

水と水分子H₂O

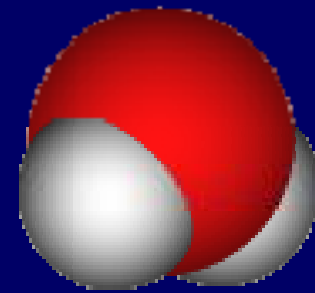
東京大学大学院理学系研究科化学専攻 濱口宏夫



地球(水の惑星)



飲料水



水分子

「※:このマークが付してある著作物は、第三者が有する著作物ですので、同著作物の再使用、同著作物の二次的著作物の創作等については、著作権者より直接使用許諾を得る必要があります。」

<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%B0%B4>

自然との出会い

科学と昆虫採集は同根（同魂）！



台湾シカクワガタ（2004.6.12 採集、台湾福山）

スペクトルとの出会い



スペクトルは分子
からの手紙です。

分光学(光を分けて
調べる学問)は
面白そうだ。



島内武彦教授 (1916-1980)

イラスト: 濱口研究室所有

自然との出会い

科学と昆虫採集は同根（同魂）！



山形県置賜郡小国町小枕山（2009.6.20日、灯火採集）

水と水分子H₂O

地球(水の惑星)

1,300,000 (1.3x10⁶) m



100,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000,000 (10⁴⁷) 個

コップ(飲料水)

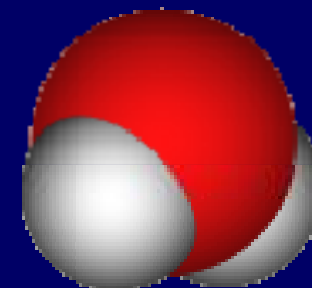
0.1 (10⁻¹) m



1,000,000,000,000,000,000,000,000 (10²⁴) 個

水分子

0.000,000,000,1 (10⁻¹⁰) m



1個

大きな数

<http://homepage3.nifty.com/such/shumi/shumi3/number1.html>
より引用

≠

数の名前	読み	指数表記	英語での呼称	SI単位接頭語
一	いち	10^0	one	
十	じゅう	10^1	ten	da(デカ)
百	ひゃく	10^2	hundred	h(ヘクト)
千	せん	10^3	thousand	k(キロ)
万	まん	10^4		
億	日本の人口	10^8		
兆	ちょう	10^{12}	trillion	T(テラ)
京	けい	10^{16}		
垓	がい	10^{20}		
杼	コップ中の水分子数	10^{24}	septillion	Y(ヨタ)
正	せい	10^{40}		
載	さい	10^{44}		
十載		10^{45}		
百載		10^{46}		
千載	地球上の水分子総数	10^{47}		
極	ごく	10^{48}		
那由他	なゆた	10^{60}		
不可思議	ふかしぎ	10^{64}		
無量大数	むりょうたいすう	10^{68}		

数の名前	読み	指数表記	SI単位接頭語
分	ぶ	10 ⁻¹	d(デシ)
厘	りん	10 ⁻²	c(センチ)
毛	もう	10 ⁻³	m(ミリ)
糸	し	10 ⁻⁴	
忽	こつ	10 ⁻⁵	
微	び	10 ⁻⁶	μ(マイクロ)
纖	せん	10 ⁻⁷	
沙	しゃ	10 ⁻⁸	
塵	じん	10 ⁻⁹	n(ナノ)
埃	水分子の大きさ	10 ⁻¹⁰	
渺	びょう	10 ⁻¹¹	
漠	ぼく	10 ⁻¹²	p(ピコ)
模糊	もこ	10 ⁻¹³	
逡巡	しゅんじゅん	10 ⁻¹⁴	
須臾	しゅゆ	10 ⁻¹⁵	f(フェムト)
瞬息	しゅんそく	10 ⁻¹⁶	
彈指	だんし	10 ⁻¹⁷	
刹那	せつな	10 ⁻¹⁸	a(アト)
六徳	りっとく	10 ⁻¹⁹	
虚	きょ	10 ⁻²⁰	
空	くう	10 ⁻²¹	z(ゼプト)
清	せい	10 ⁻²²	
淨	じょう	10 ⁻²³	

水と水分子H₂O

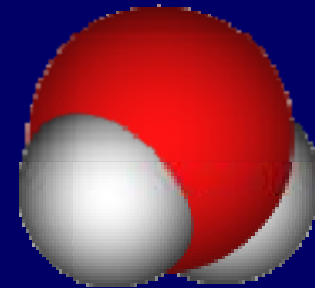
1,300,000 (1.3X10⁶) m



0.1 (10⁻¹) m



0.000,000,000,1 (10⁻¹⁰) m



物理化学

マクロ世界

ミクロ世界



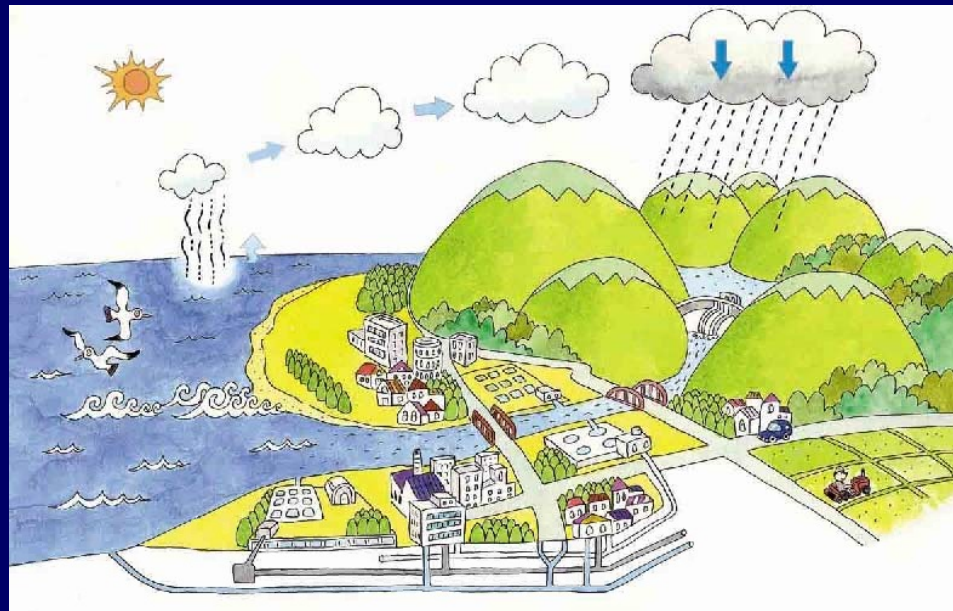
クレオパトラのワイン

2000年少し前のある晩、クレオパトラがグラス1杯のワインを飲み干しました。

水の循環



BC 20



図：日本下水道協会提供

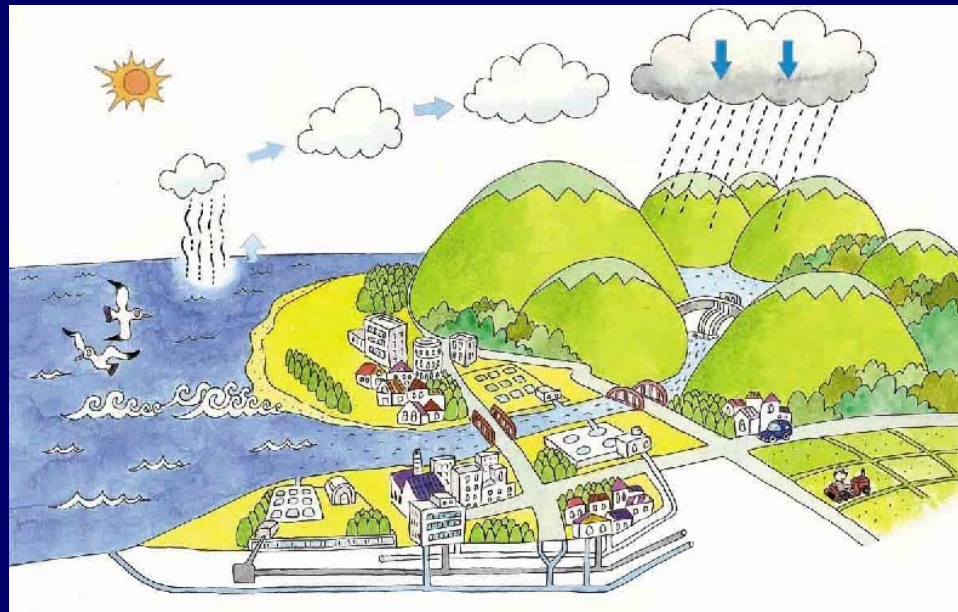


AD 2009

クレオパトラのワイン

クレオパトラのグラスには1,000,000,000,000,000,000,000,000個 (10^{24} =1 掬個) の水分子  が含まれていました。それらの水分子は今どうなっているのでしょうか。

≠



1,000,000,000,000,000,000,000,000 (10^{24}) 個

図：日本下水道協会提供

クレオパトラのグラス中にあった水分子である確率
 $=10^{24} \div 10^{47} = 10^{-23} = 1$ 浄

$10^{24} \times 10^{-23} = 10$ 個

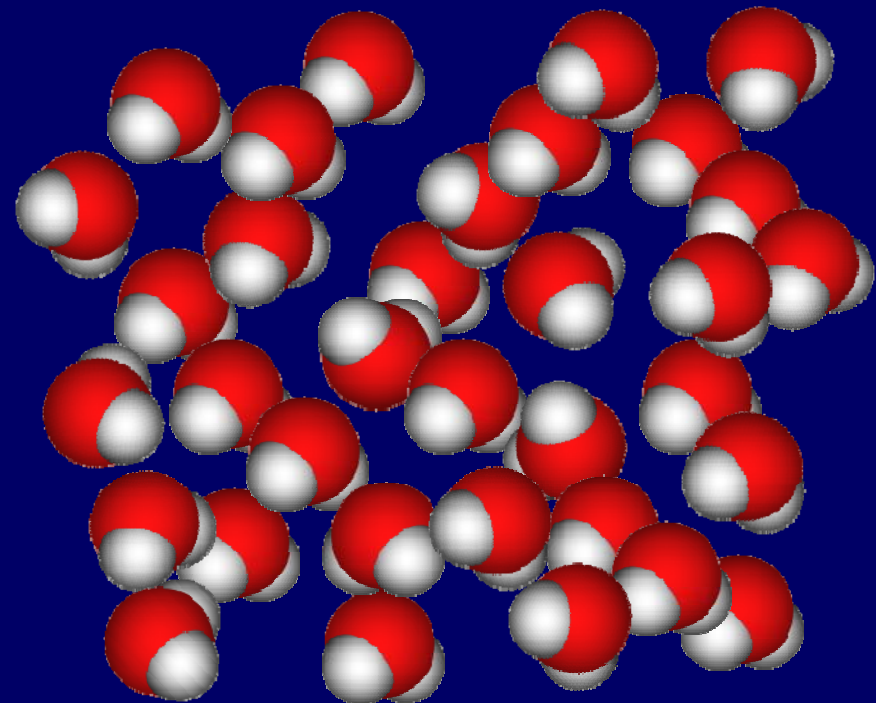
マイクロ世界の常識はマクロ世界の非常識

クレオパトラのグラスには1,000,000,000,000,000,000,000,000個 ($10^{24}=1$ 杼個) の水分子が含まれていました。そしてそれらの水分子は、皆完全に同じなのです。不思議ですね。したがって、水分子に目印をつけることはできません。

マクロ世界



マイクロ世界



水分子の構造

どの水分子も皆寸分違わず同じ顔をしているのです。不思議ですね。

+

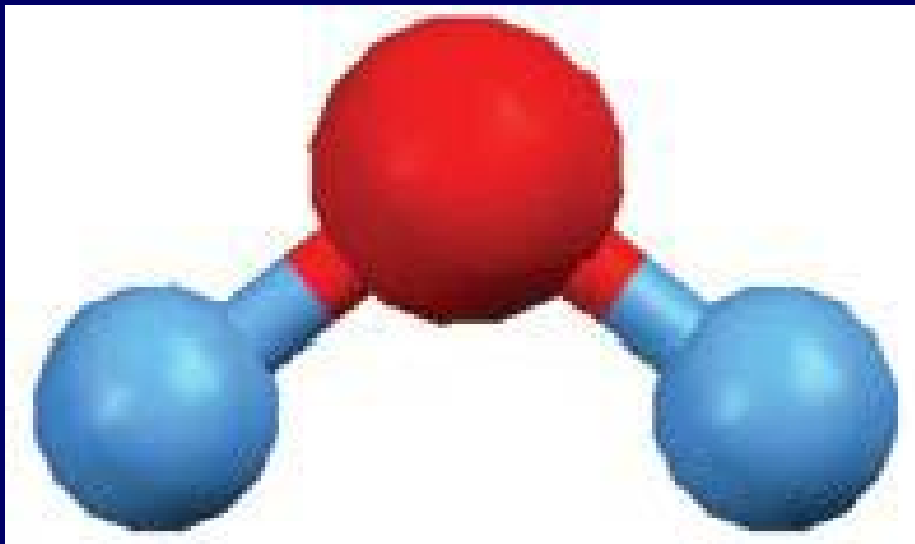
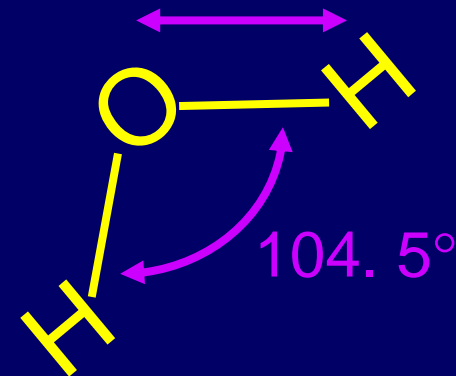


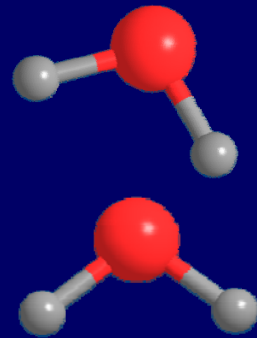
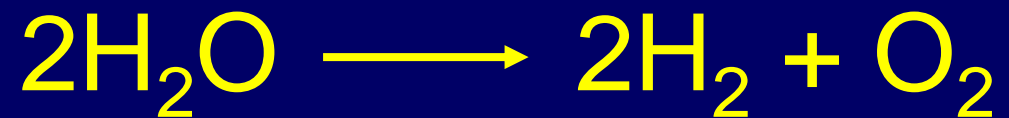
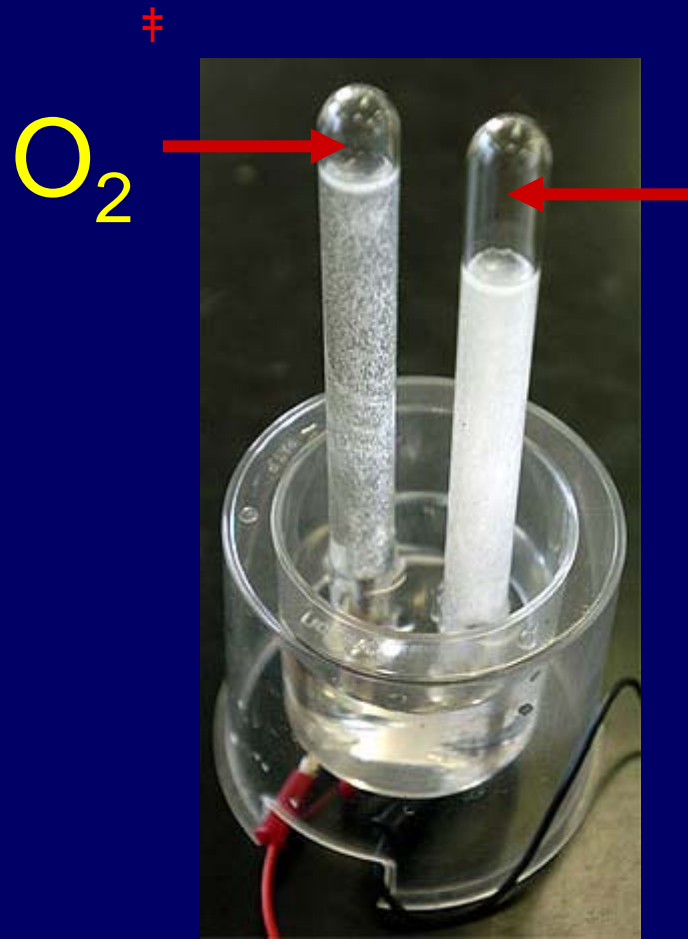
図: 大阪市立大学 吉野治一教授提供

