



◇第30回生物工学懇話会 報告◇

(企画担当理事) 青柳 秀紀・竹山 春子・本多 裕之
岡村 好子・山田 翼・章 超・田中 剛

2025年5月22日(木)、2025年度総会終了後の千里ライフサイエンスセンター山村雄一ライフホール(大阪)で、第30回生物工学懇話会が対面で開催され、約65名の方々にご参加いただきました。誌面をお借りして、演者の先生方、参加者の皆様、関係各位に心より御礼申し上げます。秦洋二 第24代日本生物工学会会長の開会のご挨拶のあと、今回は「最先端AIと生物工学研究」をテーマに下記の2題のご講演をいただきました。以下に講演内容の概要をご紹介します。

◆「分子化学に基づく生体中分子機能の理解とデザイン：大規模データサイエンスの未来と課題」

(東京大学) 山東 信介

生体中分子であるペプチド、特に大環状ペプチドは、新たな創薬モダリティとして注目を集めています。山東信介先生は、二重らせん内部に安定に入り込む分子に関するご自身の核酸化学の研究から、分子構造のデザインに強い興味を持ったという導入の話から始められ、分子の構造と機能に関する話を、分かりやすくかつ大変魅力的に話されました。具体的には、ペプチドに置換基を導入する合成化学的手法の開発から、置換基を導入した直鎖状ペプチドの機能改変の話をしたのち、環状ポリペプチド抗生物質であるシクロスポリンの親・疎水構造変化と受動的膜透過性を解説されました。細胞膜透過性は薬剤化合物の効能に直結する重要な特性です。分子が、環境(溶媒や周囲の分子)に応じて自らの構造や性質を柔軟に変化させて細胞膜バリアを突破するChameleonicity(カメレオン性)という分子の振る舞いに言及されたのち、具体的に自身のご研究に触れられました。先生は、大環状ペプチドのアミド基をエステルに置換して分子内の水素結合パターンを変化させた置換体を実際に合成され、構造の柔軟性を高めて分子のカメレオン性を変化させることに成功されました。結果として、カメレオン性を強化することで、ペプチドが脂質膜中で自ら疎水的に折りたたむ能力を得て、膜透過性が向上することを見いだされました。環境に応じて構造変化するこの現象は、まるで分子に意思があるようで驚かされました。カメレオン性は分子モデリングで予測できることも示され、膜透過性の予測ができれば、細胞内での目的分子との結合に関してもデザインできるという可能性も話されました。これはまさに、生体中分子の機能理解とデザインに向けた、大規模データサイエンスの可能性を示唆しておられ、当該分野のますますの発展が予感されるご講演でした。

(座長：名古屋大学 本多 裕之)



◆「生物工学の研究推進における基盤AIの役割と実践、あるいは脱神話化」

(SyntheticGestalt) 桑原 直之

AIの活用は、創薬やバイオものづくりにおいて大きな革新をもたらす手段として注目されています。本講演では、創薬・生物工学分野におけるAIシステムの開発に取り組むスタートアップ、SyntheticGestalt株式会社の桑原直之先生より、同社の取り組みや関連研究分野の動向についてご紹介いただきました。同社が注力している低分子化合物に特化したAIによる創薬へのアプローチの他、桑原先生が中心となって進めている酵素探索の取り組みについてもお話いただきました。酵素探索においては、ドメイン特化型AIを開発しており、配列相同性に依存しない言語モデル(PLM)を採用するなど、複数の指標を組み合わせることで、これまでの方法論では高速で見いだされなかった有用酵素の設計が実現できつつあるとのことで、PETの分解酵素を標的とした実施例などが紹介されました。一方で、AIによるDryなアプローチのみでは必ずしも完結せず、Wetな実験系からのフィードバックが依然として重要である点も強調されました。桑原先生は、タンパク質の構造・機能相関や構造生物学に関する多くの知見や高い見識をお持ちであり、その専門性がドメイン特化型AIの設計にも活かされていることが印象的でした。また、酵素開発においては、無細胞タンパク質合成系や微生物によるタンパク質発現といった最終的な生産プロセスでの有効性の確認も重要であり、AIの活用研究におけるボトルネックについても丁寧にご紹介いただきました。講演タイトルにある「脱神話化」という言葉には、「AIですべてが解決できる」といった過剰な期待だけではなく、実践の積み重ねを通じてこそ成果が得られるという、桑原先生ご自身の現実的な視点が込められており、今後AIを活用する我々研究者にとって重要なメッセージであったと改めて感じています。

(座長：東京農工大学 田中 剛)

