

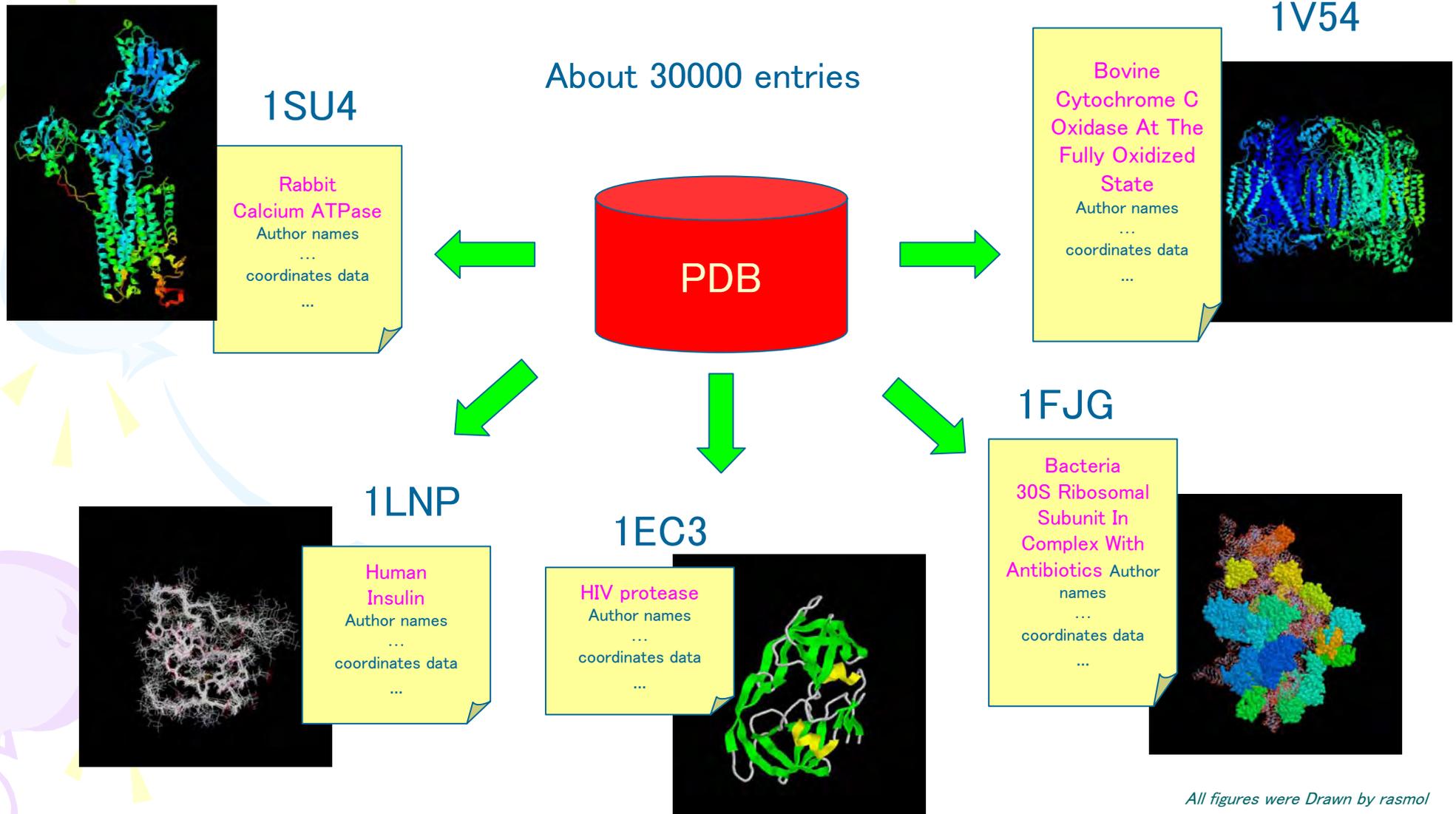
ADITによる立体構造データ登録法と 実習

小佐田高史¹, 五十嵐令子^{1,2}, 見学有美子^{1,2}, 佐伯忍^{1,2}, 池川恭代^{1,2}, 楠木正巳¹, 中村春木¹
(阪大・蛋白研¹, 科学技術振興機構²)

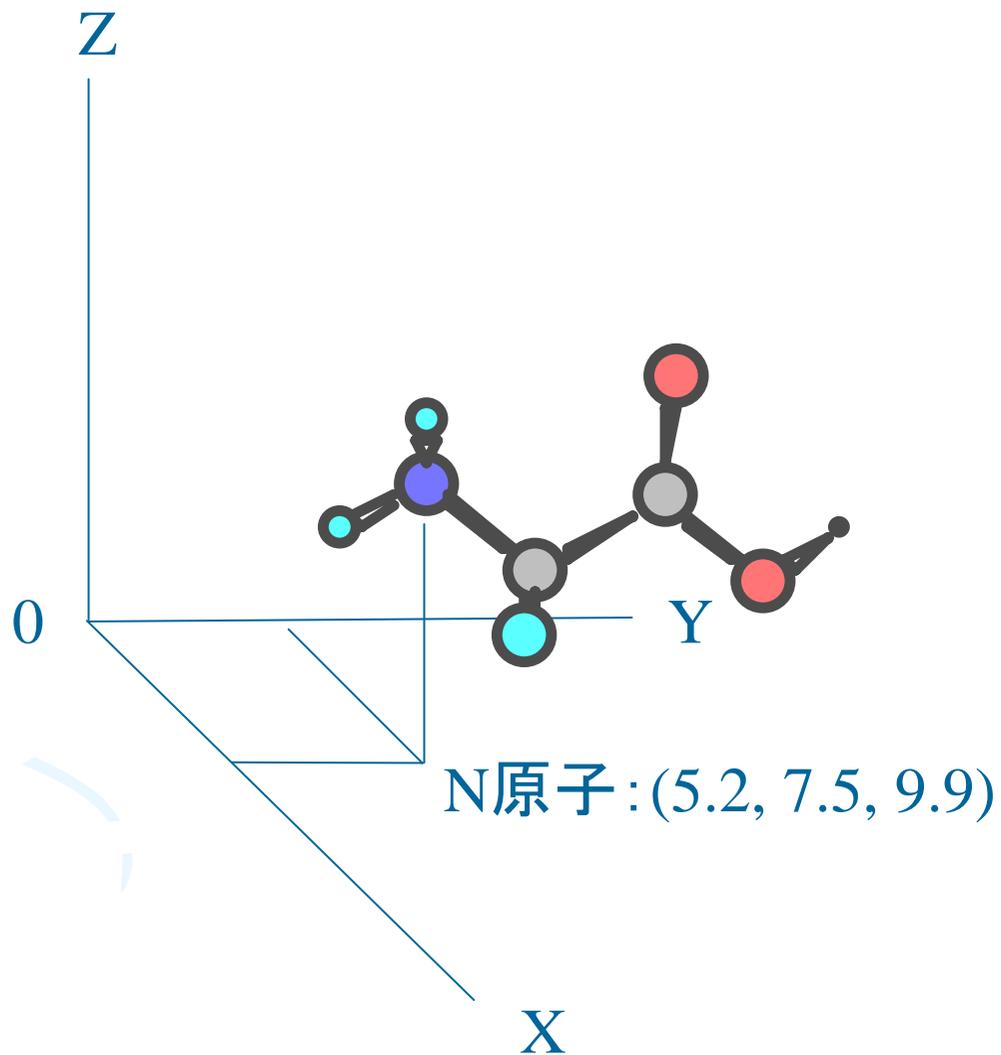
目次

1. はじめに
2. 登録方法の紹介
3. PDBjにおける運営の現状

● What's PDB ? (補足)

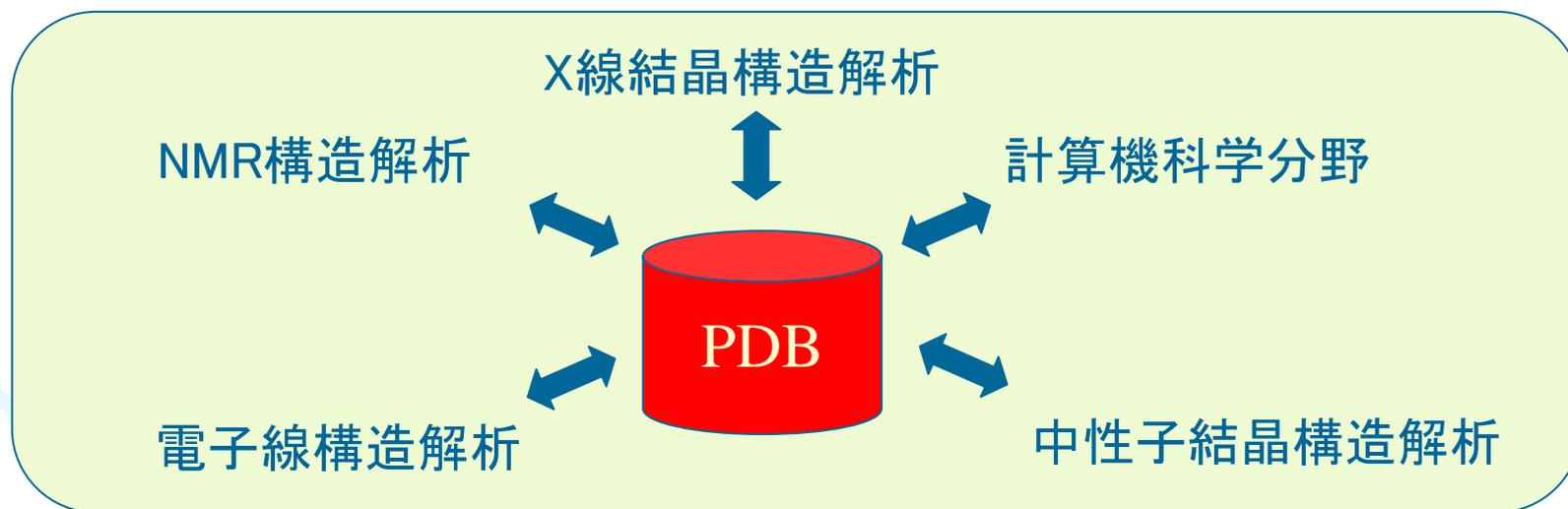


● What's PDB ? (補足)



