

Anthropic「Claude」による タンパク質設計・分析化学自動化

－ 技術成果の定量的評価と知財実務への定性的影響 －

最終版 2026 年 8 月 20 日

原案：Gemini 3.7 Flash

2026 年 8 月 18 日、Anthropic は、Claude Mythos Preview、Claude Opus 4.8 および Claude Opus 5 を用いた生命科学分野の研究発表と 2 本の技術レポートを公表した。対象は、(1) *de novo* タンパク質バインダー設計における計算ワークフローの自律的オーケストレーション、(2) ベンダー固有の生 NMR・LC-MS データの自動処理・解釈、の 2 領域である。[1-3]

本成果は、AI エージェントが専門ツールを統合して研究者の計算・解析作業を効率化し得ることを示す一方、同一条件の人間専門家との統制比較、薬理機能・安全性・体内動態の確認、実験構造の決定などは行われていない。したがって、「AI が治療薬を完成させた」「人間専門家を一般的に凌駕した」と評価するのではなく、初期探索と分析業務の一部で有用性を示した研究と位置付けるのが適切である。[1-3]

注：本報告書は、2026 年 8 月 20 日までに公表された一次資料を中心とする公開情報に基づく一般的な技術・知財分析であり、個別案件についての法的助言ではない。

1. 研究発表・技術レポート内容の分析

Anthropic の検証は、Claude がオープンソースの構造生成・配列設計・複合体予測ツールを選択、導入、実行し、候補を反復最適化・順位付けできるか、また、化学分析装置の生データを専用ベンダーソフトなしで処理・解釈できるかを調べたものである。タンパク質設計では Claude が計算工程を担い、配列合成、発現および BLI/SPR 等の結合測定は、互いに独立して測定を行った有償 CRO の Adaptic Bio と Twist Bioscience が担当した。[1,2,4]

1.1 *de novo* タンパク質バインダー設計

ミニバインダーは、標的タンパク質の特定表面に結合するよう設計された小型タンパク質であり、研究用試薬、診断用分子、標的化分子、さらには将来の治療候補などへの応用が検討される。ただし、一般的な抗体医薬や低分子医薬とは異なる設計モダリティであり、高親和性結合の確認は医薬品開発の最初期段階にすぎない。[1,2]

Claude Science 上では、約 3 万トークンの設計プロトコル、インターネット・論文資源、Google Drive、Slack、Gmail、bioRxiv のコネクタ、ならびに NVIDIA H100 計算資源が与えられた。Claude は標的調査、標的領域・エピトープ選定、RFdiffusion、BoltzGen、FreeBindCraft、Genie 3、PXDesign、SolubleMPNN 等の専門ツールの組合せ、イン・シリコ最適化、候補の計算スクリーニングと順位付けを実行した。[1,2]

実験構成と定量的実績

実行時には 16 標的について合計 1,440 設計が作成された。成熟型 GDF-8 の 120 設計は、標的の凝集と非特異的付着により両 CRO で解釈可能な測定が得られなかったため、解析から除外された。その結

果、15 標的・1,320 設計が分析対象となり、354 設計が結合陽性と統合判定された（全体ヒット率 26.8%）。[2]

表 1 タンパク質設計キャンペーンの分析対象内訳

設計モード／モデル	分析対象標の数／設計数 (測定不能データ除外後)	実行壁時計時間	計算資源上限	ヒット数／分析対象数 (ヒット率)	補足・比較指標
Multi-target (Opus 4.8)	13 標的／390 件	48 時間	12,500 H100 GPU 時間	88／390 (22.6%)	全標的を同一セッションで実行
Multi-target (Mythos Preview)	13 標的／390 件	48 時間	12,500 H100 GPU 時間	104／390 (26.7%)	全標的を同一セッションで実行
Single-target (Mythos Preview)	15 標的／450 件	24 時間／標的	2,500 H100 GPU 時間／標的	158／450 (35.1%)	標的別セッションを並列実行
Single-target (Opus 4.8)	2 標的／90 件	24 時間／標的	2,500 H100 GPU 時間／標的	4／90 (4.4%)	Latent GDF-8 : 0／30 TNFα : 4／60 (補足 30 件を含む)
合計	15 標的／1,320 件	—	—	354／1,320 (26.8%)	ProteinBase 公開キャンペーンから算出した典型値： 10～15%

