

## 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：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K13710

研究課題名（和文）接着の分子論とその展開

研究課題名（英文）Molecular Theory of Adhesion and Its Development

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） 3,000,000円

研究成果の概要（和文）：量子化学計算を用いて、金属表面、炭素繊維表面およびガラス表面とエポキシ樹脂との接着相互作用に関する分子論的な研究を行い、水素結合が接着相互作用の要因になっていることを明らかにした。とくに接着界面に存在する吸着水の影響について理論的な考察を行った。計算モデルには接着剤分子としてビスフェノールA型のエポキシ樹脂を、被着材表面として水酸化された $\gamma$ -アルミナ面および同様に水酸化された炭素表面とシリカ表面を用いた。吸着水の層の厚みは接着力に極めて重要な効果を及ぼし、とくに吸着水の層の厚みが増すと界面の接着力が急激に低下することを理論的に明らかにした。

研究成果の概要（英文）：We have carried out theoretical studies of adhesion interactions of epoxy resin and metal surface, carbon surface, and glass surface using quantum chemical calculations, demonstrating that hydrogen bonding is a main factor for the adhesive interactions. In particular we considered effects of adsorbed water molecules on the adhesive surface. Our calculation models consist of epoxy resin of the bisphenol A type with hydroxylated alumina, carbon, and glass surfaces. Adsorbed water layers significantly weaken the adhesive forces.

研究分野：化学

キーワード：接着 量子化学 エポキシ樹脂

### 1. 研究開始当初の背景

接着現象は最も興味深い界面現象の一つである。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。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、接着がどのような界面相互作用により起こるのかは十分に明らかになっておらず、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これまでほとんど行われていない。

### 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。本研究では金属や炭素繊維などの被着材と接着剤との界面における引力的相互作用を量子化学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、接着の分子論的構築であり、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

本研究では金属や炭素繊維の接着性能の向上を目標として、これらの材料とエポキシ樹脂界面における接着機構に関する理論的研究を行う。具体的には量子化学計算を用いて接着界面での化学反応や分子間相互作用を解析し、接着による安定化のエネルギーや接着強度を理論的に評価する。一般に接着性を高めるための表面処理として酸化処理が用いられるが、それによって表面にヒドロキシル基、カルボキシル基、カルボニル基などの官能基が生成する。しかしながら、それぞれの官能基が接着性にどのように影響を与えるかは明らかになっていない。界面の接着として化学結合による接着と分子間相互作用による接着が考えられる。酸化処理によって炭素繊維表面に生じる酸素原子を含む官能基は反応性が高く、エポキシ樹脂のヒドロキシル基やエポキシ基と反応し、化学結合を形成することで接着に寄与することが考えられる。一方で、極性をもつこれらの官能基による水素結合や  $\pi$ - $\pi$  相互作用といった分子間相互作用による接着機構も考えられる。本研究では、エネルギー分割計算により接着界面における接着機構の解明を行う。金属材料は一般に常温、空气中で表面に酸化被

膜を形成し、その上に水酸基等の官能基の層を形成している。これらの官能基により空気中の水分子は吸着され、数原子層程度の水分子の層を形成すると考えられる。表面に1分子層程度の水を吸着した金属表面と接着剤樹脂との接着機構を密度汎関数計算により解析し、接着剤樹脂がもつヒドロキシル基やエーテル基といった親水基と、金属表面の水酸基とが水分子を介して水素結合ネットワークを形成することを示す。この場合、表面の水分子が被着材と接着剤の界面の剥離に対して構造を緩和し、接着力に大きな影響を及ぼすと予想される。その結果、被着材表面に吸着した水分子は接着機構を変えて、接着による安定化のエネルギーや接着力に重大な影響を与えると考えられる。

### 4. 研究成果

理論計算による接着機構の解析は今まではほとんど行われていなかったが、近年の計算機や計算理論の進歩により表面や界面といった大規模系の計算が可能となった。今年度は量子化学計算を用いて、金属表面とエポキシ樹脂系接着剤およびガラス表面とエポキシ樹脂との接着相互作用に関する分子論的な研究を世界に先駆けて行い、水素結合が接着相互作用の要因になっていることを明らかにした。とくに接着界面に存在する吸着水の影響について理論的な考察を行った。計算モデルには接着剤分子としてビスフェノール A 型のエポキシ樹脂を、被着材表面として水酸化された  $\gamma$ -アルミナ面および同様に水酸化されたシリカ表面を用いた。接着界面に働く接着力は接着強度に強く関係すると考えられるが、実験による接着強度の測定では、濡れの不完全さや、被着材や接着剤の内部応力により原子間にはたらく最大接着力は過小評価されてしまう。そこで、理論計算から独自の手法を提案し、最大接着力を理論的に求めることに成功した。吸着水の層の厚みは接着力に極めて重要な効果を及ぼし、とくに吸着水の層の厚みが増すと界面の接着力が急激に低下することを理論的に明らかにした。この理論結果は接着現象の理解に資するものである。

