合成反応自動化システム 一式

仕様書

令和 8 年 10 月

国立大学法人奈良先端科学技術大学院大学

Ⅰ　仕様書概要説明

1　調達の背景及び目的

本学では、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）の「国家戦略分野の若手研究者及び博士後期課程学生の育成事業（BOOST）次世代 AI 人材育成プログラム（若手研究者支援）」による支援のもと、有機合成化学と人工知能（AI）・情報科学を融合した新たな研究手法の開発を推進している。本研究では、有機化学反応の反応性や選択性を分子構造に基づいて定量的に予測し、基質に応じた適切な反応条件を合理的に選択するための基盤技術の確立を目指している。本調達における「合成反応自動化システム 一式」の導入は、有機合成実験の自動化・ハイスループット化を通じて、AI による反応性予測に必要な高品質な実験データを効率的かつ体系的に取得するための研究基盤の整備を目的とする。

有機合成化学は、医薬品や機能性材料などの創製を支える基盤学問である。目的とする化合物を効率的かつ選択的に合成するためには、基質の分子構造や共存する官能基に応じて、適切な反応条件を選択することが重要である。しかし、実際の反応条件の選択は研究者の経験や直感に大きく依存しており、最適な条件を事前に予測することは依然として困難である。近年、機械学習を活用した反応予測が注目されているものの、その精度や汎用性は学習に用いる実験データの質と量に大きく左右される。特に、基質の分子構造や反応条件が反応性や選択性に及ぼす影響を体系的に評価したデータの蓄積が不可欠である。一方、従来の手作業による実験では、多数の基質や反応条件の検討に多大な時間と労力を要するほか、実験操作のばらつきによる再現性の低下も課題となっている。

本研究では、アルコールの酸化反応をはじめとする有機合成反応を対象に、分子構造と反応性の相関を定量的に解析し、反応性予測モデルの構築を進める。具体的には、反応中心近傍の立体的・電子的特徴に基づく解析を出発点として、分子内の多様な官能基の影響も考慮した、汎用性の高い反応性予測手法の確立を目指す。本調達により導入する合成反応自動化システムは、試薬や溶媒の分注、反応液の撹拌、温度制御などの実験操作を自動化し、多数の反応を並列的かつ再現性よく実施するための装置である。これにより、従来の手作業では困難であった大規模かつ系統的な反応条件の検討を可能とし、反応性や選択性に関する高品質な実験データを効率的に蓄積する。

さらに、得られた実験データを機械学習と組み合わせ、予測モデルの構築と実験による検証を繰り返すことで、反応性予測の精度と適用範囲を継続的に向上させる研究基盤の確立を目指す。以上のように、本調達は単なる実験操作の自動化や省力化にとどまらず、有機合成化学と AI を融合した次世代の研究手法を確立するために不可欠な研究基盤の整備である。本システムの導入により、従来の経験と試行錯誤に依存した反応条件の選択から、データと予測に基づく合理的な条件選択への転換を促進し、将来的には医薬品や機能性材料の効率的な創製に貢献することが期待される。

2　調達物品及び構成内訳

合成反応自動化システム　一式

（構成内訳）

1．	リキッドハンドラー	1 台
2．	シリンジポンプ	1 台
3．	温調付きラック式スターラー	1 個
4．	試薬用冷却ラック	1 個
5．	反応後サンプル用ラック	1 個
6．	制御部	1 式

以上、搬入、据付、配線、調整及び耐震対策一式を含む。

3　技術的要件の概要

3.1　本調達物品に係る性能、機能及び技術等（以下「性能等」という。）の要求要件（以下「技術的要件」という。）は「Ⅱ　調達物品に備えるべき技術的要件」に示すとおりである。

3.2　技術的要件は、全て必須の要求要件である。

3.3　必須の要求要件は、本学が必要とする最低限の要求要件を示しており、入札機器の性能等がこれを満たしていないとの判定がなされた場合には不合格となり、落札決定の対象より除外する。

3.4　入札機器の性能等が技術的要件を満たしているか否かの判定は、本学「合成反応自動化システム 一式」技術審査職員が、入札機器に係る技術仕様書、その他入札説明書で求める提出資料の内容を審査して行う。

4　その他

4.1　技術仕様等に関する留意事項

入札機器は、原則として入札時点で製品化されていること。入札時点で製品化されていない機器によって応札する場合は、本仕様書に示す技術的要件を全て満たすことの証明、および納入期限までに製品化され納入できることを保証する資料、確約書等を提出すること。

4.2　提案に関する留意事項

4.2.1　提案に際しては、技術的要件をどのように満たすか、あるいはどのように実現するかを「Ⅱ　調達物品に備えるべき技術的要件」に示す項目ごとに資料を添付する等して、具体的かつ分かりやすく記載すること。従って、本仕様

