

八木清（やぎきよし）

【研究課題名】生体分子系に対する振動状態理論の開発と応用



理化学研究所 杉田理論分子科学研究室 専任研究員

【E-mail】 kiyoshi.yagi@riken.jp

【専門】 分子振動状態理論

【キーワード】 量子化学、分子動力学、非調和性、振動分光

生体分子の振動スペクトルを定量的精度で計算できる新しい理論的方法を開発します。①非調和性、②生体環境の動的効果、③計算コストをバランス良く考慮した計算手法を考案し、プログラムに実装します。

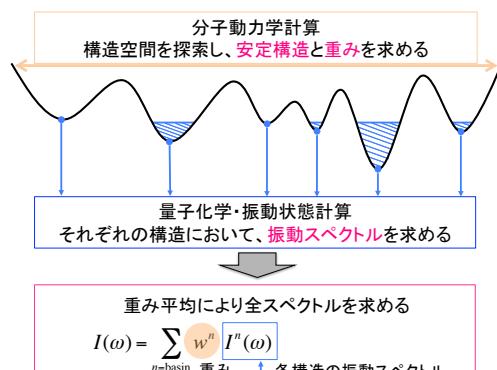
〈研究グループアクティビティー〉

振動状態理論

$$H\Psi_n = E_n \Psi_n$$

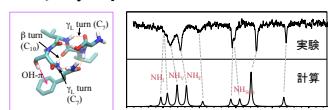
- ・ 非調和ポテンシャル
 - ・ 擬縮退摂動論
- ・ 振動モードの変分最適化

凝縮相のスペクトル計算

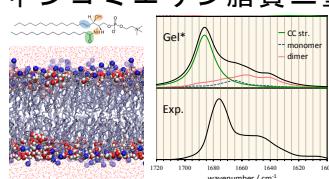
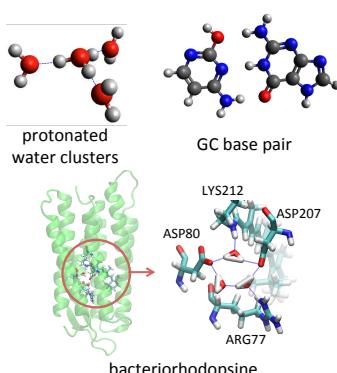


アミドバンド

- ・ ポリペプチド



- ・ スフィンゴミエリン脂質二重膜

強い水素結合と
プロトン移動

Kiyoshi Yagi

Development of vibrational structure theory for biomolecules



RIKEN, Theoretical Molecular Science Laboratory

【E-mail】 kiyoshi.yagi@riken.jp

【Speciality】 Molecular Vibrational Structure Theory

【Keywords】 Quantum Chemistry, Molecular Dynamics, Anharmonicity, Vibrational Spectroscopy

We develop a new theoretical method to predict the vibrational spectrum of biomolecules with high accuracy by taking into account the anharmonic and environment effects with reasonable computational cost.

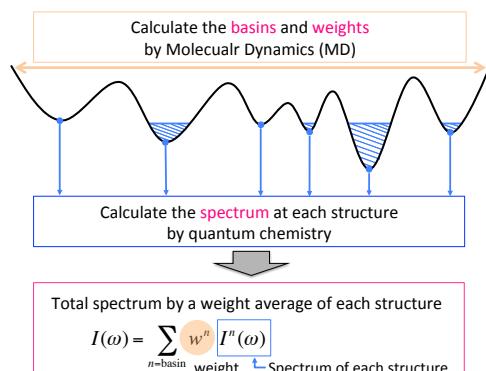
Research Group Activity

Vibrational Structure Theory

$$H\Psi_n = E_n \Psi_n$$

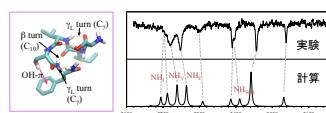
- Anharmonic Potential Energy
- Quasi-Degenerate Perturbation
- Optimized Vibrational Modes

Weight-averaged method for Condensed Phase

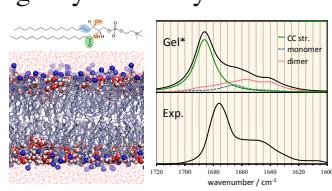


The Amide Bands

- Polypeptide



- Sphingomyelin bilayer



Strong Hydrogen Bonds and Proton Transfer

