

新構造式は分子の本質的な化学イメージを提供する

(地球エネルギーシステム研究所) ○佐野 寛

A New Chemical Structural Formula gives us an Essential Chemical Image of a Molecule

(LOGES) SANO Hiroshi

[Key Words]: New chem-formula, chem-property visualization, shape of π electron cloud, π bond modelling

The new chem-formula can directly show the shape of π bonding electron distribution, at a side of the bond. It visualizes a chemical reactivity of a molecule. Traditional **molecule model** only shows a **geometric shape of atoms**. On the other hand, a chemical reactivity owes to a vast expanse of electron distribution shown by the pictorial electron-model. Such a pictorial electron-model of molecule makes a chemical education free from a rote memorization.

<概要>

新構造式は π 結合を結合側面に直示する。それは分子の化学活性の可視化に直結する。古典的な分子モデルは原子の幾何学的位置表現である。ところが、化学活性は(原子ではなく)電子 or 空軌道の位置により決まる。 \therefore 電子モデルを絵画的に表せば、化学活性を直示し、化学活性を推理できるので、化学教育を暗記から解放すると期待できる。

しかし電子の位置は点ではなく拡がり(=波動関数 ϕ^2)を持つ分布なので原子組立モデル的な固定描画は困難である。だが、 π 結合関連では下記のように、比較的容易に描画できるので、感覚的に優れた化学教材を提供できる。

< π 結合の表示：構造式から絵画表示まで>

C=C、 C=C-C=C (エチレン) (ブタジエン) 従来型構造式	\Rightarrow $\frac{\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}}{\text{(ブタジエン)}}、 \frac{\text{C}=\text{C}}{\text{(エチレン)}}$ 新式 a(印刷体)	C-C、 C-C — — 新式 b、 新式 c	C-C、 C-C  描画 a、 描画 b
------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------

構造式印刷を一行で収めたい場合には「アンダライン利用表記」(新式 a)が便利。だが実態の π 電子張出し長さは、 σ 結合長さと同程度なので新 b がより近似性が高いモデル;さらに π 電子の揺らぎを取込める新 c がより高い近似 \dots となる(=手描きの良さ)。

π 電子の横長さを σ 結合に揃える表示(古典的な C=C)は、実態の学習に有害である。隣接原子への π 電子分布はみ出し(共役性の可視化)理解には、ブタジエン例を示した。

<C=C-X の π 結合電子の偏移>

電子偏移性が、 σ 結合と π 結合が独立に挙動することは、有機電子論の運用で重要。しかし旧構造式では σ と π が区別できない。一方、新構造式では自然に形で表示されている。

C=C \rightarrow -Cl 従来型構造式 (C=C間結合電子は右へ偏移?)	C=C \rightarrow -Cl 新構造式 (σ 系電子は右偏移; π 系は左偏移)
--------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------

塩化ビニルでは C-Cl が右へ偏るのに、 C^+ の攻撃を受ける(=電子リッチ)2重結合は左端。ビニルアルコール(C=C-OH)が不安定、アセトアルデヒド(HC=C=O)になる予測も可能。

<逆配位>置換基が電子的に「 σ で吸引し π で供与」する現象の、他の数例を紹介する。