

教育・研究活動 年次報告書

2018 年度

九州大学大学院理学研究院
化学部門

2019 年 12 月

目 次

はじめに	-----
1. 2018 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 2018 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 2018 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. 2018 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	-----
反応分析化学分野	-----
無機反応化学分野	-----
[物理化学講座]	-----
界面物理化学分野	-----
分散系物理化学分野	-----
量子化学分野	-----
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 _____

物性有機化学分野 _____

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 2018 年度の教育・研究活動 年次報告書をお届けします。

インターネットの普及に伴い、今年度から紙媒体での発行をやめ、化学科ホームページでの掲載としました。既に物理学部門や地球惑星科学部門では同様の形式となっております。また、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、下記のサイトの情報と重複するので省略いたしました。

九州大学研究者情報サイト

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

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。2018 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、准教授 2 名が新規採用になりました。一方、准教授 1 名が定年退職、准教授 1 名・助教 1 名が栄転、助教 1 名が退職しています。経常的な人事ポイント削減の中、大学改革活性化、テニユアトラック教員、女性教員など競争的な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 5 年一貫の博士課程教育リーディングプログラム「分子システムデバイスコース」のもと、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。

理学研究院が 2015 年 10 月に伊都キャンパスに移転してから 4 年が過ぎました。立地が不便という声もありますが、充実した研究環境のなかで着実に研究成果があがっております。本報告書にお目通しいただき、忌憚のないご意見、ご助言を賜りますようお願い申し上げます。

2019 年 12 月

2019 年度 化学部門長 徳永 信

1. 2018年度における化学専攻の活動

1.1 教員名簿 (2018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)	小澤公宜(無機・分析化学)	竹原 公(無機・分析化学)
宇都宮聡(無機・分析化学)	槇 靖幸(物理化学)	大橋和彦(物理化学)
松原弘樹(物理化学)	萩島 正(有機・生物化学)	谷 元洋(有機・生物化学)
伊藤芳雄(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)	未永正彦(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)
劉 曉輝(有機・生物化学)	鳥飼浩平(有機・生物化学)	海老根真琴(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)	槇田祐輔(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

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

‘18.5.16	量子化学	堀尾 琢哉	准教授	採用 (京都大学より)
‘18.6.30	生物有機化学	海老根 真琴	助教	退職
‘18.11.1	ナノ物性化学	有馬 祐介	准教授	採用 (京都大学より)
‘19.1.1	錯体物性化学	大谷 亮	准教授	採用 (熊本大学より)
‘19.3.31	反応分析化学	竹原 公	准教授	退職 (定年退職)
‘19.3.31	物性有機化学	伊藤 芳雄	教授	転出 (九州大学環境安全センターへ)
‘19.3.31	生体情報化学	劉 暁輝	助教	転出 (崇城大学へ)

1.3 非常勤講師

長谷川 靖哉	教授	北海道大学大学院工学研究院
杉本 幸彦	教授	熊本大学大学院生命科学研究科
立間 徹	教授	東京大学生産技術研究所
清水 研一	教授	北海道大学触媒化学研究所
山下 雄史	特任准教授	東京大学先端科学技術センター
Thorsten M. Bernhardt	教授	Unibersity of Ulm, Germany
金 有洙	主任研究員	理学研究所
野々村 美宗	教授	山形大学大学院理工学研究科
喜多 理王	教授	東海大学理学部物理学科
Robin G. Hicks	教授	カナダ ビクトリア大学

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

(2018年5月1日現在)

博士課程

1年生 (D1)

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

2年生 (D2)

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

3年生 (D3)

田中 咲久弥

斉藤 昂

石島 歩

小柴 慧太 *

袈裟丸 仁志 *

平城 慎也 *

田坪 大来

三浦 大樹

山本 啓也

*...日本学術振興会特別研究員

修士課程

1年生 (M1)

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

2年生 (M2)

中園 智光	知田 健吾	迫田 晃祐
渡部 玲於	藤井 悟	福富 航青
内谷 眞彬	末武 瑞樹	畔野 貴史
藤田 大助	藤本 周平	堀岡 正崇
木村 萌水	斉木 孝輔	山川 あゆみ
高山 優太	岩本 美帆	高橋 宏典
邱 逸飛	大久保 貴史	戸田 卓実
岡田 大知	中山 裕棋	川口 翼
大藏 孝太	江口 弘人	田中 達也
木下 義輝	武岡 浩司	浅川 桃子
河村 拓哉	武田 依子	大津 美紀子
合田 尚人	榎 剛史	柳本 峻太
相本 雄太郎	池原 遼平	程 心怡
松原 哲	富松 哲郎	南川 賢人
半田 健太郎	富安 幸仁	若藤 空大
枘屋 宇洋	奥村 祐也	毛利 勇介
梅崎 卓也	梶村 裕人	馬渡 弥佳
竹藤 春菜	甲田 憲司	瀧尻 孝平
宮尾 遼	井上 雄希	福本 佳弘
檜枝 愛美	岡本 大介	池田 孝明
手嶋 博也	竹熊 晴香	
松下 想	加藤 誠	
辻 優太郎	大島 章生	

研究生

ニ ルイチ
許 柯

学振 (PD) 研究員等

安東 航太
植松 祐輝
末松 安由美

ThurgoodParkes Kalum
Milandip Karak

1.5 2018年度に授与した大学院学位

課程博士 (理学)

- 齊藤 昂 A Study on the Dependence of Plasmonic Properties of Metal Nanoparticle Sheets on Its Electronic States at the Metal/capping-molecule Interface
金属微粒子膜におけるプラズモニック特性と金属/被覆分子界面電子状態の相関性に関する研究
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- 石島 歩 Establishment of nanointerface fluorescence imaging techniques for characterization of biomolecules
生体分子評価のためのナノ界面蛍光イメージング法の確立
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- 小柴 慧太 Electrochemical and Theoretical Studies on Nickel Dithiolene Hydrogen Evolution Catalysts: Developing Ligand-based Proton-coupled Electron Transfer Pathways
ニッケルジチオレン水素発生触媒に関する電気化学的及び理論化学的研究: 配位子中心のプロトン共役電子移動過程の開拓
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 袈裟丸 仁志 Study on the assessment for the adverse effects of the bisphenol A analogs in the human body
ビスフェノール A アナログが人体に与える有害作用の評価に関する研究
(協力講座：生体分子化学講座)
- 平城 慎也 Study on Molecular Miscibility and Domain Formation in Adsorbed Monolayer and Lipid Bilayer
吸着単分子膜と脂質二分子膜における分子混和性とドメイン形成に関する研究
(協力講座：ソフト界面化学講座)

田坪 大来 The study on short elastin-like peptides: sequence, condition of solution, and structures influenced self-assembly of the peptide
短鎖エラスチン様ペプチドに関する研究：配列、溶液条件、構造がペプチドの自己集合に与える影響
(協力講座：生体分子化学講座)

山本 啓也 Development of Hybrid Molecular Catalysts Tethered to Functional Groups: Applications to Fuel Production
機能性分子を共有結合させた複合型分子触媒の開発と燃料製造への応用
(無機・分析化学：錯体化学講座)

課程修士 (理学)

戸田 卓実 Functional analysis of metabolic enzymes involved in determination of structural diversity of complex sphingolipids in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*
出芽酵母の複合スフィンゴ脂質の構造多様性を規定する代謝酵素の機能解析
(有機・生物化学：生体情報化学講座)

枘屋 宇洋 Elucidation of a unique mechanism of transcriptional activation induced by halogen-containing bisphenols
ハロゲン含有ビスフェノールが誘導する特異な核内受容体活性化機構の解明
(有機・生物化学：構造機能生化学講座)

合田 尚人 Cardiolipin accumulation through Ups1-independent biosynthetic pathway in the yeast *Saccharomyces cerevisiae*
出芽酵母における Ups1 非依存的生合成経路によるカルジオリピンの蓄積
(有機・生物化学：生体情報化学講座)

- 檜枝 愛美 Interaction Between Sterols and Amphidinols, Membrane-Active
 Marine Natural Products, in Lipid Membranes
 脂質膜中における膜作用性海洋天然物アンフィジノール類とステロ
 ールの相互作用
 (無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 池田 孝明 Synthesis of Unsaturated Lactones by Metal Oxide Supported Gold
 Nanoparticles-Catalyzed Cyclization of Alkynyl Carboxylic Acids
 金属酸化物担持金ナノ粒子を用いたアルキニルカルボン酸の環化によ
 る不飽和ラクトンの合成
 (複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 浅川 桃子 Development of Efficient Synthetic Method of the LM Ring of
 Maitotoxin マイ
 トトキシンの LM 環部の効率的合成法の開発
 (有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 木村 萌水 New Synthesis Method of Polysulfanes and Selective Adsorption of
 Sulfur Compounds from Japanese Sake
 ポリスルファン類の新規合成法および日本酒からの硫黄分の選択的吸
 着除去
 (複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 中山 裕棋 Development of Chemo- and Enantioselective Hydrogenation of
 Pyridine Rings in Azaindoles through Iridium Catalysis
 イリジウム触媒によるアザインドールのピリジン部位の化学選択的か
 つエナンチオ選択的水素化の開発
 (複合領域化学：分子触媒化学講座)
- 大津 美紀子 Role of complex sphingolipids of yeast *Saccharomyces cerevisiae*
 under low pH condition 低 pH 条件
 下における出芽酵母の複合スフィンゴ脂質の役割
 (有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 加藤 誠 Evaluation of structural stabilities of wild-type and point-mutated
 estrogen-related receptor γ エ
 ストロゲン関連受容体 γ 型とその点変異体の構造安定性評価

(有機・生物化学：構造機能生化学講座)

- 川口 翼 Study of Inhalation Anesthetic Effect on the Artificial Membrane
Lipids 人
工膜脂質に対する吸入麻酔剤作用の検討
(無機・分析化学：生体分析化学講座)
- 中園 智光 Evaluation of phosphatidylserine transfer via ER-mitochondria
encounter structure (ERMES) complex in vivo
ERMES 複合体を介した小胞体-ミトコンドリア間ホスファチジルセ
リン輸送の in vivo 評価
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 宮尾 遼 Effect of Adsorbed Film Composition on Common Black Film
Thickness and Newton Black Film Formation in Ionic-Nonionic
Surfactant Mixed Systems
コモン黒膜の膜厚とニュートン黒膜形成に対するイオン-非イオン界
面活性剤混合吸着膜の吸着膜組成の効果
(物理化学：界面物理化学講座)
- 岩本 美帆 Salt-induced Phase Transition Behavior of Thermo-sensitive
Hydrogels
感温性ハイドロゲルの塩水溶液中における相転移挙動
(物理化学：分散系物理化学講座)
- 斉木 孝輔 Domain Formation and Molecular Miscibility in the Adsorbed
Films of Mixed Fluoroalkanol-Cationic Surfactant System of
Hexane/Water Interface
ヘキサン/水界面でのフルオロカーボンアルコール-陽イオン界面活性
剤混合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)
- 大島 章生 Selective absorption of porous polymer crystal immersed in binary
fluid 多孔
性高分子結晶における二成分混合有機溶媒からの選択的分子吸蔵
(複合領域化学：量子生物化学講座)

