

大阪大学の蛋白質構造データベース、新型コロナウイルスの蛋白質構造情報を公開、中国語ページも

大阪大学蛋白質研究所の日本蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank Japan : PDBj、<https://pdbj.org>)では、アジアの代表機関として、新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)の新しく解析された蛋白質構造情報を蛋白質構造データベース(Protein Data Bank: PDB)に登録しました。

また、3月11日の定期データ更新に合わせて、新型コロナウイルス特集ページ(<https://pdbj.org/featured/covid-19>)を作成し、関連するPDBデータを研究者が利用しやすいように集約して公開します(図1)。特集ページには、毎週水曜日(日本時間 9:00am)に最新エントリーが追加されます。

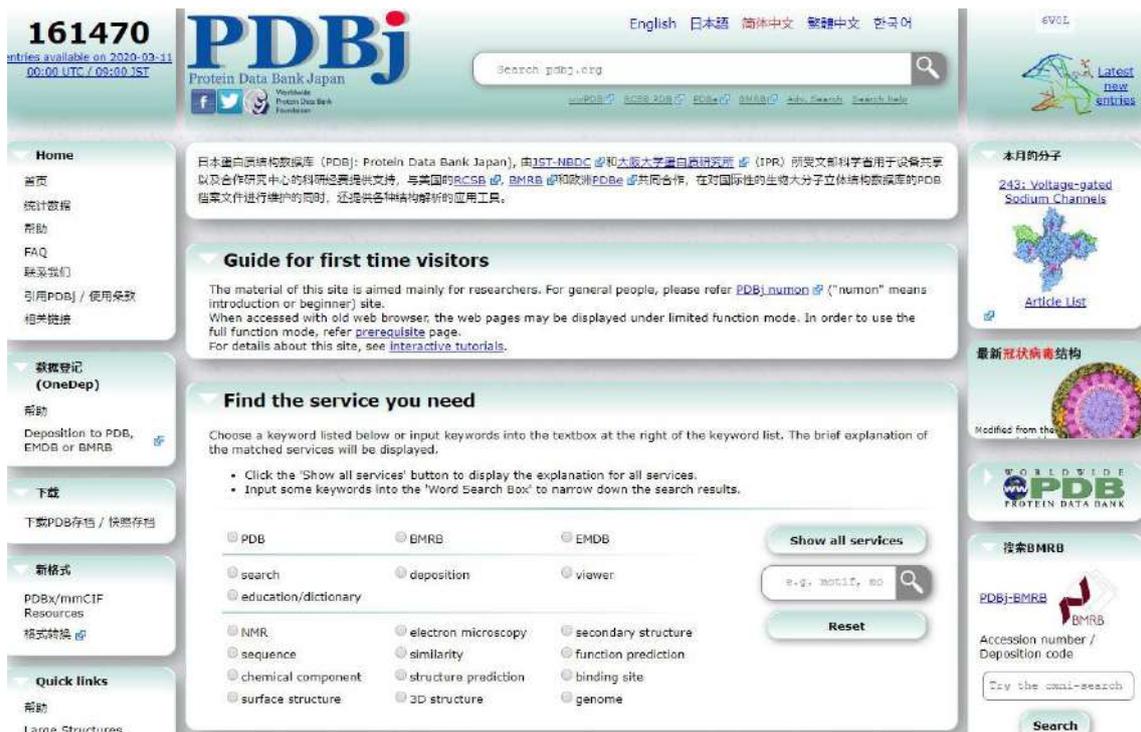


図1 PDBjの中国語ページ

SARS-CoV-2 に対する構造研究は、新型コロナウイルスの国際的な分類基準が確立する前からスタートしています。そこで、PDBj では、登録した研究者に対し個別に確認をとり、データ検証と編集・登録作業の過程で正確な情報を収集し、SARS-CoV-2 の蛋白質情報の精度を高め、信頼度の高いデータを登録しました。

