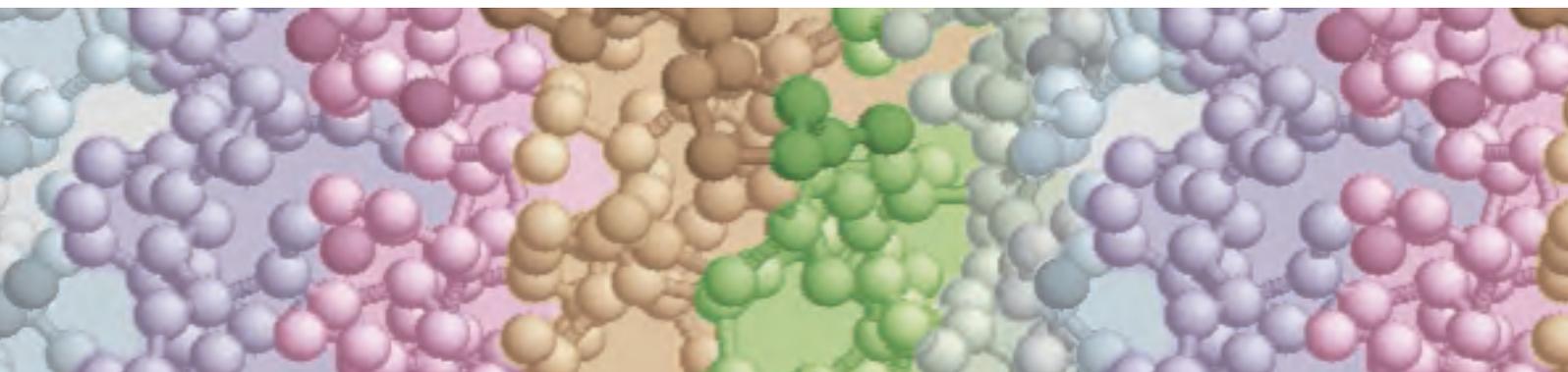


日本蛋白質構造データバンク

News Letter Vol. 11, No. 1

2009年4月



PDBj は大阪大学蛋白質研究所が（独）科学技術振興機構の支援によって運営しています。

ニュース

新しい記述フォーマット V 3.15 と V3.2

wwPDB では、2009 年 3 月 17 日（日本時間では 3 月 18 日）を期して、全ての PDB データのフォーマットを一斉に変換しました。2008 年 12 月 2 日以前に公開されていたデータは V 3.15 と称されるフォーマットに、また、それ以降に公開された PDB データは V 3.2 と称されるフォーマットに、一斉に変換しました。V 3.15 は、基本的には V 3.2 と同一ですが、旧来のデータからの変換を行っているため、数カ所の REMARK 情報において、V 3.2 に準拠できない所が残ってしまっているものです (<http://www.wwpdb.org/documentation/changesv3.15.pdf>)。この新しいフォーマットへの移行は、従来からのフラットな PDB フォーマットだけでなく、mmCIF や XML による PDBML に対しても適用されています。詳細については、次の Web page に記載されています。 <http://www.wwpdb.org/documentation/format32/v3.2.html>

この新たなフォーマット V3.2 の特徴を次に示します。

- 1) 巨大な複合体構造に対しては、原子番号が大きすぎてあふれたり鎖の名前が多くなりすぎて分割されたエントリに対し、SPLIT レコードを新設して分割先 PDBID を明示。
- 2) 構造モデルの総数を新設の NUMMDL レコードに明記。
- 3) NMR 等において複数モデルに対して最適化した平均構造のモデルや、蛋白質における主鎖 Ca 原子モデルや核酸における P 原子モデル等を MDLTYP レコードにて明示。
- 4) 配列情報におけるアクセッション番号が長過ぎて DBREF で定義される書式に必ずしも対応しない場合に、DBREF1/DBREF2 という新たな 2 行のレコード行を用いて記載。
- 5) 占有率が 0 である残基/原子に対して、それぞれ、REMARK 475/REMARK 480 で記載。
- 6) 金属の配位情報について、新たに REMARK 620 で記載。
- 7) データベース参照情報の追記：
 - 7-1) 生体高分子試料が由来する生物種については、NCBI Taxonomy (生物種分類学) データベースの ID を SOURCE レコードに記載。
 - 7-2) 主要参考文献 (Primary Citation) に対して、その PubMed ID と DOI を JRNL レコードに記載。
- 8) 複合体情報：PISA/PQS および著者による 4 次構造情報を REMARK 350 に記載。
- 9) 生体高分子に結合しているリガンドや金属イオンの結合部位情報を、SITE レコードに記載。著者が実験によって得た結合部位情報なのか、あるいは登録時に CCP4 プログラムの contact.f (<http://www.ccp4.ac.uk/html/contact.html>) を基にしたプログラムによって計算された情報なのかを、区別して記載。特に後者の場合には、原則として、リガンドや金属イオンの重原子からの距離が 3.7Å 以下の場合に SITE 情報に記載。
- 10) 電子顕微鏡と NMR による生体高分子構造に対する登録用フォームの改良・標準化。
- 11) 結合している低分子用の辞書 (<http://www.wwpdb.org/ccd.html>) を修正し、SMILES との整合性や光学活性を正確に記載。
- 12) その他、マイナーな誤りの修正。

