

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 16 日現在

機関番号：17102

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2012～2016

課題番号：24109014

研究課題名（和文）酵素触媒反応種の状態変化と活性制御に関する理論的研究

研究課題名（英文）Theoretical Studies on State Change of Enzymatic and Catalytic Species and Activity Control

研究代表者

吉澤 一成 (Yoshizawa, Kazunari)

九州大学・先導物質化学研究所・教授

研究者番号：30273486

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 37,600,000円

研究成果の概要（和文）：理論計算化学の立場から、高周期典型元素と遷移元素を活性中心にもつ酵素反応系およびモデル系を対象として、実在系に生成する感応性化学種の発見に努めた。また、大規模量子化学計算を用いて活性中心の周辺環境や反応過程に応じて状態を変化させる感応性化学種の発見と、それらが受ける摂動メカニズムの解明に寄与した。本研究では、とくに金属酵素と関連するモデル錯体について、酸化反応などの生体模倣反応やタンパク質間相互作用の機構を領域内の実験グループと連携して研究を行った。反応過程で生成する中間体のスピン状態変化およびタンパク質中での電子移動が、金属の関与する酵素触媒反応を理解するための鍵となることを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：We have carried out enzymatic and model systems that involve transition metals at the active centers using theoretical calculations. On the basis of large-scale calculations, we considered environmental effects and perturbational effects at the active centers of enzymes. In this study we did collaborative studies with experimental groups about metalloenzymes and model complexes. We demonstrated a spin-state change and electron transfer in proteins are main factors that determine metal-based enzymatic reactions.

研究分野：化学

キーワード：量子化学 生体関連化学 金属酵素 電子物性 酵素反応

1. 研究開始当初の背景

生体内の様々な化学反応は、多くの場合、活性中心に金属元素を含む、いわゆる金属酵素によって触媒されている。酸化還元反応、光合成、窒素固定など現代化学が中心的なテーマとして位置付ける重要な化学反応を、これらの金属酵素は常温常圧で高選択的に触媒している。酵素の活性構造と反応性の相関を解明するためには、実験的研究のみならず計算量子化学の果たす役割が重要である。単寿命活性種の関与する化学反応機構を解明するためには、全反応過程における素反応レベルでの理解が必須である。そのためには、とくに大規模量子化学計算による理論的研究が有効である。

2. 研究の目的

理論化学計算は、実験的に観測困難な化学種の構造、反応、物性の研究に極めて有効な研究手段である。金属酵素は通常は困難な化学反応を常温常圧で高選択的に触媒している。本研究では、金属酵素に生成して、高い反応性を示す“感応性化学種”の理論化学的研究を領域内の実験系研究者と行う。とくに、生体化学反応に関わる活性種の構造と反応性の相関に焦点を当て、これを量子化学計算により解明する。反応過程で生じる不安定活性種を実験的に補足することは極めて困難である。一般に詳細な化学反応経路の研究を行うためには、量子化学計算に基づく素反応レベルでの理解が不可欠である。本研究では、金属酵素や関連する人工触媒での反応活性種の研究を量子化学計算により行うとともに、班内外の実験研究者と連携して、酵素触媒反応種の状態変化と活性制御に関するわれわれの理解を飛躍的に深化させ、人工酵素の開発へと展開する。

3. 研究の方法

金属酵素活性点と周辺タンパクの相互作用と外部刺激応答性錯体のスピン転移継続的について研究する。大規模量子化学計算を実行し、金属酵素と関連するモデル錯体について、生体模倣反応の機構について研究を行う。鉄や銅などからなる活性点モデルのQM計算を行い、活性種およびそれと反応物との相互作用を明らかにする。次いで、QM/MM法による大規模計算を実行する。酸化酵素の解析をヒントに、金属置換ゼオライト(主に鉄と銅の置換型を考える)による高性能酸化触媒についての研究を行う。まず、QM計算を実行し、ゼオライトのルイス酸点、細孔の影響を考慮するためのQM/MM計算を実行する。最近、ゼオライトの吸着作用が放射性同位体などの環境汚染物質の除去に有効であることが分かり、その金属吸着能にも注目する。さらに、前年度までの成果に基づいて窒素固定や水分解の理論研究を展開する。

