

分子の世界 ー小分子から機能性分子へー

[塩谷 優](#)

私たちは、さまざまな“もの”に囲まれて暮らしています。これらの“もの”はどれも“原子”又は“分子”からできています。こんにちでは、原子や分子の構造や性質に関する理解が急速に進歩し、新しい機能をもつ分子を設計・合成し、私たちの暮らしに役立てるテクノロジーが普及しています。本日は原子がどのように結びついて分子を作り、分子の形や性質などを決めているかをお話しし、機能性分子や最近のナノテクノロジーの例をいくつかご紹介しましょう。



2012年2月21日、TSS文化大学で講演する著者

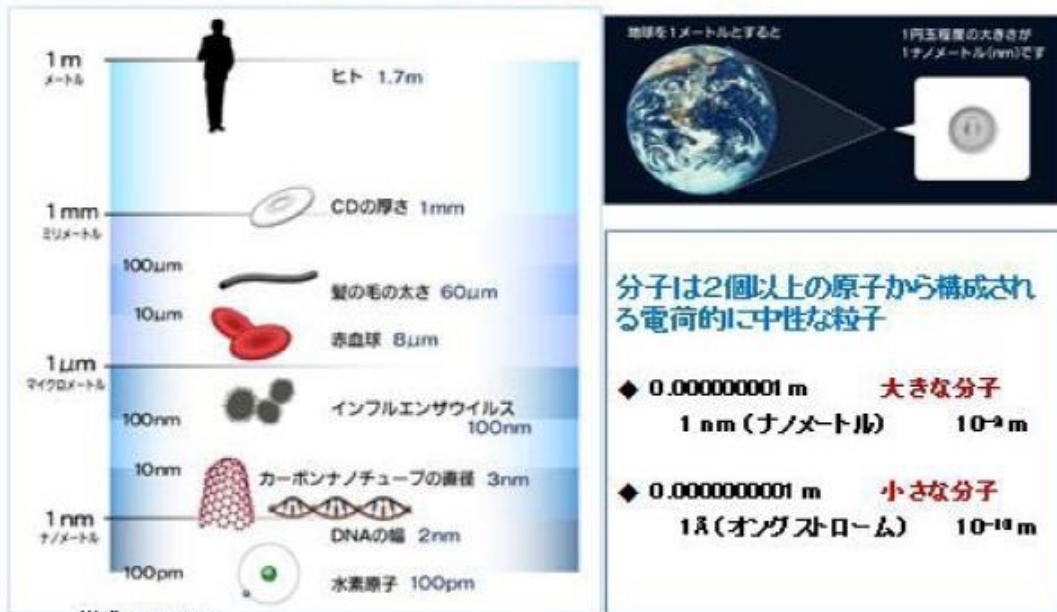
1. マクロの世界からミクロの世界へ

原子・分子の大きさ

原子や分子は非常に小さな粒子です。分子や原子の半径は 10^{-10} m (100億分の1メートル) 位です。プラスチックなどの大きな高分子でもせいぜい 10^{-8} m (1億分の1メートル) です。このような小さなものの大きさを表す単位としてナノメートル (nmと表記; 10^{-9} m) とかオングストローム (Åと表記; 10^{-10} m) が用いられます。今1 mを地球の直径(約1万3千キロメートル) と仮定すると、1 nmは一円玉の直径に相当します。私たち人間が肉眼で見ることのできる世界をマクロの世界、目には見えない原子・分子の極微小の世界をミクロの世界と呼ぶ理由です。どうぞ図1を見ながら、原子や分子の大きさを想像してみてください。図1に示されている水素原子(一番

小さな原子)の大きさは約0.1nmです。1ナノメートル(1nm) = 1,000ピコメートル(1,000pm)なので、図1では水素原子の大きさが100pmと記されています。

図1 マクロの世界からミクロの世界へ



出典 NEDO_hp
<http://app2.infoc.nedo.go.jp/kaisetsu/nan/nan00/index.html>

原子の構造

人類は誕生以来、物質を構成する最小の要素について知恵を巡らせてきました。例えば、紀元前5世紀ごろの古代ギリシャの哲学者は「全ての物質は有限で分割不可能なアトムからできている」と考えました。今日までに数多くの原子模型が提案されてきました。現在では、原子は電子と原子核からなり、原子核は陽子と中性子から、陽子と中性子はおのおの3個のクォークからできていることが明らかになっています(図2参照)。

