

TSS 文化大学一般教養講座  
平成 28 年 2 月 16 日 10:00~  
於 TSS 新館 9 階スタジオ

## 身近な分子の化学 — 分子の目で ‘もの’ を見る —

塩谷 優 (広島大学名誉教授)

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み、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。ここでは、生命の維持に不可欠な水や空気およびいくつかの身近な有機物を取り上げ、それらの化学的性質を原子・分子のレベルで解説し、それらがどのように環境・エネルギー問題や有機材料の機能性に関わるかを、最新的话题を交えて紹介します。

### 1. はじめに

私たちは、衣食住をはじめ、医療、交通、通信等々と多くの分野で化学製品や技術に取り囲まれて生活しています。それらの製品・技術を構成する化学物質 (chemical substances) は 10,935 万件に達しています (2016 年 3 月 23 日現在 ; Chemical Abstract (CA) 登録)。1965 年に新物質の CA 登録が始まりましたが、最近は人工の有機物質を中心として登録数が急増し、1 年で約 500 万件が新たに登録されています。21 世紀は化学物質の時代とも言われる所以です。化学物質は原子や分子で構成されますが、その構造や性質に関する原子・分子レベルでの理解が急速に進み、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も進歩しています。一方、自然との調和、持続可能社会の実現が課題となっています。ここでは、生命の維持に不可欠な水や空気およびいくつかの身近な有機物の化学



TSS 文化大学で講演する著者

的性質を原子・分子のレベルで解説し、それらがどのように環境・エネルギー問題や有機材料の機能性に関わるかを、最新の話題を交えて紹介します。豊かな生活の維持に必要な科学リテラシー(科学的概念や手法に関する知識と理解)の向上のための一助となれば幸いです。

## 2. 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  $10^{-10}$  m (100 億分の 1 メートル) 位の半径をもつ、非常に小さな粒子です。プラスチックなどの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 1m を地球の直径(約 1 万 3 千キロメートル)と仮定すると、1nm 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、肉眼では見えない原子・分子の極微小の世界をミクロの世界と呼びます。図 1 を見て、原子や分子の大きさを想像してみてください。

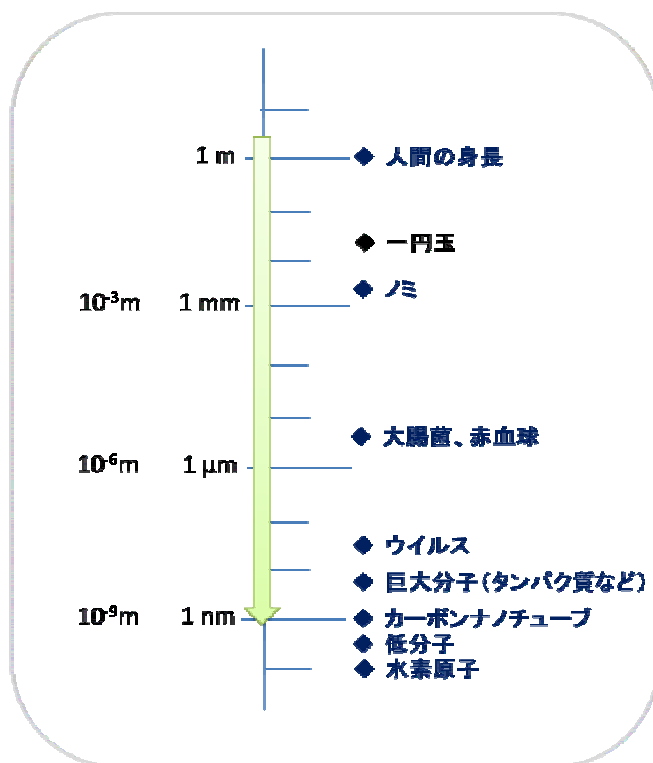


図 1: 原子・分子の大きさ

### 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。そして、今日までに数多くの原子模型が提案されました。現在では、原子は**電子**と**原子核**から構成され、原子核は**陽子**と**中性子**から、陽子と中性子は各々 3 個のクォークから構成されていることが明らかになっています。表 1 に電子、陽子(プロトン( $H^+$ )とも呼ぶ)および中性子の質量と電荷を示しました。

