



理論と実験、溝と橋渡し

東京大学 先端科学技術研究センター
石北研究室 野地 智康

光化学系 I や II 内部で起こる高効率なエネルギー移動、電子移動はとても魅力的で、今もその虜だ。

石北研に来るまでは、実験屋だった。分光実験が主体で、エネルギー移動や電子移動の反応速度を解析し、光合成タンパク質が、生体外でも生体内と同程度以上に機能する反応場の構築を行ってきた。石北研では、理論化学的手法を用い、タンパク質の機能を解明する。石北研に来て、本当に凄いことだと思ったのは、今まで、実験データのみでは、憶測ぐらいにしか言えなかったことが、タンパク質の構造を元に計算し、検証できることである。「そんなことはもう知っているよ」と、言われそうであるが、実験データを分子軌道やエネルギー準位から説明できたとき、「ああ！こんな仕組みだったんだ！」と思ったのは、今でも忘れられない。このような経験から、論文の実験データの見方は、実験データそのものから解釈できることに加え、分子軌道やエネルギー準位がどう変化しているのかを意識するように、変わった。

そのような変化があつてから、理論が主軸の論文を読んでいて、ふと気づいたことがある。計算値と実験値を比較して、自身の計算結果が正しいことを主張するのだが、実験条件をきちんと理解せずに、実験値を引用してしまったのだろうと考えられる論文にいくつか出会った。理論屋は実験を経験していないので、どうしても実験条件の細かい箇所はわからない。実験屋も理論の細かいところまではわからないので、実験値と計算値が合わないことが、理論の誤差によるものなのか、わからない。お互いにわからないものだから、比較すべきでない実験値と計算値を見て、「合わない」となり、理解から遠ざかる。はたまた、偶然合ってしまう、間違つて理解し、先に進めな

くなる。まさに、落とし穴(溝)。このような事態は、避けなければならない。特に、天然の光合成を解明し、それを人工触媒の設計に活かすのであれば、尚の事である。

CanApple では、「理論は異なる分野の橋渡し」の役割を持つ。その重要な役割をより効果的にするためには、異分野間の交流が重要である。天然の光合成の実験屋は、人工触媒の開発の実験を経験したり、また、その逆も行う。天然と人工の両試料を比較したり、同時に扱える条件を模索する必要があるのかもしれない。理論屋は、実験データの測定条件などが計算する系に適切か、実験の人たちと確認しておきたい。ここで、石北先生のお言葉をお借りするが、「あるタンパク質の機能を理解するために、全く異なるタンパク質の解析で得た知識や経験が必要だった」という。ならば、「全く関係ない研究分野の研究技術が、自身の研究を進展させるために必要」ということもあり得るだろう。

今、私は、ロドプシン中のレチナールという色素の吸収波長が、タンパク質の中間状態毎に変化する機構を、計算と実験結果の比較から解析している。吸収変化の機構を理解する上で、タンパク質の構造変化に伴う水素結合の掛け変わり、プロトン化状態変化、分子軌道の可視化が重要だった。僅かな色素の捻じれや、水素原子の僅かな角度や距離の変化が、思いの外、吸収に影響を与える。逆に言えば、色素をどう歪ませるか、色素に近いアミノ酸残基の水素原子の距離や角度をどう変化させるか、で、エネルギー準位を制御できることを意味する。実は、天然光合成でも、広い意味で同様に、エネルギー準位調節に使われる。

光合成タンパク質は生体内で最も合理的に働くように設計されている。それを人工的環境で働くように再設計できないか？あるいは、天然光合成で使われているエネルギー準位調整機構を人工触媒に組み込めないか？今は無理でも、将来は、そんなことが提案できるかもしれない。少しでもその将来に近づくように、今の研究を進めたい。