

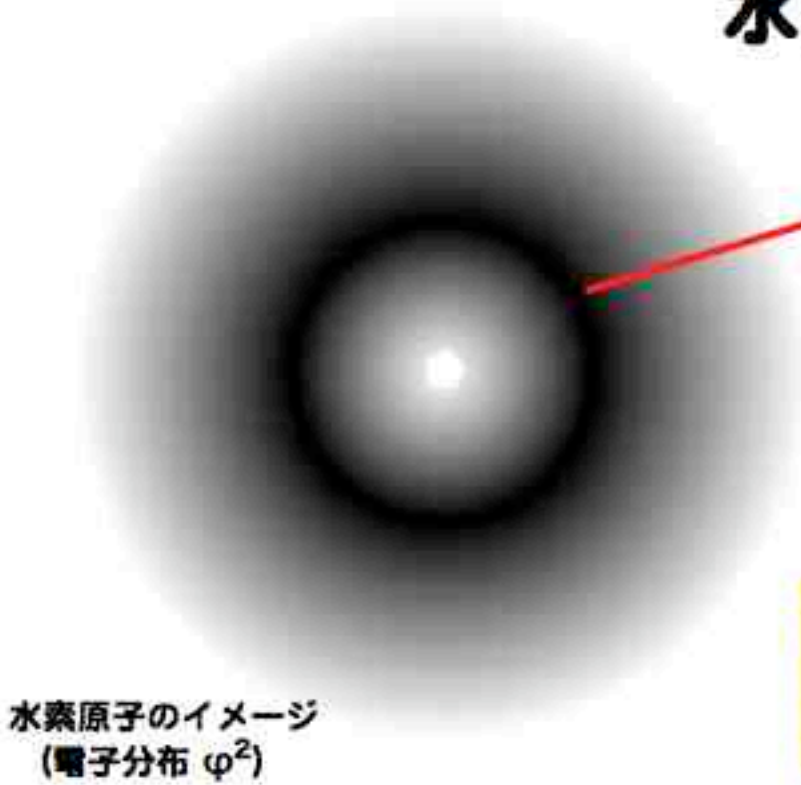
化学

(化学結合論)

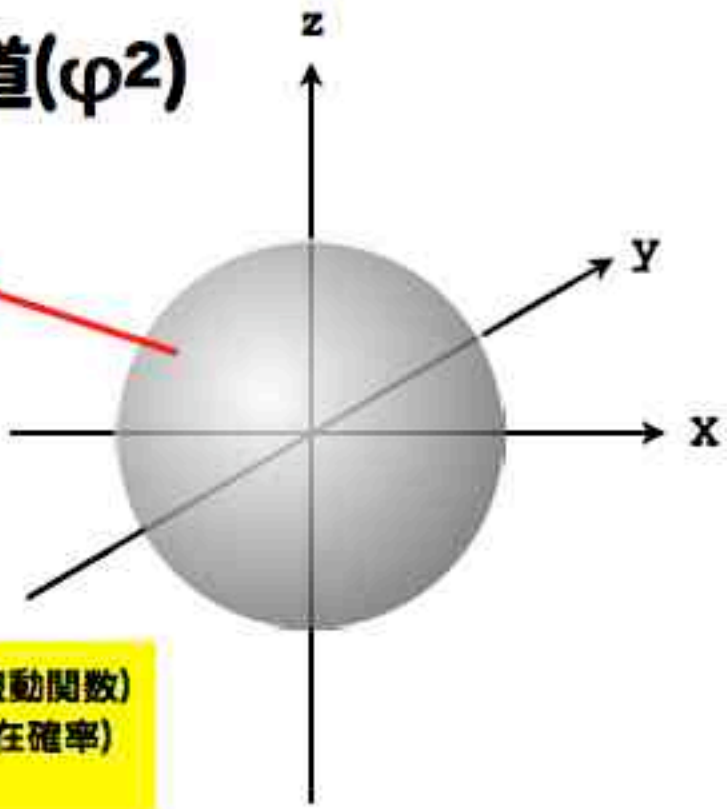
平成19年 4月26日

津田 栄

水素の電子軌道(ψ^2)



