

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 5月12日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究（A）

研究期間：2009~2011

課題番号：21685002

研究課題名（和文） 励起状態における分子間相互作用理論の高度化

研究課題名（英文） Development of inter-molecular interaction theory for excited states

研究代表者

長谷川 淳也（HASEGAWA JUN-YA）

京都大学・福井謙一記念研究センター・准教授

研究者番号：30322168

研究成果の概要（和文）： 周辺の分子環境に応じて光吸収・発光エネルギーを大きく変化させる光機能性蛋白質（ヒト錐体視物質・蛍光タンパク質）について、理論化学計算によりメカニズムを解析した。その結果、色素の電子励起に伴い電荷分布が大きく変化すること、蛋白質が偏った静電ポテンシャルを色素上に形成することを見出し、これらのシナジーにより励起エネルギー準位が変化することを明らかにした。また、いくつかのレチナル蛋白質では、周辺アミノ酸の電子状態が励起エネルギーに寄与することを見出した。このような蛋白質の電子的効果を解析するために、新たに分子軌道の局在化法を開発し、事前に定義した形状や領域に局在化した分子軌道を得ることが可能になった。この方法を応用し、励起エネルギー移動における super-exchange 機構について移動経路の解析を行なった。

研究成果の概要（英文）： Depending on molecular environment, some photo-functional proteins (human visual cone pigments and fluorescent proteins) significantly change their photo-absorption/emission energy. We performed quantum chemical calculations to analyze the mechanism. We found that, upon excitation, the charge distributions of the chromophores change significantly and the proteins produce polarized electrostatic potential. These two facts cause a synergy effect on the excitation energy. We also found that the wave functions of amino acids close to the chromophore also affect the excitation energy in some retinal proteins. To analyze the electronic effect of the protein environment, we have developed a new localization scheme that can localize MOs into predefined shapes and regions. This localization scheme was applied to analyze the pathway for the excitation transfer.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
平成21年度	8,700,000	2,610,000	11,310,000
平成22年度	5,100,000	1,530,000	6,630,000
平成23年度	5,200,000	1,560,000	6,760,000
年度			
年度			
総計	19,000,000	5,700,000	24,700,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：物理化学

キーワード：理論化学、量子化学、電子状態理論、マルチフィジクス理論、励起状態理論、分子間相互作用、光機能性蛋白質、カラーチューニング

## 1. 研究開始当初の背景

光化学、光生物学分野の重要な研究対象である光合成・視覚・フォトクロミズム・発光などの光過程においては、光機能性分子の電子励起状態が機能発現において本質的に重要である。これまでに励起状態における分子間相互作用が光機能制御と密接に関わる系が報告されているが、分子の励起状態と周辺環境の分子間相互作用理論が未成熟であるため、研究の進展が停滞していると言わざるを得ない。反応場が制御する励起状態の化学を研究するためには、場そのものの記述と、場との相互作用理論を高度化する必要があった。

また、蛋白質においては、そもそもどのような分子間相互作用が機能に重要となるかが未解明である。光機能性分子と蛋白質と分子間相互作用を解析するための手法もまた開発途上であった。

## 2. 研究の目的

申請者はそれまで高精度量子化学理論を用い、主に光生物学システムについて、蛋白質中における分子の励起状態と機能の関わりについて研究してきた。本研究では、

(i) 視物質や蛍光タンパク質などの光機能性蛋白質について、励起分子と周辺環境である蛋白質との相互作用に関する解析を行い、

(ii) 現実系をよく反映した計算モデルを發展させ、標準的な理論モデルを確立する。

(iii) これを光合成系や視物質などの重要な系に応用し、励起分子の機能と周辺環境の関係を明確にする。

(iv) また、分子間相互作用理論を励起エネルギー移動理論の一般的に応用する。

ことを目的とした。

本研究により、励起状態における分子間相互作用の理論、励起エネルギー移動の理論を高度化し、光合成系・視覚の量子化学を確立させ、分子間相互作用の制御を通じた色素の励起エネルギー制御を目指した。

