

Ароматические системы



Ароматичность. Правило Хюккеля.

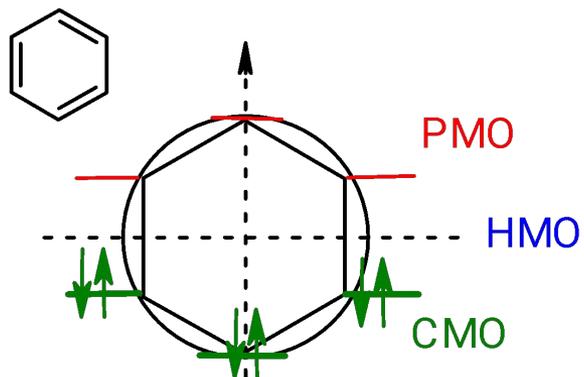
Ароматическими свойствами обладает соединение, если его строение удовлетворяет следующим требованиям:

- 1. соединение включает в себя плоскую моно- или полициклическую структуру,*
- 2. каждый цикл в этой структуре содержит замкнутую систему делокализованных π -электронов,*
- 3. число π -электронов в цикле должно равняться $(4n+2)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$ (целое число).*

Диаграмма (круг) Фроста

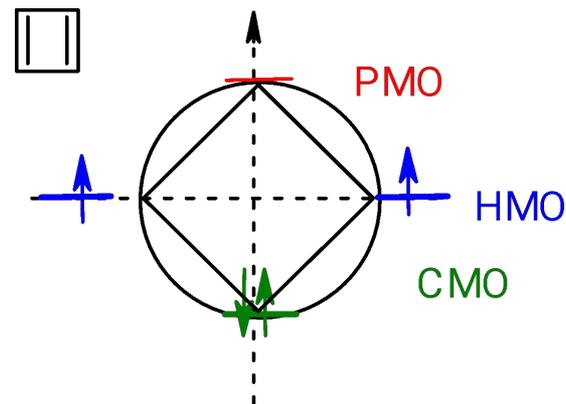
- 1. Молекула циклического сопряженного соединения изображается правильным многоугольником с числом вершин равным числу атомов в цикле.*
- 2. Многоугольник вписывают в круг таким образом, чтобы одна из вершин цикла касалась круга в самой низшей точке.*
- 3. Вертикальный диаметр круга – ось энергий; точки касания круга вершинами многоугольника – уровни энергии π -орбиталей циклического сопряженного полиена; горизонтальный диаметр – уровень энергии несвязывающих орбиталей.*

