirus

タイプ: All Spike glycoprotein RNA polymerase Virus receptor (human)

294件中、1から50件目までを表示しています

23094	23095	23097	12073	12083	12084	12085	12086	12089	11993	11994	11995
30666	30661	30701	22943	22949	22950	30786	30488	30483	30484	30485	30485
30325	22923	22927	22927	22941	22745	22745	22744	22745	30504	11347	
22610	22611	22612	22613	11865	22433	22433	30702	30703	30704	30705	
30635	30641	30642	30643	11670	22515						

ページ: 1 2 3 6 < > 次へ

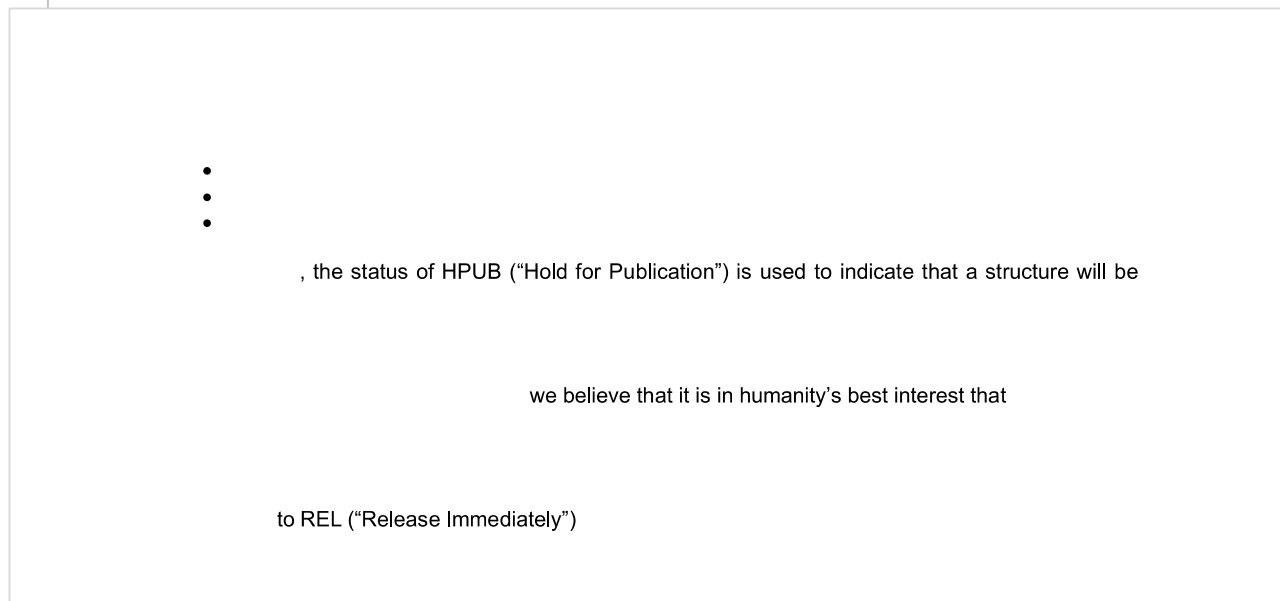
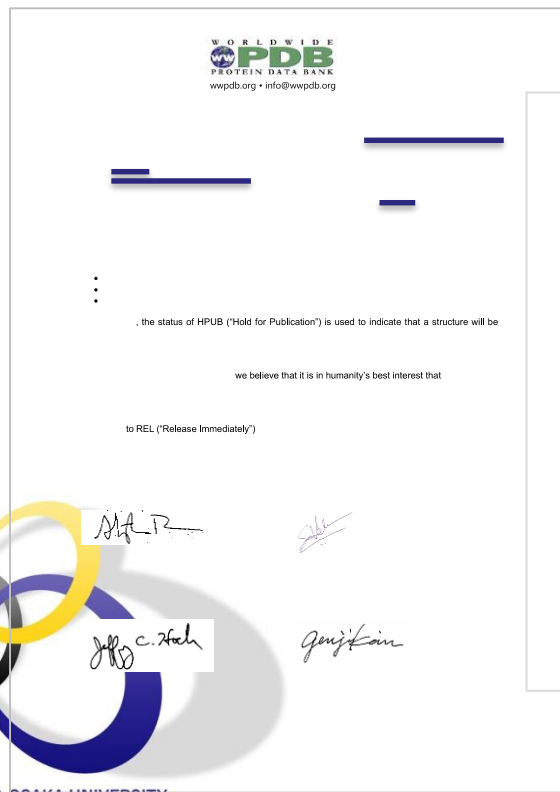
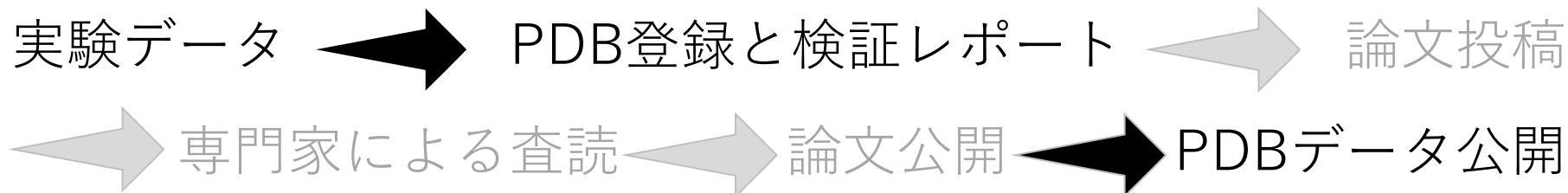
EM Navigator検索で詳細な検索

