

甲南大学 総合研究所報

甲南大学総合研究所

〒658-8501 神戸市東灘区岡本 8-9-1

電話 (078)435-2754(ダイヤルイン)

第 82 回 総合研究所公開講演会

『はたらく分子たち』

～分子はどのようにして機能を生み出すのか～

2024 年 11 月 15 日 (金) 13:30～14:30

講 師 檀上 博史 (甲南大学 理工学部教授)



総合研究所第 82 回公開講演会

令和 6 年 11 月 15 日

甲南大学理工学部教授 檀上 博史

【三上】甲南大学総合研究所公開講演会を開催いたしたいと思います。私は、甲南大学総合研究所所長を務めております三上と申します。どうぞよろしくお願いいたします。

甲南大学総合研究所は、人文科学・社会科学・自然科学という学問の垣根を超えて、複数の研究者が協力して研究する総合的・学際的研究を発展させると共に、その研究成果を社会に還元することを目指して 1984 年 5 月に設立されました。総合研究所の研究成果を知っていただく機会として、広く地域住民の方々にも参加いただける公開講演会を開催しており、本講演を含めまして 82 回の講演会を開催してまいりました。

今回の講演会は、平日開催となっております。従来ご参加いただいた皆様は、ご承知のとおりだと思いますが、週末開催という形でこれまで実施してきたのですが、学生の皆さんにもぜひ参加していただきたいということで、今回、平日開催とさせていただきます。学外からご参加の皆様には、不都合な日程だったかもしれませんが、週末ではなかなか見られない「普通の大学の様子」というところもご確認いただけたのではないかと思っております。もちろん、従来の形である週末開催の講演会というのも検討を予定しておりますので、ぜひこれから開催される講演会にも足をお運びいただければと思います。どうぞよろしくお願いいたします。

それでは、これから講演いただく檀上先生のご紹介をしたいと思います。檀上先生は 1999 年に京都大学大学院理学研究科化学専攻の博士後期課程を修了後、ハーバード大学博士研究員、千葉大学理学部化学科、徳島文理大学香川薬学部にてお勤めの後、2009 年 4 月より、甲南大学理工学部にてご研究、そして学生の教育を担っております。

本日は『「はたらく分子たち」～分子はどのようにして機能を生み出すのか～』と題し、分子の不思議な力と機能を生み出す理屈、それを利用した「ものづくり」について、ご講演いただきたいと思います。

それでは檀上先生、よろしくお願いいたします。

【檀上】只今ご紹介に預かりました、甲南大学理工学部機能分子化学科に所属しております檀上と申します。本日は、このようなタイトルでお話をさせていただくのですけれども、まず、最初にこのような形で皆さんの前でお話をさせていただく機会を与えてくださいました三上所長をはじめ、スタッフの方々に改めてお礼を申し上げたいと思います。ありがとうございます。

今日お話をさせていただくにあって、こういうタイトルでお話をするということになりまして、分子というキーワードを使って何かお話ができたかなど。ただ、話が少し細くなっていく可能性があったりしますし、雑談とか分かりにくいところもあるかもしれないのですけれど、何卒最後までお付き合いいただければと思います。よろしくお願いいたします。

今少し申し上げたように、この「はたらく分子たち」。最初、こういう形で皆さんの前でお話をする講演依頼をいただいた時に、どんな内容にしようかなど。私は有機合成化学の専門ですので、分子という内容を入れてお話をしたいなと思ったのですけれど、このタイトルでお話をしたいとお伝えしてから「はて？」と思ひまして。分子の世界というのも広大で、逆に言いますと、その分子なしで色々な物質のことを語るなど、ほぼ不可能に近いところがありますので、1 時間という短い時間で全てを語り尽くすのは無理であるということで、本日の僕の話は、分子という世界の中でも僕の視点から見た一部、本当に一部の内容についての話になり、僕が今回語りきれなかったもっと大事な分子の話は沢山ありますので、ご容赦いただければと思います。

早速、お話を始めたいと思います。できるだけ今日のところは専門的な話、僕より化学に詳しい方が沢山おられるかもしれないので、そういう方には「表現が雑過ぎるぞ」とか、お叱りをいただくかもしれないのですけれども、その辺はご容赦いただきつつ、今日は身近なところで「どんなものが実は分子で成り立っているのか」とか「分子がこういうふうに使われているのだ」みたいな部分をお話させていただければなど。あとは、僕のバックグラウンドも含めたところでトピックを選ばせていただきました。

というわけで、身近なところでどんな分子が、インターネットなどで写真を集めてきたのですけれども、写真を貼り付けてみました。食品、調味料関係ですね。紙、ペットボトル、スマートフォンの液晶のことを紹介しようかなと。これ、浴衣ではなく着物ですね。絹かなと思うのですけれど。犬が走って、葉。これは有機 EL と最近の流行りの材料ですかね。

例えば、こんなものを挙げてみた時に、これらはいずれも分子の働きで、その機能であるとか変化、もしくは構造、形というのが保たれていると。表現していきますと。我々化学で使う化学式、構造式。のちほど、じっくりとご紹介をしたいと思うのですが。こんな形でそれぞれに、その分子というものが関わっていたり、それそのものであったりということになります。

例えば、お砂糖。いわゆるショ糖は、この化合物がそもそもショ糖という化合物です。これが、ほぼ 100% の調味料ですね。いわゆる僕らが食品として食べてお砂糖になりますし、味の素もグルタミン酸ナトリウムだとか言いますが、まさにこれがグルタミン酸ナトリウムという化合物で、これが、主成分の調味料になると。こんな感じですね。

