

主催 理学部化学科

共催 グリーンケミストリー連携教育研究センター

講演会

拡張型の溶媒和概念に基づく ソフト分子集団系の自由エネルギー解析

京都大学化学研究所

松林 伸幸 准教授

日時：平成24年10月3日(水) 16時30分より

会場：大学院情報理工棟 2階・第2ゼミ室

<講演概要>

溶ける／溶けないは日常生活での感覚であり、溶質・溶媒・溶媒和という概念は、多くの人に馴染み深い。本研究の目的は、溶媒和の概念を拡張し、溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質のようなソフト分子（集団）に対する物質結合を統一的に解析することである。我々は、均一および不均一条件の幅広い系に適用可能な溶液理論を開発し、分子動力学シミュレーションと組合せて、原子レベルの分解能を保った自由エネルギー解析を行っている。溶液理論の紹介の後、ミセルや脂質膜における分子間相互作用を議論する。さらに、タンパク質の構造ゆらぎにおける水和効果・共溶媒効果についても述べたい。

<問い合わせ先>

理学部化学科 大鳥範和 (6212) ohtori@chem.sc.niigata-u.ac.jp