



TOHOKU
UNIVERSITY

科学論(11-12)

化学結合と化合物の世界

大学院理学研究科 化学専攻 大野 公一

2005年12月21日

2006年 1月11日

あとで、クイズが出ます。
できるだけ、メモしておくことを、
オススメします。



Koichi Ohno

*Graduate School of Science,
Tohoku University, JAPAN*

Challenge to the unknown world!

- 科学とは未知への挑戦である
- 未知の世界・前人未到の世界への模索
 - 何を探せばよいか？ *What?*
 - 何処に行けばよいか？ *Where?*
 - どうすればよいか？ *How?*



Serendipity!

- セレンディピティとは、
 - 貴重なものを偶然に発見する能力のことである。
- 未知との遭遇は、
 - 洞察 (Insight) ・ 直観 (Intuition) ・ 靈感 (Inspiration)
 - に優れた者
 - 希求心・探究心の旺盛な者
 - 常になぜ *Why?* と問う者に与えられる。

Frontier Spirit!

- チャレンジ精神とは、
 - 失敗の不安を克服しつつ、
 - 可能性が否定されていない目標に
 - 果敢に挑戦する**勇氣**と**情熱**である



物質は何からできているか？

- 元素からなる

- 水 : B.C.640 タレス
- 空気 : B.C.550 アナクシメネス
- 土 : B.C.540 クセノファネス
- 火 : B.C.500 ヘラクレイトス

- 火・空気・水・土 :

- B.C.440 エンペドクレス

- アリストテレスの哲学

- ↓ 18世紀

- 近代元素説 : ラボアジエ

- 原子 *atomos* からなる

- B.C.400 デモクリトス

- ↓

- 1803年

- 近代原子説 : ドルトン

化学元素の周期表

族 周期	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	ランタノイド	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	アクチノイド	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub						

常温で単体の状態

- 固体
- 液体
- 気体

金属 / 非金属

標準 単体が金属

太字 単体が非金属

水素と、この線から右側の原子は
非金属（太字で表記）

各元素は、
それぞれに固有の原子 *Atom* からなる

化合物と化学式

- 水 H_2O
- 二酸化炭素 CO_2
- メタン CH_4
- アンモニア NH_3
- 酢酸 $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ (食酢の主成分 CH_3COOH)
- 塩化ナトリウム NaCl (食塩の主成分)
- グリシン $\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$ (最も基本的なアミノ酸)

化合物の種類は、どのくらいあるのか？

- 我々の周りに約10万種
- 1965年には、21万種が知られていた。
- 現在は、
2500万種が知られており、
- 毎年約200万種ずつ増加している(人工的に作り出されている)。

化学式が同じなら、同じ物質か？

- とは限らない！
 - ジメチルエーテル CH_3OCH_3
 - エタノール $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
 - どちらも化学式は、 $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$
 - 原子同士の結合の仕方が違う
- 同じ化学式で、違う物質を、互いに異性体 (*isomer*) という。

原子から、分子を作ってみよう

*Let's play with **atoms** to make a molecule.*

- H原子2個から、水素分子 H-H ができる。
- O原子2個から、酸素分子 O=O ができる。
- さて、HとOを組み合わせると何ができるか？

- H2個とO1個から、 H-O-H
- H2個とO2個から、 H-O-O-H
ができる！

炭素 C や 水 H₂O から何ができるか？

Cの単体(同素体)

■ 石墨(グラファイト)



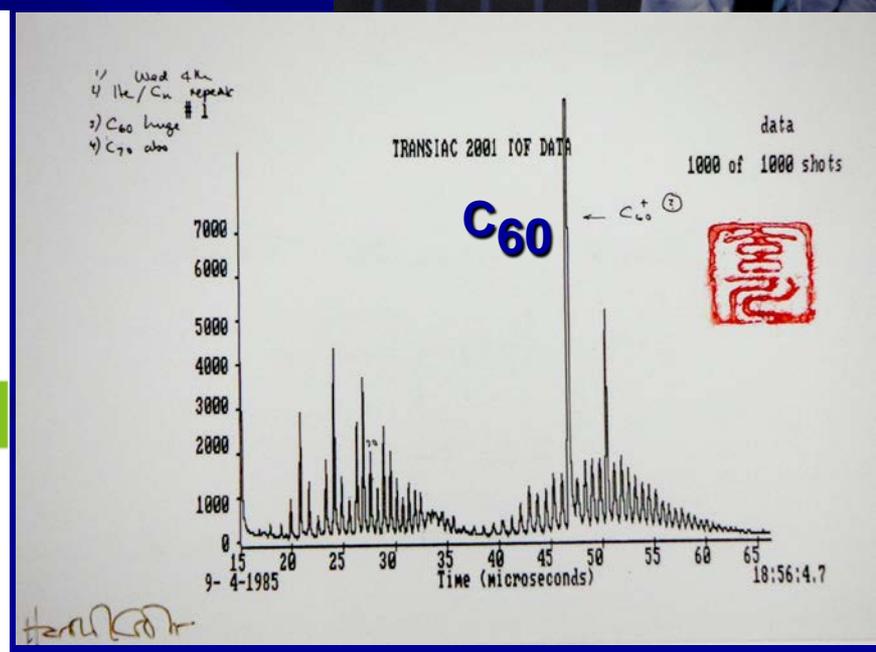
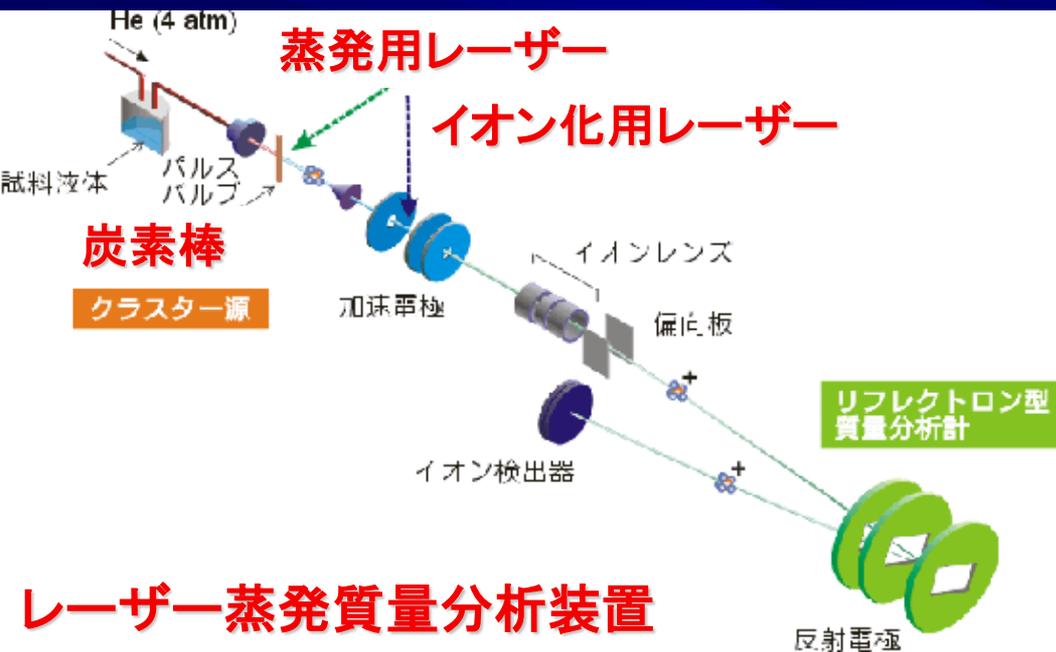
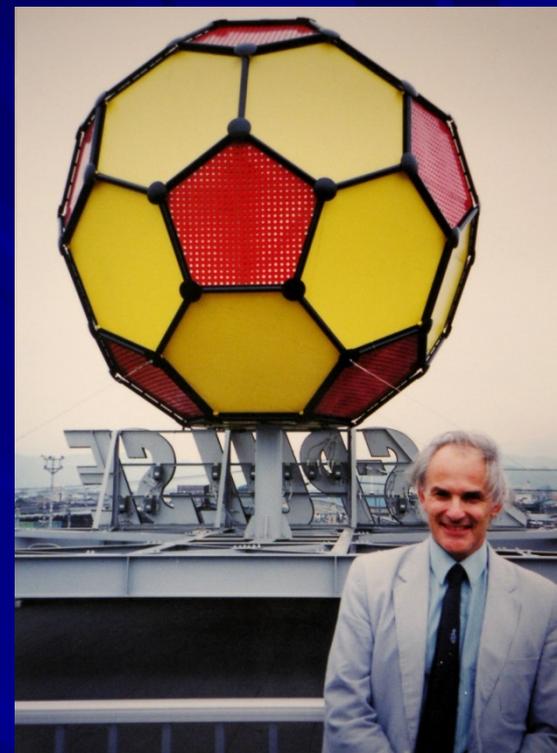
■ ダイヤモンド



