

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

第 14 回日本蛋白質科学会年会ランチョンセミナー

1. Protein Data Bank as the Base for Structural Life Science

ー 構造生命科学の基盤である蛋白質構造データバンク

◆ 中村 春木 (大阪大学蛋白質研究所)

PDBj (PDB Japan, <http://pd bj.org/>) は、wwPDB (worldwide PDB, <http://wwpdb.org/>) のメンバーとして国際的な共同作業により、X 線結晶解析、核磁気共鳴 (NMR) 法解析、電子顕微鏡解析などの構造生物学実験によって決定された蛋白質等の生体高分子の 3 次元立体構造を登録し、PDB (Protein Data Bank) データとして全世界へ無償で公開している。X 線結晶構造に対しては各構造情報に対する精度に関する検証レポートを公開してデータの品質管理を高める一方、蛋白質の構造と機能解析のための様々なツールを開発して提供し、いわゆる構造生命科学の基盤を与えている。

2. The Basics of PDBx/mmCIF, the "new" PDB format

ー “新しい” PDB フォーマット PDBx/mmCIF の基礎

◆ 伊藤 暢聡 (東京医科歯科大学大学院)

いわゆる PDB フォーマットは、1970 年代に開発され、単純で理解しやすく、座標の編集等も簡単にできるなどの便利さから広く普及してきた。しかし、もともと座標記述が目的だったため、生物学的なデータなどに関しては、record name や REMARK 行の拡充で対応してきたものの、必ずしも最適とは言えなかった。また、ペプチド鎖数や原子数の制限など、近年の巨大複合体に適応しきれていない面もある。そこで wwPDB では、これまで内部的な標準フォーマットとして使用してきた mmCIF をもとに PDBx/mmCIF を開発し、新しい標準書式として採用した。今回は PDBx/mmCIF の基本を旧来の PDB フォーマットと比較しながら解説する予定である。

3. BMRB and Tools for NMR Analysis and Deposition to the Database

ー BMRB と NMR データ解析、登録ツール

◆ 小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所)

大阪大学の BMRB は NMR 実験データベースの登録、管理、公開を行っている。これまでに BMRB は NMR データ解析とデータベースへの登録を支援するツールとして MagRO を開発し、公開してきた。また、最近では BMRB データベースを他のデータベースと統合的に利用するために全登録データを XML 化、RDF 化し公開している。本セミナーにおいてはデータ解析のための更なる効率化を図るために開発された、高度に自動化された NMR シグナルの帰属機能やデータベースに登録されているデータの高度な利用方法について解説する。

Protein Data Bank Japan
<http://pd bj.org/>

〒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 データベース登録事務局 tel: (06) 6879-8634, Fax: (06) 6879-8636