あと身近なところで言いますと、例えば、ペットボトル。これは分かりにくいですが、ペットボトルはこういう化合物。これ、ポリエチレンテレフタレートという化合物の頭文字「PET」を取って「ペット」と読んでいるのですけれども、これはいわゆる高分子と言いまして、例えば、分子というのは一塊で振る舞うようなものなのですが、中には、鎖がずっと無限に伸びて行って、その鎖で一つの分子として振る舞うものも沢山ありまして、そういうものを、分子は分子ですが大きな分子ということで、「高分子」と読むわけです。例えば、これペット。それから、これは紙ですね。セルロースなのですが、これは、こういう六角形なのですが、六角形が繋がって行ってできた高分子になります。こういうものが紙を形作っています。

実は、着物。絹と思って僕は写真を引用したのですけれども。絹というのは、こういう形で高分子ですね。繊維というのは、だいたい高分子になりまして、丈夫であるとかそういう形で性質を表すのですけれども、実は、こういう形の高分子化合物である。

例えば、有機 EL。最近少し流行っていますけれども、これなども実は、中に色々な化合物があるのです。例えば、こういう化合物がある。ルブレインという化合物ですね。これが光る、もしくは、光るのを助けるという機能を持っている。蛍が光るのも、実は分子です。この化合物です。この分子が酵素の助けを借りて光っている。蛍発光の分子、ルシフェリンと言いますが、こういう化合物が光っている。

この辺は葉をイメージしたのですけれども、葉も無限にありまして、葉こそ、ほぼほぼ、分子の世界です。もう語り尽くせないのですけれど。これはタミフルの構造でして、一時期「異常行動が、どうのこうの」というのがありましたけれども、因果関係は明らかにされておらず、この化合物が悪者というわけではないと思っているのですが。例えば、タミフルはこんな形をしています。色素も色々ありまして、例えば、青色の色素。アリザリンという色素は、こんな形をしています。

というわけで、その形に依存して色々な性質、色だったり味だったり、こういう性質ですね。丈夫な透明なプラスチックになるとか。

これ、犬なのですが、もちろん生き物。これも、はっきり言って化合物、分子の塊でできています。ここに書いてあるのは、この犬を形作っている分子というより、犬が走る時に筋肉にエネルギーを供給する。その燃料として身体の中で流通している化合物、分子がこれです。これ、ATP と言いますが人間にとって

車の燃料、ガソリンと同じような働きを身体の中でしているのが、この ATP という分子ですね。こういうものが存在するおかげで犬が走れるとか、そのような形で分子というのは我々の身近なところで働いている。そういうことを言いたくて、1枚のスライドを作りました。

ウルトラセブンなのですが、この写真を出したいがためにスライドを作ったのですけれど、うちの子どもたち、もう十五、六年前の写真でして、今では成長して可愛くないのですけれどね。

当然ながら生き物の身体の分子、さきほど申し上げた、これも語り尽くせるわけではないのですけれども、DNA、これはいわゆるタンパク質を作っているペプチド、高分子になります。これは、レチナールと言いますけれども、目の中で目が見える仕組みのところで、これが作用している。この化合物「ロドプシン」と言うタンパク質が働くことで、目に光に応じた電気信号を与えるということですね。

さきほどの ATP になります。これなどは、細胞膜を作っているリン脂質という化合物ですね。これは、デンプンです。グリコーゲンとか栄養になるようなもの。これが真ん中に鉄と書いてある。Fe、鉄です。こういう化合物がありまして、これは、ヘモグロビンという血液の中の色素です。タンパク質なのですが、ヘモグロビンの中にこの分子が埋まっています、実は、この分子が酸素を捕まえて運ぶという役割を中心に担っているヘムという化合物です。こういう化合物が身体の中で活躍している。もちろん、これだけではなくて、ありとあらゆるものが身体を作っています。

ちなみにウルトラセブン、雑談になりますが、だいたい人間の比重、重さというのは、水と同じぐらいで比重1ぐらい。だから、海では浮くし、水中では下手したら沈むという感じで、だいたい水と同じぐらいの重さなのですけれども。ウルトラマンは、密度、比重で人間の40倍あるそうです。要は円谷プロの設定の部分なのですけれど。

実を言うと、地球上で我々が扱う物質の中で、一番重たいもので水の20倍、だいたい比重が20。タングステンとか金属の塊が20で、それが一番重いらしいのですけれど、その2倍ぐらいあるそうです。だから、ウルトラマンに蹴られるとダメージが大きいと。比重が40あるそうです。宇宙人なので、その辺は僕らの常識で測ってはいけないなという気はするのですが。ウルトラマンはともかく、色々な分子で生命が成り立っている。この辺をまずは導入としてお話をさせていただきたかったことです。

ここから、少し順番に個別のトピックを話していきたいと思います。その前に分子を少し定義して、分子の書き表し方というのですかね。そういうものもお話をさせていただければと思います。ちょっと約束事みたいな話になるのですけれども。

そもそも分子とは何かという話になりまして、辞書で調べてみますと、物質を構成する最小の単位粒子のこととなっております。かなり雑な表現なのですけれど。この表現は、詳しい方ならさすがに雑過ぎる表現なのですが。実はこれ、化学辞典にこのように書いてある。だから辞典はこう書くのかと。ただ、もちろん続きがありまして、単位粒子は何なのかという話ですね。

アヴォガドロという方が昔居られ、この方が色々気体を使って調べていく中で定義したのですけれども、最小の単位粒子というのは、それまでは原子ですね。あれが最小の単位粒子だということで、色々な世の中の物質を構成していると思われていたのですが、アヴォガドロが気づいたところによると、「我々が扱い得る色々な性質を示す、発揮する単位粒子というのは、原子ではなくて分子というものでなければならない」ということを最初に発見、提唱したのです。この辺は、高校の化学の教科書に出てくる話ではあるのですけれども。

