

序章

バイオ研究と 化学結合

バイオは生体の機能を解明する研究です。DNAの遺伝作用、タンパク質の酵素作用、代謝、植物の光合成など、バイオの研究領域はたくさんあります。バイオは、分子生物学に代表されるように、多くの場合、研究の焦点は分子に当てられます。DNA、タンパク質、糖、クロロフィル、どれもみな分子です。すなわち、バイオは分子の広い機能のうち、生体に関連した分野を研究する学問とみなすことができます。したがって、バイオを研究するのに、分子の基礎的な理解が必須なのは言うまでもないことです。

分子の研究は構造面と機能面に分けることができます。また機能は分子1個で発現する単分子的なものと、集合体になって初めて発現するものがあります。いずれにしろ、分子の機能は分子の構造の上に発現するものです。したがって分子の機能を研究するためには分子の構造面への深い理解が必要になります。

分子は原子が集合して作った構造体です。そして分子を作る原子は互いに結合しています。すなわち分子構造を研究するということは結合を研究することにつながります。また、分子が集合体として機能するときには分子間に弱い結合が発現します。この結合を分子間力といいます。

本書はこのような結合を、バイオの見地から見直してみようというものです。本書を読み終えた後には皆さんの分子を見る目が変わっているのではないかと思います。決して難しい話ではありません。ものは試し。バイオのための結合論をみてみましょう。

本章は、読者の皆さんができるようなバイオのための化学結合論に入ってゆくための導入の章です。本書がこれから取り扱う主な項目と、そのための簡単な予備知識をまとめてあります。軽い気持ちで読み進んでください。きっと、次章からの各論に入ってゆくのが楽しみになるでしょう。



1. 化学結合の種類と特徴

化学結合は単に結合ともいい、原子を結びつけて分子にする力です。結合は重力などと同じように、物質の間に働く引力の一種ですが、重力と違い、きわめて近い距離の間でしか働くかないという特色があります。

1 化学結合とは

結合には多くの種類があります。しかし、大きく分類すると、原子の間に働くものと、分子の間に働くものに分けることができます。

普通に結合というと、原子を結合して分子を構成する結合をいいます。しかし、バイオの特徴は分子間に働く結合が重要な働きをするということにあります。分子の性質には、原子間距離とか、結合角度などのように、分子1個を調べれば明らかになる性質があります（図0-1）。

一方で、融点や沸点、粘度などは分子1個をどのように詳細に調べても決してわかりません。これらの性質は分子が集団として機能するときに初めて発現する性質なのです。そして、これらの性質に大きく影響するのが分子間の結合なのです。

2 原子間結合の種類

原子間の結合には、食塩（塩化ナトリウム）NaClを構成するイオン結合、鉄や亜鉛を構成する金属結合などがあります（図0-2）。しかし、バイオで活躍する有機分子を構成する結合はほとんどすべてが共有結合です。

共有結合は最も化学結合らしい結合ですが、少々複雑です。共有結合はまず σ （シグマ）結合と π （パイ）結合という、多分耳慣れない結合に分類することができます。そしてこの2種類の結合が組み合わさって単結合、二重結合、三重結合などの耳慣れた結合が発生するのです（3、4章参照）。

また、ヘモグロビン、クロロフィルなどで、金属原子（イオン）と有機物が結合するものに配位結合というものがあります（7章参照）。バイオ分野における配位結合の研究は今後ますます発展するものと思われます。

