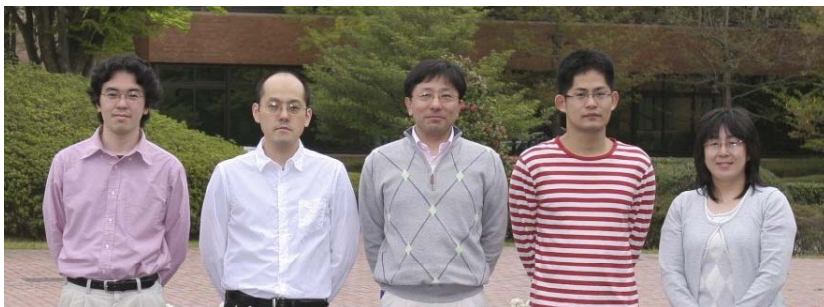


凝縮系におけるダイナミクスと 分光の理論研究



理論・計算分子科学研究領域
齊藤グループ

溶液や生体などの系では、

熱的および非熱的な電子・分子ダイナミクスによる

状態の変化の結果として様々な物性や機能を示します。

我々のグループでは、このような凝縮系のダイナミクスの

様相・分子論的起源について理論研究を行っています。

<http://dyna.ims.ac.jp/>

研究目的

溶液や生体系において

さまざまな空間・時間スケールで起こる

ダイナミックな変化の様相、起源について、
統計力学や量子力学に基づく独自の理論計算・

解析手法を開発し、また、分子シミュレーションや
電子状態計算を駆使し

分子レベルから明らかにする

具体的な研究内容

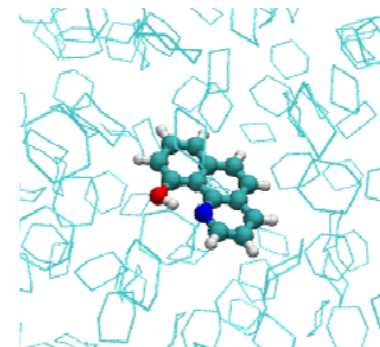
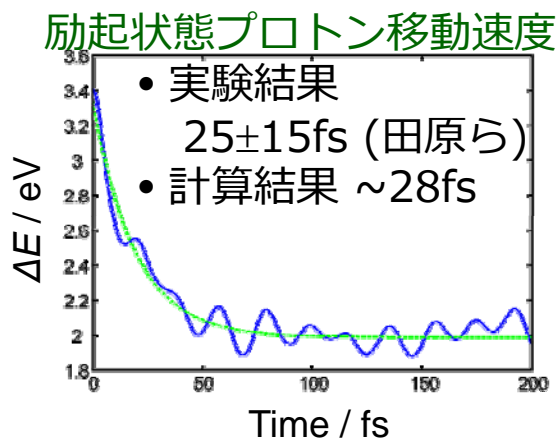
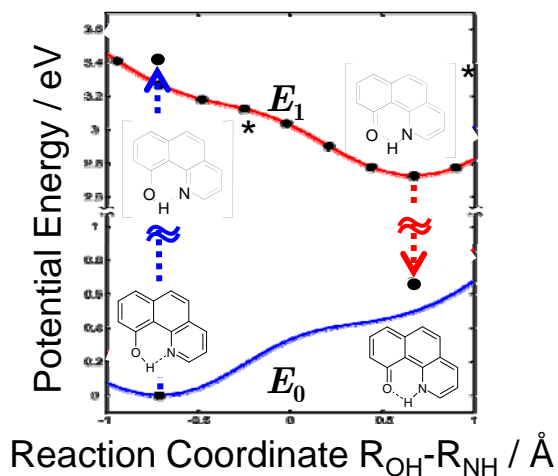
液体やタンパク質における反応ダイナミックスの解析

