

クレジット:

UTokyo Online Education 学術俯瞰講義 2017 吉信淳

ライセンス:

利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。

現代社会における表面化学

①「神は固体を創造し、悪魔は表面を創作した」

東京大学物性研究所

吉信 淳

Kyoto Univ. → Pittsburgh Univ. → RIKEN → ISSP

1980 -1989



無機化学講座(恩地研)
March 1989: Dr. of Science

1989-1991



Yates Laboratory
(Post Doc.)
© Jun Yoshinobu

1991-1997



青野研究室
(Post Doc.)
© M. Aono



分子科学研究所
<https://www.ims.ac.jp/research/head/kawai.html>

1997-



W. L. Braggの3箇条

- 過去の栄光を振り返るな
- 流行っているというだけで研究するな
- 理論家の冷笑を気にするな



from State Library of South Australia

(1890-1971)

精緻な測定と 定量的解析

I learned a lot.

- 研究室構築
- 研究室運営
- 研究費獲得
- 論文執筆
etc.

10年後に 教科書や総説 に載る研究を!

「君たちは何のために研究するのか？」

ブレヒト「ガリレイの生涯」より

ブレヒト「ガリレイの生涯」第14場より:

ガリレオ・ガリレイは上記の問いを発し、次のように続けた。「**科学の唯一の目的は、人間の生存の辛さを軽くすることにあると私は思うんだ。**もし科学者が欲の強い権力者に脅かされて、知識のための知識を積み重ねることに満足するようになったら、科学は不健全になり、君たちの作る機械も新たな苦しみを生み出すことにしかないかもしれない。……」。

第3場:ガリレイの友人ザグレド「……権力者たちが真理を知ってしまったような男を自由にうろうろさせると思うかね……」

第13場:ガリレイの弟子アンドレア「英雄のいない国は不幸だ!」……ガリレイ「違うぞ、英雄を必要とする国が不幸なのだ」。

日本語訳:「ガリレイの生涯」(岩淵達治訳, 岩波文庫)と「ガリレオの生涯」(谷川道子訳, 光文社新訳文庫)がある。

欲の強い権力者に支配された不健全な科学だけは避けねばならない。なぜなら、人間の生存の辛さを大きくすることにつながりかねないから。[表面科学34(2013)403]

東京大学憲章より

東京大学は、これまでの蓄積をふまえつつ、世界的な水準での学問研究の牽引力であること、あわせて公正な社会の実現、科学・技術の進歩と文化の創造に貢献する、**世界的視野をもった市民的エリート**が育つ場であることをあらためて目指す。

卓越した研究とエリート教育

基礎研究の「氷河期」

著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画像を削除しました

新聞記事

2017年10月28日(土)朝日新聞 12頁

東洋経済の眼

見出し: 基礎研究の「氷河期」 博士号とっても就職難しく
本文抜粋(前略)一方、2004年の国立大学法人化で運営費交付金
が徐々に減らされた結果、短期の成果を求める風潮は、
研究環境が恵まれている東京大学にも及んでいます。(中
略)東大での修士から博士課程への進学率は01年に42%
だったのが16年には26%まで低下。背景には...(後略)

朝日新聞2017/10/28

未来社会協創推進本部



● サイト内検索 ○ 教員検索

English 中文 한국어
アクセス・キャンパスマップ お問い合わせ サイトマップ

入学・進学をご希望の方へ 社会人・一般の方へ 企業の方へ 卒業生の方へ 在学生の方へ 留学生の方へ

大学案内 学部・大学院等 研究活動 国際交流 社会連携 産学連携 入学案内 教育・学生生活

東京大学ホーム > 大学案内 > 総長室から > 未来社会協創推進本部

未来社会協創推進本部

Future Society Initiative



2017年7月、東京大学は、総長を本部長とする「未来社会協創推進本部」を設置しました。

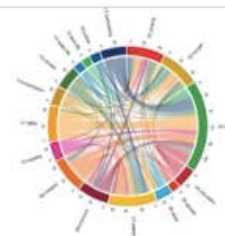
その目的は、東京大学憲章に示した「世界の公共性に奉仕する大学」としての使命を踏まえ、地球と人類社会の未来への貢献に向けた協創を効果的に推進することです。



▶ ニュース & トピックス

SUSTAINABLE
DEVELOPMENT
GOALS

▶ SDGs の活用



▶ 登録プロジェクト

東京大学未来社会協創推進本部
<http://www.u-tokyo.ac.jp/adm/fsi/ja/index.html>

SDGs

(2015/9/25 国連開発サミットで採択)

SUSTAINABLE DEVELOPMENT GOALS

世界を変えるための17の目標

©United Nation

http://www.un.org/development/desa/dest/2030agenda/sdgs_logo/



ヘレン・クラーク総裁:「私たちは、気候変動の最悪の影響を阻止できる最後の世代であると同時に、貧困を根絶できる富と知識を備えた最初の世代でもあります。これを実現するためには、私たち全員が大胆なリーダーシップを発揮する必要があります。持続可能な開発目標(SDGs)の達成という課題に向けて立ち上がる用意が国際社会全体にあれば、持続可能な開発を達成し、それによって人々と地球の前途を明るくする可能性が開けます」

2015年9月25日

「持続可能な開発目標(SDGs)」採択に寄せてーヘレン・クラーク国連開発計画(UNDP)総裁ステートメント
<http://www.jp.undp.org/content/tokyo/ja/home/presscenter/speeches/2015/09/25/helen.html>

SDGsまでの経緯

『人口論』 by T. R. Malthus (1798)

「人口は等比級数的に増加するが、食糧は等差級数的にしか増えない。そして、人の性欲はなくなる。」(齊藤悦則 訳 光文社古典新訳文庫)

『The Limits to Growth』 by Potomac Associates for the Club of Rome (1972)

「人口増加や環境汚染などの現在の傾向が続けば、100年以内に地球上の成長は限界に達する」と警鐘を鳴らした。

『Our Common Future』 by 国連「環境と開発に関する委員会」(1987)

持続可能な開発 (Sustainable development) = 「将来の世代がそのニーズを満たす可能性を損なうことなく、現在の世代のニーズを満たすような開発」

『Millennium Development Goals: MDGs 』(2000)

1. 極度の貧困と飢餓の撲滅 2. 普遍的初等教育の達成 3. ジェンダーの平等の推進と女性の地位向上 4. 幼児死亡率の削減 5. 妊産婦の健康の改善 6. HIV／エイズ、マラリア
その他疾病の蔓延防止 7. 環境の持続可能性の確保 8. 開発のためのグローバル・パートナーシップの推進

地球の資源環境問題は、世代間の公平性の問題でもある。

ユニセフ事務局長 日本の子どもの貧困率に懸念

- ユニセフのアンソニー・レーク事務局長は13日、都内でこしの「世界子供白書」を発表したのに続いて、NHKのインタビューに応じました。

レーク事務局長は、国連が掲げる世界の持続可能な開発目標「SDGs」が、あらゆる貧困の解消を掲げているにもかかわらず、日本の子どもの貧困率が先進国の中でも高い水準にあることについて、「日本のおよそ16%の子どもが深刻な貧困状態にある。SDGsの下で、とりわけ豊かな社会において子どもが飢えや格差に苦しむことがあってはならない」と懸念を示しました。

そして、「相対的な貧困はどの社会にも存在するが、その原因の多くは医療と教育の不平等にある」と述べ、日本でも子どもたちが医療や教育を平等に受ける機会が確保されるべきだという認識を示しました。

2017/12/14 NHKニュース

2011: 世界化学年だった

“Let's get practical”

George M. Whitesides & John Deutch

Nature 469, 21–22 (06 January 2011) doi:10.1038/469021a

<https://www.nature.com/articles/469021a?message-global=remove>

Chemistry is at the end of a century of expansion. In 1900, the chemical industry was in its infancy. The modern research university was still 50 years away, and the basic concepts of the field — the chemical bond, the laws of thermodynamics, theories of kinetics — were still being developed. In 2011, the industry is mature and fully embedded in society, and chemists have a good, semi-empirical grasp of many of the characteristics of molecules and reactions. Academic chemistry is established, and with its maturity has come an increasingly incurious and risk-averse attitude. So, what's next?

アカデミックな化学は確立され、現状に満足して、無関心でリスクを嫌っている。

Cracks in the 100-year-old structure of chemistry began to emerge in the 1990s.

Chemistry — fundamental and applied — has been slow to exploit these research opportunities, and even the best academic chemists have a Prussian-like loyalty to the status quo. Universities that consider themselves the most innovative and radical in their thinking, and that should be in the forefront, are in the rear, defending already familiar and well-established fields.

Cracks in the 100-year-old structure of chemistry began to emerge in the 1990s. **First**, it became clear that chemistry's best intellectual opportunities lay outside its historical boundaries. The new frontiers were the life sciences and materials science. Now others — energy, the environmental sciences, complexity and affordable health care — offer additional and perhaps even more compelling opportunities.

Second, 'function' replaced 'structure' as the objective. Molecular structure is now easy to define and manipulate in chemistry; function is hard to achieve, especially by design, and usually emerges from empiricism and serendipity. Society does not care if a molecule has a particular structure; it cares if a pill lowers blood pressure, or a panel generates electricity when exposed to sunlight.

Third, academic chemistry is overpopulated. The proliferation of PhD programs resulted in a demand for research funds that exceeded the (much-expanded) supply, and the imbalance of supply and demand contributed to a peer-review system that protects established fields at the expense of new ideas. These PhD programmes produced too few new ideas and too many average scientists, and neither provided novel solutions to problems (or jobs), nor caught the attention of the public.

Finally, Balkanization of the field has led to specialization in young scientists. If understanding the molecular basis of life requires integrating a high level of expertise in organic reactivity, kinetics, dissipative systems, biochemistry and cell biology, who is to do it? Probably no single person — and certainly not a young scientist trained narrowly in a technical apprenticeship — has the range of skills demanded.

George M. Whitesides & John Deutch: *Nature* 469, 21–22 (2011)

<https://www.nature.com/articles/469021a?message-global=remove>

1990年代、伝統的化学にひび割れがではじめた

- 第一に、新しいフロンティアは生命科学、材料科学だった。今は、エネルギー、環境科学、複雑系、医療など。
- 第二に、化学の目的が、構造から機能にかわった。
- 第三に、アカデミックな化学は人口過密。

→新分野の創造に適さない化学者を生み出している。

- 最後に、分野のバルカン化(分割)が若い化学者を専門化させている(たこつぼ)。

George M. Whitesides & John Deutch: Nature 469, 21–22 (2011)
<https://www.nature.com/articles/469021a?message-global=remove>

Real-world solutions

Here is what chemists should do instead:

Rewrite the social contract. Chemistry must reorganize to try to solve problems that are important and recognizable to the society that is paying for the research, especially those to do with water, food, health, energy and the environment. **To make fundamental discoveries, an approach that starts with practical problems, and uses them to reveal unsolved fundamental problems, will work at least as well as (and arguably better than) one that starts with the familiar questions of familiar disciplines.**

Do away with the old disciplinary structures. Disciplines mature, and must be subsumed into others. Chemistry should cluster its teaching and research around the exciting and uncertain future rather than the ossified historical past. A first step is to merge chemistry and chemical-engineering departments. A second is to form broad new entities that address the most challenging problems that require the skills of chemists. **Plausible topics could include functional materials, catalysis, complex dynamic networks, energy, the environment and sustainability, health and out-of-equilibrium systems.**

Focus on chemistry's strengths. Chemistry has unique capabilities in many areas: complex kinetics, biological and environmental networks, synthesis of new molecules and forms of matter, examination of the properties of molecules, relating the properties of molecules to the properties of materials, and many others. A focus on these intellectual strengths avoids being second-best in someone else's game.

Teach students, rather than use them. Many subdisciplines of chemistry still use an apprenticeship model in which a professor conceives the problem and strategy, and graduate students execute the bench work. **It is hard to imagine a worse way to prepare tomorrow's chemists to work at the integration of many disciplines. Instead, professors should teach students the tools of curiosity.** An independent, engaged student, exploring as a colleague in a promising area, will do better work than a simple apprentice.

Chemistry must also change its coursework, to include the hard parts (the role of solvent in chemistry, the importance of thermodynamics in biochemistry, the centrality of mathematics to the study of networks, the subtlety of catalysis and systems of coupled catalysts). It must also include 'non-science' subjects — especially economics and corporate finance and manufacturing — useful in generating practical technologies.

A focus on the practical does not mean ditching fundamental science. It means using fundamental science for a purpose, and practical problems as a stimulus to curiosity. Chemists can still be curious, en route to addressing the big societal challenges of our times.

George M. Whitesides & John Deutch: *Nature* 469, 21–22 (2011).

<https://www.nature.com/articles/469021a?message-global=remove>

現実世界における解決法：化学者のやるべきこと

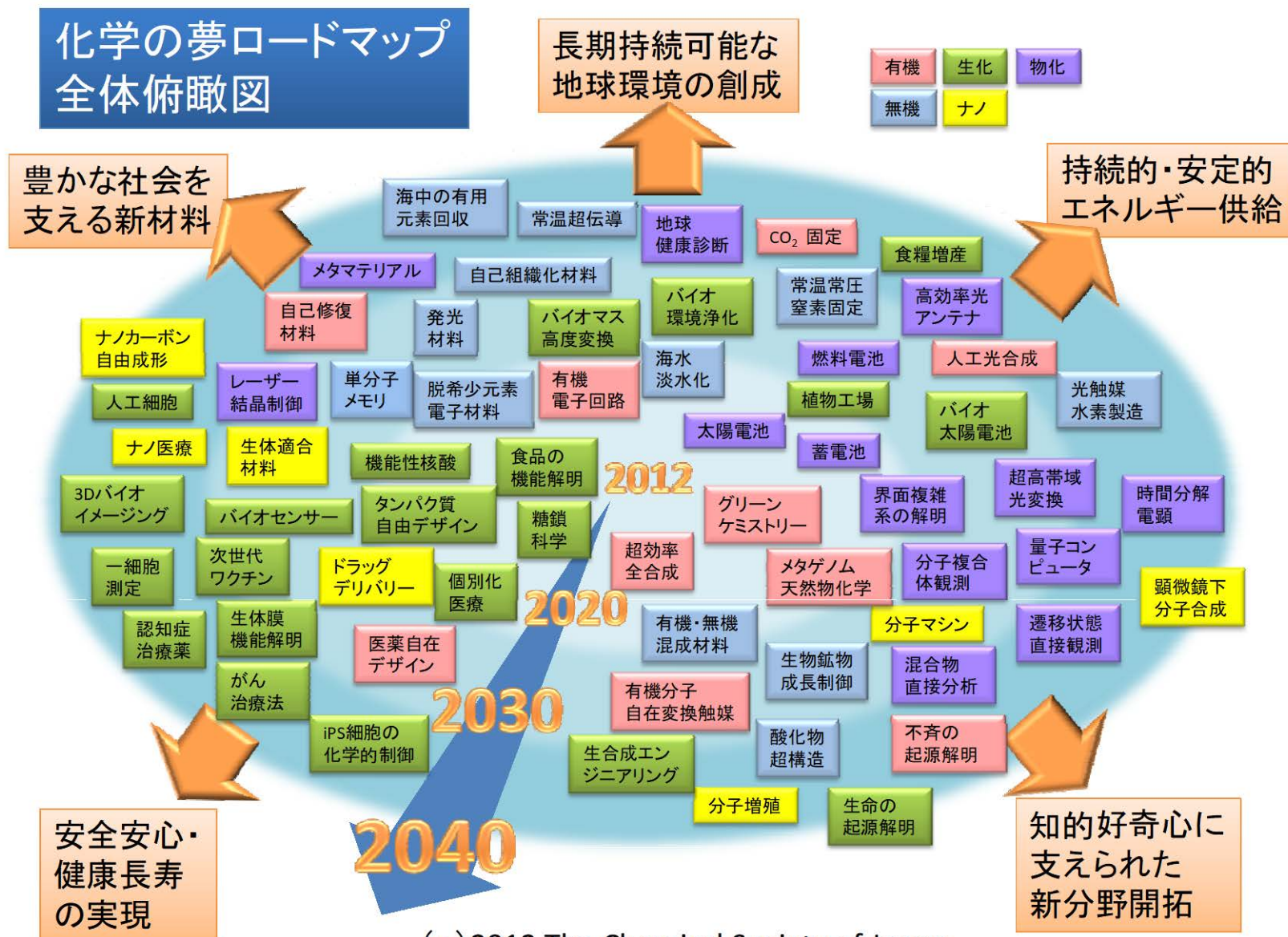
- 社会との契約を更新せよ：化学において基礎的な発見をするためには、**実際的な問題から始めて、そこから未解決の問題を解明するというアプローチが有効。**
- 古い分野を捨て去り、エクサイティングで不確かな未来に向けて研究や教育を集中せよ：課題となるトピックスとしては、**機能性材料、触媒、複雑 & 動的ネットワーク系、エネルギー、環境と持続可能性、健康、非平衡系など。**
- 化学の強みを活かす**：複雑な速度論（キネティクス）、生体あるいは環境系ネットワーク、新しい分子や物質の合成、分子の性質と材料物性との相関などに取り組み、独自の発展をめざせ。
- 学生を使うのではなく教育せよ：教授が問題と戦略を考え、大学院生が実験を遂行するという徒弟制度は、将来の化学者の育成にとって最悪である。**教授は、学生の好奇心を啓発する教育をすべき。**

G. M. Whitesides & J. Deutch: Nature 469, 21–22 (2011)

<https://www.nature.com/articles/469021a?message-global=remove>

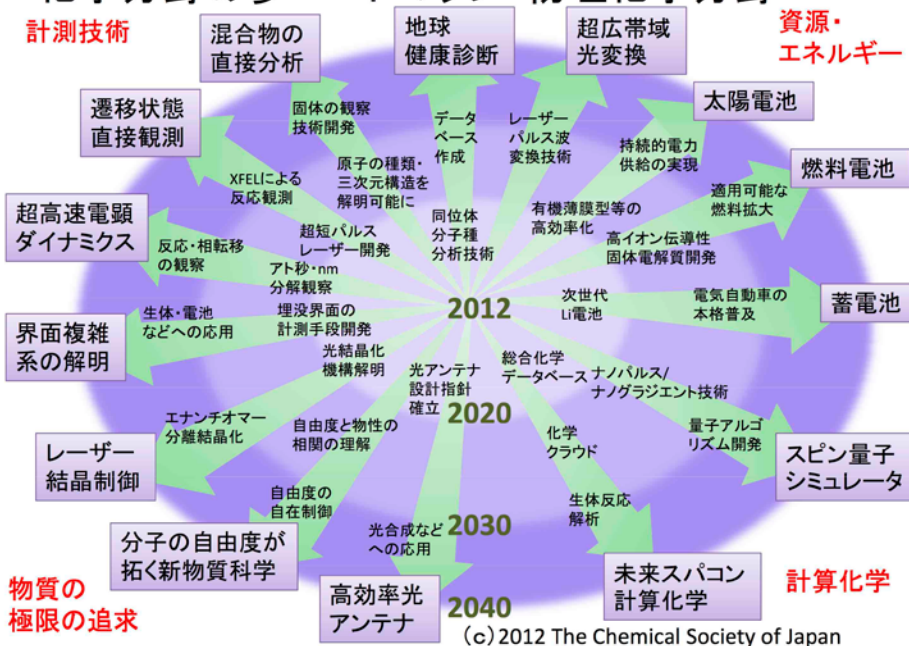
UTokyo Online Education 学術俯瞰講義 2017 吉信淳 [CC BY-NC-ND](#)

化学のロードマップ (日本化学会)



化学ロードマップ(物理化学、ナノサイエンス)

化学分野の夢ロードマップ・物理化学分野



化学の夢ロードマップ・ナノテク分野



日本化学会
30年後の化学の夢ロードマップ
<http://www.chemistry.or.jp/roadmap/Roadmap.html>
ref. 20180109

元素周期表

「原子量表(2017)」について
<http://www.chemistry.or.jp/activity/atomictable2017.pdf>
 p5元素の周期表(2017)

元素の周期表(2017)

周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	族/周期	
1	1 H 水素 1.00784~ 1.00811																	2 He ヘリウム 4.002602	1	
2	3 Li リチウム 6.938~ 6.997	4 Be ベリリウム 9.0121831												5 B ホウ素 10.806~ 10.821	6 C 炭素 12.0096~ 12.0116	7 N 窒素 14.00643~ 14.00728	8 O 酸素 15.99903~ 15.99977	9 F フッ素 18.998403163	10 Ne ネオン 20.1797	2
3	11 Na ナトリウム 22.98976928	12 Mg マグネシウム 24.304~ 24.307											13 Al アルミニウム 26.9815385	14 Si ケイ素 28.084~ 28.086	15 P リン 30.973761998	16 S 硫黄 32.059~ 32.076	17 Cl 塩素 35.446~ 35.457	18 Ar アルゴン 39.948	3	
4	19 K カリウム 39.0983	20 Ca カルシウム 40.078	21 Sc スカンジウム 44.955908	22 Ti チタン 47.867	23 V バナジウム 50.9415	24 Cr クロム 51.9961	25 Mn マンガン 54.938044	26 Fe 鉄 55.845	27 Co コバルト 58.933194	28 Ni ニッケル 58.6934	29 Cu 銅 63.546	30 Zn 亜鉛 65.38	31 Ga ガリウム 69.723	32 Ge ゲルマニウム 72.630	33 As ヒ素 74.921595	34 Se セレン 78.971	35 Br 臭素 79.901~ 79.907	36 Kr クリプトン 83.798	4	
5	37 Rb ルビジウム 85.4678	38 Sr ストロンチウム 87.62	39 Y イットリウム 88.90584	40 Zr ジルコニウム 91.224	41 Nb ニオブ 92.90637	42 Mo モリブデン 95.95	43 Tc* テクネチウム (99)	44 Ru ルテチウム 101.07	45 Rh ロジウム 102.90550	46 Pd パラジウム 106.42	47 Ag 銀 107.8682	48 Cd カドミウム 112.414	49 In インジウム 114.818	50 Sn スズ 118.710	51 Sb アンチモン 121.760	52 Te テルル 127.60	53 I ヨウ素 126.90447	54 Xe キセノン 131.293	5	
6	55 Cs セシウム 132.90545196	56 Ba バリウム 137.327	57~71 ランタノイド	72 Hf ハフニウム 178.49	73 Ta タンタル 180.94788	74 W タングステン 183.84	75 Re レニウム 186.207	76 Os オスミウム 190.23	77 Ir イリジウム 192.217	78 Pt 白金 195.084	79 Au 金 196.966569	80 Hg 水銀 200.592	81 Tl タリウム 204.382~ 204.385	82 Pb 鉛 207.2	83 Bi* ビスマス 208.98040	84 Po* ポロニウム (210)	85 At* アスタチン (210)	86 Rn* ラドン (222)	6	
7	87 Fr* フランシウム (223)	88 Ra* ラジウム (226)	89~103 アクチノイド	104 Rf* ラザホージウム (267)	105 Db* ドブニウム (268)	106 Sg* シーボーギウム (271)	107 Bh* ボーリウム (272)	108 Hs* ハッシウム (277)	109 Mt* マイタネリウム (276)	110 Ds* ダームスタチウム (281)	111 Rg* レントゲニウム (280)	112 Cn* コベルニウム (285)	113 Nh* ニホニウム (278)	114 Fl* フレロビウム (289)	115 Mc* モスコビウム (289)	116 Lv* リバモリウム (293)	117 Ts* テネシン (293)	118 Og* オガネソン (294)	7	

