

生体高分子NMRデータバンク（BMRB）新ポータルサイト データ解析、登録支援、データベースの活用

大阪大学 蛋白質研究所
岩田武史

Table of Contents

- PDBj-BMRB グループ
 - 登録・公開データについて
- 新ポータルサイトの紹介
 - 登録の流れ、FAQ
- Webブラウザでの高度なDB検索
 - アドバンスドサーチ
- データ解析・DB活用ツールの紹介

PDB j –BMRB グループの紹介

Biological **M**agnetic **R**esonance **B**ank

生体高分子のNMRデータベース

Wisconsin大学Madison校が運営

登録受付から公開までを行なっており

アジア圏はPDB j が担当している

BMRBはwwPDB (**w**orld **w**ide **P**rotein **D**ata **B**ank)を
構成している 4 団体のうちのひとつ

wwPDBメンバーについて

WORLDWIDE
wwPDB
PROTEIN DATA BANK

The worldwide Protein Data Bank

www.wwPDB.org • info@wwPDB.org

RCSB **PDB**
PROTEIN DATA BANK

Research Collaboratory for
Structural Bioinformatics
www.pdb.org

NSF, NIGMS, DOE,
NLM, NCI, NINDS,
NIDDK



BioMagResBank
www.bmrwisc.edu

NLM

EMBL-EBI **PDBe**
PROTEIN DATA BANK EUROPE

Protein Data Bank in Europe
pdbe.org

EMBL-EBI,
Wellcome Trust,
BBSRC, NIGMS, EU

PDBj
Protein Data Bank Japan

Protein Data Bank Japan
www.pdbj.org
NBDC-JST

NMRデータ登録受付サービス

- 生体高分子のNMR実験データは**ADIT-NMR**へ
– 化学シフトデータなど
- wwPDBの登録基準に満たない2-3残基以下の蛋白質、3塩基以下の核酸、3つ以下の糖からなる糖鎖のNMRデータが登録可能な**SMS-Dep**も運営しています

新ポータルサイトの紹介

The screenshot shows the PDBj-BMRB portal website. At the top, there is a header with the PDBj-BMRB logo and a language selector set to "English". Below the header, a blue banner contains the text: "PDBj-BMRBでは生体高分子のNMR実験データの登録受付・公開をPDBjグループの一員として行っています。"

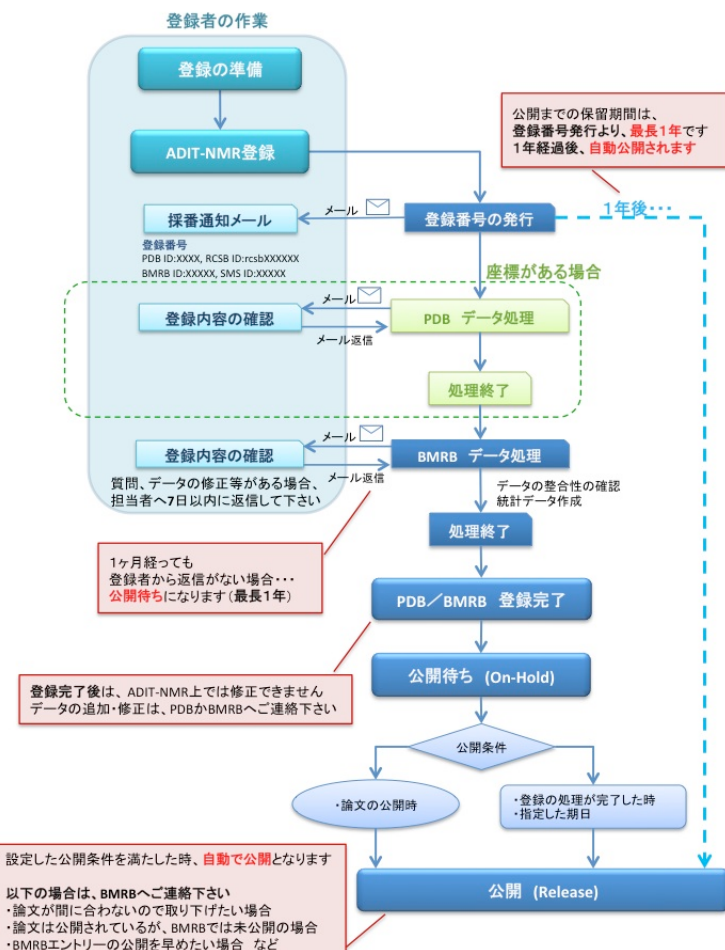
The main content area is divided into several sections:

- BMRB Search:** Includes a search bar for "Retrieve entry by BMRB accession No." with a "search" button. Below it, there are radio buttons for "Accession number" (selected) and "Deposition code". A note says "登録後の処理状況もAcc.No.で検索すると確認できます。". There is also a "Retrieve by keywords [Google]" section with another "search" button and radio buttons for "BMRB Database" (selected) and "www".
- Deposit Data:** Contains two sub-sections: "ADIT-NMR" with a link to "生体高分子のNMR実験データの登録はこちら。" and "SMS-Dep" with a link to "低分子量生体分子のNMR実験データと原子座標データ登録".
- BMRB Database:** Includes a link to the "Osaka site" and a link to the "BMRBウェブサイトはこちら。".
- Contents:** A grid of links with icons: "Over view of the Submission Process", "Submitting data", "ADIT-NMR or SMS-Dep", "FAQ", "NMR Tool BOX", "BMRBxTool", "Tool List", and "Contact us".
- Information:** A section with a date "Feb. 04-2013" and a note about the transition from ADIT-NMR to PDBj.

On the right side of the page, there are logos for PDBj, BMRB, PDB, and NBDC.

