

# 教育・研究活動 年次報告書

2019 年度

九州大学大学院理学研究院  
化学部門

2020 年 12 月

## 目 次

はじめに	-----
1. 2019 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 2019 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 2019 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. 2019 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	-----
構造化学分野	-----
界面物理化学分野	-----
[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 2019 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。2019 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、助教 2 名が着任し、准教授 1 名が転出、助教 2 名が退職しています。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 大・ヴィンチコース」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。

2019 年度は、新型コロナウイルスの感染拡大により、大学の学位記授与式が縮小され、化学専攻・化学科でも長い歴史を持つ予餞会が中止になるなど、年度の終わりに少なからぬ影響を受けました。その流行は今なお収まらず、学生と教員が教室で顔を合わせ新しいことを学ぶ、学生と教員が研究室でともに未知の世界を探求する、これらのことが大学にとってとても大切なことと実感させられます。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。

2020 年 12 月

2020 年度 化学部門長 中野 晴之

# 1. 2019年度における化学専攻の活動

## 1.1 教員名簿 (2019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)
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)	松原弘樹(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)	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)	渡邊祥弘(複合領域化学)	山本英治(複合領域化学)
石塚賢太郎(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

'19.4.1	触媒有機化学	石塚 賢太郎 助教	採用 (分子システムデバイス国際リーダー教育センターより)
'20.3.1	生物有機化学	保野 陽子 助教	採用 (大阪市立大学より)
'19.4.30	分子触媒化学	槇田 祐輔 助教	退職
'20.3.31	界面物理化学	松原 弘樹 准教授	転出 (広島大学へ)
'20.3.31	触媒有機化学	石塚 賢太郎 助教	退職

## 1. 3 非常勤講師

奥村 久士	准教授	自然科学研究機構生命創成探究センター
正岡 重行	教授	大阪大学大学院工学研究科
山下 誠	教授	名古屋大学大学院工学研究科
斉藤 拓巳	准教授	東京大学大学院工学系研究科
唐澤 悟	教授	昭和薬科大学薬学部
井口 佳哉	教授	広島大学大学院理学研究科
鈴木 淳史	教授	横浜国立大学大学院環境情報研究院

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

(2019年5月1日現在)

博士課程

1年生 (D1)

相本 雄太郎  
河合 靖貴  
末光 勇輝  
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  
朴<sup>ハク</sup>ウァン・プリム  
WON SUNGYONG

2年生 (D2)

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

3年生 (D3)

辻 美穂  
稻田 壮峰  
谷本 勝一 \*  
増田 志穂美  
脇山 史彬  
大坪 宥太  
若宮 佑真 \*  
村上 亜紀子  
吉丸 翔太郎  
楊 晨  
李 君秋

\*...日本学術振興会特別研究員



## 修士課程

### 1年生 (M1)

松尾 美香	住吉 勝伍	松尾 和哉
隅川 佳星	磯野 晃太郎	白井 力
山下 敦裕	張 奥	橋本 桂吾
脇本 椋太郎	下田 侑史	田島 悠太郎
春田 朝陽	岡林 隆太	林 奈穂
大橋 奈央	浦越 諒	諸岡 和也
大久保 堅三郎	橋本 大資	宮田 透子
大庭 隆也	中村 理志	堀 翔太郎
櫻井 敦也	渡邊 光	柳瀬 由起美
瓜田 敦哉	首藤 元希	岩本 雅輝
中島 航馬	中村 達也	宮崎 栞
近江 賛泰	八木 政俊	渡部 雄太
横尾 浩輝	堀田 徹耶	川原 啓汰
久保 功貴	高木 真由	上田 友香
吉松 大慶	ロング ジェレミー	楠本 多聞
米本 純太	内之倉 朋紘	横田 航希
笹木 健太	田畑 光一朗	浦 研二郎
川相 誓也	田中 孝記	松下 伸
杉原 諒一	深井 雅輝	三浦 崇太郎
枝広 遥毅	田川 幸樹	吉清 倅生
外山 小夏	徐 文煌	ニ ルイチ
桁山 雅旭	飯田 岳史	許 柯
		周 子堯

2年生 (M2)

小宮 晋世	行武 美華	中尾 陸人
平田 拓馬	岳田 彩花	森 拓也
多田 悠亮	有田 頌彬	山口 晋平
矢野 諒介	大谷部 嶺志	吉村 庄太郎
坂口 雄人	須田 慶樹	瀧本 佳樹
湯川 真悠子	古賀 俊弘	平野 佳奈
坂本 直樹	松永 航	中村 孝
三宅 雄一郎	川本 圭佑	小林 薫
西川 享佑	笠谷 和見	千葉 佳祐
栗原 英太郎	満田 るな	川村 昌也
熊谷 友哉	新井 智之	千口 圭介
森本 達美	曾根 諒	安田 裕貴
坂本 理沙	梅野 圭太郎	坂本 弘武
瀬島 響	山川 和馬	高倉 慶
森 陽暉	土居内 大樹	黄 啓安
竹田 宙加	松田 倫太郎	小宮 樹
河野 聖	古閑 卓也	神田 涼亜
高 ヨハン	前田 迪子	原田 瑛志
安富 貴也	伊藤 貴紀	西郷 将生
吉武 正貴	多伊良 夏樹	武田 依子
佐藤 友子	赤嶺 勝広	丁 亨鎮
長尾 正明	楊 興赫	RIZKI RAHMAD

研究生

学振 (PD) 研究員等

楊 皓宇

## 1. 5 2019 年度に授与した大学院学位

### 課程博士 (理学)

- 三浦 大樹      Studies on Guest-responsive Luminescence Properties of Coordination Polymers Based on Nitridotetracyanorhenate(V) Ion  
ニトリドテトラシアノレニウム(V)イオンを用いた配位高分子のゲスト応答的発光特性  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 楊 晨            Theoretical Investigation and Development of a New Method towards Quasi-Degenerate Electronic States in Molecular Systems  
分子系の擬縮退電子状態に向けた理論的調査と新たな方法の開発  
(複合領域化学：理論化学講座)
- 辻 美穂         Control of Spin Transition Behaviour of Hofmann-type MOFs by Crystal Lattice Engineering  
結晶格子設計による Hofmann 型 MOF のスピン転移挙動制御  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 稲田 壮峰       Development of a methodology for quantitative analysis of interaction between membrane proteins and lipids towards comprehensive investigation into biological functions of lipids  
脂質の生命機能解明を目指した膜タンパク質-脂質相互作用定量化法の開発  
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 谷本 勝一       Theoretical study of the effect of solvents on the function and structure of biomolecules by the integral equation theory of solvation  
液体の積分方程式理論による溶媒が生体分子の機能と構造

に及ぼす影響の理論的研究  
(複合領域化学：理論化学講座)

増田 志穂美      Establishment of LSPR-mediated fluorescence imaging  
for cell-attached nanointerface  
細胞接着ナノ界面の観察のための局在プラズモン蛍光イメージング法の確立  
(協力講座：ナノ物性化学講座)

脇山 史彬      Reaction Kinetics of Hydrogen Evolution Catalyzed by  
Platinum(II)-Based Molecular Systems  
白金(II)錯体を触媒とした水素生成反応に関する速度論的研究  
(無機・分析化学：錯体化学講座)

大坪 宥太      Nuclear Spin Isomer Conversion of Molecular Hydrogen  
in Prussian Blue Analogs  
プルシアンブルー類縁体による水素分子の核スピン異性体変換  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)

若宮 佑真      Synthetic Studies of Amphidinol 3  
アンフィジノール3の合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)

吉丸 翔太郎      Support effects of MOFs in their composites with metal  
nanoparticles  
金属ナノ粒子担持配位高分子における担体効果  
(協力講座：ナノ機能化学講座)

#### 課程修士 (理学)

Yemba Baruti      Synthetic Study of Hawaiiimycin Analogs  
ハワイマイシンアナログの合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)

- Rizki Rahmad **Synthetic Study of Oscillatoxin E**  
オシラトキシンEの合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- Jeong Hyengjin **Syntheses and Characterization of Novel Ruthenium Sensitizers with Picolinate Derivatives, and Their Application to TiO<sub>2</sub>-Based Photoelectrochemical Cells for Solar Hydrogen Production**  
丁 亨鎮  
ピコリン酸誘導体を有するルテニウム増感剤を用いた TiO<sub>2</sub> 電極型光電気化学セルの作製と太陽光水素生成への応用  
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 高倉 慶 **Base-Catalyzed Thiol-Disulfane Exchange Reaction and New Catalytic Synthesis Method of Polysulfanes**  
塩基触媒によるチオール-ジスルファン交換反応およびポリスルファン類の触媒的新規合成法  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 新井 智之 **Synthetic Study of the RS Ring of Brevisulcenal-F for Elucidating Relative Configuration**  
相対配置の決定を目的としたブレビスルセナル-FのRS環部の合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 小林 薫 **Mechanistic Study of Phase-Transfer Catalytic Asymmetric Base-Hydrolysis of N-Protected Amino Acid Esters and New Catalyst Development**  
相間移動触媒によるN-保護アミノ酸エステルの不斉塩基加水分解反応の反応機構解析及び新規触媒開発  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 有田 頌彬 **Analysis of cytotoxic activity of intracellularly accumulated dihydrosphingosine in the yeast *Saccharomyces cerevisiae***  
出芽酵母におけるスフィンゴイド塩基ジヒドロスフィンゴシンの過剰蓄積が引き起こす細胞毒性のメカニズム解析

