

原子球直結式分子模型の開発とその制作方法

佐藤美代志

元焼津市公立中学教員 miyoshi_sato@outlook.jp (静岡県焼津市石津港町 11-11 TEL 054-624-5980)

キーワード：分子模型，原子球直結，分子内回転，発泡スチロール，玩具

(受付：2019年12月31日)

I. はじめに

化学教育において，分子模型は学習の大きな助けとなる。分子模型には，市販の球棒モデル，空間充填式モデルや発泡スチロール球を用いた分子模型，紙細工による自作の分子模型（佐藤，2003）などがある。

このほど，連結棒を用いずに原子球同士を直接結合させて組み立てる分子模型（佐藤，2017）を考案した。

また，発泡スチロール球を素材にした本分子模型（図1）の簡単な製作方法も併せて紹介する。

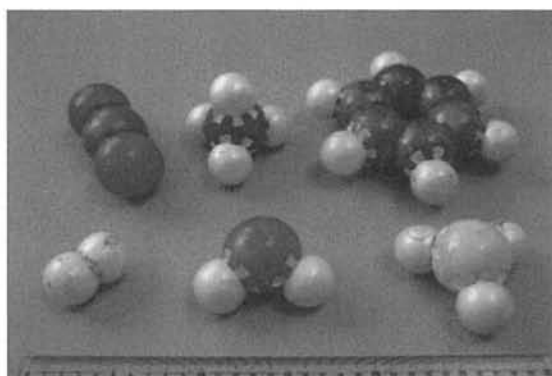


図1 分子模型

(下左から H₂, H₂O, NH₃, 上左から CO₂, CH₄, C₆H₆)

II. 原子球直結式分子模型

1) 空間充填式分子模型の問題点

空間充填式分子模型は，球棒モデル等の分子模型より実在の分子の外観に近い，分子の三次元的な構造を理解しやすい。しかし，従来の空間充填式分子模型は，原子球の結合面を前もって切除しているため，分子模型を分解すると，個々の原子球が半球や三角球などの球欠となり，実際の原子の球体構造などを的確に表現できていない。また，連結棒を用いているため，その分，分子模型の組み立てや分解に手間取る傾向にある。

本分子模型の特徴は，原子球の球体構造をできるだけ維持したまま，連結棒を用いずに，原子球同士を直接結合させて分子模型を組み立てる点にある。

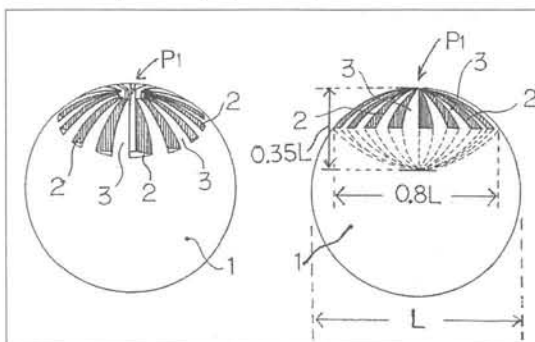


図2 一価原子の斜視図と正面図

2) 原子球直結式分子模型のしくみ

本分子模型は、図2の原子球1の結合部P1に溝部2と楔部3を放射状に設け、この原子球1の結合部同士を嵌め合せて組み立てる分子模型である(図3)。これは、各原子の電子雲が互いに重なり合って結合し、分子となっている状態を模している。

特に、連結棒を用いることなく、原子球同士を直接結合させるため、組み立てや分解が極めて容易であり、生徒はブロック玩具で遊ぶ感覚で分子模型の組立てや分解ができる。

ただし、この分子模型は結合部P1を互いに嵌め合せているため、結合部P1を軸にして“回転させる”ことはできない。

しかし、結合を一旦外して嵌め直すようにして、結合部P1を軸に一定の角度で“回す”ことは可能である。例えば、溝部2と楔部3の中心角が各々15度の場合、結合を一旦外して嵌め直すように回すことで、30度、60度、90度、120度・・・と、溝部2と楔部3の中心角の合計角となる30度単位で、分子内回転を表現することができる。

この結果、60度周期の分子内回転で生じる、エタン等の重なり配座やねじれ配座のような回転異性体(図4)やアレン($\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{CH}_2$)の炭素原子($=\text{C}=\text{C}=\text{C}=\text{C}=\text{C}$)に求められる、 $=\text{CH}_2$ の二重結合面が互いに90度で直交し合う状態も表現できるため、本分子模型は各種分子構造に対応可能である。

