

令和 2 年 6 月 9 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03117

研究課題名(和文)高分子異種材料間の相互作用に関する理論的研究

研究課題名(英文)Theoretical study of the interaction between polymer materials

研究代表者

吉澤 一成 (Yoshizawa, Kazunari)

九州大学・先端物質化学研究所・教授

研究者番号：30273486

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,300,000円

研究成果の概要(和文)：密度汎関数計算を用いて接着界面の分子構造、接着界面における結合エネルギー、接着応力等を理論的に計算し、さらに相互作用エネルギーを静電相互作用等の各成分に分割することにより、接着現象の本質について分子論的に考察した。特にエポキシ樹脂を対象とし、被着材の種類を変えた場合や、被着材表面に形成される水分子層を考慮したモデルについて理論的解析を行った。また、疎水性表面とエポキシ樹脂の接着が一般に良好ではない理由について原子・分子論的に考察した。さらに、第一原理計算およびマテリアルズインフォマティクス的手法による実験と理論計算のデータの融合を進め、接着に関係する高分子のガラス転移温度の予測などを行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物と物をくっつける接着技術の研究は、実用面から極めて活発に行われている。しかし、接着現象がどのような界面相互作用により生じるのかについての理論的な議論は行われていない。本研究では被着材と高分子の界面における相互作用を第一原理計算により解析し、界面に働く相互作用エネルギーおよび接着力に関して理論的に研究した。相互作用エネルギーを静電相互作用、ファンデルワールス相互作用、電荷移動相互作用、交換斥力相互作用等の成分に分割することにより、接着現象の本質について分子論的に考察した。このような研究は世界的にも行われておらず、その成果は高分子化学や界面化学などにインパクトを与えると期待される。

研究成果の概要(英文)：We have theoretically calculated the molecular structure, binding energy, and adhesion stress of adhesion interface using density functional theory calculations. In addition we have considered some essential points of adhesion by partitioning the interaction energy into electrostatic term and so on. In particular we have studied the water layer that is located in the adhesion interface of epoxy-metal. We have demonstrated using the energy decomposition method at the atomic and molecular level that the adhesion between hydrophobic surfaces and epoxy resin is bad. We have studied glass transition temperatures of various polymers that has close relationship with adhesion using first-principles calculations and materials informatics.

研究分野：化学

キーワード：接着 量子化学 エポキシ樹脂 計算化学 界面化学 第一原理計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

物と物をくっつける接着技術の研究は、実用面から極めて活発に行われている。しかし、接着現象がどのような界面相互作用により生じるのかについての理論的な議論はあまり行われていない。分子間の弱い相互作用(静電的相互作用、酸塩基相互作用、水素結合相互作用、ファンデルワールス相互作用、電荷移動相互作用、交換斥力相互作用)は同種あるいは異種材料間に広く存在するもので、接着相互作用の起源になりうる。接着現象は最も興味深い界面現象の一つである(「分子間力と表面力 第3版」J. N. Israelachvili 著)。一方、接着剤を用いた材料の接合は工業的にも非常に重要な技術であり、自動車産業や航空産業をはじめとする多くの工業分野で利用されている。例えば、金属と高分子あるいは高分子同士などの異種材料間での接着性を向上させるために多くの実験研究が行われているが、材料間での接着がどのような界面相互作用により起こるのかは理論的に十分には明らかにされておらず、古くから議論の対象となっている。特に原子分子レベルでの接着界面の理論的解析は今までほとんど行われていない。接着エネルギーは量子力学による第一原理計算から見積もることができる。代表者らのグループでは、相互作用エネルギーの引張方向の座標微分から接着エネルギーを理論的に見積もることを行っている。

2. 研究の目的

接着機構として、機械的結合、分子拡散、静電気力、分子間力などが仮説として提案されているが、それらの本格的な理論解析はこれまで行われていない。本研究では金属と高分子(図1)あるいは高分子同士などの異種材料間の界面における引力的相互作用を量子力学に基づく第一原理計算により解析する。被着材と接着剤との界面に働く相互作用エネルギーおよび接着力に関して理論的に研究する。相互作用エネルギーを静電相互作用、ファンデルワールス相互作用、電荷移動相互作用、交換斥力相互作用等の成分に分割することにより、接着現象の本質について分子論的に考察する。本研究の第一の目的は、接着の分子論の構築であり、その成果は高分子化学や界面化学など多方面に応用されると期待される。接着相互作用に関する原子分子レベルの原理が構築できれば、接着力を実験的に制御する上でも非常に有用である。