S軌道

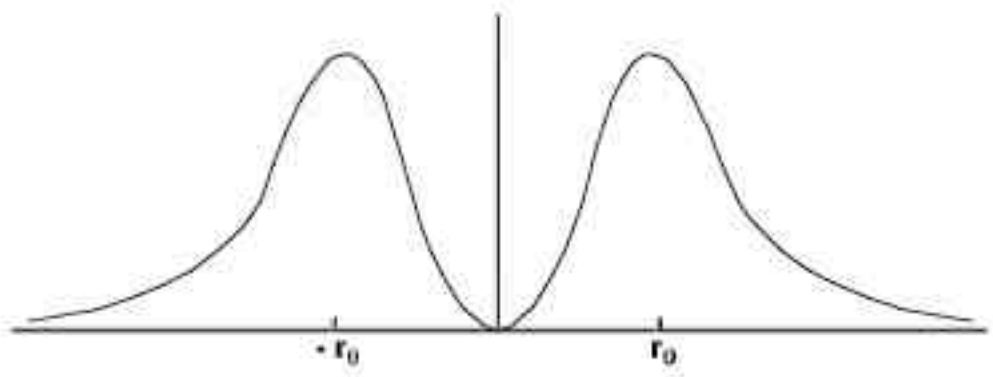


この球が ψ (軌道関数、波動関数) ではなくて ψ^2 (電子の存在確率) であることに注意。

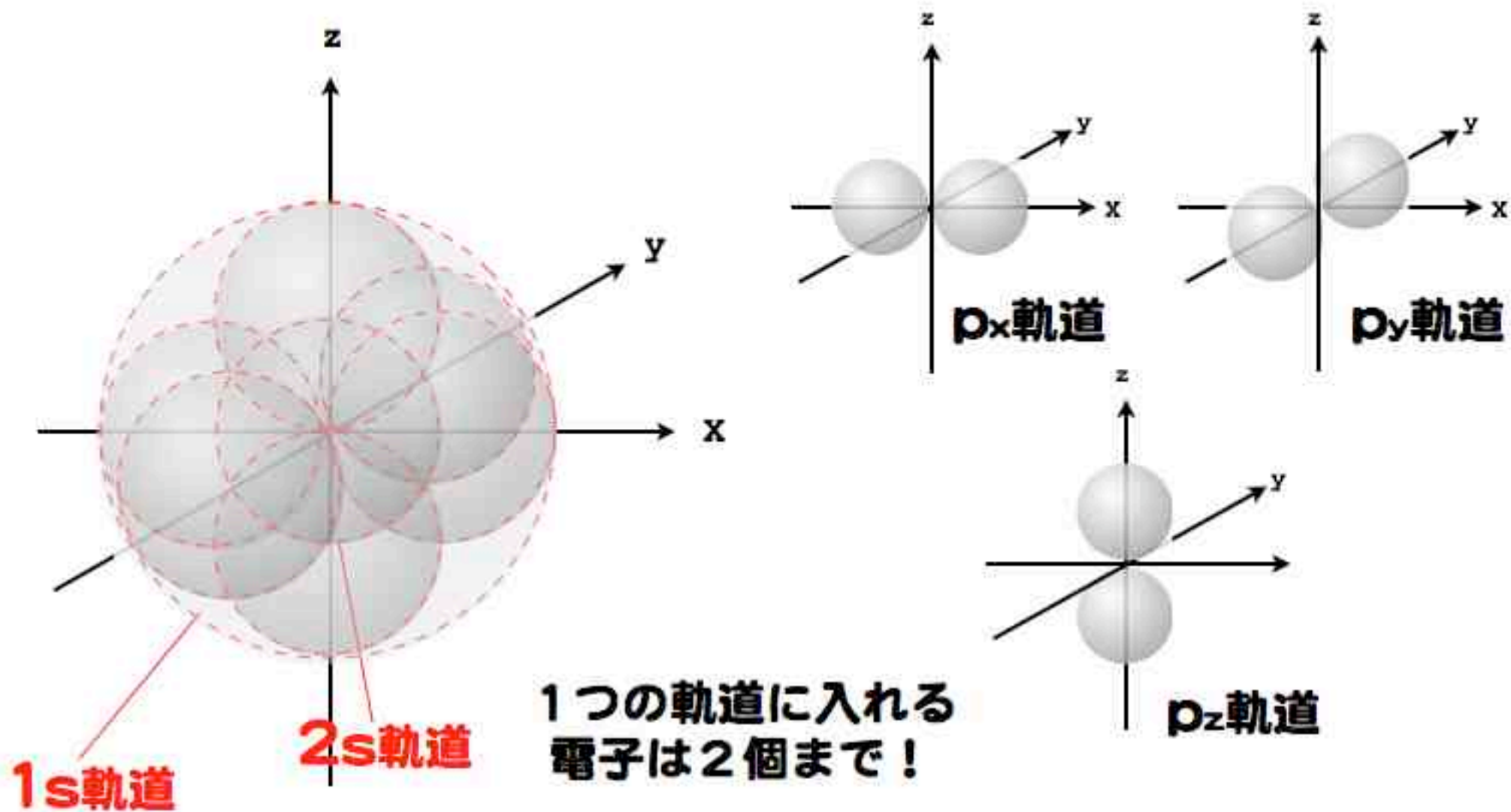
中空の球 (サッカーボール) をイメージ

S軌道
あくまでも球の
”皮の部分”

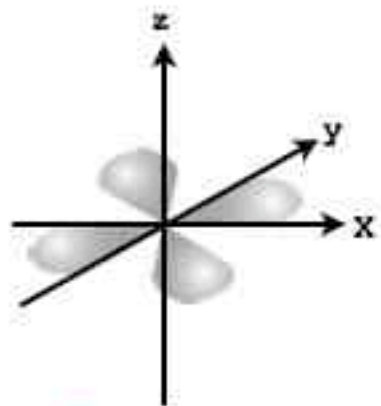
電子の存在確立 (ψ^2)



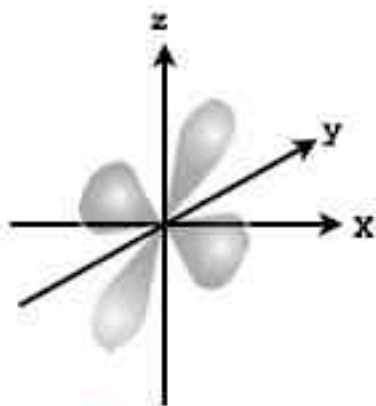
チツソ (7N) の電子軌道 (φ^2)



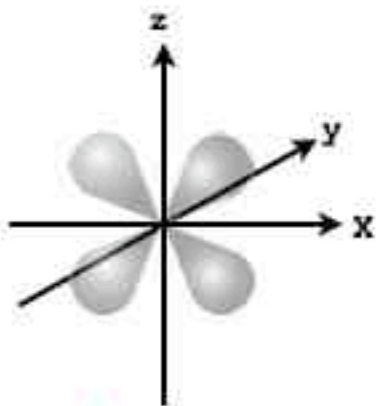
アルゴン ($_{18}\text{Ar}$) の電子軌道 (φ^2)



