

wwPDBとPDBjが担う PDB活動の現状

栗栖源嗣

大阪大学蛋白質研究所



<http://pd bj.org/>
<http://wwpdb.org/>

Protein Data Bank Japan

<http://pd bj.org/>

Since 2001, PDBj has been managed at **Institute for Protein Research, Osaka University** as a member of the **wwPDB**, to curate and process the deposited data for an open and single archive.



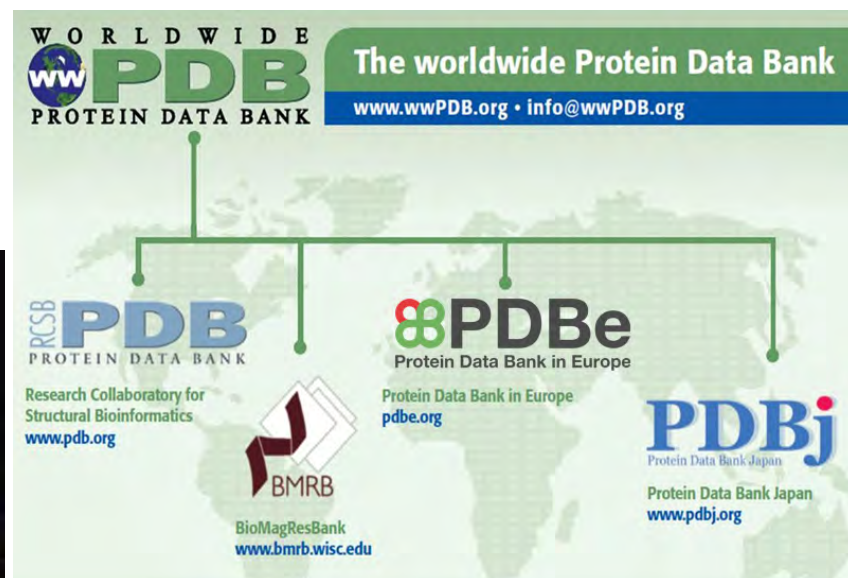
PDBj staffs (April 2014)



wwPDB.org

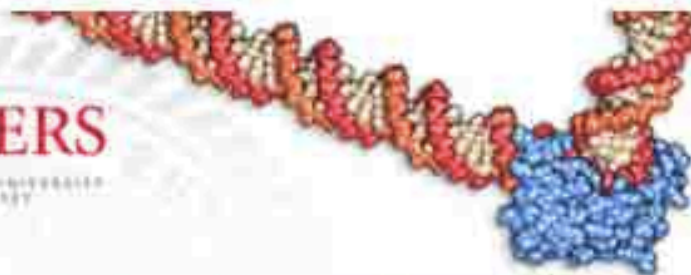


Kleywegt, G Markley, JL
 Berman, HM Nakamura, H



wwPDB members and their heads

RUTGERS
THE STATE UNIVERSITY
OF NEW JERSEY



Center for Integrative
PROTEOMICS
Research

[Home](#) [About](#) [People](#) [Resources](#) [Facilities](#) [Seminars](#) [Graduate Study](#) [BioMaPS](#) [Boot Camp](#) [Job Openings](#)

Stephen K. Burley, M.D., D.Phil.

Director, Center for Integrative Proteomics Research

Associate Director, RCSB-PDB

Distinguished Professor, Department of Chemistry and Chemical Biology

Member, Cancer Institute of New Jersey



A new director of the RCSB-PDB

(Helen M. Berman is going to be a chair of the wwPDB)

