

化学反応のはなし：輝く皆さんに

Short Stories of Chemical Reactions for Young Students

鈴木 俊法

Toshinori Suzuki

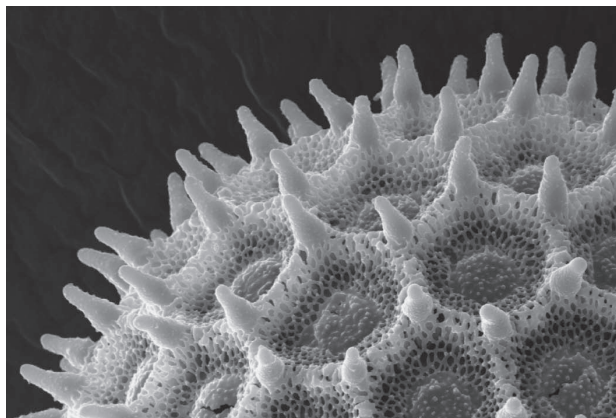
少し前になりますが、ある高校1年生の生徒さんから電子メールが届きました。私の研究室を訪ねて、研究内容について聞いてみたいという要望でした。その高校では、大学の先生を訪ねて研究内容の説明を聞き、それを学校に持ち帰って皆に話す活動を行っているというのです。もちろん、私はその生徒さんを歓迎して、分子がどんな成り立ちをし、どんなふうに応答するかを説明したり、実験装置を見せてあげたりしました。生徒さんにとっては初めての話ばかりだったでしょうが、熱心に話を聞き、とても良い質問をたくさんしてくれました。そうして考えてみると、私は専門家や大学院生のための解説をいくつも書いているのに、中学生や高校生の皆さんへの解説文は書いたことがないことに気がつきました。生徒さんの訪問をきっかけに、分子や化学反応に興味を持っている方もいるかもしれないと思いました。そこで今回、この雑誌に原稿を依頼された機会に、解説文を書いてみることにしました。

少し難しく感じる所もあるかもしれませんが、そういうところがあれば、とばして読んでいただいて構いません。後になってから、ああそうかと分かってもらえる時もあるかもしれませんし、私の解説よりもっとわかりやすい説明を図書館やインターネットで探してもらおうきっかけになるだけでも、うれしく思います。

1. 分子の中の電子の波

水面に石を投げ入れると、丸くきれいに波紋が広がります。こうした「波」は化学とは関係がなさそうですが、どうでしょうか？

今から100年ほど前、20世紀の初めに科学者は、「光は電気と磁気の波（電磁波）であると同時に、つぶ（粒子）の性質を持っている」ことを発見しました。そこで、「逆につぶも波の性質を持つのでは？」と考えた科学者が調べた結果、実際に原子や電子のようなつぶも波の性質を持つことを発見しました。初めて聞いた方は「えっ！」とびっくりするでしょう？でも皆さんは電子顕微鏡という名前をどこかで聞いたことはありませんか？皆さんの学校にある顕微鏡は光学顕微鏡という器械で、目に見える光（可視光）の波を使って植物の細胞などを見るのですが、電子顕微鏡は電子の波の性質を使って物を見るのです。電子顕微鏡の



http://remf.dartmouth.edu/pollen2/pollen_images_1/

図1. 電子顕微鏡で見た花粉の表面（出典：Dartmouth College Electron Microscope Facility）

優れた点は、光学顕微鏡よりもずっと小さな物まで見ることができることです。図1は花粉を電子顕微鏡で撮影した写真です。細かい構造がよくわかりますね。

つぶが持つ波の性質は、電子のように私たちの目には見えないような、小さくて軽い粒子にははっきり現れますが、野球のボールやリングのように重い粒子については、（波の性質はあるものの、その影響があまりにも小さいため）ほとんど見ることはできません。そのため、20世紀の初めまで、誰も「波と粒子の両方の性質を持つこと（二重性）」には気がつかなかったのです。だから皆さんが気がつかないのも当然です。私も、物質が粒と波の両方の性質を持つことを初めて勉強した時には、なぜそんな奇妙なことになっているのか困惑して、大いに悩みました。でも実際の所、私たち科学者も「なぜ」かは説明できないのです。自然がそうなっているのです、そのまま素直に理解するより仕方ありません。若い皆さんは柔軟な頭脳を持っていますので、「ふーん、そうだったのか」と聞いていただくと良いと思います。勉強が進むと、そう考えれば何もかもうまく説明できるんだ、ということが分かってきます。だから、ちょっとがまんして話を聞いてくださいね。

原子は、原子核と電子から成り立っています。原子核は、原子の中心にあるプラスの電気を持ったつぶです。核というのは「中心になるもの」といった意味です。（福島県で津波のために壊れて被害が出た「福島第一原子力発電所」の

名前を皆さんも覚えているでしょう？原子力発電所というのは、原子核を壊した時に放出されるものすごい熱を使って発電機を回す、電気の工場です。でも、ここでは原子核が壊れるような話は出てきません。原子核はプラスの電気を持ったつぶとだけ考えましょう。）この原子核のまわりに、マイナスの電気（電荷）を持った電子がいます。どの原子にも原子核は1個しかありませんが、電子の数は原子によって違います。例えば水素原子の原子核は+1の電気、酸素原子の原子核は+8の電気を持っているので、水素原子は-1の電気を持った電子を1個、中性の酸素原子は8個持っていて、原子全体の電気がつりあっています。原子が電子を1個失ったり、あるいはもらったりすると、原子は+1や-1の電気を持ちます^{注1}。例えば、食卓にある食塩は塩化ナトリウム（NaCl）という物質で、塩素原子（Cl）とナトリウム原子（Na）からできています、塩素原子がナトリウム原子から電子を1個もらっているため、塩素は-1、ナトリウムは+1になっています。

私たちが原子の大きさと呼んでいるのは、原子核のまわりにある電子の波の広がりをさしています。原子核の大きさは、電子の波の広がりに比べれば、無視して良いほど小さいです。一方、原子核の重さは電子の重さより何万倍も大きいので、原子の重さは原子核の重さと同じと考えて構いません。原子には、水素、酸素、鉄などの様々な種類（元素）があり、それぞれ異なる性質を持っていますが、これらの違いは主に原子が持っている電子の数の差に由来しています。

原子が結びついたものが分子です。皆さんは、今息を吸ったり吐いたりして、空気中の酸素分子を吸い二酸化炭素分子（炭酸ガス）をはき出していますね。この酸素分子のことを考えてみましょう。酸素分子は酸素原子（O）2個が結びついてできた分子で、 O_2 という記号で表します。酸素分子は2個の原子核と16個の電子を持っています。2個の原子核はそれぞれ+8の電気を持つため互いに反発しあい、16個の電子はマイナスの電気で反発し合っています。でも、2個の原子核と16個の電子が引き合っているのです、分子がうまくまとまっているのです。これらの原子核や電

子の波を表す方程式の形はわかっているのです、これが解ければ、分子のあらゆる性質や化学反応が予測できるようになります。でも実際には、18個の粒子が反発したり引き合ったりする様子があまりにも複雑すぎて、そのままでは方程式を解くことも計算することもできません。