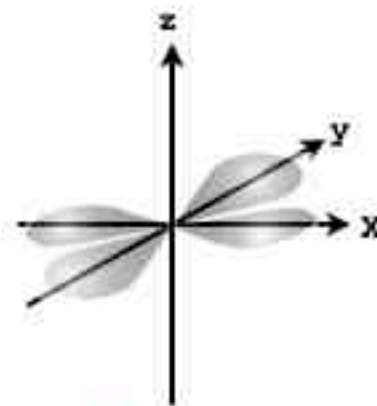
d_{xy} 軌道



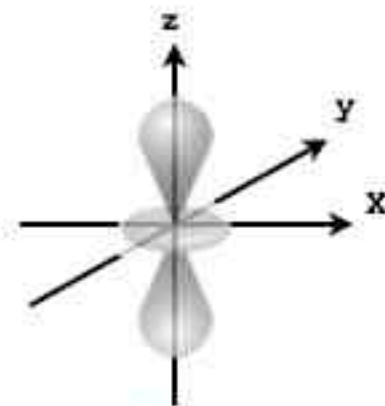
d_{yz} 軌道



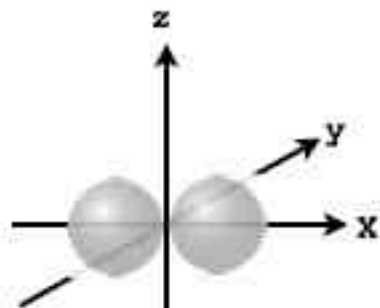
d_{zx} 軌道



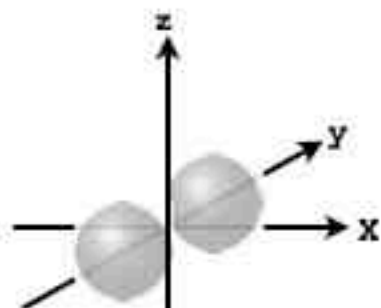
$d_{x^2-y^2}$ 軌道



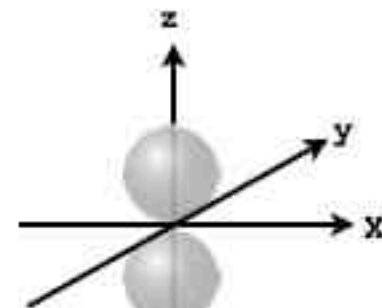
d_{z^2} 軌道



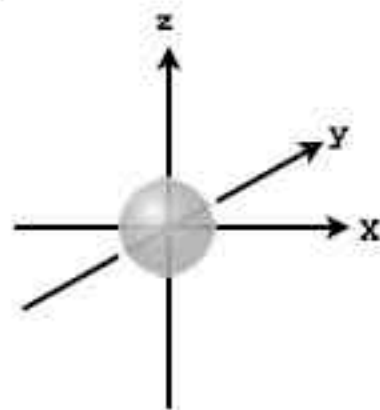
p_x 軌道



p_y 軌道



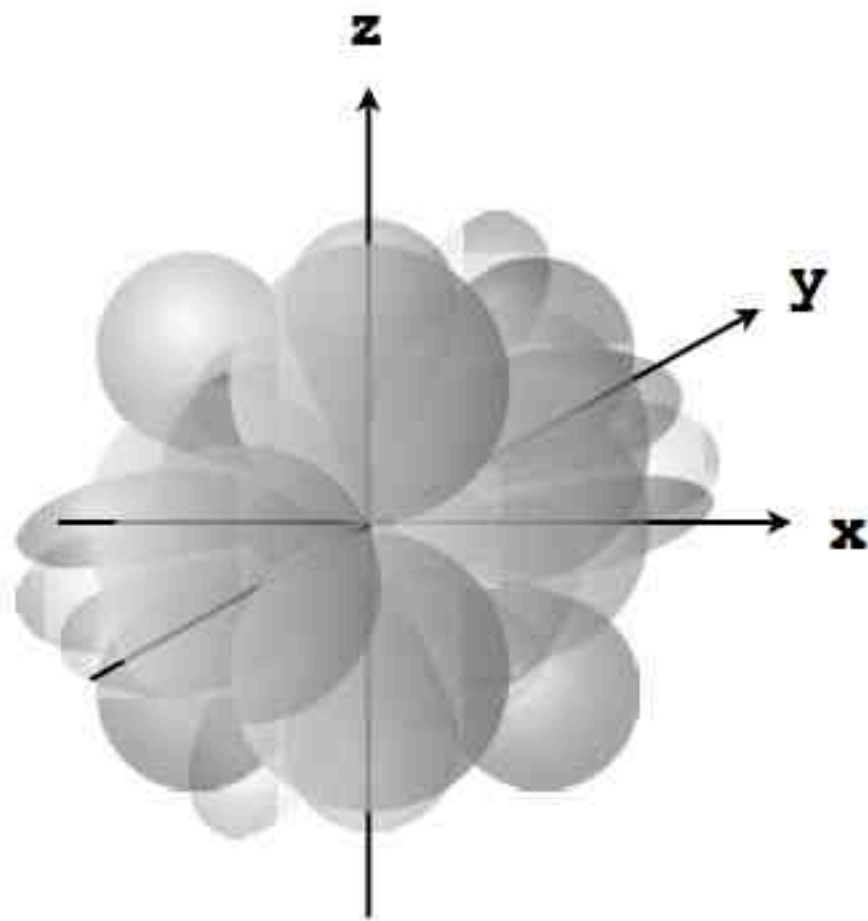
p_z 軌道



s軌道

1つの軌道に入れる電子は2個

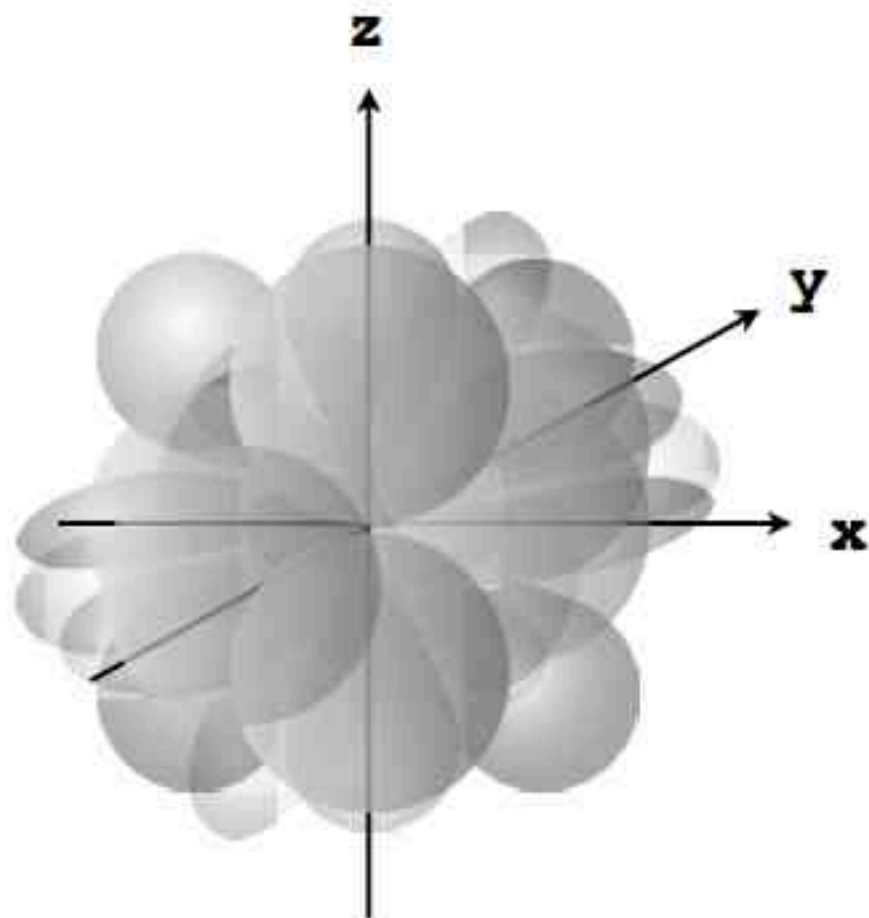
アルゴン (${}_{18}\text{Ar}$) の電子軌道 (ψ^2)



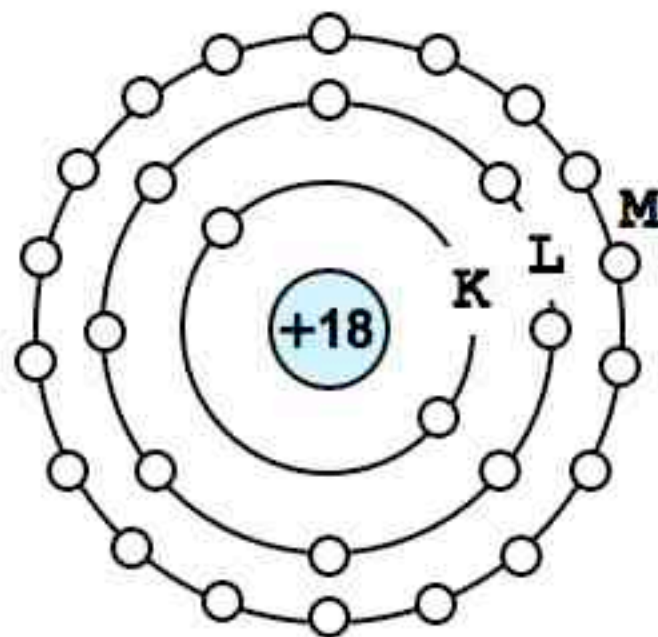
*ソフトウェアの都合で一部に背景(四角)が写り込んでいます。

感覚的に原子を知る

アルゴン原子 (18Ar) の電子軌道 (ψ^2)