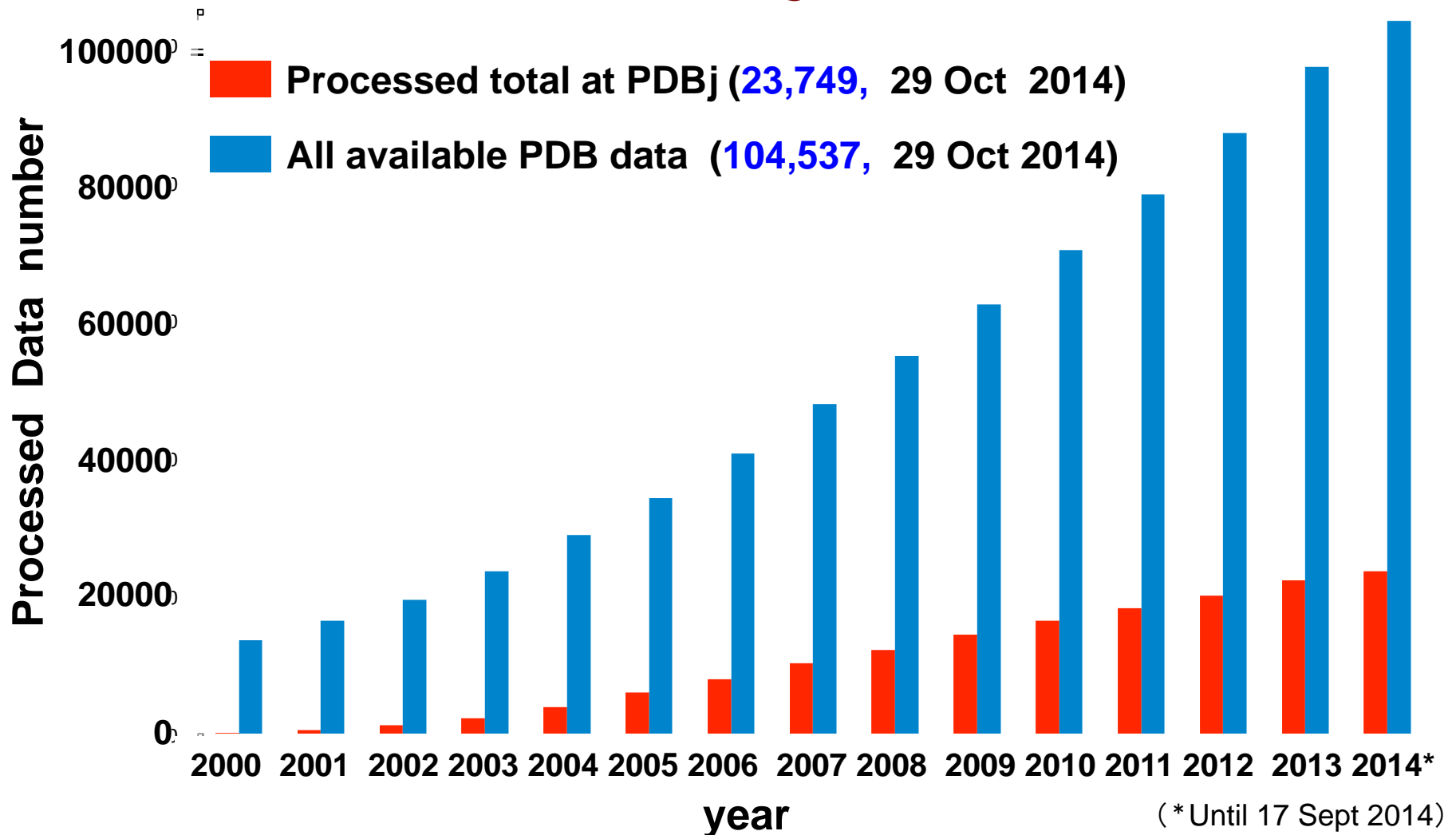
Activities/Services of each member of the wwPDB

- **“Data-in”** activity, common in all the wwPDB members with high quality control. For that purpose, new format, data deposition, and validation system are developed
- **“Data-out”** services, common archive as the ftp site and the characteristic services by each wwPDB member

Activities/Services of each member of the wwPDB

- **“Data-in”** activity, common in all the wwPDB members with high quality control. For that purpose, new format, data deposition, and validation system are developed
- **“Data-out”** services, common archive as the ftp site and the characteristic services by each wwPDB member

Data-in at PDBj and wwPDB



PDBj curates and processes about **a Quarter of the deposited data**, mainly from Asian and Oceania regions

Activities/Services of each member of the wwPDB

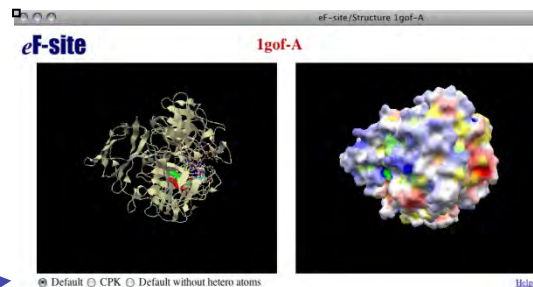
- “Data-in” activity, common in all the wwPDB members with high quality control. For that purpose, new format, data deposition, and validation system are developed
- “**Data-out**” services, common archive as the ftp site and the characteristic services by each wwPDB member

Data-out from PDBj

<http://pd bj.org/>

Amino acid sequence (FASTA)

```
>1GOF: GALACTOSE OXIDASE
ASAFIGSAISNNMAVTCDSAGSGNECNKAIDGNEKDTFWHTFYGANGDKPFHTYTI DME
TQNVNGLSMLPRQDGRQNGHIGRHEVYLSDDGNGSPVAGSFWADSTKYSNFTFRP
ARTVRLVAITEAGQGFWSIAEINIVQASVETAPQGLGRNQTIDLPVFAAAAIETPS
GKVLANSYSNDAPGSGPGIILTSNDPSTQIVSDRFTVYKHNPCPSISNDGQOIV
VTGGNDAREKSLYSDSSDNIPGDMQVARGVQSSATNSGKVTTCGSNSGCVFENGZ
VYFSEKWTSLPFAFVNPHLADKQCLYRSNHNAMLFQKKGVSFQAGPSTAMNNVYS
SGGVVSAGKRGSHNGVAPDAMCGNAVHYDAVNGKILTFGSGSPDQSDATTAHITLG
EPFGSPHTVYASNGLYARFHTSVLPGDSFTFIFGQGRGPFPSSTPTFELIVPQD
DTFYKQPMSEIVRYVETSLILFQGRVFNNGGGLCQDCTNMFDAQITPEYLVNSNGH
ATRPKTRTQSVRGGRITISTDSISKASLIRYGTATHTVTDQRRLPLTLNNGH
SYSFQVSDSGVALPGYNMLPVNRRAGVPSVASTIKVQ
```



Functional site	focus & details	A: 495	ACT: SITE
1) A:495	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off	sequence	Y
2) A:272	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off	description	Proton acceptor.
3) A:495	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off	source	Swiss-Prot: I
4) A:496	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
5) A:581	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
6) A:228	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
7) A:290	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
8) A:272	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
9) A:495	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
10) A:75-87	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
11) A:194	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
12) A:227-228	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		
13) A:272	<input type="checkbox"/> on <input type="checkbox"/> off		

