

(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
Gln25-リボヌクレアーゼ T1	1IYY	Released	2003/10/7	リボヌクレアーゼ T1 の分子機能の発現機構が明らかになった。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
L-メチオニン リアーゼ	1UKJ	Released	2004/10/19	抗がん酵素として臨床試験段階から実用化に向けて、立体構造解析に基づいてタンパク質工学的改変を進めている。	塩野義製薬株式会社	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
ピルビン酸カルボキシラーゼのピオチンカルボキシラーゼサブユニット	1ULZ	Released	2004/3/9	ピルビン酸カルボキシラーゼの酵素反応機構が解明できた。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
ウシ臍臓トリプシンインヒビター (2000気圧加圧下)	1OA5	Released	2003/8/28	加圧下での立体構造解析は世界に例のないものであり、これまで知られていない新しいタンパク質構造の学問領域が開拓できた。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
ウシ臍臓トリプシンインヒビター (2000気圧加圧下)	1OA6	Released	2003/8/28	加圧下での立体構造解析は世界に例のないものであり、これまで知られていない新しいタンパク質構造の学問領域が開拓できた。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
ニワトリリゾチーム(2000気圧加圧下)	1GXV	Released	2003/3/27	同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
ニワトリリゾチーム(2000気圧加圧下)	1GXX	Released	2003/3/27	同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
carboxyl transferase subunit of archaeal propionyl-CoA carboxylase (アシル-CoA カルボキシラーゼのカルボキシルトランスフェラーゼ (CT) サブユニット)	1X0U	on hold	2005/3/29	古細菌のピオチン依存カルボキシラーゼとしては初めての立体構造である。カルボキシル転移の仕組みはまだ十分明らかにはなっていないのでその解明が可能になると期待される。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
SshEstI(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> )	1WZJ	on hold	2005/3/6	(1)エステルの酵素的分解ならびに合成に利用可能な耐熱性酵素 (2)触媒トライアドの機能解明に重要な知見を与える (3)同上 (4)構造解析がなされた類似酵素と 40%の配列類似性 (5)エステルの不斉分解ならびに合成の構造的基盤の提供	民間企業	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
Est 1(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> ) H274A mutant at pH 4.2	1WZP	on hold	2005/3/8	同上	同上	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
Est 1(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> ) H274E mutant at pH 7.0	1WZQ	on hold	2005/3/8	同上	同上	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
Est 1(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> ) H274E mutant at pH 4.0	1WZR	on hold	2005/3/6	同上	同上	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
Est 1(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> ) H274E mutant at pH 4.2	1WZS	on hold	2005/3/6	同上	同上	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)

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
Est 1(エステラーゼ、 <i>Sulfolobus shibatae</i> ) H274D mutant at pH4.2	1WZT	on hold	2005/3/6	同上	同上	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D5Y	on hold		試験管内進化を利用して、アスパラギン酸アミノ基転移酵素のバリンに対する触媒活性を100万倍増大させた。その酵素には17アミノ酸残基の変異が導入されていたが、意外なことに、変異アミノ酸残基は直接基質と接触するアミノ酸残基ではなく、その一層外側で、基質結合部位を囲むように分布するアミノ酸残基であった。どの部分が酵素の基質特異性を変化させるのかについて構造機能解析した結果、ごくわずかの変化が数多く蓄積したことによって、このような基質特異性の変化が生じたこと示唆された。		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D61	on hold		同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D63	on hold		同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D64	on hold		同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D65	on hold		同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>E.coli</i> , 変異体)	2D66	on hold		同上		大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
aspartate aminotransferase ( <i>Mesorhizobium spi</i> )	2D5E	on hold		ピリドキサミンのアミノ基転移反応、PLP依存性酵素の分子進化についての手がかりをもたらす。補酵素型ビタミンB6の製造への応用	ファインケミカル 製造産業	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
イソクエン酸脱水素酵素	2D4V	on hold		臨床診断キット、血中アンモニア定量既存品よりも高い感度	オリエンタル酵母	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
グリセロールキナーゼ	2D4W	on hold		臨床診断薬。中性脂肪定量	東洋紡	大阪大学大学院理学研究科 (倉光成紀)
sulerythrin (スルエリスリン)	1J30	Released	2003/10/14	超好熱性古細菌 <i>Sulfolobus tokodaii</i> sp. 7 の細胞質から単離された非ヘム鉄含有蛋白質で、分子量16kのサブユニットからなるホモダイマーでドメインスワップを示す等の構造上の特徴から、新規に sulerythrin と命名した。1個のサブユニットは4本のヘリックスからなり、鉄イオンと亜鉛イオンを1個ずつ結合している。鉄イオンに結合する形で、酸素分子と思われる電子密度が観察された。本タンパクは酸素の貯蔵、運搬に関わっている可能性がある。細胞内で80℃付近での高温で酸素を保持する分子として機能していることが考えられる。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