- 内谷 眞彬 A novel method of screening for yeast genes involved in
intra-mitochondrial phospholipid transport
ミトコンドリア内リン脂質輸送に関与する酵母遺伝子の新規探索法の
開発
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 馬渡 弥佳 Self-association and metal-binding properties of elastin-derived
peptide (FPGVG)_n analogs conjugated with nitrilotriacetic acid
ニトリロ三酢酸を付加したエラスチン由来ペプチド(FPGVG)_n アナ
ログの自己集合特性および金属結合性の解析
(協力講座：生体分子化学講座)
- 榎 剛史 The effects of glucocorticoids synthesized in pancreatic β cells
against the cell death
膵臓 β 細胞内で合成される糖質コルチコイドの細胞死抑制効果
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 大久保 貴史 Effects of halogenation on nuclear receptor PPAR γ -binding and
transcriptional activities of bisphenol A
ビスフェノール A へのハロゲン置換基の導入が核内受容体 PPAR γ へ
の結合性や転写活性に与える影響
(協力講座：生体分子科学講座)
- 藤井 悟 The role of the ER membrane protein Ice2 in
phosphatidylethanolamine metabolism in the budding yeast
出芽酵母のホスファチジルエタノールアミン代謝における小胞体膜タ
ンパク質 Ice2 の機能解明
(有機・生物化学：生体情報化学講座)
- 毛利 勇介 Bifunctional Thiourea-Quaternary Phosphonium Salts Catalyzed
Enantioselective Protonation of Enol Esters
チオウレア-四級ホスホニウム塩型二官能性相間移動触媒を用いたエノ
ールエステル類の不斉プロトン化反応
(複合領域化学：触媒有機化学講座)

- 田中 達也 Synthetic Study of the VWX Ring of Brevisulcenal-F
ブレビスルセナル-F の VWX 環部の合成研究
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 若藤 空大 Phase-Transfer Catalytic Base-Hydrolysis and Alcoholysis for the
Synthesis of α -Chiral Amino Acid Derivatives via Dynamic Kinetic
Resolution
相間移動触媒を用いた塩基加水分解および加アルコール分解による α -
キラルアミノ酸誘導体の動的速度論分割
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 武岡 浩司 Development of A New Concerted Catalyst System Using Chiral
Brønsted Acid and Metal Particles for Catalytic Asymmetric
Hydrogenation of Quinoline
キラルブレンステッド酸と金属微粒子による新規協奏的触媒系の開発
とキノリンの触媒的不斉水素化への応用
(複合領域化学：分子触媒化学講座)
- 手嶋 博也 Development of a Novel Synthetic Strategy for 6/6/6/6/6-Pentacyclic
Ether System
6/6/6/6/6-五環性エーテルの新奇合成法の開発
(有機・生物化学：生物有機化学講座)
- 邱 逸飛 Degradation of Cyclic Carbonate Esters on Lithium Cobalt Oxide for
Positive Electrode コバルト
酸リチウム正極上での環状炭酸エステル類の劣化反応の解析
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 梶村 裕人 Synthesis and properties of new helicene compounds composed of
azulenes and quinones
アズレンとキノンからなる新規ヘリセン化合物の合成と性質
(協力講座：構造有機化学講座)
- 柳本 峻太 Synthesis of Novel Histidine Derivative for the Suppression of
Racemization
ラセミ化抑制を志向した新奇ヒスチジン誘導体の合成

(有機・生物化学：生物有機化学講座)

- 木下 義輝 Epoxidation of Alkenes with Molecular Oxygen using
Heterogeneous Lead Catalysts
固体鉛触媒による分子状酸素を酸化剤とするアルケンのエポキシ化反
応
(複合領域化学：触媒有機化学講座)
- 甲田 憲司 I: The study of asymmetric cyclopropanation using in situ generated
diazocompounds as carbene source
ジアゾ試薬の系中発生法を用いた不斉シクロプロパン化反応の研究
II: The study of catalytic oxidations with newly designed chiral
non-heme N4-tetradentate ruthenium complexes
新規光学活性な非ヘム型 N4 配座ルテニウム錯体を用いた酸化反応
に関する研究
(協力講座：有機反応化学講座)
- 相本 雄太郎 A Family of Molecular Dithiolatonickel(II) Catalysts Promoting
Hydrogen Evolution from Water with Low Overpotentials
ニッケルジチオラト錯体触媒による水からの低過電圧水素生成反応と
その機構
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 河村 拓哉 Correlation between Guest Adsorption Property and Integrated
Structure of Porous Ionic Crystals Consisting of Cyclic Hexacopper
Complex and Polyoxometalate
環状六核銅錯体とポリ酸からなる多孔性イオン結晶のゲスト吸着特性
と集積構造の相関
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 畔野 貴史 Investigations of Novel Phenomena in Composite Materials
Consisting of Metals and Metal-Organic Frameworks
金属-配位高分子複合体における新規物性の探索
(協力講座：ナノ機能化学講座)

- 辻 優太郎 Near-Infrared Light-Driven Hydrogen Evolution and Electrochemical Water Oxidation by New Ruthenium Molecular Catalysts
新規ルテニウム錯体を触媒とした近赤外光水素生成反応及び、電気化学的酸素生成反応
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 富松 哲郎 Mechanical Properties on Chemically Cross Linked Hydrogel Prepared with Thermosensitive Polymer, Pluronic
温度応答性高分子 Pluronic を用いた化学架橋ハイドロゲルの力学物性
(物理化学：分散系物理化学)
- 梅崎 卓也 Discontinuous Change in Disjoining Pressure Isotherms Induced by Phase Transition of Surfactant-Alkane Mixed Adsorbed Films
界面活性剤-アルカン混合吸着膜の相転移に起因する泡膜の分離圧等温線の不連続変化
(物理化学：界面物理化学)
- 山川 あゆみ Phase Transition and Heterogeneous Structure of the Adsorbed Film of Mixed Tetradecyltrimethylammonium Bromide-Cholesterol System at Hexane/Water Interface
ヘキサン/水界面における臭化テトラデシルトリメチルアンモニウム-コレステロール混合吸着膜の相転移と不均一構造
(協力講座：ソフト界面化学講座)
- 竹藤 春菜 Sliding Friction and Adhesion of Hydrogels with Surface Hemi-Spherical Patterns
表面半球状パターンをもつハイドロゲルの滑り摩擦と凝着
(物理化学：分散系物理化学講座)
- 岡田 大知 Co-adsorption of carbon monoxide and hydrogen molecules on a cobalt cluster cation for initiating intermolecular reaction
コバルトクラスター正イオン上での一酸化炭素-水素共吸着系の生成と吸着分子間の反応誘起
(物理化学：量子化学講座)

- 半田 健太郎 Study on ionic interaction in ion selectivity of KcsA potassium ion channel
KcsA カリウムイオンチャネルのイオン選択性におけるイオン間相互作用に関する研究
(複合領域化学：理論化学講座)
- 堀岡 正崇 Effects of transition-metal-atom doping on silver cluster cations reacting with NO molecules: Size and dopant-atom dependence on reactivity and reaction products
一酸化窒素分子との反応における銀クラスター正イオンへの遷移金属添加効果：サイズと添加元素に依存した反応性・生成物の変化
(物理化学：量子化学講座)
- 岡本 大介 State-averaged multiconfiguration SCF method introduced to RISM- and 3D-RISM-SCF schemes
RISM-SCF および 3D-RISM-SCF への状態平均多配置 SCF 法の導入と応用
(複合領域化学：理論化学講座)
- 福富 航青 Synthesis and Physical Properties of Coordination Polymers based on Nitridotetracyanochromate(V) ion
ニトリドテトラシアノクロム(V)を基盤とする配位高分子の合成と物性評価
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 程 心怡 Photochemical and Electrochemical CO₂ Reduction Catalyzed by Water-Soluble Metalloporphyrins of Cobalt, Iron, Manganese and Nickel
水溶性ポルフィリンの Co, Fe, Mn, Ni 錯体触媒による光化学的及び電気化学的 CO₂ 還元反応
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 江口 弘人 Physical and Catalytic Properties of Titanium oxide-based Electrode Catalysts
酸化チタン系電極触媒の物性と触媒特性
(協力講座：ナノ機能化学講座)

- 福本 佳弘 Control of Spin State in Molecular Conductors Consisted of TTF Analogues and Anionic Iron(III) Complexes
 アニオン性 Fe(III)錯体と TTF 系分子による複合分子性伝導体のスピン状態の制御
 (協力講座：光機能物質化学講座)
- 池原 遼平 Novel Method of Quantifying Radioactive Cesium-Rich Microparticles (CsMPs) at Fukushima and the Application to the Dynamics of CsMPs
 高濃度放射性セシウム含有微粒子の新規定量法(QCP 法)開発とその移行挙動の解明
 (無機・分析化学：無機反応化学講座)
- 富安 幸仁 Quantitative study of the detection for organophosphorous compound by the immobilization of acetylcholinesterase(AChE)
 AChE の固定化による有機リン酸化合物検出の定量的研究
 (無機・分析化学：反応分析化学講座)
- 末武 瑞樹 Solubility of Radioactive Cesium Released from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant
 福島第一原発事故由来セシウムの溶解特性
 (無機・分析化学：無機反応化学講座)
- 松下 想 Millimeter-wave spectroscopy of the $j=3-2$ internal rotation band of the Ar-HCN complex
 Ar-HCN 分子錯体の $j=3-2$ 内部回転バンドのミリ波ジェット分光
 (物理化学：量子化学講座)
- 南川 賢人 Exploring size-dependent s-d electron interaction in AgNM (M = Sc, Ti, V, Co, Ni) via a chemical probe (M = Sc, Ti, V, Co, Ni) における s-d 相互作用のサイズ依存性探究
 化学反応性を介した遷移金属添加銀クラスターイオン AgNM (M = Sc, Ti, V, Co, Ni) における s-d 相互作用のサイズ依存性探究
 (物理化学：量子化学講座)

- 高山 優太 Theoretical study on photodissociation reaction of
6,13- α -diketopentacene
ペンタセンジケトンの光解離反応に関する理論的研究
(複合領域化学：理論化学講座)
- 藤本 周平 Size-dependent optical responses of silver cluster cations in the size
range up to 70 atoms
サイズ選別された銀クラスター正イオンの光応答：70 量体までの展開
(物理化学：量子化学講座)
- 渡部 玲於 Millimeter-wave spectroscopy of the $j=2-1$ internal rotation band of
the Ar-DCN complex
Ar-DCN 分子錯体の $j=2-1$ 内部回転バンドのミリ波ジェット分光
(物理化学：量子化学講座)
- 知田 健吾 Relation between Phase Diagram of Ionic-Nonionic Mixed
Surfactant Adsorbed Films and Foam Film Stability
イオン-非イオン界面活性剤混合系の吸着の相図と泡膜の安定性の関
係
(物理化学：界面物理化学講座)
- 大藏 孝太 Emission of Quantum Dots from Metal Nanoparticle on Mirror
Structures
金属ミラー上金属微粒子構造を利用した蛍光発光素子の作製
(協力講座：ナノ物性化学講座)
- 松原 哲 Effect of n-Alkane and Nonionic Surfactant on Surface Dilational
Viscoelasticity of Cationic Surfactant Adsorbed Film Studied by
Surface Quasi-Elastic Light Scattering
表面準弾性光散乱による陽イオン界面活性剤吸着膜の拡張粘弾性に及
ぼすアルカンと非イオン活性剤の添加効果の研究
(物理化学：界面物理化学講座)
- 竹熊 晴香 Optical Characteristics from Multilayered Colloidal Quantum Dots
2D Sheet
コロイド状量子ドット多層膜の光学特性評価

(協力講座：ナノ物性化学講座)