非線形分光に基づく分子運動の揺らぎ・緩和ダイナミックスの解析

時間・空間的に不均一な系の構造・状態変化ダイナミックスの解析

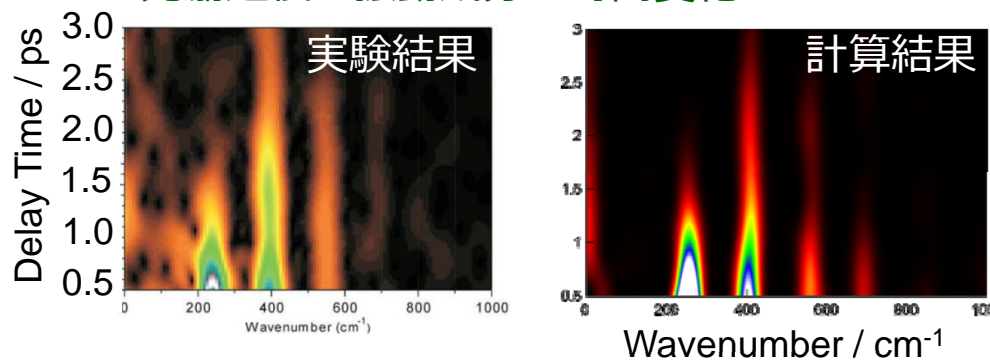
研究例：液体やタンパク質における反応ダイナミックスの解析

10-HBQの S_0 、 S_1 ポテンシャル面



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

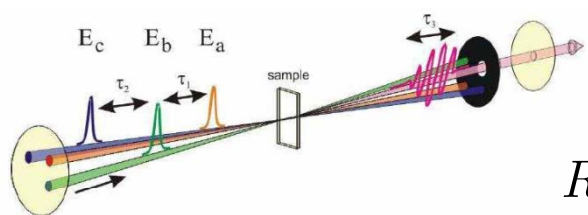
光励起後の振動成分の時間変化



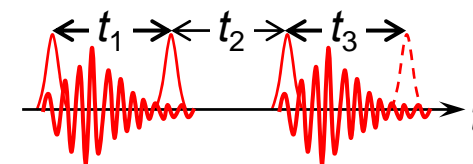
多次元ポテンシャル面を構築し、
光励起後の反応ダイナミックスの
分子論的起源を解析

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

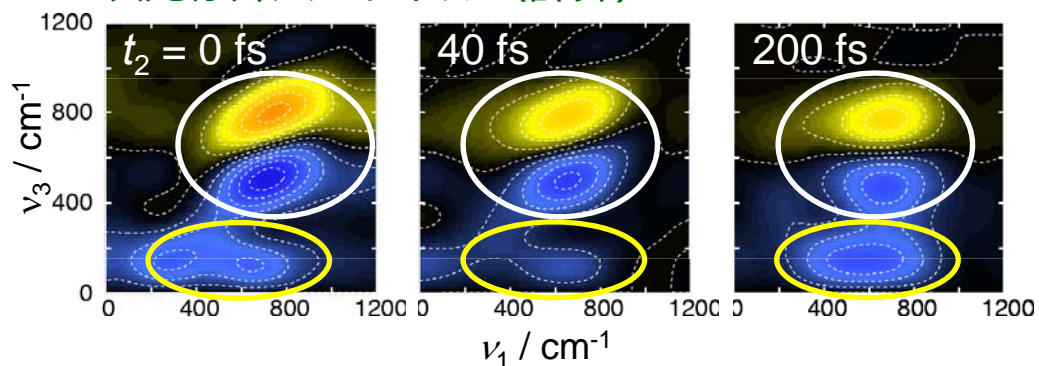


三次非線形分光法に対する
*ab initio*的理論計算手法の開発



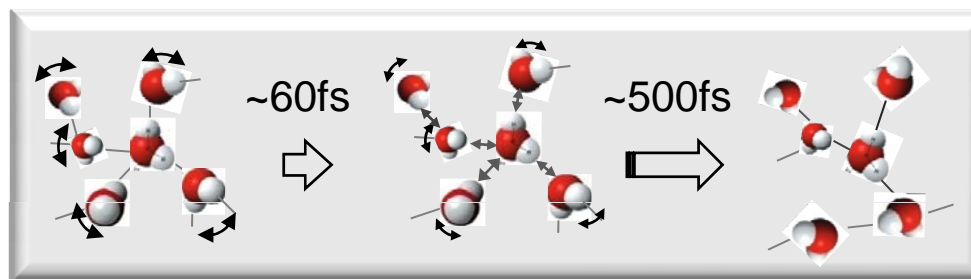
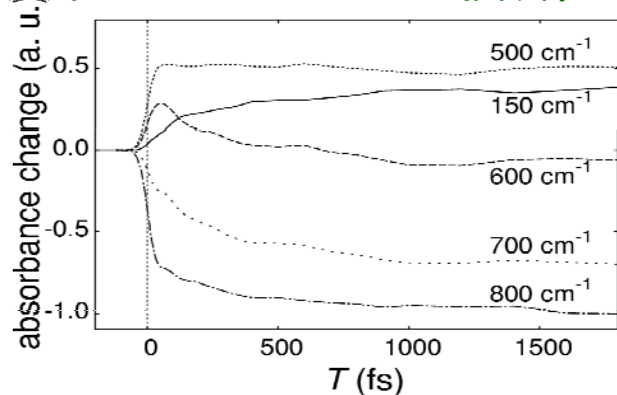
$$R(t_1, t_2, t_3) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \langle [[[M(t_1 + t_2 + t_3), M(t_1 + t_2)], M(t_1)], M(0)] \rangle$$

