

第36回日本放射光学会年会・ 放射光科学合同シンポジウム(JSR2023)学生発表賞審査結果について

第36回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム(JSR2023)
組織委員長 阿部 仁(KEK 物構研/茨城大)

日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム(年会・合同シンポ)学生発表賞では、将来性・独創性のある優れた発表を行った学生を顕彰し、賞状を贈呈してまいりました。年会・合同シンポの精神に則り、口頭発表及びポスター発表の「学生による全ての発表」を対象としています。第36回年会・合同シンポ(JSR2023)では、組織委員長、副組織委員長、実行委員長、副実行委員長、プログラム委員長、副プログラム委員長の6名で学生発表賞選考委員会を組織し、総勢64名の審査員に審査頂き、審査結果に基づき選考を行いました。原則、発表1件あたり4名の審査員をお願いしましたので、多い方では10件以上をご担当頂きました。審査にご協力いただいた先生方には、この場をお借りして厚く御礼申し上げます。

第36回年会・合同シンポ(JSR2023)では学生発表賞対象講演の申込数が105件(口頭発表42件、ポスター発表63件)ありました。今年度は、実行委員会の先生方のご尽力により、久しぶりに現地にて発表及び審査をすることができました。ありがとうございました。分野別の内訳は以下の通りです。

第1分野 X線領域の回折・散乱・分光など

口頭発表: 17件, ポスター発表: 15件

第2分野 VSX領域の固体・原子分子など

口頭発表: 11件, ポスター発表: 22件

第3分野 加速器装置・イメージングなど

口頭発表: 14件, ポスター発表: 26件

合計件数

JSR2023: 105件(JSR2022: 68件, JSR2021: 70件, JSR2020: 99件, JSR2019: 108件, JSR2018: 123件, JSR2017: 126件, JSR2016: 109件, JSR2015: 113件, JSR14: 124件, JSR13: 104件, JSR12: 111件, JSR11: 124件, JSR10: 96件)

学生発表賞選考委員会では上記発表を対象に、審査員による審査結果を評価し、以下の8名の方々に学生発表賞を授与することに決定しました。受賞者の皆様が、これを契機に今後も放射光分野において益々活躍されることを期待しております。

【JSR2023学生発表賞受賞者(各分野, 五十音順)】

第1分野 X線領域の回折・散乱・分光など

発表番号: 4D03S

氏名(所属): 阿部真樹(東北大SRIS, 東北大院工, 理研放射光センター)

演題: テンダーX線スペクトロタイコグラフィによるリチウム硫黄電池正極の硫黄化学状態イメージング

発表番号: 4F02S

氏名(所属): 吉川崇大(名古屋工業大学)

演題: 微小角入射X線回折によるZn負極/KOH電解液界面*In-Situ*評価

第2分野 VSX領域の固体・原子分子など

発表番号: 1C01S

氏名(所属): 新井陽介(東大物性研)

演題: 少数キャリア半金属CeXにおける強相関メカニズムの系統的な変化

発表番号：4C04S

氏名（所属）：田中宏明（東大物性研）

演題：SX-ARPES で調べる強磁性スピネル HgCr_2Se_4 の半導体的電子状態

発表番号：4C02S

氏名（所属）：本間飛鳥（東北大学理学研究科）

演題：マイクロ ARPES による反強磁性トポロジカル絶縁体候補物質 NdX_p (X_p : Bi, Sb) のドメインに依存したバンド分散の観測

第3分野 加速器装置・イメージングなど

発表番号：8P56S

氏名（所属）：櫻井 快（東京大学物性研究所）

演題：軟 X 線タイコグラフィを利用した細胞内化学状態イメージング技術の開発

発表番号：2D02S

氏名（所属）：橋本 聡（広島大学先進理工系科学研究科）

演題：時間分解真空紫外円二色性分光法による β ラクトグロブリンと生体膜の相互作用研究

発表番号：8P29S

氏名（所属）：的場美希（立命館大学大学院）

演題：人工結合タンパク質を用いた糖鎖切断酵素の立体構造解析

所属は発表申込時の情報を記載しています。なお、次ページ以降に各受賞者の研究要旨が本人の紹介と受賞コメントと合わせて掲載されております。ぜひご覧ください。

受賞者：阿部真樹（発表者番号：4D03S）

題目：テンダー X 線スペクトロタイコグラフィによる
リチウム硫黄電池正極の硫黄化学状態イメージ
ング講演者：阿部真樹^{1,2,3}，金子房恵^{4,5}，石黒 志^{1,3,5}，
久保達也⁴，中条文哉⁴，為則雄祐⁶，岸本浩通⁴，
高橋幸生^{1,3,5,7}所属：¹東北大学国際放射光イノベーション・スマート
研究センター，²東北大学大学院工学研究科，
³理化学研究所放射光科学研究センター，⁴住友
ゴム工業株式会社，⁵東北大学多元物質科学研究所，
⁶高輝度光科学研究センター，⁷東北大学金属材料
研究所

1. 緒言

リチウム硫黄 (Li-S) 電池は高い理論容量 (~ 1675 mAh g⁻¹) を示すことに加え，正極活物質に用いる硫黄が安価であるなど多くの利点を有する二次電池である。しかしながら，充放電を繰り返すことで容量が急速に低下するなど課題も多く，その商用利用はほとんど進んでいない。この課題を解決するためには，充放電過程において正極内部の硫黄がどこで，どのように反応して劣化が引き起こされるのかを理解する必要がある。この要求を満たす計測手法として有望視されるのが X 線スペクトロタイコグラフィである。本手法はレンズレス顕微法として知られる X 線タイコグラフィを分光計測に拡張した手法であり，物質内部の微細構造および化学状態を集光・結像素子の性能より優れた分解能 (数十–数百 nm) で観察可能である。従って，その計測を S K 吸収端 (~ 2.47 keV) において実施することで正極内部における硫黄化学状態変化の高分解能可視化が実現し，その反応・劣化機構解明への貢献が期待できる。本研究では，我々が SPring-8 BL27SU において開発したテンダー X 線スペクトロタイコグラフィ計測システム¹⁾を用いて事前に充放電処理を施した Li-S 電池正極の薄片を計測し，正極内部での微視的な硫黄化学状態変化の可視化に取り組んだ²⁾。

2. 実験

試料として Li-S 電池正極活物質材料である硫黄変性ポリブチルメタクリレート (SPBMA) と導電材のアセチレンブラック，そしてアクリル系バインダーによって構成される正極を作製した。電解液に LiPF₆/(EC : DEC = 50 : 50 vol.%) を使用したコインセルを用いてその充放電処理を行い，充放電状態が異なる三つの正極試料 (初期，一回放電，一回充電) を用意した。そして，これらを集束イオンビームで 4 μ m 厚の薄片に加工した後 SiN メンブレン上にマウントして計測に用いた。タイコグラフィ計測では，Si(111)チャンネルカットモノクロメータにより単色化さ

れた X 線を直径 10 μ m のピンホールで切り出した後，フレネルゾーンプレートにより 5 μ m に縮小して試料に照射した。測定は S K 端近傍である 2.46–2.50 keV の 30 点で行い，得られた回折強度パターンに対して位相回復計算を実行することで試料像 (ピクセルサイズ： $\sim 30 \times 30$ nm²) を再構成した。

3. 結果と考察

再構成結果の例として 2.50 keV で測定した初期状態試料の吸収像を Fig. 1(a) に示す。再構成像からは，電子顕微鏡では観察が難しい正極内部の構造が捉えられていることが確認できた。初期・放電・充電状態試料の吸収像から得られた平均的な X 線吸収微細構造 (XAFS) スペクトルを Fig. 1(b) に示す。試料間のスペクトル形状の差異は充放電過程での硫黄化学状態変化が捉えられていることを意味する。その分布を可視化するため，各ピクセルから得られた空間分解 XAFS スペクトルに対してカーブフィッティング解析を実施し，スペクトル中のピークの高さやエッジジャンプ量を抽出した。それらのパラメータを基に得られた代表的な硫黄化学状態マップを Fig. 1(c) に示す。特徴的

