

2004年6月19日

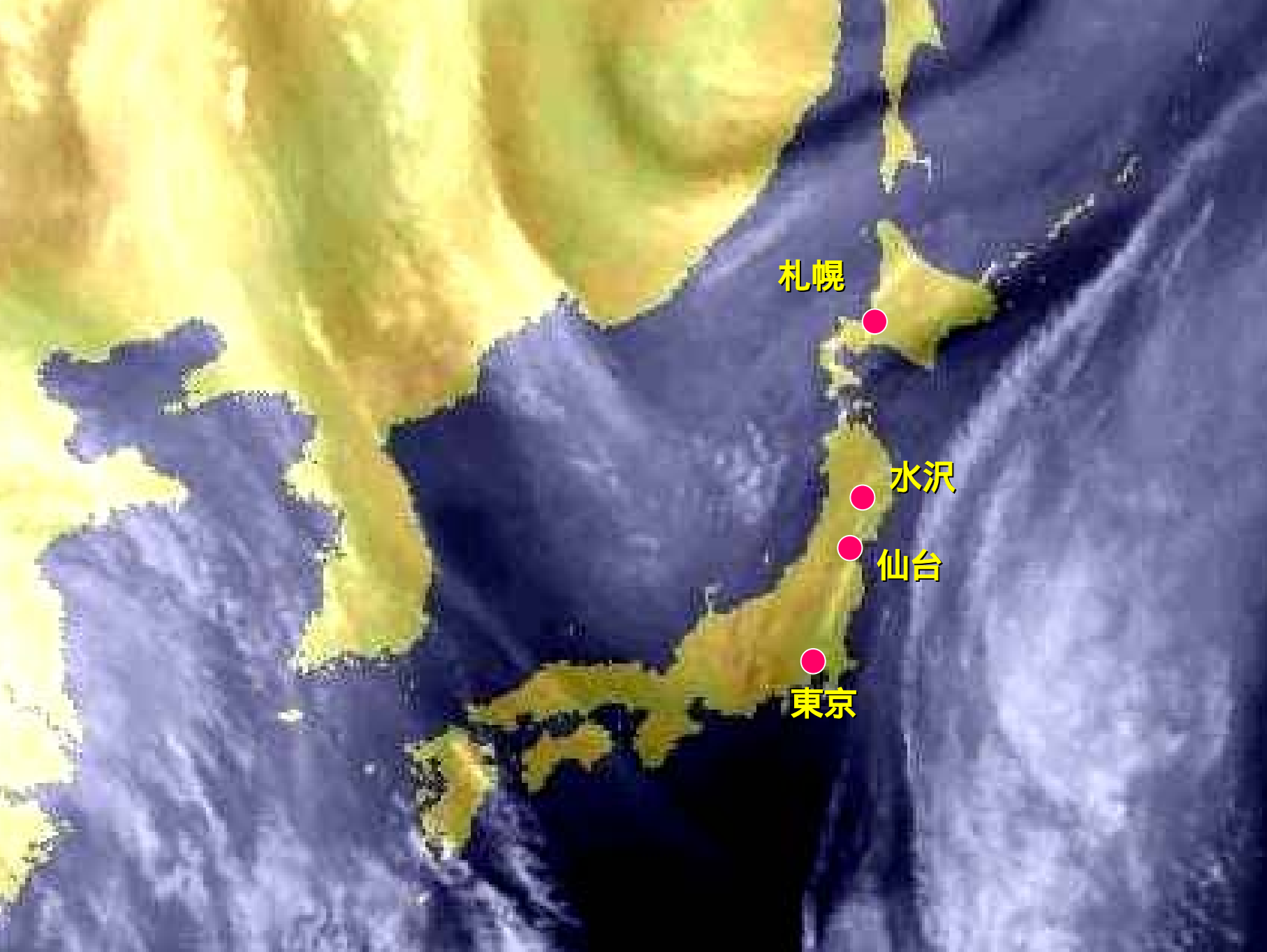
SSH 岩手県立水沢高等学校

特別講義：**サイエンスを楽しもう！**

Let's Enjoy Science!

