October 13, 2012 Hearton Hall, Osaka

# wwPDB and its Impact to Science and Society

## Haruki Nakamura







Worldwide Protein Data Bank Foundation

## **Institute for Protein Research**

http://pdbj.org/
http://wwpdb.org/



# Contents

- What is Protein?
- Structure and Function of Proteins
- Protein Structure Databank: PDB
- Big data: Data intensive Science
- Application to Drug Discovery
- IPR Osaka University and PDBj
- Activity and Usage of PDBj



# What is Protein ?

**Protein:** Originated from a Greek word *προτειω*(*prima materia*)

Named by a Swedish Chemist, J. J. Berzelius in 1838.







## What is Protein ? Protein: Molecular chain composed of 20 different amino acids, based on the genome information (amino acid sequence)





# **Structure and Function of Proteins**

### Each amino acid sequence produces unique tertiary structure



# Proteins have unique and specific functions



# Antibody

Cyt

Hormone

Receptor



## Enzyme

# Photosynthetic Reaction Center

**Intracellular region** 

Extracellular region



# **Structure and Function of Proteins**



Specific molecular recognition of proteins

Key and Lock model

Complex of Trypsin (Green) and its inhibitor protein (Orange) (PDB-ID: 2ptc)



## Structure and Function of Proteins Protein structure is flexible

- A protein changes the structure upon binding to its partner
- Structural change is dynamic
- Protein functions with its structural change







# **Structure and Function of Proteins**



## Molecular model : Checkpoint kinase-I (2cgu)



Designed by Prof. Masaru Kawakami (Japan Advanced Institute of Science and Technology)



- International Database collecting all the structure information of biological macromolecules: Data Bank
- Information is used publicly and freely by researchers, teachers, students, and industries
- Funded by research grants by USA, EU and Japan



Used by (380 million downloads in 2011)



## • X-ray Crystallography

### SPring-8 synchrotron





Crystal  $\rightarrow$  X-ray diffraction  $\rightarrow$  Electron density map  $\rightarrow$  Atomic model

## Nuclear Magnetic Resonance (NMR)





950 MHz NMR spectrometer with superconducting magnet

Cryo-Electron Microscopy



## **PDB History**

**1960s:** Protein crystallography started Myoglobin, Hemoglobin,

Lysozyme, etc

1970s : PDB started with 7 data

(October, 1971) at Brookhaven National Laboratory, USA

IPR-Osaka Univ. determined

cytochrome *c* and deposited it to PDB Magnetic tapes were distributed



Max Perutz & John Kendrew (Nobel Prize in Chemistry, 1962)

### CRYSTALLOGRAPHY

### Protein Data Bank

A repository system for protein crystallographic data will be operated jointly by the Crystallographic Data Centre, Cambridge, and the Brookhaven National Laboratory. The system will be responsible for storing atomic coordinates, structure factors and electron density maps and will make these data available on request. Distribution will be on magnetic tape in machine-readable form whenever possible. There will be no charge for the service other than handling costs. Files will be updated as new material is received. The total holding will be



**1980s :** Rapid data increase (IUCr recommendation

**"Data deposition to PDB is mandatory for** 

paper submission to journals")

**1990s : RCSB-PDB started in USA** 

2000s : Foundation of wwPDB (worldwide PDB) Further many data by structural genomics

2010s : New methodologies are applied More than 85,000 data

Towards "Big Data"







## The worldwide Protein Data Bank

www.wwPDB.org • info@wwPDB.org



SPDB PROTEIN DATA BANK

BMRB

BioMagResBank www.bmrb.wisc.edu

Research Collaboratory for Structural Bioinformatics www.pdb.org PDBC PROTEIN DATA BANK EUROPE

Protein Data Bank in Europe pdbe.org



Protein Data Bank Japan www.pdbj.org

## wwPDB Foundation (Founded in February, 2010)



Worldwide Protein Data Bank Foundation

## wwPDB Foundation

Helen Berman	President
Stephen Burley	Chairman of the Board
Gerard Kleywegt	Vice President
John Markley	Vice President
Haruki Nakamura	Vice President
Martha Quesada	Executive Director
	Secretary
	Treasurer



# Big data: Data intensive Science A new paradigm in science

**Experiment**, Theory

Sir Isaac Newton (1642-1727)

# Third Paradigm:

**Fourth Paradigm**: Data-intensive Science





## **DIKW** pyramid

(J. Rowley: The wisdom hierarchy, 2007)