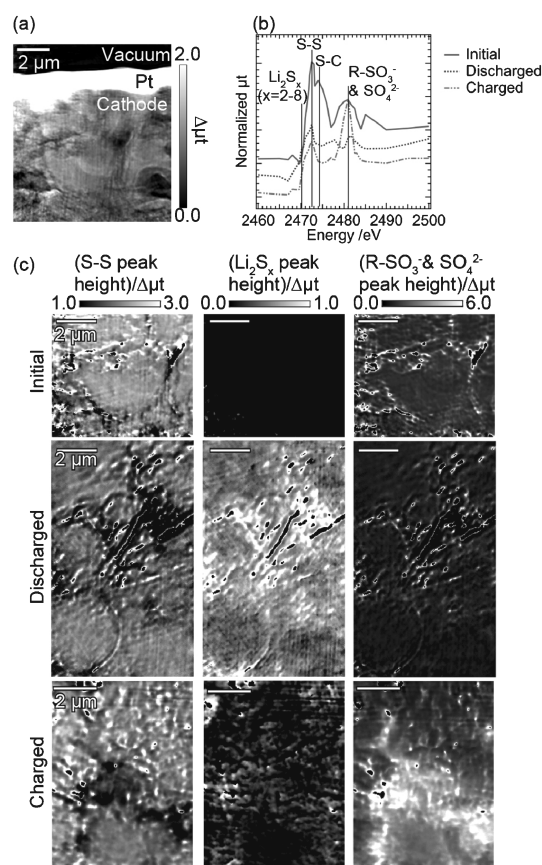


Fig. 1 (a) 2.50 keV で測定された初期状態正極試料の吸収像。(b) 充放電状態の異なる試料の再構成像が示した平均的な XAFS スペクトル。(c) 空間分解 XAFS スペクトルのカーブフィッティング解析により得られた代表的な硫黄化学状態マップ。

なのは Li-S 電池の充放電反応における中間生成物である Li_2S_x ($x=2-8$) と、硫黄と電解液との副反応生成物と見られる R-SO_3^- や SO_4^{2-} がそれぞれ放電状態、充電状態試料に多く存在し、さらにそれらが S-S 結合が少ない領域に分布していることである。これらの領域は SPBMA が少ない領域に対応することが予想されるため、この結果は上述の生成物が導電材やバインダーが多く存在する領域に蓄積していることを示唆している。先行研究において、 Li_2S_x ($x=2-8$) の電解液への溶出や $\text{R-SO}_3^- \cdot \text{SO}_4^{2-}$ の生成は容量低下を引き起こすことが指摘されている^{3,4)}。従って本結果は、テンダー X 線スペクトロタイコグラフィを用いることで Li-S 電池の劣化と関係が深い生成物が正極内部で局在している様子を捉えたことを意味する。

4. 今後の展望

今回の成果はあくまで ex-situ 計測での結果あり、充放電処理から計測を行うまでに様々な工程を経ているため、捉えた化学状態変化が真に充放電反応由来であると断定することはできない。この困難を解決するためには、動作中の Li-S 電池正極において生じる化学状態変化を直接観察するオペランド計測の実施が必須となる。今後はその実現のため、真空中で電解液を封止可能かつ、正極以外の構成要素（電解液や負極材など）からの X 線吸収を最低限に抑

える薄型セルの開発に取り組む。

参考文献

- 1) M. Abe *et al.*: J. Synchrotron Radiat. **28**, 1610 (2021).
- 2) M. Abe *et al.*: J. Phys. Chem. C **126**, 14047 (2022).
- 3) Y. Mikhaylik *et al.*: J. Electrochem. Soc. **151**, A1969 (2004).
- 4) X. Feng *et al.*: Phys. Chem. Chem. Phys. **16**, 16931 (2014).



阿部真樹

東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻博士後期課程 1 年

【略歴】

2020年3月東北大学工学部材料科学総合学科卒業。2022年3月東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻博士前期課程修了。現在、同博士後期課程在籍。

【受賞のコメント】

この度は名誉ある JSR2023 学生発表賞に選出していただき大変光栄に存じます。日頃よりご指導をいただいております高橋幸生教授、石黒志助教、試料準備や放射光実験において多大なるご助力をいただきました岸本浩通博士、金子房恵博士、為則雄祐博士、ならびに本研究にご協力いただいた共同研究者の皆様に厚く御礼申し上げます。この受賞を励みに、今後もより一層研究活動に邁進してまいります。

JSR2023 学生発表賞 第 1 分野

受賞者：吉川崇大（発表番号 4F02S）

題目：微小角入射 X 線回折による Zn 負極/KOH 電解液界面 *in-situ* 評価

講演者：吉川崇大¹、黍野景介¹、山本美樹¹、高林康裕¹、木村耕治¹、藤波 想²、仲谷友孝²、林 好一¹

所属：¹名古屋工業大学、²京都大学

1. 緒言

亜鉛負極電池は、高容量かつ資源性に富み、非発火性を兼ね備えており、ポストリチウムイオン電池の 1 つとして考えられている。しかし、充放電を繰り返すことで亜鉛負極の表面からデンドライトと呼ばれる針状組織が成長し、対極に到達することで短絡が生じてしまう。そのため、亜鉛負極電池はサイクル特性が低く、未だ二次電池として実用化されていない。そこで、本研究では、動作環境下における電極表面数 nm の構造情報を抽出するため、X 線全反射 (XRR) を利用した実験を実施した。XRR は物質界面を詳しく評価するのに有用な現象である。我々は、これまで、Li 金属極を対象として、XRR 現象を利用した界面状態のその場解析に関する手法開発を行ってきた^{1,2)}。本課題の目的は、Zn 負極/KOH 電解液界面の X 線反射率曲線と微小角入射 X 線回折 (GIXD) を動作環境下で測定し、界面状態の変化を捉えることである。

2. 実験

まず、負極に Zn 結晶、対極に亜鉛金属を配置した専用のセルを作製した。XRR および GIXD は SPring-8 BL28XU で行った。測定には、2 次元 CdTe 検出器 PILATUS 3X 300K-W を使用した。GIXD 実験では、入射角 θ_i を XRR にて得た臨界角 θ_c 付近に固定し、回折 X 線を観測した。入射 X 線のエネルギーは 28 keV、ビームサイズは $23 \times 57 \mu\text{m}$ (W×H) とした。

3. 結果と考察

GIXD から得られた各面指数における強度の時間変化を Fig. 1 に示す。初期充電時には、(101) が成長し、放電時 (101)、(002) が溶解することが分かった。再充電時には (101) が主に成長し、(002) も似た挙動で変化した。一方で (100) は充放電に対して変化が小さかった。以上を模式的に Fig. 1 の右端に示した。ここで、GIXD は面反射の測定であることから (101)、(002) は試料表面に対して寝た状態を表しており、(100) は立った状態のものを表している。そのため、充電や放電によって、電極表面の亜鉛は寝た状態の結晶が変化に対して敏感に変化していることが明らかとなった。これはデンドライト成長の初期段階を捉えたものと考えられ、電池に使用される金属表面の構造情報への理解を拡大する。

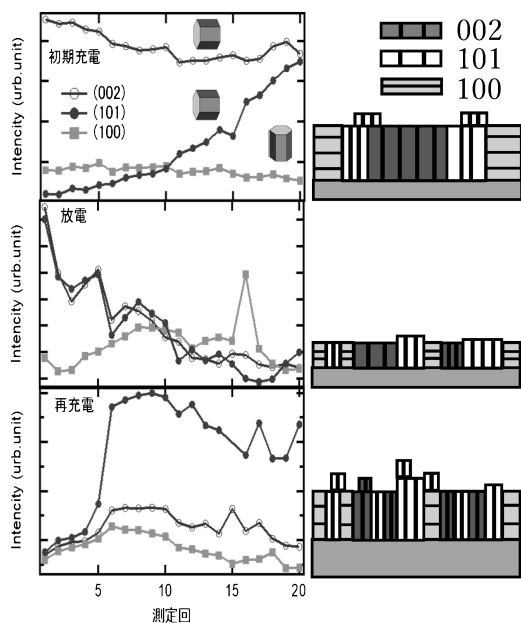
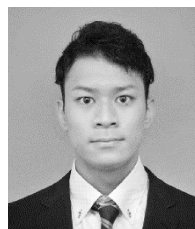


Fig. 1 Zn 面方位強度の充放電経時変化とその模式図。

の助成で実施された。本実験は、SPring-8 課題番号 2021B7619, 2022A7619, 2022B7619 で行った。

参考文献

- 1) K. Kimura *et al.*: Chem. Lett. **50**, 1526 (2021).
- 2) K. Fujii *et al.*: Phys. Status Solidi B, 202100539 (2022).



