

PDBjへのデータ登録

のための前準備

Categories

Data Items																																									
DISPLAY AS TABLE																																									
Enter Data in Category Reflections Enter the details about the crystallographically unique set of measured reflection data used to determine the coordinates of this deposition. Note that the collection characteristics entered here may be different from the values which are to be entered under Refinement Statistics.																																									
Save Reflections Reflections <table border="1"> <tr><td>Observed criterion sigma(F)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>0</td></tr> <tr><td>Observed criterion sigma(I)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>0</td></tr> <tr><td>Resolution (high)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>1.13</td></tr> <tr><td>Resolution (low)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>26.63</td></tr> <tr><td>Number unique reflections (all)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>58852</td></tr> <tr><td>Number unique reflections (observed)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>58852</td></tr> <tr><td>Percent possible (observed)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>100</td></tr> <tr><td>R-merge I (observed)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>0.051</td></tr> <tr><td>R-sym I (observed)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>0.051</td></tr> <tr><td>Net I over average sigma(I)</td><td>Help</td><td>Example</td><td>12.4</td></tr> </table> Description of Net I over average sigma(I) <small>(mmCIF) <chem>rem_refdn.refln.netI_over_avr_sigmaI</chem></small> The ratio of the mean of all the intensities classified as 'observed' to the mean of the standard uncertainties of the intensities of the 'observed' reflections.		Observed criterion sigma(F)	Help	Example	0	Observed criterion sigma(I)	Help	Example	0	Resolution (high)	Help	Example	1.13	Resolution (low)	Help	Example	26.63	Number unique reflections (all)	Help	Example	58852	Number unique reflections (observed)	Help	Example	58852	Percent possible (observed)	Help	Example	100	R-merge I (observed)	Help	Example	0.051	R-sym I (observed)	Help	Example	0.051	Net I over average sigma(I)	Help	Example	12.4
Observed criterion sigma(F)	Help	Example	0																																						
Observed criterion sigma(I)	Help	Example	0																																						
Resolution (high)	Help	Example	1.13																																						
Resolution (low)	Help	Example	26.63																																						
Number unique reflections (all)	Help	Example	58852																																						
Number unique reflections (observed)	Help	Example	58852																																						
Percent possible (observed)	Help	Example	100																																						
R-merge I (observed)	Help	Example	0.051																																						
R-sym I (observed)	Help	Example	0.051																																						
Net I over average sigma(I)	Help	Example	12.4																																						

PDBj Autodep Input Tool

Send correspondence e-mails to annotators in English!!

We cannot accept any email messages other than in English because correspondence emails are logged and shared with all wwPDB annotators.

Please note that ADIT_{Beta} will replace the current ADIT in early 2008.

ADIT_{Beta} indicates file format errors with suggestions for solutions; automatically validates the structure; checks for consistency between sequence and coordinates; allows easier organization of sequence information and simplifies the way for entering title and citation information.

Files and information required to deposit X-ray, NMR, and Electron Microscopy structures.

- Check for ligands using Ligand Export.

Start New Session

To start a new ADIT session, select the experimental method and the molecular structure type. Then press the **BEGIN** button.

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

Please be sure to compress your experimental data files before uploading them into ADIT.

All new NMR depositions at PDBj will use ADIT-NMR tool.

For small peptide structures determined by NMR, you can use SMSDep at BMRB.

Continue Previous ADIT Session

To continue a session from an earlier date, Enter your session restart ID and press the **CONTINUE SESSION** button.

If you have started your session without the structure factor (for crystal structures) or restraints (for NMR structures) files at the beginning of your session, you have to send your SF/restraints files immediately after your deposition is completed.

To send us the file, you simply reply to our receipt mail with your SF/restraints files attached. PDB ID and RCSB ID should be included in the subject of the mail. We cannot start any annotation process without SF/restraints files.

Session Restart ID: 2006-07-01 serverhostname.9999.12345678 | CONTINUE SESSION

If you have started an ADIT-NMR session, you can continue at ADIT-NMR.

PDB PROTEIN DATA BANK BMRB

ADIT-NMR tool for creating individual or combined depositions to BMRB and PDB

Please note the PDB no longer accepts small peptides less than 24 residues as either NMR or X-ray structure entries. However, NMR structures for these molecules may be submitted to BMRB through the **SMSDep** system.

