

分子模型

G.1 分子のモデル

模型は実物から必要な要素を取り出し、我々が容易に扱える大きさにスケーリングをしたものである。模型は、実物に対して不可能な操作を可能にする有力な手段のひとつである。分子の物性や構造を考えると、分子を直接扱える大きさに拡大した分子模型も、研究を助ける強力な道具である。分子模型の場合、取り出す分子の特徴に応じていくつかのタイプがある。

結合を表現したモデル

分子が占有する空間を表現したモデル

分子上の電子の軌道を表現したモデル

などがある。

G.1.1 分子の形について

(不活性ガスをのぞいて)分子は2つ以上の原子から構成される。2原子分子の場合は、原子と原子の距離のみで決まる。この距離を結合距離という。一般的に、3つ以上の原子で構成される分子では、隣り合う任意の3つの原子について、2つの結合が形成される。これらの2つの結合の間の角度を結合角という。炭素を中心にした分子の骨格では、一重結合であれば、炭素と炭素の結合距離は0.15 nm, 結合角は109.5度である。

G.1.2 分子の大きさについて

分子の大きさについて、妥当なのは、ファンデアワールス半径である。2つの分子と分子がそれぞれ接近したとき、ある距離以下で反発力が急激に大きくなる。これは、分子が結晶を形成したとき接触している原子と原子の距離に相当する。この反発を引き起こしているのは、それぞれの分子の電子による、電子間反発である。したがって、ファンデアワールス半径は電子の広がりを示す。

G.1.3 結合について

2つの原子を結びつけているのは、電子である。原子の核は、原子番号に等しい正の電荷を持ち、核のまわりには等しい数の電子が存在する。それぞれの電子は核の周りの軌道上を運動しているが、一つの軌道に存在できる電子は2個までである(パウリの排他原理)。したがって、2つの電子が存在している軌道は、そのまま安定しているが、一つしか電子が入っていない軌道は、不安定であり、これが結合に寄与する。すなわち、2つの原子が、お互いの不安定な軌道(電子が一つしか入っていない軌道)を一つずつ出し合って、新たに電子が2つ入っている軌道を形成する。これが、共有結合である。電子が一つしか入っていない軌道の数は、表に示す。

D.1.4 結合の方向、角度

共有結合で構成される分子の場合、空間的に同じ角度ずつ異なる4つの方向(sp³混成軌道)を基

準にする。炭素では、それぞれ約 109.5° ずつ異なる 4 つの軌道である。窒素では、4 つの軌道の内 1 つには、電子が二つそろっている軌道 (孤立電子対) ができる。このため、結合できる数は、3 になる。結合の角度は、孤立電子対の空間も考慮して、109.5° ずつ占める。酸素では、孤立電子対は 2 つでき、結合できる方向は 2 つになる。結合できる方向の角度は、109.5° である。ここで、結合角の 109.5° は基本的角度で、結合する原子や孤立電子対の影響で少しずれる。たとえば、水の場合には二つの孤立電子対の軌道により、∠H-O-H は 105° となる。代表的な結合角を表 D.1 に示す。

原子と原子の結合が二重結合になった場合には、空間的に同じ角度ずつ異なる 3 つの方向を基準にする。この場合には、お互いに 120° ずつことなる同一平面上の 3 つの方向となる。このうち、一つの方向は、二重結合に寄与しており、この二重結合は回転しない。

G.2 分子模型の制作 (分子が占有する空間を表現した 1 億分の 1 模型)

材料は発砲スチロールの球である。炭素のファンデアワールス半径は 0.143 nm (0.143×10^{-9} m) である。これを 1 億倍にすると、14.3 mm であり、直径 29 mm の球になる。その他の元素について、ファンデアワールス半径と結合距離を表 D.2 にまとめた。炭素と炭素の結合距離は 0.153 nm であり、この半分の 1 億倍は約 7.7 mm である。中心からこの 7.7 mm を残して直径 29 mm の球を切り取る (図 D1)。これで、結合一つ分の接合面ができたことになる。この面に対して、109.5° 方向のことなる面をあと 3 つ切り取ればよい。

切断面の微調整は紙ヤスリです。切断面が小さかったり、角度が良くなければ、紙ヤスリを水平な机の上に置き、削る面を紙ヤスリにあててこする。力を入れすぎるとけづりすぎるので注意する。

それぞれの元素が削れれば、色を塗る。段ボールの反対面から、虫ピンを 2 本約 5 mm はなして突き刺したものを用意する。切断面の一つを虫ピンに刺し、固定する。分子模型で原子を区別するために原子の種類を色で識別できるようにする。一般的な色分けを表 D.2 に示す。アクリルペイントで薄く塗る。べったり塗ると乾くのに時間がかかる。ペイントが乾けば、接着剤で接合する。接合するときには、立体的な位置関係に注意すること。

参考

平尾二三夫、板倉聖宣、分子模型を作ろう、仮説社、1992

P.W. Atkins, 分子と人間、東京化学同人、1990

表 G.1 代表的な結合角

結合の種類			結合の種類		
	結合の種類	結合角		結合の種類	結合角
アルカン	C-C-C	112.6°	アミノ基	H-N-H	106°
	H-C-H	104°		C-N-H	112°
メチル基	H-C-H	107°	ペプチド	N-C-O	122 ~ 125°
	C-C=C	122 ~ 125°		C-C-N	115°
H ₂ O	H-O-H	104.5°		H-N-C	121°
アルコール	C-O-H	108 ~ 109°	H ₂ S	H-S-H	92.3°
	C-O-C	110°		チオール	C-S-H
NH ₃	H-N-H	107.3°			