吉川 崇大

名古屋工業大学大学院工学専攻物
理工学系プログラム博士前期課程 1 年
【略歴】

2022 年名古屋工業大学工学部物理工学
科卒業。2022 年名古屋工業大学大学院
工学専攻理工学系プログラム入学。

【受賞のコメント】

この度は、栄誉ある賞を頂き大変光栄に
思います。日頃よりご指導頂いております林好一教授、木村耕
治助教、高林康裕特任助教、共同研究者である京都大学の藤波
想特任准教授、仲谷友孝特任助教、ならびに本研究にご協力く
ださいました構造物性科学研究室の皆様方に、この場を借りて
厚く御礼申し上げます。本賞を励みにし、より一層精進してい
きたいと思っています。

謝辞

本研究は NEDO の RISING3 プロジェクト (JPNP21006)

JSR2023 学生発表賞 第 2 分野

受賞者：新井陽介 (発表者番号：1C01S)

題 目：少数キャリア半金属 CeX における強相関メカニ
ズムの系統的な変化

講演者：新井陽介¹，黒田健太²，筒井智嗣^{3,4}，
平井大悟郎¹，田中宏明¹，Yuyang Dong¹，
岩田拓万²，片山和郷⁵，野本拓也⁶，辛 埴⁷，
久保田正人⁸，芳賀芳範⁹，鈴木博之¹，
宮坂茂樹⁵，田島節子⁵，有田亮太郎^{6,10}，
近藤 猛¹

所 属：¹東大物性研，²広大理，³JASRI，⁴茨大院理工，
⁵阪大院理，⁶東大工，⁷東大特別教授室，
⁸原子力機構物質科学研究センター，
⁹原子力機構先端研，¹⁰理研 CEMS

1. はじめに

現代テクノロジーを支える機能物性の多様性は、秩序形
成を伴った相転移の上に成り立っており、その応用や制御
が科学技術の発展に欠かせない。この秩序状態からのズレ
に対する復元力として定義される素励起 (ボソン) は、電
子ボソン結合という形で伝導電子と協奏的に相互作用し、
このとき形成される準粒子が超伝導¹⁾や巨大磁気抵抗²⁾な
どの強相関現象を引き起こす。したがって、この準粒子を
特徴付ける相互作用を解明して理解することが物質科学の
重要なテーマの 1 つとなっている。

本研究で我々は、異常磁性を示す少数キャリア半金属
CeX (X=P, As, Sb, Bi)³⁾における準粒子状態の違いに注
目した。CeX は温度・磁場・圧力といった外部環境に応
じて多彩な磁気構造を形成する^{4,5)}。中でも CeSb の磁気
相転移は特異に複雑で「悪魔の階段」と呼ばれ、磁場や圧
力のない状況でも 7 回の転移が生じる (Fig. 1(a))。我々
はこれまでに、この CeSb で 4f 結晶場励起と伝導電子の
結合した「多極子ポーラロン」という新しい準粒子が形成
されることを、レーザー角度分解光電子分光 (ARPES)
やレーザーラマン分光によって明らかにしている^{6,7)}。一
方、CeX の中で CeSb の隣に位置する CeAs は磁場や圧力
のない状況で 1 回の転移しか示さず、CeSb と対照的に単
純な磁気相転移を示す (Fig. 1(c))。したがって、CeAs で
は CeSb と異なった準粒子状態の形成が示唆される。そこ
で本研究では、レーザー ARPES・レーザーラマン分光・
非弾性 X 線散乱 (IXS) を利用して、CeAs で形成される
準粒子状態を解明し、CeSb との違いを明らかにした。

2. 実験

測定試料は日本原子力機構の芳賀芳範博士、久保田正人
博士から提供された純良な単結晶を使用した。レーザー
ARPES 測定は東京大学物性研究所、レーザーラマン分光
は大阪大学田島研究室、IXS は SPring-8 BL35XU でそれ
ぞれ行った。

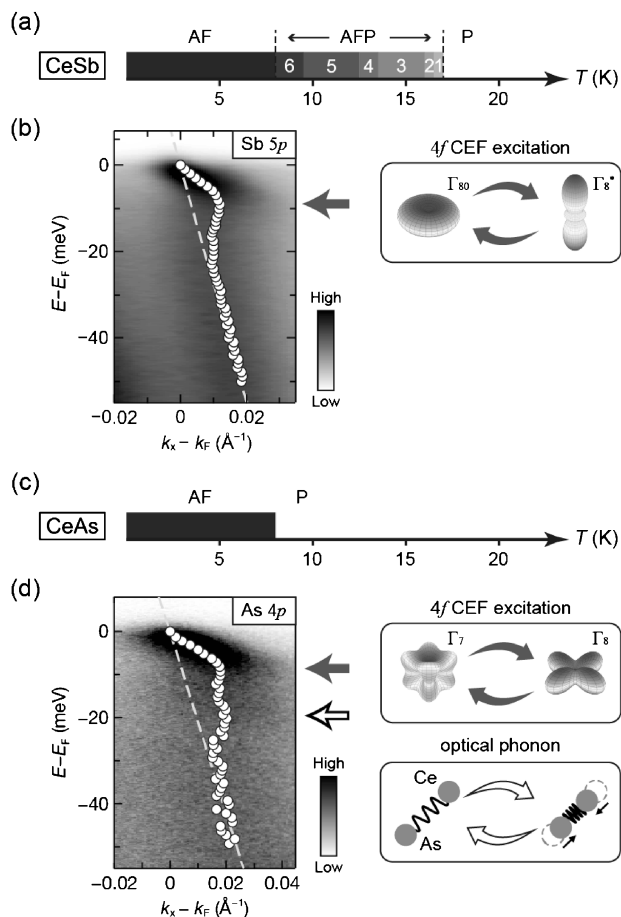


Fig. 1 (a, c) 磁場・圧力のない状況での CeSb・CeAs の磁気相図。(b, d) CeSb・CeAs におけるキंक構造と対応するボソン。

3. 結果と考察

電子ボソン結合に伴う準粒子が系に生じると、伝導電子の有効質量が増加することでバンド分散の折れ曲がった「キंक構造」が形成される。キंक構造の現れる位置はボソンのエネルギーを表しており、これに対応するボソンを見つけ出すことで準粒子の正体を明らかにすることができる。我々がこれまでに行った CeSb のレーザー ARPES では、このキंक構造が Sb 5*p* バンドのフェルミエネルギー (E_F) 以下 7 meV に観測された (Fig. 1(b))。そして、レーザーラマン分光により、このエネルギーに対応するボソンとして $4f\Gamma_{80}$ から $4f\Gamma_{8^*}$ への結晶場励起が見出され、 $4f$ 結晶場励起と Sb 5*p* の結合した準粒子状態が形成されることがわかった⁷⁾。

一方、CeAs のレーザー ARPES を行った結果、As 4*p* バンドの E_F 以下 9 meV と 21 meV に 2 つのキंक構造が観測された (Fig. 1(d))。さらに、レーザーラマン分光に

