

NMR共用プラットフォーム の将来展望

PFは“開発”と“利用”を橋渡し
“知”を蓄え“人”を育てる



NMR共用プラットフォーム

国立研究開発法人理化学研究所

公立大学法人横浜市立大学

国立大学法人大阪大学

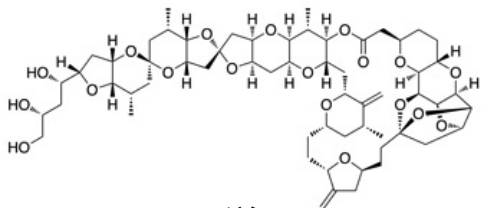
代表

国立研究開発法人理化学研究所

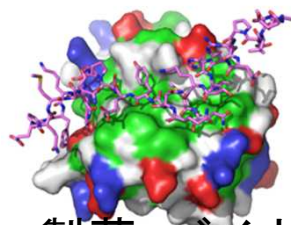
木川 隆則

NMR（核磁気共鳴）技術領域

- 分子の形や動き、分子と分子の関係を原子レベルで解析
- NMR機器市場：
 - 規模：グローバル10億ドル（2013年）、成長率7%弱見込み
 - 内訳：製品（約55%）、冷媒・部品（約25%）、保守サービス（約20%）
- アプリケーション



化学



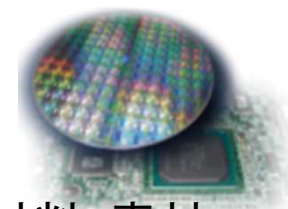
製薬・バイオ



食品・日用品



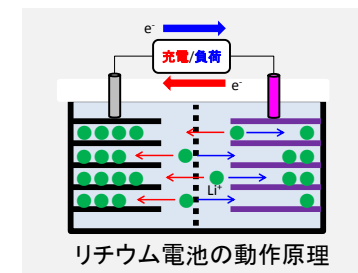
材料・素材



- 技術トレンド
 - 高性能化
 - 高磁場高分解能
 - 高感度
 - 適用範囲の拡大
 - 巨大分子、ゲル、複雑系、in situ
 - 使い勝手の向上
 - 自動化、スループット向上
 - 小型化、低冷媒消費



品質管理



電池材料開発

中規模計測機器基盤の戦略的整備の必要性

- 放射光施設や大規模計算機は国レベルで戦略的・集中的に整備・維持
- 中規模機器(超高磁場NMRなど)も戦略的・集中的な整備・配置が必要な時代に

我が国の研究基盤としてのNMR施設

- 装置は高額(導入費、運営費、アップデート)
(最先端装置(1GHz超)はより高額:15億円以上)
- 定常的維持管理は大変 ノウハウ・人員・コスト・ヘリウム入手難
- 最先端装置開発と汎用化＝商品化の間には大きなギャップ
- 最先端装置の高い性能の活用には高度な利用技術が必要
 - ❖ (アカデミア)学部、部局、研究室レベルでの整備維持困難
 - ❖ (企業)大型装置(800MHz以上)の導入なし
 - ❖ (若手・独立研究者)(特に大型装置の)利用機会少ない
 - ❖ (分野外・非専門家)手軽に活用できない

最先端装置・設備やそれを利用する技術をユーザーに
供する場が必要→NMR共用プラットフォーム

NMR共用プラットフォーム(NMR-PF)

NMRの先端設備・技術を有する三機関が連携



大阪大学
蛋白質研究所 NMR装置群

- ◇ 溶液: 400, 500, 600, 800, 950
- ◇ 固体: 500, 600, 700 × 2
- ◇ 全国共同利用拠点
- ◇ 超高感度DNP装置技術、データベース



理化学研究所 (代表機関)
NMR施設

- ◇ 溶液: 600 × 2, 700 × 2, 800 × 2, 900 × 3
- ◇ 固体: 700
- ◇ パイプライン(試料調製から構造解析まで)
- ◇ 高温超伝導技術、安定同位体標識技術



横浜市立大学
超高磁場超高感度NMR施設

- ◇ 溶液: 500, 600, 700, 800, 900(併), 950
- ◇ 固体: 900(併)
- ◇ 製薬企業
- ◇ LC-NMR技術、相互作用解析技術

NMR-PF これまでの取組(H25-27)

