

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

Protein Data Bank Japan

蛋白質立体構造データベース高度化事業

ニュースレター Vol. 1

2002年 8月

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

<http://www.pdbj.org/>

and

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

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

蛋白質立体構造データベース高度化事業 ニュースレター (Vol. 1)

Protein Data Bank Japan (PDBj): <http://www.pdbj.org/>

1. はじめに

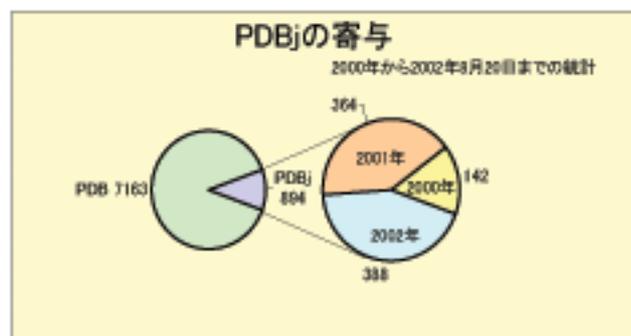
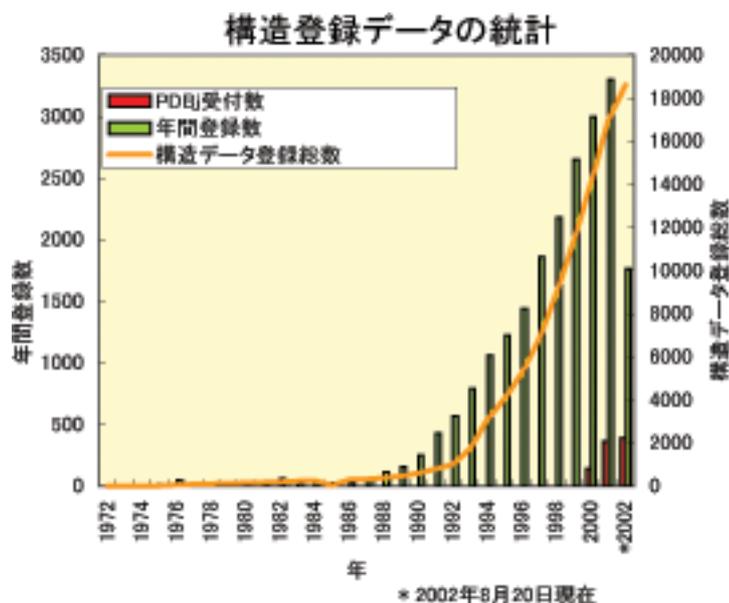
現在、国際的に構造ゲノム科学が注目されています。これは、あるプロテオームを構成する総ての蛋白質の立体構造を、高スループットで解明し、生化学的な反応経路の完全な理解を目指すものです。こうした研究は多くのデータを生み出すことが予想され、プロテイン データバンク (PDB: Protein Data Bank) は、そうした膨大な量の情報を管理し、配布するために存在します。

PDBに保存されている蛋白質や他の生体高分子の立体構造は生命科学分野の研究に欠かすことが出来ないものです。これらの生体高分子の構造を知るとは、蛋白質の働きを理解することにとっても役立ちます。この情報は、様々な病気の解明やまた、より効果的で副作用の少ない薬の開発を通して、製薬やバイオテクノロジー産業に大いに恩恵を与えるものと期待されます。

PDBは1971年に米国ブルックヘブン国立研究所で設立されました。その後PDBの運営、推進の全ての責務は1999年7月にRCSBへ移管されました。RCSB (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics: <http://www.rcsb.org/pdb/>) は、米国のラトガース大学と国立標準技術局 (NIST) とカリフォルニア大学のサンディエゴ校スーパーコンピュータセンター (SDSC) によって構成されています。

PDBはまた、欧州バイオインフォマティクス研究所 (EBI: <http://msd.ebi.ac.uk/>) とデータの登録業務、また試験段階ですが、データ変換辞書の開発に於いて協力関係にあります。