0.000,000,000,0958 m
=95.8 pm

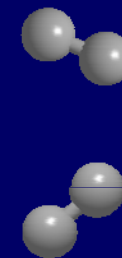


水の電気分解

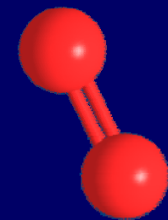
William Nicholson and Anthony Carlisle (1800年)



水分子x2



水素分子x2



酸素分子x1

<http://www.ons.ne.jp/~taka1997/education/2003/chemistry/16/index.html>より引用

水素分子の構造

水素分子は2個の水素原子から出来ています。

+

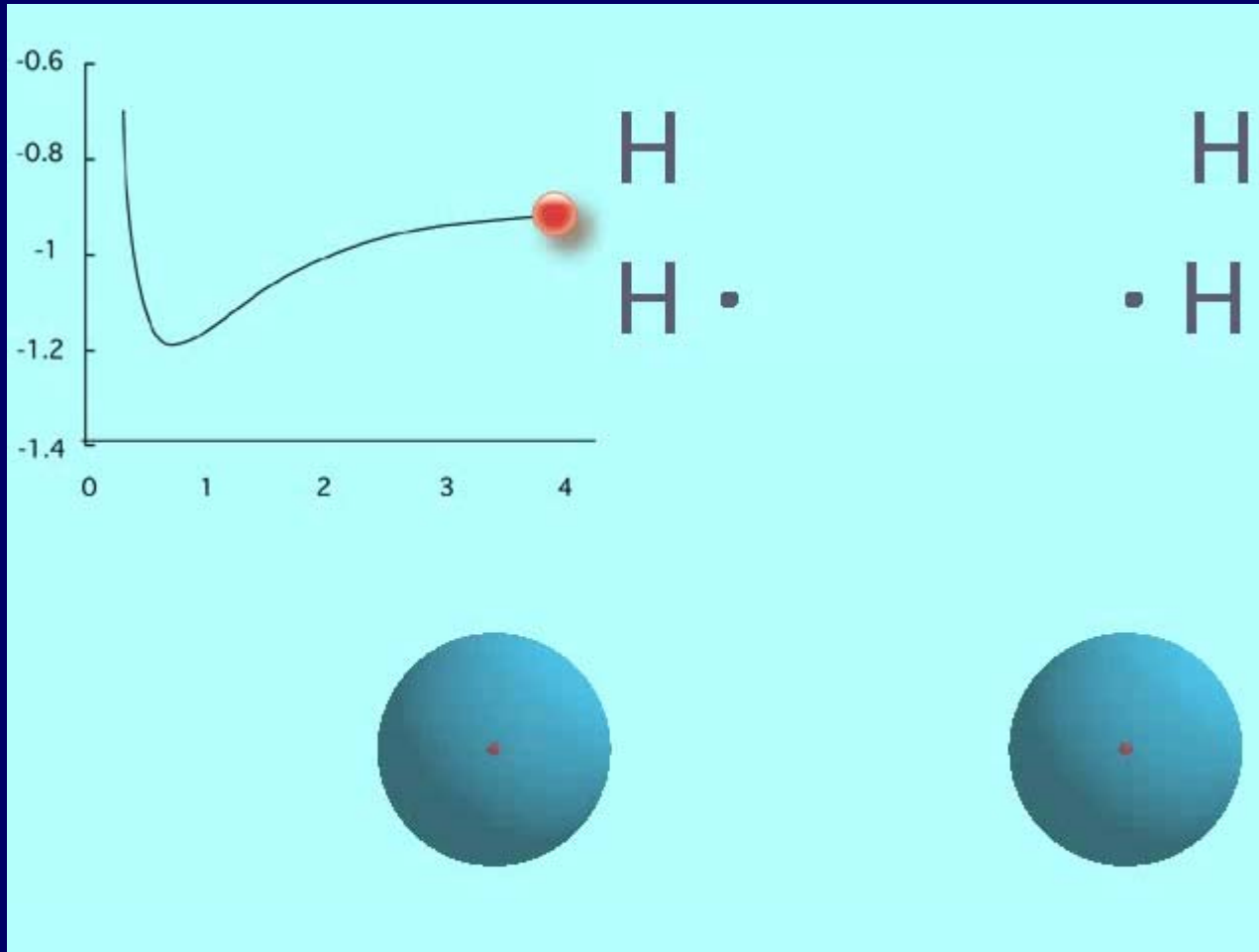
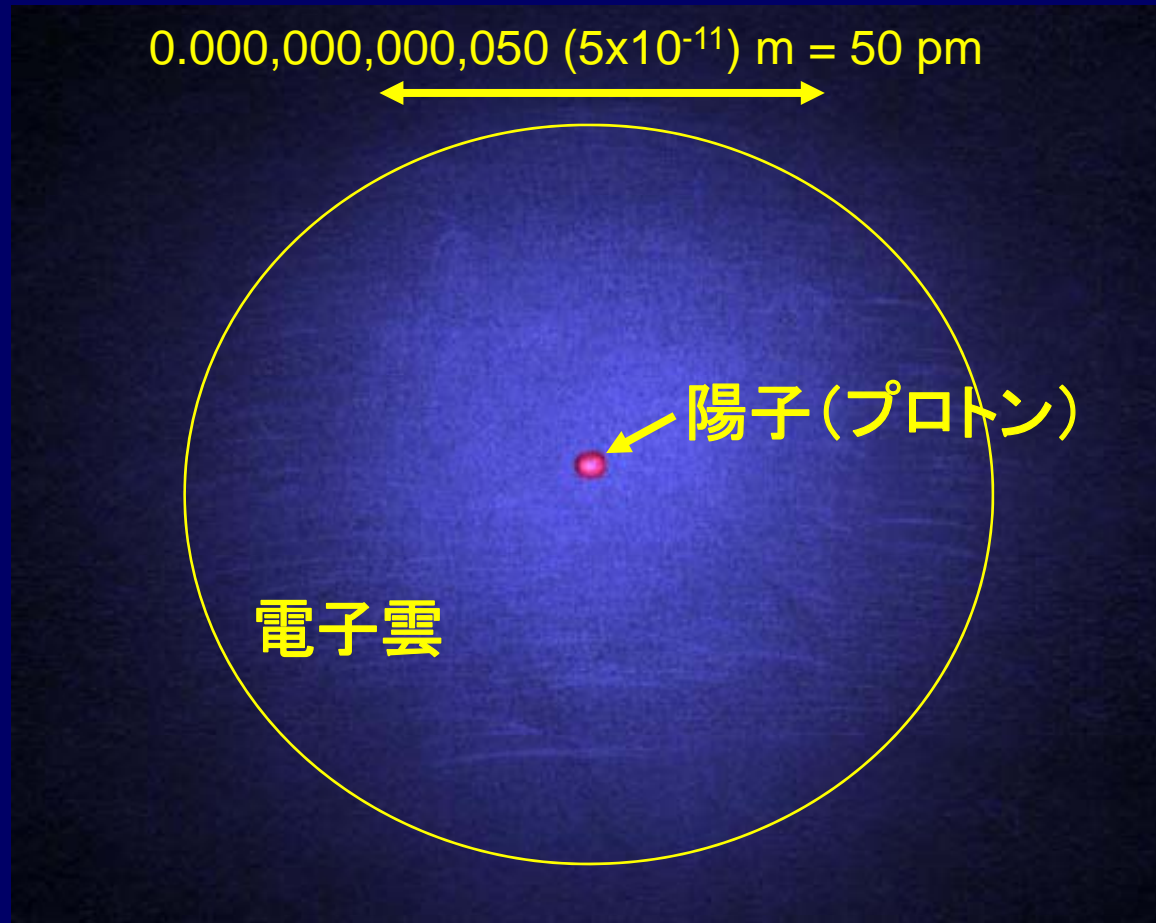


図: 独立行政法人科学技術振興機構「理科ねっとわーく」提供

水素原子の構造

水素原子は1個の陽子(プロトン)と1個の電子から出来ています。

※

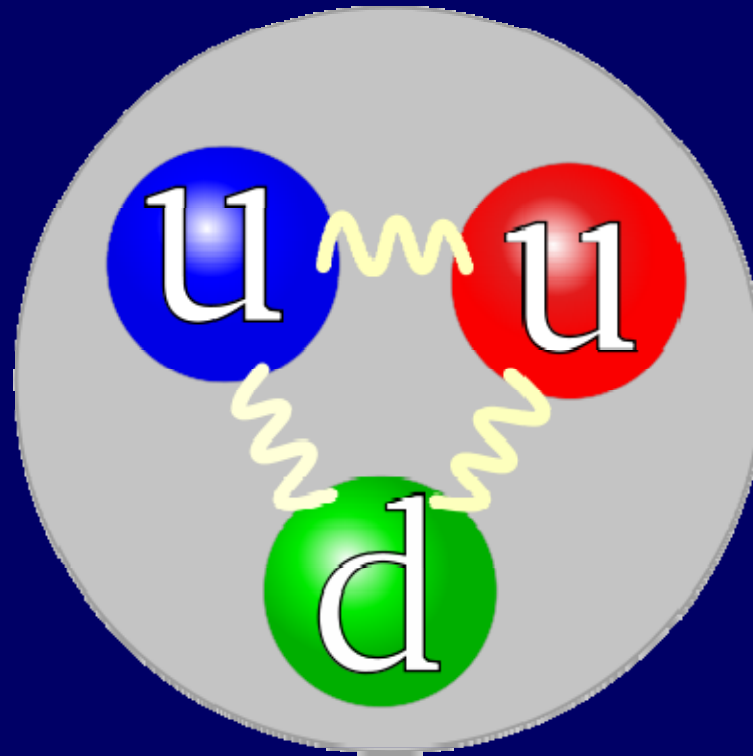


<http://snews.bnl.gov/popsci/nuclear-energy.html>より引用

陽子(プロトン)の構造

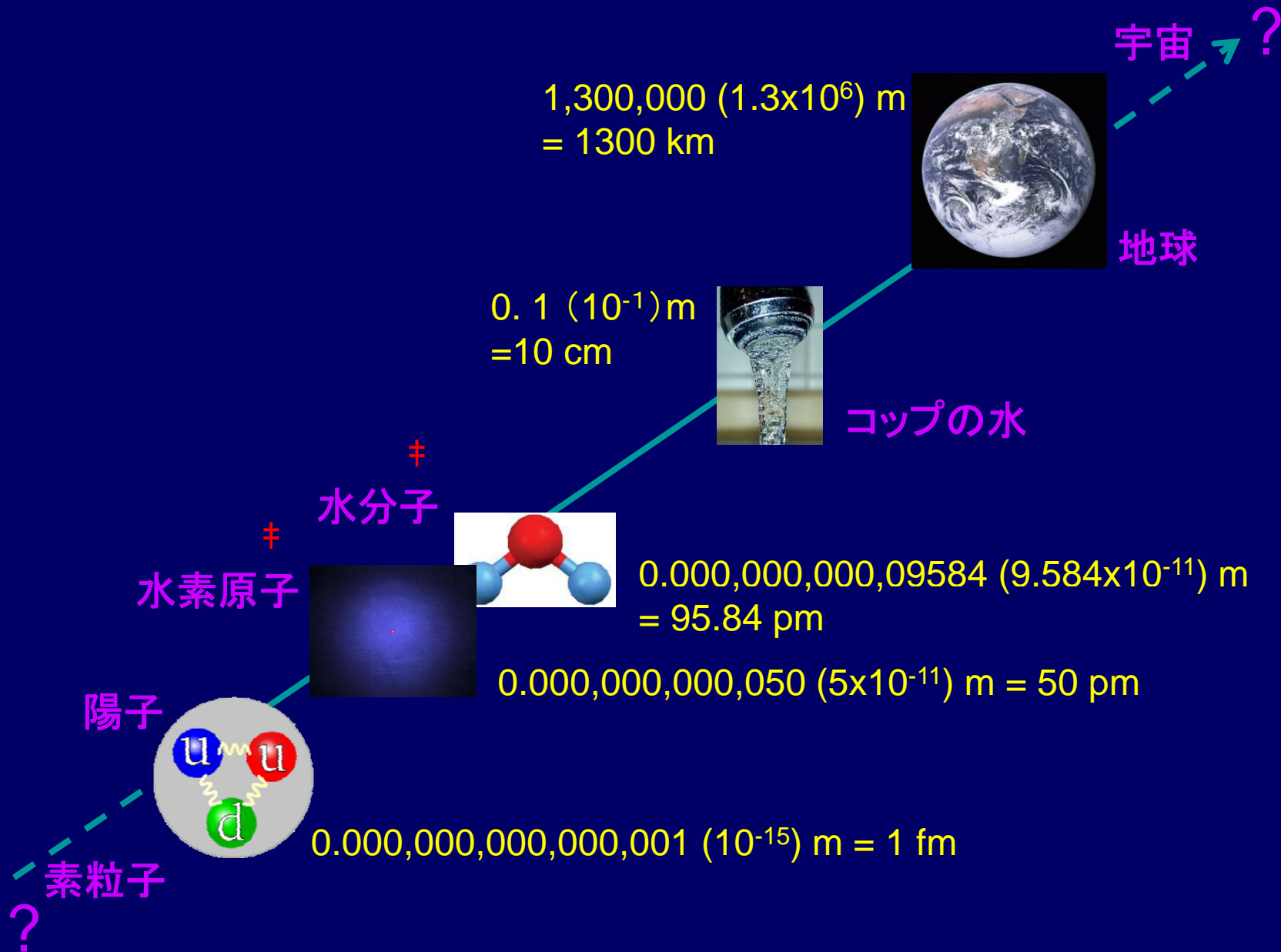
陽子は2個のアップクォーク(u)と1個のダウクォーク(d)から出来ています。

0.000,000,000,000,001 (10^{-15}) m = 1 fm



http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Quark_structure_proton.svg

ものの大きさと階層構造



20世紀の科学が明らかにしたこと

宇宙 ?

