

(別紙) 構造解析を行ったタンパク質について

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
GGA1-VHS	1JWF	Released	2002/3/6	クラスリン小胞の新奇アダプタータンパク質GGA1のVHSドメインの立体構造を初めて決定した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-VHS / M6PR complex	1JWG	Released	2002/3/6	アダプタータンパク質GGA1のVHSドメインとマンノース6リン酸との複合体の構造を決定し、輸送されるタンパク質がどのようにアダプタータンパク質によって認識されるかについて分子レベルで明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
AP1- ear	1IU1	Released	2002/7/10	AP複合体の サブユニットの立体構造を明らかにし、アダプタータンパク質とアクセサリタンパク質の相互作用機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
ARF1 / N-GAT complex	1J2J	Released	2003/5/6	GGA1-GATドメインのARF結合領域とARFの複合体の立体構造を明らかにし、アクセサリタンパク質が生体膜に局在する分子の基盤を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-GAT	1O3X	Released	2003/5/20	GGA1タンパク質のGATドメインの構造を明らかにし、VHSドメインおよびearドメインの構造と併せて、アクセサリタンパク質の全体構造の解明に迫った。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
ARF1	1O3Y	Released	2003/5/20	GGA1-GATとの相互作用を解析する上で、ARF1タンパク質の立体構造が不可欠であった。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-VHS / BACE complex	1UJJ	Released	2004/5/11	アルツハイマー病の原因とされている アミロイド(A β)を産生するのに関与している酵素のBACEのC-末端領域とGGA1のVHSドメインの認識機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-VHS / BACE-P complex	1UJK	Released	2004/5/11	アルツハイマー病の原因とされている アミロイド(A β)を産生するのに関与している酵素のリン酸化BACEのC-末端領域とGGA1のVHSドメインの認識機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GlcAT-P	1V82	Released	2004/5/25	HNK-1糖鎖抗原は、神経系に存在する細胞接着因子や糖脂質に特徴的に発現し、神経系で重要な役割を果たしている。HNK-1糖鎖の生合成に必須なグルクロン酸転移酵素 GlcAT-PのX線結晶構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市) 京都大学薬学研究科 (岡昌吾)
GlcAT-P / Mn, UDP complex	1V83	Released	2004/5/25	GlcAT-Pとドナー基質複合体の立体構造を決定した。これにより、ドナー基質との相互作用様式は他の糖転移酵素と保存されている事が明らかになった。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市) 京都大学薬学研究科 (岡昌吾)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
GlcAT-P / Mn, UDP N-acetyllactosamine complex	1V84	Released	2004/5/25	GlcAT-Pとドナー基質および受容体基質複合体の立体構造を決定した。これにより、受容体基質の基質特異性がどのように決定されているかを明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市) 京都大学薬学研究所 (岡昌吾)
AP1 ear + peptide complex	1UI2 1WSK	on hold (再取得)		AP-1複合体とGGA1との相互作用を初めて構造化学的に証明した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
AP1 ear + GGA1 hinge peptide tag	1UI3 1WSL	on hold (再取得)		上記1UI3の高分解能構造解析。これにより相互作用の様式をより詳細に解明することが出来た。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
