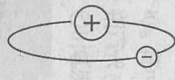


反応を根本から理解する学びへ

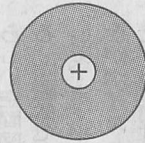
大学入試の先に広がる化学の世界

量子力学での原子の考え方

古典的なモデル



量子力学的なモデル



量子力学では、電子は正の電荷を持った核の周りを回るのではなく、雲のように核の周りの空間に存在すると考える。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$

というシュレディンガー方程式の解が電子の雲の形やエネルギーを示す。原子や分子の構造や性質を計算で求めることができる。

物質観を身に付けて

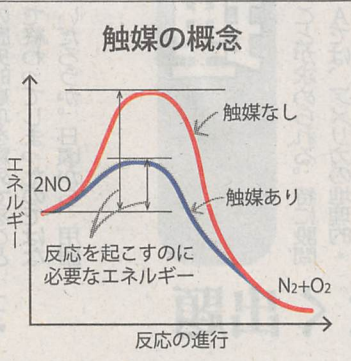
高校理科の中で化学は必ず学ぶこととなり、大学入試で化学を選択する受験生も多い。実は化学は高校と大学で内容が大きく異なる。大学の化学はまるで物理を学んでいるようにも思える。高校の化学の意義、大学で学ぶ化学はどのようなものか、そして化学研究の最前線を集める。

(取材・西村直人)

「大学で学ぶ化学は、高校や概念の基本を押さえて校の化学では説明しきれなかった根本的な内容を扱います」と話すのは真船文隆教授(総合文化研究科)。大学の化学では、ミクロな世界の物質の性質を論じる量子力学で原子・分子を捉える。方程式を解いて電子のエネルギーや軌道を求め、原子や分子の構造、原子の結合や反応の原理を説明する。「現代の化学は量子力学を基本としています。ですが、数学的に難解で高校の範囲で扱うのは難しいため、高校では量子力学を扱わずに、体系的な説明をしよう」と心掛けています。

だが高校の化学には、物質が原子や分子から構成されている、それに基づいて物質の性質が説明されるという「物質観」を身に付ける上で意味があるという。「高校の化学は化学の考え

高校の化学ではある条件下で特定の反応が起きることや、ある分子が特定の構造をしていることを教えられても、なぜその反応が起きるのか、なぜその構造なのかまでは説明されないことが多い。「大学で化学を学ぶと、そのような疑問に理論的な説明をすることができます」と真船教授。東大では前期教養課程で必修として理Ⅰでは構造化学と物性化学、理Ⅱ・理Ⅲではそれに加え化学熱力学を学ぶ。さらに選択科目として、有機反応化学などがある。必修の構造化学と物性化学はまさに量子力学で原子や分子の構造や性質を説明する科目だ。「これらを必修にしているのは、電子

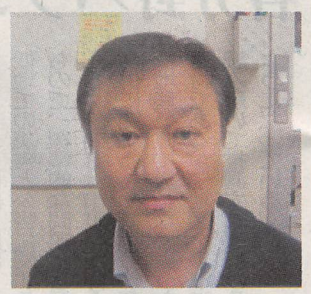


二つのNOからN₂とO₂を発生させる反応はNOよりもN₂とO₂の方が安定だが、必要なエネルギーが高いため起こらない。触媒は反応の途中段階のエネルギーを下げ、反応に必要なエネルギーを小さくする。

のエネルギーや軌道といった現代の化学に必須の概念を理解し、その後に学ぶだろう化学反応なども根本の理論から理解してほしいと

考えているからです」

真船教授の専門は量子化



まふね ふみ たか 教授
真船 文隆
(総合文化研究科)

94年理学系研究科博士課程修了。博士(理学)。総合文化研究科准教授を経て、10年から現職。理科前期教養課程必修「構造化学」の教科書や、高校化学の教科書執筆にも携わった。

学。原子が10個程度集まったクラスターという微粒子の研究をしている。「個々の原子の性質は量子力学的で、そのふるまいはよく分かっています。一方、金や銀と言われて、私たちが思い浮かべる物質は膨大な数の集合体です。原子が10個程度ではちょうどその中間で、原子の数が一つ変わるだけで性質がガラッと変わる面白い性質を示します」

クラスターが10個程度集まったクラスターという微粒子の研究をしている。「個々の原子の性質は量子力学的で、そのふるまいはよく分かっています。一方、金や銀と言われて、私たちが思い浮かべる物質は膨大な数の集合体です。原子が10個程度ではちょうどその中間で、原子の数が一つ変わるだけで性質がガラッと変わる面白い性質を示します」

「化学は新たな物質を作り、人々の幸福や問題解決につながる可能性があります。また、環境問題やエネルギー関連などで、化学に関する話題は多いです。それらを正しく理解できるように化学を通じて学んでほしいと思います」と真船教授は話す。

クラスターの応用として、それ自体は反応しないけれども、一緒にしておく他の化学反応を促進する「触媒」の設計についても研究している。例えば、一酸化窒素(N₂O)と酸素(O₂)になる反応は、一酸化窒素よりも窒素と酸素の方が安定なので起こりやすいと考えられる。しかし、反応を起こすために最低限必要とされるエネルギー(活性化エネルギー)が大きいため、この反応は起こらない。「活性化エネルギーを小さくすることで反応を起こりやすくするのが触媒の役割です。一酸化窒素の例でも良い触媒ができれば環境に害のある一酸化窒素の分解に役立ってます」

単一の元素からなる触媒は既に研究し尽くされており、現在は複数元素からなる触媒が探求されている。複数元素ではその組み合わせは膨大になる。クラスターの性質を利用して触媒候補の物質の分析を高速で行えるという。