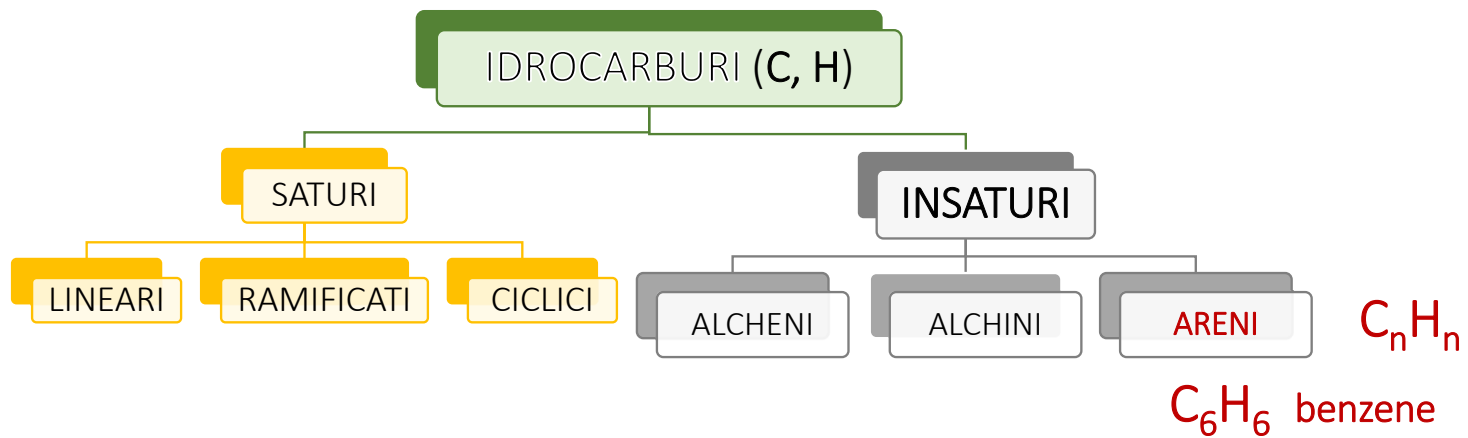


# COMPOSTI AROMATICI

Argomenti trattati:

- ✓ Struttura del benzene, strutture di risonanza e ibrido di risonanza
- ✓ Aromaticità del benzene, idrocarburi policiclici aromatici e esempi di composti eterociclici aromatici
- ✓ Nomenclatura IUPAC di derivati del benzene
- ✓ Proprietà fisiche di derivati del benzene

Bruice: cap.7 (paragrafi 1-2; 13-15)



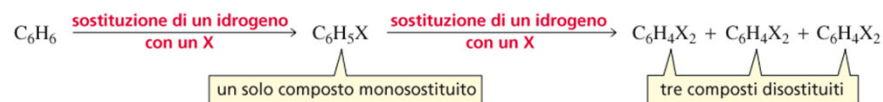
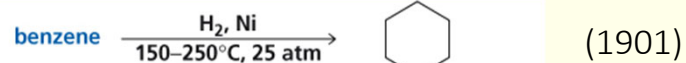
## Struttura del benzene...un rebus...

formula  $C_6H_6$

- composto stabile
- non subisce reazioni di addizione tipiche degli alcheni

$C_6H_6$  presenta 8H in meno rispetto all'alcano lineare

- ogni legame  $\pi$  comporta 2 H in meno rispetto all'alcano lineare
- ogni ciclo comporta 2 H in meno rispetto all'alcano lineare



Kekulé erroneamente credeva che i doppi legami del benzene si spostassero rapidamente avanti e indietro

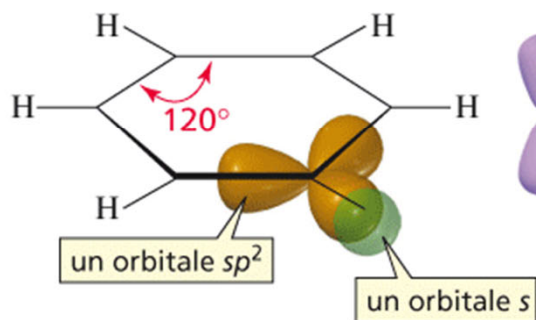


.....struttura raggi X del benzene (anni '30)