	質量 / kg	原子質量 単位 / u	電荷
電子	$9.109 \times 10^{-31}$	0.00055	-1
陽子	$1.673 \times 10^{-27}$	1.007	+1
中性子	$1.675 \times 10^{-27}$	1.009	0

表 1 : 原子を構成する電子、陽子および中性子の質量と電荷 (原子単位 1u:  
炭素 12 ( $^{12}\text{C}$ )の質量の  $1/12 = 1.660 \times 10^{-27}$  kg)

最近、日本の理化学研究所から 113 番目の原子(元素)発見のニュースがありましたこと、ご記憶の方もおられるでしょう。全原子の名称と電子数、質量などは‘元素の周期律表’ (例えば、<http://img.2chen.com/2015/03/periodic210.gif> を参照) にまとめられています。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、原子は電氣的には中性です。陽子と中性子の質量はほぼ等しく、電子の質量の約 1,800 倍です。従って、原子の質量は原子核の質量にほぼ等しくなります。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。原子の大きさ(広がり)は電子が決めることとなります。

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。電子は、単なる粒子ではなく、波の性質をもつ粒子として振舞います。従って、原子核のまわりに存在する電子の位置と運動を特定することができず、電子の存在する領域(電子軌道)は雲のように描かれます。

図 2 に水素型原子の電子軌道の一覧を示します。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)で決まりますので、1s, 2s, 2p のように、数字とアルファベットの組合せで区別し、さらに 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

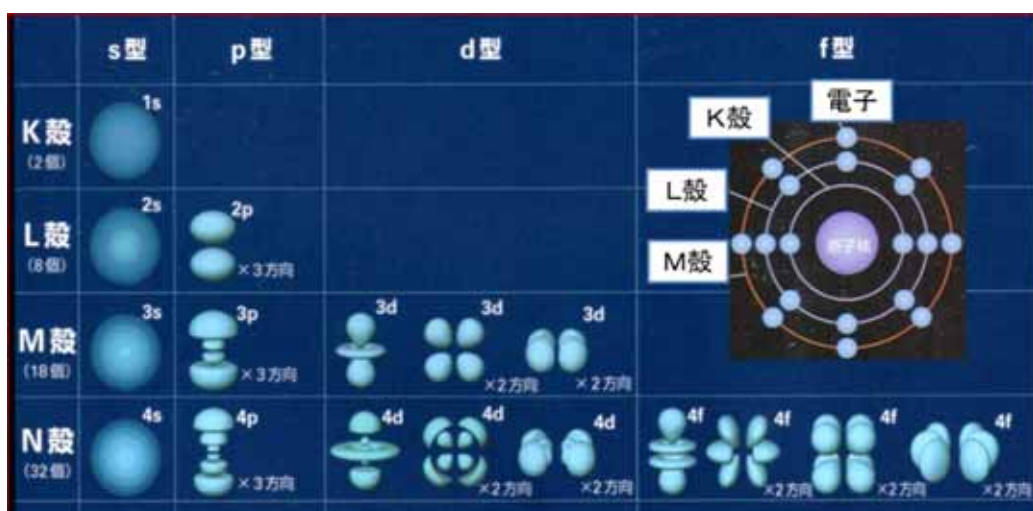


図 2 : 水素型原子の電子軌道 (出典 : ニュートン別冊「ビジュアル化学」2010, p26)

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。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分子(H<sub>2</sub>)ですが、2個の電子が2個の水素原子核(プロトンH<sup>+</sup>)に共有されて安定化し、(H—H)分子が形成されます。