図2 原子の構造



現在の原子模型

出典:「ビジュアル化学」ニュートン別冊[2010]、p.13

- 原子は電子と原子核(陽子 + 中性子)からなる
- 原子の質量は原子核が、大きさは電子(雲)の広がりが決める

電子、陽子(プロトンとも呼ぶ)および中性子の質量と電荷を図2に掲げました。原子は同じ数の電子と陽子からなります。電子は負の電荷を、陽子は正の電荷を持ち、中性子には電荷がないので、原子は電気的には中性です。陽子と中性子の質量はほぼ等しく、電子の質量(約 9.1×10^{-31} kg)の約1800倍あります。従って、原子の質量は原子核が決めることとなります。一方、原子の大きさ(広がり)を東京ドームと仮定すると、原子核はドームの中心においた一円玉位しかありません。従って、原子の大きさ(広がり)は電子(雲)が決めることとなります。

原子の電子構造

電子および原子核の質量が非常に小さいことにより、原子・分子のミクロの世界ではマクロの世界に住む我々が実感し難いことが起こります。すなわち、電子は普通の粒子ではなく、波の性質をもつ粒子なのです。このことにより原子核のまわりに存在する電子の位置と運動の様子を特定することができず、電子の存在する領域を雲のように描きます。

図3 原子の電子構造

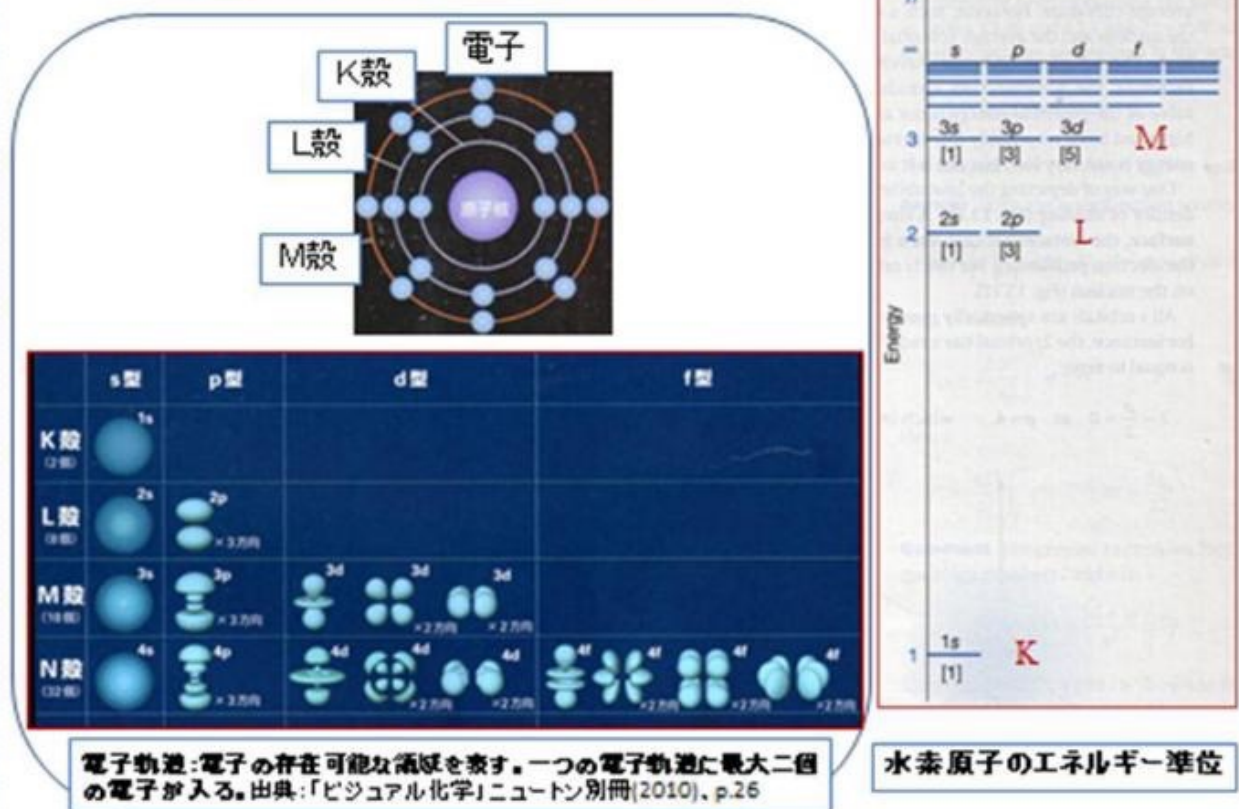


図3は電子雲(電子軌道)の一覧です。電子雲の右肩の1s, 2s, 2p等の数字とアルファベットの組合せは電子軌道の名前です。電子軌道は三つの量子数(主量子数、方位量子数、磁気量子数)で決まり、K殻、L殻等に分類されます。一つの電子軌道には最大2個の電子が対になって入ることができます。電子1個の場合を不対電子と呼びます。

例えば、酸素原子 (O) は8個の電子をもちますが、それぞれの電子が存在する領域は異なります。すなわち、最も内側のK殻の1s軌道に2個、L殻の2s軌道と2p軌道（方向が異なる3種類の2p軌道がある）にそれぞれ2個と4個の電子が入ります。電子軌道の形や広がりや電子の数で決まりますが、化学反応では最も外側の電子軌道（最外殻）に入る電子が重要な働きをします。

