

9. 物質の性質を占う分子人相学

原子やイオンはみな丸顔ですが、原子が相互作用するときにはエネルギー的な安定化を伴って原子は結合します。その結合様式の違いにより分子はテトラポットのように棘々の顔になったり平板なタイルのような顔になります。しかし、原子やイオンは $0.1 \sim 0.2 \text{ nm}$ ($1 \sim 2 \times 10^{-10} \text{ m}$) の半径の球に過ぎませんから、いずれも極めて小さなものです。原子やイオンほどでは有りませんが、多くの分子もこれらの原子が集合した物ですからその大きさは大きな物でも 10 nm ($1 \times 10^{-8} \text{ m}$) ほどしかありません。そのような分子ですから 1 個の分子の持つ性質は微々たるものに過ぎません。19 世紀の化学者 Avogadro は日常生活を支えている多くの物質が分子の極めて多く集合した物という考えをまとめました。物質は分子がある秩序を持って集合して形作られていますから、当然その微々たる性質が総合した性質を示しますが、さらにその集合の仕方により物質の性質は大きく影響されると思われます。

分子はそれぞれ固有のエネルギーを持って運動していますが、これらの分子も集合する時には互いに接近しますから相互作用するようになります。分子と分子が接近しますと van der Waals 力などの分子間力と呼ばれる弱い引力が相互に働きます。分子間力は分子と分子の間の距離に反比例して変化しますから、分子同士が遠く離れている時には無視できるほどに小さな分子間力しか働きませんが、分子の密度が高くなると、分子の間の距離が小さくなるため分子間力が大きくなります。分子が隙間なく集合して規則的に並びますと分子間力は最も大きくなりエンタルピー的に安定化します。また、分子は個々に運動エネルギーを持って動き回りますが、分子を集合させて物質を構成するためにはエントロピー的には大きなエネルギーを要します。低温では運動エネルギーが小さく、温度が高くなるに従って分子の運動エネルギーが大きくなり動きが活発になりますから、分子同士は離れてゆき分子間力は小さくなります。

物質には固体、液体、気体の 3 態があり、分子同士の間で相互に働く分子間力と、分子が持つ運動エネルギーの大きさの大小と、秩序を持って分子の集合するために要するエントロピーの 3 種のエネルギーが釣り合って物質の状態は決まってきます。しかも、運動エネルギーは温度により変化しますし、分子間力は密度により変化しますから、物質の状態も温度と圧力により固体から液体へ、さらに液体から気体に変化します。液体の状態では物質の中を分子は自由に動き回っていますが、温度が高くなるに伴い運動エネルギーが大きくなります。分子間力よりも分子の運動エネルギーがはるかに大きくなると、分子は物質の中の分子間力のしがらみから開放されて自由な世界に飛び出して、分子が分子間力の影響をほとんど受けずに自由に運動できる気体の状態になります。分子の持つ運動エネルギーの関係式から考えて、分子は質量が小さな時には非常に早い速度で運動し、質量の大きな分子はゆっくりと運動します。そのため、質量の小さな分子は物質の中の分子間力のしがらみから容易に開放されて自由な世界に飛び出しますが、大きな質量の分子は気体になり難く高い沸点を示します。小さな顔をした分子はすばしっこく動き回ることができますが、大きな顔の分子

はどっしりと構えて泰然としています。

分子の運動エネルギーが分子間力とほとんど同じ程度のときには、分子は整然とした配列を保つことが出来ませんから、その配列を崩して自由に動き回る液体の状態をとります。温度が少し低くなり分子の運動エネルギーが小さくなりますと分子は次第に集合してきます。温度が低いために分子の運動エネルギーが分子間力よりはるかに小さいときには、分子は可能な限り密に集合しますから、整然と規則的に並んでほとんど動くことが出来ない固体の状態になります。このとき、分子間の距離が小さいほど強い分子間力が働きますから固体になります。丸顔の分子は顔の向きを替えなくても容易に近付くことができますから、固体になり易く高い融点を示します。曲がった胡瓜は箱に少量しか収納できませんから輸送費が嵩み産地での商品価値を低くしていますが、不揃いの顔や曲がった顔の分子も密に集合することができませんから、大きな分子間力が働かず、整然と規則的に並んでほとんど動くことが出来ない固体の状態になり難い性質を示します。原子が多く繋がった鎖状の顔をした分子では、分子がグニャグニャして百面相をしており、整然と規則的に並ぶことができませんから、低温からかなりの高温まで液体の状態を保ちます。液体の状態では物質の中を分子が自由に動き回りますから、分子の顔は沸点にあまり大きく反映しませんが、固体の状態では分子が整然と規則的に並びますから、分子の顔が並び易さに大きく影響を与え、融点に大きな違いが現れます。特に球状に近い顔の分子は容易に整然と並ぶことが出来ますから、分子間力が大きくなり他の異性体と比較して 100℃以上の高い融点を示します。

