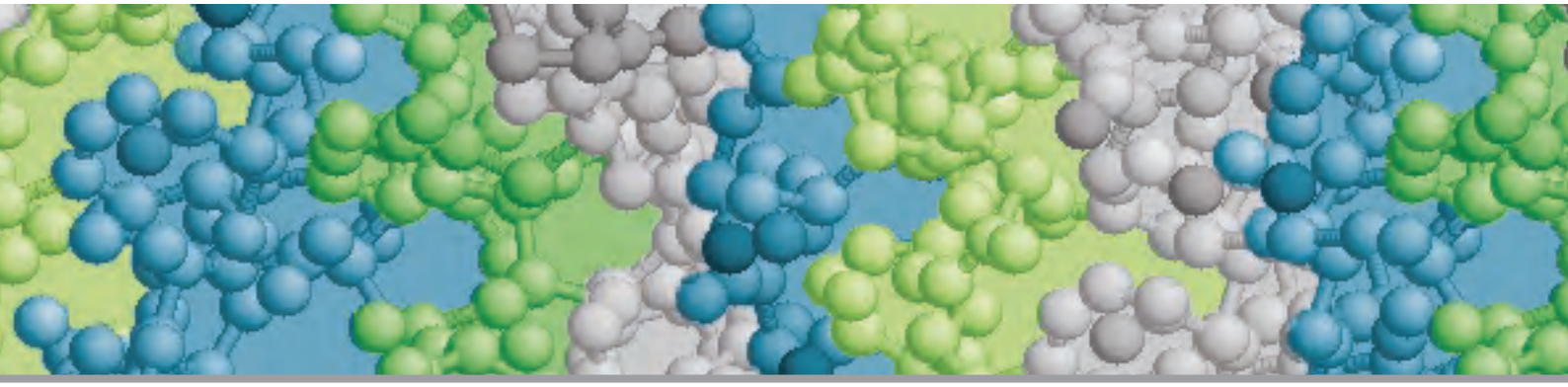
PDBj
Protein Data Bank Japan

http://www.pdbj.org/

日本蛋白質構造データバンク

News Letter Vol. 9 No. 1

2007 年 8 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

wwPDB のデータ修正プロジェクト（wwPDB Remediation Project）について

実験手法の進展、蛋白質機能についての知見の増大、PDB データ処理法の進化により、PDB データには、いくつかの不具合が生じ始めています。蛋白質立体構造データベースを維持・運営する国際組織である wwPDB（国際蛋白質構造データバンク）では、この数年、これらのデータを修正し、より統一性のとれたデータベースとする作業を行ってきました。その努力の結果として、PDB の座標データファイルのフォーマットとデータそのものを修正し、2007 年 4 月からテスト的な公開を始めました。このテストデータに対する皆様からのコメントやご指摘を受けてさらにマイナーな修正を行い、2007 年 8 月 1 日から、この修正データによるデータベースを、正規アーカイブとして本格的な運用を開始いたしました。

この新たな正規アーカイブは、wwPDB（国際蛋白質構造データバンク）の FTP サイト ftp://ftp.wwpdb.org/ および、我々 PDBj（日本蛋白質構造データバンク）の FTP サイト ftp://pdb.protein.osaka-u.ac.jp/v3/ から公開しております。また、2007 年 8 月 1 日以降の PDBj のデータ閲覧システム（xPSSS）で閲覧される全てのデータは、この修正された PDB アーカイブデータ（version 3.1）に基づいています。

ところで、この修正された PDB データは、以前のデータとは原子名称等が若干異なっているため、以前のソフトウェアはそのままでは利用できない場合があります。この新たなフォーマットを扱うことが可能な種々のソフトウェアツールは、http://remediation.wwpdb.org/software.html から入手できます。PDBj が開発しておりますグラフィックス・ビューア jV3.4（http://www.pdbj.org/PDBjViewer/index_j.html）も、この修正された PDB データ（version 3.1）を直接読み、分子構造を表示することができますし、従来の書式の PDB データ（version 2.3）も同時に扱えます。また、原子名称を修正 PDB データ書式(version 3.1)から従来の PDB データ書式(version 2.3)へ変換するツールは、http://util.wwpdb.org/ から提供されています。

この新たな PDB データにおける主な修正点は、以下となっております。

- アミノ酸配列：配列データベースと生物種の分類情報をアプデートし、化学構造と配列情報の間の不一致を修正しました。
- 文献情報：主たる文献情報を検証し、修正いたしました。
- ウィルスの情報：座標系、対称性、座標系の変換について、登録された実験情報を修正いたしました。
- デオキシリボヌクレオチドは DA, DC, DG, DT, DI と表記し、リボヌクレオチドはこれまでどおり A, C, G, T, I と表記するようにいたしました。
- ビームラインとシンクロトロンの装置名称を、BioSync（Structure Biology Synchrotron Users Organization: http://biosync.sdsc.edu, 構造生物学のためのシンクロトロン利用者協会）が定義するものに合致させました。
- 原子名称については、下記に示すように、化学構造辞書に合致させるように標準化を行いました。
- 高分子以外の低分子やモノマー・リガンドの化学構造の記述も同様に標準化し修正しました。
  - ＊ 標準のアミノ酸や核酸に対して、C 末原子の OXT あるいは HXT の例外を除いて、IUPAC（国際純正・応用化学連合）命名法に従った原子名称とすることにいたしました。これにより、特に水素原子の名称が大幅に変更になりました。
  - ＊ リガンドの標準モデルとしての座標を表示しました。
  - ＊ 化学物質のよく利用される記述法（SMILES や InChI）を用いました。
  - ＊ 光学活性の記述を加えました。
  - ＊ 同一のリガンドに対する重複した名称による記述を削除しました。
  - ＊ 化学物質の記述法として、アミノ酸の N 末や C 末および側鎖におけるイオン化の状態に応じた多様な状態に対応できる記述法を追加しました。

今回の修正のより詳細については、http://remediation.wwpdb.org を参考にしてください。

従来の書式の PDB データ（version 2.3）は、2007 年 7 月 31 日付けのものを最後に、アプデートは行われませんが、引き続きしばらくの間、ftp://pdb.protein.osaka-u.ac.jp/pub/pdb/ にてダウンロード可能です。また、PDBj のウェブページ http://www.pdbj.org/remediation/index_j.html から、各 PDBID を指定して、2007 年 7 月 31 日付けの PDB データとして、各種の書式のファイルをダウンロードすることもできます。

第７回日本蛋白質科学会年会

第 7 回日本蛋白質科学会年会が 2007 年 5 月 24－26 日、仙台国際センターで開催されました。

PDBj では、私たちの活動と提供しているサービス、BMRB の登録データベースの紹介、更に 8 月 1 日より変更された PDB フォーマットの情報をお知らせしました。セミナー後に回収させていただいたアンケートからは、多くのご要望やご意見をお寄せいただきました。

セミナー会場の様子。

いちょう祭

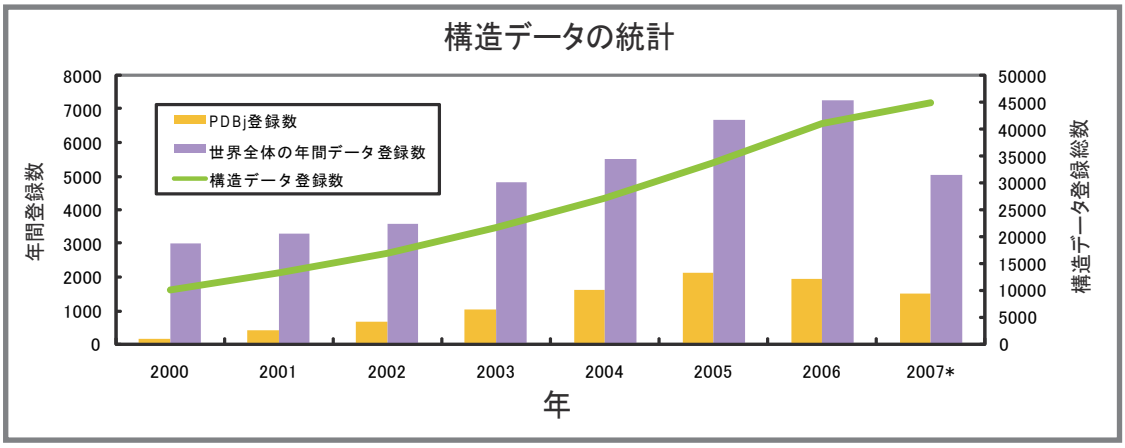
大阪大学の創立記念日に伴い、4 月 30 日･5 月 1 日に「いちょう祭」が開催され、大阪大学の研究機関、及び研究室が一般開放されました。

