

MERIT 長期海外派遣報告書

理学系研究科化学専攻 博士課程 2 年 MERIT-WINGS 11 期

中村研究室 花澤 美幸

派遣先：イリノイ大学

派遣期間：2024 年 9 月 6 日～2024 年 11 月 26 日

研究課題名：

分子動態の定量的電子顕微鏡解析を強化するためのデータサイエンスの統合

【研究内容】

自己組織化は、材料科学、生物学、化学などで広く見出される現象であり、機能構築の根幹を担う重要なプロセスである。しかし、確率論的に起こる非線形現象であることから現在の科学をもってしても機構は解明できておらず、結晶化の精密制御・材料の自在設計は実現されていない。

所属研究室では、単分子原子分解能時間分解電子顕微鏡（SMART-EM）法を開発し、核生成及び結晶成長における分子動態を映像から直接解明してきた。私はこの手法を応用し、アモルファスにおける秩序形成機構の解明に取り組んでいる。しかし、構造記述子のないアモルファスにおいて、核生成前・凝集過程の非周期構造内に現れる過渡構造および動的挙動の評価は容易ではない。そこで、液中における透過電子顕微鏡（LP-TEM）観察と、機械学習を用いた解析手法の開発を展開する Qian Chen 研究室で、分子の認識をはじめとした先駆的な技術習得を目指した。

一般的に、LP-TEM 像では、真空中で撮像したものと比べてバックグラウンドの影響が大きく、観察対象を識別しにくいという課題がある。そこで、LP-TEM 像における、深層学習によるセグメンテーションの手法を学んだ。観察対象には、受入研究室で用いられているナノ粒子を用いた。そして、セグメンテーションした連続画像上で各粒子の移動を追跡するプログラムを実行し、観察初期に見られた乱雑な分布から、ナノ粒子が凝集および整列する様子が明らかになった。

次に、受入研究室の持つ解析手法を応用して、アモルファス内に形成する結晶領域の検出を試みた。その結果、周期構造によって分類することに成功した。また、複数のフレームで分類基準を統一することで、同じ構造がどこでいつ形成したのかということを時間発展的に解析できる可能性が示された。今後、今回検出された結晶構造の特定に基づく詳細な考察を展開したいと考えている。

【研究環境について】

アメリカの大学では、基本的に大学全体で装置を共有する体制であるため、規則や運営体制が想像以上にしっかりしていた。電子顕微鏡へのアクセスも、各装置専門で常駐している技術員にアポイントメントをとって、大学で厳格に定められたトレーニングのプログラムを修了する必要があった。また、機器予約は土日を含めて基本的に埋まっていた。さらに、予約フォームには、具体的なサンプル調製条件やその測定の目的などを詳細に入力する必要があり、数ヶ月の滞在期間中に少し触らせてもらうということは難しい環境であった。研究科ごと、また研究室ごとに分かれて運営している日本の組織との違いを感じ、それぞれのメリット・デメリットを学ぶ機会となった。

また、受入先の研究室では、解析は基本的に各自個人で持っている PC で行っており、新たな解析を覚えてもらうためには、研究室で共通して行っている解析であっても、それに用いるソフトやプログラムのインストールから始めなければならなかった。特に、windows と mac の間で互換性のないソフトを使うための環境構築に苦労した。しかし、その試行錯誤のおかげで、ノート PC ひとつで大抵のことはできるという知識、経験、自信を得ることができた。

【生活について】

キャンパスのある Urbana-Champaign は、同じイリノイ州の大都市シカゴから、車で 2 時間半～3 時間、車がない場合チャーターバスで 4～5 時間の場所にあるのどかな場所で、トウモロコシの生産地として有名な地域という側面を持つ。キャンパス内には、スーパーや銀行、飲食店街などがコンパクトに揃っており、

寮やキャンパス内のレジデンスに住む学生にとって、便利な環境だった。図書館やカフェなども充実しており、講義室や研究室以外にも、学生が席に困ることなく勉強やPC作業をできる場所の選択肢が多いと感じた。

一方、キャンパスタウンの外に出ると、スーパーも徒歩で行ける距離にはなく、特に私の宿泊先は土日はバスが通っていなかったこともあり、アメリカの車社会を痛感した。

【謝辞】

まず、滞在を受け入れ指導してくださった Qian Chen 教授、解析方法の検討やディスカッションをしてくださった受入研究室の皆様、厚く御礼申し上げます。そして、この長期海外派遣を快く認め、推薦してくださった指導教員の中村栄一教授、相談に乗ってくださった中室貴幸准教授、研究室不在中にサポートしてくださった研究室メンバーに心から感謝申し上げます。また、海外派遣に際して、様々なサポートをしてくださった MERIT 副指導教員の柴田直哉教授、MERIT コーディネーターおよび事務局の皆様、秘書の皆様に、深く御礼申し上げます。この海外派遣は、東京大学理学系研究科の経済的支援により実現しました。合わせて御礼申し上げます。