

石 崎 章 仁 (特任准教授 (若手独立フェロー))(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) 光合成光捕集系におけるエネルギー移動・電荷分離ダイナミクスを解析する有用な実験手法の一つとして二次元電子分光法が挙げられる。光合成光捕集系二次元電子分光データに見られる量子ビートの物理的起源に関して、2009年の Ishizaki と Fleming による理論予測と Engel らによる実験データの解析に基づき、色素分子の 0-0 振電遷移と別の色素分子の 0-1 振電遷移の量子力学的混合と複数のレーザーパルス照射により誘起される電子基底状態と電子基底状態の両方の振動コヒーレンスが提案されている。本プロジェクトでは、色素分子の振電遷移間の量子混合がタンパク質環境が誘起する揺らぎによってどのように破壊されるのかを解析し、分光データの温度依存性について整合性のある描像を与えることができた。また、タンパク質環境における揺らぎや再配置過程の中で振電遷移間の量子混合が電子励起エネルギー移動のダイナミクスに与える影響について解析した。さらに、光化学系 II 反応中心における初期電荷分離過程についても同様の解析を進めている。
- b) 光合成光捕集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・環境応答性を説明できない。本プロジェクトでは、光合成エネルギー移動過程の環境応答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を検討している。

B-3) 総説，著書

A. SHABANI, M. MOHSENI, S. JANG, A. ISHIZAKI, M. B. PLENIO, P. REBENTROST, A. ASPURU-GUZIŁ, J. CAO, S. LLOYD and R. J. SILBEY, "Open quantum system approaches to biological systems," in *Quantum Effects in Biology*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).

B-4) 招待講演

A. ISHIZAKI, "Impacts of protein-induced fluctuations upon quantum mechanically mixed electronic and vibrational states in photosynthetic energy transfer," Indo-Japan joint Workshop on "Frontiers in Molecular Spectroscopy: Fundamentals and Applications to Material and Biology," Nara (Japan), November 2014.

A. ISHIZAKI, “Non-Markovian quantum dynamical aspects in photosynthetic energy transfer,” The XIXth International Workshop on Quantum Systems, in Chemistry, Physics and Biology (QSCP XIX), Taipei (Taiwan), November 2014.

A. ISHIZAKI, “Quantum Dynamic Aspects in Photosynthetic Light Harvesting—Old Roots, New Shoots,” International Symposium on Optobiotechnology, OptBioTechnology Research Center, Nagoya Institutes of Technology, Nagoya (Japan), October 2014.

A. ISHIZAKI, “Impact of environment-induced fluctuations on quantum mechanically mixed electronic and vibrational states of pigments in photosynthetic energy transfer,” Technische Universität Dresden, Dresden (Germany), June 2014.

A. ISHIZAKI, “Energy transfer dynamics in photosynthetic light harvesting systems and their two-dimensional electronic spectra,” 2nd Sweden-Korea Joint Symposium on Advanced Spectroscopy: Light Capture and Conversion Processes in Biological and Artificial Systems, Lund University, Lund (Sweden), May 2014.

A. ISHIZAKI, “Electronic and Vibrational Coherences in Photosynthetic Energy Transfer and 2D Electronic Spectra,” CECAM workshop “investigating fine quantum effects in biological systems: Toward a synergy between experimental and theoretical approaches?” Paris (France), May 2014.

石崎章仁, 「レーザー分光と理論で探る光合成光捕集系における量子力学」第6回超高速時間分解光計測研究会「ソフトマターの先端光計測」浜松, 2014年3月.

A. ISHIZAKI, “What do we learn about photosynthetic light harvesting systems from long-lived electronic quantum coherence?” German-Japanese Colloquium on Frontiers of Laser Science, Heidelberg (Germany), January 2014.

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

45th World Chemistry Congress of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC-2015), Physical Chemistry “Natural and Artificial Photosynthesis,” セッションオーガナイザー (2014).

第3回NINS Colloquium 「自然科学の将来像」運営組織委員 (2014).

NTU-IMS Faculty Exchange Meeting 世話人 (2014).

第22回化学ソルベール会議, 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

京都大学大学院理学研究科, 「光合成光捕集系の物理化学」2014年1月.

Wissenschaftskolleg zu Berlin (ベルリン高等研究所) Fellow, 2012年–2013年.

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).

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

2008年より開始した光合成エネルギー移動の量子ダイナミクス理論のプロジェクトも収束しつつある。当面の科学的課題は、光合成光捕獲系の電子励起エネルギー移動・電荷分離過程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、分子システムがその機能を自律的に発現させるための動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小ささを鑑みて、この数年は将来の詳細かつ大規模な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。