

2017年7月20-21日 筑波大学

2017年度 有機合成化学特論

分子軌道理論を用いた有機反応機構の考察

Investigation of Organic Reaction Mechanism
by Molecular Orbital Theory

園田 高明
Takaaki SONODA

uapfukuro@icloud.com

所属：九州大学（筑紫キャンパス） 先導物質化学研究所
IMCE of Kyushu University (2013年3月退職)
日本学術振興会産学連携委員会F155フッ素化学研究会
JSPS Fluorine Chemistry 155 Committee

研究分野：フッ素が絡んだナノサイエンス
Fluorine Nano Science
物理有機化学 Physical Organic Chemistry
有機フッ素化学 Organofluorine Chemistry
計算有機化学 Computational Organic Chemistry

研究テーマ： 活性有機中間種の研究
Reactive Organic Intermediates
含フッ素弱配位性アニオン（超強酸）の分子設計
Molecular Designing for Fluorinated
Weakly Coordinating Anions(Superacids)
次世代型リチウム電池電解質の分子設計
New Material for Lithium Battery Electrolytes
気相、液相、固相中のフッ素が絡んだ分子集合体の研究
Fluorinated Molecular Clusters in Gas, Liquid, and
Solid Phases

ボランティア社会活動：

ユニバーサルアートプロジェクト活動
Universal Art Project

I P A 子どもの遊ぶ権利のための世界協会(会員)
UNICEF/UNESCO Advisory Group (諮問団体)

U A P (Universal Art Project) ふくろうの会(代表)

万華鏡伝道士 Kaleidoscope Missionary
病院道化師 Cliniclown



2010 Aug 福岡国立がんセンター-Fukuoka National Cancer Center



Collaboration with Universal Design Center of Kangnam University (Korea)

**2014 Aug 13 2014年8月 延世大学校セブランス病院
Severance Hospital of Yonsei University in Seoul (Korea)**



2009 Feb 24 南ドイツ チュービンゲン大学子ども病院

Workshop at the Children Hospital of Tuebingen University in Germany



2014 Dec 17 Kaleidoscope Artists in Weiblingen(Germany)

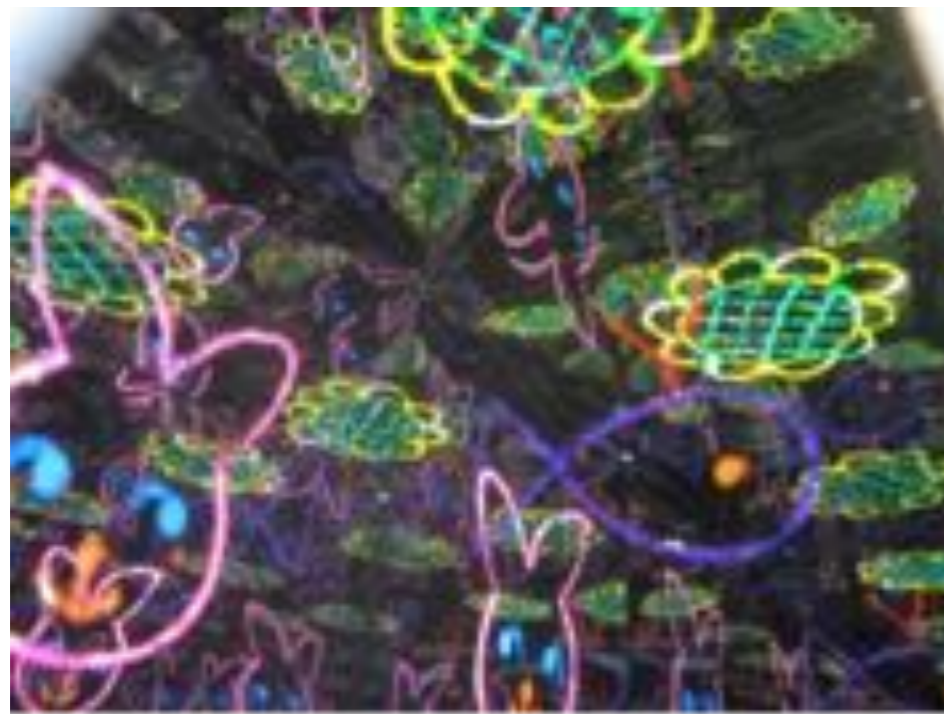


2013 Aug 気仙沼 水梨地区仮設住宅

Tsunami Disaster Refugee Camp at Kesennuma in Miyagi Pref.



one-year-old & three-years- old girls with their mother



with grand-mother

Three-generation's joint-work at Kesenuma

Designing Large-size Kaleido-Boxes:



秋田自然科学学習館 大型万華鏡ワークショップ

2005 Aug Akita Natural Science Learning Center(Japan)



2006 自然科学学習館
新しい大型のぞき箱の誕生
全国巡回とこどもたちの参観



Large size-Box at Akita Natural Science Learning Center

How to use Large-size Kaleidoscopes:



2005-2014

Large-size Kaleidoscope Workshops at Akita (Japan)



2011 Oct

Lernwerkstatt at Alice Salomon Hochschule Berlin (Germany)

アリスサロモン大学ベルリン学びの工房 (ドイツ)





2015 May 5 Fukuoka Children Hospice Project

福岡子どもホスピスプロジェクト

Fukuoka Children Hospice Project



重い病や障害児に楽しい時間を



神園千聖ちゃんを楽しませるブルーノさん

重い病や障害があり、自宅から簡単に外出できない子どもたちを楽しませたいと、フランスでクリニックラウン（病院進化部）のボランティアをしているブルーノ・アメドゥーリさん(50)が23日、福岡市や須恵町の5軒の家庭を訪問し、手品や風船アートで楽しい時間を演出した。

“病院の「ヒーロ」お家に！”

福岡訪問の仏・ブルーノさん 手品や風船アート披露

九州大の学生有志が取り組んでいる「福岡子どもホスピスプロジェクト」の一貫、ブルーノさんの本職は、フランス南部のモンペリエ大の化学者。8年前に九州大の研究者と「天賦」というクリニックラウン活動で意気投合したのが縁で、九大であった国際学会に来日したのを機に引き受けられた。

須恵町の沢津来実ちゃん(3)の自宅では、ハンカチや本の絵を機にかき消す手品を披露。来実ちゃんの友だちも集まった部屋は笑いに包まれた。

福岡市博多区の神園千聖ちゃん(11)は、初めて外国人を家に迎えるにあつて和服を着て歓迎。人工呼吸器のために声は出せないが、目を動かして、風船が犬の形になつていくのを楽しんでいた。

ブルーノさんは「単調な生活を送る子どもたちに小さな幸せを与えられたかな」と喜んでいました。

九州大の学生有志が取り組んでいる「福岡子どもホスピスプロジェクト」の一貫、ブルーノさんの本職は、フランス南部のモンペリエ大の化学者。8年前に九州大の研究者と「天賦」というクリニックラウン活動で意気投合したのが縁で、九大であった国際学会に来日したのを機に引き受けられた。

講義内容：

1. フロンティア分子軌道論

(化学結合論の歴史、有機反応機構序論)

2. 有機フッ素化学序論—戦争と平和—

3. 計算化学的手法を用いた有機反応機構の考察

(現在進行中の研究実例の紹介)

(4. Geometric Art (幾何学アート) の紹介)

Universal Magic Cube(UAPふくろうの会)

Bead Science(和算、算額、ビーズを用いた3D分子モデル)

有機合成化学特論 講義資料：

[www.chem.tsukuba.ac.jp/
junji/lecture](http://www.chem.tsukuba.ac.jp/junji/lecture)



市川淳士研究室 ウェブサイト

筑波大学 | 大学院数理工学物質科学研究科 | 化学専攻

市川淳士教授

有機化学III

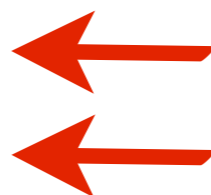
シラバス



有機合成化学特論

園田高明先生 講義資料 1

園田高明先生 講義資料 2



マーカス・チャウン著

「僕らは星のかけら -原子をつかった魔法の炉を探して-」
(ソフトバンク文庫)



好奇心を持った原子=人間は、いかにして自分たちの身体を構成する原子の起源を発見したのか?

物質はすべて原子で成り立っている。私たち人間も例外でなく、「星のかけら」たる原子の集まりなのである。

古代ギリシャの原子仮説から、ビッグバンや超新星爆発という現代宇宙論への系譜を、「元素の起源」というテーマに沿って面白くわかりやすく解き明かした科学啓蒙書の傑作。

米沢富美子著 「人物で語る物理入門」(上)(下)(岩波新書)
(2005-2006年)

発見の物語を楽しみながら、物理の基礎がわかる！



科学史(第1章)、力学(第2章&第3章)、
光学(第4章)、電磁気学(第5章)、
熱力学・統計力学(第6章)、特殊相対論(第7章)、
一般相対論(第8章)、量子力学(第9章)、
宇宙論(第10章)、原子核物理(第11章&第12章)、
素粒子物理(第13章&第15章)、物性物理(第14章)

- 第 1章 人類と科学との出会い —アリストテレス、アルキメデス、プトレマイオス—
- 第 2章 近代科学の夜明け —コペルニクス、ガリレイ、ケプラー—
- 第 3章 月とりんごを統一する法則 —アイザック・ニュートン—
- 第 4章 光の本質を求めて —クリスティアン・ホイヘンス—
- 第 5章 電気と磁気の謎を追う —ジェームズ・C・マクスウェル—
- 第 6章 エネルギーとエントロピー —ルートヴィヒ・ボルツマン—
- 第 7章 「時空」への旅 —特殊相対性理論— —アルバート・アインシュタイン1—
- 第 8章 空間がひずむ —一般相対性理論— —アルバート・アインシュタイン2—
- 第 9章 「コペンハーゲン精神」の誕生 —ニールス・ボーア—
- 第10章 宇宙の果てを覗く —エドウィン・ハッブル—
- 第11章 原子核物理学を築いた女性たち —マリー・キュリーとリーゼ・マイトナー—
- 第12章 「原爆の父」の刻印を背負って —ロバート・オッペンハイマー—
- 第13章 日本の物理学の揺籃期 —湯川秀樹と朝永振一郎—
- 第14章 情報化社会の開拓者 —ジョン・バーディーン—

第9章 「コペンハーゲン精神」の誕生

ニールス・ボーア(量子力学)

20世紀の科学技術と量子力学／議論好きの少年／

原子モデル／ボーア研究所の設立／

ボーアの「対応原理」／ハイゼンベルクの行列力学／

シュレーディンガーの波動力学／量子力学の理論体系の確立／

不確定性原理／コペンハーゲン解釈／

ボーア-アインシュタイン論争／コペンハーゲン精神／

ヒトラーに追われて／ボーアと原爆

竹内 敬人著「人物で語る化学入門」(岩波新書)(2010年3月)

序章 物質は原子からできている

ドルトン／アインシュタイン／ペラン／トムソン／ラザフォード

第1章 物質世界の役者たち—元素と原子

1 世界をつくる元素

パスカル／ボイル／ラヴォアジエ

2 増え続ける元素

アヴォガドロ／ブンゼン／メンデレーエフ／ラムゼー

3 あふれ出る元素

マリー・キュリー／モーズリー／小川正孝／シーボーグ

第2章 電気と化学の切っても切れない関係

1 電気が新しい元素を生み出す

フランクリン／ヴォルタ／デイヴィー／ベルセーリウス

2 電気の正体

ファラデー／アレニウス

3 電子が原子を結びつける

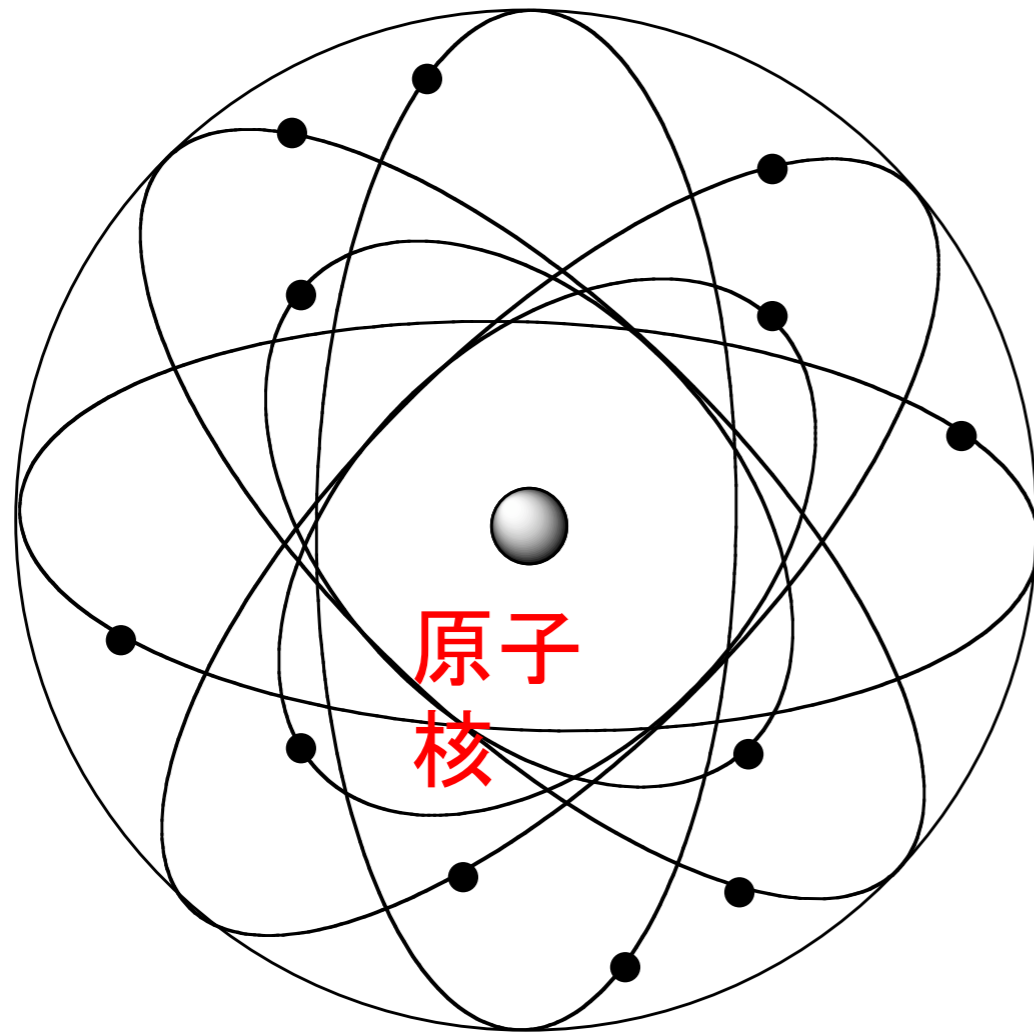
ボーア／ド・ブロイ／シュレーディンガー／ルイス

4 反応は電子のやりとり

ウェーラー／インゴルド／ケクレ／福井謙一／ポーリング

(以下、3-7章、終章 21世紀の化学)





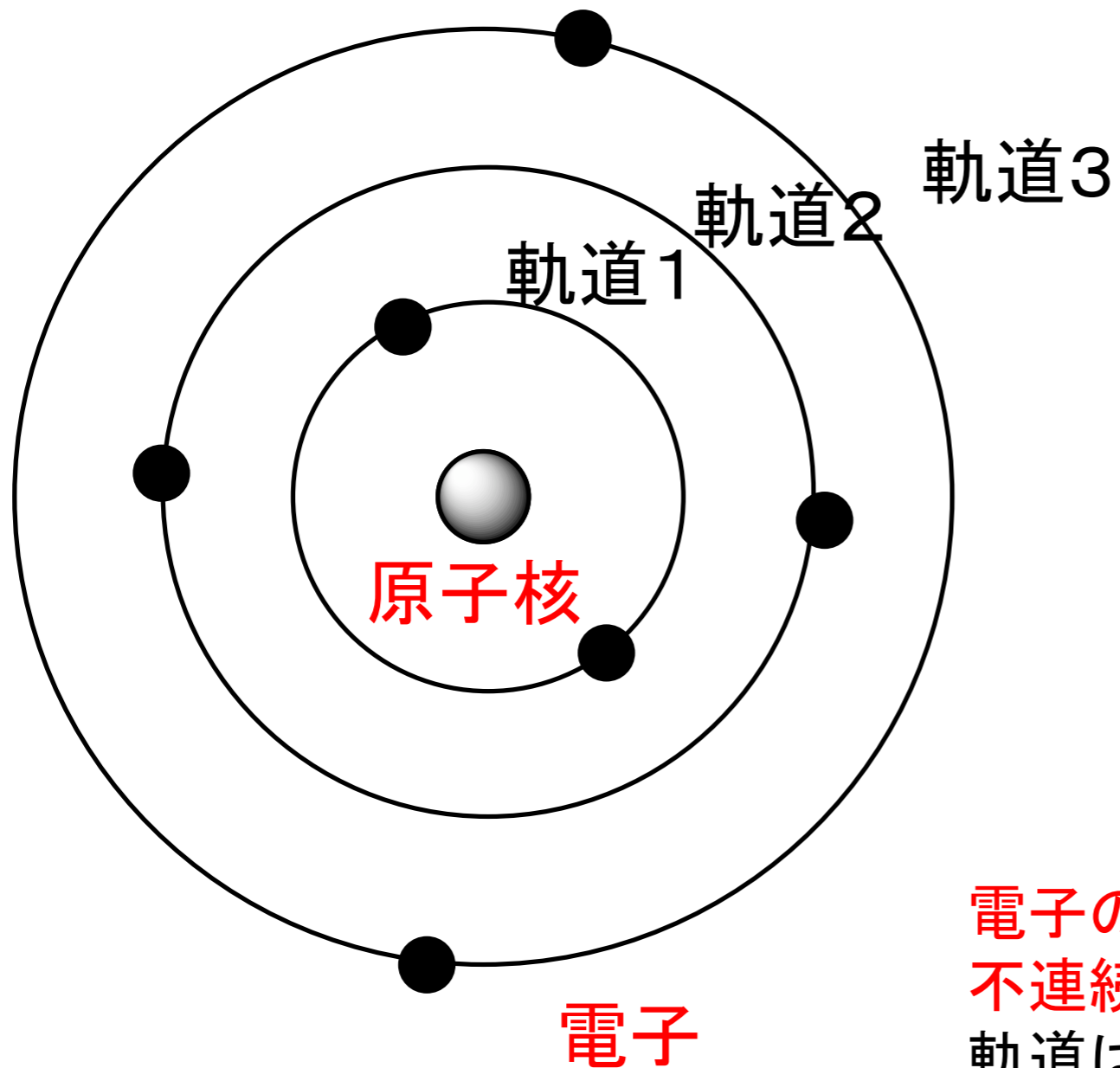
電子の軌道



Ernest Rutherford
(1871-1937)

アーネスト ラザフォードの原子模型(1911年)

マイケル・ファラデーと並び称される実験物理学の大家。 α 線と β 線の発見、ラザフォード散乱による原子核の発見、原子核の人工変換などの業績により「原子物理学(核物理学)の父」と呼ばれる。1908年ノーベル化学賞受賞



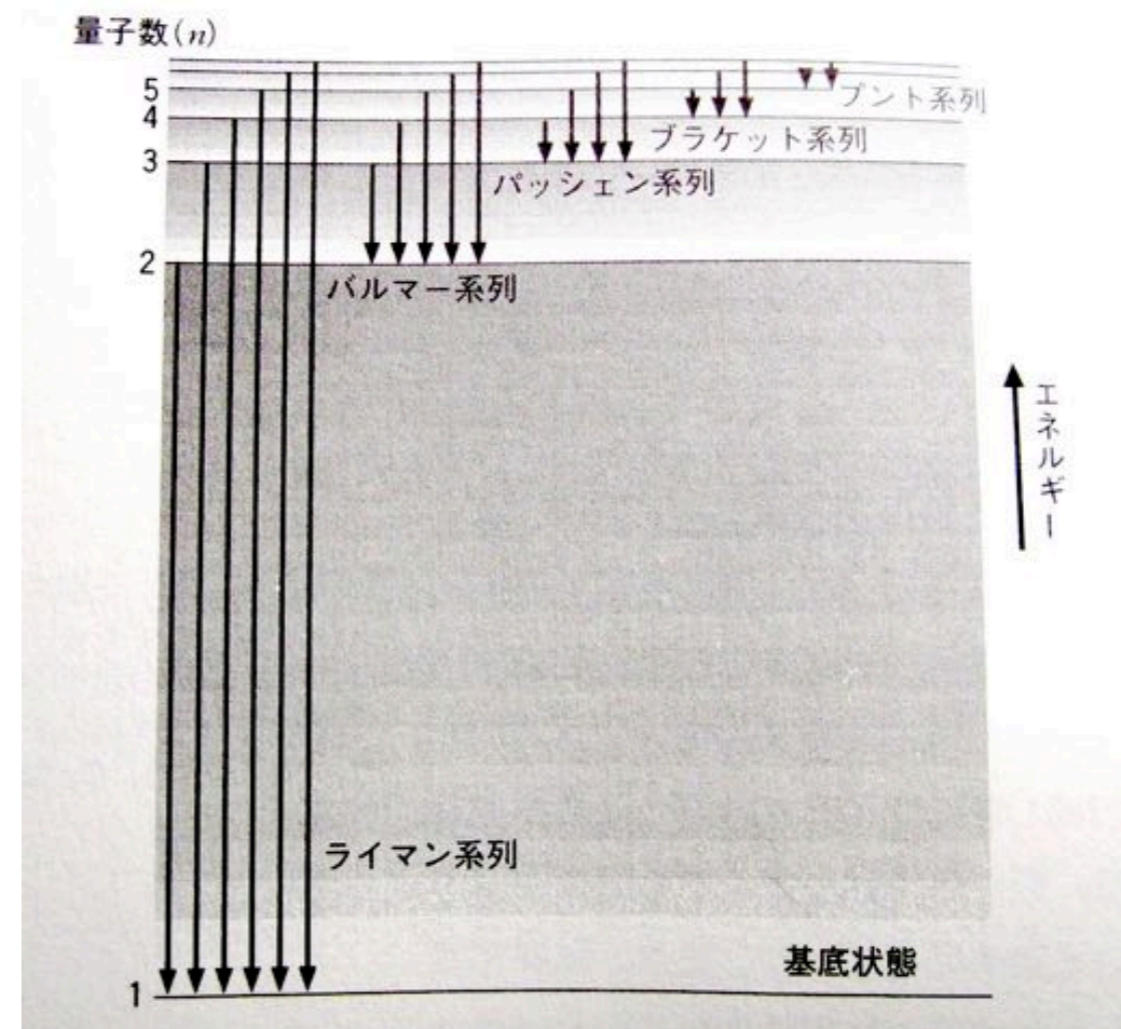
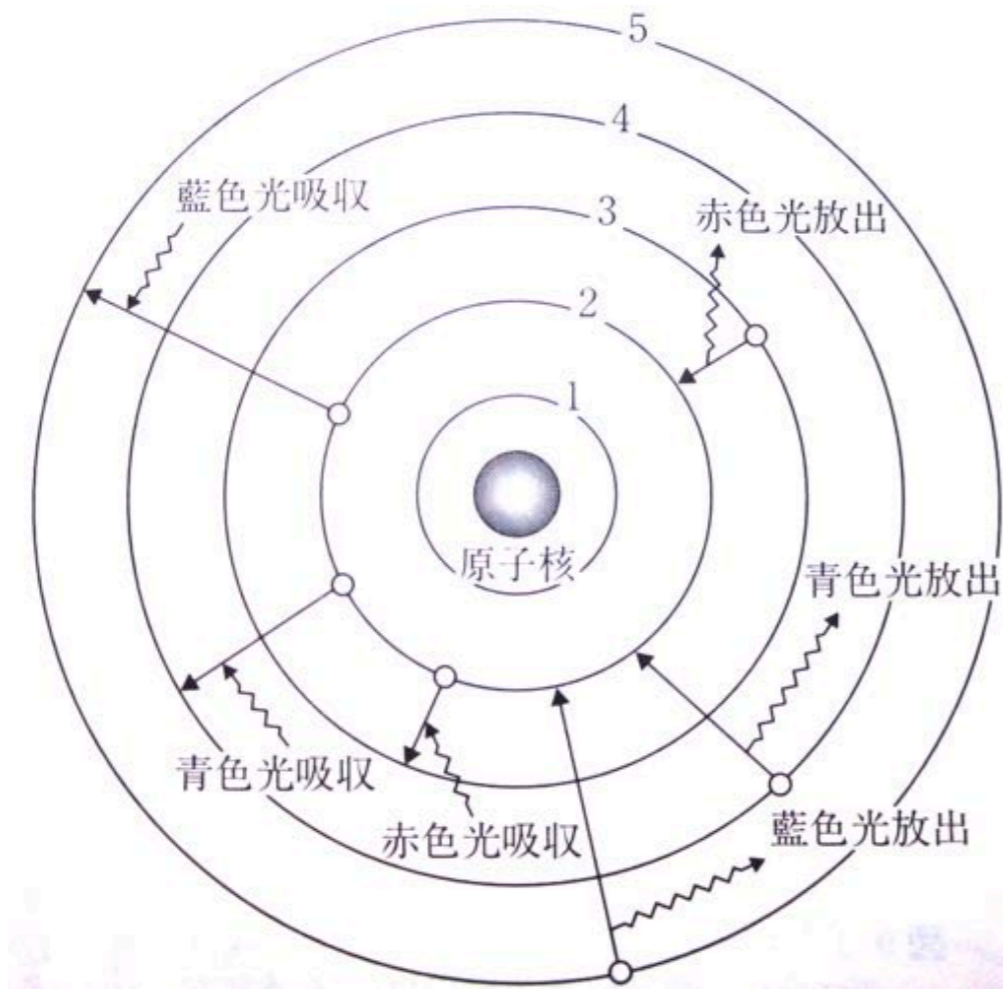
Niels Bohr(1885-1962)

電子の軌道は量子化されていて不連続で、とびとびの値だけがとれる。軌道は内側から番号を1、2、3とする。各軌道には電子は2個ずつ入る。

ニールス ボーアの原子模型(1913年)

ボーアによる前期量子理論

水素原子モデルと量子化された電子軌道間の電子遷移スペクトルの予測 (1913年)



ボーアモデルを用いた水素原子からの電磁波(光を含む)の放出と吸収の様子

水素原子のスペクトル

励起された状態から低エネルギー状態への遷移を示す。バルマー系列の左側の矢印は $n=3$ から $n=2$ への遷移に対応する。

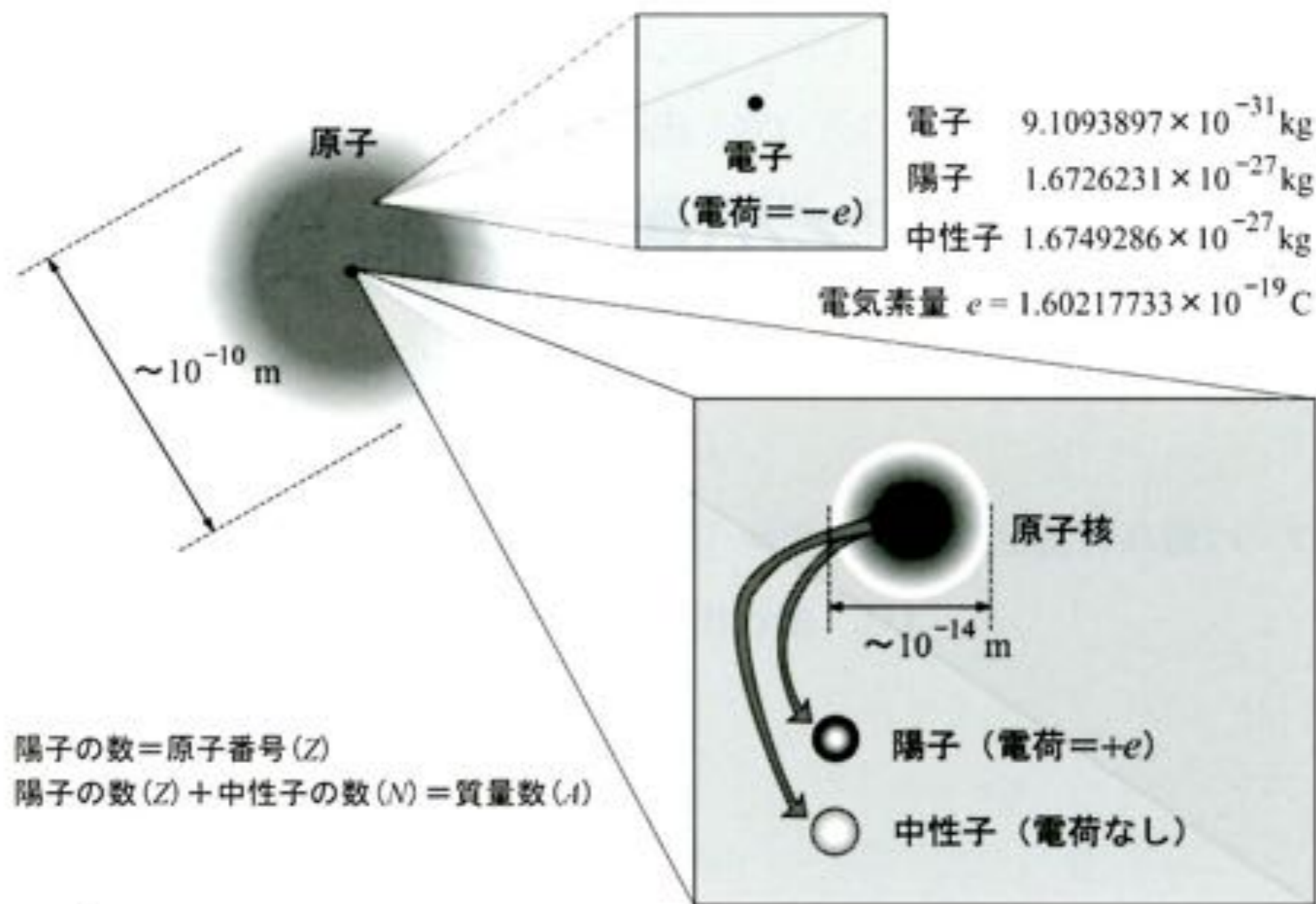


図1 原子の構成要素

THE DISCOVERY OF SUBATOMIC PARTICLES STEPHEN WINBERG

スティーブン・ワインバーグ 本間三郎訳



新版
電子と
原子核の
発見

20世紀物理学を導いた人々



Kinokuniya 学芸文庫

立花隆選

元素111の 新知識

第2版

さらに最新知識を盛り込んで

桜井弘



講文芸春秋 21世紀図書館

[立花隆選の100冊]

選出された定番ロングセラーを
全面改訂

10万円超

立花 隆・佐藤 優 『21世紀図書館 必読の教養書200冊』

文藝春秋 第86巻第15号 (2008.12) <http://www21.atwiki.jp/wikiwiki2/pages/14.html>

立花 隆選の100冊(参照: 立花 隆「東大講義一人間の現在1 一脳を鍛える」(新潮文庫))

生命科学

1. ワトソン『二重らせん』講談社文庫
2. アルバーツ『細胞の分子生物学』ニュートンプレス
3. フリント『数値でみる生物学』シュプリンガー・ジャパン
4. モリソン『パワーズオブテン』日経サイエンス

物質科学

5. ファインマン『ファインマン物理学』岩波書店
6. 桜井弘編『元素111の新知识』講談社ブルーバックス
7. 桜井弘編『生命元素辞典』オーム社

地球科学

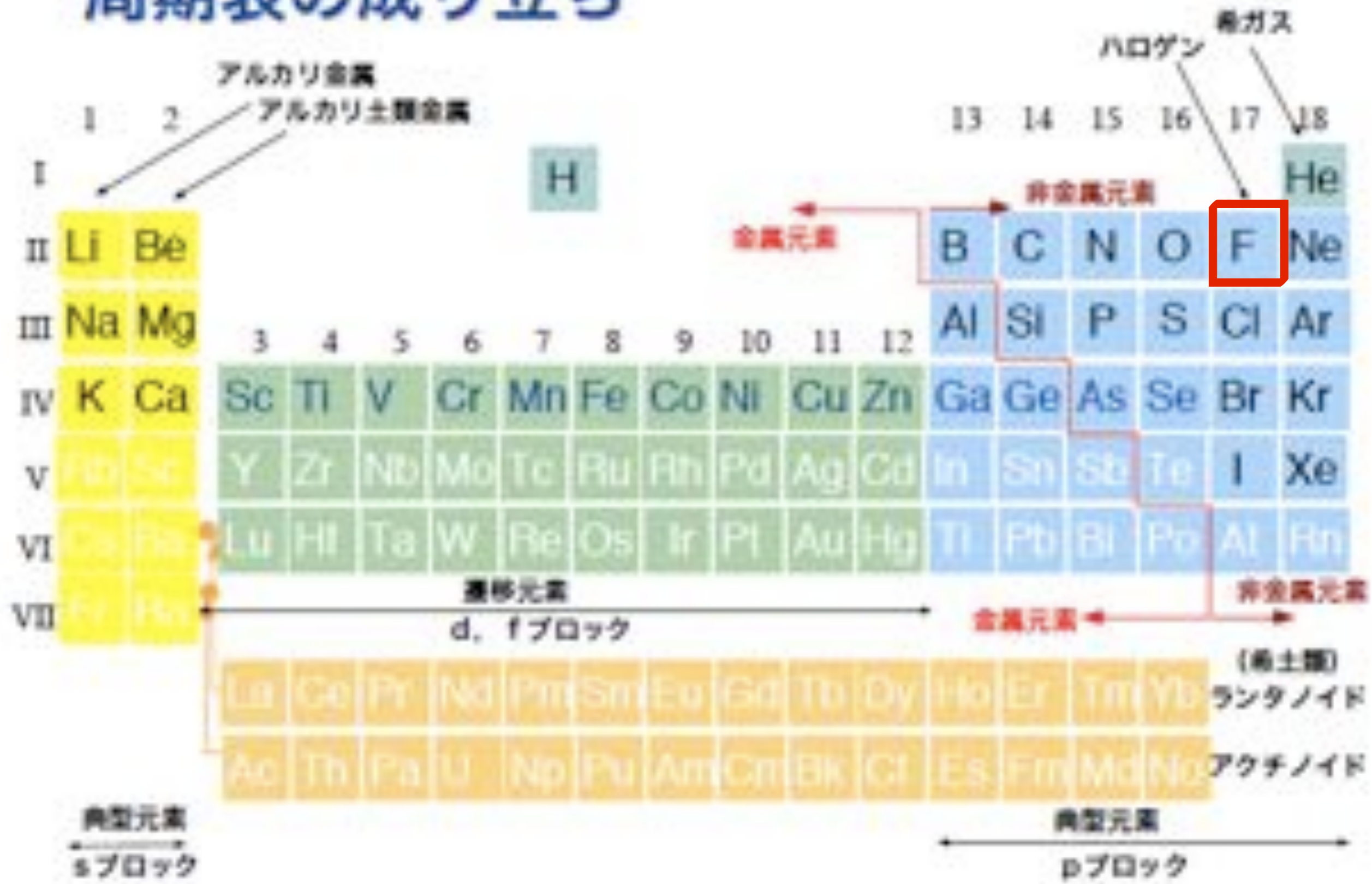
8. ダイソン『宇宙をかき乱すべきか』ちくま学芸文庫
9. 熊澤峰夫他編『全地球史解説』東京大学出版会

現代科学論

10. フェイガン『古代文明と気候大変動』河内文庫 現代科学論
11. ドーキンス『神は妄想である』早川書房
12. クーン『科学革命の構造』みすず書房
13. ミンスキー『心の社会』産業図書
14. シルヴァー『人類最後のタブー』NHK出版

心理学、生理学、人類史・文化人類学、20世紀の歴史、日本近現代史、基礎的古典、数学、哲学、政治学・法学、共産主義思想、日本思想、世界文学、日本文学、ファンタジー・SF、

周期表の成り立ち





Max Plank(1858–1947)



Niels Bohr(1885–1962)



Louis Victor de Broglie(1885–1962)



Erwin Schroedinger(1887–1961)

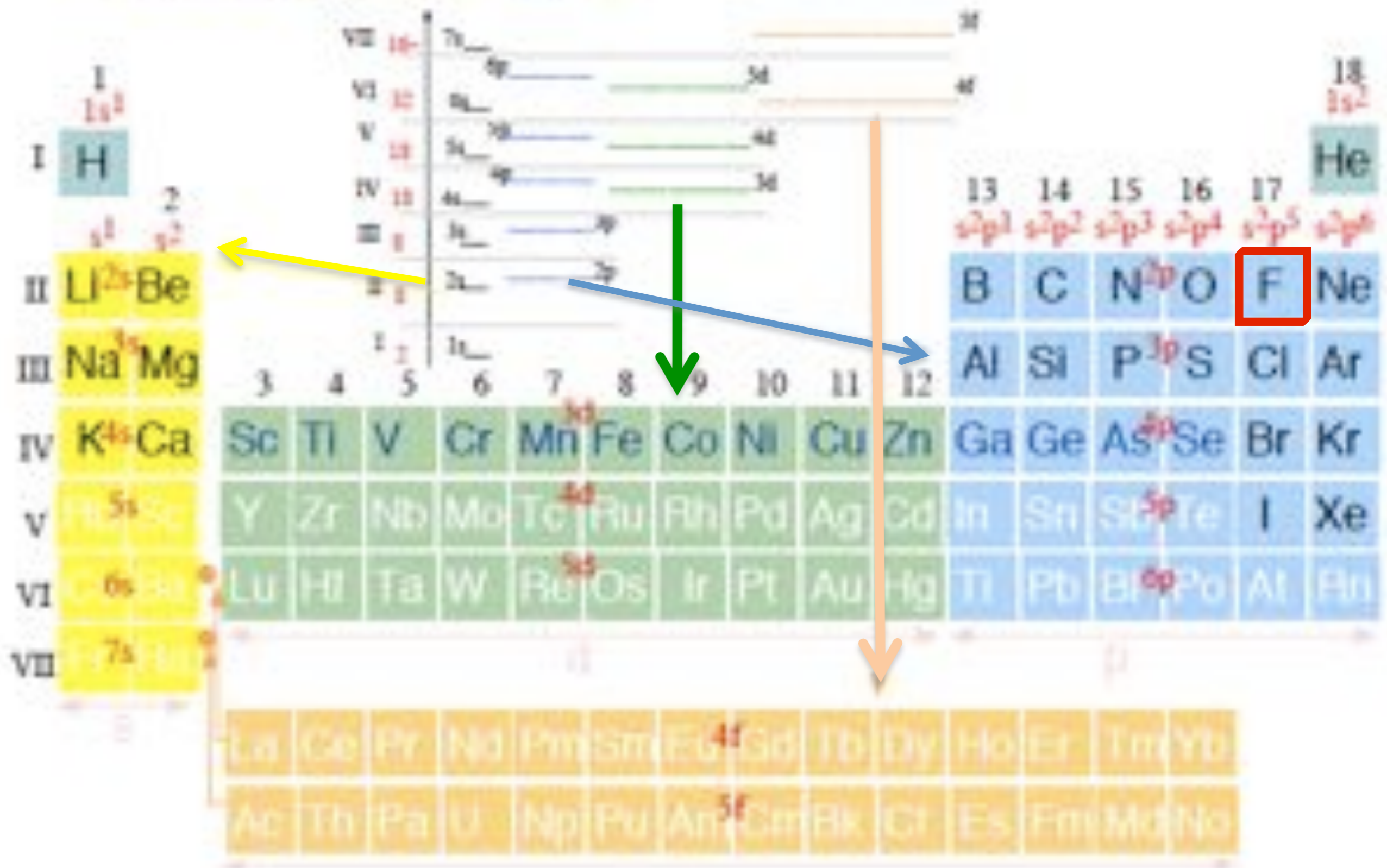


Werner Heisenberg (1901–1976)

量子力学時代の夜明け

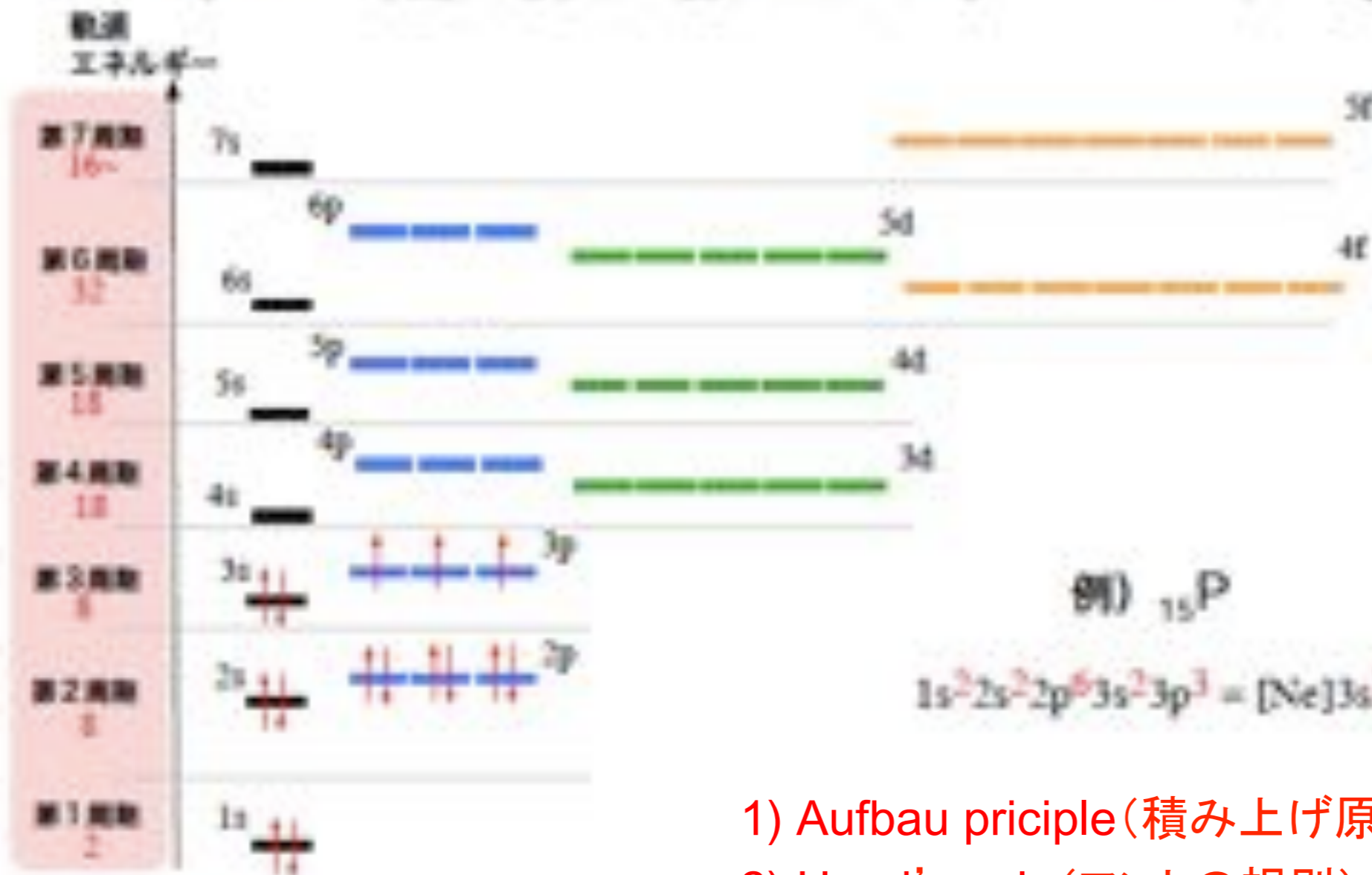
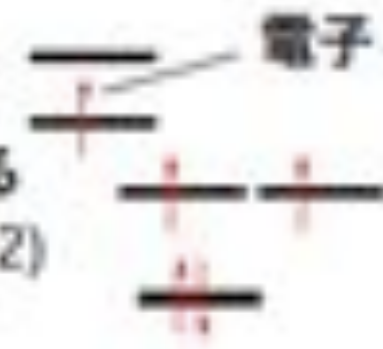
**Scientists
contributed for
Wave Mechanical
View of Atom**

周期表の成り立ち



構成原理 (電子のつまり方)

- 規則
- 1) 電子はエネルギーの低い軌道から順に入る
 - 2) 軌道のエネルギーが同じ場合は、できるだけ1つずつ入る
 - 3) 1つの軌道に電子は2個まではいる (スピン = +1/2, -1/2)



例) ${}_{15}\text{P}$



- 1) Aufbau principle (積み上げ原理)
- 2) Hund's rule (フントの規則)
- 3) Pauli exclusion principle (パウリの排他原理)

