

教育・研究活動 年次報告書

2023 年度

九州大学大学院理学研究院
化学部門

2024 年 12 月

目 次

はじめに

1. 2023 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 2023 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 2023 年度関係行事一覧

(1) 講演会

(2) 談話会・報告会

(3) 2023 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. 2023 年度における各講座の活動

[無機・分析化学講座]

錯体化学分野

錯体物性化学分野

生体分析化学分野

分光分析化学分野

無機反応化学分野

[物理化学講座]

分散系物理化学分野

量子化学分野

光物理化学分野

構造化学分野

[有機・生物化学講座]

生体情報化学分野

生物有機化学分野

動的生命化学分野

構造機能生化学分野

[複合領域化学講座]

理論化学分野

触媒有機化学分野

分子触媒化学分野

量子生物化学分野

はじめに

昨今の慣例に従い、九州大学大学院理学研究院化学部門 2023 年度教育・研究活動の年次報告書を化学科ホームページにて掲載させていただきます。2018 年頃より紙媒体での書類形態の多くを廃止し、本年次報告書についても電子媒体にて公開するに至っております。また、化学部門教員の論文・学会発表などの研究業績・担当講義・各種委員などの情報については下記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/html/home_ja.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>

およそ 20 年前の講座再編以降、化学部門では、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四大講座を配置し、研究と教育に専心して参りました。2023 年度はこれら四大講座に総計 15 研究室を配置し、独創性と重要度の高い、幅広い先端的研究課題に取り組む体制を調え、優れた成果を収めることができました。その甲斐もあり、人事異動に関しても実に活発な栄転と新任採用を実現する実り多き年度となりました。具体的には、准教授 2 名及び助教 1 名の栄転が実現したことに加え、教授 1 名の他大学転出がありました。一方、新任教員とし、准教授 2 名と助教 3 名を採用することにより、部門教員の平均年齢を劇的に引き下げることになりました。このほか、教授 1 名の早期退職と講師 1 名の定年退職により、使用可能な教員ポイントの拡大にも成功しています。このように化学部門では、人事流動化を進め、時代のニーズに即した新しい研究課題に取り組む新任教員の採用を達成しました。

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「フロンティアリサーチャー育成プログラム」および「アドバンス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・ヴィンチコース」、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。

2023 年度は、新型コロナウイルスの感染が収束傾向になり、教育研究活動の制限が少しずつ解除されていきました。部門内会議は引き続きオンラインで開催しましたが、研究活動に関しては、セミナーは研究室の状況に応じて対面開

催が増え、実験は十分な感染予防対策を取った上で、全学の行動指針に従った上で、徐々にコロナ前の活動状況に戻っていきました。講義については対面開催が増え、状況に応じてオンラインが併用されました。大学院入試は昨年度の経験を活かして、十分な対策を講じた結果、自己推薦入試、一般入試とも対面で無事実施ことができました。

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

今後とも、化学科・化学専攻・化学部門の教育・研究に皆様方のご理解とご支援賜りますよう、何卒お願い申し上げます。

2024年12月

2024年度 化学部門長 酒井 健

1. 2023年度における化学専攻の活動

1.1 教員名簿 (2023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)	大石 徹(有機・生物化学)	堀雄一郎(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

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)
宮田潔志(無機・分析化学)	宇都宮聡(無機・分析化学)	槇 靖幸(物理化学)
堀尾琢哉(物理化学)	大橋和彦(物理化学)	谷 元洋(有機・生物化学)
松島綾美(有機・生物化学)	村山美乃(複合領域化学)	渡邊宙志(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)	未永正彦(複合領域化学)
---------------	--------------

助教

山内幸正(無機・分析化学)	Benjamin LE OUAY(無機・分析化学)	木下祥尚(無機・分析化学)
鳥飼浩平(無機・分析化学)	八島慎太郎(物理化学)	荒川 雅(物理化学)
桶谷亮介(物理化学)	保野陽子(有機・生物化学)	足立惇弥(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)
吉澤明菜(複合領域化学)		

【協力講座】

先導物質化学研究所

教授

玉田 薫(ナノ物性化学) 佐藤 治(光機能物質化学) 山内美穂(ナノ機能化学)

准教授

有馬祐介(ナノ物性化学) 谷 文都(構造有機化学) 小林浩和(ナノ機能化学)

助教

金川慎治(光機能物質化学) 呉 樹旗(光機能物質化学)
堂ノ下将希(ナノ機能化学) 五島健太(構造有機化学) 梶野祐人(ナノ物性化学)

基幹教育院

教授

瀧上隆智(ソフト界面化学) 野瀬 健(生体分子化学)

准教授

内田竜也(有機反応化学)

R I センター

准教授

杉原真司(環境動態化学)

1.2 人事異動

'23. 4.1	理論化学	渡邊 宙志	准教授	採用 (慶応義塾大学より)
'23. 4.1	動物生命化学	足立 惇弥	助教	採用
'23. 4.1	触媒有機化学	吉澤 明菜	助教	採用
'23. 9.30	生体情報化学	谷 元洋	准教授	転出 (岐阜大学)
'23. 9.30	触媒有機化学	村山 美乃	准教授	転出 (神奈川工科大学)
'23. 10.1	分光分析化学	小川 知弘	助教	採用 (富山大学より)
'23. 10.1	光物理化学	平松光太郎	准教授	採用 (東京大学より)
'24. 3.31	光物理化学	加納 英明	教授	転出 (慶応義塾大学)
'24. 3.31	分子触媒化学	桑野 良一	教授	早期退職
'24. 3.31	分子触媒化学	末永 正彦	講師	定年退職
'24. 3.31	量子化学	荒川 雅	助教	転出 (九州大学理学研究院地球惑星科学部門)

1.3 非常勤講師

鈴木 健一	教授	東海国立大学機構	岐阜大学糖鎖生命コア研究所
品田 哲郎	教授	大阪公立大学大学院理学研究科	
佃 達哉	教授	東京大学理学系研究科化学専攻	
藤井 朱鳥	教授	東北大学理学研究科	
井村 考平	教授	早稲田大学理工学術院	
前田 和彦	教授	東京工業大学理学院	
北垣 浩志	教授	佐賀大学農学部	

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

(2023年5月1日現在)

博士課程

1年生 (D1)

岩井 優大
江原 巧*
羽座 寛登
吉岡 拓哉
山内 崇弘
周 子奇
HUANG YUBO
西川 七海
田中 尚輝

2年生 (D2)

Yan Xin
管 昌権
廖 晨
森藤 将之
WANGAMNUAYPORN SUPAKORN
笠 僚宏
胡 祖亮
岩下 智哉
鄭 文偉
水 棋鋭

3年生 (D3)

宮崎 栞*
河野 聖*
飯田 岳史*
上川 拓也
許 柯
斉 維昕
WON SUNGYOUNG
張 奥
竹田 宙加
松尾 美香
ZHANG XIAOPENG
JI TIANCHI
徐 文煌
植松 尊
Nada Besisa
Sun Mingxu

*...日本學術振興會特別研究員

修士課程

1年生 (M1)

井上 眞子	能見 倫	林 結華
國久保 透真	青沼 優奈	後藤 彩香
浦 陸人	鈴木 悠太	星野 秀太郎
河村 佳央理	坂本 涼	坂井 翔太郎
池田 達紀	小田 淳生	池田 泰輔
姚 自立	矢ヶ部 未歩	Verner Saeaesk
王 冠	勅使川原 樹弥	居倉 稜
神崎 友理	山口 寛史	浜重 竜也
周 堯	御手洗 拓真	奥迫 茉優
山本 直也	太田 航司郎	手島 優希
下川 真依	樋口 貴士	草場 智
末田 悠太	山内 葉月	多田隈 歩実
宋 衍慶	小野原 永遠	河野 賢亮
猪狩 世玲菜	荒卷 光汰	岡崎 浩志
清水 浩太郎	中村 圭太	
山根 晃輝	中辻 賢人	
西村 あおい	吉村 早織	
高田 亜美	黒木 博由	
屋良 雅也	平岡 杏央	
石井 優生	佐藤 一斗	
三好 健太	石井 健	
藤井 貴也	北 康平	
久保田 樹	山本 向洋	
平川 未歩	伊藤 宇宙	

2年生 (M2)

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

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

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

研究生等

鄭 卿恩
邱 昶睿
UKTAMOVA Malokhat
ZHANG YINGHAO

学振 (PD) 研究員等

Boruah Kanta Purna
梅野 圭太郎
須田 慶樹

1.5 2023 年度に授与した大学院学位

課程博士（理学）

- 竹内 佑甫 Development of an RF cavity for muon linac middle- β section for muon $g-2$ /EDM experiment at J-PARC
(J-PARC におけるミュオン $g-2$ /EDM 実験のためのミュオン線形加速器中速度領域用 RF 空洞の開発)
- NADA
HUSSIEN
AMIN
MOHAMED
BESISA Electrochemical generation of active coenzyme 1,4-NADH for enzymatic lactic acid production on metal oxides with engineered defects/active sites
(設計された欠陥/活性部位を有する金属酸化物を使った酵素的乳酸生成のための活性補酵素 1,4-NADH の電気化学的生成)
- 張 曉鵬 Magnetic Field Effects on Polar Spin Crossover Complexes
(極性スピנקロスオーバー錯体に対する磁場効果)
- 孫 明旭 Rational Design of Cu-based Catalysts and Synthetic Systems for Carbon Dioxide Electroreduction
(電気化学的二酸化炭素還元のための銅触媒と合成システムの合理的な設計)
- 宮崎 栞 Energy Transfer Mechanism in Lanthanide Complexes Studied by Time-Resolved Spectroscopy
(時間分解分光を用いたランタニド錯体のエネルギー移動機構の研究)
- 辻野 泰之 Heterochronic evolution of the Cretaceous heteromorph ammonoid *Baculites* from the Coniacian to lower Campanian in Hokkaido, northeastern Japan
(北海道の後期白亜紀（コニアシアン期～前期カンパニアン期）における異常巻きアンモノイド *Baculites* の異時性進化)

- 杉山 祐紀 **Theoretical Study on Quantum Mechanical Aspects of Gravity based on Quantum Field Theory**
(場の量子論に基づいた重力の量子力学的側面の理論的研究)
- 金 龍熙 **Properties of heavy hadrons studied with a chiral effective model of diquarks**
(ダイクォークのカイラル有効模型を用いたヘビーハドロンの特質の研究)
- 大久保 勇利 **Exploring Higher-Dimensional Gauge Theory: A Model of Early Dark Energy and A Non-Abelian Gauge Theory with Magnetic Flux Background**
(高次元ゲージ理論の探究：Early Dark Energy の模型と背景磁場を伴う非可換ゲージ理論)
- 田邊 巧祐 **Hall effect of itinerant electron metamagnetic systems**
(遍歴電子メタ磁性体のホール効果)
- 河野 聖 **Experimental and Theoretical Studies on Size-Dependent Optical Responses of Free Silver Cluster Cations: Geometry Evolution and Emergence of Collective Excitation of Electrons**
(銀クラスター正イオンの光応答特性の実験および理論的研究：サイズ成長に伴う幾何構造の変化と集団電子励起の発現)
- 許 柯 **Novel Synthetic Method of Thiols using Heterogeneous Cobalt Catalysts from Hydrogen, Elemental Sulfur and Alkenes and Other Substrates**
(水素、硫黄、アルケン及びその他の基質からの不均一系コバルト触媒を用いたチオールの新規合成法)
- 齊藤 圭太 **Rotational motion of externally driven anisotropic particles in complex fluids**
(複雑流体中における外部駆動異方性粒子の回転運動)

- 徐 文煌 Investigation of Magnetoelectric Effects in $\mu_3\text{-oxo}$ -bridged Polynuclear Transition Metal Complexes
(μ_3 -オキソ架橋遷移金属多核錯体の電気磁気効果)
- 松尾 美香 Multi-body effects on molecular recognition regulated by translational motion of solvent particles
(溶媒分子の並進運動効果によって調整される分子認識における多体効果)
- 飯田 岳史 Ion-beam manipulation and liquid-droplet dynamics in a vacuum explored with the aid of computational approaches
(真空中のイオンビーム制御と液滴ダイナミクスの探究：計算機活用による実験支援)
- 柳 玉華 Dust Polarization Study of Prestellar and Protostellar Sources in OMC-3 with ALMA
(ALMA による OMC-3 における原始星と星なし天体ダスト偏波研究)
- 橋本 翼 Disruption Process of Accumulated Northward Interplanetary Magnetic Fields Ahead of the Dayside Magnetosphere
(昼側磁気圏前面に蓄積された北向き惑星間空間磁場の解消プロセスに関する研究)
- 原田 直人 Dust Dynamics and Growth from Prestellar Collapse to Protostellar Accretion Phase Using Non-ideal Magnetohydrodynamics Simulation with Lagrangian Particles
(ラグランジュ粒子を取り入れた非理想磁気流体シミュレーションで探る星・円盤形成過程におけるダストのダイナミクスとサイズ進化)

- 川崎 良寛 Early evolutionary stage of protoplanetary disk and dust growth
(原始惑星系円盤の初期進化段階とダスト成長)
- 佐藤 亜紗子 ALMA fragmented source and outflow catalogue in a cluster-forming environment within the Orion Molecular Cloud 2
(ALMA 望遠鏡を用いたオリオン分子雲 2 の星団形成環境における分裂構造とアウトフローのカタログ化)
- 土田 耕 Modulation of Internally Generated Radiative Feedbacks and its Application for Global Warming Evaluation
(気候系内部変動が引き起こす放射フィードバック強度の変調と温暖化予測における不確実性評価への応用)

課程修士 (理学)

- 合屋 裕輝 Photoelectrochemical CO₂ Reduction Using a Photosensitizer-Modified TiO₂ Photoanode and a Co-Porphyrin-Catalyst-Modified TiO₂ Cathode
(光増感剤を修飾した TiO₂ フォトアノードおよび Co ポルフィリン触媒を修飾した TiO₂ カソードを用いた光電気化学的 CO₂ 還元反応)
- 潘 雲逸 Synthesis of Dinuclear Cobalt Complexes Bearing Close Metal Sites and Their Catalytic Activities in Electrochemical CO₂ Reduction
(近接した金属サイトを有するコバルト二核錯体の合成ならびにその電気化学 CO₂ 還元反応における触媒活性)
- 田栗 萌々 Selective and Sensitive Ammonia Sensing based on Luminescent Unit, [Re^VN(CN)₄]²⁻
(発光性ニトリドテトラシアノレニウム錯体を基盤とする選択的かつ高感度なアンモニアセンシング)