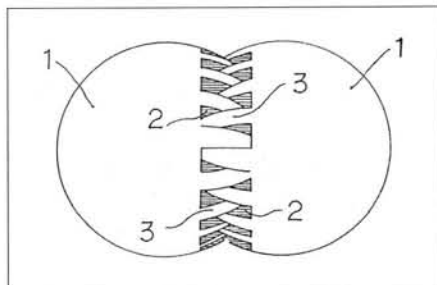


図3 二原子分子の正面図

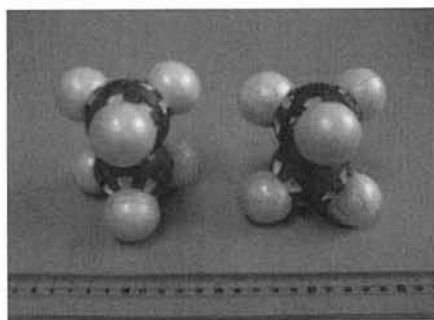


図4 エタン(C_2H_6)の回転異性体

Ⅲ. 各種原子球の製作

各種原子球は、価数に応じた単一ないしは複数の結合部を持つ、本分子模型の製作では、原子球の結合部における溝部と楔部の製作と結合部の位置の特定が重要となる。

1) 1価の原子球の製作

水素原子などの1価原子は、原子球1の表面に1箇所の結合部P1を設ける(図2)。結合部P1には中心角15度の溝部2と楔部3を放射状に設ける。原子球1の結合部P1同士を嵌め合わせることで、水素などの二原子分子の分子模型(図3)を組み立てることができる。

2) 直線型結合構造の原子球の製作

SP混成軌道をとる炭素原子などの、直線型結合構造の原子球の製作では、まず、原子球1の両端に2箇所の結合部P1、P2を定める(図5)。その際、両結合部の溝部2と楔

部3の配列が、結合部 P1~P2 を結ぶ円弧状罫線6に対して、同じ配列になるように製作する。

これによって分子内回転の基点が一致し、複雑な分子構造の組み立てが可能になる。

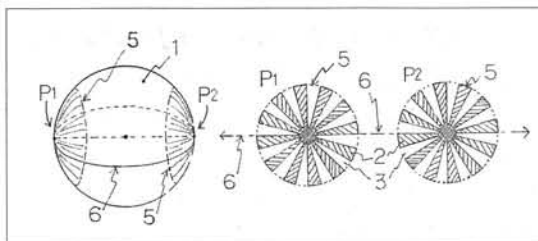


図5 直線型結合構造の原子球

3) 正三角形型結合構造の原子球の製作

SP² 混成軌道をとる炭素原子などの正三角形型結合構造の原子球1の製作では、まず原子球表面の円周上に、結合角 120 度で均等に3箇所の結合部 P1~P3 を特定する(図6)。ここでも、3箇所の結合部 P1~P3 を結ぶ円弧状罫線6に対して、各結合部の溝部2と楔部3の配列が同じになるように製作する。

