

第45回日本分子生物学会年会 フォーラム  
生命科学のデータベース活用法

# 蛋白質構造データベース (PDB)

2022年11月30日

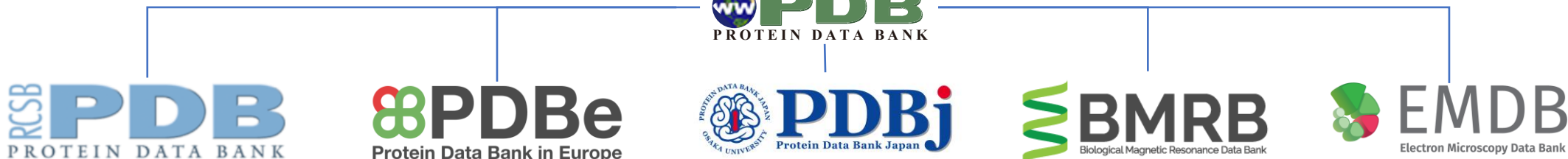
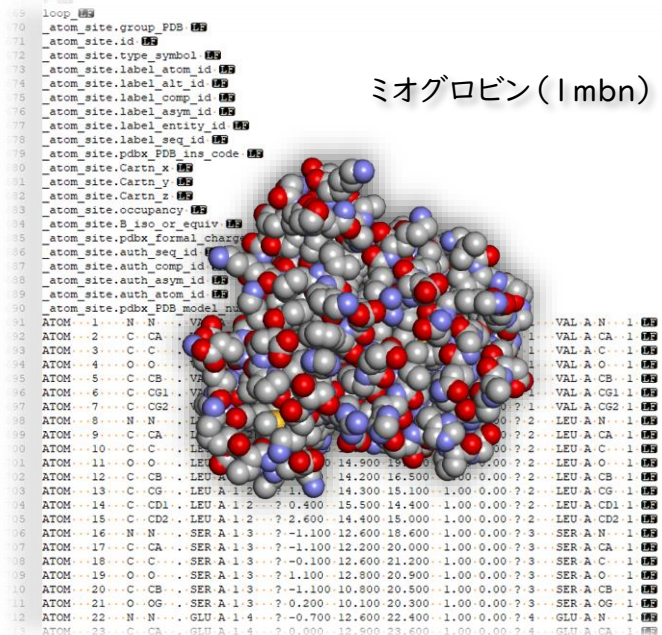
大阪大学蛋白質研究所 工藤 高裕



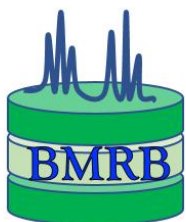
# 1. 蛋白質構造データバンク (PDB) とは

蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank、PDB)とは

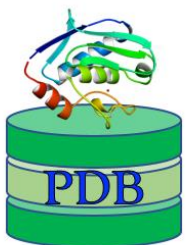
- 生体高分子の分子構造データを集めたデータアーカイブ。
- 1971年に発足して以来、50年以上にわたってサービスを提供。
- PDBはPDBを維持するための国際組織「国際蛋白質構造データバンク」(worldwide Protein Data Bank、wwPDB)の下、5つのメンバーが協力して運営している国際プロジェクト。
- 各メンバーの運営費用は各国の政府機関による研究費用でまかなわれている。



