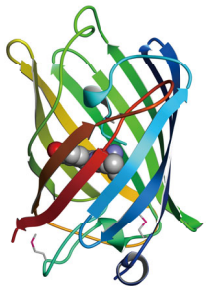
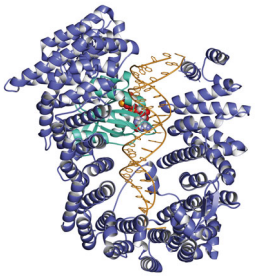
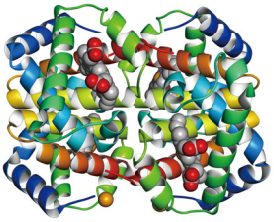
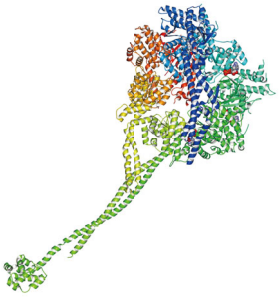
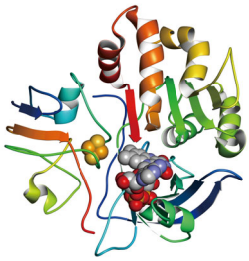
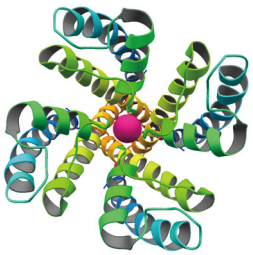
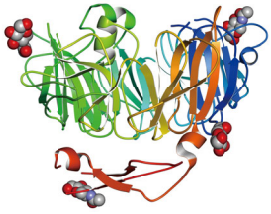
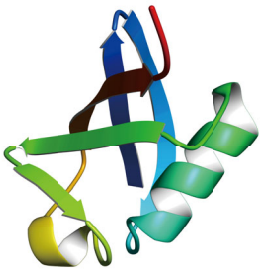
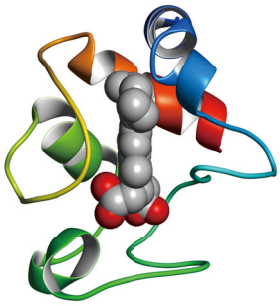
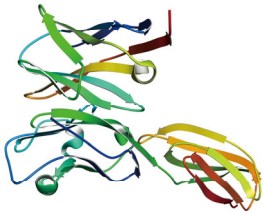
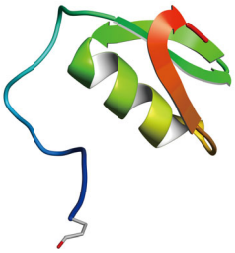
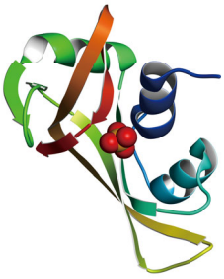
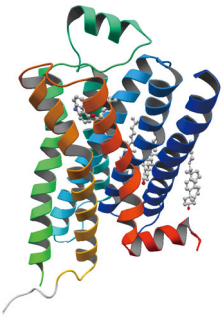



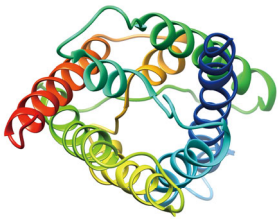
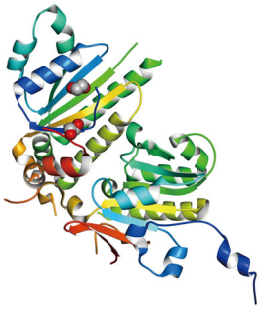
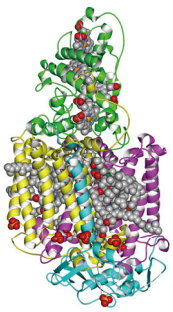
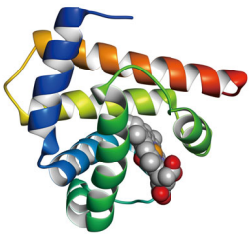
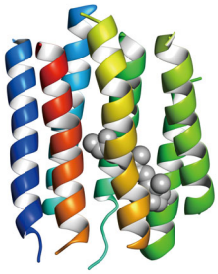
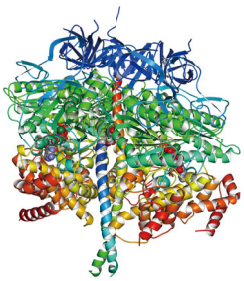
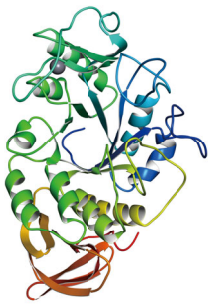
PDBj Newsletter