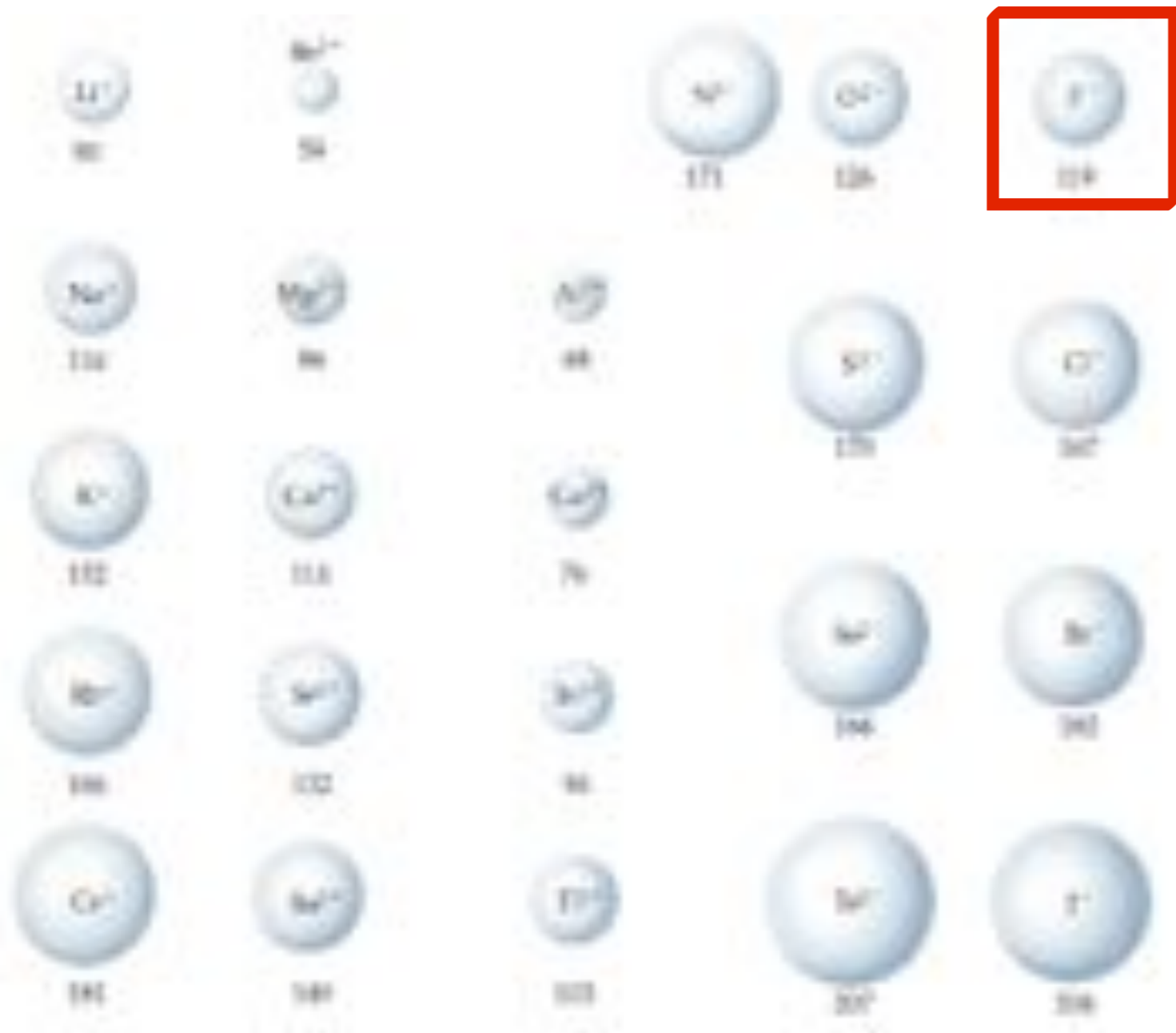
電子のつまり方 (例)



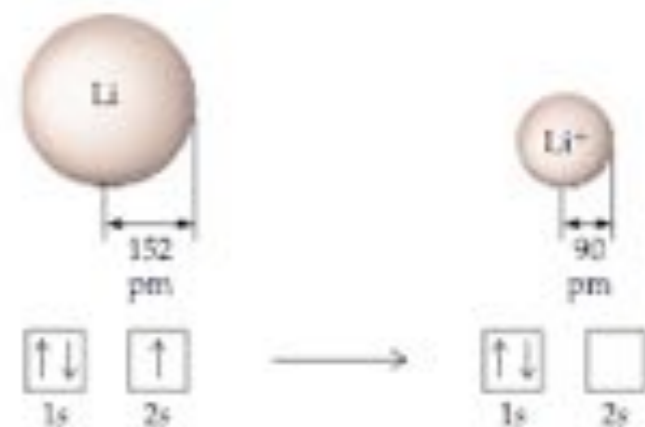
Atomic radii (原子半径) in picometer ($1 \text{ pm} = 1 \times 10^{-12} \text{ m}$)



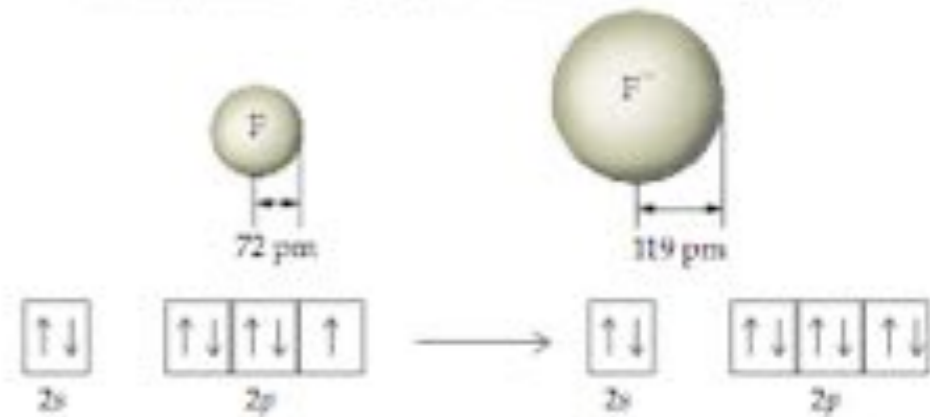
ionic radii (イオン半径) in picometer ($1 \text{ pm} = 1 \times 10^{-12} \text{ m}$)



Li atom (radius = 152 pm) Li⁺ cation (radius = 90 pm)



F atom (radius = 72 pm) F⁻ anion (radius = 119 pm)

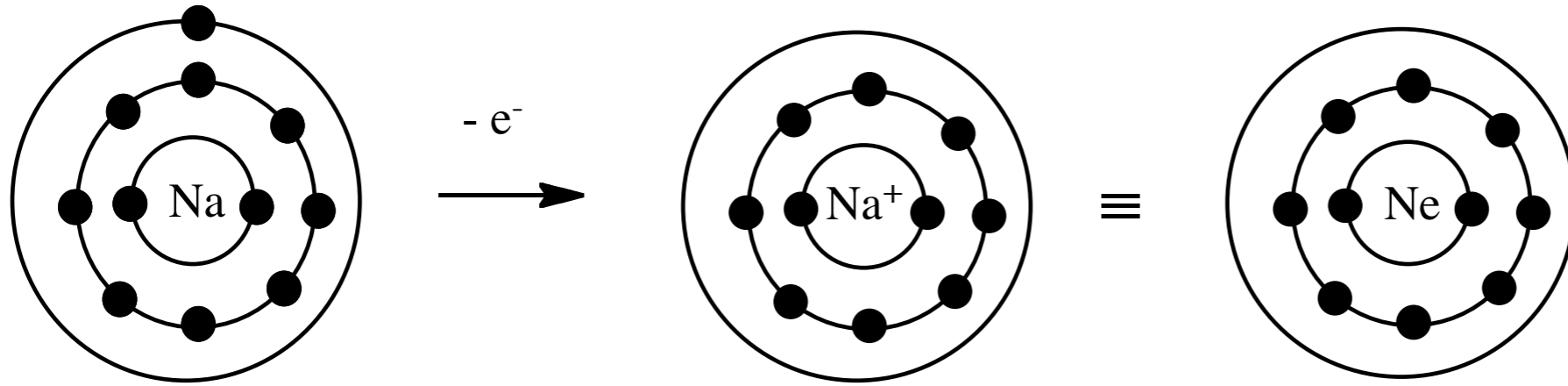


コッセルの原子価理論

Walter Kossel's Valence Theory(1916)

イオン結合のモデルをボーアの原子模型をもとに考えた 原子価理論

原子が、何らかの原因で電子を獲得するか放出して、**希ガス構造の電子配置**をとるならば、その結果生じるイオンは安定となり、**静電引力で反対符号のイオンと安定な結合を生成**するので、**安定な化合物として存在可能**となる。



ナトリウム 原子
最外殻価電子1個

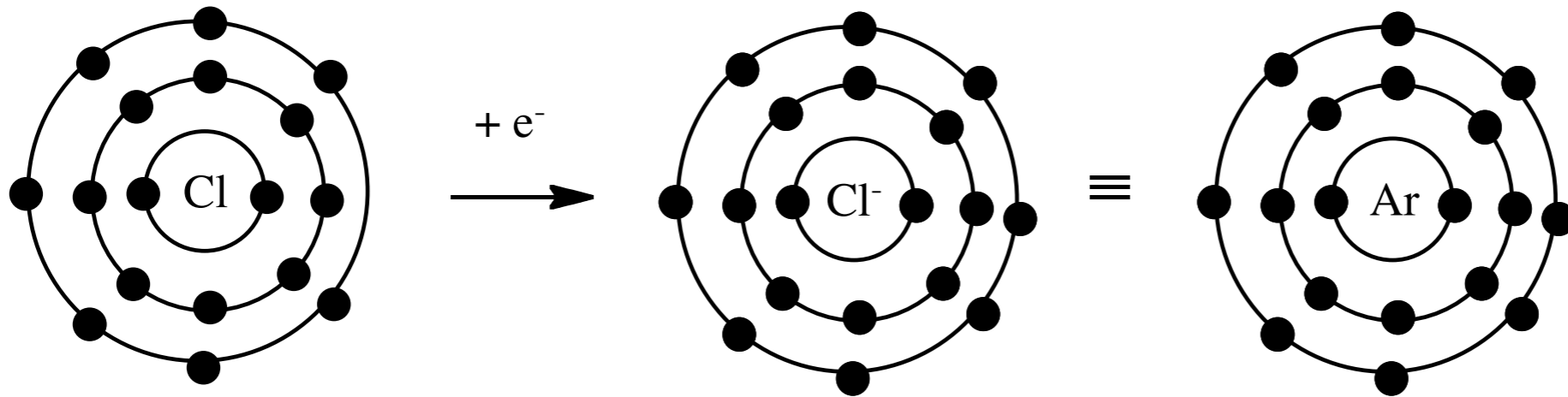
valence electron

ナトリウムイオン(Na⁺)
最外殻価電子8個

valence electron

ネオンと等電子構造

isoelectronic structure



塩素 原子
最外殻価電子7個

valence electron

塩化物イオン(Cl⁻)
最外殻価電子8個

アルゴンと等電子構造

isoelectronic structure

Ionic Bond (イオン結合)

Electron transfer(電子移動) from sodium atom to chlorine atom

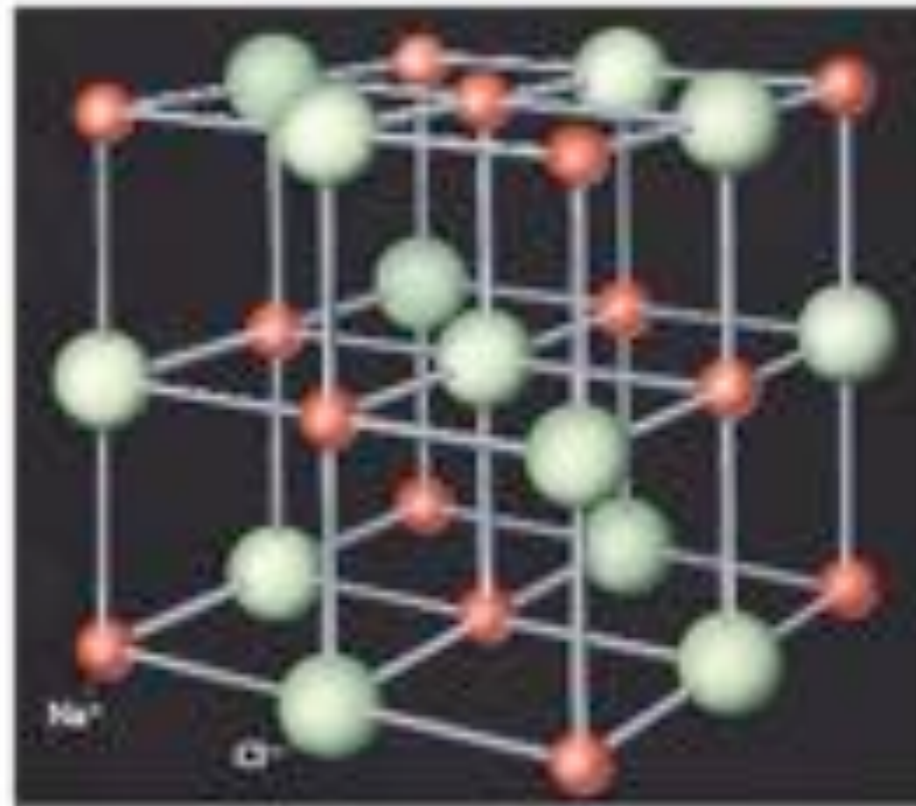


W. H. Bragg(1862-1942)

W. L. Bragg(1890-1971)

父子による

X線結晶解析法の開発

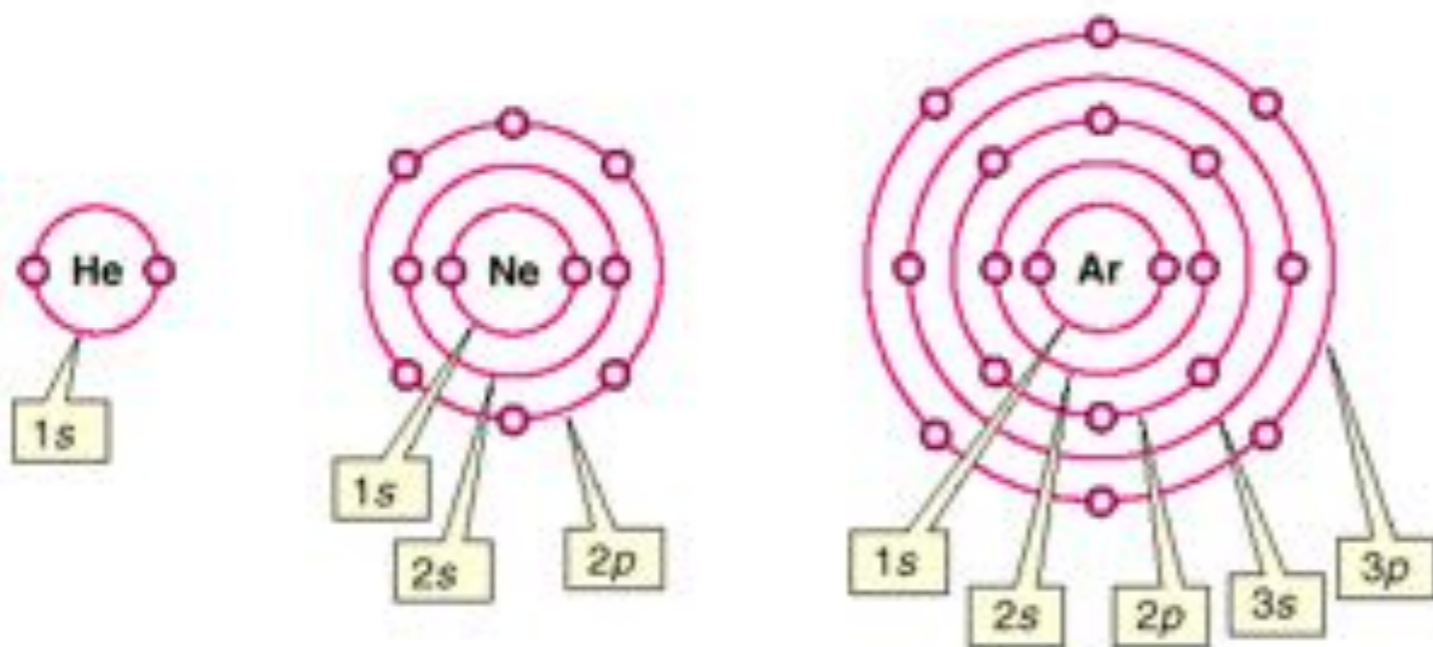


Sodium chloride (Na^+Cl^-) crystal lattice structure (NaCl結晶格子構造)

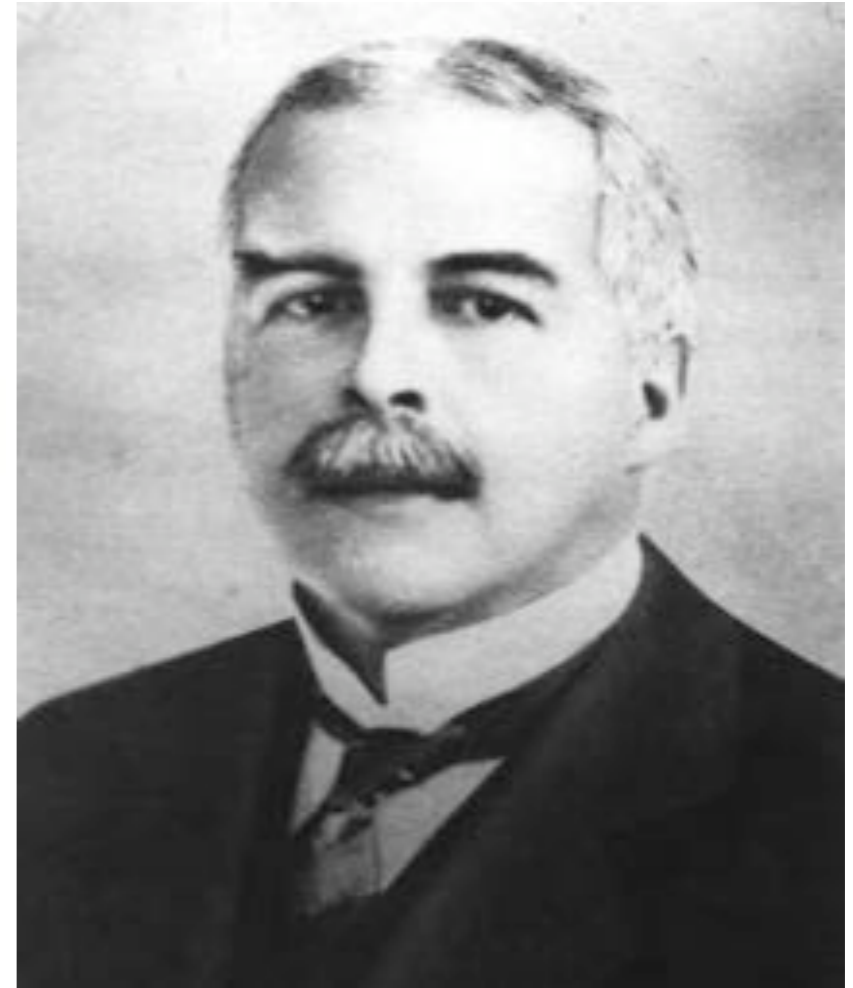
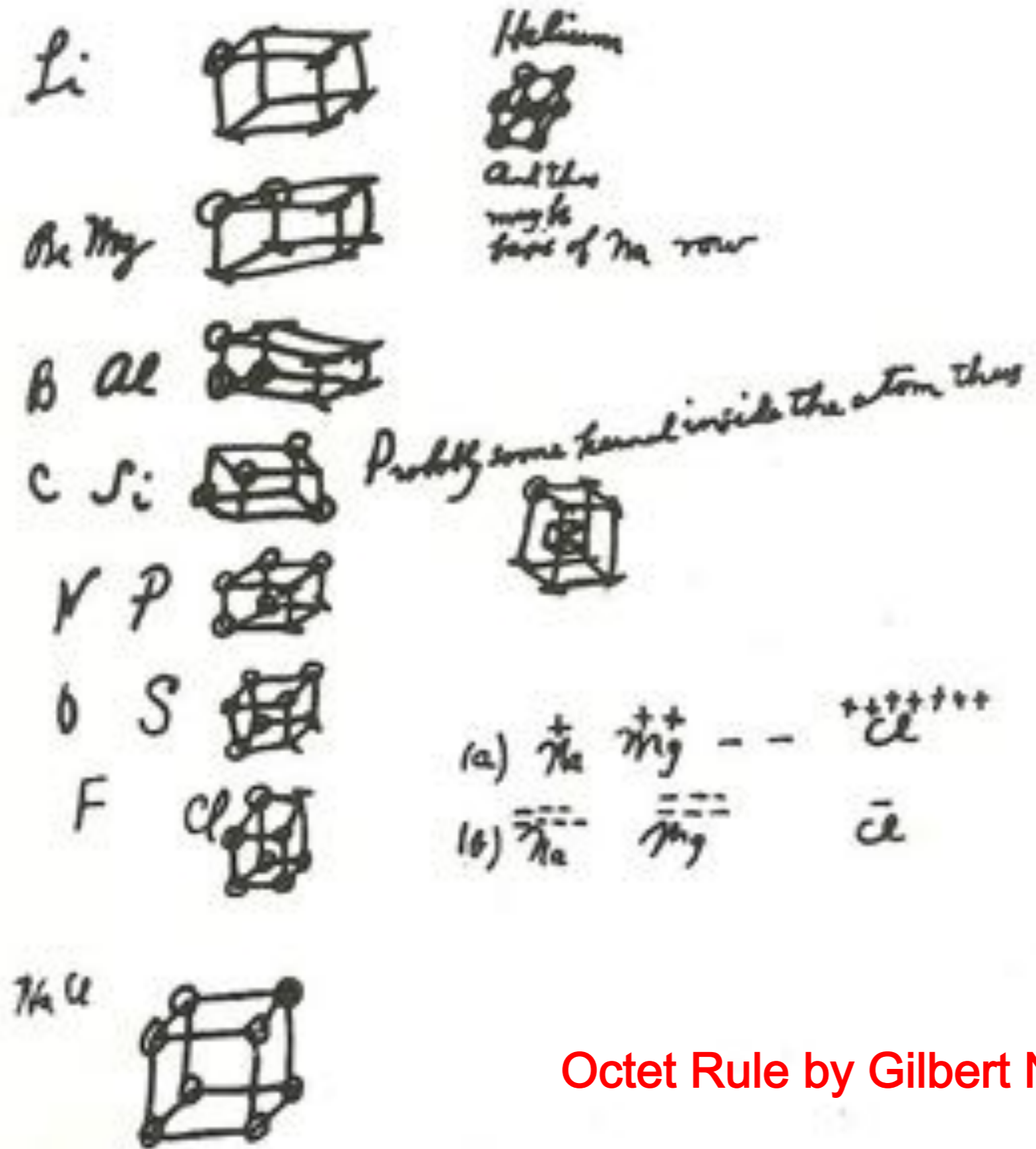
Chemical Bond Theory before Quantum Theory (量子論以前の化学結合理論)

ルイスのオクテット則(八隅説)

Octet Rule by Gilbert N. Lewis for Chemical Bond (1916)



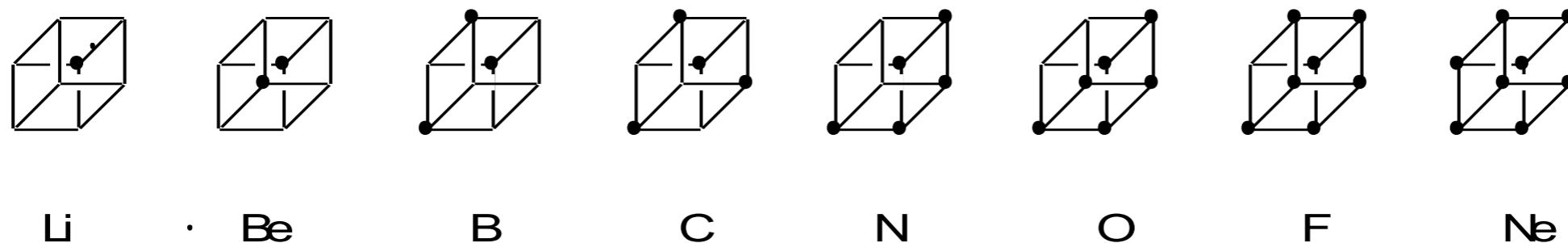
Gilbert Newton Lewis
(1875-1946)



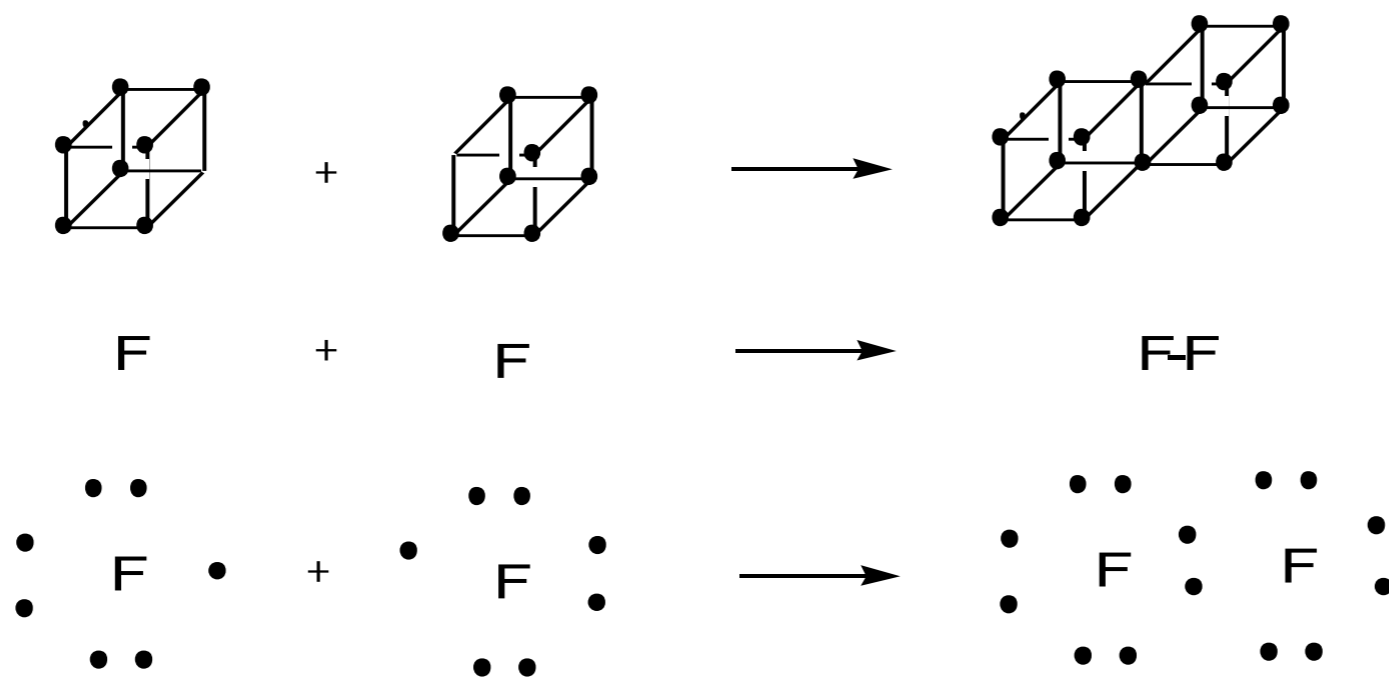
Octet Rule by Gilbert N. Lewis (1916)

Octet rule(八隅説) by G. N. Lewis for chemical bond (1916, 1923)

第2周期元素の結合が2個の電子で形成され、それぞれの原子は8個の原子価電子で囲まれて希ガス(Ne)の電子配置をとって安定な化合物を作るといふ仮説



Octet figures by Lewis

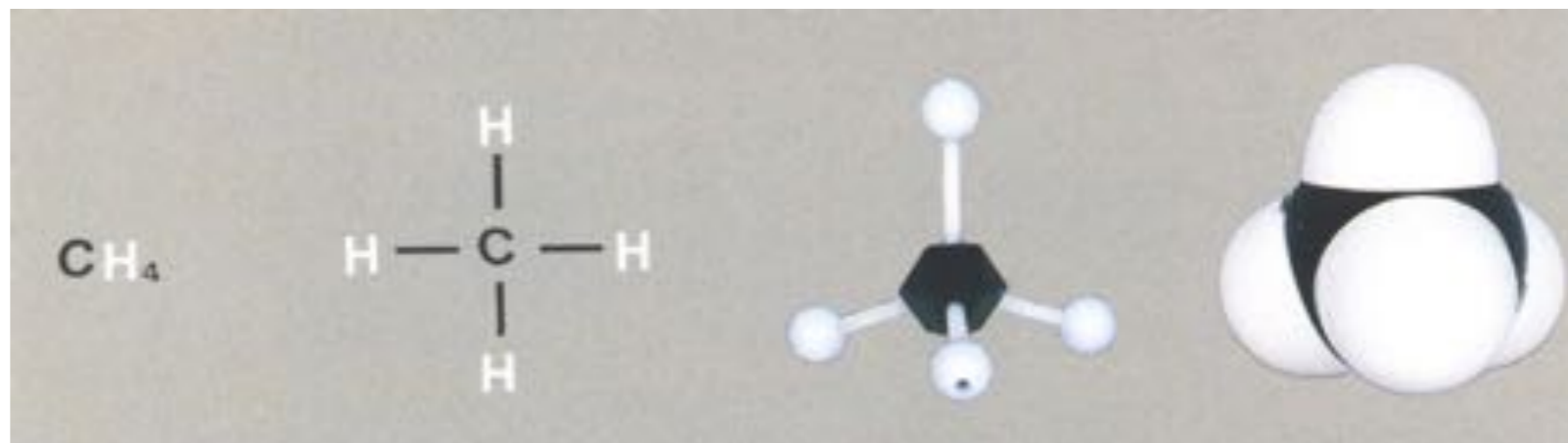


F₂ molecule and octet rule

フッ素分子とオクテット則

炭素原子の正四面体構造説 (1874年)

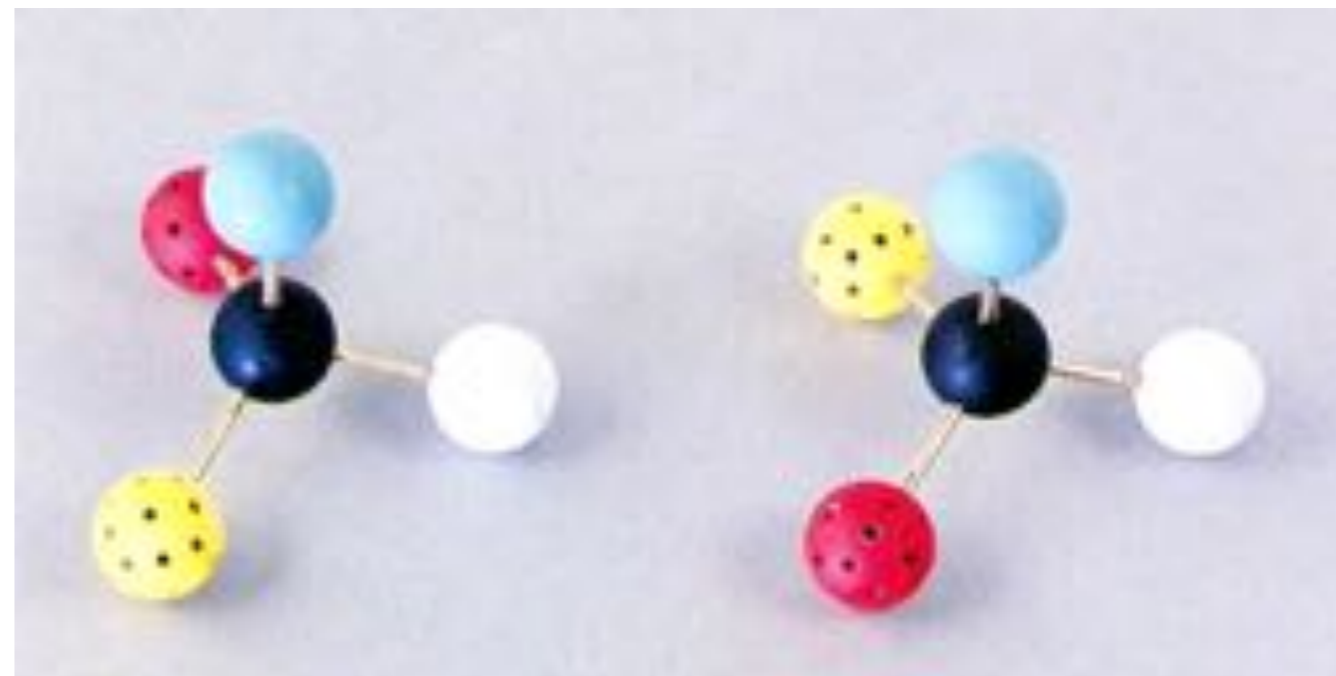
ヤコブス・ファントホッフ Jacobus Henricus van't Hoff (1852-1911) (22歳)



メタン炭素の結合角(H-C-H)は 109.5° である。

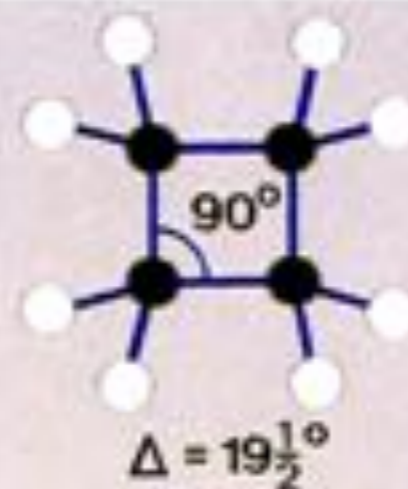
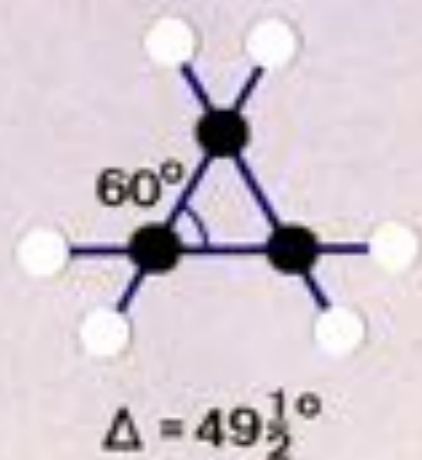


ファントホッフ自身が作った模型

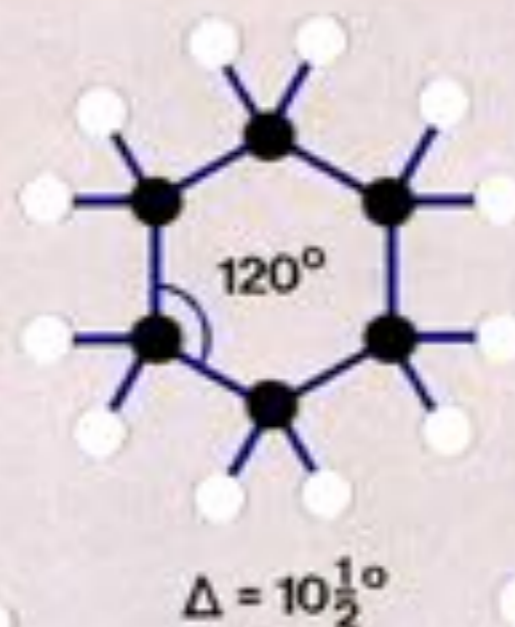
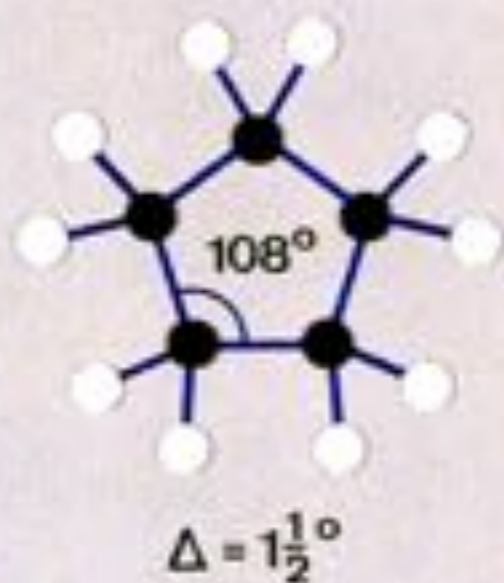


正四面体模型によるenantiomer(鏡像体)の説明

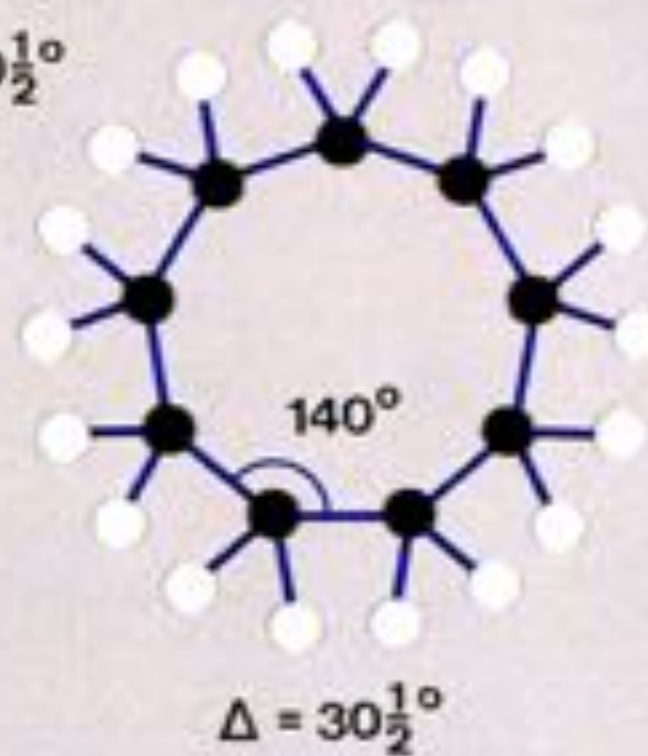
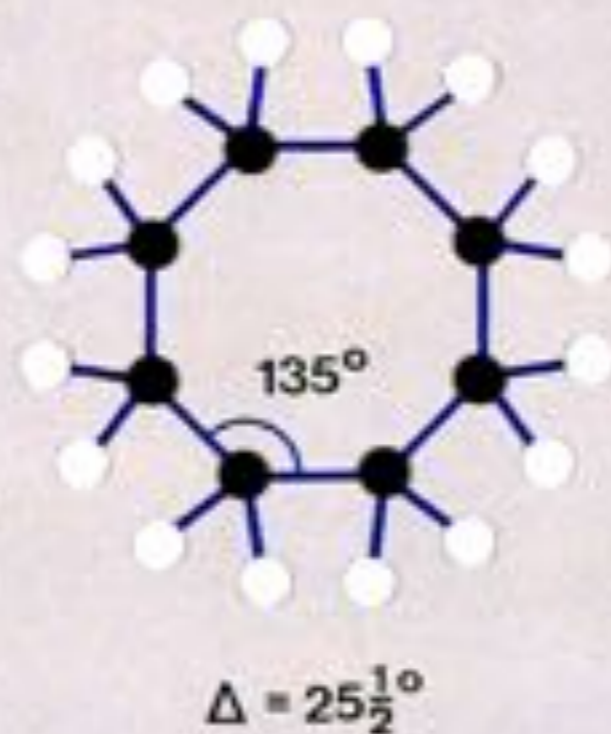
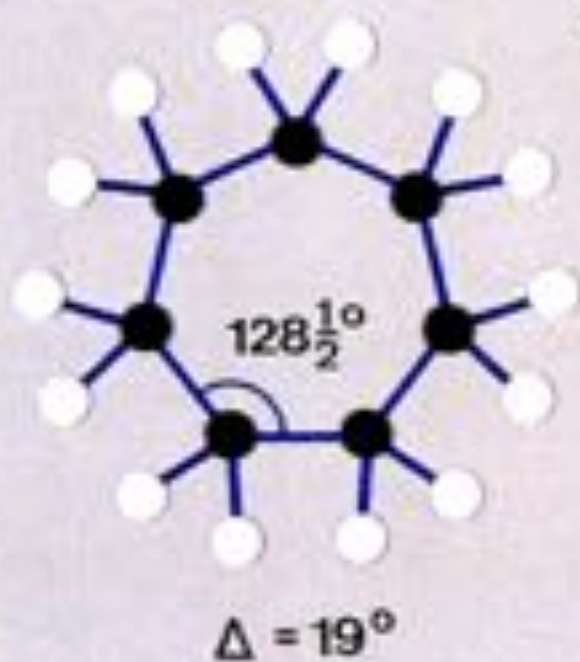
1886, Adolf Baeyer(1835-1917)による Bayer Strain (バイヤーの角度ひずみ説)



rare



common

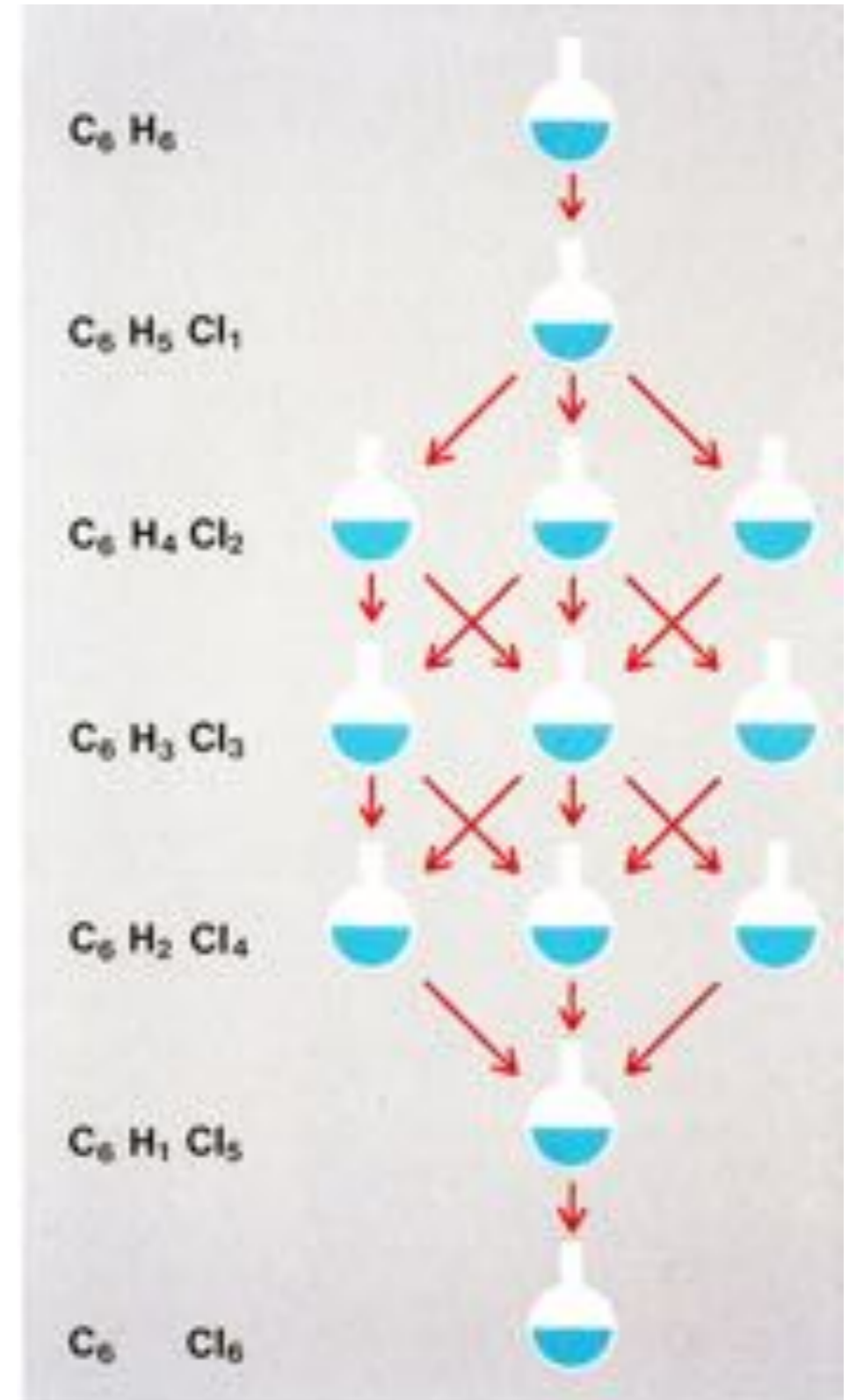
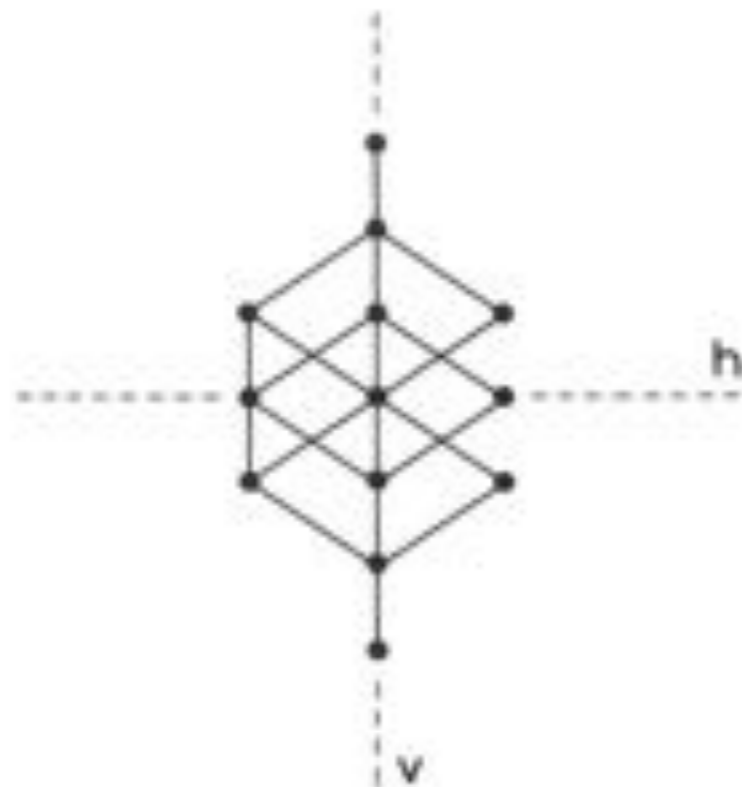


