

日本蛋白質構造データバンク

News Letter Vol. 12, No. 1

2010年9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

2011 年から NMR 構造の PDB 登録には化学シフト情報が必須要件になります

wwPDB 顧問会議の勧告に基づき、来年 2011 年から NMR により決定された構造データの登録には制限情報 (restraints) とともに化学シフト情報の登録が必須要件となる予定です。これに伴い、大阪大学の PDBj-BMRB とウィスコンシン大学マディソン校の BMRB に設置されている ADIT-NMR 登録サイトは更新されます。登録に当たっては、化学シフトデータにおける原子名と構造データにおける原子名はともに IUPAC 標準に則って行ってください。登録された化学シフトファイルと構造ファイルの原子命名法が一致していることを受付側が検証しやすくするために、化学シフトデータは必ず NMR-STAR v3.1 のフォーマットに変換し、原子命名法を検証したうえで登録してください。NMR-STAR v3.1 フォーマットへの変換は BMRB ウェブサイトの STARch (<http://bmr.b.u.osaka-u.ac.jp/software/starch/>) を用いて行うことができます。非標準ペプチド・核酸の命名は PDB Ligand Expo dictionary に従ってください。PDB Ligand Expo dictionary に登録されていない化合物の場合には構造データと化学シフトデータの命名法を一致させておいて下さい。

皆様の積極的な登録と新ルールへのご協力をお願いします。

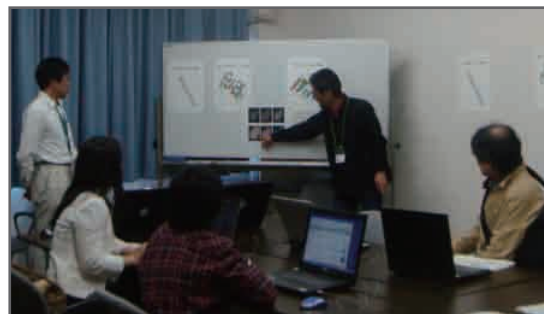
Small Molecular Structure Deposition (SMSDep) の大阪サイトを開設

2010 年 8 月 23 日に SMSDep サイトが PDBj-BMRB に開設されました。本サイトは今後、世界で唯一の SMSDep 登録サイトとなります。このデータベースは PDB の主要な対象から外れている生体低分子の NMR 構造を化学シフト情報、制限情報とともに収集することが目的で、BMRB によって管理されています。ただし、運営はウィスコンシン大学の BMRB と大阪大学の PDBj の協力により行われます。低分子の定義は 23 残基以下のポリペプチド、3 残基以下の核酸、3 残基以下のオリゴ糖、およびその他の天然物です。この中には非標準のアミノ酸、核酸を含むものも入ります。化合物の各原子の命名は構造ファイル、化学シフトファイルともに IUPAC の命名法に従ってください。そうでない場合は検証・編集の過程で再提出をお願いすることがあります。登録作業は新 ADIT-NMR に準拠しています。非標準残基の命名は PDB Ligand Expo dictionary に基づきます。後者に登録されていない場合には構造と化学シフトの命名を一致させて下さい。このような分子は当面、構造データの検証・編集なしで登録されます。登録データの検証・編集は主に PDBj の PDB、BMRB 担当が行います。構造生物学から天然物有機化学の研究者まで、このデータベースを広くご利用いただくようお願いします。

大阪大学いちょう祭

いちょう祭は大阪大学の創立記念日 (5 月 1 日) に伴い、新入生の歓迎と地域との連携を図ることを目的に毎年開催され、今年は 2010 年 4 月 30 日-5 月 1 日、大阪大学の研究機関、及び研究室が解放されました。

PDBj では 4 月 30 日に、一般の方にも興味を持っていただけるよう高校生や専門家以外の方を対象とした eProtS データベースを中心に PDBj の活動を紹介しました。