- 迫田 晃祐 Syntheses and Water Oxidation Activities of Several Oxido-Bridged
Trimetallic Molecular Catalysts
各種オキソ架橋三核錯体の合成と酸素発生触媒機能
(無機・分析化学：錯体化学講座)
- 井上 雄希 Regulation of Ion Permeability of Amphotericin B Incorporated
Metal-binding Site by Changing Its Aggregation State through
Complexation
金属配位部位を組み込んだアンフォテリシン B の錯形成に伴う会合状
態変化を利用したイオン透過能制御
(無機・分析化学：錯体物性化学講座)
- 瀧尻 孝平 Preparation and Characterization of TiO₂-Based Photoanodes
Coadsorbed with Polypyridyl Ruthenium Dyes and Cobalt Water
Oxidation Catalysts
ポリピリジルルテニウム色素およびコバルト酸素発生触媒を共吸着さ
せた TiO₂ フォトアノードの作製と機能評価
(無機・分析化学：錯体化学講座)

1.6 2018年度関係行事一覧

(1) 講演会

- [1] 講演者 長谷川 靖哉 教授 (北海道大学大学院工学研究院)
演 題 強発光を示す希土類配位高分子の設計と機能
開催日 2018年5月28日
世話人 大場 正昭
- [2] 講演者 荒井 緑 准教授 (千葉大学大学院薬学研究院)
演 題 天然物を基盤とした生物活性分子の探索と創製
開催日 2018年6月5日
世話人 伊藤 芳雄
- [3] 講演者 杉本 幸彦 教授 (熊本大学大学院生命科学研究部)
演 題 プロスタグランジン受容体を介した生理と病態の調節機構
開催日 2018年6月8日
世話人 松島 綾美
- [4] 講演者 立間 徹 教授 (東京大学生産技術研究所)
演 題 ナノ粒子のプラズモン共鳴による電荷分離とその応用
開催日 2018年6月21日
世話人 玉田 薫
- [5] 講演者 清水 研一 教授 (北海道大学触媒化学研究所)
演 題 固体触媒を用いた有機合成
開催日 2018年6月28日
世話人 徳永 信、村山 美乃
- [6] 講演者 山下 雄史 教授 (東京大学先端科学技術センター)
演 題 分指導力学シミュレーションによるタンパク質機能解析
および創薬支援
開催日 2018年7月5日
世話人 吉田 紀生

- [7] 講演者 中野 幸司 准教授 (東京農工大学大学院工学研究院)
演 題 キラル π 共役分子の設計・合成とキロプティカル特性
開催日 2018年7月10日
世話人 伊藤 芳雄
- [8] 講演者 中崎 敦夫 准教授 (名古屋大学大学院生命農学研究科)
演 題 C-N軸性キラリティを有するイサチンの創製とその利用
開催日 2018年7月31日
世話人 伊藤 芳雄
- [9] 講演者 Martino Di Serio 教授 (Università di Napoli Federico II, Italy)
演 題 The Catalysis in Biodiesel Production
開催日 2018年8月10日
世話人 大場 正昭
- [10]講演者 Murray Baker 教授 (The University of Western Australia, Australia)
演 題 Azolium Cyclophanes — Fascinating Structures with Surprising Applications
開催日 2018年8月10日
世話人 大場 正昭
- [11]講演者 Thorsten M. Bernhardt 教授 (University of Ulm, Germany)
演 題 Ultrafast photochemistry on oxide surfaces and Supported metal clusters
開催日 2018年9月25日
世話人 寺寄 亨
- [12]講演者 金 有洙 主任研究員 (理化学研究所)
演 題 単一分子の化学
開催日 2018年10月11日
世話人 恩田 健
- [13]講演者 野々村 美宗 教授 (山形大学大学院理工学研究科)
演 題 触るということ ～触角のサイエンスとテクノロジー～
開催日 2018年10月25日

- 世話人 松原 弘樹
- [14]講演者 喜多 理王 教授 (東海大学理学部物理学科)
演 題 温度勾配を外場とする高分子溶液の不可逆的輸送現象
開催日 2018年11月16日
世話人 榎 靖幸
- [15]講演者 藤原 哲晶 准教授 (京都大学大学院工学研究科)
演 題 遷移金属錯体触媒の特徴を活かした二酸化炭素を用いる有機合成反応
開催日 2018年11月20日
世話人 伊藤 芳雄
- [16]講演者 布施 新一郎 准教授 (東京工業大学科学技術創成研究院)
演 題 高速マイクロフローアミド結合形成法の開発とペプチド合成の革新
開催日 2018年12月11日
世話人 伊藤 芳雄
- [17]講演者 Robin G. Hicks 教授 (カナダ ビクトリア大学)
演 題 インディゴ類縁配位子を有する機能性金属錯体の創出と展開
開催日 2019年1月8日
世話人 酒井 健
- [18]講演者 山田 泰之 准教授 (名古屋大学大学院理学研究科)
演 題 ポルフィリン・フタロシアニン face-to-face 型超分子触媒：
高活性メタン酸化触媒への展開
開催日 2019年1月29日
世話人 伊藤 芳雄

(2) 談話会・報告会

前期特別談話会

開催日 : 2018年8月3日(金)

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

～一般向け講演～

- L01 Switching morphology of molecular by a mechanical motio
光機能物質化学 蘇勝群(Su Shengqun)
- L02 環境トリチウムの動態
環境動態化学 杉原真司
- L03 高濃度放射性セシウム含有微粒子(Cesium rich microparticle, CsMP)の
本質的解明に基づく炉内の情報と環境影響
無機反応化学 宇都宮聡
- L04 放射光 X 線を用いたソフト界面膜の研究
ソフト界面物理化学 今井洋輔
- L05 電解質溶液の界面物理化学
量子生物化学 植松祐輝
- L06 光を使って金属イオンを取り囲む溶媒分子を探る
構造化学 大橋和彦
- L07 光に応答する分子性結晶の機能的運動と緩和
構造有機化学 五島健太
- L08 巨大分子の化学合成と生体機能化学
生物有機化学 大石徹
- L09 ハロゲンを含む有害化学物質の受容体タンパク質に対する結合性・生理活性
の解析
生体分子化学 巢山慶太郎

～一般及び高校生向け講演～

L10 細胞膜における脂質の分布を可視化する
-細胞膜の描像と新ラフト仮説-

生体分析化学 木下祥尚

L11 出芽酵母を用いて細胞の成り立ちを探る

生体情報化学 宮田暖

第2部 ポスターセッション

～高校生向けポスター～

H01 金属錯体を用いた人工光合成～循環型エネルギー社会を目指して～

錯体化学 堀翔太郎 管昌権

H02 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 宮田潔志

H03 量子化学ってこんなにおもしろい！

量子化学II 横路健生

H04 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 岩本美帆 竹藤春菜 富松哲郎 松永航 森拓也

H05 生体内シグナル伝達の攪乱 ～受容体化学と有害化学物質によるシグナル
毒性～

構造機能性化学 多田悠亮 行武美華

H06 人と環境にやさしい合成化学 ～実験には危険がつきもの？～

有機反応化学 甲田憲司 吉武正貴

H07 し ょ く ば い だ ろ ー ！！

分子触媒化学I 武岡浩司 中山裕棋

H08 ナノの世界で光を操る

ナノ物性化学 大倉孝太 竹熊晴香 松田倫太郎 三宅雄一郎

- P10 放射性核種を用いた環境動態研究
環境動態化学 上紺涼 安原賢太
- P11 ナノレベルの視点から解き明かす環境問題の真実
無機反応化学 川本圭佑 栗原英太郎 小宮樹 岳田彩花
- P12 LINE for membrane ～あなたの知らない界面の世界～
ソフト界面化学 神田涼亜 満田るな
- P13 分子シミュレーションと拡散係数と分子の大きさ
量子生物化学 末松安由美 植松祐輝 大島章生
須田慶樹 竹田宙加 長尾正明
大久保堅三郎 櫻井敦也 秋山良
- P14 光で探る分子の構造と性質
構造化学 横田航希 脇本椋太郎 川村昌也
- P15 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 成田昌弘 梶村裕人 矢野諒介 平田拓馬
- P16 生物活性天然有機化合物を基盤としたケミカルバイオロジー
生物有機化学 新井智之 梅野圭太郎 安富貴也 吉村庄太郎
- P17 タンパク質・ペプチドの機能～カギを握るのは相互作用～
生体分子化学 笠谷和見 坂本直樹
- P18 生体膜の統合分析を目指して
生体分析化学 古閑卓也 平野佳奈 安田裕貴 山口晋平
- P19 細胞を舞台に活躍する分子たち
生体情報化学 有田頌彬 伊藤貴紀 熊谷友哉
坂本理沙 中尾陸人

後期特別談話会

開催日：2018年12月1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 脳神経系にある核内受容体とハロゲン含有ビスフェノールの受容体化学
構造機能生化学 松島綾美
- L02 生体高分子ゲルのレオロジー
分散系物理化学 槇靖幸
- L03 量子化学手法と液体の統計力学理論による定量的 pKa 予測手法の開発
理論化学 藤木涼
- L04 錯体触媒および色素を用いた分子性光電気化学セルによる太陽光水分解
錯体化学 小澤弘宜
- L05 多孔性配位高分子に包接したアルカン分子の挙動と骨格構造の磁性の相関
錯体物性化学 芳野遼
- L06 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
- L07 生体とのナノ界面を観る・制御する
ナノ物性化学 有馬祐介
- L08 極微小粒子「クラスター」の性質を独自の手法で探る
量子化学 堀尾琢哉
- L09 光励起状態ダイナミクスの実時間追跡：超高速レーザー分光
分光分析化学 宮田潔志
- L10 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

- L11 C-H 結合に挑む
有機反応化学 内田竜也
- L12 イリジウム触媒によるアザインドールのピリジン環選択的な不斉水素化
分子触媒化学 中山裕棋
- L13 金属酸化物担持ルテニウム触媒による不斉水素化反応とフロー法への応用
触媒有機化学 村上亜紀子

～ポスター発表～

- P01 金属錯体触媒を用いた人工光合成の実現を目指して
錯体化学 (酒井研) 堀翔太郎 管昌権
- P02 有機色素フタロシアニンのサンドイッチ化合物 — 三層型二核錯体系列
錯体化学 (高橋研) 高橋和宏
- P03 P.C.P ～C'mon baby SAKUBUTSU～
錯体物性化学 川原啓汰 桁山雅旭 笹木健太
外山小夏 松尾和哉
- P04 ナノテクノロジーで未来を拓く
ナノ物性化学 三宅雄一郎 碓木凌 杉原諒一
- P05 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 福本佳弘 瀬島響
- P06 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
ナノ機能化学 吉丸翔太郎 江口弘人 大谷部嶺志
森本達美 浦研二郎 久保功貴
- P07 放射性核種を用いた環境動態研究
環境動態化学 上紺谷涼 安原賢太
- P08 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 池原遼平 末武瑞樹 川本圭佑 小宮樹