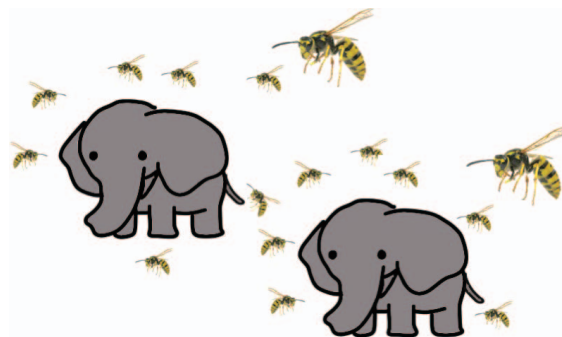


図2. 酸素分子の原子核と電子を重さの違いから象とハチに例えると。。。。

そこで、少しだけ式を簡単にした上でコンピュータを使って計算します。どうするかというと、原子核は電子よりも何万倍も重いことは説明しましたね。そのため、原子核は電子に比べてゆっくりとしか動かないことを考慮に入れるのです。例えば、酸素分子を考える時に、原子核を2頭の象（名前をゲンシ君とカク君とします）とし、16個の電子をハチと考えて話を進めましょう（図2）。ゲンシ君とカク君はハチに追われて移動しますが、その動きはハチの素早い動きに比べれば、ほとんど止まっていると見なして良さそうです。そこで、ゲンシ・カクが完全に立ち止まっていると仮定して、ハチの動きだけを計算します。こうした計算を、ゲンシ・カクが動きそうなあらゆる場所に対してあらかじめ行っておけば、ゲンシ・カクが最初にいる場所を決めただけで、ハチがゲンシ・カクをどの場所に追いかけるかを全て予測できるようになるのです。このように、原子核と電子の動きを完全に分けて考えるという近似（問題を簡単にするために、細かい部分を省略してしまうことです）をして、答えを予測します。でもゲンシ・カクが素早く動いたら、ハチもびっくりして影響があるのでは？そうですね。原子核と電子の動きを完全に分けて考えるのは良い近似なのですが、分けられない場合も出てきます。その問題は紫外線による遺伝子の破壊に関連して、後でお話ししましょう。

酸素分子の中の電子の波を計算すると、原子核の間の距離（核間距離）が0.12ナノメートル（0.1ナノメートルは1ミリメートルの10万分の1です）の時に原子核と電子全員の居心地が最も良くなり、全体のエネルギーが低くなると予測されます。実際に、空気中の酸素分子は、この核間距離を保っています。核間距離はいくつかの実験方法で測ることができます。例えば、分子が回転する速さを測る方法です。皆さんはフィギュアスケートの選手が氷の上でく

注1 私たちがお店で払うお金は1円という単位で使っていますね。お父さんが力まかせに1年玉を半分に分けてお金を払っている所を見たことはないでしょう？電気についても、やりとりができる最小の大きさがあることが実験の結果分かっています。これを電気素量（でんきそりょう）と呼びます。電子や原子核は、この電気素量の何倍かの電気の量を持っているのです。+1や-1と呼んでいるのは、電気素量と同じだけの量だけれど、性質が反対の電気ということです。プラスとプラスの電気は反発し合い、プラスとマイナスの電気は引き合います。エボナイトという黒くてかたいゴムの棒を毛皮でこすると、ゴムの棒はマイナスの電気を帯びることが分かっています。このエボナイト棒の電気を2枚の金属（アルミホイルなど）に移すと、どちらもマイナスの電気を帯びるので、お互いにはじき合います。学校で実験したことはあるかな？電気にプラスとマイナスの2種類があることは、すでに18世紀に分かっていました。

るくる回る（スピンと言います）ときに、腕を縮めて回転を速めるのを見たことはありませんか？分子の場合も、核間距離が短い方が分子の回転が速くなります。そのため、分子がくるくる回る速さを測れば、核間距離を決めることができます。

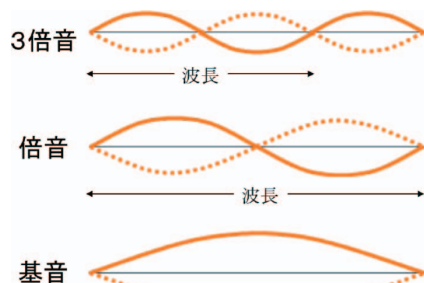


図3. 弦の振動の様子。山と谷の間で、ちょうどゆれがない所を節（ふし）と呼びます。それに対して、ゆれの大きいところは腹（はら）と呼びます。

さて、もうちょっと電子の波について考えておきましょう。分子の中の電子の波は、ギターの弦の波と共通する特徴を持っています。図3を見てください。ギターの弦が振動する時は、弦が固定されている一方の端から次第に波の振れ幅が大きくなり、ちょうど真ん中で最大になって、反対の端でまた振れ幅がゼロになる形が基本ですね。この基本的な振動の場合の音を基音と言います。1オクターブ高い音（倍音）では、図のように弦の長さの1/4の所で振れが最大になり、真ん中でゼロを通過して、3/4の所で反対側に最大に振れて、反対の端でゼロに戻る波打ち方になります。基音の振動には波の節はありませんが、倍音では、真ん中に節が1個できます。その後は、節の数が2個、3個と増え、波長（波の長さ：図3の倍音の波のように、上がったたり下がったりしてちょうどゼロに戻るまでの長さです）の短い波になっていきます。分子の中の電子の波も同じように、波長が長くゆるやかな波から波長が短く細かな波まで発生します。楽器が奏でる音の波の場合は、波長が短いほど高い音になります。電子の波の場合には、波長が短いほどエネルギーの高い波になります。

2. 電子の波と分子の色

分子の中には幾つもの電子があります。電子の世界では、2個まで同じ波形を持つことができるというルールがあります。ですから、電子が4個あったとしたら、2個の電子は一番エネルギーの低い波に、他の2個はその次に低い波になります。この様子は、電子が図4のような「ブンシホテル」に泊まっているようなものです。ブンシホテルの各階にはシングルルーム（一人部屋）が2つずつあります。ですから、四人のお客さん（電子）がいれば1階と2階の部屋はいっぱいです。

電子は1階と2階にしか入れられないのでしょうか？いい

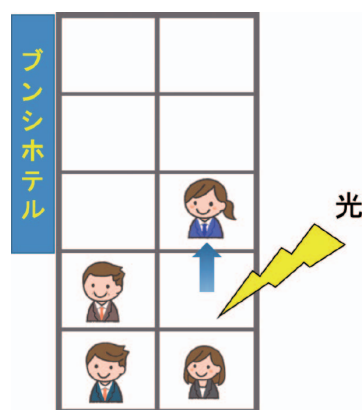


図4. 分子の中の電子は、2個まで同じ波の形を持つことができ、同じエネルギーを持っています。これは、ホテルの各階に二人ずつ宿泊しているようなものです。分子が光を吸収すると、一人が空いている上の階の部屋に上がることができます。各階には二人しか泊まれないので、空室がなければ上がりません。また、一つ上の階に上がるより、二つ上の階に上がる方がたくさんのエネルギーが必要です。

え、そんなことはありません。電子が四人泊まっている時に、ちょうど良い光を吸うと、2階の電子のうちの一人が3階に上がれます。（1階の電子は2階には上がりません。なぜなら2階には既に二人泊まっているので、三人目の部屋がないからです。ただし、エネルギーをたくさんもらえば、1階から3階に上がることはできます。）

ところで、庭に咲く花は赤や黄色などの美しい色を見せられますが、こうした物質の色は電子の波と深い関わりがあります。これを理解するためには、ちょっと脱線しますが、光についてももう少し説明が必要です。太陽は温度6,000°Cの燃えたぎった火の玉で、あらゆる波長の光を放っています。その光が地球にも届いているから私達は生きていられるのです。私たちが目で見ることができるのは、波長が400から700ナノメートルの波（光）で可視光と呼ばれます。（酸素分子の中の核間距離が、だいたい0.1ナノメートル程度ですから、可視光の波長は分子の大きさよりもずっと長いですね。）

