令和4年度科学技術試験研究委託費 先端研究基盤共用促進事業 (先端研究設備プラットフォームプログラム)

# NMR プラットフォーム 委託業務成果報告書

令和5年5月 国立研究開発法人理化学研究所 本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立研究開発法人理化学研究所が実施した令和4年度「NMRプラットフォーム」の成果をとりまとめたものです。

# 目次

I. 委託業務の目的
1.1 委託業務の題目・・・・・・・・・・・・・・・・1
1. 2 委託業務の目的・・・・・・・・・・・・・・・1
Ⅱ. 令和4年度の実施内容
2. 1 実施計画・・・・・・・・・・・・・・・・・1
( i ) 委託機関(代表機関)としての業務
(ii )再委託機関(代表機関を除く実施機関)としての業務
(iii)協力機関の取組
2. 2 成果・実績・・・・・・・・・・・・11
(i)委託機関(代表機関)としての業務
①プラットフォーム運営体制の構築
②利用支援体制の構築
③ワンストップサービスの設置
④共用機器
⑤専門スタッフの配置・育成
⑥遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共
有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援(利用と機
器開発の連携拡大)等
⑦コミュニティ形成、国際的ネットワーク構築
(ii) 再委託機関(代表機関を除く実施機関)としての業務・・・・・20
①利用支援体制の構築
②共用機器
③専門スタッフの配置・育成
④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共
有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援(利用と機
器開発の連携拡大)等
⑤その他
(iii) 協力機関の取組・・・・・・・・・・・・・・・28
Ⅲ. フォローアップ調査項目
3.1 令和5年度以降の取組実施に向けた課題、問題点・・・・・・28

3.	2	分野融合・新興領域の拡大について・・・・・・・・・28
3.	3	スタートアップ支援にについて・・・・・・・・・29
3.	4	共同研究・受託研究について・・・・・・・・・・29

- I. 委託業務の目的
  - 1.1 委託業務の題目

「NMR プラットフォーム」

# 1. 2 委託業務の目的

本事業では、国内有数の先端的な研究施設・設備について、その整備・運用を含めた研究施設・設備間のネットワークを構築し、全ての研究者への高度な利用支援体制を有する全国的なプラットフォームを形成することで、我が国の研究開発基盤の持続的な維持・発展に貢献することを目的とする。

本プラットフォームでは、産学官が共用可能な先端的 NMR 研究基盤のネットワーク「NMR 共用プラットフォーム」の活動成果を基盤として、先端人材が育んだ技術・知恵・職人芸(暗黙知)を形式知化し、先端機器とあわせて有機的に連携させ、様々な地域・分野の課題解決を提供する研究基盤を全国的に展開することにより、我が国全域の研究開発の促進・イノベーション創出に貢献する体制を構築する。地理的な制約を受けず、必要に応じて最適な先端人材の支援を受けながら、最適な技術・機器・手法・知恵等を活用して、安全・安心にデータ取得・解析して課題解決できる、新時代に相応しい共用体制の模範となるプラットフォーム「NMR プラットフォーム」(NMR-PF)を構築・実施する。

# Ⅱ. 令和4年度の実施内容

- 2. 1 実施計画
- (i) 委託機関(代表機関) としての業務

【機関名:国立研究開発法人理化学研究所】

- ①プラットフォーム運営体制の構築
  - 1)プラットフォーム実施機関、協力機関、事業支援機関と連携するための取組
    - ・全体戦略を決定する運営委員会、外部有識者による諮問委員会、 利用課題を選定・進捗評価する課題選定委員会等を運営する。
    - ・事務局を代表機関に配置する。
    - ・ポータルサイトを拡充・機能強化する。
    - ・取組課題毎に必要に応じて部会を設置し検討・活動する。
  - 2)他のプラットフォームと連携するための取組
    - ・プラットフォーム間の連携を推進するための方策等について検討する。また、JASIS2022 への出展等を通じて、各プラットフォー

ム間のネットワーク化を進める。

#### ②利用支援体制の構築

- ・ポータルサイトを拡充・機能強化して、ワンストップサービス、知 識共有、課題解決対応のシステムとして機能させる。
- ・事業推進の課題把握・効果検証のため、遠隔操作や自動化技術を活用した利用を対象とする「先端利用課題」枠を設定し、課題選定委員会において課題選定を行う。
- ・高度利用支援体制の構築のため、課題に対する解決策を提示して実施する専門スタッフとして、研究実績も豊富な事業統括補佐5名、リエゾン活動およびNMR 測定解析に関する高度利用支援研究員を兼務するスタッフ3名(うち1名はタンパク質試料調製の高度利用支援研究員を兼ねる)、NMR 測定解析に関する高度利用支援研究員2名、NMR 装置調整に関する高度利用支援技術員1名、プラットフォーム事務局運営に関する高度利用支援技術員1名を、それぞれ配置する。このうち高度利用支援研究員3名を本事業で雇用する。

# ③ワンストップサービスの設置

- ・ポータルサイトを充実・機能強化して、ワンストップサービスの質 の向上を図る。
- ・参画機関に所属する知識・経験が豊富な専門スタッフにて申請課題 に対応する。

#### ④共用機器

・400~900MHz の溶液及び固体 NMR 装置で構成され、多数試料の自動 連続測定に対応したオートサンプルチェンジャーや超高速 MAS プロ ーブを備えることにより、多様なニーズに対応する。

#### ⑤専門スタッフの配置・育成

- ・課題に対する解決策を提示して実施する専門スタッフとして高度利用支援研究員5名(うち3名を本事業にて雇用)、高度利用支援技術員2名を配置する。
- ・各機関の専門スタッフを対象とした派遣研修制度による技術向上や 新技術獲得の機会を提供し、人材交流・情報交換・技術交流促進も 図る。
- ・日本核磁気共鳴学会と「NMR 技術認定資格制度」の創設・運用に向

けた検討を進める。

- ⑥遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等
  - ・遠隔利用に対応した機器操作環境の整備をすすめる。
  - ・必要となるネットワーク等インフラの調査と検討を進める。
  - ・データ・セキュリティポリシーや利用規程の調査と検討を進める。
  - ・協力機関とともに、装置・技術に関する課題解決や新技術開発・高度化での協力・連携を進めるとともに、安全性の高い試料運搬・保管の仕組みの検討を進める。
  - ・人材育成とコミュニティ連携のための利用枠の検討
- ⑦コミュニティ形成、国際的ネットワーク構築
  - ・JASIS2022 に出展し、NMR-PF の取組について関連する出展者や参加者との交流・情報交換を行う。
  - ・NMR-PF シンポジウムを開催し、産学ユーザーを交えて成果発表や 意見交換を行う。
- (ii) 再委託機関(代表機関を除く実施機関) としての業務