3 分子間力の種類

分子間に働く結合は原子間に働く結合に比べれば弱い力です。そのため、結合とは呼ばれず、分子間力と呼ばれます。

分子間力として最もよく知られているものは水素結合でしょうが、そのほかにファ

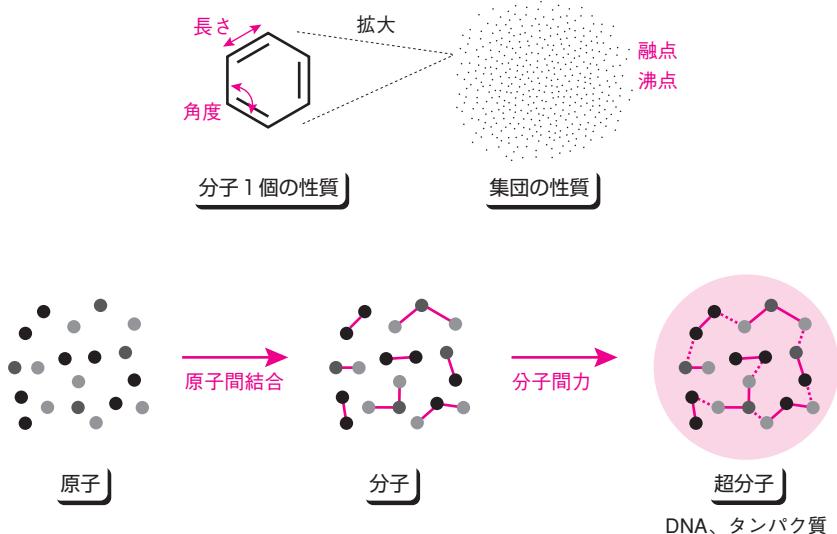


図 0-1 化学結合が分子を作る

原子 間 結 合	イオン結合		
	金属結合		
	共有結合	σ 結合	単結合
		π 結合	二重結合 三重結合
	配位結合		
	水素結合		
分子 間 力	ファンデルワールス力		
	疎水性相互作用		
	$\pi\pi$ スタッキング		

図 0-2 化学結合の種類

ンデルワールス力、疎水性相互作用、 $\pi\pi$ スタッキングなど個性的な結合があります(図 0-2)。分子間力はDNAにおいて特有の塩基同士を結びつける力、タンパク質の立体構造を形成保持する力、酵素作用において酵素と基質を選択的に結びつける力など、生体の重要な機能発現の場でキャスティングボードを握る結合として重要な働きをします(8, 9章参照)。

分子間力を理解すると、生体中での分子の動きが“見える”ようになることでしょう。



2. 化学結合は電子雲の分布

金属結合やイオン結合の本質はプラスとマイナスの電荷の間に働く静電引力とみなすことができます。しかし、共有結合ではチョット変わっています。バイオで扱う分子の多くは有機化合物であり、有機化合物はほとんどすべての部分が共有結合で成り立っています。したがって、バイオの研究を進めるためには共有結合の理解が必須になります。

ここでは、各論を理解するための足がかりを作つておくことにしましょう。

1 電子雲が原子の性質を決める

原子は原子核と電子からできています。原子核は小さく重い粒子であり、原子の奥深い中心にあります。原子核の周りを取り囲むのが、軽くて軟らかくフワフワした電子雲です（図0-3）。

もし原子を見ることができたら、見えるのは外側の電子雲だけになります。また、原子同士が衝突した場合、実際に触れ合うのは電子雲だけです。ということは原子の性質を決定するのは電子雲ということになります。すなわち、化学というは電子雲の科学と言ひ直すこともできるのです。

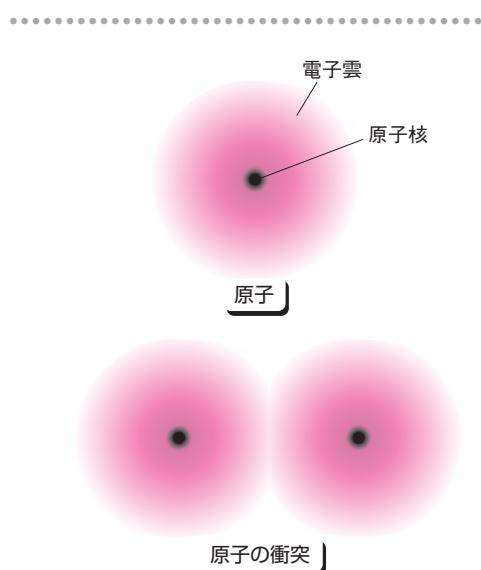


図0-3 原子のビジュアル化

2 電子の移動とイオン結合

結合も原子の性質の表れの1つとみることができます。原子から電子が取れれば陽イオンとなり、反対に加われば陰イオンとなります。このようにしてできた陰陽両イオンの間の静電引力がイオン結合の本質になります（図0-4）。すなわち、結合のなかには電子移動の結果生じているものもあるのです。