(有機・生物化学：生体情報化学講座)

- 安田 裕貴      Preparation and membrane properties of aminated ceramide derivatives  
アミノ化セラミド誘導体の調製と膜物性分析  
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 坂本 理沙      Analysis of protective mechanism of the HOG pathway under impaired biosynthesis of complex sphingolipids  
複合スフィンゴ脂質代謝破綻による生育阻害から細胞を保護する HOG 経路の機能解析  
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 多田 悠亮      Analysis of the neurological effects in mice induced by environmental chemicals bisphenol derivatives in vivo and in vitro  
環境化学物質ビスフェノール類のマウス脳神経系に対する影響解析  
(有機・生物化学：構造機能生化学講座)
- 平野 佳奈      Effects of acyl chain structure of sphingomyelin on lipid raft formation as studied by fluorescent derivatives  
スフィンゴミエリンアシル鎖構造が脂質ラフト形成に及ぼす影響 – 蛍光スフィンゴミエリンを用いた解析 –  
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 小宮 晋世      Flow system for adsorptive removal of aged odor in Japanese sake with gold nanoparticles supported on silica  
シリカ担持金ナノ粒子による日本酒劣化臭の流通式吸着除去  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 平田 拓馬      Synthesis of Fused Polycyclic pi-Conjugated Compounds Composed of Thiophene and Azulene Units

チオフェンとアズレンからなる縮合多環型  $\pi$  共役系化合物の合成

(協力講座：構造有機化学講座)

- 吉武 正貴      **Study on Catalytic N-Acyl Nitrene Transfer using 1,4,2-Dioxazole-5-ones: Synthesis of Optically Active N-Acyl Sulfimides**  
ジオキサゾロンを窒素源とする触媒的ナイトレン移動反応：光学活性 N-アシルスルフィミドの合成法の研究  
(協力講座：有機反応化学講座)
- 原田 瑛志      **Selective removal of sulfur compounds in Japanese sake by adsorption on mordenite-supported Ag nanoparticles**  
モルデナイト担持 Ag ナノ粒子吸着剤を用いた日本酒に含まれ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)
- 山口 晋平      **Low-flux scanning-electron-diffraction (LFSED) reveals local structures inside a single membrane domain**  
低流量走査電子線散乱法(LFSED)による秩序的膜領域内部の構造解析  
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 坂本 直樹      **Characterization and preparation of liposomes composed of short elastin-like peptides conjugated to fatty acids**  
短鎖脂肪酸付加エラスチン様ペプチドを用いたリポソーム形成とその特性解析  
(協力講座：生体分子化学講座)
- 中村 孝      **Synthesis and Complexation of Chiral Tripodal-like Ligands from Proline**  
プロリンを出発原料としたキラルなトリポータル様配位子の合成と錯体化  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)

- 矢野 諒介      **Synthesis and Properties of Novel  $\pi$ -Extended Porphycenes Fused with Thiophenes**  
チオフェンが縮環した新規  $\pi$  拡張型ポルフィセンの合成と物性  
(協力講座：構造有機化学講座)
- 高 ヨハン      **Ultra-deep desulfurization of fuel by photoreaction with supported noble metal nanoparticles**  
担持貴金属ナノ粒子を用いた光反応による燃料油からの超深度脱硫  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 土居内 大樹      **The Study of Site-Selective C-H Oxidation Catalyzed by Non-Heme-Type Durable Ruthenium Complexes**  
高耐久性非ヘム型ルテニウム錯体を用いた位置選択的 C-H 酸化反応の研究  
(協力講座：有機反応化学講座)
- 安富 貴也      **Unified Synthesis of the DEF and GHI Rings and Synthetic Study of the BCDEF Ring of Maitotoxin**  
マイトトキシンの DEF 環部と GHI 環部の統一的合成および BCDEF 環部の合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 黄啓安      **Isomerization of Allylic Esters over Supported Platinum and Gold Catalysts**  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 古閑 卓也      **Formation of raft-like ordered domains in outer leaflet and its effects on the phase behavior of inner leaflet**  
脂質二重層膜外葉でのラフト秩序領域の形成とそれが内葉に及ぼす影響  
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 長尾 正明      **System size dependence of diffusion coefficient of a protein in water using molecular dynamics simulation**



分子動力学法を用いたタンパク質の拡散係数におけるシステムサイズ依存性の検討  
(複合領域化学：量子生物化学講座)

笠谷 和見 Investigation of binding affinity and binding mode of bisphenol analogs to retinoid-related orphan receptor, ROR $\gamma$   
核内受容体 ROR $\gamma$  に対するビスフェノールアナログの結合能および結合構造の解析  
(協力講座：生体分子化学講座)

伊藤 貴紀 The physiological role of phosphatidylethanolamine in budding yeast in post-diauxic shift phase  
出芽酵母のポストダイオキシックシフト期におけるホスファチジルエタノールアミンの生理学的役割の解明  
(有機・生物化学：生体情報化学講座)

吉村 庄太郎 Synthetic Study of the AB Ring of Maitotoxin  
マイトトキシンの AB 環部の合成研究  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)

熊谷 友哉 Elucidation of the function of pancreatic non-endocrine steroids using pseudo-islets consisted of INS-1 cells  
疑似膵島化した INS-1 細胞を用いた膵非内分泌型ステロイドの機能解明  
(有機・生物化学：生体情報化学講座)

森 陽暉 Catalytic Carbonylation of Alkenes  
アルケン類の触媒的カルボニル化反応  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)

梅野 圭太郎 Synthesis and Structure Revision of the C30-C63 Section of Karlotoxin 2  
カルロトキシンの C30-C63 部分の合成と構造改訂  
(有機・生物化学：生物有機化学講座)

- 曾根 諒      **Synthesis and use for asymmetric reactions of 1,10-phenanthroline having chiral cleft structures**  
キラルクレフト構造を有する 1,10-フェナントロリンの合成と不斉反応への応用  
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 中尾 陸人      **Elucidation of the function of porin proteins in mitochondrial phospholipid metabolism and transport**  
ポリンタンパク質のミトコンドリア内リン脂質代謝、輸送に関する機能解明  
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 河野 聖      **Analysis of Growth Condition and Electronic Excitation of Silver Cluster Ions by Plasma-Emission and Optical-Absorption Spectroscopy**  
銀クラスターイオンの生成条件と電子励起挙動の解析：プラズマ発光分光と光吸収分光  
(物理化学：量子化学講座)
- 瀧本 佳樹      **Theoretical study on the role of Mg(II) ion in MeTP hydrolysis reaction using 3D-RISM-SCF method**  
3D-RISM-SCF 法を用いた MeTP 加水分解反応における Mg(II)イオンの寄与に関する理論的研究  
(複合領域化学：理論化学講座)
- 西川 享佑      **DFT analysis of NO-molecule adsorption on doped and undoped silver cluster cations: Doping effects of cobalt and nickel**  
DFT 計算による遷移金属ドーピング銀クラスター正イオンへの NO 分子吸着の解析：コバルトおよびニッケル原子ドーピングの効果  
(物理化学：量子化学講座)
- 川村 昌也      **Excited-State Proton Transfer of Hydroxybenzoic Acids**  
ヒドロキシ安息香酸の励起状態プロトン移動  
(物理化学：構造化学)

- 西郷 将生      Relation between Excited-State Structural Change and Thermally Activated Delayed Fluorescence in Carbazole-Benzonitrile Derivatives  
カルバゾール-ベンゾニトリル誘導体における励起状態構造変化と熱活性化遅延蛍光に関する研究  
(無機・分析化学：分光分析化学講座)
- 赤嶺 勝広      Electrochemical Water Splitting Using Mesoporous TiO<sub>2</sub> Anode and Cathode Respectively Modified with Co and Pt Porphyrins  
Co 及び Pt ポルフィリンで修飾した TiO<sub>2</sub> 電極による電気化学的水分解反応  
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 佐藤 友子      Incorporation of Luminescent Boron-complex Ligand to Coordination Polymer Framework Aimed for Guest Sensing  
ゲストセンシングを指向した発光性ホウ素錯体配位子の配位高分子骨格への組み込み  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 瀬島 響      Crystal Structures and Polarization Switching of Heterometallic Pseudo-Racemic Complexes based on Novel Synthetic Strategy  
新奇合成戦略に基づく異種金属擬ラセミ錯体結晶の構造と分極スイッチング  
(協力講座：光機能物質化学講座)
- 松永 航      Phase Separation in Gelatin Solutions and Gels  
ゼラチン水溶液とゲルの相分離  
(物理化学：分散系物理化学講座)
- 神田 涼亜      Effects of Hybrid Phospholipid on Line Tension and Morphology of Liquid-like Domain in Lipid Mixed Vesicle  
脂質混合ベシクルにおける線張力およびドメイン形態へのハイブリッドリン脂質の効果