- Lee Dongseob Controlling the Formate Selectivity in Photocatalytic CO₂ Reduction: Role of Hydroxyl Groups in RhCp*(dihydroxy-bpy) Catalysts
- 本田 瑛之 Realtime Analysis of CO₂ Reduction Reaction of Dyad Photocatalysts Using Zinc Porphyrin as a Photosensitizer
(亜鉛ポルフィリンを光増感体として用いた二元系光触媒の CO₂ 還元反応の実時間解析)
- 藁毛 健太 Formation process of Cesium-rich micro particles and relationship with debris generated during molten-core concrete interaction
(MCCI 反応時の高濃度放射性 Cs 含有微粒子の生成過程及びデブリとの相関)
- 木村 周慈 Elucidation of the Emission Mechanism in Thienyl Diketone Derivatives Showing Highly Efficient Room-Temperature Phosphorescence
(高効率な室温リン光を示すチエニルジケトン誘導体の発光機構の解明)
- 大淵 美亜 Phase-separated liquid droplets studied by fluorescence and Raman spectroscopic imaging
(相分離液滴の蛍光・ラマン分光イメージング)
- 山中 美佳 Morphological Change of Lipid Vesicles Induced by Mixing of Cone-Shaped Lipid
(コーン型脂質の混合により誘起される脂質ベシクルの形態変化)
- 岩間 拓樹 Relation between Friction and Wear of Hydrogels with Surface Hemispherical Dimple Patterns
(表面半球状くぼみパターンを有するハイドロゲルの摩擦と摩耗の関係)

- 徳永 紗友稀 **Drying dynamics imaging of human stratum corneum**
(ヒト皮膚角層の乾燥ダイナミクスイメージング)
- 新垣 怜央 **Simulation of clustering caused by self-propelled particles focusing on shape anisotropy and effective excluded area**
(自己駆動粒子によるクラスター形成に対する形状異方性・実効排除面積に着目した粒子シミュレーション)
- 富田 侑樹 **Photocatalytic Oxygen Evolution from Water by a Carbon Nitride Modified with Molecular Cobalt Catalyst**
(分子性コバルト触媒を修飾したカーボンナイトライドによる水からの光化学的酸素生成反応)
- 米野 斐 **Correlation among Ammonia Adsorption Properties, Structures and Luminescence Properties of One-dimensional Re(V)Cd(II) Coordination Polymers**
(一次元 Re(V)Cd(II) 配位高分子のアンモニア吸着特性、構造および発光特性の相関)
- 楮 京 **Investigation of polarization hysteresis induced by magnetic field in single-ion magnets**
(単イオン磁石における磁場変化による分極ヒステリシスの研究)
- 南 良友 **Novel Enzyme Immobilization Method using Water-Soluble Ionic Metal-Organic Polyhedra**
(水溶性とイオン性を併せ持つ金属有機多面体を用いた新規酵素固定化法の開発)
- 寺戸 美樹 **Protein Modification on Cell Surface Using Poly(Ethylene Glycol)-Lipids with Chelating Ligands**
(キレート配位子を有するポリエチレングリコール-脂質を用いた細胞表面へのタンパク質修飾)

- 阪本 将裕 Theoretical analysis on intersystem crossing rate using higher order expansion of spin orbit coupling
(スピン軌道相互作用の高次摂動展開による項間交差速度の解析)
- 金城 海里 Spectroscopic Properties of Solvated Aniline Derivatives: Molecular Dynamics and TDDFT Calculations
(溶媒和されたアニリン誘導体の分光特性：分子動力学および TDDFT 計算)
- 末吉 史佳 Controlling the Photofunctionality of a Water-soluble Copper(I) Photosensitizer for CO₂ Reduciton Using Its Ion-pair Formation with Alkylammonium Cations
(アルキルアンモニウムカチオンとのイオン会合体形成にもとづく水溶性銅(I)光増感錯体の光機能制御および CO₂還元反応への応用)
- 辻岡 利菜 Synthesis and Structural Characterization of Cyano-based Organic-Inorganic Hybrids with Methylpyridinium Cations
(メチルピリジニウムカチオンを用いたシアノ系有機-無機ハイブリッドの合成と構造特性)
- 中島 直人 Solar Hydrogen Production by a TiO₂ Photoanode Modified with Zinc Porphyrin Photosensitizer with Tuned Redox Potentials
(酸化還元電位を制御した亜鉛ポルフィリン光増感剤を修飾した TiO₂ フォトアノードを用いた太陽光水素生成反応)
- 常盤 美怜 Design of Functional Salt Composed Polyoxometalate Anion and Cationic Coordination Cages
(ポリ酸アニオンとケージ型カチオン錯体からなる機能性塩の構築)

- 吉村 美波 **Forward and backward CARS microscopy for biological tissue imaging**
(前方・後方 CARS 顕微鏡による生体組織イメージング法の開発)
- 小副川 智哉 **Resonance Wavelength Tuning in Plasmonic Nanocavity Structures Using Self-Assembled CeO₂ Nanoparticle Films**
(CeO₂ ナノ粒子自己組織化膜を用いたプラズモニックナノキャビティ構造における共鳴波長制御)
- 五反田 基彰 **Time-Resolved Spectroscopic Study on Luminescent Mechanism in Tb(III) Complexes Showing Strong Temperature Dependent Luminescence**
(強い温度依存発光を示す Tb(III)錯体の時間分解分光による発光機構の研究)
- 田中 悠太 **Controlling the Transfer of Perovskite Nanoparticle Monolayer film by Surface Wettability**
(表面濡れ性によるペロブスカイトナノ粒子単層膜の転写制御)
- 茂谷 尚貴 **Development of Proton Conductive Materials under Non-humidified Conditions**
(無加湿条件下におけるプロトン伝導性材料の開発)
- 諏訪 靖拓 **Study on the Alkaline-Water Reduction Activity of Bis(NHC)cobalt Catalysts Possessing Either a Secondary or Tertiary Amine Donor**
(二級または三級アミンドナーを有するビス(NHC)コバルト触媒のアルカリ水還元活性に関する研究)

- 今村 祐輝 Control of the Structure and the Magnetic Property of Novel Two-dimensional Coordination Polymers with Quasi C_{4V} -symmetric $[\text{Cr}^{\text{V}}\text{N}(\text{CN})_4]^{2-}$ Building Unit
(疑似 C_{4V} 対称錯体 $[\text{Cr}^{\text{V}}\text{N}(\text{CN})_4]^{2-}$ を構築素子とする新規二次元型配位高分子の構造と磁気特性の制御)
- 堀部 紗代 Time-Resolved Spectroscopic Study on the Emission Dynamics in a Eu(III) Complex Bearing a Ligand with a Spacer
(時間分解分光によるスペーサーをもつ配位子を有するEu(III)錯体の発光ダイナミクスの研究)
- 田中 京介 Nonlinear Raman spectroscopic imaging of microorganisms
(非線形ラマン分光イメージング法の微生物への応用)
- 豊田 彩人 Non-ionic Polymer Gel with Upper Critical Solution Temperature Behavior in Water
(上限臨界共溶温度(UCST)を示す非イオン性高分子ゲルの水中での相挙動)
- 小柳 裕聖 Investigation of the Quenching Mechanism of Stilbene Derivatives Showing Aggregation-Induced Emission Using Ultrafast Spectroscopy
(超高速分光を用いた凝集誘起発光を示すスチルベン誘導体の消光機構の研究)
- 大田 舜 Phase Behavior in Ternary Lipid Vesicle including Ceramide and Effect of Surfactant on its Phase State
(セラミドを含む三成分ベシクル系の相挙動と界面活性剤添加の効果)

- 松本 一陽 Development of charged-particle velocity map imaging with an event-based vision sensor: Realization of sub-MHz event counting and improvement of image resolution by centroiding
(イベント駆動型イメージセンサによる荷電粒子速度マッピング法の開発: サブ MHz 計数法の実現と重心演算による高分解能化)
- 北川 将大 Theoretical Examination on Baird Aromaticity based on Magnetic Shielding Effect Calculations
(Baird 芳香族性の外部磁場応答性に基づく理論的考察)
- 安野 海輝 Solvation Structures of Al(III) ion in Formamide: Infrared Spectroscopy and Quantum Chemistry Calculations
(ホルムアミド中における Al(III)イオンの溶媒和構造: 赤外分光および量子化学計算)
- 都々木 一平 Two-component transformation inclusive contraction scheme in the relativistic molecular orbital theory
(相対論的 2 成分法における 2 成分変換内包型短縮スキームの構築および数値的評価)
- 市川 聖人 Partial Reduction of Acetals by Supported Nickel Catalysts with Hydrogen
(水素を用いた担持ニッケル触媒によるアセタールの部分還元)
- 忍田 渉太郎 Study on Improvement of Double Reaction Strategy for Synthesizing Pentacyclic Ethers
(五環性エーテル合成のための二重反応戦略の改良に関する研究)

- 青山 大樹 **Synthesis and Properties of a Pyrrole Derivative Fused with a Helicene of 1,1'-Biazulene Skelton**
(1,1'-ビアズレン骨格で構成されるヘリセンが縮環したピロール誘導体の合成と性質)
- 高城 悠太 **Heterogeneous Transition Metal Catalyzed Dialkylpolysulfanes Synthesis from Molecular Hydrogen, Sulfur, and Alkenes**
(不均一系遷移金属触媒を用いた、分子状水素、硫黄、アルケンを原料とするジアルキルポリスルファン合成)
- 藤村 泰地 **Single-cell Pharmacokinetic Analysis by Ultra-Sensitive CE-MS**
(超高感度 CE-MS 分析法を用いた一細胞薬物動態解析)
- 伊藤 琴音 **Integrated Study of Halogen Bond Using Nuclear Receptors**
(核内受容体を用いたハロゲン結合の統合的解析)
- 三木 太陽 **Development of glycan analysis method based on LC/CE two-dimensional separation**
(液体クロマトグラフィー/キャピラリー電気泳動二次元糖鎖分析法の開発)
- 山縣 里美 **Screening and analysis of suppressor mutations conferring resistance to impairment of sphingolipid biosynthetic pathway**
(スフィンゴ脂質の生合成経路の破綻に対して抵抗性を付与するサプレッサー変異の探索と解析)
- 久保田 颯 **Quantitative Lipid Profiling of Biomembranes Microdomain by Microneedle-based Solid Phase Extraction-Mass Spectrometry**
(生体膜局所の定量的脂質プロファイリングに向けたマイクロニードル固相抽出-質量分析法の開発)

- 赤坂 龍矢 **Membrane Localization of Poly(ethylene Glycol)-Lipid Modified to Adhered Cell and its Molecular Weight-Dependence**
(接着細胞に修飾したポリエチレングリコール-脂質の膜局在とその分子量依存性)
- 立岡 千恵 **Effects of Surfactant Mixing and Salt Addition on Adsorbed Films and Micelles of Single-Chain Phospholipids**
(一本鎖リン脂質から成る吸着膜やミセルに及ぼす界面活性剤の混合および塩添加の効果)
- 小柳 惇平 **Study of Solvent effects on polymer conformations focused on packing fraction of solvent molecules**
(溶媒分子充填率に着目した高分子の形状における溶媒効果)
- 布施 賢志朗 **Synthetic Study of the C1-C10 Section of Maitotoxin**
(マイトトキシンの C1-C10 部分の合成研究)
- 大内田 希奈 ***N*-Arylation of Tertiary Amines Using Diarylchloronium Salts**
(ジアリールクロロニウム塩を用いた第三級アミンの *N*-アリール化)
- 田島 春瑠乃 **Studies towards Carboxylic Acid Cooperative Asymmetric Aerobic Epoxidation**
(分子状酸素を酸化剤とする不斉エポキシ化反応における酸協働作用に関する研究)
- 今田 皇緑 **Effects of marine toxin maitotoxin and antimicrobial cyclic peptides on lipid membrane**
(海産毒マイトトキシシンと抗菌環状ペプチドの脂質膜に対する影響)

- 松崎 桃子 **Screening and analysis of genes that rescue cellular functional abnormalities caused by disruption of structural diversity of complex sphingolipids**
(複合スフィンゴ脂質の構造多様性破綻による細胞機能異常を補填する遺伝子の探索と解析)
- 宗 玲那 **Chemical Modification of Proteins Using Temperature-Responsive Phe-Containing Short Elastin-Like Peptides**
(温度応答性 Phe 含有短鎖エラスチン様ペプチドを用いたタンパク質の化学修飾)
- 武田 拓人 **Mechanism of action of Yessotoxin and its desulfo derivative**
(イエソトキシンとその脱硫酸体の作用発現機構)
- 藤 莉莉 **Kinetic Solubilization of an Organic Molecule and its Electronic Structure**
(有機分子の速度論的な可溶化と電子構造)
- 春口 一騎 **Carbonylation of Alkenes and Aerobic Oxidation of Alcohols with Noble Metal Catalysts**
(貴金属触媒を用いたアルケン類のカルボニル化およびアルコール類の空気酸化反応)
- 谷口 大真 **Study on Improvement of Synthetic Method of the LMNO Ring of Maitotoxin**
(マイトトキシンの LMNO 環部の改良合成法に関する研究)
- 福重 智基 **Flow Desulfurization from Alcohol Beverages and Adsorption Kinetics of Various Sulfur Compounds on Silica-supported Au Nanoparticles**
(シリカ担持金ナノ粒子による酒類からの流通式脱硫と種々の硫黄化合物の吸着速度の検討)