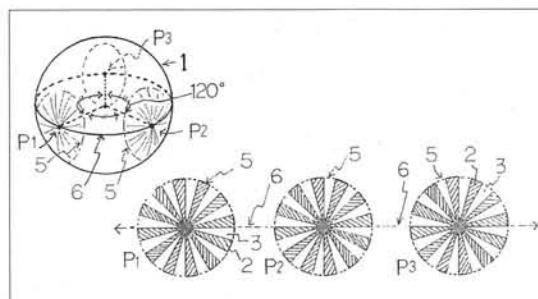


図6 正三角形型結合構造の原子球

4) 正四面体型結合構造の原子球の製作

SP³ 混成軌道をとる炭素原子などの、正四面体型結合構造の原子球1の制作では、模型球の球面全体に結合角 109.5 度で、均等に4箇所の結合部を設ける(図7)。

この場合も、4箇所の結合部を結ぶ円弧上罫線6に対する、各結合部 P1~P4 の溝部2と楔部3の配列が同じになるように製作する。

同じ SP³ 混成軌道の結合構造をとる、通常の2価の酸素原子や3価の窒素原子も、この正四面体型結合構造に基づいて各原子球を製作する。

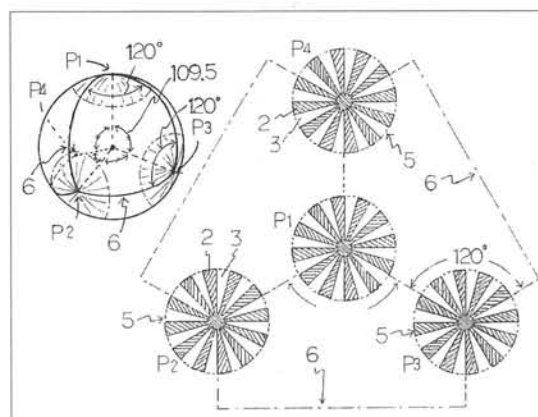


図7 正四面体型結合構造の原子球

5) その他の結合構造の原子球の製作

その他の三角両錐型結合構造や正方形型結合構造、正八面体型結合構造の場合も、原子球表面に4箇所ないしは6箇所の結合部を設ける。その溝部と楔部の配列も、各結合部を結ぶ円弧状罫線に対し同じ配列にする。

6) 分子模型の素材と原子球、結合部の大きさ

分子模型の素材には ABS 樹脂などを用いて、各種の原子球を成型加工して製作する。あたかも球形のブロック玩具からなる分子模型ようになる。

原子球の大きさは、ファンデルワールス半径 ($H=0.12nm$, $C=0.17nm$ ・・・等) を基準にする。実在原子の 1 億倍の原子球を製作する場合、水素原子は直径 2.4cm の球、炭素原子は直径 3.4cm の球となる。

結合部外円 5 の直径と結合部の深さは、原子球の直径を L とすると、結合部外円 5 の直径は $0.8L$ 程度、結合部の深さは $0.35L$ 程度とする (図 2)。特に結合部の深さは、模型球の構造上の強度の関係で、原子球 1 の芯まで届くほどの深い溝部 2 を設けることはできない。このため本分子模型の原子間の結合距離は、実際の当該分子の原子間距離と比べてやや長くなる。

そのため本分子模型は、原子球の大きさや結合角については、実際の原子球の大きさや当該分子の結合角に対応しているが、結合距離はやや長く、実際の当該分子よりややスリムな外観の分子模型となる。

IV. 本分子模型の簡単な製作方法

授業等で使う自作の大きな分子模型を想定し、本来の ABS 樹脂でなく、発泡スチロール球を素材にした分子模型の簡単な製作方法を紹介する。

1) 原子球の大きさと彩色

各原子球の大きさは、水素原子は直径 3.5cm 球、炭素、酸素、窒素原子は直径 5.0cm 球、塩素原子は直径 6.0cm 球を用いる。原子球の彩色にはプラモデルの製作などで使う安価な水溶性アクリル樹脂塗料 (水性ホビーカラー、図 8) を用いる。

炭素の原子球の彩色は、黒色でなく紺色にし、酸素を赤色、窒素を黄色、水素を水色とするとカラフルな分子模型が完成する。



図 8 水性ホビーカラーとカッターナイフ

2) 結合部の製作方法の工夫

発泡スチロール球の素材は柔らかい。結合部の強度を確保するため、溝部 2 や楔部 3 の中心角を 15 度でなく各々 30 度とする (図 9)。この結果、結合部を軸に 60 度ずつ回すことはでき、エタン等の回転異性体への対応は可能である。但し、アレン ($H_2C=C=CH_2$) の炭素原子 ($=C=$) では、 $=CH_2$ の二重結合面同士の直交状態 (90 度) への対応に工夫

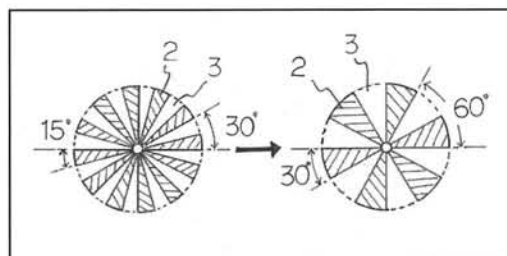


図 9 溝部と楔部の中心角の修正

が必要である。直線型結合構造の炭素原子球の両結合部 P1, P2 における, 溝部 2 と楔部 3 の配列を, 敢えて 30 度ずらす (図 10) と, アレンの直交状態の表現が可能となる (図 11)。

