

# Aromatizität

von Friederike Wildemann

Die Aromaten sind eine Stoffklasse der organischen Chemie. 1825 wurden sie erstmals als eigene Stoffklasse charakterisiert. Gekennzeichnet wurden sie damals durch ihren aromatischen Geruch. Durch weiteres experimentieren fand man nun heraus, dass Aromaten auch durch Doppelbindungen gekennzeichnet sind. Als weitere Erklärung kann die erhöhte Elektronendichte der Doppelbindungen hinzugezogen werden.

Aromaten sind also deutlich stabiler und energetisch günstiger, weshalb man darauf geschlossen hat, dass sie in einem Ringsystem angeordnet sein müssen. Dadurch ist über den Ring ein vollständiges System aus konjugierten Doppelbindungen verteilt. Somit sind alle Atome  $sp^2$ -hybridisiert und das Molekül ist planar. Erich Hückel (1869-1980) stellte zur Bedingung von Aromaten die Hückel-Regel auf. Diese besagt, dass sich in einem aromatischen System immer  $(4n + 2)$   $\pi$ -Elektronen befinden müssen.

Heute weiß man, dass so ein vollständig geschlossenes  $\pi$ -Elektronensystem entstehen kann, welches auf das gesamte Molekül verteilt ist. Somit können sich die  $\pi$ -Elektronen über das gesamte Molekül bewegen. Es entsteht ein Ringstrom.

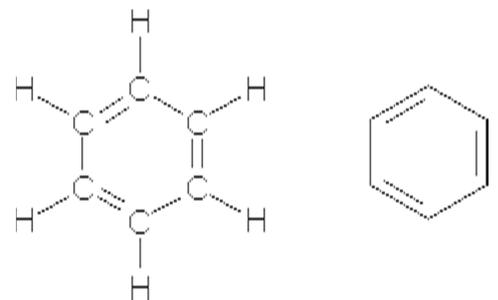
## Bedingungen der Aromatizität

- Geschlossenes delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem (Ringstrom)
- $(4n + 2)$   $\pi$ -Elektronen (Hückel-Regel)
- planares Molekül (alle Atome sind  $sp^2$  hybridisiert)
- zyklischer Aufbau (Ringsysteme)
- Alken- untypische Reaktionsweise (keine Addition von Halogenen)
- aromatischer Geruch

## Aromatizität nach VB-Theorie:

Nach der VB-Theorie bestehen Aromaten aus einem ringförmigen System bestehend aus konjugierten Doppelbindungen.

Diese konjugierten Doppelbindungen ermöglichen es dem Molekül mesomere Grenzstrukturen zu bilden, indem sie hin und her klappen können, wodurch sich die Doppelbindungen über den ganzen Ring verteilen.



Mesomere Grenzstrukturen sind umso stabiler, desto weniger Ladungen sie besitzen, desto weiter gleichnamige Ladungen voneinander entfernt sind und je näher unterschiedliche Ladungen beieinander liegen.

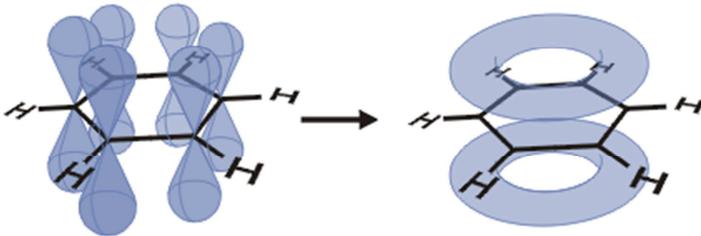


## Aromatizität nach MO-Theorie:

Nach der MO-Theorie sind alle Atome im Ring des Aromaten  $sp^2$ - hybridisiert, außerdem besitzt das Molekül ein delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem. Dadurch, dass die Atome  $sp^2$ -hybridisiert sind, muss jedoch zwischen  $\sigma$ -Bindung und  $\pi$ -Bindung unterschieden werden.

Die Atome sind zunächst einmal durch  $\sigma$ -Bindungen miteinander verbunden, die Doppelbindung kommt durch die  $\pi$ -Bindung zwischen den Atomen zustande.

Durch die räumliche Struktur der p-Orbitale, kann sich ein geschlossenes, planares  $\pi$ -Elektronensystem bilden, wodurch diese Elektronen delokalisiert werden beziehungsweise sich auf den ganzen Ring verteilen (Elektronenwolke).