- 白根 共太 **Analysis of Gene Expression in BPC-Exposed Fetal Mouse Brain and Effects of Putative Nurr1-Binding Compounds in Neural Model Cells**
(BPCによるマウス胎仔脳が発現遺伝子変動と Nurr1 転写活性に影響する化合物の神経細胞への影響の解析)
- 川口 貴大 **Novel drug resistance mechanisms against sphingolipid biosynthesis inhibitor via lipid-translocating exporter family protein**
(Lipid translocating exporter family protein によるスフィンゴ脂質生合成阻害剤に対する新規耐性獲得機構)
- 長田 晃彦 **Chemoenzymatic Synthesis of Thermoresponsive Elastin-Like Peptides Employing Papain-Mediated Peptide Fragment Condensation**
(パパインを用いたペプチドフラグメント縮合反応による温度応答性エラスチン様ペプチドの化学酵素的合成)
- 石岡 沙耶果 **Exploration of lipid-specific recognition natural products using lipid-immobilized beads**
(脂質固定化ビーズを用いた脂質特異的認識天然物の探索)
- 河村 正 **Synthetic Study of the NOPQ and STUVW Rings of Brevisulcenal-F**
(ブレビスルセナル-F の NOPQ 環部および STUVW 環部の合成研究)
- 向野 友稀 **Bifunctional Thiourea-Catalyzed Asymmetric Ring-Opening Reaction of Azlactones with Hydrazine Nucleophiles and Associated Preferential Enrichment**
(二官能性チオウレア触媒を用いたアズラクトン類のヒドラジン求核剤による不斉開環反応とそれに伴う優先富化現象)

齊藤 竜馬

**Synthetic Study of 6/6/7/6/6-Pentacyclic Ethers Based
on Convergent Method via Three-Rings Construction**

(三環構築型収束的合成法に基づいた 6/6/7/6/6-五環性エーテルの合成研究)

深江 友博

**Preparation of Gold Nanoparticles by Impregnation
Method with Various Au-amino Acid Complexes**

(各種の金-アミノ酸錯体を用いた含浸法による金ナノ粒子の調製)

1.6 2023年度関係行事一覧

(1) 講演会

- [1] 講演者 鈴木 健一 教授 (東海国立大学機構 岐阜大学糖鎖生命コア研究所)
演 題 1分子・超解像顕微鏡観察によるシグナル伝達場の可視化解析
開催日 2023年5月19日
世話人 松森 信明
- [2] 講演者 Prof. Yang Zhao(Nanyang Technological University, Singapore)
演 題 The hierarchy of Davydov trial states: from guesswork to numerically "exact" many-body wave functions
開催日 2023年5月22日
世話人 秋山 良
- [3] 講演者 Prof. Alexandr Simonov (Monashu University)
演 題 Sustainable electrosynthesis of hydrogen and ammonia
開催日 2023年5月28日
世話人 酒井 健
- [4] 講演者 Prof. Mischa Bonn, (Max Plank Institute for Polymer Research, Germany)
演 題 Morino Lecture 2023, "Water and Graphene – a Quaint Quantum Couple"
開催日 2023年5月30日
世話人 恩田 健
- [5] 講演者 品田 哲郎 教授 (大阪公立大学大学院理学研究科)
演 題 有機合成化学が牽引するテルペン化学の新展開
開催日 2023年6月16日
世話人 大石 徹
- [6] 講演者 佃 達哉 教授 (東京大学理学系研究科化学専攻)
演 題 超原子を基盤とする物質化学
開催日 2023年6月30日
世話人 山内 美穂

- [7] 講演者 藤井 朱鳥 教授 (東北大学理学研究科)
演 題 プロトン付加アルコールクラスターの赤外分光：水素結合の箱庭
開催日 2023年7月21日
世話人 大橋 和彦
- [8] 講演者 Prof. Paul G. Hayes (University of Lethbridge)
演 題 Rhodium-Phosphinimine Cooperative Small Molecule Cooperation
開催日 2023年8月14日
世話人 酒井 健
- [9] 講演者 井村 考平 教授 (早稲田大学理工学術院)
演 題 ナノ物質の可視化から光物性の制御へ
開催日 2023年9月1日
世話人 加納 英明
- [10] 講演者 前田 和彦 教授 (東京工業大学理学院)
演 題 光触媒材料研究の裏話集
開催日 2023年11月2日
世話人 酒井 健
- [11] 講演者 北垣 浩志 教授 (佐賀大学農学部)
演 題 スフィンゴ脂質の腸内細菌に対する影響の解析
開催日 2024年1月24日
世話人 堀 雄一郎

(2) 談話会・報告会

前期特別談話会

開催日：2023年8月9日（水）

会場：九州大学理学部講義室（W1-C-314）、エントランスホール

マイトトキシンの合成研究 有機合成のパワー！

生物有機化学 大石徹

水を使う有機合成

有機反応化学 内田竜也

量子化学計算を志向したノイズつき量子コンピューター向けアルゴリズム開発

理論化学 渡邊宙志

ジベンゾチオフェンの光反応による液体燃料からの脱硫

触媒有機化学 山内崇弘

多芸多彩な有機 π 電子系分子

構造有機化学 谷文都

ナノ界面機能を活用する持続可能な化学合成

ナノ機能化学 山内美穂

機能性金属錯体を基盤とした太陽光水分解システムの開発

錯体化学 小澤弘宜

脂質ラフトに着目した局所麻酔薬の作用機序

生体分析化学 木下祥尚

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

鉱物クラスターの反応研究で探る宇宙での化学過程

量子化学 荒川雅

生細胞を染めずに見る ～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

非天然型アミノ酸含有ペプチドの迅速合成と機能評価

生体分子化学 友原啓介

核内受容体による有害環境化学物質のシグナル伝達メカニズム

構造機能生化学 荒巻光汰 小野原永遠 中村圭太 伊藤琴音 白根共太

ナノの世界へようこそ！

ナノ物性化学 星野秀太郎 後藤彩香 林結華 坂井翔太郎

光と電気と磁気と分子結晶

光機能物質化学 植松尊 池田泰輔

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 勅使川原樹弥 山口寛史

触媒の限界を引き出す新しい力

有機反応化学 岡崎浩志 河野賢亮 内田竜也

コンピューターでわかる化学の世界

理論化学 中辻賢人 池田拓真 福嶋悠也

SHOKUBAI×FAMILY ~~子ニニキ~~あるこーるがすき。にんじんきらい。

触媒有機化学 石井健 北康平 佐藤一斗 平岡杏央 山本向洋

有機 π 電子系化合物の新奇物質開発・分子配列・機能化

構造有機化学 青山大樹 藤莉莉 居倉稜 浜重竜也

創って、測って、考えて ～新しい高機能触媒をナノレベルで～

ナノ機能化学 藩雲逸・平川朱里 梅野磨比流 松鶴恭弘

金属錯体を触媒とする人工光合成の実現

錯体化学 澁谷篤紀 千綿晃士郎 富田悠也 中村拓海 野間大暉

生体膜の統合分析を目指して ～Rord to Lipid～

生体分析化学 中本朱音 安田美月 山下愛斗 光永龍世

光を使って見てみよう！分子の構造と性質

構造化学 安野海輝 金城海里 渡久山直輝

クラスターを化学する ～光による原子レベルへのアプローチ～

量子化学 松本一陽 青沼優奈 鈴木悠太 能見倫 平川未歩

分子からの手紙 光による生体組織の分子イメージング

光物理化学 小田淳生 坂本涼 矢ヶ部未歩

変性しない不思議なポリペプチド ～温度応答性分子の合成・分析・応用～

生体分子化学 草場智 多田隈歩実

置換シクロヘキサンにおける配座異性体の優位性の起源について

分子触媒化学II 末永正彦

地球生命圏環境科学

無機反応化学I 三好健太 杉本侃駿 宮崎加奈子

$\sum_{k=1}^{\infty}$ (金属錯体分子) = ???

錯体物性化学 木村紗彩 玉島光士郎

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 高田亜美 屋良雅也

吸着膜や生体膜を界面化学から知るゾ

ソフト界面化学 手島優希 奥迫茉優

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 羽座寛登 豊田彩人 岩間拓樹 山崎涼平 藤井貴也

生体分子の動きを可視化するケミカルバイオロジー研究

動的生命化学 足立淳弥 堀雄一郎

Transformation: Power of the Catalyst

分子触媒化学 I 張奥 張英豪 齊維昕 元誠庸

溶液中の不思議な現象

量子生物化学 竹田宙加 松尾美香 岩下智哉

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 福留朱莉

後期特別談話会

開催日：2023年12月9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

Magnetic Field Effects on Polar Spin Crossover Complexes

光機能物質化学 Xiaopeng Zhang

ナノ粒子の光化学

ナノ物性 化学 梶野祐人

病院でマクロアニオンと再開する

量子生物化学 秋山良

Optically Active Iridium Catalysis Chemo- and Enantioselective Hydrogenation of Pyridine Ring of Azaindole

分子触媒化学 I Zhang Ao

光照射によるエラスチン様ペプチド(FPGVG)_n アナログ自己集合能の制御

生体分子化学 巢山慶太郎

受容体科学：核内で働くホルモン受容体のいろいろな働き

構造機能生化学 松島綾美

タンパク質ラベル化技術を応用した核酸の化学修飾の可視化

動的生命化学 堀雄一郎

低摩擦な生体代替材料の創製を目指したハイドロゲルの摩擦と摩耗の解析
分散系物理化学 八島慎太郎

モデル生体膜の不均一性及び界面活性剤添加の効果
ソフト界面化学 大田舜

先端レーザー分光と材料科学の協奏で切り拓く光化学研究の新展開
光分析化学 宮田潔志

常識と直観を裏切るシアノ化合物 ～d8 金属の疑似スピントスオーバー～
錯体物性化学 岩井優大

Science Behind Fukushima Daiichi: 原発事故インジェクタの多角的精密分析
無機反応化学 宇都宮聡

金属錯体を触媒とする人工光合成の実現
錯体化学 澁谷篤紀 千綿晃士郎 富田悠也 中村拓海 野間大暉

地球生命圏環境科学
無機反応化学 蓑毛健太 三好健太 杉本侃駿 宮崎加奈子

金属錯体ってなあになあに？
錯体物性化学 木村沙彩 玉島光士郎

生体膜の統合分析を目指して ～ Road to Lipid ～
生体分析化学 中本朱音 安田美月 山下愛斗 光永龍世

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 石井優生 江原巧 屋良雅也 笠僚宏

光を使って見てみよう！分子の構造と性質
構造化学 安野海輝 金城海里 渡久山直輝

光で探る金属クラスター ―新規ナノ物質「超原子」化学への挑戦―
量子化学 牛木優大 川村右京 松村大樹 青沼優奈 鈴木悠太

吸着膜や生体膜を界面化学から知るゾ

ソフト界面化学 手島優希 奥迫茉優

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 羽座寛登 岩間拓樹 豊田彩人 山崎涼平 藤井貴也

先端光技術による分子イメージング ～化学, 光学, 情報科学の融合によるアプローチ～

光物理化学 江嶋郁人 大上柊介 西川智 山本航

特異な生物活性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 勅使川原樹弥 山口寛史

合成分子タンパク質を駆使した生体分子イメージング

動的生命化学 太田航司郎 御手洗拓真

有害環境化学物質のシグナル伝達メカニズムの受容体科学

構造機能生化学 絹笠雅門 香西丈一郎 荒巻光汰 小野原永遠 中村圭太

アミノ酸・ペプチドの可能性を追求する

生体分子化学 藤田瞬 藤田涼平

酸化触媒で目指すゼロエミッション合成

有機反応化学 岡崎浩志 河野賢亮 松田泰佑 内田竜也

理論と計算と化学

理論化学 福嶋柊也 池田拓真

触媒で一攫千金! with まこっちゃん

触媒有機化学 迫水裕斗 真崎裕司

Catfinder-For the 100% yield

分子触媒化学 斉維昕 張英豪

統計力学でわかる溶液の世界

量子生物化学 竹田宙加 新垣怜央 岩下智哉

有機 π 電子系化合物の新奇物質開発、分子配列、機能化

構造有機化学 藤莉莉 青山大樹 居倉稜 浜重竜也 岩下祐也

ナノの世界へようこそ！

ナノ物性化学 打越真希 松井信明 宮脇遥大

放射性核種を利用した環境動態研究

環境動態化学 福留朱莉

ナノ触媒サイエンス ～設計、合成、評価から機能検討まで～

ナノ機能化学 潘雲逸 平川朱里 松鶴恭弘 梅野真比流

電磁気機能を合わせ持つ分子結晶の開発

光機能物質化学 池田泰輔

置換シクロヘキサンにおける配座異性体の優位性の起源について

分子触媒化学II 末永正彦

(3) 2023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 : 2023年10月13日(月)

会場 : 九州大学理学部大会議室 (W1-C-408)

講演タイトル : 「ACS on Campus」

講演者 : 玉田 薫 教授 (先導物質化学研究所)

佃 達哉 教授 (東京大学理学系研究科化学専攻)

(4) 2023年度修士課程論文公開講演会

開催日 : 2024年2月15日(木)・16日(金)

会場 : 講義棟301号室・ウエスト1号館B314号室

(5) 2023年度学士課程卒業研究業績報告会

開催日：2024年2月29日(木)・3月1日(金)

会場：理学部 大会議室

2. 2023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、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(5名)、修士1年生(7名)、修士2年生(7名)、博士課程1年生(2名)、博士課程2年生(3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。

(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、2023年度は配属学生なし。

研究目標

(酒井・小澤グループ)

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

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

- ・ 水からの水素発生触媒機能を有する金属多核錯体の合成と機能評価
- ・ 新規光水素発生デバイスの開発と機能評価
- ・ 水からの酸素発生触媒機能を有する金属錯体の開発
- ・ 二酸化炭素還元を駆動する分子システムの開発
- ・ 電気化学的手法による各種錯体の電極触媒能の評価

- ・ 水の太陽光水分解を駆動する光電気化学セルの作製と機能評価
- ・ DFT 計算による触媒反応機構の探求と分子設計への応用
(岡上グループ)

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

研究分野

錯体化学、光化学、触媒化学、結晶学、溶液化学、生物無機化学、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、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 13 年目となる本年度は、コロナ禍以降に構築した研究環境を活かして、オンライン等を活用しつつ、十分な感染予防対策を講じて対面での指導機会を増やし、一定水準の成果は得られた。