PDBとは

- 各種構造解析による立体構造座標とそれに関するデータ群のデータベース



生物学分野

工学分野

医学、薬学分野

論文の投稿規定を見てみると・・・

結晶学的研究について

新たに決めた立体構造に関する内容を論文に記述する場合、必ず座標データおよび、X線回折データをProtein Data Bankに登録する必要がある。

J.BIOL.CHEM. の投稿規定より抜粋 (2004-Feb-24 現在)

各雑誌の座標および回折データの取り扱い

	雑誌名	座標の登録	構造因子の登録
1	<i>J.BIOL.CHEM.</i>	必要	必要
2	<i>J.MOL.BIOL.</i>	必要	必要
3	<i>ACTA CRYSTALLOGR., SECT.D</i>	必要	必要
4	<i>PROC.NAT.ACAD.SCI.USA</i>	必要	必要
5	<i>PROTEIN SCI.</i>	必要	強く奨励する
6	<i>BIOCHEMISTRY</i>	必要	記述なし
7	<i>EMBO J.</i>	必要	必要
8	<i>J.BIOCHEM.(TOKYO)</i>	記述なし	記述なし

2004年4月現在

時間の経過によって各雑誌のpolicyは変わるので投稿前に改めて投稿規定を確認してください。

目次

1. はじめに
2. 登録方法の紹介
3. PDBjにおける運営の現状

日本語の登録案内サイトへ www.pdbj.org

Welcome to PDBj

Protein Data Bank Japan

Welcome to PDBj, the archive for macromolecular structures.

WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

EMBL-EBI

National Project on Protein Structural and Functional Analyses

PDBj is maintained at the Protein Research Institute, Osaka University, and supported by Japan Science and Technology Agency.

mail to pdbj-master

News (on 10 Dec., 2004): PDBj starts the following two new services: Structure Navigator, a tool for querying the PDB using structure similarity, and GASH, a robust structure alignment program.

News (on 16 Nov., 2004): We release the latest version of PDBjViewer, jV3, which can be used both as applet and stand alone on windows 2000/XP, Macintosh OS-X, and Linux.

News (on 12 Nov., 2004): PDBj starts a new service in xPSSS to display the Electron Density Map of each biological macromolecule, whose structure factor file has been deposited, through the Summary page or the Experimental Details page of xPSSS.

The central diagram shows a hub-and-spoke model with 'PDB Browser' and 'PDB Deposit' at the center. A red arrow points to 'PDB Deposit'. Surrounding services include 'Seq-Navigator', 'GASH', 'PDBj Viewer', 'Other Links', 'mirrors', 'About PDBj', 'eF-site', 'Ash', 'eProtS', and 'ProMode'. The diagram is enclosed in a red circular border with 'PDB' logos at the top, bottom, and sides.

日本語の登録案内サイトへ www.pdbj.org

deposit

http://www.pdbj.org/deposit.html

ADIT V12.812 * ** * Your Se... NCBI Sequence Viewer v2.0 ADIT Validation Report deposit

PDB Deposit

PDB Data Deposition
and
Data Processing Procedures

**AD
IT!** Auto Dep
Input Tool

蛋白質立体構造データ登録
ご案内
(日本語によるガイド)

日本語の登録案内サイトへ www.pdbj.org

Deposit Now!

PDB™ deposit via Japan

蛋白質立体構造データ登録のご案内

INSTITUTE for  PROTEIN RESEARCH

 大阪大学 蛋白質研究所
蛋白質情報科学研究系

最終更新: 2005 Feb. 18

 **Auto Dep
Input Tool**
[ADIT について](#)

PDB(Protein Data Bank)への登録はウェブブラウザを利用して対話的に登録を行うことができるADIT(Auto Deposition Input Tool)を使用します。

このページでは登録の手順、必要なデータ類とその書式や注意事項などについてご案内いたします。

- ← 登録完了までの流れ
- ← 登録までの準備 (必要なデータ類など)
- ← 各セクションでの詳細な手順
- ← **登録にあたっての注意事項**
- ← その他のお知らせ
- ← 登録サイトへ

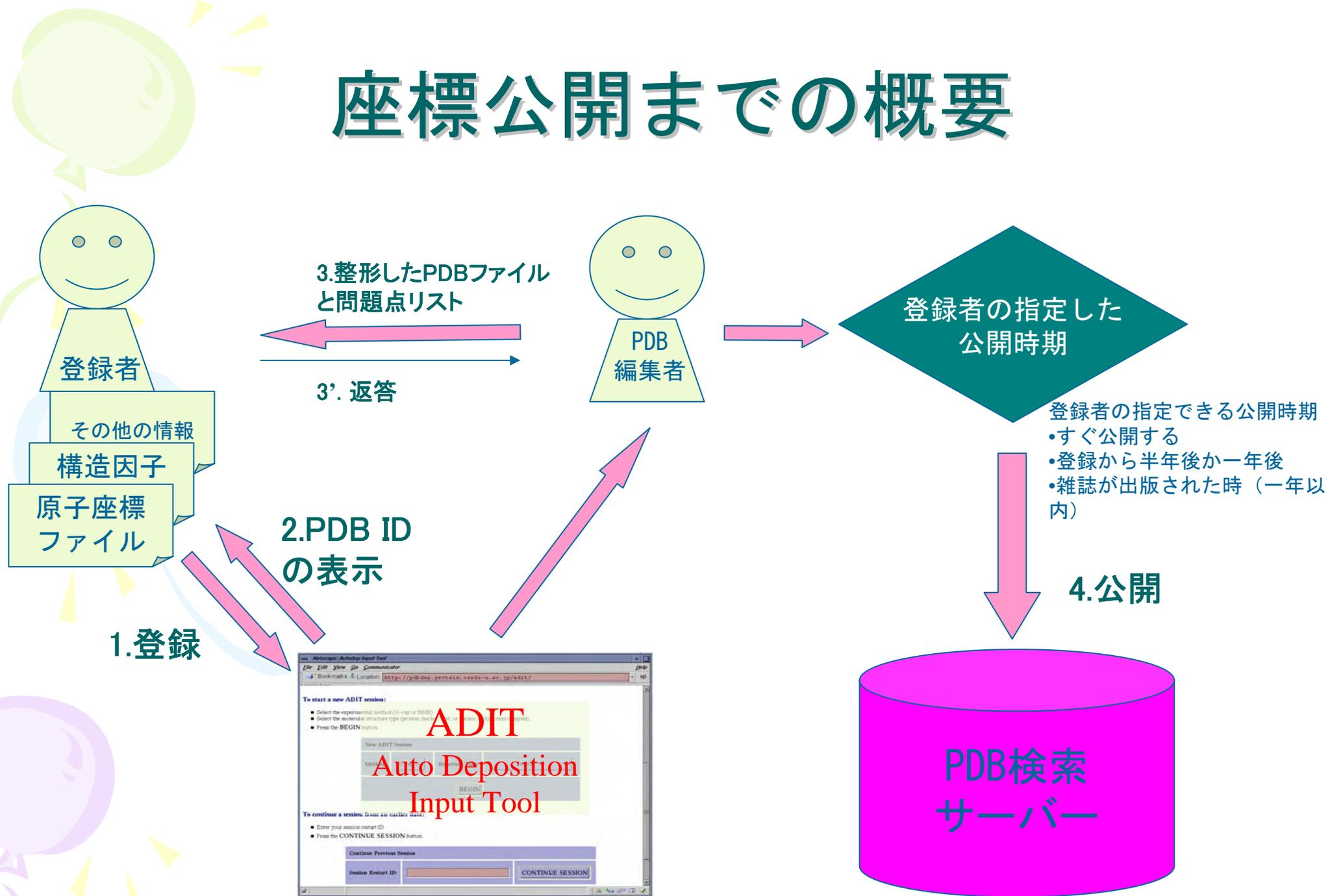
016676 入目 (Since 2000, Mar, 26)