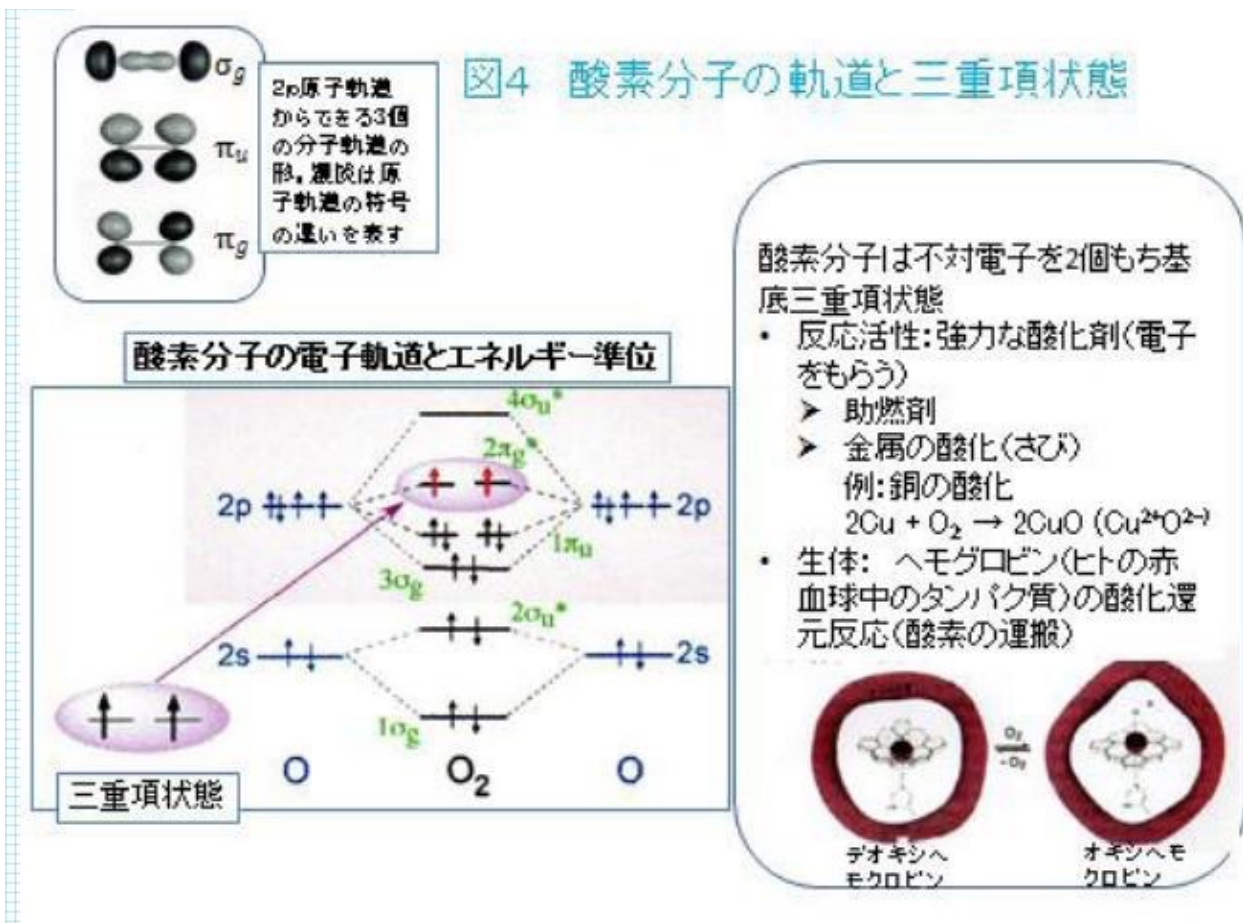
2. 原子と原子が結合して分子ができる-電子の働き

水素分子

原子と原子が電子を媒介として結びつき、分子ができます。最も小さな分子は、水素原子(H) 2個が結合してできた水素分子(H₂)です。2個の電子が2個の水素原子核（プロトン）に共有されて安定化した状態です。

酸素分子

空気中に約20% 存在する酸素分子(O₂)は酸素原子(O) 2個が結合して生成します。酸素原子は外側のL殻に6個の電子をもちます。2個の酸素原子が（共有）結合して酸素分子ができる様子を図4に示しました。酸素分子には1個の電子（不対電子）が占有する軌道が2つあるのが特徴的です(2πg* 分子軌道)。これを三重項状態と呼びます。