Molecular surface DB: eF-site
<http://ef-site.hgc.jp/eF-site/>


Data viewer at PDBj

Graphic viewer: jV
<http://pd bj.org/jV/>



Kinjo et al. NAR 40, D453 (2012)

New standard PDB format: PDBx/mmCIF

- Current PDB format is almost **40 years old** and does not support today's science.
 - PDB Record format limitations
 - **Max. 62 chains**
 - **Max. 99,999 atoms**
 - No bond orders or chirality specified for ligands
 - No support for NMR, EM, hybrid methods, ...
 - Meta-data specification cumbersome and inflexible
- 
- **Preserve backward compatibility where possible**
 - **PDBML (XML) and RDF format files are available.**
 - **Start in 2014 and the current PDB format will be phased out in 2016.**

ATOM	1	N	GLN	A	39	24.690	-27.754	24.275	1.00	60.76	N
ATOM	2	CA	GLN	A	39	23.581	-26.768	24.416	1.00	60.98	C
ATOM	3	C	GLN	A	39	23.990	-25.379	23.905	1.00	59.98	C
ATOM	4	O	GLN	A	39	25.070	-25.209	23.330	1.00	60.25	O
ATOM	5	CB	GLN	A	39	23.136	-26.685	25.878	1.00	60.69	C
ATOM	6	N	VAL	A	40	23.115	-24.395	24.122	1.00	59.58	N
ATOM	7	CA	VAL	A	40	23.342	-23.010	23.690	1.00	57.26	C
ATOM	8	C	VAL	A	40	24.000	-22.152	24.778	1.00	56.00	C
ATOM	9	O	VAL	A	40	23.992	-20.920	24.692	1.00	55.53	O
ATOM	10	CB	VAL	A	40	22.015	-22.337	23.275	1.00	57.32	C

PDB

```

loop_
_atom_site.group_PDB
_atom_site.id
_atom_site.auth_atom_id
_atom_site.type_symbol
_atom_site.auth_comp_id
_atom_site.auth_asym_id
_atom_site.auth_seq_id
_atom_site.Cartn_x
_atom_site.Cartn_y
_atom_site.Cartn_z
_atom_site.pdbx_PDB_model_num
_atom_site.occupancy
_atom_site.pdbx_auth_alt_id
_atom_site.B_iso_or_equiv

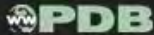
```


ATOM	1	N	N	GLN	A	39	24.690	-27.754	24.275	1	1.000	.	60.760
ATOM	2	CA	C	GLN	A	39	23.581	-26.768	24.416	1	1.000	.	60.980
ATOM	3	C	C	GLN	A	39	23.990	-25.379	23.905	1	1.000	.	59.980
ATOM	4	O	O	GLN	A	39	25.070	-25.209	23.330	1	1.000	.	60.250
ATOM	5	CB	C	GLN	A	39	23.136	-26.685	25.878	1	1.000	.	60.690
ATOM	6	N	N	VAL	A	40	23.115	-24.395	24.122	1	1.000	.	59.580
ATOM	7	CA	C	VAL	A	40	23.342	-23.010	23.690	1	1.000	.	57.260
ATOM	8	C	C	VAL	A	40	24.000	-22.152	24.778	1	1.000	.	56.000
ATOM	9	O	O	VAL	A	40	23.992	-20.920	24.692	1	1.000	.	55.530
ATOM	10	CB	C	VAL	A	40	22.015	-22.337	23.275	1	1.000	.	57.320
ATOM	11	N	N	ALA	A	41	24.560	-22.804	25.797	1	1.000	.	54.570

PDBx/mmCIF

wwPDB Service site for a new format

<http://mmcif.wwpdb.org/>

PDBx/mmCIF [Home](#) [Dictionaries](#) [Documentation](#) [Downloads](#) [Contact Us](#) 



PDBx/mmCIF Dictionary Resources

This site provides information about the format, dictionaries and related software tools used by the Worldwide Protein Data Bank ([wwPDB](#)) to define data content for deposition, annotation and archiving of PDB entries.

[Browse the current dictionary »](#)

Dictionaries

- [Browse the current dictionary](#)»
- [Download/view all dictionaries](#) »
- [Search dictionaries](#)»

Documentation

- [PDB -> PDBx/mmCIF correspondences](#) »
- [PDBx/mmCIF for large structures](#) »
- [Software resources](#) »
- [C++](#) » and [Python](#) » programming examples
- [File syntax](#) » and [dictionary organization](#) »
- [Atomic](#) » and [molecular](#) » descriptions
- [References](#) »
- [Glossary](#) »

FAQs

Questions about PDBx/mmCIF format, and data content, or software tools? Check out the [FAQ](#)»

wwPDB Service site for a new format

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

PDBx/mmCIF
[トップ](#)
[辞書](#)
[文書](#)
[ダウンロード](#)
[サービス](#)
[お問い合わせ](#)


[検索](#)

PDBx/mmCIF 辞書関連情報

このサイトでは、PDBエントリーの登録、アノテーション、データ保管を行う際に 国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) で利用されているファイルの書式、辞書、ソフトウェア・ツールに関する情報を提供しています。

[現在の辞書を見る](#)

辞書

- [現在の辞書を見る](#)
- [全ての辞書をダウンロードする](#)
- [辞書を検索する](#)

