

世界初、人工知能で蛍光分子を開発
—複雑な現象を示す機能性分子の開発に貢献—

蛍光分子は、塗料やセンサーなどとして応用が考えられる機能性分子の一つです。近年では、有機ELとしての応用も進み、蛍光分子開発の重要性は増えています。その一方で、蛍光分子の開発は、既知の蛍光分子を元にした誘導体の開発が主流であり、ゼロから蛍光分子を設計することはほとんどありません。これは、蛍光が特定の分子が持つ性質であり、分子骨格のみから蛍光分子であるかの判断が困難なためです。

今回、分子情報科学チームは、量子化学計算を通して蛍光機構をデジタル化し、深層学習によるAIに蛍光現象を理解させることで、蛍光分子を一から設計するAIを開発しました。このAIによって設計された分子の中から、計八つの分子を合成し、その蛍光を測定したところ、一つの未報告分子を含む六つの分子が蛍光を発することを確認しました。

Sumita et al., Science Advances, 2022

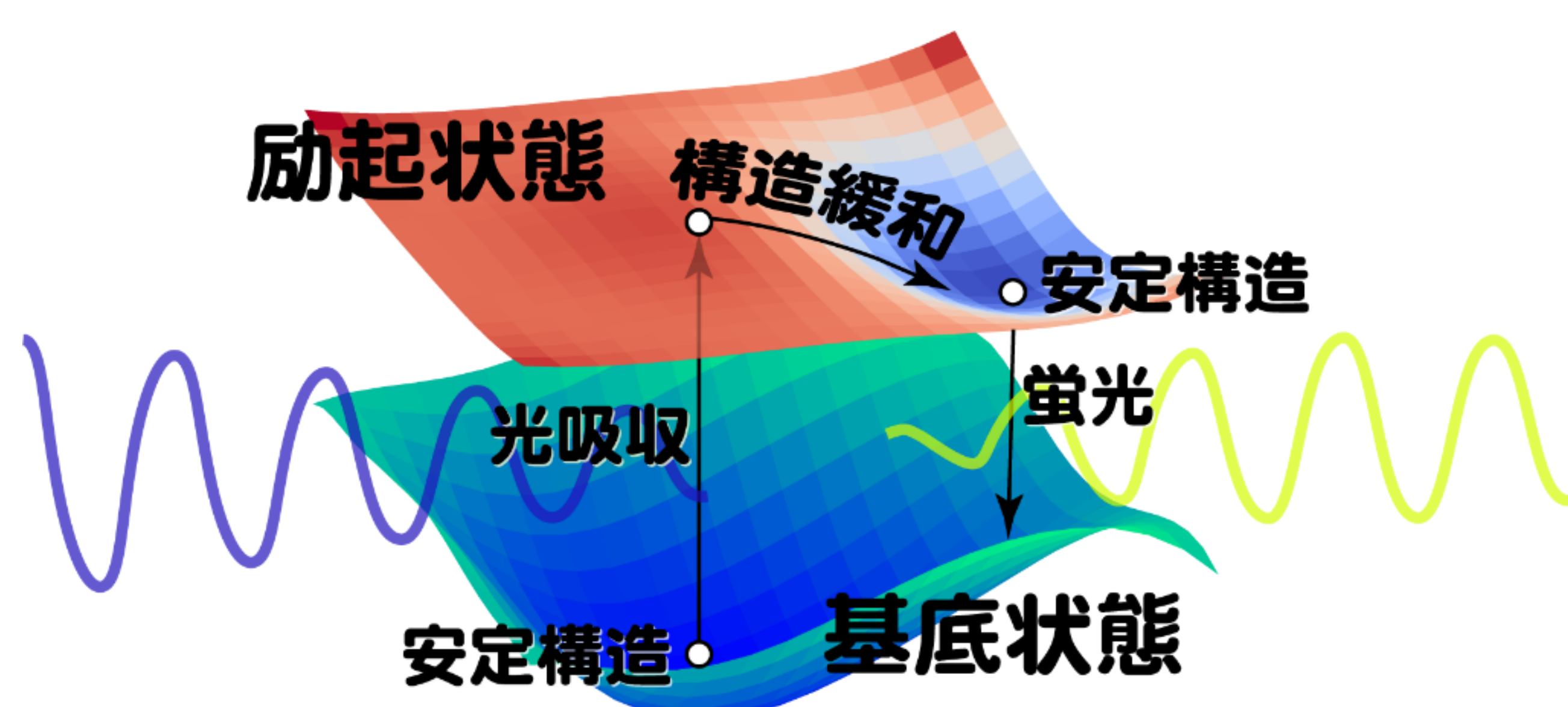
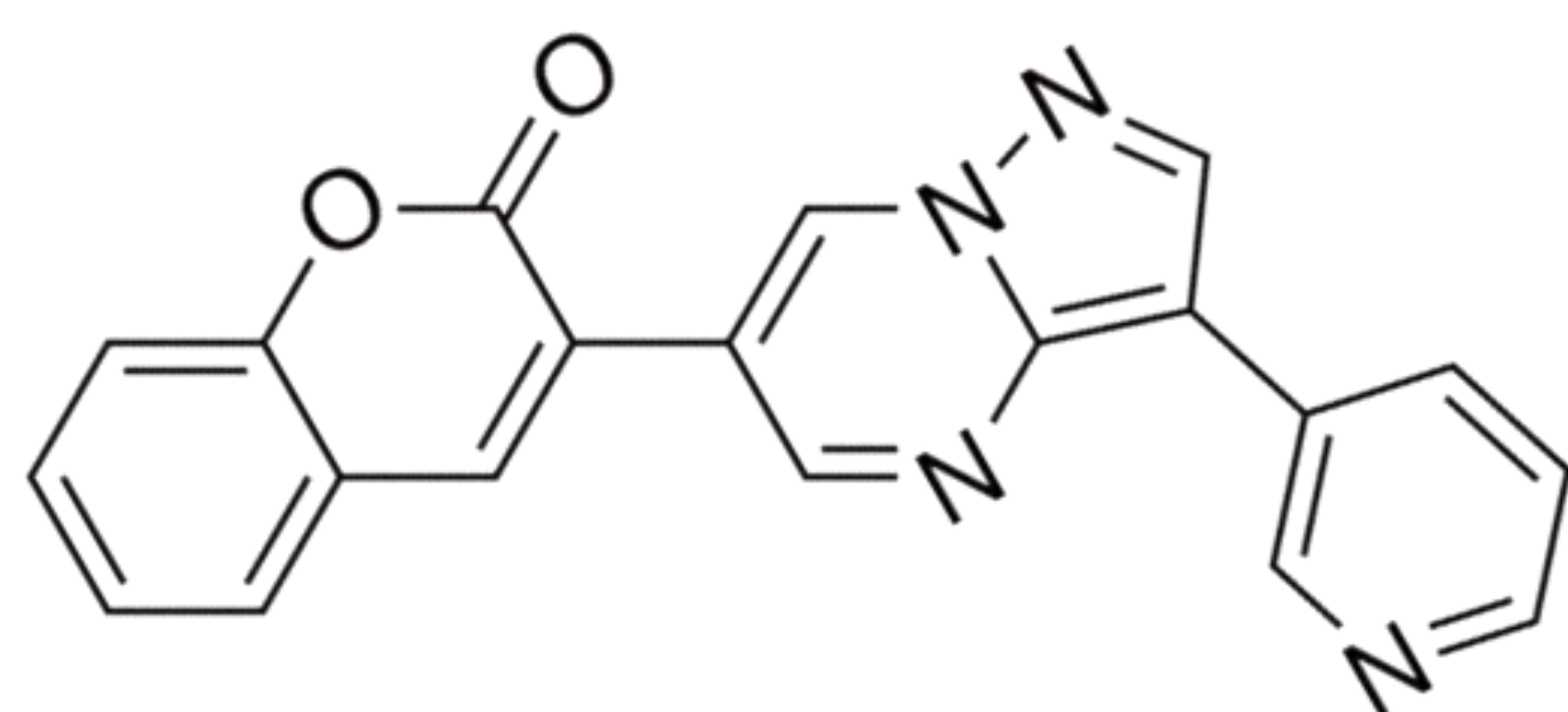
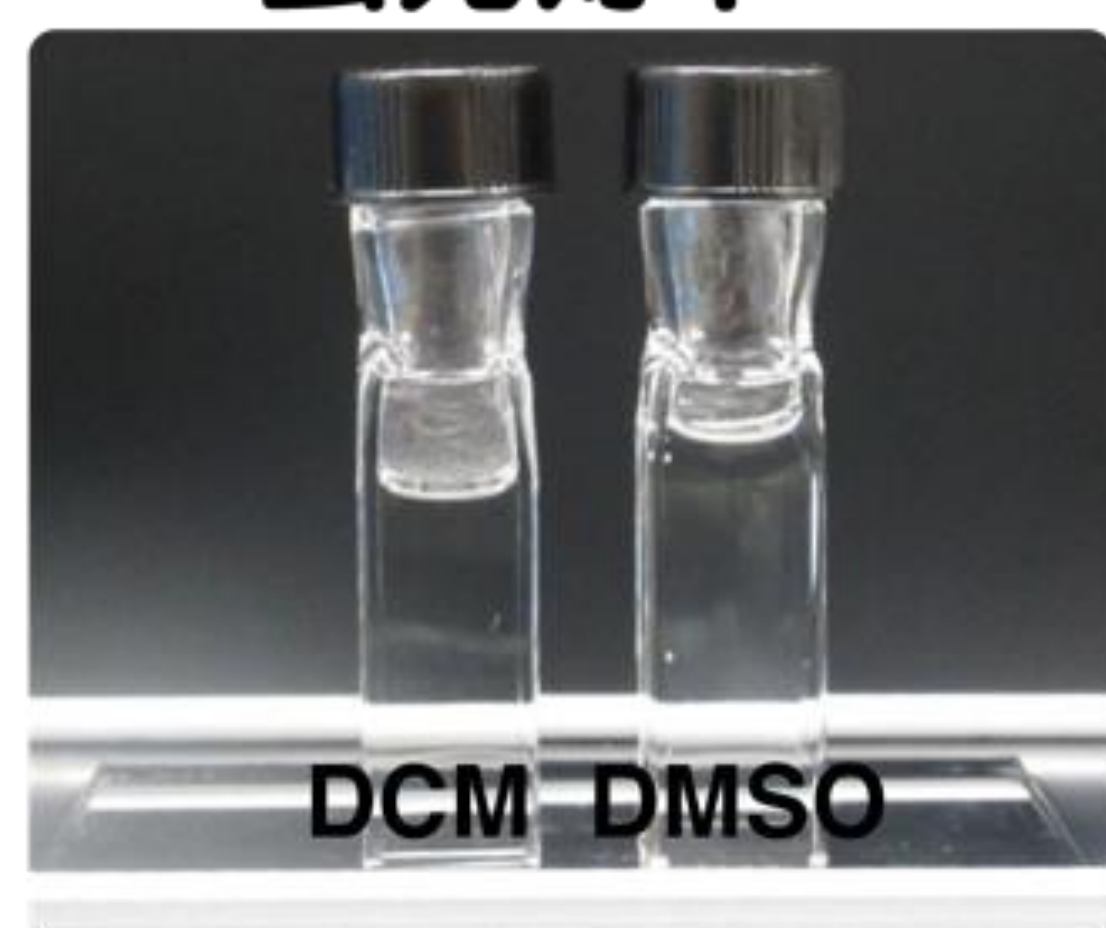