rare

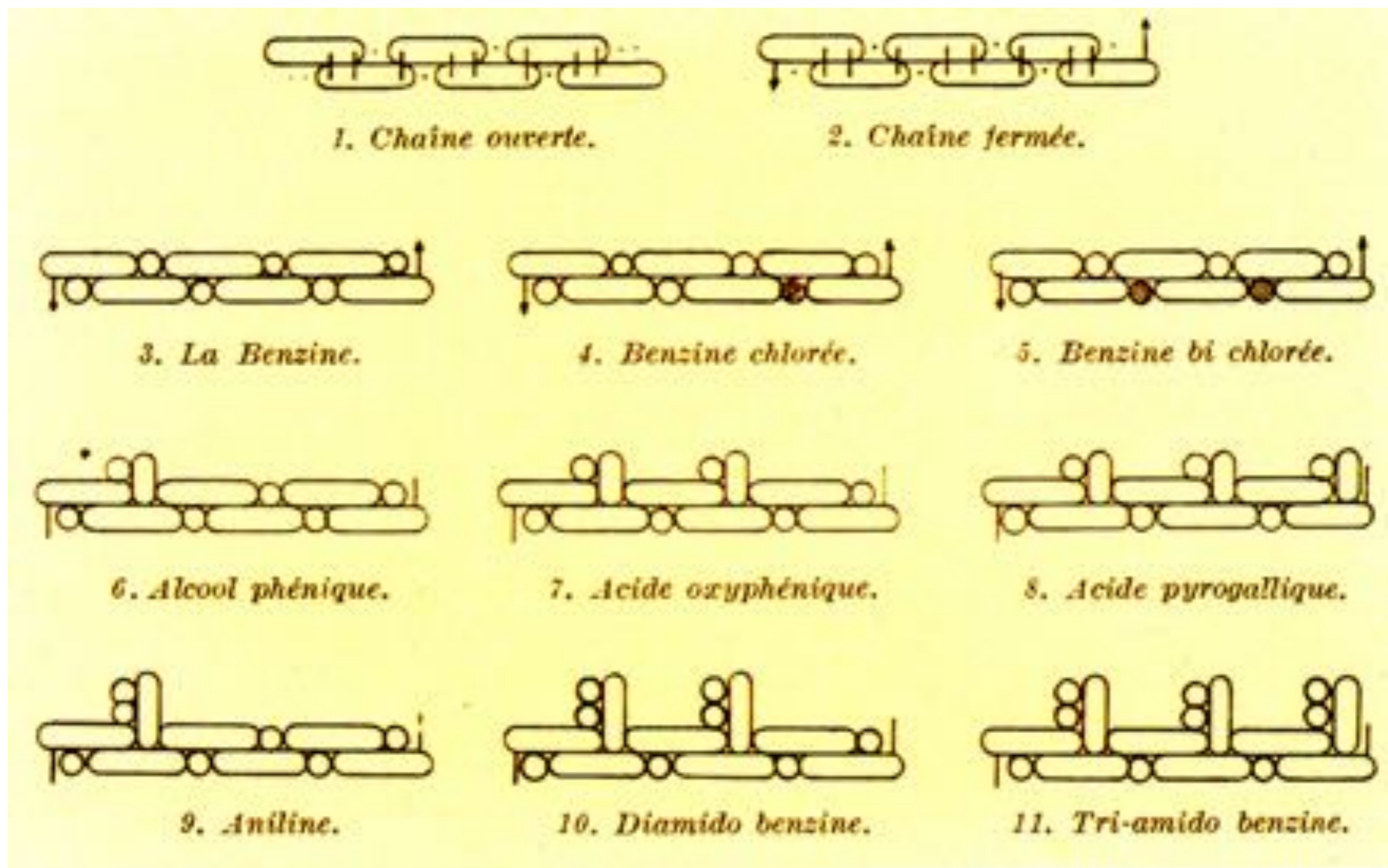
多数個の塩素原子で置換されたベンゼン化合物の構造異性体

Structural Isomers of Polychlorinated Benzene Compounds

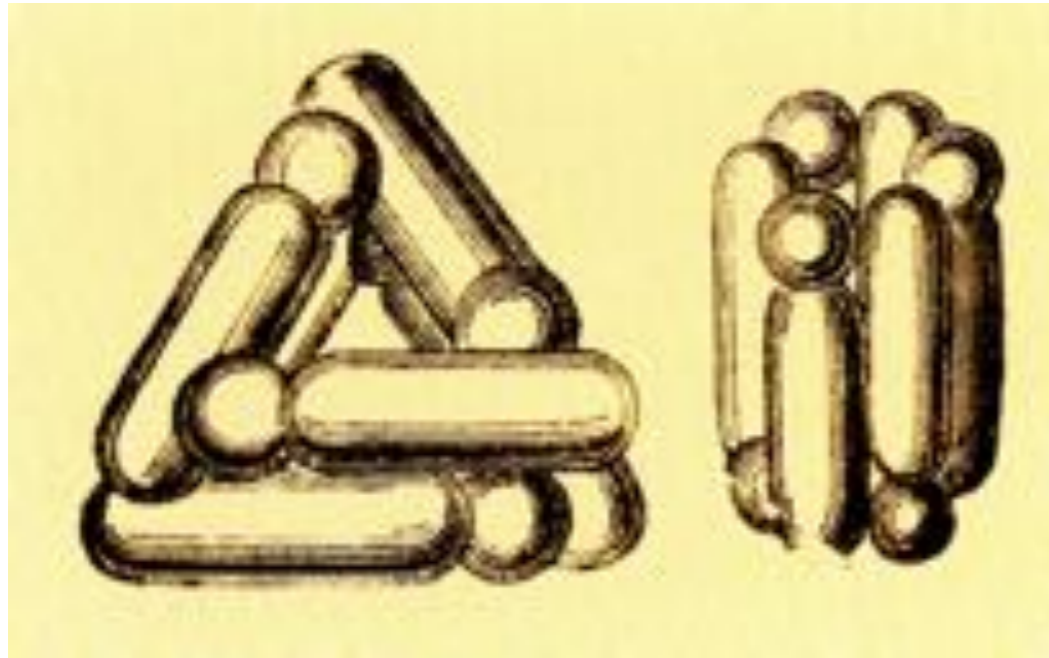
Sum-formula	Number of isomers
C_6H_6	1
C_6H_5Cl	1
$C_6H_4Cl_2$	3
$C_6H_3Cl_3$	3
$C_6H_2Cl_4$	3
C_6HCl_5	1
C_6Cl_6	1



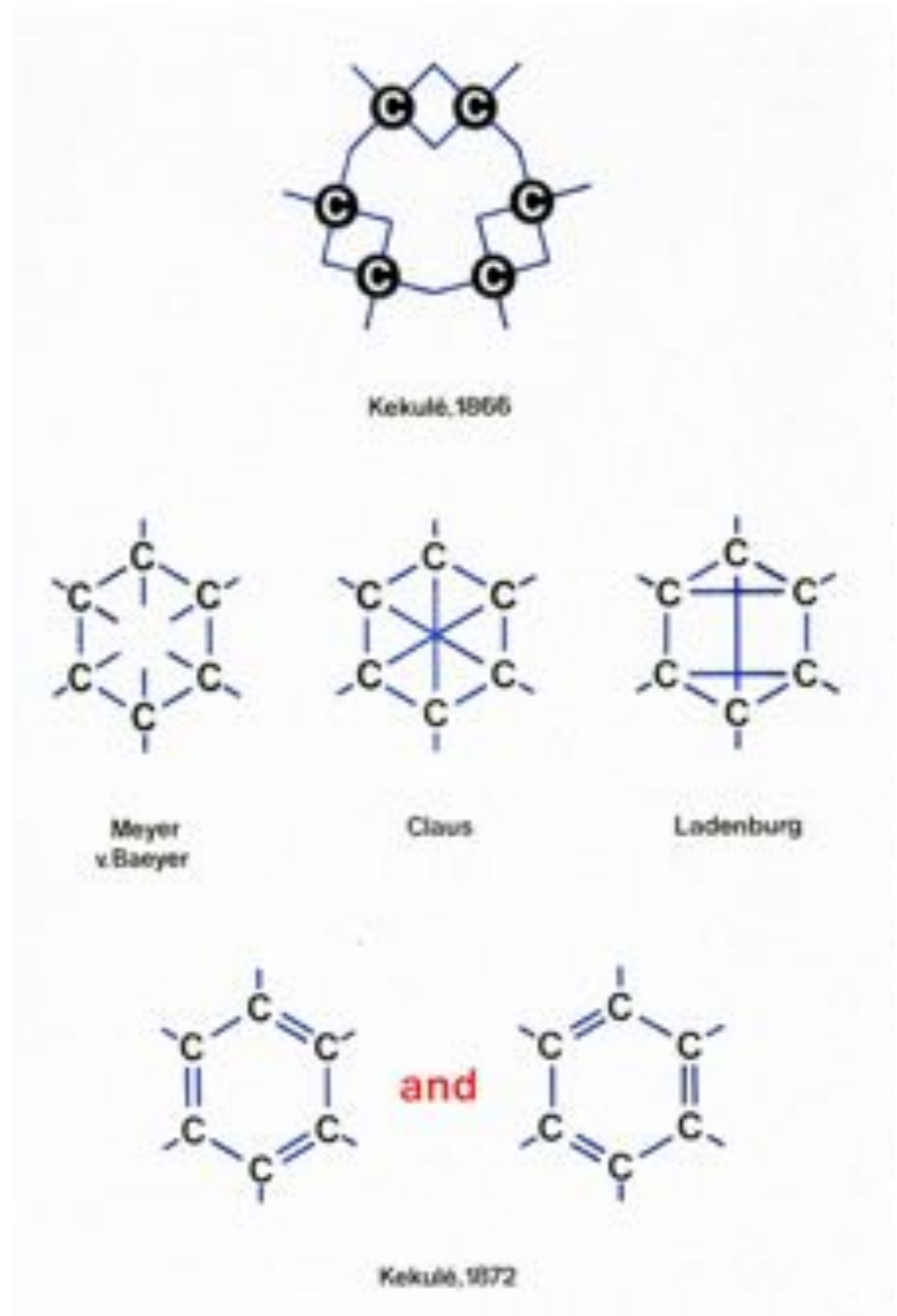
フリードリッヒ・ケキュレ(Friedrich August Kekule, 1829-1896) の ベンゼン6員環構造仮説(1861年)(32歳)



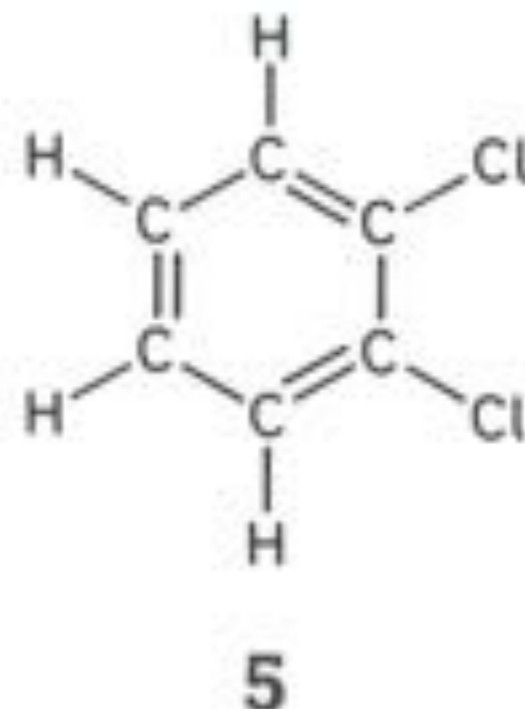
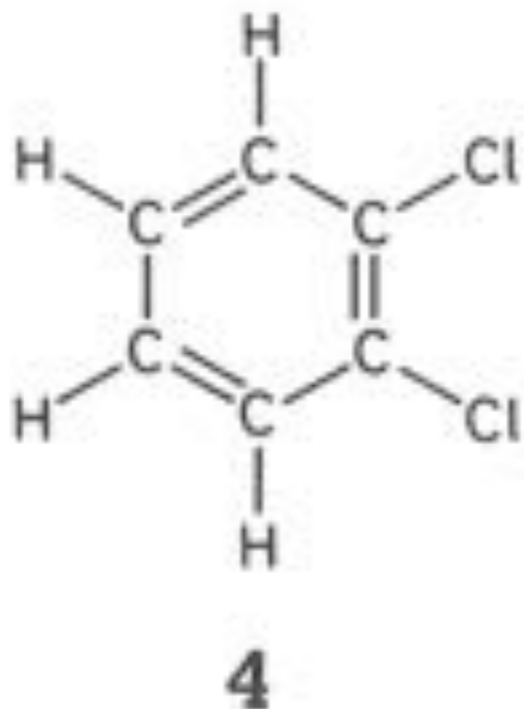
ケキュレによるベンゼンとその誘導体に関するソーセージ模型(1865年)



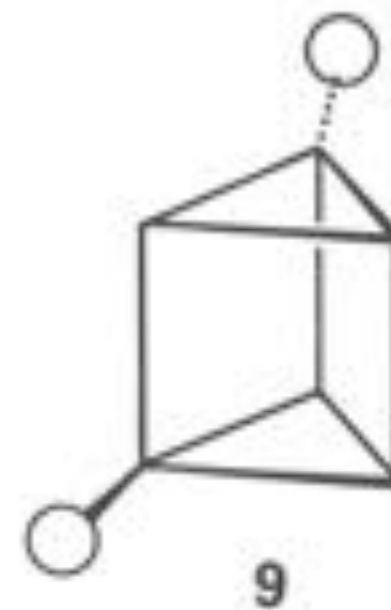
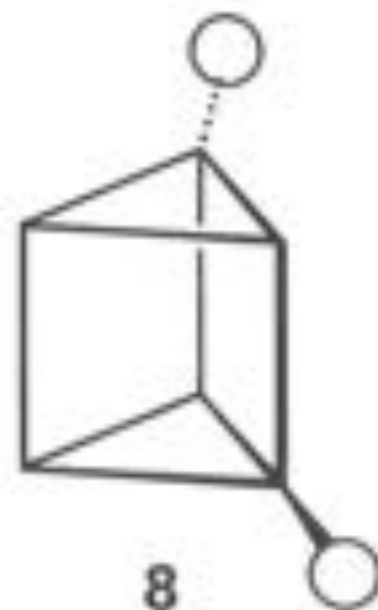
Paul Havrezによるベンゼンの対称的な
立体模型（1865年）



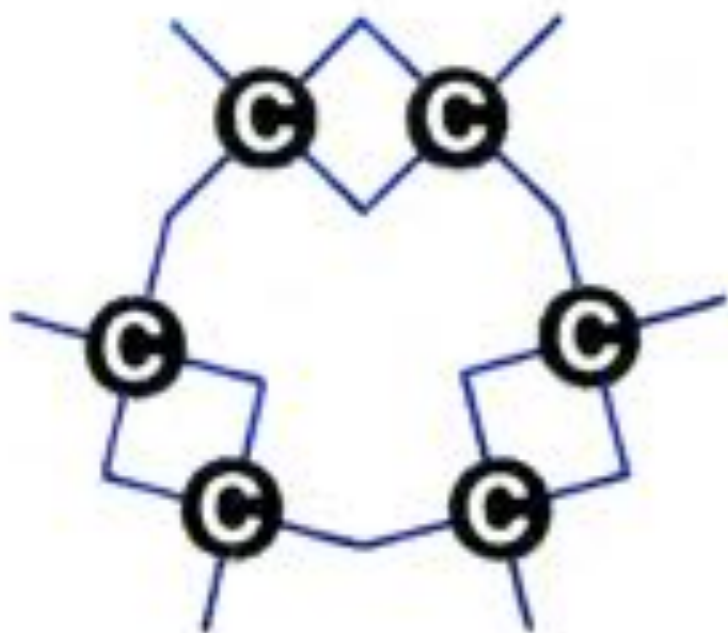
1935年までに提唱された様々なベンゼン構造モデル



ケキュレ6員環モデルの問題点： $C_6H_4Cl_2$ 分子（化合物4と5）は実験的に区別できない



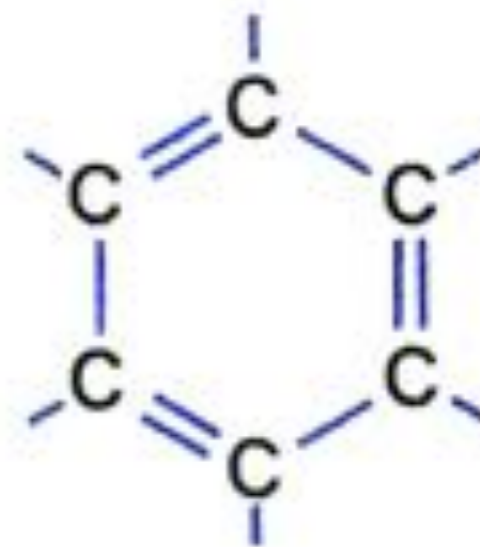
Ladenburgによる $C_6H_4Cl_2$ 分子 構造モデル: 化合物8と9は鏡像関係にある



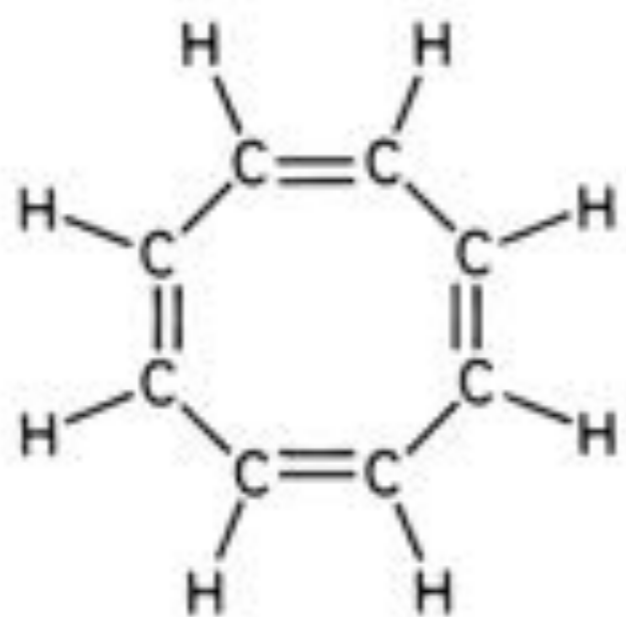
Kekulé, 1866



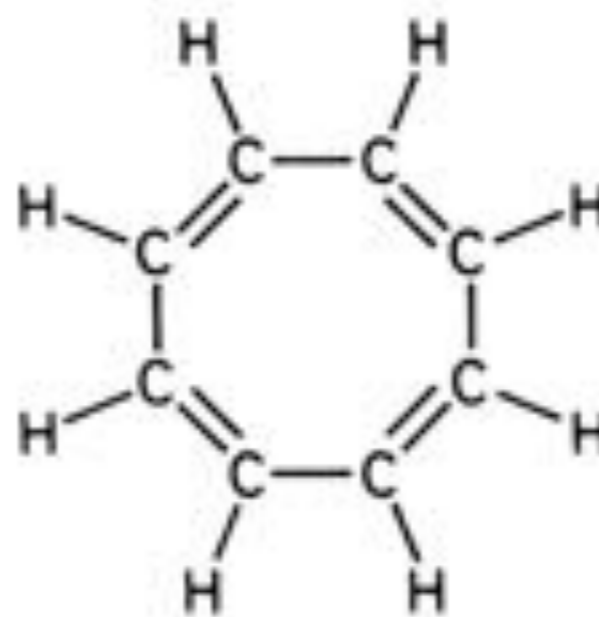
and



Kekulé, 1872



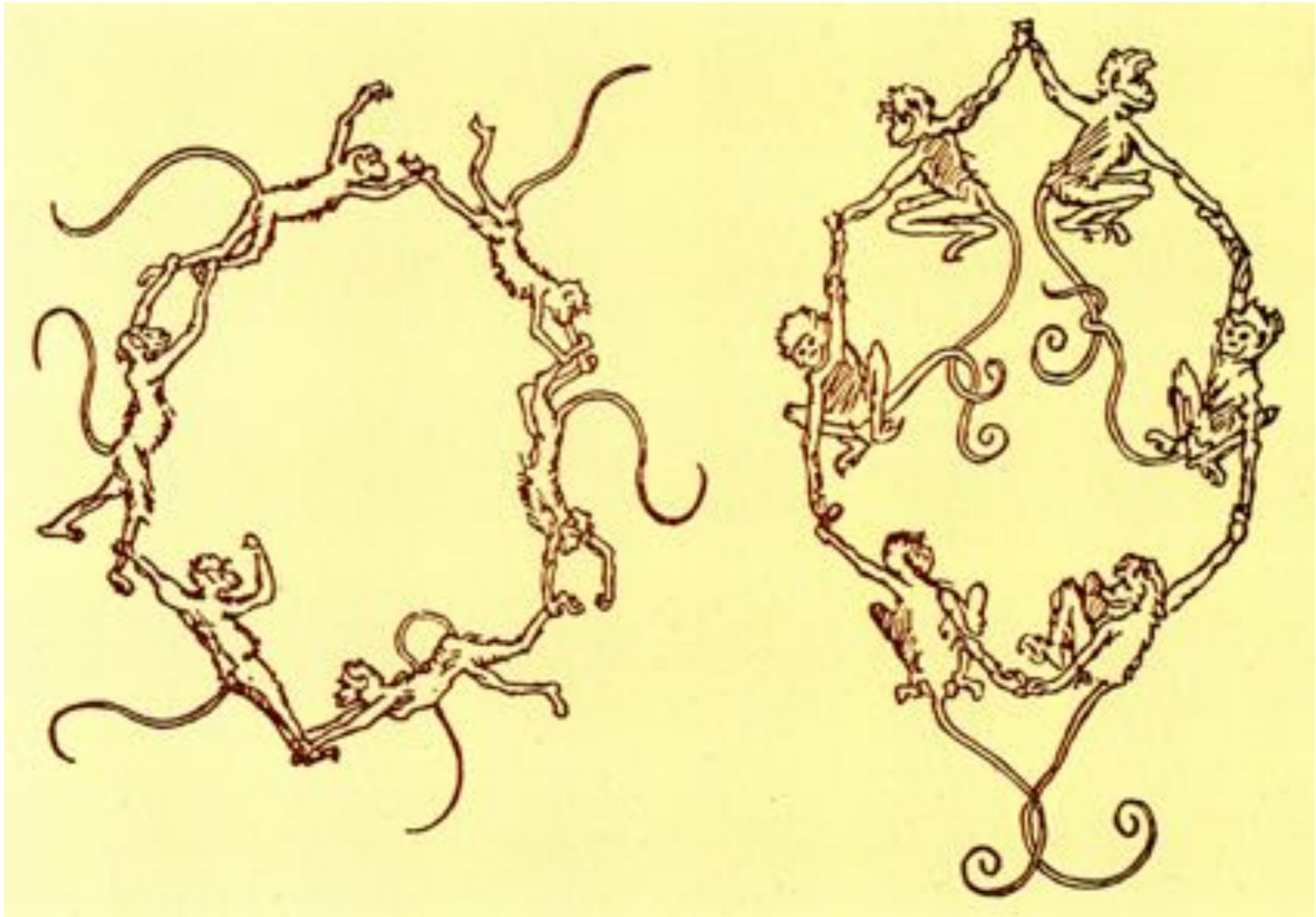
and



10

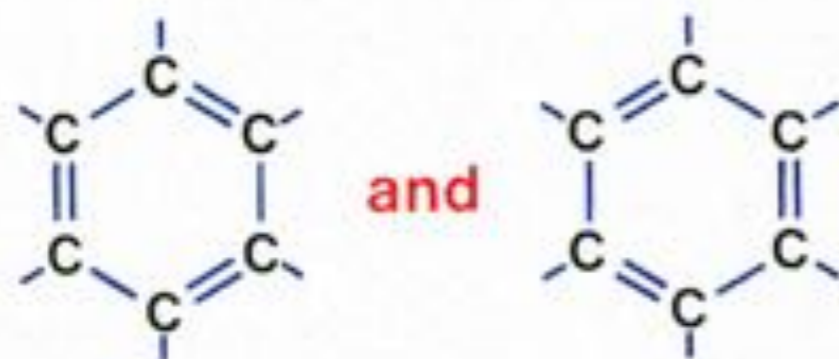
Richard Willstaetter(1872-1942), 1911

ケキュレの6員環構造は当時の化学者すべてから支持されていた訳ではない。

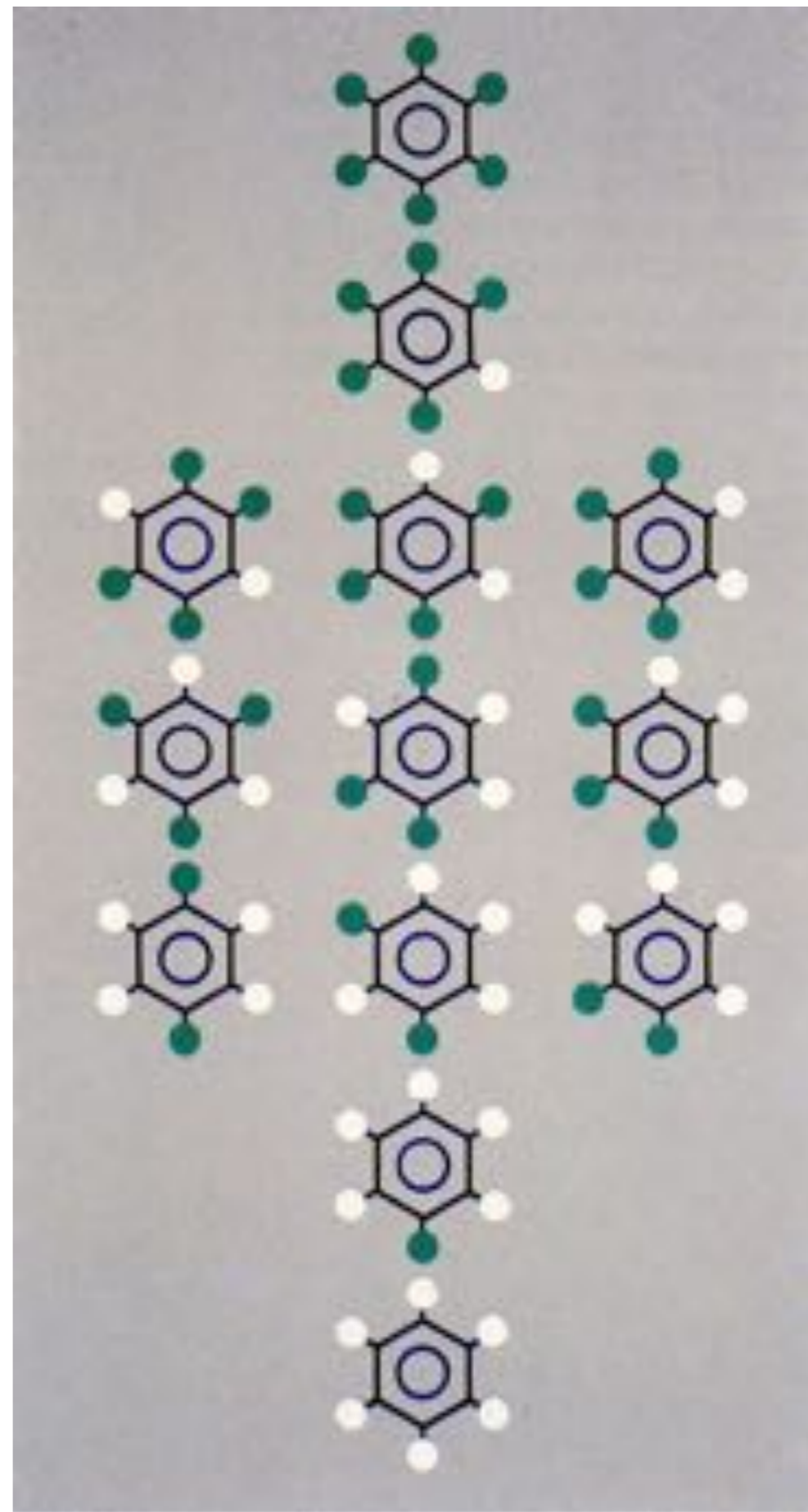
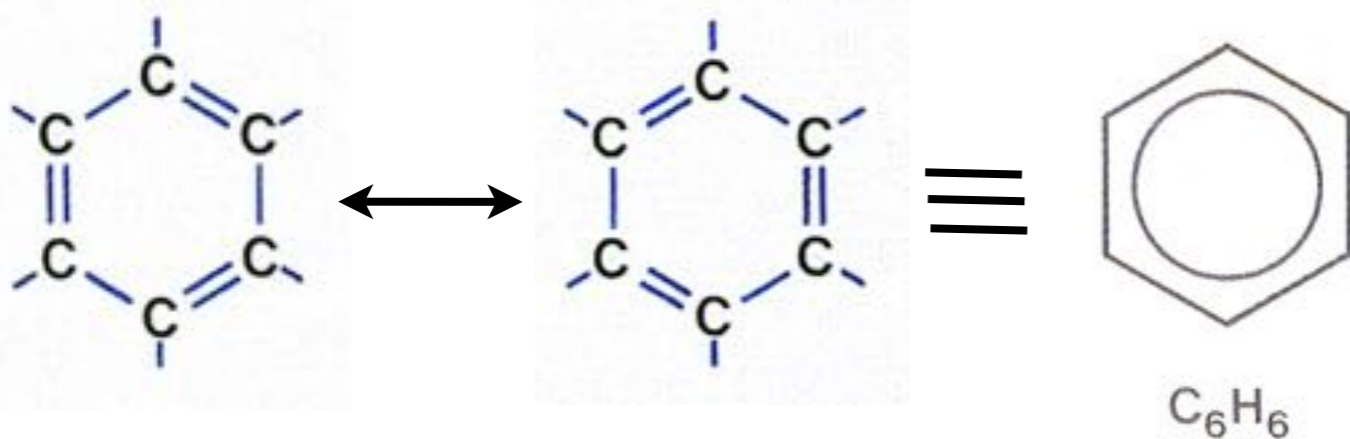


F. W. Finding(N. O. Wittの偽名) によるベンゼン構造のパロディ (1886年)

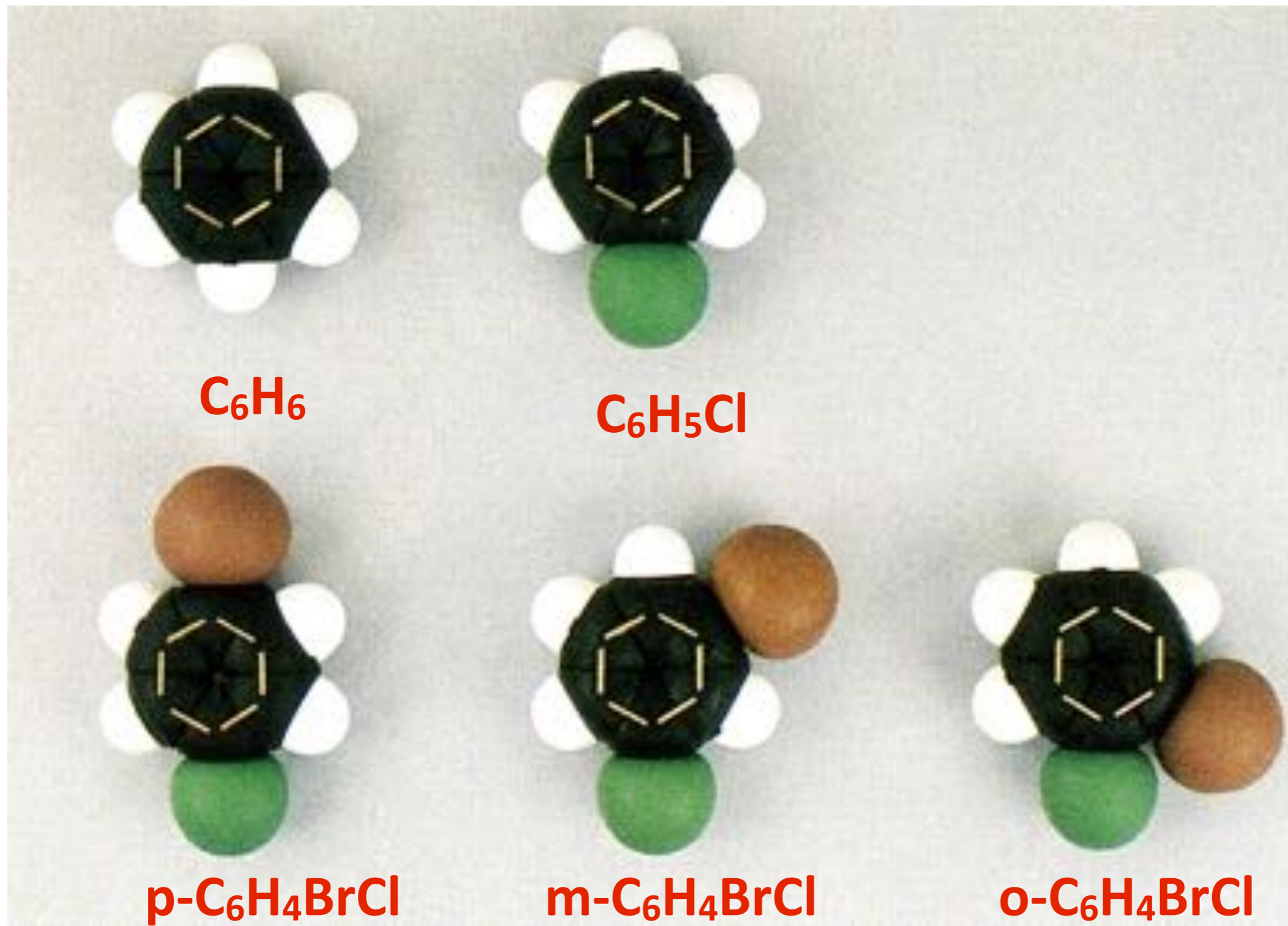
Sum-formula	Number of isomers
C_6H_6	1
C_6H_5Cl	1
$C_6H_4Cl_2$	3
$C_6H_3Cl_3$	3
$C_6H_2Cl_4$	3
C_6HCl_5	1
C_6Cl_6	1



Kekulé, 1872



Linus Paulingの共鳴 resonance理論



塩素Clを臭素Brに置換し臭素Brを塩素Clに置換する反応で同じ化合物を合成する。

1866-1874年 Kekuleの学生とWilhelm Koerner(1839-1925)の試み、

1980年 J. Michael MacBrideによる最終的な証明



Linus Carl Pauling
(1901– 1994)

(原子価結合法の創設者の一人)

Valence Bond Theory

量子化学者、生化学者。結晶学者、分子生物学者、医療研究者とも自称。20世紀における最も重要な化学者の一人。量子力学を化学に応用した先駆者(原理上、量子力学は化学と分子生物学の全情報を記述出来る)。化学結合の本性を記述した業績により1954年にノーベル化学賞を受賞。結晶構造決定やタンパク質構造決定に重要な業績を残し、分子生物学の祖の一人とされる。ワトソンとクリックが1953年にDNAの超微細構造である「二重らせん」を発見した時に、ポーリングはほぼそれに近い形を発見していた。量子力学と分子生物学に加え、無機化学、有機化学、金属学、免疫学、麻醉学、心理学、弁論術、放射性崩壊、原水爆戦争の影響などを究めた。

1962年、地上核実験に対する反対運動の業績によりノーベル平和賞を受賞。

(Wikipedia)



Robert Sanderson Mulliken
(1896 –1986)

(分子軌道法の創設者の一人)

Molecular Orbital Theory

シカゴ大学でロバート・ミリカンのもとで、水銀の同位体の分離の研究。ヨーロッパ留学中に、当時の量子力学の研究者たちと研究し、**1927年には、フリードリヒ・フントと分子軌道法に関するフント-マリケンの理論を示した。**

ニューヨーク大学の物理学科で教え物理学者としても認められたが、物理と化学の境界領域を研究した。**分子の電子構造はハイトラーとロンドンによって1927年に水素分子について計算され、スレーターとポーリングによって原子価結合法 (Valence Bond Theory) に改良された。マリケンはレナード＝ジョーンズが行った量子力学的取り扱いを用いて、分子軌道法 (Molecular Orbital Theory) の適用範囲を拡大した。1966年にノーベル化学賞を受賞した。(Wikipedia)**



京都大学工学部教授， 後に京都工芸繊維大学学長

メモ魔： 枕元にメモ帳と鉛筆を置いて就寝。散歩にメモ帳を持参。

「メモしないでも覚えているような思いつきは大したものではない。メモしないと忘れてしまうような着想こそが貴重なのです」

「時間と空間を媒介して宇宙空間の全ては因果関係でつながっている」

「ひとりの人間は、無限の過去、無限の未来とつながっている」

「科学者を目指す若者に中等教育で最も励んで欲しいのは数学、特に平面幾何学である」

福井謙一(1918-1998)

フロンティア軌道理論
の創設者

Frontier MO Theory

「化学と私」 (1982, 化学同人)

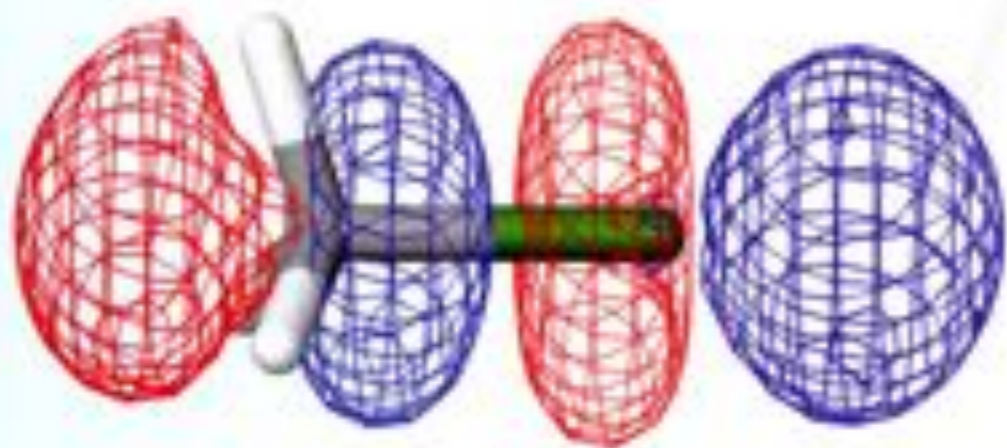
日本化学会 学会出版センター 化学総説 No.38(1983):
「福井謙一とフロンティア軌道理論」

「学問の創造」 (1987, 朝日文庫)

「哲学の創造」 (1996, 梅原猛との共著・PHP研究所)

Ian Fleming
Molecular Orbitals
and Organic
Chemical Reactions

Student Edition



WILEY

(2009)

Ian Fleming
Frontier Orbitals and Organic
Chemical Reactions
(1976, John Wiley & Sons)
フロンティア軌道法入門(1978, 講談社)

福井謙一のフロンティア軌道理論(1952)
Ken-ichi Fukui
Frontier Orbital Theory

K. Fukui, T. Yonezawa, H. Shingu,

A molecular orbital theory of
reactivity in aromatic hydrocarbons

J. Chem. Phys., 1952, 20, 722-725

Theory of Orientation and
Stereoselection

(1975, Springer-Verlag)

化学反応と電子の軌道 (1976, 丸善)

1981年ノーベル化学賞
化学反応過程の理論的研究
福井謙一とRoald Hoffmannの受賞

Ian Fleming's

Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions

Preface

1 Molecular Orbital Theory

2 The Structures of Organic Molecules

3 Chemical Reactions—How Far and How Fast

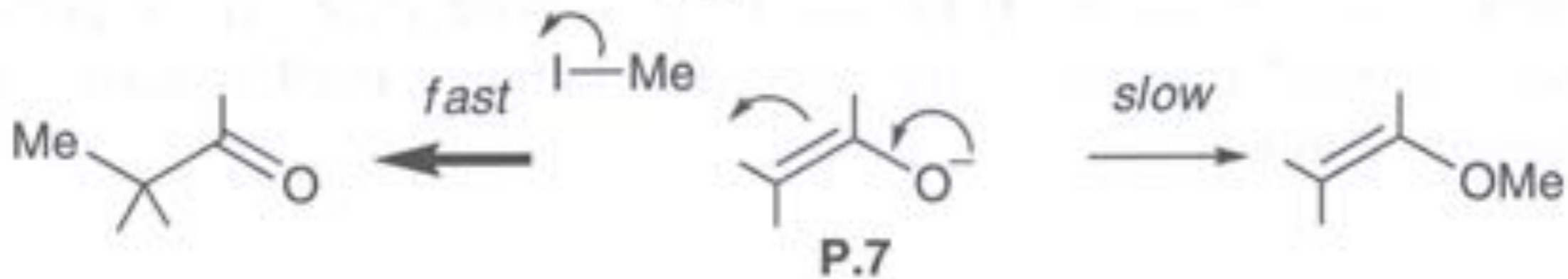
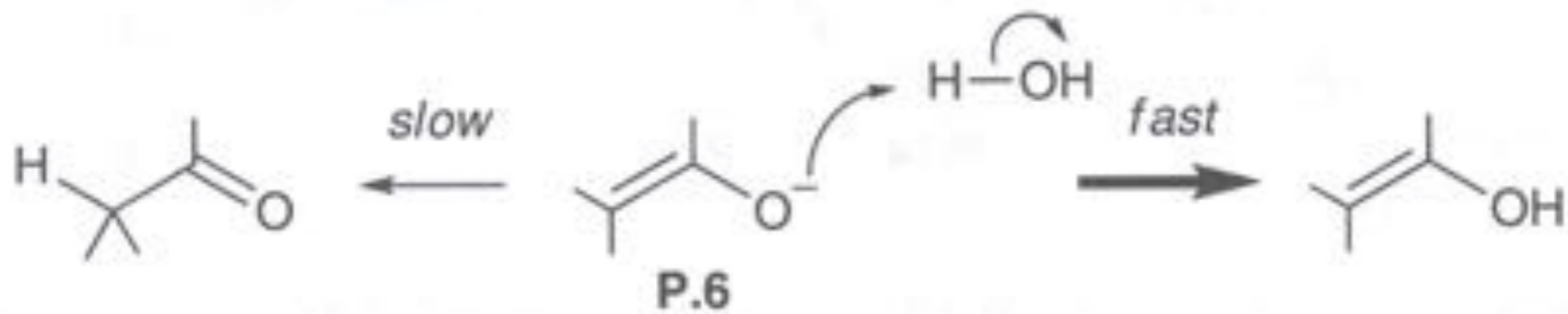
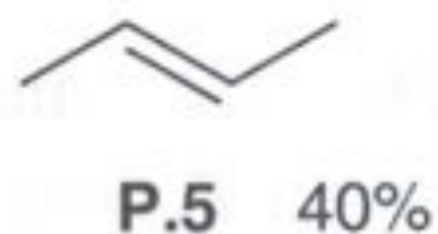
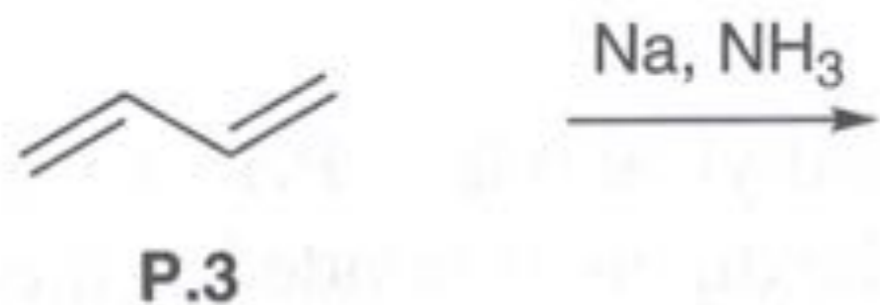
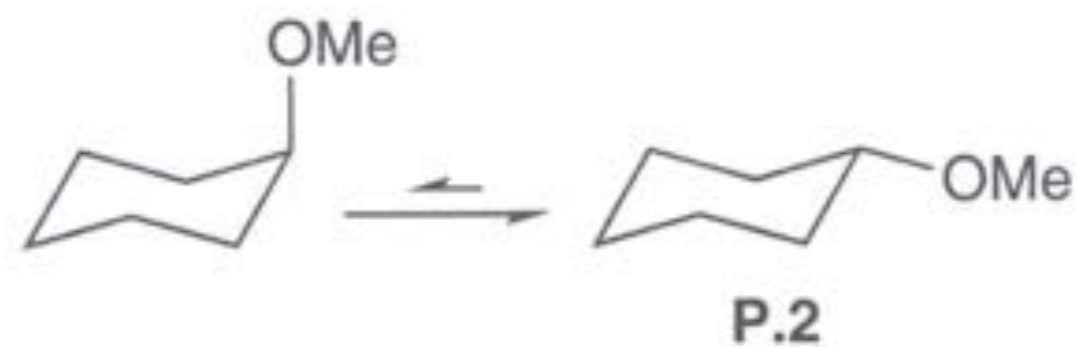
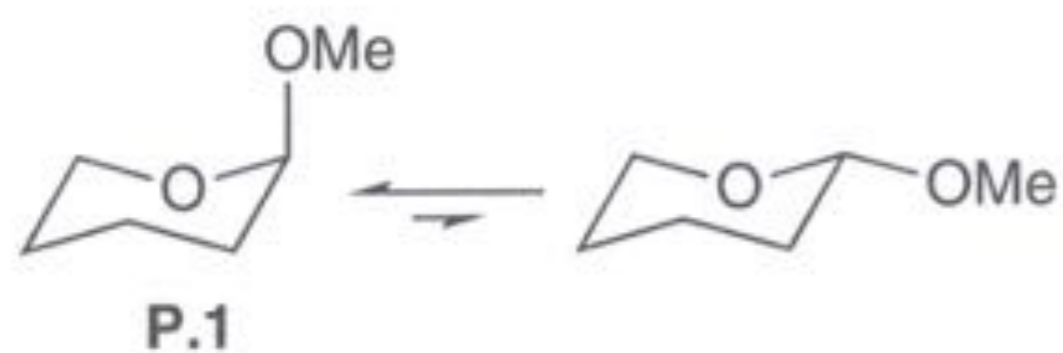
4 Ionic Reactions—Reactivity