太陽光はさまざまな波長の可視光を全て含んでいますが、太陽光が雨上がりの空に浮かんでいる水滴の中を通ると、光の成分が分かれて見えます。そう、雨上がりの空に見える虹ですね。同じことは、理科の実験で使う三角形の形をしたガラス（プリズム）を通っても起こりますし、回折格子という細かい溝が刻まれている板で光を反射しても光が分かれます。（皆さんの家にあるCDやDVDのディスクにも細かい溝があるので、斜めにして光を反射してみると虹色が見えますよ。）さて、太陽光の通り道に赤い花の成分を溶かした液体を置いて、通り抜けた光を調べてみましょう。すると、赤い液体を通った太陽光では青や緑に見える成分が吸収されてなくなっていることが分かります。つまり赤い花は、太陽光の中から青や緑に見える波長の短い光の成分を吸収し、波長の長い光をはね返しているから赤く見えているのです（図5）。

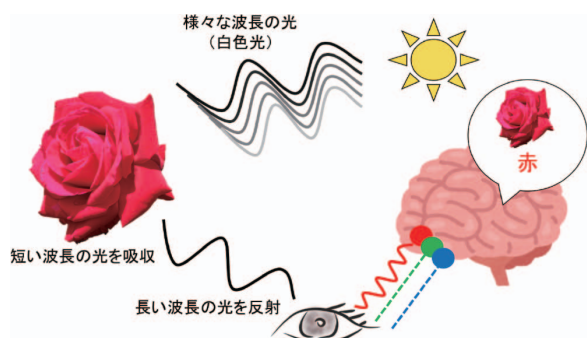


図 5. 赤い花の見え方。いろいろな波長の光を含む太陽光から花が一部の波長の光を吸収し、残りを反射します。目の中の細胞が、波長のちがう光を感じて脳に信号を送り、脳が色を認識します。

花の色が種類によって違うのは、花の色を決めている分子（色素分子）が、植物によって違うからです。ブンシホテルの各階の高さが違えば、電子を上の方階に上げるのに必要な光の波長が違うので、反射される残りの光の波長も違ってきます。つまり、庭に咲くさまざまな花の色は、色素分子のブンシホテルの各階の高さの違いが原因になっているのです。オーケストラには、バイオリン・ピオラ・チェロといった、形は似ているけど大きさの違う弦楽器がありますね。花にもいろいろな大きさの色素分子があり、様々な色を見せてくれるのです。

ところで、そもそも色って何でしょう？実は、光そのものには色はないのです。あるのは波の長さの違いだけで、色というのは私たちの脳が作っている「感覚」です。私たち人間の目は光を感じるために、かん体細胞とすい体細胞という2種類の光のセンサーを持っています。かん体は暗い所で物を見るときに働きますが、基本的に色を見分けることはできません。すい体は明るい時に働く細胞で、少し性質の違う3種類があって、それぞれ長い波長、中ぐらいの波長、そして短い波長を受け持っています。これら3種類のすい体が受けた光の信号が脳に送られると、脳は、3種類の信号の組み合わせに応じて色を認識します（図5）。3種類の信号の強さの組み合わせによってどんな色に感じるかを表したのが図6です^{注2}。赤・緑・青は3種類のすい体のどれかの信号が特に強い時に感じる色で、全ての信号が強いと白色に感じます。こうした波長を感じる能力（色覚）のおかげで、私たちはどのリンゴが熟していて、どれがまだかも一瞬でわかるのです。

3種類のすい体のどれかが欠けていたり、働きが弱いと色の感じ方も違ってきます。日本人男性の20人に1人は、赤と緑の色の区別に困難があるといわれています。というのも、波長の長い光と中ぐらいの光を感じるすい体は、も

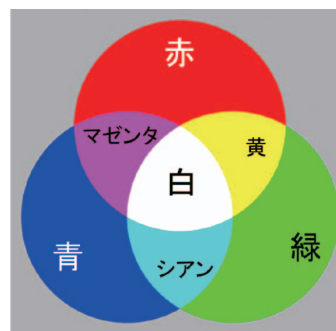


図 6. 私たちの目は、明るいところでは、波長が短い・中ぐらい・長い光を別々に感知することができ、それらの信号が脳に送られると赤・緑・青といった色として認識します。これらの組み合わせによってどんな色に感じるかを表したのがこの図です。

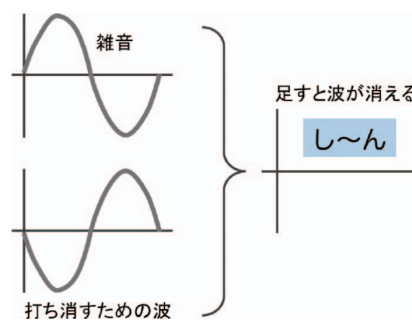


図 7. 雑音を打ち消す仕組み。雑音の波の山と打ち消す波の谷がちょうど合わさることで、波を消すことができます。

ともと1種類しかなかったものが進化の過程で分かれて二つになったので、こうした不便が起こりやすいそうです。しかたのないことなのですね。さまざまな人たちが暮らす私たちの社会では、交通標識や案内板、機械の動作ランプなどは、全ての方にわかりやすくしなければなりません。そのために、色の区別が難しい方にもわかりやすい配色（カラーユニバーサルデザイン）を心がけたり、記号や言葉を添える配慮が大切です。

最後に、波の話をもう一つだけしましょう。電車の中などで、イヤホンやヘッドホンをつけて音楽を聴いている人がいますね。騒がしいところで音楽を聴いてちゃんと聞こえるのでしょうか？大丈夫です。最近のイヤホンやヘッドホンの多くにはマイクが付いていて、外から来たうるさい雑音の波を素早く調べ、その波とちょうど正反対の形の波を作って耳の中に出すのです。すると、外から来た雑音と、人工的に作った雑音の山と谷が耳の中でちょうど打ち消し合って、雑音が消えてしまいます（図7）。こうして静かになったところで音楽を流すと、はっきりと音楽を聴くことができるのです。便利です。波の大切な特徴の一つは、このように波と波を重ね合わせると消すことができるということです。

では、分子が化学反応を起こす時にも、電子や原子核の波を打ち消せば、起こって欲しくない化学反応を消すことが可能なののでしょうか？はい。実際に科学者は、分子に特殊な光を当てて、分子の中に打ち消し合う波を作って化学

注2 テレビの画面を虫眼鏡で拡大してみると、赤、緑、青の細かい点が並んでいませんか？私たちは3つの信号のバランスで色を認識するので、赤 (Red)、緑 (Green)、青 (Blue) の光を適切な強さの割合で光らせれば、どんな色も見せる（感じさせる）ことができます。そのため、三つの光でさまざまな色を表現する方法（RGB方式）が広く使われています。

反応をコントロールすることに成功しました。ただ、この方法では簡単な反応しか制御できませんし、そのためにかかる費用を考えると、工場で製品を作るような産業にはまだ利用できていません。でも、将来は皆さんが、こうした研究をもっと発展させて役立てることができるかもしれません。がんばってください！