例えば、原子がある。炭素原子、酸素原子、水素原子とかあるのですけれども、他にも元素周期表があります。118番かな、今、原子が知られているわけなのですけれども、そのうちの三つだけを書きました。原子そのものというのは、少し化学的な視点で言いますと「性質を持たない」というふうに我々は扱います。物理学になると少し話は変わってくるのですけれども、化学的な視点で、いわゆる僕らが手に取って、目に見えてという、物性という観点でいくと「原子には性質はない」というふうに言っているのかなと思います。

これが、結合ですね。原子同士が結びついて一定の形をとる。例えば、炭素と酸素が二つで二酸化炭素、水素が二つで水とか、こういう形で炭素、炭素、酸素、あと水素。これ、エタノールですね。こういう形で分子という形態になって初めて「性質」というものが現れてくると。水、二酸化炭素、エタノール。エタノールなどは、僕も毎晩お世話になってはいますが、人間にとって多分一番付き合いの古い分子ですね。人間に一番たくさんの幸せと不幸をもたらしているという気はしますね。こんな簡単な分子ですね。

ということで、結局は、原子が結合を使ってくっつきあって、最終的にある一定の形を持った、こういう粒子を構成する。これが分子で、この組合せの形ですね。それによって色々な性質を示していくということになりますね。

ただ、原子が性質を発揮し得るためには、結合を作って分子にならないと性質が出ない。逆に言いますと、全ての性質を持っている物質が分子なのかと言うと、それはそうでもなくて、分子ではない物質もたくさん存在する。例えば、鉄、南部鉄、食塩、ガラス。こういったものは分子ではありません。例えば、鉄ですと鉄原子ですね。鉄原子も原子1個という状態では基本的な性質がないのですが、それがこういうふうに、きれいに整列、結晶、もしくは、それが歪むことでアモルファス状態。結晶ではない結晶質という形になるのです。こういう形で塊として性質を発揮するということがありますし、例えば、食塩ですと、こんな形でナトリウムイオンと塩化物イオン、こういうイオンが、きれいに整列する。

イオンというのは、原子からその電子を一つ与える、奪うということによって、電氣的にプラスの電気、マイナスの電気を帯びる。これがイオンになりますけれども、マイナスとプラスが引き寄せ合いますので、それがきれいに整列することで形成された、こういう整った形です。これも結晶という言い方をするので、結晶構造。これも、やはり分子にはなりません。

こう書いていて、これだけの塊というわけではなく、縦横奥行き無限に繋がっていると思ってください。その一部を書いているに過ぎなくて、この中の一部を形のあるものとして取り出すことはできない。塊として一つの性質を示す。強引な言い方をすれば「鉄は、これ1個で分子として振る舞う」と言えなくもないのですが、そうすると分子という議論は意味がありませんので、こういったものは、分子という形態はとらない。とにかく、無限にくっついていくことで塊として性質を示す。

ガラスもそうですね。ガラスの場合は、こういうふうに整列はしないのですが、酸素とケイ素が、比較的ランダムにくっついていくことによって出来上がっている塊。非晶質というものなのですが、ガラスですね。これも分子にはなりません。これ全体で性質を示していく。こういう分子にならない化合物。さきほど僕は、有機合成化学、有機化学者と言いましたが、無機化合物ですね。そういうものがこういう形で、性質を示すような形で、それは分子という形態をとらない。そういう物質も存在するというのは一応ご理解いただければと思うのですが、今日のお話の中ではこういうものは置いておいて、分子として色々な性質を示すもののお話にさせていただきたいと思います。

最近、こういう分子が色々活躍はするのですが、それ以前の我々の産業・生活を支えてきた色々な材料、物質ですね。最初は、こういう無機物質といいますか、分子の形を取らない化合物からスタートしていることが多くて、例えば、LEDですね。LEDは、もともとはこっち系です。このような化合物、分子の形を取らないものが先に開発されて、それを有機化合物で置き換えて使っていくと、分子がその領域にどんどん進出しているというのが実態になります。

ということで、こういう化合物がすごく大事でして、今日のトピックに入らないのですが、産業を支えている化合物たちということになります。

ここから約束事だけ少しご紹介というか、ご説明。分子の書き方、最初にたくさん分子を書いているルブレンとか、グルタミン酸ナトリウムが書いてあるのですが、あの表現法、やはり一般に馴染みがないと言えば馴染みがないので、書き方のルールだけご説明といいますか、ご存じの方には退屈な話なのですが、

例えば、これが分子だとしてください。炭素が 13 個、水素が 10 個、窒素が 2 個、酸素が 4 個、こういう分子がある。これだと各原子の個数は分かるのですが、どんな形をしているのか、さっぱり分からないので、少し物足りないし、情報としては不十分ということです、これでは議論がやりにくい。

ということで、もう少し分子の形に関しての情報をきちんと表記しようと、こういう化学構造式というのが使われます。こうすることによって、同じ情報なのですが、より形に関してのものが、特に「どの原子とどの原子が」「どのようにつつき方、結合をしているのか」ということが、きちんと盛り込まれている。これによって「分子」というかなり形が明確になったものを言いますね。

ただ、例えば、授業でノートに書くとか、仕事をしていてこの分子を書く。少し面倒です。これはいいのですが、炭素 50 とかになると大変なのです。そのため、簡略化した構造式を使うことが多くて、この分子はこんなふうに書くことができます。有機化合物が分子の世界では基本的には主役ですので、だいたい原子としても主役が炭素と水素になってきます。「炭素は分子を表す上では当たり前」ということなので、炭素は省略しよう、炭素の上にくっついている他の原子、水素以外の原子とくっついていない水素も省略しよう、ということで、これはこのように表せます。この線の角、角、角。ここは全部炭素ということになりまして、本来炭素というのは、他の原子と手をつなぐ時の、その手のつなげる数、結合の数。4 つなのですから、例えば、これと 1 個、2 個、3 個という。この線が 1 個 1 個、結合を表しているのですが、4 本に 1 個足りていないので、残った 1 個は、この水素がくっついているのですけれど、それは省略しようということで、この分子はこんなふうに書き表します。炭素以外の原子は真面目に書いている。これで大分楽になりました。ノートに書く時も、これぐらいであれば頑張って書けるかなと。