Soon!

第 9 回日本蛋白質科学会年会にてランチンセミナーを行います。

日時：2009 年 5 月 21 日 (木) 11:35-12:45

場所：熊本全日空ホテルニュースカイ C 会場 (若草 (1F))

データベース講習会 DDBJing & KEGGing & PDBjing in Kyoto

DDBJ、KEGG、PDBj と DBLCS（ライフサイエンス統合データベース）とで協力して、2008年11月27、28日、京都大学化学研究所バイオインフォマティクスセンターにてデータベース講習会を行いました。



会場の様子。



DDBJ, KEGG, PDBj, DBLCS スタッフ。

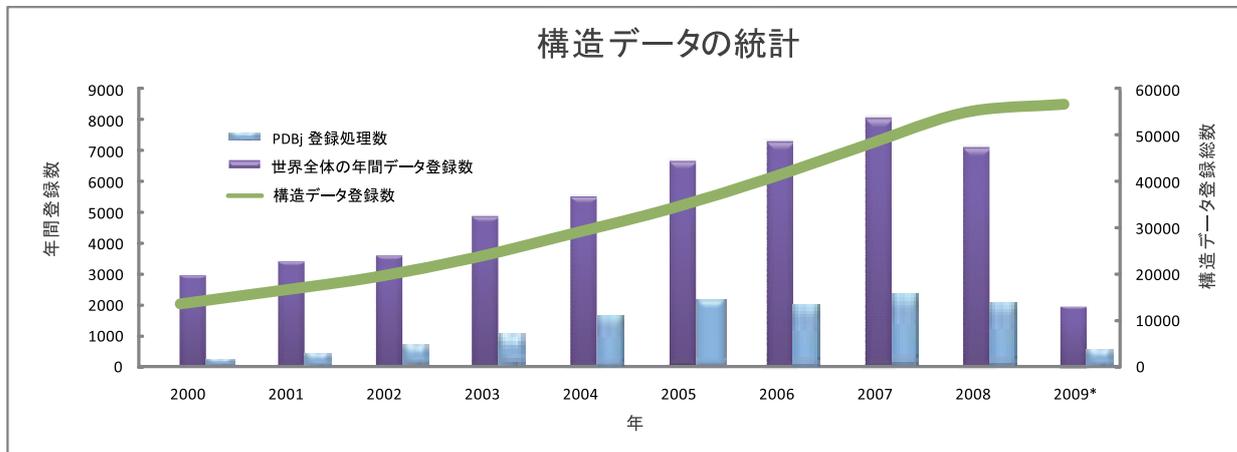
第46回日本生物物理学会年会

2008年12月3-5日、福岡国際会議場にて第46回日本生物物理学会年會が開催されました。PDBjでは、4日にPDBjの活動と新しく提供しているサービスやBMRBデータベースなどの紹介を行いました。アンケートで寄せられたご意見やご要望は、今後の活動への貴重な資料となっています。