文書

- [PDB→PDBx/mmCIFの対応](#)
- [巨大構造のためのPDBx/mmCIF](#)
- [ソフトウェア](#)
- [C++](#)と[Python](#)のプログラム例
- [ファイルの書式](#)と[辞書の構成](#)
- [原子](#)と[分子](#)の記述方法
- [参考文献](#)
- [用語集](#)

よくある質問

PDBx/mmCIFフォーマット、データ内容、ソフトウェアツールについての質問は、[よくある質問](#)を参照下さい。

PDBx/mmCIF Software Support

- **Phenix and Refmac** – produce native PDBx files for deposition
- **MMDB** - macromolecular object library in CCP4
- **iotbx.cif/ucif** - CCTBx C++/Python IO library with dictionary validation
- **CCIF** – CCP4 C++ library with FORTRAN support and dictionary validation
- **CBFLib** - ANSI-C library for CIF & imgCIF files
- **mmLIB** - Python toolkit supporting CIF & mmCIF
- **BioPython** - Python toolkit for computational biology
- **PyCifRW** - Python CIF/mmCIF parsing tools
- **BioJava** - Java mmCIF IO package
- **STAR::Parser** – Perl mmCIF parser and molecular object library
- **RCSBTools** - C++/Python parsing and dictionary validation tools plus many other supporting format conversion and data management applications
- **Visualization** - UCSF Chimera, Jmol, OpenRasMol, jV, molmil

PDB actively working with community developers to help fill in missing functionalities.

wwPDB Service site for a new format

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

PDBx/mmCIF

トップ 辞書▼ 文書▼ ダウンロード・サービス▼ お問い合わせ

検索 現在の辞書で検索

PDBx/mmCIF 辞書関連情報

このサイトでは、PDBエントリーの登録、アノテーション、データ保管を行う際に 国際蛋白質構造データバンク (wwPDB) で利用されているファイルの書式、辞書、ソフトウェア・ツールについて提供しています。

PDBx/mmCIF β-version

PDBフォーマット - PDBx/mmCIF 変換サービス

アップロードした分子構造データファイルを別の書式に変換します。アップロードしたファイルのタイプは自動的に判定されます。mmCIFファイルの場合はPDBファイルに、PDBファイルの場合はmmCIFファイルに変換されます。

- 変換元ファイルの指定
4m0s.cif
- ファイルタイプの確認
mmCIF → PDB format
- 変換実行・結果ダウンロード

[変換ファイルをダウンロード](#) [ファイル選択に戻る](#)

辞書

- [現行の辞書を見る](#)
- [全ての辞書をダウンロード](#)
- [辞書を検索する](#)

このページの内容は wwPDB から提供されています。

Transitional Home for Large Structures

Large single entries are now stored separately on the wwPDB ftp site, and PDB internally produces *divided/split* PDB format files.

ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/data/large_structures/mmCIF/
ftp://ftp.wwpdb.org/pub/pdb/data/large_structures/XML/

