

第253回 化学コースコロキウムのご案内

「タンパク質や溶媒中における分子間相互作用によって色素の励起エネルギー準位はどのように変化するか？」

長谷川 淳也 教授 (北海道大学 触媒科学研究所)

日時： 平成28年 2月23日 (火曜日) 16:20-17:50

場所： 11号館202室

要旨

レチナール蛋白質、蛍光蛋白質などの光機能性蛋白質における色素分子は、周辺環境に応じて励起エネルギー準位を変化させる。従って、光吸収／発光エネルギーを定める原理は蛋白質機能において重要である。このようなカラーチューニングの起源を明らかにするために、QM(SAC-CI)/MM(AMBER)計算を用いて解析し、分子構造、周辺環境の静電相互作用、カウンターイオンの電子的効果に由来する寄与を明らかにした。他方で、局在化分子軌道を用いて、周辺環境の電子状態を考慮したCI計算を行った。周辺環境の電子的寄与が励起エネルギーに及ぼす影響と励起状態波動関数の構造についての解析を行った。

連絡先 首都大学東京 理工学研究科 分子物質化学専攻 波田雅彦 内線3583 hada@tmu.ac.jp