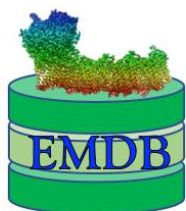
# 現在は3つのデータアーカイブを運営



NMR  
化学シフト



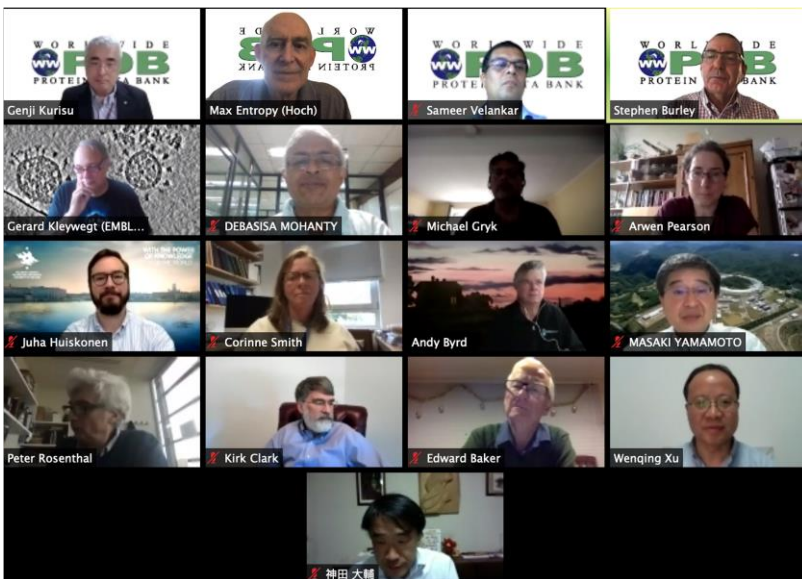
原子座標  
+ 構造因子



電子顕微鏡  
マップ

※  
BMRBとEMDBは  
「データアーカイブ」  
「運営メンバー」  
両方の名前になっている

# 毎年諮問委員会を開催



毎年構造解析・バイオ  
インフォマティクスの  
専門家を招いて諮問委  
員会を開催し運営方針  
を検討

# wwPDBメンバーの活動

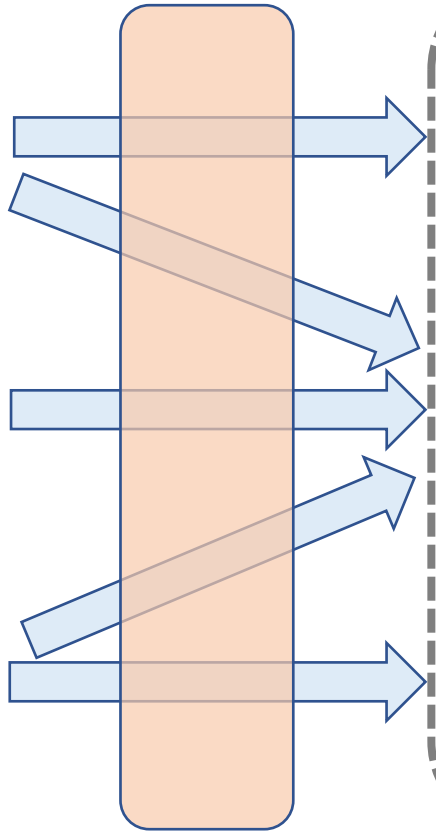


構造生物学

核磁気共鳴  
(NMR)