岳田彩花 栗原英太郎 諸岡和也 横尾浩輝

- P09 かご型シルセスキオキサンの化学
錯体化学 (岡上研) 中島望視
- P10 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
- P11 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 梅本壮和 岡林隆太 下田侑史 田中孝記
- P12 分子の動態研究～タンパク質・修飾電極～
反応分析化学 富安幸仁
- P13 身の回りの界面化学
界面物理化学 坂本弘武 千口圭介
- P14 新しい機能をもつハイドロゲルの合成・構造・解析
分散系物理化学 岩本美帆 竹藤春菜 富松哲郎 松永航 森拓也
- P15 LINE for membrane ～あなたの知らない界面の世界～
ソフト界面化学 神田涼亜 満田るな
- P16 高分子結晶への特異的分子吸蔵
量子生物化学 大島章生 大久保堅三郎 櫻井敦也 須田慶樹
竹田宙加 竹田宙加 長尾正明 植松祐輝
末松安由美 秋山良
- P17 キラルクレフト構造をもつ芳香族ヘテロ環化合物の合成と物性
物性有機化学 曾根諒 中村孝 許柯 大橋奈央
ロングジェレミー 伊藤芳雄
- P18 変わらぬもの、変わりゆくもの
触媒有機化学 川相誓也 隅川佳星 春田朝陽
 チョコヘミン 高木真由

- P19 反応をデザインするエッセンス
有機反応化学 土居内大樹 枝広遥毅
- P20 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 新井智之 梅野圭太郎 安富貴也 吉村庄太郎
- P21 ハロー！パラジウム触媒
分子触媒化学 内之倉朋紘 三浦敬
- P22 MAP キナーゼ ASK1 阻害剤の構造機能相関研究
分子触媒化学 II 吉清倅生 末永正彦
- P23 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 東大悟 大庭隆也
- P24 ナノより小さい粒子「クラスター」の性質
～電子が握るサイズ依存性の鍵～
量子化学 河野聖 西川享佑 楠本多聞
西尾俊紀 林奈穂 飯田岳史
- P25 量子化学はこんなにおもしろい！
量子化学 II 横路健生
- P26 分光学で探る分子の構造と性質
構造化学 脇本椋太郎 横田航希 川村昌也
- P27 理論と計算と化学
理論化学 田畑光一朗 平中真子 光安優典 山下裕也
- P28 はたらく生体分子 ～自己集合と分子認識～
生体分子化学 栗木暖佳 住吉勝伍
- P29 細胞を舞台に活躍する分子たち
生体情報化学 有田頌彬 伊藤貴紀 熊谷友哉
坂本理沙 中尾陸人

P30 環境有害物質が示す核内受容体によるシグナル毒性
構造機能生化学 多田悠亮 行武美華 岩本雅輝 田川幸樹

(3) 2018年度修士課程論文公開講演会

開催日：2019年2月14日(木)・15日(金)

会場：講義棟301号室・ウエスト1号館B314号室

(4) 2018年度学士課程卒業研究業績報告会

開催日：2019年3月4日(月)・5日(火)

会場：理学部 大会議室

2. 2018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

(酒井グループ)

学部4年生(2名)、修士1年(6名)、修士2年(5名)、博士課程1年(4名)、博士課程2年(1名)、博士課程3年(2名)、及び特別聴講学生(1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、および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と成長させることが目標。本年度配属学生はなく、直接的指導は行っていない。

(岡上グループ)

学部4年生1名が在籍しており、研究に必要な基礎知識の習得を目標とした。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させた。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った。

研究目標

(酒井グループ)

金属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機能性金属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や二酸化炭素還元反応を触媒する金属多核錯体の創製を当研究グループのメインテーマに設定している。

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と機能評価

- ・ 二酸化炭素還元触媒機能を有する金属錯体の開発と機能評価
- ・ 機能性錯体を用いた太陽光分解システム（色素増感光電気化学セル）の開発
- ・ 多電子貯蔵機能を有する光分子デバイスの開発と機能評価
- ・ 電気化学的手法による各種錯体の電極触媒能の評価
- ・ 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と物性の研究を行っている。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)錯体の合成と特性解明。近年の具体的課題は無置換Pcとオクタメチル置換Pcを含むヘテロレプティック三層型二核錯体の構造異性体の選択的合成。今年度は無置換Pcとオクタメチル置換Pcを含むヘテロレプティック二層型単核Lu(III)錯体と無置換Pcの単層単核Lu(III)錯体の反応から、二種の構造異性体のうち一種の選択的な生成を確認した。

（岡上グループ）

ケイ酸誘導体の一つであるかご型構造を有するシルセスキオキサン(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研究活動を行っている。配属された学部4年生は、配位サイトのシッフ塩基の芳香環に異なる置換基を導入した銅(II)錯体を合成し、ESRによる銅(II)周りの構造評価をテーマとした卒業研究を行った。

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

新規金属錯体の合成・構造・性質、多重機能性金属錯体の合成と光触媒機能評価、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の水素原子包接、かご型シルセスキオキサンを配位子とした金属錯体の合成

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、論理的に思考し能動的・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に加えて、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 5 名、修士学生 9 名、博士学生 5 名（うち博士課程教育リーディングプログラム 分子システムデバイスコース 5 年生 1 名、4 年生 2 名）、ニューカッスル大からの学部留学生 1 名の合計 20 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。前年度 3 月に助教の栄転したことにより 4 月からは教授 1 名のみで指導したが、1 月に准教授が着任することで、より充実した研究・教育体制となった。また、19 年度着任の助教の人事も立ち上げた。

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た。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、巨大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、化合物の精密な解析・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 23 件の口頭発表と 31 件のポスター発表を行った。博士 3 年の 1 名、博士 2 年の 2 名、博士 1 年の 1 名、修士 2 年の 1 名、修士 1 年生の 2 名および学部 4 年の 1 名は、国内外の国際学会で計 14 件のポスター発表を、博士 3 年の 1 名、博士 2 年の 2 名、博士 1 年の 1 名は国内外の学会で計 8 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、国際学会でポスター賞 1 件、国内学会で講演賞 1 件とポスター賞 4 件（うち最優秀ポスター賞 1 件）を受賞した。

二国間共同研究の一環で、博士 2 年の 1 名がミュンヘン工科大学の Roland A. Fischer 研およびウィーン工科大学の Peter Weinberger 研に合わせて 1 ヶ月間滞在し、化合物合成および測定技術を学び、国際経験を積んだ。研究室主催で国内外の研究者を招いた講演会を 2 回開催し、最先端の研究を学ぶとともに、研究者と交流を通して研究以外の事を学ぶ機会を提供した。昨年 10 月から滞在中のニューカッスル大学より学部学生の留学生を引き続き指導し、8 月に帰国した。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。

本年度は、学外から 1 名が大学院博士後期課程入試を受験して合格し、来年度に入学することになった。毎年学外からの受験者がいることから、ホームページでの情報公開や積極的な学会参加等で、一定の知名度を保っていると思われる。ホームページへのアクセス数は年間 15,000 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、多孔性配位高分子およびリポソームを基盤として、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特異なメゾスケール空間を基盤として、細胞における生体分子に代えて機能性金属錯体を膜の表面および内部に集積させる手法、リポソーム内部で金属錯体を直接合成する手法、および金属錯体の導入によりドメイン構造を制御す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）親脂質性金属錯体の開発とリポソームとの融合による反応空間の構築、（６）リポソーム内水相での金属錯体の直接合成、（７）リポソームの脂質ドメインを利用した高効率光エネルギー移動系の構築、（８）錯形成反応を利用した膜チャンネルの機能制御、（９）多核クラスター構造による分子触媒の開発、（１０）ポリ酸と環状金属錯体の複合化による機能性多孔性構造の構築、（１１）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
- ・ 親脂質性金属錯体の開発
- ・ 発光性多孔性金属錯体による選択的分子センシング
- ・ 多核クラスター構造の合理的構築と触媒能
- ・ ポリ酸と環状金属錯体の融合による機能性細孔構造の構築
- ・ 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/Sakutaiбусsei/page02-1.html>

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」では酸塩基平衡から分配平衡に至る平衡および滴定に関する内容を基礎から講義し、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。これらの講義は質・内容ともに充実度が増した。また、学部2年前期に開講される「化学序説」の一部を担当し、天然物化学や細胞膜に関する最先端の研究について講義を行った。木下は学部2年次の学生実験「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。これらの実験では、分析装置の構造や原理に始まり、取得したデータの解析、さらにはレポートの書き方について指導した。授業アンケートを見ても、おおむね学生の希望に沿った講義を行うことができている。また、前期特別談話会では、高校生向けに細胞膜に関する最先端の研究について講義を行った。

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。

本年度までに(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できるような環境を整えている。一方、(3)に関しては、留学生は受け入れたものの日本語がうまく、研究室内のセミナーも主に日本語で行っているため本目標の到達は不十分である。今後早急に研究室セミナー等を順次英語化していく。

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。この成果は論文掲載され（Inada et al. *Anal. Chim. Acta* 2019）、2019年2月に九州大学からプレスリリースした。

<http://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/320>

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、脂質分子との定量的な親和性解析が可能となった。さらに、このようにして同定した特異的脂質が膜タンパク質の構造や機能を制御していることも明らかにした（論文投稿中）。同時に、X線結晶構造解析を用いた脂質と膜タンパク質の相互作用解析を目指し、脂質環境下での膜タンパク質結晶化を開始した。上記のSPR法で取得した膜タンパク質特異的脂質を共存させることで、膜タンパク質の効率結晶化を目指している。また、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。同様に吸入麻酔についても検討を行ったところ、局所麻酔とは異なりラフトへの作用は限定的であった。さらに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、2017年に報告した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が大きく前進した。さらに同様の手法でセラミド誘導体や蛍光セラミドの開発にも成功した (Matsufuji et al. *Langmuir* 2018, Matsufuji et al. *Langmuir* 2019)。セラミドは肌の保湿成分として医薬品や化粧品として有用なことから、蛍光セラミドの開発は2019年2月に九州大学からプレスリリースされ、その成果は産業界も含め広く注目を集めた。
(<http://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/317>)

また、脂質膜の外側と内側の組成の異なる非対称膜の作成にも成功し、膜の外側に形成した脂質ラフトが膜の内側に及ぼす影響について精査を開始した。

このように、いずれの課題においても着実に成果を出し、研究は順調に進捗している。さらにその成果を広く内外に発信している。

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。その結果、出席率も高く、期末試験の成績も優秀であった。また化学科の学生向けには、昨年度に引き続き、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。

宮田担当の学部教育としては、①学部2年生向けの化学序説の一コマ、②学生実験の基本操作法の再結晶、③分析化学実験のデータ解析法と各種滴定を行った。①化学序説では、当研究室が展開している時間分解測定の重要性のイントロダクションと、実際に最先端でどのような研究が展開されているか紹介した。授業後にアンケートを実施したところ、多くの学生が内容に興味を持っていた。②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。③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。③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、1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、9月に国内学会(分子科学討論会)でポスター賞受賞、年度末にはアメリカ化学会の専門誌(J. Phys. Chem. Lett.)へ論文を投稿するなど十分な成果をあげている。さらに修士の学生には、3件の国際会議への参加とポスター発表やイギリスの大学において2週間の分光測定実験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)

2. 新学術領域「革新的光物質変換」

- ・アリアルホスフィン **Re(I)**錯体における励起状態構造変化と CO₂還元光触媒活性(東工大・石谷グループ)
- ・超分子2核錯体 CO₂光還元触媒(東工大・石谷グループ)
- ・アリアルホスフィン **Cu(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 **Ru(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)

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

- ・時間分解赤外分光法を用いた有機 EL 材料の励起状態の分子構造に関する研究(株式会社 Kyulux)
- ・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)

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/>

反応分析化学分野

竹原 公 准教授

教育目標

今年度は所属学生が修士2年生一人のため、修士論文の完成に向けて研究成果を学位論文としてまとめ発表する能力を養うことを目標として教育を進めた。また、他大学の学生や研究者とも積極的に交流させることで、幅広い視野とコミュニケーション力を養わせた。