関連情報

万覧のページ

- Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARSコロナウイルス2)

論文発表を待たずにwwPDBデータを公開するよう直接依頼



PDBj独自の活動とwwPDBでの位置付

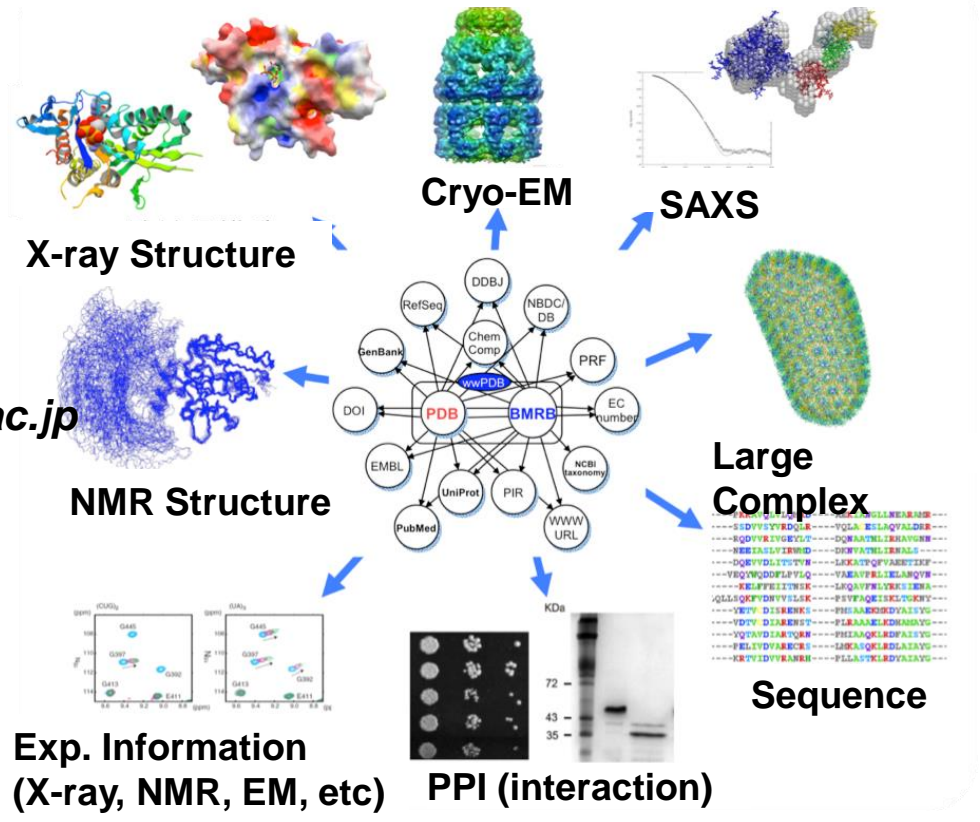
wwPDB/RDF

<http://rdf.wwpdb.org/>

BMRB/RDF

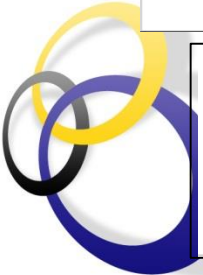
<http://bmrpub.protein.osaka-u.ac.jp>

Kinjo et al. (2012) *Nucl. Acids Res.* 40, D453-D460.
Yokochi et al. (2016) *J. Biomed. Semantics*, 7:16.



```




<rdf:Description rdf:about="http://rdf.wwpdb.org/pdb/1BY4">
  <rdf:type rdf:resource="http://purl.uniprot.org/core/Structure_Resource"/>
  <database rdf:resource="http://purl.uniprot.org/database/PDB"/>
