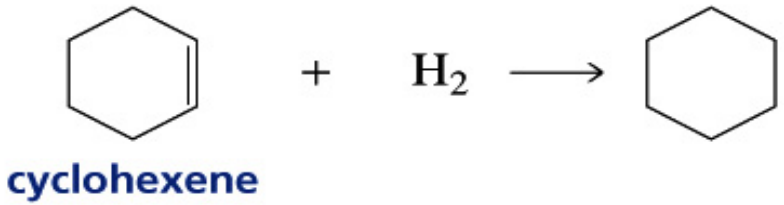
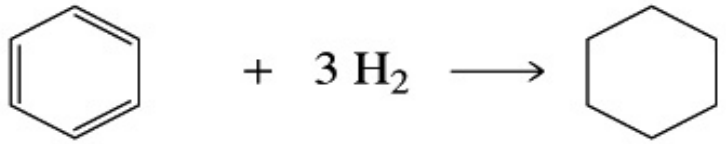
Il Benzene è stabilizzato dalla delocalizzazione elettronica.

La stabilità aggiuntiva di un composto che scaturisce dal fatto di possedere elettroni delocalizzati è chiamata energia di delocalizzazione o energia di risonanza



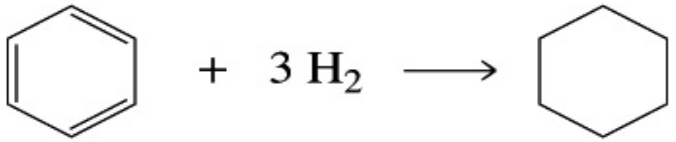
cyclohexene

$\Delta H° = -28.6$ kcal/mol (-120 kJ/mol)
experimental



"cyclohexatriene"
hypothetical

$\Delta H° = -85.8$ kcal/mol (-359 kJ/mol)
calculated

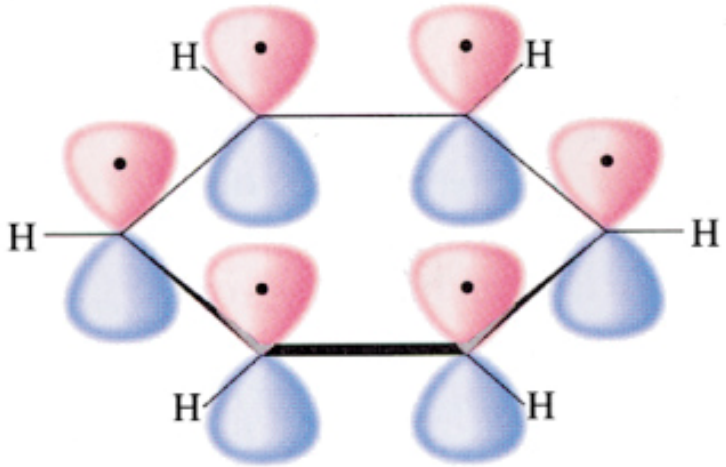


benzene

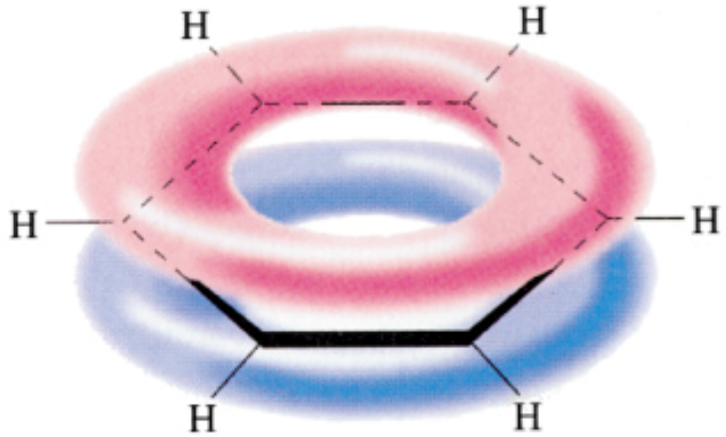
$\Delta H° = -49.8$ kcal/mol (-208 kJ/mol)
experimental