3. 研究の方法

接着相互作用に関する原子分子レベルでの本質的な理解を得るためには、量子力学に基づく第一原理計算が不可欠である。金属や炭素繊維の表面および接着剤分子を含む大規模な系の構造と相互作用解析を行うため、本研究では主に密度汎関数計算を用いる。密度汎関数計算ではシュレディンガー方程式に基づき系の電子状態を精密に取り扱うため計算コストは高いが、原子や分子間の相互作用エネルギー、電子密度などを合理的に表現できる。接着剤と被着材を界面から垂直方向へ引き離しながら、その移動距離に対する系のエネルギーを精密に計算し、さらに引き離し座標に関する微分から被着材と接着剤との間に働く接着力を理論的に算出する。また相互作用エネルギーを静電相互作用、ファンデルワールス相互作用、電荷移動相互作用、交換斥力相互作用等の成分に分割する。

4. 研究成果

当グループでは密度汎関数計算を用いて接着界面の分子構造、接着界面における結合エネルギー、接着応力等を理論的に計算し、さらに相互作用エネルギーを静電相互作用等の各成分に分割することにより、接着現象の本質について分子論的に考察した。得られた成果は以下の通りで

ある(1)エポキシ樹脂の化学的性質の把握のため、被着材の種類を変えた場合や、被着材表面に形成される水分子層を考慮したモデルについて理論的解析を行った。(2)グラファイトや窒化ホウ素等の疎水性表面とエポキシ樹脂の接着に関する研究を実施し、疎水性表面とエポキシ樹脂の接着が一般に良好ではない理由について原子・分子論的に考察した。(3)第一原理計算およびマテリアルズインフォマティクス的手法による実験と理論計算のデータの融合を進め、接着に関係する高分子のガラス転移温度の予測などを行った。なお、接着に及ぼす水の影響に関する論文は最もダウンロードされた論文として受賞した。“Molecular Understanding of the Adhesive Interactions between Silica Surface and Epoxy Resin: Effects of Interfacial Water”, C. Higuchi, H. Tanaka, K. Yoshizawa, *J. Comput. Chem.* **40**, 164-171 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計69件（うち査読付論文 67件 / うち国際共著 15件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Naooki Tsurumi, Yuta Tsuji, Taiki Baba, Hiroyuki Murata, Noriyuki Masago, Kazunari Yoshizawa	4. 巻 -
2. 論文標題 Comparative study of the ideal and actual adhesion interfaces of the die bonding structure using conductive adhesives	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Adhesion	6. 最初と最後の頁 投稿中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 樋口千紗、吉澤一成	4. 巻 -
2. 論文標題 ガラス表面とエポキシ樹脂の接着に関する分子論的研究	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 NEW GLASS	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishizuka Tomoya, Komamura Keiyu, Saegusa Yuta, Tanaka Shogo, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 24
2. 論文標題 Iron complex of a quadruply fused porphyrin: Synthesis, structure and redox properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Porphyrins and Phthalocyanines	6. 最初と最後の頁 252 ~ 258
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S1088424619500846	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuta Tsuji, Yasuhiro Kitamura, Masao Someya, Toshihiko Takano, Michio Yaginuma, Kohei Nakanishi, and Kazunari Yoshizawa	4. 巻 4
2. 論文標題 Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4491-4504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b00129	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chisa Higuchi, Dragos Horvath, Gilles Marcou, Kazunari Yoshizawa, and Alexandre Varnek	4. 巻 1
2. 論文標題 Prediction of the Glass Transition Temperatures of Linear Homo/Heteropolymers and Cross-linked Epoxy Resins	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Polymer Materials	6. 最初と最後の頁 1430-1442
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsapm.9b00198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hashimoto Koichi, Koide Taro, Okawara Toru, Shimakoshi Hisashi, Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Hisaeda Yoshio	4. 巻 48
2. 論文標題 Redox behaviour of the -dihydroporphycene cobalt complex: study on the effect of hydrogenation of the ligand	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 872 ~ 881
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT03743D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Abe Tsukasa, Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Ohta Takehiro, Morimoto Yuma, Sugimoto Hideki, Ogura Takashi, Yoshizawa Kazunari, Itoh Shinobu	4. 巻 2
2. 論文標題 Cupric-superoxide complex that induces a catalytic aldol reaction-type C?C bond formation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-019-0115-6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ikeda Kei, Hori Yuta, Mahyuddin Muhammad Haris, Shiota Yoshihito, Staykov Aleksandar, Matsumoto Takahiro, Yoshizawa Kazunari, Ogo Seiji	4. 巻 58
2. 論文標題 Dual Catalytic Cycle of H ₂ and H ₂ O Oxidations by a Half-Sandwich Iridium Complex: A Theoretical Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 7274 ~ 7284
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b00307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mahyuddin Muhammad Haris, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 9
2. 論文標題 Methane selective oxidation to methanol by metal-exchanged zeolites: a review of active sites and their reactivity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Catalysis Science & Technology	6. 最初と最後の頁 1744 ~ 1768
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cy02414f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Abdel-Rahman Mohamed A., Al-Hashimi Nessreen, Shibl Mohamed F., Yoshizawa Kazunari, El-Nahas Ahmed M.	4. 巻 9
2. 論文標題 Thermochemistry and Kinetics of the Thermal Degradation of 2-Methoxyethanol as Possible Biofuel Additives	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-40890-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Ida Tomonori, Yoshizawa Kazunari, Mizuno Motohiro	4. 巻 685
2. 論文標題 Local structures and electronic properties of In atoms in In-doped ZnO	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Thin Solid Films	6. 最初と最後の頁 428 ~ 433
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tsf.2019.05.047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Yuta, Hashimoto Wataru, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 92
