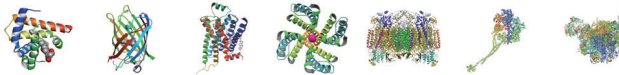




<https://pdbj.org>

PDBj (Protein Data Bank Japan, 日本蛋白質構造データバンク)は、2000年7月より大阪大学蛋白質研究所にて、アジア・オセアニア地域を主とした立体構造データの新規登録事業を始めました。2003年には米国・RCSB-PDB、欧州・PDBe-EBIと協力してwwPDB (worldwide PDB, <https://wwpdb.org/>) を設立し、そのメンバーの一員としてアジア・オセアニア

PDBjの活動



(左から 1mbn, 1ema, 2rh1, 1k4c, 1v54, 3vkx, 1ffk)

PDBデータの登録

<https://deposit-pdbj.wwpdb.org/deposition>

PDBjでは主にアジア地区からのPDB登録受付を行っています。登録された構造は決められた公開日になるとPDBの各拠点から同時に公開されます。

PDBj Mine (PDB構造検索)

<https://pdbj.org/mine>

PDBjが提供するPDBエントリー検索サービスがPDBj Mineです。

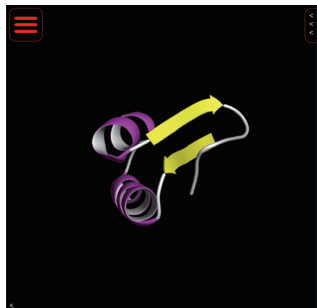
キーワード検索だけでなく、詳細検索やSQL検索を使ってより細かな条件を指定し検索することもできます。

また、この検索ではPDBで規定した化合物、PDBjサイトの記事内容(ニュース、ヘルプなど)、未公開エントリーの状態(公開日や現在の処理段階)なども合わせて横断検索することができます。

さらに日本語ページには自動翻訳機能があり、日本語でも検索しても自動的に英語に変換して検索することができます。

Molmil : ウェブブラウザで動く分子ビューアー

<https://pdbj.org/help/molmil>



Molmilは、ウェブブラウザ上で動作する分子閲覧ソフトウェアです。Windows、Mac、LinuxなどのPC環境だけではなく、AndroidやiOSなどのモバイル環境にも対応しています。

地域代表アーカイブとなりました。2006年には、BMRB (Biological Magnetic Resonance Data Bank、生体分子NMRデータベース)が新たにメンバーとして加わりました。wwPDBメンバーと構造生物学の専門家で構成されたwwPDBAC (wwPDB諮問委員会)は毎年集まって会議を開き、現状の問題と今後の方針について議論を行い、その助言を受けてwwPDBは運営されています。

毎年10,000件以上の生体高分子が登録処理されており、2022年8月時点で公開しているPDBエントリーの数は19万件以上になります。現在PDBjでは、主にアジア地域からの登録を担当しており、その処理数は全体の約20~25%になります。登録時だけでなくその後も適宜データの見直しを行いデータ品質の維持管理に努めています。さらに、NMRや電子顕微鏡によるデータも加え、さまざまなツールやサービスも提供しています。また、Webインタフェースはモバイル環境(Android・iOS)にも対応しています。

また、提供サービスの利活用促進やユーザからのフィードバックを得てサービス改善につなげるため、利用者向け講習会などを時々開催しています。

これらの活動は、「JST-NBDC」(国立研究開発法人科学技術振興機構 バイオサイエンス・データベースセンター)と「大阪大学蛋白質研究所に措置された共同利用・共同研究拠点経費(文部科学省)」の支援を受け運営しています。またNBDCや関連する他のデータベースとJBI (Japan alliance for Bioscience Information) を設立して連携の強化を図っています。今後とも皆さまのご支援とご協力をよろしくお願いいたします。

BMRB (生体分子NMRデータベース)

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

NMR(核磁気共鳴)の手法を使って分子構造を解いたとき、原子座標などの情報はPDBに登録されますが、合わせてNMR特有の情報がBMRB (BioMagResBank)に登録されます。

BMRBは米国Wisconsin大学Madison校のグループとPDBj-BMRBのグループで協力して運営されています。

また、PDBには登録できない低分子生体分子のNMR実験データと原子座標データの登録を受け付けるSMSDep (Small Molecule Structure Deposition) の運営もPDBj-BMRB独自のサービスとして行っています。

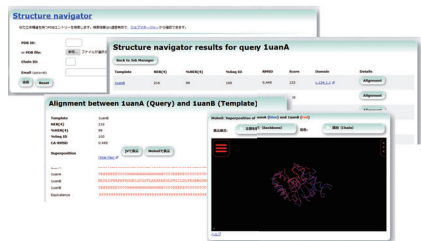
Sequence Navigator : 類似配列検索

<https://pdbj.org/seq-navi>

Sequence Navigatorはあるアミノ酸配列と似た配列をPDB登録エントリーの中から探すBLAST検索サービスです。任意のアミノ酸配列または既にPDBに登録されている構造のPDBID+ChainIDで検索できます。後者の検索は、PDBjの個別PDBエントリーページの「相同蛋白質」(Sequence Neighbor)タブからも行うことができます。

