

先導物質化学研究所 吉澤研究室 “反応・物性理論分野”

スタッフ：

吉澤 一成 教授

○塩田 淑仁 准教授

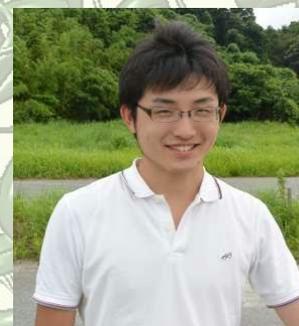
蒲池 高志 助教

田中 宏昌 特任助教

P. K. Sajith 研究員



M1 糸山



B4 松尾

比多岡 清司 研究員

Jun Li 客員教授

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

卒業後の進路

企業その他

エーザイ、電気化学工業、新日鉄エンジニアリング、三菱瓦斯化学、京セラ、三菱自動車、豊田自動織機、富士通、NTT西日本、カネカ、チッソ、半導体エネルギー研究所、ソニーセミコンダクタ、旭化成マイクロシステムズ、野村証券、みずほ銀行、特許事務所、宮崎県、ベンチャー起業。

研究者への道

九大教員3名、東工大、京工大、ドイツ留学、米国留学、シンガポール留学。

吉澤研究室構成員の心得17箇条

- 1 毎日朝早く登校し、規則正しい生活を心がけること
- 2 もの真似でないオリジナリティーのある研究を行うこと
- 3 自分の研究に埋もれることなく、広い視野を持つこと
- 4 基礎化学の知識習得に努め、勉強会には積極的に参加すること
- 5 研究は集中的に行い、深夜まで研究室に居残るのは避けること
- 6 外国人客員教授や博士研究員と交流し、英語の習得に努めること
- 7 提出物は余裕をもって準備し、提出前に教員の助言を受けること
- 8 病気・けがなどでやむを得ず休むときは連絡すること
- 9 旅行や出張などの際は前もってその予定を知らせること
- 10 日頃から挨拶を心がけ、廻りの者と良い人間関係を築くこと
- 11 退室時には声をかけ、最終退出者は全ての部屋の戸締りを確認のこと
- 12 研究室の備品は丁寧に扱い、許可なく外部に持ち出さないこと
- 13 授業・集中講義を計画的に受講し、単位不足に注意すること
- 14 整理・整頓に気を配り、廻りの者に迷惑を掛けないこと。
- 15 電話を受けたときには相手の名前、日時、用件のメモを残すこと
- 16 電子メールは1日1回確認し、必要に応じて返信すること
- 17 健康管理に気をつけ、偏食、過度の飲酒、運動不足に注意すること

理論研究を支える最新の計算機



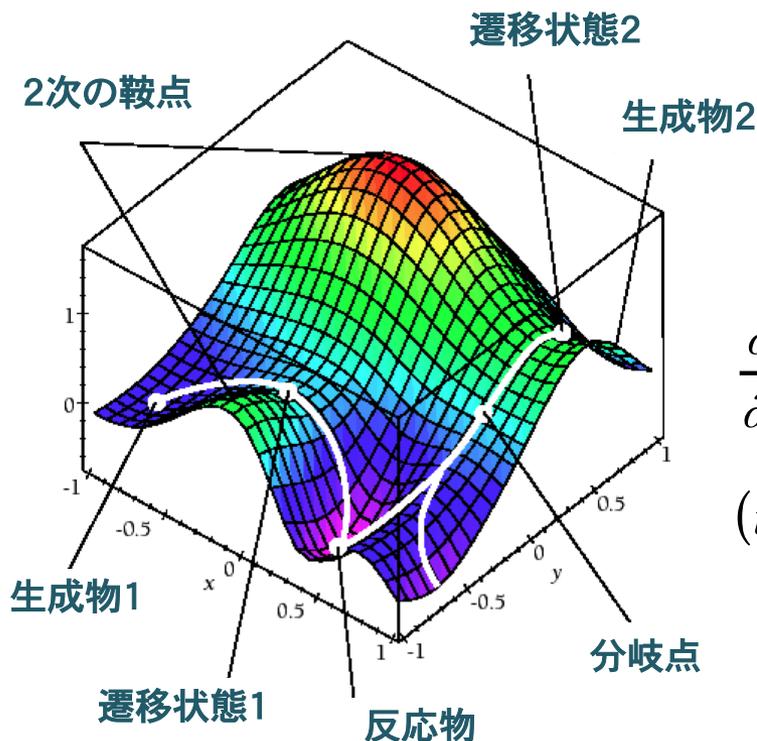
シュレーディンガー方程式から見えるもの

化学反応経路(反応物、遷移状態、生成物)の数学的定義

- ◎ 不安定中間体や遷移状態の観測
- ◎ 活性化エネルギーや反応速度定数の算出
- ◎ 速度論的同位体効果(例 k_H/k_D)の見積り
- ◎ 軌道概念による定性的理解と反応予測