- 1: 科学とは？ 化学とは？
- 2: 蝋燭の火を消す方法？
- 3: 沸騰石が「死ぬ」理由？
- 4: 炭素や水から何ができるか？

東北大学 理学部 化学科 大野 公一



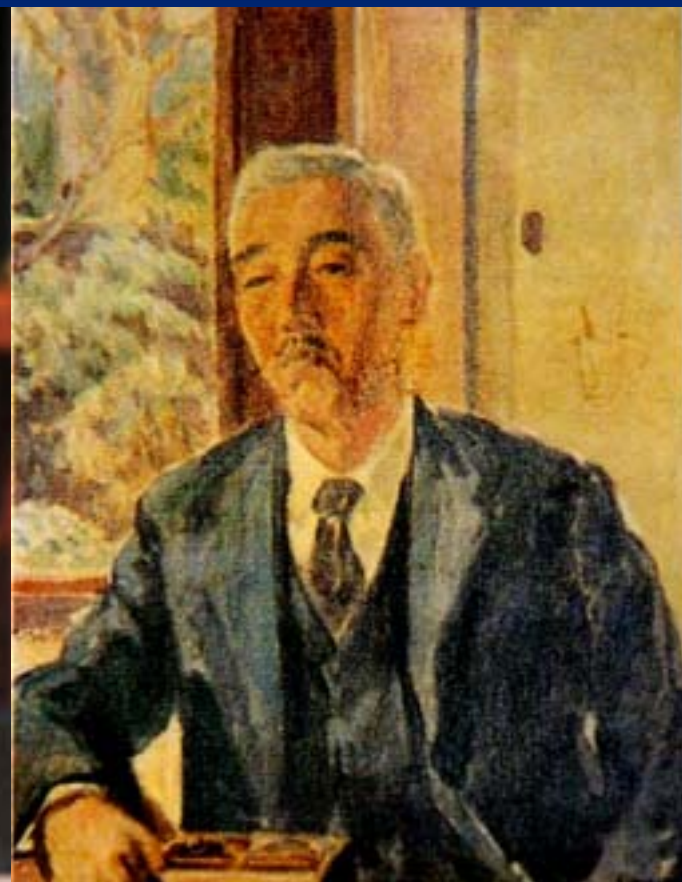
札幌

水沢

仙台

東京

宮澤賢治の愛読書 化学本論



著者 東北大学理学部 理論化学研究室 初代教授 **片山正夫**
明治44年 - 大正8年

サイエンスを楽しもう！

科学とは？

なぜ？ どうして？

「考える・調べる・やってみる」

化学とは？

原子や分子に着目して、

物質の構造・性質・変化を科学する

聖火リレー : 「愛」の火をつなげ！



火を消す方法？



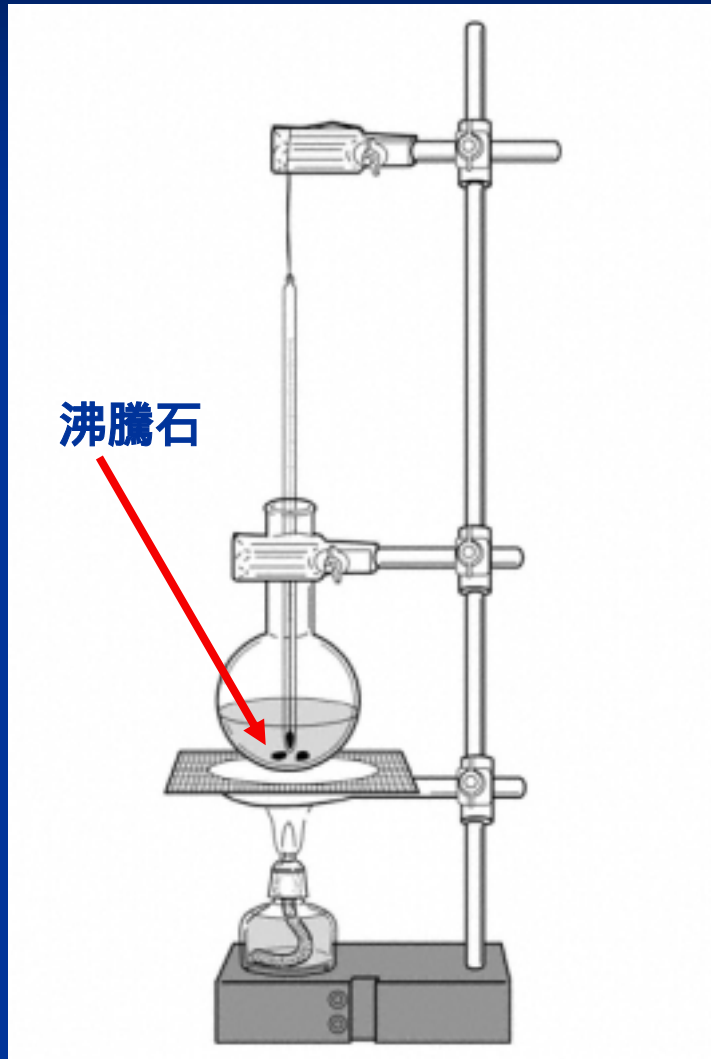
燃烧の三要素

- 1.燃えるものが必要
- 2.酸素が必要
- 3.温度が必要

消火の三要素

- 1.可燃物の除去による消火
- 2.窒息効果による消火
- 3.冷却効果による消火

蒸留と沸騰石 : 沸騰石の謎？



突沸を防ぐため、沸騰の核となる**沸騰石**を始めに入れておく。

蒸留を中断し、再び加熱を始める前にも**新しい沸騰石**を入れる。

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)

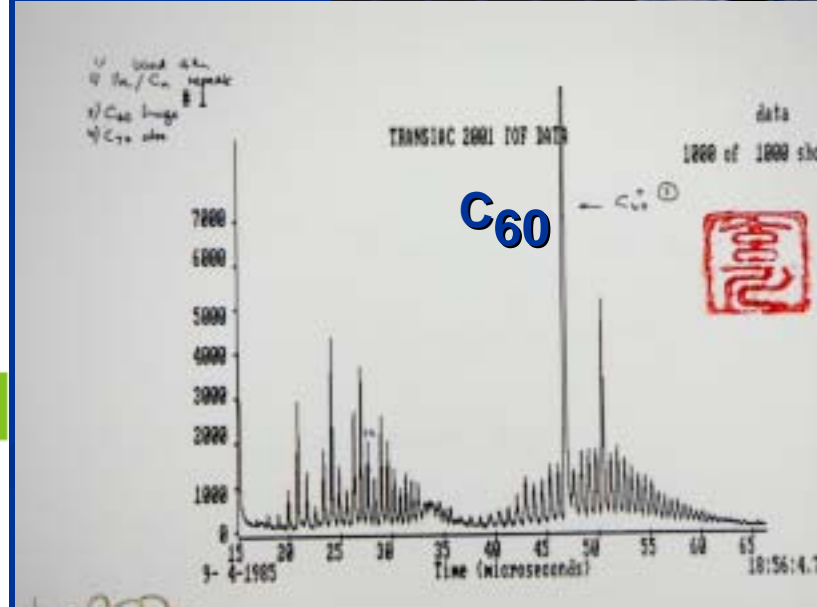
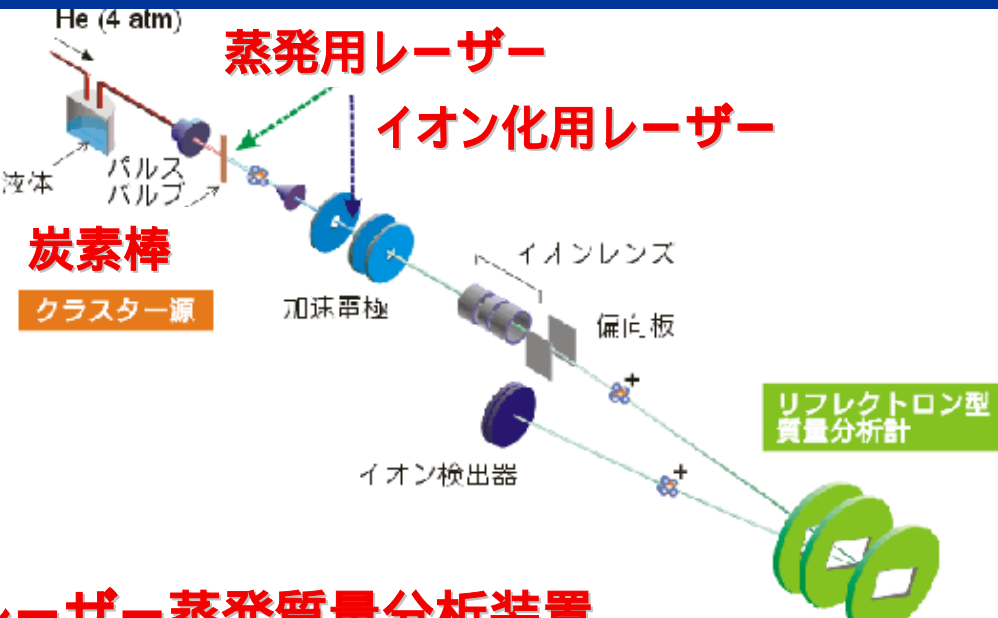
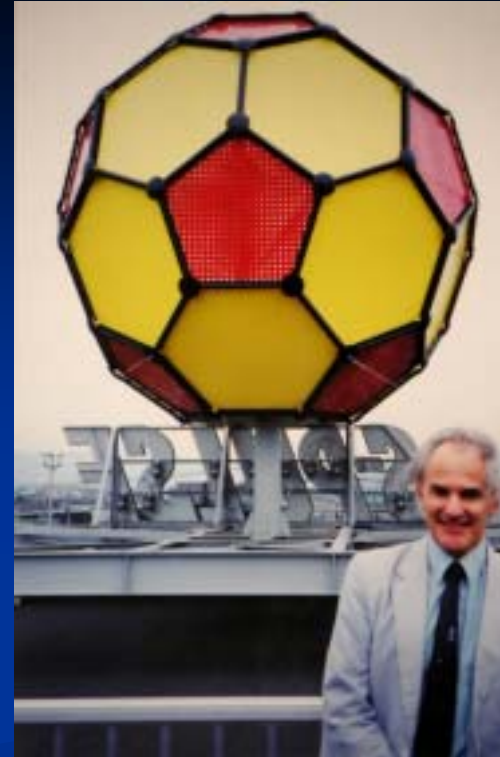


