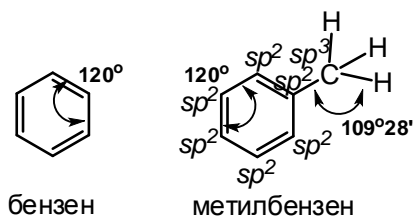


Задача 9 В какво хибридно състояние са въглеродните атоми в молекулите на бензена и на метилбензена? Какви изводи могат да се направят от това за валентните ъгли между  $\sigma$ -връзките и за пространствения строеж на молекулите на бензена и на метилбензена.

**Решение:**

Дефиниция на арени виж в решението на Задача ОХ 008. За теорията на хибридни състояния на въглеродните атоми виж решението на Задача ОХ 006.



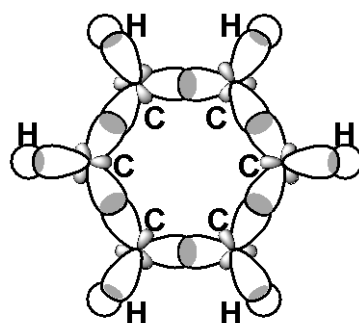
В молекулата на бензена всички въглеродни атоми са в  $sp^2$  хибридно състояние. Всички валентни ъгли в молекулата са  $120^\circ$ . Молекулата на бензена е планарна (равнинна) – всички 12 атома лежат в една равнина.

В молекулата на метилбензена (толуена) въглеродните атоми в бензеновото ядро са в  $sp^2$  хибридно състояние, а въглеродният атом в метиловата група е в  $sp^3$  хибридно състояние. Пространственият строеж на толуена се описва с равнинен фрагмент на бензеновото ядро, към което с върха си е свързан правилният тетраедър на метиловата група. В бензеновото ядро валентните ъгли са  $120^\circ$ , а в метиловата група –  $109^\circ28'$ .

Бензенът,  $C_6H_6$ , се отнася към едноядрените арени, тъй като съдържа в молекулата си само едно бензеново (ароматно) ядро.

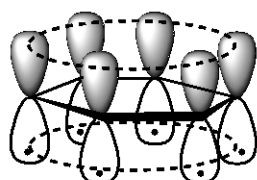
Молекулата на бензена е планарна (плоска) – всички 12 атома лежат в една равнина, като въглеродните атоми образуват правилен шестоъгълник. Дължината на всички въглерод-въглеродни връзки е еднаква, 0.140 nm, която е междинна стойност между дължина на проста и на двойна C–C връзка. Валентните ъгли са  $120^\circ$ .

Въглеродните атоми в молекулата на бензена са в  $sp^2$  хибридно състояние. Чрез хибридните си орбитали всеки въглероден атом участва в образуването на три прости  $\sigma$  връзки – две със съседни въглеродни атоми и една с водороден атом. Сигма-скелетът на бензена, погледнат отгоре е:



σ скелет на бензена

Всеки от въглеродните атоми в пръстена има по една  $2p_z$  нехибридизирана атомна орбитала с по един електрон. Осите на тези шест атомни орбитали са успоредни помежду си и са перпендикулярни на равнината на  $\sigma$ -връзките. Всяка  $2p$  атомна орбитала се припокрива частично странично с  $2p$  атомните орбитали на два съседни въглеродни атома. Припокриването се осъществява под и над равнината на  $\sigma$ -връзките. Така се образува една делокализирана шест  $\pi$  електронна система, която обхваща ядрата и на шестте въглеродни атома. Такава система се нарича  $\pi$  електронен секстет или ароматен секстет. Електронната плътност е равномерно разпределена над и под равнината на пръстена, което обяснява изравняването на връзките между въглеродните атоми в молекулата на бензена по дължина и енергия. Делокализираната  $\pi$  електронна система на бензена е показана по-долу в перспектива. Погледът на наблюдателя е към равнината на сигма-скелета, която е хоризонтална и перпендикулярна на равнината на екрана (листа хартия). Шестте успоредни  $2p$  атомни орбитали се припокриват частично странично под и над равнината на сигма-скелета.



$\pi$  секстет на бензена

Показаните фигури илюстрират обяснението на равнинната геометрия на бензеновата молекула и големината на валентните ъгли.

Химичната структура от шест въглеродни атома, свързани в шестатомен пръстен с шест  $\sigma$ -връзки и една шестелектронна делокализирана  $\pi$ -електронна връзка, се нарича бензеново или ароматно ядро. То се характеризира с изравнена здравина и дължина на C–C връзките, с ниска енергия и голяма стабилност.

Не всички плоски циклични спрегнати системи са ароматни. Ароматните съединения следват правилото на Хюкел, известно още като  **$4n+2$  правило**. Съгласно това правило, сред планарните, циклични, спрегнати въглеводороди само тези, които имат  $(4n+2)$   $\pi$ -електрона ( $n$  е цяло положително число) се отличават с особено голяма стабилност и се наричат **ароматни**. **Антиароматни** са системите съдържащи  $4n$   $\pi$ -електрона в пръстена. Бензенът има 6  $\pi$ -електрона и съответства на правилото  $4n+2$

при  $n=1$ . Бензенът е ароматно съединение. Въпреки, че циклохепта-1,3,5-триенът също съдържа 6  $\pi$  електрона и е циклично съединение, той не притежава ароматен характер, защото структурата му не е планарна. Циклобутадиенът има 4  $\pi$ -електрона и е антиароматен защото отговаря на правилото  $4n$  при  $n=1$ .

Толуенът (метилбензенът) е хомолог на бензена. Толуенът може да се разглежда като произлязъл от бензеново ядро, в което един водороден атом е заместен с метилова група. Всички въглеродни атоми в бензеновото ядро на толуена са в  $sp^2$  хибридно състояние. Валентните ъгли в ароматното ядро са  $120^\circ$ . Хибридизацията на въглеродния атом в метиловата група е  $sp^3$ . Групата е остатък от метан и както в него, валентният ъгъл между простите  $\sigma$ - C–H връзки е  $109^\circ 28'$ . Геометрията на молекулата на толуена се описва с равнинен бензенов пръстен, към който с върха си е свързан правилен тетраедър.