【機関名:国立大学法人北海道大学】

①利用支援体制の構築

本機関独自の機器共用事業及び第2期 NMR プラットフォーム参画により構築してきた機器共用利用支援体制を再整備する。

業務主任、担当責任者を本機関の教授1名が担当し全体統括を行う。 また、同教授に加え、本機関の研究院長及び教授2名が、北海道大学 先端 NMR ファシリティ運営委員会委員として、NMR 測定、データ解析 の助言を行う。

さらに、本機関で雇用した技術分野に精通した専門スタッフである技術職員1名、学術研究員1名も業務に参加し、NMR 測定、データ解析の助言を行う。

#### ②共用機器

60MHz~800MHz の溶液及び固体 NMR 装置で構成。

遠隔利用・自動利用可能な冷却機能付きオートサンプルチェンジャーを装備した800MHz溶液NMR装置、超高速MAS、半固体試料(HR-

MAS)等が測定可能な 600MHz 及び 800MHz の固体 NMR 装置、冷媒不要の永久磁石低磁場タイプでありながら生体系の NMR 測定も対応可能な高性能 60MHz 溶液 NMR 装置などから構成され、研究・産業分野の幅広いニーズに対応する。

#### ③専門スタッフの配置・育成

NMR を専門とした教員、技術職員、学術研究員等が中心となり機器共用利用の支援及び、NMR教育用のICT教材と遠隔利用も積極的に活用したハンズオン講習等を実施することで、高度な NMR 技術を習得した高度人材の育成を進める。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

プラットフォーム内での相互利用環境の整備や外部へ提供する遠隔利用の質の向上のため、本機関独自に構築を進めている遠隔利用・自動化に関する技術情報の提供や、他機関との技術交流を進める。特に、高磁場 NMR を中心とした NMR プラットフォームの機器利用ネットワークの形成にも寄与すると期待される、永久磁石低磁場 NMR の利用に関する技術開発を進める。

# ⑤その他

本機関で採択されているコアファシリティ構築支援プログラムとの連携についての検討を行う。特に、高度人材育成・高度人材供給の場となるコンソーシアムの形成を目指し、コアファシリティとの情報交換、基本的な制度設計を進める。

# 【機関名:国立大学法人東北大学 東北メディカル・メガバンク機構】

#### ①利用支援体制の構築

令和3年度に引き続き、当機構の最先端のNMR装置について内外の研究者や企業による利活用の促進・支援を行う。具体的には事業に関わる助教2名が技術指導・教育を行うと共に、技術補佐員3名が具体的な設備の管理や施設利用者への対応を行う。

#### ②共用機器

溶液用高磁場 NMR 装置 3 台

ブルカー社製 800MHz NMR (AvanceNEO、TXI CryoProbe、 SampleJet (冷却機能付き))

ブルカー社製 600MHz NMR (AvanceNEO、TCI CryoProbe、 SampleJet (冷却機能付き))

ブルカー社製 600MHz NMR (AvanceIIIHD、TCI CryoProbe、SampleJet (冷却機能付き))

微量かつ不安定な溶液試料の多検体自動測定も可能な、冷却機能付きオートサンプルチェンジャーと高感度クライオプローブを全てのNMR装置に装備しており、特に人の検体の測定など医学・生物系研究に多数の実績がある。また、遠隔操作にも対応しており幅広い分野の研究開発事業に対応する。なお、本NMR装置は本事業により保守管理を行うことで装置の継続的な管理・利用を実現する。

#### ③専門スタッフの配置・育成

令和3年度に引き続き専門スタッフを配置して利用支援体制を維持すると共に、より高度な測定法の指導等育成を行う。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

これまでに当機関が実施してきた先端研究基盤共用促進事業で 蓄積した遠隔操作技術や実験の自動化に関わるノウハウを他の実施機関とも共有すると共に、システムの高度化・標準化を進めることで利用や連携を拡大する。

#### ⑤その他

当機関の特徴であるメタボローム解析など医学生命分野における強みを生かして内外の研究者や企業への各種技術支援を行う。支援に際しては、当大学に設置のクライオ電子顕微鏡や質量分析装置などと連携して最先端の技術支援を目指す。

# 【機関名:国立大学法人東京大学】

#### ①利用支援体制の構築

東京大学・薬学系研究科においては、~30 kDa 程度のタンパク質の みならず、膜タンパク質等の高分子量のタンパク質に対しても適用可 能な独自の測定技術を活用し、動的構造解析を可能にする実施体制を 整える。高度利用支援体制を拡充させるため、技術分野に精通した教員1名を代表者のほかに共用機器の管理に当たらせるとともに、プラットフォーム内での連絡調整業務などを補助する事務補助者1名、窒素充填など共用設備管理の補助を行う研究補助員1名を配置する。

#### ②共用機器

ブルカー、800MHz、溶液、分光器: AVANCE III HD、プローブ: cryo-TXO

ブルカー、600MHz、溶液、分光器: AVANCE、プローブ: cryo-TXI 800MHz および 600MHz の静磁場強度で稼働する上記の溶液 NMR 装置を共用する。これら装置では、一般的に用いられるほぼすべての多核多次元測定が可能であり、クライオプローブでの高感度も図られていることから、研究・産業分野の幅広いニーズに対応する。

# ③専門スタッフの配置・育成

当該実施機関においては NMR の専門スタッフは置かないが、代表機関や他機関が雇用する専門スタッフを技術研修で受け入れるなど技術向上や新技術獲得の機会を提供し、人材交流・情報交換・技術交流促進を図る。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

代表機関や他の参画機関からの技術的支援を受けながら、遠隔利用に対応した 1)機器操作、2)ネットワークインフラ等、3)データ・セキュリティポリシーや利用規程の整備を進める。

#### 【機関名:公立大学法人横浜市立大学】

#### ①利用支援体制の構築

高度利用支援体制を拡充させるため、技術分野に精通した専門 スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタッフ1名、施設共用技術指導研究員1名、施設利用・技術指導監督者1名を配置するとともに、プラットフォーム内での連絡調整業務やセミナー等の運営を補助する事務補助者1名を配置する。

「第61回 NMR 討論会」に参加し、NMR に関する最新情報などを収集及び広報活動を行う。

#### ②共用機器

600MHz~950MHz の溶液及び固体 NMR 装置で構成。950MHz の LC- NMR 及び固体 NMR、LC-NMR と 16 本のオートサンプラーを装着した 700MHz、480 本のオートサンプルチェンジャーを装着した 800MHz のほか 600MHz とする。

#### ③専門スタッフの配置・育成

技術分野に精通した専門スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタッフ1名、施設共用技術指導研究員1名、施設利用・技術指導監督者1名を配置するとともに、研究会や講習会を利用してNMR人材の育成を図る。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

いち早く産業界に遠隔測定の開放を行ってきたノウハウを生か して、プラットフォーム内の代表機関や実施機関と密に連携し、共有システムの統一化を進める。

#### ⑤その他

本学の施設利用・技術指導監督が主催しているよこはま NMR 研究会を年に数回開催し、NMR 及び関連分野の研究会を開催する。

「第61回 NMR 討論会」に参加し、NMR に関する最新情報などを収集及び広報活動を行う。

NMR を維持するため、液体ヘリウム充填作業及び液体ヘリウム容器 運搬・回収作業を実施する。

【機関名:大学共同利用機関法人自然科学研究機構生命創成探究センター】 ①利用支援体制の構築

NMR 計測・解析の支援のため、教員3名を配置する。

# ②共用機器

ブルカー AVANCE NEO 800US (5mm H-C-N TCI型 cryo)