AP1 ear + -synergin peptide tag	1UI4 1WSM	on hold (再取得)		1-earドメインとアクセサリタンパク質の複合体の初の構造解析例。上記1UI2,1UI3との比較から、1-ear結合モチーフが[F/W]xxPhiモチーフであることを明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2	1SNT	Released	2004/11/2	哺乳類由来のものとして初めてのヒト由来シアリダーゼの立体構造を明らかにした		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / maltose complex	1SO7	Released	2004/11/2	ヒト由来シアリダーゼNeu2に糖が結合する事によって、その一部の構造が変化する事を初めて示した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / DANA complex	1VCU	Released	2004/11/2	ヒト由来シアリダーゼNeu2と基質アナログとの複合体の立体構造を決定し、基質認識がどのように行われているかを原子レベルで詳細に明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Hrs-UIM / Ubiquitin complex	1WM € 2D3G	on hold (再取得)		細胞内輸送に働くと考えられているHrsタンパク質とユビキチンタンパク質の結合様式を原子レベルで詳細に明らかにし、アクセサリタンパク質とは異なる局面的細胞内輸送で、ユビキチンタンパク質の果たす機能についての重要な知見を与えた。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Tom1-GAT / Ubiquitin complex	1WRD	Released	2005/10/11	Tom1のGATドメインとユビキチンの複合体の結晶構造解析を行ない、その相互作用の様式を調べた。GATドメインは3本の α -ヘリックスから構成されており、ユビキチンの11e44面を介した疎水性相互作用によるものであった。Tom1GATドメインによる、ユビキチンを介したタンパク質のエンドソームへの輸送に關する立体構造的基盤が解明された。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA3-GAT / Ubiquitin complex	1WR6	Released	2005/1/28	GGA3のGATドメインとユビキチンの複合体の結晶構造解析を行ない、その相互作用の様式を調べた。これまでGGAは、タンパク質の細胞膜から細胞内への取り込み(エンドサイトーシス)には直接関与しないと考えられていたが、この複合体結晶構造から、ユビキチンを介したエンドサイトーシスにもGGAが関与していることを確認することができた。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
GGA1-GAE	1X2C	on hold		GGA1タンパク質のGAEドメインの構造を明らかにし、他のアクセサリタンパク質のearドメインと基本的な構造は同じであることを見出した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-GAE/peptide1	1X2D	on hold		GGA1-GAEとアクセサリタンパク質由来ペプチド1の複合体の立体構造を明らかにし、タンパク間相互作用の分子機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GGA1-GAE/peptide2	1X2F	on hold		GGA1-GAEとアクセサリタンパク質由来ペプチド2の複合体の立体構造を明らかにし、異なるタンパク間相互作用の分子機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
GlcAT-S	2D0J	on hold		HNK-1糖鎖抗原は、神経系に存在する細胞接着因子や糖脂質に特徴的に発現し、神経系で重要な役割を果たしている。HNK-1糖鎖の生合成に必須な第2のグルクロン酸転移酵素であるGlcAT-SのX線結晶構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市) 京都大学薬学研究科 (岡昌吾)
Emp46-K-complex	2A6V	on hold		Emp46pはER - ゴルジ体間において糖タンパク質を輸送するレセプターで、その糖鎖認識ドメイン(CRD)とカリウムイオンとの複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Emp46	2A6W	on hold		Emp46pはER - ゴルジ体間において糖タンパク質を輸送するレセプターで、その糖鎖認識ドメイン(CRD)の単体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Emp46-Y131F	2A6X	on hold		Emp46pはER - ゴルジ体間において糖タンパク質を輸送するレセプターで、その糖鎖認識ドメイン(CRD)のカリウムが結合できない変異Y131Fを導入した変異体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Emp47	2A6Z 2A6Y 2A70 2A71	on hold		Emp47pはER - ゴルジ体間において糖タンパク質を輸送するレセプターで、その糖鎖認識ドメイン(CRD)の晶系 $P4_32_12$, $C2$, $P2_1$, $P2_12_12_1$ の構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / zanamivir	2F0Z	on hold		Neu2はヒト細胞質シアリダーゼで、インフルエンザウイルスシアリターゼの阻害剤と相互作用し得る。この構造では、インフルエンザ薬のzanamivirとNeu2の複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / peramivir	2F10	on hold		Neu2はヒト細胞質シアリダーゼで、インフルエンザウイルスシアリターゼの阻害剤と相互作用し得る。この構造では、インフルエンザ薬のperamivirとNeu2の複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