ランタノイド	57 La ランタン 138.90547	58 Ce セリウム 140.116	59 Pr プラセオジウム 140.90766	60 Nd ネオジウム 144.242	61 Pm* プロメチウム (145)	62 Sm サマリウム 150.36	63 Eu ユウロピウム 151.964	64 Gd ガドリニウム 157.25	65 Tb テルビウム 158.92535	66 Dy ジスプロシウム 162.500	67 Ho ホルミウム 164.93033	68 Er エルビウム 167.259	69 Tm ツリウム 168.93422	70 Yb イットルビウム 173.045	71 Lu ルテチウム 174.9668
アクチノイド	89 Ac* アクチニウム (227)	90 Th* トリウム 232.0377	91 Pa* プロトアクチニウム 231.03588	92 U* ウラン 238.02891	93 Np* ネプツニウム (237)	94 Pu* プルトニウム (239)	95 Am* アメリシウム (243)	96 Cm* キュリウム (247)	97 Bk* バークリウム (247)	98 Cf* カリホルニウム (252)	99 Es* アインシュタインウム (252)	100 Fm* フェルミウム (257)	101 Md* メンデレビウム (258)	102 No* ノーベリウム (259)	103 Lr* ローレンシウム (262)

注1：元素記号の右肩の*はその元素には安定同位体が存在しないことを示す。そのような元素については放射性同位体の質量数の一例を()内に示した。ただし、Bi, Th, Pa, U については天然で特定の同位体組成を示すので原子量が与えられる。

注2：この周期表には最新の原子量「原子量表(2017)」が示されている。原子量は単一の数値あるいは変動範囲で示されている。原子量が範囲で示されている12元素には複数の安定同位体が存在し、その組成が天然において大きく変動するため単一の数値で原子量が与えられない。その他の72元素については、原子量の不確かさは示された数値の最後の桁にある。

備考：原子番号104番以降の超アクチノイドの周期表の位置は暫定的である。

で囲んだ元素の集合は何？

元素周期表

「原子量表(2017)」について
<http://www.chemistry.or.jp/activity/atomictable2017.pdf>
 p5元素の周期表(2017)

元素の周期表(2017)

周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	族/周期	
1	1 H 水素 1.00784~ 1.00811																	2 He ヘリウム 4.002602	1	
2	3 Li リチウム 6.938~ 6.997	4 Be ベリリウム 9.012183												5 B ホウ素 10.806~ 10.821	6 C 炭素 12.0096~ 12.0116	7 N 窒素 14.00643~ 14.00728	8 O 酸素 15.99903~ 15.99977	9 F フッ素 18.998403163	10 Ne ネオン 20.1797	2
3	11 Na ナトリウム 22.98976928	12 Mg マグネシウム 24.304~ 24.307											13 Al アルミニウム 26.981538	14 Si ケイ素 28.084~ 28.086	15 P リン 30.973761998	16 S 硫黄 32.059~ 32.076	17 Cl 塩素 35.446~ 35.457	18 Ar アルゴン 39.948	3	
4	19 K カリウム 39.0983	20 Ca カルシウム 40.078	21 Sc スカンジウム 44.955908	22 Ti チタン 47.867	23 V バナジウム 50.9415	24 Cr クロム 51.9961	25 Mn マンガン 54.938044	26 Fe 鉄 55.845	27 Co コバルト 58.933194	28 Ni ニッケル 58.6934	29 Cu 銅 63.546	30 Zn 亜鉛 65.38	31 Ga ガリウム 69.723	32 Ge ゲルマニウム 72.630	33 As ヒ素 74.921595	34 Se セレン 78.971	35 Br 臭素 79.901~ 79.907	36 Kr クリプトン 83.798	4	
5	37 Rb ルビジウム 85.4678	38 Sr ストロンチウム 87.62	39 Y イットリウム 88.90584	40 Zr ジルコニウム 91.224	41 Nb ニオブ 92.90637	42 Mo モリブデン 95.95	43 Tc テクネチウム (99)	44 Ru ルテチウム 101.07	45 Rh ロジウム 102.90550	46 Pd パラジウム 106.42	47 Ag 銀 107.8682	48 Cd カドミウム 112.414	49 In インジウム 114.818	50 Sn スズ 118.710	51 Sb アンチモン 121.760	52 Te テルル 127.60	53 I ヨウ素 126.90447	54 Xe キセノン 131.293	5	
6	55 Cs セシウム 132.90545196	56 Ba バリウム 137.327	57~71 ランタノイド	72 Hf ハフニウム 178.49	73 Ta タンタル 180.94788	74 W タングステン 183.84	75 Re レニウム 186.207	76 Os オスミウム 190.23	77 Ir イリジウム 192.217	78 Pt 白金 195.084	79 Au 金 196.966569	80 Hg 水銀 200.592	81 Tl タリウム 204.382~ 204.385	82 Pb 鉛 207.2	83 Bi ビスマス 208.98040	84 Po ポロニウム (210)	85 At アスタチン (210)	86 Rn ラドン (222)	6	
7	87 Fr* フランシウム (223)	88 Ra* ラジウム (226)	89~103 アクチノイド	104 Rf* ラザホージウム (267)	105 Db* ドブニウム (268)	106 Sg* シーボーギウム (271)	107 Bh* ボーリウム (272)	108 Hs* ハッシウム (277)	109 Mt* マイトネリウム (276)	110 Ds* デームスタチウム (281)	111 Rg* レントゲニウム (280)	112 Cn* コペルニシウム (285)	113 Nh* ニホニウム (278)	114 Fl* フレロビウム (289)	115 Mc* モスコビウム (289)	116 Lv* リバモリウム (293)	117 Ts* テネシン (293)	118 Og* オガネソン (294)	7	

ランタノイド	57 La ランタン 138.90547	58 Ce セリウム 140.116	59 Pr プラセオジウム 140.90766	60 Nd ネオジウム 144.242	61 Pm* プロメチウム (145)	62 Sm サマリウム 150.36	63 Eu ユウロピウム 151.964	64 Gd ガドリニウム 157.25	65 Tb テルビウム 158.92535	66 Dy ジスプロシウム 162.500	67 Ho ホルミウム 164.93033	68 Er エルビウム 167.259	69 Tm ツリウム 168.93422	70 Yb イットリウム 173.045	71 Lu ルテチウム 174.9668
アクチノイド	89 Ac* アクチニウム (227)	90 Th トリウム 232.0377	91 Pa プロアクチニウム 231.03588	92 U* ウラン 238.02891	93 Np* ネプツニウム (237)	94 Pu* プルトニウム (239)	95 Am* アメリシウム (243)	96 Cm* キュリウム (247)	97 Bk* バークリウム (247)	98 Cf* カリホルニウム (252)	99 Es* アインシュタインウム (252)	100 Fm* フェルミウム (257)	101 Md* メンデレビウム (258)	102 No* ノーベリウム (259)	103 Lr* ローレンシウム (262)

注1：元素記号の右肩の*はその元素には安定同位体が存在しないことを示す。そのような元素については放射性同位体の質量数の一例を()内に示した。ただし、Bi, Th, Pa, U については天然で特定の同位体組成を示すので原子量が与えられる。

注2：この周期表には最新の原子量「原子量表(2017)」が示されている。原子量は単一の数値あるいは変動範囲で示されている。原子量が範囲で示されている12元素には複数の安定同位体が存在し、その組成が天然において大きく変動するため単一の数値で原子量が与えられない。その他の72元素については、原子量の不確かさは示された数値の最後の桁にある。

備考：原子番号104番以降の超アクチノイドの周期表の位置は暫定的である。



で囲んだ元素の集合は何？

基礎物理定数

2013 化学で使われる量・単位・記号
<http://www.chemistry.or.jp/activity/unit2013.pdf>
 p35、基礎物理定数の値(参考文献7)

5. 基礎物理定数の値 (参考文献 7) カッコの中の数値は最後の桁につく標準不確かさを示す。

物 理 量	記 号	数 値	単 位
真空の透磁率 ^{a,b)}	permeability of vacuum μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$	N A ⁻²
真空中の光速 ^{a)}	speed of light in vacuum c, c_0	299 792 458	m s ⁻¹
真空の誘電率 ^{a,c)}	permittivity of vacuum $\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2$	$8.854\,187\,817... \times 10^{-12}$	F m ⁻¹
電気素量	elementary charge e	$1.602\,176\,487(40) \times 10^{-19}$	C
プランク定数	Planck constant h	$6.626\,068\,96(33) \times 10^{-34}$	J s
アボガドロ定数	Avogadro constant N_A, L	$6.022\,141\,79(30) \times 10^{23}$	mol ⁻¹
電子の質量	electron mass m_e	$9.109\,382\,15(45) \times 10^{-31}$	kg
陽子の質量	proton mass m_p	$1.672\,621\,637(83) \times 10^{-27}$	kg
中性子の質量	neutron mass m_n	$1.674\,927\,211(84) \times 10^{-27}$	kg
原子質量定数 (統一原子質量単位)	atomic mass constant (unified atomic mass unit) $m_u = 1\,u$	$1.660\,538\,782(83) \times 10^{-27}$	kg
ファラデー定数	Faraday constant F	$9.648\,533\,99(24) \times 10^4$	C mol ⁻¹
ハートリーエネルギー	Hartree energy E_h	$4.359\,743\,94(22) \times 10^{-18}$	J
ボーア半径	Bohr radius a_0	$5.291\,772\,085\,9(36) \times 10^{-11}$	m
ボーア磁子	Bohr magneton μ_B	$9.274\,009\,15(23) \times 10^{-24}$	J T ⁻¹
核磁子	nuclear magneton μ_N	$5.050\,783\,24(13) \times 10^{-27}$	J T ⁻¹
リュードベリ定数	Rydberg constant R_∞	$1.097\,373\,156\,852\,7(73) \times 10^7$	m ⁻¹
気体定数	gas constant R	8.314 472(15)	J K ⁻¹ mol ⁻¹
ボルツマン定数	Boltzmann constant k, k_B	$1.380\,650\,4(24) \times 10^{-23}$	J K ⁻¹
万有引力定数(重力定数)	gravitational constant G	$6.674\,28(67) \times 10^{-11}$	m ³ kg ⁻¹ s ⁻²
重力の標準加速度 ^{a)}	standard acceleration of gravity g_n	9.806 65	m s ⁻²
水の三重点 ^{a)}	triple point of water $T_{tp}(\text{H}_2\text{O})$	273.16	K
理想気体 (1 bar, 273.15 K) のモル体積	molar volume of ideal gas (at 1 bar and 273.15 K) V_0	22.710 981(40)	L mol ⁻¹
標準大気圧 ^{a)}	standard atmosphere atm	101 325	Pa
微細構造定数	fine structure constant $\alpha = \mu_0 e^2 c / 2h$ α^{-1}	$7.297\,352\,537\,6(50) \times 10^{-3}$ 137.035 999 676(94)	
電子の磁気モーメント	electron magnetic moment μ_e	$-9.284\,763\,77(23) \times 10^{-24}$	J T ⁻¹
自由電子のランデ g 因子	Landé g factor for free electron $g_e = 2\mu_e/\mu_B$	-2.002 319 304 362 2(15)	
陽子の磁気モーメント	proton magnetic moment μ_p	$1.410\,606\,662(37) \times 10^{-26}$	J T ⁻¹

a) 定義された正確な値である。

b) 磁気定数 magnetic constant ともよばれる。

c) 電気定数 electric constant ともよばれる。

エネルギー単位換算表

2013 化学で使われる量・単位・記号
<http://www.chemistry.or.jp/activity/unit2013.pdf>
 p4 エネルギーに関する単位の換算表

エネルギーに関する単位の換算表^{a)} (参考文献 2)

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = kT; E_m = N_A E$$

	波 数 $\tilde{\nu}$		振 動 数 ν		エ ネ ル ギ ー E			モルエネルギー E_m		温 度 T
	cm^{-1}		MHz		aJ	eV	E_h	kJ/mol	kcal/mol	K
$\tilde{\nu} : 1 \text{ cm}^{-1}$	$\hat{=}$	1	$2.997\,925 \times 10^4$		$1.986\,446 \times 10^{-5}$	$1.239\,842 \times 10^{-4}$	$4.556\,335 \times 10^{-6}$	$11.962\,66 \times 10^{-3}$	$2.859\,144 \times 10^{-3}$	1.438 775
$\nu : 1 \text{ MHz}$	$\hat{=}$	$3.335\,641 \times 10^{-5}$	1		$6.626\,069 \times 10^{-10}$	$4.135\,667 \times 10^{-9}$	$1.519\,830 \times 10^{-10}$	$3.990\,313 \times 10^{-7}$	$9.537\,076 \times 10^{-8}$	$4.799\,237 \times 10^{-5}$
1 aJ	$\hat{=}$	50 341.17	$1.509\,190 \times 10^9$	1		6.241 510	0.229 371 3	602.2142	143.9326	$7.242\,963 \times 10^4$
$E : 1 \text{ eV}$	$\hat{=}$	8065.545	$2.417\,989 \times 10^8$	0.160 217 6	1		$3.674\,933 \times 10^{-2}$	96.485 34	23.060 55	$1.160\,451 \times 10^4$
1 E_h	$\hat{=}$	219 474.63	$6.579\,684 \times 10^9$	4.359 744	27.211 38	1		2625.500	627.5095	$3.157\,747 \times 10^5$
$E_m : 1 \text{ kJ/mol}$	$\hat{=}$	83.593 47	$2.506\,069 \times 10^6$	$1.660\,539 \times 10^{-3}$	$1.036\,427 \times 10^{-2}$	$3.808\,799 \times 10^{-4}$	1		0.239 005 7	120.2722
1 kcal/mol	$\hat{=}$	349.7551	$1.048\,539 \times 10^7$	$6.947\,694 \times 10^{-3}$	$4.336\,410 \times 10^{-2}$	$1.593\,601 \times 10^{-3}$	4.184	1		503.2189
$T : 1 \text{ K}$	$\hat{=}$	0.695 035 6	$2.083\,664 \times 10^4$	$1.380\,650 \times 10^{-5}$	$8.617\,343 \times 10^{-5}$	$3.166\,815 \times 10^{-6}$	$8.314\,472 \times 10^{-3}$	$1.987\,207 \times 10^{-3}$		1

a) 換算表の使用例：1 aJ = 1×10^{-18} J $\hat{=}$ 50 341 cm^{-1} , 1 eV $\hat{=}$ 96.4853 kJ mol⁻¹。 $\hat{=}$ は“に対応する”あるいは“とほぼ等価である”(1を除く)という意味を表す。

© 2013 日本化学会 単位・記号専門委員会

室温 ($T \sim 295 \text{ K}$) では、

波数: 205 cm^{-1} 振動数: $6.15 \times 10^{12} \text{ Hz} = 6.15 \text{ THz}$ E : 25.4 meV E_{mol} : $2.45 \text{ kJ/mol} = 0.586 \text{ kcal/mol}$

$$E = h\nu = hc\tilde{\nu} = kT; E_{mol} = N_A E$$

SI 単位の 10 進の倍量および分量を表すために SI 接頭語が使われる。それらの名称と記号は次のとおりである^{a)}。

倍 数	接 頭 語	記 号	倍 数	接 頭 語	記 号
10	デ カ	deca da	10 ⁻¹	デ シ	deci d
10 ²	ヘ ク ト	hecto h	10 ⁻²	セ ン チ	centi c
10 ³	キ ロ	kilo k	10 ⁻³	ミ リ	milli m
10 ⁶	メ ガ	mega M	10 ⁻⁶	マイ ク ロ	micro μ
10 ⁹	ギ ガ	giga G	10 ⁻⁹	ナ ノ	nano n
10 ¹²	テ ラ	tera T	10 ⁻¹²	ピ コ	pico p
10 ¹⁵	ペ タ	peta P	10 ⁻¹⁵	フェ ム ト	femto f
10 ¹⁸	エク サ	exa E	10 ⁻¹⁸	ア ト	atto a
10 ²¹	ゼ タ	zetta Z	10 ⁻²¹	ゼ プ ト	zepto z
10 ²⁴	ヨ タ	yotta Y	10 ⁻²⁴	ヨ ク ト	yocto y

a) 質量の単位の 10 進の分量あるいは倍量は、グラムに単一の接頭語をつけて表示する。たとえば, mg (μkg と書かない); Mg (kg と書かない)。

2013 化学で使われる量・単位・記号
<http://www.chemistry.or.jp/activity/unit2013.pdf>
 p1 2、SI接頭語

物性と化学: Diracのことば

「物理学の大部分と化学全体の数学的理論の基礎となる物理法則は、このように完全に理解され、唯一の困難は、この法則の厳密な応用があまりにも複雑で解けない方程式を導くことである。」 P. A. M. Dirac, Proc. Royal. Soc., A123 (1929) 714.

<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/123/792/714>

Quantum Mechanics of Many-Electron Systems

1 Introduction.

The general theory of quantum mechanics is now almost complete, the imperfections that still remain being in connection with exact fitting in of the theory with relativity ideas. These give rise to difficulties only when high-speed particles are involved, and are therefore of no importance in the consideration of atomic and molecular structure and ordinary chemical reactions, in which it is, indeed, usually sufficiently accurate if one neglects relativity variation of mass with velocity and assumes only Coulomb forces between the various electrons and atomic nuclei. The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble. It therefore becomes desirable that approximate practical methods of applying quantum mechanics should be developed, which can lead to an explanation of the main features of complex atomic systems without too much computation.



P. A. M. Dirac
(1902–1984)

Photo by GFHund, from Wikipedia Commons. ref.20180116
https://en.wikipedia.org/wiki/Paul_Dirac#/media/File:Dirac,Paul_1963_Kopenhagen.jpg
CC BY 3.0

量子力学: 物性や化学現象を原子レベルで理解するための基本原理

クイズ

Q1: あなたの身体を構成している蛋白質中の窒素の何%が、
工業的に製造されたアンモニアに由来するでしょうか？

Q2: 20世紀における三大発明をあげると、何になりますか？

表面？

表面的

1. 見方, 観察力: うわべだけ, 皮相的, 見かけの, ...
2. つき合い, 応対: 形だけ, 儀礼的, 見せかけの, ...
3. 行動, 結果: 地に足がつかない, 底が浅い, 名ばかりの, ...

あまり良い意味には使われていない ⇒ 中身が大事

Surface	⇔	Bulk
表面		中身

表面は悪魔の創作物である

God made solids, but surfaces were the work of the Devil.