生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解 能測定支援が可能である。極低温プローブによる <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C-<sup>15</sup>N 三重共鳴 測定に対応している。

#### ③専門スタッフの配置・育成

事業に関わる教員3名がNMR計測・解析を行う人材の育成に携わる。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

当該 NMR 装置について、遠隔地からの利用・実験に関する自動化の 試みはこれまで限定的であった。そのため、本事業にて、多拠点での 実施例を参考に、遠隔化・自動化・高度化の可能性を追求する。

#### ⑤その他

生命創成探究センターでは、大学共同利用機関法人として、施 設利用、共同利用研究を行っており、当該 NMR 装置について、従前から全国の幅広い研究分野の研究者への共同利用が行われてきている。今後も施設利用、共同利用研究の装置として活用される計画である。利用申請の受付については生命創成探究センターの共同利用システムを活用する。

ナノテクノロジープラットフォーム (ナノテク PF) との連携について、ナノテク PF 内分子・物質合成プラットフォームの代表機関である本機関が中心となって検討を行う。

#### 【機関名:国立大学法人大阪大学】

#### ①利用支援体制の構築

溶液および固体 NMR の専門性を持つ教員から成る課題選定委員会を設置する。NMR 利用に経験のある教員と専門スタッフで運営会議を毎月開催して、通常の NMR 測定支援に加えて、新型コロナウイルス感染症など社会情勢にも即応した支援体制の点検・改善ができる体制を作る。利用者資格認定制度も実施して、利用者の安全で容易な測定の便宜を図る。特に、技術指導研究員のリエゾン 5 名は利用者と装置利用について直接連絡調整を行うために本事業にて雇用する。リエゾンの1 名はポータルサイトの管理を補助する。連絡調整と利用契約の便宜を図るために事務補佐員1名を本事業にて雇用する。

#### ②共用機器

溶液 NMR では、950, 800, 600, 500, 400 MHz、固体 NMR では、700

(2 台), 600, 500MHz の静磁場強度で稼働する装置を共用する。これら装置では、クライオプローブでの高感度多核多次元測定、自動試料交換測定、<sup>19</sup>F-NMR 測定、超高感度 DNP 測定、超高速マジック角試料回転などの高度な測定機能を提供する。

### ③専門スタッフの配置・育成

高度な NMR 技術の専門性をもつ教授、准教授らの指導の下に、利用支援および高度 NMR 開発と利用を行うリエゾンを 5 名と事務職員 1 名を配置する。これらリエゾンは溶液および固体 NMR などの領域で高度な利用技術を提供できる。講習会の開催、機関間との利用連携なども実施して、より高度な技術を持つ専門スタッフの育成を行う。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

溶液 NMR の標準的な測定ではすでにリモート測定の環境を整備しており、引き続き、高度な NMR 測定、固体 NMR 測定でもリモート測定、自動測定の環境を整備する。オンライン利用説明会を実施する。また、NMR データベースグループ BMRBj とも連携して、熟練スタッフが持つ暗黙知を共有・活用するナレッジマネジメントを構築して行く。先進的な NMR 装置の開発と利用のために、大阪大学協働研究所を利用して日本電子株式会社と研究開発を行う。

#### ⑤その他

蛋白研のNMR施設で実施している共共拠点、JST A-STEP、JST OPELA、MEXT Q-LEAP、AMED BINDS、PDBj/BMRBj、コアファシリティ構築支援プログラムの事業とは、重複を避けつつ連携して NMR 利用の拡大と高度化をはかる。アカデミックな NMR 研究者に加えて産業界の NMR 研究者も多数出席する第70回固体 NMR・材料フォーラムを開催して、これにも基づいて NMR 利用者との連携を進める。NMR 技術利用者のコミュニティである日本核磁気共鳴学会の運営に協力して連携を進める。また、NMR 研究者や利用者が多数出席する第61回 NMR 討論会と CBI 学会2022 大会に参加して、情報交換や議論を行い連携できる関係を作る。

# 【機関名:国立大学法人 広島大学】

#### ①利用支援体制の構築

内閣府「地方大学・地域産業創成交付金」の支援を得て進める 地域企業との連携を基盤として NMR を用いた地域企業研究支援体制を構築する。技術分野に精通した専門スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタッフ1名、施設共用技術指導研究員1名を配置する。固体・溶液・半固体の全ての状態のサンプルに対応した測定支援を行う。中国地方ファシリティーネットワークを通して、中国地区の大学企業への NMR 利用講習・支援を行う。 700MHz 装置、500MHz で遠隔利用の運用を開始、中四国地域・九州地域からの遠隔利用に供する。

#### ②共用機器

ブルカー 700MHz 溶液用 (クライオ3重共鳴プローブ装備、タンパク質構造解析対応)

ブルカー 500MHz 溶液 NMR(オートサンプルチェンジャー装備、低分子化合物の自動測定)

バリアン 400MHz 溶液(低分子合成化合物 <sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C スペクトルの迅速 測定に対応)

バリアン 500MHz 溶液・半固体 (Nano-Probe を装備しており液晶など半固体測定に対応)

バリアン 600MHz 固体 (MAS プローブを装備しており、ゴムなど固体試料の構造解析に対応)

#### ③専門スタッフの配置・育成

各装置には、管理責任者としての教員 1 名と技術職員 1 名が配置 する。教員とともに依頼計測を行う中で技術職員の技能向上を進める。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

広島大学の NMR 装置の遠隔利用を通して、近隣地域の研究機関の研究者・技術職員に装置遠隔利用に慣れてもらうことにより、他の NMR プラットフォーム拠点装置の遠隔利用の促進を図る。

#### ⑤その他

NMR 学会の活動を連携した NMR 利用者コミュニティに対する支援 を 進める。NMR を担当する技術職員のコミュニティである NMR-Club の活動を支援する。とくに、中国地方ファシリティーネットワークに参画する中国地区の大学の技術職員を対象として、遠隔・オンサイトでの 実機を使った高度 NMR 利用研修のためにマシンタイムを提供する。

# (iii)協力機関の取組

株式会社 JEOL RESONANCE、ブルカージャパン株式会社は、NMR 技術に関する教育・人材育成活動を支援する。装置・技術に関する課題解決や新技術開発・高度化での協力・連携を進める。

株式会社シゲミは NMR 試料管に関して、大陽日酸株式会社は低温保存運搬に関して、それぞれが有する豊富な知見を活かして、安全性の高い試料運搬・保管の仕組みの検討に協力する。