Effective February 1, 2008, structure factor amplitudes/intensities (for crystal structures) and restraints (for NMR structures) will be a mandatory requirement for PDB deposition. This policy is published at <http://www.wwpdb.org/news.html>.

To start a new ADIT-NMR session:

New ADIT-NMR Session

- Press the BEGIN button

To continue with an existing session from an earlier date:

Continue Previous Session

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

To begin a new deposition using a previous deposition:

New Session Copied From Previous Deposition

- Enter the previous deposition's Restart ID
- Press the NEW SESSION button

Previous Session's Restart ID example: 2006-07-01 serverhostname.9999.12345678

Please send any questions regarding your PDB entry to deposit@deposit.wwpdb.org. Please send any questions regarding your BMRB entry to bmrhelp@bmrwbc.wisc.edu. Questions, comments, and suggestions regarding the ADIT-NMR deposition tool itself can be sent to bmrhelp@bmrwbc.wisc.edu

PDB PROTEIN DATA BANK BMRB

An Information Portal to Biological Macromolecular Structures

pdb_extract

pdb_extract is an utility tool which generates specific details about your experiment and experimental model from your coordinate output file in preparation for PDB deposition. The tool:
 1. provides you with an [author information form](#), which can be saved/distributed for multiple related entries
 2. provides you with a [protein structure validation report](#), which can be distributed for multiple related entries
 3. allows you to "tag" the primary sequence of your protein/macromolecule chains to account for unresolved residues
 4. provides you with a [chemical component list](#) for your structure, which can be used for PDB or ADIT_{Beta} deposition

HOW TO RUN

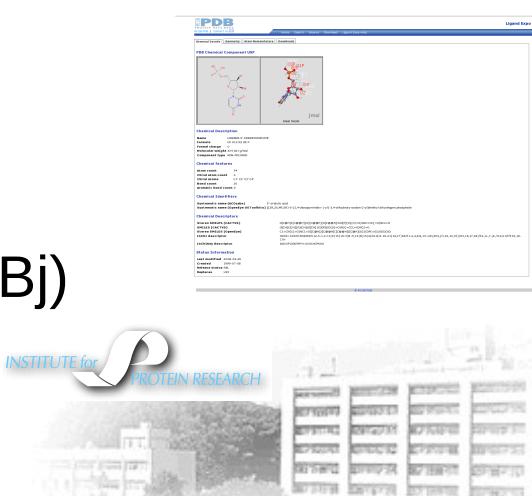
- Save your experimental method (X-ray or NMR)
- Select your PDB refln coordinate file (mmCIF) and click "Open"
- Press the "RUN" button to start **pdb_extract**
- The results file (tagged pdb) will then be used for validation or deposition

Coordinate File: X-Ray | NMR | Select | File type: mmCIF | Select Program for Structure Refinement: mmCIF | If Other: Run | Exit

NOTE:
 If the refinement program you used is not listed, select OTHER and write the name in the box provided.
 If the refinement program you used is not listed, select OTHER and write the name in the box provided.
 Questions, comments, and suggestions should be sent to help@deposit.wwpdb.org.

松浦 孝範

Protein Data Bank Japan (PDBj) 大阪大学蛋白質研究所



PDBへのデータ登録に関する情報

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

登録サーバ

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

<http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmrb-adit/> (NMR)

構造検証サーバ

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

PDBへのデータ登録に関する情報

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

編集方針

wwPDBウェブサイトの “Annotation Documentation”

<http://www.wwpfb.org/docs.html>

Data Processing and Annotation Procedures Manual

<http://deposit.rcsb.org/depoinfo/download/dp.pdf>

日本語による登録の手引き

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

http://bmrbbdep.protein.osaka-u.ac.jp/manual_top.html (NMR)

