

教育・研究活動 年次報告書

2020 年度

九州大学大学院理学研究院
化学部門

2021 年 12 月

目 次

はじめに	_____
1. 2020 年度における化学専攻の活動	_____
1.1 教員名簿	_____
1.2 人事異動	_____
1.3 非常勤講師	_____
1.4 大学院博士課程・修士課程・研究生・学振 (PD)・研究員等 名簿	_____
博士課程	_____
修士課程	_____
研究生・学振 (PD)	_____
1.5 2020 年度に授与した大学院学位	_____
課程博士 (理学)	_____
課程修士 (理学)	_____
1.6 2020 年度関係行事一覧	_____
(1) 講演会	_____
(2) 談話会・報告会	_____
(3) 修士課程論文公開講演会	_____
(4) 学士課程卒業研究業績報告会	_____
2. 2020 年度における各講座の活動	_____
[無機・分析化学講座]	_____
錯体化学分野	_____
錯体物性化学分野	_____
生体分析化学分野	_____
分光分析化学分野	_____
無機反応化学分野	_____
[物理化学講座]	_____
分散系物理化学分野	_____
量子化学分野	_____
光物理化学分野	_____
構造化学分野	_____
[有機・生物化学講座]	_____
生体情報化学分野	_____
生物有機化学分野	_____
構造機能生化学分野	_____

[複合領域化学講座] _____

理論化学分野 _____

触媒有機化学分野 _____

分子触媒化学分野 _____

量子生物化学分野 _____

はじめに

九州大学大学院理学研究院化学部門の 2020 年度の教育・研究活動 年次報告書をお届けします。

2018 年度より、本報告書の公表は化学科ホームページでの掲載という形をとっております。論文や学会発表などの研究業績・担当講義・各種委員などの情報は、下記のサイトをご覧ください。

九州大学研究者情報サイト

<http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/>

九州大学によろこそ（研究者プロファイリングツール Elsevier 社 Pure）

<https://kyushu-u.pure.elsevier.com/ja/>

化学部門は、無機・分析化学講座、物理化学講座、有機・生物化学講座、複合領域化学講座の 4 講座体制で運営されています。2020 年度は 18 研究室で活動し、教育・研究を行いました。人事異動では、教授 1 名、准教授 1 名、助教 2 名が着任し、年度末に講師 1 名が定年退職しています。昨今の人事ポイントが厳しい中、大学内の各種人事制度を活用しながら、良い人材を確保して陣容を充実し、部門の活力を増強することに注力しています。

大学院教育を担当する化学専攻では、先導物質化学研究所、基幹教育院、カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所、アイソトープ統合安全管理センターから協力講座 8 研究室に加わっていただき、幅広い化学教育を展開しています。理学府独自の教育プログラムである「フロントリサーチャー育成プログラム」および「アドバンストサイエンティスト育成プログラム」、ならびに工学府との連携による博士課程教育リーディングプログラムを発展させた「分子システムデバイス Ⅰ・Ⅱ」の下、先端学際科学者ならびに高度理学専門家の育成に向けた教育を行っています。

2020 年度は、新型コロナウイルスの感染拡大によって教育研究活動の大きな変更を迫られた年でありました。まず新年度早々授業日程の変更があり、春学期が 5 月 7 日～6 月 24 日、夏学期が 6 月 25 日～8 月 12 日となりました。また春学期については対面授業を原則的に行わないことになったため、すべての講義でこれまで経験のない遠隔による授業方法を探ることになりました。さらに 4 月 7 日には、福岡県ほか 7 都府県に緊急事態宣言が発令され、すべての教職員、学生の登校が原則として禁止されました。そのため、部門内会議を全面的にオンラインに移行し、教育研究活動も在宅、オンラインで行えるものを除き、停止せざるを得なくなりました。さらに各研究室では実験試料、実験装置の維持、オンラインによる大学院生のサポートなどのへの対応に追われました。

その後、5月14日に福岡県の緊急事態宣言は解除をされたものの、講義については引き続き遠隔授業のみとなり、この状況は年度終わりまで続きました。ただどうしても対面で行わざるを得ない学生実験は、夏学期期間に内容を短縮し、実験室当たりの人数を制限した上で、対面で行いました。一方、研究活動の方は、6月に入ったころから教員による輪番制など必要最小限の人数で徐々に行うようになり、さらに夏学期の始まりに伴って卒業年度の学部生、大学院生の研究指導も同様に人数制限を行った上で行うようになりました。その後、研究活動については、感染対策を十分に行いつつ徐々に再開し、秋学期にはほぼ通常どおりに行うようになりました。また大学院入試も大きな影響を受け、TOEIC の中止による英語試験問題の作成など対応に追われましたが、自己推薦入試、一般入試とも対面が無事終わることができました。

このような事態は年度を通して続き、これを書いている時点でも感染の収束、以前通りの教育研究活動が行える見通しは立っていません。しかし一方で、近年のIT機器、ネットワークの発達により、このような状況でも十分に教え、学ぶことができることを実感しました。とはいうものの、やはり化学という学問では、実際に危険な化学物質などを自ら操作し、その扱いを身に付けなければなりません。そのため大学の整った環境での対面教育がどうしても必要であることも痛感しました。ワクチンの普及などによって、早く以前通りの教育、研究活動ができるようになることを願っています。

今後とも、化学科・化学専攻・化学部門の教育・研究に皆様方のご支援賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

2021年12月

2021年度 化学部門長 恩田 健

1. 2020年度における化学専攻の活動

1.1 教員名簿 (2020年5月1日現在)

教授

酒井 健(無機・分析化学)	大場正昭(無機・分析化学)	松森信明(無機・分析化学)
恩田 健(無機・分析化学)	安中雅彦(物理化学)	寺寄 亨(物理化学)
加納英明(物理化学)	久下 理(有機・生物化学)	大石 徹(有機・生物化学)
中野晴之(複合領域化学)	徳永 信(複合領域化学)	桑野良一(複合領域化学)

准教授

高橋和宏(無機・分析化学)	小澤弘宜(無機・分析化学)	大谷 亮(無機・分析化学)
宇都宮聡(無機・分析化学)	槇 靖幸(物理化学)	堀尾琢哉(物理化学)
大橋和彦(物理化学)	荻島 正(有機・生物化学)	谷 元洋(有機・生物化学)
松島綾美(有機・生物化学)	吉田紀生(複合領域化学)	村山美乃(複合領域化学)
秋山 良(複合領域化学)		

講師

岡上吉広(無機・分析化学)	原田賢介(物理化学)	末永正彦(複合領域化学)
---------------	------------	--------------

助教

山内幸正(無機・分析化学)	Benjamin LE OUAY(無機・分析化学)	木下祥尚(無機・分析化学)
宮田潔志(無機・分析化学)	八島慎太郎(物理化学)	荒川 雅(物理化学)
宮田 暖(有機・生物化学)	鳥飼浩平(有機・生物化学)	保野陽子(有機・生物化学)
渡邊祥弘(複合領域化学)	山本英治(複合領域化学)	

【協力講座】

先導物質化学研究所

教授

玉田 薫(ナノ物性化学) 佐藤 治(光機能物質化学)

准教授

有馬祐介(ナノ物性化学) 谷 文都(構造有機化学)

助教

龍崎 奏(ナノ物性化学) 金川慎治(光機能物質化学) 五島健太(構造有機化学)

基幹教育院

教授

瀧上隆智(ソフト界面化学) 野瀬 健(生体分子化学)

准教授

内田竜也(有機反応化学)

カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所

教授

山内美穂(ナノ機能化学)

R I センター

准教授

杉原真司(環境動態化学)

1. 2 人事異動

'20. 4. 1	錯体物性化学	Benjamin LE OUAY	助教	採用
'20. 5. 1	光物理化学	加納 英明	教授	採用 (筑波大学より)
'21. 1. 1	生体分析化学	川井 隆之	准教授	採用 (理化学研究所より)
'21. 3. 1	理論化学	鈴木 聡	助教	採用
'21.3.31	量子化学II	原田 賢介	講師	定年退職

1. 3 非常勤講師

向井 邦晃	講師	慶應義塾大学医学部
土井 隆行	教授	東北大学大学院薬学研究科
杉山 成	教授	高知大学理工学部
池田 浩	教授	大阪府立大学大学院工学研究科
大島 康裕	教授	東京工業大学理学院
四方 俊幸	教授	東京農工大学大学院農学研究院
秋根 茂久	教授	金沢大学ナノ生命科学研究所

1. 4 大学院博士課程・修士課程・研究生・学振 (PD) ・研究員等 名簿

(2020年5月1日現在)

博士課程

1年生 (D1)

多伊良 夏樹*
河野 聖
須田 慶樹
橋口 雄太
邱 逸飛
柳澤 純一
坂口 雄人
土居内 大樹
竹田 宙加
西郷 将生*
黄 啓安
松田 倫太郎
斉 維昕
梅野 圭太郎
程 豊

2年生 (D2)

相本 雄太郎
河合 靖貴
篠崎 貴旭
藤井 悟*
若藤 空大*
竹藤 春菜
南川 賢人
江口 弘人
岡本 大介
サウカン・プリム
WON SUNGYONG

3年生 (D3)

八束 孝一
森田 浩平
成田 昌弘
藤木 涼
金丸 恒大
冷 俊夫
芳野 遼
久家 恵大
Baruti Yemba Yemba
張 嫻
李 君秋

*...日本学術振興会特別研究員

修士課程

1年生 (M1)

村島 幹征

沖 拓海

渡 直樹

鄭 文偉

LIN YU MING

神田 史章

岩下 智哉

三田 祐輔

赤井 翔

中西 京香

YANG HAOYU

松井 将騎

LEE EUNHYUNG

杉岡 寛爾

古城 優樹

高見 龍

松村 彩郁

古賀 綾乃

高倉 新平

空田 晃

西島 孝

三苫 研人

福田 凌大

ケン キン

森藤 将之

鹿間 裕太

イ デユン

許 嘉能

金城 信哉

柳田 侑真

岩佐 颯起

若藤 恭暢

神 優樹

田中 康裕

川田 真衣

笠原 ののか

鳥山 加奈子

辻 真樹

寺西 勇登

黒岩 勇

本多 めぐみ

瀧上 世奈

合屋 茜

菊永 竜馬

椎木 大地

丸林 聖司

山田 実

清水 真凜

白岩 あゆみ

笠 僚宏

高山 千廣

渡邊 巧

上村 祐樹

管 昌権

JI CONGHAO

田中 柊也

矢城 勇樹

寺西 龍

後藤 伯照

東 大悟

PARK JONGWOOK

WANGAMNUAYPORN Supakorn

LUO YIMING

2年生 (M2)

武田 依子	住吉 勝伍	白井 力
行武 美華	磯野 晃太郎	橋本 桂吾
千葉 佳祐	張 奥	田島 悠太郎
松尾 美香	下田 侑史	林 奈穂
山下 敦裕	岡林 隆太	諸岡 和也
脇本 椋太郎	浦越 諒	宮田 透子
大橋 奈央	橋本 大資	堀 翔太郎
大久保 堅三郎	中村 理志	柳瀬 由起美
大庭 隆也	渡邊 光	岩本 雅輝
櫻井 敦也	首藤 元希	宮崎 栞
瓜田 敦哉	中村 達也	渡部 雄太
中島 航馬	八木 政俊	川原 啓汰
近江 賛泰	堀田 徹耶	上田 友香
横尾 浩輝	高木 真由	楠本 多聞
久保 功貴	ロング ジェレミー	横田 航希
吉松 大慶	内之倉 朋紘	浦 研二郎
米本 純太	田畑 光一郎	松下 伸
笹木 健太	田中 孝記	三浦 崇太郎
川相 誓也	深井 雅輝	吉清 倅生
杉原 諒一	田川 幸樹	ニ ルイチ
枝広 遥毅	徐 文煌	許 柯
外山 小夏	飯田 岳史	周 子堯
桁山 雅旭	松尾 和哉	

研究生

今吉 隆昭
Nada Besisa

学振 (PD) 研究員等

1. 5 2020 年度に授与した大学院学位

課程博士 (理学)

- 成田 昌弘 **Studies on Synthesis and Properties of Azulene Derivatives**
アズレン誘導体の合成と物性に関する研究
(協力講座：構造有機化学講座)
- 張 嫻 **Development of Earth-Abundant Molecular Systems for Efficient Photocatalytic CO₂ Reduction in Fully Aqueous Media**
光触媒的二酸化炭素還元を高効率に促進する環境適合型分子システムの開発
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 八束 孝一 **Development of Improved Photocatalytic Hydrogen Evolution Systems by the Rational Redox Tuning of Electron Mediators**
電子伝達系の酸化還元特性制御による高活性光水素生成触媒系の開発
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 森田 浩平 **Platinum Porphyrin-Modified TiO₂ Electrode as an Efficient Cathode of Molecular-Based Photoelectrochemical Cell for Solar Hydrogen Production**
高効率な太陽光水素生成を駆動する分子性光電気化学セルにおける白金ポルフィリン修飾二酸化チタン電極
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 冷 俊夫 **Control of Emission Wavelength of Colloidal Semiconductor Nanocrystal**
コロイド半導体ナノ結晶の発光波長の制御に関する研究
(協力講座：ナノ物性化学講座)

久家 恵大 Theoretical Study on Hydrogen Evolution Reaction
Catalyzed by Platinum Subnanoclusters
白金サブナノクラスターによる水素発生触媒反応の理論的
研究
(無機・分析化学：錯体化学講座)

課程修士 (理学)

Ziyao Zhou Characterization of mechanical property of nanofilm on
周子堯 porous alumina
ポーラスアルミナ基板上でのナノフィルムの力学特性評価
(協力講座：ナノ物性化学講座)

Ni Ruiqi High throughput screening of lipid-raft inhibitors by
inter-lipid fluorescent energy transfer.
脂質間蛍光共鳴エネルギー移動を用いた脂質ラフト阻害の
ハイスループットスクリーニング
(無機・分析化学：生体分析化学講座)

Kyo ka Synthesis of Novel Thiazolium Salts Having a Chiral
許 柯 Cleft Structure
キラルクレフト構造を有するチアゾリニウム塩の合成
(複合領域化学：触媒有機化学講座)

川原 啓汰 Luminescent Mechanism of Novel 1-D Re(V)-Ln(III)
Coordination Polymers with Two Types of Luminescent
Centers
二種類の発光中心を有する新規一次元 Re(V) - 希土類配位
高分子の発光機構
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)

下田 侑史 Time-resolved Infrared Spectroscopic Study of
Photoexcitation Dynamics in Various Photo-functional
Materials
時間分解赤外分光による各種光機能性物質の光励起ダイナ
ミクスの研究

(無機・分析化学：分光分析化学講座)

横尾 浩輝 Mechanisms of adsorption, desorption and coprecipitation of barium ion on biogenic manganese oxides produced by a fungus isolated from the Ningyo-toge uranium mine.
人形峠ウラン鉱山から単離された微生物が生成するマンガン酸化物へのバリウムイオン吸着、脱着、共沈メカニズム
(無機・分析化学：無機反応化学講座)

桁山 雅旭 Magnetic Property Changes of Hofmann-type Porous Coordination Polymers by Interhalogen Compound Adsorption
ハロゲン間化合物の吸着による Hofmann 型多孔性配位高分子の磁気特性変化
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)

林 奈穂 Exploring s-d and s-f electron interaction in AgNX^+ ($\text{X} = \text{Mn}, \text{Ce}, \text{and Sm}$) and AlNMn^+ by chemical reaction
ホスト-ゲスト金属クラスターイオンの反応実験による s-d および s-f 電子間相互作用の研究 - AgNX^+ ($\text{X} = \text{Mn}, \text{Ce}, \text{Sm}$) と AlNMn^+ -
(物理化学：量子化学講座)

櫻井 敦也 Development of Molecular Simulation Programs for Electrolytes Concentration Annealing Method
電解質濃度アニーリング法のための分子シミュレーションプログラムの開発
(複合領域化学：量子生物化学講座)

田畑 光一郎 Study of the solvent effect on excited-state proton transfer (ESPT) using the 3D-RISM-SCF theory
3D-RISM-SCF 理論を用いた励起状態プロトン移動における溶媒効果の研究
(複合領域化学：理論化学講座)

- 脇本 椋太郎 **Liquid Structures and Intermolecular Interactions of Deep Eutectic Solvents Reline**
深共晶溶媒 Reline の液体構造および分子間相互作用
(物理化学：構造化学講座)
- 久保 功貴 **Luminescence Mechanism of Di(2-thienyl)diketone Derivatives Exhibiting Mechanochromic Luminescence**
発光性メカノクロミズムを示すジ(2-チエニル)ジケトン誘導体の発光メカニズム解明
(無機・分析化学：分光分析化学講座)
- 外山 小夏 **Correlation Between Structural Distortion and Magnetic Behavior of 2-D Coordination Polymers by Incorporating Axial Ligands**
軸配位子の導入による二次元配位高分子の構造歪みと磁気挙動の制御
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 浦 研二郎 **Development of Cu-TiO₂ Complex Catalysts for Selective Electrochemical CO₂ Reduction Reaction.**
選択的 CO₂ 電気化学還元のための Cu-TiO₂ 複合触媒の創製
(協力講座：ナノ機能化学講座)
- 田中 孝記 **Mechanisms of Functional Expressions in Stimuli-responsive Materials Using Time-resolved Spectroscopies**
時間分解分光による外部刺激応答性材料の機能発現機構の解明
(無機・分析化学：分光分析化学講座)
- 飯田 岳史 **Ion trajectory simulation of linear multipole ion traps for analysis and control of spatial ion distribution**
飛跡シミュレーションによる線形イオントラップ内の捕捉イオン分布の解析と制御
(物理化学：量子化学講座)

- 松尾 美香 **Assessment of Theoretical Approximations for Studies of Molecular Recognition**
分子認識研究を目指した液体理論の近似の検討
(複合領域化学：量子生物化学講座)
- 堀田 徹耶 **Effect of Headgroup Structure on Adsorption Behavior of Fluoroalkyl Methyl Esters and Amide at Hexane/Water Interface**
ヘキサン/水界面におけるフルオロアルキルメチルエステル及びアミドの吸着挙動に与える親水基構造の効果
(協力講座：ソフト界面化学講座)
- 磯野 晃太郎 **Analysis of elastic modulus for single soft nanoparticles in aqueous solutions by using a nanopore device**
ナノポアデバイスを用いた1粒子弾性率評価
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- ロングァ ジェレミー **Electronic Pyroelectricity in Valence Tautomeric Dinuclear Complexes and Development of Measurement Methods**
原子価互変異性複核錯体における電子焦電性とその測定手法の開発
(協力講座：光機能物質化学講座)
- 宮崎 栞 **Elucidation of Emission Mechanisms in Ln(III) Complexes toward OLED Application**
Ln(III)錯体の発光ダイナミクス解明と有機 EL デバイスへの応用
(無機・分析化学：分光分析化学講座)
- 松尾 和哉 **Selective Synthesis and Higher Organization of Self-assembled Supramolecular Isomers Based on an Asymmetric Copper(II) Complex**
非対称銅(II)錯体の自己集積による超分子異性体の作り分けと複合化
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)

