

令和4年度「学術変革領域研究（A）」新規採択研究領域
に係る研究概要・審査結果の所見

領域番号	22A203	領域略称名	予知生合成科学
研究領域名	生体反応の集積・予知・創出を基盤としたシステム生物合成科学		
領域代表者名 (所属等)	葛山 智久 (東京大学・大学院農学生命科学研究科（農学部）・教授)		

(応募領域の研究概要)

本研究領域は、既に目覚ましい成果を挙げ高い評価を受けた2つの新学術領域研究「生合成マシナリー」と「生合成リデザイン」の格段の発展を目指す。爆発的に増える遺伝情報や構造情報をタンパク質構造予測、機械学習や量子化学計算、オミックス等の処理技術を駆使して統合的に解析し、未利用の天然化合物の構造や生合成経路を理論的に予知するシステムを構築する。生体反応の①集積、②予知、③創出、の3つの研究項目を新たに設定し、計算科学を基盤とし生体反応と化学反応を予知する。この予知と実験科学を基盤とした生物合成と化学合成の実証を密に連携させることで、分子種と総数を効率的に拡張可能とする優れた新たな分子創製法を確立する。これにより世界最先端の未来型天然物化学研究を強力に展開する。

(審査結果の所見)

微生物の酵素反応によって産出される天然有機化合物は、微生物内での挙動解明のみならず、創薬への応用などの観点から非常に重要な研究対象である。微生物の天然物生合成に関連する遺伝情報が大量に手に入るようになったものの、遺伝子産物である酵素や構造や反応性については容易に解明できなかったため、天然物の生合成経路の多くが未知のままにとどまっている。本研究領域では、多くの成果を上げた2つの新学術領域研究「生合成マシナリー」と「生合成リデザイン」の成果を元に、最新の情報科学・計算化学を活用してこれを格段に発展させるものである。本研究領域では、遺伝情報や部分的にわかっている構造情報から、機械学習を用いたタンパク質の構造予測、量子化学計算による反応予測、オミックス等による処理技術を統合し、未活用の天然化合物の構造や生合成経路を理論的に予測するシステムを構築、さらに新しい機能や構造をもつ新しい天然物の創出を目指す。本研究領域は、既存の学問の枠を超えて、有機合成化学・生化学・計算機科学の密接な協力により実現できるものであり、日本が伝統的に強い天然物合成と構造ライブラリ、菌ゲノム情報研究の上に、現在急速に発展しているAI技術を組み合わせ、タイミングを得たものとなっており、世界トップレベルの研究者を集めていることも相まって、国際的に例を見ない独創性・新規性を持つ提案となっている。真の学術変革を達成するためにウェットとドライの単なる協業ではなく、両方を自在に使いこなせるような若い世代の研究者育成も目指して、研究を進めていただきたい。