2. 論文標題 Lithium-Richest Phase of Lithium Tetrelides Li ₁₇ Tt ₄ (Tt = Si, Ge, Sn, and Pb) as an Electride	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1154 ~ 1169
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190040	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Singha Rajib Kumar, Tsuji Yuta, Mahyuddin Muhammad Haris, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 123
2. 論文標題 Methane Activation at the Metal-Support Interface of Ni4-CeO2(111) Catalyst: A Theoretical Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9788 ~ 9798
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b11973	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kotani Hiroaki, Shimomura Hinatsu, Horimoto Momoka, Ishizuka Tomoya, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Yanagisawa Sachiko, Kawahara-Nakagawa Yuka, Kubo Minoru, Kojima Takahiko	4. 巻 48
2. 論文標題 Fundamental electron-transfer and proton-coupled electron-transfer properties of Ru(IV)-oxo complexes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 13154 ~ 13161
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9DT02734C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Kazuyuki, Yamamoto Kaoru, Yamamoto Takashi, Einaga Yasuaki, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Mori Hatsumi	4. 巻 9
2. 論文標題 High-Temperature Cooperative Spin Crossover Transitions and Single-Crystal Reflection Spectra of [FeIII(qsal)2](CH3SO3) and Related Compounds	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 81 ~ 81
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst9020081	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Yuta, Kitamura Yasuhiro, Someya Masao, Takano Toshihiko, Yaginuma Michio, Nakanishi Kohei, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 4
2. 論文標題 Adhesion of Epoxy Resin with Hexagonal Boron Nitride and Graphite	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4491 ~ 4504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b00129	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hori Yuta, Abe Tsukasa, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 92
2. 論文標題 Mechanistic Insights into Methane Oxidation by Molecular Oxygen under Photoirradiation: Controlled Radical Chain Reactions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1840 ~ 1846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190171	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Higuchi Chisa, Horvath Dragos, Marcou Gilles, Yoshizawa Kazunari, Varnek Alexandre	4. 巻 1
2. 論文標題 Prediction of the Glass-Transition Temperatures of Linear Homo/Heteropolymers and Cross-Linked Epoxy Resins	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Polymer Materials	6. 最初と最後の頁 1430 ~ 1442
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsapm.9b00198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Itabashi Takayuki, Arashiba Kazuya, Tanaka Hiromasa, Konomi Asuka, Eizawa Aya, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 38
2. 論文標題 Synthesis and Catalytic Reactivity of Bis(molybdenum-trihalide) Complexes Bridged by Ferrocene Skeleton toward Catalytic Nitrogen Fixation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 2863 ~ 2872
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.9b00263	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ashida Yuya, Arashiba Kazuya, Tanaka Hiromasa, Egi Akihito, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 58
2. 論文標題 Molybdenum-Catalyzed Ammonia Formation Using Simple Monodentate and Bidentate Phosphines as Auxiliary Ligands	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 8927 ~ 8932
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b01340	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Haidar El-Abed, Tawfik Sherif Abdulkader, Stampfl Catherine, Hirao Kimihiko, Yoshizawa Kazunari, El-Demerdash Safinaz H., Nakajima Takahito, El-Nahas Ahmed M.	4. 巻 21
2. 論文標題 Electronic transport investigation of redox-switching of azulenequinones/hydroquinones via first-principles studies	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 17859 ~ 17867
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP03233A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakanishi Takumi, Hori Yuta, Sato Hiroyasu, Wu Shu-Qi, Okazawa Atsushi, Kojima Norimichi, Yamamoto Takashi, Einaga Yasuaki, Hayami Shinya, Horie Yusuke, Okajima Hajime, Sakamoto Akira, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Sato Osamu	4. 巻 141
2. 論文標題 Observation of Proton Transfer Coupled Spin Transition and Trapping of Photoinduced Metastable Proton Transfer State in an Fe(II) Complex	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 14384 ~ 14393
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b07204	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyaniishi Mayuko, Abe Tsukasa, Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 58
2. 論文標題 Role of Amino Acid Residues for Dioxygen Activation in the Second Coordination Sphere of the Dicopper Site of pMMO	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 12280 ~ 12288
