

NEWS LETTER vol.20

代表あいさつ

大阪大学蛋白質研究所 教授 栗栖源嗣



2018 年度の報告をさせていただきます。第一に、PDBj の前代表である中村春木教授が 2018 年 3 月末をもって大阪大学を定年退職されました。中村先生は、2000 年 7 月に PDBj を設立し、国際的に認知されるデータセンターへと育てられた立役者です。先生の永年にわたるご貢献に改めて感謝の意を表したいと思います。現在は、大阪大学名誉教授・国立遺伝学研究所特任教授として AMED-BINDS プロジェクトの Program Supervisor としてご活躍中です。また、PDBj の Data-out の活動でご尽力頂いた金城玲准教授（ブルネイ・ダルサラーム大学へ）と鈴木博文特任助教（早稲田大学へ）、および PDBj-BMRB の担当者として長く米国 BMRB との橋渡し役を務めて頂いた小林直宏特任准教授（横浜理研へ）が、それぞれ転出されました。開発協力者として今後も PDBj の活動をサポートして頂くことをお願いする次第です。

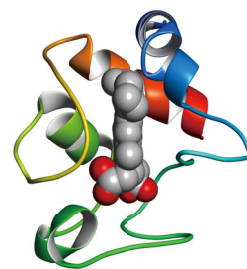
次に、PDBj は、EMBL-EBI と電子顕微鏡画像のデータ収集と配布について学術交流協定を結び、2018 年 12 月から Electron Microscopy Public Image Archive (EMPIAR) の日本サイト (EMPIAR-PDBj) をスタートしました。PDBj がメンバーとして加わっている worldwide PDB (wwPDB) では、Electron Microscopy Data Bank (EMDB) を正式メンバーに招聘し EMDB データの検証に力を入れ始めました。PDB を取り巻く関連アーカイブ（小角散乱データベース、X 線回折データアーカイブなど）との連携も強めています。PDBj は設立時より、PDB と BioMagResBank (BMRB) を中心に活動を進めてまいりましたが、これからは急速に発展する電子顕微鏡構造解析のサポートにも力を入れて参ります。

ところで、3 ページに対応停止の報告をしております PDB フォーマットでの登録は、いつどのような経緯で開始されたのでしょうか？1976 年 11 月発行の PDB Newsletter 3 号に以下の記述があります。

“1976 (Oct. 15th) , No. Sets Held (72), No. Sets Distributed (1101), No. Recipients (38).

These distribution statistics represent activity only at Brookhaven. Duplicate copies of the file are maintained at the Crystallographic Data Centre in Cambridge (England) and at the University of Tokyo (Japan). These sites distribute data independently. All of the new structures obtained since this past spring have been entered in the new 80-column format and work is proceeding on conversion of the old parameter sets to the new format.”

1976 年春から古い Diamond フォーマットをやめて、“新しい” PDB フォーマットでの登録が必須になるというアナウンスです。実に PDB フォーマットは 40 年以上にわたり利用されたことになりましたが、ついにリタイアの時が来たと言っても過言ではありません。ちなみに、40 年前の PDB データは、東大の島内教授、田隅教授のご努力で米国から東大の大型計算機センターに送られ、そこから名大、阪大、九大と順に送られてコピーがとられていたそうです [1]。1976 年 10 月時点で 38 研究室から登録された 76 データセットのエントリーの中には、阪大蛋白質研（角戸教授）からのチトクロム c の結晶構造 (ICYC) [図 1] が含まれています。上記 Newsletter 3 号に 76 エントリーの全てがリストされており、アジアから唯一の登録です。



2019 年度も、例年通り日本蛋白質科学会、日本生物物理学会、日本結晶学会、生命医薬情報学連合大会においてランチョンセミナーを企画いたします。また本年は、wwPDB-AC 会議を PDBj が大阪大学蛋白質研究所で主宰する予定です。今回の wwPDB-AC 会議は、（一財）蛋白質研究奨励会の支援を受けて開催いたします。関係各機関のサポートに感謝申し上げると共に、ユーザーの皆様方にも引き続きご支援とご協力を賜りますよう、宜しく願い申し上げます。

[1] 角戸正夫, 安岡剛武, 日本結晶学会誌 19, 294 (1977)

図 1. チトクロム c の結晶構造

PDBj と wwPDB, その活動について

PDBj は米国 RCSB-PDB、欧州 PDBe、米国 BMRB とともに、wwPDB のメンバーとして、アジア・中東地域の構造生物学研究者から蛋白質・核酸等の生体高分子立体構造のデータを受け入れ、登録作業を行って品質の高い共通の国際的データベースを構築しています。また、米国 BMRB および英国 EMBL-EBI とは 2 極間の学術交流協定を結び、PDBj-BMRB と EMPIAR-PDBj を運営しています。これら PDBj の活動は、国立研究開発法人・科学技術振興機構 (JST) バイオサイエンスデータベースセンター (NBDC) と国立研究開発法人・日本医療研究開発機構 (AMED) 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム (BINDS)、文部科学省から共同利用・共同研究拠点として大阪大学蛋白質研究所に措置された経費によって支援されています。

2018 年度 wwPDB 諮問委員会 参加報告

2018 年度の wwPDB アドバイザー会議 (wwPDB-AC) は、2018 年 11 月 2 日の終日、英国 Cambridge の Madingley Hall において開催されました [図 2]。2018 年 2 月に開催した蛋白質研究所の蛋白質構造データベース専門部会と共に、運営を外部から諮問して頂く重要な会議と位置づけられています。アドバイザー会議は、各 PDB のデータセンターから選ばれたアドバイザーが 2 名ずつと、結晶学分野 (IUCr) と電子顕微鏡解析分野の代表者が 1 名ずつ、それに中国、インドからの地域代表者の各 1 名から構成されています。次回からは NMR 構造解析分野 (ISMAR) の代表が加わる予定です。PDBj からは、専門部会メンバーである大阪大学大学院薬学研究科の井上豪教授と、理研 SPring-8 センターの山本雅貴部門長にご出席頂きました。会議では、この 1 年間の wwPDB としての活動報告が、X 線結晶解析、NMR 溶液構造解析、電子顕微鏡構造解析の順で報告された後、幾つかの重要な運営方針について議論されました。そのうち、PDB ユーザーに影響の大きい話として、「結晶構造解析をデータ登録する際に PDBx/mmCIF フォーマットでの登録を必須とする」という方針決定がありました (詳細は page 3 を参照)。



図2. 2018 年度 wwPDB-AC 参加メンバー

AsCA2018 参加報告

2018 年 12 月 2 日 -5 日にニュージーランド オークランドで開催されたアジア結晶学会 the Asian Crystallographic Association (AsCA) 2018 に、PDBj から栗栖源嗣教授と川端猛特任准教授が参加しました。AsCA は広い意味の結晶学の学会で、PDBj が扱う生体高分子の結晶学以外に、低分子化合物、無機材料の研究も含まれ、XFEL や中性子線などの新しい計測技術の研究も発表されます。大ホールで行われるキーノート・プレナリー講演のほかに、18 のマイクロシンポジウムが三つの部屋で分かれて開催され、ポスター発表も 250 件ほどありました。また、二つのマイクロシンポジウムが低温電子顕微鏡にフォーカスしており、結晶学者の多くが電頭を自分のツールとして使っていくとする気運が感じられました。南半球での開催ということで、オーストラリア (106 人)、ニュージーランド (86 人) からの参加者が多く、次に多いのは日本 (86 人)、中国 (47 人)、韓国 (34 人)、台湾 (29 人) でした。欧米からの招待講演者も多数いました。

この学会で、栗栖教授は英国の Dr. Amy Sarjeant とともに、

データベースの開発とデータの検証・マイニングに関するワークショップを企画しました。米国 RCSB-PDB の Dr. Stephen Burley、ケンブリッジ構造データベースの Dr. Mathew Lightfoot、国際結晶学連合 IUCr の Dr. Brian McMahon、結晶条件のデータベースを開発している Dr. Janet Newman、結晶学のデータ構造の研究をしている Dr. James Hester が講演しました。Dr. Burley は、低分子リガンド構造の検証に関する PDB の活動について、日本からは川端准教授より “Databases and Web services from PDBj for Electron Microscopy” という題目で、電子顕微鏡の 2D 画像群のデータベースのミラーサイト EMPIAR-PDBj の紹介、EM Navigator、Omokage 検索、gmfit による重ね合わせサービスの紹介を行いました。

PDBj は、今回の大会からアジア地区の優秀な学生ポスターに対し、PDBj ポスター賞の授与を始めました。今後も多くの優秀な発表が報告されることを期待し、アジア地区の優秀な学生への懸賞を続けて行く予定です。



図3. AsCA2018 のデータベースセッションの登壇者



図4. PDBj ポスター賞の表彰式

1. 公開前データの差し替え手順を改善、プライバシー・ポリシーを更新【2018 年 5 月】

2018 年 5 月、公開前に PDB や EMDB エントリーのデータを差し替える際の手順を改善しました。新しいファイルがアップロードされる度に新しい検証レポートが作成され、深刻なデータのエラーやバージョン間のデータの矛盾について登録者が事前に確認できるようになりました。これにより問題点を公開前に修正することができます。

また同月、wwPDB では欧州一般データ保護規則 (GDPR) に準拠するよう OneDep における個人情報の取り扱いを見直し、wwPDB のプライバシー・ポリシーページを更新しました。

2. OneDep での登録時に、研究者 ID 番号 (ORCID) が必須になりました【2018 年 7 月】

2018 年 7 月以降に OneDep システムで構造を登録する際、コンタクトオースター (連絡先) 情報の一つとして研究者 ID 番号 (ORCID) が必須となりました。これにより、PDB エントリーの各登録者が正しく特定できるようになりました。将来、ORCID の認証を OneDep 登録システムへのログインにも使えるようにすることを計画しています。

ORCID

Connecting Research
and Researchers

3. XFEL/SFX による構造の登録へのサポートを強化【2018 年 10 月】

2018 年 10 月、X 線自由電子レーザー (XFEL) や連続フェムト秒結晶構造解析 (SFX) を使って解析された構造を登録する際、より広範囲のメタデータを収集できるようにするため OneDep システムを改良しました。XFEL や SFX の実験手法に特化した PDBx/mmCIF のカテゴリを使って、試料の供給方法やデータの測定方法 (集光光学系、パルスエネルギー、周波数、結晶数など) について詳細な情報を記載することができるようになりました。

4. 結晶構造の登録時に、PDBx/mmCIF フォーマットが必須になります【2019 年 7 月】

2019 年 7 月 1 日以降、X 線、中性子、繊維、電子線を含む各種結晶構造解析法によって解かれた構造を PDB に登録するときに見えるフォーマットは PDBx/mmCIF のみとなり、PDB フォーマットで登録することはできなくなりました。

PDBx/mmCIF フォーマットファイルで登録を行うと、登録処理の効率化できます。また、PDBx/mmCIF は従来の PDB フォーマットよりも豊富に実験情報を記載できるため、検証をより厳密に行うことができます。旧来の PDB フォーマットでは 10 万原子以上を含む構造や、2 文字以上の鎖 ID を含む構造を記述することはできません。また、現在 3 文字以内で構成されている PDB の化合物 ID は 2021 年までに枯渇することが見込まれており、文字数を増やす必要に迫られています。文字数を増やすと PDB フォーマットでは記述できなくなり、そうなると PDB フォーマットを廃止せざるを得なくなります。

Refmac、Phenix.refine、Buster などのプログラムは PDBx/mmCIF 形式での出力に対応しています。またその他の構造決定や精密化のソフトウェアを使う方向けに、wwPDB では旧式の PDB フォーマットを PDBx/mmCIF フォーマットに変換するスタンドアロンツールやウェブサービスとして、pdb_extract や MAXIT を提供しています。登録の際必要となる PDBx/mmCIF フォーマットでの出力やデータの準備に関して、より詳しくは wwPDB のウェブサイトをご覧ください。

◆ PDB エントリーを論文中で引用する際のお願い ◆

現在は、PDB エントリーは、wwPDB のメンバーである RCSB、PDBe、PDBj サイトが協力して、処理を行っています。登録について引用される際は以下の様に記述して頂きますようお願いいたします。

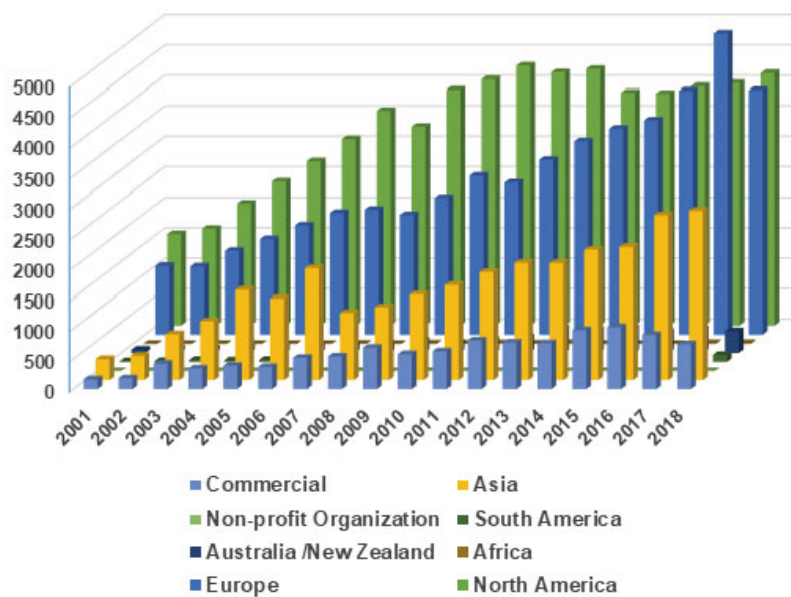
- 例 1. “The coordinates and structure factors for the structures reported here have been deposited to the worldwide Protein Data Bank[1] and are available from Protein Data Bank Japan[2,3] with the accession codes #####.”
- 例 2. “The cryo-EM density map has been deposited to the Electron Microscopy Data Bank[4] under accession number EMD-####. The atomic models of the cryo-EM structures have been deposited to the worldwide Protein Data Bank (wwPDB)[1] under the accession numbers ##### and ####, respectively.”
- 例 3. “The coordinates for [YOUR PROTEIN1] and [YOUR PROTEIN2] are available as PDB[5] entries ##### and ####, respectively. The resonance assignment for [YOUR PROTEIN1] has been deposited to the Biological Magnetic Resonance Bank[6] as accession number #####.”

参考文献

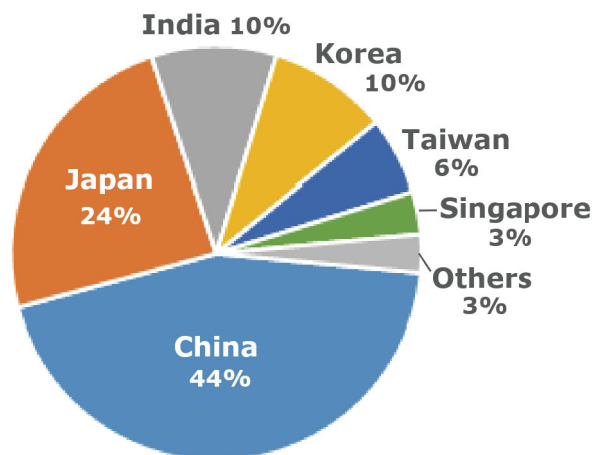
- [1] Berman, H.M. et al. (2003). Nature Structural Biology 10 (12): 980.
[2] Kinjo, A.R. et al. (2018). Protein Science 27 (1): 95-102.
[3] Kinjo, A.R. et al. (2017). Nucleic Acids Research 45(D1), D282-D288.
[4] Lawson C.L. et al. (2016). Nucleic Acids Research 44(D1), D396-403.
[5] wwPDB consortium (2019). Nucleic Acids Research 47(D1), D520-D528.
[6] Ulrich E.L. et al. (2008). Nucleic Acids Research 36, D402-408.

Data Growth

wwPDB 全体での地域別 PDB 登録数



PDBj が処理した PDB エントリーの国別分布 (2018 年)



BMRB Report

ウィスコンシン大学マディソン校で開催された BMRB AC ミーティング

2018 年 4 月 15 日、米ウィスコンシン大学マディソン校で開催された BioMagResBank Advisory Committee (BMRB AC) meeting に PDBj-BMRB 代表として小林直宏特任准教授が参加しました [図 5]。年間登録数や関連ツールについて発表し、活動状況、データベース業界への貢献度などがアドバイザー委員会によって評価されました。また、新しいプロジェクトリーダーとして Prof. Jeffrey C. Hoch が紹介され、引退予定であり現プロジェクトリーダーである Prof. John L. Markley との交代のアナウンスとそのための引き継ぎタイムラインが紹介されました。