### 3. 空気と水の化学

#### 3.1 空気の化学

空気の化学から始めましょう。空気の主成分は窒素分子(N<sub>2</sub>)と酸素分子(O<sub>2</sub>)であり、体積比で、各々、78.084%、20.946%です。他に、少量のアルゴン(Ar: 0.934%)や二酸化炭素(CO<sub>2</sub>: 0.039%)等が存在します。ここでは、先ず、O<sub>2</sub>分子の高い化学反応性は不対電子が二個ある電子構造に因ることを述べます。次に、N<sub>2</sub>分子のアンモニア(NH<sub>3</sub>)への転換反応(化学的固定化とも言う)に進みます。さらに、CO<sub>2</sub>分子の振動と地球表面温度の上昇(温暖化)との関係についても触れます。

#### 反応活性な酸素分子

酸素原子(O)は8個の電子を持ちますが、それぞれの電子が存在する領域(電子軌道)は異なります。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、各々、2個及び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。等価な2個のO原子が合計16個の電子を共有(結合)してO<sub>2</sub>分子ができる様子を電子軌道を用いて示しました(図3)。O<sub>2</sub>分子には不対電子が占有する軌道(2π<sub>g</sub><sup>\*</sup>軌道)が二つある(三重項状態)のが特徴的です。

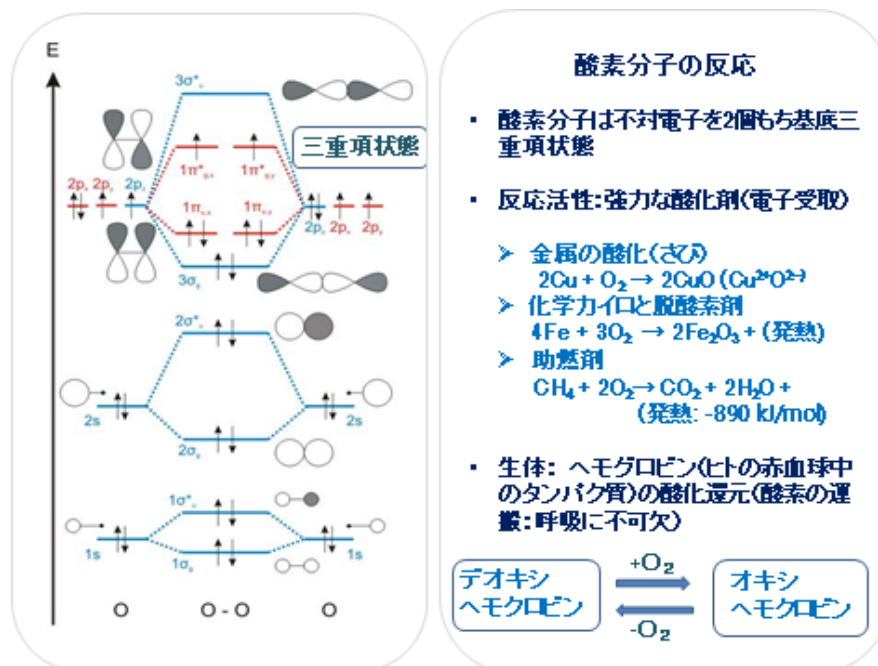
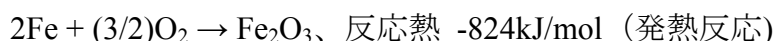


図3: (左) 酸素分子の電子軌道(出典: [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/4/4e/Diagramme\\_O2.jpg/400px-Diagramme\\_O2.jpg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/4/4e/Diagramme_O2.jpg/400px-Diagramme_O2.jpg)) と (右) 酸素分子が関与する酸化・還元反応の例

O<sub>2</sub>は‘もの’の燃焼や生命の維持に必要な不可欠な分子です。燃焼は発熱と発光を伴う激しい化学反応ですが、O<sub>2</sub>なしでは起こり得ません。O<sub>2</sub>分子は相手の原子又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、もの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、O<sub>2</sub>の酸化作用の結果です。化学カイロと脱酸素剤は、共に鉄(Fe)原子のO<sub>2</sub>による酸化反応を利用したものです。両者の相違は、酸化反応に関与するFe原子とO<sub>2</sub>分子の数が前者では多く、後者では少ないことです。



