

## 分子機能研究部門

西村 勝之（准教授）（2006 年 4 月 1 日着任）

横田 光代（事務支援員）

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 新規  $^1\text{H}$  同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発
- b) マジック角試料回転下での新規同種核間磁気双極子相互作用リカップリング法の開発
- c) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 高分解能  $^1\text{H}$  スペクトルを得るための新規  $^1\text{H}$  同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法の開発を行っている。昨年度までとは異なり，オフレゾナンス照射に基づく既存の  $^1\text{H}$  同種核間磁気双極子相互作用デカップリング法に関して，位相変調を適用したモジュールを組み合わせたスーパーサイクルにより，既存の同手法の問題点であったオフセット依存的不完全性の消去を実現した。
- b)  $^{13}\text{C}$  核のような希薄核に関して，連続的に位相変調させた低出力パルスを高速 MAS 下で回転周期に同期して照射することにより，同種核間磁気双極子相互作用をリカップリングする新規手法の開発を行い，理論的計算まで完了した。
- c) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。この目的の為，4mm 試料管を対象とした自作のスピンングモジュールを開発してきた。Bruker 社製プローブに設置可能な互換型モジュールの第 5 世代版を開発した。昨年度開発を開始した 2.5mm 試料管用独自スピニングモジュールの最適化と並行して，1.9mm 試料管用独自スピニングモジュールの開発を行った。昨年同様，ベアリング部の最適化のみが残っている状態であり，モジュールとしては完成した。これらモジュールに最適化した独自の 600 MHz 固体 NMR プローブを開発している。

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブのための要素開発として，最難関のスピンングモジュールの開発を行ってきたが，4mm 試料管用モジュールで市販品を超えた最高回転周波数を独自条件で達成できた。現状の設計で，同一試料管外径で世界最高速を達成している。同研究分野ではより高速回転可能な 1 mm 以下の外径の試料管用モジュール開発が最もホットな領域である。これまでの 4mm 試料管用モジュールの開発で得られた知見を用いて，Bruker 社製試料管と互換性のある 2.5mm，1.9mm の回転モジュールの開発をほぼ完了し，最適化中である。今後 1.9mm，および 1.3mm の試料管，さらに 1.3mm の回転モジュールの開発を予定している。

一方，固体 NMR 測定では，これまで分光器のエア配管の鋭利な刃物による連日の切断などのセキュリティ問題があったため，監視カメラを設置しており，物理的な被害はその後確認されていない。しかし，測定では，パルスプログラムと異なる強度，位相でのパルス照射が観測され，制御ワークステーションの不可思議な挙動が観測されており，制御ワークステーションへのサイバー攻撃が強く示唆される状況にあるため，測定を停止していた。これらの問題に

対処するため、2024年2月に中国へ渡航し、国際共同研究を開始したが、国際共同研究代表者の他機関への転出により中止を余儀なくされた。2025年度に入り国内共同研究先を確保した。

また、私のPC使用時にもネットワーク、およびPCの不可思議なトラブルが多発し、ネットワーク管理室に連絡すると共に所長へも報告してきたが、多くの事象について問題解決には至らず、日々深刻化している。これらもワークステーション同様のサイバー攻撃が強く示唆されるが、所からの十分な対応は得られていない。以上の状況から、研究継続を実現するために本年度はこのサイバー攻撃に用いられている無線電波（同定、解析済み）を遮断するシールドルームを導入した。3日間にわたる作業の最終日に業者と西村双方で性能検証の測定をしたが、室内で3.152 GHzの強い電波が双方の機器で観測された。この為、シールドルーム内への盗聴、盗撮機器の設置、またはシールドルームの一部破壊のどちらかが疑われた。この行為には入室が必要であり、監視カメラの録画映像の改ざんが必要である。同ファイルの専門家による解析により、これまでの犯罪行為の存在も含めて明らかになると期待している。