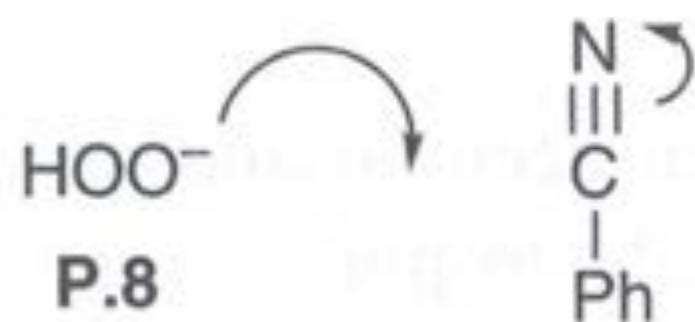
5 Ionic Reactions—Stereochemistry

6 Thermal Pericyclic Reactions

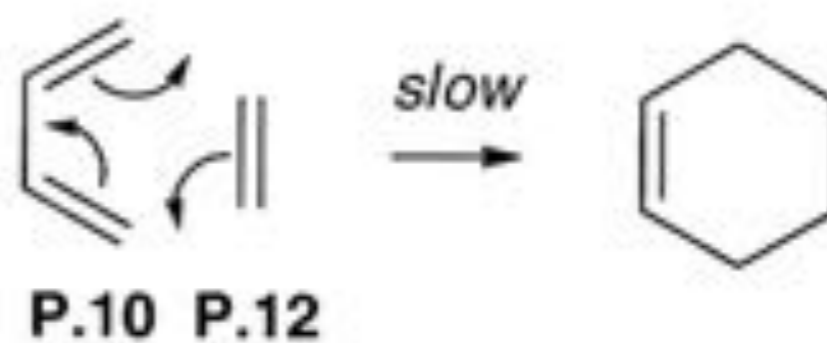
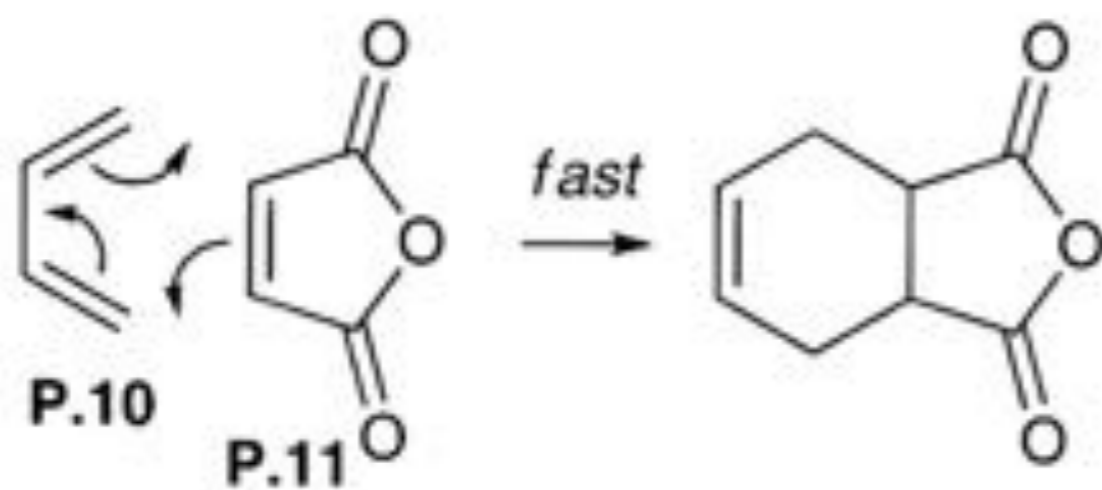
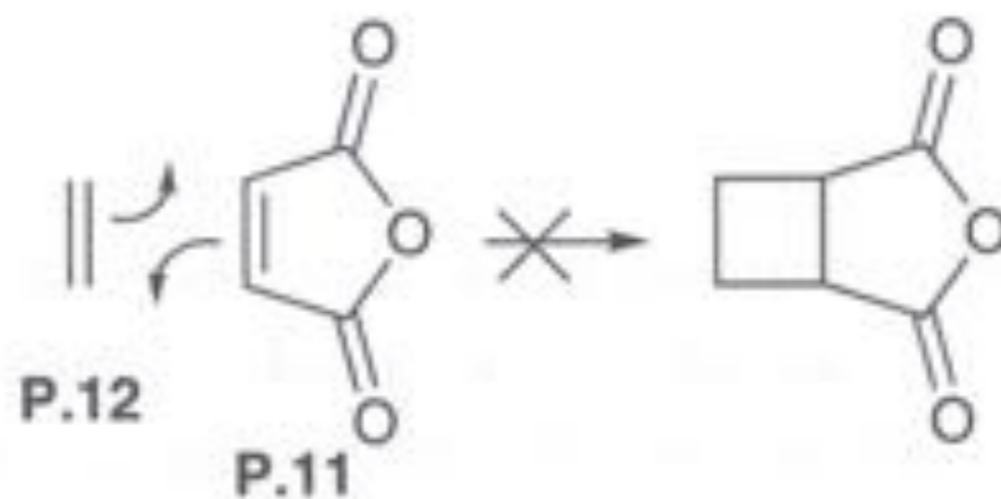
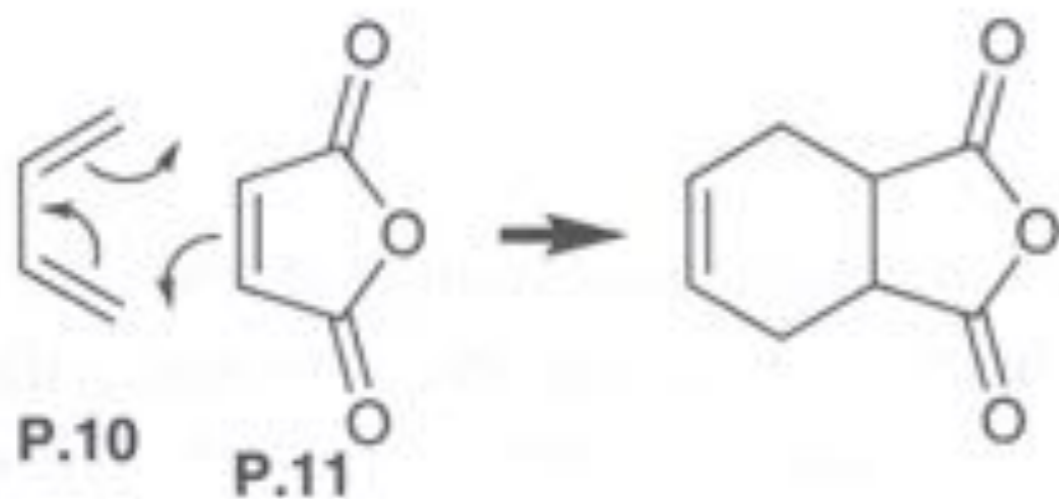
7 Radical Reactions

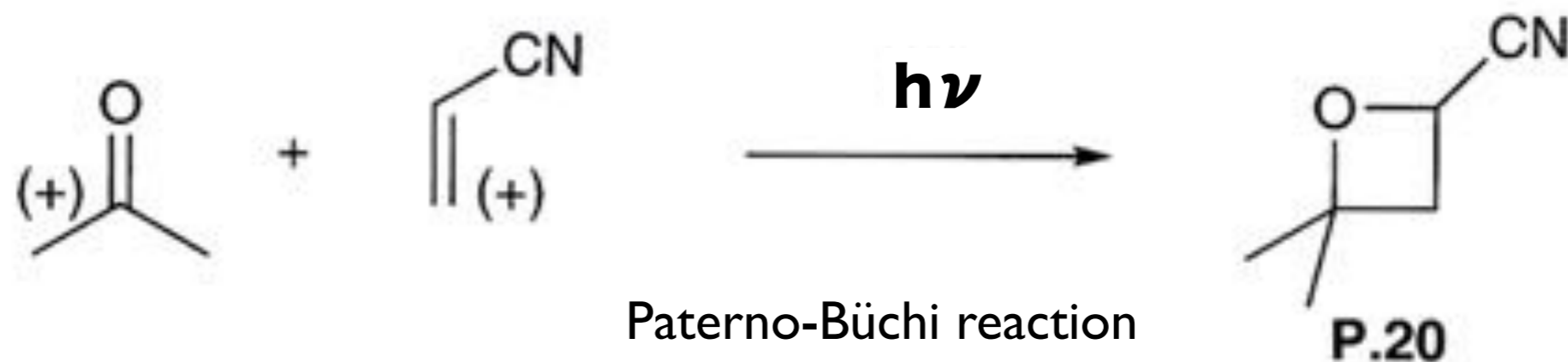
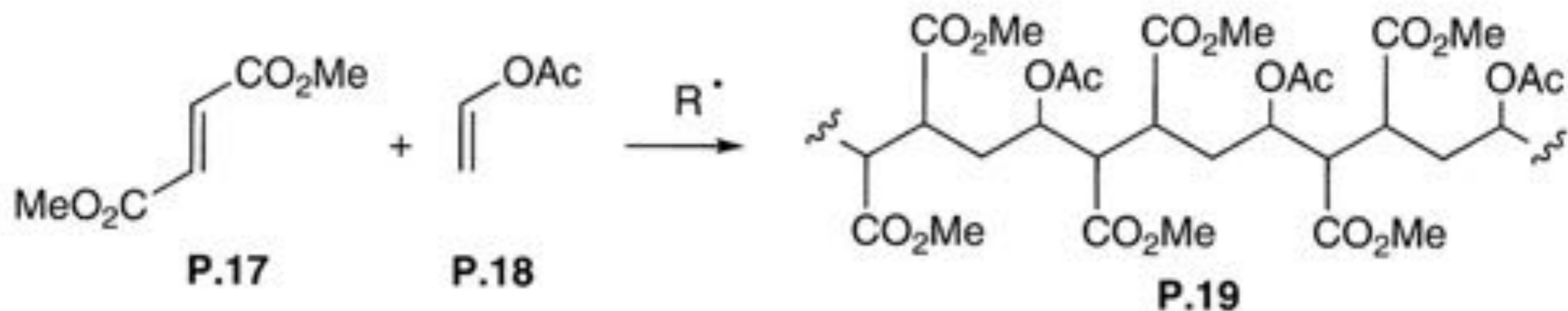
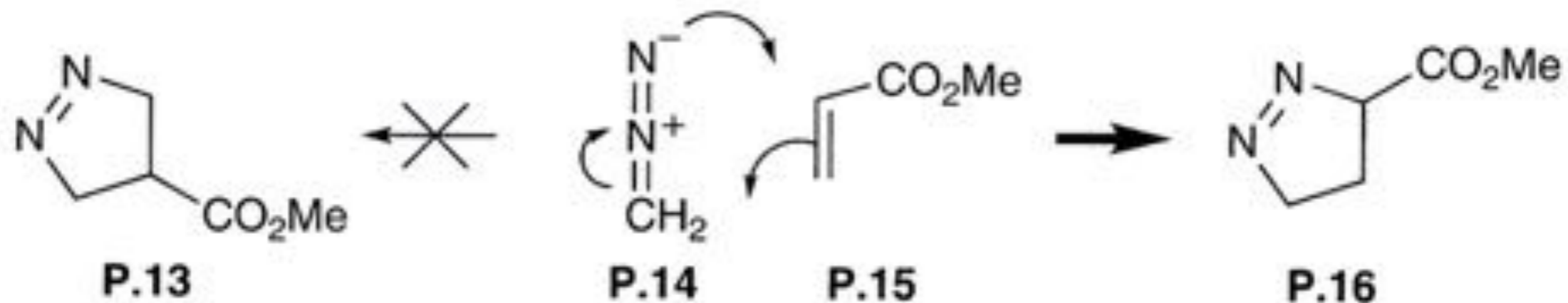
8 Photochemical Reactions





10^5 times faster than





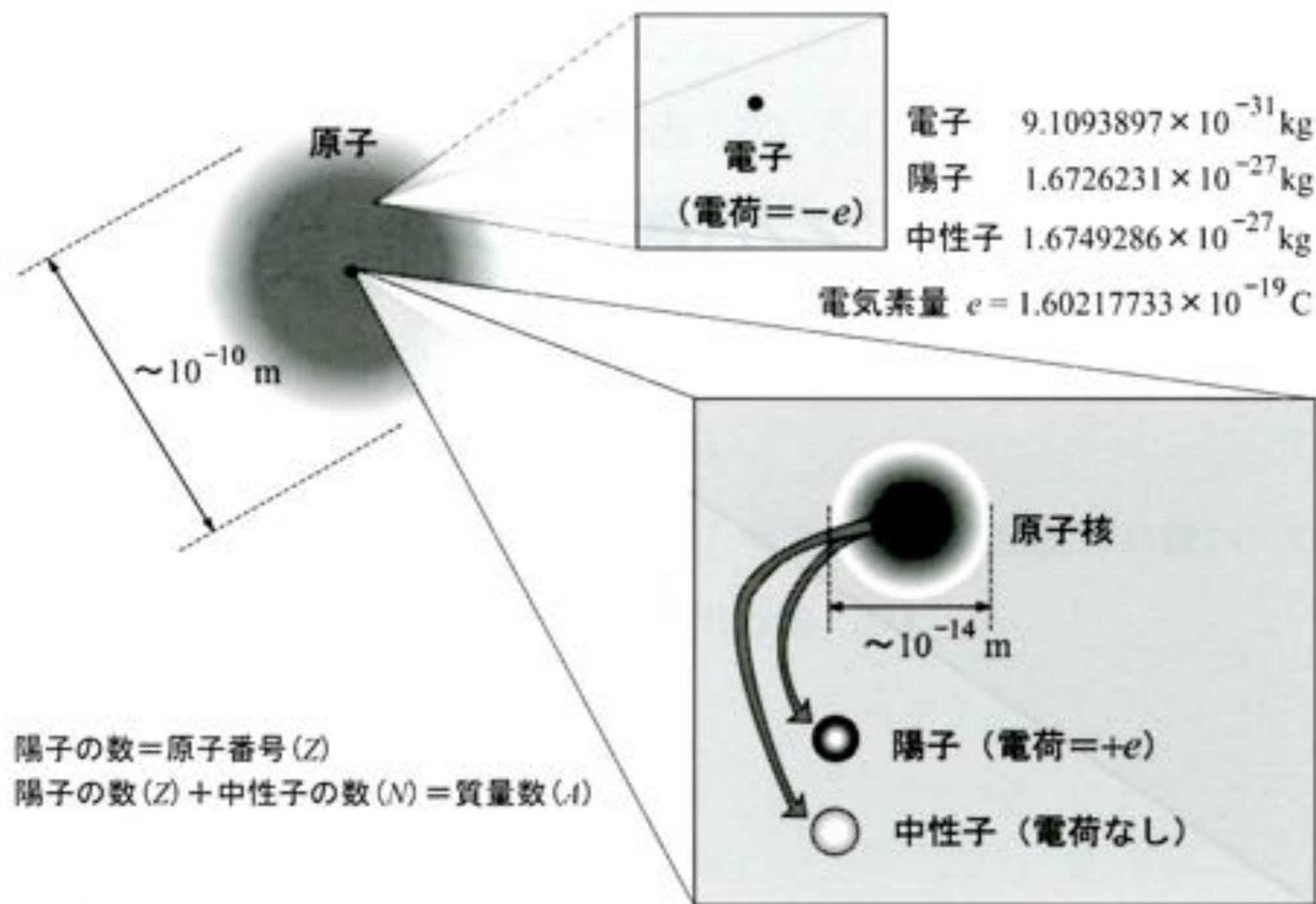


図1 原子の構成要素

Hydrogen Atom

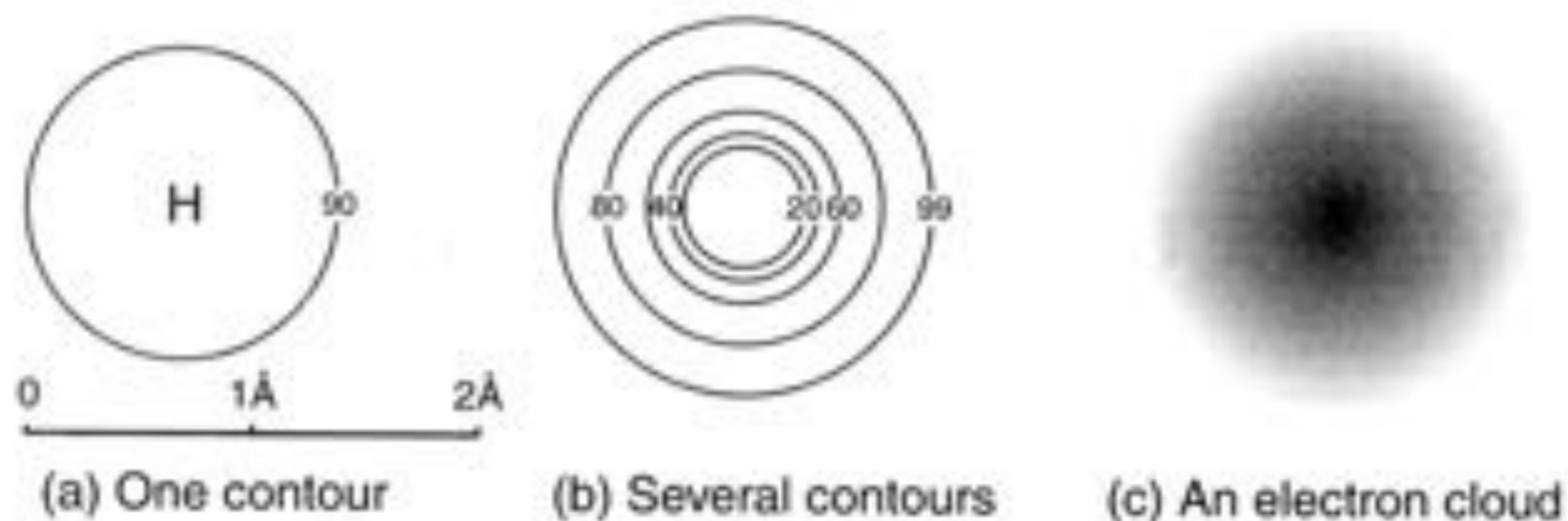


Fig. 1.1 The 1s atomic orbital of a hydrogen atom

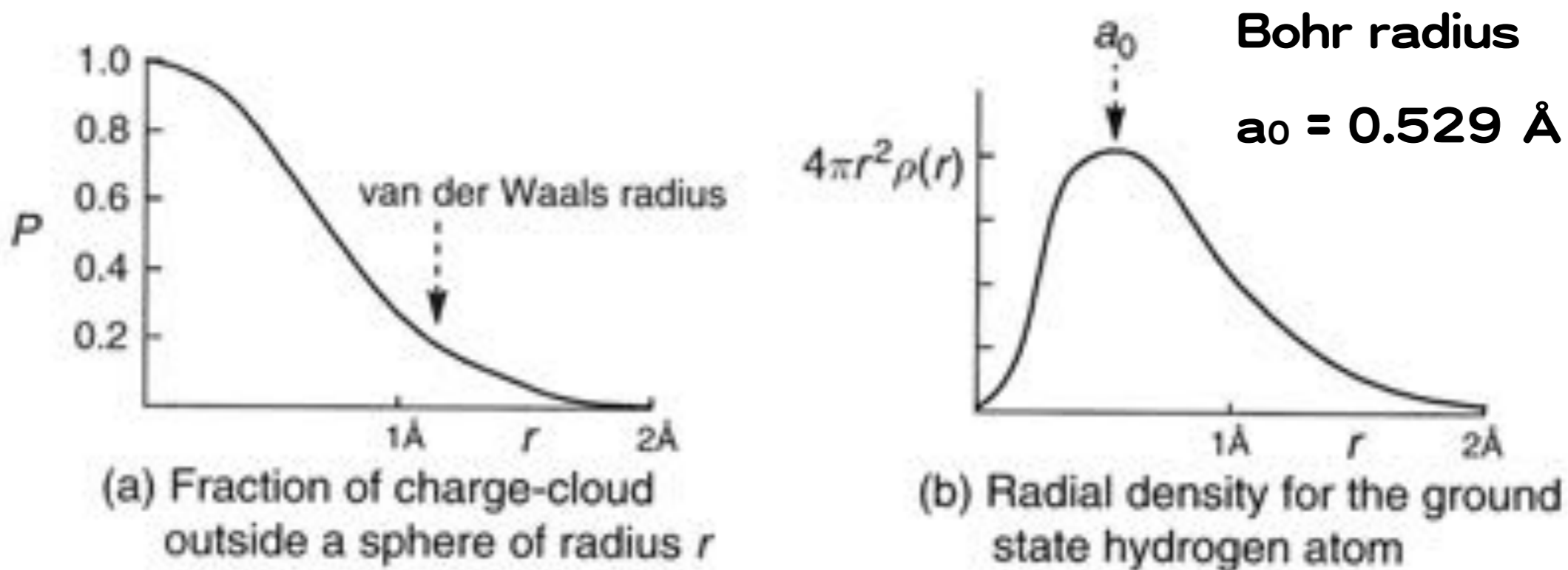


Fig. 1.2 Radial probability plots for the 1s orbital of a hydrogen atom

The H₂ Molecule

分子軌道 molecular orbital: $\sigma = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$

linear combination of atomic 1s wave functions on atoms 1 and 2.

電子密度 electron distribution:

$$\sigma^2 = (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^2 = (c_1\phi_1)^2 + (c_2\phi_2)^2 + 2c_1\phi_1c_2\phi_2$$

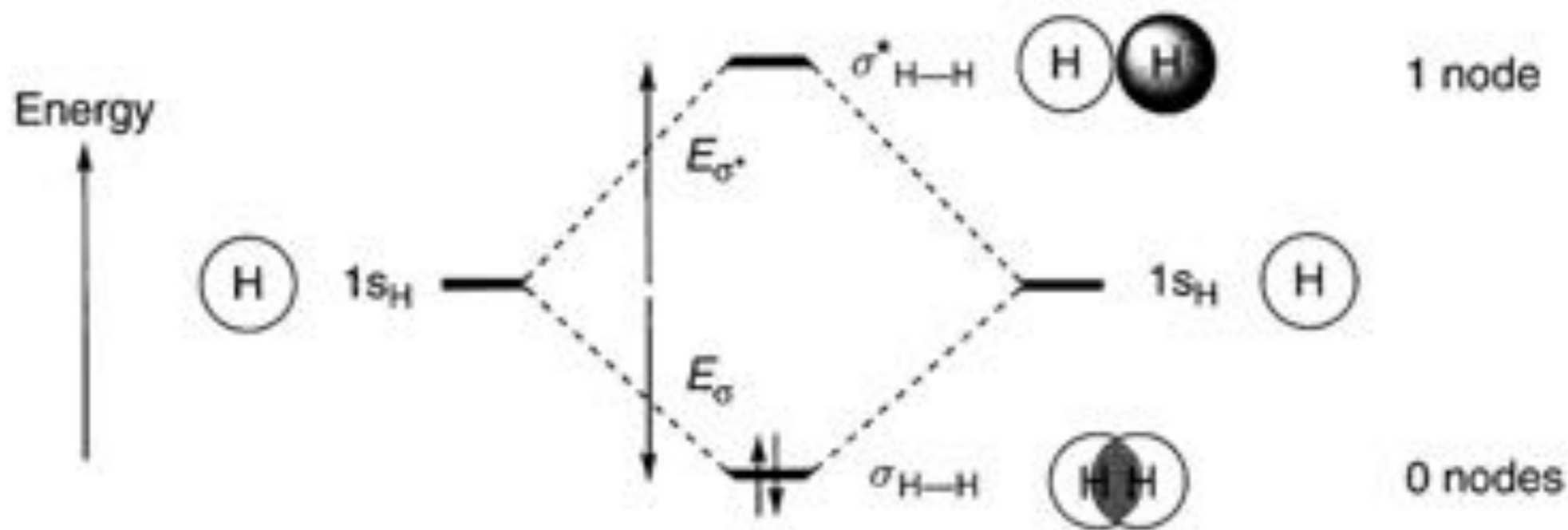


Fig. 1.3 The molecular orbitals of the hydrogen molecule

重なり積分 overlap integral S :

$$S_{12} = \int \phi_1 \phi_2 d\tau$$

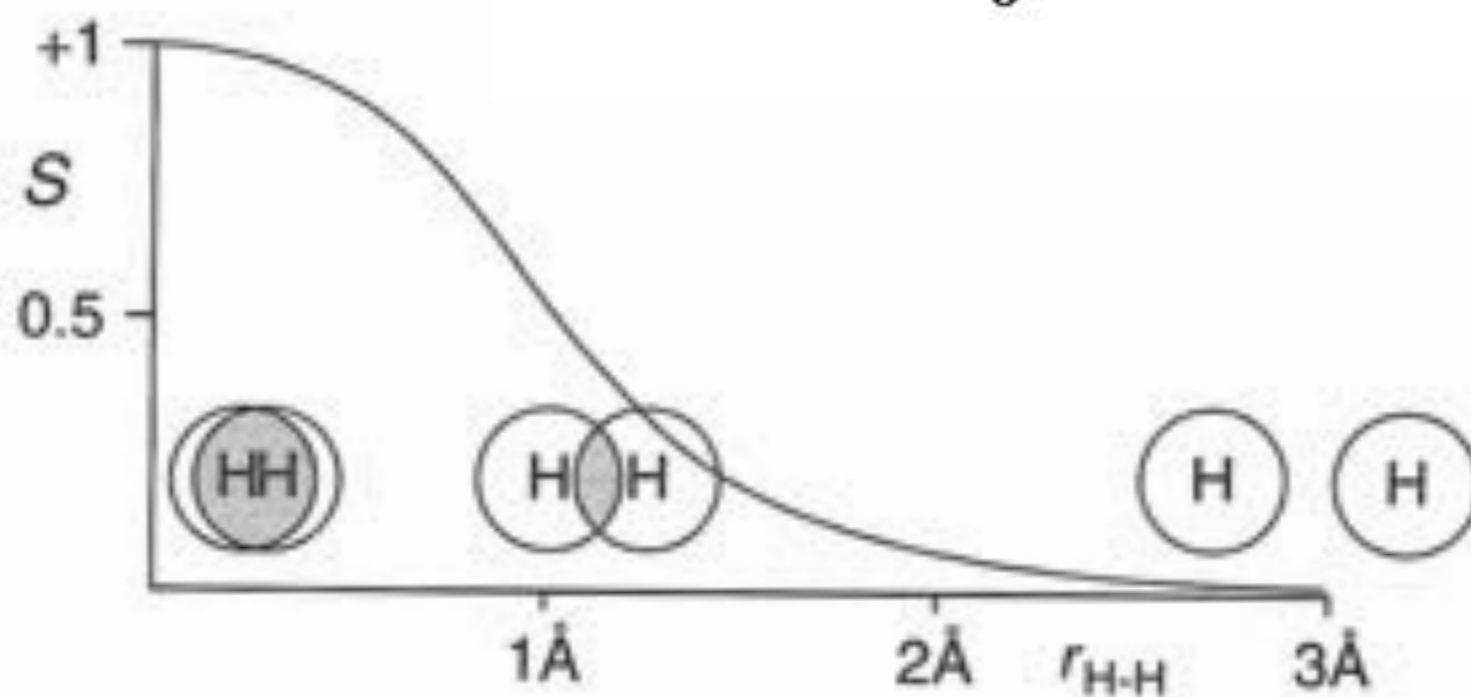


Fig. 1.4 The overlap integral S for two $1s_H$ orbitals as a function of internuclear distance

結合性と反結合性分子軌道にある電子エネルギー準位
Energy E of an electron in a **bonding** and an
antibonding molecular orbitals

$$E = \frac{\alpha + \beta}{1 + S} \quad (\text{結合性軌道}) \quad E = \frac{\alpha - \beta}{1 - S} \quad (\text{反結合性軌道})$$

α : クーロン積分 **Coulomb integral**
孤立した原子軌道にある 1 個の電子エネルギー

$$\alpha = \int \phi_1 H \phi_1 d\tau$$

β : 共鳴積分 **resonance integral**
二つの原子核の間の中にある 1 個の電子エネルギー
(非局在化 delocalisation による安定化エネルギー)

$$\beta = \int \phi_1 H \phi_2 d\tau \quad (\text{負の値をとる})$$

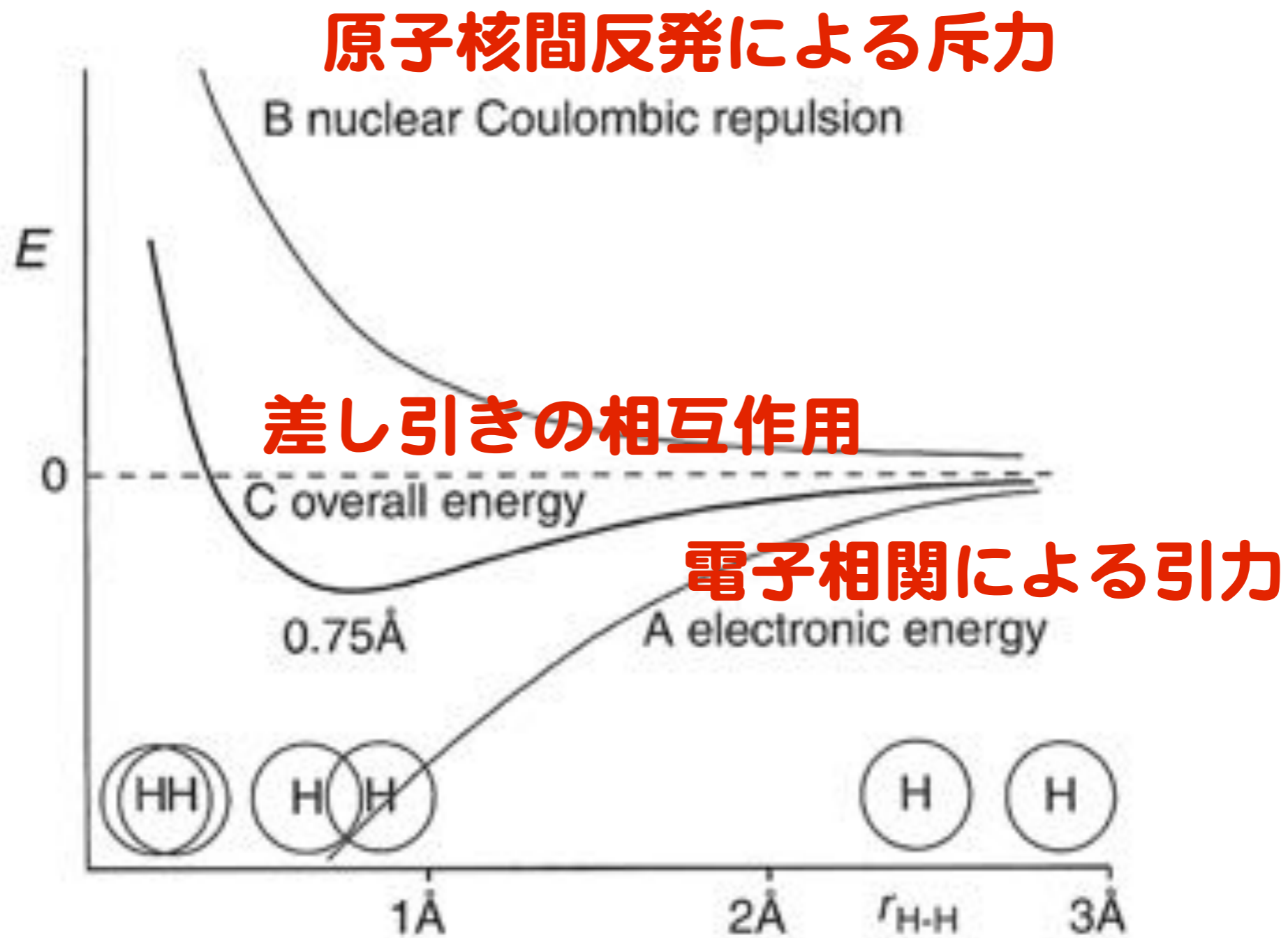
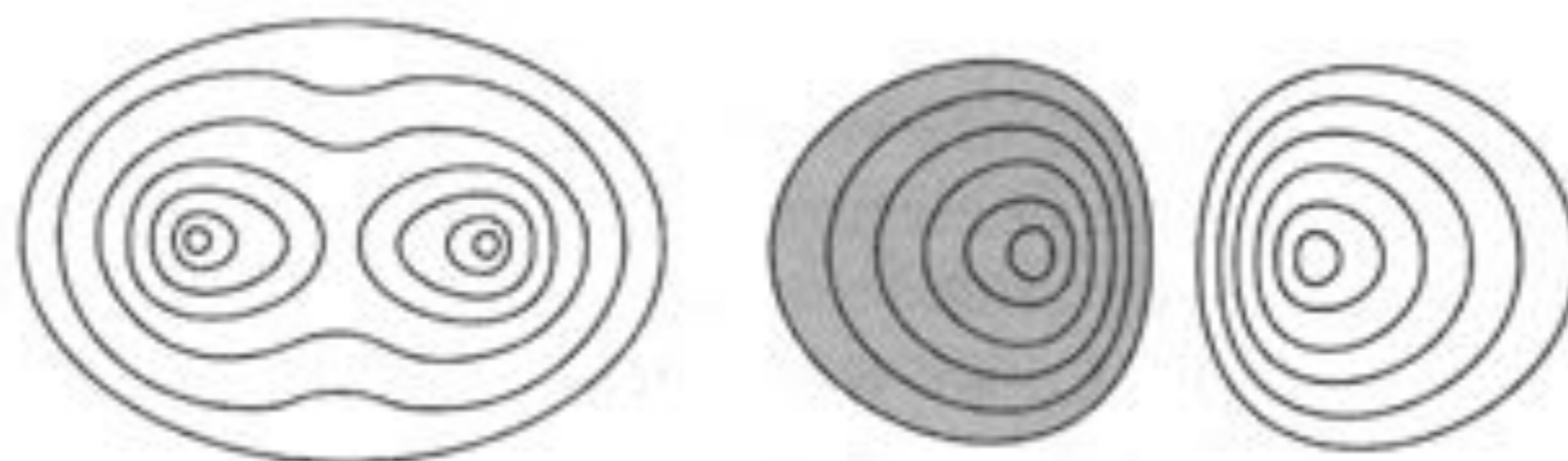






Fig. 1.5 Electronic attraction, nuclear repulsion and the overall effect as a function of internuclear distance for two $1s_{\text{H}}$ atoms



(a) The σ -bonding orbital

(b) The σ^* -antibonding orbital

Fig. 1.6 Contours of the wave function of the molecular orbitals of H_2

	c_1		c_2	
σ^*	0.707			-0.707
				$\sum C^{*2} = 1.000$
σ	0.707			0.707
				$\sum C^2 = 1.000$
	$\sum C_1^2 = 1.000$		$\sum C_2^2 = 1.000$	

The H_3 Molecule

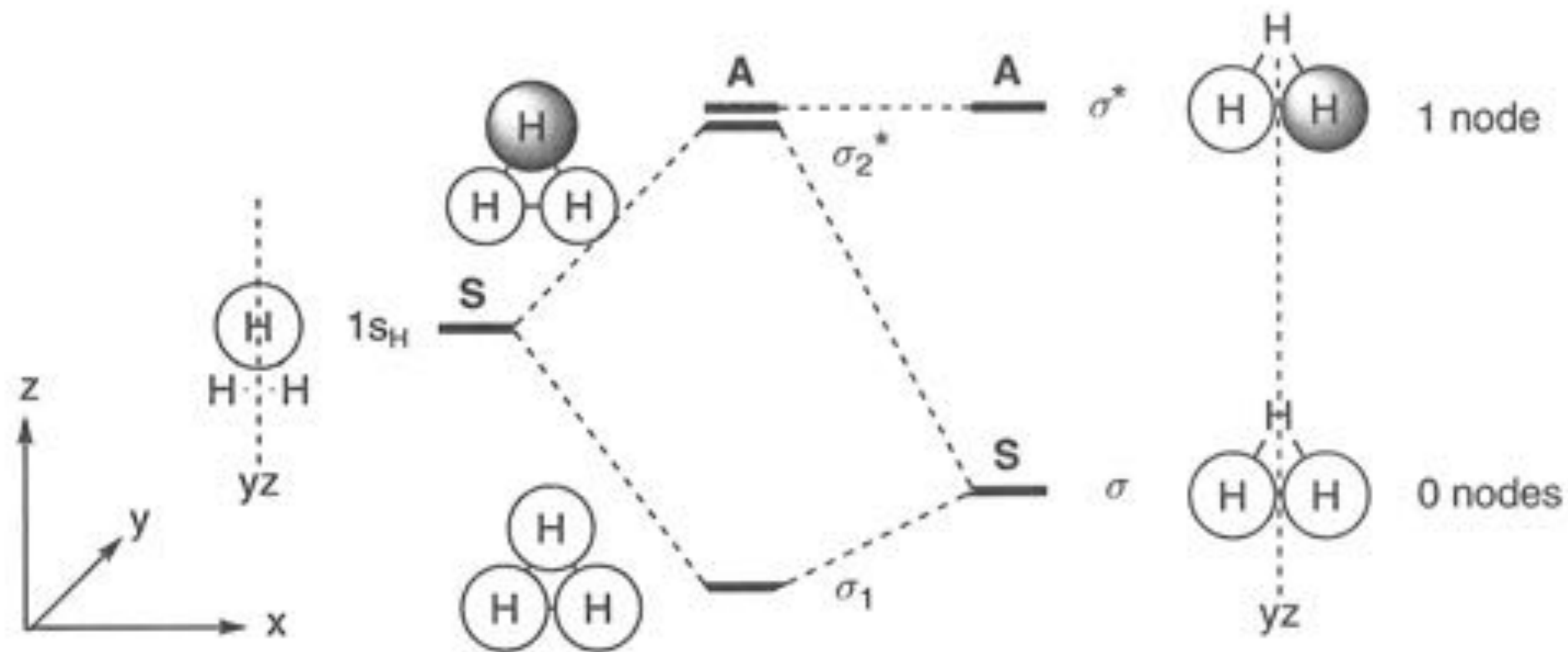


Fig. 1.7 Interacting orbitals for H_3

The H₄ 'Molecule'