会場の様子。

ライフサイエンス・データベース講習会 in 名大

DBLCS (ライフサイエンス統合データベース), DDBJ と PDBj で協力して、2010 年 8 月 9-10 日、名古屋大学 情報文化学部棟にてライフサイエンス・データベース講習会を行いました。

第 48 回日本生物物理学会年会

2010 年 9 月 20-22 日、東北大学川内キャンパスにて第 48 回日本生物物理学会年会が開催されました。PDBj では、20 日にランチョンセミナーを行い PDBj の活動と提供しているサービスの紹介を行いました。また、21, 22 日には講習会を行いました。講習会は早朝の悪天候にもかかわらず、予想以上の方に参加いただきました。この場をお借りしてお礼を申し上げます。

InCoB2010 (The 9th International Conference on Bioinformatics)

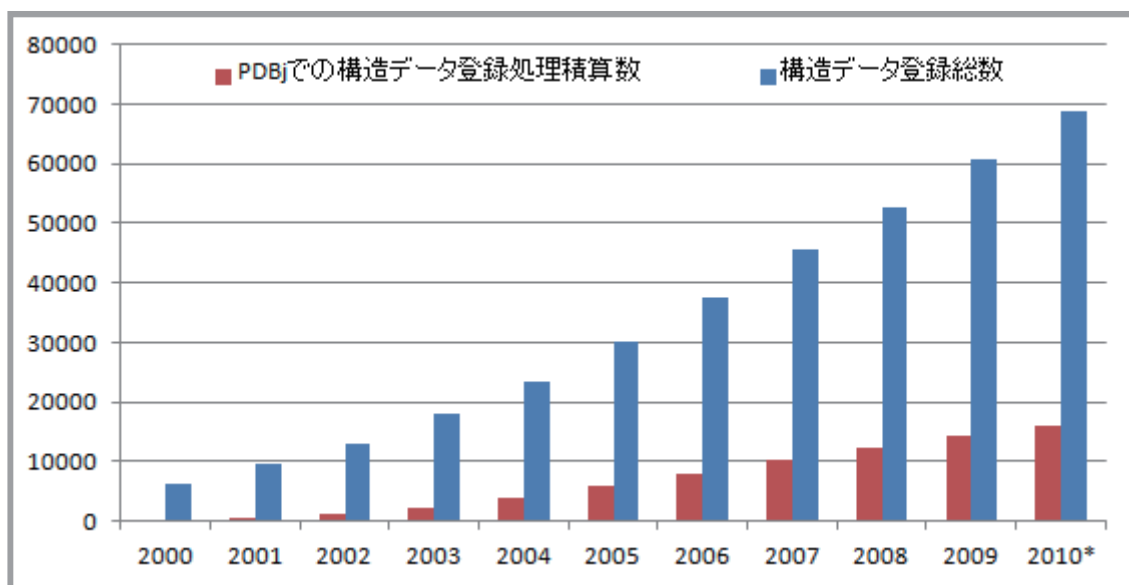
2010 年 9 月 26-28 日、早稲田大学 International Conference Center にて InCoB2010 (The 9th International Conference on Bioinformatics) が Chem-Bio Informatics Society of Japan と International Immunomics Society との協力で開催されました。PDBj では、会期中ブースにて展示、27 日にランチョンセッションを行いました。



会場の様子 (左から第10回日本蛋白質学会、PDBj講習会 in 名大、第48回日本生物物理学会、InCoB2010)。

PDBj 構造登録データ統計

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



*2010 年 10 月 6 日付データ。

サービス

GIRAF

GIRAF (<http://www.pdbj.org/giraf/>) は蛋白質の相互作用部位の原子レベルの立体構造を比較・検索するサービスです。GIRAF の新バージョンでは、低分子化合物の結合部位の他に、蛋白質や DNA/RNA との相互作用部位との比較も可能になりました。ここで「相互作用部位」とは、蛋白質の各サブユニットで、リガンド（低分子化合物、核酸、蛋白質など）から 5 オングストローム以内にある原子の集合を意味します。