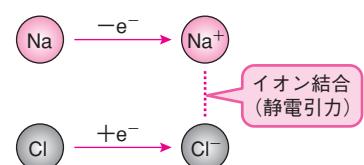


図0-4 イオン結合

3 結合電子雲が共有結合を作る

共有結合も電子雲の働きによるものであり、共有結合を構成する電子雲は特に結合電子雲と呼ばれます。共有結合は、結合する2個の原子がこの共有結合電子雲を持ち合うことによる結合なのです（図0-5）。

共有結合の特徴は分子を構成する原子の間で電子の移動がないということでしょう。典型的な共有結合でできた分子である水素分子は、分子を構成する2個の水素原子は両方とも中性のままでです。

共有結合では、原子の間に存在する結合電子雲があたかも糊のような働きをしていえると考えることができます。共有結合については、3章で詳しく取り上げます。

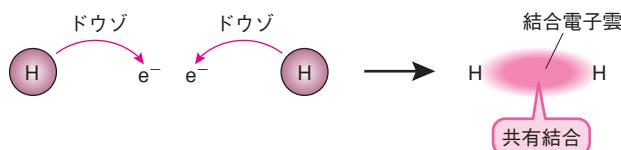


図0-5 共有結合と結合電子雲

4 結合のイオン性

水素分子のような典型的な共有結合分子を除けば、多くの共有結合分子には電気的にプラスの部分とマイナスの部分が生じています。これは共有結合にイオン結合が混じったようなものであり、結合分極といわれます（3章参照）。

結合分極は原子が電子を引きつける度合いに強弱があることに起因します。このような電子を引きつける度合いを電気陰性度といいます（1章参照）。酸素Oと水素Hでは電気陰性度はOのほうが大きいです。そのため、O-H結合では結合電子雲を酸素が奪い、その結果Oは幾分マイナスに、Hは幾分プラスに帯電します。すると、OとHの間に静電引力が生じ、という具合に、結合の輪は次々と広がってゆきます（図0-6）。

生体の中の分子はこのようにすべてが関連しあって機能しているのです。

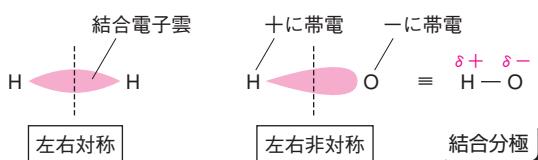


図0-6 電気陰性度の差による結合分極



3. 化学結合は分子の構造、反応性を支配

イオン結合は、プラスとマイナスの電荷の間に働く静電引力です。したがって方向に関係なく作用します。

しかし共有結合には方向性があります。この結果、分子に構造が導入されます。

1 分子構造と結合

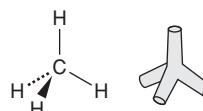
分子には形があります。分子の形というのは、原子核を結んだ線が表す幾何学的な形をいいます。

分子には図0-7のように、いろいろの形をしたものがあります。同じように3個の原子でできた分子でも、水H-O-Hは“く”の字型に曲がっていますし、二酸化炭素O=C=Oは直線状です。メタンCH₄は海岸に並ぶ波消しブロックのテトラポッドのような形ですし、ベンゼンは六角形の平板状です。そして、これらの構造は共有結合の方向と個数によるのです。

このように、結合は分子の形と構造を決定するのです（4章参照）。



くの字型 一直線



テトラポッド型



六角タコ型

図0-7 分子の形いろいろ

2 物性と結合

エタノールCH₃CH₂OHとジメチルエーテルCH₃OCH₃はともに分子式がC₂H₆Oであり、構成原子は同じです（図0-8）。しかし、エタノールはお酒に含まれるアルコールであり、飲めば愉快になります。しかし、ジメチルエーテルを飲む人はいませんし、飲んだらかなり危険なことになるでしょう。