PDBj では 4 月 29 日に、高校生を中心とした専門家以外の方に蛋白質構造に興味を持ってもらえるよう、eProtS データベースの検索方法を紹介しました。

いちょう祭会場の様子。

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。



サービス

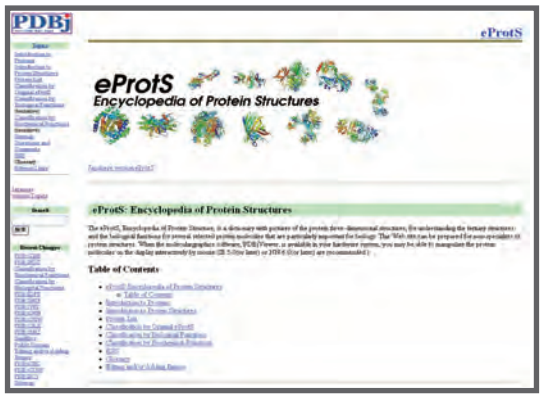
eProtS: 蛋白質構造百科事典

eProtS の 名 前 は ``encyclopedia of Protein Structures'' に由来しています。社会的状況や生物学的、構造学的に一般に関心を持てる蛋白質を多く掲載しています。

eProtS は専門分野でない科学者、特に高校生や大学生を対象にしており、日本語と英語で記述されています。

増加する PDB エントリーに対応するため、私たちは eProtS の Wiki バージョンを開発しました。Wiki バージョンでは、その蛋白質構造の特徴的な構造部分の図を加え、説明文も生物学的記述と構造的記述に分け分りやすくしました。また、UniProt など他のデータベースへのリンクも貼っています。

構造生物学の専門家で、紹介したい構造をお持ちの方は是非ご参加ください！



eProtS のトップページ。

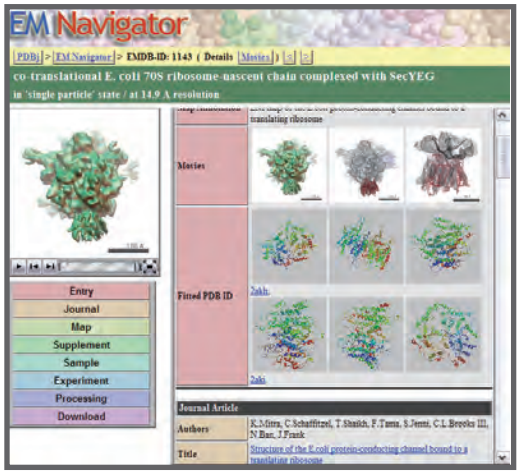
EM Navigator - 電子顕微鏡データブラウザ

このニュースレターをご覧いただいているかたの多くは、電子顕微鏡による構造解析についてあまりご存知ないことと思います。先日公開を始めたばかりの EM Navigator は、そのようなかたでも気軽に楽しく電子顕微鏡データを閲覧できるサイトを目指しています。

これまで電子顕微鏡の構造データは、「とっつきにくい」ものでした。論文などで目にする 3 次元構造は、図を見ているだけではどういった形状なのかよく分からないことがしばしばです。原子座標データの場合は PDBj のウェブサイトを開いて jV で表示したり、ダウンロードしたデータを RasMol などのソフトで開いたりすれば、分かりやすく 3 次元構造を眺めることができます。一方、電子顕微鏡構造解析で得られる 3 次元マップは、wwPDB のメンバーでもある EBI-MSD が運営する EM databank (EMDB) に登録されています。しかし、そのデータを 3 次元閲覧用のソフトウェアを使って論文に載っている図のように表示するには、手間と専門的な知識が必要です。原子モデルなどと組み合わせた複合的な構造データの場合は、そのハードルはさらに高くなります。

そこで EM Navigator では、誰でも簡単に分かりやすく見ることができるように、EMDB に登録されている各データのムービーを作成し、それを各ページに埋め込みました。特殊なソフトをインストールすることなく、3 次元映像をその詳細情報とともに、ウェブブラウザで見ることができます。原子モデルを当てはめたムービーや重要な部位のズームアップなど、各データに特有のムービーも順次追加していく予定です。さらに、原子モデルが同時に公開されたデータはそのスナップショット画像も表示したり、データの投稿者による付加情報をウェブブラウザでそのまま閲覧できるようにしたりするなど、さまざまな工夫を凝らしています。

