

まえがき

有機化学では非常にたくさんの反応があり、特に発見者の名前のついた人名反応や、反応に関わる化合物名に由来する名称が付けられたものが多い。これらの反応の多くは電子の動きで説明される。「有機電子論」と呼ばれる記述法である。電子の動きの基本原則を理解して「有機電子論」に慣れると多様な有機反応を解釈し、定型化できる。その意味で有機化学の反応解釈は、定理を駆使して解く数学の問題解決法と似ているかもしれない。ところが、大学で有機化学を学ぶ学生諸君はこの電子の動かし方の基本原則を理解せずにそのまま講義が進んでしまって、結局、有機化学は暗記ものとして終わってしまっている場合が少なくないように思われる。本書の第1部は、有機反応の基本原則や電子の動きを自在に扱えないために足踏みしてしまった人にとって役立つと思う。はじめの部分は退屈な原則の確認、繰り返しかもしれないが、徐々に理解が進むと有機化学が面白くなるに違いない。

一方で、「有機電子論」では説明ができず、「分子軌道」を用いて解釈すべき一連の反応がある。その代表は、有機化学反応のなかでも極めて大事な Diels-Alder 反応である。この反応の解釈には、1981年に日本人としてはじめてノーベル化学賞を受賞された福井謙一博士のフロンティア軌道理論が欠かせない。有機化学の教科書では必ず Diels-Alder 反応を扱うが、分子軌道自体の説明には殆ど触れないか、あるいは分子軌道がいきなり出て来て解説が始まっている。量子化学をある程度理解していないとこれらの分子軌道は一体どこから来てどのような意味をもつのかもわからないまま話が進んでしまうことになる。これらの分子軌道の導出は、有機化学の範疇を越えるので有機化学の教科書では扱わない。したがって、分子軌道の導出に必要な π 電子系 Hückel 法、さらには、そのもととなる Schrödinger 波動方程式も有機化学の教科書で扱えないのは当然のことである。しかしながら、有機化学と量子化学、すなわち実験と理論とが見事に調和しているこの部分についてその奥義を理解しないではもったいないことと思う。本書では、思い切って Schrödinger 波動方程式の導出から始め、 π 電子系 Hückel 法によるエチレンおよび鎖状共役ポリエンの分子軌道を求める数学的過程を詳述した。用いる数学は偏微分等を除いてほぼ高校数学の範囲内にある。これらの分子軌道を理解したその勢いで芳香族性に関する Hückel の $(4n+2)$ 則についても分子軌道からの解釈を記述した。

本書でこれらの基礎を克服した諸君は、さらに豊かな有機化学の世界の理解へと向かって欲しいと思う。なお、本書の原稿を通読して数多くの助言をいただいた信州大学繊維学部化学・材料系応用化学課程の藤本哲也准教授および野村泰志准教授に感謝したい。最後に、本書を出版する機会を与えてくださった三共出版株式会社の秀島功氏に厚くお礼申し上げる。

2016年1月

著 者