注 1：実行時の構成は、Multi-target が各モデル 14 標的・各 420 設計、Mythos Preview の Single-target が 16 標的・480 設計、Opus 4.8 の Single-target が 3 標的・90 設計であり、さらに TNFα について同一キャンペーンのスコア済み候補群から 30 設計が補足発注された。成熟型 GDF-8 の計 120 設計を除外すると、表の分析対象数となる。補足 30 設計は Claude が生成・採点したが、キャンペーン終了後、事前に固定した規則に基づき人間の研究者が選択したため、Claude の順位付け評価からは除外された。[2]

注 2：「10～15%」は一般的な「業界平均」ではなく、Anthropic が ProteinBase の公開キャンペーンから算出した典型値である。また、Mythos Preview の Single-target 方式は Multi-target 方式より 1 標的当たりの計算予算が約 2.8 倍であり、35.1% という差を標的集中の効果だけに帰属させることはできない。[1,2]

個別成果と研究上の限界

- 1. RBX1 に対する結合成績:** Mythos Preview の Single-target キャンペーンでは 12／30（40%）が結合陽性となった。トップランク設計の KD は Adaptic Bio 測定で 3.9 nM、Twist Bioscience 測定で 8.4 nM であり、コンペティション優勝設計を再合成し同一プレートで測定した 45 nM を上回る親和性を示した。ただし、これは公開コンペティションとの事後比較であり、同一ツール・同一予算・同一支援条件の人間専門家を置いた統制試験ではない。[1,2,4]
- 2. TNFα における種交差性:** 多量体構造を持つ TNFα に対し、Opus 4.8 はヒト、カニクイザルおよびマウスの TNFα に結合する候補を得た。種交差性は非臨床評価を行う上で有用な属性となり得るが、細胞機能、薬効、特異性および安全性は未評価である。[1,2]
- 3. 二次構造の多様性:** 設計モデル上、β ストランドを 20%以上含むと予測された結合陽性候補を 6 標的について 15 件（10 種類のバックボーン）得た。ただし、これらの実験構造は決定されておらず、予測されたフォールドを実際に形成しているかは未確認である。熱安定性、プロテアーゼ耐性および薬物動態も未評価である。[1,2]
- 4. 難関標的での限界:** 人工設計 β バレルの BBF-14 では弱いバインダー 3 件にとどまり、表面が平滑で親水性の高いマルトース結合タンパク質（MBP）では 90 設計から確実なバインダーを得られなかった。[1,2]
- 5. 結果解釈上の限界:** 確認されたのは主として試験管内の結合であり、生物学的活性、標的選択性、細胞作用、薬効、毒性、免疫原性、体内動態、製剤化・製造適性は評価されていない。また、各モデル・形式・標的の組合せは原則 1 回のみで、モデル差、実行形式差およびラン間変動が交絡して

いる。したがって、今回の数値から一般的な再現性や、人間専門家に対する包括的優位を結論付けることはできない。[2]

1.2 NMR・LC-MS 生データ解析の自動化

第2の検証では、一般提供モデル Claude Opus 5 に、CRO が取得したベンダー固有の生データと1〜3文の簡潔な自然言語プロンプトを与えた。NMR と LC-MS は独立セッションで並列処理され、NMR は23分、LC-MS は19分で処理・解釈結果が返された。[1,3]