書の技術的要件に対して、単に「はい、できます。」、「はい、有します。」といった回答のみの提案書であるために評価が困難であると本学が判断した場合には、技術的要件を満たしていない提案とみなし、不合格とするので十分に留意して作成すること。

4.2.2　提案書においては、本仕様書の技術的要件とそれに対応する提案内容を明確かつ簡潔に示した対照表を添付すること。

4.2.3　提案書においては、提案機器が本仕様書の技術的要件を満たしていることを提出資料のどの部分で証明できるか、参照すべき箇所を対照表に明示すること。参照すべき箇所が、カタログ・性能仕様書・説明書等である場合、アンダーラインを引いたり、色付けしたりする等して該当部分を明示すること。

4.2.4　提出資料等に関する照会先を明記すること。

4.2.5　提案された内容等について、ヒアリングを行う場合があるので誠実に対応すること。

4.3　導入に関する留意事項

4.3.1　導入スケジュールについては、本学職員と協議し、その指示に従うこと。

4.3.2　搬入、据付、配線、調整及び耐震対策一式に要する全ての費用を本調達に含めること。

Ⅱ　調達物品に備えるべき技術的要件

(性能、機能に関する要件)

合成反応自動化システム 一式

1　リキッドハンドラー　1 台

1.1　以下の要件を満たすこと。

1.1.1　幅 38 cm×奥行 28 cm 以上であり、φ18 mm×150 mm の試験管を 210 本以上設置可能なワークエリアを有すること。

1.1.2　搭載された分注ニードルがワークエリア内の任意の位置にアクセスし、接続された「2 シリンジポンプ」によって規定される容量および速度にて、サンプル及び試薬の吸引ならびにワークエリア上に設置された容器への吐出を行う機能を有すること。

1.1.3　ワークエリア上には、「3 温調付きラック式スターラー」及び「4 試薬用冷却ラック」ならびに「5 反応後サンプル用ラック」を設置可能な構造を有すること。

1.1.4　分注ニードルは容器のセプタムピアッシングを行う機能を有すること。

1.1.5　分注ニードルはセプタムピアッシングを行った状態で、溶媒や溶液の吸引・吐出を可能とする機能を有すること。

1.1.6　分注ニードルによるクロスコンタミネーションを防ぐため、ニードルの内部/外部双方の洗浄を可能とする機構を有すること。また、後述の「6 制御部」から洗浄液量および供給速度を設定する機能を有すること。

2　シリンジポンプ　1 台

2.1　以下の要件を満たすこと。

2.1.1　ステッピングモーター駆動の送液システムであること。

2.1.2　シリンジを取り付け、送液を行う機構を有すること。シリンジのうち、25 mL、10 mL、5 mL、1 mL、500 µL、250 µL、100 µL のシリンジが設置可能な構造であり、使用容量範囲は各シリンジの 10%～100%を満たす範囲であること。本仕様では 1 mL と 100 µL のシリンジを備えていること。追加のオプションを必要とせず、上記 7 種類のシリンジから任意に選択した 2 本を同時に設置可能な構造を有すること。

2.1.3　「6 制御部」からの指示に従い、使用するシリンジの選択および流路の切替を行い、選択したシリンジを駆動し、「1 リキッドハンドラー」を介して液体の吸引・吐出を可能とする機能を有すること。