神は固体を創造したが、表面は悪魔の創作物である

Wolfgang Pauli (ヴォルフガング パウリ)

1900-1958

スイスの物理学者

1945年ノーベル物理学賞

パウリの排他原理

「2つ以上のフェルミ粒子は同一の量子状態を占めることはできない」
(電子)



Photo from Wikipedia Commons

表面，そこに美は宿る

人の関心を引くのはまず表面であり，そこに美は宿る

Giacomo Casanova (ジャコモ カサノヴァ)
(1725-1798)
イタリアの術策家，色事師，作家

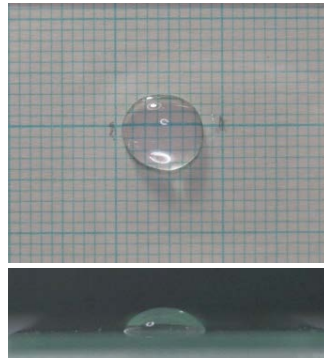


From Wikipedia Commons
http://en.wikipedia.org/wiki/Giacomo_Casanova

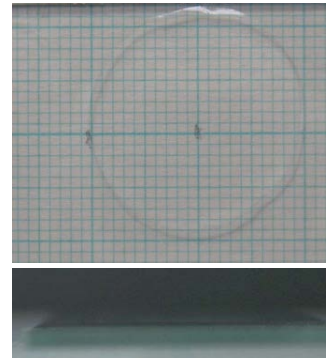
身近な表面現象

- 表面の親水性，疎水性

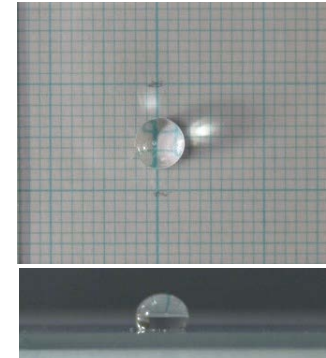
ガラス基板に
スポイドで
水を1滴たらす



洗浄ガラス



石鹼を塗布



撥水コート剤塗布

上面から観察

側面から観察

物質の機能や反応性は表面で変化する

ラングミュア

ー現代表面科学の創始者ー

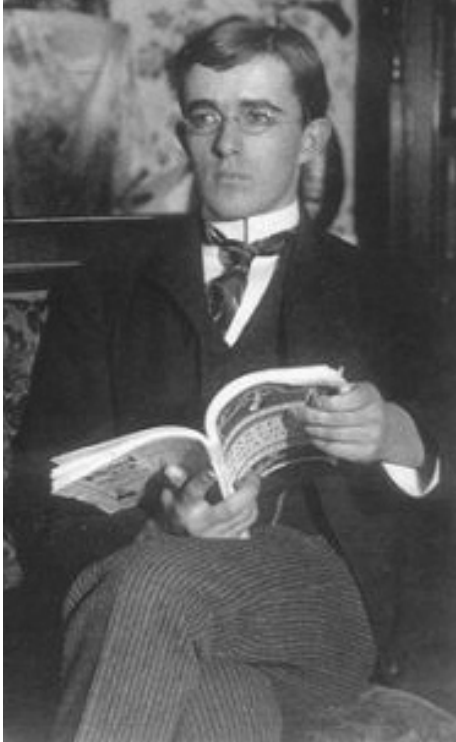


Photo from Wikipedia Commons

Irving Langmuir (1881-1957)
1932年ノーベル化学賞受賞
(GEの科学技術者)

- 原子論に基づく吸着の概念の確立
 - 原子状水素の生成法
 - タングステンフィラメント(電球)
 - 一酸化炭素の酸化反応(触媒)
 - 単分子膜の生成法
 - 人工降雨の研究
- など

物質表面と人間社会との関わり

nobelprize.org

The Nobel Prize in Chemistry 2007 Press Release

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2007/press.html

Information for the Public

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2007/popular-chemistryprize2007.pdf

1(6)

ref. 20180109



図の出典：The Nobel Prize in Chemistry 2007 •
The Royal Swedish Academy of Sciences より



2002年9月に葉山で行われた日独セミナー
Ertl博士と山下氏(吉信研究室 前助手)

1. 自動車排気ガス浄化コンバーター

Pt, Rh, Pdなどの**遷移金属触媒表面**では、排気ガス中の有害なCO、NOx、炭化水素を、無害なCO₂やN₂に変換。

2. フロンガスとオゾンホール

南極におけるオゾンホール発生のメカニズムは、**氷表面**におけるフロンガスの光化学反応により説明できる。

3. 金属のさび

分子（酸素、水）と**金属表面**の化学反応の結果である。防錆やコーティングなどは表面における化学反応を制御すること。

4. 電子機器の集積回路

半導体基板の表面に、酸化反応，蒸着，イオン照射，エッチングなどの化学プロセスを積み重ねて，回路を構築していく。それらのプロセスの基礎過程は，原子や分子と固体表面との相互作用がかぎとなっている。

5. 化学肥料（窒素固定）

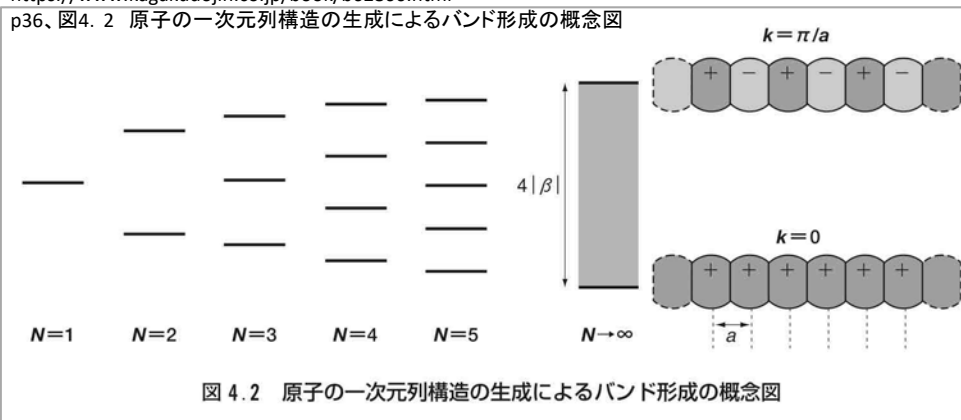
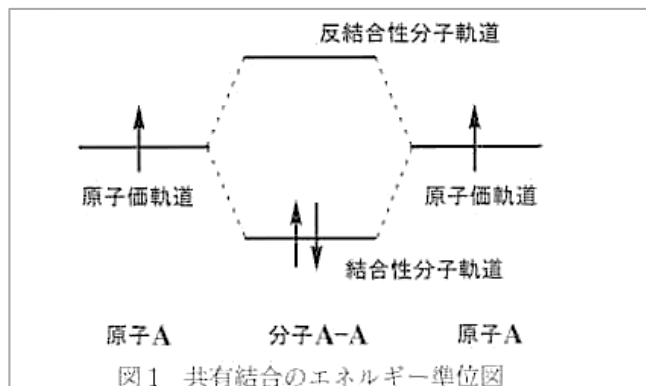
植物性食料の生産には欠かせない。空気中の窒素ガス（N₂）からアンモニア（NH₃）を合成するために、**鉄（Fe）を主成分とする触媒**をドイツのフリッツ・ハーバー（1918年ノーベル化学賞）が発明した。窒素からのアンモニア合成は、肥料だけでなく他の化学工業（爆薬，染料，医薬品など）にも大きく寄与した。

原子→分子→固体

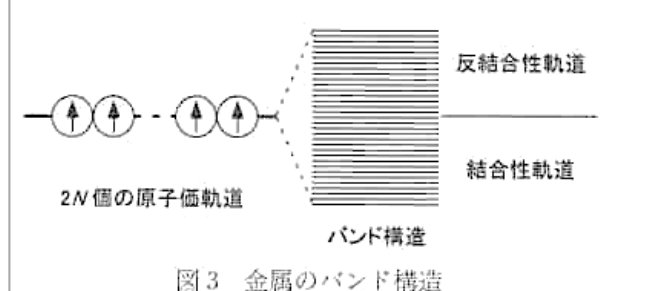
岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

p36、図4.2 原子の一次元列構造の生成によるバンド形成の概念図



化学同人「ベーシック表面化学」



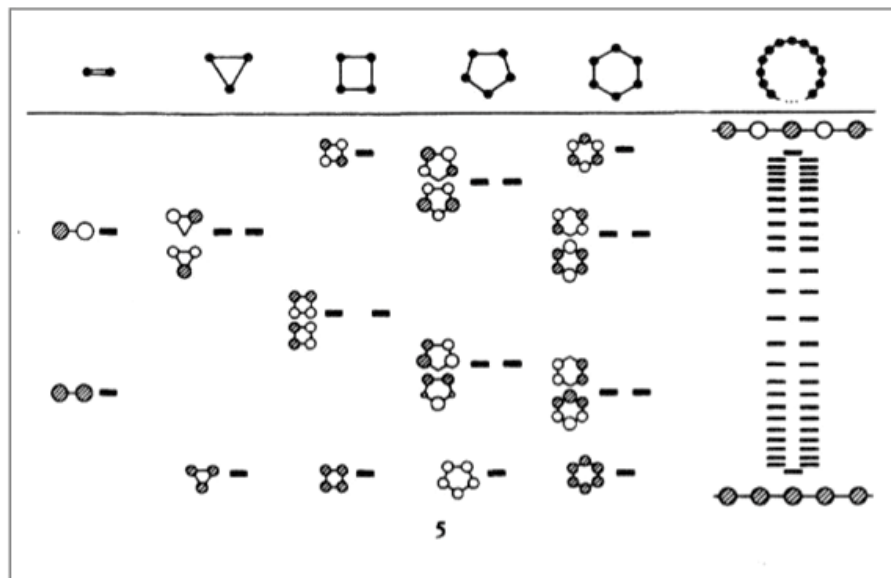
東京大学教養学部化学部会編『化学の基礎77講』(東京大学出版会、2003年)

<http://www.utp.or.jp/book/b302176.html>

II 化学結合と分子

p34図1 共有結合のエネルギー準位図

p35図3 金属のバンド構造

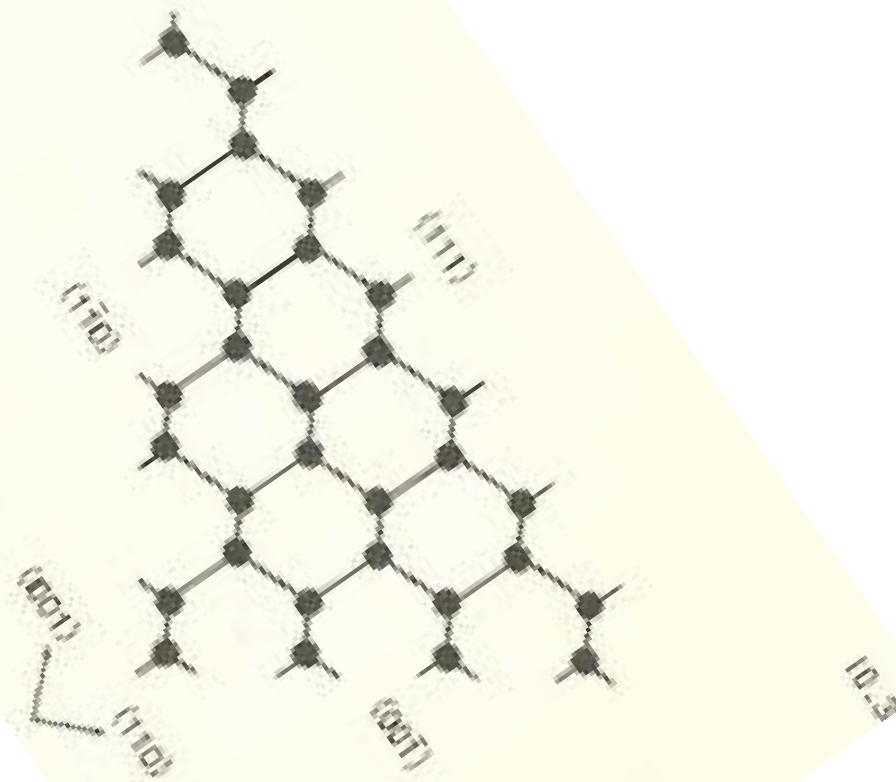


原子リングの電子状態

R. Hoffmann "Solids and Surfaces" (Wiley-VCH, 1988)

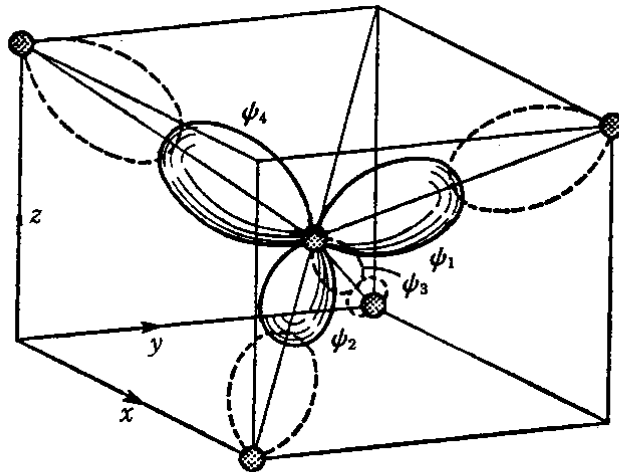
p5 BLOCH FUNCTIONS, k , BAND STRUCTURES

ダイヤモンド格子のバルク切断面

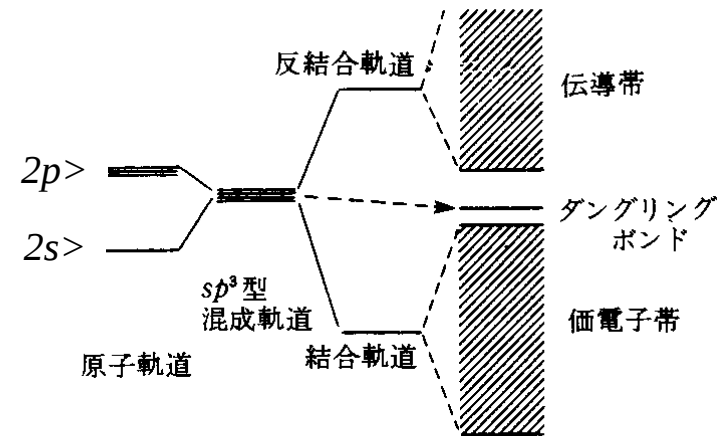


岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)
<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>
p205図10.2ダイヤモンド構造のバルク切断面

sp³混成軌道とバンドの形成, ダングリングバンド

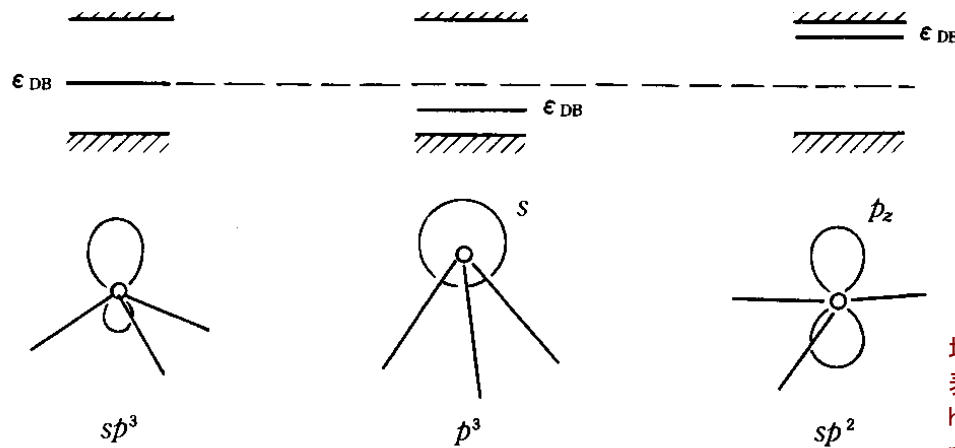


(a) sp³混成軌道



(b) sp³混成軌道のエネルギー準位とバンド構造

図 2-19 sp³混成軌道とその電子状態



(a) バックボンドの頂角とダングリングバンド準位

塚田捷
表面物理入門(東京大学出版会,1989)
<http://www.utp.or.jp/book/b302137.html>
p40、図2-19 sp³混成軌道とその電子状態
p64、図4-3 Si(III) 2×1面のハネマン模型 (a)

遷移金属のエネルギーバンド図

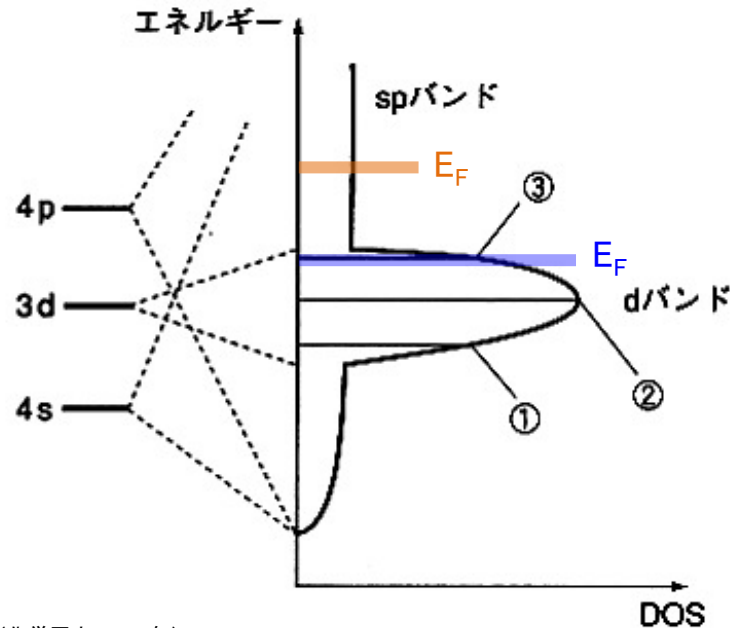


図 4.10 3d 遷移金属のバンド構造

岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

p44、図4.10 3d遷移金属のバンド構造

The occupation of d band determines the position of Fermi level (E_F).

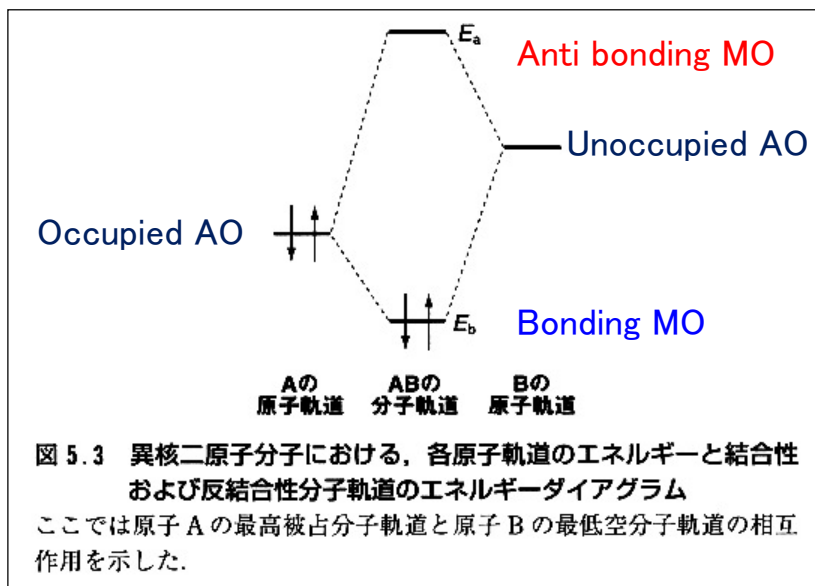
- 貴金属 (Cu, Ag, Au): d-bandは完全に占有
- 遷移金属 (Fe, Ni, Pd, Rh, Pt etc.): d-bandは部分占有

sp band: 非局在的

d band: 局在的, 指向性

フロンティア軌道理論

HOMO-LUMO interaction

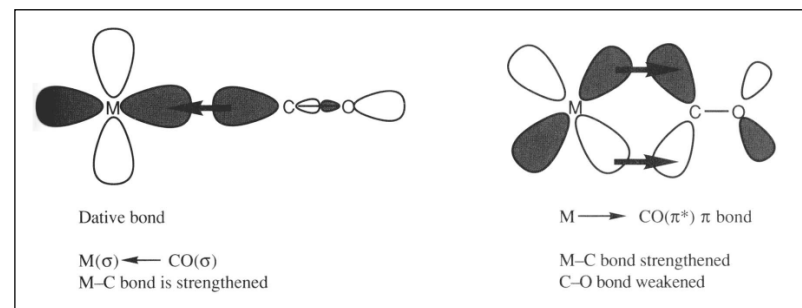


著作権等の都合により、
ここに挿入されていた
画像を削除しました

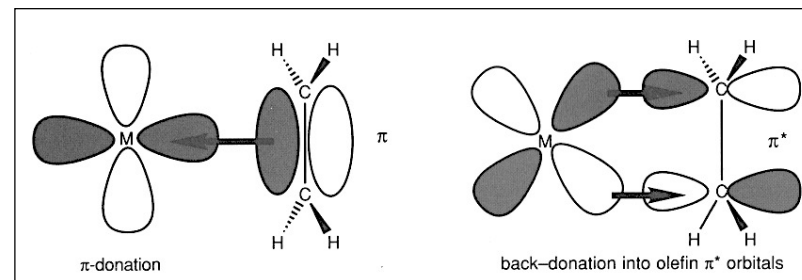
福井謙一氏の写真

福井謙一
1981年ノーベル化学賞
(1918-1998)

Metal carbonyl (Blyholder model)



Zeise's salt (Dewar-Chatt-Duncanson model)



Molecule → metal
donation

molecule ← metal
back-donation

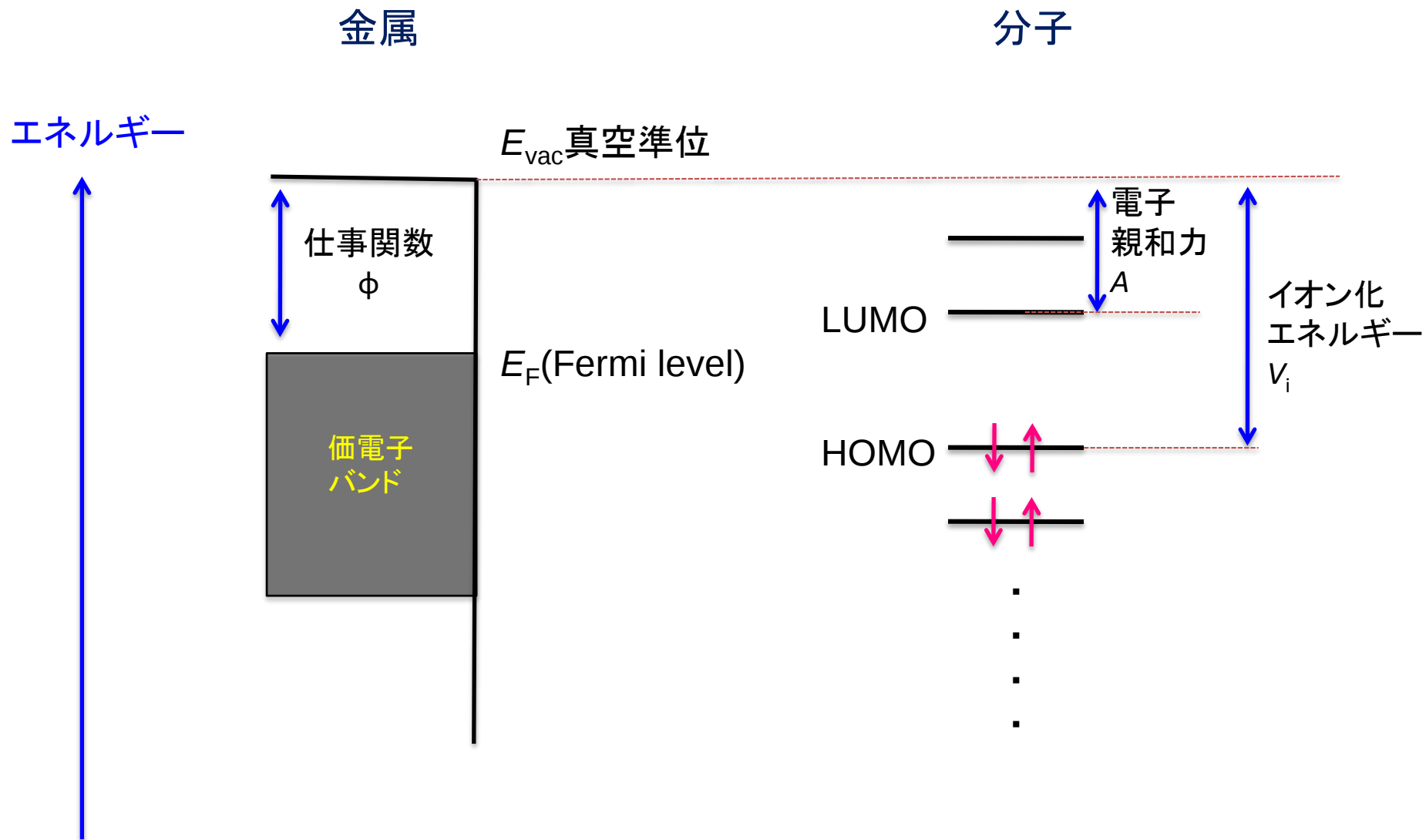
岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

