

# 目 次

まえがき	細矢 治夫	i
------	-------	---

## I 口 絵 写 真

## II ノーベル賞受賞講演

化学反応におけるフロンティア軌道の役割	福井 謙一	1	
1 フロンティア軌道相互作用の概念	2	4 展 望	12
2 化学反応経路	10	文 献	14
3 関連分野におけるフロンティア軌道	11		

## III 福井謙一教授の原報

原報の選択にあたって	細矢 治夫	19
III-1) A Molecular Orbital Theory of Reactivity in Aromatic Hydrocarbons	"Frontier Electron Theory"	56
III-2) Molecular Orbital Theory of Orientation in Aromatic, Heteroaromatic, and Other Conjugated Molecules	III-7) A Simple Quantum-Theoretical Interpretation of the Chemical Reactivity of Organic Compound	58
III-3) Theory of Substitution in Conjugated Molecules	III-8) An MO-Theoretical Illumination for the Principle of Stereoselection	83
III-4) Molecular Orbital Theory of Reactivity in Radical Polymerization	III-9) Recognition of Stereochemical Paths by Orbital Interaction	89
III-5) Interrelations of Quantum-Mechanical Quantities Concerning Chemical Reactivity of Conjugated Molecules	III-10) Constituent Analysis of the Potential Gradient Along a Reaction Coordinate. Method and an Application to $\text{CH}_4 + \text{T}$ Reaction	97
III-6) Reply to the Comments on the	III-11) Interaction Frontier Orbitalals	104

## IV 福井謙一教授の総説および解説

不飽和炭化水素の反応性に関する量子力学的解釈の進歩	109
“Frontier Electron” その後	117
「化学反応と電子の軌道」より	
II 反応座標の定式化	119
VI 非局在化と結合交換の場所的並行性	121
VII HOMO-LUMO準位間隔減少の原理	124
VIII 反応中心への HOMO, LUMO 局在化の原理	125
IX “フロンティア電子”の呼称	129
X 反応性指数	130

## V フロンティア軌道理論の解説

1 福井理論の背景とその流れ	細矢 治夫	137
2 フロンティア軌道理論——その生い立ち, 基礎, および他の反応性理論との関連	米澤貞次郎, 諸熊 奎治	142
1 フロンティア軌道概念の生い立ち	自由原子価	142
2 フロンティア軌道理論と他の反応性理論との関連	2.3 局在化法——局在化エネルギー	148
2.1 有機反応性理論の歴史的背景	2.4 各反応性指数と実験との比較	148
2.2 静的方法——全電子密度, 自己分極率,	2.5 反応性指数間の関係	148
3 ラジカル・イオン重合と HOMO-LUMO 相互作用	米澤貞次郎	156
1 重合反応性の経験的理論	文献	156
2 重合反応のフロンティア軌道理論		159
4 生物学的応用	永田 親義, 今井 詮	164
1 発がんおよび制がん反応への応用	2.3 利尿作用その他	164
1.1 発がん反応	3 酵素反応および酵素阻害反応への応用	164
1.2 制がん化合物への応用	3.1 酵素反応機構	166
1.3 代謝体と DAN の結合	3.2 酵素阻害反応	166
2 薬理作用への応用	4 その他の生理作用への応用	167
2.1 幻覚作用およびニコチン様作用	文献	167
2.2 殺菌作用		168
5 $\sigma$ 電子系の取扱い	加藤 博史	173
1 水素引抜き反応——ラジカル反応	文献	173
2 求核反応		174

6 立体選択とフロンティア軌道理論の展開 .....	藤本 博	180
1 軌道相互作用 .....	子軌道計算 .....	180 186
2 立体選択の原理 .....	5 相互作用の局在化 .....	181 189
3 フロンティア軌道理論の展開 .....	文 献 .....	184 192
4 フロンティア軌道理論と非経験的分		
7 反応経路解析 .....	加藤 重樹	194
1 IRC とは .....	4 化学反応の動力学へのアプローチ .....	194 198
2 IRC の計算例 .....	文 献 .....	196 200
3 反応経路解析 .....		197
8 反応論からみたフロンティア軌道理論 .....	笛野 高之	201
1 化学相互作用におけるフロンティア軌道 .....	2 反応動力学に向けて .....	201 205
1.1 芳香族置換反応の遷移状態模型 .....	2.1 反応経路と角運動量保存 .....	201 205
1.2 ラジカル反応 .....	2.2 反応速度 .....	204 205
	文 献 .....	207
9 有機化学からみたフロンティア軌道理論 .....	井本 稔	208
1 フロンティア軌道理論の有機化学における意義 .....	(HSAB) .....	208 211
2 Hammett 則の理論 .....	4 $\sigma\pi$ 相互作用 .....	209 212
3 硬い・軟らかい酸・塩基の理論 .....	5 軌道変化の規則 .....	212 214
	文 献 .....	214
福井先生との一問一答 .....	米澤貞次郎, 細矢 治夫	216

## VI 参 考 論 文

VI-1) Stereochemistry of Electrocyclic Reactions .....	221
R.B. WOODWARD, Roald HOFFMANN, <i>JACS</i> , 87, 395-397 (1965)	
VI-2) The Electronic Mechanism of Electrocyclic Reactions .....	223
H.C. LONGUET-HIGGINS, E.W. ABRAHAMSON, <i>JACS</i> , 87, 2045-2046 (1965)	
VI-3) Selection Rules for Concerted Cycloaddition Reactions .....	223
Roald HOFFMANN, R.B. WOODWARD, <i>JACS</i> , 87, 2046-2048 (1965)	
VI-4) Orbital Symmetries and <i>endo-exo</i> Relationships in Concerted Cycloaddition Reaction .....	227
Roald HOFFMANN, R.B. WOODWARD, <i>JACS</i> , 87, 4388-4389 (1965)	
VI-5) Orbital Symmetries and Orientational Effects in a Sigmatropic Reaction .....	228
Roald HOFFMANN, R.B. WOODWARD, <i>JACS</i> , 87, 4389-4390 (1965)	
VI-6) Selection Rules for Sigmatropic Reactions .....	230
R.B. WOODWARD, Roald HOFFMANN, <i>JACS</i> , 87, 2511-2513 (1965)	
VI-7) The Conservation of Orbital Symmetry .....	232
Roald HOFFMANN, R.B. WOODWARD, <i>Acc. Chem. Res.</i> , 1, 11-22 (1968)	