## 3. 研究の方法

光機能性蛋白質は光機能性分子と蛋白質の複合体である。このような生体分子の分子構造はQM/MM法により決定した。

光機能性分子と蛋白質環境の相互作用を解析する方法として、蛋白質を分子力学と量子化学の二種類が考えられる。前者については、古典的な静電相互作用が励起エネルギーに与える影響を

$$V_{Tot} = \sum_{A \in MM}^{protein\ res.} \sum_{i \in QM}^{elec.} \left\langle \Psi_X^{SAC-CI} \left| \frac{q_A}{r_{iA}} \right| \Psi_X^{SAC-CI} \right\rangle \quad (1)$$

で考慮した。これを用いて各アミノ酸毎の寄与は

$$V_A^X = \sum_{A \in MM}^X \sum_{i \in QM}^{elec.} \left\langle \Psi_X^{SAC-CI} \left| \frac{q_A}{r_{iA}} \right| \Psi_X^{SAC-CI} \right\rangle \quad (2)$$

と見積もられる。他方で、量子化学に基づく方法としては、電子励起の寄与を各アミノ酸毎に区別する必要がある。この方法については、本研究課題において達成され、次章において報告する。

## 4. 研究成果

### ヒト錐体視物質のミュータントを用いたカラー・チューニング機構の解析[9, 14, 16]

ヒトは網膜中に赤・緑・青色の三原色の光に対して応答する錐体視物質、human red (HR), human green (HG), human blue (HB)を有するが、色素であるレチナールの励起エネルギーを蛋白質(オプシン)が制御している。本研究では、ミューテーションに関する計算を行い、実験結果と比較した。

QM/MM法およびSAC-CI法を用いて励起状態を計算した結果、塩化物イオン結合サイトがスペクトルの赤方シフトに寄与すること示した。同様に、HGとHRの励起エネルギーに差を与えているアミノ酸シークエンスについても、計算機上でミューテーションを行い、実験で観測される励起エネルギーの変化と比較を行い、よく一致する結果が得られた。

また、HB, HG, HRとアミノ酸シークエンスと光吸収波長との間に系統的な違いがあることを見出したので、視物質の進化系統樹におけるアミノ酸変異と光吸収波長変化について解析を行なった。その結果、今回の解析で明らかになった光吸収波長の変化を与えるアミノ酸残基の変異は、実際に起きた視物質の進化とよく対応することが明らかになった。

### 蛍光蛋白質における発光波長の制御メカニズムと分子設計[9, 12]

蛍光蛋白質は分子生物学や細胞生理学などにおける分子マーカーとして必須の研究ツールである。橙色蛍光蛋白質 mKO、赤色蛍光蛋白質 DsRed は緑色蛍光蛋白質 GFP と比較して大きく長波長シフトした蛍光を示すが、その発光色変化の起源の詳細は未解明であった。本研究ではGFP, mKO, DsRedの励起状態をQM/MM法およびSAC-CI法を用いて解析し、長波長シフトの原因の詳細を明らかにし、より長波長の蛍光を得るための分子設計指

針を提案した。

また、レチナール、蛍ルシフェリン、蛍光蛋白質の励起状態の研究を通して、容易に吸収波長を変化させることが可能な光機能性蛋白質においては、色素の励起状態に分子内電荷移動性があることと蛋白質による静電ポテンシャルが大きく分極していることが共通する特徴であり、そのシナジーにより静電相互作用が増大することを見出した。

### 脱プロトン化レチナールのオブシシフト [10]

脱プロトン化した Schiff base (DPSB) も bR 蛋白質中と MeOH 溶液中で比較すると約 0.4 eV もの赤方シフトを示す。脱プロトン化はレチナールの C T 性を著しく低下させるため、例外的なメカニズムとして興味深い。

励起に伴って DPSB 周辺の MeOH と bR の電子状態も変化し、スペクトルシフトに寄与する可能性がある。従って、DPSB 周囲の分子についても励起状態計算に考慮した。SAC-CI/CIS/MM の 3 層構造モデルを用い、ONIOM 法を用いて励起エネルギーを計算した。

周辺環境との電子的相互作用について、bR は MeOH より 0.11-0.16 eV 低下したが、実験結果 (0.4 eV) を説明するには不十分であった。次に、DPSB の構造変化について検討した。蛋白質中での 6-s-trans/13-cis 構造は MeOH 中の 6-s-cis/13-trans 構造より励起エネルギーが 0.31-0.32 eV 低下した。即ち、DPSB のオブシシフトは環境変化に伴う DPSB の構造の違いに原因があり、PSB とは異なる例外的なオブシシフトの起源を示すことができた。