p64、図5.3異核二原子分子における、各原子軌道のエネルギーと結合性および反結合性分子軌道のエネルギーダイアグラム

p65、図5.4 フロンティア軌道素相互作用の例

金属と分子の電子エネルギー準位

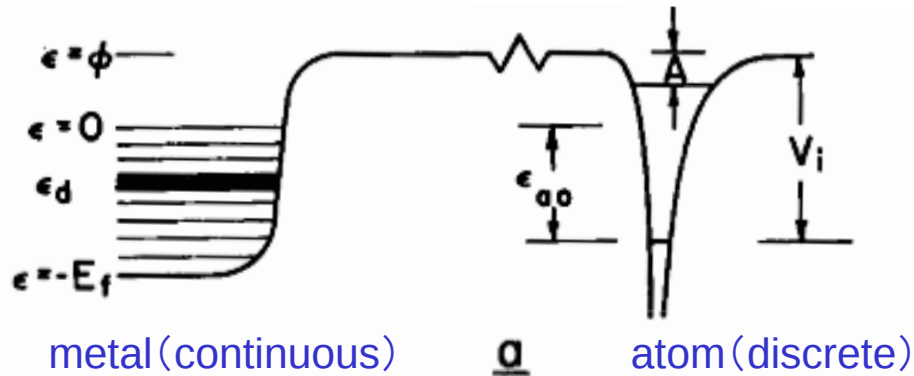


連続準位(バンド)と離散準位(原子)の相互作用

Newns-Anderson model

多体系と孤立系

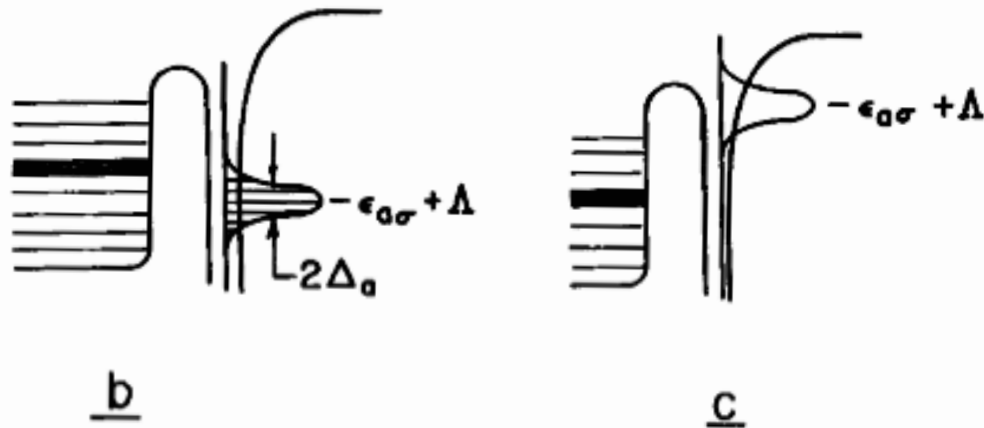
相互作用 OFF



A: 電子親和力

V_i : イオン化エネルギー

相互作用 ON



吸着分子のエネルギー準位図

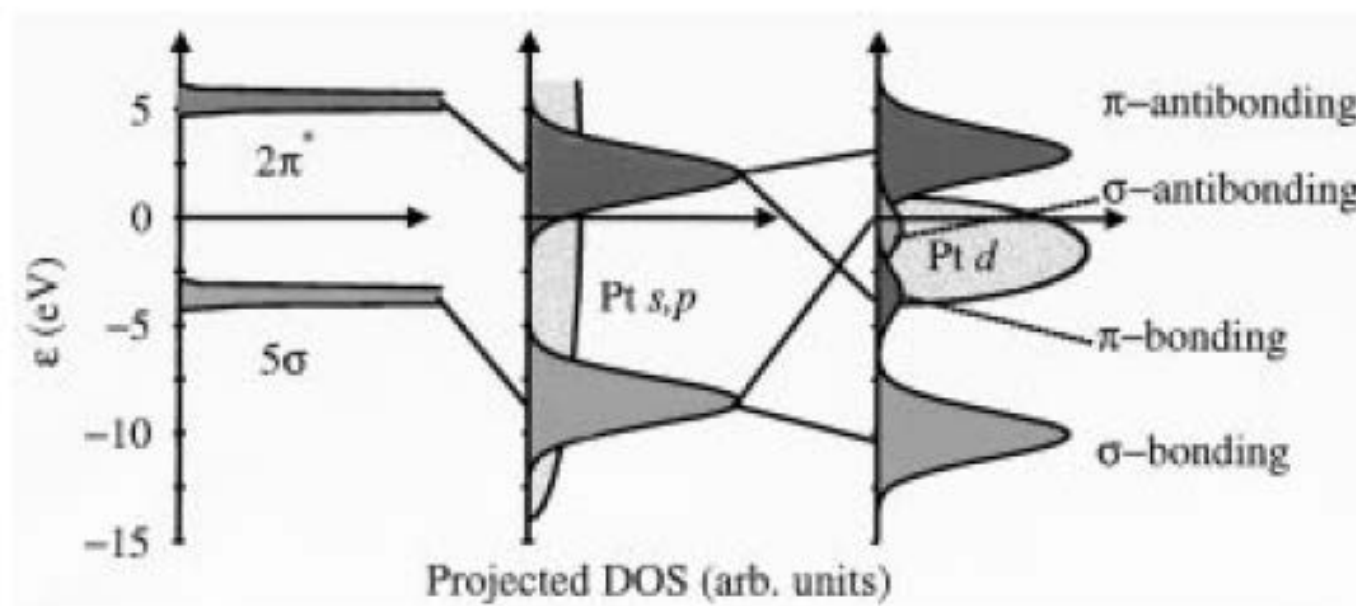


Figure 4. Schematic illustration of the two-step model for CO adsorption on a transition metal surface.

化学吸着により

離散的な分子エネルギー準位は、金属バンドとの相互作用で広がり、さらに分裂する。

B. Hammer O.H. Nielsen J.K. Nørskov
Structure sensitivity in adsorption: CO interaction with stepped and reconstructed Pt surfaces
Catalysis Letters, 46, 1997
<https://link.springer.com/article/10.1023/A:1019073208575#copyrightInformation>
Figure 4. Schematic illustration of the two-step model for CO adsorption on a transition metal surface.

よく規定された表面を作る

原子的に清浄な表面をいかに保つか？

—表面研究における超高真空の必要性—

気体分子の表面への衝突頻度
(気体分子運動論より)

$$Z = \frac{p}{\sqrt{2\pi mk_B T}}$$

p : 圧力,
 m : 分子の重さ,
 k : ボルツマン定数,
 T : 絶対温度

例えば, $p=10^{-6}\text{Torr}$ (10億分の1気圧), m : 窒素分子, $T=300\text{K}$ (室温)
 $\therefore$ 衝突頻度は, 約 $4 \times 10^{14} [\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}]$

一方, 1cm^2 当たりの原子の個数は約 10^{15} 個
 $\therefore 10^{-6}\text{Torr}$ という真空でも, 数秒で表面は汚れる

観測時間(数分～約1時間)の間「清浄表面」を保持

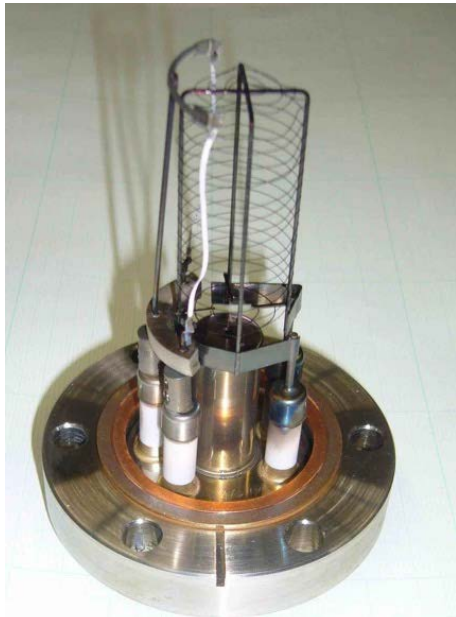


超高真空 (10^{-10}Torr = 約10兆分の1気圧) が不可欠

超高真空技術



コンフラット・フランジとガスケット



Bayard-Alpert型イオンゲージ

JIS(日本工業規格)では、真空を圧力の範囲によって5段階に分類している。

低真空 (low vacuum) $10^5 \text{ Pa} \sim 10^2 \text{ Pa}$

中真空 (medium vacuum) $10^2 \text{ Pa} \sim 10^{-1} \text{ Pa}$

高真空 (high vacuum) $10^{-1} \text{ Pa} \sim 10^{-5} \text{ Pa}$

超高真空 (ultra high vacuum) $10^{-5} \text{ Pa} \sim 10^{-8} \text{ Pa}$

単位面積あたりの分子の衝突頻度
(Rate of surface bombardment by molecules)

Hertz-Knudsenの式

$$Z = \frac{p}{\sqrt{2\pi mk_B T}}$$

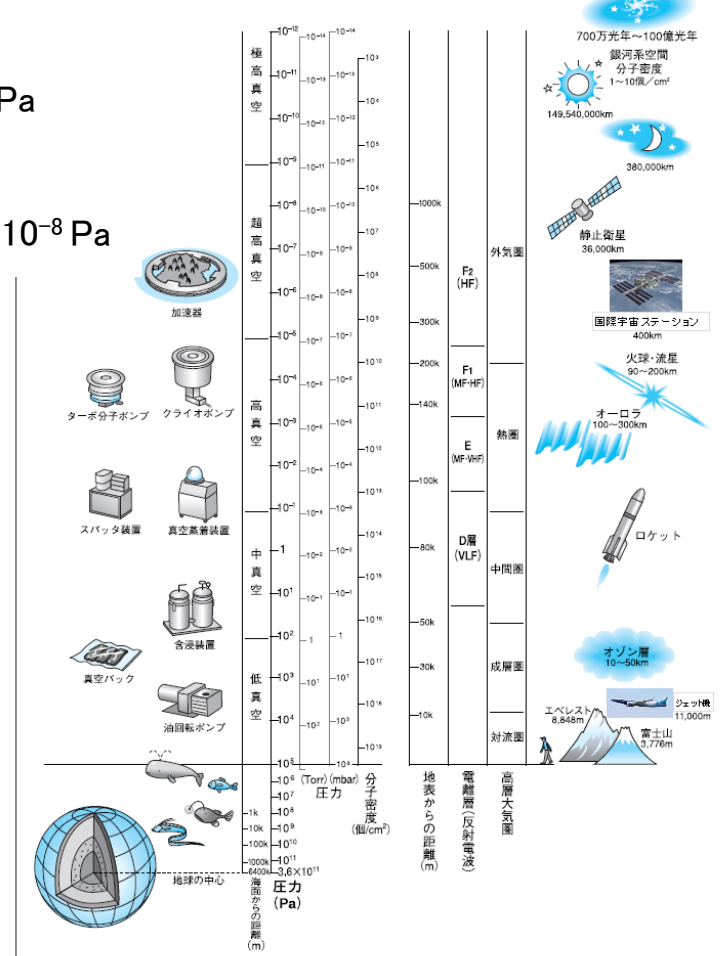
p : 圧力

m : 分子の質量

k_B : ボルツマン定数

T : 絶対温度

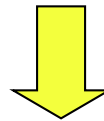
圧力の世界(宇宙・地球・真空)



提供: 日本真空工業会

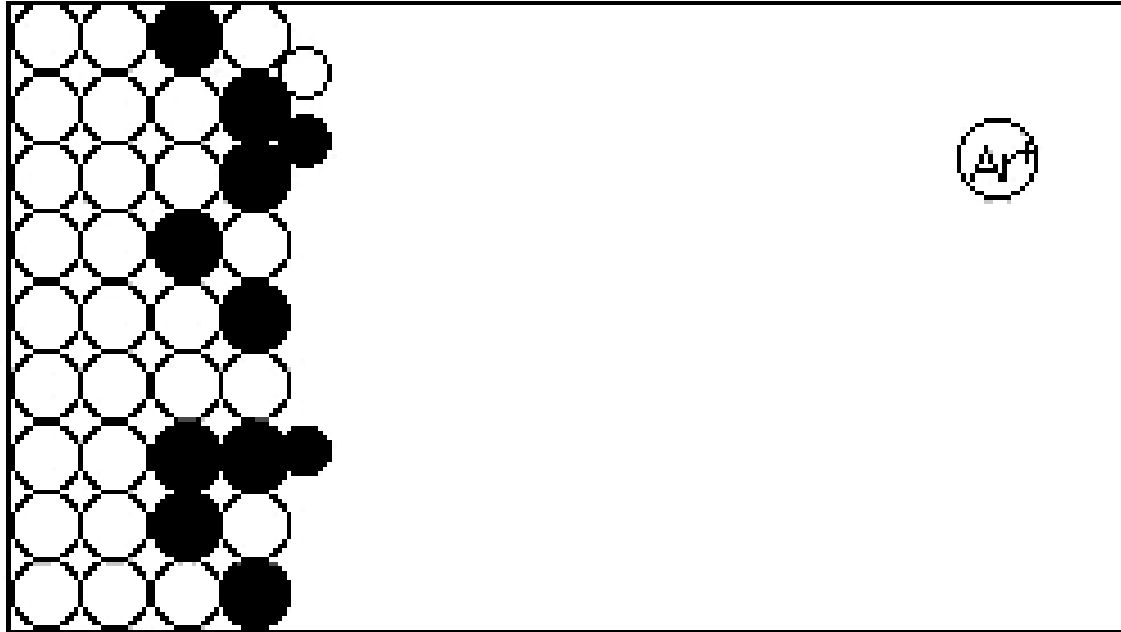
表面清浄化：原子レベルで清浄な表面をいかにして作るか？

- 金属, 半導体結晶など
鏡面研磨 ($< \mu\text{m} \sim \text{nm}$)
イオンスパッタリング + アニール (焼きなまし)
フラッシング (瞬間加熱)
クリーブ = 劈開 (割る)
- 層状物質
剥離 (はがす)



原子レベルで清浄な表面
(well-defined surface)

イオン・スパッタリング



汚れた表面層

スパッタリング収量

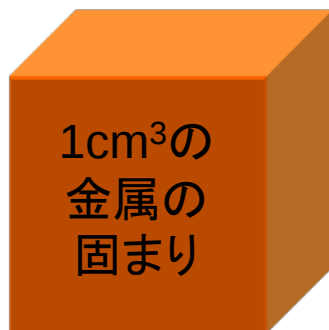
例. 500eVの1個の Ar^+ イオンにより
跳ね飛ばされる原子の数
Pt(1.4), Pd(2.1)

表面を測る

物質の大きさと表面の割合

Image by Smokefoot ,from Wikipedia Commons ref.20180307
<https://en.wikipedia.org/wiki/Heme#/media/File:Mboxygenation.png>
CC BY-SA 4.0

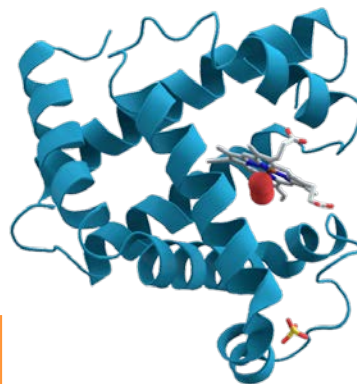
固体



表面：内部＝1：～10⁸

巨大分子

ミオグロビン

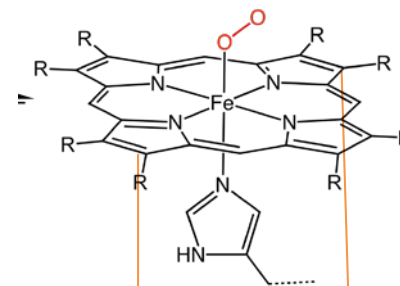


約5nm

Image from Wikipedia Commons

分子

O₂/Fe(II)ポルフィリン複合体



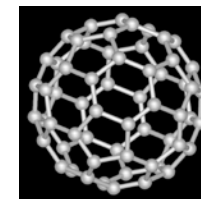
約0.8nm

ベンゼン



約0.5nm

C₆₀



by IMeowbot from Wikimedia Commons ref. 20180109
<https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fullereno.png>
CC BY-SA 3.0

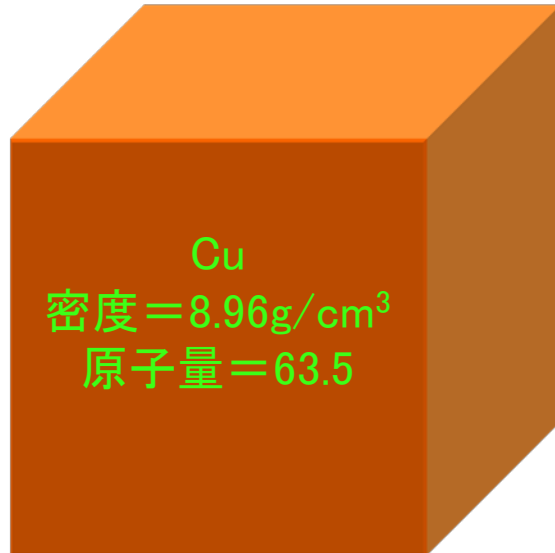
ものが小さくなればなるほど表面の割合が増える



表面・界面を制するものはナノ・テクノロジーを制す

固体の内部と表面

1cm²の表面にはいくつの原子があるのか？



1cmにn個の原子

$$\begin{aligned} n^3 &= \frac{8.96}{63.5} \times 6.02 \times 10^{23} \\ &= 8.5 \times 10^{22} \\ \therefore n^2 &\approx 10^{15} \end{aligned}$$

ざっくり計算すると、
1cm²に約10¹⁵個の原子

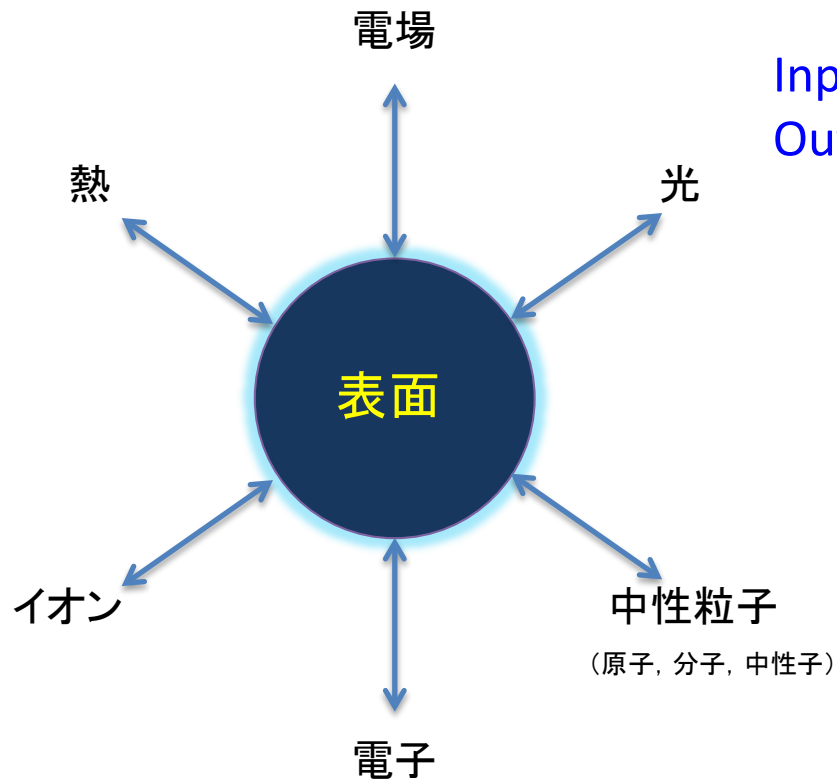
- ・表面原子：内部原子 = 1:10⁷~10⁸
→ 内部に比べて圧倒的に少ない
- ・1cm²に約10⁻⁹ mol
→ 絶対数として非常に小さい

表面だけを観測・観察するのは、とてもむずかしい！

表面だけを観測・観察するためには？

- **表面選択性**が必要 (selectivity)
 - ∴ 表面原子 : 内部原子 = $1 : 10^7 \sim 10^8$
(対象が $\sim 1 \text{ cm}^3$ の場合)
- もちろん **超高感度** が必要 (sensitivity)
 - ∴ $10^{-9} [\text{mol}/\text{cm}^2]$ しかない！

表面を観測・観察する: その戦略



Input: 探りを入れる } 実験的観察・観測
Output: 応答をみる }

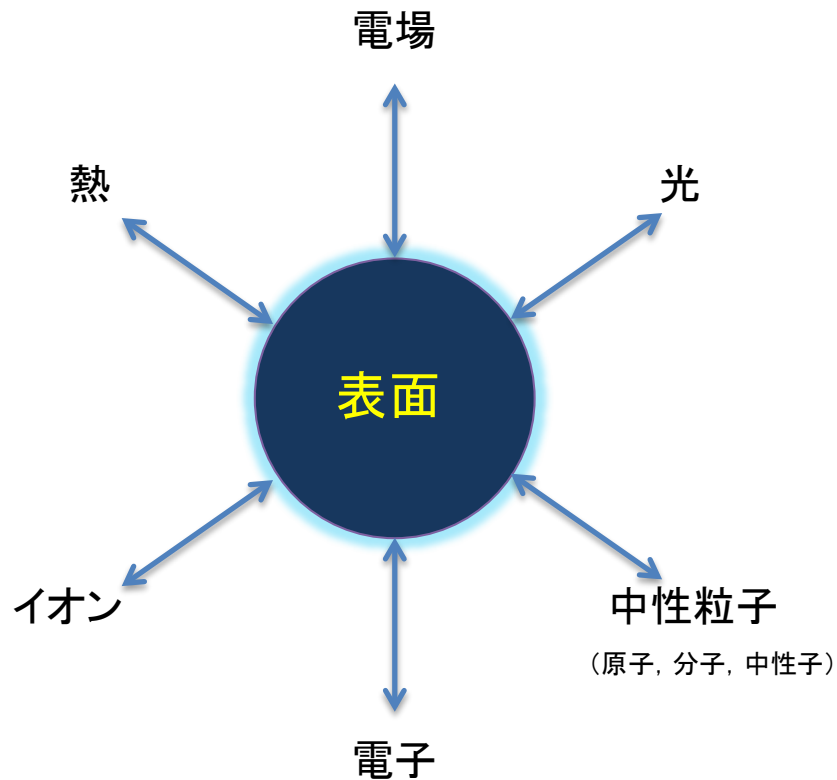
著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画像を
削除しました

