

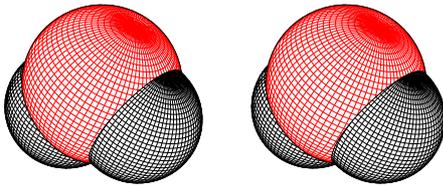
分子の気持になって考えよう

基本的な分子, ステレオ図に慣れる

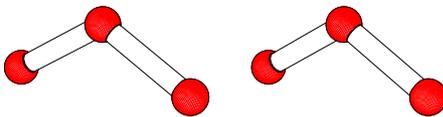
まずは目の訓練を兼ねて, 基本的な分子の三次元構造を見てみましょう。

以下には分子の図が二つずつなっています。ほとんど同じなのですが, よく見ると少し向きが違います。右の図を右目で, 左の図を左目で見ると, 分子が立体的に見えてきます。さあチャレンジしてみましょう。

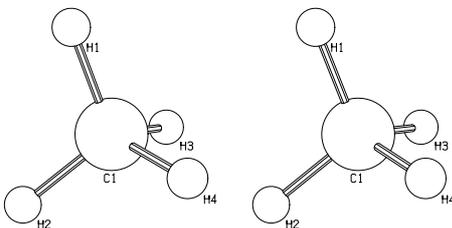
水 (H_2O)



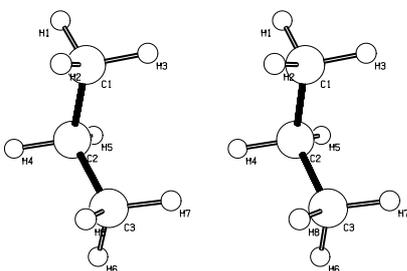
オゾン (O_3)



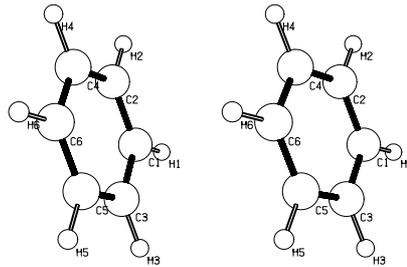
メタン (CH_4)



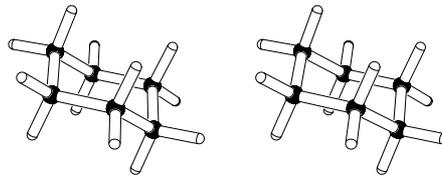
プロパン (C_3H_8)



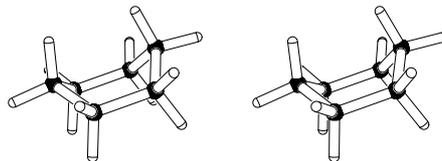
ベンゼン (C_6H_6)



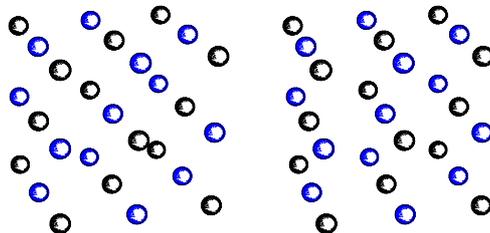
シクロヘキサン (C_6H_{12}), イス型



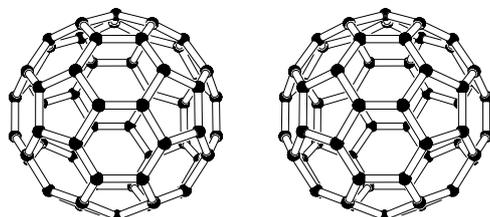
シクロヘキサン (C_6H_{12}), フネ型



食塩 (NaCl)



フラーレン (C_{60})



分子の気持になって考えよう

原子・イオン・分子の大きさに関連して、以下のような値が知られています。

(理科年表を一部改変)

表 1 金属原子の有効半径 (単位, Å or 0.1 nm).

原子	半径												
Li	1.57	Mg	1.60	La	1.88	Mn	1.37	Cu	1.28	Zn	1.37	Al	1.43
Na	1.91	Ca	1.97	Cr	1.29	Fe	1.26	Ag	1.44	Hg	1.55	Pt	1.39
K	2.35	Sr	2.15	Mo	1.40	Co	1.25	Au	1.44	Sn	1.58	Pd	1.37
		Ba	2.24	W	1.41	Ni	1.25			Pb	1.75		

表 2 イオン半径 (6 配位の場合, *1: 4 配位) (単位, Å or 0.1 nm).

