

量子技術を適用した生命科学基盤の創出
平成 30 年度採択研究者

2018 年度
実績報告書

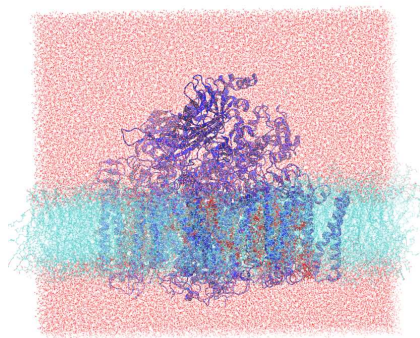
東 雅大

京都大学 大学院工学研究科
准教授

光合成反応中心における初期電荷分離過程の分子論的機構解明

§ 1. 研究成果の概要

本研究の目的は、緑色植物の光合成反応中心における高効率な初期電荷分離過程の分子論的機構を明らかにすることである。本年度は、その準備として、色素の励起状態間のカップリングの大きさと揺らぎを効率的に解析可能な TrCRK 法の開発および改良を行った。この TrCRK 法をテスト計算に適用し、従来の計算手法よりもカップリングの揺らぎを適切に記述できることを明らかにした。また、緑色植物の光合成反応中心の分子動力学シミュレーションを行うための準備を進めた。X 線結晶構造に含まれる色素や脂質二重膜など系を構成する全ての分子について分子力場を用意し、平衡化の分子動力学シミュレーションを行い、安定な構造が得られるか検討中である。さらに、光合成系の高効率なエネルギー移動と量子コヒーレンスの相関について解析に取り組んだところ、必ずしも長時間の量子コヒーレンスが高効率なエネルギー移動につながらないことが示唆された。



§ 2. 研究実施体制

①研究者:東 雅大 (京都大学 大学院工学研究科 准教授)

②研究項目

・光合成反応中心における初期電荷分離過程の解析