

1. 研究概要

【背景】

光合成における太陽光エネルギー利用のメカニズムは古くより研究者の興味の対象となってきました。光合成器官には、光エネルギーを化学エネルギーに変換する反応中心^{*1} という色素集合体があり、またその周囲には、太陽光を捕捉し、反応中心へそのエネルギーを伝えるための多数のアンテナ色素が配置されています。特に紅色光合成細菌^{*3} では、16個、或いは18個などのまとまった数の色素分子（バクテリオクロロフィル^{*2}）が美しい円環、B850 リング^{*4} を形成し（図1左図）、その円環が反応中心を取り囲んでいます（図1中図）。このような円環はアンテナとして太陽光を吸収しますが、さらにそのエネルギーは極めて高い効率で反応中心へ輸送されることが知られています。この高いエネルギー移動効率とアンテナ系の特徴的な幾何学的形状がどのような関係にあるのか、分子生物学的興味のみならず、物理学、或いはエネルギー技術への応用的関心からも、長年に渡って興味が持たれてきました。

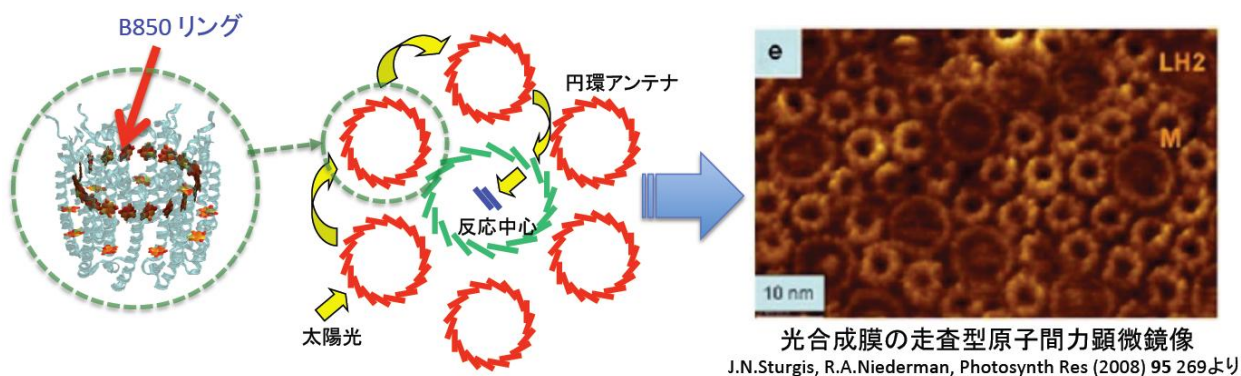


図1 光合成膜中の円環アンテナ。左図：色素（バクテリオクロロフィル）がタンパク質と複合して円環アンテナを構成。上段の円が B850 リング。中図：色素の励起エネルギーを化学エネルギーに変換する反応中心を取り囲む円環アンテナの模式図。右図：反応中心と周辺円環アンテナからなる光合成膜の走査型原子間力顕微鏡像。

【研究手法】

光合成器官中の色素は太陽の光を吸収し、それを色素の方向に依存したある軸に沿った電荷の振動エネルギーに変えます。この振動エネルギーは、面内に並ぶ色素の間を音叉の共鳴のように伝わっていきます（図2）。グループはこのような色素が単にランダムに並んでいる場合（シングル-ユニットモデル）のエネルギー移動速度と、合計で同じ数になる色素が、多数の円環を構成した場合（リング-ユニットモデル）の速度とを比較しました（図3）。これまで、色素間の相互作用を、このように多数の色素に対して取り入れるのは計算機の負荷から困難であったため上記問題は未解決でしたが、本研究では独自の理論でこれを近似的に取り扱うことに成功し、今回の大規模シミュレーションが可能になりました。