Franklyn M. Propst
の写真

プロプスト・ダイアグラム

Franklyn M. Propst
Department of Physics,
University of Illinois at Urbana-Champaign,
courtesy AIP Emilio Segre Visual Archives

表面を観測・観察する: その道具



プロプスト・ダイアグラム

岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)
<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>
 パネル: 表面分析とPropstダイアグラム
 p57、表1おもな表面分析手法

表1 おもな表面分析手法

インプット	アウトプット	表面分析手法	省略形
光	光	赤外反射吸収分光	IRAS
		X線発光分光	XES
		和周波発生	SFG
		第二高調波発生	SHG
		表面増強 Raman 分光	SERS
光	中性粒子, イオン	光刺激脱離	PSD
光	電子	紫外光電子分光(価電子帯)	UPS
		X線光電子分光(内殻)	XPS
		X線吸収分光(電子)	XAS
中性粒子	中性粒子	He原子線散乱	HAS
		分子線散乱	MBS
中性粒子	電子	準安定原子励起電子分光	MAES
電子	光	逆光電子分光	IPES
電子	中性粒子, イオン	電子刺激脱離	ESD
電子	電子	低速電子回折	LEED
		反射高速電子回折	RHEED
		電子エネルギー損失分光	EELS
		Auger 電子分光	AES
イオン	中性粒子, イオン	二次イオン質量分析	SIMS
イオン	イオン	イオン散乱分光	ISS
熱	中性粒子	熱脱離分析	TDS
電場	イオン	電界イオン顕微鏡	FIM
電場	電子	電界放射顕微鏡	FEM
		走査トンネル顕微鏡	STM

ユニバーサルカーブ(電子の平均自由行程)

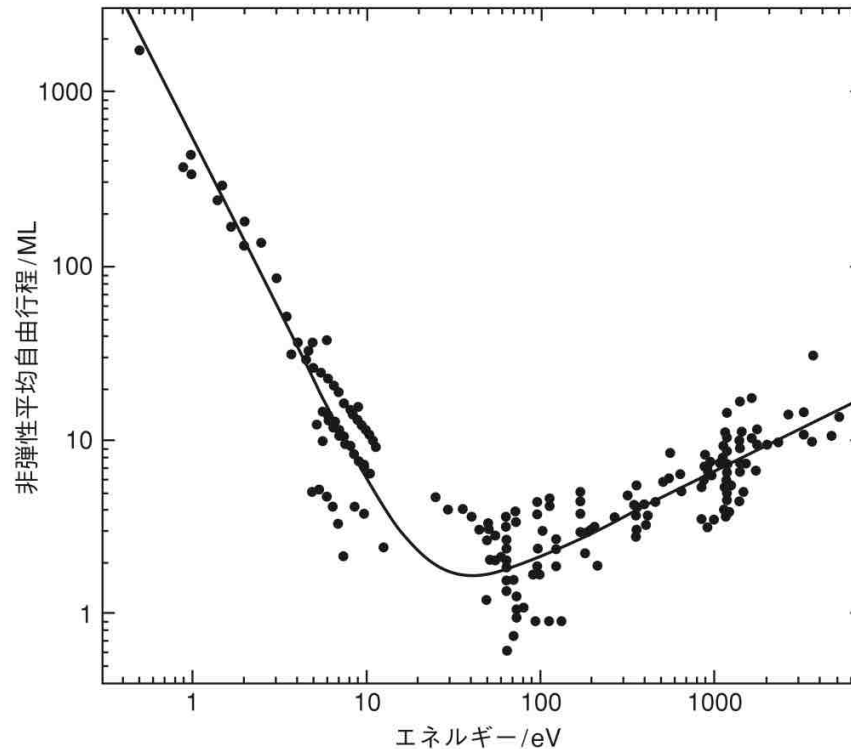


図2 電子の非弾性平均自由行程

横軸は電子の運動エネルギー，縦軸は非弾性平均自由行程（単位は原子層）．1原子層は約2 Åに相当する．

岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』（化学同人、2010年）

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

パネル：表面分析とPropstダイアグラム

p56、図2電子の非弾性平均自由行程

固体内の非弾性散乱主な因子

1. 電子正孔対生成
2. プラズモン励起
3. 振動励起

物質の粒子性と波動性

ド・ブロイ波

波長 λ を持つ粒子の運動量は

$$mv = p = (h/2\pi) k = h/\lambda \quad (k: \text{波数})$$

と書ける。

そのエネルギーは

$$\text{電磁波: } E = cp \quad (c: \text{光速})$$

$$\text{粒子: } E = p^2/2m \quad (m: \text{質量})$$

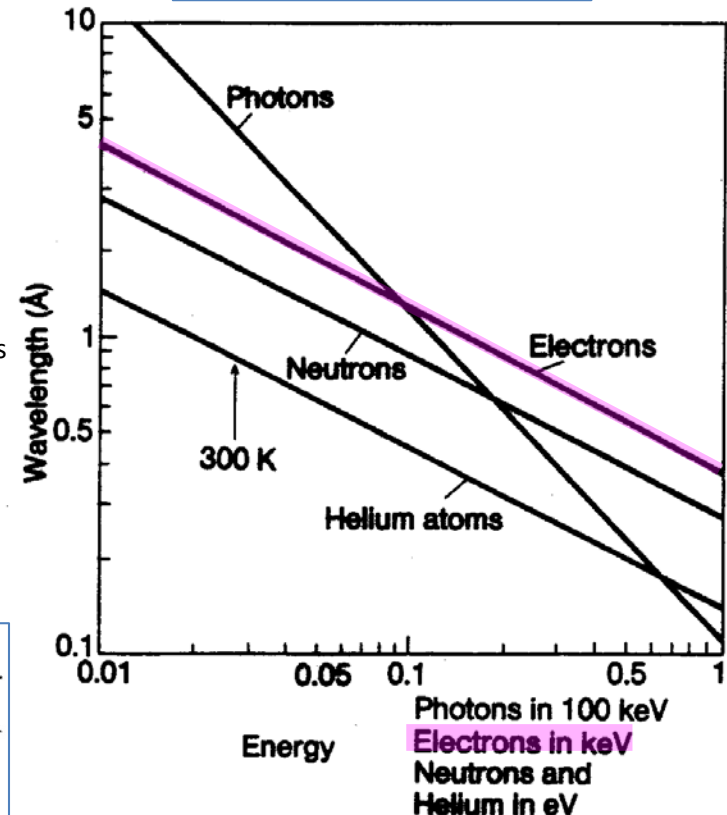
となる。



Louis de Broglie
(1892–1987)

Photo from Wikipedia Commons

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k}$$



東京大学教養学部化学部会編『化学の基礎77講』(東京大学出版会、2003年)

<http://www.utp.or.jp/book/b302176.html>

p8、表1いろいろな運動物体のド・ブロイ波長

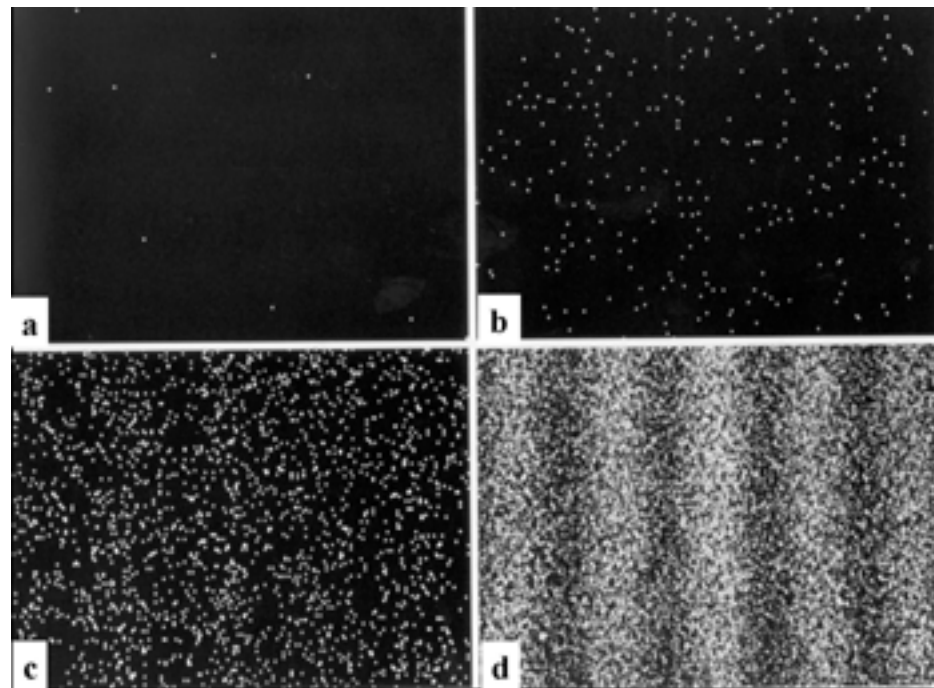
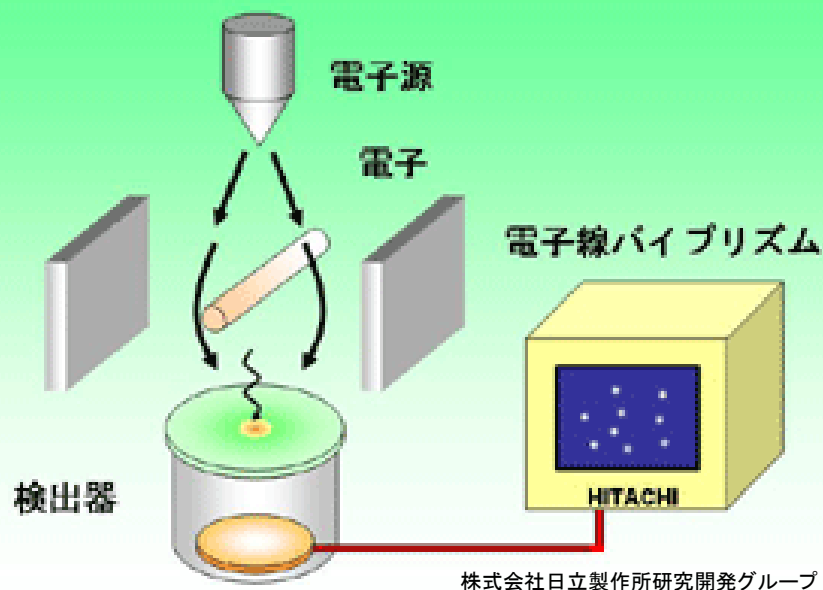
表1 いろいろな運動物体のド・ブロイ波長

運動物体	質量 (kg)	速さ (ms ⁻¹)	ド・ブロイ波長 (pm)
100 V で加速された電子	9.109×10^{-31}	5.93×10^6	123
10 kV で加速された電子	9.284×10^{-31}	5.85×10^7	12.2
野球のボール	0.142	25.0	1.87×10^{-22}
時速 100 kmh ⁻¹ で走る自動車	1000	27.8	2.38×10^{-26}

Harald Ibach, Hans Lüth "Solid-state physics : an introduction to principles of materials science" (Springer, 2009)

p68, fig3.11

二重スリット実験(電子の波動性)



株式会社日立製作所中央研究所

電子顕微鏡の中の電子源から電子を一個ずつ発射します。発射された電子は「電子線バイプリズム」という装置を通ります。この装置は、中央には細い糸状の電極が張っており、その両側に二枚の平行な金属板を置いたものです。糸の太さは1ミクロン(千分の一ミリ)以下です。糸の両側を通過した電子は、検出器で一個一個検出されます。この検出器は、浜松フotonixの光子検出器を電子用に変えたものです。驚くことに、電子一個を100%に近い効率で検出する感度を持っています。

日立製作所 外村の実験

<http://www.hitachi.co.jp/rd/portal/highlight/quantum/doubleslit/index.html>

低速電子回折(電子の波動性を利用)

$$\text{電子の波長 } \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \approx \sqrt{\frac{1.504}{V}} \text{ (nm)}$$

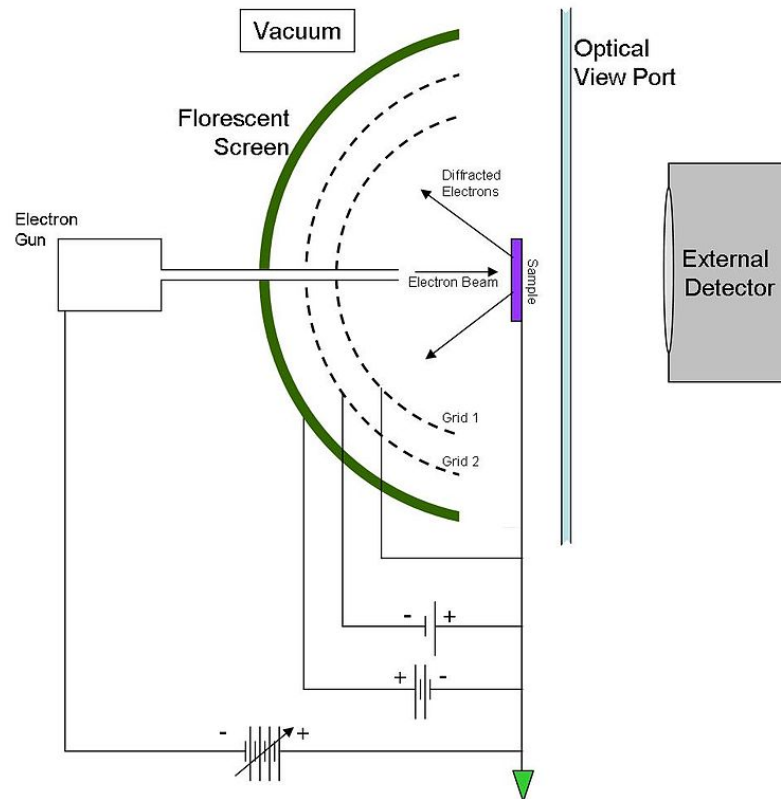
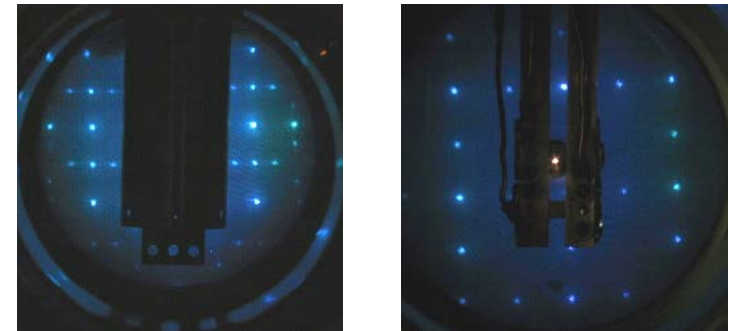


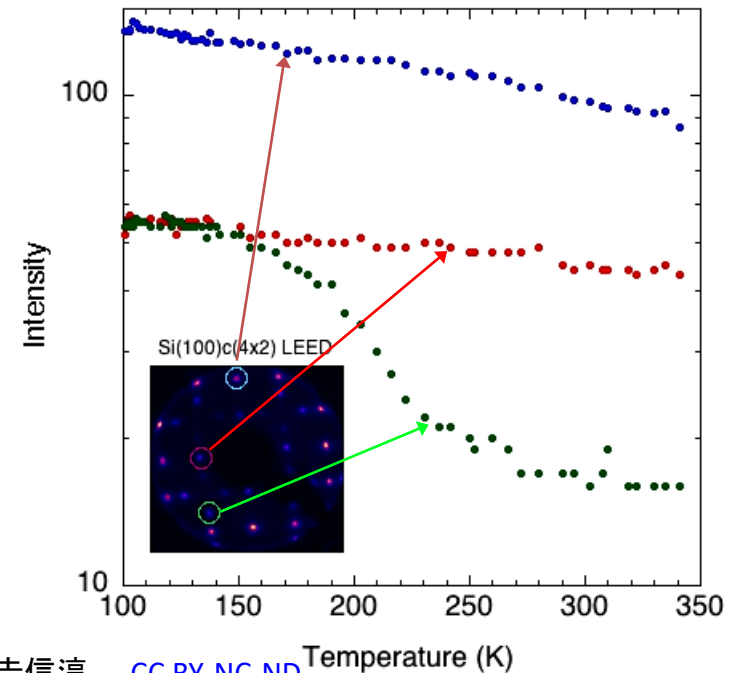
Photo t
https://en.wikipedia.org/wiki/Low-energy_electron_diffraction#/media/File:LEED_Experimental_Diagram.jpg
 CC BY-SA 3.0

Si(100)表面のLEED像



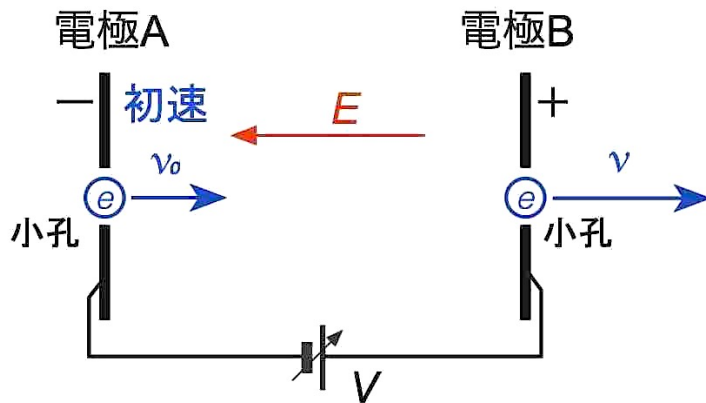
c(4x2) $\Leftrightarrow$ (2x1)
 200K

order-disorder transition

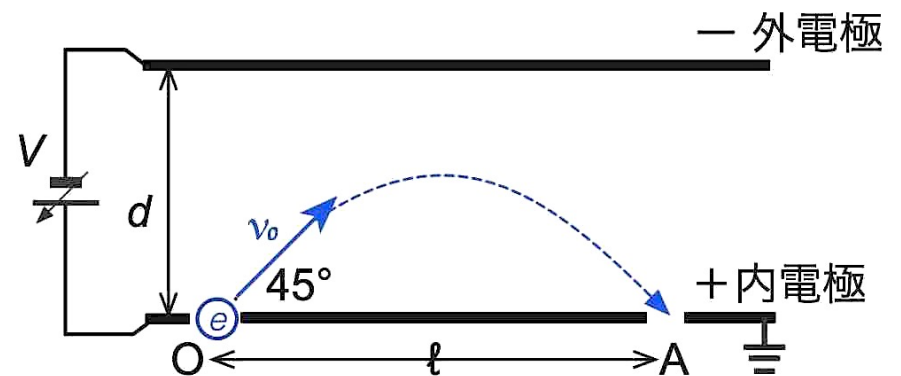


電子分光の基本原理は高校物理で習った

加速電子レンズ



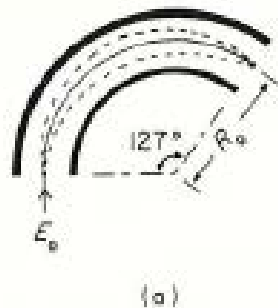
平行平板分析器



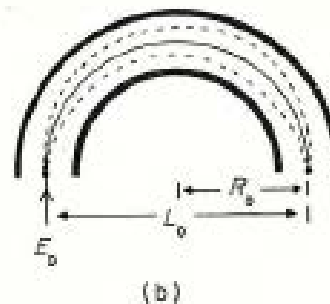
電子分光装置(電子のエネルギー選別)

Handbook of x-ray and ultraviolet photoelectron spectroscopy /
edited by D. Briggs(Wiley,1977)
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/piuz.19790100107>
7 p105 Fig 13 Electrostatic electron energy analysers

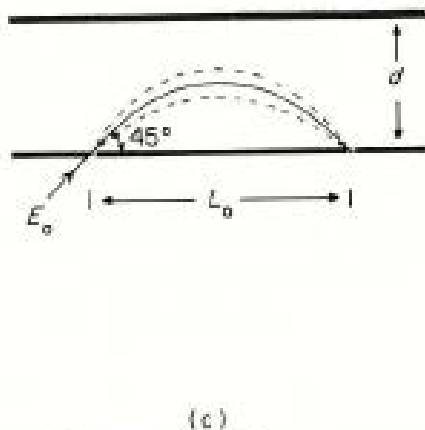
円筒偏向型分析器



半球偏向型分析器



平面鏡型分析器



円筒鏡型分析器

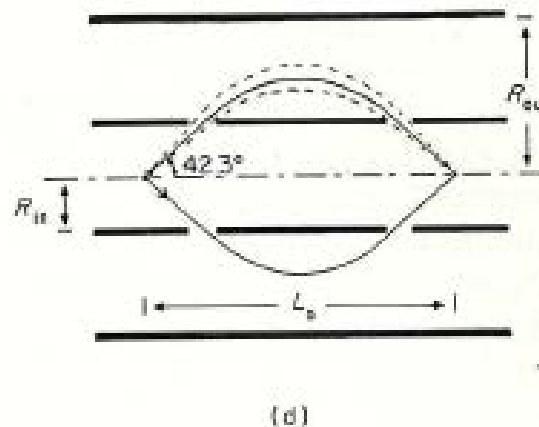
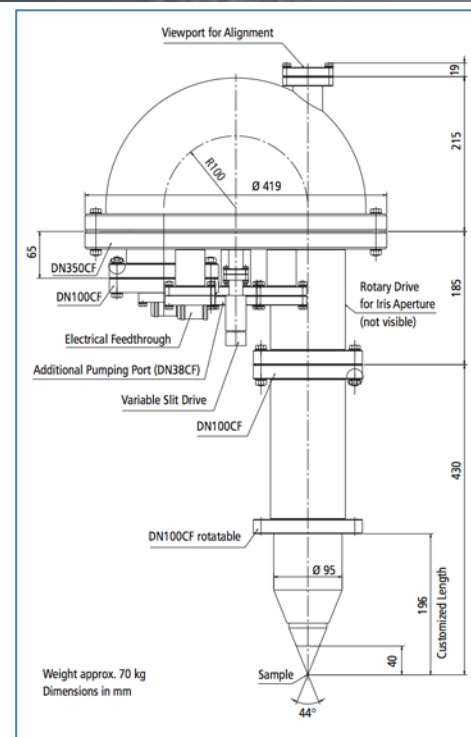


Fig. 13. Electrostatic electron energy analysers: (a) 127° cylindrical deflector; (b) hemispherical (180°) deflector; (c) parallel plate mirror; (d) cylindrical mirror.

