

P53b 生命指標となりうる光合成の光吸収スペクトル帰属についての理論的研究

田口真彦、小松勇、佐藤皓允、蘇埜成、庄司光男、栢沼愛、神谷克政梅村雅之、矢花一浩、白石賢二（筑波大学）

近年、系外惑星の数は大幅に追加されており、系外惑星における生命の指標 (biomarker) の一つに、光合成等の植物の構造に由来する光反射スペクトル (red edge) がある (S. Seager et al. 2005, Kiang et al. 2007)。光合成は植物において光エネルギーを化学エネルギーに変換する基幹的働きであり、葉緑体チラコイド膜上に存在する光化学系複合体がその役割を担っている。光化学系複合体は、コア部とアンテナ部で構成されており、それぞれ化学反応と光捕集をおこなっている。光捕集部は多くの色素等により構成される。本研究の目的は、red edge におけるミクロな要因である光化学系の光吸収特性について精密に評価し、その特性を明らかにすることである。植物の光化学系複合体について、時間依存密度汎関数法 (TDDFT) レベルで、励起状態の光吸収スペクトル帰属をおこなった。まず始めに、分極連続体モデル (PCM) 計算をおこない、メタノール中での色素吸収スペクトルとのよい一致を確認した。次に、タンパク質中での色素の吸収スペクトルを量子力学/分子力学混合計算法 (QM/MM 法) レベルで求め、真空中に比べて長波長側に約 15nm シフトすることがわかった。さらに、光化学系複合体内部でのすべての色素の種類 (クロロフィル a,b、カロテノイド) や多量体での計算をおこなうことで、そのスペクトル帰属と可変性を示した。これらの結果をもとに、red edge におけるミクロな要因である光化学系の光吸収特性について議論する。

最後に、「お知らせ」をもう一度よく読んでいただくことをお願いしておきたい。しかしそれでも何か質問等がある場合は、年会実行委員会まで遠慮なくお問い合わせいただきたい。