- ダイヤモンド



サッカーボール状炭素の発見 H.W. Kroto博士

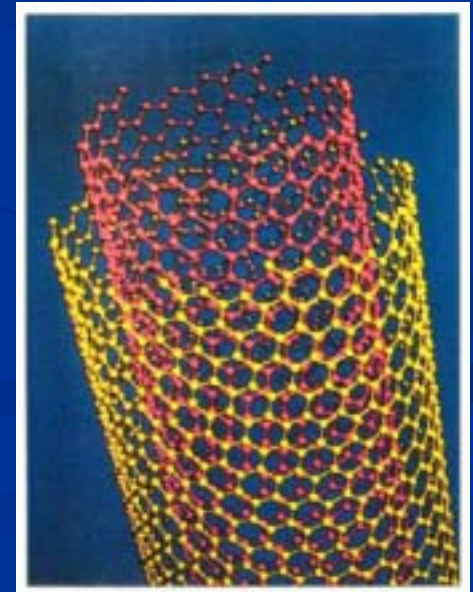
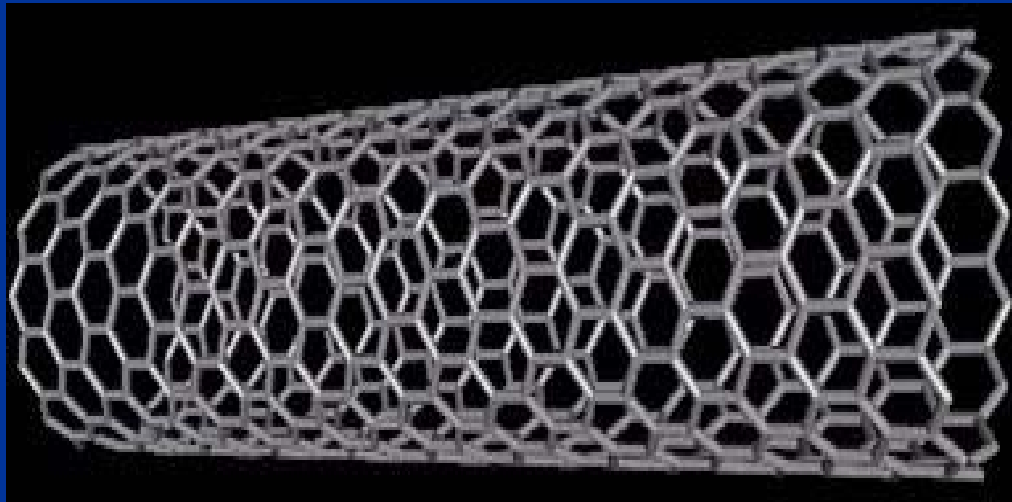
宇宙から来る電波の謎を解くため
地上で炭素の反応実験 1985年



チューブ状炭素の発見

飯島澄男博士

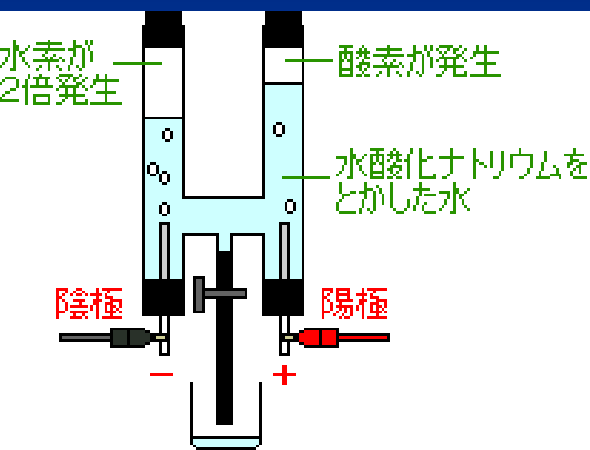
電子顕微鏡で原子の並び方を直接見ようとしてカーボンナノチューブを発見
1991年



