

# 凝縮系（生体分子や溶液）の構造や ダイナミクスに関する理論的研究

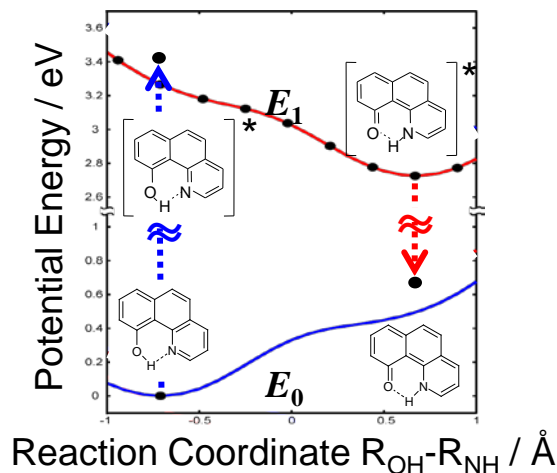
理論・計算分子科学研究領域  
齊藤グループ

凝縮系のダイナミクスは、  
多数の粒子間の非線形相互作用により引き起こされ、  
相互作用と熱揺らぎの大小関係により運動の様相が大きく変化。  
とくに、生体分子など（熱揺らぎ～相互作用）では、  
時間的・空間的に複雑で階層的な運動を示す。

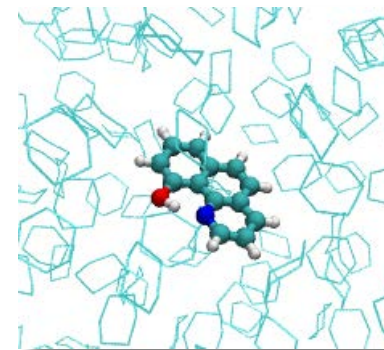
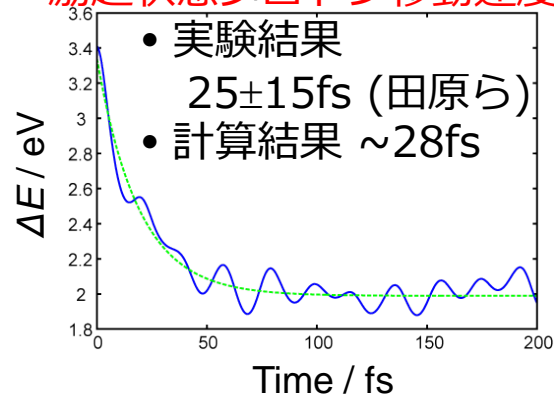
液体やタンパク質における反応ダイナミクスの解析  
非線形分光に基づく分子運動の揺らぎ・緩和ダイナミクスの解析  
時間・空間的に不均一な系の構造・状態変化ダイナミクスの解析

# 研究例：液体やタンパク質における反応ダイナミックスの解析

## 10-HBQの $S_0$ 、 $S_1$ ポテンシャル面

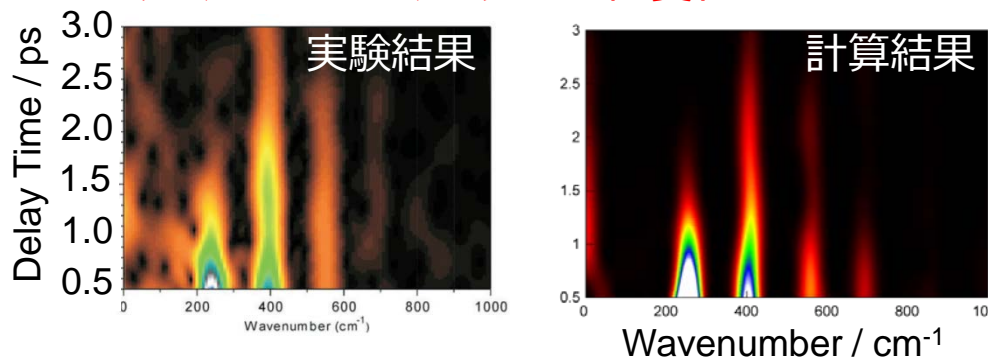


## 励起状態プロトン移動速度



シクロヘキサン中の  
10-Hydroxybenzo[h]quinoline  
(10-HBQ)

