

# 教育・研究活動 年次報告書

2021 年度

九州大学大学院理学研究院  
化学部門

2022 年 12 月

## 目 次

はじめに	_____
1. 2021 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 2021 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 2021 年度関係行事一覧	_____
(1) 講演会	_____
(2) 談話会・報告会	_____
(3) 2021 年度 FD・HD	_____
(4) 修士課程論文公開講演会	_____
(5) 学士課程卒業研究業績報告会	_____
2. 2021 年度における各講座の活動	_____
[無機・分析化学講座]	_____
錯体化学分野	_____
錯体物性化学分野	_____
生体分析化学分野	_____
分光分析化学分野	_____
無機反応化学分野	_____
[物理化学講座]	_____
分散系物理化学分野	_____
量子化学分野	_____
光物理化学分野	_____
構造化学分野	_____
[有機・生物化学講座]	_____
生体情報化学分野	_____
生物有機化学分野	_____
構造機能生化学分野	_____

[複合領域化学講座] \_\_\_\_\_

理論化学分野 \_\_\_\_\_

触媒有機化学分野 \_\_\_\_\_

分子触媒化学分野 \_\_\_\_\_

量子生物化学分野 \_\_\_\_\_

はじめに

九州大学大学院理学研究院化学部門の 2021 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。化学部門の教員の論文や学会発表などの研究業績・担当講義・各種委員などの情報は、下記のサイトをご覧ください。

九州大学研究者情報サイト

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

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

<https://kyushu-u.pure.elsevier.com/ja/organisations/department-of-chemistry-2>

化学部門は、無機・分析化学講座、物理化学講座、有機・生物化学講座、複合領域化学講座の 4 講座体制で運営されています。2021 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 1 名が着任し、准教授 1 名が転出、年度末に准教授 1 名が定年退職しています。昨今の人事ポイントが厳しい中、大学内の各種人事制度を活用しながら、良い人材を確保して陣容を充実し、部門の活力を増強することに注力しています。

大学院教育を担当する化学専攻では、先導物質化学研究所、基幹教育院、カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所、アイソトープ統合安全管理センターから協力講座 8 研究室に加わっていただき、幅広い化学教育を展開しています。理学府独自の教育プログラムである「フロントリサーチャー育成プログラム」および「アドバンストサイエンティスト育成プログラム」、工学府との連携による博士課程教育リーディングプログラムを発展させた「分子システムデバイス Ⅰ・Ⅱ・Ⅲコース」、ならびに九州大学次世代研究者挑戦的研究プログラム「未来創造コース」との連携の下、先端学際科学者ならびに高度理学専門家の育成に向けた教育を行っています。

2021 年度は、引き続き新型コロナウイルスの感染拡大によって教育研究活動に大きな制限がかけられた年でありました。部門内会議は全面的にオンラインで開催しました。研究活動に関しては、セミナーはオンラインで開催し、実験は十分な感染予防対策を取った上で時間差で行うなど、全学からの行動指針に従った上で、密を避けるために工夫をしながら、研究活動の維持に努めました。講義については対面とオンライン授業の併用で実施しましたが、前期はまだオンラインが多く、後期は対面講義が増えました。しかし、コロナの感染者数は増減を繰り返し、第 4 波により 5 月 12 日－6 月 20 日には緊急事態宣言、第 5 波では 6 月 21 日－7 月 11 日と 8 月 2 日－11 日に 2 回のまん延防止等重点措置お

よび8月20日-9月30日に緊急事態宣言が、第6波では1月27日-3月6日までまん延防止等重点措置が発令され、オリンピックも無観客で開催される状況で、現場も状況に応じた対策が求められました。学生実験は対面での実施を重視して、十分な感染予防対策を取った上で行いました。大学院入試は昨年度の経験を活かして、十分な対策を講じた結果、自己推薦入試、一般入試とも対面で無事実施ことができました。

2022年度は第6波の感染再拡大防止対策期間から始まり、現時点でも感染の収束は見られず、新しい変異株により感染拡大の第8波が懸念されている状況です。一方で、以前よりも過敏・過剰な対応は減ってきて、徐々にコロナ共存に進んでいる印象です。現場においては、オンラインの活用により、作業の効率化、時間の有効利用による恩恵はありました。講義においても、講義動画の配信により教育効果が向上した面はあります。オンラインを駆使することで、十分に学べる環境は提供できましたが、学生の学習意欲の差はより大きくなった印象もあります。化学という学問では、実際に化合物を合成し、それらを用いて各種測定を行う実践教育により実際に見て触って、知覚とともに感覚で学ぶことも大切です。先の見通しを立てにくい状況は変わりませんが、この2年間で学生と教員にとって後の負債とならぬよう、経験を糧に新しいフェーズに移行すべく先に進まねばなりません。

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。

2022年12月

2022年度 化学部門長 大場正昭

# 1. 2021年度における化学専攻の活動

## 1.1 教員名簿 (2021年5月1日現在)

### 教授

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

### 准教授

高橋和宏(無機・分析化学)	小澤弘宜(無機・分析化学)	大谷 亮(無機・分析化学)
川井隆之(無機・分析化学)	宇都宮聡(無機・分析化学)	榎 靖幸(物理化学)
堀尾琢哉(物理化学)	大橋和彦(物理化学)	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)	末永正彦(複合領域化学)
---------------	--------------

### 助教

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

【協力講座】

先導物質化学研究所

教授

玉田 薫(ナノ物性化学) 佐藤 治(光機能物質化学)

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)

呉 樹旗(光機能物質化学) 五島健太(構造有機化学)

特任助教

蘇 勝群(光機能物質化学)

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

'21. 4. 1	光物理化学	桶谷 亮介 助教 採用
'22. 1. 31	理論化学	吉田 紀夫 准教授 転出 (名古屋大学へ)
'22. 3. 31	生体情報化学	荻島 正 准教授 定年退職

## 1.3 非常勤講師

林 重彦	教授	京都大学大学院理学研究科
水垣 共雄	教授	大阪大学大学院基礎工学研究科
塗谷 睦生	准教授	慶應義塾大学医学部
伊藤 武彦	教授	東京工業大学生命理工学院
山田 鉄兵	教授	東京大学大学院理学系研究科
松崎 典弥	教授	大阪大学大学院工学研究科
野澤 俊介	准教授	高エネルギー加速器研究機構



#### 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

(2021年5月1日現在)

##### 博士課程

###### 1年生 (D1)

宮崎 栞  
飯田 岳史\*  
許 柯  
張 奥  
松尾 美香  
徐 文煌  
植松 尊  
ZHANG XIAOPENG  
JI TIANCHI  
Nada Besisa  
Sun Mingxu

###### 2年生 (D2)

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

###### 3年生 (D3)

相本 雄太郎  
芳野 遼  
竹藤 春菜  
南川 賢人  
藤井 悟\*  
藤木 涼  
金丸 恒太  
岡本 大介  
河合 靖貴  
篠崎 貴旭  
若藤 空大\*  
WON SUNGYONG  
サトウカン・プリタム  
江口 弘人

\*...日本学術振興会特別研究員

## 修士課程

### 1年生 (M1)

前田 晃志	西里 将	梅田 泰樹
Zhao Rui	橋本 治暉	山口 康誠
大原 朋	吉岡 拓哉	佐藤 洸太郎
木下 宏子	吉原 玲未子	阿部 玲子
北野 仁悟	福田 しづか	平井 千晶
岩井 優大	中島 未由	大野 友輔
藤本 志己	原田 季貴	田中 悠太
前田 万優	河野 裕史	前田 朱里
辻村 晃也	原田 陽光	角 幸樹
中山 憲太朗	山下 祐輝	HUANG YUBO
江原 巧	鈴木 悠平	中村 倫太郎
笛田 和希	是枝 龍聖	堀切 奈々
上原 基希	金子 昌央	松島 彩夏
Winarni Ilma	細瀬 摩利	田中 尚輝
羽座 寛登	石橋 知佳	吉田 耕平
遠藤 周	城下 景亮	安藤 拓海
高田 真子	西村 拡	野網 悠一朗
大原 志織	柳澤 直人	下田 菜々子
中村 直希	大内田 希奈	松藤 大士
今吉 隆昭	白倉 那桜	鮫島 徹真
河村 駿	山内 崇弘	黒田 元豊
久保田 樹	松川 一聖	

2年生 (M2)

山田 実  
若藤 恭暢  
楊 皓宇  
JI CONGHAO  
Yan Xin  
管 昌權  
菊永 竜馬  
笠原 ののか  
許 嘉能  
寺西 勇登  
本多 めぐみ  
武田 依子  
空田 晃  
田中 康裕  
後藤 光凜  
合屋 茜  
森藤 将之  
WANGAMNUAYPORN  
Supakorn  
福田 凌大  
笠 僚宏  
杉岡 寛爾  
高見 龍

沖 拓海  
黒岩 勇  
矢城 勇樹  
渡邊 巧  
高山 千廣  
田中 柊也  
古賀 綾乃  
柳田 侑真  
鳥山 加奈子  
三苫 研人  
三田 祐輔  
上村 祐樹  
寺西 龍  
丸林 聖司  
行武 美華  
イ デュン  
辻 真樹  
鹿間 裕太  
川田 真衣  
岩佐 颯起  
神田 史章  
松村 彩郁

李ウンヒョン  
林 昱銘  
高倉 新平  
岩下 智哉  
西島 孝  
金城 信哉  
羅 奕鳴  
鄭 文偉  
椎木 大地  
中西 京香  
東 大悟  
朴 鐘旭  
神 優樹  
瀧上 世奈  
堀田 友香  
清水 真凜  
村島 幹征  
白岩 あゆみ  
渡 直樹  
赤井 翔  
古城 優樹  
松井 将騎

研究生

黄 李伯爵

学振 (PD) 研究員等

張 嫻

Raj Kumar Koninti

Honggui Wang

## 1.5 2021 年度に授与した大学院学位

### 課程博士 (理学)

- Sadhukhan Pritam      Fundamental study of electronic pyroelectricity on valence-tautomeric molecular crystals  
(原子価異性分子結晶の電子焦電性に関する基礎研究)
- 芳野 遼              Control of Magnetic Behavior in Molecular Clathrate based on Metal-organic Framework  
(多孔性金属錯体を基盤とした分子包接体における磁気特性の制御)
- 加藤 聡              Investigation of Liquid-Phase Adsorption Processes in Metal-Organic Frameworks for Dialysis-Related Applications  
(人工透析用吸着剤の開発に向けた MOF 中の液相吸着現象に関する研究)
- 若藤 空大            Study on Phase-Transfer Catalytic Asymmetric Transformations of Esters using a Water and Alcohols as a Nucleophile  
(水やアルコールを求核剤として用いた相間移動触媒によるエステル類の不斉変換法についての研究)
- 相本 雄太郎        Studies on the Molecular Catalysts for Energy Conversion towards Rational Functionality Control  
(エネルギー変換を担う金属錯体触媒の機能制御に関する研究)
- 河合 靖貴            Green catalytic reactions with high atom economy: oxidation of isoprene glycol, unsymmetric disulfane synthesis, polysulfane synthesis, and asymmetric aminolysis

(高原子効率でグリーンな触媒反応：イソプレングリコールの酸化、非対称ジスルファン合成、ポリスルファン合成、不斉アミノリシス)

南川 賢人

Electronic and Geometric Structures of Transition-Metal-Doped Silver Clusters: Size-Dependent s-d Interaction Studied by Chemical Reaction and Anion Photoelectron Imaging

(遷移金属添加銀クラスターの電子構造・幾何構造：化学反応と負イオン光電子イメージングによる s-d 相互作用のサイズ依存性探究)

江口 弘人

Study on Electrocatalytic Properties of Structure-Defined Titanium Dioxide Particle System

(構造制御された酸化チタン粒子系における電気化学触媒反応特性に関する研究)

#### 課程修士 (理学)

Park  
Jongwook

Synthetic study on a photoisomeric molecule having norbornadiene skeleton toward intramolecular triplet-triplet annihilation and up-conversion

上田 友香

Morphology of Fluid Domain and Line Tension in Lipid Vesicle Containing Sphingomyelin

(スフィンゴミエリンを含むベシクルでの液体様ドメインの形態と線張力)

Wangamnuaypon  
Supakorn

Determination of membrane protein-specific lipids using gold nanoparticle-based method.