イオン	半径	イオン	半径	イオン	半径	イオン	半径	イオン	半径	イオン	半径
Li ⁺	0.90	La ³⁺	1.17	Fe ³⁺ *1	0.69	Zn ²⁺	0.88	B ³⁺	0.25 *1	O ²⁻	1.28
Na ⁺	1.16	Ti ⁴⁺	0.75	Fe ²⁺ *1	0.75	Hg ²⁺	1.16	Al ³⁺	0.68	S ²⁻	1.70
K ⁺	1.52	Cr ³⁺	0.76	Co ²⁺	0.89	Sn ⁴⁺	0.83	Si ⁴⁺	0.40 *1	Cl ⁻	1.67
Mg ²⁺	0.86	Mn ³⁺	0.79	Ni ²⁺	0.83	Pb ²⁺	1.33	P ⁵⁺	0.31 *1	Br ⁻	1.82
Ca ²⁺	1.14	Mn ²⁺	0.97	Cu ²⁺	0.87					I ⁻	2.06
Ba ²⁺	1.49										

表 3 原子のファン・デル・ワールズ半径 (単位, Å or 0.1 nm).

原子	半径	原子	半径	原子	半径	原子	半径	原子	半径
H	1.2							He	1.50
		N	1.5	O	1.40	F	1.35	Ne	1.59
		P	1.9	S	1.85	Cl	1.80	Ar	1.91
		As	2.0	Se	2.20	Br	1.95	Kr	2.01
		Sb	2.2	Te	2.20	I	2.15	Xe	2.20
CH ₃ -基	2.0							芳香族分子の厚さの半分	1.70

表 4 共有結合の原子間隔 (単位, Å or 0.1 nm).

結合	分子	原子間隔	結合	分子	原子間隔	結合	分子	原子間隔
H-H	H ₂	0.741	S-O	SO ₂	1.431	C [⋯] C	C ₆ H ₆	1.399
O-O	O ₂	1.207	S-S	S ₂	1.889	C-H	C ₂ H ₆	1.094
O-H	H ₂ O, CH ₃ OH	0.957	Cl-Cl	Cl ₂	1.988	C-Cl	C ₂ H ₅ Cl	1.788
N-N	N ₂	1.098	Br-Br	Br ₂	2.281	Si-Si	ケイ素結晶	2.352
N-H	NH ₃	1.012	I-I	I ₂	2.6663	Si-H	SiH ₄	1.4798
N-O	NO ₂	1.193	C-C	C ₂ H ₆	1.5351	Si-O	SiO	1.510
N=O	NO	1.151	C=C	C ₂ H ₄	1.339			
S-H	H ₂ S	1.3356	C≡C	C ₂ H ₂	1.203			

表 5 分子内における原子価角

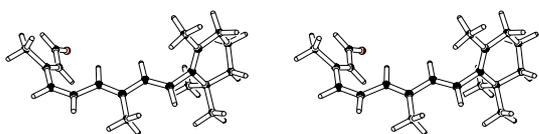
分子	原子結合	原子価角	分子	原子結合	原子価角
H ₂ O	H-O-H	104.5	C ₂ H ₂	C-C-H	180
CO ₂	O-C-O	180	C ₆ H ₆	C-C-C	120
H ₂ S	H-S-H	92.2	CH ₄	H-C-H	109.5
NH ₃	H-N-H	106.7	C ₃ H ₈	H-C-C	112.4
O ₃	O-O-O	116.8			

分子の気持になって考えよう

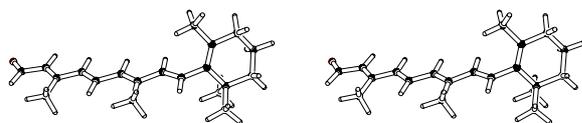
視覚と色の分子

11-シス-レチナール (11-*cis*-retinal)

レチナールは目に存在する分子で、光のエネルギーによって折れ曲がった構造 (シス型) がまっすぐな構造 (トランス型) に変化します。この変化が タンパク質 → 視神経 → 脳 へと伝わり、私たちは光を感じるようになります。



11-トランス-レチナール (11-*trans*-retinal)

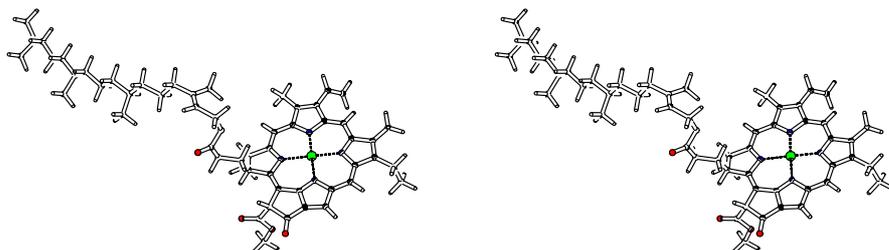


β -カロテン (β -carotene)