(協力講座：ソフト界面化学講座)

- 森 拓也      **Study on Network Structure dependence of Mechanical Properties of Thermo-sensitive Triblock Copolymer Gels**  
ブロック共重合体ゲルの力学特性のネットワーク構造依存性に関する研究  
(物理化学：分散系物理化学講座)
- 須田 慶樹      **Effect of depletion force driven by lipid molecules on crystallization of bacteriorhodopsins: Analysis based on binary hard-disk model**  
バクテリオロドプシン結晶形成における脂質分子の枯渇効果：2成分剛体円盤系に基づく解析  
(複合領域化学：量子生物化学講座)
- 満田 るな      **Domain Formation and Molecular Miscibility in Adsorbed Film of Hybrid Alcohol Mixture at Alkane/Water Interface**  
ハイブリッドアルコール混合系のアルカン/水界面吸着膜におけるドメイン形成と分子混和性  
(協力講座：ソフト界面化学講座)
- 竹田 宙加      **Effective second virial coefficients of macroanion in an electrolyte solution**  
電解質溶液中のマクロアニオンの実効第2ビリアル係数  
(複合領域化学：量子生物化学講座)
- 森本 達美      **Creation of Pt based nanoalloy electrode catalysts for selective oxidation of lactic acid and its application to fuel cells**  
乳酸の選択的酸化反応に用いる白金基ナノ合金電極触媒の創製と燃料電池への応用  
(協力講座：ナノ機能化学講座)

- 前田 迪子      **Formation Control of Calcium Phosphates in the Inner Aqueous Phase of Liposome**  
リポソーム内水相におけるリン酸カルシウム類の制御形成  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 古賀 俊弘      **Photochemical and Electrochemical CO<sub>2</sub> Reduction Catalyzed by a Co-NHC Complex**  
Co-NHC 錯体を触媒とした光化学的及び電気化学的二酸化炭素還元反応  
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 湯川 真悠子      **Direct Synthesis of Prussian Blue Nanoparticles in Liposomes and Cesium Ion Adsorption Property**  
リポソーム内におけるプルシアンブルーナノ粒子の直接合成と Cs<sup>+</sup>吸着能の評価  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 坂本 弘武      **Effect of Nonionic Additives in Cationic Surfactant Adsorbed Films on Surface Freezing and O/W Emulsion Stability**  
非イオン添加物が陽イオン界面活性剤吸着膜の表面凝固及び O/W エマルションの安定性に与える影響  
(物理化学：界面物理化学講座)
- 松田 倫太郎      **Characteristics of inverted cone shaped plasmonic nanopore structure**  
すり鉢型プラズモニクナノポア構造の作製と評価  
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- 千口 圭介      **Effect of Particle Size on Physical Property of Pickering Emulsion**  
ピッカリングエマルションの物性に及ぼす粒子サイズの影響  
(物理化学：界面物理化学講座)

- 三宅 雄一郎 Study on Plasmonic Biosensor Using Multilayered Metal Nanoparticle Sheets  
金属ナノ粒子多層構造を用いたプラズモニックバイオセンサーの研究  
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- 川本 圭佑 Natural attenuation of U and As at the Ningyo-toge U mine  
人形峠ウラン鉱山における坑水自然浄化機構の解明  
(無機・分析化学：無機反応化学講座)
- 大谷部 嶺志 Preparation of solid-solution Fe-Ru nanoalloy catalysts with bcc structures and their application to ammonia synthesis  
体心立方構造を持つ固溶体 Fe-Ru ナノ合金の作製とアンモニア合成反応への適用  
(協力講座：ナノ機能化学講座)
- 岳田 彩花 Mechanism of MnO<sub>2</sub> formation by fungi at the Ningyo-toge U mine  
人形峠ウラン鉱山における Mn 酸化菌による MnO<sub>2</sub> 生成機構の解明  
(無機・分析化学：無機反応化学講座)
- 坂口 雄人 Light-Driven Carbon Dioxide Reduction Catalyzed by Diazapyridinophane First-Row Transition Metal Complexes  
ジアザピリジノファン錯体を触媒とした光化学的二酸化炭素還元反応に関する研究  
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 小宮 樹 Occurrence of Cesium-rich Micro-particles in Indoor Environment in Fukushima  
屋内における放射性 Cs 含有微粒子の定量と分布状況の解明  
(無機・分析化学：無機反応化学講座)

- 楊 興赫 Control of Membrane Deformation by Forming Coordination Polymers on Giant Unilamellar Vesicles  
ジャイアントベシクル上での配位高分子形成による膜変形の制御  
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 多伊良 夏樹 Mechanistic Studies on the Oxygen Evolution Catalyzed by a Monocobalt Polymolybdate  
単核コバルトポリオキソメタレートに触媒とした酸素発生反応に関する機構的研究  
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 栗原 英太郎 Release of fuel fragments with Pu from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant  
福島第一原子力発電所から放出されたプルトニウム含有微粒子の同位体特性と化学種の解明  
(無機・分析化学：無機反応化学講座)
- 山川 和馬 H<sub>2</sub> Evolution Catalyzed by Covalently Linked Pt(bpy) Dimers and the Enhancement Using the Optimized Pt-Pt Interaction Mode  
共有結合で二量化した Pt(bpy)二核錯体の合成及び白金間相互作用による H<sub>2</sub> 生成触媒活性の最適化  
(無機・分析化学：錯体化学講座)

## 1. 6 2019年度関係行事一覧

### (1) 講演会

- [1] 講演者 Prof. Muralee Murugesu (University of Ottawa)  
演題 The Use of Metal-Organic Frameworks as Crystalline Sponges  
開催日 2019年4月9日  
世話人 酒井 健
- [2] 講演者 奥村久士 准教授 (自然科学研究機構生命創成探究センター)  
演題 分子動力学シミュレーションで見るアルツハイマー病原因物質  
開催日 2019年7月17日  
世話人 秋山 良
- [3] 講演者 正岡 重行 教授 (大阪大学大学院工学研究科)  
演題 5つの金属イオンが織り成す革新機能  
開催日 2019年10月2日  
世話人 小澤 弘宜
- [4] 講演者 山下 誠 教授 (名古屋大学大学院工学研究科)  
演題 高反応性13族元素化合物の特徴的な性質  
開催日 2019年10月29日  
世話人 桑野 良一
- [5] 講演者 斉藤 拓巳 准教授 (東京大学大学院工学系研究科)  
演題 深部地下環境の天然有機物  
開催日 2019年11月5日  
世話人 宇都宮 聡
- [6] 講演者 唐澤 悟 教授 (昭和薬科大学薬学部)  
演題 アミノキノリン誘導体の発光特性  
開催日 2019年12月13日  
世話人 佐藤 治



- [7] 講演者 井口 佳哉 教授 (広島大学大学院理学研究科)  
演 題 極低温・気相分光による, 超分子化学の研究  
開催日 2019年12月17日  
世話人 堀尾 琢哉
- [8] 講演者 鈴木 淳史 教授 (横浜国立大学大学院環境情報研究院)  
演 題 架橋高分子表面に見られるマクロ物性の制御  
-摩擦・粘着・パターン形成-  
開催日 2019年12月25日  
世話人 安中 雅彦

## (2) 談話会・報告会

前期特別談話会

開催日 : 2019年8月7日(水)

会 場 : 九州大学 工学部大講義室[ウエスト2号館 総合学習プラザ2階]

第1部 公開講演会

～一般向け講演～

- L01 第7周期pブロック元素水素化物の理論的研究  
理論化学 金丸恒大
- L02 原子の数を操る化学 ～クラスターの世界～  
量子化学 寺寄亨
- L03 錯体ネットワークの動力学と相転移  
錯体物性化学 大谷亮
- L04 持続可能な社会の実現に資する高機能ナノ材料の創製  
ナノ機能化学 山内美穂
- L05 ナノの世界で光を操る  
ナノ物性化学 増田志穂美