アルゴン原子 (18Ar) の古典的モデル

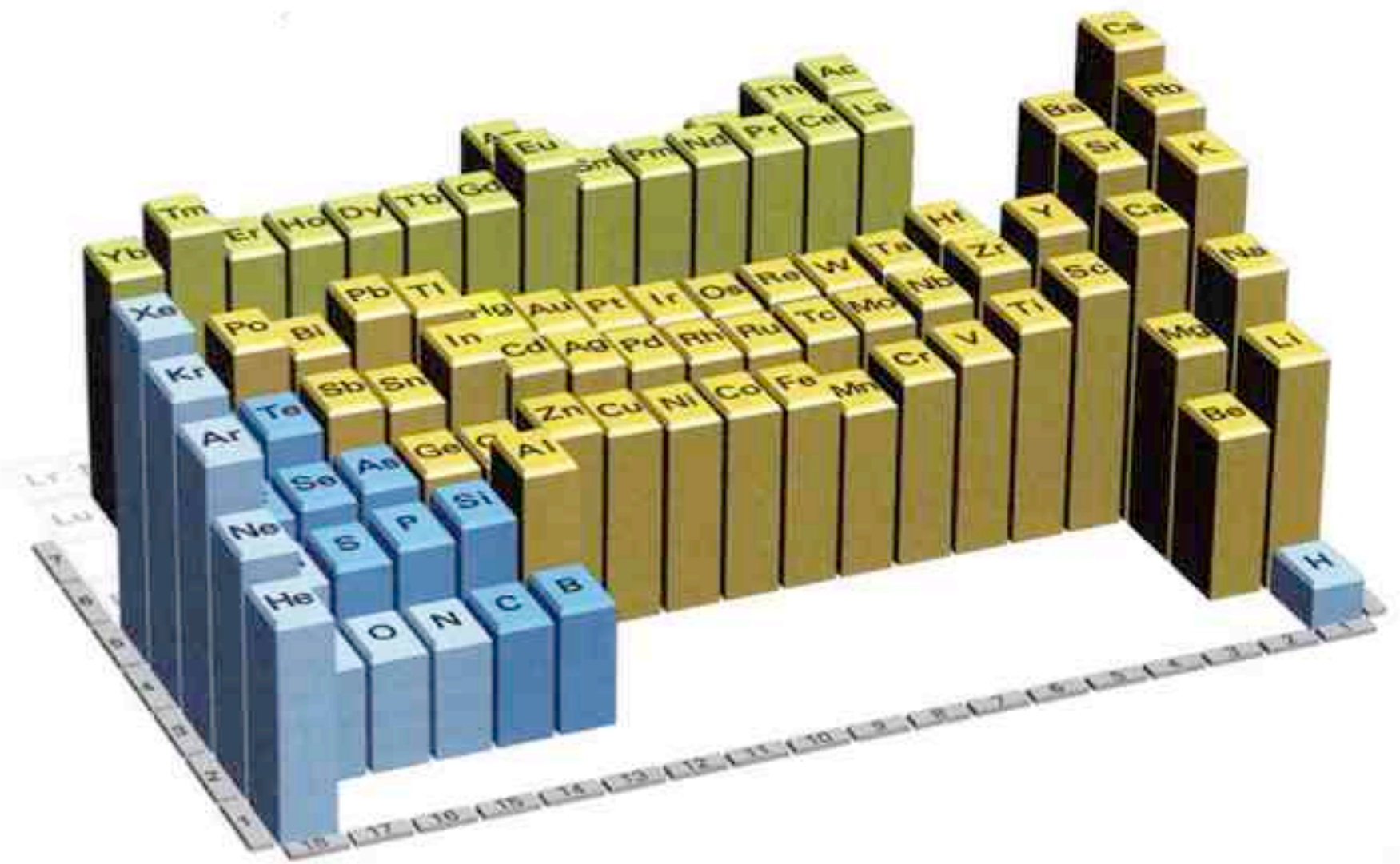


M殻 : s軌道 + p軌道 + d軌道 (18個)

L殻 : s軌道 + p軌道 (8個)

K殻 : s軌道 (2個)

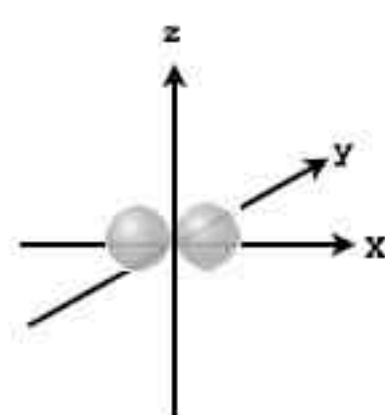
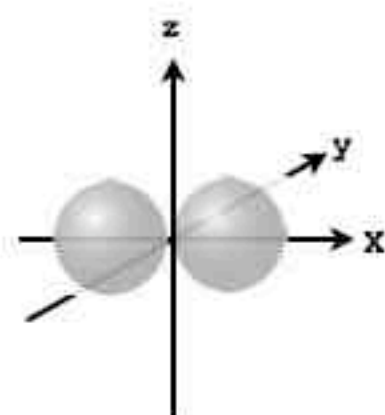
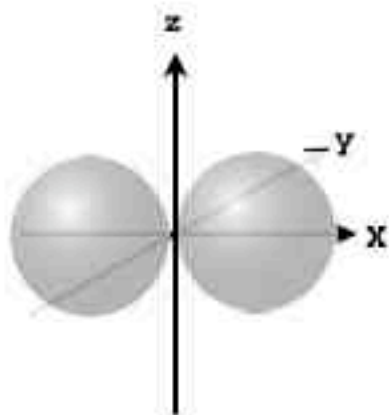
原子半径を比較した棒グラフ



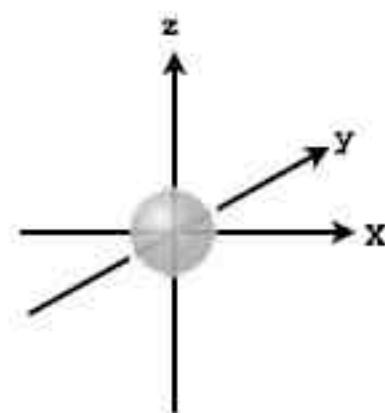
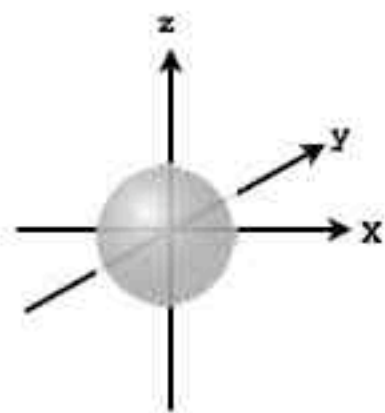
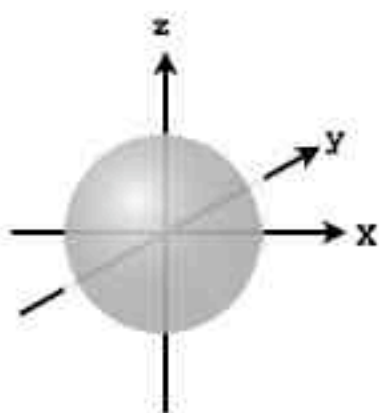
感覚的に原子を知る

軌道半径は原子番号とともに小さくなる

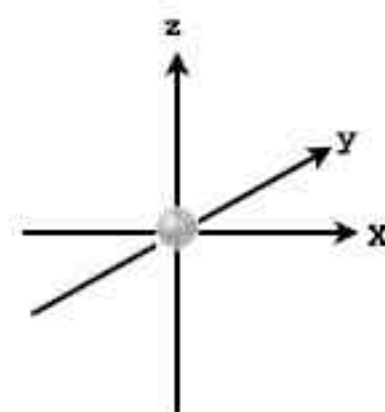
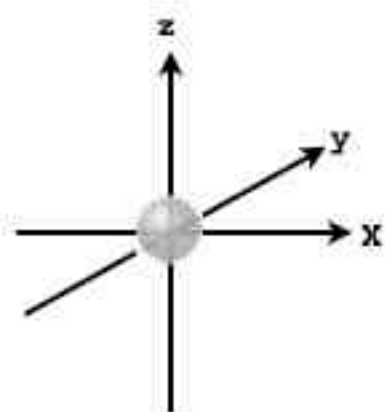
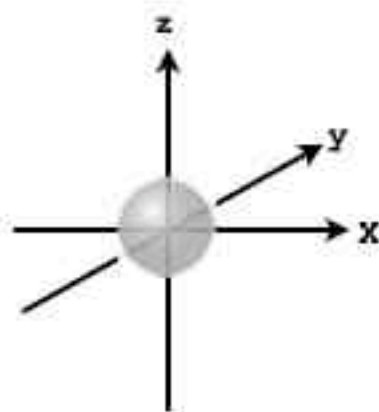
2p_x軌道



