

教育・研究活動 年次報告書

2022 年度

九州大学大学院理学研究院
化学部門

2023 年 12 月

目 次

はじめに

1. 2022 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 2022 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 2022 年度関係行事一覧

(1) 講演会

(2) 談話会・報告会

(3) 2022 年度 FD・HD

(4) 修士課程論文公開講演会

(5) 学士課程卒業研究業績報告会

2. 2022 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

動的生命化学分野

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 2022 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の形をとっております。化学部門の教員の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

<https://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/organization/03070200/index.html>

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/organisations/department-of-chemistry-2>

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。2022 年度は 17 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 名が着任、助教 1 名が昇進し、助教 1 名が転出、年度末に教授 1 名と准教授 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」、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コース」、ならびに九州大学次世代研究者挑戦的研究プログラム「未来創造コース」との連携の下、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。

2022 年度は、新型コロナウイルスの感染が収束傾向になり、教育研究活動の制限が少しずつ解除されていきました。部門内会議は引き続きオンラインで開催しましたが、研究活動に関しては、セミナーは研究室の状況に応じて対面開催が増え、実験は十分な感染予防対策を取った上で、全学の行動指針に従った上で、徐々にコロナ前の活動状況に戻っていきました。講義については対面開催が増え、状況に応じてオンラインが併用されました。大学院入試は昨年度の経験を活かして、十分な対策を講じた結果、自己推薦入試、一般入試とも対面で無事実施ことができました。

現場においては、オンラインの活用により、作業の効率化、時間の有効利用

はより進みました。講義においても、オンライン教材がより充実し、対面講義にオンライン講義の良い所を取り込むことで、より学べる環境を提供できました。一方で、オンライン慣れした学生において、学習意欲・学力・行動力・コミュニケーション力の差がより大きくなった印象もあります。化学という学問では、実際に化合物を合成し、それらを用いて各種測定を行う実践教育により見て触って、知覚とともに感覚で学ぶことも大切です。今後は、教員と学生が交流する機会や、学生の学習意欲向上のための企画を増やしていく予定です。

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。

2023年12月

2023年度 化学部門長 大場正昭

1. 2022年度における化学専攻の活動

1.1 教員名簿 (2022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)
堀雄一郎(複合領域化学)	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)
川井隆之(無機・分析化学)	宇都宮聡(無機・分析化学)	榎 靖幸(物理化学)
堀尾琢哉(物理化学)	大橋和彦(物理化学)	谷 元洋(有機・生物化学)
松島綾美(有機・生物化学)	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)	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)
鳥飼浩平(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)	桶谷亮介(物理化学)	宮田 暖(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)	鈴木 聡(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) 山内美穂(ナノ機能化学)

准教授

有馬祐介(ナノ物性化学) 谷 文都(構造有機化学)

助教

金川慎治(光機能物質化学) 呉 樹旗(光機能物質化学)

堂ノ下将希(ナノ機能化学) 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)

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

- '22.4.1 動的生命化学 堀 雄一郎 教授 採用 (大阪大学より)
- '22.12.16 分光分析化学 宮田 潔志 准教授 昇任
- '22.12.31 錯体化学 高橋 和宏 准教授 定年退職 (早期退職)
- '22.3.31 生体情報化学 久下 理 教授 定年退職
- '22.3.31 生体情報化学 宮田 暖 助教 転出 (国立感染症研究所)

1.3 非常勤講師

- | | | |
|-------|------|-------------------|
| 大貫 敏彦 | 名誉教授 | 東京工業大学 |
| 大木 靖弘 | 教授 | 京都大学化学研究所 |
| 松本 正和 | 准教授 | 岡山大学理学部 |
| 天尾 豊 | 教授 | 大阪公立大学人工光合成研究センター |
| 竹内 佐年 | 教授 | 兵庫県立大学大学院理学研究科 |
| 澤村 正也 | 教授 | 北海道大学理学研究院化学部門 |
| 丸山 厚 | 教授 | 東京工業大学生命理工学院 |

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

(2022年5月1日現在)

博士課程

1年生 (D1)

Yan Xin

管 昌権

廖 晨

森藤 将之

WANGAMNUAYPORN SUPAKORN

笠 僚宏

胡 祖亮

辻 真樹

岩下 智哉

鄭 文偉

水 棋銳

2年生 (D2)

宮崎 栞*

飯田 岳史*

許 柯

張 奥

松尾 美香

徐 文煌

植松 尊

ZHANG XIAOPENG

JI TIANCHI

Nada Besisa

Sun Mingxu

3年生 (D3)

坂口 雄人

多伊良 夏樹*

柳澤 純一

西郷 将生*

河野 聖*

梅野 圭太郎*

藤木 涼

金丸 恒大

岡本 大介

黄 啓安

邱 逸飛

橋口 雄太

篠崎 貴旭

斉 維昕

WON SUNGYOUNG

竹田 宙加

須田 慶樹*

松田 倫太郎

程 豊

土居内 大樹

*...日本学術振興会特別研究員

修士課程

1年生 (M1)

末吉 史佳
中島 直人
富田 侑樹
諏訪 靖拓
合屋 祐輝
LEE DONG-SEB
常盤 美怜
南 良友
辻岡 利菜
米野 斐
茂谷 尚貴
今村 祐輝
田栗 萌々
三木 太陽
武田 拓人
久保田 颯
石岡 沙耶果
藤村 泰地
今田 皇緑
黄 李伯爵
小柳 裕聖
本田 瑛之
木村 周慈
五反田 基彰
堀部 紗代
蓑毛 健太

山崎 涼平
豊田 彩人
岩間 拓樹
久保田 樹
松本 一陽
徳永 紗友稀
吉村 美波
田中 京介
大淵 美亜
安野 海輝
金城 海里
山縣 里美
川口 貴大
松崎 桃子
河村 正
谷口 大真
齊藤 竜馬
忍田 渉太郎
布施 賢志朗
伊藤 琴音
白根 共太
阪本 将裕
北川 将大
都々木 一平
市川 聖人
高城 悠太

春口 一騎
福重 智基
深江 友博
向野 友稀
沈 思婷
新垣 怜央
小柳 惇平
赤坂 龍矢
寺戸 美樹
小副川 智哉
Bucmys Eimantas
Baliunaite Ema
チヨ 京
平川 朱里
潘 雲逸
藤 莉莉
青山 大樹
立岡 千恵
山中 美佳
大田 舜
宗 玲那
長田 晃彦
田中 健祥
田島 春瑠乃
河中 大哉

2年生 (M2)

前田 晃志	西里 将	梅田 泰樹
Zhao Rui	橋本 治暉	山口 康誠
大原 朋	吉岡 拓哉	佐藤 洸太郎
木下 宏子	吉原 玲未子	阿部 玲子
北野 仁悟	福田 しづか	平井 千晶
岩井 優大	中島 未由	大野 友輔
藤本 志己	原田 季貴	田中 悠太
寺西 勇登	河野 裕史	前田 朱里
本田 めぐみ	柳瀬 由起美	角 幸樹
前田 万優	原田 陽光	HUANG YUBO
辻村 晃也	山下 祐輝	鮫島 徹真
中山 憲太朗	鈴木 悠平	黒田 元豊
江原 巧	是枝 龍聖	中村 倫太郎
笛田 和希	金子 昌央	堀切 奈々
Winarni Ilma Dwi	細瀬 摩利	松島 彩夏
羽座 寛登	石橋 知佳	田中 尚輝
遠藤 周	城下 景亮	吉田 耕平
高田 真子	西村 拡	安藤 拓海
大原 志織	大内田 希奈	野網 悠一郎
中村 直希	白倉 那桜	下田 菜々子
今吉 隆昭	山内 崇弘	松藤 大士
河村 駿	松川 一聖	

研究生

周 堯
宋 衍慶

学振 (PD) 研究員等

稲田 壮峰

1.5 2022 年度に授与した大学院学位

課程博士 (理学)

- 藤木 涼 Development of theoretical methods for describing the protonation states of solvated molecules based on the integral equation theory of liquids
(液体の積分方程式理論に基づく溶媒和分子のプロトン化状態の理論的記述手法の開発)
- 程 豊 Mononuclear Valence Tautomeric Cobalt Complexes Bearing Enantiopure Ligands for Polar Space Groups and Helical Morphology
(エナンチオピュア配位子を有するコバルト原子価異性錯体の極性構造とヘリカル形態)
- 篠崎 貴旭 Desulfurization from Liquid Fuels by Decomposition of Aromatic Sulfur Compounds under Ultraviolet Irradiation
(紫外線照射下での芳香族硫黄化合物の分解による液体燃料からの脱硫)
- 黄 啓安 Investigation of Soft Lewis Acid Function in Supported Noble Metal Nano-catalysts for Sustainable Synthesis
(担持貴金属触媒におけるソフトルイス酸機能の解明と持続可能な合成への応用)
- 金丸 恒大 Development of relativistic electronic structure theory for solvated molecules based on the integral equation theory of molecular liquid
(分子性液体の積分方程式理論に基づく溶液内分子の相対論的電子状態理論の開発)
- 多伊良 夏樹 Studies on Mechanism and Control of O-O Coupling in Water Oxidation Catalyzed by Cobalt Polymolybdates
(コバルトポリモリブデン酸を触媒とした酸素発生反応に

における O-O 結合形成機構の解明と制御に関する研究)

- 須田 慶樹 **Theoretical Study on Two-dimensional Crystallization of Bacteriorhodopsins Driven by Lateral Depletion Effects**
(枯渇効果によるバクテリオロドプシン 2次元結晶形成の理論研究による検討)
- 橋口 雄太 **Study on Flow Synthesis Process for Core-Shell Nanoparticle Catalysts**
(コアシェル型ナノ粒子触媒のフロー合成法に関する研究)
- 邱 逸飛 **Oxidation reactions with inorganic materials: synthesis of methacrylic acid by supported gold catalysts and formation of vinylene carbonate by cathode active materials of lithium-ion batteries**
(無機材料による酸化反応：担持金触媒によるメタクリル酸の合成およびリチウムイオン電池の正極活物質による炭酸ビニレンの生成)
- 柳澤 純一 **Studies on functional development of polar crystals based on asymmetric metal complex**
(非対称金属錯体を基盤とする極性結晶の合成と機能開発)
- 坂口 雄人 **Controlling the Reactivity and Selectivity of Transition Metal Molecular CO₂ Reduction Catalysts by Frontier MO Engineering**
(フロンティア軌道工学による分子性 CO₂還元触媒の活性制御機構の開発)
- 土居内 大樹 **Study on Ru(bpga)-Catalyzed Practical C-H Oxidation - Using Water as an Oxygen Source and Acid-Cooperative Oxygen Atom Transfer -**
(Ru(bpga)触媒を用いた実用的 C-H 酸化に関する研究-水の酸素源利用と酸協働作用を用いた酸素原子移動反応-)

西郷 将生 Studies on the Structural Dynamics of Thermally Activated Delayed Fluorescence Molecules Using Time-Resolved Infrared Spectroscopy
(時間分解赤外分光を用いた熱活性化遅延蛍光分子の構造ダイナミクスの研究)

松田 倫太郎 A Study on Single Nanoparticle Analysis using Plasmonic Nanopore Structure
(プラズモニクナノポア構造を用いた1粒子解析法に関する研究)

梅野 圭太郎 Synthetic Study of the WXYZA'B'C'D'E'F' Ring Segment of Maitotoxin
(マイトトキシンのWXYZA' B' C' D' E' F' 環部の合成研究)

藤井 悟 Regulation of phosphatidylserine decarboxylase abundance in the ER and mitochondria
(小胞体とミトコンドリアにおけるホスファチジルセリン脱炭酸酵素量の調節)

課程修士 (理学)

Ilma Dwi Winarni Strontium Adsorption to Denitrifying Bacteria in Nitrate- and Calcium-rich Solution

Yubo Huang Optically Rewritable Polarization States in Cyanide-Bridged Molecular Crystals

橋本 治暉 Photoelectron imaging of Ag_nM^- (M = Sc, Ti): Exploring geometric structures and delocalization of valence electrons
(Ag_nM^- (M = Sc, Ti)の光電子イメージング: 幾何構造の決定及び価電子非局在性の探求)

