

取り組む課題:「非天然の反応を触媒できる酵素のAI・計算科学による開発」

実現したい未来からの逆算

- ・100年先も先も必要な時に必要な医薬品をつかえるような世の中を作りたい
- ・活力ある未来を後世に残していきたい



化合物をもっと簡単、かつ持続可能に作れる技術開発
→ **バイオ触媒技術**の進化が必要

酵素の利点

・高速な反応

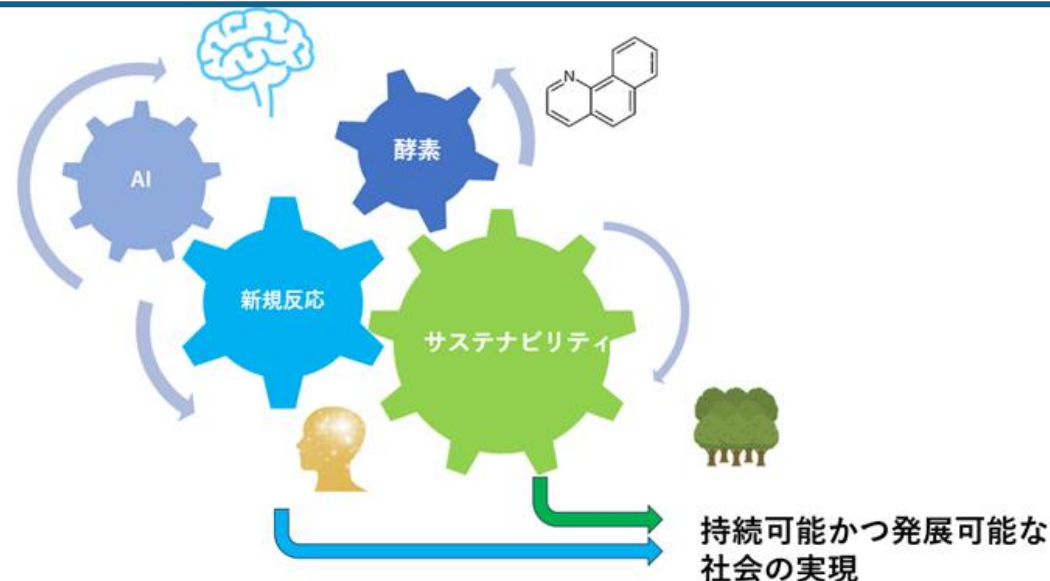
反応を数百万倍速く進めることが可能

・低エネルギー性

低いエネルギーで反応を進めることが可能→常温で反応/高価な金属触媒を必要としない

・高い位置選択性

選択性が高く目的物質を正確・効率的に合成可能



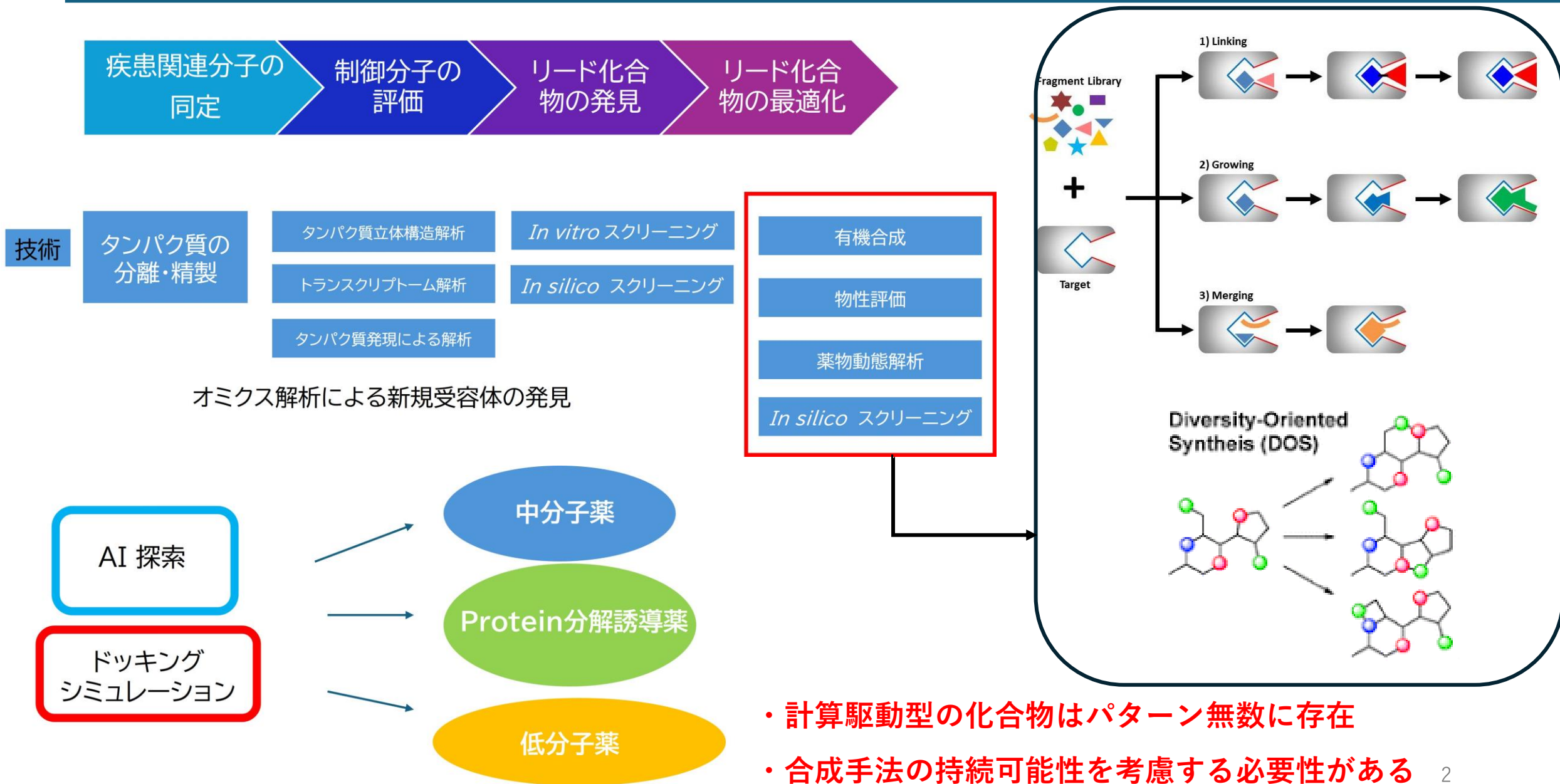
医薬品製造

バイオ燃料

環境浄化

バイオセンサ

