

Om Benzolmolekulets Konstitution.

Af

Julius Thomsen.

(Meddelt i Mødet den 22. Oktober 1886)

Spørgsmaalet om, paa hvilken Maade Benzolets Molekul maa antages at være bygget, er af ikke ringe Vigtighed, eftersom Benzol saa at sige danner Grundlaget for det overordentlige store Antal af organiske Forbindelser, som med et fælles Navn benævnes aromatiske Stoffer. Bygningen af Benzolmolekulet eller dets Konstitution har man tænkt sig paa forskjellig Maade og anskueliggjort den formodede Bygningsmaade ved grafiske Konstitutionsformler, der vel alle mere eller mindre fuldkomment svare til Stoffets kemiske Egenskaber, men dog tillige paa een Undtagelse nær lider af den Fejl, at de forudsætte en Ordning af Benzolmolekulets sex Kulstofatomer i et Plan, medens det dog er naturligt at antage Molekulets Bygning at være sfærisk, altsaa svare til en Fordeling af Kulstofatomerne efter Rummets tre Dimensioner.

Endvidere er det blevet højst sandsynligt ved de af mig i Aaret 1880 udførte Undersøgelser over Benzolets Forbrændingsvarme, og det er ogsaa bleven bestyrket ved mine senere Undersøgelser over andre aromatiske Stoffer, at Benzolmolekulets Kulstofatomer ikke ere knyttede til hinanden ved saakaldte dobbelte Bindinger imellem to og to Atomer, saaledes som det almindeligt antages, men derimod ved ni enkelte Bindinger.

Den af Ladendurg foreslaaede Konstitution, den saakaldte Prismeform, tilfredsstiller vel baade Fordringen om en rumlig Fordeling af Benzolmolekulets sex Kulstofatomer og deres gjensidige Binding ved ni enkelte Bindinger; men der klæber dog forskellige Mangler ved den. I fysisk eller mekanisk Henseende er Prismeformen ikke ret tilfredsstillende; thi det tresidede Prisme er ikke noget regelmæssigt Legeme, idet Prismets Højde og Længden af Trekantens Sider ikke staa i noget uforanderligt Forhold til hinanden; og det vilde vel ogsaa være vanskeligt af de almindelige mekaniske Principer at udvikle en rimelig Bevægelsesform for de sex, til Prismets Hjørner svarende Kulstofatomer. Ogsaa fra et kemisk Standpunkt er der bleven rejst Indvendinger, senest af Baeyer (Berichte der Deutschen chemischen Gesellschaft Bd. 19, Side 1797 ff.), som synes at tyde paa, at Prismeformen ikke paa en tilstrækkeligt let Maade forklarer Benzolderivaternes Dannelse. Hvilken Betydning man nu end vil tillægge denne Indvending, saa er der dog ikke derved givet noget Bevis for Rigtigheden af den af Kekulé foreslaaede Konstitution af Molekulet med tre enkelte og tre dobbelte Bindinger.

Det forekommer mig derfor rigtigt at se sig om efter en anden Konstitution for Benzolmolekulet, og jeg tror, at Spørgsmaalet kan besvares ad rationel Vej paa følgende Maade.

1. Benzolmolekulet indeholder sex Kulstofatomer, som ifølge alle Iagttagelser maa være fuldstændigt identiske i kemisk Henseende og derfor ogsaa maa tilfredsstille de samme Fordringer i fysisk Henseende.

2. En fuldstændig regelmæssig Fordeling af sex Punkter i Rummet fører til det regulære Oktaeder, og man har saaledes Grund til at antage, at Benzolmolekulets sex Kulstofatomer i rumlig Henseende svare til de sex Hjørner i Oktaedret og saaledes ere regelmæssigt fordelte i en Kugleflade.

3. Det regulære Oktaeder er bestemt ved tre Axer, som staa lodrette paa hinanden og gjensidigt halvere hinanden; deres

Endepunkter svare altsaa til de sex Kulstofatomer. Man maa derfor antage, at disse Axer danne det fundamentale i Benzolmolekulet, og at de tre til disse svarende Bindinger imellem Kulstofatomerne ere uløselige, saafremt Molekulets Grundkarakter skal bibeholdes.