サッカーボール状炭素の発見

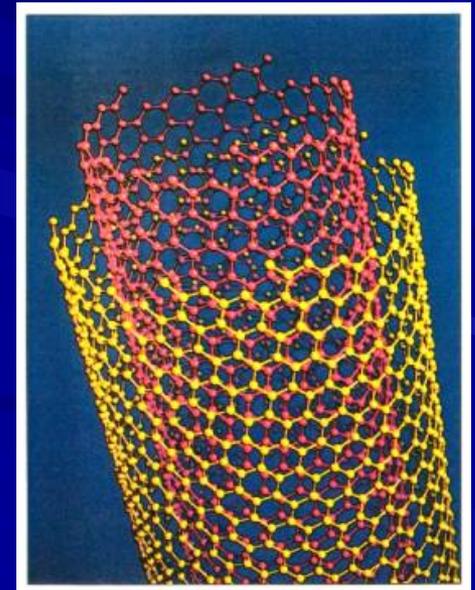
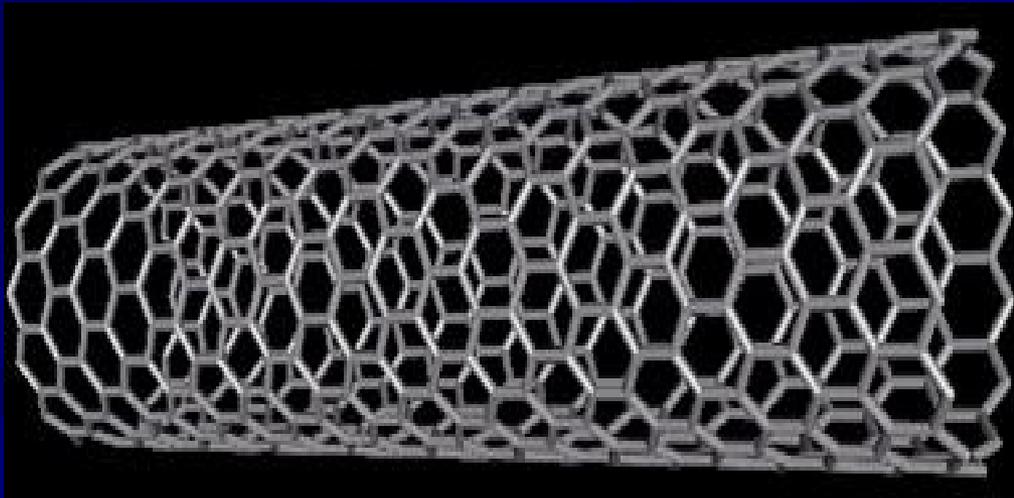
H.W. Kroto博士

宇宙から来る電波の謎を解くため
地上で炭素の反応実験 1985年



チューブ状炭素の発見 飯島澄男博士

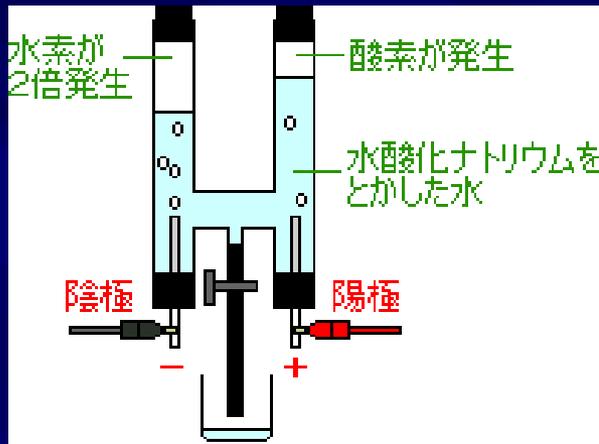
電子顕微鏡で原子の並び方を直接見ようとしてカーボンナノチューブを発見
1991年



