

令和 2 年 7 月 7 日現在

機関番号：12102

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H04866

研究課題名(和文)光化学系II酸素発生中心における水分解反応の全反応経路解明

研究課題名(英文)Elucidation of the complete reaction pathways of the water decomposition reactions in the oxygen-evolving complex of photosystem II

研究代表者

庄司 光男(Shoji, Mitsuo)

筑波大学・計算科学研究センター・助教

研究者番号：00593550

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 19,900,000円

研究成果の概要(和文)：自然界において光合成明反応の水分解反応は光化学系II酸素発生中心において触媒されている。本反応はクリーンなエネルギー源として極めて重要であるが、その詳細の反応機構については未だ解明がなされていない。特にS3→S4→S0過程では基質水分子の挿入、O-O結合形成、酸素放出過程が含まれるが、その反応経路を理論的に解明するのが本研究の目的である。これらを解き明かしたのみならず、基質酸素原子の起源、Ca<sup>2+</sup>イオンの役割、新しいO-O結合機構(CBS機構)も明らかにした。さらに、より複雑な酵素反応機構の解明に必要な自動探索法(GLAS)を開発したことで、より早くより正確に理論解析することを可能にした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

光合成の水分解反応は国際的に活発に研究がなされており、熾烈な研究競争がなされている。自然系の優れた水分解反応機構は自然科学の学理解明のためのみならず、次世代のクリーンなエネルギー開発にとって、鍵となる重要な反応である。本研究ではその核心とも言える水分解反応を一通り理論解析した。近年の時分割構造解析結果とも一致しており、先駆的理論研究となっている。これらの結果は、人工光合成の性能向上(高耐性TON)、高速(TOF)、安価(低過電圧)の手がかりとしても極めて重要である。その為、今後は人工光合成との直接的対応関係について具体的に示していきたい。

研究成果の概要(英文)：In the natural world, the oxygen-evolving complex of photosystem II owns the water decomposition reaction for the photosynthetic light reaction. This reaction is critically important as the sustainable energy source, however, the detailed reaction mechanisms are still unclear. Especially, the S3→S4→S0 transition is most important as that contains insertion of substrate water molecule, O-O bond formation and O<sub>2</sub> ejection. In the present study, details of the reaction steps were investigated theoretically. Not only we revealed these issues, but also for the origin of substrate water molecules, role of Ca<sup>2+</sup> ion, novel O-O bond formation mechanism (CBS mechanism) were clarified. Furthermore, we have developed a novel automatic search algorithm for complicated enzymatic catalytic reactions. The new method, named GLAS, permits to improve the speed and accuracy of the theoretical investigations.

研究分野：理論化学

キーワード：QM/MM 反応機構 光化学系II 水分解 酸素発生 Mnクラスター 反応経路探索

## 1. 研究開始当初の背景

光合成は光エネルギーを効率的に化学エネルギーに変換する優れた生命機能の一つである。その最初の化学反応は光化学系 II(PSII)で行われ、水分子はプロトン、電子、酸素分子に分解される(水分解反応)。PSIIは巨大な膜タンパク質複合体で構成されており(図1)、水分解反応は特殊な活性中心(酸素発生中心, OEC)において、5つの酸化状態( $S_i, i = 0-4$ , ただし  $S_4$ は仮想状態)を経由して行われる(Kok-Joliet サイクル, 図2)。水分解に直接関わる重要な化学反応は  $S_2$ 状態以降で起こる。本反応は極めて難しい(高い酸化力が必要な)反応であるが、PSIIは4つの光で(太陽光の低いエネルギーで)反応を触媒できるため、PSIIの優れた水分解機構を解明する事は自然現象の学理解明のためのみならず、クリーンなエネルギー開発に関連して現在極めて注目されている。より具体的な研究状況と学術的背景は以下のように4項目存在する。

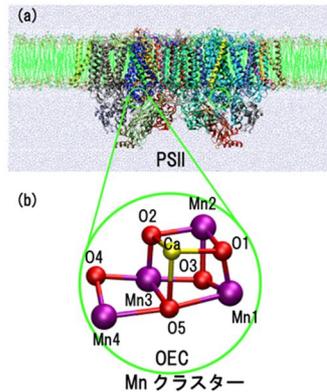


図1.(a)光化学系 II (PSII)の全体構造と(b)活性中心(OEC)拡大図

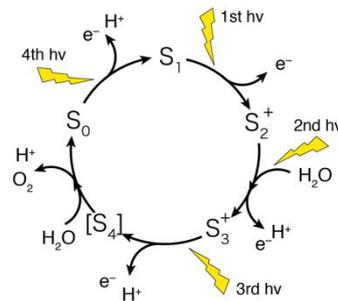


図2. Kok-Joliet サイクル。PSIIは四電子酸化反応( $2\text{H}_2\text{O} + 4\text{h}\nu \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ )を触媒する。