L06 ハロゲン含有ビスフェノールがおよぼす脳神経系に発現する核内受容体への影響

構造機能生化学 岩本雅輝

L07 越えていく触媒開発

有機反応化学 土居内大樹

L08 有機分子を触媒として用いた反応の開発

触媒有機化学 若藤空大

L09 エラスチン様ペプチドの可逆的な温度依存的自己凝集

生体分子化学 野瀬健

～一般及び高校生向け講演～

L10 色を見てミクロの世界を探る

分光分析化学 恩田健

L11 ハイドロゲルの滑り摩擦と表面形状

分散系物理化学 竹藤春菜

第2部 ポスターセッション

～高校生向けポスター～

H01 Environmental Nano-materials Chemistry ～環境化学の最前線～

無機反応化学 川本圭佑 栗原英太郎 小宮樹 岳田彩花 諸岡和也 横尾浩輝

H02 生体膜の統合分析を目指して Road to Lipid

生体分析化学 近江賛泰 田島悠太郎 橋本大資 渡邊光 NIRUIQI

H03 光で探る分子の構造と性質

構造化学 渡邊巧 矢城勇樹 脇本椋太郎 横田航希 川村昌也

H04 生物活性天然有機化合物の全合成を基盤としたケミカルバイオロジー

生物有機化学 内之倉朋紘 中村理志 深井雅輝 山下敦裕 渡部雄太

H05 細胞を舞台に活躍する分子たち

生体情報化学 首藤元希 三浦崇太郎 瓜田敦哉 柳瀬由起美

H06 統計力学と生物物理・材料化学  
量子生物化学 岩下智哉 高倉新平 松尾美香 櫻井敦也 大久保堅三郎  
長尾正明 竹田宙加 須田慶樹 秋山良

H07  $\pi$ 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 成田昌弘 矢野諒介 平田拓馬 大庭隆也

H08 放射性核種を用いた環境動態研究  
環境動態化学 中本竜郎

H09 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 瀬島響 ロングジェレミー 徐文煌

～一年生向けポスター～

P01 クリーンエネルギー社会を実現させる金属錯体の開発 ～太陽光を化学エネルギーへ～  
錯体化学 嘉村拓海 山田実 若藤恭暢 楊皓宇

P02 金属錯体を用いた機能集積場の構築  
錯体物性化学 笠原ののか 許嘉能 寺西勇登 本多めぐみ

P03 一兆分の一秒のダイナミクスを捉える超音速分光  
分光分析化学 岡林隆太 久保功貴 下田侑史 田中孝記 宮崎葉

P04 原子の数で性質が変わるクラスターの探究 ～実験装置の設計・製作から反応の測定・解析まで～  
量子化学Ⅰ 楠本多聞 林奈穂 飯田岳史

P05 量子化学はこんなにおもしろい!  
量子化学Ⅱ 原田賢介

P06 界面吸着膜とエマルション  
界面物理化学 坂本弘武 千口圭介

P07 KAIMEN トーク! ドメイン大好き院生  
ソフト界面化学 堀田徹耶 上田友香

- P08 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 竹藤春菜 松永航 森拓也 米本純太
- P09 核内受容体に有害環境化学物質が引き起こす生体内シグナル毒性  
構造機能生化学 田川幸樹 岩本雅輝
- P10 生体分子のデザインと機能評価の方法  
生体分子化学 大橋奈央 住吉勝伍 松下伸 吉松大慶
- P11 空気 de 手軽に酸化反応!  
有機反応化学 白岩あゆみ 渡直樹
- P12 コンピューターでわかる化学の世界  
理論化学 田畑光一郎 堀翔太郎 瀧本佳樹
- P13 「触媒」という神アイテムを知っていますか?  
触媒有機化学 川相誓也
- P14 Shokubai GO  
分子触媒化学 I Sungyong Won 張奥 浦越諒 松村彩郁
- P15 NBO と IQA で考える “立体反発”  
分子触媒化学 II 吉清倅生 末永正彦
- P16 ナノバイオテクノロジーで未来を創る  
ナノ物性化学 磯野晃太郎 金城信哉 西島孝 萩尾蓮
- P17 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 吉丸翔太郎 江口弘人 森本達美 大谷部嶺志  
浦研二郎 北島伸一郎 赤井翔

後期特別談話会

開催日：2019年11月30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

第1部 公開講演会

～口頭講演～

- |     |  |         |      |
|-----|--|---------|------|
| L01 | 島県における環境トリチウムの動態   | 環境動態化学  | 杉原真司 |
| L02 | 環境科学の最先端とその未来：<br>福島第一原発原子力災害への科学的貢献   | 無機反応化学  | 宇都宮聡 |
| L03 | ヒドロキシ安息香酸におけるプロトン移動  | 構造化学    | 川村昌也 |
| L04 | 生体膜脂質の構造多様性崩壊に対する生物の生存戦略   | 生体情報化学  | 谷元洋  |
| L05 | 麻酔の「化学」  | 生体分析化学  | 松森信明 |
| L06 | ベシクルの不均一構造の制御  | ソフト界面化学 | 神田涼亜 |
| L07 | Polarization Switching via Directional Electron Transfer in Molecular Crystals | 光機能物質化学 | 呉樹旗  |
| L08 | 抗真菌物質アンフィジノール3の合成研究  | 生物有機化学  | 若宮佑真 |
| L09 | 核スピン異性体の化学   | 量子化学Ⅱ   | 原田賢介 |

L10 できないことを可能にする触媒システム  
ー ベンゼン環の不斉水素化に向けて

分子触媒化学 桑野良一

L11 アズレンとチオフェンから構成される不斉ヘリセンの合成と酸化還元特性  
構造有機化学 谷文都

～ポスター発表～

P01 金属錯体触媒を基盤とした人工光合成の実現  
錯体化学 嘉村拓海 山田実 若藤恭暢 楊皓宇

P02 Environmental Nano-materials Chemistry  
原子・ナノレベルの視点から解き明かす環境問題  
無機反応化学 諸岡和也 横尾浩輝 沖拓海 高見龍 武原政人

P03 全集中！  $\infty$ ノ型 配位高分子 !!!  
錯体物性化学 笠原ののか 許嘉能 寺西勇登 本多めぐみ

P04 生体膜の統合分析を目指して Road to Lipid  
生体分析化学 合屋茜 後藤伯照 空田晃 田中康裕 森藤将之

P05 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 岡林隆太 久保功貴 下田侑史 田中孝記 宮崎栞

P06 光で探る分子の構造と性質  
構造化学 渡邊巧 矢城勇樹 脇本椋太郎 横田航希

P07 「クラスター」の謎に迫る サイズの違いで性質を変える微小な粒子  
量子化学 麻生真介 内布直洋 楠本多聞 林奈穂 飯田岳史

P08 量子化学はこんなにおもしろい！  
量子化学II 原田賢介

P09 界面吸着膜とエマルション  
界面物理化学 坂本弘武 千口圭介

- P10 Domain is in our Domain  
ソフト界面化学 白井力 堀田徹耶 上田友香
- P11 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 松永航 森拓也 米本純太  
今吉隆昭 梶本晃太 黒岩勇
- P12 生物活性天然有機化合物の全合成を基盤としたケミカルバイオロジー  
生物有機化学 内之倉朋紘 中村理志 深井雅輝 山下敦裕 渡部雄太
- P13 有害環境化学物質によるシグナル毒性の受容体化学  
構造機能生化学 岩本雅輝 田川幸樹
- P14 細胞を舞台に活躍する分子たち  
生体情報化学 首藤元希 三浦崇太郎 瓜田敦哉 柳瀬由起美
- P15 生体分子を知る ~分子のデザインと機能性評価~  
生体分子化学 清水真凜 大橋奈央 住吉勝伍 松下伸 吉松大慶
- P16 グリーンケミストリーを指向した触媒的不斉ナイトレン移動反応の開発  
有機反応化学 吉武正貴
- P17 理論と計算と化学  
理論化学 イデユン 奥田綾音 古賀由真 櫻江里佳子 辻真樹
- P18 触媒やろうぜ  
触媒有機化学 川田真依 小松弘樹 酒井遼 鹿間裕太 土肥弘嗣
- P19 <sup>H K Z</sup> 芳香族をぶっ壊す!  
分子触媒化学 SungyongWon 張奥 浦越諒 松村彩郁
- P20 IQAによるシクロヘキサン舟形配座における”歪み”の再考  
分子触媒化学II 末永正彦 吉清倅生
- P21 統計力学とシミュレーションを用いた生命現象の解析  
量子生物化学 岩下智哉 高倉新平 大久保堅三郎 櫻井敦也 松尾美香

須田慶樹 竹田宙加 長尾正明 秋山良

- P22  $\pi$ 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 中西京香 椎木大地
- P23 ナノバイオテクノロジーで未来を創る  
ナノ物性化学 磯野晃太郎 金城信哉 西島孝 萩尾蓮
- P24 放射性核種を用いた環境動態研究  
環境動態化学 中本竜郎
- P25 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 吉丸翔太郎 江口弘人 森本達美  
大谷部嶺志 浦研二郎 北島伸一郎 赤井翔
- P26 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 徐文煌

### (3) 2019年度修士課程論文公開講演会

開催日：2020年2月13日(木)・14日(金)

会場：講義棟301号室・ウエスト1号館B314号室

### (4) 2019年度学士課程卒業研究業績報告会

開催日：2020年3月2日(月)・3日(火)