図 5. BMRB AC 参加者

進化し続けより使いやすくなった PDBj-BMRB ウェブサイト

PDBj-BMRB のウェブサイトと関連するツール群 (BMRB データを XML や RDF に変換するなど) をアップデートしました。トップページでは多様な生命科学系データベースサイト (PDB, EMDB, Swiss-plot, Metabolomics など) の同時検索機能に加えホモログの PDB-ID、関連する文献 (PubMed)、相互作用情報など豊富な情報を提示できます。

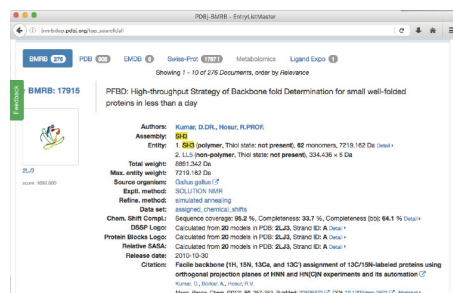
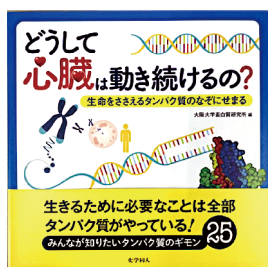


図 6: BMRB エントリー検索結果の一例

本を出版しました!



大阪大学蛋白質研究所創設 60 周年を記念し、記念書籍「どうして心臓は動き続けるの—生命をささえるタンパク質のなぞにせまる—」を化学同人より出版しました [左図]。

PDBj 代表 栗栖源嗣教授が編集委員、執筆者として参加したほか、PDBj が担当したコラムや Molmil で作成した立体構造イメージも掲載されています。

ご興味のある方は化学同人 HP をご確認ください。

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b378581.html>

PDBj は様々な機会に、ランチョンセミナーや講習会、企画展示を行い、データベースの具体的な利用法や PDB の最新の活動について紹介しています。一般向けのイベントにも積極的に参加し、タンパク質科学の普及に貢献しています。

○サイエンスアゴラ 2018 (科学技術振興機構主催)

○大阪大学共創 DAY@EXPOCITY『大阪大学とあそぼう』

PDBj は、2018 年 11 月 10 日 (土)・11 日 (日) テレコムセンタービル (東京都江東区) で開催された「サイエンスアゴラ 2018」に、11 月 17 日 (土) にはららぽーと EXPOCITY (大阪府吹田市) で開催された「大阪大学共創 DAY@EXPOCITY『大阪大学とあそぼう』」にそれぞれブースを出展しました。来場者は子供から大人まで幅広く、それぞれのイベントで約 500 名が参加しました。ブースでは以下の出展を行いました。



ペーパーモデル

1 枚の紙を切ったり折ったり貼ったりして、タンパク質などの分子モデルを作る工作を通じてタンパク質分子の構造について理解を深めることができます。また、これを使ってタンパク質の構造と機能に関する解説を行いました。ペーパーモデルのデータには RCSB PDB の許諾を得て和訳したものと、PDBj で独自に作成したものがあり、いずれも PDBj 入門サイト [PDBj の一般向けサービスページ (<https://numon.pdbj.org/>)] で PDF データを提供しています。



3D プリント出力モデル

3D プリンタを使ってプラスチック製の分子立体模型をつくることができます。まず PDB に登録されている分子構造データを 3D プリントオブジェクトファイル (STL) に変換します。データサイズとできる構造物の強度を考慮し、表面 (surface) モデルで表現したものを出力するのが一般的です。小さな分子の場合は各原子を球で表現した空間充填表現 (spacefill) を用いることもあります。このデータを 3D プリンタに入力して造形物の出力を行います。ただし、方式によっては出力後に支持棒を取り除くなどの整形作業が必要です。また分割して出力し、後で接着するなどの工夫が必要となる場合もあります。この 3D モデルを使って、酵素の活性部位にあるくぼみの形などの情報が薬の開発に役立っている事例などを紹介しました。