結晶解析

電子顕微鏡



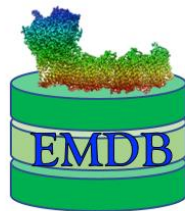
Data-in



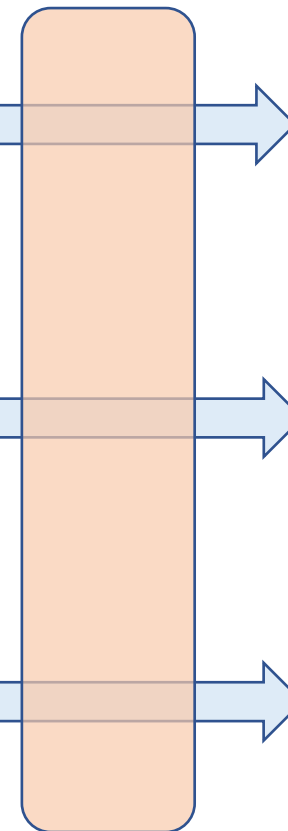
NMR  
化学シフト



原子座標  
+ 構造因子



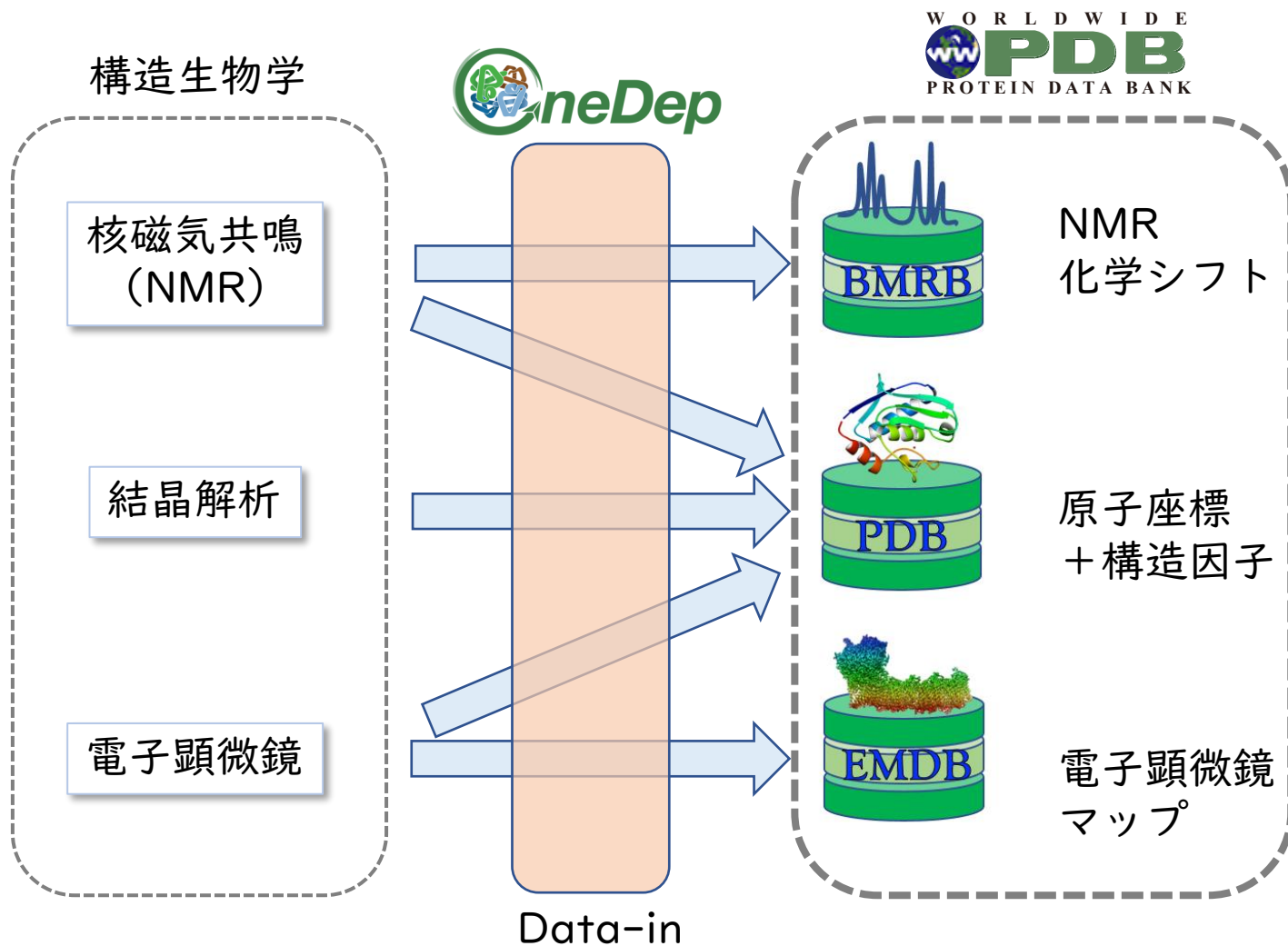
電子顕微鏡  
マップ



Data-out

- 創薬
- 生命現象のしくみ解明
- 新たな構造の解析や構造予測への活用