Structure Navigator : 類似立体構造検索

<https://pdj.org/struc-navi>



Structure Navigatorは立体的に似た分子をPDBに登録された分子の中から検索するサービスです。検索条件はPDBID+ChainID、またはPDB形式の構造情報ファイルで指定します。

EM Navigator・Omokage検索・万見

<https://pdj.org/emnavi/>
<https://pdj.org/emnavi/omo-search.php>
<https://pdj.org/yorodumi/>

EM Navigatorは、電子顕微鏡で得られた電子密度マップのデータベースEMDBのデータを検索・閲覧するためのウェブサイトで、専門的な知識や経験がなくても気軽に閲覧できます。

Omokage検索は、PDBの原子座標モデル、EMDBの電子密度マップ、SASBDB(生体試料小角散乱データバンク)の分子モデルの中から横断的に検索し、似た「形状」の分子を探すサービスです。

以上のサービスは共通の分子構造閲覧ウェブサービス「万見」(よろづみ)を使っています。



PDBj入門 : 一般向けの生体分子解説サイト

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

PDBjのメインサイトは主に研究者の利用を想定して作られているのに対し、PDBj入門のサイトは一般向けに、生体分子を理解する上で助けとなる以下のようなサービスを提供しています。

VR分子ビューア: VRで分子の世界を体験

万見プライム: 分子の解説と赤青メガネを使った立体視

ペーパーモデル: 紙を組み立てて分子モデルを作る

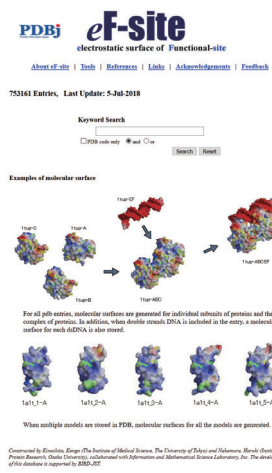
今月の分子: RCSB PDBのPDB-101で提供されている月替わりの分子解説記事Molecule of the Monthの日本語訳

ゲーム: アミノ酸・タンパク質の神経衰弱とアミノ酸配列をつくるスネークゲーム



eF-site : タンパク質の分子表面形状データベース

<https://pdj.org/eF-site/>
<https://pdj.org/eF-surf/>
<https://pdj.org/eF-seek/>



eF-site (electrostatic-surface of Functional site、エフサイト)はタンパク質の機能部位に関する分子表面形状のデータベースです。

eF-surf(エフサーフ)サービスでは、手元にある分子構造データファイルを使ってeF-siteに登録されているデータと同じ様に分子表面と静電ポテンシャルを計算できます。

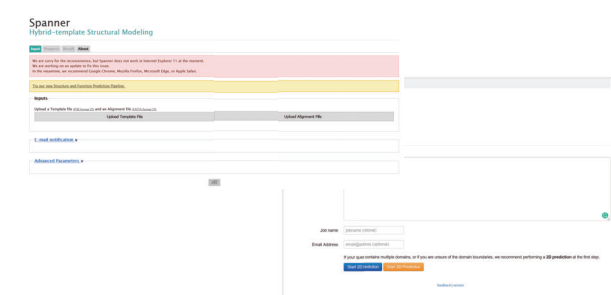
eF-seek(エフシーク)サービスでは、用意した分子構造データファイルと似た結合部位を持つ構造をeF-siteエントリーから検索することができます。

Spanner/SFAS : 配列から立体構造を予測

<https://sysimm.org/spanner/>
<https://sysimm.org/pipeline7/>

Spanner(スパーナー)はアミノ酸配列情報からタンパク質の立体構造を予測するサービスです。予測は似た配列を持ち構造が分かっている鑄型構造を別途指定し、それに基づいて行います。

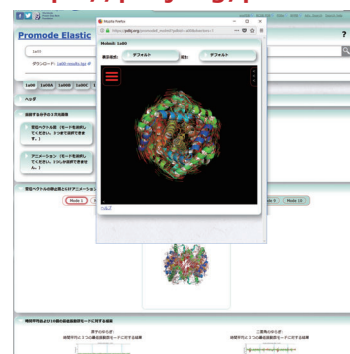
鑄型構造をPDBエントリーから探し出す過程をつなげたパイプラインサービスSFAS(Sequence Function Annotation Service)も提供しています。



ProMode : タンパク質の基準振動解析データベース

<https://pdj.org/promode-elastic>

ProMode Elasticは、タンパク質の基準振動解析のデータベースです。各分子のページではMolmil分子ビューアを使ったアニメーションや原子の変位ベクトル図で各モードのゆらぎを見ることができます。



PDBjが提供する各サービスについては、*Nucleic Acids Research* (2017) vol.45, D282-D288にて紹介しています。また詳しい説明とチュートリアルを掲載しているヘルプ(<https://pdj.org/help/>)もご参照ください。

日本蛋白質構造データバンク (PDBj)

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2

大阪大学蛋白質研究所・構造解析研究棟

プロテインデータバンク研究室内

TEL : 06-6879-4311 (全般) / 06-6879-8634 (PDB登録)

FAX : 06-6879-8590

Web問い合わせ : <https://pdj.org/contact>