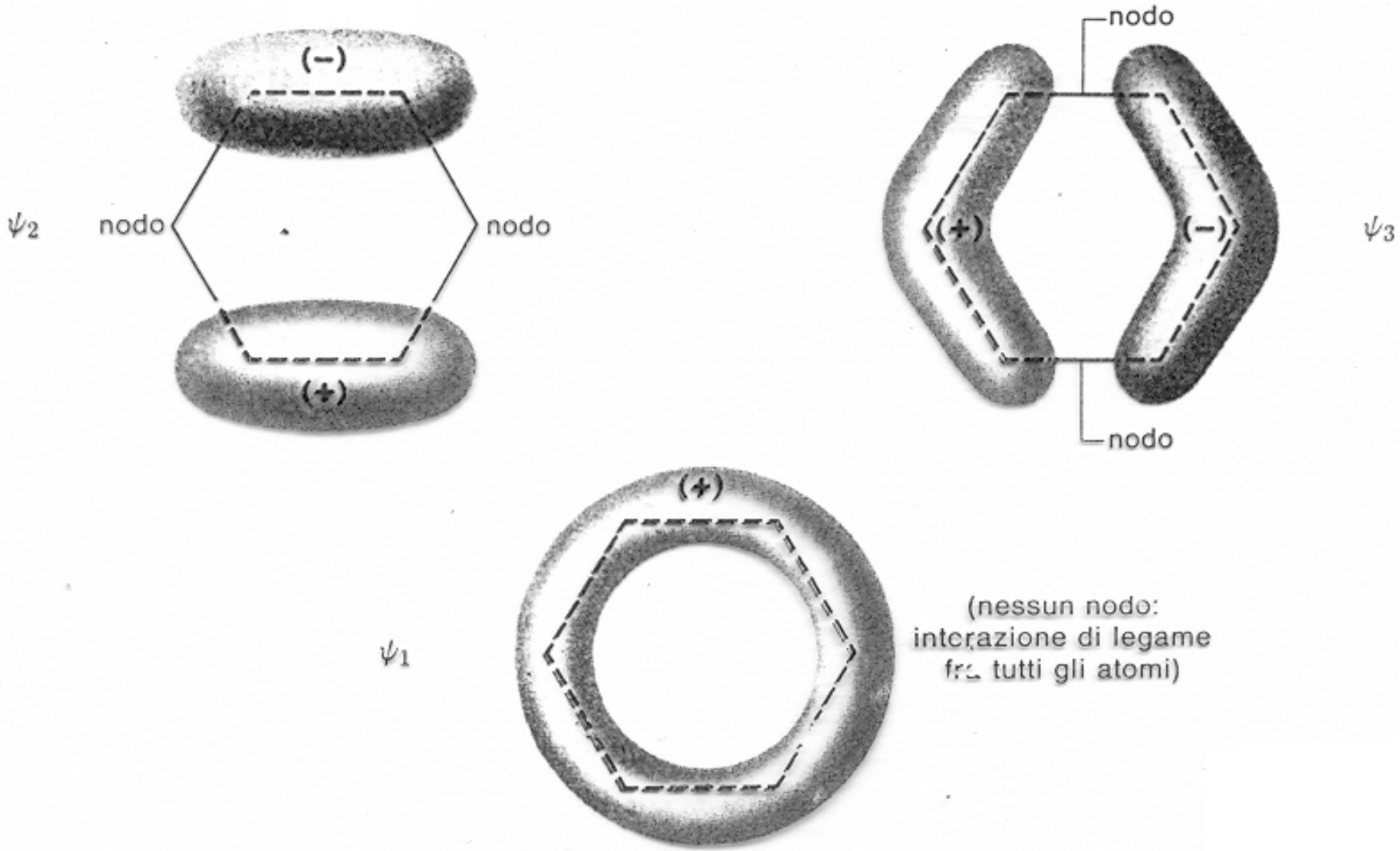
Energia di risonanza = 36 kcal/mol

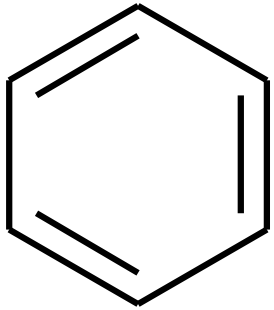
(a)



