

벤젠 (Benzene)



목 차

- 서론
- 방향족 탄화수소의 자원
- 방향족 화합물의 명명
- 벤젠의 구조 및 안정도
- 벤젠의 분자 궤도함수 설명
- 방향족성과 Hückel $4n+2$ 규칙
- 방향족 이온
- Pyridine과 pyrrole
- 요약

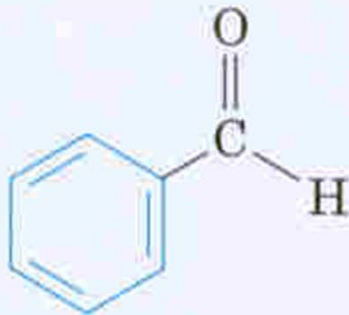
서론

방향족(aromatic)

- 벤즈알데히드, 톨루엔, 벤젠 등 향기를 내는 물질을 기술하는데 사용(초기)
- 벤젠 그리고 벤젠과 구조적으로 관계있는 화합물들에 적용하여 사용(오늘날)



Benzene



Benzaldehyde



Toluene

방향족 탄화수소의 자원

- 석탄:

진공상태에서 100°C 로 가열 \rightarrow

석탄분자의 열분해 \rightarrow 증류 \rightarrow Coal tar(휘발성혼합생성물) \rightarrow 분별증류 \rightarrow benzene, toluene, xylene, naphthalene 등

- 석유: 약간의 방향족 화합물과 대부분의 알켄

알케인을 500°C , 고압하에서 촉매에 통과 \rightarrow 방향족 분자

예) heptane(C_7H_{16}) \rightarrow 탈수소화, 고리화반응 \rightarrow toluene(C_7H_8)