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b01752	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Lin Chenfang, Ikeda Kei, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kumagai Takashi	4. 巻 151
2. 論文標題 Real-space observation of far- and near-field-induced photolysis of molecular oxygen on an Ag(110) surface by visible light	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 144705 ~ 144705
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5112158	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Narita Masahiro, Teraoka Takaaki, Murafuji Toshihiro, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Mori Shigeki, Uno Hidemitsu, Kanegawa Shinji, Sato Osamu, Goto Kenta, Tani Fumito	4. 巻 92
2. 論文標題 An Azulene-Based Chiral Helicene and Its Air-Stable Cation Radical	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1867 ~ 1873
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190219	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Higuchi Chisa, Tanaka Hiromasa, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 40
2. 論文標題 Molecular understanding of the adhesive interactions between silica surface and epoxy resin: Effects of interfacial water	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 164 ~ 171
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25559	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toyao Takashi, Nurnobi Rashed Md., Morita Yoshitsugu, Kamachi Takashi, Hakim Siddiki S. M. A., Ali Md. A., Touchy A. S., Kon Kenichi, Maeno Zen, Yoshizawa Kazunari, Shimizu Ken ichi	4. 巻 11
2. 論文標題 Esterification of Tertiary Amides by Alcohols Through C-N Bond Cleavage over CeO ₂	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ChemCatChem	6. 最初と最後の頁 449 ~ 456
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201801098	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mahyuddin M. Haris, Tanaka Takahiro, Shiota Yoshihito, Staykov Aleksandar, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 8
2. 論文標題 Methane Partial Oxidation over [Cu ₂ (μ-O)] ²⁺ and [Cu ₃ (μ-O) ₃] ²⁺ Active Species in Large-Pore Zeolites	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 1500 ~ 1509
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b03389	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Wataru, Kotani Hiroaki, Ishizuka Tomoya, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 57
2. 論文標題 Formation and Isolation of a Four-Electron-Reduced Porphyrin Derivative by Reduction of a Stable 20 Isophlorin	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 1973 ~ 1977
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201711058	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Kazuyuki, Okai Mitsunobu, Mochida Tomoyuki, Sakurai Takahiro, Ohta Hitoshi, Yamamoto Takashi, Einaga Yasuaki, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Konaka Hisashi, Sasaki Akito	4. 巻 57
2. 論文標題 Contribution of Coulomb Interactions to a Two-Step Crystal Structure Phase Transformation Coupled with a Significant Change in Spin Crossover Behavior for a Series of Charged FellComplexes from 2,6-Bis(2-methylthiazol-4-yl)pyridine	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1277 ~ 1287
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.7b02721	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Koide Taro, Aritome Isao, Saeki Tatsuya, Morita Yoshitsugu, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Shimakoshi Hisashi, Hiseada Yoshio	4. 巻 3
2. 論文標題 Cobalt-Carbon Bond Formation Reaction via Ligand Reduction of Porphycene Cobalt(II) Complex and Its Noninnocent Reactivity	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 4027 ~ 4034
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.8b00239	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sunada Yusuke, Ogushi Hajime, Yamamoto Taiji, Uto Shoko, Sawano Mina, Tahara Atsushi, Tanaka Hiromasa, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Nagashima Hideo	4. 巻 140
2. 論文標題 Disilaruthena- and Ferracyclic Complexes Containing Isocyanide Ligands as Effective Catalysts for Hydrogenation of Unfunctionalized Sterically Hindered Alkenes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 4119 ~ 4134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b00812	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamamoto Takaaki, Mitsuno Koki, Mori Shigeki, Itoyama Shuhei, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Ishida Masatoshi, Furuta Hiroyuki	4. 巻 24
2. 論文標題 Two Discrete RuCp* (Cp*=Pentamethylcyclopentadienyl) Binding Modes of N-Confused Porphyrins: Peripheral Complex and Sitting Atop Ruthenocenophane Complex by Skeletal Transformation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 6742 ~ 6746
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201801237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hong Dachao, Tsukakoshi Yuto, Kotani Hiroaki, Ishizuka Tomoya, Ohkubo Kei, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Fukuzumi Shunichi, Kojima Takahiko	4. 巻 57
2. 論文標題 Mechanistic Insights into Homogeneous Electrocatalytic and Photocatalytic Hydrogen Evolution Catalyzed by High-Spin Ni(II) Complexes with S2N2-Type Tetradentate Ligands	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 7180 ~ 7190