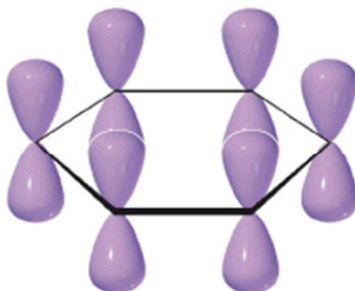
**BENZENE È UNA MOLECOLA PLANARE CON 6 C-C DELLA STESSA LUNGHEZZA**

# BENZENE

Ogni C usa 2 orbitali  $sp^2$  per legare altri 2 C



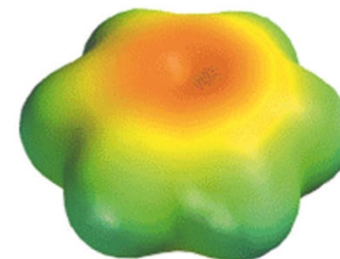
Ogni C ha un orbitale  $p$  perpendicolare a  $sp^2$



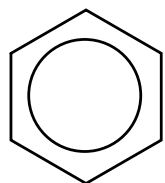
La sovrapposizione degli orbitali  $p$  forma una nuvola continua



Stessa densità elettronica per tutti i legami C-C



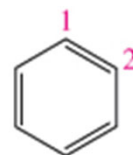
Ogni elettrone  $\pi$  è condiviso dai 6 atomi di C