방향족 화합물의 명명

● 관용명

- 다른 어떤 유기화합물 계열보다도 많
비체계적인 이름을 가지고 있음

예) methylbenzene → toluene,
hydroxybenzene → phenol,
aminobenzene → aniline

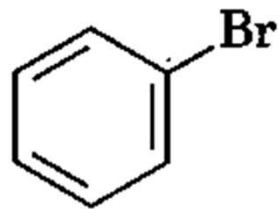
일치환 벤젠 유도체 -

1. 치환기-benzene : 벤젠은 모체, 치환기는 접두사

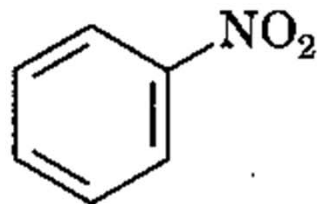
예) C_6H_5Br = bromobenzene,

$C_6H_5NO_2$ = nitrobenzene,

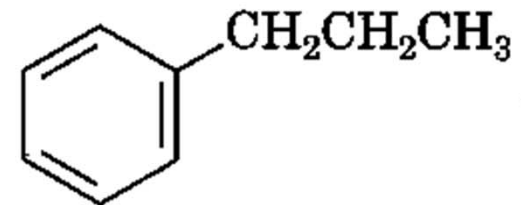
$C_6H_5CH_2CH_2CH_3$ = propylbenzene



Bromobenzene



Nitrobenzene

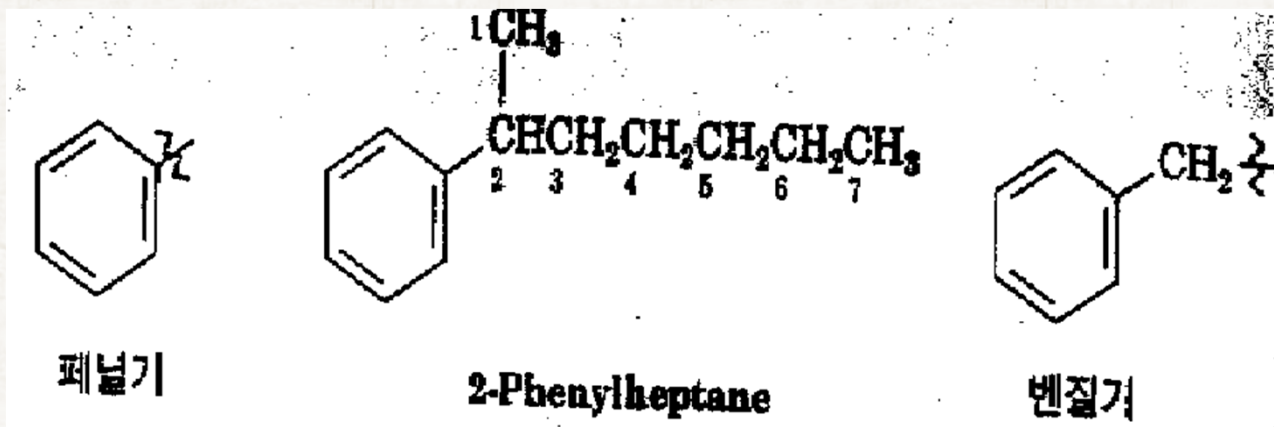


Propylbenzene

2. 알킬 치환기의 탄소 수에 따라

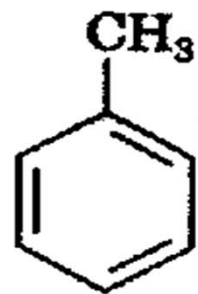
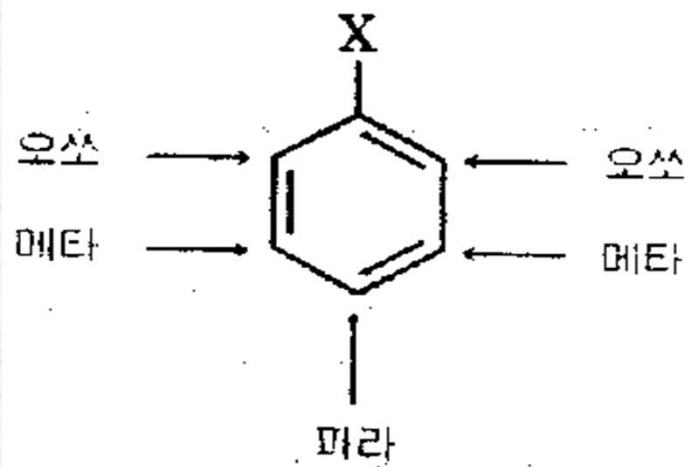
- 1) 알킬 치환기가 여섯 혹은 그 이상의 탄소를 가지고 있을 때 : 알킬 치환 benzene
- 2) 알킬 치환기가 여섯 개 이상의 탄소를 가질 때 : 페닐-치환 알케인

예) C_6H_5- 기를 페닐(phenyl),
 $C_6H_5CH_2-$ 기는 벤질(benzyl)이라고 함

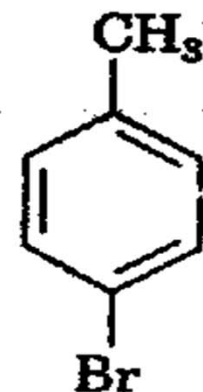
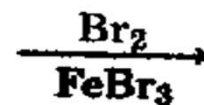


이치환 화합물 -

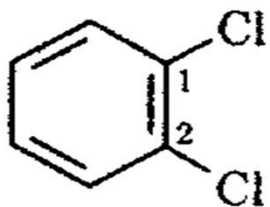
1. 오쏘(ortho, o) : 두 치환기가 고리의 1,2 위치 관계에 있을 때
2. 메타(meta, m) : 두 치환기가 고리의 1,3 위치 관계에 있을 때
3. 파라(para, p) : 두 치환기가 고리의 1,4 위치 관계에 있을 때