- 城下 景亮 Theoretical study of the electronic structure change of ligand molecules associated with molecular recognition using QM/MM/3D-RISM
(QM/MM/3D-RISM を用いた分子認識に伴うリガンド分子の電子状態変化に関する理論的研究)
- 阿部 玲子 DNA analysis using acute angle plasmonic nanostructures
(鋭角プラズモニクナノ構造を用いた DNA 解析)
- 西里 将 Visualization and theoretical investigation of superatomic orbitals formed in silver and 3d transition-metal-doped silver cluster anions
(銀および 3d 遷移金属添加銀クラスター負イオンに形成される超原子軌道の可視化と理論検証)
- Zhao Rui Synthesis, characterization, and electrochemical properties of rhodium dithiolene hydrogen evolution catalysts
- 岩井 優大 Synthesis and characterization of a new metal cyanide $\text{NiPd}(\text{CN})_4$ with dynamic four-coordinate Ni centers
(動的な四配位 Ni 中心を有する金属シアニド $\text{NiPd}(\text{CN})_4$ の合成と物性)
- 角 幸樹 Development of a Neutral Spin-Transition Complex Exhibiting Thermally- and Photo-induced Proton Transfer
(熱-光誘起プロトン移動を示す中性スピン転移錯体の開発)
- 大原 朋 Property Investigation and Development of a Purification Procedure for Water-soluble Metal-Organic Polyhedra
(水溶性金属-有機多面体の特性と精製法の開発)

- 遠藤 周 **Critical Dynamics of the Sol-Gel Transition Studied by Particle Tracking Microrheology**
(粒子追跡マイクロレオロジーによるゾル-ゲル転移の臨界ダイナミクス)
- 佐藤 洸太郎 **Brownian Dynamics Simulations for Structural Stability and Disappearance of Point Defects in a Crystal of Patchy Colloids**
(ブラウン動力学シミュレーションを用いたパッチコロイド結晶の構造安定性と格子欠陥解消方法の検討)
- 松島 彩夏 **Domain Morphology and Line Tension in Multi-component Vesicles Containing Hybrid Phospholipid**
(ハイブリッドリン脂質を含む多成分ベシクルでのドメイン形態と線張力)
- 大原 志織 **The Effect of Sucrose on the Structure and Mechanical Properties of Agarose Gel**
(アガロースゲルの構造と力学物性に対するスクロースの影響)
- 江原 巧 **Studies on Photofunctions and Electronic and Structural Dynamics in Al (III) and Cu(I) Complexes**
(Al(III)錯体および Cu(I)錯体における電子・構造ダイナミクスと光機能の研究)
- 河村 駿 **Photoabsorption processes of size-selected silver cluster anions: Exploration of bound excited states embedded in a continuum state**
(サイズ選別銀クラスター負イオンの光吸収過程：連続状態に埋もれた束縛励起状態の探究)
- 西村 拓 **Implementation of approximation method of GMC-QDPT and examination of new approximation formulas**
(多参照摂動法 GMC-QDPT の近似手法の高速化と新たな近似式の検討)

- 山口 康誠 **Theoretical Analyses of Selective Absorption of Longer Alkane from Alkane-Mixture into Tubes**
(長鎖アルカンのアルカン混合溶液からチューブへの選択的吸蔵現象の理論的解析)
- 羽座 寛登 **Mechanical and Microstructural Changes of Tetronic Hydrogel During Dehydration**
(Tetronic ハイドロゲルの乾燥過程における力学物性および微視的構造の変化)
- 前田 晃志 **Studies on Consecutive Multi-electron Reductions of CO₂ Catalyzed by Co-NHC Complexes**
(Co-NHC 錯体を触媒とする二酸化炭素逐次多電子還元反応に関する研究)
- 北野 仁悟 **Luminescence Control of Nobel Cd(II)M(II) (M = Pt, Pd) Coordination Polymers Including M(II)-M(II) Linear Chains**
(M(II)-M(II) 直鎖を含む新規 Cd(II)M(II) (M = Pt, Pd) 配位高分子の発光制御)
- 鮫島 徹真 **Electrochemical synthesis of alanine using a Rh hydride complex with a chiral ligand**
(不斉配位子を有する Rh ヒドリド錯体を用いた電気化学的アラニン合成)
- 木下 宏子 **Synthesis and physical properties of a polar ion conductor Li₂MnN(CN)₄·3H₂O**
(極性イオン伝導体 Li₂MnN(CN)₄·3H₂O の合成と機能特性)
- 吉岡 拓哉 **Freezing processes of droplets of polyol aqueous solutions in a vacuum:
Freezing-time measurement and MD simulation**

(ポリオール添加水液滴の真空中での凍結過程：凍結時間の測定と分子動力学シミュレーションによる解析)

- 中村 直希 Particle Tracking Microrheology of Gelatin during the Sol-Gel Transition
(ゼラチンのゾル-ゲル転移における粒子追跡マイクロレオロジー)
- 大野 友輔 Intermembrane interaction studied using model cell membrane
(モデル細胞膜を用いた細胞膜間相互作用の解析)
- 堀切 奈々 Effects of Added Salt on Self-assembly in Mixed Short-chain Phospholipids Systems
(短鎖リン脂質混合系の自己集合に及ぼす添加塩の効果)
- 高田 真子 Elucidating the Mechanism of Multi-step Upconversion from Near-infrared to Blue Light in Rare Earth Nanoparticles
(近赤外光を青色光に変換する希土類ナノ粒子の多段階アップコンバージョン機構解明)
- 藤本 志己 Magnetic Behavior of Alkane and Alkene Clathrates with Hofmann-type Fe(II)Pt(II) Coordination Polymer
(Hofmann 型 Fe(II)Pt(II)配位高分子を用いたアルカンおよびアルケン包接体の磁気挙動)
- 笛田 和希 Distribution and Dynamics of Cs-rich Microparticles released from Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant in 2011
(2011年の土壌試料分析に基づく福島第一原発由来高濃度 Cs 含有微粒子の分布と動態)
- 黒田 元豊 Synthesis and CO₂ reduction performance of Cu/Ag core-shell nanocubes
(Cu/Ag コア・シェルナノキューブの合成と二酸化炭素還

元特性)

- 寺西 勇登 **Synthesis of ionic liquid metal complexes consisting of tetracyanonickelate**
(テトラシアノニッケル錯体を用いた金属錯体イオン液体の合成)
- 山下 祐輝 **Synthetic Study of the C22-C67 and 51-*epi*-C21-C67 Section of Amphidinol 3**
(アンフィジノール3のC22-C67部分および51-*epi*-C21-C67部分の合成研究)
- 白倉 那桜 **Alkoxy carbonylation of Alkenes Using Homogeneous and Heterogeneous Palladium Catalysts**
(均一系及び不均一系パラジウム触媒によるアルケン類のアルコキシカルボニル化)
- 梅田 泰樹 **On the Origin of Conformational Preference of Substituted Cyclohexanes**
(置換シクロヘキサンにおける配座異性体の優位性の起源について)
- 原田 陽光 **Synthetic Study of the STU Ring of Maitotoxin**
(マイトトキシンのSTU環部の合成研究)
- 中島 未由 **Regulation of mitochondrial function and cell fate through phospholipid metabolism in *Saccharomyces cerevisiae***
(出芽酵母におけるリン脂質代謝を介したミトコンドリア機能と細胞運命の制御)
- 前田 万優 **Low-flux electron diffraction discloses chain packing structures inside ordered domains formed in lipid bilayers**
(低流量電子線散乱を用いた脂質二重層膜に形成されるラフト様秩序相内部の構造解析)

- 細瀬 摩利 **The effects of bisphenol C feeding on mouse behavior and fetal gene expression**
(ビスフェノール C 食餌マウスの行動変化と胎仔の遺伝子発現への影響)
- 吉田 耕平 **Efficient Preparation of Thermoresponsive Elastin-Like Peptides by Liquid-Phase Synthesis Using Hydrophobic Benzyl Alcohol Supports**
(疎水性ベンジルアルコール担体を用いた液相合成法による温度応答性エラスチン様ペプチドの効率的な調製)
- 中村 倫太郎 **Synthesis and Properties of a Phthalocyanine Fused with a Helicene of 1,1'-Biazulene Skeleton**
(1,1'-ビアズレンで構成されるヘリセンが縮環したフタロシアニンの合成と性質)
- 是枝 龍聖 **Synthetic Study of Naturido**
(ナトリードの合成研究)
- 松川 一聖 **Adsorption mechanism of sulfur compounds onto silica-supported noble metal nanoparticles**
(シリカ担持貴金属ナノ粒子上への各種硫黄化合物の吸着メカニズム)
- 野網 悠一郎 **Study on Carbon-Chain Elongation in Ruthenium-Catalyzed Asymmetric Sigmatropic Rearrangement**
((OC) ルテニウム-サレン触媒を用いた不斉シグマトロピー転位における炭素鎖伸長反応に関する研究)
- 吉原 玲未子 **Por1 function in regulation of phosphatidylethanolamine synthesis in mitochondria**
(ミトコンドリア内ホスファチジルエタノールアミン合成制御に関する Por1 の機能解析)

- 辻村 晃也 Apoptotic activity of ceramide derivatives and its molecular mechanism
(セラミド誘導体のアポトーシス活性とその分子機構の研究)
- 安藤 拓海 Development of toxic metal scavengers by short-chain elastin-like peptides (FPGV)₄ conjugated with metal-binding peptide sequences
(金属結合性ペプチド配列を付加した短鎖エラスチン様ペプチド(FPGV)₄を用いた有害金属回収担体の開発)
- 福田 しづか Impaired biosynthesis of ergosterol confers resistance to complex sphingolipid biosynthesis inhibitor in *PDR16*-dependent manner
(エルゴステロール生合成系の損傷は、*PDR16*を介して複合スフィンゴ脂質生合成阻害剤に対する抵抗性を酵母に付与する)
- 平井 千晶 Cell-type dependence in nucleic acid modification on cell surface
(細胞表面の核酸修飾における細胞種依存性)
- 鈴木 悠平 Synthetic Study of the BCDEF Ring of Maitotoxin
(マイトトキシンの BCDEF 環部の合成研究)
- 山内 崇弘 Photo-oxidation of dibenzothiophene using metal oxide-supported catalysts for desulfurization of liquid fuels
(担持金属触媒を用いたジベンゾチオフェンの光酸化反応による液体燃料からの脱硫)
- 下田 菜々子 Mechanistic Studies of Carboxylic Acid-Cooperative Non-Heme-Type Ruthenium(bpga)-catalyzed C-H Oxidation
(非へム型ルテニウム(bpga)錯体が触媒する C-H 酸化反応におけるカルボン酸協働作用に関する機構的研究)

- 河野 裕史 Phenotypic analysis of budding yeast that sphingolipid and sterol structures are replaced with the mammalian types
(スフィンゴ脂質、ステロールの構造を哺乳動物型に置換した出芽酵母の表現型解析)
- 中山 憲太朗 Formation of protein-lipid-cation triple complex in the light-driven proton pump bacteriorhodopsin
(バクテリオロドプシンにおけるタンパク質-脂質-カチオン三者複合体形成)
- 石橋 知佳 Study of a nucleotide repeat sequence in genome acting as a novel estrogen-responsive element
(新規エストロゲン応答配列として機能するゲノム上の反復塩基配列の研究)
- 原田 季貴 Regulation of phosphatidylethanolamine synthesis in mitochondria through the cellular energy sensor, Snf1/AMPK
(細胞内エネルギーセンサーSnf1/AMPK を介したミトコンドリアホスファチジルエタノールアミンの合成制御)
- 田中 尚輝 Design, Synthesis, and Characterization of Branched Elastin-Like Peptides Composed of Short (FPGVG)_n Sequences
(短鎖(FPGVG)_n 配列から成る分岐エラスチン様ペプチドの設計、合成、特性評価)
- 松藤 大士 Study on Non-Heme-Type Ruthenium(bpga) complexes-Catalyzed C-H Oxidation of Nitrogen-containing Compounds
(非ヘム型ルテニウム (bpga) 錯体を触媒に用いた含窒素有機化合物の C-H 酸化反応の研究)

金子 昌央

Synthetic Study of the MN Ring of Caribbean
Ciguatoxin C-CTX-1 via Desymmetrization by Acetal
Formation

(アセタール生成による非対称化を経由したカリビアンシ
ガトキシン C-CTX-1 の MN 環部の合成研究)

