

(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 |
|---|--------|----------|------------|--|---------------------|----------------------|
| モノアミン酸化酵素MAOA (阻害剤複合体) | 1O5W | Released | 2004/4/20 | モノアミン酸化酵素(MAO)は、中枢神経系においていくつかの神経伝達物質を分解する、FADを補酵素として持つ外膜結合タンパク質である。MAOには、MAOAおよびMAOBという2つのサブタイプがあり、両者は類似したアミノ酸配列を持つにもかかわらず、基質や阻害剤に対する特異性が異なっている。MAOの活性を阻害することにより、中枢神経における神経伝達物質の濃度を上昇させることができることが知られていることから、MAOがうつ病などのさまざまな神経症治療のための薬物のターゲット分子となるため、MAOの立体構造は、その基質/阻害剤認識機構を理解し、新しい治療薬を開発するために重要な知見を与えることが期待される。構造解析を行ったラット由来MAOAと特異的阻害剤であるclorgylineとの複合体の構造に基づいてMAOAおよびMAOBのそれぞれに特異的な阻害剤の開発に向けての重要な知見が得られた。この結果に基づいて、現在リード化合物を探索中である。また、ヒト由来のMAOAの構造解析にも成功している。 | インターサイトナノサイエンス | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| オレキシンA | 1WSO | Released | 2004/11/30 | 神経ペプチドであるオレキシンAが、自律神経制御を介して血圧や血糖の調節に関与することを見いだすとともに、NMRを用いてその水溶液中での構造を明らかにした。得られた結果に基づき、構造機能相関の解析をすすめることにより、新規アゴニスト、アンタゴニストのデザインが可能であり、生活習慣病の新規治療薬の開発が期待できる。 | 検討中 | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| CNR EC1 domain | 1WUZ | on hold | | カドヘリンスーパーファミリーの中で最大のファミリーを形成するプロトカドヘリンの最初の立体構造。この構造により、脳で発現するプロトカドヘリンが、従来からよく知られていたクラシカルカドヘリンとは異なることが構造の観点からも証明された。この多様性が脳の形成に関与していると思われる。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| SCF ^{Fbs1} SBD domain | 1UMH | Released | 2004/4/6 | ユビキチン/プロテアソーム系による異常タンパク質分解系において、細胞質に逆行輸送された糖タンパク質にユビキチンを付加するSCF ^{Fbs1} は、分解すべきタンパク質のN型糖鎖を認識し、脳に特異的に存在することが知られている。この糖鎖認識ドメイン(SBD)のネイティブ(本構造)および基質複合体(下記)の立体構造決定を行い、糖鎖認識の機構を明らかにした。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| SCF ^{Fbs1} SBD domain (NAG複合体) | 1UMI | Released | 2004/4/6 | 上記参照 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Cortactin (SH3 domain) | 2D1X | on hold | | 神経回路の形成に重要な働きを担うcortactinのSH3ドメインとAMAP1ペプチド複合体の構造解析を行った。これによりcortactin SH3ドメインがこれまでに知られていない相互作用でAMAP1と相互作用することが明らかとなった。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Importin-beta/SREBP2 | 1UKL | Released | 2003/12/9 | 核内へタンパク質を輸送する輸送因子Importin- と転写因子SREBP2の複合体の構造解析を行い、ロイジンジッパーを持つ転写因子がimportin- に結合し核へ運び込まれる機構を原子レベルで始めて明らかにした。従来、2量体を形成することにより機能する転写因子が、どのようにしてimportin- によって認識されるのかというメカニズムがわかっていなかったが、本構造解析により、importin- が分子内の疑似2回対称を使って、転写因子2量体と結合する様子が明らかになった。この認識機構は、非常に基本的なものであり、転写因子のフィードバック機構に基づく体内時計の自発的発信機構など、生体内での重要な機能の解明につながっている。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| 2ミクログロブリンの野性型 | 2D4F | on hold | | 2ミクログロブリンは透析アミロイドーシスの原因蛋白質である。本解析は狂牛病などの原因であるアミロイド線維形成の分子機構の解明に寄与する。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |

| 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 |
|--|--------|----------|------------|--|---------------------|----------------------|
| 2 ミクログロブリンの変異体 W60F/W95F/L39W | 2D4D | on hold | | 2 ミクログロブリンは透析アミロイドーシスの原因蛋白質である。本解析は狂牛病などの原因であるアミロイド線維形成の分子機構の解明に寄与する。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| ヒトTタンパク質 | 1WSR | Released | 2005/8/16 | 新生児期に発症し重篤な中枢神経障害を示す新生児型と乳幼児期に徐々に神経運動発達の遅れる遅発型の2種類がある非ケートーシス型高グリシン血症(NKH)は、グリシン開裂酵素系の一次障害によって起こる。グリシン開裂酵素系は、4つのタンパク質からなる複合酵素であるが、そのうちのTタンパク質の構造決定を行った。本構造は、ヒト由来Tタンパク質として初めてのものである。遺伝子解析により明らかになったNKHを発症する遺伝子変異の情報や、下記の基質結合型の構造と合わせて、NKHに関して構造面からの重要な知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| ヒトTタンパク質(基質結合型) | 1WSV | Released | 2005/8/16 | 上記参照 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| サソリ トキシン | 1OMY | Released | 2003/9/9 | サソリ由来の トキシンは、電位依存性ナトリウムチャンネルを阻害することが知られている。本毒素は、サソリ由来の新しいタイプの トキシンの構造解析を行った。この構造は、ナトリウムチャンネル関連の病理生理学に関する重要な知見が得られるだけでなく、チャンネルのキネティックスやゲートの開閉機構を調べる為のプローブとなることが期待される。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Lipoate-protein ligase A (apo form) | 1X2G | Released | 2005/8/2 | LplAがリボ酸を様々なタンパク質のリジン残基に結合する機構のうち、リボ酸とATPを結合する反応についての重要な知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Lipoate-protein ligase A (lipoate-bound form) | 1X2H | Released | 2005/8/2 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| チトクロム酸化酵素(完全酸化型) | 1V54 | Released | 2003/12/23 | 呼吸鎖において能動的にプロトン輸送を行う、チトクロム酸化酵素のプロトンおよび水の輸送機構を明らかにするために、酸化状態の異なる構造解析を高分解能で行い、立体構造に基づく反応機構を明らかにした。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| チトクロム酸化酵素(完全還元型) | 1V55 | Released | 2003/12/23 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| F1Fo-ATPase c subunit | 1WU0 | on hold | | 好熱菌由来のATP合成酵素の膜内成分であるcサブユニットの立体構造をNMRで決定した。大腸菌のcサブユニットの立体構造はすでに報告されているが、プロトンの受け渡しに重要な酸性残基の位置が両者で大きく異なっている。さらに、磁気緩和を利用した動的性質の解析と組み合わせると、従来のcサブユニットで主張されているC末端ヘリックスの構造変換がないという結果が出た。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| マラリアフェレドキシン | 1IUE | Released | 2003/9/30 | マラリアにおける還元力分配機構の構造的知見が得られた。 | 検討中 | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| イネ萎縮ウイルス | 1UF2 | Released | 2003/10/14 | これまでに解析された最も大きな超分子複合体であるイネ萎縮ウイルス(分子質量70MDa)の原子レベルでの構造解析を通して、超分子複合体の構造解析の方法論を確立した。また、得られた立体構造から、限られた種類のタンパク質が自己会合によって巨大な生体超分子複合体を構築する構造構築機構が明らかになった。また、この構造はイネ萎縮病の駆除薬の開発につながる事が期待される。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |

| 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 |
|---------------------|--------|----------|-----------|---|---------------------|--|
| <i>n</i> -aequorin | 1UHK | Released | 2005/2/8 | 発光タンパク質として知られるイクオリンの発光機構の解明と新しい性質を持った半合成イクオリンの作製のための基礎データを得るために、発光パターンの異なるいろいろな種類の半合成イクオリンの構造解析を行った。これらの構造比較を通して、イクオリンの発光のメカニズムに関する知見を得た。この知見は、新たな機能を持った発光標識の開発につながる事が期待される。また、イクオリンと同様にセレンテラジンを基質とする発光タンパク質オペリンの構造解析では、基質がperoxide化しているかどうかがあいまいであったが、詳細な解析を行った結果、X線回折強度データ収集の過程で、放射線損傷によりセレンテラジンのperoxideが分解していることを証明した。この結果により、これまで、曖昧であったセレンテラジンを基質とする発光タンパク質の発光基質の構造を決定することができた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| <i>i</i> -aequorin | 1UHI | Released | 2005/2/8 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| <i>cp</i> -aequorin | 1UHH | Released | 2005/2/8 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| <i>br</i> -aequorin | 1UHJ | Released | 2005/2/8 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| レクチン CEL-I | 1WMY | Released | 2004/9/7 | グミ由来レクチンCEL-Iは、N-アセチルグルコサミンに高い特異性を示すC型レクチンである。このCEL-IおよびN-アセチルグルコサミン複合体の構造解析を行い、その糖認識機構を明らかにした。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) 東京大学大学院総合文化研究科 (栗栖源嗣) |
| レクチン CEL-I (NAG複合体) | 1WMZ | Released | 2004/9/7 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) 東京大学大学院総合文化研究科 (栗栖源嗣) |
| レクチンCEL-III | 1VCL | Released | 2004/9/7 | グミ由来レクチンの構造解析を行い、その糖認識機構を明らかにした。構造解析の結果、本タンパク質は、2つのトリフォイル構造を持つ新規のCa ²⁺ 依存型レクチンであることを明らかにした。この構造から、本レクチンが赤血球膜に穴を開け、赤血球溶血を起こすメカニズムに関する重要な知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ/グルコース複合体 | 1J0Y | Released | 2003/6/17 | アミラーゼ(およびその変異体)と各種基質との複合体の構造解析を通してその基質認識機構を原子レベルで明らかにした。この結果は新しい機能を持ったアミラーゼの開発につながる事が期待される。本研究では、一連の構造解析を行うことにより、より一般的な認識機構に関する知見を得ることができた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ/マルトース複合体 | 1J0Z | Released | 2003/6/17 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ/GGX複合体 | 1J10 | Released | 2003/6/17 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ/EPG複合体 | 1J11 | Released | 2003/6/17 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |

| 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 |
|--|--------|-----------|-----------|---|---------------------|--|
| アミラーゼ / EBG複合体 | 1J12 | Released | 2003/6/17 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼE367A ES complex | 1ITD | Released | 2003/5/27 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ / マルトペントース複合体 | 1ITC | Released | 2003/5/27 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ / マルトース複合体 | 1J18 | Released | 2003/5/27 | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミラーゼ / グルコース複合体 | 1ITJ | Withdrawn | | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| トリプシン / ペプチドインヒビター複合体 | 1OX1 | Released | 2004/5/18 | トリプシンと新しいペプチドインヒビターの構造解析を行った。この結果は、トリプシンの反応機構の解明だけではなく、トリプシン阻害剤開発の為に重要な知見を与えた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Cytochrome <i>b5</i> reductase | 1UMK | Released | 2004/11/2 | ヒト赤血球由来のcytochrome <i>b5</i> reductaseの構造解析を行い、既に構造解析されているラット由来の同酵素との構造比較を行った。さらに、cytochrome <i>b5</i> との複合体モデルを提唱した。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| スギナ由来フェレドキシンII | 1WRI | Released | 2004/11/2 | スギナ由来のフェレドキシンII (FdII) は、他のフェレドキシンで良く保存されているArg38とGlu28が欠如している。他のフェレドキシンでは、これらの残基が活性中心の[2Fe-2S]クラスターの安定化に深く関与していることが知られている。構造解析の結果、本タンパク質では、これら2つの残基に代わって、Arg22とGlu58という全く違った2つの残基が[2Fe-2S]クラスターの安定化に寄与していることが明らかになった。他の生化学実験と合わせて、FdIとFdIIでは、フェレドキシン還元酵素との結合様式が異なると考えられる結果が得られた。このことから、FdIとFdIIが異なった酸化還元代謝経路で働くことが示唆された。この成果により、植物還元力分配のメカニズムの構造的知見が得られた | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) 東京大学大学院総合文化研究科 (栗栖源嗣) |
| トウモロコシ根型フェレドキシン | 1C7A | on hold | | 根における植物還元同化作用の構造的知見とメカニズムの知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| トウモロコシ根型フェレドキシン NADP+還元酵素 | 1IWS | on hold | | 根における植物還元同化作用の構造的知見とメカニズムの知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| トウモロコシ根型フェレドキシン NADP+還元酵素とフェレドキシンの複合体 | 1IWR | on hold | | 根における植物還元同化作用の構造的知見とメカニズムの知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| ポブラグルタレドキシンCxxC1 | 2D0R | on hold | | レドックスシグナルの伝達機構の新規の知見が得られた。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |

| 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 |
|--|--------|----------|-----------|--|---------------------|-----------------------|
| 不均化酵素native | 1X1N | on hold | | 植物の多糖代謝と酵素反応機構の解明 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Mastoparan X | 2CZP | on hold | | 情報伝達系においてG蛋白質を活性化する。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| Chitinase C | 2D49 | on hold | | キチン分解酵素の基質結合ドメイン。従来のキチン、セルロース結合ドメインは、基質と相互作用するための芳香環が3個表面に飛び出しているのが特徴的であるが、当キチナーゼ結合ドメインは、そのような芳香環が2つしかない。基質との分子間相互作用の機構、および、進化的にもたいへん興味深い。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| gp44 (baseplate component of bacteriophage μ) | 1WRU | Released | 2005/9/20 | バクテリオファージ μ の構造構築の鍵となり感染能力を持った構造構築に必須の尾構造を形成するタンパク質の構造決定を行った。これによりバクテリオファージ μ の構造構築機構と宿主との相互作用の機構を明らかにした。 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| グルタミン合成酵素ADP MetSox | 2D3A | on hold | | 真核細胞では初めての結晶解析人への影響の少ない農業開発のデータ | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| グルタミン合成酵素AMPPNP MetSox | 2D3B | on hold | | 同上 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| グルタミン合成酵素ADP PPT | 2D3C | on hold | | 真核細胞では初めての結晶解析現在市販の農薬との複合体 | 予定なし | 大阪大学蛋白質研究所 (中川敦史) |
| アミン酸化酵素 (TPQ 生合成初期反応中間型) | 1IVU | Released | 2002/8/7 | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (TPQ 生合成DPQ反応中間型) | 1IVV | Released | 2002/8/7 | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (TPQ 生合成DPQ反応中間型) | 1IVW | Released | 2002/8/7 | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (結晶中で生成したholo型) | 1IVX | Released | 2002/8/7 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素(Co置換型) | 1IQX | Released | 2003/2/4 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |

| 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 |
|---|--------|----------|-----------|---|---------------------|--|
| アミン酸化酵素 (Co置換型TPQ生成反応中間型) | 1WMN | Released | 2005/8/2 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) 関西学院大学 (山口宏) |
| アミン酸化酵素 (Co置換型TPQ生成初期反応中間型) | 1WMP | Released | 2005/8/2 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) 関西学院大学 (山口宏) |
| アミン酸化酵素(Ni置換型) | 1IQY | Released | 2003/2/4 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (Ni置換型TPQ生成反応中間型) | 1WMO | Released | 2005/8/2 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) 関西学院大学 (山口宏) |
| アミン酸化酵素(holo型, 100K) | 1IU7 | Released | 2003/2/4 | 翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程における金属イオン役割を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素(H592A) | 1UI7 | Released | 2004/4/20 | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) 関西学院大学 (山口宏) |
| アミン酸化酵素(H433A) | 1UI8 | Released | 2004/4/20 | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) 関西学院大学 (山口宏) |
| アミン酸化酵素 (D298A変異型酵素holo型) | 2CWT | on hold | | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (D298A変異型酵素holo型、フェニルエチルアミンソーキング1時間) | 2CWU | on hold | | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| アミン酸化酵素 (D298A変異型酵素holo型、フェニルエチルアミンソーキング1週間) | 2CWV | on hold | | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |

| 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 |
|---|--------|----------|----------------|--|--|-----------------------|
| アミン酸化酵素 (D298A変異型酵素holo型、チラミン ソーキング8日間) | 2D1W | on hold | | 外部由来通常型補酵素を含む酵素ではなく、酵素内部にペプチドとして含まれ、翻訳後に補酵素に転換される極めてユニークなビルトイン型補酵素の生成過程を解明。脳神経系で作動する各種アミンの高感度定量系を構築するのに極めて有用。 | アミンセンサー素子 | 大阪大学産業科学研究所 (黒田俊一) |
| AcrB | 1IWG | Released | 10th.Oct..2002 | 1) 膜を介した抗生物質等の輸送。トランスポーター。 2) トランスポーター初の結晶構造解析 3) 薬剤耐性化問題の克服 4) 全く新規構造の膜蛋白質 5) 抗菌剤、抗ガン剤の耐性化に対する阻害剤や、回避剤の開発の初めての手がかり | 新規抗生物質の開発 | 大阪大学産業科学研究所 (村上聡) |
| ヒト由来アレルギー伝達物質合成酵素 | 1IYI | Released | 2003/4/8 | アレルギー情報伝達を担うプロスタグランジン(PG)D2を合成する酵素で、97年にラット由来構造がCellから報告されたが、今回はヒト由来で金属イオン効果を発見した。Nature Structural BiologyのEditorial BoardからEditorial Boardで紹介された。抗アレルギー剤開発の構造基盤構築が整った。 | 数社既に依頼あり | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ヒト由来アレルギー伝達物質合成酵素 | 1IYH | Released | 2003/4/8 | 同上。 | 数社既に依頼あり | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| アフリカ睡眠病病原虫Trypanosoma brucei由来PGF合成酵素 | 1VBJ | on hold | | PGF2aは子宮筋収縮を担い、陣痛促進剤として広く臨床応用されている。人畜共通の感染性病原虫からの酵素で、Nagana病やアフリカ睡眠病の原因の1つ。特効薬開発や、流産防止薬開発の構造基盤となりうる。 | African Unionの Biosciences eastern and central Africa (BecA)との共同研究 | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| アフリカ睡眠病病原虫Trypanosoma brucei由来PGF合成酵素 | 1MZ7 | on hold | | 上記の異なる沈殿剤で結晶化した構造。活性部位が上記の構造と大きく変化。反応機構の解明に寄与。 | African Unionの Biosciences eastern and central Africa (BecA)との共同研究 | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| C1資化性菌由来azurin | 1UAT | Released | 2004/3/30 | フレキシブルなフープ構造が30種類以上知られているアズリン類で初めて見つかった。電子伝達活性の向上と関係していた。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| C1資化性菌由来azurin | 1CUO | Released | 2000/8/23 | 上の構造と併せてJ. Mol. Biol., 333, 117-124 (2003) | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ヒト由来アレルギー伝達物質合成酵素 | 1V40 | Released | 2004/11/7 | 阻害剤複合体の初めての例。抗アレルギー剤開発の構造基盤構築 | 数社既に依頼あり | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ズッキーニ由来mavicyanin | 1WS8 | Released | 2004/11/23 | 高いpHで酸化還元電位が急激に下がる原因について詳細に検討した。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ズッキーニ由来mavicyanin | 1WS7 | Released | 2004/11/23 | 高いpHで酸化還元電位が急激に下がる原因について詳細に検討した。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 超好熱菌由来DNA polymerase mutant | 1WN7 | Released | 2005/8/2 | 変異体DNA polymeraseのエキソヌクレアーゼ活性が低下している原因を構造から明らかにした。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |

| 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 |
|---------------------------------|--------|----------|------------|--|---------------------|---|
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSF | Released | 2005/2/8 | 変異体D134AとMnの共結晶構造を解析することにより触媒反応におけるMnの役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSE | Released | 2005/2/8 | 変異体E48AとMnの共結晶構造を解析することにより触媒反応におけるMnの役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSG | Released | 2005/2/8 | 変異体E48A/D134NとMnの共結晶構造を解析することにより触媒反応におけるMnの役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSJ | Released | 2004/11/23 | 変異体H124Aの結晶構造を解析することにより触媒残基の役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSH | Released | 2004/11/23 | 変異体E48Aの結晶構造を解析することにより触媒残基の役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 大腸菌 RNase HI mutant | 1WSI | Released | 2004/11/23 | 変異体E48A/D134Nの結晶構造を解析することにより触媒残基の役割を明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 超好熱古細菌Homing endonuclease | 2CW8 | on hold | | DNAポリメラーゼのインテインの構造を明らかとした(Proteins, in press)。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 超好熱古細菌Homing endonuclease | 2CW9 | on hold | | DNAポリメラーゼのインテインの構造を明らかとした(Proteins, in press)。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 超好熱古細菌TBP interacting protein | 2CZR | on hold | | TATA結合蛋白質TIPで初めての構造解析。TIPの転写制御機構について提唱した。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 超好熱古細菌Thioredoxin peroxidase還元体 | 1XOR | on hold | | 細菌から真核生物に至るまで広く存在する過酸化分解酵素で、H ₂ O ₂ やalkyl peroxideを水やアルコールに還元する重要な酵素。10量体構造をSe-Met置換体によるMAD法で解析した(Protein Sci., in press) | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |

| 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H-PGDSとHQL-79との複合体 | 2CVD | on hold | | 経口投与で抗アレルギー効果を発揮するHQL-79のvivo, vitroの生化学実験とX線構造解析をあわせて論文化した(J. Biol., Chem., in press)。 | 本化合物は経口投与で筋ジストロフィーや外傷性能損傷にも効果を示し、リード化合物として十分な威力を発揮している。誘導化を連携して取り組んでいる | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ホスホエノールピルビン酸カルボキシラーゼ | 1JQO | Released | 2003/1/14 | 超分子複合体を形成するトウモロコシ由来炭酸固定酵素PEPCのX線構造解析でアロステリック効果について解明した(Structure, 2002) | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| ホスホエノールピルビン酸カルボキシラーゼ | 1JQN | Released | 2003/1/14 | 超分子複合体を形成するトウモロコシ由来炭酸固定酵素PEPCのX線構造解析でアロステリック効果について解明した(Structure, 2002) | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 二酸化炭素固定酵素Rubisco | 1IR2 | Released | 2002/3/20 | 超分子複合体を形成する緑藻クラミドモナス由来二酸化炭素固定酵素Rubiscoの1.84 分解能構造解析(J. Mol. Biol., 2002) | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 二酸化炭素固定酵素Rubisco | 1IR1 | Released | 2002/3/20 | 超分子複合体を形成する高等植物ホウレンソウ由来二酸化炭素固定酵素Rubiscoの1.8 分解能構造解析。1IR2と併せて論文化した(J. Mol. Biol., 2002)。 | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 二酸化炭素固定酵素Rubisco | 1IWA | Released | 2002/3/20 | 超分子複合体を形成する紅藻Galdieria Partita由来二酸化炭素固定酵素Rubiscoの1.84 分解能構造解析(FEBS., 2002)。 | | 大阪大学大学院工学研究科 (井上豪) |
| 超好熱菌古細菌キヌレニンアミノトランスフェラーゼII (KAT-II) ホモログ | 1X0M | Released | 2005/4/12 | KAT IIの阻害剤はハンチントン病、ダウン症、アルツハイマー病、神経分裂症、知覚障害などの様々な病気の治療薬になることが期待されている。超好熱古細菌由来ホモログの構造を決定することにより、阻害剤の設計が可能になった | 具体的な産業移転先はまだないが、KAT-II阻害剤の開発に興味を示す企業があれば協力する予定 | 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| アミロイドペプチド(A _β) | 1X1P | on hold | | 超好熱菌RNase HIIIのC末端にA _β 28-42を付加した融合蛋白質の構造を決定することにより、A _β 28-42が水溶液中で構造をもつことを明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 好熱菌RNase HIII | 2D0A | on hold | | RNase HIIIはTBPに似た構造の基質結合部位とRNase Hドメインの2つのドメインから成ることをはじめて明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 好熱菌RNase HIII+Mg | 2D0B | on hold | | RNase HIIIの活性部位にMgイオンが一つだけ結合することを明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| 好熱菌RNase HIII+Mn | 2D0C | on hold | | RNase HIIIの活性部位にMnイオンが一つだけ結合することを明らかにした | なし | 大阪大学大学院工学研究科 (金谷茂則) |
| Cytochrome C552 | 2AI5 | on hold | | NMRによる溶液中立体構造決定。酸化還元系に関与したタンパク質の安定性に関して新規知見を得た。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |

| 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 |
|---|--------|----------|-----------|---|---------------------|------------------------------|
| Cytochrome C552 | 2D0S | on hold | | X線結晶構造解析による結晶中立体構造決定。酸化還元系に関与しタンパク質の安定性に関して新規知見を得た。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| Sp1 zinc finger1 | 1VA1 | on hold | | ヒト転写因子Sp1 DNA結合ドメインのZinc finger 1でGC-boxに結合。DNA配列特異的結合様式の解明とタンパク質工学的改変に必須の立体構造を決定した。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| Sp1 zinc finger2 | 1VA2 | on hold | | 同上 Sp1 DNA結合ドメインのZinc finger 2。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| Sp1 zinc finger3 | 1VA3 | on hold | | 同上 Sp1 DNA結合ドメインのZinc finger 3。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| Endothelin-1 | 1V6R | Released | 16-Mar-04 | 血管内皮細胞由来生理活性ペプチドで血管収縮作用を示す。これまでのX線結晶回折法、NMR法による立体構造解析で不明瞭であったC末領域の高分解能立体構造決定に成功。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| Holo-Neocarzinostatin | 1O5P | Released | 14-Oct-03 | NeocarzinostatinはDNA合成阻害と細胞分裂阻害による制癌効果を発揮。基質認識機構と制癌作用解明に必須の立体構造を決定した。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| N-terminal domain of E.coli Ada protein | 1WPK | on hold | | DNAリオン酸骨格のアルキル化損傷の修復とDNA修復関連遺伝子の転写制御を行う。NMRによる立体構造決定を行い修復反応に伴うメチル化による転写制御活性の発現機構を解明。 | | 大阪大学大学院・薬学研究科 (大久保忠恭) |
| HAP1(FlgK) 49K fragment | 2D4Y | on hold | | 1.細菌べん毛フック-フィラメント結合蛋白質 力学的性質が全く異なるフックとフィラメントを強固にしかし互いの機能を妨げることなく繋ぐカップリングジョイントの働きをする。 2.3.ナノスケールで実現されている上記カップリングジョイントのしくみの解明は、生体ナノマシンの作動機構の理解するうえで非常に興味深く、将来のナノマシン設計において、重要な指針を与えることができる。 4.フラジェリンに似たヘリックスドメイン、および主にベータ鎖とターンより構成された新規フォールドによるドメインから成る。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) |
| HAP3(FlgL) 26K fragment | 2D4X | on hold | | 1.細菌べん毛フック-フィラメント結合蛋白質 力学的性質が全く異なるフックとフィラメントを強固にしかし互いの機能を妨げることなく繋ぐカップリングジョイントの働きをする。 2.3.ナノスケールで実現されている上記カップリングジョイントのしくみの解明は、生体ナノマシンの作動機構の理解するうえで非常に興味深く、将来のナノマシン設計において、重要な指針を与えることができる。 4.フラジェリンに似たヘリックス束、および新規フォールドによる側面結合部から成る。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) |
| FlgE 31K fragment | 1WLG | Released | 2/11/2004 | 1.細菌べん毛フック構成蛋白質べん毛モーターの回転トルクをスクリュウの働きを持つべん毛繊維へ滑らかに伝えるためのユニバーサルジョイントの働きをする。 2.3.ナノスケールで実現されているユニバーサルジョイントのしくみの解明は、生体ナノマシンの作動機構の理解するうえで非常に興味深く、将来のナノマシン設計において、重要な指針を与えることができる。 4. Ig様のベーター構造ドメインとベーター・ターン・ベーター構造を主体とする新規フォールドから成る。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) |