すなわち、同じ原子でできた分子でも、結合がどのようにになっているかでその性質は全く変わってしまうのです。

このように、結合は分子の性質、物性を決定する力があります。

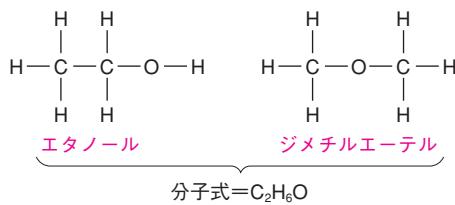


図 0-8 同じ原子でできた構造の異なる分子

3 反応性と結合

化学反応には多くの種類がありますが、どのような反応にしろ、必ず結合の変化が伴います。

例えば図 0-9 上の $\text{A} \rightarrow \text{B}$ のように、分子式の変化を伴わない反応を異性化といいます。異性化は原子の結合順序が変化しただけの反応です。しかし図 0-8 の例でみたように、結合順序が違えば、分子は全く異なったものになります。

図 0-9 下に示した $\text{A}-\text{A} \rightarrow \text{B}=\text{B} + \text{C}$ の反応は、 A_2 という分子から C がとれ、 B_2 が生成したもので、一般に脱離反応といわれます。この反応では $\text{A}-\text{A}$ という単結合が $\text{B}=\text{B}$ という二重結合に変化しています。

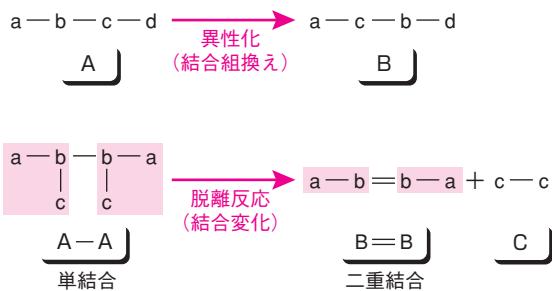


図 0-9 異性化と脱離反応

このように、反応は結合の変化と言い直すこともできます。結合は、言ってみれば化学のすべてと言ってもよいようなものです。結合をキチンと理解すれば、それをもとにして化学のかなりの部分を理解することができます。しかし、結合を理解しないと、多くの“化学知識”が根拠の乏しいアヤフヤなものになり、応用の利かない、要するに役に立たない“知”になってしまいます。それは糸と織物の関係のようなものです。

断片的な“知”を組織立った“知識”にするためには哲学が必要です。結合は化学においてその哲学の役割を果たしているのです。皆さんはすでにたくさんの糸をお持ちです。それをきちんとした織物に仕上げるとその糸は美しい体系となり、生きたものとなります。本書はそのようなお手伝いをしようというものです。



4. 化学結合は分子間にも働く

多くの化学結合は原子間に働き、原子を結びつけて分子にします。しかし、本章1節で簡単に触れたように、結合のなかには分子同士を結びつけるものもあるのです。

1 分子を引きつけあう力

本章2節で述べたようにO-H結合は結合分極を起こし、酸素がマイナス、水素がプラスに荷電しています。プラスに荷電した粒子とマイナスに荷電した粒子が近づけば両者の間に静電引力が働きます。

水の場合に、まさしくこのことが起ります。すなわち、2つの水分子の酸素と水素の間で静電引力が生じるのです（図0-10）。このようにO-H…Oの結合関係で、…で表した部分を水素結合といいます。水では水素結合は水分子を結びつける力となっており、この結合によって水分子は多くの間に結合を生じ、緊密な集合体を作ります。このような集合を一般に会合体といいます。

