

Die Ringe werden **im Uhrzeigersinn** von dem Index 1 nummeriert.

Polyaddition von Benzol

Wenn man Brom mit Alkenen (*funktionelle Gruppe Doppelbindung zwischen Kohlenstoffatome*) reagieren lässt, kann man eine Addition beobachten. Die Doppelbindung löst sich auf, und bindet das Brom.

Wenn man mit Katalysatoren Benzol mit Brom reagiert, findet jedoch keine Addition statt.

Das liegt daran, da die Elektronen der Doppelbindungen **delokalisiert** sind. Das heißt sie sind überall und nirgendwo gleichzeitig, und man kann nicht sagen wo sie sind.

Z.B. Ethen hat eine **lokalisierte** Doppelbindung, bei der man weiß wo sie ist. Also passiert bei Ethen eine Addition.

Benzol ist mesomeriestabilisiert

Mesomerie

Da man bei z.B. *Benzol* nicht wissen kann, wo die Elektronen sind, weiß man auch nicht wo die Doppelbindungen sind.

Sie sind an verschiedenen Stellen gleichzeitig. Dies nennt man **Mesomerie**. Wichtig ist, dass Mesomerie nicht nur bei **Aromaten** existiert.

Zeichne die Mesomerie von $\langle \rangle$

Ist die Aufgabe die Mesomerie von etwas zu zeichnen, zeichnet man alle möglichen Doppelbindungen und dazwischen ein Mesomerie-Pfeil:



Bei Benzol sieht das beispielsweise so aus:

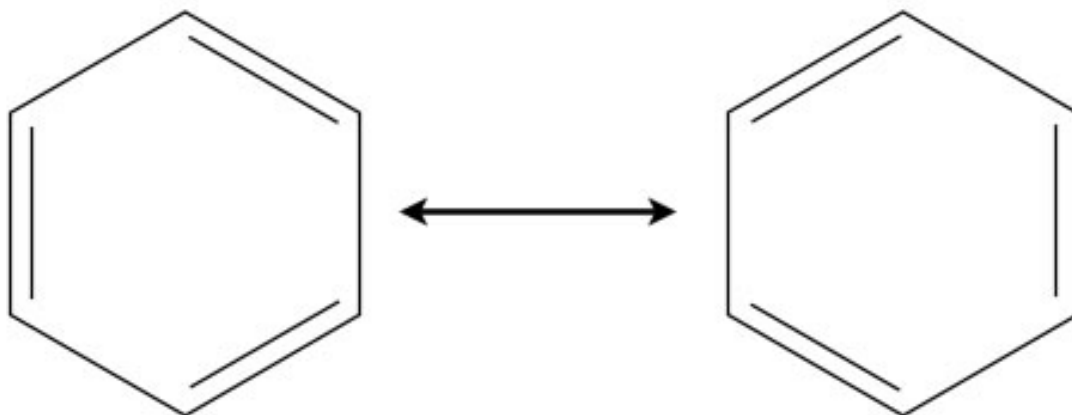


Figure 1: Mesomerie-Benzol (<https://www.u-helmich.de>)

Mesomerieenergie

Die Einzelnen Grenzstrukturen haben immer eine höhere Energie als der tatsächliche Energiezustand des mesomeren Zustandes.

Dies liegt daran das der mesomere Zustand stabiler als die Grenzstrukturen ist.

Die **Mesomerieenergie** bezeichnet die Energiedifferenz zwischen Grenzstruktur und Mesomeres Molekül.
[$\frac{J}{mol}$]

Orbitalmodell

Ein Molekül hat für jedes Elektron ein Orbital, in dem sich das Elektron aufhalten kann.

Es existieren *S*-Orbitale, *P*-Orbitale.

Diese können durch eine **hybridisierung** verschmolzen werden, so dass das Molekül einen energetischen besseren Zustand erreicht.

Beispiel eines Hybridorbitales

sp^2 Hybridorbital: Es besteht aus einem *s*-Orbital und 2 *p*-Orbitalen.

Hückel Regel

Unter π Elektronen versteht man **delokalisierte Elektronen**.

Wiki

Mit Hilfe der Hückel Regel, kann man bestimmen, ob ein Molekül ein Aromat ist.

$$4n + 2 \quad n \in \mathbb{N}_0$$

1. Man zählt die π Elektronen (*bp. Benzol: 6*)
2. Man setzt gleich und schaut ob es eine Lösung gibt

$$4n + 2 = 6 \quad 4n = 4 \quad n = 1 \quad n = 1 \in \mathbb{N}_0$$

Wenn das gelöste n zu den natürlichen Zahlen, oder 0 gehört, dann ist das Molekül ein Aromat.

Die Hückel Regel formuliert mathematisch, dass die Anzahl der delokalisierten Elektronenpaare ungerade sein müssen um Aromaten zu sein.

Zählen der π Elektronen

- Eine Einfachbindung enthält keine π Elektronen
- Eine Doppelbindung enthält 2 π Elektronen
- Eine Dreifachbindung enthält 4 π Elektronen

Mesomere Grenzstrukturen

Grenzformeln sind mehrere Strukturformeln des gleichen Moleküls, die mit einem Mesomeriepfeil abgegrenzt sind.