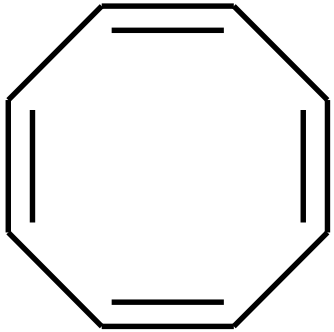
(b)



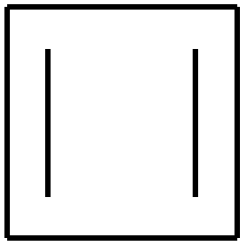

(−)
nodo
nodo
(+)
ψ_2
nodo
(+)
(−)
nodo
ψ_3
(+)
ψ_1
(nessun nodo:
interazione di legame
fra tutti gli atomi)



Composti ***non*** aromatici



cicloottatetraene

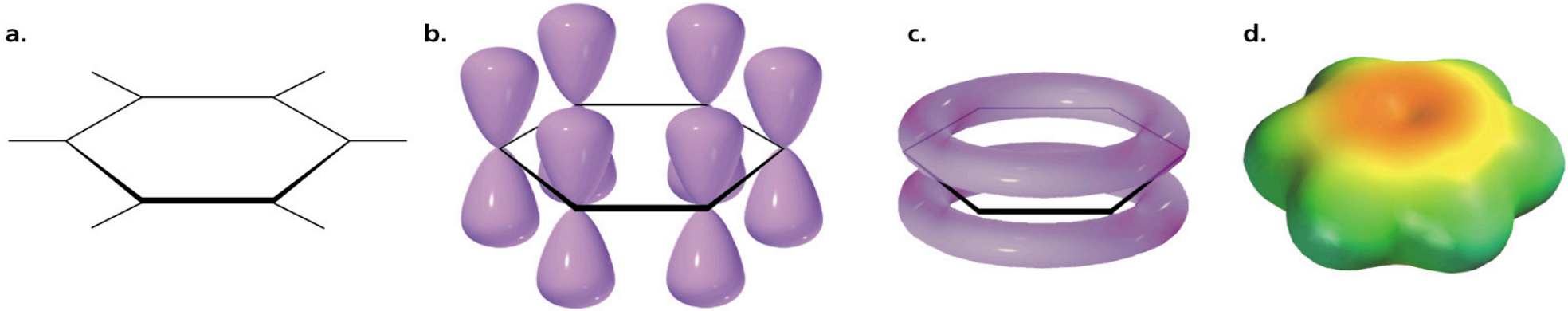


ciclobutadiene

Benzene

- Molecola planare

- I sei legami carbonio–carbonio hanno tutti la stessa lunghezza



- Ognuno dei sei elettroni π è condiviso tra i sei atomi di carbonio

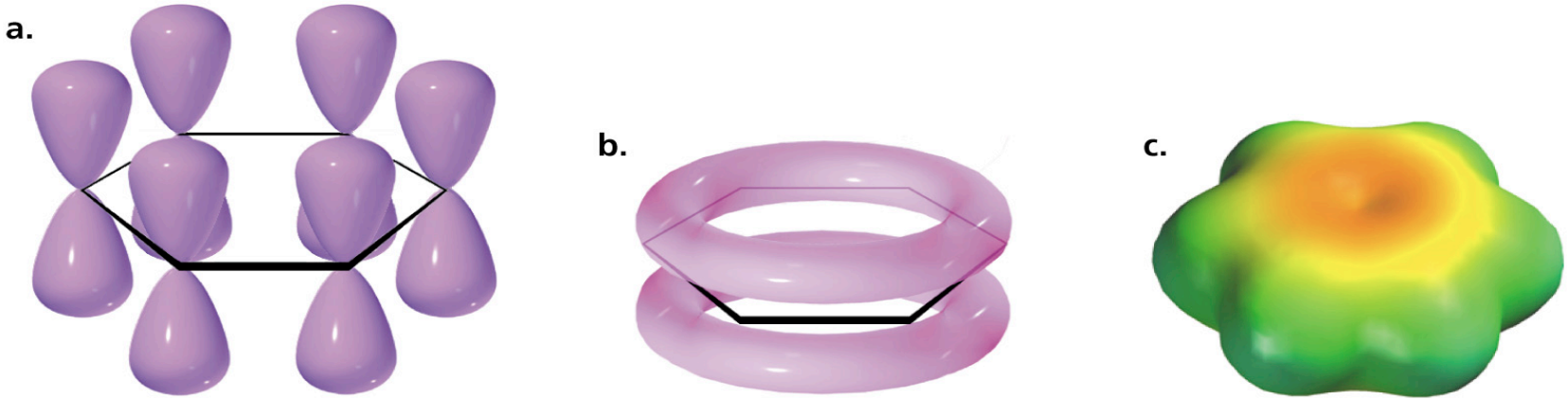
- Gli elettroni π sono delocalizzati

Criteri per l'Aromaticità

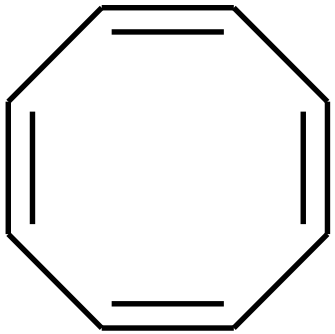
1. Un composto, per essere aromatico, deve essere ciclico e planare (ogni atomo dell'anello deve essere ibridato sp^2).

2. La nuvola π deve essere formata da un numero dispari di coppie di elettroni π (regola di Huckel).

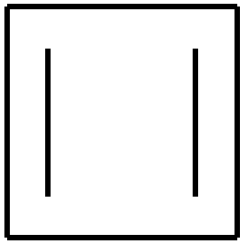
Regola del 4*n*+2, (nota come **regola di Hückel)**: un composto ciclico planare è aromatico se la sua nuvola π contiene $(4n+2)$ elettroni π, dove n è un qualsiasi numero intero, positivo, compreso lo zero



