



PDBj
Protein Data Bank Japan

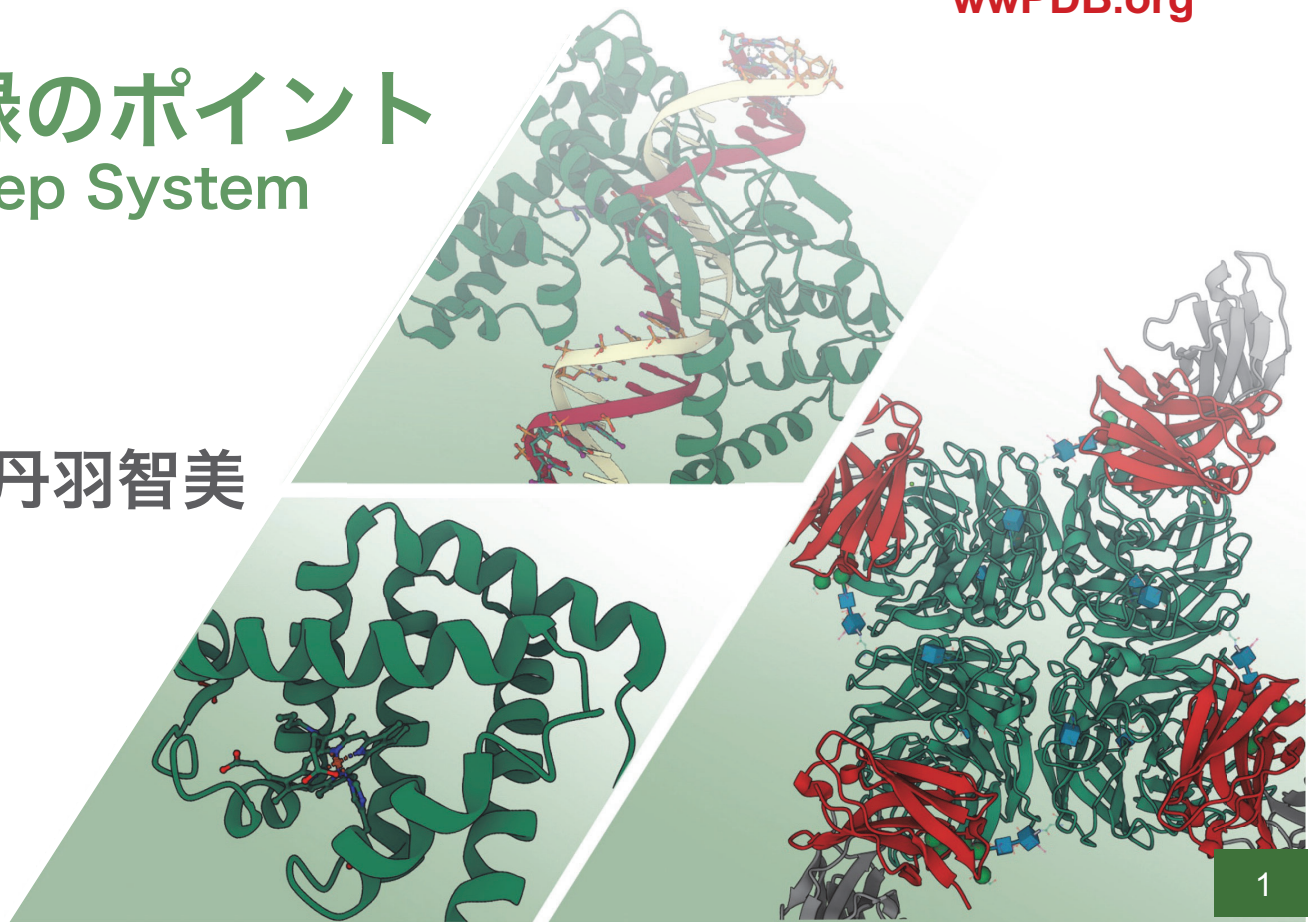
WORLDWIDE
wwPDB
PROTEIN DATA BANK

wwPDB.org

OneDepにおける登録のポイント

Tips for Deposition in OneDep System

大阪大学蛋白質研究所 丹羽智美



アノテーション的登録のポイント

登録に必要なもの

X-ray

Navigation

- ✓ Instructions
- ✓ Communication
- ✓ Re-upload files
- ✓ Upload summary
- Admin
 - ✗ Contact information
 - ✗ Grant information
 - ✗ Release status
 - ✗ Entry title & author
 - ✗ Citation information
- Macromolecules
 - ✗ Molecule 1
- Data collection
 - ✗ Crystal Information
 - ✗ Collection Source
 - ✗ Software/Phasing
 - ✗ Collection Statistics
- Refinement
 - ✗ Refinement
 - ✗ Ligands
 - Assembly
 - ✗ Related entries
 - ✗ Validation reports
 - ✗ Summary & conditions