【連携強化】

- ・運営委員会の設置・随時開催
- ・3機関の課題募集時期の同期
- ・3機関の課題選定委員の共通化

【利便性向上】

- ・ポータルサイト開設

【広報・人材育成活動】

- ・セミナー・講習会の共催
- ・展示会等への共同出展
- JASIS, 学会ランチョンセミナー等

【NMR技術領域の発展】

- ・NMR-PF運用「特定課題利用」枠

- 将来的なワンストップサービスに向けた窓口
- 課題受付
- 3施設の利用事例の紹介
- 3施設の共用設備の一括検索(複数の検索条件による施設・装置の絞り込みが可能)

→利用者の利便性向上



特定課題利用枠 (NMR-PFとして一体的に運用)

- プラットフォーム／技術領域の拡大発展に寄与する利用課題を実施
 - ❖ (主として)外部有識者で構成される委員会にて厳正に審査
 - － 最先端技術開発
 - 装置技術
 - 手法技術
 - 利用技術
 - ◇ 産業界、アカデミア、産学連携による技術開発加速
 - － 複数機関にまたがる利用
 - 参画機関間
 - 参画機関・他共用施設間
 - ◇ ワンストップサービス、連携協力のフィージビリティスタディ
- 若手育成重視

独自技術

(理研) 超高磁場磁石技術、安定同位体標識技術

(横市) LC-NMR技術、相互作用解析技術

(阪大) 超高感度DNP装置技術

特定課題利用 採択課題(H25-27)

申請者	所属	課題	利用施設
嶋田 一夫	東京大学	マルチドメインタンパク質CheA-CheY 複合体の動的構造平衡の解析	横浜市立大学
西山 裕介	JEOL RESONANCE	^{14}N solid-state NMR	理化学研究所
末松 浩人	JEOL RESONANCE	600MHzでのDNP- $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -NMRプローブ開発	大阪大学
横山 順	大陽日酸	選択的安定同位体標識導入技術を利用したNMR法によるタンパク質と核酸の機能・構造解析技術の実用化	理化学研究所 横浜市立大学
三島 正規	首都大学東京	NMRによるマルチドメインタンパク質の構造解析のための統合的アプローチ	理化学研究所
末松 浩人 中村 新治	JEOL RESONANCE	700MHzでのDNP- $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -NMRプローブ開発	大阪大学
西山 裕介	JEOL RESONANCE	超高速試料回転固体NMRプローブを用いた材料解析	理化学研究所
田巻 初	北海道大学	超高磁場固体NMRによる7回膜貫通型タンパク質の立体構造解析	横浜市立大学
阿部 郁朗	東京大学	超微量生合成中間体の構造解析及び高感度NMRを用いた生合成経路解析手法の構築	理化学研究所
山崎 和彦	産業技術総合研究所	反応中間体分子の動的構造解析のためのreal-time計測技術開発～タンパク質・DNA相互作用を中心に	理化学研究所
山田 和彦	高知大学	半整数四極子固体核磁気共鳴法開発	理化学研究所
上村 みどり	帝人ファーマ株式会社	^{19}F 核を利用した低親和性リガンドの結合モード決定法の開発	理化学研究所 大阪大学
脇 浩	株式会社三井化学 分析センター	末端基および微量構造の測定法の開発およびその測定法を用いた構造解析手法の確立	理化学研究所