### (1) 安定状態( $S_1, S_2, S_3$ )を理論解析してきた。

我々は PSII 活性中心の安定中間状態( $S_1, S_2, S_3$ )について電子状態と構造変化を実験結果と対応させて理論解析してきた。量子古典混合計算法(QM/MM 法)を用いて、最小モデル(QM 領域 150 原子)から大規模モデル(QM 領域 350 原子)まで3段階の QM/MM 計算モデルを構築し、精密に物性評価を行ってきた。安定状態( $S_1$ )においては Mn 酸化状態、スピン状態、O5 がプロトン化している可能性(O5=OH)をいち早く指摘してきた。Mn クラスターのみならず、タンパク質環境効果と、Mn クラスター周りの水素結合ネットワークについて精密に検討することで、プロトン移動経路、水チャンネル、塩素イオンとの相互作用を明らかにした。 $S_2, S_3$ 状態では O5 移動に関連した特長的 Mn クラスターの構造変化と電子状態変化を明らかにしてきた。

### (2) 反応機構は未解決。

反応機構は理論計算からもなされてきた(P. Siegbahn, 2006, F. Neese, 2015)。現在、O5 サイトで酸素生成がなされるという説が有力であるが、2016年8月の光合成国際会議では菅・沈らが O4 サイトで酸素生成する機構を実験的に示すなど、異なる反応機構も注目されている。これまでの理論計算では実験結果を元にして、小さなモデル(QM モデルなど多くの簡略化、仮定を導入)で検証するスタイルであり、かつ反応経路も手動探索であるため(P.Siegbahn に直接確認)反応機構は年々変更されてきている状況である。そのため、反応機構は本研究領域における最大の重要問題となっている。

### (3) S 状態遷移の主要反応の理論解析を始めている。

申請者は最も初めの化学反応過程( $S_2 \rightarrow S_3$  状態遷移)での水の挿入経路( $\text{Ca}^{2+}$ に配位する水 W3 が Mn4 サイトに挿入する経路)を理論的に最初に提唱した。本反応は振動分光法から最も支持される機構となっている(R.J. Debus, 2016)。

### (4) 実験的に直接構造変化が観測できるようになってきている。

2011年のPSIIの高分解能(1.9 Å)X線構造(梅名ら, 2011.)以降、結晶構造は劇的に進歩してきており、現在3グループ(P. Fromme, V.K. Yachandra, 沈)が独立に時分割X線構造解析で高酸化状態( $S_2, S_3, S_4$ )を報告するなど、低解像度ではあるが反応中間体構造を直接構造決定できる時代に突入している。近い将来に高分解能構造が報告される可能性があり、反応機構はまさに議論の渦中に入ろうとしている。

## 2. 研究の目的

これまでの研究実績を踏まえ、水分解反応にとって最も重要な3つの化学反応過程: 水分子挿入過程( $S_2 \rightarrow S_3$  遷移)、O-O結合生成反応過程( $S_3 \rightarrow S_4$ )、O2放出過程( $S_4 \rightarrow S_0$ )に焦点を当て、 $S_3, S_4$ 状態を含む全ての可能な反応経路をQM/MM法により明らかにする(図3)。本研

究課題では1つの最安定反応経路だけでなく、他の(よりエネルギー的に高く見積もられた)可能性のある反応経路についても特徴を明らかにすることで、広く水分解反応を解明する。

### 3. 研究の方法

本研究方法における学術的特徴及び独創的な点は以下の3項目が挙げられる。

#### (1) 独自の計算手法の効率化と電子状態解析法を活用する。

Broken-Symmetry Density Functional Theory (BS-DFT)法は電子相間を考慮した開殻系の電子状態計算法として実用的方法であり、スピン射影により近似的に正確な量子状態を見積れる。しかしながら、BS-DFT法は解の収束が悪く、特に大規模系では極めて計算の手間がかかる。申請者は10年以上BS-DFTを利用してきており、初期軌道作成方法と電子状態解析法を独自に開発してきた。本研究課題のような大規模多スピンサイト系において活用する。