え、その前に「宿題しなさい」というお母さんの声を消す波が欲しいって？むむむ。

3. ^{とうげ}峠を越える分子

化学反応は、たいていの場合、山登りになります。分子の中で原子がうまく結合しているのに、それらをわざわざ引き離して新しい分子を作ろうとすると、少なくともいったんは電子の居心地が悪くなるからです。化学反応を起こさせるためには、分子に熱を加えたり、光を当てたりして、あの手この手で山の峠まで登らせなければなりません。化学反応にまず必要なのは、この峠まで登るためのエネルギーです。

次に、^{とうげ}峠越えの道には、道幅が広い場合も狭い場合もあります（図8）。道幅が広ければ峠にたどり着いた人はみんな簡単に通れるでしょうが、道幅が狭い崖^{がけ}や岩場のような峠なら、体を横向きにしてゆっくり通らなければいけない難所になるでしょう。つまり、単純にエネルギーが足りたからといって峠を越えられるとは限りません。分子と分子が衝突して化学反応を起こす場合に、「ある決まった向きで衝突しないと反応できない」といった具合に、条件が厳しくなると峠の道はどんどん狭くなります。サッカーボールをただ蹴れば良い場合と、サッカーボールの上に印刷されている会社の名前の所を狙って蹴る場合を想像してみてください。条件が厳しくなると難しくなるでしょう？つまり化学反応の起こりやすさには、峠の高さのほかに、峠を通る道幅（条件の厳しさ）が関係します。



図8. 峠越えの道はいろいろ。高さだけではなく、通りやすさも大事。

そこで、化学反応の起こりやすさを予測する一番簡単な方法では、峠の高さと道幅だけを考えます。峠までの登りやすさや峠からの降りやすさを無視して、峠周辺^{ごせつ}だけを考えますから、峠を越えたにもかかわらず途中で挫折して目的地にたどり着けない分子が続出する場合には間違った予測になってしまいます。ただし、峠をぎりぎり越えるエネルギーでの反応については、この方法で正確な予測ができ

ます（あらゆる場合に、化学反応の起こりやすさを正しく予測するためには、山のこちら側から向こう側までの全行程をていねいに追跡しなければいけません）。

では、化学反応の峠のまわりの地形を考えるために、地図を描いてみましょう。むむ、そのとたんに困った問題が起きますね。たとえば、原子AとBからできた分子(AB)と原子(C)が反応する場合、3つの原子が登場するので、それらのぶつかり方を表すためには、A-B、B-C、A-Cの3つの距離が必要です。でも、紙の上に描く地図では、2つの距離しか表すことができません。これは、クリームパンやジャムパンを平らな画用紙の上うまく描くことができないのと同じです。この困った問題の解決方法の一つは、パンを縦や横に切った切り口を選んで絵に描くことです。パンの端っこを切ったらクリームから外れて、ジャムパンかどうか区別がつかませんから、うまく切り口を選んで描きます。同じように、A-BとCの反応については、三つの原子が一行に並んで反応する場合を選んで平面の上に図を描くことにしましょう。そうすれば常に

$$A-B \text{ の距離} + B-C \text{ の距離} = A-C \text{ の距離}$$

になるので、A-Bの距離とB-Cの距離を縦（上下）と横（左右）にして地図を描けば、だいたいの様子が分かります。こうして描いた化学反応の地図が図9です。

図9には、峠の場所が違う3つの地図が描かれています。峠の場所をXで示していますが、峠が（1）地図の左下の角にある、（2）角よりも右に寄っている、（3）角よりも上に寄っている3つの場合です。まず、（2）について考えてみましょう。この場合の峠は、A-Bの距離が伸びていない場所にあります。地図の上に、うまく反応を起こす時の原子の動きを黒い線（実線）で示していますので、これをたどっていきましょう。CがBに近づいていき、峠を越えるとBとCが急速に引きあってぶつかります。そしてBとCの核間距離が伸びたり縮んだりする運動（振動）をしながら、AとBの距離がどんどん大きくなって原子Aと分子BCに分かれていきます。うまく反応しましたね！（2）の図の下にイラストが描いてありますので、地図と見比べてみてください。青い玉が緑の玉に当たって新しい化学結合を作った後、ぶるぶる振動しながら遠ざかっているようすが分かりますか？

一方、（2）の地図の上に描かれている赤い線（点線）は、反応が起こらない場合の原子の動き方です。この時は、あらかじめA-B分子が伸び縮みするような振動のエネルギーが与えられていますが、C原子が衝突する時のエネルギーはその分少し低くしてあります。A-B分子の振動は（2）の地図の峠を越すのに有効ではありません。峠を越すためには、C原子の衝突エネルギーが重要です。ですから、赤い線の動きではX印で示された峠を越えられずに、手前で跳ね返されて右に戻っていきます。反応は失敗です。こうした結果から（2）の場合は、エネルギーを効果的に使うな

ら、AB を振動させるのではなく、C をぶつけるために使うべきだということがわかります。

(3) の地図の場合には事情が違います。この場合の峠は、A-B の距離が大きなところにあり、地図上で左下の角よりも上側に寄っています。ですから、(3) の峠に上るためには C が B の原子に当たった時に、A-B の距離が伸びている必要があります。A-B の距離が短いままでは、C を勢い良くぶつけても峠を越えることはできません。そのため、A-B をあらかじめ振動させておくことが必要です。

このように化学反応を起こすためには、峠を越えるのに有効な運動が必要です。(2) の場合は C 原子を剛速球のように AB 分子にぶつけるべきで、(3) の場合は分子を激

しく揺らしておくとう利です。こうした差が生まれる原因は化学反応の地形の違いにあるのです。

地形の効果は、自分で山や谷の形を作って玉を転がしてみれば直ぐに分かります。実際に、私たちは石膏で山や谷の地形を作って小学生や中学生の皆さんにビー玉を転がしてもらいましたが、みんな喜んで体験してくれました。高校生には、パソコンのソフトで、玉転がしを計算してもらいました。ただの遊びのようですが、化学反応の峠の場所によって反応の様子が変わるというのは、「ポラニーの規則」というノーベル化学賞を受賞したジョンポラニー博士の研究の成果です。皆さんも図9の説明が分かれば、この問題に関してはもう大学4年生レベルです。素晴らしい！