表 G.2 元素と基本的共有結合数

元素	共有結合数	分子模型の色	元素	共有結合数	分子模型の色
水素	1	白	炭素	4	黒
酸素	2	赤	窒素	3	紫
窒素	3	青	珪素	4	赤
塩素	1	黄	リン	3	橙
硫黄	2	黄			

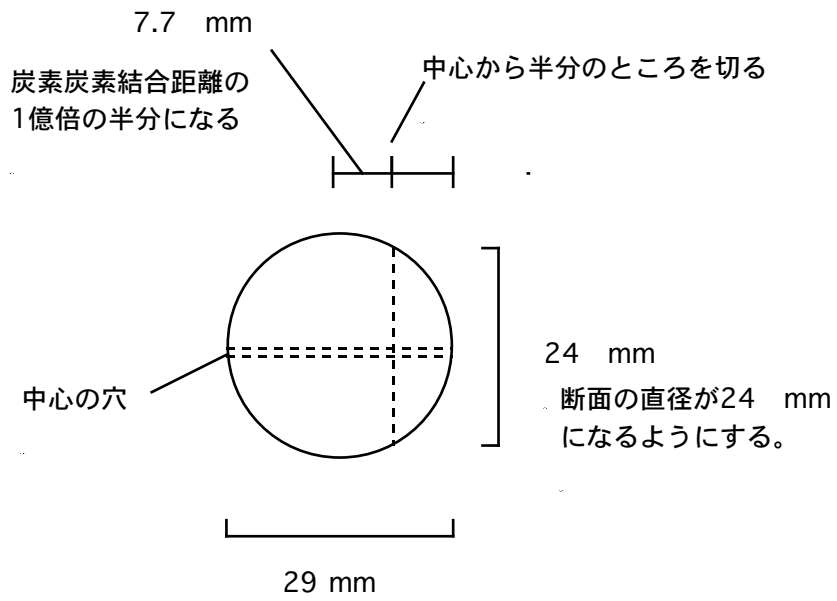


図 G1 ひとつ目の結合方向の切断

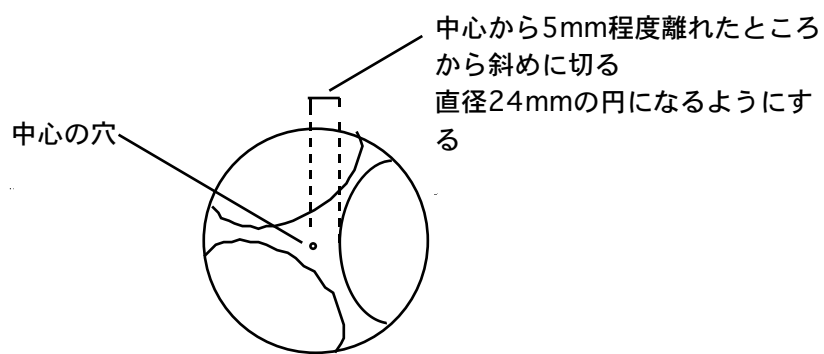


図 G2 残りの3つの結合方向の切断

表 G3 ファンデルワールス半径と結合距離
 結合のタイプ ファンデルワールス半径 結合距離 モデル球の直径 断面の直径 中心から断面までの長さ

	nm	nm	nm	mm	mm	mm	mm	mm	mm
A-B	A	B	結合距離	D1	D2	断面の直径	r1	r2	
C-C	0.14	0.14	0.15	29	29	24	14.3	14.3	14.3
C=C	0.15	0.15	0.13	29	29	25	14.3	14.3	14.3
C=C Benzene	0.15	0.15	0.14	29	29	25	14.3	14.3	14.3
C≡C	0.15	0.15	0.12	29	29	26	14.3	14.3	14.3
C-H	0.15	0.11	0.10	29	24	24	14.3	12.0	14.3
C-O H alcohol	0.15	0.13	0.14	29	29	25	14.3	14.3	14.3
C-O carboxyl	0.15	0.13	0.12	29	29	26	14.3	14.3	14.3
C=O carbonyl	0.15	0.13	0.12	29	29	26	14.3	14.3	14.3
C-N	0.15	0.14	0.15	29	29	24	14.3	14.3	14.3
C-S	0.15	0.17	0.18	29	34	25	14.3	17.0	17.0
S-S	0.17	0.17	0.20	34	34	27	17.0	17.0	17.0
C≡N	0.15	0.14	0.16	29	29	24	14.3	14.3	14.3
C-Cl	0.15	0.17	0.18	29	34	26	14.3	17.0	17.0
C-F	0.15	0.13	0.14	29	29	25	14.3	14.3	14.3
O-H alcohol	0.13	0.07	0.09	29	19	19	14.5	9.5	9.5
O-H carboxyl	0.13	0.06	0.10	29	15	14	14.5	7.5	7.5
N-H	0.14	0.08	0.10	29	19	19	14.5	9.5	9.5
Si-C	0.18	0.15	0.19	34	29	25	17.0	14.3	14.3
Si-H	0.18	0.11	0.15	34	24	23	17.0	12.0	12.0
Si-O	0.18	0.13	0.16	34	29	26	17.0	14.3	14.3
P-O	0.18	0.13	0.16	34	29	26	17.0	14.3	14.3
P-O phosphate	0.18	0.13	0.15	34	29	27	17.0	14.3	14.3