登録可能な構造

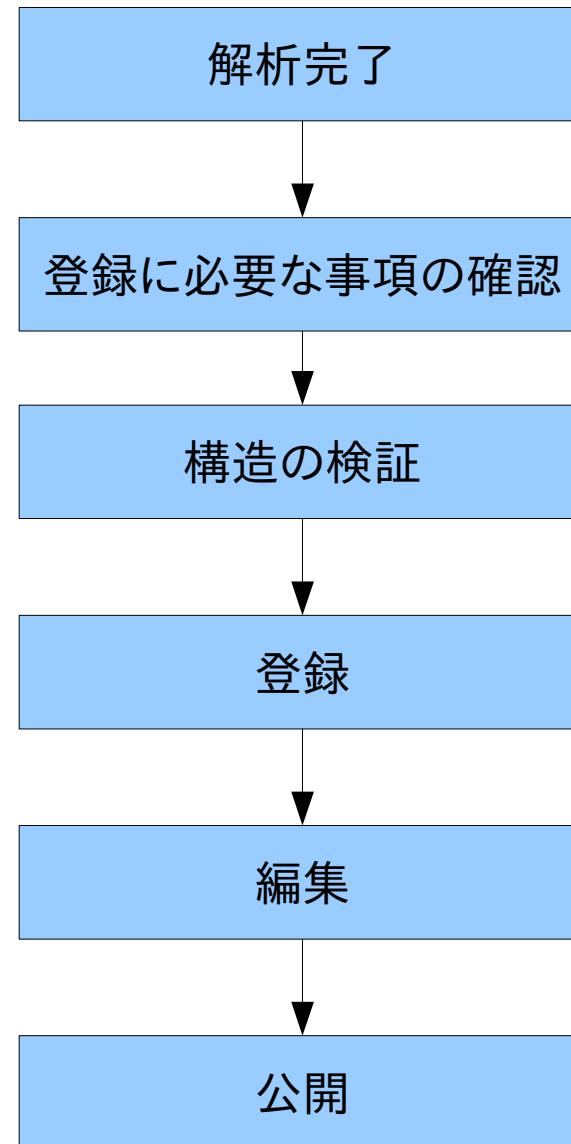
以下のいずれかに該当する生体高分子の
“実験データに基づく構造”

24残基以上のポリペプチド

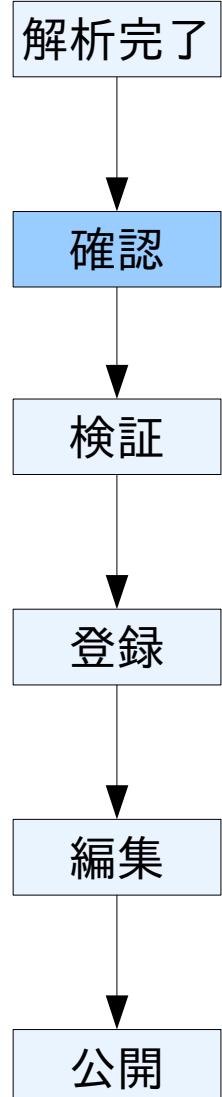
纖維蛋白質の繰り返し単位構造の登録は可能

4残基以上の核酸

公開までの流れ



登録前の確認事項



最終構造か?

アミノ酸配列がUniprotで検索可能か?

標準アミノ酸/核酸以外の化合物が含まれているか?

水分子や化合物の残基番号が蛋白質/核酸と重複していないか?

登録前の確認事項

最終構造か？

精密化および構造の検証を終えたものを登録する

wwPDBでは、登録戴いた構造の差し替えは**認めていない**

例外

編集者からの指摘事項に基づく修正

論文投稿先のrefereeからの指摘事項に基づく修正

登録前の確認事項

アミノ酸配列がUniprotで検索可能か？

構造解析した蛋白質の生物種およびアミノ酸配列が一致するものが、UniProtに登録されていることを確認

<http://www.pir.uniprot.org/>

登録前の確認事項

アミノ酸配列がUniprotで検索可能か？

登録されていない場合

Edman分解等、蛋白質から直接アミノ酸配列を決定した場合

EBIのSPINから**アミノ酸配列**を登録

<http://www.ebi.ac.uk/swissprot/Submissions/spin/>

核酸配列から推定アミノ酸配列を得た場合

DDBJのSAKURA, EMBLのWebin, NCBIのBankIt等から**核酸配列**を登録

<http://sakura.ddbj.nig.ac.jp/>

<http://www.ebi.ac.uk/embl/Submission/webin.html>

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BankIt/>

登録前の確認事項

標準アミノ酸/核酸以外の化合物が含まれているか？

PDBで使用実績がある化合物の情報をLigand Expoで調べる

<http://ligand-expo.rcsb.org/>

分子名, 組成式, 構造式, SMILES, InChi等
で検索可能

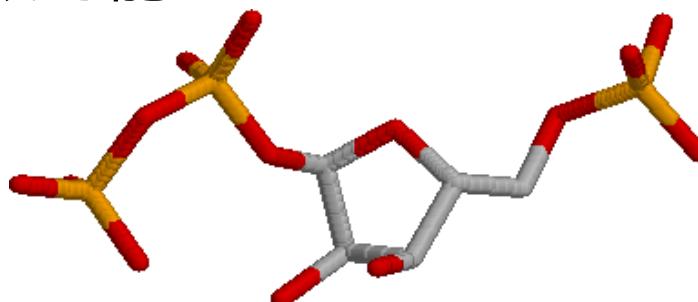
登録しようとしているデータにLigand Expoで検索可能な化合物が含まれる場合、component identifier (3文字コード) および構成原子の原子名を一致させる

