

氏名（本籍地）	小松勇			
学位の種類	博士（物理学）			
学位記番号	博甲第 7224 号			
学位授与年月日	平成 27 年 3 月 25 日			
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当			
審査研究科	数理解物質科学研究科			
学位論文題目	Absorption efficiencies of antenna complexes in photosynthetic organisms exposed to the photoenvironment of extrasolar planets (太陽系外惑星の光環境にさらされた光合成生物のアンテナ複合体の吸収効率)			
主査	筑波大学教授	博士(理学)	重田育照	
副査	筑波大学教授	理学博士	梅村雅之	
副査	筑波大学教授	理学博士	矢花一浩	
副査	筑波大学客員教授	理学博士	白石賢二	

## 論 文 の 要 旨

近年、Kepler宇宙望遠鏡の活躍により、太陽系外惑星の発見数は大きく更新されている。地球に類似した惑星の発見が望まれる中、これらの惑星のスペクトルから生命の痕跡を捉えることが提案されている。その指標として、植生由来のスペクトルを特定することが地球のスペクトルの解析から提案されており、700-750 nmに見られるred edgeが1つの候補とされている。しかしながら、今後の観測では太陽より低温の恒星を公転している惑星がターゲットとなっており、そこで光合成と現状のred edgeの基準には大きなギャップがある。

本研究においては、まずその最初の段階として、より長波長側の光を吸収する紅色細菌に焦点を当て、これらのアンテナ複合体（LH2）が恒星からの放射の環境が変わったときにどのように効率的に光を吸収するかについて評価した。LH2などの吸収スペクトルを算出するために量子化学計算を用いた。まずはLH2などを構成するいくつかの光合成色素（クロロフィル、バクテリオクロロフィルなど）について時間依存密度汎関数理論（TDDFT）によって計算をした。これらの色素やLH2は3つの主だった吸収バンドを持ち、波長の短い方から、Soret、Q<sub>x</sub>、Q<sub>y</sub>と呼ばれている。吸収効率を評価した結果、高温の恒星（F、G、K型）においてはSoret帯の影響が大きく見られ、この領域の放射強度によって効率が大きく変わることがわかった。一方、低温のM型星ではSoret帯の影響は殆ど無視できる程小さく、代わりにQ<sub>y</sub>帯の影響が大きく見られた。色素の中で効率を比較した結果、バクテリオクロロフィルのSoret帯は4000 Å break（恒星の金属の吸収によって生じる、400 nm前後の放射スペクトルにみられる急勾配）の短波長側にあることによって吸収効率が小さくなり、クロロフィルは長波長側にあるので効率が大きくなることがわかった。続いて、構築したLH2のモデルについて、実験結果などと比較してモデルの妥当性を検証した。複数

のLH2の系において励起エネルギー移動 (EET) の計算を行った結果、中心のLH2の2つの色素を低エネルギーのものに交換した結果 (850→870 nm)、移動速度が2倍になることがわかった。LH2の系に関しても先と同様に吸収効率を評価した。恒星のスペクトルに加えて黒体放射によって評価すると、LH2は太陽の有効温度よりも高温側に外れて最大吸収効率を示すことがわかった。Soret帯のピークはちょうど400 nmあたりに来るので、吸収効率は大きくなっている。さらに惑星大気の減光の影響を調べるために輻射輸送計算を行って、惑星地表における吸収効率を評価した。その結果、地球大気の影響によって効率は大きく変わらず、Soret帯の寄与は無視できないことがわかった。地球とM型星の地表においてはいずれもQy帯の水蒸気による吸収の影響が見られ、大気の変えたと地球型よりもM型惑星の吸収効率が大きく変化することがわかった。さらに、M型惑星においてアンテナ複合体が効率良く吸収するための条件をLH2の構造を基準にしながら探った。色素やLH2の構造や溶媒などの条件を変えた結果、70 nmほどの長波長化が見られたが、吸収効率は大きく向上しなかった。これらを踏まえると、地球大気の影響を考慮してもSoret帯は4000 Å breakの影響を受け、吸収効率の上昇に寄与していることがわかった。M型惑星においてはSoret帯の寄与はなくなり、Qy帯における大気の水蒸気の影響が大きいことが期待され (存在していれば)、そこでの光合成生物はこれらの吸収バンドを避けながら絶妙に吸収スペクトルを調整する必要がある。