シュレーディンガー
“ $H\Psi = E\Psi$ ”



$$\frac{\partial V}{\partial r_i} = 0$$

($i = 1, 2, 3, \dots$)



遷移状態: ポテンシャルエネルギー面上の鞍点

量子論による化学の最先端研究

The Nobel Prize in Chemistry, 1981

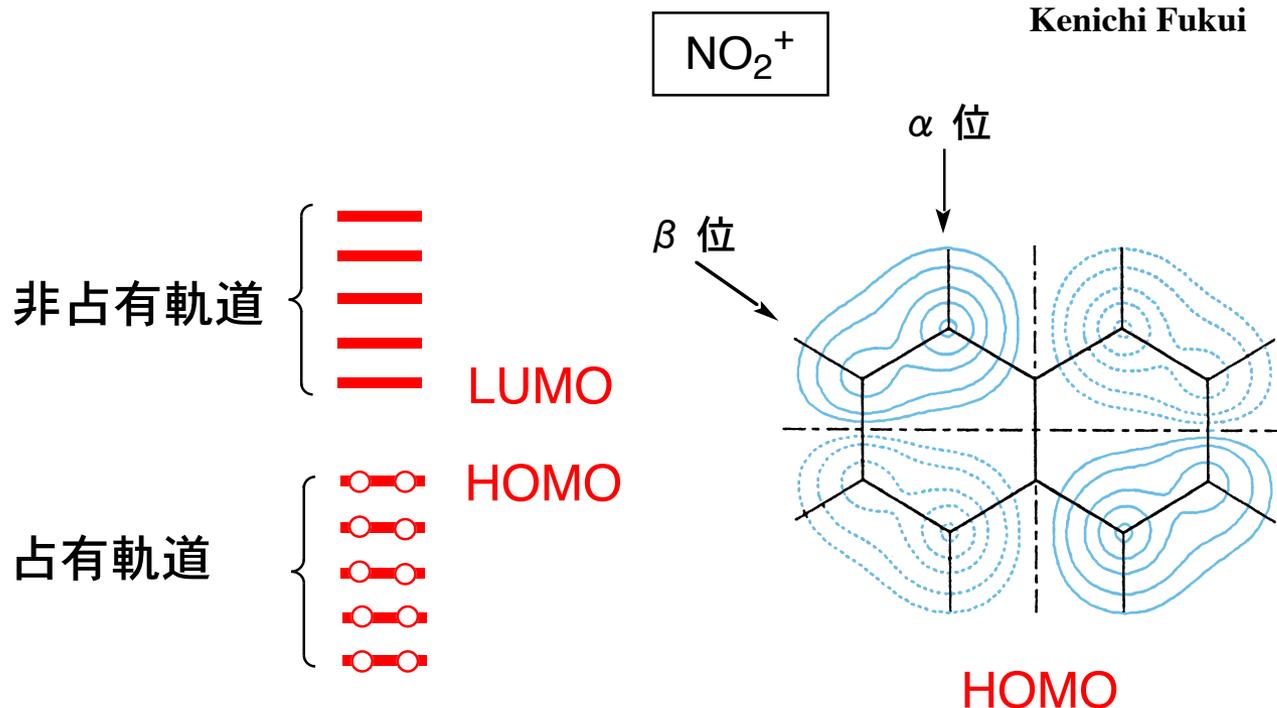
"for their theories, developed independently, concerning the course of chemical reactions"