EM

Navigation

- ✓ Instructions
- ✓ Communication
- ✓ Re-upload files
- ✓ Upload summary
- Admin
 - ✗ Contact information
 - ✗ Grant information
 - ✗ Release status
 - ✗ Entry title & author
 - ✗ Citation information
- Macromolecules
 - ✓ 1) sample
- EM sample
 - ✓ Overall sample description
- EM experiment
 - ✓ Specimen preparation
 - ✓ Microscopy
 - Image recording
 - ✓ Reconstruction
 - ✓ Fitting interpretation
- Ligands
 - ✗ Ligands
- Assembly
- ✓ Related entries
- ✓ Validation reports
- ✓ Summary & conditions

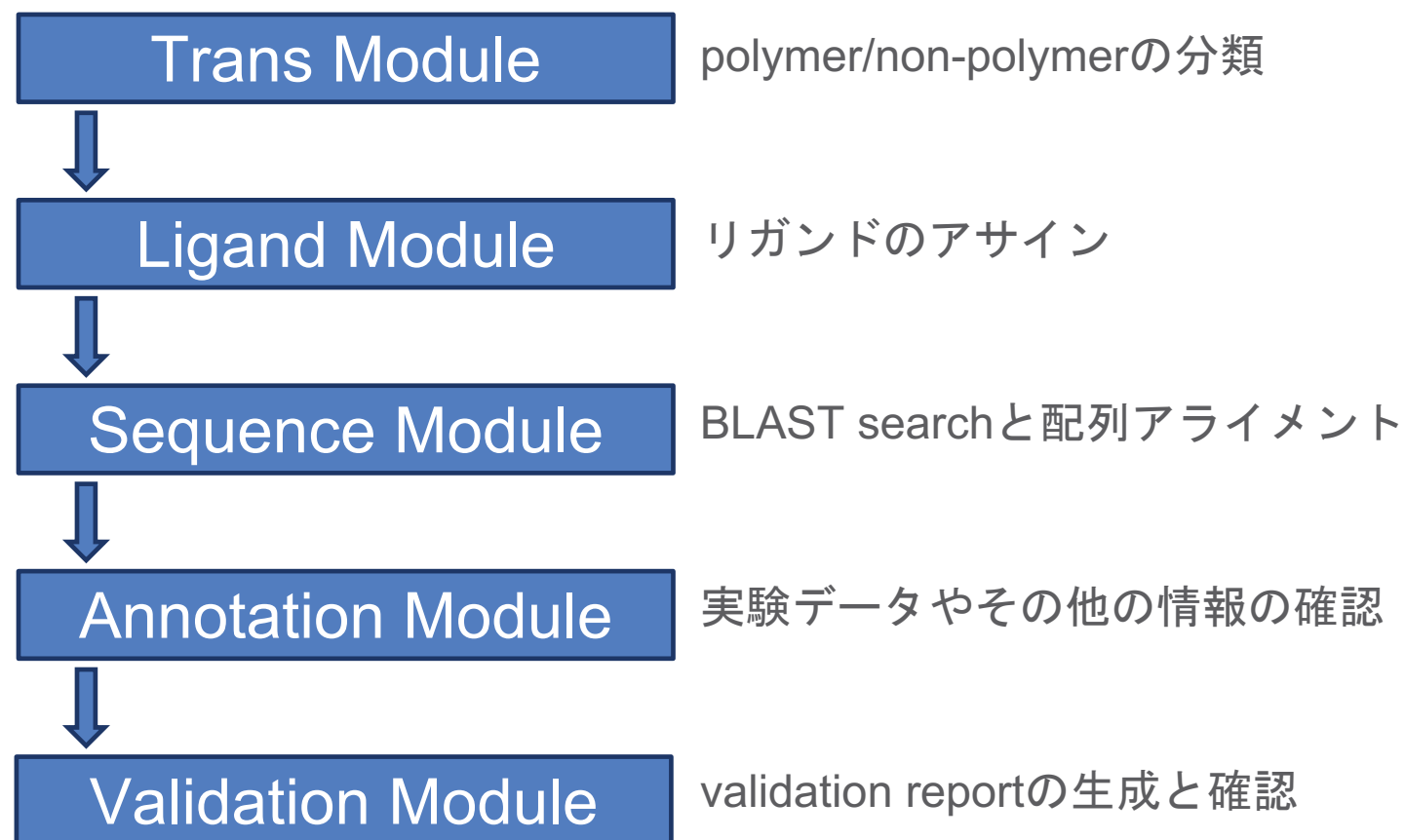
NMR

Navigation

- ✓ Instructions
- ✓ Communication
- ✓ Re-upload files
- ✓ Upload summary
- Admin
 - ✗ Contact information
 - ✗ Grant information
 - ✗ Release status
 - ✗ Entry title & author
 - ✗ Citation information
- Macromolecules
 - ✓ 1) sample
- NMR experimental
 - ✓ NMR samples
 - ✓ NMR data collection
- NMR software
 - ✓ NMR software
- NMR data and refinement
 - ✓ Peak lists
 - ✓ Chemical shift references
 - ✓ Chemical shift connection
 - ✗ NMR constraints
 - ✓ NMR refinement
- Ligands
- Assembly
- ✓ Related entries
- ✓ Validation reports
- Summary & conditions

- 実験情報、座標情報
 - ファイルをアップロード
- メタデータの登録
 - フォームに入力
- 入力が全て完了し、
”submit”を押すと
セッションがロックされ
メタデータに送られる

アノテーションの流れ



アノテーションで必ずチェックするポイント

- 配列アライメント ➡ “Macromolecules”
 - Sample sequenceを基にデータベースを検索し、配列アライメントを作成
 - タンパク質: Uniprot, 核酸: GenBank
 - 異なる残基については理由を併記
 - mutation, expression tag, database error, ...
- リガンド情報 ➡ “Ligands”
 - どの登録済み化合物と一致するか
 - (一致しない場合) 新規登録
- 生物学的単位 ➡ “Assembly”
 - 結晶構造: PISAによる安定な構造の推定
 - EM, NMR: 基本的には登録構造をひとまとめとして登録

Macromolecules

Macromolecule 1 -- bacteriorhodopsin

▼ Classification

Molecule type*:

Molecule class*: ☐ Antibiotic/inhibitor ☐ Carbohydrate ☐ Chimera ☒ None of these

▼ General Information

Molecule name*: ←

EC number:

Contained in chains:

Structural Genomics target identifier:

List any mutations:

- Molecule nameは
わかりやすい名前を記述
 - 配列検索の手がかりにもなる
 - : ATP synthase subunit c,
Fab heavy chain, HapR など
 - ×: bacteria protein, chain A など

Macromolecules

Sample sequence in one letter code*:

TGRPEWIWALGTMGLGTYFLVKMGVSDP
DAKKFYAITTLVPAIAFTMYLSMLLGYGLTMVPFG
GEQNPIYWARYA
DWLFTPLLLLDALLVDADQGTILALVGADGIMI
GTGLVGALTKVYSYRFVWVAISTAAMLYILVLF
GFTSKAESMR



The sequence alignment is valid

Refresh the alignment from sample sequence provided

The following is the alignment between the sample sequence and sequence from the coordinates. **The sample sequence is shown at the top of the alignment display.**

Important: Please address any discrepancy between the sample sequence and coordinate sequence by either providing a correct sample sequence or re-uploading new coordinates.

ok : Sample sequence aligned with Coordinates - all chains :

Molecule : 1

Chain : A

```
-----10-----20-----30-----40-----50-----60-----70-----80-----90-----100
TGRPEWIWALGTMGLGTYFLVKMGVSDPDAKKFYAITTLVPAIAFTMYLSMLLGYGLTMVPFGGEQNPIYWARYADWLFTPLLLLDALLVDAD
|||||
TGRPEWIWALGTMGLGTYFLVKMGVSDPDAKKFYAITTLVPAIAFTMYLSMLLGYGLTMVPFGGEQNPIYWARYADWLFTPLLLLDALLVDAD

-----110-----120-----130-----140-----150-----160-----170-----180-----190-----200
QGTILALVGADGIMIGTGLVGALTKVYSYRFVWVAISTAAMLYILVLFPGFTSKAESMRPEVASTFKVLRNVTVVLWSAYPVVWLIGSEGAGIVPLNIE
|||||
QGTILALVGADGIMIGTGLVGALTKVYSYRFVWVAISTAAMLYILVLFPGFTSKAESMRPEVASTFKVLRNVTVVLWSAYPVVWLIGSEGAGIVPLNIE

-----210-----220-----
TLLFMVLDVSAKVGGLILLRSRAIFGEAE
|||||
TLLFMVLDVSAKVGGLILLRSRAIFGEAE
```