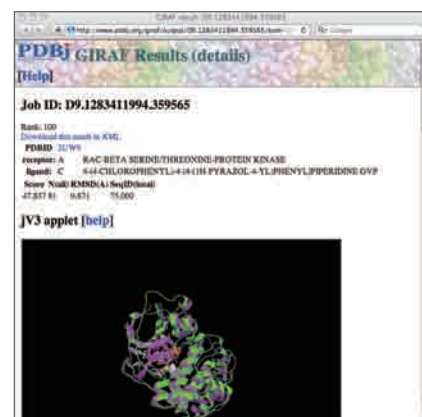
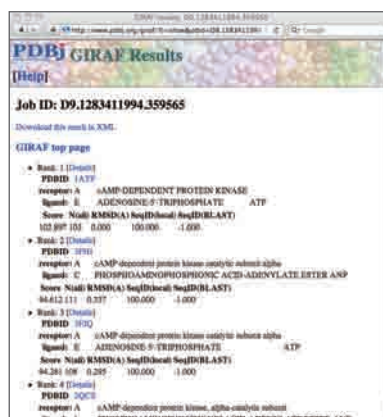
ユーザは PDB ID を入力するか、PDB フラットファイルをアップロードして、その構造のいずれかの部分と類似する相互作用部位をもつ PDB エントリを検索できます。検索結果は、ウェブページ上にヒットしたエントリがリストとして表示され、各エントリにはより詳細な結果ページが用意されていて、PDBj の分子グラフィックスソフト jV でアラインメントも表示されます。検索の終了を E メールでお知らせするオプションもあります。相互作用部位のデータベースは毎週更新され、最新の PDB に存在するすべての分子間相互作用部位を含みます（ただし水分子との相互作用は除きます）。2010 年 9 月現在、合計で 52 万件以上の相互作用部位が登録されています。GIRAF では「幾何学的索引付け」という技術を用いているため、このような大規模なデータベースに対する構造検索を高速に処理することができます。さらに相互作用部位が単に似ているか似ていないかだけではなく、原子レベルでの対応関係（アラインメント）も出力されます。このため、相互作用部位の類似性を詳細に見ることができます。アミノ酸配列や全体構造（フォールド）の比較では類似性のない蛋白質でも、リガンド結合部位（特にモノヌクレオチドやイオンなど）のみに着目すればよく似た構造が存在する場合もあるので、新規に解かれた構造の機能推定にも GIRAF による検索が有効かもしれません。高速な検索のアルゴリズムと GIRAF の応用についての詳細は、下記の文献を参考にしてください。



GIRAF ページのトップページ。

【参考文献】

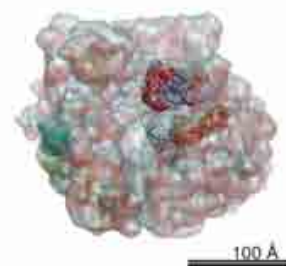
1. Geometric similarities of protein-protein interfaces at atomic resolution are only observed within homologous families: An exhaustive structural classification study. Kinjo AR, Nakamura H. *Journal of Molecular Biology*, **399**:526-540 (2010).
2. Comprehensive structural classification of ligand binding motifs in proteins. Kinjo AR, Nakamura H. *Structure*, **17**:234-246 (2009).
3. Similarity search for local protein structures at atomic resolution by exploiting a database management system. Kinjo AR, Nakamura H. *BIOPHYSICS*, **3**:75-84 (2007).



