

分子シミュレーションによる

凝縮相中の励起状態反応ダイナミクスの定量的理解を 目指して

**東 雅大 助教（琉球大学理学部海洋自然科学科
化学系）**



2014年5月12日（月）16:00—17:00

創成科学研究棟4階セミナー室C

<http://www.cat.hokudai.ac.jp/access.html>

溶液やタンパク質中といった凝縮相における励起状態反応ダイナミクスに関する理論的研究は、高精度な量子化学計算と十分なサンプリング計算の両方が必要なため、現在でも最も挑戦的な課題の1つである。本発表では、この困難を解決するために我々が開発してきた高精度ポテンシャル関数の効率的生成手法を紹介し、その応用例として溶液中の励起状態プロトン移動反応並びに光捕集アンテナでの色素の励起エネルギー揺らぎに適用した研究を紹介する。

問合せ先： 触媒化学研究センター・中山 哲 (nakayama@cat.hokudai.ac.jp・011-706-9145)

略歴：2007年3月 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程修了 博士(理学)・2007年5月 University of Minnesota, USA, Postdoctoral Research Associate・2009年5月 分子科学研究所 IMS フェロー・2011年4月 分子科学研究所 日本学術振興会特別研究員(PD)・2013年4月 琉球大学理学部海洋自然科学科化学系 助教