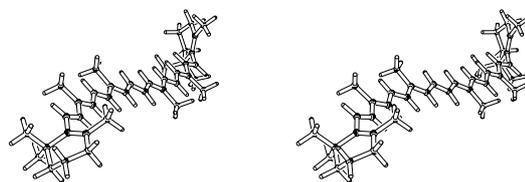
β -カロテン はニンジンの橙色、クロロフィルは葉緑素とも呼ばれ植物の葉の緑色の元です。カロテン類は葉の中にも含まれていて、秋になっ

クロロフィル a (chlorophyll-a)

葉緑素ともいい、マグネシウムイオンを含んだ化合物です。大きな平面型の骨格部分 (下図では右半分の部分) はヘモグロビンやチトクロームの活性中心と共通の構造ですが、そこでは Mg^{2+} の代わりに鉄イオンが入っています。

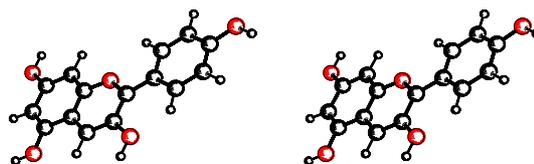


てクロロフィルが減ることで美しい紅葉を示します。



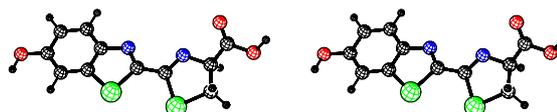
ペラルゴニジン (pelargonidin)

花の色の多くはフラボノイド類という一群の化合物です。ペラルゴニジンはその中でも比較的単純な化合物で、ヤグルマギク・アサガオの紅色花やゼラニウムの赤色の元となり、熟したイチゴの色にも関係しています。



ルシフェリン (luciferin)

ルシフェリンは化学反応 (酸化反応) により発光する化合物で、ホタルの発光の元です。

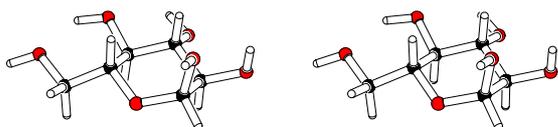


分子の気持になって考えよう

味をきめる分子

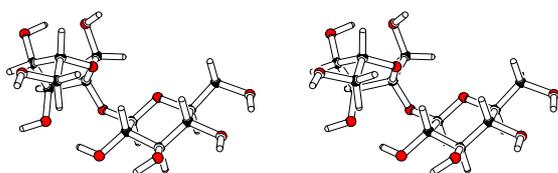
グルコース (glucose)

グルコースは糖類のうちの最も基本的なものです。日常的には甘味料として用いられていませんが、生物の活動エネルギー源として重要です。



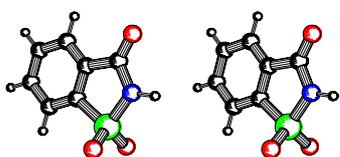
スクロース (sucrose)

スクロースは、普通に食卓で用いる砂糖のことで、グルコースとフルクトースが結合している二糖類です。



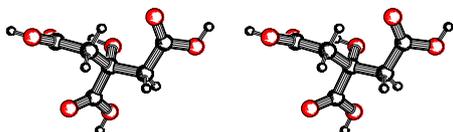
サッカリン (saccharin)

サッカリンは砂糖の約 500 倍の甘味性を持つので、人工の甘味料として用いられています。



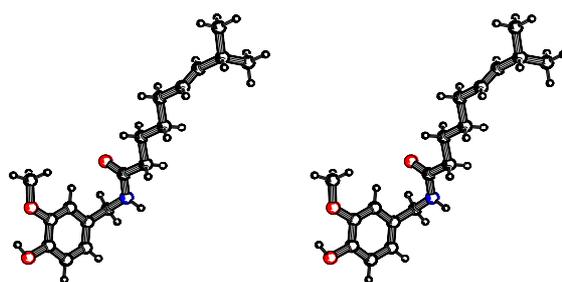
クエン酸 (citric acid)

酸味は文字通り酸 (水素イオン, H^+) のせいですが、柑橘類の酸っぱい味の主な原因はクエン酸です。酸解離するカルボン酸の部位を三つも持っています。



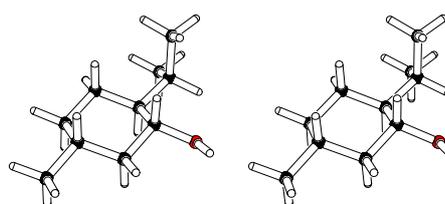
カプサイシン (capsaicin)