# Data-in : データの受け入れ

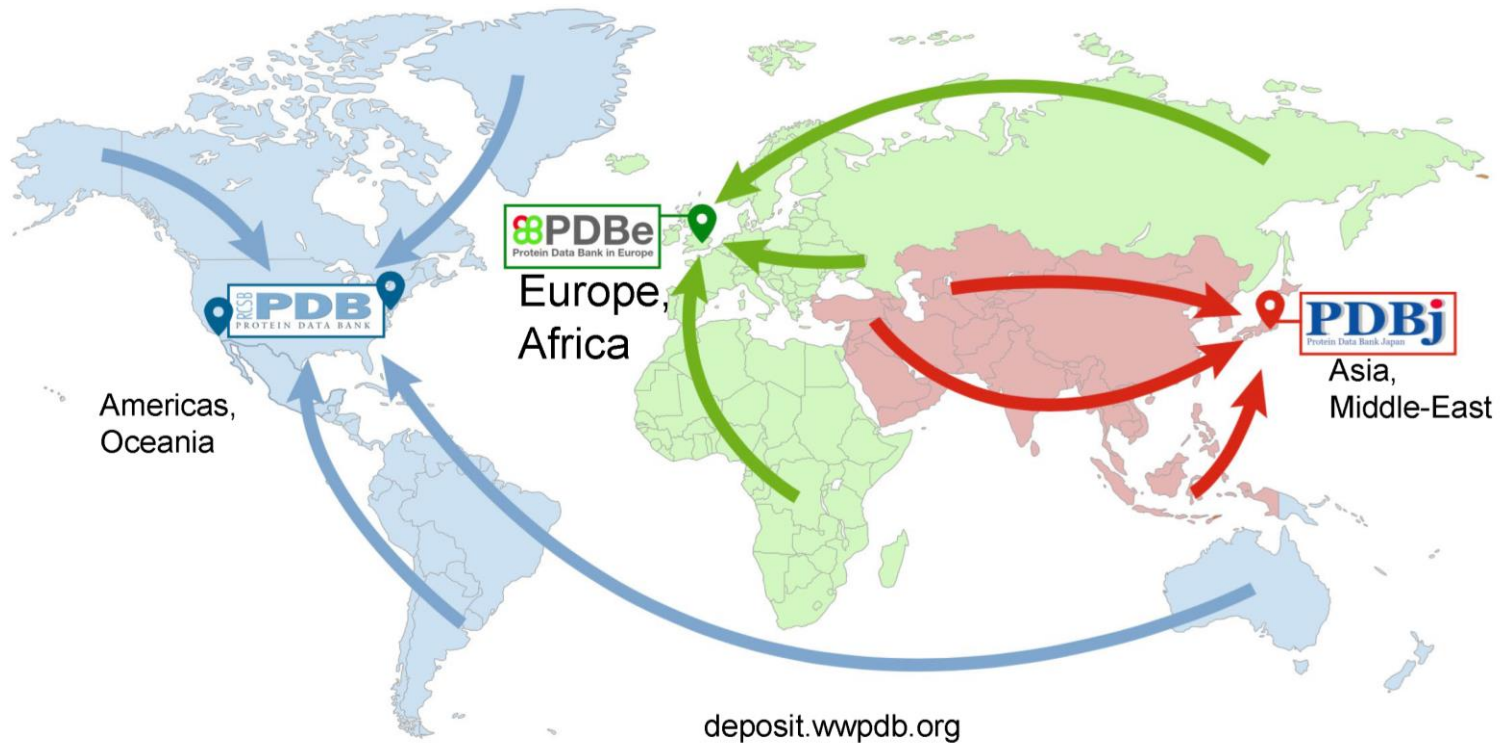


- 多くの論文雑誌で構造を  
発表するときPDBIDを  
記す必要があるため、事前  
にPDBへ登録する
- PDBへの登録には  
実験の根拠が必須

# Data-inは地域ごとに分担



共通のPDB登録  
プラットフォーム



# 登録データは検証の上受け入れ

新規データは非公開、公開日まで厳重に管理  
(入室管理された部屋で専門スタッフが処理)