PDBj 構造登録データ統計

統計データは wwwPDB の WEB ページ (<http://www.wwpdb.org/stats.html>) においてご覧になれます。



*2009年4月1日付データ。

MAFFTash: 配列と構造の同時マルチプルアラインメント

MAFFTash は配列および可能であれば立体構造も含めてマルチプル・アライメント (MSA) を行うウェブベース・ツールです。立体構造は、直接 PDB ID を指定したり、PDB フォーマットのファイルをアップロードすることによって提供していただきます。MAFFTash はまず、ASH プログラムと Protein Domain Parser を利用して全ての構造ドメイン・ペアを重ね合わせます。ドメイン分割の利用は構造アラインメントがドメイン内においては固定されている一方で、ドメインとドメインの間では可動であることを考慮しています。そして、MAFFTash は、良くアラインメントがなされた連続する残基ペアを抽出し、MSA をさらに改良します。MAFFTash プログラムは、様々なアルゴリズムを用いて正確な MSA を効率的に構築できるため広く利用されています。MAFFTash の最終結果は、この MAFFT によって算出されます。

MAFFTash を実行するためには、アミノ酸配列のリストと PDB ID、あるいはユーザの手元にある PDB フォーマット・ファイルが必要です。すべての PDB エントリーに対して現在は chain ID が必須であり、空白、ダッシュ、アンダーバーを chain ID として指定することはできません。chain ID が不明な場合は、PDBj の検索エンジンである xPSSS を使用して下さい：検索方法は、PDB ID を入力し、“sequence information (FASTA format)”をクリックします。すると、FASTA フォーマットで PDB 中のアミノ酸配列が表示され、対応する chain が表示されます。また、MAFFTash には FASTA フォーマットのアミノ酸配列を与えると、対応する複数の PDB ID のセットを自動的に検索するツールもあります。この機能を利用するためには、MAFFTash トップページ上の Example の下にある“Prep-MAFFTash”をクリックしてください。ところで、MAFFTash における MSA では、構造情報の重みを調整することも可能です。現在、この重み付けは手動によってなされていますが、数百以上のアミノ酸配列を調べるような場合には、例えば 1 に設定するなど、大きな重みを使う必要があります。

下の図に表示例を示します。この例では、Caspase activating and recruitment (CARD) ドメインとそのホモログに対応する、2つの PDB ID、ユーザの手元にある2つの PDB フォーマット・ファイル、および2つのアミノ酸配列が入力されています。アラインメント結果は、Jalview で表示され、FASTA フォーマットのテキストファイルとしてダウンロードできます。

The screenshot displays the MAFFTash web interface. On the left, the 'alignment of multiple sequences and structures' form is visible. It includes a text input field for 'Enter sequences & PDB IDs', a 'Submit' button, and a section for 'Upload your own structures'. An example of input sequences and PDB IDs is provided. On the right, the 'Multiple Sequence Alignment' results are shown, featuring a sequence logo and a Jalview-style alignment view with color-coded residues and structural annotations.

MAFFTash ページの表示例。

スタッフ

統括責任者

中村春木（大阪大学蛋白質研究所・教授）

PDBj データベース管理運営グループ

中川敦史（大阪大学蛋白質研究所・教授）

松浦孝範（大阪大学蛋白質研究所）

五十嵐令子（JST-BIRD）

見学有美子（JST-BIRD）

松浦かんな（JST-BIRD）

井上真由美（大阪大学蛋白質研究所）

Chen, Minyu（大阪大学蛋白質研究所）

PDBj 国際運営高度化グループ

金城玲（大阪大学蛋白質研究所・准教授）

岩崎憲治（大阪大学蛋白質研究所・准教授）

鈴木博文（大阪大学蛋白質研究所）

山下鈴子（JST-BIRD）

鎌田知佐（JST-BIRD）

清水有希子（JST-BIRD）

工藤高裕（大阪大学蛋白質研究所）

BMRB データベース管理運営グループ

藤原敏道（大阪大学蛋白質研究所・教授）

阿久津秀雄（大阪大学蛋白質研究所・客員教授）

小林直宏（大阪大学蛋白質研究所）

中谷英一（JST-BIRD）

原野陽子（大阪大学蛋白質研究所）

九州大学生体防御医学研究所グループ

藤博幸（九州大学生体防御医学研究所・教授）

加藤和貴（九州大学デジタルメディスンイニシヤティブ・准教授）

大津美希（九州大学生体防御医学研究所）

研究協力者

輪湖博（早稲田大学社会科学部・教授）

伊藤暢聡（東京医科歯科大学大学院・教授）

木下賢吾（東京大学医科学研究所・准教授）

Standley, Daron M.（大阪大学免疫学フロンティア研究センター・准教授）

連絡先

PDBj

〒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

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

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