Composti ***non*** aromatici

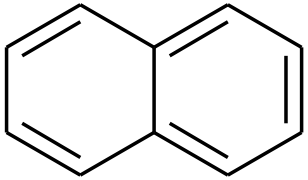


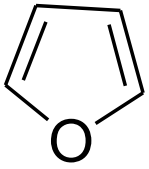
cicloottatetraene

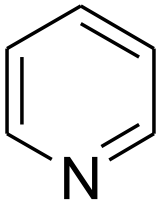


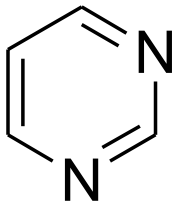
ciclobutadiene

Altri composti aromatici

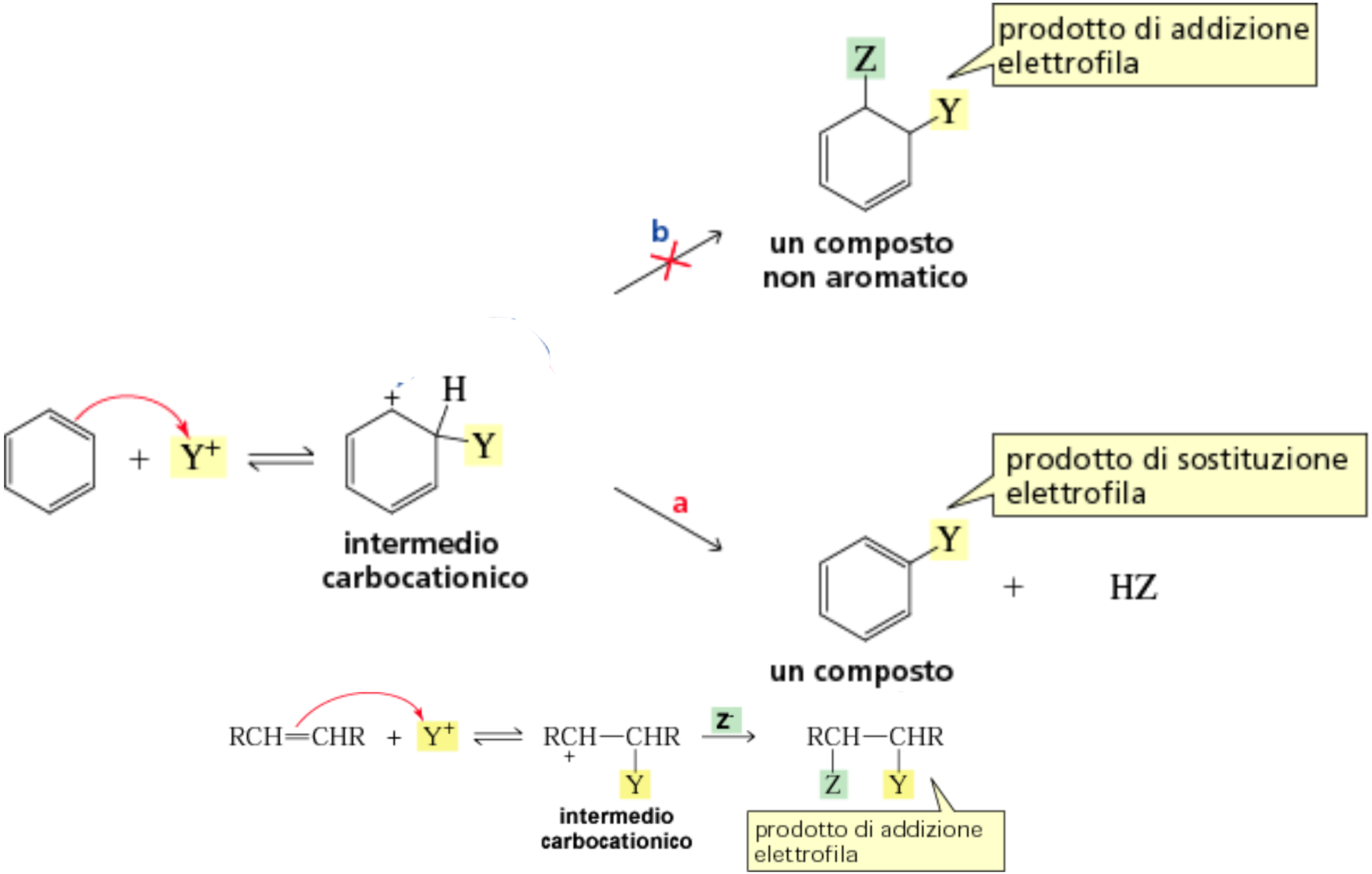








Composti
Eterociclici
aromatici


prodotto di addizione elettrofila
Z
Y
b
un composto non aromatico
H
Y
intermedio carbocationico
a
prodotto di sostituzione elettrofila
Y
+ HZ
un composto
RCH=CHR + Y+
RCH—CHR
Y
z-
RCH—CHR
Z Y
intermedio carbocationico
prodotto di addizione elettrofila