1,300,000 (1.3×10^6) m
= 1300 km



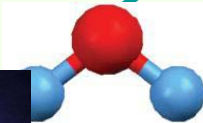
地球

0.1 (10^{-1}) m
= 10 cm



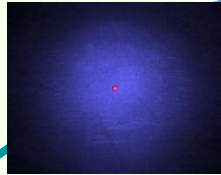
コップの水

水分子



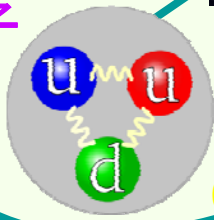
0.000,000,000,09584 (9.584×10^{-11}) m
= 95.84 pm

水素原子



0.000,000,000,050 (5×10^{-11}) m = 50 pm

陽子



0.000,000,000,000,001 (10^{-15}) m = 1 fm

素粒子

?

21世紀の物理化学

宇宙 ?

1,300,000 (1.3×10^6) m
= 1300 km



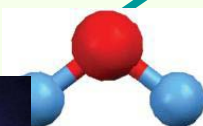
地球

0.1 (10^{-1}) m
= 10 cm



コップの水

≠
水分子



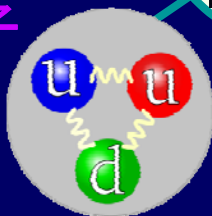
≠
水素原子



0.000,000,000,09584 (9.584×10^{-11}) m
= 95.84 pm

0.000,000,000,050 (5×10^{-11}) m = 50 pm

陽子



0.000,000,000,000,001 (10^{-15}) m = 1 fm

素粒子

?
?

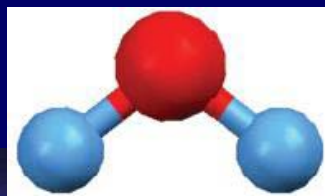
今日のお話:水の物理化学

コップの水



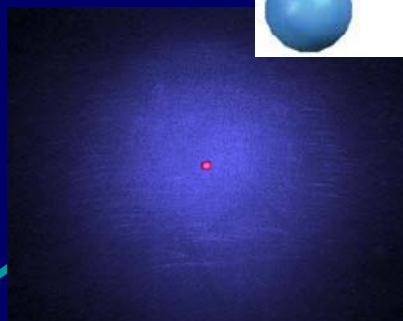
0.1 (10^{-1}) m
= 10 cm

≠ 水分子



0.000,000,000,09584 (9.584×10^{-11}) m
= 95.84 pm

≠



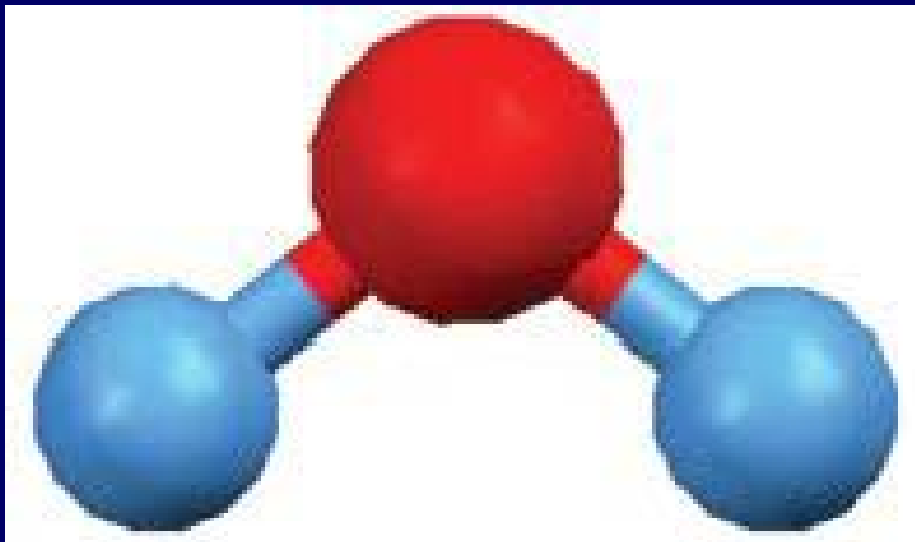
0.000,000,000,050 (5×10^{-11}) m = 50 pm

水素原子

水分子の構造

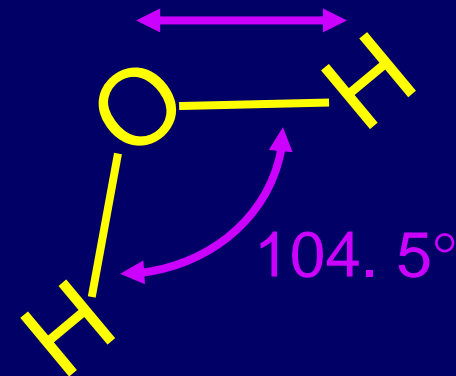
こんなに小さな水分子をどうやって測るのでしょうか。不思議ですね。

✦



図：大阪市立大学 吉野治一教授提供

0.000,000,000,0958 m
=95.8 pm



スペクトルで分子を測る



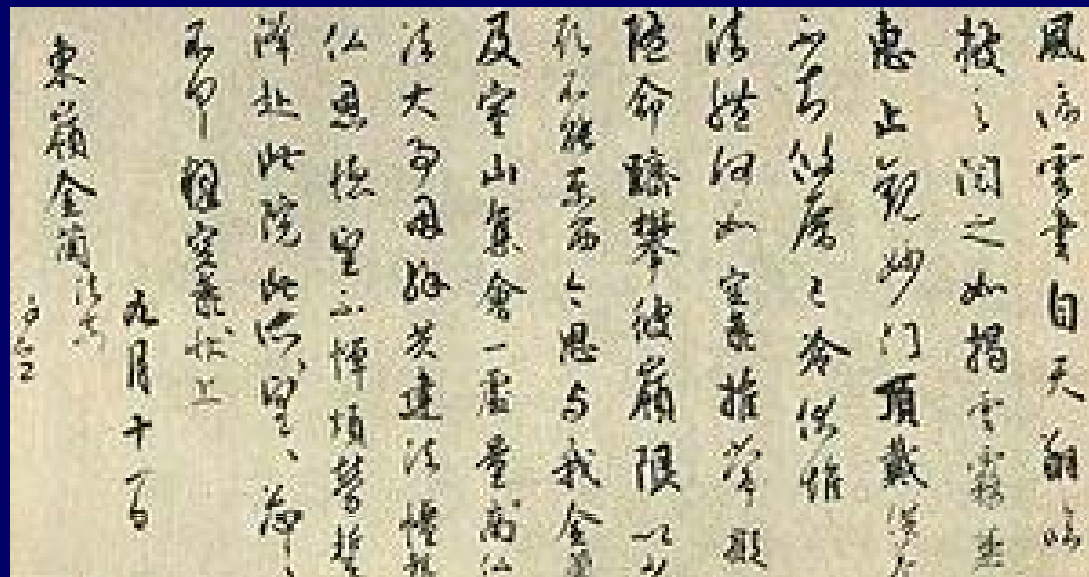
スペクトルは分子
からの手紙です。



島内武彦教授 (1916-1980)

水分子H₂Oからの手紙

弘法大師筆尺牘三通
(風信帖)



<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%A2%A8%E4%BF%A1%E5%B8%96>

H₂Oの振動回転ラマンスペクトル

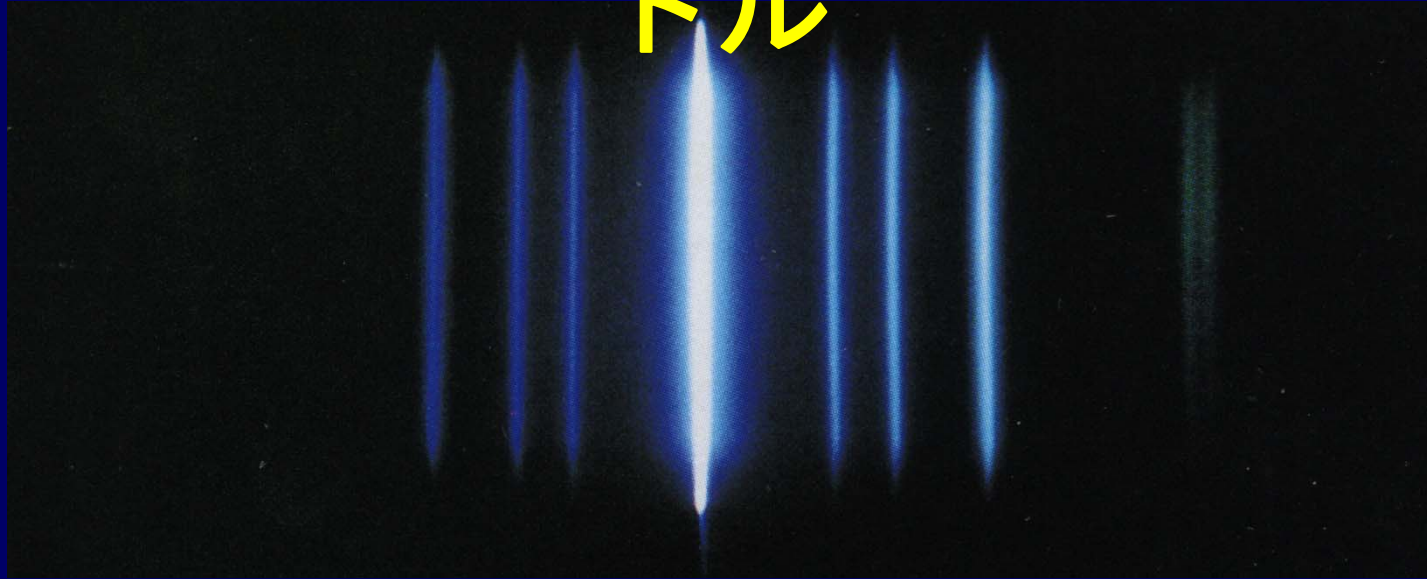
著作権処理の都合で、

この場所に挿入されていた

グラフ

を省略させていただきます。

ラマン散乱とラマンスペクトル



ラマン散乱：

インドの物理学者C. V. Raman が1928年に発見

ラマンスペクトル：

ラマン散乱光のスペクトル



写真：Wikipediaより引用

http://de.wikipedia.org/wiki/C._V._Raman

スペクトルで分子の指紋をとる



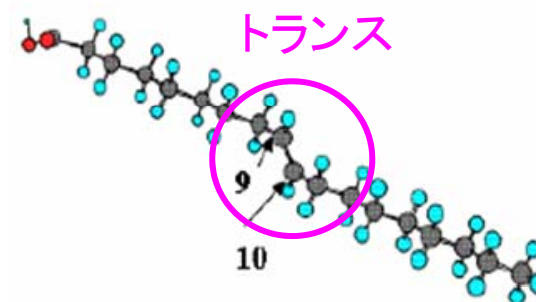
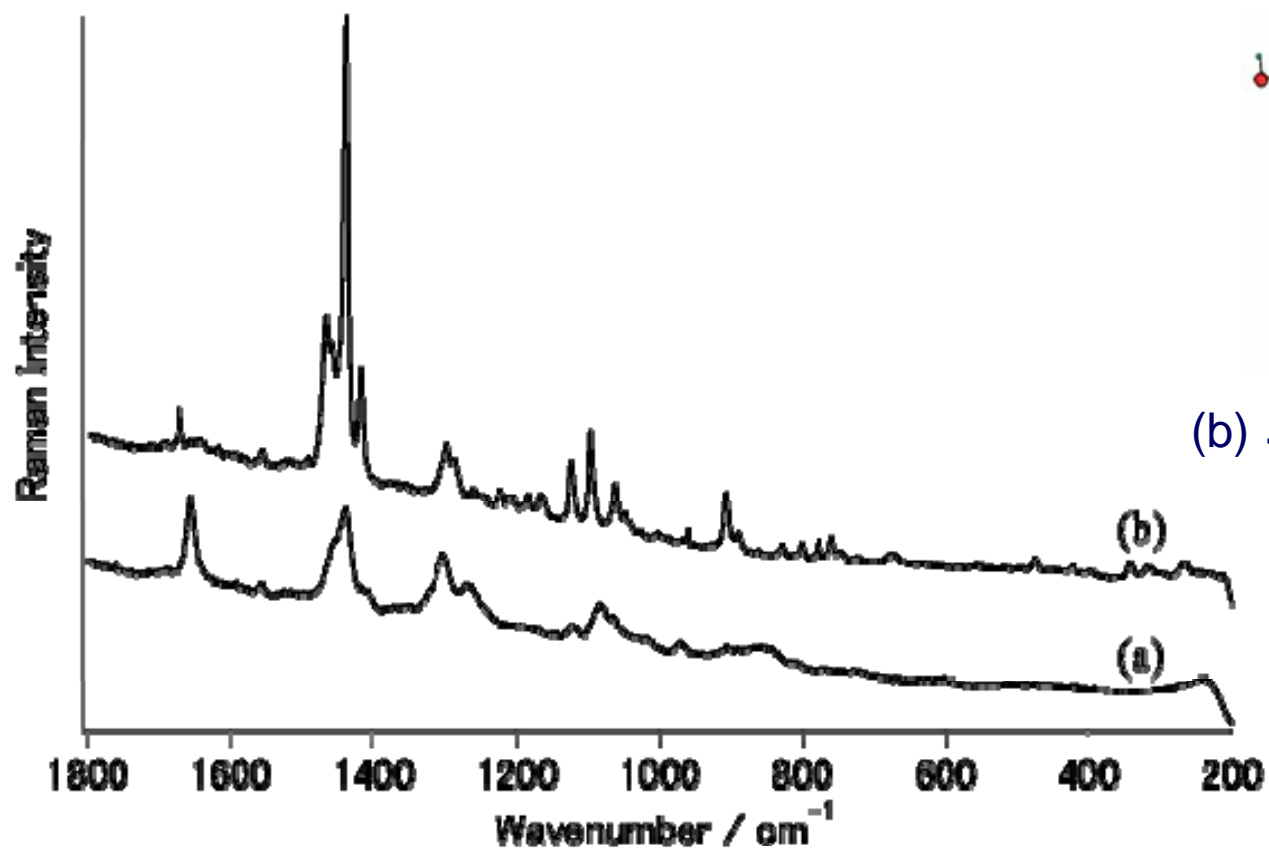
ラマンスペクトルは
分子の指紋です。



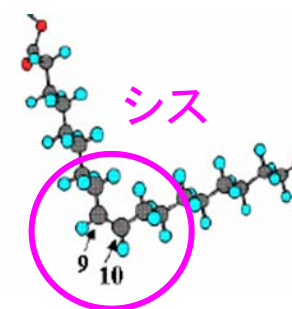
島内武彦教授 (1916-1980)