2s軌道



1s軌道



H

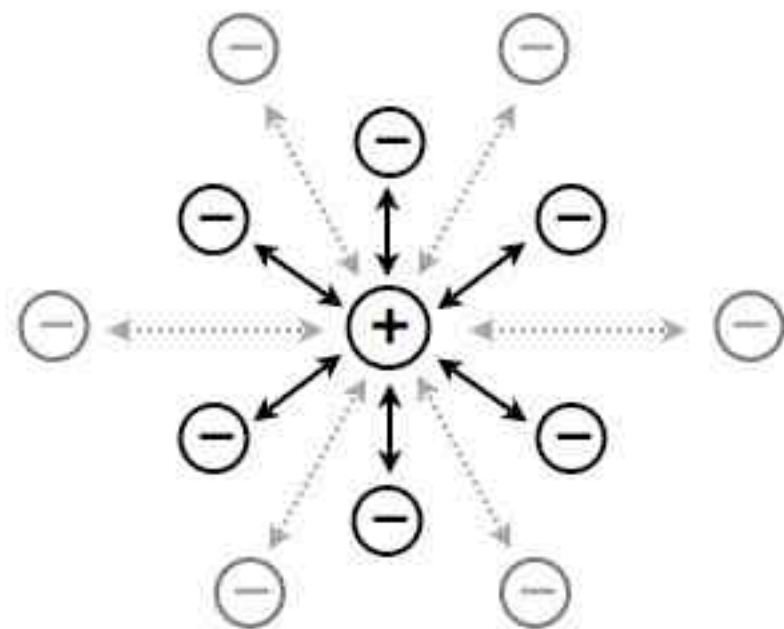
He

Li

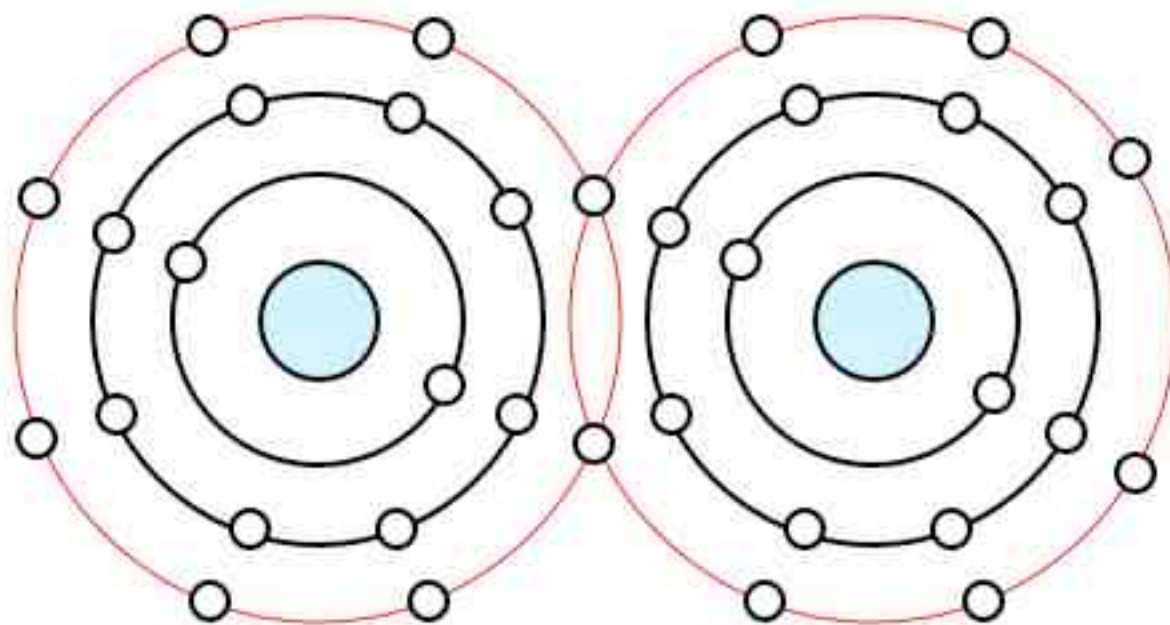
イオン結晶

右の図はプラス電荷とマイナス電荷の間のクーロン力を示したものである。プラス電荷の周りに何個のマイナス電荷があろうと、それらは全てプラス電荷の引力を受ける。このように、引力が働く相手に個数の制限がないことを不飽和性という。また、引力の大きさは距離によって変化するだけであり、方向によって影響されることはない。これを無方向性という。この不飽和性と無方向性がイオン結合の大きな特徴になっている。

上記のことは、食塩が Na^+ と Cl^- の2つのイオンからなる分子ではないことを示している。 Na^+ の周りには何個もの Cl^- があり、 Cl^- の周りには何個もの Na^+ がある。そしてそれらはすべてクーロン力で結合されている。従って、食塩の結晶を構成する無数の Na^+ と Cl^- の間には無数のクーロン力のネットワークが張り巡らされ、全体が1個の分子のような様相を呈していることになる。イオン数は全体として個数比1:1になっており、約分するとあたかも NaCl のようになる。イオン結合は、そのように考えた方が現実に近い。