1.6 2022年度関係行事一覧

(1) 講演会

- [1] 講演者 山下 正廣 名誉教授 (東北大学)
演 題 量子コンピューターを指向した分子スピンキュービットと超高密度磁気デバイス
開催日 2022年5月12日
世話人 大場 正昭
- [2] 講演者 Prof. Kell Mortensen (Niels Bohr Institute, Copenhagen University)
演 題 Structural Study of Four-Armed Amphiphilic Star-Block Copolymers: Pristine and End-Linked Tetronic T1307
開催日 2022年6月17日
世話人 安中 雅彦
- [3] 講演者 大貫 敏彦 名誉教授 (東京工業大学)
演 題 環境放射性核種微生物化学
開催日 2022年7月7日
世話人 宇都宮 聡
- [4] 講演者 高橋 康史 教授 (名古屋大学大学院工学研究科)
演 題 走査型プローブ顕微鏡による超解像度ライブセルイメージング
開催日 2022年7月7日
世話人 川井 隆之
- [5] 講演者 Roland A. Fisher 教授 (Technical University Munich, Germany)
演 題 Integration of Photophysical and Photochemical Properties to MOFs.
開催日 2022年9月29日
世話人 大場 正昭
- [6] 講演者 大木 靖弘 教授 (京都大学化学研究所)
演 題 酵素を模倣する金属-硫黄クラスター錯体の反応機能開拓
開催日 2022年10月21日
世話人 大場 正昭

- [7] 講演者 松本 正和 准教授 (岡山大学理学部)
演 題 氷の超均質性について
開催日 2022年11月1日
世話人 秋山 良
- [8] 講演者 天尾 豊 教授 (大阪公立大学人工光合成研究センター)
演 題 光触媒色素・生体触媒複合系による二酸化炭素の有機分子への固定化
開催日 2022年11月17日
世話人 佐藤 治
- [9] 講演者 竹内 佐年 教授 (兵庫県立大学大学院理学研究科)
演 題 針でなぞり、光でさぐる単一分子の構造と振舞い
開催日 2022年12月1日
世話人 堀尾 琢哉
- [10] 講演者 澤村 正也 教授 (北海道大学理学研究院化学部門)
演 題 不斉触媒反応における分子間力のシナジー効果
開催日 2022年12月16日
世話人 桑野 良一
- [11] 講演者 丸山 厚 教授 (東京工業大学生命理工学院)
演 題 合成ポリマーを用いた生体高分子操作
開催日 2022年12月20日
世話人 安中 雅彦
- [12] 講演者 鈴木 芳治 主幹研究員 (物質・材料研究機構)
演 題 水のポリアモルフィズムから見た水溶液の溶媒状態
開催日 2023年3月27日
世話人 秋山 良

(2) 談話会・報告会

前期特別談話会

開催日：2022年8月10日(水) オンライン開催

錯体分子の異方的集積による極性結晶の合成

錯体物性化学 柳澤純一

一兆分の一秒の光で化学反応の瞬間を見る

分光分析化学 恩田健

脂質ベシクルの不均一性と形態変化

ソフト界面化学 瀧上隆智

砂糖入りゼリーと高分子物理化学

分散系物理化学 槇靖幸

合成分子とタンパク質を駆使した生体分子イメージング

動的生命化学 堀雄一郎

生体膜脂質の構造多様性の意義を探る

生体情報化学 谷元洋

高校でもエントロピー

量子生物化学 秋山良

Benzylic Substitution of (Difluoromethyl)arenes Based on C-F Activation

分子触媒化学 斉維昕

ナノ界面での光と物質科学

ナノ物性化学 梶野祐人

身の回りの放射性核種をトレーサとして利用した環境動態研究

環境動態化学 杉原真司

福島未来について

無機反応化学 宇都宮聡

体で働くアミノ酸、ペプチド、タンパク質

構造機能生化学 松島綾美

人工光合成の実現に導く金属錯体触媒の開発

錯体化学 國久保透真 浦陸人 河村佳央理 池田達紀

生体膜の統合分析を目指して

生体分析化学 猪狩世玲菜 清水浩太郎 西村あおい 山根晃輝

なんか小さくてかわいい微粒子「金属クラスター」

量子化学 橋本治暉 河村駿 西里将 飯田岳史 松本一陽 吉岡拓哉

分子からの手紙 ～光による生体組織の分子イメージング～

光物理化学 大淵美亜 田中京介 徳永紗友稀 吉村美波

知ろう!まねしよう!生体分子!

生体分子化学 宗玲那 長田晃彦

触媒で築く持続的有機合成反応

有機反応化学 田島春瑠乃 田中健祥 内田竜也

コンピューターでわかる化学の世界

理論化学 北川将大 阪本将裕

有機π電子化合物の魅力

構造有機化学 谷文都

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 植松尊 角幸樹

環境ナノ物質科学

無機反応化学 笛田和希 蓑毛健太 三好健太 北原充喜 Ilma Dwi Winarn

金属錯体を利用した機能空間の構築

錯体物性化学 金崎隆心 下川真依 末田悠太 山本直也

超高速レーザー分光で探る一兆分の一秒の世界

分光分析化学 西郷将生 宮崎栞 笠僚宏 江原巧 木村周慈
五反田基彰 小柳裕聖 堀部紗代 本田瑛之

光で探る分子の構造と性質

構造化学 安野海輝 金城海里 千蔵康太郎

KAIMEN×FAMILY 【MISSION: γ 】 線張力の謎を解明せよ

ソフト界面化学 立岡千恵

やわらかい物質 ソフトマテリアルの世界

分散系物理化学 今吉隆昭 遠藤周 大原志織 中村直希
羽座寛登 岩間拓樹 豊田彩人 山崎涼平

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

合成分子とタンパク質を駆使した生体分子イメージング

動的生命化学 堀雄一郎

有害環境化学物質の核内受容体を介したシグナル毒性

構造機能生化学 伊藤琴音 白根共太 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 川口貴大 松崎桃子 山縣里美

今年もやるってよシヨクバイ娘アクティビティダービー

触媒有機化学 市川聖人 高城悠太 春口一騎
福重智基 深江友博 向野友稀

分子触媒化学研究室ご案内

分子触媒化学 I Sungyong Won 張奥

1,3-ジアキシャル相互作用の再考

分子触媒化学 II 梅田泰樹 末永正彦

引き合うマイナスイオンの不思議

量子生物化学 竹田宙加 佐藤洸太郎 片平凌士 新垣怜央 小柳惇平
山口康誠 岩下智哉 松尾美香 須田慶樹 秋山良

ナノの世界へようこそ!

ナノ物性化学 赤坂龍矢 寺戸美樹 小副川智哉

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 河中大哉 中川舞穂

持続可能な社会を目指した無機ナノ材料の創製

ナノ機能化学 鮫島徹真 黒田元豊 Han Unitsu 平川朱里

後期特別談話会

開催日：2022年12月10日（土）

会場：九州大学理学部大会議室（W1-C-408）、エントランスホール

水分解反応を促進する金属錯体触媒の創製と制御

錯体化学 山内幸正

超高感度・網羅的バイオ分析技術の開発と医療・創薬応用

生体分析化学 川井隆之

紫外吸収スペクトルと溶媒効果

構造化学 大橋和彦

金属クラスター中の電子の振る舞いを“可視化”する

量子化学 堀尾琢哉

分子の指紋で脳組織を可視化する

～非線形ラマン分光学的イメージング～

光物理化学 加納英明

有機合成化学を基盤とした天然物研究

生物有機化学 梅野圭太郎

温度依存的な可逆自己集合を示す短鎖ペプチドの構造要因の解析と応用

生体分子化学 巢山慶太郎

究極の酸化を目指して：金属の力を引き出す触媒設計

有機反応化学 内田竜也

大環状分子の包接による pKa シフトの QM/MM/3D-RISM 解析

理論化学 城下景亮

徳永研で触媒開発しよう！

Case 1: 廃プラスチックから有機物を再生

触媒有機化学 白倉那桜

多重エマルションの形成と性質

構造有機化学 五島健太

無機ナノ物質の創製と触媒反応への展開 ～ものづくりから生まれる新しい触媒～

ナノ機能化学 小林浩和

Polarization Switching via Electron Delocalized/localized Transition in a Mixed Valence Trinuclear Iron Complex

光機能物質化学 Xu Wenhua

金属錯体を用いた人工光合成システムの構築

錯体化学 池田達紀 浦陸人 國久保透真 河村佳央理

地球生命圏環境科学

無機反応化学 笛田和希 蓑毛健太 三好健太 北原充喜

金属錯体を用いた機能空間の構築

錯体物性化学 金崎隆心 下川真依 山本直也

生体膜の統合分析を目指して

生体分析化学 猪狩世玲菜 西村あおい 山根晃輝

超高速レーザー分光で探る一兆分の一秒の世界

分光分析化学 木村周慈 五反田基彰 小柳裕聖 堀部紗代 本田瑛之

光で探る分子の構造と性質

構造化学 安野海輝 金城海里 千蔵康太郎

なんか小さくてかわいい金属クラスター ～「超原子」…ってコト!?!～

量子化学 青沼優奈 鈴木悠太 能見倫 平川未歩 松本一陽 橋本治暉 西里将

あつまれ かいめんの森 ～線張力ってご存じだなも?～

ソフト界面化学 立岡千恵 山中美佳 大田舜

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 今吉隆昭 遠藤周 大原志織 中村直希
羽座寛登 岩間拓樹 豊田彩人 山崎涼平

分子からの手紙～光による生体組織の分子イメージング～

光物理化学 小田淳生 坂本涼 矢ヶ部未歩

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 忍田渉太郎 河村正 齊藤竜馬 谷口大真 布施賢志朗

合成蛍光分子とタグタンパク質を用いた生体分子の細胞内動態の解明

動的生命化学 太田航司郎 御手洗拓真

核内受容体を介して、有害環境化学物質が誘起するシグナル毒性

構造機能生化学 荒巻光汰 中村圭太 伊藤琴音 白根共太

細胞を舞台に活躍する分子たち

生体情報化学 川口貴大 松崎桃子 山縣里美

アミノ酸から温度応答性分子を作ろう ～温度応答性の獲得へ向けて～

生体分子化学 草場智 多田隈歩実

「触媒×酸」で切り拓く新しい酸化

有機反応化学 土居内大樹 下田菜々子

理論と計算と化学

理論化学 麻生あいか 黒木博由 照本彩香

SHOKUBAI×FAMILY 「アニーヤ、アルコールが好き」

触媒有機化学 石井健 北康平 佐藤一斗 山本向洋

CatFinder®

分子触媒化学 I Won Sungyong, Qi Weixin, Zhang Ao

1,3-ジアキシャル相互作用の再考

分子触媒化学 II 梅田泰樹

エントロピー駆動で分離する:特別な直接引力相互作用は必ずしも必要ない

量子生物化学 山口康誠 新垣怜央 小柳淳平 片平凌士

有機 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 中村倫太郎 藤莉莉 青山大樹

ナノの世界へようこそ!

ナノ物性化学 星野秀太郎

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 河中大哉 中川舞穂

持続可能な社会を目指した無機ナノ材料の創製

ナノ機能化学 平川朱里 鮫島徹真 黒田元豊 Han Unitsu

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 植松尊 池田泰輔

(3) 2021年度FD・HD

(ファディカルディベロップメント・ヒューマンディベロップメント) 講演会

開催日 : 2022年7月11日(月) オンライン

講演タイトル: 「電子ジャーナルをとりまく環境について理解を深める」

講演者 : 九州大学附属図書館 e リソース課

e リソース管理係 堀課長, 松石係長

(4) 2022 年度修士課程論文公開講演会

開催日：2023 年 2 月 16 日(木)・17 日(金)

会場：講義棟 301 号室・ウエスト 1 号館 B314 号室

(5) 2022 年度学士課程卒業研究業績報告会

開催日：2023 年 3 月 1 日(水)・3 月 2 日(木)

会場：理学部 大会議室

2. 2022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(4名)、研究生(1名)、修士1年生(7名)、修士2年生(2名)、博士課程1年(2名)、博士課程2年(1名)、博士課程3年(2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大事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)

学部4年生は卒業研究を通じて自律的な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、近い将来社会人として自立する素養の育成が目標。大学院学生は、習得した専門知識と技術・思考法を基盤とする新規課題の探索・企画・実行力と専門外の仕事にも対応可能な広い視野と一般常識を持ち、社会に貢献できる資質を備えた人材へと成長させることが目標。本年度は配属学生なし。

(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、2022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。主な研究課題は新規サンドイッチ型二核希土類錯体の選択的合成と特性解明。本年度は無置換 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)錯体の合成研究を継続。

(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)周りの構造変化について研究を行っている。また ESR を用いた材料物性評価に関する検討も行っている。

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

本研究室では、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。

研究室開設 12 年目となる本年度は、コロナとの共存が進み、オンラインを活用しつつ、十分な感染予防対策を講じて対面での指導機会を増やし、一定水準の成果は得られた。