ラマンスペクトル: 分子の指紋

シス脂肪酸とトランス脂肪酸の判別

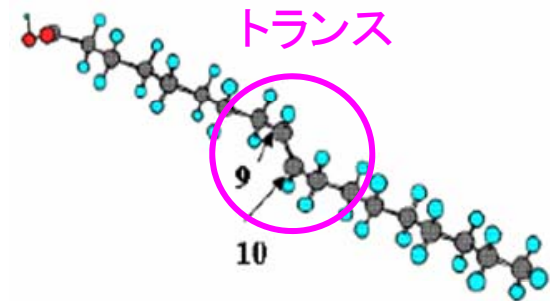
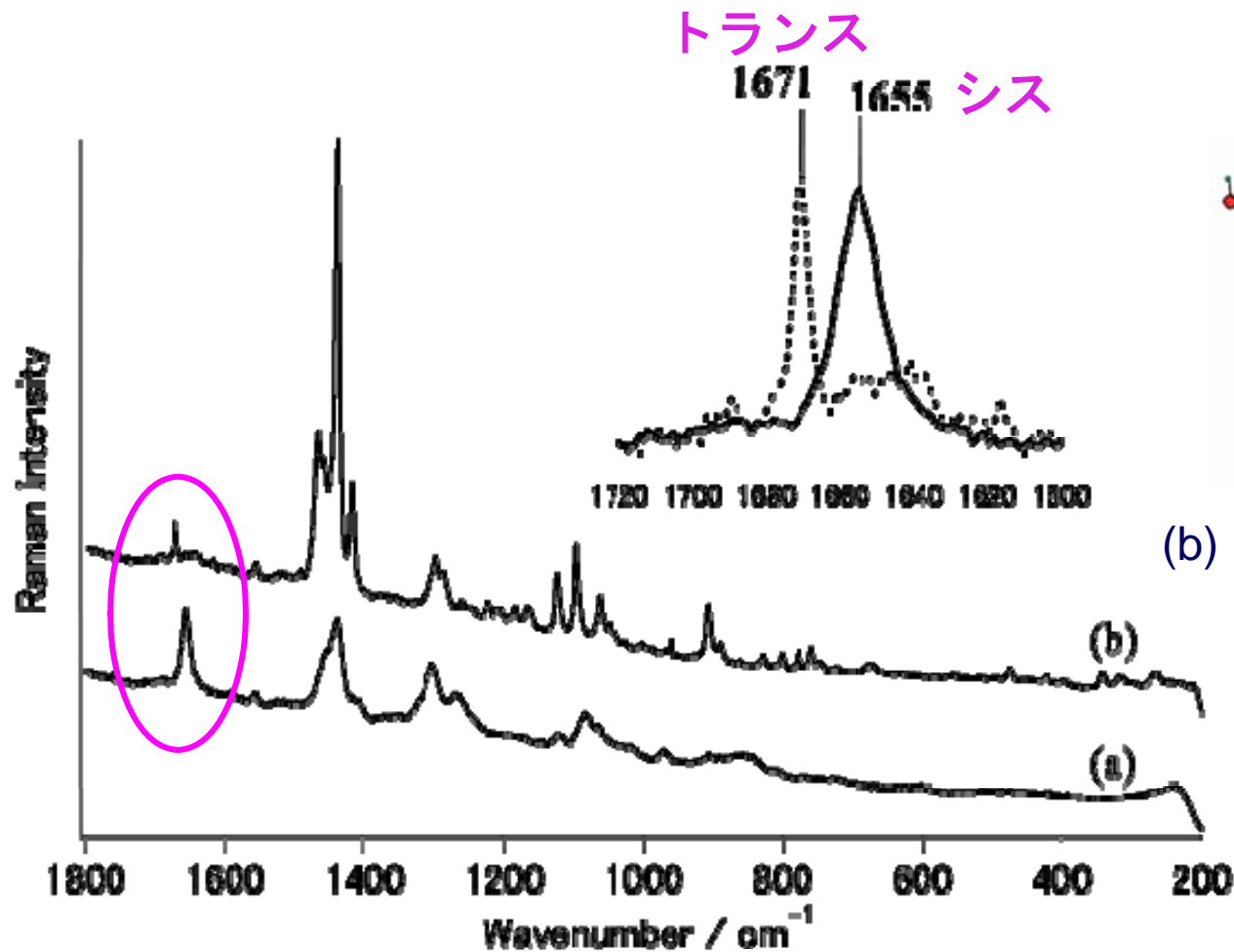


(b) エライジン酸 (mp. 46.5 oC)

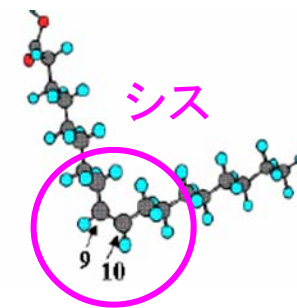


(a) オレイン酸 (mp. 13.4 oC)

不飽和脂肪酸のラマンスペクトル: シス脂肪酸とトランス脂肪酸の判別



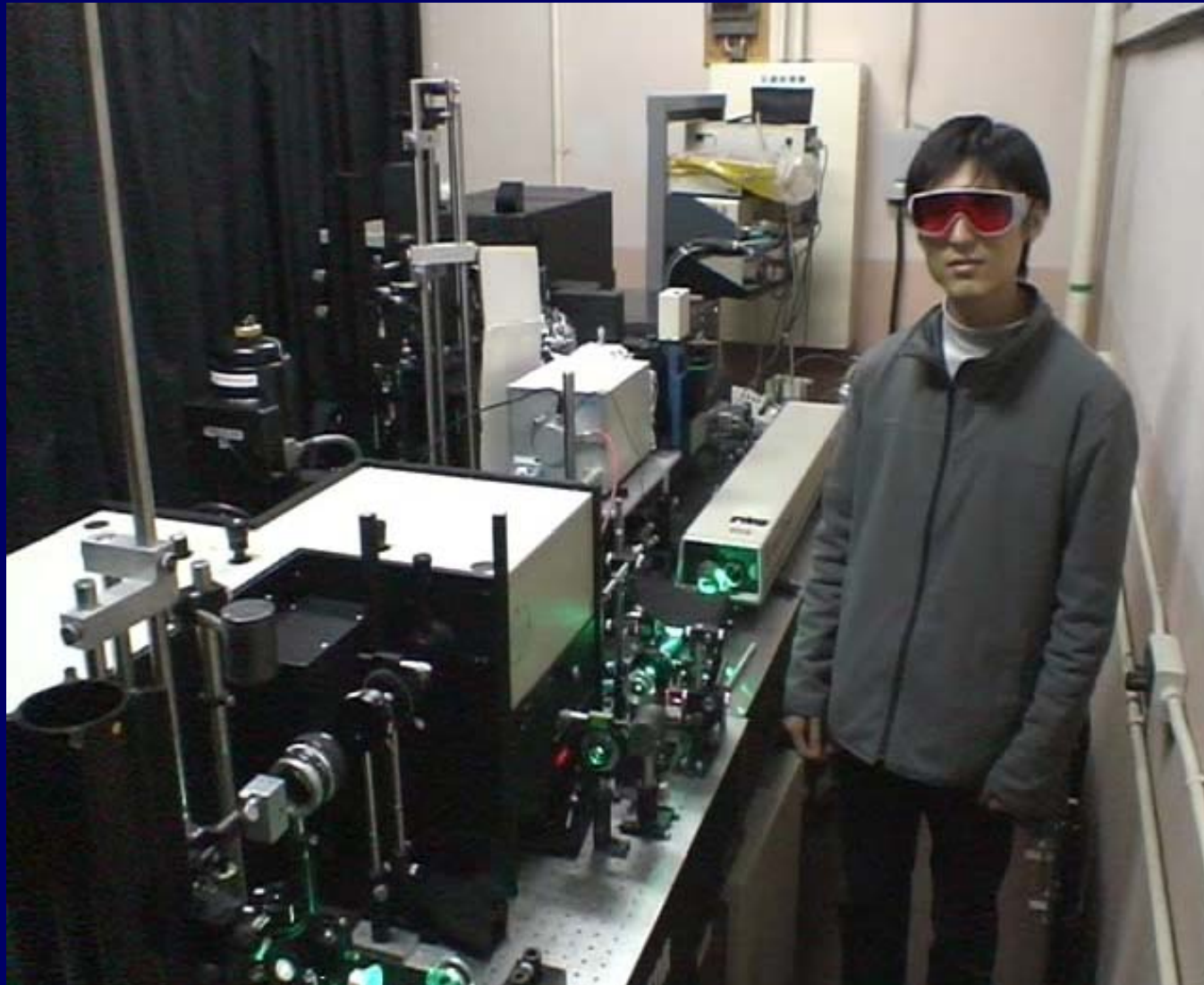
(b) エライジン酸 (mp. 46.5 oC)



(a) オレイン酸 (mp. 13.4 oC)

ラマン分光実験

どのようにして分子からの手紙を受け取るのでしょうか？



気体水中のH₂Oからの手紙

H₂O振動回転ラマンスペクトル

著作権処理の都合で、

この場所に挿入されていた

グラフ

を省略させていただきます。

G. Avila, J.M. Ferná'ndez*, G. Tejeda, S. Montero, J. Mol. Spectrosc. 228, 38-65 (2004).

$$\hat{H}_{total} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu_M} \Delta_R + \frac{z_1 z_2}{R}}_{H_n(\mathbf{R})} + \underbrace{\sum_i^n \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_e} \Delta_{r_i} - \frac{1}{R_1 - r_i} - \frac{1}{R_2 - r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{|r_i - r_j|}}_{H_{el}(\mathbf{r}, R)}$$

気体水中のH₂Oからの手紙

振動回転ラマンスペクトル

著作権処理の都合で、
この場所に挿入されていた
グラフ
を省略させていただきます。

水分子の構造

振動回転スペクトルの解読によりH₂Oの構造を精密に決定することができました。

✦

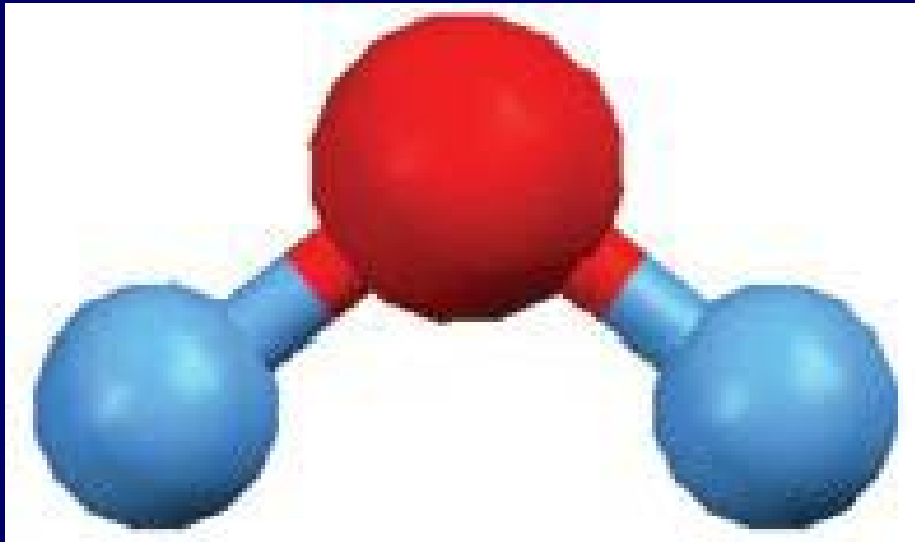
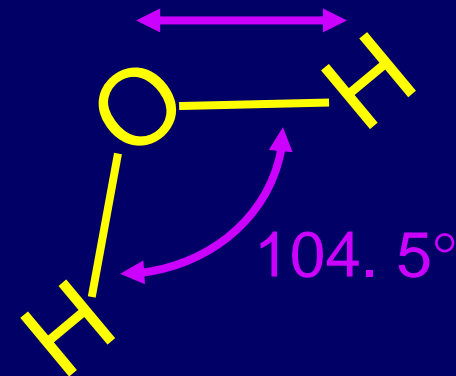