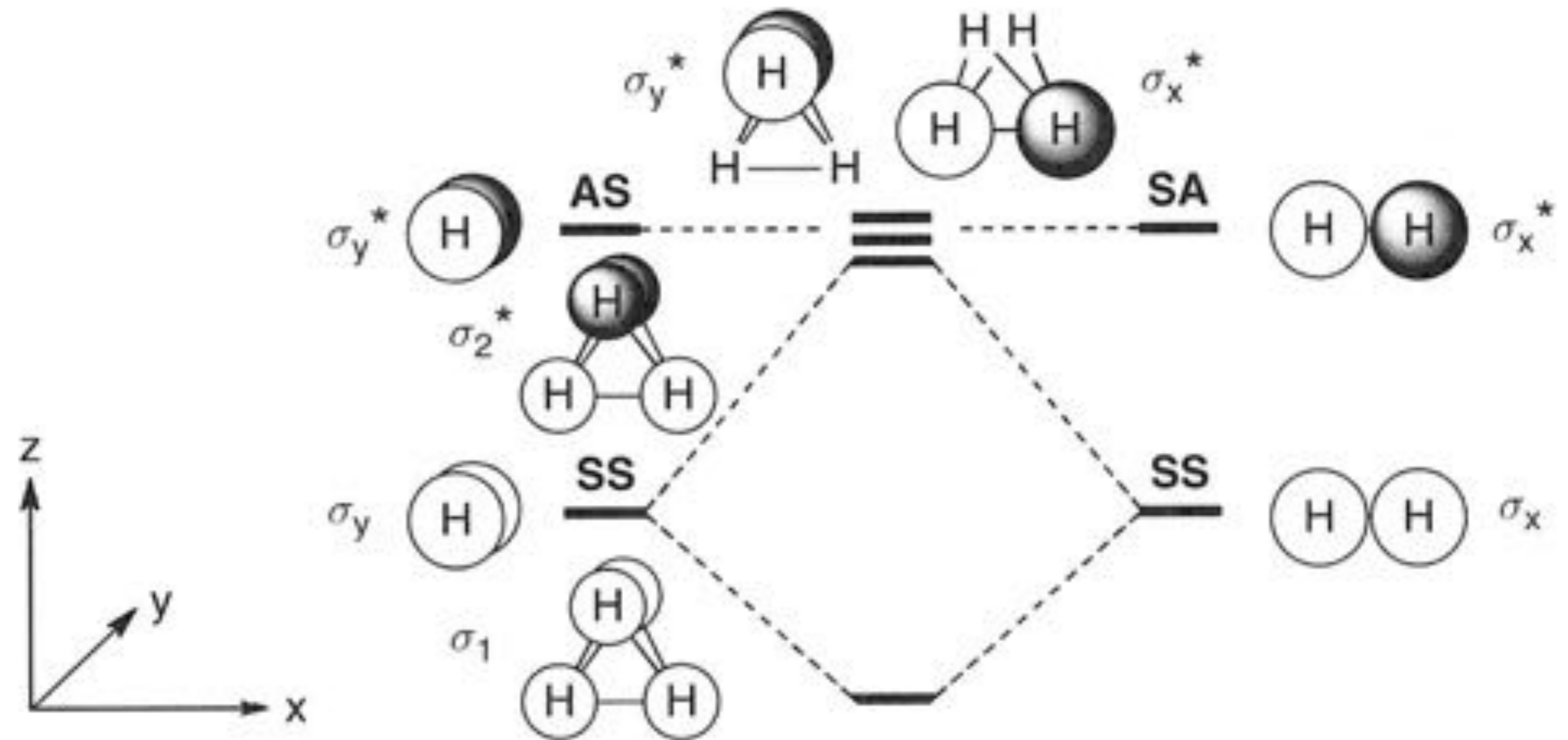


Fig. 1.8 The orbitals of tetrahedral H₄

Carbon Atom

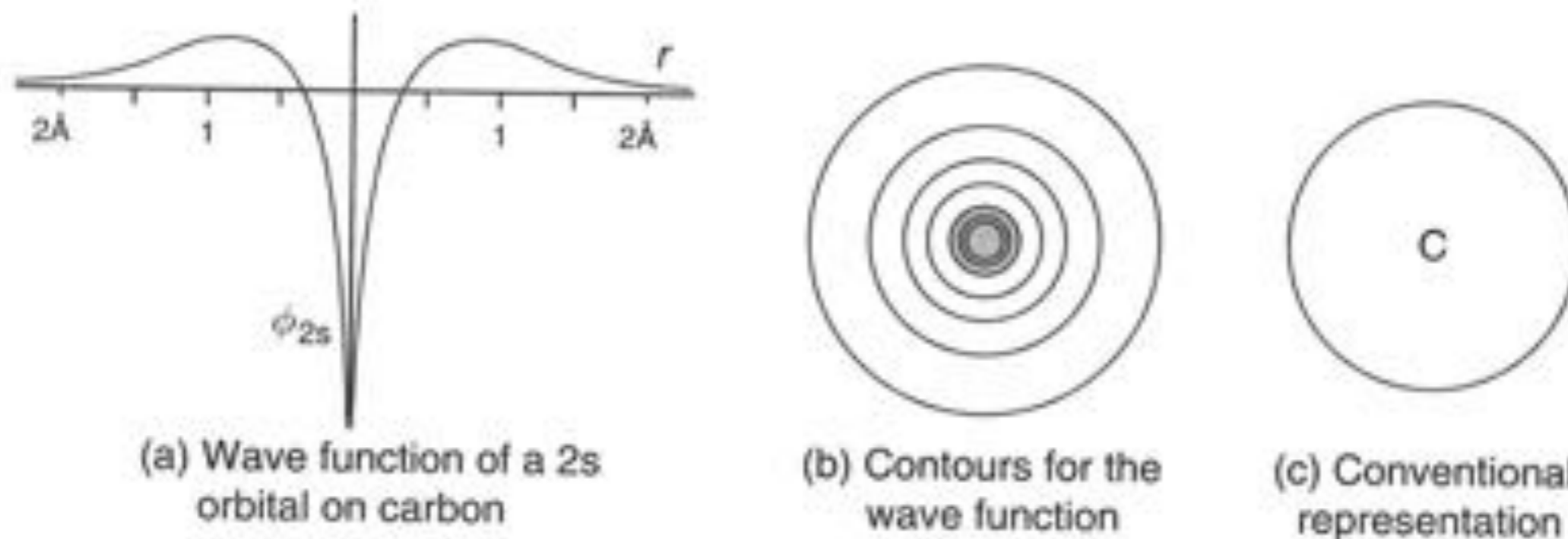


Fig. 1.9 The 2s atomic orbital on carbon

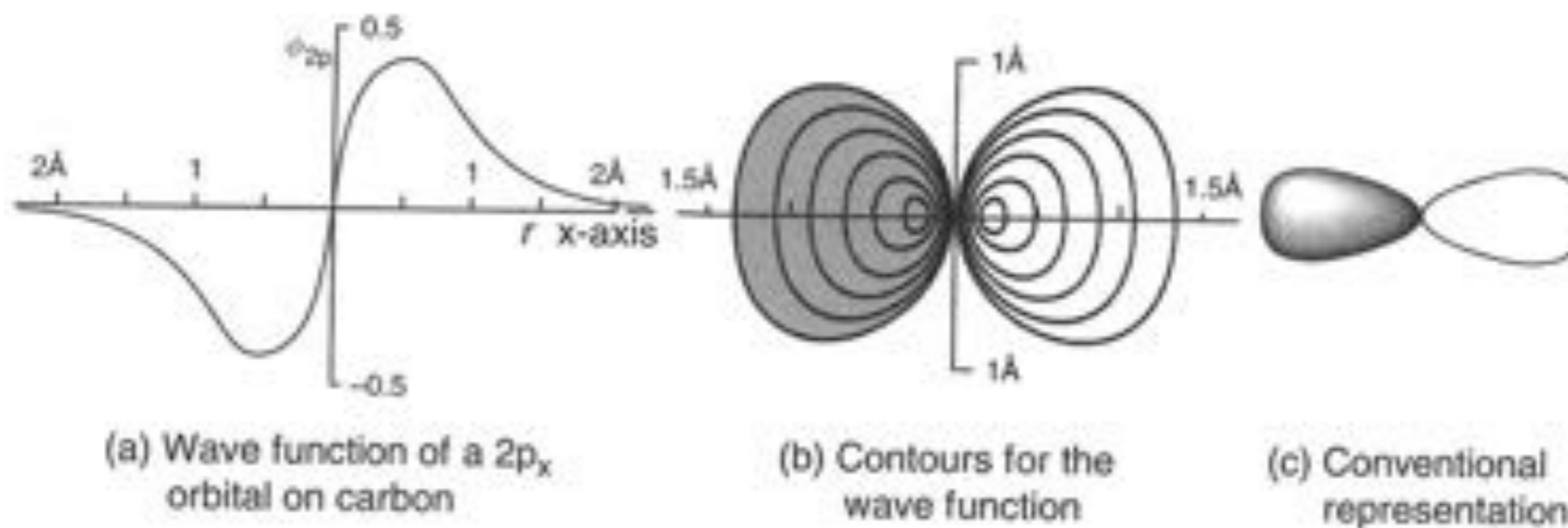
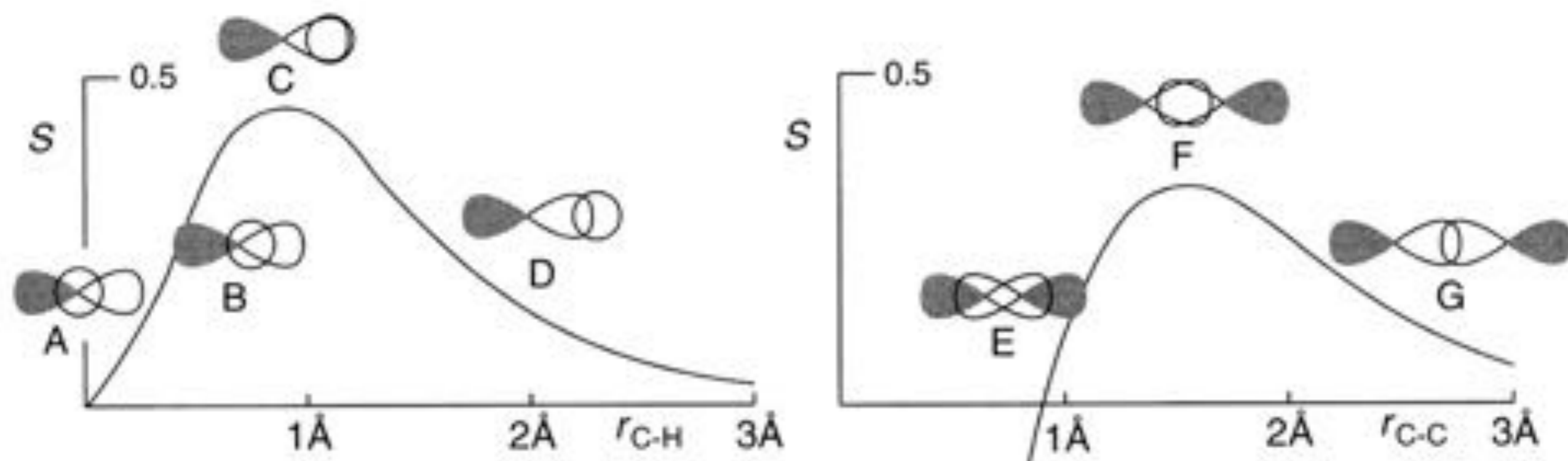


Fig. 1.10 The $2p_x$ orbital on carbon

C—H and C—C Bonds



(a) Overlap integral for σ overlap of a p orbital on C with an s orbital on H

(b) Overlap integral for σ overlap of two p orbitals on C

Fig. 1.11 Overlap integrals for σ overlap with a p orbital on carbon

Methane $\text{CH}_4 = \text{C} + \text{H}_4$

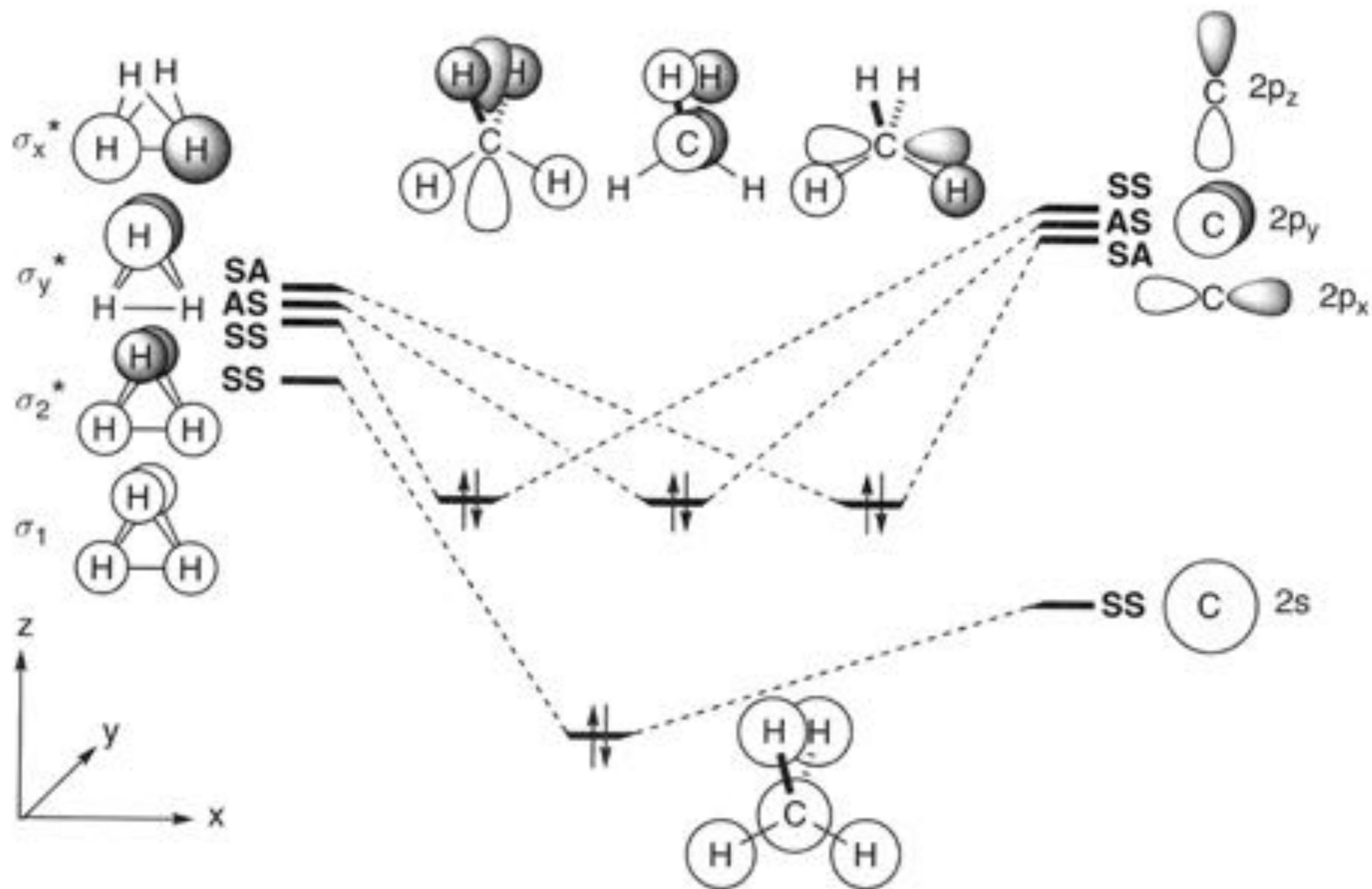


Fig. 1.12 The molecular orbitals of methane from the interaction of the orbitals of tetrahedral H_4 and a C atom

Methane CH₄

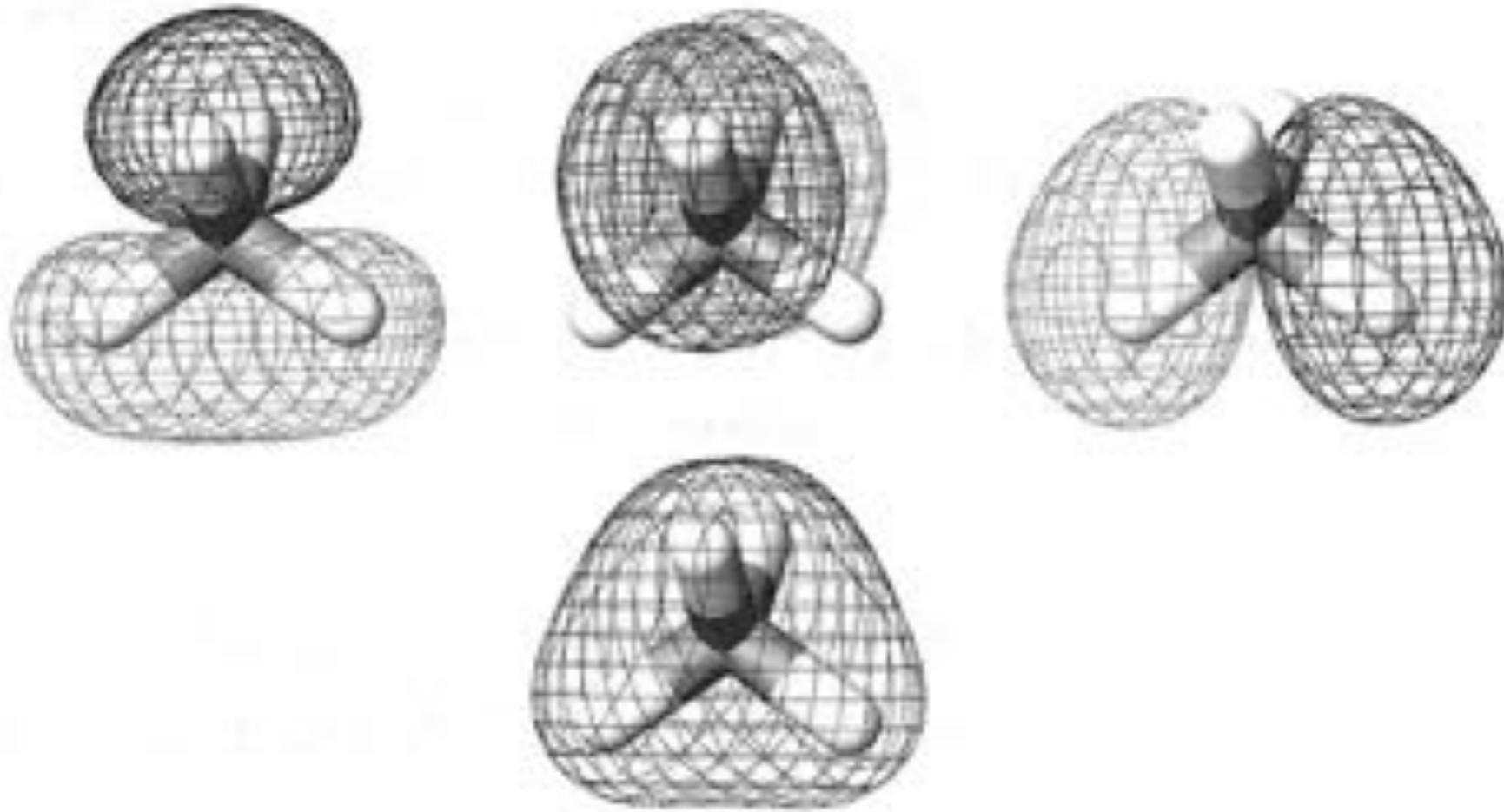


Fig. 1.13 One contour of the wave functions for the four filled molecular orbitals of methane

Methylene CH₂

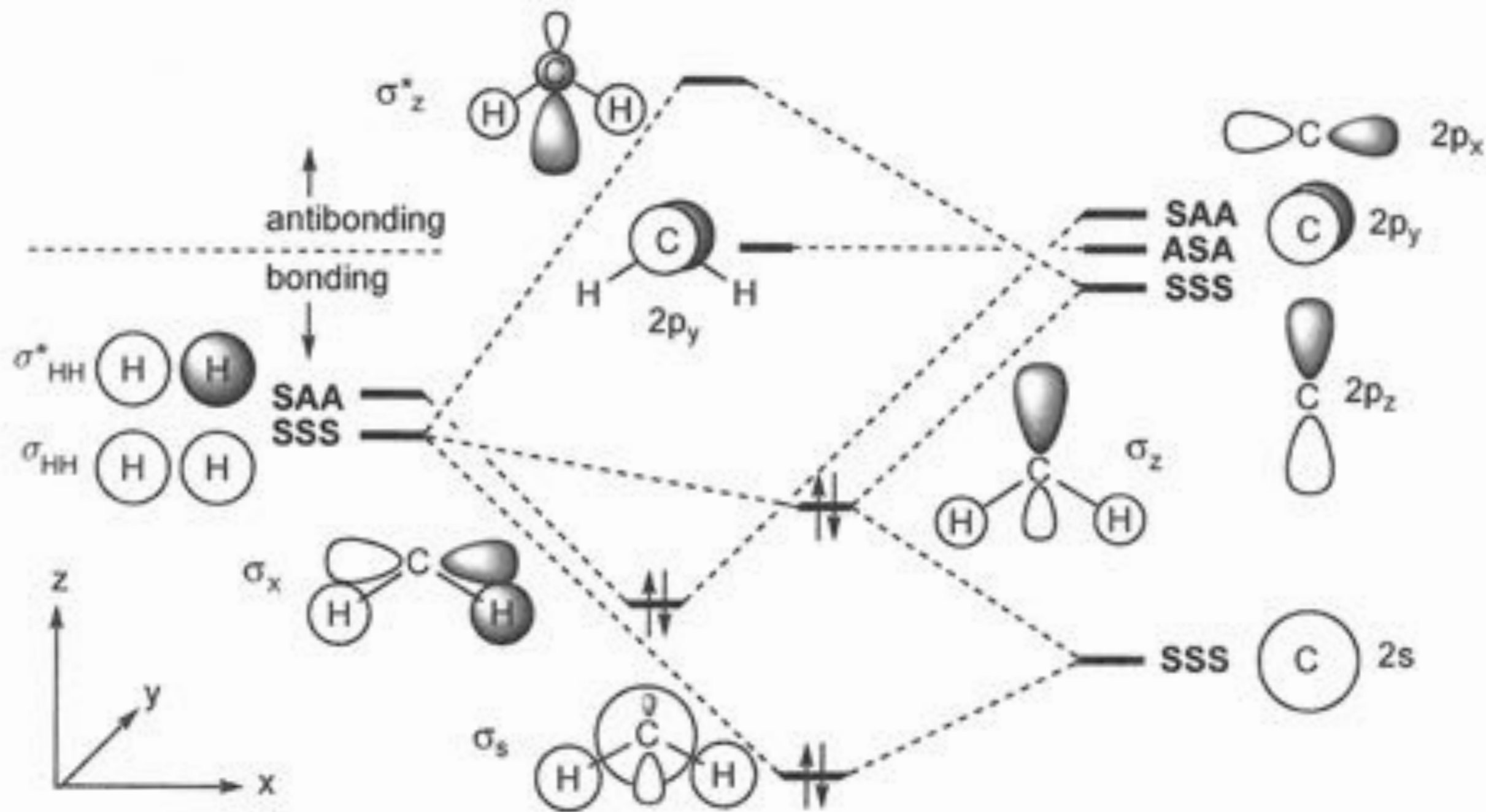
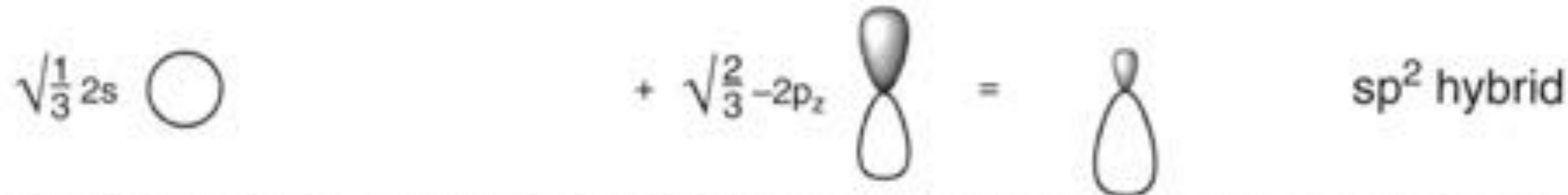
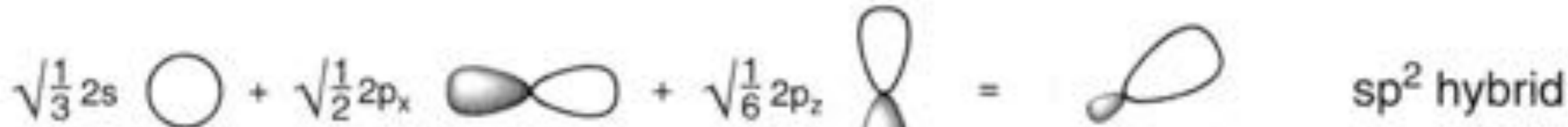
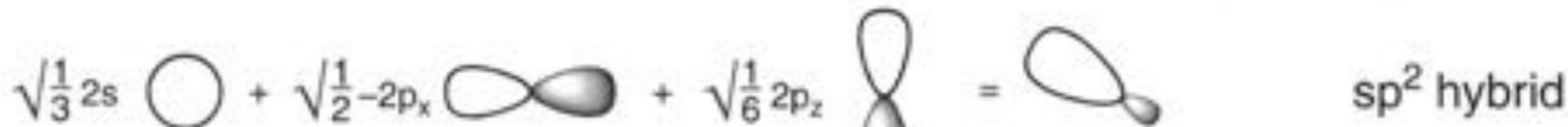


Fig. 1.14 The molecular orbitals of methylene from the interaction of the orbitals of H₂ and a carbon atom

Hybridisation (Valence Bond Theory)



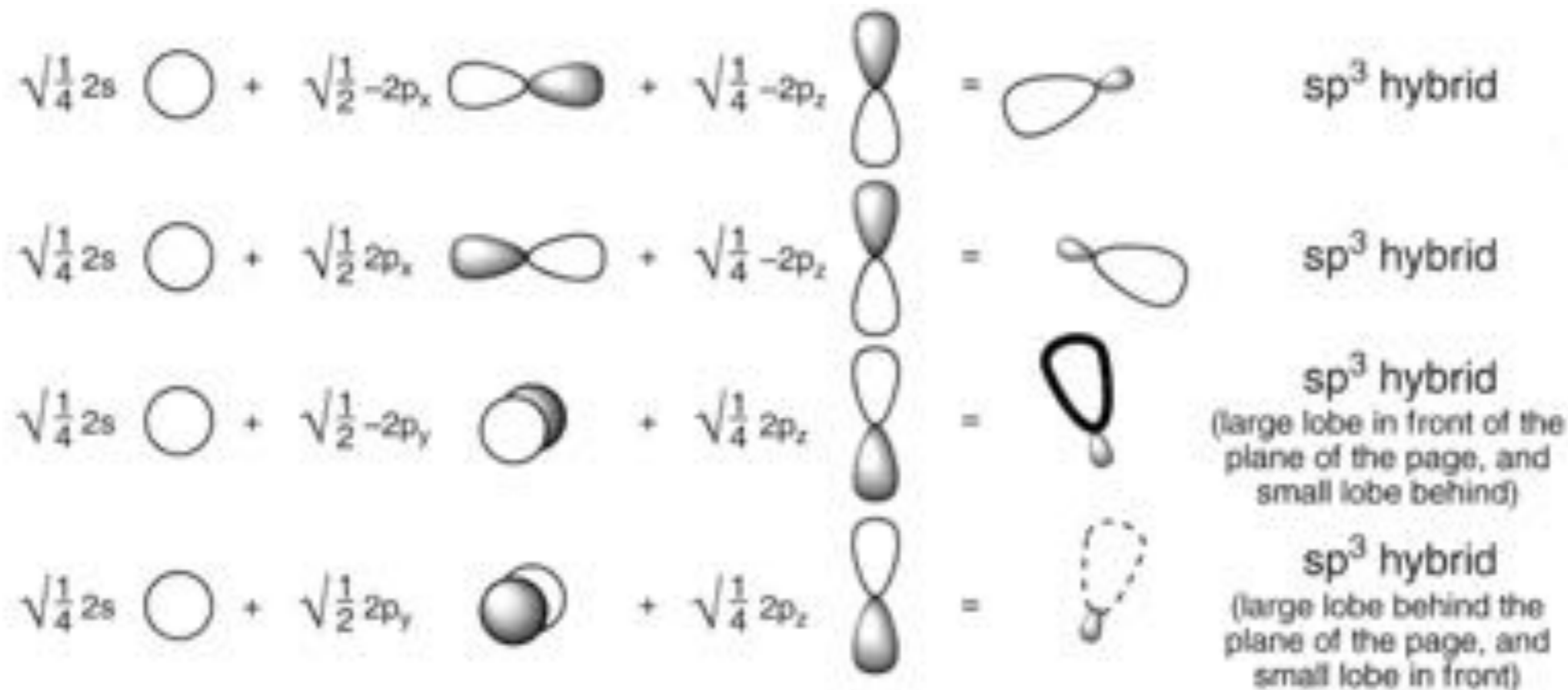
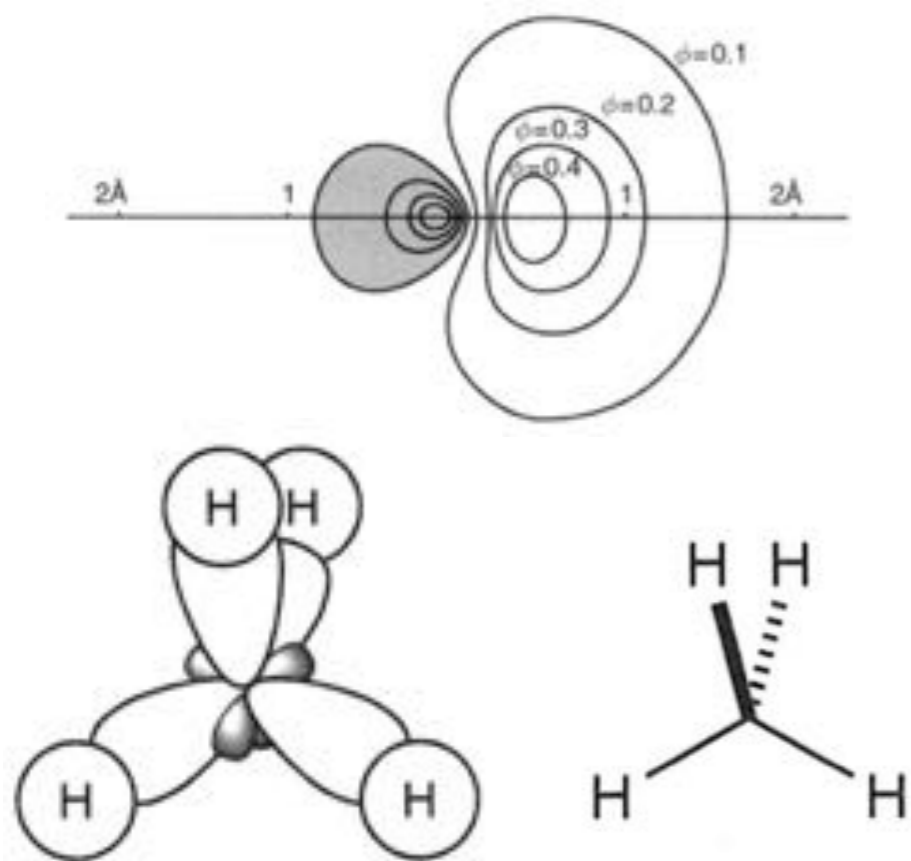


Fig. 1.15 Hybrid orbitals



CH₄

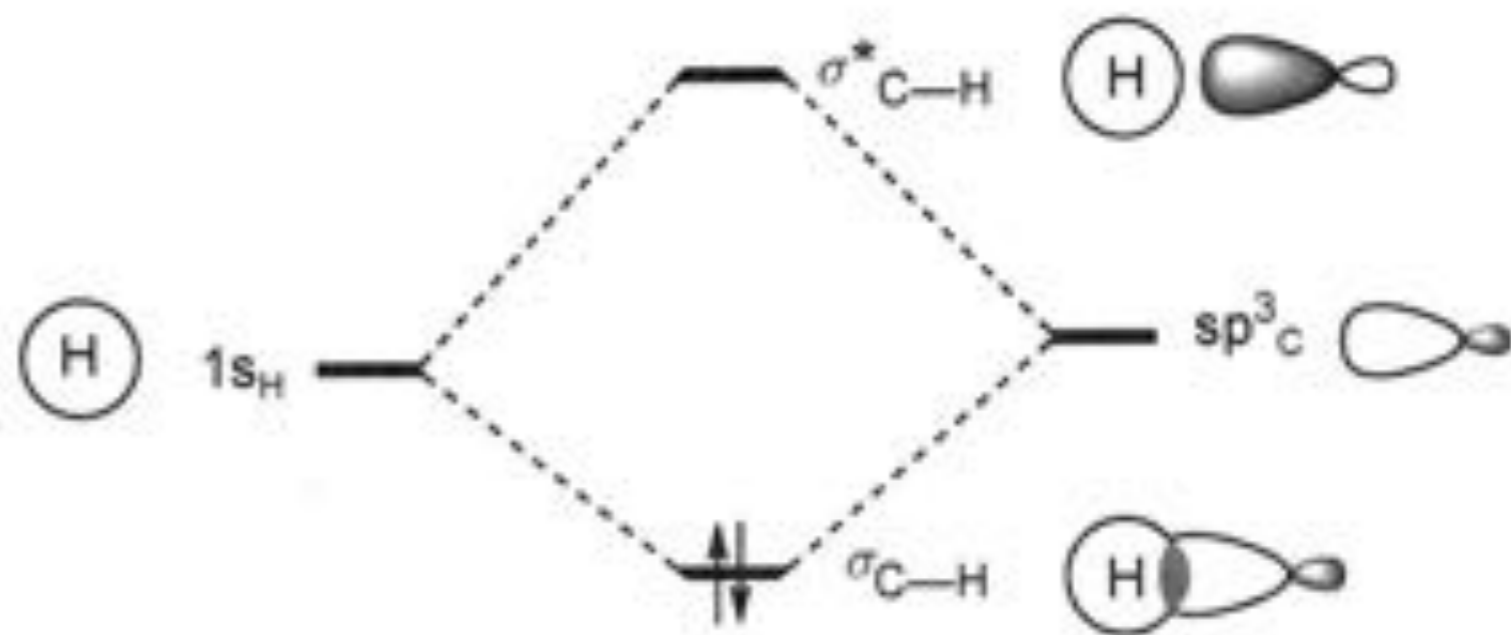


Fig. 1.17 Bonding and antibonding orbitals of a C-H bond

Ethane C_2H_4

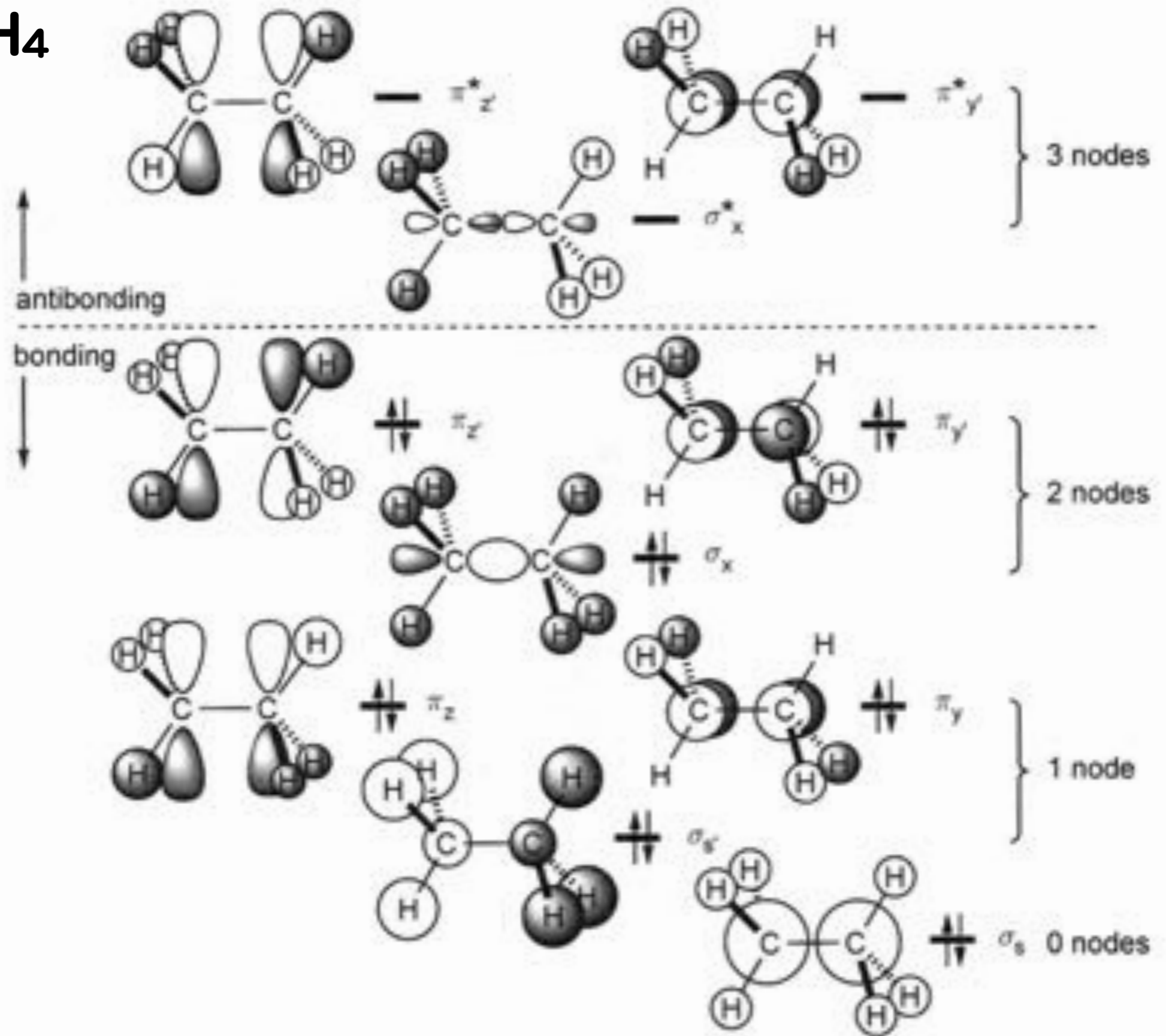


Fig. 1.19 The bonding orbitals and three antibonding orbitals of ethane

σ and π Bonds

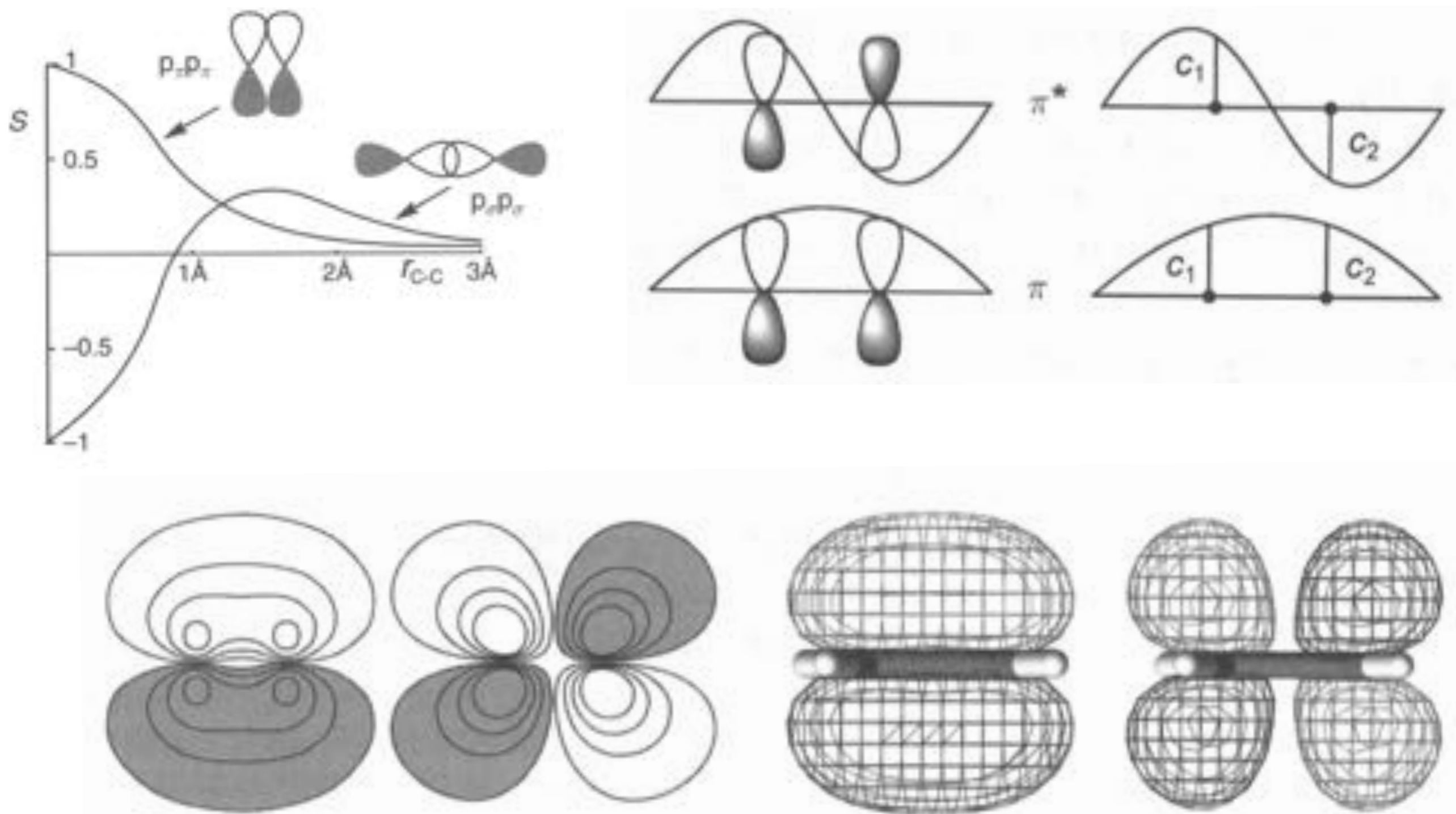


Fig. 1.24 A section through the contours of the π and π^* wave functions of ethylene, and wire-mesh outlines of one contour of each

Ethylene C₂H₂

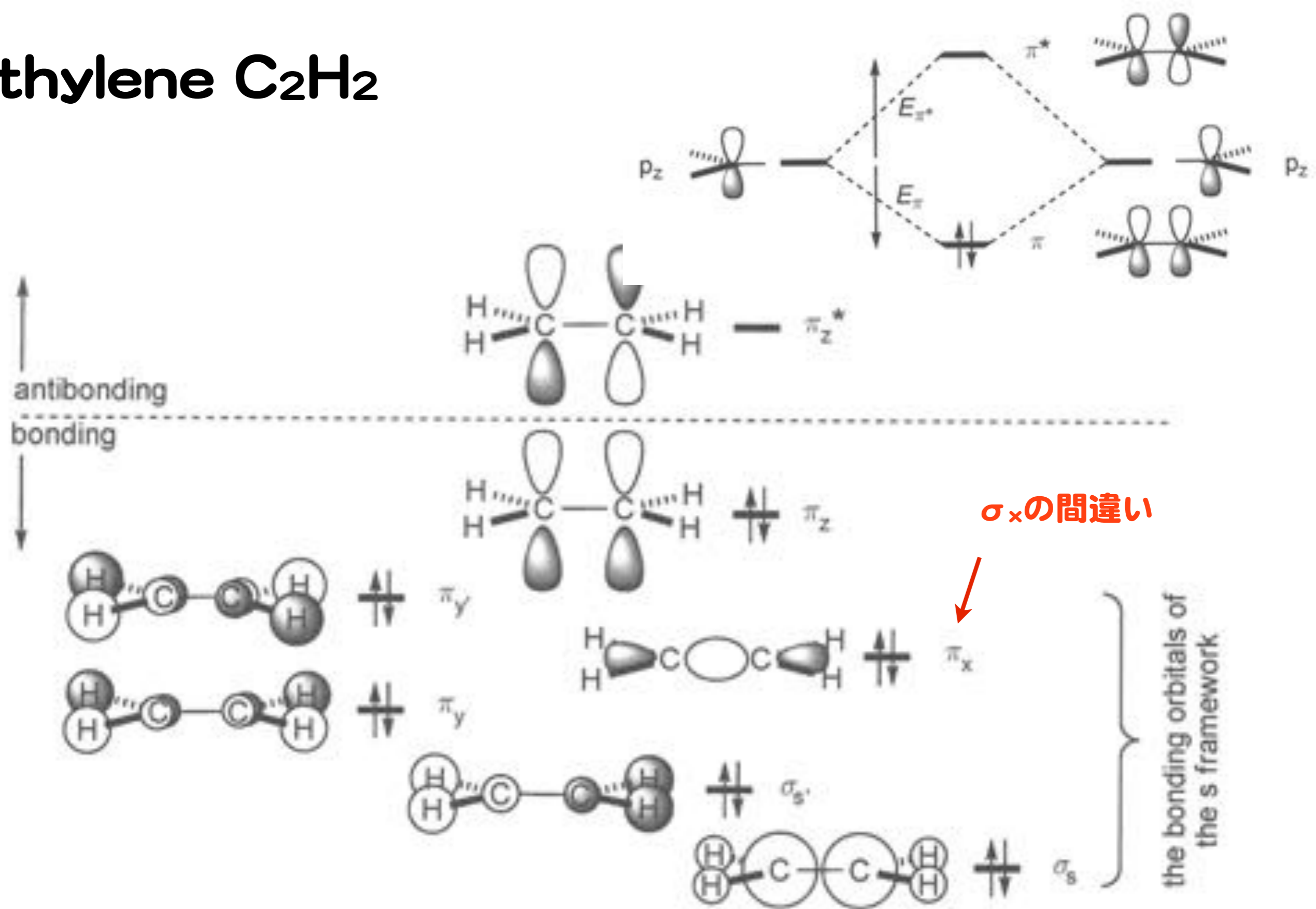
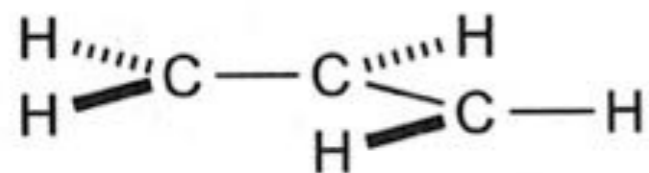
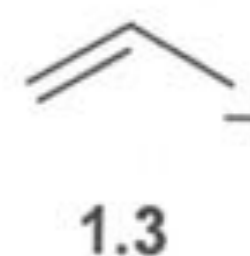
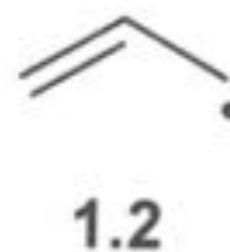
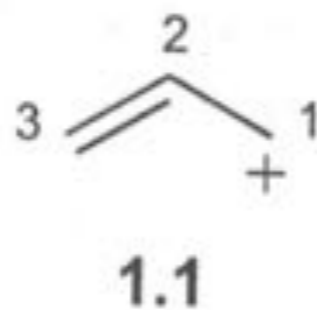
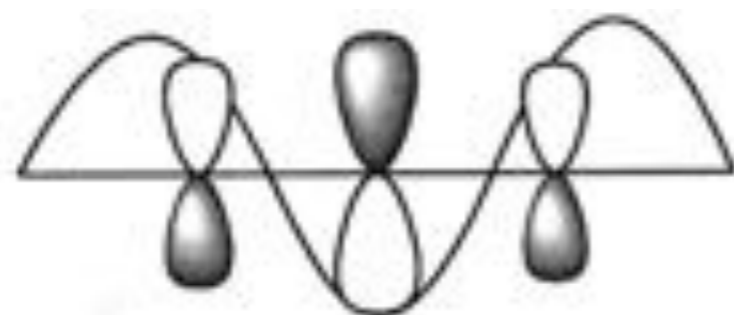


