Hydrierungswärme von zyklischen Alkenen und Bindungsverhältnisse des Benzens TO

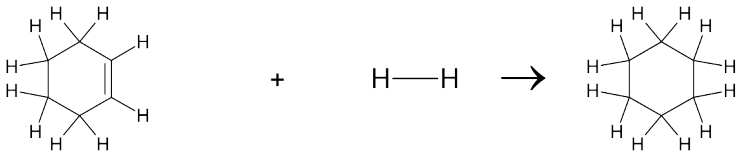
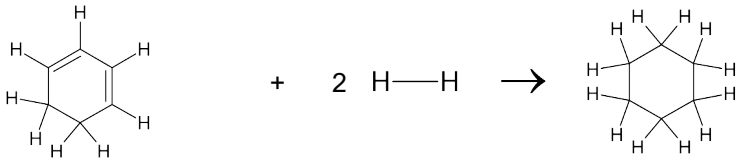
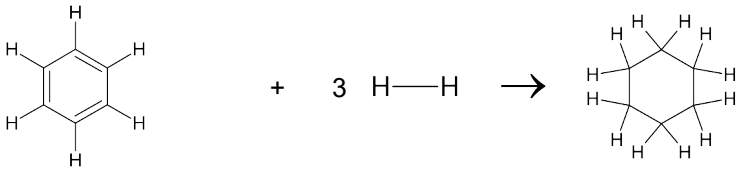
laborberufe.de

Die Reaktionsenthalpie (Reaktionswärme) beschreibt die Energiebilanz einer chemischen Reaktion.

- **Exotherme Reaktion ($\Delta_R H<0$ kJ/mol):** Das System gibt Energie in Form von Wärme an die Umgebung ab, dort kommt es zur Erwärmung.
- **Endotherme Reaktion ($\Delta_R H>0$ kJ/mol):** Das System nimmt Energie in Form von Wärme aus der Umgebung auf, in der Umgebung kann man den Wärmeabgang in das System hinein als Abkühlung spüren.

Die Reaktionsenthalpie von Hydrierungen wird auch als **Hydrierungswärme** bezeichnet. Sie lässt sich theoretisch aus den Enthalpien der einzelnen Teilschritte berechnen und anschließend mit experimentellen Messwerten vergleichen. Dies ermöglicht Rückschlüsse auf die Stabilität und Struktur der beteiligten Moleküle.

1. Berechnen Sie die Hydrierungswärme von zyklischen Alkenen mit Hilfe folgender mittlerer Bindungsenergien pro mol: π-Bindung (= über Einfachbindung hinausgehende Bindung, C=C): 265 kJ/mol; Bindung (H-H): 435mol kJ/mol; Bindung (C-H): 410 kJ/mol

Reaktionsgleichung	Hydrierungswärme pro mol
 Cyclohexen + H—H → Cyclohexan	berechnet: **gemessen: - 120 kJ**
 1,3-Cyclohexadien + 2 H—H → Cyclohexan	berechnet: **gemessen: -230 kJ**
 „1,3,5-Cyclohexatrien“ + 3 H—H → Cyclohexan	berechnet: **gemessen: - 206 kJ**

Fazit:

Beschreibung der Bindungsverhältnisse im Benzen (Benzol)

Benzen ist eben nicht *1,3,5-Cyclohexatrien!* Es besitzt auch nicht drei Doppelbindungen und auch nicht drei Einfachbindungen zwischen den C-Atomen. Statt Doppel- und Einfachbindungen besitzt es 1,5-fach-Bindungen. Jede der sechs C-C-Bindungen ist dabei völlig gleichwertig. Das zeigt sich auch daran, dass die Bindungsabstände der C-C-Bindungen alle exakt gleich lang sind. Gäbe es Doppelbindungen, wäre deren C-C-Bindungsabstand kürzer als die der C-C-Einfachbindungen. Im Gegensatz zu den Cycloalkanen und Cycloalkenen ist Benzen auch **absolut *planar*** gebaut.