本年度は学部 4 年生 2 名、修士学生 14 名、博士学生 1 名の合計 16 名が在籍し、主体的に研究を遂行するための基盤構築を目指して、錯体化学、物性化学、光化学、構造化学、生物無機化学に関する基礎の習得に注力した。本研究室の研究分野は、錯体化学、物性化学、生物化学、環境化学、触媒化学、界面化学などの境界領域に位置する。このような境界領域で独創的な研究を展開するために、偏った視点から事象を論じず、常に広い視野を持ち、批判的思考のもとに論理的に物事を捉えることを第一に指導した。毎週開催する研究室セミナーでは、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、固溶体の合成など、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、誘電特性、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 16 件の口頭発表と 18 件のポスター発表を行った。これらの発表でのプレゼンテーションと成果が高く評価されて、博士課程 1 年の学生が「Phase controls of cyanido-based luminescent organic-inorganic hybrids」の口頭発表で日本化学会第 104 春季年会において CSJ Student Presentation Award 2024、「The physical property of new four-coordinate metal cyanide $\text{NiPd}(\text{CN})_4$ with active Ni(II) node」の口頭発表で錯体化学会第 73 回討論会において学生講演賞、「動的な Ni(II)中心を有する新規四配位金属シアニド $\text{NiPd}(\text{CN})_4$ の物性」の口頭発表で第 17 回分子科学討論会において分子科学会優秀講演賞、「動的な Ni(II)中心を有するシアノ架橋 2 次元配位高分子 $\text{NiPd}(\text{CN})_4$ の構造解析と物性」のポスター発表で第 60 回化学関連支部合同大会において学生奨励賞を受賞した。また、7 報の論文で研究成果を発表した。

本年度は博士号の授与はなかったが、4 件の博士論文の副査を務めた。

国際性の向上を目指して、インドから PD (学振) を 1 名、中国から研究生 2 名、インドからインターン生 2 名を受け入れた。いずれの学生もセミナーに参加して英語で質疑応答することで、学生の英語力向上に良い効果があった。

ホームページでの論文や研究成果を公開した。ホームページへのアクセス数は年間 10,000 件程度であった。

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

研究目標

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

で、空間内の分子の運動や配列変化、ゲスト分子の吸脱着、熱や光などの害場の変化、などに連動して構造および機能・物性が可逆的に変化するシステムの構築を目指している。また、金属錯体と酵素などの生体分子を複合化することで、新しい高機能な生体複合材料の開発も目指している。

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

研究分野

錯体化学、物性化学、光化学、生物無機化学

研究課題

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

参考 URL :

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

生体分析化学分野

松森 信明 教授、川井 隆之 准教授、木下 祥尚 助教、鳥飼 浩平 助教

教育活動

学部教育において、松森は専攻教育科目「分析化学 III」を担当した。3年前期の「分析化学 III」では、バイオ分析を志向した各種機器分析（各種クロマトグラフィー、電気泳動、質量分析、NMR、X線結晶構造解析、各種顕微鏡）について、独自の講義資料により基礎から最先端研究に至るまでの実践的な講義を展開した。また松森は1年生が受講する必修科目の化学序説 I および II も担当した。各研究室が最先端の研究をわかりやすく紹介することで、基幹教育科目の多い1年生が見失いがちな化学への興味を掻き立てる効果があった。川井は基幹教育科目「自然科学総合実験」、専攻教育科目「分析化学 I」「分析化学実験」「国際科学特論」の一部を担当した。1年後期に開講の「自然科学総合実験」では、炎色反応やアセチルサリチル酸の合成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年前期開講の分析化学 I では、酸塩基、錯形成、沈殿生成などの反応を利用した滴定分析法を中心に講義を行い、理解の定着を図るため演習を頻繁に実施した。2年後期に開講の「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、Excel を利用したデータ解析法の基礎について演習形式で授業を実施した。

「国際科学特論」では、科学に関する基礎単語および簡潔な英文の書き方である 3C Writing を演習形式で学び、その後ディスカッションや発表を英語で行ってもらうことで、科学英語の実践力の養成に努めた。木下は、化学序説一コマと、学生実験で「基本操作法」と分析化学実験の「分光光度法」を担当した。化学序説では日頃研究室で取り組んでいる生体膜研究について紹介した。基本操作法では再結晶法を指導し、また、分析化学実験では分光測定による安息香酸の解離定数の決定法はもとより、レポートの書き方までを指導した。鳥飼は、「基本操作法」にてガラス細工を、「有機化学実験」にて Wittig-Horner-Emmons reaction (and Arbuzov reaction)、Grignard reaction（主担当）、Synthesis and chemoluminescence of luminol、および Friedel-Crafts acylation（副担当）を受け持った。現代の有機合成化学における実験研究とのギャップをできる限り埋めるべく、鳥飼が主担当の実験では、反応中の TLC による分析などを可能な限り取り入れ、その見方も指導した。

また、大学院においては、松森は「分析化学特論 IIA」を、川井は「分析化学特論 IIB」を担当し、バイオ分析を志向した NMR や LC-MS などについての発展的な講義を行った。

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) 他分野融合を促進する研究環境（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、複数の研究分野を組み合わせた発想力を滋養する。

(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。特に専門の異なるスタッフを配置し、多分野融合、境界領域研究が名実ともに実現可能となった。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、タイ、ウズベキスタンからの留学生を受け入れ、学生のおよそ3分の1が外国人となった。研究室でのセミナーも一部英語で行っているため、本目標はほぼ到達されたが、日本人学生の英語力の向上が思ったほど見られない。今後は日本人学生の英語力の向上が課題となる。

研究目標

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

一方で、生体膜中には数千種類に及ぶ脂質が存在しているが、単に脂質二重膜やラフトを形成するだけであれば、これほど多様な脂質は必要ない。つまり「なぜ生物は多様な脂質分子を持つのか」、「多様な脂質はどのような機能を持っているのか？」という極めて根源的な問いが解明されずに残されているのである。上述の脂質ラフトの形成機構や脂質—タンパク質間の相互作用が明らかになれば、脂質の生理的機能を明確化することができ、上記の疑問に対する解答が得られると期待される。そこで本研究室では、脂質ラフトを含む生体膜における脂質分子間相互作用や脂質—タンパク質間相互作用、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各種タンパク質に応用した (*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 (*Anal. Biochem.* 2024)。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に成功した (受理)。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報告した (*iScience* 2023)。

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 (*BBA -Gen. Subj.* 2019)、引き続き全身麻酔も含めて麻酔作用機構解明を行っている。また渦鞭毛藻由来の天然物イェットキシニンが膜タンパク質である液胞型 APTase を阻害することに関して詳細な解析を行った。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行った。

(3) の課題に関しては、蛍光スフィンゴミエリンの開発によりラフト形成機構の解明に大きく前進したが (*J.Cell Biol.* 2017)、この標識法を各種脂質に適用し、脂質の挙動解析を行っている。例えばスフィンゴミエリンの二重結合が単結合になったジヒドロスフィンゴミエリンや、多価不飽和脂肪酸のドコサヘキサエン酸 (DHA) をアシル鎖に持つリン脂質に蛍光標識を適用し、細胞膜を含む脂質膜における挙動を精査した。

(4) の課題では、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している。生体膜の直接評価法として、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、固相抽出およびナノエレクトロスプレーイオン化を行って質量分析 (MS) によって解析することで、サブセラーで脂質プロファイルを取得することに成功した (論文投稿準備中)。また、超高感度キャピラリー電気泳動 (CE)-MS 分析法を用いた一細胞レベル薬物動態解析や、簡便な薬剤の細胞膜浸透性評価法の開発などを実現した (論文投稿準備中)。糖鎖の解析では、複雑な構造異性体を有する生体由来の糖

鎖試料を高感度かつ網羅的に解析するため、液体クロマトグラフィー (LC) と超高感度 CE 糖鎖分析技術を組み合わせた二次元分離法を開発し、複雑な糖鎖混合物からマイナーな微量糖鎖を分離して超高感度に検出することが可能となった (*Anal. Chim. Acta* 2024)。

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、コロナ禍で研究の進捗が遅れた影響で今年度の論文発表も低調であった。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 : <https://www.scc.kyushu-u.ac.jp/BioanalChem/>

分光分析化学分野

恩田 健 教授、宮田 潔志 准教授、小川 知弘 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、5月からの新型コロナウイルス 5類移行に伴い、ほぼ以前通りの研究、教育が行われるようになった。またそれ以前、延期されていた対面での交流が盛んに行われた年でもあった。主な年間行事、イベントとしては、5月にさきがけ「光エネルギーと物質変換」領域会議と森野基金の支援による学術講演会「森野レクチャー」を主催した。5月から6月にかけての3週間にセントアンドリュース大のブラジル人留学生が滞在し、共同研究を行った。また8月には博士課程3年に在籍していた宮崎菜さんが優秀な業績を認められ半年早く博士の学位取得をした。10月には新たに富山大学から小川知弘を助教として迎え入れた。11月には国際交流を目的とした科研費「国際先導研究」(代表 安達千波矢教授)に採択され、本年度を含め7年間、博士課程学生、博士研究員を中心に国際共同研究を推進することとなった。さらに2月から3月にかけて早稲田大学からインターン学生の受け入れた。3月から次年度5月にかけての2ヶ月間は、JSPS外国人招へい研究者をインドから迎え入れ、学生との交流を行った。

恩田担当の学部教育としては、後期に例年通り化学科2年生向けの分光分析、電気化学の講義「分析化学Ⅱ」を「クリスチャン分析化学Ⅰ,Ⅱ」をテキストにして行った。また隔年で行っている大学院生向けの講義「分析化学特論ⅢA, B」では、分光分析の理解に必要となる光と物質の相互作用および分子の光物理、光化学過程についての基礎理論についての解説を行った。また新たに冬学期に酒井教授とともに理学部国際コース学生向けの国際科学特論Ⅳを担当し、英語論文の書き方のワークショップ、英語による分光化学入門の講義を行った。さらに他大学での大学院生向け集中講義として、10月30日から3日間、分子化学特別講義Ⅱと題して、学内向け大学院講義とほぼ同様の内容の講義を行った。

宮田担当の学部教育としては、分析化学実験のスペクトル分析入門を実施した。大きく内容を変え、スペクトルの情報から物性を考えるための手ほどきとして、分光器の原

理、吸収スペクトル、発光スペクトル、赤外吸収スペクトルを順に一日づつかけて実験と解析を行った。

小川担当の学部教育としては、上記学生実験の補助を行った。

研究室に配属された学部4年生5名、修士課程学生8名、博士課程学生3名に対しては、一か月に一度程度の頻度で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、对外発表や論文執筆の指導も行った。学会も積極的に参加し、研究室全体で合計30件以上の発表経験を積ませることができた。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シンポジウムの企画や Chem-Station 主催のバーチャルシンポジウムに携わったり、Twitter を用いた情報発信も功を奏し、分子科学・光化学分野の広い意味での教育・啓蒙に役立てることができた。

研究目標とその到達度

身の回りにある化学物質は、まわりの熱や光によりその構造や状態が常に変化している。またその変化を能動的に制御することが、生命活動や人工的な化学物質の生産、分解の基本となっている。そのため時々刻々と変化する物質を実時間で捉え、その構造や状態を明らかにすることは、化学物質の理解だけでなく、その利用の観点からも重要である。しかし、その時間スケールが1兆分1秒から秒におよぶほど広いことから、これまでは、このような分析を汎用的に行うことは困難であった。そこで当研究室では、多くの実用的な機能性物質に利用可能な時間分解分光装置の開発を行い、物質開発の専門家と共同で、各種機能性物質の原子、分子レベルの動的過程を明らかにすることを目的に研究を行っている。本年度は特に以下のトピックについて研究を推進した。

1. 金属錯体、人工光合成

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

2. 有機発光体

- ・熱活性化遅延蛍光分子の励起状態ダイナミクスの溶媒依存性
- ・新規発光性ホウ素錯体の光物性解明
- ・有機固体薄膜中の発光ダイナミクス
- ・有機りん光材料チエニルジケトンの励起状態構造ダイナミクス
- ・超分子ペンタセン集合体を利用した一重項励起子分裂の核偏極への利用
- ・含ペンタセン金属有機構造体の励起状態ダイナミクス
- ・プラズモンを利用した三重項三重項光アップコンバージョン機能向上の解析
- ・ドナー・アクセプター連結分子における特異的な光反応の解析

3. 希土類錯体、希土類ナノ粒子

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

以上の研究成果を随時学術論文として発表し、当該年度で7件掲載に至った。

民間企業との共同研究

住友化学株式会社 「時間分解分光法を用いた化合物の構造解析」

出光興産株式会社 「有機 EL 材料における励起状態の構造変化の解明」

訪問、滞在研究者

5月 Prof. Mischa Bonn, Max Planck Institute for Polymer Research, Germany

5・6月 Michele Duarte Tonet, Organic Semiconductor Centre, University of St. Andrews, UK

2・3月 長谷部翔大, 早稲田大学大学院 先進理工学研究科 (インターン学生)

3月 Prof. Partha Hazra, Indian Institute of Science Education & Research, Pune, India

研究分野

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

研究課題

フェムト秒からミリ秒領域における各種時間分解分光装置の開発

上記分光装置を用いた有機発光ダイオード材料、人工光合成系、希土類化合物等における励起状態構造と各機能、効率との関係性の解明

参考 URL

<http://www.chem.kyushu-univ.jp/Spectrochem/>

無機反応化学研究室

宇都宮 聡 准教授

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

教育目標

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

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

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

研究目標

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

<本年度の研究活動実績>

- ・ 国内学会、シンポジウム等計 3 件発表。
- ・ 発表論文 4 報

研究分野

環境ナノ物質科学

研究課題

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

参考 URL:

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

[物理化学講座]

分散系物理化学分野

安中 雅彦 教授、榎 靖幸 准教授、八島 慎太郎 助教

教育目標

<教育に関する目標、目的、成果について>

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

<研究室セミナーについて>

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

<学生の学外活動>

国内の主要学会での発表にできるだけ参加するように勧めている。大学院生は全員発表することができた。修士課程および博士課程の学生が、九大外施設である KEK Photon Factory (日本), J-PARK (日本) 等で中性子・X線散乱測定, 広島大学放射光化学研究所で放射光真空紫外円二色性分光実験を行い, 学外との交流を深めている。さらに博士学生が, University of Copenhagen (デンマーク) との共同研究を実施した。

研究目標

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

研究分野

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

研究課題

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

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

量子化学分野

寺寄 亨 教授、堀尾琢哉 准教授、荒川 雅 助教、山口雅人 特任助教

教育目標

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

〈教育内容〉

1. 講義

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

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

1-2. 専攻教育科目「量子化学Ⅰ」（対象：学部2年、担当：堀尾）

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

1-3. 専攻教育科目「分子構造論」（対象：学部3年、担当：寺寄）

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

2. 学生実験

2-1. 「色素の吸収および発光スペクトル」（対象：学部3年、担当：堀尾）

発光ダイオードを光源とする簡易的な分光器を組み立て、市販の分光器の原理を学ぶとともに、ミラー、レンズ、スリット、回折格子などの光学素子の取り扱いを習得する

ことを目的とした。さらに、色素分子の吸収スペクトルおよび発光スペクトルを観測し、Lambert-Beer 則の分子論的な理解、ならびに溶液中の分子の発光機構について議論した。