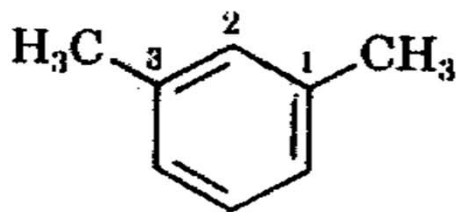
Toluene



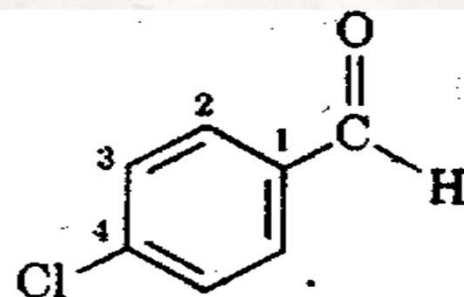
p-Bromotoluene



ortho-Dichlorobenzene
1,2 이치환



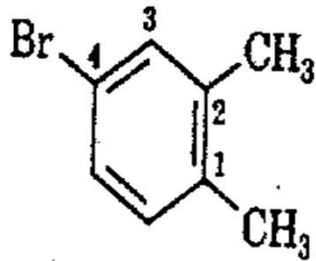
meta-Xylene
1,3 이치환



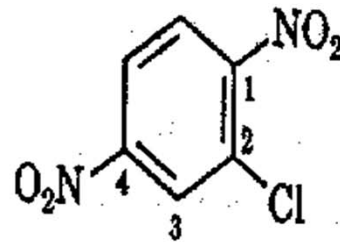
para-Chlorobenzaldehyde
1,4 이치환

두개 이상의 치환기가 있을 경우

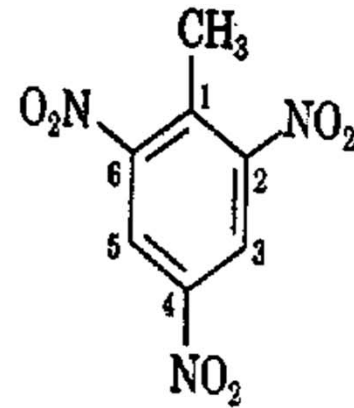
- 각각의 치환기 위치에 번호를 붙여 명명함
- 치환기의 번호가 가능한 낮은 번호가 되도록 함
- 화합물명을 쓸 때는 치환기 이름의 알파벳 순으로 나열한다.



4-Bromo-1,2-dimethylbenzene



2-Chloro-1,4-dinitrobenzene

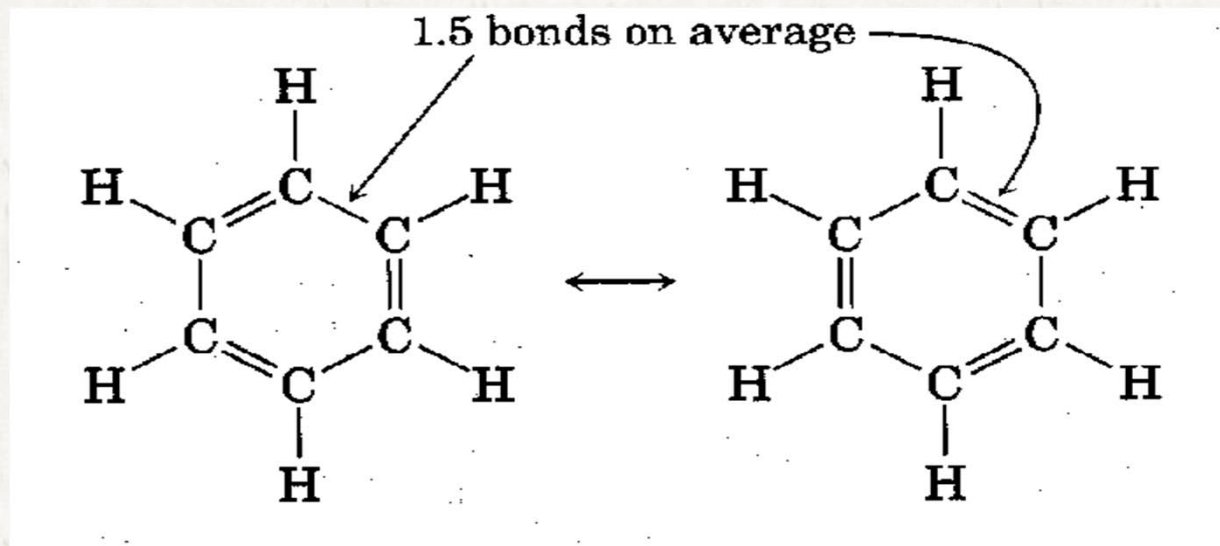


2,4,6-Trinitrotoluene (TNT)

Benzene의 구조 및 안정도

● Kekulé 구조(1.5 bond 결합)