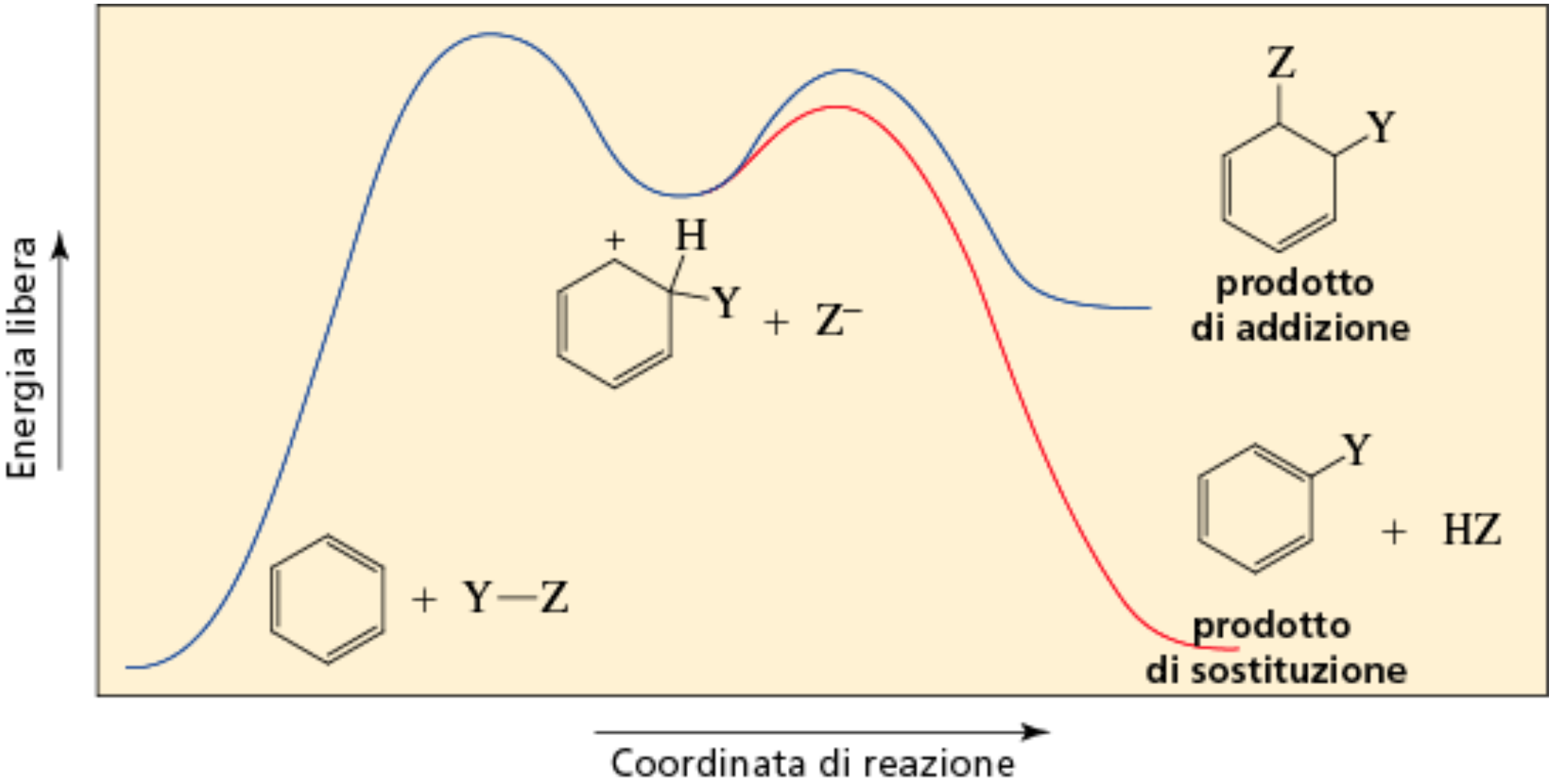
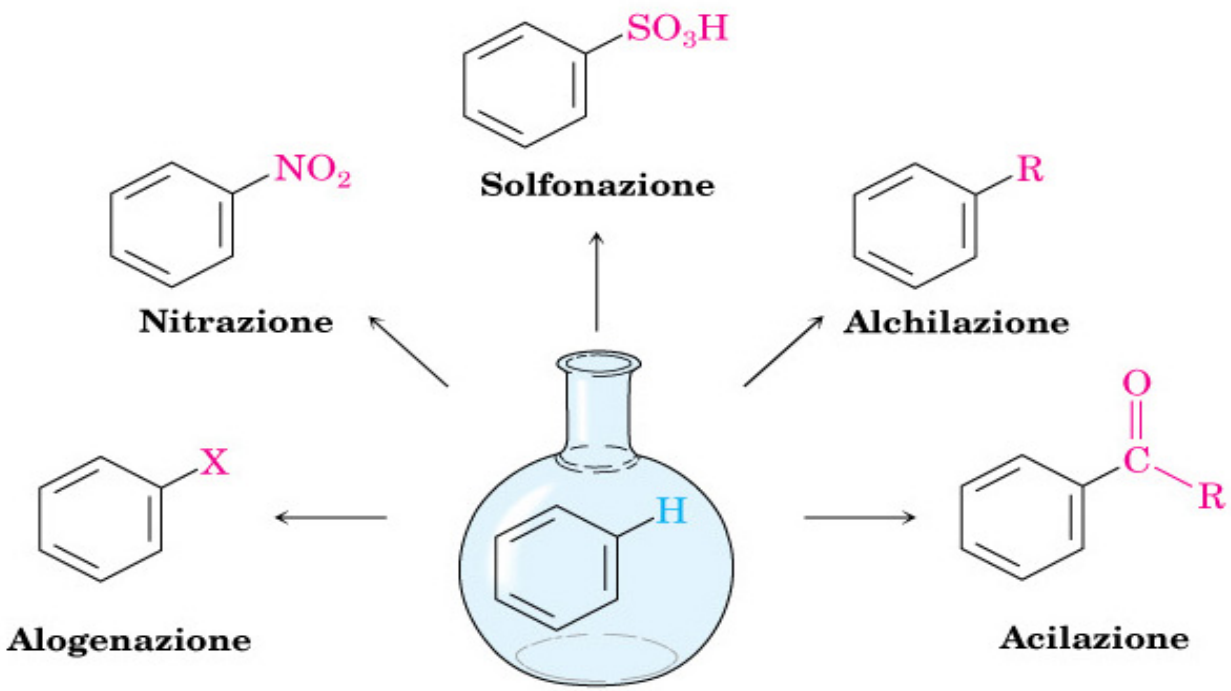
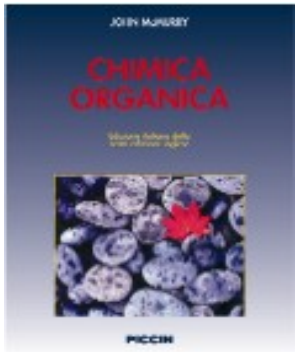