- 研究者の方々とBMRBとの接点となるサイト
- 日本に拠点がある強みを活かしたサポートの提供
- タブレットなどでも見やすく必要な情報へ簡単にアクセスできるようなサイトづくり

登録者の声を反映した情報提供



BMRB登録の流れについて

よくあるお問い合わせ

- 1. BMRBデータの内容・登録について
- 2. データの公開・検索サービスについて
- 3. 化学シフトについて
- 4. トラブルシューティング
- 5. その他

1. BMRBデータの内容・登録について

Q 1-1 初めて登録をするのですが、どうしたらいいですか。

A トップページ上のSubmitting dataをクリックすると、データ登録の手引きがご覧いただけます。
データ登録の手引きでは、下記以外の「提出するファイル」や「ADIT-NMR 入力項目についての解説」の詳細も載せています。

- * 登録を始める前に：登録の際に、留意していただきたい事項
- * 登録の流れについて：登録から公開までのフローチャート
- * 入力項目と記入例：実際に入力する項目の一覧表

Q 1-2 ADIT-NMRの操作方法を知りたい。

Q 1-3 NMR-STARフォーマットについて詳しく知りたい。

Q 1-4 NMR構造データは既にPDB登録済みで、その構造を得るために行ったNMR実験データをBMRBに登録したい。

Q 1-5 NMR実験データは既にBMRB登録済みで、その実験から得たNMR構造データをPDBに登録したい。

Q 1-6 既存BMRB・PDB登録を利用して、新しいNMRデータを登録したい。

Q 1-7 既存BMRB登録の内容を修正したい。

Q 1-8 既存PDB登録の内容を修正したい。

2. データの公開・検索サービスについて

Q 2-1 登録データの公開時期はどのように設定できますか。

Q 2-2 BMRB登録の処理状況を教えてください。

Q 2-3 論文に掲載されていたBMRB登録がまだ公開されていません。いつ頃公開されるか判りますか。

Q 2-4 PDB登録を取り下げた(WITHDRAWN)のですが、関連するBMRB登録も取り下げする必要がありますか。

Q 2-5 他データベースの登録データに関連したNMR実験データを見たいのですが、BMRB登録番号が判りません

よくあるお問い合わせ FAQ

日本語で登録を支援

- Study
- 01. Deposit data files
- 02. Entry information
- 03. Citations
- 04. Ligands, cofactors, etc
- 05. Molecular entity
- 06. Molecular assembly
- 07. Natural source
- 08. Experimental source
- 09. Sample
- 10. Sample conditions
- 11. Software descriptions
- 12. NMR spectrometer list
- 13. NMR experiments and samples
- 14. NMR experiment details
- 15. Chemical shift references
- 16. Assigned chemical shifts

NMR experiments and samples

13. NMR experiments and samples

この登録データを得るのに必要なすべてのNMR測定に対して、これまで記述した「試料」「分光器」「試料条件」を関連づけるために一覧表を作成します。

Data collection details

Other details

NMR実験に関して特記事項があればここに記入します。

[例: The structure was determined using a combination of NOE and residual dipolar coupling data.]

Experiment list

NMR experiment name

このNMR測定法の一般名称をプルダウンリストから選択あるいは入力します。

[例: 2D 1H-15N HSQC]

もし、同じ測定法を異なる試料に対して行なった場合は、以下のように記入してください。

[例: 2D 1H-15N HSQC No.1, sample_1]

[例: 2D 1H-15N HSQC No.2, sample_2]

Time-domain data provided

そのNMR測定で得られたFIDファイルの提供を行なうかどうかを示します。

[例: yes]

Sample label

このNMR測定はどの試料に対して行なわれたのかを示します。

カテゴリ「Sample」で入力した試料の項目の組に対して名づけた名前を入力します。

既に以前の項目で記入した場合は、プルダウンリストの中にその名前が登録されているので、該当するものを選択します。

[例: sample_1]

Sample state

その試料溶液中の生体高分子がNMR測定で観測される時、

磁気学的に等方的であるか異方的であるかを示します。

--pull down--

Sample conditions label

3. 帰属した化学シフトデータの記入



NMR-STARテンプレートの例

上記のファイルを、テキストエディタかExcelなどで開きます。

NMR-STARテンプレートは、loopで始まり、stopで終わる構成になっています。

loopの中には、データの種類を示す「タグ」が縦方向に並び、その下に、データカラムが横方向に並んでいます。

以下のタグに相当するデータカラムの“@”（アットマーク）部分を、実験のデータと置き換えます。

(例)

```
loop
  _atom_chem_shift.ID
  _atom_chem_shift.Entity_assembly_ID
  _atom_chem_shift.Comp_index_ID
  _atom_chem_shift.Comp_ID
  _atom_chem_shift.Atom_ID
  _atom_chem_shift.Atom_type
  _atom_chem_shift.Atom_isotope_number
  _atom_chem_shift.Val
  _atom_chem_shift.Val_err
  _atom_chem_shift.Assign_fig_of_merit
  _atom_chem_shift.Ambiguity_code
  _atom_chem_shift.Occupancy
  _atom_chem_shift.Details
1  . 1  H1S  H  H  1  @  @  . 1  .  .
2  . 1  H1S  HA H  1  @  @  . 1  .  .
3  . 1  H1S  MB H  1  @  @  . 1  .  .
4  . 1  H1S  HD1 H  1  @  @  . 1  .  .
5  . 1  H1S  HD2 H  1  @  @  . 1  .  .
6  . 1  H1S  HE1 H  1  @  @  . 1  .  .
7  . 1  H1S  HE2 H  1  @  @  . 1  .  .
8  . 1  H1S  C  C  13 @  @  . 1  .  .
9  . 1  H1S  CA C  13 @  @  . 1  .  .
10 . 1  H1S  CB C  13 @  @  . 1  .  .
11 . 1  H1S  CG C  13 @  @  . 1  .  .
```

4. タグの説明

• _atom_chem_shift.Val:

化学シフトの値をppmの単位で記入します。有効数字に注意してください。

BMRBでは記述された値の文字列をそのまま取り扱います。(例) 2.190と2.19など

• _atom_chem_shift.Val_err:

化学シフト値に対する誤差の見積もり値 (ppm) を記入します。

この値はBMRB登録サイト (ADIT-NMR) の中で、核種 (1Hや13C、15Nなど) 特異的に定義することができます。

例えば、すべての1Hに対して誤差は“0.02”であると報告することができます。

その場合はこの値に値を記入する必要はありません。

• _atom_chem_shift.Ambiguity:

ambiguityとは、曖昧さ、不明確さという意味で、

Ambiguity Codeとは、特定の原子に対する化学シフトの帰属の明確さを表す情報です。

(注意) テンプレートには自動的に既定値が記入されますが、必ず登録者自身で確認および修正をしてください。

ADIT-NMR 全入力項目の解説

化学シフトデータファイルの作成方法

Webブラウザからの高度な検索

Biological Magnetic Resonance Data Bank
A Repository for Data from NMR Spectroscopy on Proteins, Peptides, Nucleic Acids, and other Biomolecules

NMR Data Visualizations (see more)

Your data ?

The BMRB project

Search BMRB

Advanced Search

Field Value to search for Display

Entry ID 5357

Entry title

Entry author

SG project

Entry src

Struct keywords

Data set

Datum

Release

Entry ID ☐ display

Title ☐ display

Submission date ☐ display

Experimental method ☐ display

Experimental method subtype ☐ display

Status code ☐ display

Database ☐ BMRB ☐ metabolomics

Output ☐ HTML ☐ CSV

Look for: _Entry.Title ~* 'ubiquitin'

Display: count, _Entry.ID, _Entry.Title, _Entry.Submission_date

BMRBDB



select distinct cast(T0."ID" as integer) as "Entry.ID", T0."Title" as
"Entry.Title" from T0, T1 where T0."ID" = T1."ID" and T1."Physical_state"
as "Entity_assembly" T1 on T0."ID" = T1."ID" and T1."Physical_state" ~*
'denatured' order by cast(T0."ID" as integer)

SQLクエリ

Entry.ID Entry.Title

68 Sequential 1H NMR Assignments and Secondary Structure Identification of Human Ubiquitin

1520 Characterization of a Partially Denatured State of a Protein by Two-Dimensional NMR Spectroscopy

2573 Fast Internal Main-Chain Dynamics of Human Ubiquitin

2573 Fast Internal Main-Chain Dynamics of Human Ubiquitin

444 1H, 13C and 15N Assignments of Ubiquitin Unfolded in 8M Urea, pH2 and Analysis of Chemical Shift Dispersion in Unfolded Proteins

4493 Solution structure of the designed hydrophobic core mutant of ubiquitin, 1D7

4769 Backbone 1H, 13C and 15N assignments for yeast ubiquitin at pH 7.5

5500 Parkin binds the Rpn10 subunit of 26S proteasomes with the ubiquitin-like domain

5594 Structural insights into the U-box, a domain associated with multi-ubiquitination

5669 Structure and Ubiquitin Interactions of the Conserved NZF Domain of Npl4

6128 Structure of At3g01050.1, a ubiquitin-fold protein from Arabidopsis thaliana

6176 Solution structure of a ubiquitin-like domain of tubulin-folding cofactor B

GUIを用いて複雑な検索が可能に

変性状態のユビキチンの検索

Search BMRB

How to use this form (please read this first)

Search BMRB

How to use this form (please read this first)

Entry information Citations **Molecular assembly** Experimental descriptions NMR parameters

Kinetic data Thermodynamic data Structure determination

Chem comp Entity **Assembly** Natural source Experimental source

Assembly Assembly type Entity assembly Bond

Experimental data reported display

Physical state display

Conformational isomer

Chemical exchange state

Magnetically equivalent group

Entry ID

Look for: Display:

Molecular assembly contents (polymer chains, cofactors, metal ions, etc.)

Assembly component name

構成分子の名前を記入します。ここでは集合体を構成する分子の数と同数の分子の名前が挙げられます。
例えば2つの亜鉛イオンが生体高分子と結合している場合、
"Zn2+ No.1""Zn2+ No.2"のように区別してください。
[例 : Cyt.c peptide, heme]

Molecular entity name to assign to this assembly component

カテゴリ「Molecular entity」の「Brief molecule name or acronym (label)」項目で入力した生体高分子やリガンド、金属イオンの名前を記入します。
既に入力した場合はプルダウンリストに登録されているので、その中から選択します。
ホモダイマーのように同じ残基（塩基）配列で同環境下にある2つの生体高分子は同じ1つの名前を差すことになるでしょう。
[例 : HIV protease polypeptide]

NMR experimental data reported

今回の登録でNMR登録データを登録するものに「yes」を選択します。

Physical state (biopolymers only)

この生体高分子の物理的状態を表す適当な語句を、プルダウンリストから選択あるいは簡潔に記入します。

denatured--変性状態

--pull down--

native--天然状態 安定配座状態をとり、

denatured--変性状態 あるとNMRスペクトルで観測された場合は「yes」を選択します。

molten globule--乳化状態 子で、'cis'と'trans'の

unfolded--折りたたみ構造をとらない状態 れた場合はこれに該当するでしょう。

あるいは、系を構成するグルコースが一方ではalpha-D-グルコースで他方ではbeta-D-グルコースの場合など。

検索タグはポータルサイトの解説を参照下さい

検索結果

Entry.ID Entry.Title

4375	1H, 13C and 15N Assignments of Ubiquitin Unfolded in 8M Urea, pH2 and Analysis of Chemical shift Dispersion in Unfolded Proteins
15047	Ubiquitin in 8 M Urea
16626	Backbone and stereospecific beta-sidechain assignments of 1H, 13C and 15N for Ubiquitin Unfolded in 8M Urea, pH2.5.
18610	1H, 13C and 15N assignments of Ubiquitin for both folded and denatured states at 258K and 2500 bar