本年度は学部 4 年生 4 名、修士学生 11 名、博士学生 1 名の合計 16 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。本研究室の研究分野は、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 8 件の口頭発表と 20 件のポスター発表を行った。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、博士課程 3 年の学生が「Bias modulative proton conductivity in a polar crystal of $K_2MnN(CN)_4 \cdot H_2O$ 」の口頭発表で、錯体化学会第 72 回討論会において学生講演賞を、修士課程 1 年の学生が「有機金属多面体をプラットフォームとする汎用的な酵素固定化」のポスター発表で、第 59 回化学関連支部合同大会で学生奨励賞を受賞した。加えて、大場教授が「ゲスト応答型機能性配位高分子の開発」で錯体化学会学術賞を、大谷准教授が「Studies on dynamic structures constructed by anisotropic assemblies of tetracyanometallate units」で錯体化学会研究奨励賞を受賞した。また、5 報の論文で研究成果を発表した。

本年度は 1 名の学生が「Studies on functional development of polar crystals based on asymmetric metal complex (非対称金属錯体を基盤とする極性結晶の合成と機能開発)」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。

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

本研究室では、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。この配位高分子が形成した「空間」を基盤に、新しい機能や物性を開拓する。配位高分子の空間内にゲスト分子を取り込ませて、分子運動の自由度を組み込むことで、空間内の分子の運動や配列変化、ゲスト分子の吸脱着、熱や光などの害場

の変化、などに連動して構造および機能・物性が可逆的に変化するシステムの構築を目指している。また、金属錯体と酵素などの生体分子を複合化することで、新しい高機能な生体複合材料の開発も目指している。

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）相変化する機能性金属錯体の開発、（７）高イオン伝導性錯体の開発、（８）多核クラスター錯体の集積による機能空間の構築、（９）中空構造と有する金属-有機多面体と酵素の複合体の開発、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

- ・ 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
- ・ 中空金属錯体と酵素の融合による再生可能触媒システムの創製
- ・ 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、鳥飼 浩平 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」では酸塩基から錯形成、沈殿生成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。また松森は1年生が通年で受講する必修科目の化学序説も担当した。各研究室が最先端の研究をわかりやすく紹介することで、基幹教育科目の多い1年生が見失いがちな化学への興味を掻き立てる効果があった。これらの講義は対面とオンラインを併用したが、質を低下させることなく実施できた。川井は基幹教育科目「自然科学総合実験」、専攻教育科目「分析化学実験」「国際科学特論」の一部を担当した。1年後期に開講の「自然科学総合実験」および「基礎化学実習」では、炎色反応やダニエル電池の作製実験を丁寧に指導し、その原理に関する考察を含むレポートを課すことで、基礎的な化学に関する知識および考察力の向上を図った。2年前期に開講の「分析化学実験」では、全体の取りまとめおよび「データ解析」を担当した。「国際科学特論」では、科学に関する基礎単語および簡潔な英文の書き方である 3C Writing を演習形式で学び、その後ディスカッションや発表を英語で行ってもらうことで、科学英語の実践力の養成に努めた。木下は、化学序説一コマと、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。化学序説では日頃研究室で取り組んでいる生体膜研究について紹介した。基本操作法では再結晶法を指導し、また、分析化学実験では分光測定による安息香酸の解離定数の決定法はもとより、レポートの書き方までを指導した。

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。特に川井准教授の着任により、クロマトグラフィや質量分析といった分析化学関連の研究環境が大幅に改善した。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、研究室内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なかった。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、脂質組成について、各種分析手法を駆使して、この解明にあたっている。

現在大きく以下の4つの研究課題について研究を行っている。

- (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、2019年に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が (Inada et al., *Anal. Chim. Acta.* 2019)、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を行った。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。これに関連して、カリウムチャンネル KcsA に脂質カルジオリピンが相互作用し、アロステリックにチャンネルの開口を制御していることを見出した (論文投稿中)。

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報告したが (Kinoshita et al., *BBA - Gen. Subj.* 2019)、引き続きこの研究を細胞膜を用いて行っている。また渦鞭毛藻由来の天然物アンフィジノールがエルゴステロールと脂質膜中で近接していることを短距離エネルギー移動法を用いて初めて証明した (Hieda et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 2022)。同様に渦鞭毛藻由来のミイトトキシニンについても、膜へ強い作用があることを見出し、この研究を行っている。また上記の脂質固定ビーズを利用し、脂質に相互作用する天然物の探索も開始した。

(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., *J. Cell Biol.* 2017)、これを用いてスフィンゴミエリンのアシル鎖の長さが脂質ラフトに与える影響を精査した (Hirano et al., *BBA Biomembranes* 2022)。その結果、飽和の炭素鎖を持つスフィンゴミエリンはいずれもラフト様の固い膜ドメインを形成することや、アシル鎖長の異なるスフィンゴミエリンを混合すると膜ドメインの流動性が増加することをモデル膜系の研究により明らかにした。また、セラミドの頭部構造が異なる各種誘導体を合成し、アポトーシス活性を調べた (論文投稿中)。興味深いことに、セラミド頭部がアルコール以外の誘導体でもセラミドに匹敵するアポトーシス活性を有することがわかり、セラミドがアポトーシスを誘導する機構解明につながると期待される。さらに、セラミドやスフィンゴミエリンが形成する膜ドメインについて、我々の研究成果を含めた総説を 2 報報告した (Kinoshita et al., *Membranes* 2022, Murata et al., *Biophys. Rev.* 2022)。

(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、生体膜に存在する脂質や糖鎖の超微量分析法を新たに開発することにより、生体膜の理解を進めるとともに、疾病などの診断や創薬へと応用することを指向するものである。脂質の分析法としては、ガラス製マイクロニードルを用いて細胞の一部を採取し、そのままナノエレクトロスプレーイオン化を行って質量分析 (MS) によって解析する手法 (Kawai et al., *Anal. Chem.* 2021) を膜分析へ応用したところ、単一リポソームや細胞であっても十分な感度で構成脂質

を検出できた (論文投稿準備中)。また、川井の開発した超高感度キャピラリー電気泳動 (CE)-MS (Kawai *et al.*, *Anal. Chem.* 2019) を応用した超高感度脂質分析法の開発も進めている。sweeping 法と analyte focusing by micelle collapse 法を組み合わせた新規二重濃縮技術を開発することで、疎水性試料を従来の CE 分析より 1000 倍以上高感度に測定できるようになり、疎水性の薬物の組織内濃度を amol レベルの極微量で定量することに成功した (Koganemaru *et al.*, *Br. J. Pharmacol.* 2023)。さらに世界初となる一細胞レベル薬物動態解析にも成功しており、今後様々な応用研究が期待される (論文投稿準備中)。糖鎖の解析では、複雑な構造異性体を有する生体由来の糖鎖試料を高感度かつ網羅的に解析するため、液体クロマトグラフィー (LC) と超高感度 CE 糖鎖分析技術 (Kawai *et al.*, *J. Chromatogr. A* 2018) を組み合わせた二次元分離法を開発し、従来法よりも 100 倍以上のピークキャパシティで糖鎖を分離して検出することが可能となった (論文投稿準備中)。また、生体膜を介した物質輸送の動態を簡便かつ定量的に計測するため、低張液を用いた細胞破裂現象を利用した新たな細胞試料調製法を開発した。これにより、従来はマイクロニードルなどを用いて細胞質を吸引する手動操作と 1 細胞レベルの超高感度分析法が必要であったが (Kawai *et al.*, *Anal. Chem.* 2021)、僅か数十秒程度の前処理と LC-MS の組み合わせで従来法と同等レベルで膜透過性を評価することに成功した。

このように、いずれの課題においても着実に成果が出ているが、2020 年から続くコロナの影響で進捗が鈍化していることは否めず、論文発表も例年に比べると低調であった。今後はこれらの研究の遅れを取り戻すとともに、部門内外や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 潔志准教授

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流行による各種行動制限が和らぎ、学内においてはマスクなどの感染症対策を施した上で、基本的に対面による教育、研究が行われるようになった。また外国との行き来も緩和されたことから海外からの訪問者も増え、年度内に6名の研究者を迎え、学生も交えて活発な議論を行った。研究室の体制としては、学生が博士3年1名、博士2年1名、博士1年1名、修士2年2名、修士1年5名、学部4年3名の計13名であり、さらに12月には宮田助教が准教授に昇進した。また3月には西郷将生君が研究室として初めて博士(理学)の学位を取得した。

恩田担当の学部教育としては、後期に文系と保健、薬学系の1年生を対象としたクォーター制の講義「身の回りの化学」を行った。この講義では、以前、 Semester制で行っていた「基礎化学」の前半にあたる内容を「トロウ 化学入門」をテキストにして行った。また例年通り、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」を「クリスチャン分析化学Ⅰ,Ⅱ」をテキストにして行った。さらに他大学での大学院生向け集中講義として、6月に名古屋大学大学院理学研究科「複合化学特別講義」、12月に東京工業大学理学院「化学特別講義第四(無機・分析化学)」、1月に東京大学理学系研究科「物理化学特別講義Ⅳ(英語講義)」を担当した。これらの講義では、自ら執筆した「化学の要点シリーズ 39 時間分解赤外分光」をテキストにして、光化学の基礎理論と時間分解分光について解説した。

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分析化学実験の各種滴定・イオン交換法を担当した。①学生実験の基本操作法は、対面で実験を行い、硫酸銅五水和物結晶と炭の混合物から、再結晶により硫酸銅五水和物の精製を行った。②の各種滴定・イオン交換法では、主に滴定操作による成分分析、イオン交換カラムによる金属イオンの分離を指導した。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3名、修士課程学生7名、博士課程学生3名に対し

では、二週間に一度は対面で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 4 月に光化学に関する連続集中講義、5 月に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を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。学会も積極的に参加し、研究室全体で合計 30 件以上の発表経験を積ませることができた。うち 10 件程度は国際学会であった。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。本年度は特に以下のトピックについて研究を推進した。

1. 金属錯体、人工光合成

- ・発光性二核三重らせん Al 錯体の光物性の解明
- ・ポルフィリン光増感剤-Re 錯体触媒連結二元系光触媒の光励起初期過程の解析
- ・色素-半導体界面の電子移動ダイナミクス
- ・発光ダイオードへの応用を志向した発光性 Pt 錯体材料の時間分解分光
- ・発光性配位高分子材料の時間分解分光

2. 有機発光体

- ・熱活性化遅延蛍光分子の励起状態ダイナミクスの溶媒依存性
- ・新規発光性ホウ素錯体の光物性解明
- ・有機固体薄膜中の発光ダイナミクス
- ・有機りん光材料チエニルジケトンの励起状態構造ダイナミクス

- ・超分子ペンタセン集合体を利用した一重項励起子分裂の核偏極への利用
- ・含ペンタセン金属有機構造体の励起状態ダイナミクス
- ・プラズモンを利用した三重項三重項光アップコンバージョン機能向上の解析
- ・ドナー・アクセプター連結分子における特異的な光反応の解析

3. 希土類錯体、希土類ナノ粒子

- ・希土類錯体の分子内エネルギー移動の実時間解析
- ・三重項エネルギー移動を利用した発光性希土類薄膜の創成
- ・希土類光アップコンバージョンナノ粒子の発光過程の追跡
- ・小分子発光体の構造柔軟性と発光特性のメカニズム研究

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8件掲載に至った。

民間企業との共同研究

住友化学株式会社「時間分解分光法を用いた化合物の構造解析」

出光興産株式会社「有機 EL 材料における励起状態の構造変化の解明」

訪問研究者

7月 Prof. Partha Hazra, Indian Institute of Science Education & Research, Pune, India

7月 清川慎介、香港科学技術大学、香港

9月 Prof. Marc Robert, University Paris Cité, France

12月 宮岸拓路、東京大学

2月 Dr. Arvydas Ruseckas, University of St. Andrews, UK

3月 Prof. Ifor Samuel, University of St. Andrews, UK

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、希土類化合物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.chem.kyushu-univ.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ナノ粒子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 3 件発表。
- ・ 発表論文 6 報

研究分野

環境ナノ物質科学

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。修士1年、修士2年の学生が、九大外施設である 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), 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、荒川 雅 助教、山口雅人 特任助教

教育目標

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。とりわけ、原子・分子を記述する量子化学の考え方に重点を置く。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標とする。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Ⅰ・Ⅱ」（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・Ⅱ」（対象：大学院修士課程、担当：堀尾）

「英語で学ぶ量子化学」と題し、James M. Lisy 博士（University of Illinois at Urbana-Champaign 名誉教授）製作の Podcast を使用した講義を行った。前期量子論、古典的な波動方程式、シュレーディンガーの波動方程式、量子論的期待値、自由粒子、一次元の箱の中の粒子、円運動する粒子、調和振動子、剛体回転子、角運動量、原子軌