  <method rdf:resource="http://purl.uniprot.org/core/X-Ray_Crystallography"/>
  <resolution rdf:datatype="http://www.w3.org/2001/XMLSchema#float">2.10</resolution>
</rdf:Description>
    
```

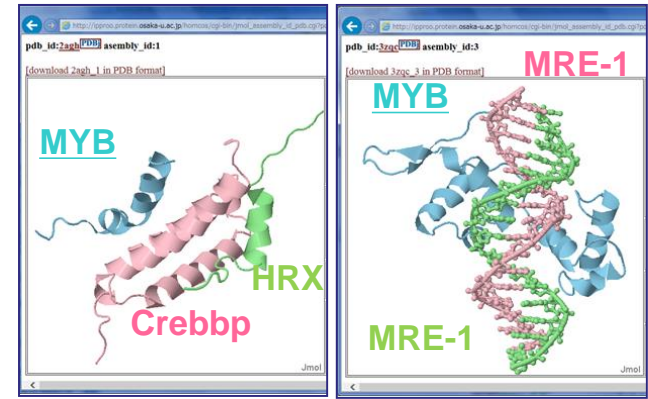


HOMCOS : 複合体立体構造の検索・ホモロジーモデリングのサーバ

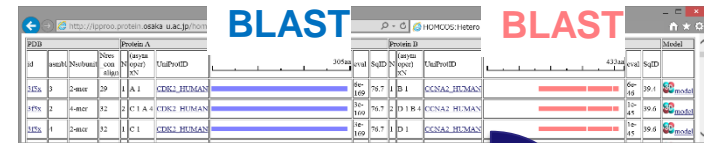
・PDB内の複合体の立体構造データを検索し、それを鋳型にモデリングする
<http://homcos.pdbj.org>

タンパク質に対する結合分子検索
 入力アミノ酸配列について対PDBのBLASTを実行

サービス	HOMCOS	入力1	入力2
PDB内の結合分子の検索	 タンパク質に対する結合分子の検索	アミノ酸配列	
	 化合物に対する結合分子の検索	化合物構造	
複合体立体構造のホモロジーモデリング	 ホモ多量体モデル	アミノ酸配列	
	 ヘテロ多量体モデル	アミノ酸配列A	アミノ酸配列B
	 化合物-タンパク質複合体のモデル	アミノ酸配列	化合物構造