#### 2. 2 成果·実績

(i) 委託機関(代表機関) としての業務

【機関名:国立研究開発法人理化学研究所】

- ①プラットフォーム運営体制の構築
  - 1)プラットフォーム実施機関、協力機関、事業支援機関と連携するための取組
    - ・NMR-PF 事業の取りまとめを行い、事業の事務局機能を果たした。
    - ・NMR-PF の運営体制として、以下の委員会を設置、開催した。
      - -NMR-PF 運営の戦略の検討・決定を行う「運営委員会」(北海道大学、 東北大学、東京大学、理化学研究所、横浜市立大学、分子科学研究 所、大阪大学、広島大学の8機関で構成)を2回(いずれもオンラ イン)開催した。

#### 議論の内容

令和4年4月27日開催:「連携・人材育成」利用枠の運用 令和4年8月3日開催:昨今のヘリウム等の高騰に伴う影響につ いて

-NMR-PF の運営に意見や助言を行う「諮問委員会」(外部有識者3名で構成)を2回(令和4年4月27日、令和4年8月3日)、オンラインにて開催した。

#### 議論の内容

令和4年4月27日開催:利用時間の上限について

令和4年8月3日開催:シンポジウムについて

- -NMR-PF に設置する利用枠の課題選定を行う「課題選定委員会」(実施機関及び外部有識者4名で構成)を3回(令和4年7月20日、令和4年11月8日、令和5年3月15日)、開催(いずれもメール審議)した。「先端利用開発課題」を13課題採択した。
- ポータルサイト(<a href="https://nmrpf.jp">https://nmrpf.jp</a>)の英語化など内容拡充・機能強化した。
- ・取組課題毎に必要に応じた部会の設置については運営委員会にて対 応することとした。
- ・実施機関である広島大学(令和5年3月1日)と北海道大学(令和5年3月23日)の施設を訪問し、事業実施状況の確認、設備 視察ならびに責任者・現場担当者との意見交換をおこなった。

#### 2)他のプラットフォームと連携するための取組

- ・プラットフォーム連携意見交換会(令和4年5月9日、7月20日・オンライン、令和4年9月7日・千葉県TKPガーデンシティ幕張、令和4年11月1日、令和5年1月10日・オンライン)に参加し、展示会合同出展の打合せ、連携できる可能性がある取組についての議論、コアファシリティ構築支援プログラムなど他事業との連携実績などについて情報を共有した。
- ・JASIS2022 展示会(令和 4 年 9 月 7~9 日・千葉県幕張メッセ)に合同出展したほか、各プラットフォームが開催するシンポジウム等のイベント情報を共有し、各プラットフォームよりプラットフォーム内外に向けた広報活動を行った。
- ・プラットフォームの共通課題である AI/深層学習に関連する取組と成果の共有を目的とした「データ駆動型・AI 駆動型研究推進のための統合環境ワークショップ」(令和5年3月9日・オンライン)を共催した。
- ・顕微イメージングソリューションプラットフォームの代表・実施機関である北海道大学・創成研究機構(令和5年3月24日)ならびに広島大学・自然科学研究支援開発センター(令和5年3月2日)を訪問し、施設設備の視察とともに具体的な技術連携の可能性について議論し、本事業全般に関する意見交換を行った。

#### ②利用支援体制の構築

・NMR-PF において NMR 技術を活用したイノベーション創出を加速するた

- め、以下の利用枠を設置した。
- 「先端利用開発」利用枠:NMR 技術領域の飛躍的な発展に資する課題を実施。課題選定委員会において課題選定を行った(表 1 に令和 4 年度の実施課題をリストアップした)。
- 「連携・人材育成」利用枠:コミュニティ連携や人材育成活動に資する課題を実施。運営委員会において運用を行った。

表 1. 「先端利用開発」採択課題一覧(令和 4 年度)

課題番号	課題名	実施責任者
PF22-01-044	N-メチルペプチドの立体構造解析基盤	東京大学大学院工学系研
	としての Karplus 係数の決定およびそ	究科化学生命工学専攻
	の応用	森本 淳平
PF22-01-045	微小重力下で形成したアミロイド線維	自然科学研究機構 生命
	の多次元高分解能固体 NMR 解析	創成探究センター
		矢木 真穂
PF22-01-046	K, Na, NbO3 をドープした珪酸塩系ガラ	名古屋工業大学 技術部
	スの93NbおよびMQMAS測定による局所	計測分析課
	構造解析	瀧雅人
PF22-01-047	機能性ナノグラフェンの開発	広島大学大学院先進理工
		系科学研究科基礎化学プ
		ログラム
DD00 01 040		関谷 亮
PF22-01-048	ポルフィリンとトリニトロフルオレノ	広島大学大学院先進理工
	ンの超分子錯体形成を利用した分子の	系科学研究科
PF22-01-050	配列構造制御   凍結保護ポリマー溶液の低温時の分子	灰野 岳晴 北陸先端科学技術大学院
PF22-01-050	保結保護ホリマー俗板の低温時の分子   ダイナミクス測定による凍結保護機序	北陸尤斒科子技術人子院   大学
	ダイノミグへ側たによる保福休護機庁   の解明	松村 和明
PF22-01-051	NMR と電子顕微鏡を用いたハイブリッ	徳島大学先端酵素学研究
11722 01 031	ド動的構造解析	形面八子儿编 <u>的</u> 系子切几一
	1、到171年,但17年7月	齋尾 智英
PF22-01-052	GPCR・モジュレーター特異的複合体の	群馬大学
1122 01 002	構造: 単独で特定の構造を形成しない	若松 馨
	ペプチドのペアを用いた解析	
PF22-01-053	生体活性ガラスの歯質欠損修復機能の	東京医科歯科大学大学院
	解析	医歯学総合研究科う蝕制
		御学分野
		平石 典子
PF22-01-054	パターン認識受容体とリガンド糖鎖の	東北医科薬科大学
	相互作用解析	真鍋 法義
PF22-01-055	修飾ヌクレオチドを利用した核酸ルー	産業技術総合研究所 バ
	プ領域のシグナル帰属	イオメディカル研究部門
		山崎 和彦
PF22-01-056	HIV エンベロープスパイク蛋白質の膜	九州大学大学院薬学研究
	近傍のエピトープを認識する抗体の相	院

	互作用解析	Jose M.M. Caaveiro
PF22-01-057	強力な電位依存性ナトリウムチャネル 阻害活性を有する天然物の構造決定	東北大学大学院農学研究 科天然物生命化学分野
		山下 まり

・高度利用支援体制の構築のため、課題に対する解決策を提示して実施する専門スタッフとして、研究実績も豊富な事業統括補佐5名、リエゾン活動およびNMR測定解析に関する高度利用支援研究員を兼務するスタッフ2名(うち1名はタンパク質試料調製の高度利用支援研究員を兼ねる)、リエゾン活動およびNMR測定解析に関する高度利用支援技術員を兼務するスタッフ1名、NMR測定解析に関する高度利用支援研究員1名、NMR装置調整に関する高度利用支援技術員1名、プラットフォーム事務局運営に関する高度利用支援技術員1名を、それぞれ配置した。このうち高度利用支援研究員3名、高度利用支援技術員2名を本事業で雇用した。