道に至るまで、量子論の基礎を全て英語で講義した。学部時代に学習した量子化学を改めて、かつ英語で学ぶことで、同分野の専門用語を習得するとともに、英語を母国語とする研究者が使う実用的な英語を学ぶ機会を提供した。

2. 学生実験

2-1. 「色素の吸収および発光スペクトル」 (対象：学部3年、担当：堀尾)

発光ダイオードを光源とする簡易的な分光器を組み立て、市販の分光器の原理を学ぶとともに、ミラー、レンズ、スリット、回折格子などの光学素子の取り扱いを習得することを目的とした。さらに、色素分子の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを観測し、Lambert-Beer 則の分子論的な理解、ならびに溶液中の分子の発光機構について議論した。

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。

2-3. 「レーザー光の特性」 (対象：学部3年、担当：山口)

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。

3. 研究指導

研究室では、学部4年(4名)、修士1年(2名)、修士2年(4名)、博士2年(1名)、博士3年(1名)が在籍した。昨年に引き続き新型コロナウイルス感染拡大の影響があり、理学部工場での金属加工実習の中止など一部の活動が制限されたが、研究活動は支障なく行われた。学部学生には、金属クラスターの光解離分光・光電子イメージング分光と量子化学計算による構造・スペクトル解析の課題をそれぞれ与え、卒業論文をまとめた。修士1年の学生は、光電子イメージング分光の画像分解能の向上を目指した装置開発に新たに取り組んだ。修士2年の学生は、1名が光解離・脱離分光、2名が光電子イメージング分光で、銀クラスター負イオンおよび異元素添加種の電子構造研究を行い、もう1名は真空中の液滴の凍結過程をテーマとして、それぞれ修士論文をまとめた。博士2年の学生は、イオンの軌道シミュレーションの研究をさらに進めるとともに、Whispering Gallery Mode を利用した液滴径の精密測定の研究に新たに取り組んだ。博士3年の学生は体調不良から復帰し、在学期間を一年延長して博士号取得を目指すこととして、銀クラスターの光吸収スペクトルの解析を進めた。

成果の発信では、ナノ学会（5月）、化学反応討論会（6月）、化学関連支部合同九州大会（7月）、Mini-Symposium on Liquids（7月）、分子科学討論会（9月）、Symposium on Size-Selected Clusters（2月）、日本化学会春季年会（3月）など、対面形式が再開された国内外の学会で成果発表した。なお、ナノ学会にて博士2年の学生が優秀ポスター発表賞を、分子科学討論会にて修士2年の学生が優秀講演賞を、それぞれ受賞したことは、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。また、『量子化学：基礎からのアプローチ』（化学同人）をテキストとして、演習問題を通して量子化学の基礎固めを行った。さらに英語力について、週刊英和新聞 *Asahi Weekly* を活用し、科学関連記事を中心に、特にリスニングに関して実践的なトレーニングを行った。

研究目標

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の開拓を念頭に、原子の数（サイズ）が正確に制御された原子・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、物理化学の研究手段で探究する。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、電子構造の観点から原子と類似した特性を示す超原子クラスター種は、元素代替戦略に貢献する新物質として期待が高まっている。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、科学の広い分野への波及が注目されている。具体的には、気

相分子との反応が進む様子を捉える化学反応追跡法、レーザー光で電子が占有する軌道のエネルギーや形状を調べる可視-紫外吸収分光・光電子イメージング分光、個々の構成原子の電子状態を観察する X 線内殻分光など、最先端の実験手段で、構成原子の数で変化するこれらクラスターの特異な物性・反応性の解明に取り組んだ。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、これらの研究への支援として、科学研究費助成事業において、基盤研究(A)「金属クラスター超原子の量子論構築に向けた電子過程・光学過程の探究」(代表者・寺寄)、基盤研究(B)「超原子軌道イメージング」(代表者・堀尾)、基盤研究(B)「鉍物クラスターを触媒とした惑星系形成環境での C1 化学」(代表者・荒川)、挑戦的研究(萌芽)「微小液滴内還元反応による超原子金属クラスターの合成とその光電子イメージング」(代表者・堀尾)が新たに採択され、継続課題である基盤研究(C)「金属クラスターへの希土類元素の添加効果：極微金属中での s-f 電子間相互作用の解明」(代表者・荒川)、挑戦的研究(萌芽)「真空中の液滴で挑む過冷却液体の未踏領域」(代表者・寺寄)と合わせて推進した。

〈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

触媒材料等の反応性の鍵を握る遷移金属元素の d 電子や f 電子に着目し、化学反応性を指標とした電子構造研究に取り組んできている。前年度までに、s 電子を価電子とする銀クラスターに開殻 3d 遷移金属 (M=Sc~Ni) をドーピングし、一連の正イオン種 Ag_nM^+ および負イオン種 Ag_nM^- について s-d 電子間の相互作用の探究を網羅的に進め、論文発表までを行って一区切りを迎えた。本年度は、次の 2 つのテーマを中心に反応研究を推進した。

第 1 のテーマとして、上述の s-d 電子間の問題を s-f 電子間に拡張し、 Ag_nCe^+ (Ce: $4f^15d^16s^2$) および Ag_nSm^+ (Sm: $4f^66s^2$) と O_2 分子との反応実験を行って、実験結果の解析を進めた。いずれも f 電子の局在性が d 電子よりも強いことを示唆する結果となり、この成果を原著論文として発表した [J. Phys. Chem. A **126**, 6920 (2022)]。この論文は、アメリカ化学会が発刊した物理化学誌の特集号“Experiment-Theory Synergies in the Study of Metal and Metal-Containing Clusters”にも掲載され、高く評価された。

第 2 のテーマでは、宇宙空間での分子進化の観点から金属酸化物クラスターを触媒とする C1 化学に着目し、火星大気での急激なメタン減少の起源を解明する目的で、酸化鉄クラスターとメタン分子 (CH_4 および重水素置換体 CD_4) との反応実験を行った。クラスターへのメタン分子吸着と脱水素が観測され、火星表層でのメタンの減少を説明し得る速度で反応が進行することを見出した。

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

昨年度までに、サイズ選別したクラスター負イオンを測定対象とする光電子イメージング分光装置を立ち上げた。特色として、連続発生する負イオンビームをサブ MHz のパルスに変換し、脱離レーザー光に連続発振 (CW) レーザーダイオードを使用する我々独自の高繰り返し測定手法で、光電子画像を極めて短時間で撮像することが可能であり、研究が大きく加速された。この手法をまず銀クラスター負イオン Ag_n^- に適用し、測定法の新規性を原著論文として発表した [Rev. Sci. Instrum. **93**, 083302 (2022)]。

続いて、構成原子数によって変化するクラスターの特性 (サイズ効果) の探究例として、 Ag_n^- の測定を 20 量体 ($n=20$) まで行った。銀クラスターは、クラスター骨格が形成する 3次元井戸型ポテンシャルの中に、原子と同数の 5s 電子 (負イオンの場合には余剰電子を含む $n+1$ 個) が自由電子として閉じ込められ、これら自由電子は超原子軌道 1S, 1P, 1D, 2S, ... を占有すると理解される。したがって、価電子が 19 個の Ag_{18}^- の電子配置は $1S^2 1P^6 1D^{10} 2S^1$ と推測され、最外殻電子は 2S 軌道に収容される。この最外殻電子を光脱離して角度分布を測定した結果、脱離レーザーの偏光方向に強く偏った p 波が観測されたことから、確かに超原子 2S 軌道が形成されたことが裏付けられた。さらに測定対象を広げ、課題(1)の反応性研究で取り組んだ遷移金属添加系負イオン種 Ag_nM^- を測定したところ、s 電子と 3d 電子を合わせた価電子数が 19 個の $\text{Ag}_{15}\text{Sc}^-$ が、 Ag_{18}^- と同様の光電子角度分布を示すことを発見し、Sc 添加種でも超原子 2S 軌道を見出した。この成果は非常に高く評価され、第 16 回分子科学討論会にて修士 2 年の学生が「分子科学会優秀講演賞」を受賞した。また、原著論文を J. Phys. Chem. Lett. 誌 (アメリカ化学会) に投稿した。

同数の価電子をもつクラスターが同様の超原子軌道を占有することを見出したこの成果に基づいて、添加種を 3d 遷移金属に限定せず 4d, 5d にも拡張するほか、Sc の代わりに同数の価電子を持つ典型金属 Al を添加するなど、多様なクラスター種へ研究を大きく展開している。また、2S 軌道以外の超原子軌道の解析には、脱離レーザーの波長を変えながら光電子画像を測定することが不可欠であり、そのための新たな波長可変光源の導入も進めた。

課題(3)：レーザー吸収分光による金属クラスターの電子構造研究

サイズの増加とともに電子の集団励起が期待される銀クラスターの光吸収分光について、これまでに正イオン種 Ag_n^+ の測定を 92 量体 ($n=92$) まで進めてきた。本年度は理論的な解析を主眼とし、クラスターの光応答理論の専門家である安池智一教授 (放送大学) から助言を受けながら、電子励起の集団性の評価を進め、論文投稿に向けた作業を行った。

一方、前年度から開始した負イオン種 Ag_n^- の研究を継続し、 $n=3\sim 19$ のサイズで、光脱離・脱離の作用スペクトルを可視-紫外領域で取得した。その結果、垂直脱離エネ

ルギー以上のエネルギー領域に、電子脱離した連続状態とともに束縛励起状態が顕著な吸収ピークとして現れることを見出し、量子化学計算による解析で電子遷移の帰属を行った。また、球形や楕円体など、サイズによって変化するクラスターの形状とスペクトルの形状との間の相関を見出した。これらの議論をもとに論文投稿の準備を進めた。

さらに、正イオン種の実験を遷移金属添加種 Ag_nSc^+ にも展開し、同数の価電子をもつ無添加種 Ag_{n+3}^+ とスペクトルを比較する新たな研究を開始した。例えば、電子配置 $1\text{S}^2 1\text{P}^6 1\text{D}^8$ をとると考えられる $n=14$ では 1P から 2S 軌道への遷移が主に観測されたが、電気陰性度の低い Sc が Ag に内包される結果、 $\text{Ag}_{14}\text{Sc}^+$ では 2S 軌道が不安定化し、 Ag_{17}^+ よりもスペクトルが高エネルギー側にシフトすることなどが明らかになった。添加種を変えて、 Ag_nCo^+ などの実験も進めている。

課題(4)：イオン光学系シミュレーションによるイオントラップの特性評価

元来希薄なクラスターの高密度化を目的としたイオントラップについて、イオン光学系の解析ソフトウェア SIMION を高度に活用した特性評価に取り組んでいる。これまでにイオントラップ内に捕捉されたイオンの密度と空間分布を数値解析し、実験結果を定量的に再現する成果を上げている。その際、イオン間の反発やイオン-バッファガス間の衝突とともに、室温から極低温 (10 K) へのバッファガスの冷却効果までを考慮したシミュレーションを行った。この成果の原著論文を *Molecular Physics* 誌 (Taylor & Francis) に投稿した。

課題(5)：X線吸収分光による金属/金属化合物クラスターの化学状態・磁性研究

金属化合物クラスターの化学状態を分析するX線吸収分光 (XAS) をテーマとする共同研究を株式会社コンボン研究所と推進し、構成原子の化学状態と反応性を系統的に関連づけ、高活性なクラスター種が持つ特徴を明らかにすることを目的とした。具体的には、触媒金属であるマンガンもしくは銅と複合化した酸化セリウムクラスターを取り上げ、構成原子の化学状態 (酸化状態) を評価する XANES (X線吸収端近傍構造) 測定により、触媒金属に対して酸化セリウムクラスターが酸化抑制効果を持つか否かの検証を行った。また、酸化マグネシウムクラスターを取り上げて、局所的な幾何構造の情報を得る EXAFS (広域X線吸収微細構造) 測定に挑戦した。なお、酸素原子数の増加とともに Mn 原子の酸化数が増加する現象を見出した酸化マンガンクラスター Mn_xO_y^+ ($x=4, y=4-7$) に関する前年度までの成果を、原著論文として発表した [Chem. Phys. Lett. **806**, 140056 (2022)]。

一方、ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究で、サイズ選別された孤立クラスターのX線磁気円二色性 (XMCD) 分光を実現し磁性研究を進めてきている。しかしながら、この数年、新型コロナウイルスの影響でドイツへの渡航が叶わず、過去の実験結果に基づく成果発表を進めた。具体的には、Co原子をドーピングしたAgクラスター Ag_nCo^+

