

量子技術を適用した生命科学基盤の創出
2018 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

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、昨年度に引き続き、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、量子化学計算の結果から効率的にポテンシャル関数を生成可能な MMSIC 法を用いて解析した。まず、色素の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に影響を与えるため、その方向に色素のポテンシャル関数を高精度化した。しかし、高精度化したポテンシャル関数を用いても、得られた励起エネルギーの分布は実験から予測されるものと大きく異なったため、参照とする量子化学計算手法を検討した。その結果、計算手法により得られる励起エネルギーは大きく異なることが分かった。その中で最適なもので励起エネルギーを計算してところ、ほぼ全ての分布が重なったが、最低の励起エネルギーを示す色素が実験結果と一致した。また、緑色植物の反応中心との比較対象として、紅色細菌の反応中心に含まれる 6 つのバクテリオクロロフィル色素の励起エネルギーも解析した。両者の構造は非常によく似ているものの、吸収スペクトルや初期電荷分離過程は大きく異なっており、その詳細はよく分かっていない。MMSIC 法により得られた各色素の励起エネルギーは、色素ごとに大きく異なったものが得られ、実験結果とよく一致した。また、異なる環境に置かれた色素の励起エネルギーの揺らぎが大きく異なることも明らかになった。今後は、緑色植物と紅色細菌の反応中心両方について吸収スペクトルの解析や各色素がカチオン・アニオン状態になった電荷分離状態のエネルギーや各状態間のカップリングの解析を行い、類似点や相違点を明らかにする。

【代表的な原著論文情報】

該当なし