Compound details:



- Sample sequenceには
サンプルのポリマー配列を記述
 - 実際に見えていない残基も書く
 - リガンドなどは含めない
(入ってしまう場合、元のPDBファイルの
ポリマーの最後にTERを入れる)
- キメラタンパク質など、
追加で説明を入れたい場合は
Compound detailsに記述
(1-230: GFP from A. victoria, 231-237: linker,
238-435: membrane protein from HKU5 など)

Macromolecules

How was the molecule obtained: ☐ Recombinantly expressed ☒ Purified from natural source ☐ Chemically synthesized

Natural source

Scientific name (nat)*:

Taxonomy ID*:

Strain:

Variant:

Cell line:

ATCC number:

Organ:

Tissue:

Source details:

▼ Cross-reference to other sequence databases

Database Name: ☐ GenBank ☒ UniProt

Accession:

Sequence start:

Sequence end:

Sequence:

If you run a BLAST search, you must remain on this page until the results appear. This normally takes about 30 seconds.

[Get cross-reference from accession code](#) [Get cross-reference from biological sequence \(run BLAST\)](#)

- Expression Hostがヒト細胞の場合
Cell lineも記述
- わかる場合は、UniprotIDも記述
(あるととても嬉しいです！)
 - 上で登録したものと由来生物が異なる場合、登録した方を採用

Ligands

Summary of ligands identified in coordinate file provided for dataset: D_1300036570

LIGAND ID	NUMBER OF INSTANCES	STATUS	SELECT FOR INSPECTION <input type="checkbox"/> ALL	LIGAND OF INTEREST (LOI)?
L2P	14	Mismatch(es) Require Attention	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
RET	1	OK	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
SQU	4	Mismatch(es) Require Attention	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
No ligand of interest				<input type="checkbox"/>



Inspect Selected Ligands

Finish (all issues are addressed)

- 登録構造と辞書構造が一致するか
 - 一致しない場合は
Inspection pageで確認
 - 必要に応じて追加情報を登録
(SMILES, 図, ...)
- Ligand of Interestに設定すると
reportに構造とmapが載る

Assembly

Experiments performed to support the assembly
electron microscopy

Additional information about the assembly
trimer

Chains and matrices for the assembly

Does this assembly apply to all chains?:
☐ N ☒ Y

List of chain IDs in this assembly:
A

Can you generate the assembly without applying matrices?:
☐ N ☒ Y

Provide 3x4 rotation with translation matrices in the format:

R1-1	R1-2	R1-3	T1
0.8660254038	-0.5000000000	0	121.1800000000
0.5000000000	0.8660254038	0	-104.9449584306
0.0000000000	0.0000000000	1	0.0000000000