GIRAF ページの表示例。

EMDB のマップデータが修正されました

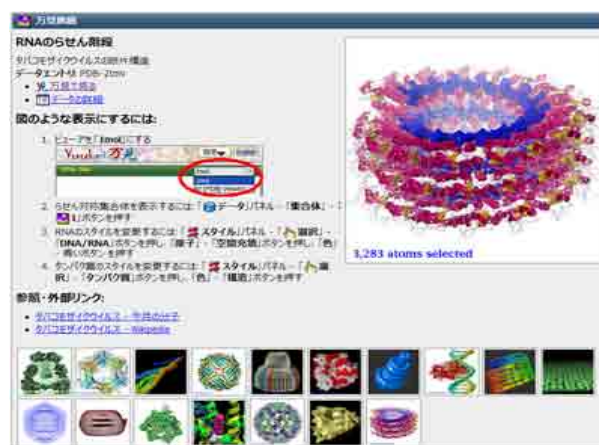
3 次元電子顕微鏡のデータベース、EMDB (Electron Microscopy Data Bank : <http://www.pdbe.org/emdb/>) のマップデータの多くが修正されました。マップデータは 3 次元の密度分布を表すデータですが、これには各点の密度値だけではなく、軸の長さや角度、各軸に沿った点の数といった形状情報も含まれています。この形状情報は正確な構造を表現するのに非常に重要な情報ですが、マップのフォーマット変換などの問題で、正しいデータを作成することは簡単ではありません。最近、EMDB のスタッフの尽力と私たち PDBj のスタッフの協力によって、多くのマップデータのマップ形状情報が修正されました。これによってマップデータがより望ましいものになり、これまで PDB の座標データとうまく重ならなかったデータの多くが、正しく重なるようになりました。



修正されたマップデータ (EMDB-1003) と、原子モデル (PDB-1eg0) との重ね合わせ。

EM Navigator の新機能

EM Navigator は 3 次元電子顕微鏡の構造データを閲覧するためのサイトです。公開当初から、非専門家や初心者でも気軽に 3 次元構造を見られるサイトを目指してきましたが、先日そのための更なる改良を二つ行いました。ひとつは「万見 (よろずみ)」と名付けられた構造ビューアページの公開です。もともとは複雑な電子顕微鏡の構造データをインタラクティブに見るために作成したものだったのですが、ほとんどの PDB と EMDb のデータを見ることができるようになりました。生物学的集合体の再現、リガンド結合部位や複数サブユニット構造中の特定の要素の可視化、電子顕微鏡による 3 次元マップの表示など、多彩な機能を持っています。万見のトップページ (<http://www.pdbj.org/emnavi/viewtop.php>) にある「万見画廊」(右図) は、チュートリアルとしても利用できます。もうひとつは、ムービーのインターフェースの改良です。マウスポインタの動きや位置によって、ムービーのフレームが切り替わるようになりました。コツを掴めば、よりインタラクティブでわかりやすい操作が可能になります。そのほか専門化に向けた新機能もありますが、そちらについては EM Navigator (<http://www.pdbj.org/emnavi>) でご覧下さい。



万見画廊の表示例。

jV3.8

2004 年に公開を開始した、単体でもアプレットでも利用できるタンパク質立体構造ビューアー jV3 (<http://www.pdbj.org/jv/>) ですが、その後着実に機能追加と安定性の向上を図り、2010 年 7 月に最新版 (ver. 3.8) を公開しました。

このバージョンでの主な変更点は、(1) jV での複数分子を表示している際に、特定の分子の原子を選びやすくするために GUI のボタンを追加、(2) 原子単位での表示・非表示を切り替えやすくするために、displayatom コマンドを追加 (3) アプレットとして使用時に、画像を save 出来るようにメニューの中に File/save/PNG(JPEG) コマンドを追加の 3 点です。また、マニュアルへのアクセスを容易にするために、Help から jV の Wiki ページへアクセス出来るようにしたり (Java 1.6 以上が必要です)、様々な細かいバグの修正を行ったり

最新の OS での動作の安定性の向上を図る修正を行っていますので、古いバージョンを利用している方は是非バージョンアップして下さい。また、これまで利用したことない方はこれを機会に利用してみてください。



jV3.8 の表示例。

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)6879-8634、FAX(06)6879-8636

統括責任者

中村春木（大阪大学蛋白質研究所・教授）