日本蛋白質構造データバンクへの御登録に関するお問い合わせ先は下記まで

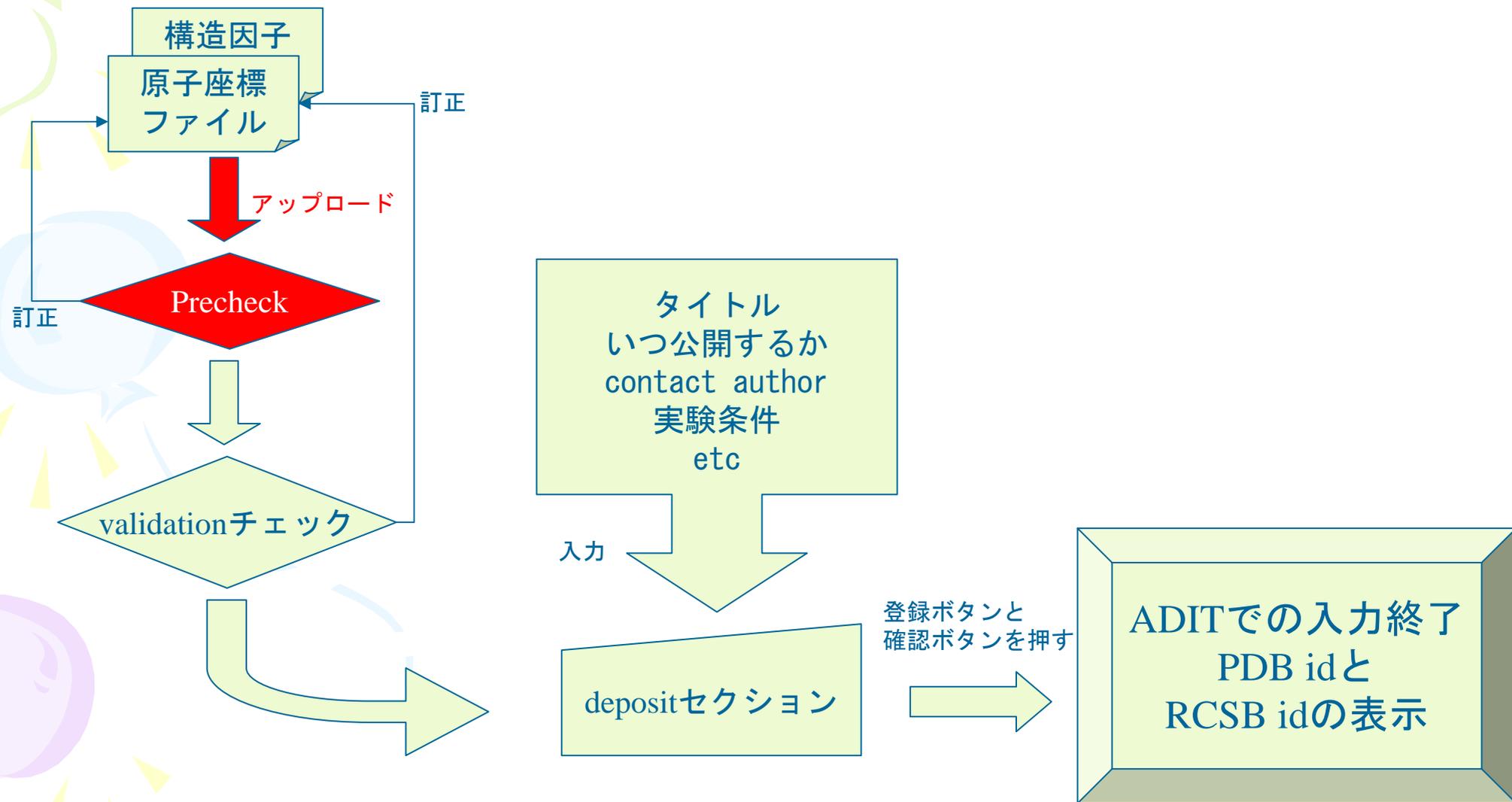
大阪大学 蛋白質研究所 蛋白質情報科学研究系

pdhclp@protein.osaka-u.ac.jp

座標公開までの概要



ADITでの登録操作 (Precheck)



日本語の登録案内サイトへ www.pdbj.org

Welcome to PDBj

Protein Data Bank Japan

Welcome to PDBj,
the archive for
macromolecular
structures.

WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

EMBL-EBI

National Project
on Protein Structural
and Functional Analyses

PDBj is maintained at the
Protein Research Institute,
Osaka University, and
supported by Japan Science
and Technology Agency.

[mail to pdbj-master](mailto:pdbj-master)

News (on 10 Dec., 2004):
PDBj starts the following two new services: Structure Navigator, a tool for querying the PDB using structure similarity, and GASH, a robust structure alignment program.

News (on 16 Nov., 2004):
We release the latest version of PDBjViewer, jV3, which can be used both as applet and stand alone on windows 2000/XP, Macintosh OS-X, and Linux.

News (on 12 Nov., 2004):
PDBj starts a new service in xPSSS to display the Electron Density Map of each biological macromolecule, whose structure factor file has been deposited, through the Summary page or the Experimental Details page of xPSSS.

Navigation menu: [PDB](#), [PDBj Viewer](#), [Other Links](#), [mirrors](#), [About PDBj](#), [PDB Browser](#), [PDB Deposit](#), [Seq-Navigator](#), [GASH](#), [Structure- Navigator](#), [eF-site](#), [Ash](#), [eProtS](#), [ProMode](#)

Japanese

日本語の登録案内サイトへ www.pdbj.org

deposit

http://www.pdbj.org/deposit.html

ADIT V12.812 * ** * Your Se... NCBI Sequence Viewer v2.0 ADIT Validation Report deposit

PDB Deposit

PDB Data Deposition
and
Data Processing Procedures

**AD
IT!** Auto Dep
Input Tool

蛋白質立体構造データ登録
ご案内
(日本語によるガイド)

ADIT開始画面

Autodep Input Tool

<http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/adit/>

If you have any comments or questions, please let us know at deposit@rcsb.rutgers.edu.

If your question is about a particular entry, please include the RCSB ID.

[ADIT Frequently Asked Questions](#) [Information on Chain IDs](#)

[ADIT Tutorial](#) [Current HET Group Dictionary](#)

[Search the Status of Unreleased Entries](#)

To start a new ADIT session:

- Select the experimental method (X-ray, NMR or Electron Microscopy)
- Select the molecular structure type (protein, nucleic acid, or nucleic acid/protein complex),
- Press the BEGIN button.

New ADIT Session

Method:	X-ray	Structure Type:	Protein
----------------	-------	------------------------	---------

BEGIN

To continue a session from an earlier date:

- Enter your session restart ID
- Press the CONTINUE SESSION button.

Continue Previous Session

Session Restart ID: CONTINUE SESSION

Questions, comments, and suggestions should be sent to help@rcsb.rutgers.edu.

© RCSB

ファイルアップロード画面

Input Tool

PDBを指定してください。

sample.txtを指定してください。

Running an ADIT Session

- Depositors are urged to submit structure factors according to the [ADIT UCR guidelines](#).
- Please note that SFCHECK can only be run on structure factor files in mmCIF format.

Enter coordinate file name: 05.03講習会/sample-dep.txt 参照...
Compress (.gz or .Z files) first.

Enter structure factor file name: 参照...
Compress (.gz or .Z files) first.

Choose Operation: Precheck Validate Deposit

Select file type: PDB mmCIF mmCIF mtz Other ASCII

BEGIN

Precheckを指定してください。

本番で構造因子ファイルを登録される時はunixコマンドのcompressかgzipで圧縮して下さい

An ADIT session involves three steps:

1. a data format precheck,
2. a validation check,
3. the actual deposition of the structural data to the database.

*今回の座標ファイルはPDB id=1KUHを元に変更したのを使っております。



登録に必要なデータ

1. 座標ファイル

2. 構造因子ファイル*

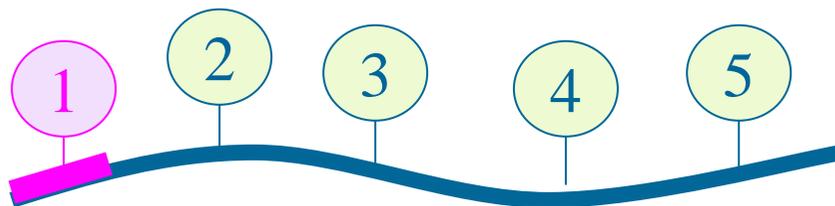
3. その他の情報

*必要か否かは雑誌のpolicyによりますが、登録することをIUCr（国際結晶学会）では勧告しています。

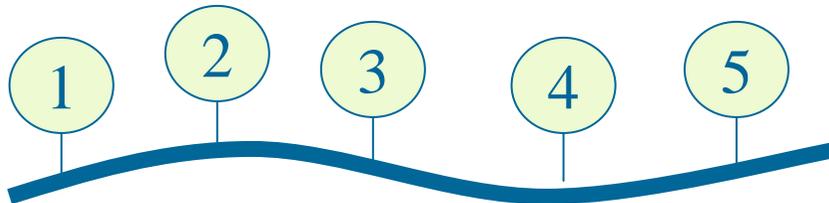
PDBファイルの概要 -座標について

ここでの例はsample.txtに対応していません。

Chain A



Chain B



各カラムは定義づけられている

1-6
レコードタイプ

13-16
原子名

18-20
残基名

23-26
残基番号

31-38
X座標

39-46
Y座標

47-54
Z座標

55-60
占有率

61-66
温度因子

77-78
元素名

```
12345678901234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890
ATOM 1 N ALA A 1 19.939 -9.549 -28.385 1.00 22.89 N
ATOM 2 CA ALA A 1 18.991 -9.650 -27.239 1.00 22.67 C
ATOM 3 C ALA A 1 19.453 -8.784 -26.076 1.00 22.30 C
ATOM 4 O ALA A 1 20.618 -8.386 -26.010 1.00 22.33 O
ATOM 5 CB ALA A 1 18.879 -11.103 -26.775 1.00 23.21 C
```