酸素分子は物の燃焼や我々の生命の維持に必要不可欠な分子です。即ち、燃焼は発熱と発光を伴う激しい化学反応ですが、酸素分子なしでは起こり得ません。酸素分子は相手の原子または分子から電子を奪う能力（酸化力）が高く、助燃剤として働き、物が燃焼するわけです。金属の錆

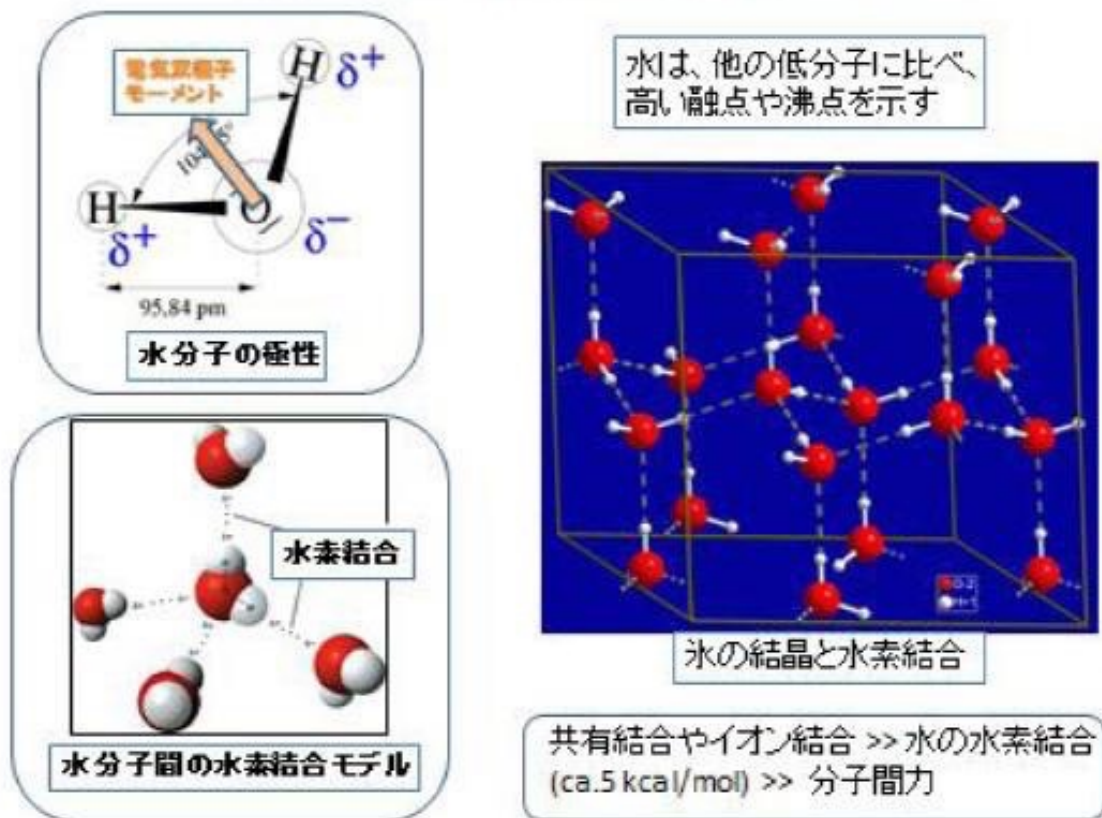
びも、反応速度は遅いですが、酸素の酸化作用の結果です。また酸素はヘモグロビンとの（酸化・還元）反応により生体の隅々まで運ばれることにより、細胞が呼吸できるわけです。このように酸素分子は化学的活性が非常に大きいわけですが、この性質は酸素分子が不対電子を2個持つことに起因します。不対電子を持つ化学種をラジカルと言います。酸素分子は気体状態でラジカルである数少ない分子の一つです。また、不対電子を持つことにより酸素分子には（常）磁性が現れます。