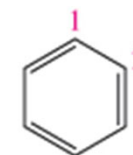
ASSENZA DI DOPPI LEGAMI

ibrido di risonanza

NON indica un equilibrio

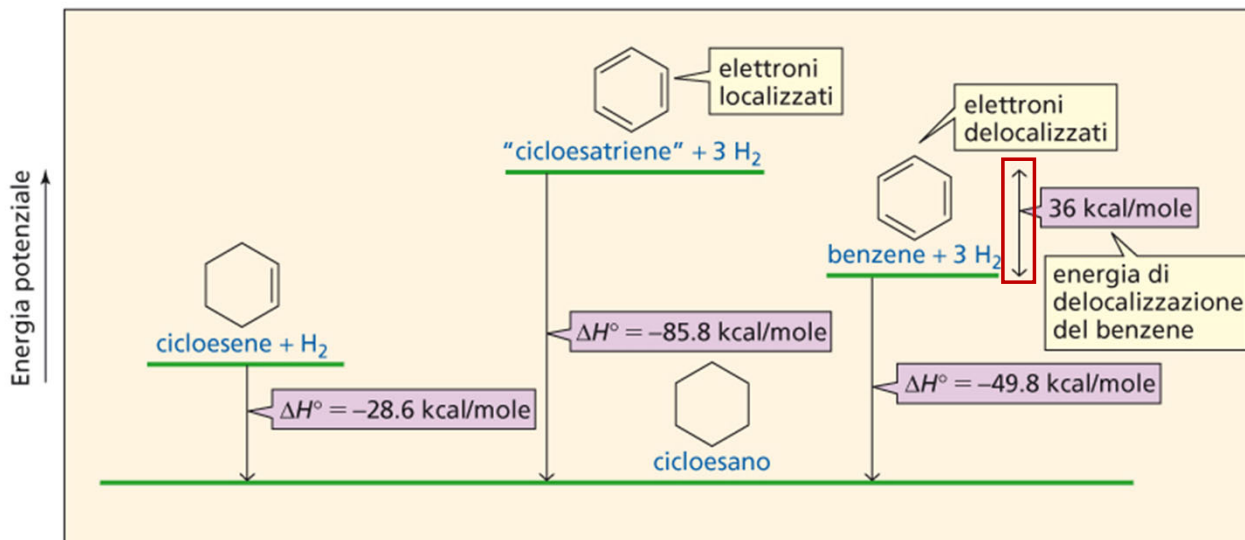


struttura di risonanza



struttura di risonanza

Ogni legame C-C è intermedio tra un legame singolo e uno doppio



## REQUISITI PER AROMATICITÀ

- ✓ molecola **ciclica**
- ✓ avere **orbitali 2p** su ogni atomo dell'anello
- ✓ Essere **planare** o *quasi planare* per consentire sovrapposizione degli orbitali 2p
- ✓ la nuvola π deve contenere un **numero dispari** di coppie di elettroni π (2, 6, 10, 14, 18...elettroni π)

$4n+2$  elettroni (regola di Hückel)

## ENERGIA DI RISONANZA

### del benzene

(extra-stabilità dovuta alla presenza di elettroni delocalizzati)



GRANDI energie di delocalizzazione

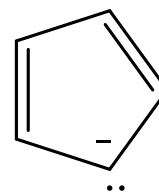
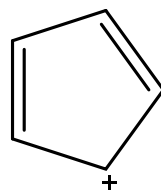
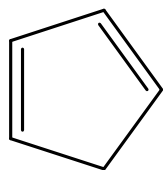


## COMPOSTI AROMATICI



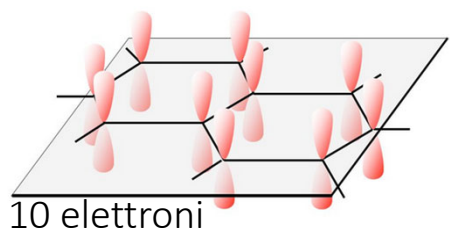
nuvola π del benzene

Quali tra le seguenti molecole rappresentano sistemi aromatici?



**Idrocarburi aromatici** molecole che contengono solo C e H e presentano comportamento chimico simile al benzene

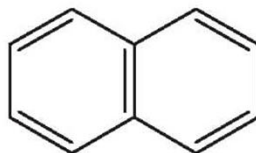
Composti organici con 2 o più anelli benzenici che condividono almeno 2 atomi di C adiacenti sono noti come **idrocarburi policiclici aromatici** (derivano dalla combustione incompleta di materiale organico)



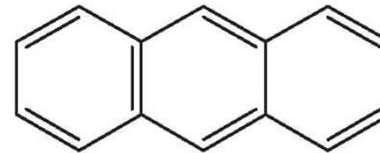
Energia di risonanza  
[kJ/mol (kcal/mol)]



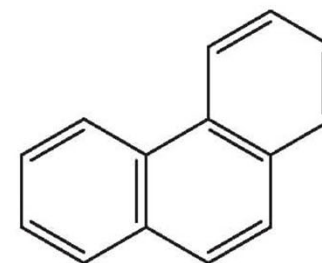
Benzene  
150 (36.0)



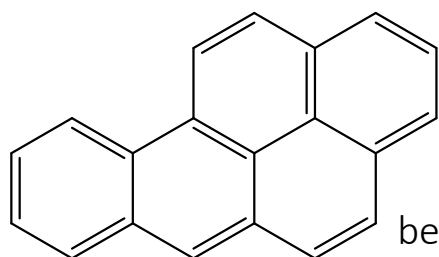
Naftalene  
255 (60.9)



Antracene  
347 (82.9)

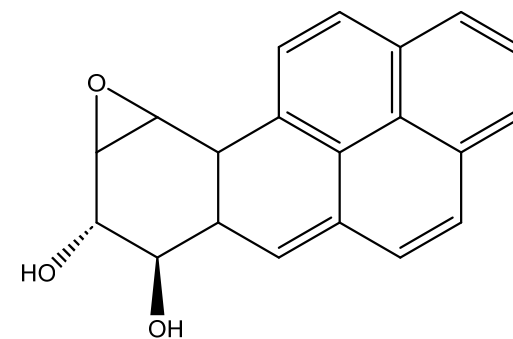


Fenantrene  
381 (91.0)



