## 有機化学の専門基礎教育のための共役系での電子の非局在化 に関する用語について

(創価大理工)○伊藤 眞人

Terms and Usages on Electron Delocalization in Conjugated Systems for Organic Chemistry in University Basic Education

(Faculty of Science and Engineering, Soka University) OMasato M. Ito

Delocalization of  $\pi$ -electrons in a conjugated system has been called "resonance", without any description of its theoretical basis. So are the "resonance formula", which combines classical structural formulas to understand the delocalized electron distribution, and "resonance effect" which refers to the electronic effect of the substituent on the conjugated system. The concepts underlying these terms are very useful in understanding the delocalization of  $\pi$ -electrons in conjugated systems, based on traditional structural formula. Indeed, it is widely used, especially in the basic education of organic chemistry at universities, including in basic education. However, the electronic theory (hypothesis) concerning the "resonance" in its name is now known to have no proper theoretical background. Therefore, in the previous annual meeting, it was proposed to use the term "delocalization", which expresses the essence of the behavior of electrons that make up a conjugated system, instead of "resonance", to express the contents corresponding to the above concept. This time, by using this term, an attempt is exemplified to construct teaching materials for organic chemistry in basic university education. An overview of the teaching materials is available on the website.

Keywords: Organic Chemistry, University Basic Education, Conjugated System, Delocalization Effect, Terms and Usage

共役系での $\pi$ 電子等の非局在化は「共鳴」と呼ばれている。その理論的基盤が示されることはない。非局在化の様子を理解するために古典的な構造式を複数組み合わせて用いる「共鳴式」や、置換基の共役系に対する電子効果をさす「共鳴効果」も同様である。これらの根底にある概念は、共役系での $\pi$ 電子の非局在化の様子を、伝統的な構造式に基づいて理解するには非常に有用であり、実際、特に大学有機化学の基礎教育をはじめ、広く用いられている。しかしながらその名前にある「共鳴」に関する電子理論(仮説)は、今日では正当な理論的基盤を持たないことがわかっている。そこで、昨年の年会では、「共鳴」ではなく、共役系を構成する電子の挙動の本質を表す「非局在化」という用語を用いて上記に対応する内容を表現することを提案した<sup>1)</sup>。今回は、この用語を用いて、大学の基礎教育での有機化学の教材を構築する試みを例示する。教材の全体像はホームページに公開されている<sup>2)</sup>。

- 1) 日化第 102 春季年会講演予稿集, D202-2pm-03 (2022).
- 2) 伊藤眞人「有機化学のページ」, url = https://home.soka.ac.jp/chem/yuki/shiryo.html.