19p-E4-4

自然エネルギー利用の秘密を示唆する天然光合成 PSII

Learning Independent Energy System from PSII

理研[1]，東大 GS+I[2], ○中村振一郎[1], 畠山允[1], 緒方浩二[1], 藤井克司[2]

RIKEN[1], GS+I[2], °Shinichiro Nakamura[1], Makoto Hatakeyama[1], Koji Ogata[1], Katsushi Fujii[2]

E-mail: snakamura@riken.jp

自然エネルギー利用は人類が存続しようとするのなら、避けて通ることのできない課題である。先進国よりも、むしろ化石系燃料の産出国では将来の化石燃料枯渇を見据え、様々な新しい形でのエネルギー創出を目指した研究が盛んである。一方、先進国では人工光合成に代表される意欲的な試みへの挑戦が成されている。そのような状況で我々は、むしろ「急がば廻れ」と考えた。その目的基礎研究の結果を報告する。つまり天然光合成を急いで模倣し人工光合成として応用する前に、天然光合成そのものが示唆する事実と意味を、生物、化学、生物物理にとどまらず、数理物理、応用数理を含みつつ、可能な限り現存する全方位のサイエンスから学びなおそうという試みである。我々はこの難題に 2 つの仮説を検証することによって挑戦する。第一仮説は、(i)ゆらぎの介在した場の効果が高効率を可能にしている[1]、第二仮説は、(ii)光合成のエネルギー伝達にはドレスト光子が関与している、である。今回、第一仮説に関する結果を報告する。

天然光合成の最大の謎は、水 2 分子からの酸素 1 分子の発生を、ありふれた Mn と Ca 金属からなる錯体(OEC)によって電極もバイアス電圧もなく、易々とやってのける事実である。その逆反応である燃料電池においては希少金属 Pt を用いないで行うことが如何に困難かという事実を少しでも認識するならば、天然光合成が成す水の酸化反応が如何に人間にとって未踏科学であるかを痛感せざるを得ない。

この謎に迫るために、我々はまず人工的な Mn２核錯体による水の酸化反応の詳細メカニズムを量子化学計算によって解析した。その知見に立脚し天然光合成の OEC について QM/MM 計算を用いて詳細メカニズムの解明をおこなった。同時並行して、天然光合成の高効率反応の秘密は OEC でおこる水酸化反応が精妙な反応場にあるからであるという仮説を検証するために、PSII タンパクの全原子古典 MD 計算（水を含んで１２０万）を実行した結果、水、プロトン、酸素の供給経路が浮かびあがり、場の効果の一端を垣間見ることができた[2]、残る課題はゆらぎを介した場と OEC の協奏的ダイナミクスである。

[1]関本謙「ゆらぎのエネルギー論」（岩波書店）

[2] K. Ogata et al., ***J.Am.Chem.Soc.***,(2013) 135,15670.

© 2014 年　応用物理学会