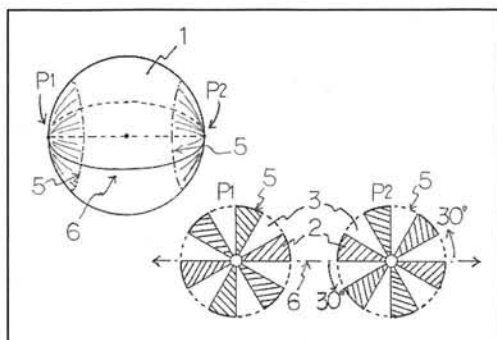


図 10 溝部と楔部の配列の工夫

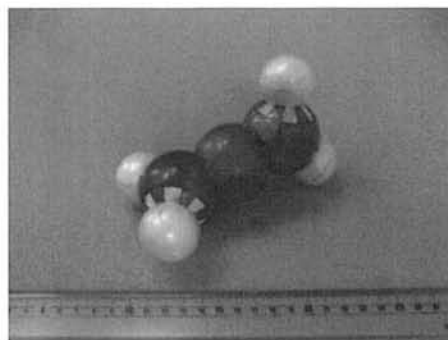


図 11 アレンの =CH_2 結合面の直交状態

3) 結合部位特定定規

原子球表面の結合部の位置の特定や, 溝部や楔部の製作には, 固い厚紙等で作った結合部位特定定規 (図 12) を用いる。

結合部位特定定規中央部の大きな円形枠は直径 4.0cm で, 炭素や酸素, 窒素などの原子球の結合部の製作に用いる。小さな円形枠は直径 2.8cm で水素原子の結合部の製作に用いる。分度器状半円形枠の直径は 5.0cm で, 縁に分度器の目盛をコピーして貼り付け, 正四面体型結合構造における結合角 109.5° などを特定する際に用いる。0 度の基点部 P には爪楊枝の先端部をテープで固定し, 測定時の基点とする (図 13, 図 14)。

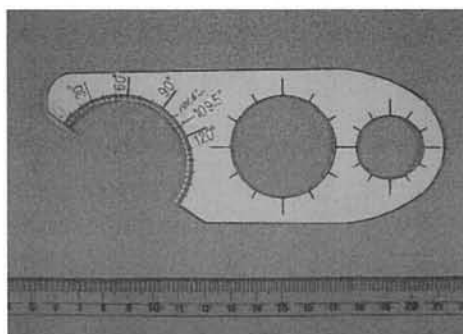


図 12 結合部位特定定規

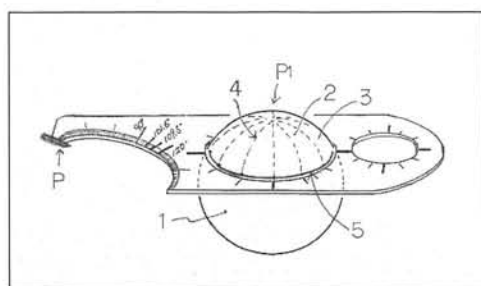


図 13 結合部の溝部, 楔部の製作

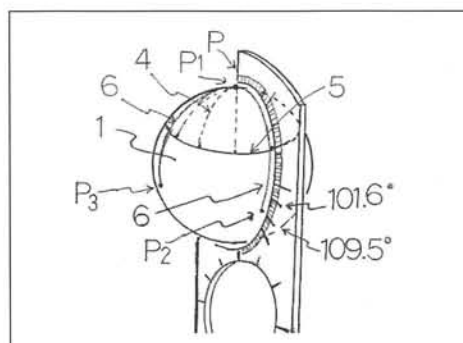


図 14 正四面体型結合構造の結合部の特

4) 結合部と溝部や楔部の製作方法

結合部の製作では、例えば、炭素原子の模型球表面に結合部の中心点 P1 を定め、この P1 を中心とした結合部の外円 5 を、特定定規の大円形枠をあてがい作図する (図 13)。この結合部の外円 5 を大円形枠の目盛を参考に 30 度ずつ区切り、結合部 の中心点 P1 を基点に放射状罫線 4 を引くことで溝部 2 と楔部 3 の線引きを行う (図 13)。