タンパク質分子の立体視

2 つの立体視サービスを使ってタンパク質分子の形を体感していただきました。

- 1) Android 端末の VR 機能と VR ゴーグルを使って分子を見ることに特化した「VR 分子ビューア」サービス。PDBj の VR 分子ビューアページにアクセスした Android 端末を VR ゴーグルに装着し、目に取り付けるとさまざまなタンパク質分子を見ることができます。顔の向きを変えただけで見る方向を変えることができ、さらに VR リモコンを使えば、近づいて分子の中に入ったり分子から離れて全体を見渡したりできます。
- 2) 赤青立体視メガネと「万見プライム」(よろづみプライム) を使ったサービス。万見プライムには分子の画像と簡単な説明があり、マウスや指操作で分子を回転したり拡大縮小したりすることができます。また、立体視モードに切り替えることもできます。



○その他のアウトリーチ活動

* セミナーや講習会の資料は PDBj webpage『過去の講習会』よりダウンロードできます。
<https://pdbj.org/info/previous-workshop>

第 18 回日本蛋白質科学会年会 PDBj ランチョンセミナー
2018 年 6 月 28 日、朱鷺メッセ (新潟)

第 56 回日本生物物理学会年会・PDBj ランチョンセミナー
2018 年 9 月 16 日、岡山大学 (岡山)

第 7 回生命医薬情報学連合大会・PDBj ランチョンセミナー
2018 年 9 月 20 日、庄銀タクト鶴岡 (山形)

日本結晶学会 H30 年度年会・PDBj ランチョンセミナー
2018 年 11 月 11 日、東京工業大学 (東京)

第 41 回日本分子生物学会年会・特別企画
“使ってみようバイオデータベース - つながるデータ、広がる世界”
2018 年 11 月 28 - 30 日、パシフィコ横浜 (神奈川)

All-in-one 合同講習会 2018/ 統合データベース講習会
2019 年 1 月 28 日、科学技術振興機構東京別館 (東京)

PDBj & BINDS 合同講習会
2019 年 2 月 19 日、大阪大学蛋白質研究所 (大阪)



Protein Data Bank Japan

Staff

統括責任者

栗栖 源嗣 (大阪大学蛋白質研究所・教授)

PDBj データベース構築グループ

中川 敦史 (大阪大学蛋白質研究所・教授)
見学 有美子 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
張 羽澄 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
池川 恭代 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
佐藤 純子 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
金 宙妍 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)

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)
児嶋 長次郎 (横浜国立大学工学部・教授)
宮ノ入 洋平 (大阪大学蛋白質研究所・准教授)
岩田 武史 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
横地 政志 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)

EMPIAR データベース管理グループ

川端 猛 (大阪大学蛋白質研究所・特任准教授)

PDBj 国際的な運営高度化グループ

藤 博幸 (関西学院大学理工学部・教授)
山下 鈴子 (大阪大学蛋白質研究所・技術専門職員)
工藤 高裕 (大阪大学蛋白質研究所・特任研究員)
Bekker, Gert-Jan (大阪大学蛋白質研究所・特任助教)

研究協力者

中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所・名誉教授)
金城 玲 (ブルネイ・ダルサラーム大学・准教授)
由良 敬 (早稲田大学先進理工学部・教授) for EM Navigator
鈴木 博文 (早稲田大学先進理工学部・次席研究員) for EM Navigator
小林 直宏 (理化学研究所横浜放射光科学研究センター・上級研究員)
輪湖 博 (早稲田大学社会科学総合学術院・教授) for ProMode
猿渡 茂 (北里大学理学部・准教授) for ProMode
伊藤 暢聡 (東京医科歯科大学大学院・教授)
木下 賢吾 (東北大学大学院情報科学研究科・教授) for eF-site
Standley, M.Daron (大阪大学微生物病研究所・教授)
for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, ASH,
MAFFTash, Spanner and SFAS
加藤 和貴 (大阪大学微生物病研究所・准教授) for MAFFTash

Contact

PDBj 事務局

PDBj 登録事務局

Tel: (06)6879-4311

Tel: (06)6879-8634

〒565-0871

大阪府吹田市山田丘 3-2

大阪大学蛋白質研究所 附属蛋白質解析先端研究センター内

※ご質問やご要望は常時 webpage 左「お問い合わせ」より受け付けております。

お問い合わせ <https://pdbj.org/contact>



第1版 2019年3月 発行

第2版 2019年8月 発行