よって $4f$ 結晶場を調べることで 9 meV に対応するボソンとして $4f\Gamma_7$ から $4f\Gamma_8$ への結晶場励起が見出され、IXS によってフォノン分散を調べることで 21 meV に対応するボソンとして光学フォノンが見出された。これにより CeAs では、As 4*p* が $4f$ 結晶場励起だけでなく光学フォノンとも結合することで、CeSb と異なる準粒子状態が形成されることがわかった。

以上の測定から、CeX における準粒子状態の変化として、伝導電子と光学フォノンの結合の影響の違いが明らかになった。少数キャリア半金属である CeX では P 3*p* から Bi 6*p* までの電子構造の違いに応じてキャリア密度が系統的に変化しており、CeAs では CeSb よりもキャリア密度が小さい。この際立った少数キャリア性によって静電遮蔽の効果は弱まることで、CeAs では CeSb に見られなかった電子フォノン結合が顕在化したと考えられる。したがって、本研究結果は電子構造のわずかな差異に基づいた相互作用の変化が CeX に存在することを示しており、こうした違いが CeX の異常磁性の発現機構に大きな影響を与えていることが示唆される。

参考文献

- 1) D. Reznik *et al.*: Nature **440**, 1170 (2006).
- 2) J. M. D. Teresa *et al.*: Nature **386**, 256 (1997).
- 3) K. Kuroda *et al.*: Phys. Rev. Lett. **120**, 086402 (2018).
- 4) J. Rossat-Mignod *et al.*: J. Magn. Magn. Mater. **52**, 111 (1985).
- 5) M. Kohgi *et al.*: Phys. B: Condens. Matter **281-282**, 417 (2000).
- 6) K. Kuroda, Y. Arai *et al.*: Nat. Commun. **11**, 2888 (2020).
- 7) Y. Arai *et al.*: Nat. Mater. **21**, 410 (2022)



新井陽介

東京大学物性研究所

【略歴】

2018年慶應義塾大学理工学部物理学科卒業。2020年東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修士課程修了。現在、同博士課程に在籍中、物性研究所所属。東京大学フォトンサイエンス国際卓越大学院プログラム (XPS) コース生。日本

学術振興会特別研究員 (DC2)。

【受賞のコメント】

この度は JSR2023 学生発表賞に選出いただきましたことを大変光栄に思います。日頃よりご指導いただいております近藤猛准教授、黒田健太准教授、ならびに共同研究者の皆様にご場をお借りして厚く御礼申し上げます。

受賞者：田中宏明（発表番号：4C04S）

題目：SX-ARPES で調べる強磁性スピネル HgCr_2Se_4 の半導体的電子状態講演者：田中宏明¹, A. V. Telegin², Yu. P. Sukhorukov², V. A. Golyashov³, O. E. Tereshchenko³, A. N. Lavrov³, 松田拓也¹, 松永隆佑¹, 明石遼介⁴, M. Lippmaa¹, 新井陽介¹, 室隆桂之⁵, 出田真一郎⁶, 田中清尚⁶, 近藤猛¹, 黒田健太^{7,8}所属：¹東大物性研, ²UB RAS, ³SB RAS, ⁴QST, ⁵JASRI, ⁶分子研 UVSOR, ⁷広島大先進理工, ⁸広島大 WPI-SCKM²

1. 講演要旨

本講演は、強磁性スピネル HgCr_2Se_4 の電子状態を角度分解光電子分光 (ARPES) により直接観測したことを報告するものである。 HgCr_2Se_4 は、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算によって磁性 Weyl 半金属であることが提案されている¹⁾物質であり、この提案はパイロクロア型イリジウム酸化物に対するもの²⁾と並び磁性 Weyl 半金属の最初期の研究として広く知られている。後に提案された Mn_3Sn や $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ の磁性 Weyl 半金属状態が ARPES で直接観測されてきた^{3,4)}一方、 HgCr_2Se_4 における電子状態の直接観測はこれまで報告されてこなかった。

我々は、軟 X 線 (SX) を用いた ARPES により HgCr_2Se_4 のバンド分散を直接観測することに成功した。その電子状態は先行研究¹⁾が予測した Γ 点付近でホールバンドと電子バンドが交差する半金属ではなく、ホールバンドと電子バンドがバンドギャップを持っていた。これは第一原理計算とは一致しないが、赤外吸収分光測定⁵⁾や電気伝導測定⁶⁾で報告されてきた半導体という結果と合致している。DFT に基づく第一原理計算ではバンドギャップを過小評価してしまう可能性があることが知られており⁷⁾、この欠点を解消するために開発されたハイブリッド汎関数を用いることで半導体的電子状態を再現することにも成功した。強磁性スピネル HgCr_2Se_4 が磁性 Weyl 半金属であるという先行研究の予測はバンドギャップを過小評価しており、実際には磁性半導体であるということを、計算・実験の両面から明らかにした⁸⁾。

2. 実験手法

SX-ARPES 実験は SPring-8 軟 X 線固体分光ビームライン BL25SU⁹⁾で行った。放射光を用いた ARPES 実験では 100 eV 前後の真空紫外光 (VUV) がよく用いられるが、SX を使用することで光電子が散乱を受けづらくなり、SX-ARPES は VUV-ARPES と比べバルク (結晶内部) の電子状態を捉えられると考えられている¹⁰⁾。さらに本研究においては、 HgCr_2Se_4 が平坦な劈開面を持たないため

に VUV-ARPES でバンド分散を観測することが困難であることが明らかとなっている。光電子が結晶中から真空へ放出される際、結晶内と真空のポテンシャル差によって光電子は屈折を受ける。 HgCr_2Se_4 の場合、ランダムな凹凸を持つ劈開面によって屈折方向もランダム性を持ち、それが VUV-ARPES でのバンド分散観測を難しくしている。我々は、SX 領域であればこのランダム性を加味してもバンド形状は維持されるということを、シミュレーションによって明らかにしている。

3. 実験結果

SX-ARPES の実験結果は Fig. 1(a) の通りである。 Γ 点付近の価電子帯にはいくつかのホールバンドが存在するが、ホールバンドと交差するような電子バンドは観測できなかった。また、*p* 型試料と *n* 型試料の結果を比較すると、*n* 型試料では電子ドーピングによってホールバンドが低エネルギー側にシフトしている様子を観測した。

本研究で用いた HSE06 汎関数¹¹⁾は、先行研究¹⁾でも用いられた PBE 汎関数に Hartree-Fock 交換エネルギーを混合することで得られ、その混合比 α は 0.25 程度が標準値とされている。 α を 0 から 0.25 まで変化させながら電子状態の計算を行うと、 $\alpha > 0.12$ ではバンドギャップを持つことが分かった [Fig. 1(b)]。 HgCr_2Se_4 のバンドギャップは低温で 0.3 eV 程度である⁵⁾ため、この値を再現する混合比 [Fig. 1(b) 白抜き丸] を採用してバンド計算を行った。その結果が Fig. 1(c) であり、SX-ARPES で得られたバンド分散 [Fig. 1(a)] とよく一致している。

