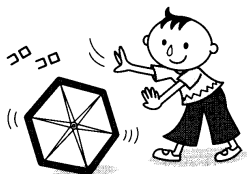
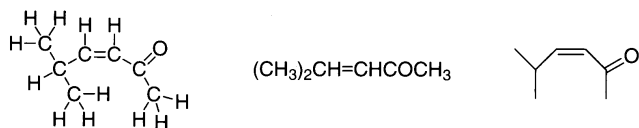


# 1章 ケクレ構造式



有機化学とうまくつきあうには、有機化学者が使っている画法を読み解けるようになる必要がある。ある分子の図を読むときは、そこに含まれるすべての情報を読み解くことが絶対に必要になる。この技術が身につけていないと、最も基本的な反応や概念を把握することができない。

分子にはいろいろな書き表し方がある。



明らかに、右端の構造(ケクレ構造式, Kekulé structure)が一番手早く書けるし、素早く読みとれるし、情報を伝える最善の方法である。有機化学のどんな教科書でもよいから、後半のどこかのページを開いてほしい。どのページにもケクレ構造式で書かれた図がちりばめられているのに気づくだろう。たいていの学生は、これらの図を問題なく読む能力がどんなに大切かを理解しないままに、これらの図に時間をかけてなじんでいく。この章は、これらの図を手早く巧みに読む技術を君が身につけられるよう助けてくれるだろう。

## 1.1 ケクレ構造式の読み方

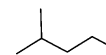
ケクレ構造式は、炭素骨格(分子の骨格をつくる炭素原子のすべてのつながり)と、それに結合している-OHや-Brなどの官能基(functional group)のすべてを示す。結合線はジグザグ形式で書き、その末端はすべて炭素原子を表す。たとえば、次に示す化合物は6個の炭素原子からなる。



結合線の末端も炭素原子を表すことは忘れがちなので、注意する。たとえば、次の分子は6個の

## 2 \* 1章 ケクレ構造式

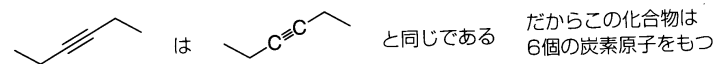
炭素原子からなる(数えて確かめてみなさい)。



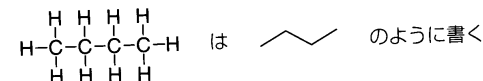
二重結合(double bond)は2本の結合線で、三重結合(triple bond)は3本の結合線で表す。



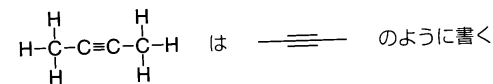
三重結合は直線形であるから、これを書く際は、ジグザグではなく直線的に書くこと(分子の三次元構造については4章で扱う)。最初はおおいに混乱するかもしれない。というのも、三重結合にはいくつの炭素原子が含まれているかが、すぐには見てとりにくいからである。そこで、はっきりさせよう。



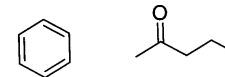
三重結合に迷わされないようにしよう。三重結合の2個の炭素原子と、それに結合している2個の炭素原子を直線的に書く。ほかの結合はジグザグに書く。



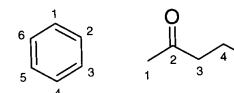
しかし



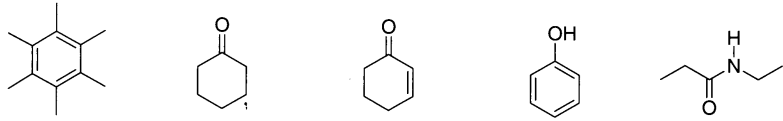
例題 1.1 次のそれぞれの図に含まれる炭素原子を数えなさい。



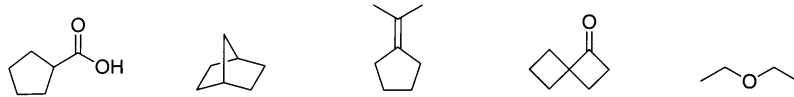
解答 第一の分子は6個の、第二の分子は5個の炭素原子をもつ。



**練習問題** 次のそれぞれの図に含まれる炭素原子を数えなさい。

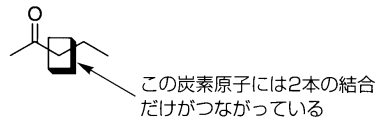


1.2 解答 \_\_\_\_\_ 1.3 解答 \_\_\_\_\_ 1.4 解答 \_\_\_\_\_ 1.5 解答 \_\_\_\_\_ 1.6 解答 \_\_\_\_\_



1.7 解答 \_\_\_\_\_ 1.8 解答 \_\_\_\_\_ 1.9 解答 \_\_\_\_\_ 1.10 解答 \_\_\_\_\_ 1.11 解答 \_\_\_\_\_

さて、炭素原子の数え方がわかったから、次に、分子のケクレ構造式における水素原子の数え方を学ぼう。水素原子は表にでてこないで、そのためにケクレ構造式は読みとりやすく、手早く書ける。それぞれの炭素原子上に何個の水素原子があるかを定める規則、すなわち中性の炭素原子はつねに4本の結合をもつという規則がある。次の図の四角でくくった炭素原子は2本の結合をもつだけである。