分子間電子移動について研究する。酵素の触媒サイクルには周辺タンパクからの電子

伝達に関与しており、その機構を解明することは生体化学反応のよりよい理解に必須である。申請者は分子ワイヤーの伝導シミュレーションを手掛け、分子エレクトロニクスへの展開も視野に入れた研究を行っている。そこで得られた知見を応用し、酵素における電子伝達機構を明らかにする。電子伝達解析は、ニトロゲナーゼやヒドロゲナーゼといった還元酵素において必須である。

領域内研究者との連携研究を実施する。A04班の杉本、中井、井上、小島は、さまざまな機能を有する金属酵素の専門家であり、人工モデル酵素の構築、新しい酵素の探索、生体模倣反応解析、など幅広い実験的バックグラウンドを持っている。申請者は、これら4名の研究者との緊密な連携の下に、A04班及びその他の班との連携研究を強力に推進する。

4. 研究成果

新学術領域「感応性化学種が拓く新物質科学」のA04班の計画班長として本研究に参画し、酵素触媒反応種の状態変化と活性制御に関する理論的研究を推進した。酵素触媒反応の原動力となる金属活性種の構造と反応性について探索するため、実験研究者との共同研究体制の下に量子化学計算および分子力学計算による理論研究を展開した。本研究では理論計算化学の立場から、高周期典型元素と遷移元素を活性中心にもつ酵素反応系およびモデル系を対象として、実在系に生成する感応性化学種の発見に努めた。また、大規模量子化学計算を用いて活性中心の周辺環境や反応過程に応じて状態を変化させる感応性化学種の発見と、それらが受ける摂動メカニズムの解明に寄与した。本研究では、とくに金属酵素と関連するモデル錯体について、酸化反応などの生体模倣反応やタンパク質間相互作用の機構を領域内の実験グループと連携して研究を行った。実験による不安定活性種の観測は困難なため、量子化学計算は有効な研究手段となることを示した。領域内共同研究は、領域内共同研究の推進に貢献した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計46件)すべて査読あり

(1)"Electrical Conductance and Diode-Like Behavior of Substituted Azulene" A.

El-Nahas, A. Staykov, K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 121 (5), 2504-2511 (2017) DOI:10.1021/acs.jpcc.6b10339

(2)"Synergy of Electrostatic and van der Waals Interactions in the Adhesion of Epoxy Resin with Carbon-Fiber and Glass Surfaces" K. Yoshizawa, T. Semoto, S. Hitaoka, C. Higuchi, Y. Shiota, and H. Tanaka, Bull. Chem. Soc. Jpn., 90 (5),