# **Big data: Data intensive Science** "Semantic Web" for construction of DIKW pyramid

## Linked Data: Automatically link distributed data on internet http://linkeddata.org





## Application to Drug Discovery (SBDD: Structure Based Drug Design SGDD: Structure Guided Drug Development)

Viracept: Agron, Agenerase: Vertex & USA-Kissei

AIDS Target: HIV-1 protease

**Gleevec** : Novartis

Chronic Myeloid Leukemia Target: BCR-ABL, Tyr kinase

Iressa : AstraZeneca

Lung cancer Target: EGFR, Tyr kinase

Tamiflu: F. Hoffmann-La Roche, Gilead Sciences

Influenza virus Target:glycosidase





# **IPR Osaka University and PDBj**

**IPR: Institute for Protein Research, Osaka University** 

- in 1958, founded by Director Shiro Akabori as an inter-university joint-use facility
- in 1972, the first crystal structure of a protein (1cyc) was determined by Masao Kakudo,
   6<sup>th</sup> Director
- in 2010, assigned as one of the Joint Usage/ Centers by MEXT, Japanese Government

20 Iaboratories, covering X-ray crystallography, NMR, Bioinformatics, Biochemistry, and Molecular biology



1<sup>st</sup> Director Shiro Akabori



6<sup>th</sup> Director Masao Kakudo



### **IPR Osaka University and PDBj Protein Data Bank** Since 2001, PDBj has Japan worked with the 日本蛋白質構造データバンク support from JST-BIRD and JST-NBDC http://pdbj.org/

English implified (	binese traditional Chinese Kerean	in a setting	FAO #89 10 10+			
English several simplified C			1102 0300/1247/2			
トッフペーシ	ロキ編ロ戸物地フーブンンプロロウトIntellent Data balin Saparula, Sol Fibble CARの大手の支援されて、水晶化CAS, Ball CSS, Ball					
データ登録 >>	デート 予告 第一日 第一日 第一日 第一日 第一日 第一日 第一日 第一日	CO CARD 9 DECORCI AN COMPUTY 70 EARING COSTAL 9 0	on 12 Sep. 2012 00:00(UTC) / 09:00(JST)			
ADIT: PDB Deposition	7 724					
ADIT-NMR	データ登録のご案内 >>					
検索 >>			PDB			
Search PDB (PDBj Mine)	DDRAMA AD toron	MADE - DEM ADUN	PROTEIN DATA BANE			
PDB/RDF, chem_comp/RDF	PDDD ## ITI TOTO	MMRT-9924 FFINK	Ala			
Latest Release Search			ROBRADURB			
Sequence-Navigator	検索		eProts			
Structure-Navigator						
SeSAW	poptets Mind	and the second se	Protein Structures			
Ligand Binding Sites (GIRAF)	PUDIKA IVIIILE	NMRデータ検索	-14			
EM Navigator	Mine日本語ページについて	BMR8				
Search NMR Data (BMRB)	constation of the					
Status Search	POBIOBCUT COCK -	Accession number	Protein			
サービス&ソフトウェア>>	19.00	U Deposition code	Globe			
JV: Graphic Viewer	詳細冬件錄壶 >>	Go	1			
万見 (Yorodumi)						
Protein Globe			OBLIG			
ASH	最新情報		UDULO			
MAFFTash	2012/9/13					
SEALA	2012年9月23日(日)に、第50回日本生物物理学会年会にて、ランチョンセミ	ナーを開催いたします。(詳細)	Tanpaku.org			
Structure Prediction >>	2012/8/16		H. S. March Colding State			
CRNPRED	2012年10月13日(十)に、大阪福田にてwwPDB Outreach議演会が開催さ	れます。(詳細))	NBDC			
Spanner	2012/8/10		Network Bite (ante Security Carter			
SFAS	2012年9月9日/大)に行われましたパノオノンロュウモノカス建築合における	2.発生の空光現新しています。ご園味のある方は見北ご覧/ださ				
二次データペース >>	2012年0月3日にハイビビリルイロングイクインノオイナイン人構成会にのける	かたたい 3月、579年かり くたっか きっこう 新水水のの クソリウ 返注に 第7759				
eF-site/eF-seek/eF-surf	2012/6/26					
eProtS	2012年6月20日(水)に行われました第12回職白質科学会年会におけるラ	ンチョンヤミナーの発表内容を掲載しています。ご興味のある方				
ProMode Elastic	は是非ご覧ください。					
Molecule of the Month	2012/6/5					
ダウンロード>>	今月の分子の記事数が150件に達しました。今月の記事「スライディング	ックランブ」(Sliding Clamp)が150件目の記事となりました。(詳				
PDB Archive/Snapshot Archive	編)					
115 July	2012/5/1					