4. Af Benzolmolekulets sex Kulstofatomer ere altsaa hver to bundne ved en axiær Binding; men for at fastholde de tre uafhængige Axer i deres gjensidigt lodrette Stilling, ere flere Bindinger imellem Kulstofatomerne nødvendige. Dette kan opnaaes derved, at hvert Kulstofatom binder et Naboatom, hvorved hvert Atom vil blive knyttet til to Axer, eller derved at hvert Atom binder to Naboatomer, hvorved hvert Atom vil blive forbundet med alle tre Axer. Disse Bindinger svare selvfølgelig til Oktaedrets Kanter.

5. Da denne periferiske Binding af Kulstofatomerne selvfølgelig ikke maa ophæve Atomernes fuldstændige Lighed i kemisk og fysisk Henseende, maa disse Bindinger være regelmæssigt fordelte; men denne Fordring tilsteder kun een Op-løsning, nemlig saaledes, at hvert af Benzolmolekulets Atomer binder tre andre Atomer, som tilhøre hvert sin Axe, men ikke ere indbyrdes forbundne.

Den saaledes for Benzolet afledede Konstitution tydeliggjøres ved vedføjede Figurer. Fig. 1 viser det regulære Oktaeder i perspektivisk Tegning; dets Hjørner ere numererede fra 1 til 6, hvilke Tal bibeholdes i de følgende Figurer til at betegne de samme Hjørner. Oktaedrets tre Axer ere altsaa 1:4, 2:5 og 3:6.

Figur 2 viser Oktaedrets tre Axer, hvis Endepunkter altsaa svare til de sex Atomer Kulstof.

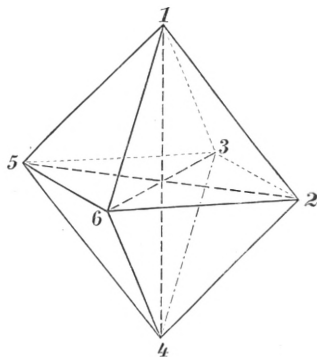


Fig. 1.

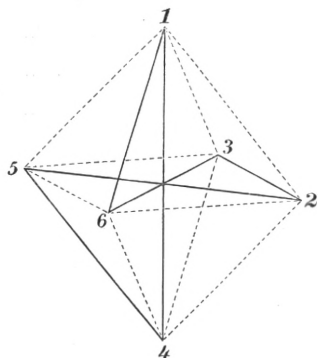


Fig. 2.

Naar nu hvert Atom ogsaa skal bindes til et Naboatom, saaledes at Bindingerne komme til at ligge regelmæssigt i Rummet og Atomerne ikke derved faa forskellige Egenskaber, saa kan dette kun ske paa en bestemt Maade, f. Ex. derved, som i Figur 2, at Atom 2 bindes af Atom 3, Atom 4 af 5 og 6 af 1; eller ogsaa idet 1 og 2, 3 og 4 samt 5 og 6 binde hinanden, hvorved en med Fig. 2 symmetrisk Figur vilde fremkomme. Hvert Kulstofatom er altsaa nu bundet til to andre og har altsaa endnu to Valenser til Raadighed; den til denne Ordning svarende Brintforbindelse er derfor Hexahydrobenzol, hvis Formel er C_6H_{12} .