他方で、周辺の分子環境を量子化学的に記述したことにより、計算されたスペクトルは bR で 0.21-0.26 eV, MeOH で約 0.1 eV もの変化を示したことは重要な結果である。これまでの理論計算においては重要視されてこなかったが、相対的なスペクトルシフトにも無視できない寄与を与えている。この結果は、励起状態における分子間相互作用を高度化すべきであることを裏付けている。

### ヒト錐体視物質のカラーチューニングにおける周辺蛋白質の電子的効果 [1]

視物質に含まれるプロトン化シッフ塩基 (PSB) の光励起エネルギーは蛋白質環境により大きく変化する。これまで、赤 (HR)・緑 (HG)・青色 (HB) 錐体視物質におけるカラーチューニングメカニズムについて研究を行ってきた。今回は周辺蛋白質の電子的効果が相対的な励起エネルギーに影響を与えるかどうかを解析した。

SAC-CI/CIS/MM の 3 層構造モデルを用い、

CIS の計算結果を ONIOM 外挿を行い、励起エネルギーを計算した。CIS で扱う領域を段階的に拡大し、PSB から 6 Å 程度の距離に入ってくるアミノ酸を含めた。静電ポテンシャルを点電荷として扱う CIS/AS モデルと比較すると、周辺環境との電子的相互作用により、0.14-0.17 eV 低下し、これらの系においても周辺環境の電子的効果が励起エネルギーの絶対値に無視できない寄与を与えることが明らかになった。他方で、励起エネルギーの相対値には大きな変化は無かった。従って、視物質のカラーチューニングでは、蛋白質の古典的な静電ポテンシャルが主要な寄与を与えることを確認できた。

### 参照軌道を用いる局在化法の開発：励起状態への応用 [8]

これまで局在化分子軌道 (LMO) の開発やその応用研究が多く報告されているが、意図した領域に意図した形状の LMO を与える方法はあまり知られていない。本研究では、minimum orbital deformation (MOD) 法と Pipek-Mezey (PM) 法を組み合わせた分子軌道の局在化法を提案し、ペプチド分子の LMO を求め、励起状態の計算に応用した。

非局在化した CMO を用いると、局所励起や電荷分離状態などの励起配置が混合し、複雑な電子構造が得られる。しかし、本方法の局在化軌道を用いると、同状態が一つのアミノ酸残基の局所励起であることが明らかになる。非局在化した CMO を用いると、局所励起を記述するための軌道回転に相当する電子励起が混合し、波動関数を複雑化している原因になっている。

### 局在化軌道を用いた励起エネルギー移動経路の解析 [2, 6]

励起エネルギー移動 (EET) 速度定数は、ドナーとアクセプターの励起状態間の Electronic coupling,  $T_{if}$  の大きさの自乗に比例する。従って、 $T_{if}$  を計算・解析できれば EET のメカニズムを理解できる。本研究では、昨年度開発した分子軌道の局在化を応用し、 $T_{if}$  を計算する手法を開発した。また、EET 経路を解析するための tunneling configuration flux に基づく手法を開発し、ペプチド化合物に応用した。

多くの系の  $T_{if}$  において、ブリッジを介する間接項の寄与は、ドナー—アクセプター間の直接項と比べて小さかった。他方でドナーとアクセプターの配向によっては間接項が支配的になる場合も確認できた。また、間接項において EET 経路を解析したところ、ブリッジのエキシトン状態を介した経路が主要であった。今回開発した局在化法では化学的

描像が明確な軌道に変換できるので、EET 経路を直観的に理解できる。

### 励起状態における分子の周辺環境の量子的相互作用：局在化軌道を用いた配置間相互作用計算による解析

バクテリオロドプシンの M 中間体について、脱プロトン化シッフ塩基(DPSB)から第一溶媒和圏内に入るアミノ酸を含んだモデルを構築し、前述した局在化軌道を用いて励起状態計算を行った。局在化軌道を用いているので励起配置を、アミノ酸残基毎にタイプ分けし、各タイプ毎に係数の最大値をプロットした。このような解析により、レチナール色素の局所励起の次に重要になるのは、色素との CT 励起や各アミノ酸残基の局所励起であることが分かった。また、CT 遷移として寄与するアミノ酸を特定できた。このようにして、スペクトルシフトにおける周辺分子環境の量子的効果の起源を局在軌道を用いることで明快に示すことに成功した。