PDBj top pages in Japanese, English, Chinese, and Korean



PDBj / PDBj-BMRB staffs (April 2012)



# Activity and Usage of PDBj

- "Data-in" activity, common in all the wwPDB members with high quality control
- "Data-out" services, characteristic at each wwPDB member site except common ftp-site data. Service tools and derived databases are available



# Activity and Usage of PDBj





# Activity and Usage of PDBj http://pdbj.org/

1				Internet in the second					
<u>F974-7</u>	国本語自己構造データパラクトでも、Fictern bala bala bala bala spanka、Son Hebber August (1995)、Fictern bala bala bala spanka、Son Hebber August (1995)、Fictern bala bala bala bala spanka、Son Hebber August (1995)、Fictern bala bala bala bala spanka、Son Hebber August (1995)、Fictern bala bala bala bala bala spanka (1995)	80850	トッフページ	日本張白質構造データパンク(PDB): Protein Data Bank Japan)は、JST-BIRD 高分子の立体構造データベースを回答的に統一化されたアーカイブとして運営すると			とけ、米国RCSS、SMRS、および欧州FDSEと協力して、生い な解析ツールを提供しております。		
テータ登録>>	ツールを提供しております。	on 18 Apr. 2012	データ登録 >>						
ADIT: PDB Deposition	sition データ登録		ADIT: PDB Deposition	Mine		検索結果ページ	日本語ページについて FDBi Mine/Cつい1		
ADIT-NMR	and a consider		ADIT-NMR	mine			更新情報		
検索 >>	データ登録のこ案内 >>	<b>CPDB</b>	論案 >>						
Search PDB (Mine/xPSSS)		PROTEIN DATA BANE	Search PDR (Mine/vPSSS)			(PDB-IDをクリックすると、評事情量をご覧い	っただけます)		
PDB/RDF, chem_comp/RDF	PDB登録 留計 MMRデータ登録 留料 WR	N.	Latest Released Search						
Latest Release Search		annaansan	Casuanan Naviator			1 - 16/ 148			
Sequence-Navigator		eProtS	Stephenoe-Wavigator						
Structure-Navigator	検索	Encyclopedia of	Structure-Ivavigator	123456	10 22~				
SeSAW	1 (1 101)	Protein souccores	Jesavy						
Ligand Binding Sites (GIRAF)	PDB検索 Mine NMRデータ検索 J		Ligand Binding Sites (GIRAP)	クェリ: トリプトフ	アン合成解素	PDB ID or Keyword 🗙 表示順: 一致件数	M		
EM Navigator	Mine日本語ページについて		EM Navigator	実換クエリ:(try	ptophan synthase)	l (tryptophan synthetase)			
Status Search		Protein	Search NMR Data (BMRB)						
	PDB D±t,Lt+-7-F -	Globe	Status Searon	リセット 横素					
J-EX877FJI7>>	ドリフトファン合成結束 使素  © Deposition code		サービス&ソフトウェア >>						
JV: Graphic Viewer	洋細名供換表 >> [5]		N: Graphic Viewer	Zolb	Q728	TRYPTOPHAN SYNTHASE AI PHA CHAIN			
力見 (Yorodumi)		OPPCIO	Protein Globe		CHAIN (E.C.4.2.1.	CHAIN (E.C.4.2.1.20)	SASE ALFRA CRAIN (E.C.4.2.1.20), TRIFICFRAN STNIRASE BEIA		
Protein Globe		UBLLS)	ASH		タイトル	TRYPTOPHAN SYNTHASE IN COMPLEX	WITH (NAPHTHALENE-2"-SULFONYL)-2-AMINO-1-		
MAEETash	最新貨幣	payment cannot be been in	MAFFTash	St. al		ETHYLPHOSPHATE (F19)			
SEALA	2012/4/18	Tanpaku.org	Structure Prediction >>	14550	32	: Ngo, H., Harris, R., Kimmich, N., Casino, I Wavand M. Schlichting J. Dung M.E.	P., Niks, D., Blumenstein, L., Barends, T.R., Kulik, V.		
Structure Prediction >>	2012年6月20日(水)に、第12回蛋白質科学会年会にて、ランチョンセミナーを開催いたします。(詳細)	Real Processing and the second	CRNPRED		主要手法	X-RAY DIFFRACTION			
CRNPRED	2012/4/16	NBDC	Spanner		29 B	: 2008-04-27			
Soapper	2012年 4月 30日をもちまして、xPSSSサービスを終了させていただきます。それに伴いSOAPサービスも終了となりますが、	Reinw EnzemeinerGenet	SFAS	ダウンロード	公開日	: 2007-08-12			
SFAS	今後は、PDBj Mine の RESTサービスをご利用ください。								
	2012/3/26		二次データペース >>	2olk	分子名称	: TRYPTOPHAN SYNTHASE ALPHA CHAIN	(E.C.4.2.1.20), TRYPTOPHAN SYNTHASE BETA		
	jVの最新版(jV4.2)がリリースされました。eF-siteで配布されるPyMOL用ポリゴンファイル(CGOファイル)の読み込み機能		eF-site/eF-seek/eF-surf			CHAIN (E.C.4.2.1.20)			
eF-site/eF-seek/eF-suff	が加わり、コマンド「load polygon_cgo」が追加されました。詳細はリリースノートをご覧ください。		eProtS	the second	タイトル	TRYPTOPHAN SYNTHASE IN COMPLEX	WITH D-GLYCERALDEHYDE 3-PHOSPHATE (G3P)		
Protos	2012/3/16		ProMode	- Frith	-2-6	Weyand, M., Schlichting, I., Dunn, M.F.,	P., Niks, D., blumenstein, L., barenos, T.R., Kulik, V.		
ProMode Oligomer	PDBで公開済みのエントリー数が、8万件を超えました。また、PDB40シンボジウムの報告書が掲載されました。(詳細)		Molecule of the Month	. Belo	实歌手法	X-RAY DIFFRACTION			
Molecule of the Month	2012/3/7		ダウンロード>>		登集日	: 2008-04-27			
ダウンロード >>	EMデータバンクがPDBアーカイブに追加されました		PDB Archive/Snapshot Archive	ダウンロード	公員日	: 2007-08-12			
PDB Archive/Snapshot Archive	2012年3月7日に、EMデータバンク(EMDB)がPDBアーカイブに追加されました。今後は PDBjのttpサイト(		11527						
· ····································	ttp://pdb.protein.osaka-u.ac.jp/pub/emdb/ かっお洗い見げます。(詳細)		33 5 m	Zoli	分子名称	:TRYPTOPHAN SYNTHASE ALPHA CHAIN	(E.C.4.2.1.20), TRYPTOPHAN SYNTHASE BETA		