Fig. 1.21 The bonding orbitals and one antibonding orbital of ethylene

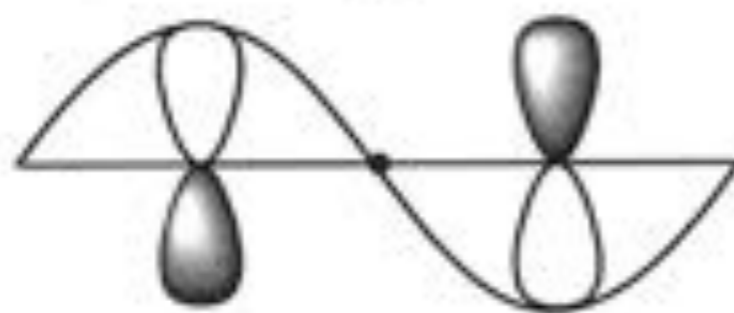
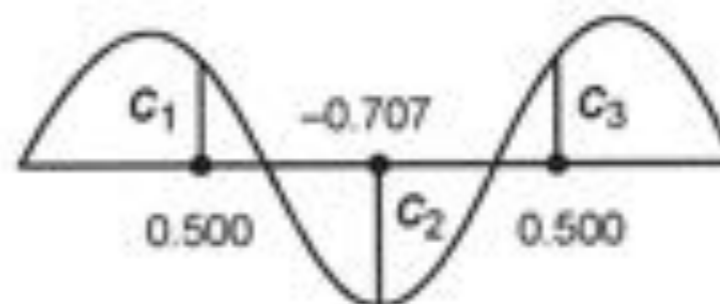
Allyl Systems



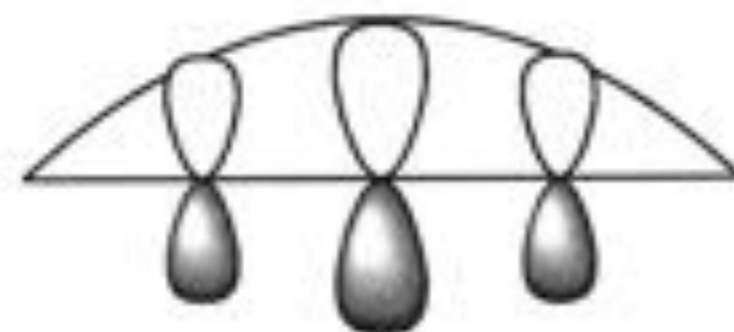
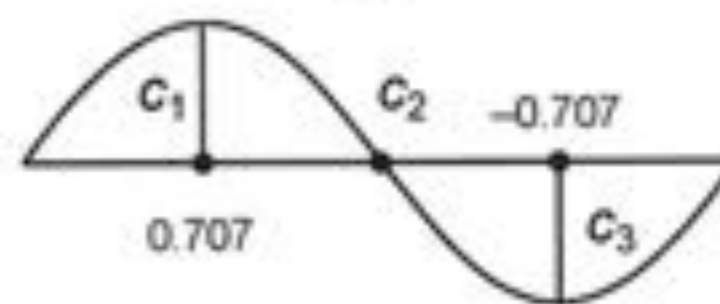
$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3$$



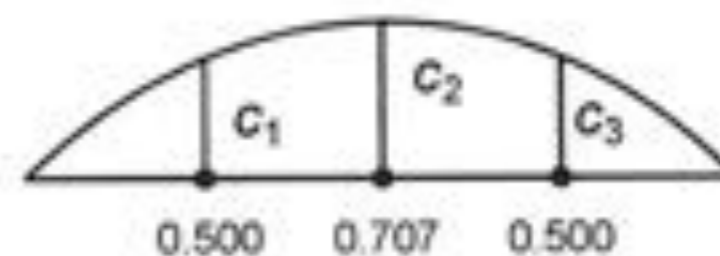
ψ_3^*



ψ_2



ψ_1



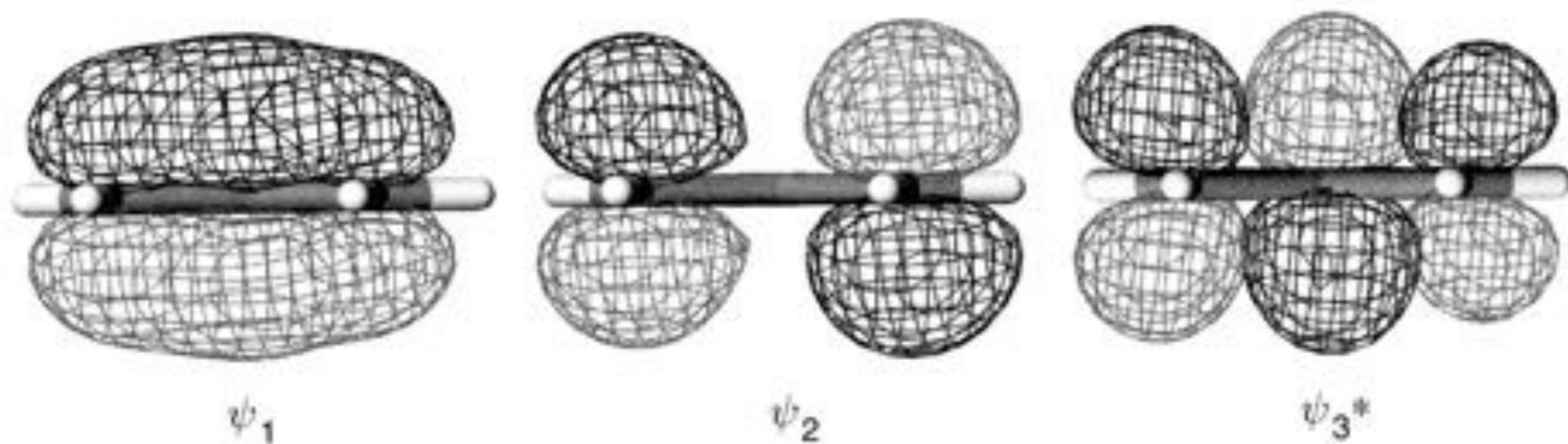
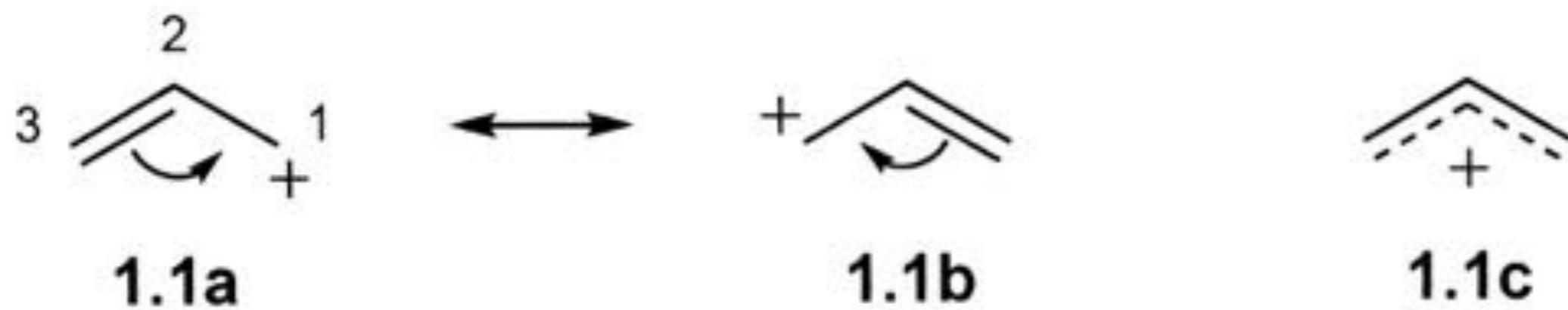


Fig. 1.30 The π molecular orbitals of the allyl system



$$E = 2\beta \cos \frac{k\pi}{n+1}$$

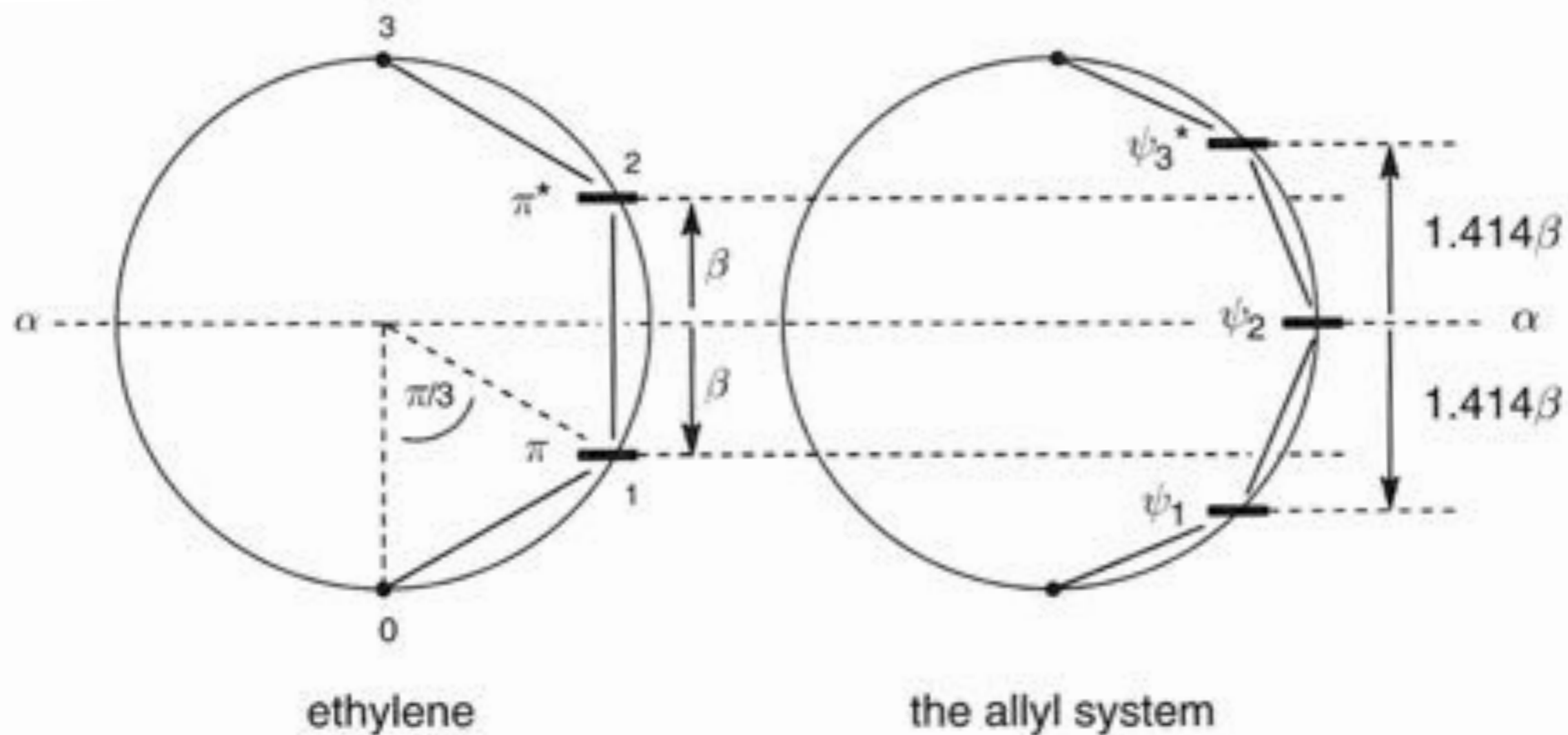


Fig. 1.26 Energies of π molecular orbitals in ethylene and the allyl system

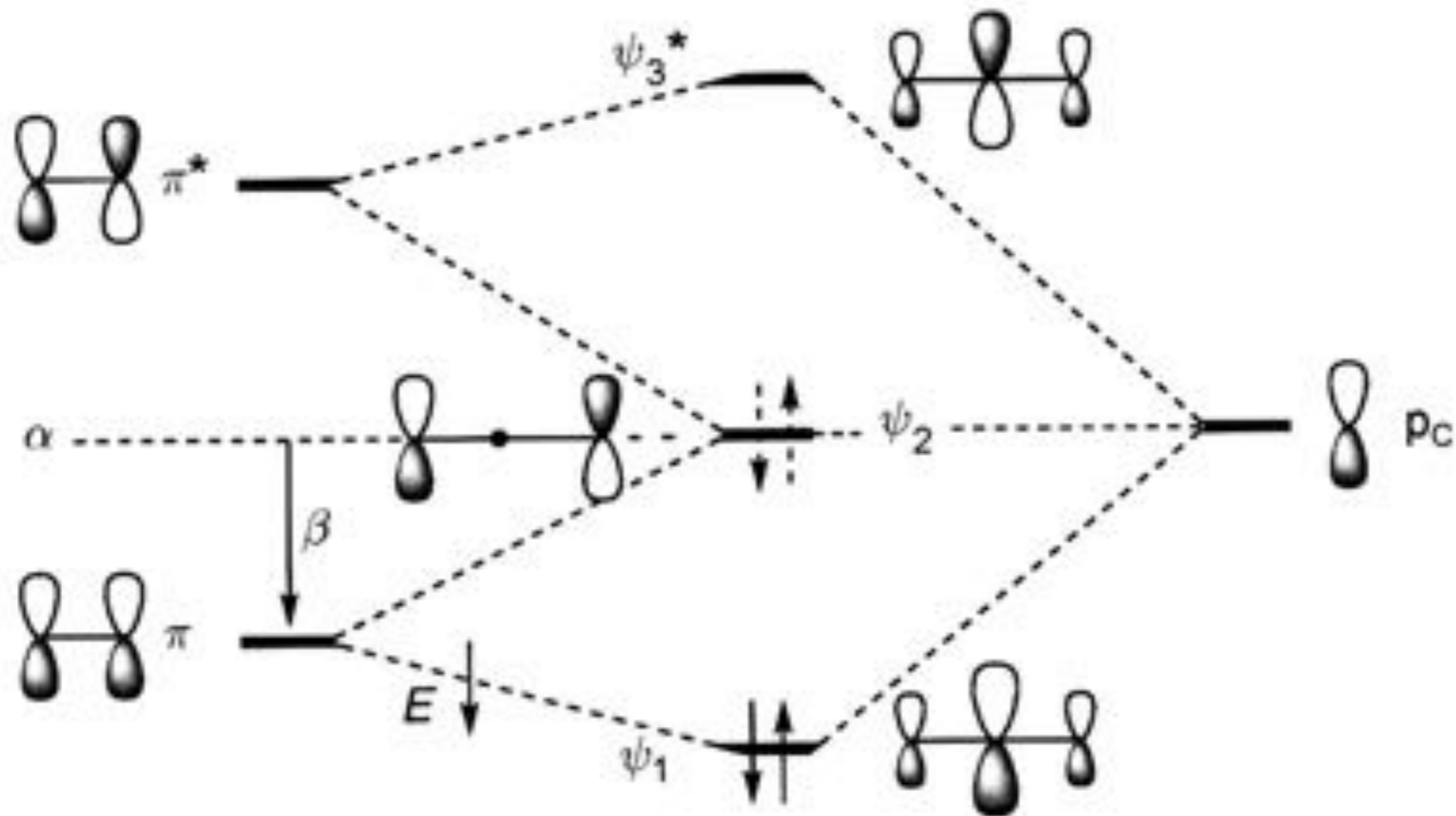
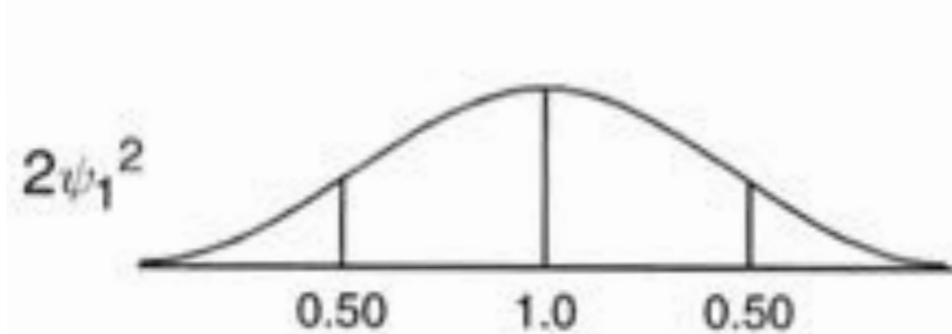
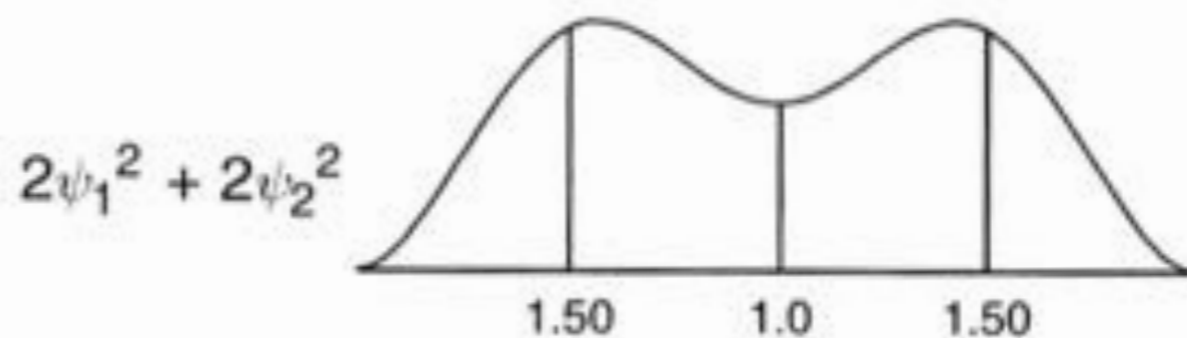


Fig. 1.28 The allyl system by interaction of a p orbital with π and π^* orbitals

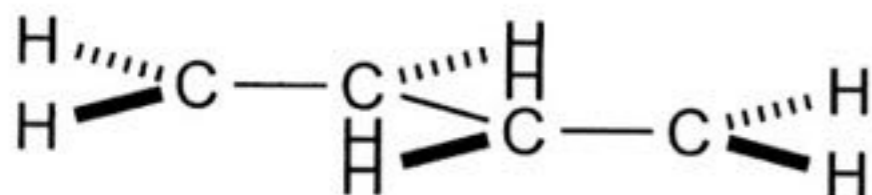
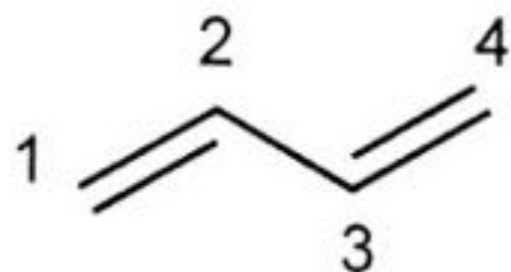


(a) π electron population in the allyl cation

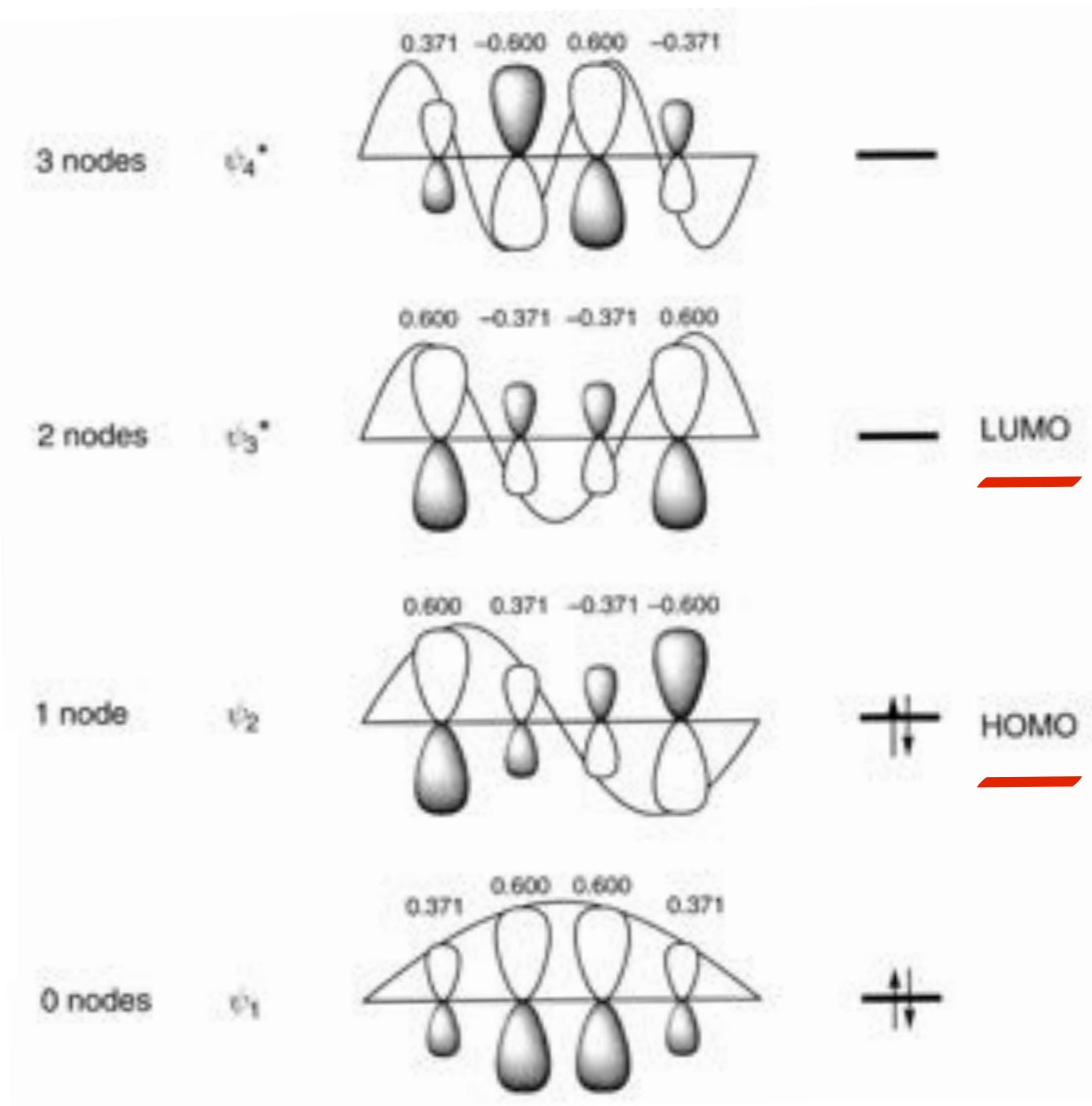


(b) π electron population in the allyl anion

Butadiene



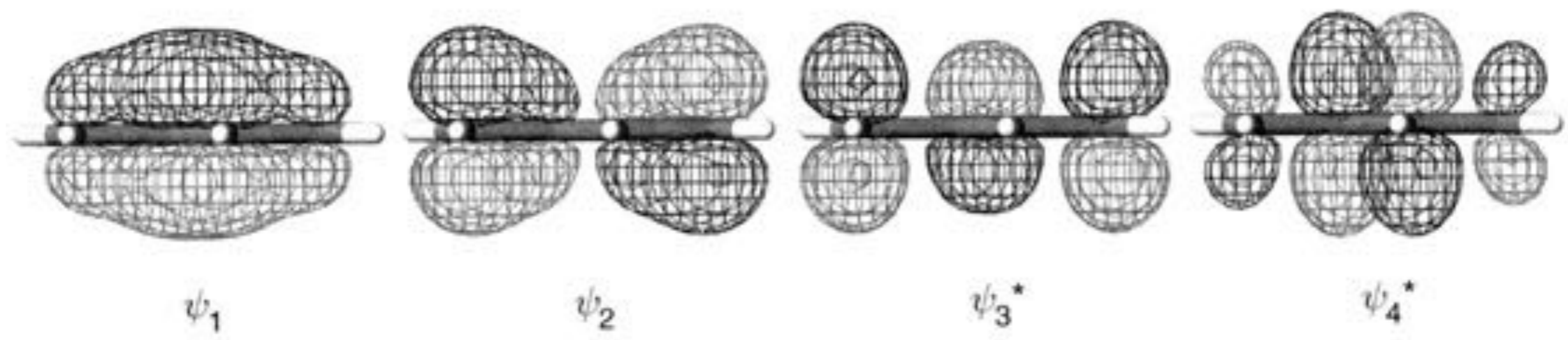
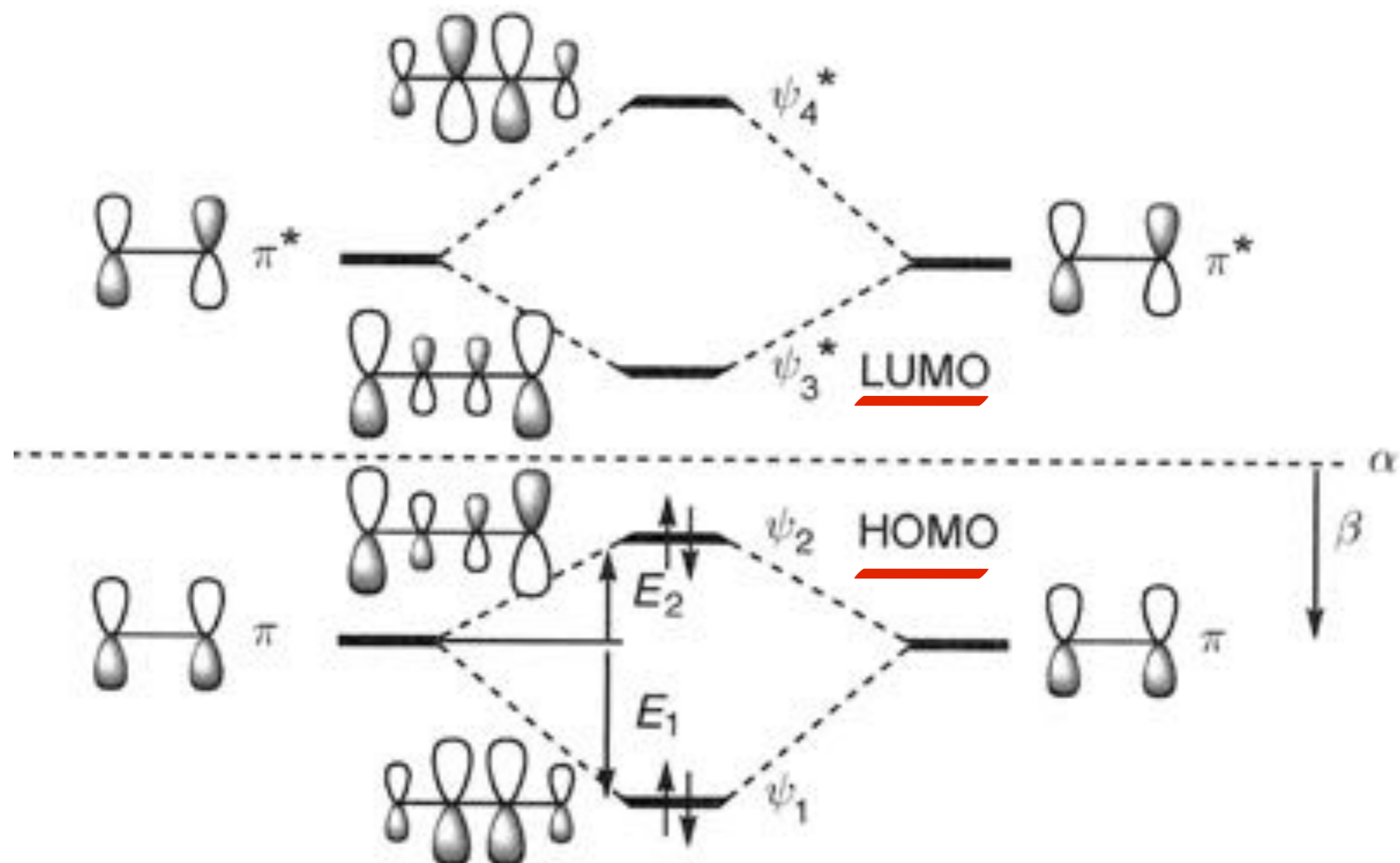
$$c_{jr} = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin \frac{rj\pi}{n+1}$$



Frontier Orbitals:

HOMO: Highest Occupied MO

LUMO: Lowest Unoccupied MO



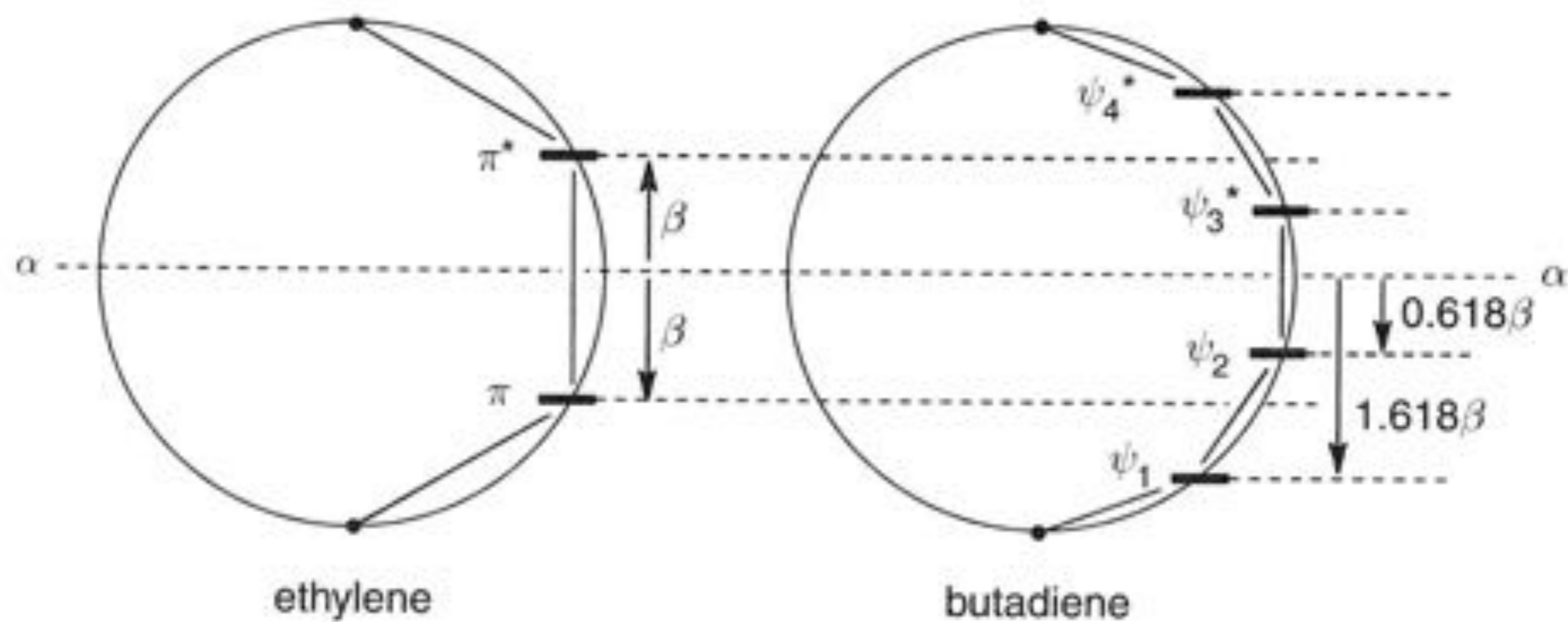


Fig. 1.33 Energies of the π molecular orbitals of ethylene and butadiene by geometry

Longer Conjugated Systems

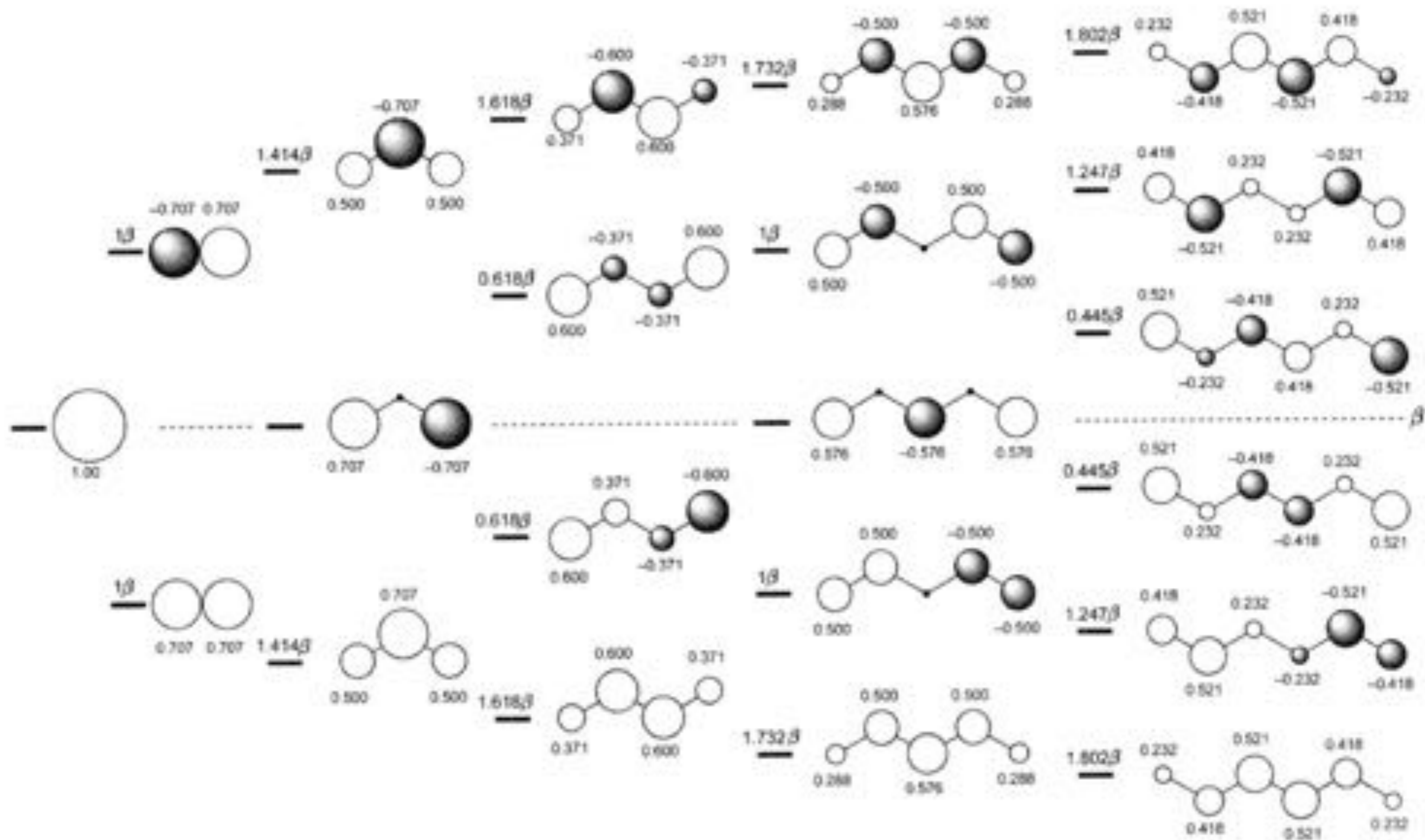
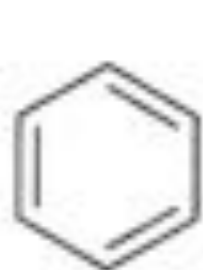


Fig. 1.35 The energies and coefficients of the π molecular orbitals of the smaller conjugated systems

芳香属性 Aromaticity

Aromatic Systems: $(4n+2)\pi$ systems



1.7



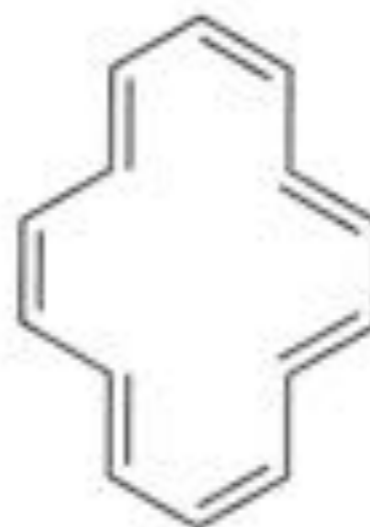
1.8



1.9



1.10



1.11



1.12

Antiaromatic Systems : $4n\pi$ systems



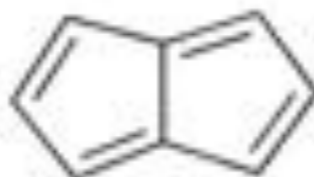
1.13



1.14



1.15



1.16

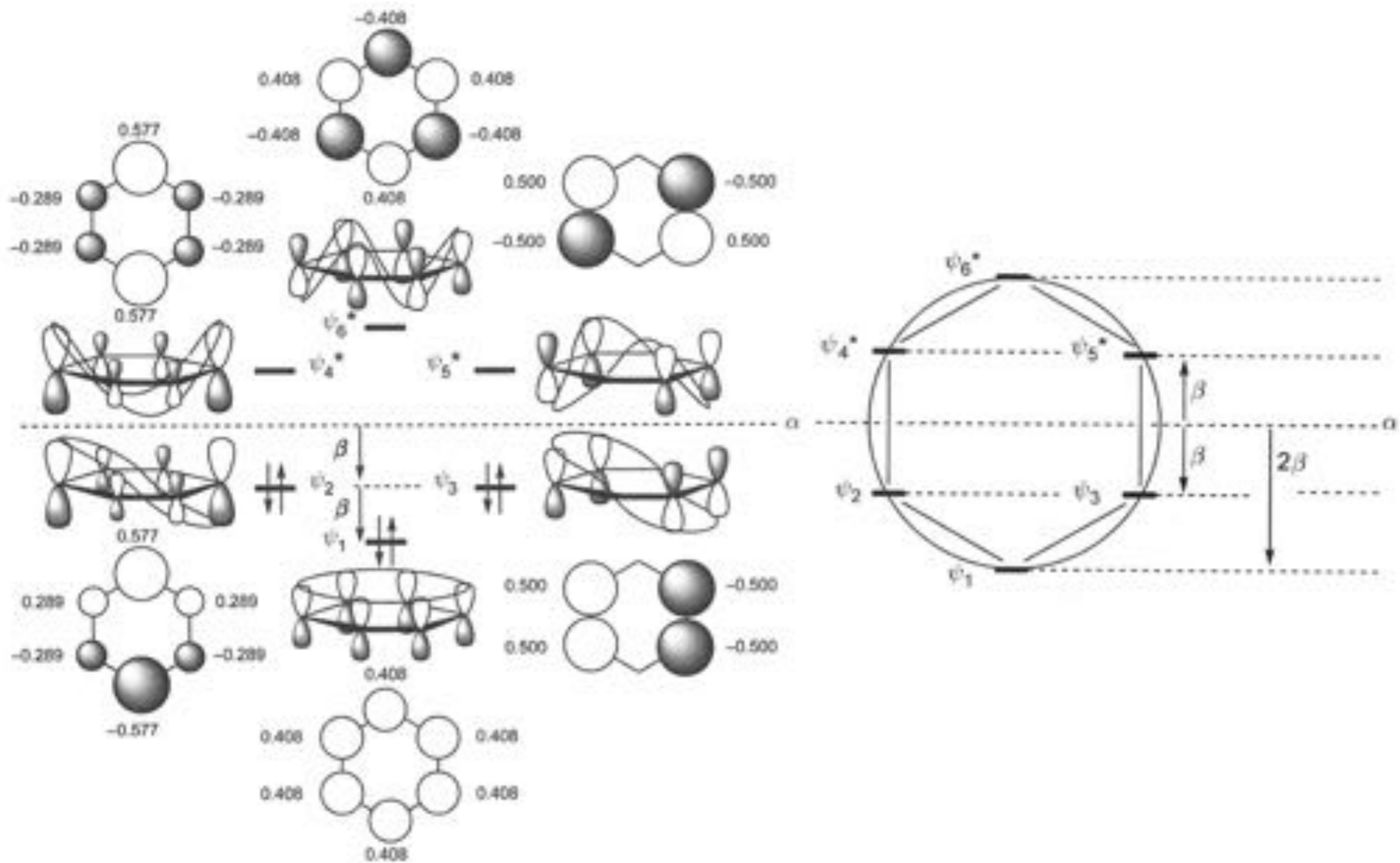


1.17



1.18

Aromatic Benzene C₆H₆



Antiaromatic Cyclobutadiene C_4H_4

Scuare Cyclobutadiene (正方形)

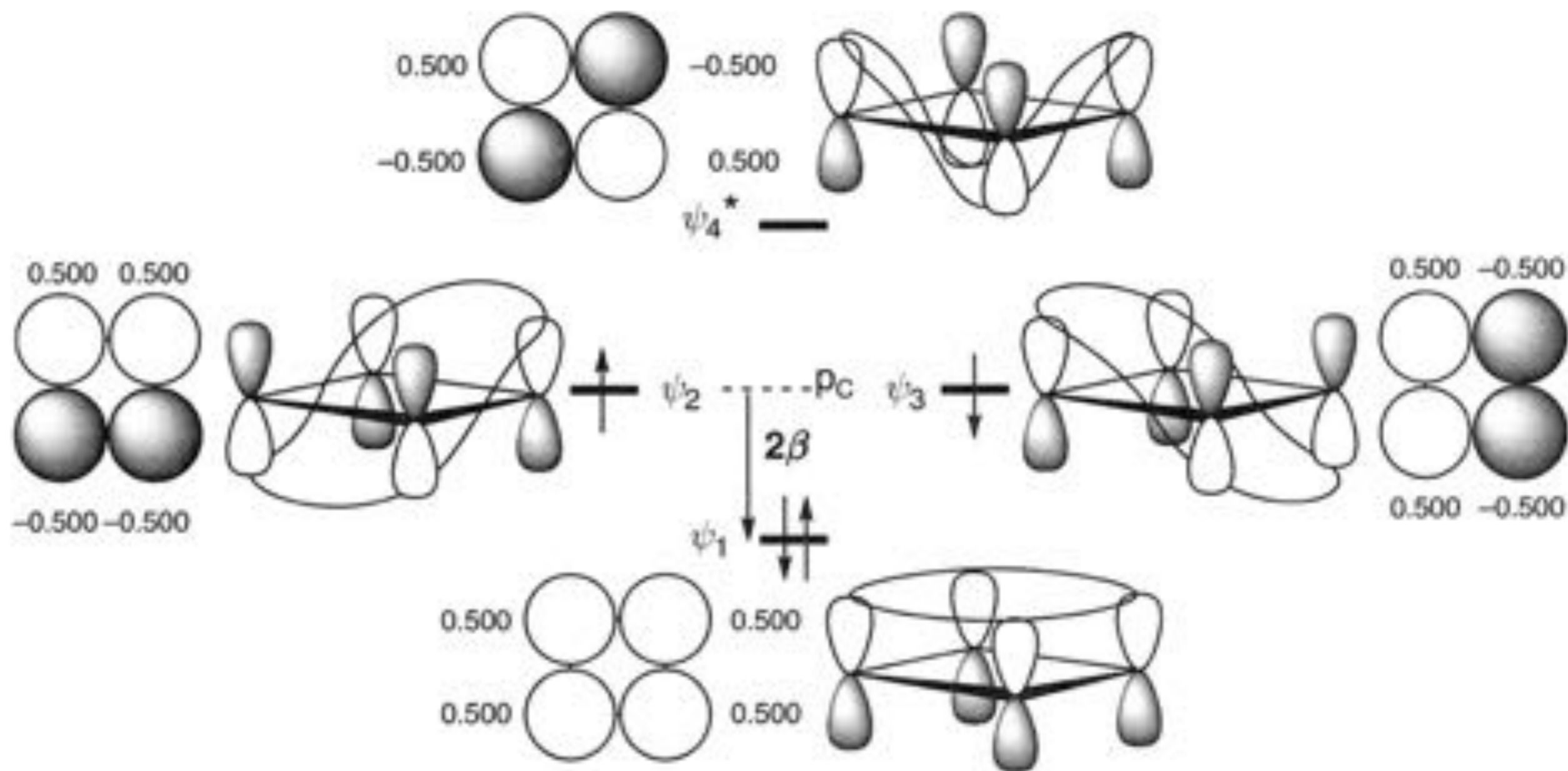


Fig. 1.38 The π molecular orbitals of cyclobutadiene

Rectangular Cyclobutadiene (長方形)

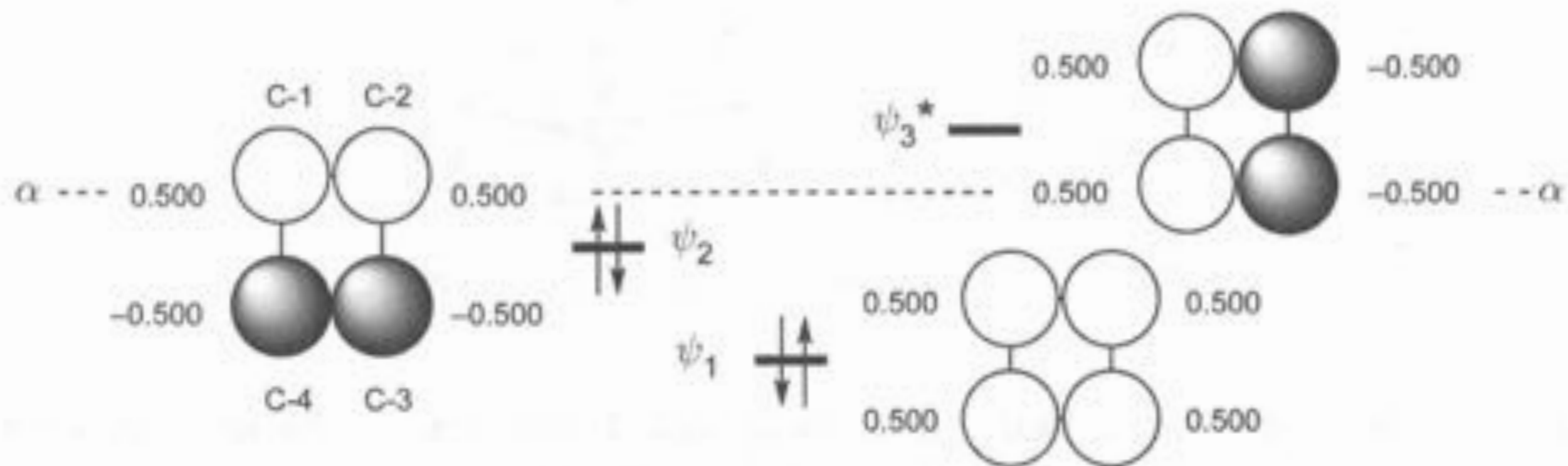


Fig. 1.39 The three lowest-energy π molecular orbitals of rectangular cyclobutadiene

Cyclopentadienyl Anion and Cation

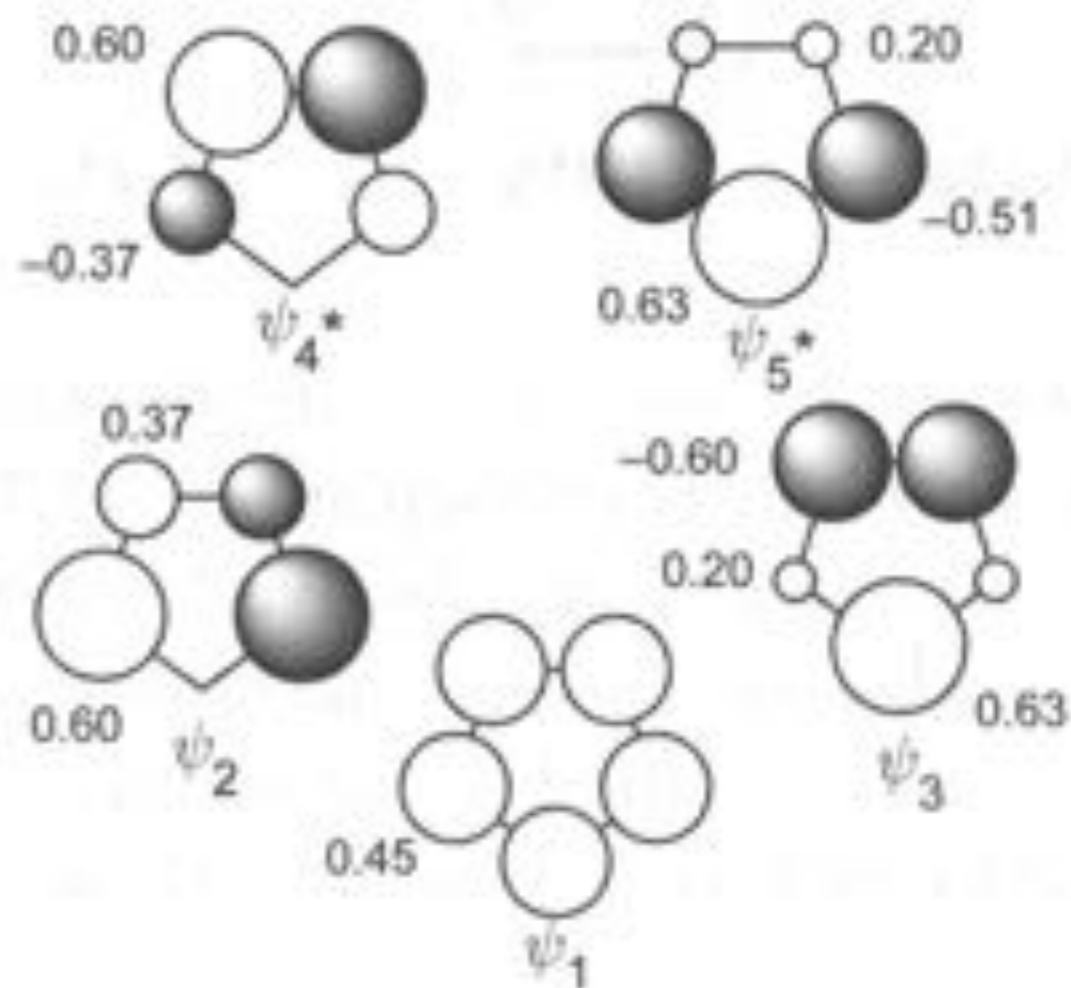
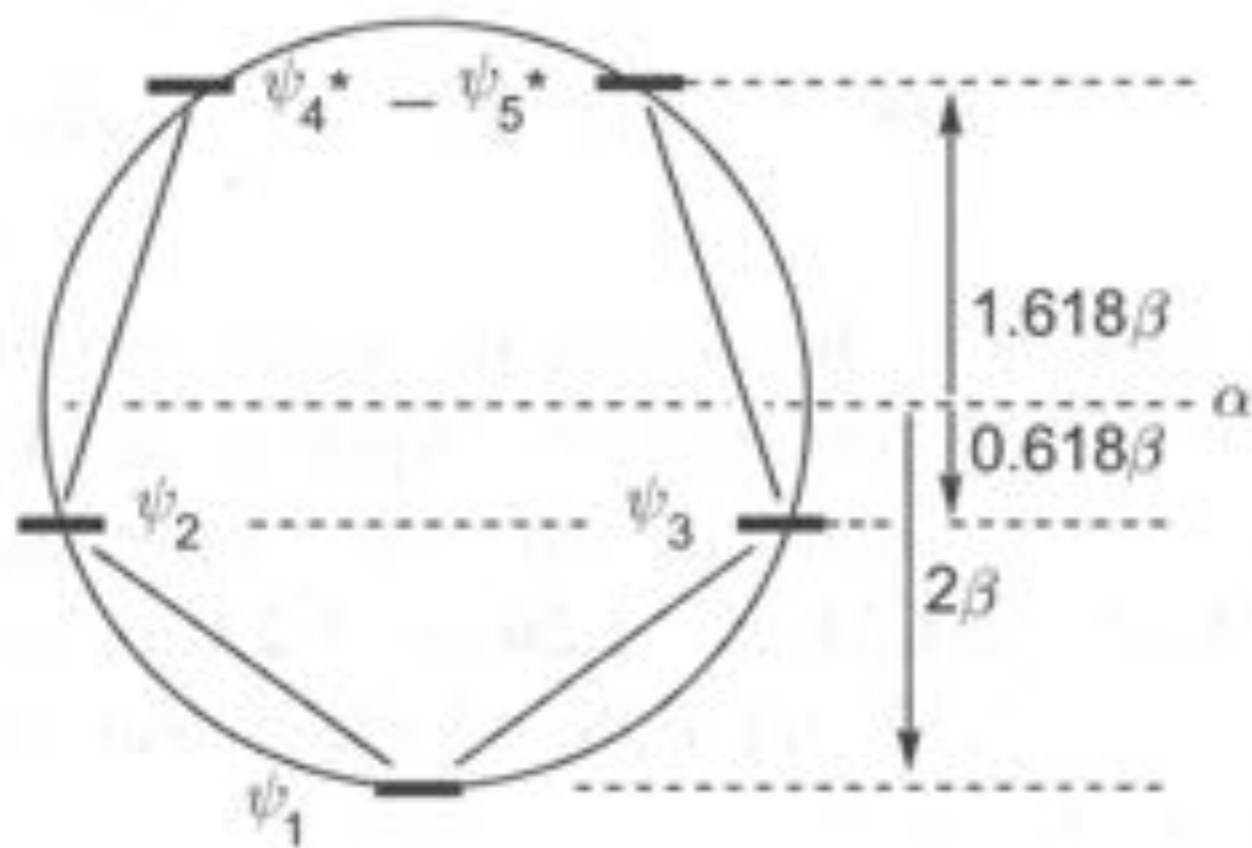
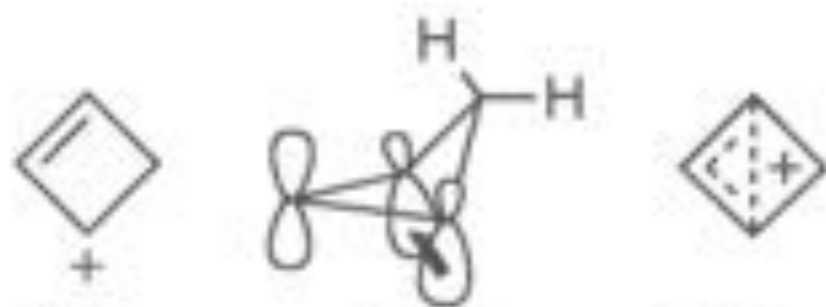


Fig. 1.40 The energies and coefficients of the π molecular orbitals of the cyclopentadienyl system

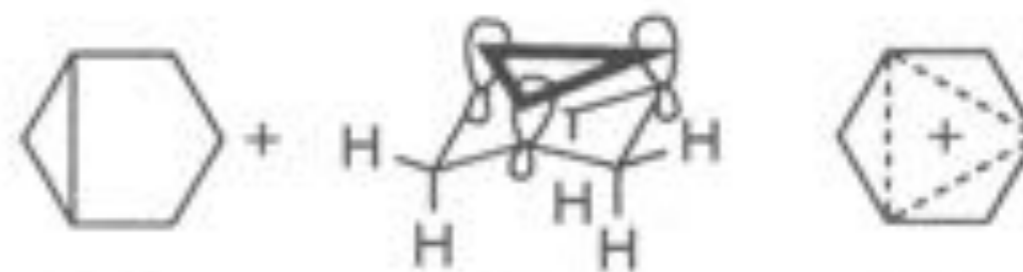
Homoaromatic Systems



1.19a

1.19b

1.19c



1.20a

1.20b

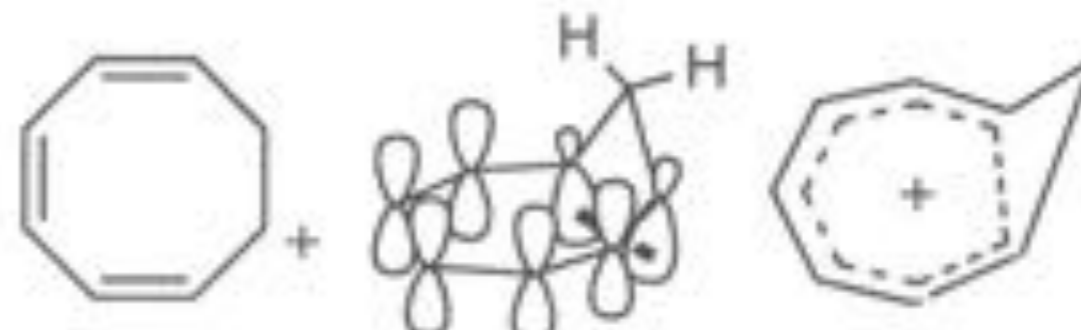
1.20c



1.21a

1.21b

1.21c



1.22a

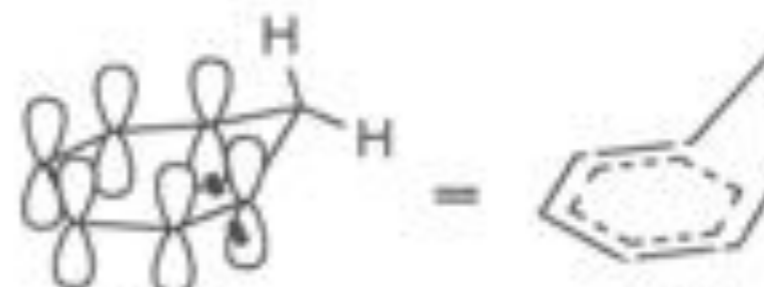
1.22b

1.22c



1.23

1.24



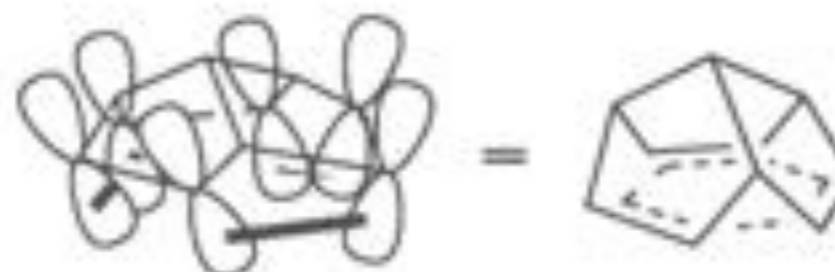
1.25a

1.25b



1.26

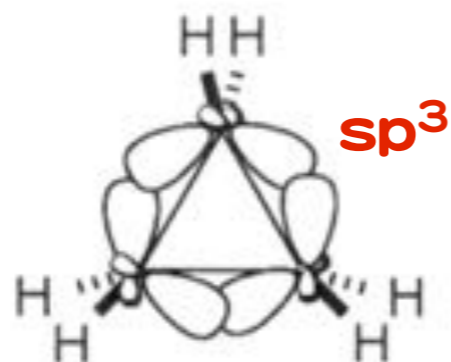
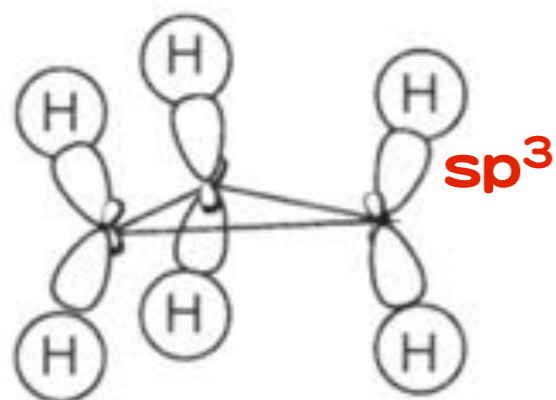
1.27



1.28a

1.28b

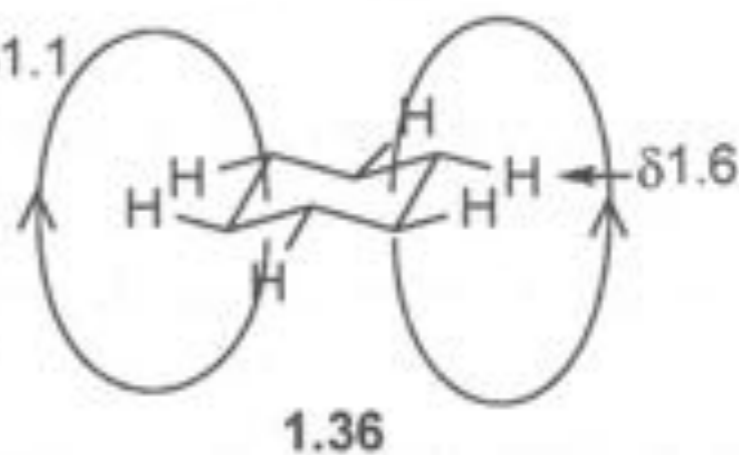
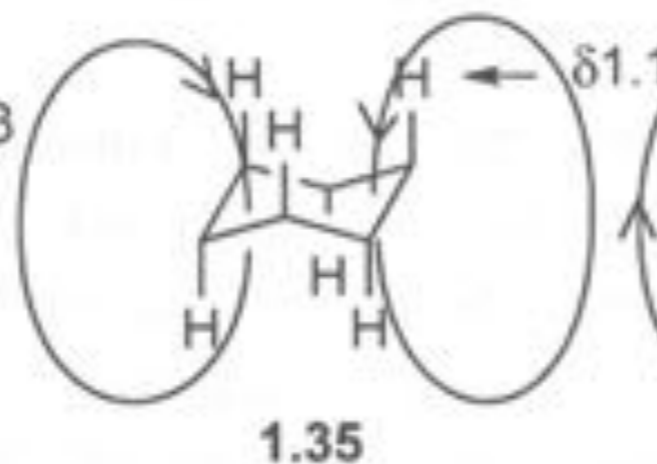
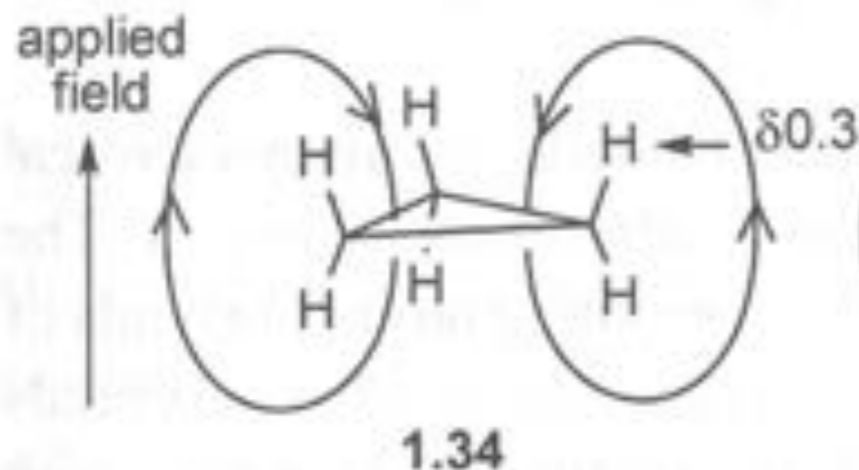
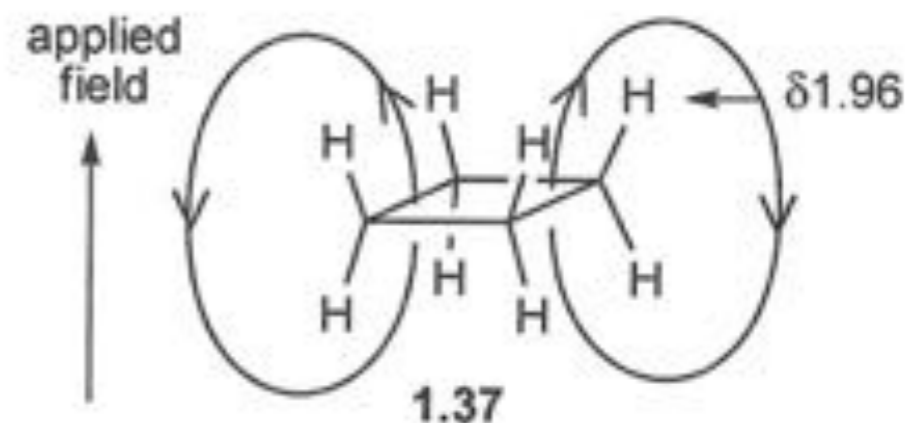
Strained σ Bonds—Cyclopropanes and Cyclobutanes



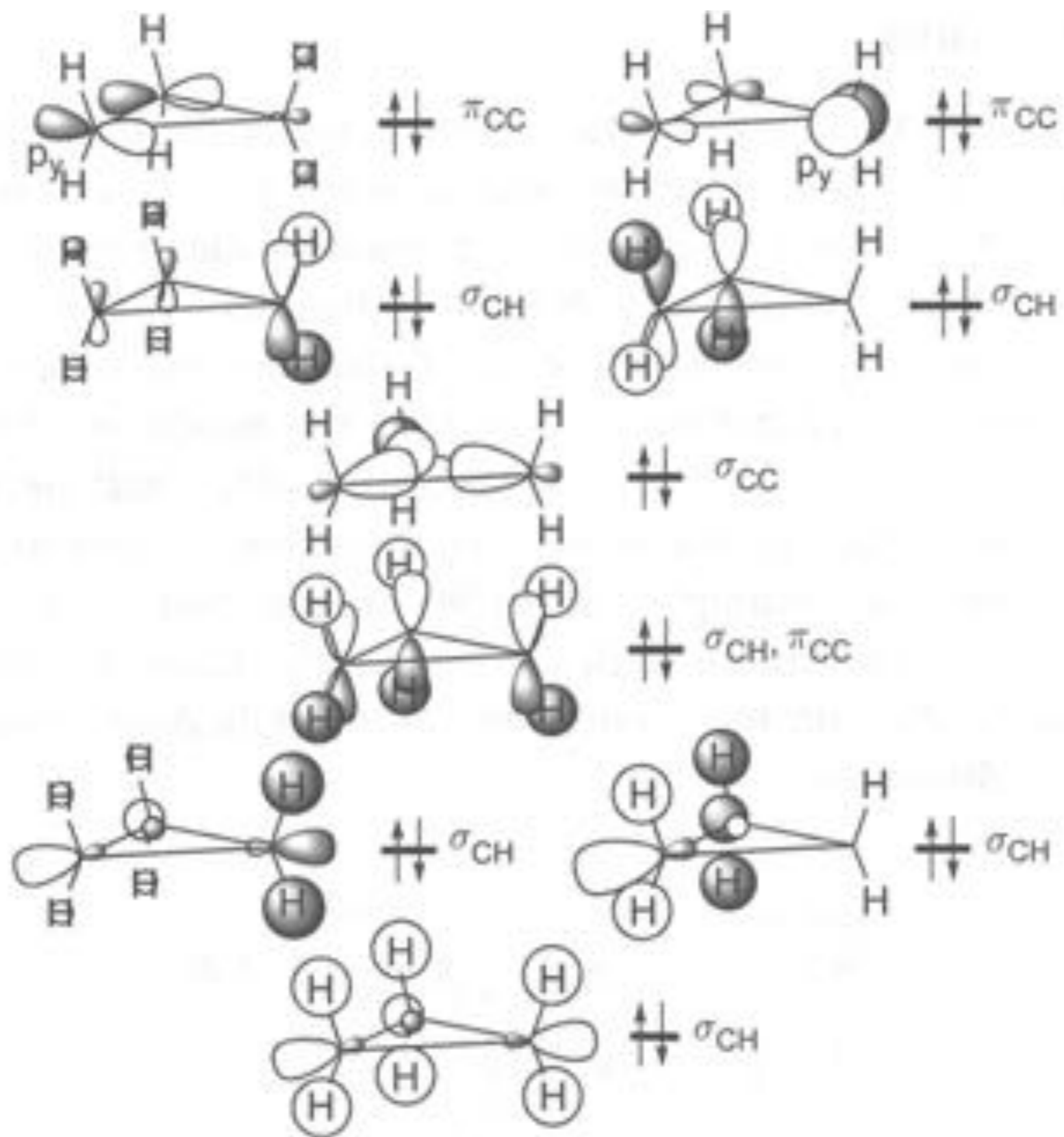
C-C Bonds of cyclopropane

reactive to bromine, but less reactive than ethylene π bond

Anisotropic shift in NMR Spectra



Walsh Orbitals of Cyclopropane



Heteronuclear Bonds, C—M, C—X and C=O

Electronegativity

H and First Row	Hybrids on C	Second Row	Third Row	Fourth Row
0.91 — Li		0.87 — Na	0.73 — K	0.71 — Rb
			1.03 — Ca	0.96 — Sr
1.58 — Be		1.29 — Mg		
		1.61 — Al	1.76 — Ga	1.66 — In
2.05 — B		1.92 — Si	1.99 — Ge	1.82 — Sn
2.30 — H	2.3 — sp^3	2.25 — P	2.21 — As	1.98 — Sb
2.54 — C	2.6 — sp^2	2.59 — S	2.42 — Se	2.16 — Te
		2.87 — Cl	2.69 — Br	2.36 — I
3.07 — N	3.1 — sp			
3.61 — O				
4.19 — F				

Fig. 1.43 Allen electronegativity values and Pauling-based values for carbon hybrids

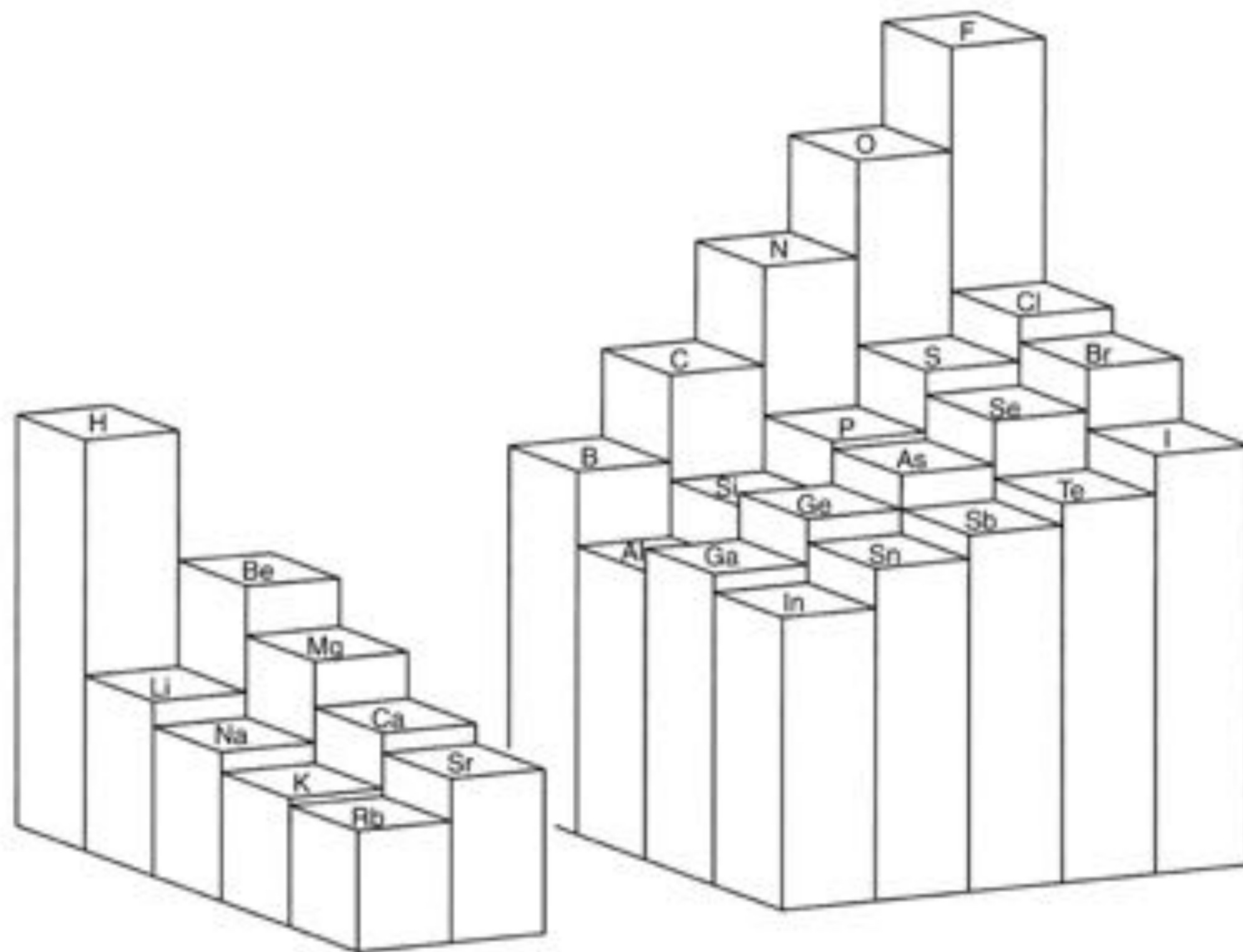


Fig. 1.44 Electronegativity as the third dimension of the periodic table (adapted with permission from L. C. Allen, *J. Am. Chem. Soc.*, 1989, **111**, 9003. Copyright 1989 American Chemical Society)

Table 1.1 Valence atomic orbital energies for s, p and selected hybrid orbitals in eV (1 eV = 96.5 kJ mol⁻¹ = 23 kcal mol⁻¹)

H								
1s	-13.6							
	Li	Be	B	C	N	O	F	
2s	-5.4	-9.4	-14.7	-19.4	-25.6	-32.4	-40.1	
sp				-19.3	-19.3	-24.2	-29.4	
sp²				-17.1	-17.1	-21.4	-25.8	
sp³				-16.1	-16.1	-20.0	-24.4	
2p	-3.5	-6.0	-5.7	-10.7	-12.9	-15.9	-18.6	
	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	
3s	-5.2	-7.6	-11.3	-15.0	-18.4	-20.9	-25.3	
3p			-6.0	-7.8	-9.8	-11.7	-13.7	

C—X σ Bonds

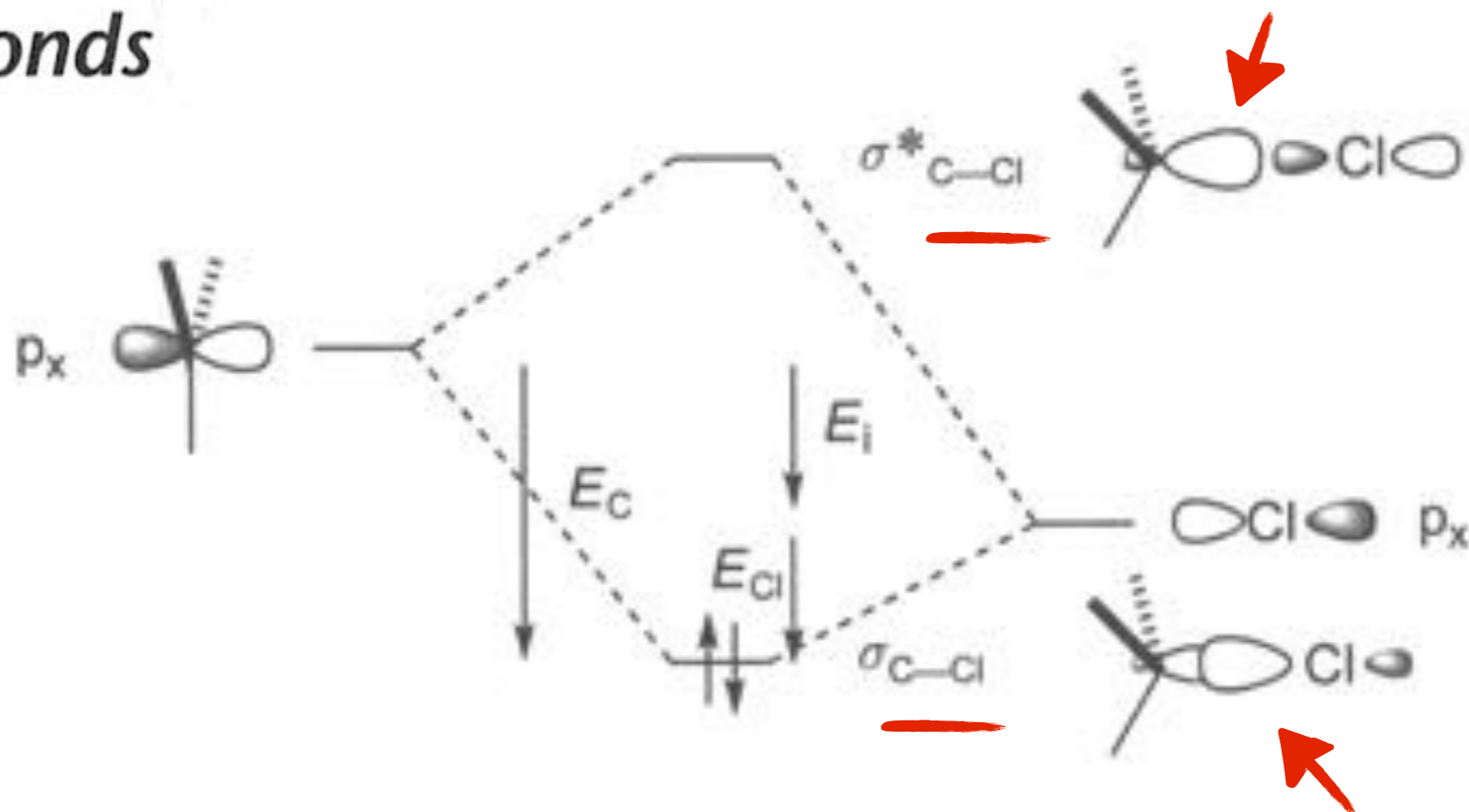


Fig. 1.45 A major part of the C—Cl σ bond

$$E_{\sigma_{CCl}} = E_{p_{Cl}} + \frac{(\beta_{CCl} - E_{p_{Cl}} S_{CCl})^2}{E_{p_{Cl}} \pm E_{p_C}}$$

$$E_{\sigma^*_{CCl}} = E_{p_C} + \frac{(\beta_{CCl} - E_{p_C} S_{CCl})^2}{E_{p_C} \pm E_{p_{Cl}}}$$

Methyl Chloride

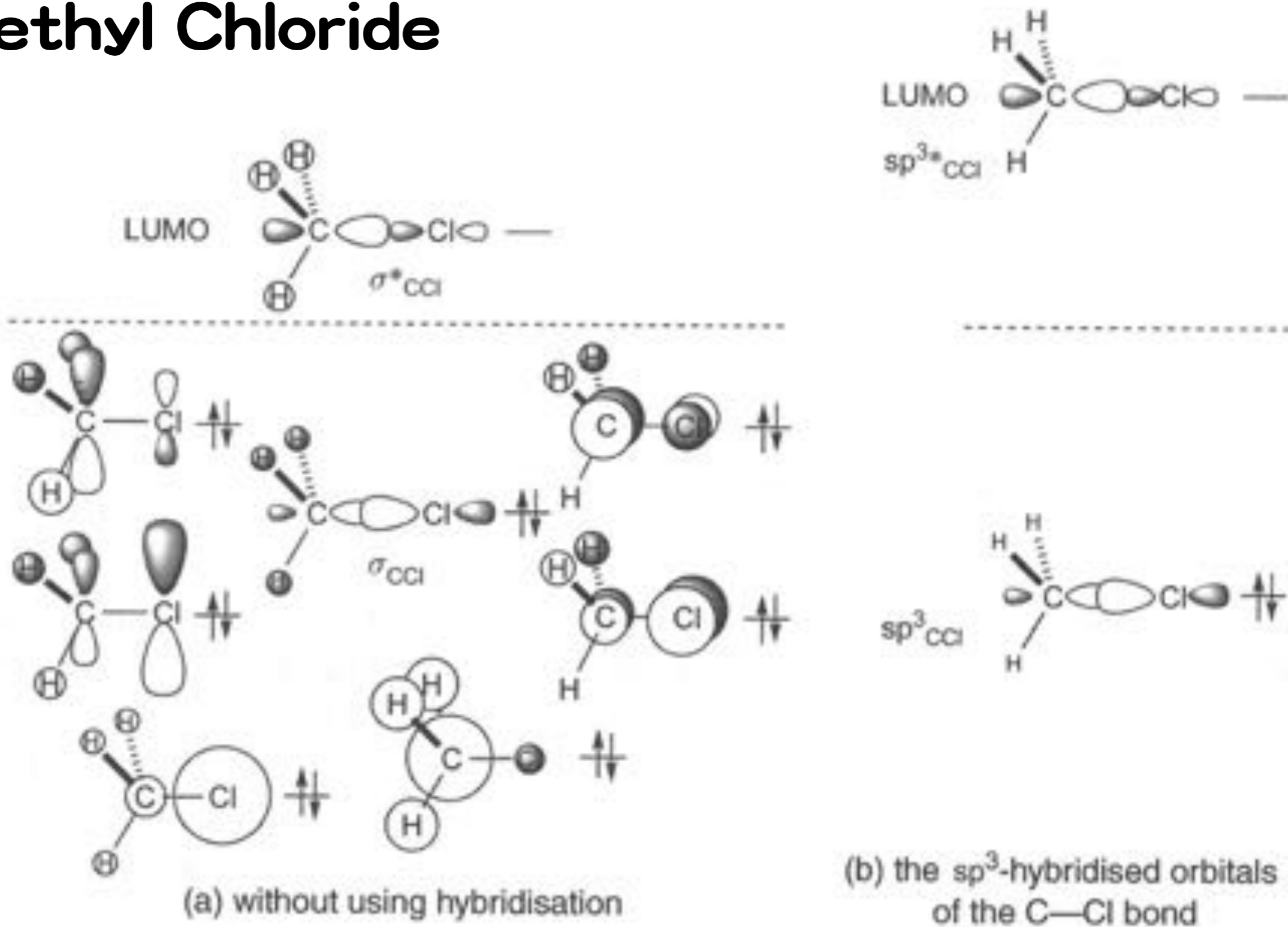


Fig. 1.46 The filled molecular orbitals and the lowest unfilled molecular orbital of methyl chloride