2-2. 「エレクトロニクス」 (対象：学部3年、担当：荒川)

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

3. 研究指導

研究室では、学部4年(3名)、修士1年(5名)、修士2年(1名)、博士1年(1名)、博士3年(2名)が在籍した。コロナ禍の影響で昨年まで開催中止が続いていた理学部工場での金属加工実習が再開し、これまで未受講だった学生が受講し、金属加工の実技を体験して真空部品等の設計・製作の基礎を身につけた。学部学生は、金属クラスターの光解離分光・光電子イメージング分光と量子化学計算による構造・スペクトル・波動関数の解析に取り組み、卒業論文をまとめた。修士1年の学生は、特に異元素をドーピングした銀クラスターの光解離分光・光電子イメージング分光に取り組みとともに、高対称性を持つクラスターの系統的な探査を行った。修士2年の学生は、光電子イメージング分光の画像分解能の向上を目指した装置開発に取り組みで修士論文をまとめた。博士1年の学生は、修士課程から引き続いて真空中の液滴の凍結過程をテーマとし、水-ポリオール混合溶液の凍結時間測定の実験を進めるとともに、分子動力学シミュレーションによる凍結過程の解析を開始した。博士3年の学生は、イオンの軌道シミュレーションの研究を引き続き進めるとともに、真空中の液滴のダイナミクスに関して、超高速カメラを取り入れた液滴振動の観察や、Whispering Gallery Mode を利用した液滴径の精密測定に取り組み、「真空中のイオンビーム制御と液滴ダイナミクスの探究：計算機活用による実験支援」の題目で博士号を取得した。体調不良の影響で在学期間を一年延長した学生も博士論文の執筆に取り組み、「銀クラスター正イオンの光応答特性の実験および理論的研究：サイズ成長に伴う幾何構造の変化と集団電子励起の発現」の題目で博士号を取得した。

成果の発信では、ナノ学会(5月)、化学反応討論会(6月)、The 8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2023)、International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 21)、International Symposium for the 80th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan、分子科学討論会(いずれも9月)、The 17th DAE-BRNS Biennial Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry (TSRP-2024)、レーザー学会(いずれも1月)、日本化学会春季年会(3月)など、国内外の学会で成果発表を行った。なお、化学反応討論会にて修士1年の学生が Best Poster Prize を受賞したことは、教育の成果として特筆に値する。

これら研究活動による教育と並行して、研究室セミナーでは、研究の進捗状況報告、関連する文献調査とその紹介など、課題の設定と解決、成果発信に向けた訓練を行った。また、『これからはじめる量子化学』（オーム社）をテキストとして、物理・数学の基本を通して量子化学の基礎固めを行った。さらに英語力について、週刊英和新聞 *Asahi Weekly* を活用し、科学関連記事を中心に、特にリスニングに関して実践的なトレーニングを行った。

研究目標

現行のナノ材料よりもさらに小さな物質を扱う次世代のナノ物質科学の開拓を念頭に、原子の数（サイズ）が正確に制御された原子・分子クラスターを対象として、これら極微小な物質に特有の基礎物性を、物理化学の研究手段で探究する。クラスターの特質は、原子1個の増減で物性や反応性が不規則かつ劇的に変化し（サイズ効果）、常識を超えた新物質の発見が期待されることであり、元素戦略の手段としても注目される。我々は、原子数をパラメータとして千変万化するこれらクラスターを新たな物質群と捉え、物質科学の本質を掘り起こす新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的には、質量分析技術で原子1個の精度でサイズを制御するクラスター発生法、反応生成物の時々刻々の変化を捉える化学反応追跡法、ナノ秒・フェムト秒のレーザー光源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〉

金属／金属化合物／合金種のクラスターに着目し、構成原子数が正確に定まったサイズ選別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の期待が高い。触媒を代表とする化学反応では、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、宇宙空間で化学過程においてクラスターが反応の鍵を握っているとの仮説があり、科学の広い分野への波及が注目されている。具体的には、気相分子との反応が進む様子を捉える化学反応追跡法、レーザー光で電子が占有する軌道のエネルギーや形状を調べる可視-紫外吸収分光・光電子イメージング分光など最先端の実験手段で、構成原子の数と組成で変化するこれらクラスターの特異な物性・反応性の解明に取り組んだ。さらに、これら気相クラスターの液相への展開を狙いとして、真空中に生成した溶媒液滴の物性研究に取り組んだ。

これらの研究への支援として、科学研究費助成事業で前年度までに採択された基盤研究(A)「金属クラスター超原子の量子論構築に向けた電子過程・光学過程の探究」(代表者・寺寄)、基盤研究(B)「超原子軌道イメージング」(代表者・堀尾)、基盤研究(B)「鉍物クラスターを触媒とした惑星系形成環境での C1 化学」(代表者・荒川)、挑戦的研究(萌芽)「微小液滴内還元反応による超原子金属クラスターの合成とその光電子イメージング」(代表者・堀尾)を継続し、新たに挑戦的研究(開拓)「気相-液相融合によるナノ物質科学の新開拓: クラスターマテリアルの創製」(代表者・寺寄)を開始した。また、複数の民間助成金(代表者・堀尾)を獲得し、これらの資金に基づいて研究を推進した。

〈研究成果〉

課題(1): 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

独自に開発を進めてきた光電子イメージング分光装置で、サイズ選別された種々のクラスター負イオン種を測定対象として研究を推進している。まず対象とした銀クラスター負イオン Ag_n^- は、クラスター骨格が形成する 3次元井戸型ポテンシャルの中に、原子と同数の 5s 電子(負イオンの場合には余剰電子を含む $n+1$ 個)が自由電子として閉じ込められ、これら自由電子は超原子軌道 1S, 1P, 1D, 2S, ... を占有すると理解される。昨年度までに 20 量体 ($n=20$) までの測定を行って、電子配置 $1S^2 1P^6 1D^{10} 2S^1$ が予想される価電子 19 個の Ag_{18}^- について、最外殻から脱離した光電子の放出角度分布が p 波の特徴を示したことから、超原子 2S 軌道の形成を裏付けた。さらに測定対象を広げて行ったスカンジウム添加種 Ag_nSc^- についても、s 電子と 3d 電子を合わせた価電子数が 19 個の $\text{Ag}_{15}\text{Sc}^-$ が、 Ag_{18}^- と同様の光電子角度分布を示すことを発見し、Sc 添加種でも超原子 2S 軌道を見出した。本年度、これらの成果をまとめて原著論文“Probing superatomic orbitals of Sc-doped and undoped silver cluster anions via photoelectron angular anisotropy”を発表した [J. Phys. Chem. Lett. 14, 4011 (2023)]。

一方、価電子 18 個のクラスターは $1S^2 1P^6 1D^{10}$ の電子閉殻構造をとると期待され、さらに原子数が 13 個であれば、正二十面体型など、幾何学的な安定性も期待される。この点に着目し、第 5 族元素を添加種としたクラスター $\text{M}@\text{Ag}_{12}^-$ ($\text{M} = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}$) の光電子イメージング実験を行い、これらいずれもが縮重した 1D 軌道と大きな電子束縛エネルギーを示すことから、1D 軌道が充満した正二十面体型であることを突き止めた。この成果を学会発表した修士 1 年の学生が、第 38 回化学反応討論会にて「Best Poster Prize」を受賞した。さらに、原著論文を J. Phys. Chem. Lett. 誌に投稿した。

同数の価電子をもつクラスターが同様の超原子軌道を占有することを見出したこれらの成果に基づいて、添加種を遷移金属に限定せず、3 族 Sc の代わりに同数の価電子を持つ典型金属 13 族 Al を添加するなど、多様なクラスター種へ研究を展開した。修士 1 年の学生が、 Ag_nM^- ($\text{M} = \text{Al}, \text{Sc}$) の成果を、ナノ学会および分子科学討論会にてポスター

発表した。また、純粋な Al クラスタ負イオン Al_n^- の実験も開始し、予備的な結果で学部4年生が卒業論文をまとめた。

さらに、超原子軌道を定量的に解析する目的で、Angular Momentum Projection 数値積分法の開発を新たに開始し、1D 軌道や 2S 軌道への各軌道角運動量成分の寄与を定量化する理論手法の構築に取り組んだ。学部4年生の一人が、この開発に協力して卒業研究を行った。

一方で、実験装置の改良の一環として、撮像部を従来の CMOS カメラからイベント駆動型イメージセンサーに更新し、光電子画像の分解能向上など、イメージング実験のさらなる高度化に向けた装置開発を行った。光電子画像の高速取得や、重心演算を用いた画像分解能の向上を修士2年の学生が担当し、修士論文をまとめた。また、学会発表を分子科学討論会ならびにレーザー学会にて行った。

課題(2)：レーザー吸収分光による金属クラスタの電子構造研究

サイズの増加とともに電子の集団励起が期待される銀クラスタの光吸収分光について、これまでに正イオン種 Ag_n^+ の測定を 92 量体 ($n=92$) まで進めてきた。この成果について、博士課程3年・河野 聖が、クラスタの光応答理論の専門家である安池智一教授（放送大学）からも指導を受けながら実験結果の解析を進め、博士論文「銀クラスタ正イオンの光応答特性の実験および理論的研究：サイズ成長に伴う幾何構造の変化と集団電子励起の発現」を執筆して学位を取得した。

一方、前年度までに実験を進めてきた負イオン種 Ag_n^- ($n=3\sim 19$) について、可視～紫外領域の光解離・脱離スペクトルの解析を進め、連続状態とともに垂直脱離エネルギー以上のエネルギー領域に現れる束縛励起状態を含めた電子遷移の帰属のほか、球形や楕円体など、サイズによって変化するクラスタの形状とスペクトルの形状との間の相関に関して成果をまとめ、原著論文“Photodestruction action spectroscopy of silver cluster anions, Ag_n^- ($N=3-19$), with a linear ion trap: Observation of bound excited states above the photodetachment threshold”を発表した[J. Phys. Chem. A **127**, 6063 (2023)]。

さらに、遷移金属添加種 Ag_nM^+ ($M=Sc, Co, Ni$) に光解離実験を展開し、量子化学計算による構造最適化・スペクトル計算と合わせて、電子構造・幾何構造の解析を進めた。これらの成果を、修士1年の学生を中心にナノ学会、化学反応討論会、分子科学討論会で発表した。また、銅クラスタ Cu_n^+ ($n=8\sim 13$) の実験・解析も開始し、学部4年生が卒業論文をまとめた。

課題(3)：金属／金属化合物クラスタの反応性と電子構造

触媒材料等の反応性の鍵を握る遷移金属元素の d 電子や f 電子に着目し、化学反応性を指標とした電子構造研究に取り組んできている。これまで、s 電子が支配的な Ag クラ

スターに対して、開殻 3d 遷移金属 ($M=Sc\sim Ni$) をドーブした正イオン種 Ag_nM^+ および負イオン種 Ag_nM^- 、またランタノイドをドーブした Ag_nCe^+ 、 Ag_nSm^+ に注目して、s-d 電子間および s-f 電子間の相互作用による反応性変化の探究を網羅的に進め、論文発表までを行ってきた。一方で、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 化学に着目した研究にも取り組んだ。一例として、火星大気でメタン濃度の急激な減少が観測されたことに注目し、その起源を解明する目的で、 $Fe_nO_m^+$ クラスターとメタン分子 (CH_4 および重水素置換体 CD_4) との反応実験を進めた。その結果、クラスターへのメタン分子吸着と脱水素が観測され、その反応速度で火星表層でのメタン減少の速さを説明できることを見出した。この成果を原著論文“Reaction of size-selected iron-oxide cluster cations with methane: A model study of rapid methane loss in the Mars' atmosphere”としてまとめ、Phys. Chem. Chem. Phys. 誌に投稿した。

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解析

元来希薄なクラスターの高密度化を目的としたイオントラップについて、イオン光学系の解析ソフトウェア SIMION を高度に活用した特性評価に取り組んだ。具体的には、イオントラップ内に捕捉されたイオンの密度と空間分布を数値解析し、実験結果を定量的に再現したほか、イオン間の反発やイオン-バッファガス間の衝突とともに、室温から極低温 (10 K) へのバッファガスの冷却効果までのシミュレーションを行い、これらの成果を原著論文“Ion trajectory simulation of linear multipole ion traps for analysis of spatial ion distribution”として発表した [Mol. Phys. **122**, e2259013 (2024)]。また、この研究に取り組んだ博士課程3年・飯田岳史が、液滴のダイナミクス研究と合わせて博士論文「真空中のイオンビーム制御と液滴ダイナミクスの探究：計算機活用による実験支援」を執筆し、学位を取得した。

課題(5) : X線吸収分光による金属クラスターの磁性研究

ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究で、サイズ選別された孤立クラスターの X線磁気円二色性 (XMCD) 分光で磁性研究を進めてきてきた。本年度は、Co 原子をドーブした Ag クラスター Ag_nCo^+ ($n=2-15$) について、 $n=9$ までは Co 原子がクラスター表面に存在して磁気モーメントを持つが、 $n\geq 10$ では Co 原子が内包されて磁気モーメントも消失する現象を見出した成果を、Stern-Gerlach 実験で中性種 Ag_nCo の磁性を測定した他グループとの共著の形でまとめ、原著論文“Magnetic nanodoping: Atomic control of spin states in cobalt doped silver clusters”を発表した [Phys. Rev. Research **5**, 033103 (2023)]。

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。特に水液滴は、真空中で急激な蒸発冷却を受け、短時間のうちに凍結する。この蒸発冷却過程での蒸発速度を測定する手段として、液滴外周に共鳴するラマン散乱光の **Whispering-gallery mode (WGM)** を利用して液滴径の精密測定を行った。この方法で初期直径 $40\ \mu\text{m}$ の水液滴を測定し、**Knudsen** の蒸発速度理論と合致する蒸発速度を得た。また、凍結に至る過冷却深部では、時間を追って撮像したレーザー光の散乱画像に対して、深層学習で自動化された画像判定を適用して樹状結晶の形成時刻を特定し、凍結核生成速度を算出した。これらの測定値は、これまで報告のない温度領域 $232\text{--}235\ \text{K}$ の均質凍結核生成速度を与える成果となった。一方、超高速カメラを利用して発生直後の液滴の形状変化を観察し、四重極振動を捉えた。この振動の周期から表面張力を、振幅の減衰時間から粘性をそれぞれ評価し、大気中に比べ真空中で、つまり室温よりも過冷却領域で、表面張力と粘度がともに増加する結果を得た。これらの成果は、ナノ学会、日本化学会年会での発表とともに、博士課程3年・飯田岳史が上述の課題(4)の成果と合わせて博士論文にまとめ、学位を取得した。