Nitrile hydratase mutants (ニトリルヒドラーゼ)	1UGP 1UGQ 1UGR 1UGS	Released	2004/6/17	本酵素はアクリロニトリルと水からアクリルアミドを生成する反応を触媒する。活性中心に、システイン誘導体をリガンドとするコバルトを持つ。工業的に非常に重要な酵素である。活性中心に關与する残基の変異体 T109S、Y114T や、コバルトを欠失したアポ酵素では、大幅に活性が低下し、活性中心のシステインが、野生型の修飾構造とは異なっていた。	本酵素は工業的なアクリルアミド生産に利用されている(三井化学)	東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)

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
isocitrate dehydrogenase (イソクエン酸デヒドロゲナーゼ)	1V94	Released	2005/1/25	<i>Aeropyrum pernix</i> 由来の本酵素は TCA 回路において、NADP を補酵素としてイソクエン酸を酸化的に脱炭酸し 2-オキソグルタル酸を生成する反応を触媒する。本酵素は Tm=109.9 を示す。この高度の耐熱性に S-S 結合と分子表面の静電結合ネットワークが寄与していることが構造解析から明らかになった。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
fructose-1,6-bisphosphatase (フルクトース-1,6-ビスホスファターゼ)	1UMG	Released	2004/7/13	超好熱性古細菌で糖新生に関わると考えられる新しいタイプのフルクトース-1,6-ビスホスファターゼの最初の構造解析であり、新規フォールドの蛋白質である。基質フルクトース-1,6-ビスリン酸が水解されること無く鎖状態で結合していた。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
cumene dioxygenase (CumA1A2) (クメンジオキシゲナーゼ)	1WQL	Released	2005/3/29	クメン(イソプロピルベンゼン)分解系の初段で水酸基の導入を行う酵素である。ヘテロダイマー(サブユニットab)が3個集まった6量体を形成しており、aサブユニットには活性中心の鉄イオンと[2Fe-2S]のクラスターがあり、後者から前者に電子の伝達を行うと思われる。ピフェニルをも基質として水酸化出来ることから、PCBのような環境汚染物質の分解除去に応用可能と考えられる。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
lipoamide dehydrogenase (リポアミドデヒドロゲナーゼ)	1V59	Released	2005/2/15	2-オキソ酸デヒドロゲナーゼ複合体(ODH)を構成する3つの成分E1,E2,E3の内の一つ、E3は、リポアミドデヒドロゲナーゼと呼ばれるフラビン酵素であって、ジヒドロリポアミド型のE2酵素とNADから、リポアミド型のE2酵素とNADHを生成する反応を触媒する。これまで既にE3酵素の立体構造は報告済みであったが、今回E3酵素とNADとの複合体の立体構造を初めて解明し、NADとFADとの相互作用について知見が得られた。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
3-Isopropylmalate dehydrogenase (イソプロピルリンゴ酸デヒドロゲナーゼ)	1V53 1V5B	Released	2005/2/15	<i>Bacillus coagulans</i> 由来の本酵素(IPMDH)はロイシン合成系の酵素で、NADを補酵素として3-イソプロピルリンゴ酸を酸化的に脱炭酸し2-オキソイソカプロン酸を生成する反応を触媒する。野生型酵素1V53と耐熱性の増加した変異型酵素1V5Bを比較して、サブユニット界面の4-ヘリックス・バンドルの疎水性の増加が耐熱化の機構と考えられる。IPMDHは蛋白質の耐熱化のモデル酵素として研究が進んでおり、その立体構造解析は、安定性の原子レベルでの解明に寄与する。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
2-keto-3-deoxygluconate kinase (ST2478)	1WYE	on hold		<i>Sulfolobus</i> 菌特有の糖代謝であるエントナー・ドウドロフ経路において、2-ケト-3-デオキシグルコン酸をリン酸化して2-ケト-3-デオキシ-6-ホスホグルコン酸を生ずる反応を触媒する。この酵素は、キナーゼファミリーではK <sup>+</sup> イオンの結合構造としては新規フォールドの蛋白質である。基質結合部位の立体構造や活性部位近傍における1価イオンの結合様式が構造解析から明らかになった。		東京大学大学院農学生命科学研究科 (若木高善)
	2D2T	on hold				
Chitosanase, Active form (pH 6.4) (キトサナーゼ)	1V5D	Released	2004/12/7	カニ、エビ、昆虫等の甲殻を構成するキチンから得られるキトサン(アミノ糖)は人工皮膚やダイエット食品など種々の利用が期待されており、その製造過程で重要な酵素であるキトサナーゼの改良はキトサン工業の発展を促す。 <i>Bacillus</i> sp. K17株が産生するキトサナーゼは基質特異性が高く、利用価値も高い。このキトサナーゼの立体構造を高分解能でX線解析することによって、基質特異性と反応機構が明らかになった。他の糖加水分解酵素との構造比較から構造王国論という新しい進化概念を導き、それによってタンパク質の分子進化と生物進化の関係を明らかにすることができた。	未定	東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)
Chitosanase, Inactive form (pH 3.7) (キトサナーゼ)	1V5C	Released	2004/12/7	同上 本酵素の不活性状態の構造が明らかになった。	未定	東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)
Pyruvate oxidase with FAD, TPP, pyruvate (ピルビン酸酸化酵素)	1V5E	on hold		グルコース由来のピルビン酸をエネルギーに変換する重要なタンパク質であり、ピルビン酸、GOTやGPTを定量する健康診断に不可欠のタンパク質である。また、河川水中のリン酸計測用のバイオセンサーとしても注目を浴びている。本研究では、 <i>Aerococcus viridans</i> 由来のピルビン酸酸化酵素について、その反応機構を明らかにした。		東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)

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