### 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)"TiO<sub>2</sub>-Supported Re as a General and Chemoselective Heterogeneous Catalyst for Hydrogenation of Carboxylic Acids to Alcohols"  
 T. Toyao, S. M. A. H. Siddiki, A. S. Touchy, W. Onodera, K. Kon, Y. Morita, T. Kamachi, K. Yoshizawa, and K. Shimizu, Chem. Eur. J., 23, 1001-1006 (2017)  
 DOI:10.1002/chem.201604762

Selected as "Cover Article"

(2)"Anisotropic Change in Magnetic Susceptibility of a Dynamic Single Crystal of Cobalt(II) Complex"

Z.-S. Yao, S.-Q. Wu, Y. Kitagawa, S.-Q. Su, Y.-G. Huang, G.-L. Li, Z.-H. Ni, H. Nojiri, Y. Shiota, K. Yoshizawa, S. Kang, S.

Kanegawa, O. Sato, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 717-721 (2017)

DOI:10.1002/anie.201606165

(3)"Acid-Base Properties of a Freebase Form of a Quadruply-Ring-Fused Porphyrin—Stepwise Protonation Induced by Rigid Ring-Fused Structure"

Y. Saegusa, T. Ishizuka, Y. Shiota, K. Yoshizawa, T. Kojima, *J. Org. Chem.*, **82** (1), 322-330 (2017)

DOI:10.1021/acs.joc.6b02419

(4)"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

(5)"Redox Potentials of Cobalt Corrinoids with Axial Ligands Correlate with Heterolytic Co–C Bond Dissociation Energies"

Y. Morita, K. Oohora, A. Sawada, T. Kamachi, K. Yoshizawa, T. Hayashi, *Inorg. Chem.*, **56** (4), 1950-1955 (2017)

DOI:10.1021/acs.inorgchem.6b02482

(6)"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"

(7)" $\sigma$ -CAM Mechanisms for the Hydrogenation of Alkenes by cis- and trans-Disilametallacyclic Carbonyl Complexes (M = Fe, Ru, Os): Experimental and Theoretical Studies"

K. Miyamoto, A. Tahara, Y. Sunada, H. Tutumi, R. Inoue, H. Tanaka, Y. Shiota, K. Yoshizawa, and H. Nagashima, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **90** (5), 613-626 (2017)

DOI:10.1246/bcsj.20170004

"BCSJ Award"

(8)"Thermodynamics and Photodynamics of a Monoprotonated Porphyrin Directly Stabilized by Hydrogen Bonding with Polar Protic Solvents"

W. Suzuki, H. Kotani, T. Ishizuka, K. Ohkubo, Y. Shiota, K. Yoshizawa, S. Fukuzumi, and T. Kojima, *Chem. Eur. J.*, **23** (19), 4669-4679 (2017)

DOI:10.1002/chem.201606012

(9)"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

(10)"Phenylamine-functionalized mesoporous silica supported PdAg nanoparticles: a dual heterogeneous catalyst for the formic acid/CO<sub>2</sub>-mediated chemical hydrogen delivery/storage"

Kohsuke Mori, Shinya Masuda, Hiromasa Tanaka, K. Yoshizawa, Michel Che, and Hiromi Yamashita, *Chem. Commun.*, **53**, 4677-4680 (2017)

DOI:10.1039/C7CC00864C

(11)"Electrical conductivity of dithiophene-based diblock molecular Junctions"

A. El-Nahas, A. Gamea, M. M. El-Hendawy, and K. Yoshizawa, *Comp. Theoret. Chem.*, **1099**, 64-74 (2017)

DOI:10.1016/j.comptc.2016.11.012

(12)"Persistent Four-Coordinate Iron-Centered Radical Stabilized by p-Donation"

Y. Sunada, S. Ishida, F. Hirakawa, Y. Shiota, K. Yoshizawa, S. Kanegawa, O. Sato, H. Nagashima, and T. Iwamoto, *Chem. Sci.*, **7**, 191-198 (2016)

DOI:10.1039/C5SC02601F

(13)"Heterometallic FeIII/K coordination polymer with a wide thermal hysteretic spin transition around room temperature"

