

液体・生体分子系の分子間相互作用と赤外・ラマンスペクトルの理論解析

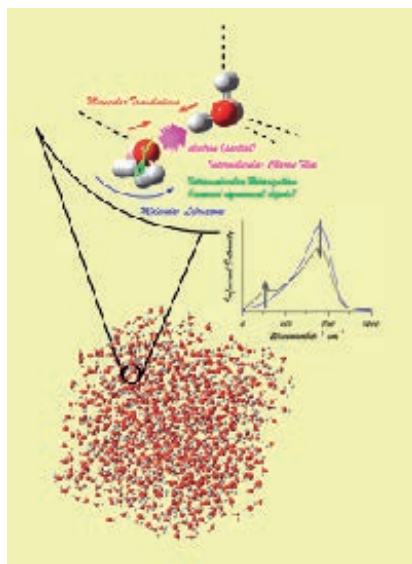
Keyword: 液体・溶液、タンパク質、分子間相互作用、赤外、テラヘルツ、ラマン

研究の概要

水などの液体系や、蛋白質などの生体分子系の、構造・ダイナミクス・相互作用を、理論的に研究しています。

これらの物質系において、その各部分は独立に運動しているのではなく、全体が相互作用しながら連動的に運動しており、これによって、物質系の諸性質が生み出されます。この相互作用や連動的運動が、光との相互作用によってどのように検出できるか、どうすれば確に解析できるか、ということに、特に力点をおいて理論研究を進めています。例えば、蛋白質と赤外線の相互作用による吸収帯には、幾つか特徴的なものが存在することが知られており、解明できていない部分もありますが、未解明の部分も多く残されています。このうち、アミドIIと呼ばれる吸収帯の蛋白質構造依存性において、電子の連動的運動が大きく寄与することを、最近明らかにしました。似たようなメカニズムは、さらに低振動数の「テラヘルツ光」が液体の水と相互作用する際にも重要であることが、最近分かってきています(右図)。

これとは別に、ハロゲン原子をもつ化合物の中に、興味深い分子間相互作用を引き起こすものがあることが、最近明らかとなっています。これに関わる理論研究も進めています。



・特筆すべき研究ポイント:

理論化学は、物質に関わる多様な現象や測定結果を解析・整理・統合し、新たな原理や概念を導き、それを数値的に実証するための、強力な手段を提供します。既存の理論計算プログラムで解析可能な問題もありますが、新規手法の開発を必要とする問題も多く存在します。そのため、個々の主題について本質を見抜き、解析に必要な手段を(既存のものに無ければ開発して)取り揃えて使いこなす力量が必要です。

・新規研究要素、および従来技術との差別化要素・優位性:

これまでに、以下に示すような成果を挙げてきています。

- ・液体の水のテラヘルツスペクトルを的確に計算するために必要な電子の振舞いを効果的に取り込んだ古典MDベースのシミュレーション法を、世界に先駆けて開発しました [*J. Phys. Chem. B* **115**, 6636-6643 (2011); *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 1219-1227 (2014)]。水素結合系一般への展開を探索中です。
- ・蛋白質の2次構造の最も顕著なマーカーとなる「アミド I バンド」の、2次構造依存性の起源となる主要因(ペプチド基間の振動カップリング)のマッピングを、世界に先駆けて示しました [*J. Raman Spectrosc.* **29**, 81-86 (1998)]。現在でも多くの引用を得ています(本稿執筆時点で250件 [Google Scholar])。
- ・アミド I バンドや水のOH伸縮振動バンドなどを対象に、ダイナミクスまでを効果的に取り入れることができるシミュレーション法を、世界に先駆けて開発しました [*J. Phys. Chem. A* **110**, 9469-9477 (2006) など]。
- ・リチウムイオン二次電池の電解液における選択的溶媒和構造を、偏光ラマンスペクトルの測定と理論解析によって明らかにしました [*J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 3296-3302 (2015)]。
- ・このほかに、新規の振動解析手法を多く編み出しています。

アピールポイント



鳥居 肇

学術院教育学領域
理科教育系列
教授

■ 技術相談に応じられる関連分野

- ・分子軌道(MO)計算や密度汎関数理論(DFT)計算から導かれる振動モードの理論解析に関わる、考え方・手法など
- ・上記「研究の概要」「アピールポイント」および下記「その他の研究紹介」の内容に関連した諸課題

■ その他の研究紹介

共役π電子系などの、大きな赤外強度をもつ振動モードにおける、電子の振舞いと赤外強度の関係を定量的に示す研究も、行っています。

[H. Torii, "Delocalized electrons in infrared intensities" (feature article) *J. Mol. Struct.* **1056/1057**, 84-96 (2014)]