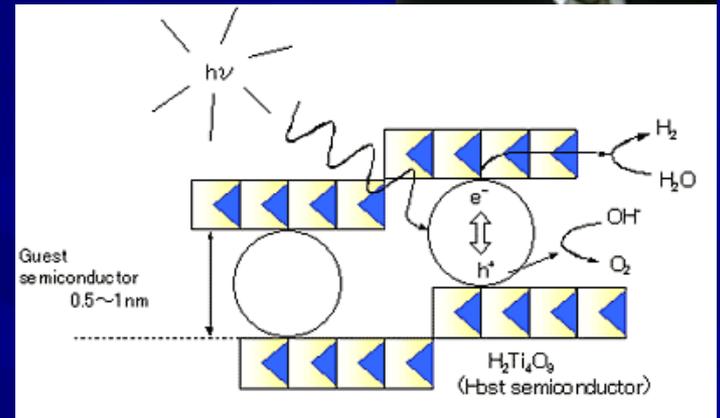
水 H₂O から何ができる？



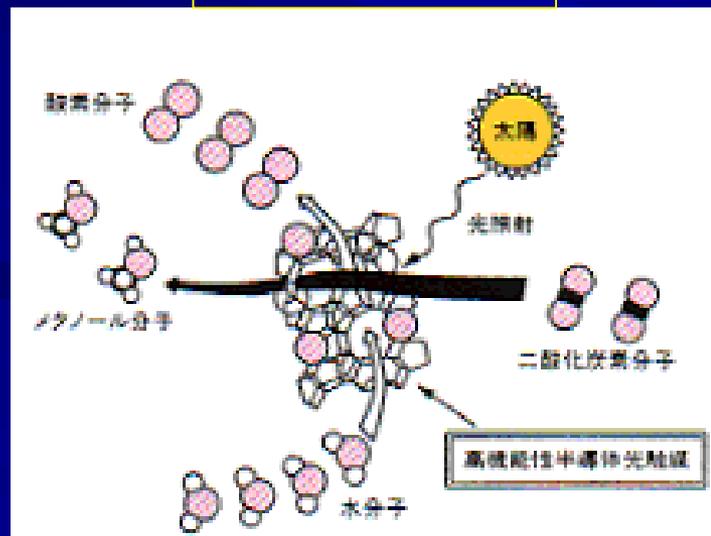
水の電気分解



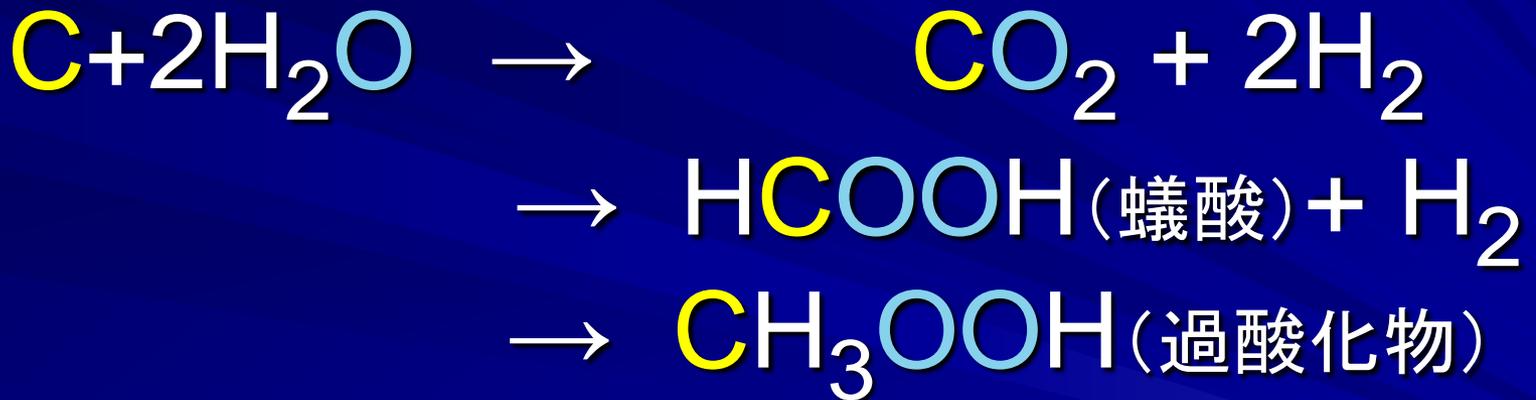
水が光分解することを発見 藤島 昭 博士 1975年



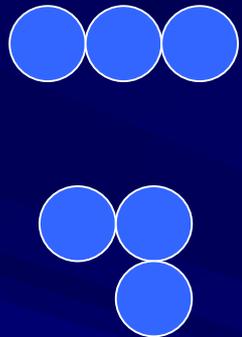
人工光合成



炭素 C と水 H₂O から何ができるか？