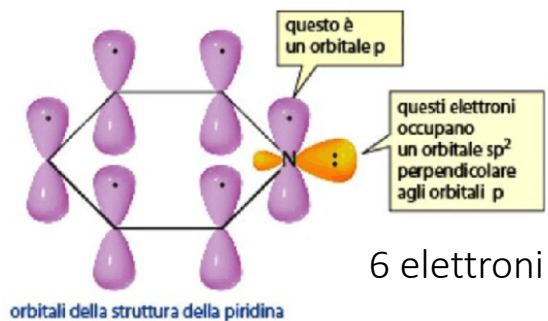
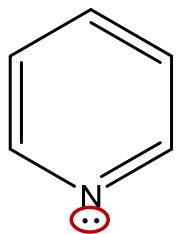
benzopirene

Il benzopirene è un agente cancerogeno. Si forma in tutti i processi di combustione incompleta di materiale organico (fumo di sigarette, gas di scarico di auto, carne arrostita alla brace). Quando viene assorbito, l'organismo cerca di renderlo più solubile per riuscire ad eliminarlo.: in una serie di reazioni enzimatiche viene convertito in un diolo epossido che si può legare al DNA causando una mutazione che può portare al cancro

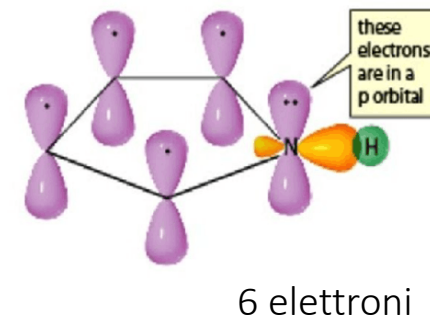
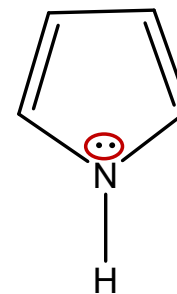


## COMPOSTI ETEROCICLICI AROMATICI

PIRIDINA

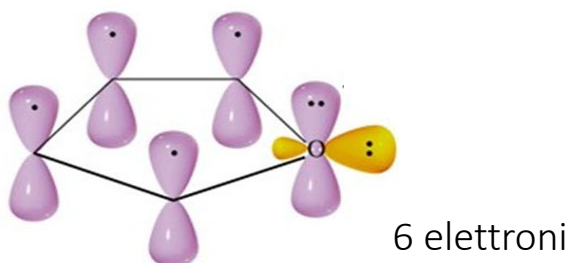
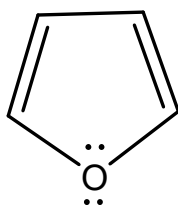


PIRROLO

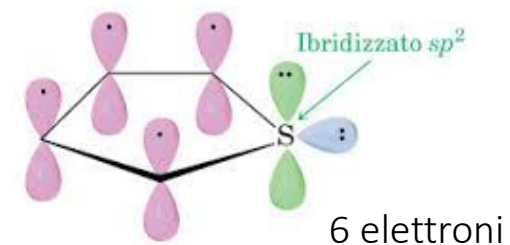
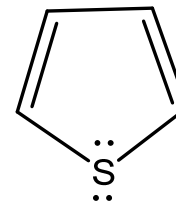