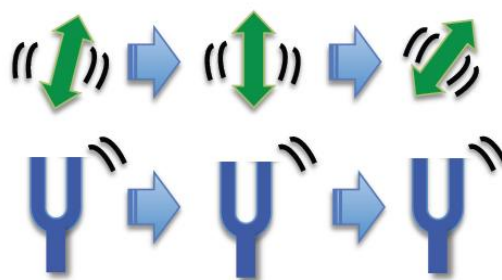


図2 上図：色素における電荷の振動エネルギーが伝わる様子。下図：音叉の振動エネルギーが伝わる様子。

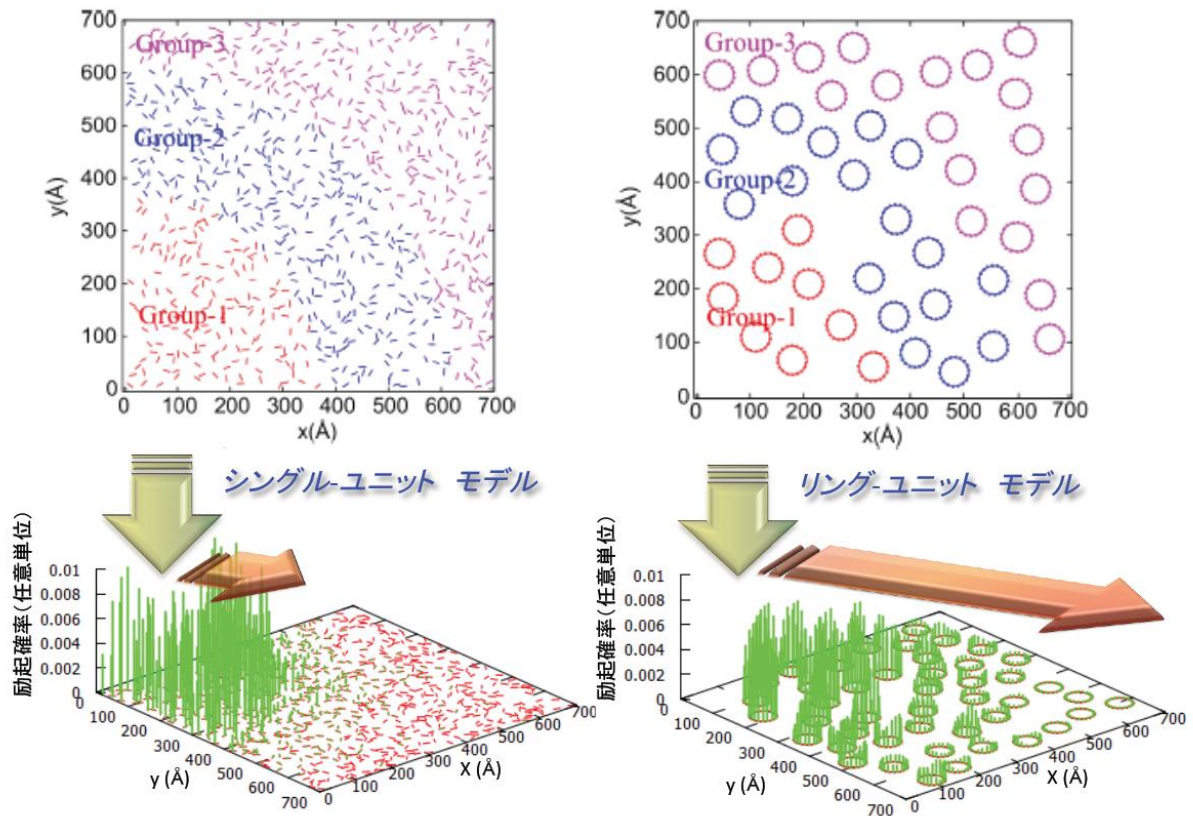


図3 上左図：色素をある数だけランダムにばらまいた様子。上右図：幾つかの色素で円環を構成し、合計の色素数が同じになるようにして、円環をランダムにばらまいた様子。下図：端の部分の一定面積に光を当てた際に、そのエネルギーの分布が広がっていく様子のシミュレーション結果。緑の線がエネルギーの分布を表す。シングルユニットモデルではエネルギーがほとんど広がらないが、リングユニットモデルでは、遠くへ広がっていくことができる。

2. 研究の成果

【1】まずグループは、シングルユニットモデルの場合では、色素の数を増やしていても、エネルギー輸送速度がほとんど増加しないことを明らかにしました。これはランダムに色素をばらまいた場合、うまくエネルギーが伝わらない色素の方向の組み合わせがあったり（図4(A))、色素間に隙間が出来てしまう場合があったり（図4(B)) することが原因で、これを「不規則性によるエネルギーシールド」と名付けました。

【2】一方、リングユニットモデルの場合は、リングの数を増やすと、合計の色素数が同じでもシングルユニットモデルに比べて急速にエネルギー輸送速度が増加し、実際の色素密度程度ではリングユニットモデルの方が数十から数百倍高速になることが分かりました（図3下図）。

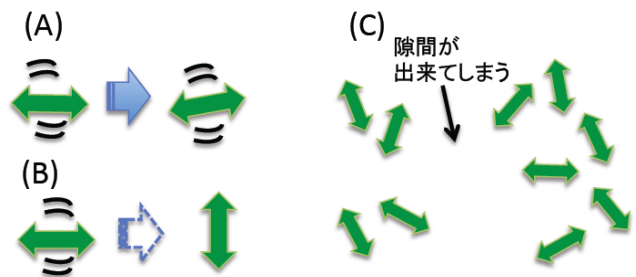


図4 (A)：電荷の振動エネルギーが伝わりやすい色素の方向の組み合わせ。(B)：電荷の振動エネルギーが伝わらない色素の方向の組み合わせ。(C)：ランダムな配置で色素間に隙間が出来てしまいエネルギーが伝わらない。

