



## “水・蛋白質等の諸性質を生み出す相互作用と連動的運動の理論的研究”

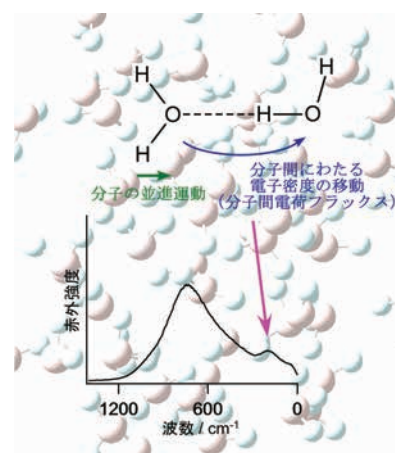
### 教授 鳥居 肇 (理論化学)

1964年生まれ、1992年東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了、1992年東京大学理学部化学科助手、2001年静岡大学教育学部助教授、准教授を経て2008年より同教授

#### 研究概要

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、蛋白質と赤外線と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、解明できている部分もありますが、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。



#### メッセージ

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。研究を進めるためには、高性能の計算機が不可欠ですが、その計算機を用いて独創性の高い計算を的確に行うためには、研究者自身の構想力と実行力が求められます。

化学など多くの自然科学分野の研究は、国際的な競争と協調の上に、成り立っています。私自身は、欧州 (具体的にはEuropean Molecular Liquids Groupなど) との連携に重点を置きながら、凝縮相系 (液体系や生体分子系) の理論化学研究における日本のプレゼンスを高めることができるよう、努力しているところです。

#### 【主な研究業績】

**受賞歴:** 井上科学振興財団 井上研究奨励賞 (1993)、日本分光学会 論文賞 (2000)、溶液化学研究会 学術賞 (2008)

**外部資金獲得状況:** 公益信託分子科学研究奨励森野基金 (2007)、文部科学省科学研究費補助金 (1996-2011、2013-)、日本学術振興会二国間交流事業 共同研究 (2004-2005)、ほか

**学会等:** 日本化学会 理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン 副主査 (2011-)、溶液化学研究会 運営委員 (2010-)、Japanese Molecular Liquids Group (JMLG) 幹事 (2005-2009) チェアマン (2010-)、International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS) International Steering Committee member (2008-)、ほか

**学会等:** 日本化学会 理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン 副主査 (2011-)、溶液化学研究会 運営委員 (2010-)、Japanese Molecular Liquids Group (JMLG) 幹事 (2005-2009) チェアマン (2010-)、International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS) International Steering Committee member (2008-)、ほか

**国内外の学会誌編集等:** Bulletin of the Chemical Society of Japan (BCSJ) Associate Editor (2008-2012)、Journal of Raman Spectroscopy (JRS) Editorial Advisory Board member (2010-)、ほか

#### 著書・論文:

- 1) H. Torii and M. Yoshida, "Properties of halogen atoms for representing intermolecular electrostatic interactions related to halogen bonding and their substituent effects", *J. Comput. Chem.* **31**, 107-116 (2010).
- 2) H. Torii, "Intermolecular electron density modulations in water and their effects on the far-infrared spectral profiles at 6 THz", *J. Phys. Chem. B* **115**, 6636-6643 (2011).
- 3) H. Torii, "Mechanism of the secondary structure dependence of the infrared intensity of the amide II mode of peptide chains", *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 112-116 (2012).