Kenichi Fukui



Roald Hoffmann



ナノテクノロジーと酵素触媒反応

反応グループ



- ◎ 化学反応の経路(遷移状態)
- ◎ 金属酵素の構造活性相関
- ◎ 触媒反応の解析と反応設計
- ◎ 有機ケイ素化合物の構造と反応

物性グループ



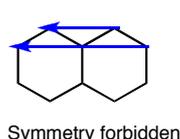
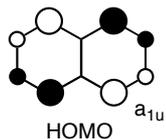
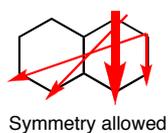
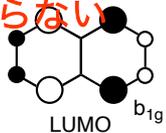
- ◎ 分子ナノワイヤーの電子輸送過程
- ◎ 単一分子による整流制御
- ◎ 固体表面と分子との相互作用
- ◎ DNA分子の電子物性と応用

分子軌道理論に基づく 単一分子の電気伝導度の予測

非平衡グリーン関数(NEGF)
法による軌道選択則

$$\frac{C_{r\text{HOMO}}C_{s\text{HOMO}}^*}{E_F - \epsilon_{\text{HOMO}} \pm i\eta} + \frac{C_{r\text{LUMO}}C_{s\text{LUMO}}^*}{E_F - \epsilon_{\text{LUMO}} \pm i\eta}$$

両端のアンカー上の分子軌道
係数の積の符号がHOMOと
LUMOで異ならなければ
ならない



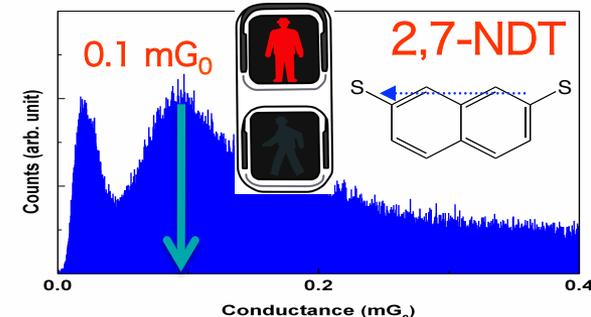
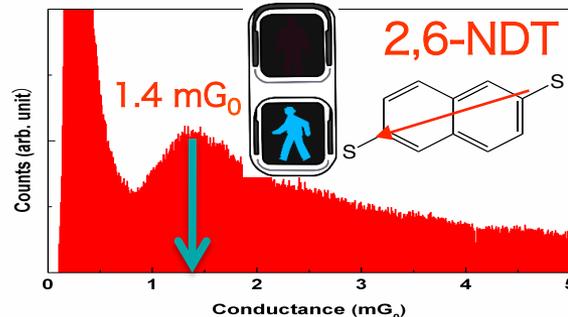
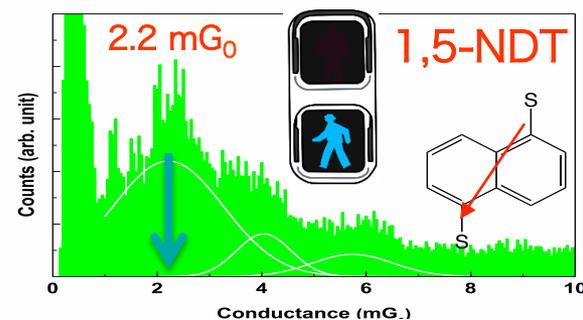
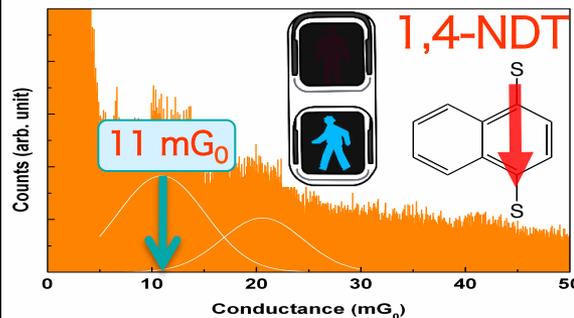
JPC C, 111, 852 (2007); *JPC C*, 111, 11699 (2007); *JACS*, 130, 9406 (2008); *JPC C*, 112, 17408 (2008); *JPC C*, 113, 21477 (2009); *JPC C*, 114, 9997 (2010); *ACS Nano*, 5, 1165 (2011); *JACS*, 133, 5955 (2011); *JACS*, 133, 11426 (2011); *ACR*, 45, 1612 (2012).