1. Alle Grenzformeln müssen in der Anordnung der Atomrümpfe und in der Summe der Valenzelektronen übereinstimmen. In der Anordnung der Valenzelektronen (und damit der Bindungen) unterscheiden sie sich.
2. Die Summe der Formalladungen muss die Ionenladung erhalten.

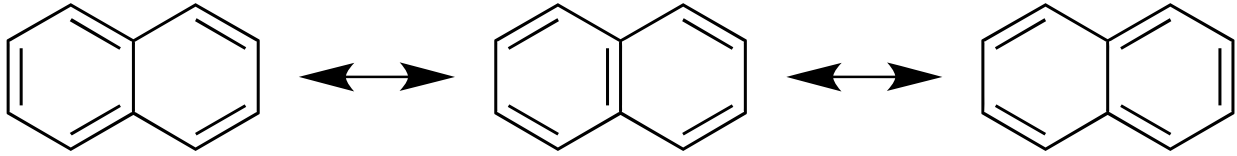
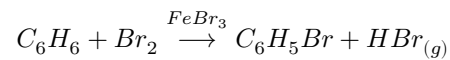


Figure 2: Naptalin

3. Grenzformeln ohne Ladungstrennung sind energetisch günstiger als Grenzformeln mit Ladungstrennung.
4. Grenzformeln, in denen alle Atome ein Elektronenoktett haben, sind günstiger als Grenzformen, in denen dies nicht gegeben ist.

Halogenierung von Benzol



Die Halogenisierung von Benzol ist eine Substitutionsreaktion, bei der ein H -Atom des Benzols mit einem anderen Atom oder Atomgruppe ersetzt wird. (*das delokalisierte Elektron bleibt bestehen.*)

Reaktionsmechanismus

Reaktionsmechanismus der elektrophilen aromatischen Substitution

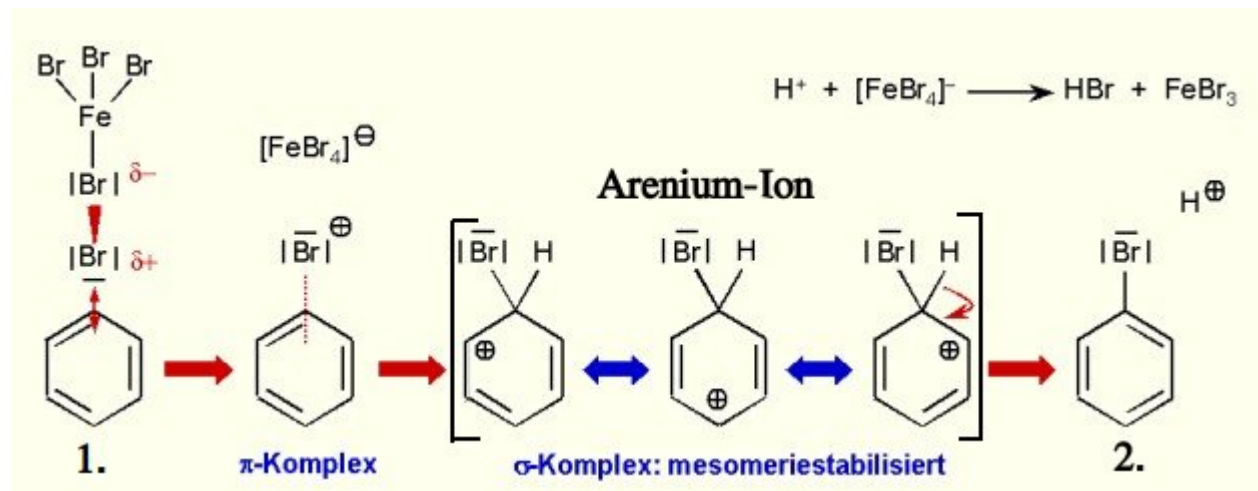


Figure 3: <https://www.volker-berg.de/Chemie/halbenz.htm>

1. Elektrophiler Angriff und heterolytische Spaltung
2. Deprotonierung und Rearomatisierung

HBr ist ein saures Gas, und ist verantwortlich, das sich der Indikator von blau zu gelb gefärbt wurde.

Deprotonierung

Deprotonierung ist die Abspaltung eines Protons (H^+)

Heterolytische Spaltung

Eine Spaltung, in der die Bildungselektronen an einem Bindungspartner verbleiben. (*Das elektronegativere Element nimmt die Ladung auf.*)

Ein Anion und Kathion entsteht

Zusammenfassung

Während Aromaten die Elektrophile Substitutionsreaktion eingehen, reagieren ungesättigte Kohlenwasserstoffe (*Alkene und Alkine*) mit der elektrophilen Addition (A_E).

Mögliche Arbeitsaufgaben

- Ein Molekül ist gegeben und wir müssen mithilfe der Hückel-Regel bestimmen, ob es ein Aromat ist
- Begründe warum Brom und **Benzol** keine Addition am Benzolring vornimmt.
- Zeichne die mesomerie von $\langle \rangle$
- Zeichnen Sie den Reaktionsmechanismus von der Halogenisierung von Benzol