| 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 |
|--|--------|----------|-----------|---|---------------------|--|
| Tsr | 2D4U | on hold | | <ol style="list-style-type: none"> セリン走化性受容体 細胞は、走化性受容体からの細胞外情報に基づいて自身の行動を決定する。走化性受容体は、いわば細胞外情報の入口であり、その情報認識・伝達機構の解明は、生物の情報処理の仕組みを理解する上で極めて重要である。 厳密な化学物質認識とその情報伝達を行うので、分子センサーの基本モデルとなりうる。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) 名古屋大学 (本間道夫) |
| KaiB | 1VGL | Released | 16/8/2005 | <ol style="list-style-type: none"> 藍色細菌生物時計発振に必須な蛋白質 藍色細菌は、生物時計機能を持つ最も簡単な生物である。KaiBはKaiA、KaiCと共に時計発振の中核を担う蛋白質であり、生物時計機能の解明には、構造情報が必須である。 生物の成長、増殖、分化は生物時計により制御されている。生物時計の機構が原子レベルで明らかになれば、生体リズムの乱れに起因する病気に対する薬剤開発、成長、増殖、分化のコントロールによる農産物生産に大きなインパクトを与えることができる。 ホモテトラマーにもかかわらず、対称性が崩れた4量体構造を持つ。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) 名古屋大学 遺伝子実験施設 (石浦正寛) |
| NAD-dependent Isocitrate dehydrogenase | 2D4V | on hold | | <ol style="list-style-type: none"> イソクエン酸から2オキソグルタル酸を生成する脱水素脱炭酸反応を触媒する。 二量体型イソクエン酸脱水素酵素の補酵素はNADPだが、本酵素はNADを利用する。補酵素認識機構のモデルケースとして研究されてきたが、今回決着をつけることができた。また解析結果から、本酵素が反応に合わせて補酵素コンフォメーションを制御している可能性が示唆された。 補酵素を結合する構造の違いと反応性の関係が明らかになった。NADやNADPを補酵素に用いる酵素は多数あるが、これらの機能を改良・改変する際の指針となる成果である。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) |
| Glycerol Kinase | 2D4W | on hold | | <ol style="list-style-type: none"> グリセリンにリン酸を付加する反応を触媒する。 グリセロールキナーゼは、活性のアロステリック制御を会合解離で行う。会合解離に伴う非常に大きなドメイン配置の変化を捉え、制御機構を明らかにした。 グリセロールキナーゼは、Mgやグリセロールの定量、中性脂肪の定量診断薬に使用されている。本酵素は、防腐剤耐性を持ち、今までのこの種の試薬の欠点を解決できる酵素である。 | | 大阪大学大学院 生命機能研究科 (今田勝巳) |

| 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 |
|------------------------------|--------|----------|----------|---|---|--------------------------|
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO型A) | 1UBH | Released | 4-Apr-03 | <p>(a) [NiFe]ヒドロゲナーゼの水素活性化機構において水素結合位置の特定に成功．以下のことを見出した．</p> <p>(1) 競争阻害剤が結合した後，100Kの温度では阻害剤の結合は変化しない．</p> <p>(2) 100Kでは可視光により効率的に阻害剤は活性部位から遊離する．</p> <p>(3) 活性の本質はNiおよびその一つの配位子であるイオウ原子に存在する．</p> <p>(b) Ni-A型（不活性型）はCO結合型の構造と酷似していることが判明．活性部位の活性化機構の解明に道がたった．</p> | <p>(1) 新規燃料電池（生物酵素の応用）の開発</p> <p>(2) 生物酵素を利用した工業的な反応において本酵素反応（水素分解）による電子およびATPの供給へ道を拓く可能性がある．</p> | <p>兵庫県立大学 (樋口芳樹)</p> |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (H2型A) | 1UBJ | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO型B) | 1UBK | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO光型B) | 1UBL | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO光解離型B) | 1UBM | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO型C) | 1UBO | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO光型C) | 1UBR | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (CO光解離型C) | 1UBT | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (H2置換型C) | 1UBU | Released | 4-Apr-03 | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (As-purified型) | 1WUK | on hold | | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (H2還元型) | 1WUL | on hold | | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (Ni-A1型) | 1WUH | on hold | | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (Ni-A2型) | 1WUI | on hold | | | | |
| [NiFe]ヒドロゲナーゼ (Ni-B型) | 1WUJ | on hold | | | | |