# ③ワンストップサービスの設置

- ・ワンストップサービスの質の向上を企図して、NMR プラットフォームポータルサイトを拡充・機能強化した。NMR プラットフォームポータルサイトでは、北海道大学、東北大学、東京大学、理化学研究所、横浜市立大学、分子科学研究所、大阪大学、広島大学のNMR 施設の装置情報を検索できる機能を有しており、また、NMR 施設の利用案内、イベントの開催情報、利用事例、教育教材等を掲載している。NMR プラットフォームポータルサイトのアクセス数は 89,392 件/年(令和 4 年度)であった。
- ・ワンストップサービス窓口を開設し、プラットフォーム運営担当者 (高度利用支援技術員(事務局運営))を配置した。

#### ④共用機器

・400~900MHz の溶液及び固体 NMR 装置で構成され、多数試料の自動 連続測定に対応したオートサンプルチェンジャーや超高速 MAS プロ ーブを備えることにより、多様なニーズに対応した。

#### ⑤専門スタッフの配置・育成

・講習会、セミナーやシンポジウム等の開催については、各実施機関が 主体のもと、詳細な実施場所、時期等について運営委員会で情報共有 しながら検討を行った。必要に応じて学会等のコミュニティと連携し て開催し、コミュニティの結成・強化に貢献するとともに、こうした 情報共有を通じて専門スタッフの人材育成を行った(表 2)。

表 2. 令和 4 年度における講習会・セミナー・シンポジウム (参加者数の括弧は内数)

開催日	タイトル	参加者数
令和4年		
5月19日~20日	「基礎から学ぶ最新 NMR 解析法 第4回 ワークショップ ー創薬研究および産 業研究における NMRー」 (東京大学、大阪大学)*	139 名
5月20日	第 70 回固体 NMR 材料フォーラム(大阪 大学)	60 名
7月28日	よこはま NMR 研究会 第 69 回ワークショップ「RNA 構造と NMR」 (横浜市立大学)*	77 名
8月9日	NMR スペクトル処理ソフトウェア「Mnova セミナー」(北海道大学)**	38名 (オンライン 25名)
8月31日	NMR プラットフォーム×NMR Club コラ ボレーション企画「SOFAST 法(高速測 定法)講習会(大阪大学)**	10 名
9月13日~14日	「基礎から学ぶ最新 NMR 解析法 第 5 回 ワークショップ - NMR ハードウェア - 」(東京大学、大阪大学、理化学研究所)**	128 名
10月22日	理化学研究所・横浜市立大学一般公開	176名 (NMR・クライオ電顕 ツアー参加者:20 名)
10月22日~11月20日	理化学研究所・横浜市立大学一般公開 横浜市立大学施設紹介・セミナー動画 公開*	2,970名 (NMR バーチャルラ ボツアー 209名)
10月27日~28日	The 7 <sup>th</sup> International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR よこはま NMR 研究会 第7回国際シンポジウム「NMR 創薬」(横浜市立大学)	79 名
11月14日	NMR 先端技術講習会「The use of asymmetric nuclear interaction in liquid NMR for structural information Prof. Nico Tjandra, Ph.D.」(広島大学・東京大学)**	26 名

11月28日	NMR プラットフォームシンポジウム	103 名
11 / 1 20 д	2022**	(オンライン 85 名)
12月14日~15日	北大装置実習コース「蛋白質 NMR 実習」 【第1回】(北海道大学)	10 名
令和5年		
1月8日	北大装置実習コース「蛋白質 NMR 実習」【第2回】(北海道大学)	10名
1月13日	International Symposium on Structure and Folding of Disease Related Proteins, Korea (ソウル大 学・大阪大学)	45 名
1月26日	横浜市立大学 LC-NMR 講習会(横浜市立 大学)	3名
2月27日~28日	第 3 回インドー日本 NMR ワークショップ (北海道大学) **	61 名 (オンライン 11 名)
3月10日	よこはま NMR 研究会 第 70 回ワークショップ「RNA 生物学」 (横浜市立大学) *	56 名
3月16日~17日	「基礎から学ぶ最新 NMR 解析法第 6 回ワークショップ - 統合型構造生物学研究-」(東京大学、大阪大学) *	110名

<sup>\*</sup> オンラインで開催した

- \*\* ハイブリッド形式で開催した
  - ・課題に対する解決策を提示して実施する専門スタッフとして高度 利用支援研究員3名(うち3名を本事業にて雇用)、高度利用支援 技術員3名(うち2名を本事業にて雇用)を配置した。
  - ・各機関の専門スタッフを対象とした派遣研修制度による技術向上や 新技術獲得の機会を提供し、人材交流・情報交換・技術交流促進も 図った。
  - ・日本核磁気共鳴学会と「NMR 技術認定資格制度」の創設・運用に向けた検討を進めた(学会長を通じて学会理事会(令和4年4月4日開催)との意見交換を進めた)。
- ⑥遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共 有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援(利用と機 器開発の連携拡大)等
  - ・遠隔利用に対応した機器操作環境の整備を進めた。
  - ・必要となるネットワーク等インフラの調査と検討を進めた。
  - ・データ・セキュリティポリシーや利用規程の調査と検討を進めた。
  - ・協力機関とともに、装置・技術に関する課題解決や新技術開発・高

度化での協力・連携を進めるとともに、安全性の高い試料運搬・保 管の仕組みの検討を進めた。

- ・人材育成とコミュニティ連携のための利用枠を運用した。
- ・情報科学分野との融合により、データ計測中に測定パラメータを適 応的に最適化していく「適応的 NMR 測定」による NMR 測定の高度化 を進めた。

# ⑦コミュニティ形成、国際的ネットワーク構築

- ・JASIS2022 に出展し、NMR-PF の取組について関連する出展者や参加者との交流・情報交換を行った。
- ・NMR プラットフォームシンポジウム 2022 を開催し、産学ユーザーを交えて成果発表や 意見交換を行った。

表 3. 施設毎の外部共用状況(件数、日数、時間数)

	1. 有償利用	<u> </u>	2. 無償利用	
		(0) 1 375 644		(0) 1 376 666
	(1) 企業等	(2) 大学等	(1) 企業等	(2) 大学等
北大	3 件	95 件	0 件	0 件
	21 日	196 日		
	170 時間	3, 153 時間		
東北大	1 件	0 件	0 件	64 件
	4 日			311 日
	40 時間			3,727 時間
東大	4件	5 件	0 件	2 件
	14 日	10 日		32 日
	124 時間	264 時間		352 時間
理研	37 件	2 件	0 件	28 件
	50 日	7 日		106 日
	898 時間	150 時間		2,280 時間
横市大	22 件	0 件	0 件	6 件
	49 日	0 日		36 日
	1,176 時間	0 時間		864 時間
ExCELLS	0 件	0 件		146 件
				358 日
				8,592 時間
阪大	17 件	0 件	0 件	17 件
	26 日			439 日
	624 時間			10,536 時間
広大	61 件	51 件	0 件	0 件
	15 日	23 日		