S. Kang, Y. Shiota, A. Kariyazaki, S. Kanegawa, K. Yoshizawa, and O. Sato, *Chem. Eur. J.*, **22**, 532-538 (2016)

DOI:10.1002/chem.201680262

(14)"Synthesis and Structure of a Water-soluble m-h1: h1-N<sub>2</sub> Dinuclear RuII Complex with a Polyamine Ligand"

K. Yoshimoto, T. Yatabe, T. Matsumoto, A. Robertson, H. Nakai, H. Tanaka, T. Kamachi, Y. Shiota, K. Yoshizawa, K.

Asazawa, H. Tanaka, and Seiji Ogo, *Chem. Lett.*, **45**, 3277-3284 (2016)

DOI:10.1039/C5DT04109K

(15)"Intraprotein transmethylation via a CH<sub>3</sub>-Co(III) species in myoglobin reconstituted with a cobalt corrinoid complex"

Y. Morita, K. Ohora, A. Sawada, K. Doitomi, T. Kamachi, K. Yoshizawa, Y. Hisaeda, and T. Hayashi, *Dalton Trans.*, **45**, 3277-3284

- (2016)  
DOI:10.1039/C5DT04109K  
(16)"A New Family of Anionic FeIII Spin Crossover Complexes Featuring a Weak-field N2O4 Coordination Octahedron"  
K. Takahashi, K. Kawamukai, M. Okai, T. Mochida, T. Sakurai, H. Ohta, T. Yamamoto, Y. Einaga, Y. Shiota, and K. Yoshizawa, *Chem. Eur. J.*, 22, 1253-1257 (2016)  
DOI:10.1002/chem.201504883  
(17)"Crystal Structures and Coordination Behavior of Aqua- and Cyano-Co(III) Tetrahydrocorrins in the Heme Pocket of Myoglobin"  
Y. Morita, K. Oohora, E. Mizohata, A. Sawada, T. Kamachi, K. Yoshizawa, T. Inoue, and T. Hayashi, *Inorg. Chem.*, 55, 1287-1295 (2016)  
DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b02598  
(18)"The chemistry of benzodisilacyclobutenes and benzobis(disilacyclobutene)s: New development of transition-metal-catalyzed reactions, stereochemistry and theoretical studies"  
M. Ishikawa, A. Naka, and K. Yoshizawa, *Dalton Trans.*, 45, 3210-3235 (2016)  
DOI:10.1039/C5DT04569J  
(19)"Homogeneous Photocatalytic Water Oxidation with a Dinuclear Co(III)-Pyridylmethylamine Complex"  
T. Ishizuka, A. Watanabe, H. Kotani, K. Satonaka, T. Wada, Y. Shiota, K. Yoshizawa, K. Ohara, K. Yamaguchi, S. Kato, S. Fukuzumi, and T. Kojima, *Inorg. Chem.*, 55, 1154-1164 (2016)  
DOI:10.1021/acs.inorgchem.5b02336  
(20)"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  
(21)"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  
(22)"Thermal behavior of benzobis(tetraethylidisilacyclobutene)"  
A. Naka, K. Yoshizawa, and M. Ishikawa, *Zeitschrift für Naturforschung B*, 71, 227-230 (2016)  
DOI:10.1515/znb-2015-0155  
(23)"Formation and high reactivity of anti-dioxo form of high-spin  $\mu$ -oxodioxodiiron(IV) as the active species that cleaves strong C-H bonds"  
M. Kodera, S. Ishiga, Y. Kawahara, T. Tsuji, K. Sakurai, Y. Hitomi, Y. Shiota, P. K. Sajith, K. Yoshizawa, K. Mieda, T. Ogura, *Chem. Eur. J.*, 22, 5924-5936 (2016)  
DOI:10.1002/chem.201600048  
(24)"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  
(25)"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  
(26)"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  
(27)"Unsymmetrical PNP-Pincer Type Phosphaalkene Ligands Protected by a Fused-Ring Bulky Eind Group: Synthesis and Applications to Rh(I) and Ir(I) Complexes"  
H. Taguchi, D. Sasaki, K. Takeuchi, S. Tsujimoto, T. Matsuo, H. Tanaka, K. Yoshizawa, and F. Ozawa, *Organometallics*, 35, 1526-1533 (2016)  
DOI:10.1021/acs.organomet.6b00113  
(28)"Computational Study of Cyclobutane-1,3-diylidene Dicarbenes: Ground-State Spin Multiplicity and New Strategy Toward the Synthesis of Bicyclo[1.1.0]but-1(3)-enes"  
Y. Fujita, M. Abe, Y. Shiota, T. Suzuki, and K. Yoshizawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 89, 770-778 (2016)  
DOI:10.1246/bcsj.20160051  
"Selected Paper"  
(29)"The Role of Coulombic Interactions for Spin Crossover Behaviors and Crystal Structural Transformation in Novel Anionic Fe(III) Complexes from a  $\pi$ -Extended ONO Ligand"  
S. Murata, K. Takahashi, T. Sakurai, H. Ohta, T. Yamamoto, Y. Einaga, Y. Shiota, K. Yoshizawa, *Crystals*, 6, 49-64 (2016)  
DOI:10.3390/cryst6050049

