

## Protein Data Bank Japan (日本蛋白質構造データバンク)

### 第 13 回日本蛋白質科学会年会ランチョンセミナー

#### 1: Introducing PDBj's new web interface: Smart, Customizable & Futuristic

新しい PDBj Web; カスタマイズ可能な未来型インタフェース ーより賢く、あなた好みに

◆ Gert-Jan BEKKER (大阪大学蛋白質研究所)

Here we present the new web interface developed by the PDBj. Aside from offering a more modern look, the new website offers users to customize what information to show and in which manner. All features and services users know from the previous website are still present in the new interface, but have been redesigned and integrated into a single unified design. The underlying databases, search algorithms and web services have also been redesigned. Searching the new PDBj website has been made easier by the new quick search bar available on every page to quickly search the entire PDBj website. All data viewable on the website can also be accessed using the new REST interface including (but not limited to) the quick/advanced search function, PDB Explorer pages and website content. Future releases of the interface will offer even more conveniences for users as new features will be added. Upon user's requests, new features can also be added. Please contact us to suggest a feature to be included.

#### 2: 生体高分子 NMR データバンク (BMRB) 新ポータルサイト :データ解析、登録支援、データベースの活用

Upgraded portal site of Biological Magnetic Resonance Bank (BMRB):  
tools for NMR data analysis, deposition to the database

◆ 岩田武史 (大阪大学蛋白質研究所)

PDBj- BMRB グループは米国 BMRB および wwPDB と連携して、NMR データベースである BioMagResBank の開発や、拠点としてサイトの構築運営を行っている。登録した研究者から寄せられた意見を反映した新ポータルサイトを昨年末より公開し、日本及びアジア圏での NMR 実験データの登録支援の向上を目指している。日本に拠点がある強みを活かした日本語での新たな登録解説マニュアルに加え、NMR データの解析支援ツールである MagRO、NMR-STAR 形式から XML 形式へと変換するコンバータなど我々が独自に開発した支援ツール群をセミナーで紹介する。

#### 3: PDB の『新』フォーマット

The "new" PDB format

◆ 金城 玲 (大阪大学蛋白質研究所)

いわゆる「PDB 形式 (フォーマット)」は、人の目に読みやすく、一見したところ行指向で機械的にも扱いやすそうに見えるため、40 年以上にわたり広く使われてきた。しかし近年の巨大複合体の構造データや、より複雑化した生物学的な注釈や PDB 以外のデータベースとの連携などといった課題に対し対応できないといった問題を抱えている。wwPDB では、これらの問題に対応するために、従来の PDB 形式に代わり、mmCIF を基礎とした PDBx 形式を PDB の基本フォーマットとして推進していくことを決定した。PDB 形式が無くなると、既存のソフトウェアが動かなくなるといった不都合が予想されるが、多くの著名なソフトウェアは PDBx を既にサポートしているか、今後のサポートを予定している。しかし、何よりも重要なのは、利用者が PDBx 形式のファイルを読み解けるようになることである。このセミナーでは、PDBx 形式の基本概念を解説し、いくつかの具体例を紹介していく。

#### Protein Data Bank Japan

〒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

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

<http://pd bj.org/>