2022年3月

Vol.22 No.2



PDBj Activities

PDB50 Award

2021 年5月 4 日（火）～ 5 日（水）（EST=UTC-4）に開催された PDB 設立 50 周年記念事業の始まりとなるアメリカ生化学・分子生物学会（ASBMB）オンラインイベントで 209 件のポスター発表があり，その中から 4 名の発表者にポスター賞が贈られました。

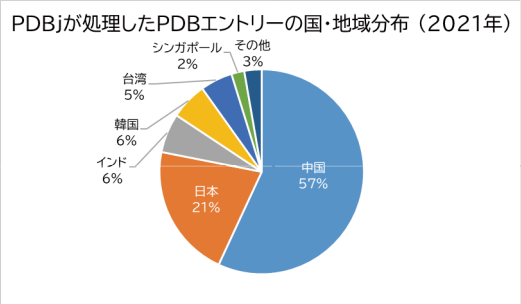
高校生最優秀賞：Nicholas Mamisashvili, Shelter Island High School, Molecular Dynamics Simulation of 6PEY.pdb a Novel Mutation in the Enzyme Methylenetetrahydrofolate Reductase

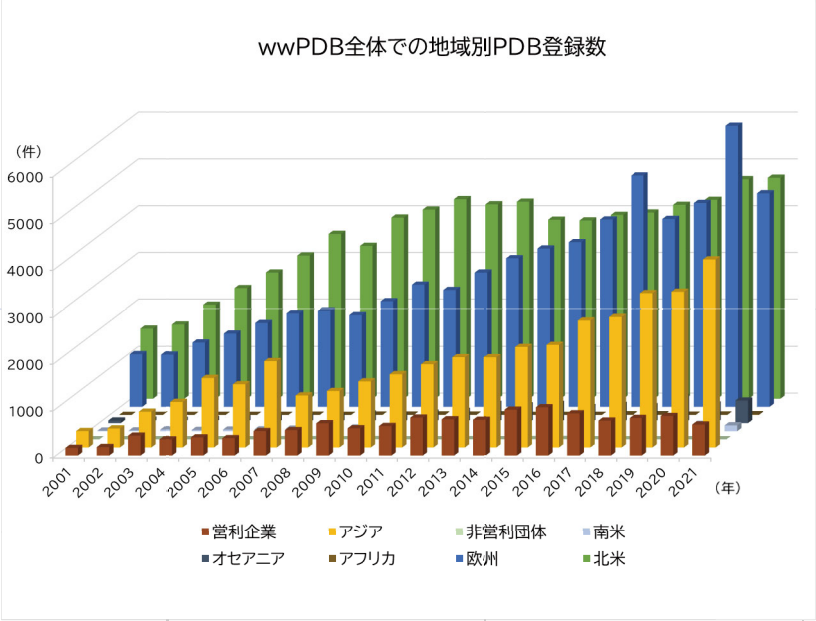
大学生最優秀賞：Ijeoma Okoye, Vassar College, X-ray and Antioxidant Determination of Butein and 2’,4’-dihydroxy-3,4-dimethoxychalcone to Examine their Antimalarial Activity by Binding to Falcipain-2