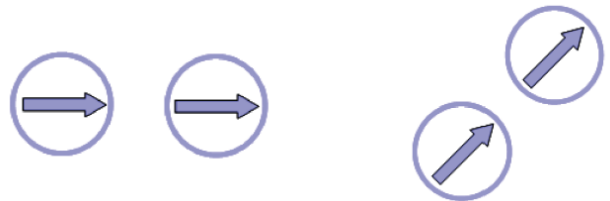


図5 色素を環状に並べれば、円全体として電荷の振動をどのような向きにも生じさせることができるので、エネルギー輸送に不都合な向きの組み合わせは存在しない。

【3】さらに今回、リング-ユニットモデルが不規則性シールドを克服する際の3つのポイントを明らかにしました。すなわち、(1) リングではどのような方向の電荷振動も可能なので、エネルギーが伝わらない方向の組み合わせが存在しない(図5)、(2) また一個の色素同士の場合に比べ、複数の色素が集合する円環同士の方がお互いの相互作用が強く、(3) さらに面積の大きな円環が増加すると急速に平面を埋め尽くしてエネルギー移動速度が最大になる秩序配列構造に近づく(図6)、ことが理由であることを明らかにしました。特に円を形成することでユニットの占有面積を拡大する手法は、色素という資源の効率的利用にもなります。

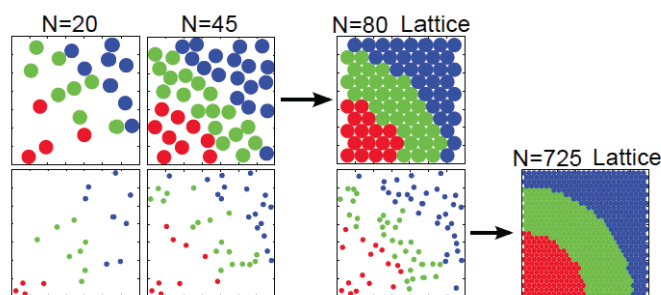


図6 ユニットの占有面積が大きい方(上図)が小さい場合(下図)より少ない個数で秩序構造に近づく。秩序構造を取ればエネルギー輸送速度は最も速くなる。色素単体より円環をユニットとした方が一つのユニットの占有面積が大きくなる。

これらの結果は、基本単位を円にするというごく単純な変化だけで、不規則性による深刻な不利益に打ち勝つ、巧みなメカニズムを示しています。またこの構造は、もともと広い範囲で規則性を確保するのが難しい生物が、進化の過程で得てきた自然の知恵であることを示唆しています。

これら結果は、基本単位を円にするというごく単純な変化だけで、不規則性による深刻な不利益に打ち勝つ、巧みなメカニズムを示しています。またこの構造は、もともと広い範囲で規則性を確保するのが難しい生物が、進化の過程で得てきた自然の知恵であることを示唆しています。

3. 今後への期待

今回得られた結果は、太陽光利用のための人工的なナノシステムを作製する際に、ある程度の不規則性も許容しながら、それによる不利を消し去る構造(すなわち、不規則性に対する耐性のある構造)のデザインに関する重要なヒントを与えると考えられます。また、それだけでなく、単純な幾何学的変化により、生体が避けがたい不規則性による不利益を消し去って、極めて有利な機能を獲得する進化の事例である可能性もあり、分子進化における新たな観点からの議論を引き起こすことも期待できます。

4. 研究助成資金等

本研究は、文部科学省 科学研究費挑戦的萌芽研究「光合成アンテナ系を基礎にした新しい光エネルギー捕集・変換スキームの提案」(研究代表者 石原一 本学工学研究科 教授)などの支援を受けて行われました。

5. 参考:用語の解説

- ① **反応中心**: 光合成において、クロロフィル分子が捕捉した光エネルギーを化学エネルギーに変換するための光化学系を構成する部位の呼称。タンパク質と色素の複合体となっている。
- ② **バクテリオクロロフィル**: 紅色細菌に含まれる青緑色色素。ポルフィリン分子の一種。光エネルギーを効率よく吸収する。
- ③ **紅色光合成細菌**: 光合成を行う細菌で、カロテノイドという色素の色のため、赤色ないしは褐色を呈している。光合成の際に酸素を発生しない。
- ④ **B850 リング**: バクテリオクロロフィルが対になったユニットが9回または8回回転対称になるようにリング上に並んだ部位。850nmの光波長に吸収極大を持つためこのように呼ばれる。