また、O<sub>2</sub>分子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、細胞が呼吸できるわけです。このようにO<sub>2</sub>分子は化学的活性が非常に高いわけですが、これはO<sub>2</sub>分子が不対電子を2個持つこと（三重項状態）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とな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常磁性が現れ、外部から磁場を加えるとその方向に弱く磁化します。

### 不活性な窒素分子：空中窒素の固定

窒素原子(N)は、アミノ酸をはじめとする多くの生体物質の構成原子であり、地球のほぼ全ての生物にとって必須な原子です。空気の約78%を占める窒素分子(N<sub>2</sub>)は三重結合(N≡N)を有し安定なため、（活性化エネルギーが大きく）化学反応（原子の組み換え）が極めて困難な分子です（図4）。この反応不活性なN<sub>2</sub>分子を人工的に反応性の高い有用な窒素化合物（アンモニア、硝酸塩、二酸化窒素など）に変換することを‘空中窒素の（化学的）固定’と言います。

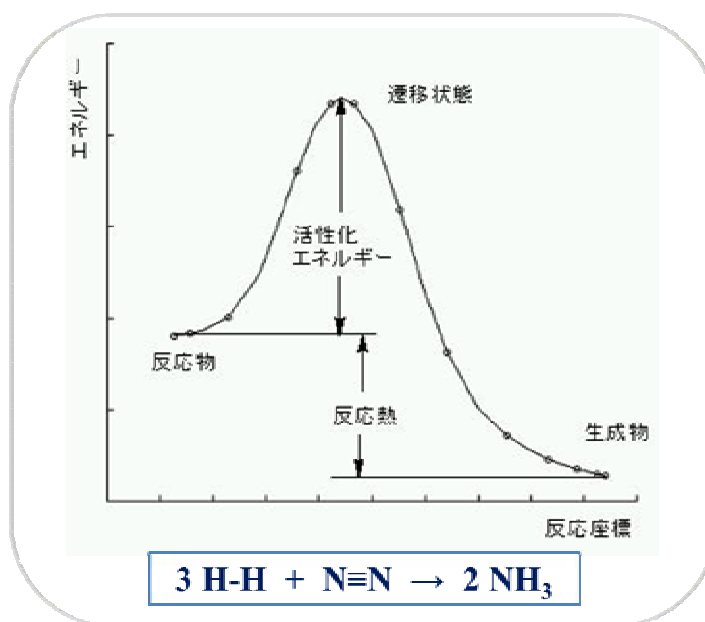


図4：H<sub>2</sub>分子とN<sub>2</sub>分子（反応物）からのNH<sub>3</sub>生成反応。触媒の作用により活性化エネルギーを低下させ、反応を進行させることができる



特に、 $H_2$ 分子と $N_2$ 分子からの、鉄触媒を用いる高温・高圧下での、アンモニア( $NH_3$ )合成法(ハーバー・ボッシュ法)は非常に重要な反応です: $N_2 + 3H_2 \Rightarrow 2NH_3$ 、反応熱  $-45.9 \text{ kJ/mol}$  (発熱反応)。パンの原料である小麦を始めとして、農作物を育てるには窒素を含む肥料が不可欠です。ハーバー・ボッシュ法による $NH_3$ 合成法の開発により、農作物の収穫量は飛躍的に増加し、人類は急激な人口増加に伴う食糧問題を回避できました。水と石炭( $H_2$ の原料)と空気(主成分が $N_2$ )からパンを作る方法ともいわれ、20世紀最大の発見の一つに数えられます。一方、生態系への窒素化合物の過剰供給による環境破壊や火薬の原料としての使用など、負の側面も指摘しなければなりません。