LUO  
YIMING

Interfacial design of metal nanoparticle sheet for LSPR-based fluorescence imaging of adhered cells

- 山田 実      Electrochemical Hydrogen Evolution Catalyzed by Water-soluble Metal Complexes Having Pyrazinedithiolate Ligands  
(ピラジンジチオラト配位子を有する新規水溶性金属錯体を触媒とする電気化学的水素生成反応)
- 笠原ののか      Guest Responsivity and Multistep Luminescence Change in a One-dimensional Re(V)Cd(II) Coordination Polymer  
(一次元 Re(V)Cd(II) 配位高分子のゲスト応答性と多段階発光変化)
- 鄭 文偉      Polarization Switching from Electron Dynamics in Dinuclear Complexes with a Homochiral Ligand  
(ホモキラル配位子を持つ二核錯体における電子ダイナミクスに基づく分極スイッチング)
- 巖 鑫      Photoelectrochemical Water Oxidation by TiO<sub>2</sub> Photoanode Modified with Molecular Ruthenium Photosensitizer and Catalyst
- 杉岡 寛爾      Elucidation of Up-Conversion Mechanism in Lanthanide-Based Core-Shell Nanoparticles Using Time-Resolved Photoluminescence Spectroscopy  
(時間分解発光分光法を用いたコアシェル型希土類ナノ粒子のアップコンバージョン機構解明)
- 渡邊 巧      Solvent Effects on Spectroscopic Properties of Aniline: Investigation by Molecular Dynamics Simulations and Quantum Chemistry Calculations  
(アニリンの分光特性に対する溶媒効果:分子動力学および量子化学計算による研究)
- イ デユン      Theoretical study of the transition metal substitution effects on the Cs<sup>+</sup> adsorption affinity of Prussian blue analogues

(プルシアンブルー類似体のセシウム親和性に対する遷移金属置換効果の理論的研究)

岩下 智哉

**System-size Dependence of Effective Viscosities and Diffusion Coefficients using Molecular Dynamics Simulations**

(分子動力学シミュレーションを用いた場合の拡散係数と実効粘度のシステムサイズ依存性)

管 昌権

**Electrochemical Hydrogen Evolution from Water Catalyzed by a Co-NHC Complex**

(Co-NHC 錯体を触媒とする水からの水素生成反応に関する電気化学的研究)

松井 将騎

**Preparation of cubic Cu particles by electrodeposition and its application to electrocatalysis**

(電析法による立方体 Cu 粒子の作製と電極触媒への応用)

楊 皓宇

**Electrochemical Water Oxidation Catalyzed by  $\alpha$ -Pyrrolidinonate-bridged Multinuclear Platinum Complexes**

沖 拓海

**Fate of Mn(II) in the Mn oxides formation by a basidiomycete fungus, *Coprinopsis urticicola* isolated from a uranium mine: Nanoscale phenomena revealed by X-ray absorption spectroscopy, ratiometric fluorescence pH nanoprobes, and transmission electron microscopy**

(ウラン鉱山から単離された Basidiomycete 真菌 *Coprinopsis urticicola* によるマンガン酸化物形成過程に関する実験的研究: X線吸収分光、蛍光 pH ナノプローブ、透過型電子顕微鏡を駆使したナノスケール現象の解明)

金城 信哉

**Self-Assembly and Optical Properties of Thiol-Terminated Poly(ethylene glycol) Coated Gold**

## Nanoparticles

(PEG チオール被覆金微粒子の自己組織化と光学特性)

- 黒岩 勇      Preferential solvation of myoglobin in sucralose + water mixtures  
(スクラロース-水混合溶液中におけるミオグロビンの選択的溶媒和)
- 神 優樹      Heterogeneity of vesicles composed of phospholipids with different critical packing parameter  
(臨界充填パラメータの異なるリン脂質の混合とベシクルの不均一性)
- 西島 孝      Interaction between Mannose-functionalized Amphiphilic Molecules and Its Ion Selectivity  
(マンノースを親水部に持つ両親媒性分子の分子間相互作用とそのイオン選択性)
- 許嘉能      Structure and Function Controls of Cyanide-based Luminescent Complexes with Pyridinium Cations  
(ピリジニウム系カチオンを用いた発光性シアノ金属錯体の集積制御と機能変換)
- 古城 優樹      Creation of RuFe nanoalloy ammonia synthesis catalysts and elucidation of their reaction mechanism  
(RuFe ナノ合金アンモニア合成触媒の創製および反応機構解明)
- 笠 僚宏      Elucidation of the emission mechanism of organic light-emitting materials that undergo isomerization in the excited states  
(励起状態で異性化を示す有機発光材料の発光メカニズム解明)



- 冀 聡昊 Preparation and Characterization of Mesoporous Graphitic Carbon Nitrides Modified with Cobalt Porphyrin CO<sub>2</sub> Reduction Catalysts  
(Co ポルフィリン触媒を修飾したメソポーラス窒化炭素の作製と CO<sub>2</sub> 還元触媒機能)
- 矢城 勇樹 Interactions of *N,N*-dimethylformamide with Metal Cations and Anions: Infrared Spectroscopy and Quantum Chemistry Calculations  
(*N,N*-ジメチルホルムアミドと金属カチオンおよびアニンの相互作用:赤外分光および量子化学計算)
- 辻 真樹 Theoretical study on the bonding of period 7 p-block element monoxides using four-component relativistic molecular orbital method  
(4成分相対論的分子軌道法による第7周期 p ブロック元素一酸化物の結合に関する理論的研究)
- 高倉 新平 Construction of Electrolyte Concentration Annealing Method Based on Particle Simulation and Quality Improvement of Protein Crystal  
(濃度アニーリング法を用いた結晶高品質化のためのシミュレーション)
- 瀧上 世奈 Deformation and collapse of lipid vesicles by amphiphilic peptide Alamethicin  
(両親媒性ペプチド Alamethicin による脂質ベシクルの変形と崩壊)
- 若藤 恭暢 Studies on the Co-NHC Catalysts Exhibiting High Activity in Photochemical Hydrogen Evolution under Highly Alkaline Conditions  
(強アルカリ性条件下で高い活性を示す Co-NHC 錯体の光水素生成触媒機能)

- 武田 依子      Composites of Nitridotetracyanometalate and Crown ether-containing Cation  
(ニトリドテトラシアノ金属酸イオンとクラウンエーテル含有カチオンの複合化)
- 赤井 翔      Amino acid syntheses via electro-reductive amination of  $\alpha$ -keto acids on titanium based composite oxides  
(チタン基複合酸化物触媒を用いた電気化学的アミノ酸合成)
- 菊永 竜馬      Metalloporphyrin-Modified TiO<sub>2</sub> Electrodes for Electrocatalytic CO<sub>2</sub> Reduction  
(金属ポルフィリン修飾 TiO<sub>2</sub> 電極を用いた電気化学的 CO<sub>2</sub> 還元触媒反応)
- 上村 祐樹      Synthetic Study of 6/6/6/6/6-Pentacyclic Ethers Based on Double Reaction Strategy  
(二重反応戦略に基づいた 6/6/6/6/6-五環性エーテルの合成研究)
- 鹿間 裕太      Studies on Reaction Paths of a Synthesis of Alkyl Polysulfanes and Development of a New Synthetic Method of Thiols Using Cobalt Catalysts under Hydrogen Sulfide-Free Conditions  
(コバルト触媒を用いた硫化水素フリーなアルキルポリスルファン合成の反応経路調査及びチオールの新規合成法の開発)
- 松村 彩郁      Studies toward Catalytic Asymmetric Reduction of Arenes  
(芳香環の触媒的不斉還元の実現に向けた研究)
- 寺西 龍      Synthetic Study of Alexandrolide  
(アレキサンドロリドの合成研究)

- 行武 美華      Expression analysis of estrogen-related receptor  $\gamma$  in infant and child rat brain  
(乳児および幼児ラット脳内のエストロゲン関連受容体  $\gamma$  の発現解析)
- 古賀 綾乃      Comprehensive analysis of physiological significance of structural diversity of complex sphingolipids in budding yeast  
(出芽酵母における複合スフィンゴ脂質構造多様性の意義の総合的解析)
- 合屋 茜      Partition and dynamic behavior of sphingomyelin and its dihydro-analogs in model and live-cell membranes  
(モデル膜や細胞膜におけるスフィンゴミエリンとそのジヒドロ体の分布や動的挙動の解析)
- 清水 真凜      Effects of Substitution at Phe Residues of Elastin-Like Peptide (FPGVG)<sub>5</sub> on Coacervation Property  
(エラスチン様ペプチド(FPGVG)<sub>5</sub> のフェニルアラニン残基におけるアミノ酸置換がコアセルベーションに及ぼす影響)
- 中西 京香      Formation of Phase-Separated Multiple Droplet in an Oil-Alcohol-Water Ternary System and Its Mass-Transfer Mechanism  
(油-アルコール-水三成分系での相分離による多重液滴形成とその物質移動機構)
- 鳥山 加奈子      Synthetic Study of the NOPQ Ring of Brevisulcenal-F  
(ブレビスルセナル-F の NOPQ 環部の合成研究)
- 川田 真衣      Aerobic Oxidation of Isoprene Glycol Using Supported Platinum Catalysts  
(担持白金触媒を用いたイソプレングリコールの空気酸化反応)

- 林 昱銘                    **Study on Asymmetric Hydrogenation of b-Carbolines with Chiral Iridium catalyst**  
(光学活性イリジウム触媒による b-カルボリンの不斉水素化に関する研究)
- 田中 柊也                    **Analysis of phospholipid transport pathway between endoplasmic reticulum and mitochondria**  
(小胞体-ミトコンドリア間リン脂質輸送経路の解析)
- 空田 晃                    **Effects of docosahexaenoic acid on the raft-like ordered/non-raft like disordered phase separated membrane**  
(高度不飽和脂肪酸ドコサヘキサエン酸がラフト/非ラフト相分離膜に及ぼす影響)
- 村島 幹征                    **Effect of Aromatic Compounds on Temperature-Dependent Self-Aggregation of Elastin-Like Peptide (FPGVG)<sub>5</sub> and Evaluation of Their Adsorption Properties**  
(エラスチン様ペプチド・(FPGVG)<sub>5</sub> の温度依存的自己凝集に対する芳香族化合物の影響および吸着性の評価)
- 田中 康裕                    **Effects of local anesthetics on lipid rafts formed in live cell-membranes**  
(局所麻酔剤が細胞膜に形成される特異的膜領域「脂質ラフト」に及ぼす影響)
- 丸林 聖司                    **Synthetic Study of the Left Segment of Phomopsin A**  
(ホモプシン A の左セグメントの合成研究)
- 岩佐 颯起                    **Asymmetric Alcoholysis of Azlactones Catalyzed by Phase-Transfer Catalysts**  
(相間移動触媒によるアズラクトン類の不斉加アルコール分解反応)

- 李 殷珩      Palladium-Catalyzed Borylation of *o,o*-Disubstituted Haloarenes and Palladium-Catalyzed C-H Arylation of Azaindoles
- 東 大悟      Synthesis and Properties of Novel meso-Alkynyl-Substituted Porphycenes  
(メソ位にアルキニル基が置換した新規ポルフィセンの合成と性質)
- 柳田 侑真      Analysis of the localization mechanism of phosphatidylserine decarboxylase Psd1 to the endoplasmic reticulum  
(ホスファチジルセリン脱炭酸酵素 Psd1 の小胞体局在化機構の解析)
- 後藤 光凜      Effects of Inhalation Anesthetics on Lipid Membrane System  
(吸入麻酔剤が脂質膜系へ与える影響)
- 高山 千廣      Analysis of signal transduction system related to cytotoxicity of dihydrosphingosine in budding yeast  
(ジヒドロスフィンゴシンの細胞毒性と関連する出芽酵母の細胞内シグナル伝達系の解析)
- 森藤 将之      Development of a method for comprehensive analysis of lipid-specific proteins  
(脂質特異的タンパク質の網羅的解析手法の開発)
- 渡 直樹      Highly Selective Kinetic Resolution of H/D Isotopic Chiral Compounds via Ru(CO)-salen-Catalyzed Asymmetric C-H Amination  
(不斉 C-H アミノ化反応を利用した H/D 同位体性キラル化合物の高選択的速度論的光学分割)

- 三田 祐輔      **Structure-Activity Relationship Study of Artificial  
Analogues of Amphidinol 3 Corresponding to the C21-C65  
and C21-C67 Sections**  
(アンフィジノール 3 の C21-C65 および C21-C67 部分に  
相当する人工類縁体の構造活性相関研究)
- 神田 史章      **Decomposition of Odorous Substances on Heterogeneous  
Catalysts**  
(固体触媒による悪臭物質の分解反応)
- 椎木 大地      **Synthesis and Properties of Chiral Helicene Compounds  
Having 1,1'-Biazulene Skeleton**  
(1,1'-ビアズレン骨格を有する不斉ヘリセン化合物の合成と  
性質)
- 三苫 研人      **Synthetic Study of the VWX Ring of Brevisulcinal-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  
VWX 環部の合成研究)

## 1.6 2021年度関係行事一覧

### (1) 講演会

- [1] 講演者 林 重彦 教授 (京都大学大学院理学研究科)  
演 題 分子シミュレーションによるタンパク質分子機能活性化機構の解明  
開催日 2021年6月15日 (オンライン)  
世話人 吉田 紀生
- [2] 講演者 水垣 共雄 教授 (大阪大学大学院基礎工学研究科)  
演 題 環境に優しいバイオリファイナーに向けた高機能固体触媒の開発  
開催日 2021年11月30日 (対面及びリアルタイム配信)  
世話人 徳永 信
- [3] 講演者 塗谷 睦生 准教授 (慶應義塾大学医学部)  
演 題 化学と生命科学の融合による脳機能の理解に向けた生理活性物質の可視化研究  
開催日 2021年12月3日  
世話人 加納 英明
- [4] 講演者 伊藤 武彦 教授 (東京工業大学生命理工学院)  
演 題 非モデル生物のゲノム配列決定とその解析から見えてきたもの  
開催日 2021年12月9日 (対面およびリアルタイム配信)  
世話人 松島 綾美
- [5] 講演者 山田 鉄兵 教授 (東京大学大学院理学系研究科)  
演 題 非平衡系分子電気化学とエネルギー科学への展開  
開催日 2021年12月17日 (リアルタイム配信)  
世話人 酒井 健
- [7] 講演者 松崎 典弥 教授 (大阪大学大学院工学研究科)  
演 題 細胞微小環境のナノデザインによる機能細胞の創製と医・薬・食への展開  
開催日 2022年1月11日 (対面およびリアルタイム配信)  
世話人 有馬 祐介

[8] 講演者 野澤 俊介 准教授 (高エネルギー加速器研究機構)  
演 題 X線分子動画で見る光化学反応  
開催日 2022年1月20日  
世話人 恩田 健

## (2) 談話会・報告会

前期特別談話会

開催日：2021年8月7日(土) オンライン開催

地球環境科学の最先端とその未来  
～福島第一原発原子力災害への貢献～

無機反応化学 宇都宮聡

細胞膜に形成される膜ドメインと薬

生体分析化学 木下祥尚

ソフト界面における対イオン結合

ソフト界面化学 今井洋輔

非線形ラマン散乱でみる皮膚のうるおい  
～分子の指紋を用いたラベルフリーイメージング～

光物理化学 加納英明

多芸多彩な有機 $\pi$ 電子系分子

構造有機化学 谷文都

トリチウムの環境動態研究

環境動態化学 杉原真司

Molecular Pyroelectricity via Directional Electron Transfer in Polar Crystals

光機能物質化学 SadhuKhan Pritam

女性ホルモン受容体を活性化せず阻害する新しいビスフェノール

構造機能生化学 松島綾美



カルボン酸とアルコールの新しい反応

分子触媒化学 桑野良一

抗がん剤の創製に向けた天然物の合成研究

生物有機化学 保野陽子

錯体化学で切り拓く人工光合成

錯体化学 山内幸正

分子の間にはたらく力を調べる

構造化学 矢城勇樹 渡邊巧

金属錯体を基盤とする機能性物質の創出

錯体物性化学 今村祐輝 米野斐 辻岡利菜 常盤美怜 南良友 茂谷尚貴

超高速レーザー分光で探る 一兆分の一秒の世界

分光分析化学 西郷将生 宮崎栞 笠僚宏 杉岡寛爾 江原巧

身の回りの界面化学～二次元の領域を操る呪術界線～

ソフト界面化学 堀切奈々 松島彩夏

生体分子“様”化合物の探究

生体分子化学 安藤拓海 田中尚輝 吉田耕平

コンピューターでわかる化学の世界

理論化学 Lee Daeyun 城下景亮 北川将大 阪本将裕

PUI PUI mol%

触媒有機化学 大内田希奈 白倉那桜 松川一聖 山内崇弘

ナノってなんナノ??