図: 典型的な蛍光分子の分子内自由度の変化に対するエネルギー曲面。



蛍光灯下



紫外線照射下



図: AIによって初めて開発された蛍光性分子。

人工知能で酵素を自動設計
—様々な機能性タンパク質開発の加速に期待—

バイオ産業の研究開発では、酵素や抗体などの機能性タンパク質を改変し、その機能を向上したいというニーズが広く存在します。しかし、多数の変異体タンパク質を調製し、その中から目的の機能を有するタンパク質を実験によって探し出すという作業には、大きな費用と時間を要します。

分子情報科学チームは、人工知能と実験を組み合わせる手法を酵素タンパク質の機能改変に適用し、目的とする機能性タンパク質を従来の方法よりも少ない実験で効率よく得ることに成功しました。この実験で得られたペプチド転移酵素は、触媒機能が5倍向上しました。本手法は、酵素や抗体などの医療・食品・環境で役立つ様々な機能性タンパク質の開発を加速することが期待されます。

Saito et al., ACS Catalysis, 2021.

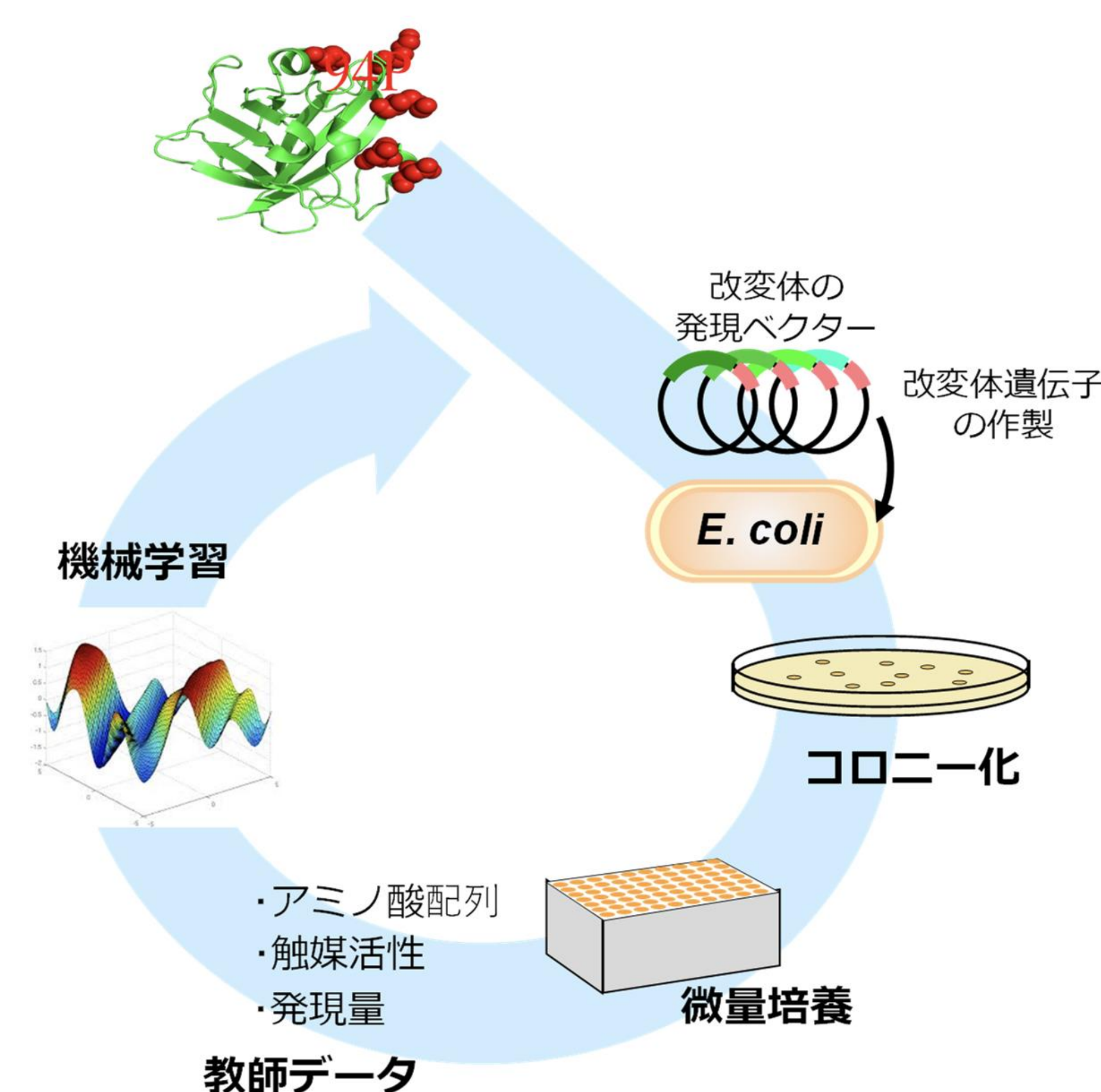


図: 人工知能による酵素タンパク質の高機能化

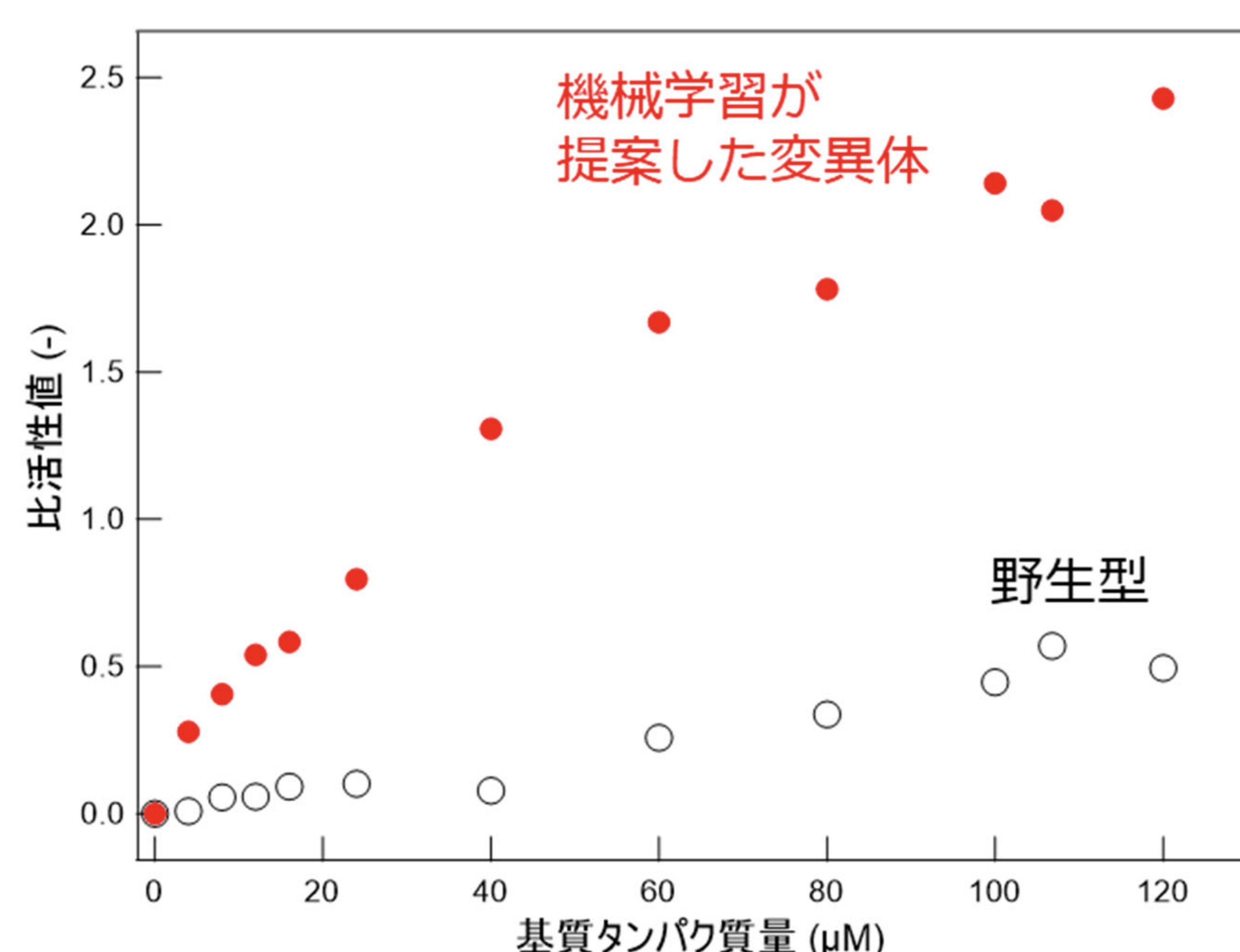


図: 人工知能が提案した変異体の触媒活性