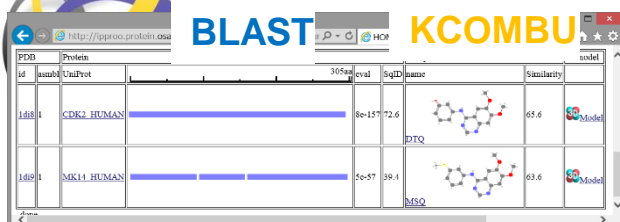


ヘテロ多量体のモデリング
 アミノ酸配列2本を入力、それぞれ、PDBに対するBLASTを実行

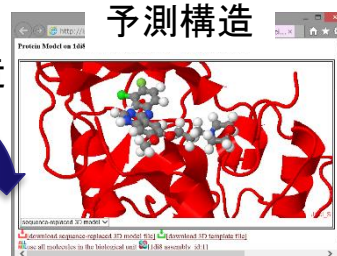


化合物-タンパク質複合体のモデル

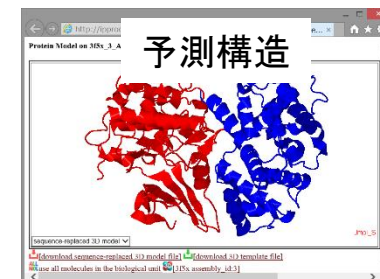
アミノ酸配列と化合物構造を入力、アミノ酸配列はBLASTで、化学構造はKCOMBU でPDBに対して検索



鋳型構造



鋳型構造



構造データのアーカイブの現状

1. 結晶解析

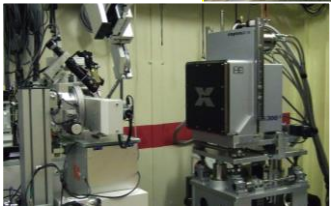


回折イメージ → 構造因子(hkl) → 座標データ(xyz)

配列やヘテロ化合物の情報, 実験条件や
生物種の情報などmetadataを付与して,
PDBアーカイブとしてwwPDBが一元管理



アジア・オセアニア地区では, 公的アーカイブは存在せず.
論文発表したデータ保管は研究者個人にゆだねられていた.



New Archive for X-ray Diffraction Images

<https://xrda.pdbj.org>

XRDa English 日本語
X-Ray Diffraction Archive
Login using ORCID ヘルプ エントリー検索 統計情報

XRDaへようこそ
The X-Ray Diffraction Archive (XRDa for short) top page.
We welcome depositions of raw X-ray diffraction images corresponding to PDB entries.
To submit new entries, please login using your ORCID ID.
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: 6 weeks ago)

Latest entries All entries Covid-19 entries

- 7CZ9: Crystal structure of multidrug efflux transporter OqxB from *Klebsiella pneumoniae***
Structure resolution: 1.85 Å
Murakami, S., Okada, U., Yamashita, E.
DOI: [10.1038/s41467-021-25679-0](https://doi.org/10.1038/s41467-021-25679-0)
Deposition date: 2021-08-06
Release date: 2021-09-22
- 4X8Y: Crystal structure of human PGRMC1 cytochrome b5-like**
Structure resolution: 1.95 Å
Nakane, T., Yamamoto, T., Shimamura, T., Kobayashi, T., Kabe, Y., Suematsu, M.
DOI: [10.1038/ncomms11030](https://doi.org/10.1038/ncomms11030)
Deposition date: 2021-09-16
Release date: 2021-09-16
- 7DVE: Crystal structure of FAD-dependent C-glycoside oxidase**
Structure resolution: 2.40 Å
Senda, M., Watanabe, S., Kumano, T., Kobayashi, M., Senda, T.
Deposition date: 2021-08-19
Release date: 2021-09-08
- 7E18: Crystal structure of SAR-CoV-2 3CL protease complex with**
Structure resolution: 1.65 Å
Senda, M., Konno, S., Hayashi, Y., Senda, T.
DOI: [10.1021/acs.jmedchem.1c00665](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.1c00665)
Deposition date: 2021-08-19
Release date: 2021-08-19
- 7E19: Crystal structure of SAR-CoV-2 3CL protease complex with**
Structure resolution: 2.15 Å
Senda, M., Konno, S., Hayashi, Y., Senda, T.
DOI: [10.1021/acs.jmedchem.1c00665](https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.1c00665)
Deposition date: 2021-08-19
Release date: 2021-08-19
- 7CD0: Crystal structure of the 2-iodoporphobilinogen-bound**
Structure resolution: 2.31 Å
Sato, H., Sugishima, M., Wada, K., Hirabayashi, K., Tsukaguchi, M.
DOI: [10.1042/BCJ20200996](https://doi.org/10.1042/BCJ20200996)
Deposition date: 2021-07-16
Release date: 2021-07-16

