Die Zusammensetzung der bei 150-160° getrockneten Substanz ist:

	<i>Gef.</i>	<i>Ber.</i>
C %	23.225	23.245
H %	1.434	1.042
S %	9.359	8.552
Hg %	20.275	20.066
Na %	17.250	16.102

Diese Tatsachen weisen darauf hin, dass durch die unter Zersetzung an das unverteilte Elektron des Phenolhydroxyls anhaftende Mercurigruppe die Carboxylgruppe zersetzt worden ist.

K. Ishihara: *Charakteristische Eigenschaften neuer dynamischer, auf Elektronenbegriff beruhender Benzolformel.*

(*Studien über die Benzolfrage und das Substitutionsproblem. I. Mitteilung*).

Abschnitt I und II.

Die vom Elektronenbegriff abgeleitete Strukturformel des Benzols hat durch Fry, Stieglitz, Vorländer bedeutende Fortschritte gemacht, doch haben dieselben die Theorie der Oktettstabilität von G. N. Lewis noch nicht angewendet.

Unter den ganz neuerdings veröffentlichten Arbeiten, welche die auf Oktetttheorie beruhende Benzolformel behandeln, sind zu nennen die von Kermack und Robinson (Jour. **121**, 427 (1922)), H. J. Lukas (Amer. Soc. **48**, 1827 (1926)) etc. Lukas hat dabei das auf der Bohrschen Theorie beruhende Benzolmodell von Pauling (Amer. Soc. **48**, 1132 (1926)) benutzt, indem er dasselbe mit der Vorstellung der "Schirmwirkung" ("Screening effect") verbunden hat.

Viele Organiker haben von alters her versucht, die Polarität des Benzols zu erklären. Fry hat bei der Anwendung dieses Begriffes gleichzeitig den Begriff "Elektromer" eingeführt und dadurch in geschickter Weise viele Reaktionen aufzuklären vermocht.

Der Verfasser hat die Theorien dieser Forscher über Benzol benutzt, aber auch die folgenden Beobachtungen gesammelt.

I. Statisches Benzolmodell.

Wie aus obiger Figur ersichtlich ist, liegen C und H auf derselben Ebene, welche "erste Ebene" genannt sein möge.

Das Zentrum des Hexagons, in dessen Eckpunkt sich der positive Kern des C befindet, und der positive Kern werden durch eine Linie verbunden, auf welcher, nämlich auf der äusseren Seite des C, der H ist, während die vierte Valenz auf der inneren Seite liegt. Rechtwinklig zu dieser "ersten Ebene" welche die oben erwähnte Linie enthält, denke man sich noch eine Ebene, welche "zweite Ebene" genannt werden möge. Die Entfernung zwischen dem positiven Kern von jedem C und H ist gleich, ebenso auch die des positiven Kerns von jedem C und C.

II. Dynamisches Benzolmodell.

Die Verbindung zwischen C und C sowie zwischen C und H geschieht durch Co-Valenzen (Lewis), so dass dem unverteiltten Valenzelektron ("unshared electron" Lewis) entsprechende vierte Valenz und H beide um den Umfang des Mutter-C herum rotieren können. Eine solche vierte Valenz bildendes Elektron wird pseudo-unverteilttes Elektron (" ϕ -unshared electron") genannt. Die durch pseudo-unverteiltte Elektronen gebildete Doppelbindung nach Kekule heisst "Pseudo-Doppelbindung" ("n-double bond").

Da Benzol Symmetriecharakter hat, so wird die Stellung der Elektronen ebenfalls regelmässig sein. Kommt dazu noch die Vorstellung des "Screening effect", so wird Benzol den folgenden Zustand einnehmen:

Erst durch die Annahme, dass da, wo die Elektronen sich nähern, negativer ist, kann die Vorstellung von der Polarität des Benzols gewonnen werden. Aus obigen Gründen will der Verfasser dem Benzol, welches die Polarität aufweist, denselben Grad von ($\pm$) H zuerkennen, wie er sich in der H_2 -Molekel durch die Beziehung $H(+)\text{---}H(-)$ ergibt.

III. Benzolvibration.

Jeder C des Benzols steht rechtwinklig in der "zweiten Ebene" und als Mittelpunkt der den (+) Kern durchdringenden Axe begleitet er bei der Rotation den H und das pseudo-unverteilte Elektron. H und pseudo-unverteiltes Elektron zeigen an beiden Seiten der "zweiten Ebene" unter Bildung von E. H. B. (S. H. M.) eine Sinuskurve. Bei der grössten Annäherung zweier pseudo-unverteilter Elektronen bildet sich zeitweilig ein "Pseudo-Doppelbindung".

Da Benzol 7 Ultraviolett-Absorptionsspektren besitzt, so kann man sich durchaus Elektronenverschiebungen denken, so dass damit die Existenz der Polarität bestätigt wird.

Beim Polarität zeigenden Benzol gleicht, wenn in der folgenden Figur

—○— verteiltes Elektronenpaar,

—○- - - unverteiltes Elektron

darstellen, jede Periode von H^1, H^3, H^5 , ebenso auch die Periode von H^2, H^4, H^6 , während je nach der Verschiedenheit der Elektronenstellung die Perioden zwischen H^1, H^3, H^5 und H^2, H^4, H^6 geringfügige Abweichungen zeigen.

IV. Die Änderung der durch Substituenten verursachten Vibration.

Bei der Substitution irgend eines Benzolwasserstoffs durch andere Atome oder Atomgruppen ist ein Unterschied in seiner Periode von den anderen H zu bemerken. Wenn diese gleichen Atome oder Atomgruppen zwei H der Orthostellung ersetzen, so zeigen ihre Perioden gegenseitig geringe Differenzen, während dieselben gegenüber anderen Wasserstoffen bedeutende Unterschiede aufweisen.