

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) 凝縮相化学動力学過程の量子理論
- b) 分子システムの環境適応性の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 光合成を行う藍色細菌や緑色植物の光化学系 II 反応中心における初期電荷分離過程の様態は、同じく光合成を行う紅色細菌のそれとは大きく異なることが明らかになってきた。紅色細菌の反応中心ではスペシャル・ペアからの電荷分離は数ピコ秒の時間スケールで起こる事が明らかになっているが、藍色細菌や緑色植物の光化学系 II 反応中心での初期電荷分離はスペシャル・ペアの隣にあるアクセサリ・クロロフィルから数百フェムト秒～1ピコ秒の時間スケールで起こることが明らかになりつつある。我々は、凝縮相量子動力学の視点から光化学系 II 反応中心で見られるような超高速光誘起電子移動反応の可能性やその原因を解析している。タンパク質の運動が色素分子の電子状態に及ぼす揺らぎ/タンパク質の再配置過程の時間スケールと色素の電子励起の量子力学的非局在化との競合が光誘起電子移動反応の速度を制御し、電子供与体と電子受容体との結合が数十  $\text{cm}^{-1}$  程度である状況においてでさえ数百フェムト秒の時間スケールの電荷分離が実現し得ることを理論的に示した。
- 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

**A. ISHIZAKI**, "Interaction between Quantum Mixing and Environmental Dynamics Controlling Ultrafast Photoinduced Electron Transfer and Its Temperature Dependence," *Chem. Lett.* **43**, 1406–1408 (2013).

**L. BANCHI, G. COSTAGLIOLA, A. ISHIZAKI and P. GIORDA**, "An Analytical Continuation Approach for Evaluating Emission Lineshapes of Molecular Aggregates and the Adequacy of Multichromophoric Förster Theory," *J. Chem. Phys.* **138**, 184107 (14 pages) (2013).

B-3) 総説, 著書

石崎章仁, 「光合成光捕集系における電子エネルギー移動と量子コヒーレンス」, *レーザー研究* **41**, 391–397 (2013).

B-4) 招待講演

A. **ISHIZAKI**, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting—old roots, new shoots,” Sixth Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), November 2013.

A. **ISHIZAKI**, “Electronic and vibrational wave packets in photosynthetic energy transfer,” Quantum Simulation of Open Quantum Systems, Albert-Ludwigs Universität Freiburg, Freiburg (Germany), November 2013.

A. **ISHIZAKI**, “Electronic and vibrational wave packets in photosynthetic energy transfer,” Vancouver-Okazaki Workshop on Coherent and Incoherent Wave Packet Dynamics, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), November 2013.

A. **ISHIZAKI**, “TBA,” International Conference on Computational Modeling Methods and Applications, Northeast Normal University, Changchun, Jilin (China), September 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. **ISHIZAKI**, “Quantum dynamical aspects of efficient energy transfer in photosynthetic light harvesting,” The 15<sup>th</sup> Asian Chemical Congress, Sentosa (Singapore), August 2013.

石崎章仁, 「光合成光捕獲系におけるエネルギーと電子の移動」, CMSI 第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校2013, 蔵王, 2013年8月.

A. **ISHIZAKI**, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” Quantum Effects in Condensed-phase Systems, Telluride Science Research Center, Telluride (U.S.A.), July 2013.

A. **ISHIZAKI**, “Quantum aspects in photosynthetic light harvesting—old roots, new shoots,” The 15<sup>th</sup> Japan-Korea Symposium on Molecular Science: Quantum to Life, Kobe (Japan), July 2013.

A. **ISHIZAKI**, “TBA,” Quantum Transport in Light-Harvesting Bio-nanostructures, Florence (Italy), March 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

石崎章仁, 「植物・細菌の光捕獲戦略」若手研究者による分野間連携研究プロジェクトワークショップ「太陽系外惑星のハビタビリティと光合成」, 修善寺, 2013年3月.

石崎章仁, 「分子システムが見せる自律性の理解に向けて」, 第1回NINS Colloquium「自然科学の将来像」, 箱根, 2013年2月.

A. **ISHIZAKI**, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” International Workshop on Quantum Biology: Facts and Future Prospects, Indian Institute of Technology Rajasthan, Jodhpur (India), January 2013.

A. **ISHIZAKI**, “What do we learn about light harvesting systems from long-lived electronic coherence?” The 72<sup>nd</sup> Okazaki Conference on Ultimate Control of Coherence, Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), January 2013.

A. **ISHIZAKI**, “TBA,” 7<sup>th</sup> Winter School on Quantum Information Science in Taiwan, Kaohsiung (Taiwan), January 2013. (スケジュールの不都合によりキャンセル)

A. **ISHIZAKI**, “Photosynthetic Light Harvesting: Recent Advances in Theoretical and Experimental Studies,” SOKENDAI Asian Winter School, Frontiers in Photo-Molecular Science, Okazaki (Japan), January 2013.

## 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 22nd Solvay Conference on Chemistry, Scientific Secretary (2010).

### その他

The Netherlands Foundation for Fundamental Research on Matter, external reviewer (2013).

Research Grant Council of Hong Kong, external reviewer (2012).

## B-8) 大学での講義，客員

Wissenschaftskolleg zu Berlin, Fellow 2012–2013, 2013年 2月–3月，5月–6月.

## B-10) 競争的資金

科研費若手研究(A), 「光合成光捕獲系における電子エネルギー移動ダイナミクスとその環境適応性の分子理論」石崎章仁 (2013年–2017年).

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–2013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力学の理論的解析」石崎章仁 (2006年–2008年).

## C) 研究活動の課題と展望

米国における助教授人事を途中で辞退し、帰国・着任してから2年が経過しようとしている。当面の科学的課題は、これまで取り組んできた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の卓越した効率の物理化学的理解に加えて、環境応答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。この研究課題を通して、一般に、電子構造・分子力学という歴史的進展の先にある分子システムがその機能を自律的に発現させるための分子力学自由度の条件を探りたい。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。しかし、更なる研究の広がりや深まり・国際競争力増強のためにはグループの拡充が重要課題の一つであることは言うまでもない。ヒューマンリソースは真剣に議論すべきクレーシヤルな問題である。