

フラーレンC₆₀の化学

◆西山 豊 (大阪)

1996年度のノーベル化学賞は、サッカーボールの形をした分子C₆₀の発見に贈られた。C₆₀は電子素材などさまざまな分野の応用で爆発的な研究開発を呼び起こした、と1996年10月11日の朝日新聞(夕刊)は報じている。

化学賞を受けたのはロバート・カール米ライス大教授、リチャード・スモーリー同大教授、ハロルド・クロート英サセックス大教授で、ここ数年、前評判の高かった研究者たちである。

C₆₀の発見は、まったくの偶然だった。炭素が長くつながった星間分子を研究していたクロートは、こうした分子を作る実験をしていたスモーリーを訪ね、1985年9月に実験を始めた。カールが仲介役になった。炭素の固まりにレーザー光を当てて蒸発させ、新しい分子を作ろうとした。3日ほどで、炭素60個が集まった安定な分子が多くできた。だが、その時はこの60個をどう並べれば安定な分子ができるのか分からなかった。

クロートは「その時、思い出したのがモンリオール万博で見た鉄骨ドーム構造で、六角形の格子の所々に五角形が混ざると丸い構造ができる。これだと思った」と話している。最後にたどり着いたのはサッカーボールの表面のように、六角形と五角形の頂点に炭素原子を置いた構造だった。

フラーレンC₆₀の分子模型とサッカーボールを図1に示す。

炭素原子は多面体の頂点に位置している。五角形の面が12、六角形の面が20あって、1つの五角形を5つの六角形が囲んでいる。サッカーボールにも、五角形と六角形と同じパターンがある。炭素だけでできている完全に対称なこの構造は、分子構造におけるまったく新しい概念を表している。英国の科学雑誌『ネイチャー』(1985年11月14日号)に論文が掲載されて世界的に有名になった。ドーム構

造を作った著名な建築家バックミンスター・フラーにちなんで名称をバックミンスターフラーレンとし、略してフラーレンとしたのがその由来だ。

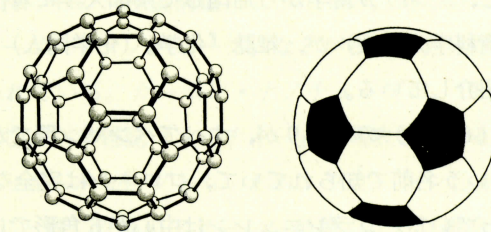


図1 C₆₀の分子模型とサッカーボール

数学的に興味あることは、オイラーの公式によると、60個の原子から成るグラフアイトのシートを曲げて閉じた球をつくることはできないということだ(図2)。ちなみに各要素が六角形の金網を丸めても球面はできない。

ジム・バゴット『究極のシンメトリー：フラーレン発見物語』(白揚社)にはその理由が説明されている。オイラーの多面体定理は、多面体の頂点の数をV、面の数をF、辺の数をEとすると、これらには次の関係が成り立つ。

$$V + F = E + 2$$

60個の原子に対して頂点の数は60である(V=60)。各頂点は他の3つの頂点を結合しているから、1つの頂点は3つの「半分の辺」と結び付いている。なぜなら1つの辺は2つの頂点で共有されているから。したがって、辺の総数は90である(60×3÷2=90, E=90)。すべての面が六角形だとすると、1つの辺は2つの面(1つの辺の両側に1つずつ)のそれぞれの6分の1を構成しているから(90×2=180, 180÷6=30)、面の総数は30である(F=30)。

すぐわかるように、V+F(90)はE+2(92)に等しくない。そのため、グラフアイトのシートからC₆₀の多面体をつくることは不可能である。

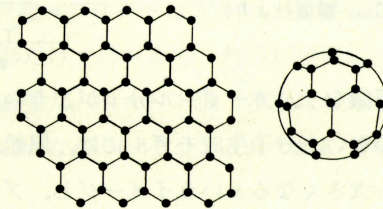


図2 見かけにだまされてはいけない。(ジム・バゴット『究極のシンメトリー』白揚社より)

ところで、このサッカーボール型の分子は、スモーリーとクロートが発見するよりも15年前に、日本人化学者によって予言されていたのだ。

1970年のこと、アメリカ留学から帰国して京都大学に着任したばかりの大澤映二（現豊橋技術科学大学教授）が、雑誌『化学』（化学同人）に「コランニュレン」という分子を紹介している。