#### (2) 反応経路の自動探索法を開発する。

反応経路の探索は極めて手間と計算コストがかかる。化学反応をよく知っていれば、多くの反応経路を絞り込み、少ない手続きで検討が可能であるが、複雑なコンフォメーション変化を伴う場合や思いもよらない経路に対しては手動ではどうしても探索漏れが発生してしまう。そのため、計算コストがかかってしまっても反応経路を自動的に探索する方法を見つけないと本質的解決にならない。申請者はこれまでの経験をもとに、独自の自動探索法を開発する。本手法を活用することで、より完全な反応経路探索を実施する。

#### (3) スパコンを活用した高速計算を実施する。

国内のスパコン(Tsukuba-COMA, 京, Oakforest-PACS等)を活用することで、大規模QM/MM計算を高速に実行する。本課題で異なる反応経路を検討するにはQM領域を十分大きく設定し、比較できる必要があるが、そのためにはスパコンを十分に利用する必要がある。また、反応経路探索もスパコン上で実行できるようにする。効率的計算実行法について今までに研究を重ねてきており、スパコンの実行環境をより整備し、高速計算を実施できるようにする。

### 4. 研究成果

S<sub>3</sub> [S<sub>4</sub>] S<sub>0</sub> 遷移には少なくとも2つの反応過程が観測されている。1つは $\tau = 50 \sim 250 \mu\text{s}$ のラグタイムと呼ばれる過程で、もう1つは $\tau = 1.2 \mu\text{s}$ のより長いタイムスケールの反応過程である。これらはMnクラスター周りの水素結合の組み替えを伴う反応(プロトン移動/組み替え反応)とMnクラスターの再構築過程に相当する。前者の水素結合の組み替えにより、O-O結合の形成がなされる。O-O結合形成にはこれまでラジカルカップリング(RC)機構と酸塩基(AB) / nucleophilic attack 機構の2つが主に提唱されてきている。両機構の一番大きな違いはO-O結合生成時のプロトンの有無にある。電子状態としては、RC機構では2つの反強磁性的に分極したオキソラジカルが結合を形成する機構であり、AB機構では電子を与える塩基のhydroxo(OH)から酸であるoxoに電子を与えて結合を形成する機構である。反応性の高いoxoが2つ生成される状況になれば、RC的な反応経路の方がAB経路に比べてずっと起こり易い(反応障壁が低くなる)ため、理論計算的にはRC経路が最も妥当な機構であるように思える。RCはP.E. Siegbahnが提唱してきているが、我々は、精密な電子状態解析を行ったところ、RC反応機構の反応経路であっても、非ラジカル電子状態がO-O結合形成において重要な寄与を担っていることを見出した。つまり、RCではMn4( , IV)-O5(-2)+O6( , -1)-Mn1( , IV) [Mn4( , III)-O5( , -1)+O6( , -1)-Mn1( , IV)] Mn4( , III) O5(-1)-O6(-1)-Mn1( , IV) と反応が進むが、非ラジカル機構ではMn4( , IV)-O5(-2)+O6(-2)-Mn1( , V) Mn4( , III) O5(-1)-O6(-1)-Mn1( , IV)と記述され、O6上の1電子がMn4に移動すると共にMn4-O5間の結合がO5-O6間の結合に移動する協奏反応になっている。そのため、本機構を特にConcerted Bond Switching (CBS)機構と呼んだ。RCとCBSの違いは単なる形式的な原子電荷の割り振りだけの違いだけではなく、CBS機構では高原子荷Mn(Mn1(V))を反応に利用している事、Ca原子はLewis酸として働いており、酸素結合生成前の状態を安定化していることに合致すること、不安定なラジカル状態を生成しなくても反応が進行できることを示しており、O-O結合形成がより理解が容易になる。

S<sub>3</sub> [S<sub>4</sub>] S<sub>0</sub> 遷移の後半過程においては酸素分子の放出と水分子の挿入によるMn<sub>4</sub>CaO<sub>5</sub>骨格の再構築過程が含まれる。酸素分子放出と水分子の挿入過程が別々に起こると20 kcal mol<sup>-1</sup>の高い反応障壁が必要であるが、酸素分子放出と共にW3近傍の水分子が協奏的に反応を起こすと反応障壁は12.3 kcal mol<sup>-1</sup>となり、 $\tau = 1.2 \mu\text{s}$ の遅い反応過程に対応することを初めて理論計