日本に於いては、大阪大学・蛋白質研究所がアジア・オセアニア地域の公式アーカイブとなり、RCSBと共同でデータベースの運営を行っています。2000年7月より、この地域の研究者から寄せられたデータの登録も始めました。同時に2000年より、科学技術振興事業団の支援を受けて、蛋白質立体構造データベースの高度化事業も進めています。蓄積されたデータは近年急速に増えているおり、現在、18000以上の構造が登録・公開されています。このうち、アメリカからが約50%、ヨーロッパからが約30%、そしてアジアからが約



2. PDBjにおけるデータ登録

PDBjでは、米国PDB運営グループのRCSBと協力し、2000年7月より、データ登録サーバ、ADITによる自動登録を受け付けております。(http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp)登録にあたっては、全ての処理をPDBjの専属スタッフが担当し、データの確認等、登録者との間で連絡をとりあいながら、正確で迅速な登録作業を進めております。



(左から) 五十嵐令子、見学有美子、楠木正巳、小佐田高史、佐伯忍

3. PDBjの研究活動

PDBjの主な役割は、新しく登録される構造データの処理といったデータベースの維持管理ですが、その他にも様々な研究活動も行っています。

3-1. PDBj-ML (PDBのXML化) の開発

PDBの蛋白質立体構造データは、いわゆる、PDBフォーマットに納められています。このフォーマットは何回かの見直しがされていますが、フォーマットとしての限界は広く感じられています。一方、HTMLの成功に続いて、XMLがコンピューター間でデータをやり取りする上で、最も魅力的な方法の一つと見なされています。そこで、私たちはPDBのXMLフォーマットであるPDBj-MLを開発し、既に全てのファイルはそのフォーマットに変換しています。これは他の生物学系データベースとのデータの互換にも役立つと思われます。

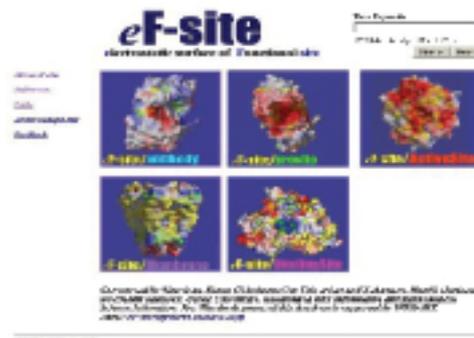


3-2. 構造・機能データベースの開発

蛋白質の分子機能に関する情報は現在のPDBにはほんの限られたものしか入っていません。一方、蛋白質の構造を報告する論文には、通常、詳細な機能情報が書かれています。私たちはそのような情報の抽出を試み、構造データを付加していこうと考えています。人手による入力に加え、自動化の可能性も追及しており、最初のステップとしてPDBファイル内のREMARK行から自動的に必要な情報を抽出するソフトウェアを開発しています。

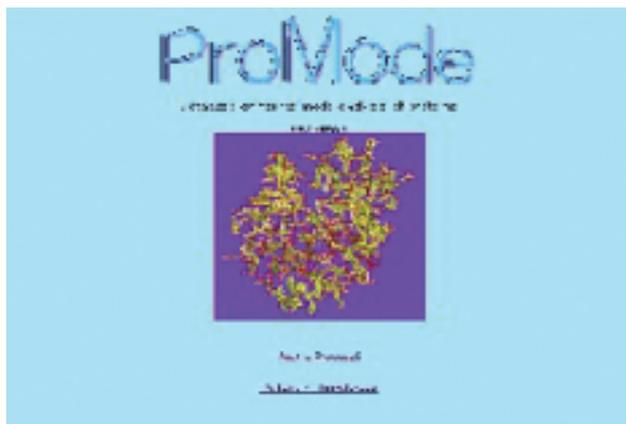
3-3. 蛋白質表面形状のデータベース (eF-Site)