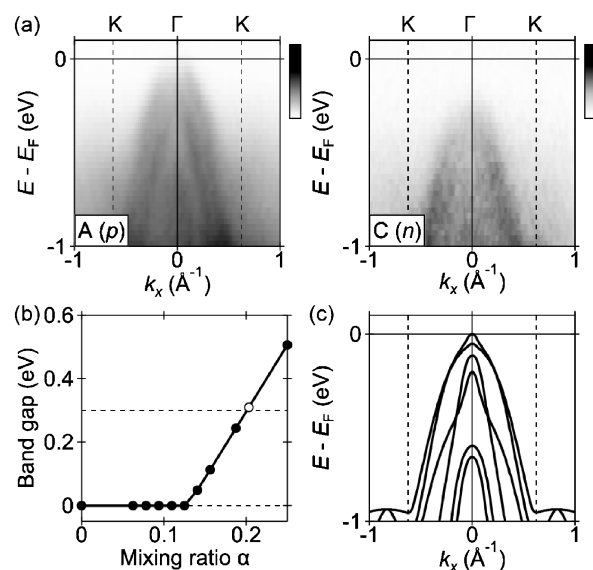


Fig. 1 HgCr_2Se_4 に対する SX-ARPES 実験および第一原理計算の結果。

(a) 475 eV の SX で測定した Γ 点付近のバンド分散。

(b) HSE06 汎関数の混合比 α とバンドギャップの関係。

(c) 図 (b) の白抜き丸に対応する条件で計算したバンド分散。

4. まとめ

本研究では、磁性 Weyl 半金属候補物質として広く知られていた強磁性スピネル HgCr_2Se_4 のバンド分散を SX-ARPES で観測することに成功し、その電子状態が半導体的であることを直接的に明らかにした。第一原理計算による予測と実験結果の違いには、PBE などの一般化勾配近似 (GGA) に基づく汎関数でバンドギャップを過小評価する傾向が影響していると考えられる。ハイブリッド汎関数を用いた第一原理計算で適切にパラメータ調整を行うことで、実験で得られたバンドギャップ・バンド分散ともに再現することができた。

参考文献

- 1) G. Xu *et al.*: Phys. Rev. Lett. **107**, 186806 (2011).
- 2) X. Wan *et al.*: Phys. Rev. B **83**, 205101 (2011).
- 3) K. Kuroda *et al.*: Nat. Mater. **16**, 1090 (2017).
- 4) D. F. Liu *et al.*: Science **365**, 1282 (2019).
- 5) T. Arai *et al.*: J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 68 (1973).
- 6) L. Goldstein *et al.*: J. Appl. Phys. **49**, 1474 (1978).
- 7) M. Marsman *et al.*: J. Phys.: Condens. Matter **20**, 064201 (2008).

- 8) H. Tanaka *et al.*: arXiv:2211.15884.
- 9) T. Muro *et al.*: J. Synchrotron Rad. **28**, 1631 (2021).
- 10) V. Strocov *et al.*: J. Electron Spectrosc. **236**, 1 (2019).
- 11) J. Heyd *et al.*: J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003), *ibid.* **124**, 219906 (2006).



田中宏明

東京大学 大学院理学系研究科 物理学専攻 博士課程

【略歴】

2019年3月東京大学理学部物理学専攻卒業。2021年3月東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修士課程修了。同年4月同博士課程進学、現在に至る。2019年10月より東京大学変革を駆動する先端物理・数学プログラム (FoPM) コース生、2021年4月より日本学術振興会特別研究員 (DC1)。

【受賞のコメント】

この度は、JSR2023学生発表賞を授与していただきありがとうございます。本研究は、物性物理分野の様々な手法を駆使することで完成させることができました。共同研究者の皆さまにこの場を借りて感謝申し上げます。

JSR2023学生発表賞 第2分野

受賞者：本間飛鳥（発表者番号：4C02S）

題目：マイクロ ARPES による反強磁性トポロジカル絶縁体候補物質 NdX_p (X_p : Bi, Sb) のドメインに依存したバンド分散の観測

講演者：本間飛鳥¹, 高根大地¹, 相馬清吾^{2,3}, Wang Yongjian⁴, 中山耕輔¹, 北村未歩⁵, 堀場弘司⁶, 組頭広志⁷, 田中清尚⁸, Kim Timur⁹, Cacho Cephus⁹, 高橋 隆¹, 安藤陽一⁴, 佐藤宇史^{1,2,3,10}

所属：¹東北大学理学研究科, ²東北大学 CSIS, ³東北大学 WPI-AIMR, ⁴ケルン大学, ⁵物質構造科学研究所, 高エネルギー加速器研究機構, ⁶量子科学技術研究開発機構, ⁷東北大学多元研, ⁸分子研 UVSOR, ⁹ダイヤモンド放射光施設, ¹⁰東北大学 SRIS

1. 緒言

反強磁性トポロジカル絶縁体は複合対称性 $S = \Theta T_{1/2}$ (Θ : 時間反転演算子, $T_{1/2}$: 反強磁性秩序によって2倍される結晶の並進演算子) によって保護された表面 Dirac 電子状態を有する物質¹⁾で、近年トポロジカル電気磁気効果や巨大磁気光学応答、ダークマター検出への応用などが予測され大きく注目を集めているが、その表面状態の実験的実証には至っていない。希土類モノプニクタイト RX_p (R : 希土類元素, X_p : Bi, Sb) は、その多くが反強磁性を示し、さらに近年常磁性相において、 $R-5d$ 軌道と X_p

- np 軌道が X 点で反転するバンドギャップが負の強いトポロジカル絶縁体となることが予想され、反強磁性トポロジカル絶縁体候補物質として注目を集めている。その電子状態については、トポロジーの非自明性を決定づける表面 Dirac 電子状態の直接観測が角度分解光電子分光 (ARPES) 法によって行われてきたが、主に常磁性相における結果に限られており、反強磁性相の Dirac 電子状態についてはあまりよくわかっていなかった。これは、この系が NaCl 型構造で高い対称性を有していることから、実現しうる3種の反強磁性ドメイン (Fig. 1) が単一試料内に共存し、かつ無磁場化で行う ARPES 測定ではシングルドメイン化が困難であり、従来の ARPES 装置の空間分解能では反強磁性ドメインを分離できずに積算して観測していたためである。

そこで我々は、KEK Photon Factory (PF) BL-28A において、真空紫外領域の放射光を K-B ミラーを用いてマイクロスポット化したマイクロ ARPES 装置の開発を行った。これを用いて NdBi ($T_N = 24$ K) 及び NdSb ($T_N = 16$ K) の ARPES 測定を行った。

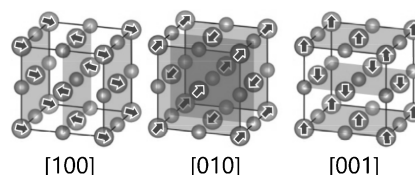


Fig. 1 3種の反強磁性ドメインの模式図。

2. 装置開発と実験

マイクロ ARPES 装置の開発は、測定槽直上40 cm の位置に K-B ミラーを導入し、ミラー角の調整、高精度試料駆動システムの構築をすることで実現した²⁾。最終的に得られたスポット径は $10 \times 12 \mu\text{m}^2$ で、従来のスポット径と比較して1/500のサイズの集光に成功した。

試料は共同研究者より提供いただき、ARPES 測定は PF BL-28A の他に Diamond Light Source I05, UVSOR 5U で行った。

3. 結果と考察

Fig. 2 に真空紫外領域の放射光を用いて行なった NdBi の ARPES 結果を示す。真空紫外領域の励起光は表面敏感であり、 k_z -ブロードニングの効果が顕著となるため、主に Fig. 2(a) に示す表面 Brillouin ゾーン (BZ) に射影された電子状態が観測される。常磁性相 ($T = 30 \text{ K}$) で得られた結果 [Fig. 2(b)] を見ると NdBi がトポロジカル絶縁体であることを示す $\bar{\Gamma}$ 点で縮退した表面 Dirac 電子状態が観測されている。 $\bar{M}$ 点では自明な表面状態が2個観測されており、全体として奇数個の非自明な表面 Dirac 電子状態が観測されたことから NdBi が常磁性相でトポロジカル絶縁体であると結論づけた。

さらに同じ位置で同様の測定を反強磁性相 ($T = 5 \text{ K}$) において行なった結果を Fig. 2(c) に示す。 $\bar{\Gamma}$ 点で縮退していた表面 Dirac 電子状態にエネルギーギャップが形成されており、その大きさも125 meV と他の磁性トポロジカル絶縁体で観測されているものと比べて非常に大きい。ところが、測定位置を変えて同様の測定を行うと E_F 近傍に新たに現れた S1, S2 バンドで示す変調とともにギャップレスな表面 Dirac 電子状態が観測された [Fig. 2(d)]。この