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b00881	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kojima Takahiko, Ogishima Fumiya, Nishibu Takahisa, Kotani Hiroaki, Ishizuka Tomoya, Okajima Toshihiro, Nozawa Shunsuke, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Ohtsu Hiroyoshi, Kawano Masaki, Shiga Takuya, Oshio Hiroki	4. 巻 57
2. 論文標題 Intermediate-Spin Iron(III) Complexes Having a Redox-Noninnocent Macrocyclic Tetraamido Ligand	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 9683 ~ 9695
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b00037	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sekiguchi Yoshiya, Arashiba Kazuya, Tanaka Hiromasa, Eizawa Aya, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 130
2. 論文標題 Catalytic Reduction of Molecular Dinitrogen to Ammonia and Hydrazine Using Vanadium Complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie	6. 最初と最後の頁 9202 ~ 9206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ange.201802310	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Staykov Aleksandar, Miwa Tetsuya, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 364
2. 論文標題 Aerobic oxidation of alkanes on icosahedron gold nanoparticle Au55	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Catalysis	6. 最初と最後の頁 141 ~ 153
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcat.2018.05.017	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Maurya Yogesh Kumar, Noda Katsuya, Yamasumi Kazuhisa, Mori Shigeki, Uchiyama Tomoki, Kamitani Kazutaka, Hirai Tomoyasu, Ninomiya Kakeru, Nishibori Maiko, Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Ishida Masatoshi, Furuta Hiroyuki	4. 巻 140
2. 論文標題 Ground-State Copper(III) Stabilized by N-Confused/N-Linked Corroles: Synthesis, Characterization, and Redox Reactivity	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6883 ~ 6892
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b01876	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 122
2. 論文標題 Adsorption and Activation of Methane on the (110) Surface of Rutile-type Metal Dioxides	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 15359 ~ 15381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b03184	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mahyuddin M. Haris, Shiota Yoshihito, Staykov Aleksandar, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 51
2. 論文標題 Theoretical Overview of Methane Hydroxylation by Copper-Oxygen Species in Enzymatic and Zeolitic Catalysts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Accounts of Chemical Research	6. 最初と最後の頁 2382 ~ 2390
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.accounts.8b00236	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Staykov Aleksandar, Fukumori Shun, Yoshizawa Kazunari, Sato Kenta, Ishihara Tatsumi, Kilner John	4. 巻 6
2. 論文標題 Interaction of SrO-terminated SrTiO ₃ surface with oxygen, carbon dioxide, and water	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 22662 ~ 22672
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8TA05177A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mahyuddin M. Haris, Tanaka Takahiro, Staykov Aleksandar, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 57
2. 論文標題 Dioxygen Activation on Cu-MOR Zeolite: Theoretical Insights into the Formation of Cu ₂ O and Cu ₃ O ₂ Active Species	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 10146 ~ 10152
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b01329	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sekiguchi Yoshiya, Meng Fanqiang, Tanaka Hiromasa, Eizawa Aya, Arashiba Kazuya, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 47
2. 論文標題 Synthesis and reactivity of titanium- and zirconium-dinitrogen complexes bearing anionic pyrrole-based PNP-type pincer ligands	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 11322 ~ 11326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8DT02739K	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 149
2. 論文標題 Effects of electron-phonon coupling on quantum interference in polyenes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134115 ~ 134115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5048955	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mahyuddin Muhammad Haris, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 8
2. 論文標題 DFT exploration of active site motifs in methane hydroxylation by Ni-ZSM-5 zeolite	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Catalysis Science & Technology	6. 最初と最後の頁 5875 ~ 5885
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CY01441H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kotani Hiroaki, Kaida Suzue, Ishizuka Tomoya, Mieda Kaoru, Sakaguchi Miyuki, Ogura Takashi, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 57
2. 論文標題 Importance of the Reactant-State Potentials of Chromium(V)-Oxo Complexes to Determine the Reactivity in Hydrogen-Atom Transfer Reactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 13929 ~ 13936
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.8b02453	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshizawa Kazunari, Murata Hiroyuki, Tanaka Hiromasa	4. 巻 34
