



## 斉藤 真司 (教授)

1988年慶應義塾大学工学部卒 1990年京都大学大学院工学研究科修士課程修了、1995年博士(理学)(総合研究大学院大学) 1990年分子科学研究所技官、1994年名古屋大学理学部助手、1998年助教授を経て2005年10月より現職  
TEL: 0564-55-7468 FAX: 0564-55-7025  
電子メール: shinji@ims.ac.jp

専  
門  
領  
域

機能分子科学専攻

溶液や生体をはじめとする凝縮系の運動は、様々な時間・空間スケールで変化または反応を引き起こし、多様な物性、機能発現へとつながる。このような凝縮系の運動を理解することを目的に、時間・空間的不均一ダイナミクスの解析、揺らぎや構造変化と生体反応との関わり、多次元分光法による運動の解析を進めている。<sup>1)-4)</sup> 現在の主な研究テーマは以下の通りである。

### 液体、過冷却状態の水のダイナミクスの解析

水の特異的な性質は強い水素結合による。水素結合ネットワーク構造変化は幅広い時間スケールをもち、 $1/f$  スペクトルの様相を示す。我々は、このような運動の起源、様々な観測量への影響、相転移に伴うネットワーク構造変化について調べてきた。現在、水素結合ネットワークの影響がさらに重要となる過冷却水における運動の時間・空間スケールを解析し、水の特異的な性質の起源の解明を目指している。

### 多孔質媒体中の粒子のガラス転移の解析

生体膜、薄膜や多孔質媒体など制限空間にある物質は、空間等方性をもつバルク液体とは異なるダイナミクスを示す。我々は、多孔質媒体中の粒子のダイナミクスについて解析を行い、固定粒子の増加とともに運動が遅くなること、固定粒子の密度により2種類のガラス転移が存在すること、非常に高い固定粒子密度におい

てリエントラント現象が見られることを明らかにした。これらのガラス転移における揺らぎの違い、リエントラント現象の機構解明を進めている。

### 生体高分子における揺らぎと反応の解析

低分子量 G タンパク質 Ras は、GTP の加水分解により細胞増殖のオン・オフを制御する分子スイッチである。この GTP の加水分解は、GAP と呼ばれるタンパク質の結合により5桁も速くなる。我々は、GAP 結合による Ras の構造や揺らぎや加水分解に関わる水の揺らぎを明らかにした。GTP の加水分解がどのように引き起こされ、どのような機構(構造および反応経路)で進行するのか、分子シミュレーションおよび電子状態計算を用いて解析を進めている。

### 凝縮系ダイナミクスの多次元分光法に基づく解析

多次元分光法により、通常の分光法では知ることの困難なダイナミクスの詳細を解析している。我々はこれまでに、現実系に対する多次元分光法の計算および解析手法の開発を世界に先駆けて進めてきた。その結果、水の2次元ラマン分光法の理論解析から、分子間運動のカップリング、運動の非調和性の様相を明らかにした。また、2次元赤外分光法による分子間運動の解析から、非調和性の強い並進運動とのカップリングによる超高速な平衡振運動の相関の喪失、平衡振運動から並進運動への緩和など、水に特徴である速い緩和が比較的遅い分子間並進運動によって引き起こされていることを明らかにした。溶液や遅いダイナミクスの解析への多次元分光法の展開も進めている。

### 参考文献

- 1) M. Matsumoto, S. Saito and I. Ohmine, "Molecular Dynamics Simulation of the Ice Nucleation and Growth Process Leading to Water Freezing," *Nature* **416**, 409-413 (2002).
- 2) A. Shudo and S. Saito, "Slow Relaxation in Hamiltonian Systems with Internal Degrees of Freedom," *Adv. Chem. Phys.* **130**, 375-421 (2005).
- 3) T. Yagasaki, K. Iwahashi, S. Saito and I. Ohmine, "A Theoretical Study on Anomalous Temperature Dependence of pKw of Water," *J. Chem. Phys.* **122**, 144504 (9 pages) (2005).
- 4) S. Saito and I. Ohmine, "Fifth-Order Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquid Water, Crystalline Ice Ih and Amorphous Ices: Sensitivity to Anharmonic Dynamics and Local Hydrogen Bond Network Structure," *J. Chem. Phys.* **125**, 084506 (12 pages) (2006).