탄소-탄소 결합: 단일결합(154pm)과 이중결합(134pm) 사이인 139pm

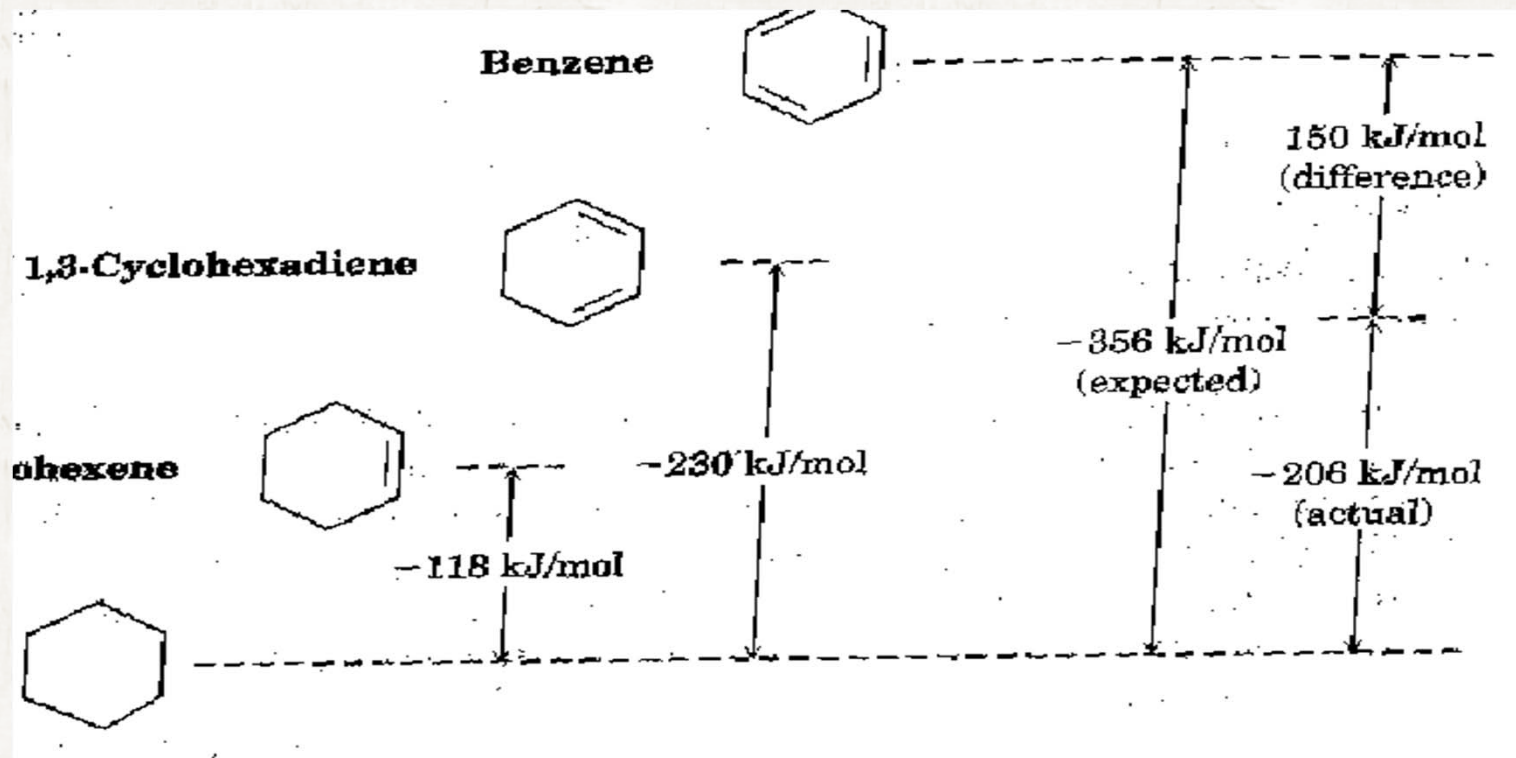


cyclohexene의 $H = -118 \text{ kJ/mol}$

1,3-cyclohexadiene의 $H = -230 \text{ kJ/mol}$

benzene의 H 예상값 $= -356 \text{ kJ/mol}$,

실제값 $= -206 \text{ kJ/mol}$ (차이 150 kJ/mol)