- 諸岡 和也 Super-Radioactive Unit 1-Derived Particles from Fukushima Daiichi : Properties and Environmental Impacts
福島原発 1 号機由来の超高放射性粒子 : その特性と環境影響
(無機・分析化学 : 無機反応化学講座)
- 横田 航希 Effects of the Substituents on the Spectral Properties of 2-Methoxybenzoic Acid
2-メトキシ安息香酸の分光特性に与える置換基の影響
(物理化学 : 構造化学講座)
- 楠本 多聞 Freezing processes of water droplets evaporatively cooled in a vacuum: Effects of droplet size and ethylene-glycol addition
真空下での蒸発冷却による水液滴の凍結過程 : 液滴サイズおよびエチレングリコール添加の効果
(物理化学 : 量子化学講座)
- 大久保 堅三郎 Size Selective Absorption Induced by a Nano-Cylindrical Confined Space Immersed in a Solvent Mixture
混合溶媒中のナノサイズ細孔による低分子のサイズ選択的吸蔵
(複合領域化学 : 量子生物化学講座)
- 中島 航馬 Development and application of solvation theory of Liquid-Vapor interface using inhomogeneous system integral equation theory for simple liquids
単純液体における不均一系積分方程式理論を用いた気液界面溶媒和理論の構築とその応用
(複合領域化学 : 理論化学講座)
- 笹木 健太 Guest-responsive Mechanism of Mononuclear Complexes and Coordination Polymers Based on a Luminescent Re(V) Complex

発光性 Re(V) 錯体を基盤とする単核錯体および配位高分子のゲスト応答機構
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)

岡林 隆太 **Excited State Structural Dynamics of Copper Complexes as Potential Photosensitizers for Artificial Photosynthesis**
人工光合成光増感剤として期待される銅錯体の励起状態構造ダイナミクスの解明
(無機・分析化学：分光分析化学講座)

徐 文煌 **Photo-induced Valence Tautomerism and Polarization Switching in Mononuclear Cobalt Complex with Chiral Ligand**
キラル配位子を用いた単核コバルト錯体の光誘起原子価互変異性と分極スイッチング
(協力講座：光機能物質化学講座)

米本 純太 **Formation of Multi-Capillary Structure in the Directional Gelation of Collagen**
コラーゲンの一方向性ゲル化におけるマルチキャピラリー構造形成
(物理化学：分散系物理化学講座)

白井 力 **Effect of Line Tension on Domain Formation of Fluorocarbon Alcohol at Oil/Water Interfaces**
油/水界面におけるフルオロカーボンアルコールのドメイン形成に及ぼす線張力の効果
(協力講座：ソフト界面化学講座)

杉原 諒一 **Light induced 1/f noise in a nanopore device**
ナノポアデバイスにおける光誘起された 1/f ノイズ
(協力講座：ナノ物性化学講座)

内之倉 朋紘 **Synthetic Study of the ABCD Ring of Caribbean Ciguatoxin C-CTX-1**

カリビアンシガトキシン C-CTX-1 の ABCD 環部の合成研究

(有機・生物化学：生物有機化学講座)

川相 誓也 Decomposition of Organic Electrolytes on Lithium Cobalt Oxide in Lithium-ion Batteries

リチウムイオン電池正極における電解質溶液の分解反応
(複合領域化学：触媒有機化学講座)

橋本 桂吾 Studies on Ruthenium-Catalyzed Chemoselective Asymmetric Oxazolation using 3-Substituted 1,4,2-Dioxazol-5-one Derivatives as Nitrene Precursors

ジオキサゾロン類を窒素源とするルテニウム触媒を用いた
化学選択的不斉オキサゾリン化に関する研究
(協力講座：有機反応化学講座)

浦越 諒 Decarboxylative Cross-Coupling Reaction between Benzoic Acids and Benzyl Alcohols

安息香酸類とベンジルアルコール類との脱炭酸クロスカップリング反応
(複合領域化学：分子触媒化学講座)

田島 悠太郎 Role of DHA-containing phospholipid in membrane as studied by fluorescent observation.

蛍光観察による DHA 含有リン脂質の膜上挙動解析
(無機・分析化学：生体分析化学講座)

吉松 大慶 Kinetic and thermodynamic analysis of the self-assembling process of short-chain elastin-like peptide, (FPGVG)₅, analogs

短鎖エラスチン様ペプチドアナログの自己集合過程の速度論的及び熱力学的解析
(協力講座：生体分子化学講座)

三浦 崇太郎 The phosphatidylserine (PS) transport pathway between the endoplasmic reticulum and mitochondria

小胞体-ミトコンドリア間ホスファチジルセリン(PS)輸送経路の解析

(有機・生物化学：生体情報化学講座)

- 田川 幸樹 Development of a universal coactivator peptide that binds to the estrogen receptor and Nurr1
エストロゲン受容体と Nurr1 の両方に結合できるコアクチベータペプチドの開発
(有機・生物化学：構造機能生化学講座)
- 中村 達也 The Study of Non-Heme-type Ruthenium Catalyzed Site-selective C-H Oxidation
非ヘム型ルテニウム触媒を用いた位置選択的 C-H 酸化反応に関する研究
(協力講座：有機反応化学講座)
- 高木 真由 Reduction Mechanism of Au-amino Acid Complexes for Preparation of Supported Au Nanoparticles by Impregnation Method
含浸法による担持金ナノ粒子調製と金-アミノ酸錯体の還元メカニズム
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 中村 理志 Development of a Practical Synthetic Method of the LM(NO) Ring of Maitotoxin
マイトトキシンの LM(NO)環部の実用的合成法の開発
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 大庭 隆也 Synthesis of Asymmetric Naphthalene Diimide Molecules Having Hydrophilic and Hydrophobic Functional Groups, and Their Aggregation Behavior
親水性および疎水性官能基を有する非対称ナフタレンジイミドの合成とその会合挙動
(協力講座：構造有機化学講座)
- 住吉 勝伍 Development of self-aggregating elastin-like peptide (FPGVG)_n analogs conjugated with a Cd²⁺-binding

sequence

Cd²⁺結合性配列を付与した自己集合性エラスチン様ペプチドの開発

(協力講座：生体分子化学講座)

橋本 大資

Local anesthetic dibucaine disrupts lipid rafts formed in erythrocyte membranes.

局所麻酔薬ジブカインによる赤血球ゴースト膜中での脂質ラフト形成阻害

(無機・分析化学：生体分析化学講座)

瓜田 敦哉

Functional analysis of cAMP/protein kinase A signaling pathway under impaired biosynthesis of complex sphingolipids in budding yeast

出芽酵母の複合スフィンゴ脂質生合成破綻下におけるcAMP/プロテインキナーゼ A 経路の機能解析

(有機・生物化学：生体情報化学講座)

松下 伸

Development of efficient synthetic method of self-assembling peptides using random copolymerization and fragment condensation

ランダム共重合およびフラグメント縮合を利用した自己集合性ペプチドの効率的な合成法の開発

(協力講座：生体分子化学講座)

深井 雅輝

Development of a Convergent Method for Synthesizing Ladder-Shaped Polyethers via Three-Rings Construction

梯子状ポリエーテルの三環構築型収束的合成法の開発

(有機・生物化学：生物有機化学講座)

吉清 倅生

A Development of Educational Application for Assistance in Organic Synthesis Using SMILES Notation

SMILES 記法を用いた教育用有機合成支援アプリケーションの開発

(複合領域化学：分子触媒化学 II 講座)

- 八木 政俊 **Analysis of Aromatic Compounds in Shochu and Selective Removal of Sulfur Compounds by Adsorption on Silica-supported Au Nanoparticles**
焼酎の香り成分分析とシリカ担持金ナノ粒子による硫黄化合物の選択的吸着除去
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 山下 敦裕 **Synthetic Study of the MN Ring of Caribbean Ciguatoxin C-CTX-1**
カリビアンシガトキシン C-CTX-1 の MN 環部の合成研究
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 張 奥 **Study on Enantioselective Hydrogenation of Azaindoles : Chemoselective Reduction of the Pyridine Ring of Azaindole through Iridium Catalysis**
アザインドールのエナンチオ選択的水素化の研究:イリジウム触媒によるアザインドールのピリジン環の化学選択的水素化
(複合領域化学：分子触媒化学講座)
- 枝広 遥毅 **Study on (ON)Ruthenium-salen Complexes-Catalyzed Asymmetric Aerobic Cross-coupling of 2-Naphatols**
(二トルシル) ルテニウム-サレン錯体を用いた 2-ナフトール類の不斉クロスカップリング反応に関する研究
(協力講座：有機反応化学講座)
- 宮田 透子 **Oxidation of Aldehydes and Continuous-flow Asymmetric Hydrogenation of Esters on Supported Metal Catalysts**
担持金属触媒によるアルデヒドの酸化反応およびフロー式不斉水素化反応
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 渡部 雄太 **Synthetic Study of the C'D'E' Ring of Maitotoxin**
マイトトキシンの C'D'E'環部の合成研究
(複合領域化学：生物有機化学講座)

- 近江 賛泰 Analysis of the Distribution of the Transmembrane Protein Bacteriorhodopsin to the Membrane Domain.
膜貫通タンパク質バクテリオロドプシンの膜ドメインへの分配特性の解析
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 大橋 奈央 Simultaneous synthesis of natural product-like Ugi adducts using medicinal plant extracts as substrates
薬用植物エキストラクトを基質とした天然物様 Ugi 付加体の一斉合成
(協力講座：生体分子化学講座)
- 首藤 元希 Identification of novel factors involved in the Ups1-independent cardiolipin(CL) synthetic pathway
Ups1 非依存的なカルジオリピン(CL)合成経路に関与する新規因子の探索
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 岩本 雅輝 Design and synthesis of novel estrogen receptor antagonists based on the structure of an environmental chemical bisphenol C
環境化学物質ビスフェノール C に由来するエストロゲン受容体阻害剤の設計合成
(有機・生物化学：構造機能生化学講座)
- 渡邊 光 Effect of Nystatin, a Polyene Macrolide Antifungal Agent, on Ergosterol-Containing Lipid Membrane.
ポリエンマクロライド系抗真菌薬ナイスタチンがエルゴステロール含有脂質膜に与える影響
(無機・分析化学：生体分析化学講座)

1. 6 2020年度関係行事一覧

(1) 講演会

- [1] 講演者 向井 邦晃 講師 (慶應義塾大学医学部医学教育統轄センター)
演 題 生化学から病気の診断・治療、さらに病態形成の解明へ
開催日 2020年7月13日~17日 (オンライン)
世話人 荻島 正
- [2] 講演者 土井 隆行 教授 (東北大学大学院薬学研究科)
演 題 多様化を志向した天然物合成、生物活性、および三次元構造解析
開催日 2020年10月8日~9日 (オンライン)
世話人 大石 徹
- [3] 講演者 杉山 成 教授 (高知大学理工学部化学生命理工学科)
演 題 発展を続ける細胞構造生物学
開催日 2020年11月9日~13日 (オンライン)
世話人 松森 信明
- [4] 講演者 池田 浩 教授 (大阪府立大学大学院工学研究科)
演 題 有機光電子移動化学の基礎と応用
開催日 2020年11月26日~27日 (オンライン)
世話人 谷 文都
- [5] 講演者 大島 康裕 教授 (東京工業大学理学院)
演 題 光と分子のコヒーレントダイナミクス
開催日 2020年12月3日~4日(オンライン)
世話人 大橋 和彦
- [6] 講演者 四方 俊幸 教授 (東京農工大学大学院農学研究院)
演 題 化学修飾セルロースの水溶液物性
開催日 2020年12月17日~24日 (オンライン)
世話人 榎 靖幸

- [7] 講演者 秋根 茂久 教授 (金沢大学ナノ生命科学研究所)
演 題 超分子金属錯体化学
開催日 2021年1月25日~26日 (オンライン)
世話人 大場 正昭

(2) 談話会・報告会

前期特別談話会・・・新型コロナウイルス感染症拡大の影響により中止

後期特別談話会

開催日：2020年12月5日(土) オンライン開催

金属錯体を用いた人工光合成システムの構築

錯体化学 前田晃志 イウンジェ

無機反応化学研究室

地球環境科学・環境ナノ物質科学

無機反応化学 宇都宮聡

Go To SAKUBUTSU

錯体物性化学 岩井優大 大原朋 北野仁悟 木下宏子 國友凜

生体膜の統合分析を目指して

生体分析化学 柏勇希 辻村晃也 舟崎司 前田万優

一兆分の一秒の化学反応を捉える超高速分光

分光分析化学 西郷将生 宮崎栞 杉岡寛爾 笠僚宏 江原巧

生命現象を物理化学で語る ～ラマン散乱による生細胞の分子イメージング～

光物理化学 加納英明

光で探る分子の構造と性質

構造化学 横田航希 脇本暲太郎 矢城勇樹 渡邊巧

反応と分光で見る金属クラスターの世界

量子化学 楠本多聞 林奈穂 飯田岳史 河村駿 西里将

量子化学はこんなにおもしろい!

量子化学II 原田賢介

線とユウカ ～身の回りの界面化学～

ソフト界面化学 神優樹 瀧上世奈

新しい機能を持つハイドロゲルの合成・構造・解析

分散系物理化学 竹藤春菜 米本純太 黒岩勇 今吉隆昭 遠藤周 大原志織
高田真子 羽座寛登 中村直希

特異な生物活性を有する天然有機化合物の構造決定・全合成・生物活性評価

生物有機化学 大石徹

有害環境化学物質が引き起こすシグナル毒性と受容体生化学

構造機能生化学 田川幸樹 岩本雅輝 石橋知佳 細瀬摩利

細胞を舞台に活躍する分子たち

生体情報化学 田中柊也 柳田侑真 古賀綾乃 高山千廣

生体分子を知ろう!

生体分子化学 田中尚輝 吉田耕平

合成の“近道”を作る反応開発

有機反応化学 下田菜々子 野網悠一朗

理論と計算と化学

理論化学 神山結希 城下景亮 永井颯人 西村拓 柳澤直人

あつまれ しよくばいの森

触媒有機化学 白倉那桜 則松希奈 山内崇弘

分子触媒化学研究室ご案内

分子触媒化学 SungyongWon 張奥 浦越諒 松村彩郁

IQAによるシクロヘキサン舟形配座における“歪み”の再考(2)

分子触媒化学II 末永正彦

液体の化学の理論と応用 パッキングが重要な液体内の化学現象

量子生物化学 大久保堅三郎 櫻井敦也 松尾美香

π 電子系化合物の新奇物質開発、分子配列、機能化

構造有機化学 谷文都 五島健太

ナノバイオテクノロジーで未来を創る

ナノ物性化学 阿部玲子 大野友輔 平井千晶

放射線核種を用いた環境動態研究

環境動態化学 永尾虎丸 東村佳紀

カーボンニュートラルな社会の実現のための新規触媒開発

～環境に優しい触媒を作ろう～

ナノ機能化学 江口弘人 NadaBesisa SunMingxu 浦研二郎 赤井翔

古城優樹 松井将騎 鮫島徹真

外場に応答するダイナミック分子材料の開発

光機能物質化学 ロングジェレミー 鄭文偉

(3) 2020年度修士課程論文公開講演会

開催日：2020年2月17日(水)・18日(木) オンライン開催

(4) 2020年度学士課程卒業研究業績報告会

開催日：2020年3月1日(月)・2日(火) オンライン開催

2. 2020年度における各講座の活動

[無機・分析化学講座]

錯体化学分野

酒井 健教授、高橋和宏准教授、小澤弘宜准教授、岡上吉広講師、山内幸正助教

教育目標

(酒井・小澤グループ)

学部4年生(2名)、修士1年生(8名)博士課程1年(2名)、博士課程2年(1名)、博士課程3年(4名)が本グループに在籍しており、各学生の到達目標に応じた教育を行った。

学部4年生に対しては、錯体化学の基礎的な実験法を修得させ、各自の研究テーマを遂行するための基盤を身に付けさせることを目標とした。学問・研究対象としての錯体化学は、合成化学、分光学、構造学、反応速度論、電気化学、光化学、触媒化学、材料科学、生物化学、環境化学などの境界領域として位置付けられる。そのため、教育においては、常に広い視野を持って研究に取り組むよう促した。また、自立した研究者として将来活躍することのできる人材の輩出を目標とし、常に各自の独習能力を育てることを念頭にすえて教育にあたってきた。一方、大学教育は社会人育成の最終的教育機関であることを踏まえ、社会人としての素養を育むよう導いてきた。そのため、研究室においては、学部生であっても企業との連携事業の窓口として機能する機会を設けた。さらに、海外の一流研究者と共同研究する機会を設け、直接生の英語に触れさせるとともに、電子メールによるやり取りを行わせ、国際社会への適用能力を体得させるよう務めてきた。それに加え、学会活動にも積極的に参加させ、学外研究者との交流を図ることにより、各自の研究に対する外部評価を受けるよう努めた。これにより、自らを再認識し、自身の研究をより深く掘り下げるよう促してきた。

修士学生に対しても、上記同様、視野の拡大、研究者としての基礎固め、基礎知識のさらなる向上、社会人としての素養の育成、国際社会での活動体験などを重視した教育を行ってきた。特に、修士学生に対しては、4年生の時には体験したことのない論文の執筆と投稿という大きな課題を与え、研究データのより精密な取り扱い、英語論文の書き方、論理的な思考のあり方などについて教えるよう努めてきた。その結果、修士課程に在籍する学生の多くが論文執筆へ繋がる研究成果を出し、第一著者として論文の執筆、投稿を行った。

博士学生に関しては、自立した研究者へと成長させるために、研究の企画から実施に至るまでの全ての研究活動に責任と能動的な姿勢をもって取り組むように導いてきた。

特に、自立した研究者として最も重要であると考えられる、オリジナリティーの高い着想力を養わせることを目標とし、新規性と独創性の高いテーマの設定を行わせ、在籍期間中に自身の能力を最大限発揮するよう促してきた。また、国際学会での研究発表、及び、海外短期留学を経験させ、国際社会においても即戦力として活躍できる人材の育成に努めた。

また、本講座では、学生のみによる勉強会の実施、学生間の研究討論、後輩指導による教育者としての素養を養うこと、実験補助を行うことを通してやはり教育に携わる人材を育成すること、教員と学生の深い研究討論などを重視し、次世代を担う有能な研究者・教育者の育成にも重点を置き指導を行ってきた。

(高橋グループ)

2020年度は学部4年生1名在籍。卒業研究を通して自律的修学姿勢と論理的思考に基づく問題発見・解決力の自己養成意識を醸成し、社会人として自立できる素養を育むことを目標に指導した。具体的には、合成実験主体の卒業研究計画の把握と研究課題の理解に必須の研究背景等の基盤および周辺知識の習得、実験実施上必須の使用化学物質のリスクアセスメントと、薬品管理を含む実験の準備から実験終了時の廃液処理等の、一連の作業と安全確保措置の体得、卒業研究のまとめと発表準備等を、対話と議論を随時行って指導した。