有機化学をやっていく上では、これが一つの分子の表記法になります。さきほど 1 枚目のスライドをお見せしたような分子は、全部この書き方に則ってしまっていて、これ、色々な業界で通用する構造式というものになります。骨格構造式。

さらに言いますと、今日のお話は分子の形というところに少し焦点を当てますので、この分子の形を重視して、これをよりリアルに書こうと考えた場合、こんなふうにも書くこともあります。実はこれ、ここが一つの平面的な形になってしまっていて、この部分というのは、これと捻じれる形で横向きに平面なのです、実際は。だから、それを書き表そうと思うと、このような構造式になります。ただ、少し分かりにくいのもありますので、何か特殊な事情がない限りはこれを書くということになります。

でも、それでも立体的な分子の姿を捉えて議論したい、特に創薬とかそういう世界ではものすごく大事な話になってきますので、こういう形できちんと「どの部分とどの部分が、どんなふう捻じれているのだろう」みたいなことを議論したいという場合には、こういう情報が必要なのです。もう、こうなってくると、手書きではあまりに情報が不十分過ぎますので、ここから先はコンピューターとかの力を借りる形で模型を、もしくは、分子模型は売っていますので、こういう形で分子を「炭素はこれ、水素をこれ」と組み立てて、こういうものを作ることができます。分子模型、これはコンピューターに書かせたものなのですから、形に関して正確な情報が欲しい場合は、この模型を表して、分子構造を表していくということになります。これはもう、まさにこのままでして、例えば、この模型ですと灰色部分が炭素、白が水素、赤が酸素、青が窒素という形で、模型を使えば本当にリアルな形が見えてくる。

ただ、これも実は不十分でして、こんな形であるとか、原子の位置をより分かりやすくしようと、例えば、原子の部分はちょっと球で置いてやろうということで、こんな模型もあるのですが、これも、だいたい形が分かりやすくなるのですが、本当にその分子の真の姿を表しているとは言えず、一番本当にその分子の形をより正確に反映している模型というのが、最後これになります。

これは、空間充填模型というものですけれども、何かと言いますと、元々この模型というのは、この角、角が原子です。頂点とか。ただ、この角とか頂点というのは、炭素であったり水素であったりという原子の位置を表しているだけでして、この骨組みとかあまり意味がないです。実際、分子というのは、原子と原子

が電子を使って、お互いくっつきあっているということで、実は、原子核の周りを電子が覆っているのです。よく言われるのは、例えば、水素の原子。あれはどんな姿をしているのかと言うと、例え話として、甲子園球場に1円玉をピッチャーマウンドに置くのです。その時に1円玉の大きさが原子の中心にある角の原子核という部分でして、それがプラスの電気を帯びている。それに対応して、そのプラスと対になるようなものとして電子が原子核の周りを回るのですけれども、その回っている周回の広さ、軌道と言います。それが、だいたい甲子園のアルプススタンドとか球場全体の輪郭、あれぐらいの規模感になると言われています。

ということを考えますと、この骨組みは所詮原子核の位置を決めているだけで、電子の広がりに関しては無視している表現法になっている。ただ分かりやすいので、これはよく用いられます。実際に、電子の広がりまでを考慮して、その分子の真の姿というと、ちょっと分からないのですが、それに近いものを議論していこうという場合に、最後に用いられるのがこれになります。

というわけで、大きな球は電子がここまで広がっていますよ、という。ファンデルワールス半径と言うのですけれども、そのような用語で示される電子の広がりを考慮した、ちょっと正確な表現ではないけれど、触って形として認識できる分子の表現法になっている模型の変遷がありまして。最終的には、こういう形で議論するのが一番正しいというふうになります。ただ、分かりづらいためですので、だいたいこのような骨組みで分子の形を理解することが多いということになります。分子の書き方を理解していただければと思います。ちょっと分かりやすく骨組み、さきほどの模型で書きますと、ここから具体的な個別の分子の話に入っていきたいと思っているのですけれども。

例えば、分子というのがどのように優れているのか。もちろん、色々な面が優れてはいるのですが、僕らの視点からしますと、さきほどの分子を作らない化合物ですね。食塩とか鉄。ああいうものと明確に違うのは、形というのを明確に定義している。さっきから僕は、形、形と申し上げているのですけれども、分子の性質は、かなり形に依存することにあります。例えば、その分子を作るとなった場合、合成というのは、分子を作るわけですけれども、その形を狙って作っていきける、デザインしていきけるといふところに強みがあるということです。

例えば、たくさんある中で、特徴的な形のことを挙げてみたのですが、ボール状の分子があったり、こういう輪っか状の分子があったり、四角、これプリズム型の分子。これは、うちの研究室で作ったのですが、こういう形で何か特徴的な形を持った分子というのを、狙って作っていくことができる。その形を基に性質を出していこうということができる。というのが、分子の強みなのかなというふうに思っております。

実際、これは構造式で、原子で表しますと、これはそのままなのですが、この角、角はさきほど申し上げた、約束事的な全部炭素です。ご存じの方も多いかもかもしれませんが、これ全部炭素でして、サッカーボールの形をしていまして、フラーレンという分子ですね。C60という、こういう分子が存在しています。もしくは、こういう四角形、窒素などが含まれていたり、輪っかですね。プリズムというのは炭素と水素と窒素、一部酸素ということで、一部ホウ素なども使われたりすることがあるのですけれども、色々な元素を組み合わせることで、こういう一定の形を持った分子を作ることができる。

のちほど幾つか紹介しますが、分子で輪っかを作ると、勝手にこの穴の中に他の分子が入ってくるのです。僕らはその性質を利用して、色々な仕掛けを作って物を作る、機能を発揮させるということをするのです。のちほど、これがたくさん出てきます。