登録前の確認事項

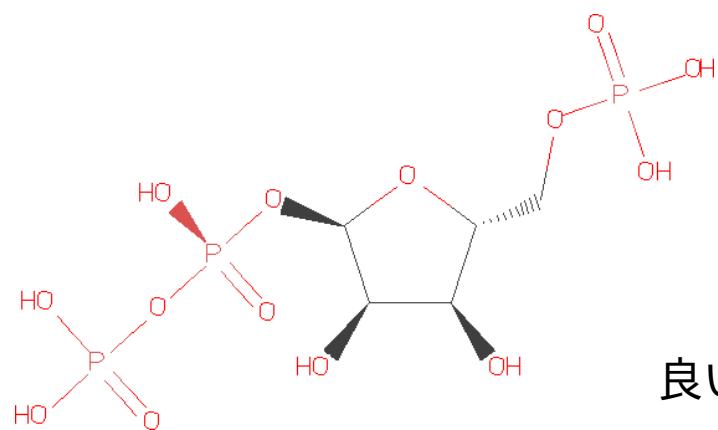
標準アミノ酸/核酸以外の化合物が含まれているか?

PDBで使用実績のない化合物が含まれる場合

使用している新規化合物のIUPAC名および構造式の情報を用意する
化合物の分子名, キラリティ等の立体化学情報, 結合の種類を明確にする
Ligand Expoの“Sketch input and/or structure search options”等で
作成可能



悪い例: 原子の種類, 結合の種類
が読み取れない



良い例

登録前の確認事項

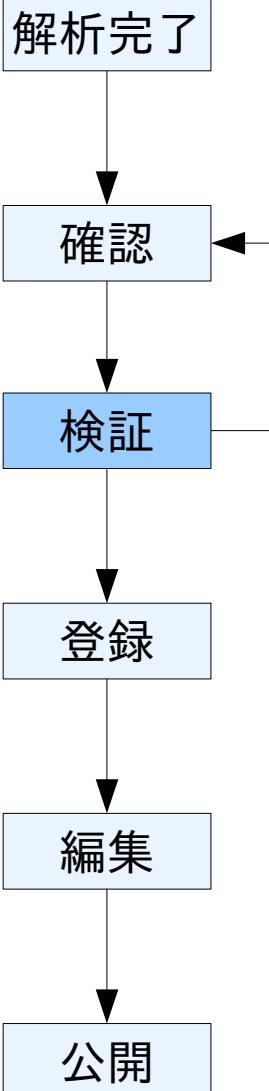
水や化合物分子の残基番号が蛋白質/核酸と重複していないか?

水や化合物分子のchain IDが、最も近接する蛋白質分子のものに振り直される

蛋白質分子と化合物分子の残基番号が重複する場合、化合物分子の残基番号が振り直される

論文で化合物分子を残基番号で言及する場合は、化合物分子の残基番号を蛋白質分子と重複しないように割り当てる

構造の検証



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

非結晶学的対象中および結晶学的対象におけるclose contact
結合長および結合角の理想値からのずれ

ねじれ角

Ramachandran revisitedに基づいた ϕ/ψ 角

キラリティ

蛋白質分子から3.5Å以上離れた水分子

Missing Residues/Atoms

Extra Atoms

構造の検証

Ramachandran revisitedに基づいたΦ/Ψ角

Phi/Psi-chology: Ramachandran revisited

G.J. Kleywegt and T.A. Jones

Structure 4(12), 1395-1400 (1996)

Ramachandran		Ramachandran revisited
1965	発表年	1996
463	分類に用いた構造	403
463	検証に用いた構造	3000以上
Most favored, Additional allowed, Generously allowed, Disallowed Gly, Pro	分類	Inside core Outside core Gly, Terminal
	除外される残基	

登録

解析完了

確認

検証

登録

編集

公開



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

<http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmrb-adit/> (NMR)