電子錠付きの部屋

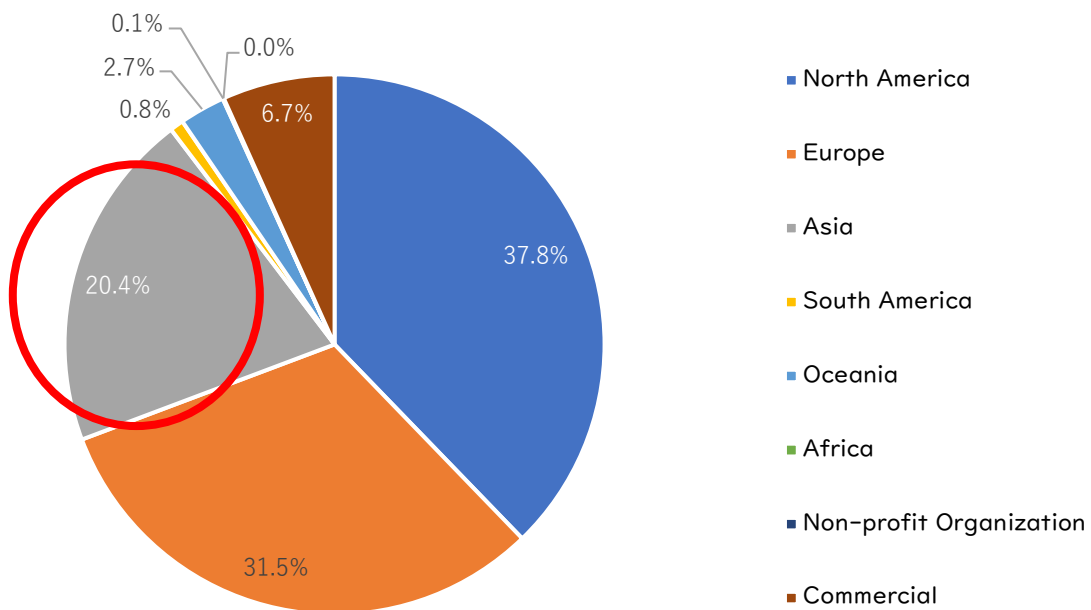


専門スタッフが登録・検証作業を実施

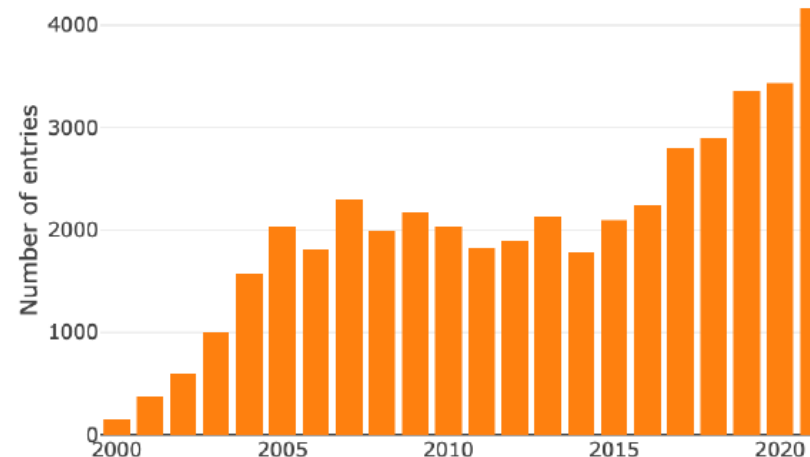


# 近年アジアからの登録データが増加

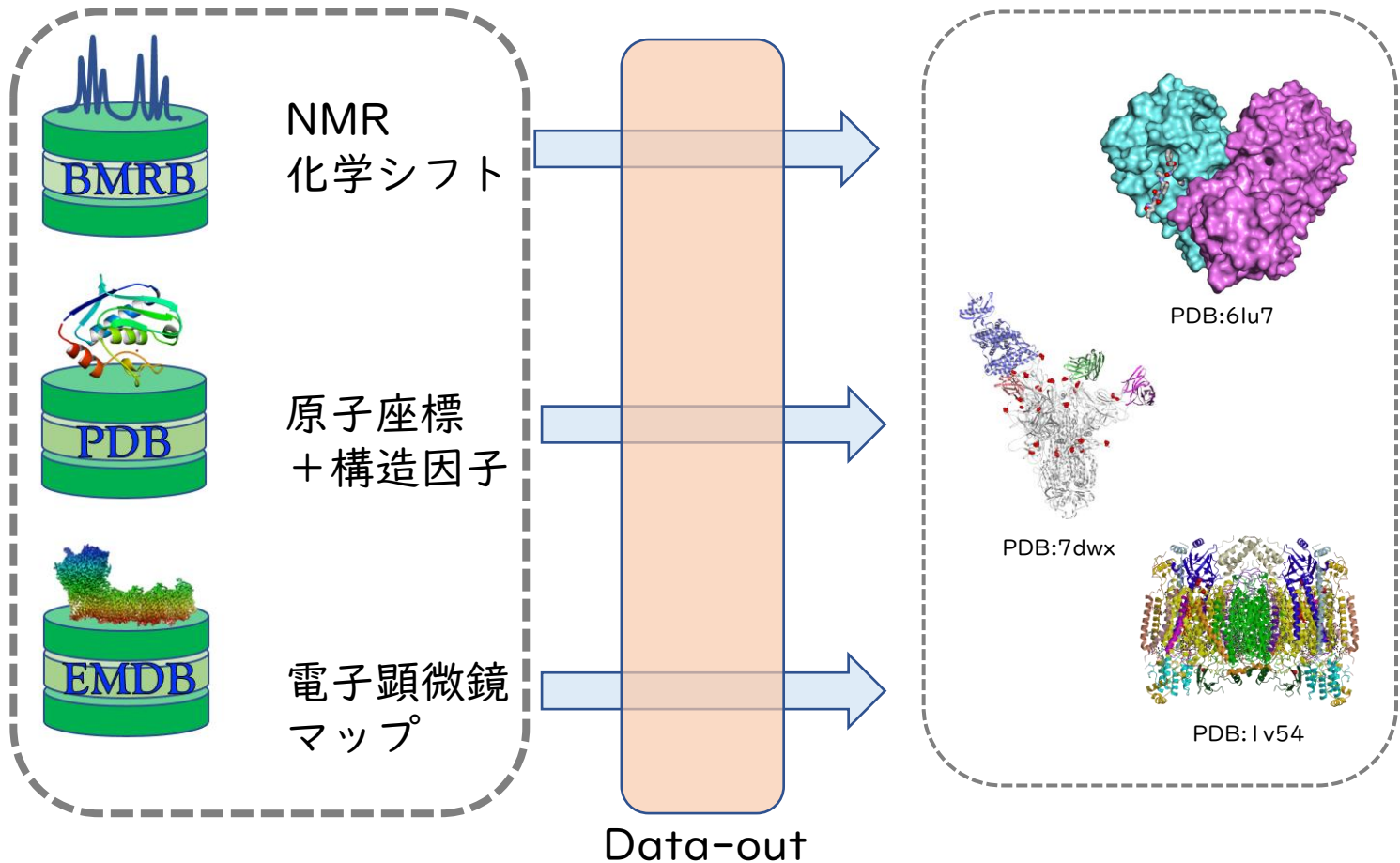
場所別PDB総登録数 (2022/10/6現在)



PDBjで処理したエントリー数の推移



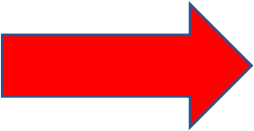
# Data-out : データの提供



# Data-out : データの提供

- 全拠点で同時公開 (毎週水曜 日本時間9:00)
- 利用は無償・登録不要 人類の財産
- 拠点ごとに独自のツール・サービスを提供

# Data-out : データの提供

かたち分かる  分子の機能を知る  
助けになる

- 創薬
- 生命現象のしくみ解明
- 新たな構造の解析や構造予測への活用

# AIがあればPDBはもう要らない？→No

PDBと構造予測は  
相互に補完し合う関係