空間位置に依存した電子構造の変調は、同じ反強磁性相における違いであること、Néel 温度を挟んで消失することから反強磁性ドメイン (Fig. 1) による違いであると考え Domain A, B と名付けた。これらと3種の反強磁性ドメインを同定するために、その変調が顕著に現れると考えられるフェルミ面の観測を行った。その結果を Fig. 2(e), (f) に示す。それぞれ Domain A [Fig. 2(e)] では4回、Domain B [Fig. 2(f)] では S1, S2 バンドに起因して2回の回転対称性を有することがわかる。この対称性と、反強磁性秩序によって起こる BZ の折り返しによるバンドの再構成を考慮した結果、Domain A は $[001]$ ドメイン、Domain B は $[100]$ ドメインであると結論づけた。特に、 $[001]$ ドメインでは表面に正味の磁化が残り、S 対称性が破れることから、Domain A で観測されたギャップの開いた表面 Dirac 電子状態とも矛盾しない。以上から我々は反強磁性トポロジカル絶縁体の実証に成功したと結論づけた。さらに反強磁性相で新たに現れた S1, S2 バンドの起源についてトポロジカルに自明な半金属である NdSb の ARPES 測定を行うことで考察した。

NdSb は NdBi と同様の結晶構造・磁気構造 (cf. Fig. 1, $T_N = 16 \text{ K}$) を有しており、なおかつトポロジカルに自明な半金属であると予想されることから、NdBi との対照実験によって表面 Dirac 電子状態を除いた磁性のみの議論が行えると考えた。Fig. 3(a)–(c) に NdSb の反強磁性相で得られた ARPES 結果 (E vs. k_x) を示す。反強磁性ドメインの分離を示す3種のバンド分散 (Domain A–C) が観測されており、かつ NdBi と同様の S1, S2 バンドも観測されている。さらに NdSb ではバンド反転は観測されておらず、表面 Dirac 電子状態も観測されていないことから、S1, S2 バンドはトポロジーに関与しない自明な状態であ

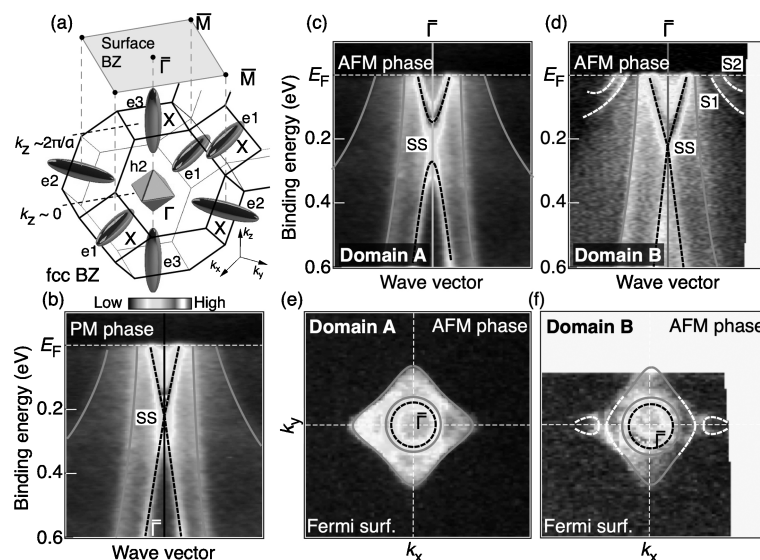


Fig. 2 (a)NdBi の fcc BZ とフェルミ面。 k_z 方向に射影した表面 BZ も同時に描かれている。(b)NdBi の常磁性相で得られた $\bar{\Gamma}$ 点近傍のバンド構造。(c), (d)それぞれ NdBi の反強磁性相における Domain A, B で得られた $\bar{\Gamma}$ 点近傍のバンド構造。(e), (f)同じく Domain A, B で得られた表面 BZ におけるフェルミ面。

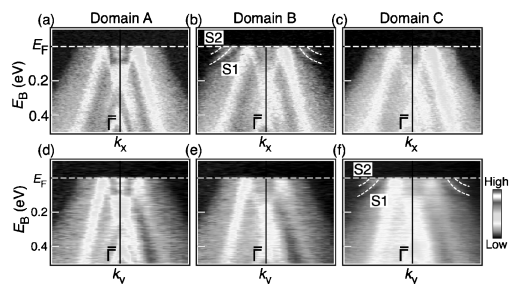


Fig. 3 (a)–(c)NdSbの反強磁性相における Domain A–C で得られた $\bar{\Gamma}$ 点近傍のバンド構造を k_x に対して描画した図。(d)–(f) (a)–(c)と同じだが、 k_y に対して描画した図。

と考えられる。この電子構造の変調に着目し、反強磁性ドメインの同定を行うために ARPES 測定を行った結果 (E vs. k_y) を **Fig. 3(d)–(f)** に示す。この結果から、S1, S2 バンドに起因してそれぞれのドメインは 4 回, 2 回, 2 回の回転対称性を有することがわかる。この対称性と反強磁性ドメイン (**Fig. 1**) が表面で持つ回転対称性を比較することで Domain A–C がそれぞれ [001], [100], [010] ドメインであると同定した。以上の結果から、反強磁性ドメインの分離観測と同定に成功し、S1, S2 バンドはトポロ

ジカル起源ではなく、磁性起源の自明な状態であることを明らかにした。

参考文献

- 1) R. S. K. Mong, A. M. Essin and J. E. Moore: Phys. Rev. B **81**, 245209 (2010).
- 2) M. Kitamura, S. Souma, A. Honma, D. Wakabayashi, H. Tanaka, A. Toyoshima, K. Amemiya, T. Kawakami, K. Sugawara, K. Nakayama, K. Yoshimatsu, H. Kumigashira, T. Sato and K. Horiba: Rev. Sci. Instrum. **93**, 033906 (2022).



本間飛鳥

東北大学大学院理学研究科物理学専攻
修士 2 年

【略歴】

2021 年 3 月東北大学理学部物理学科卒業。2021 年 4 月より東北大学大学院理学研究科物理学専攻修士課程在籍。

【受賞のコメント】

この度は名誉ある JSR2023 学生賞に選出いただきありがとうございます。日頃よりご指導いただいている佐藤宇史教授、相馬清吾准教授、菅原克明准教授、中山耕輔助教授をはじめ多くの先生方、共同研究者の方々に感謝申し上げます。本賞受賞を励みに今後とも精進してまいります。

JSR2023 学生発表賞 第 3 分野

受賞者：櫻井 快 (発表番号：8P56S)

題 目：軟 X 線タイコグラフィを利用した細胞内化学状態イメージング技術の開発

講演者：櫻井 快¹, 竹尾陽子¹, 古谷 登¹, 吉永享太¹, 江川 悟², 寶本俊輝¹, 井上圭一¹, 志村まり², 木村隆志¹

所 属：¹東大物性研, ²理化学研究所

1. はじめに

細胞内の成分分布計測は、オルガネラの機能や代謝反応を理解する上で重要な技術である。軟 X 線による顕微イメージングは高分解能計測、非破壊計測、ラベルフリーでの化学状態解析など、可視光顕微鏡や電子顕微鏡にはない細胞計測に適した多くの特徴を持つ。本研究では哺乳類細胞内の化学状態を調べるため、軟 X 線 XAFS タイコグラフィ¹⁾を利用し、細胞内各所の吸収スペクトルを高分解能で取得した。また、各位置のスペクトルを機械学習によって特徴毎に分類し、細胞内構造との対応関係を調べた。

2. 実験

実験は SPring-8 の軟 X 線用ビームラインである BL07LSU²⁾で行った。計測には所属研究室で開発した軟 X 線タイコグラフィ装置である CARROT³⁾を利用した。CARROT では照明光学素子として全反射ウォルターミラーを利用しており、細胞試料に多く含まれる軽元素の吸