「開発」と「利用」の連携例

DNP法による超高感度固体NMR装置開発（阪大）

2006

2011

2014

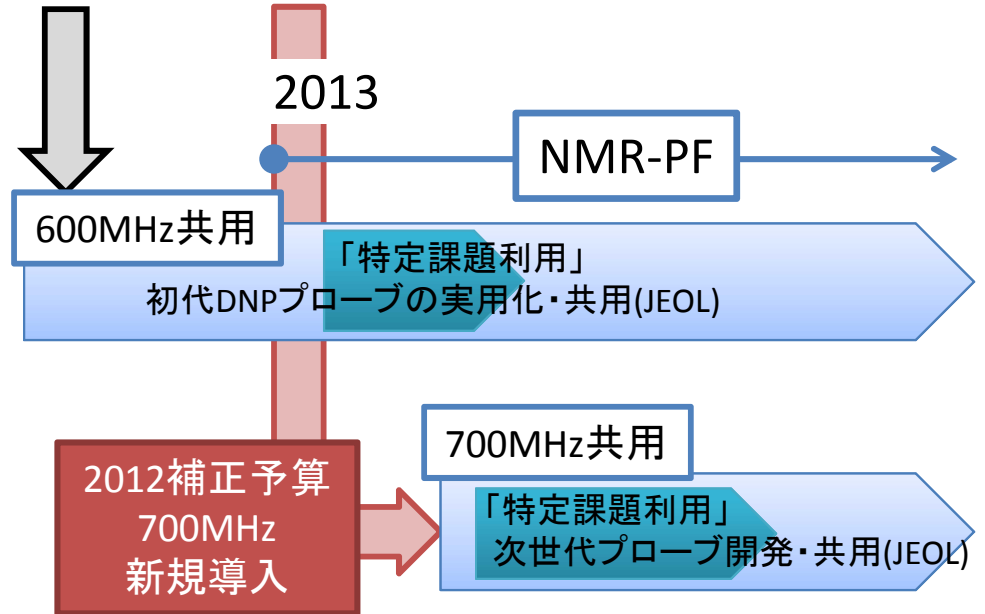
2016

先端計測分析技術・
機器開発プログラム
(JEOL/福井大/阪大)

プロトタイプ機開発 (600MHz)

開発成果の活用
普及促進

先端研究施設
共用促進事業
先端研究基盤共用・
プラットフォーム形成
事業
(阪大)



NMR技術領域の状況

- 次世代NMR装置
 - 汎用分析機器のスケールを超えてしまった
例：1.2GHz NMR(20億円程度) 開発中に受注(8台)
 - 優先・集中配置による効率的活用@EU
- “最先端機器”と“ユーザー”をつなぐ存在が不可欠
 - 「開発」と「利用」「製品化」の間に大きなギャップ
 - 製品化前にどんどん使って成果を出すことが重要
→「利用」し易い環境・周辺技術の整備も必要
 - “最先端機器”を駆使できる高度技術支援者の育成・配置が重要
 - 放射光施設等の大規模機器と似た状況になってきた
 - Agilent社(旧Varian社)撤退により2メーカー体制に(2014年10月)
→“ユーザー”の積極的主導がより重要に

