

石 崎 章 仁（若手独立フェロー（特任准教授））（2012 年 3 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：理論物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 凝縮相化学反応過程の量子動力学理論
- b) 分子システムの環境適応性に関する理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光合成色素タンパク質複合体のような凝縮系における電子移動／電子励起移動ダイナミクスの実験研究は、巨視的な分子アンサンブルにレーザーを照射することでなされ、その理論解析には統計力学に基づく古典および量子マスター方程式が用いられ一定の成功を収めてきた。そこでは電子励起を取り巻く環境としてのタンパク質は揺動・散逸を引き起こすだけの化学的には無個性な熱浴として扱われ、その分子個性や機能的側面が議論されることは皆無であった。本プロジェクトでは「光合成光捕獲系における電子／電子励起を好ましい方向に効率よく移動させるには電子／電子励起とそのダイナミクスそしてそれを取り巻く局所的なタンパク質環境・アミノ酸残基はどうあるべきか？」という物理化学原理の模索に取り組むべく新規量子動力学理論開発の取り組みを開始した。
- b) 光合成光捕獲系における色素の電子励起エネルギー移動を議論する上で、色素分子とタンパク質環境との相互作用によって形成される色素分子の励起エネルギー「地形」は重要な枠割を果たし、電子励起がエネルギー地形の勾配に従って拡散するという描像で議論されてきた。このエネルギー地形は *in vitro* のサンプルを用いた分光実験とX線結晶構造の情報により決定され、また色素の電子状態の揺らぎとタンパク質の局所的な歪みの間には線形応答論が成り立つことが前提とされてきた。しかし、そのような議論では環境変動に応じた「高い効率で起こるエネルギー移動」と「過剰摂取したエネルギーを熱放出させる制御機構」という一見相反する2つの機構の自律的スイッチング・環境適応性を説明できない。本プロジェクトでは、光合成エネルギー移動過程の環境適応性を生み出す因果関係のループを明らかにすべく、色素タンパク質複合体の局所的な歪みが誘起するコンフォメーション変化、それに伴う色素の再配置・エネルギー地形変化の可能性の検討を統計力学的モデルに基づいて開始した。

B-1) 学術論文

- G. S. SCHLAU-COHEN, A. ISHIZAKI, T. R. CALHOUN, N. S. GINSBERG, M. BALLOTTARI, R. BASSI and G. R. FLEMING, "Elucidations of Timescales and Origins of Quantum Electronic Coherence in LHCI," *Nat. Chem.* **4**, 389–395 (2012).
- S. HOYER, A. ISHIZAKI and K. B. WHALEY, "Spatial Propagation of Excitonic Coherence Enables a Quantum Ratchet for Electronic Energy Transfer," *Phys. Rev. E* **86**, 041911 (14 pages) (2012).
- K. MARUYAMA, D. BURGARTH, A. ISHIZAKI, K. B. WHALEY and T. TAKUI, "Application of Indirect Hamiltonian Tomography to Complex Systems with Short Coherence Times," *Quantum Infor. Comput.* **12**, 0763–0774 (2012).
- J. M. DAWLATY, A. ISHIZAKI, A. D. KUMAR and G. R. FLEMING, "Microscopic Quantum Coherence in Photosynthetic Light Harvesting Antenna," *Phil. Trans. R. Soc. A* **370**, 3672–3691 (2012).

B-3) 総説, 著書

A. ISHIZAKI and G. R. FLEMING, “Quantum coherence in photosynthetic light harvesting,” *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **3**, 333–361 (2012).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence in photosynthetic light harvesting,” Workshop on Coherent Energy Transport and Optimization in Photosynthesis, Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), December 2012. (スケジュール不具合のため取消)

石崎章仁, 「What do we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived electronic coherence?」, 第841回分子研コロキウム, 分子科学研究所, 岡崎, 2012年9月.

A. ISHIZAKI, “On the generalized/multichromophoric Förster theories,” Institute for Scientific Interchange, Turin (Italy) July 2012.

石崎章仁, 「What can we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived quantum coherence in electronic energy transfer?」, 第9回AMO 討論会, 理化学研究所, 和光, 2012年6月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about photosynthetic light harvesting from long-lived electronic quantum coherence?” School of Materials Science and Engineering, Nanyang Technological University, Singapore (Singapore), May 2012.

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence and its interplay with protein environments in photosynthetic electronic energy transfer,” Special Seminar of a candidate for Assistant Professor, Department of Chemistry, University of California Berkeley, Berkeley (U.S.A.), January 2012. (分子研着任のため辞退)

A. ISHIZAKI, “Quantum coherence and its interplay with protein environments in photosynthesis,” Department of Chemistry, Stanford University, Stanford (U.S.A.), January 2012.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

ベルギー王国 the 22th Solvay Conference on Chemistry, Scientific Secretary (2010).

B-10) 競争的資金

科研費研究活動スタート支援, 「光合成エネルギー移動ダイナミクスを制御するタンパク質構造の揺らぎと変化について」, 石崎章仁 (2012年–2014年).

ドイツ連邦共和国 Short-term Fellowship at Wissenschaftskolleg zu Berlin, “Bridging Quanta, Molecules, and Life: Theoretical investigation of responsive and autonomous behaviors of molecular systems,” Akihito Ishizaki (2012年–2013年).

日本学術振興会海外特別研究員事業, 「光合成複合体における超高速エネルギー移動の量子力学的機構の解明」, 石崎章仁 (2008年–2010年).

科研費特別研究員奨励費, 「超高速非線形分光による凝縮相中分子および分子集合体の量子動力学的理論的解析」, 石崎章仁 (2006年–2008年).

C) 研究活動の課題と展望

帰国し1年が経過しようとしている。当面の大きな課題は、光合成光捕獲系の色素電子状態・電子励起エネルギー移動だけに注視してきた従来の理論物理化学を越えて、その環境適応性というダイナミックで自律的な分子機構を理解することである。多重の階層を跨ぐかもしれない問題の複雑さと現在の研究グループの規模を鑑みて、この数年は将来の定量的で詳細な大規模研究への展開に備えた理論の枠組み構築に重心を置くことになる。また、研究の広がりを実現させるためにはグループの拡充も重要な課題となる。高性能コンピュータに基づく種々の計算技術が発達した現在においても、理論研究を新しい方向に向かわせる原動力はやはり何気ない談話や遠慮ない議論、人であろう。