（様式第 20）成果報告書

共同利用 成果報告書 平成 21 年度 課題種別 i09bb

利用課題名 天然光合成の動作メカニズムに関する理論的研究
英文：Theoretical Study of Photosynthesis

中村 振一郎
NAKAMURA Shinichiro

地球快適化インスティテュート
The KAITEKI Institute, Inc.

邦文抄録（300 字程度）
天然光合成の動作メカニズムのなかでも分からないことの多い酸素発生中心について、その機構を明らかにすることをめざし、構造同定のための計算、および手法開発をおこなった。具体的には X 線構造から得られた構造に対して様々な候補構造を作り、これに対して酸素発生中心周辺における電子状態計算をおこない、EXAFS や FTIR の結果と比較した。

英文抄録（100 words 程度）

Keywords: Photosynthesis, Computational Science, OEC, EXAFS, FTIR

背景と目的

エネルギー問題の解決のためにはふんだんに降り注ぐ太陽エネルギーを活用するのが理想的である。しかしながら、現状では太陽電池の効率は十分であるとはいえない。これに対し、天然光合成においては極めて高い効率が実現されている。そこで、その動作メカニズムを理解し、それを活かして人工光合成として活用することが出来れば、エネルギー問題の解決につなげることが出来ることになる。

しかしながら、天然光合成においては酸素発生中心における水の分解の機構はもちろんのこと、その構造すら十分には分かっておらず、その解明が急務となっている。

本プロジェクトでは、手始めに酸素発生中心を構成する Mn_4Ca クラスターとその周辺のタンパク質の配位構造について多数の候補構造を構成し、それらの電子状態を DFT を用いた Broken Symmetry 法により計算しそのスピン状態を得た。また、EXAFS や FTIR などの実験との比較をおこなった。

概要

光合成の初期過程であり、まったく未踏なる領域である水の分解メカニズムの解明をおこなうため EXAFS と FTIR の実験結果を再現するような構造の構築をめざした。Mn の配置については様々な候補が考えられており、考えられているもののうち 13 個の候補について試した。さらに Ca の位置についても各候補構造に対して Ca が配位しそうな構造についてなるべく多く試した。また、この Mn_4Ca クラスターが周辺タンパク質のなかで取りうる配位構造を出来うる限り試した。

結果および考察

上記の計算によって出来た構造はそのほとんどが電子状態において実験で期待されている酸化数とことなるものとなり、わずかに2個の構造のみが Mn の酸化数のふるいで生き残った。しかしながら、これらの２個の構造についても EXAFS や FTIR の結果は実験結果とは一致したものとはならず、今回の計算からは実験結果を再現するような構造は得られなかったことになる。この理由として構造として必要な因子は水の配位や Cl の存在、周囲のタンパク質が作る場のより正確な再現の必要性、などが考えられる。

まとめ、今後の課題

　今回の計算からは実験結果を再現するような構造は得られなかったが、これらの計算を通じて徐々にこうした計算を自動化していくためのツール開発が進んでいる。また、EXAFS や FTIR だけでなく、他の実験結果についても再現性を調べていくことが必要であると考えている。