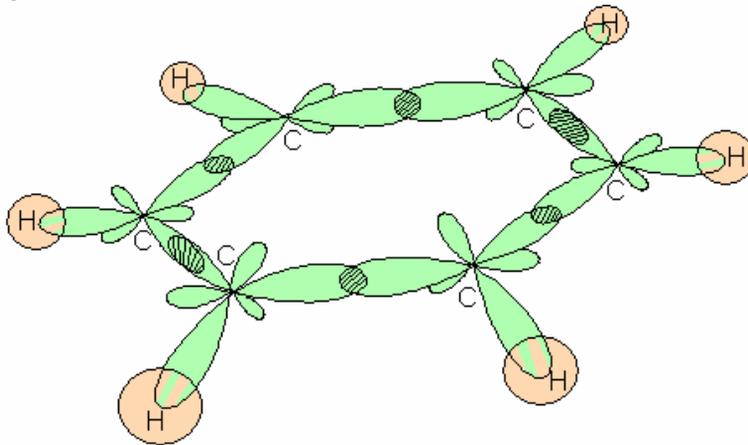


Bindungsverhältnisse im Benzolmolekül

Zur Beschreibung der Bindungen im Benzolmolekül geht man im Orbitalmodell wegen der planaren Sechseckstruktur mit Bindungswinkeln von 120° von sp^2 -hybridisierten Kohlenstoffatomen aus. Je zwei der insgesamt drei sp^2 -Hybridorbitale eines Kohlenstoffatoms überlappen mit sp^2 -Hybridorbitalen der beiden benachbarten Kohlenstoffatome. Mit dem dritten sp^2 -Hybridorbital wird das Wasserstoffatom gebunden. Somit bilden die sechs Kohlen- und Wasserstoffatome das hexagonale σ -Bindungsgerüst des Benzolmoleküls.



Jedes Kohlenstoffatom hat noch ein viertes Valenzelektron. Es befindet sich in dem nicht an der Hybridisierung beteiligten p_z -Orbital. Die p_z -Orbitale stehen senkrecht zur Molekülebene. Ihre paarweise Kombination würde zu drei alternierenden Doppelbindungen führen. Unter der Annahme lokalisierter Elektronenpaarbindungen ergäben sich die beiden bereits von Kekulé vorgeschlagenen Formeln, die aber im deutlichen Gegensatz zu den experimentellen Befunden stehen.

Mesomeriemodell:

Die Bindungsverhältnisse im Benzolmolekül mit gleichartigen C-C-Bindungen lassen sich gut durch das Mesomeriemodell beschreiben. Man stellt sich vor, dass alle sechs p_z -Orbitale überlappen.

Es bildet sich ein π -Elektronensystem aus, das sich ringförmig oberhalb und unterhalb der Molekülebene verteilt. Man sagt, die sechs π -Elektronen sind über den gesamten Ring delokalisiert, und spricht deshalb auch von einem delokalisierten π -Elektronensystem.