(岡上グループ)

学部4年生は研究に必要な基礎知識の習得を目標とする。実験計画の立案、実験準備、実験データの収集、考察、報告書作成、研究発表という研究の一連の流れを把握するとともに、試薬管理や廃液処理など、実験を安全に行うために必要な法規制を理解し実践できるように努める。また、卒業研究を進める過程において、自分の研究に対する客観的な評価ができるように、教員との議論を活発に行うとともに、文献調査を行う習慣を身につける。なお、2020年度は配属学生なし。

研究目標

(酒井・小澤グループ)

金属多核錯体のもたらす特異的な性質・機能に着目し、その魅力的な特性を生かした高機能金属多核錯体の開発を進めている。具体的には、現代のエネルギー・環境問題を解決に導く技術のひとつとして、水の可視光分解反応を触媒する金属多核錯体の創生を当研究グループのメインテーマに設定している。金属多核錯体を触媒に用いる利点としては、(1) 複数の金属イオンが共存することによる特異的反応サイトを発現することができること(基質活性化)、(2) 複数の金属イオンが共存することによって多電子過程を遂行する電子プールとしての効果を備えることができること、(3) 拡散現象によらない空間配置の制御が可能であることなどが挙げられる。

また、金属多核錯体を触媒とした水の分解反応に関する研究と並行し、二酸化炭素還元反応を促進する金属錯体触媒の開発についても行っている。以下に具体的なテーマを列記する。

- ・ 水からの水素発生触媒機能を有する金属多核錯体の合成と機能評価
- ・ 新規光水素発生デバイスの開発と機能評価
- ・ 水からの酸素発生触媒機能を有する金属錯体の開発
- ・ 二酸化炭素還元を駆動する分子システムの開発
- ・ 電気化学的手法による各種錯体の電極触媒能の評価
- ・ 水の太陽光水分解を駆動する光電気化学セルの作製と機能評価
- ・ DFT 計算による触媒反応機構の探求と分子設計への応用
(高橋グループ)

有機色素のフタロシアニン(Pc)類を配位子とする新規金属錯体の合成・物性研究を行っている。目標は機能開拓。主な研究課題は新規サンドイッチ型二核希土類(III)錯体の合成と特性の解明。2020年度は前年度に引き続き、無置換Pcとオクタメチル置換Pcの、二種のPc配位子を含むヘテロレプティック三層サンドイッチ型二核Lu(III)錯体の構造異性体の選択的合成とオクタメチル置換Pcのホモレプティック三層サンドイッチ型二核Lu(III)錯体の合成研究を行った。

(岡上グループ)

ケイ酸誘導体の一つであるかご型構造を有するシルセスキオキサンを配位子とした金属錯体の化学を主な研究テーマとしている。現在は、配位サイトのシッフ塩基の芳香環に異なる置換基を導入した銅(II)錯体を合成し、ESRによる銅(II)周りの構造評価について研究を行っている。

研究分野

錯体化学、光化学、触媒化学、結晶学、溶液化学、生物無機化学、金属フタロシアニン化学、無機化学、分析化学

研究課題

新しい金属多核錯体の合成・構造・性質、多重機能性金属多核錯体の合成と光触媒機能評価、光電気化学セルの作製と触媒機能評価、新規サンドイッチ型金属フタロシアニンの合成と特性解明、かご型シルセスキオキサンを配位子とする金属錯体の合成と性質

参考 URL :

酒井・小澤グループ Web ページ <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Sakutai/jp/index.html>

錯体物性化学分野

大場正昭 教授、大谷亮 准教授、Benjamin LeOuay 助教

教育活動

本講座では、能動的・主体的に行動できる人材の育成を目指して、専門分野および一般教養の知識はもとより、柔軟な思考、俯瞰力と問題解決力、および研究室生活を通してコミュニケーション力と協調性ならびに自主性を身につける指導を心掛けている。個々の学生の特長を活かして、長所を伸ばしつつ「啐啄同機」を目指して指導に取り組んでいる。

講座開設 10 年目となる本年度は、4 月に Benjamin LeOuay 博士が助教として着任し、より充実した新体制で研究・教育を進めた。コロナ禍により対面での直接の指導機会が減り、研究・教育活動において難しい 1 年であったが、オンラインの活用により、一定水準の成果は得られた。

本年度は学部 4 年生 5 名、修士学生 11 名、博士学生 2 名の合計 18 名が在籍し、主体的に研究を遂行するための基盤構築を目指して、錯体化学、物性化学、光化学、構造化学、生物無機化学に関する基礎の習得に注力した。本講座の研究は、錯体化学、物性化学、生物化学、環境化学、触媒化学、界面化学などの境界領域に位置する。このような境界領域で独創的な研究を展開するために、偏った視点から事象を論じず、常に広い視野を持ち、批判的思考のもとに論理的に物事を捉えることを第一に指導した。毎週開催する研究室セミナー（オンライン）では、研究報告と論文紹介をプレゼン形式で行い、合成の方法論、物性・機能の基礎的知識を習得させるとともに、研究の進め方、情報収集の方法、データのまとめ方、発表資料の作り方、プレゼンテーションの仕方、ロジック展開の方法等を指導した。セミナーの司会も学生が担当し、積極的な発言を促し、活発なディスカッションが広げられる場の仕切りを学ばせている。実験技術に関しては、有機配位子、親脂質性配位子や両親媒性脂質の合成、金属錯体および配位高分子の合成、クラスター錯体の合成、発光性分子の合成、ベシクルの調整など、様々な合成を通して技術を指導した。測定・解析に関しては、共焦点レーザー顕微鏡や TEM による直接観察から、単結晶および粉末 X 線回折、NMR、磁化率、電気伝導度、気体吸着、各種分光、電気化学、ゼータ電位などの各種測定に加え、SPring-8 の高輝度放射光を用いた X 線回折やガス雰囲気下の *in situ* ラマンおよび IR 分光測定等を通して、化合物の精密な評価法を学び、それらのデータの解析法、客観的評価や思考ロジックを指導した。また、吸着装置と磁化率測定装置、粉末 X 線回折装置およびラマン散乱測定装置を連

結した独自の *in situ* 測定系の構築し、その作業を通して、測定原理の理解と測定系の設計および作成法を指導した。

所属学生は、基本的に全員最低 1 回は学会で研究成果を発表した。本年度は、研究室全体で 12 件の口頭発表と 18 件のポスター発表を行った。博士 3 年生の 1 名、および修士 2 年生の 2 名は、オンラインの国際学会でポスター発表を、博士 3 年生の 1 名、博士 2 年生の 1 名はオンラインの国内学会で英語の口頭発表を行い、英語でのプレゼンテーションならびに国際交流を経験した。これらの発表でのプレゼンテーションと成果が高く評価されて、国際学会でポスター賞 2 件を受賞した。また、13 報の論文で研究成果を発表した。

本年度は 1 名の学生が博士号を取得予定であったが、コロナ禍で予定していた海外の実験ができなかったため、申請を半年延期した。1 名の社会人が「MOF-polymer hybrid materials towards high MOF loaded thin films (高 MOF 含有率薄膜に向けた MOF-ポリマー複合材料) の研究で、博士号 (乙) を取得した。また、4 件の博士論文の副査を務めた。

昨年 12 月から本年 6 月まで、ハノーヴァー大学より博士学生の短期留学生を受け入れた。コロナ禍で研究が上手く進められない問題はあったが、成果をまとめて論文発表した。共同研究などを通して、英語によるディスカッションが日常的になり、所属学生にとって *native* な英語に触れる良い機会となった。

ホームページでの論文や研究成果を公開した。ホームページへのアクセス数は年間 12,000 件程度であった。

今後、大学院教育としては、各自が能動的・主体的に研究を遂行できる自立した研究者として成長できるように、積極的な学会活動による異分野の研究者との交流により、自分の現状の立ち位置と力を認識した上で、自ら課題設定して取り組ませる指導を心掛ける。学生だけの自主ゼミの開講、指導教員抜きで共同研究者とディスカッションなど、より自らが能動的に行動する機会を設定し、成長を促す。また、ホームページの英語版を作成するなど、より積極的に海外に情報を発信することで、留学生を増やして、国際性を高めていく。

研究目標

本講座では、金属錯体および配位高分子をベースに新しい機能空間の創製を目指した研究を進めている。個々の分子の空間配列を制御して高次組織化し、それらを動的かつ協同的に機能させることは、分子科学の一つの目標である。無機物の優れた単一性能と有機物の多様性と性質の柔軟さが分子レベルで融合した「金属錯体」では、従来の無機材料・有機材料にはない物性・機能の発現が期待される。このナノメートルサイズの無機-有機複合体分子である金属錯体分子を、規則的に連結して多次元構造に展開した「配位高分子」は、金属錯体の物性・機能を連動させて高度化する高次組織体形成の基盤となる。一方、

細胞の膜構造は、分子の集積により多様な現象、機能を示す特異的なメゾ領域を形成している。本講座では、この脂質二重膜で形成されるリポソームや両親媒性分子によるベシクルのメゾ空間を基盤として、細胞における生体分子に代えて、目的に応じた金属錯体を膜の表面および内部に集積させる手法を開発している。柔軟かつ異方的な空間の表面と内部に、機能制御した複数の金属錯体および配位高分子をオンデマンドで組み込むことで、メゾサイズ結晶化した「配位高分子」は、マクロサイズにおける機能を維持しつつ、膜に組み込んだ「金属錯体」と連動して高速かつ高効率に動作することが期待される。このようなメゾ空間に錯体化学の粋を凝縮して、環境低負荷な触媒やドラッグデリバリーなどにも応用可能な、化学反応・物質移動などが連動して動作する新しい「高機能で制御された化学反応場」の構築を目指している。

本年度は、これまでの成果を基に（１）多孔性配位高分子に包接した分子の細孔内挙動と骨格の物性の相関の解明、（２）磁気双安定性な多孔性配位高分子の開発とゲスト分子による磁気特性の精密制御、（３）多孔性配位高分子固溶体の開発とゲスト分子との相互作用の制御、（４）発光性多孔性配位高分子のゲスト分子に応答性の制御と機構解明、（５）極性配位高分子の構造制御と誘電特性、（６）親脂質性金属錯体の開発とリポソームとの融合、（７）相変化する機能性金属錯体の開発、（８）高イオン伝導性錯体の開発、（９）多核クラスター錯体の集積による機能空間の構築、（１０）発光性ホウ素錯体を配位子に含む新規多色発光性金属錯体の開発と発光特性制御、のテーマを推進し、国内および国際共同研究、ならびに論文発表を積極的に進めた。

研究分野

錯体化学、物性化学、光化学、生物無機化学

研究課題

- ・ 金属錯体と脂質二重膜の融合による新しい機能空間の創製
- ・ 外場応答性配位高分子の開発
- ・ 細孔内に束縛した小分子の量子的振る舞いの解明
- ・ サイズ制御した金属錯体結晶の物性・機能の研究
- ・ 極性配位高分子の構造制御と物性の研究
- ・ 高イオン伝導性錯体の開発
- ・ 相変化を起こす金属錯体集積体の開発
- ・ 発光性多孔性金属錯体による選択的分子センシング
- ・ 多色発光性金属錯体の開発と発光特性制御

参考 URL :

<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Sakutaibussei/>

生体分析化学分野

松森 信明 教授、川井 隆之 准教授、木下 祥尚 助教

教育活動

学部教育において、松森は専攻教育科目「分析化学 I」および「分析化学 III」を担当した。2年前期に開講の「分析化学 I」では酸塩基から酸化還元に至る平衡および滴定に関する基礎を講義し、理解の定着を図るための演習を頻回に行った。3年前期の「分析化学 III」では、バイオ分析を志向した各種機器分析（各種クロマトグラフィー、電気泳動、質量分析、NMR、X線結晶構造解析、各種顕微鏡）について、独自の講義資料により基礎から最先端研究に至るまでの実践的な講義を展開した。これらの講義は今年度オンラインとなったが、質を低下させることなく実施できた。木下は、学生実験で「基本操作法」と分析化学実験の「分光光度法」を担当した。分析化学実験については全体の取りまとめも行っている。

さらに、学外での教育活動として、松森は宗像高校での出前授業をオンラインで行った。

一方、研究室においては、後述する生体膜に関する分析研究を推進するため、以下の3つの教育目標を設定している。

(1) 研究室はヘテロな研究環境（分析化学、有機化学、計算化学、生化学、生物物理学）を実現し、学生には複数の分野を経験させる。それにより幅広い知識と技術、ヘテロな研究を組み合わせた発想力を鍛える。

(2) 新しい分析法にチャレンジしていく実行力、生体膜という困難な研究対象の本質を見極める洞察力と論理的思考力を身に着ける。

(3) 留学生を積極的に受け入れ、研究室内の英語圧力を上げる。

(1) に関しては、計算化学以外の研究環境は実現し、各学生には複数の分野での実験を実施させている。また(2)については、各学生に独立した研究テーマを設定し、各自が実行力を発揮し研究を推進している。さらに、研究室セミナーや個別の相談会できめ細かな指導を行い、各学生の成長をサポートしている。(3)に関しては、中国およびタイからの留学生を受け入れ、研究室でのセミナーも一部英語で行っているため、本目標はある程度到達されつつある。一方で、日本人学生の英語力の向上が思ったほど見られず、留学生とのコミュニケーションも十分取れているとは言い難い。今後は日本人学生の英語力の向上が課題となる。

研究目標

細胞膜は流動モザイクモデルで提唱された均質な二次元流体ではなく、ス

フィンゴ脂質とコレステロールに富んだ脂質ラフトと呼ばれる微小領域が存在することが近年明らかとなった。脂質ラフトは、周囲の細胞膜よりも硬い相状態を有し、GPIアンカータンパク質などの膜タンパク質が特異的に集積することで膜輸送やシグナル伝達の“足場”として生理的に重要な機能を果たしていると考えられている。しかし、ラフトがどのように形成され、またタンパク質がどのようにラフトを認識しているのかについての知見は極めて限られている。

一方で、生体膜中には数千種類に及ぶ脂質が存在しているが、単に脂質二重膜やラフトを形成するだけであれば、これほど多様な脂質は必要ない。つまり「なぜ生物は多様な脂質分子を持つのか」、「多様な脂質はどのような機能を持っているのか？」という極めて根源的な問いが解明されずに残されているのである。上述の脂質ラフトの形成機構や脂質－タンパク質間の相互作用が明らかになれば、脂質の生理的機能を明確化することができ、上記の疑問に対する解答が得られると期待される。そこで本研究室では、脂質ラフトを含む生体膜における脂質分子間相互作用や脂質－タンパク質間相互作用について、各種分析手法を駆使して、この解明にあたっている。

この解明のため、大きく以下の4つの研究課題について現在研究を行っている。

- (1) 脂質－膜タンパク質相互作用解析
- (2) 麻酔薬などの膜作用性分子の作用機構解析
- (3) 脂質ラフト形成の分子機構の解明
- (4) 脂質を含む生体分子の超高感度分析技術開発

各課題について具体的な成果を述べる。(1)の課題については、まず表面プラズモン共鳴法 (SPR 法) を用いた脂質と膜タンパク質間の相互作用測定法の開発に成功した (Inada et al, *Anal. Chim. Acta.* 2019)。SPR センサーチップ表面に自己組織化単分子膜を貼ることで膜タンパク質を大量に固定化することが可能となり、脂質分子との定量的な親和性解析が可能となった。この手法をバクテリオロドプシン (Inada et al, *ACS Chem. Biol.* 2020) やカリウムチャンネル KcsA などの膜タンパク質に適用した(論文投稿予定)。さらにこの方法を発展させて、金ナノ粒子に膜タンパク質を固定化し、特異的脂質をアフィニティー精製する手法の開発も行っている。一方、脂質特異的なタンパク質の取得を目指し、脂質固定ビーズの開発も進行している。すでにスフィンゴミエリンやセラミドを固定化したビーズの開発に成功し、特異的タンパク質の同定を行っている。

また (2) の課題については、局所麻酔が脂質ラフトを破壊することを見出し、その作用が麻酔強度と関連することを明らかにした (Kinoshita et al *BBA-Gen. Subj.* 2019)。この研究成果について、九州大学からプレスリリースを行った。また渦鞭毛藻由来のアンフィジノールについても脂質ラフトを破壊する作用があることを見出し、膜中のステロールとの親和性解析を行った (Hieda et al *Biochem. Biophys. Rep.* 2021)。

(3) の課題に関しては、蛍光スフィンゴミエリンの開発によりラフト形成機構の解明に大きく前進したが (Kinoshita et al. *JCB* 2017)、同様の手法で蛍光セラミドの開発にも成功し (Matsufuji et al *Langmuir* 2019)、九州大学からプレスリリースを行った。またセラミドが脂質ラフトに及ぼす影響について、示差走査熱量測定や X 線回折などの手法を用いて精査した (Kinoshita et al. *Chem. Phys. Lipids* 2020)。さらに、電子顕微鏡を用いて脂質膜の電子線散乱を取得する手法の開発 (Kinoshita et al. *Sci. Rep.* 2020, 10, 1, 22188) や、脂質膜の外側と内側の脂質組成の異なる非対称膜の作成に成功した。さらに、スフィンゴミエリンの二重結合た単結合になったジヒドロ体の膜物性を調べ、脂質ラフトとの関係を論じた論文も発表した (Kinoshita et al. *Sci. Rep.* 2020, 10, 1, 11794)。

(4) の課題は、2021 年 1 月に着任した川井准教授の研究であり、研究に必要な装置類の搬入が年度内に終了し、2021 年度からは本格的に稼働する。生体膜に存在する脂質や糖鎖の超微量分析により、生体膜の理解が進むばかりでなく、疾病などの診断にも役立つと期待される。

このように、いずれの課題においても着実に成果が出てきており、研究は順調に進捗している。今後はこれらの研究をさらに深めていくとともに、企業などとの共同研究を積極的に行い、医療を含めた周辺分野へ本研究を展開していくことを予定している。

研究分野

生体分析化学、ケミカルバイオロジー、生物物理学

研究課題

分析化学的手法を用いて膜タンパク質を含む生体膜の解析を行い、生体膜そのものを理解するとともに、生体膜に作用する薬剤や生体膜が関与する疾病の機構解明を目指す。

参考 URL : <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioanalChem/>

分光分析化学分野

恩田 健 教授、宮田 潔志 助教

教育目標とその到達度

身の回りの世界が限られた種類の原子によって成り立っていること、それらの集まり方により物質の外見、性質が大きく変化することを理解してもらおう。特に分析化学的観点から、眼に見えないミクロな原子、分子の世界をどのように観測するか、その理論的背景、具体的な測定技術を身につけ、実際の物質への応用ができるようにする。さらにこれらの知識を元に、エネルギーの生産と利用、人間を含む生物との関わり、人工的な物質の社会的影響などについても理解させる。その上で、身につけた知識、技術を活かし、より良い人間社会の実現を担う人材を育てることを目標とする。