47.5 時間	172 時間		
---------	--------	--	--

表 4. NMR プラットフォームの NMR 装置リスト

機関名	対象施設・設備名	メーカー
	先端 NMR ファシリティ 800 MHz 溶液・固体・半固体 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	先端 NMR ファシリティ 800 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	先端 NMR ファシリティ 600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
国立大学法人	先端 NMR ファシリティ 600 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
北海道大学	先端 NMR ファシリティ 600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	先端 NMR ファシリティ 600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	先端 NMR ファシリティ 600 MHz 溶液 NMR 装置	日本電子(株)
	先端 NMR ファシリティ 60 MHz 溶液 NMR 装置	マグリテック社
	東北メディカル・メガバンク機構 800MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
国立大学法人 東北大学	東北メディカル・メガバンク機構 600MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	東北メディカル・メガバンク機構 600MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
国立大学法人	薬学系研究科         800 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
東京大学	薬学系研究科 600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 900 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 900 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 900 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
国立研究開発法人理化学研究所	NMR 研究基盤 800 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 800 MHz 固体 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 700 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤 700 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)

	NMR 研究基盤	
	TOO MHz 固体 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤	
	700 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
	NMR 研究基盤	
	600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	NMR 研究基盤	ブルカージャパン(株)
	600 MHz 溶液 NMR 装置	
	NMR 研究基盤	日本電子(株)
	600 MHz 固体 NMR 装置	1
	NMR 研究基盤 600 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
	NMR 研究基盤	
	400 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
	大学院生命医科学研究科	-3 , 1, 3° 0, (4th)
	950 MHz 溶液・固体 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	大学院生命医科学研究科	ブルカージャパン(株)
	800 MHz 溶液 NMR 装置	77V7 7 Y 1 (1/K)
公立大学法人	大学院生命医科学研究科	ブルカージャパン(株)
横浜市立大学	700 MHz 溶液 NMR 装置	The state of the s
	大学院生命医科学研究科	ブルカージャパン(株)
	600 MHz 溶液 NMR 装置 大学院生命医科学研究科	
	大子阮生叩医科子听先科 500 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	分子科学研究所	
分子科学研究所	800MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	蛋白質研究所	ディム 22、22、(44)
	950 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
	蛋白質研究所	ブルカージャパン(株)
	800 MHz 溶液 NMR 装置	2 / V / V (pk)
	蛋白質研究所	日本電子(株)
	700 MHz 固体 DNPNMR 装置	
	蛋白質研究所 700 MHz 固体 NMR 装置	日本電子(株)
国立大学法人	蛋白質研究所	
大阪大学	600 MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
7 (1//07)	蛋白質研究所	
	600 MHz 固体 DNP NMR 装置	日本電子(株)
	蛋白質研究所	ブルカージャパン(株)
	500 MHz 溶液 NMR 装置	ブルガーンヤハン(株)
	蛋白質研究所	日本電子(株)
	500 MHz 固体 NMR 装置	PATE 1 (NIV)
	蛋白質研究所	ブルカージャパン(株)
国子十份许工	400 MHz 溶液 NMR 装置	
国立大学法人 広島大学	自然科学研究支援開発センター 700MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
四四八十	TOUMILL 俗似 NMI 农但	_1

自然科学研究支援開発センター 600MHz 固体 NMR 装置	バリアン社
自然科学研究支援開発センター 500MHz 溶液 NMR 装置	ブルカージャパン(株)
自然科学研究支援開発センター 500MHz 溶液・半固体 NMR 装置	バリアン社
自然科学研究支援開発センター 400MHz 溶液 NMR 装置	バリアン社

# (ii) 再委託機関(代表機関を除く実施機関)としての業務

【機関名:国立大学法人北海道大学】

# ①利用支援体制の構築

本機関独自の機器共用事業及び第2期 NMR プラットフォーム参画により構築してきた機器共用利用支援体制を再整備した。

業務主任、担当責任者を本機関の教授1名が担当し全体統括を行った。 また、同教授に加え、本機関の研究院長及び教授2名が、北海道大 学先端NMRファシリティ運営委員会委員として、NMR測定、データ解 析の助言を行った。

さらに、本機関で雇用した技術分野に精通した専門スタッフである技術職員1名、学術研究員1名も業務に参加し、NMR測定、データ解析の助言を行った。

#### ②共用機器

60MHz~800MHzの溶液及び固体 NMR 装置で構成した。

遠隔利用・自動利用可能な冷却機能付きオートサンプルチェンジャーを装備した 800MHz 溶液 NMR 装置、超高速 MAS、半固体試料(HR-MAS)等が測定可能な 600MHz 及び 800MHz の固体 NMR 装置、冷媒不要の永久磁石低磁場タイプでありながら生体系の NMR 測定も対応可能な高性能 60MHz 溶液 NMR 装置などから構成され、研究・産業分野の幅広いニーズに対応した。

#### ③専門スタッフの配置・育成

NMR を専門とした教員、技術職員、学術研究員等が中心となり機器 共用利用の支援及び、NMR 教育用の ICT 教材と遠隔利用も積極的に活 用したハンズオン講習等を実施することで、高度な NMR 技術を習得し た高度人材の育成を進めた。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共

有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援(利用と機器開発の連携拡大)等

プラットフォーム内での相互利用環境の整備や外部へ提供する遠隔 利用の質の向上のため、本機関独自に構築を進めている遠隔利用・自 動化に関する技術情報の提供や、他機関との技術交流を進めた。

特に、高磁場 NMR を中心とした NMR プラットフォームの機器利用ネットワークの形成にも寄与し、大規模なデータ収集によりデータ駆動型サイエンスの基盤ともなることが期待される、永久磁石低磁場 NMR の利用に関する技術開発を進めた。

沖縄科学技術大学院大学(OIST)等と共同で、分解能で劣る低磁場 NMR のスペクトルデータから、高磁場 NMR のデータを教師情報とした 機械学習等により情報を解析する技術について研究開発を行った。

これらの技術を生体試料の代謝産物の網羅解析であるメタボロミクスに応用することで、「データ駆動型メタボローム解析」を行う技術についての基礎的検討を進めた。

## ⑤その他

本機関で採択されているコアファシリティ構築支援プログラムとの連携についての検討を行った。特に、高度人材育成・高度人材供給の場となるコンソーシアムの形成を目指し、コアファシリティ技術支援・設備共用コアステーション (CoSMOS) との情報交換、基本的な制度設計を進めた。

# 【機関名:国立大学法人東北大学 東北メディカル・メガバンク機構】 ①利用支援体制の構築

令和3年度に引き続き、本機関の最先端のNMR装置について内外の研究者や企業による利活用の促進・支援を行った。具体的には本事業に関わる助教2名が技術指導・教育を行うと共に、技術補佐員3名が具体的な設備の管理や施設利用者への対応を行った。