- 500-505 (2017)
DOI:10.1246/bcsj.20160426
"Selected Paper"
- (3)"Remarkable Catalytic Activity of Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum-Dinitrogen Complexes Bearing N-Heterocyclic Carbene-Based PCP-Pincer Ligand toward Nitrogen Fixation under Ambient Reaction Conditions" A. Eizawa, K. Arashiba, H. Tanaka, S. Kuriyama, Y. Matsuo, K. Nakajima, K. Yoshizawa, Y. Nishibayashi, *Nature Commun.*, 8, 14874/1-12 (2017)
DOI:10.1038/ncomms14874
- (4)"Low-mode conformational search method with semiempirical quantum mechanical calculations: application to enantioselective organocatalysis" T. Kamachi and K. Yoshizawa, *J. Chem. Inf. Mod.*, 56, 347-353 (2016)
DOI:10.1021/acs.jcim.5b00671
- (5)"Possible Peroxo State of the Dicopper Site of Particulate Methane Monooxygenase from Combined Quantum Mechanics and Molecular Mechanics Calculations" S. Itoyama, K. Doitomi, T. Kamachi, Y. Shiota, and K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.*, 55, 2771-2775 (2016)
DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b02603
- (6)"Superior Thermoelasticity and Shape-Memory Nanopores in a Porous Supramolecular Organic Framework" Y.-G. Huang, Y. Shiota, M.-Y. Wu, S.-Q. Su, Z.-S. Yao, S. Kang, S. Kanegawa, G.-L. Li, S.-Q. Wu, T. Kamachi, K. Yoshizawa, M.-C. Hong, and Osamu Sato, *Nature Commun.*, 7, 11564/1- (2016)
DOI:10.1038/ncomms11564
- (7)"First-Principals Calculations of Electron Transport Through Azulene" A. El-Nahas, A. Staykov, and K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. C*, 120, 9043-9052 (2016)
DOI:10.1021/acs.jpcc.6b00767
- (8)"Interplay between Theory and Experiment for Ammonia Synthesis by Transition Metal Complexes" H. Tanaka, Y. Nishibayashi, and K. Yoshizawa, *Acc. Chem. Res.*, 49, 987-995 (2016)
DOI:10.1021/acs.accounts.6b00033
- (9)"Computational Mutation Study on the Role of Catalytic Residues in Coenzyme B12-Dependent Diol Dehydratase" K. Doitomi, T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 89, 955-964 (2016)
DOI:10.1246/bcsj.20160083
"Selected Paper"
- (10)"Energetic Mechanism of Cytochrome c - Cytochrome c Oxidase Electron Transfer Complex Formation under Turnover Conditions Revealed by Mutational Effects and Docking Simulation" W. Sato, S. Hitaoka, K. Inoue, M. Imai, T. Saio, T. Uchida, K. Shinzawa-Itoh, S. Yoshikawa, K. Yoshizawa, and K. Ishimori, *J. Biol. Chem.*, 36, 291-300 (2016)
DOI:10.1074/jbc.M115.708065
- (11)"Catalytic transformation of molecular dinitrogen into ammonia and hydrazine by using iron-dinitrogen complexes bearing anionic PNP-pincer ligand" S. Kuriyama, K. Arashiba, K. Nakajima, Y. Matsuo, H. Tanaka, K. Ishii, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Nature Commun.*, 7, 12181 (2016)
DOI:10.1038/ncomms12181
- (12)"Mechanistic Insights into C-H Oxidations by Ruthenium(III)-Pterin Complexes: Impact of Basicity of the Pterin Ligand and Electron Acceptability of the Metal Center on the Transition States" H. Mitome, T. Ishizuka, H. Kotani, Y. Shiota, K. Yoshizawa, T. Kojima, *J. Am. Chem. Soc.*, 138, 9508-9520 (2016)
DOI:10.1021/jacs.6b03785
- (13)"Directional Electron Transfer in Crystals of [CrCo] Dinuclear Complexes Achieved by a Chirality-Assisted Preparative Method" S. Kanegawa, Y. Shiota, S. Kang, K. Takahashi, H. Okajima, A. Sakamoto, T. Iwata, H. Kandori, and K. Yoshizawa, and O. Sato, *J. Am. Chem. Soc.*, 138 (43), 14170-14173 (2016)
DOI:10.1021/jacs.6b05089
- (14)"A Platinum(0) Complex with a Square Planar Geometry" K. Takeuchi, H. Taguchi, I. Tanigawa, S. Tsujimoto, T. Matsuo, H. Tanaka, K. Yoshizawa, and F. Ozawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 15347-15350 (2016)
DOI:10.1002/anie.201609515
- (15)"Direct Conversion of Methane to Methanol by Metal-Exchanged ZSM-5 Zeolite (Metal = Fe, Co, Ni, and Cu)" M. H. Mahyuddin, A. Staykov, Y. Shiota, and K. Yoshizawa, *ACS Catal.*, 6, 8321-8331 (2016)
DOI:10.1021/acscatal.6b01721
- (16)"A Ferromagnetically Coupled Fe₄ Cyanide-Bridged Nanocage" S. Kang, H. Zheng, T. Liu, K. Hamachi, S. Kanegawa, K. Sugimoto, Y. Shiota, S. Hayami, M. Mito, T. Nakamura, M. L. Baker, H. Nojiri, K. Yoshizawa, C. Duan, and O. Sato, *Nature Commun.*, 6, 5955/1-6 (2015).
DOI:10.1038/ncomms6955
- (17)"Computational Exploration of the Mechanism of the Hydrogenation Step of the Anthraquinone Process for Hydrogen Peroxide Production" T. Kamachi, T. Ogata,