本年度は、新型コロナウイルス感染拡大によって教育研究活動の大きな変更を迫られた年であった。まず4月上旬に全国的緊急事態宣言の発出および九州大学行動指針制限によって、原則として大学キャンパスへの出勤、登校ができなくなり、在宅、オンラインによる活動をせざるを得なくなった。そこで、早速Zoom, Teamsなどのツールを導入し、グループミーティングや学生との面談は全てオンラインに切り替えた。このような事態は6月下旬まで続いた。この間、学生に対しては、在宅でできる勉強やこれまでの実験のまとめ、後期に予定されている「リサーチレビュー」の準備、修士論文の草稿作成などを行ってもらった。その後、7月からは感染防止策を行い、さらに人数を制限しての対面での研究指導を再開した。9月からは少人数で行う実験指導はほぼ例年通り対面で行えるようになったが、多人数でのミーティング、ディスカッションは年度を通してオンラインで行わざるを得なかった。

恩田担当の学部教育としては、後期に理学科以外の1年生を対象とした「基礎化学」の講義を行った。例年と同じ内容だが全てオンラインでの対応となった。講義自体はTeamsを使ってリアルタイムオンラインで行い、出欠、アナウンス、資料の配布などをMoodleによって行った。質問等の対応は講義時間中直接やり取りをするほか、メール、Moodleなどを通して行った。期末試験は、直前に対面での試験が基幹教育全体で中止となったため、急遽レポート課題提出により行った。初めての全面オンラインによる講義であったが、例年に比べ質問などを熱心にする学生も多く、レポートもほとんどの学生は丁寧に取り組んでいるようであった。さらに後期には、化学科2年生向けの分光分析、電気化学の講義「分析化学Ⅱ」も例年通り担当した。こちらも講義は基本的にリアルタイムオンラインで行い、外部のオンライン学会と重なった2回だけ、事前に講義を録画、Moodle上にアップロードしてオンデマンドの講義となった。専門の講義では式の導出など板書がどうしても必要となるが、液晶タブレットと専用ペンを使ってスライド画面上に記入するなどして対応した。期末試験は2部屋を使用し、着席間隔を広

げるなど感染症対策を十分行ったうえで対面により行った。こちらも初めてのオンライン講義で、学生の理解の程度が心配されたが、試験の成績は例年以上であった。また年度を通して、時間分解赤外分光と光化学の基礎理論に関する教科書の執筆を行い、3月に脱稿した。その後、2021年4月25日に「化学の要点シリーズ 39 時間分解赤外分光 光化学反応の瞬間を診る」のタイトルで、B6版183ページの書籍が共立出版株式会社より出版された。今後、学部や大学院講義で活用する予定である。

宮田担当の学部教育としては、①学生実験の基本操作法の再結晶、②分析化学実験のデータ解析法と各種滴定を行った。①学生実験の基本操作法では、例年より広く実験室を利用して対面で実験を行い、硫酸銅と炭の混合物から、再結晶により硫酸銅の精製を行った。②のデータ解析法では、エクセルを用いたデータ解析の基礎を行った。なぜデータ分析が必要かといった大きなところから入って、エクセルの基本操作を含めた実習形式で授業を行った。学生によってエクセルに慣れている度合いが大きく異なったので難しかったが、最終的にはみな満足いくレベルまで操作を習熟していた。なお、感染対策としてオンデマンドで予めアップロードした動画を見ながら進めていただく形式を採用した。YouTubeによるオンデマンド講義、Slackによる連絡・質問受付、Zoomによる個別指導を上手く織り交ぜた形式で進めた。授業後のアンケートによればほとんどの学生が今回の形式で満足していたようで、実習型の授業では各自のペースもあるのでオンデマンド形式が望ましいのかもしれないと思われた。②の各種滴定では、主に滴定操作による成分分析を指導した。例年よりも広くスペースを使いながら感染対策を徹底した上で対面で行った。

研究室に配属された学部4年生4名、修士課程学生8名、博士課程学生1名に対しては、毎週1回Zoomでのグループミーティングを行い、研究の進捗や最近の論文の紹介、議論を行った。また、おおむね週一回のペースで学生主体の輪読、また特にB4に対しては毎日一本論文の概要を読みこなす会を継続的に開催し、分子科学・光化学に関する知識の底上げを行った。多くの学生は積極的に取り組み、年度末には十分な議論ができるレベルまで知識が成熟した。並行して各自与えられたテーマに沿って研究活動を行っており、対外発表や論文執筆の指導も行った。それにより修士の学生が、アメリカ化学会の専門誌(J. Phys. Chem. A)に論文がアクセプトされ、その後も化学物理の専門誌(J. Chem. Phys.)に学生と共著の論文が採択されるなど十分な成果をあげている。オンライン化により学会のにも参加しやすくなったため、合計8件のオンライン会議の発表経験を積ませることができた、うち二件は国際オンライン学会である。最近では、自ら積極的に国際会議への出席や外国人訪問研究者との議論を行うまでに成長してきている。また、九大の若手教員有志で立ち上げたオンライン連続コロキウム“光”機到来！QコロキウムやChem-Station主催のバーチャルシンポジウムに携わったり、Twitterを用いた情報発信も功を奏し、分子科学・光化学分野の広い意味での教育・啓蒙に役立てることができた。

研究目標とその到達度

身の回りにある化学物質は、まわりの熱や光によりその構造や状態が常に変化している。またその変化を能動的に制御することが、生命活動や人工的な化学物質の生産、分解の基本となっている。そのため時々刻々と変化する物質を実時間で捉え、その構造や状態を明らかにすることは、化学物質の理解だけでなく、その利用の観点からも重要である。しかし、その時間スケールが1兆分1秒から秒におよぶほど広いことから、これまでは、このような分析を汎用的に行うことは困難であった。そこで当研究室では、多くの実用的な機能性物質に利用可能な時間分解分光装置の開発を行い、物質開発の専門家と共同で、各種機能性物質の原子、分子レベルの動的過程を明らかにすることを目的に研究を行っている。本年度は、既存の時間分解赤外分光装置および時間分解発光スペクトル測定装置を用い、それぞれの物質開発、計測の専門家と共同で下記のプロジェクト研究を進めた。緊急事態宣言等で自由に実験ができない時期は、Zoom、Gather、SpatialChat、Slack、YouTube等のツールを上手く利用して勉強会やプログラミング教育を行った。

1. 新学術領域「ソフトクリスタル」

- ・応力発光材料の発光メカニズム (産総研・徐グループ)
- ・ベイポクロミズム錯体の発光メカニズム (北大・加藤グループ)
- ・希土類発光体の発光ダイナミクス (北大・長谷川グループ)
- ・結晶中での励起状態プロトン移動ダイナミクス (東大・務台グループ)
- ・希土類錯体の分子内エネルギー移動過程 (北大・長谷川グループ)
- ・発光性金属 Al 錯体の励起状態構造 (九州大・小野グループ)

この他、1月に当研究室が世話人となって九州大学を会場に領域会議、公開シンポジウムを行う予定で準備を進めた。しかし直前に緊急事態宣言が発出されたため全面的にオンラインでの開催となった。

2. 新学術領域「革新的光物質変換」

- ・Ru-Re 超分子錯体における励起状態構造変化と CO₂還元光触媒活性(東工大・石谷グループ)
- ・Re リング錯体における錯体内エネルギー移動メカニズム(東工大・石谷グループ)

3. JSPS Core-to-Core Program, "Clarification of emission mechanism of thermally-activated delayed fluorescence and challenge for novel light-emitting materials"

- ・熱活性化遅延蛍光物質における発光効率とスピン変換に伴う構造変化の関係の解明(九大・安達グループ)
- ・有機ポラリトンの緩和ダイナミクス(九大・安達グループ)

- ・第4世代 OLED 分子の励起状態構造変化(ドイツ University of Regensburg, Yersin グループ)
- ・励起状態プロトン移動を利用した有機半導体レーザー材料の時間分解分光(オーストラリア University of Queensland, Namdas グループ)
- ・発光性 Pt 錯体材料の時間分解分光(オーストラリア University of Queensland, Namdas グループ)

年度を通して対面での会議ができなかったため、12月から3月の間、参加研究室持ち回りのオンライン講演会シリーズが行われた。12月3日は当研究室が担当し、恩田の他、大学院生2名が講演を行い、全世界から100名ほどの参加者があった。

4. フランス CNRS 国際共同研究所 Impacting materials with light and electric fields and watching real time dynamics (IM-LED)

- ・導電性分子性結晶における光誘起相転移過程の解明(東工大・腰原グループ、京大・矢持グループ)

対面、オンラインを含めて会議は行われなかった。関連する論文一報の出版(C. R. Phys.)、総説の投稿(Phys. Rep.)を行った。

5. 民間企業との共同研究

- ・時間分解分光法を用いた化合物の構造解析(住友化学株式会社)
- ・有機 EL 材料における励起状態の構造変化の解明(出光興産株式会社)

6. その他、

- ・発光性 Re 錯体材料の時間分解分光(九州大・大場グループ)
- ・トリプレット機能を利用した複合系の超高速ダイナミクス(九州大・君塚グループ)

以上の研究成果を随時学術論文として発表し、当該年度で6件掲載に至った。また、宮田助教が文部科学省表彰若手科学者賞を受賞など、対外的にも活動が認められている。

研究分野

分光分析化学、時間分解赤外分光、レーザー分光、光化学、光エネルギー変換、有機エレクトロニクス

研究課題

フェムト秒からミリ秒領域における各種時間分解分光装置の開発
上記分光装置を用いた有機発光ダイオード材料、人工光合成系、ソフトクリスタル等における励起状態構造と各機能、効率との関係性の解明

参考 URL

<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Spectrochem/>

無機反応化学研究室

宇都宮 聡 准教授

当グループでは地球環境中に存在する天然ナノ物質の生成、反応特性、移行挙動、また生物圏との相互作用に注目して、最先端の顕微鏡観察技術とバルク分析法を駆使しながら環境中における様々な現象の本質的な解明を目指している。特に重要な環境問題となっている重金属元素や放射性核種の挙動を研究対象としている。

教育目標

学部4年生については、与えられたテーマの実験をきちんと遂行し、データを整理・吟味し、結論を導き出すプロセスを体験することで研究課題を解決する方法論を修得することを目標とする。当研究室で卒業研究を行うのに必要な最低限のトレーニングを通じて研究室の整理・整頓、掃除、実験計画の立案、実験器具や試薬の管理と記録、化学実験における安全、廃液の処理方法、文献調査法、実験ノートの記載法、データの取り扱い方、報告書の書き方、研究発表の仕方など研究者や化学技術者をめざすのに必須事項を確実に身につける。卒業研究では、得られたデータを客観的に解釈する能力を養うために頻繁に構成員との議論の場を設け、自分の考えの表明や第三者との討論を経験させる。化学教室での業績報告会を終えた後卒業論文を仕上げる。

修士課程の学生については、研究課題の意義や解決の方向性などを理解し、それにそった研究計画を立案、実行する能力を養成することを目標とする。報告書を英語で書くこと、国内学会での発表を経験させる。

さらに、自ら研究課題を探求し、研究者として自立できることを目標とする。国際誌に論文を書き、国際学会での発表を経験させる。指導者になるためのトレーニングとして4年生・修士学生の研究指導を教員と協力して行う。

研究目標

地球表層環境中には多様な天然・工業ナノ結晶が普遍的に存在しており、その生成・成長・相互作用・移行挙動はグローバルな元素循環、生命圏、放射性廃棄物貯蔵施設周辺での元素移行に大きな影響を与えている。本グループでは、地圏・生命圏におけるナノ結晶化プロセス、ナノ粒子を媒介とした有害元素（放射性核種等）の状態、移行挙動、環境、生体への影響を定量的に評価することを研究目標としている。特に原子・ナノスケールの視点から現在問題となっている環境汚染の本質的な解明を目指す。

<本年度の研究活動実績>

- ・ 国内学会、シンポジウム等計4件発表、内学生の発表件数は2件。
- ・ 発表論文7報

研究分野

環境ナノ物質化学

研究課題

- [1] 地圏微生物、天然ナノ粒子による有害元素の移行挙動解明
- [2] 高濃度放射性セシウム含有粒子を基軸とした環境、廃炉問題研究
- [3] 最先端高分解能電子顕微鏡法の応用

参考 URL:

<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/ircl/utu-j/index-j.html>

[物理化学講座]

分散系物理化学分野

安中 雅彦 教授、榎 靖幸 准教授、八島 慎太郎 助教

教育目標

<教育に関する目標、目的、成果について>

教育目標は、自身の研究課題、身近な出来事、社会的諸事象に対して、合理的判断にもとづき対応する能力を育てることにある。学部生卒業研究、大学院における研究課題を進捗させるに当たり、将来どのような研究課題に取り組んでも、それを解決する能力を育てるよう努力している。また、学生との対話を重視している。研究課題およびその周辺分野に関する知識なども、自分の研究に則して勉強するように指導している。数ヶ月に一度の割合で研究発表会を行い、研究進捗状況の報告と研究計画をまとめさせている。結果については、全員で討論することにより、他のメンバーの研究内容を自己のものとするに配慮している。発表に対するコメントを義務づけるなどして、積極的に討論に参加させるよう工夫している。これにより、学生が自己啓発することを期待している。学部4年生と博士後期課程学生では、知識量に大きな差があり、全員対等に討論出来ないが、それぞれの学年に固有の教育効果をあげている。受動的だった学部4年生の研究課題に取り組む姿勢が能動的になった。

<研究室セミナーについて>

研究室セミナーでは、学部4年生、大学院生ともに高分子物理化学、および研究を進捗させるために必要な関連分野に関する英語論文の読解力を身につけている。また、自分自身の研究テーマに関連した分野の英語論文を精読し要点をまとめて人前で発表し、内容に関する質疑応答を行っている。この論文紹介では、自分の言葉で説明できる、すなわち漠然と論文をよむのではなく、自分の頭で考えながら読んでいくことを重要視して指導している。その結果、研究テーマの理解を深め、自分の力で研究テーマを発展させる能力がつくようになっている。さらに、定期的に研究の進捗状況について、要点をまとめて発表することを課すことで、研究テーマの動向や国際的位置づけを知ると共に、課題以外の研究テーマについても、理解を深めている。また、研究結果を人前で発言することにより、プレゼンテーションに必要な基本が身に付くよう指導している。

<学生の学外活動>

国内の主要学会での発表にできるだけ参加するように勧めている。大学院生は全員発表することができた。学部4年、修士1年、修士2年の学生が、九大外施設である Paul Scherrer Institute (スイス), Los Alamos National Laboratory (米国), Spring-8 (日本), KEK Photon Factory (日本), J-PARK (日本) 等で中性子・X線散乱測定を行い、国内外で学外との交流を深めている。さらに修士学生が, University of Copenhagen (デンマーク), Technical University of Denmark (デンマーク), Riso National Institute (デンマーク), 東京女子医科大学先端生命医科学研究所, および奈良県立医科大学医学部眼科学教室との共同研究を実施した。

研究目標

研究目標は、生命現象の本質を、高分子集合体、ゲル、高分子-低分子複合体の物性論的立場から解明することによって理解することにある。研究の目的は、水中で起こる様々な生体機能を、水中での諸物質の自己集合・凝集反応と力学応答の関連の諸原理で理解しようとするところにある。現在、両親媒性ブロック高分子、高分子電解質・界面活性剤複合体等が水媒体中で起こす自己集合・凝集反応によって引き起こされるメソ構造・状態相（ゲル相、分散相、液晶相等）転移の現象を明らかにすべく、種々の物理化学的条件下で、光散乱スペクトル、中性子散乱スペクトル、X線散乱スペクトル、蛍光スペクトル、AFM等の観測を行なっている。これらの測定は、国内外の研究者などとも協力しながら行なっている。

研究分野

高分子物理化学, 生物物理化学 (主として水を媒質とする構造形成)
生体高分子化学, 生体機能材料, トライボロジー

研究課題

両親媒性高分子のメソスコピック構造形成と物性
高分子電解質-低分子複合体のメソ構造・物性の解明
生体由来高分子ゲルの構造・物性・機能
生体高分子のゲル化ダイナミクス
ゲル表面摩擦のダイナミクス
ゲル表面摩耗の科学

参考 URL: <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/softmatter/index.html>

量子化学分野

寺寄 亨 教授、堀尾琢哉 准教授、原田賢介 講師、荒川 雅 助教

教育目標

【量子化学研究室：寺寄・堀尾・荒川グループ】

原子・分子を記述する量子化学の考え方を軸に、物質の成り立ちとその性質を原子スケールのミクロな視点から理解する物理化学の基礎的な素養を身につけて、広く社会で活躍する人材の育成を目標とする。講義では、化学結合の形成、電子状態の記述、振動・回転など分子の運動、原子集合体の形成とその構造・物性など、物質の成り立ちについて理解を深めるとともに、物質の性質を調べる強力な手段である分光学について、光の性質や光と物質との相互作用を扱う。これらを題材に、最先端科学技術の要である量子論の基礎とその発展動向を講義する。学生実験では、講義で扱った事柄を実験・解析を通して体験し、さらに理解を深めることを目的とする。研究室では、さらに実践的な経験を積み、挑戦的な研究課題を成し遂げることを目標に、実験技術の修得、ならびに、問題を解決しながら研究を遂行する実行力の養成を重視した教育を行う。これらと並行して、国際的な活動を通して、広く世界で活躍する人材を育成する。

〈教育内容〉

1. 講義

1-1. 基幹教育科目「基礎化学結合論」（対象：学部1年、担当：寺寄）

分子の形成について、古典的なルイス構造の考え方から現代的な量子論へと展開し、シュレーディンガー方程式に基づいて原子軌道、分子軌道の理解へと導く化学結合の量子化学的な考え方を講義した。

1-2. 専攻教育科目「量子化学I」（対象：学部2年、担当：堀尾）

20世紀初頭に始まった量子論の展開をたどりながら、光や物質の粒子性と波動性、シュレーディンガーの波動方程式の導入、箱の中の粒子のエネルギーの量子化、分子の回転・振動の量子論など、量子化学の基礎を概観する講義を行った。

1-3. 専攻教育科目「分子構造論」（対象：学部3年、担当：寺寄）

分子の運動に基づく分子構造の議論をテーマに、特に、分子の振動と回転に関する分光データから構造情報を導き出す過程を講義した。また、群論に基づく考察で、分子の各運動モードの対称性を議論した。演習では、具体的な数値を扱う訓練を重視した。

1-4. 大学院教育科目「構造化学特論I」（対象：大学院修士課程、担当：寺寄、堀尾）

前半では、光学を題材としてマクスウェル方程式に基づいて光の伝播を解析し、物質境界面での透過、屈折、反射に特に着目して、誘電体多層膜ミラーなど、光学素子の原理を講義した。後半はレーザーの原理とその応用を題材とし、EinsteinのA係数とB係