Pyruvate oxidase with FAD, TPP (ピルビン酸酸化酵素)	1V5F	on hold		同上 TPPの結合状態が明らかになった。		東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Pyruvate oxidase with FAD, TPP and pyruvate (ピルビン酸酸化酵素)	1V5G	on hold		同上 ピルビン酸がTPPと反応し、酸化型アセチルTPPとなって本酵素に結合し、リン酸の接近を待機 している構造が明らかになった。この構造はまさに反応機構の中間体を表しており、本酵素の反 応機構を解明した大きな成果である。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Uricase with Na-borate (尿酸酸化酵素)	1VAX	on hold		尿酸酸化酵素は尿酸の診断薬としてだけでなく、この酵素の遺伝子をもたない人類にとって通風の 治療薬としても非常に重要なタンパク質である。真基質である尿酸が結合した状態の立体構造 が明らかにした。本酵素をより効率の良いタンパク質に改変するための貴重な基盤となる	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Uricase with an inhibitor, 8-azaxanthine (尿酸酸化酵素)	1VAY	on hold		同上	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Uricase with the substrate, uric acid (尿酸酸化酵素)	1WRX	on hold		同上 真の基質である尿素が結合した状態の構造を明らかにし、尿素が2価イオンの状態で結合するこ とを見出した。この結果は、本酵素の反応機構を決定する重要な成果である。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Uricase with the product, allantoin (尿酸酸化酵素)	2D67	on hold		同上 生成物であると言われているアラントインと本酵素との複合体のX線解析から、アラントインが さらに反応してアラントイン酸に変化することを見出した。この結果は、本酵素の反応機構を決 定する重要な成果である。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
Aspartyl-tRNA synthetase (アスパルチル tRNA 合成酵素)	1WYD	on hold		ある種の生物ではタンパク質合成系においてアスパラギンに対するアミノアシル tRNA 合成酵素 の遺伝子が欠落している。そのなぞを解くために、tRNA <sup>Asn</sup> とtRNA <sup>Asp</sup> の2種類を区別しない本 酵素 Asp-RS のX線解析に成功した。その結果、2種類の tRNA の異なるアンチコドンを両方とも 認識する仕組みが明らかになった。これを改良することによって、天然には存在しないアミノ酸 をタンパク質に導入することが可能になり、タンパク質の応用範囲が広がる。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
マメグンバイナズナ水溶性クロロフィ ルタンパク質	1WYA	on hold		植物から単離した水溶性のクロロフィル結合タンパク質は全く初めての構造例であり、植物の光 合成システムの解明に貢献する。また、このタンパク質はクロロフィルにマグネシウムイオンを 供給する機能を持っていると考えられ、 <i>in vitro</i> 光合成を調節する制御技術に応用が期待され る。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
O6-メチルグアニンメチル基転移酵素	1WRJ	on hold		本酵素の解析により、DNA のメチル化機構が明らかになる。一方、ガンや突然変異の原因とな り得るメチル化 DNA の修復機構が解明され、それを標的とする治療薬の開発に役立つ。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)
5'-デオキシ-5'-メチルチオアデノシン加 リン酸分解酵素	1WTA	on hold		細胞の成長や分化に必要なポリアミン合成経路上に存在する酵素で、その生物学的機能と反応機 構が明らかになる。また、悪性腫瘍細胞が本酵素の欠損に起因するので、その治療診断薬等の開 発に構造的基盤を与えるものである。	未定	東京工業大学大学院生命理工学 研究科 (竹中章郎)

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
Threonyl-tRNA synthetase	2D5S	on hold		ある種の生物ではタンパク質合成系においてトレオニンに対するアミノアシル tRNA 合成酵素が2種類 (Thr-RS1 とThr-RS2) 存在している。そのなぞを解くために、Thr-RS1のX線解析に成功した。その結果、Thr-RS1ではアミノアシル化後に機能する校正ドメインが残っていて、Thr-RS2では欠落していることが明らかになった。この結果は、生物進化を解明する上で極めて重要な成果である。	未定	東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)
グリシン開裂系Hタンパク質	2EX7	on hold		これまでに解析されたHタンパク質の中で最も分解能が高い。他のHタンパク質に比べN末が長く、2本のストランドからなるシートが存在している。	未定	東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)
pyrroline-5-carboxylate reductase (ST0646)	2D7A	on hold		論文作成中	未定	東京工業大学大学院生命理工学研究科 (竹中章郎)
<i>Aspergillus oryzae</i> aspartic proteinase	1IZD 1IZE	Released	2003/3/4	黄麹菌は、発酵産業において、よく使用される菌である。本酵素のX線結晶解析により、黄麹菌酵素特有の基質特異性について新たな知見を得た。		香川大学(神鳥成弘)
<i>Sulfolobus tokodaii</i> cytochrome P450	1UE8	Released	2004/7/13	シトクロムP450は、幅広い分野で興味を持たれている酵素である。好熱好酸性古細菌由来の本酵素は、85℃の熱にも安定に機能することから、工学的な実用化の期待が持たれる。本酵素の3次元構造は、実用化に向けた基礎データとして大変有用なものである。		香川大学(神鳥成弘)
<i>Sporobolomyces salmonicolor</i> aldehyde reductase 2	1UJM	Released	2004/10/12	本酵素は、立体選択的に(S)体を、ほぼ100%生成することから、化学工業における不斉合成触媒としての実用化の可能性がある。本酵素の3次元構造は、実用化に向けた基礎データとして大変有用なものである。		香川大学(神鳥成弘)
	1Y1P	Released	2005/9/6			
<i>Arthrobacter globiformis</i> glucodextranase	1UG9	Released	2003/12/9	グルコデキストラナーゼは、デキストランの非還元末端からエキソ型に作用して、-D-グルコースを遊離する酵素である。デンプンおよび関連するデキストランなどの多糖を分解する酵素は、食品産業において種々の糖を製造するのに必須であり、本酵素はシクロデキストランの生産など産業への応用が期待される。		香川大学(神鳥成弘)
	1ULV	Released	2003/12/9			
<i>Aspergillus niger</i> ATCC9642 isoplullanase	1WMR	on hold		イソプルラーナーゼ (IPU) は、多糖プルランの -1,4-グルコシド結合を分解し、三糖イソパノースを生成する酵素である。多糖プルランを分解する酵素は極めて限られており、本酵素は、プルランを原料としたオリゴ糖生産への応用が期待される。		香川大学(神鳥成弘)
Iba1	1WY9 (マウス) 2D58 (ヒト)	on hold		脳内免疫細胞であるミクログリアに大量に発現するタンパク質 Iba1 はミクログリア活性化に関与している。本解析により、Ca <sup>2+</sup> 依存的に Iba1 が構造変化を起こすことがわかり、Iba1 の構造機能相関について新たな知見を得た。最近、活性化したミクログリアが効率よく アミロイド凝集体を取り除くことがヒトの脳で証明され、ミクログリアの活性化制御によるアルツハイマー病等のコンホメーション病治療・予防薬開発の可能性が示唆されている。		香川大学(神鳥成弘)