VALE LA **REGOLA DI HÜCKEL**  
 $4n+2$

FURANO

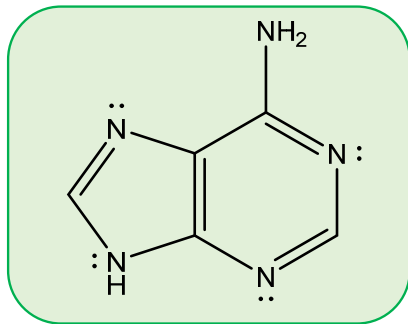


TIOFENE

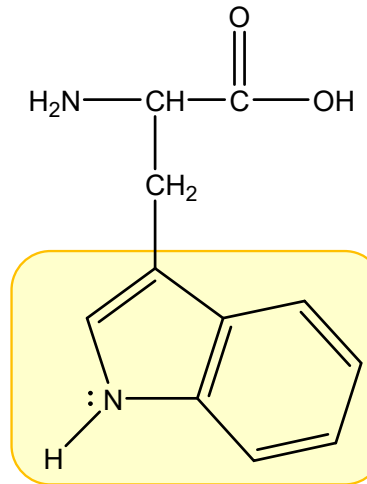




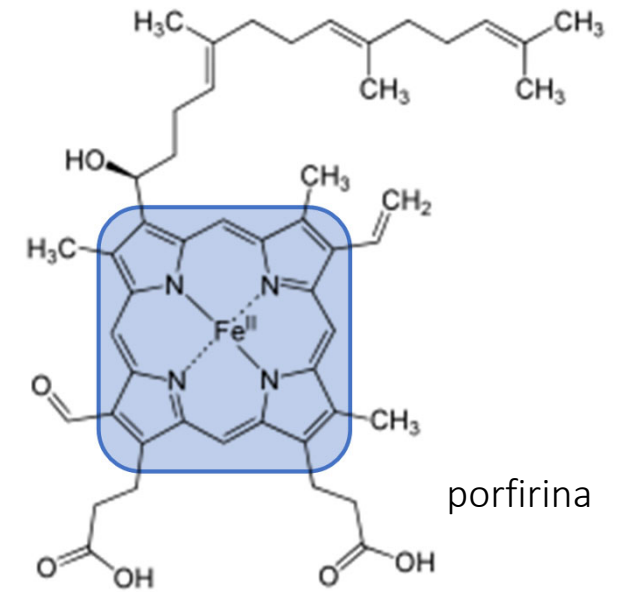
COMPOSTI NATURALI CHE PRESENTANO STRUTTURE AROMATICHE CON PIÙ CICLI FUSI TRA LORO



purina

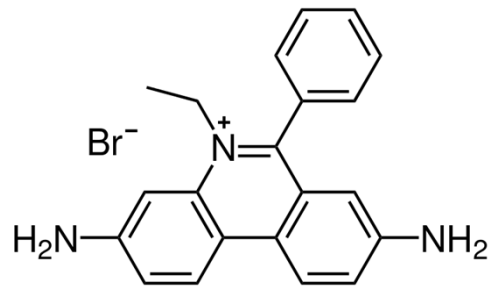


indolo

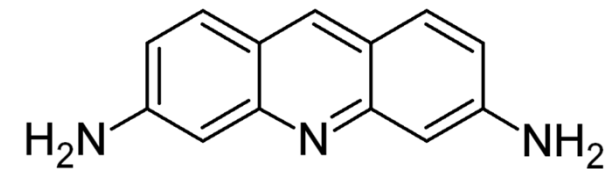


porfirina

Sistemi aromatici con anelli condensati possono essere intercalanti del DNA, con attività mutagena



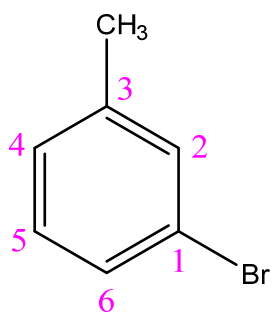
Etidio bromuro



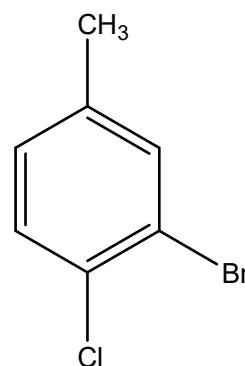
proflavina

## Nomenclatura IUPAC

La nomenclatura IUPAC prevede di indicare la posizione dei sostitenti seguita dalla desinenza **-BENZENE**  
I sostituenti vanno indicati in ordine alfabetico, in modo da assegnare i numeri più bassi possibili

