

吉田紀生 Norio Yoshida
九州大学大学院理学研究院化学部門准教授
Email address: noriwo@chem.kyushu-univ.jp



【専門】 理論化学

- 1973年4月 群馬県生まれ：高崎高等学校卒業
2003年3月 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了(加藤重樹教授)
2003年4月 株式会社富士総合研究所 研究員
2004年4月 分子科学研究所 博士研究員
2007年7月 分子科学研究所 助教
2012年2月 九州大学高等研究院 准教授
2017年1月 現職

【プロジェクト、官公庁委員、編集委員など】

日本化学会九州支部会計幹事(2018年4月-2019年3月)

革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラの構築次世代スーパーコンピュータ戦略分野2
「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ・特別支援課題(2011年4月～2016年3月)

【受賞】 溶液化学研究会奨励賞(2011年)

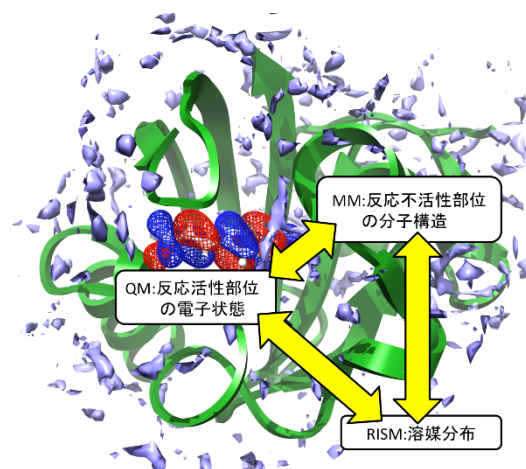
【趣味】 釣り

主な研究テーマと成果

1. 液体の統計力学理論と量子化学理論の融合による 溶液内分子の電子状態理論の開発(2000年～)

JCP 2000, 113, 4974; *JML* 2011, 159, 93; *JCP* 2014, 140, 214118. など

- 液体の分布関数理論 (RISM、3D-RISM、MOZ理論など) と量子化学手法を組み合わせた手法を開発し、さまざまな溶液内化学反応への応用を可能とした
- MOZ-SCF理論: 溶媒の配向を露わに考慮したMOZ法との組み合わせにより、高精度な記述を可能とした
- QM/MM/RISM理論: QM/MM法とRISM理論の融合により、生体分子の電子状態が記述可能とした
- FMO/3D-RISM理論: フラグメント分子軌道法を組み合わせることで、生体分子の全電子状態を記述可能とした

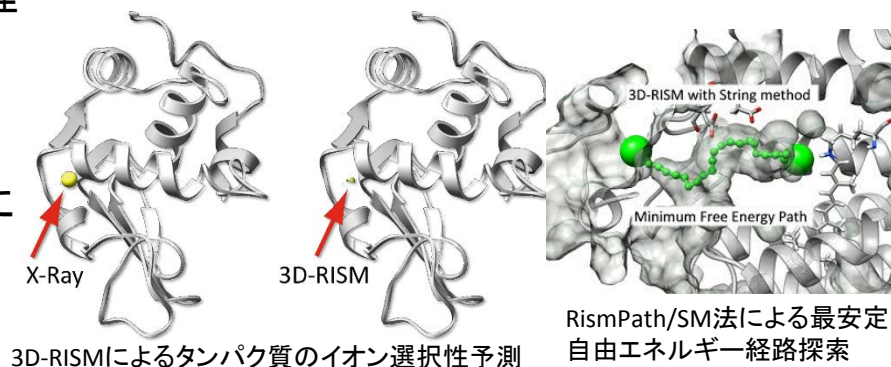


QM/MM/RISM法では系を3つの層に分けそれぞれをself-consistentに解く

2. 液体の統計力学理論を基盤とした生体分子の分子認識と機能の 解析手法の開発(2006年～)

JACS 2006, 128, 12042; *JACS* 2009, 131, 3852; *JCTC* 2011, 7, 3803; *CPL* 2018, 699, 22. など

- 生体分子の溶媒和分布関数理論である3D-RISM理論をタンパク質の分子認識へ適用し、分子認識部位の特定、選択性の予測を可能とした
- イオンチャネルの選択性、薬剤分子の認識における置換基効果、変異による選択性の変化の解析に適用した
- 3D-RISMの分布関数からタンパク質内物質輸送の最小自由エネルギー経路の探索も可能とした



3D-RISMによるタンパク質のイオン選択性予測

RismPath/SM法による最安定自由エネルギー経路探索