一方で、水液滴に微量のポリオールを混合すると凍結までの所要時間が延びる現象を、前年までに見出してきた。この現象を数値シミュレーションで再現する際、凍結核生成速度の温度依存性のデータが必要となる。特に過冷却状態深部の温度領域ではそのデータが無く、分子動力学計算による解析を進めた。これら理論面での研究を、化学部門・秋山良准教授との共同研究で進めている。この成果を、修士2年の学生が日本化学会年会にて発表した。

研究分野

物理化学、クラスター・ナノ物質科学、レーザー・X線・光電子分光

研究課題

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

参考 URL：

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

寺寄 亨：https://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/html/100018238_ja.html

堀尾琢哉：https://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/html/100018253_ja.html

荒川 雅：https://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/html/100018375_ja.html

なお、特任助教・山口雅人は、2023年7月1日付にて東京大学大学院総合文化研究科・助教として転出した。また、助教・荒川 雅は、本年度末（2024年3月31日）をもって異動し、本理学研究院地球惑星科学部門・准教授に着任することとなった。

光物理化学分野

加納 英明 教授、平松 光太郎 准教授、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・オランダの共同研究グループとの研究交流により、国際的な視野で研究を俯瞰できる力を養うと同時に、国際学会・国際共同研究への参加も早い段階から推奨している。

<実績>

・講義

(加納)

「光生物物理化学」

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

「環境問題と自然科学」

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

「物理化学実験」

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

「物理化学特論 I」

光と分子との相互作用の基礎を、半古典論に基づき密度行列を用いて説明した。分布の緩和と分極の緩和がそれぞれ縦緩和、横緩和で記述できることを示し、ローレンツモデルの場合はスペクトルの線幅が横緩和に対応していることを説明した。これに加えて、飽和、第二・第三高調波発生、非線形ラマン散乱など、光と分子との非線形な相互作用について概観した。

(桶谷)

「物理化学実験」

物理化学実験全体の取りまとめ、および「偏光を用いた基礎実験」を担当した。取りまとめでは、学生のグループ分けについて、グループ変更の機会を新たに設けた。初回説明時に、どうしても変更できない予定がある場合のみグループ変更を可能とし、学生ができる限り全ての実験に参加できるよう配慮した。

「偏光を用いた基礎実験」

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

・研究指導

2023年度は、博士課程2年次生1名、修士課程2年次生4名、1年次生3名に加え、新たに学部4年次生4名が配属された。6月に開催された日台国際シンポジウムにて、

修士課程2年次生3名、1年次生3名がポスター発表を行った。このうち一名がポスター賞を受賞した（理学部広報掲載）。また、9月に開催された分子科学討論会では、修士課程2年次生、1年次生がポスター発表を行った。10月に開催された分光学会年次講演会では、修士課程2年次生がポスター発表を行い、ポスター賞を受賞した（理学部広報掲載）。10月に開催された医用分光学会では、修士課程2年次生、1年次生、学部4年生がポスター発表を行った。3月に開催された応用物理学会年次講演会では、博士課程2年次生が口頭発表を行った。修士課程2年次生は2月に修士論文発表会を、学部4年次生は3月に業績報告会を行った。

研究目標

<概要>

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

電子増倍型 CCD カメラ (EM-CCD) を導入することで、後方散乱配置のマルチカラー-CARS イメージングシステムを開発した。ポリスチレンビーズを用いてシステムの性能を評価したところ、EM ゲインの活用により、信号対雑音比が従来の CCD モードと比較して約3倍向上した。本装置を用いて、後方散乱配置で上皮生細胞の CARS 分光イメージングを行った。100 ミリ秒ピクセルの露光時間で、脂肪滴や核などの細胞内小器官を分光学的に捉え、かつ細胞全体を可視化できた。一連の研究は査読付き雑誌に投稿・受理された (Backward multiplex coherent anti-Stokes Raman (CARS) spectroscopic imaging with electron-multiplying CCD (EM-CCD) camera, Yusuke Murakami, Minami Yoshimura, W. J. Niels Klement, Atsuki Oda, Ryo Sakamoto, Miho Yakabe, Atsushi Matsumoto, Ryosuke Oketani, Philippe Leproux, Junichi Ikenouchi, Wesley R. Browne, and Hideaki Kano, *Optics Continuum* 2, 2044-2054 (2023).)。本研究はオランダ・グローニンゲン大学、フランス・リモージュ大学との三国間国際共同研究の成果であることに加え、生物学部門代謝生理学研究室との部門間共同研究の成果である。

昨年度に続き、オランダ・グローニンゲン大所属の博士課程学生を実習生として短期間受け入れた。CARS 信号の高感度検出を目指した実験等を指導した。また、フランス・リモージュ大学および Institute of research for ceramics (IRCER) から研究者 2 名が来訪し、研究交流を行った他、部門内でセミナーも行った。

研究分野

光物理化学、分子分光学、物理化学、構造化学、光化学、非線形光学、分子イメージング

研究課題

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

- ・非線形ラマン散乱を用いた新規ラベルフリー分子イメージング法の開発
- ・非線形光学効果を用いた生体内分子アーキテクチャの顕在化
- ・睡眠に伴う脳内活動現象のラベルフリー・サブセルラーイメージング
- ・藻類が蓄積する新規代謝物の非線形ラマン・スクリーニング
- ・第二高調波をプローブとした毛髪ケラチンの二次構造解析
- ・芽胞菌 (*Bacillus megaterium*) のラベルフリー非線形ラマンイメージング
- ・化粧水浸透過程のラベルフリーラマン分光イメージング
- ・保湿成分可視化に向けたヒト皮膚の顕微ラマンイメージング
- ・CARS 光の飽和を用いた無標識超解像分子イメージング法の開発
- ・CARS 光の増倍率の定量評価
- ・不凍タンパク質の二次構造解析
- ・ベイズ推定を用いた CARS スペクトル解析
- ・初代培養細胞のラベルフリー分子イメージング
- ・ラマン分光イメージングによる鳥類始原生殖細胞の発生過程の追跡
- ・非線形ラマン分光イメージングを用いた薬剤処理による毛髪ダメージの解析
- ・心アミロイドーシスの早期発見に向けたラベルフリー心臓組織イメージング

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

構造化学分野

大橋 和彦 准教授

教育目標

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

■ 指導方針

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

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

■ 学生の学外活動

学生は例年、分子科学討論会、溶液化学シンポジウム、化学関連支部合同九州大会、九重分子科学セミナーなどの学会、研究集会において研究成果を発表している。しかし、新型コロナウイルス感染拡大による研究活動の停滞があったため、本年度は学生による学会発表がなかった。

研究目標

分子や分子集合体の物理化学的性質と反応性は、幾何構造、電子構造、分子間相互作用に支配されている。構造化学研究室では、分子クラスターの幾何・電子構造、分子間相互作用と励起状態ダイナミクスとの関係について、分光測定実験および量子化学計

算を駆使して明らかにすることを研究目標にしている。この目標を達成するために、現在以下の項目を研究課題として設定している。

■ 溶液中の芳香族分子の励起状態における動的過程に関する研究

種々の溶媒中におけるアニリン、アミノベンズニトリル等のベンゼン誘導体分子の吸収スペクトル、蛍光スペクトル、蛍光寿命を測定している。また、分子動力学計算により構築した溶存化学種のモデルに対する時間依存密度汎関数理論計算を行っている。本年度は、アニリンの吸収スペクトルに対する微視的溶媒効果が、アニリンのメチル置換によりどのように変化するか調査した。溶媒の極性を増大させた際の分光特性の変化をみると、メチル基による立体効果(立体障害)のみならず、置換基導入による電子的効果も重要であることが明らかとなった。

■ 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、分子動力学計算を用いた研究を行っている。本年度は、過塩素酸 Na(I), Mg(II), Al(III)/FA の系に対して分子動力学計算を行った。1価イオンの場合は、O 原子で金属イオンに配位する FA のみが見られるが、多価イオンの場合は、一部の FA が O, N 両原子で 2 座配位し、その配位構造が 10 ns にわたって保持されることが分かった。2 座配位した FA が赤外およびラマンスペクトルに与える影響について検討している。

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・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 : <https://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

谷元洋 准教授

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）を行っている。

研究目標

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。

2023年度は、以下の二つのことを明らかにした。

① ミリオシンは、複合スフィンゴ脂質生合成の最初のステップを担うセリンパルミトイル転移酵素の阻害剤である。2023年度は、Lipid-translocating exporter (LTE) family

として知られる出芽酵母の *Rsb1*, *Rta1*, *Pug1*, *Ylr046c* がミリオシンに対する抵抗性獲得に寄与することを示した。各 LTE の遺伝子を欠損させた単独欠損株、多重欠損株を用いた解析から、全ての LTE がミリオシンの細胞毒性の抑制に寄与していることが示唆された。また、各 LTE の過剰発現をさせた株ではミリオシン抵抗性が付与されることもわかった。さらに、*RSB1* 過剰発現によってミリオシン処理による複合スフィンゴ脂質減少効果が抑制されていることも確認された。ミリオシンの細胞外存在量を LC-MS で解析した結果、*Rsb1* がミリオシンを細胞外に排出していることが示唆された。ミリオシンの細胞毒性を軽減させるタンパク質として、ミリオシンの *N*-アセチル化を行う *Sli1* が報告されている。LTE 欠損、過剰発現のミリオシン感受性に対する効果は、*SLI1* 欠損下でも観察された。以上の結果より、全ての LTE family が、おそらく細胞内に取り込まれたミリオシンを細胞外に排出することで、その毒性の緩和に寄与していることが示された。

② 出芽酵母には 15 種類の複合スフィンゴ脂質サブタイプが存在する。これまでに我々は、この構造多様性を規定する代謝酵素遺伝子 (*CSG1*, *CSH1*, *IPT1*, *SUR2*, *SCS7*) を様々な組み合わせで欠損させた「複合スフィンゴ脂質構造多様性破綻ライブラリー」を構築し、その表現型を解析した。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感受性が高くなる」ことを発見した (*Mol Biol Cell*, 33, ar105 (2022))。本年度は、複合スフィンゴ脂質の種類を IPC-A の 1 種類のみ限定した変異株 (*csg1Δ csh1Δ sur2Δ scs7Δ (ccssΔ)* 株) が、最も高いストレス高感受性を示すことに着目し、*ccssΔ* 株の酢酸および SDS 高感受性を抑制できるサプレッサー変異の探索を行った。その結果、形質膜リン脂質フリッパーゼ遺伝子 *DNF2*, または細胞内物質輸送に関与する *TRS85* の変異で酢酸抵抗性が付与できること、*TRS85* の変異は SDS 抵抗性も付与できること、を見出した。*ccssΔ* 株に形質膜リン脂質フリッパーゼ (*Dnf1/2*) の調節サブユニットである *LEM3* を欠損させると、酢酸, NaCl, 高温に対する抵抗性が付与された。また、複合スフィンゴ脂質の構造バリエーションが限定されていくこととリンクする形で、形質膜フリッパーゼ活性が低下することもわかった。このことから、*ccssΔ* 株は形質膜フリッパーゼ活性を積極的に低下させることで、複数のストレスに対する耐性能低下を回復させている可能性が示唆された。一方で、細胞内物質輸送に関与する *TRS85* を欠損させると、酢酸, NaCl 耐性付与に加えて、*ccssΔ* 株の SDS 高感受性も抑制した。また、*ccssΔ* 株で観察されていた膜透過性上昇が *TRS85* 欠損によって抑制されることもわかった。これらのことより、*ccssΔ* 株で生じている形質膜インテグリティの損傷を *TRS85* 欠損が回復させることで、最終的に SDS 耐性が付与されることが示唆された。一方で、*LEM3* 欠損は、*ccssΔ* 株の SDS 高感受性を抑制せず、形質膜インテグリティにも影響を与えなかった。これらのことから、*LEM3* と *TRS85* 欠損は、別個のメカニズムで *ccssΔ* 株にストレス耐性を付与することが示唆された。

研究分野

生化学、細胞生物学、分子生物学、酵母遺伝学

研究課題

生体膜脂質の機能と代謝制御機構

生物有機化学分野

大石 徹 教授、保野陽子 助教

教育目標

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

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

到達度

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

研究目標

複雑な構造を有する生物活性物質の化学合成および作用メカニズムを分子レベルで解明することに重点を置き研究を行う。すなわち天然から微量しか得られない天然物や、作用機構解明のための分子プローブを化学合成し、生物有機化学的手法と最先端の機器分析を用いることで分子レベルでの活性発現機構解明に取り組む。2023年度は以下のテーマに重点を置く。

研究課題

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

研究分野

天然物化学、有機合成化学、ケミカルバイオロジー

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

動的生命化学分野

堀 雄一郎 教授、足立 惇弥 助教

教育目標とその到達度

動的生命化学研究室の教育方針は、化学と生命科学の多岐にわたる分野の知識と技術を学生に習得させ、ケミカルバイオロジーの研究を遂行することができる研究者へと育成することである。化学のアイディアと技術により、従来の生命科学の技術では明らかにならなかった生命現象を解明し、医学や創薬に有用な知見を与えることで、社会貢献することを目指した学生教育を実践する。

上記の目標を達成するために本年度に行った活動としては、週一回程度、学部の講義ではカバーしきれない分子・細胞生物学に関する勉強会を開催するとともに、蛍光の原理・応用に関する勉強会を実施した。これらの勉強会では、教科書や専門書（洋書）を読解させ、その内容を発表させるアクティブラーニングの形式をとり、発表後に学生同士で議論させるようにした。この結果、学部の講義とは異なり、より能動的に探求させ、知識を定着させるトレーニングを行った。

ケミカルバイオロジーや蛍光イメージングの専門性を高め深めることを目的として、最先端の関連分野の研究論文を読み発表する **Journal club** や、学生自身の研究テーマの進捗を報告・議論する研究報告会も週一回程度のペースで開催するとともに、学会参加・発表により、関連分野の研究に触れる機会を与え、研究者としての視野を広げられるようにした。また、共同研究者とのミーティングにも積極的に参加させることで、人的ネットワークの構築を支えた。