### PSII 反応中心の励起スペクトルと分子間相互作用の解析[7]

光合成色素蛋白質複合体である PSII の反応中心(RC)と紅色細菌反応中心(bRC)は、進化的に同一の起源を持ち、構造が類似するにもかかわらず、光吸収スペクトルの形状や励起電子移動メカニズムが異なる。本研究ではシアノバクテリア *T. elongatus* の RC におけるクロロフィル六量体に関する量子化学計算を行い、励起状態の電子構造を解析し、観測される光吸収スペクトルを帰属した。

### 単参照クラスター展開法を起点とする擬縮退電子系の理論[13]

我々はこれまでに指数関数型演算子を用いた波動関数が generalized valence bond (GVB) 構造を含むことに着目し、射影空間を一般化することで単参照 symmetry-adapted cluster (SAC) 方程式を拡張し(MRbra-SACSD 方程式)、擬縮退電子系の記述が改善できることを報告した。本研究では、同方法に定量性を与えるために、摂動補正の方程式を導き、幾つかのベンチマーク計算を行って評価した。波動関数に高次の励起演算子を線型に加えた方程式を摂動展開し、1次波動関数と2次のエネルギーを計算する方程式を導き、これらを計算するプログラムを開発した。

フッ素分子等における結合解離ポテンシャルの計算を行った。結合が伸びるにつれて、CCSD 法や平衡構造においては標準理論と呼ばれる CCSD(T)法は破綻するが、本研究で得られた方程式による結果(橙)は厳密解

(Full-CI)の結果をよく再現できた。今後、同法の励起状態理論を導出し、光化学系への適用可能性について研究を進める予定である。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 21 件)

[1]Color tuning in human cone visual pigments: the role of the protein environment, J. Hasegawa, K. Fujimoto, and H. Nakatsuji, *Progress in Theoretical Physics and Chemistry*, in press. (査読あり)

[2]Excitation Energy Transfer in GFP-X-CFP Model Peptides (X=amino acids): direct vs. through-bridge energy transfers, T. Kawatsu and J. Hasegawa, *Intern. J. Quantum. Chem.*, in press. (査読あり)

DOI: 10.1002/qua.24027

[3]Chronological Change from Face-On to Edge-On Ordering of Zinc Tetraphenylporphyrin at Phenyloctane-HOPG Interface T. Sakano, J. Hasegawa, K. Higashiguchi, and K. Matsuda, *Chem. Asian J.* 7(2), 394-399 (2012). (査読あり)

DOI: 10.1002/asia.201100587

[4]Kinetic investigation on carbamate formation from the reaction of carbon dioxide with amino acids in homogeneous aqueous solution, Y. Yamamoto, J. Hasegawa, and Y. Ito, *J. Phys. Org. Chem.*, 25(3), 239-247 (2012). (査読あり)

DOI: 10.1002/poc.1900

[5]Theoretical study of the excited states and the redox potentials of unusually distorted  $\beta$ -trifluoromethylporphycene J. Hasegawa and K. Matsuda, *Theoret. Chem. Acc.* 130(2-3), 175-185 (2011). (査読あり)

DOI: 10.1007/s00214-011-0950-8

[6]Bridge-Mediated Excitation Energy Transfer Pathways through Protein Media: a Slater Determinant-Based Electronic Coupling Calculation Combined with Localized Molecular Orbitals, T. Kawatsu, K. Matsuda, and J. Hasegawa, *J. Phys. Chem. A* 115(39), 10814-10822. (2011). (査読あり)

DOI: 10.1021/jp2068792

[7]Theoretical Study of the Excited States of the Photosynthetic Reaction Center in Photosystem II: Electronic Structure, Interactions, and Their Origin, Y. Kitagawa, K. Matsuda, and J. Hasegawa,

Biophys. Chem. 159(2-3), 227-236 (2011). (査読あり)

DOI: 10.1016/j.bpc.2011.06.011

[8]Chemical-intuition based LMO transformation simplifies excited-state wave functions of peptides, J. Hasegawa, T. Kawatsu, K. Toyoya, and K. Matsuda, Chem. Phys. Letters, 508(1-3), 171-176 (2011). (査読あり)