Energia libera
+ Y—Z
+ H
Y
+ Z⁻
Z
Y
prodotto
di addizione
Y
+ HZ
prodotto
di sostituzione
Coordinata di reazione

FIGURA 16.1 Alcune reazioni di sostituzione elettrofila aromatica.



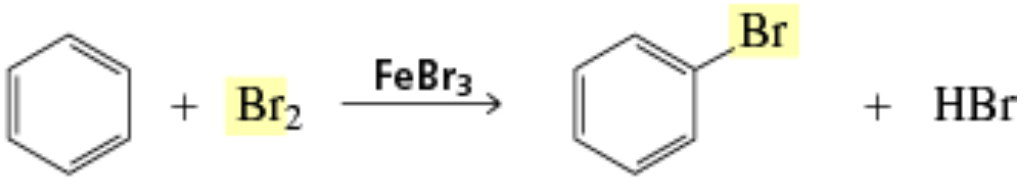


Dal volume: McMurry “Chimica organica”

Piccin Nuova Libraria S.p.A.

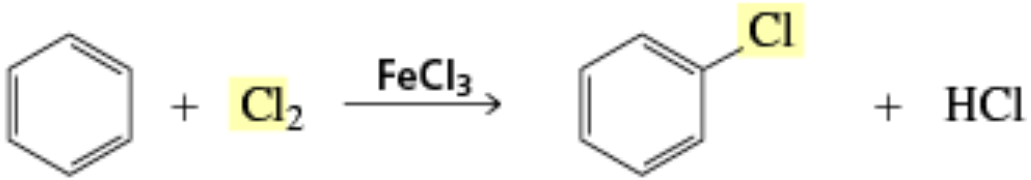
ALOGENAZIONE DEL BENZENE