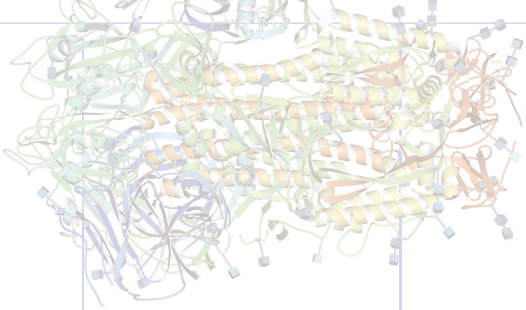
大学院生最優秀賞：Daniel Sultanov, New York University, Mining for functional ribosomal variants in Saccharomyces cerevisiae

博士研究員最優秀賞：Seda Kocaman, National Institute of Environmental Health Sciences, Different ATP binding states of the essential AAA (ATPases Associated with various Activities)-ATPase Rix7 facilitate substrate translocation in ribosome biogenesis

PDBj Data Growth





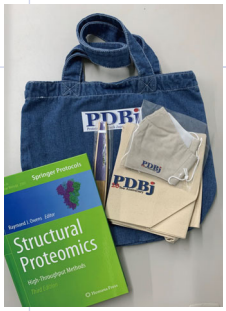


「PDB アジア地区50周年記念シンポジウム」開催とPDBjポスター賞について

2021 年 11 月 24 日（水）、PDB 創設 50 周年を記念して「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～」をオンラインで開催しました。国内外から 300 名以上の研究者のご参加をいただき盛会のうちに終えることができました。

ポスターセッションでは、アジアを中心に 7 か国から 78 件の発表があり、そのうち、学生ならびに若手研究者による 57 件が PDBj ポスター賞の審査対象となりました。

選考の結果、以下の 4 名が受賞者と決定しましたので、ここに発表するとともに、心よりお祝いいたします。受賞者のみなさんには証明書と副賞（書籍、PDBj ノベルティグッズ）をお送りします。



* “Structural Insights into the Clustering and Activation of Tie2 Receptor Mediated by Tie2 Agonistic Antibody”, Gyunghee Jo (Center for Biomolecular and Cellular Structure, Institute for Basic Science(IBS), Republic of Korea)
* “Crystal structure of methylenetetrahydrofolate reductase from Sphingobium sp. SYK-6”, Hongyang Yu (Structural Biology Research Center (SBRC), Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Organization (KEK), and Department of Materials Structure Science, School of High Energy Accelerator Science, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), Japan)
* “Exploring the structural aspects of a novel phospholipid-binding protein”, Angshu Dutta (Department of Biosciences and Bioengineering, Indian Institute of Technology Guwahati, India)
* “A new trend of protein crystallography: Polymorph analysis using hierarchical clustering of diffraction data”, Hiroaki Matsuura (RIKEN/SPring-8 Center)

ポスター賞の審査員の先生方にはご協力に感謝申し上げます。また、セッションに参加くださったすべての発表者のみなさまにお礼申し上げます。

【ポスター審査員】

有森貴夫（大阪大学）、大山拓次（山梨大学）、加藤貴之（大阪大学）、川端猛（(一財）蛋白質研究奨励会）、川本晃大（大阪大学）、岸川淳一（大阪大学）、栗栖源嗣（大阪大学）、児嶋長次郎（横浜国立大学）、小手石泰康（大阪大学）、杉木俊彦（大阪大学）、杉島正一（久留米大学）、髙木淳一（大阪大学）、髙﨑寛子（大阪大学）、田中秀明（大阪大学）、藤間祥子（奈良先端科学技術大学院大学）、中川敦史（大阪大学）、長尾知生子（大阪大学）、沼本修孝（東京医科歯科大学）、橋本浩介（大阪大学）、橋本博（静岡県立大学）、平田邦生（理化学研究所）、深井周也（京都大学）、藤原敏道（大阪大学）、松木陽（大阪大学）、水口賢司（大阪大学）、宮ノ入洋平（大阪大学）、山下栄樹（大阪大学）　　敬称略、あいうえお順