7Cz9: Crystal structure of multidrug efflux transporter OqxB from *Klebsiella pneumoniae*

Authors: Murakami, S., Okada, U., Yamashita, E.
R-work: 0.18020
R-free: 0.21690
Unit cell edges (Å): 128.947 x 128.78 x 137.262
Unit cell angles (°): 91.28, 90.01, 103.57
Resolution: 43.28 Å - 1.85 Å
Space group: P 1
Primary citation
PDB website for 7Cz9
Entry: [Download](#) (26.74 GB)

Dataset OqxB efflux transporter from *Klebsiella pneumoniae*

Number of frames	3800
Distance (mm)	270
Oscillation width (°)	0.1
Wavelength (Å)	0.9
Equipment	DECTRIS EIGER X 16M
Beamline	SPRING-8 BEAMLINE BL44XU
Data	Download (26.74 GB)

ファイルマネージャー
Path: /

名	説明	サイズ	変更日
Qqx8-1	Full data set from single crystal		

Copyright © 2020-2021 X-Ray Diffraction Archive

構造データのアーカイブの現状

2. NMR構造解析

Spectral データ

Chemical shifts
Coupling constants
Time-domain data
Spectral peak lists

Relaxation データ

R1/T1, R2/T2, R1rho/T1rho, NOEs

→ 座標データ (xyz)

配列やヘテロ化合物の情報,
実験条件や生物種の情報など
metadataを付与して, PDBアーカイブへ



構造データのアーカイブの現状

3. 電子顕微鏡構造解析

画像データ



欧州EBIがパイロット的にデータベースを運用中。ファイルサイズが大きいため、欧州のデータが中心。遠距離からの登録は長時間を要する。

→

密度マップ



→ 座標データ(xyz)

配列やヘテロ化合物の情報、実験条件や生物種の情報などmetadataを付与して、PDBおよびEMDBアーカイブへ



wwPDB EM Validation Reports Now Publicly Available

The wwPDB archive has now been updated to include validation reports for every released set of EM model coordinates in the PDB and every released EMDB map entry. Validation reports provide quantitative and visual assessments of structure quality and enable archive-wide comparisons (<https://www.wwpdb.org/validation/validation-reports>).

wwPDB EM validation reports were first made available to OneDep depositors in 2019 (<http://www.wwpdb.org/news/news?year=2019#5db841ceea7d0653b99c8839>). The current reports are based on recommendations obtained from EM Validation Task Force (VTF) meetings in 2010 (Structure 20: 205-214, www.wwpdb.org/task/em) and 2020 (white paper in preparation), as well as EM Validation Challenge events (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/32002441>, <https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.06.12.147033v1>). Examples of recent improvements include images for deposited masks, improved map-model overlay images, visualization of a (approximate) raw map from two half-maps, and rotationally averaged power spectrum plots. The underlying methodology is continually improved, based on community requirements, requests and feedback.

The PDB Core Archive holds validation reports that assess each PDB model along with its associated experimental map/tomogram from EMDB. EM map+model reports can be downloaded at the following wwPDB mirrors:

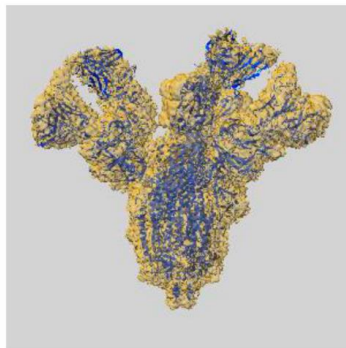
- wwPDB: ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/validation_reports/
- RCSB PDB: ftp://ftp.rcsb.org/pub/pdb/validation_reports/
- PDBe: ftp://ftp.ebi.ac.uk/pub/databases/pdb/validation_reports/
- PDBj: ftp://ftp.pdbj.org/pub/pdb/validation_reports/