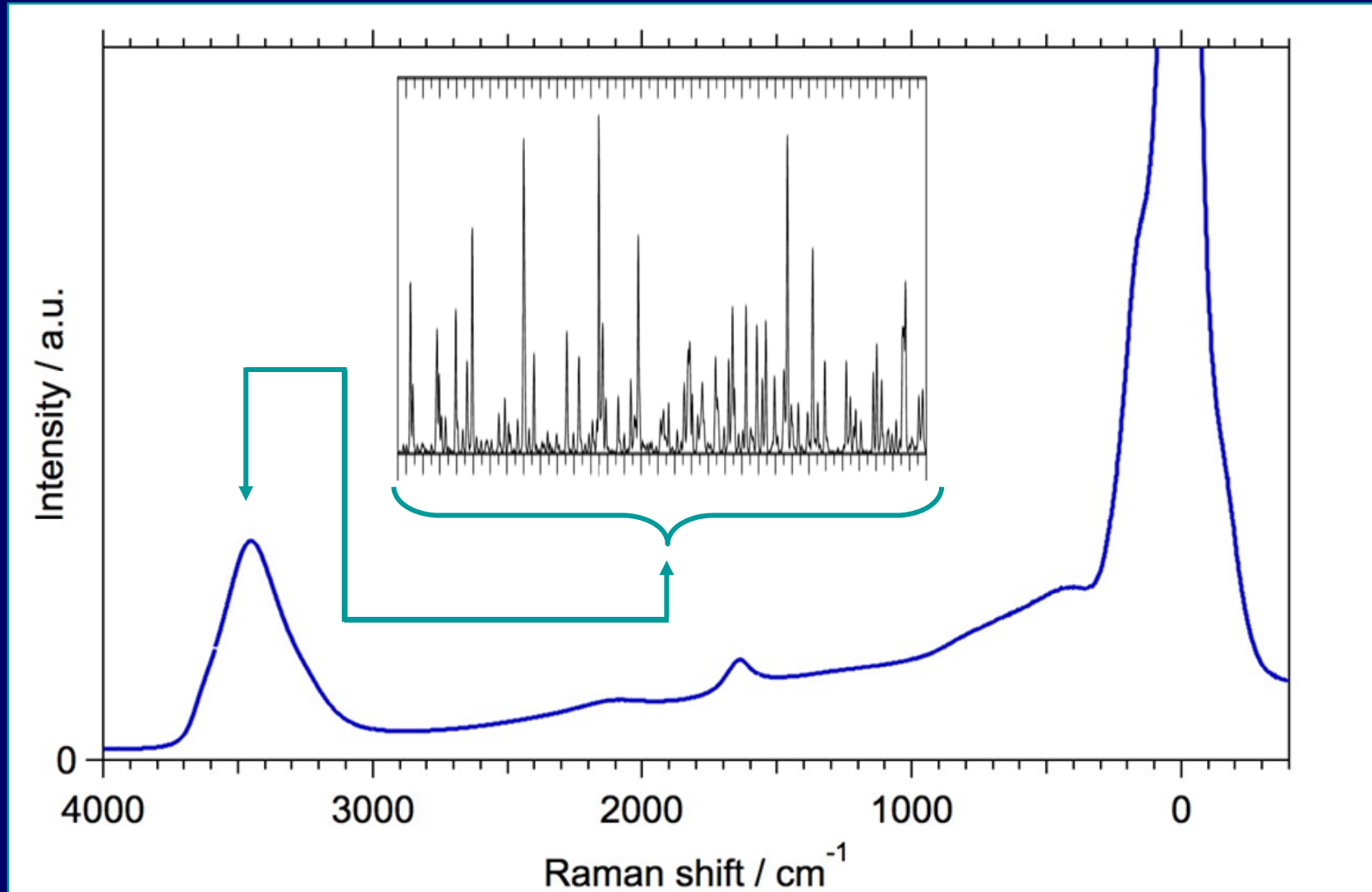
図: 大阪市立大学 吉野治一教授提供

0.000,000,000,0958 m
=95.8 pm



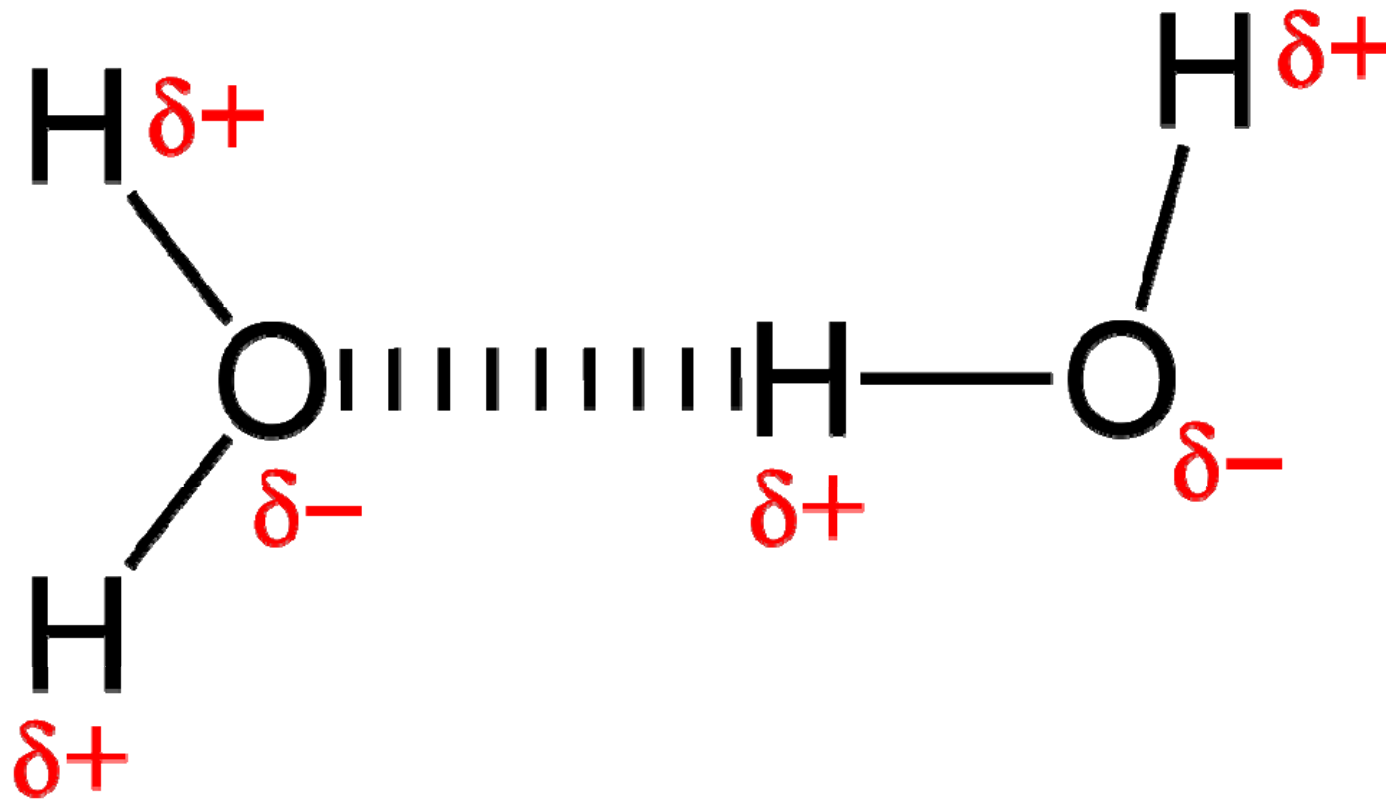
液体水中のH₂Oからの手紙

H₂O振動ラマンスペクトル



水分子の間に働く力：水素結合

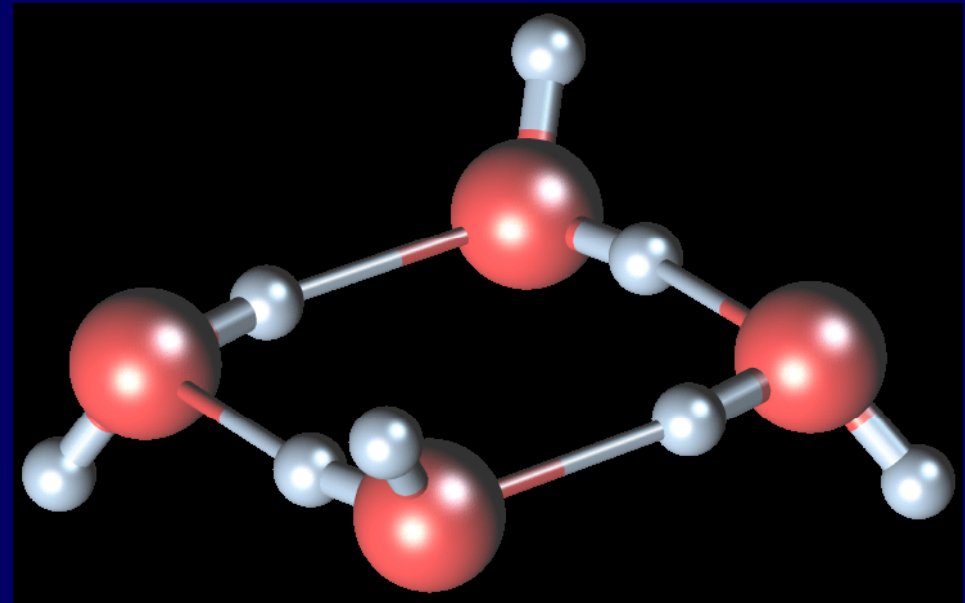
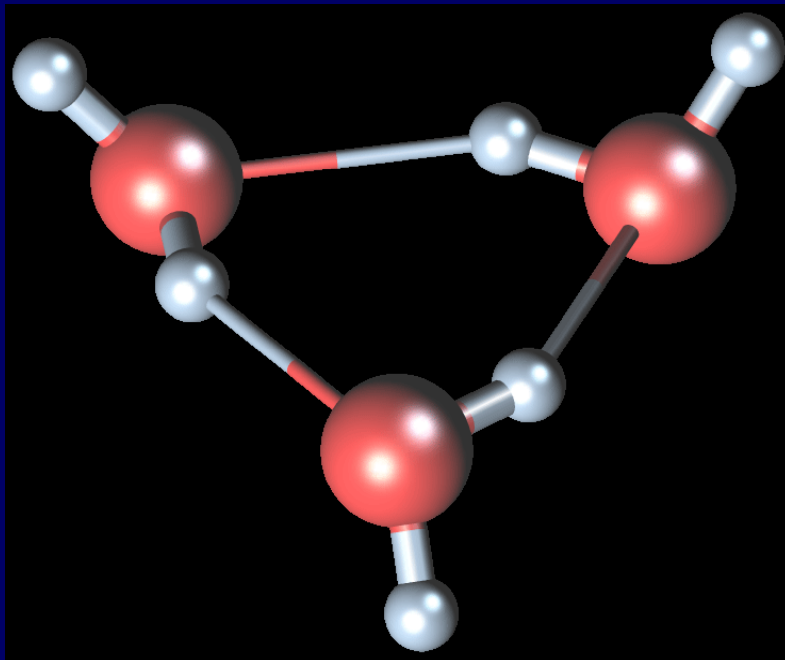
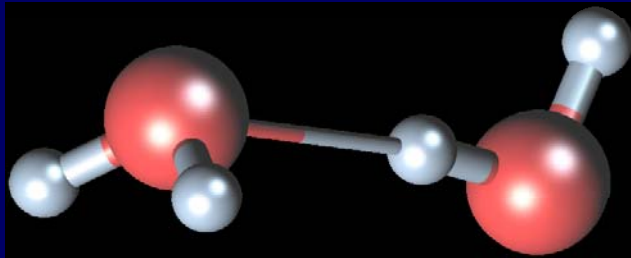
水分子は水素結合によってクラスターを形成します。



<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/b/b5/Hydrogen-bonding-in-water-2D.png>

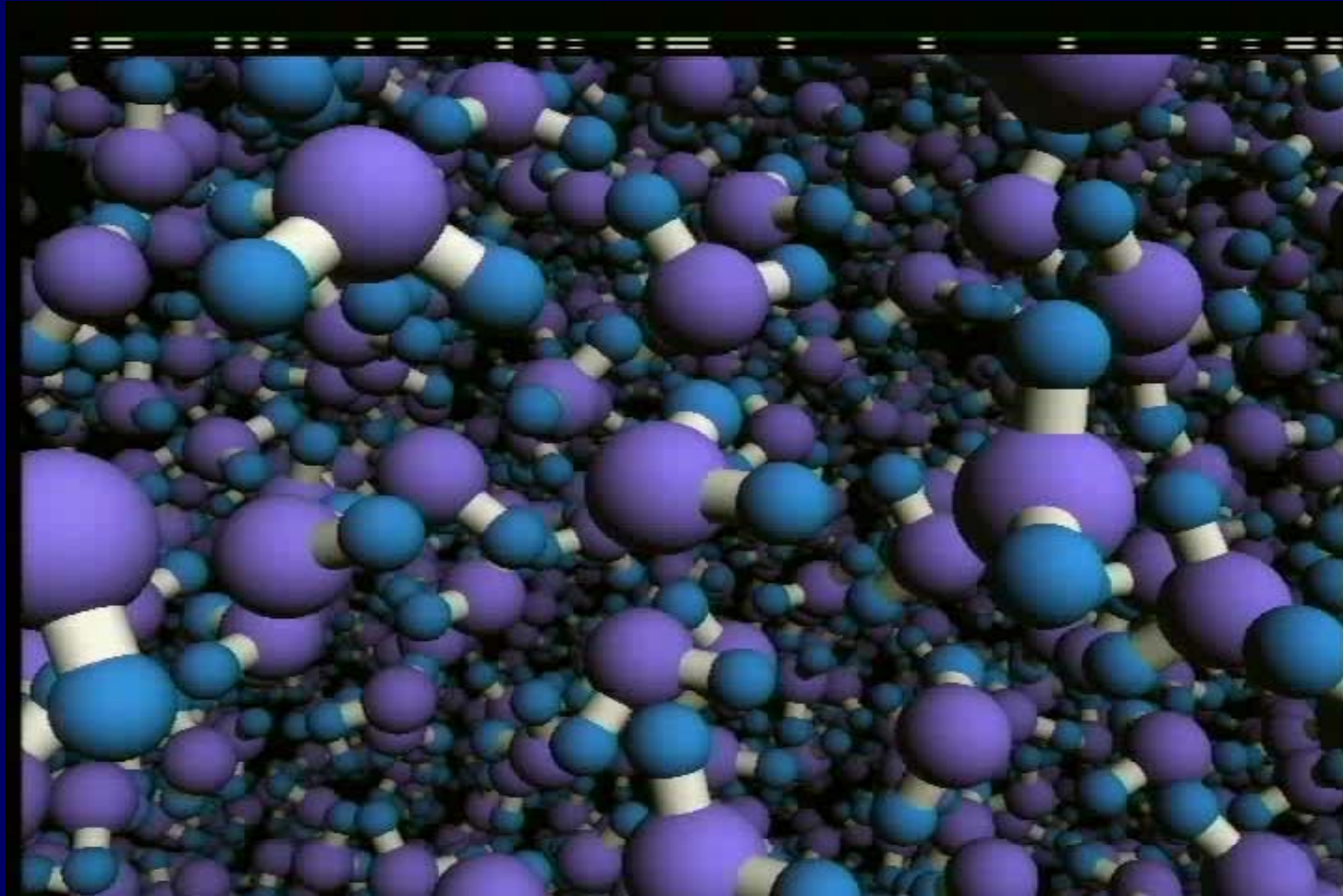
水分子クラスター：水素結合

水分子は水素結合によってクラスターを形成します。



水の分子動力学シミュレーション

液体の水中の水分子は絶えずダイナミックに水素結合を組み替えています。

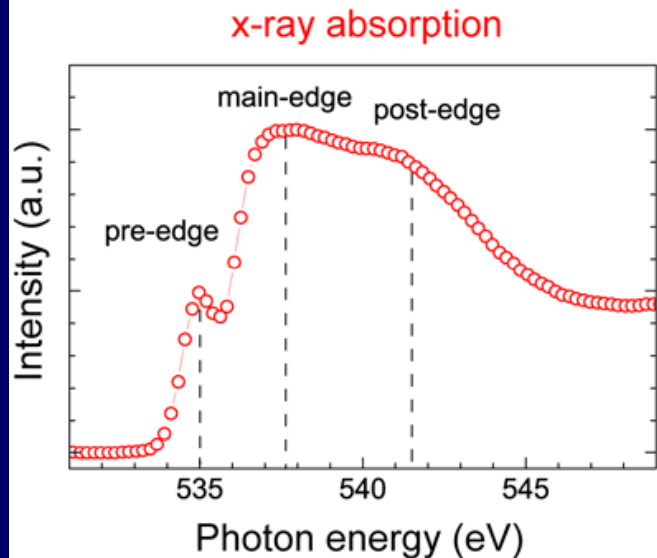
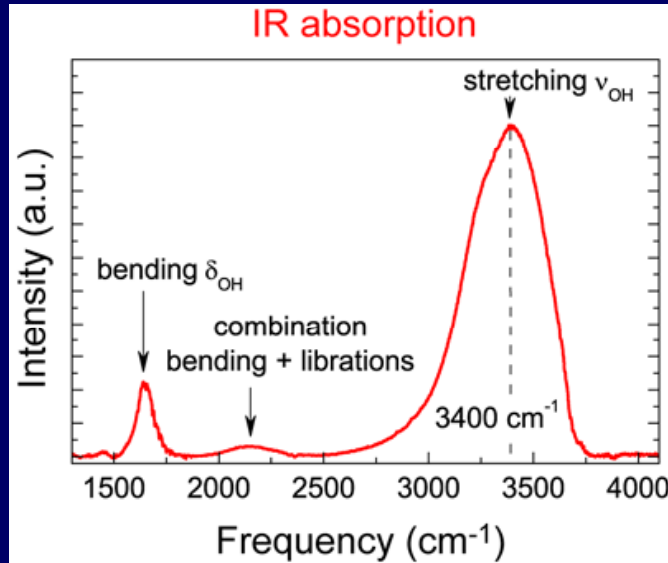


提供：京都大学福井謙一記念研究センター 大峯 巖教授

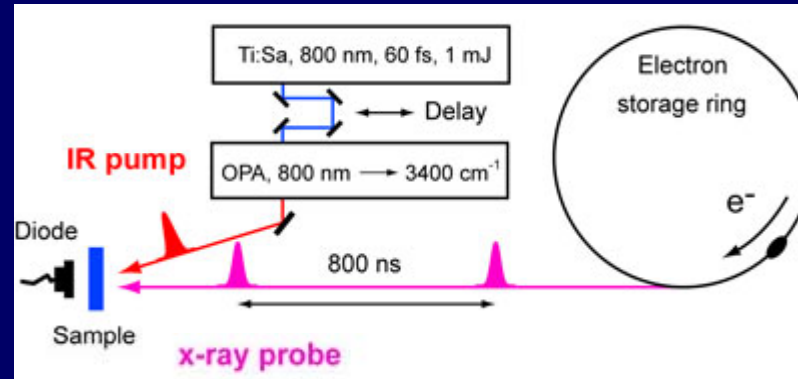
水の超高速動力学

Ph. Wernet, G. Gavrilu, K. Godehusen, C. Weniger, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser, W. Eberhardt, Appl. Phys. A 92, 511 (2008),