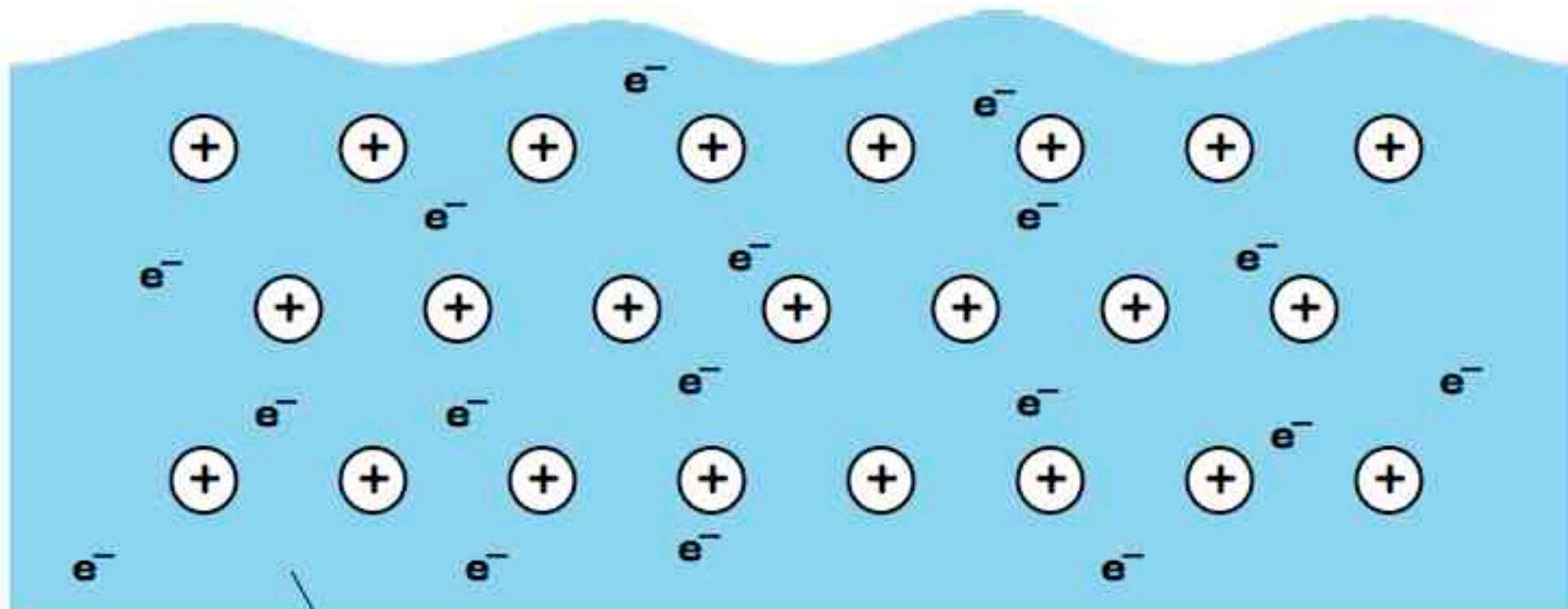


共有結合性結晶



非金属原子が互いに電子を出し合い、それを共有することで出来る結合（共有結合）からできている結晶

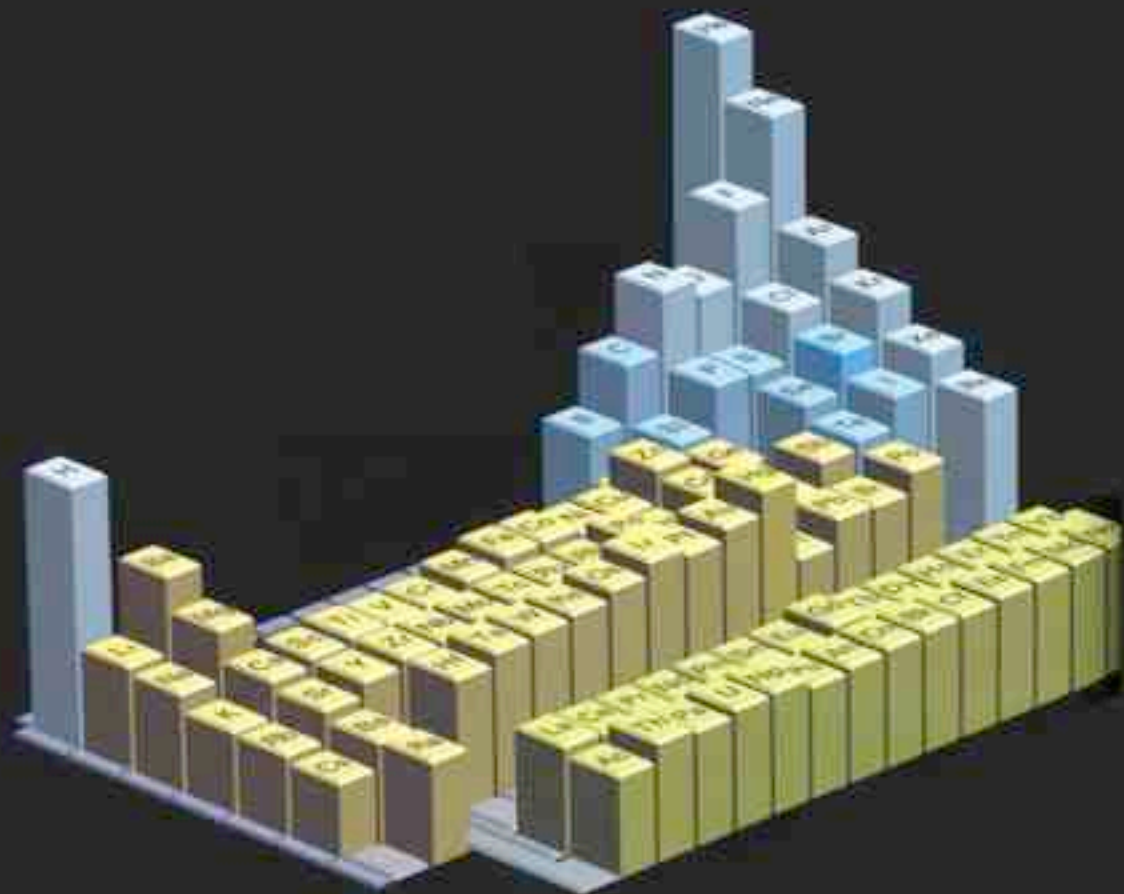
金属結合性結晶



電子の海

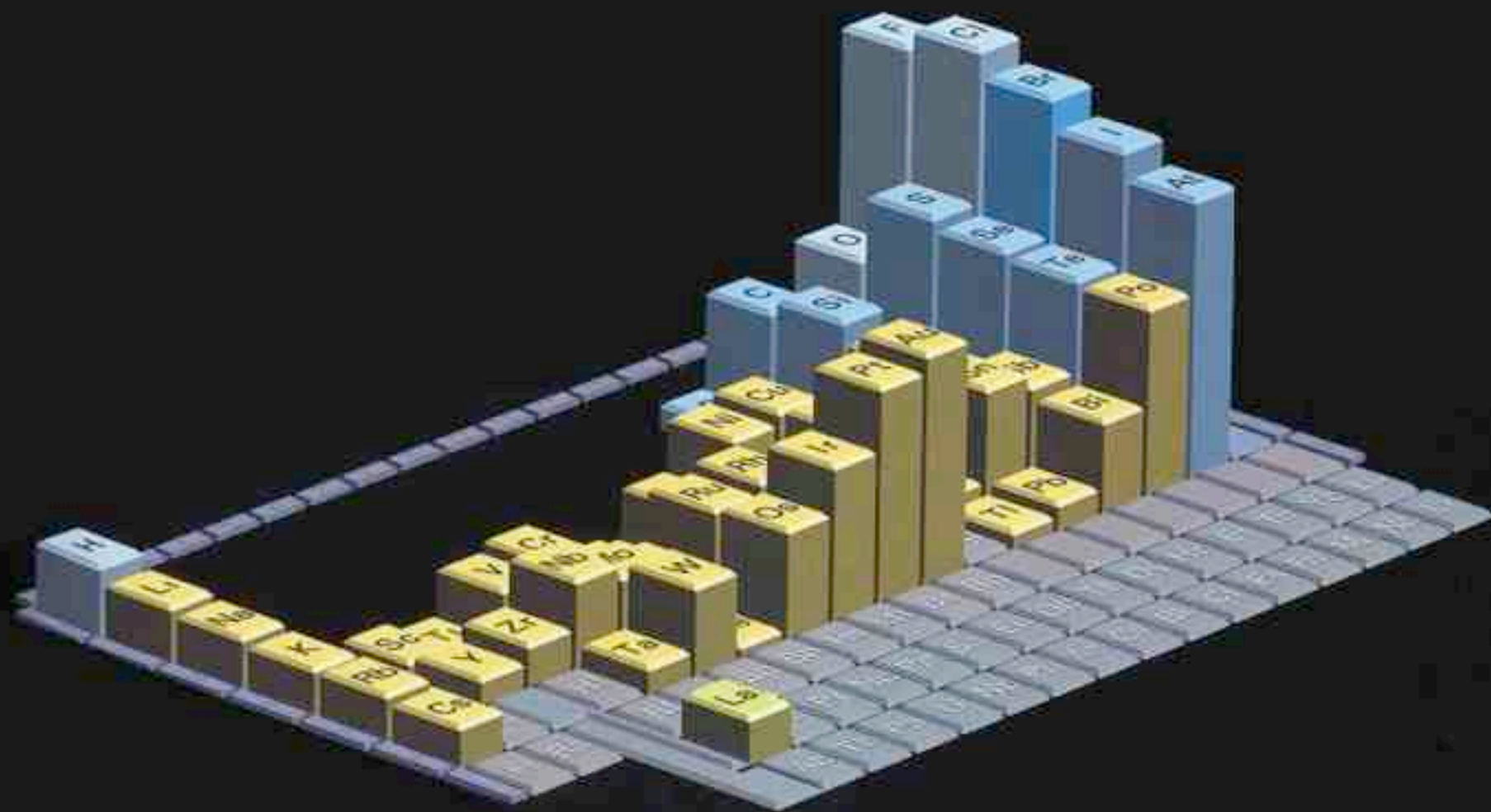
注. 常温下では金属原子が熱振動をするために電子と原子の衝突の頻度が高まる（移動が損なわれる）。しかし極低温下では振動が抑えられるために電子は流れやすくなる（超伝導現象）。

イオン化エネルギー (電子の奪われ易さ) の比較



左下の原子ほど、電子が奪われ易い。原子番号が増えるにつれて原子核のプラス電荷が大きくなり最外殻電子が核に引きつけられ、電子が奪われにくくなる。

電子親和力 (電子の受け入れ易さ) の比較



右上の原子ほど電子を受け入れ易い。

タンパク質の一次構造 (アミノ酸配列情報)