こんな形を自分でデザインできますので。これはアメリカのライス大学のジェームス・ツァー先生という方が作った分子ですね。ナノプシャン、リリパットは小人のことなのですけれども、ナノの小人ということでナノプシャンという名前をつけてあるのです。分子で、ナノキッドとかナノバレエダンサー。別にこれが人みたいに動いたり踊ったりはしません。ただ、この形をしているだけという、ある意味お遊びの研究なのです。何でこんなことをされたのかと言いますと、アメリカの大学での子ども向けの科学啓発のプログラムの一環として、こんなふうには作っている論文があったのです。子どもに分子で色々なものを作ることができ

るということで興味を持ってもらえたらいいなと。こんなお遊びの研究を洒落が効いているのか、きちんと論文文化されるのですね。この JOC というジャーナル論文は権威がある一流雑誌でして、そこに、こういうものを作ったという論文が載ったという。アメリカの取組みでアメリカの学会誌なので、そういうところもあるのですけれど、こういうちょっと洒落の効いたような、お遊びで、人の形の分子を作った。別に機能は何も発揮しませんけれども。

同じくツアー先生が「車も作りました」と言っていて、さきほどのサッカーボールですね。フラーレンというのをタイヤに見立てて繋げて車っぽいのを作りました。これも、別に人が乗って運転できるわけではないのですけれど、こうなると多少機能ではないのですが、性質が生まれます。これは、ナノカー。ナノというのは「10 の 9 乗分の 1 メートル」という小さい、世界の小さい車という意味なのですけれども、これを基板、要はミクロの世界での地面上に置くのですね。これを顕微鏡で観察します。すると、フラーレン、C60 をここで繋げてあるので、この C60 の部分、僕らは直感で理解できるのですけれど、普通は、球だと色々な方向に回りますが、ここで結びつけると、この球は縦方向にしか回れなくなるのですね。ここで結びつけられている。横方向に回れない。前後そういう形、要はタイヤですね。それを基板上に置くと、このタイヤが回ることができる進行方向に何となく動いていくというのが観察されているのです。分子の世界、お遊びで作った車ですけれど、ちゃんと進む方向を形によって定義できているので、それは、一つ学術的にも価値が高いという研究でして。ツアー先生のところなのですが、実際にやったのは日本人です。

さらに面白いのが世界中でこういうことをやっている人がいまして、そういう人たちが集まってレースを開催しているらしいですね。今日は資料を持ってきていないのですが、ナノカーレース。しかも、ご丁寧にフォルクスワーゲンとかトヨタが協賛しています。なかなか盛り上がっている。日本のチームは強いです。こういう遊びも真面目にやると、なかなかサイエンスとして興味深いものが生まれてくるという例です。

というわけで、形をデザインできると色々なことが可能になってきそうな、しかも、それがナノの世界でできるようになってくるぞという、そんなお話であります。一例ですけれど、この化合物 1-メントールと言いまして、兵庫県に高砂香料という会社があります。あそこがシェアナンバー1 ですかね。メントールというハッカです。こういう形をしている分子です。1-メントールなのですけれども、これと左右逆になった形の分子、これが d-メントールという名前なのですが、これを作った場合、まるで違う匂いになります。こちらはハッカです。この逆の形のメントールは、なんかすごく臭いらしいです。僕は嗅いだことはないのですけれど、消毒液のような不快臭がするようで、全然違うのです。

ここでお示ししていないのですが、リモネンも逆の形になると、片方は柑橘系で、もう片方は、もう少し良い匂いなのですけれども違う匂いがするという感じで、本当に些細な形の違いで全く結果が変わってくるということになります。

コロナの形の話。少し物騒なのですが、これ、サリンですね。猛毒であると。これは何かと言いますと、ここに書いてあるように、もともとこれが標的にしているのはこの分子でして、この分子はアセチルコリンという分子になります。これは神経伝達物質と言いまして、人間の神経から筋肉細胞に、要は脳に命令を送る時に伝達される、その情報を伝えるための分子です。細かな話になってしまうのですが、神経から筋肉に情報伝達していくその時に、一瞬このアセチルコリンが産み出されて、それが相手方の筋肉細胞の受容体というタンパク質にはまって信号が伝わっていくのです。情報が伝わり終わった後は、アセチルコリンは用済みなもので、どんどん壊していかなければならなくて、その時に働くアセチルコリンエステラーゼというのは酵素になります。サリンは、アセチルコリンを壊すためのアセチルコリンエステラーゼという酵素にアセチルコリンのふりをしてくっつくのです。すると、このアセチルコリンエステラーゼがサリンによって機能を止められてしまう。すると、その神経細胞の間にこれがどんどん溜まり続けて、信号がいつまで経ってもなくなっていくということで、次の信号が送れなくなって神経から筋肉に情報が伝達できなくなっていくというのが、サリンの毒性の作用機序ですね。そういうものになりまして、サリンはアセチルコリンのようなふり

をして、アセチルコリンエステラーゼを潰してしまおう。のちほど漫画絵でお示しします。そういう化合物、分子です。

色々な分子が、形を使って人の身体に作用している。「人の身体」とざっくり言いましたけれど、具体的にはどこなのかという話でして、大概の場合は、人の身体で分子の形を受け止めるのは、タンパク質になります。例え話で言うならば、人間の身体を会社と例えますと、働いている社員は、タンパク質になります。メインプレーヤーです。それ以外は DNA とか脂肪とか、DNA はタンパク質を生み出すための設計図が書いてあるとか、脂肪などはそれを働かせていくためのエネルギーを供給するとか、そのような感じでサブの役割という形になりますので、人間の身体を運営しているのは、タンパク質になります。そのタンパク質がさっきの色々な分子を受け取って、情報を伝えたり動いたりしている訳です。