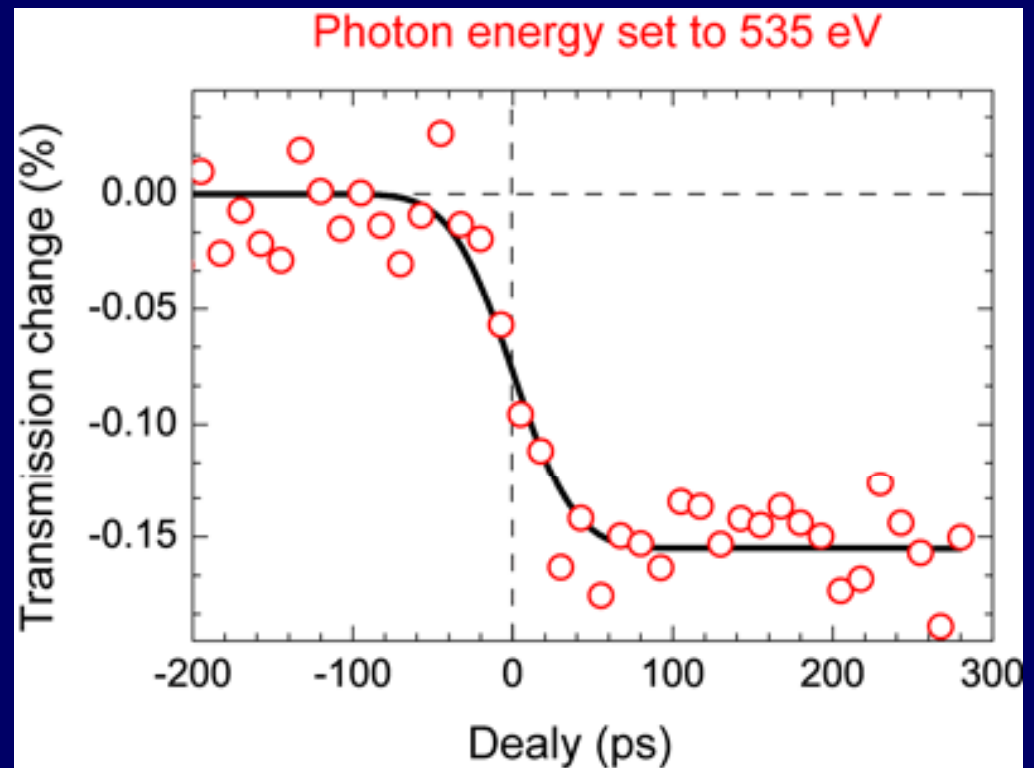
≠



≠



≠



生体中の水: バクテリオロドプシン

赤く着色した塩田

著作権処理の都合で、
この場所に挿入されていた
塩田の写真
を省略させていただきます。

<http://mixotrophy.blogspot.com/2007/07/bacteriorhodopsin-phototrophy.html>

バクテリオロドプシン: 光エネルギー 利用のモデル分子

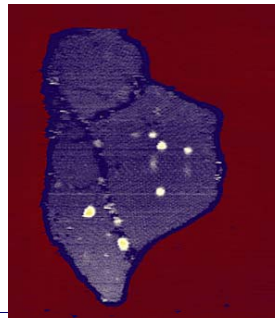
高度好塩菌



<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%AB%98%E5%BA%A6%E5%A5%BD%E5%A1%A9%E8%8F%8C>

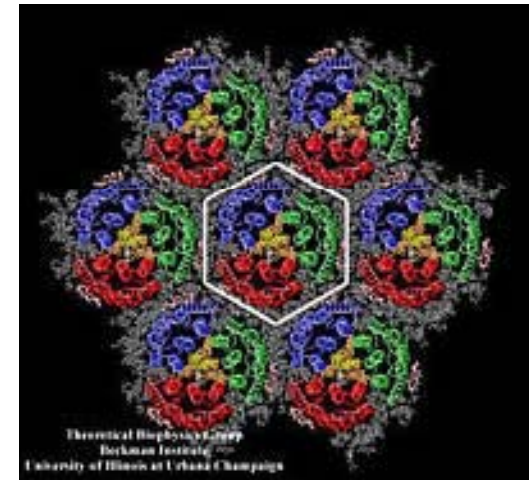
≠

紫膜



バクテリオロドプシン (結晶)

≠



<http://www.ks.uiuc.edu/Research/Categories/Membrane/all.cgi>

写真: JPKインスツルメンツ提供

+

The Bacteriorhodopsin バクテリオロドプシン

(c) 2003 Peter Galajda and Pal Ormos

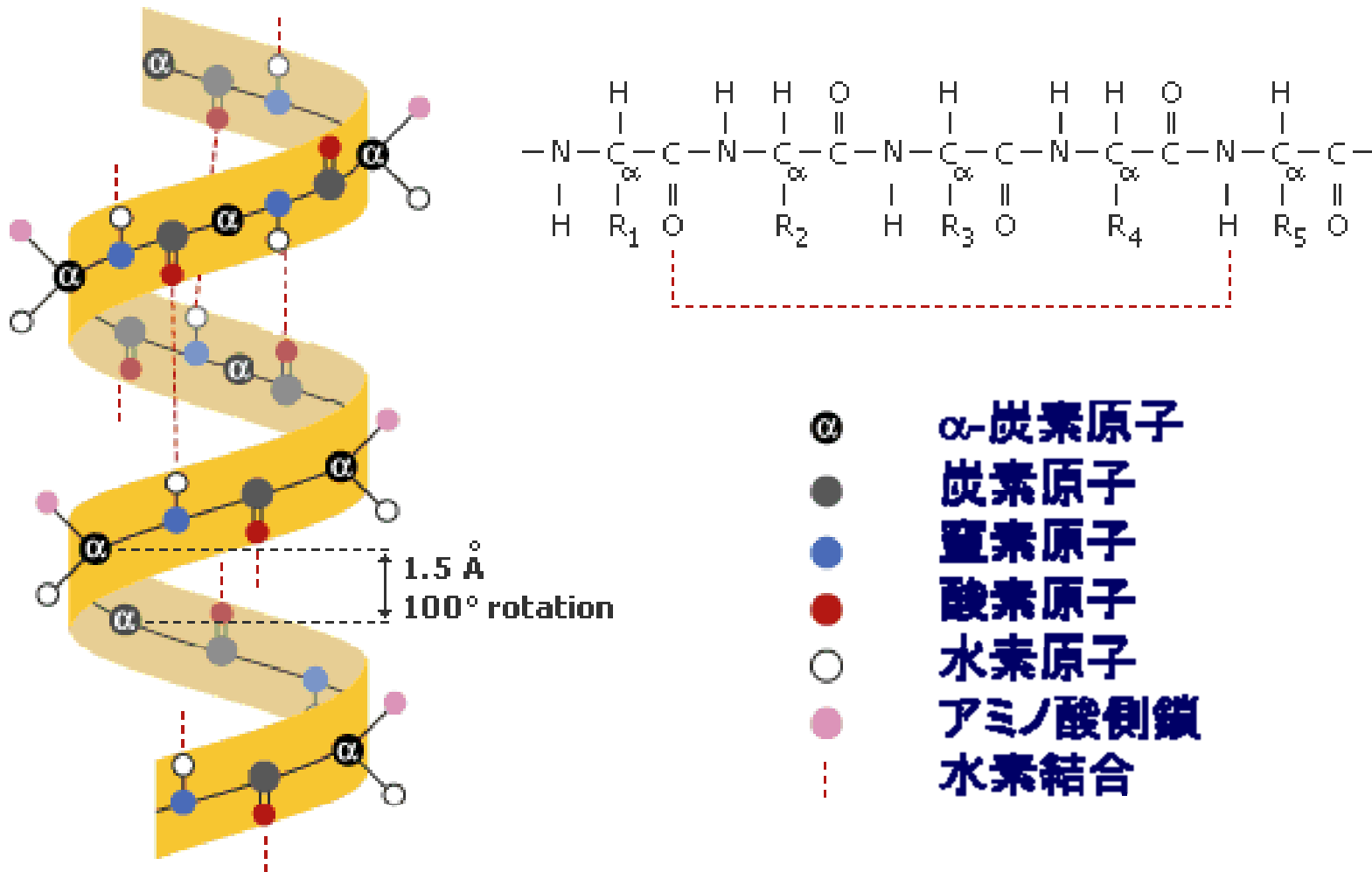
http://www.szbk.u-szeged.hu/~gpeter/br_movie/

提供:名古屋工業大学 神取秀樹教授

バクテリオロドプシン

X線結晶構造解析により、バクテリオロドプシンは螺旋構造(α -ヘリックス)を多く含むたんぱく質であることがわかっています。

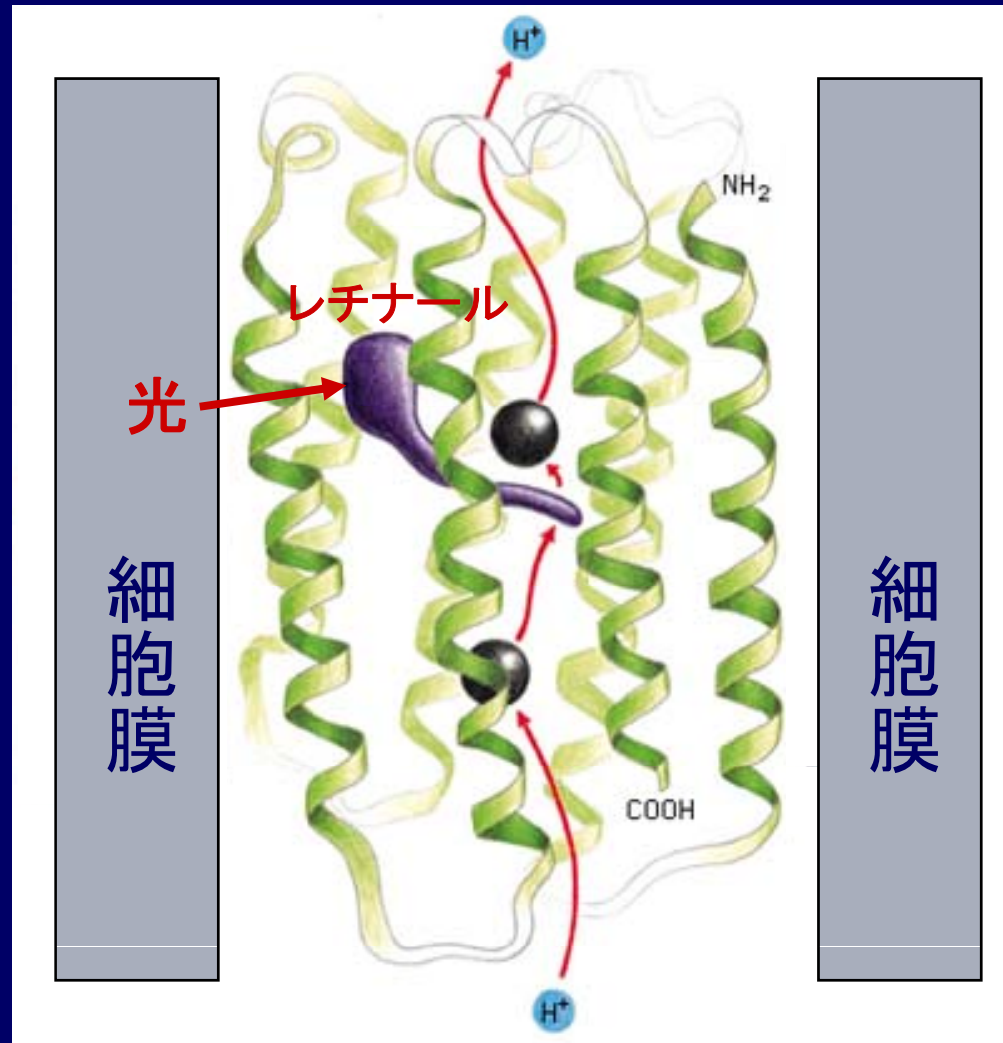
✦



プロトンポンピング

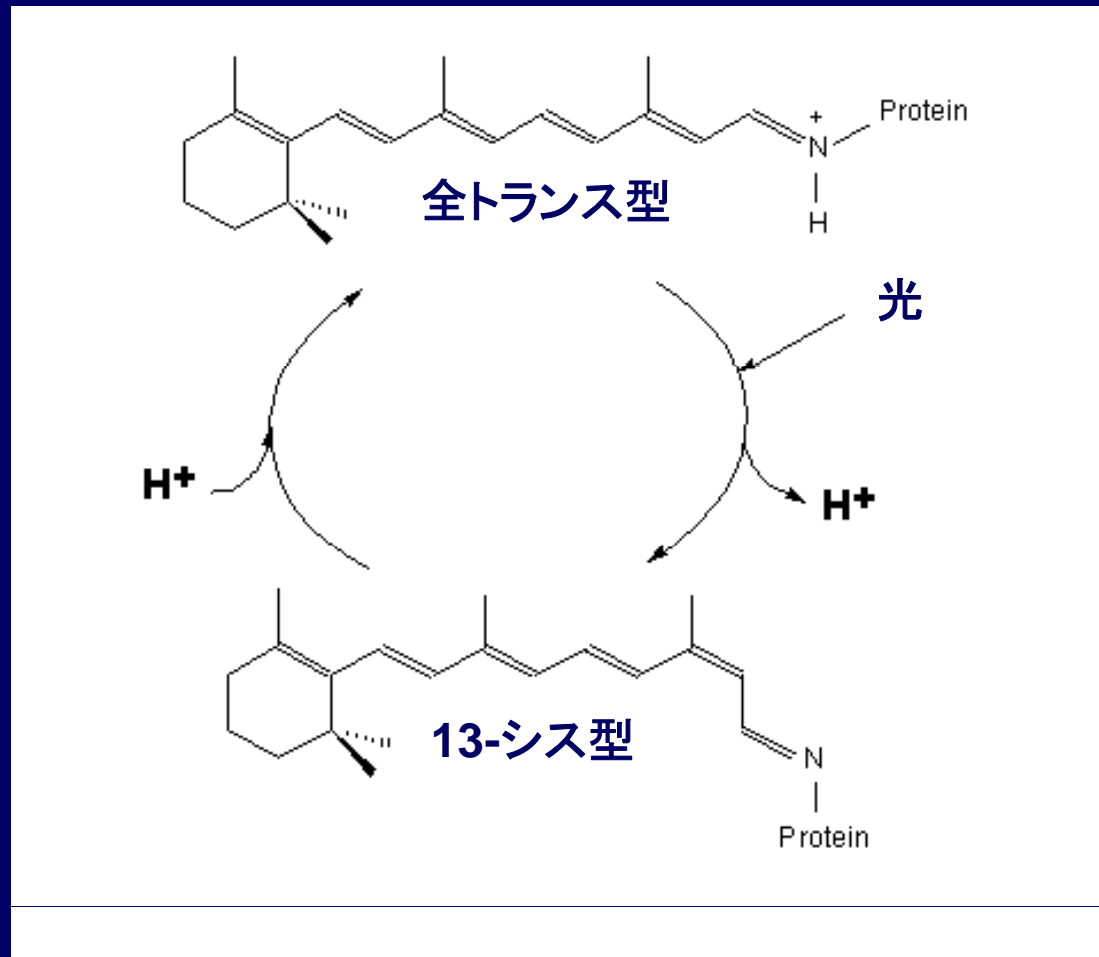
バクテリオロドプシンは光を吸収してプロトン(H⁺)細胞内から細胞外へ汲み出します。