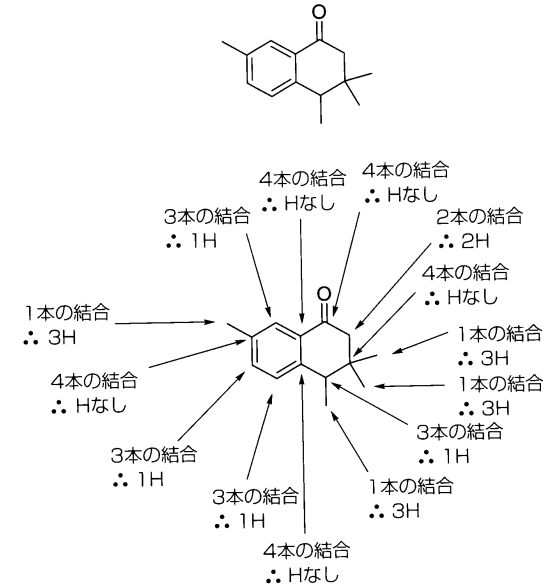


したがって、水素原子に結合しているもう2本の結合があると推定できる(これで合計4本となる)。この規則があるから、水素原子を書かずにすませることができ、図を書く際に時間を大幅に節約できるのだ。誰でも4まで数えることができ、表にはでていない水素原子を数えることができるというのが前提である。

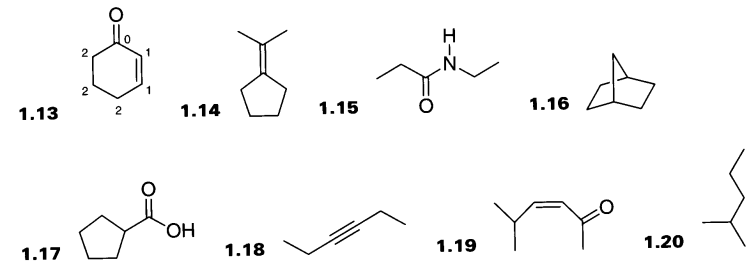
そういうわけで、君にとって必要なのは、炭素原子につながって見える結合を数えるだけでよく、そうすれば、炭素原子が4本の結合をもつのに必要な水素原子の数わかる。この作業を何回か繰り返せば、もういちいち数えなくてもすむようになる。このタイプの図を見るのに慣れて、いちいち数えなくても、すべての水素原子を一目で「見る」ことができるようになるだろう。この段階に達するように、少し練習をしてみよう。

**例題 1.12** 次の分子は14個の炭素原子をもっている。それぞれの炭素原子に結合している水素原子を数えなさい。

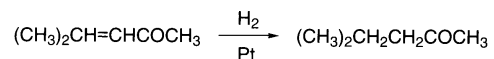
**解答**



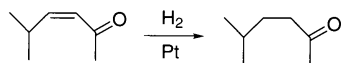
**練習問題** 次のそれぞれの分子について、各炭素原子に結合している水素原子を数えなさい。例として、最初の問題の解答を示しておく(数字は、いくつの水素が各炭素原子に結合しているかを示す)。



これで、ケクレ構造式を用いることで、どれだけ時間の節約になるかがわかっただろう。全部の炭素Cや水素Hを書かないことで、時間が節約できるのはいうまでもないが、書くのが簡単だけでなく、読むのも同様に簡単である。たとえば次の反応式を見てみよう。



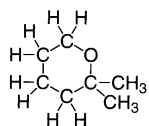
何が起きているかを読みとるのは簡単ではない。起きている変化を見抜くために、反応式をしばらく眺める必要がある。しかし、ケクレ構造式を用いて式を書き直すと、反応式は簡単になってすぐに読みとれる。



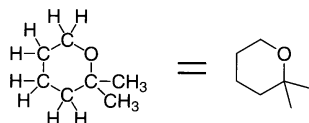
式を見ただけで、何が起きているかを見てとれる。この反応では2個の水素原子を二重結合に付加させることで、二重結合を単結合(single bond)に変換している。このタイプの図を楽に読めるようになれば、反応の際に起きている変化を見抜く準備ができたことになる。

## 1.2 ケクレ構造式の書き方

この画法の読み方がわかったところで、次にこれらの書き方を学ぶ。次の分子を例にしよう。

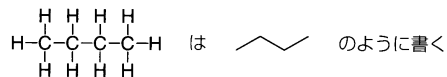


この分子をケクレ構造式で書く際は、炭素骨格に注目し、CとH以外の原子はすべて書き忘れないようにする。そうすると、上の分子は次のようになる。

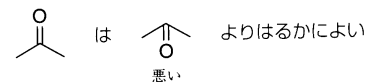


問題に取り組む前に、役立ちそうな点をあげておこう。

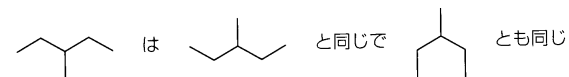
- 直鎖状に連なっている炭素原子はジグザグに書く。



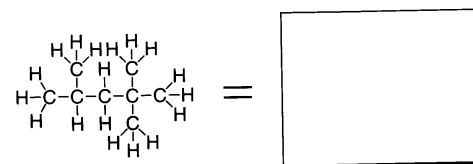
- 二重結合を書くときは、ほかの結合からなるべく離す。



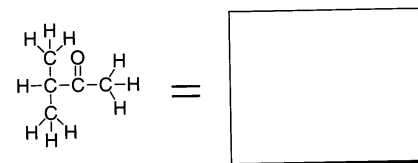
- ジグザグを書くときは、どの方向に向けてもかまわない。



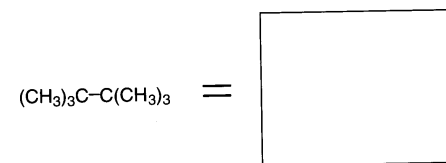
**練習問題** 次のそれぞれの構造式について、ケクレ構造式を枠の中に書きなさい。



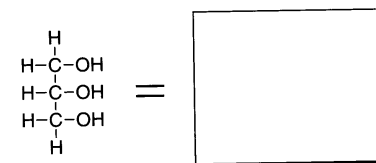
1.21



1.22



1.23



1.24