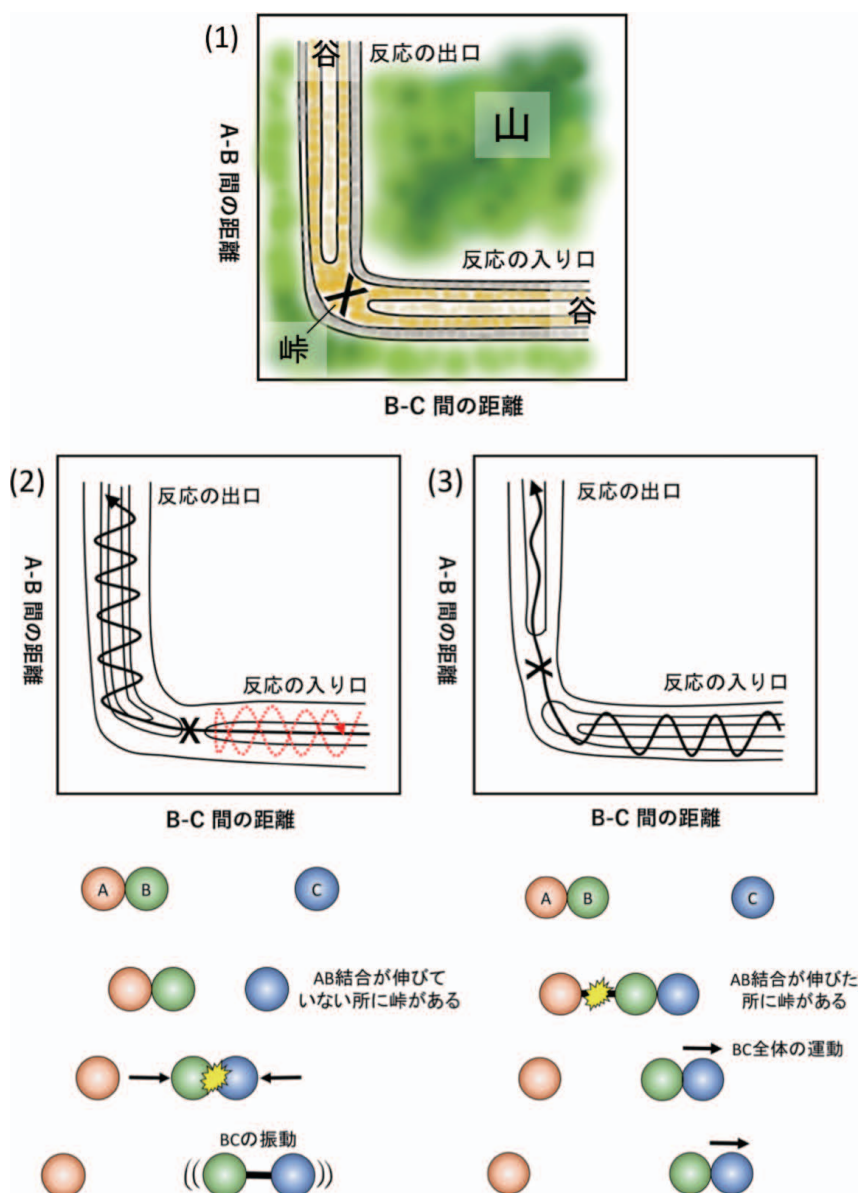


図9. 化学反応の峠付近の地形と反応の関係。化学反応の峠（遷移状態）の場所をXで示しています。(2)では峠の場所が反応の入り口に近く、(3)では出口に近い。そのため、(2)では反応した後にABが強く振動するのにに対して、(3)ではABはあまり振動せず大きな速度で飛び去ります。また(2)ではCを勢い良くBにぶつけると反応が起こりやすいが、(3)では、ABが激しく振動している方が反応しやすいという違いがあります。(2)と(3)に描かれている黒い線はうまく反応する場合、(2)に描かれている赤い線は反応しない場合の原子の動きを表しています。

パチパチパチ。

化学反応の山の峠は最も決定的な瞬間です。その高さ、地形などが分子の運命を決めるからです。野球で言えば、ボールにバットが当たった瞬間の様子ですね。この化学反応の決定的な瞬間を、化学者は特別な意味を込めて、化学反応の「遷移状態」と呼びます。今までの話から、化学反応の峠の高さ、道幅、さらには地図上での峠の場所が化学反応の様子を決めていることが分かっていたかと思えます。

今お話しした化学反応の地形というのは、前の節でお話しした、ハチのように飛び回っている電子のエネルギーを地図に表したものです。この地図を作るためには、あらゆるゲンシ・カクの場所に対して電子の波の形とエネルギーを求めなければなりません。これは大変な計算ですが、長年にわたる計算方法の開発とコンピュータの飛躍的な性能向上のおかげで、原子の数が10個程度までの分子なら遷移状態の構造や反応の速さはほとんど正確に予測できるようになりました。ただ、やっかいなことに、この計算は電子の数が2倍に増えると10倍、100倍の量に増える性質があるので、コンピュータの能力が100倍になっても、100倍大きな分子の計算ができるようにはなりません。でも、反応を大まかに予想することはできるでしょう。薬の開発では、薬の分子の形をいろいろに変えながら、病気の原因になる分子とどのように結びつくかをコンピュータで計算する研究も行われています。薬になりそうな分子の候補を計算を使って絞り込んでから実験すれば、始めからたくさんの候補について実験するよりも時間と労力が少なく済むでしょう。化学反応の計算は、さまざまな研究開発や皆さんの学習にもどんどん利用されるようになるはずです。

大きな分子の化学反応を計算で予測するためには、計算速度の大きなコンピュータが必要ですが、巨大なコンピュータを作るには大変なお金と時間がかかります。そこで、科学者の中にはテレビゲームのアニメーション用の計算回路 (GPU) に目をつけて計算方法を開発している人もいます。皆さんはテレビゲームは好きですか？サッカーやアイスホッケーなどのテレビゲームを見ると、選手の表情やしぐさ、光や影の見え方などは本物のテレビ中継に驚くほどそっくりですね。あの絵を計算するために、ゲーム機は小さいながらも最先端の計算回路を使っています。「必要は発明の母」と言いますが、世の中にたくさん売れる商品の開発はどんどん進みます。高度なアニメーションを瞬時に計算して面白いゲームを提供するGPUの性能は飛躍的に上がりました。そこで、GPUを100個、1,000個つなげた電子回路で、大コンピュータを打ち負かすような化学反応の計算に挑戦する科学者もいます。

なにに、科学の発展のために、今からテレビゲームをしますって？それは関係がないんじゃないかな？

4. 衝突する原子と分子

水は、氷 (固体)、水 (液体)、そして水蒸気 (気体) とその姿を変えますね。固体は、分子がカチンコチンに固まっていて自由に動けない状態です。液体では、分子が満員電車のように詰め込まれて押し合いへし合いしています。気体では、分子が自由に飛び回り、時々ぶつかっています。化学反応を研究するのに最も適しているのは気体の状態です。なぜなら、反応する原子や分子だけに注目することができ、周りからぶつかってくる分子を考える必要がないからです。そう考えた科学者は、分子を真空の中に飛ばして、他の原子や分子と衝突させて反応を詳しく調べる実験研究 (交差分子線実験) を始めました。1950年代のことです。

でも、考えてみてください。あなたが野球のボールを1個投げて、友達が別のボールを1個投げたとして、空中でうまく当たると思いませんか？不可能ではないですが、難しいですね。1,000個のボールを一度に投げて、友達も1,000個のボールを一度に投げたら？少しは当たるかもしれません。あなたが10万個、友達が10万個のボールを一度に投げたら、もっと当たるけれど、今度は1個のボールが幾つものボールとぶつかるようになって、何が何だか分からなくなりますよね。だから、あまりにもたくさんのボールを一度に投げるわけにもいきません。同じように、真空の中で分子をぶつける実験は、当たるか当たらないかの、ぎりぎりの条件で行わなければならないのです。

でも、ぶつけたら何が分かるのでしょうか？野球やソフトボールをした時に、もしもキャッチャーフライが上がったら、ボールとバットがどんなふうに当たったと思いませんか？ボールの下側をバットがたたいたはずですね。ボーリングをした時に10本全部ピンが倒れたら？少なくとも一番手前の1番ピンのあたりにボールが当たったはずですよ。このように、ぶつかった瞬間の様子が直接見られなくても、その後に起こった様子を見ることで何が起こったのかを推測できます。原子や分子は非常に小さく、かつ高速に動いているので、それらがぶつかる様子を直接見ることは困難ですが、化学反応の後にできた原子や分子がどの方向にどのくらいの速さで飛んでいくかを測ることは可能です。その情報から、化学反応の仕組みを解き明かすことができます。事故や事件を調べる刑事は、現場に残された証拠品などから犯人を推理しますが、科学の研究も似ています。(どちらの場合にも、結論するためには決定的な証拠が必要です。)