バクテリオロドプシン・基底状態 (H. salinarum)	1IW6	Released	2002.4.22	生体イオンポンプの作動機構の解明。膜融合法という新しい結晶化法を開発し、脂質環境を保持した3次元結晶を作成するのに成功した。	高効率光エネルギー変換分子の設計	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)

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
バクテリオロドプシン・K中間体	1IXF	Released	2002.6.20	生体イオンポンプの作動機構の解明。光励起直後に現れるK中間体においてレチナール色素のポリエン鎖が大きく揺れることを見出した。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
バクテリオロドプシン・L中間体	1UCQ	Released	2003.4.17	生体イオンポンプの作動機構の解明。プロトン輸送サイクルの間に水分子が能動輸送されることを明らかにした。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
バクテリオロドプシン・M中間体	1IW9	Released	2002.4.25	生体イオンポンプの作動機構の解明。M中間体の形成にともない、7番目の膜貫通ヘリックスの細胞外方向にスライドし、プロトン放出チャンネルの水素結合網の大きな変化を誘発することを明らかにした。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
バクテリオロドプシン・酸性型	1XOI	Released	2005.05.23	生体イオンポンプの作動機構の解明。広範囲のpH環境での構造変化を調べ、プロトン濃度の変化が及ぼすプロトンの輸送機構への寄与を明らかにした。酸性転移に伴い、活性部位の水が排除され、シッフ塩基の対イオンのプロトン化を促すこと、タンパク質の吸収波長制御に寄与することを示した。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
バクテリオロドプシン・アルカリ型	1XOK	Released	2005.05.23	生体イオンポンプの作動機構の解明。pH10あたりで、プロトン放出基の脱プロトン化が起こり、プロトン放出チャンネルの構造変化が生じることを明らかにした。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
バクテリオロドプシン・暗順応状態	1XOS	Released	2005.05.28	生体イオンポンプの作動機構の解明。レチナール結合部位において硬さの異なるアミノ酸側鎖の分布していることがレチナールの特異的部位における異性化のタンパク質の吸収波長制御に寄与することを示した。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
アーキロドプシン-1 ( <i>Halorubrum</i> sp. aus-1)	1UAZ	Released	2003.3.26	生体イオンポンプの作動機構の解明。bR 類似タンパク質であり、構造比較によりレチナール異性化反応に及ぼすレチナール近傍の空隙の影響を明らかにした。	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
アーキロドプシン-2 ( <i>Halorubrum</i> sp. aus-2)	1VGO	Released	2004.4.28	生体イオンポンプの作動機構の解明。3種類のプロトンポンプ ( bR、aR-1、aR-2 ) の構造比較から、プロトン取り込みチャンネルの構造が正確に保存されていることを見出し、	同上	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
光捕集クロロフィルa/b蛋白質複合体-II	1VCR	Released	2004.4.28	エンドウ葉緑体チラコイド膜より精製した光捕集クロロフィル a/b タンパク質複合体の結晶を作成し、その結晶が非常に安定な球殻構造体から構成されることを示した。	膜蛋白質の結晶化技術の開発	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
クエン酸合成酵素 I ( <i>Sulfolobus tokodaii</i> )	1VGM	Released	2004.4.27	エネルギー代謝の主要経路、クエン酸回路の最初のステップを触媒する酵素である。ひとつの好熱菌が有する2つのアイソザイムの立体構造を決定し、このタンパク質が獲得した耐熱化機構を提案した。	耐熱性蛋白質の設計	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
クエン酸合成酵素II ( <i>Sulfolobus tokodaii</i> )	1VGP	Released	2004.4.28	同上	耐熱性蛋白質の設計	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
v8 プロテアーゼ ( ブドウ球菌 )	1WCZ	Released	2004.5.10	ブドウ球菌は食中毒や化膿性疾患、敗血症の原因菌として知られ、さまざまな感染症を引き起こす。その分泌タンパク質である V8 プロテアーゼの構造を決定した。	創薬	名古屋大学大学院理学研究科 (神山勉)
Catalytic Domain of <i>N</i> -Acetylmuramoyl-L-Alanine Amidase	1JWQ	Released	2003/11/18	アミダーゼは細菌の細胞壁を溶解する酵素である。新規な構造からの活性メカニズムの解明は感染症を引き起こす細菌をターゲットとする創薬につながる。		名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)

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
Family 30 Carbohydrate Binding Module	1WMX	Released	2004/8/3	セルロースは生物資源として重要であるが、セルラーゼの効率が非常に悪いため有効利用されていない。セルロースを効率よく加水分解するために特異性の異なる酵素が集中したセルロソームの中で、新規な糖質認識・結合部位の構造を決定し、糖質認識機構を解明した。セルラーゼの融合タンパク質などを生産することにより、効率的なセルロース分解系を作成できる。		名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)
Family 30 Carbohydrate Binding Module	1WZX	Released	2005/3/22	基質との相互作用の解明を目指して構造を決めたが、基質は含まれていなかった。異なる結晶系の構造から、構造のダイナミクスが解明できた。		名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)
Ubiquitin-Conjugating Enzyme Ubch8	1WZW	Released	2005/3/22	タンパク質分解酵素の関与する様々な疾病の原因解明が新しい創薬につながる。ユビキチン-プロテアソーム(UP)代謝系では、E1で活性化されたユビキチンがE2を経由してE3に伝達されると、E3は分解すべき標的蛋白質を正確に識別し、補足することで標的基質にユビキチンを受け渡す反応を触媒する。ヒトのE2であるUbch8の構造から、E3によるE2の選択機構を解明することが可能となる。		名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)
Ubiquitin-Conjugating Enzyme Ubch8	1WZV	Released	2005/3/22	別の結晶形のE2であるUbch8の構造からE2の機能がより詳細に解明できた。		名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)