벤젠의 분자 궤도함수 설명

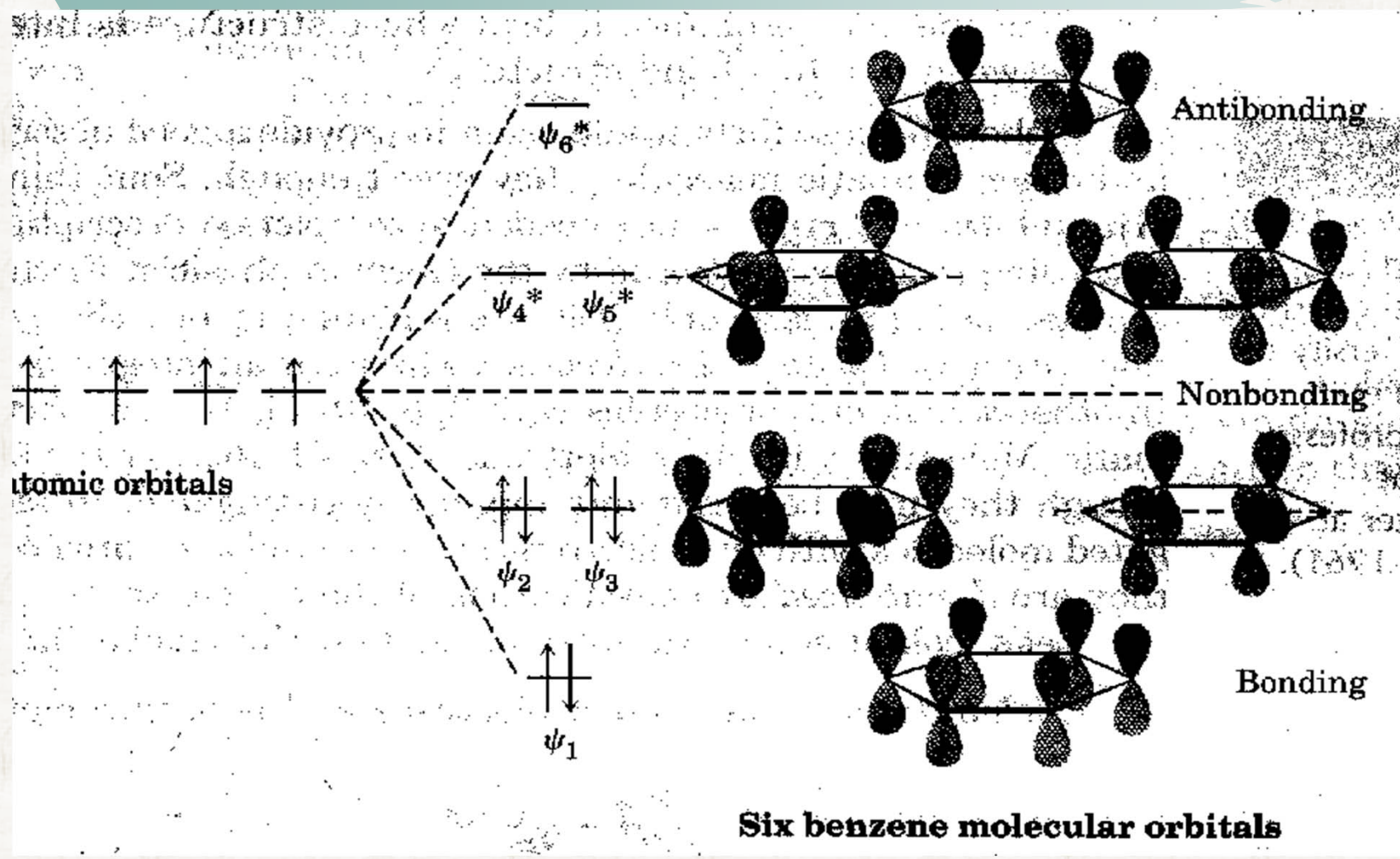
정육각형모양의 평면 대칭분자,

C-C-C결합각은 모두 120° ,

6개의 탄소원자는 sp^2 -혼성화, 여섯-원자고리에

수직으로 배열된 p궤도함수 포함

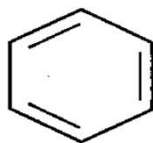
두개의 도우넛 형태의 전자구름 형성



방향족성과 Hückel $4n+2$ 규칙

한 분자가 방향족성이 되기 위해서는 평면이어야 하고 $4n+2$ 개의 π 전자를 가진 단일 고리형 콘쥬게이션 계이어야 한다.

