



【研究内容】

生体由来の機能性分子における電子スピンや光励起、量子化学情報に関する理論的研究を行っています。特に、植物や一部細菌の光合成や酸素発生機構について取り組んでいます。

【研究目的】

人・環境に優しい分子科学の展開を目指し、生命がすでに実現している分子設計や分子制御について、基礎的な原理解明を目的としています。特に光合成について、酸素発生機構の解明を目指すと共に、人工光合成との橋渡しとなりうる理論的研究を目指しています。

【今後の展開】

光合成を光電荷分離の観点から理解できるよう、静電相互作用ネットワークや電荷キャリアに対する理論モデルを確立します。また、量子化学計算から薬学研究への応用展開も計画しています。

【主な研究テーマ／実績テーマと内容】

光合成における酸素発生中心の理論的研究

植物や光合成細菌における酸素発生反応は、地球上の生命を支える重要な生化学反応であり、近年は人工光合成や水分解電極のお手本としても注目されています。酸素発生の機構解明を目指して、水が酸素へと変換されるタンパク内反応中心に注目し、その分子構造や電子状態の理論的研究に取り組んでいます。特に、酸素発生中心の核であり Mn と Ca から成る多核金属クラスターについて、金属酸化数やスピン状態の量子化学計算を行っています。

M. Hatakeyama, K. Ogata, K. Fujii, V. K. Yachandra, J. Yano, S. Nakamura, *Chemical Physics Letters* 651, 243-250, (2016). J. Yang, M. Hatakeyama, K. Ogata, S. Nakamura, C. Li, *The Journal of Physical Chemistry B* 118, 14215-14222 (2014).

生体由来の高光耐久色素に関する理論的研究

生体由来の各種色素分子は、太陽光に由来する光反応やラジカル反応によって生体自身を傷つけないよう、光耐久性を様々な機構で実現しています。一例として、高光耐久性で知られる海藻由来の色素 Porphyrin-334 について、光吸収前後の挙動や外部環境（水溶媒）へのエネルギー拡散機構を量子化学計算や分子シミュレーションの立場から研究しています。

K. Koizumi, M. Hatakeyama, M. Boero, K. Nobusada, H. Hori, T. Misonou, S. Nakamura, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19, 15745-15753 (2017).

機能性分子に関する実験グループとの共同研究

種々の機能性分子について、生体由来か人工合成物かを問わず、特性か原理解明を目指した実験グループとの共同研究に取り組んでいます。一例として、陽電子放出断層撮影 (PET) のプローブ前駆体として期待されているベンザイン (C_6H_4) について、プローブ合成の機構解明やその反応を触媒する金属錯体の電子状態解析について取り組んでいます。

M. Hatakeyama, Y. Sakamoto, K. Ogata, Y. Sumida, T. Sumida, T. Hosoya, S. Nakamura, *Physical Chemistry Chemical Physics* 19, 26926-26933, (2017).

【企業との共同研究の実績】