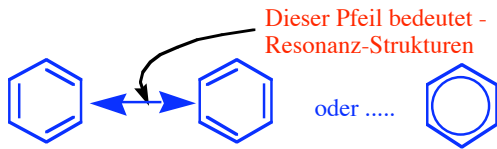


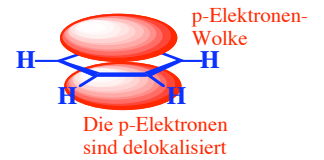
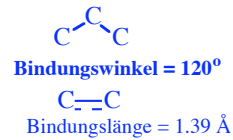
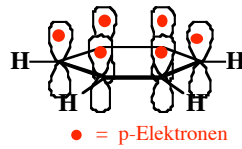
# Kapitel 5: Zusammenfassung: Aromatische Kohlenwasserstoffe

## Struktur von Benzol:

Valenz-Struktur-Beschreibung



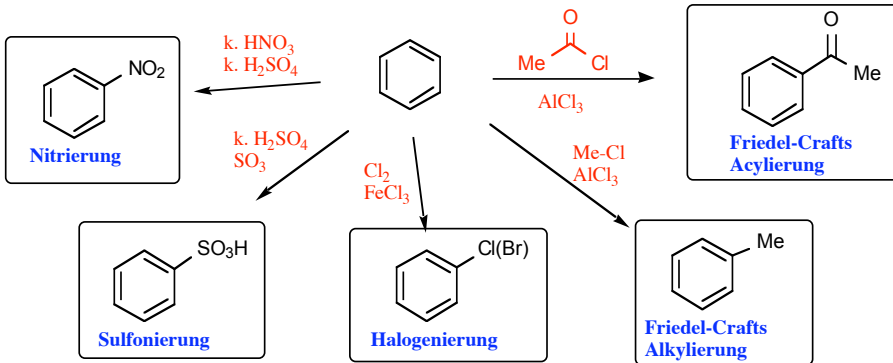
Molekularorbitalbild :



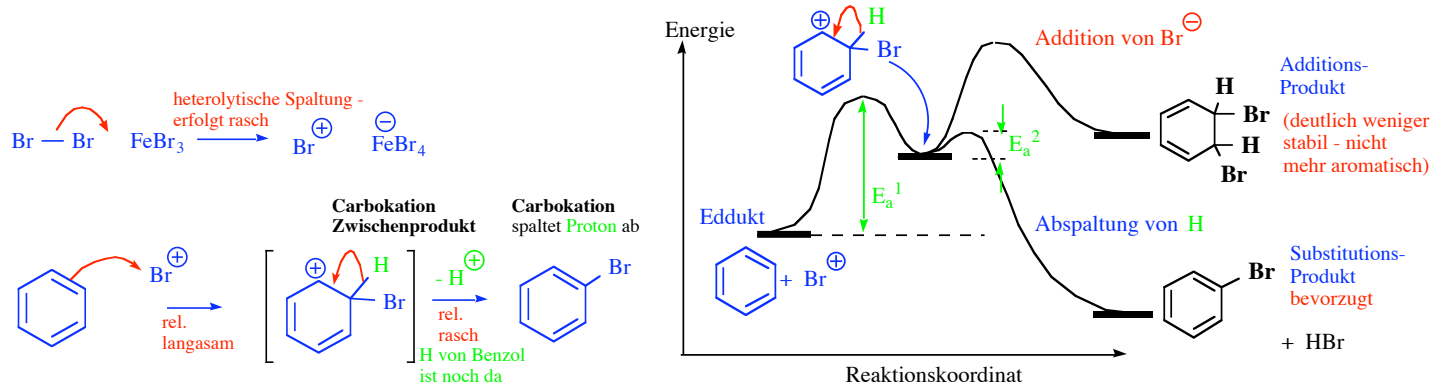
jedes C-Atom  $sp^2$ -hybridisiert, p-Orbitale stehen parallel zueinander und überlappen. Alle C-C-Bindungslängen sind identisch, und alle Bindungswinkel sind  $120^\circ$ . Mit zwei Grenzstrukturen kann der Benzolring dargestellt werden. Die **Resonanzenergie** beträgt ungefähr 124 kJ/mol. Andere Namen dafür sind Delokalisierungsenergie, aromatische Stabilisierung oder einfach **Aromatizität** von Benzol.