トウガラシの辛みの成分がカプサイシンです。カプサイシンは種々の代謝促進効果があるので、機能性の食品添加物やある種の治療薬としての開発も考えられています。



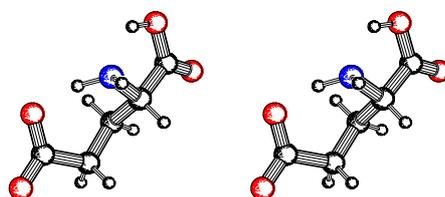
メントール (menthol)

ハッカの清涼感をもたらす成分が、メントールです。ハッカは古くから薬草として用いられてきており、現代でも鎮痛・殺菌剤として使われています。またその他にも、いろいろな食品・化粧品・タバコなどにも用いられています。



グルタミン酸ナトリウム (sodium glutamate)

第五の味“旨味”は、明治期に日本人が昆布のダシ汁からその成分物質を取り出しました。それがグルタミン酸ナトリウムです。下図ではナトリウムイオンは省略しています。

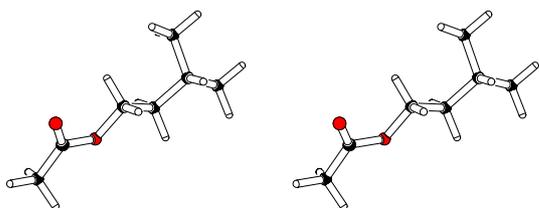


分子の気持になって考えよう

香りの分子

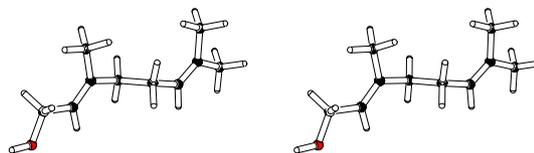
酢酸イソアミル (isoamylacetate)

バナナの香り



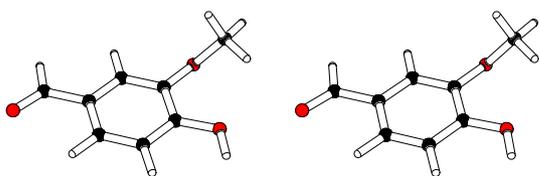
ゲラニオール (geraniol)

薔薇 (バラ, rose)



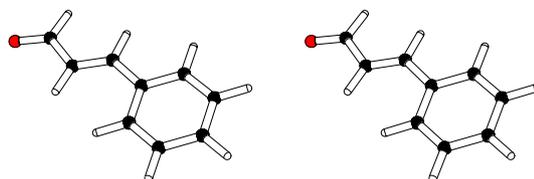
バニリン (vanillin)

バニラ (vanilla)



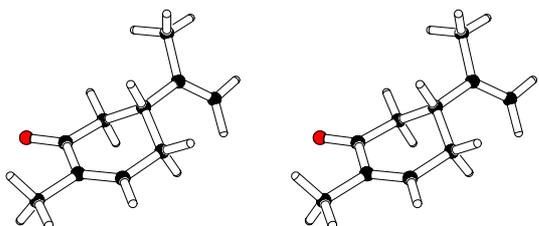
シンナムアルデヒド (cinnamaldehyde)

シナモン (cinnamon), 肉桂



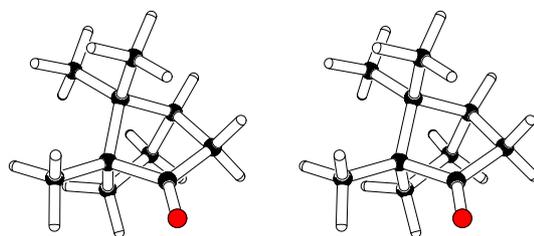
カルボン (carvone)

スペアミント油 (speamint oil)



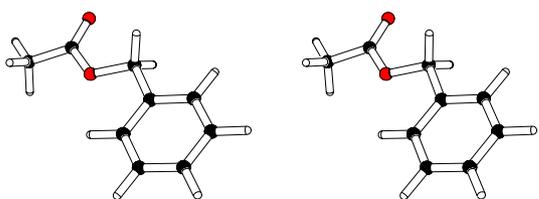
樟脳 (camphor)

カンフル (オランダ語)



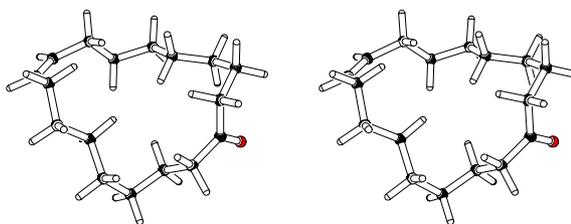
酢酸ベンジル (benzilacetate)