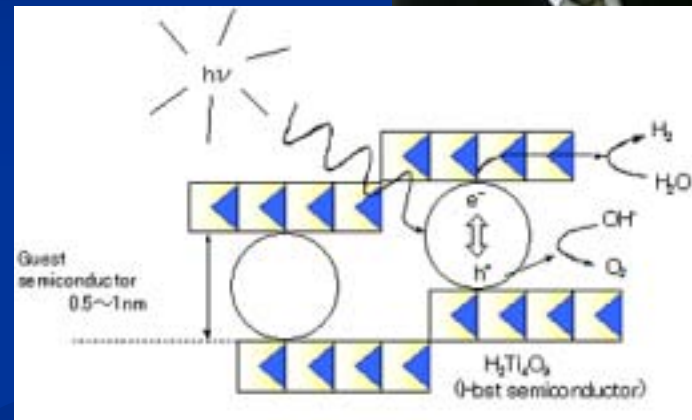
水 H₂O から何ができる？



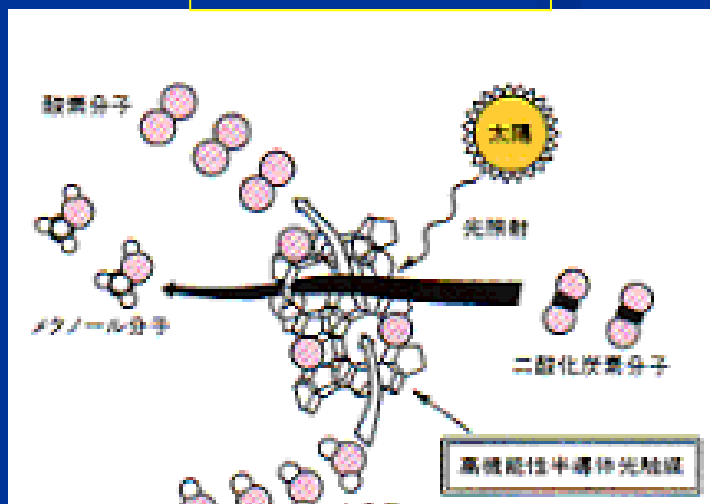
水の電気分解



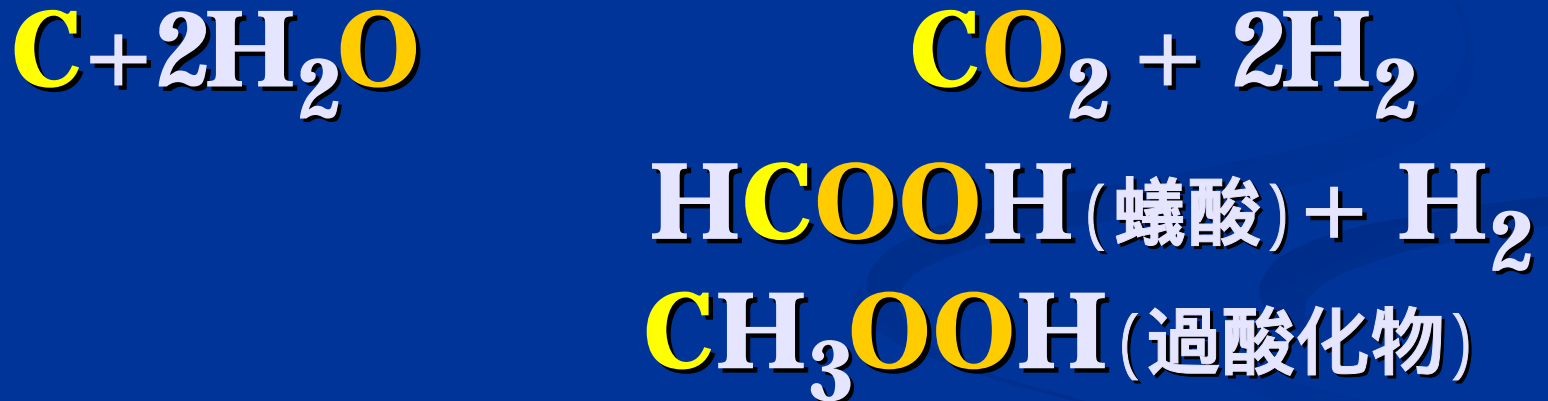
水が光分解することを発見 藤島 昭 博士 1975年



人工光合成



炭素 C と水 H₂O から何ができるか？



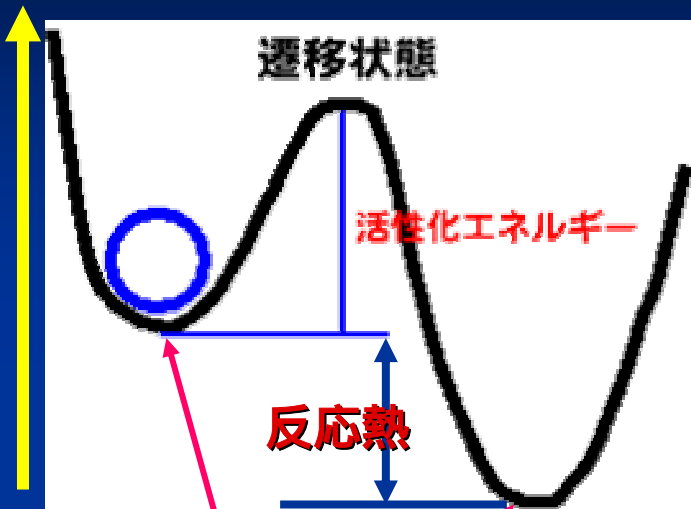
コンピュータ化学

構造

エネルギー

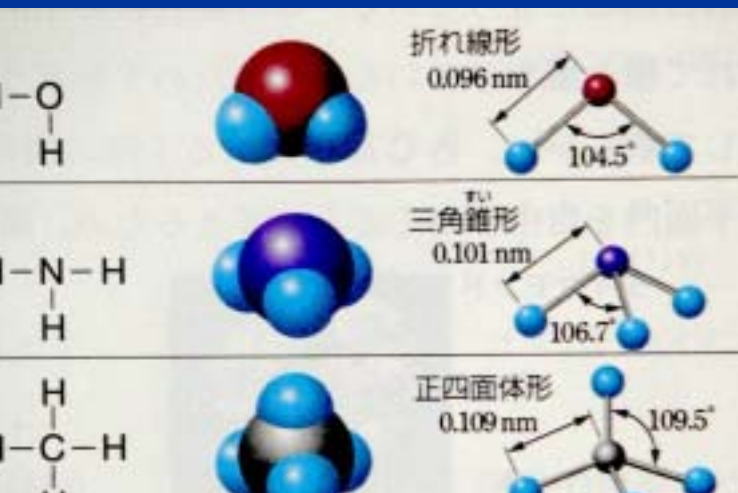