DOI: 10.1016/j.cplett.2011.04.028

[9]Color tuning in photo-functional proteins, J. Hasegawa, K. J. Fujimoto, and H. Nakatsuji ChemPhysChem 12(17), 3106-3115 (2011). (査読あり)

DOI: 10.1002/cphc.201100452

[10]Theoretical Study of the Opsin Shift of Deprotonated Retinal Schiff Base in the M state of Bacteriorhodopsin, K. Fujimoto, K. Asai, and J. Hasegawa, Phys. Chem. Chem. Phys. 12(40), 13107-13116 (2010). (査読あり)

DOI: 10.1039/C0CP00361A

[11]Theoretical Investigation on the Origin of the CD Signal Reversal for the Closed-ring Isomer of Diarylethene with Peripheral pi-Conjugated Substituents, T. Hirose, J.-v. Hasegawa, and K. Matsuda, Chem. Lett. 39(5), 516-517 (2010). (査読あり)

DOI: 10.1246/cl.2010.516

[12]Excited States of Fluorescent Proteins, mKO and DsRed: Chromophore-protein Electrostatic Interaction Behind the Color Variations, J. Hasegawa, T. Ise, K. Fujimoto, A. Kikuchi, E. Fukumura, A. Miyawaki, and Y. Shiro, J. Phys. Chem. B, 114(8), 2971-2979 (2010). (査読あり)

DOI: 10.1021/jp9099573

[13]Generalizing the bra state in the symmetry-adapted cluster singles and doubles method and the second-order perturbation correction, J. Hasegawa, A. Obata, and K. Matsuda, Chem. Phys. Letters, 486(1-3), 84-88 (2010). (査読あり)

DOI: 10.1016/j.cplett.2009.12.080

[14]"光機能性蛋白質におけるカラー・チューニングの量子化学", 長谷川 淳也, Molecular Science, 4(1) p.A0031 (2010). (査読あり)

DOI: 10.3175/molsci.4.A0031

[15]Circular Dichroism and Absorption Spectroscopy for Three-membered Ring Compounds Using Symmetry-adapted Cluster-Configuration Interaction (SAC-CI) Method, T. Miyahara, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, Bull. Chem. Soc. Jpn. 82(10), 1215-1226 (2009). (査読あり)

り)

DOI: 10.1246/bcsj.82.1215

[16]Color tuning mechanism in human red, green, and blue cone visual pigments: SAC-CI theoretical study, K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, Bull. Chem. Soc. Jpn. 82(9), 1140-1148 (2009). (査読あり)

DOI: 10.1246/bcsj.82.1140

[17]Charge-polarized coordination space for H<sub>2</sub> adsorption, J. Hasegawa, M. Higuchi, Y. Hijikata, and S. Kitagawa, Chem. Mater. 21(9), 1829-1833 (2009). (査読あり)

DOI: 10.1021/cm802566z

[18]Artificial Color Tuning of Firefly Luminescence: Theoretical Mutation by Tuning Electrostatic Interactions between Protein and Luciferin, N. Nakatani, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, Chem. Phys. Letters, 469(1-3), 191-194 (2009). (査読あり)

DOI: 10.1016/j.cplett.2008.12.062

[19]A multi-core QM/MM approach for the geometry optimization of chromophore aggregate in proteins, Y. Kiyota, J. Hasegawa, K. Fujimoto, B. Swerts, and H. Nakatsuji, J. Comp. Chem. 30(8), 1351-1359 (2009). (査読あり)

DOI: 10.1002/jcc.21156

[20]Photocyclization of 2,4,6-Triethylbenzophenones in the Solid State, Y. Ito, H. Takahashi, J. Hasegawa, and N. J. Turro, Tetrahedron, 65(3), 677-689 (2009). (査読あり)

DOI: 10.1016/j.tet.2008.10.105

[21]"水素吸蔵体：分子間相互作用の解析と分子設計への展望", 長谷川 淳也, 配位空間の化学—最新技術と応用—, 北川 進監修, (シーエムシー出版、東京、2009). (査読なし)

[学会発表] (計19件)

