

## 齊藤真司(教授)(2005年10月1日着任)

### A-1) 専門領域：理論化学

### A-2) 研究課題：

- a) 過冷却水のダイナミクス，多孔質媒体中の粒子のガラス転移の理論研究
- b) 生体高分子における構造揺らぎと反応の理論研究
- c) 多次元分光法による凝縮系ダイナミクスの理論研究

### A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 液体を急冷すると，融点で結晶化せずに過冷却液体さらにはガラスとなる。過冷却液体は，様々な興味深い性質を示す。我々は，分子動力学計算を用い過冷却水の構造・密度・エネルギー揺らぎの解析を進め，等圧比熱の特異的温度依存性を与える時空ダイナミクスを明らかにした。また，薄膜や多孔質媒体などの制限空間におけるガラス転移に関する研究も進めている。パーコレーション閾値に近い非常に高い固定粒子密度において，流動粒子密度を増やすと自由体積が減少するにも関わらずガラス相から液体相に転移し，再びガラス相に転移するリエントラント現象があることを明らかにした。
- b) GTP 結合タンパク質 Ras は，細胞増殖に関わるタンパク質である。我々は，GTP 加水分解反応前後の揺らぎや構造変化が，どのように反応（機能発現）に影響しているか分子動力学法，電子状態計算を用い調べている。GTP 結合型 Ras において，標的タンパク質との結合が抑制される状態 1 と活性状態である状態 2 が混在している事が最近の実験研究で明らかとなった。我々は，これらの状態においてスイッチ領域での構造や揺らぎの違いについて分子動力学法を用いて解析を行い，状態 1 ではスイッチ領域の配位が変化し，標的タンパク質の結合部位が構造変化を起こす事，そのため構造揺らぎも大きくなっていることを明らかとした。
- c) 凝縮系のダイナミクスを解析法として，多次元分光法の理論解析を進めている。我々は，2 次元赤外分光法により水の分子間運動の理論研究を行っている。その結果，衡振運動の相関が約 110 fs で喪失すること，また，約 100 fs で衡振運動から分子間並進運動へ緩和することを明らかにした。さらに，非調和性の強い水の分子間並進運動が，これら運動の相関の喪失および緩和に大きな影響を及ぼしていることを明らかにした。また，パンププローブ分光法，異方性減衰の理論解析から，水中の衡振運動のエネルギー緩和機構を明らかにした。

### B-1) 学術論文

**T. YAGASAKI and S. SAITO**, "Ultrafast Intermolecular Dynamics of Liquid Water: A Theoretical Study on Two-Dimensional Infrared Spectroscopy," *J. Chem. Phys.* **128**, 154521 (2008).

**R. YAMAMOTO, K. KIM, Y. NAKAYAMA, K. MIYAZAKI and D. R. REICHMAN**, "On the Role of Hydrodynamic Interactions in Colloidal Gelation," *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 084804 (2008).

**Y. NAKAYAMA, K. KIM and R. YAMAMOTO**, "Simulating (Electro) Hydrodynamic Effects in Colloidal Dispersions: Smoothed Profile Method," *Eur. Phys. J. E* **26**, 361–368 (2008).

**Y. NAKAYAMA, K. KIM and R. YAMAMOTO**, "Smoothed Profile Method for Direct Simulation of Flowing (Charged) Colloids in Solvents," *AES Tech. Rev. Int. J. Nano Adv. Eng. Mat.* **1**, 21–28 (2008).

B-4) 招待講演

S. SAITO, "Ultrafast Intermolecular Dynamics of Water," 4th conference on Coherent Multi-Dimensional Spectroscopy, Kyoto, August 2008.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学討論会世話人会委員 (2002-).

分子シミュレーション研究会幹事 (2007-).

日本化学会東海支部幹事 (2007-).

分子科学会幹事 (2008-).

B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学理学部, 「物理化学基礎」2008年前期.

東京大学大学院総合文化研究科, 相関基礎科学特別講義I「溶液の分子論的ダイナミクスと分光解析」2008年11月5日-7日.

東京大学大学院総合文化研究科, 客員教授, 2005年4月-.

B-10) 競争的資金

特定領域研究(計画研究)「空間・時間不均一ダイナミクス理論の構築」斉藤真司(2006年度-2009年度).

若手研究(B)「密度揺らぎの多体相関関数による過冷却液体ダイナミクスの解析」, 金 鋼(2007年度-2008年度).

基盤研究(B)(2)「化学反応および相転移ダイナミクスの多次元振動分光法による理論解析」斉藤真司(2004年度-2006年度).

基盤研究(C)(2)「凝縮系の揺らぎおよび非線形分光に関する理論研究」斉藤真司(2001年度-2002年度).

基盤研究(C)(2)「溶液内化学反応と高次非線形分光の理論研究」斉藤真司(1999年度-2000年度).

奨励研究(A)「溶液の高次非線形分光と化学反応ダイナミクスの理論研究」斉藤真司(1997年度-1998年度).

B-11) 産学連携

日本電信電話(株)マイクロシステムインテグレーション研究所, 「テラヘルツ分光スペクトル解析に関する研究」, 斉藤真司(2008年度-2009年度).

C) 研究活動の課題と展望

液体や過冷却液体のダイナミクスの解析として, 過冷却水の解析を行っている。密度揺らぎによるポテンシャルエネルギーの変化を明らかにし, この結果をもとに, 液体構造変化に由来する遅い揺らぎの解析へと展開させていく。また, 空間的異方性をもつ系の構造・ダイナミクスへの展開していきたい。

生体高分子における構造揺らぎと反応の解析として, 細胞増殖に関わるRasにおけるGTPの加水分解反応の解析をさらに進める。とくに, GTPの加水分解反応がどのような機構で, どのように引き起こされるのかを明らかにしていきたい。

多次元分光による凝縮系ダイナミクスの解析として, 2次元赤外分光法に基づく理論研究を過冷却水や氷へ, また分子内振動の解析へと展開し, 温度, 構造により緩和過程がどのように変化するかを明らかにする。さらに, 溶質の存在により水の

運動がどのような影響を受けるのかなど溶液のダイナミクスの詳細を解析する。

イオン水溶液の結晶化過程を明らかにし、どのような構造乱れ・揺らぎがイオンをトラップした氷のテラヘルツ分光に寄与しているかを明らかにする。