研究目標

酵素固定化電極の開発と生体成分分析への応用：金電極表面に作成した自己組織化単分子膜（SAM）を介して酵素を固定化することで、酵素反応の制御と定量分析への応用を試みた。SAM 末端に導入したアミノ基あるいはカルボキシル基とのカップリングによりペルオキシダーゼ（HRP）を固定化して HRP 反応で生じる H_2O_2 を電気化学的に検出した。 H_2O_2 濃度に対して直線性のある結果が得られ定量法としての可能性が示された。

研究分野

分析化学, 電気化学, 生物物理化学

研究課題

修飾電極の電気化学的特性と電極・溶液界面の構造に関する研究（膜修飾電極の構築と電気化学的特性の解明, 単分子膜・脂質二分子膜の修飾による電極の機能化および酵素タンパク質の電極表面への固定化）

参考URL：

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 13 件発表、内学生の発表件数は 7 件。
- ・ 修士課程 1, 2 年生 2 名が国際学会で口頭発表した。

研究分野

環境化学、地球化学、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]

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、研究開拓能力、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年生、修士課程、博士課程それぞれの到達目標は以下の通りである。

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。

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。

本年度は学生の研究発表は国内学会 14 回であった。残念ながら学生の国際学会での発表、学生が筆頭著者として発表した論文はなかった。次年度以降は改善できるよう努力したい。

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 4 報の論文を発表した。

- (1) Finite-size and solvent dependent line tension effects for nanoparticles at the air-liquid surface, *Langmuir*, 2018, 34, 331-340, H. Matsubara, J. Otsuka, B.M. Law
- (2) Surface dilational viscoelasticity of aqueous surfactant solutions by surface quasi-elastic light scattering, *Colloid Polym. Sci.*, 2018, 296, 781-798, S. Ueno, Y. Takajo, S. Ikeda, R. Takemoto, Y. Imai, T. Takiue, H. Matsubara, M. Aratono
- (3) Effect of Surface Phase Transition on OW Emulsion Stability, Y. Tokiwa, E. Ohtomi, T. Takiue, M. Aratono, C.D. Bain, H. Matsubara
- (4) Effect of the Headgroup Structure on Counterion Binding in Adsorbed Surfactant Films Investigated by Total Reflection X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2018, 91, 1487-1494. Y. Imai, Y. Tokiwa, S. Ueno, H. Tanida, I. Watanabe, H. Matsubara, T. Takiue, M. Aratono

また、吸着膜相転移を応用して新しいコロイド・界面現象を創出する、これまでの継続的な研究が評価され、アメリカ化学会発行のコロイド化学専門

誌 *Langmuir* に特集記事 (Invited Feature Article) 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)

参考 URL : <http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/Bukka/phy4j.html>

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

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。

研究室セミナーでは, 学部4年生, 大学院生ともに高分子物理, 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のテキストを精読し, それぞれの基礎を学ぶと共に, 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。大学院生には, 国際的に評価の高い学術雑誌の中から当研究室のテーマに関連した最新の内容について, 要点をまとめて発表する速報を課すことで, 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。

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，動的・静的光散乱，中性子小角散乱，X線小角散乱，蛍光分光法，レオロジー，マイクロレオロジー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、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光学について、光の性質や物質と光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の波動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「化学序説」（対象：学部2年、世話人：寺寄）

低年次の学部生に向けたオムニバス形式の授業を行い、その責任者を担当した。14名の教員が、それぞれの専門分野の基礎と最先端研究について講義を行った。加えて、安全教育および研究倫理教育を行い、化学に携わる者としての心構えを指導した。また、九重研修を実施し、共同での討論や行動を通して学生間および教員との交流を深めた。

1-3. 専攻教育科目「分子構造論」（対象：学部3年、担当：寺寄）

分子の運動に関する考察に基づいて分子の構造を議論する講義を行った。特に、分子の振動と回転運動について量子化学的な取り扱いを述べ、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、分子運動の各モードの対称性を議論した。演習問題では、具体的な数値を扱う訓練を重視した。

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

光学を題材に、マクスウェル方程式から導かれる光の伝播について、物質境界面での透過、屈折、反射、偏光、さらには光学素子やレーザーの原理を題材に講義した。光学は多くの科学研究で重要性を増しており、化学専攻ばかりでなく物理学専攻の学生も交えて光技術の基礎を修得する場とした。

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(4名)、修士1年(2名)、修士2年(4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、実験に必要な部品や装置の設計図を描く訓練を行った。それぞれに、金属クラスターの化学反応、分光、装置設計などの課題を与え、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、東京)、Asian Symposium on Nanoscience and Nanotechnology(5月、東京)、International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters(8月、中国)、分子科学討論会(9月、福岡)、日本化学会春季年会(3月、神戸)等で学生が発表した。

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、量子論の基礎を丁寧に扱った英文教科書“Atoms, Molecules and Photons”(W. Demtröder)の輪読を量子化学研究室IIと合同で行い、量子化学の基本とともに英文の読解力を養った。加えて、国際的な活動を通じた教育の一環として、外国人非常勤講師の招聘、外国人大学院生の短期滞在受入などを行った。

【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としている。

〈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」および学部2年生の専攻教育科目「量子化学Ⅰ」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。「量子化学Ⅰ」では、理論的には量子化学の原理をしっかりと理解させること、実用的には、シュレーディンガー方程式を書き下し、調和振動子の固有関数や、角運動量の固有関数を基底に用いて行列要素を計算し、永年方程式を作ることが出来る能力を養うことを目標に講義・演習を行った。

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、2種類のプログラムによって教育を行っている。一方は、英文テキストの輪読により、英文の読解力を鍛え、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するもので、今年度は量子化学研究室と合同で、W. Demtröder, “Atoms, Molecules and Photons”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、討論を行った。この他に、4年生のスタートアップのための量子力学に関する講義・演習を行った。

修士2年の学生一名は、Ar-DCNの $j=2-1$ 内部回転バンドの帰属・解析を進め修士論文をまとめた。修士2年の学生もう一名は、トロポロン-dおよびビニルラジカル(HDCCH)のプロトトンネリングについて研究した。またAr-HCN分子錯体の $j=3-2$ 内部回転バンドの測定・帰属を進め修士論文をまとめた。4年生一名はアレンの高分解能FTIRスペクトルの観測を試みた。また水素・HCN錯体のミリ波分光を行った。

研究目標

【量子化学研究室：寺寄・堀尾・荒川グループ】

現行のナノ材料よりもさらに小さな物質を扱う次世代のナノ物質科学を切り拓くことを目標に、原子の数（サイズ）が数～数十個の範囲で正確に定まった原子分子クラスターを対象として、これら極微小な物質に特有の基礎物性を、物理化学の視点と手段で探究する。クラスターの特質は、原子1個の増減で物性や反応性が不規則かつ劇的に変化し（サイズ効果）、常識を超えた新物質の発見が期待されることであり、元素戦略の手段としても注目される。我々は、原子数をパラメータとして千変万化するこれらクラスターを新たな物質群と捉え、物質科学の本質を掘り起こす新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的には、質量分析技術で原子1個の精度でサイズを制御するクラスター発生法、反応生成物の時々刻々の変化を捉える化学反応追跡法、レーザーや放射光を利用した分光法など、最先端の実験手段で特性解明に取り組む。一方で、真空中で液体を扱う技術を開発して気相化学と液相化学との融合に挑むなど、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ている。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。そこで、原子の数で変化する特異な物性・反応性の探索に加え、これらの基本となるクラスターの電子構造・幾何構造の解明に、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でいる。また、これら気相クラスターの液相展開を狙いとして、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でいる。

〈研究成果〉

課題(1)：金属／金属化合物クラスターの化学反応過程

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。通常、d電子は遷移金属原子上に局在し、開殻系の不対電子が高い反応性の起源になるが、銀などの金属中にドーブされて自由電子（s電子系）と相互作用すると、d電子が非局在化して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クラスター中の電子数を調節し、s-d相互作用に対する電子数の効果を明らかに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）をドーブした正イオン種 Ag_nM^+ について、酸素分子との反応性

をサイズを変えながら調べ、Cr, Mn 以外において、正電荷を考慮した上で原子 M ($3d^m4s^2$) と銀 ($5s^1$) クラスタとで価電子数が合計 18 個となるサイズ $n = 17 - m$ で反応性が特異的に低下することを見出した。この結果は、18 電子系において s-d 軌道混成が促進され、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、電子数の効果をさらに追究するために負イオン種 Ag_nM^- の反応性研究を開始し、M = Sc, Ti, V, Co, Ni の 5 種について実験を行った。その結果、Sc, Ti, V では、正イオン種と同様に 18 電子系 ($n = 15 - m$) で反応性が極小を示すことを見出した。対照的に、Co, Ni をドーピングした負イオン種は高い反応性を示した。18 電子系のサイズにおいて Co, Ni が銀原子で完全には内包されず、d 電子の一部がクラスタ表面上に局在することが高い反応性の原因と推測した。

第 2 のテーマでは、宇宙空間での分子進化過程、すなわち有機分子誕生のメカニズム解明を目的とした研究を推進した。本年度は、特に、宇宙に遍在する鉄族元素を触媒とする反応に着目し、Co クラスタ正イオン Co_n^+ 上における水素分子 H_2 と一酸化炭素分子 CO との反応に取り組んだ。 Co_n^+ への H_2 吸着効率は非常に低いが、予め一酸化炭素分子が吸着した Co_n^+CO は高い H_2 吸着能をもつことを見出した。さらに、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。今後、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ていく。

課題(2) : レーザー分光による金属クラスタの電子構造研究

直径 10~100 nm 銀ナノ粒子において、電子の集団励起による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途上で電子の集団励起が如何に発現するかは自明でなく、サイズ選別された Ag_n^+ クラスタを対象に、我々独自のレーザー分光実験で電子の挙動の探究を進めた。前年度まで $n \leq 40$ の領域で光解離分光・吸収分光を行ってきたが、従来、色素レーザーが光源だったため、測定波長が狭い範囲に限られていた。本年度はパラメトリック発振 (OPO) レーザーを新たな光源に加え、測定波長を紫外から近赤外まで大きく広げ、さらに測定サイズも $n = 70$ まで大きく進めた。その結果、 $n \geq 25$ 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。さらに、電子励起の集団性を評価する理論的な手法として、TD-DFT 計算による理論解析を開始した。

課題(3) : 発光分析による金属クラスタ成長過程の研究

クラスタの実験では試料作製が肝心であり、とりわけ目的とするサイズを如何に多く生成するかが実験成功の鍵を握る。そこで、クラスタ生成条件の解析を新たな研究課題とした。我々が金属クラスタ発生源としているマグネトロンスパッタ法では、スパッタ用アルゴンイオンを生成する放電領域からプラズマ発光が観測されるが、その発

光を分析してクラスター成長室内の様子を探ることを試みた。発光スペクトルには、アルゴン、バッファガスのヘリウム、そしてスパッタされた銀原子の、いずれも中性原子からの発光線が観測された。これらの強度や強度比と実際に発生するクラスターの質量分布（質量スペクトル）が、アルゴン流量、ヘリウム流量、放電パワーなどのクラスター発生条件にどのように依存しているかを調べ、目的のサイズを効率よく生成する条件を突き止めることを目指して、結果の解釈を進めている。