主体的・能動的な研究活動を実践できるように、大きな研究の方向性は示しつつも、あまりに詳細な指示を出すことを避け、自身で考え実験方針や研究を組み立てられる能力を育成することを教育方針とした。一方で、学生の状況や必要に応じて柔軟に対応し、学生に実験内容を指導し、研究の方向性を誘導した。研究室のセミナーにおいては、学生間での議論を促し、**Discussion** 能力を向上させる取り組みを行った。この際に、教員が先に発言することを避けることで、学生の積極性を向上させた。また、国際教育の観点から、外国人留学生を受け入れ、交流させることで英語力の向上を図り、国際性豊かな学生の育成に努めた。

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

研究目標とその到達度

(1) タンパク質ラベル化技術の開発

本研究室では、**PYP** タグと名付けた独自のタグタンパク質とそれに特異的に結合する合成蛍光プローブを利用したタンパク質ラベル化法を開発してきた。この技術では、標的タンパク質に融合した **PYP** タグを細胞で発現させ、合成蛍光プローブによりタグを介してその融合タンパク質をラベル化することで、細胞が生きたままの状態でも標的タンパク質の動態を可視化できる。その技術的利点は、蛍光タンパク質に比べ光退色に強い色素が利用できること、他のタグタンパク質に比べサイズが小さく目的タンパク質への影響を最小化できること、細胞内局在に応じてラベル化反応を引き起こすプローブを利

用することでタンパク質動態を精密に明らかできることである。

これまでに PYP タグをラベル化する様々な合成蛍光プローブを開発し、細胞内・細胞表層のタンパク質をイメージングすることに成功してきた。一方、プローブにカルボキシ基やスルホ基といったアニオン性官能基を導入した場合は、膜透過性が低いこと、電荷を持たないプローブの場合は、水溶性が低いこと、プローブがカチオン性の場合は、ミトコンドリアに蓄積し非特異的なシグナルを生み出しやすいことが問題であった。そこで、この問題を解決するために、バイオイソスターと呼ばれる分子に着目し、膜透過性・水溶性がありながらミトコンドリアに蓄積せずに、タンパク質をラベル化できる合成蛍光プローブの開発を行った。

まず、膜透過性を維持し、ミトコンドリアに蓄積しないプローブを設計するうえで、疎水性度が比較的高くアニオン性であるテトラゾールに着目した。この分子は、カルボン酸のバイオイソスターと呼ばれ、医薬品化学の分野で、カルボン酸と類似した性質がありながら生物学的活性を向上させる目的で用いられる。この疎水性・アニオン性分子をカチオン性蛍光色素にリンカーを介して導入し、さらに、PYP タグリガンドを連結したプローブを設計・合成した。プローブを細胞に添加し PYP タグ融合タンパク質の細胞内局在を顕微鏡観察したところ、細胞膜を透過しミトコンドリアに集積することなくタンパク質を特異的にラベル化し可視化する技術を開発することに成功した。さらに、この技術を応用することで、細胞内で多重局在するグルコース輸送体 GLUT4 と呼ばれるタンパク質の細胞内における異なる局在を異なる蛍光色で識別できることを示した。

(2) GLUT4 の膜動態の制御機構解明と操作

GLUT4 は、通常は、細胞内貯蔵小胞やゴルジなどのオルガネラ膜に存在するが、インスリンが存在すると、細胞膜にトランスロケートし、血中グルコースを細胞内に取り込む。この結果、血糖値を低下させる役割を担っている。これまでの研究で、インスリン存在下で、糖鎖が GLUT4 を細胞膜に引き留める役割を担っていることを明らかにしてきた。また、糖鎖が GLUT4 の細胞内動態も制御することを示してきた。

本年度は、GLUT4 の糖鎖と細胞膜表層で相互作用し、その動態を制御するタンパク質を同定するために近位依存性標識技術の開発に取り組んだ。この技術において、必要とするものは、GLUT4 を特異的に標識しビオチン化するプローブ、そのビオチンを目印として結合するストレプトアビジン-酵素連結体、およびその周辺に存在するタンパク質を酵素活性によりビオチン化する基質である。我々は、細胞膜上で選択的に機能するこれらのプローブと基質を開発し、細胞膜上で標的タンパク質の周辺タンパク質を標識することに成功した。この技術の開発により、今後 GLUT4 の糖鎖による動態制御機構の解明に繋がっていくと期待される。

また、糖鎖による膜動態制御機能を利用することで、GLUT4 の膜動態を操作する研究を行った。GLUT4 の糖鎖欠損体は、インスリン刺激時に細胞膜に一過性にトランスロケートするが、すぐに細胞内に内在化する。そこで、糖鎖欠損 GLUT4 に合成糖鎖を人為的に導入すると、GLUT4 の細胞膜への局在を維持させることができることが分かった。GLUT4 の細胞膜局在の持続は、血糖値を低下させることに必須であるため、本研究結果は、糖尿病の治療において有用な知見を提供するといえる。

(3) OFF-ON-OFF 型蛍光プローブによりタンパク質分解を可視化するタグタンパク質の開発

タンパク質の分解は、細胞周期やシグナル伝達の制御に重要な役割を果たすことが知られている。また、近年では、疾患の原因となるタンパク質の分解を誘導する分子が医薬品として注目を集めている。このため、タンパク質の分解を可視化する分子は、生命現象の制御機構の解明に加え、医薬品開発の評価ツールとしても、極めて有用である。そこで、我々は、タンパク質をラベル化すると蛍光を発生し、タンパク質が分解されるとその蛍光が減弱する OFF-ON-OFF 型蛍光プローブの開発を行い、タンパク質の分解を可視化してきた。

一方、この技術の克服すべき課題は、タンパク質分解時における蛍光強度が十分に低下しきらないことであった。その原因として、タンパク質分解後のペプチドフラグメントが大きく、タグタンパク質の酵素による分解が不十分であることが考えられた。本年度は、タグタンパク質に変異を導入することで、この問題を解決することを試みた。その結果、分解後の蛍光強度がより低下する変異体を見出した。

(4) 新規な刺激に応答する蛍光プローブの開発

蛍光プローブに特定の刺激に応答する機構を組み込むことで生細胞内の特定の物質や状態を特異的に可視化することが可能であるが、未だに可視化が難しく挑戦的課題として残っている刺激も存在する。そこで、タンパク質と合成小分子の双方からアプローチすることで、新規な刺激に応答する蛍光プローブの開発を目指した。本年度の結果として、新たな変異を導入したタンパク質を1種類得ることに成功し、刺激応答部位を組み込んだ蛍光プローブのプロトタイプを合成した。各々の基本的な物性はある程度狙い通りの性質を示したが、その組み合わせが思わしくなく、生細胞系への適用は難しいことが判明した。一方、タンパク質と蛍光プローブの双方の観点で重要な知見が溜まっており、設計に修正を施した蛍光プローブの開発を進めている。

研究分野

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

研究課題

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

参考 URL

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

構造機能生化学研究室

松島 綾美 准教授

教育目標

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

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

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

(講究・演習)

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

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

（学生の研究活動）

修士学生、4年生を含めて、常に真理を探究すべくさまざまな視点から、時宜に即して学術的に意義の高い研究課題について、果敢に挑戦している。従って、萌芽的、挑戦的な課題が多い。学生の研究発表は、第60回化学関連支部合同九州大会（福岡市）で2件、令和5年度日本生化学会九州支部例会（福岡市）で1件、環境化学物質3学会合同大会（第31回環境化学討論会、第25回環境ホルモン学会研究発表会、第27回日本環境毒性学会研究発表会）（徳島市）で1件、第35回DV-X α 研究会（福岡市）で1件、第60回ペプチド討論会（仙台市）で2件であった。

研究目標

構造機能生化学研究室では、レセプター（受容体）について、生体情報伝達の分子機構解析・解明を目標に、独自の研究手法で、独自の研究視点から精力的に取り組んできた。特に、分子情報伝達システムの中核をなす受容体の分子起動メカニズムの解明を研究課題の中心に据え、脳神経情報伝達系の神経ペプチドやタンパク質の受容体、血管系のプロテアーゼ活性化受容体（PAR1）、細胞核内での遺伝情報発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）伊藤琴音、白根共太、（1年）小野原永遠、荒巻光汰、中村圭太

学部4年生：香西丈一郎、絹笠雅門

研究室構成員の2023年度進路

修士：佐藤製薬株式会社、株式会社出雲村田製作所

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 <https://www.scc.kyushu-u.ac.jp/biochem/>

[複合領域化学講座]

理論化学分野

中野晴之教授，渡邊宙志准教授，渡邊祥弘助教，鈴木聡助教

教育目標

本年度は，修士課程 2 年生 3 名，1 年生 3 名，学部 4 年生 2 名，留学生 1 名が在籍した。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，理論化学分野の理論・計算手法を学ぶため，理論・計算手法の原著論文の輪読を，学部学生は，分子軌道法の基礎を身につけるため「新しい量子化学」(ザボ，オストランド著)の輪読を行うとともに，研究発表，文献紹介を行った。

また，大学院学生は，理論化学討論会などの国内学会において，おのこの研究発表を行った。継続して，名古屋大学，新潟大学，大阪大学，京都大学，京都工芸繊維大学，東京工業大学のグループとの共同研究も進めている。

研究目標

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

本年度は，相対論的分子軌道理論における QED ハミルトニアン of 理論的検討，相対論的 2 成分法のための一般化 Foldy-Wouthuysen 変換，相対論的分子軌道理論における 2 成分変換内包型短縮 (TIC) スキームの開発，Dirac-Hartree-Fock 波動関数に基づく参照相互作用点モデル SCF 法の化学反応への応用，変分量子固有値ソルバーの逐次最適化のための最適パラメータ構成，一般化固有値問題に対する変分量子アルゴリズムとその有限要素法への応用，自由軸単一量子ビットゲートによるパラメータ化量子回路の最適化，メタノール溶液中の pK_a 予測のための LFC/3D-RISM-SCF スキームの適用性の評価，異なるサイズのククルビトウリルへのリガンド結合における水の役割の理論的解析，水溶液中のククルビトウリルによるアミノ酸とその誘導体の

選択的分子認識，等の論文を出版するとともに，相対論的 2 成分法における 2 成分変換内包型短縮スキームの構築および数値的評価，Baird 芳香族性の外部磁場応答性に基づく理論的考察，スピン軌道相互作用の高次摂動展開による項間交差速度の解析，第一遷移金属水和錯体の準安定構造のランダム探索等に関する研究，溶液系の分子動力学法の開発，等を行った。以下に主なものを記す。

(1) 相対論的 2 成分法における 2 成分変換内包型短縮スキームの構築および数値的評価

重元素や超重元素を含む分子系の性質を正確に予測するためには，相対論的量子化学に基づく計算手法が必要である。このような計算手法のなかでも，相対論的 2 成分法は精度と計算負荷のバランスに優れた手法である。その一方で，大規模な分子系では分子全体の 2 成分ハミルトニアンを構成，すなわち 2 成分変換の計算コストを無視できなくなる。このような分子系の計算コスト低減には基底関数の短縮が有効である。しかし，分子 2 成分変換は primitive (非短縮の) 基底で計算する必要があるため，基底の短縮によって分子 2 成分変換の計算コスト低減を図ることは困難である。これらの課題を解決するために，「2 成分変換を内包した短縮係数」(two-component inclusive contraction, TIC) スキームの構築および数値的評価を行った。評価は，TIC の検証のために新たに導出した 2 次および 3 次のユニタリ化 Douglas-Kroll 法と無限次の 2 成分法を用いた。数値検証の結果，TIC は原子・分子ともに原始基底セットの結果を十分に再現できることが示唆された。

(2) Baird 芳香族性の外部磁場応答性に基づく理論的考察

励起状態にある平面環状分子の芳香族性を Baird はエネルギー的特性から評価し， $4n$ π 電子系が芳香族になるという，基底状態に対する Hückel 則との逆転を提唱した。一方，芳香族性は磁気的特性からも評価可能で，環電流の代替値である NICS (nucleus-independent chemical shift) が有効な指標として知られている。代表的な NICS 指標には環中心で測定する NICS(0) や NICS(0)_{zz} および分子平面の 1 Å 上方で同様に測定される NICS(1) や NICS(1)_{zz} がある。これらは基底状態に広く用いられているが，励起状態に対しては検証例が少なく NICS 評価は慎重に行う必要がある。本研究では，NICS 指標の励起三重項状態への適用性の評価および複合環化合物に対する新たな NICS 指標 NICS(m)_{zz} の提案を行った。

NICS 評価は三次元的に計算することで Baird のエネルギー指標と一致したが，従来の単一の NICS 指標はその他の NICS 指標や総合的に期待される芳

香族性分類と異なる解釈を与え得る結果となった。環電流効果を正確に再現したNICS評価および芳香族性の分類を行うには、NICS(m)_{zz}のように少なくとも2箇所測定した値を採用することが望ましいことが示された。

(3) スピン軌道相互作用の高次摂動展開による項間交差速度の解析

熱活性化遅延蛍光TADFは、三重項励起状態から逆項間交差 (rISC) を経て生成する一重項励起状態から得られる蛍光である。重元素を用いずに、高効率な有機発光ダイオードを実現する物質として注目を集めている。状態間遷移の速度が発光効率という機能性に直結することから、rISC速度の理論的な理解、並びに、それに基づく分子設計が求められる。一次の摂動展開である Fermiのgolden ruleによる表式によると、スピン軌道相互作用 (SOC) を大きくし、かつ、一重項励起状態と三重項励起状態間のエネルギー差を小さくすることで高速なrISCが実現されると考えられる。一重項励起状態と三重項励起状態間のエネルギー差を小さくする分子設計によって、実際に高い発光効率を示すTADF分子が知られている一方、そのような分子設計ではEl-Sayed則からSOCは小さくなるという問題点が知られている。本研究では、Fermiのgolden ruleを超える枠組みとして、高次の摂動展開に基づいてrISC速度を導出した。導出した式を基に、既知の分子のrISC速度について解析を行った。多くのドナーを導入して三重項励起状態の状態密度を増やすこと、平面性の高い分子を用いて大きな非断熱カップリングを得ることが高速なrISCを実現する分子設計指針として得られた。

