

有機無機相互作用の熱力学と反応速度論

Thermodynamics and kinetics of organic-inorganic interactions

中嶋 悟[1], 塩田 大[2], 生駒 大洋[3], 中澤 清[4]

Satoru Nakashima[1], Dai Shiota[2], Masahiro Ikoma[3], Kiyoshi Nakazawa[4]

[1] 東工大・理工・流動機構（地惑）, [2] 東工大・理工・地球惑星, [3] 東工大・理・流動機構, [4] 東工大・理・地球惑星

[1] Interactive Research Center, Tokyo Inst. Technol., [2] Dept. Earth and Planet. Sci., TITech, [3] Interactive Research Center of Science, Tokyo Inst. Tech., [4] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Tech

<http://www.geo.titech.ac.jp/nakashimalab>

地球表層には様々な有機物と無機物の相互作用があり、生命の起源・進化と生物地球化学サイクルを規制している。しかしながら、その相互作用は、構造不明の複雑な有機物と無機物を含み、これらの物質についての物理化学的定数が不足しているため、その定量的な取り扱いは極めて困難である。そこで、ここでは、有機無機相互作用の熱力学と反応速度論を検討し、上記の困難を乗り越えるため、以下の2つのアプローチを提案する。

複雑な有機分子のギブス生成自由エネルギー等の熱力学定数は求められていないため、これらを含む水圏での反応の平衡は解析が困難である。しかし、熱力学定数既知の無機物との反応の平衡を解析することにより、複雑な有機分子の変成反応の自由エネルギーは求めることができる。

無機物存在下での有機物の変成反応の速度論的研究には、未同定反応物質や副反応や連鎖反応などの存在によって、正確な反応速度定数などが求まらず、「みかけ」のものしか得られないという問題や、pHなどの環境条件や無機物触媒の効果などの問題などの困難がある。そこで、これらの効果を取り入れた数値シミュレーションと対比しつつ反応実験を行い、より正確な速度定数、活性化エネルギー、頻度因子等を求める必要がある。

これらのアプローチを用いて、有機無機相互作用を定量的に解析する例をいくつか示す。1つは、生命の化学進化における新しい作業仮説としての、非晶質シリカの存在下でのアミノ酸の重合反応の解析である。もう一つの例は、鉱物表面での有機汚染物質の変成反応の可能性についてである。