**Input Keywords** 

→ Search Result page







http://pdbj.org/eprots/index\_ja.cgi

## Activity and Usage of PDBj eProtS: Compact articles for protein structures and functions both in Japanese and English



### タンパク質名

ミオグロビン

### 生物種

マッコウクジラ

### 生物学的役割

酸素がなくても生育できる生物もいれば、酸素がない中で起こる生命活動もある。嫌気性細菌や嫌気的代謝がその例である。しかしながら、大多数の生物にとっ て酸素は生命活動には必要不可欠な要素である。哺乳動物ではヘモグロビンが酸素を肺から末梢器官にまで運んでいる。しかし、時によっては酸素を畜積してお くことができなくてはならないこともある。たとえば、鯨のような海生哺乳類は一度水面に酸素補給に来るとその後は酸素補給なしで水中にもぐっていられる。この ような行動のために自然はミオグロビンという蛋白質を作り出したのである。ミオグロビンは主に筋肉組織に分布している。ミオグロビンはその構造が解かれた2番 目の蛋白質であり、そのときのミオグロビンはマッコウクジラの筋肉組織からとったものであった。ミオグロビンは単量体の単一ポリペプチド鎖でできた蛋白質で、ヘ モグロビンβサブユニットに非常に似ている。ミオグロビンはヘモグロビンと同じように酸素を結合する。中央に酸素を結合する鉄原子を持つプロトポルフィリン(ヘ ム)グループが分子にくっついている。ヘモグロビン内のヘムのように、ミオグロビンのヘムも一酸化炭素、二酸化炭素、シアン化物のような酸素以外の分子を結合 することができる。一酸化炭素やシアン化物への親和性は酸素への親和性よりも大きいので、これらによる酸素結合の阻害により死に至ることもある。

