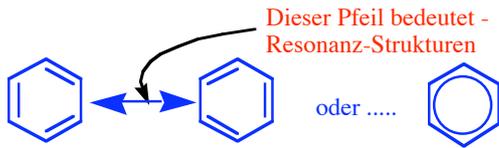


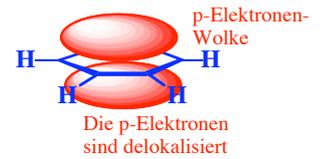
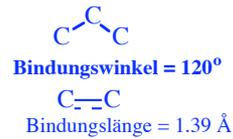
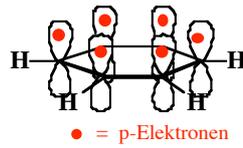
Kapitel 5: Zusammenfassung: Aromatische Kohlenwasserstoffe

Struktur von Benzol:

Valenz-Struktur-Beschreibung



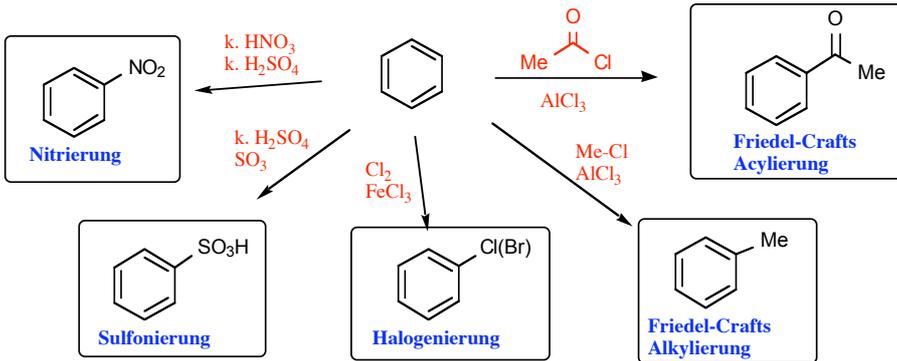
Molekularorbitalbild :



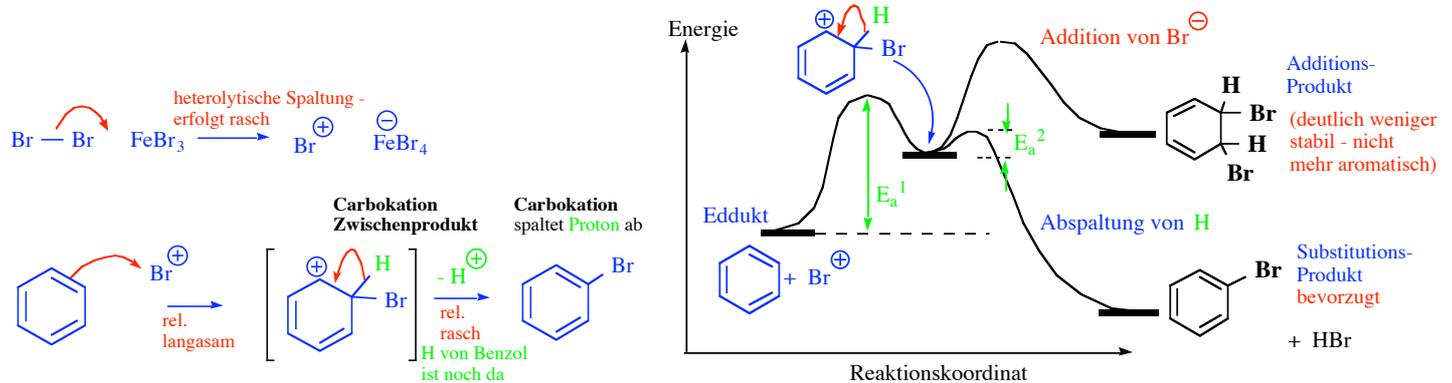
jedes C-Atom sp^2 -hybridisiert, p-Orbitale stehen parallel zueinander und überlappen. Alle C-C-Bindungslängen sind identisch, und alle Bindungswinkel sind 120° . Mit zwei Grenzstrukturen kann der Benzolring dargestellt werden. Die **Resonanzenergie** beträgt ungefähr 124 kJ/mol. Andere Namen dafür sind 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 $4n+2$ π -Elektronen enthalten, sind aromatisch, d.h. besitzen eine aromatische Resonanz-Energie und sind stabiler als man sonst erwarten würde.

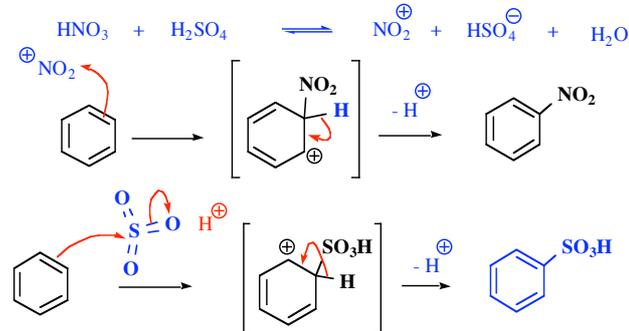
Elektrophile aromatische Substitutions-Reaktionen