Alkaline Mannanase from Bacillus Sp. Strain Jamb-602	1WKY	Released	2005/6/15	アルカリ側に至適 pH をもつアルカリマンナーゼが発見された。これまでに、アルカリマンナーゼの立体構造の報告はなく、マンナーゼにおける好アルカリ性要因を探る手がかりが期待される。アルカリマンナーゼの構造中に、未知のCBM様の構造が存在していた。	洗剤に配合する特許は既に報告されている。生理活性、生分解性プラスチックの生分解促進剤、石油回収補助剤等の可能性がある。	名古屋大学大学院工学研究科 (山根隆)
セリンラセマーゼ	1WTC	on hold		<i>Schizosaccharomyces pombe</i> 由来の酵素で、ピリドキサルリン酸を補酵素としてセリンのラセミ化反応を触媒する。哺乳類のホモログは、統合失調症とも関連のある脳内のD-セリン濃度の調節に関与している。基質であるセリンによって活性中心の修飾反応が起こり、新規な構造であるリジノアラニン残基が生成する。		京都大学化学研究所 (江崎信芳) 大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
	1V71	Released	2005/6/14			
2-ハロアクリル酸レダクターゼ	1WLY	Released	2005/10/4	<i>Burkholderia</i> sp. WS 株由来の酵素であり、2-ハロアクリル酸の不斉還元反応を触媒し、除草剤の原料として産業的に需要の高い2-クロロプロピオン酸を生成する反応を触媒する。2-クロロプロピオン酸の生産系の構築に応用している。	昭和電工	京都大学化学研究所 (江崎信芳) 大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
アスパラギン酸アミノ基転移酵素	1IX6 1IX7 1IX8	Released	2002/7/3	ビタミン B6 酵素の研究において中心的な位置を占める酵素である。立体構造と速度論的データをもちいて、基質結合時の大きな構造変化による活性部位の歪が、反応の活性化エネルギーを低下させることを明らかにした。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
大腸菌分岐鎖アミノ酸アミノ基転移酵素	1IYD 1IYE	Released	2003/5/6	本酵素は分岐鎖アミノ酸の生合成の鍵酵素であり、性質の異なる2種類のアミノ酸(分岐鎖アミノ酸と酸性アミノ酸であるグルタミン酸)を基質とする点が特徴である。酵素機能に必須の基質二重認識機構を立体構造に基づいて明らかにした。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)

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
中鎖アシル-CoA脱水素酵素	1UDY	Released	2003/12/9	フラビン酵素(ビタミン B2)で、脂肪酸のβ酸化経路の第一段階を触媒する酵素である。遷移状態アナログのX線構造解析を行い、基質からフラビンへの電子移動に関する知見を得た。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
フェニルセリンアルドラーゼ	1V72	Released	2005/3/1	ビタミン B6 酵素で、β-ヒドロキシ-β-アミノ酸である 3-フェニル-L-セリンをベンジルアルデヒドとグリシンから可逆的に生成する。β-ヒドロキシ-β-アミノ酸は広範囲の抗生物質(サイクロスポリン、バンコマイシンなど)の構成要素である。フェニルセリンの逆アルドール開裂反応を立体特異的に触媒するので、変異型酵素を作成して、薬剤の前駆体を合成することができる。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
大腸菌トレオニン合成酵素	1VB3	Released	2005/6/21	極めて複雑な立体特異的の反応を触媒し、トレオニンを合成する。反応機構を明らかにし、生成物触媒機構を提案した。トレオニンの生合成は菌類、細菌類、植物に限って存在する系路であるため、新規抗生物質、除草剤の開発や栄養性の高い植物品種への改良など、産業への応用が期待される。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
フルオロ酢酸デハロゲナーゼ	1Y37	on hold		フルオロ酢酸デハロゲナーゼはフルオロ酢酸の加水分解的脱フッ素反応を触媒し、グリコール酸を生成する。本酵素は脂肪族有機フッ素化合物の強固な炭素-フッ素結合の開裂を触媒する唯一の既知酵素である。この酵素の立体構造を決定し、活性部位の構造を明らかにした。全体構造はハロアルカンデハロゲナーゼと類似するが、活性中心がより疎水的環境になっている点が新規である。	本酵素による化学的に極めて安定な炭素-フッ素結合の開裂機構の解明は、フロン類の酵素的分解システムの開発などに繋がる可能性があり、環境汚染物質の浄化への応用が期待される。	大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建) 京都大学化学研究所 (江崎信芳)



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
1-ピペリدين-2-カルボン酸還元酵素	1WTJ	Released	2005/10/4	1-リジンと 1-プロリンの資化に関与する酵素で、それぞれ、-ピペコリン酸、-プロリンを生成する反応を触媒する。-ケト酸とメチルアミンからN-メチル-L-アミノ酸を生成する反応も触媒する。ネイティブ酵素、NADPH複合体、NADPH+基質アナログ複合体の立体構造を決定し、誘導適合、反応機構を解明した。	産業的に有用な光学活性ピペコリン酸や N-メチルアミノ酸の生産に利用できる。L-ピペコリン酸と N-メチル-L-アミノ酸はポリケチドと生理活性ペプチドの構成成分であり、医薬品や農業の中間原料として重要な用途があり、三菱化学にて工業的生産系を構築中である。	大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建) 京都大学化学研究所 (江崎信芳)
	2CWF 2CWH	Released	2005/10/4			
ヒトサイトゾル分岐鎖アミノ酸アミノ基転移酵素	2COI 2COJ 2COG	Released	2005/8/30	ヒトサイトゾル分岐鎖アミノ酸アミノ基転移酵素 (hBCATc) は中枢神経系に偏在し、神経伝達物質グルタミン酸を生成している。したがって、hBCATc の阻害は脳内のグルタミン酸の合成を抑制するので、本蛋白は薬剤開発のターゲット酵素である。hBCATc と抗癌薬ガバペンチン複合体の構造を決め、なぜ本酵素がガバペンチンに阻害され、ミトコンドリア酵素が阻害されないかを解明した。	最近になって、アメリカのファイザーで本酵素をターゲットとする神経性変性疾患の治療薬開発の研究が進められていることがわかった。	大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
大腸菌アスパラギン酸アミノ基転移酵素	1X28 1X2A 1X29	Released	2005/6/14	本酵素と基質アスパラギン酸の相互作用については膨大な研究があり、よく理解されている。しかし C5 基質との相互作用はほとんど知られていない。そこで本酵素とグルタミン酸の複合体モデルの立体構造を決定し、相互作用の詳細を調べ、C4 基質との違いを解明した。		大阪市立大学大学院理学研究科 (広津建)
ホスホセリンスルフヒドリル化酵素	1WKV	Released	2005/6/28	新規な酵素 (国際生化学連合から EC 番号 EC2.5.1.65 付与) の最初の構造解析であり、新規な基質特異性の構造的基礎が分かる。同時にシステイン合成能をもつ酵素の中で最高の耐熱性とシステイン合成速度を有しており、産業応用の基盤を与える。	株式会社耐熱性酵素研究所	産業技術総合研究所 (安宅光雄)
チオレドキシシンペルオキシダーゼ	1X0R	on hold		有毒な過酸化水素を処理できる本酵素の内これまでで最高の耐熱性を有しており、それ自身で過酸化水素を無毒の水に分解できる他、本構造を利用すれば遺伝子工学適用ができる。チオレドキシシンペルオキシダーゼとしては新規な arm domain を有することが分かり、多くの生物がもつチオレドキシシンペルオキシダーゼの進化、多量体形成機構、過酸化水素処理機構を考える上で貴重な構造情報を提供する。	未定	産業技術総合研究所 (安宅光雄)