### 立体構造の特徴



ミオグロビンは円盤のような形をしている。その厚さは約20Å(1Åは100億分の1メートル)で直径は約35Åである。ヘムグループは2つのヘリックスでできている 表面ボケットの中に円盤の平面に対して約90°の角度で入り込んでいる。ヘモグロビンで酸素結合による効果として見られる現象がミオグロビンでは見られないも のもある。ミオグロビンは単量体であるので、酸素結合の際にサブユニット間での共同化がみられない。ヘモグロビンは四量体であり、おのおののサブユニットがヘ ムグループを持っているのでこういった共同化がみられる。ヘモグロビンでもミオグロビンでもいわゆる末端ヒスチジンと呼ばれるヒスチジン残基がヘムグループの 近くにある。しかしながら、象のミオグロビンではこのヒスチジンがグルタミンに置き換わっており、隣のロイシンがフェニルアラニンに置き換わっている (PDBjMine:1EMY)。そのように置き換わっているにも関わらず酸素結合特性は通常のミオグロビンと非常に似ている。



Worldwide Protein Data Bank Foundation

S

http://pdbj.org/mom/

## Activity and Usage of PDBj MoM: Monthly articles by Dr. David S. Goodsell, translated into Japanese by PDBj staff

	今月の分子(Molecule of the Month)
このサイトは 造データバンク	RCSBの David S. Goodsell博士による「Molecule of the Month」を日本語に訳したものです。社会で話題となっている内容に関わる分子を蛋白質構 「PDB)から選び、機能と構造に関して解説しています。転載・引用については利用規約をご覧下さい。
ja:日本語	鴉駅版(PDBj) en:英文オリジナル版(RCSB)
一覧:公開	の新しい順 アルファベット順 五十音順 カテゴリ別
2012 2011	2010 2009 2008 2007 2006 2005 2004 2003 2002 2001 2000
	154 [ja en]:2012/10:クエン酸回路(Citric Acid Cycle)
	153 [ja en]:2012/09:ビルビン酸脱水素酵素複合体(Pyruvate Dehydrogenase Complex)
	152 [ja   en]:2012/08:環状AMP依存性蛋白質リン酸化酵素(cAMP-dependent Protein Kinase、PKA)
2012	151 [ja en] :2012/07:ヒポキサンチン-グアニン ホスホリボシル 基転移酵素 (Hypoxanthine-guanine phosphoribosyltransferase、HGPRT)
a 47 8 99	150 [ja en] :2012/06:スライディングクランプ(Sliding Clamps)
	149 [ja en] :2012/05:レブチン(Leptin)
& G.S.	148 [ja   en ] :2012/04:Ras蛋白質(Ras Protein)
	147 [ja en]:2012/03:ロドプシン(Rhodopsin)
	146 [ja en]:2012/02:アミノグリコシド系抗生物質(Aminoglycoside Antibiotics、アミノ配糖体系抗生物質)
	145 [jalen]:2012/01:伝令RNAのキャップ形成(Messenger RNA Capping)
	144 [ja en]:2011/12:複合体I(Complex I、NADH:キノン酸化還元酵素)
	143 [ja   en ] :2011/11:Toll様受容体(Toll-like Receptors)
	142 [ja en]:2011/10:PDBの先駆者たち(PDB Pioneers)
	141 [ja en]:2011/09:O-GlcNAc転移酵素(O-GlcNAc Transferase、O結合型β-N-アセチルグルコサミン転移酵素)
2011	140 [ja en]:2011/08:ロンボイドブロテアーゼGlpG(Rhomboid Protease GlpG)
10	139 [ja]en]:2011/07:DNAメチルトランスフェラーゼ(DNA Methyltransferase、DNAメチル基転移酵素)
Contraction of the	138 [ja en]:2011/06:グルカン分解酵素(Glucansucrase)
	137 [ja en]:2011/05:シトクロム bc1(Cytochrome bc1)
	136 [ja en]:2011/04:ナノボディ(Nanobodies、単一ドメイン抗体)
	135 [ja en]:2011/03:インテグラーゼ(Integrase)
	134 [ja en]:2011/02:インテグリン(Integrin)
	133 [ja en]:2011/01:一酸化窒素合成酵素(Nitric Oxide Synthase、NO合成酵素)

### 今月の分子(Molecule of the Month)

このページはRCSBの David S. Goodsell博士による「Molecule of the Month」を日本語に訳したものです。転載・引用については利用規約をご覧下さい。 「今月の分子」一覧に戻る / この記事のRCSBオリジナルサイト(英語)を見る

2012 / 10: No. 154 クエン酸回路(Citric Acid Cycle)