原子シリアル番号

Chain ID

登録に必要なデータ

1.座標ファイル

```
HEADER      ----                XX-XXX-XX  xxxx
COMPND     ---
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT.
REMARK      3 PROGRAM       : REFMAC 5.1.19
REMARK      3 AUTHORS       : MURSHUDOV,VAGIN,DODSON
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT TARGET : MAXIMUM LIKELIHOOD
REMARK      3
REMARK      3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 1.60
REMARK      3 RESOLUTION RANGE LOW  (ANGSTROMS) : 47.36
...
CRYST1     22.733  23.029  24.842  90.00  90.00  90.00 P 1
...
SCALE1     0.043988  0.000000  0.000000      0.00000
SCALE2     0.000000  0.043423  0.000000      0.00000
SCALE3     0.000000  0.000000  0.040254      0.00000
ATOM       1  N  TYR  A  75      8.994  18.792  21.986  1.00  6.91  N
ATOM       2  CA TYR  A  75      8.561  17.928  20.896  1.00  6.65  C
ATOM       3  C  TYR  A  75      8.632  16.500  21.446  1.00  6.21  C
ATOM       4  O  TYR  A  75      9.241  16.356  22.519  1.00  7.30  O
...
ATOM      306 OH TYR A 116      6.284  1.133  16.924  1.00 20.56  O
TER
...
ATOM      313 O  HOH  404     14.367  11.914  3.849  1.00 12.77  O
END
```

精密化の情報は座標ファイルに添付する必要はないが、あった方が後で入力の手間が省ける。

CCP4(i)の場合、refmac5の出力ファイルに精密化の情報が座標ファイルに添付されている。

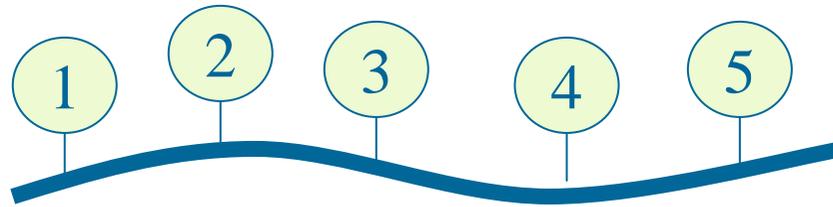
CNSの場合、
xtal_pdbsubmission.inpファイルを使えば作成できる。

- ATOMレコードは必須。
- CRYST1レコードもファイルに入力しておく方が好ましい。
- TERレコード:ポリペプチド鎖の終わりを示します。
- ENDレコード:PDBファイルの終わりを示します。

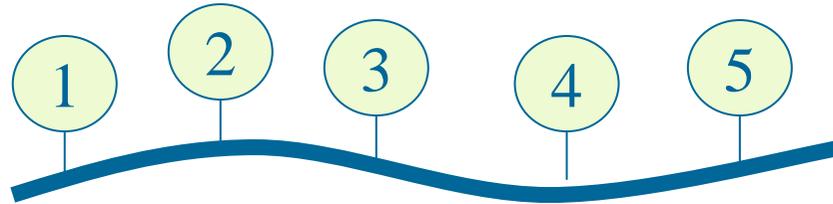
座標ファイルのchain ID、残基番号について

- 蛋白質にはchain idが必須です。
- 同じ配列の蛋白質は同じ残基番号で異なるchain idをつけます。
- 蛋白質以外の原子は、全原子において一意な残基番号をつけることをお勧めします。

chain A



chain B



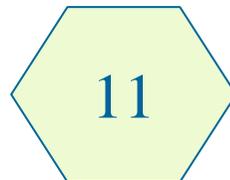
水分子

31

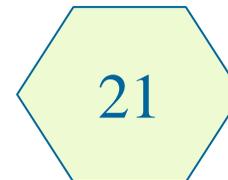
32

33

ヘテロ化合物X



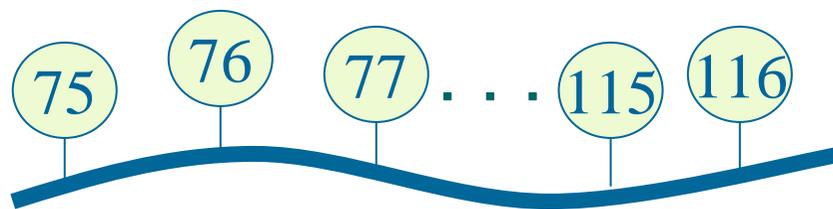
ヘテロ化合物Y



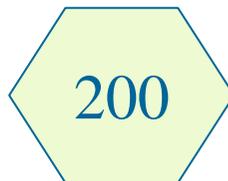
今回の演習用データの概要

- 蛋白質は一種類chain Aのみです。
- 蛋白質以外には Zn^{2+} 、 Ca^{2+} のそれぞれ一原子ずつと水分子が4つです。

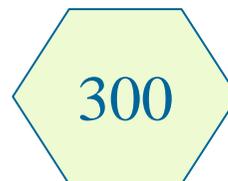
chain A



ヘテロ化合物 Zn^{2+}



ヘテロ化合物 Ca^{2+}



水分子

401

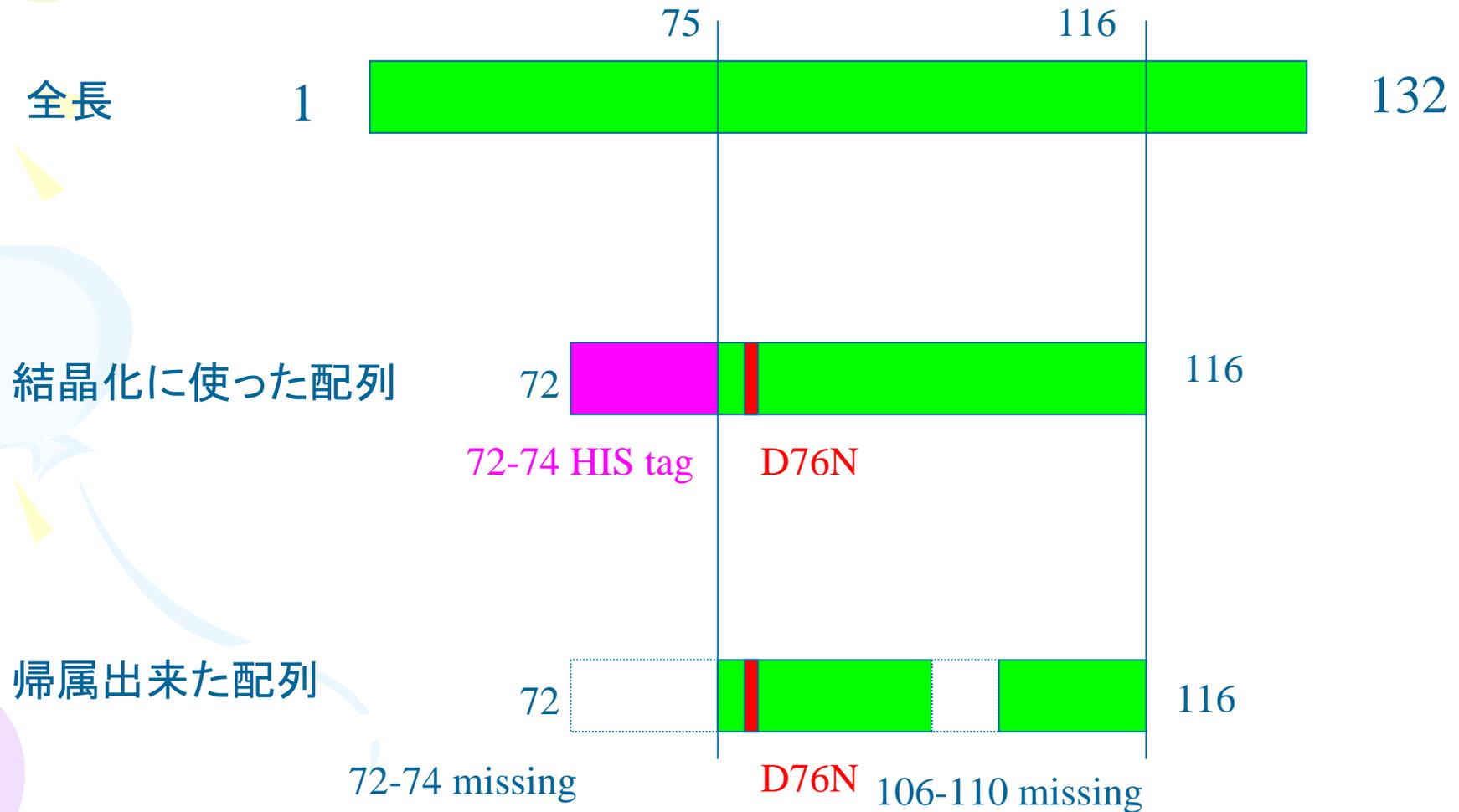
402

403

404

今回の演習用データの概要 ~配列について~

*Streptomyces caespitosus*由来のZinc Protease



N・C末端やループ領域はふらふらしていることによって構造解析(帰属)出来ないことがよくあります。

登録に必要なデータ

2. 構造因子ファイル*

*必要か否かは雑誌のpolicyによりますが、登録することをIUCrでは勧告しています。

mmCIFフォーマット

テキストフォーマットでh, k, l, Fobs, Fsigma, および Rfreeに使用したフラッグが記入されたmmCIF形式か下側のような形式で、UNIXコマンドのgzipかcompressコマンドを使って圧縮してADITにアップデートしてください。

```
loop_
_refln.wavelength_id
_refln.crystal_id
_refln.index_h
_refln.index_k
_refln.index_l
_refln.F_meas_au
_refln.F_meas_sigma_au
_refln.status
1 1 0 0 16 97.600 0.600 0
1 1 0 0 18 115.300 1.200 0
1 1 0 0 22 502.700 1.100 1
1 1 0 0 24 120.600 0.600 0
.....
```

mmCIF以外のフォーマット

```
INDEX 0 0 16 FOBS= 97.600 0.000 SIGMA= 0.600 TEST=0
INDEX 0 0 18 FOBS= 115.300 0.000 SIGMA= 1.200 TEST=0
INDEX 0 0 20 FOBS= 51.600 0.000 SIGMA= 1.200 TEST=0
INDEX 0 0 22 FOBS= 502.700 0.000 SIGMA= 1.100 TEST=1
INDEX 0 0 24 FOBS= 120.600 0.000 SIGMA= 0.600 TEST=0
.....
```

登録に必要なデータ

3. その他の情報

- 登録者の連絡先、名前等
- 原子座標ファイル・構造因子ファイルの公開時期
- 登録するPDBファイルのタイトル
- 原子座標を報告した論文に関する情報
- シーケンス関連情報
- キーワード
- データ収集に関するデータパラメータ
- 精密化に関するデータパラメータ
- 等...