3. 水分子の話

水の融点（1気圧下0℃）や沸点（1気圧下100℃）は、他の低分子に比べ、高い値を示します。それらの水の性質は水分子同士の間で水素結合が形成されることに起因します。この水素結合のため水は地表で液体として存在し、生物は生命を維持できるわけです。我々が日常生活で接する水を分子の立場から見てみましょう。

水分子の生成から話を始めます。水分子(H₂O)は1個の酸素原子と2個の水素原子から構成されています。水素分子や酸素分子は比較的容易に化学反応する分子ですが、単に接触しただけでは水分子は生成しません。水素分子および酸素分子に熱や光のエネルギーを加えて分子運動を盛んにしてやると、分子同士が衝突したり、分子が原子に解離したりして水分子の生成反応が始まります。水素分子と酸素分子との間で化学結合の組み換えがおき、水分子が生成するわけです。

図5 水分子の極性と水素結合



水素分子と酸素分子から水分子ができる反応（発熱反応）を利用して電気エネルギーを取り出すしくみが燃料電池です。化石燃料を用いない（炭酸ガス CO₂ が発生しない）クリーンな電池として注目され、飛躍的な性能の向上と用途の拡大が期待されています。

水分子では構成するH原子とO原子の間で電子が共有され、2個のO-H共有結合ができます。H原子核とO原子核は電子を引き寄せる能力に差がありますので、水分子を構成するH原子は少し正に荷電し、O原子はその分だけ負に荷電します。水分子のように正電荷と負電荷の重心が一致しない分子を極性分子と言います。この極性により、水分子は電気双極子モーメントを持ちます（図5参照）。

我々が日常生活で接する水は莫大な数の水分子の集まりです。例えば、18g (18cc)の水は 6×10^{23} 個（アボガドロ数）の水分子からなります。水分子が集まると、正に荷電した水素原子と負に荷電した酸素原子間で‘分子間’の弱い結合が出来ます。これが水素結合です（図5）。水素結合は共有結合よりはるかに弱い結合ですが、相変化（氷(固相) ↔ 水(液相) ↔ 水蒸気(気相)）などの熱的性質や他の物質との親和性などにおいて重要な役割を果たします。水から氷に相変化しますと体積が増えるのも水素結合に起因します。水の融点や沸点が他の低分子に比べて高いのも水素結合に起因します。水素結合は有機物においても重要な結合です。例えば、生物の遺伝をつかさどるDNA（デオキシリボ核酸）は水素結合（水素原子と酸素原子間および水素原子と窒素原子間）により二重らせん構造をとることが知られています。

食物の温めや料理に使う電子レンジは水分子の極性を利用したものです。水を含む食物にマイクロ波などの電磁波を照射すると、水分子の電気双極子モーメントが電磁波と相互作用して回転し始めます。この水の回転運動により摩擦熱が発生し、食物が温まるわけです。

