尤禎祥 博士

Email: jsyu@mail.nctu.edu.tw
聯絡電話: 886-3-5712121 ext 56962 (office) 56964 (Lab)
個人網頁: http://wild.life.nctu.edu.tw/~jsyu

現職

職稱	服務機構
副教授	國立交通大學生物科技學系暨研究所
	國立交通大學生物資訊研究所

參與之研究所與研究生學程

Bioinformatics and System Biology;
Molecular Biomedical Science and Bioengineering

學歷

學位	學校	學系	畢業年份
博士	國立清華大學	化學	2002
碩士	國立清華大學	原子科學	1997
學士	國立清華大學	化學	1995

經歷

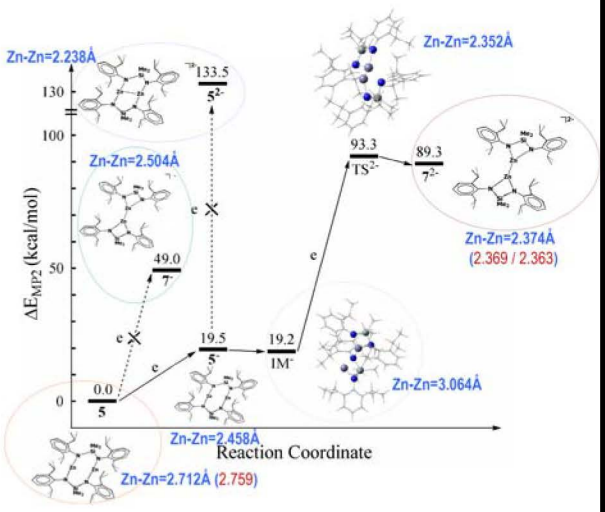
職稱	服務機構	到任年份	離職年份
副教授	國立交通大學生物科技學系	2012/08	迄今
助理教授	國立交通大學生物科技學系	2007/08	2012/07
博士後研究員	日本京都大學合成暨生物化學系	2006/11	2007/03
博士後研究員	國立交通大學生物科技學系	2002/10	2007/07
博士後研究員	國立清華大學資訊系	2002/10	2003/10

研究領域

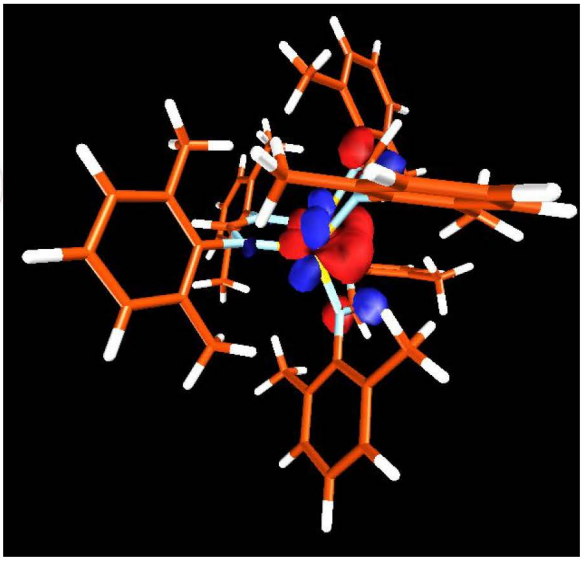
1. 理論配位化學
2. 計算化學
3. 物理化學
4. 分子模擬
5. 高速計算效能評比

重要研究成果

理論配位化學：以量子化學理論研究過渡金屬配位化合物的多重鍵結性質與反應途徑，及配位化學在金屬蛋白研究上之應用。

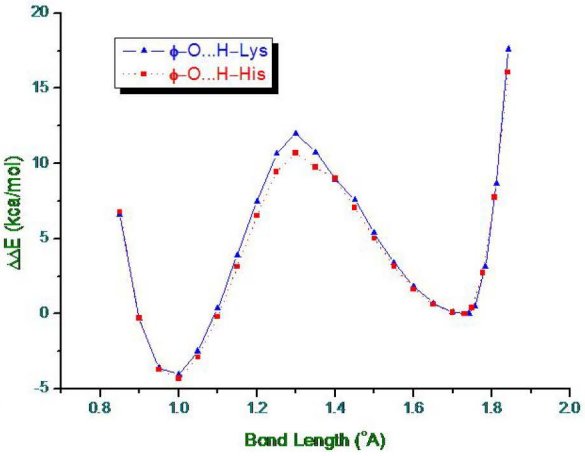


一價雙鋅鍵之還原反應位能面



雙鉻五重鍵之δ 鍵 (HOMO)