The screenshot shows the PDBj ADIT interface. At the top, there's a banner with the PDBj logo and the text 'Autodrop Input Tool'. Below it, a navigation bar includes links for Tutorial, ADIT FAQ, Deposition FAQ, Format Information, and Contact Us. A green header message says 'Send correspondence e-mails to annotators in English!!'. A note states that we cannot accept any email messages other than in English because correspondence emails are logged and shared with all wwPDB annotators. A red note from February 1, 2008, specifies that structure factor amplitudes/intensities (for crystal structures) and restraints (for NMR structures) will be a mandatory requirement for PDB deposition. Another note from August 1, 2007, indicates that wwPDB no longer accepts small peptide less than 24 residues for both NMR and X-ray entries. A note about ADIT Beta replacing the current ADIT in early 2008 follows. The main area has sections for 'Start New Session' (Method: X-ray, Structure Type: Protein, BEGIN button) and 'Continue Previous ADIT Session' (Session Restart ID input field, CONTINUE SESSION button). A note at the bottom says 'If you have started your session without the structure factor (for crystal structures) or restraints (for NMR structures) files at the beginning of your session, you have to send your SF/restraints files immediately after your deposition is completed.' A note at the bottom of the continuation section says 'To send us the file, you simply reply to our receipt mail with your SF/restraints files attached. PDB ID and RCSB ID should be included in the subject of the mail. We cannot start any annotation process without SF/restraints files.'

回折強度または構造因子(X線)
距離制限情報(NMR)
が必須

登録用ファイルの準備



<http://pdb-extract.rcsb.org/>

各種解析プログラムのログファイルから登録に必要な項目を抽出し、mmCIFファイルで出力
登録時の手動入力項目を減らすことができる

CCP4を使用する場合

各種プログラムの実行時に“NOHARVEST”キーワードを使用しない

(CCP4iを使用する場合、“Data Harvesting”で“Do not create harvest file”を選択しない)
ログファイルの代わりにSCALA, MLPHARE, REFMAC5が出力するCIFファイルを使用する

CNSでX線結晶構造解析を行う場合

PDB-extractを使用して登録する際は、**deposit_mmcif.inp**を実行し、出力されたファイル
(deposit.mmcif, deposit_sf.mmcif) を使用する

PDB-extractを使用せずに登録する際は、**xtal_pdbsubmission.inp**を実行し、出力された
ファイル (xtal_pdbsubmission.deposit) からSEQRES行を削除したPDBファイルを登録に使用
する

登録

解析完了

確認

検証

登録

編集

公開



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

<http://nmradit.protein.osaka-u.ac.jp/bmrb-adit/> (NMR)

AP
Auto Dep Input Tool

HELP PREVIEW ENTRY DEPOSIT DEPOSITION HOME

Categories	Data Items
Related Entries	Enter Data in Category Reflections
Authors	Enter the details about the crystallographically unique set of measured reflection data used to determine the coordinates of this deposition.
Entry Authors	Note that the collection characteristics entered here may be different from the values which are to be entered under 'Refinement Statistics'.
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	
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	
Upload Supplemental Information	
Ligand Information	
Virus Matrices	

DISPLAY AS TABLE

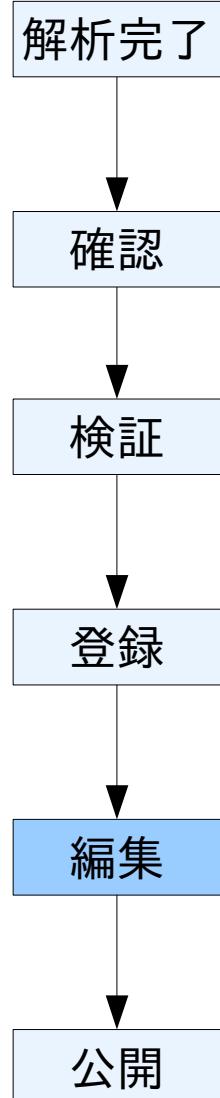
Save Reflections

Reflections	
Observed criterion sigma(F)	Help Example 0
Observed criterion sigma(I)	Help Example 0
Resolution (high)	Help Example 1.13
Resolution (low)	Help Example 26.63
Number unique reflections (all)	Help Example 38852
Number unique reflections (observed)	Help Example 38852
Percent possible (observed)	Help Example 100
R-merge I (observed)	Help Example 0.051
R-sym I (observed)	Help Example
Net I over average sigma(I)	Help Example 12.4

Description of Net I over average sigma(I)
(mmCIF item _reflns.ndb_netI_over_av_sigmaI)

The ratio of the mean of all the intensities classified as 'observed' to the mean of the standard uncertainties of the intensities of the 'observed' reflections.