2.1.4　最大分注速度は、1 mL シリンジ装着時に 40 mL/min 以上、100 µL シリン

ジ装着時に 4 mL/min 以上であること。

2.1.5　工具を使用することなく、シリンジの取り外し及び取り付けが行える構造であること。

2.1.6　分注容量精度は水を用いた重量法での測定において±2%以内であること。

3　温調付きラック式スターラー　1 個

3.1　以下の要件を満たすこと。

3.1.1　温度調節機能及び攪拌速度調節機能を有するマグネチックスターラーであること。

3.1.2　φ16.5 mm×125 mm 試験管が 10 本以上設置可能な構造を有すること。

3.1.3　温度調節範囲は 0～65℃を満たす範囲であること。

3.1.4　温度設定機能を有する冷却装置を備えており、その冷却装置の温度安定性は±0.05℃以内であること。

3.1.5　最大撹拌速度は 2000rpm 以上であること。

3.1.6　設置した各試験管に対して同時攪拌を行う機能を有すること。また、「6 制御部」から当該攪拌の ON/OFF を制御する機能を有すること。

3.1.7　「1 リキッドハンドラー」のワークエリア内へ設置可能な構造を有すること。

4　試薬用冷却ラック　1 個

4.1　以下の要件を満たすこと。

4.1.1　φ18 mm×45 mm バイアルが 20 本以上設置可能な構造を有すること。

4.1.2　温度調整範囲は 0～5℃を満たしていること。

4.1.3　温度設定単位は 0.1℃であること。

4.1.4　設定温度に対して±0.1℃以内の精度のラック内の温度制御機能を有すること。

4.1.5　「6 制御部」から温度調節機能の ON/OFF 及び温度設定機能を有すること。

4.1.6　「1 リキッドハンドラー」のワークエリア内へ設置可能な構造を有すること。

5　反応後サンプル用ラック　1 個

5.1　以下の要件を満たすこと。

5.1.1　φ11.7 mm×35 mm バイアルが 64 本以上設置可能な構造を有すること。

5.1.2　工具を使用することなく、「1 リキッドハンドラー」のワークエリア内への設置及び取り外しが行える構造であること。

6　制御部　1 式

6.1　ハードウェアは以下の要件を満たすこと。

6.1.1　制御用ソフトウェアがインストールされたノート型 PC であること。

6.1.2　OS が日本語版 Windows11（64bit）professional 以上、CPU が Core 5-120U プロセッサ相当以上、メモリが 8GB 以上、記憶領域が SSD 250GB 以上であること。

6.2　制御用ソフトウェアは以下の要件を満たすこと。

6.2.1　「1 リキッドハンドラー」及び「2 シリンジポンプ」のモデル名や製造番号、シリンジ情報が登録されていること。

6.2.2　「3 温調付きラック式スターラー」、「4 試薬用冷却ラック」、「5 反応後サンプル用ラック」のリキッドハンドラーのワークエリア上の位置情報が登録されていること。

6.2.3　「1 リキッドハンドラー」、「2 シリンジポンプ」、「3 温調付きラック式スターラー」及び「4 試薬用冷却ラック」の個別制御及び連動制御機能を有すること。

6.2.4　処理するサンプルの種類、数量、分注量及び分注速度を変数に設定する機構を有し、サンプル毎で個別条件にて分注する機能を有すること。また、「4 試薬用冷却ラック」の温度も変数に設定する機構を有すること。

(性能、機能以外に関する要件)

1　設置条件等

1.1　設置場所

国立大学法人東北大学　薬学研究科 B 棟 4 階 B402 号室

1.2　設備要件

本学が用意する電源は以下であり、これらの電源設備を使用して稼働させること。

単相 100V, 50 Hz, 17A

また稼働させるための変換設備、ケーブル等は供給者において用意するものとし、それに係る費用は本調達に含むこと。

1.3　本調達物品の搬入、設置を計画する上では以下の条件を考慮すること。

①搬入に使用できるエレベータの性能・仕様は以下のとおりである。

最大ドア開口部　幅 1700 mm　× 高さ 2080 mm

②搬入に使用できる搬入路の条件は以下のとおりである。

幅 1700 mm × 高さ 2000 mm の通路が確保でき、搬入を妨げる固定設備、極端な曲がり角、段差および急こう配のスロープ等が無いルートを設定すること。またクレーン搬入の必要がある場合はクレーン車の駐車および作業スペースが確保できるよう調整すること。

③設置場所の諸条件は以下のとおりである。

幅 1300 mm x 高さ 800 mm x 奥行 750 mm ※2

※2 付帯設備（PC、マウス、ケーブル、配管類）を除く。

天井高　最小 2400 mm

1.4　搬入、据付、配線、調整及び耐震対策一式

搬入、据付、配線、調整及び耐震対策一式については、業務に支障をきたさないよう、あらかじめ本学の職員と協議し、その指示に従うこと。また、設置後、物品が正常かつ安定に動作する状態にすること。また、物品の搬入にあたっては、建物、設備等に損傷を与えないように搬入口、廊下、ドア、及び部屋内の養生を充分に施すこと。なお、万が一、建物、設備等に損傷を与えた場合は、速やかに本学職員に報告し、現況に復元すること。

2　保守体制等

2.1　本調達物品の修理、部品供給、その他のアフターサービスについては、速やかに対処する体制を有していること。

2.2　本調達物品の設置完了及び設置完了後から開始する現場受入試験（SAT）は、令和 9 年 3 月 26 日までに完了すること。

2.3　保証期間は本調達物品の導入（SAT）後から 1 年間の期間とし、その間に通常の使用により故障及び不具合が生じた場合には、無償にて速やかに修理すること。

2.4　障害対応に関する報告書をその都度提出すること。

3　教育・支援体制等

利用者に対する使用方法及び物品の日常保守についての十分な教育を実施すること。
日時及び場所については本学の指示に従うこと。

4　提出書類

取扱説明書　1 部（紙媒体）及び 電子化されたファイル

5　その他

5.1　仕様に定めのない事項又は本仕様の事項について疑義が生じた場合には、本学職員と協議し、その指示に従うこと。

5.2　納入にあたっては、納入時間、納入経路等について、事前に本学職員と協議し、その指示に従うこと。また、納入が円滑に行われるよう必要な措置をとること。