実際の電子分光装置



Scienta Omicron
R3000
<http://www.scientaomicron.com/en/products/357/1206>
ref. 20180109

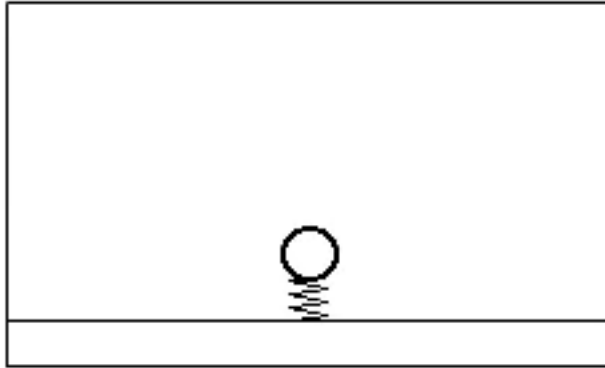


SPECS
Hemispherical Energy
Analyzer PHOIBOS 100/150
<http://www.specs.de/cms/frontend/content.php?idart=122>
Brochure p. 8
http://www.specs.de/cms/upload/PDFs/SPECS_Prospexte/phoibos100150_11_2006_72dpi.pdf
ref. 20180109

R3000電子分析器(シエンタ・オミクロン社)

Phoibos100 (SPECS社)

電子エネルギー損失分光の原理



- 一定エネルギーの電子が表面へ入射
- 電子が吸着粒子と相互作用
- 吸着粒子の振動を励起
- 電子は振動エネルギー分を失う

エネルギー保存の法則

$$E_{in} - E_{out} = h\omega$$

(入射電子エネルギー) - (散乱電子エネルギー) = 振動エネルギー

単振動 角振動数 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

バネ定数 $k \Leftrightarrow$ 化学結合
質量 $m \Leftrightarrow$ 原子

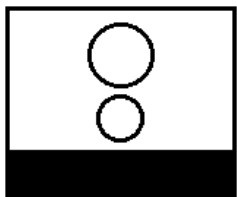


京都大学の研究室で自作したEELS装置

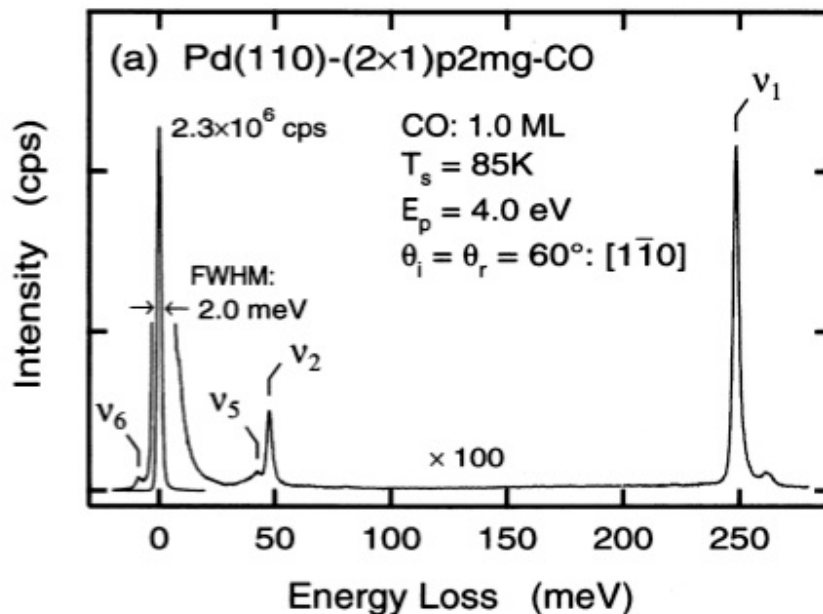
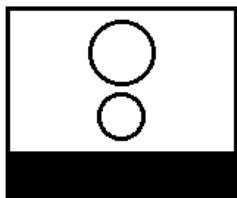
表面の振動を測定すると、原子や結合についての情報が得られる

Pd(110)表面に吸着したCOのEELSスペクトル

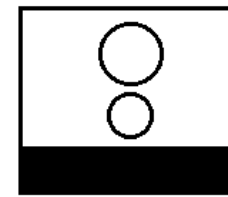
v5: 束縛回転



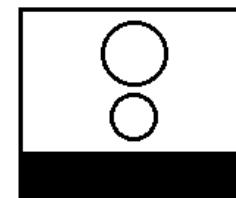
v6: 束縛並進横



v1: CO伸縮振動



v2: 束縛並進縦



70

H. Kato et al. / Surface Science 427-428 (1999) 69-73

Table 1

Observed vibrational frequencies of bridge CO on metal surfaces. The vibrational energy is described in meV

	v ₁	v ₂	v ₃	v ₄	v ₅	v ₆
c(4x2)-CO on Pt(111)	229.4 ^a	47.1 ^a	10.0 ^b	—	44.6 ^a	8.0 ^b
CO on Ni(100)	239.5 ^c	44.5 ^c	—	81.5 ^c	—	4.2 ^d
(2x1)p2mg-CO on Ni(110)	246.0 ^e	52.3 ^e	—	—	47.7 ^e	7.5 ^f
p(4√2x√2)R45°-CO on Pd(110)	246.0 ^g	42 ^g , 35 ^g	—	—	51 ^g	—
(2x1)p2mg-CO on Pd(110)	248.4 ^h	47.5 ^h	≈25 ^h	≈53 ^h	42.0 ^h	8.6 ^h

H. Kato et al.
"Determination of six types of vibrational mode for bridge CO on Pd(110)"
Surface Science Volumes 427-428, 1 June 1999, Pages 69-73
p. 70 Table 1
p. 71 Fig. 2.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039602899002356>

光電効果

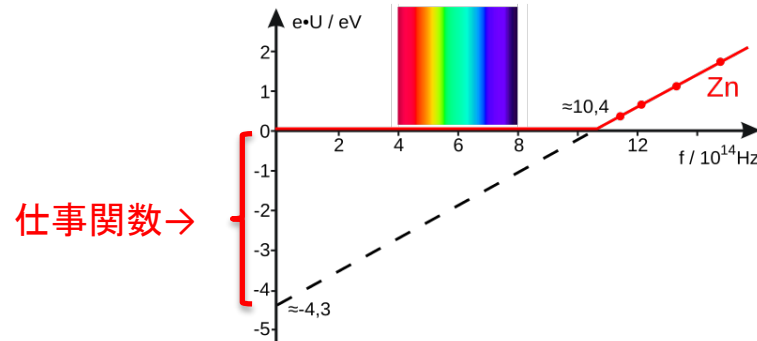
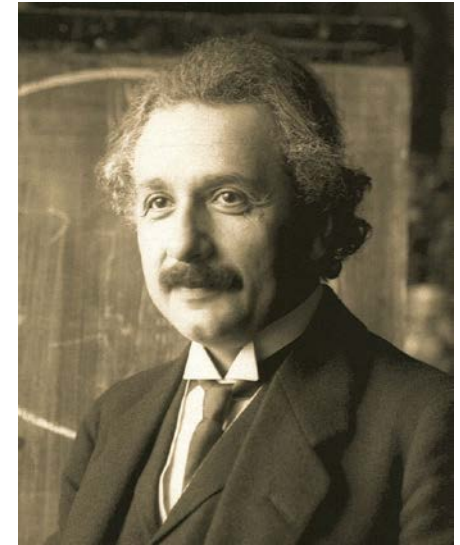


Image by Klaus-Dieter Keller, from Wikipedia Commons ref.20180307
https://en.wikipedia.org/wiki/Photoelectric_effect#/media/File:Photoelectric_effect_diagram.svg
CC BY 3.0



Albert Einstein
(1879–1955)

Photo from Wikipedia Commons

光電効果: アインシュタインによる光の粒子性による解釈(1905)
(photon)

光電子分光の原理

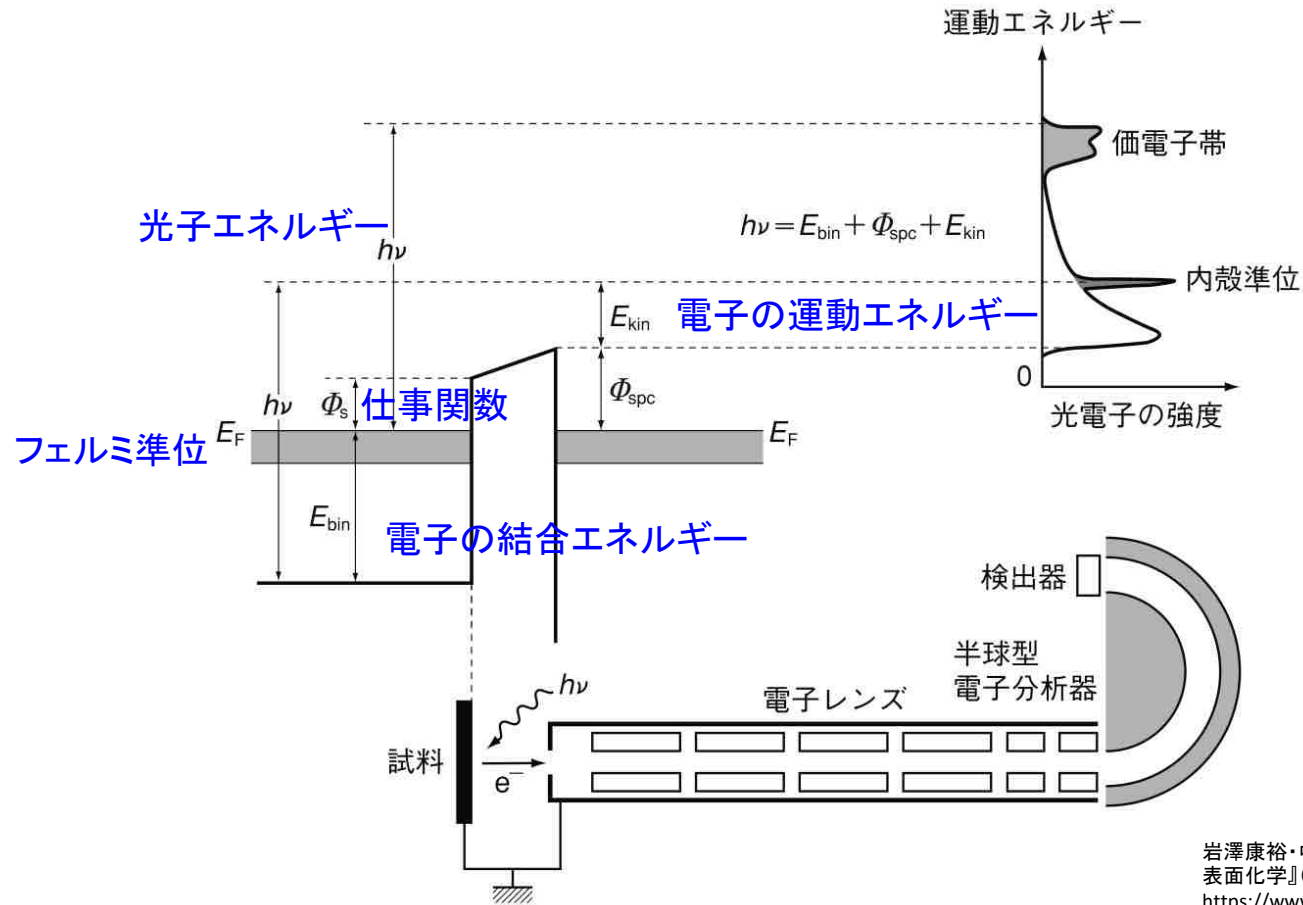


図1 光電子分光実験の原理図

$h\nu$ は入射光のエネルギー, E_{bin} は電子の結合エネルギー, Φ_{spc} と Φ_s はそれぞれ電子分光器の仕事関数, および試料の仕事関数, E_{kin} は電子分光器により測定される光電子の運動エネルギーである. 試料と電子分光器は接地してあるので E_F が一致する.

岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

パネル: 光電子分光法

p52、図1 光電子分光実験の原理図

内殻光電子分光

1. 化学シフト

2. 線幅

- 装置分解能＝入射光と電子分光器
- 物質本来の線幅 (homogeneous broadening)
 - 空孔寿命
 - Auger過程: 原子番号が大きいほど速い→幅の広がり
 - 発光
 - 振動準位
 - 内殻空孔→緩和→始状態と終状態の平衡構造変化
- 系の不均一性 (inhomogeneous broadening)

- Chemical shift (化学シフト → 局所電子状態)
- Peak intensity (ピーク強度) → 化学種の定量
- Peak width (ピーク幅) → 振動状態, 周辺の環境, etc.

高分解能内殻光電子分光で何がわかるか

・分子の化学シフト

著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画像を削除しました

トリフルオロ酢酸エチルのC1sスペクトル
K.Siegbahn, "Electron spectroscopy - an
outlook"

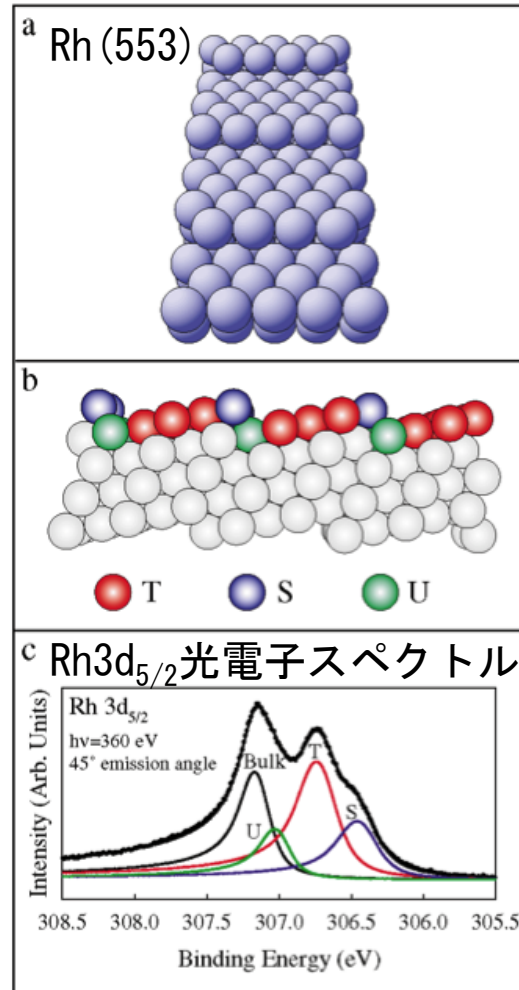
Journal of Electron Spectroscopy and Related
Phenomena

Volume 5, Issue 1, 1974, Pages 3-97

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/036820487485005X>

p37、Fig. 28 The ESCA shifts of the C 1s in
ethyl trifluoroacetate.

・表面内殻シフト



J. Gustafson, M. Borg, A. Mikkelsen, S. Gorovikov, E. Lundgren, and J. N. Andersen, "Identification of Step Atoms by High Resolution Core Level Spectroscopy" Phys. Rev. Lett. 91, 056102 – Published 30 July 2003 056102-2 FIG. 1 <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.91.056102>

MAXII-I311
hν=360eV, 45° off

J. Gustafson et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 056102.

スピン分解光電子分光

Okuda and Kimura J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 021002

SPECIAL

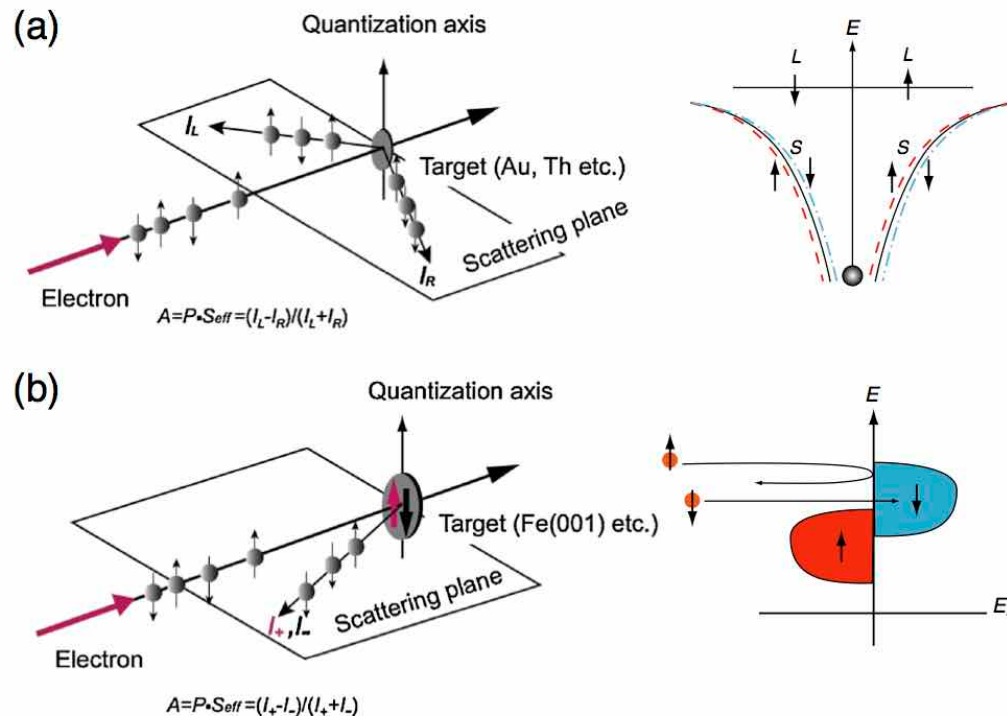
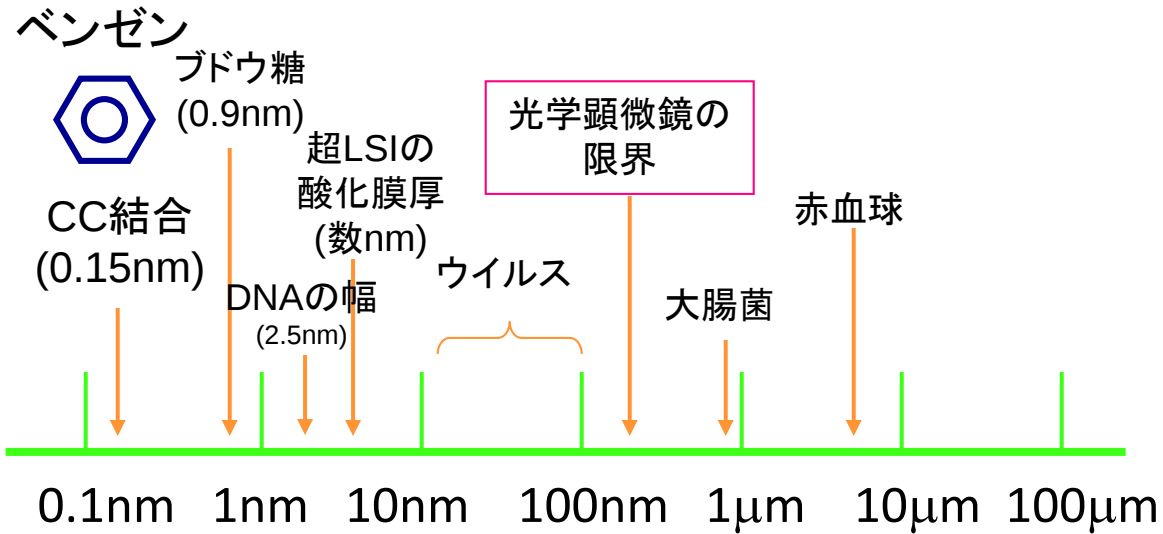


Fig. 8. (Color online) Schematic illustrations of electron spin detection with (a) Mott detector and (b) VLEED detector. The principles of both methods are also schematically indicated on the right panels of each illustration.