コンピュータ化学

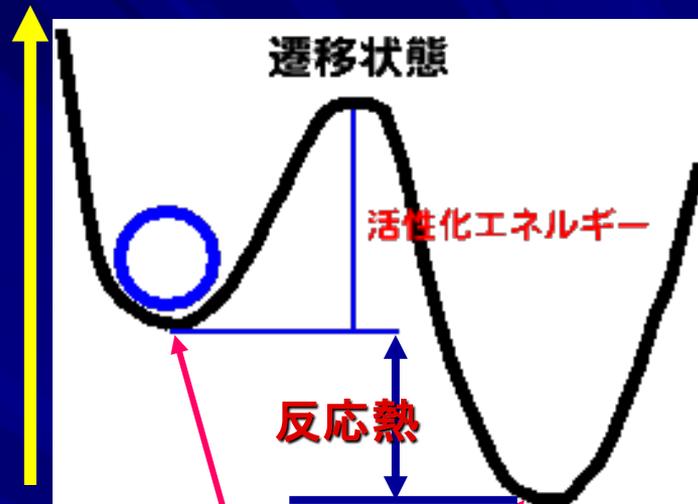


構造



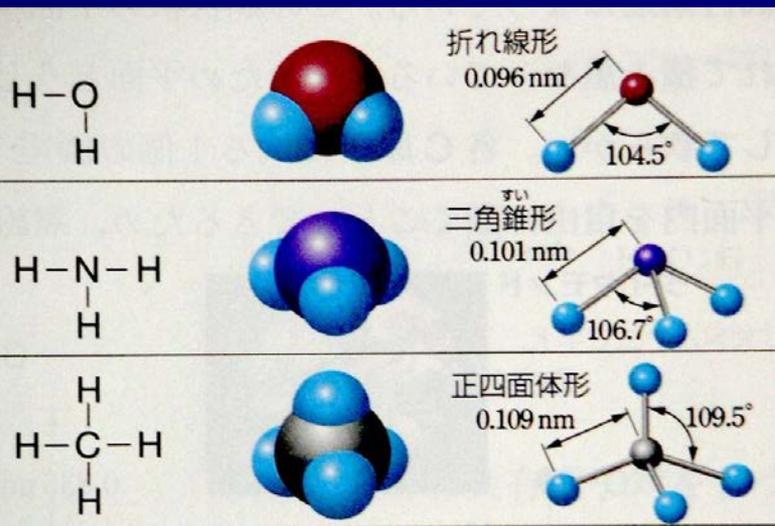
エネルギー

エネルギー



構造: 原子の並び方

極小点 (Minimum) の
構造とエネルギーを決定



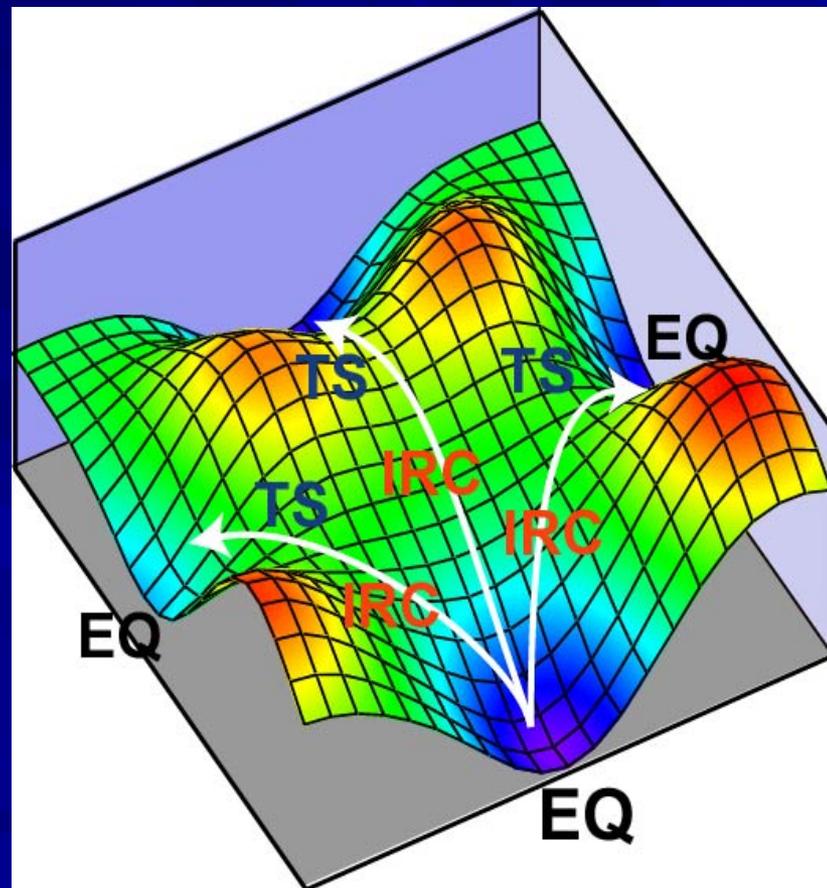
- 分子の形 (結合長・結合角)
- 結合エネルギー (反応熱)