エネルギー



構造: 原子の並び方

極小点 (Minimum) の
構造とエネルギーを決定



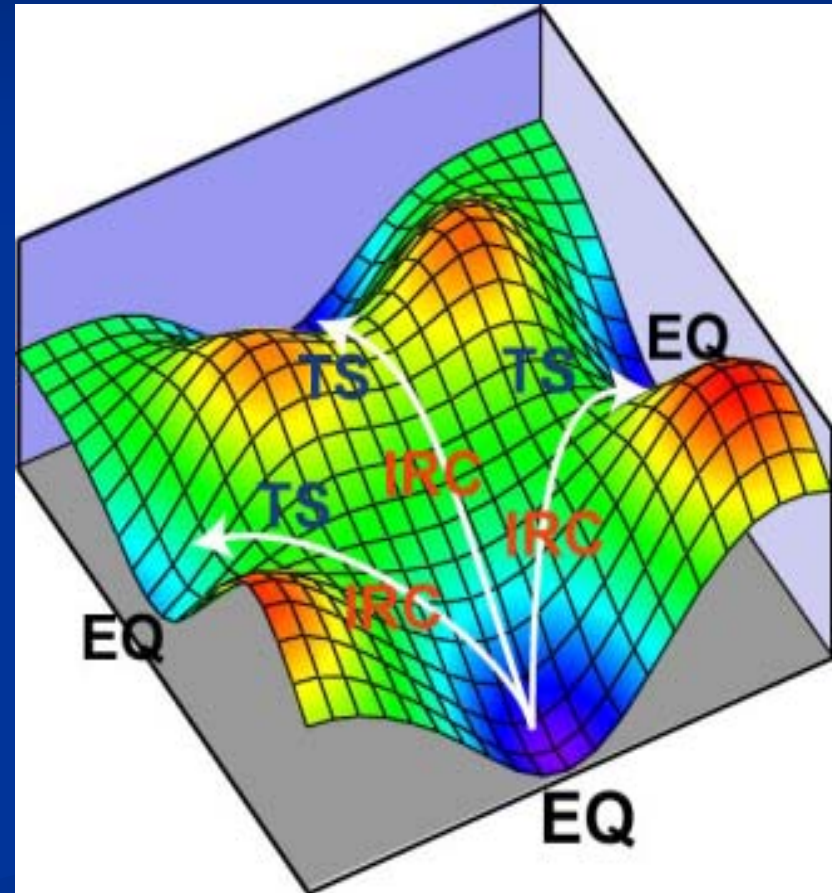
- 分子の形 (結合長・結合角)
- 結合エネルギー (反応熱)

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

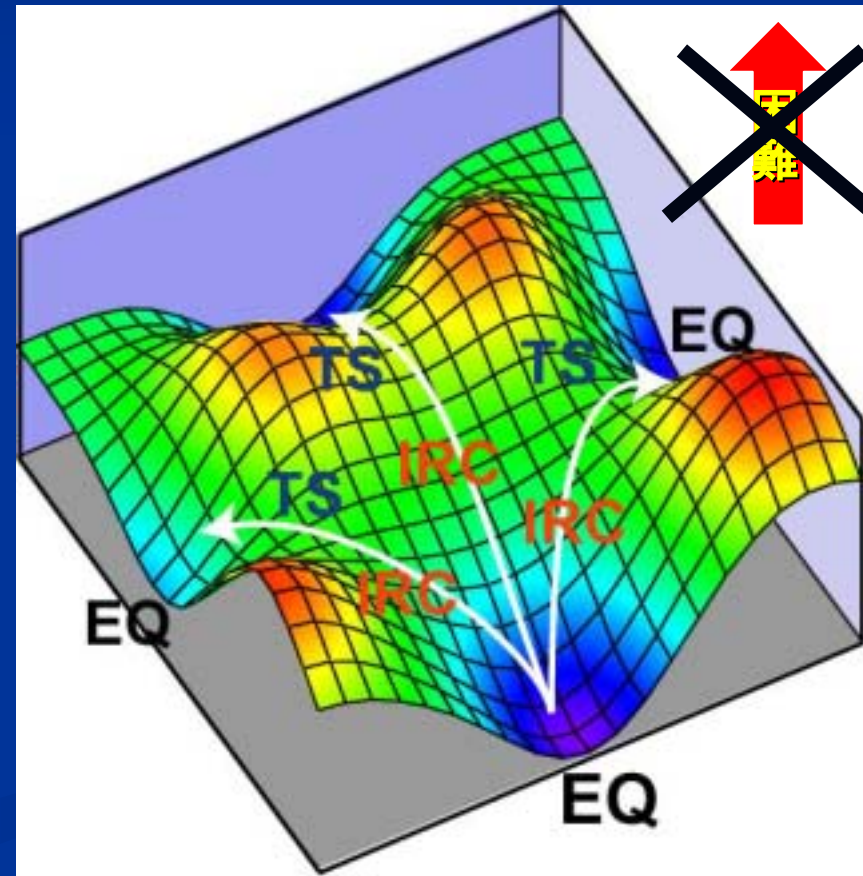
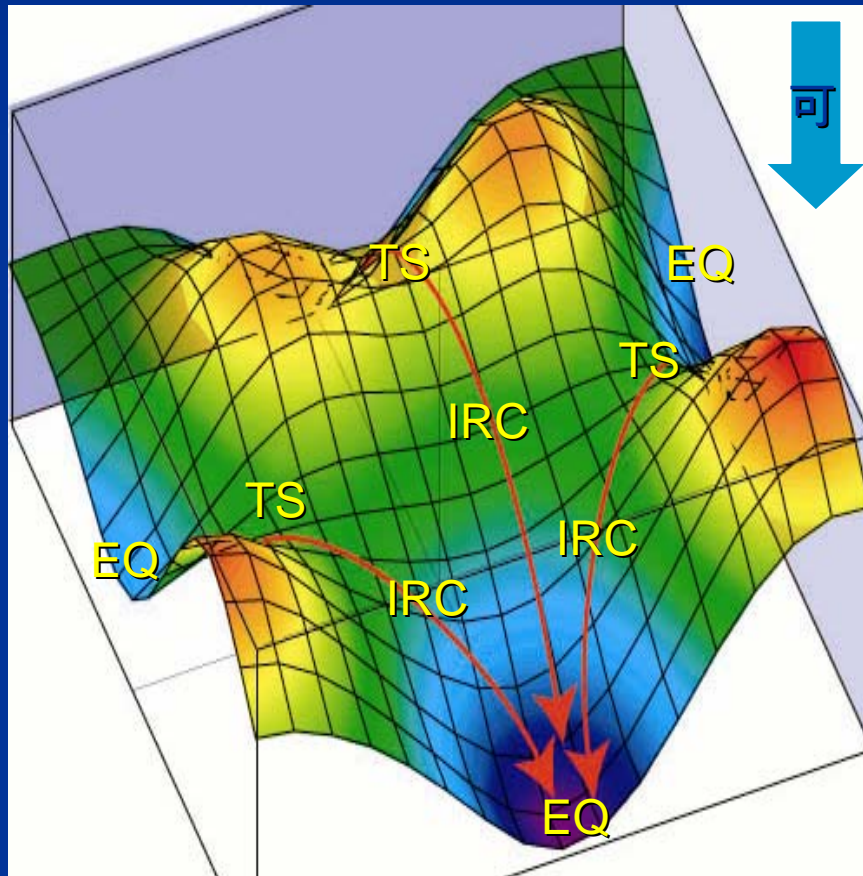
活性化状態 : 峠 鞍点