ハーバー・ボッシュ法は、鉄触媒を用いる高温(400-600 C)、高圧(200-1000 atm)下での反応であり、エネルギー消費型反応です。現在、常温・常圧下での省エネルギー型 $NH_3$ 合成法を目指した新しい触媒の開発研究が精力的に行われています(例えば、次を参照：[http://www.riken.jp/pr/press/2013/20130628\\_1/](http://www.riken.jp/pr/press/2013/20130628_1/))。低エネルギーで効率的に $H_2$ 分子を $NH_3$ に変換し、貯蔵・運搬が可能になれば、燃料電池の普及が加速され、脱炭素・水素型社会の実現に大いに貢献できます。

## 二酸化炭素

空気中にはおよそ 390ppm 濃度 (ppm : 百万分の 1) の二酸化炭素( $CO_2$ )が存在します。 $CO_2$ は有機化合物(骨格に炭素を含む物質)の燃焼や分解により発生します。例として、メタンの燃焼反応を挙げておきます：



$CO_2$ は、常圧では液体にならず、 $-79C$ で昇華して固体のドライアイスとなります。 $CO_2$ は、特有の(C=O)結合伸縮や(O=C=O)変角振動を有し、赤外線領域(波長:  $1\sim 100\mu m$ )に電磁波の強い吸収帯を持ちます。このことにより、地上から放射される赤外線が大気中の $CO_2$ 分子に吸収され、(宇宙への拡散が、一部、妨げられ)地上への再放射が可能となります。大気中の $CO_2$ 濃度は、産業革命以前はおよそ 280 ppm だったと推定されています。近年、化石燃料(石炭・石油・天然ガス等)の大量消費により、 $CO_2$ 濃度は増加し 390ppm に達しています( $CO_2$ 濃度の全球平均経年変化：

<http://ds.data.jma.go.jp/ghg/kanshi/co2time/co2comp.html> 参照)。 $CO_2$ 排出量の急激な増加が最近の地球温暖化現象の最大の原因と考えられています。

植物は、水と空気中の二酸化炭素から、光エネルギーを利用して炭水化物(例えばショ糖やグルコースやデンプン等)と酸素を生成します(光合成)。現在、化石燃料や農業・林業・畜産業起源を含む多岐の分野で $CO_2$ 抑制案が提案され、排出量削減のための努力がなされており、その中にあり、‘人工光合成’法の開発研究が注目されています。例えば、固体触媒存在下、光照射により $H_2O$ を分解して $H_2$ 分子を生成し、 $CO_2$ と反応させてギ酸( $HCO_2H$ )やメタノール( $CH_3OH$ )等の化学的に有用な有機化合物を合成する方法が報告されています(図5参照)。

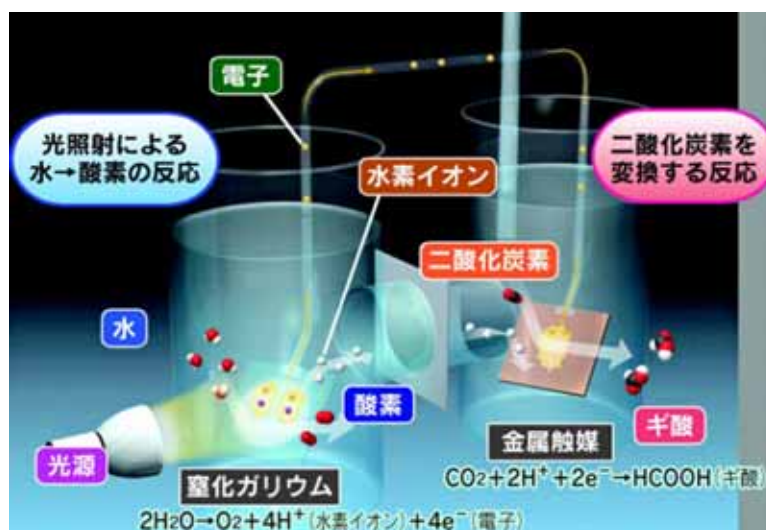


図5：人工光合成（パナソニック開発）の仕組み（出典：日経産業新聞 2012/12/10

[http://www.nikkei.com/article/DGXNASDD050FH\\_W2A201C1000000/](http://www.nikkei.com/article/DGXNASDD050FH_W2A201C1000000/)