Taichi Okuda, and Akio Kimura, "Spin- and Angle-Resolved Photoemission of Strongly Spin-Orbit Coupled Systems" Journal of the Physical Society of Japan Volume 82, Issue 2 (February 15, 2013) <http://journals.jps.jp/toc/jpsj/2013/82/2> 021002-6 Fig. 8. (Color online) Schematic illustrations of electron spin detection

表面を観る

物質のスケール



テラ	10^{12}	1000000000000	1兆
ギガ	10^9	1000000000	10億
メガ	10^6	1000000	100万
キロ	10^3	1000	千
	10^0	1	
ミリ	10^{-3}	1/1000	千分の1
マイクロ	10^{-6}	1/1000000	100万分の1
ナノ	10^{-9}	1/1000000000	10億分の1
ピコ	10^{-12}	1/1000000000000	1兆分の1

ナノテクノロジーは原子・分子のスケール

顕微鏡の発展

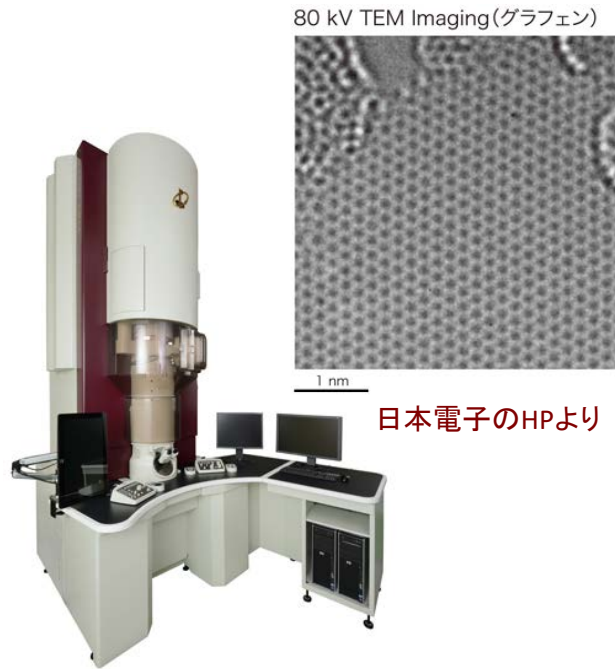
光学顕微鏡



Photo from Wikipedia Commons

分解能 $\sim 1 \mu\text{m} (10^{-6}\text{m})$

電子顕微鏡



日本電子 JEM-ARM300F

63 pm (10^{-12}m)

電子顕微鏡の発明者

著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画
像を削除しました

エルンスト・ルスカの写真

Ernst Ruska

1906-1988

1986年ノーベル物理学賞

電子を利用した顕微鏡を
1931年に初めて製作

でも、表面だけを原子スケールで見たい！

表面の原子・分子を観るために — 走査トンネル顕微鏡 (STM) —

STMの装置概念図

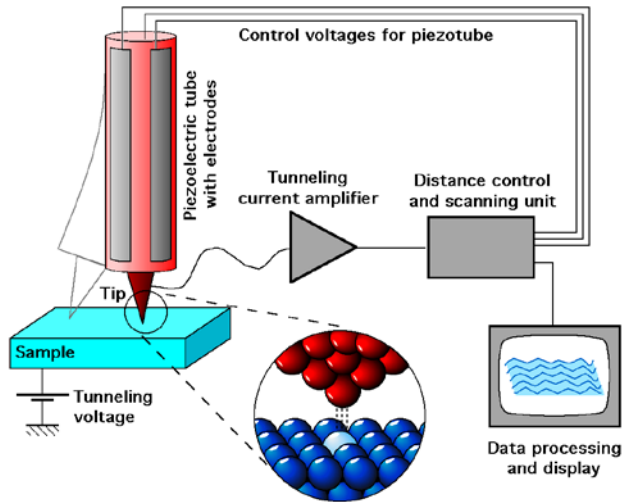
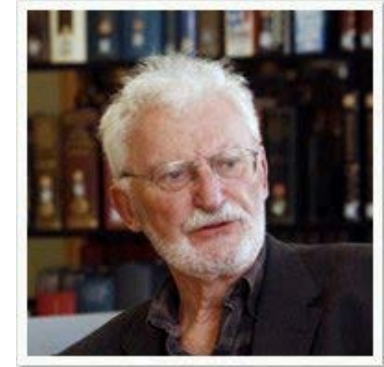


Image by Michael Schmid ,from Wikipedia Commons ref.20180424
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E8%B5%B0%E6%9F%BB%E5%9E%8B%E3%83%88%E3%83%B3%E3%83%8D%E3%83%AB%E9%A1%95%E5%BE%AE%E9%8F%A1#/media/File:ScanningTunnelingMicroscope_schema_tic.png
CC BY-SA 2.0 AT

Photo by ibm research zurich,from Wikipedia Commons ref.20180214
[https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%B2%E3%83%AB%E3%83%88%E3%83%BB%E3%83%93%E3%83%BC%E3%83%8B%E3%83%83%E3%83%92#/media/File:Gerd_Binnig_at_the_Memorial_Symposium_for_Heinrich_Rohrer_\(cropped\)_2.jpg](https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%B2%E3%83%AB%E3%83%88%E3%83%BB%E3%83%93%E3%83%BC%E3%83%8B%E3%83%83%E3%83%92#/media/File:Gerd_Binnig_at_the_Memorial_Symposium_for_Heinrich_Rohrer_(cropped)_2.jpg)
CC BY 2.0



G. Binnig & H. Rohrer
(1986年ノーベル物理学賞)

Photo by NIMSOoffice,from Wikipedia Commons ref.20180214
https://en.wikipedia.org/wiki/Heinrich_Rohrer#/media/File:Rohrer.jpg
CC BY-SA 3.0

1982年に開発に成功！

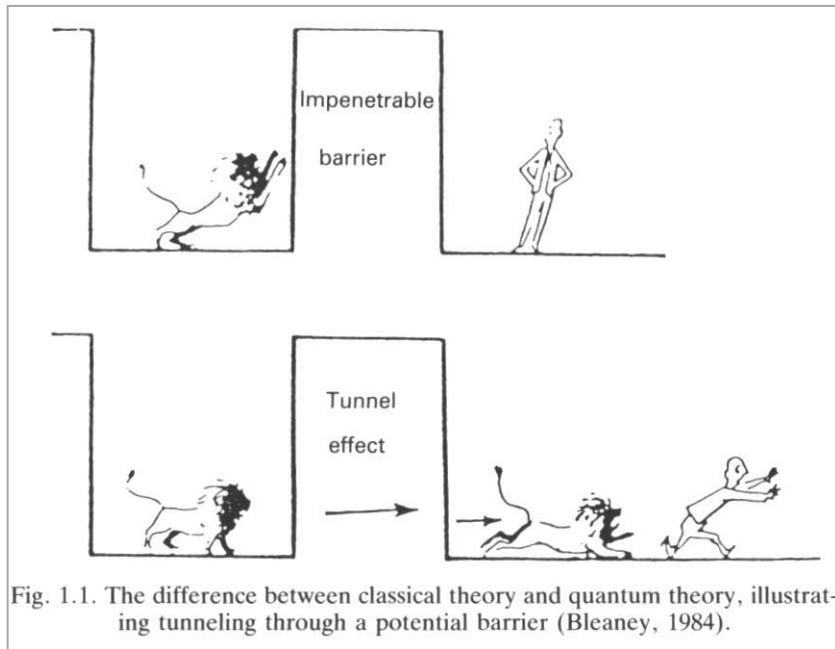
著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画像を削除しました

原子表面の観察についての図
Attard & Barnes “Surfaces” (Oxford,1998)
p59 Fig2.31

<https://global.oup.com/academic/product/surfaces-9780198556862?cc=jp&lang=en&ISBN:9780198556862>

表面の凸凹が原子スケールで観察できる

トンネル現象とは？



R. Wiesendanger "Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy" (Cambridge Univ. Press, 1994)

著作権等の都合により、
ここに挿入されていた画像を削除しました

電子の波動性についての図
C. J. Chen, "Introduction to Scanning Tunneling Microscopy"
(Oxford Univ. Press, 1994)
p5 Fig1.4 A one-dimensional metal-vacuum-metal turning junction

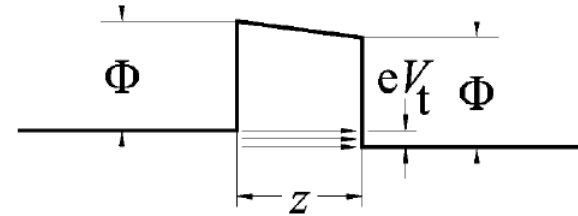


FIG. 3. Energy diagram of an idealized tunneling gap. The image charge effect (see Chen, 1993) is not taken into account here.

Franz J. Giessibl
Advances in atomic force microscopy
<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.75.949>
Rev. Mod. Phys. 75,2003
p951, Fig3

Work function Φ

$$I_t(z) = I_0 e^{-2\kappa_t z}$$

$$\kappa_t = \sqrt{2m\Phi}/\hbar,$$

M is the mass of the electron

For metals, $\Phi \approx 4\text{eV}$, thus $\kappa_t \approx 1\text{\AA}^{-1}$

表面の構造

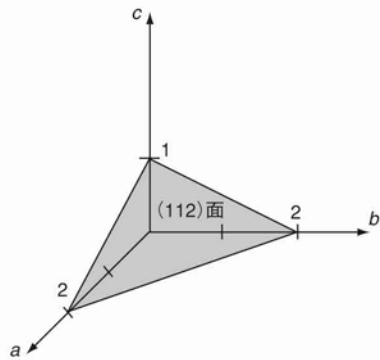
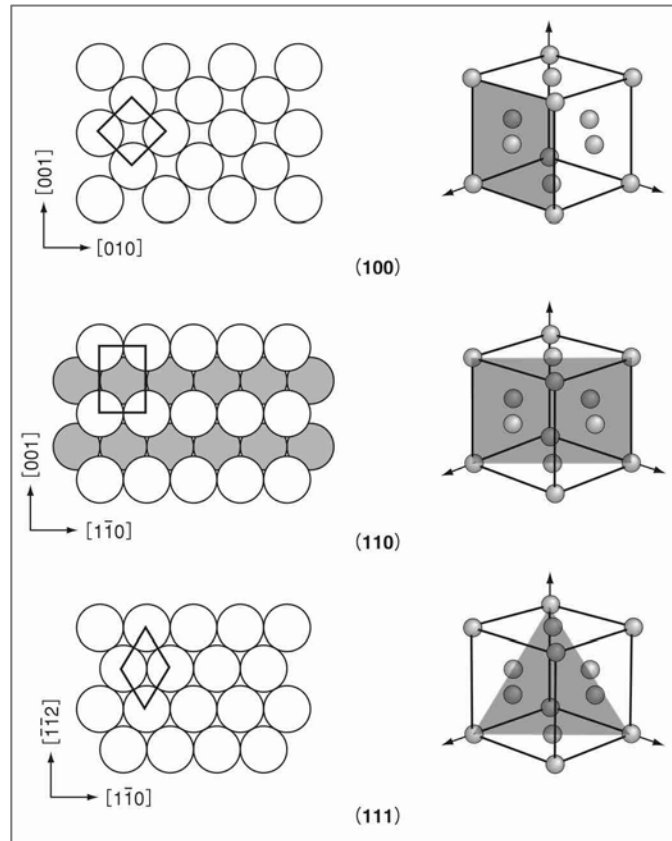
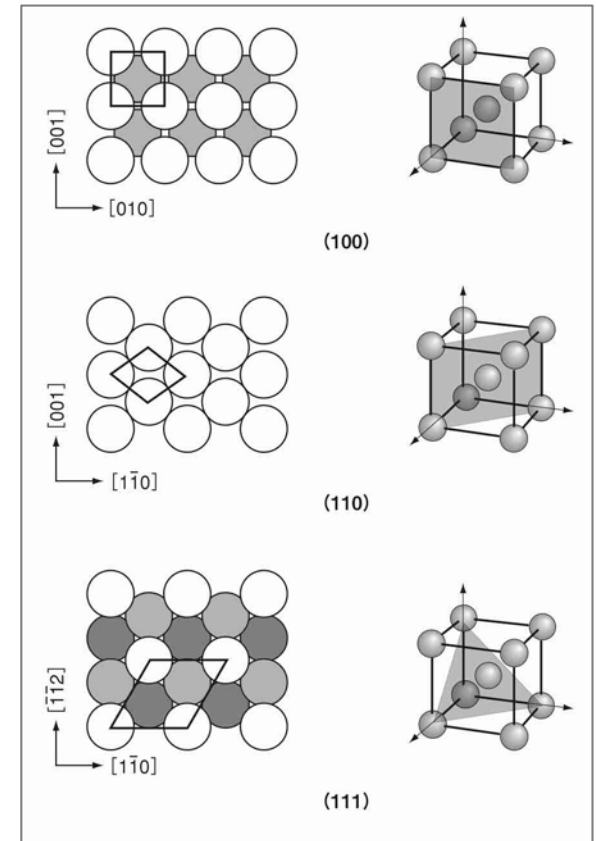


図 3.2 Miller 指数



面心立方格子の低指数面



体心立方格子の低指数面

岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

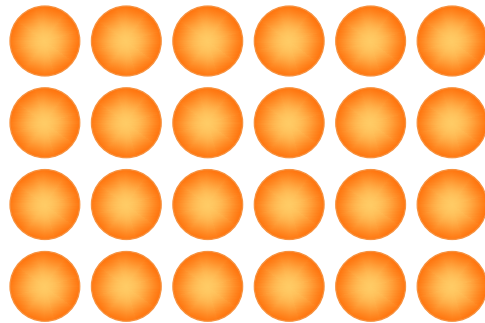
p18、図3.2 Miller指数

p19、図3.3 体心立方格子の低指数面

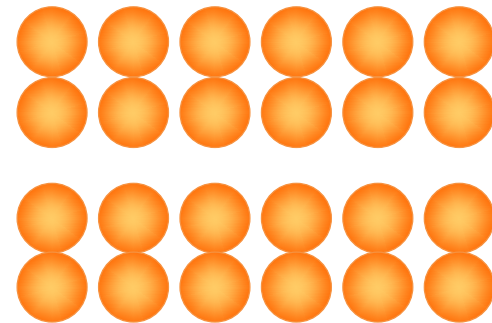
p20、図3.4 面心立方格子の低指数面

表面の構造は固体内部と違う

表面緩和（上から見ても同じ）

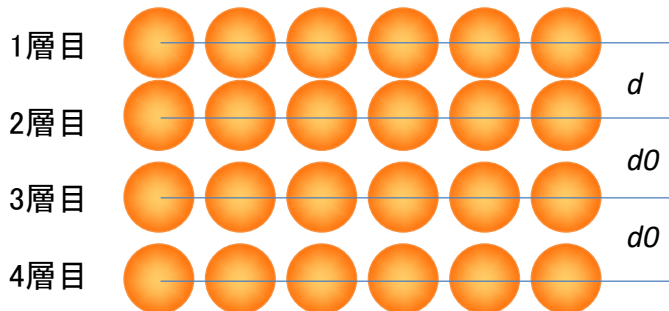


表面再構成（上から見ると違う）

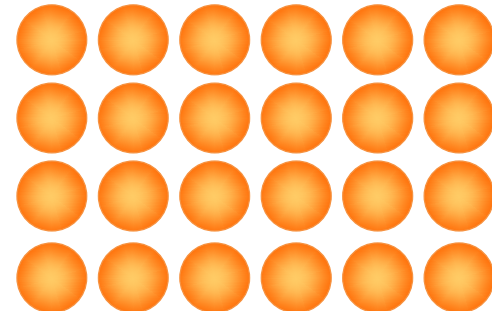


上面図

面間隔が違う（ $d \neq d_0$ ）



側面図



シリコンの表面再構成

ダイヤモンド構造

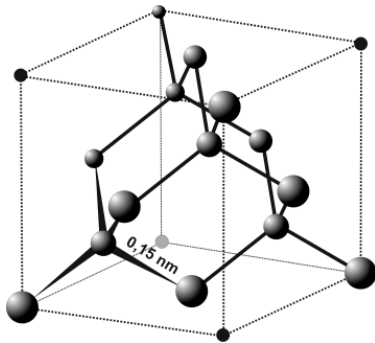


Image by Anton, from wikipedia
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%80%E3%82%A4%E3%83%A4%E3%83%A2%E3%83%B3%E3%83%89#/media/File:Diamond_s_glitter.png
 CC BY-SA 3.0

Si(100)c(4x2)構造図

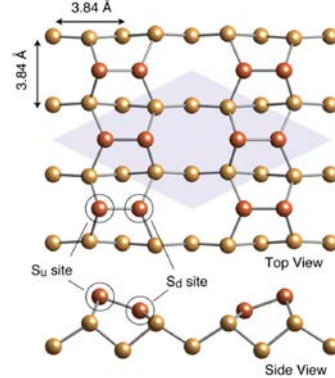
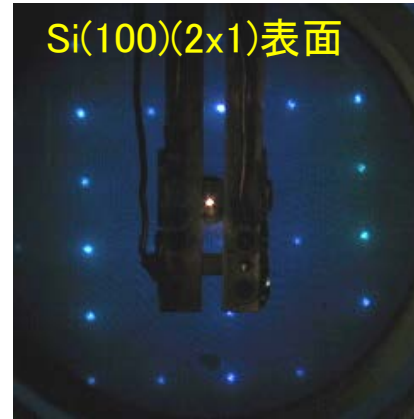


Fig. 1. A ball-stick model of Si(100)c(4x2). The gray rhombus shows a unit cell of c(4x2). Only the top three Si layers are shown here. Brown balls: surface Si dimers. Yellow balls: subsurface and bulk Si atoms.

K. Akagi and J. Yoshinobu
 Surface Science 652 (2016) 304–311
<http://dx.doi.org/10.1016/j.susc.2016.03.027>

低速電子回折 (LEED)



東大物性研吉信研究室

電子の波動性

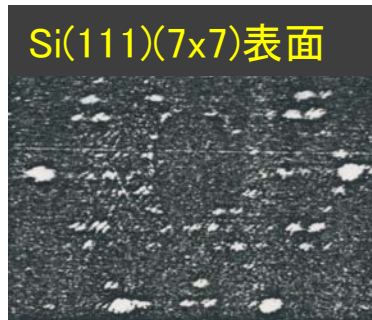
Schlier と Farnsworth が
 はじめて報告 (1959)

著作権等の都合により、
 ここに挿入されていた画
 像を削除しました

ファンズワースの写真

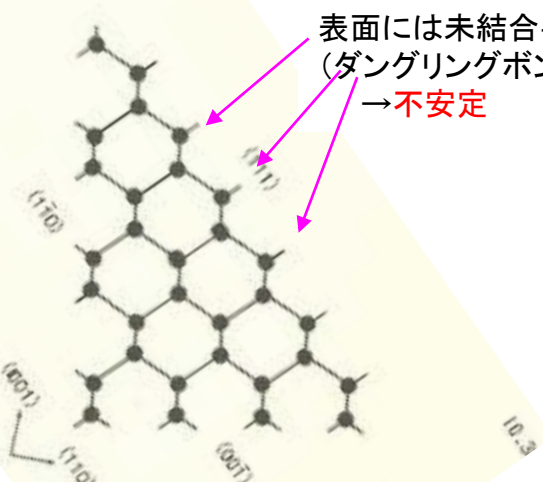
Farnsworth

Si(111)(7x7)表面



Schlier と Farnsworth が
 はじめて報告 (1959)

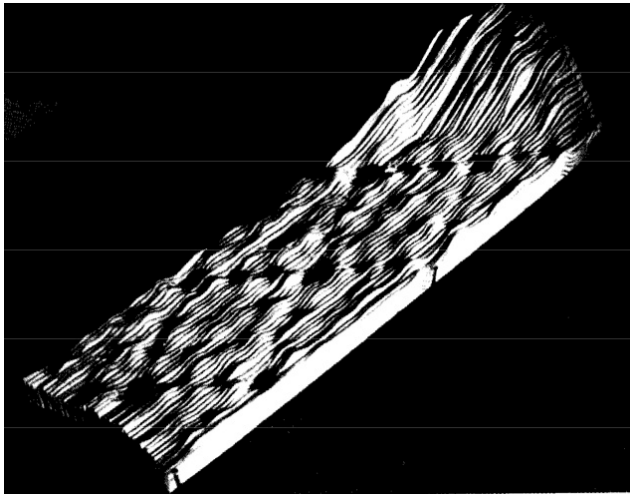
表面には未結合手
 (ダングリングボンド)
 → 不安定



Si(111)(7x7)構造の解明

Binnig, Rohrer, Gerber, and Weibel, "7 × 7 Reconstruction on Si(111) Resolved in Real Space"
Phys. Rev. Lett. 50, 120
<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.50.120>
p. 120 FIG. 1.

STMではじめて観察された
Si(111)(7x7)表面の実空間像



Binnig, Rohrer, Gerber, and Weibel,
Phys. Rev. Lett. **50**(1983) 120.

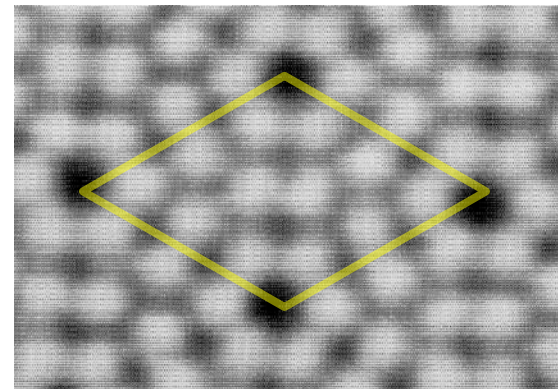
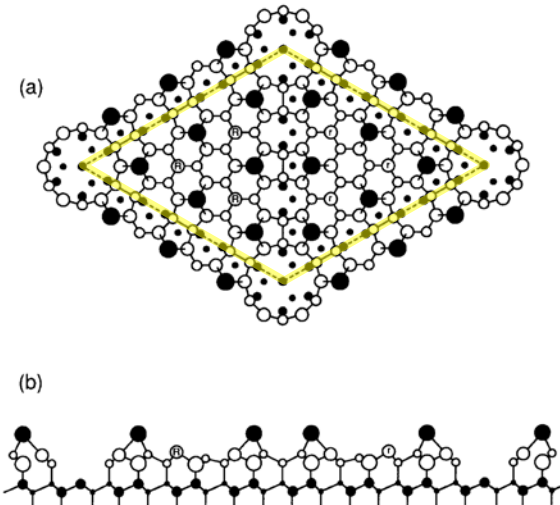
1959年以来の謎を解決！



Binnig, Rohrer, Ruskaに
ノーベル物理学賞(1986)

K. Takayanagi, Y. Tanishiro, M. Takahashi, and S. Takahashi,
"Structural analysis of Si(111)-7 × 7 by UHV-transmission electron diffraction and microscopy"
Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films 3, 1502 (1985);
<https://doi.org/10.1116/1.573160>
<http://avs.scitation.org/doi/10.1116/1.573160>
p. 1504 FIG. 2.

高柳らによりTEMの結果から
提案されたDASモデル(1985)



Si(111)(7x7)のSTM像

Si(111)(7x7)表面のDASモデル

K. Takayanagi, Y. Tanishiro, M. Takahashi, and S. Takahashi,

"Structural analysis of Si(111)-7 × 7 by UHV-transmission electron diffraction and microscopy"

Journal of Vacuum Science & Technology A:

Vacuum, Surfaces, and Films 3, 1502 (1985);

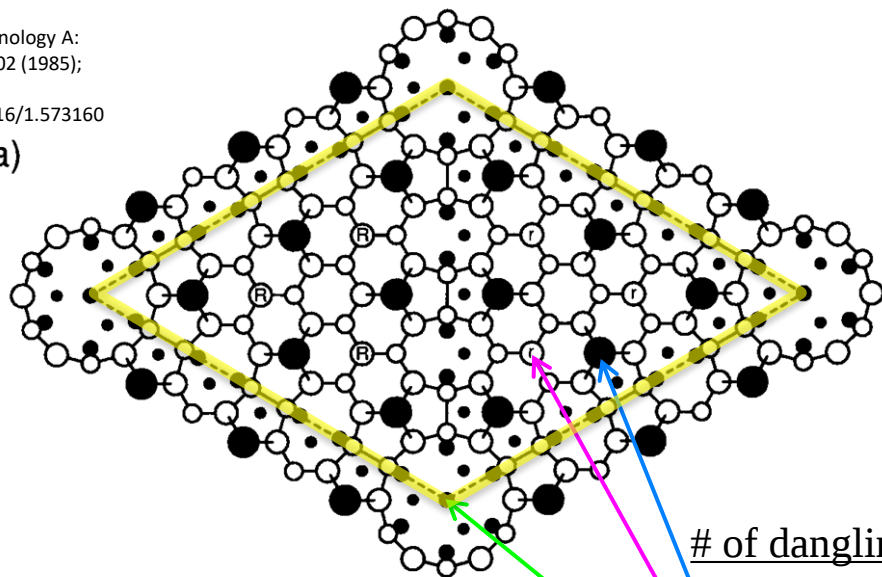
<https://doi.org/10.1116/1.573160>

<http://avs.scitation.org/doi/10.1116/1.573160>

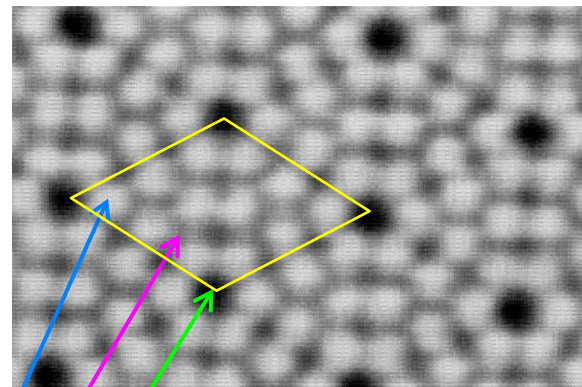
p. 1504 FIG. 2.