2. 論文標題 Density-Functional Tight-Binding Study on the Effects of Interfacial Water in the Adhesion Force between Epoxy Resin and Alumina Surface	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 14428 ~ 14438
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.8b02490	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kamachi Takashi, Siddiki S.M.A. Hakim, Morita Yoshitsugu, Rashed Md. Nurnobi, Kon Kenichi, Toyao Takashi, Shimizu Ken-ichi, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 303
2. 論文標題 Combined theoretical and experimental study on alcoholysis of amides on CeO ₂ surface: A catalytic interplay between Lewis acid and base sites	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Catalysis Today	6. 最初と最後の頁 256 ~ 262
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cattod.2017.09.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hori Yuta, Shiota Yoshihito, Tsuji Tomokazu, Kodera Masahito, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 57
2. 論文標題 Catalytic Performance of a Dicopper-Oxo Complex for Methane Hydroxylation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 8 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.7b02563	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Saegusa Yuta, Ishizuka Tomoya, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 122
2. 論文標題 NH Tautomerism of a QuadruPLY Fused Porphyrin: Rigid Fused Structure Delays the Proton Transfer	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 316 ~ 327
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b10945	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 El-Nahas Ahmed M., Staykov Aleksandar, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 121
2. 論文標題 Electrical Conductance and Diode-Like Behavior of Substituted Azulene	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2504 ~ 2511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.6b10339	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Morita Yoshitsugu, Oohora Koji, Sawada Akiyoshi, Kamachi Takashi, Yoshizawa Kazunari, Hayashi Takashi	4. 巻 56
2. 論文標題 Redox Potentials of Cobalt Corrinoids with Axial Ligands Correlate with Heterolytic Co-C Bond Dissociation Energies	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1950 ~ 1955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.6b02482	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshizawa Kazunari, Semoto Takayuki, Hitaoka Seiji, Higuchi Chisa, Shiota Yoshihito, Tanaka Hiromasa	4. 巻 90
2. 論文標題 Synergy of Electrostatic and van der Waals Interactions in the Adhesion of Epoxy Resin with Carbon-Fiber and Glass Surfaces	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 500 ~ 505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20160426	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hoshi Konoka, Tahara Atsushi, Sunada Yusuke, Tsutsumi Hironori, Inoue Ryoko, Tanaka Hiromasa, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Nagashima Hideo	4. 巻 90
2. 論文標題 -CAM Mechanisms for the Hydrogenation of Alkenes by cis- and trans-Disilametallacyclic Carbonyl Complexes (M = Fe, Ru, Os): Experimental and Theoretical Studies	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 613 ~ 626
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20170004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Wataru, Kotani Hiroaki, Ishizuka Tomoya, Ohkubo Kei, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Fukuzumi Shunichi, Kojima Takahiko	4. 巻 23
2. 論文標題 Thermodynamics and Photodynamics of a Monoprotonated Porphyrin Directly Stabilized by Hydrogen Bonding with Polar Protic Solvents	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 4669 ~ 4679
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201606012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Eizawa Aya, Arashiba Kazuya, Tanaka Hiromasa, Kuriyama Shogo, Matsuo Yuki, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 8
2. 論文標題 Remarkable catalytic activity of dinitrogen-bridged dimolybdenum complexes bearing NHC-based PCP-pincer ligands toward nitrogen fixation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 14874/1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/ncomms14874	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mori Kohsuke, Masuda Shinya, Tanaka Hiromasa, Yoshizawa Kazunari, Che Michel, Yamashita Hiromi	4. 巻 53
2. 論文標題 Phenylamine-functionalized mesoporous silica supported PdAg nanoparticles: a dual heterogeneous catalyst for formic acid/CO ₂ -mediated chemical hydrogen delivery/storage	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 4677 ~ 4680
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CC00864C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mahyuddin M. Haris, Staykov Aleksandar, Shiota Yoshihito, Miyanishi Mayuko, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 7
2. 論文標題 Roles of Zeolite Confinement and Cu-O-Cu Angle on the Direct Conversion of Methane to Methanol by [Cu ₂ (μ-O)] ²⁺ -Exchanged AEI, CHA, AFX, and MFI Zeolites	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 3741 ~ 3751
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.7b00588	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Fujita Daiki, Sugimoto Hideki, Shiota Yoshihito, Morimoto Yuma, Yoshizawa Kazunari, Itoh Shinobu	4. 巻 53