Neu2 / IEM	2F11	on hold		Neu2はヒト細胞質シアリダーゼで、インフルエンザウイルスシアリターゼの阻害剤と相互作用し得る。この構造では、インフルエンザシアリターゼ阻害剤候補IEMとNeu2の複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / HEM	2F12	on hold		Neu2はヒト細胞質シアリダーゼで、インフルエンザウイルスシアリターゼの阻害剤と相互作用し得る。この構造では、インフルエンザシアリターゼ阻害剤候補HEMとNeu2の複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2 / DEM	2F13	on hold		Neu2はヒト細胞質シアリダーゼで、インフルエンザウイルスシアリターゼの阻害剤と相互作用し得る。この構造では、インフルエンザシアリターゼ阻害剤候補DEMとNeu2の複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-E111Q	2F24	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域に変異を入れたNeu2 E111Q変異体の構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-E111Q / DANA	2F25	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域に変異を入れたNeu2 E111Q変異体と基質類似体であるDANAの複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-E111Q-Q112E	2F26	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域に変異を入れたNeu2 E111Q-Q112E変異体の構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-E111Q-Q112E / DANA	2F27	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域に変異を入れたNeu2 E111Q-Q112E変異体と基質類似体であるDANAの複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-Q116E	2F28	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域末端に変異を入れたNeu2 Q116E変異体の構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Neu2-Q116E / DANA	2F29	on hold		ヒト細胞質シアリダーゼNeu2の基質認識では、フレキシブルループが重要な役割を果たしている。この認識機構を理解するために、ループ領域末端に変異を入れたNeu2 Q116E変異体と基質類似体であるDANAの複合体構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
CERT START domain (apo-form)	2D6V	on hold		セラミド選別輸送タンパク質CERTのSTARTドメインの立体構造を明らかにしセラミド選別輸送機構について明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
CERT START domain complex with C6-ceramide	2D6Q	on hold		セラミド選別輸送タンパク質CERTのSTARTドメインとC6セラミドの複合体の立体構造を決定し、膜間選別輸送におけるC6セラミド特異的認識機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
CERT START domain complex with C16-ceramide	2D6R 2D6S	on hold		セラミド選別輸送タンパク質CERTのSTARTドメインとC16セラミドの立体構造を複合体で決定し、セラミド特異的認識機構を明らかにした。C16セラミドはアミドアシル鎖の炭素鎖長16のセラミドであり、生体内の脂質セラミドの大部分を占める。また、空間群の異なる2種類(P1, P212121)の結晶構造を登録した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
CERT START domain complex with C18-ceramide	2D6T 2D6U	on hold		セラミド選別輸送タンパク質CERTのSTARTドメインとC18セラミドの複合体の立体構造を決定し、セラミド特異的認識機構を明らかにした。C18セラミドはアミドアシル鎖の炭素鎖長18のセラミドであり、脳、神経細胞に多く分布する。空間群の異なる2種類(P1, P212121)の結晶構造を登録した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
CERT START domain co-crystallized with C24-ceramide	2D6W	on hold		セラミド選別輸送タンパク質CERTのSTARTドメイン(脂質結合ドメイン)をC24セラミドと共結晶させ、立体構造を決定し、セラミドの選別輸送機構について明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-9 N-terminal CRD	2D6K 2D6L	on hold		白血球遊走化因子であり、腫瘍抑制因子として期待されるガレクチン9のN末端ドメインのリガンド非結合型の構造を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-9 N-terminal CRD / lactose complex	2D6M	on hold		白血球遊走化因子であり、腫瘍抑制因子として期待されるガレクチン9のN末端ドメインとラクトースとの結合様式を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-9 N-terminal CRD / N-acetyllactosamine complex	2D6N	on hold		白血球遊走化因子であり、腫瘍抑制因子として期待されるガレクチン9のN末端ドメインとNアセチルラクトサミンとの結合様式を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-9 N-terminal CRD / N-acetyllactosamine dimer (LN2) complex	2D6O	on hold		白血球遊走化因子であり、腫瘍抑制因子として期待されるガレクチン9のN末端ドメインとNアセチルラクトサミン二量体との結合様式を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-9 N-terminal CRD / T-antigen complex	2D6P	on hold		白血球遊走化因子であり、腫瘍抑制因子として期待されるガレクチン9のN末端ドメインとT抗原との結合様式を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
galectin-4 C-terminal CRD / lactose complex	2D6Z	on hold		硫酸化糖鎖に特異的に結合するガレクチン-4のC末端CRDによるラクトースの認識機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
galectin-4 C-terminal CRD / sulfated T-Antigen complex	2D70	on hold		硫酸化糖鎖に特異的に結合するガレクチン - 4 の C 末端 C R D による硫酸化T-Antigenの認識機構を明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Fucosidase	2D79	on hold		ピフィズス菌由来の新奇フコシダーゼの立体構造を初めて決定した。今まで明らかでなかった活性中心残基の推定でき、基質認識機構や酵素反応機構についての考察も行うことができるようになった。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市) 京都大学 (山本憲二)
PGRP-LCa	1Z6I	Released	2005/7/19	真核生物の自然免疫において働くペプチドグリカン認識蛋白質PGRPは細菌の細胞壁に含まれるペプチドグリカンを認識し、細菌の侵入を感知するセンサー蛋白質である。ショウジョウバエ由来PGRP-LCaの細胞外ドメインの2.5 分解能の結晶構造を、テキサス大学との共同研究で明らかにした。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
FIP3 / Rab11 complex	2D7C	on hold		Rab11とFIP3 (Family of Rab11 interactiong protein 3)のRab結合ドメインと複合体の構造解析を行い、FIP3がホモダイマーを形成し、その両側にRab11を結合している構造を明らかにすることができた。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
RNA polymerase holoenzyme	2A6E	Released	2005/9/20	細菌のRNAポリメラーゼは抗結核薬のターゲットの一つであり、その立体構造解析は、抗生物質耐性菌の出現を抑えるためにも極めて重要である。好熱菌由来RNAポリメラーゼホロ酵素の立体構造解析に成功した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
RNA polymerase holoenzyme / rifabutin complex	2A68	Released	2005/9/20	リファマイシン (rifamycin) は抗結核薬として用いられている。リファマイシン誘導体であるリファブチンと好熱菌由来RNAポリメラーゼホロ酵素との複合体の立体構造解析に成功した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
RNA polymerase holoenzyme / rifapentin complex	2A69	Released	2005/9/20	リファマイシン誘導体であるリファペンチンと好熱菌由来RNAポリメラーゼホロ酵素との複合体の立体構造解析に成功した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
RNA polymerase holoenzyme / Sterptolydigin complex	2A6H	Released	2005/9/20	Streptolydiginもまた、細菌のRNAポリメラーゼを阻害する抗生物質である。Streptolydiginの結合部位は、リファマイシンの結合部位とは全く異なっていた。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
RNA polymerase holoenzyme / tagetitoxin complex	2BE5	Released	2005/11/8	抗生物質tagetitoxinは、RNAポリメラーゼの活性を制御する細胞内因子グアノシン4リン酸 (ppGpp) の結合部位と同じ位置に結合して、活性を阻害していることが明らかになった。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
E. coli thioredoxin mutant 11P	2D6A	on hold		HIV-1の抗体中和メカニズムを解明するために必要である、安定なチオレドキシンダイマーの結晶構造を決定した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
E. coli thioredoxin mutant 6P	2D6D	on hold		HIV-1の抗体中和メカニズムを解明するために必要である、安定なチオレドキシンドダイマーの結晶構造を決定した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
E. coli thioredoxin mutant 12P	2D6E	on hold		HIV-1の抗体中和メカニズムを解明するために必要である、安定なチオレドキシンドダイマーの結晶構造を決定した。		高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (若槻壮市)
Calmodulin : Myristoylated Cap-23/Nap-22 Peptide complex	1L7Z	Released	16-Sep-03	蛋白質翻訳後修飾の一つであるミリスチル化が蛋白質の分子認識に直接関わっていることを世界で初めて構造レベルで明らかにしたものである。ミリスチル化蛋白質はウイルス蛋白質や癌遺伝子産物に多く見られることから、今回の構造は抗ウイルス薬や抗がん剤の開発にも役立つ可能性がある。		京都大学薬学研究科 (加藤博章)
PsbP	1V2B	Released	18-May-04	PsbPは植物が光合成を行う中で、水分解 酸素発生反応を最適化するために必要である。この立体構造は真核生物の細胞核への輸送や細胞分裂に関わるRan-GTPaseとの結合タンパク質である Mog1pと非常に良く似ていた。光化学系IIにおけるD1タンパク質の分解 再構成過程にGTPが重要であり、その際、さらにPsbQというタンパク質がGTPと結合することから、PsbPがMog1pと同じような働きを高等植物において行う可能性が示唆された。		京都大学薬学研究科 (加藤博章)
KaiA	1V2Z	Released	1-Jun-04	生物が24時間の周期を保つために必須のタンパク質であり、そのリズム発振機能に重要なHis残基を世界で初めて明らかにした。またこの立体構造は構造学的には新規なものであった。この立体構造の決定は生物時計の分子機構を明らかにしていく足掛かりであり、これからの不眠治療などにも役立つ可能性がある。		京都大学薬学研究科 (加藤博章)
PPDK	1VBG 1VBH	Released	8-Mar-05	PPDKはATPを用いてピルビン酸からホスホエノールピルビン酸 (PEP) を合成する酵素で、酵素自身がリン酸化された中間体を經由する。この立体構造では、これまで得られていたPPDKとは異なるコンフォメーション、すなわち、リン酸化ドメインの位置が異なっていたことから、反応に必要とされていたリン酸化ドメインの回転機構を構造学的に証明できた。また、PEPとの複合体結晶からPEP結合部位を決定するとともに、PEPの結合がドメインの動きを誘引することが示唆された。		京都大学薬学研究科 (加藤博章)
Luciferase	2D1Q 2D1R 2D1S 2D1T	on hold		Luciferaseはホタルが発光を行う際に必須のタンパク質であり、発光反応に重要なアミノ酸残基を世界で初めて決定した。またLuciferaseはアミノ酸を1残基変異させるだけで発光色が黄緑色から赤色に変化する性質を持っており、その発光色を決定する機構についても明らかにした。さらにLuciferaseは発光の量子収率が約90%と言われており、エネルギー効率のよい発光システムの構築に役立つ可能性がある。		京都大学薬学研究科 (加藤博章)
キチナーゼC	1WVU	on hold	2005/12/27	ファミリー19キチナーゼで初めて立体構造が明らかとなった、マルチドメイン蛋白質である。	なし。	長岡技術科学大学 (野中孝昌)