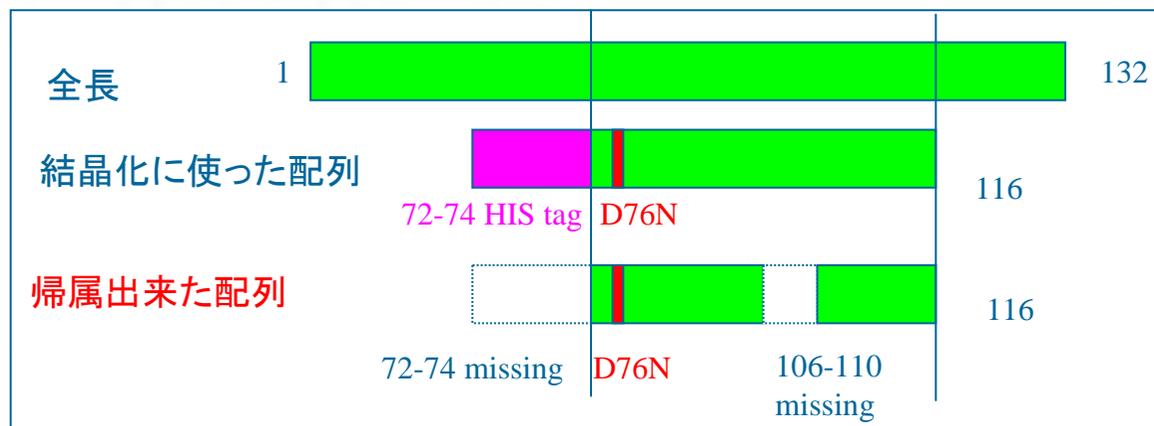
Precheck結果画面

Data Syntax Check

[Continue to Validation or Deposition](#)

Coordinate format is OK!

Sequence information:



Cell Unit Parameters: a=22.733 b=23.029 c=24.842 alpha=90.00 beta=90.00 gamma=90.00
Space Group: P 1

One letter code sequence extracted from coordinate section:

CHAIN A: YNSTRVTAHETGHVGLPDPHYQGPCSELMMSGCTNPY

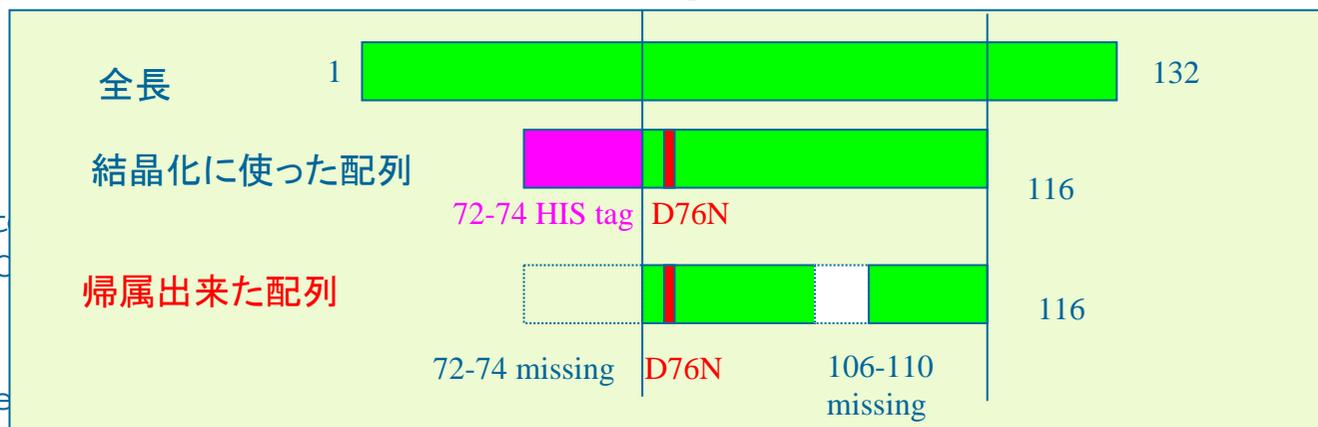
Total 37 residues.

If a sequence above has missing residues, please add the missing residues before entering the sequence into the deposition tool.

Blast*での確認

```
>gi|2147666|pir||S63978 metalloprot
gi|3024624|sp|P56406|SNPA_STRC
Length = 132
```

```
Score = 68.6 bits (166), Expect = 4e
Identities = 36/42 (85%), Positives = 37/42 (88%), Gaps = 5/42 (11%)
```



```
Query: 1  YNSTRVTAHETGHV LGLPDHYQGPCSELMSG-----SCTNPY 37
          Y+STRVTAHETGHV LGLPDHYQGPCSELMSG SCTNPY
Sbjct: 75  YDSTRVTAHETGHV LGLPDHYQGPCSELMSGGGPGPSCTNPY 116
```



この部分は mutation です。

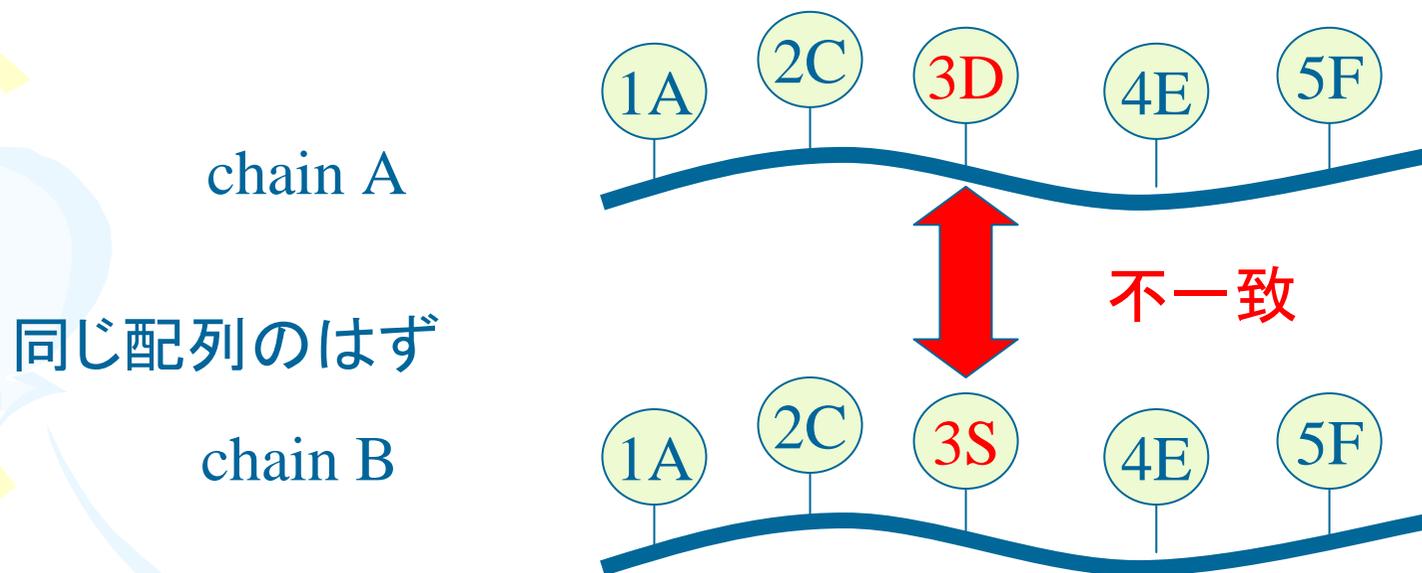


この部分は missing residues です。

- (1) 意図通りの配列になっていますか？
- (2) NとD、EとQのミスアサインはありませんか？
- (3) ALA/GLYモデルは本来の配列に直して下さい。
- (4) 同じはずの複数の chain間で配列に違いがありませんか？