+



レチナールの光異性化反応

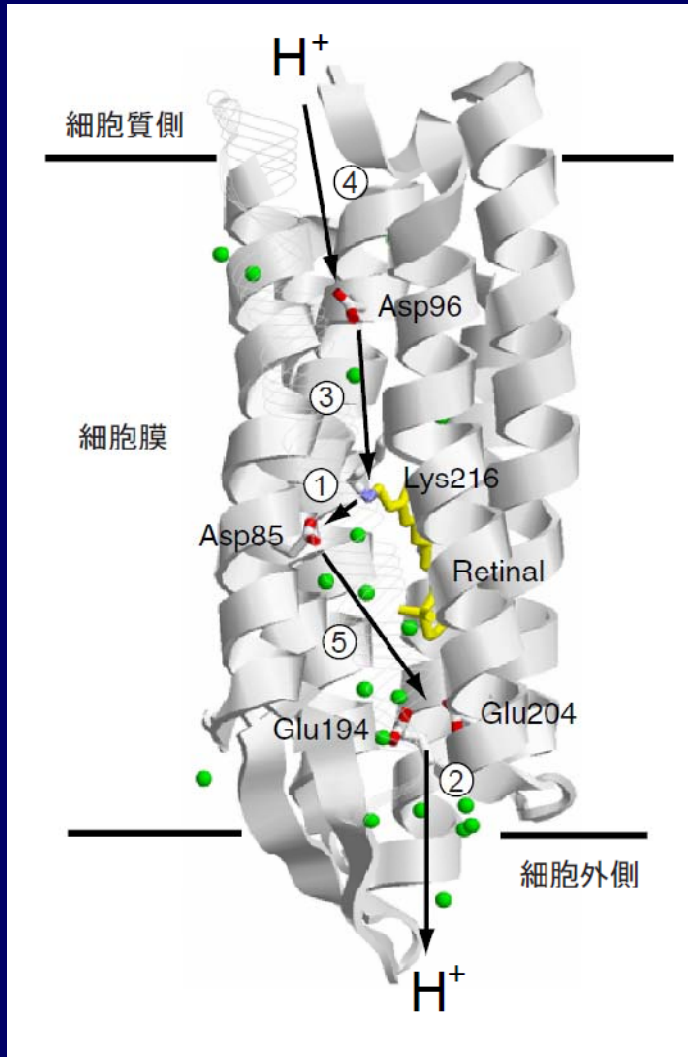
光を吸収すると、バクテリオロドプシン中のレチナール(ビタミンA誘導体)が全トランス型から13-シス型へ構造変化し、それとともにプロトンが1個汲み出されます。



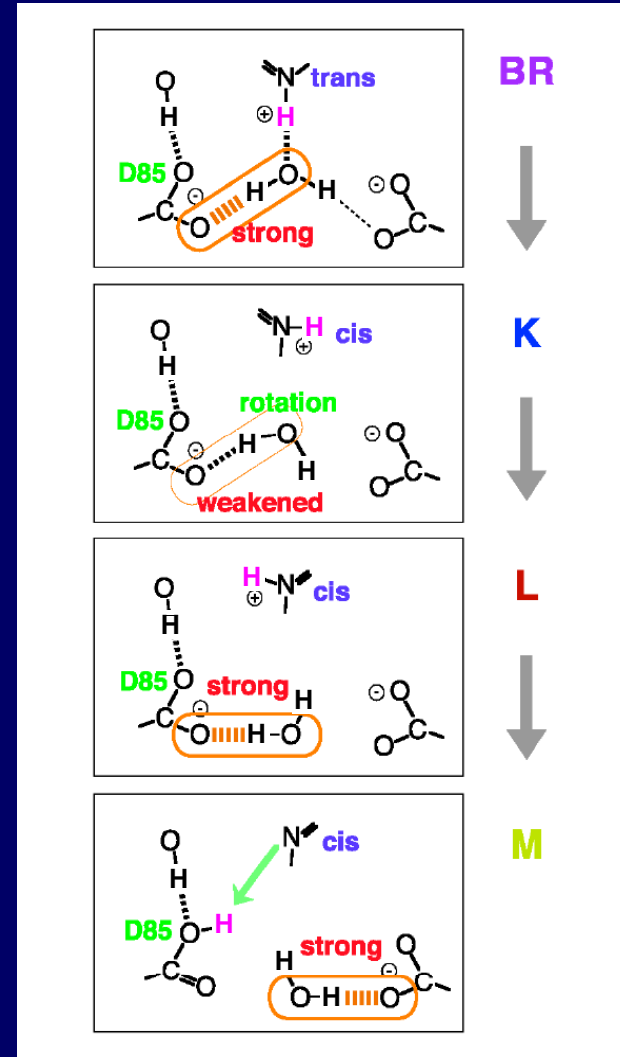
生体中の水: バクテリオロドプシン

プロトンポンピングで水分子が重要な働きをしていることがわかってきました。

✦



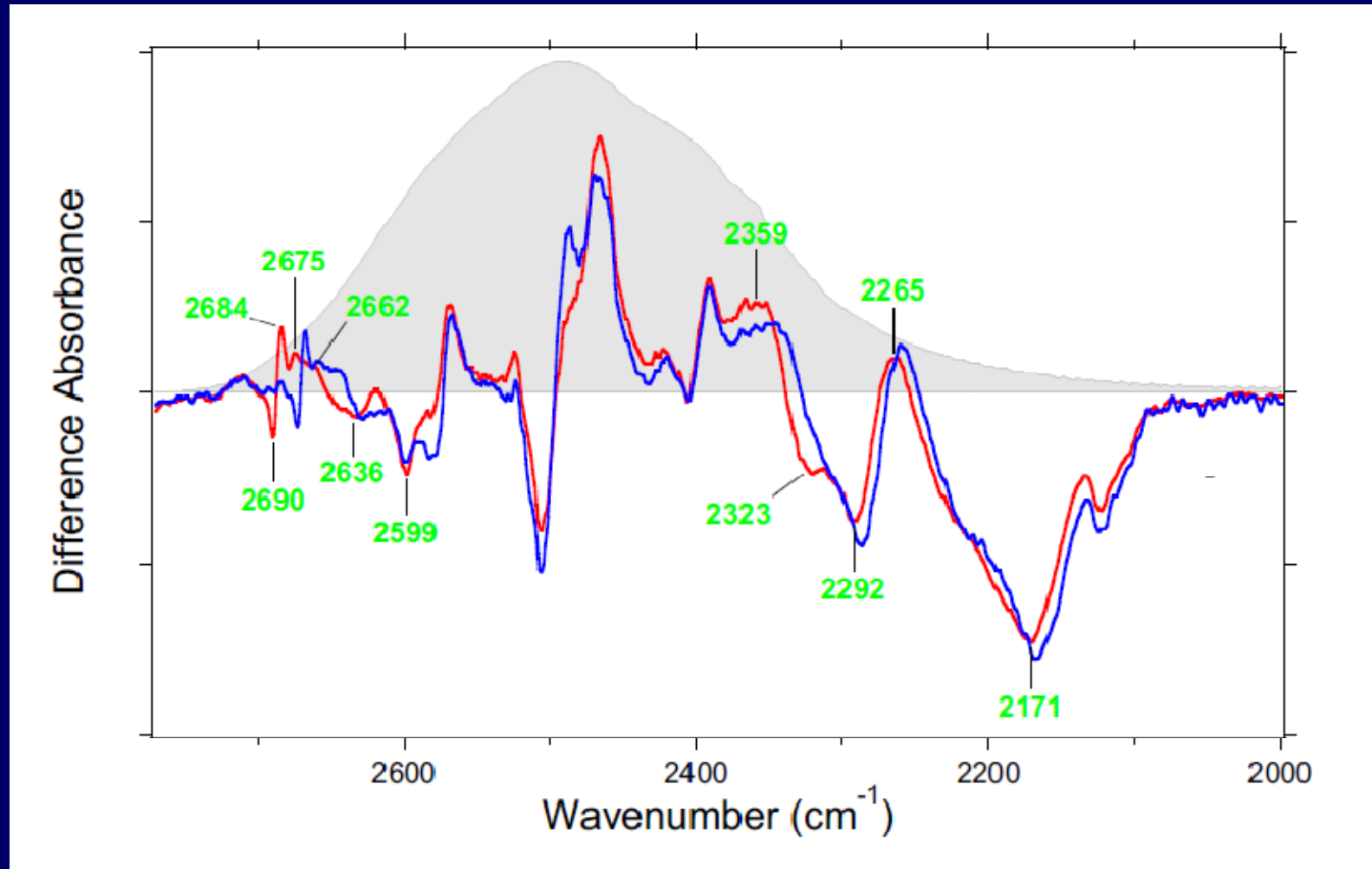
✦



生体中の水分子からの手紙

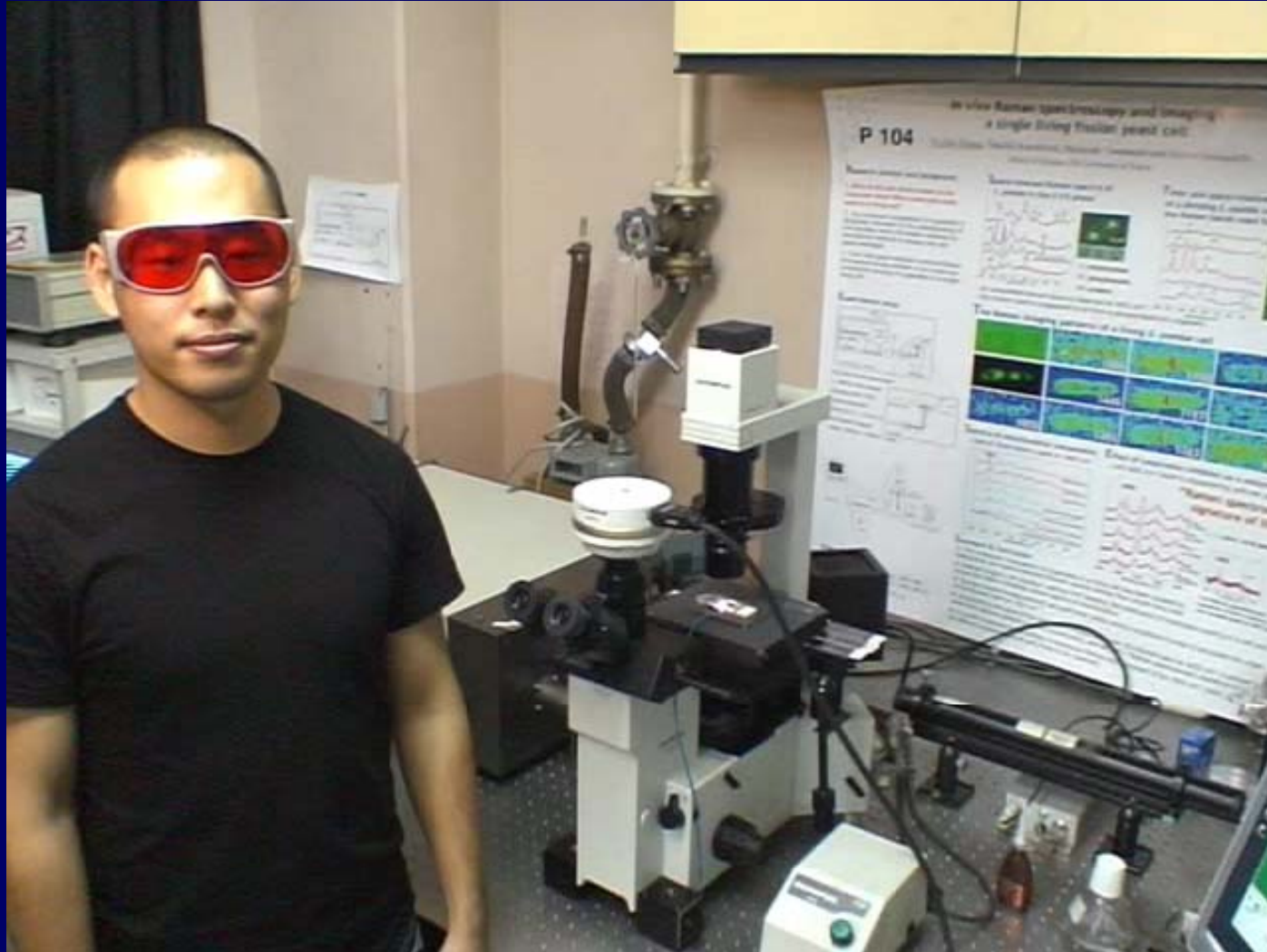
バクテリオロドプシンの光変化を赤外線吸収スペクトルを使って詳細に解析することができました。その結果、水分子の重要な役割が明らかになりました。

