



学生化学賞2.docx

[Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>の構造に関する研究

(長崎県立長崎西高等学校<sup>1</sup>・長崎大学大学院工学研究科<sup>2</sup>・岐阜大学地域科学部<sup>3</sup>・分子科学研究所<sup>4</sup>・総合研究大学院大学<sup>5</sup>) ○岩本 崇弘<sup>1</sup>・赤坂一成<sup>1</sup>・権藤 好信<sup>1</sup>・野口 大介<sup>1,2</sup>・橋本 智裕<sup>3</sup>・岩田 末廣<sup>4,5</sup>

Study on the structure of [Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup> (<sup>1</sup>Prefectural Nagasaki-Nishi High School, <sup>2</sup>Graduate School of Engineering, Nagasaki University, <sup>3</sup>Faculty of Regional Studies, Gifu University, <sup>4</sup>Institute of Molecular Science, <sup>5</sup>Graduate University of Advanced Study) ○Takahiro Iwamoto,<sup>1</sup> Issei Akasaka,<sup>1</sup> Yoshinobu Gondoh,<sup>1</sup> Daisuke Noguchi,<sup>1,2</sup> Tomohiro Hashimoto,<sup>3</sup> Suehiro Iwata<sup>4,5</sup>

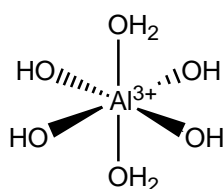
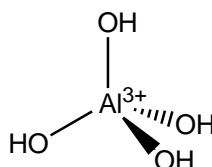
In most of textbooks for high school chemistry, it has been stated that the hydrate of [Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup> has a hexa-coordinated octahedral structure<sup>1)</sup>; [Al(OH)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>-</sup> with four hydroxide ions and two water molecules coordinated to Al<sup>3+</sup>. On the other hand, it was reported previously that calculational results by Ruiz et al.<sup>2)</sup> and experimental analyses by Sipos<sup>3)</sup>, where the hexa-coordinated complex ions are not presented; their stable structures are tetra-coordinated tetrahedral structures. In this study, MP2/6-311++G (d, p) was used to determine the geometric structure of various isomers of complex ions, and their stability was compared with each other. TDDFT calculations were performed for the obtained structures at the M06-L/6-311++G (d, p) level, and an experimental UV-Vis spectrum was also compared. Our results show, that Al<sup>3+</sup> ions in alkaline solution exist as not water-coordinated octahedral structure but tetrahedral structure.

**Keywords :** Quantum Chemistry; Hydrated Complex; Aluminum; High School Chemistry; Inorganic Chemistry

多くの高校化学において[Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>の構造は、Al<sup>3+</sup>に対して4つの水酸化物イオンと2つの水分子が配位した6配位の八面体構造[Al(OH)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>-</sup>をとる<sup>1)</sup>としているものが多い。一方で、Ruizらの計算やSiposの実験では、6配位の錯イオンの記載はなく4配位の正四面体構造をとると報告されている。本研究では、MP2/6-311++G(d,p)を用いて錯イオンの構造を求め、安定性の比較を行った。また、得られた構造に対してM06-L/6-311++G (d,p)レベルで、TDDFT計算を行いUV-visスペクトルとの比較を行った。



[Al(OH)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sup>-</sup>は、安定性の観点から見ても不安定であり、[Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>は、従来の図説に記載されている構造と異なり4配位の正四面体型である可能性が高い。

図.1 [Al(OH)<sub>4</sub> · 2H<sub>2</sub>O]<sup>-</sup>図.2 [Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>

1)「三訂版 フォトサイエンス 化学図録」数研出版

2)Ruiz et al., *J. Phys. Chem. B* **1997**, 101, 1733

3)Sipos, University of Szeged Journal of Molecular Liquids 146(2009)1–14