The EMDB Core Archive holds validation reports that assess each EMDB map/tomogram entry. EM map-only reports can be downloaded at the following URLs:

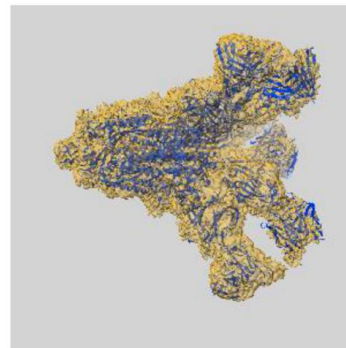
- EMDB: ftp://ftp.ebi.ac.uk/pub/databases/emdb/validation_reports/
- wwPDB: ftp://ftp.wwpdb.org/pub/emdb/validation_reports/
- RCSB PDB: ftp://ftp.rcsb.org/pub/emdb/validation_reports/
- PDBj: ftp://ftp.pdbj.org/pub/emdb/validation_reports/

Additional information about validation reports is available for **EM map+model**, **EM map only**, and **EM tomograms**.

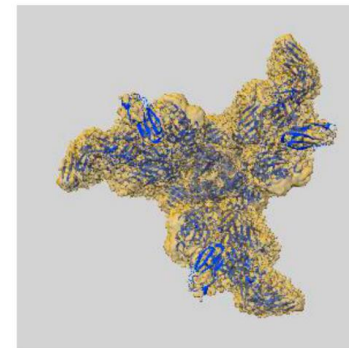
If you have any questions or queries about wwPDB validation, please contact us at validation@mail.wwpdb.org.



X



Y



Z

Example of map-model overlay image: EMD-30388/7CWU, SARS-CoV-2 spike proteins trimer in complex with P17 and FC05 Fabs cocktail

EMPIAR-PDBj の運営

EMPIAR: 電顕の2D画像のデータベース

目的: 1)分解能向上 2) 3Dマップの検証 3)教育

→サイズが大きいので地域分散が必要

The screenshot shows the EMPIAR-PDBj website interface. The main header includes the logo and navigation links. A search bar is visible. Below the header, there is a table of datasets with columns for Dataset, Title, Authors, Related EMDB/PDB entries, Size, and Resolution. A callout box highlights the current data statistics: "2020/9/1 現在 データエントリー数:619 全データサイズ:約1.2 PB". To the right, a detailed view of dataset EMPIAR-10248 is shown, including its title, authors, deposition and release dates, and a 3D reconstruction image.

Dataset	Title	Authors	Related EMDB/PDB entries	Size	Resolution
EMPIAR-10332	Cryo-EM structure of the translocator of the outer mitochondrial membrane [2057 multi-frame micrographs composed of 49 frames each in TIFF format]	Araiso Y, Tsutsumi A, Qiu J, Imai K, Shiota T, Song J, Lindau C, Wenz LS, Sakaue H, Yunoki K, Kawano S, Suzuki	EMD-9851, 6jnf	1.9 TB	3.81
EMPIAR-10327	Processed FIB SEM images of a parasitophorous vacuole containing Toxoplasma gondii ΔCAP parasites, complemented with CAP. [1 multi-frame micrographs composed of 1 frames each in MRC]				

2020/9/1 現在
データエントリー数:619
全データサイズ:約1.2 PB

EMPIAR-10248
The 1.54 Å structure of Apoferritin by CRYOARM300 with cold-FEG
No publication information available
Authors: Kato T, Makino F, Nakane T, Terahara N, Yonekura K, Namba K
Deposited: 2019-02-14
Released: 2019-02-19
Last modified: 2019-03-26
Dataset size: 145.9 GB

- 1) 日本サイトの一般公開開始(2018/12)
- 2) 高速ファイル転送ソフトウェアAsperaを導入・運用
- 3) 早稲田大学のコールドストレージにデータのバックアップ(由良研と共同)
- 4) 日本でのデータ登録(Deposition)支援の開始(2019/08)。ハードディスクの阪大への送付に対応。