では、水素分子 (H_2) とフッ素原子 (F) をぶつけて反応させ、反応でできたフッ化水素分子 (HF) が飛び出て行く方向を測定してみましょう。その結果を示したのが図10です。この図の真ん中で、右下から飛んできた H_2 と左上から飛んできた F が衝突していますが、HF は F 原子が飛んできた方向を逆向きに進むように左上に跳ね返されています。F 原子の進んできた方向に沿って飛んでいく HF 分

子はありません。このことから、この化学反応の山の峠（遷移状態）では、F-H-Hの3つの原子がほぼ一列になっていると推測できます。なぜなら、そうでない限り、フッ化水素分子が100%はね返るということはないからです。

今度は、エチレン分子(C_2H_4)に酸素原子(O)がぶつかって、 CH_3 と CHO という分子ができる反応を調べてみると、(その結果はお見せしませんが) CH_3 と CHO があらゆる方向に飛び出ていることが分かります。この結果は、酸素原子とエチレン分子が長い時間くっついて、ぐるぐる回ってから CH_3 と CHO に分かれることを意味しています。どの方向からぶつかったかという記憶がなくなるのです。したがって、この反応の地図には、今までお話ししたような化学反応の峠とは逆の深くのぼみがあるはずです。実際に、エチレンと酸素原子の化学反応では、化学結合が入れ替わって、化学的に安定なアセトアルデヒド(CH_3CHO)という分子が一瞬できて、ぐるぐると回転し、それがまた壊れて CH_3 と CHO ができます。

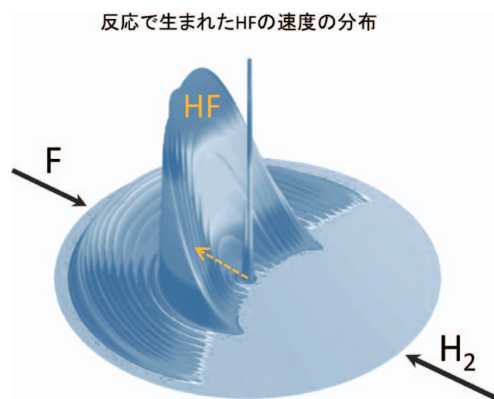


図 10. $F + H_2 \rightarrow FH + H$ の反応で生成する HF 分子が飛ぶ方向、速度、量を表した図。画面の中央で F と H_2 が衝突して反応すると、F は H 原子を受け取った後、後ろにはね返っていきます。[出典 X. Yang and D. H. Zhang, *Accounts of Chemical Research*, **41**, 981 (2008)]

このように、交差分子線実験は化学反応に関する詳しい情報を与えてくれます。この実験技術が初めて発表されたのは 1956 年ですが、当時の実験は本当に大変でした。真空中で飛び散る原子や分子を敏感に観測する方法がなかったからです。こうした実験がある程度うまくいくようになったのは 1969 年頃です。1969 年と言えば、アメリカのアポロ 11 号が月への着陸に成功した年です。月面に最初の一步を踏み出したアームストロング船長は、「一人の人間にとっては小さな一歩だが、人類にとっては大きな飛躍である」と言いました。当時は、科学者が原子や分子を衝突させたり、コンピュータで分子の中の電子の波を正確に計算できなかったのですが、それでも人類は巨大なロケットを打ち上げて月まで行けたのです。宇宙開発は軍隊に関する技術(軍事技術)とも関係していたので、アメリカがたくさんのお金と人を注ぎ込んだこともアポロ計画の成功につながった大きな理由でしょう。それにしても驚くべき技術の

成果です。私も子供ながら、テレビでアポロを見て「すごいな」と思いましたし、世界中の人々が感動しました。科学は、人々が気がつかないような基礎的で本質的な問題を研究して新しい教科書を作っていく作業です。一方、技術は、科学の成果を使って人間の可能性を上げ、人々の暮らしを楽しく豊かにする作業です。科学と技術は深く関わって合っていて、どちらも大切です。

時代は進み、1981 年からアメリカが開発に取り組んだスペースシャトルという宇宙船を知っていますか？飛行機のような形をしていて、宇宙に出て行くときはブースターロケットで打ち上げられ、帰りはグライダーのように飛んで地上に戻ってくる宇宙船です。スペースシャトルは地上から 300 km の高度を飛行しましたが、その時に宇宙船が緑色に光る現象が見つかりました。その原因は始めは分かりませんでした。宇宙船の緑色の光を良く調べた結果、これは宇宙船の表面にくっついた一酸化窒素(NO)分子が酸素原子と反応してつくる二酸化窒素(NO_2)分子が出す光だということが分かりました。300 km の高度の大気はほとんど酸素原子になっていますが、その中を宇宙船が高速(時速 28,000 km)に飛ぶと、すごい速さで酸素原子と宇宙船が衝突します。そのため、酸素原子と宇宙船の表面の物質が反応するのです。

宇宙船が光るだけならよいかもしれませんが、人間を乗せて安全に宇宙船を飛行させるためには、宇宙船の大事な部品が酸素原子と反応して壊れないかどうか調べる必要があります。そこで、宇宙空間に材料をむき出しにして、どのくらい壊れるかが測定されました。1990 年代に入ると、地上の実験室でも高速の酸素原子を作ることが可能になり、真空装置の中で材料に当てる実験が始まりました。こうした実験には、交差分子線実験の技術が応用されています。今日でも、エネルギーの高い原子や分子の反応の計算は非常に難しいため、主に実験によって研究が進められています。

5. 光のエネルギーを捨てる分子

屋外に貼られたポスターの色はだんだん薄くなっていきますね。これは、ポスターに使われている色素分子が太陽の光を受けて徐々に壊れていくからです。こうした光によって起こる化学反応を、光化学反応と呼びます。

私たちが目で物を見る場合は、目の奥にある網膜の中のかん体細胞やすい体細胞の中にある、レチナール分子が光を吸収して高速に分子の形を変えます。その変化がきっかけになって、電気信号が神経を通して脳に届いて、「あ、光が来たぞ」とわかるのです。一方、紫外線を受けた皮膚の細胞の中の遺伝子の場合は、光化学反応で分子が壊れたり変形しては困ります。遺伝情報が壊れてしまうからです。そうならないために、できるだけ速くエネルギーを逃がす必要があります。光を受けて高速に分子の形を変えたい場

合もあれば、全く変えたくない場合もあるのです。

花の色の所でお話したように、分子が光を吸うと、電子がエネルギーの高い階に上がると共に、電子の波の形が変わります。電子の波が変わると、原子核を動かします。図 11 のレチナール分子が光を吸収してできる電子の波は、図中のピンクに染めた部分の化学結合をねじる強い力を与えるため、光を吸収すると高速に分子がねじれるのです。

生物の遺伝子 (DNA: デオキシリボ核酸) は、アデニン、チミン、グアニン、シトシンと呼ばれる共通の分子 (核酸塩基) を部品に使っています (図 12)。これらの分子も光を吸うと変形し始めるのですが、ある特別な仕組みで、光化学反応が起こりにくくなっています。これらの分子の中心部分は平らなのですが、光を吸収すると変形して平面ではなくなり、この変形が電子の滞在しているホテルの構造をゆがめて、上の階に上がった電子をすべり台のように下の階に戻す役割を果たすのです。すると、電子の波が光を吸う前の状態に戻るのです。ただし、たとえ電子の波が戻っても、光のエネルギーを吸ってしまったので、その分のエネルギーは余っています。このエネルギーは分子がぶるぶる振動するエネルギーになります。これは熱のことです。この熱は遺伝子の他の部分に伝えたり、遺伝子から外の分子に逃がして捨てられます。私たちが熱い物を指でさわった時には、やけどしないように直ぐに水で冷やしますよね。これは指の表面に接した水の分子に熱エネルギーを