クエン酸回路(citric acid cycle)はクレブス回路(Krebs cycle)、トリカル ボン酸回路(TriCarboxylic Acid cycle、TCAサイクル)とも呼ばれている反応 経路群で、細胞代謝の中心的存在であり、エネルギー産生と生合成の両過 程において主たる役割を果たしている。この回路で解糖系酵素(glycolytic enzyme)から始まった糖分解作業は終わり、この過程からATPをつくる燃料 が供給される。また生合成反応においても中心的な存在となっており、アミノ 酸などの分子を作るのに使われる中間体を供給している。クエン酸回路を司 る酵素は、酸素を使う全ての細胞だけでなく、酸素を使わない細胞の一部で もみられる。ここには何種類かの生物から得られた事例を示す。

#### 8つの反応

クエン酸回路を構成する8つの反応では小さな分子「オキサロ酢酸」 (oxaloacetate)が触媒として用いられる。回路は、このオキサロ酢酸にアセ チル基(acetyl group)が付加されて始まる。次に8段階かけてアセチル基が 完全に分解されてオキサロ酢酸が再び得られる。この分子が次のサイクルに 使われる分子になる。だが、生物学の話題展開としてよくあるように、実際は こんなに単純なものではない。ご想像の通り、酵素はオキサロ酢酸を便利な 輸送体として利用し、アセチル基が持つ2つの炭素原子を取り出すことができ るだけである。しかしこれら分子中の特定炭素原子を念入りに標識することに より、炭素原子はサイクルの度に入れ替わっていることが分かった。実は、各 サイクルで二酸化炭素(carbon dioxide)として放出される2つの炭素原子 は、アセチル基由来のものではなく、元々オキサロ酢酸の一部であったもの だったのだ。そして、回路の最後では、元々アセチル基の炭素であったもの が混ぜ込まれてオキサロ酢酸が再生成されるのだ。



# Acknowledgements

### PDBj (Protein Data Bank Japan) staffs

### Group for PDB Database Curation

- Nakagawa, Atsushi, Ph. D. (Group Leader, Prof., IPR, Osaka Univ.)
- Matsuda, Makoto (IPR, Osaka Univ.)
- Igarashi, Reiko (IPR, Osaka Univ.)
- Kengaku, Yumiko (IPR, Osaka Univ.)
- Cho, Hasumi (IPR, Osaka Univ.)
- Ikegawa, Yasuyo (IPR, Osaka Univ.)
- Sato, Junko (IPR, Osaka Univ.)

### Group for Development of new tools and services

- Kinjo, Akira, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Iwasaki, Kenji, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Suzuki, Hirofumi, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Yamashita, Reiko (IPR, Osaka Univ.)
- Kudou, Takahiro (IPR, Osaka Univ.)
- Nishikawa, Ken, Ph. D. (Guest Prof., IPR, Osaka Univ.)
- Bekker, Gert-Jan (IPR, Osaka Univ.)

### Group for BMRB

- Fujiwara, Toshimichi, Ph. D. (Group Leader, Prof. Osaka Univ.)
- Akutsu, Hideo, Ph. D. (Prof., IPR, Osaka Univ.)
- Kojima, Chojiro (IPR, Osaka Univ.)
- Kobayashi, Naohiro (IPR, Osaka Univ.)
- Iwata, Takeshi (IPR, Osaka Univ.)
- Takahashi, Ami (IPR, Osaka Univ.)

### Collaboratory Researchers

- Wako, Hiroshi, Ph. D. (Prof., Waseda Univ.) (for ProMode)
- Ito, Nobutoshi, Ph. D. (Prof., Tokyo Medical and Dental Univ.)
- Kinoshita, Kengo, Ph.D. (Prof., Tohoku Univ.) (for eF-site)
- Standley, Daron, Ph. D. (IFReC, Osaka Univ.) (for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, and ASH)
- Katoh, Kazutaka, Ph. D. (IFReC, Osaka Univ.) (for ASH)

### Secretary

Haruki, Nahoko (IPR, Osaka Univ.)

### wwPDB members

Stephen K. Burley Helen M. Berman Gerard Kleywegt John L. Markley

### **PDBj Advisory Board members**

Soichi Wakatsuki (KEK) Genji Kurisu (IPR, Osaka U) Tsuyoshi Inoue (Fac. Eng., Osaka U) Masahiro Shirakawa (Fac. Eng., Kyoto U) Yoshitsugu Shiro (RIKEN Harima)

Kei Yura (Ochanomizu U)