

Aromaten

Struktur des Benzolmoleküls

1. Erkenntnisse aus chemischen Reaktionen:

- keine Additionsreaktion → nicht alkenartig
- keine radikalische Substitutionsreaktion → nicht alkanartig
- katalysierte elektrophile Substitutionsreaktion
- Nur ein Monosubstitutionsprodukt → alle C-Atome sind identisch
Bei einer gestreckten Verbindung würde es einen Unterschied machen, ob eine Gruppe am C-1 oder C-3 ersetzt wurde.
- Nur 3 Disubstitutionsprodukte → keine 3 Doppelbindungen
Wäre Benzol eine zyklische Verbindung mit drei Doppelbindungen, so würde es vier Möglichkeiten geben, 2 Brom anzulagern ((1,2), (1,3), (1,4), (2,3))
- Benzol ist eine stabile, *energiearme* Verbindung, die *symmetrisch* aufgebaut ist.

2. Erkenntnisse aus Messungen:

- Benzol bilden ein regelmäßiges 6-Eck, alle 12 Atome liegen in einer Ebene
- Der Bindungswinkel ist überall 120°
- Die Bindungslänge (C-C) liegt zwischen denen von Alkanen und Alkenen
- Die Hydrierungsenergie ist viel kleiner als bei einem Molekül mit drei Doppelbindungen.

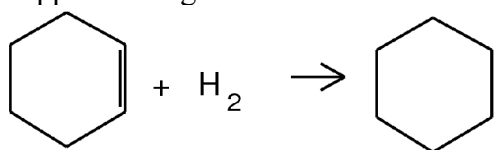


Abbildung 1: Hydrierung von Cyclohexen - es werden 120kJ/mol frei

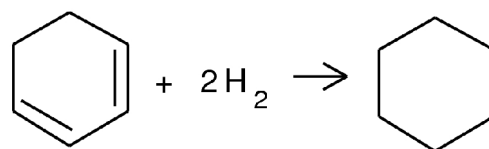


Abbildung 2: Hydrierung von Cyclohexdien - es werden 240kJ/mol frei

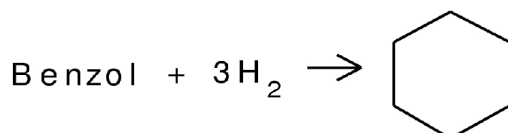


Abbildung 3: Hydrierung von Benzol - es werden 209kJ/mol frei.
Nicht wie erwartet 360kJ/mol

3. Modellvorstellung:

C ist 4-bändig, hat also 4 einfach besetzte Elektronenwolken. 3 davon je C gehen Bindungen mit C und H ein, das 4. je C ist *delokalisiert*. Es gehört keinem der C mehr. Alle diese delokalisierten Elektronen bilden einen Ring über und unter dem Molekül. Dieser Ring ist sehr energiearm und deshalb stabil.

Es gibt zwei verschiedene Darstellungsformen:

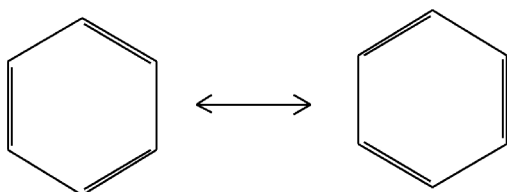


Abbildung 5: Mesomere Grenzstrukturen mit Mesomeriepfeil - der wahre Zustand liegt zwischen den beiden Grenzformen

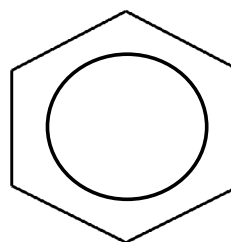


Abbildung 4: Der Ring steht für die delokalisierten Elektronen