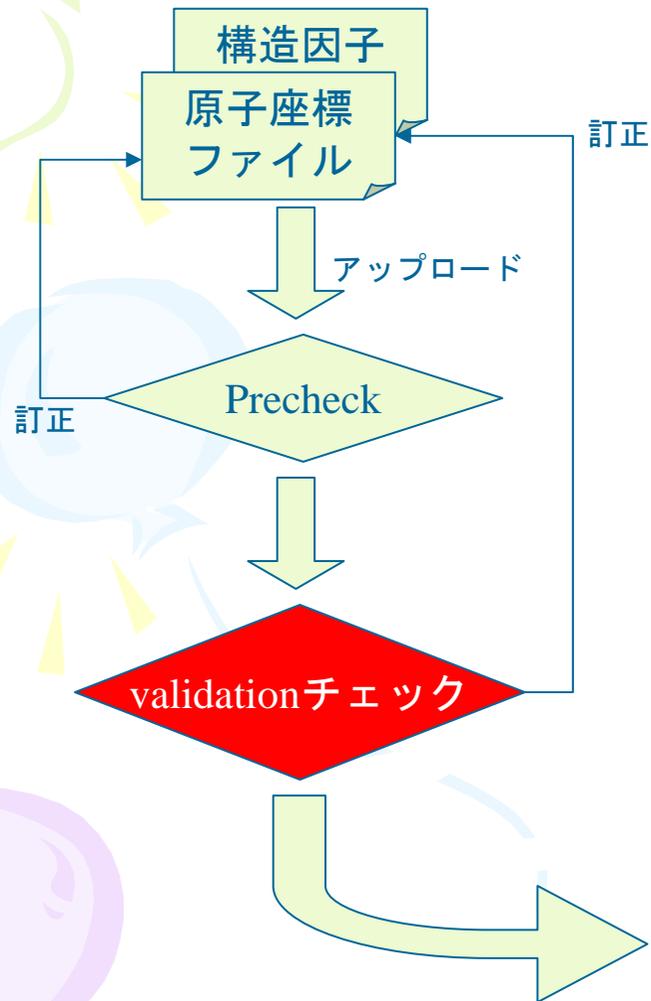
Blast*での確認(補足)

•例として、1種類の蛋白質だけを結晶化したときには、非対称単位中(結晶格子中でこれ以上対称性がない最小限の領域)に複数のchainがある場合、これらの配列は普通同じはずです。



•違いがある場合、編集者は登録者に確認して頂きもし間違いなら訂正して頂きます。

ADITでの登録操作 (Validation チェック)



入力

depositセクション

登録ボタンと
確認ボタンを押す

ADITでの入力終了
PDB idと
RCSB idの表示

PrecheckからValidation checkへ

(補足)

Data Syntax Check

[Continue to Validation or Deposition](#)



Coordinate format is OK!

Sequence information:

Cell Unit Parameters: a=22.733 b=23.029 c=24.842 alpha=90.00 beta=90.00 gamma=90.00
Space Group: P 1

One letter code sequence extracted from coordinate section:

 10 20 30 40 50 60
CHAIN A: YNSTRVTAHETGHVGLPDPHYQGPCSELMMSGCTNPY

Total 37 residues.

If a sequence above has missing residues, please add the missing residues before entering the sequence into the deposition tool.

Validation check開始画面

時間短縮のため実習では省略致します。

PDB
PROTEIN DATA BANK

**AD
IT!** Auto Dep
Input Tool

[Tutorial](#) [PDB Home](#) [Contact us](#)

[!Adit Home Page!](#)

[!ADIT Tutorials!!](#)

To continue working with this set of data files, select precheck, validate or deposit from the **Operation** menu, and then press the **BEGIN** button.
To begin a new session with another set of data files, select **Adit Home Page** above.

Coordinate file:	sample-dep.txt	File type:	PDB
Structure factor file:		File type:	
Choose Operation:	<input type="radio"/> Precheck	<input checked="" type="radio"/> Validate	<input type="radio"/> Deposit
			<input type="button" value="BEGIN"/>

Validation 結果

demo-dep¥validationフォルダーのvalidation-report.htmlに結果があります。



ADIT Validation Report

[Continue](#)

Structure Summary

- [Atomic summary](#)
- [Validation summary letter](#)

Protein Validation Report

- **PROCHECK Validation**
 - Ramachandran plot ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Ramachandran plots by residue ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Chi1-Chi2 plots ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain parameters ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Side-chain parameters ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Residue properties ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain bond distance comparisons ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain bond angle comparisons ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - RMS deviations from planarity ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Summary of geometrical distortions ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))

The above figures were obtained using PROCHECK V 3.4.4

Validation summary letter

CHIRALITY

The chirality has been checked. O1P, O2P, and hydrogen atoms which do not follow the conventions defined by IUBMB (Liebecq, C. Compendium of Biochemical Nomenclature and Related Documents, 2nd ed.; Portland Press: London and Chapel Hill, 1992) and IUPAC (J.L. Markley, A. Bax, Y. Arata, C.W. Hilbers, R. Kaptein, B.D. Sykes, P.E. Wright and K. Wuthrich, Recommendations for the Presentation of NMR Structures of Proteins and Nucleic Acids, Pure & Appl. Chem., Vol. 70, pp. 117-142, 1998) will be standardized at the time of processing; there is no need to change these labels in your coordinate file. Any other stereochemical violations are listed below.

SOLVENT

The following solvent molecules are further than 3.5 Angstroms away from macromolecule atoms in the asymmetric unit that are available for hydrogen bonding. Solvent molecules in extended hydration shells separated by 3.5 Angstroms or less are not listed.

none

The coordinates for water molecules which could be translated back into the asymmetric unit are listed. If you do not indicate otherwise we will replace the solvent coordinates in the entry with the ones below:

none

SEQUENCE WARNING: Residue (A GLY 105) and Residue (A SER 111) are not linked
Distance of C-N bond is 9.62

WARNING: Please provide the total
observed reflections for

WARNING: Please provide the high

WARNING: Please provide the low r

★ 分子内、分子間で接近しすぎている原子が多すぎないか



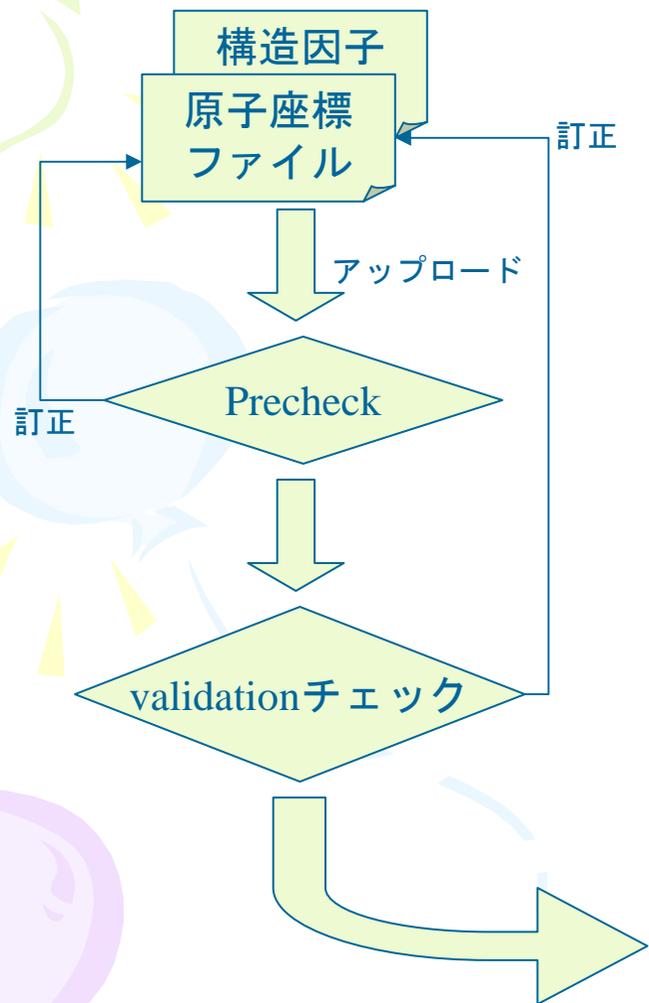
格子定数、空間群が間違っている可能性

★ 各残基の結合長／結合角が極端に標準値から離れていないか

★ Alaモデルが多すぎないか

★ 主鎖にキラリティーエラーがないか (NMRのHの場合はOKです)

ADITでの登録操作 (Depositセクション)



タイトル
いつ公開するか
contact author
実験条件
etc

入力

depositセクション

登録ボタンと
確認ボタンを押す

ADITでの入力終了
PDB idと
RCSB idの表示

Validation から deposit セクションへ (補足)



ADIT Validation Report

[Continue](#)

Structure Summary

- Atlas [summary](#)
- Validation [summary letter](#)

Protein Validation Report

- **PROCHECK Validation**
 - Ramachandran plot ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Ramachandran plots by residue ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Chi1-Chi2 plots ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain parameters ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Side-chain parameters ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Residue properties ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain bond distance comparisons ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Main-chain bond angle comparisons ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - RMS deviations from planarity ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))
 - Summary of geometrical distortions ([PS](#)) ([GIF](#)) ([PDF](#))

The above figures were obtained using PROCHECK V 3.4.4

Depositセクション開始画面



[!Adit Home Page!](#)
[!ADIT Tutorials!!](#)

To continue working with this set of data files, select precheck, validate or deposit from the **Operation** menu, and then press the **BEGIN** button. To begin a new session with another set of data files, select **Adit Home Page** above.

Coordinate file:	sample.txt	File type:	PDB
Structure factor file:		File type:	
Choose Operation:	<input type="radio"/> Precheck	<input type="radio"/> Validate	<input checked="" type="radio"/> Deposit
			<input type="button" value="BEGIN"/>

Questions, comments, and suggestions should be sent to help@rcsb.rutgers.edu.

