

使用OneDep系統進行PDB登記的5個簡單步驟

1 檢驗樣品序列

序列應該

- 包括所有殘基
- 包括表達標籤和無序區域

使用BLAST將樣品序列與參考數據庫中的序列作比對

- 蛋白質 → UniProt BLAST
- 核酸 → NCBI BLAST



請說明樣品序列和數據庫中序列的所有不匹配，比如基因突變，變異或表達標籤等等。

UniProt比對結果示例
塗色部分是不匹配序列

Query

61 RWWANDGRTPGSR

RWW NDGRTPGSR

79 RWWCNDGRTPGSR

P00698
(UniProt 的序列)

2 檢驗配位基

您的配位基是否存在於我們的化學成分字典 (CCD) ?

請查尋：

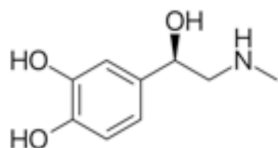
- Ligand Expo
ligand-expo.rcsb.org
- PDBeChem
pdbe.org/chem
- Chemie search
pdbj.org/chemie-search

配位基是否存在於CCD ?

是 請選用化學成分字典中的3字符代碼作為配位基代碼

否 請在登記時提供SMILES或上傳2D化學構造圖

化學構造圖示例



3 準備登記數據

作成PDBx / mmCIF格式的坐標文件

- 可由結構優化軟件 (例如 PHENIX, REFMAC) 自動輸出
- 這樣可以確保在登記中最大限度地保留元數據

請使用pdb_extract提取所需信息。
請訪問：

pdb-extract.wwpdb.org

- 使用記錄文件生成包含多個元數據 (例如，作者信息，數據收集和結構優化參數) 的單個PDBx / mmCIF文件
- 將非MTZ格式的結構因子文件轉換為PDBx / mmCIF格式

4 檢驗！檢驗！

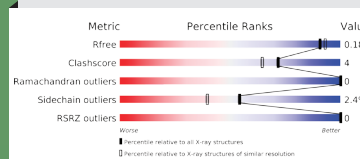
wwPDB提供了一個獨立的驗證服務器來檢驗您的結構
請造訪：

validate.wwpdb.org

- 驗證坐標和實驗數據
- 提供詳細報告 (PDF和XML文件)



請在數據登記前盡量解決顯著重要問題，以避免登記後的數據更換。
這將有效減少數據處理人員的工作負荷。



5 結構登記

向OneDep系統的提出登記可以直接在wwPDB登記網頁進行
請造訪：

deposit-pdbj.wwpdb.org

登記網頁是根據實驗類型量身定做的：

- X射線，中子，NMR，EM或這些實驗方法的任何組合
- 您必須上傳相關的坐標和實驗數據文件，並提供必要的信息

發行登記號 (session ID) 以便您能夠在以後反覆登入繼續數據登記。
完成數據提交後，將發行PDB ID。

數據登記後

編輯人員將對數據進行必要的註釋，驗證，並要求作者核對

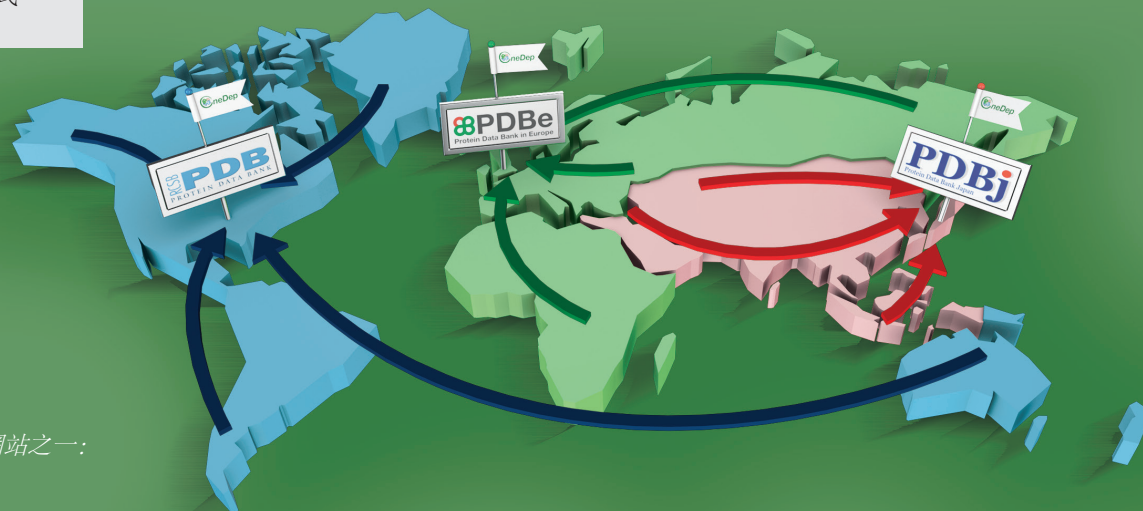
- 處理後的文件和官方驗證報告可以在通訊頁面下載

請使用OneDep的通訊頁面申請數據公佈以及提供出版物信息。

有關數據發布請遵循您在登記時所作的設置

- REL - 處理完畢後即時發布
- HPUB - 相關論文出版後即時發布，最長可保持1年非公開狀態
- HOLD - 最長可保持1年非公開狀態

如果相關論文在1年內未能出版，您可以選擇發布或撤銷該數據。



根據存款人的地理位置，結構將被分配到世界各地的蛋白質數據庫網站之一：
RCSB PDB，PDBe或PDBj。

登記步驟一覽

✓ 檢驗樣品序列

請參考UniProt

✓ 檢驗配體

配體是否正確命名?

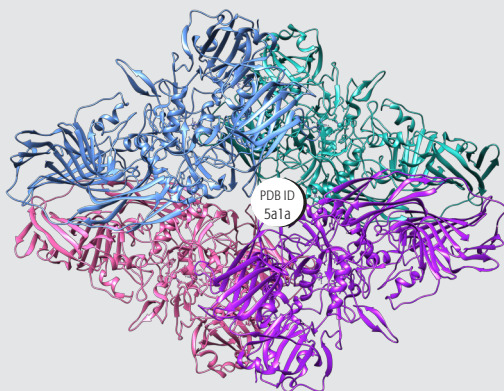
✓ 準備登記數據

作成PDBx / mmCIF格式的數據文件，盡可能提供所有與結構相關的完整信息

✓ 驗證數據

使用wwPDB的獨立驗證服務

✓ 一切準備就緒，使用OneDep系統登記結構數據



在線資源

PDB_extract: pdb-extract.wwpdb.org

驗證: validate.wwpdb.org

登記: deposit-pdbj.wwpdb.org

更多信息

有關驗證與登記的教程和常見問題可訪問以下網頁:

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

聯繫我們

validation@mail.wwpdb.org

deposit-help@mail.wwpdb.org

參考文獻

wwPDB 相關文獻:
Nature Structural Biology **10**, 980 (2003)
doi: 10.1038/nsb1203-980

OneDep 相關文獻:
Structure **25**, 536-545 (2017)
doi: 10.1016/j.str.2017.01.004

wwPDB 成員



wwPDB.org



繁體中文

5 EASY STEPS TO PDB DEPOSITION

