

アカリオクロリス光化学系Iが持つ スペシャルペアP740の電子状態計算

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 アカリオクロリス生物の光化学系Iが持つスペシャルペアP740について、光誘起電荷分離後のカチオン状態における電子状態を解析する。

内容 スペシャルペアP740(クロロフィルdとクロロフィルd'の2量体)をQM領域、タンパク質とその他の色素/補因子をMM領域と設定し、量子化学計算プログラムORCA 6.0.1によるQM/MM計算を実行した。

結果 P740カチオンの電子スピン密度はタンパク質環境から受ける静電相互作用の影響によってBブランチ側に偏り、対称性が崩れていることが分かった。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
使用した資源:1ノード 76コア並列

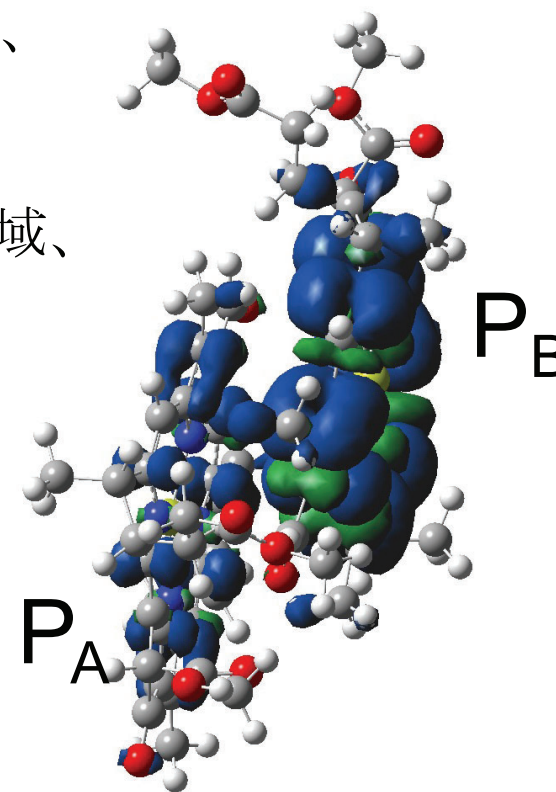


図 QM/MM(B3LYP-D3BJ/def2-TZVP:Amber99)
計算から求めたアカリオクロリス光化学系Iの
P740カチオンのスピン密度。MM領域は省略した。