| 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 |
|---|--------|----------|---|------------------------------------|---|------------------|
| DsrDタンパク質 | 1UCR | Released | 14-Oct-03 | DNA/RNA結合ドメインを有することがわかり現在結合遺伝子を探索中 | S04, S03などのイオウ化合物の代謝に関する工業的応用等 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) |
| チトクロムc3 (wild高分解能) | 1J00 | Released | 12-Aug-03 | 変異の導入で電子伝達速度に変化があるためその理由を構造化学的に解明中 | 高圧の水素雰囲気 で超伝導に近い性質を示すため、 生物半導体への応用が可能 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) |
| チトクロムc3変異体 (Y43L) | 1J0P | Released | 12-Aug-03 | | | |
| チトクロムc3変異体 (E41K) | 1WR5 | Released | 12-Aug-03 | | | |
| チトクロムc3変異体 (F20Y) | 2EWI | on hold | | | | |
| チトクロムc3変異体 (F20H) | 2EWK | on hold | | | | |
| FMN結合タンパク質変異 (L122E) | 1WLK | on hold | FMN結合タンパク質の構造 機能相関の解明 | 機能的な電子伝達体としての工業利用の可能性 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) | |
| FMN結合タンパク質変異 (L122K) | 1WLL | on hold | | | | |
| FMN結合タンパク質変異 (L122Y) | 1WLI | on hold | | | | |
| フラボレドキシン | 2D5M | on hold | | | | |
| Axin-DIX (Wild) | 1WSP | on hold | 脳神経等生体内器官の細胞分化を制御．がん細胞の分化成長にも関与 | 細胞分化初期の疾病やがんに対する創薬 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) | |
| Axin-DIX (R767E) | 2D5G | on hold | | | | |
| DAPキナーゼ | 1WVW | on hold | 細胞死に関与するが、その基質は不明．がん細胞の細胞死や脳内の虚血性疾患にも関与 | がんや脳内の虚血性疾患に関わる創薬 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) | |
| DAPキナーゼ (Staurosporine複合体) | 1WVY | on hold | | | | |
| DAPキナーゼ (BDB-402複合体) | 1WVX | on hold | | | | |
| Hyb-24 (ナイロンオリゴマー分解酵素) | 1WYB | on hold | 人工繊維 (ナイロン) の副産物・ナイロンオリゴマーの分解に関与 | ナイロン合成時の不要副産物の除去、及び材料の再利用への応用 | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) | |
| Hyb-24変異体 (Hyb-24DN) | 1WYC | on hold | | | | |
| Diol Dehydratase活性化因子 (ADP free) | 2D0P | on hold | ジオールデヒドラターゼ再活性化因子 | Co酵素の再活性化など酵素作用の工業的応用への道を拓く | 兵庫県立大学 (樋口芳樹) | |
| Diol Dehydratase活性化因子 (ADP+Mg ²⁺) | 2D0O | on hold | | | | |

| 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 |
|--|--------------|----------|------------|---|--|----------------------------|
| m-ヒドロキシ安息香酸4水酸化酵素、Xe結合型 | 1X21 1X20 | on hold | | 基質認識機構の解明によりバイオリメディエーションに利用可能 | タンパク質工学により基質改変ができれば、バイオリメディエーション、合成試薬として利用可能 | 関西学院大学 (山口宏) |
| KaiA (clock oscillator domain) from <i>T. elongatus</i> BP-1 | 1V2Z | Released | 1-Jun-04 | (2) 機能：生物時計は原核生物からヒトにまで存在するにもかかわらず、その分子レベルでの発振メカニズムは不明である。KaiAは藍色細菌の時計発振に不可欠なタンパク質（時計タンパク質）であり、時計タンパク質KaiCとの結合やKaiCリン酸化の促進活性を持つ。 (3) 科学的重要性：高等動物の生物時計は脳の視床下部に存在し、脳の重要な機能の一つである。時計タンパク質が多数クローニングされているが、結晶化は難しくまだ成功例はない。また構成タンパク質の数も多く発振機構の原子レベルでの解析は今のところ極めて困難である。一方、最も単純な時計である藍色細菌の時計分子装置は3つの時計タンパク質KaiA、KaiB、KaiCで構成されており、これら3つの時計タンパク質をATP存在下で反応させると24時間周期でKaiCリン酸化-脱リン酸化レベルの自律発振リズムが認められる（時計装置の <i>in vitro</i> 再構成）。このような実験系は他には存在しない。藍色細菌の生物時計装置は最も単純で最も理想的なモデル実験系である。この系で得られた時計発振機構は他の生物の生物時計にも適用できる。KaiAの凹レンズ型構造を決定し、この構造に基づいて機能アミノ酸残基His ₂₇₀ を同定した。 <i>in vitro</i> 生化学実験、 <i>in vivo</i> リズム解析でHis ₂₇₀ が機能残基であることを実証した。1アミノ酸置換突然変異を原子構造上にマップして、時計発振におけるKaiAの原子レベルでの構造-機能相関（アミノ酸残基の構造上、機能上の重要性）を解明した。生物時計では世界初の研究成果である。構造-機能相関を理論的に解明することができれば、任意の周期を持つ時計装置を設計・製作できることになり、「生体分子装置設計学」の先駆けとなりうるであろう。 (3) タンパク質工学的利点：耐熱性タンパク質であり安定である。 (4) 構造学的新規性：サブユニット構造は新規フォールドであった。 (5) 産業移転性：今のところ該当なし。 | 該当なし。 | 名古屋大学 遺伝子実験施設 (石浦正寛) |
| Cryptochrome from <i>Synechocystis</i> sp. strain PCC 6803 | 1NP7 | Released | 28-Jan-03 | (1) 機能：cryptochromeは動物では時計タンパク質であり、植物では青色光受容体の一種である。本研究の藍色細菌では機能未知である。 (2) 科学的重要性：バクテリアのphotolyaseと相同なタンパク質であるが、機能は異なっており、cryptochromeの構造決定では世界で初めてである。 (3) タンパク質工学的利点：バクテリア由来のため大腸菌で調製しやすい。 (4) 構造学的新規性：photolyaseと近縁の構造であったが、cryptochrome特有の構造的特徴が見つかった。 (5) 産業移転性：今のところ該当なし | 該当なし。 | 名古屋大学 遺伝子実験施設 (石浦正寛) |
| IP3受容体IP3結合コア | 1N4K | Released | 2002/12/25 | カルシウムシグナリングに関連したIP3受容体のIP3結合に関する構造学的な知見を得た。これによりIP3受容体の機能解明に大きなブレークスルーを与えた。 | | 東京大学医科学研究所 (竹縄忠臣) |
| IP3受容体リガンド結合サブプレッサードメイン | 1XZZ | Released | 2005/1/25 | カルシウムシグナリングに関連したIP3受容体のリガンド結合抑制ドメインの構造解析により、IP3受容体の機能解明に大きなブレークスルーを与えた。 | | 東京大学医科学研究所 (竹縄忠臣) |