エネルギー表面上の反応経路の探索

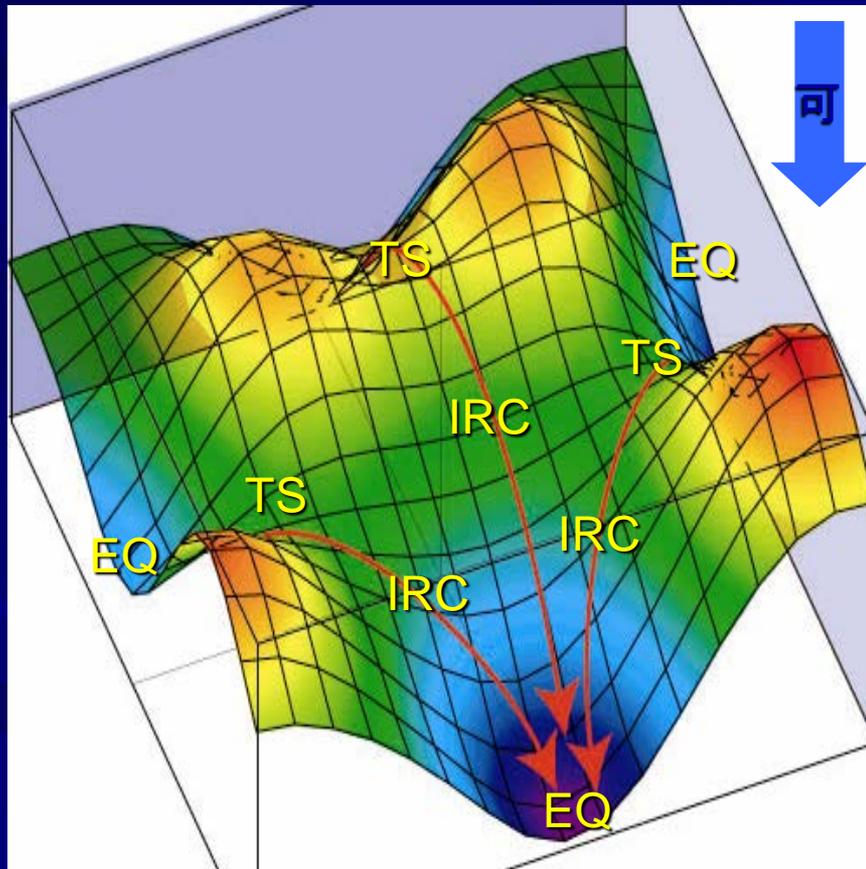
化合物 : 平衡点 極小点

活性化状態 : 峠 鞍点

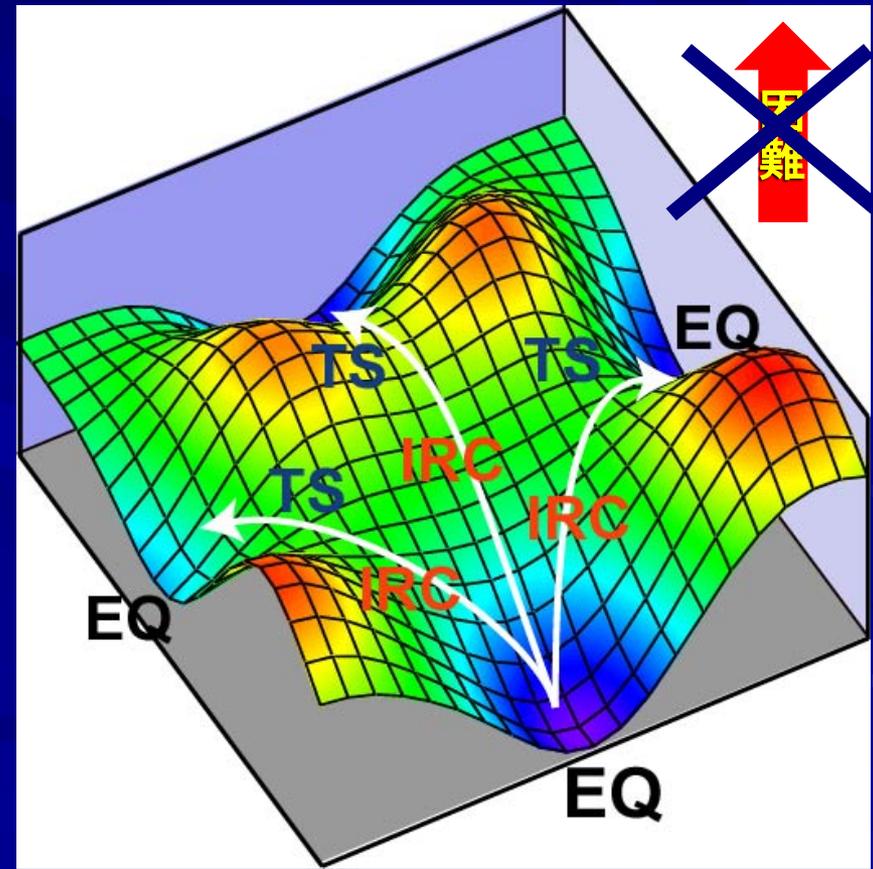
反応経路 : IRC 最低ルート



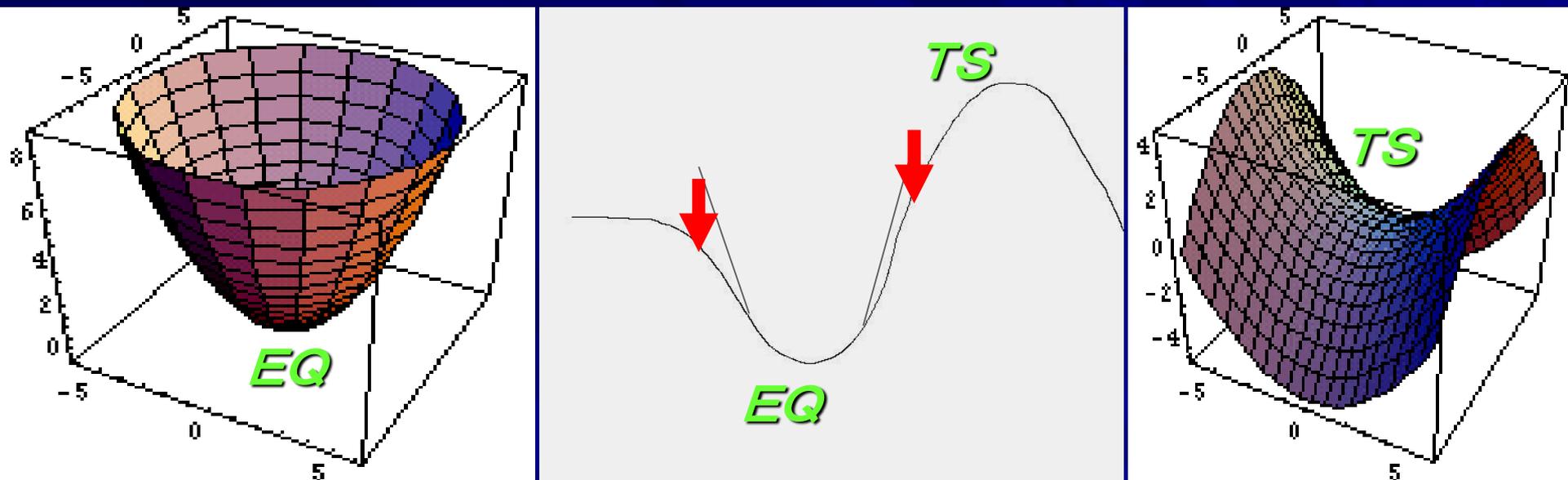
安定構造 (EQ) への
山下りは簡単!



遷移状態 (TS) への
山登りは困難!