Entity assembly.Physical state

denatured
denatured
denatured
denatured

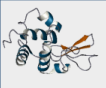
Found 4 row(s)

SQL query was:

select distinct cast(T0."ID" as integer) as "Entry.ID",T0."Title" as "Entry.Title",T0."Physical_state" as "Entity_assembly.Physical_state" from "Entry" T0 join "Entity_assembly" T1 on T0."ID"=T1."Entry_ID" where T0."Title" ~* 'ubiquitin' and T0."Physical_state" ~* 'denatured' order by cast(T0."ID" as integer)


Biological Magnetic Resonance Data Bank
A Repository for Data from NMR Spectroscopy on Proteins, Peptides, Nucleic Acids, and other Biomolecules


Member of
PDBe
PROTEIN DATA BANK



Search

Validation Tools

Deposit Data

NMR Statistics

Spectroscopists' Corner

Programmers' Corner

Metabonomics

Educational Outreach

NMR Data Formats

Utility NMR Links

Site Map

FTP Access

BMRB Entry 5387

PDB ID: 1gbl
Entry in NMR-RESTRAINTS Grid
Validation report in NRG-CING
Chem Shift validation: AYS, SLS, LACS

BMRB number (accession): 5387
Accession: Deposition

Click image to activate.
NMR-STAR v3.1 file: [bmr5387.star](#)
NMR-STAR v2.1 file: [bmr5387.star](#)

[Data Visualizations](#)

Title: Complete ¹H, ¹³C, and ¹⁵N chemical shifts for human recombinant ubiquitin in reverse micelles PubMed: 11458950

Authors: Babu, Charles; Flynn, Peter; Wand, A. Joshua

Citation: Babu, Charles; Flynn, Peter; Wand, A. "Validation of protein structure from preparations of encapsulated proteins dissolved in low viscosity fluids" J. Am. Chem. Soc. 123, 2691-2692 (2001).

Assembly members:
ubiquitin, polymer, 76 residues, 8565 Da.

Natural source: Common Name: Human Taxonomy ID: 9606 Superkingdom: Eukaryota Kingdom: Metazoa Genus/species: Homo sapiens

Experimental source: Production method: recombinant technology Host organism: Escherichia coli

Data sets:

Data type	Count
1H chemical shifts	576
13C chemical shifts	340
15N chemical shifts	82

Additional metadata:

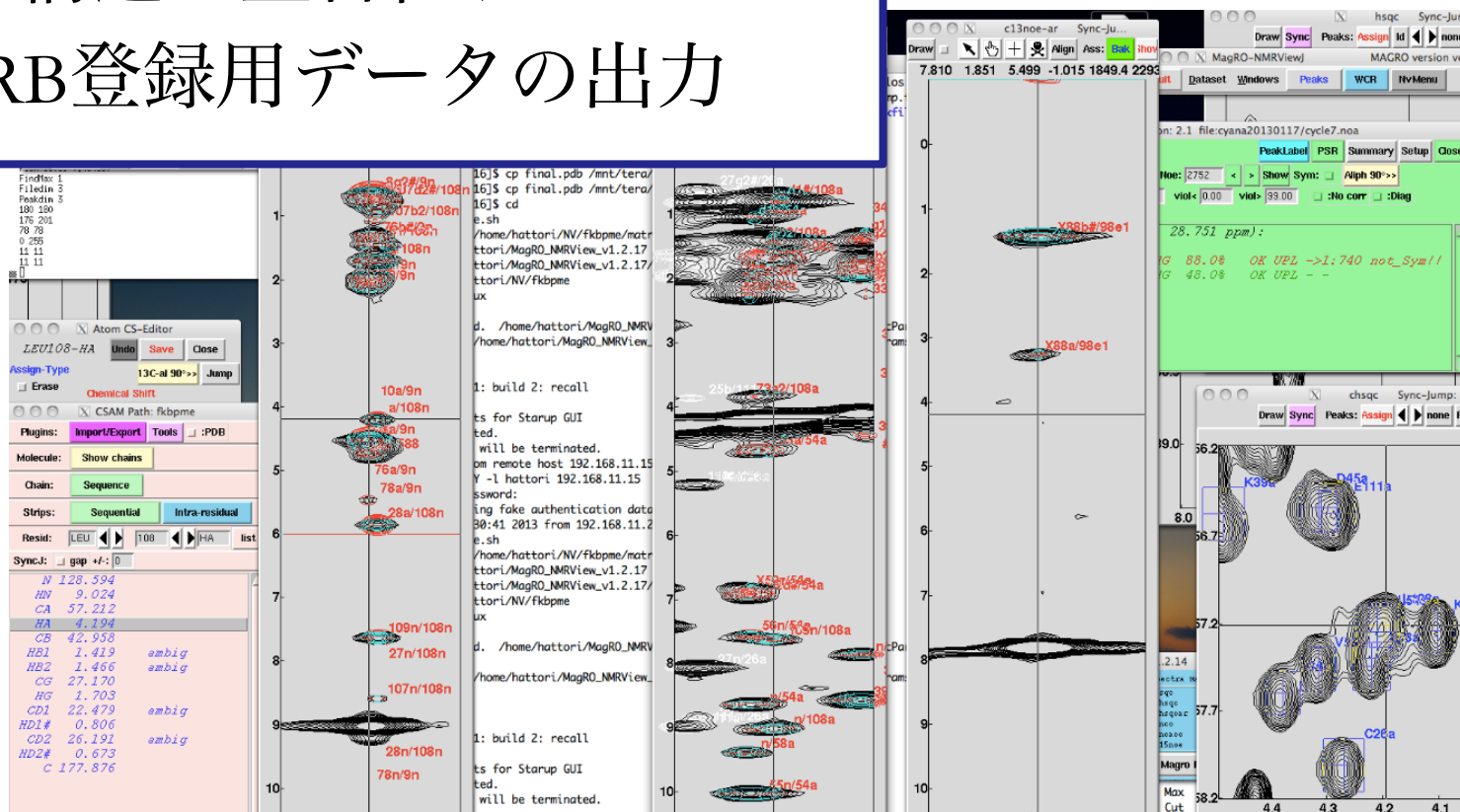
[Assembly](#) | [Samples and Experiments](#) | [Software](#) | [Spectrometers](#) | [Hide all](#)