課題(4)：イオン光学系シミュレーションに基づく実験装置の改良

課題(3)のクラスター発生とともに、生成したクラスターを高効率に搬送・検出することも重要である。従来の設計の飛行時間型質量分析計において、特にイオンを反射するリフレクトロンが検出効率の低下を招いている懸念があった。そこで、イオン光学系の解析ソフトウェア SIMION を用いて、イオンの飛跡をシミュレーションしたところ、確かにイオンビームが発散傾向にあり、その原因がリフレクトロン前面の等電位面の形状にあることを突き止めた。そこで、シミュレーションを繰り返してより良いリフレクトロン電極形状を検討し、イオンビームの空間集束性を高めるリフレクトロンを設計した。この設計に基づいて新たなリフレクトロンを製作し、動作試験を行ったところ、設計通りの性能が確認され、イオン検出効率を約5倍向上することに成功した。これは学部4年生の卒業研究の成果であり、現在、論文投稿の準備を進めている。

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) を行った。本年度は、まず、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、銅原子の酸化数は変化せず、銅が金属状態を維持して触媒活性を失わない可能性があることを突き止めた。続いて、光合成（光化学系 II）の酸素発生中心として知られ、水活性化触媒として期待されているマンガン酸化物クラスターの研究に取り組んだ。 $\text{Mn}_4\text{O}_4^{7+}$ クラスターに対する測定を行った結果、 $\text{Mn}_4\text{O}_4^{7+}$ ではほぼ2価だったマンガン原子の酸化数が、酸素原子数と共に大きくなる様子を捉えた。

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

ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究を継続し、X線磁気円二色性 (XMCD) 分光を推進した。本年度は、9量体以下のコバルトクラスター Co_n^+ に着目し、これらが比較的大きな軌道磁気モーメントを持つことを突き止め、*J. Phys.: Condens. Matter* 誌に発表した。これは、3量体で既に軌道磁気モーメントがほぼ消失する鉄クラスター Fe_n^+ とは対照的な結果である。

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進めている真空中の液滴研究について、水液滴に関する成果をまとめて論文発表を行った。多数の液滴を観察して液滴発生から凍結までの時間を測定する統計的な凍結時間測定法を確立し、およそ 1 ms の間に凍結が一気に進む測定結果を、蒸発冷却による液滴の温度変化と、温度低下に伴う均質凍結核生成速度の増加を考慮したシミュレーションで再現した。とりわけ、過冷却状態の凍結核生成速度を初めて明らかにした。Phys. Chem. Chem. Phys.誌に発表したこれらの成果は大きな注目を集め、PCCP Hot Article 2018 に選出された。

【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、電子の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β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。結果をまとめ論文執筆中である。

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、トロポロン-d および ¹³C-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。

分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では Ar-HCN および Ar-DCN 分子錯体の内部回転遷移をミリ波領域で観測した。また H₂-HCN 分子錯体の内部回転バンドの帰属をミリ波・ミリ波二重共鳴により確認した。

〈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
(2) 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 β 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。結果をまとめ論文執筆中である。*cis*-HDCCH の観測も試みたが、まだ観測されていない。

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-d およびトロポロンのすべての炭素の ^{13}C 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。

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ーを生成させ、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。分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では、Ar-HCN 分子錯体の $j=3-2$ 内部回転遷移および Ar-DCN 分子錯体の $j=2-1$ 内部回転遷移をミリ波領域で観測し分子間ポテンシャルを決定した。また $\text{H}_2\text{-HCN}$ 分子錯体の $\Pi_1-\Sigma_0$ 内部回転バンドの帰属をミリ波・ミリ波二重共鳴により確認した。帰属本数が 2 本しかない $\Sigma_1-\Sigma_0$ バンドについて、さらに新たなスペクトルの観測を進めている。

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グストロームサイズのクラスターから、はるかに大きなマイクロメートルサイズの液滴まで、種々の原子・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

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年生には、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教育目標にしている。修士課程の学生には、論理的思考力、文章力、および発表能力の向上を重視した教育を行っている。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、W. G. Richards, P. R. Scott 著の“Energy Levels in Atoms and Molecules”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。本年度は九州大学大学院理学研究院が中心となって分子科学討論会を開催したため、研究室の学生全員が討論会運営に参加した。

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。

■ 金属イオン－生体関連分子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、尿素などの溶媒分子からなる系の振動分光の結果に対して、量子化学計算を用いた解析を行っている。Ca²⁺/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。

■ 金属イオン－配位子間の動的な相互作用に関する研究

水溶液中の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着目している。サリチル酸分子の蛍光強度は、遷移金属イオンの添加により減少するが、Na⁺やCa²⁺添加の場合は増大することを見出し、国内学会で報告した。この原因を解明するため、サリチル酸類似分子に対する分光実験および量子化学計算を継続中である。

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>

[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
劉曉輝 助教、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リン脂質、糖脂質、ステロールなど様々な脂質分子で構成される脂質二重層であるが、現在、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、脂質分子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、特に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。従って、これら経路のリン脂質輸送機構の解明が、ミトコンドリアにおけるリン脂質代謝の理解に不可欠であるが、その輸送機構には未だ不明な点が山積みされている。現在、ミトコンドリア外膜から内膜へのリン脂質輸送に関しては、酵母の Ups1-Mdm35 複合体と我々が見出した Ups2-Mdm35 複合体がそれぞれ PA と PS を輸送することが示されているが、これら因子が欠損しても酵母は PE と CL を野生株の約 50% と 20% 合成出来る。従って、これら因子以外による現在不明の輸送経路も存在し、その解明が急務となっている。一方、ミトコンドリア外膜と内膜におけるリン脂質の膜横断輸送の機構は、現在ほとんど理解されていない。また ERMES、vCLAMP、EMC、MFN2 と名付けられた因子が、小胞体や液胞からミトコンドリア外膜への脂質輸送に関与することが示唆されているが、これら因子が、実際にどの程度どの脂質の輸送に関与しているかは、現在論争中で明らかにされていない。さらに、ミトコンドリアの CL と PE の量 (恒常性) がどのような機構 (遺伝子発現レベルや酵素レベルでの機構等) で制御されているのかも現在ほとんど分かっていない。そこで本研究室では、これらの研究課題に取り組み、ミトコンドリアにおけるリン脂質代謝とその制御機構の全貌解明を目指している。

これまでに知られているミトコンドリアの CL と PE の生合成経路を構成する主要タンパク質は、ヒトと酵母の間で保存されていることから、本研究室では、まず、遺伝学的解析が容易な酵母を用いて、ミトコンドリアリン脂質代謝に関連する新たな脂質輸送遺伝子、代謝遺伝子、あるいはそれらの調節遺伝子を同定することを試みている。

これまでに我々は、酵母遺伝学のメリットを利用し、ミトコンドリアリン脂質代謝に関与する新規遺伝子として、報告済みの遺伝子、*POR1* と *POR2* (Miyata N. *et al. JBC* 2018)、*UPS2* (Miyata N. *et al. JCB* 2016)、*VID22* (Miyata N, *et al. Biochem J.* 2015)、*TAM41* (Tamura Y. *et al. Cell Metab.* 2013)、*FMP30* (Kuroda T. *et al. Mol Microbiol.* 2011) や未発表の遺伝子を多数同定した。それら遺伝子の中で、現在解析中の遺伝子 *ICE2* は大変興味深い遺伝子であり、2018 年度は、*ICE2* 遺伝子の機能解析において以下の重要な研究成果を得た。

従来、PS 脱炭酸酵素 1 (Psd1) はミトコンドリア内膜でのみ PS の脱炭酸により PE を合成すると考えられていたが、近年 Psd1 がミトコンドリア内膜に加え小胞体上にも局在す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 PE の生合成や代謝についても再考し検証する必要がある。そのような研究背景のもと我々は、遺伝学的

スクリーニングにより、Psd1 を介した PE 生合成に関与する因子として小胞体膜タンパク質 Ice2 を同定した。さらにリン脂質の代謝標識実験により、グルコースを含む発酵条件下の培地中において、Ice2 欠損変異株では小胞体での Psd1 を介した PE 生合成は低下するが、ミトコンドリア内膜での Psd1 を介した PE 生合成は低下しないことが示唆された。従って、Ice2 が小胞体の Psd1 活性に特異的に関与していることが示唆された。一方、グリセロールとエタノールを含む非発酵性培地中、すなわち呼吸条件下では、Ice2 欠損変異株の細胞内 PE 量は正常レベルであったが、ミトコンドリアで合成された PE のホスファチジルコリン (PC) への変換が低下していることが明らかとなった。(PE の PC への変換は小胞体のリン脂質メチル化酵素により行われる。) 従って、呼吸条件下では、ミトコンドリアから小胞体への PE の輸送に Ice2 が関与していることが考えられた。これらの結果は、Ice2 が Psd1 を介した PE 生合成や PE の代謝に対して様々な役割を担っていることを示唆しており、リン脂質代謝の研究に大きなインパクトを与えるものである。

(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、真核生物の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観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、生体膜の多彩な機能を支えていること、第二に、複合スフィンゴ脂質の分解代謝産物 (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。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。この構造多様性は、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。一方で、生物は様々な形 (遺伝性代謝疾患、感染、異種微生物間での抗生物質による攻撃等) でスフィンゴ脂質の代謝系が破綻し、生命機能に重大な損傷が生じるリスクにさらされている。そのため、生物はスフィンゴ脂質代謝破綻による被害を最小限にするための救済システムを備えていることが想定されるが、それに関する知見は極めて乏しい。本研究では、分子遺伝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、およびスフィンゴ脂質代謝破綻から細胞を守る救済機構の解明をおこなっている。

2018 年度は、以下の二つのことを明らかにした。① 出芽酵母は、自然界において温度、浸透圧、pH、栄養等の環境因子が急激に変化することで、様々な環境ストレスをうけている。これは、出芽酵母が利用されている様々な食品、医薬品の発酵生産現場においても同様である。本研究では、複合スフィンゴ脂質 MIPC の生合成が欠損した酵母

が、低 pH ストレス下 (pH 2.5~3.5)において生育できなくなることを明らかにした。MIPC 生合成欠損株の低 pH 高感受性発現のメカニズム解明を試みた結果、i) MIPC 生合成欠損により MIPC の前駆体である IPC が過剰蓄積することによって低 pH 高感受性が引き起こされること、ii) IPC 過剰蓄積によって低 pH 下での酵母の形質膜透過性が上昇すること、iii) 形質膜のエルゴステロールの増大によって低 pH 高感受性および形質膜透過性上昇が抑制できること、がわかった。また、酵母は低 pH にさらされると、細胞内の IPC 量を速やかに低下させることも確認された。これらの結果より、複合スフィンゴ脂質 IPC 量を低下させることが、酵母の低 pH ストレス応答機構の一つであることが示唆された。

② 複合スフィンゴ脂質は、酵母の正常な生育に必要な膜脂質である。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 (Yamaguchi Y. *et al. Mol Microbiol.* 2018)。本研究では、HOG 経路の下流因子の同定を試みた。DNA マイクロアレイによって、複合スフィンゴ脂質生合成破綻下で HOG 経路依存的に転写が活性化される遺伝子が 80 個程度存在することが確認された。この中より、救済に実際に寄与する候補因子として *FMP48*、*FMP45*、*GRE2* 遺伝子を同定した。*FMP48* は、複合スフィンゴ脂質生合成破綻下での生育低下の原因の一つとなるミトコンドリア由来の活性酸素種 (ROS)の増加を抑制することで、救済に寄与することが示唆された。