理論予測をもとに共同
研究先へ実験を依頼

分子伝導の選択則の実験的検証!! (理論予測と完全に一致)

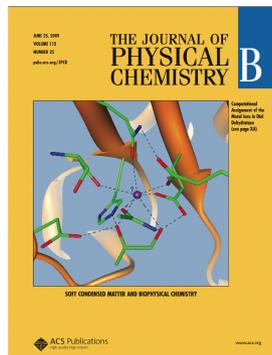
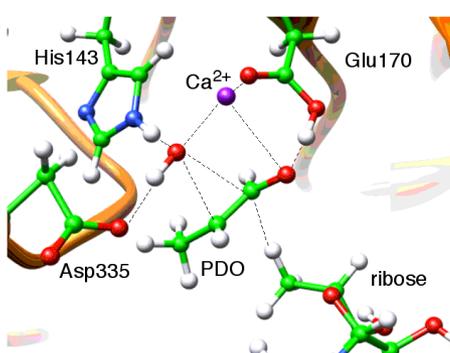
電気伝導度 1,4-NDT \gg 1,5-NDT \approx 2,6-NDT \gg 2,7-NDT



J. Am. Chem. Soc., 133, 11426 (2011); *Acc. Chem. Res.*, 45, 1612 (2012).

B12依存酵素の触媒機構に関する理論的研究

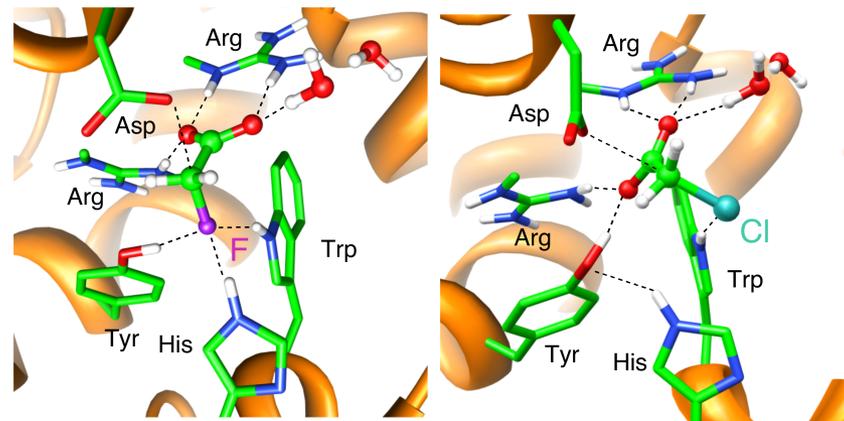
共同研究 岡山大(虎谷研)
ルイビル大(Kozlowski研)



ACIE. 46, 980 (2007); *JPC B* 114, 5928 (2010); *Chem. Eur. J.* 13, 7864 (2007); *JPC B* 113, 8435 (2009). (表紙)

フルオロ酢酸デハロゲナーゼによるC-F結合開裂に関する理論的研究

共同研究 京大化研(栗原、江崎)



Inorg. Chem. 50, 2944 (2011).

その他の共同研究成果(2007-2011)

九工大(近藤研)
韓国 ナム教授

JCTC 4, 366 (2008).
ACIE. 46, 2291 (2007); *JPC A* 112, 13102 (2008).

倉敷芸科大(仲研)

Organometallics 27, 2750 (2008);
Organometallics 28, 5641 (2009);
Z. Naturforsch. B 64, 1580 (2009).
Inorg. Chem. 48, 3875 (2009).

東工大(川口研)
九大先導研(永島研)
九大先導研(佐藤研)

Organometallics 28, 1988 (2009).
JACS 131, 4560 (2009); *Cryst. Eng. Comm.* 12, 4031 (2010).

酵素の理論研究により受賞(日本化学会学術賞2011)

学術賞(複合領域分野)

吉澤一成氏 九州大学教授(先導物質化学研究所) 博士(工学)