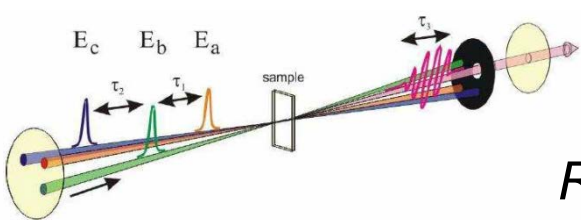
## 光励起後の振動成分の時間変化



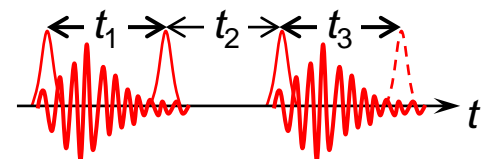
多次元ポテンシャル面を構築し、  
光励起後の反応ダイナミックスの  
分子論的起源を解析

溶媒により面外運動の抑制、溶媒の分子間モードに緩和  
→溶媒の有無に依存するエネルギー緩和過程

# 研究例：非線形分光に基づく分子運動の解析

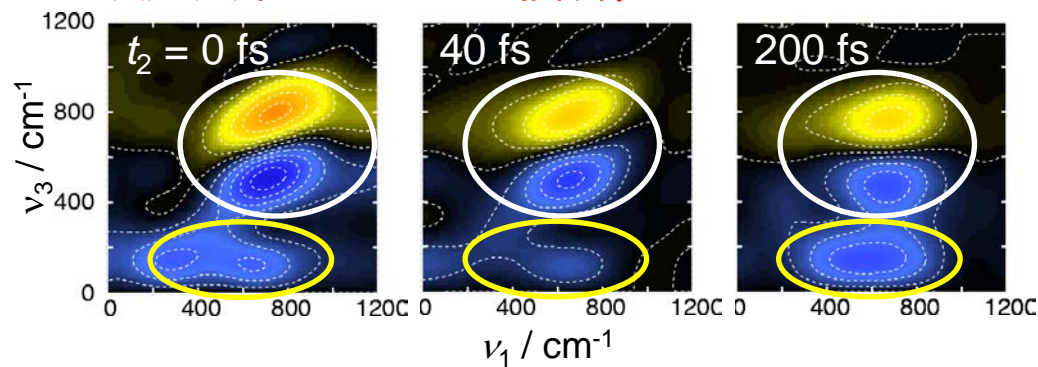


三次非線形分光法に対する  
*ab initio*的理論計算手法の開発



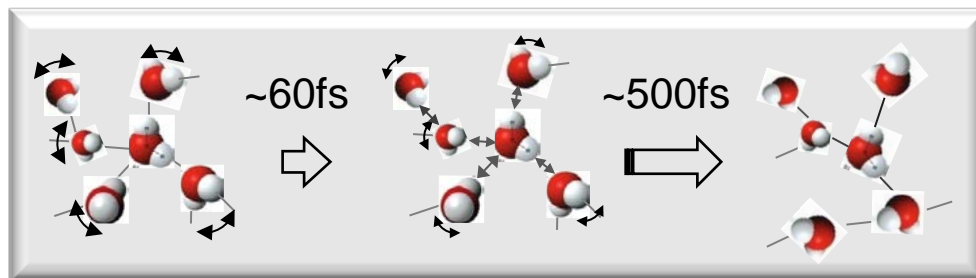
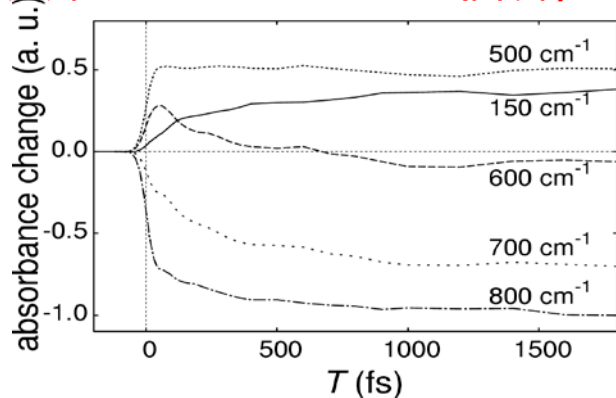
$$R(t_1, t_2, t_3) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 [[M(t_1 \ t_2 \ t_3), M(t_1 \ t_2)], M(t_1)], M(0)]$$