Related Database Links:

Database	Accession
BMRB	11505 15047 15410 15689 15866 15907 16228 16582 16753 16880 16985 16995 17059 17181 17239 17333 17439 17769 17919 18582 18583 18584 18610 18611 18425 18578 18583 18584 18585 18586 18587 18588 18589 18590 18591 18592 18593 18594 18595 18596 18597 18598 18599 18600 18601 18602 18603 18604 18605 18606 18607 18608 18609 18610 18611 18612 18613 18614 18615 18616 18617 18618 18619 18620 18621 18622 18623 18624 18625 18626 18627 18628 18629 18630 18631 18632 18633 18634 18635 18636 18637 18638 18639 18640 18641 18642 18643 18644 18645 18646 18647 18648 18649 18650 18651 18652 18653 18654 18655 18656 18657 18658 18659 18660 18661 18662 18663 18664 18665 18666 18667 18668 18669 18670 18671 18672 18673 18674 18675 18676 18677 18678 18679 18680 18681 18682 18683 18684 18685 18686 18687 18688 18689 18690 18691 18692 18693 18694 18695 18696 18697 18698 18699 18700 18701 18702 18703 18704 18705 18706 18707 18708 18709 18710 18711 18712 18713 18714 18715 18716 18717 18718 18719 18720 18721 18722 18723 18724 18725 18726 18727 18728 18729 18730 18731 18732 18733 18734 18735 18736 18737 18738 18739 18740 18741 18742 18743 18744 18745 18746 18747 18748 18749 18750 18751 18752 18753 18754 18755 18756 18757 18758 18759 18760 18761 18762 18763 18764 18765 18766 18767 18768 18769 18770 18771 18772 18773 18774 18775 18776 18777 18778 18779 18780 18781 18782 18783 18784 18785 18786 18787 18788 18789 18790 18791 18792 18793 18794 18795 18796 18797 18798 18799 18800 18801 18802 18803 18804 18805 18806 18807 18808 18809 18810 18811 18812 18813 18814 18815 18816 18817 18818 18819 18820 18821 18822 18823 18824 18825 18826 18827 18828 18829 18830 18831 18832 18833 18834 18835 18836 18837 18838 18839 18840 18841 18842 18843 18844 18845 18846 18847 18848 18849 18850 18851 18852 18853 18854 18855 18856 18857 18858 18859 18860 18861 18862 18863 18864 18865 18866 18867 18868 18869 18870 18871 18872 18873 18874 18875 18876 18877 18878 18879 18880 18881 18882 18883 18884 18885 18886 18887 18888 18889 18890 18891 18892 18893 18894 18895 18896 18897 18898 18899 18900 18901 18902 18903 18904 18905 18906 18907 18908 18909 18910 18911 18912 18913 18914 18915 18916 18917 18918 18919 18920 18921 18922 18923 18924 18925 18926 18927 18928 18929 18930 18931 18932 18933 18934 18935 18936 18937 18938 18939 18940 18941 18942 18943 18944 18945 18946 18947 18948 18949 18950 18951 18952 18953 18954 18955 18956 18957 18958 18959 18960 18961 18962 18963 18964 18965 18966 18967 18968 18969 18970 18971 18972 18973 18974 18975 18976 18977 18978 18979 18980 18981 18982 18983 18984 18985 18986 18987 18988 18989 18990 18991 18992 18993 18994 18995 18996 18997 18998 18999 19000 19001 19002 19003 19004 19005 19006 19007 19008 19009 19010 19011 19012 19013 19014 19015 19016 19017 19018 19019 19020 19021 19022 19023 19024 19025 19026 19027 19028 19029 19030 19031 19032 19033 19034 19035 19036 19037 19038 19039 19040 19041 19042 19043 19044 19045 19046 19047 19048 19049 19050 19051 19052 19053 19054 19055 19056 19057 19058 19059 19060 19061 19062 19063 19064 19065 19066 19067 19068 19069 19070 19071 19072 19073 19074 19075 19076 19077 19078 19079 19080 19081 19082 19083 19084 19085 19086 19087 19088 19089 19090 19091 19092 19093 19094 19095 19096 19097 19098 19099 19100 19101 19102 19103 19104 19105 19106 19107 19108 19109 19110 19111 19112 19113 19114 19115 19116 19117 19118 19119 19120 19121 19122 19123 19124 19125 19126 19127 19128 19129 19130 19131 19132 19133 19134 19135 19136 19137 19138 19139 19140 19141 19142 19143 19144 19145 19146 19147 19148 19149 19150 19151 19152 19153 19154 19155 19156 19157 19158 19159 19160 19161 19162 19163 19164 19165 19166 19167 19168 19169 19170 19171 19172 19173 19174 19175 19176 19177 19178 19179 19180 19181 19182 19183 19184 19185 19186 19187 19188 19189 19190 19191 19192 19193 19194 19195 19196 19197 19198 19199 19200 19201 19202 19203 19204 19205 19206 19207 19208 19209 19210 19211 19212 19213 19214 19215 19216 19217 19218 19219 19220 19221 19222 19223 19224 19225 19226 19227 19228 19229 19230 19231 19232 19233 19234 19235 19236 19237 19238 19239 19240 19241 19242 19243 19244 19245 19246 19247 19248 19249 19250 19251 19252 19253 19254 19255 19256 19257 19258 19259 19260 19261 19262 19263 19264 19265 19266 19267 19268 19269 19270 19271 19272 19273 19274 19275 19276 19277 19278 19279 19280 19281 19282 19283 19284 19285 19286 19287 19288 19289 19290 19291 19292 19293 19294 19295 19296 19297 19298 19299 19300 19301 19302 19303 19304 19305 19306 19307 19308 19309 19310 19311 19312 19313 19314 19315 19316 19317 19318 19319 19320 19321 19322 19323 19324 19325 19326 19327 19328 19329 19330 19331 19332 19333 19334 19335 19336 19337 19338 19339 19340 19341 19342 19343 19344 19345 19346 19347 19348 19349 19350 19351 19352 19353 19354 19355 19356 19357 19358 19359 19360 19361 19362 19363 19364 19365 19366 19367 19368 19369 19370 19371 19372 19373 19374 19375 19376 19377 19378 19379 19380 19381 19382 19383 19384 19385 19386 19387 19388 19389 19390 19391 19392 19393 19394 19395 19396 19397 19398 19399 19400 19401 19402 19403 19404 19405 19406 19407 19408 19409 19410 19411 19412 19413 19414 19415 19416 19417 19418 19419 19420 19421 19422 19423 19424 19425 19426 19427 19428 19429 19430 19431 19432 19433 19434 19435 19436 19437 19438 19439 19440 19441 19442 19443 