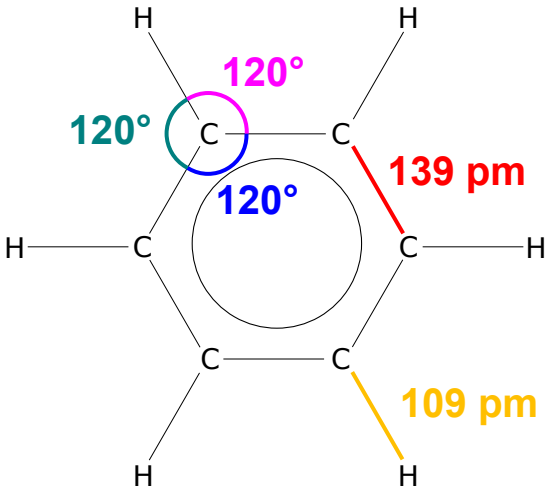


Abb. 1: Molekülgeometrie von Benzen (Q: wikicommons. A: Haltopub)

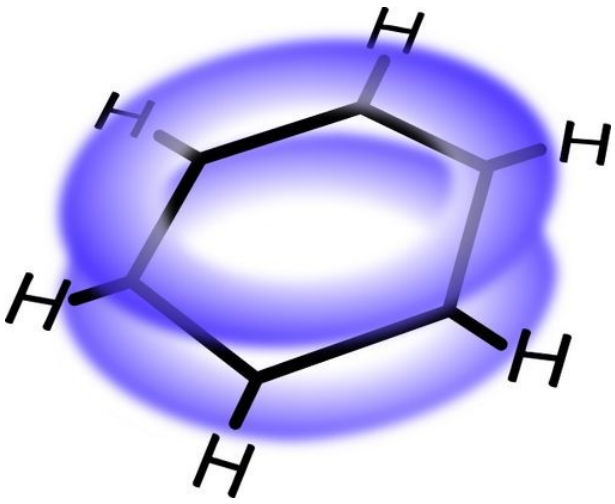


Abb. 2: delokalisierte π-Elektronen des Benzens (Q: wikicommons. A: Roland.chem)

Insgesamt gibt es im Ring der Kohlenstoffatome 9 Elektronenpaare, also 18 Elektronen.

- Sechs der bindenden Elektronenpaare halten die C-Atome als Grundgerüst zusammen. Die Elektronenpaare dieser Bindungen sind zwischen den gebundenen C-Atomen örtlich fixiert, also **lokalisiert**.
- Darüber hinaus gibt es drei weitere Elektronenpaare, deren Ladungsdichte völlig gleichmäßig über den Ring verteilt und im Ring frei beweglich ist. Im Benzen liegen also auch sechs **de-lokalisierte** π-Elektronen vor.

Man kann den wahren Bindungszustand nicht als Lewis-Formel darstellen, denn diese erlaubt nur die Darstellung von Einfach- und Doppelbindungen. Für 1,5-fach-Bindungen oder beispielsweise 1,333-fach-Bindungen sind keine Symbole vorgesehen. Um trotzdem die Struktur darstellen zu können, hat man sich auf ein Verfahren geeinigt: Man gibt bei solchen Molekülen mit delokalisierten Elektronen gleich alle mesomere Grenzformeln an. Sie drücken in ihrer Gesamtheit den tatsächlichen Bindungszustand am besten aus. Zur Entwicklung der mesomeren Grenzformeln muss man das Grundgerüst unverändert lassen. Die delokalisierten Elektronen kann man in der Darstellungen umklappen. **Dieses Phänomen, dass sich die Bindungsverhältnisse nicht durch eine einzige Strukturformel wiedergeben lassen, wird als Mesomerie bezeichnet**.

Die *Mesomerieenergie* ist die Energie, um die ein Aromat gegenüber einem hypothetischen Moleküle mit lokalisierten π-Bindungen stabiler ist. Dieser Betrag wurde für Benzen in Aufgabe 1 berechnet.

Die Mesomerieenergie im Benzen beträgt ..... kJ/mol.

2. Entwickeln Sie die mesomeren Grenzformeln von Benzen.