キチナーゼ	2CWR (X-ray)	on hold		バイオマスとして 2 番目に多く存在するキチンを分解する耐熱性キチナーゼの活性に必須のキチン吸着ドメインの構造を溶液状態と結晶状態の二つの構造を明らかにし、静的、動的情報を明らかにした。本ドメインは ーシートのみからなり、3 つの芳香環が一列に並んだ特長的な構造をしていた。これらの構造情報を元に蛋白質工学を行いセルロースに強い親和性を持つ耐熱性セルロース吸着ドメインを創出した。セルロースとキチンは地球上のバイオマスのほぼ全てを占めているため両方のバイオマスを利用するための基盤を与える点で意義深い。	未定	産業技術総合研究所 (安宅光雄)
	2CZN (NMR)	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
ADP-グルコキナーゼ	1L2L	Released	2002/12/30	(1)ADPをリン酸基供与対としてAMPを生成する。 (2)糖尿病マーカー、アンヒドログルシトールの定量 (3)基質特異性の改良 (4)リボキナーゼと類似 (5)診断薬酵素として製品化されている。	旭化成で製品化済み	徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
Co-homing endonuclease I-Tsp 061I	1VAW	on hold		(1)16 bpの特定のDNA配列を認識・切断するレアカッター酵素 (2)メガクローニングやゲノムマッピング等、ゲノム工学技術のツールとして有用 (3)構造データは、今後その認識配列を自由に改変して人工レアカッター酵素の分子設計を行うために重要。		徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
グルタミン酸脱水素酵素	1V9L	Released	2004/12/14	(1)NADを補酵素として、L-グルタミン酸の2-オキソグルタル酸への可逆的な脱アミノ反応を触媒する。 (2)超好熱菌の酵素で、酵素の構造と機能相関の解明に有用性の高い酵素 (3)新しい基質特異性を持つ高度耐熱性アミノ酸脱水素酵素の創成 (4)タンパク質の熱成熟化メカニズムの解明、新規熱安定化メカニズムの解明 (5)食品分析用バイオセンサーとして実用化されている。	(株)中野酢店で製品化済み	徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
デオキシリボースアルドラーゼ	1N7K	Released	2003/3/25	(1)可逆的にアルドール縮合反応を触媒する。 (2)医薬中間体キラル化合物の合成 (3)基質特異性の改良 (4)耐熱性に関与するユニークなオリゴマー構造 (5)宇部興産が実用化を進めている。	・宇部興産 ・プレジジョンシステムサイエンス	徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
アルドラーゼ	1VCV	Released	2005/8/2	(1)可逆的にアルドール縮合反応を触媒する。 (2)医薬中間体キラル化合物の合成 (3)基質特異性の改良 (5)三井化学が実用化を進めている。	・三井化学 ・プレジジョンシステムサイエンス	徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
機能未知タンパク質	1WY6	Released	2004/4/6	(1)不明 (2)構造からの機能同定の可能性 (3)タンパク質の新規構造の解析		徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
色素依存性L-プロリン脱水素酵素	1Y56	Released	2005/7/26	(1)FAD依存的にプロリンの酸化反応を触媒する。 (2)バイオセンサー素子として利用可能 (3)基質特異性の改良 (4)新規ヘテロテトラマー構造 (5)ダイキン工業がレジオネラ菌遺伝子センサーの実用化を進めている。	・ダイキン工業 ・プレジジョンシステムサイエンス	徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
キノリン酸シンターゼ	1WZU	Released	2005/6/7	(1)NAD生合成系の2段階目を触媒する。 (2)NAD生合成系で構造決定されていなかった最後の酵素酵素 (3)反応阻害剤の合成 (4)新規擬似3回対称構造 (5)新規抗菌剤開発のターゲット		徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
リンゴ酸脱水素酵素	2D4A	on hold		(1)NADを補酵素として、リンゴ酸のオキサロ酢酸への可逆的脱水素反応を触媒する。 (2)従来の酵素とは異なるテトラマー構造 (3)耐熱化メカニズムの解明 (4)新規テトラマー構造 (5)肝機能診断用酵素GOTの活性測定に利用		徳島大学 (大島敏久) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)

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
ウリカーゼ	1J2G	Released	2004/6/15	ウリカーゼの安定性・触媒能に関わる構造的基盤	企業2社	福井県立大学 (日比隆雄)
-グルタミルシステイン合成酵素 ( GCS )	1V4G	Released	2005/2/1	本酵素の立体構造を世界で初めて決定した。	未定	福井県立大学 (日比隆雄)
GCS	1VA6	Released	2005/3/8	本酵素の活性調節機構が明らかにされ、生体内ストレス応答へのグルタチオンの生理的役割の解明及び、抗寄生原虫剤・抗ガン剤の開発への応用が期待される。	未定	福井県立大学 (日比隆雄)
GCS	2D32	on hold		同上	未定	福井県立大学 (日比隆雄)
GCS	2D33	on hold		同上	未定	福井県立大学 (日比隆雄)
MexA	1VF7	Released	2004/5/25	抗生物質排出蛋白であるので病原菌の薬剤耐性に関与する。MexAの構造はこれまで知られていない新規のものであった。また膜融合蛋白としては世界初の構造決定であった。抗生物質排出ポンプ阻害剤の開発に寄与する。	膜透過剤、膜透過阻 止剤の開発(抗生物質等)、特異細胞への膜輸送(抗がん剤等)	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二)
OprM	1WP1	Released	2004/11/2	抗生物質排出蛋白であるので病原菌の薬剤耐性に関与する。薬剤排出専用外膜蛋白としては初めての構造解析	膜透過剤、膜透過阻 止剤の開発(抗生物質等)、特異細胞への膜輸送(抗がん剤等)	岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二)
glycerol dehydratase-cyanocobalamin complex (グリセロールデヒドラターゼ)	1IWP	Released	2002/10/2	<i>Klebsiella pneumoniae</i> 由来の本タンパク質はグリセロールの嫌氣的代謝において、グリセロールから -ヒドロキシプロピオンアルデヒドへの脱水反応を触媒する。本酵素は代表的なビタミンB12 補酵素関与酵素の1つで、この構造は本酵素で解かれた初めての解析結果である。類似酵素ジオールデヒドラターゼとの構造比較により、両酵素の共通点、相違点の分子的基盤が解明された。合成繊維原料の酵素法による生産に重要な酵素である。		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二)