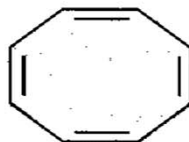
Benzene has six π electrons ($4n + 2 = 6$ when $n = 1$)



Benzene

Three double bonds;
six π electrons

Cyclooctatetraene has eight π electrons and is not aromatic.



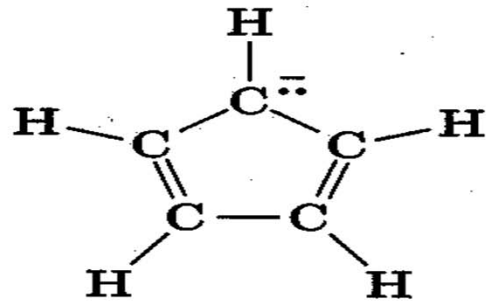
Cyclooctatetraene

Four double bonds;
eight π electrons

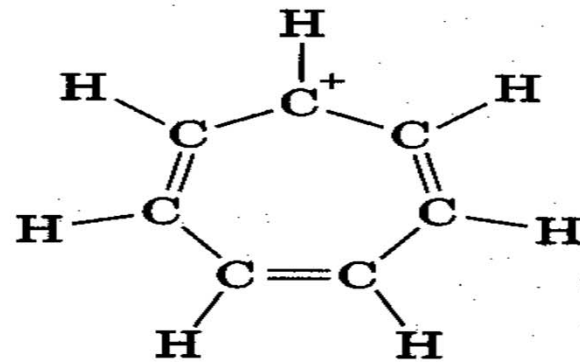
방향족 이온

- P 궤도함수의 개수와 ○전자의 개수가 같아야 할 필요는 없다. 실제로 그들 개수가 달라질 수 있다.

