

使用OneDep系统进行PDB登记的5个简单步骤

1 检验样品序列

序列应该

- 包括所有残基
- 包括表达标签和无序区域

使用BLAST将样品序列与参考数据库中的序列作比对

- 蛋白质 → UniProt BLAST
- 核酸 → NCBI BLAST

! 请说明样品序列和数据库中序列的所有不匹配，比如基因突变，变异或表达标签等等。

UniProt比对结果示例
涂色部分是不匹配序列

Query

61 RWWANDGRTPGSR

RWW NDGRTPGSR

79 RWWCNDGRTPGSR

P00698
(UniProt 的序列)

2 检验配体

您的配体是否存在于我们的化学成分字典 (CCD) ?

请查找:

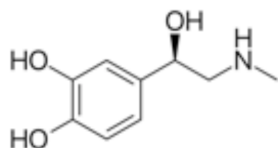
- Ligand Expo
ligand-expo.rcsb.org
- PDBeChem
pdbe.org/chem
- Chemie search
pdbj.org/chemie-search

配体是否存在于CCD ?

是 请选用化学成分字典中的3字符代码作为配体代码

否 请在登记时提供SMILES或上传2D化学构造图

化学构造图示例



3 准备登记数据

作成PDBx / mmCIF格式的坐标文件

- 可由结构优化软件 (例如 PHENIX, REFMAC) 自动输出
- 这样可以确保在登记中最大限度地保留元数据

请使用pdb_extract提取所需信息。

请访问:
pdb-extract.wwpdb.org

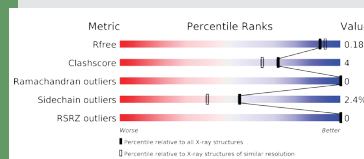
- 使用记录文件生成包含多个元数据 (例如, 作者信息, 数据收集和结构优化参数) 的单个PDBx / mmCIF文件
- 将非MTZ格式的结构因子文件转换为的PDBx / mmCIF格式

4 验证! 验证!

wwPDB提供了一个独立的验证服务器来检验您的结构
请访问:
validate.wwpdb.org

- 验证坐标和实验数据
- 提供详细报告 (PDF 和XML文件)

! 请在数据登记前尽量解决显著重要问题, 以避免登记后的数据更换。这 will 有效减少数据处理人员的工作负荷。



5 结构登记

向OneDep系统的提出登记可以直接在wwPDB登记网页进行
请访问:
deposit-pdbj.wwpdb.org

登记网页是根据实验类型量身定做的:

- X射线, 中子, NMR, EM或这些实验方法的任何组合
- 您必须上传相关的坐标和实验数据文件, 并提供必要的信息

发行登记号 (session ID) 以便您能够在以后反复登入继续数据登记。
完成数据提交后, 将发行PDB ID。

数据登记后

编辑人员将对数据进行必要的注释, 验证, 并要求作者核对

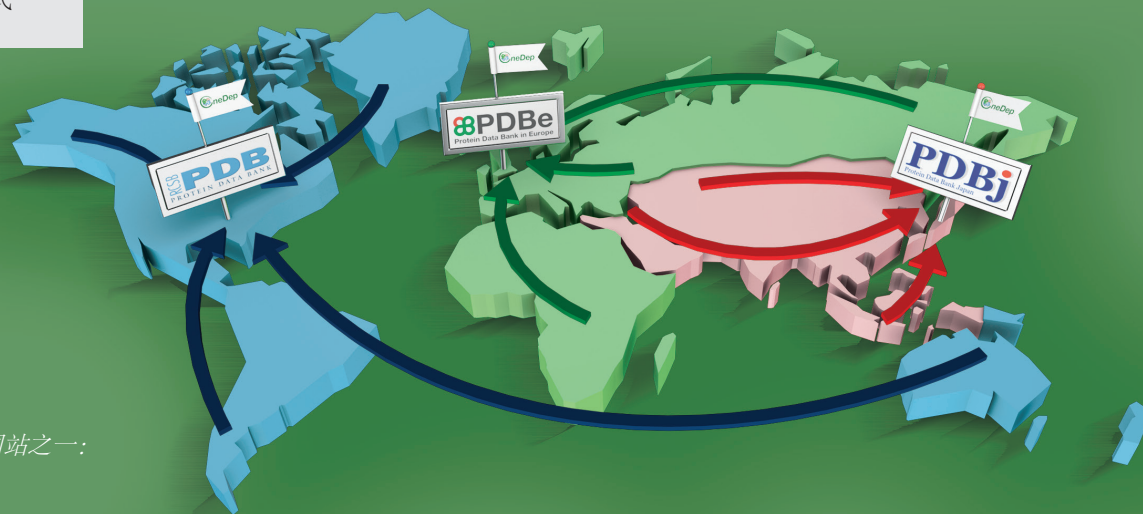
- 处理后的文件和官方验证报告可以在通讯页面下载

请使用OneDep的通讯页面申请数据公布以及提供出版物信息。

有关数据发布请遵循您在登记时所作的设置

- REL - 处理完毕后即时发布
- HPUB - 相关论文出版后即时发布, 最长可保持1年非公开状态
- HOLD - 最长可保持1年非公开状态

如果相关论文在1年内未能出版, 您可以选择发布数据或撤销该条目。



根据存款人的地理位置, 结构将被分配到世界各地的蛋白质数据库网站之一:
RCSB PDB, PDBe或PDBj。

登记步骤一览

✓ 检验样品序列

请参考UniProt

✓ 检验配体

配体是否正确命名?

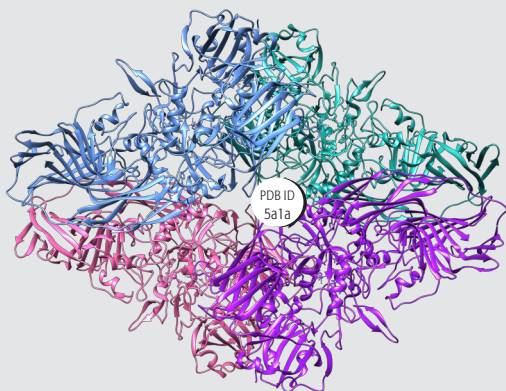
✓ 准备登记数据

作成PDBx / mmCIF格式的数据文件, 尽可能提供所有与结构相关的完整信息

✓ 验证数据

使用wwPDB的独立验证服务

✓ 一切准备就绪, 使用OneDep系统登记结构数据



在线资源

PDB_extract: pdb-extract.wwpdb.org

验证: validate.wwpdb.org

登记: deposit-pdbj.wwpdb.org

更多信息

有关验证与登记的教程和常见问题可访问以下网页:

- www.wwpdb.org/validation/validation-reports
- wwpdb.org/deposition/tutorial
- pdbj.org/help/wwpdb_dep_tutorial (简体中文)
- wwpdb.org/deposition/faq

联系我们

validation@mail.wwpdb.org

deposit-help@mail.wwpdb.org

参考文献

wwPDB 相关文献:

Nature Structural Biology **10**, 980 (2003)

doi: 10.1038/nsb1203-980

OneDep 相关文献:

Structure **25**, 536-545 (2017)

doi: 10.1016/j.str.2017.01.004

wwPDB 成员



wwPDB.org



简体中文

5 EASY STEPS TO PDB DEPOSITION