会場：理学部 大会議室



## 2. 2019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(3名)、修士2年(6名)、博士課程1年(1名)、博士課程2年(3名)、博士課程3年(2名)、及び研究生(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、及び研究生に対しては、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年生は卒業研究の実施過程で自律的修学姿勢と論理的思考に基づいた問題発見・解決力の自己養成意識を醸成し、社会人として自立可能な素養を育むことが目標。大学院学生は、習得した専門知識と技術、思考法を基盤とした新規課題の探索・企画・実行力、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自律的な人材へ成長させることが目標。なお、2019年度は配属学生なし。

(岡上グループ)

学部4年生については、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、2019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)類が配位子の、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。近年の具体的目標は、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。

(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(POSS)の化学について研究を行っている。現在は、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合成を主なテーマとしており、特に、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)周りの構造評価をテーマとした研究を行っている。

## 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 : (錯体化学研究室) <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Sakutai/>

## 錯体物性化学分野

大場正昭 教授、大谷亮 准教授

### 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 9 年目となる本年度は、学部 4 年生 4 名、修士学生 11 名、博士学生 3 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、磁気化学、光化学、生物無機化学および脂質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、ポリ酸の合成、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、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、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 14 件の口頭発表と 24 件のポスター発表を行った。博士 2 年生の 1 名、および修士 2 年生の 3 名は、国内外の国際学会で計 4 件のポスター発表を、博

士3年生の1名、博士2年生の1名、修士1年生の1名は国内外の学会で計3件の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、国内学会で講演賞2件とポスター賞6件を受賞した。

本年度は2名の学生が、「Nuclear Spin Isomer Conversion of Molecular Hydrogen in Prussian Blue Analogs (プルシアンブルー類縁体による水素分子の核スピン異性体変換)」、「Control of Spin Transition Behaviour of Hofmann-type MOFs by Crystal Lattice Engineering (結晶格子設計によるHofmann型MOFのスピン転移挙動制御)」の研究で、博士号を取得した。また、3件の博士論文の副査を務めた。

12月から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。学生と共同研究を進めることで、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と特異なメゾスケール空間を形成可能な脂質二重膜を融合させて、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）リポソーム内水相での金属錯体の直接合成、（８）発光性錯体液晶の開発、（９）多核クラスター構造による分子触媒の開発、（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を積極的に進めた。本年度も論文発表が翌年に持ち越したものが多くあるので、今後はより積極的に論文を発表する。

## 研究分野

錯体化学、磁気化学、光化学、生物無機化学、脂質化学

## 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
- ・ 親脂質性金属錯体の開発
- ・ 発光性錯体液晶の開発
- ・ 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、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。これらの講義は着任後5回目となり、質・内容ともに充実度が増した。木下は学部2年後期に開講される「化学序説」の一部を担当し、細胞膜の描像に関する最先端研究に関する講義を行った。また、学生実験では「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。

また、大学院においては、松森および木下は「分析化学特論 II」を担当し、やはりバイオ分析を志向した NMR および各種顕微鏡についての発展的な講義を行った。

さらに、学外での教育活動として、松森は筑前高校での出前授業や福岡県高校教員を対象にしたリカレント教育を行った。木下は佐世保北高校での出前授業を担当した。

一方、研究室においては、後述する生体膜に関する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、中国人およびタイ人留学生を受け入れ、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3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

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。さらに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。

(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。

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病気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。

恩田担当の学部教育としては、理学科以外の1年生を対象とした「基礎化学」の講義を昨年に引き続き行った。この講義では、必ずしも高校で化学を学んでいない学生に、身の回りの世界を化学的に見る目を養うことを目標にした。実際の受講者は、医学部保健学科、芸術工学部環境設計科など、高校時代だけでなく専門課程でも化学的知識を必要とする学生から、経済学部、教育学部、法学部、文学部などのように化学にほとんど縁のない学生まで幅広かった。そのためなるべく身近な話題を示す一方、化学における系統的な理解も損なわないように配慮した。また化学科の学生向けには、例年通り2年生を対象とした分析化学Ⅱを担当した。本講義は、分光分析に関する項目を、基礎的な概念から実際の測定技術まで幅広く学んでもらうものである。高校までの化学では、あまりまとまって学ぶ機会のない項目であることから、有機化学や物理化学など他の化学の分野の関連を意識した講義を行った。この講義においても出席率、試験の成績とも良好であった。さらに今年は、新たに大学院生対象の分析化学特論Ⅲの講義を行った。分光分析の理解に必要となる光と物質の相互作用について詳細な解説を行った。具体的には、古典的な光と物質の相互作用、非線形光学過程、時間を含む摂動論を用いた半古典的な光と物質の相互作用、超高速分光の原理などをテーマにした。

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、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。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。

研究室に配属された学部4年生、4名、修士1年学生、6名に対しては、毎週1回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を行い、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。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. Lett.)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。また、学会でも多数賞を取り(国内学会三件)、発表能力も順調に指導できていると言える。加えて、博士後期課程に進学する学生はDC1に採択され、客観的に優れた人材を育てることに成功している。さらに修士の学生には、8件の国際会議への参加など国際経験も積ませた。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なっている。

## 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。

### 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)
- ・ベイポクロムズ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)
- ・酸化グラフェンの光還元メカニズム(筑波大・羽田グループ、岡山大・仁科グループ)
- ・鉛ハライドペロブスカイトのTR-PEEM(KEK・福本先生、東大・木下先生)
- ・蓄光機能を持った有機結晶のトラップの定量解析(九州大・嘉部グループ)
- ・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)

## 2. 新学術領域「革新的光物質変換」

- ・アリアルホスフィン  $\text{Re}(\text{I})$  錯体における励起状態構造変化と  $\text{CO}_2$  還元光触媒活性(東工大・石谷グループ)
- ・超分子 2 核錯体  $\text{CO}_2$  光還元触媒(東工大・石谷グループ)
- ・アリアルホスフィン  $\text{Cu}(\text{I})$  錯体の励起状態構造と発光特性(東工大・石谷グループ)
- ・配位子空間を制御した  $\text{Ru}(\text{II})$  ターピリジン錯体における励起状態構造変化と発光寿命(阪大・船橋グループ)
- ・クロロフィルにおける光毒性制御に関連する光励起構造変化過程(立命館大・民秋グループ)

## 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)
- ・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)

## 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)

## 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)

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 4 件掲載に至った。また、宮田助教は第 14 回 PCCP Prize を受賞したり、分子科学森野基金の若手研究助成の対象に選ばれたりと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。特に現在問題となっている環境汚染の本質的な解明を原子・ナノの視点から目指す。

### <本年度の研究活動実績>

- ・ 国内学会および国際学会で計 2 件発表、内学生の発表件数は 1 件。
- ・ 発表論文 5 報
- ・ h-index: 40 (google scholar), 34 (Scopus)

### 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）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

### 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

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】

原子や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ミクロな視点から理解し、これら物理化学の素養を基礎に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、種々の実験技術の修得、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。

#### 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)

演算増幅器を用いた電子回路の作製、オシロスコープを用いた回路特性の測定、加算回路や積分回路・微分回路の組み立て・理解など、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(2名)、修士1年(3名)、修士2年(2名)、博士1年(1名)を対象に教育を行った。新規配属の学部生には、まず、真空装置と電子機器からなる実験装置の操作を習得させ、実験に取り組めるように訓練した。また、理学部工場の実習に全員が参加して金属加工を体験した。それぞれに、金属クラスターの化学反応、分光スペクトルの解析などの課題を与え、卒業論文をまとめた。修士1年の学生は、卒業研究の成果をさらに発展させる研究に取り組んだ。修士2年の学生は、前年度からの研究を継続して修士論文をまとめた。これらの成果を、ナノ学会(5月、鹿児島)、分子科学討論会(9月、名古屋)、Fujihara Seminar(10月、苫小牧)、Workshop on Advances in Cluster Beam Deposition(10月、沖縄)等で学生が発表した。なお、新型コロナウイルスの影響で開催は中止となったが、日本化学会春季年会(3月、野田)でも発表を行った。修士2年の学生の一人が、分子科学討論会にて優秀ポスター賞を受賞したことは特筆に値する。

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)の第II部「反応速度論とダイナミクス」の輪読を始めた。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】

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、また与えられた研究課題を確実に実行できる能力を得させることを目標としている。修士課程の学生については、分子分光学の専門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能力を向上し、研究課題を発展・展開することができるようにすることを目標として

いる。また発表の能力を高め、外国語で論文を書ける力を得させることを目標にしている。

#### 〈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。

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、現代英会話により、英語の語学力と英会話能力を鍛え、かつ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幸田・小谷・染田・阿波賀編「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、文献調査、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、討論を行う。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・演習を行う。本年度は研究室の所属学生不在のため、研究の中間報告および4年生スタートアップセミナーは行わなかった。