[1]光生物学システムの励起状態と機能への理論的アプローチ (依頼講演)、長谷川淳也、日本化学会第92春季年会 (第2次先端ワークショップ)、慶應義塾大学、平成24年3月25-28日

[2]光機能性蛋白質における励起状態と分子間相互作用(招待講演)、長谷川淳也、計算科学研究センター・ワークショップ「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」、分子科学研究所、平成24年1月24, 25日。

[3]光機能性蛋白質のカラーチューニング (依頼講演)、長谷川淳也、大阪大学蛋白質研究所セミナー“タンパク質科学の未来を語る—実験・理論研究者の対話—”, 大阪大学, 2011年11月21,22日。

[4]"Excited states of photo-functional proteins: SAC-CI study" (Invited talk), J. Hasegawa, The 16-th Quantum Systems in Chemistry and Physics, Kanazawa, Sep. 12-17, 2011.

[5]"Theoretical study on the excited states and molecular interactions of photo-functional proteins" (Invited talk), J. Hasegawa, The 14-th Asian Chemical Congress, Bangkok, Thailand, Sep. 2-4, 2011.

[6]"Excited states of photo-functional proteins" (Invited talk), J. Hasegawa, Fukui International Symposium for Theoretical Chemistry, Kyoto, Aug. 31-Sep.1, 2011.

[7]"Quantum chemistry of the excited states of photo-functional proteins: physical, chemical, and biological origins of the color-tuning (Invited talk), J. Hasegawa, BioInformatics in Torun - BIT11, N. Copernicus University, Torun, Poland, Jun. 2-4, 2011.

[8]Excited states of photo-functional proteins: SAC-CI study (Invited talk), J. Hasegawa, The 4-th Japan-Czech-Slovakia Symposium on Theoretical Chemistry, Prague, Czech, May 18-20, 2011.

[9]光機能性蛋白質の励起状態と機能 (招待講演), 長谷川 淳也, 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)計算分子科学拠点 第1回研究会, 分子科学研究所, 2011年2月4-5日.

[10]Quantum Chemistry on the Photofunctional Proteins, 長谷川 淳也, 分子アンサンブル, 理化学研究所, 2010年11月16日.

[11]光合成反応中心における励起電子移動の量子化学 (依頼講演), 長谷川 淳也, 第59回高分子討論会, 北海道大学, 2010年9月17日.

[12]光生物学システムの励起状態と機能: 高精度電子理論の開発を基盤とする理論的研究 (奨励賞受賞講演), 長谷川 淳也, 第4回分子科学討論会, 大阪大学, 2010年9月14日.

[13]Spectral tuning mechanism in photofunctional proteins: A SAC-CI theoretical study (Invited talk), J. Hasegawa, BIT's 2nd Annual World Congress of Biosoft-2010, Dalian, China, Jun. 23-25, 2010.

[14]光生物学における分子理論の展開, 長谷川 淳也, 特定領域研究「実在系の分子理論」最終成果報告会, 東京大学, 2010年3月5,6日.

[15]Quantum Chemistry in the Primary Event of Photobiological Processes (Invited

talk), J. Hasegawa, Pure and Applied Chemistry International Conference 2010, Ubonratchathani, Thailand, Jan. 21-23, 2010.

[16]Toward Rational Molecular Design of Functional Proteins: Emission Color Tuning Mechanism of Fluorescent Proteins, 長谷川 淳也, 理研シンポジウム「分子アンサンブル」、理化学研究所、2009年12月7-9日.

[17]光合成・色覚・蛍光蛋白質の光機能への量子化学アプローチ, 長谷川 淳也, 東北大学理学部化学教室「一般雑誌会」、東北大学、2009年11月27日.

[18]Excited states of photofunctional molecules in protein: Electronic structure and interaction (Invited talk), J. Hasegawa, 45th Symposium on Theoretical Chemistry, Excited States: From Photophysics to Photobiology, Neuss am Rhein, Germany, Sep. 8-12, 2009.

[19]Excited states of photofunctional molecules in protein environments (Invited talk), J. Hasegawa, CREST International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems, Kyoto University, Jul. 19-21, 2009.

[その他]

ホームページ等

<http://www.fukui.kyoto-u.ac.jp/users/hasegawa/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

長谷川 淳也 (HASEGAWA JUN-YA)

京都大学・福井謙一記念研究センター・准教授

研究者番号: 30322168