#### ②共用機器

溶液用高磁場 NMR 装置 3 台

ブルカー社製 800MHz NMR (AvanceNEO、TXI CryoProbe、SampleJet (冷却機能付き))

ブルカー社製 600MHz NMR (AvanceNEO、TCI CryoProbe、SampleJet (冷却機能付き))

ブルカー社製 600MHz NMR (AvanceIIIHD、TCI CryoProbe、SampleJet (冷却機能付き))

微量かつ不安定な溶液試料の多検体自動測定も可能な、冷却機能付きオートサンプルチェンジャーと高感度クライオプローブを全ての NMR 装置に装備しており、特に人の検体の測定など医学・生物系研究に多数の実績がある。また、遠隔操作にも対応しており幅広い分野の研究開発事業に対応した。なお、本 NMR 装置は本事業により保守管理を行うことで装置の継続的な管理・利用を実現した。

# ③専門スタッフの配置・育成

令和3年度に引き続き専門スタッフを配置して利用支援体制を維持すると共に、より高度な測定法の指導等育成を行った。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

これまでに本機関が実施してきた先端研究基盤共用促進事業で蓄積した遠隔操作技術や実験の自動化に関わるノウハウを他の実施機関とも共有すると共に、システムの高度化・標準化を進めることで利用や連携を拡大した。

#### ⑤その他

本機関の特徴であるメタボローム解析など医学生命分野における強みを生かして内外の研究者や企業への各種技術支援を行った。支援に際しては、本機関に設置のクライオ電子顕微鏡や質量分析装置などと連携して最先端の技術支援を目指した。

#### 【機関名:国立大学法人東京大学】

①利用支援体制の構築

東京大学・薬学系研究科においては、~30 kDa 程度のタンパク 質のみならず、膜タンパク質等の高分子量のタンパク質に対しても適用可能な独自の測定技術を活用し、動的構造解析を可能にする実施体制を整えた。高度利用支援体制を拡充させるため、技術分野に精通した教員1名を代表者のほかに共用機器の管理に当たらせるとともに、プラットフォーム内での連絡調整業務などを補助する事務補助者1名、窒素充填など共用設備管理の補助を行う研究補助員1名を配置した。

#### ②共用機器

ブルカー、800MHz、溶液、分光器: AVANCE III HD、プローブ: cryo-TXO

ブルカー、600MHz、溶液、分光器:AVANCE、プローブ: cryo-TXI 800MHz および 600MHz の静磁場強度で稼働する上記の溶液 NMR 装置を共用した。これら装置では、一般的に用いられるほぼすべての多核多次元測定が可能であり、クライオプローブでの高感度も図られていることから、研究・産業分野の幅広いニーズに対応した。

# ③専門スタッフの配置・育成

本機関においては NMR の専門スタッフは置かないが、代表 機関や他機関が雇用する専門スタッフを技術研修で受け入れるなど技術向上や新技術獲得の機会を提供し、人材交流・情報交換・技術交流促進を図った。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

代表機関や他の実施機関からの技術的支援を受けながら、遠隔利用に対応した 1)機器操作、2)ネットワークインフラ等、3)データ・セキュリティポリシーや利用規程の整備を進めた。

#### 【機関名:公立大学法人横浜市立大学】

①利用支援体制の構築

高度利用支援体制を拡充させるため、技術分野に精通した専門スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタ

ッフ1名、施設共用技術指導研究員1名、施設利用・技術指導監督者1名を配置するとともに、プラットフォーム内での連絡調整業務やセミナー等の運営を補助する事務補助者1名を配置した。

「第 61 回 NMR 討論会」に参加し、NMR に関する最新情報などを収集及び広報活動を行った。

#### ②共用機器

 $600 \, \text{MHz} \sim 950 \, \text{MHz}$  の溶液及び固体 NMR 装置で構成。 $950 \, \text{MHz}$  の LC-NMR 及び固体 NMR、LC-NMR と 16 本のオートサンプラーを装着した  $700 \, \text{MHz}$ 、480 本のオートサンプルチェンジャーを装着した  $800 \, \text{MHz}$  のほか  $600 \, \text{MHz}$  とすることとした。

# ③専門スタッフの配置・育成

技術分野に精通した専門スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタッフ1名、施設共用技術指導研究員1名、施設利用・技術指導監督者1名を配置するとともに、研究会や講習会を利用してNMR人材の育成を図った。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

いち早く産業界に遠隔測定の開放を行ってきたノウハウを生かして、 プラットフォーム内の代表機関や実施機関と密に連携し、共有システムの統一化を進めた。

#### ⑤ その他

本機関の施設利用・技術指導監督が主催している「よこはま NMR 研究会」を開催し、NMR 及び関連分野の研究会を開催した。

「第 61 回 NMR 討論会」に参加し、NMR に関する最新情報などを収集及び広報活動を行った。

【機関名:大学共同利用機関法人自然科学研究機構生命創成探究センター】 ①利用支援体制の構築

NMR 計測・解析の支援のため、教員3名を配置した。

#### ②共用機器

ブルカー AVANCE NEO 800US (5mm H-C-N TCI型 cryo)

生体分子複合体をはじめとする低溶解性物質などの高感度・高分解 能測定支援が可能であった。極低温プローブによる <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C-<sup>15</sup>N 三重共 鳴測定に対応した。

#### ③専門スタッフの配置・育成

本事業に関わる教員 3 名が NMR 計測・解析を行う人材の育成に携わった。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

当該 NMR 装置について、遠隔地からの利用・実験に関する自動化の 試みはこれまで限定的であった。そのため、本事業にて、多拠点での 実施例を参考に、遠隔化・自動化・高度化の可能性を追求した。

#### ⑤ その他

生命創成探究センターでは、大学共同利用機関法人として、施設利用、共同利用研究を行っており、当該 NMR 装置について、従前から全国の幅広い研究分野の研究者への共同利用が行われてきている。今後も施設利用、共同利用研究の装置として活用される計画である。利用申請の受付については生命創成探究センターの共同利用システムを活用した。

ナノテクノロジープラットフォーム (ナノテク PF) との連携について、ナノテク PF 内の分子・物質合成プラットフォームの代表機関である本機関が中心となって検討を行った。

#### 【機関名:国立大学法人大阪大学】

#### ①利用支援体制の構築

溶液および固体 NMR の専門性を持つ教員から成る課題選定委員会を設置した。NMR 利用に経験のある教員と専門スタッフで運営会議を毎月開催して、通常の NMR 測定支援に加えて、新型コロナウイルス感染症など社会情勢にも即応した支援体制の点検・改善ができる体制を作った。利用者資格認定制度も実施して、利用者の安全で容易な測定の便宜を図った。特に、技術指導研究員のリエゾン 5 名は利用者と装置

利用について直接、連絡調整を行うために本事業にて雇用した。リエ ゾンの1名はポータルサイトの管理を補助した。連絡調整と利用契約 の便宜を図るために事務補佐員1名を本事業にて雇用した。