2. 論文標題 Catalytic C-H amination driven by intramolecular ligand-to-nitrene one-electron transfer through a rhodium(III) centre	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 4849 ~ 4852
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CC01840A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tsuji Yuta, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 121
2. 論文標題 Frontier Orbital Perspective for Quantum Interference in Alternant and Nonalternant Hydrocarbons	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9621 ~ 9626
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b02274	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wang Yue, Harada Takunori, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Wang Heng, Wang Sheng, Ye Xichong, Ogasawara Masamichi, Nakano Tamaki	4. 巻 7
2. 論文標題 Isolation and phototransformation of enantiomerically pure iridium(III) bis[(4,6-difluorophenyl)pyridinato-N,C2]picolinate	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 29550 ~ 29553
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7RA04141A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Tsuji Tomokazu, Zaoputra Antonius Andre, Hitomi Yutaka, Mieda Kaoru, Ogura Takashi, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Sato Hiroyasu, Kodera Masahito	4. 巻 56
2. 論文標題 Specific Enhancement of Catalytic Activity by a Dicopper Core: Selective Hydroxylation of Benzene to Phenol with Hydrogen Peroxide	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 7779 ~ 7782
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201702291	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Wataru, Kotani Hiroaki, Ishizuka Tomoya, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Kojima Takahiko	4. 巻 53
2. 論文標題 Formation of supramolecular hetero-triads by controlling the hydrogen bonding of conjugate bases with a diprotonated porphyrin based on electrostatic interaction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 6359 ~ 6362
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CC03635C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Arashiba Kazuya, Eizawa Aya, Tanaka Hiromasa, Nakajima Kazunari, Yoshizawa Kazunari, Nishibayashi Yoshiaki	4. 巻 90
2. 論文標題 Catalytic Nitrogen Fixation via Direct Cleavage of Nitrogen-Nitrogen Triple Bond of Molecular Dinitrogen under Ambient Reaction Conditions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1111 ~ 1118
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20170197	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ando Naoki, Fukazawa Aiko, Kushida Tomokatsu, Shiota Yoshihito, Itoyama Shuhei, Yoshizawa Kazunari, Matsui Yasunori, Kuramoto Yutaro, Ikeda Hiroshi, Yamaguchi Shigehiro	4. 巻 56
2. 論文標題 Photochemical Intramolecular C-H Addition of Dimesityl(hetero)arylboranes through a [1,6]-Sigmatropic Rearrangement	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 12210 ~ 12214
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201706929	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mahyuddin M. Haris, Shiota Yoshihito, Staykov Aleksandar, Yoshizawa Kazunari	4. 巻 56
2. 論文標題 Theoretical Investigation of Methane Hydroxylation over Isoelectronic [FeO] ₂ ⁺ and [MnO] ₂ ⁺ -Exchanged Zeolites Activated by N ₂ O	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 10370 ~ 10380
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.7b01284	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Toyao Takashi, Siddiki S. M. A. H., Morita Yoshitsugu, Kamachi Takashi, Touchy Abeda S., Onodera Wataru, Kon Kenichi, Furukawa Shinya, Ariga Hiroko, Asakura Kiyotaka, Yoshizawa Kazunari, Shimizu Ken ichi	4. 巻 23
2. 論文標題 Rhenium Loaded TiO ₂ : A Highly Versatile and Chemoselective Catalyst for the Hydrogenation of Carboxylic Acid Derivatives and the N Methylation of Amines Using H ₂ and CO ₂	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 14848 ~ 14859
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201702801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kawanami Toshio, Ishizuka Kentaro, Furuno Hiroshi, Shiota Yoshihito, Yoshizawa Kazunari, Inanaga Junji	4. 巻 28
2. 論文標題 Efficient ¹ H NMR chiral discrimination of sulfoxides caused by the dynamic nature of (R,R)-3,3'-biBINOL	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Tetrahedron: Asymmetry	6. 最初と最後の頁 1587 ~ 1590
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tetasy.2017.10.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 吉澤一成	4. 巻 37
2. 論文標題 第一原理計算による接着界面相互作用の研究	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 接着の技術誌	6. 最初と最後の頁 25-30
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計33件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 共役系の導電経路と伝導度に関する理論的研究
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀 幹矢、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 ルビジウム亜酸化物の電子状態に関する理論的研究
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Chisa Higuchi、Dragos Horvath、Gilles Marcou、Kazunari Yoshizawa、Alexandre Varnek
2. 発表標題 A QSPR Study of the Glass Transition Temperatures of Linear Polymers and Cross-linked Epoxy Resins
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉澤 一成
2. 発表標題 第一原理計算を用いた接着界面相互作用の分子論的理解