収端で高い軟 X 線利用効率でのシームレスな計測を実現している。

計測試料はマウス神経芽細胞腫とラット神経のハイブリッド細胞 (ND7/23) である。細胞は軟 X 線透過窓付きのシリコンチップ上に培養し、パラホルムアルデヒドで化学固定した。固定後、純水によって洗浄した細胞と洗浄していない細胞とで、2 種類の試料を準備した。計測に使用した軟 X 線エネルギーは、窒素吸収端付近 (395–425 eV) の 105 点と酸素吸収端付近 (520–570 eV) の 100 点である。

3. 結果と考察

両試料の各位置における吸収スペクトルのうち、3 点を抽出したものを **Fig. 1** に示す。酸素吸収端の高エネルギー側のなだらかなピークが洗浄によって大きく減少していることから、洗浄によってグルコースに類似する成分が流出している可能性が示唆された。

また、細胞内の構造と化学状態との相関を調べるために吸収スペクトルの分類を行った。分類には変分オートエンコーダー⁴⁾と混合ガウスモデルを組み合わせて使用した。結果として **Fig. 2** のように、細胞核、細胞質、細胞膜などの構造を反映したスペクトル分類に成功した。

4. 今後の展望

今後は生きた細胞内での薬剤代謝反応の計測に向けて、生細胞の計測手法の確立や薬剤投与機構の開発を進める。今回開発した分類アルゴリズムを活用して、薬剤による状

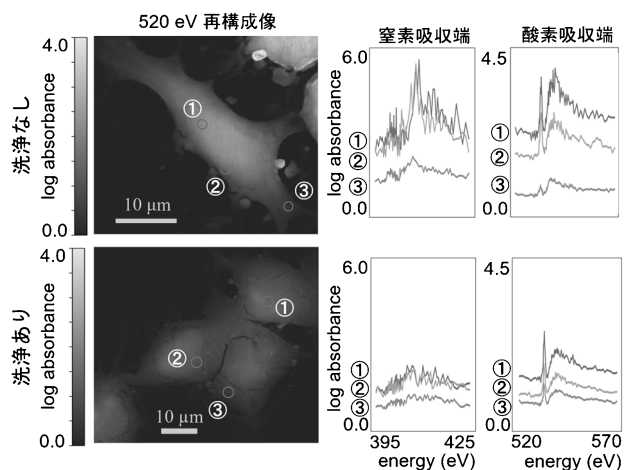


Fig. 1 細胞の各位置の吸収スペクトル。

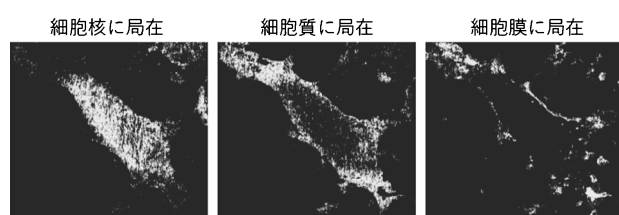
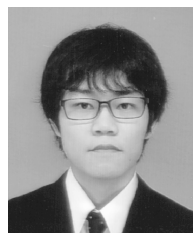


Fig. 2 分類した各グループの細胞内での分布。

態の変化や薬剤分布を検出できれば副反応の理解に向けて大きく貢献できると考えている。

参考文献

- 1) S. Urquhart: ACS Omega **7**, 14 (2022).
- 2) S. Yamamoto *et al.*: J. Synchrotron Radiat. **21**, 352 (2014).
- 3) T. Kimura *et al.*: Opt. Express **30**, 26220 (2022).
- 4) Diederik P. Kingma *et al.*: arXiv (2013).



櫻井 快

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士 2 年

【略歴】

2021年3月埼玉大学工学部情報システム工学科卒業。2021年4月より東京大学工学系研究科物理工学専攻修士課程に在学。

【受賞のコメント】

この度は JSR2023 学生発表賞にご選定頂き大変光栄に存じます。日頃よりご指導いただきました木村隆志准教授、竹尾陽子博士、放射光実験に協力していただいた木村研究室のみなさま、共同研究者のみなさまに厚くお礼申し上げます。本研究でのチップ作成には東大浅野キャンパスの武田先端知ビルスーパークリーンルームを利用しました。作成にご協力いただいたスタッフの皆様に感謝いたします。また本発表をお聞きいただいた皆様に感謝いたします。

JSR2023学生発表賞 第3分野

受賞者：橋本 聡（発表者番号：2D02S）

題目：時間分解真空紫外円二色性分光法による β ラクトグロブリンと生体膜の相互作用研究

講演者：橋本 聡¹，松尾光一²

所属：¹広島大学先進理工系科学研究科，
²広島大学放射光科学研究センター

1. 緒言

膜結合タンパク質は、生体膜に相互作用し天然状態とは異なる構造に変化することで、様々な生物学的機能を発現する。しかし、生体膜と結合した状態（膜結合状態）は、結晶化が難しく、タンパク質の構造研究において主流となる X 線結晶学や核磁気共鳴法では解析が困難であるため、実験的手法での構造・機能解析に、大きな進展が見られなかった。円二色性（CD）分光法は、タンパク質構造解析に使われる研究手法の一つであり、膜存在下などの様々な溶媒条件下のタンパク質構造が観測可能であるため、膜結合タンパク質の構造解析の実験的アプローチとして確立されている。HiSOR の真空紫外円二色性（VUVCD）分散計は、市販装置では測定が困難な 190 nm 以下である真空紫外領域（VUV, ~ 140 nm）の CD 測定が可能であり、原子レベルでの構造観測はできないが、細胞膜の構造

に近い脂質二重層の球状リボソーム生体膜存在下など、様々な実験条件で膜結合タンパク質の構造研究を展開できる。また、測定領域の拡張により、従来法に比べ高精度で二次構造含量、本数、位置（アミノ酸配列レベル）解析が可能で、これまでに膜結合タンパク質の構造解析に応用されてきた。本研究では、VUVCD 分散計に時間分解機能を搭載することで、タンパク質の構造変化（生体膜相互作用）の動的観測を試みた。

2. 時間分解装置の構築

HiSOR BL-12 の VUVCD 分散計に溶液混合のための時間分解セル、ビームサイズ縮小のための集光レンズ、溶液注入のためのシリンジポンプを搭載して時間分解機構を構

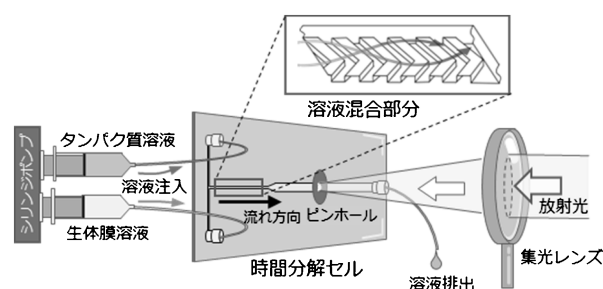


Fig. 1 時間分解装置概略図。

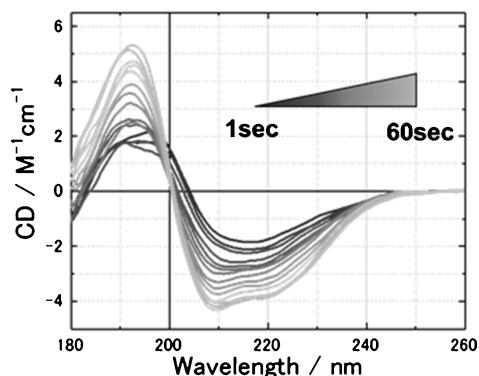


Fig. 2 β ラクトグロブリンとLysoDMPGの相互作用の時間分解スペクトル。

築した (Fig. 1)。連続フロー型的高速混合法を採用しており、対象とする反応時間点のスペクトルを観測することができる。今回開発した時間分解セルには、ジグザグヘリンボン型 (SHM) と呼ばれる混合部分底面に複数の凹凸パターンを有するモデルを採用した^{1,2)}。反応時間点はシリンジポンプによる流速設定で操作を行い、0.1秒～数分の時間領域を対象として観測可能である。