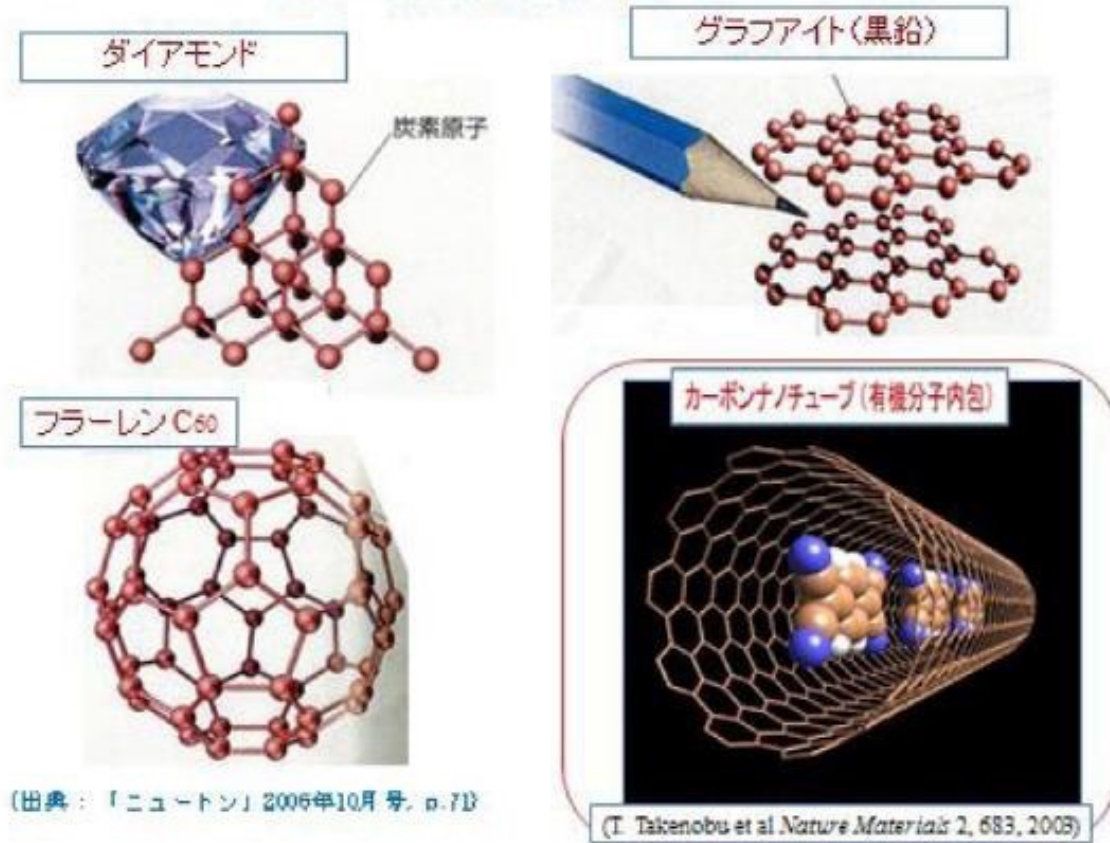
病気の診断に欠かせない核磁気共鳴画像 (MRI; Magnetic Resonance Imaging) 法も水分子と密接に関係しています。水分子を形成する水素原子核（陽子；プロトン）は核スピンを持ち、小さな磁石です。核スピンをもつ物質を大きな電磁石の中に入れ、外部から電磁波（通常はラジオ波）を照射して共鳴現象を観測することができます。核磁気共鳴 (NMR; Nuclear Magnetic Resonance)法と言います。人間の身体は体重の約65%は水分子からなり、さらに約25%はプロトンを含む脂質です。身体全体を大きな電磁石の中に入れ、体内の水分子や脂質に含まれているプロトンの核磁気共鳴を観測するのがMRI法です。人体組織内の水分子及び脂質のMRI信号が分子運動に依存することを利用し、信号を画像化して病気の診断に用いているわけです。

4. 炭素同素体の話

炭素(C)原子は6個の電子を持ちます。炭素原子は4つの結合手を持ちますので、炭素原子のみから構成される単体として、また他の原子と結合した化合物として炭素は極めて多様な形状と構造をとります。生物を構成する有機化合物（蛋白質、脂質、炭水化物など）の骨格は炭素-炭素結合からなります。炭素化合物は光合成（植物が水、光、二酸化炭素を原料として酸素と糖分を合成する反応）などで生命活動を担い、また石油などの化石エネルギーとして人間活動に密接に関与しています。ここでは炭素同素体の話をします。