化学反応の登坂アルゴリズム



K. Ohno & S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.* 384 (2004) 277.

新アルゴリズム

安定平衡点を囲む全方向の中で、

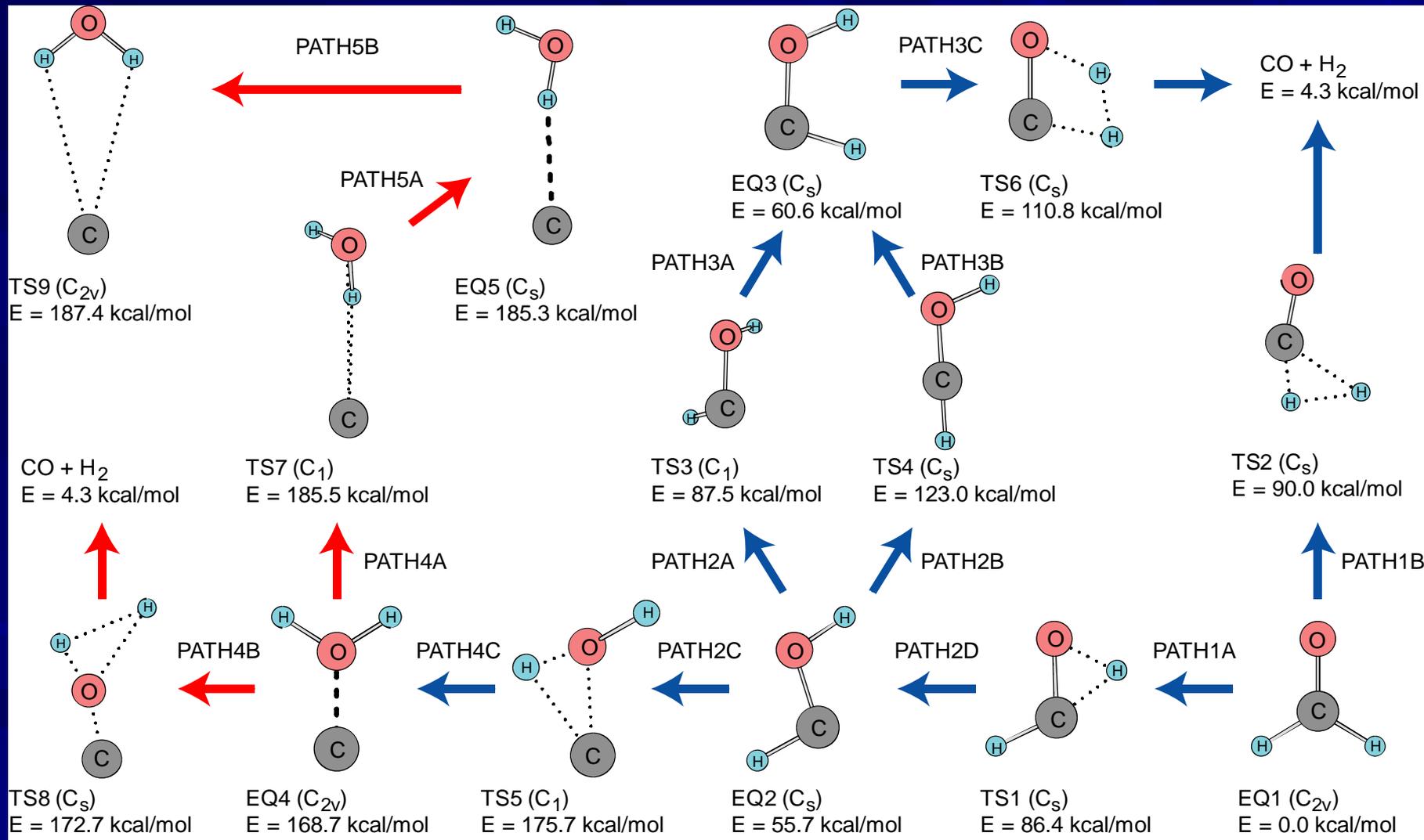
Downward Distortion ↓ が大きい方向を探す!

化学の**基本問題**が解けるようになった

反応のネットワークが全てわかる

- 1) **異性体**が全てわかる
- 2) **合成経路**が全てわかる
- 3) **分解経路**が全てわかる

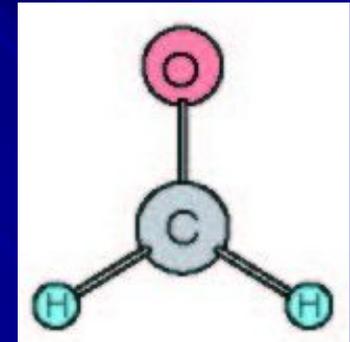
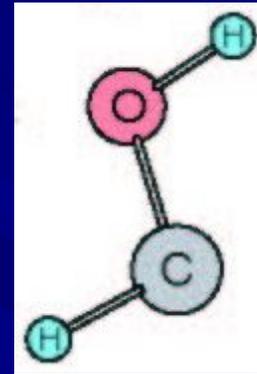
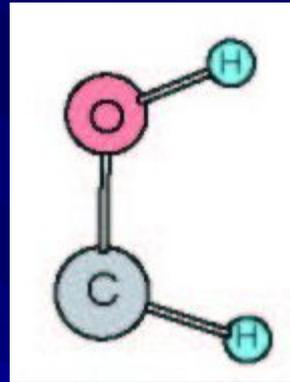
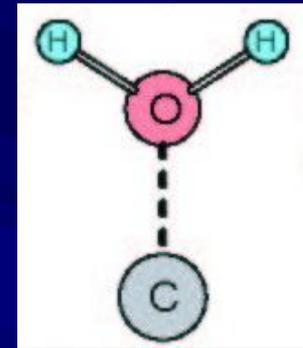
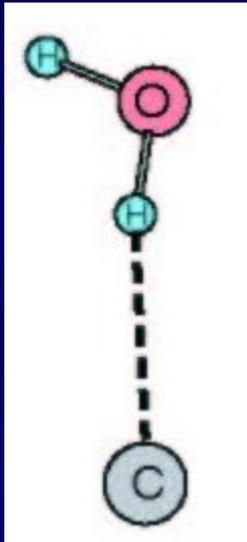
CH₂Oの合成・分解および異性体



← 新反応

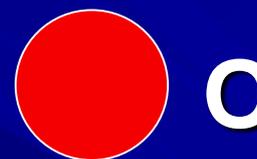
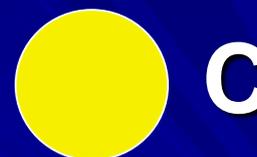
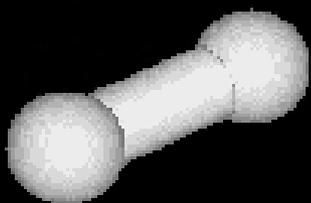
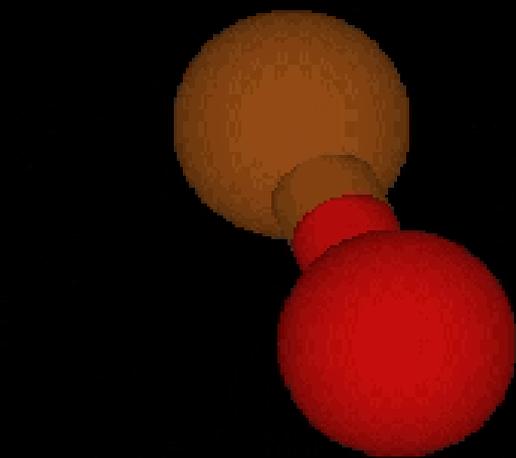
← 既知の反応