Бензол, $n=6$



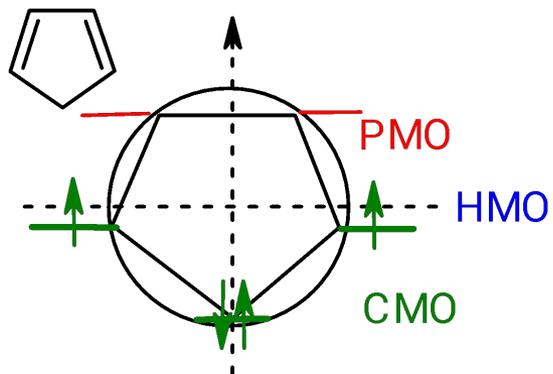
Ароматическое
соединение

Циклобутадиен, $n=4$



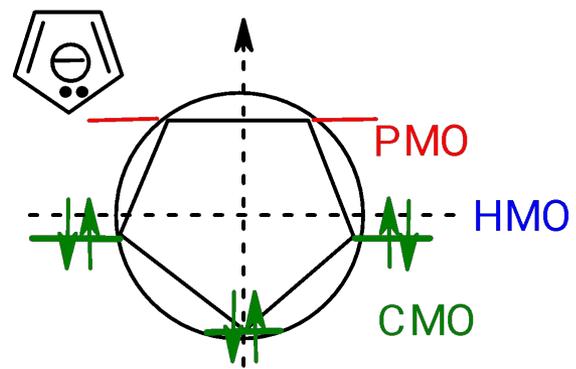
Бирадикал

Циклопентадиен, $n=4$



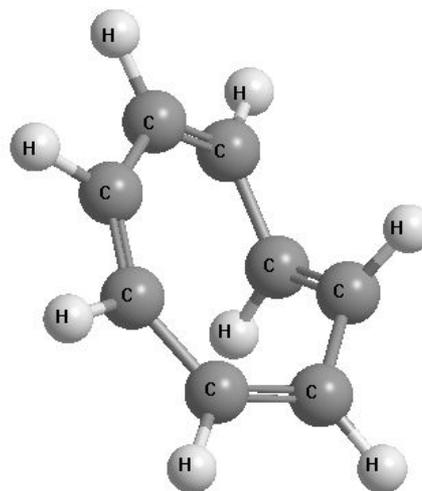
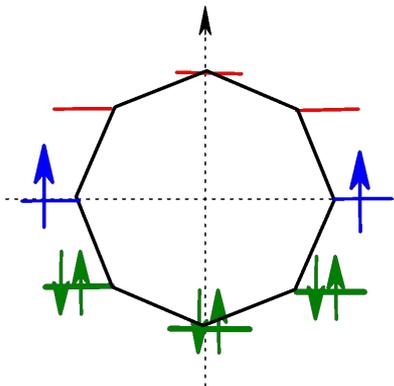
Бирадикал

Циклопентадиениланион, $n=6$

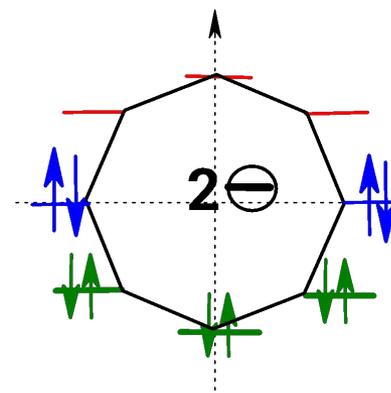
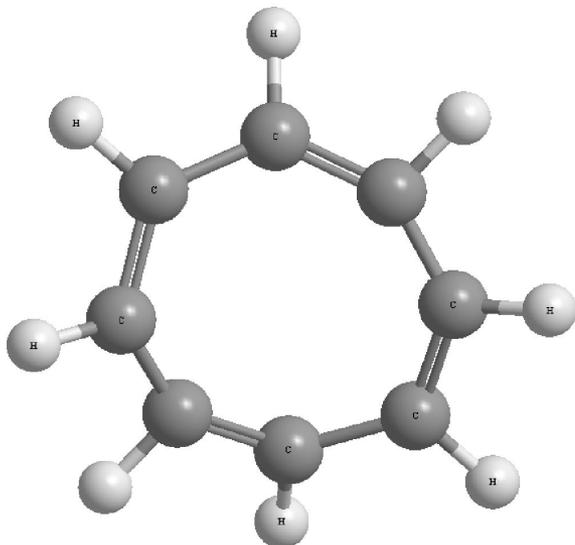


Ароматическое соединение

Плоский циклооктатетраен – бирадикал (не ароматическое соединение)



Плоский дианион циклооктатетраена – ароматическое соединение



«Ненасыщенная циклическая или полициклическая диатропная* молекула или ион может рассматриваться как ароматическая, если все атомы цикла входят в полностью сопряженную систему таким образом, что в основном состоянии все р-электроны располагаются только на связывающих молекулярных орбиталях аннулярной (замкнутой) оболочки».

* Ароматические соединения характеризуются наличием диамагнитного кольцевого тока, индуцируемого внешним магнитным полем с напряженностью H_0 .
Соединения, способные удерживать диамагнитный кольцевой ток, называются диатропными.

* Диатропные системы в химии – циклические или полициклические молекулы, в которых возможно возникновение электронных кольцевых токов