構造データのアーカイブの現状

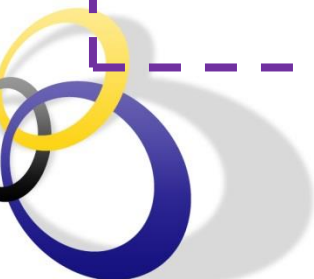
4. MD等計算結果

計算条件等 → 多数のトラジェクトリ → 座標(代表的)

MDboxなど、幾つかデータベースはあるものの、論文に登録された代表的な座標をアーカイブし公開する目的の息の長いデータベースは存在しない。

必要最小限のアノテーションを附した、登録者フレンドリーな一般公開アーカイブを構築

一般公開を目的に、以前はPDBに登録されたが、今は登録を受け付けていない



生物学的構造モデルアーカイブの整備

<https://bmsa.pdbj.org>

- 1) サイトの一般公開開始(2018/12)
- 2) ORCID iD認証によるデータ受付(Deposition)の開始
- 3) インシリコユニットからの登録開始

English 日本語

BSM-Arc  Login using ORCID ヘルプ プロジェクト探検

Welcome to BSMA

MA for short) top page.
lopment.

Outward open conformation of a Major Facilitator Superfamily multidrug/H⁺ antiporter provides insights into switching mechanism
Kumar Nagarathinam, Yoshiko Nakada-Nakura, Christoph Parthier, Tohru Terada, Narinobu Juge, Frank Jaenecke, Kehong Liu, Yunhon Hotta, Takaaki Miyaji, Hiroshi Omote, So Iwata, Norimichi Nomura, Milton T. Stubbs, Mikio Tanabe
Deposition date: 2019-06-19
Modification date: 2019-06-21
Release date: 2019-06-21

Mutational analysis of cutinase-like enzyme, Cut190, based on the 3D docking structure with model compounds of polyethylene terephthalate.
Takeshi Kawabata, Masayuki Oda, Fusako Kawai
Deposition date: 2019-05-14
Modification date: 2019-05-21
Release date: 2019-05-21

Accurate Prediction of Complex Structure and Affinity for a Flexible Protein Receptor and Its Inhibitor
Gert-Jan Bekker, Narutoshi Kamiya, Mitsugu Araki, Ikuro Fukuda, Yasushi Okuno, Haruki Nakamura
Deposition date: 2018-12-10
Modification date: 2018-12-10
Release date: 2018-12-10

Folding thermodynamics of PET-hydrolyzing enzyme Cut190 depending on Ca²⁺ concentration
Satomi Inaba, Narutoshi Kamiya, Gert-Jan Bekker, Fusako Kawai, Masayuki Oda
Deposition date: 2018-12-10
Modification date: 2018-12-10
Release date: 2018-12-10

Structural Dynamics of the PET-Degrading Cutinase-like Enzyme from *Saccharomonospora viridis* AHK190 in Substrate-Bound States Elucidates the Ca²⁺-Driven Catalytic Cycle.
Nobutaka Numoto, Narutoshi Kamiya, Gert-Jan Bekker, Yuri Yamagami, Satomi Inaba, Kentaro Ishii, Susumu Uchiyama, Fusako Kawai, Nobutoshi Ito, Masayuki Oda
Deposition date: 2018-12-10
Modification date: 2018-12-10
Release date: 2018-12-10



Outward open Occluded Inward facing

Protonation on D34 → MD ← MD

BSM00006: Outward open conformation of a Major Facilitator Superfamily multidrug/H⁺ antiporter provides insights into switching mechanism

エントリー登録者: Kumar Nagarathinam; Yoshiko Nakada-Nakura; Christoph Parthier; Tohru Terada; Narinobu Juge; Frank Jaenecke; Kehong Liu; Yunhon Hotta; Takaaki Miyaji; Hiroshi Omote; So Iwata; Norimichi Nomura; Milton T. Stubbs; Mikio Tanabe