(3) 非内分泌型ステロイドの合成と機能

内分泌型ではないステロイドホルモンが生体組織で局所的に合成され作用する例が見つかっている。膵臓β細胞は活発なインスリン合成を行う内分泌細胞であるが、この細胞もエンドクライン/パラクライン的なステロイド合成をしている。インスリン合成は過重の小胞体対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。β細胞は内分泌とは独立してステロイドホルモンの合成をおこなうことで、小胞体ストレスを抑えていると考えられる。コルチゾールやコルチコステロンにはその効果が観察され、β細胞由来の INS-1 細胞は実際に作っている。一方で、β細胞が合成するステロイドにはストレスを増強させるものも存在することから、必要に応じて正負のストレス制御をしている可能性が示唆された。合成させたステロイドは薬物代謝を担う肝臓同様、速やかに薬物代謝 P450 により不活化されることから、β細胞では種々のステロイドホルモンの合成と分解を行うことで、内分泌による恒常性維持とは別の細胞機能制御をしている可能性を見いだした。

(4) 新世代ビスフェノールのヒト核内受容体を介したシグナル毒性分子機構の解明

ビスフェノールA (BPA)は、現代生活に欠かせないプラスチック製品やエポキシ樹脂の原料であり、女性ホルモン・エストロゲン様の作用を示し、低濃度において胎児や乳幼児の生殖腺系や脳神経系で悪影響を及ぼす。この「低用量効果」の悪影響は、核内受容体を介した遺伝子DNA転写におけるシグナル毒性であるが、その詳しい分子メカニズムは未解明である。一方、現在、BPAの代替えとして、その誘導体が開発され、生産が急ピッチになっている。しかし、こうした所謂『新世代ビスフェノール』の毒性・安全性評価はほとんど未実施であり、きわめて重要な研究課題である。こうした新世代ビスフェノールの悪影響の実体・本質、そして、その分子機構の解明を目指している。

研究分野

生化学、細胞生物学、分子生物学、酵母遺伝学、環境化学

研究課題

リン脂質の代謝調節、細胞内輸送、生理機能

膵臓β細胞で非内分泌的＝局所的に合成されるステロイドホルモンの生理機能

膜タンパク質のシグナル伝達機構

ビスフェノールの核内受容体を介したシグナル毒性の分子機構

参考 URL : https://www.sci.kyushu-u.ac.jp/department/chem/labo/mol_cell.html

生物有機化学分野

大石 徹 教授、鳥飼浩平 助教、海老根真琴 助教

教育目標

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

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

到達目標の指針

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

研究目標

複雑な構造を有する生物活性物質の化学合成および作用メカニズムを分子レベルで解明することに重点を置き研究を行う。すなわち天然から微量しか得られない天然物や、作用機構解明のための分子プローブを化学合成し、生物有機化学的手法と最先端の機器分析を用いることで分子レベルでの活性発現機構解明に取り組む。2018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) 天然物をリード化合物とした次世代抗マラリア薬の開発
- (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

ハワイマイシンアナログの合成研究

オスシラトキシシン E の構造決定と全合成研究

マイクロフローリアクターを利用したキラルビルディングブロックの合成

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

物性有機化学分野

伊藤 芳雄 准教授

教育目標とその達成度

学部4年生は研究室生活をスタートさせる重要な時期であり、必要となる実験の基礎技術を習得したうえで自分の卒業研究課題の趣意を理解し、研究生活の基本的姿勢を身に付けることを目標としている。大学院修士課程学生においては、学生自ら研究計画を提起し、実験結果を考察・議論して国内の学会で発表することを目標としている。

学部4年生は、はじめの三ヶ月間、基本的な合成実験、機器分析、化学英語、天然物の紙上合成などを行い、研究活動のための基礎を習得する。また、各自テーマを選定して卒業研究を開始する。文献紹介、研究報告会などの研究室セミナーを毎週行う。

以上を通して、有機化学に関する知識を充実させるとともに英語論文を読みこなす力を養い、自らの研究を発展させ、成果を適切にまとめて発表するという経験を積んでおり、一般社会で求められている能力を持つ人材が育っている。また、就職活動についても十分に時間をかけて学生と相談し学生を支援している。

研究目標とその達成度

当研究室では「新しい機能性分子システムの開拓」を研究目標に設定し、特異な不斉反応場の構築による立体化学の制御に関する研究を主に行っている。例えば、近年優れた不斉有機触媒として知られているプロリンあるいはプロリノール誘導体に窒素原子や酸素原子を含む配位性置換基を賦与してより高次の立体制御を目指した研究、キラルクレフト構造を有する芳香族ヘテロ環の合成研究などを本年度は行った。

その結果、複核金属錯体やトリポータル様金属錯体の形成に成功し、不斉触媒反応への展開も行った。2018年に学会で発表した課題は、「プロリンを出発原料としたトリポータル様配位子の合成」(第55回化学関連支部合同九州大会)である。また、キラルクレフト構造を導入した新しい不斉配位子の合成とその錯体化も達成した。2018年に学会で発表した課題は、「軸不斉を有する4,7-二置換-1,10-フェナントロリンの合成研究」(第55回化学関連支部合同九州大会)である。

研究分野

有機反応化学、有機光化学、構造有機化学

研究課題

新しい機能性分子システムの開拓

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

構造機能生化学分野

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。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、筥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。なお、構造機能生化学研究室は、下東康幸名誉教授が 2015 年度に定年退職の後、2016 年度より松島綾美准教授が独立の准教授として研究室を運営している。

(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、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 リサーチプログ्रेस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）。セミナーとレクチャーについては、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た。

（学生の研究活動）

学生の数は少ないが、研究活動はきわめて活発である。修士学生、4年生を含めて、科研費研究をはじめとして、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。学生の研究発表は、平成30年度日本生化学会九州支部例会（福岡市）で口頭発表を1件、第55回化学関連支部合同九州大会（北九州市）でポスター発表を1件、第18回泉屋コロキウム（九州大学）でポスター発表を1件、第55回ペプチド討論会（京都市）で1件、第40回日本分子生化学会年会で1件、第31回DV-X α 研究会でポスター発表を1件、第91回日本生化学会大会（神戸市）でポスター発表を1件など、合計約6件であった。

（学生の研究助成金獲得状況）

該当なし。学生が積極的に研究助成金獲得に挑戦できる環境を整えたい。

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。いずれの受容体も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。これらは乳がん増悪などにも関与しており、創薬への応用が期待される。最近では、代謝に環境化学物質が影響することが注目されており、肥満や糖

尿病との関連にも注目している。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、これまでにな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）加藤 誠・柘屋宇洋

修士：（1年）多田悠亮・行武美華

学部4年生：岩本雅輝・田川幸樹

研究室構成員の平成30年度進路

修士：加藤 誠（株式会社トライアングル）・柘屋宇洋（東洋紡株式会社）

学部4年生：岩本雅輝（修士課程進学）・田川幸樹（修士課程進学）

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：

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

<http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K002660/index.html>

[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 2 年生 2 名，1 年生 2 名，修士課程 2 年生 4 名，1 年生 1 名，学部 4 年生 4 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，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，磁気遮蔽定数の鞍点に基づく芳香族性の指標 NICS(S)の有用性の検討，RISM-SCF および 3D-RISM-SCF への状態平均多配置 SCF 法の導入，溶液中の光誘起プロトン移動反応の解析，定量的酸解離定数の予測手法の開発，ペンタセンジケトンの光解離反応，等に関する研究を行った。以下に主なものを記す。

- (1) 磁気遮蔽定数の鞍点に基づく芳香族性の指標NICS(S)の有用性の検討

芳香族化合物は、外部磁場に対して特異的に応答することが知られている。これは、芳香族化合物の非局在 π 電子が外部磁場の变化を受けて環電流を生じることによる。NICS (nucleus-independent chemical shift) は、芳香族環内部の外部磁場応答を利用した芳香族性の理論的指標の一つである。この値は、芳香環内部にダミー原子を配置し、ダミー原子が受ける磁気遮蔽効果を計算したものである。NICSには、ダミー原子を配置する位置によって異なる定義が存在する。芳香環の平均位置にダミー原子を配置して磁気遮蔽定数を計算するNICS(0)、芳香環の平均位置から上方 1 Å の位置で計算するNICS(1)等が主に利用されている。NICS(1)は、 π 軌道の節面ではなく、高電子密度領域に近い位置にダミー原子を配置することで環電流を効果的に反映することを意図してNICS(0)の後に提唱された。NICS(0), (1)は、優れた指標であるが、平面性を欠く芳香族分子に対しては、ダミー原子位置の適切な定義が難しい。この問題を解決する指標として、磁気遮蔽定数の鞍点におけるNICS値 (NICS(S)) を昨年提唱した。本研究では、さまざまな平面・非平面芳香族化合物に対してNICS(S)を検証し、その有用性を明らかにした。

(2) RISM-SCF および 3D-RISM-SCF への状態平均多配置 SCF 法の導入

多配置 SCF (MCSCF) 法は、一電子波動関数 (分子軌道) と多電子波動関数 (CI 波動関数) を同時に定める現代量子化学理論の基本的な手法の一つである。特に状態平均 MCSCF (SA-MCSCF) 法は、基底状態だけでなく励起状態を含む複数の電子状態を求めることができる優れた手法である。しかしながら、reference interaction site model (RISM) SCF 法に代表される、溶液内分子の電子状態を定める積分方程式理論と電子状態理論の組み合わせは、これまで単一状態に特定した MCSCF (SS-MCSCF) 法に限定されてきた。溶液内分子の励起状態を含む電子状態の予測には、SA-MCSCF 法との組み合わせが強く求められる。本研究では、RISM-SCF および 3D-RISM-SCF に SA-MCSCF 法を導入し、その手法を水溶液中にあるいくつかの系に対して適用した。

(3) 溶液中の光誘起プロトン移動反応の解析

光酸 (photoacid) は、光吸収による励起によって酸性度が大きく上昇する分子であり、励起状態プロトン化移動に関する知見を得るための、重要な分子種である。近年、実験により、Coumarin183 の励起状態脱プロトン化反応のイオン濃度依存性に関する報告がなされた。これは、塩濃度によって励起状態反応を制御できる好例である。この研究では、実験に加えて電子の密度汎関数法を用いた解析が行われているが、イオンや溶媒といった環境の取り

込みが不十分である。そこで、当研究室で開発を行っている RISM/3D-RISM-SCF 法を用いて、この反応に対するイオン濃度依存性とその分子論を明らかにすることを目的に研究を行った。研究では、イオン濃度を変化させ、反応系および生成系の自由エネルギーを求め、詳細な成分解析を行うことで、そのメカニズムを明らかにした。

(4) 定量的酸解離定数の予測手法の開発

タンパク質の構造形成や機能発現において、解離性アミノ酸残基のプロトン化・脱プロトン化は本質的な役割を果たしている。また、さまざまな有機化合物のプロトン化・脱プロトン化も化合物の溶解度や、分子間相互作用に多大な影響を与えている。したがって、プロトン化・脱プロトン化、すなわち酸解離反応の平衡定数（酸解離定数、 pK_a ）の決定は化学・生物分野における重要な技術要素である。有機分子の pK_a は比較的容易に測定することができるが、タンパク質中の解離性アミノ酸残基の pK_a の決定は容易ではない。このような背景の下、昨年度に引き続き、溶液内分子の量子化学理論である 3D-RISM-SCF 法と線形フィッティング補正法(LFC)の組み合わせによる定量的 pK_a 予測手法の開発を行った。この手法では、プロトン解離反応の自由エネルギー変化のうち、プロトンの自由エネルギーと計算誤差を緩和するためのスケールリングファクターを pK_a が既知の化合物に対するフィッティングによって決定することで、わずかな計算で定量的な pK_a 予測を可能とする。本年度は、生体分子の電子状態理論であるフラグメント分子軌道法との結合手法を用いて、タンパク質内アミノ酸残基の pK_a 予測精度を検討した。