ナノ物性化学 阿部玲子 大野友輔 田中悠太 平井千晶

持続可能な社会の実現のための新規触媒開発～ナノスケールの世界～

ナノ機能化学 鮫島徹真 黒田元豊

カーボンニュートラルな社会を実現させる金属錯体の開発

錯体化学 諏訪靖拓 末吉史佳 中島直人 富田侑樹

先端超顕微解析技術を駆使した環境研究最前線

無機反応化学 笛田和希 沖拓海 蓑毛健太

生体膜の統合分析を目指して

生体分析化学 藤村泰地 武田拓人 石岡紗耶果  
今田皇緑 三木太陽 久保田颯

光で探る分子の構造と性質

構造化学 矢城勇樹 渡邊巧 金城海里 安野海輝

クラスターの化学 ～原子レベルで物性を探究する～

量子化学 西里将 河村駿 久保田樹 橋本治暉 吉岡拓哉 飯田岳史

やわらかい物質 ソフトマテリアルの世界

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

生命現象を物理化学で語る～ラマン錯乱による生細胞の分子イメージング～

光物理化学 加納英明 桶谷亮介

特異な生物活性を有する天然有機化合物の構造決定・全合成・生物活性評価

生物有機化学 大石徹

受容体化学と有害環境化学物質によるシグナル毒性

構造機能生化学 石橋知佳 細瀬摩利

細胞を舞台に活躍する分子たち

生体情報化学 河野裕史 中島未由 原田季貴 福田しづか 吉原玲未子

新しいのもつくり～ルテニウムで選択的合成～

有機反応化学 下田菜々子 野網悠一朗

貴様！楽しい有機化学へのご勧誘（学習しなさい）

分子触媒化学Ⅰ 齊維昕 松村彩郁 工藤陸

1,3-ジアキシャル相互作用についての再考

分子触媒化学Ⅱ 梅田泰樹 末永正彦

大きな分子の運命を決める小さいが膨大な数の溶媒分子たち

量子生物化学 須田慶樹 竹田宙加 松尾美香 岩下智哉  
高倉新平 山口康誠 佐藤洸太郎

有機 $\pi$ 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 谷文都 五島健太

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 内村岳叶 河中大哉

電子移動に基づく分極と磁性の制御

光機能物質化学 徐文煌

後期特別談話会

開催日：2021年12月11日（土）オンライン開催

先端レーザー分光計測で切り拓く励起状態の光化学

分光分析化学 宮田潔志

Ionic metal-organic cages as building blocks for advanced composites

錯体物性化学 Benjamin LeOuay

エントロピーの両面

量子生物化学 秋山良

ハイドロゲルの摩耗に及ぼす表面形状の効果

分散系物理化学 八島慎太郎

ナノの空間を作る・観る・測る

ナノ物性化学研究室 阿部玲子 大野友輔 田中悠太 平井千晶

持続可能な社会の実現に貢献する化学反応プロセスの開拓

ナノ機能化学 山内美穂

アルコール分解してたのに痛風になった俺

触媒有機化学 若藤空大

水を使う有機合成：ルテニウム触媒を用いた C-H 酸化反応

有機反応化学 内田竜也

分子モデリングと計算化学のための可視化ツールの開発

分子触媒化学Ⅱ 末永正彦

出芽酵母を用いたリン脂質代謝の研究

生体情報化学 藤井悟

温度に応答して相転移するペプチドのデザインと開発

生体分子化学 巢山慶太郎

光励起状態の理論化学

理論化学 鈴木聡

超原子軌道イメージング

～サブナノ金属中の電子の振る舞いを可視化する～

量子化学 堀尾琢哉

カーボンニュートラルな社会を実現させる金属錯体の開発

錯体化学 富田侑樹 末吉史佳 諏訪靖拓 中島直人

環境化学研究最前線 ～微生物機能を利用するナノサイエンス～

無機反応化学 沖拓海 笹田和希 蓑毛健太 Ilma Dwi Winarni

錯物卍リベンジャーズ ～錯体作るの日和ってる奴いる？～

錯体物性化学 今村祐輝 米野斐 辻岡利菜 常盤美怜 茂谷尚貴 南良友

生体膜の結合分析を目指して Road to Lipid

生体分析化学 石岡沙耶果 今田皇緑 久保田颯  
武田拓人 藤村泰地 三木太陽

超高速レーザー分光で探る一兆分の一秒の世界

分光分析化学 木村周慈 五反田基彰 小柳裕聖 本田瑛之 西郷将生 宮崎栞

光で探る分子の構造と性質

構造化学 渡邊巧 安野海輝 矢城勇樹 金城海里

気相化学反応やレーザー分光を介したナノクラスターの特異的電子構造の解明

量子化学 西里将 河村駿 久保田樹 橋本治暉 吉岡拓哉 飯田岳史

ソフト界面ジャーズ ～界面化学を勉強するの日和ってるやついる？～

ソフト界面化学 堀切奈々 松島彩夏

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 黒岩勇 今吉隆昭 遠藤周  
大原志織 高田真子 中村直希 羽座寛登

生命現象を物理化学で語る ～ラマン散乱による生細胞の分子イメージング～

光物理化学 加納英明 桶谷亮介

特異な生物活性を有する天然有機化合物の構造決定・全合成・生物活性評価

生物有機化学 大石徹

有害環境化学物質が引き起こすシグナル毒性と受容体化学

構造機能生化学 伊藤琴音 白根共太 石橋知佳 細瀬摩利

細胞を舞台に活躍する分子たち

生体情報化学 河野裕史 中島未由 原田季貴 福田しづか 吉原玲未子

生体分子の構造と機能の関係性を探る

～エラスチン由来ペプチドの合成・分析・応用～

生体分子化学 宗玲那 長田晃彦

ルテニウム触媒を用いた選択的合成法の開発

有機反応化学 下田菜々子 野網悠一朗 松藤大士

理論と計算と化学

理論化学 阪本将裕 北川将大

シヨクバイ娘 アクティビティダービー

触媒有機化学 市川聖人 高城悠太 春口一騎 福重智基 深江友博

きみ本当に有機化学ちゃんとわかってるか??

分子触媒化学 I 季殷珩 林昱銘 工藤陸

1,3-ジアキシャル相互作用についての再考

分子触媒化学 II 梅田泰樹 末永正彦

超多自由度系の生物物理と材料化学

量子生物化学 新垣怜央 小柳淳平 佐藤洸太郎 山口康誠 岩下智哉  
高倉新平 松尾美香 須田慶樹 竹田宙加 秋山良

$\pi$  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 谷文都 五島健太

ナノバイオテクノロジーで未来を創る

ナノ物性化学 赤坂龍矢 寺戸美樹 碓井日茄乃

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 内村岳叶 河中大哉

カーボンニュートラルな世界を目指した触媒研究

ナノ機能化学 鮫島徹真 黒田元豊

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 徐文煌

**(3) 2021年度FD・HD**

(ファディカルディベロップメント・ヒューマンディベロップメント) 講演会

開催日 : 2021年6月18日(金) オンライン

講演タイトル: 「理系研究室の運営技術-ラボラトリーマネジメントという考え方-」

講演者 : 谷口 勇仁 教授 (中央大学経営学部)

**(4) 2021年度修士課程論文公開講演会**

開催日 : 2021年2月16日(水)・17日(木) オンライン開催

**(5) 2021年度学士課程卒業研究業績報告会**

開催日 : 2021年2月28日(月)・3月1日(火) オンライン開催

## 2. 2021年度における各講座の活動

### [無機・分析化学講座]

#### 錯体化学分野

酒井 健 教授、高橋和宏 准教授、小澤弘宜 准教授、岡上吉広 講師、山内幸正 助教

#### 教育目標

(酒井・小澤グループ)

学部4年生(4名)、修士1年生(1名)、修士2年生(8名)、博士課程1年(1名)、博士課程2年(2名)、博士課程3年(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年生は卒業研究を通じて自律的な修学姿勢と論理的思考に基づく問題発見・解決力の自己養成意識を醸成し、近い将来社会人として自立する素養の育成が目標。大学院学生は、習得した専門知識と技術・思考法を基盤とする新規課題の探索・企画・実行力と専門外の仕事にも対応可能な広い視野と一般常識を持ち、社会に貢献できる資質を備えた人材へと成長させることが目標。本年度は配属学生なし。

(岡上グループ)

学部4年生は研究に必要な基礎知識の習得を目標とする。実験計画の立案、実験準備、実験データの収集、考察、報告書作成、研究発表という研究の一連の流れを把握するとともに、試薬管理や廃液処理など、実験を安全に行うために必要な法規制を理解し実践できるように努める。また、卒業研究を進める過程において、自分の研究に対する客観的な評価ができるように、教員との議論を活発に行うとともに、文献調査を行う習慣を身につける。なお、2021年度は配属学生なし。

## 研究目標

(酒井・小澤グループ)

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

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

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

(高橋グループ)

有機色素のフタロシアニン(Pc)類を配位子とする新規金属錯体の合成・物性研究を行っている。主な研究課題は新規サンドイッチ型二核希土類錯体の選択的合成と特性解明。本年度は無置換 Pc とオクタメチル置換 Pc の二種の Pc 配位子を含むヘテロレプティック三層サンドイッチ型二核 Lu(III)錯体の構造異性体の選択的合成とオクタメチル置換 Pc のホモレプティック三層サンドイッチ型二核 Lu(III)錯体の合成研究を継続。

(岡上グループ)

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

## 研究分野

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

## 研究課題

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

## 参考 URL :

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

## 錯体物性化学分野

大場正昭 教授、大谷亮 准教授、Benjamin LeOuay 助教

### 教育活動

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

研究室開設 11 年目となる本年度は、引き続きコロナ禍により対面での直接の指導機会が減り、研究・教育活動において難しい 1 年であったが、オンラインの活用により、一定水準の成果は得られた。

本年度は学部 4 年生 6 名、修士学生 12 名、博士学生 2 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、物性化学、光化学、構造化学、生物無機化学に関する基礎の習得に注力した。本研究室の研究分野は、錯体化学、物性化学、生物化学、環境化学、触媒化学、界面化学などの境界領域に位置する。このような境界領域で独創的な研究を展開するために、偏った視点から事象を論じず、常に広い視野を持ち、批判的思考のもとに論理的に物事を捉えることを第一に指導した。毎週開催する研究室セミナー（オンライン）では、研究報告と論文紹介をプレゼン形式で行い、合成の方法論、物性・機能の基礎的知識を習得させるとともに、研究の進め方、情報収集の方法、データのまとめ方、発表資料の作り方、プレゼンテーションの仕方、ロジック展開の方法等を指導した。セミナーの司会も学生が担当し、積極的な発言を促し、活発なディスカッションが広げられる場の仕切りを学ばせている。実験技術に関しては、有機配位子、親脂質性配位子や両親媒性脂質の合成、金属錯体および配位高分子の合成、クラスター錯体の合成、発光性分子の合成、ベシクルの調整など、様々な合成を通して技術を指導した。測定・解析に関しては、共焦点レーザー顕微鏡や TEM による直接観察から、単結晶および粉末 X 線回折、NMR、磁化率、電気伝導度、気体吸着、各種分光、電気化学、ゼータ電位などの各種測定に加え、SPring-8 の高輝度放射光を用いた X 線回折やガス雰囲気下の *in situ* ラマンおよび IR 分光測定等を通して、化合物の精密な評価法を学び、それらのデータの解析法、客観的評価や思考ロジックを指導した。また、吸着装置と磁化率測定装置、粉末 X 線回折装置およびラマン散乱測定装置を連結した独自の *in situ* 測定系の構築し、その作業を通して、測定原理の理解と測定系の設計および作成法を指導した。

所属学生は、基本的に全員最低 1 回は学会で研究成果を発表した。本年度は、研究室全体で 14 件の口頭発表と 16 件のポスター発表を行った。博士 3 年生の 1 名、および修士 2 年生の 1 名は、オンラインの国際学会でポスター発表を、博士 3 年生の 1 名はオンラインの国際学会で口頭発表を行い、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、国内学会でポスター賞 2 件を受賞した。また、13 報の論文で研究成果を発表した。