ジャスミン (jasmine)



シベトン (civetone)

ジャコウ (麝香, musk)

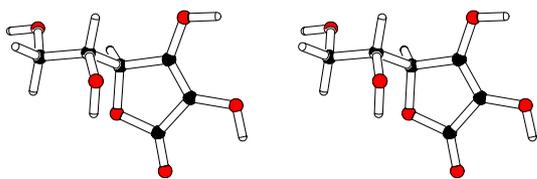


分子の気持になって考えよう

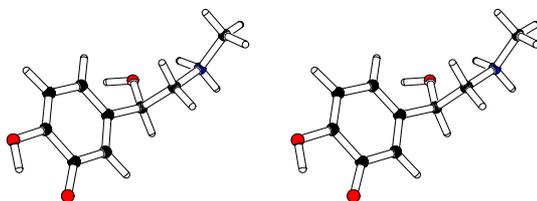
ビタミンとホルモン

ビタミン C (vitamin C)

L-アスコルビン酸 (ascorbic acid)

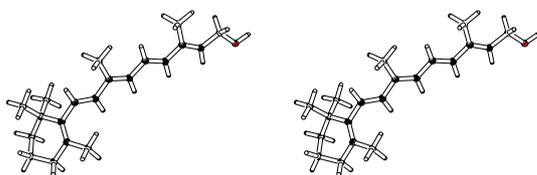


アドレナリン (adrenaline)

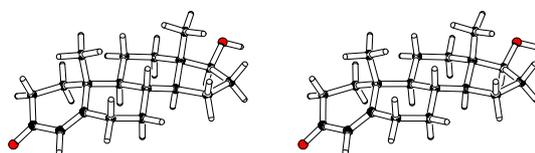


ビタミン A₁

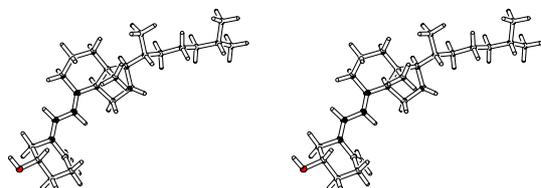
トランスレチノール (trans-retinol)



テストステロン (testosterone)
男性ホルモン

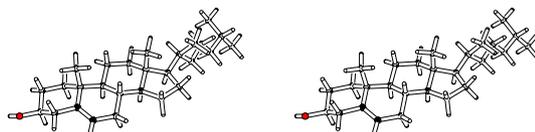


ビタミン D₃



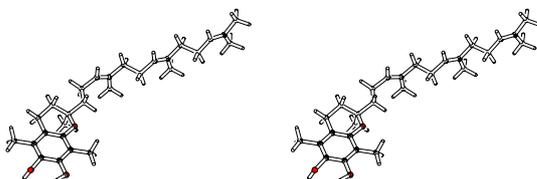
コレステロール (cholesterol)

細胞の常成分で細胞膜などの構成要素。性ホルモン、副腎皮質ホルモン、ビタミン D などの原料。

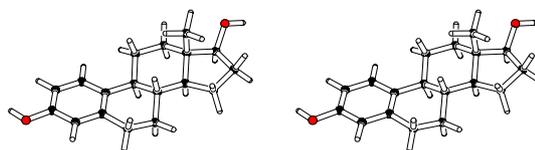


ビタミン E

トコフェロール (tocopherol)



エストラジオール (estradiol)
女性ホルモンのひとつ

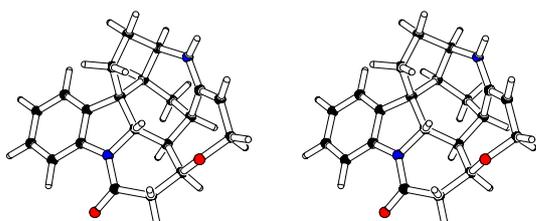


分子の気持になって考えよう

毒と薬

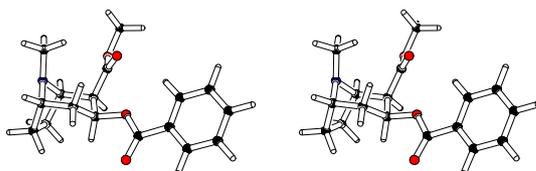
ストリキニーネ (strychnine)

