

光合成系の光捕集に関する理論的解析

近畿大学 理工学部 鬼頭宏任

名古屋大学 大学院 理学研究科 木村明洋

目的 光合成系の光捕集機構を解析するための準古典マッピング動力学シミュレーションプログラムの実装と精度検証

内容 昨年度までに開発していたプログラムに、一般化スピンマッピング(SM)法を実装し、FMO光合成アンテナ蛋白質3量体の24サイトモデルを用いてベンチマーク計算を実行した。

結果 焦点SM法から計算された各サイトの励起子のポピュレーションは20ピコ秒あたりで適切に熱平衡状態に収束した。また少ない古典軌跡数で、図のように良い統計平均が得ることが出来た。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

40ピコ秒シミュレーションに使用した資源

8ノード 並列

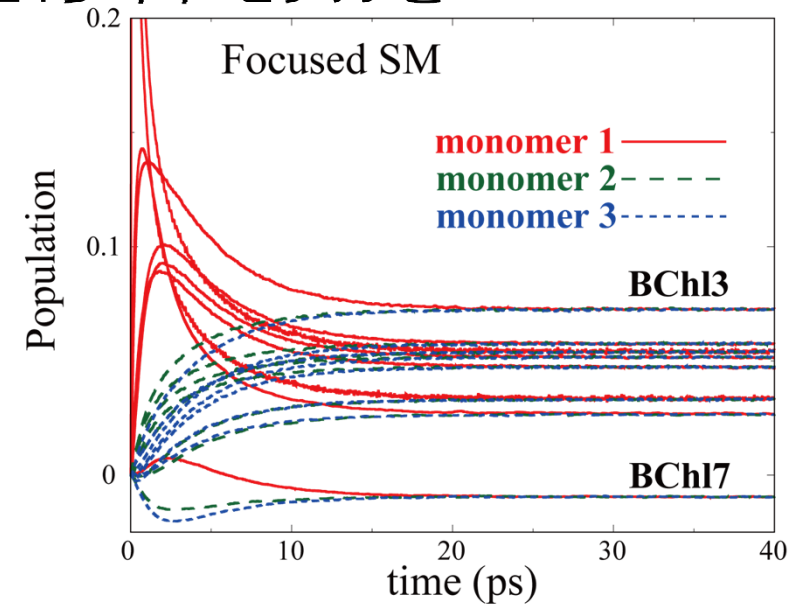


図 FMO3量体モデルに対する焦点SM法シミュレーション結果