CH₂Oの異性体



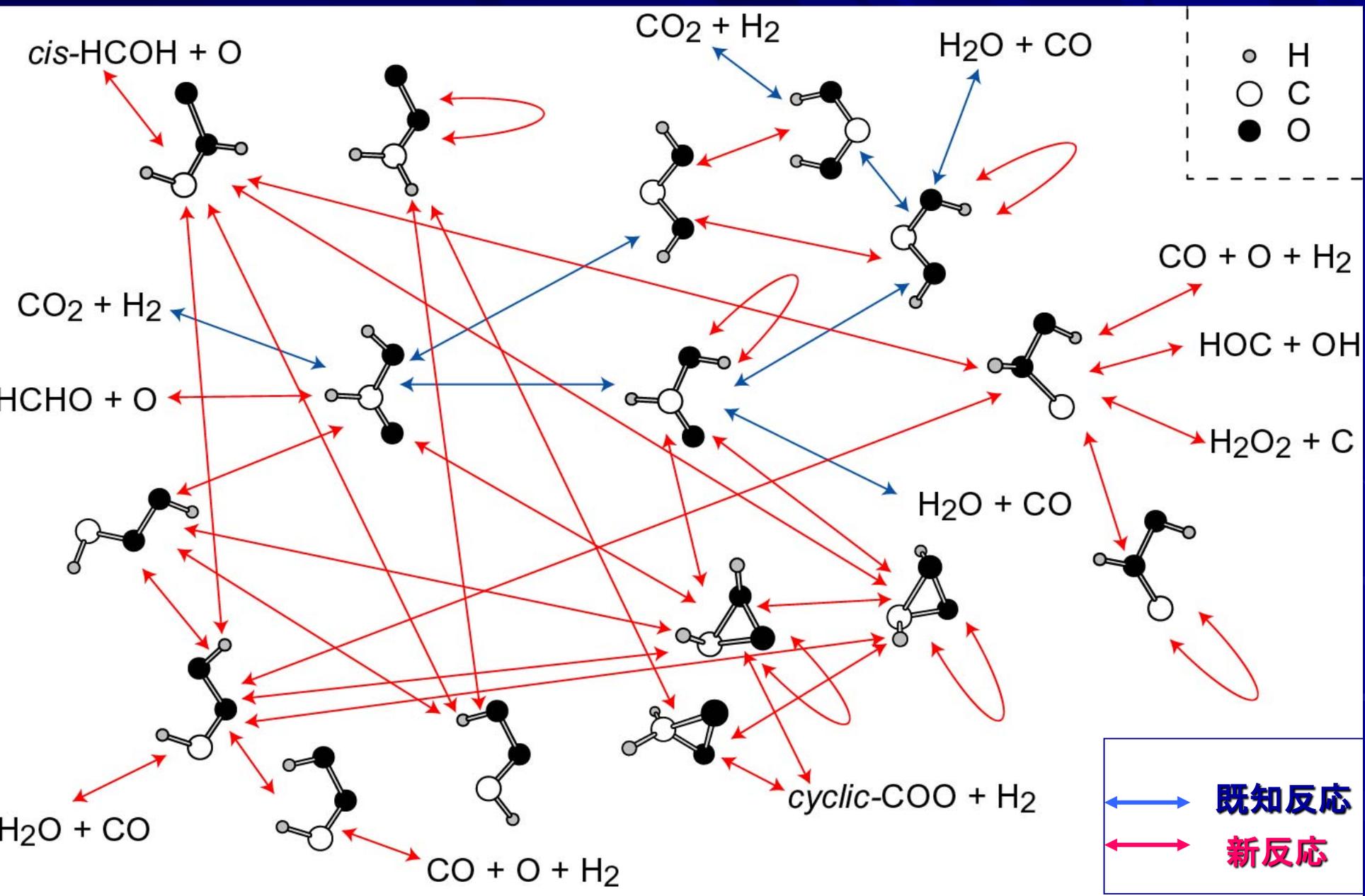
40.3 kJ/mol 14.5 kJ/mol 13.3 kJ/mol 0.0 kJ/mol