(4) 第一遷移金属水和錯体の準安定構造のランダム探索

遷移金属イオンは土壌や生体系に遍在しており、溶液化学、生化学、環境化学など幅広い分野で注目されているため、数多くの実験的、計算化学的研究が行われてきた。しかしながら、配位水分子の数や水和錯体の幾何学的形状について十分に解明されているとは言えない。第一遷移金属の2,3価カチオンは水溶液中において六つの水分子からなる正八面体型またはヤーンテラー効果によって歪んだ八面体型の錯体が生じるとされている。しかし、例えばCu²⁺は先行研究の理論的検証から最安定構造である六配位だけではなく四、五配位錯体も競合して存在していることが示唆されており、他の遷移金属についても安定して存在している水和錯体の配位数は自明ではない。また、エネルギーが最小になるように水分子が配位した最安定構造だけではなく、複数の準安定構造も多数存在すると考えられる。本研究では、第一遷移金属水和錯体について異なる配位数を持つ準安定構造群の様相を理論的に調査することを目的とした。その結果、最安定構造のスペ

クトルでは吸光係数がごく小さく、そのスケールにおいて実験値を全く再現しない一方、準安定構造から計算したスペクトルでは吸光係数が実験値と近いスケールまで算出されることが明らかとなった。

(5) 溶液系の分子動力学法の開発

溶媒の量子化学効果を取り込むためには、量子力学モデル(QM)を利用する必要がある。しかし QM モデルは計算コストが大きく溶液系全体に適用することは困難である。これに対処するために溶媒の分子モデルが溶質との距離に応じて、シミュレーションの最中に溶媒が QM モデルと古典的な MM モデルとの間で滑らかに切り替わることを目的とした adaptive QM/MM 法が提唱されてきた。しかし adaptive QM/MM 法は、人為的な境界から生じるアーティファクトが問題となる。そこで、本研究は adaptive QM/MM 法の中で利用される重み関数の定義を工夫することで、アーティファクトを小さくすることが可能かを検証/実証を行った。

研究分野

理論化学，量子化学，電子状態理論，液体論，分子動力学法，量子コンピューティング

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，溶液系の分子動力学法の開発，最適化量子アルゴリズムの開発

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, 吉澤明菜助教

教育活動

触媒有機化学研究室は、2023年度は教員4名で教育、研究活動を行った。理学研究院の国際化業務を担当する吉澤助教が4月に当研究室に配属された。また、村山准教授が10月に神奈川工科大学に教授として栄転した。また、博士課程5名、修士2年生6名、修士1年生5名、学部4年生2名で研究室を運営した。また、修士課程には、日本大学、九州工業大学、からの進学者が2名在籍した。また中国からの留学生3名（博士課程3名）が在籍した。2021年度から、コロナ禍の影響で、文献紹介のゼミを毎週木曜日の夜にオンラインで行っている。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。2023年度は、12件の学会発表を行った。

研究活動

当研究室では、有機分子触媒、均一系錯体触媒、固体触媒の研究を行っており、有機合成や触媒反応だけでなく、食品化学やトライボロジーの分野まで研究対象を拡げている。有機分子触媒の研究では、不斉四級アンモニウム塩を用いるエステルの不斉加水分解や加アルコール分解の研究に続き、不斉チオウレア触媒による不斉加アミン分解の研究を行った。ここでは、得られた生成物を再結晶すると、溶液部分からは高い鏡像体過剰率の生成物が得られ、固体部分からは低い鏡像体過剰率の生成物が得られる優先富化現象が確認された。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、極圧添加剤として有用な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、ポリスルファンの新規合成法の開発を進展させ、チオール類の合成に応用した。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エン誘導体の分解や酸化なども行った。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。

2023年5月16日

Titanium oxide catalyzed photo-oxidation of dibenzothiophene for desulfurization of liquid fuel
Supported Au Nanoparticles-Catalyzed Isomerization of Allylic Esters with a Flow Reactor

Kazuto Satou, Qi-An Huang, Haruno Murayama, Eiji Yamamoto, Yousuke Suzuki, Makoto Tokunaga*

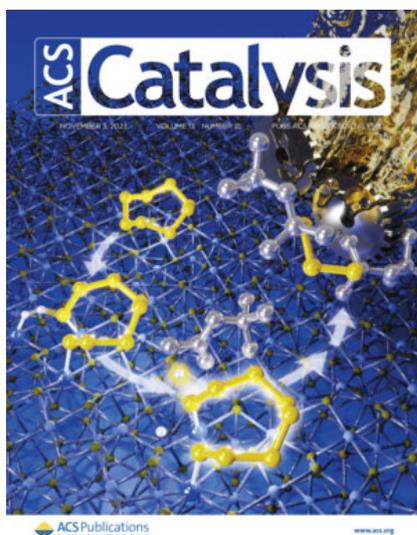
19th Korea-Japan Symposium on Catalysis, May 16, Seoul, Korea, YP76 ポスター賞

Heterogeneous Cobalt-catalyzed H₂S-reagent-free dialkylpolysulfane synthesis from alkenes, elemental sulfur, and hydrogen

Yamamoto, E.; Takaki, Y.; Kawai, Y.; Takakura, K.; Kimura, M.; Murayama, H.; Nagao, T.; Kamachi, T.; Matsueda, H.; Otsuki, S.; Sakata, H.; Tokunaga, M.

ACS Catal. 2023, 13, 14121–14130. DOI: <https://doi.org/10.1021/acscatal.3c03545>

がカバーフィーチャーされた



研究分野

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

研究課題

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

参考URL :

<http://www.chem.kyushu-univ.jp/shokubaiyuki/>

分子触媒化学分野

桑野良一 教授、末永正彦 講師

教育目標

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

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

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

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

学生の学外活動では、第38回 有機合成化学セミナーでポスター発表した。また、同セミナーでは運営スタッフとして活躍した。

以上により、教育に関する目標は概ね達成されたと考えている。

研究目標

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

(1) 近年の有機合成化学の発展は著しく、抗癌剤として期待されるタキソールや、熱帯地域の海産物による食中毒の原因物質の1つであるシガトキシンのような複雑な構造を持つ高分子量の生理活性化合物の合成も可能になってきた。一方、遷移金属錯体を触媒とする有機反応は、近年の精密有機合成や有機工業化学の分野では欠かせない手法となりつつあり、これまでの手法では不可能であった分子骨格の構築や複雑な化合物の短工程での合成を可能にしている。しかし、このような有機合成の飛躍的な進歩にもかかわらず、官能基選択性や立体選択性など未だに解決されていない問題は多く、例えば複雑な構造を持つ生理活性化合物の合成では数 100 kg の原料を用いて数 mg の目的化合物を得ているのが現状である。以上のような観点に基づいて、当研究室では遷移金属錯体を用いた新しい有機合成反応の開発を行っている。また、その反応を実際の有機合成の利用に耐えうるレベルにまで洗練することも行っている。最近では、今まで有機合成化学でほとんど注目されてこなかった(η^3 -ベンジル)パラジウム錯体に着目し、パラジウム触媒によるベンジルエステル類のベンジル位求核置換反応の開発に世界に先駆けて成功し、有機合成化学における反応制御の新しい様式を開拓している。本年度は、脱離基をカルボン酸エステルを反応性の低いフッ素原子にしても同様の反応が進行することを見出し、その効率化を検討した。

(2) 医薬・農薬などの多くの有用な生理活性化合物はキラルな構造を持ち、2種類の鏡像異性体が存在する。そして、望みの生理活性を示すのは片方の鏡像異性体のみであり、場合によっては他方の異性体は人体や生態系に悪影響を及ぼすことがある。また、近年では強誘電液晶などの機能性材料としても光学活性化合物の需要は高い。従って、光学活性化合物の効率の良い供給法の開発は、現在の有機合成化学における重要な課題の1つである。本研究室では、光学活性な遷移金属錯体を触媒とする光学活性化合物の高エナンチオ選択的合成における新しい反応制御法の開発を行っている。近年の大きな成果では、(a) 今まで不可能と考えられてきた複素芳香族化合物の高エナンチオ選択的な触媒的不斉還元の世界で初めて成功した。(b) プロキラルな 1,3-ジカルボニル化合物のカルボアニオンのエナンチオ選択的アルキル化による高エナンチオ選択的な4級不斉炭素骨格の構築、などがある。本年度は水素化による軸不斉ピアリアル化合物の速度論的光学分割やアザインドールのピリジン環部位選択的なエナンチオ選択的水素化について検討した。

研究分野

有機合成化学、有機金属化学、計算化学

研究課題

遷移金属錯体を触媒とする新規有機合成反応の開発。光学活性遷移金属錯体を触媒とする触媒的不斉合成法の開発。糖認識タンパク質における認識部位と認

識糖の予測を目指した、フラグメント MO 法による糖とアミノ酸残基の相互作用の研究。

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

量子生物化学分野

秋山良 准教授

常勤スタッフとしては秋山のみの研究室であるが、2018年度まで所属していた末松安由美氏（九州産業大学理工学部基礎サポートセンターに特任講師）が共同研究員として加わっており、月曜ゼミに加えて、不定期に議論を行っている。秋山は、2023年度にはMini-Symposium on Liquidsの開催、放送大学の客員准教授、Physica A (Elsevier)のEditorial Boardメンバーとして学会や出版関係の活動をおこなった。その一方で、この年は資金面で大きな困難（主に校費）を抱えて、招待があっても海外での活動にほとんど応えられない状況であった。韓国でのセミナーや国際会議での招待講演は先方からの旅費の提供で実施できたが、タイでの国際会議はリモートで行わざるを得ず、更にアメリカでの招待講演は断らざるを得なかった。ただし、逆に今年度は海外からの訪問者が多かった。学部学生2名と大学院修士学生3名と大学院博士学生3名と学術振興会特別研究員（PD）1名からなる研究室体制で研究を進めた。そのおかげで、研究・研究活動を維持できた。2023年の出版物点数は1点(原著論文1点)でやや低調であった。学部学生1名は教職に、学部学生1名、修士2年生を1名企業に送り出し、昨年が続いて博士課程の学生が1名学位を取得し、取得後半年で九州大学の別のセクションの助教として赴任した。また修士2年生1名が本研究室の博士課程に進学する予定である。

教育目標とその到達度

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

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

勉強会では、具体的には数学や物理の考え方と基本技術の学習を目的に

- (1) 高橋康著 量子力学を学ぶ為の解析力学入門

をほぼ全て学習し、さらに統計力学を学ぶために

(2) David Chandler著 統計力学概説

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

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

(1) UNIX上でのコンピュータの基本操作、

(2) 研究室のWebページの作成

から開始し、

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

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

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

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

(1) 英語の教科書等の読書会

を行った。可能な限り毎朝実施した。読みやすい英文をたくさん読む事を重要視し、D. W. Oxtoby: Principles of Modern Chemistryなどを、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。

なお、今年度は秋山が手術のため3回入院していたため、適宜簡略化するなどの対処を行い、期間内に完了できる様に調整を行なった。

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、物理化学の中でも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] 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と巨大平板が作る構造物の研究 (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、小泉、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 (新垣、千葉 (慶応大)、秋山)
- [5] 高分子の配座への溶媒効果の研究 (小柳、秋山)
- [6] 水溶液中のタンパク質の拡散係数の計算 (岩下、秋山)
- [7] 積分方程式の高精度化の検証と分子認識 (松尾、秋山)
- [8] 2次元2成分剛体円盤の相転移の研究 (須田、秋山)
- [9] 自己駆動粒子の相分離とキラリティの研究
(新垣、平岩 (シンガポール大)、秋山、角五 (北大) ら)
- [10] 粉体の相分離挙動の研究 (越智、秋山)

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

電解質溶液内でマクロアニオンは実効相互作用を研究してきた。その実効相互作用の研究を元に、平板間の実効相互作用を構成しその平板が作る特異な自己集合体のシミュレーション研究を開始した。平板間の実効相互作用が概ね固まり、シミュレーションが動き始めた。

- [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、小泉、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)。タンパク質分子間の実効相互作用が、パッチモデルを考える場合には重要なので、負に帯電した酸素間の実効相互作用に関する計算結果の分析を進めている。

[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 (新垣、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。実験結果は、大きな分子が優先的に吸蔵されることを示しており、混合溶液の分離が可能なほどのものであった。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。溶媒分子同士の斥力を考慮したものについてはまだ出版していないので、グランドカノニカルモンテカルドの計算と並行して論文文化を急いでいる。

[5] 高分子の配座への溶媒効果の研究 (小柳、秋山)

高分子の配座は分子内ポテンシャルばかりでなく、溶媒の粒子性にも関係しているはずである。その高分子の広がりについてシミュレーションを用いて検討を続けた。

[6] 水溶液中のタンパク質の拡散係数の計算 (岩下、秋山)

上記の分子動力学シミュレーションにおける拡散係数の計算値はシミュレーションボックスのサイズ依存性の問題をタンパク質のケースで調べた。溶媒和層の問題だけでなく、粘性変化の問題もあり、もともとYehらの行ったケースよりも難しい問題が含まれていることがわかった。それらの問題は概ね説明がまとまりつつある。新しくより高度な補完式が適切に機能していることをシミュレーションを用いて確かめて、論文投稿を開始した。(2022年に出版される。) 現在、さらにその拡散係数の変化を各官能機に分解する研究が進んでいる。その際、摩擦係数に注目することでその分解が可能であることがわかり、論文の作成を開始した。

[7] 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。2023年度に論文を投稿でき、2024年度の始めに掲載が決定された。

[8] 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、論文を発表した。さらにシミュレーションの論文を準備中である。

[9] 自己駆動粒子の相分離とキラリティの研究

(新垣、平岩 (シンガポール大)、秋山、角五 (北大) ら)

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

[10] 粉体の相分離挙動の研究 (越智、秋山)

粉体も液体と同じ様に相分離をする。サイズの違いが駆動する系を想定して、相分離挙動について調べ始めた。

出版物の出版状況は活動状況を知る上で指標の1つとなるので、資料として記載する。教科書の執筆と3度の手術による入院があったので、やや低調になったことは仕方がないかと考えている。ここでは2023年の出版物のみを記載する。

論文：

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

Two-dimensional ordering of bacteriorhodopsins in a lipid bilayer and effects caused by repulsive core between lipid molecules on lateral depletion interaction: A study based on a thermodynamic perturbation theory, *Physica A*, 630, 129260 (2023).

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16回目を、2023年6月10-11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

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/>