### 3.2 水分子の化学

水を分子の目で見てみましょう。水分子( $\text{H}_2\text{O}$ )は1個の酸素(O)原子と2個の水素(H)原子から構成されます。水素分子( $\text{H}_2$ )や酸素分子( $\text{O}_2$ )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 $\text{H}_2\text{O}$ 分子は生成しません。 $\text{H}_2$ 分子と $\text{O}_2$ 分子が存在する系に熱や光のエネルギーを加え、分子間の衝突頻度を増やしたり、振動運動を励起することにより、 $\text{H}_2\text{O}$ 分子の生成反応が始まります ( $\text{H}_2 + (1/2)\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ )。その際、 $119 \text{ kJ/mol}$  ( $1.23\text{V}$  at  $25\text{C}$ ,  $1 \text{ at}$ )の熱が発生します(発熱反応)。逆に、同じ量の熱を加えて、水の電気分解により $\text{H}_2$ と $\text{O}_2$ を生成することが可能です(吸熱反応)。 $\text{H}_2$ 分子と $\text{O}_2$ 分子から $\text{H}_2\text{O}$ 分子を生成する反応で発生する熱量を電気エネルギーに変換して、取り出す仕組みが燃料電池です。化石燃料を用いない( $\text{CO}_2$ が発生しない)クリーンな電池として注目され、その性能の向上と用途の拡大が期待されています。

$\text{H}_2\text{O}$ 分子を構成するH原子とO原子の間で電子が共有され、分子内に2個のO-H共有結合ができます。しかし、Hの原子核(陽子)とOの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、 $\text{H}_2\text{O}$ は電気双極子モーメントを持ちます(図6)。

我々が日常生活で接する水は莫大な数の $\text{H}_2\text{O}$ 分子の集まりです。例えば、 $18\text{g}$  (1モル)の水は $6 \times 10^{23}$ 個(アボガドロ数)の $\text{H}_2\text{O}$ 分子からなります。多数の $\text{H}_2\text{O}$ 分子が集まると、正に荷電したH原子と負に荷電したO原子間で‘分子間’の弱い結合が出来ます。これが水素結合(約 $5 \text{ kcal/mol}$ )です(図6)。水素結合は‘分子内’の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化学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(1気圧下 $0^\circ\text{C}$ )や沸点(1気圧下 $100^\circ\text{C}$ )が他の低

分子化合物に比べて高いのも水素結合に起因します。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。水素結合は有機化合物においても重要です。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（H 原子と O 原子間および H 原子と N 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。

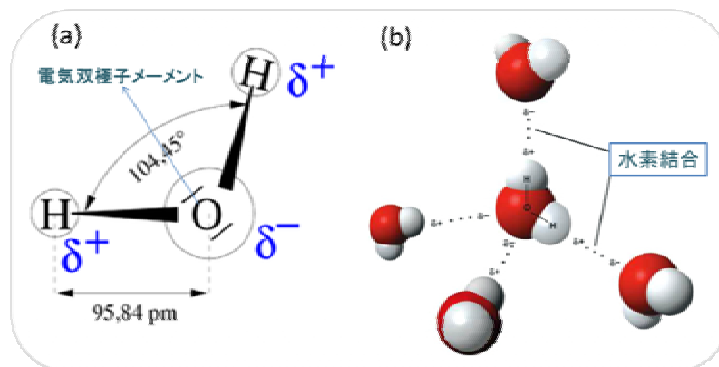


図 6 : (a) 水分子の極性と(b) 水分子間の水素結合モデル

([https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/f9/3D\\_model\\_hydrogen\\_bonds\\_in\\_water.jpg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/f/f9/3D_model_hydrogen_bonds_in_water.jpg))

食物の温めや料理に使う電子レンジは H<sub>2</sub>O 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、H<sub>2</sub>O 分子の電気双極子モーメントが電磁波と相互作用して、水分子が回転し始めます。この H<sub>2</sub>O 分子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 H<sub>2</sub>O 分子と密接に関係しています。H<sub>2</sub>O 分子を形成する H 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に強磁場を印加し、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。身体全体を大きな強い磁石の中に入れ、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ます。