#### 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、ミクロ（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。

## 〈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ピングされた場合には、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。これまでに、開殻3d遷移金属(M=Sc~Ni)をドーピングした正・負イオン種 $Ag_nM^{\pm}$ について酸素分子との反応性を調べ、Cr, Mn以外の多くの場合に、電荷を考慮した総価電子数が18個となるサイズで反応性が特異的に低下することを見出した。これらの結果は、18電子系においてs-d軌道間の結合が促進され、電子閉殻構造が形成されることを示唆している。本年度は、まず正イオン種に関する結果をまとめて論文発表した[J. Phys. Chem. C **123**, 25890 (2019)]。さらに、負イオン種の実験をすべてのドーピング種に対して完了した。この中で、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、量子化学計算を丹念に行って反応性と光電子スペクトルの双方を同時に説明し、先行研究の解釈を修正する結論を得て論文発表した[Chem. Phys. Lett. **753**, 137613 (2020)]。

第2のテーマでは、宇宙空間での分子進化過程の解明を目的とした研究を推進した。有機分子誕生のメカニズムに注目して、Coクラスター正イオン $Co_n^+$ 上における水素分子 $H_2$ と一酸化炭素分子COとの反応に取り組む、前年度に特定のサイズの $Co_n^+$ 上でホルムアルデヒド $H_2CO$ が僅かながら生成した可能性を示す結果を得たが、本年度は、実験条件等をさらに精査して、 $H_2$ -CO間の反応メカニズムを探った。

主に化学反応を実験手段として展開している本研究で、電子構造を実測する実験の重要性を改めて認識し、負イオン種を対象に光電子スペクトルを測定する光電子イメージ

ング分光装置の立ち上げに着手し、装置の設計・製作を開始した。

#### 課題(2)：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  $\text{Ag}_n$  クラスターを対象に、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。前年度までに  $n \leq 70$  の領域で光解離分光・吸収分光を行い、 $n \geq 25$  で現れる表面プラズモン共鳴の前兆が、球形や楕円体の銀ナノ粒子に現れる吸収スペクトルの特徴へと変化する様子を捉えた。 $n \leq 20$  の小さなサイズでは、サイズ毎にスペクトルの形状が大きく変化するが、これまで測定波長範囲が限られていた。そこで、昨年度に導入したパラメトリック発振 (OPO) レーザーを活用して測定波長を紫外から近赤外まで広げ、 $2 \leq n \leq 40$  のすべてのサイズでスペクトルの測定を行った。その結果、電子遷移の特徴を定量的に解析する基礎データを得た。

#### 課題(3)：発光分析による金属クラスター成長過程の研究

クラスターの実験において肝要な、目的のサイズを効率よく生成する手段の確立を目標として、クラスター生成条件の解析に前年度から取り組んできた。我々が金属クラスター発生源とするマグネトロンスパッタ法において、スパッタ用 Ar イオンを生成する放電領域からのプラズマ発光を分析し、クラスター成長室内の様子を探った。スパッタされた銀原子の発光強度と、生成された銀クラスターのサイズ分布との関係を、放電パワーを変えながら測定した結果、放電パワーとともに銀原子量が増加する一方で、銀原子の分布領域も広がるために、単純な予測ほどには平均サイズの増加が見られなかった。つまり、大きなサイズの生成には、成長室内の銀原子の空間分布を抑え、銀原子密度を高めることが鍵であることを突き止めた [Chem. Lett. 48, 1537 (2019)]。この成果は、第 13 回分子科学討論会にて学生が優秀ポスター賞を受賞したほか、クラスターを担持して材料化する機能性材料分野からも国際的に注目を集めている。

#### 課題(4)：イオン光学系シミュレーションに基づく質量分析計の改良

昨年度、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、飛行時間型質量分析計の再設計を行い、特にイオンを反射するリフレクトロンの電極形状を工夫し、イオンビームの空間集束性を高めることに成功した。本年度は、この新たなリフレクトロンを共同研究先の装置にも導入し、同様のイオン検出効率の改善を実証した。以上の実績をもとに、この成果を質量分析の国際専門誌に論文発表した [Int. J. Mass Spectrom. 451, 116311 (2020)]。

#### 課題(5)：X線吸収分光による金属化合物クラスターの化学状態測定

株式会社コンポン研究所との共同研究で、触媒材料の活性サイトのモデルとなるクラスターを取り上げ、放射光を利用したX線吸収分光 (XAS) を行っている。特に、酸素吸蔵・放出機能を有する酸化セリウムに着目し、前年度に、銅原子を添加した酸化セリウムクラスターの酸化状態分析を進めた。その結果、酸素原子数の増加とともにセリウム原子の酸化数が増加する一方で、銅原子の酸化数は1価に保たれ、銅が触媒活性を失わない可能性があることを突き止めた。本年度は、セリウムが優先的に酸化されると考えられるこの特性についてさらに確証を得る目的で、セリウムを含まない酸化銅クラスター $\text{CuOAr}^+$ 、 $\text{Cu}_2\text{O}_2^+$ のXAS測定を行った。その結果、銅原子はいずれも2価と同定され、銅の酸化を抑えるセリウムの効果が実証された [Z. Phys. Chem., 印刷中]。

#### 課題(6)：X線分光による金属/金属化合物クラスターの磁性測定

サイズ選別したクラスターのX線磁気円二色性 (XMCD) 分光について、ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究を継続した。本年度は、酸化鉄クラスター $\text{Fe}_n\text{O}_m^+$ とその水和物に着目し、触媒や磁気センサーとしての特性解明を目的とする実験計画の立案に取り組んだ。

#### 課題(7)：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を進めている。前年度までに、エチレングリコール (EG) と水の純粋な液滴について真空中での凍結過程を測定した結果、水液滴が10 ms程度で凍結するのに対して、EG液滴は1分間にもわたって凍結せずに液相を保つことが観察され、それぞれの特徴的な振る舞いを見出した。本年度は、水とEGの混合溶液の液滴に着目して研究を進めた。その結果、微量なEGの混合で液滴の凍結が大きく抑制される傾向が見られた。今後、種々の混合比で実験を計画し、系統的な研究を展開する。

#### 【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〉

ラジカル種の研究では、ビニルラジカルの $\beta$ 位をD置換すると、ゼロ点振動により実効的なトンネル運動のポテンシャルが非対称となるため、トンネル運動が阻害され、エネルギーの低いtrans-HDCCHラジカルのみがミリ波分光により観測された。結果をまとめ論文発表した。

プロトン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、 $^{18}\text{O}$ -トロポロンの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。

分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では( $o$ ) $\text{H}_2\text{-HCN}$ 分子錯体の $\Sigma_1\text{-}\Sigma_0$ 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ン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)では、ビニルラジカルの $\beta$ 位をD置換すると、ゼロ点振動により実効的なトンネル運動のポテンシャルが非対称となるため、トンネル運動が阻害され、エネルギーの低いtrans-HDCCHラジカルがミリ波分光により観測された。結果をまとめ論文発表した。

課題(2)では、台湾交通大学との共同研究により、トロポロンの酸素の $^{18}\text{O}$ 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。 $\text{H}_2\text{-HCN}$ 分子錯体の $\Sigma_1\text{-}\Sigma_0$ 内部回転バンドのR(1)およびP(3)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

少数の原子で構成されるオンゲ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、種々の原子・分子集合体を対象とした、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、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、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](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>

## 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、J. M. Brown 著の“Molecular Spectroscopy”を使用した。

### ■ 学生の学外活動

修士1年生以上の学生は、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。本年度は構造化学研究室が九重分子科学セミナー2019を主催したため、研究室の学生全員がセミナー運営に参加した。

### 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としている。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。

■ 生体関連分子と金属イオンの間に働く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。本年度はジメチルアセトアミドを用いた研究も開始した。Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>/ホルムアミドの系について、溶媒分子の振動数シフトは、金属イオンとの相互作用のみならず、溶媒分子間の相互作用にも大きく影響されることを解明した。成果は国際会議および学術論文にて発表した。

■ 有機分子の動的過程に対する金属イオンの影響に関する研究

水溶液中における芳香族カルボン酸の発光特性に対する金属イオンの影響に対して、分光実験と量子化学計算を用いた研究を行っている。本年度はアニリン誘導体を用いた研究も開始した。3-および4-ヒドロキシ安息香酸の蛍光放出過程について、溶媒分子の水素結合ネットワークを介した励起状態プロトン移動機構を提案し、その妥当性を量子化学計算により確認した。成果は国内学会で報告した。

■ 学会活動（セミナーの主催）

本年度は構造化学研究室が中心となって、九州地区国立大学九重共同研修所において、九重分子科学セミナー2019を開催した。内容は、特別講演1件、招待講演2件、大学院生・学部生の一般講演9件であり、分子分光および分子科学に携わる九州地区の研究室の教員、大学院生、学部生計42名が参加した。

## 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、分子内・分子間エネルギー移動

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

## 界面物理化学分野

松原弘樹准教授

### 教育目標（とその到達度）

研究室が掲げる長期計画「界面分子熱力学と界面構造化学から界線物理化学という学問分野の創出」に向かって、スタッフと学生が一体となって基礎的かつ先端的な研究テーマを遂行する過程で、当該および周辺分野の学力、問題解決能力、研究開発能力、国際性などの先端研究者および技術者としての資質向上を目指す教育を行っている。