末筆となりますが、このシンポジウム開催につきましては、一般財団法人蛋白質研究奨励会より多大なるご支援を賜りました。また、第 59 回日本生物物理学会サテライトイベントならびに大阪大学蛋白質研究所の国際蛋白研セミナーとして開催しました。関係各位のご配慮・ご協力に改めて感謝申し上げます。

PDBj Topics

一部EMエントリー登録時のハーフマップ必須化

2022 年 2 月 25 日より、単粒子、単粒子ベースのヘリカル、およびサブトモグラムの平均化再構成法による EM エントリーについては、ハーフマップを EM データバンク（EMDB）に登録することが必須化されました。

https://pdbj.org/news/Mandatory-deposition-half-maps2

（2022 年2月 25 日）

PDBx/mmCIF形式での生物学的集合体構造データの提供について

これまで生物学的集合体の構造ファイルは PDB フォーマット形式で提供してきましたが、2022 年 5 月 3 日より PDBx/mmCIF 形式での提供を開始します。対象操作等により鎖を複製した場合、鎖 ID は変えずにモデル番号で区別する方法を取ってきましたが、この新たに提供する形式では生物学的集合体に含まれるすべての鎖に一意な鎖 ID が割り振られるようになります。

https://pdbj.org/news/Assembly_files_mmCIF_format

（2022年２月２日）

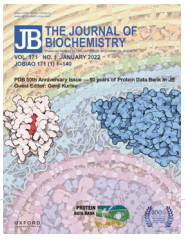
PDBj 論文

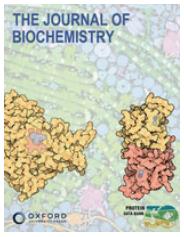
Protein Science

PDBj の活動 20 周年を記念し、これまでの歴史と最近の活動について紹介した論文です。

Protein Data Bank Japan: Celebrating our 20th anniversary during a global pandemic as the Asian hub of three dimensional macromolecular structural data, Gert-Jan Bekker, Masashi Yokochi, Hirofumi Suzuki, Yasuyo Ikegawa, Takeshi Iwata, Takahiro Kudou, Kei Yura, Toshimichi Fujiwara, Takeshi Kawabata, Genji Kurisu, Protein Science 31(1) 173-186 2022 doi:10.1002/pro.4211

Journal of Biochemistry





PDB 50 周年を記念した特集号が The Journal of Biochemistry で公開されました。
https://academic.oup.com/jb/issue/171/1

また、PDB50 記念のバーチャル号「Protein Data Bank 50th Anniversary Virtual Issue: Featured structural articles from The Journal of Biochemistry」も公開されています。
https://academic.oup.com/jb/pages/protein-data-bank-50th-anniversary

この号では、1971 年以降 JB 誌に掲載された論文のうち、引用数が多い上位 10 件、分解能の高い上位 5 件を取り上げ、JB 誌における最初の NMR 構造に関する論文 2 件とデータベースに関する論文 1 件を合わせて紹介しています。

PDBj

Outreach

トーゴーの日シンポジウム2021

2021 年 10 月 5 日（火）にオンラインで開催された、ライフサイエンス分野のデータ統合に関する課題をともに考え、議論を深めるためのイベント「トーゴーの日シンポジウム 2021」（主催：国立研究開発法人科学技術振興機構）において PDBj および BMRBj の活動について紹介するポスター発表を行いました。

SciDataCon

2021 年 10 月 27 日（水）にオンラインで開催された SciDataCon 2021: The Global Open Science Cloud Initiative において、PDBj がアーカイブを開始した結晶解析の生回折イメージのデータベース「XRDa」が紹介されました。国際学術会議の Data 委員会においてケーススダディの対象アーカイブに認定され，今後の展開と活用が期待されています。

IPRリトリート

2021 年 11 月 15 日（月）にオンラインで開催された第 19 回 IPR リトリートにおいて、PDBj/BMRBj の Data-in 活動と、ウェブベースで軽快に動作する分子ビューア Molmil の紹介を行いました。