しかし、私たちが目指しているのは楽しいだけのサイトではありません。今後はデータの網羅的な解析も含めたサービスを展開していきたいと考えています。

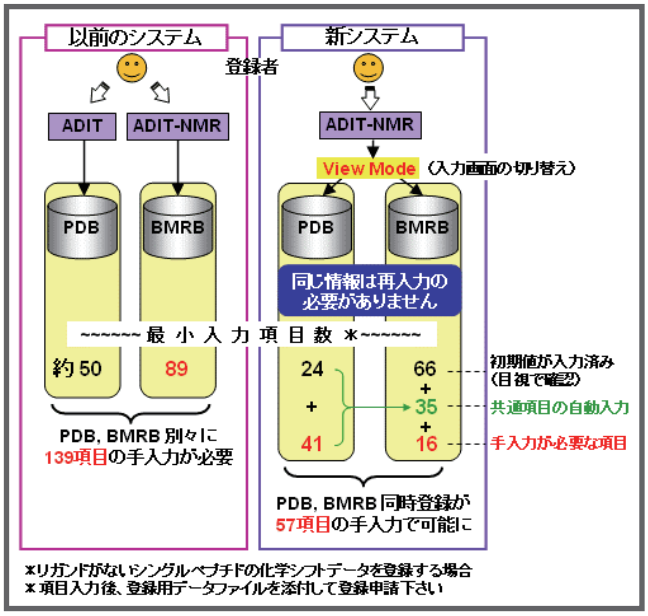


EM Navigator のトップページ。

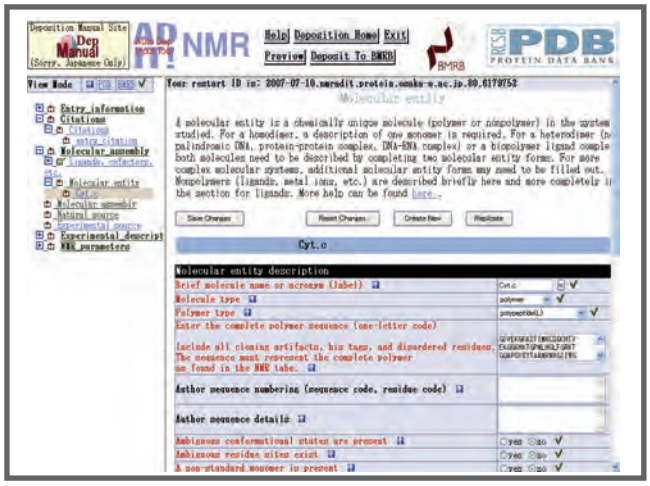
BMRB データベースの新しい登録ウェブサイト（新 ADIT-NMR）

蛋白質や核酸の国際的な NMR データベースである BMRB（BioMagResBank, University of Wisconsin-Madison）は、データ登録のためのウェブインターフェイス（ADIT-NMR）の新バージョンを開発しました。これまで、生体高分子研究における NMR 実験データと、その情報を基として決定された構造座標データをそれぞれ BMRB と PDB（Protein Data Bank）に登録する場合、研究者は両データベース個別の登録サイトにアクセスして、それぞれデータの入力と NMR データファイルあるいは構造座標ファイルのアップロードが必要でした。新 ADIT-NMR では両登録サイトを一つにまとめ、システムも単一化することで、一度の登録作業で BMRB と PDB に登録することを可能としました。このことによって、登録情報や引用情報、生体高分子の記述や出所情報など、両データベースの登録で重複する必要項目の入力は一度で済み、さらに既定値の設定やプルダウンによる選択の項目を増加させることで、研究者の登録作業の手数を減少させました（右上図）。

二ヵ所ある BMRB の登録サイトのうち BioMagResBank では 2006 年 9 月より、大阪大学蛋白質研究所の PDBj サイトでは 2007 年 5 月より新 ADIT-NMR でデータ登録を受け付けています（http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmrb-adit）。



新旧のデータ登録システム。



新 ADIT-NMR のデータ入力画面。
（http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmrb-adit）

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）
楠木正巳（ 大阪大学蛋白質研究所・准教授 ）
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
Standley, Daron M. （JST-BIRD, 大阪大学臨床医工学融合研究教育センター・招聘准教授 ）
金城玲（大阪大学蛋白質研究所・客員准教授）
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・准教授 ）
阿久津秀雄（ 大阪大学蛋白質研究所・招聘教授 ）
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 ）

関連データベース
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 ）
輪湖博（ 早稲田大学社会科学部・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/

PDBj
Protein Data Bank Japan