

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子ビームが拓く光合成膜タンパク質のマルチモーダル構造解析

2. 個人研究者名

菅 倫寛(岡山大学異分野基礎科学研究所 准教授)

3. 事後評価結果

本研究では、光合成酸素発生反応を触媒する光化学系 II を対象とし、その結晶を光励起させた後に量子ビーム (X 線自由電子レーザー) を照射して時間分割シリアル X 線構造解析を行い、反応の中間体状態を構造解析するとともに、ピコ秒からミリ秒のタンパク質立体構造変化を捉えるための技術基盤の確立を目指した。

[どのような量子性をどのように扱ったのか]

- ・ X 線自由電子レーザーが発振する超極短 (数十フェムト秒)・超高輝度 (大型放射光の 10 億倍の明るさ) の量子ビームを活用。
- ・ タンパク質の電荷、スピン状態、プロトン化状態の変化が協奏する反応機構を解明。

[達成状況とインパクト]

菅研究者は、光化学系 II の結晶を光励起させるのに必要な光照射条件を決定する方法を確立し、光化学系 II (PSII) の S_1 , S_2 , S_3 の 3 つの中間体状態を 2.15 Å 分解能で解析した。その結果、PSII の反応機構がオキソ/オキシルの中間体状態を経て進むことを示し、基質となる水分子を取り込むための仕組みとその経路を明らかにすることに成功している。これまで時間分割シリアルフェムト秒で構造解析する技術は数多くあったが、これらを本研究のテーマである PSII に直ちに適用することは困難であった。そこで菅研究者は、結晶用タンパク質を調製するための培養・精製条件とそのスケールアップ検討、結晶試料を調製する条件の最適化、シリアルフェムト秒回折実験のための様々な条件、回折データの処理 (ソフトウェアおよびパラメーター) の最適化による分解能の改善などについて、極めて丁寧に検討を続けた。それらの結果、ナノ秒からミリ秒にかけて複数の遅延時間に相当するデータを測定し、原子レベルの分解能で構造解析するに至っている。さらに、結晶サンプルの消費を軽減する固定ターゲット法を検討の上、中間体状態の寿命が長い PSII の S_2 状態と S_3 状態の結晶構造を 2.15 Å 分解能で解析することにも成功するなど、当初の目標を高いレベルで達成していると評価できる。その成果は *Science* 誌に発表するとともにプレスリリース[※]を行っている。また、光合成膜タンパク質や金属タンパク質を対象としたマルチモーダル構造解析への展開を目指し、緑藻 PSI-LHCI 超複合体やケイ酸チャンネルなどをサンプルの改善を検討しつつ、シリアルフェムト秒結晶構造解析へのチャレンジを続けている。菅研究者は将来展望として創薬ターゲットの GPCR、イオンチャンネル、トランスポーターの構造解析を挙げており、今後一研究者の視点からのさらなる独自の研究展開に期待したい。

本研究からどのような生命現象の量子現象にアプローチできる手法もしくは理論につながるかの方向性について、菅研究者は、好気性生物に最も重要な反応である光合成水分解・酸素発生反応の触媒反応機構を動画的視点から考証して触媒反応の作動原理を明らかにすること、光合成反応における量子科学的な現象の理解に貢献する構造情報を提供すること、そして、光合成膜タンパク質が光エネルギーを高効率に利用するために必要な基本原理の解明から人工光合成への応用につなげることを挙げている。

「生体系における反応ダイナミクスをどう可視化するか」という大きなテーマに今後も挑み続けてほしい。

※<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20191018/index.html>