Depositセクション

AD!
Auto Dep
Input Tool

HELP

PREVIEW
ENTRY

DEPOSIT

DEPOSITION
HOME

Categories

Deposition

[Contact Authors](#)

[Structural Genomics](#)

[Release Status](#)

[Title](#)

[Related Entries](#)

Authors

[Citation Authors](#)

[Citation](#)

Chemical/Biological Features

[Molecule Names](#)

[Molecule Details](#)

[Sequence](#)

[Genetically Manipulated Source](#)

[Natural Source](#)

[Synthetic Source](#)

Structure Features

[Keywords](#)

[Biological Assembly](#)

Crystallization

[Methods and Conditions](#)

[Experimental Crystal](#)

Crystal Data

Data Items

DISPLAY AS TABLE

How to use the AUTO DEP INPUT TOOL

- **BEGIN ENTERING DATA:** For each category, a set of instructions and places to enter data will be displayed in this frame. Fill in any relevant missing information.
- **RESTART:** if you want to restart your session at a later time, record the restart ID for this session: **localhost.80.Session.1986**. This ID is also displayed in the title bar of your browser. When you are ready to continue, enter this code in the appropriate box at the bottom of the ADIT HOME page.
- **HELP:** An explanation for any item can be obtained by selecting the Help button within the table. This information will appear in the bottom frame. Pressing the Help button in the top frame will

This is the HELP frame

This frame is used to display dictionary descriptions, examples, tables and diagnostic information.

For Data Items:

- Press the **HELP** button for advice about how to enter data in the item.
- Press the **EXAMPLE** button in the item frame to view examples of the item.

ADIT入力開始画面 (Restart IDを使う)

Autodep Input Tool

<http://pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/adit/>

If you have any comments or questions, please let us know at deposit@rcsb.rutgers.edu.

If your question is about a particular entry, please include the RCSB ID.

[ADIT Frequently Asked Questions](#) [Information on Chain IDs](#)

[ADIT Tutorial](#) [Current HET Group Dictionary](#)

[Search the Status of Unreleased Entries](#)

To start a new ADIT session:

- Select the experimental method (X-ray, NMR or Electron Microscopy)
- Select the molecular structure type (protein, nucleic acid, or nucleic acid/protein complex),
- Press the BEGIN button.

New ADIT Session

Method:	X-ray	Structure Type:	Protein
---------	-------	-----------------	---------

BEGIN

To continue a session from an earlier date:

- Enter your session restart ID
- Press the CONTINUE SESSION button.

Continue Previous Session

Session Restart ID: **example. 226465** CONTINUE SESSION

Questions, comments, and suggestions should be sent to help@rcsb.rutgers.edu.

© RCSB

以前の入力情報が保持されています。



HELP PREVIEW ENTRY DEPOSIT DEPOSITION HOME

Categories

Deposition

[Contact Authors](#)

[Structural Genomics](#)

[Release Status](#)

[Title](#)

[Related Entries](#)

Authors

[Citation Authors](#)

[Citation](#)

Chemical/Biological Features

[Molecule Names](#)

[Molecule Details](#)

[Sequence](#)

[Genetically Manipulated Source](#)

[Natural Source](#)

[Synthetic Source](#)

Structure Features

[Keywords](#)

[Biological Assembly](#)

Crystallization

[Methods and Conditions](#)

[Experimental Crystal](#)

Crystal Data

[Data Cell](#)

Data Items

DISPLAY AS TABLE

entry. Information for other contacts can be placed in subsequent entries.

Save Contact Authors

Contact Authors

Contact name (Surname, F.M.)		Contact e-mail		Contact address	
Help	Example	Help	Example	Help	Example
Kosada, Takashi.		xxxx@protein.osaka-u.ac.jp		Insititute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN	
				Insititute for Protein Research,	

Contact Authors

Contact name (Surname, F.M.)	Contact e-mail	Contact address	Contact phone number	Contact fax number
Kosada, Takashi.	xxxx@protein.osaka-u.ac.jp	Insititute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka,	+81-6-879-4311	+81-6-879-8636

Depositセクション入力画面

Auto Dep
Input Tool

HELP

PREVIEW
ENTRY

DEPOSIT

DEPOSITION
HOME

Categories

Deposition

[Contact Authors](#)

[Structural Genomics](#)

[Release Status](#)

[Title](#)

[Related Entries](#)

Authors

[Citation Authors](#)

[Citation](#)

Chemical/Biological Features

[Molecule Names](#)

[Molecule Details](#)

[Sequence](#)

[Genetically Manipulated Source](#)

[Natural Source](#)

[Synthetic Source](#)

Structure Features

[Keywords](#)

[Biological Assembly](#)

Crystallization

[Methods and Conditions](#)

[Experimental Crystal](#)

Crystal Data

Data Items

DISPLAY AS TABLE

Save Contact Authors

Contact Authors

Contact name (Surname, F.M.)		Contact e-mail		Contact address		Contact
Help	Example	Help	Example	Help	Example	Help
Kosada, T.		xxxx@protein.osaka-u.ac.jp		Institute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN		+81-6-879-
Yamada, T.		yyyy@protein.osaka-u.ac.jp		Institute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN		+81-6-879-

This is the HELP frame

This frame is used to display dictionary descriptions, examples, tables and diagnostic information.

For Data Items:

Depositセクションでの入力は以下のページを参考にしてください。

登録にあたっての重要注意事項

大阪大学 蛋白質研究所
蛋白質情報科学研究系

PDB™ deposit via Japan
蛋白質立体構造データ登録のご案内

- 登録の案内トップページへ戻る
- 登録前に必要な準備へ戻る
- Deposit入力項目一覧へ戻る

2005-02-18 更新

！登録にあたっての特に重要な注意点！

このページでは立体構造データをADITサーバーを用いて登録して頂く際の特に重要な注意点をお知らせしています。

アップロードして頂く座標ファイルについて

●mmCIFフォーマットの座標ファイルのuploadはお控え下さい。

uploadされる座標ファイルがmmCIFで文法にエラーがあると登録できず、始めからやり直しする必要があります。

構造因子ファイルはcv (CNSのcross validation)/mmCIFフォーマットどちらでも構いません。

●帰属できなかったアミノ酸残基(missing residue)がある場合

帰属できなかったアミノ酸残基 (missing residue) がある場合は、そのC末側のアミノ酸残基の残基番号は、missing residueも加算した番号を付けてください。

帰属されたアミノ酸残基配列	I	L	L	?	?	?	D	D	L
残基番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9

●データファイルのアップデートがうまくいかない場合

座標ファイルおよび構造因子ファイルをUNIXコマンドのgzipかcompressコマンド

Depositセクションでの注意事項1

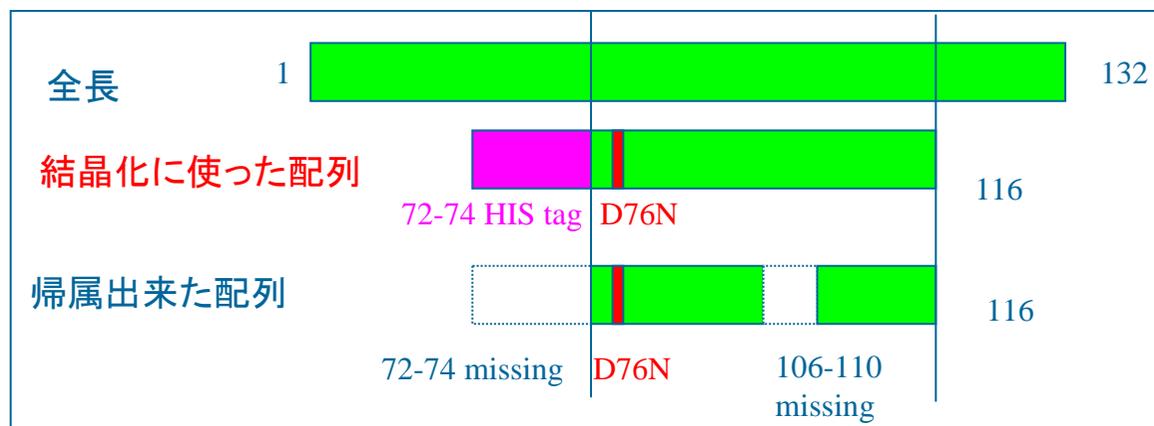
Sequence/One-letter sequence codeでは
帰属できなかったアミノ酸残基 (missing
residue) を含む全配列を記入してください。

解析して分かった座標

N末端



C末端



Depositセクションでの注意事項2

- 変異体である場合は、**mutation site**を Molecule Details/Specific mutationに明記して下さい。
- 必ず記入しなければならない項目は全145項目のうち約半分なので、**日本語登録案内サイトを参考**にして下さい。

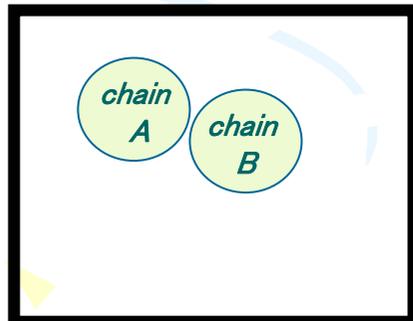
Depositセクションでの注意事項3 biological unit

生物学的に機能する最小限の分子構成をbiological unitといいます。ここでは非対称単位中の分子をbiological unitとして表現できる対称操作を指定します。biological unitが単量体の場合その旨を、また単量体以外の場合は対象となる蛋白のChain IDとその対称操作($-x+1$, $-y$, $z+3/2$)等を入力してください。