反応経路 : IRC 最低ルート

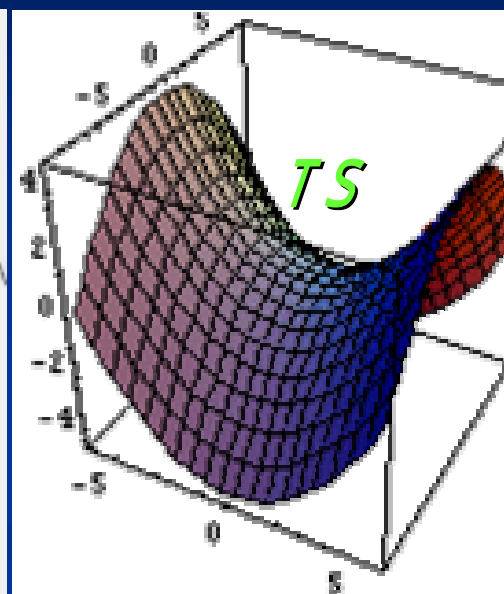
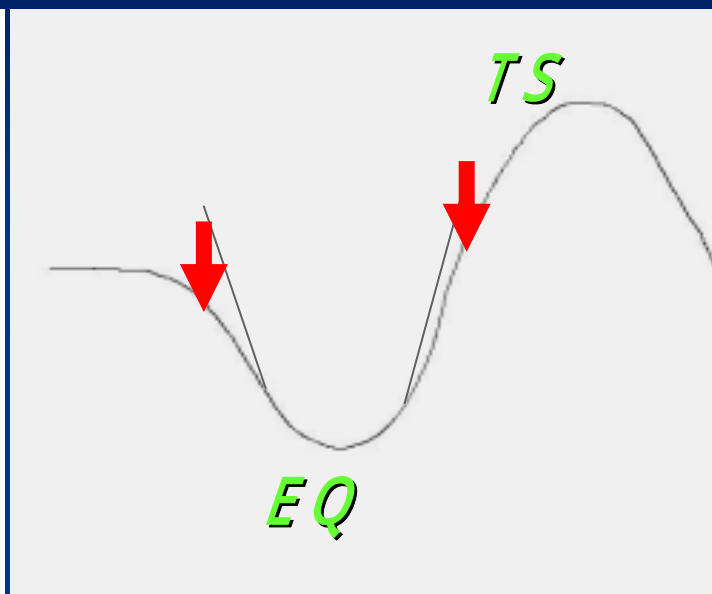
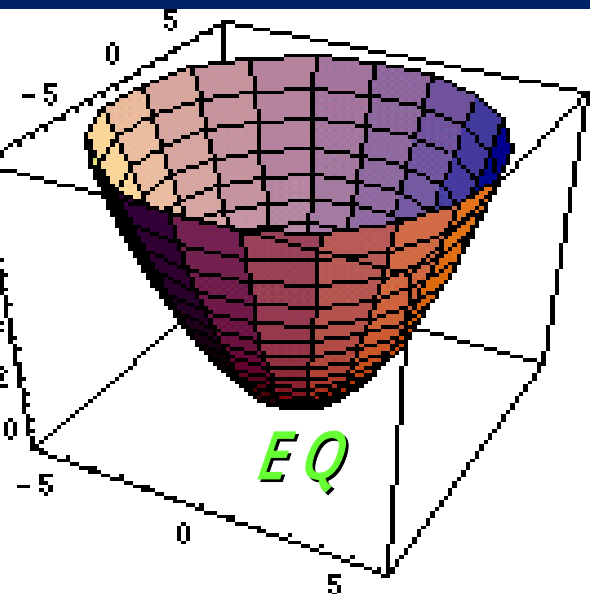


安定構造 (EQ) への
山下りは簡単!