さっき申し上げたアセチルコリンエステラーゼというのは、タンパク質になります。タンパク質には穴が空いているのです、だいたい。穴が空いています。固有の形です。その穴は結構厳密に作られているので、そこにフィットする分子というのは、だいたい決まっています、そういうものを「リガンド」と呼ぶのですけれども、とにかく分子です。

例えば、こういうタンパク質。これ、さっきの空間充填模型で書いたタンパク質なのですが、少し分かりづらいのですけれど、こういう分子を与えますと、ここにピタっとはまるのです。これは、コンピューターシミュレーションになります。分かりにくいのですが、穴にこれが、きれいにはまっている状態というのが書いてありまして、結構厳密です。「この穴には、これ」と少しでも形が違った分子は入らないです。

タンパク質の穴というのは、すごく精密に作られています。よく例えとして、鍵と鍵穴理論ということは言われますね。本当にそれぐらい緻密で、家の鍵は僕が持っている鍵穴ですね。僕が持っている鍵では回らない。当たり前なのですけれど、それぐらい、ほぼ一対一対応で「この穴には、これ」というのが、かなり厳密に決められています。というわけで、鍵と鍵穴と呼ぶのですけれども、これもさっきの模式図ですね。もう決まった穴が空いていると。色々なものが分子として来ましても、ちょうどこれに当てはまるこの赤い「リガンド」と言われる分子しか入れない。青とか黄色は、ここには入れないです。タンパク質には、こういうリガンド分子が来た時に、これでスイッチが入って働き出すとか、逆にスイッチが入って機能が止まるとか、だいたいそういうのがタンパク質の一般的な作用の仕方となっております。

さっきのサリンの話ですね。例えばこんな感じでして、これがアセチルコリンを分解して元の正常な状態に戻すためのアセチルコリンエステラーゼだとしますと、この赤がアセチルコリン。ここにサリンがやってくるわけですね。サリンは似ているので、結構だまされて入るのです。すると、サリンはここから抜けられないのです。そうすると、本来分解してもらわないといけないアセチルコリンが入れなくなって身体が止まってしまうという。こういう感じで毒性を発揮する化合物分子は多いです。ターゲット、標的になるタンパク質を決めて、それを殺してしまう、機能を邪魔してしまう。逆に、こういう現象を逆手に取って作られる薬というのも多いです。

創薬の考え方としては、ターゲットになるものと少し形が違うものを作って、そのタンパク質を与えて、元のリガンドよりも、よりくっつきやすいものなどを沢山、スクリーニングというのですけれども、探し出して、それを薬として育てていくというやり方が製薬会社ではよく使われます。だから、彼らはタンパク質、その薬が働くタンパク質の形をすごく大事にしています。そのタンパク質の形というのも、なかなか調べるのが難しく、それを調べるベンチャー企業がたくさんあります。すごくお金になるそうです。

さっき申し上げたのですが、酵素というのも同じ話です。ただ、酵素は鍵穴と鍵がありまして、鍵穴に入ります。さきほどはリガンドと呼んでいますけれども、酵素の場合は基質と言います。ここに書いてあるように、要するに酵素というのは何のことかと言いますと、タンパク質はタンパク質なのですけれども、触媒作用を持っているタンパク質のことを酵素と呼ぶと。実際に触媒になるような化学反応を促すということですね。

だから、くっついて自分が働くとかではなくて、酵素というのは取り込んだものを化学変化させてしまう、そういうタンパク質のことになります。この理屈ですね。鍵穴に入ったら、アセチルコリンエステラーゼが、まさにこういう感じです。アセチルコリンが入る、ポケットに入った状態のものを分解させる。分解すると居心地が悪くなるので出ていくのです。よくできています。穴が空くので、次のアセチルコリンが入って、分解されて居心地が悪くなって出ていくということが繰り返されて、アセチルコリンエステラーゼはアセチルコリンを分解していると。確か1秒間に数万回の触媒をする。反応をグルグルグルグルと回しています。

本当に色々なタンパク質があるのですけれど、チャンピオンの酵素で言いますと、1秒間100万回ぐらいの反応を触媒するような酵素、カタラーゼだったかな。あると思います。とにかく酵素というのは凄まじい。人間が作った人工の触媒にそこまでの活性が出せた例というのはありませんので、まだまだ人間は酵素には勝っていないですね。

形を似せると身体をだませるという話で、創薬にも応用されているという話をしたのですが、例えば、抗がん剤はこのコンセプトが多く、どういうことかと言いますと、例えば、チミジン。これは、DNAの原料になります。DNAは身体の遺伝子の中にありまして、さきほど少し申し上げたように、結局、そのDNAに書かれている情報を基にタンパク質を作って、そのタンパク質が身体の中で働いていくわけですけれども、だから、身体を形作っている設計図です、DNA。

これらはDNAの原料の一部なのですが、ガン細胞というのは、身体の中で必要がないのに増えていく細胞なのです。もちろん、人間の身体というのは、細胞がある時期には増えていって、身体が大きくなる、何か臓器ができるということが必要なのですけれど、一定の形ができてしまった後は、細胞分裂が止まらないといけません。細胞が増えてはいけないわけですね。それが増えるのがガンである。ガン細胞は増えるための細胞の材料が常に必要なのです。

というわけで、細胞の材料になるようなDNAのパーツを与えるとガン細胞がそれを食べて増えていく。その食欲さというか、それを逆手に取りまして、このDNAの材料によく似た、少し違うのだけれど、こういう化合物を与えてやるのです。すると、ガン細胞は自分が増えるためにDNAの材料のこのような薬剤、ジェムザールとか、AZT、5-FUと言うのですけれども、こういうものを取り込む。ガン細胞が自分の細胞を増やすために、こういうものを取り込んでDNAを作るのですが、残念ながらちょっと違うので、きちんと働かないのです。出来たDNAがきちんとタンパク質を生み出せなくなってしまうので、結局、これを取り込んで出来たガン細胞は増えることができなくなるというわけで、ガンを抑制する。そういう感じで、ガン細胞をだます。そこに形という枠なのです。よく似ているけれど、ちょっと違う。フッ素などが入ったり、Nがいっぱい繋がっている。こういう理屈でガンを抑止、増殖することを防ぐ。ただ、これはだますわけではないのですけれども。