예) cyclopentadienyl 음이온,
cycloheptatrienyl 양이온

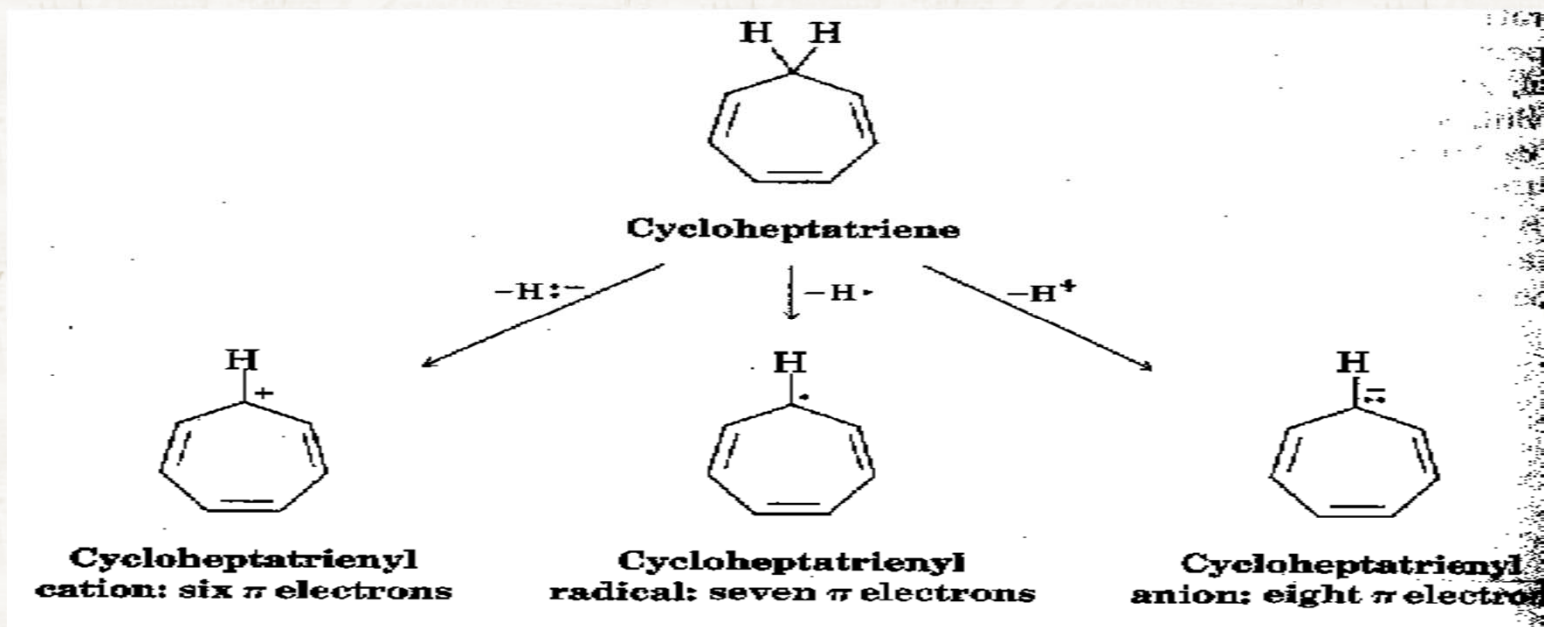
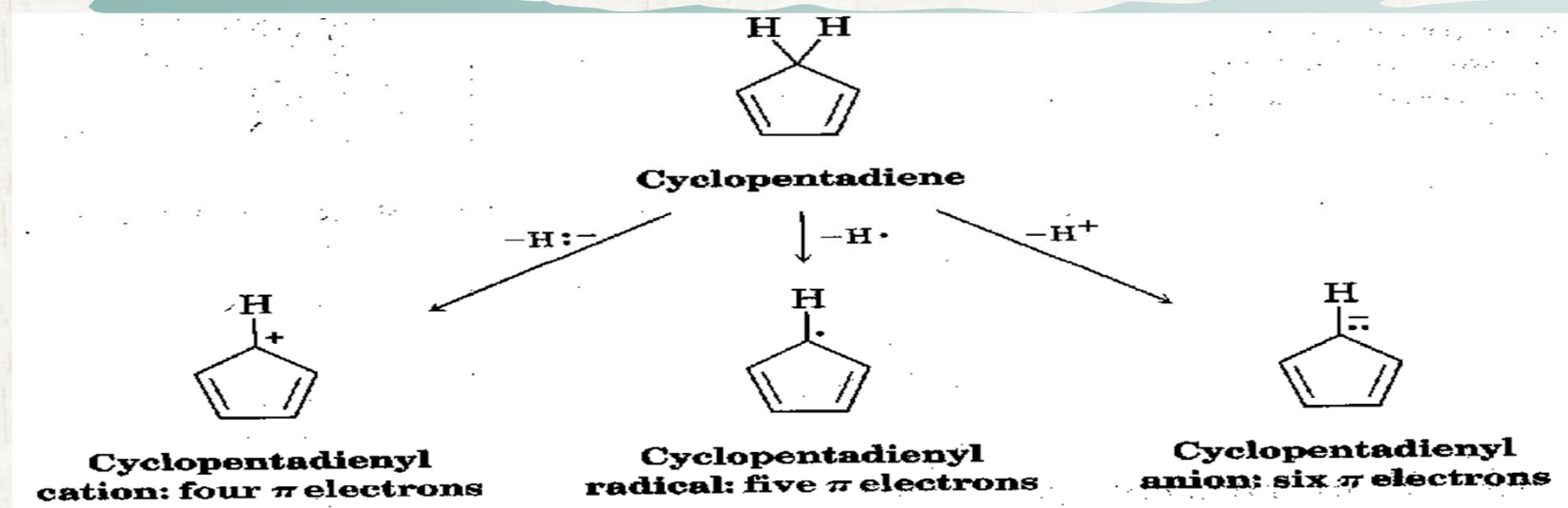