PDBj が提供するデータベースには、SARS-CoV-2 の他にも類縁ウイルスに由来するタンパク質の構造情報が沢山収録されています(ウイルス、微生物、植物、動物がもつ蛋白質・核酸など総データ数 16 万件以上)。その中でよく似た構造を排し、今回の新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)に直接関係あるエントリーだけを厳密に抽出してデータ提供します。

研究の背景

蛋白質構造データベース(Protein Data Bank:PDB)は実験的に決定した生体高分子の 3 次元構造を保存する世界で唯一のデータベースです。毎日世界中で 200 万件以上がダウンロードされ、基礎研究から創薬などへの応用まで幅広い研究に活用されています。大阪大学蛋白質研究所の日本蛋白質構造データバンク(Protein Data Bank Japan: PDBj)を含む日米欧の世界 4 拠点が、国際蛋白質構造データバンク(worldwide Protein Data Bank:wwPDB)※4 という組合を組織して共同で登録・維持・管理を行っています。日本は wwPDB の設立メンバーであり、アジア・中東地区からのデータ処理・登録を分担して、全ての PDB データを大阪大学から世界に発信(<https://pdbj.org>)しています(図 2)。

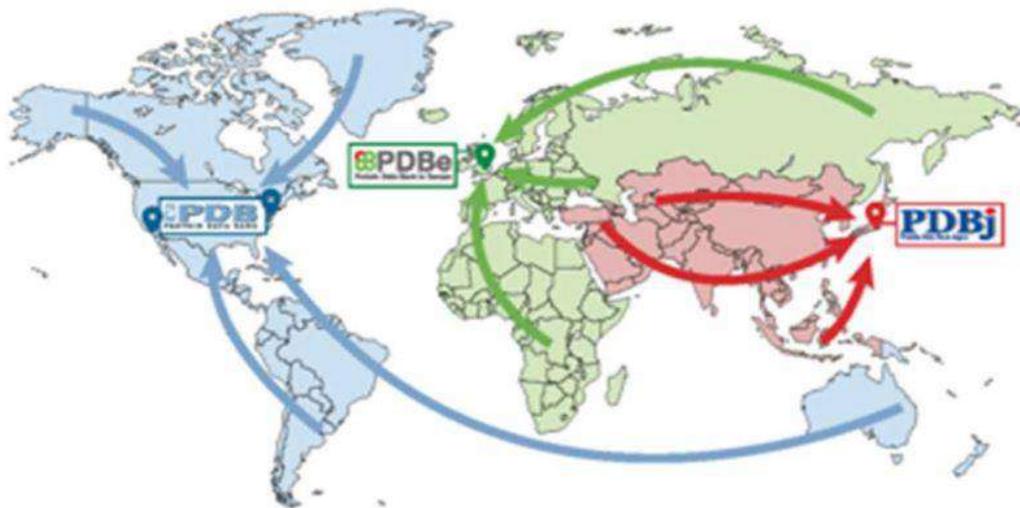


図 2.蛋白質構造データベースの登録地域分担を示す地図

米国はラトガース大学とカリフォルニア大学サンディエゴ校の共同研究チーム(RCSB PDB)、欧州はイギリスにある欧州生物情報科学研究所(EMBL-EBI)が拠点となっている。アジアは、大阪大学蛋白質研究所の日本蛋白質構造データバンク(PDBj)が 20 年に渡り登録拠点として活動している。

世界中の研究者が構造解析した蛋白質の構造情報は、必ず全て日米欧のいずれかのサイトで事前にデータベースに登録する約束になっています。通常、登録済み PDB データは、該

当の情報を含む研究が論文として発表されるまで非公開とされ、実験のオリジナリティーが担保される仕組みになっています。しかし、蛋白質の構造情報は、立体構造に基づいた創薬研究に積極的に活用される基盤情報であり、新型コロナウイルスの構造情報も、できるだけ早い構造データの蓄積と公開が期待されていました。