3. 実験結果および考察

相互作用観測の試料として、モデルタンパク質である β ラクトグロブリン、生体膜としてミセルを形成するLysoDMPGとドデシル硫酸ナトリウム (SDS) を使用した。時間分解測定を行った結果、LysoDMPG 相互作用では1～60秒 (Fig. 2)、SDS 相互作用では0.1～90秒のCDスペクトルを獲得した。時間分解データの解析により、生体膜の種類に依存した2つの速度定数を算出し、各相互作用で1つの中間状態のスペクトルを算出した。天然状態、中間状態、膜結合状態の3種のCDスペクトルから、SELCON3プログラムによる二次構造解析、VUVCD-NN

(ニューラルネットワーク) 法による二次構造位置予測を行った結果、生体膜の種類に依存した特徴的な中間構造を獲得することができた。以上のことから、時間分解CD装置の構築により、生体膜相互作用過程の膜結合タンパク質の動的構造変化が実験的に観測でき、また解析により生体膜相互作用が誘起する構造ダイナミクスの詳細な情報を獲得できることが分かった。

4. 今後の展望

構築した時間分解装置を用いて、 α_1 酸性糖タンパク質などの生命機能を有する膜結合タンパク質^{3,4)}の動的観測から、細胞内への薬物輸送機構などの現象を理解する。時間分解セルを高度化することで、生体分子間の相互作用研究への本装置の汎用性をさらに高める。

参考文献

- 1) A. D. Stroock *et al.*: SCIENCE **295**, 647 (2002).
- 2) T. J. Kwak *et al.*: PLOS ONE, 0166068 (2016).
- 3) K. Matsuo *et al.*: Biochemistry **48**, 9103 (2009).
- 4) M. Kumashiro *et al.*: Proteins **89**, 1251 (2021).



橋本 聡

広島大学先進理工系科学研究科物理学プログラム博士課程前期2年

【略歴】

2021年3月広島大学理学部物理学卒業。2021年4月より同大学先進理工系科学研究科物理学プログラム博士課程前期在籍。

【受賞のコメント】

JSR2023学生発表賞を受賞したことを大変光栄に思います。本学会にて、本研究の発表をご覧頂いた皆様に感謝申し上げます。また、日頃からご指導いただいております松尾光一准教授、ならびにHiSORの皆様にも厚く御礼を申し上げます。本賞を励みとし、今後も研究活動に精進してまいります。

JSR2023学生発表賞 第3分野

受賞者：的場美希（発表者番号：8P29S）

題目：人工結合タンパク質を用いた糖鎖切断酵素の立体構造解析

講演者：的場美希¹、高島 晶²、藤田純三³、雨坂心人⁴、吉澤拓也¹、難波啓一³、田中俊一⁴、松村浩由¹

所属：¹立命館大学大学院、²公益財団法人野口研究所、³大阪大学大学院、⁴京都府立大学大学院

1. 緒言

糖鎖切断酵素の一つとして *Tannerella sp.* より発見されたタンパク質 Endo-Tsp1263は、報告が少ない多分岐複合型糖鎖を切断可能な糖鎖切断酵素であり、糖鎖工学上の課題を解決する可能性を持っている。本研究では、Endo-

sp1263の触媒機構の解明を目的として、X線結晶構造解析およびクライオ電子顕微鏡による単粒子解析による立体構造の決定に挑戦した。Endo-Tsp1263の結晶化は以前から試みられてきたものの、酵素の安定性が低いためか結晶化することができなかった。そこで本研究では、Endo-Tsp1263の安定性を向上させるため、触媒ドメインを残した変異体 Endo-Tsp1263 (22-793) を用い、またファージディスプレイ法により取得した Endo-Tsp1263に結合する人工結合タンパク質 Monobody を結合させ、実験を行った。

2. 実験

Endo-Tsp1263 (22-793) と Monobody をそれぞれ大腸菌発現系で発現・精製し、モル比1:1.2で混合して複合



Fig. 1 Endo-Tsp1263 (22-793)-Monobody 複合体の結晶。針状の結晶がドロップ中にいくつも見られた。

体を形成させた。X線結晶構造解析のための結晶化にはタンパク質濃度を10 mg/mLに設定し、ハンギングドロップ蒸気拡散法で結晶化を行った。取得できた結晶を用いて、SPRING-8 BL44XUにおいてX線回折実験を行った。

クライオ電子顕微鏡による観察では、同様に作成したEndo-Tsp1263 (22-793)-Monobody複合体を用い、タンパク質濃度1.0 mg/mLで実験を行った。

3. 結果と考察

10% PEG4000, 0.1 M HEPES-NaOH pH 6.0のリザーバー条件で行った結晶化で、**Fig. 1**のような針状の結晶を得ることが出来た。この結晶を用いてSPRING-8 BL44XUにおいてX線回折実験を行ったところ、分解能3.2 Å程度のX線回折強度データを収集でき、そのデータを用いて、現在構造解析を試みている。クライオ電子顕微鏡による観察結果を**Fig. 2**に示した。特定の向きの粒子の画像が鮮明に得られ、二量体らしき構造が確認できた。一方で、その他の向きの粒子の画像は不鮮明であったため、現在のところ立体構造決定には至っていない。ここで得られた粒子画像に偏りがあったのは、サンプルグリッド上に並んだタンパク質粒子の向きが一方に偏っていることが原因であると考えられる。これにより、一部の向きのデータは多く集まるために鮮明になるが、その他の向きはデータが少なく不鮮明になっている。これは、グリッド上のタンパク質粒子が界面と相互作用して配向の偏りが生じているためだと推測している。

4. 今後の展望

現状ではEndo-Tsp1263の立体構造決定には至っていないため、X線結晶構造解析においては、結晶化条件を再検討し、結晶の質を高めることでより高分解能のX線回折強度データを取得できるようにしたい。クライオ電子顕

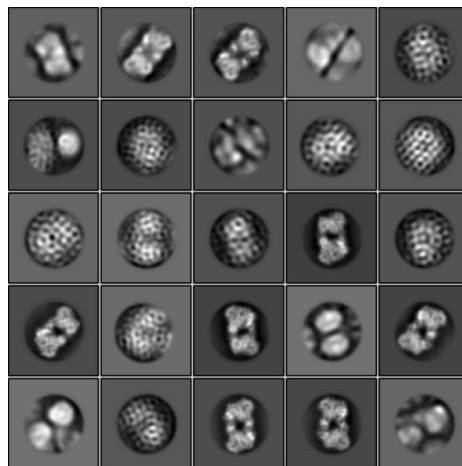


Fig. 2 クライオ電子顕微鏡によるEndo-Tsp1263 (22-793)-Monobody複合体の観察結果。一部の向きからは二量体らしき構造が見えているものの、その他の向きは不鮮明になっている。

微鏡による実験においては、今後、異なる人工結合タンパク質を結合させ、タンパク質の界面との相互作用を変化させることで、配向が平均化するかどうかを検討する予定である。

また、今回はどちらの実験でも触媒ドメイン以外をなくしたEndo-Tsp1263変異体を用いて実験を行った。しかし、触媒機構の完全な解明のためには全長のEndo-Tsp1263の構造を知る必要がある。今後、全長Endo-Tsp1263の構造を安定化するような人工結合タンパク質を取得し、こちらについても構造解析を試みていきたい。



的場美希

立命館大学大学院生命科学研究科生命科学専攻博士前期課程2年 構造生命科学研究室

【略歴】

2021年3月立命館大学生命科学部生物工学科卒業、2021年4月立命館大学大学院生命科学研究科生命科学専攻入学。

【受賞のコメント】

この度は栄誉ある学生発表賞に選出頂き大変光栄に思います。日頃からご指導いただいております松村浩由先生、吉澤拓也先生、共同研究者である高島晶先生、藤田純三先生、難波啓一先生、田中俊一先生、雨坂心人氏および助力いただきました研究室の皆様にお礼申し上げます。今回の受賞を励みとし今後も研究に精進して参ります。