#### 4. 有機材料の話

有機化合物の骨格を形成する炭素原子(C)は 6 個の電子を持ちますが、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 個ずつの電子が入り、炭素原子は 4 つの結合手を持つことができます。このことにより、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、炭素を含む有機物は極めて多様な形状と構造をとり、種々の機能を発現します。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。先に述べましたように、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。

#### 4.1 炭素同素体

炭素同素体の話から始めます。同じ元素で構成される物質（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3種同素体が知られています（図7a, b）。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（スマートフォンやパソコン用）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。

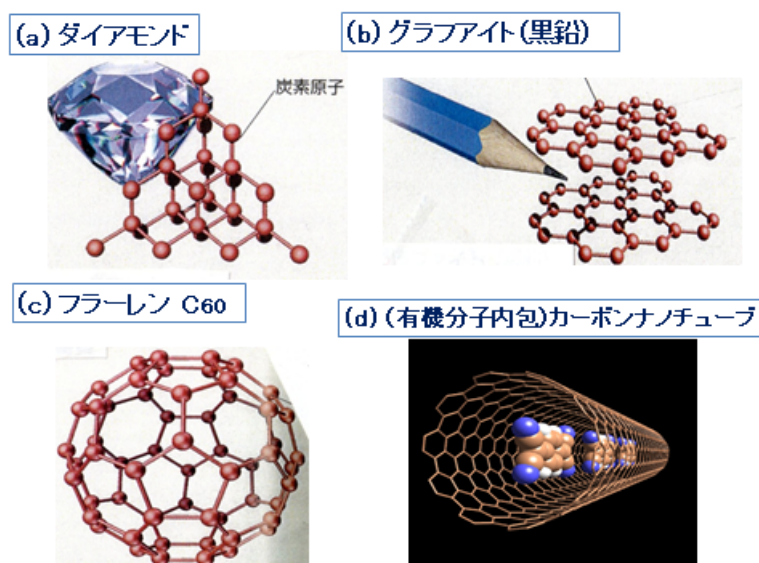


図7：(a-c) 炭素の同素体（出典：「ニュートン」2006年10月号，p.71）と(d)（有機分子内包）カーボンナノチューブ（出典：T. Takenobu et al. Nature Materials 2, 683, 2003）

もう一つの炭素同素体はフラーレンです（図7c）。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 $C_{60}$ 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。 $C_{60}$ 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@C<sub>60</sub>) 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@C<sub>60</sub>)、2種以上の元素 (N と Sc 原子) を内包したフラーレン((Sc<sub>3</sub>N)@C<sub>80</sub>)、水素分子(H<sub>2</sub>)を封入したフラーレン (H<sub>2</sub>@C<sub>60</sub>) 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 7d)。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<sup>-9</sup> 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。

## 4.2 身の回りの機能性材料

◆ **機能性高分子**  
(高分子化合物(分子量が10<sup>4</sup>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

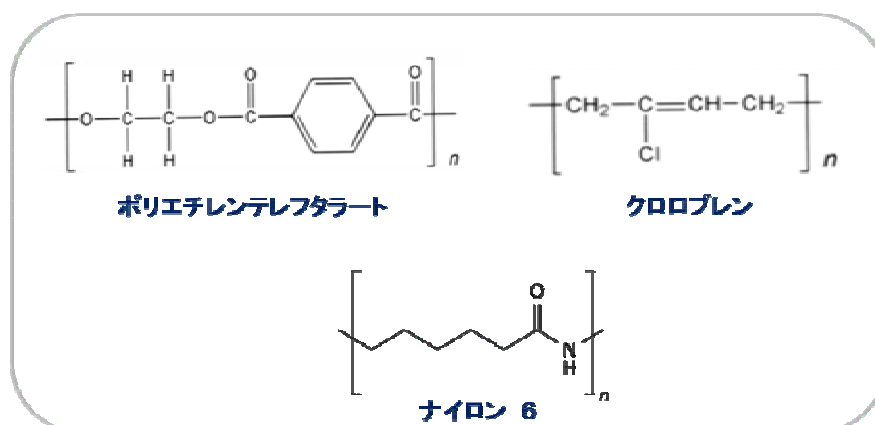
◆ **機能性有機分子**  
液晶 (薄型ディスプレイ)  
有機EL (エレクトロルミネッセンス)  
グラファイト (リチウムイオン電池の負極材料)  
医薬品  
など

