

日本結晶学会令和元年度年会 ランチョンセミナー

日時：2019年11月19日（火） 12:00-13:00

会場：金沢市文化センター A会場：会議棟 3F 大会議室

1. PDBx/mmCIF フォーマットによる PDB 登録と データ検証ポリシーについて

栗栖 源嗣(大阪大学蛋白質研究所)

PDBj (PDB Japan, <https://pd bj.org/>)は蛋白質等の生体高分子の構造情報を登録し、世界で唯一の PDB (Protein Data Bank) データとして無償で公開しています。今回のセミナーでは、PDBx/mmCIF フォーマットでの登録が必須となった点や、リガンド構造のデータ検証の方針など、本年 10 月に開催された wwPDB 運営諮問委員会で議論された最新の情報を紹介します。本セミナーでは、日々更新される世界共通の登録システム OneDep の効率的な使い方とデータ登録の際の注意点について具体的な例を紹介します。当日は PDBj アノテーターが参加し、皆様からの質問にお答えします。

2. Editing PDBx/mmCIF files via a web-based CIF editor

Gert-Jan Bekker

Institute for Protein Research, Osaka University

From July 1st 2019, deposition of PDBx/mmCIF formatted files has become mandatory for MX depositions. However, since many depositors are still used to the legacy flat-file format, we have developed a PDBx/mmCIF editor to help users transition to the new format. Because the editor can be used from within a web browser, it doesn't require any installation. Local files can be loaded directly into the editor, which processes all the data on the client side, without requiring any data to be sent to a server. Individual data items can be edited manually, while via batch operations, such as renumbering and renaming, a large number of data items within a category can be modified instantaneously. A filter mechanism enables these batch operations to only be performed on a subset of the data, e.g. only on a specific chain, or even only part of a chain. Finally, the modified PDBx/mmCIF file can then be saved back to the user's local file system. During the seminar, the editor will be introduced and demos to how it can be used will be given. The editor is available at <https://pd bj.org/cif-editor> and we encourage depositors to try it out. We greatly appreciate any comments or feature requests you might have, which can also be made online at <https://pd bj.org/contact>.