算から解明した。生成される酸素分子は W3 に押し出されるようにして O5 原子近傍の Val185 側鎖で被われる疎水環境を通して、Asp61 側に透過するため、非極性の酸素分子の誘導に最適な環境が形成されている。また、Asp61 から PSII 外のチラコイド内側には酸素分子が透過できるチャンネルが形成されているため、PSII-OEC の水分解反応は蛋白環境場が効率的な反応に極めて重要である。我々の理論解析結果の後に、J. Kern らは Kok-Joliot cycle 中の全ての安定中間体状態 ( $S_i, i=0-3$ ) の XFEL 構造を報告している (Nature 2018)。彼らの構造では  $S_3$  状態生成後に W3 近傍に新たな水分子の存在が見えており、その結果から W3 が基質水分子の候補であると結論付けている。最近の TR-SFX 解析からも、 $S_2 \rightarrow S_3$  遷移過程において W3 が基質水分子候補であると報告がなされている (Science 2019, PNAS 2020)。また、M. Sugiura らは Val185 を Thr に置換することで、 $S_3 \rightarrow S_0$  遷移が遅くなることを報告しており (BBA 2018)。これらの結果は我々の反応機構と良く整合している。

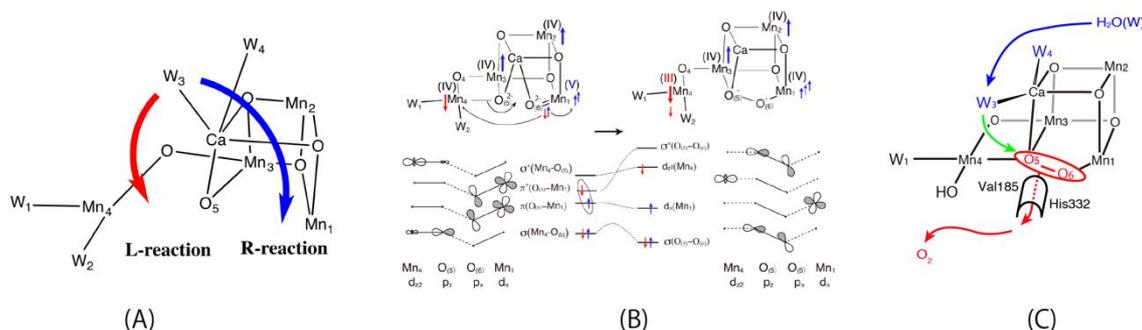


図 3. (A)  $S_2 \rightarrow S_3$  状態遷移での水分子挿入過程、(B)  $S_3 \rightarrow [S_4]$  状態遷移での O5-O6 結合生成機構 (CBS 機構)、(C)  $[S_4] \rightarrow S_0$  状態遷移での酸素分子放出と Mn クラスター骨格再構成の協奏的反應機構

反応経路の自動探索法については、複数のウォーカーを用い、ウォーカー間に反発力をかけていく事で、広い構造空間を網羅し、多くの分子構造 (局所安定構造) と構造間遷移経路 (反応経路) を自動的に求める事ができる新しい手法 GLocal Area Search (GLAS) 法を考案した。基質や蛋白質分子の複雑なコンフォメーション変化、多くの反応中間体の検討、それらを結ぶ複雑な反応経路を評価するために、広い構造及び反応空間を効率的に網羅探索する事が可能になった。本計算手順を図 4 に示す。(1) まず始めに構造最適化を行い、局所安定構造 ( $X_{min1}$ ) を求める。(2) 次にウォーカーを  $X_{min1}$  周りにランダムに配置する。(3) 次式の様にウォーカー間に反発ポテンシャル  $V_R$  を与えながら各ウォーカーを構造最適化させる。