# ②共用機器

溶液 NMR では、950, 800, 600, 500, 400 MHz、固体 NMR では、700 (2台), 600, 500MHz の静磁場強度で稼働する装置を共用した。これら装置では、クライオプローブでの高感度多核多次元測定、自動試料交換測定、<sup>19</sup>F-NMR 測定、超高感度 DNP 測定、超高速マジック角試料回転などの高度な測定機能を提供した。

# ③専門スタッフの配置・育成

高度な NMR 技術の専門性をもつ教授、准教授らの指導の下に、利用支援および高度 NMR 開発と利用を行うリエゾンを 5 名と事務職員 1 名を配置した。これらリエゾンは溶液および固体 NMR などの領域で高度な利用技術を提供できた。講習会の開催、機関間との利用連携なども実施して、より高度な技術を持つ専門スタッフの育成を行った。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

溶液 NMR の標準的な測定ではすでにリモート測定の環境を整備しており、引き続き、高度な NMR 測定、固体 NMR 測定でもリモート測定、自動測定の環境を整備した。オンライン利用説明会を実施した。また、NMR データベースグループ BMRBj とも連携して、熟練スタッフが持つ暗黙知を共有・活用するナレッジマネジメントを構築した。先進的なNMR 装置の開発と利用のために、大阪大学協働研究所を利用して日本電子株式会社と研究開発を行った。

#### ⑤その他

蛋白研の NMR 施設で実施している共共拠点、JST A-STEP、JST OPELA、MEXT Q-LEAP、AMED BINDS、PDBj/BMRBj、コアファシリティ構築支援プログラムの事業とは、重複を避けつつ連携して NMR 利用の拡大と高度化を図った。アカデミックな NMR 研究者に加えて産業界の NMR 研究者も多数出席する「第 70 回固体 NMR・材料フォーラム」を開催し、これにも基づいて NMR 利用者との連携を進めた。NMR 技術利用

者のコミュニティである日本核磁気共鳴学会の運営に協力して連携を進めた。また、NMR 研究者や利用者が多数出席する「第 61 回 NMR 討論会」と「日本生物物理学会 2022 大会」に参加し、情報交換や議論を行い連携できる関係を作った。

### 【機関名:国立大学法人 広島大学】

#### ①利用支援体制の構築

内閣府「地方大学・地域産業創成交付金」の支援を得て進める地域企業との連携を基盤として NMR を用いた地域企業研究支援体制を構築した。技術分野に精通した専門スタッフとしてリエゾン活動及び施設共用技術指導研究員を兼務するスタッフ 1 名、施設共用技術指導研究員 1 名を配置した。固体・溶液・半固体の全ての状態のサンプルに対応した測定支援を行った。中国地方ファシリティーネットワークを通して、中国地区の大学企業への NMR 利用講習・支援を行った。700MHz,500MHz 装置で遠隔利用の運用を開始し、中国地域・四国地域・九州地域からの遠隔利用に供した。

# ②共用機器

ブルカー 700MHz 溶液 (クライオ3重共鳴プローブ装備、タンパク 質構造解析対応)

ブルカー 500MHz 溶液(オートサンプルチェンジャー装備、低分子 化合物の自動測定)

バリアン 400MHz 溶液 (低分子合成化合物 <sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C スペクトルの迅速 測定に対応)

バリアン 500MHz 溶液・半固体 (Nano-Probe を装備しており液晶など半固体測定に対応)

バリアン 600MHz 固体 (MAS プローブを装備しており、ゴムなど固体試料の構造解析に対応)

#### ③専門スタッフの配置・育成

各装置には、管理責任者としての教員1名と技術職員1名が配置した。教員とともに依頼計測を行う中で技術職員の技能向上を進めた。

④遠隔地からの利用・実験の自動化等に係るノウハウ・データの蓄積・共有、利用システムの標準化、技術の高度化に向けた利用支援 (利用と機器開発の連携拡大)等

本機関の NMR 装置の遠隔利用を通して、近隣地域の研究機関の研究者・技術職員に装置遠隔利用に慣れてもらうことにより、代表機関・他の実施機関の NMR 装置の遠隔利用の促進を図った。

#### ⑤その他

NMR 学会の活動を連携した NMR 利用者コミュニティに対する支援を進める。NMR を担当する技術職員のコミュニティである「NMR Club」の活動を支援した。特に、中国地方ファシリティーネットワークに参画する中国地区の大学の技術職員を対象として、遠隔・オンサイトでの実機を使った高度 NMR 利用研修のためにマシンタイムを提供した。

# (iii)協力機関の取組

株式会社 JEOL RESONANCE (現日本電子株式会社)、ブルカージャパン株式会社は、NMR 技術に関する教育・人材育成活動を支援した。装置・技術に関する課題解決や新技術開発・高度化での協力・連携を進めた。

株式会社シゲミは NMR 試料管に関して、大陽日酸株式会社は低温保存 運搬に関して、それぞれが有する豊富な知見を活かして、安全性の高い 試料運搬・保管の仕組みの検討に協力した。

#### Ⅲ. フォローアップ調査項目

- 3.1 令和5年度以降の取組実施に向けた課題、問題点
  - ・令和3年度に引き続き、慢性化している物流混乱に加えロシアのウクライナ侵攻が重なり、円安基調もあいまって、NMR装置の運用に欠かせないヘリウムに関して供給不足と価格高騰が深刻化しており、さらに、電気料金や液体窒素価格の高騰も進んでいる。今後の動向次第では施設運営に大きな影響を与えかねない状況であり、注意が必要となっている。
  - ・「データ・セキュリティポリシーや利用規程の調査と検討」に関して、 各機関で定められたポリシーとその運用の具体的内容が、現時点(令和5年5月)では機関外へ公開されていない場合があり、機関の枠を超えた 統一的なポリシー策定を検討するのは時期尚早であることが判明した。

#### 3.2 分野融合・新興領域の拡大について

・北海道大学や理化学研究所では、情報科学分野との融合により機械学習

やベイズ推定等を導入した NMR 計測の高度化が進んでいる。

#### 3. 3 スタートアップ支援について

「連携・人材育成」利用枠を通じて、全国の大学に所属する NMR 技術職員のコミュニティである「NMR Club」と連携し、サンプル輸送や遠隔測定による実地にて、普段触れることのない高磁場装置の高感度データに触れてもらうことができた。また、大阪大学のコアファシリティ構築支援プログラムとも連携した講習会を開催し、実地にて測定・解析をした。これによって職員が抱えていた課題が多数解決したと報告を受けた。

#### 3. 4 共同研究・受託研究について

- ・北海道大学では、本事業を利用した企業 2 社との間で、新たな共同研究 契約の準備を進めるに至った。また、過去も含め本事業を利用した複数 企業との間で、人材育成コンソーシアム連携準備に関する情報交換を進 めた。
- ・東京大学では、本事業の実施に伴い、国内製薬企業 2 社との共同研究契約の締結に至った。