

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、緑色植物の反応中心に含まれる 6 つのクロロフィル色素の電子状態を解析した。私が開発した凝縮系中のポテンシャル関数を効率的に記述可能な MMSIC 法を用いて、6 つのクロロフィル色素の基底状態と励起状態のポテンシャル関数を過去の研究と同程度の精度で作成することができた。しかし、得られたポテンシャル関数により各色素の励起エネルギーは、実験結果から予測されるものと大きく異なった。その原因を解析したところ、クロロフィル色素の側鎖のビニル基のねじれ度合いが励起エネルギーの大きさに影響を与えることが判明し、これまでよりも高精度なポテンシャル関数が必要であることが明らかになった。さらに、中央のマグネシウムに配位子が結合するクロロフィルとマグネシウムがないフィオフィチンで励起エネルギーの差が実験結果から予測されるものより小さく、ポテンシャル関数作成の参照となる量子化学計算もさらに注意深い取り扱いが必要であることも明らかになった。今後は、この結果を踏まえて、量子化学計算手法の改良とポテンシャル関数の高精度化を行い、緑色植物の反応中心に含まれる 6 つのクロロフィル色素の電子状態の定量的な解析を目指す。