+



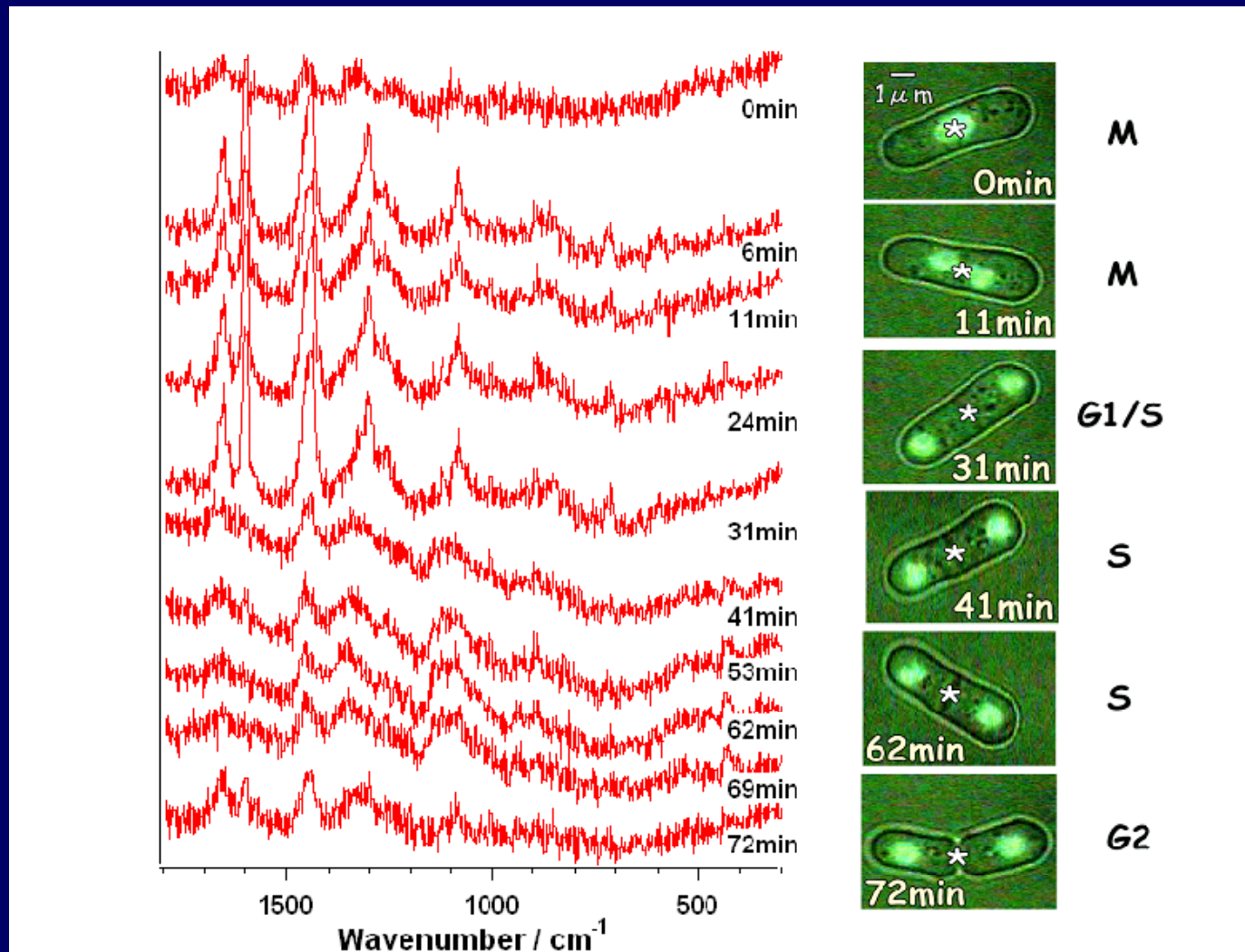
生きた細胞中の水：顕微ラマン分光

顕微鏡下の生きた細胞のラマンスペクトルをとることができるようになりました。



分裂中の酵母からの手紙

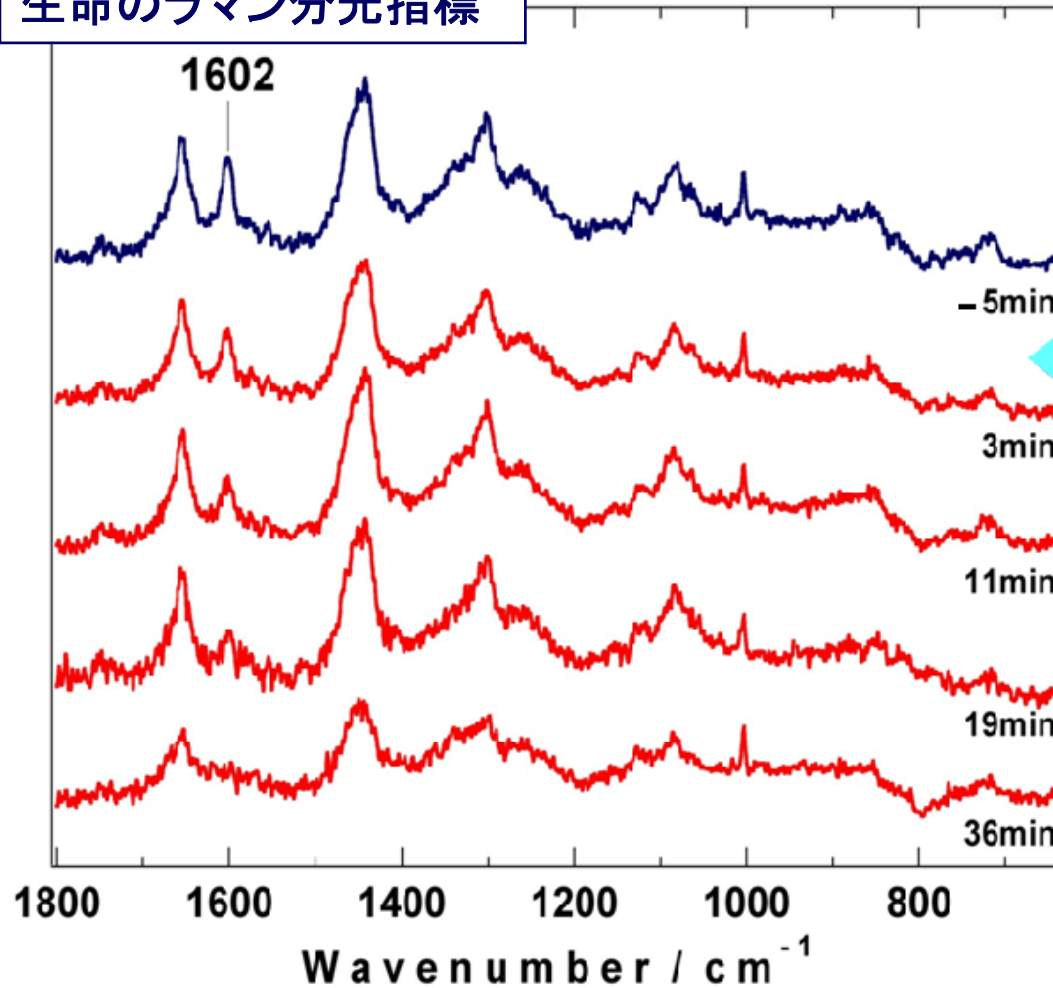
生きた酵母細胞の細胞分裂の様子をラマンスペクトルで捉えることができました。



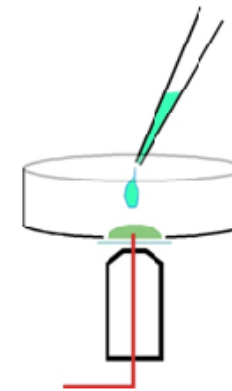
KCNによる呼吸阻害を起こした酵母からの手紙

酵母の呼吸活性を敏感に反映する「生命のラマン分光指標」を見つけることができました。

生命のラマン分光指標

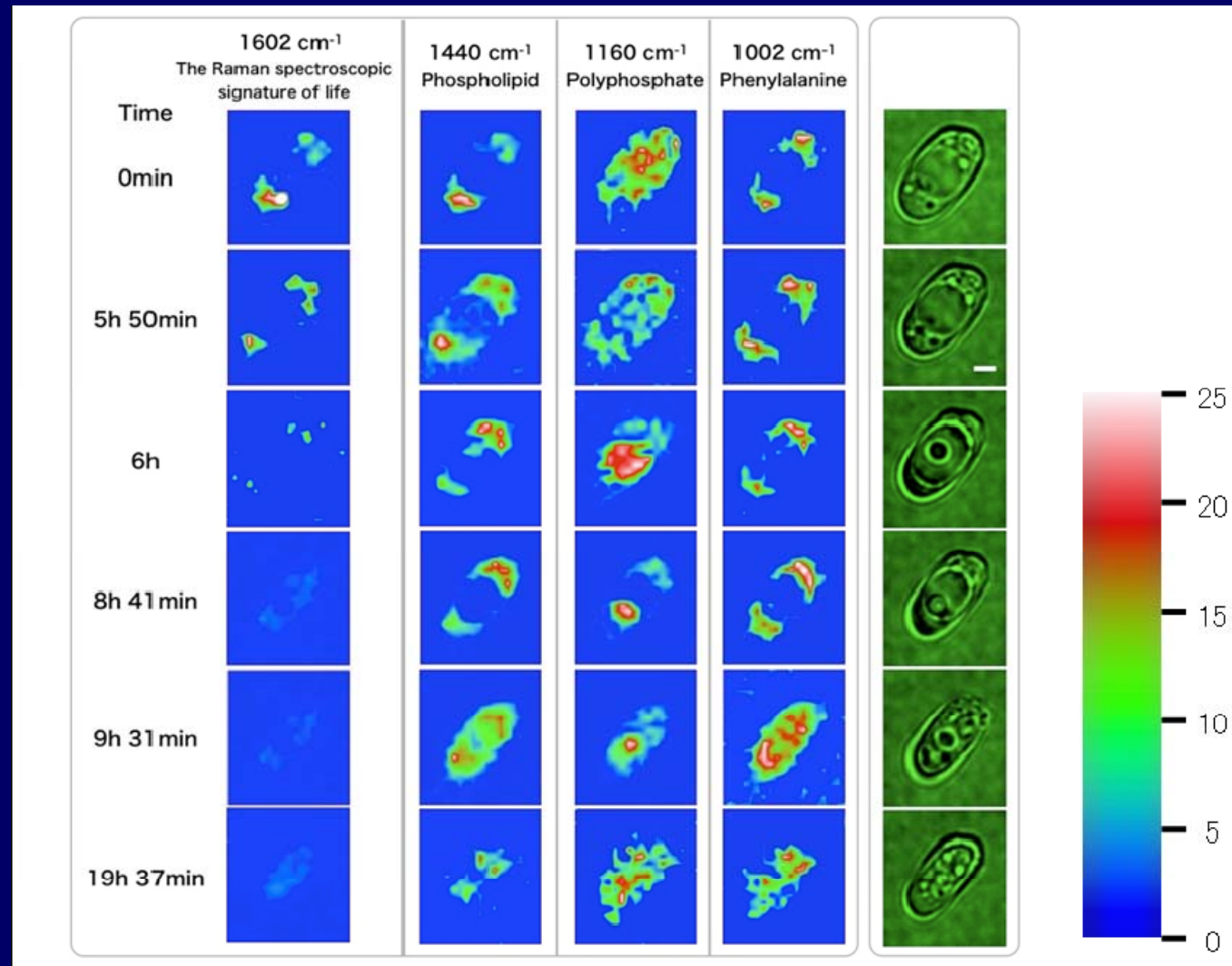


Final conc.
0.5mM KCN



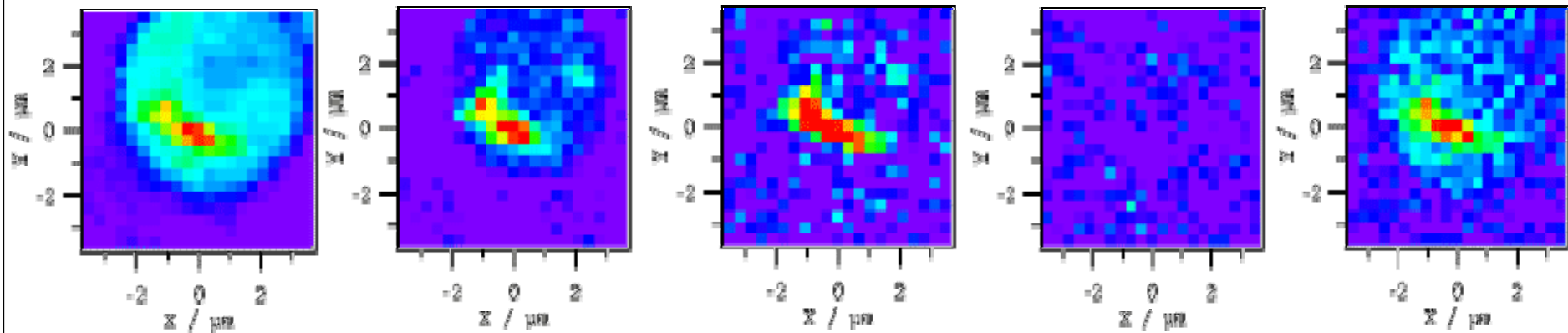
飢餓状態の酵母からのフォトレター

飢餓状態の酵母の活性低下の様子をラマンイメージで捉えることができました。



酵母からのビデオレター

レーザー照射による細胞変化過程のラマンムービーとして捉えることができました。



@ CH₃ str.

@ CH₂ str.

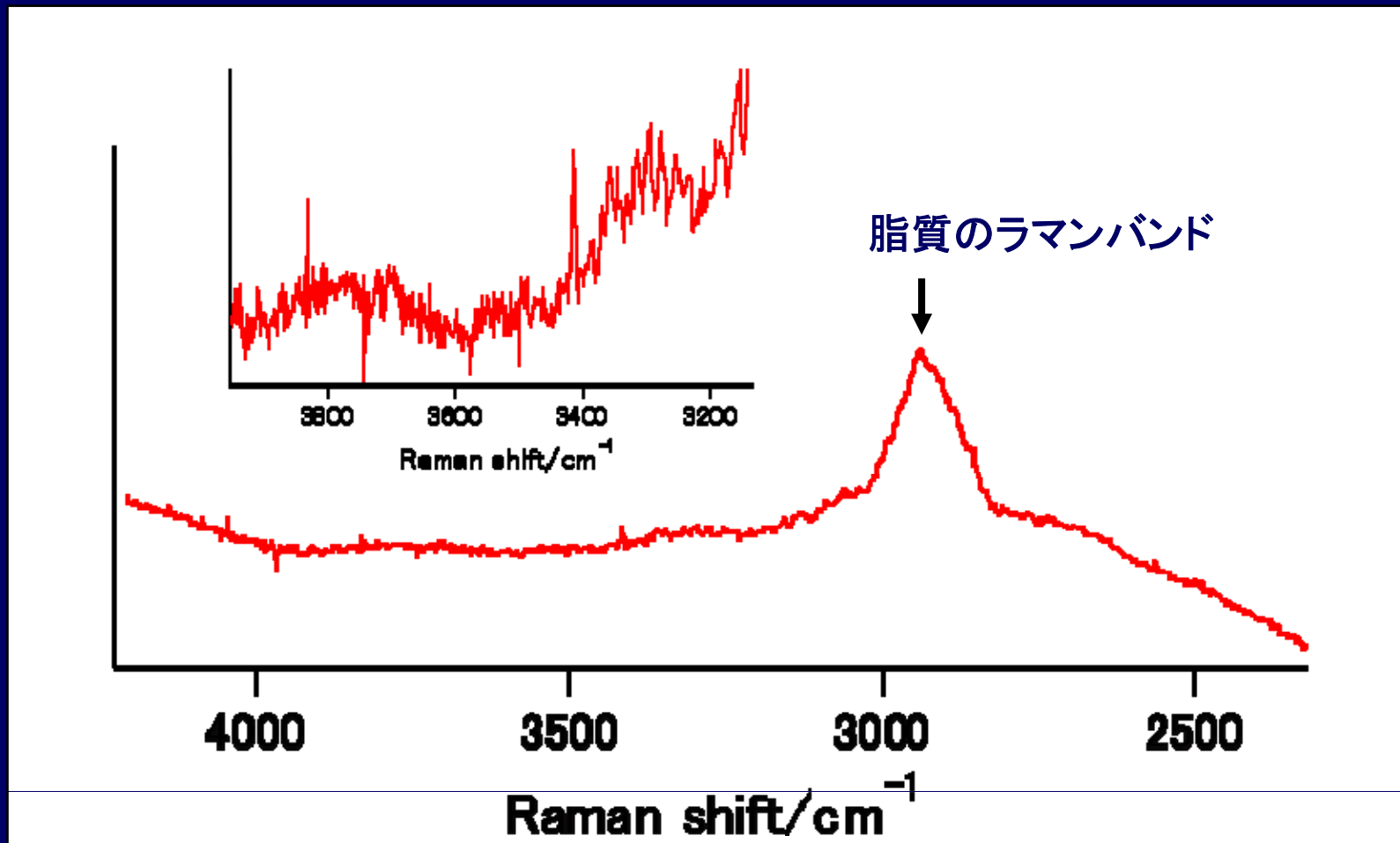
@ 1602 cm⁻¹

@ Phosphate

@ CH bend.

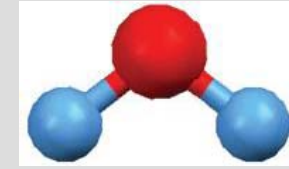
生きた細胞中の水からの手紙を求めて

酵母ミトコンドリア中の水のラマンスペクトルの取得に挑戦中です。





水と水分子 H_2O ≠



水から H_2O へ： 19世紀の科学

- 水分子が H_2O であることがわかった。
- コップの水中に 10^{24} 個（1 掬個～アボガドロ数）の H_2O があることがわかった。

H_2O の構造： 20世紀の科学

- H_2O の構造と性質についてほぼ完璧にわかった。
- H_2O を含む水素結合についてもかなりわかってきた。

H_2O から水へ： 21世紀の科学

- 生体中の H_2O や水素結合の役割が少しずつわかりはじめている。
- 液体の水は鋭意研究されている。しかしまだ殆どわかっていない。

→ 世間を騒がす「xx水」には何の科学的根拠もありません。

