



## 岡崎 進 (教授)

1977年京都大学工学部工業化学科卒業 1982年同大学院博士課程修了、工学博士 大阪工業技術試験所、東京工業大学助手、助教授を経て2001年10月より現職  
TEL: 0564-55-7460  
FAX: 0564-55-7025  
電子メール: okazaki@ims.ac.jp

専  
門  
領  
域

構造分子科学専攻

分子動力学法やモンテカルロ法など計算機シミュレーションの手法を用い、方法論の開発も含めて、様々な凝集系の構造や動力学に対する分子レベルからの研究を行っている。

### I. 量子化された系の計算機シミュレーション

#### 溶液中における溶質の分子振動量子動力学

分子振動緩和や振動状態間デコヒーレンスなど、溶液中における溶質の量子動力学を取り扱うことのできる計算機シミュレーション手法の開発を進めている。これまですでに、経路積分影響汎関数理論に基づいた方法論や、量子 - 古典混合系近似に従った方法論を展開してきており、これらにより、溶液中における量子系の非断熱な時間発展を分子レベルで解析している。

#### 溶液中におけるプロトン移動の量子動力学

量子 - 古典混合系近似に基づいて、水溶液中における分子内プロトン移動の量子動力学シミュレーションを行っている。これにより、振動励起に端を発した熱的移動と溶媒分子の運動との相関など、移動機構について分子レベルでの動的解析を行っている。

### II. 複雑な古典凝集系の計算機シミュレーション

#### ミセル生成の分子論

イオン性、非イオン性の両親媒性分子が水溶液中に生成する球状ミセル、棒状ミセルなどに対し、熱力学的積分法に基づいたシミュレーションからの自由エネルギー計算により、安定性のミセルサイズ依存性の検討を進めている。また、これらミセルの構造と動力

学について、集団運動にも注目しながら詳細な解析を進めている。

#### 生体膜

水中において異方性を示し、かつ不均一系を構成する脂質二重層膜に対し、膜の構造や動力学の分子論的解析を行ってきた。一方で、単純なイオンチャンネルを埋め込んだ系に対しても予備的な分子動力学シミュレーションを試み、さらには細胞の単純モデルであるベシクルへの展開も大規模高並列演算に基づいて検討している。

#### タンパク質の機械的一分子操作

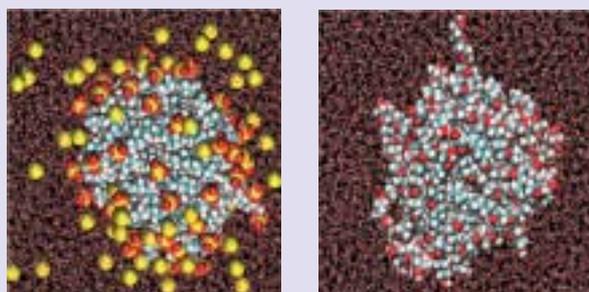
非接触型原子間力顕微鏡の機構を利用して試みられつつあるタンパク質の機械的延伸実験に対応した分子動力学シミュレーションを行っている。これにより、延伸実験で測定される力のプロファイルの分子論的な意味を明らかにするとともに、タンパク質の安定構造や準安定構造を人工的に積極的に生成させ得る機械的な一分子操作の可能性について検討を進めている。

#### 超臨界流体の構造と動力学

超臨界流体の示す構造と動力学について、大規模系に対する分子動力学シミュレーションを実施し、臨界タンパク光の発生に対応する強い小角散乱や臨界減速などを良好に再現した上で、流体中に生成されるクラスターの構造と動力学について詳細な検討を行ってきた。

#### 参考文献

- 1) T. Mikami and S. Okazaki, "Path integral influence functional theory of dynamics of coherence between vibrational states of solute in condensed phase," *J. Chem. Phys.* **121**, 10052-10064 (2004).
- 2) 長岡正隆、岡崎 進, 「実験化学講座」12, 計算化学, 丸善, 315-365 (2004).
- 3) 岡崎 進、岡本祐幸編, 化学フロンティア「生体系のコンピュータシミュレーション」, 化学同人 (2002).



水溶液中のイオン性および非イオン性球状ミセルの分子動力学シミュレーション  
(左) SDS(sodium dodecyl sulfate)60分子、水 8,349分子  
(右)  $C_{12}E_4$ (tetraoxyethylene dodecyl ether)45分子、水 8,092分子