Protein Data Bank Japan
https://pdbj.org

CBI 学会 2021 年大会 スポンサーセッション SS-12
2021 年 10 月 26 日(火) 15:00-16:30

1. コロナ禍における PDB の活動と構造データの品質向上およびデータ検証の取り組みについて

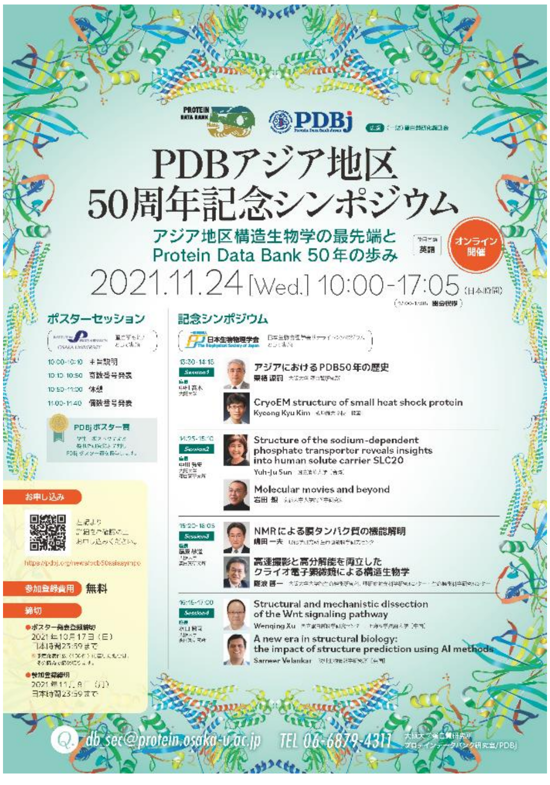
大阪大学蛋白質研究所 栗栖源嗣

PDBj(PDB Japan, https://pdbj.org/)はタンパク質等の生体高分子の構造情報をデータベース化し，世界で唯一の蛋白質構造データバンク（PDB）を無償で公開しています。今回のセッションでは，コロナ禍において，必要なデータをどの様に迅速に提供しているのか，また，PDB データの品質向上のために行っているデータ更新プロジェクト，さらに Cambridge Structural Database (CSD)を活用したデータ検証の現状についてお話しします。

2. wwPDB がデータ検証で用いる CSD を活用した BUSTER による構造精密化事例について

大阪大学蛋白質研究所 中川敦史

2019 年 6 月以降，wwPDB(worldwide Protein Data Bank)は Global Phasing Ltd.が提携する結晶学的精密化ソフト BUSTER と CSD の Mogul を積極的に利用して作成した制限情報（Restraint File）を活用してタンパク質に結合したリガンドの構造化学と電子密度への一致度を評価しています。Mogul を活用した制限情報を使うことで，構造化学的により信頼性の高い構造を導き出し，最も確からしい電子密度を得ることができます。講演では，実際に BUSTER を使って構造精密化した実例についてお話しいたします。



PDBアジア地区
50周年記念シンポジウム
アジア地区構造生物学の最先端と
Protein Data Bank 50年の歩み
英語
オンライン開催
2021.11.24 [Wed.] 10:00-17:05 (日本時間)

ポスターセッション
10:00-10:10 主旨説明
10:10-10:50 奇数番号発表
10:50-11:00 休憩
11:00-11:40 偶数番号発表

PDBjポスター賞

記念シンポジウム
13:30-14:15 Session1
アジアにおけるPDB50年の歴史 栗栖 源嗣
CryoEM structure of small heat shock protein Kyeong Kyu Kim

14:25-15:10 Session2
Structure of the sodium-dependent phosphate transporter reveals insights into human solute carrier SLC20 Yuh-Ju Sun
Molecular movies and beyond 岩田 想

15:20-16:05 Session3
NMRによる膜タンパク質の機能解明 嶋田 一夫
高速撮影と高分解能を両立したクライオ電子顕微鏡による構造生物学 難波 啓一

16:15-17:00 Session4
Structural and mechanistic dissection of the Wnt signaling pathway Wenqing Xu
A new era in structural biology: the impact of structure prediction using AI methods Sameer Velankar

お申し込み
https://pdbj.org/news/pdb50asiasympo

参加登録費用 無料

締切
●ポスター発表登録締切
2021年10月17日（日）
日本時間23:59まで
●参加登録締切
2021年11月8日（月）
日本時間23:59まで

db_sec@protein.osaka-u.ac.jp TEL 06-6879-4311 大阪大学蛋白質研究所 プロテインデータバンク研究室/PDBj

PDB は今年設立 50 周年を迎えます！

181780
PDBj
PDBjについて
お知らせ
必要なサービスを探す
最新情報
今月の分子
PROTEIN DATA BANK
新型コロナウイルス 最新構造情報
EM Navigator
BMRBj

PDBj 事務局
565-0871 大阪府吹田市山田丘 3-2
大阪大学蛋白質研究所プロテインデータバンク研究室
Email: db_sec@protein.osaka-u.ac.jp
TEL: 06-6879-4311 (事務局) 8634 (登録事務局)

3.Data integration to facilitate drug discovery

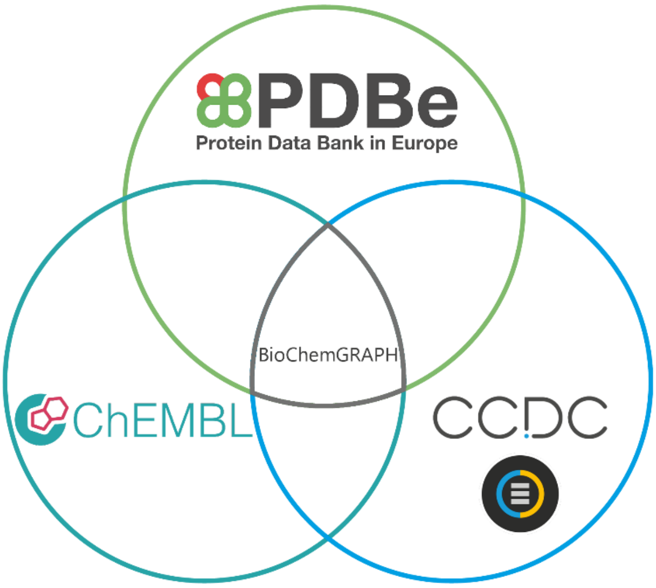
Francis L. Atkinson
Cheminformatics Data Scientist
Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)
Email: fatkinson@ccdc.cam.ac.uk

Several data resources for chemical and biochemical data relevant to structure-based drug design exist. However, much time must currently be spent by drug discovery researchers to standardise, curate, and integrate data from these multiple resources to gain a comprehensive understanding of biological systems.

A recent collaboration between EMBL's European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI) and the CCDC will allow the aggregation of data on small molecules and related macromolecules together into a knowledge-based platform developed by the Protein Data Bank in Europe (PDBe). The collaboration, called BioChemGRAPH, will bring together data from the PDBe, ChEMBL and the Cambridge Structural Database (CSD) and will allow researchers to quickly access relevant information from trusted, but currently separate, datasets, helping to advance research in the fields of drug target validation, development, and repurposing. It will be possible to better answer questions like:

* How does this target behave?
* Where can this drug be repurposed?
* What potential side-effects could this candidate have?

In this talk we will describe the background to this project and the progress made to date.



国内連絡先：
化学情報協会
科学データ情報室
Email: crystal@jaici.or.jp