($n=2-15$)について、コバルト L 吸収端の XMCD 測定を行って、各サイズで Co 原子のスピン状態と軌道角運動量状態を評価した実験で、 $n=9$ までは Co 原子がクラスター表面に存在し、磁気モーメントを持つが、 $n \geq 10$ では Co 原子が内包され、磁気モーメントも消失することが示された。この成果を、Stern–Gerlach 実験で中性種 Ag_nCo の磁性を測定した他グループとの共著の形でまとめ、原著論文を Phys. Rev. Research 誌 (アメリカ物理学会) に投稿した。

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。液滴は真空中で急激な蒸発冷却を受け、短時間のうちに凍結する。実験では、液滴発生から観察までの時間を少しずつ変えながら、各時刻で 200 滴ほど画像観察を行った。個々の画像から凍結/未凍結を判定できるため、画像判定を機械学習により自動化して行い、時間とともに凍結した液滴の割合が増加する様子 (凍結曲線) を描いて、凍結に至る時間 (凍結時間) を測定した。その結果、純水の液滴は約 10 ms で凍結する一方で、蒸気圧の低いエチレングリコールやグリセロールを微量ながら混合すると凍結が大きく遅延すること (凍結抑制効果) を前年度までに見出した。本年度は、さらにキシリトールの混合を試みて同様の実験結果を見出し、その結果、水液滴へのポリオール混合において、OH 基近傍ばかりでなく、混合分子周辺の水素結合ネットワークの乱れが凍結を阻害するとの仮説に至った。この成果を、修士 2 年の学生が、溶液化学者が集う Mini-Symposium on Liquids でポスター発表した。

ポリオール混合で凍結が遅延するこの現象を数値シミュレーションで再現したいが、その際、凍結核生成速度の温度依存性のデータが必要となる。特に過冷却状態深部の温度領域ではそのデータが無く、分子動力学計算によるアプローチを開始した。これら理論面での研究を、化学部門・秋山良准教授との共同研究で進めている。

一方、蒸発冷却過程の詳細な解析には液滴径の精密測定が重要との認識から、液滴外周に共鳴するラマン散乱光の Whispering-gallery mode (WGM) に着目し、その測定・解析に関して、周回モードに加えて動径モードを考慮する高度化を図った。さらに、ラマン散乱に代えて白色光レーザーを光源とした広帯域測定も試み、多数のモードを実測して計測精度の一層の向上を進めている。この研究で、博士 2 年の学生がナノ学会第 20 回大会にて「若手優秀ポスター発表賞」を受賞し、成果が高く評価された。

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・光電子分光

研究課題

質量分析法と分光法を主な実験手段とし、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マイクロメートルサイズの液滴まで、気相から凝縮相への中間領域を狙いとする原子・分子集合体の物性・反応性研究。

参考 URL :

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

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>

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
桶谷 亮介 助教

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

(加納)

「光生物物理化学」

生物は生命を維持するために様々な形で光を利活用している。生物と光との関わりを、その背景にある物理化学的原理を理解することで捉え直し、生物が光によって営む様々な光生命現象を概観した。これに加えて、光と分子との相互作用の基礎について講義し、二準位系のラビ振動や赤外・ラマン散乱の起源である振電相互作用について説明した。

「環境問題と自然科学」

我々の身の回りを見回してみると、実にたくさんの物質が存在する。それらは、天然のものばかりではなく、人工的に創りだされたものも沢山ある。これらのほとんどは、我々の生活を豊かにするために大きく貢献している。しかし、その反面、環境問題を引き起こしたものや起こしつつあるものもある。本講義では、科学の発展に伴って生じた環境問題に焦点をあて、環境問題に対する自然科学の捉え方とそのための定量的方法、さらに、問題解決に向けた取り組みに関して、複数の教員が分担して紹介した。このうち2コマを担当し、「藻類がつくるサステナブルエネルギーとその化学分析」という標題で、微細藻類がつくるバイオ燃料をはじめとする各種有用分子の紹介と、微細藻類生

細胞内に蓄積されるスクアレン等の機能性分子の細胞内分子分析手法、特に分子イメージング手法について講義を行った。

「物理化学実験」

物理化学実験課題として 2021 年度に新規に立ち上げた「反応速度」を、今年度も継続して担当した。実験ではまず、旋光度を測定する装置を He-Ne レーザーや各種光学素子、そして光検出器を用いて組み上げさせ、ゼラチンの旋光度を測定することで、コイルヘリックス転移の速度定数を求める実験を指導した。解析では非線形最小二乗法を用いるため、その原理と実際の適用方法についても指導した。

(桶谷)

「物理化学実験」

物理化学実験全体の取りまとめ、および「偏光を用いた基礎実験」を担当した。

取りまとめでは、学生のグループ分けについて、グループ変更の機会を新たに設けた。初回説明時に、どうしても変更できない予定がある場合のみグループ変更を可能とし、学生ができる限り全ての実験に参加できるよう配慮した。

「偏光を用いた基礎実験」光の偏光とその制御に関する基礎実験（偏光板、 $\lambda/2$ 板、 $\lambda/4$ 板の利用）を、実際に装置を構築するところから指導し、それぞれの使用方法を確認した。その後、スクロース溶液を用いて旋光性の確認方法について指導した。最後にセロハンテープの偏光特性を調べる課題実験を指導した。実験方法・実験装置を学生自ら考案し、セロハンテープの旋光性の有無を確認させる内容とした。TA の協力を得ながら、基礎実験および課題実験で変更に関する基礎と測定方法・実験のデザイン方法を指導した。また、今年度は新たにレポートにページ数制限を設け、分量より内容を重視するように指導した。これにより、教科書の丸写しや長文の引用など unnecessary な記載が減った。レポートに必要な内容についても箇条書きで示し、基礎的なレポート作成方法の指導も行った。

・研究指導

2022 年度は、修士課程に進学した 4 名に加え、新たに学部 4 年次生が 3 名、および博士課程 1 年次生が配属された。学部 4 年次生は、3 月に業績報告会を行った。

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>

芽胞菌は極限的な環境で生き残るために spore を形成する。この際、細胞内にジピコリン酸 (DPA) が蓄積されることが知られており、ラマン分光法を含む様々な手法で研究されてきたが、芽胞菌のもう一つの形態である栄養細胞については、これまで研究は少なかった。本研究では、コヒーレント・アンチストークス・ラマン散乱 (coherent anti-Stokes Raman scattering; CARS) 顕微鏡を用いて、孢子と栄養細胞の両方を同一視野にてラベルフリーで同定した。spore は DPA に由来する強い CARS 信号によって識別された。一方、栄養細胞については既報にない明るいスポットを細胞内に見出した。この位置で顕著に見られた 1735 cm^{-1} のラマンバンドはカルボニル基に帰属される。そこで、これらの栄養細胞には C=O 結合を持つ分子種が含まれていることがわかった。モデル分子や DFT 計算により、この分子はジケトピメリン酸 (DKP) であることを同定した。以上の結果は、観察された栄養細胞が spore 形成プロセスにあることを示唆している。CARS スペクトルを使用することで、spore の成熟と形成のモニタリングを行えることが実証できた。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された (Kyosuke Tanaka, Ryosuke Oketani, Takeshi Terada, Philippe Leproux, Yuki Morono, and Hideaki Kano, “Label-Free Identification of Spore-Forming Bacteria Using Ultrabroadband Multiplex Coherent Anti-Stokes Raman Scattering Microspectroscopy”, *Journal of Physical Chemistry B* 127(9), 1940-1946 (2023)). 本研究は国立研究開発法人海洋研究開発機構との共同研究の成果であり、次年度の科研費（基盤研究 A ; 2023 年度採択）申請のための基礎データとなった。

極性結晶 (tetraethylammonium) $2[\text{Mn}(\text{CN})_4] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ は、水分子の脱吸着により極性が変化する有機-無機ハイブリッド錯体である。極性のスイッチング機能により、この有機-無機錯体は伝導性をコントロールできる新たなデバイス材料として期待されている。本結晶に対して第二高調波 (second harmonic; SH) を含む複数の非線形光学効果を検出できるマルチモーダル非線形光学顕微鏡を用いた解析を行ったところ、水分子の脱吸着と SH 信号発生に相関があることがわかった。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された (Junichi Yanagisawa, Kyosuke Tanaka, Hideaki Kano, Kiyoshi Miyata, Benjamin Le Ouay, Ryo Ohtani, and Masaaki Ohba, “Vapor-Induced Conversion of a Centrosymmetric Organic-

Inorganic Hybrid Crystal into a Proton-Conducting Second-Harmonic-Generation-Active Material”, *Inorganic Chemistry* 61(39), 15638-15644 (2022). ; 第二著者が研究室所属大学院生)。本研究は化学部門錯体物性化学研究室との共同研究の成果であり、初の部門内連携となった。

オランダ・グローニンゲン大所属の博士課程学生を実習生として短期間受け入れた。CARS 信号の高感度検出を目指した実験等を指導した。

研究分野

光物理化学、分子分光学、物理化学、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
- ・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
- ・第二高調波をプローブとした毛髪ケラチンの二次構造解析
- ・芽胞菌 (*Bacillus megaterium*) のラベルフリー非線形ラマンイメージング
- ・化粧水浸透過程のラベルフリーラマン分光イメージング
- ・保湿成分可視化に向けたヒト皮膚の顕微ラマンイメージング
- ・CARS 光の飽和を用いた無標識超解像分子イメージング法の開発
- ・CARS 光の増倍率の定量評価
- ・不凍タンパク質の二次構造解析
- ・初代培養細胞のラベルフリー分子イメージング

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、分光実験の技術を修得させると共に、研究テーマについてまとめて発表する能力を向上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、新しい知識の吸収および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、溶液化学シンポジウム、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研究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による研究活動の停滞のため、学生による学会発表はなかった。

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アニリン、アミノベンズニトリ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、溶存化学種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。本年度は昨年度からの継続課題として、アニリンの吸収・発光スペクトルに対する溶媒効果を微視的レベルで解釈することを目的に、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行った。修士学生が第1著者となった論文を学術雑誌に発表した。

■ 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ホルムアミド(FA)、ジメチルホルムアミド(DMF)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、過塩素酸 Na(I), Mg(II), Al(III)/FA の系において、FA の O 原子での金属イオンへの配位に加えて、N 原子での配位および O, N 両原子での 2 座配位の可能性について検討した。また、過塩素酸 Fe(III)/FA の系において、赤外およびラマンスペクトルの CO 伸縮バンドにみられる双極子カップリングについて調査した。

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、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。

我々は、2021 年度までにミトコンドリア内 PS 輸送因子 *Ups2* の欠損などによってミトコンドリアにおける PE 合成が低下した出芽酵母では、グルコース枯渇時に細胞エネルギーセンサー *Snf1* (哺乳動物 AMPK) の過剰活性化を引き起こし、これに起因してミトコンドリア ATP 産生、静止期(G0)細胞への分化が促進すること、*Ups2* と細胞周期制御因子 *Whi5*、*Whi7* の三重欠損酵母が著しい合成生育損傷を引き起こすことを見出していた。

2022 年度はさらに、前年度に見出されていた *UPS2* と *WHI5*、*WHI7* の遺伝学的相互作用の機序解明を試みた。その結果、*Ups2Whi5Hwi7* 三重欠損酵母では、ミトコンドリア DNA が完全に欠損していることが明らかとなった。さらに、*Ups2* や *Psd1* の欠損によるミトコンドリア PE 合成の低下は、ミトコンドリア DNA を不安定化させること、*Whi5*、*Whi7* はミトコンドリア DNA の不安定性を保護する作用を有することを見出した。また、出芽酵母における知見と一致して、ヒト乳がん由来細胞においても、*Whi5*、*Whi7* のヒトオルソログであるがん抑制遺伝子 *RB1* と *Ups2* のヒトホモログ *PRELID3b* の間に遺伝学的相互作用が認められることから、ミトコンドリア PE 合成経路およびミトコンドリア DNA は、*RB1* を欠損したがん細胞に対する新規抗がん剤開発の標的として期待される。

(2) 生体膜スフィンゴ脂質の生物機能

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、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関連の解明を試みている。