本年度は 1 名の学生が「Control of Magnetic Behavior in Molecular Clathrate based on Metal-organic Framework (多孔性金属錯体を基盤とした分子包接体における磁気特性の制御) の研究で、博士号 (乙) を取得した。また、1 名の社会人が「Investigating Liquid-Phase Adsorption Processes in MOFs towards Adsorbent for Dialysis (人工透析用吸着剤の開発に向けた MOF 中の液相吸着現象に関する研究) の研究で、博士号 (乙) を取得した。また、3 件の博士論文の副査を務めた。

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

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

## 研究目標

本研究室では、金属錯体および配位高分子をベースに新しい機能空間の創製を目指した研究を進めている。個々の分子の空間配列を制御して高次組織化し、それらを動的かつ協同的に機能させることは、分子科学の一つの目標である。無機物の優れた単一性能と有機物の多様性と性質の柔軟さが分子レベルで融合した「金属錯体」では、従来の無機材料・有機材料にはない物性・機能の発現が期待される。このナノメートルサイズの無機-有機複合体分子である金属錯体分子を、規則的に連結して多次元構造に展開した「配位高分子」は、金属錯体の物性・機能を連動させて高度化する高次組織体形成の基盤となる。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。本研究室では、この脂質二重膜で形成されるリポソームや両親媒性分子によるベシクルのメゾ空間を基盤として、細胞における生体分子に代えて、目的に応じた金属錯体を膜の表面および内部に集積させる手法を開発

している。柔軟かつ異方的な空間の表面と内部に、機能制御した複数の金属錯体および配位高分子をオンデマンドで組み込むことで、メゾサイズ結晶化した「配位高分子」は、マクロサイズにおける機能を維持しつつ、膜に組み込んだ「金属錯体」と連動して高速かつ高効率に動作することが期待される。このようなメゾ空間に錯体化学の粋を凝縮して、環境低負荷な触媒やドラッグデリバリーなどにも応用可能な、化学反応・物質移動などが連動して動作する新しい「高機能で制御された化学反応場」の構築を目指している。

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

## 研究分野

錯体化学、物性化学、光化学、生物無機化学

## 研究課題

- ・ 外場応答性配位高分子の開発
- ・ 細孔内に束縛した小分子の量子的振る舞いの解明
- ・ サイズ制御した金属錯体結晶の物性・機能の研究
- ・ 極性配位高分子の構造制御と物性の研究
- ・ 高イオン伝導性錯体の開発
- ・ 相変化を起こす金属錯体集積体の開発
- ・ 中空金属錯体と酵素の融合による再生可能触媒システムの創製
- ・ 発光性多孔性金属錯体による選択的分子センシング
- ・ 多色発光性金属錯体の開発と発光特性制御

## 参考 URL :

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

## 生体分析化学分野

松森 信明 教授、川井 隆之 准教授、木下 祥尚 助教

### 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。また松森は今年度から必修科目の化学序説も担当した。これはこれまで2年生に実施していた科目であるが、今年度から1年生が受講する科目となった。各研究室が最先端の研究をわかりやすく紹介することで、基幹教育科目が多い中で失われがちな化学への興味を掻き立てる効果があった。これらの講義は対面とオンラインを併用したが、質を低下させることなく実施できた。川井は基幹教育科目「自然科学総合実験」および「基礎科学実習」、専攻教育科目「分析化学実験」および「化学序説」の一部を担当した。1年後期に開講の「自然科学総合実験」および「基礎化学実習」では、炎色反応やダニエル電池の作製実験を丁寧に指導し、その原理に関する考察を含むレポートを課すことで、基礎的な化学に関する知識および考察力の向上を図った。2年前期に開講の「分析化学実験」では、全体の取りまとめおよび「データ解析」を担当した。1・2年前期に開講の「化学序説」においては、それぞれ2コマと短い講義であったが、最先端の分析化学研究を分かりやすく説明することで学生に興味を持ってもらうことを意識した講義を展開した。木下は、学生実験で「基本操作法」と分析化学実験の「分光光度法」を担当した。

また、大学院においては、松森および木下は「分析化学特論 IIA」を担当し、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。川井は「分析化学特論 IIB」を担当し、最先端のバイオ分析法として次世代シーケンサーや各種分離分析法および質量分析を用いたオミックス解析について、その原理から応用までを幅広く紹介した。

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

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

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

(3) 留学生を積極的に受け入れ、研究室内の英語圧力を上げる。

(1) に関しては、計算化学以外の研究環境は実現し、各学生には複数の分野での実験を実施させている。特に川井准教授の着任により、クロマトグラフィーや質量分析といった分析化学関連の研究環境が大幅に改善した。また

(2) については、各学生に独立した研究テーマを設定し、各自が実行力を発揮し研究を推進している。さらに、研究室セミナーや個別の相談会できめ細かな指導を行い、各学生の成長をサポートしている。(3) に関しては、中国およびタイからの留学生を受け入れ、研究室内のセミナーも一部英語で行っているため、本目標はある程度到達されつつある。一方で、日本人学生の英語力の向上が思ったほど見られなかった。今後は日本人学生の英語力の向上が課題となる。

## 研究目標

細胞膜は流動モザイクモデルで提唱された均質な二次元流体ではなく、スフィンゴ脂質とコレステロールに富んだ脂質ラフトと呼ばれる微小領域が存在することが近年明らかとなった。脂質ラフトは、周囲の細胞膜よりも硬い相状態を有し、GPIアンカータンパク質などの膜タンパク質が特異的に集積することで膜輸送やシグナル伝達の“足場”として生理的に重要な機能を果たしていると考えられている。しかし、ラフトがどのように形成され、またタンパク質がどのようにラフトを認識しているのかについての知見は極めて限られている。

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

現在大きく以下の4つの研究課題について研究を行っている。

- (1) 脂質－膜タンパク質相互作用解析
- (2) 麻酔薬などの膜作用性分子の作用機構解析
- (3) 脂質ラフト形成の分子機構の解明

#### (4) 脂質を含む生体分子の超高感度分析技術開発

各課題について具体的な成果を述べる。(1)の課題については、2019年に表面プラズモン共鳴法 (SPR 法) を用いた脂質と膜タンパク質間の相互作用測定法の開発に成功したが (Inada et al, *Anal. Chim. Acta.* 2019)、この方法を発展させて、金ナノ粒子に膜タンパク質を固定化し、特異的脂質をアフィニティー精製する手法の開発を行った。一方、脂質特異的なタンパク質の取得を目指し、脂質固定ビーズの開発も進行している。すでにスフィンゴミエリンやセラミドを固定化したビーズの開発に成功し、特異的タンパク質の同定を行っている。これに関連して、カリウムチャンネル KcsA に脂質カルジオリピンが相互作用し、アロステリックにチャンネルの開口を制御していることを見出した (論文投稿中)。

また (2) の課題については、局所麻酔が脂質ラフトを破壊することを見出し、その作用が麻酔強度と関連することを報告したが (Kinoshita et al *BBA-Gen. Subj.* 2019)、引き続きこの研究を細胞膜を用いて行っている。また渦鞭毛藻由来の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報告した (Hieda et al *Biochem. Biophys. Rep.* 2021)。同様に渦鞭毛藻由来のマイトトキシニンについても、膜へ強い作用があることを見出し、この研究を開始した。また上記の脂質固定ビーズを利用し、脂質に相互作用する天然物の探索も開始した。

(3) の課題に関しては、蛍光スフィンゴミエリンの開発によりラフト形成機構の解明に大きく前進したが (Kinoshita et al. *JCB* 2017)、これを用いた脂質間相互作用に関する研究を行った。また、セラミドの頭部構造が異なる各種誘導体を合成し、その膜物性を調べた (Yasuda et al. *Langmuir* 2021)。興味深いことに、セラミド頭部がアルコール以外の誘導体でもセラミドに匹敵するドメイン形成能を有することがわかり、分子プローブとしての可能性を示した。さらに、2020年に発表した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 (Kinoshita et al. *Sci. Rep.* 2020) を応用して、各種脂質膜内部に形成されるドメインの構造情報を取得することに成功した。

(4) の課題は、2021年1月に着任した川井准教授の研究であり、生体膜に存在する脂質や糖鎖の超微量分析法を新たに開発することにより、生体膜の理解を進めるとともに、疾病などの診断や創薬へと応用することを指向するものである。脂質の分析法としては、ガラス製マイクロニードルを用いて細胞の一部を採取し、そのままナノエレクトロスプレーイオン化を行って質量分析 (MS) によって解析する手法 (Kawai et al., *Anal. Chem.* 2021) を膜分析へ応用した。人工膜を用いた分析の結果、単一のリポソームであっても十分



な感度で構成脂質を検出できた。また、川井の開発した超高感度キャピラリー電気泳動 (CE)-MS (Kawai *et al.*, *Anal. Chem.* 2019) を応用した超高感度脂質分析法の開発も進めている。sweeping 法と analyte focusing by micelle collapse 法を組み合わせた新規二重濃縮技術を開発することで、疎水性試料を従来の CE 分析より 1000 倍以上高感度に測定できるようになった (論文投稿中)。糖鎖の解析では、複雑な構造異性体を有する生体由来の糖鎖試料を高感度かつ網羅的に解析するため、液体クロマトグラフィー (LC) と川井独自の超高感度 CE 糖鎖分析技術 (Kawai *et al.*, *J. Chromatogr. A* 2018) を組み合わせた二次元分離法を開発した。これにより、従来法では 20 種類程度の糖鎖しか検出できなかった IgG 由来糖鎖から 100 種類近い糖鎖を分離して高感度に検出することに成功した。

このように、いずれの課題においても着実に成果が出ているが、2020 年から続くコロナの影響で進捗が鈍化していることは否めず、論文発表も例年に比べると低調であった。今後はこれらの研究の遅れを取り戻すとともに、部門内外や企業などとの共同研究を積極的に行い、医療を含めた周辺分野へ本研究を展開していくことを予定している。

## 研究分野

生体分析化学、ケミカルバイオロジー、生物物理学

## 研究課題

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

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

## 分光分析化学分野

恩田 健 教授、宮田 潔志 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。

本年度は、昨年度からの新型コロナウイルス流行が続き、教育、研究に様々な影響があった1年であった。前期は大学の講義は引き続きオンラインで行われていたが、研究室での教育、研究はオンラインでは十分に行えないことから、感染症対策を十分行った上で、対面で行った。一方、化学部門内の行事、学外の学会などは年間を通してオンラインで行われた。また恩田は部門長として一年間、部門の運営を担った。

恩田担当の学部教育としては、後期に主に薬学部の1年生を対象とした「基礎化学結合論」の講義を行った。九州大学基幹教育シリーズの教科書を元に、古典的な化学結合論から量子化学の基礎について解説した。また例年通り、化学科2年生向けの分光分析、電気化学の講義「分析化学Ⅱ」も担当した。これらの講義は、最初の一回をオンラインとした後は対面で行った。後期には、隔年で担当する大学院講義「分析化学特論Ⅲ」の講義も行った。内容は、4月に恩田が出版した「化学の要点シリーズ 39 時間分解赤外分光」の本を教科書に、分光分析の理解に必要な光と物質の相互作用の基礎理論について解説した。この大学院講義に関しては、入国が制限されていた海外の学生への対応として全てオンラインで行った。さらに「化学特別講義」として集中講義も担当した。講師として高エネルギー加速器研究機構の野澤俊介准教授を招き、「放射光の基礎から時間分解計測まで」というテーマで放射光を用いた分析手段について3日間の講義で解説してもらった。

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・イオン交換法を担当した。①学生実験の基本操作法では、感染対策には留意しながら対面で実験を行い、硫酸銅五水和物結晶と炭の混合物から、再結晶により硫酸銅五水和物の精製を行った。②のデータ解析法では、エクセルを用いたデータ解析の基礎を行った。なぜデータ分析が必要かといった大きなところから入って、エクセルの基本操作を含めた実習形式で授業を行った。学生によってエクセルに慣れている度合いが大きく異なったので難しかったが、最終的にはみな満足いくレ

ベルまで操作を習熟していた。なお、オンデマンドで予めアップロードした動画を見ながら進めていただく形式を採用した。YouTubeによるオンデマンド講義、Slackによる連絡・質問受付、Zoomによる個別指導を上手く織り交ぜた形式で進めた。授業後のアンケートによればほとんどの学生が今回の形式で満足していた。②の各種滴定・イオン交換法では、主に滴定操作による成分分析、イオン交換カラムによる金属イオンの分離を指導した。例年よりも広くスペースを使いながら、感染対策を徹底した上で対面で行った。

研究室に配属された学部4年生4名、修士課程学生3名、博士課程学生2名に対しては、毎週1回対面でグループミーティングを行い、研究の進捗や最近の論文の紹介、議論を行った。また、おおむね週一回のペースで学生主体の輪読、また特にB4に対しては4月に光化学に関する連続集中講義、5月に毎日一本論文の概要を読みこなす会を継続的に開催し、分子科学・光化学に関する知識の底上げを行った。多くの学生は積極的に取り組み、年度末には十分な議論をできるレベルまで知識が成熟した。並行して各自与えられたテーマに沿って研究活動を行っており、対外発表や論文執筆の指導も行った。学会はすべてオンライン形式であったものの、合計21件のオンライン会議の発表経験を積ませることができた、うち4件は国際オンライン学会である。最近では、自ら積極的に国際会議への出席や外国人訪問研究者との議論を行うまでに成長してきている。また、九大の若手教員有志で立ち上げたオンライン連続コロキウム“光”機到来!QコロキウムやChem-Station主催のバーチャルシンポジウムに携わったり、Twitterを用いた情報発信も功を奏し、分子科学・光化学分野の広い意味での教育・啓蒙に役立てることができた。