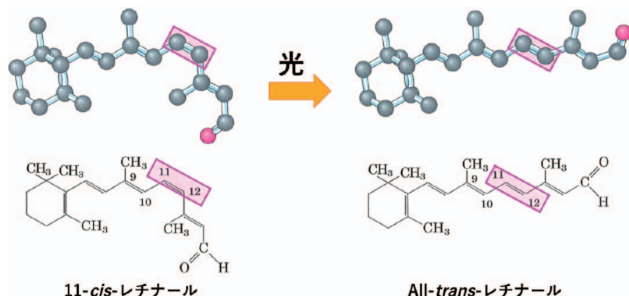


図 11. 11-*cis*-レチナールが光を吸収すると、分子の特定の場所で高速に折れ曲がります。[出典 Lehninger, Principles of Biochemistry 5th edition (2008)]

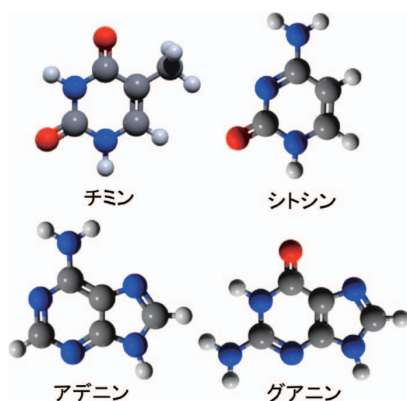


図 12. DNA の部品になっている核酸塩基の構造。赤が酸素原子、青がチッ素原子、灰色が炭素原子、白が水素原子をあらわしています。原子が 6 個つらなって輪になっている部分が、光を吸うと変形します。

移して、指の温度を下げるためです。分子も同じことです。「ひゃー、熱い。すぐに冷たい所に熱を逃がさなくちゃ。」という感じです。もしも分子が全く何とも接していないなら、余った熱のエネルギーで分子はやがて壊れてしまうでしょう。

これらの分子が光を吸収した後でエネルギーを熱に変えるのは、だいたい 10 兆分の 1 秒程度の時間です。こんなに速い変化を実験で観測することはできるのでしょうか？はい、レーザーを使えばできます。スーパーやコンビニで会計をする時に、レジで赤い光の出る機械を使っているのを見たことがありますか？あの機械は、レーザーの光を使って品物のラベルに付いている、しましまの模様 (バーコード) を読んで、瞬時に値段を調べる機械です。あのレーザーの大親分のようなもっと大がかりなレーザー (超高速レーザー) を使えば、分子の電子の波の変化を調べることができるのです。超高速レーザーは、10 兆分の 1 秒以下の時間だけ光ります。この光を使って、超高速な電子の変化をスローモーション撮影することができます。

ところで、私の話の最初の方で、象のゲンシ君とカク君がハチよりもずっと動きが遅いから、まずハチの動きを考えようと言いましたね。ところが、光を吸った分子が高速に反応する場合には、ゲンシ・カクの動きが速くてハチの動きに影響してしまうような場面が、ほとんど必ず出てきます。「僕たちだって、のろのろしているわけじゃないぞ。無視するな！」というわけです。こういう電子の動きと原子核の動きを分けられない状況では、化学反応があっちに進んだり、こっちに進んだりするのでとても面白い研究テーマになります。レチナールの問題も、核酸塩基の問題もゲンシ・カクの動きとハチの動きを同時に考える必要があります。

光を積極的に吸収し、かつそのエネルギーを効果的に逃がす機能を持つ分子が皆さんの身近にありますよ。日焼け止めです。日焼け止めの中には、鉱物に由来する成分を持つ物もありますが、多くは核酸塩基と同じような構造と電子の波を持った分子です。日焼け止めは赤や青の色はついていませんね。(そんな日焼け止めなら売れません。) 目に見える光をほとんど吸収せず、紫外線^{注3}を吸収し、そのエネルギーを逃がす役割を果たしています。太陽光の中で有害なのは、紫外線ですが、紫外線 (UV-A) は曇りの日でも晴れの日と比べてそれほど弱くなりません。また、肌が日

注3 紫外線は ultraviolet radiation という英語に対応しています。Ultraviolet (ウルトラバイオレット) は、光のスペクトル (虹) の violet (バイオレット) の外側にあるよという意味です。ただし、日本語の紫はふつう赤と青が混じった赤紫色をさして、その色は英語では purple (パープル) と言います。violet はむしろ深い青紫色で、すみれ色と訳している場合もあります。国語辞典や理化学辞典を見ていただくと、「紫外線は、波長が 1 から 400 ナノメートル程度の電磁波で目には見えない」と書いてあります。これが正確な紫外線の説明です。

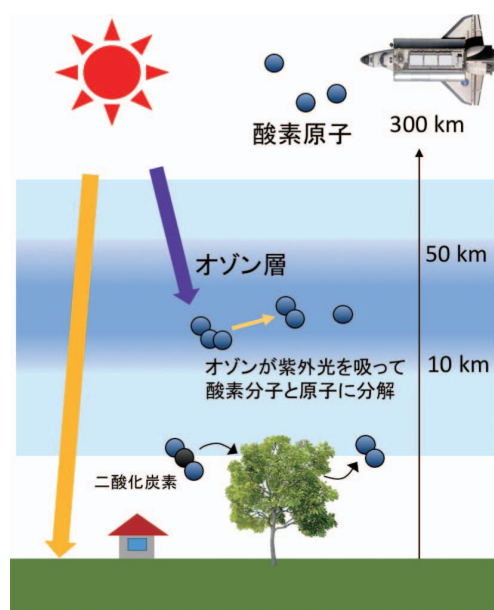


図 13. オゾンは生物に有害な紫外線の大部分を吸収して分解しますが、常に補充されています。オゾン層を破壊すると、生物に大きな影響があります。

焼けしても紫外線を防御する効果は小さいことが知られています。子供達は元気に外で遊んだ方が良くに決まっていますが、体を守るためには、紫外線が強い場合は当たすぎないようにしなければなりません。ですから、日焼け止めは必要なのです。

太陽光の中には、地上の生物の細胞を破壊するような有害な紫外線 (UV-B や UV-C) が含まれていますが、その大部分は地上から 30 キロメートル程度上空にあるオゾン層によって吸収されています^{注 4}(図 13)。オゾン (O_3) は酸素原子 3 つからできた分子で、紫外線を吸収すると分解しますが、オゾンを作る化学反応によって常に補充^{ほじゅう}されています。そのため、成層圏には常に一定量のオゾンが保たれている (はずでした)。ところが、オゾン濃度が大幅に減少する危機が訪れました。冷蔵庫やクーラーにも使われていた、フロン (またはフレオン) という分子のためです。フロンは、例えばメタン (CH_4) という分子の水素原子 (H) を塩素 (Cl) やフッ素 (F) などの原子に置き換えたものです。これらの分子は壊れにくく、人間にも直接害がないので工業的にたくさん利用されました。でも逆に、これらの分子は壊れにくいので、一度地上で放出されるとオゾン層まで上昇し、オゾン層で紫外線を受けて分解し塩素原子などを放出します。この塩素原子がオゾンを破壊したり、再生を妨害したりしました。こうした現象は主に南極の上空で観測されたのですが、放置していれば全世界に広がる危険が