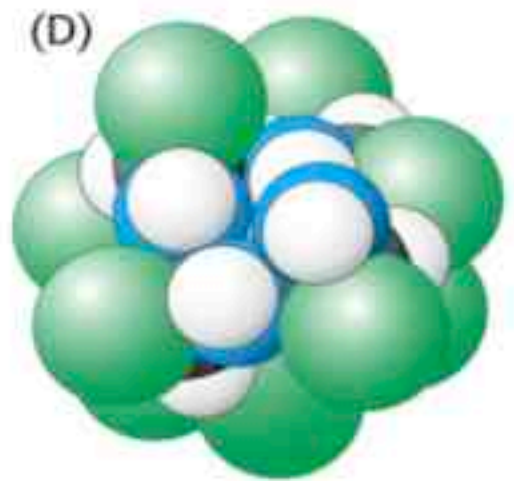
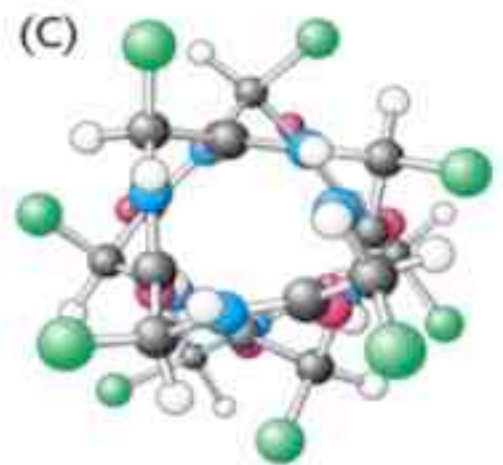
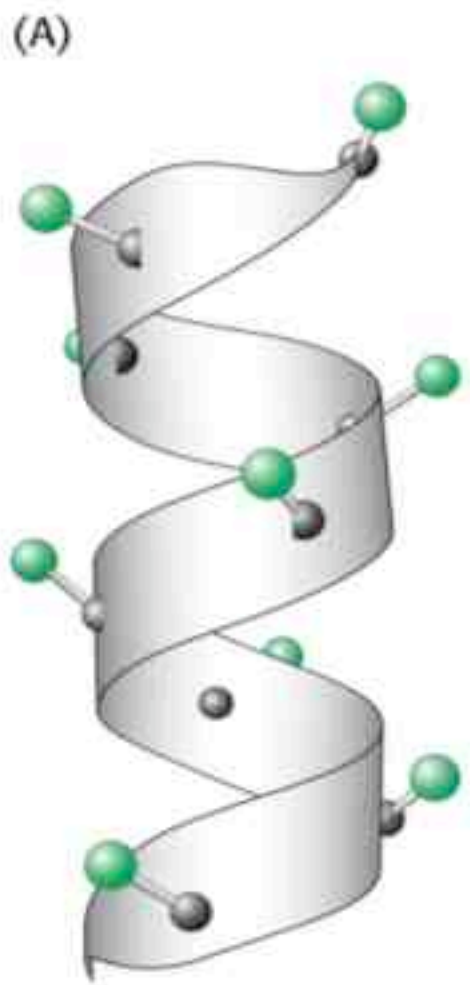
sbwAFP
(res.#=90)

ASP GLY SER CYS THR ASN THR ASN SER GLN
 LEU SER ALA ASN SER LYS CYS GLU LYS SER
 THR LEU THR ASN CYS TYR VAL ASP LYS SER
 GLU VAL TYR GLY THR THR CYS THR GLY SER
 ARG PHE ASP GLY VAL THR ILE THR THR SER
 THR SER THR GLY SER ARG ILE SER GLY PRO
 GLY CYS LYS ILE SER THR CYS ILE ILE THR
 GLY GLY VAL PRO ALA PRO SER ALA ALA CYS
 LYS ILE SER GLY CYS THR PHE SER ALA ASN

tmAFP
(res.#=84)

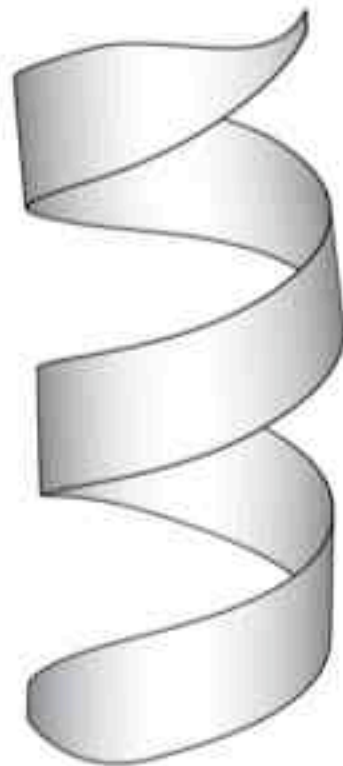
GLN CYS THR GLY GLY ALA ASP CYS THR SER CYS THR GLY
 ALA CYS THR GLY CYS GLY ASN CYS PRO ASN ALA VAL
 THR CYS THR ASN SER GLN HIS CYS VAL LYS ALA ASN
 THR CYS THR GLY SER THR ASP CYS ASN THR ALA GLN
 THR CYS THR ASN SER LYS ASP CYS PHE GLU ALA ASN
 THR CYS THR ASP SER THR ASN CYS TYR LYS ALA THR
 ALA CYS THR ASN SER SER GLY CYS PRO GLY HIS

タンパク質の二次構造 (α -らせん構造)



タンパク質の二次構造 (α -らせん構造)

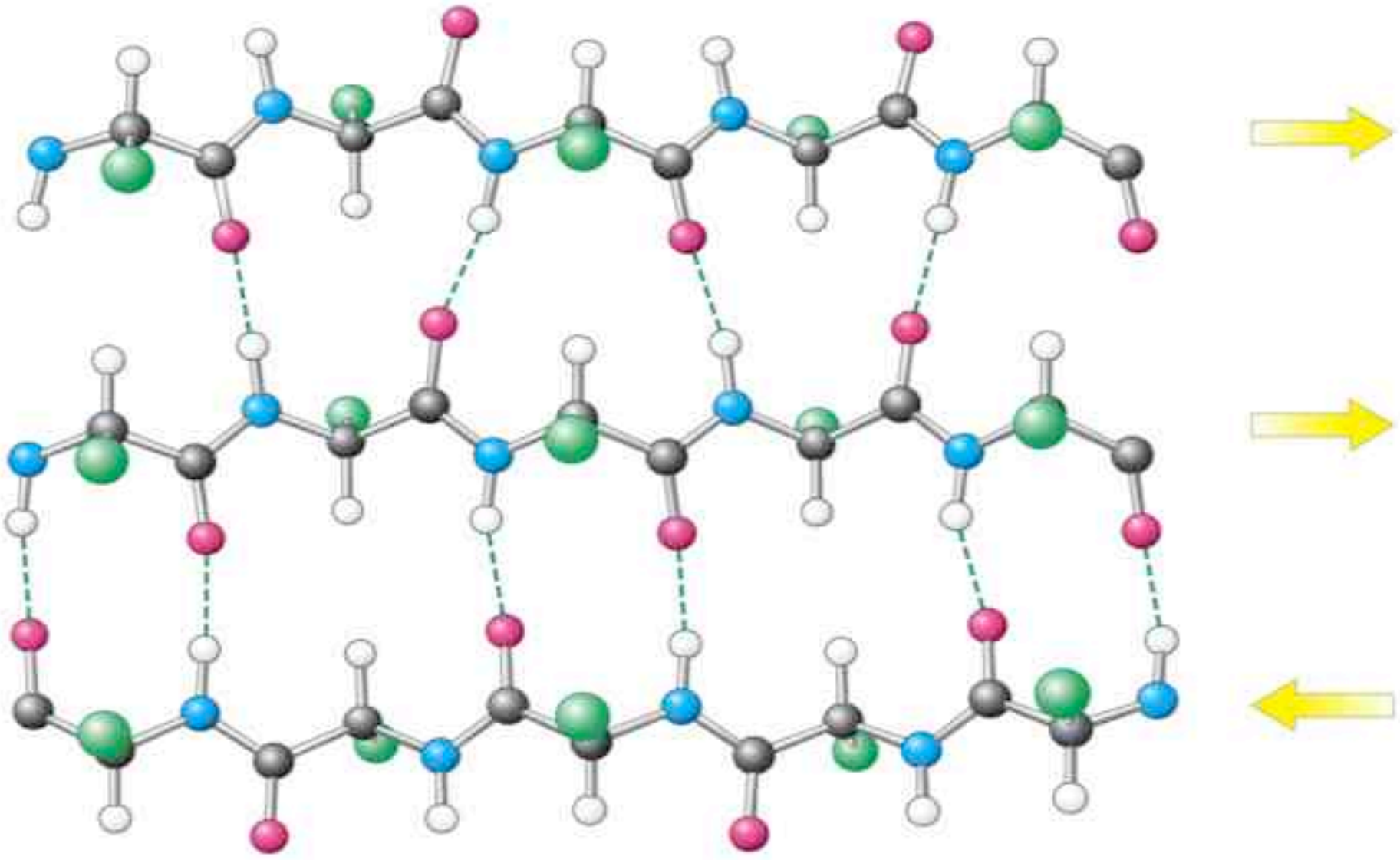
(B)



(C)