同じ元素で構成される単体であるが、互いに性質や構造の異なる物質を同素体と言います。炭素にはダイヤモンド、グラファイト（黒鉛）及びフラーレンの同素体が存在します（図6参照）。ダイヤモンドは炭素原子が4個の軌道（ sp^3 混成軌道と言う）をつくり正四面体の立体結晶構造を形成し、巨大分子化したものです。グラファイトは炭素が3個の軌道（ sp^2 混成軌道と言う）をつくり正六角形の平面構造を形成して層状に重なったものです。ダイヤモンドは硬度や透明性が非常に高く、工業用の研磨剤や宝石として貴重な物質です。一方、グラファイトは鉛筆の芯として日常的に見かけますが、摩擦係数が小さく、導電性もあるため潤滑剤としても使用されています。さらに、グラファイトは層間に他の分子やイオンを取り込み易く、リチウムイオン電池（携帯電話やパソコン用）の負極材料としても使用されています。このようにダイヤモンドとグラファイトは

図6 炭素の同素体



(出典:「ニュートン」2006年10月号、p.71)

炭素原子のみでできていますが、化学結合様式の相違により形状や物理・化学的性質が大きく異なります。

炭素のもう一つ同素体はフラーレンです(図6の左下)。1985年、クロトー博士らにより炭素原子60個で構成されたサッカーボール状のC₆₀フラーレンが発見されました(1996年度ノーベル化学賞受賞)。その時の興奮を筆者は今でもはっきり記憶しています。C₆₀フラーレンは炭素の6員環が20個、炭素の5員環が12個、すなわち60本の炭素-炭素単結合(C-C)と30本の炭素-炭素二重結合(C=C)で形成されており、安定な構造をとります。その後、炭素数(70, 74, 76, …)個をもつ高次フラーレンも発見されています。カリウム等のアルカリ金属(M)を内包したフラーレン(M@C₆₀)には超伝導性が発現するものがあり、新しい電気材料として注目されています。さらに、窒素(N)原子を閉じこめたフラーレン(N@C₆₀)、2種以上の元素(NとSc原子)を内包したフラーレン((Sc₃N)@C₈₀)、水素分子(H₂)を封入したフラーレン(H₂@C₆₀)なども合成され、その物理・化学的性質に関心が集まっています。

カーボンナノチューブはフラーレンと同一種同素体です。グラファイトを丸めて円筒状にしたような構造をもちます(図6の右下)。1991年に飯島澄男博士が透過電子顕微鏡(TEM)により初めて観測に成功した物質で、文字通りナノメートル(nm: 10⁻⁹ m)サイズの物質です。カーボンナノチューブはアルミニウムの半分の軽さであり、しなやかな弾性力と鋼鉄の20倍の強度をあわせて持ちますので新しい構造材料として期待されています。また、広い表面積と優れた電気特性をもちますので、燃料電池材料や半導体素材としても期待されています。カーボンナノチューブ内でEr(エルビウム)原子を一次元につなげた金属ナノワイヤーを作る研究(名大・篠原ら)や有機分子をチューブ内に挿入してチューブの電気伝導特性を制御する研究(図6)など、カーボンナノチューブのナノテクノロジーの素材としての研究に関心が集まっています。

5. 機能性高分子材料

分子の構造と性質の関連についての理解が進むに従い、構造を変えることで種々の機能を設計することが可能になってきました。図7に身の回りの機能性材料の一例を示します。

図7 機能性材料の例

◆ 機能性高分子
高分子化合物(分子量が 10^4 を超えるような巨大分子)

	天然	合成
有機高分子 (骨格が炭素)	生体高分子(タンパク質など)、でんぷん、天然ゴム	合成樹脂、合成繊維 合成ゴム、導電性高分子など
無機高分子 (骨格がケイ素など)	二酸化ケイ素(水晶、石英)	シリコン樹脂 光ファイバー

◆ 機能性有機分子
液晶 (薄型ディスプレイ)
有機EL(エレクトロルミネッセンス)
グラファイト(リチウムイオン電池の負極材料)
医薬品
など

骨格が炭素-炭素結合からなる有機分子に限っても、上述のグラファイトなどの炭素同素体の他に、薄型ディスプレイ用の液晶、エレクトロルミネッセンス用の有機EL、有機高分子(樹脂、繊維、導電性高分子)、農薬や医薬品など多くの分野で機能性分子(材料)の設計と合成が進んでいます。