$$\dot{X}_i(n) = -\nabla V(X_i(n)) - \nabla V_R(\{X_i(n)\}),$$

$$V_R = \sum_{(i,j)} V_R(i,j) = \sum_{(i,j)} \frac{k}{\text{RMSD}(i,j)}$$

$V_R$  には平均二乗偏差 (RMSD) に対する逆比例関数系を用いた。反発係数  $k$  を強めていく事で、ウォーカーを広く分布させる。 $k$  はウォーカーの平均エネルギー ( $E_{\text{avg}}$ ) が目標値 ( $\Delta E_t \sim$  反応障壁エネルギー) に到達するまで少しずつ大きくしていく。(4) ウォーカーの構造変化やエネルギーが収束したら各ウォーカーを個別に構造最適化する事で、他の安定構造 ( $X_{min2}$ ) を得ることができる。本手法のプログラムを Python で作成し、簡単な分子系 (エタン、グリシン、グリシン生成反応) に適用したところ、適切に構造と反応経路を探索できることを確認した。図 5 にはエタンに適用した時のウォーカーの構造変化過程 (重ね合わせ図) を示す。反応座標を明確に与えていないのに適切にメチル基が回転し、広く分布することが分かる。本 GLAS 法は (i) 計算コストが構造最適化レベルである事、(ii) 並列実行に向いている事、(iii) 未知の反応経路探索に利用できる事から、酵素反応での複雑な反応機構の解明に有益な手法となり得ると思われる。今後、様々な酵素反応系に適用し、理論解明に活用していきたい。

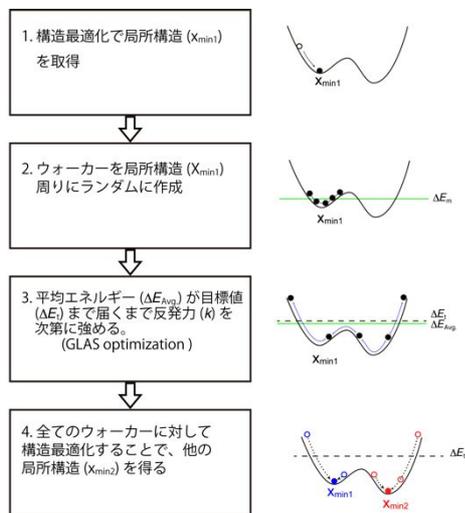


図 4. GLAS 法の計算手続き

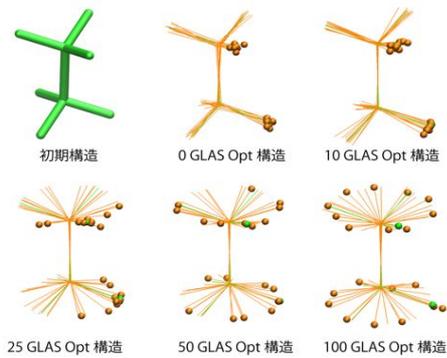


図 5. GLAS 最適化過程での構造変化 (エタンの場合)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Shoji Mitsuo, Isobe Hiroshi, Yamaguchi Kizashi	4. 巻 714
2. 論文標題 Concerted bond switching mechanism coupled with one-electron transfer for the oxygen-oxygen bond formation in the oxygen-evolving complex of photosystem II	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 219 ~ 226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1016/j.cpllett.2018.10.041">https://doi.org/10.1016/j.cpllett.2018.10.041</a>	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 M.Shoji, H.Isobe, Y.Shigeta, T.Nakajima, K.Yamaguchi	4. 巻 122 (25)
2. 論文標題 Concerted mechanism of water insertion and O <sub>2</sub> release during the S <sub>4</sub> to S <sub>0</sub> transition of the oxygen-evolving complex in photosystem II	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6491-6502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b03465	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 M.Shoji, M.Kayanuma, Y.Shigeta	4. 巻 191(10)
2. 論文標題 A practical approach for searching stable molecular structures by introducing repulsive interactions among walkers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1465-1473
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI:10.1246/bcsj.20180122	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 庄司光男, 磯部寛, 重田育照, 中嶋隆人, 山口兆	4. 巻 58(3)
2. 論文標題 光合成における酸素発生の反応機構	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 生物物理	6. 最初と最後の頁 127-133
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) ISSN 05824-4052	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M.Shoji, Y.Abe, M.Boero, Y.Shigeta, Y.Nishiya	4. 巻 -
2. 論文標題 Reaction Mechanism of Monomeric Sarcosine Oxidase with N-Cyclopropylglycine	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP01679A.	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mitsuo Shoji, Hiroshi Isobe, Jian-Ren Shen, Michihiro Suga, Fusamichi Akita, Koichi Miyagawa, Yasuteru Shigeta, Kizashi Yamaguchi	4. 巻 730
2. 論文標題 Elucidation of the entire Kok cycle for photosynthetic water oxidation by the large-scale quantum mechanics/molecular mechanics calculations: Comparison with the experimental results by the recent serial femtosecond crystallography	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 416-425
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2019.06.026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mitsuo Shoji, Hiroshi Isobe, Koichi Miyagawa, Kizashi Yamaguchi	4. 巻 518
2. 論文標題 Possibility of the right-opened Mn-oxo intermediate (R-oxo(4444)) among all nine intermediates in the S3 state of the oxygen-evolving complex of photosystem II revealed by large-scale QM/MM calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 81-90
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2018.11.003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 12件)