その結合部 P1 に溝部 2 と楔部 3 を設けるには、放射状罫線 4 にそって、カッターナイフで切り込みを入れ、特に中心部を鍋底状にやや深く切り込む。深さは模型球直径の約 0.35 倍相当とする。

次に、溝部 2 に相当する箇所をカッターナイフの刃先で切り取ることで、中心角 30 度の溝部 2 と楔部 3 を備えた結合部が完成する。なお、溝部 2 を切り取るには、刃先角 30 度のカッターナイフ (Tajima 製 : DC-E395, 図 8) を突き刺して、一気に切り取ると簡単に溝部を設けることができる。

5) 正四面体型結合構造の結合部の特定方法

正四面体型結合構造の結合角 109.5 度となる結合部の位置の特定方法を紹介する。特定定規の分度器状半円形枠の基点の爪楊枝先端を原子球 1 の結合部の中心 P1 にあてがい、P1 から結合部外円 5 対し直角に、特定定規の分度器状半円形枠の内縁をあてる (図 14)。この内縁上の 109.5 度の分度器目盛の位置を結合部 P2 の中心とし、両結合部の中心 P1 と P2 を円弧状罫線 6 で結ぶ。

次に、P1-P2 の円弧状罫線 6 を基準に 120 度間隔で、P2 を特定したのと同じように、結合部の中心 P3, P4 を特定し、P1-P3, P1-P4 の 2 本の円弧状罫線 6 を設ける。さらに、P2, P3, P4 も互いに円弧状罫線 6 で結ぶ。

続いて、三結合部それぞれに結合部外円 5 と放射状罫線 4 を引き、溝部 2 と楔部 3 を設ける。この場合も溝部 2 と楔部 3 の配列は、円弧状罫線 6 に対して常に同じにしてカッターナイフで溝部などを切り取ると、正四面体型結合構造の原子球模型が完成する。

6) フラーレン分子模型の製作方法

フラーレン分子 (C₆₀) の炭素原子球の結合部は、正四面体型結合構造における結合角 101.6 度の箇所 (篠原・斎藤, 1997) で、結合部は 3 箇所である。分度器状半円形枠内縁の目盛り 101.6 度を参考に、結合部 P2, P3, P4 を特定してこれらの結合部を製作すると、C₆₀ 専用の炭素原子球が製作できる。これらの原子球を 60 個結合させれば、フラーレン分子 (図 15) が完成する。

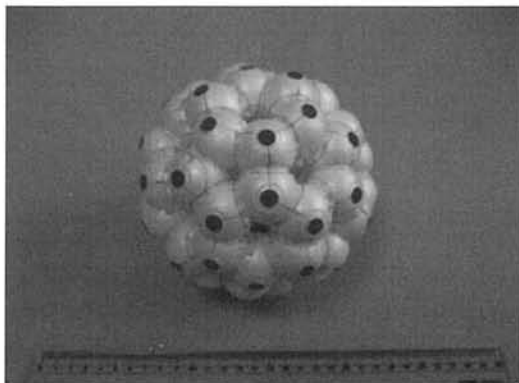


図 15 フラーレン分子 (3.5 cm 球の炭素原子)

V. まとめ

地元の中学校に本分子模型を提供し授業で活用してもらい、以下の報告を得た。

- ① 生徒はブロック玩具で遊ぶ感覚で、意欲的に分子模型の組立てに取り組んだ。
- ② 連結棒を用いず直接原子球同士を結合でき、組み立て分解が大変容易である。
- ③ 水分子、二酸化炭素分子、アンモニア分子などが、化学式では読み取れない個性的な三次元構造をしていることに興味関心を抱く生徒がいた。
- ④ 子犬の縫いぐるみのようなプロパンの分子、幾何学的な形状のベンゼンの分子など、その形状の面白さに興味を持つ生徒も多くいた。

以上の報告により、原子・分子概念や分子の構造等を初めて学習する生徒にとって、本分子模型は、ブロック玩具のように親しみやすく、取り扱いも容易であるため、大きな教育的効果を望める教具といえる。

文献

佐藤美代志 2003. 特許公報 PAT No.2519562 「原子・分子模型」

佐藤美代志 2017. 特許公報 PAT No.5913218 「分子模型」

篠原久典・斎藤弥八 1997. フラーレンの化学と物理. 名古屋大学出版会, 59pp.