日本分子生物学会

2021 年 12 月 02 日（木）に開催された第 44 回 日本分子生物学会年会のフォーラム「生命科学のデータベース活用法」において、PDB のメタデータと他のデータベースの情報と連携した検索に役立つ、RDF グラフデータモデルで記述された PDB/RDF アーカイブを紹介しました。PDB/RDF アーカイブは、UniProt などのデータベースと関連づけられる SIFT データと、実験データと構造モデル間の整合性を評価する PDB 検証レポートの内容を統合することで強化されました

NHKスペシャルのCG作成に協力

2022 年 1 月 25 日（火）午後 10:00 から放映されたテレビ番組、NHK スペシャル「オミクロン株 “第 6 波” の行方」において、川端猛招へい准教授が作成したスパイクタンパク質の立体構造モデルが使用されました。2020 年、2021 年に放映された NHK スペシャルで用いられたコロナウィルスの CG 作成にも PDBj は協力しています。

CBI学会

2021 年 10 月 26 日（火）にオンラインで開催された「情報計算化学生物学会（CBI 学会）2021 年大会」にて Cambridge Crystallographic Data Centre（CCDC）と共同でスポンサーセッションを開催しました。

PDBj からはコロナ禍における PDB の活動、構造データの品質向上や検証について、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紹介しました。

日本生化学会

2021 年 11 月 3 日（水）～ 5 日（金）にオンラインで開催された第 94 回日本生化学会大会にてポスター発表を行いました。

日本生化学会の英文誌 J. Biochem. の PDB50 周年記念号で紹介した “50 years of Protein Data Bank in the Journal of Biochemistry” という内容で，J.Biochem. 誌に報告されている 317 件の PDB エントリーのメタデータについて，各年の報告数，分解能，解析精度，解析対象，引用件数などの視点で欧米の学会が発行する雑誌に報告されたエントリーと比較・検討しています。

日本結晶学会

2021（令和 3）年 11 月 19 日（金）にオンラインで開催された日本結晶学会 令和 3 年（2021 年 ）度年会の企業セミナーにて講演を行いました。PDBj からはコロナ禍における PDB の活動，構造データの品質向上や検証について，また wwPDB がデータ検証でもちいる CSD を活用した BUSTER による構造精密化事例について，登録者向けに紹介を行いました。

統合データベース講習会(AJACS)

バイオサイエンスデータベースセンター（NBDC）の主催で 2022 年 1 月 20 日（木）に開催されたオンライン講習会「タンパク質のデータベースを活用する」（AJACS オンライン 10）にて、PDB データの見方、分子ビューア Molmil の使い方、およびホモロジーモデリングサービス HOMCOS について川端猛招へい准教授が講義を行いました。

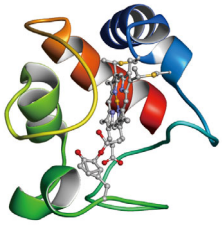
講義動画は下記アドレスで参照できます。

https://youtu.be/Iapa-dAwmpU

PDBj

Episode

アジアで最初に解かれた構造について



アジアで最初に PDB に登録された構造は大阪大学蛋白質研究所の角戸正夫教授のグループが解析したカツオの還元型チトクロム c（PDB ID: 1cyc）です。私は，これまでその事実を持ってして“アジアで最初に解かれた構造はカツオのチトクロム c です”と申し上げていました。しかし当時アジアには、PDB に登録されていなかったものの、独立で解析された構造が他にもあったことがわかりました。友人から 1972 年の IUCr 京都大会においてノーベル賞受賞者の D. C. Hodgkin 教授が自身のグループで構造解析したインシュリンの構造を発表した際に「中国に全く独立に構造解析されたインシュリンの結晶構造がある」と話され世界中の結晶学者が驚いたと聞かされました。1972 年の IUCr 京都大会の要旨集を確認したところ，5 番目の講演が角戸教授グループによる 2.3 Å 分解能の結晶構造で，その前の 4 番目の講演が Hodgkin 教授グループによる 1.9Å 分解能のインシュリンの発表でした（ちなみに，3 番目の講演は名古屋大学の坂部先生グループによる 3.1 Å 分解能のインシュリン結晶の重原子同型置換法による位相決定です）。国際結晶学連合会議でアジア発の構造が結果的に2つ紹介された訳で，アジアには同じ時期に 2 つの構造があったことを示しています。私は中国語を読めませんが漢字はわかりますので，1972 年に中国国内で出版された中国語の論文「2.5 埃分辨率胰岛素晶体结构的研究」を取り寄せて，内容を確認しました。1970 年に 4.0 Å，1971 年に 2.5 Å 分解能で構造が解析されたと記されていました。日本のチトクロム c の構造についても，日本結晶学会誌の記事と日本生化学会が発行する J. Biochem. 誌を確認し，1970 年にスイスで開催された国際生化学会で 6.0 Å の構造が発表され要旨集の表紙を飾り，1971 年に 4.0 Å の構造が J. Biochem. 誌に報告されて，1972 年の IUCr 京都大会で 2.3 Å の構造が発表された資料を発見しました。これまでの私の発言を訂正すると共に，今後はどちらの構造が先かを突き詰めることはせずに，日中の先達の貢献に敬意を表して“アジアで最初に解かれた構造はほぼ同時期に 2 つあります“と発言させていただこうと思います。

大阪大学蛋白質研究所 栗栖源嗣

Protein Data Bank Japan

Staff

統括責任者　栗栖 源嗣（大阪大学蛋白質研究所・教授）

PDB/EMDBデータベース構築グループ

中川 敦史　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
見学 有美子（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
張 羽澄　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
池川 恭代　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
佐藤 純子　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
金 宙妍　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

BMRBデータベース管理運営グループ

藤原 敏道　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
児嶋 長次郎（横浜国立大学工学部・教授）
宮ノ入 洋平（大阪大学蛋白質研究所・准教授）
岩田 武史　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）
横地 政志　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

EMPIARデータベース管理グループ

川端 猛　（蛋白質研究奨励会・研究員/
大阪大学生命機能研究科招へい准教授）
中根 崇智　（大阪大学蛋白質研究所・特任講師）
常住 規代　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

PDB/EMDBデータベース高度化グループ

藤 博幸　（関西学院大学理工学部・教授）
水口 賢司　（大阪大学蛋白質研究所・教授）
Bekker, Gert-Jan（大阪大学蛋白質研究所・特任助教）
長尾 知生子（大阪大学蛋白質研究所・助教）
山下 鈴子　（大阪大学蛋白質研究所・技術専門職員）
工藤 高裕　（大阪大学蛋白質研究所・特任研究員）

研究協力者

中村 春木　（大阪大学蛋白質研究所・名誉教授）
由良 敬　（お茶の水女子大学 教授 / 文理融合AI・データサイエンス
センター 副センター長）for EM Navigator
鈴木 博文　（早稲田大学先進理工学部・次席研究員）for EM Navigator
小林 直宏　（理化学研究所横浜放射光科学研究センター・上級研究員）
輪湖 博　（早稲田大学社会科学総合学術院・教授）for ProMode
猿渡 茂　（北里大学理学部・准教授）for ProMode
伊藤 暢聡　（東京医科歯科大学大学院・教授）
木下 賢吾　（東北大学大学院情報科学研究科・教授）for eF-site
Standley, M.Daron（大阪大学微生物病研究所・教授）
for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, ASH, MAFFTash, Spanner and SFAS
加藤 和貴　（大阪大学微生物病研究所・准教授）for MAFFTash

秘書　佐久間 量子（大阪大学蛋白質研究所・特任事務職員）

Contact

PDBj 事務局　Tel: (06)6879-4311
PDBj 登録事務局　Tel: (06)6879-8634
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2 大阪大学蛋白質研究所 内

ご質問やご要望は
ウェブページ左にある「お問い合わせ」
https://pdbj.org/contact
から常時受け付けています

2022年3月 発行