抗インフルエンザ薬として有名なザナミビル(商品名リレンザ)やオセルタミビル(商品名タミフル)は、PDB に登録されている立体構造を用いて開発されたものです(参照:<https://numon.pdbj.org/mom/113>)。ウイルスがもつ蛋白質の天然基質をまねて薬剤設計することで、創薬研究が加速された例として広く知られています。

研究の内容と成果

新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)の蛋白質構造情報の蓄積によって、新型コロナウイルスのより深い理解につながり、立体構造に基づいた創薬研究を加速する可能性があることは、抗インフルエンザ薬の開発例からも明らかです。日米欧の合意の下、我々は新型コロナウイルスの構造情報がデータベースに登録された場合、個別に登録者(研究者)と連絡を取り、論文発表を待たずに即時公開することを強く勧めることにしました(アジア・中東地区のデータ登録者には PDBj が連絡します)。

新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)は中国で発生したこともあり、1月26日に中国の研究者から最初の関連構造情報が PDBj に登録されました。SARS-CoV-2 が既知のコロナウイルスとよく似た遺伝子を持っていることに併せて、国際的な分類基準が決定される前に構造データが登録されたこともあり、厳密に SARSCoV-2 の情報だけを抽出することは専門家でも難しい状況でした。我々は、データ検証と編集・登録作業の過程で正確な情報を収集し、SARS-CoV-2 と類縁ウイルスを厳密に区別してデータを取り扱っています。そこで創薬研究の加速を支援する目的で、以降登録された新型コロナウイルス SARS-CoV-2 の構造情報 データのみを正確に集約して、日英中韓の各言語で以下の HP から発信することにしました。

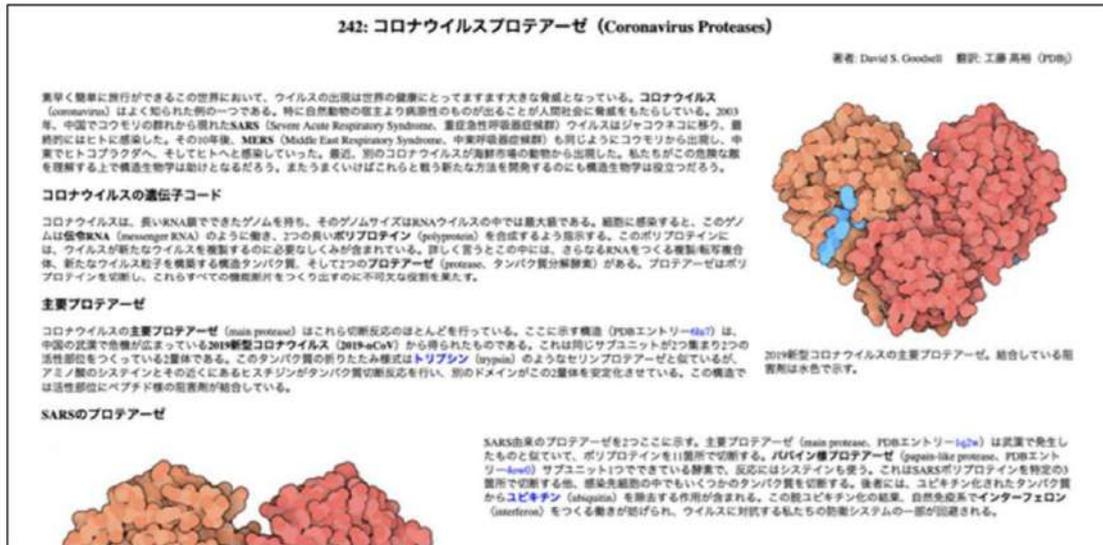


図 3.新型コロナウイルスのプロテアーゼ(蛋白質分解酵素)の役割と創薬対象としての意味を解説したページ (<https://numon.pdbj.org/mom/242>)

日本語発表原文 <https://research-er.jp/articles/view/87122>

文 JST 客観日本編集部