表2 NMR・LC-MS 解析結果と CRO データとの比較

分析手法	入力データ	処理時間	Claude の解析結果	CRO 結果との比較・留保
¹ H-NMR	ベンダー固有 FID 生データ (262 KB)	23 分	18 シグナルを特定 積分値合計 19.8 H	対応可能な積分領域で 0.08 H 以内の差。 D ₂ O 追試を提案し、初回解釈を自己監査で訂正
LC-MS 純度解析	未公開バイナリ.lcd (16 MB)	19 分	保持時間 4.34 分 純度 96.4% 公称質量 504 Da	CRO 報告 96.33%。ピーク集合が異なり、同じ基準に換算すると Claude 側 98.8%

NMR では、Claude はフーリエ変換、位相補正、ベースライン補正、ピーク抽出と積分を行い、交換性プロトンを確認する D₂O 添加実験を提案した。追試データの初回比較では「4 シグナルが消失」と過大に述べたが、内部監査により「明確に消失したのは2領域」と訂正した。この経緯は、自己監査機能が有用である一方、最終判断には人間による検証が必要であることを示す。[1,3]

LC-MS では、Claude は OLE2 コンテナ内の未公開バイナリ構造を推定し、2,664 スキャンの総イオン強度等を装置内データと照合してからクロマトグラム、質量スペクトル、純度表と再利用可能な読取コードを生成した。ただし、96.4%と96.33%は異なるピーク集合に基づき、504 Da も単一四重極装置による公称質量であって高分解能精密質量ではない。したがって、「完全一致」ではなく、条件差を伴いながら主要結果が整合したと評価すべきである。[1,3]

1.3 デュアルユースリスクとアクセス制限

Anthropic は、自律的な研究能力が治療法開発と基礎研究を加速する一方、生物兵器開発を含む危険な研究に悪用され得るデュアルユース性を明示している。そのため、タンパク質設計等の高度な研究生物学機能は一般アクセスの Claude Fable 5 では利用できず、管理された信頼対象向けアクセス・プログラムを通じた提供を計画している。一般提供モデルの Opus 5 で実施された分析化学タスクとは、アクセス条件を区別して理解する必要がある。[1]

2. 産業界・科学コミュニティにおける初期反応と論点

発表直後の反応はまだ初期段階であり、生命科学界全体の評価が確立したとはいえない。ウェットラボ検証を担当した Adaptiv Bio は、(1) 科学目標を解釈し計画・統括する汎用モデル、(2) 構造予測・設計を担う専門モデル、(3) デジタル設計を実測値に変換する自動化ウェットラボ、の3層が連携する「agentic science loop」に本研究の意義を見いだしている。一方、同社は実験受託者・プラットフォーム提供者でもあるため、その評価は立場を踏まえて読む必要がある。[4]

技術的には、専門家が行ってきた複数ツールの導入・選択・反復実行を AI が統括した点が重要である。しかし、高親和性バインダーの取得はヒット創出に相当するにすぎず、リード候補又は開発候補へと発展させるには、オフターゲット回避、免疫原性、組織移行性・標的到達性、細胞内標的の場合の細胞膜透過性、物理化学的安定性、製造性、細胞機能、PK/PD、薬効・毒性等の多段階評価が必要である。[1,2,4]

また、Multi-target キャンペーンには最大 12,500 H100 GPU 時間の上限が設定され、技術レポート上の計算予算もキャンペーン当たり数万米ドル規模であった。人間専門家との同条件比較や総費用比較はないため、「計算コストが数分の一になった」とは結論できない。現時点で示されたのは、専門家のオーケストレーション作業と所要期間を削減する可能性であり、費用対効果の一般化には追加検証を要する。[2]

Anthropic は、全 1,440 設計の配列・計算モデル等と、信頼できる測定が得られた 1,320 設計の結合データを公開した。データは CC BY 4.0、スクリプトは MIT License で提供されており、これは利用許諾を伴う公開情報であって、権利放棄を意味するパブリックドメインとは異なる。公開時点以降、各国法上の基準日、開示内容、実施可能性、グレースピリオド等に応じ、後顧の新規性・進歩性判断に用いられる先行技術となり得る。[2,15]