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、

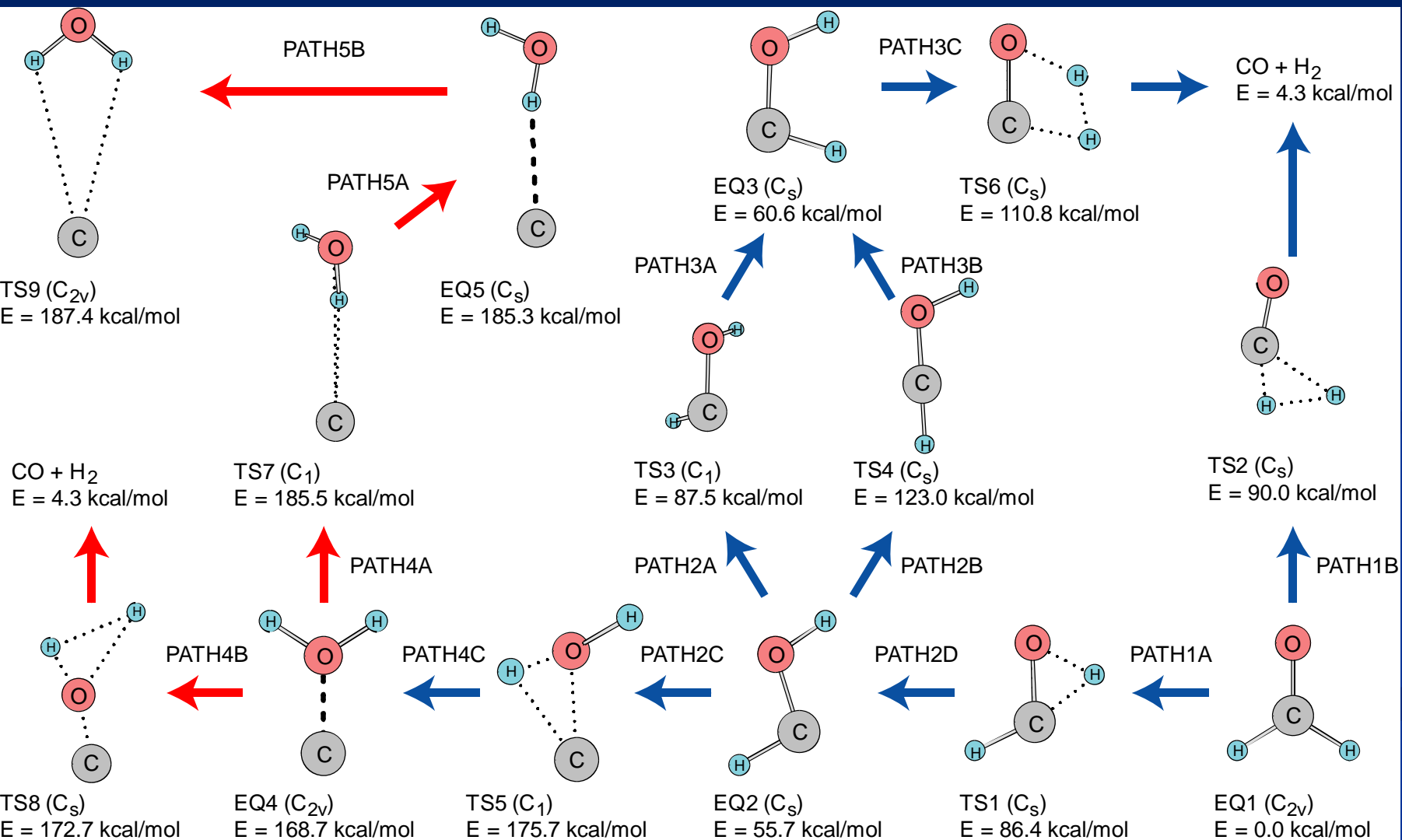
Downward Distortion が大きい方向を探す!

化学の基本問題が解けるようになった

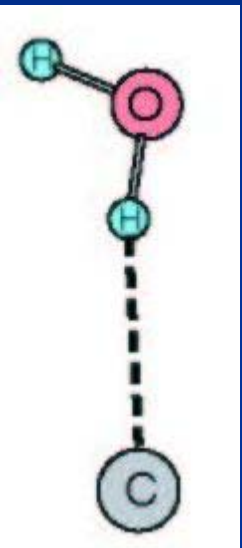
反応のネットワークが全てわかる

- 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

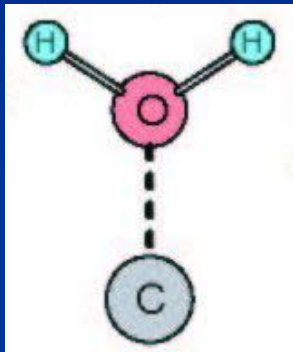
CH₂Oの合成・分解および異性体



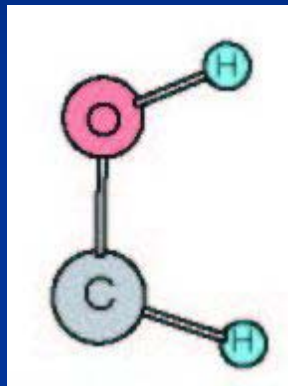
CH₂Oの異性体



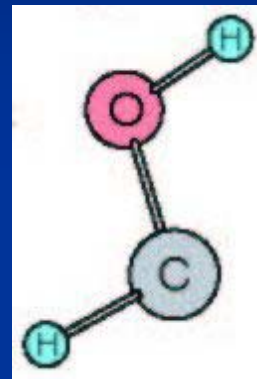
40.3 kJ/mol



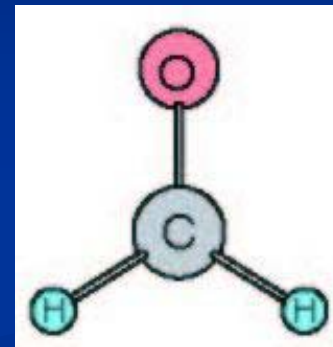
14.5 kJ/mol



13.3 kJ/mol



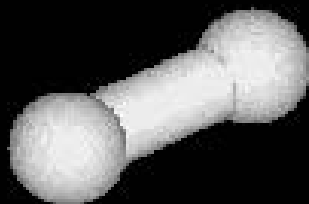
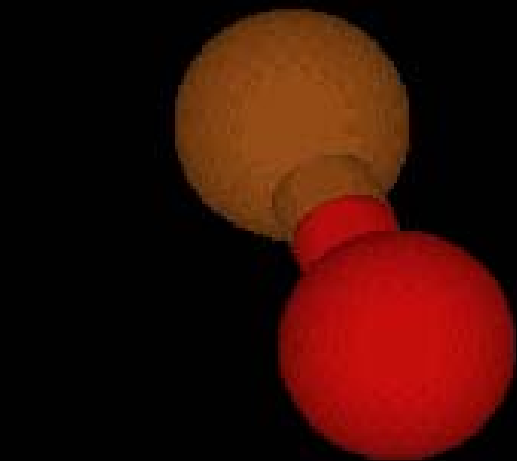
0.0 kJ/mol