## 2次元赤外スペクトル (計算)



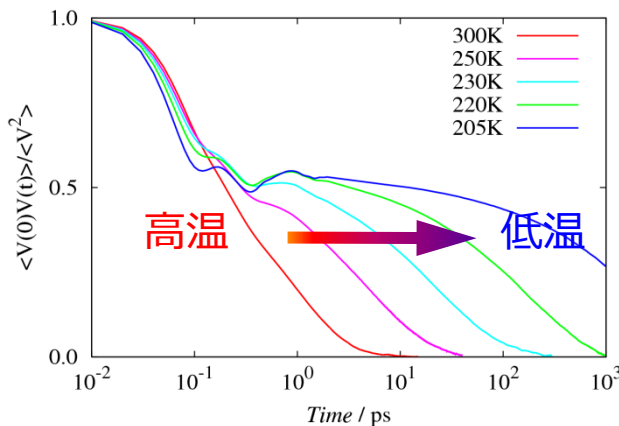
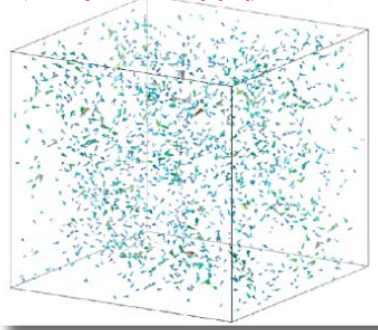
平衡運動の  
速い不均一性の速い減衰 (上) と  
エネルギー緩和 (下) は  
並進運動とのカップリングによる

## 赤外ポンプ・プローブ (計算)

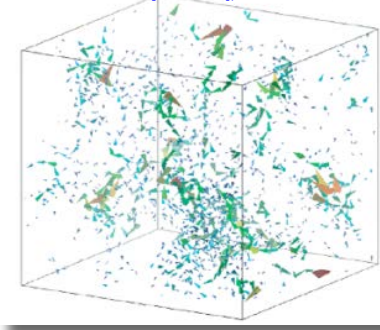


# 研究例：不均一な系の構造・状態変化ダイナミクスの解析

通常の液体状態

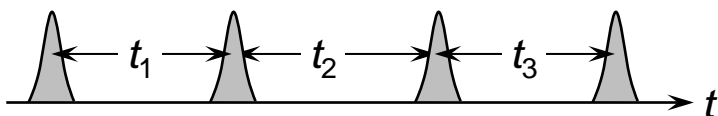


過冷却状態



液体状態：  
指数関数的減衰

過冷却液体状態、高分子、  
生体分子など：非指数関数的減衰  
←不均一ダイナミクス  
従来解析では均一・不均一  
ダイナミクスの区別は不可能

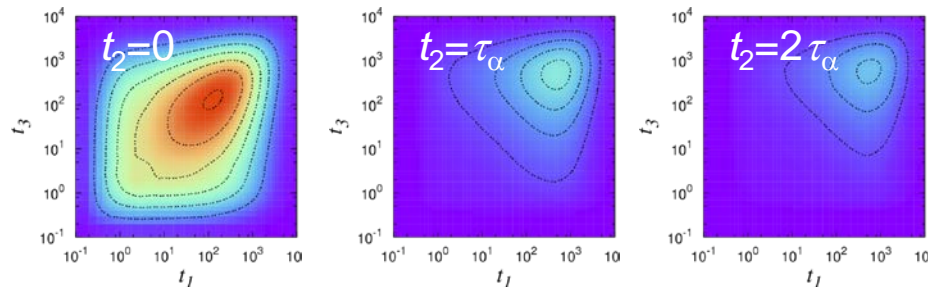


$$\Delta F_{A_k B_{k'}}(t_1, t_2, t_3) \\ \equiv \langle A_k(0) A_k^*(t_1) B_{k'}(t_1 + t_2) B_{k'}^*(t_1 + t_2 + t_3) \rangle \\ - \langle A_k(0) A_k^*(t_1) \rangle \langle B_{k'}(t_2) B_{k'}^*(t_2 + t_3) \rangle$$

分散の相関関数

→不均一性の寿命

→ $\tau_\alpha$ よりも遅い相関時間スケールの存在



# 体験入学プログラム例

## タンパク質を「見て」・「触ってみる」

- 結晶構造の「可視化」
- 構造を動かして・見てみる

## タンパク質を「動かしてみる」

- シミュレーションを仕組みを学ぶ
- シミュレーションを流す

## タンパク質の動きを「解析してみる」

- シミュレーション結果の解析・考察
- ダイナミクスと機能の相関は？

