

次世代スパコンは人工葉の夢を見るか

平野 敏行

2011年3月11日の東日本大震災で被災された方々、および関係者の皆様には心よりお見舞いを申し上げるとともに、亡くなられた方々のご冥福を祈り、哀悼の意を捧げたい。M9の東北地方太平洋沖地震は、福島第一原子力発電所事故を招き、温室効果ガスCO₂の排出削減に伴う代替エネルギー源として期待された原子力の課題を露呈した。早急なクリーンエネルギー獲得技術の開発を「待ったなし」で突きつけられた格好になった。

太陽光は、最も身近で応用が期待されているクリーンエネルギーの一つである。奇しくもマサチューセッツ工科大学のDaniel Nocera教授が、3月末のアメリカ化学会で実用的な人工葉の作製に成功したと報告した¹⁻³⁾。この人工葉により得られた水素と酸素はそのまま燃料電池に利用することができる。人工葉自体は新しいものではないが、安価な素材で45時間性能が劣化することなく水の分解に成功したことが評価されている。太陽光エネルギーを利用したデバイス開発には、高効率で低成本、長寿命であることが求められている。

太陽光エネルギー変換デバイス、特に有機系太陽電池の開発では、植物から学ぶことは大きい。植物はなぜ効率良く、温和な条件のもとで太陽光から還元力を得、二酸化炭素を固定することができるのか。光合成に関与するタンパク質の3次元構造を参考にするべく、最新のX線結晶構造解析技術を用いた研究が積極的に行われてきた。特に光合成反応中心タンパク質複合体は、光エネルギーを酸化還元エネルギーに変換する生体の太陽電池といえる。そのエネルギー変換は、光励起された色素からの素早い電子移動反応によって起こる電荷分離が起点となる。光化学系I (PS I)、光化学系II (PS II)ともに構造解析が行われ、最近ではPS IIの構造解析が1.9 Åという高分解能で成功している⁴⁾。また数フェムト秒という瞬間的に起こる光励起反応は、電子常磁性共鳴 (EPR)ならびに超高速レーザー分光法により追跡されている⁵⁾。

光合成反応中心タンパク質の構造・機能が明らかになるにつれて、さらに疑問が出てくる。高速な電子移動反応、電荷分離の逆反応の抑制に大きく寄与するのは何か。色素の酸化還元電位・分子軌道、色素の位置、色素の構造変化、色素を取り巻く周辺アミノ酸残基の影響……。量子収率が高く、電子・ホール再結合が防止され、電子移動反応を効率良く行う機能性分子を設計するためには何に注意すれば良いだろうか。そのヒントは光合成反応中心タンパク質に隠されていると考えられるが、一つひとつ検証は非常に厄介である。光合成の秘密は構造を調べただけで明らかにするのは難しいように思える。

近年のコンピュータの進歩により、高度なシミュレー

ションを扱うことができるようになってきた。天気予報や地震・津波のシミュレーション、航空機の設計に至るまでさまざまな分野でシミュレーションは利用されている⁶⁾。分子設計においてもシミュレーションは有用なツールである。

分子設計におけるシミュレーションの魅力の一つは、現実には存在しない(実験室で合成するのが困難な)分子の物性を見積もることができることにある。たとえば、光合成反応中心にある色素クロロフィルを溶液中に抽出した場合、クロロフィルは溶液中で安定な溶媒和構造を取り、タンパク質中の立体構造はもはや保持していない。タンパク質の影響を受けずに、タンパク質中の構造を保持したクロロフィルの分光学的データを実験的に得ることは難しいが、量子化学シミュレーションを使うと合成困難な分子の物性を見積もることができる。また、観察が難しいデータを可視化できることも、シミュレーションの魅力である。タンパク質の静電ポテンシャルや電荷分布がどのような分布になっているか、知識と経験によって定性的な判断は可能であるが、シミュレーションでは数値化が可能である。

光合成反応中心タンパク質を含めたクロロフィルの量子化学シミュレーションは膨大な計算量を必要とするため、これまで品質を犠牲にするか計算領域を限定するなど工夫と苦労が必要であった。しかし神戸で稼働予定の次世代スパコン「京」の登場により事態は一変する。2011年6月、世界一のスパコンになった「京」が本格稼働することにより、1000残基級タンパク質の精緻なシミュレーションが約1日で達成できるであろう。光合成反応中心タンパク質の電子移動反応に隠された秘密をじっくりと謎解きできるかもしれない。実験だけでも理論だけでもなく、実験と理論を相補的に活用することで高効率かつ安価な太陽光エネルギー変換デバイスが一日も早く実現できることを願っている。

- 1) http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content?_nfpb=true&pageLabel=PP_ARTICLEMAIN&node_id=222&content_id=CNBP_026944&use_sec=true&sec_url_var=region1&_uuid=f2c9aab-14d5-4c23-814a-5f6139db7225#
- 2) Young, E. R. *et al.*: *Energy Environ. Sci.*, **4**, 2058 (2011).
- 3) Pijpers, J. J. H. *et al.*: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **108**, 10056 (2011).
- 4) Umena, Y. *et al.*: *Nature*, **473**, 55 (2011).
- 5) Lee, H. *et al.*: *Science*, **316**, 1462 (2007).
- 6) 日本計算工学会・(財)計算化学振興財団 編: 計算力学シミュレーションハンドブック, 丸善 (2009).