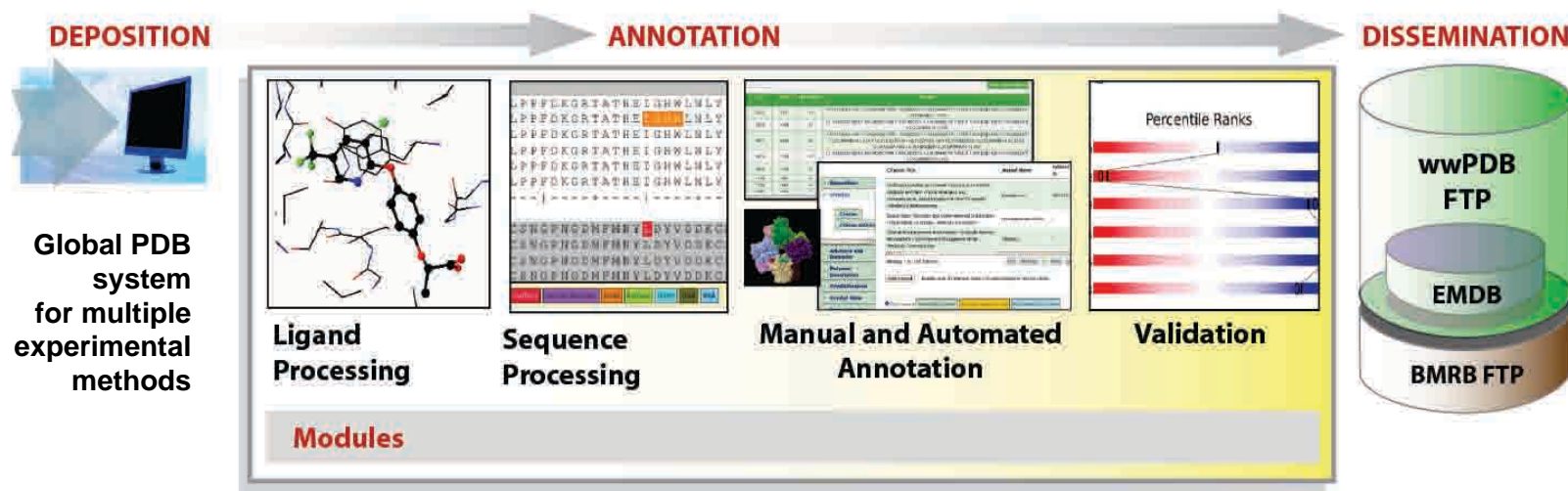


HIV-1 Capsid 3J3Q
•1356 chains
•>2M atoms
•25 – PDB format entries

Large structure entries	
Other lists	
	ATOMIC-LEVEL STRUCTURE OF THE ENTIRE HIV-1 CAPSID Authors: Zhao, G., Renia, J.R., Vukobratovic, E.L., Meng, X., Chen, B., Ling, S., Ahn, J., Gronenberg, A.M., Schuten, K., Aiken, C., Zhang, P. Deposit date: 2013-04-12 Release date: 2013-09-28 Modification date: 2013-09-12 Cite: Mature HIV-1 capsid structure by cryo-electron microscopy and all-atom molecular dynamics. Nature, 497, 2013.
	ATOMIC-LEVEL STRUCTURE OF THE ENTIRE HIV-1 CAPSID (186 HEXAMERS + 12 PENTAMERS) Authors: Zhao, G., Renia, J.R., Vukobratovic, E.L., Meng, X., Chen, B., Ling, S., Ahn, J., Gronenberg, A.M., Schuten, K., Aiken, C., Zhang, P. Deposit date: 2013-09-06 Release date: 2013-09-28 Modification date: 2013-09-12 Cite: Mature HIV-1 capsid structure by cryo-electron microscopy and all-atom molecular dynamics. Nature, 497, 2013.
	STRUCTURE OF THE YEAST MITOCHONDRIAL LARGE RIBOSOMAL SUBUNIT Authors: Amores, A., Bruni, A., Bai, Y.C., Lacer, J.L., Hussain, T., Smiley, P., Cong, F., Murakami, G., Scheres, S.H., Ramakrishnan, V. Deposit date: 2014-01-22 Release date: 2014-04-09 Cite: Structure of the yeast mitochondrial large ribosomal subunit. Science, 343, 2014.
	ASYMMETRIC STRUCTURE OF A VIRUS-RECEPTOR COMPLEX Authors: Denti, K.C., Thompson, R., Baker, A.R., Misco, J.A., Barr, J.A., Stockley, P.G., Ranson, N.A. Deposit date: 2013-07-17 Release date: 2013-07-17 Modification date: 2013-09-11 Cite: The Asymmetric Structure of an Icosahedral Virus Bound to Its Receptor Suggests a Mechanism for Genome Release. Structure, 21, 2013.
	THE CRYSTAL STRUCTURE OF THE EUKARYOTIC 40S RIBOSOMAL SUBUNIT IN COMPLEX WITH EIF1 AND EIF1A Authors: Weissert, H., Voigts-Hofmann, P., Rasi, C., Leisegang, H., Ban, N. Deposit date: 2013-09-24 Release date: 2013-07-17 Cite: The Crystal Structure of the Eukaryotic 40S Ribosomal Subunit in Complex with EIF1 and EIF1A. Nat. Struct. Mol. Biol., 2013.
	THE LIMITS OF STRUCTURAL PLASTICITY IN A PICORNAVIRUS CAPSID REVEALED BY A MASSIVELY EXPANDED EQUINE RHINITIS A VIRUS PARTICLE Authors: Baker, S.E., Strope, E., Pearson, A.R., Stockley, P.G., Rowlands, D.J., Ranson, N.A. Deposit date: 2014-04-02 Release date: 2014-09-21 Modification date: 2014-09-28 Cite: Limits of Structural Plasticity in a Picornavirus Capsid Revealed by a Massively Expanded Equine Rhinitis A Virus Particle. J. Virol., 88, 2014.
	THE LIMITS OF STRUCTURAL PLASTICITY IN A PICORNAVIRUS CAPSID REVEALED BY A MASSIVELY EXPANDED EQUINE RHINITIS A VIRUS PARTICLE Authors: Baker, S.E., Strope, E., Pearson, A.R., Stockley, P.G., Rowlands, D.J., Ranson, N.A. Deposit date: 2014-05-01 Release date: 2014-09-21 Modification date: 2014-09-28 Cite: Limits of Structural Plasticity in a Picornavirus Capsid Revealed by a Massively Expanded Equine Rhinitis A Virus Particle. J. Virol., 88, 2014.
	COMPUTATIONALLY DESIGNED TWO-COMPONENT SELF-ASSEMBLING TETRAHEDRAL CAGE T33-28 Authors: King, N.P., Seib, J.S., Sheffer, W., McLamrani, D.E., Soren, E., Soren, T., Yates, T.G., Baker, D. Deposit date: 2013-12-06 Release date: 2014-09-28 Modification date: 2014-09-28 Cite: Accurate design of co-assembling multi-component protein nanomaterials. Nature, 2014.
	CRYSTAL STRUCTURE OF TCDA1 Authors: Neusch, D., Gatsogiannis, C., Stremov, R.G., Lang, A.E., Mohapel, O., Vetter, I.R., Amden, J., Rauten, S. Deposit date: 2014-01-03 Release date: 2014-02-06 Modification date: 2014-02-05 Cite: Mechanism of Tc toxin action revealed in molecular detail. Nature, 2014.