## 研究目標とその到達度

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

### 1. 新学術領域「ソフトクリスタル」

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

### 2. 新学術領域「革新的光物質変換」

- ・ Ru-Re 超分子錯体における励起状態構造変化と CO<sub>2</sub>還元光触媒活性(東工大・石谷グループ)
- ・ Re リング錯体における錯体内エネルギー移動メカニズム(東工大・石谷グループ)
- ・ ポルフィリン-Re 二元系錯体における錯体内エネルギー・電子移動メカニズム(東京理科大・佐竹・倉持グループ)

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

- ・ 熱活性化遅延蛍光物質における発光効率とスピン変換に伴う構造変化の関係の解明(九大・安達グループ)
- ・ 有機ポラリトンの緩和ダイナミクス(九大・安達グループ)
- ・ 第4世代 OLED 分子の励起状態構造変化(ドイツ University of Regensburg, Yersin グループ)
- ・ 励起状態プロトン移動を利用した有機半導体レーザー材料の時間分解分光(オーストラリア University of Queensland, Namdas グループ)
- ・ 発光性 Pt 錯体材料の時間分解分光(オーストラリア University of Queensland, Namdas グループ)

### 4. 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)

### 5. その他、

- ・ 発光性 Re 錯体材料の時間分解分光 (九州大・大場グループ)
- ・ トリプレット機能を利用した複合系の超高速ダイナミクス (九州大・君塚グループ)
- ・ 有機りん光材料の発光メカニズム (大阪大・谷グループ)

- ・小分子発光体の構造柔軟性と発光特性のメカニズム研究（東工大・小西グループ）
- ・希土類を利用した光アップコンバージョンナノ粒子の機構解明（帝京科学大・石井グループ）

以上の研究成果を随時学術論文として発表し、当該年度で 10 件掲載に至った。

### **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.chem.kyushu-univ.jp/Spectrochem/>

## 無機反応化学研究室

宇都宮 聡 准教授

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

### 教育目標

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

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

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

### 研究目標

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

### <本年度の研究活動実績>

- ・ 国内学会、シンポジウム等計 3 件発表。
- ・ 発表論文 4 報

### 研究分野

環境ナノ物質化学

### 研究課題

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

### 参考 URL:

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

## [物理化学講座]

### 分散系物理化学分野

安中 雅彦 教授、榎 靖幸 准教授、八島 慎太郎 助教

#### 教育目標

##### <教育に関する目標、目的、成果について>

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

##### <研究室セミナーについて>

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



### <学生の学外活動>

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

### 研究目標

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

### 研究分野

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

### 研究課題

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

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

## 量子化学分野

寺寄 亨 教授、堀尾琢哉 准教授、荒川 雅 助教

### 教育目標

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

#### 〈教育内容〉

#### 1. 講義

##### 1-1. 基幹教育科目「基礎化学結合論Ⅰ・Ⅱ」（対象：学部1年、担当：寺寄）

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

##### 1-2. 専攻教育科目「量子化学Ⅰ」（対象：学部2年、担当：堀尾）

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

##### 1-3. 専攻教育科目「分子構造論」（対象：学部3年、担当：寺寄）

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

#### 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

レーザーを励起光源として、色素の蛍光観察を行った。また、市販の半導体レーザーを用いて、光の回折・干渉を学ぶ課題を課した。

## 2-2. 「エレクトロニクス」 (対象：学部3年、担当：荒川)

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

## 3. 研究指導

研究室では、学部4年(2名)、修士1年(5名)、博士1年(1名)、博士2年(1名)、博士3年(1名)が配属された。昨年に引き続き新型コロナウイルス感染拡大の影響で活動が制限され、理学部工場での金属加工実習の中止などを余儀なくされたが、研究室の閉鎖は無く、研究活動は概ね平常通りに行われた。学部学生には、金属クラスターの光電子分光と量子化学計算による構造解析の課題をそれぞれ与え、卒業論文をまとめた。修士1年の学生は、内部からの進学者は前年度からの研究を継続し、金属クラスターの光吸収分光と光電子分光に取り組んだ。外部からの新規学生は、1名は光電子分光、もう1名は真空中の液滴の凍結過程をテーマとした。博士1、2年の学生は前年度までの研究をさらに発展させ、博士3年の学生は、遷移金属を添加した銀クラスターの反応性研究で3d電子の局在性/非局在性の議論を深め、博士論文を完成した。その主要部分を発表した原著論文はPCCP Hot Article(英国王立化学会)に選出され、国際的にも高い評価を受けた。なお、これらの成果を、ナノ学会(5月)、International Symposium on Molecular Beams XXIX(7月)、分子科学討論会(9月)、環太平洋国際化学会議 Pacifichem(12月)、日本化学会春季年会(3月)で、いずれもオンライン発表した。また、博士1、2年の学生が本年度から日本学術振興会特別研究員DC1, DC2に採用されたことは、教育の成果として特筆に値する。

これら研究活動による教育と並行して、研究室セミナーでは、研究の進捗状況報告、関連する文献調査とその紹介など、課題の設定と解決、成果発信に向けた訓練を行った。専門知識の教育では、『大学院講義 物理化学』(東京化学同人)第II部「反応速度論とダイナミクス」と『量子コンピュータ入門』第2版(日本評論社)の輪読を行った。さらに、英語力について、NHK語学講座『高校生からはじめる「現代英語」』を活用し、リスニングとスピーキングに関して実践的な訓練を行った。

## 研究目標

現行のナノ材料よりもさらに小さな物質を扱う次世代のナノ物質科学の開拓を念頭に、原子の数(サイズ)が正確に制御された原子・分子クラスターを対象として、これら極微小な物質に特有の基礎物性を、物理化学の研究手段で探究する。クラスターの特質は、

原子 1 個の増減で物性や反応性が不規則かつ劇的に変化し（サイズ効果）、常識を超えた新物質の発見が期待されることであり、元素戦略の手段としても注目される。我々は、原子数をパラメータとして千変万化するこれらクラスターを新たな物質群と捉え、物質科学の本質を掘り起こす新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的には、質量分析技術で原子 1 個の精度でサイズを制御するクラスター発生法、反応生成物の時々刻々の変化を捉える化学反応追跡法、レーザーや放射光を利用した分光法など、最先端の実験手段で特性解明に取り組む。一方で、真空中で液体を扱う技術を開発して気相化学と液相化学との融合に挑むなど、マイクロ（原子・分子・クラスター）からマクロ（液相・固相）までをつなぐ科学の開拓を目指している。

#### 〈研究概要〉

触媒や磁性材料など機能性物質に関連した金属／金属化合物に着目し、構成原子数が正確に決まったクラスターを研究対象として、その特性解明を推進した。特に、電子構造の観点から原子と類似した特性を示す超原子クラスター種は、元素代替戦略に貢献する新物質として期待が高まっている。触媒に代表される化学反応では、活性点となるナノ構造を切り出したクラスターが反応の本質理解と新規材料の設計指針につながると期待される。また、宇宙空間で分子が合成される過程においてクラスターが反応の鍵を握っているとの仮説があり、科学の広い分野への波及が注目されている。これら原子の数で変化するクラスターの特異な物性・反応性を解明する実験手段として、気相分子との反応、レーザーによる可視-紫外分光、X線による内殻分光など前年度までの実験に、光電子イメージング分光を新たな手法に加えて研究に取り組んだ。さらに、これら気相クラスターの液相への展開を狙いとして、真空中に生成した溶媒液滴の熱力学過程の研究に取り組んだ。なお、長く継続してきたドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究は、新型コロナウイルス感染拡大の影響で、本年度も実質的な実験活動を行えなかったが、これまでの成果の一つを論文発表した。

#### 〈研究成果〉

##### 課題(1)：金属／金属化合物クラスターの反応性と電子構造

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に取り組んだ。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、反応性に影響を及ぼす可能性がある。そこで、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の解明を目的とした実験研究を推進している。本年度は、開殻 3d 遷移金属（M=Sc~Ni）をドーピングした一連の負イオン種  $Ag_nM^-$  について網羅的な研究を進め、昨年度までに行った正イオン種  $Ag_nM^+$  と合わせて、体系的な知見を得た。

その結果、M原子がAgクラスターに内包された場合にのみ、総価電子数が18個となるサイズで酸素分子との反応性が特異的に低下することを見出し、従来報告されていた18電子系正イオン種  $\text{Ag}_{16}\text{Sc}^+$ ,  $\text{Ag}_{15}\text{Ti}^+$ ,  $\text{Ag}_{14}\text{V}^+$ ,  $\text{Ag}_{11}\text{Fe}^+$ ,  $\text{Ag}_{10}\text{Co}^+$ ,  $\text{Ag}_9\text{Ni}^+$ に加えて、負イオン種  $\text{Ag}_{14}\text{Sc}^-$ ,  $\text{Ag}_{13}\text{Ti}^-$ ,  $\text{Ag}_{12}\text{V}^-$ を新たな安定種として発見した。なお、Cr、Mn添加種は、半閉殻3d軌道の局在性が強く、特異的な安定種は認められなかった。以上の成果を発表した原著論文 [Phys. Chem. Chem. Phys. **24**, 1447 (2022)] は PCCP Hot Article に選出され、国際的に高く評価された。また、これらを主要な成果として、博士課程3年・南川賢人が博士号を取得した。

第2のテーマとして、上述のs-d電子間の相互作用の問題をs-f電子間に拡張し、昨年度に  $\text{Ag}_n\text{Ce}^+$  (Ce:  $4f^15d^16s^2$ ),  $\text{Ag}_n\text{Sm}^+$  (Sm:  $4f^66s^2$ ) と  $\text{O}_2$  との反応実験を行い、本年度は実験結果の解析を進めた。いずれも、f電子の局在性がd電子よりも強いことを示唆する結果となっている。

第3のテーマとして、銀クラスター正イオン  $\text{Ag}_n^+$  と一酸化窒素分子 NO との逐次反応実験を昨年度までに行って論文発表した。本年度は遷移金属Mを添加した  $\text{Ag}_n\text{M}^+$  を反応物クラスターとして、NO分子との反応を調べた。その結果、小さなサイズでは、M原子とNOとの反応に類似して、酸化物もしくはNO付加物が生成した。一方、大きなサイズでひとたびM原子が内包されると、 $\text{Ag}_n^+$  クラスターと同様に  $\text{NO}_2$  付加物が生成した。反応中間体の検出から反応速度係数の評価まで、反応カインेटイクスの詳細を解明した本研究は国際的に高く評価され、原著論文 [Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, 22947 (2021)] が PCCP Hot Article に選出された。

第4のテーマでは、宇宙空間での分子進化の観点から金属酸化物クラスターを触媒とするC1化学に着目し、火星表面でのメタン減少の起源を解明する目的で、鉄酸化物クラスターとメタン分子との反応実験を開始した。

## 課題(2) : 光電子イメージング分光による金属クラスターの電子構造研究

昨年度に開発を進めた光電子イメージング分光の実験装置を本格稼働させた。特に、連続発生する負イオンビームをサブMHzのパルスに変換し、脱離レーザー光に連続発振 (CW) レーザーダイオードを使用する我々独自の測定手法で、光電子画像を極めて短時間で撮像することが可能となった。この実験を、まず銀クラスター負イオン  $\text{Ag}_n^-$  に適用した。20量体まで ( $n \leq 20$ ) を測定し、価電子が19個の  $\text{Ag}_{18}^-$  から放出される光電子の角度分布が脱離レーザーの偏光方向に強く偏っていることから、19個目の電子がs軌道を占有し、超原子2S軌道の形成を強く示唆する結果を得るなど、金属クラスターの電子構造研究に新たな展開をもたらす成果を上げた。これまでに測定法の開発に関する論文執筆に取り組み、投稿に向けた最終段階まで進んでいる。また、分子科学討論会、レーザー学会、日本化学会年会にて成果発表を行った。その後、測定対象として、課題(1)で発見した安定種  $\text{Ag}_{14}\text{Sc}^-$ ,  $\text{Ag}_{13}\text{Ti}^-$ ,  $\text{Ag}_{12}\text{V}^-$  を含む添加系負イオン種  $\text{Ag}_n\text{M}^-$  に着

目し、さらに  $Ce_n^-$ ,  $Ce_nO_m^-$  など種々のクラスター負イオン種を取り上げるなど、研究を大きく展開している。

#### 課題(3) : レーザー吸収分光による金属クラスターの電子構造研究

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、光吸収の巨大共鳴で発生する増強された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。この集団電子励起の発現機構は自明でなく、サイズ選別された銀クラスターを対象に、銀原子が集合してナノ粒子に成長する過程における電子の挙動を、我々独自のレーザー分光実験で探究してきた。これまでに、正イオン種  $Ag_n^+$  について 92 量体まで ( $n \leq 92$ ) の光解離分光を進め、スペクトルのピーク数の推移から、球形や楕円体など、サイズによって変化するクラスターの形状を議論し、9 月の分子科学討論会にて発表した。本年度は、実験をさらに負イオン種  $Ag_n^-$  に展開し、10 量体以下のいくつかのサイズで測定を行った。負イオン種では、光吸収のエネルギー帯が電子脱離エネルギーと拮抗するため、光吸収後に結合解離と電子脱離とが競合する可能性がある。このような超励起状態の挙動にも注目して研究を進めている。