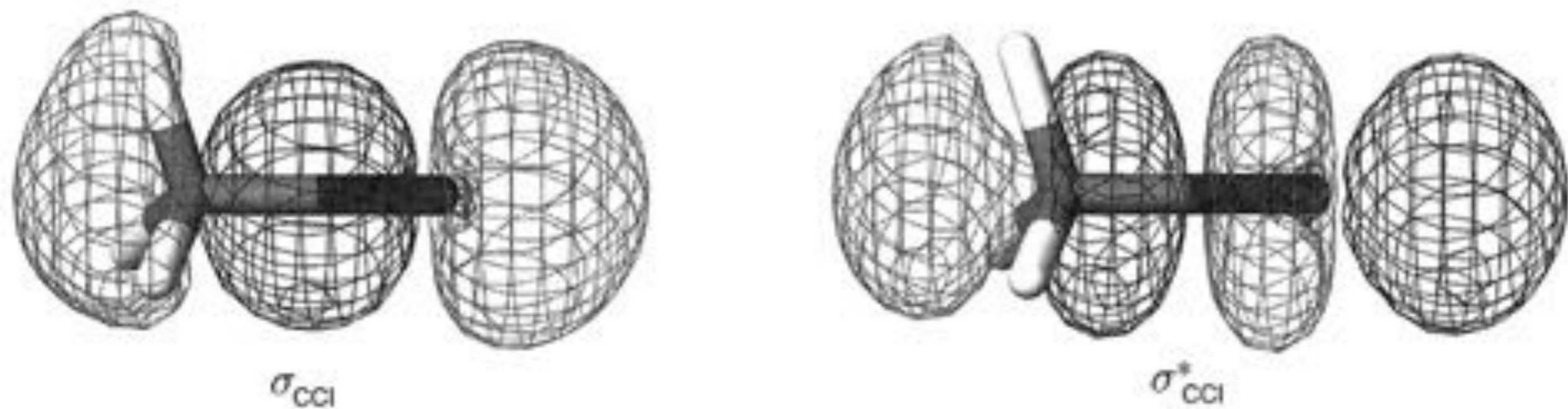


Fig. 1.47 The major C—Cl bonding orbital and the LUMO for methyl chloride

C—M σ Bonds

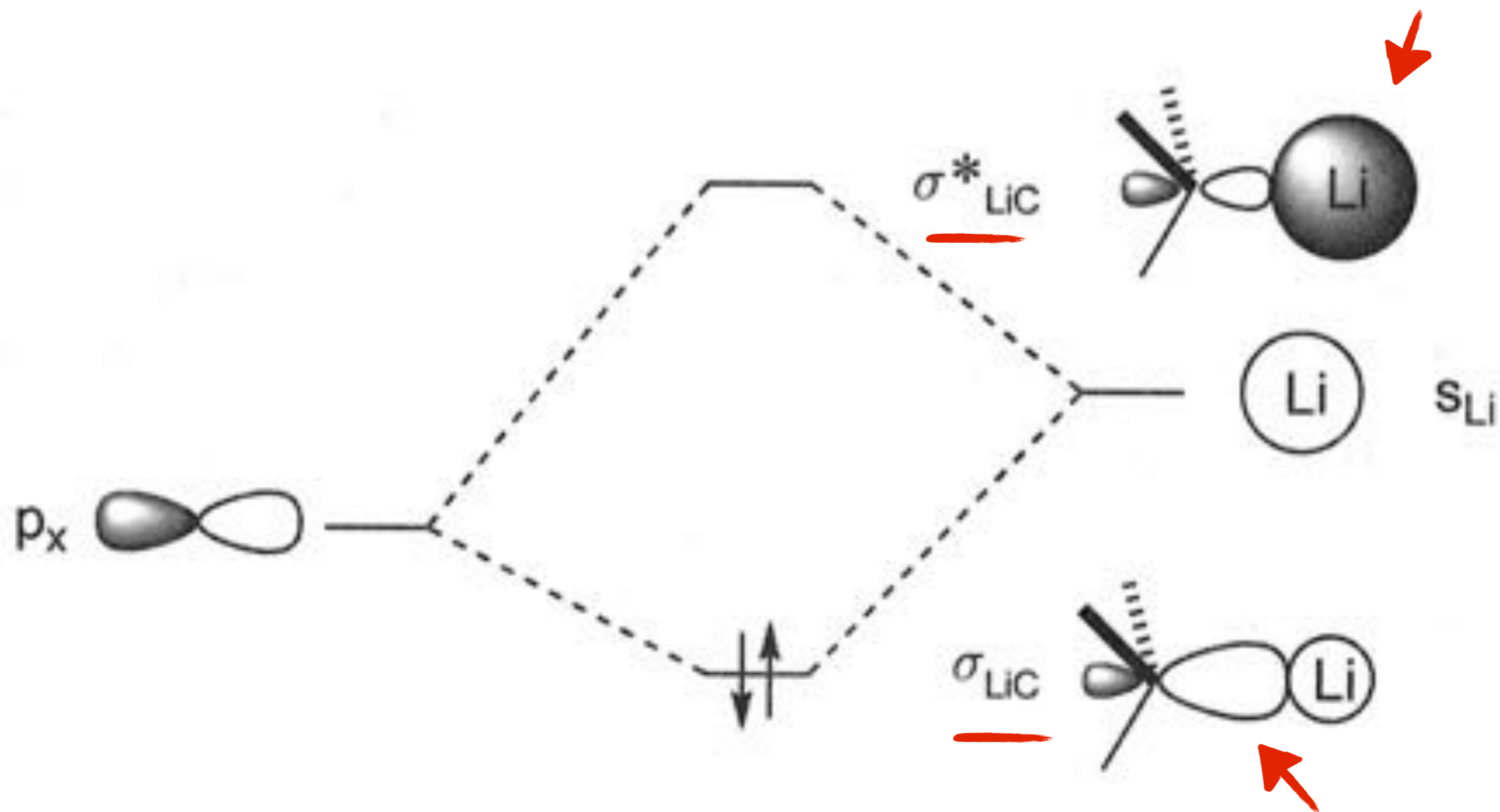


Fig. 1.48 A major contributory part of the Li—C σ bond

Methyl Lithium

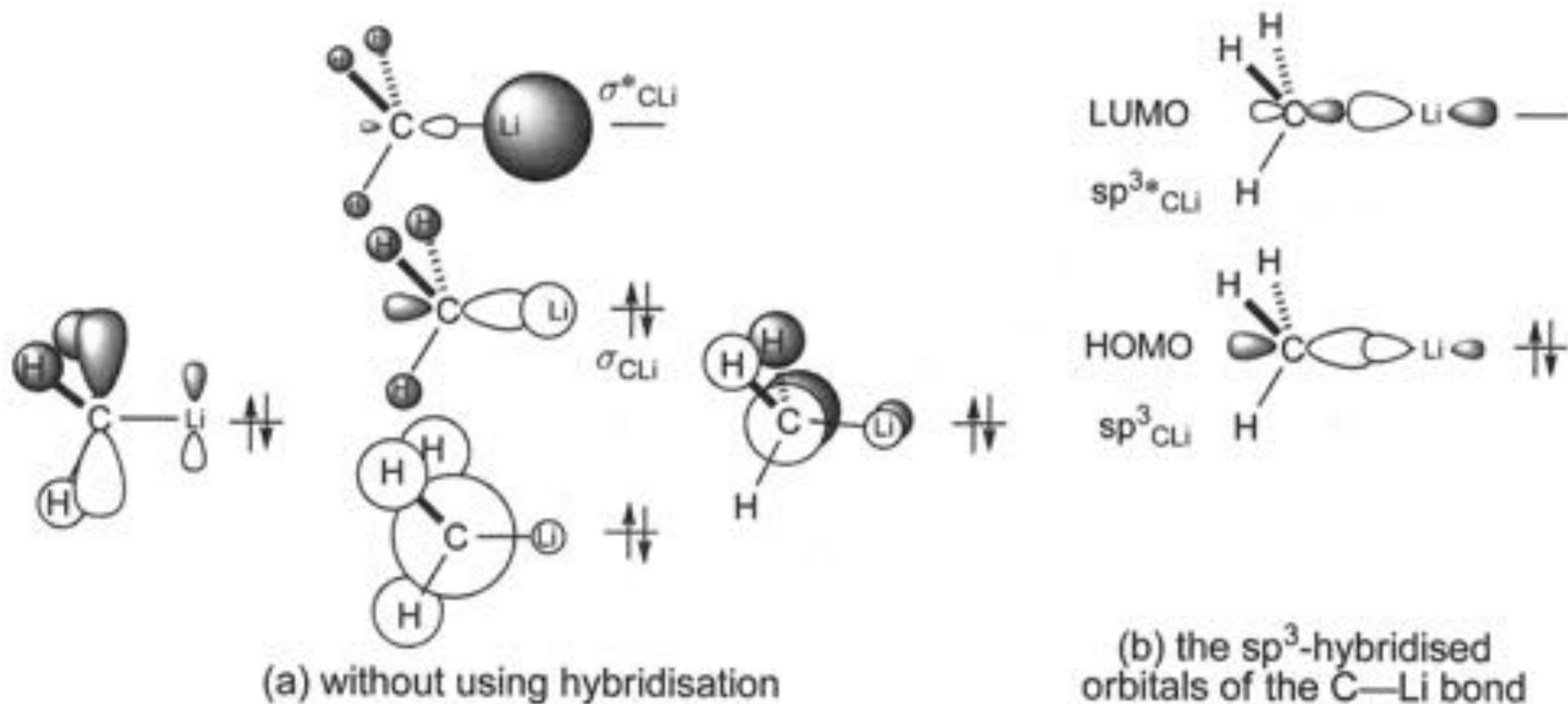


Fig. 1.49 The filled and one of the unfilled molecular orbitals of methyllithium

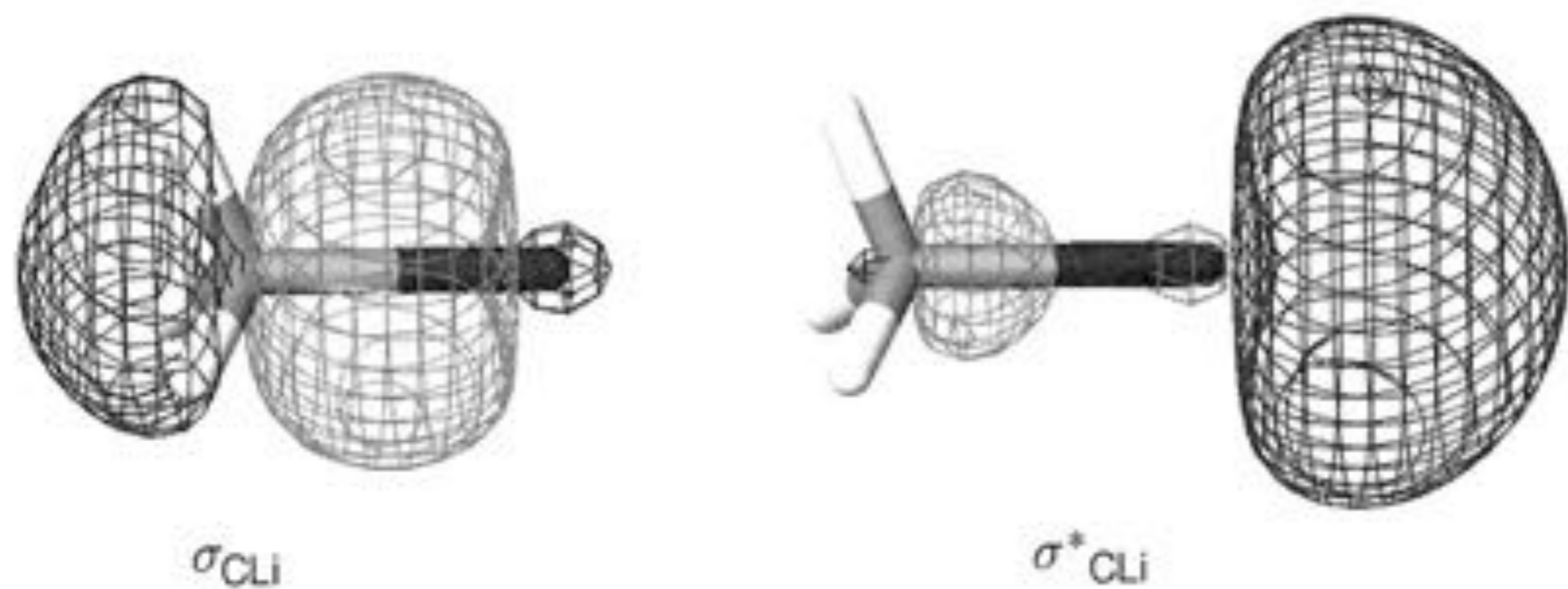


Fig. 1.50 The HOMO and LUMO for methyllithium in the vapour phase

C=O π Bonds

$$\alpha_X = \alpha_0 + h_X \beta_0$$

$$\beta_{CX} = k_{CX} \beta_0$$

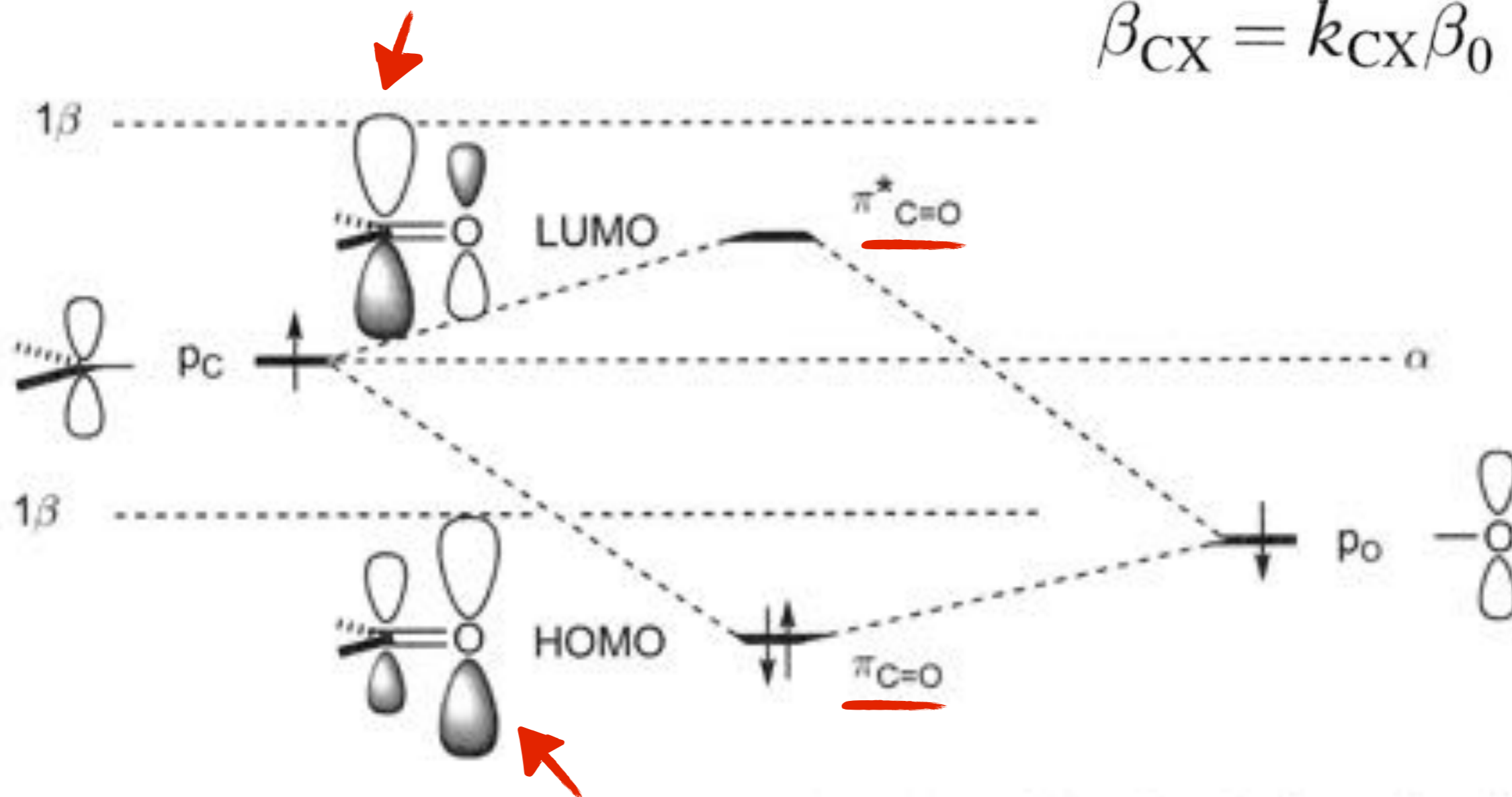


Fig. 1.51 The interaction of p orbitals in the formation of the π bond of a carbonyl group

$$\alpha_X = \alpha_0 + h_X \beta_0$$

$$\beta_{CX} = k_{CX} \beta_0$$

Table 1.2 Parameters for simple Hückel calculations for bonds with heteroatoms

Element		h	k	Element		h	k
B	Trigonal	-0.45	0.73				
C	Trigonal	0	1	Si	Trigonal	0	0.75
N	Trigonal	0.51	1.02	P	Trigonal	0.19	0.77
N	Tetrahedral	1.37	0.89	P	Tetrahedral	0.75	0.76
O	Trigonal	0.97	1.06	S	Trigonal	0.46	0.81
O	Tetrahedral	2.09	0.66	S	Tetrahedral	1.11	0.69
F	Tetrahedral	2.71	0.52	Cl	Tetrahedral	1.48	0.62

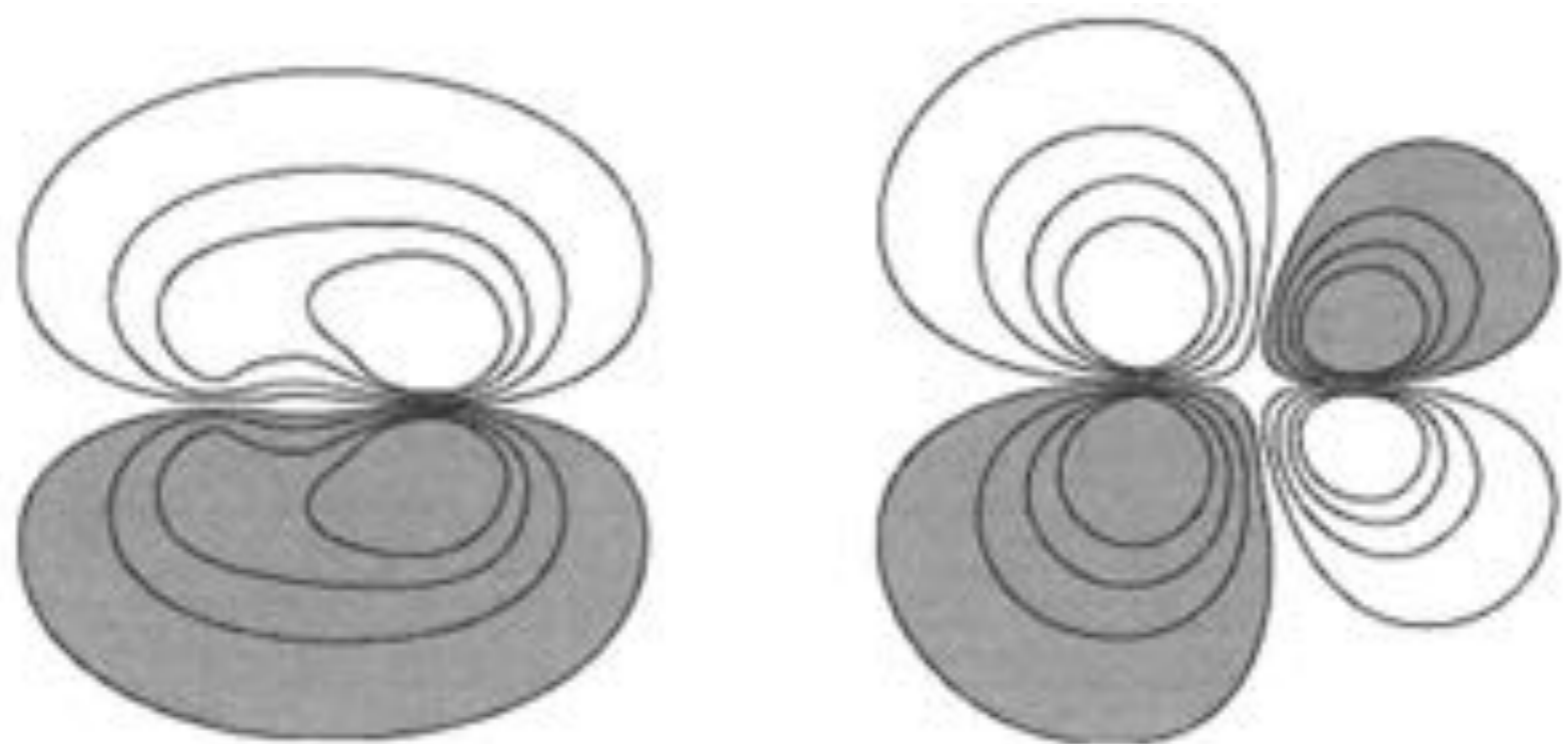


Fig. 1.52 Electron population contours for the π and π^* orbitals of formaldehyde

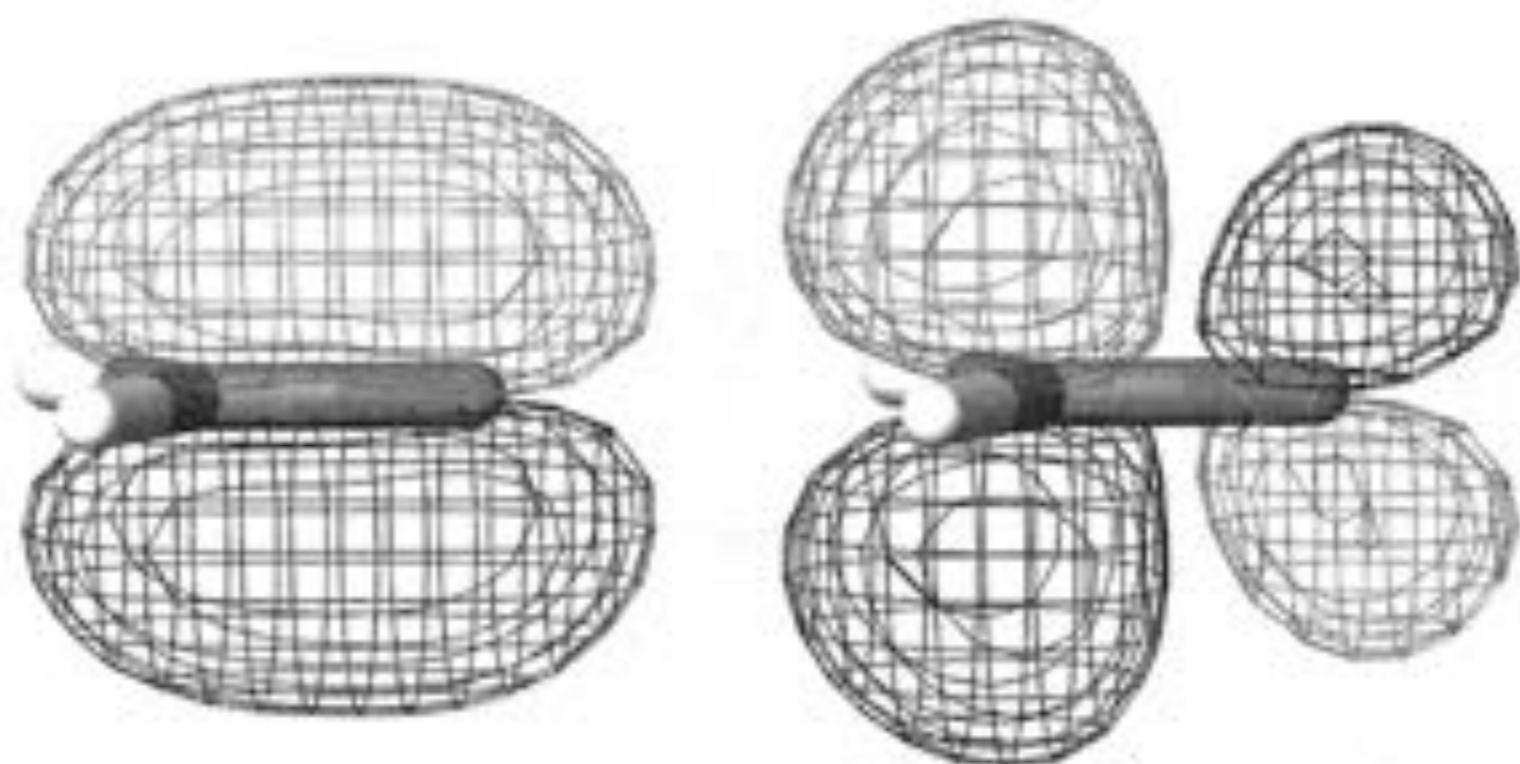


Fig. 1.53 Wire-mesh plot of the π and π^* orbitals of formaldehyde

Ian Fleming

Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions

Preface

1 Molecular Orbital Theory

2 The Structures of Organic Molecules

3 Chemical Reactions—How Far and How Fast

4 Ionic Reactions—Reactivity

5 Ionic Reactions—Stereochemistry

6 Thermal Pericyclic Reactions

7 Radical Reactions

8 Photochemical Reactions



九大百年

修養が広くなければ
完全な士と云ふ可からず

九州大学創設100周年
山川健次郎



己ガ専門ノ学問ノ蘊奥ヲ極メ、

合セテ他ノ凡テノコトニ対シテ

一応ノ知識ヲ有シテ居ラシテ、

即チ

修養ガ

広ク

ナケレバ

完全主ナト云フ可カラズ

ト云フ事デアアル



山田 善次郎

嘉永7(1854)年閏7月17日(9月9日)会津藩家老職の三男として誕生

文久2(1862)年会津藩校 日新館に入学

慶應4(1868)年戊辰戦争 白虎隊入隊、会津若松城落城(15歳)

明治4(1871)年米國留学(18歳)、イエール大学で物理学を学ぶ

同8(1875)年帰国

同9(1876)年東京開成学校教授補

同10(1877)年東京大学理学部教授補

同12(1879)年日本人として初の物理学教授となる

同19(1886)年帝国大学(理科大学)教授

同21(1888)年日本初の理学博士号を授与される

同26(1893)年理科大学長

同34(1901)年東京帝国大学総長就任(48歳)

同37(1904)年貴族院勅選議員

同38(1905)年七博士問題で、東京帝国大学総長辞任

同40(1907)年明治専門学校(現九州工業大学)総裁

就任

同44(1911)年九州帝国大学初代総長就任(56歳)

教授、職員及び学生に対して総長訓示

大正2(1913)年九州帝国大学総長辞任(5月)

東京帝国大学総長就任

同3(1914)年京都帝国大学総長を兼任、総長公選制

を導入

同4(1915)年男爵を授爵

同9(1920)年勲一等瑞宝章を受章

東京帝国大学総長辞任

同15(1926)年私立武蔵高等学校校長

昭和3(1928)年勲一等旭日大綬章を受章

同6(1931)年死去(78歳)

1853年6月 ペリー艦隊浦賀来訪

1854年7月 山川健次郎生誕(会津藩家老三男)

15歳で津藩若松城籠城戦に白虎隊として参加、
戊辰戦による会津藩死者3014名、
官軍参謀 奥平謙輔(長州藩士)と越後府判事
前原一誠との出会い、奥平、前原とともに東京へ
黒田清隆(薩摩藩士、北海道開拓次官、後に
総理大臣)の建議で降伏した榎本武揚ら旧幕軍を
助命し、若者を開拓の先進地、米国へ留学派遣

1871年(18歳) 米国Yale大学物理学教室で
土木工学を勉学

当時は、理学と工学(建築、土木など)が未分化、
科学も工学技術も同時に勉学

ハーバード大学 vs MIT(マサチューセッツ工科大)
(哲学、数学、自然科学)

1877年(明治10年) 東京大学(法学、医学、理学)設立、工学は物理の一部

1889年 工部省の大学統合で帝国大学設立後に工学部が発足、工業化の促進



砲弾が撃ち込まれ落城した会津若松城



立花 隆 「天皇と東大Ⅰ」 -大日本帝国の誕生- (文春文庫)

目次

東大は勝海舟が作った
明治四年、東大医学部は学生の八割を
退学させた
初代学長・加藤弘之の変節
『国体新論』と「天皇機関説」
慶応は東大より偉かった
早大の自立精神、東大の点数主義
元落第生・北里柴三郎博士の抵抗
「不敬事件」内村鑑三を脅した一高生
東大国史科の「児島高德抹殺論」
天皇「神格化」への道
日露開戦を煽った七博士
戸水寛人教授の「日露戦争継続論」
戸水事件と美濃部達吉
元白虎隊総長・山川健次郎の奔走
山川健次郎と超能力者・千里眼事件
沢柳・京大総長の七教授クビ切り事件
東大経済は一橋にかなわない
大逆事件と森戸辰男

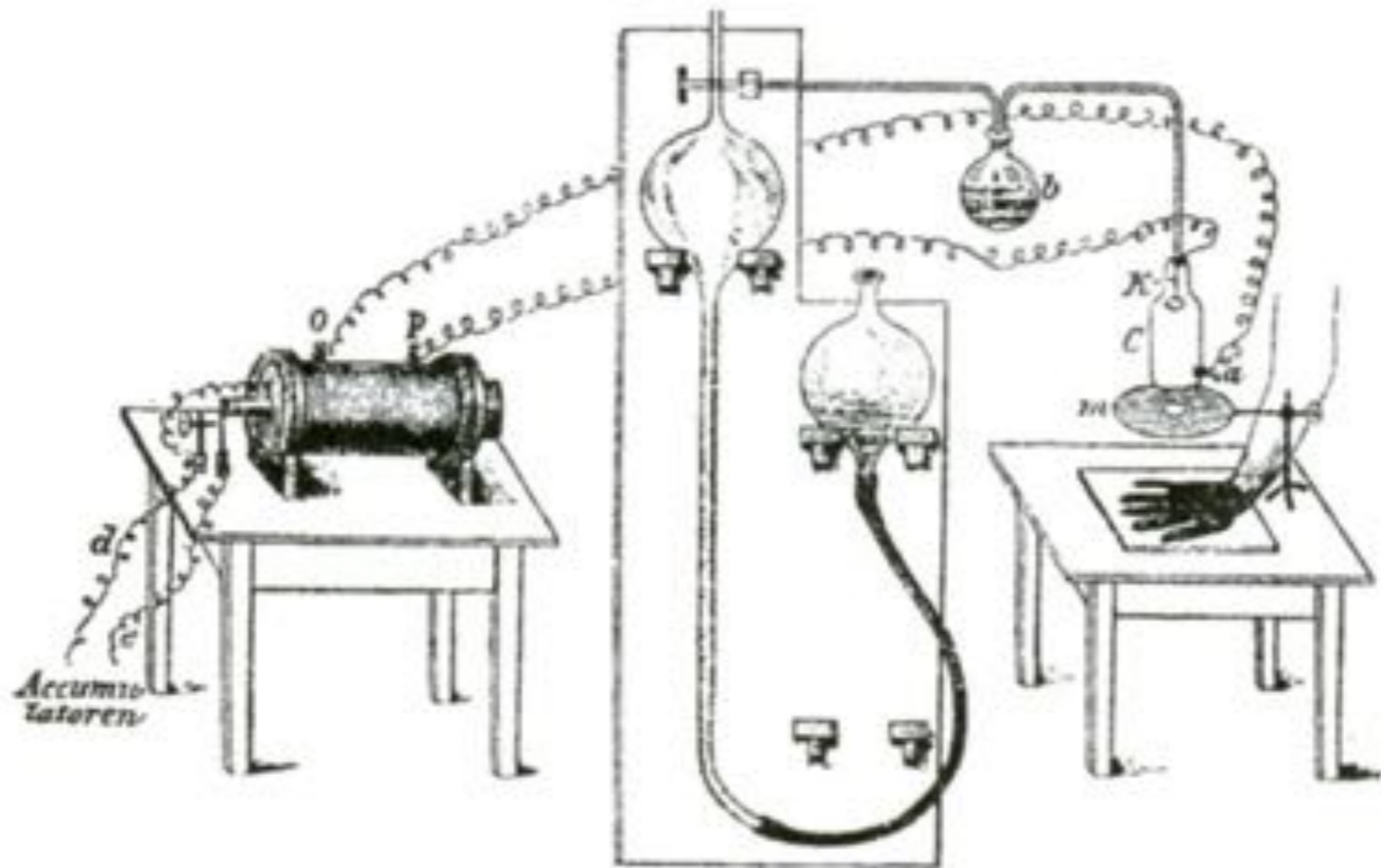


アメリカ留学中の山川(2列目左端)

西洋の機械文明の進歩に驚愕した山川は、物理学の研究を志し、イエール大学付属のシェフィールド理学校で学んだ

1895年末のW. C. RöntgenによるX線発見と1901年の第1回ノーベル物理学賞受賞
X線発見のニュースはドイツ留学中の長岡半太郎が伝える(インド洋経由便で翌年2月)

発見から3ヶ月後の3月25日には旧制第一高等学校の教授・水野敏之丞によって日本の科学雑誌でも紹介された。東京大学、第一高等学校、第三校等学校、によるX線発生実験競争が行われる。4月中旬に一高と東大で実験成功。6月に医学的応用の可能性に関する報告。三高の村岡範為駆物理学教授と島津製作所による合同研究で10月10日に成功。

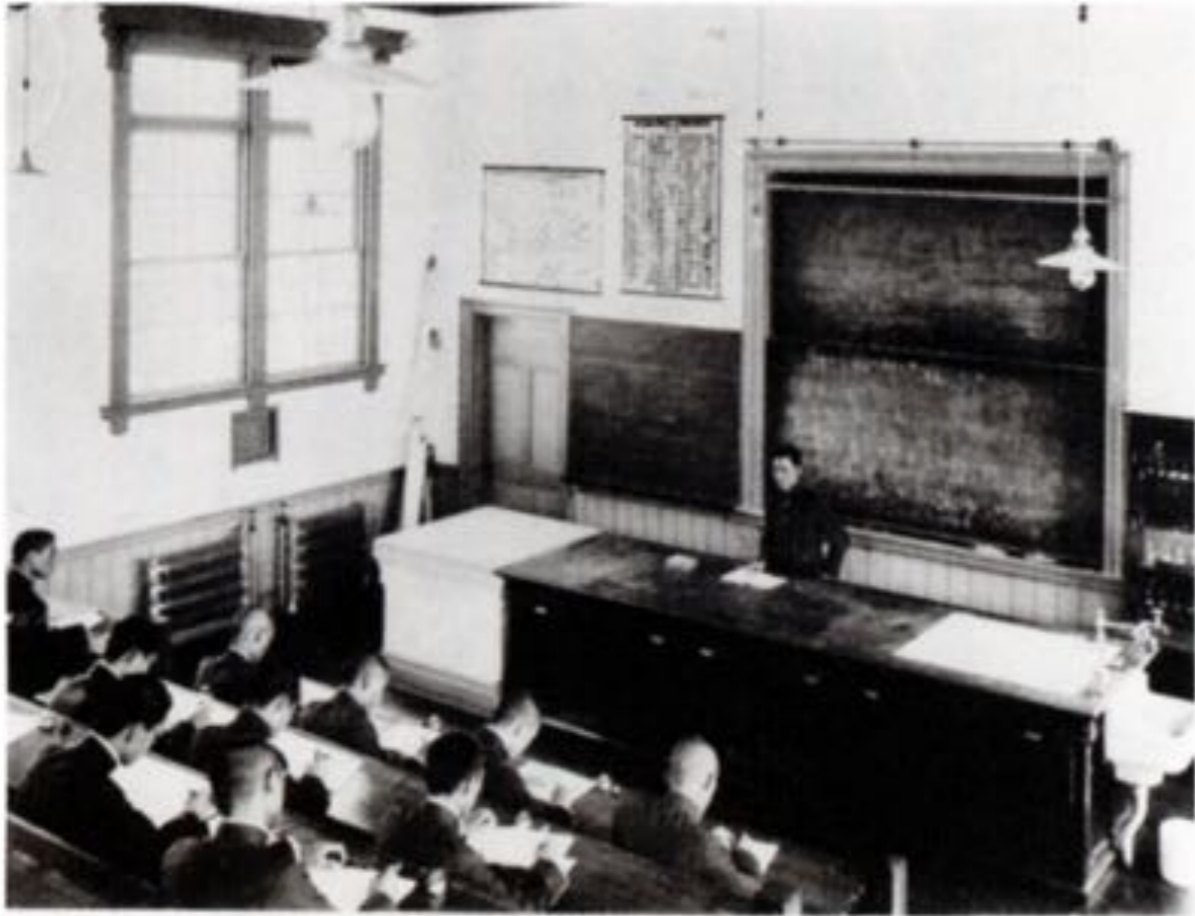


第一高等学校にて水野敏之丞教授らの実験に使用せし装置



工科大学正面(大正3年) (1914年)

写真中央の建物は、大正3年3月竣工の工科大学本館。その左隣は講堂。正門の左に門衛所が見えるが、この建物は大正13年の法文学部創設に際し移築され、現在は向かって右側に建っている



工科大学での理科講義(大正5年)(1916年)



工科大学理科教室での物理実験をする学生たち(大正9年)
(1920年)



山川が執筆したわが国初めての物理学教科書原稿。墨で丁寧に書き上げられている



アインシュタインの来学(大正11年12月)

アインシュタインが来学した。前列左から2番目は相対性理論の紹介で有名な桑木教授。前列右端は真野文二(第2代総長)

長州五傑(ちょうしゅうごけつ) = 長州ファイブ

幕末期(1863年)に長州藩から清国経由でヨーロッパに派遣され、主に**ロンドン大学ユニヴァーシティ・カレッジ**などに密航留学した**井上聞多(馨)**、**遠藤謹助**、**山尾庸三**、**伊藤俊輔(博文)**、**野村弥吉(井上勝)**の5名の長州藩士を指す。

ロンドン大学に**長州ファイブ(Choshu Five)**としてこの5名についての顕彰碑が建てられている。2003年に山口市にも顕彰碑が建てられた。

井上(馨)は**外交**の、遠藤は**造幣**の、山尾は**工学**の、伊藤は**内閣**の、井上(勝)は**鉄道**の、それぞれ「父」とされている。

遠藤謹助(27才) 伊藤博文(21才)


井上勝(20才)

山尾庸三(26才)

井上馨(28才)



長州ファイブ(1863年ロンドン)

A promotional photograph for the movie 'Rangū Five' featuring five actors in traditional Japanese clothing. They are standing in a row outdoors, with a large tree and a building in the background. From left to right: 1. Actor in a dark green kimono and dark hakama. 2. Actor in a greyish-green kimono and dark hakama. 3. Actor in a light blue kimono and dark hakama. 4. Actor in a dark blue kimono and dark hakama. 5. Actor in a dark blue kimono and dark hakama. Each actor has their name and role printed below them.

北村有起哉

井上 勝
初代外務大臣

前田倫良

遠藤謹助
遠州藩主

山下徹大

井上 勝
鎮西外務官(鎮西の父)

三浦アキフミ

伊藤博文
初代内閣総理大臣

松田龍平

山尾庸三
工部卿(鉄道之父)

© 映画「長州ファイブ」制作委員会



日本を密出航する際に
丁髷(ちょんまげ)を切って武士の
身分を捨てる。



3ヶ月後1863年のロンドンにて

長州ファイブを自宅に下宿させて世話したのはAlexander W. Williamson博士というロンドン大学ユニヴァーシティ・カレッジの化学教授夫妻であった。彼ら5名は大学で**分析化学**を勉強し、大学にいる時以外は、**英語**や**数学**といった**基礎教育**を学ぶ生活が続けていたが、元治元(1864)年、彼らにある一つの転機が訪れた……

犬塚孝明著『密航留学生たちの明治維新』(日本放送出版協会、2001年)

2006年(平成18年)には、この5名の渡航前後の様子を描いた**映画「長州ファイブ -CHOSHU Five-」**が作成された。

<http://www.chosyufive-movie.com/>

密航留学生たちの明治維新

井上 馨と幕末藩士

犬塚孝明 *Takanaaki Inuzuka*



76

NHK BOOKS

[921]

なぜ国禁を犯して 海を渡ったのか

●時代の半歩先を読む

NHKブックス——921



HSAB 則 (rule)

HSAB: Hard and Soft Acids and Base

HSAB則とは、酸および塩基の相性を、硬い **hard**、軟らかい **soft**、という表現を使って表したものである。

硬い酸は硬い塩基と相性がよく、軟らかい酸は軟らかい塩基と相性がよい。ここで用いている酸、塩基はLewis(ルイス)の定義による。

HSAB則は主に**錯体**中の金属および金属イオン(Lewis酸)と**配位子**(Lewis塩基)の相性に関して用いられる。

硬い酸や硬い塩基を強酸や強塩基、軟らかい酸と塩基を弱い酸と塩基と考えることは、まったくの誤りである。

硬い酸 サイズが小さく、**価数**が大きい、**正電荷密度**が大きい。

軟らかい酸 サイズが大きく、価数が小さく、**正電荷密度**が小さい。

硬い塩基 サイズが小さく、分極しにくい

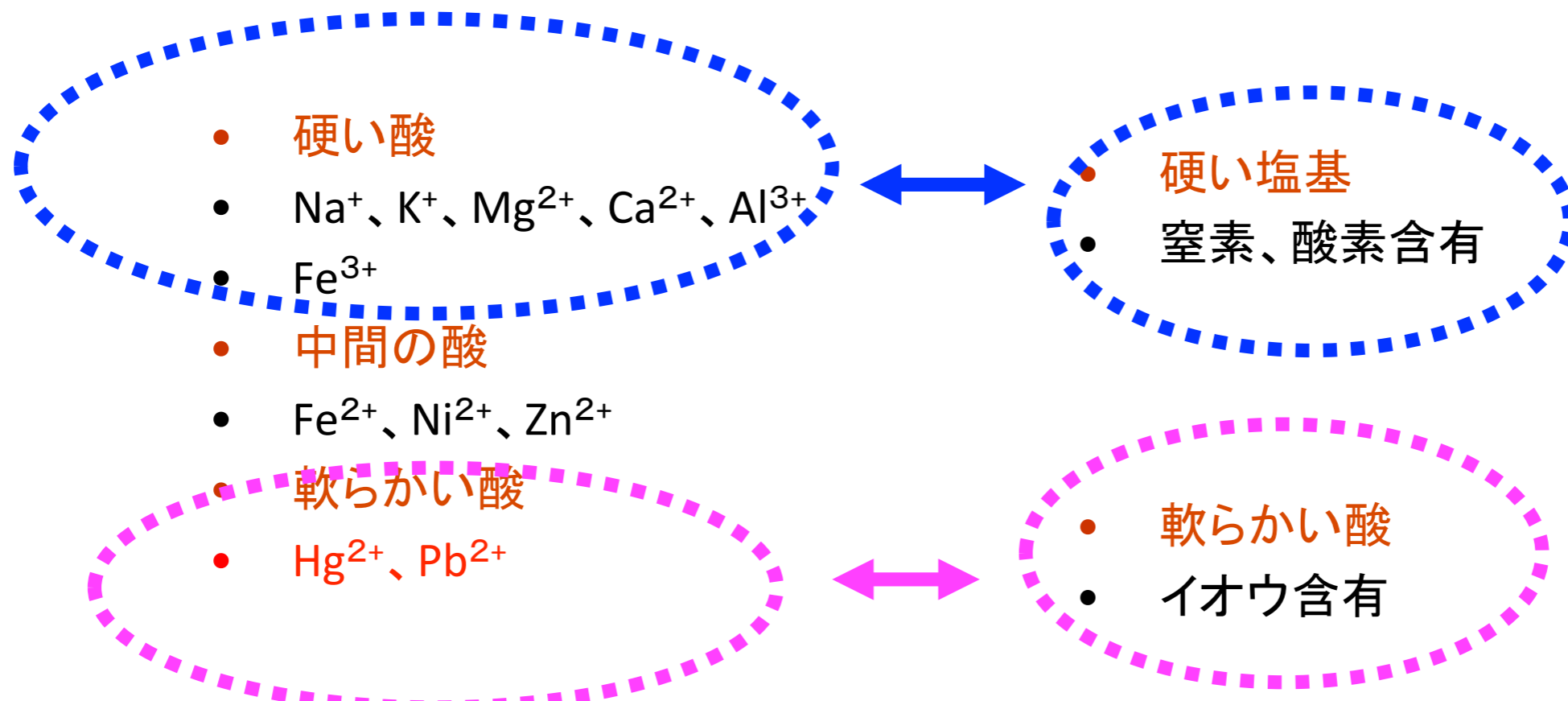
軟らかい塩基 サイズが大きく、分極しやすい

硬い酸 アルカリ金属(アルカリ土類金属)イオン、高原子価の軽金属イオン、

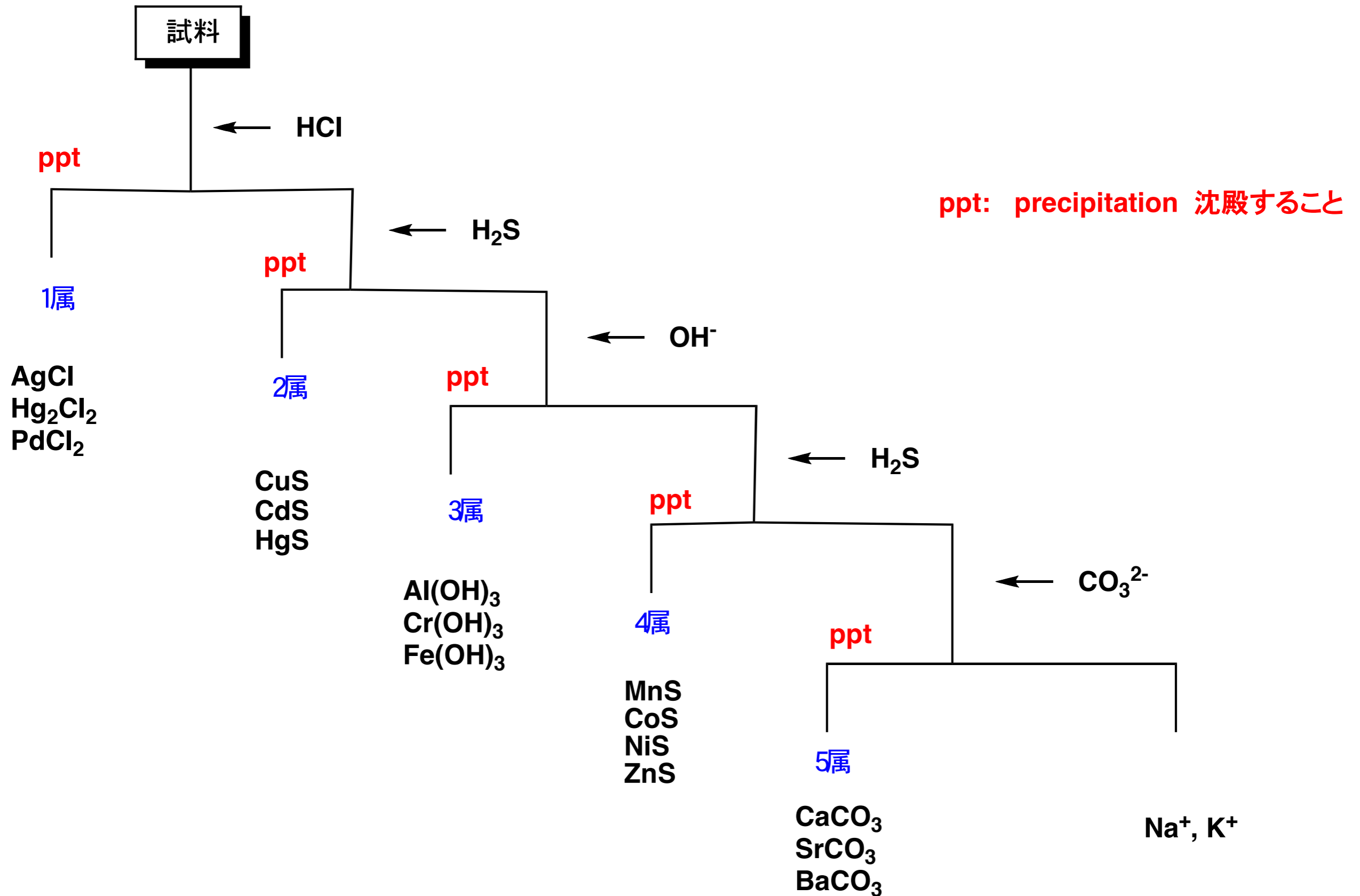
軟らかい酸 重い遷移金属イオン、低原子価の軽金属イオン

周期表と元素の結合性

周期\族	1A	2A	3A	4A	5A	6A	7A	8			1B	2B	3B	4B	5B	6B	7B	0	
1	1																		2
	H																		He
2	3	4											5	6	7	8	9	10	
	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	11	12											13	14	15	16	17	18	
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	19	20		21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38		39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57~71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
	Cs	Ba	ランタノイド	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	88	89~103																
	Fr	Ra	アクチノイド																



金属イオンの定性分析のフローチャート





フルベッキ写真

写真師上野彦馬によって明治元年(1868年)撮影された幕府が長崎につくった英語伝習所の英語講師フルベッキと佐賀藩の学生たち

吉見 俊哉 「大学とは何か」 (岩波新書) (2011/7/21)

いま、大学はかつてない困難な時代にある。その危機は何に起因しているのか。これから大学はどの方向へ踏み出すべきなのか。大学を知のメディアとして捉え、中世ヨーロッパにおける誕生から、近代国家による再生、明治日本への移植と戦後の再編という歴史のなかで位置づけなおす。大学の理念の再定義を試みる画期的論考。

佐藤文隆 「職業としての科学」 (岩波新書) (2011/1/21)

冷戦崩壊以来、科学は大きな転換期を迎えている。社会を巻き込んで突っ走る一方、科学技術創造立国政策の中で科学はリスクな職業と化し、もはや聖域とも見られなくなった。この巨大な社会資源を生かすために、未来に受け継ぐべきものは何か。宇宙物理学に半世紀携わってきた著者が科学の歴史を縦横に語り、発想の転換を促す。

池内 了 「科学と人間の不協和音」 (角川oneテーマ21新書) (2012/1/10)

第一章 ” 科学者 ” と ” 素人 ” のあいだの深い溝 第二章 役に立たない科学の居場所

科学技術という日本語
「文化」としての科学
「技術」化する科学
「毒ガス」発明者へのノーベル賞
戦時下の科学と科学者
軍事研究の蠱惑
私有化される科学
論文よりも特許を優先

第三章 欲望と科学の共犯関係

遺伝子工学による生物の改造
特許による自縄自縛
生と死を操る現代医学
死から逃れるための科学
脳科学ブームを支える神話
「必要」が先か「発明」が先か
科学を騙るまがいもの
疑似科学が科学を駆逐する？
科学者の眼差しの先にあるもの
科学者とスポンサー
科学研究はどこまで自由か

第四章 科学という神話、科学という宗教

二種類の神話

現代の神話が崩れるとき

進化論と宗教的原理主義

イデオロギーによる科学の排除

ポストモダニズムとサイエンス・ウォーズ

複雑系と懐疑主義

エイズ否認主義

科学と宗教の類似点

科学と宗教は紙一重？

第五章 科学を支えるもの、科学を縛るもの

制度としての科学と国家

ポスト・アカデミック科学の時代

産学官連携と事業仕分け

科学者は企業を裏切れるか

科学者は国家を裏切れるか

科学の限界

社会に対する科学者の責任

終章 地下資源文明から地上資源文明へ — 原発事故後の科学 —

地下資源文明の終焉、 地上資源文明への転換

科学

原理、法則

心理発見の知
形式知、論理知

普遍的 (グローバル)
単純系、理想世界

原理主義 (発見)

個人の合理的価値

人間と独立

多様性、多重性

精神的 (文化)

技術

応用、開発

創造の知
経験知、暗黙知

特殊 (ローカル)
複雑系、現実世界

現実との妥協 (発明)

集団の多元的価値

人間と密着

一様性、簡明性

物質的 (文明)