2022年度は、以下の二つのことを明らかにした。

①複合スフィンゴ脂質とエルゴステロールは、協調的に機能し、両者の生合成酵素の多重変異は重篤な細胞機能異常を引き起こす。2022年度は、エルゴステロール生合成酵素の一つをコードする *ERG6* の欠損株が、セラミドから複合スフィンゴ脂質を生合成する酵素 Aur1 の阻害剤 Aureobasidin A (AbA) に対して強い抵抗性を示すことを新たに見出した。この抵抗性は、*AURI* の発現抑制では観察されなかった。*ERG6* 欠損株では AbA による複合スフィンゴ脂質減少効果が顕著に抑制されていた。これらのことから、*ERG6* 欠損によって AbA の阻害効果が減弱していることが示唆された。*ERG6* 欠損株の AbA 耐性は、以前我々が同定した AbA 耐性を付与する遺伝子 *PDR16* もしくは *PDR17* の欠損によって消失もしくは減少した。さらに、*ERG6* 欠損株では Pdr16 の発現量が上昇しており、その上昇はプロモーター活性非依存的に起きていることも確認された。これらのことより、*ERG6* 欠損による AbA の阻害効果の減弱は、Pdr16/17 を介していることが示唆された。

② スフィンゴイド塩基 (LCB: 複合スフィンゴ脂質の基本骨格) とステロールの構造は、生物種間で大きく異なるが、この違いが生じた理由はわかっていない。2022年度は、出芽酵母の LCB をスフィンゴシン (SPH: 哺乳動物型 LCB) に構造置換した変異株を作製し、詳細な表現型解析を行った。その結果、SPH で LCB 構造を置換した酵母では複数の環境ストレスに対する耐性能の著しい低下と、形質膜インテグリティー (膜透過性、流動性) と細胞壁インテグリティーに異常が観察された。一方で、LCB 構造と同時にステロールも哺乳動物型 (コレステロール) にした酵母の創成にも成功したが、LCB とステロールの両方を哺乳動物型にしても、SPH 構造置換でみられたストレス感受性の異常は改善しなかった。LCB とステロールの両方を同時に構造置換した報告はこれまで無く、本研究はこれらの脂質の構造を哺乳動物型にしても酵母が生育可能であることを示した。

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

生物有機化学分野

大石 徹 教授、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 や MS 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3週間に1度程度の間隔でおこない、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。

到達度

- (1) 学部 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) 修士課程学生: 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) 博士課程学生: 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。2022年度は以下のテーマに重点を置く。

研究課題

- (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>

動的生命化学分野

堀 雄一郎 教授

教育目標

動的生命化学研究室では、化学と生命科学の多岐にわたる分野の知識と技術を習得し、ケミカルバイオロジーの研究を遂行することができる研究者の育成を行う。化学のアイデアと技術により、従来の生命科学の技術では明らかにならなかった生命現象を解明し、医学や創薬に有用な知見を与えることで、社会貢献することを目指した学生教育を実践する。研究室内での教育活動としては、定期的に、学部の講義ではカバーしきれない分子・細胞生物学に関する勉強会を開催するとともに、蛍光の原理・応用に関する専門書（洋書）を読解させ、その内容を発表させる勉強会を実施する。ケミカルバイオロジーの専門性を高めることを目的として、最先端の関連分野の研究論文を読み発表する Journal club や、学生自身の研究テーマの進捗を報告・議論する研究報告会も定期的に開催するとともに、学会参加・発表により、関連分野の研究に触れる機会を与え、研究者としての視野を広げられるようにする。また、共同研究者とのミーティングにも積極的に参加させることで、人的ネットワークの構築を支える。

主体的・能動的な研究活動を実践できるように、大きな研究の方向性は示しつつも、あまりに詳細な指示を出すことを避け、自身で考え実験方針や研究を組み立てられる能力を育成することを教育方針とする。研究室のセミナーにおいては、教員が先に発言することを避け、学生間での議論を促し、Discussion 能力を向上させる取り組みを行う。国際教育促進のために、外国人研究者との Discussion や英語での発表の機会を設け、英語の会話・発表能力の育成を行う。

以上の研究・教育活動により、科学と社会に貢献し、将来の化学分野をリードする人材育成を行う。

研究目標

(1) タンパク質ラベル化技術の開発

タグタンパク質と合成蛍光プローブを利用したタンパク質標識法は、化学を基盤とする新しいイメージング技術として近年脚光を集めている。この技術では、標的タンパク質に融合させたタグタンパク質を合成蛍光プローブにより特異的に標識することで、標的タンパク質の動態を可視化できる。その結果、パルスチェイス実験による高精度なタンパク質動態の時空間解析が可能となり、タンパク質の動態制御機構を明らかにする有用かつ強力な知見が得られる。一方、通常のプローブは、常に蛍光を発しているため、プローブを細胞に添加してそのまま顕微鏡で観察すると、遊離プローブの蛍光がバックグラウンドシグナルとなり、標的タンパク質の検出に問題を与える。当研究室では、この課題を解決するために、PYP タグという独自のタグタンパク質とラベル化反応に伴い蛍光性となる「発蛍光プローブ」を用いたタンパク質ラベル化技術を開発してきた。発蛍光プローブは、バックグラウンド蛍光を抑制し、洗浄なしの迅速操作でタンパク質を可視化する優れた性質を持つ。この技術を応用することで、エピジェネティクスや免疫応答、細胞のガン化などに関わる様々なタンパク質の動態の可視化を行ってきた。

これまでは、PYP タグの天然リガンドやその誘導体をリガンドとして、蛍光色素をフ

レキシブルリンカーである PEG を介して連結したタンパク質ラベル化プローブを開発してきた。一方、既存のプローブでは、リガンドの脂溶性の高さや合成ステップの煩雑さ、細胞内ラベル化効率など、改善すべき点があった。そこで、これらの問題を解決する人工的なリガンドを開発し、PEG を介して蛍光色素を連結した蛍光プローブの開発を行った。複数のリガンド候補をスクリーニングして、PCAF と呼ぶ PYP タグとの反応基がクロロアセタミド基となる分子を見出し、このリガンドに異なる色の蛍光を発する色素を連結した4種のタンパク質ラベル化プローブを開発した。その結果、プローブの合成工程数を減少させ、水溶性・細胞膜透過性を向上させ、さらには高効率に細胞内タンパク質をラベル化できるプローブの開発に成功した。

(2) 糖鎖による GLUT4 の多重局在制御機構の解明

前項の PCAF 型プローブのうち、緑色または橙色蛍光を発する PCAFgreen と PCAForange は、細胞膜表層タンパク質または細胞内タンパク質をそれぞれ選択的にラベル化する性質を持つ。後者のプローブは、細胞膜表層タンパク質をラベル化することなく細胞内タンパク質のみをラベル化する。この二つのプローブを用いて、グルコース輸送体の一種である GLUT4 の多重局在が糖鎖によって制御されていることを明らかにした。

GLUT4 は、通常は、細胞内貯蔵小胞やゴルジなどのオルガネラ膜に存在するが、インスリンが存在すると、細胞膜にトランスロケートし、血中グルコースを細胞内に取り込む。この結果、血糖値を低下させる役割を担っている。これまでの研究で、インスリン存在下で、糖鎖が GLUT4 を細胞膜に引き留める役割を担っていることを明らかにしてきた。一方、糖鎖が GLUT4 の細胞内動態をいかにして制御しているかについては、詳細が明らかとなっていなかった。そこで、GLUT4 の細胞内動態を上記の二つのプローブを用いて解析した。その結果、GLUT4 には、ダイナミックに動くものとほとんど動きのないものが存在し、それらを異なる蛍光色で識別してラベル化できることが分かった。さらには、糖鎖が欠損した GLUT4 の動態と比較したところ、糖鎖欠損によって、GLUT4 は、リソソームに移行していることが分かり、ERLAD (ER-to-lysosome-associated degradation) の機構が作用している可能性を示した。以上の結果、ケミカルバイオロジーに基づき開発した合成蛍光プローブにより、GLUT4 の糖鎖による新たな制御機構の発見につながった。

(3) タンパク質分解を可視化する OFF-ON-OFF 型蛍光プローブの開発

タンパク質の分解は、栄養環境の維持や異常タンパク質の除去に加え、細胞のシグナル伝達や細胞周期の制御においても極めて重要な役割を果たしている。このタンパク質分解の異常は、癌や神経疾患の原因となることが知られていることに加え、タンパク質の分解を人為的に誘導する化合物は、新たな医薬品として大きな期待を集めている。このため、タンパク質の分解を生細胞で可視化することは、タンパク質分解機構に関する有用な情報を提供するとともに、医学や創薬の新たなツールとなることが期待できる。当研究室では、遊離状態では非蛍光性で、タンパク質をラベル化すると蛍光性となり、タンパク質が分解されると蛍光強度が再び低下する、「OFF-ON-OFF 型蛍光プローブ」を開発し、タンパク質の分解を可視化することに成功してきた。一方、これまでに開発

したプローブは、ラベル化後のプローブ-タンパク質複合体の安定性が低いことや、ラベル化速度が遅いことなどが問題であった。そこで、これらの問題を解決するうえで、PYP タグの蛍光性リガンドに着目した。このリガンドは、PYP タグを迅速にラベル化し、ラベル化後の複合体は安定であることは判明していたが、タンパク質分解後に蛍光強度と OFF となるか、分かっていなかった。そこで、タンパク質ラベル化後に分解を行い、その分光学的性質を明らかにした。

(4) 超解像イメージングへの応用を目指した蛍光スイッチングプローブの開発

蛍光スイッチング分子 (PSFM) は、生命科学分野において超解像イメージングに広く応用されている。化学合成した既存の PSFM は分子構造が大きく疎水性であるため、生理条件で凝集する可能性があり、可逆的な光スイッチングを持続する PSFM の開発を行ううえで困難を伴うことが多い。我々は、水溶液中で PSFM の持続的かつ可逆的な蛍光スイッチングを可能にするうえで、タンパク質表面修飾を利用した。第一段階として、蛍光スイッチング可能な蛍光消光剤としてフォトクロミック発色団フリルフルジミド (FF) を適用し、フェルスター型共鳴エネルギー移動に基づく PSFM (FF-TMR と命名) を開発した。最も重要な点は、タンパク質表面修飾戦略により、FF-TMR が水溶液中で持続的な可逆的な光スイッチング性能を示すことである。固定された細胞中で、抗チューブリン抗体に結合した FF-TMR の蛍光強度を繰り返し変調させた。このプローブ設計指針は、光照射に対する高い耐性を継承しつつ、持続的な蛍光スイッチングを可能にする機能性合成発色団の有用性を広げるプラットフォームとして有用である。

研究分野

ケミカルバイオロジー、蛍光イメージング、有機合成化学、分光学、生物物理化学、タンパク質化学、細胞生物学、分子生物学、生物化学

研究課題

タンパク質ラベル化技術の開発と応用、蛍光プローブの開発、タンパク質分解の可視化、近位依存性標識技術の開発と応用、膜タンパク質の動態解析、糖鎖による膜動態制御機構の解明、核酸の化学修飾の可視化、蛍光スイッチングプローブの開発

参考 URL

<http://chem.kyushu-univ.jp/horilab/>

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、第59回化学関連支部合同九州大会（福岡市）で2件、令和4年度日本生化学会九州支部例会（福岡市）で1件、環境化学物質3学会合同大会（第30回環境化学討論会、第24回環境ホルモン学会研究発表会、第26回日本環境毒性学会研究発表会）（徳島市）で1件、第34回DV-X α 研究会（京都市）で1件、第59回ペプチド討論会（仙台市）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）石橋知佳、細瀬摩利、（1年）伊藤琴音、白根共太

学部4年生：荒巻光汰、中村圭太

研究室構成員の2022年度進路

修士：東ソー株式会社、マイクロンメモリジャパン株式会社

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，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 3 名，1 年生 1 名，修士課程 2 年生 2 名，1 年生 3 名，学部 4 年生 3 名，留学生 1 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，理論化学討論会などの国内学会において，おのこの研究発表を行った。継続して，名古屋大学，新潟大学，大阪大学，京都大学，京都工芸繊維大学，東京工業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，Dirac-Hartree-Fock 波動関数に基づく RISM-SCF 法の開発，Dirac-Hartree-Fock 波動関数に基づく RISM-SCF 法の化学反応への適用，異なるサイズの cucurbit[n]uril へのリガンド結合における水の役割の理論的解析，等の論文を出版するとともに，大環状分子による包接が pK_a シフトに及ぼす影響，銅錯体の発光量子収率に対する配位子の効果に関する理論的研究，ランタノイドフッ化物の結合に関する理論的研究，等に関する研究を行った。以下に主なものを記す。