#### 課題(4) : イオン光学系シミュレーションによるイオントラップの特性評価

元来希薄なクラスターの高密度化を目的として、イオントラップを利用した実験を行っているが、イオントラップの特性評価が課題となっている。そこで、昨年度、イオン光学系の解析ソフトウェア SIMION を高度に活用して、イオントラップ内に捕捉されたイオンの密度と空間分布を数値解析する手法の開発に取り組み、実験結果を定量的に再現するシミュレーションに成功した。イオン間の反発やイオン-バッファガス間の衝突を考慮した計算に加えて、本年度は、バッファガスの温度を室温から極低温 (10 K) に冷却した際のイオン空間分布の変化までをシミュレーションし、局所的にさらに高密度なイオン蓄積が達成できることなどを見出した。この成果を分子科学討論会で発表し、原著論文の執筆を開始した。

#### 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・磁性研究

金属化合物クラスターの化学状態を分析する X 線吸収分光 (XAS) を、株式会社コンポン研究所との共同研究で推進している。構成原子の化学状態と反応性を系統的に関連づけ、高活性なクラスター種が持つ特徴を明らかにすることを目的としている。具体的には、銅-酸化セリウム、銅-酸化マグネシウムの 2 種の複合クラスターを取り上げ、前者だけが有すると予想される銅原子の酸化抑制効果の検証実験に取り組んだ。

一方、放射光を利用した磁性研究を、ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究でこれまで進めてきた。研究対象の一つに取り上げた単分子磁石として知られる  $Mn_{12}$  核錯体は、従来、結晶状態での磁性研究が行われてきたが、一分子の磁性測定は極めて困

難なために、真に単分子の状態での磁性は明らかでなかった。この問題に対して、本共同研究で実現したイオントラップを利用した気相クラスターの X 線磁気円二色性

(XMCD) 分光を、この Mn<sub>12</sub> 核錯体分子に適用し、真に単分子の状態で磁石の性質を示すことを実証した。この実験は 10 年ほど前の成果だが、その後、理論的な裏付けを進めた末、ようやく論文発表を果たした [Chem. Eur. J. **28**, e202102592 (2022)]。

#### 課題(6) : 真空中に生成した液滴の蒸発冷却・凍結過程

気相金属クラスターの液相化学への展開を狙いとして、真空中の液滴の研究に取り組んでいる。液滴は真空中で急激な蒸発冷却を受け、純水液滴の場合には約 10 ms で凍結するが、蒸気圧の低いエチレングリコール (EG) を微量ながら混合すると凍結が大きく遅延すること (凍結抑制効果) を昨年までに見出した。本年度は、このテーマに関して科研費 挑戦的研究 (萌芽) 「真空中の液滴で挑む過冷却液体の未踏領域」が採択され、化学部門・秋山良准教授との共同研究を開始するとともに、EG のほかグリセロール (GL) の混合を試み、ポリオール混合効果を系統的に研究した。その際、凍結時間の濃度依存性などの測定には大量のデータ処理を伴うため、液滴凍結の画像判定を機械学習で自動化し、解析の効率化を図った。さらに、蒸発冷却過程の詳細な解析には液滴径の精密測定が重要との認識から、液滴外周に共鳴するレーザー波長 (whispering gallery mode) を利用する精密測定法の検討に着手した。成果発表を、分子科学討論会および日本化学会春季年会にて行った。

#### 研究分野

物理化学、クラスター・ナノ物質科学、レーザー・X線分光

#### 研究課題

質量分析法と分光法を主な実験手段とし、少数原子で構成されるオングストロームサイズのクラスターからマイクロメートルサイズの液滴まで、気相から凝縮相への中間領域を狙いとする原子・分子集合体の物性・反応性研究。

#### 参考 URL :

量子化学研究室 : [http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/quantum/index\\_j.php](http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/quantum/index_j.php)

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

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

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

## 光物理化学分野

加納 英明 教授  
桶谷 亮介 助教

### 教育目標

#### <概要>

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

#### <実績>

##### ・講義

(加納)

##### 「光生物物理化学」

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

##### 「物理化学特論 I」

凝縮相における光と分子との相互作用を扱うため、密度行列とそれが従う方程式を導入し、摂動展開により各種の非線形相互作用が導出されることを講義した。この発展的応用として、細胞内分子を可視化する各種顕微イメージング手法について概説した後、特にラマン分光法や非線形光学効果を用いたラベルフリー分子イメージング手法について講義し、その分野の最先端の研究についても紹介した。



### 「物理化学実験」

2021 年度に「反応速度」というテーマで新しい物理化学実験課題を立ち上げた。実験ではまず、旋光度を測定する装置を He-Ne レーザーや各種光学素子、そして光検出器を用いて組み上げさせ、ゼラチンの旋光度を測定することで、コイルヘリックス転移の速度定数を求める実験を指導した。

(桶谷)

「化学序説、学部 2 年前期および学部 1 年通年」

それぞれで、講義を 1 コマ担当した。2014 年ノーベル化学賞を受賞した超解像蛍光顕微鏡および、関連する超解像観察技術に関して概要を解説した後、自身の研究を中心として最新の開発状況を紹介した。

### 「物理化学実験」

新たに「偏光を用いた基礎実験」を立ち上げた。光の偏光とその制御に関する基礎実験（偏光板、 $\lambda/2$  板、 $\lambda/4$  板の利用）を、実際に装置を構築するところから指導し、それぞれの使用方法を確認させた。その後、スクロース溶液を用いて旋光性の確認方法について指導した。最後にセロハンテープの偏光特性を調べる課題実験を指導した。実験方法・実験装置を学生自ら考案し、セロハンテープの旋光性の有無を確認させる内容とした。TA の協力を得ながら、基礎実験および課題実験で変更に関する基礎と測定方法・実験のデザイン方法を指導した。

#### ・研究指導

2021 年度に 4 年次生が 4 名配属され、3 月に業績報告会を行った。また、Materials Research Meeting (MRM) 2021 (国際会議) で、サブメンターとして研究指導を担当している大学院生 (筑波大・博士一貫コース 3 年生) が Graduate Student Award を受賞した (講演タイトル: 「Lipids and proteins changes during heat-shock-induced sleep detected by CARS and SHG microscopy」)。

## 研究目標

### <概要>

生命現象の究極的な理解のためには、生細胞内で機能する分子をそのまま可視化し、それらの分子が協調的に連動しながら機能を発現させる物理化学的過程をその場観察することが必須である。細胞内分子を可視化する分子イメージング手法の中でも、ラマン分光イメージング法は、生細胞内の分子分布や分子構造及び動態を、標識無し (ラベルフリー) でその場観察することのできる、非常に強力な手法である。我々の研究室では、

微弱なラマン散乱光を増幅する非線形ラマン散乱を用いることで、分子集合体から生細胞・生体組織まで、様々な生命システムを対象として、生命現象の物理化学的理解を目指した研究を進めている。これに加え、フランス・リモージュ大学との共同研究、複数の民間企業との共同研究も同時に遂行している。

#### <実績>

生体深部を可視化するためには、散乱しにくい近赤外光を用いる必要があるが、同時に水による吸収も生じるため、第1生体窓(650-950 nm)や第2生体窓(1100-1350 nm)の光が一般によく利用されている。一方、これらよりも侵入長が長く、深部観察により適しているはずの第3生体窓の光は、水による吸収のため生体イメージングには不向きであると考えられていた。しかし近年になって、その高い生体透過性に関心が高まりつつある。そこで我々は、第3光学窓の光源を用いた非線形光学顕微鏡を新たに立ち上げ、マウス脳組織切片のラベルフリー・イメージングを行った。第二高調波発生(second harmonic generation; SHG)、第三高調波発生(third harmonic generation; THG)という非線形光学効果を用いることで、くも膜、脳室、白質、大脳新皮質などの領域でユニークかつ明瞭なコントラストで脳組織を可視化することに成功した。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された(“Spectroscopic second and third harmonic generation microscopy using a femtosecond laser source in the third near-infrared (NIR-III) optical window”, *Biomedical Optics Express* 13, 694 (2022)). 特筆すべき点として、この論文は *Biomedical Optics Express* 誌の Editors' Pick に取り上げられた。

#### 研究分野

光物理化学、分子分光學、構造化学、光化学、非線形光学、分子イメージング

#### 研究課題

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

- ・非線形ラマン散乱を用いた新規ラベルフリー分子イメージング法の開発
- ・非線形光学効果を用いた生体内分子アーキテクチャの顕在化
- ・睡眠に伴う脳内活動現象のラベルフリー・サブセルラーイメージング
- ・藻類が蓄積する新規代謝物の非線形ラマン・スクリーニング
- ・第二高調波をプローブとした毛髪ケラチンの二次構造解析
- ・芽胞菌 (*Bacillus megaterium*) のラベルフリー非線形ラマンイメージング
- ・化粧水浸透過程のラベルフリーラマン分光イメージング
- ・保湿成分可視化に向けたヒト皮膚の顕微ラマンイメージング

・CARS 光の飽和を用いた無標識超解像分子イメージング法の開発

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

## 構造化学分野

大橋 和彦 准教授

### 教育目標

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

### ■ 指導方針

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

### ■ 研究室セミナー

雑誌会においては、最先端の論文を各人が調査して発表した後、全員で討論を行い、新しい知識の吸収およびプレゼンテーション能力の向上に努めている。コロキウムでは、量子化学と分光学の基礎について書かれた教科書を輪読して、分子分光学の研究に不可欠な基礎的事項の理解を深めると共に、英語力の向上にも努めている。本年度は、W. G. Richards, P. R. Scott 著の“Energy Levels in Atoms and Molecules”およびC. E. Wayne, R. P. Wayne 著の“Photochemistry”を使用した。

### ■ 学生の学外活動

学生は例年、分子科学討論会、化学関連支部合同九州大会、九重分子科学セミナーなどの学会において研究成果を発表している。本年度は新型コロナウイルス感染拡大の影響によりオンラインで開催された分子科学討論会、溶液化学シンポジウムにおいて、修士学生が発表した。

### 研究目標

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

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

■ 溶液中の芳香族分子の励起状態における動的過程に関する研究

種々の溶媒中におけるアニリン、アミノベンズニトリル等のベンゼン誘導体分子の吸収スペクトル、蛍光スペクトル、蛍光寿命を測定している。また、溶存化学種のモデルとしての溶媒和クラスターに対して量子化学計算を行っている。本年度は、アニリンの吸収・発光スペクトルに対する溶媒効果を微視的レベルで解釈することを目的として、分子動力学計算と時間依存密度汎関数理論計算を組み合わせた研究を行った。2 学会において修士学生が成果を発表した。

■ 生体関連分子と金属イオンの間の相互作用に関する研究

種々の金属イオンとホルムアミド(FA)、ジメチルホルムアミド(DMF)などの溶媒分子からなる系に対して、振動分光実験と量子化学計算を用いた研究を行っている。本年度は、過塩素酸 Na(I), Mg(II), Al(III)/DMF の系において、金属イオンに加えて過塩素酸イオンが DMF に与える影響も考慮し、イオン対生成の可能性について検討を行った。また、過塩素酸 Fe(III)/FA の系において、赤外およびラマンスペクトルの CO 伸縮バンドにみられる双極子カップリングについて調査した。

## 研究分野

物理化学、分子分光学、溶液化学、クラスター化学

## 研究課題

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

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

## [有機・生物化学講座]

### 生体情報化学分野

久下理 教授、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。

2021年度は、以下の主要な成果をあげた。我々は、2020年度までに Ups2 欠損などによってミトコンドリアにおける PE 合成が低下した出芽酵母では、グルコース枯渇時に細胞エネルギーセンサー Snf1(哺乳動物 AMPK)の過剰活性化を引き起こし、これに起因してミトコンドリア ATP 産生、静止期(G0)細胞への分化が促進することを見出していた。2021年度は、脂質-タンパク質オーバーレイアッセイにより、Snf1 と PE が結合することを見出した。これらのことより、ミトコンドリア PE は、Snf1 との物理的相互作用を介して Snf1 の活性を制御していると考えられる。さらに、Snf1 によって制御される下流因子のうち、グルコース枯渇時の酵母におけるミトコンドリア ATP 産生、G0 細胞分化に直接影響するものを探索した。その結果、野生型酵母において、ピルビン酸カルボキシラーゼ Pyc1 を発現上昇させるとグルコース枯渇時のミトコンドリア ATP 産生の増加が見られた。また、アシル-CoA カルボキシラーゼ Acc1 の発現抑制は G0 細胞分化を促進させた。これらのことより、Snf1 はグルコース枯渇時において活性化し、Pyc1 の発現上昇させることでミトコンドリア ATP 産生を、Acc1 の抑制によって G0 細胞分化を促進することが示唆された。

さらに、ミトコンドリア PE 合成と細胞周期制御の関連性を解析することを目的に、G1-S 期進行の中心的制御因子である Whi5、Whi7 と Ups2 の三重欠損酵母を樹立した。その結果、Ups2 欠損酵母、Whi5Whi7 二重欠損酵母は正常に生育するのに対し、Ups2Whi5Whi7 三重欠損酵母は強い生育損傷を示すことを発見した。また、この出芽酵母において見られた合成生育損傷と一致して、Whi5、Whi7 のヒトオルソログであるがん抑制遺伝子 RB1 を欠損した乳がん細胞において Ups2 のヒトホモログ PRELID3b を発現抑制すると増殖の抑制が観察された。さらに、RB1 を発現する乳がん細胞において RB1 と PRELID3b を同時発現抑制すると、合成生育損傷を示した。このことより、ミトコンドリア PE 合成経路は、RB1 を欠損したがん細胞に対する新規抗がん剤開発の標的となり得る。

## (2) 生体膜スフィンゴ脂質の生物機能

スフィンゴ脂質は長鎖スフィンゴイド塩基を持つ脂質の総称で、親水性頭部を持つ複合スフィンゴ脂質は生体膜を構成する脂質として古くから知られている。近年、スフィンゴ脂質は二つの視点から注目を集めている。第一に、形質膜上のラフトと呼ばれるマイクロドメインの構成分子として機能し、細胞内外のシグナル伝達の中継地点の役割を