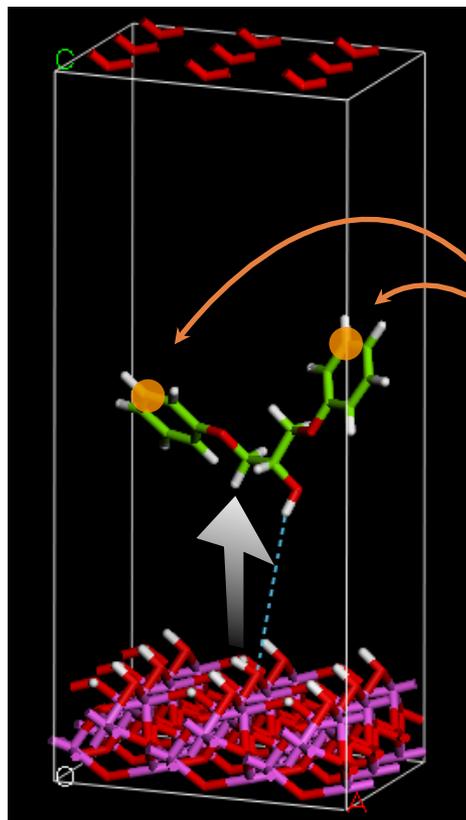
大規模量子化学計算による金属酵素の構造と反応に関する研究

Studies on the Structures and Reactions of Metalloenzymes by Large-Scale Quantum Chemical Calculations



金属酵素は生命活動を支える必須の役割を果たしている。その活性中心には1個から数個の遷移金属イオンが存在している。吉澤一成氏は分子軌道法と密度汎関数法さらに量子力学と分子力学を組み合わせたQM/MM法といった量子化学計算法を用いた理論研究を展開し、金属酵素の構造と反応についての新たな研究方法を確立した。酵素反応を理論的に研究するには、大規模な系を扱うため構造の自由度が多く最適化が難しい、多くの場合酵素の真の活性構造が実験的にわからない、活性部位の金属に複数のスピン状態がある、などの困難な問題があるが、同氏はこれらを克服しつつ先導的な理論研究を行った。

量子化学計算による引っ張り接着強度の解析



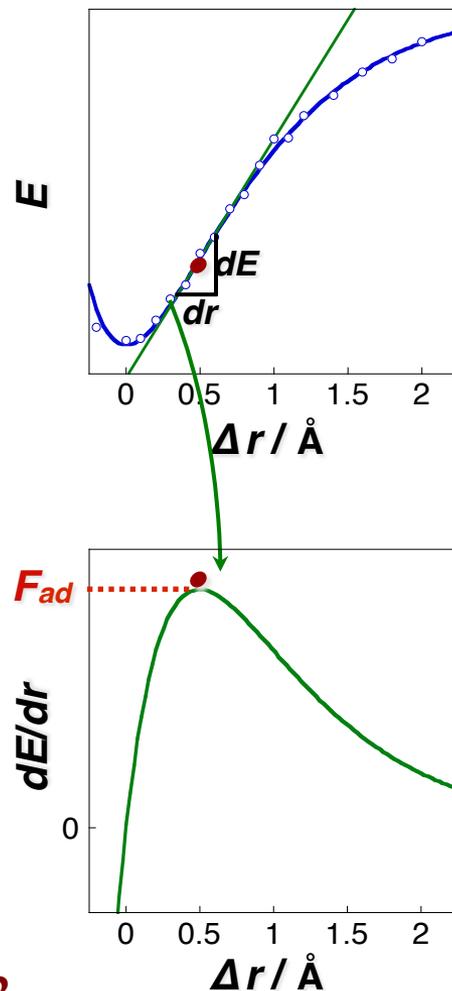
エポキシ樹脂モデルを界面から垂直方向へ
引き離しながら

部分構造最適化

この部分を固定

移動距離 Δr に対する
全エネルギー E のプロット
($\Delta r = 0$ は最適化構造に対応)

$$\text{接着力 } F_{ad} = \left(\frac{dE}{dr} \right)_{MAX}$$



大迫, 吉澤, 高分子論文集, 2011, 68, 72.

Semoto, T.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *J. Phys. Chem. C* 2011, 115, 11701.

瀬本貴之, 辻雄太, 吉澤一成, 日本接着学会誌, 2012, 48, 144.

Semoto, T.; Tsuji, Y.; Yoshizawa, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 2012, 85, 672.

吉澤研究室

研究室のみなさん



M1 糸山

B4 松尾

蒲池助教

Li客員教授
(中国)

吉澤教授

田中特任助教
(京大所属)

D2 瀬本

塩田准教授

M1 村田

M2 森

D3 土井富

比多岡博士

P.K.Sajith博士
(インド)



M2 鈴木
(写真係)