

## GCOE特別講演会報告書

開催日時： 11月17日 午後1時～3時

開催場所： 理学部6号館 571号室

講師： 韓国高麗大学・教授 Minhaeng CHO

演題：“Coherent Multidimensional Spectroscopy of Biomolecules?”

参加者数： 教員・ポスドク 約 10 名 大学院・学部学生 約 20 名

コヒーレントな多次元スペクトロスコピーは新しく広がりつつある非線形スペクトロスコピーであり、タンパク質や核酸などの複雑な分子系を時間分解・周波数分解で観測することができる。講演では最近の計算機実験とその実験結果との比較が議論された。プローブ光として可視光を使うことで、二次元あるいは三次元の振動スペクトロスコピーが振動緩和、chromophore-溶媒間ダイナミクス、ポリペプチドの分子構造揺らぎと転移を追求する有益な手段であることが示された。特に、量子化学計算と分子動力学シミュレーションを用いた様々なポリペプチドのアミドI振動ダイナミクスの研究成果が紹介され、構造と振動周波数の関係やchromophore-溶媒相互作用に起因する溶媒和振動数シフトが議論された。半古典近似を用いたアミドIの周波数相関関数を計算することで、二次元IR振動スペクトロスコピーに関連した非線形応答関数が数値的に計算され、得られた二次元スペクトルが最新の実験結果と比較されながら紹介された。質疑応答では、学部学生を含む幅広い層や分野からの聴衆を反映し、非線形スペクトロスコピーに対する基礎的な質問から、その将来的な未解決の問題に関する突っ込んだ質問まで多くの議論がなされ非常に有意義な講演会となった。



(理・化学 金 賢得 記)