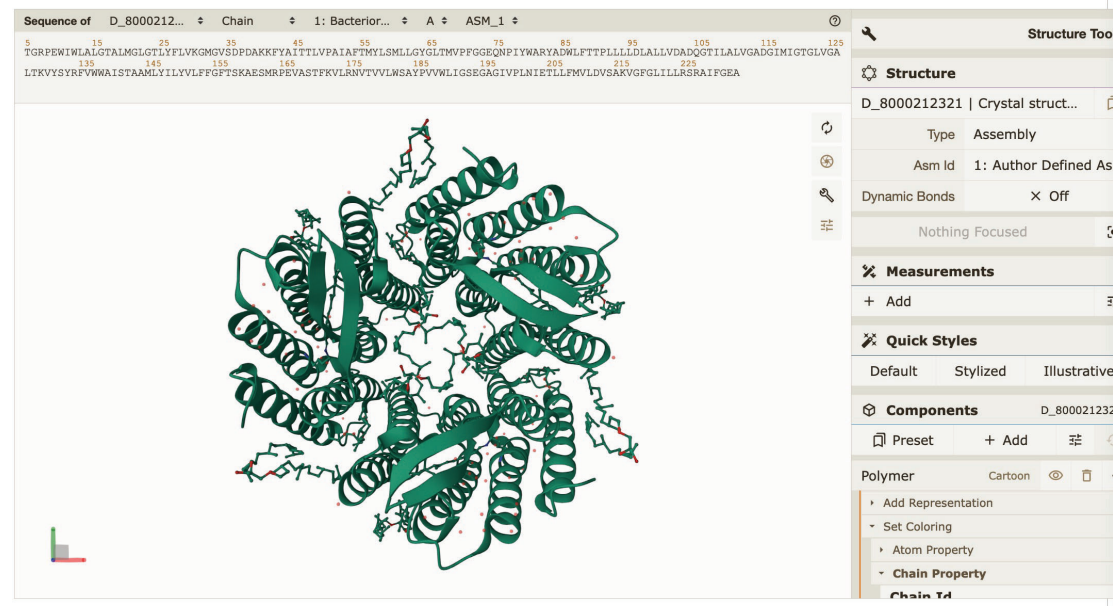
R2-1	R2-2	R2-3	T2
0.8660254038	-0.5000000000	0	151.4750000000
0.5000000000	0.8660254038	0	-52.4724792153
0.0000000000	0.0000000000	1	0.0000000000

R3-1	R3-2	R3-3	T3
0.8660254038	-0.5000000000	0	151.4750000000
0.5000000000	0.8660254038	0	-52.4724792153
0.0000000000	0.0000000000	1	0.0000000000

- 生体中での構造を記述
- “trimer”や”DNA double strand”
など、伝わればOK
 - EM,NMRのエントリについては
基本的に登録構造＝生物単位
 - ウイルスなどのmatrixは
matrix欄かdescriptionに
REMARK350の形式で記述
(rotation+translation(orthogonal))
 - その他の場合は
Matrixを無理して書かなくてもOK

Assembly

Use the menu in the right hand side of the 3D viewer to change between the assemblies.



Check this box to accept your assemblies:



- Matrix(assembly)の情報を
入力し、updateを押すと
対応する構造がビューアに表示
- 必要な情報を入力/確認したら
下の欄にチェックを入れる

登録の公開

- 登録された構造の公開条件
 - Authorからの公開要請
 - 対応する論文（primary citation）の出版
 - 登録から1年が経過
- 木曜日までに公開処理したエントリが次週の水曜に公開
 - 公開したいエントリがある場合は前の週の木曜日正午までに連絡
 - 構造/情報/論文内容のチェックを行うため時間に余裕をもってお知らせください
 - 問題がある場合は直してからの公開

2023年7月

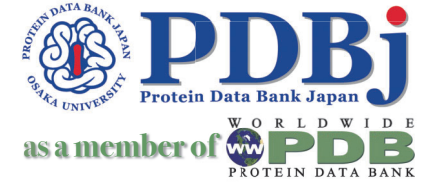
2023年7月							< 今月 >
日	月	火	水	木	金	土	
25日	26日	27日	28日	29日	30日	7月1日	
2日	3日	4日	5日	6日			ここまでに公開処理したエントリが
9日	10日	11日	12日	13日	14日	15日	ここで公開
16日	17日 海の日	18日	19日	20日	21日	22日	

登録の公開



- 公開後に引き下げはできない
 - 引き下げ（Withdrawn）の連絡は早めにください
- 論文公開なしで公開する場合、定期的に”unpublished citation”のリマインドメールが送付
 - このメールが不必要な場合はアノテータにお知らせください

アノテータからのお願い



- 登録中に困ったことやわからないことがある場合、Communication Tabを通して質問してください
 - 登録ページやファイルの状況をスムーズに確認できます
- 登録状況によっては、処理し始めるまでに2~3週間かかりますreportが必要な場合は時間に余裕を持って登録してください
 - 正直な話、何件もの手付かずのエントリの山を常に抱えている状況です

アノテータからのお願い



- 実験データと座標情報の修正以外はこちらでやりますのでお知らせください
 - メタデータの修正、配列の修正、原子の削除、占有率の修正が可能です
 - Session unlockを避けたいのが本音です...
(unlockすると処理が最初からスタートします)
- Unlock時、Release Status (Release now, Hold for publication...) は勝手に変えないでください
 - 変更したい場合はCommunicationでアノテータにお知らせください
- アノテータからの質問にはできるだけ答えてください
 - Validation letterがスルーされるとそれなりに不安です