果たしていること、第二に、複合スフィンゴ脂質が分解されて産生される代謝産物（セラミド、スフィンゴシン、スフィンゴシン 1-リン酸等）が、細胞分化、増殖、アポトーシス及び細胞運動を制御する点である。また、哺乳動物の複合スフィンゴ脂質は、千種類以上の分子種を持つことが知られている。近年、この構造多様性が複合スフィンゴ脂質の多機能性を支える分子基盤であることが示唆されているが、全貌の解明には至っていない。本研究では、分子生物学的アプローチが容易、且つ複合スフィンゴ脂質の構造バリエーションが比較的シンプルな酵母をモデル生物とし、スフィンゴ脂質の構造と機能の相関の解明を試みている。

2021年度は、以下の二つのことを明らかにした。

① これまでに、スフィンゴ脂質の合成中間産物であるジヒドロスフィンゴシン (DHS) が出芽酵母の細胞内に蓄積すると、ミトコンドリアの ROS 増大を介したネクロシス様の細胞死が引き起こされることを見出している。2021 度は、この細胞死を抑制できるサブレッサー変異の探索を行った。その結果、ミトコンドリアレトログレートシグナル伝達経路 (RTG 経路)の構成因子である *RTG2* を同定した。解析の結果、RTG 経路を正に制御する *RTG3* の変異は、DHS の細胞毒性を低減させるが、RTG 経路を負に制御する *MKS1* の変異は、細胞毒性を増強させることがわかった。更に、DHS 処理によって RTG 経路の活性化が観察された。本来 RTG 経路は、ミトコンドリアの損傷を修復するためのシグナル経路であるが、DHS の異常蓄積が RTG 経路の誤作動を引き起こすことで、ミトコンドリアを介した細胞毒性がむしろ増強されることが示唆された。

② 出芽酵母の複合スフィンゴ脂質は、合計 15 種類のサブタイプに分類され、この構造多様性は 5 つのスフィンゴ脂質代謝酵素 (*SUR1*, *CSH1*, *IPT1*, *SUR2*, *SCS7*) によって規定される。2021 度は、これらスフィンゴ脂質代謝酵素の変異を組み合わせることで、様々な複合スフィンゴ脂質サブタイプが抜け落ちた計 11 種類の変異株ライブラリーを作製し、それらの環境ストレス耐性能の評価を行った。その結果、複合スフィンゴ脂質の構造多様性が限定されればされるほど、多面的な環境ストレスに対する耐性能が減少することを見出した。さらに複合スフィンゴ脂質構造多様性破綻株では、細胞壁機能維持に關与する Cell Wall Integrity (CWI) 経路の MAP kinase である Slt2 やジェネラルストレス応答転写因子である Msn2/4 が、ストレスをかけていない通常の培養条件における生育の維持に必要となることがわかった。また、Slt2 および Msn2/4 は、複合スフィンゴ脂質構造多様性破綻株の細胞壁インテグリティーおよび形質膜インテグリティーの維持にそれぞれ寄与していることも示唆された。以上の結果より、複合スフィンゴ脂質の構造多様性の限定は、細胞壁、形質膜といった細胞表面の環境の異常を介して多面的なストレス高感受性をもたらすことが考えられた。さらに酵母は CWI 経路や Msn2/4 を介した転写応答によって、これらの異常に対する機能補填をしていることが示唆された。

(3) 膵臓非内分泌型ステロイドの合成と機能



細胞によるタンパク質の細胞外分泌過程では、合成されたタンパク質が構造形成をし、機能のある成熟タンパク質ができる。しかし、実際には合成されたタンパク質に全てが完全なものとならず、不良品となるものが多い。これら不良品の除去や完成までの複雑な工程は細胞に過度の負担を強いている。膵臓β細胞は食後の血糖値の上昇に応じて大量のインスリンを血流に放出するため活発なインスリン合成と分泌をすることから、常に強度の小胞体ストレスに晒されている。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。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)は膵β細胞に実験的な小胞体ストレスを与えることが知られ、β細胞は細胞死を起こす。また、β細胞由来の樹立細胞である INS1-細胞でも細胞死が起こる。β細胞や INS1-細胞にはステロイド合成酵素が発現し、ステロイドホルモンをつくることが判明している。薬物で細胞内での糖質コルチコイドの合成を阻害するとTGが細胞死を起こす効果が高まることから、糖質コルチコイドはTGで誘発される小胞体ストレスを緩和し、細胞死を阻止していると考えられる。生体内で膵臓β細胞を刺激して、血糖値依存的にインスリン分泌を促進する消化管ホルモンのインテグリンであるGLP-1にも小胞体ストレス緩和作用があり、INS1-細胞におけるTG誘発性小胞体ストレスを緩和ないし阻止した。このとき、プロゲステロン合成が高まり、最終的にはコルチゾールも合成も見られた。植物テルペンであるフォルスコリンでも同様の効果が得られ、cAMP 合成阻害剤で効果が打ち消されたことから、ステロイド合成はcAMP 経路であることが示唆された。副腎皮質などの内分泌器官では、刺激ホルモンによりできるcAMP がステロイドの直接の合成要因であり、非内分泌型ステロイド産生細胞である膵臓β細胞でも同様に起きていることが示された。

## 研究分野

生化学、細胞生物学、分子生物学、酵母遺伝学

## 研究課題

リン脂質の代謝調節、細胞内輸送、生理機能

膵臓β細胞で局所的に合成されるステロイドホルモンの生理機能

## 生物有機化学分野

大石 徹 教授、鳥飼浩平 助教、保野陽子 助教

### 教育目標

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

- (1) 実験技術に関しては、複雑な構造を有する生物活性天然物の多段階合成を通して様々な反応を数多く経験し、数百  $\mu$  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。2021年度は以下のテーマに重点を置く。

## 研究課題

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

## 研究分野

天然物化学、有機合成化学、ケミカルバイオロジー

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

## 構造機能生化学研究室

松島 綾美 准教授

### 教育目標

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

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

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

### (講究・演習)

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

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

### （学生の研究活動）

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

### 研究目標

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

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

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

## 研究室構成員

准教授：松島綾美

修士：（2年）行武美華、（1年）石橋知佳、細瀬摩利

学部4年生：伊藤琴音、白根共太

研究室構成員の2021年度進路

修士：なし

学部4年生：進学

## 研究分野

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

## 研究課題

脳神経受容体の起動分子機構の解明および構造機能相関の解析

内分泌かく乱化学物質（環境ホルモン）の核内受容体応答機構の解明

生理活性コンホメーション変化の分子機構解明

受容体分子機構解析用分子ツールのケミカルバイオロジー

受容体応答におけるハロゲン結合-逆ハロゲン結合の分子機構解明

受容体アゴニズム-アンタゴニズムの相互機能変換

概日リズムの発振、伝達に関わる生物時計の分子機構およびその異常の解析

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

## [複合領域化学講座]

### 理論化学分野

中野晴之教授，吉田紀生准教授，渡邊祥弘助教，鈴木聡助教

#### 教育目標

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

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

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

#### 研究目標

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

本年度は，共溶媒によるタンパク質のグローバルな構造変化を計算で再現する手法，Douglas-Kroll 法における相対論的 2 電子反発演算子公式の導出，等の論文を出版するとともに，4 成分相対論的分子軌道法による第 7 周期 p ブロック元素一酸化物の結合，磁気遮蔽に基づく芳香族性評価法の三重項状態への適用，Hydroxyphenylbenzothiazole 誘導体の無輻射失活過程に対する置換基効果，プルシアンブルー類似体のセシウム親和性に対する遷移金属置換効果，等に関する研究を行った。以下に主なものを記す。

### (1) Douglas–Kroll法における相対論的 2 電子反発演算子公式の導出

2 次および 3 次の Douglas–Kroll (DK2, DK3) 法における 2 電子反発演算子公式を導き、計算機上実装した。この公式を  $Z = 10, 20, \dots, 130$  のヘリウム様イオンと希ガス原子に適用した。その結果、DK2 および DK3 の 2 電子演算子に対して得られたエネルギーは、4 成分法との差が非相対論的及び DK1 の 2 電子演算子よりも 1 桁小さいことを示した。また、小成分型 2 電子積分の近似式も導出し、 $Z = 80$  と  $130$  のヘリウム様イオンに適用して未補正值を非常に正確に再現することを数値的に明らかにした。

### (2) 4 成分相対論的分子軌道法による第 7 周期 p ブロック 元素一酸化物の結合

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。これらの元素の原子核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、閉殻の  ${}_{118}\text{Og}$  とハロゲンである  ${}_{117}\text{Ts}$  を除くこれらの元素 (M) の一酸化物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 4 成分の相対論的手法により計算を行った。結果より、スピン軌道相互作用による平衡核間距離の増加が分子軌道解析により明らかにされた。特に、 ${}_{114}\text{Fl}$ ,  ${}_{115}\text{Mc}$ ,  ${}_{116}\text{Lv}$  においては、 $7p_{1/2}$  軌道の安定化が結合の形成に影響を及ぼすことが示された。

### (3) 磁気遮蔽に基づく芳香族性評価法の三重項状態への適用

芳香族性を評価する指標の 1 つに磁気遮蔽効果に基づく NICS (nucleus-independent chemical shift) が知られている。芳香環の非局在  $\pi$  電子は分子平面垂直方向の外部磁場に対して強く応答し、誘起された環電流によって新たに生じた副次的な誘導磁場は環の内部に遮蔽効果をもたらす。NICS 値はこの遮蔽効果を数値化したもので、空間内に設置したダミー原子の化学シフトを算出することで定義される。特にダミー原子を芳香環の中心に置いて計算したものを NICS(0) とよび、平面環状化合物の芳香族性評価に有用とされている。しかしながら、これらの NICS 値は対象を基底一重項状態の分子としており、最低三重項励起状態の芳香環に対しての有用性は不確かである。本研究では、三重項状態の分子における NICS 値について、芳香族性とのよい相関が見られるか、一重項状態との比較とともに、その有用性を検討した。その結果、三重項状態では NICS 値に常磁性項が加わるため、一重項状態ほど明瞭ではないが芳香族性と NICS 値とのよい相関を確認した。軌道の寄与や一重項状態との比較を解釈に加えることで、三重項状態の NICS 値の有用性



を明らかにした。

#### (4) Hydroxyphenylbenzothiazole 誘導体の無輻射失活過程に対する置換基効果

Hydroxyphenylbenzothiazole (HBT) は近紫外光を吸収し励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) を起こした後可視光領域で蛍光を示す分子であり、液晶化も可能であるため発光デバイスとして期待されている。ESIPT は電子励起状態において分子内でプロトンが移動し異性化する現象であり、ESIPT の起こりやすさや発光量子収率は置換基や溶媒に依存することが知られている。従来の研究では、 $\pi$  共役を拡張した系において発光量子収率が增大することが確認されている。本研究では、電子状態計算により得られるポテンシャルエネルギー曲面を用いて励起状態分子内プロトン移動と無輻射失活過程の置換基の効果を解明し、高い発光量子収率となる分子を予測した。計算の結果、HBT 誘導体の無輻射失活の速度定数と反応障壁の相関を明らかにし、さらに発光強度の高い新規分子を提案することに成功した。

#### (5) プルシアンブルー類似体のセシウム親和性に対する遷移金属置換効果

プルシアンブルー (PB,  $\text{Fe}_4^{\text{III}}[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_6]_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  または  $\text{KFe}^{\text{III}}[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_6] \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ) は、各種イオンが共存する溶液から  $\text{Cs}^+$  を選択的に吸着する性質をもつことから、放射性汚染水からのセシウム除去剤としての活用が期待されている。この PB の鉄を他の遷移金属に置換した PB 類似体 (PBA) は置換する金属によって異なる  $\text{Cs}^+$  吸着能を示すことが知られている。このような PBA の性質から、置換遷移金属を適切に選ぶことで優れた  $\text{Cs}^+$  吸着能を示す PBA を設計するという取り組みがなされている。これまで、PBA 格子の作るナノ空間と  $\text{Cs}^+$  とのサイズマッチングが吸着プロセスにおいて重要な役割を果たすと考えられているが、その分子論的なメカニズムは明らかになっていない。本研究では、遷移金属の置換が PBA の  $\text{Cs}^+$  吸着能に与える影響を分子論的に明らかにすることを目的として、PB の  $\text{Fe}^{\text{III}}$  を  ${}_{25}\text{Mn}^{\text{II}}$  から  ${}_{30}\text{Zn}^{\text{II}}$  までの 6 つの遷移金属に置換し、第一原理計算による結合エネルギー解析を行った。結果から、Zn と Mn の PBA は高い  $\text{Cs}^+$  親和性を有することが示唆され、先行研究の結果と定性的に一致することがわかった。

### 研究分野

理論化学, 量子化学, 電子状態理論, 液体論

### 研究課題

高精度電子相関理論, 相対論的分子軌道理論, 溶液系・生体系の非経

驗的分子理論,  $\pi$  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

### 教育活動

触媒有機化学研究室は、2021年度は教員3名、博士研究員1名で教育、研究活動を行った。また、博士課程7名、修士2年生4名、修士1年生5名、学部4年生5名で研究室を運営した。このうち博士課程の2名は社会人ドクターとして研究を行った。また、修士課程には、琉球大学、九州工業大学、同志社大学からの進学者が3名在籍した。また中国からの留学生4人（博士課程3人、修士課程1人）が在籍した。修士課程の1人は、国際コースの学生として10月に入学したが、2021年度中は政府の渡航数制限のため来日できなかった（2022年度5月に来日できた）。2021年度から、コロナ禍の影響で、文献紹介のゼミや研究の議論をオンラインで行うことが多くなった。オンラインで行うと、遠隔地にいる社会人ドクターや中国から参加の国際コースの学生が出席できるため、ゼミは毎週木曜日の夜に行うこととした。このセミナーを通じて、有機化学、触媒化学および関連分野の基礎事項の確認と習得、研究分野の最新情報、研究の価値や意義、および専門用語を含む英語の勉強を行った。また、月に2回程度、研究の進展状況の報告を行った。研究室全体での研究の発表も年に2回行った。2020年度は、学会の延期や中止が多く学生が発表したものは5件に留まったが、2021年度になるとオンライン学会など、コロナ禍での学会運営方法が確立してきたため、当研究室からも19件の発表を行うことができた。