DAS model: Si(111) - (7 × 7)

(a)



Si(111)(7x7)のSTM像



of dangling bonds (total=19)

Adatom: 12

Rest-atom: 6

Coner Hole: 1

(b)



高柳邦夫

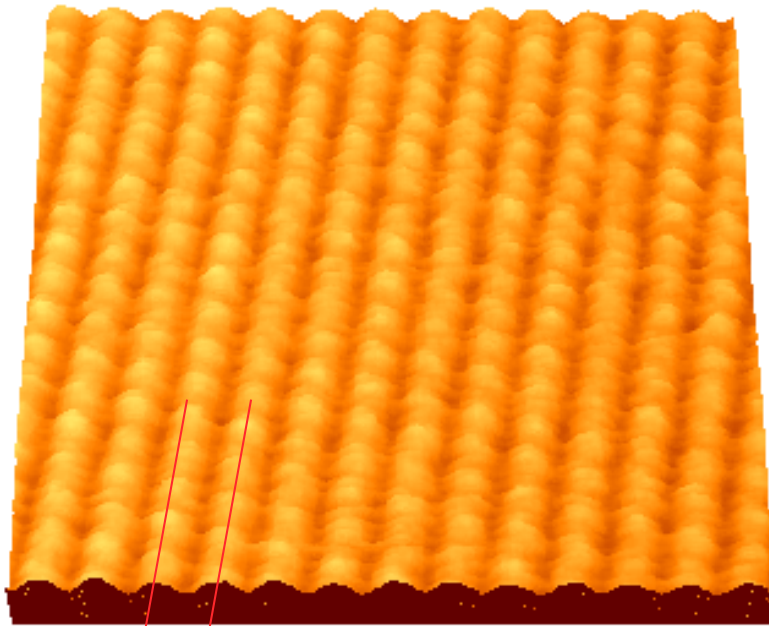
(©日本表面科学会)

Fig. 2.26. Side view of the surface structure of the DAS model of the Si(111)-(7 × 7) surface (Takayanagi et al., 1985b).

“Structural analysis of Si(111)-7 × 7 by UHV-transmission electron diffraction and microscopy”

K. Takayanagi, Y. Tanishiro, M. Takahashi, and S. Takahashi; Journal of Vacuum Science & Technology A: 3, 1502 (1985).

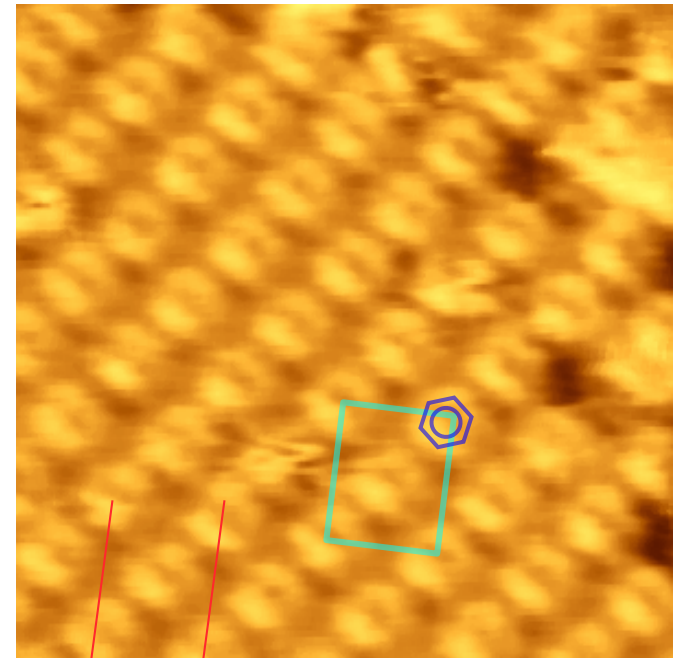
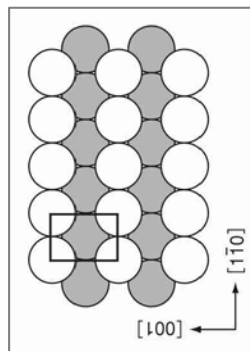
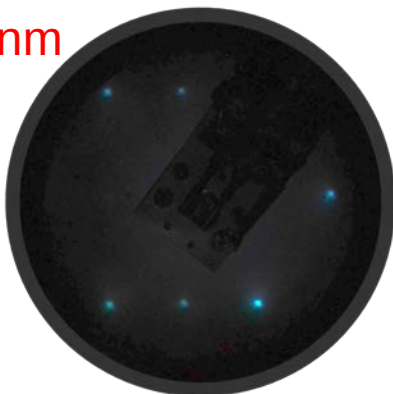
Pd(110)表面に吸着したベンゼン分子のSTM像



Pd(110)清浄表面

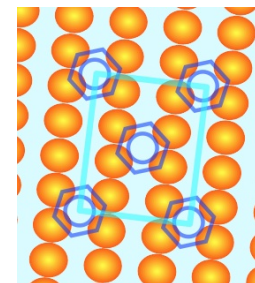
0.39 nm

LEED像
 $E_p=82\text{eV}$



0.78 nm

J. Yoshinobu et al.,
Phys. Rev. B.,
53 7492-7495 (1996).



吸着モデル図

The interaction between benzene and Pd(110) surface

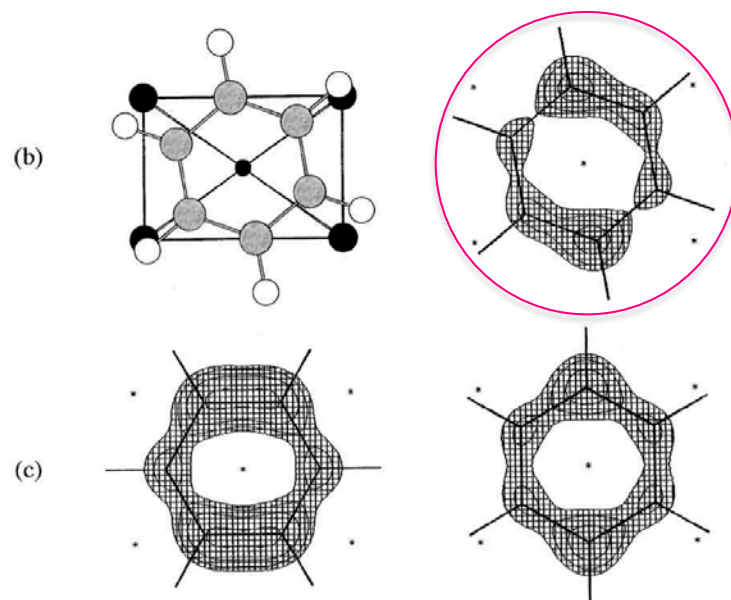
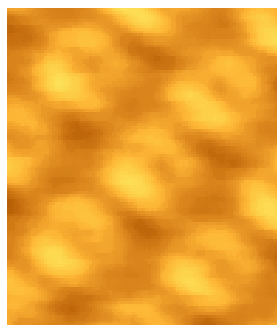
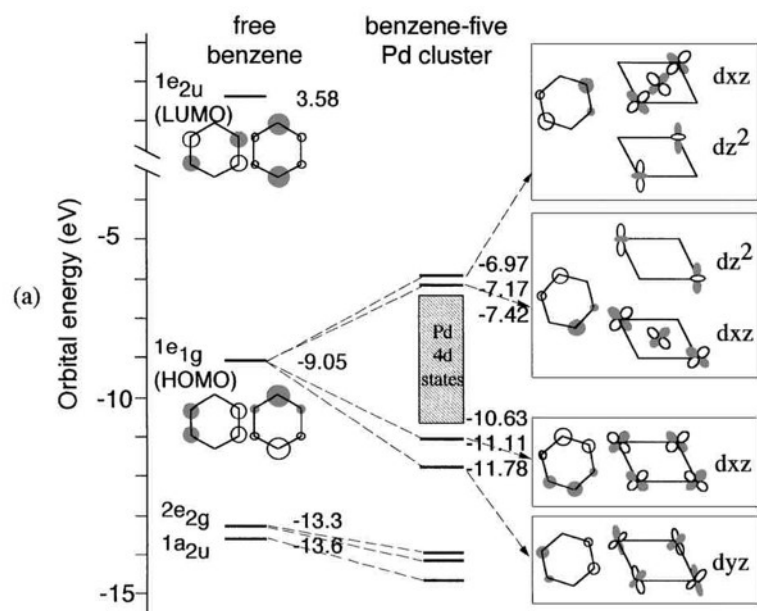


FIG. 3. (a) Orbital diagrams of free benzene and benzene-five Pd cluster system. In the cluster system, the benzene molecule is rotated by 10° . Note that the rotation brings about the specific interactions between benzene π orbitals and Pd d orbitals. (b) Density profiles above the benzene plane of the benzene-five Pd cluster system (C_2 symmetry) in which the benzene molecule is rotated by 10° . The electron densities of the upper two antibonding states are overlaid. The geometry of calculated cluster system is also shown. (c) Density profiles above the benzene planes of the symmetrically adsorbed (C_{2v} symmetry) benzene-five Pd cluster systems. The electron densities of the upper two antibonding states are overlaid in each system.

Jun Yoshinobu, Maki Kawai, Issei Imamura, Fumiyuki Marumo, Ryochi Suzuki, Hiroyuki Ozaki, Masaru Aoki, Shigeru Masuda, and Misako Aida
 "Direct Observation of Molecule-Substrate Antibonding States near the Fermi Level in Pd(110)- $c(4 \times 2)$ -Benzene"
 Phys. Rev. Lett. 79, 3942 – Published 17 November 1997
 p. 3944 FIG. 3. (a)
<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.79.3942>

Owing to the interaction with metal d states, the degenerate discrete MO levels are split into four levels (bonding/antibonding).

The interaction between benzene and Pd(110) surface

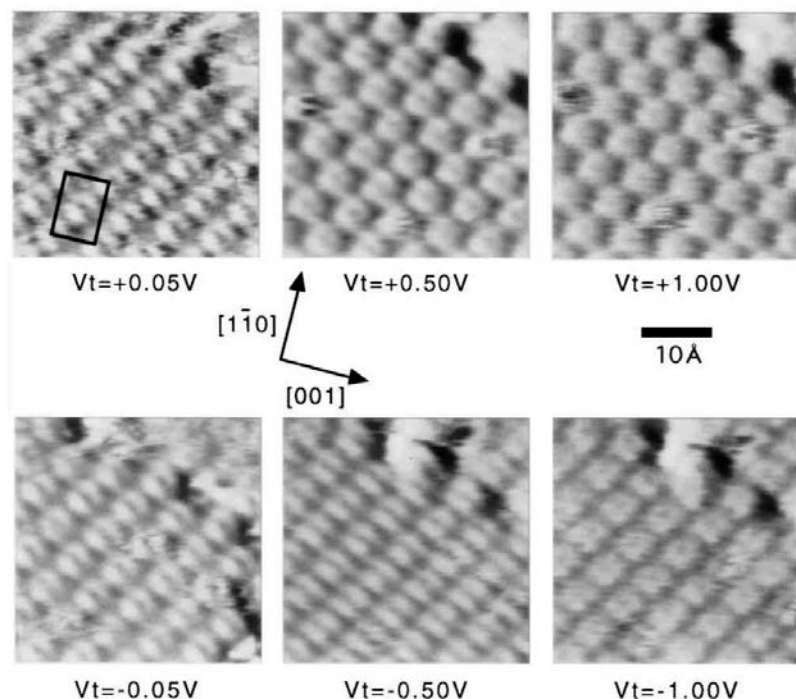


FIG. 1. A series of STM images of the identical area as a function of the tip bias voltage (V_t) between +1 to -1 V ($I_t = 0.6$ nA). Positive (negative) tip bias corresponds to occupied (unoccupied) states of the system, respectively.

Jun Yoshinobu, Maki Kawai, Issei Imamura, Fumiyuki Marumo, Ryochi Suzuki, Hiroyuki Ozaki, Masaru Aoki, Shigeru Masuda, and Misako Aida
 "Direct Observation of Molecule-Substrate Antibonding States near the Fermi Level in Pd(110)- $c(4 \times 2)$ -Benzene"
 Phys. Rev. Lett. 79, 3942 – Published 17 November 1997
 p. 3943 FIG. 1
 p. 3944 FIG. 2.
<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.79.3942>

Yoshinobu et al., Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3942.

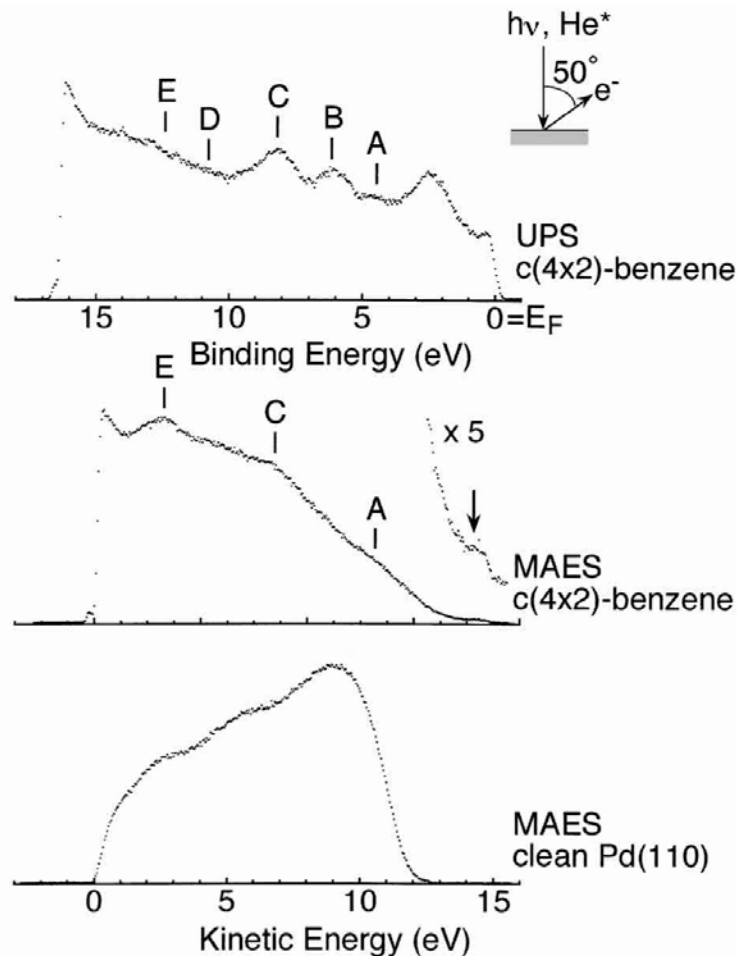


FIG. 2. Metastable atom electron spectra of the clean Pd(110) and $c(4 \times 2)$ -benzene surfaces using He^* (2^3S , 19.8 eV) atoms. Photoemission spectrum of the $c(4 \times 2)$ -benzene surface using HeI (21.2 eV) resonance line is also shown. To facilitate comparison, the energy scale for the HeI spectrum is shifted to that for the He^* spectra by the difference in the excitation energies, $21.2 - 19.8 = 1.4$ eV.

内部(バルク)は重要、しかし、
機能や反応では、表面は決定的に重要

∴ 直接、原子や分子と相互作用するのは表面

参考図書

・ベルトルト・ブレヒト(岩淵達治訳)『ガリレイの生涯』(岩波書店、1979年)
<https://www.iwanami.co.jp/book/b247785.html>

・ブレヒト(谷川道子訳)『ガリレオの生涯』(光文社、2013年)
<https://www.kobunsha.com/shelf/book/isbn/9784334752644>

・廣田 襄『現代化学史』(京都大学学術出版会、2013年)
<http://www.kyoto-up.or.jp/book.php?isbn=9784876982837>

・マイケル・D・フェイヤー『絶対微小』(化学同人、2013年)
<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b107990.html>

・Michael D. Fayer, Absolutely small : how quantum theory explains our everyday world (AMACOM, 2010)
<http://www.amacombooks.org/book.cfm?isbn=9780814438114>

表面科学の参考書

・上羽弘『工学系のための量子力学』(森北出版、1997年)

<http://www.morikita.co.jp/books/book/1801>

・日本表面科学会編『表面科学こと始め：開拓者たちのひらめきに学ぶ』(共立出版、2012年)

<http://www.kyoritsu-pub.co.jp/bookdetail/9784320033696>

・岩澤康裕・中村潤児・福井賢一・吉信淳『ベーシック表面化学』(化学同人、2010年)

<https://www.kagakudojin.co.jp/book/b62860.html>

・Roald Hoffman, Solids and surfaces : a chemist's view of bonding in extended structures (New York: Wiley-VCH, 1988)

[https://www.wiley.com/en-](https://www.wiley.com/en-us/Solids+and+Surfaces%3A+A+Chemist%27s+View+of+Bonding+in+Extended+Structures-p-9780471187103)

[us/Solids+and+Surfaces%3A+A+Chemist%27s+View+of+Bonding+in+Extended+Structures-p-9780471187103](https://www.wiley.com/en-us/Solids+and+Surfaces%3A+A+Chemist%27s+View+of+Bonding+in+Extended+Structures-p-9780471187103)

・John T.Yates, Jr., J.Karl Johnson (川合眞紀, 宗像利明, 清水智子訳)『エンジニアのための物理化学』(東京化学同人、2010年)

<http://www.tkd-pbl.com/book/b51580.html>

・松本吉泰『分子レベルで見た触媒の働き：反応はなぜ速く進むのか』(講談社、2015年)

<http://bookclub.kodansha.co.jp/product?isbn=9784062579223>

20世紀の3大発明

(a) 窒素分子からアンモニアを合成する触媒の発明と工業化

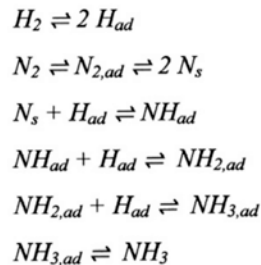
著作権等の都合により、ここに挿入されていた画像を削除しました

ハーバーの写真

著作権等の都合により、ここに挿入されていた画像を削除しました

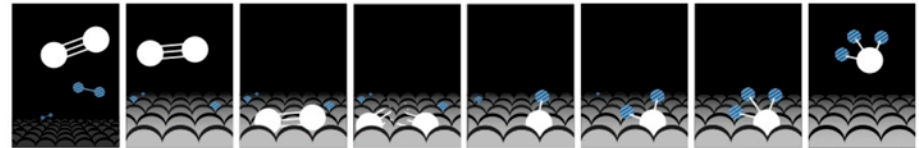
ボッシュの写真

Fritz Haber Carl Bosch



理論的な取り組みと不屈の執念

The Haber-Bosch process step-by-step



ノーベル財団Webより転載

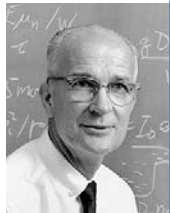
https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2007/popular-chemistryprize2007.pdf
p3The Haber-Bosch process step-by-step

John Bardeen - Nobel Lecture

https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1956/bardeen-lecture.pdf
p337, Fig11

(b) トランジスタの発明

Photo by Chuck Painter, from Wikipedia Commons
https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%A6%E3%82%A3%E3%83%AA%E3%82%A2%E3%83%A0%E3%83%BB%E3%82%B7%E3%83%A7%E3%83%83%E3%82%AF%E3%83%AC%E3%83%BC#/media/File:William_Shockley,_Stanford_University.jpg
CC BY 3.0



W. B. Shockley

著作権等の都合により、ここに挿入されていた画像を削除しました
バーディーンの写真

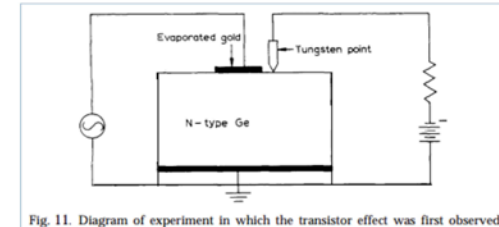
著作権等の都合により、ここに挿入されていた画像を削除しました
ブラッテンの写真

真空管から固体素子へ



最初の点接触型トランジスタのレプリカ(左)と概念図(右)

Photo from Wikipedia Commons



ノーベル財団Webより転載

(c) 常温・常圧における高分子合成法の発明

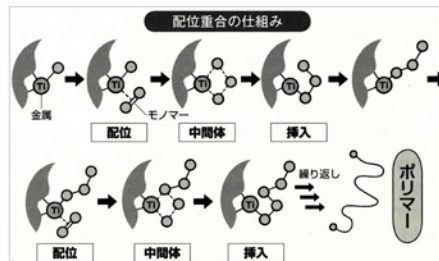
チーグラー=ナツタ触媒によるポリエチレン、ポリプロピレン合成

著作権等の都合により、ここに挿入されていた画像を削除しました
ツィーグラーの写真



Giulio Natta

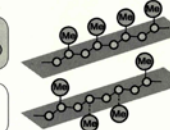
Photo from Wikipedia Commons



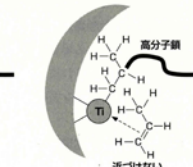
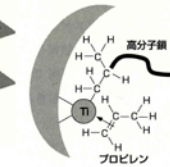
ポリプロピレン (PP) の立体規則性

アイソタクティック PP (メチル基が同じ方向に出ている)

アタクティック PP (メチル基の向きがでたらめ)



プロピレン重合での立体規則性のポイント



触媒学会編『よくわかる工業触媒』(日刊工業新聞社、2014年)

p89 配位重合の仕組み、ポリプロピレン (PP) の立体規則性、プロピレン重合での立体規則性のポイント