蛋白質の相互作用の多くはその表面で行われています。したがって、形状や静電ポテンシャルといった蛋白質表面の特性には、大きな関心が持たれています。eF-siteはそのような情報のデータベースであり、蛋白質研究所で開発されています (http://www.pdbj.org/eF-site/)。そして現在、データベース高度化プロジェクトの一部として色々な改良が施されています。表面データをブラウザで見たりダウンロードしたりして、他のタンパク質の表面と比較することができます。これはまだ知られていない機能を持つ蛋白質の機能同定に役立つと期待されています。



3-4. 蛋白質ダイナミクス・データベース (ProMode)

蛋白質の分子機能を知る上で、その動的特徴（ダイナミクス）を考慮することはとても重要なことです。蛋白質のダイナミクスをシミュレートする様々な方法がありますが、そうした計算は莫大な計算機資源を要します。ダイナミクスのデータベースは、十分な計算機資源を持たない多くの研究者にも役に立つと期待されます。データベース、ProModeでは、基準振動解析という手法を用い、公開用のデータを随時追加しています。



3-5. 全自動分子置換法解析システム (MrPDB)

新しい蛋白質結晶構造を解明する時、類似の蛋白質の構造が知られていれば、分子置換法によって、その構造決定を加速することが出来ます。多くの蛋白質の立体構造が集められている現状から、この方法がますます多くの場合に適用されるようになるのは明らかです。この自動分子置換法解析システム (MrPDB) は蛋白質研究所で開発されています。



3-6. NMR実験データ・データベース (BioMagResBank)

米国Winscon大学ではNMR（核磁気共鳴）の実験データのデータベースを開発しています。PDBjは日本でのミラーサイト業務を始めました (<http://bmr.b.protein.osaka-u.ac.jp/>)。今後、データの登録・編集も行う予定です。



4. PDBj研究開発担当者

- ・ 統括責任者： 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所・教授)
- ・ PDBデータベース管理運営グループ：
 - 楠木 正己 (大阪大学蛋白質研究所・助教授)
 - 小佐田 高史 (大阪大学蛋白質研究所・技官)
 - 五十嵐 令子 (科学技術振興事業団・研究補助員)
 - 見学 有美子 (科学技術振興事業団・研究補助員)
 - 佐伯 忍 (科学技術振興事業団・研究補助員)
- ・ 新規蛋白質立体構造データベース構築グループ：
 - 伊藤 暢聡 (科学技術振興事業団・研究員)
 - 小林 香織 (科学技術振興事業団・技術員)
 - 坂本 久 (科学技術振興事業団・技術員)
 - 清水 有希子 (科学技術振興事業団・研究補助員)
 - 高橋 亜紀 (科学技術振興事業団・研究補助員)
- ・ 解析システム開発と二次データベース開発グループ：
 - 木下 賢吾 (横浜市立大学大学院総合理学研究科・助手)
 - 輪湖 博 (早稲田大学社会科学部・教授)
 - 大川 剛直 (大阪大学大学院情報科学研究科・助教授)
 - 藤 博幸 (技術研究組合生物分子工学研究所・部長)
- ・ BMRBデータベース管理運営グループ：
 - 阿久津 秀雄 (大阪大学蛋白質研究所・教授)
 - 中谷 英一 (科学技術振興事業団・技術員)
- ・ 研究チーム事務員：
 - 鎌田 知佐 (科学技術振興事業団・事務員)
- ・ 連絡先： 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2
大阪大学蛋白質研究所・附属プロテオミクス総合研究センター内
PDBj事務局：TEL (06)6879-4311, FAX (06)6879-8636
PDBデータベース登録業務：TEL (06)6879-8638, FAX (06)6879-8636
E-mail: pdbj@protein.osaka-u.ac.jp

PDBj

連絡先：〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2

大阪大学蛋白質研究所・附属プロテオミクス総合研究センター内

PDBj事務局：TEL (06)6879-4311, FAX (06)6879-8636

PDBデータベース登録業務：TEL (06)6879-8638, FAX (06)6879-8636

E-mail: pdbj@protein.osaka-u.ac.jp

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj

PDBj