Chapter 1では、本研究に至る先行研究について述べた後、本研究がfocusするポイントについて述べる。系外惑星、その中でも生命を育むと考えられるハビタブルプラネットについて記述した (1.1)。惑星のスペクトルから切り分けるbiosignaturesになり得るものは大きく2種類に分類され、大気分子と惑星地表によるものがある。これらのうち地表のbiosignatureとされているred edgeについて言及する (1.2)。その後、光合成において重要な光吸収とEETの役割を担う光合成色素とアンテナ複合体について述べ (1.3)、本研究の目的について記述した (1.4)。

Chapter 2では、本研究で用いた数値計算の手法である量子化学計算と輻射輸送計算を用いた。量子化学計算に関してはまず分子の電子励起状態の計算に広く用いられているTDDFTについて述べた (2.1)。TDDFTは色素1つの計算に用いた。また、光合成のアンテナ複合体における光吸収とEETを扱う、量子力学モデルについてまとめた (2.2)。これらの計算から得られた吸収スペクトルを用いて、様々な恒星からの輻射に対する吸収効率を評価する (2.3)。さらに、恒星からの輻射輸送に関して用いた惑星大気の1次元の平行平板モデルを採用し、これについて記述した (2.4)。

Chapter 3では、数値計算の結果について記述した。まず地球上の主だった6つの光合成色素について吸収効率を評価した (3.1)。輻射環境としては、FGKM型 (表面温度が下がる順、太陽はG型) の恒星から惑星大気上端に到達したときの輻射スペクトルを用いた。つぎにLH2の光吸収とEETの結果を先行研究と比較し、吸収効率を評価した (3.2)。ここまで色素とLH2に関して別々のモデルによって評価していたので、系の大きさによる効果とモデルの差による効果によって吸収効率がどのように変化するかを比較した (3.3)。続いて、惑星大気の影響による効果を考慮するために、惑星大気上端と地表における効率を比べた (3.4)。また、恒星のうちM型星にさらに焦点を当て、これらの吸収スペクトルがどのように長波長化するか吸収効率の向上がみら

れるかについて議論した (3.5)。惑星地表における LH2 の吸収効率を地球と M 型惑星で比較するために輻射輸送計算を用いて、地表における効率を比較した (3.6)。ここでは地球型、還元型、酸化型の 3 つの大気条件で計算した。最後に M 型惑星における効率的な光合成に関する示唆に関して述べる (3.7)。Chapter 4 では、これらの結果のまとめについて記述した。

## 審 査 の 要 旨

### 〔批評〕

本学位論文では、系外惑星の生命痕跡の理論予測のため、惑星の反射・吸収スペクトルにおける植物由来の物質の光吸収特性に着目し、(1) 第一原理計算に基づく紅色細菌中の光合成色素の励起スペクトル計算と双極子モデルに基づく光アンテナ複合体 (LH2) の励起スペクトル解析、および、恒星の輻射を考慮した吸収効率の算出、(2) 量子リ्यूビュ方程式に基づくモデル LH2 多量体の励起エネルギー移動ダイナミクス解析による光補修機構に重要な物理パラメーターの抽出、(3) クロロフィルの中心金属を変えた場合の吸収スペクトルへの影響、(4) 複写輸送計算に基づく惑星大気由来の吸収の影響の見積もりなど、量子力学から古典力学まで物理学における様々な理論を駆使し、物質・生命科学と宇宙科学を横断した学際融合領域の研究を開拓するなど、学術的価値の極めて高い研究がなされた。宇宙生命物理学は現在急速に発展してきている分野であり、この分野において本学位論文の成果はパイオニアとなりうる様々な新しい試みが含まれており、今後ますます重要になるものと期待できる。

### 〔最終試験結果〕

平成 27 年 2 月 18 日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

### 〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(物理学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。