キチナーゼC	1WVV	on hold	2005/12/27	1WVUが野生型であるのに対し、こちらは触媒残基の変異体であり、より分解能が高い。	なし。	長岡技術科学大学 (野中孝昌)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
Parkin Ubiquitin-like domain	1IYF	Released	25-Mar-03	Parkinは、家族性パーキンソン病の原因遺伝子産物であり、その基質候補としてO型糖鎖の修飾を受けた α -synucleinが提唱されている。Parkinのubiquitin-like domainの三次元構造決定をNMRにより行った。さらに、parkinのユビキチン様ドメインは、プロテアソームの構成サブユニットであるRpn10と特異的に結合することをはじめて明らかとし、parkinが基質蛋白質を効率よくプロテアソームへ輸送していることが考えられた。	なし	名古屋市立大学 (加藤晃一)
PDI b domain	1V52	Released	28-Jun-05	PDIの立体構造は、小胞体における蛋白質の品質管理メカニズムを解明するうえで有用な知見を与える。さらに本研究で用いた好熱カビ由来のPDIは耐熱性・長期安定性に優れていることから、その立体構造情報はタンパク質のリフォールディングを工業的レベルで効率よく行うための技術開発の基礎となる。	豊田中研	名古屋市立大学 (加藤晃一)
PDI a domain	1XTX	on hold		PDIの立体構造は、小胞体における蛋白質の品質管理メカニズムを解明するうえで有用な知見を与える。さらに本研究で用いた好熱カビ由来のPDIは耐熱性・長期安定性に優れていることから、その立体構造情報はタンパク質のリフォールディングを工業的レベルで効率よく行うための技術開発の基礎となる。	豊田中研	名古屋市立大学 (加藤晃一)
Ufm-1	1WXS	on hold		Ufm-1は、NEDD8やSUMOといった他のユビキチン様タンパク質と同様に標的となるタンパク質と結合する新規modifierである。本研究ではUfm-1がユビキチンフォールドをしたタンパク質であることをNMRにより明らかとし、Ufm-1の修飾メカニズムについて議論する基盤を整えた。	なし	名古屋市立大学 (加藤晃一)
Peptide:N-glycanase PUB domain	2D5U	on hold		PNGaseは細胞質においてN結合型糖鎖を遊離させる酵素として機能している。N末端領域に存在するPUBドメインは小胞体関連分解(ERAD)に関与するタンパク質(ユビキチン、19SプロテアソームサブユニットS4など)と相互作用することが報告されており、PUBドメインの立体構造は、糖タンパク質分解のメカニズムを明らかにする上で重要である。	なし	名古屋市立大学 (加藤晃一)
ヒト由来がん細胞運動刺激因子(hAMF)・阻害剤フリー	1JIQ	Released	2002/6/19	AMFは、腫瘍細胞の運動能を刺激する蛋白質である。AMF阻害剤はがん転移抑制剤と成り得る。AMFと種々の阻害剤複合体の立体構造情報は、がん転移抑制剤のデザインに有用な情報を与える。特に、「ヒト」由来蛋白質の立体構造は、化合物デザインに必須である。	未定	昭和大学 (田中信忠)
hAMF・E4P複合体	1IRI	Released	2002/6/5	上記ヒトAMFと阻害剤エリスロース4リン酸(E4P)との複合体の構造解析により、阻害剤結合部位を明らかにした。	未定	昭和大学 (田中信忠)
ホルムアルデヒド脱水素酵素	1KOL	Released	2002/12/11	<i>Pseudomonas putida</i> 由来ホルムアルデヒド脱水素酵素は、腎機能を評価のための臨床検査用酵素(東洋紡より市販)である。立体構造情報に基づき、臨床検査薬としての機能向上が可能である。	未定	昭和大学 (田中信忠)
マラリア原虫由来S-アデノシルホモシステイン加水分解酵素・反応生成物複合体	1V8B	Released	2004/10/26	本酵素は、マラリア原虫の育成に必須の酵素である。しかし、ヒトの体内にもこの酵素が存在する。種選択的阻害剤デザインのためには、マラリア原虫由来酵素の立体構造情報が不可欠である。	未定	昭和大学 (田中信忠)
ヒト由来インターフェロン誘導型リボヌクレアーゼL・活性化因子(2-5A)複合体	1WDY	Released	2004/10/5	インターフェロン(IFN)により誘導されるリボヌクレアーゼL(RNase L)は、IFNによる抗ウイルス機構主要酵素の一つである。生体内で安定な2-5A類似化合物は、RNase Lを活性化するという作用機構の抗ウイルス薬となりうる。	未定	昭和大学 (田中信忠)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
ヒト由来2',3'-環状化ヌクレオチドホスホジエステラーゼ活性フラグメント	1WOJ	Released	2005/3/15	ヒト脳に局在し神経性疾患への関与が示唆されている本酵素の立体構造を解明し、反応機構を提唱した。興味深いことに、本酵素の反応機構は構造上全く類似性の無いリボヌクレアーゼAと同様のものであると推定される。	未定	昭和大学 (田中信忠)