NMR-PFの役割はより大きく

NMR-PF 第二期の方向性

- 「開発」と「利用」を結びつける場となる
- 「連携協力」関係の拡大構築
- 「知」の集積・共有の場
- 「人材」育成機能の強化

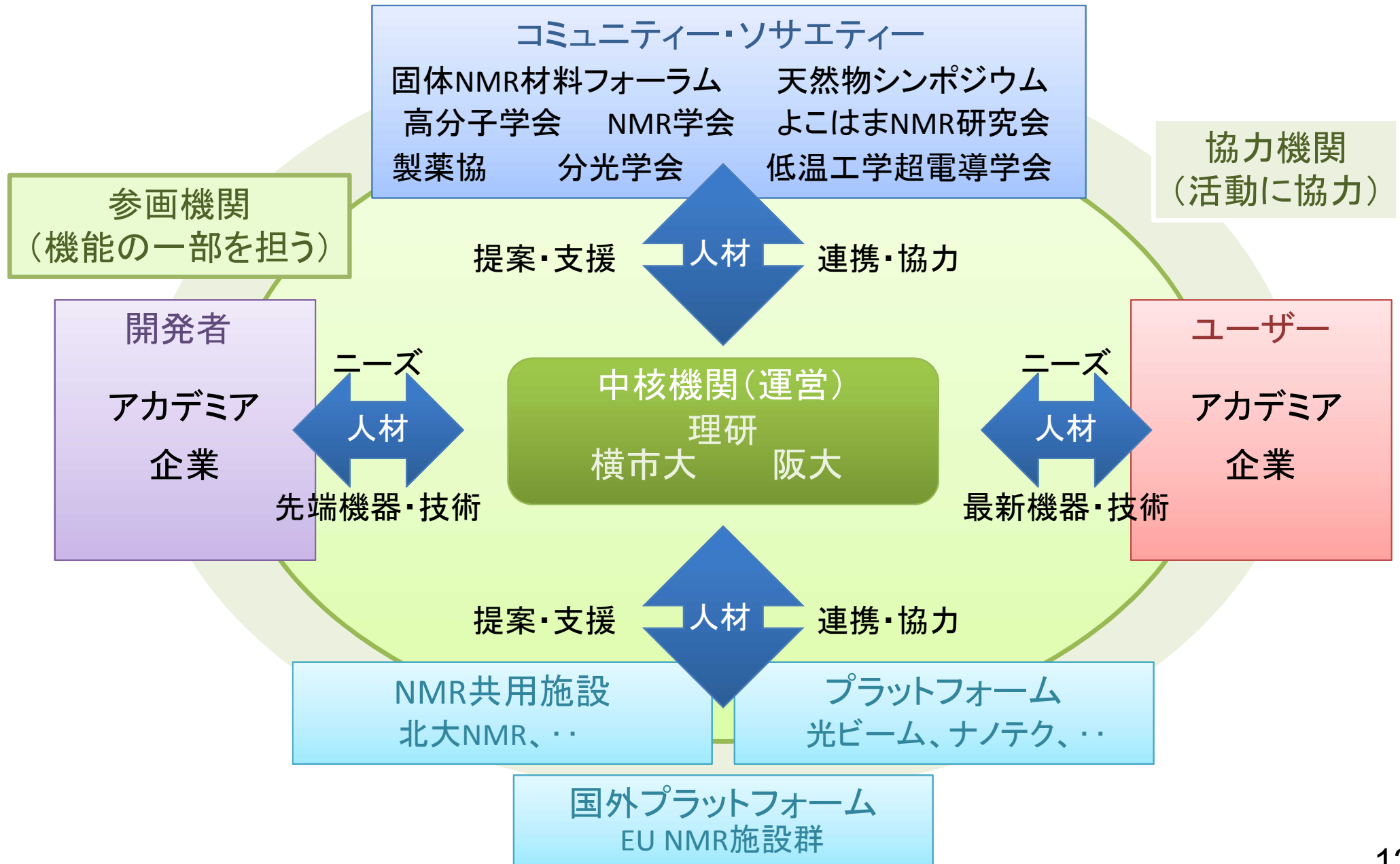
**PFは“開発”と“利用”を橋渡し
“知”を蓄え“人”を育てる**

「開発」と「利用」に関する取組

- 「開発」の入口と出口を担う
 - “ユーザー”ニーズを吸い上げ技術開発へ反映
 - 「製品化」前の機器・技術を導入・提供
 - 「利用」のための環境・技術を開発・整備・提供
 - 装置技術、周辺技術、利用技術
 - 自らも「開発」の一部を担う
- 「先端計測」との連携
 - NMR-PFへの導入・活用を前提とした開発課題
 - “ユーザー”ニーズ、NMR-PFからの要望、を反映
 - 「先端計測」の成果を「利用」(とそれによるによる重要課題の達成)に即時に結びつける
- 開発企業、開発者との連携強化
- “ユーザー”コミュニティとの連携協力
 - アカデミア、企業
 - 学会、研究会、業界団体
 - NMR-PFへの参画も検討