ペニシリンはご存じですかね。ペニシリンという化合物は抗生物質ですね。我々、医薬品として抗生物質を使うのですけれども、抗生物質を与えると問題がありまして、使い過ぎるとその抗生物質に耐性、要は、耐える力を持つ細菌がすぐにできるのです。細菌というのは突然変異の割合が高いものですから、これで死んでいた細菌が死ななくなってしまうのです。仕方なしに人間の方も、このペニシリンの少し形を変えたものを与えていく。すると、ペニシリンGには耐えたものはペニシリンVでは死ぬ。でも、今度これにも耐えるものが出来ているということで、実を言うと、細菌と抗生物質はイタチごっこを繰り返しているということがあり、抗生物質というのは、むやみやたらと投与してはいけなさとされています。あまりやると、耐性菌がどんどん出てくるので、そのうち人間が持っている薬では対応できない細菌が出来てしまう。そうなると、治せる薬がなくなるということですね。

というわけで、こういうイタチごっこもあつたりするのですが、その時にちょっと変えたものをデザインして与えていくという、そのような話になります。ちょっと時間が申し訳ございません。少しトピックを絞ってお話しした方がいいですかね。

ガムシロップの話なのですが、果糖というのがガムシロップの甘みの成分でして、これも身体に作用して、身体に情報伝達させるというものでして、それも形が関わってきます。果糖というのは、皆さん、ご存じかどうか分からないのですけれども、冷たい方が甘いですよ。女性の方はご存じですかね。ガムシロップはホットコーヒーに入れるとあまり甘くないですよ。あれはなぜかという話なのですけれども、実は、化学的にそれは説明がつかまして、これは、グラフです。砂糖とかブドウ糖の甘さは変わらないです。甘味度というものなのですけれども、果糖だけは温度が低いと甘くて、温度が高くなると甘くなくなる。それはなぜかと言いますと、実は、果糖というのは、こういう4つの形を水の中で行ったり来たりしてしまっていて、もともと鎖なのですが、輪っかを巻いてこうなったり、切れて輪っかを巻いてという、この形の変換を水の中で延々繰り返しているのです。

ただ、温度によってこの割合が違っていて、これとこれは、ほとんどいないのです。この3つです。これが水の中で一定の割合でいて、その割合がこれ。青が20度で、オレンジが80度なのですけれども、低い温度の時は、これが一番多いです、76%、20%、4%。温度が上がると48%、35%という感じで割合が減るのですけれど。実は、一番甘いのがこれなのです。これが一番甘いので、要するに低い温度の時ほど、この割合が高いので甘く感じるという理屈でして、これが、果糖は冷たい方が甘いという理屈になります。この形というのを舌の先端にあるタンパク質の穴が捉えて信号を発すると。だから、甘く感じるわけですね。これも形であると。

ここは少し複雑な話になるのですけれども、タンパク質の形は誰が決めているのかという話でして、タンパク質の形というのは、例えば、模型で多分こんな感じなのですが、これは、タンパク質は、もともとアミノ酸が沢山繋がってできている高分子、鎖なのです。本来はヒモなのです。ただ、身体の中に置きますと、それが決まった形にクシャッと丸まるのです。その丸まり方が常に一定でして、特定の穴をきっちり生み出すように丸まっています。それがこんな形になるということです。とにかく長いヒモがクシャッとなる。これが一定の形で決まっていますので、狂うこともあるのです。よく言われるのは、例えば、ゆで卵と生卵でアルブミンというタンパク質なのですけれども、ゆで卵は白いですよ。あれは何かと言いますと、元々室温のアルブミンが正しい形をしているのですが、熱を加えると形が崩れます。そうすると、水に溶けなくなって白くなるのです。だから、ゆで卵の白い部分はクシャッとなる。これは、折り畳みと言うのですけれども、それが狂った形です。もともと鎖そのものは何も変わっていないのですけれども、クシャッと成る方が違うということです。実を言うと、あれを元に戻す方法は、あるにはあります。僕は食べるので気にしないのですけれども。

先日ノーベル賞の発表があったのですが、化学賞はタンパク質がクシャッと成って、どんな形になるかというのを正確に予想した研究です。「昔はヒモみたいなものが、紙をクシャクシャッとやって、この形になります。予想せよ」と言われているようなものでして、あんなものを予想するのは、ほぼ不可能と言われていたのですけれども、それをAIで予想したのがこの2人。この方は、自分のプログラムで好きな形のタンパク質を生み出すことに成功しているということで、この3人はコンピューターでタンパク質のクシャッと成った形というのをきっちり予測するための手法を開発したのです。特にこの2人、AI囲碁というのがありまして、この2人が作ったのです。この方達はもともとゲームの開発の仕事をされている、Googleの子会社のDeepMindという企業の技術者だったのです。この人自身が、もともと8歳でチェスか何かの王者になったりした人なのですけれども、AIの技術を使ってタンパク質の構造予測をして、色々なコンテストをわずか3年ぐらいで総なめにして、このプログラムについては、今は一般公開されているという。そういう事例でノーベル賞を取っています。そういう方々でして、昔は神の領域と言われていたタンパク質の折り畳みを人間が予測したという、そういう偉大な業績で今年度ノーベル化学賞になっています。

お時間の関係で大変申し訳ございませんが、絞らせていただきます。本当に申し訳ございません。さっきシクロデキストリンと言いましたので、輪っかの分子というものが、実は、でん粉かな、ある特殊な酵素で

