

第 21 回日本蛋白質科学会年会 ランチタイムセミナー 2021 年 6 月 16 日 (水)

1. PDBj の最近の活動と wwPDB の今後の活動方針について

Activity report of PDBj and scheduled activity plan of wwPDB

栗栖 源嗣(Genji Kurisu)

大阪大学蛋白質研究所

PDBj (<https://pdbj.org/>)は, worldwide PDB (wwPDB, <http://wwpdb.org/>) の設立メンバーとしてアジア・中東地区で決定された蛋白質等の生体高分子の構造を wwPDB が管理するコアアーカイブ (PDB, BMRB, EMDB) に登録処理し, 国際的に協調して座標と実験データを全世界へ無償で公開しています。今回のセミナーでは, PDBj の最近の活動を報告するとともに, wwPDB が管理するコアアーカイブの今後の運営体制とデータ検証の方向性について, 更に旧来の PDB フォーマットが 2.3 年のうちに使えなくなる事情と PDBx/mmCIF フォーマットへの完全切替えの予告について説明します。さらに 2020 年 wwPDB 運営諮問委員会で議論された今後の活用の方向性など, PDB に関する最近の状況を紹介します。

2. PDBj tools and services for analyzing, editing and registering structural data.

PDBj が提供する、構造データを分析、編集・登録するためのツールやサービス

Gert-Jan Bekker

大阪大学蛋白質研究所

PDBj has developed multiple services for exploring, visualizing and retrieving data from the PDB. In this seminar, we will introduce some of the new functionality of the main PDBj website, as well as new functionality of our WebGL based molecular viewer Molmil (<https://pdbj.org/molmil2/>). Besides these data-out related services, we have also developed several tools related to our data-in activities. To help depositors edit mmCIF formatted files, e.g. to add additional data or modify the data produced by structure determination software such as PHENIX or CCP4, we have developed a web-based CIF editor, which can also be used for non-mmCIF files (<https://pdbj.org/cif-editor/>). Finally, we will introduce our new service for depositing raw X-Ray diffraction images, XRD-Arc (<https://xrda.pdbj.org>).