Cyclopentadienyl anion



Cycloheptatrienyl cation

Six π electrons; aromatic ions



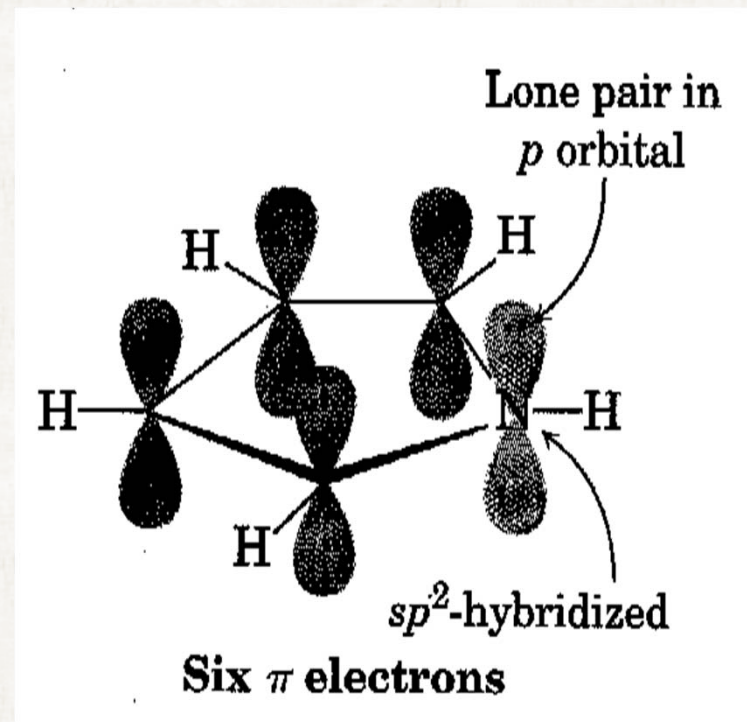
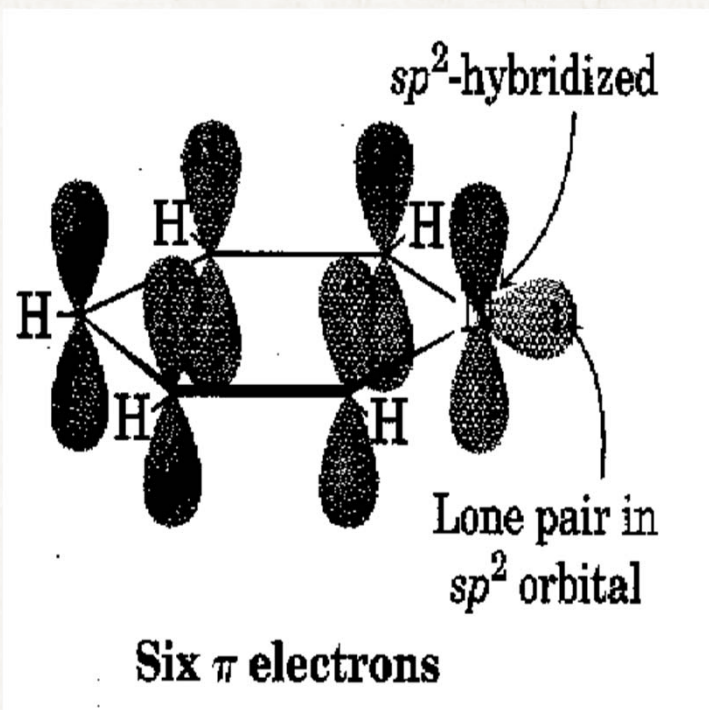
Pyridine과 pyrrole

Hückel $4n+2$ 규칙은 고리안의 원소가 탄소이어야함을 의미하지는 않는다.

실제로 헤테로고리 화합물은 방향족이 될 수 있다.

헤테로고리는 고리안의 하나 혹은 그 이상의 원자가 탄소 이외의 원자로 된 고리형 분자이다.

예) pyridine (질소원자 포함한 6원자 고리),
pyrrole(질소원자를 포함한 5원자 고리)



요약

- 방향족이란 용어는 역사적으로 벤젠과 구조적으로 관계있는 화합물들에 적용된다.
- 방향족 화합물의 명명법
 - 관용명, ortho/meta/para, phenyl기와 benzyl기
- 두개의 Kekulé 공명구조를 혼합한 한 개의 공명혼성구조
- Hückel $4n+2$ 규칙
- 벤젠류외의 방향족화합물이 되는 화합물
 - cyclopentadienyl 음이온, cycloheptatrienyl 양이온, 헤테로고리 화합물(pyridine, pyrrole)