

庄司 光男

筑波大学計算科学研究センター
助教

生体内量子多体系における特異的化学反应の機構解明

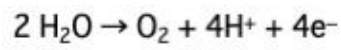
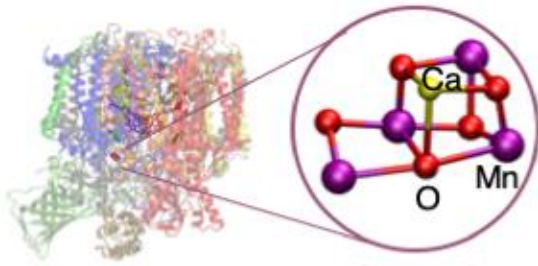
§ 1. 研究成果の概要

生命現象を支える生体内の化学反応には驚異的に優れた反応が存在する。その反応機構の解明は学術的な重要性のみならず、クリーンなエネルギー開発にとっても極めて重要であり、次世代社会の創生に不可欠な技術である。生体内化学反応は酵素によって触媒されるが、活性中心は特異的な(保存)アミノ酸配置で構成されており、多くの場合において補酵素や金属イオンも活用している。その為、何故そのような活性中心で効率的に反応を進行させることができるかを解明および予測することができる様になれば、科学技術を革新的に発展させることができる。

化学反応の解明には分子の構造変化だけでなく、プロトン移動、電子移動など、量子状態(スピン状態)変化も伴っている。そのため、正確な解明のためにはその最も本質的な量子状態を決定し、主な反応経路を確定することが極めて重要となっている。

本研究では量子状態の決定手法と反応経路解析に対する新しい技術を確立し、重要な生体内反応における量子性と反応性の相関(反応量子性)を解き明かす。光合成光化学系 II における水分解反応とニトロゲナーゼにおける窒素固定反応に着目し、スピン状態から正確に量子性を決定し、実験と直接対応させる。

光合成光化学系II



ニトロゲナーゼ