- E. Mori, K. Iura, N. Okuda, M. Nagata, and K. Yoshizawa, *J. Phys. Chem. C*, 119, 8748-8754 (2015).
DOI:10.1021/acs.jpcc.5b01325
- (18)"Catalytic Reduction of Dinitrogen into Ammonia by Use of Molybdenum-Nitride Complexes Bearing Tridentate Triphosphine as Catalysts"
K. Arashiba, E. Kinoshita, S. Kuriyama, A. Eizawa, K. Nakajima, H. Tanaka, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *J. Am. Chem. Soc.*, 137, 5666-5669 (2015).
DOI:10.1021/jacs.5b02579
- (19)"Proton-Assisted Mechanism of NO Reduction on a Dinuclear Ruthenium Complex"
T. Suzuki, H. Tanaka, Y. Shiota, P. K. Sajith, Y. Arikawa, and K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.*, 54, 7181-7191 (2015)
DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b00394
- (20)"cis-1,2-Aminohydroxylation of Alkenes Involving a Catalytic Cycle of Osmium(III) and Osmium(V) Centers: OsV(O)(NHTs) Active Oxidant with a Macrocyclic Tetradentate Ligand"
H. Sugimoto, A. Mikami, P. K. Sajith, Y. Shiota, K. Yoshizawa, K. Asano, T. Suzuki, and S. Itoh, *Inorg. Chem.*, 54, 7073-7082 (2015).
DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b01083
- (21)"Redox Non-Innocent Behavior of Tris(2-Pyridylmethyl)amine Bound to a Lewis Acidic Rh(III) Ion Induced by C-H Deprotonation"
H. Kotani, T. Sugiyama, T. Ishizuka, Y. Shiota, K. Yoshizawa, and T. Kojima, *J. Am. Chem. Soc.*, 137, 11222-11225 (2015).
DOI:10.1021/jacs.5b06237
- (22)"Assembling an alkyl rotor to access abrupt and reversible crystalline deformation of a cobalt(II) complex"
S.-Q. Su, T. Kamachi, Z.-S. Yao, Y.-G. Huang, Y. Shiota, K. Yoshizawa, N. Azuma, Y. Miyazaki, M. Nakano, G. Maruta, S. Takeda, S. Kang, S. Kanegawa, O. Sato, *Nature Commun.*, 6, 8810/1-7 (2015)
DOI:10.1038/ncomms9810
- (23)"Enantioselective Alkylation by Binaphthyl Chiral Phase-Transfer Catalysts: A DFT-Based Conformational Analysis"
T. Kamachi and K. Yoshizawa, *Org. Lett.*, 16, 472-472 (2014).
DOI:10.1021/ol4033545
- (24)"Unique Behavior of Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum Complexes Bearing PNP Pincer Ligand toward Catalytic Reduction of Molecular Dinitrogen into Ammonia"
H. Tanaka, K. Arashiba, S. Kuriyama, A. Sasada, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Nature Commun.*, 5, 3737/1-11 (2014).
DOI:10.1038/ncomms4737
- (25)"Role of Acidic Proton in the Decomposition of NO over Dimeric Cu(I) Active Sites in Cu-ZSM-5 Catalyst: A QM/MM Study"
Sajith P. K., Y. Shiota, and K. Yoshizawa, *ACS Catal.*, 4, 2075-2085 (2014).
DOI:10.1021/cs500223z
- (26)"Computational Mutation Design of Diol Dehydratase: Catalytic Ability toward Glycerol beyond the Wild-Type Enzyme"
K. Doitomi, H. Tanaka, T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 87, 950-959 (2014).
DOI:10.1246/bcsj.20140115
- (27)"Catalytic Formation of Ammonia from Molecular Dinitrogen by use of Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum-Dinitrogen Complexes Bearing PNP-Pincer Ligands: Remarkable Effect of Substituent at PNP-Pincer Ligand"
S. Kuriyama, K. Arashiba, K. Nakajima, H. Tanaka, N. Kamaru, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 9719-9731 (2014).
DOI:10.1021/ja5044243
- (28)"Molecular Motor-driven Abrupt Anisotropic Shape Change in a Single Crystal of a Ni Complex"
Z.-S. Yao, M. Mito, T. Kamachi, Y. Shiota, K. Yoshizawa, N. Azuma, Y. Miyazaki, K. Takahashi, K. Zhang, T. Nakanishi, S. Kang, S. Kanegawa, O. Sato, *Nature Chem.*, 6, 1079-1083 (2014).
DOI:10.1038/nchem.2092
- (29)"Thiophene-Fused Bisdehydro[12]annulene that Undergoes the [2+2] Alkyne Cycloaddition by Either Light or Heat"
A. Fukazawa, H. Oshima, Y. Shiota, S. Takahashi, K. Yoshizawa, and S. Yamaguchi, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 1731-1734 (2013).
DOI:10.1021/ja3126849
- Selected as "SYNFACTS, S002113SF"
- (30)"Role of Tyrosine Residue in Methane Activation at the Dicopper Site of pMMO: A DFT Study"
Y. Shiota, G. Juhász, K. Yoshizawa, *Inorg. Chem.*, 52, 7907-7917 (2013).
DOI:10.1021/ic400417d
- (31)"Facile N-H Bond Cleavage of Ammonia by an Iridium Complex Bearing a Non-innocent PNP-Pincer Type Phosphaalkene Ligand"
Y.-H. Chang, Y. Nakajima, H. Tanaka, K. Yoshizawa, and F. Ozawa, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 11791-11794 (2013).
DOI:10.1021/ja407163z
- (32)"Quantum Chemical Studies on