分解するとできる、結構簡単に作れるものなのですが、この輪っかの形が研究者には魅力的でして、これを使って色々な研究がなされています。この輪っかの分子はこんな形をしまして、この分子は、さっきのブドウ糖です。ブドウ糖が輪っかになっているのです。だから、人間の身体の中に入れても全く無害です。ブドウ糖が輪っかになっていて、中が実は、結構油っぽい。油になじむ環境、外が水になじむ環境という分子なので、中に油っぽい分子をめちゃくちゃ取り込むのですね。

例えば、シクロデキストリンというのは、ワサビなどに入っています。ワサビの辛みというのは、実は、この化合物で、分子でアリルイソチオシアネートというのですけれども、この分子はすごく軽いので、例えば、お寿司屋さんでワサビをおろす。これは放置しておく、多分1日経つと辛くないのですね。なぜかという、辛味成分がどんどん空気中に逃げていくから辛くないのです。だから、練りからしのS&Bなどで売っているチューブに入ったものは、いつまでもちゃんと辛いと。あれにはこれが入っています。この分子を一緒に入れておくと、アリルイソチオシアネートという辛味成分が、この穴の中にどんどん入っていくのですね。そうすると外に逃げていかなくなるので、ずっと練りワサビの中に留まり続ける。いつまでも辛いというのが実現できているということで、シクロデキストリンが使われています。しかも、さっき申し上げたように、別に体の中に入れて食べても何の害もない。ブドウ糖が並んでいるだけです。体に害がないということで、かなり食品にもよく応用されている。

こういう分子は、さきほどのこれもそうですし、色々な分子を取り込む性質がございます。しかも、細長いのと丸いの、細長いのだけ、形、大きさを選んで閉じ込めますので、この性質を利用して色々な応用研究がなされていて、例えば、大阪大学の先生ですと、シクロデキストリンと中に入りそうなもの、入らなさそうなものみたいなものを、それぞれぶら下げたブヨブヨのゲルを作ったのです。それを水の中で混ぜるのです。さきほど「これにはこれが入るよ」と言っていた、ちょっと大きいサイズは、今度これが入るのです。「これはブカブカ過ぎて入らないですよ」というわけで、分子としては「これとこれがくつつく」「これとこれがくつつく」という組合せですね。それを練り込んだゲルを作ると、これは、ちょっと時間がかかってくるのですけれども、お分かりですかね。青いゲルと黄色いゲルが、だんだんとくつついていって赤と緑がくつついていって、こうとかこうは一切くつつかないのです。というような現象が生み出せる。要するに、好みのゲル、相手のゲルを見分けてくつつくという、このような材料を作ることができる。まるで、好き嫌いをちゃんと判断して選んでいるようなものが出来たりする。

あとは、この輪っかの部分とこういう分子、光を当てると曲がるのです。そういう分子があるのですけれども、これをうまく組み合わせると、これを2つ、こういう感じでお互い糸通しするのです。これに光を当てると、この赤い部分が曲がるので、今度こうなると大きさが足りなくなってニュルッと出てくるのです。すると、ズボッとずれるのです。紫外線を当てるとずれて、可視光線を当てると目に見える光を当てると戻るといって、これを行ったり来たりしています。要は、紫外線を当てると分子の全体の大きさが小さくなるのです。これを練り込んだゲル、ぶよぶよのグミみたいなものを作りますと、紫外線を当てると縮むということが起こるのです。こういうのを使うと、紫外線を当てると、当てた方向に曲がるのが分かりませんか。紫外線を当てるとクニャッと曲がっていくのです。

という感じで、外の刺激に応じて動く物質を作ることができる。こういうのを我々は、分子筋肉と呼ぶのです。将来的に化合物で筋肉を作るとなった時に、こういう原理がいつか役に立つ。まだまだ実用化はされていないのですけれども、分子でモーターとか、ああいうものではなく動力を得ようとした時に、一つのこういうものが解決策になるという、そういう研究が行われております。

というわけで、まだお話したいことがいっぱいあったのですけれども、すみません。こういう研究を本当にたくさんされていて、僕も研究をもっと基礎的なところから始めてはいるのですが、またどこかでお話ができる機会があればいいのですが、時間の配分の都合上、申し訳ございませんでした。

最後に、これで終わりにするのですけれども、少し前にノーベル賞を取った方々というのがこの辺でして、僕の分野がこういう分子機械とか、この考えの基になったのが超分子化学というものでして、さきほど分子筋肉の概念、原田明先生という大阪大学の先生なのですけれども、分子機械で、こういう方々と肩を並べて研究されているような方ですが、今後、単純にある分子が光るとか、そういうことに加えて分子自体が積極的に動いて、それこそ機械のように振る舞っていく、そういう機能を持たせるという研究が、これからどんどん流行ってくるようになると思います。SFで、よくナノマシーンというのがありますけれども、ああいうのはこういう研究の延長線上に最終的に多分出来上がるものであろうと。あれの究極の目標の姿というのは生命なのですね。

タンパク質の緻密さとか、あとは分子モーターと言いまして、例えばバクテリアが泳ぐ、尻尾がクルクル回るのは、実は分子でできたモーターでして、ああいうものを最後人工で作っていけるみたいな研究を色々な大学がやっているのですけれども、実現していくと、本当に人工の分子でできたナノサイズのロボットみたいなものが実現できるかもしれないと。そういう一例として、こういう分子の働きを理解して、基礎的なところから応用していくといいよねという。そういうことを我々、僕は超分子化学のところに所属しているのですけれども、考えながら研究をやっております、今後またいい研究成果が出て皆さんの前でお話できたらいいなと思うのですけれども、今日のところはすみません、ちょっと時間オーバーでお話できずに終わってしまいました。以上になります。

— 了 —