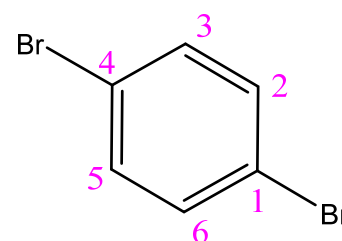
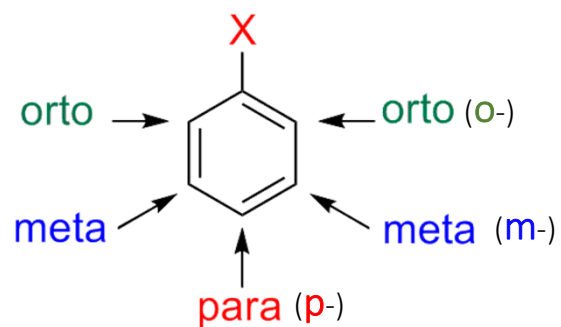


1-bromo-3-metilbenzene



1-bromo-2-cloro-5-metilbenzene

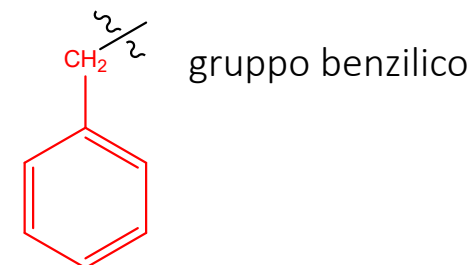
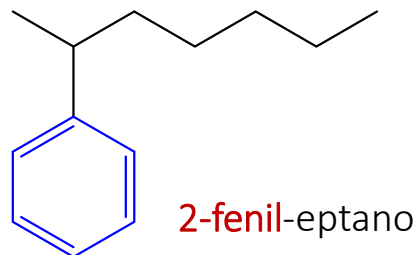
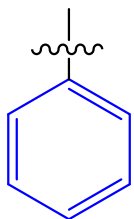
Tuttavia rimane ancora la nomenclatura tradizionale basata sulla posizione relativa dei sostituenti



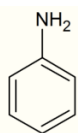
1,4-dibromobenzene  
p-dibromobenzene

Per le molecole in cui il benzene non è la parte predominante sono stati definiti il gruppo fenilico e benzilico

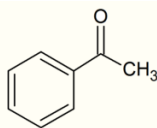
gruppo fenilico



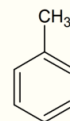
Per alcuni derivati del benzene è stato mantenuto il nome comune:



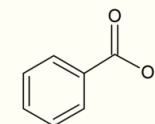
**ANILINA**



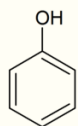
**ACETOFENONE**



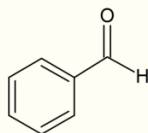
**TOLUENE**



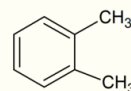
**ACIDO BENZOICO**



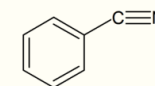
**FENOLO**



**BENZALDEIDE**




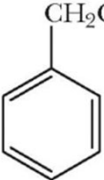
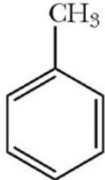
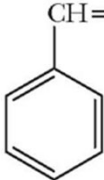
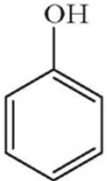
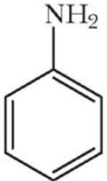
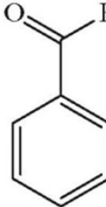
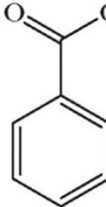
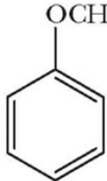
**o-XILENE**



**BENZONITRILE**

## Le proprietà fisiche dei benzeni sostituiti dipendono dalla natura del sostituito

Alchilbenzeni (apolari) hanno punti di ebollizione più bassi di benzeni con sostituenti polari (fenolo, anilina, acido benzoico)

apolari					
	Benzene	Etilbenzene	Toluene	Stirene	
	p.f. (°C)	5.5	-95	-93	-31
p.e. (°C)	80	136	110	145	
polari					
	Fenolo	Anilina	Benzaldeide	Acido benzoico	Anisolo
	p.f. (°C)	41	-6	-26	123
p.e. (°C)	182	184	178	249	154