(例)PDB ID = 1LFY, ヒトヘモグロビン

非対称単位にchain A,Bの計二本がありますが、実際生物学的に機能するのは4量体です。この4量体はchain A,Bと、さらにchain A,Bをそれぞれ($1-y, 1-x, 1/2-z$)で移動させた二量体A',B'とを合わせることで、発生させることができます。

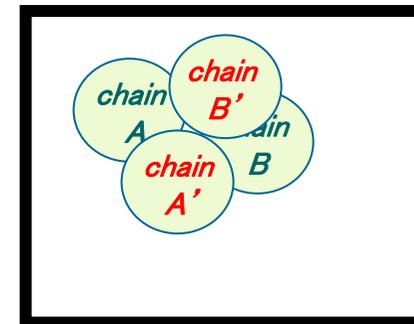
非対称単位



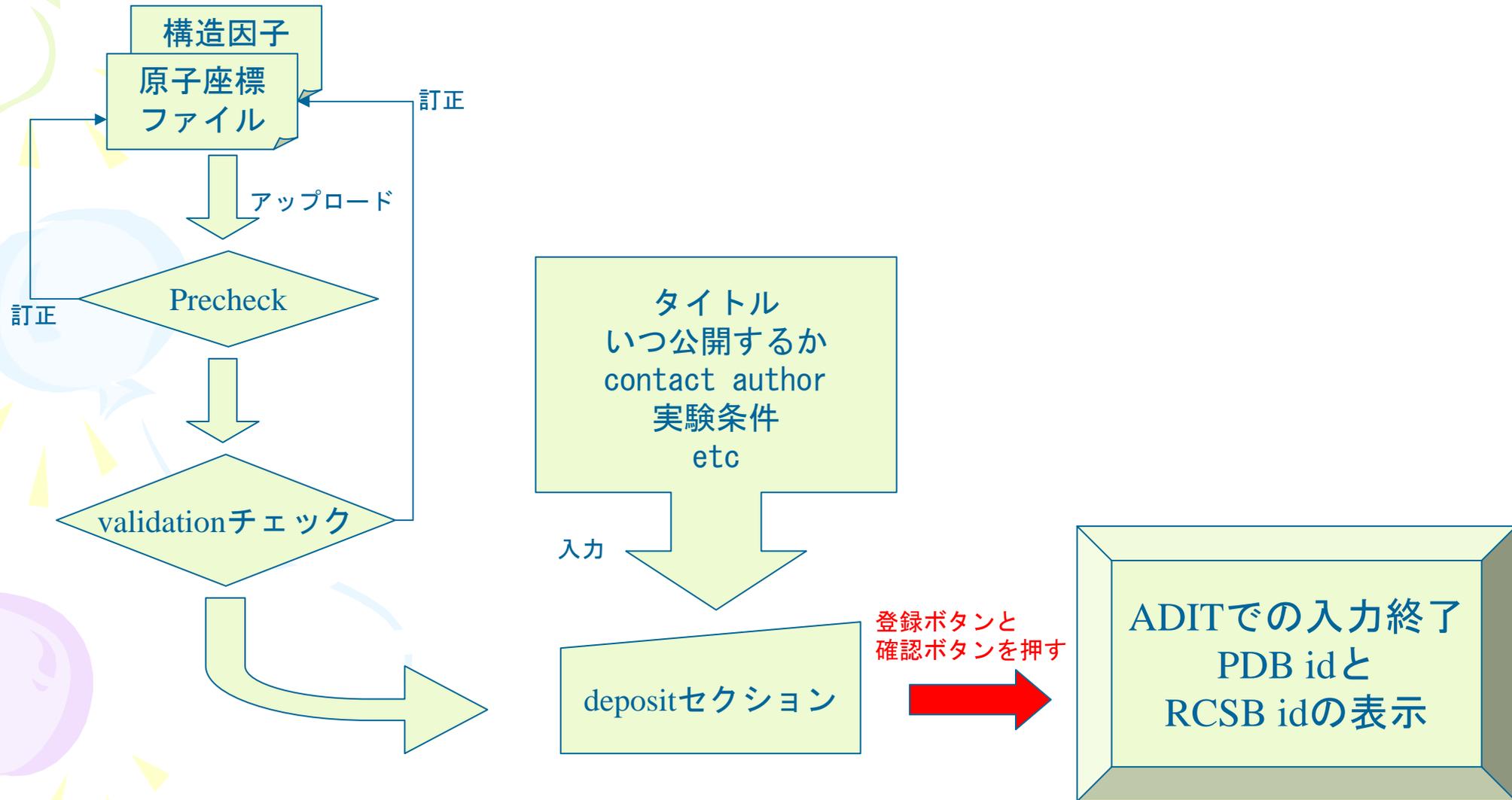
chain A,Bをそれぞれ($1-y, 1-x, 1/2-z$)で移動



biological unit



ADITでの登録操作



登録:ここからは操作しないでください。
Please don't deposit for practice.

Auto Dep
Input Tool

HELP

PREVIEW
ENTR

DEPOSIT

DEPOSITION
HOME

Categories

[Keywords](#)

[Biological Assembly](#)

Crystallization

[Methods and Conditions](#)

[Experimental Crystal](#)

Crystal Data

[Unit Cell](#)

[Space Group](#)

Data Collection

[Crystals](#)

[Radiation Source](#)

[Radiation Detector](#)

[Collection Temperature](#)

[Collection Protocol](#)

[Reflections](#)

[Reflections: High Resol. Shell](#)

Refinement

[Refinement Statistics](#)

[Resolution shells](#)

[RMS Deviations](#)

[Coordinate Error](#)

Software

[Programs](#)

Data Items

DISPLAY AS TABLE

Enter Data in Category **Programs**

Select the computer programs used in the crystal structure analysis. If several programs were used at any step, enter the final one utilized.

Save Programs

Programs			
Data collection	Help	Example	MOSFLM <input type="text"/> If Other: <input type="text"/>
Data reduction	Help	Example	SCALA <input type="text"/> If Other: <input type="text"/>

Diagnostics for Category **Programs**

• In row 0

- Value of item **Data collection** is: MOSFLM
- Value of item **Data reduction** is: SCALA
- Value of item **Structure solution** is: Molrep
- Value of item **Structure refinement** is: REFMAC 5.2.0005

登録: 操作しないでください。
Please don't deposit for practice.

PDB
PROTEIN DATA BANK

AD
IT!
Auto Dep
Input Tool

[Tutorial](#) [PDB Home](#) [Contact us](#)

[Return to the Input Tool!](#)

- If you choose to deposit your structure at this point you will NOT be able to change your entry further in this ADIT session.
- Please review the following tables of the data you have input for missing information.
- Items surrounded by >> << indicate missing mandatory items or data incorrectly input.
- Items surrounded by >> << indicate other important missing items or data incorrectly input.
- Please try to fill in as many of these items as possible before depositing your structure.
- To continue entering data, press the **Return to Input Tool** button above.
- If you are satisfied with the data that you have entered, press the **DEPOSIT NOW** button below to deposit your structure.

DEPOSIT NOW

Contact Authors

Contact name (Surname, F.M.)	Contact e-mail	Contact address	Contact phone number	Contact fax number
Kosada, Takashi.	xxxx@protein.osaka-u.ac.jp	Institute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN	+81-6-879-4311	+81-6-879-8636
Yamada, Taro.	yyyy@protein.osaka-u.ac.jp	Institute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN	+81-6-879-xxxx	+81-6-879-yyyy

登録終了

RCSB ID、PDB IDは記録しておいて下さい。



[!Continue!](#)

Your deposition has been accepted.

Your RCSB ID code is RCSB02xxxx.

Your PDB ID code is IXXX

Thank you for using the ADIT.

The following tables contain a summary of the data you have just deposited. A complete data file including your coordinate data and a validation summary will be sent to you by e-mail at the address xxxx@protein.osaka-u.ac.jp shortly. If multiple authors have been entered, a copy of the coordinate file and validation report will be sent to each author's e-mail address

If your e-mail address here or in the table below is in error, please send a brief message to deposit@rcsb.rutgers.edu which includes your session restart identifier, **Session.XXXX**, and your correct contact information.

Contact Authors

Contact name (Surname, F.M.)	Contact e-mail	Contact address	Contact phone number	Contact fax number
Kosada, Takashi.	xxxx@protein.osaka-u.ac.jp	Institute for Protein Research, 3-2 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871, JAPAN	+81-6-879-4311	+81-6-879-8636
		Institute for Protein Research, 3-2		

登録後

- 公開するまでの間、座標データの交換はできませんが、なるべく少ない回数ですむようにして下さい。
- なるべく編集処理されたPDBファイルの chain id、残基番号、残基名にして送付して下さい。
- 公開する期日の前の週の木曜13時が変更のタイムリミットです。これより早めにお問い合わせ致します。

目次

1. はじめに
2. 登録方法の紹介
3. PDBjにおける運営の現状

PDBjにおける運営の現状



謝辞と参照アドレス

謝辞

今回のセミナーではPDB ID=1KUHを元に練習用に変更いたしました。PDB ID=1KUHの使用・変更を快諾して下さった東京大学大学院総合文化研究科 広域科学専攻・生命系 栗栖 源嗣助教授に深く感謝致します。

PDBj 参照アドレス

<http://www.pdbj.org/>

科学振興事業機構『バイオインフォマティクス推進事業 BIRD』
研究開発課題「蛋白質立体構造データベースの高度化」研究代表者 中村春木