3. 学会等名 日本接着学会 研究会合同シンポジウム～「接着の未来」～（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 フロンティア軌道論に基づいた 共役系の伝導度と導電経路の関係性の解明
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀 幹矢、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 ルビジウム亜酸化物の理論的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 馬場 太基、村田 裕幸、辻 雄太、鶴見 直明、眞砂 紀之、吉澤 一成
2. 発表標題 金とエポキシ樹脂の界面における接着相互作用の理論的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樋口 千紗、Horvath Dragos、Marcou Gilles、吉澤 一成、Varnek Alexandre
2. 発表標題 高分子の2D化学構造に基づくガラス転移温度予測モデルの構築
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Orbital Concept for Methane Activation
3. 学会等名 APATCC 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉澤 一成
2. 発表標題 分子伝道の軌道理論
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 辻雄太、橋本航、吉澤一成
2. 発表標題 リチウムテトラライドの電子状態
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡澤一樹、辻雄太、吉澤一成
2. 発表標題 単分子並列回路におけるフロンティア軌道と伝導度の関係
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡澤 一樹、辻 雄太、吉澤 一成
2. 発表標題 フロンティア軌道論に基づく単分子並列回路の電気伝導の理論的研究
3. 学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 樋口 千紗、Dragos Horvath、Gilles Marcou、吉澤 一成、Alexandre Varnek
2. 発表標題 線形ポリマーとエポキシ樹脂のガラス転移温度予測
3. 学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉澤 一成
2. 発表標題 第一原理計算による接着界面相互作用に関する考察
3. 学会等名 接着・接合技術コンソーシアム 第6回企業ワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 三輪 哲也、Aleksander Staykov、吉澤 一成
2. 発表標題 金ナノ粒子担持層状複水酸化物ナノシート触媒を用いた酸素発生反応の量子化学的解析
3. 学会等名 第52回酸化反応討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazunari Yoshizawa
2. 発表標題 Orbital Concept for Methane Activation by Metal-Oxo Species: Enzyme to Surface
3. 学会等名 The 81st Okazaki Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 IMAMURA, Kenji; SHIOTA, Yoshihito; SHIMAKOSHI, Hisashi; HISAEDA, Yoshio; YOSHIZAWA, Kazunari
2. 発表標題 Theoretical study of Co-C bond dissociation reactions by B12-TiO2
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 (2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 EGI, Akihito; IKEDA, Kei; TANAKA, Hiromasa; SHIOTA, Yoshihito; ARIKAWA, Yasuhiro; YOSHIZAWA, Kazunari
2. 発表標題 Theoretical Study on the Reduction of Nitrite to Ammonia on a Diruthenium Complex
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 (2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 BABA, Taiki; MURATA, Hiroyuki; TSUJI, Yuta; TSURUMI, Naoaki; MASAGO, Noriyuki; YOSHIZAWA, Kazunari
2. 発表標題 Theoretical Study of Adhesion Stress between Au and Epoxy Resin
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 (2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 MIWA, Tetsuya; STAYKOV, Aleksandar; YOSHIZAWA, Kazunari
2. 発表標題 Catalysis of gold nanoparticles supported on a layered double hydroxide
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会 (2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉澤一成
2. 発表標題 第一原理計算による接着の分子論
3. 学会等名 高分子科学 (理研九大) ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 TSURUMI, Naoaki; MASAGO, Noriyuki; BABA, Taiki; MURATA, Hiroyuki; TSUJI, Yuta; YOSHIZAWA, Kazunari
2. 発表標題 A Study of Adhesion Interface about Die Bonding Structure with Conductive Silver Paste
3. 学会等名 2018 IEEE CPMT Symposium Japan (ICSJ) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Chisa Higuchi
2. 発表標題 Molecular Mechanism on the Reducion of Adhesion between Silica Surface and Epoxy Resin by interfacial Water
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 馬場太基, 村田裕幸, 辻雄太, 吉澤一成
2. 発表標題 Theoretical Study on the Adhesion Interaction at the Interface between Metal and Resin
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 村田裕幸, 辻雄太, 吉澤一成
2. 発表標題 Theoretical Study of the Influence of Temperature on Adhesion between Metal and Resin
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 樋口千紗, 田中宏昌, 吉澤一成
2. 発表標題 Theoretical Study on the Role of Hydrogen Bond in the Adhesion between Glass Surface and Epoxy Resin
3. 学会等名 IMCE 国際シンポジウム (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 樋口千紗, 田中宏昌, 吉澤一成
2. 発表標題 Molecular Understanding of Adhesion at Silica Surface/Epoxy Resin Interface: Effects of Interfacial Water Molecules
3. 学会等名 IRCCS The 1st International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 村田裕幸, 田中宏昌, 吉澤一成
2. 発表標題 吸着水の接着界面に及ぼす影響に関する理論的考察
3. 学会等名 IRCCS The 3rd Symposium
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 樋口千紗, 田中宏昌, 吉澤一成
2. 発表標題 ガラス表面とエポキシ樹脂の接着における吸着水の影響と水素結合の重要性
3. 学会等名 第66回高分子討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 村田裕幸, 辻雄太, 吉澤一成
2. 発表標題 アルミナ/エポキシ樹脂間の接着における温度の影響に関する理論的研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 樋口千紗, 田中宏昌, 吉澤一成
2. 発表標題 シリカ表面/エポキシ樹脂接着界面の吸着水が接着特性に与える影響
3. 学会等名 第68回コロナイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 吉澤一成
2. 発表標題 接着の分子機構
3. 学会等名 第66回高分子討論会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 田中宏昌, 村田裕幸, 吉澤一成	4. 発行年 2017年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 633
3. 書名 異種材料の接着・接合技術とマルチマテリアル化 第2節 接着の分子機構	

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 接着構造体、及び半導体モジュール	発明者 吉澤一成、辻雄太、 村田裕幸、馬場太 基、鶴見直明	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2018-037198	出願年 2018年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

九州大学先端物質化学研究所吉澤研究室ホームページ
<http://trout.scc.kyushu-u.ac.jp/yoshizawaJ/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----