Naar nu hvert Kulstofatom, som allerede er knyttet til to andre, skal binde et tredje, saaledes at der af hvert Atoms fire Valenser kun bliver een tilbage, saa kan dette kun ske paa den Maade, at Atom 1 og 2, 3 og 4 samt 5 og 6 gjen-

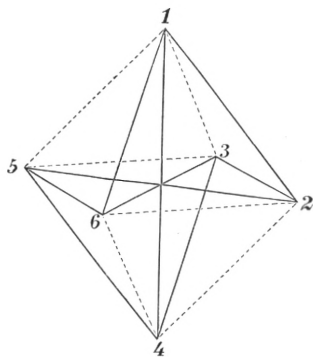


Fig. 3.

sidigt binde hinanden, saaledes som det er antydnet i Figur 3. Ved denne Ordning bliver altsaa hvert Kulstofatom knyttet til tre andre, som tilhøre hver sin Axe. Saaledes er Atom 1 knyttet til Atomerne 2, 4 og 6, der ligge i samme Trekant og ikke ere indbyrdes forbundne, medens de tilhøre henholdsvis Axen 2:5, 1:4 og 3:6. Den til Figuren svarende Kulbrinte er da Benzol, C_6H_6 .

indbyrdes forbundne, medens de tilhøre henholdsvis Axen 2:5, 1:4 og 3:6. Den til Figuren svarende Kulbrinte er da Benzol, C_6H_6 .

Af Benzolmolekulets oktaedriske Konstitution vilde da følgende Egenskaber fremgaa:

1. De sex Atomer Kulstof ere ligeligt fordelte paa en Kugleflade og svare til Hjørnerne i et regulært Oktaeder.

2. Alle Kulstofatomer ere identiske; ethvert er knyttet til tre andre ved en axiær og to periferiske Bindinger.

3. Af Disubstitutionsprodukter ere tre mulige, f. Ex. 1:2, 1:3 og 1:4; thi Atomerne 2 og 6, ligesom 3 og 5 ere identiske med Hensyn til Atom 1.

4. De tre axiære Bindinger, som ere karakteristiske for Oktaedret, kunne ikke hæves, uden at Konstitutionen forandres, hvorimod hver anden af de periferiske kunne hæves uden at Axesystemets Stabilitet forstyrres.

En betydelig Lettelse m. H. t. Benyttelsen af den for Benzolet antagne Konstitution til Anskueliggjørelsen af Benzolderivaternes Egenskaber og gjensidige Afhængighed, opnaas ved at benytte en Projektion istedetfor den perspektiviske Gjen-givelse af Molekulets antagne Bygning. Oktaedrets Projektion er som bekjendt en regulær Sexkant, naar det hviler paa en af Fladerne, saaledes som vist i Fig. 4, der giver Projektionen for et paa Fladen 1:3:5 hvilende Oktaeder. Tallene have samme Betydning som ovenfor, og altsaa betegne de punkterede Linier 1:4, 2:5 og 3:6 Oktaedrets tre Axer.

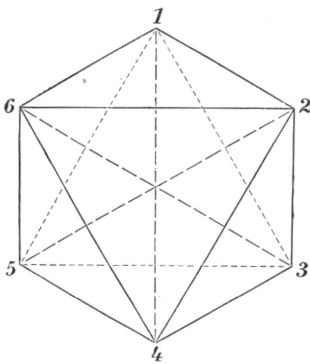


Fig. 4.

Naar man nu af Fig. 4 udelader de Linier, som ikke findes i den til Benzolmolekulets antagne Konstitution svarende Figur 3, og altsaa kun medtager dem, som svare til de antagne ni Bindinger imellem Kulstofatomerne, saa fremkommer Fig. 5, som Projektion af

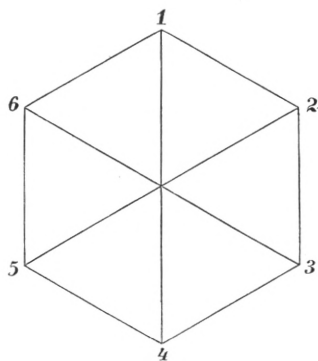


Fig. 5.

som uløselige, medens de sex periferiske svare til Oktaedrets Kanter.

De tre Disubstitutionsprodukter ere lige som ovenfor betegnede ved 1:2, 1:3 og 1:4; i Ortho- og Metastillingen ligge altsaa de tvende substituerende Radikaler i samme Kant, i Parastillingen derimod i samme Axe af det til Molekulet svarende Oktaeder.