注 4 UV-A, UV-B, UV-C は、それぞれ波長 400 から 315, 315 から 280, そして 280 ナノメートル以下の紫外線を指しています。UV-A は皮膚の内側の組織をゆっくと壊し、肌のしわの原因になると言われています。UV-B は肌が赤くなる炎症を起こしたり、細胞や DNA を傷つける作用があります。UV-C は細胞を傷つける効果が最も大きな紫外線です。

ありました。オゾン層が破壊されてしまったら、人間を含めた全ての生物の遺伝子が紫外線によって壊される深刻な問題が起きます。そこで、国際会議で真剣な議論が行われて、フロンの使用量を減らしていく約束がなされたのです。

花嫁さんがウエディングドレスを着た時に頭にかけている薄い布をウエディングベールと言いますね。とても美しく神秘的です。宇宙から見ると、オゾン層はまさに地球のベールです。山に登ると息が苦しくなる体験をしたことがあると思いますが、それは高い所になるほど空気が薄くなる (圧力が低くなる) からです。オゾン層は地上から遠く離れた圧力が低い空気の層にあるために、何十キロメートルもの厚みを持っていますが、もしも地上と同じ圧力 (1 気圧) にしたら、わずか 3 ミリメートルほどの厚みにしかありません。それほどオゾンの量は少ないのです。こんなに薄いベールが地球上の生命を守る盾の役割をしているのです。

大気や川や海に捨てられた化学物質は、私たちの目の前からなくなっても、地球環境がそのゴミ処理をしています。フロンガスの使用を止めても、直ちに次の日から環境が良くなるわけではありません。地球全体の大きな営みの中では何十年もかかるのです。化学物質なしには現代社会は成り立ちませんが、全ての生き物のためにも環境を守ることが常に心がけましょう。宇宙船地球号は、みんなのものです。

6. ばらばらになっていく流れと化学反応

水は常に高いところから低いところに流れます。これはエネルギーが低くなる方向に変化するからです。一方、水にインクをたらすと、かき回さなくてもやがて全体に色が付きますが、これはどうしてでしょう。もちろん原因の一つは、水分子がインク分子の集団にぶつかって行って、スクラムを組んでいるインク分子の集団からインク分子を 1 個 1 個水の中に連れ出していくからです。でも、もう一つの大事な原因は、インク分子だけが集まっている状態は、インク分子が水分子と混じった状態よりも、起こりにくからです。

例えば、黒玉 3 個と白玉 2 個を横一列に並べるとします。(ただし同じ色の玉は区別しないものとしましょう。) 黒玉がかならず 3 個隣り合うように並べる方法は 3 通りです (図 14)。でも、全部適当に並べれば、並べ方は 10 通りあります。玉の数を増やして考えると、黒玉が全部隣り合うような並べ方は、より一層起こりにくくなります。ばらばらになった状態の方が、整頓^{せいとん}された状態よりも常に起こりやすいのです。そのため、整頓された状態は、ばらけた状態に変化していきます。この変化はエネルギーが低くなる変化と同じではありません。そこで、ばらけ具合を表す目安を「エントロピー」と呼びます。インクが水全体に広がるのは、「エントロピーが大きくなる」という自然の法則に

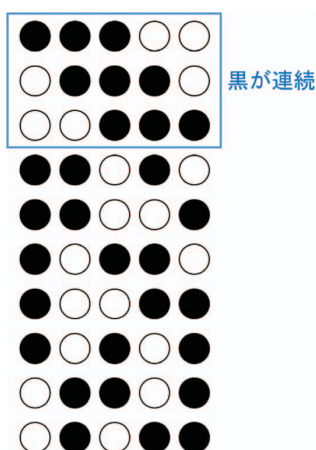


図 14. 3 個の黒玉と 2 個の白玉を並べるやり方。3 個の黒玉が全部集まる方が珍しいことがわかります。

したがっています。(私の娘達の部屋も、エントロピーが大きくなる方向に、どんどん散らかっていきます。困ったものです。) ですから、化学反応はエネルギーが低くなる方向へ、そしてエントロピーが大きくなる方向へ進みやすいのです。

分子の中には、たくさんの原子核と電子があり、お互いに反発したり引き合ったりしていることをお話ししました。その中の電子や原子核を選んでエネルギーを集中させることで、原子と原子の結合を自由自在に切ることに挑戦した研究者が数多くいました。しかし、エネルギーは直ぐに他の電子や原子核の運動に移ってしまい、なかなかうまくいきませんでした。ケーキにナイフを入れるように分子を切りたいのに、ケーキ全体を揺さぶって崩してしまったのです。エネルギーは、ほんの短い時間しか一部の電子や原子に集中させることは難しく、直ぐに分子の中に平等に分けられます。

化学の研究における重要な目標の一つは、今も昔も変わりません。化学反応を自在に操ることです。フラスコや試験管の中の化学反応では、お鍋で肉や野菜を熱しているように、全ての材料に熱が伝わりますから、エネルギーの集中は困難です。こうした中でも、化学反応を操る方法として、例えば分子の形の違いを使う方法があります。私があ

なたと握手をするときに、私が右手を出したら、あなたは右手を出すのが最も自然で握手がしやすいですね。左手でもできなくはないかもしれませんが、大変です。ですから、分子の形を選んでおけば、反応する相手が定まる可能性があります。生命は、エネルギーやエントロピーのわずかな大小や、非常に良く工夫された分子の構造を利用して化学反応をうまく動かしています。こうして私たちは生きています。

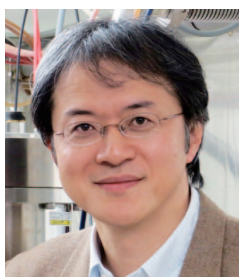
7. さいごに

ばらばらになる性質を持つ世界は、ゆっくりと崩れていく砂山のようなものです。そんな中で、皆さんがなんとなく眺めている草花、自然、そして鏡の中の皆さん自身が力強く、たくましく、輝いて生きていることに是非気がつくください。そして、また明日もいっそう元気よく、(オゾン層を通ってきた) 日の光の下で遊んだり、スポーツをしたり、あるいは勉強したりしていきましょう。

ちょっとくらい失敗してもめげてはいけません。私たち科学者は失敗のプロです。新しいことや難しいことに挑戦すれば、失敗するのは当たり前です。失敗を恐れていたなら科学は進歩しません。さすがに 5 年や 10 年うまくいかないとししょんぼりしますが、それでもあきらめずにちょっとずつ改良して前進していきます。学校の勉強では難しい知識や式を覚えたりすることもあるでしょう。でも科学の本を見たときに本当に知って欲しいことは、そういうことではありません。自然の美しさや、ひとつひとつの問題をあきらめずに解決してきた人達の素晴らしい頑張りです。皆さんにも、そういう力があるのです。私たちの失敗も皆さんがきっと成功に変えることができるでしょう。私たちは皆さんのこれからにおおいに期待しています。

The author thanks Luisa Howard, Dartmouth E. M. Facility, Dartmouth College for kind permission for the use of the electron microscope image.

(受理日 2016 年 2 月 15 日)



鈴木 俊法 (すずき としのり)

所属：京都大学大学院理学研究科化学専攻

専門分野：化学反応実験

連絡先：〒 606-8502 京都市左京区北白川追分町

電子メール：suzuki@kuchem.kyoto-u.ac.jp