New Deposition and Annotation System

For data increase and high quality data management



- Enables workload balancing and increased productivity
- Better quality assurance of **ligand chemistry and polymer sequences**
- **PDBx/mmCIF** is the master file format
- Validation suites based on recommendations from expert task forces; **X-ray validation pipeline** is available as a stand-alone server
- System will support all accepted experimental methods


New Deposition and Annotation System




A member of the

Languages: [en](#) | [ja](#) | [ko](#) | [zh-cn](#) | [zh-tw](#)

[登録サーバトップ](#) | [新登録システムチュートリアル](#) ([en](#), [ja](#)) | [ADIT登録チュートリアル](#) ([en](#), [ja](#), [ko](#), [zh-cn](#), [zh-tw](#)) | [ADITに関するFAQ](#) | [登録に関するFAQ](#) | [ファイルフォーマット](#) | [お問い合わせ](#)



巨大構造を登録される方は、wwPDBの新登録システムをお使いください。
PDBフォーマットの制限を超えるような巨大構造（鎖数が62、又は原子数が99,999個を超える）を登録する場合、最新バージョンのCCP4 (REFMAC > 5.8) 又は Phenix (> 1.8.2)を使って一つのPDBx/mmCIFファイルを準備した後、[wwPDBの登録システム](#)からご登録ください。



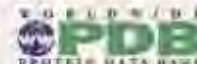
X線結晶構造を登録される方は、wwPDBの新登録システムをお使いください。
<http://deposit.wwpdb.org/deposition>
(NMRと電子顕微鏡（3DEM）構造については、近々公開される予定です。)

wwPDBの新登録・編集システムについての情報（チュートリアル、FAQ等）は、[こちら](#)からご覧ください。

New Deposition and Annotation System



A member of the



詳細は、wwPDB: Deposition System: Getting Started (英語) をご覧ください。

wwPDBの新登録・編集システムについてのその他の情報は、[こちらの一覧ページ](#)もご覧ください。

新登録システム：はじめに

wwPDBの新しい登録システムについてご紹介します。新システムは、PDBへの登録手続きにおける効率や、完全性、データ収集の品質を改善するために、wwPDBパートナーが開発を行ってきました。今後の改良や開発のためにも、新システムについてのご感想・ご意見を頂ければ幸いです。

新登録システムの概要

新システム (<http://deposit.wwpdb.org/deposition>) は、現在はX線結晶構造の登録にご利用頂けます。近い将来に、NMRや電子顕微鏡によって解析された構造も登録できるようになります。

登録の前に、wwPDBの構造検証ツール (<http://wwpdb-validation.wwpdb.org/>) を使って、データを検証することをお勧めします。

今後増々、複雑で大きい構造がPDBに登録されることに備え、新システムは、PDBx/mmCIFの辞書とファイル形式に基づいています。登録データの処理や配布もPDBx/mmCIFデータファイルで行われます。PDBフォーマットのデータも、登録の際にアップロードでき、アノデータによって処理された後は、ダウンロードすることもできます。

New Deposition and Annotation System

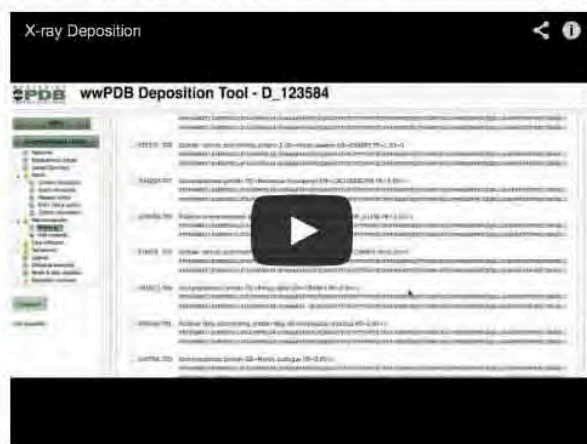
登録システムについては、大きな変更点が4つあります。

- 1. リガンドの検証** アップロードされる座標に含まれる全てのリガンドに対して、PDBで公開済みのリガンドに一致するものがあるかどうかを検索します。完全一致ではないが近い構造のリガンドが存在する場合、登録者は注意して確認する必要があります。PDBに近い構造も存在しない新しいリガンドの場合、登録者はSMILESやInChI文字列、または二次元画像を求められます。
- 2. 配列の検証** 座標ファイル中の全ての高分子について、登録者が入力した一次配列と座標ファイル中の配列との間で、配列を比較します。不一致があれば、登録者に注意が促されます。登録者は、登録のインターフェース上で一時配列を修正することもできますし、新しい座標をアップロードすることによって座標を修正することもできます。さらに、BLAST検索でUniProtデータベースを検索したり、UniProtのアクセシオン番号を提供することもできます。登録者の配列とUniProtの配列の間に不一致がある場合は、登録者はその理由についての注釈（例えば、置換変異やバリエーションなど）を求められます。
- 3. X線結晶構造に対する専門的な検証** 登録者が座標ファイルをアップロードすると、検証処理が始まり、処理が終了すると、登録者にメールで通知が届きます。検証レポートは、ナビゲーションパネルのオプション「**ダウンロードと表示 (Download & View) > レポートの表示 (View Reports)**」から、閲覧できます。
- 4. コミュニケーションパネル** コミュニケーションパネルでは、登録者とアナウンサー間でメッセージを送ることができます。文章を送るだけでなく、このインターフェースを通して、アップロードしたデータや、編集されたもしくは議論したデータに簡単にアクセスできます。このページで行われたコミュニケーションは、このエントリーの登録とともに永久に保管され、このエントリー以外では使用されません。注) いかなるデータファイルのアップロードも、「**ファイルのアップロード (File Upload)**」オプションを使って行い、コミュニケーションパネルや電子メールでは行わないことに注意してください。

