

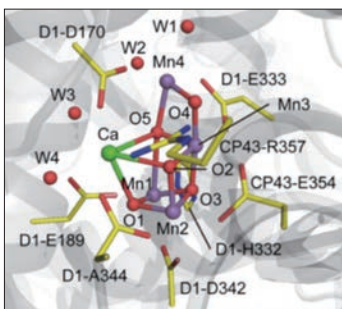


石北 央 **ISHIKITA, Hiroshi**

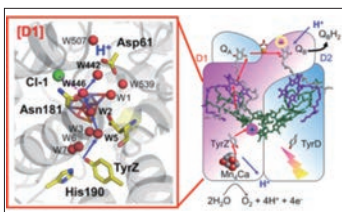
- 1998 東京大学工学部化学生命工学科卒業  
B.S. The University of Tokyo
- 2000 東京大学大学院工学系研究科 修士課程修了  
M.S. The University of Tokyo
- 2005 ベルリン自由大学 Ph.D. (Dr. rer. Nat.) 取得  
Ph.D. Freie Universität Berlin
- 2005 ペンシルベニア州立大学 博士研究員  
Postdoc, The Pennsylvania State University
- 2006 南カリフォルニア大学 博士研究員  
Postdoc, University of Southern California
- 2007~2008 日本学術振興会 海外特別研究員  
JSPS fellow for research abroad
- 2008 東京大学分子細胞生物学研究所 助教  
Assistant Professor, The University of Tokyo
- 2009 京大大学生命科学系キャリアパス形成ユニット 特定助教  
Assistant Professor (tenure track), Kyoto University
- 2009~2013 科学技術振興機構 さきがけ研究者 兼任  
JST PRESTO researcher
- 2013 京大大学生命科学系キャリアパス形成ユニット 講師  
Lecturer, Kyoto University
- 2013 大阪大学大学院理学研究科 教授  
Professor, Osaka University
- 2014 東京大学大学院工学系研究科 教授  
東京大学先端科学技術研究センター 教授  
Professor, The University of Tokyo

光合成に関わる主要蛋白質の分子構造が明らかになりつつあることもあり、「太陽光から有益なエネルギー源となる物質を生産する系」=人工光合成系の実現は、現実味を帯びてきました。私たちは、人工光合成系の構築を重要視し、その対象である錯体分子等の小さな系から生体超分子等の大きな系までの化学反応を分子動力学計算、静電相互作用計算等の理論解析手法を駆使することで、反応機構の解明を進めています。また、蛋白質内の反応活性部位を「反応を引き出すために要素が最適に配向した場」であると解し、そこから機能性分子の設計思想を見いだすことも重要な研究課題です。

1. 人工光合成系構築に向けた光駆動水分解反応機構の解明
  - ・長距離電子移動反応
  - ・蛋白質内プロトン移動反応
  - ・光捕集・励起エネルギー移動反応
2. 機能性分子の設計指針・スマートプロテインデザインに関する研究
  - ・酵素活性部位の設計: 「酵素触媒反応に重要な蛋白質環境場因子」の解明
  - ・阻害剤の設計: 「酵素触媒反応を阻害する(=制御する)分子」の設計及び阻害機構の解明



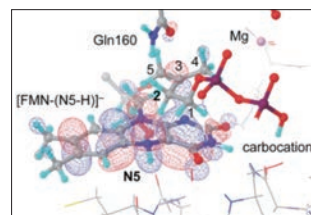
■ 光化学系II蛋白質に埋め込まれている水分解酵素発生触媒サイト  $Mn_4CaO_5$  錯体  
Mn<sub>4</sub>CaO<sub>5</sub> cluster, the water-oxidation / O<sub>2</sub>-evolving site in Photosystem II



■ Mn<sub>4</sub>CaO<sub>5</sub>錯体近傍の水分子からプロトンを引き抜き水分解反応を促進させるために必要な「蛋白質内プロトン移動経路」(左)と「長距離電子移動経路」(右)  
Proton transfer(left) and electron transfer pathways (right) required for water oxidation ( $2H_2O \rightarrow O_2 + 2H^+ + 4e^-$ ) in the Mn<sub>4</sub>CaO<sub>5</sub> moiety of Photosystem II.

Artificial photosynthesis, a process that converts water or carbon dioxide into oxygen, hydrogen, or carbohydrates via sunlight, has more significance in overcoming future energy problem, since the molecular structures of key proteins in plant photosynthesis have been solved. To realize artificial photosynthesis, we are trying to clarify mechanisms of reactions in small (e.g., metal complexes) to large systems (e.g., biomacromolecules) using theoretical approaches (e.g., molecular dynamics simulations and electrostatic calculations). We consider that enzymatic active sites are formed by preorganized protein dipoles. Keeping this in mind, we analyze protein functions on the basis of the molecular structure to present a new strategy of designing functional artificial molecules.

1. Understanding molecular mechanism of light-driven water oxidation: photosystem II and artificial photosynthesis
  - ・ Mechanism of long-distance electron transfer reactions
  - ・ Mechanism of proton transfer reactions in proteins
  - ・ Mechanism of light-harvesting / excitation energy transfer reactions
2. Designing functional molecules—Smart Protein Design
  - ・ toward more active catalytic centers: elucidation of minimum key components that contribute to enzymatic reactions in enzymes
  - ・ toward better inhibitors, better control over enzymatic reactions: elucidation of inhibition mechanisms on the basis of the molecular structures



■ 酵素の触媒活性部位における基質-蛋白質間軌道相互作用  
Substrate-protein interaction in the catalytic center of an enzyme: overview with HOMO (highest occupied molecular orbital)

### 若者へのメッセージ

これからの科学は、「この手法でこう研究を進めるべき」という考え方だけでは大きく開かないと思います。時には遠回りに見えるようでも脱線して冒険してみることが、実は局所的なトラップから脱出してブレークスルーにつながる近道なのかも知れません。「理論研究では無理」と一般には思われがちな現象も、化学・物理学・生物学・情報学等の基礎を大切に柔軟にアプローチすることで、思わぬところから解けることもあります。数値をはじき出すだけで終わってしまう「計算」ではなく、分子構造と分子機能に横たわる「サイエンス」を共に鑑賞しましょう。