### 研究活動

当研究室では、有機分子触媒、均一系錯体触媒、固体触媒の研究を行っており、有機合成や触媒反応だけでなく、食品化学や電池の分野まで研究対象を拡げている。有機分子触媒の研究では、不斉四級アンモニウム塩を用いるエステルの不斉加水分解や加アルコール分解の研究で、アズラクトン類の加アルコール分解の研究を行った。固体触媒を用いた触媒反応開発は、バルクケミカルや石油化学、またプラスチックのケミカルリサイクルで得られる一酸化炭素や合成ガスの有効利用を志向した研究を行った。具体的には、C4石油化学プロセスで有用なアリルエステルの異性化反応、C4およびC5中間体の酸化反応、C2およびC3中間体のヒドロホルミル化、アルコキシカルボニル化反応、また揮発性有機化合物の低濃度での分解反応、さらに、硫黄化合物の合成反応などを行った。硫黄化合物の合成では、ファインケミカル合成向けのチオールジスルファン S-S 交換反応のほか、潤滑油添加剤に使われるポリスルファンの新規合成法の開発なども行った。また、ガソリンなどからの脱硫の新手法開発としてチオフェン誘導体の分解や吸着なども行った。一方、担持金ナノ粒子の食品化学分野への応用として、日本酒からの

老香の選択的除去の研究や、焼酎の飲みにくさ、臭さの原因となっている硫黄化合物の除去を行った。担持金ナノ粒子に関しては新たな調製法の開発、前駆体の開発と構造、焼成時の金の状態変化などに関して、SPring-8 や京都大学複合原子力科学研究所などで実験を行った。また、リチウムイオン電池の電解液分解メカニズムの研究を引き続き行った。これらの成果により第11回CSJ化学フェスタ2021で篠崎貴旭氏が優秀ポスター発表賞を受賞したほか、不斉加アルコール分解の論文がACS Catalysis の cover picture に採用されたほか、Synfacts で紹介され、またチオール/ジスルファン交換反応の論文がChemCatChem の cover picture に採用された。

ACS Catalysis

<https://pubs.acs.org/toc/accacs/11/22>

ChemCatChem

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cctc.202101589>

## 研究分野

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

## 研究課題

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

参考URL :

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

## 分子触媒化学分野

桑野良一 教授、末永正彦 講師

### 教育目標

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

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

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

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

当該年度は新型コロナウイルスの流行のため、学生の学外活動では、第38回 日本分析化学会有機微量分析研究懇談会および計測自動制御学会力学量計測部会 合同シンポジウム、第118回 有機合成化学シンポジウム、第67回 有機金属化学討論会、日本化学会 第102春季年会（2022）で研究成果を口頭あるいはポスター発表した。

以上により、教育に関する目標は概ね達成されたと考えている。

### 研究目標

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

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

(2) 医薬・農薬などの多くの有用な生理活性化合物はキラルな構造を持ち、2種類の鏡像異性体が存在する。そして、望みの生理活性を示すのは片方の鏡像異性体のみであり、場合によっては他方の異性体は人体や生態系に悪影響を及ぼすことがある。また、近年では強誘電液晶などの機能性材料としても光学活性化合物の需要は高い。従って、光学活性化合物の効率の良い供給法の開発は、現在の有機合成化学における重要な課題の1つである。本研究室では、光学活性な遷移金属錯体を触媒とする光学活性化合物の高エナンチオ選択的合成における新しい反応制御法の開発を行っている。近年の大きな成果では、(a) 今まで不可能と考えられてきた複素芳香族化合物の高エナンチオ選択的な触媒的不斉還元の世界で初めて成功した。(b) プロキラルな 1,3-ジカルボニル化合物のカルボアニオンのエナンチオ選択的アルキル化による高エナンチオ選択的な4級不斉炭素骨格の構築、などがある。本年度は、入手困難かつ高価なパラジウム触媒を用いる必要があったオルト二置換ブロモアレーン類のホウ素化において、入手容易で安価なトリス(*p*-トリル)ホスフィンと酢酸パラジウムから調製される触媒でも十分に進行することを見出した。

## 研究分野

有機合成化学、有機金属化学、計算化学

## 研究課題

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

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

## 量子生物化学分野

秋山良 准教授

様々な面で新型コロナウイルスの感染拡大の影響が残った年であるとともに、一部通常の業務が戻ってきた為、忙さが増える時期でもあった。常勤スタッフとしては秋山のみの研究室である。また、2018年度まで所属していた末松安由美氏（九州産業大学工学部基礎サポートセンターに特任講師）が共同研究員として加わっており、月曜ゼミに加えて、不定期に議論を行っている。秋山は、2021年度にはMini-Symposium on Liquidsの復活開催(6月26日)、放送大学の客員准教授、Physica A (Elsevier)のEditorial Boardメンバーとして学会や出版関係の活動をおこなった。コロナ禍ため、会議が多い中、学部学生2名と大学院修士学生4名と大学院博士学生3名が主体的に研究などを進めてくれた。そのおかげで、活発な研究・研究活動を維持できた。2021年の出版物点数は6点(原著論文4点、日本語の解説2点)で、復調しつつある。修士2年生を1名企業に送り出し、残り1名は本研究室の博士後期課程に進学した。学部学生2名も2名は本研究室の修士課程に進学した。

### 教育目標とその到達度

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

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

勉強会では、具体的には数学や物理の考え方と基本技術の学習を目的に

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

(2) David Chandler著 統計力学概説  
に接続した。この教科書では特に化学に関連する統計力学の基本的な知識と取り扱いに



ついて学ぶ事を目的とした。簡単な例題作成にポイントを置くことで、『統計力学や熱力学は、化学や物理の単なる道具ではなく、その考え方自体はもっと広い』という事に注意しながら議論を進めた。目標は十分なレベルで達成された。

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

(1) UNIX上でのコンピュータの基本操作、

(2) 研究室のWebページの作成

から開始し、

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

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

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

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

(1) 英語の教科書等の読書会

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

### 研究目標とその到達度

本研究室の目標は、特に溶媒の効果に着目して生体分子の性質を考える事にある。ただし、生物物理、物理化学のより基本的な問題へ興味が進んだ。従って、背景が専門的、個別的すぎるものについては、教育的な点からのみならず研究を深める点からも避けた方が良く考えた。主に単純な系から法則を見出して物理化学的な現象の説明に向かう傾向の課題を設定した。具体的には以下の様な項目で研究を行った。

- [1] 希薄な電解質溶媒中における荷電大粒子間の平均力ポテンシャルの研究  
(末松 (九産大)、秋山)
- [2] 同符号荷電コロイド粒子間の強い実効引力相互作用のリエントラント挙動とATPの加水分解を利用した分子モーターメカニズムの研究  
(末松 (九産大)、竹田、高倉、秋山)
- [3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究  
(吉森 (新潟大)、中村 (新潟大)、秋山)

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

- [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、共イオンの価数依存性はDLVO理論と実験では定性的に異なっている。我々は、HNC-OZ理論を用いて計算を行った。その結果、実験と定性的に同じ結果を得られる事が分かった。筑波大で実験的な研究をしている菱田らとの議論がまとめ、懸案であった積分方程式の計算上の問題点も解消ができた。

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

電解質溶液中では同じ符号を持った荷電コロイド粒子間にも引力が働き凝集などの現象が起こる事が知られている。いわゆる強結合領域での問題を扱った。DLVO理論ではこうした問題は全く扱う事が出来ないため、液体の積分方程式理論を用いてこの問題を扱った。この強い引力は、同符号荷電コロイドの電荷が大きな場合にのみ現れ、その会合安定性は共有結合に匹敵する。さらに、塩濃度が高くなるとその引力は消失する。この結果は、マクロイオンを原子核に、カウンターイオンを電子に置き換え、共有結合の古典描像を想定すると理解できる。実在系の実験結果との一致も良く、この現象における溶媒効果の意味づけに成功したので、その論文を投稿中である。また、この実効相互作用を元に初めてリエントラントな相図を出版することができた (2020年に出版)。また、電解質濃度変化を利用したタンパク質結晶の高品質化を目指して、シミュレーションプログラム作成を行っている。

[3] 溶媒中で大粒子が感じる摩擦の研究

(吉森 (新潟大)、中村 (新潟大)、秋山)

以前、物理学部門にいた中村、吉森との共同研究である。吉森によって、山口理論に特異摂動法を適用する事で溶媒が大きな極限で成り立つ簡便な理論が導出された。様々な巨大粒子-溶媒間動径分布関数に対して拡散係数が計算され、動径分布関数と拡散係数の間の関係が議論された。この方法を、多成分溶媒系に適用した。その結果、巨大分子の影響は、粘性からの予測より大きな事が示されつつある。今年は特に中村により動的な理論部分の近似方法について検討を行った。(2021年に出版) また、共溶媒の効果が予想以上に大きくなる事が示されつつ有る。これまでの結果とタンパク質の拡散の問題と結びつけることを目指して研究を進めている。

[4] 高分子結晶への溶媒分子の吸着の研究

(山口、千葉 (慶応大)、秋山)

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

[5] 水溶液中のタンパク質の拡散係数の計算

(岩下、秋山)

上記の分子動力学シミュレーションにおける拡散係数の計算値はシミュレーションボックスのサイズ依存性の問題をたんぱく質のケースで調べた。溶媒和層の問題だけでなく、粘性変化の問題もあり、もともとYehらの行ったケースよりも難しい問題が含まれていることがわかった。それらの問題は概ね説明がまとまりつつある。新しくより高度な補完式が適切に機能していることをシミュレーションを用いて確かめて、論文投稿を開始した。(2022年に出版される。)

[6] 積分方程式の高精度化の検証と分子認識

(松尾、秋山、中村 (新潟大))

動径分布関数の問題も解決して、HNC-OZ理論にBridge関数を追加したMHNC-OZ理論が極めて高精度であることを、モンテカルロシミュレーションを用いて求めることができ、2成分系の論文を準備中である。さらに松尾がグランドカノニカルモンテカルロシミュレーションのプログラムを組んだおかげで、よりの確な比較が行われつつある。3次元方程式理論のケースで同じBridge関数がどう機能するかについても結果が得られ

つつある。

[7] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究

(須田、末松 (九産大)、秋山)

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

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

自己駆動粒子は引力相互作用をしていなくても、極めて低い密度で群れを作る、すなわち凝集が起きることが知られている。2種類のトルクがあることに注目して群れ(凝集相)の発生タイプについて議論を行なってきている。これは微小管の実験でもみられており、説明が求められている。その実験の論文が2021年に出版された。2021年時点では、粒子シミュレーションによる論文を投稿中である。(理論計算の論文は2022年に出版される。)

出版物の出版状況は活動状況を知る上で指標の1つとなるので、資料としての意味からここでは2021年の出版物のみを記載する。(2021年度でも2022年のものは記載しない。)

論文：

[1] Farhana Afroze, Daisuke Inoue, Tamanna Farhana, Tetsuya Hiraiwa, Ryo Akiyama, Arif Kabir, Kazuki Sada, Akira Kakugo

Monopolar flocking of microtubules in collective motion

Biochemical and Biophysical Research Communications, 563, 73-78(2021). (上記[8]に関連。)

[2] Keiju Suda, Ayumi Suematsu, and Ryo Akiyama

Lateral depletion effect on two-dimensional ordering of bacteriorhodopsins in a lipid bilayer: A theoretical study based on a binary hard-disk model

J. Chem. Phys., 154, 204904-1-11 (2021). (上記[7]に関連。)

[3] Yuka Nakamura, Akira Yoshimori, and Ryo Akiyama

Solvation effects on diffusion processes of a macromolecule: Accuracy required for radial distribution function to calculate diffusion coefficient  
J. Chem. Phys., 154, 084501-1-10 (2021). (上記[3]に関連。)

[4] Ayumi Suematsu, and Ryo Akiyama  
Solvent effect for an effective attraction between like-charged macroions immersed in an electrolyte solution: The intensification mechanism of the effective attraction caused by the translational motion of solvent particles  
J. Chem. Phys., 154, 034902-1-8 (2021). (上記[2]に関連。)

解説:

[1] 千葉文野、秋山 良  
高分子P4MP1膜への低分子混合溶液からの選択的分子吸蔵  
高圧力の科学と技術, Vol.31, No.2, 82-89(2021) (上記[4]に関連。)

[2] 秋山 良, 末松 安由美  
液体の積分方程式理論を用いた電解質溶液内の同符号電荷間実効引力相互作用の研究  
分子シミュレーション学会誌"アンサンブル" Vol.23, No.2, 103-112(2021). (上記[2]に関連。)

また、液体論研究の場を作るという観点では、研究室の公開セミナーに加えて、秋山が岡山大の甲賀研一郎氏と共に液体論のシンポジウム“Mini-Symposium on Liquids”を毎年主催し、継続的や活動を行なっている。第14回目を、2021年6月26日に岡山大学で開催した。

研究分野

化学物理、生物物理、溶液化学、物理化学

研究課題

液体論、蛋白質溶液の相挙動

生体分子や表面での吸着、分子認識、安定性

非平衡状態からの緩和と仕事

ATPのエネルギー論

アクティヴマター

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