ORCID ログインについて

ORCIDログインとセッション作成



- 2023年5月から、
セッションID (D_13000****) +パスワードによるログインに加えて、
ORCIDを用いたログインが利用可能
- 自分がContact authorになっている登録を一覧で確認可能
- ORCID認証した状態でセッションを作成することで
ID,パスワード入力なしで新規登録スタートが可能

ORCIDログインとセッション作成



wwPDB OneDep System


Existing deposition

Deposition ID

Password

Log in


Forgot Password

 Sign in with ORCID

Validation server

Have you checked your data at the stand-alone validation server?
validate.wwpdb.org

wwPDB regions



wwPDB news and announcements

Carbohydrate News
Carbohydrates will be renumbered and reassigned chain ids to provide consistent representation. For more information, see: [10.1093/glycob/cwab039](https://doi.org/10.1093/glycob/cwab039).

Scientific Software Developers and Postdocs at RCSB PDB
Join RCSB PDB to design, develop, & deploy modern web and data applications & complex user interfaces.

Start a new deposition

Welcome to the wwPDB OneDep system!
To continue with an existing deposition, please login on the left.
Please note that un-submitted sessions will expire 3 months after last login. Un-submitted sessions and un-submitted depositions will expire 3 months after last login.
For requests such as entry release or citation updates, please login to the deposition system and
If you have any other feedback, please write to us at deposit-help@mail.wwpdb.org.
At this time this deposition system does not work with Internet Explorer versions 8 or less.
Warning: Please note that the current system does not support having multiple sessions open at the same time. Please log out using the "Log out" button in the bottom left corner of the openec


Please select the location of the institute of your PI.
This will automatically direct to the closest wwPDB data center (RCSB PDB/US, PDBe/UK, or PDBj/Japan).

Country/Region:

- 左側の
Sign in with ORCID
をクリック
- 認証画面に進み、
ORCIDの番号(16桁)と
ORCIDのパスワードを入力

ORCIDログインとセッション作成

B OneDep System

FAQ Tutorials 

wwPDB news and announcements

Carbohydrate News

Carbohydrates will be renumbered and reassigned chain ids to provide consistent representation. For more details: Modernized uniform representation of carbohydrate molecules in the Protein Bank, (2021) *Glycobiology* 31: 1204–1218, doi: 10.1093/glycob/cwab039.

Scientific Software Developers and Postdocs at RCSB PDB

Join RCSB PDB to design, develop, & deploy modern web and data applications & complex user interfaces. Positions at Rutgers and SDSC/UCSD and UCSF.

Deposition list

Depositions available to 0000-0002-2648-8257 (Niwa, Satomi)

Deposition ID	Entry ID	Entry Title	Created	Site	Status	Last login
D_1300031483	PDB	Crystal structure of the transmembrane of TPOA	2022/8/9	PDBJ	AUTH	2022/12/2
D_1300031482	PDB	Crystal structure of the transmembrane of TPOA	2022/8/9	PDBJ	HPUB	2022/12/2
D_1300028946	PDB	Crystal structure of lactate dehydrogenase in the R state refined against the extrapolated dataset	2022/4/15	PDBJ	REL	2023/1/19
D_1300028945	PDB	Crystal structure of lactate dehydrogenase in the ground state refined against the extrapolated dataset	2022/4/15	PDBJ	REL	2023/3/16
D_1300025895	PDB	Crystal structure of lactate dehydrogenase in the ground and R states after green laser irradiation	2021/11/24	PDBJ	REL	2023/3/15
D_1300009047	PDB	Crystal structure of human Arginase from <i>Bacillus subtilis</i> ...	2018/9/12	PDBJ	REL	2018/10/15

< 1 >

Start a new deposition

- 自分がContact authorであるセッションが一覧で表示される
- ログインしたいセッションのIDをクリックするとセッションにログインできる
- ORCID認証した状態で新しくセッションを作ると1クリックで新しいセッションにログインできる
- 詳しくはWebで！
(https://pd bj .org/news/ORCID_Login)

ORCIDログインの注意点



- Contact authorのORCIDを間違えると
間違えた先の人とそのセッションにアクセスできてしまう
- Contact authorのORCIDを登録する際は、IDをよく確認してください