diol dehydratase-reactivating factor complexed with ADP and Mg <sup>2+</sup> (ジオールデヒドラターゼ再活性化因子)	2D0O	on hold		<i>Klebsiella pneumoniae</i> 由来の本タンパク質はグリセロールによって機構依存的に不活性化されたジオールデヒドラターゼのホロ酵素を再活性化する。本構造はADP結合型で解析されたB12酵素再活性化因子の初めての構造解析結果であり、2D0Pとの構造比較により、再活性化因子によるB12酵素の再活性化の分子機構が初めて解明された。合成繊維原料の酵素法による生産に重要なタンパク質である。		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二)
diol dehydratase-reactivating factor complexed with ADP and Mg <sup>2+</sup> (ジオールデヒドラターゼ再活性化因子)	2D0P	on hold		同上 タンパク質のヌクレオチド非結合型の構造解析結果である。		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二)
Iota-Toxin	1GIQ	Released	2003/1/14	(1)アクチンをADPリボシル化する毒素 (2)毒素分子機構の理解 (4)ADPリボシル化毒素の基本構造と反応の共通性 (5)ガス壊疽菌(ウェルシュ菌)抗感染症薬開発		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 (小熊恵二) 徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)

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
Iota-Toxin	1GIR	Released	2003/1/14	(1)アクチンを ADP リボシル化する毒素 (2)毒素分子機構の理解 (4)ADP リボシル化毒素の基本構造と反応の共通性 (5)ガス壊疽菌(ウェルシュ菌)抗感染症薬開発		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 小熊恵二 ) 徳島文理大学健康科学研究所 ( 津下英明 )
Sphingomyelinase ( スフィンゴミエリナーゼ )	1WUX	on hold		(1)スフィンゴミエリンをセラミドに代謝 (2)生理活性脂質であるスフィンゴシン1リン酸を作る初発酵素 (4)DNase と構造相同性 (5)ヒトスフィンゴミエリナーゼ特異的阻害剤開発		岡山大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 小熊恵二 ) 徳島文理大学健康科学研究所 ( 津下英明 )
Phospholipase A <sub>2</sub> from <i>S. violaceoruber</i>	1LWB	Released	2002/5/31	放線菌由来のホスホリパーゼ A <sub>2</sub> の構造を原子分解能で求め、内部振動を解析した。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
Bleomycin-binding protein (BLMT) from transposon Tn5	1MH6	Released	2003/2/19	BLMT の溶液構造を NMR の手法を用いて求めた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
BLMT complexed with Co(III)-bound bleomycin	1NIQ	Released	2003/12/25	BLMT と活性型プレオマイシナンalogである Co(III) 結合型プレオマイシンの結合様式を明らかにした。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
Alanine racemase (ALR) from <i>S. lavendulae</i>	1VFH	Released	2004/9/14	通常の細菌の ALR は、抗生物質 D-サイクロセリン (DCS) によってその酵素活性が阻害されるが、DCS 生産菌由来の本 ALR は DCS による阻害度が低い。構造解析の結果、本 ALR の基質結合部位は、DCS 感受性菌由来の ALR よりも大きくなっていることがわかった。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
DCS-bound form of <i>S. lavendulae</i> ALR	1VFS	Released	2004/9/14	DCS 感受性菌由来の ALR に結合した DCS の構造に比べて、本 ALR に結合した DCS の構造には不均一性が認められた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
L-cycloserine (LCS)-bound form of <i>S. lavendulae</i> ALR	1VFT	Released	2004/9/14	本 ALR に結合した LCS の構造には不均一性および不安定性が認められた。この結果は、DCS 感受性菌由来の ALR にはある程度 LCS が結合できるという結果と対照的であった。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
Cu(II)-free tyrosinase complexed with caddie protein in <i>P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2</i>	1WXC	on hold		チロシナーゼの構造をキャディータンパク質との複合体としてもとめることができた。本構造はチロシナーゼとしては世界ではじめての報告であり、メラニン合成阻害剤のドラッグデザインに役立つと考えられる。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
Cu(II)-free tyrosinase complexed with caddie protein in <i>P2<sub>1</sub></i>	1WX5	on hold		異なる空間群の結晶中でも、上記の複合体の構造を得ることができた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )
Cu(II)-bound met-form tyrosinase complexed with caddie protein	1WX3	on hold		複合体の結晶に銅イオンをソーキングすると、チロシナーゼの活性中心に2つの銅イオンが取り込まれた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 ( 杉山政則 )

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
Cu(II)-bound oxy-form tyrosinase complexed with caddie protein obtained by the addition of DTT	1WX4	on hold		銅イオンを取り込ませた後、DTT で処理すると活性中心に過酸化水素イオンが取り込まれていた。DTT 処理で生じるデオキシ型は非常に酸素との親和性が高いと考えられる。