材木や鉄筋は向きを揃えればしっかりと束ねることができますが、棒状の顔をした分子も方向を揃えれば分子間の距離を小さくすることができます。しかし、揃った方向に沿って分子が多少移動しても分子間力は変化しませんから、液体のように流動性を示します。紙や板は何枚でも重ねることができますが、同じように盤状の顔を持つ分子も積み重ねれば分子間距離が小さくなり、固化し易くなります。しかし盤の平面方向に多少ずれても分子間力があまり変化しませんから、液体のような流動性を示します。このように棒状や盤状の分子では、ある方向には固体の状態で他の方向には液体の状態を示す液晶の性質を示す物質があります。

運動エネルギーの大きさが液体から気体へ変化する沸点に大きく影響をしていますから、物質の沸点は主に分子の大きさに比例します。これに対して液体から固体へ変化する融点は分子間力の大きさが支配的ですから、分子の顔が融点に大きく影響を与えます。球状や盤状や棒状の顔の分子は比較的結晶し易く高い融点を示しますが、鎖状の顔を持つ分子は整然と規則的に並ぶことができませんから、融点が低く液体になり易い性質を持っています。風船やサッカーボールのように中空で球状の顔を持つ分子では表面積に比較して分子量が小さくなりますから、沸点と融点が等しくなり昇華する性質を示す物質もあります。逆に、非常に長い顔を持つ分子は整然と規則的に並ぶことが極めて困難なために、低温になって運動エネルギーが小さくなっても結晶化することができず、次第に粘性が高くなりガラス状に固化します。絹糸やナイロンなどのプラスチックはこのように極めて長い顔を持ってい

ますから、明確な融点も沸点も持たず、自在に変形する硬い液体のような性質を示します。

人の顔が眉毛と眼と鼻と口の位置や大きさが微妙に異なるために、個々に美人の顔や愛嬌のある顔や優しい顔や怖い顔など人相が変わります。分子も小さな顔、大きな顔、丸顔、平らな顔、長い顔、棒状の顔など種々の顔を持っており、それぞれその顔にふさわしい性質を示します。さらに、眼や鼻や口のように分子は種々の部分構造が組み合わされた顔をしていますから、それらの部分構造の持つそれぞれの性質の複合した性質を出現します。そのような分子の部分的な顔の違いによる微妙な性質の違いは、分子が集合した物質にはあまり顕著に現れませんが、風邪薬や抗生物質や覚醒剤などの例からも明らかなように、人間をはじめとする生物の体内では極めて顕著に現れてきます。生体内では生命維持活動の必要に応じて種々の変化や活動が開始され、継続され、停止されていますが、これらの変化がすべて化学的な分子の反応で機能していますから、それぞれの変化や活動に関する指令も種々の顔を持つ分子のそれぞれ特有の反応によりなされています。鍵穴と鍵の関係のような極めて固有の顔をした分子だけが関与する場合がありますが、おおよそ似ている顔を持っていればその反応に関与する場合があります。逆に、似ていることから一部の反応に関与してしまうために、それ以降に続く反応が不調になり、生命活動の維持が出来なくなる場合もあります。

医薬品や毒薬の薬理効果など生体内の種々の変化や活動も特定の原子が配列する部分的な分子の顔により出現しますから、類似する多くの分子の顔とその生体内の変化や活動を比較して、必要な顔を推定することが出来ます。この研究方法は構造活性相関法と呼ばれ医薬品の開発において極めて有効な方法になります。このとき水との親和性や原子の大きさや並び方などの部分構造の顔付きが大きく関係してきます。このように物質の性質に大きな影響を与える分子の顔は、物質を種々の化学的分析をすることにより明らかにされてきました。紫外線や赤外線やマイクロ波などの各種の波長の電磁波を物質に照射して、吸収される波長とその吸収強度から原子の結合の仕方を調べたり、結晶化した物質に X 線を照射してその反射の仕方で原子の並び方を調べたりしています。さらに、PC やコンピューターの演算速度や記憶容量の飛躍的向上により、近年になって原子の結合の仕方から仮定した分子の顔をかなり高い精度で予想することができるようになって来ました。多くの構造活性相関が明らかになれば、その分子の顔を見ただけで薬の働きが推定できるようになるのではないかと期待されます。

人間の顔や身体の形は人間の個々に生まれつき与えられている性質ですが、身体の形の類型と性質の類似性の間に明確な科学的相関性が未だに見出されていないために、古くインドで発祥した人相学はあまり合理性を具えるものと認められていません。これに対して物質を構成する分子の顔とその物質の性質の間には合理的な相関性が認められています。本書ではこのような分子の人相とその物質の性質の間に見られる相関性に付いて化学してきました。日常生活において分子の人相を見ることにより、その物質の性質を予測したり、利用法を考える人々に示唆を与えることができると考えられます。本書の中に、何か一つでも薬学

や化学の研究や教育に役立つものが見つけ出せれば良いと思っております。また、逆に多くの化学的な技術や知識が日常生活を快適にする新たな物質を生み出す助けになれば、本書はさらなる意義を持つことになると思われます。本書が分子の人相学を深める上で貢献できればよいと思っています。