

マヤ顔料の神秘を解明

驚くべき古代顔料・マヤブルーの化学構造を解き明かすために、BIOVIAのCerius2ソフトウェアを用いた研究者たちがいます。

マヤ文明とは、おそらく最も有名な古代文明であり、紀元前250年頃に中央アメリカのユカタン地方で勢力を誇っていました。この地域は、現在は南部メキシコ・グアテマラ・北部ベリーズ・西部ホンジュラスとして良く知られており、蒸し暑いジャングルの上にそびえ立つピラミッドを含め、過去の偉大な文明の物理的な痕跡が残されています。しかし、この素晴らしい建造物だけでなく、知的学問においてもマヤ文明はさらに偉大な影響を現代世界に与えました。彼らの高度な数学は、惑星の運行を追跡し、日食・月食を予測して正確な暦を作り出しました。さらにマヤの書記官は、書き言葉である象形文字を生み出しました。また、マヤ文明は精巧な装飾が施された壁画・塑像・陶芸品を含む芸術品においても有名です。これらの芸術品に使用された色彩は、おそらくその時代で最も華やかなものであったと思われ、天然材料（たとえば、鉄・酸化マンガン・木炭）に由来するものでした。これらの原材料は用途に応じて特殊な結合剤と混ぜ合わされ、そのためには実用的な化学の知識が必要とされました。

マヤの人々に使用された最も印象的な色彩の一つがマヤブルーであり、カリブ海の海面の色に似た明るい青緑のターコイズ色をしています。長い年月と厳しい気象条件にもかかわらず、マヤブルーで色づけされた陶磁器は何世紀を経た後も色あせてはいません。さらに注目すべきことに、その色は極度のpH、化学溶剤、微生物分解に対して著しい耐性を持っています。この顔料は、有機原料と無機原料（自然粘土であるパリゴルスカイトと植物抽出物であるインディゴ）の両者の混合物です。特に驚くべきことには、既知の有機顔料でこのような安定性を示すものはないということです。それゆえ、マヤブルーの化学的複雑性と非凡な物理特性は、50年以上にわたってずっと科学的に注目され続けています。その顔料の実験室における製造法はわかっているにもかかわらず、その安定性の秘密には未だに謎が残されています。

テキサス大学のLori Polette氏、Norma Ugarte氏、Russell Chianelli氏とメキシコシティにあるメキシコ国立原子力研究所のJosé Yacamán氏は、共同研究の中でBIOVIAの分子モデリング&シミュレーションソフトCerius2を使い、初めてパリゴルスカイトの結晶構造の仮想モデルを作りました。この粘土は繊維状で、チャンネル構造を持ち、そのチャンネル内にゆるく水分子を保持しています。これらの水分子は加熱によって除去され、一度加熱されると他の分子を取り込むことができます。マヤブルーの場合、インディゴ分子が取り込まれ、結果的に顔料の安定性をもたらします。これらの研究者達は、Cerius2を使いこの取り込み過程をシミュレートし、一度取り込みの条件が最適化されると、インディゴ分子が強い化学結合によってチャンネル内に保持されることを見いだしました。

Polettes氏は「マヤブルーは、無類の安定性を持ちながら重金属を含んでおらず、それ故に非常に重要な物質です。塗料および顔料産業では、戦略的には重要だが環境的には扱いづらい金属を毎年大量に消費しているわけですが、彼らにとってこれは重要な発見です。これらの金属をふくむ顔料をマヤブルーのような顔料に置き換えていくことは、環境問題の現状を大幅に改善し、戦略的に用いられている金属の使用を減じる結果となるでしょう。」と述べています。

Polette氏はこの研究におけるBIOVIAのソフトウェアの重要性を強調し、「我々は実験室にてマヤブルーを合成によって作り出し、肉眼で見えるレベルから原子レベルまでのスケ