Dioxygen Activation and Methane Hydroxylation by Diiron and Dicopper Species as well as Related Metal-Oxo Species" K. Yoshizawa, Bull. Chem. Soc. Jpn., 86, 1083-1116 (2013).
10.1246/bcsj.20130127 Submitted as an "Award Account"
(33)"Light-induced Spin-crossover Actuated Single-chain Magnet" T. Liu, H. Zheng, S. Kang, Y. Shiota, S. Hayami, M. Mito, O. Sato, K. Yoshizawa, S. Kanegawa, and C. Duan Nature Commun., 4, 2826/1-6 (2013).
DOI:10.1038/ncomms3826
(34)"Role of Edge Oxygen Atoms on the Adhesive Interaction between Carbon Fiber and Epoxy Resin" T. Semoto, Y. Tsuji, H. Tanaka, and K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 117, 24830-24835 (2013).
DOI:10.1021/jp407835d
(35)"Mechanistic Insight into the Cleavage of an Aromatic C-C Bond by Tungsten" J. Li, and K. Yoshizawa, Chem. Eur. J., 16, 783-787 (2012).
DOI:10.1002/chem.201101899
(36)"Orbital Views on Electron Transport Properties of Cyclophanes: Insight into Intermolecular Transport" X. Li, A. Staykov, and K. Yoshizawa, Bull. Chem. Soc. Jpn., 85, 181-188 (2012).
DOI:10.1246/bcsj.20110256 Received "BCSJ Award"
(37)"Molecular Rectifier Based on π - π Stacked Charge Transfer Complex" Y. Tsuji, A. Staykov, and K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 116, 2575-2580 (2012).
DOI:10.1021/jp209547a
(38)"Substrate Specificity of Fluoroacetate Dehalogenase: An Insight from Crystallographic Analysis, Fluorescence Spectroscopy, and Theoretical Computations" T. Nakayama, T. Kamachi, K. Jitsumori, R. Omi, K. Hirotsu, N. Esaki, T. Kurihara, and K. Yoshizawa, Chem. Eur. J., 18, 8392-8402 (2012).
DOI:10.1002/chem.201103369
(39)"Molecular Understanding of the Adhesive Force between a Metal Oxide Surface and an Epoxy Resin: Effects of Surface Water" T. Semoto, Y. Tsuji, and K. Yoshizawa, Bull. Chem. Soc. Jpn., 85, 672-678 (2012).
DOI:10.1246/bcsj.20120028 Received "BCSJ Award"
(40)"Orbital Determining Spintronic Properties of a π -Conjugated System" Y. Tsuji, A. Staykov, and K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 116, 16325-16332 (2012).
DOI:10.1021/jp305448q