アルカロイドの一種。毒薬。

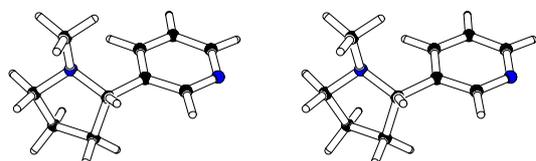


コカイン (cocaine)

中枢神経興奮剤, 局所麻酔剤, 習慣性による麻薬

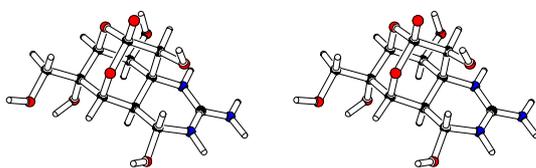


ニコチン (nicotine)



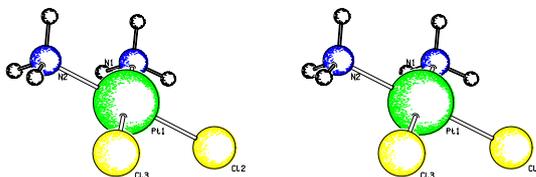
テトロドトキシン (tetrodotoxin)

フグの毒



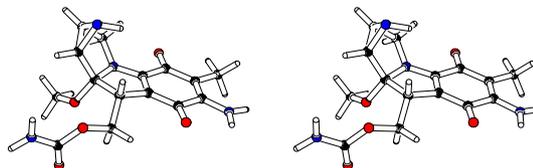
シスプラチン (cisplatin)

白金 (II) 錯体, 制ガン剤



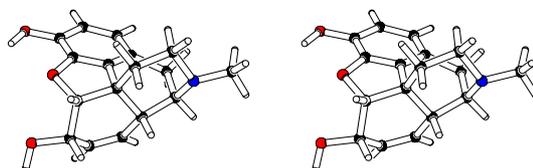
マイトマイシン (mitomycin)

制癌性抗生物質



モルヒネ (morphine)

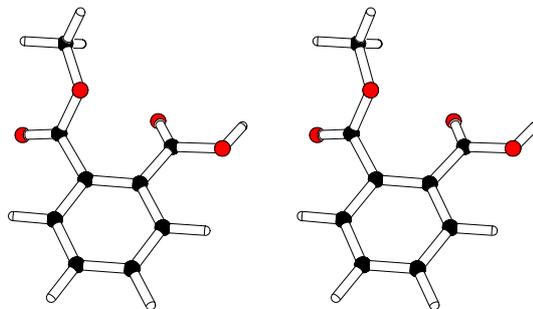
モルフィン。麻薬性鎮痛薬。



アスピリン (aspirin)

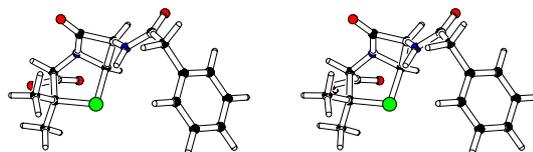
アセチルサリチル酸 (acetylsalicylic acid)。

解熱性鎮痛薬。



ペニシリン G (penicillin G)

ペニシリンは世界で最初に発見された抗生物質です。ベンジル基の代りにいろいろな置換基が導入されたものがあります。

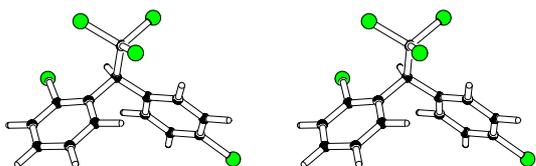


分子の気持になって考えよう

人の生活に役立つ物質の光と影

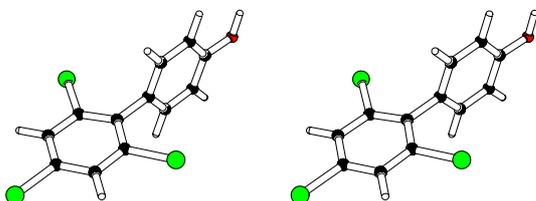
DDT

ジクロロジフェニルトリクロロプロパン。1945年にマラリア蚊の撲滅のために使用されて大成功をおさめ、その後も殺虫剤として使用されてきました。しかし現在は使用禁止になっています。



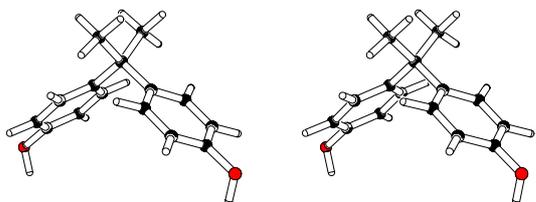
PCB

ポリ塩化ビフェニル類のうちのトリクロロヒドロキシビフェニル。PCBは熱安定性に優れ、電気特性が良いことから、大量に使用されました。しかし環境への残留性が非常に高く、また人体に対する毒性が非常に強いことから、生産と使用が禁止されました。現在でも未処理で残されているPCBの処分方法が大問題です。