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Cu(II)-bound oxy-form tyrosinase complexed with caddie protein obtained by the addition of H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1WX2	on hold		銅イオンを取り込ませた後、H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> で処理すると活性中心に過酸化水素イオンが取り込まれていた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Cu(II)-bound met-form II tyrosinase complexed with caddie protein	2AHK	on hold		チロシナーゼとキャディータンパク質との複合体に長期間銅イオンをソーキングすると、1WX3 とは異なる活性部位の構造が得られた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Cu(I)-bound deoxy-form tyrosinase complexed with caddie protein obtained by the addition of NH <sub>2</sub> OH	2AHL	on hold		銅イオンを取り込ませた後、NH <sub>2</sub> OH で処理すると活性中心の銅が一価に還元されたデオキシ型の構造が得られた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Mitomycin C-binding protein complexed with metal-free bleomycin	2A4X	on hold		マイトマイシン C 結合タンパク質 (MRDP) はブレオマイシンとも結合できることを見出し、その結合様式を結晶構造解析によってもとめた。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Mitomycin C-binding protein complexed with Cu(II)-bound bleomycin	2A4W	on hold		銅結合型ブレオマイシンの方が、MRDPとより強く結合する。このことを結晶構造解析によって証明した。		広島大学大学院医歯薬学総合研究科 (杉山政則)
Alginate lyase	1J1T	Released	2004/2/3	新規構造ファミリー 褐藻の細胞壁と細胞間に充填物質として存在する多糖アルギン酸を分解する、エンド型の 脱離分解酵素。アルギン酸を分解することにより機能性オリゴ糖が得られる。		佐賀大学 (渡邊啓一)
Pokweed Antiviral Protein (PAP-S1)	1J1Q 1J1R 1J1S	Released	2004-02-03			佐賀大学 (渡邊啓一)
Ricin A-chain	1J1M	Released	2004/2/3			佐賀大学 (渡邊啓一)
L-Lactate dehydrogenase	1V6A	Released	2005/2/15			佐賀大学 (渡邊啓一)

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
Subtilisin-like protease Apa1	1V6C	Released	2004/12/28	新規構造ファミリー (1)南極産好冷細菌が生産する新規サチライシン様低温アルカリプロテアーゼである。 (2)本酵素はサチライシン様の触媒領域とアミノ酸148残基からなる挿入領域を有する。挿入領域のゆらぎが水素結合ネットワークを介して基質結合に関与するループのコンフォメーションに影響している可能性が得られた。この結果は、活性部位と離れた位置にある構造のゆらぎが低温での高い触媒活性に関与している可能性を示唆しており、酵素の構造ゆらぎと触媒活性の関係を理解する上で、極めて重要である。 (3)低温で活性の高いプロテアーゼが、洗剤添加酵素や様々な食品の加工に望まれている。本酵素の構造から得られた知見は、既存の中温酵素の低温活性を上昇させるための新たなタンパク質工学的な戦略につながる。 (4)アミノ酸148残基からなる挿入領域は、新規に構造が決定されたタンパク質ファミリーである。洗剤添加酵素や様々な食品の加工に本低温酵素を直接用いることも期待されるが、本酵素の構造から得られた知見を既存の中温酵素のタンパク質工学的改良法に応用することも可能である。		佐賀大学 (渡邊啓一)
	1WVM	on hold				
ホルムアルデヒドデヒドロゲナーゼ	1KOL	Released	2002/12/11	ホルマリンの測定に用いる。	酵素試薬として東洋紡から販売。	長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
クレアチナーゼ	1J2U	Released	2004/1/27	クレアチンをクレアチンに加水分解する酵素である。アミノ酸配列のホモロジー検索で新規性があり。MATRAS 解析から本酵素の構造は非常に新規(7%)の高いものと判断された。	我々が見出した本酵素は腎機能診断酵素キットとして東洋紡で生産、小野薬品で販売され広く臨床の場で用いられている。	長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
Mn 活性化クレアチナーゼ	1J2T	Released	2004/1/27	酵素の Zn を Mn に置換することによって安定化される機構が X 線結晶解析によって明らかになった。	診断酵素試薬としての利用に重要なことで、東洋紡とから特許を申請中である。	長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
基質との複合体クレアチナーゼ	1V7Z	Released	2004/1/27	診断酵素試薬の特異性を X 線結晶解析により明らかにすることができた。	部位特異的変異法により親和性(Km)の改変を東洋紡との共同研究で行なっている。	長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
プロリルアミノペプチダーゼ + Pro-TBODA 複合体	1WM1	Released	2007/7/20	日和見感染セラチア菌のプロリルアミノペプチダーゼの構造から阻害剤をデザインし、感染症の新規治療薬を目指す。		長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
プロリルアミノペプチダーゼ + Ala-TBODA 複合体	1X2B	on hold		日和見感染セラチア菌のプロリルアミノペプチダーゼの構造から阻害剤をデザインした。		長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
プロリルアミノペプチダーゼ + Sar-TBODA 複合体	1X2E	on hold		日和見感染セラチア菌のプロリルアミノペプチダーゼの構造から阻害剤をデザインした。		長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
D-3-ヒドロキシ酪酸脱水素酵素	1WMB	Released	2005/9/6	ケトン体として知られる 3-ヒドロキシ酪酸とアセト酢酸の相互変換を触媒する酵素である。糖尿病のケトン体測定用酵素。臨床診断酵素として応用する。	東洋紡績と特許を申請中である。	長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 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
D-3-ヒドロキシ酪酸脱水素酵素 + NAD	1X1T	Released	2006/1/10	補酵素の結合位置を明らかにした。糖尿病のケトン体測定用酵素。臨床診断酵素として応用する。		長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
プロリルトリペプチジルアミノペプチダーゼ	2D5L	on hold		歯周病菌の歯肉分解に関するプロリルトリペプチジルアミノペプチダーゼの構造解析で、構造を基に阻害剤を開発し治療薬の開発を目指す。		長崎大学大学院 医歯薬学研究科薬学系 (芳本 忠)
Human D-amino acid oxidase	1ZPJ	on hold		(1)D-アミノ酸代謝調節 (2)統合失調症疾患感受性候補遺伝子 (4)同じく統合失調症疾患感受性候補遺伝子G72はこの酵素を活性化する因子。今後G72との複合体構造が期待される (5)統合失調症治療薬開発の基礎		徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)
The kexin-type serine protease	2C3R	on hold		(1)セリンプロテアーゼ (4)Pドメインを持つ中でもっとも古いタイプのセリンプロテアーゼ (5)エロモナス菌感染症薬の開発		徳島文理大学健康科学研究所 (津下英明)