(41)"Current Rectification in Nitrogen and Boron Doped Nanographenes and Cyclophanes" A. Staykov, X. Li, Y. Tsuji, and K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 116, 18451-18459 (2012).
DOI:10.1021/jp303843k
(42)"An Orbital Rule for Electron Transport in Molecules" K. Yoshizawa, Acc. Chem. Res., 45, 1612-1621 (2012).
DOI:10.1021/ar300075f
(43)"Orbital Control of Single-Molecule Conductance Perturbed by π -accepting Anchor Groups: Cyanide and Isocyanide" J. Koga, Y. Tsuji, and K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. C, 116, 20607-20616 (2012).
DOI:10.1021/jp3068156
(44)"Surface Oxygen Atom as Cooperative Ligand in Pd Nanoparticles Catalysis for Selective Hydration of Nitriles to Amides in Water: Experimental and Theoretical Studies" K. Shimizu, T. Kubo, A. Satsuma, T. Kamachi, and K. Yoshizawa, ACS Catalysis, 2, 2467-2474 (2012).
DOI:10.1021/cs3006154
(45)"Inactivation Mechanism of Glycerol Dehydration by Diol Dehydratase from Combined QM/MM Calculations" K. Doitomi, T. Kamachi, T. Toraya, and K. Yoshizawa, Biochemistry, 51, 9202-9210 (2012).
DOI:10.1021/bi300488u
(46)"Iron-Catalyzed Transformation of Molecular Dinitrogen into Silylamine under Ambient Conditions" M. Yuki, H. Tanaka, K. Sasaki, Y. Miyake, K. Yoshizawa, Y. Nishibayashi, Nature Commun., 3, 1254/1-6 (2012).
DOI:10.1038/ncomms2264

その他 65 報

〔学会発表〕(計 17 件) 招待講演のみ
(1)吉澤一成, "アンモニア合成反応における理論と実験のインタープレイ", 分子研研究会「触媒の分子科学: 理論と実験のインタープレイ最前線」, 2016 年 3 月 10 日, 自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター会議室(岡崎市)
(2)吉澤一成, "接着の分子論", 機能性ハイブリッド材料研究会公開研究会, 2016 年 2 月 4 日, 回路会館地下会議室(東京都杉並区)
(3)Kazunari Yoshizawa, "Mechanism of NO Reduction on a Dinuclear Metal Complex", PACIFICHEM 2015, 2015 年 12 月 15 日 ~ 2015 年 12 月 20 日, ハワイコンベンションセンター(アメリカ)
(4)吉澤一成, "ラジカル酵素の理論的考察", BMB2015, 2015 年 12 月 1 日 ~ 2015 年 12 月 4 日, 神戸ポートピアホテル(神戸市)
(5)Kazunari Yoshizawa, "Mechanism of

