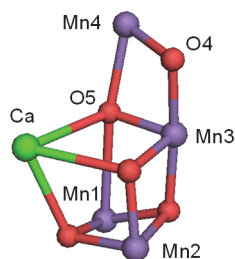




結論ありき、にならない

東京大学 石北 央

photosystem II (PSII)の水分解触媒部位の構造は、2011年に初めて Mn_4CaO_5 と同定されるに至りました。 Mn_4CaO_5 の形状は「歪んだ椅子」にたとえられます。



この形状を見れば、3つの Mn 原子だけでなく（酸素発生に必須である）Ca にも囲まれた O5 という酸素原子は、私も含めた多くの研究者にとって、非常に興味深い存在です。この特異さから、まずは O5 を（酸素発生における）基質水分子候補と考えるのは自然な流れです。実際、O5 と Mn4、O5 と Mn1 との距離は両者とも 2.5 Å 以上と長くなっています。そこで「O5 はプロトン化 (OH) しており、 Mn_4CaO_5 が酸化されるとプロトンを放出する」との仮説が作れます。O5 プロトンを放出するには、水素結合パートナーが存在しなくてはなりません。しかし、結晶構造上では水素結合パートナーは見当たりません。

Siegbahn は自身の量子化学的手法による理論研究で、「O5 近傍に水分子がやってくことで O5 からのプロトン放出が起こるが動きが速いため結晶構造では見えない。」と唱えました。そして水分子を仮定し、量子化学計算により O5 からのプロトン放出を実証しました。

この論文は、多くの研究者の心をとらえ引用されています。しかし、その主張ばかり鵜呑みにし、中身を確認しない研究者が多いのも残念な現状です。彼が計

算に用いた分子構造を見ると、愕然とします。

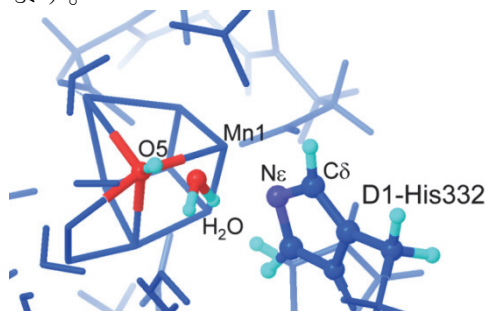


図 2. Siegbahn が用いた構造。Siegbahn. *BBA* 1827, 1003 (2013)

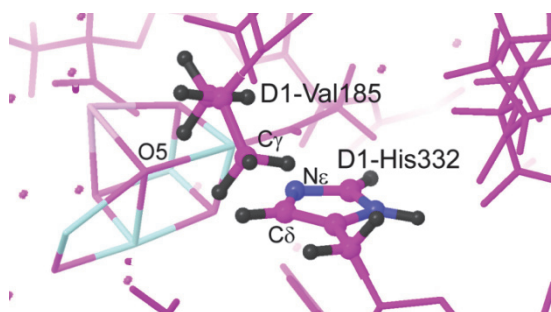


図 3. 結晶構造。Umena et al. *Nature* 473, 55 (2011)

Siegbahn は O5 近傍に水分子を導入するため、O5 と隣接する Mn1 に配位している D1-His332 のイミダゾール平面を 90 度も回転させ、かつ、近傍の疎水性アミノ酸残基 D1-Val185 のイソプロピル基を削除することで、水分子を導入しています。（図 2、3）

他にも、PSII 基質水分子が絡む反応機構関連の論文には、自説を通すため、芸術的ともいえる分子の動きを仮定し議論を展開するものが多々あります。結晶構造座標を尊重して電子状態計算をするにもかかわらず、都合が悪くなると名ばかりの「ダイナミクス」を理由に一気に結晶構造の否定にかかります。

実験も理論も、結論ありきの“研究”は、研究ではないと思います。仮説はあってよいと思いますが、結論ありきの姿勢で研究に臨むと、本人は捏造するつもりはなくても、無意識のうちに他人に流され、客観的事実を見失ってしまうかもしれません。