19444 19445 19446 19447 19448 19449 19450 19451 19452 19453 19454 19455 19456 19457 19458 19459 19460 19461 19462 19463 19464 19465 19466 19467 19468 19469 19470 19471 19472 19473 19474 19475 19476 19477 19478 19479 19480 19481 19482 19483 19484 19485 19486 19487 19488 19489 19490 19491 19492 19493 19494 19495 19496 19497 19498 19499 19500 19501 19502 19503 19504 19505 19506 19507 19508 19509 19510 19511 19512 19513 19514 19515 19516 19517 19518 19519 19520 19521 19522 19523 19524 19525 19526 19527 19528 19529 19530 19531 19532 19533 19534 19535 19536 19537 19538 19539 19540 19541 19542 19543 19544 19545 19546 19547 19548 19549 19550 19551 19552 19553 19554 19555 19556 19557 19558 19559 19560 19561 19562 19563 19564 19565 19566 19567 19568 19569 19570 19571 19572 19573 19574 19575 19576 19577 19578 19579 19580 19581 19582 19583 19584 19585 19586 19587 19588 19589 19590 19591 19592 19593 19594 19595 19596 19597 19598 19599 19600 19601 19602 19603 19604 19605 19606 19607 19608 19609 19610 19611 19612 19613 19614 19615 19616 19617 19618 19619 19620 19621 19622 19623 19624 19625 19626 19627 19628 19629 19630 19631 19632 19633 19634 19635 19636 19637 19638 19639 19640 19641 19642 19643 19644 19645 19646 19647 19648 19649 19650 19651 19652 19653 19654 19655 19656 19657 19658 19659 19660 19661 19662 19663 19664 19665 19666 19667 19668 19669 19670 19671 19672 19673 19674 19675 19676 19677 19678 19679 19680 19681 19682 19683 19684 19685 19686 19687 19688 19689 19690 19691 19692 19693 19694 19695 19696 19697 19698 19699 19700 19701 19702 19703 19704 19705 19706 19707 19708 19709 19710 19711 19712 19713 19714 19715 19716 19717 19718 19719 19720 19721 19722 19723 19724 19725 19726 19727 19728 19729 19730 19731 19732 19733 19734 19735 19736 19737 19738 19739 19740 19741 19742 19743 19744 19745 19746 19747 19748 19749 19750 19751 19752 19753 19754 19755 19756 19757 19758 19759 19760 19761 19762 19763 19764 19765 19766 19767 19768 19769 19770 19771 19772 19773 19774 19775 19776 19777 19778 19779 19780 19781 19782 19783 19784 19785 19786 19787 19788 19789 19790 19791 19792 19793 19794 19795 19796 19797 19798 19799 19800 19801 19802 19803 19804 19805 19806 19807 19808 19809 19810 19811 19812 19813 19814 19815 19816 19817 19818 19819 19820 19821 19822 19823 19824 19825 19826 19827 19828 19829 19830 19831 19832 19833 19834 19835 19836 19837 19838 19839 19840 19841 19842 19843 19844 19845 19846 19847 19848 19849 19850 19851 19852 19853 19854 19855 19856 19857 19858 19859 19860 19861 19862 19863 19864 19865 19866 19867 19868 19869 19870 19871 19872 19873 19874 19875 19876 19877 19878 19879 19880 19881 19882 19883 19884 19885 19886 19887 19888 19889 19890 19891 19892 19893 19894 19895 19896 19897 19898 19899 19900 19901 19902 19903 19904 19905 19906 19907 19908 19909 19910 19911 19912 19913 19914 19915 19916 19917 19918 19919 19920 19921 19922 19923 19924 19925 19926 19927 19928 19929 19930 19931 19932 19933 19934 19935 19936 19937 19938 19939 19940 19941 19942 19943 19944 19945 19946 19947 19948 19949 19950 19951 19952 19953 19954 19955 19956 19957 19958 19959 19960 19961 19962 19963 19964 19965 19966 19967 19968 19969 19970 19971 19972 19973 19974 19975 19976 19977 19978 19979 19980 19981 19982 19983 19984 19985 19986 19987 19988 19989 19990 19991 19992 19993 19994 19995 19996 19997 19998 19999 20000 20001 20002 20003 20004 20005 20006 20007 20008 20009 20010 20011 20012 20013 20014 20015 20016 20017 20018 20019 20020 20021 20022 20023 20024 20025 20026 20027 20028 20029 20030 20031 20032 20033 20034 20035 20036 20037 20038 20039 20040 20041 20042 20043 20044 20045 20046 20047 20048 20049 20050 20051 20052 20053 20054 20055 20056 20057 20058 20059 20060 20061 20062 20063 20064 20065 20066 20067 20068 20069 20070 20071 20072 20073 20074 20075 20076 20077 20078 20079 20080 20081 20082 20083 20084 20085 20086 20087 20088 20089 20090 20091 20092 20093 20094 20095 20096 20097 20098 20099 20100 20101 20102 20103 20104 20105 20106 20107 20108 20109 20110 20111 20112 20113 20114 20115 20116 20117 20118 20119 20120 20121 20122 20123 20124 20125 20126 20127 20128 20129 20130 20131 20132 20133 20134 20135 20136 20137 20138 20139 20140 20141 20142 20143 20144 20145 20146 20147 20148 20149 20150 20151 20152 20153 20154 20155 20156 20157 20158 20159 20160 20161 20162 20163 20164 20165 20166 20167 20168 20169 20170 20171 20172 20173 20174 20175 20176 20177 20178 20179 20180 20181 20182 20183 20184 20185 20186 20187 20188 20189 20190 20191 20192 20193 20194 20195 20196 20197 20198 20199 20200 20201 20202 20203 20204 20205 20206 20207 20208 20209 20210 20211 20212 20213 20214 20215 20216 20217 20218 20219 20220 20221 20222 20223 20224 20225 20226 20227 20228 20229 20230 20231 20232 20233 20234 20235 20236 20237 20238 20239 20240 20241 20242 20243 20244 20245 20246 20247 20248 20249 20250 20251 20252 20253 20254 20255 20256 20257 20258 20259 20260 20261 20262 20263 20264 20265 20266 20267 20268 20269 20270 20271 20272 20273 20274 20275 20276 20277 20278 20279 20280 20281 20282 20283 20284 20285 20286 20287 20288 20289 20290 20291 20292 20293 20294 20295 20296 20297 20298 20299 20300 20301 20302 20303 20304 20305 20306 20307 20308 20309 20310 20311 20312 20313 20314 20315 20316 20317 20318 20319 20320 20321 20322 20323 20324 20325 20326 20327 20328 20329 20330 20331 20332 20333 20334 20335 20336 20337 20338 20339