2次元赤外スペクトル (計算)



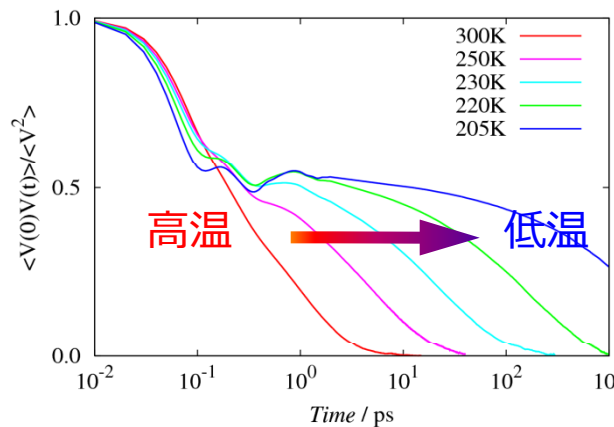
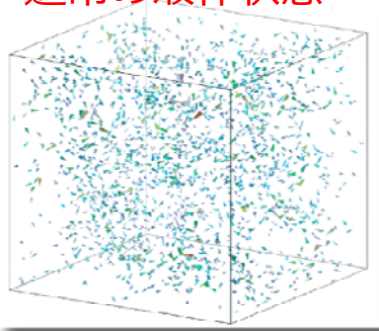
平衡運動の
速い不均一性の速い減衰（上）と
エネルギー緩和（下）は
並進運動とのカップリングによる

赤外ポンプ・プローブ (計算)

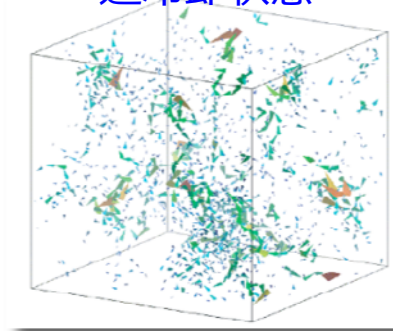


研究例：不均一な系の構造・状態変化ダイナミックスの解析

通常の液体状態

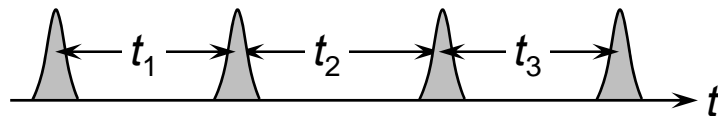


過冷却状態



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
←不均一ダイナミックス
従来の解析では均一・不均一
ダイナミックスの区別は不可能

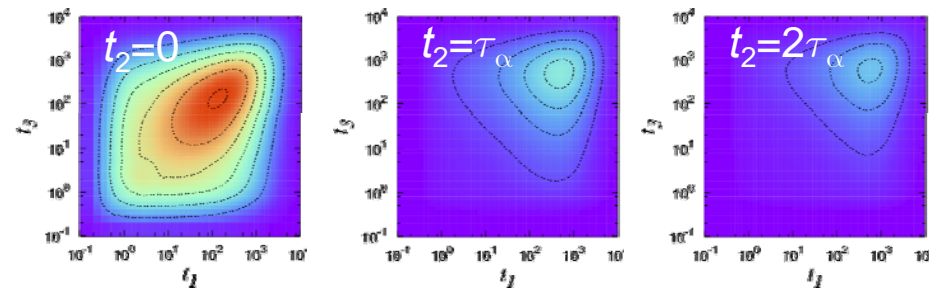


$$\Delta F_{A_k B_k}(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3)$$

$$\equiv \langle A_k(0) A_k^*(\mathbf{t}_1) B_k(\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2) B_k^*(\mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3) \rangle$$

$$- \langle A_k(0) A_k^*(\mathbf{t}_1) \rangle \langle B_k(\mathbf{t}_2) B_k^*(\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3) \rangle$$

分散の相関関数
→不均一性の寿命
→ T_g 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

- 分子シミュレーションとは？
- 分子動力学シミュレーションを動かしてみよう
単原子分子モデルの分子シミュレーション
- 結果の解析と可視化
動径分布関数
平均二乗変位、など
- どんな研究ができるか考えてみよう

