

第676回 化学・物質工学セミナー

(グリーンシステム創成科学専攻 平成28年度第4回国際セミナー)

Path integral molecular dynamics simulation of anionic molecular systems

(経路積分分子動力学シミュレーション: アニオン分子への応用)

Dr. Yukio Kawashima (川島 雪生 博士)

理化学研究所 計算科学研究機構 フラッグシップ2020プロジェクト
アプリケーション開発チーム

記

日時：平成28年11月11日（金）14:30～16:00

場所：総合教育研究棟1階 109講義室

本講演は、工学研究科グリーンシステム創成科学専攻の「平成28年度第4回国際セミナー」を兼ね、英語による講演として実施します。なお、邦文のアブストラクトを2ページ目に付しております。

Abstract Hydrogen bonds are important for the formation of three-dimensional structure and functionality of biomolecules. Recently, low-barrier hydrogen bonds (LBHB), which are short and strong compared to typical hydrogen bonds with low proton transfer barrier, are suggested to play a crucial role in the functionality of biomolecules and enzyme reactions. We have been studying the nature of LBHB with small ion clusters. We found that treatment of electronic structure, nuclear quantum effect, and thermal fluctuation are essential to describe these hydrogen bonds. In my talk, I would like to show the results of my research employing path integral molecular dynamics simulation, which allows us to treat all the three effects mentioned above together.

オーガナイザー連絡先：〒852-8521 長崎市文教町1-14

長崎大学大学院工学研究科 相樂隆正

TEL: 095-819-2676, E-mail: sagara@nagasaki-u.ac.jp

抄録（邦文）

水素結合は生体分子における三次元構造形成や機能発現において重要な役割を果たす。最近、プロトン移動障壁が低い、通常の水素結合よりも短くて強い低障壁水素結合が生体分子の機能や酵素反応において重要な役割を果たすことが示唆されている。我々はこれまでにこの低障壁水素結合の性質を理解すべく、小さいアニオン分子のプロトン移動障壁が低い、通常の水素結合よりも短くて強い水素結合の研究を行ってきた。我々はこの水素結合を正確に記述するためには、電子状態、原子核の量子効果と温度揺らぎの効果の三つすべてを取り扱わないといけないことが分かった。当日は、その三つすべてを取り扱うことができる経路積分分子動力学シミュレーションを用いた研究成果についてお話しする予定である。