bromurazione



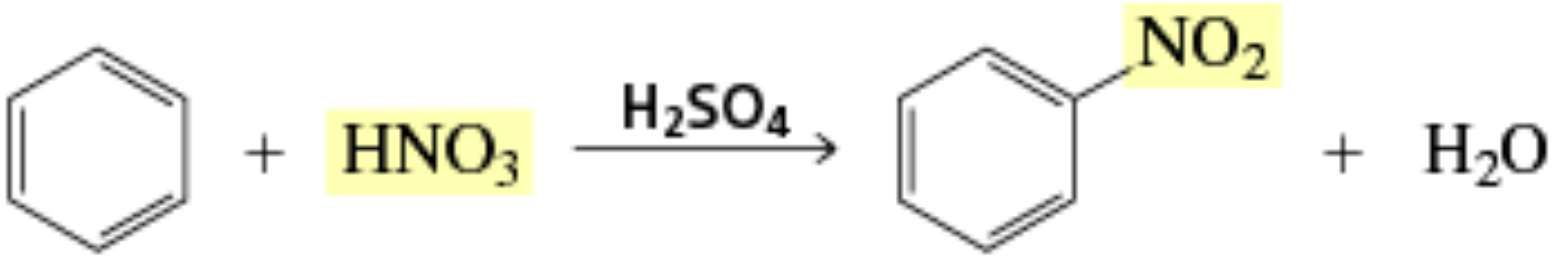
bromobenzene

clorurazione



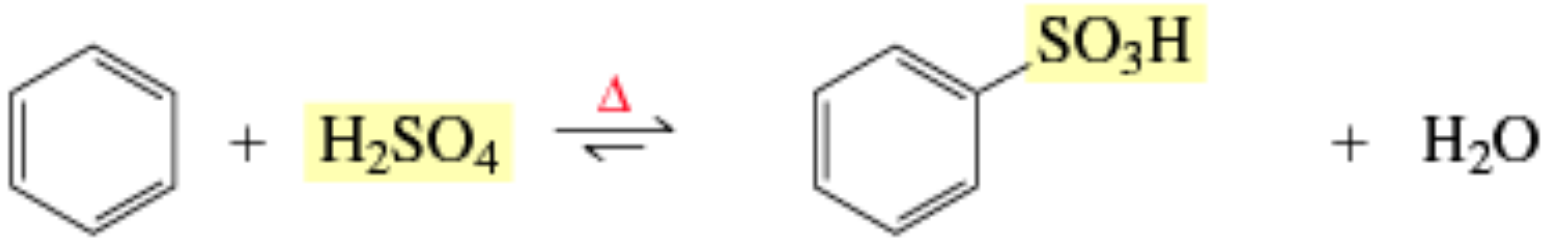
clorobenzene

nitrazione



nitrobenzene

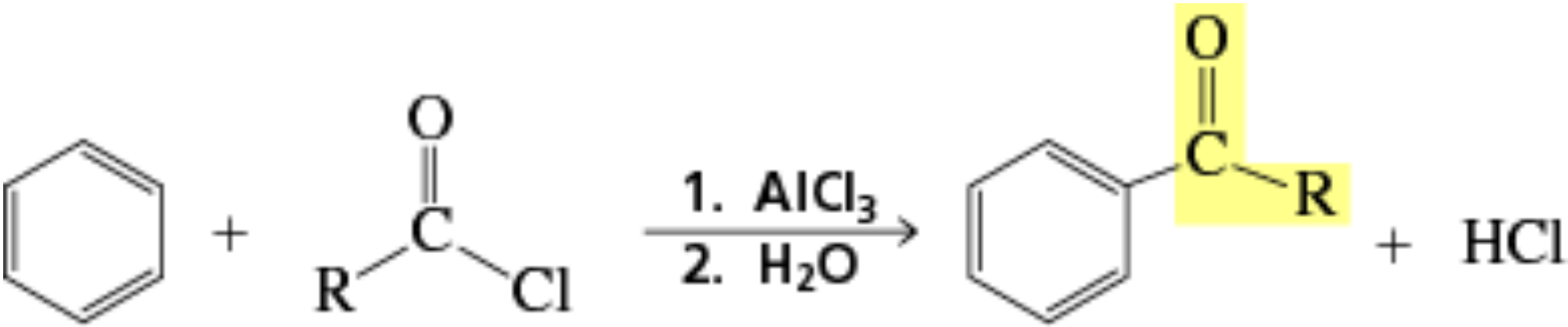
solfonazione



acido benzensolfonico

ALCHILAZIONE DI FRIEDEL-CRAFTS

ACILAZIONE DI FRIEDEL-CRAFTS



Reazione di Gatterman-Koch