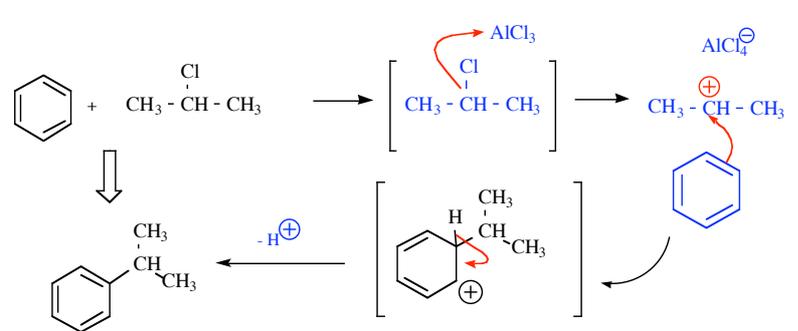
Mechanismus der Brominierung:



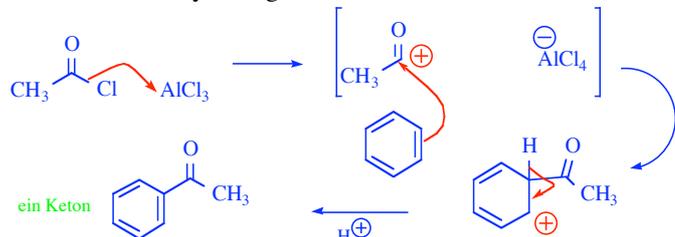
Nitrierung und Sulfonierung:



Friedel-Crafts-Alkylierung:



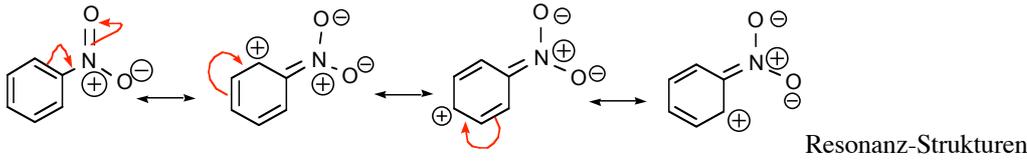
Friedel-Crafts-Acylierung:



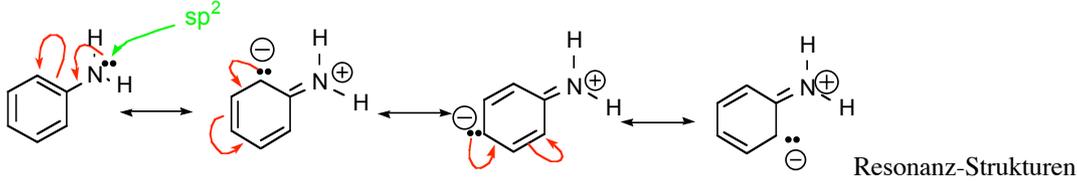
Aktivierender oder deaktivierender Einfluss von Substituenten

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 σ -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 -NH₂ -NR₂ -NH-COR -R -Ar

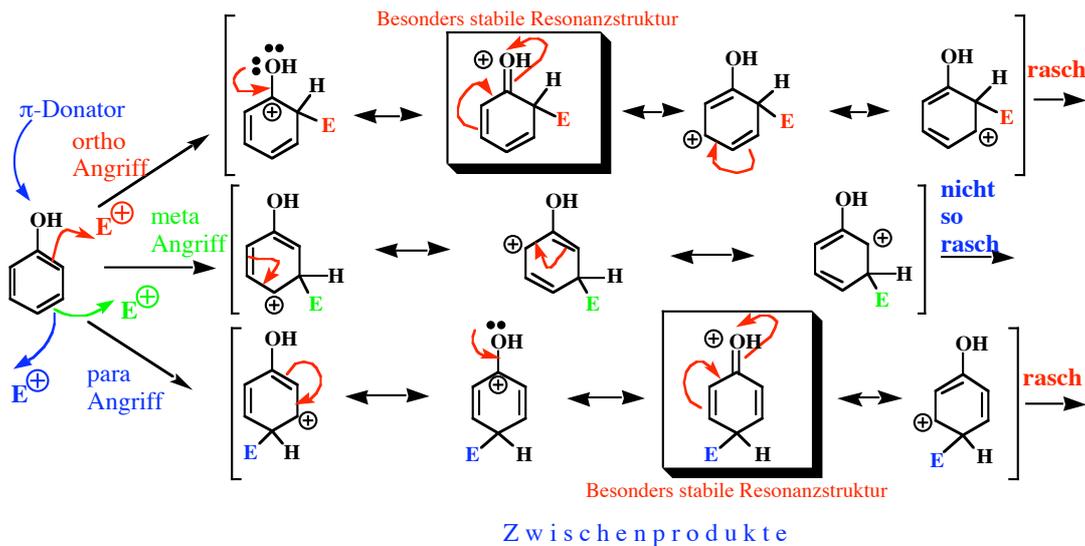
Ortho, para-dirigierend und deaktivierend sind

-Cl -Br -I

meta-dirigierend und deaktivierend sind

-NO₂ -CF₃ -NR₃⁺ -CO-R -COOR -SO₃H -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:

