

Calcolo dell'energia di risonanza e aromaticità

Come è noto, i doppi legami C=C possono essere ridotti per *idrogenazione catalitica*, ottenendone prodotti saturi. Il processo di idrogenazione è **esotermico** (vale a dire sviluppa calore) perché, dai materiali di partenza insaturi, si ottengono specie *più stabili*, solitamente alcani.

Per esempio, idrogenando il *cicloottene* si sviluppano 22,9 kcal/mol di energia (calore, ΔH_h). Analogamente, idrogenando il *cicloottatetraene*, si liberano 98,0 kcal/mol, una quantità di energia che è, come prevedibile, approssimativamente quattro volte quella corrispondente a *un solo doppio legame* come quello del cicloottene. D'altro canto il calore di idrogenazione del *cicloesene* è di 28,7 kcal/mol, mentre idroge-

nando il *benzene* si sviluppano soltanto 50,0 kcal/mol, una quantità di calore **molto minore** delle 86 kcal/mol che si potrebbero prevedere.

La *differenza* fra la quantità di energia che si prevedeva di ottenere idrogenando il benzene (86 kcal/mol) e quella che si misura sperimentalmente (50 kcal/mol) è pari a ben 36 kcal/mol. Essa costituisce una misura di quanto il benzene sarebbe **più stabile** del previsto ove contenesse *tre doppi legami localizzati*. Il valore di circa 36 kcal/mol prende il nome di **energia di risonanza** (o di delocalizzazione) **del benzene** e ci fornisce una valutazione quantitativa approssimativa dell'**aromaticità** di questa molecola.

