



プロトンと化学

東京大学 菅生 優

[石北研究室](#)に所属している修士 2 年の菅生優です。この度はこのような機会をいただき、感謝申し上げます。

光合成において、水力発電でいう水の役割、ATP 合成酵素のタービンを回しているのは、水素イオン H^+ です。水力発電で水を高いところに持ち上げるのは、太陽の光ですが、光合成でも光を使っています。光によって、電子が移動し、反対の電荷を持った H^+ が膜の反対側に運ばれて、 H^+ の濃度差を生じさせています。私は、この電子の移動に応答して動く H^+ の移動について研究しています。

H^+ が動く。といっても、 H^+ はとても小さいので実験で観測するのは至難の業です。しかし、理論化学を使えば、 H^+ の動く際のエネルギーを計算して、動いていることを実証することができます。 H^+ が動くとき、ふわふわと移動することを想像されるかもしれませんが、実はそうではないことが多いです。水素結合の線の上を隣に移動する、というのを繰り返すバケツリレーのような仕組みです。詳しくは、Grotthuss 機構をご参照ください。この機構では、水素結合の生成、開裂を伴います。このエネルギー変化の解析は量子化学計算が得意とするところです。これと、速く計算できる分子力学計算を組み合わせた手法を使って、 H^+ をコンピュータの中で動かしながら、最適な構造を計算し、エネルギーを算出することで、 H^+ がバケツリレーで動く過程を明らかにしました¹。

紅色光合成細菌の反応中心タンパク質に光エネルギーが移動すると、電荷分離が起こり、キノン Q_B という分子まで電子が移動します。 Q_B は還元されると H^+ も受け取ります。私たちが調べたのはこの Q_B までの H^+ 移動です。実は、植物にも存在する酸素発生型の反応中心タンパク質 (photosystem II: PSII) でもとても似た反応が起こっています。

PSII における Q_B までの H^+ 移動は 2013 年に明らかになっています²。紅色細菌での機構解明が今になって可能となったのは、PSII のものよりも、長い水素結合ネットワークを持ち、複雑な形状だからです。

もちろんこの研究は、光合成の理解に繋がりが、もしかすると人工光合成にも役立つことがあるかもしれません。しかし、私はもっと広く応用できると考えています。光合成の反応の一部である H^+ の移動を切り取ってそれを実証した、ということ以上の意味があるのです。

私は応用化学専攻に所属しています。一方で、やっていることは化学ではなく生物だと自身も思っていたこともありました。化学や生物などの分野で縦に割ることにあまり意味は感じませんが、今はこの H^+ 移動の研究は化学だと思っています。化学反応の本質は軌道の変化です。 H^+ の移動は、特にタンパク質環境において、軌道の変化、すなわち電子密度や位相の変化と密接に関係しています。今回研究した光合成は、これのわかり易い例です。電子 1 つの動きに協奏的に H^+ が 1 つ動いています。この研究によって得られた知見を、応用、発展させてさらに複雑な H^+ の移動の連鎖を調べています。

今までは H^+ 付加・脱離のイベントのみに焦点を当てるだけでサイエンスとは言い難い研究も見受けられましたが、今後はどういうタイミングで、どうやって、どこからそれが起こるかまで明らかにするかつスタンダードになっているでしょう。 H^+ の輸送は化学反応を語るうえで、欠かせないピースの 1 つです。そのピースを拾い集め、当てはめていくなかで今まで見えなかった景色が見えてきます。このことが、この研究の醍醐味です。

【参考文献】

1. Yu Sugo, Keisuke Saito, and Hiroshi Ishikita. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 118 (2021) e2103203118
2. Keisuke Saito, A. William Rutherford, and Hiroshi Ishikita. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 110 (2013) 954