

## 未来社会創造事業 探索加速型探索研究

### 事後評価結果

#### 1. 領域

「共通基盤」領域

#### 2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

#### 3. 研究開発課題名

微小結晶構造の自動・高精度電子線解析

#### 4. 研究開発代表者名(機関名・役職は評価時点)

米倉 功治(理化学研究所放射光科学研究センター グループディレクター)

#### 5. 評価結果

評点: S (特に優れている)

総評:

本研究開発課題は、クライオ電子顕微鏡での電子回折、単粒子解析において、水素結合ネットワーク、電荷分布の精密同定を可能にする事を目指し、①汎用の装置でも利用可能な自動撮影・解析技術の開発により、試料に含まれる構造の迅速かつ定量的な分析を可能にすること、②解析理論構築、解析手法の開発と高度化により実験誤差の指標である R 値を現状より改善することを実施するものである。

探索研究期間においては、これまで誰もなし得なかった 3 つの世界初を達成している。すなわち、①電荷情報の取得(電荷・水素の可視化、作動機構の解明)、②電子回折と XFEL との相補解析技術(あらゆる微結晶試料が構造解析可能に)、③機械学習による対象物の正確な位置決めなど、操作の自動化により熟練オペレーターをはるかに上回る時間効率と精度で観察、解析を可能とする顕著な研究開発成果が創出されたことを高く評価する。

特に、この成果により、例えば、光合成の初期過程に関係するタンパク質の構造・機構解析や、筋萎縮性側索硬化症(ALS)に関わるアミロイド繊維の構造を解析し、発病機構の解明につながる成果を得るなど、学術的にインパクトのある成果も創出しており、当初の計画を上回る成果が認められる。

また、日本電子株式会社とは、同社のクライオ電顕 1 号機から密に連携して研究開発を進めてきたが、同社の装置開発において様々な助言をする他、探索研究期間の成果については、製品に搭載するとともに、GitHub でソースコードやプロトコル等を公開するなど社会還元も並行して進めるといった工夫も実施された。

今後は、本格研究での POC 達成に向け、基盤技術のさらなる高度化のため精密解析を引き続き進めるとともに、成果を社会に裨益させるために、製薬企業等との連携強化に留意しながら研究開発を進めることを期待する。

以上