有機高分子を例にとります。多様な機能をもつ樹脂や繊維が合成され、我々の衣・食・住の様々な局面で活用されています。例えばペットボトルの成分はポリエチレンテレフタレート(PET)で、主鎖(分子鎖)にベンゼン環を含む合成有機高分子です(図8)。ベンゼン環を含むことにより分子鎖が直線状に連なり、結晶になり易くなります。その結果、変形し難くかつ比較的熱に強い性質が現れ、ペットボトルやフィルム・磁気テープの基材、衣料用の繊維など(フリースなど)に用いられています。ポリクロロプレンは側鎖に塩素原子を付加した合成有機高分子です。かさ高くかつ重い塩素原子により炭素-炭素の分子鎖(1重結合と2重結合からなる)が複雑に曲がった構造をとります。張力が加わると分子鎖は直線状に伸びますが、張力が無くなると元の曲がった構造に戻ります。このようにポリクロロプレンは優れた弾性体の性質を有し、合成ゴムとして使用されています。ナイロンは主鎖に窒素を、側鎖に酸素を含む合成高分子です。軽くて強靱なため、人工の絹と言われ、ストッキングや水着、ウインドブレーカーやスキーウェアなど、スポーツウェアの素材に用いられています。このように有機高分子を構成する原子の組み合わせを変えることにより、多様な機能が現われます。

図8 合成有機高分子化合物



高分子は、通常、電気を通さない絶縁体です。白川英樹博士（2000年度ノーベル化学賞受賞）らによる電気が流れる高分子‘ポリアセチレン’の合成により、導電性高分子に関する研究が飛躍的に発展しています。ポリアセチレンの骨格は炭素-炭素の1重結合と2重結合が交互に連なった構造をとり、電気伝導性が現われます。銀行などのATMの透明タッチパネルや、リチウムイオン電池の電極など多様な分野で使用されています。

以上、例として骨格が炭素-炭素結合からなる有機分子（高分子）を取り上げ、構造と機能の関係についてお話ししました。実は、炭素-炭素結合を効率よく生成することは化学者の長年の夢でした。鈴木章、根岸英一及びリチャード・ヘック教授らは‘パラジウム触媒を用いるクロスカップリング法’を発見し、選択的かつ効率的な炭素-炭素結合を生成する方法を確立しました。このクロスカップリング法は、医薬、農薬、液晶、有機ELなどの複雑な構造を持つ有機分子の合成に必要不可欠です。この業績により3人に2010年度ノーベル化学賞が授与されました。

6. まとめ

まず原子の構造や電子軌道など、原子・分子の世界の理解に必要な基礎的なことがらを解説しました。次に、酸素、水など身近に存在する重要な小分子を取り上げ、それらの生成と電子構造について話しました。水分子の項では、分子内に正・負電荷が現れ、この極性により分子間の水素結合が出現することを述べました。さらに、水分子の生成と燃料電池の関係に触れ、電子レンジや医療診断に用いるMRI法も水分子に関係することも述べました。

炭素の同素体（ダイヤモンド、グラファイト及びフラーレン）の項では、同じ炭素から構成されても化学結合の様式が異なると、形状や物理・化学的性質が全く異なる物質が得られることを述べ

ました。フラーレンと同一種同素体であるカーボンナノチューブはナノテクノロジーの素材として注目されていることに言及しました。最後に、有機合成高分子の一例としてポリエチレンテレフタレート（ペットボトル等）、ポリクロロプレン（合成ゴム）、ナイロン（衣類など）およびポリアセチレン（電導性高分子）を取り上げ、高分子を構成する原子や原子団（基）の組み合わせにより構造が変わり、多様な機能が現れることを述べました。

我々が日常生活で接する物質は莫大な分子の集合体である液体又は個体ですから、分子1個を認識することは稀でしょう。しかし、上で述べたように、注意深く観察すると個々の分子の性質と物質の関係が見えてきます。物質をナノメートル (10^{-9}m) の領域すなわち原子や分子のスケールにおいて、自在に制御するナノテクノロジーに関する基礎及び応用研究は日進月歩です。物質を分子レベルで理解することがますます大切になってきています。

（本稿は、2012年2月21日にT S S文化大学で行った講演の概要である）