数、反転分布と誘導放出の増幅、時間依存の摂動論、コヒーレンス、非線形光学効果について講義した。光を利用する実験で役立つ実用的な知識を重視して講義を行った。

2. 学生実験

2-1. 「レーザー光の特性」 (対象：学部3年、担当：堀尾)

空気中の窒素分子を高電圧下で放電励起してレーザー発振させる実験を学生それぞれに体験させ、レーザー発振の原理を学ぶことを課題とした。さらに、組み立てた窒素レーザーを励起光源として、色素の蛍光観察を行った。また、市販の半導体レーザーを用いて、光の回折・干渉を学ぶ課題を課した。

2-2. 「エレクトロニクス」 (対象：学部3年、担当：荒川)

加算・減算回路、積分回路・微分回路など、演算増幅器を用いた電子回路の組み立て・理解、オシロスコープを用いた回路特性の測定など、化学実験の測定手段として不可欠な電子回路の初歩を学ぶことを課題とした。

3. 研究指導

研究室では、学部4年(5名)、修士2年(3名)、博士1年(1名)、博士2年(1名)が配属された。ところが、新型コロナウイルス感染拡大に伴う緊急事態宣言発令で研究活動が制限され、例年であれば年度当初に行うべき新規配属学生に対する実験指導の遅れや、理学部工場での金属加工実習の中止など、大きな影響があった。そこで、計画を変更して、オンラインでのセミナー等で基礎知識の習得をまず進め、夏季から実験活動を本格化した。学部学生には、金属クラスターの反応、分光、量子化学計算による構造解析などの課題をそれぞれ与え、卒業論文をまとめた。修士2年の学生は、前年度からの研究を継続して、金属クラスターの反応、分光実験に適したイオントラップの設計、真空中の液滴の凍結過程をテーマに修士論文をまとめた。これらの成果を、ナノ学会(5月、横浜での現地開催は中止)、分子科学会オンライン討論会(9月)、日本化学会春季年会(3月、オンライン)で発表した。博士1年の学生が分子科学会オンライン討論会にて学生優秀講演賞を受賞したこと、2名の学生が日本学術振興会DC2, DC1への次年度採用が決まったことは、教育の成果として特筆に値する。

これら研究活動による教育と並行して、研究室セミナーでは、研究の進捗状況報告、関連する文献調査とその紹介など、課題の設定と解決、成果発信に向けた訓練を行った。専門知識の教育では、『大学院講義 物理化学』(東京化学同人)第II部「反応速度論とダイナミクス」の輪読を行った。さらに、英語力について、NHK語学講座『高校生からはじめる「現代英語」』を活用し、リスニングとスピーキングに関して実践的な訓練を行った。輪読と英語教育は、量子化学研究室IIと合同で行った。

【量子化学研究室Ⅱ：原田グループ】

量子力学の立場から化学結合・化学反応の本質を理解し、研究・開発に応用できる人材を育成することを目標に教育を行っている。学部教育では量子化学の基礎を身につけさせるとともに実際の計算に応用できる能力を養うことを目標に教育した。本年度在籍の学部4年生については、分子分光学の初歩的な知識を獲得させるとともに、科学的・論理的に思考し討論することができるよう訓練し、研究課題を確実に実行して研究発表できる能力を得させることを目標にした。

〈教育内容〉

講義では、学部2年生の基幹教育科目「基礎化学結合論」を担当した。「基礎化学結合論」ではシュレーディンガー方程式を理解し、自分で波動方程式を書き下せるようになること、原子軌道、分子軌道、化学結合の量子論的解釈を理解し、簡単なヒュッケル法による計算ができるようになることを目標に講義した。今年度はコロナ下のリモート講義となり、音声解説付きpptを作成して講義を行うとともに、自宅学習の利点を生かし、「体で覚える量子化学」と称して簡単な量子化学計算の計算実習を行い、量子力学ではどのようなやり方で実際に計算するのか体験的に学習できるように工夫した。

学部3年生の学生実験では、「OCS分子の回転スペクトル」の実験を行った。マイクロ波共振器を用いて $OC^{32}S$ と $OC^{34}S$ の $J=1-0$ 遷移を観測し、分子構造を算出する実験で、分子構造決定の原理を学ぶ課題である。

研究室セミナーでは、通常は2種類のプログラムによって教育を行っている。一方は、量子化学研究室と合同で、「高校生からはじめる現代英語」により英語の語学力と英会話能力を鍛えるとともに、分光学に関する基礎的な知識を授けることを目的として「大学院講義物理化学」を輪読した。他方は、研究の中間報告を主目的とするものである。研究の中間発表では、実験の企画及び準備の状況、実験結果、解析結果、理論的考察などを報告させ討論を行った。この他に、4年生のスタートアップのための量子力学に関する講義・演習を行った。

研究目標

【量子化学研究室：寺寄・堀尾・荒川グループ】

現行のナノ材料よりもさらに小さな物質を扱う次世代のナノ物質科学を切り拓くことを目標に、原子の数（サイズ）が数～数十個の範囲で正確に定まった原子分子クラスターを対象として、これら極微小な物質に特有の基礎物性を、物理化学の視点と手段で探究する。クラスターの特質は、原子1個の増減で物性や反応性が不規則かつ劇的に変化し（サイズ効果）、常識を超えた新物質の発見が期待されることであり、元素戦略の手段としても注目される。我々は、原子数をパラメータとして千変万化するこれらクラス

ターを新たな物質群と捉え、物質科学の本質を掘り起こす新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的には、質量分析技術で原子1個の精度でサイズを制御するクラスター発生法、反応生成物の時々刻々の変化を捉える化学反応追跡法、レーザーや放射光を利用した分光法など、最先端の実験手段で特性解明に取り組む。一方で、真空中で液体を扱う技術を開発して気相化学と液相化学との融合に挑むなど、マイクロ(原子・分子・クラスター)からマクロ(液相・固相)までをつなぐ科学の開拓を目指している。

〈研究概要〉

触媒や磁性材料など機能性物質に関連した金属/金属化合物に着目し、構成原子数が正確に決まったクラスターを研究対象として、その特性解明を推進した。特に、触媒に代表される化学反応では、活性点となるナノ構造を切り出したクラスターが反応の本質理解と新規材料の設計指針につながると期待される。また、宇宙空間で分子が合成される過程においてクラスターが反応の鍵を握っているとの仮説があり、科学の広い分野で注目されている。これら原子の数で変化するクラスターの特異な物性・反応性の解明に、気相分子との反応実験、レーザーによる可視-紫外分光、X線による内殻分光を実験手段として取り組んだ。また、光電子イメージング分光など新たな実験手段の開発に着手した。さらに、これら気相クラスターの液相への展開を狙いとして、真空中に生成した溶媒液滴の熱力学過程の研究に取り組んだ。なお、前年度まで10年にわたって続けてきたドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究は、新型コロナウイルス感染拡大による海外渡航制限のため、実質的な活動が行えなかった。

〈研究成果〉

課題(1)：金属/金属化合物クラスターの反応性と電子構造

第1のテーマとして、触媒材料等の反応性の鍵を握る遷移金属元素のd電子に着目し、化学反応性を指標とした電子構造研究を推進した。遷移金属原子上に局在したd電子は高い反応性の起源になるが、銀など伝導性金属中にドーブされた場合には、自由電子(s電子)との相互作用を介してd電子が非局在化し、反応性が低下する可能性がある。本研究は、銀原子数を制御して系の電子数を調節するクラスター研究の手法で、s-d相互作用に対する電子数の効果を解明することを目的としている。昨年度までに、開殻3d遷移金属(M=Sc~Ni)をドーブした正イオン種 Ag_nM^+ について、Cr, Mn 以外の場合に、電荷を考慮した総価電子数が18個となるサイズで酸素分子 O_2 との反応性が特異的に低下することを見出し、18電子系における電子閉殻構造が示唆された。負イオン種 Ag_nM^- についてもすべてのドーブ種に対して実験を完了したが、Sc, Ti, Vのドーブでは18電子系で閉殻構造が示唆されたのに対して、Fe, Co, Niでは18電子系でも高い反応性を示した。本年度はこれら負イオン種の解析を進め、まず、光電子分光に基づく先行研究と矛盾する結果が得られた Ag_nCo^- について、量子化学計算で反応性と光電子スペクトル

の双方を同時に説明する結果を得て、先行研究の解釈を修正する論文発表した [Chem. Phys. Lett. **753**, 137613 (2020)]。他の負イオン種の解析をさらに進めている。

第2のテーマとして、上述の s-d 電子間の相互作用の問題を s-f 電子間に拡張し、 Ag_nCe^+ (Ce: $4f^15d^16s^2$), Ag_nSm^+ (Sm: $4f^66s^2$) と O_2 との反応実験を行った。いずれも f 電子の局在性が d 電子よりも強いことを示す結果が得られ、18 電子系においても f 電子の非局在化は示唆されなかった。

第3のテーマとして、銀クラスター正イオン Ag_n^+ と一酸化窒素分子 NO との逐次反応実験で、多様な反応生成物をこれまでに得ていた。本年度、この複雑な反応過程の解析に挑み、およそ $n=10$ を境に変化する反応機構のサイズ依存性を見出した。特に $n \geq 10$ において3分子の NO から NO_2 と N_2O が生成する不均化反応が起きることを突き止め、小さなサイズにおける異なる反応機構と合わせて、論文発表した [J. Phys. Chem. C **124**, 26881 (2020)]。

第4のテーマでは、宇宙空間での分子進化の観点から有機分子生成のメカニズムに注目し、Co クラスター正イオン Co_n^+ 上での水素分子 H_2 と一酸化炭素分子 CO との反応の研究に取り組んだ。前年度までに、 H_2 に対する反応性が、 Co_n^+ よりも、むしろ CO 吸着後の Co_nCO^+ で極めて高いことを見出し、その際、ホルムアルデヒド H_2CO が僅かながら生成することを突き止めた。本年度はこの成果を取りまとめ、論文発表した [J. Phys. Chem. A **124**, 9751 (2020)]。

課題(2) : 光電子イメージング分光による金属クラスターの電子構造研究

化学反応性を指標とした課題(1)の電子構造研究で、d 電子を含む 18 価電子で形成される安定化学種を添加元素ごとに見出した。この研究の次段階として、電子構造を実測して、特に、電子閉殻構造の実験的な証拠を得ることを目的に、負イオン種の光電子イメージング分光を計画し、昨年度までに装置の設計を完了した。本年度は、前半に装置の組み立てを開始し、課題(1)の反応性評価装置に増設した。この作業と並行して、レーザーならびに光学素子の準備を行った。後半には、銀クラスター負イオン Ag_n^- を試料として、装置の性能評価を行った。当初は、光電子脱離用レーザーに繰り返し周波数 50 Hz の光パラメトリック発振器 (OPO) を想定していたが、測定感度を向上する新たな計測手法として、むしろ連続発振 (CW) レーザーダイオードを使用し、連続的に発生する Ag_n^- イオンビームをサブ MHz のパルスに変換して測定を行う手法を提案した。同時に、光電子画像を撮像する際の背景信号を極力低減するようイオン光学系の最適化を行った。以上より、連続発生する負イオンビームの光電子画像を極めて短時間で撮像することが可能となった。以上の成果を原著論文として公表するため、本年度末より論文執筆を開始した。

課題(3) : レーザー分光による金属クラスターの電子構造研究

直径 10~100 nm の銀ナノ粒子において、電子の集団励起が引き起こす表面プラズモン共鳴が知られており、強い光吸収で発生する大きな局在電場を利用したプラズモニクスが応用展開されている。銀原子が集合してナノ粒子が成長する過程における電子の集団励起の発現機構は自明でなく、サイズ選別された Ag_n クラスタを対象に、我々独自のレーザー分光実験で電子の挙動の探究を進めてきた。小さなサイズから測定を始めて、前年度までに $n \leq 70$ の領域で光解離分光を行った。本年度はさらに $n = 92$ まで測定を進め、銀ナノ粒子と類似したスペクトルの特徴からクラスタの形状がサイズと共に変化する様子を捉えた。つまり、正二十面体構造をとる $n = 55$ 付近での球形が、 $n = 70$ 近傍では楕円体に変形し、さらに $n = 92$ では再び球形へと変化するを見出した。一方で、光吸収断面積を評価する実験として、光共振器を利用して希薄な試料の光吸収を超高感度に計測する光閉じ込め分光をいくつかのサイズに適用し、電子遷移を定量的に解析するための基礎データを得た。

課題(4) : イオン光学系シミュレーションに基づく高密度イオントラップの設計

イオン光学系の解析ソフトウェア SIMION を用いたイオン飛跡のシミュレーションに基づいて、これまでにイオン集束性能の高い飛行時間型質量分析計の設計を行ってきた。本年度は、このソフトウェアをさらに高度に活用して、イオントラップのシミュレーションを行った。イオン間の反発やイオン-バッファガス間の衝突までを考慮した計算の結果、実験で観測されていた四極子型や八極子型イオントラップ内の捕捉イオンの密度と空間分布を定量的に再現することに成功した。クラスタの分光実験では、元来希薄なクラスタの高密度化が実験の成否の鍵を握っており、このシミュレーション手法が高密度イオントラップの開発手段として強力な武器となる。

課題(5) : X線吸収分光による金属化合物クラスタの化学状態測定

株式会社コンポン研究所との共同研究で、放射光施設を利用して孤立クラスタのX線吸収分光 (XAS) を行っている。触媒金属として銅に着目し、酸化セリウム上に担持された銅では、酸素雰囲気下においても酸化が抑制されることをこれまでに明らかにしてきた。つまり、酸素吸蔵・放出機能に優れたセリウムが優先的に酸化される結果、銅の酸化が抑制され、活性が保たれることが示唆された。本年度は、対比実験として行ったセリウムを含まない酸化銅クラスタ CuOAr^+ , Cu_2O_2^+ の XAS 測定結果を解析し、ひとたび酸素と結合すると銅原子がいずれも 2 価に酸化されることを見出した。この結果は、酸化数が 1 価に保たれる酸化セリウム上の銅とは対照的であり、酸化セリウムの効果を裏付ける成果として論文発表した [Z. Phys. Chem. **235**, 213 (2021)]。

課題(6) : 真空中に生成した液滴の蒸発冷却・凍結過程

気相金属クラスターの液相化学への展開を狙いとして真空中の液滴の研究に取り組んでいる。真空中で約 10 ms で凍結する純水液滴に対して、1 分間にもわたって凍結せずに液相を保つことを明らかにしたエチレングリコール (EG) を混合し、凍結抑制効果を調べた。その結果、微量な EG の混合で水液滴の凍結が大きく遅延することを見出した。現在、EG 混合による液滴の蒸気圧変化などに注目して、その解析を進めている。

【量子化学研究室 II : 原田グループ】

高分解能の分光法によって基本的な分子種を研究し、分子の精密な構造、分子内ならびに分子間ポテンシャル、電子的および振動回転励起状態のダイナミクスを詳細に説明することを目標として研究を展開し、国際的にこの分野での高レベルの研究グループとして評価されている。我々のグループは、過去に化学的に安定な分子種について十分な研究実績をもつが、これを基盤として、近年は短寿命の分子種に重点を移し、フリーラジカルや分子クラスターを主な標的として研究している。

〈研究概要〉

プロトトンネリングについては、台湾交通大学との共同研究により、フーリエ変換マイクロ波分光により、同位体置換トロポロンのトンネル回転遷移を観測し、同位体置換でトンネル効果がどう変化するか解明した。またビニルラジカルのトンネル回転遷移の P 枝を観測し、詳細な超微細分裂の知見を得た。

分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では、He-HCN および He-DCN のミリ波分光により、解離限界以下の全ての結合準位を観測した。さらに He-HCN の回転前期解離する状態も観測した。 $(o)\text{H}_2\text{-HCN}$ 分子錯体については $\Sigma_1\text{-}\Sigma_0$ 内部回転遷移をミリ波領域で観測した。

〈研究課題と進展状況〉

マイクロ波分光、フーリエ変換分光などの高分解能分光法による、分子構造、励起状態ならびにダイナミクスの実験的研究、ならびに関連する理論的研究を行っている。現在設定している主な研究課題は、

- (1) ミリ波分光によるフリーラジカルの研究
- (2) ミリ波およびフーリエ変換マイクロ波分光によるプロトトンネリングの研究
- (3) ミリ波分光によるファンデルワールス錯体の研究

である。

課題 (1) および (2) では、台湾交通大学との共同研究により、トロポロンの同位体置換体についてフーリエ変換マイクロ波分光により、トンネル回転遷移を観測し、同位体置換

でトンネル効果がどう変化するか解明した。またビニルラジカルのトンネル回転遷移の P 枝を観測し、詳細な超微細分裂の知見を得た。

課題 (3) では、パルス超音速ジェットによって実現した超低温状態中でファンデルワールスクラスタを生成させ、これによるミリ波吸収を多重反射光学系を用いて直接観測する方法を用いている。He-HCN および He-DCN については、解離限界以下の全ての結合準位を観測した。さらに He-HCN の回転前期解離する状態も観測した。これらの観測されたエネルギー準位を最小二乗解析して分子間ポテンシャルを決定した。

H₂-HCN 分子錯体については $\Sigma_1-\Sigma_0$ 内部回転バンドの $R(2)$ および $R(4)$ 遷移を観測した。

これら様々な課題に関連して、台湾交通大学、静岡大学、岡山大学など内外のグループと共同研究を行っている。

研究分野

物理化学、クラスター・ナノ物質科学、レーザー・X線分光、ミリ波分光、フーリエ変換分光

研究課題

少数原子で構成されるオングストロームサイズのクラスターから、はるかに大きなマイクロメートルサイズの液滴まで、種々のスケールの原子・分子集合体を対象に、質量分析法と分光法による物性・反応性の実験研究。ならびに、ミリ波分光、フーリエ変換マイクロ波分光などの高分解能分光法による、分子構造、励起状態ならびにダイナミクスの実験的研究、および関連する理論的研究。

参考 URL :

量子化学研究室 : http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/quantum/index_j.php

量子化学研究室 II : <http://133.5.167.83/>

寺寄 亨 : <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K003815/index.html>

堀尾琢哉 : <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K007032/index.html>

原田賢介 : <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K000706/index.html>

荒川 雅 : <http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K003966/index.html>

光物理化学分野

加納 英明 教授

教育目標

<概要>

光物理化学研究室では、生細胞内で機能する分子を分光学的に捉え、ライブで得られる振動スペクトルを丁寧に読み取ることで、分子種とそれらの作用機序を明らかにし、未知の生命現象の発見やその本質の解明を目指した研究に取り組んでいる。物理化学をベースとした一連の研究活動を通して、光と分子との相互作用について一段深く理解し、振動スペクトルを正確に読み取る素養も養うことで、社会に貢献できる骨太な spectroscopist の育成を目標としている。これに加えて、グローバル化に対応できる人材育成のため、フランスの共同研究グループとの研究交流により、国際的な視野で研究を俯瞰できる力を養うと同時に、国際学会・国際共同研究への参加も早い段階から推奨している。