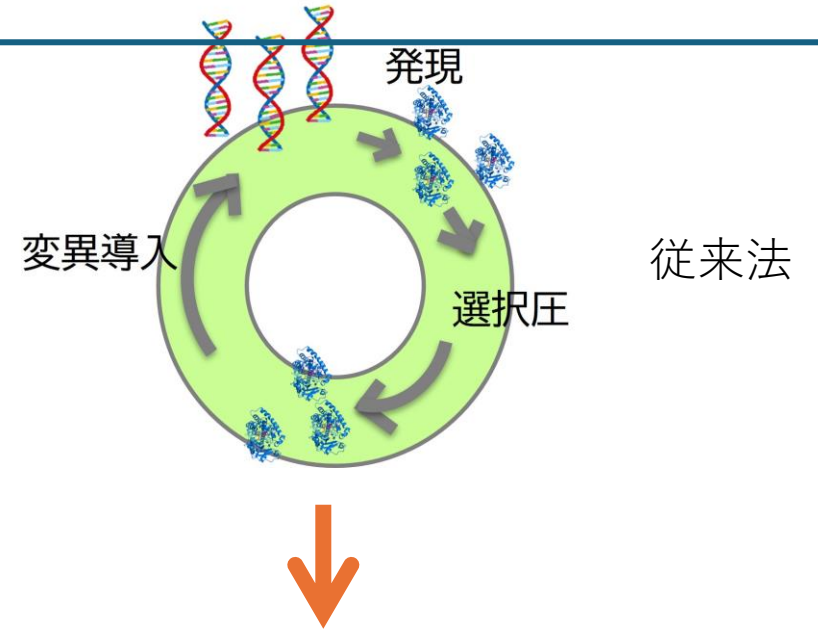
非天然反応特化の酵素の必要性



未来の社会を支えるオーダーメイドな触媒環境の構築

反応特化型（オーダーメイド）酵素の利点

1. 新規非天然化合物への応用
2. 有機合成特有の反応の**生体触媒**での実現/サステナビリティの実現
3. 酵素工学のボトルネックであった**指向性進化**の代替



～100年先も活力ある未来を維持するために～

De novo酵素の開発案の一案

De novo 酵素開発法の提案

活性部位の足場タンパクの選択

基質-タンパク質構造情報の学習

ターゲット基質

GNNベースの基質周辺環境の構築

ノード情報から安定な配列を予測

Folding安定性予測 ex) Rosetta, 分子動力学計算

損失

環境にも人にも優しい合成法の普及

持続可能な触媒技術が標準の社会の実現

医薬品が安定供給される社会の実現