(5) ペンタセンジケトンの光解離反応に関する理論的研究

ペンタセンに代表されるアセン類は有機電解トランジスターの p 型半導体材料として利用されている。山田らはトルエン中で 6,13-ジヒドロ-6,13-エタノペンタセン-15,16-ジオンに 460 nm の可視光を照射するとペンタセンが得られることを報告している。このペンタセンジケトン前駆体の光分解反応は溶液プロセスを用いた薄層形成に有用である。Mondal らはアントラセン、ヘキサセン、ヘプタセンの類似の前駆体について、フェムト秒ポンププローブ分光法を用いた実験を行った。しかしながら、反応の中間体となる励起種を特定するには至らなかった。本研究ではペンタセンジケトン前駆体を対象分子とし、理論的なアプローチを用いてこの光分解反応の機構を明らかにすることを試みた。その結果、二つの反応経路が示唆された。一つは S_1 に励起した後、 S_1/S_0 の交差点を経由し、 S_0 状態で C-C α 結合が解離するもの、もう一つは S_1 から T_1 に項間交差し、 T_1 状態で C-C α 結合が解離するものである。

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2006年5月に発足し、2017年度は発足12年目であった。2015年3月に村山准教授が、2016年3月に山本助教が着任して、教員3名で教育、研究活動を行った。2018年度は、博士課程1人、修士2年生6人、修士1年生7人、学部4年生5人で研究室を運営した。2018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24件の発表を行った。国際会議についても、シンガポールで行われた3rd Edition of International Congress on Catalysis and Chemical Scienceに、学生1人が参加した。なお学部卒業生は全員大学院に進学し、さらに研鑽を積んでいる。このうち1人は東京大学大学院理学系研究科化学専攻に進学した。

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、アミノ酸エステルの不斉加水分解反応についての成果をまとめ、ACS Catalysis 誌で発表した (ACS Catal., 2018, 8, 1150)。アルケンなどの末端から酸素求核剤を付加させる研究、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に関する研究も実施した。他にも固体触媒関係のテーマを丸善石油、三菱ケミカル、宇部興産、クラレ、DICなどを行った。一方、担持金ナノ粒子の食品化学分野への応用として、独立行政法人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、日本食品化学研究振興財団の研究助成を受け、日本酒だけでなく焼酎など種々の飲料への応用などを検討した。この研究で得られた成果は、理学部HPにおいても紹介された。また、食品以外の化学系企業からも問い合わせがあり、燃料からの硫黄化合物の分解除去を対象としてトヨタ自動車との共同研究を行った。また、固体触媒による燃料改質のテーマで、日野自動車の技術指導を行った。また村田製作所と共同で、リチウムイオン電池の電解液分解メカニズムの研究を行っている。

研究分野

有機合成化学, 不斉合成, 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た反応開発, 担持貴金属ナノ粒子による日本酒からの老香の除去, 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>

https://www.sci.kyushu-u.ac.jp/koho/qrinews/qrinews_190522.html

https://www.sci.kyushu-u.ac.jp/e/news/news_181115.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としている。

通常、初めて研究の現場に直面する学部4年生は、大部分の有機化学の知識を教科書から得ている。そこで、学部4年生に対してはできるだけ多くの実験を行うように指導し、自分自身の手で新しい有機化合物を作る喜びや、僅かな反応条件の差により収率が激変する有機合成の厳密性を理解させるように努めている。また、反応の進行に伴って観測される変化を見逃すことなく実験ノートに記録させるように指導し、この変化をベースにして反応中における化合物の状態変化や副生成物の発生のプロセスなどを議論し、有機合成に必要な論理的思考力を育てている。同時に、研究の背景や研究に必要な化合物の合成経路の立案、文献紹介などで、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65回 有機金属化学討論会、第99日本化学会春季年会など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、遷移金属錯体を触媒とする新規有機合成反応の開発および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。

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。

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を開発を行っている。

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：

量子生物化学分野

秋山良 准教授

秋山が私的に忙しかった問題は次第に解決しつつあり、さらに学部学生2名と大学院修士学生4名、学振PD2名の協力があつたこともあり、再び活発な研究・教育活動を行うことが出来た。その事は、11点の出版物を送り出せたことに象徴されていると言って良い。更に、修士2年生を企業に送り出せたことに加えて、研究室に所属していた学振PDの2名も今年度末に送り出すことが出来た。植松祐輝氏は海外学振の研究者として *Ecole Normale Supérieure, Laboratoire de Physique Statistique (Paris, France)* に向かい、末松安由美氏は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として向かった。(なお、その後間もなく植松祐輝氏は九州大学理学研究院物理部門助教として九州大学に戻って来る事が決まった。)

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。なお、平成28年度の4月から2名の日本学術振興会特別研究員(PD) (末松安由美氏、植松祐輝氏) が今年度まで加わっていた。

- [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、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、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 (工学院大)、秋山)
- [4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究 (大島、千葉 (慶応大)、秋山)
- [5] Jons-Ray効果の研究 (植松)
- [6] 液相中のフラーレンの拡散係数の計算 (植松、秋山)

- [7] 2次元流体中の拡散係数の計算 (長尾、秋山)
- [8] 溶媒和モーターの移動距離の研究 (徳永 (工学院大)、秋山)

[1] 希薄な電解質溶媒中における荷電大粒子間の平均力ポテンシャル (末松、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。今後、積分方程式理論の議論を追加してゆく。

[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 (末松、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、現在多成分系での結果を論文にまとめている。更に、白血球などの移動に関わる分子モーター駆動の仮説を立て、内外の研究者と多くの議論を行う事ができた。とくに、100mMの1価イオン雰囲気中で2価のイオンが駆動する上記の相互作用が働くかどうかについて、積分方程式理論のイオンの成分数を増やす計算をおこない、アクチン会合に置けるマグネシウム、カルシウムの効果について検討し、実験と半定量的に一致する結果を得た。この結果を論文として発表した。さらに、酸性蛋白表面の酸素のサイトが負に帯電している事から、その部分が蛋白質間引力のパッチであると考えた。そのサイトが多価カチオンでは引力パッチになるが1価カチオンでは引力的にならない計算結果を得たが、これは実験事実とよく符合する。また、引力の低下の原因も積分方程式理論の相関関数を分析する事により調べており、論文が作成された。また、この現象に関わる蛋白質溶液の相図を作成し、実験と定性的に一致する事が分かった。これらの論文の準備や次の展開への準備を行った。

[4] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究 (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。今年に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、論文が出来上がりつつある。

[4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究 (大島、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。それらの吸着量や吸着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、チューブ内への吸着の計算に進みつつある。実験も検討中である。

[5] Jones-Ray効果の研究 (植松)

電解質溶液-空気間の表面張力は溶けている電解質の濃度に比例する。希薄領域での比例関係は問題がないのだが、超希薄領域ではこの比例関係が壊れて極端に張力が下がる現象が見られる。この現象がJones-Ray効果と呼ばれており、長年の課題となっていた。本研究では純水と考えていた水に微量の界面活性剤が溶けていたことが、超希薄領域による表面張力以上と予想し、理論的な計算を行い、実験で観察された効果を再現し、長年の謎の解決に成功した。現在、実験的な検証が進みつつある。

[6] 液相中のフラーレンの拡散係数の計算 (植松、秋山)

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に強く依存する。そこで、その補正を行なって表面の性質の評価を行った。表面を親水的にする事で拡散係数が大きく変化する。その変化の割合は30%にも及び、実質フラーレンのサイズ変化がないことを考慮すると、Einstein-Stokes則の大きな破れが見られることになる。一方で、この大きな拡散係数の変化は溶媒和による影響が極めて大きいことを示している。

[7] 2次元流体中の拡散係数の計算 (長尾、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2次元流体でも調べてみた。3次元で知られているスケーリングの根拠が欠けているにも関わらず、その結果は現在のところ3次元と同様なスケーリングの結果が出ている。今後この結果の検証を進める。

[8] 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。シンブ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の方法で解決する検討が行われている。

以上の活発な研究活動の到達度は端的には2018年の出版物に表されているので、以下に記載する。

- [1] Yuki Uematsu, Kengo Chida, and Hiroki Matsubara, Intentionally Added Ionic Surfactants Induce Jones-Ray Effect at Air-Water Interface, *Colloid and Interfacial Science Communications* 27, 45-48 (2018).
- [2] Ram M. Adar, Yuki Uematsu, Shigeyuki Komura, and David Andelman, Linear Response Functions of an Electrolyte Solution in a Uniform Flow, *Phys. Rev. E* 98, 032604 (2018).
- [3] Ayumi Suematsu, Takuto Sawayama, and Ryo Akiyama, Effective potential between negatively charged patches on acidic proteins immersed in various electrolyte solutions, *J. Chem. Phys.* 149, 074105-1-8 (2018).
- [4] Yuki Uematsu, Roland R. Netz, Lydéric Bocquet, and Douwe J. Bonthuis, Cross-over of the power law exponent for carbon nanotube conductivity as a function of salinity, *J. Phys. Chem. B* 122, 2992-2997 (2018).
- [5] Yuki Uematsu, Roland R. Netz, and Douwe J. Bonthuis, Analytical interfacial layer model for the capacitance and electrokinetics of charged aqueous interfaces, *Langmuir* 34, 9097-9113 (2018).
- [6] Yuka Nakamura, Akira Yoshimori, Ryo Akiyama, and Tsuyoshi Yamaguchi, Stick boundary condition at large hard sphere arising from effective attraction in binary hard-sphere mixtures, *J. Chem. Phys.*, 148, 124502 (2018).
- [7] Ken Tokunaga, and Ryo Akiyama, Basic cell size dependence of displacement for a solvation motor in a Lennard-Jones solvent, *J. Comp. Chem. Jpn.*, 17, 80–84 (2018).
- [8] Yuki Uematsu, Douwe J. Bonthuis, and Roland R. Netz, Charged Surface-Active Impurities At Nanomolar Concentration Induce Jones-Ray Effect, *J. Phys. Chem. Lett.* 9, 189–193 (2018).
- [9] Yuki Uematsu, Roland R. Netz, and Douwe J. Bonthuis, The effects of ion adsorption on the potential of zero charge and the differential capacitance of charged aqueous interfaces, *J. Phys. Condens. Matter* 30, 064002 (2018).
- [10] Hisashi Okumura, Masahiro Higashi, Yuichiro Yoshida, Hirofumi Sato, Ryo Akiyama, Theoretical approaches for dynamical ordering of biomolecular systems, *Biochimica et Biophysica Acta(BBA) - General Subjects*, 1862, 212-228 (2018)

[11] Ryo Akiyama, Theoretical Studies of Strong Attractive Interaction Between Macro-anions Mediated by Multivalent Metal Cations and Related Association Behavior: Effective Interaction Between ATP-Binding Proteins Can Be Regulated by Hydrolysis, "The Role of Water in ATP Hydrolysis Energy Transduction by Protein Machinery" (Ed. Makoto Suzuki) Springer 2018 (著書).

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12回目は、国際シンポジウムとして開催した。(日時：2018年6月30日,7月1日、開催場所：九州大学伊都キャンパス) 著名な研究者に集まっていたいて講演、ポスター発表などを行った。更に、ブリストル大学のRobert Evans教授には、短期の講義も行なっていたき、全国から研究者、学生に集まっていたいた。これも研究活動の一環として記しておく。

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