(1) Dirac–Hartree–Fock波動関数に基づくRISM-SCF法の開発

Dirac–Hartree–Fock (DHF) 法と参照相互作用サイトモデル (RISM) 理論の結合法を提案した。本手法は、四成分相対論的電子構造理論と分子液体の積分方程式理論の結合の最初の実装である。この方法では、DHF方程式とRISM方程式が自己無撞着に解かれるため、相対論的効果を含む溶質の電子構造と溶媒和構造が同時に決定される。定式化はヘルムホルツエネルギーに関する変分原理に基づいて構築され、解析的自由エネルギー勾配も変分特性を用いて導出された。この方法を水溶液中のヨウ素イオン (I⁻)、ヨウ化メチル (CH₃I)、カルコゲン化水素 (H₂X, X=O–Po) に適用し、溶質の電子構造、溶媒和自由エネルギーとその成分分析、溶媒分布、溶質-溶媒相互作用について議論した。

(2) Dirac–Hartree–Fock波動関数に基づくRISM-SCF法の化学反応への適用

参照相互作用サイトモデルSCF (RISM-SCF) 法は、分子の電子構造理論と分子液体の積分方程式理論を組み合わせた手法である。(1)で提案したDirac–Hartree–Fock波動関数に基づくRISM-SCF法を水溶液中のMenshutkin反応に適用した。反応座標に沿ったヘルムホルツ・エネルギー・プロファイルを計算し、エネルギー成分分析に基づいて反応の特徴を議論した。

(3) 異なるサイズのcucurbit[n]urilへのリガンド結合における水の役割の理論的解析

分子動力学シミュレーションと3次元参照相互作用部位モデル

(3D-RISM) 理論の組み合わせにより、ホストとリガンドの結合における水の役割を調べた。3つの異なるホスト (CB6, CB7, CB8) を選び、代表的なリガンドとして、ジメチルスルホキシド (DMSO)、N,N-ジメチルホルムアミド (DMF)、アセトン、2,3-ジアザビシクロ[2.2.2]オクト-2-エン (DBO)、シクロペンタノン (CPN)、ピロールの6種類の有機分子を用いた。結合自由エネルギーとその成分から、リガンドを分子サイズが比較的小さいもの (DMSO, DMF, アセトン, ピロール) と分子サイズが比較的大きいもの (DBO, CPN) に分けた。その結果、小さなピロール配位子の場合を除き、比較的高い疎水性と低い双極子モーメントといった優れた固有の性質により、CB6キャビティ内の溶媒水は小さな配位子によって完全に置換され、大きなCBと比較してより大きな結合親和性をもたらすことが明らかになった。

(4) 大環状分子による包接が pK_a シフトに及ぼす影響

大環状分子はゲスト分子を包接することで複合体を形成し、その複合体はゲスト分子の時のみとは異なる性質を持つ。例えば、シクロデキストリンの場合、難溶性のゲスト分子を包接してできた複合体は水に溶ける。ククルビトリルの場合は水溶性のゲスト分子の pK_a をシフトさせることができる。この pK_a シフトについて先行研究から最大 5 pK_a 単位のものが見られ、ゲスト分子にチアベンダゾール (TBZ) を用いた時、特に大きな pK_a シフトが見られることも分かっている。このTBZを包接したときの pK_a シフトについて理論化学の観点から調べた。

(5) 銅錯体の発光量子収率に対する配位子の効果に関する理論的研究

高い発光量子収率を示す金属錯体はLED等への応用が期待されており、安価な第3周期金属である銅を用いた錯体が関心を集めている。本研究では Linfootらにより報告された発光強度が大きく異なる2種類の銅ピペリジン錯体[Cu(POP)(dmbpy)](1)と[Cu(POP)(tmbpy)](2)を対象とし、配位子の違いが無輻射失活に与える効果を理論的に考察した。銅錯体1と2の基底(S_0)状態、最低一重項(S_1)および三重項(T_1)励起状態の構造最適化、 S_0 状態と T_1 状態の最小エネルギー交差点(MECP)の調査、各失活過程の速度定数の比較のためのスピン軌道相互作用の計算を順次行い、それらの解析の結果、1と2の発光量子収率 $k_r/(k_r+k_{nr})$ の違いは k_{nr} 、特に E_a に由来することが明らかとなった。

(6) ランタノイドフッ化物の結合に関する理論的研究

ランタノイドを含む分子の性質を理論的に調査するためには、電子相関効果と相対論効果の両方を考慮する必要がある。高精度にこれらの効果を取り扱う分子軌道計算は計算量が多く、求解とその解析が困難である。本研究ではこれらの計算を効率よく計算可能とする当研究室で開発した相対論的 GMC-QDPT 法を用いて、ランタノイドフッ化物について調査を行った。これまでいくつかの化合物について同様の計算は行われてきたが、それらの結果は計算手法や基底関数に依存していた。ここでは全ランタノイドで共通で適用可能な高精度な基底関数を作成し、計算結果の基底関数依存性を無くした。また多くの開殻軌道が扱える平均電子配置によるハートリーフォック計算プログラムを開発し、GMC-QDPTでの更なる計算量の軽減を図った。得られた計算結果から今回の方法で十分に系統的に調査可能であることが分かった。

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、2022年度は教員3名で教育、研究活動を行った。また、博士課程5名、修士2年生5名、修士1年生5名、学部4年生4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、琉球大学、九州工業大学、同志社大学からの進学者が3名在籍した。また中国からの留学生4人（博士課程3人、修士課程1人）が在籍した。修士課程の1人は、国際コースの学生として10月に入学したが、2021年度中は政府の渡航数制限のため来日できなかったが2022年度5月に来日できた。また、Japan in Today's World (JTW)という留学生短期受け入れプログラムで台湾からの留学生が1名在籍した。2022年度は博士課程3年生が4名在籍し、4名とも博士の学位を取得した。2021年度から、コロナ禍の影響で、文献紹介のゼミや研究の議論をオンラインで行うようになった。オンラインで行うと、遠隔地にいる社会人ドクターや中国から渡航できない学生が出席できるため、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。2020年度は、学会の延期や中止が多く学生が発表したものは5件に留まったが、2021年度になるとオンライン学会など、コロナ禍での学会運営方法が確立してきたため19件、2022年度は20件の発表を行うことができた。

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に続き、不斉チオウレア触媒による不斉加アミン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チオールジスルファン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新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い論文を発表した。

2022年9月24日

リバネス社主催バイオテックグランプリ 2022 にて、当研究室応募のチーム(Nanocat Gold)がリアルテックファンド賞を受賞しました。

2022年8月29日

九州大学からのプレスリリースで「石油中の硫黄化合物を紫外線で分解除去小型装置でオンサイト脱硫が可能に」と紹介された。Yahoo ニュースを始め 30 以上のサイトで紹介された。また、日刊工業新聞で紹介された(2022年9月7日)

<https://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/797>

2022年10月21日

篠崎君の研究が「紫外線を当てるだけのカンタン脱硫術」として理学部ニュースで紹介されました

https://www.sci.kyushu-u.ac.jp/koho/qrinews/qrinews_221021.html

2022年10月24日

山本英治

有機合成化学協会 九州山口支部 奨励賞 2022

「高効率的な均一系・不均一系触媒反応の開発」

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.chem.kyushu-univ.jp/shokubaiyuki/>

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にしている。

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。

学生の学外活動では、第37回 有機合成化学セミナーでポスター発表した。また、同セミナーでは運営スタッフとして活躍した。

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(*η*³-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、脱離基をカルボン酸エステルを反応性の低いフッ素原子にしても同様の反応が進行することを見出し、その効率化を検討した。

(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。本年度は水素化による軸不斉ピアリール化合物の速度論的光学分割やアザインドールのピリジン環部位選択的なエナンチオ選択的水素化について検討した。

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

通常の業務が随分戻り、忙さが増えた年度でもあった。常勤スタッフとしては秋山のみの研究室である。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講師）が共同研究員として加わっており、月曜ゼミに加えて、不定期に議論を行っている。秋山は、2022年度にはMini-Symposium on Liquidsの開催、放送大学の客員准教授、Physica A (Elsevier)のEditorial Boardメンバーとして学会や出版関係の活動をおこなった。海外における活動も再開できた。例えば、スペイン、タイにおける国際会議での対面口頭発表を行い、ヘルシンキ大における対面講義を行なった。また、Kyudai Now in Bangkokでの対面発表も行った。学部学生1名と大学院修士学生4名と大学院博士学生4名と研究を進めた。そのおかげで、活発な研究・研究活動を維持できた。2022年の出版物点数は5点(原著論文4点、日本語の解説1点)で、復調しつつある。学部学生1名、修士2年生を2名企業に送り出し、博士後期課程の学生が学位を取得した。来年度は、外部の学部学生1名が本研究室の修士課程に進学する予定である。

教育目標とその到達度

研究室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考えた。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の課題を設定した。具体的には以下の様な項目で研究を行った。

- [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
(末松 (九産大)、竹田、高倉、秋山)
- [3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究

(吉森 (新潟大)、中村 (新潟大)、秋山)

- [4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究 (山口、千葉 (慶応大)、秋山)
- [5] 水溶液中のタンパク質の拡散係数の計算 (岩下、秋山)
- [6] 積分方程式の高精度化の検証と分子認識 (松尾、秋山)
- [7] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究 (須田、秋山)
- [8] 自己駆動粒子の相分離とキラリティの研究 (新垣、平岩 (シンガポール大)、秋山、角五 (北大) ら)

- [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、共イオンの価数依存性はDLVO理論と実験では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め、懸案であった積分方程式の計算上の問題点も解消ができた。

- [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
(末松 (九産大)、竹田、佐藤、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。

[3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究

(吉森 (新潟大)、中村 (新潟大)、秋山)

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。

[4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究

(山口、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タンパク質のケースで調べた。溶媒和層の問題だけでなく、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。新しくより高度な補完式が適切に機能していることをシミュレーションを用いて確かめて、論文投稿を開始した。(2022年に出版される。)

[6] 積分方程式の高精度化の検証と分子認識

(松尾、秋山、中村 (新潟大))

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。さらに松尾がグランドカノニカルモンテカルロシミュレーションのプログラムを組んだおかげで、よりの確な比較が行われつつある。3

次元方程式理論のケースで同じBridge関数がどう機能するかについても結果が得られつつある。

[7] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究

(須田、末松 (九産大)、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。)更に熱力学的摂動理論による結果も得られつつあり、論文を準備中である。

[8] 自己駆動粒子の相分離とキラリティの研究 (新垣、平岩 (シンガポール大)、秋山、角五 (北大) ら)

自己駆動粒子は引力相互作用をしていなくても、極めて低い密度で群れを作る、すなわち凝集が起きることが知られている。2種類のトルクがあることに注目して群れ(凝集相)の発生タイプについて議論を行なってきている。これは微小管の実験でもみられており、説明が求められている。その実験の論文が2021年に出版された。2021年時点では、粒子シミュレーションによる論文を投稿中である。(理論計算の論文は2022年に出版される。)現在、なぜ群れができるのかについて、平衡状態で使われるアイデアである程度整理することができるのではないかと考えて、モデルを検討し、試し計算を進めている。

出版物の出版状況は活動状況を知る上で指標の1つとなるので、資料として記載する。ここでは2022年の出版物のみを記載する。(2022年度でも2023年のものは記載しない。)

論文:

[1] Tetsuya Hiraiwa, Ryo Akiyama, Daisuke Inoue, Arif Md. Rashedul Kabir, and Akira Kakugo,

Collision-induced torque mediates the transition of chiral dynamic patterns formed by active particles, Phys. Chem. Chem. Phys., 47, 28782-28787 (2022). (上記[8]に関連。)

[2] Michika Takeda, Kotetsu Maruyama, Ryo Akiyama, Tatsuhiko Miyata,

Integral equation study of effective attraction between like-charged particles mediated by cations: Comparison between IPY2 and HNC closures, EPL (Europhys. Letters), 140, 17001-1-7 (2022). (上記[1, 2]に関連。)

[3] Tomoya Iwashita, Masaaki Nagao, Akira Yoshimori, Masahide Terazima, Ryo Akiyama
Usefulness of Higher Order of System-Size Correction for Diffusion Coefficients of Macromolecules: A Molecular Dynamics Study, Chem. Phys. Lett., 807, 140096-1-7 (2022). (上記[3, 5]に関連。)

[4] Shota Arai, Akira Yoshimori, Yuka Nakamura, and Ryo Akiyama,
A Microscopic Theory for Preferential Solvation Effects on Viscosity, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 094602-1-13 (2022). (上記[3]に関連。)

解説：

[1] 秋山 良
エントロピー駆動実効引力相互作用に関する研究
溶液化学研究会誌, Vol. 1, No. 1, 8-16(2022) (上記[3, 4, 6, 7]に関連。)

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15回目を、2022年7月9日に九州大学で開催した。

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

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