<実績>

・講義

学部2年前期に開講される「化学序説」の一部を担当した。細胞内分子を可視化する各種顕微イメージング手法について概説した後、特にラマン分光法や非線形光学効果を用いた超解像分子イメージング手法について講義し、その最先端の研究についても紹介した。

・研究指導

2020年5月着任のため2020年度の配属学生はなし。分子科学会オンライン討論会で、サブメンターとして研究指導を担当している大学院生（筑波大・博士一貫コース2年生）が学生優秀講演賞を受賞した（講演タイトル：「線虫 *C. elegans* のマルチモーダル非線形光学イメージング」）。また、日本分光学会年次講演会で、2019年度まで研究指導を担当した大学院生（筑波大・修士2年生）2名が若手ポスター賞を受賞した（講演タイトル：「ヒト毛髪メデュラ内脂質のマルチモーダル非線形光学イメージング」、「硫黄を代謝する藻類 (*Cyanidium caldarium*) のマルチモーダル非線形光学イメージング」）。

研究目標

<概要>

生命現象の究極的な理解のためには、生細胞内で機能する分子をそのまま可視化し、それらの分子が協調的に連動しながら機能を発現させる物理化学的過程をその場観察することが必須である。細胞内分子を可視化する分子イメージング手法の中でも、ラマン分光イメージング法は、生細胞内の分子分布や分子構造及び動態を、標識無し（ラベルフリー）でその場観察することのできる、非常に強力な手法である。我々の研究室では、微弱なラマン散乱光を増幅する非線形ラマン散乱を用いることで、分子集合体から生細胞・生体組織まで、様々な生命システムを対象として、生命現象の物理化学的理解を目指した研究を進めている。これに加え、フランス・リモージュ大学との共同研究、複数の民間企業との共同研究も同時に遂行している。

<実績>

毛髪は外側からキューティクル、コルテックス、メデュラという3層構造をもつ。このうちメデュラは多孔性の構造を持ち、脂質の局在が見られる場合があるが、この脂質の蓄積とその機能については未だ十分な理解が進んでいない。そこで本研究では、メデュラ内の脂質組成とその局在可視化を目標として、非線形ラマン散乱を含む複数の非線形光学効果を同時に可視化できるマルチモーダル非線形光学顕微鏡を用いた分子イメージングを行った。その結果、メデュラ内の脂質には遊離脂肪酸と脂肪酸エステルの二種類の脂質が排他的に局在することがわかった。さらに、両者の脂質で第二高調波発生のアクティビティが異なることも明らかにした。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された（“Visualizing intra-medulla lipids in human hair using ultra-multiplex CARS, SHG, and THG microscopy”, *Analyst* 146, 1163 (2021).）。

皮膚の水分保持とその破綻は各種皮膚疾患とも関係するため、皮膚水分の微視的な直接計測が望まれているが、標識無し且つサブミクロンスケールの空間分解能で皮膚を直接可視化する手法は、未だ発展途上である。そこで我々は、非線形ラマン散乱を用いて皮膚角層中の水分の局在を可視化する分子イメージングの研究を行った。その結果、角層における水分リッチな領域に共局在する脂質を見出し、標準物質との比較から、それが細胞間脂質として知られているセラミドであることを明らかにした。また、皮膚組織の深さ分解イメージングも行い、細胞核が残る有棘層の領域までサブセルラーの空間分解能で水分の局在が可視化できることを明らかにした。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された（“Visualization of water concentration distribution in human skin by ultra-multiplex coherent anti-Stokes Raman scattering (CARS) microscopy”, *Appl. Phys. Express* 14, 042010 (2021).）。特筆すべき点として、この論文は *Appl. Phys. Express* 誌の SPOTLIGHT 論文として取り上げられた。これらは民間企業との共同研究の過程で得られた成果であり、その関連で知財の出願も行った（特願 2021-020179）。

研究分野

光物理化学、分子分光学、構造化学、光化学、非線形光学、分子イメージング

研究課題

生細胞・生体組織を分子科学の対象として、分光学的・構造化学的手法を駆使することで、未知の生命現象の発見とその本質の解明を目指した以下の研究課題に取り組んでいる。

- ・非線形ラマン散乱を用いた新規ラベルフリー分子イメージング法の開発
- ・非線形光学効果を用いた生体内分子アーキテクチャの顕在化
- ・睡眠に伴う脳内活動現象のラベルフリー・サブセルラーイメージング
- ・非線形ラマン散乱でみる皮膚のうるおい
- ・藻類が蓄積する新規代謝物の非線形ラマン・スクリーニング
- ・コヒーレント・ラマン分光を用いた分子のキラリティ計測

参考 URL : <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/PhotoPhysChem/index.html>

構造化学分野

大橋 和彦 准教授

教育目標

構造化学研究室では、学部4年生に対して、量子化学と分子分光学の基礎理論を理解させると共に、分光実験の技術および研究テーマについてまとめて発表する能力を修得させることを目標とした教育を行っている。修士課程の学生の教育では、論理的な思考力、文章力および発表能力の向上を重視している。博士課程の学生には、ほぼ自立した研究能力を備えることを求めている。

■ 指導方針

当研究室では、学生が自主的に研究活動を行うことを重視しているため、教員からの指示は最少となるように努めている。したがって、教育・研究活動はもとより、研究室の行事についても学生が中心になって行う体制をとっている。しかしながら、学部4年生あるいは修士1年生までは、細かい教育的指導が必要となっており、教員がマンツーマンで指導を行っている。

■ 研究室セミナー

雑誌会においては、最先端の論文を各人が調査して発表した後、全員で討論を行い、新しい知識の吸収と共にプレゼンテーション能力の向上に努めている。コロキウムでは、量子化学と分光学の基礎について書かれた教科書を輪読して、分子分光学の研究に不可欠な基礎的事項の理解を深めると共に、英語力の向上にも努めている。本年度は、A. Ellis, M. Feher, T. Wright 著の“Electronic and Photoelectron Spectroscopy (Fundamentals and Case Studies)”を使用した。

■ 学生の学外活動

学生は例年、分子科学討論会、化学関連支部合同九州大会、九重分子科学セミナーなどの学会において成果を発表している。しかし、本年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響により、これらの学会が中止となった。一方、オンラインで開催された量子化学スクール(分子科学研究所等が主催)に修士学生が参加した。

研究目標

分子や分子集合体の物理化学的性質と反応性は、幾何構造、電子構造、分子間相互作用に支配されている。構造化学研究室では、分子クラスターの幾何・電子構造、分子間

相互作用と励起状態ダイナミクスとの関係について、分光測定実験および量子化学計算を駆使して明らかにすることを研究目標にしている。この目標を達成するために、現在以下の項目を研究課題として設定している。

■ 溶液中の芳香族分子の励起状態における動的過程に関する研究

種々の溶媒中におけるヒドロキシ安息香酸、アニリン、アミノフェノール等のベンゼン誘導体分子の吸収スペクトル、蛍光スペクトル、蛍光寿命を測定している。また、溶存分子のモデルとしての溶媒和クラスターに対して量子化学計算を行っている。本年度は、溶媒中のアニリンの吸収・発光スペクトルの微視的レベルでの解釈を目的として、分子動力学計算と時間依存密度汎関数理論計算を組み合わせた研究を開始した。成果は2021年度の学会で報告する予定である。

■ 生体関連分子と金属イオンの間の相互作用に関する研究

種々の金属イオンとアミド、尿素などの溶媒分子からなる系に対して、振動分光実験と量子化学計算を用いた研究を行っている。本年度は、塩化コリンおよび尿素からなる深共晶溶媒である Reline を対象として、大きな双極子モーメントを有する尿素および正・負イオンの間の分子間相互作用に着目し、液体構造を明らかにする研究を進めた。また、 $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2/\text{ジメチルホルムアミド}$ の系において、イオン対生成の可能性を探る研究成果を学術論文にて発表した。

研究分野

物理化学、分子分光学、溶液化学、クラスター化学

研究課題

金属イオン・有機分子と溶媒分子からなるクラスターの配位・溶媒和構造、水素結合構造、分子間相互作用、励起状態ダイナミクス、分子間エネルギー移動

参考 URL : <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Kouzou/str3j.html>

[有機・生物化学講座]

生体情報化学分野

久下理 教授、荻島正 准教授、谷元洋 准教授、宮田暖 助教

教育目標

生体情報化学研究室では、生物化学の研究を行うことをとおして、自立でき心の豊かな社会人を育成することを目標としている。このために、学部4年の学生には各個人に独立した研究テーマを与え、各テーマの背景を習得させるとともに、当該分野の最先端の研究を行わせる。また、1年間の卒業研究をまとめ、公の場で発表できる能力を身につけさせる。修士については、研究テーマの問題を解決するために、独力で研究計画を組み立て遂行し、得られた研究結果を正しく解釈できる能力を身につけさせる。博士においては、学術論文（研究テーマの背景、研究結果、得られた研究結果の考察）を独力で欧文雑誌に発表できる能力を身につけさせる。これらの目標達成のために、本研究室では各自の実験研究に加え、1) 抄読会（先端の学術論文の紹介・発表とその発表に関しての全員での討論）、2) 研究室全体での研究報告会（各自の研究テーマに関する中間報告とその報告に関しての全員での討論）、3) 小研究グループによるミーティングを行っている。

研究目標

(1) リン脂質の代謝調節機構と細胞内輸送に関する研究

生命の基本単位である細胞は、細胞膜という生体膜で外界との境界を形成しているが、細胞内部にも様々な生体膜で区画化されたコンパートメント(オルガネラ)が存在する。生体膜は、これら生物が用いる壁の役割をはたすのみではなく、高分子合成、エネルギー産生、情報伝達、選択的物質透過など細胞の生命活動維持に必要な殆どすべての生体内反応が行われる場であり、その形成・維持機構の解明は、現代生命科学の最も重要な研究課題の一つである。生体膜の基本骨格は様々なリン脂質分子で構成されるリン脂質二重層であるが、現在、リン脂質二重層の形成・維持に関して、基本的で重要な2つの疑問が未解決となっている。1つは、生体膜リン脂質の量と組成がどのような機構で決定されているのかという疑問である。もう1つの疑問は、リン脂質が合成された場所から機能する場所へどのような機構で輸送されるのかという疑問である。そこで本研究室では、これらの疑問、すなわちリン脂質の代謝調節機構と細胞内輸送機構の解明を目標・目的に、生化学的、細胞生物学的、遺伝学的研究を行っている。近年は特に、ミトコンドリアにおけるリン脂質代謝に焦点をあてた研究を行っている。

哺乳動物と酵母のミトコンドリアには、ホスファチジン酸 (PA) からカルジオリピン

(CL) を生合成するために必要な一連の酵素群(Tam41、Pgs1、Gep4、Crd1)とホスファチジルエタノールアミン (PE) を合成するホスファチジルセリン (PS) 脱炭酸酵素 1(Psd1)が存在する。しかしこれら酵素のミトコンドリア内局在により、ミトコンドリアで CL と PE が合成されるためには、その合成原料となる PA あるいは PS がそれぞれ生合成された場所からミトコンドリア外膜に輸送され、さらにそれに引き続く外膜横断輸送と内膜への輸送や内膜横断輸送が必要である。

2020 年度は、以下の主要な成果をあげた。我々は、酵母のミトコンドリア内 PS 輸送因子である Ups2 が欠損すると、グルコース枯渇時に細胞周期の G1/G0 期停止と G0 期 (静止期) 細胞である Q cell への分化が亢進することを見出していた。今回、この原因が細胞内エネルギーセンサーである AMP キナーゼの過剰活性化であることを明らかにした。

従来 PS 脱炭酸酵素 1 (Psd1) は、ミトコンドリア内膜にのみ局在すると考えられていたが、近年、その一部が小胞体にも局在し、この小胞体に局在する Psd1 が細胞内 PE 合成に大きく寄与していることが報告された。我々は、小胞体局在の Psd1 量を様々な条件下で解析し、その存在量は、TORC1-Pah1 シグナルによって制御される細胞内 PA の影響を受けることを明らかにした。つまり、TORC1 シグナルが強い環境においては、Pah1 活性が抑制され、細胞内 PA 量の増加に伴い、Psd1 の存在量が増加する。一方、TORC1 シグナルが低下した場合、Pah1 が活性化し、細胞内 PA 量が低下することで、Psd1 存在量の低下を引き起こしていた。また、PA は Psd1 タンパク質に直接結合しており、直接的に Psd1 存在量の制御に関与することが示唆された。さらに、エタノールアミン存在下において小胞体型 Psd1 は Hrd1 によって分解されていること、コリン存在下においては転写抑制因子 Opi1 によって *PSD1* の転写活性が抑制されることも見出した。これらの研究から、細胞内環境に応じたダイナミックなリン脂質恒常性維持機構の存在が明らかとなった。

(2) 生体膜スフィンゴ脂質の構造多様性の生物学的意義と生物機能

スフィンゴ脂質は長鎖スフィンゴイド塩基を持つ脂質の総称で、親水性頭部を持つ複合スフィンゴ脂質は生体膜を構成する脂質として古くから知られている。近年、スフィンゴ脂質は二つの視点から注目を集めている。第一に、形質膜上のラフトと呼ばれるマイクロドメインの構成分子として機能し、細胞内外のシグナル伝達の中継地点の役割を果たしていること、第二に、複合スフィンゴ脂質が分解されて産生される代謝産物 (セラミド、スフィンゴシン 1-リン酸等) が、細胞分化、増殖、アポトーシス及び細胞運動を制御する点である。また、哺乳動物の複合スフィンゴ脂質は、千種類以上の分子種を持つことが知られている。近年、この構造多様性が複合スフィンゴ脂質の多機能性を支える分子基盤であることが示唆されているが、全貌の解明には至っていない。本研究では、分子生物学的アプローチが容易、且つ複合スフィンゴ脂質の構造バリエーションが

比較的シンプルな酵母をモデル生物とし、スフィンゴ脂質の構造と機能の相関の解明を試みている。

2020年度は、以下の三つのことを明らかにした。

① これまでに、複合スフィンゴ脂質生合成系が破綻し細胞内の複合スフィンゴ脂質が枯渇すると、高浸透圧応答シグナル伝達経路 (HOG 経路) が活性化されることで細胞を救済することを見出している。2020年度は、複合スフィンゴ脂質代謝破綻下において cAMP/プロテインキナーゼ A (PKA) シグナル伝達経路が、HOG 経路とクロストークすることで、生育に影響を与えることを新たに見出した。cAMP/PKA 経路を活性化させる変異は、複合スフィンゴ脂質代謝破綻による生育阻害を促進させたが、この効果は PKA の欠損によって完全に抑制された。解析の結果、HOG 経路の MAP キナーゼである Hog1 の複合スフィンゴ脂質代謝破綻によるリン酸化は、PKA によって抑制されることがわかった。また、PKA による HOG 経路の抑制効果は、Hog1 のリン酸化抑制だけでなく Hog1 の下流の転写因子 Msn2/4 の直接的な抑制を介する経路もあることもわかった。これらのことより、cAMP/PKA 経路は、複合スフィンゴ脂質生合成破綻下において、HOG 経路を阻害することで適切な活性化を調節していることが示唆された。

② 複合スフィンゴ脂質代謝破綻下で HOG 経路依存的に発現が上昇する遺伝子 59 個から、実際に救済能を持つ遺伝子をスクリーニングした。その結果、*FMP48*, *TPS2* 遺伝子が救済に寄与することをつきとめた。*FMP48* は転写調節因子である Mks1 を介してミトコンドリア由来の活性酸素種の増加を抑制をすることで救済効果を発揮することが示された。また *TPS2* は、解糖系のレギュレーターであるトレハロース-6-リン酸の量を調節し、解糖系をアップレギュレーションすることで救済効果を発揮していることが示唆された。

③ 出芽酵母の複合スフィンゴ脂質は、合計 15 種類のサブタイプに分類され、この構造多様性は 5 つのスフィンゴ脂質代謝酵素 (*SUR1*, *CSH1*, *IPT1*, *SUR2*, *SCS7*) によって規定される。本研究では、これらスフィンゴ脂質代謝酵素の変異を組み合わせることで、様々な複合スフィンゴ脂質サブタイプが抜け落ちた計 11 種類の変異株ライブラリー) を作製し、それらの環境ストレス耐性能の評価を行った。その結果、複合スフィンゴ脂質のサブタイプが一種類のみとなった変異酵母 (*sur1Δ csh1Δ sur2Δ scs7Δ* 株) では、高温、高浸透圧、細胞壁およびアルカリストレスに対する耐性が顕著に低下することが新たにわかった。また、*sur1Δ csh1Δ sur2Δ scs7Δ* 株の高浸透圧ストレスおよび細胞壁ストレス高感受性は、高浸透圧応答経路 HOG 経路や細胞壁ストレス応答経路 CWI 経路の MAP キナーゼの欠損下でも観察されたことから、この高感受性はストレス応答経路の損傷で起きているものではないことが示唆された。一方で、*sur1Δ csh1Δ sur2Δ scs7Δ* 株では、Slt2 MAP キナーゼおよび転写因子 Msn2/Msn4 の恒常的活性化によって正常な生育が維持されていることを見出された。このことより、これらのシグナリングが複合スフィンゴ脂質多様性破綻に対する救済機構としてはたらくことが示唆された。

(3) 膵臓非内分泌型ステロイドの合成と機能

膵臓β細胞は活発なインスリン合成を行うのが主たる機能だが、この合成は過重の小胞体ストレスを細胞に与える。このため、インスリン合成が活発であるほど、細胞死や細胞機能不全、すなわち糖尿病のリスクが高まる。この小胞体ストレスを小胞体カルシウム依存性ATPase阻害剤であるタプシガルギン (TG) で再現させると、β細胞由来の樹立細胞である INS1-細胞でも細胞死が起こる。このとき糖質コルチコイドの合成を阻害するとTGが細胞死を起こす効果が高まる。このように糖質コルチコイドはTGで誘発される小胞体ストレスを緩和し、細胞死を阻止する。一方、膵臓β細胞を刺激して、血糖値依存的にインスリン分泌を促進する消化管ホルモンのインテグリンであるGLP-1にも小胞体ストレス緩和作用があり、この類似ペプチドであるExendin-4とともにTG誘発性小胞体ストレスを緩和ないし阻止する。これらインテグリンの効果はcAMPによるもので、植物テルペンであるフォルスコリンでも同様の効果が得られた。そこで、フォルスコリンをINS1-細胞に与えたところ、TG処理時にプロゲステロン下流のコルチゾールを含むステロイドの合成が高まった。cAMPによるステロイド合成は、副腎皮質などの内分泌型ステロイド産生細胞でも主要な刺激要因であり、非内分泌型ステロイド産生細胞である膵臓β細胞でも同様に起きていることが示された。インテグリンのようなペプチドホルモンによる膵臓β細胞の品質管理は、インテグリンによるcAMP情報に誘発されて合成されるステロイドによって担われている可能性が示唆された。