蛋白質結構與反應之理論：利用各種計算化學方法，如全初始化理論(*ab initio*)、密度泛函理論(density function theory)、半經驗理論(semi-empirical methods)以及分子力學(molecular mechanics)等理論或其混合方法，探討蛋白質構形與相關生化反應的理論性質。



Estrogen sulfotransferase 與 4-nitrophenol 間之氫鍵能量

分子光譜模擬：在分子光譜實驗中，常需要藉由理論計算來輔助實驗數據的分析與解釋。應用數學點群、對稱性與分子軌域理論的結合，有助於同步輻射實驗中的光離子化(photoionization)的游離能計算、以及一般紫外光/可見光譜中的電子躍遷軌域指認。配以適當的半經驗模型，更可用來預測有機分子材料之光電性質。

代表著作 (papers)

1. Z.-S. Lin, T.-W. Chiou, K.-Y. Liu, C.-C. Hsieh, J.-S. K. Yu*, and W.-F. Liaw*, *A Dinitrosyliron Complex within the Homoleptic $Fe(NO)_4$ Anion: NO as Nitroxyl and Nitrosyl Ligands within a Single Structure*, Inorg. Chem., **51,** 10092-10094 (2012).
2. H.-Z. Chen, S.-C. Liu, C.-H. Yen, J.-S. K. Yu*, Y.-J. Shieh, T.-S. Kuo, and Y.-C. Tsai*, *Reactions of Metal–Metal Quintuple Bonds with Alkynes: [2+2+2] and [2+2] Cycloadditions*, Angew. Chem. Int. Edit., **51,** 10342-10346 (2012).
3. Y.-L. Huang, D.-Y. Lu, H.-C. Yu, J.-S. K. Yu, T.-S. Kuo, G.-H. Lee, Y. Wang, and Y.-C. Tsai*, *Stepwise Construction of the Cr-Cr Quintuple Bond and Its Destruction upon Axial Coordination*, *Angew. Chem. Int. Edit.*, **51,** 7781-7785 (2012).
4. I.-Y. Chang, and J.-S. K. Yu*, *A Theoretical Revisit to the Lowest Ionization Potentials in Metal-Metal Bonds*, Chem. Eur. J., **18,** 9189-9193 (2012).
5. S.-C. Liu, W.-L. Ke, J.-S. K. Yu*, T.-S. Kuo, and Y.-C. Tsai*, *An Electron-Rich Molybdenum –Molybdenum Quintuple Bond Spanned by One Lithium Atom*, Angew. Chem. Int. Edit., **51,** 6394-6397 (2012).
6. D.-Y. Lu, J.-S. K. Yu, T.-S. Kuo, G.-H Lee, Y. Wang, and Y.-C. Tsai*, *Theory-Guided Experiments on the Mechanistic Elucidation of the Reduction of Dinuclear Zinc, Manganese, and Cadmium Complexes*, Angew. Chem. Int. Edit., **50,** 7611-7615 (2011).
7. C.-W. Hsu, J.-S. K. Yu, C.-H. Yen, G.-H. Lee, Y. Wang and Y.-C. Tsai, *Quintuply-Bonded Dichromium(I) Complexes Featuring Metal-Metal Bond Lengths of 1.74 Å*, Angew. Chem. Int. Edit., **47,** 9933-9936 (2008).
8. Y.-C. Tsai, C.-W. Hsu, J.-S. K. Yu, G.-H. Lee, Y. Wang and T.-S. Kuo, *Remarkably Short Metal-Metal Bonds: A Lantern-Type of Quintuply-Bonded Dichromium(I) Complex*, Angew. Chem. Int. Edit., **47**, 7250-7253 (2008).
9. Y.-C. Tsai, D.-Y. Lu, Y.-M. Lin, J.-K. Hwang and J.-S. K. Yu, *Structural Transformations in Dinuclear Zinc Complexes Involving Zn-Zn Bonds*, Chem. Commun., 4125-4127 (2007).
10. Y.-C. Tsai, Y.-M. Lin, J.-S. K. Yu and J.-K. Hwang, *A Three-Coordinate and Quadruply Bonded Mo-Mo Complex*, J. Am. Chem. Soc., **128**, 13980-13981 (2006).
11. J.-S. K. Yu, J.-K. Hwang, C. Y. Tang and C.-H. Yu, *Numerical Performance and Throughput Benchmark for Electronic Structure Calculations in PC-Linux Systems with New Architectures, Updated Compilers and Libraries*, J. Chem. Inf. Comput. Sci., **44**, 635-642 (2004).
12. J.-S. K. Yu, W.-C. Chen and C.-H. Yu, *Time-Dependent Density Functional Study of Electroluminescent Polymers*, J. Phys. Chem. A., **107**, 4268-4275 (2003).