

量子技術を適用した生命科学基盤の創出  
2019年度採択研究者

2021年度 年次報告書
-----------------

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

生命現象は生体内の酵素反応によって支えられており、酵素反応の極めて優れた変換能力が活用されている。生体内の反応機構を解明することは学術的重要性のみならず、エネルギー問題や環境問題の解決に大きな指針を与えるため、現在非常に注目されている。酵素反応を起こす活性中心は、特定の(保存された)アミノ酸で構成されており、多くの場合補因子や金属イオンを利用することで、反応を進行させている。

酵素反応では、分子の構造変化だけでなく、プロトン移動、電子移動など複雑な量子状態変化を伴っている。そのため、正確な解明のためには、量子状態を特定し、素反応過程を明らかにすることが必要である。

本研究では酵素反応における量子状態の決定と反応過程を解明するための理論化学計算手法を創出し、生体内で重要な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。今年度は光合成光化学系 II 酸素発生中心(PSII-OEC)、銅含有アミノ酸化酵素(CAO)、星間空間でのアミノ酸生成について量子状態反応解析を実施した。

PSII-OEC では、 $S_2$  状態における Val185 置換効果について、量子分子動力学計算を実施し、水素結合ネットワーク変化と、置換アミノ酸側鎖の構造変化を理論解明した。

CAO では、反応サイクル中で TPQ 補因子が大きなコンフォメーション変化を起こす。本反応について最安定エネルギー経路の決定とアミノ酸置換効果について理論解明を進展させた。

前生物的合成としての星間空間でのアミノ酸生成機構を検討するには分子の安定性の評価が必要である。Minimum Energy Principle を適用する事で、構造異性体間の安定性評価で可能となることに気づき、アミノ酸前駆体を含めたアミノ酸生成過程における全キラル分子の相対安定性を定量的に評価することに成功した。