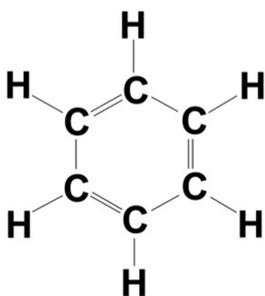
Benzol in der Molekülorbital Darstellung

## Resonanzstabilisierungsenergie

Der Aufbau und die Eigenschaften der Aromaten führen dazu, dass sie energetisch günstiger sind als man im ersten Moment erwarten würde. Die Differenz des anzunehmenden energetischen Zustands und des realen, entspricht der Resonanzstabilisierungsenergie.

Der energetisch günstige Zustand führt zur Alken untypischen Reaktionsweise, da Aromaten deutlich stabiler sind.

## Beispiel Benzol

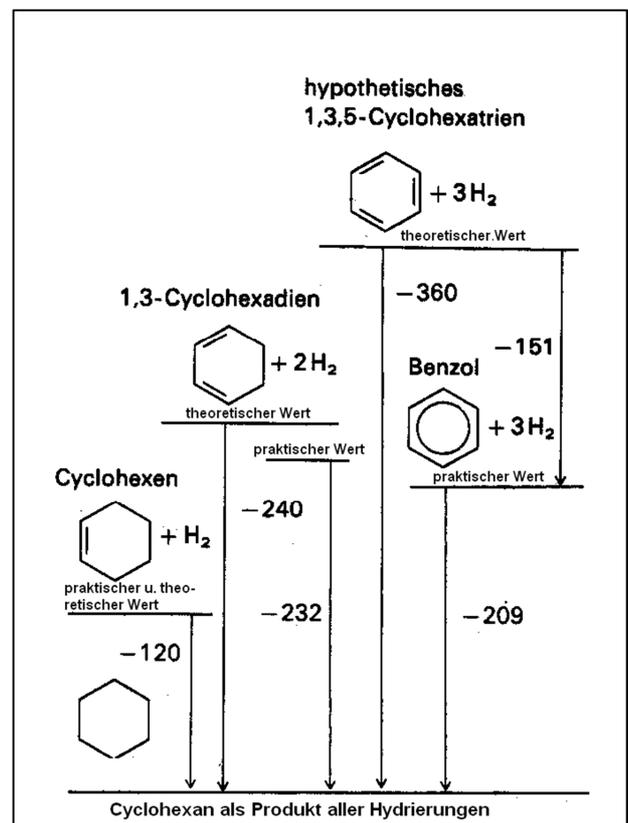


Benzol Molekül  $C_6H_6$

Benzol ist eine flüssige organische Verbindung, welche den klassischen Geruch eines Aromaten aufweist. Es ist kaum in Wasser löslich, da es nur van der Waals Wechselwirkungen besitzt.

Benzol ist das einfachste und zugleich klassischste Beispiel für die Aromatizität bestimmter Verbindungen. Somit besitzt es die Struktureinheit eines ringförmigen Gerüsts aus sechs Kohlenstoffatomen.

Heute werden alle Verbindungen, die sich von Benzol ableiten lassen, als aromatische Verbindungen zusammengefasst.



Die Aromatizität kann in der MO-Theorie und der VB-Theorie nachgewiesen werden.

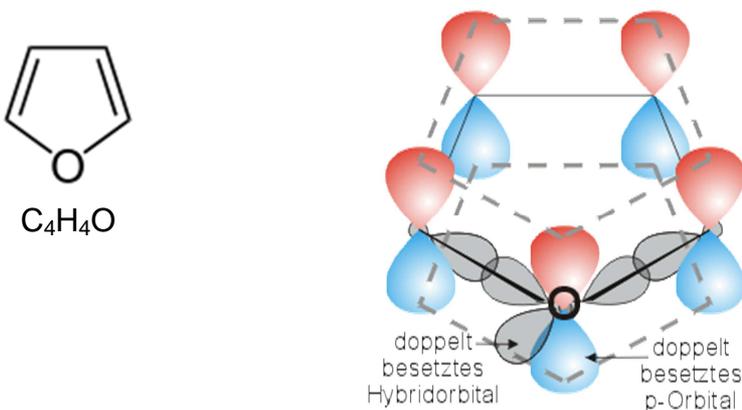
Die VB-Theorie kann zum einen durch den planaren Aufbau von  $120^\circ$ , zum anderen aber auch durch die konjugierten Doppelbindungen sowie der Mesomerie nachgewiesen werden.