3. 今後の知的財産業務・特許戦略への影響

本研究だけで各国の審査基準が直ちに変更されたわけではない。しかし、高性能な設計エージェントが広く利用可能になり、当業者が通常利用するツールとして定着すれば、発明者性の証拠管理、当業者水準・成功への合理的期待、明細書の裏付け、出願タイミング、先行技術調査の実務に影響する可能性がある。以下は現行法に基づく留意点と将来シナリオを区別して整理する。

3.1 人間の発明者性と「着想 (Conception)」

米国では、連邦巡回区控訴裁判所が *Thaler v. Vidal* において、特許法上の発明者は自然人でなければならないと判示し、米国最高裁は 2023 年 4 月 24 日に上告受理を拒否した。[6,7]

USPTO は 2025 年 11 月、2024 年ガイダンスを全面撤回して改訂ガイダンスを公表し、次の点を整理した。[5]

1. **特別基準を設けない:** AI を用いたか否かにかかわらず、同じ発明者性の法的基準を適用する。AI 支援発明のための別個又は緩和・強化された基準は設けない。
2. **着想が中心的基準:** 発明者性判断の「touchstone」は、人間の頭脳に、完全かつ実施可能な発明について確定的・永続的な着想が形成されたかである。判断はクレームごとに行われ、具体的事実に大きく依存する。
3. **Pannu 要素の範囲:** Pannu 要素は複数の自然人間の共同発明者性を判断するためのものであり、人間と AI の寄与を比較する基準ではない。AI は発明者ではなく、人間が用いるツールとして扱われる。

本研究では、人間が標的、プロトコル、予算・時間上限、測定系と発注を設定し、Claude が標的領域・エピトープ、ツールの組合せ、候補生成・最適化・順位付けの多くを担った。さらに TNF α 補足 30 件は、Claude が生成・採点した候補群から人間が選択した。したがって、特定の配列クレームについて誰が完全かつ具体的な着想を有していたかは、各クレームと研究記録に即して個別に検討する必要がある。「人間の関与が少ないから直ちに発明者不在」とも、「プロンプトを与えたから当然に発明者」ともいえない。[2,5]

USPTO は、プロンプト履歴やモデルログを出願時の一般的提出義務として定めておらず、出願書類に記載された自然人を実際の発明者と推定する。もっとも、着想の帰属が争われる場面に備え、プロンプト、候補選択、評価系設計、改変理由、意思決定時点を保存することは、本報告書上の実務的な証拠保全策として推奨できる。[5]

3.2 進歩性の判断と AI 普及の将来シナリオ

新規なタンパク質配列であることや、配列が事前に予測できなかったことだけで、直ちに進歩性が認められるわけではない。EPO の 2026 年審査ガイドライン G-II, 6.2 は、既知抗原に結合する新規抗体について、構造の相違又はアミノ酸配列の予測不能性のみでは進歩性を基礎付けず、予期せぬ技術的効果、所望特性を有する抗体を得ることへの合理的期待の欠如、生成・製造上の技術的困難の克服、新規な機能的フォーマット等を考慮すると整理している。これは抗体に関する指針でありミニバインダーに直接適用されるとは限らないが、近接技術分野の重要な公的指標である。[8,9]

AI 設計が出願の基準日時点で当業者に広く利用可能で、通常の計算資源と技能により再現可能な手段として定着すれば、「ルーチン性」又は「成功への合理的期待」を肯定する方向に作用し得る。ただし、本研究はアクセス制限、高い計算予算、1 回実行、標的別の成績差を伴うため、現時点でバインダー設計一般が当業者のルーチン業務になったことを示すものではない。[1,2,8,9]

将来、進歩性を強固に主張する上で有力な根拠となり得るのは、例えば次のような事項である。

- ヒト・非臨床動物種における有用な種交差性と、その機能的意義
- 平滑・親水性表面、特異な多量体界面、新規フォールド等、成功への合理的期待が低い標的で技術的困難を克服したこと
- 適切な比較試験で示された、熱安定性、耐分解性、低免疫原性、特異性、細胞機能、製造性等の予期せぬ改善
- 最も近い先行技術との比較において、著しく高い親和性又は新規な機能的フォーマットを実測データ等で裏付けたこと