44.3 kJ/mol

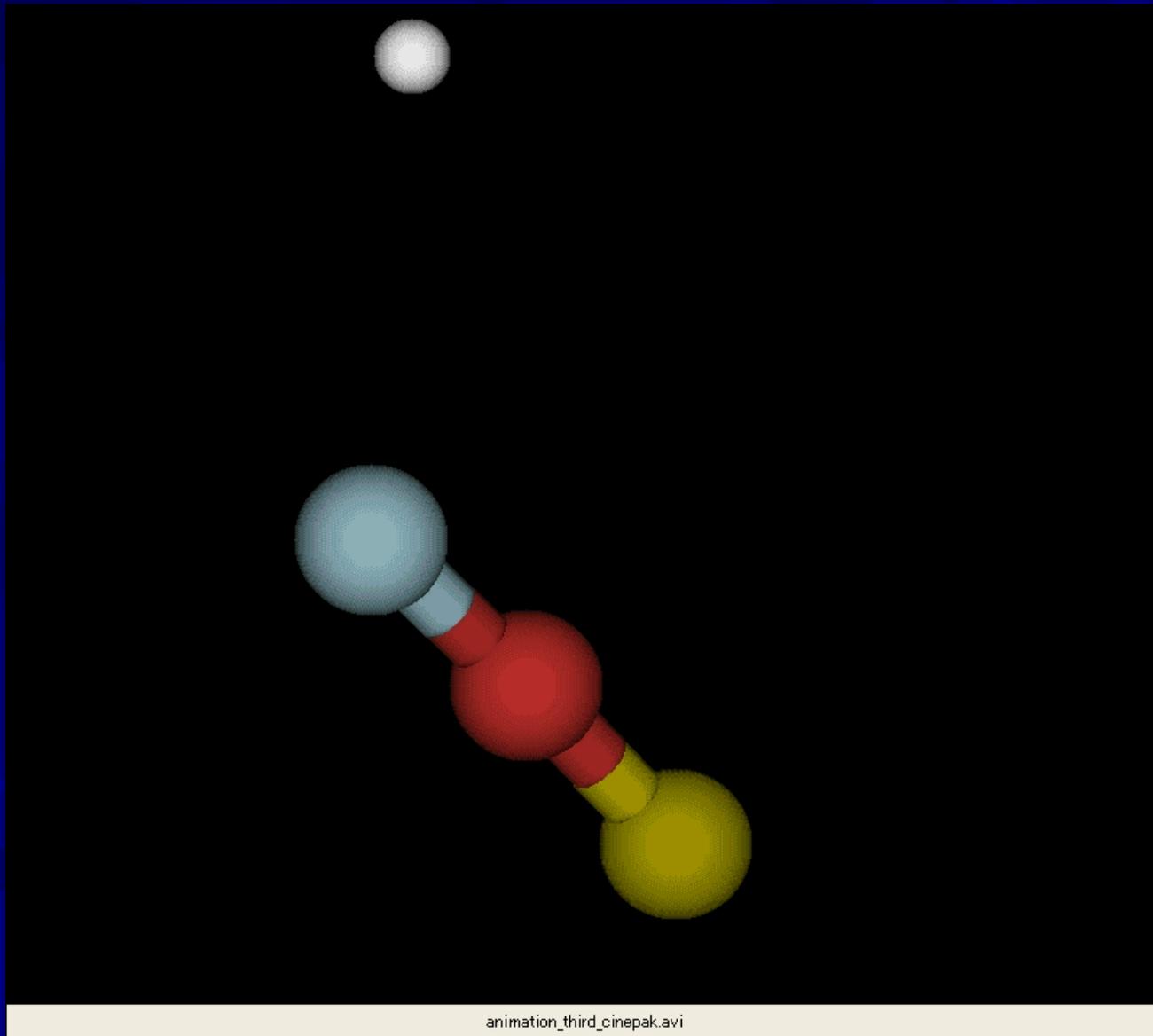


animation_fr_cinepak.avi

蟻酸HCOOHの異性体



H+NOC系の反応過程



H

N

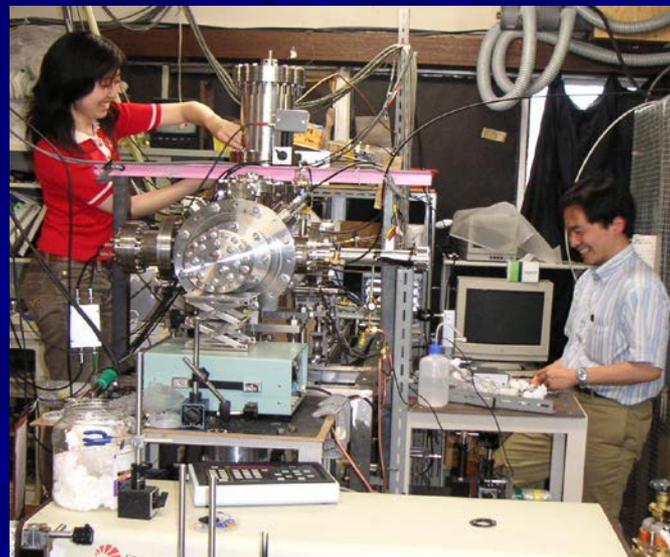
O

C

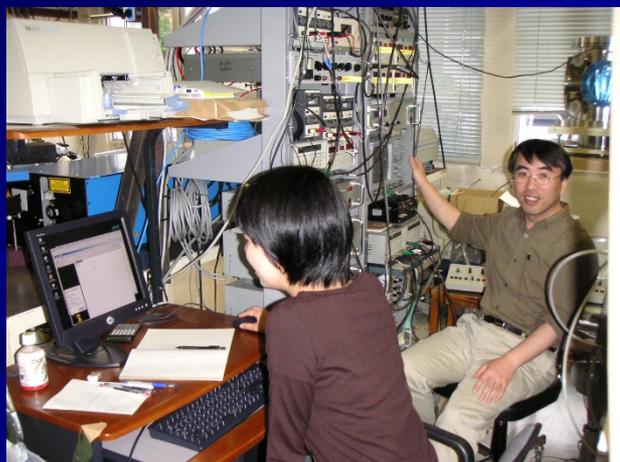
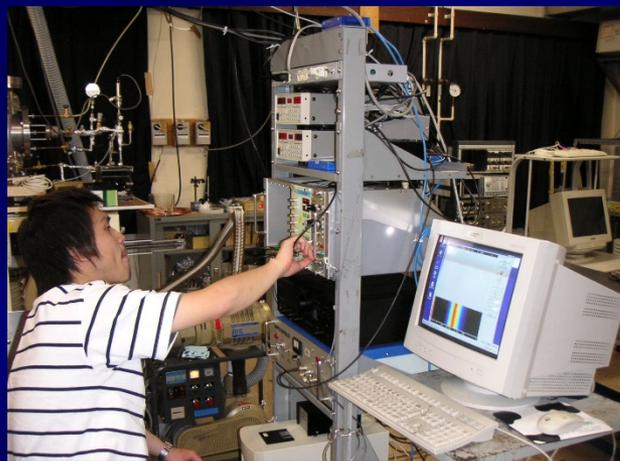
反応経路完全探索法の応用

- 資源を無駄にせず余計なものを作らない、安全・安価な合成方法の開発
 - クリーンなエネルギー源としての「水素」の安価・安全な生産方法の開発
- 尿素の合成方法の探索
 - 無機物から触媒なしに作る方法？
- アミノ酸の合成方法の探索
 - 無機物からグリシンを作ることができるか？

理論化学研究室：研究風景(1)



理論化学研究室：研究風景(2)





東北大学



化学科



理学部

理学部・理学研究科

広瀬川

広瀬川

薬学部・薬学研究科

工学部・工学研究科

理学部附属植物園

青葉山

理学部附属地震噴火
予知研究観測センター



理論化学研究室



Merry X-Mas & A Happy New Year



どうぞ、よいお年を
お迎えください。
また、この教室で、
お会いしましょう！