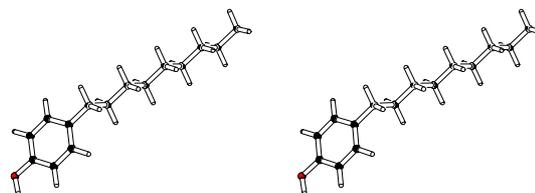
ビスフェノール A (bisphenol A)

2,2-ビス(p-ヒドロキシフェニル)プロパン。ポリカーボネート樹脂やエポキシ樹脂の原料で、電気機器、自動車、建材、食品容器などに広く用いられています。



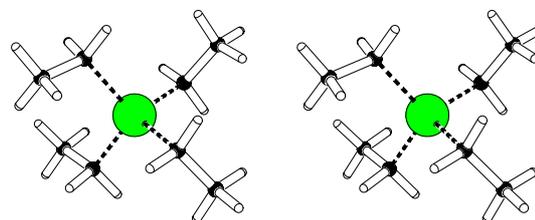
ノニルフェノール (nonylphenol)

溶剤、除草剤、塗料、化粧品などには界面活性剤としてアルキルフェノールポリエトキシレートが広く使用されています。



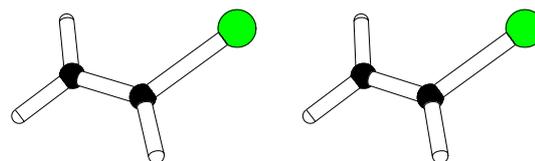
テトラエチル鉛 (tetraethyllead)

かつてはガソリンエンジンのアンチノッキング剤として使われていて、排気ガスとして鉛が大気中に放出されてきました。しかし鉛は毒物で、このことは紀元前300年に既に知られていました。現在では使用されていません。



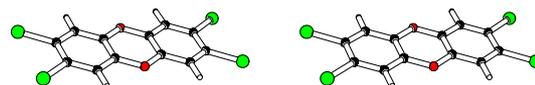
塩化ビニル (vinyl chloride)

塩化ビニルが重合したポリ塩化ビニルは、最もよく使われているプラスチックのひとつです。多くは建材用ですが、クレジットカードなどにも使われています。しかしモノマーの塩化ビニル自体には明確な毒性があります。



ダイオキシン (dioxin)

ポリ塩化ジベンゾダイオキシン類の総称で、ここではテトラクロロジベンゾダイオキシン (tetrachlorodibenzodioxin) の構造を示します。



追記: 環境省の環境ホルモン戦略計画「SPEED'98」で疑われた物質は、化学物質の内分泌かく乱作用に関する今後の対応方針「EXTEND2005」において「疑われる物質のリスト」自身が削除されました。調べた結果、疑いがあるとは言えないと分かったからです。

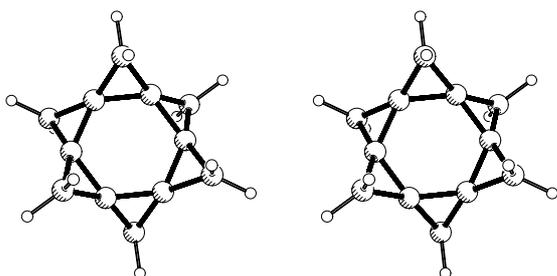
分子の気持になって考えよう

ゆかいな形の分子

特別に有用な機能や性質を持つわけではありません。しかし合成化学の挑戦としては興味深いもので、最近ではナノテクノロジーと称する分野における分子素子の基本要素として考えることもできます。

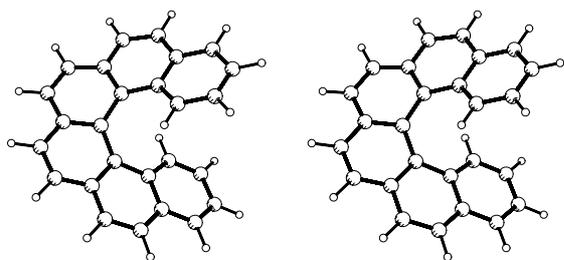
ダビデの星

二つの正三角形を逆向きにして重ねた形の六芒星、ダビデの星ともいうので、ダビダン (davidane) と名付けられています。平面ではなく周囲の三角形が交互に上下に飛び出しています。