マウス由来がん細胞運動刺激因子(mAMF)・阻害剤フリー	2CVP	on hold		AMFは、腫瘍細胞の運動能を刺激する蛋白質である。AMF阻害剤はがん転移抑制剤と成り得るため、AMFと種々の阻害剤との立体構造解析を行うことは、がん転移抑制剤のリード化合物のデザインに有用な情報を与えるものである。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・リン酸複合体	2CXN	on hold		mAMF / リン酸イオン複合体の立体構造から、リン酸基結合部位を同定した。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・E4P複合体	2CXO	on hold		mAMF / エリスロース4リン酸(E4P)複合体の構造から、阻害剤であるE4Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・A5P複合体	2CXP	on hold		mAMF / アラビノース5リン酸(A5P)複合体の構造から、阻害剤であるA5Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・S6P複合体	2CXQ	on hold		mAMF / ソルビトール6リン酸(S6P)複合体の構造から、阻害剤であるS6Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・6PGA複合体	2CXR	on hold		mAMF / 6ホスホグルコン酸(6PGA)複合体の構造から、阻害剤である6PGAの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・F6P複合体	2CXS	on hold		mAMF / フルクトース6リン酸(F6P)複合体の構造から、阻害剤であるF6Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・G6P複合体	2CXT	on hold		mAMF / グルコース6リン酸(G6P)複合体の構造から、阻害剤であるG6Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
mAMF・M6P複合体	2CXU	on hold		mAMF / マルトース6リン酸(M6P)複合体の構造から、阻害剤であるM6Pの認識機構を解明し、新規阻害剤をデザインするための知見を得た。	未定	昭和大学 (田中信忠)
Photoactive yellow protein (R52Q mutant)	2D02	on hold		PASドメインは、原核・真核生物に広く分布する情報伝達に関する機能ドメインである。本蛋白質は、PASドメインのモデル蛋白質の一つであるPYPの活性構造を一部模倣する変異体であり、この構造から、活性状態の反応中心で生じる化学反応の制御機構に対する知見が得られた。		奈良先端科学技術大学院大学 (片岡幹雄)
ヒト由来トリプトファンtRNA合成酵素	1ULH	Released	2004/9/14	tRNAのアミノアシル化以外に、血管内皮細胞にアポトーシスを誘導することにより、血管新生を抑制することから、癌や失明疾患の治療に応用される。	住友化学薬品	東京工業大学大学院 生命理工学研究科 (深井周也)

タンパク質名	PDB ID	状況	リリース日	当該解析のメリット及び重要性の概要	成果の産業移転先 (予定を含む)	シート作成者
CCA付加酵素・tRNAプライマー・ATP複合体	1VFG	Released	2005/2/2	DNAの鋳型なしで決まった配列のRNAを重合するRNAポリメラーゼの反応機構を世界にさきがけて解明した。本構造に基づいてCCA付加酵素を改変することにより、新規のアミノ酸をtRNAに結合させる技術の開発につながる可能性がある。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)
リシジン合成酵素TilS	1WY5	Released	2005/5/24	tRNAのコドン特異性とアミノ酸特異性を人為的に制御することで、新規のアミノ酸をタンパク質中に導入することが可能となる。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)
メチオニルトRNA合成酵素・tRNA複合体	2CSX	Released	2005/5/23	tRNAのアミノ酸特異性を人為的に変えることで、新規のアミノ酸をタンパク質中に導入することが可能となる。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)
メチオニルトRNA合成酵素・tRNA・MetSA複合体	2CT8	Released	2005/5/23	tRNAのアミノ酸特異性を人為的に変えることで、新規のアミノ酸をタンパク質中に導入することが可能となる。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)
tRNA ^{His} リシジン合成酵素	1WYS	Released	2005.4.5	本酵素はtRNAのアンチコドン1字目にリジンを結合する修飾を行うことにより、tRNAのコドン特異性とアミノ酸特異性を同時に変換し、正確な遺伝暗号の翻訳を保証している酵素であり、細菌に特異的なため、有効な抗生物質の開発に応用される。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)
TusBCD (tRNAのチオ化にかかわる複合体)	2D1P	Released	2006.2.28	本酵素はtRNAのアンチコドン1字目にチオ化修飾を行うことにより、tRNAのコドン特異性とアミノ酸特異性を同時に変換し、正確な遺伝暗号の翻訳を保証している酵素である。		東京工業大学大学院 生命工学研究科 (深井周也)