データ解析支援ツール MagRO

- シグナル帰属支援
- 立体構造の整合性チェック
- BMRB登録用データの出力



XMLへの変換ツール BMRBxTool

NMR-STAR v3

```
_Atom_chem_shift.Comp_ID  
_Atom_chem_shift.Atom_ID  
_Atom_chem_shift.Atom_type  
_Atom_chem_shift.Atom_isotope_number  
_Atom_chem_shift.Val  
_Atom_chem_shift.Val_err  
_Atom_chem_shift.Assign_fig_of_merit  
_Atom_chem_shift.Ambiguity_code  
_Atom_chem_shift.Occupancy  
_Atom_chem_shift.Resonance_ID  
_Atom_chem_shift.Auth_entity_assembly_ID  
_Atom_chem_shift.Auth_seq_ID  
_Atom_chem_shift.Auth_comp_ID  
_Atom_chem_shift.Auth_atom_ID  
_Atom_chem_shift.Details  
_Atom_chem_shift.Entry_ID  
_Atom_chem_shift.Assigned_chem_shift_list_ID
```

```
1 . 1 1 3 3 ASP H H 1 8.560 0.03 . 1 . . . 3 D HN . 15400 1  
2 . 1 1 3 3 ASP HA H 1 4.480 0.03 . 1 . . . 3 D HA . 15400 1
```

- ・ 汎用フォーマット
- ・ 相互互換性が向上

BMRB/XML

```
<nmrstar:Atom_chem_shiftCategory>  
<nmrstar:Atom_chem_shift Assigned_chem_shift_list_ID="1" Entry_ID="15400" ID="1">  
  <nmrstar:Ambiguity_code>1</nmrstar:Ambiguity_code>  
  <nmrstar:Assembly_atom_ID>0</nmrstar:Assembly_atom_ID>  
  <nmrstar:Atom_ID>H</nmrstar:Atom_ID>  
  <nmrstar:Atom_isotope_number>1</nmrstar:Atom_isotope_number>  
  <nmrstar:Atom_type>H</nmrstar:Atom_type>  
  <nmrstar:Auth_atom_ID>HN</nmrstar:Auth_atom_ID>  
  <nmrstar:Auth_comp_ID>D</nmrstar:Auth_comp_ID>  
  <nmrstar:Auth_seq_ID>3</nmrstar:Auth_seq_ID>  
  <nmrstar:Comp_ID>ASP</nmrstar:Comp_ID>  
  <nmrstar:Comp_index_ID>3</nmrstar:Comp_index_ID>  
  <nmrstar:Entity_ID>1</nmrstar:Entity_ID>  
  <nmrstar:Entity_assembly_ID>1</nmrstar:Entity_assembly_ID>  
  <nmrstar:Seq_ID>3</nmrstar:Seq_ID>  
  <nmrstar:Sf_ID>154000019</nmrstar:Sf_ID>  
  <nmrstar:Val>8.560</nmrstar:Val>  
  <nmrstar:Val_err>0.03</nmrstar:Val_err>  
</nmrstar:Atom_chem_shift>  
<nmrstar:Atom_chem_shift Assigned_chem_shift_list_ID="1" Entry_ID="15400" ID="2">  
  <nmrstar:Ambiguity_code>1</nmrstar:Ambiguity_code>  
  <nmrstar:Assembly_atom_ID>0</nmrstar:Assembly_atom_ID>  
  <nmrstar:Atom_ID>HA</nmrstar:Atom_ID>  
  <nmrstar:Atom_isotope_number>1</nmrstar:Atom_isotope_number>  
  <nmrstar:Atom_type>H</nmrstar:Atom_type>  
  <nmrstar:Auth_atom_ID>HA</nmrstar:Auth_atom_ID>  
  <nmrstar:Auth_comp_ID>D</nmrstar:Auth_comp_ID>  
  <nmrstar:Auth_seq_ID>3</nmrstar:Auth_seq_ID>  
  <nmrstar:Comp_ID>ASP</nmrstar:Comp_ID>  
  <nmrstar:Comp_index_ID>3</nmrstar:Comp_index_ID>  
  <nmrstar:Entity_ID>1</nmrstar:Entity_ID>  
  <nmrstar:Entity_assembly_ID>1</nmrstar:Entity_assembly_ID>  
  <nmrstar:Seq_ID>3</nmrstar:Seq_ID>  
  <nmrstar:Sf_ID>154000019</nmrstar:Sf_ID>  
  <nmrstar:Val>4.480</nmrstar:Val>  
  <nmrstar:Val_err>0.03</nmrstar:Val_err>  
</nmrstar:Atom_chem_shift>
```

全て新ポータルサイトから入手できます

English

PDBj BMRB

PDBj-BMRBでは生体高分子のNMR実験データの登録受付・公開をPDBjグループの一員として行っています。

BMRB Search

Retrieve entry by BMRB accession No.