Die MO-Theorie wird ebenfalls durch die  $sp^2$ -Hybridisierung deutlich, außerdem besteht Benzol aus einem geschlossenen delokalisierten  $\pi$ -Elektronensystem. Des Weiteren ist die Hückel-Regel erfüllt, weil 6  $\pi$ -Elektronen vorhanden sind.

## Heterozyklen

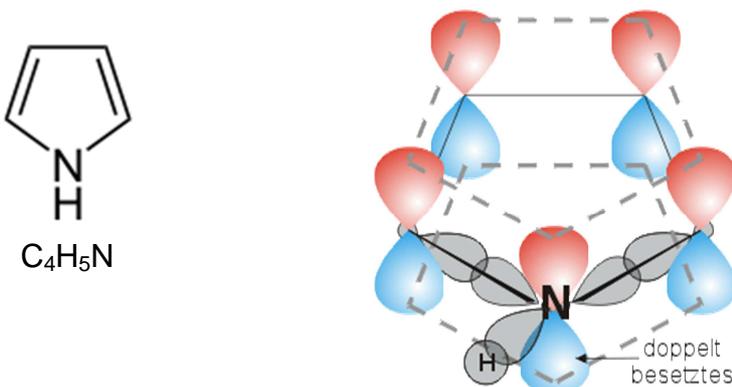
Als Heterozyklen werden in der organischen Chemie ringförmige Moleküle bezeichnet, bei denen es sich mindestens um zwei verschiedene chemische Elemente handelt. Die meisten Heteroatome in diesen Ringen sind Schwefel, Stickstoff und Sauerstoff. Sie sind sehr wichtig für die Natur, da über die Hälfte aller Naturstoffe Heterozyklen enthalten.

### Beispiel Furan



Im ersten Moment könnte man trotz der Alken-untypischen Reaktionsweise und des aromatischen Geruchs denken, dass das Molekül kein Aromat ist, da kein geschlossenes  $\pi$ -Elektronensystem vorhanden ist. Untersucht man jedoch das Sauerstoff Atom genauer, stellt man fest, dass auch dieser  $sp^2$ -hybridisiert ist, ein Hybridorbital und das p-Orbital sind doppelt besetzt, wodurch sie nichtbindend sind. Sie sind im VB-Modell die freien Elektronenpaare. Somit sind auch die weiteren Bedingungen der Aromatizität gegeben: planares Molekül mit einem zyklischen Aufbau.

### Beispiel Pyrrol



Pyrrol ist ähnlich aufgebaut wie Furan, anstelle des Sauerstoff Atoms befindet sich in dem Molekül jedoch ein Stickstoff Atom. Das Stickstoff Atom besitzt nur ein freies Elektronenpaar, jedoch eine Bindung mit einem Wasserstoff Atom. Somit könnte man auch hier denken, dass es sich trotz seiner Alken-untypischen Reaktionsweise und des spezifischen Geruchs, nicht um einen

Aromaten handelt. Untersucht man das Stickstoff Atom genauer, stellt man auch hier fest, dass es  $sp^2$ -hybridisiert ist. Das freie Elektronenpaar befindet sich im p-Orbital, dadurch ist auch hier ein delokalisiertes  $\pi$ -Elektronensystem vorhanden. Somit hat das Molekül einen zyklischen Aufbau und ist planar. Die Hückel-Regel ist ebenfalls erfüllt (6  $\pi$ -Elektronen).

Nach dem Grimmschen-Hybrid-Verschiebungssatz sind NH und O sowieso vergleichbar.

## Quellenverzeichnis

Benzol in der Valenzbindungs Darstellung

<http://www.chemgapedia.de/vsengine/media/vsc/de/ch/20/niehues/aromaten/grafik/benzolschreibweise.gif>

Mesomerie

<http://netchemie.de/images/lexi/014004.jpg>

Benzol in der Molekülorbital Darstellung

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Benzene-orbitals3.png>

Benzol Molekül

<http://www.u-helmich.de/che/Q2/aromaten/bilder/benzol014-5.jpg>

Furan Molekül

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Furan.svg>

Pyrrol Molekül

<http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pyrrol2.svg>