学部 4 年：①界面物理化学の基礎的知識を蓄積しまた実験手法を習得し、②自らの研究テーマの研究室での位置付けを十分把握することにより、③少なくとも自らのテーマの遂行には支障がないようにすること。

修士課程：④周辺分野の学問も含めた基礎学力を蓄積し、⑤自らの研究テーマの当該学問分野での位置づけを理解把握し、⑥テーマおよびその遂行上の問題点があればそれを指摘し解決する方向性を示すことができること。

博士課程：⑦自らの研究テーマの提案と実施計画の立案ができること、⑧テーマの問題点を分析し解決できること、⑨テーマの発展性を提示できること。

\*本年度は修士課程の学生 2 名のみ在籍。

学生と教員の連携による平素の実験研究活動が教育目標達成のための重要な柱であるが、対外的な自分の研究の位置付けを認識し、学外の研究者との議論を通して自らの研究を更に発展させること、コミュニケーション能力の向上などを目的として、修士課程では国内主要学会で年 1 回以上の学会発表を、博士課程では国内主要学会での発表に加え、国際会議での発表も強く推奨し国際性を養うこと目指している。また修士および博士課程の学生には時宜をみて論文執筆も強く勧めている。

本年度の学生の研究発表は国際学会での発表 6 回であった。。

## 研究目標（とその到達度）

九州大学界面物理化学研究室では、吸着膜の相転移、ならびに界面活性剤を混合した場合に現れる様々な吸着膜状態を、界面張力測定とその熱力学的な解析によって研究し、重要な成果を蓄積してきた。

近年は、界面の物性・状態を自在に制御できるこれまでの研究で得た成果を活かし、異なる界面が接する 1 次元境界の物理化学の研究を立ち上げ、一次元系の安定性を基盤とする材料化学・ナノマテリアル化学の新しい研究領域として、マクロ～ミクロ～ナノ・分子スケールに渡る「線の物理化学」の開拓を学術的な長期目標としつつ、吸着膜相転移で線張力を制御する基礎研究の成果を、応用化学、更に実学・生物化学などの境界領域に発展する課題として① 膜融合の物理化学と、② 界面吸着ナノ粒子の濡れ性制御に取り組んでいる。

本年度は①、②に関連する研究成果として以下に示す 3 報の論文を発表した。

(1) Unique Interfacial Phenomena on Macroscopic and Colloidal Scales Induced by Two-Dimensional Phase Transitions, H. Matsubara, M. Aratono, Invited Feature Article, *Langmuir*, 2019, 35, 1989.

(2) Common Black Film Stability and Synergetic Adsorption in Ionic–Nonionic Mixed Surfactant Systems, H. Matsubara, K. Chida, M. Yoshimura, M. Aratono, n. Ikeda, *Colloids Surf. A*, 2019, 582, 123932.

(3) Controlling Interfacial Properties Using Mixed Adsorbed Film Formation of Surfactant and Oil, H. Matsubara, *J. Jpn. Soc. Colour Mater.*, 2020, 93, 1.

また、吸着膜相転移を応用して泡膜の状態を制御する研究に関しては Elsevier 発行のコロイド化学専門誌 *Advanced in Colloid and Interface Science* にレビューが掲載されることも決定した。以上のことから概ね上で述べた研究目標に向かって着実に成果が挙げられていると考えている。

## 研究分野

物理化学、界面・コロイド化学

## 研究課題

- 1 界面吸着膜の相転移が O/W エマルションの安定性に与える効果  
平成 30～31 年 JSPS 二国間交流事業  
(相手先) ベルリン工科大学 ミヒャエルグラディエルスキー教授
- 2 ナノフルイドの高い流動性とカーン転移の相関に関する研究  
平成 29～31 年 基盤 (B)
- 3 吸着膜相転移をスイッチとして協同的に膜厚転移が起こる泡膜の新しい安定化メカニズム  
平成 26～28 年 基盤 (C)

## [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。ミトコンドリア外膜-内膜間グリセロリン脂質輸送について、これまでにミトコンドリア膜間部に局在する Ups1-Mdm35 複合体が PA の、Ups2-Mdm35 複合体が PS の輸送を媒介し、それぞれ CL、PE の合成に寄与していることが知られている。我々は、近年、出芽酵母において、Ups2-Mdm35 依存的な PE 合成が、細胞のエネルギー代謝状態に応じて制御されることを見出している。酵母がグルコース存在下において生育する際、Ups2-Mdm35 はほとんど機能しておらず、ミトコンドリアにおける PE 合成は低く抑えられているが、グルコースが枯渇し、ミトコンドリア呼吸活性が上昇した際に Ups2-Mdm35 は活性化され、ミトコンドリアにおける PE 合成を強く促進させる (Miyata N. *et al. JCB*2016)。しかしながら、Ups2 の欠損は酵母のミトコンドリア呼吸能に影響を及ぼさず、グルコース枯渇時において Ups2-Mdm35 依存的に合成される PE の生理的意義は不明であった。これに関し、我々は、グルコース枯渇時に、Ups2 欠損酵母において細胞周期の 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た。よって、Ups2-Mdm35 依存的に合成が促進する PE には、グルコース枯渇時において、過剰な G1/G0 期停止と静止期細胞への分化を抑制する生理作用があることが明らかになった。

また、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、一部小胞体にも局在し、この小胞体局在 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。従って現在までに考えられてきた細胞内のグリセロリン脂質合成、輸送、代謝について大きく再検証する必要に迫られている。これに関連して我々は以前、出芽酵母において小胞体膜タンパク質 Ice2 の欠損が、Psd1 経路による PE 合成を低下させることを見出していた。さらなる解析の結果、Ice2 の欠損酵母における PE 合成不全は、小胞体に局在する Psd1 の量の低下に起因することを見出した。また、小胞体局在 Psd1 は、ケネディー経路によるグリセロリン脂質合成の基質となるエタノールアミン、コリンの添加や、DTT による小胞体ストレス負荷によっても減少することを見出した。さらに、小胞体局在 Psd1 は、小胞体関連分解 (ERAD) において機能する E3 リガーゼ Hrd1 を介して構造的に分解されていた。これらのことより、小胞体局在 Psd1 は多層的な制御を受けており、細胞内グリセロリン脂質恒常性維持に重要な役割を有していると考えられる。

## (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。

2019 度は、以下の三つのことを明らかにした。① 長鎖塩基であるフィトスフィンゴシン (PHS), ジヒドロスフィンゴシン (DHS)は、複合スフィンゴ脂質の生合成経路における中間代謝産物であり、複合スフィンゴ脂質代謝経路の損傷によって量的変動が大きくみられる脂質の一つである。これまでに我々は、細胞外から PHS, DHS を添加した際、DHS が PHS よりも強い細胞毒性をもつことを明らかにしている。2019 年度は、細胞内で過剰蓄積した DHS は、ミトコンドリア呼吸鎖由来の活性酸素種の増大を介して細胞毒性を発揮していることを新たに見出した。また、DHS の生育阻害効果を抑制できる遺伝子変異 (サプレッサー変異)をスクリーニングした結果、DHS の細胞毒性と関連する可能性のある遺伝子を三つ同定した。

② 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。2019 年度は、複合スフィンゴ脂質生合成破綻下で 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*, *UIP4*, *TPS2* 遺伝子が救済に寄与することをつきとめた。

③ これまでにホスファチジルセリン合成酵素遺伝子とスフィンゴ脂質の微細構造を規定する遺伝子 (*CSG2*, *SCS2*)の二重変異によって、強い合成生育損傷が引き起こされていることを明らかにしている。2019 年度は、この合成生育損傷が細胞内活性酸素種の増大に起因していることを見出した。また形質膜のリン脂質非対称性を規定するフリッパーゼ遺伝子の欠損が、活性酸素種増大および合成生育損傷を抑制することがわかった。

### (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、 $\beta$ 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。またこの効果の亢進は、糖質コルチコイドにより抑制される。すなわち、糖質コルチコイドは正常時には細胞に対し細胞増殖抑制効果を与えるが、TG により発現誘導され、それ自身は、細胞死を誘発する転写因子である CHOP の合成誘導を抑制し、細胞死も抑えることが判明した。一方で、細胞増殖機能のあるアンドロゲンはむしろ細胞死を促進させ、CHOP の合成誘導も増加させることが判明した。このように、 $\beta$ 細胞が作り出すステロイドホルモンには相反する効果があり、細胞は環境に応じて自身にとって都合の良いステロイド合成を選択し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  $\beta$  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

### 参考 URL :

## 生物有機化学分野

大石 徹 教授、鳥飼浩平 助教、保野洋子 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  $\mu$  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。2019年度は以下のテーマに重点を置く。

- (1) 膜タンパク質に作用する梯子状ポリエーテルの化学合成、構造決定、および作用機構の解明
- (2) 細胞膜に作用する抗菌物質の構造決定と化学合成および新しい抗菌物質の開発
- (3) 梯子状ポリエーテル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