表2: 機能性材料の例

分子の構造と性質の関係についての理解が進むに従い、種々の機能をもつ化合物を設計することが可能になってきました。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 (表 2)。

有機高分子化合物を例にとります。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) であり、主鎖 (分子鎖) にベンゼン環を含む合成有機高分子です。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（フリースなど）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6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。



有機高分子化合物は、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る、炭素の電子は、隣接する軌道の重なりにより、パイ電子として分子全体に広がります。分子全体に広がった電子が、金属の自由電子のように振る舞い、ポリアセチレンに電気伝導性が現われます(図8参照)。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高分子を取り上げ、構造と機能の関係について話しました。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-炭素結合生成方法を確立しました。このクロスカップリング法により、医薬、農薬、液晶、有機EL（エレクトルミネセンス）などの複雑な構造を持つ有機（高）分子の合成が可能となりました。この業績により、2010年度ノーベル化学賞が3人に授与されました。

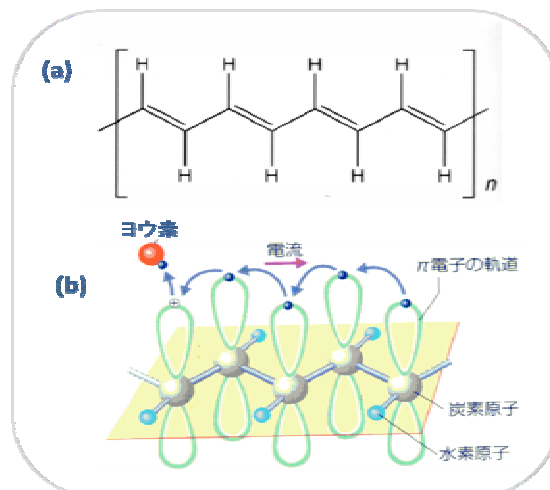


図8：ポリアセチレン (a) 分子構造 と (b) パイ電子の広がり。ヨウ素をドーピングすると電導性が高まる（出典：東京書籍、日本化学会編「感動する化学」2010, p119）

## 5. まとめ

先ず、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から解説しました。次に、身近な存在である空気と水を取り上げました。空気の項では、重要な小分子である酸素、窒素および二酸化炭素に着目しました。酸素(O<sub>2</sub>)の高い化学反応性は2個の対電子（三重項状態）に起因することを述べました。また、反応活性の低い窒素(N<sub>2</sub>)のアンモニア(NH<sub>3</sub>)への転換反応（化学的固定化）の重要性を指摘し、二酸化炭素(CO<sub>2</sub>)の振動運動と地球表面温度の上昇（温暖化）との関係について言及しました。水分子の項では、分子内に存在する正・負電荷の偏り（極性）により、水分子間に水素結合が出現することを述べました。また、H<sub>2</sub>とO<sub>2</sub>からのH<sub>2</sub>O分子の生成と燃料電池の関係にも触れ、さらに、電子レンジや医療診断に用いる核磁気共鳴画像法（MRI）にもH<sub>2</sub>O分子が関係することも述べました。

有機材料の項目は、同じ炭素から構成され同素体でも、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ことを述べました（ダイヤモンド、グラファイト及びフラーレン）。フラーレンと同一種の炭素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ます。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固体ですから、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<sup>-9</sup>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2016年2月16日に行われたTSS文化大学における講演の概要です）