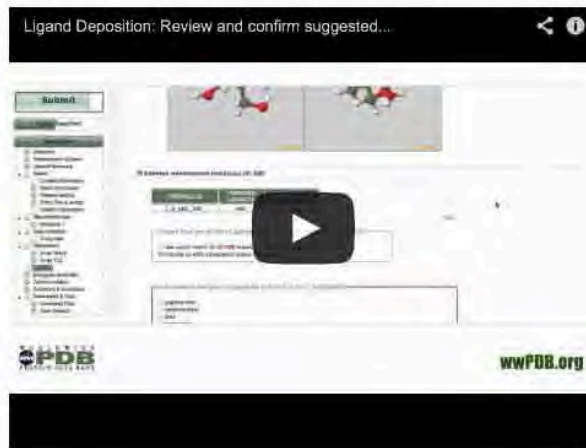
New Deposition and Annotation System

新登録システムの紹介

X線結晶構造の登録：座標・実験データファイルのアップロード
 構造の検証、必須項目の入力



リガンドの登録：登録構造のリガンドに一致するリガンドを確認する



リガンドの登録：必須の化合物情報を入力する方法




チュートリアル：新登録システムを使って

- 登録トップページ (<http://deposit.wwpdb.org/deposition>) には、2つのオプションがあります。左のパネルは登録IDとパスワードを使用して登録システムにログインするために使用します。右側のメインパネルは、新しい登録を始めるために使用します。新しい登録を開始するときは、登録者の国名を選択しますが、これは最善のサポートを提供するために必要となります。フォームを入力し、登録開始ボタンを選択すると、登録IDとパスワードが電子メールで送信されます。（パスワードは登録者自身が決めることもシステムに自動生成させることも可能です）
- この情報を使用して、左側パネルからシステムへログインしてください。ログイン後は、登録IDがページ上部に表示されます。座標と構造因子ファイルをアップロードする際には、左側のナビゲーションパネルから、「**ファイルのアップロード (File Upload)**」オプションを選択してください。ファイルのアップロード後、ドロップダウンメニューから、対応するファイルタイプを選択してください。
- ファイルのアップロード後、検証処理が始まります。検証処理が完了すると、登録者は電子メールで通知を受け取ります。また、検証処理が完了すると、ナビゲーションパネルの最下部にある「**ダウンロードと表示 (Downloads & View) > レポートの表示 (View Reports)**」から、検証レポートを参照できるようになります。

Validation Report

- **Version 1.0** in production use since August 2013
 - <http://www.wwpdb.org/validation.html>
 - Fixing occasional bugs
 - Collecting feedback to inform possible changes
validation@mail.wwpdb.org
- **January 2014** – validation data for all X-ray structures will be made publicly available through the wwPDB ftp sites



wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Aug 13, 2013 – 09:45 AM BST

PDB ID : 1CBS
 Title : CRYSTAL STRUCTURE OF CELLULAR RETINOIC-ACID-BINDING PROTEINS I AND II IN COMPLEX WITH ALL-TRANS-RETINOIC ACID AND A SYNTHETIC RETINOID
 Authors : Kleywegt, G.J.; Bergfors, T.; Jones, T.A.
 Deposited on : 1994-09-28
 Resolution : 1.80 Å (reported)

DISCLAIMER

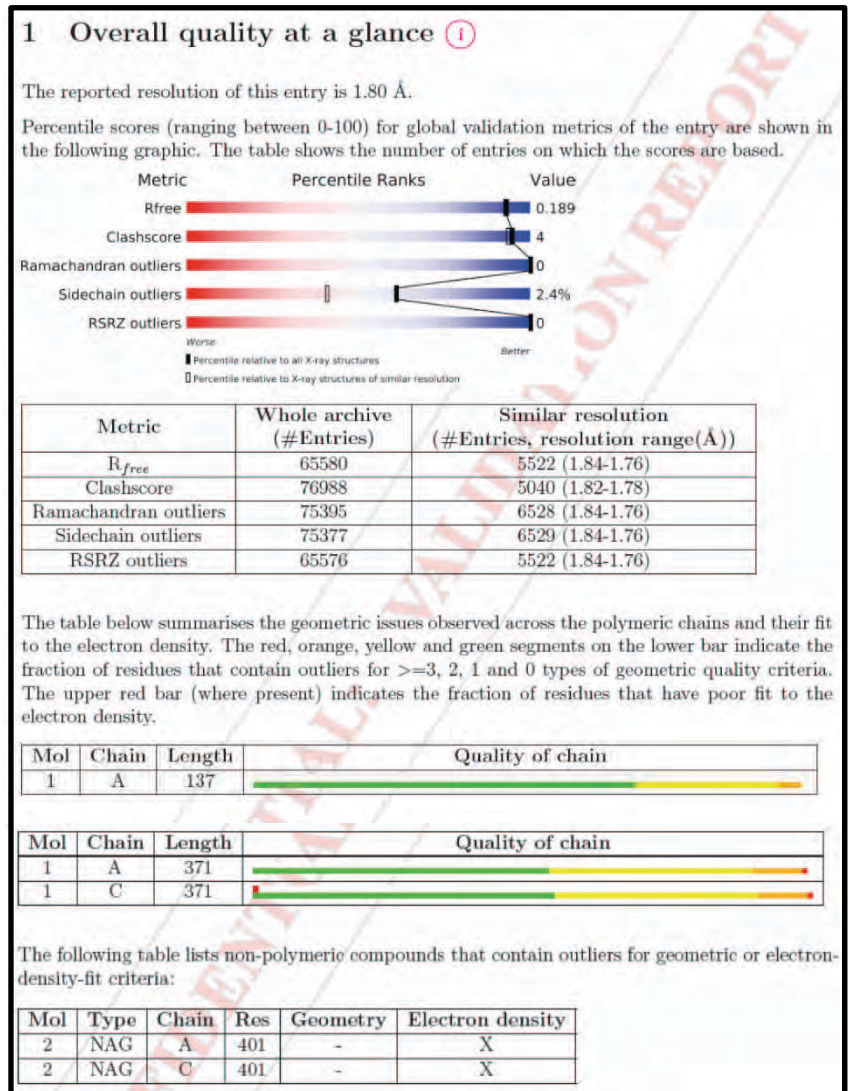
This is a preliminary version of a new style of wwPDB validation report.
 We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