44.3 kJ/mol

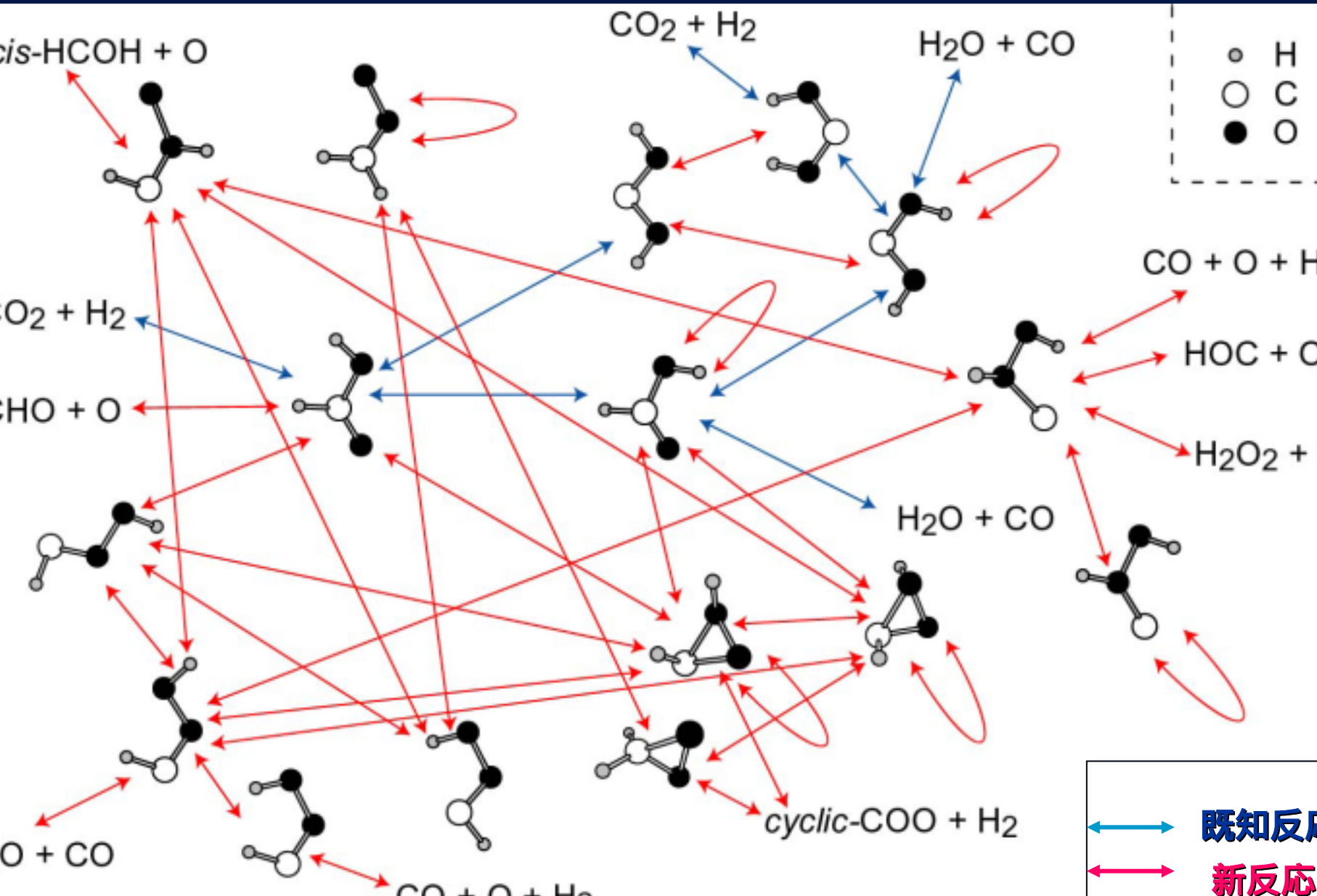
$H_2 + CO$

$HCHO$



animation_fr_cinepak.avi

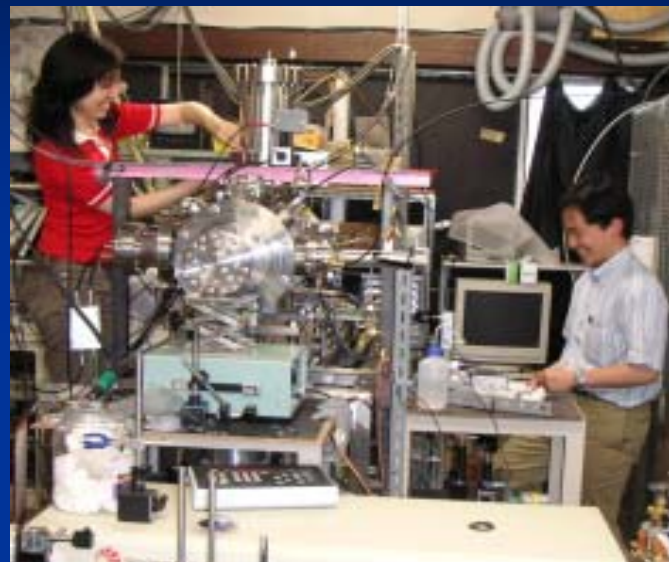
羧酸HCOOHの異性体



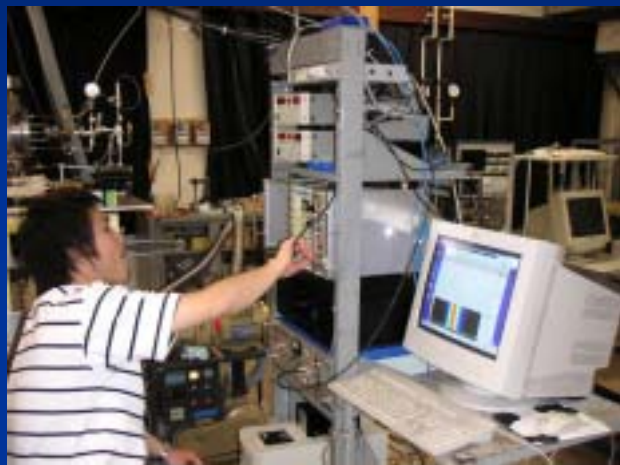
反応経路完全探索法の応用

- 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



オープンキャンパス: 2004年7月29 - 30日