| 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 |
|------------------|----------------|----------|-----------|---|----------------------------|---------------------------|
| トコトニク6f複合体 + 阻害剤 | 2D2C | on hold | 9/7/2005 | 光合成膜タンパク質複合体トコトニク6f複合体の新規阻害剤との複合体構造。構造は既報の物と同じであるが、新規結合部位を見つけた。 | 特になし | 東京大学大学院総合文化研究科 (栗栖源嗣) |
| S-Free大腸菌DHFR変異体 | 2D0K (Hold) | on hold | | 全8個の硫黄(2つのメチオニンと6つのシステイン)を抜いた変異体の構造解析例で今後の蛋白質デザインの1つのモデルとなりうる。 | イオウが無いため酸化に強い安定な蛋白質が開発できる。 | 広島大学大学院理学研究科 (片柳克夫) |
| CwlCr | 1X60 | Released | 9-Aug-05 | 枯草菌細胞壁溶解酵素のペプチドグリカン結合ドメイン。ペプチドグリカン認識機構の解明はグラム陽性菌選択的な新たな抗生物質の開発につながる。今回決定した立体構造はSPORファミリーの1つで新規基本構造である。機能解析の結果、ペプチドグリカン認識部位が分子表面全体に広がっていたため、この蛋白質を用いた抗菌剤のデザインは難しいと結論した。 | 特になし | 奈良先端科学技術大学院大学 (児嶋長次郎) |
| NA-CAG-CAG | 1X26 | on hold | | CAGトリプレットリピート配列に特異的に結合する薬剤。トリプレットリピート病は3塩基繰り返し単位でDNAに多数挿入が起こり、繰り返し数が一定数を超えると発症する神経変性疾患である。今回決定したDNAとの複合体の立体構造から、この新規薬剤はC塩基をフリップアウトさせ、A塩基およびG塩基と塩基対を形成する、構造的に全く新しいタイプの薬剤であることが分かった。本立体構造はトリプレットリピート病の診断や病態の解明に役立つことが期待され、その成果の産業移転が大きく期待される。 | 選定中 | 奈良先端科学技術大学院大学 (児嶋長次郎) |
| アクチン | 1WUA | on hold | | (1)細胞骨格形成タンパク質と抗腫瘍性物質 (2)細胞運動を理解するのに重要。侯腫瘍性物質は内抗腫瘍性発現メカニズムの解明のてがかりとなりうる (3)なし (4)抗腫瘍物質側には特異な構造が見出された (5)抗腫瘍物質との複合体なので抗腫瘍創薬の基盤となる | | (財)高輝度光科学研究センター (高田昌樹) |
| Barnase/barstar | 1X1U | Released | 26-Apr-05 | リボヌクレアーゼとその阻害タンパク質の複合体の構造。タンパク質間相互作用解析のモデル系として、多くの変異体の解析がなされており、一連の構造解析を通じたタンパク質間相互作用の定量的な解析を行った。ことに、タンパク質界面付近の水分子を介した相互作用の重要性を明らかにした。 | 特になし | 東京医科歯科大学 (伊藤暢聡) |
| Barnase/barstar | 1X1W | Released | 26-Apr-05 | 同上 | 特になし | 東京医科歯科大学 (伊藤暢聡) |
| Barnase/barstar | 1X1X | Released | 26-Apr-05 | 同上 | 特になし | 東京医科歯科大学 (伊藤暢聡) |
| Barnase/barstar | 1X1Y | Released | 26-Apr-05 | 同上 | 特になし | 東京医科歯科大学 (伊藤暢聡) |