

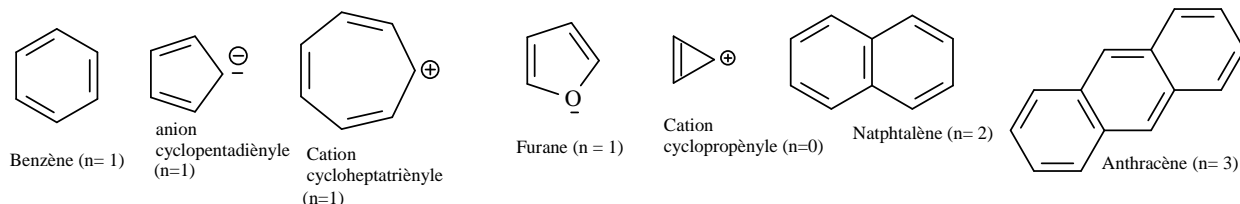
Aromaticité

1) Règle de Hückel.

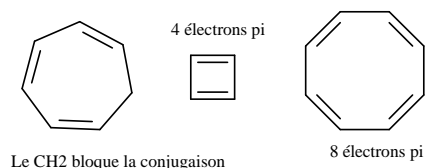
Un composé cyclique, entièrement conjugué et dont la conjugaison porte sur $4n + 2$ électrons π est qualifié d'aromatique. $n = 0, 1, 2 \dots$

2) Exemples.

Ces composés sont aromatiques :



Ceux là ne le sont pas :



3) Propriétés typiques des composés aromatiques

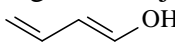
Ils présentent une grande stabilité thermodynamique.

On définit l'énergie de conjugaison (E_c ou E_r , r comme résonance) comme la différence entre l'énergie des électrons π des fragments non conjugués et celle du système π global.

Par exemple, le benzène est constitué de trois fragments éthène (énergie des deux électrons π d'un éthène : $2\alpha + 2\beta$) et l'énergie de ses 6 électrons π est : $6\alpha + 8\beta$.

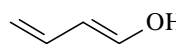
Ainsi son énergie de conjugaison est de $(6\alpha + 8\beta) - 3 * (2\alpha + 2\beta) = 2\beta$.

Pour le furane, il est constitué de deux éthène et d'un doublet non liant de O (énergie $2 * (\alpha + 2\beta)$) et l'énergie de son système π est de $6\alpha + 9.13\beta$. $E_c = 1.13\beta$.

Par comparaison l'énergie de conjugaison de l'hexa-1,3,5-triène est de 0.99β (pour comparaison avec le benzène) et celle de  est de 0.7β (pour comparaison avec le furane).

Ils présentent également une très grande stabilité cinétique, ceci se traduit par un grand écart entre HO et BV et par une HO basse et une BV haute.

Exemple : benzène HO $\alpha + \beta$ et BV : $\alpha - \beta$ à comparer à l'hexa-1,3,5-triène : HO $\alpha + 0.44\beta$ et BV : $\alpha - 0.44\beta$;

Exemple : furane HO $\alpha + 0.62\beta$ et BV : $\alpha - 0.95\beta$ à comparer à  : HO $\alpha + 0.48\beta$ et BV : $\alpha - 0.71\beta$;

En conséquence, ils seront moins réactifs que les systèmes conjugués homologues et réagiront en cherchant à préserver le caractère aromatique. Ainsi un électrophile provoque une addition sur un système π conjugué mais entraîne une substitution sur un système aromatique (Substitution Aromatique Electrophile).

Les protons aromatiques sortent vers 7 ppm en RMN