3.3 明細書記載要件と出願後データ

日本特許庁 (JPO)

JPO の「AI 関連技術に関する特許審査の事例」は、AI 予測物について、(1) 実際に製造した物の評価が明細書等に記載される、(2) AI 予測値の精度が明細書等で検証される、又は(3) AI 予測が実物評価に代わり得るとの技術常識が出願時に存在する、といった事情を記載要件判断で重視する趣旨を示している。[12]

この趣旨をタンパク質バインダー発明に当てはめると、結合性、特異性、機能等を裏付ける実測データを出願時に含めることが実務上重要となる。BLI 又は SPR は有力な測定手段であるが、特定手法、KD 値又はデータ数が一律の法的最低要件として固定されているわけではなく、必要な裏付けはクレーム範囲、明細書の教示、出願時の技術常識により個別に判断される。[12]

欧州特許庁 (EPO) –G 2/21

EPO 拡大審判部 G 2/21 の要点は、次のとおりである。[10,11]

1. **出願後証拠を一律排除しない:** 技術的効果を証明する証拠は、出願後に提出されたという理由だけで排除してはならない。
2. **当初の技術的教示との連続性:** 当業者が出願時の技術常識を踏まえ、主張される効果を当初明細書の技術的教示に包含され、同一の当初開示発明に体现されていると導ける必要がある。
3. **Plausibility の位置付け:** 「Plausibility」は EPC 上の独立した法的概念又は特許要件ではない。出願時に実験例がないことだけで出願後データへの依拠が当然に否定されるわけではなく、当初開示と技術常識から当該効果を導けるかが中心となる。

したがって、イン・シリコ候補を広くクレームし、出願後の実測値だけで当初開示にない効果又は範囲を補う戦略にはリスクがある。特に、広い属クレームの全範囲で効果が生じること、又はその効果が当初の技術的教示から導出できることが説明できない場合、出願後データだけでは不足し得る。[10,11]

3.4 知財管理・クレーム・出願実務

- 1. 証拠保全 (Prompt Audit Trail) :** 法的提出義務と混同せず、研究・発明管理上の実務提言として、モデル名・版、プロンプト、入力資料、計算条件、候補群、順位、選択・棄却理由、人間による改変、実験計画と結果を時系列で保存する。企業秘密、個人情報、外部モデルへの入力制限も同時に管理する。[5]
- 2. 階層的クレーム設計:** Amgen v. Sanofi では、機能で定義された広範な抗体属について、明細書がその全範囲を当業者に過度の試行錯誤なく実施させるに足りないとして、実施可能要件違反が認定された。したがって、機能クレームだけに依存せず、実施例と支持範囲に応じて、特定配列、保存残基・許容変異を限定した配列同一性、構造・エピトープ・機能の組合せ、測定方法、用途、組成物、製造方法を階層化する。例えば「95%以上の配列同一性」は安全な定型句ではなく、変異位置、構造機能相関、実施例数、機能確認データにより支持される範囲に限定すべきである。[13]
- 3. 初期出願と優先権:** 有望候補が得られた段階で初期出願（米国仮出願等）を行い、優先期間内の後続出願に実測データを追加する戦略は考えられる。ただし、追加事項又は追加事項に依存するクレームについて、優先権基礎出願に明示的又は内在的な開示がなければ、初期出願日への遡及が認められない可能性がある。初期出願には、対象配列群、評価方法、予想される効果、選択根拠、代替態様を可能な限り具体的に記載する必要がある。[14]
- 4. AI 生成公開データを含む先行技術調査:** 配列同一性・類似性検索だけでなく、構造、予測エピトープ、標的種、実測結合データ、失敗設計、データセットの公開日と版、モデル由来のプロベナンスを確認する。自社候補が公開データに含まれる場合でも、先行技術性は開示の具体性・実施可能性・基準日等により判断されるため、単なる一致の有無と法的結論を区別する。[2,15]