Benzolets Additionsprodukter fremkomme efter det ud-

viklede, idet en eller flere af de periferiske Bindinger hæves. Saaledes vil Fig. 6 gjengive Konstitutionen af Hexahydrobenzol, svarende til Fig. 2, hvis Projektion den giver.

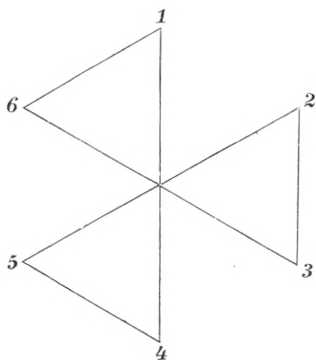


Fig. 6.

Det behøver næppe at omtales, at den regulære Sexkant med de tre uløselige diagonale Bindinger ligesaa fuldt vil kunne anskueliggjøre de af Benzozet afledede Forbindelsers Konstitution som den af

Fig. 3. Benzolmolekulets Konstitution kan altsaa anskueliggjøres ved den regulære Sexkant med de tre Diagonaler, saaledes som man allerede tidligere har forsøgt; men af den forudgaaende Udvikling følger den egentlige Betydning af denne Figur og Forskjellen imellem de forskellige Bindinger; thi de tre diagonale Bindinger svare til Oktaedrets Axer og maa altsaa betragtes

Kekulé foreslaaede Sexkant med 3 dobbelte Bindinger. Saaledes kan Naphtalinets Konstitution gjengives ved Fig. 7, som udtrykker Projektionen af to Oktaedre, som have en Kant tilfælles. Man iagttager strax Forskjellen imellem Kulstofatomerne 1:4 og henholdsvis 2:3 og 5:6, i det hine ere knyttede til hinanden ved en axiær Binding, disse derimod ved en periferisk, og de tilsvarende Substitutionsprodukter maa derfor ogsaa være isomer forskellige.

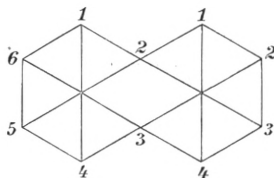


Fig. 7.

Da den her antagne Konstitution af Benzolets Molekul tilfredsstillter Fordringerne om en sfærisk Anordning af Benzolets sex Kulstofatomer og disses Binding ved ni enkelte Bindinger, samtidigt med at den tilfredsstillter de af Benzolderivaternes kemiske Egenskaber følgende Fordringer, saa er der næppe nogen Tvivl om, at denne Hypothese bør foretrækkes fremfor den hidtil benyttede, som hverken tilfredsstillter Fordringerne med Hensyn til en sfærisk Fordeling af Kulstofatomerne eller deres Sammenknytning ved ni enkelte Bindinger. —

Jeg skal endnu kun tilføje, at der foruden den i Fig. 3 viste Ordning af Bindingerne imellem Kulstofatomerne endnu kan tænkes en anden, som tilfredsstillter Fordringen om de sex periferiske Bindingers symmetriske Beliggenhed, nemlig idet disse kunne svare til Kanterne i tvende modsatte Trekanter f. Ex. 1:3:5 eller 2:4:6.

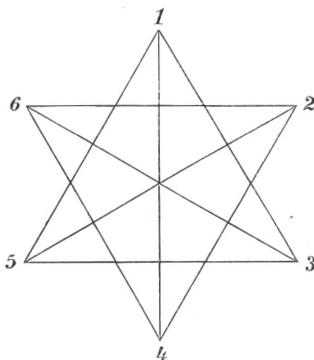


Fig. 8.

Projektionen af en saadan Bygning svarer til Fig. 8, hvilken Figur ogsaa er bekjendt fra tidligere Tid; men denne er dog ikke berettiget, eftersom et saadant bygget Molekul ikke vil kunne tilstede Dannelsen af et symmetrisk Hexahydrobenzol; det afledede Molekul vilde nemlig ikke tilfredsstille Fordringen om tre symmetrisk beliggende Bindinger.