Nitrogen Fixation Catalyzed by a Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum Complex", Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems, 2015年11月25日~2015年11月27日, ICIQ Auditorium (スペイン)

(6)吉澤一成, "大規模量子化学計算によるソフトマテリアルの物性と反応解析: 酵素反応および界面現象など", 京都市成長産業創造センター創立2周年記念フォーラム, 2015年11月4日, 京都市成長産業創造センター(京都市)

(7)Kazunari Yoshizawa, "Quantum Chemical Studies on Dioxide Activation and Methane Hydroxylation by Diiron and Dicopper Species as well as Related Metal-Oxo Species", 北海道大学触媒科学研究改組記念講演会, 2015年10月13日~2015年10月15日, 北海道大学(札幌市)

(8)吉澤一成, "量子力学によるエポキシ樹脂の接着理論", エポキシ樹脂技術協会第43期特別講演会, 2015年9月28日, ホテルグランドヒル市ヶ谷(東京都新宿区)

(9)吉澤一成, "物質創製化学における計算化学の役割と将来展望", 第6回統合物質シンポジウム, 2015年4月14日, 名古屋大学野依記念物質科学研究館(名古屋市)

(10)Kazunari Yoshizawa, "Frontier Orbital Rule for Electron Transport in Molecules", CECAM workshop, 2015年4月7日~2015年4月10日, Chimie Paris Tech(フランス)

(11)Kazunari Yoshizawa, "Theoretical Study on the Mechanism of Nitrogen Fixation Catalyzed by a Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum", ICOMC 2014, 2014年7月13日~2014年7月18日, ロイトン札幌(札幌市)

(12)Kazunari Yoshizawa, "Frontier Orbital Rule for Electron Transport in Molecules", 5th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry, 2014年6月30日~2014年7月1日, University of Strasbourg(フランス)

(13)Kazunari Yoshizawa, "How Heme Metabolism Occurs by Heme Oxygenase: Water-Assisted Oxo Mechanisms", ICPP-8, 2014年6月22日~2014年6月27日, Istanbul Lutfi Kirdar Convention and Exhibition Centre(トルコ)

(14)Kazunari Yoshizawa, "Orbital views of molecular conductance and spintronics", ISTCP-VIII, 2013年8月25日~2013年8月31日, Budapest Congress Center(ハンガリー)

(15)吉澤一成, "量子化学計算による金属酵素の構造と反応性に関する研究", 第13回日本蛋白質科学会年会, 2013年6月12日~2013年6月14日, とりぎん文化会館(鳥取市)

(16)吉澤一成, "分子の電子輸送とスピン制御

の軌道理論", 第2回新学術領域研究「感応生化学種」シンポジウム, 2013年6月10日~2013年6月11日, 九州大学医学部百年記念講堂(福岡市)

(17)Kazunari Yoshizawa, "Spin-Crossover Phenomena in Electronic Properties and Chemical Reactions Mediated by Transition Metals", CECAM workshop "Spin states in biochemistry and inorganic chemistry", 2012年9月18日~2012年9月21日, University of Zaragoza(スペイン)

[その他]
ホームページ等
<http://trout.scc.kyushu-u.ac.jp/yoshizawa/J/index.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者
吉澤 一成 (YOSHIZAWA, Kazunari)
九州大学・先導物質化学研究所・教授
研究者番号: 30273486

(2)研究分担者
()

研究者番号:

(3)連携研究者
塩田 淑仁 (SHIOTA, Yoshihito)
九州大学・先導物質化学研究所・准教授
研究者番号: 70335991

(4)研究協力者
()