DOI: [10.1038/s41467-018-06306-x](https://doi.org/10.1038/s41467-018-06306-x)

abstract

Multidrug resistance (MDR) poses a major challenge to medicine. A principle cause of MDR is through active efflux by MDR transporters situated in the bacterial membrane. Here we present the crystal structure of the major facilitator superfamily (MFS) drug/H⁺ antiporter MdfA from *Escherichia coli* in an outward open conformation. Comparison with the inward facing (drug binding) state shows that, in addition to the expected change in relative orientations of the N- and C-terminal lobes of the antiporter, the conformation of TM5 is kinked and twisted. In vitro reconstitution experiments demonstrate the importance of selected residues for transport and molecular dynamics simulations are used to gain insights into antiporter switching. With the availability of structures of alternative conformational states, we anticipate that MdfA will serve as a model system for understanding drug efflux in MFS MDR antiporters.

ファイルマネージャー

OSAKA UNIVERSITY

情報データ基盤整備の重要性

- データ駆動科学（例えばAlpha Fold2などにも応用）に必須の高品質なPDB/EMDB基盤を整備する拠点
- Data Availability Statement（DAS）を明確にする最近のコミュニティの方針に合致した1次実験データ/計算結果データのアーカイブの重要性に対応する拠点

ANNOUNCEMENT

Where are the data?

As the research community embraces data sharing, academic journals can do their bit to help. Starting this month, all research papers accepted for publication in *Nature* and an initial 12 other *Nature* titles will be required to include information on whether and how others can access the underlying data.

These statements will report the availability of the 'minimal data set' necessary to interpret, replicate and build on the findings reported in the paper. Where applicable, they will include details about publicly archived data sets that have been analysed or generated during the study. Where restrictions on access are in place — for example, in the case of privacy limitations or third-party control — authors will be expected to make this clear.

The new policy (full details of which are available at go.nature.com/2bf4vqn) builds on our long-standing support for data availability as a condition of publication. It also extends our support for data citation, the practice of citing data sets in reference lists in a similar way to citing papers. Authors are encouraged to cite data sets that have digital object identifiers (DOIs) assigned to them.

The introduction of data-availability statements follows a trial at five *Nature* journals — *Nature Cell Biology*, *Nature Communications*, *Nature Geoscience*, *Nature Neuroscience* and *Nature Physics* — that began in March 2016. The pilot confirmed differences in the culture of data sharing and access between different disciplines, and that the lack of obvious, public, community repositories can pose a significant barrier to public data deposition. Nevertheless,

even in disciplines that are not yet so able to embrace openness and sharing, there is increasing awareness and appreciation that data deposition can enhance the visibility and reuse of published research, and that data citation can increase the recognition of those who create and share data.

This new policy will be implemented across the diverse range of *Nature* journals by early 2017. We expect that its implementation will shed more light on the reasons for disciplinary differences in data sharing, identify challenges and help to promote the practice more widely.

It's not just journals. A broad drive across the research, funding and publishing communities is under way to make the availability of research data more transparent. Funders, for example, are also introducing data-availability statements. The seven UK research councils require their grant holders to include them. And the US National Institutes of Health is asking researchers to provide management plans for their research data.

We expect that offering consistent information on data availability in our papers will promote data reuse by future researchers. And where public data archiving is a mandatory requirement of journals, there is some evidence that including data-availability statements with persistent links to data in published articles is an effective approach to ensuring public data availability and policy compliance (T. H. Vines *et al.* *FASEB J.* 27, 1304–1308; 2013).

This new policy follows the launch, in July 2016, by our publisher Springer Nature of an ambitious project to introduce and standardize research data policies across all of its journals (see go.nature.com/2by6l6x). The project sets out a defined common framework for data policy — which *Nature* policies align with — that enables different journals to encourage data sharing in a way that reflects the circumstances of respective specialist communities. ■



Acknowledgements



WORLDWIDE
ww PDB
PROTEIN DATA BANK

RCSB
PDB
PROTEIN DATA BANK

PDBe
Protein Data Bank in Europe

PDBj
Protein Data Bank Japan

BMRB