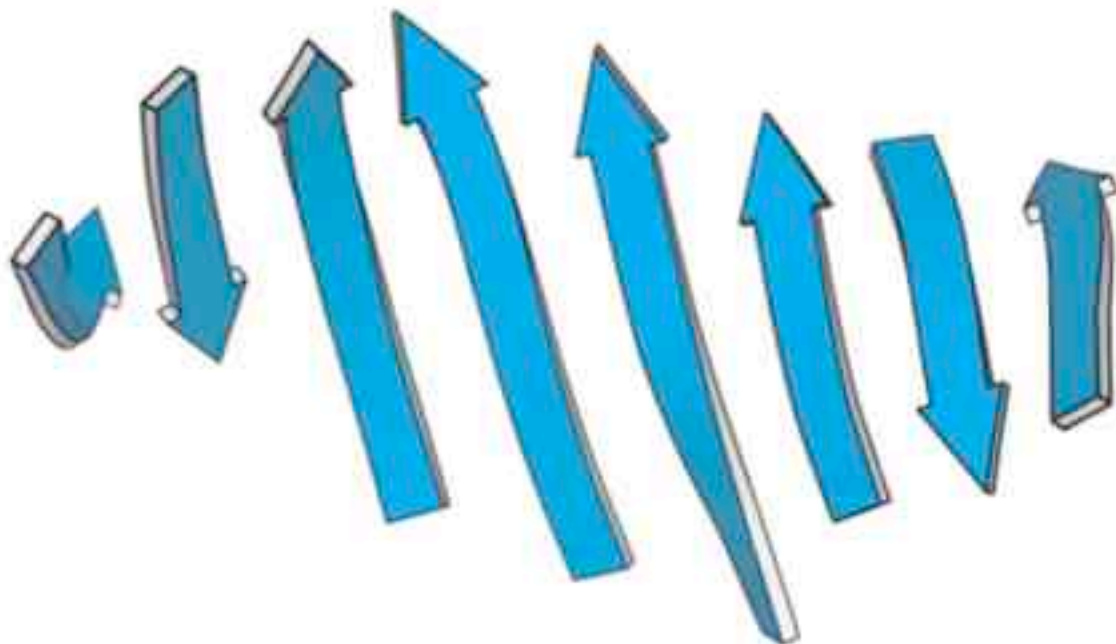


タンパク質の二次構造 (β-シート構造)



タンパク質の二次構造 (β-シート構造)

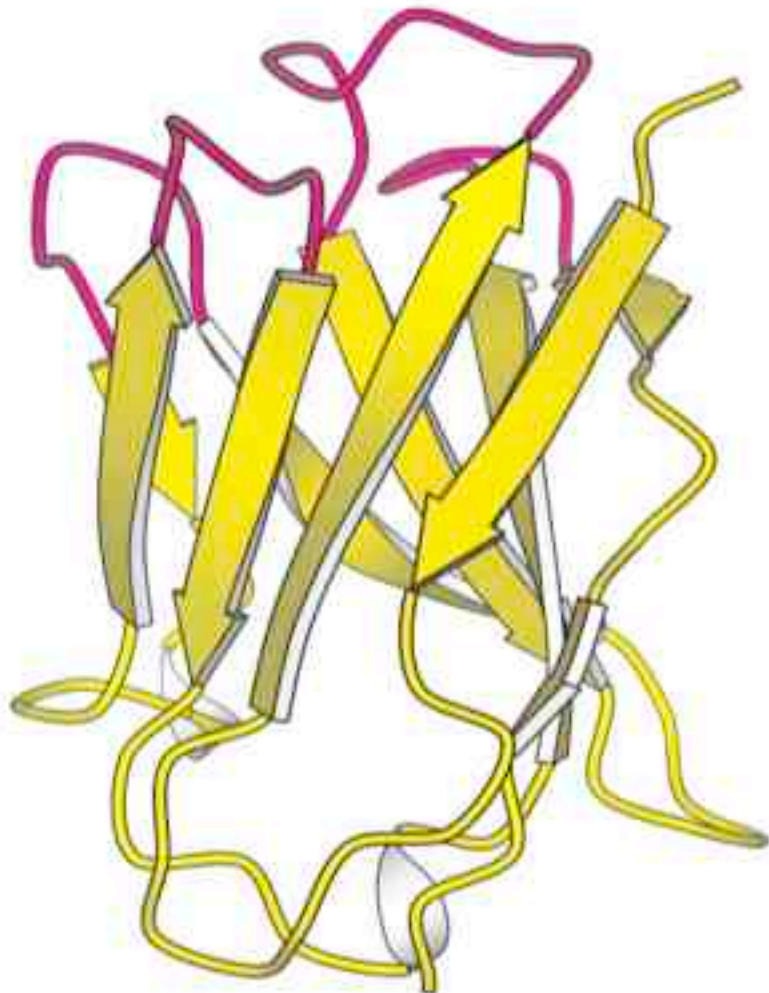
(B)



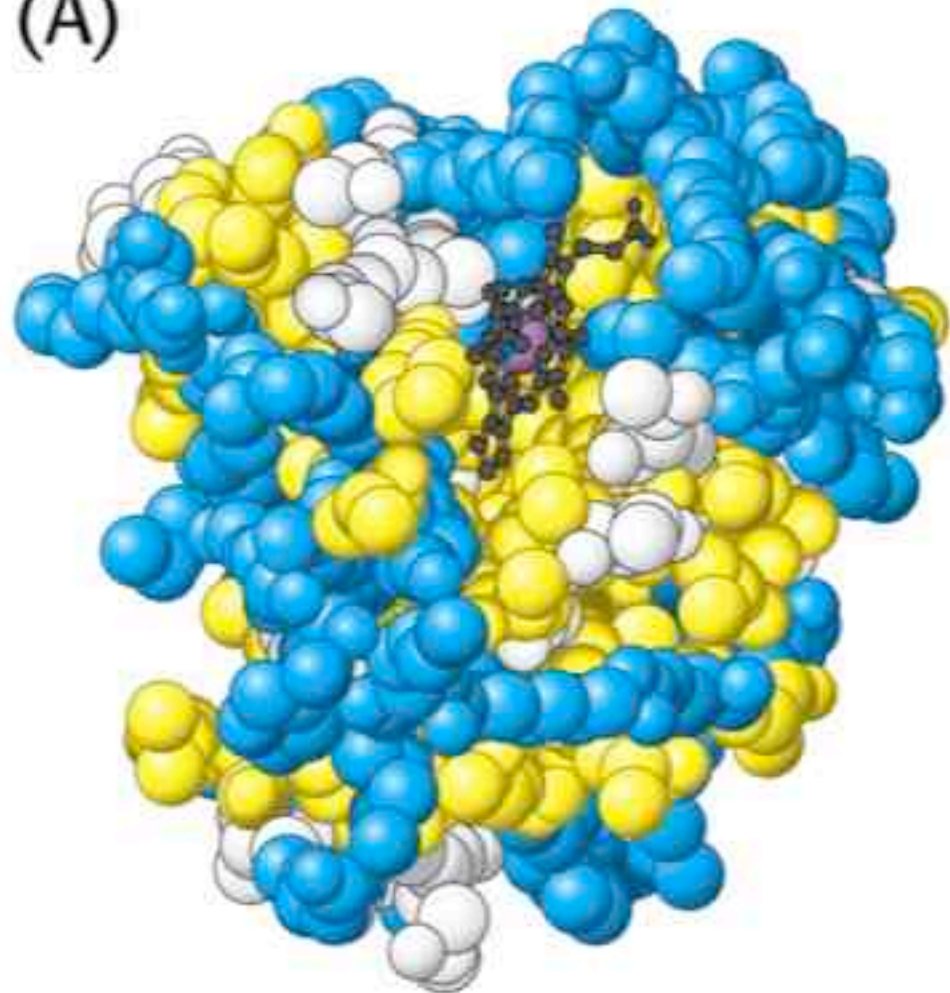
(C)



タンパク質の三次構造



(A)



(B)