- (30)"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"
- (31)"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
- (32)"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
- (33)"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
- (34)"An Azulene-Fused Tetracene Diimide with a Small HOMO-LUMO Gap"  
T. Koide, M. Takesue, T. Murafuji, K. Satomi, Y. Suzuki, J. Kawamata, K. Terai, M. Suzuki, H. Yamada, Y. Shiota, K. Yoshizawa, and F. Tani, *ChemPlusChem*, 81-86 (2016)  
DOI:10.1002/cplu.201600356
- (35)"Direct Transformation of Molecular Dinitrogen into Ammonia Catalyzed by Cobalt-Dinitrogen Complexes Bearing Anionic PNP-Pincer Ligand"  
S. Kuriyama, K. Arashiba, H. Tanaka, Y. Matsuo, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 14291-14295 (2016)  
DOI:10.1002/anie.201606090
- (36)"Azaferrocene-Based PNP-type Pincer Ligand: Synthesis of Molybdenum, Chromium, and Iron Complexes and Reactivity toward Nitrogen Fixation"  
S. Kuriyama, K. Arashiba, K. Nakajima, H. Tanaka, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Eur. J. Inorg. Chem.*, 4856-4861 (2016)  
DOI:10.1002/ejic.201601051
- (37)"A Ruthenium(III)-Oxyl Complex Bearing a Strong Radical Character"  
Y. Shimoyama, T. Ishizuka, H. Kotani, Y. Shiota, K. Yoshizawa, K. Mieda, T. Ogura, T. Okajima, T. Kojima, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 14041-14045 (2016)  
DOI:10.1002/anie.201607861
- (38)"Push-pull fluorenones and benzazulenequinones: unprecedented regioselective [4 + 2] and [2 + 2] cycloadditions of benzopentalenequinone derivative and alkynes bearing an aniline moiety"  
S. Kato, T. Kijima, Y. Shiota, T. Yoshihara, S. Tobita, K. Yoshizawa, and Y. Nakamura, *Tetrahedron Lett.*, 57, 4604-4607 (2016)  
DOI:10.1016/j.tetlet.2016.09.002
- (39)"Thermally induced intra-carboxyl proton shuttle in a molecular rack-and-pinion cascade achieving macroscopic crystal deformation"  
Y.-G. Huang, Y. Shiota, S.-Q. Su, S.-Q. Wu, Z.-S. Yao, G.-L. Li, S. Kanegawa, S. Kang, T. Kamachi, K. Yoshizawa, K. Ariga, and O. Sato, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 55, 14628-14632 (2016)  
DOI:10.1002/anie.201607886
- (40)"Push-pull fluorenones and benzazulenequinones: regioselective [4 + 2] and [2 + 2] cycloadditions of benzopentalenequinone derivative and alkynes bearing an aniline moiety"  
S. Kato, T. Kijima, Y. Shiota, T. Yoshihara, S. Tobita, K. Yoshizawa, and Y. Nakamura, *Tetrahedron Lett.*, 57, 4604-4607 (2016)  
DOI:10.1016/j.tetlet.2016.09.002
- (41)"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
- (42)"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
- (43)"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  
(44)"Theoretical Study of the Catalytic Hydrogenation of Alkenes by a Disilaferracyclic Complex: Can the Fe-Si s-Bond-assisted Activation of H-H Bonds Allow Development of an Efficient Catalysis of Iron?"  
A. Tahara, H. Tanaka, Y. Sunada, Y. Shiota, K. Yoshizawa, and H. Nagashima, J. Org. Chem., 81, 10900-10911 (2016)  
DOI:10.1021/acs.joc.6b01961  
(45)"分子動力学計算による樹脂界面の接着機構の解析"  
瀬本貴之, 山内毅, 吉澤一成, 日本接着学会誌, 51, 80-88(2015)  
(46)"接着現象に残された謎への挑戦"  
吉澤一成, 化学, 70, 12-16(2015)

〔学会発表〕(計10)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, "Participation of multi-oxidants in the pH dependence of the reactivity of ferrate(VI)", 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 Dioxygen 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所改組記念講演会, 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

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)

〔その他〕  
ホームページ等  
<http://trout.scc.kyushu-u.ac.jp/yoshizawaJ/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