**Die Hückel-Regel:** Cyclische Polyene, mit jedem Ring-Atom  $sp^2$ -hybridisiert, bei denen alle p-Orbitale überlappen und  $4n+2$   $\pi$ -Elektronen enthalten, sind aromatisch, d.h. besitzen eine aromatische Resonanz-Energie und sind stabiler als man sonst erwarten würde.

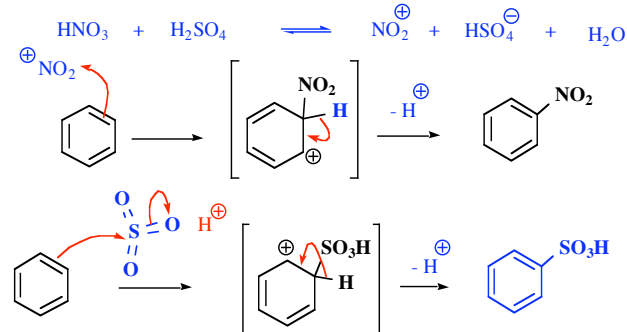
## Elektrophile aromatische Substitutions-Reaktionen



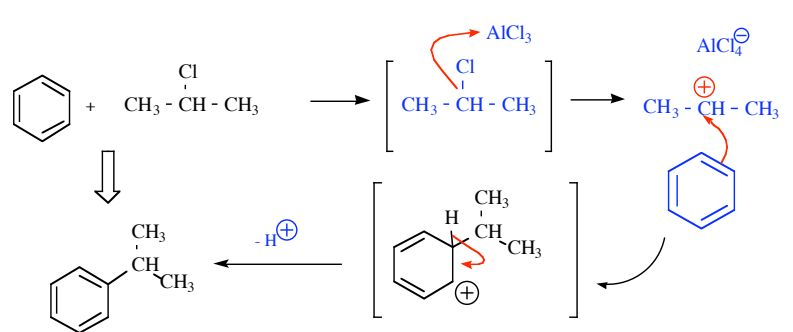
Mechanismus der Brominierung:



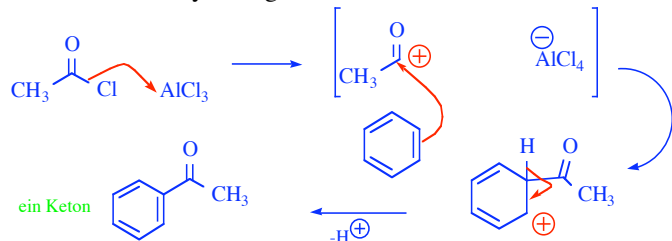
Nitrierung und Sulfonierung:



Friedel-Crafts-Alkylierung:



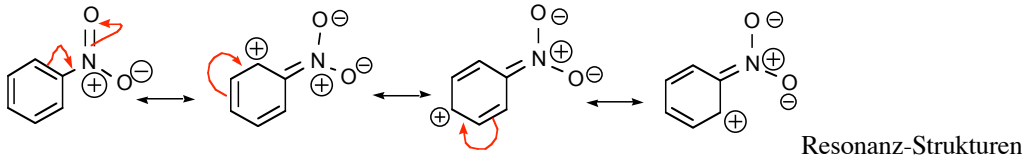
Friedel-Crafts-Acylierung:



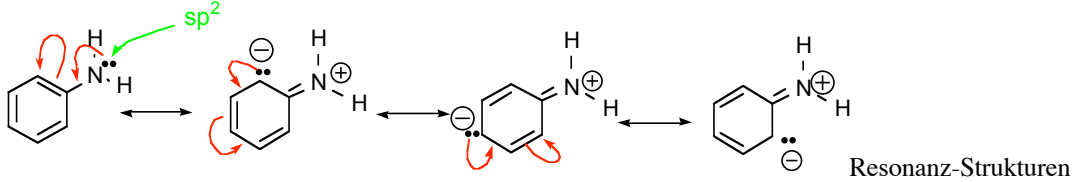
## Aktivierender oder deaktivierender Einfluss von Substituenten

**Resonanz** und **induktive Effekten**: Substituenten ziehen Elektronen aus dem Ring heraus oder liefern Elektronendichte hinein und beeinflussen dadurch die Reaktivität des Rings. Resonanz-Effekte sind stärker und reichen über längere Distanzen aus als induktive Effekte. Resonanz-Effekte werden über die p-Orbitale vermittelt, induktive Effekte über die  $\sigma$ -Orbitale.

Z.B. Die Nitrogruppe ist ein p-Akzeptor-Substituent, und wirkt deswegen deaktivierend und meta-dirigierend:



Die Aminogruppe ist ein p-Donor-Substituent, und wirkt deswegen aktivierend und ortho/para-dirigierend:



Ortho, para-dirigierend und aktivierend sind

-OH -OR -NH<sub>2</sub> -NR<sub>2</sub> -NH-COR -R -Ar

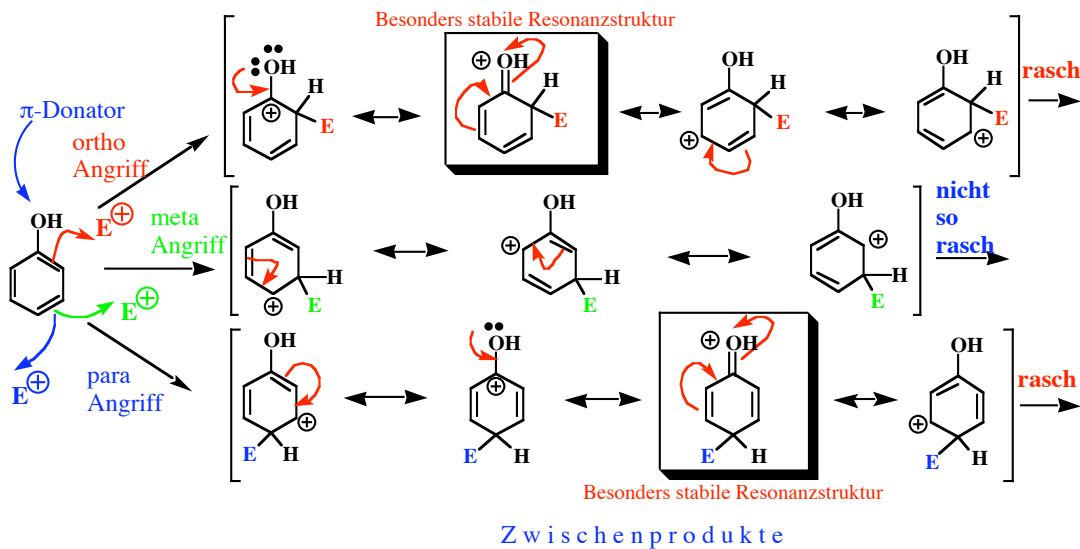
Ortho, para-dirigierend und desaktivierend sind

-Cl -Br -I

meta-dirigierend und desaktivierend sind

-NO<sub>2</sub> -CF<sub>3</sub> -NR<sub>3</sub><sup>+</sup> -CO-R -COOR -SO<sub>3</sub>H -CN

Um die relative Schnelligkeit und die Orientierung bei einer Zweitsubstitutions-Reaktion erklären zu können, muss die Stabilität der verschiedenen möglichen **Zwischenprodukte** verglichen werden. Die Reaktion läuft am schnellsten über den stabilsten Übergangszustand (d.h.  $\approx$  über die stabilsten Zwischenprodukte) ab - Vgl. Energiediagramm oben und SKRIPT, z.B.:



## Andere Transformationen:

