

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

一般社団法人  
化学情報協会

## 第 16 回日本蛋白質科学会年会ランチオンセミナー

日 時 6月7日(火) 11:45-12:35  
会 場 B会場(福岡国際会議場 2F 多目的ホール)

### 1. 統合化された NMR データベースの蛋白質研究への有効利用

小林 直宏 (大阪大学蛋白質研究所)

NMR はリガンド相互作用やタンパク質の動力学的な性質の解析などに威力を発揮する研究方法である。PDBj-BMRB グループは米 Wisconsin 大学との国際的協力関係により生体高分子の NMR 実験データについて、1 万件を超える化学シフトをはじめとするデータの登録と BioResMagBank(BMRB) からの公開を行っている。最近我々は BMRB に登録されている全 NMR データを XML 化、RDF 化し、PDB、UniProt、IntAct、OMIM など他のライフサイエンス系データベースとの統合的化を可能にした。これにより既存の配列データと類似したタンパク質データに関する NMR 実験データ、構造データ、相互作用情報、機能情報、疾患情報などを高速で得ることが出来る検索サービスを開発公開した。セミナーではこれら検索サービスや 2 次的なデータベースを利用したツールの具体的な応用事例についての詳細を解説する。

### 2. The Cambridge Structural Database (CSD)

– a vital resource for structural chemistry and biology

ケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) - 生命構造化学の重要なリソース

*Stephen Maginn, Cambridge Crystallographic Data Centre, Cambridge, UK*

For more than 50 years, the professionally-curated Cambridge Structural Database (CSD), the world's repository of small molecule crystal structures, has been in use in academia and industry. Now containing more than 820,000 entries, it is a key source of information on molecular geometry and intermolecular interactions, finding applications in structural chemistry, drug discovery and molecular design, and structural biology.

The presentation will describe how the CSD is curated, ensuring that all entries are consistently searchable and fully discoverable. The suite of software and other resources provided alongside the CSD will be described, including knowledge-based libraries on intermolecular interactions and molecular geometry.

Most importantly, some examples of how the CSD and its associated resources are applied to address real research problems will be presented. These include provision of key insights into medicinal chemistry campaigns in drug discovery, verification of proposed molecular geometry, and aiding in crystallographic refinement of protein-ligand structures.

The CSD is distributed alongside its associated software and a collection of computational applications of the data as the CSD-Enterprise package to academic institutions in Japan through the Institute for Protein Research at the University of Osaka (大阪大学蛋白質研究所), and with some targeted packages of applications to industrial organisations in Japan through JAICI (化学情報協会).

◆ PDBj に関する問合せ

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

◆ CSD に関する問合せ

[http://www.jaici.or.jp/wcas/wcas\\_ccdc.htm](http://www.jaici.or.jp/wcas/wcas_ccdc.htm)