4. 結論と創薬・バイオ企業への推奨

Anthropic の研究は、AI エージェントが複数の専門計算ツールを統括し、**de novo** バインダー設計の候補創出・スクリーニングと、**NMR・LC-MS** 生データの一次処理・解釈を効率化できる可能性を示した。一方、ウェットラボ実験は外部 **CRO** が実施し、薬理機能、構造、開発可能性、臨床有用性は未確認である。成果の核心は「新薬の自動完成」ではなく、「研究ワークフローの一部をエージェントが高い自律性で実行したこと」にある。[1-4]

知財部門と研究開発部門が優先して整備すべき事項は、次の 4 点である。

- 1. 人間の着想と意思決定の記録:** AI 利用の有無だけでなく、クレームごとに、人間がどの技術的思想をいつ形成し、どの候補をどの理由で選択・改変したかを残す。
- 2. イン・シリコと実測の高速フィードバック:** 早期に結合、特異性、機能、安定性、製造性等を測定し、出願時の支持範囲を実証データと技術的説明で裏付ける。
- 3. 実施可能範囲に対応した階層的権利化:** 配列、構造、エピトープ、機能、用途、製造方法を組み合わせ、広さに応じた実施例・比較データを用意する。
- 4. 公開速度と優先権を踏まえた出願・調査:** AI 生成データセットの公開を継続監視しつつ、初期出願で十分な具体性を確保し、後続出願の追加データがどの優先日を得られるかを個別に管理する。

AI の利用可能性、費用、アクセス制限、当業者への普及度、技術常識、審査・判例の蓄積は今後変化する。したがって、当業者水準や進歩性の「基準上昇」を既成事実として扱うのではなく、技術・法務・知財が共同で継続的に再評価する運用が必要である。

引用文献（一次資料中心）

- [1] Anthropic, How Claude is accelerating protein design and analytical chemistry, Aug. 18, 2026.
- [2] Amir Shanehsazzadeh, Autonomous de novo protein binder design with Claude, Anthropic technical report, Aug. 18, 2026.
- [3] David Kamber, Automated processing of raw NMR and LC-MS data with Claude Opus 5 on Claude Science, Anthropic technical report, Aug. 18, 2026.
- [4] Adapticv Bio, Case study: Benchmarking Claude’s protein designs in the wet lab, Aug. 19, 2026.
- [5] United States Patent and Trademark Office, Revised Inventorship Guidance for AI-Assisted Inventions, 90 Fed. Reg. 54636, Nov. 28, 2025.
- [6] Thaler v. Vidal, 43 F.4th 1207 (Fed. Cir. 2022).
- [7] Supreme Court of the United States, Docket No. 22-919, Stephen Thaler v. Katherine K. Vidal, petition for certiorari denied Apr. 24, 2023.
- [8] European Patent Office, Guidelines for Examination 2026, G-VII, 13 — Inventive step assessment in biotechnology.
- [9] European Patent Office, Guidelines for Examination 2026, G-II, 6.2 — Inventive step of antibodies.
- [10] European Patent Office, Enlarged Board of Appeal, G 2/21 — Reliance on a purported technical effect for inventive step (plausibility), Mar. 23, 2023.
- [11] European Patent Office, Press Communiqué of 23 March 2023 on decision G 2/21.
- [12] 日本国特許庁, AI 関連技術に関する特許審査の事例について.
- [13] Supreme Court of the United States, Amgen Inc. v. Sanofi, 598 U.S. 594 (2023).
- [14] World Intellectual Property Organization, PCT International Search and Preliminary Examination Guidelines, paras. 6.06–6.10.
- [15] 日本国特許庁, 特許・実用新案審査基準 第 III 部第 2 章第 3 節「新規性・進歩性の判断の基礎となる先行技術」.