ベンゼン環（6角形）のまわりが、すべてベンゼン環でかこまれた炭化水素は「コロネン」という名前で知られていて、コロネンは完全な平面構造をとっていることもわかっていた。コランニュレンは中心が6角形ではなく5角形で、そのまわりに5個のベンゼン環がついたものである（図3）。

大澤は、この分子は平面ではないが、浅い皿か盃のような形の分子だから、3次元的に延長していくと、5角形と6角形だけでちょうど球面を被うような形になり、そのときの炭素数は60個となるだろうと予測している。また、この構造は分子軌道を計算した結果、かなり安定であるに違いないという結論も出している。ただ、残念なことに、この論文が日本語で書かれたものであったために、スモーリーらに見逃がされていたのだ。

現在は、大澤のプライオリティ（科学発見における先取権）が認められ、スモーリーらも大澤の予言を「C₆₀に関する化学者による最初の記述」として認めている（山崎昶『サッカーボール型分子C₆₀』講談社）。

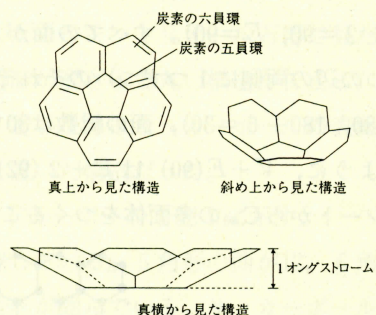


図3 C₆₀を予言するもとになったコランニュレン分子の構造（山崎昶『サッカーボール型分子C₆₀』講談社より）

この不思議なサッカーボール分子がどういう過程でできるかは、まだほとんど分かっていない。分子生成モデルには、風船がふくらむように、小さな塊からグニャグニャ大きくなるというイメージと、ブロックを積み上げるように規則的に

組み上がり、最後に球が閉じるとする2説がある。

フラレンC₆₀の研究が急速に進むにつれて、C₆₀より多い炭素数でサッカーボールに似た構造を持つものや多重構造になったもの、あるいは炭素原子がチューブ状になった「カーボン・ナノチューブ」などが次々に発見され、それらの応用研究も盛んに行われている。カーボン・ナノチューブは、1991年、NECの飯島澄男研究員が発見し、科学雑誌『ネイチャー』に発表している。

ナノチューブはバッキーチューブともいわれ、フラレンC₆₀の製造過程で偶然に発見された。C₆₀と同じ直径のフラレンが長くなった場合、C₅₀₀で長さが約61Åになるナノチューブの大きな特徴は七員環を含むものが発見されたことである。五員環がフラレンを球状に閉じさせるのに対して、七員環は逆にフラレンを広げる性質をもつ。七員環は、鞍状の曲面（負の曲面率）に発生する（『C₆₀・フラレンの科学』化学同人）。

これをまとめると、六員環は平坦な平面に発生し、五員環は凸な曲面に発生し、七員環は鞍状の曲面に発生するということになる。

以上、フラレンC₆₀について説明したが、私は、これがサッカーボールと関係しているとは知らなかった。ヒトデの研究のとき、卵割された32個の細胞の配置を準正32面体を使って説明した。そして、準正32面体は基本数が32とばかり思っていた。フラレンの場合は炭素原子が60であるが、これも準正32面体で説明できる。準正32面体は、面の数でみるなら32であるが、頂点の数でみるなら60である。私は、面を基準にしていたため同一性に気が付かなかったのだ。

前回の連載で、花の形を決めるのは茎頂細胞の配置が大きな要因になっていることは間違いないとした。それでは、茎頂にある細胞はどのような配置になっているのだろうか。このモデル化が大きな問題になっていた。

フラレンC₆₀から受けた私の研究へのヒントは大きい。茎頂が平坦なら6角形で被えるが、曲面になると6角形だけではだめで5角形が必要になってくる。さらに、場合によっては7角形も必要だ。シュート頂（茎頂）が丸いドーム状になる。この丸みが、5角形の存在につながり、そして5弁の謎につながるのではという予感がしてならない。

（大阪経済大学）