Industry Sector

塗料, コーティング

Organization

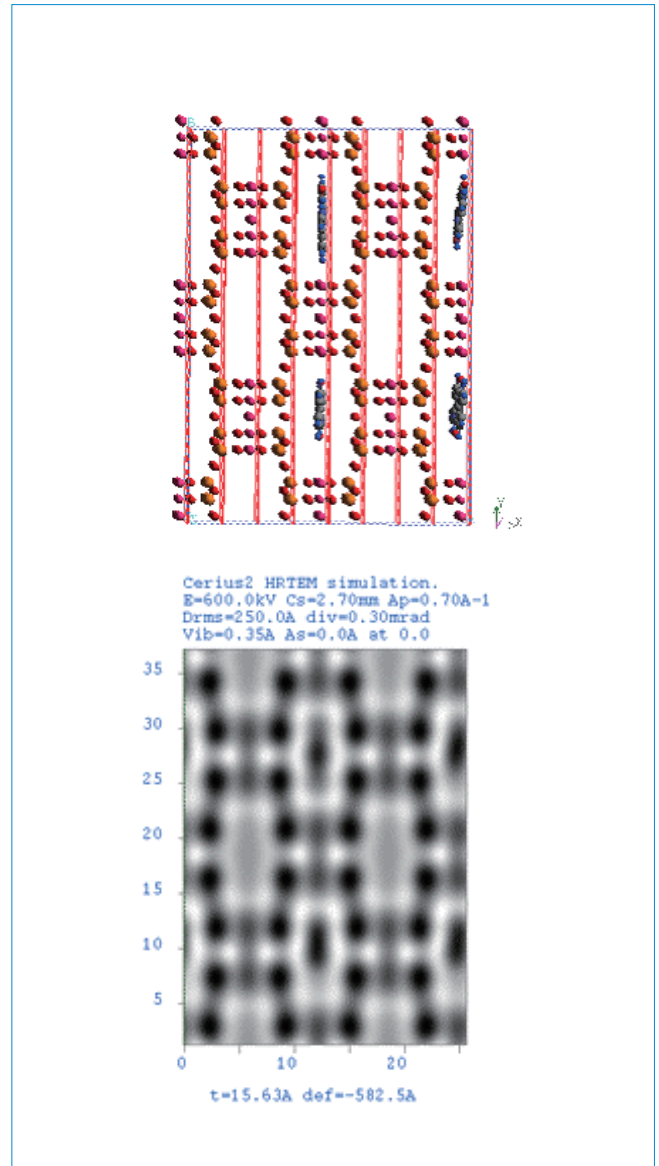
University of Texas at El Paso
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares,
Mexico City

Products

BIOVIA Materials Studio Cerius 2

これらの多くの機能は現在MS Modelingで利用可能です。

ールで、パリゴルスカイトとインディゴの複雑な相互作用を完全に理解しようとしました。Cerius2のようなプログラムの利用は、現代科学における最先端技術の応用例の一つです。」さらに「我々が装置から得た結果のほとんどすべてをCerius2上でモデル化し、理論的および実験的仮説と結論を比較することが出来ます。例えば、SorptionとHRTEMプログラムを使い、パリゴルスカイト粘土中に取り込まれている



BIOVIAの Cerius2 ソフトウェアを用いたマヤブルーの構造のシミュレーション

インディゴによって作られる超格子をモデリングしました。また、我々はシミュレーションされたX線回折パターンを用い、原材料中に存在する様々な鉱物相のモデリングも行いました。」と続けています。

これらの結果は、インディゴがパリゴルスカイトのチャンネル内に存在しているということと、さらに最も重要なこととして、何世紀にも渡って分子をつなぎとめている化学結合が存在するという初めての証拠を示したものです。「我々は現在、古代マヤ文明の技術に基づいた塗料をさらに開発中であり、塗料およびコーティング企業と協力してこれらの塗料の大規模開発を行っています。」とPolette氏は明らかにしています。

References

For the full paper, see: Scientific American Discovering Archaeology, August 2000, p. 46

(<http://www.discoveringarchaeology.com>).

For background information on the Maya, see:

<http://www.civilization.ca/membris/civiliz/maya/mmc01eng.html>

Maya paint secrets revealed