ちなみに氷は、無限大ともいえる個数の水分子が水素結合によって三次元に緊密に結合したものです。

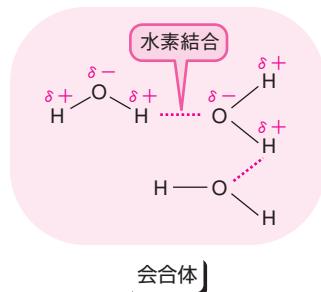


図0-10 水分子の水素結合

2 分子の立体構造を形成保持する力

分子間に働く力は分子内で働くこともできます。長い分子、すなわち天然高分子の離れた位置にある2個のO-H結合はあたかも異なる分子に存在するO-H結合のように水素結合することができます。

A) アミノ酸とタンパク質

天然高分子といえば代表的なものはタンパク質でしょう。天然のタンパク質は一部の例外を除き20種類のアミノ酸が固有の順序で並び、結合したものです。しかし、ただ隣り合ったアミノ酸が結合しただけでは機能的なタンパク質とはなりません。

機能的なタンパク質になるためには、満たさなければならない約束があります。そのような約束の1つが立体構造です。タンパク質は再現性のある特定の立体構造をもたなければなりません。例えば牛のプリオントンタンパク質の場合、固有の立体構造を保持していれば正常な機能を果たします。しかし、何かの事情で本来の立体構造が崩れ

オカシナ立体構造をとると、機能も変化してしまいます。これが狂牛病に関与しているのではないかと考えられていますが、この2つは別のタンパク質とみなされます。

B) 分子間力

タンパク質の立体構造の形成・保持には、分子間力が重要な働きをしています。例えば、分子内の適当に離れた位置にある2個のO-H原子団（ヒドロキシ基）の間で生じた水素結合によって、長い毛糸の特定部分がピンで留められたような構造になるのです。このような“ピン留め構造”によってタンパク質の固有の立体構造が形成され、保持されるのです。

水素結合はO-H間の結合に限りません。いくつかの原子団（基）、S-H、NH₂、C=Oなどが生体分子内に水素結合を作ることが知られています。分子内に形成されて立体構造を保持する力をもつ結合として、S-S結合（ジスルフィド結合）などの共有結合のほか、ファンデルワールス力、疎水性相互作用などの分子間力も重要な役割を果たしています。分子間力については8章で詳しく解説します。

3 分子を高次構造体にする力

水分子は何個もの分子が水素結合によって緊密に結合し、会合体を構成しています。しかし、会合体を作るのは水だけではありません。

DNAは二重らせんといわれます。これは、2本の長い高分子鎖が水素結合を作つて引きつけあい、特有の二重らせん構造をとっているためです（図0-11）。このように複数個の分子が分子間力で引きつけあい、特有の高次構造体を作ったものを特に超分子といいます。

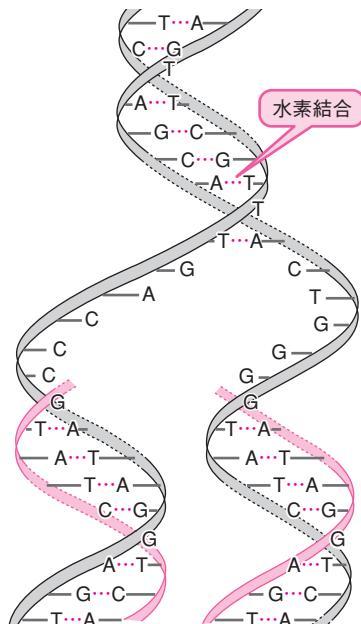


図0-11 DNAの二重らせん構造

このような例には、ほぼ同じ構造をもった2種類4個のタンパク質が作ったヘモグロビンがあります。また、生体反応において決定的な役割を果たす酵素が基質と組み合わさった構造体も超分子の一種とみなすことができます。

このように、分子間力は分子の立体構造、超分子構造を構成、維持するのに決定的に重要な役割を果たしているのです。

さあ、これで導入は終わりです。いかがでしたか？ 大体はご存知のことだったのではないかでしょうか？ 次章からは、これらのことを持続的に詳細に、正確に検討してゆきます。楽しみにしていてください。