The following versions of software and data (see [references](#)) were used in the production of this report:

MolProbity	: 4.02b-467
Mogul	: 1.15 2013
Xtriage (Phenix)	: dev-1323
EDS	: trunk21216
Percentile statistics	: 20591
Refmac	: 5.8.0043
CCP4	: 6.3.0 (Settle)
Ideal geometry (proteins)	: Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	: Parkinson et. al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	: trunk21216

Validation Report

- **Summary**
 - Quality vs. all PDB X-ray
 - Quality vs. entries at similar resolution
 - Overview of residue-based quality for every polymer
 - Table of ligands that may need attention



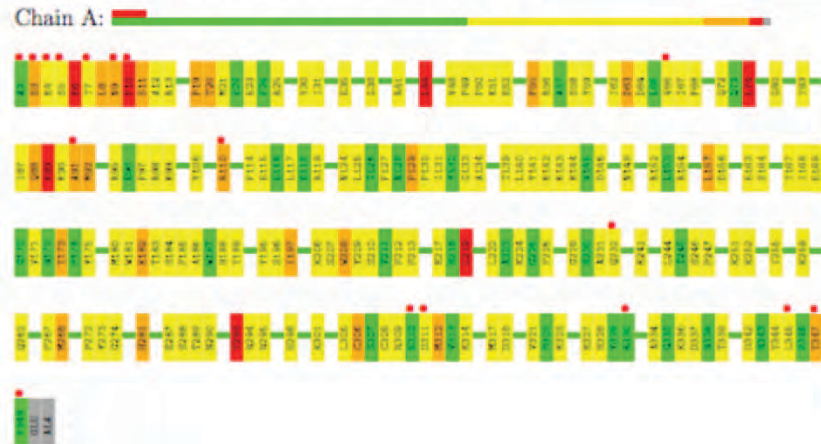
Validation Report

- Residue quality
Red dots: poor density (**RSR-Z** > 2, as in EDS)
- Model/data fit ligands etc.
 - “**LLDF**” –*Local Ligand Density Fit* = Z-score of ligand RSR relative to nearby polymeric residues

3 Residue-property plots ①

The first graphic for a chain summarises the proportions of errors displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of different types of geometric errors found. Green signifies no errors, yellow, orange and red 1, 2, and 3 or more errors respectively. A red dot above a residue indicates a problem with electron density. Regions of sequence for which no errors are detected are indicated by a green connector.

• Molecule 1: Jumonji domain-containing protein 2A



PDBj members in 2014

- **Head**

- [Nakamura, Haruki, Ph. D.](#) (Prof., IPR, Osaka Univ.)

- **Group for PDB Database Curation**

- Nakagawa, Atsushi, Ph. D. (Group Leader, Prof., IPR, Osaka Univ.)
- Matsuda, Makoto, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Igarashi, Reiko (IPR, Osaka Univ.)
- Kengaku, Yumiko (IPR, Osaka Univ.)
- Cho, Hasumi, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Ikegawa, Yasuyo (IPR, Osaka Univ.)
- Sato, Junko (IPR, Osaka Univ.)

- **Group for Development of new tools and services**

- [Kinjo, Akira R., Ph. D.](#) (IPR, Osaka Univ.)
- Iwasaki, Kenji, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Suzuki, Hirofumi, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Yamashita, Reiko (IPR, Osaka Univ.)
- Kudou, Takahiro (IPR, Osaka Univ.)
- Bekker, Gert-Jan (IPR, Osaka Univ.)

- **Group for BMRB**

- Fujiwara, Toshimichi, Ph. D. (Group Leader, Prof. Osaka Univ.)
- Akutsu, Hideo, Ph. D. (Guest Prof., IPR, Osaka Univ.)
- Kojima, Chojiro, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Kobayashi, Naohiro, Ph. D. (IPR, Osaka Univ.)
- Iwata, Takeshi (IPR, Osaka Univ.)
- Yokochi, Masashi (IPR, Osaka Univ.)

- **Collaboratory Researchers**

- [Wako, Hiroshi, Ph. D.](#) (Prof., Waseda Univ.) (for Pro Mode)
- Ito, Nobutoshi, Ph. D. (Prof., Tokyo Medical and Dental Univ.)
- [Kinoshita, Kengo, Ph.D.](#) (Prof., Tohoku Univ.) (for e F-site)
- [Standley, Daron, Ph. D.](#) (IFReC, Osaka Univ.) (for SeqNavi, StructNavi, SeSAW, and ASH)
- Katoh, Kazutaka, Ph. D. (IFReC, Osaka Univ.) (for MAFFTash)

- **Secretary**

- Haruki, Nahoko (IPR, Osaka Univ.)