

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

東 雅大（京都大学大学院工学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

本研究では、独自の理論解析手法を発展させ、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しつつ、二次元分光実験で観測されているコヒーレンスに着目してその起源と役割の解明を目指した。

[どのような量子性をどのように扱ったのか]

- ・緑色植物の反応中心に含まれる6つの色素の量子状態のエネルギーの大きさと揺らぎ。
- ・紅色細菌における反応中心内の色素の量子状態（緑色植物との比較対象）。
- ・独自の理論解析手法を改良しつつ解析。

[達成状況とインパクト]

東研究者は、緑色植物の反応中心に含まれる6つの色素について、独自の理論解析手法を展開し、従来の実験データを再現しつつ、電荷分離状態のエネルギーを解析できる独自の理論解析手法を開発した。その過程においては、従来の量子化学計算手法が実験データと大きく乖離している問題に着目した。そして、タンパク質中の色素には大きな電場がかかって溶液中と電子状態が大きく異なっていることが原因と考えて、量子化学計算手法の改良を重ねている。色素のポテンシャル関数の作成においては、色素の側鎖のビニル基のねじれ度合いなど、励起エネルギー変化に関わる要素に注目して検討を進めた。具体的には、ビニル基のねじれなどを考慮したQM/MM計算を行い、ポテンシャル関数の情報に組み込む込んだ。その結果、ビニル基のねじれの大きさは結晶構造と概ね一致し、ポテンシャル関数の平均誤差も改善するなど、より高精度なポテンシャル関数を作成するに至っている。このポテンシャル関数を用いて、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励起エネルギーを計算したところ、最低の励起エネルギーを示す色素が実験結果と一致するに至った。それらの解析結果を詳細に検討し、紅色細菌の反応中心の解析結果と比較したところ、緑色植物の反応中心では色素に非常に大きな電場がかかっているなど、緑色植物特有の機能を理論的に示唆することができている。東研究者は、紅色細菌の反応中心に含まれる6つのバクテリオクロフィル色素の励起エネルギーについても解析を進め、独自の理論解析手法より得られた各色素の励起エネルギーが実験データとよく一致するなど、緑色植物と紅色細菌で大きく異なる励起エネルギーの分布を再現することにも成功した。さらにタンパク質が揺らぎを制御して高速なエネルギー伝達する現象、光捕集複合体が室温でエネルギー伝達を最適化している現象にも踏み込んでおり、当初目標を概ね達成していると評価できる。本さきがけ研究期間中に、京都大学のポストを獲得できたことも喜ばしい。

本研究からどのような生命現象の量子現象にアプローチできる手法もしくは理論につながるかの方向性について、東研究者は、光合成系でのエネルギー移動やエネルギーの揺らぎに対するアプローチを挙げている。実験的に励起エネルギーの揺らぎを求めることは一般的に困難であることから、今後のさらなる展開が楽しみである。一方で、実験値に合わせる方向で研究が進められた印象が若干残った。真のブレイクスルーを生み出すべく、理論的手法から実現したいビジョンにこだわり、さらに発展されることを期待したい。