研究分野

生化学、細胞生物学、分子生物学、酵母遺伝学

研究課題

リン脂質の代謝調節、細胞内輸送、生理機能

膵臓β細胞で局所的に合成されるステロイドホルモンの生理機能

生物有機化学分野

大石 徹 教授、鳥飼浩平 助教、保野陽子 助教

教育目標

複雑な構造を有する有機化合物の合成および活性評価の研究を通して、有機合成化学、機器分析、および生物有機化学的手法を習得し、企業やその他の研究機関において活躍できる人材の育成を目的とする。

- (1) 実験技術に関しては、複雑な構造を有する生物活性天然物の多段階合成を通して様々な反応を数多く経験し、数百 μ g から数百 g スケールの反応を扱う技術を身につける。また、複雑な天然物の立体構造を構築していく過程において、NMR などの機器分析法について訓練を積む。研究の進捗状況を報告する実験報告会を隔週でおこない、資料作成、データのまとめ方などを身に着ける。
- (2) 学術的知識に関しては、グループ全体で行う英語の論文紹介を通して英文の読解能力を養い、さらに有機合成セミナーを通して合成の方法論や反応の基礎的な部分を習得する。
- (3) 研究発表に関しては、卒業論文、修士・博士論文のまとめ方、発表資料の作成の仕方を懇切丁寧に指導する。また、積極的に学会発表を行うことを奨励し、日本化学会年会、有機合成シンポジウム、天然有機化合物討論会などで発表する機会を与える。特に、博士課程の学生には国際学会への積極的な参加を奨励する。

到達目標の指針

- (1) 4年生：指導されたことを理解し、正しいやり方で安全に研究を遂行できること。ひとつの論文をじっくりと正確に読みこなし、内容を十分に理解すること。正しい用語（日本語）を用い、論理的な文章で卒業論文をまとめること。Supporting Informationを英語で書くこと。
- (2) 修士課程：自分で調査して研究を遂行できること。複数の論文を読んで比較検討し、客観的に評価できること。修士論文を英語で書くこと。
- (3) 博士課程：自分でアイデアを出し、工夫して研究を遂行できること。真の問題解決能力を身につけること。下級生の面倒を見ること。文献を網羅的に調査し、レビューとしてまとめること。学術論文（英語）を執筆すること（最低2報）。博士論文を英語で書くこと。

研究目標

複雑な構造を有する生物活性物質の化学合成および作用メカニズムを分子レベルで解明することに重点を置き研究を行う。すなわち天然から微量しか得られない天然物や、作用機構解明のための分子プローブを化学合成し、生物有機化学的手法と最先端の機器分析を用いることで分子レベルでの活性発現機構解明に取り組む。2020年度は以下のテーマに重点を置く。

- (1) 生物活性天然物の化学合成・構造決定・生物活性評価
- (2) 生物活性天然物の構造活性相関研究・作用機構の解明
- (3) 生物活性天然物の効率的合成法の開発
- (4) マイクロフローリアクターの天然物合成への応用

研究分野

天然物化学、有機合成化学、ケミカルバイオロジー

参考 URL : <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Seibutsuyuki/index.html>

構造機能生化学研究室

松島 綾美 准教授

教育目標

構造機能生化学研究室 (Laboratory of Structure-Function Biochemistry) は、教育目標を「共に学び、共に成長する」、研究目標を「好奇心に従い真理を追究する」ことに置き、教員と学生とで行う先端的な研究の展開を通して、優れた研究者、技術者、教育者を養成することを目指している。すなわち、独創的な研究を推進しつつ、その過程における個人的な、あるいは集団的な人的接触を通じて、社会人として優れた研究者の養成を目指す。また、好奇心に従った真理の追求研究は、最終的には問題解決型の研究展開ではなし得ないような、現実社会における偉大な貢献に繋がると考えている。特に、化学部門にある生物化学系の研究室としては、広範な「生化学」の教育研究分野において「化学」を中核・基盤の分野と位置づけ、「化学」に基礎を置く優れた生化学者の養成、育成を重視している。このように、教育と研究を一体のものとして、教員と学生が強力に協同し、先入観のない学生の頭脳と、新旧の様々な実験経験をもつ教員の間で、相乗効果を発揮しながら進んでいる。

学生に良い教育を行うために、そのツールとなる良い研究が必要である。研究は常に最先端の課題に取り組むことになる。現時点で分かっていないことで、その解明が学問的に重要かつ緊要な課題に取り組むことになるが、「なぜ？」という気付きを重視している。その解決を目指す、論理的な思考を身につけることを求めている。

研究室では、お互いの人格の尊重に十分に配慮した生活空間の創生に努めるようにしてきた。相互の思いやりを大切にする研究室であるように心がけ、その精神は十分に発揮されてきたと思われる。なお、こうした精神をより強く活かす研究室特有の年中行事として、宮崎宮放生会における実験動物供養とその後の研究祈願会等を行ってきている。また、公費による研究活動者の義務として、研究教育活動の客観的な全容は、個人的な感懐を除きつつ、研究室のホームページ <http://lsfb.scc.kyushu-u.ac.jp/index3.html> を通じて、常に最新の情報を発信している。

(講究・演習)

構造機能生化学研究室 (なお、旧講座名称は生物化学講座であり、時折、通称として使用している) では多様な講究・演習を実施し、学生・院生の啓発に努めてきた。研究室で実施してきた講究は次の3つである。① セミナー：最新の最先端報文を詳読し、構造機能相関を分子レベルで理解する基礎的な力を養う研究論文抄読会 (年5回/4年生、年3回/大学院生、年1回/教員)、② レクチャー：専門分野の時宜相応の1つの研究課題について、ここ数年間の論文を収集して総説にまとめるか、学術誌の総説を講義する総説会 (年1回/大学院生)、そして、③ リサーチプロGRESSミーティング：各自の

研究の進捗状況を、実験内容、解析手法および結果等について解説、討議する研究中間報告会（教員を含めた全員が年4回レジメ提出・年4回発表）。セミナーについては、開催日時と紹介内容・タイトルを研究室のホームページで公表している。

（学生の研究活動）

修士学生、4年生を含めて、常に真理を探究すべくさまざまな視点から、時宜に即して学術的に意義の高い研究課題について、果敢に挑戦している。従って、萌芽的、挑戦的な課題が多い。学生の研究発表は、令和2年度日本生化学会九州支部例会（福岡市）で2件、第93回日本生化学会大会（オンライン）で2件、第57回ペプチド討論会で1件であった。

研究目標

構造機能生化学研究室では、レセプター（受容体）について、生体情報伝達の分子機構解析・解明を目標に、独自の研究手法で、独自の研究視点から精力的に取り組んできた。特に、分子情報伝達システムの中核をなす受容体の分子起動メカニズムの解明を研究課題の中心に据え、脳神経情報伝達系の神経ペプチドやタンパク質の受容体、血管系のプロテアーゼ活性化受容体（PAR1）、細胞核内での遺伝情報発現に機能する核内受容体（転写因子）などについて、リガンド-受容体分子間相互作用の解析と機構解明に鋭意取り組んできた。

こうした研究において具体的には、「痛み」に関わるGタンパク質連関型受容体の活性化機構、内分泌攪乱化学物質（環境ホルモン）の核内受容体応答機構、概日リズムの分子機構、の3つについて、分子間相互作用の解析に努めてきた。独創的な分子探索子や分子追跡子『トレーサー』を設計・創製し、これを用いた新規で系統的な分析手法を開発しながら進めた。構造機能生化学研究室ではこのように、新しい分子基盤に基づく生体分子間相互作用の多方面からの鋭意な解析研究により、受容体に一般的な分子起動、機能発現の分子機構解明をめざしている。

短期的には、エストロゲン受容体およびエストロゲン関連受容体を取り巻く環境化学物質の影響解析に力を入れている。環境化学物質に由来した構造を持つ、治療薬の開発や、環境化学物質が示す特異な活性の分子機構解明を目指している。環境化学物質が結合する受容体は、細胞核内で遺伝子の転写翻訳を制御する転写因子である。そして、中長期的には、痛みに関わる神経ペプチドであるオピオイドを研究してきた経緯から、これらのオピオイドペプチド前駆体を転写制御することによる、モルヒネなどのオピオイド治療薬で問題となる依存性や耐性のない、これまでにない新しいメカニズムの鎮痛薬の開発を目指している。

研究室構成員

准教授：松島綾美

修士：（2年）行武美華、田川幸樹、岩本雅輝、（1年）なし

学部4年生：石橋知佳、細瀬摩利

研究室構成員の2020年度進路

修士：田川幸樹（日本ハム株式会社）、岩本雅輝（佐藤製薬株式会社）

学部4年生：進学

研究分野

生物化学、受容体化学、構造機能生化学、ペプチド科学、分子薬理学、酵素化学、神経科学、ケミカルバイオロジー、生物有機化学、環境生化学、構造生物学、計算化学、リスクサイエンス

研究課題

脳神経受容体の起動分子機構の解明および構造機能相関の解析
内分泌かく乱化学物質（環境ホルモン）の核内受容体応答機構の解明
生理活性コンホメーション変化の分子機構解明
受容体分子機構解析用分子ツールのケミカルバイオロジー
受容体応答におけるハロゲン結合-逆ハロゲン結合の分子機構解明
受容体アゴニズム-アンタゴニズムの相互機能変換
概日リズムの発振、伝達に関わる生物時計の分子機構およびその異常の解析

参考URL：研究室ホームページ <http://lsfb.scc.kyushu-u.ac.jp>

[複合領域化学講座]

理論化学分野

中野晴之教授，吉田紀生准教授，渡邊祥弘助教，鈴木聡助教

教育目標

本年度は，博士後期課程3年生2名，2年生1名，修士課程2年生3名，1年生2名，学部4年生5名が在籍した。博士後期課程の学生については，修了後に独立した研究者として研究活動を行うための訓練期間として，修士までの知識と経験を基に自らの考えに基づき研究を推し進めることを，修士課程の学生については，学部で身につけた量子化学の理論と計算手法を基礎に先端的な電子状態理論の新たな開発や電子構造・化学反応機構の解明を行うことを，また，学部学生は，分子軌道法，密度汎関数法の基礎を理解することとともに，研究課題について背景と意義を理解し，それを説明できること，および，研究の進め方を知りそれを経験することを目標としている。

研究室セミナーは，大学院学生は，量子化学分野の理論・計算手法を学ぶため，理論・計算手法の原著論文の輪読を，学部学生は，分子軌道法の基礎を身につけるため「新しい量子化学」(ザボ，オストランド著)の輪読を行うとともに，研究発表，文献紹介を行った。

また，大学院学生は，研究会「凝縮系の理論化学」などの国内研究会において，おのおの研究発表を行った。継続して，京都大学，新潟大学，奈良先端科学技術大学院大学，理化学研究所，分子科学研究所，慶應義塾大学，筑波大学のグループとの共同研究も進めている。

研究目標

理論化学研究室では，分子および分子集合体の構造，物性，反応を理論的に解明すること，特に，新たな電子状態理論，新たな溶液理論を開発し，それを基に化学現象を解明することを目標としている。

本年度は，多参照摂動論 GMC-QDPT の近似手法の系統的誤差評価，巨大 π 電子系環拡張ポルフィリンの電子構造の研究，包接化合物 (Curcubituril) のリガンド結合による酸解離定数変化に関する研究，等を行った。以下に主なものを記す。

(1) 多参照摂動論GMC-QDPTの近似手法の系統的誤差評価

理論化学研究室では，多参照摂動論のひとつであるGMC-QDPTの開発を

行ってきた。GMC-QDPTの計算コストを削減するため、近似手法も併せて提案している。本研究ではこの近似手法の精度と効率性の向上を図るため、摂動項の近似と誤差の関係を一定の分子群を用いて系統的に評価することを目的とした。参照分子としては、ポリエン系分子群 (butadiene – decapentaene), ポリアセン系分子群 (naphthalene – pentacene) を採用した。計算の結果、(doc,act)→(act,vir) 励起タイプに誤差が集中していること、(act,act)→(act,vir) 励起タイプを除く励起タイプは活性電子の増加に伴い同じ方向に誤差が増大することなどが明らかとなった。また、近似による主な誤差は、励起の組み合わせの数の増加に従い増大することも明らかとなり、誤差の方向と大きさに系統性のある項については、パラメータによる補正によって近似精度を高められる可能性を示唆している。

(2) 巨大 π 電子系環拡張ポルフィリンの電子構造の研究

これまで京都大学のグループにより一連の環拡張ポルフィリンが合成され、現在では52 π 系までの環拡張ポルフィリンが報告されている。実験では、ヘプタフィリン以降では、ヒュッケル則による $(4n + 2)\pi$ 系ではなく、 $(4n + 4)\pi$ 系が安定構造として合成されている。環拡張ポルフィリン系の特徴として、長波長の吸収波長を持つ、柔軟な骨格をもつ π 共役系である、複数の安定酸化状態の存在などがあるが、その基盤となる大型環状 π 電子系の基底・励起状態の電子構造については不明な点も多い。本研究では、環拡張ポルフィリンの分子構造と電子構造及び吸収特性に係る励起状態について、モデル炭化水素 π 電子系を参照系として用いて、明らかにすることを目的とした。その結果、溶媒を考慮しない場合には、環拡張ポルフィリン系、モデル炭化水素系のいずれでも22 π 電子以上では $(4n + 4)\pi$ 系が安定であることが明らかとなった。 $(4n + 4)\pi$ 系の安定性は環拡張ポルフィリン系特有の性質ではなく、大環状 π 電子系に共通の性質であることを示している。また、励起状態については、モデル炭化水素系との類似性から環拡張ポルフィリン系の一重項の遷移は高対称モデル炭化水素のスペクトルを基にその変形と考えることができることがわかった。

(3) 包接化合物 (Curcubituril) のリガンド結合による酸解離定数変化に関する研究

Curcubituril (キューカービチュリル, ククルビトウリル) は環状化合物であり、内部に空洞を持つことから、有機分子の包接化合物として、ドラッグデリバリーやカラーチューニングなどに利用されている。Curcubiturilの空洞は分極したカルボニル酸素が突きだした構造をしていおり、リガンド分子に

対して静電的影響を及ぼすことで、リガンドの酸解離定数 (K_a) を変化させることが実験で知られているが、その分子論的メカニズムは明らかになっていなかった。本研究では、分子動力学シミュレーションおよび、当研究室で開発したマルチスケールハイブリッド法である QM/MM/3D-RISM 法を用いて、酸解離定数変化のメカニズムを解明した。

研究分野

理論化学，量子化学，電子状態理論，液体論

研究課題

高精度電子相関理論，相対論的分子軌道理論，溶液系・生体系の非経験的分子理論， π 共役系の電子状態の系統的な理解，インターフェイス系の分子軌道理論と化学反応

参考URL : <http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/>

触媒有機化学分野

徳永 信教授, 村山美乃准教授, 山本英治助教

教育活動

触媒有機化学研究室は、2020年度は教員3名、博士研究員1名で教育、研究活動を行った。また、博士課程7名、修士2年生4名、修士1年生4名、学部4年生3名で研究室を運営した。このうち博士課程の2名は社会人ドクターとして研究を行った。また、修士課程には、岡山大学、鹿児島大学、琉球大学、九州工業大学からの進学者が4名在籍した。2020年度は、コロナ禍の影響で、4月、5月から6月の途中まで研究室での活動が制限されたため、文献紹介のゼミや研究の議論をオンラインで行った。オンラインで行うと、遠隔地にいる社会人ドクターも出席できるため、ゼミは毎週木曜日の夜に行うこととした。このセミナーを通じて、有機化学、触媒化学および関連分野の基礎事項の確認と習得、研究分野の最新情報、研究の価値や意義、および専門用語を含む英語の勉強を行った。また、月に2回程度、研究の進展状況の報告を行った。研究室全体での研究の発表も年に2回行った。また、学生の学会発表は、申し込みをしていた環太平洋化学国際会議をはじめ、色々な学会が延期になり、発表数の減少を余儀なくされ、学生が発表したものは5件に留まった。

研究活動

当研究室では、有機分子触媒、均一系錯体触媒、固体触媒の研究を行っており、有機合成や触媒反応だけでなく、食品化学や電池の分野まで研究対象を拡げている。有機分子触媒の研究では、不斉四級アンモニウム塩を用いるエステルの不斉加水分解や加アルコール分解の研究で、アズラクトン類の加アルコール分解の研究を行った。固体触媒を用いた触媒反応開発は、バルクケミカルや石油化学、またプラスチックのケミカルリサイクルで得られる一酸化炭素や合成ガスの有効利用を志向した研究を行った。具体的には、C4石油化学プロセスで有用なアリルエステルの異性化反応、C4およびC5中間体の酸化反応、C2およびC3中間体のヒドロホルミル化、アルコキシカルボニル化反応、また揮発性有機化合物の低濃度での分解反応、さらに、硫黄化合物の合成反応などを行った。硫黄化合物の合成では、ファインケミカル合成向けのS-S交換反応のほか、潤滑油添加剤に使われるポリスルファンの新規合成法の開発なども行った。また、ガソリンなどからの脱硫の手法開発としてチオフェン誘導体の分解や吸着なども行った。一方、担持金ナノ粒子の食品化学分野への応用として、日本酒からの老香の選択的除去の研究や、焼酎の飲みにくさ、臭さの原因となっている硫黄化合物の除去を行った。担持金ナノ粒子に関しては新たな調製法の開発、前駆体の開発と構造、焼成時の金の状態変化などに関して、SPring-8や京都大学複合原子力科学研究所などで実験を行った。また、リ

チウムイオン電池の電解液分解メカニズムの研究を引き続き行った。これらの成果により第 10 回 CSJ 化学フェスタ 2020 で宮田 透子氏が優秀ポスター発表賞を、また山本英治助教が有機合成化学協会研究企画賞を受賞した。

研究分野

有機合成化学, 均一系触媒化学, 固体触媒化学, 放射光分析化学, 電気化学, 食品化学, ナノテクノロジー

研究課題

担持金ナノ粒子調製法の開発, 酸化物担持の貴金属ナノ粒子触媒を用いる酸化反応, 還元反応, C-C 結合形成反応, 合成ガスの利用, 均一系触媒および固体触媒を用いる酸素求核剤の付加反応, アリル異性化反応, 不斉相間移動触媒を用いるエステルの不斉加水分解, 担持貴金属ナノ粒子による日本酒や焼酎からの硫黄化合物の除去, リチウムイオン電池の電解液劣化機構

参考URL :

<http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Hiheikou/index.html>

分子触媒化学分野

桑野良一 教授、末永正彦 講師

教育目標

有機合成に必要な知識と実験技術を身につけさせ、研究に必要な資料を自力で収集できる、あるいは、実験結果を自力で解析し、その後の研究計画を立案できる研究者の育成を目標としている。