「連携協力」に関する取組

広範な連携協力関係の構築による国内ネットワーク形成



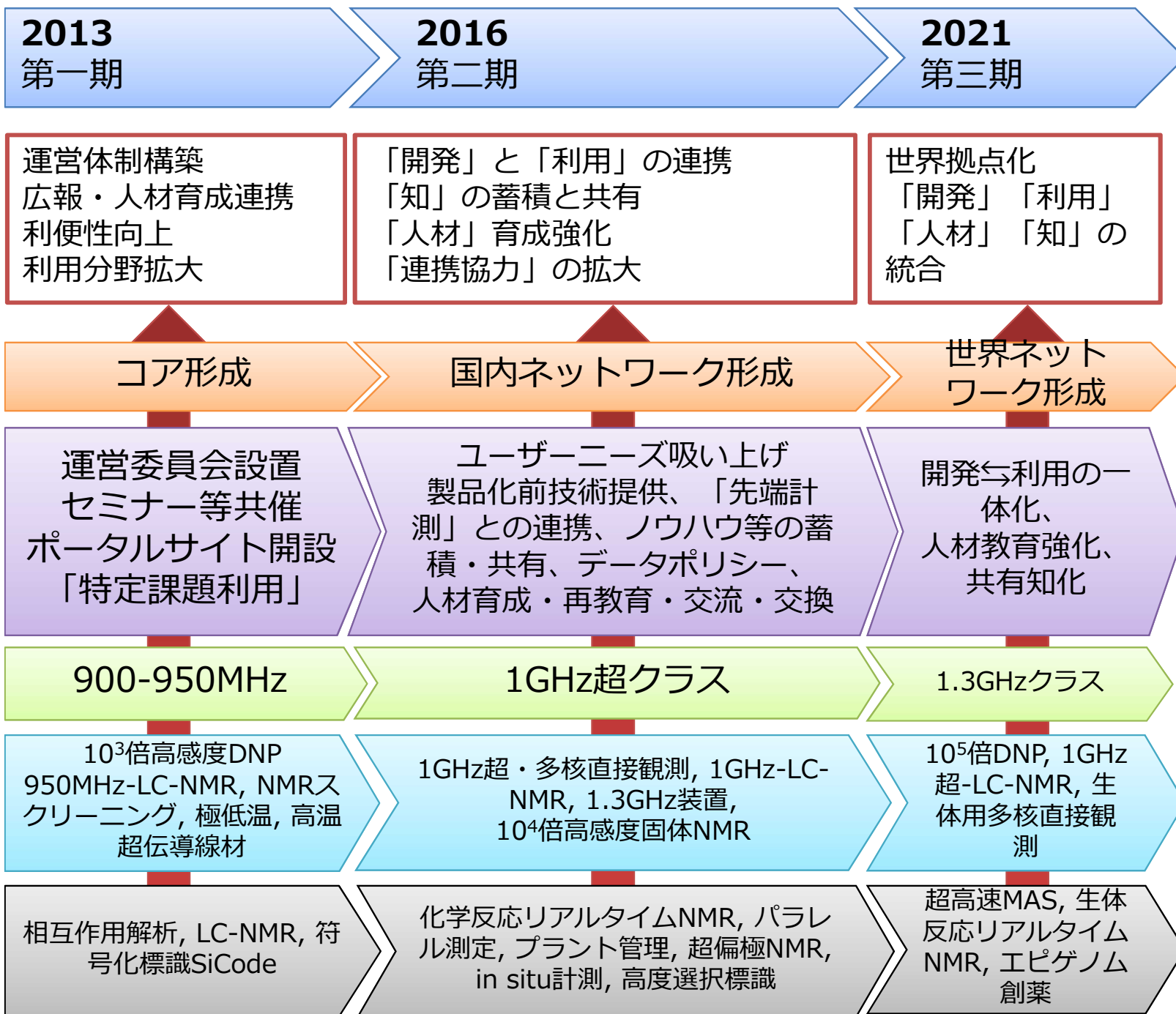
「知」に関する取組

- 「知」の蓄積と共有
 - 課題解決に関する、測定方法、解析方法、試料調製方法、ノウハウ
 - 機器のログ、障害情報、対処方法
 - 大規模で収集することによる形式知化
- データポリシーの策定
 - 蓄積・共有の効率化
- 既存データベースとの連携
 - PDB/BMRB(阪大)
 - 天然物NMRデータベース(JEOL R.)

「人材」に関する取組

- NMR技術領域に関わる「人材」
 - 最先端機器・技術を、
 - 駆使する人材（研究者、高度技術支援者）
 - 開発する人材（開発者）
 - 利用する人材（ユーザー）
 - 育成および再教育
- プログラム
 - セミナー、勉強会、講習会、トレーニングコース
 - 人材交流・交換
 - 特にセクター間（ユーザーと開発者、アカデミアと産業界）
 - 技術認定制度
 - 多様なキャリアパス形成

NMR-PF ロードマップ



最先端NMR装置整備 海外の状況

- EU
 - 研究基盤政策の成功 (FP6/7/Horizon2020)
 - 大型装置の戦略的集中整備とネットワーク化
 - EU NMR/BioNMR・EAST NMR・eNMR
 - 次世代装置 (1.2GHz NMR (Bruker))
8台受注済 (EUからのみ)
- 米国
 - 戦略的な研究基盤政策の欠除
 - 個別予算による大型装置整備
 - 例: PSI/PSI II/PSI: Biology, NYSBC
 - 次世代装置の発注はまだ (次世代超高磁場NMR装置の導入検討開始)
 - 戦略転換に迫られている

PFは“開発”と“利用”を橋渡し “知”を蓄え“人”を育てる