らせん

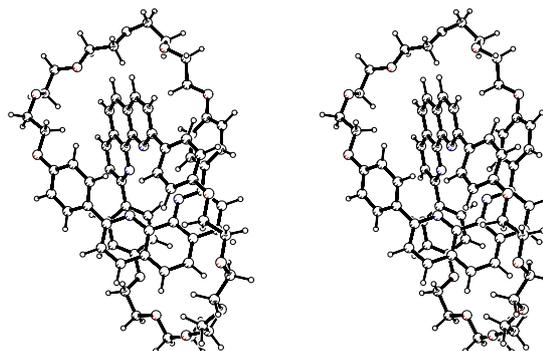
ヘリセン (helicene) という名で、最大三回巻きまで合成されているそうです。右巻きと左巻きの光学異性体があります。



鎖または知恵の輪

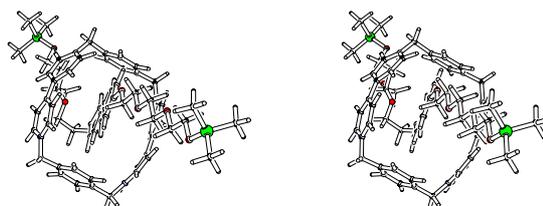
カテナン (catenane) という名で、輪の大きさや鎖の構造などが異なる種々のものがあります。

五個の輪が鎖のようにつながった分子で オリンピアダン (olympiadane) というものも合成されています。



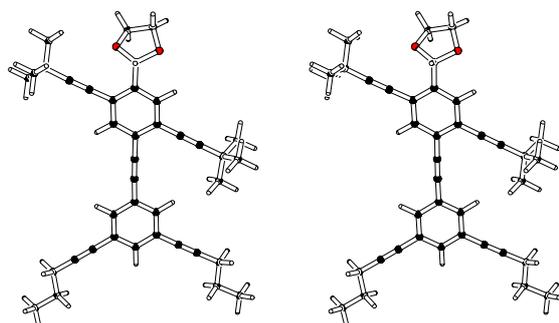
車輪と軸

ロタキサン (rotaxane) という名で、輪の大きさや鎖の構造などが異なる種々のものがあります。中を通っている軸を長くして、途中で止まるような構造をつくと、分子シャトルができます。



ナノの世界の小人

ナノキッド (nanokid) が片手をあげて挨拶しています。頭の酸素原子二つを元素記号 O で書くと



分子の気持になって考えよう

化学: レポート課題

- しめきりは, 七月末
- 提出先は, 担任へ
- 数値を求める場合には有効数字を四桁と見なしなさい。
- 答えとしての数値だけではなくて, その導出の過程も詳しく書きなさい。

課題 1

身の回りの日用品・医薬品・食品などから, そこに含まれている成分の一つとしての化合物を選んでください。ただしそれは水・グルコース以外のものとし, また他人と異なる独自のものが望ましいです。選んだ化合物を構成している分子を, 以下では, あなたの分子と呼びます。

1. あなたの分子の名前, 化学式, 構造式を書きなさい。また分子量はいくつですか?
2. あなたの分子の大きさはどのくらいですか? あなたの分子をあなたの身長のおんだけ並べるとすると, いくつ並びますか?
3. 上で得られた分子の集団の質量 (単位: g) はいくらですか? あなたの体重の何分の一でしょうか?
4. この分子集団の物質質量 (単位: mol) はどのくらいになりますか?
5. 一滴の水 (0.05 ml) の中に, この分子集団が溶けているとします。この時の水溶液 (密度は 1.0 g/cm^3 とする) の濃度を, 重量パーセント濃度・質量モル濃度・体積モル濃度の単位で表わすと, それぞれどのくらいになりますか?

課題 2

コーヒー 100 ml あたりのカフェイン (組成式 $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2$) の含有量は 50 mg 程度だそうです。そしてカフェインの毒性について, 経口摂取の場合の半数致死量 (LD_{50}) がメスのウサギに対して 224 mg/kg であると報告されています。

1. カフェイン分子の分子量はいくつですか?
2. カップ (容量 180 ml) に 1 杯のコーヒーに含まれるカフェインの質量はどのくらいですか, また物質質量はどのくらいですか?
3. コーヒーの密度が 1.0 g/cm^3 であるとします。カフェインの濃度を, 質量パーセント濃度・体積モル濃度・質量モル濃度で表わすと, それぞれどのくらいになりますか?
4. あなたがコーヒーをカップ 2 杯飲んだとします。ウサギの値がそのままヒトに適用できるとすると, LD_{50} の何パーセントの量を摂取したことになるのでしょうか?