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 光合成水分分解反応の反応機構についての理論的探求
3. 学会等名 ミニシンポジウム 『生命科学と物質科学の融合による新規エネルギー・物質変換技術の創造をめざして』 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Water-Splitting Reactions in the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II Revealed by QM/MM calculations
3. 学会等名 ICOPP2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Spin States and O-O bond formation mechanisms in the Oxygen-Evolving Complex of Photosystem II
3. 学会等名 AWEST2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 光化学系II酸素発生中心における水分解反応機構についての理論解析
3. 学会等名 第46回生体分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji,
2. 発表標題 Catalytic Reaction Mechanisms Found by using the GLAS Algorithm
3. 学会等名 ICPAC 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 光合成酸素発生機構の分子メカニズム
3. 学会等名 筑波大ブレ戦略研究会「生命から学ぶ」プログラム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Reaction mechanism of water splitting in photosystem II revealed by QM/MM calculations
3. 学会等名 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, CCS International Symposium 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji
2. 発表標題 Elucidation of the Entire Kok Cycle of the Photosynthetic Water Oxidation Using QM/MM Calculations
3. 学会等名 3rd International Solar Fuels Conference (ISF-3) and International Conference on Artificial Photosynthesis-2019 (ICARP2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mitsuo Shoji, Hiroshi Isobe, Yasuteru Shigeta, Takahito Nakajima, Yasuteru Shigeta, Kizashi Yamaguchi
2. 発表標題 Role of Ca ion of the oxygen-evolving complex of photosystem II Revealed by QM/MM
3. 学会等名 The 99th CSJ Annual Meeting (日本化学会 第99春季年会), Konan University (2019) (oral, 口頭B講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M.Shoji, M.Kayanuma, H.Kitoh-Nishioka, Y.Shigeta
2. 発表標題 A new approach for searching stable molecular structures by introducing repulsive interactions among walkers
3. 学会等名 7thJCS, Prague, Czech Republic (Poster). (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M.Shoji, M.Kayanuma, Y.Shigeta
2. 発表標題 A new algorithm searching stable molecular structures and reaction pathways by introducing repulsive interactions among walkers
3. 学会等名 ICQC 2018, Menton, France (Poster). (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 庄司光男
2. 発表標題 分子構造および反応機構探索アルゴリズムの新展開
3. 学会等名 第18回日本蛋白質科学会年会 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M.Shoji
2. 発表標題 Water insertion reactions in the oxygen-evolving complex of photosystem II revealed by QM/MM calculations
3. 学会等名 ICPAC Langkawi 2018, Langkawi Island, Malaysia (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M.Shoji, H.Isobe, Y.Shigeta, T.Nakajima, K.Yamaguchi
2. 発表標題 QM/MM study on a S4 -> S0 reaction of the Oxygen Evolving Complex in Photosystem II
3. 学会等名 CPMD2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M.Shoji, S.Yamasaki, M.Kayanuma, Y.Shigeta
2. 発表標題 Reaction mechanisms of iron-containing proteins elucidated using QM/MM calculations
3. 学会等名 55th BSJ (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 M.Shoji, H.Isobe, Y.Shigeta, T.Nakajima, J.-R.Shen, K.Yamaguchi
2. 発表標題 Large-scale QM/MM study on the S1 state structures of the oxygen-evolving complex in photosystem II
3. 学会等名 JSCC67 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 庄司光男	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Amazon Kindle direct publishing (電子書籍)	5. 総ページ数 70
3. 書名 Gaussian16で始める量子化学超入門	

1. 著者名 庄司光男	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Amazon Kindle direct publishing (電子書籍)	5. 総ページ数 70
3. 書名 フリーソフトで始める分子モデリング	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究グループホームページ  <a href="https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/people/mshoji/index.html">https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/people/mshoji/index.html</a></p>
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考