



理論によって放たれる光

東京大学大学院工学系研究科
応用化学専攻 石北研究室 神田知樹

光合成では二酸化炭素と水というありふれた物質を介して、光エネルギーから化学エネルギーへの変換が温和な条件下で達成されています。そんな光合成の電子移動機構について、私は理論化学的手法を用いて研究しています。

理論化学計算は、大学で化学を専門とする人以外にはあまり馴染みのない言葉です。私は家族や友人、初対面の人に研究内容を聞かれると説明に困ることがあります。

理論化学の研究と言っても多様であり、新しい計算方法の開発を行う研究と、これまでに開発された手法を用いて物性や化学反応機構を明らかにする研究に大別されます。石北研究室で行われている研究の多くは後者にあたります。その中でも私は石北研究室に所属して以来、光合成の電子移動を行う photosystem I (PSI) を研究しています。

上流部分には対称な 2 つの電子移動経路が存在する一方、下流部分には非対称に Fe_4S_4 錯体が 3 つ (F_X , F_A , F_B) 存在し、PSI は見れば見るほど神秘的な形をしています (図 1)。

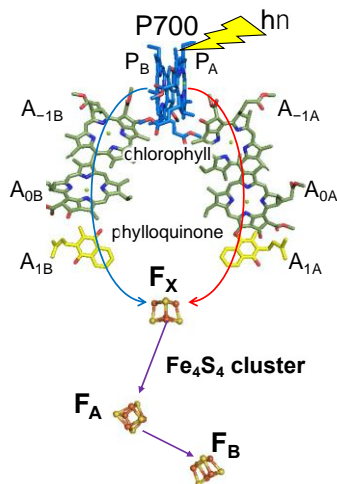


図 1. PSI の電子移動経路

光合成反応中心では、色素が興味深い配置で埋め込まれ、その結果、光子エネルギーが極力無駄にならずに電子移動が実現しています。その謎に迫るべく、古くから研究が行われてきました。しかし、各タンパク質の分子構造は非常に複雑です。私の研究対象である PSI の Fe_4S_4 錯体の場合ですと、電子移動の際に錯体内部で起きていることに関する情報はほとんどありませんでした。

理論化学計算を適用して初めて、PSI の Fe_4S_4 錯体には、(a) 単一の Fe 原子上で電子の授受が完結するもの (F_A , F_B) と、(b) 電子アクセプター Fe 原子・ドナー Fe 原子が役割分担して電子移動を行うもの (F_X)、この 2 種が存在することが判明しました¹。

化学式上は同じ Fe_4S_4 錯体なのに、異なる機構で電子移動を行う。にわかに信じがたい主張かもしれません。が、私は更に解析を進め、静電場環境によって両者の違いが生じるメカニズムを明らかにしました²。

ここ数十年で急速に発達した理論化学計算によって、実験だけでは得られない新しい知見・見解が与えられたとき、まるで暗闇に光がさすような刺激的な感覚を覚えました。

タンパク質の原子座標に理論式を介することで、(実験だと何年かかっても得られないと思われるデータでも) 数時間・数日のうちにコンピューターで得られる、というのが理論化学計算の特徴です。一方で、単に「計算した結果、この数値になった」で終わらせるのではなく、その根拠を構造から説明することが理論化学の研究では特に求められます。計算結果と説得力のある説明で研究の進む道を照らす光となると考えています。このことを頭に入れて、光合成研究を進めていきたいと思っています。

【参考文献】

1. Kanda, T., Saito, K., Ishikita, H. *J. Phys. Chem. Lett.* 12, 7431 (2021).
2. Kanda, T., Saito, K., Ishikita, H. *J. Phys. Chem. B* 126, 3059 (2022).