☒ Accession number ☐ Deposition code

登録後の処理状況もAcc.No.で検索すると確認できます。

Retrieve by keywords [Google]

☒ BMRB Database ☐ www

Deposit Data

ADIT-NMR

生体高分子のNMR実験データの登録はこちら。

SMS-Dep

低分子量生体分子のNMR実験データと原子座標データ登録

BMRB Database

Osaka site

BMRBウェブサイトはこちら。

Contents

Over view of the Submission Process

BMRB(データバンク)へデータ登録の流れ

Submitting data

登録サイトADIT-NMRの使い方、登録項目

ADIT-NMR or SMS-Dep

どちらに登録するべきか

FAQ

よく寄せられるご質問をまとめています

NMR Tool BOX

附属解析ツール

BMRBxTool

データベース活用ツール

Tool List

Validation Tool
Deposit Tool
PDBj-BMRB Tool

Contact us

お問い合わせ

Information

Feb. 04-2013 2013年2月6日以降にADIT-NMRにてPDBに登録される座標と実験データは、同じ公開条件（ステータス）に従います。(リンク)

PDBj
Protein Data Bank Japan

BMRB
BioMagical Research Consortium

WORLDWIDE PDB
PROTEIN DATA BANK

NBDC
National Biomedical Data Center

INSTITUTE for PROTEIN RESEARCH

実際に触って体感してください

pd bj-bmrbで検索

Google pd bj-bmrb

ウェブ 画像 地図 ショッピング もっと見る 検索ツール

約 332 件 (0.17 秒)

[PDBJ-BMRB portal site - Top page ja](#)
[bmrdep.protein.osaka-u.ac.jp/](#)

PDBJ-BMRBでは生体高分子のNMR実験データの登録受付・公開をPDBJグループの一員として行っています。BMRB Search, Retrieve entry by BMRB accession No ... Tool List, Validation Tool Deposit Tool PDBJ-BMRB Tool, Contact us, お問い合わせ ...

PDBJ-BMRB
PDBJ-BMRB aims to serve biological NMR communities ...

データ登録の手引き
データ登録の手引き, 研究したタンパク質や核酸のNMR実験データと構 ...

変換ツール
データ変換ツール, STARCh file convert 各種フォーマット ...
[osaka-u.ac.jp](#) からの検索結果 ▶

FAQ
よくあるお問い合わせ, 1.BMRBデータの内容・登録について・2.データの ...

登録の流れについて
データ登録の流れ, 登録の準備から, 公開までの流れを、フローチャー ...

登録を始める前に
登録を始める前に, BMRBのデータ登録に際し登録者側でご留意して頂 ...

[Contact to BMRB Group Deposition and Annotation staff - PDBJ](#)
[www.pdbj.org/pdbj_aditnmrmail.html](#) ▶ このページを訳す
Regarding the questions to know the procedure of BMRB deposition, please read the "PDBJ-BMRB Data Deposition Tutorial" and supporting information on ADIT- NMR first. It might take a week or 10 days to get an answer from PDBJ for the ...

91190 件が利用できます (2013-06-05 00:00 UTC / 09:00 JST)

PDBj
Protein Data Bank Japan
[www.PDBj](#) [RCSB](#) [BMRB](#) [PDBe](#) [JST-NBDC](#) [IPR](#) [従来版](#) [Share](#)

English 日本語 簡体中文 繁體中文 한국어 詳細条件検索

Search pd bj.org

ホーム
トップページ
統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
リンク集
PDBアーカイブ

データ登録
ADIT: PDBへの登録
ADIT-NMR
データ登録のご案内

検索

サービス&ソフトウェア

二次データベース
eF-site
eF-seek
eF-surf
ProMode Elastic

初めての利用者のためのガイド
新しいウェブインターフェースを初めてご利用の方は、[PDBjのウェブインターフェースについて](#)をご覧ください。PDBjウェブサイトの様々な機能についての説明は、[対話型チュートリアル](#)をご覧ください。

新しいPDBj ウェブサイトが、**5月23日より、正式なPDBjウェブサイトにになりました**。更なる改良のために、[ご意見・ご要望を頂ければ幸いです](#)。旧PDBj ウェブサイトは、下記URLから引き続きお使い頂けます。[http://legacy.pdbj.org/](#)

最新情報
ニュース (2013年06月05日)
2013年6月17日 (月)、18日 (火) に、中国蘇州大学にて、第11回 日韓中バイオインフォマティクストレーニングコースが開催されます。

ニュース (2013年06月04日)
2013年6月12日 (水) に、鳥取にて開催される第13回日本蛋白質科学会年會にて、ランチョンセミナーを実施いたします。

ニュース (2013年05月31日)
これまでにない完全なHIVカプシド構造がPDBで公開されました

ニュース (2013年05月23日)
大きな構造を含むPDBエントリーの登録・公開が新しくなります

3ZEL

今月の分子
2013/06: (162) [ダーミンシン \(Dermidin\)](#)

WORLDWIDE PDB PROTEIN DATA BANK

BMRB検索
NMRデータ検索
Accession number
Deposition code

Search

ツイート

PDBj-BMRB はここから

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