## 研究課題

マイトトキシンおよびブレビスルセナール F の部分構造の化学合成および構造決定

アンフィジノール 3 の構造決定と全合成研究、および類縁体の化学合成と生物活性評価

カリビアンシガトキシン C-CTX-1 の合成研究

カルロトキシン 2 の構造決定

三環構築型収束的合成法および二重反応戦略による梯子状ポリエーテルの効率的合成法の開発

マイクロフローリアクターを利用したマイトトキシンの LM 環部の合成

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、平成31年度日本生化学会九州支部例会（福岡市）で2件、第54回化学関連支部合同九州大会（北九州市）で2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）多田悠亮、行武美華、（1年）田川幸樹、岩本雅輝

学部4年生：なし

## 研究室構成員の2019年度進路

修士：多田悠亮（プリマハム株式会社）

学部4年生：該当なし

## 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

#### 教育目標

本年度は，博士後期課程 3 年生 1 名，2 年生 2 名，1 年生 1 名，修士課程 2 年生 1 名，1 年生 3 名，学部 4 年生 5 名が在籍した。また，上記に加えて GCOE の留学生 1 名（博士後期課程 3 年）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，分子科学討論会，理論化学討論会などの国内学会において，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，琉球大学，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，多配置 SCF 法の新たな活性空間 GORMAS の開発，3D-RISM-SCF 法と組み合わせた密度汎関数理論・波動関数理論の遷移金属アクア錯体の d-d 遷移に対する適用性の検討，第 7 周期 p ブロック元素一水素化物の結合に関する四成分相対論的計算，溶媒モデルにおける誘電特性の性能評価，包接化合物によるリガンド結合における溶媒効果，タンパク質-リガンド結合における構造ゆらぎと溶媒効果，等に関する研究を行った。以下に主なものを記



す。

#### (1) 多配置SCF法の新たな活性空間GORMASの開発

多配置SCF法は、擬縮退電子状態を取り扱うことができる非常に強力な手法であるが、完全活性空間を用いた多配置SCF法をはじめとする従来の手法は、活性軌道の数が大きくなると急速に電子配置の数が増大すると計算を著しく困難になるという問題を有している。適切に設計された電子配置空間は、多配置SCF法の計算量を有効に削減し、精度を損なうことなくエネルギーと波動関数を提供することから、電子配置空間の構成法が非常に重要である。この研究では、**generalized occupation restricted multiple active spaces (GORMAS)** と名付けられた電子配置空間の新しい構成法を提案した。GORMASによる多配置SCF法をいくつかの分子系（窒素分子、ホルムアルデヒド、二酸化窒素二量体、水分子二量体、および、マンガンスレン錯体）に適用した結果は、精度を損なうことなく、従来の活性空間による多配置SCF法の結果を再現し、この構成法が有効であることを示した。

#### (2) 3D-RISM-SCF法と組み合わせた密度汎関数理論・波動関数理論の遷移金属水和錯体のd-d遷移に対する適用性の検討

3D-RISM-SCF法を用いた密度汎関数理論及び波動関数理論の遷移金属水和錯体のd-d遷移への適用性を、水溶液中の $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ を例に検討した。その結果、混成汎関数を用いた密度汎関数理論、多配置SCF関数を参照とする摂動法、運動方程式CCSD法が、適切な精度をもつd-d遷移エネルギーを与えることがわかった。

#### (3) 第7周期pブロック元素一水素化物の結合に関する四成分相対論的計算

第7周期pブロック元素である $^{113}\text{Nh}$ ,  $^{114}\text{Fl}$ ,  $^{115}\text{Mc}$ ,  $^{116}\text{Lv}$ ,  $^{117}\text{Ts}$ ,  $^{118}\text{Og}$ は現在発見されている元素として最も重いものである。これらの寿命は短く実験的に化学的性質を調べるのは困難であるため、理論的な計算がほぼ唯一のアプローチである。本研究では閉殻である $^{118}\text{Og}$ を除くこれらの一水素化物MHの結合の性質を理論的に明らかにすることを目的とし、高度に相対論効果を取り入れることができる四成分の相対論的手法により計算を行った。その結果、スピン軌道相互作用が平衡核間距離に大きな影響を与え、さらに電子相関との複合効果があることを明らかにした。

#### (4) 包接化合物 (Curcubituril) のリガンド結合における溶媒効果に関する研究

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 の分子認識の駆動力について, 分子動力学シミュレーションを用いて検討した先行研究によれば, Curcubituril 内部の空洞には, リガンド結合前は水分子が充填されているが, この水分子が高いエネルギーを持った, “High-energy water” であり, 分子認識によってこれらの水が排出されることによるエネルギー利得が, 駆動力であるという。本研究では, 3D-RISM 理論を用いて, Curcubituril の分子認識過程を解析し, その駆動力の検証を行った。この結果, 親水的な Curcubituril 内部からの水分子の排出は結合エネルギーにおいては損失になり, Curcubituril とリガンドとの直接相互作用こそが駆動力であることを明らかにした。

## 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,  $\pi$  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, 石塚賢太郎助教

### 教育活動

触媒有機化学研究室は、2019年度は教員4名で教育、研究活動を行った。石塚助教は主にリーディングプログラムの教育活動を行った。2019年度は、博士課程4名、修士2年生9名、修士1年生7名、学部4年生5名で研究室を運営した。このうち3名は、旧物性有機化学研究室から移籍した学生であった。また、修士課程の学生は、岡山大学、鹿児島大学、近畿大学からの進学者が4名在籍した。2019年度は、研究論文の紹介のセミナーを毎週木曜日に行った。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、教育の一環として学生の学会発表も積極的に行い15件の発表を行った。

### 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、新たにチオウレア基を有する不斉四級ホスホニウムの合成とその応用なども行った。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新技术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、国税庁の酒類総合研究所と共同研究を行った。日本酒からの老香の選択的除去の研究は、日本醸造協会誌に論文を発表した。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。

## 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、榎田祐輔 助教

### 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、Reaxys、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、国内で開催された、第124回触媒討論会、日本化学会 第100春季年会（2020）に加えて、国立台湾師範大学と九州大学学際的研究教育促進合同フォーラム 2019（2019NTNU-KyushuU Joint Forum on Facilitating Interdisciplinary Research and Education）（台湾）などのような国際会議で研究成果を口頭あるいはポスター発表している。

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、イソキノリンの炭素環を化学選択的かつエナンチオ選択的に水素化するルテニウム触媒の開発に成功した。

## 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/tmp/>

## 量子生物化学分野

秋山良 准教授

学振PDの2名が新しい場所に助教として出て行ったため、再び秋山と学生の研究室に戻った。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り、不定期に議論を行っている。秋山は、Mini-Symposium on Liquidsの主催、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、Biophysics and PhysicobiologyのEditorial Boardに関わっていた。そのため、出張が多い中、学部学生2名と大学院修士学生6名が主体的に研究などを進めてくれたおかげで、活発な研究・研究活動を維持できた。出版物点数は3点ではあったが、どれも非常に内容の濃いもので、今後の研究室のあり方を作ってゆく重要な研究成果であった。修士2年生を1名企業に送り出し、残り2名は本研究室の博士後期課程に進学した。学部学生2名も本研究室の修士課程に進学した。なお、2019年度の後半には、秋山の海外における集中講義、修士学生の海外研究機関への中期滞在などの様々な予定があったが、新型コロナウイルスの感染拡大の影響で中止せざるを得なかった。

### 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。

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 (長尾、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] 希薄な電解質溶液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 (ただし、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、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。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ある。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、論文を出版した。

[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。

[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  
(長尾、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。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。

[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、論文を出版した。

#### [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、論文をまとめているところである。

以上の研究活動の到達度は端的には2019年の出版物に表されているので、以下に記載する。

[1] Yuka Nakamura, Shota Arai, Masahiro Kinoshita, Akira Yoshimori, and Ryo Akiyama, Reduced density profile of small particles near a large particle: Results of an integral equation theory with an accurate bridge function and a Monte Carlo simulation, *J. Chem. Phys.* 151, 044506-1-10 (2019). (特に上記[3]に関連。)

[2] Ayano Chiba, Akio Oshima, and Ryo Akiyama, Confined Space Enables Spontaneous Liquid Separation by Molecular Size: Selective Absorption of Alkanes into a Polyolefin Cast Film, *Langmuir*, 35 (52) 17177-17184 (2019). (特に上記[4]に関連。Supplementary Journal Coverに採用。)

[3] Ken Tokunaga and Ryo Akiyama, Molecular dynamics study of a solvation motor in a Lennard-Jones solvent, *Phys. Rev. E*, 100, 062608-1-8 (2019). (特に上記[6]に関連。)

また、年度内に

秋山良 安池智一, 『改訂版 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も出版されているが、2020年3月なので、次年度にふれる。

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13回目は、2019年6月29-30日に岡山大学に著名な研究者に集まっていただいて講演、ポスター発表などを行った。

### 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