編集者とのやりとり



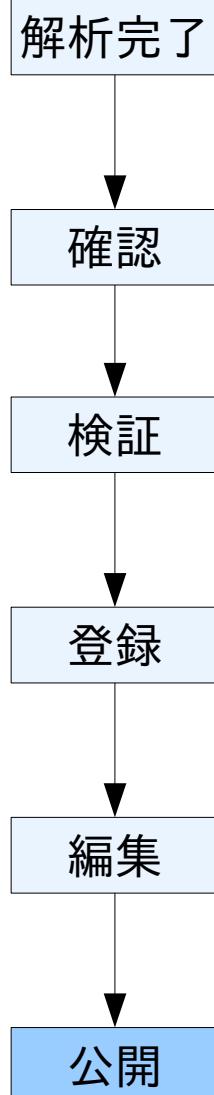
PDBj編集者と登録者との間で、電子メールにより
英語で行う

From: PDBj Annotator (XX) <xxxx@adit.protein.osaka-u.ac.jp>
Subject: structure of rcsbXXXXXX

編集者からの質問事項には、必ず返答を
登録者からのメールには、編集者から必ず（遅くとも一週間
以内に）返信が届く

Subjectは変更しない

登録エントリの公開



アミノ酸配列

直ちに公開 (RELEASE NOW)

座標の公開と同時に公開 (HOLD FOR RELEASE)

座標, 回折強度/構造因子 (X線), 距離制限情報 (NMR)

直ちに公開 (RELEASE NOW)

8週間後に公開 (HOLD FOR 8 WEEKS)

6ヶ月後に公開 (HOLD FOR 6 MONTHS)

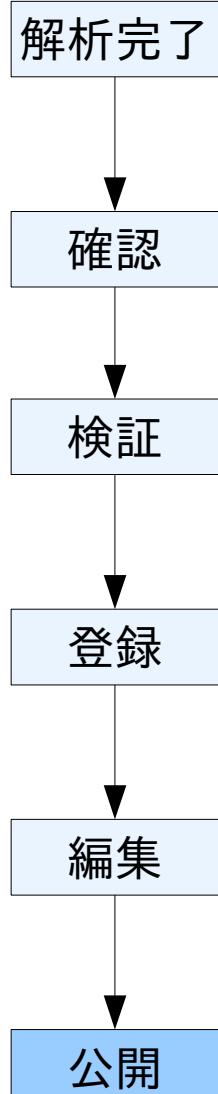
1年後に公開 (HOLD FOR 1 YEAR)

論文の出版と同時に公開 (HOLD FOR PUBLICATION)

座標と回折強度/構造因子, 距離制限情報の公開時期は独立に設定可能

投稿雑誌で解析データ公開時期を規定している場合があるので、登録前によく確認する

登録エントリの公開



登録者が指定した期日または登録1年後に公開される
(毎週水曜日午前4時 (アメリカ東部時刻))

座標の公開時期を “HOLD FOR PUBLICATION” と指定した場合、保留期間 (1年) の2か月前, 1か月前に、登録者に公開か取り下げかを確認するメールが届く

登録者が取り下げ (WITHDRAWN) を申し出ない限り、**登録者と連絡がとれなくとも公開される**

“HOLD FOR PUBLICATION” の場合、公開時期や引用論文の情報は**登録者が編集者に連絡する**

問い合わせ

自身で登録済みのデータ

PDBj編集者からのメールに英語で返信

登録サーバのトラブル, 登録や編集に関して

http://www.pdbj.org/pdbj_aditmail_j.html
から英語で問い合わせ

PDBjデータベース管理運営グループ

グループリーダー

中川 敦史 (大阪大学蛋白質研究所)

Annotators' leader

松浦 孝範 (大阪大学蛋白質研究所)

Annotators

五十嵐 令子 (科学技術振興機構)

見学 有美子 (科学技術振興機構)

松浦 かんな (科学技術振興機構)

井上 真由美 (大阪大学蛋白質研究所)

陳 晏瑜 (大阪大学蛋白質研究所)

皆様のご利用、ご登録
お待ちしております