通常、初めて研究の現場に直面する学部4年生は、大部分の有機化学の知識を教科書から得ている。そこで、学部4年生に対してはできるだけ多くの実験を行うように指導し、自分自身の手で新しい有機化合物を作る喜びや、僅かな反応条件の差により収率が激変する有機合成の厳密性を理解させるように努めている。また、反応の進行に伴って観測される変化を見逃すことなく実験ノートに記録させるように指導し、この変化をベースにして反応中における化合物の状態変化や副生成物の発生のプロセスなどを議論し、有機合成に必要な論理的思考力を育てている。同時に、研究の背景や研究に必要な化合物の合成経路の立案、文献紹介などで、SciFinder、Web of Scienceなどのデータベースを積極的に利用させ、文献収集能力の向上をはかっている。年間を通してこのような指導を行うことにより、有機合成化学の研究に欠かせない基礎知識や文献収集能力が飛躍的に向上していると思われる。

1年以上の有機合成の研究を経験した大学院生については、自分自身で研究計画を立案し、研究を遂行できる能力を身につけさせるように心がけている。日頃の研究のディスカッションや研究方針の決定のプロセスで、学生に積極的に意見を出させるように促し、その意見に対し教員が適正にコメントすることにより、学生自身の意見を反映させながら研究を行わせるようにしている。また、意見がない学生に対しても、幾つかの選択肢を示して学生自身に研究方針の最終決定を行わせるようにしている。

また、研究の進捗状況を発表する中間報告会（年2回）、最新の速報を紹介する抄録会（隔週）を毎週開催し、学生全員に発表させた。特に、抄録会で隔週発表を義務づけることにより、すべての学生に学術雑誌を読ませる習慣を身につけさせている。

当該年度は新型コロナウイルスの流行のため、学生の学外活動では、オンラインで開催された、第117回有機合成化学シンポジウム、日本化学会九州支部秋季研究発表会、日本化学会 第101春季年会（2021）で研究成果を口頭あるいはポスター発表しており、日本化学会九州支部秋季研究発表会では大学院生1名が最優秀ポスター発表賞を受賞した。

以上により、教育に関する目標は概ね達成されたと考えている。

研究目標

当研究室では (1) 遷移金属錯体を触媒とする新規有機合成反応の開発、(2) 光学活性遷移金属錯体による触媒的不斉反応を主なテーマとし、有機分子の反応の制御要因を解明し、新たな化学の構築を目指している。

(1) 近年の有機合成化学の発展は著しく、抗癌剤として期待されるタキソールや、熱帯地域の海産物による食中毒の原因物質の1つであるシガトキシンのような複雑な構造を持つ高分子量の生理活性化合物の合成も可能になってきた。一方、遷移金属錯体を触媒とする有機反応は、近年の精密有機合成や有機工業化学の分野では欠かせない手法となりつつあり、これまでの手法では不可能であった分子骨格の構築や複雑な化合物の短工程での合成を可能にしている。しかし、このような有機合成の飛躍的な進歩にもかかわらず、官能基選択性や立体選択性など未だに解決されていない問題は多く、例えば複雑な構造を持つ生理活性化合物の合成では数 100 kg の原料を用いて数 mg の目的化合物を得ているのが現状である。以上のような観点に基づいて、当研究室では遷移金属錯体を用いた新しい有機合成反応の開発を行っている。また、その反応を実際の有機合成の利用に耐えうるレベルにまで洗練することも行っている。最近では、今まで有機合成化学でほとんど注目されてこなかった(*p*-ベンジル)パラジウム錯体に着目し、パラジウム触媒によるベンジルエステル類のベンジル位求核置換反応の開発に世界に先駆けて成功し、有機合成化学における反応制御の新しい様式を開拓している。本年度は、有機リン化合物を求核剤とする新たなベンジル化反応の開発ならびに安息香酸ベンジルの脱炭酸によってジアリールメタンが効率的に生成することを見出した。

(2) 医薬・農薬などの多くの有用な生理活性化合物はキラルな構造を持ち、2種類の鏡像異性体が存在する。そして、望みの生理活性を示すのは片方の鏡像異性体のみであり、場合によっては他方の異性体は人体や生態系に悪影響を及ぼすことがある。また、近年では強誘電液晶などの機能性材料としても光学活性化合物の需要は高い。従って、光学活性化合物の効率の良い供給法の開発は、現在の有機合成化学における重要な課題の1つである。本研究室では、光学活性な遷移金属錯体を触媒とする光学活性化合物の高エナンチオ選択的合成における新しい反応制御法の開発を行っている。近年の大きな成果では、(a) 今まで不可能と考えられてきた複素芳香族化合物の高エナンチオ選択的な触媒的不斉還元の世界で初めて成功した。(b) プロキラルな 1,3-ジカルボニル化合物のカルボアニオンのエナンチオ選択的アルキル化による高エナンチオ選択的な4級不斉炭素骨格の構築、などがある。本年度は、ベンジルアルコールとカルボン酸から自アリールメタン類を与える新しい分子変換法を開発した。

研究分野

有機合成化学、有機金属化学、計算化学

研究課題

遷移金属錯体を触媒とする新規有機合成反応の開発。光学活性遷移金属錯体を触媒とする触媒的不斉合成法の開発。糖認識タンパク質における認識部位と認識糖の予測を目指した、フラグメント MO 法による糖とアミノ酸残基の相互作用の研究。

参考URL：<http://chem.kyushu-univ.jp/Yuki/>

量子生物化学分野

秋山良 准教授

様々な面で新型コロナウイルスの感染拡大の影響を受けた年度である。特に前期は、この状況下での教育、研究方法の確立のために一時的停滞があった。常勤スタッフとしては秋山のみ研究室に戻った。また、2018年度まで所属していた末松安由美氏（九州産業大学理工学部基礎サポートセンターに特任助教）が共同研究員として加わっており、不定期に議論を行っている。秋山は、2020年度はMini-Symposium on Liquidsの主催（ただし中止になった）、公益財団法人新世代研究所委員、放送大学の客員准教授、生物物理学会理事、生物物理誌の編集委員、Physica A (Elsevier) と Biophysics and PhysicobiologyのEditorial Boardメンバーとして関わっていた。コロナ禍ため、会議が多い中、学部学生2名と大学院修士学生5名と大学院博士学生2名が主体的に研究などを進めてくれた。そのおかげで、活発な研究・研究活動を維持できた。しかしながら、特に前期のコロナ禍対応のため2020年の出版物点数は3点（論文、コメンタリー、教科書各1点）ではあった。しかし、後半からリモートでの研究体制や学生の取り組み方も工夫が進み、2020年度内に更に2報の論文と1報の解説が出版出来、その後も順調に投稿などが続いている。修士2年生を2名企業に送り出し、残り1名は本研究室の博士後期課程に進学した。学部学生2名も1名は本研究室の修士課程に、もう1名は他大学の大学院に進学した。

教育目標とその到達度

研究室内での教育の基本方針はこれまでと同様で、液体論とその周辺の現象を中心に扱いつつも、特定の分野や手法に縛られる事が無い様に注意した。すなわち化学や生物に関する問題を見つけ、統計力学や熱力学等の考え方をを用いて問題の創造を行う能力の養成を第一の目標とし、次いでその問題の解決能力の養成を第二の目標とした。さらに、自分の仕事を適切に他者に伝える技術の習得を第三の目標とした。

上記の目標に向かって進むために、特定分野の専門知識を増やす事よりも、知的活動の為の足腰を鍛える事が重要であると考えた。そこで、物理、数学、コンピュータのプログラム作成、文献からの情報収集能力の獲得を学生に要求した。卒業研究の時期を大雑把に前半（11月後半まで）と後半（3月まで）に分けた。そして、前半で、教科書の勉強会、プログラミング実習、原著論文の紹介等のメニューをこなしてもらった。後半では卒業研究を中心に行った。また前期には、研究を離れて英語の文献読みをほぼ毎日行った。大半をリモートで行ったが、教科書の勉強会、プログラミング実習は対面を取り入れつつ行った。

勉強会では、具体的には数学や物理の考え方と基本技術の学習を目的に

(1) 高橋康著 量子力学を学ぶ為の解析力学入門
をほぼ全て学習し、さらに統計力学を学ぶために

(2) David Chandler著 統計力学概説

に接続した。この教科書では特に化学に関連する統計力学の基本的な知識と取り扱いについて学ぶ事を目的とした。簡単な例題作成にポイントを置くことで、『統計力学や熱力学は、化学や物理の単なる道具ではなく、その考え方自体はもっと広い』という事に注意しながら議論を進めた。目標は十分なレベルで達成された。

4年生のプログラミング実習では、既存のソフトウェアを単に利用するのではなく、自らの望む計算をプログラミングできる能力の養成が目標である。そこで前期の間に

(1) UNIX上でのコンピュータの基本操作、

(2) 研究室のWebページの作成

から開始し、

(3) NEVおよびNTVアンサンブルでの単純液体の分子動力学シミュレーション・プログラムおよび解析プログラムの作成、

などを行った。こうしたコンピュータの利用についても目標は概ね達成されていた。

後半の時期では、4年生に関しては拘束空間による分子吸蔵現象と分子会合の分子シミュレーション開発を対象に研究を進めた。この時期は、特に自分の考えをまとめ、伝え、議論する能力の養成を目標とした。そのため、秋山の時間がある限りは議論を行った。また、シンポジウムやセミナーなどで外部との接触をはかった。

一人よがりでない科学的探索を行う上で、議論を行う能力とともに情報の獲得が重要である。多くの情報は英語の原著論文にあるため、

(1) 英語の教科書等の読書会

を行った。可能な限り毎朝実施した。読みやすい英文をたくさん読む事を重要視し、D. W. Oxtoby: Principles of Modern Chemistryを、毎朝1ページ程度読んで自分なりに発表する練習を行ってもらった。一定の上達を得られた。

研究目標とその到達度

本研究室の目標は、特に溶媒の効果に着目して生体分子の性質を考える事にある。ただし、生物物理、物理化学のより基本的な問題へ興味が進んだ。従って、背景が専門的、個別的すぎるものについては、教育的な点からのみならず研究を深める点からも避けた方が良くと考え、主に単純な系から法則を見出して物理化学的な現象の説明に向かう傾向がより強まった。以下の様な項目で研究を行った。研究及び教育の一環として、液体論の情報交換、討論の場を作り学生とも共有して行くことは目標の一つである。

[1] 希薄な電解質溶媒中における荷電大粒子間の平均力ポテンシャルの研究
(末松 (九産大)、秋山)

- [2] 同符号荷電コロイド粒子間の強い実効引力相互作用のリエントラント挙動とATPの加水分解を利用した分子モーターメカニズムの研究
(吉森 (新潟大) 末松 (九産大)、竹田、櫻井、高倉、秋山)
- [3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究、高精度積分方程式理論の研究
(吉森 (新潟大)、中村 (工学院大)、秋山)
- [4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究 (大久保、千葉 (慶応大)、秋山)
- [5] 水溶液中のタンパク質拡散係数、過冷却水の水分子の拡散係数の計算
(岩下、秋山)
- [6] 溶媒和モーターの移動距離の研究 (徳永 (工学院大)、秋山)
- [7] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究 (須田、秋山)

- [1] 希薄な電解質溶媒中における荷電大粒子間の平均力ポテンシャルの研究
(末松 (九産大)、秋山)

希薄な電解質溶液内ではマクロアニオンは斥力相互作用をしている。電解質濃度が薄い極限ではマクロアニオン同士の実効相互作用はポアソン-ボルツマン方程式を基に議論される場合が多い。その電解質濃度希薄極限で、互いにマクロアニオンが近くに近寄れない場合は、多体相互作用の効果が小さくなりポアソン-ボルツマン方程式がより適切に成り立つと考えられているからである。DLVO理論でも基本的にはその遮蔽クーロン相互作用としてポアソン-ボルツマン理論の結果が用いられている。しかし、現実的な濃度ではこの近似が破れてくる。特に共イオンの価数依存性はDLVO理論と実験では逆になり定性的に異なっている。我々は、HNC-OZ理論を用いて計算を行った。その結果、実験と定性的に同じ結果を得られる事が分かった。筑波大で実験的な研究をしている菱田らとの議論がまとまった。なお、積分方程式の結果は概ねまとまったが、ごく小さな値になってから、実効相互作用が急激な変化を示す箇所があり、その部分の意味づけが難航している。

- [2] 同符号荷電コロイド粒子間の強い実効引力相互作用のリエントラント挙動とATPの加水分解を利用した分子モーターメカニズムの研究
(吉森 (新潟大) 末松 (九産大)、竹田、櫻井、高倉、秋山)

電解質溶液中では同じ符号を持った荷電コロイド粒子間にも引力が働き凝集などの現象が起こる事が知られている。いわゆる強結合領域での問題を扱った。DLVO理論ではこうした問題は全く扱う事が出来ないため、液体の積分方程式理論を用いてこの問題を扱った。この強い引力は、同符号荷電コロイドの電荷が大きな場合にのみ現れ、その会合安定性は共有結合に匹敵する。さらに、塩濃度が高くなるとその引力は消失する。この結果は、マクロイオンを原子核に、カウンターイオンを電子に置き換え、共有結合の

古典描像を想定すると理解できる。実在系の実験結果との一致も良く、この現象における溶媒効果の意味づけに成功したので、その論文を投稿中である。また、この実効相互作用を元に初めてリエントラントな相図を出版することができた（2020年に出版）。また、電解質濃度変化を利用したタンパク質結晶の高品質化を目指して、シミュレーションプログラム作成を行っている。

また、この引力に対して排除体積効果の影響が非常に強いもののシンプルな効果の和として計算できることがわかり、論文を書いた。（2021年に出版）

[3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究、高精度積分方程式理論の研究

（吉森（新潟大）、中村（工学院大）、秋山）

この内容は、ATP駆動タンパク質の駆動力測定と関係がある。しばしば、共溶媒の添加によってその駆動力の検討実験が行われるからである。以前、物理学部門にいた中村、吉森との共同研究である。吉森によって、山口理論に特異摂動法を適用する事で溶媒が大きな極限で成り立つ簡便な理論が導出された。様々な巨大粒子-溶媒間動径分布関数に対して拡散係数が計算され、動径分布関数と拡散係数の間の関係が議論された。この方法を、多成分溶媒系に適用した。その結果、巨大分子の影響は、粘性からの予測より大きな事が示されつつある。今年は特に中村により動的な理論部分の近似方法について検討を行った。（2021年に出版）また、共溶媒の効果が予想以上に大きくなる事が示されつつ有る。これまでの結果とタンパク質の拡散の問題と結びつけることを目指して研究を進めている。動径分布関数の問題も解決して、HNC-OZ理論にBridge関数を追加したMHNC-OZ理論が極めて高精度であることをモンテカルロシミュレーションを用いて求めることができ、2成分系の論文を準備中である。

[4] 高分子結晶への溶媒分子の吸蔵の研究

（大久保、松尾、千葉（慶応大）、秋山）

高分子結晶の隙間には多くの分子が吸着する。それらの吸蔵量や吸蔵のための活性化エネルギーを朝倉大沢理論や液体の積分方程式論で理解し、予測するための研究を開始した。そのために最初は固体表面への分子の吸着の問題から取り掛かった。いくつかの問題を調べて、チューブ内への吸蔵の計算に進んだ。実験も完了し両面から議論を行った論文を出版した。関連したリング状分子による分子捕獲の計算も開始した。理論中心の論文を準備中である。

[5] 水溶液中のタンパク質拡散係数、過冷却水の水分子の拡散係数の計算

（岩下、秋山）

上記の分子動力学シミュレーションにおける拡散係数の計算値はシミュレーションボックスのサイズ依存性の問題をたんぱく質のケースで調べた。溶媒和層の問題だけではな

く、粘性変化の問題もあり、もともとYehらの行ったケースよりも難しい問題が含まれていることがわかった。それらの問題は概ね説明がまとまりつつある。また、拡散係数の問題を扱える様になって来たので、過冷却水の水分子の異常拡散問題も扱い始めた。論文準備中である。

[6] 溶媒和モーターの移動距離の研究

(徳永 (工学院大)、秋山)

『分子の溶媒和状態は電子移動化学反応により生じている。その溶媒和変化した分子を移動させるか?』この課題を調べるための分子動力学シミュレーションを行った。シンプルモデルを用いた結果が示されつつあるが、厄介なことに強いシステムサイズ依存性も見られた。これを拡散係数で知られたFushikiの方法による予測やYehらの方法で解決するかに思われたが、さらに熱発生の問題に伴う粘性変化を考慮する必要があった。この現象を比較的シンプルな理論によって得られた方程式を用意する事で説明できた。そこで、論文を出版していたが、現在広い溶質重さ、溶質サイズの依存性を調べている。

[7] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究

(須田、秋山)

3次元2成分剛体球系の相転移の研究は盛んに行われて来ていた。しかし、2次元のケースは実在系との関連がはっきりしていなかったためか、あまり研究されて来ていなかった。そこで、相図を計算し実在系との関連をつけることを開始した。幸い、実在系が見つかり、論文を投稿中である。(2021年度に出版。)

以上の研究活動の到達度は前期の活動にストップがかかったため遅れが出た。とはいえ、出版物のタイトルが活動状況を示しているので、資料としての意味からここでは2020年の出版物のみを記載する。(2020年度でも2021年のものは記載しない。)

論文：

[1] Y. Tamura, A. Yoshimori, A. Suematsu, and R. Akiyama

Reentrant crystallization of like-charged colloidal particles in an electrolyte solution: Relationship between the shape of the phase diagram and the effective potential of colloidal particles EPL (Europhysics Letters), 129, 66001-1-7 (2020). (上記[2]に関連。)

Commentaries :

[1] Ryo Akiyama, Masahiko Annaka, Daisuke Kohda, Hiroyuki Kubota, Yusuke Maeda, Nobuaki Matsumori, Daisuke Mizuno, and Norio Yoshida

Biophysics at Kyushu University

Biophysical Reviews, 12, 245–247 (2020).

教科書：

[1] 秋山良 安池智一

エントロピーからはじめる熱力学(20)(放送大学教材)

放送大学教育振興会発行 (2020年3月)

また、液体論研究の場を作るという観点では、研究室の公開セミナーに加えて、秋山が岡山大の甲賀研一郎氏と共に液体論のシンポジウム “Mini-Symposium on Liquids” を毎年主催し、継続的や活動を行なっている。第14回目を、2020年6月に開催予定であったが、中止し、翌年に繰り越した。

学会発表はコロナ禍で低調な中、生物物理学会年会の全体講演で講演を行うなどリモートながら数件行うことができた。

研究分野

化学物理、生物物理、溶液化学、物理化学

研究課題

液体論、蛋白質溶液の相挙動

生体分子や表面での吸着、分子認識、安定性

非平衡状態からの緩和と仕事

ATPのエネルギー論

アクティヴマター