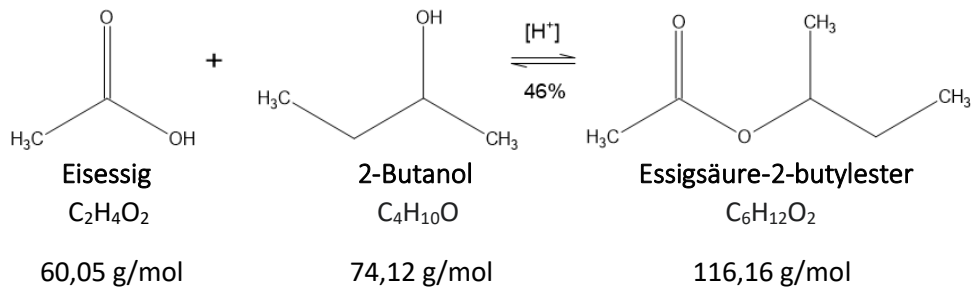


Carbonyl11: Synthese von Essigsäure-2-butylester

1. Reaktionsgleichung



2. Versuchsapparaturen:

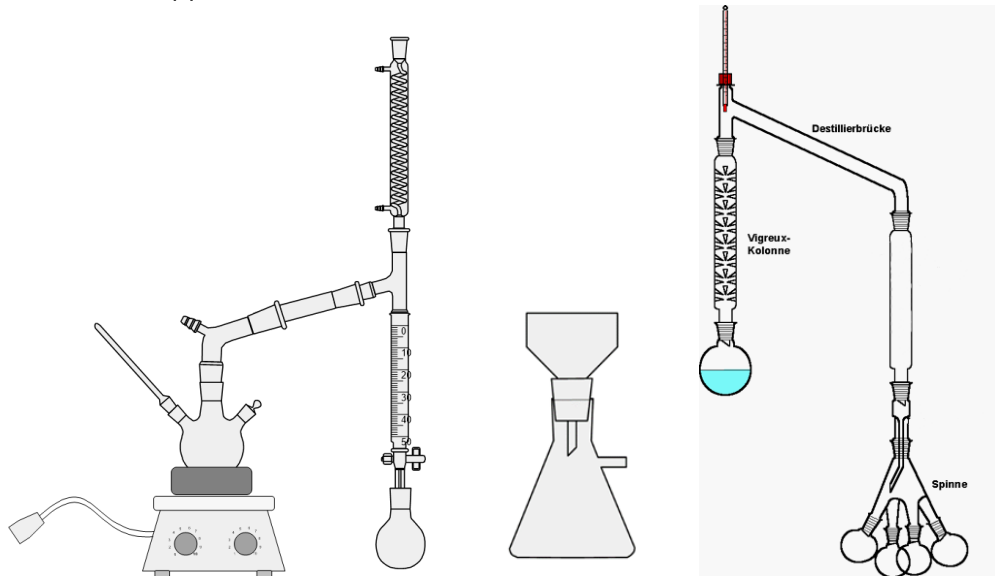


Abb. 1: Ölbad mit Rührfisch, Kolben, Thermometer, Rückflusskühler, sowie Burette

Abb. 2: Saugflasche mit Büchnertrichter und Filterpapier

Abb. 3: Destillationsapparatur ⁽¹⁾

3. Versuchsdurchführung ⁽²⁾:

Eine Mischung aus 17,2 ml Eisessig (300 mmol), 23 ml 2-Butanol (250 mmol), 0,5 g p-Toluolsulfonsäure und 80 ml Cyclohexan wurde unter Rückfluss und mit einem Wasserabscheider erhitzt und siedend gelassen, bis die Reaktion vollständig abgelaufen war. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur und Waschen mit jeweils 30 ml Wasser, gesättigter NaHCO₃-Lösung und NaCl-Lösung wurde die organische Phase mit Na₂SO₄ getrocknet und die wässrige Phase fraktioniert destilliert.

Die Brechungsindizes der einzelnen Fraktionen und die Ausbeute wurden bestimmt.

4. Ergebnisse und Analytik:

Ausbeute: Produkt: 13,4 g (46 % der theoretischen Ausbeute)

Brechungsindex: Produkt: 1,390
Literaturwert: 1,389 ⁽³⁾

IR-Banden: 2974 cm⁻¹ C-H-Valenzschwingungen
1732 cm⁻¹ C=O-Valenzschwingungen
1371 cm⁻¹ C-H-Deformationsschwingungen
1238 cm⁻¹ Ester-Valenzschwingungen

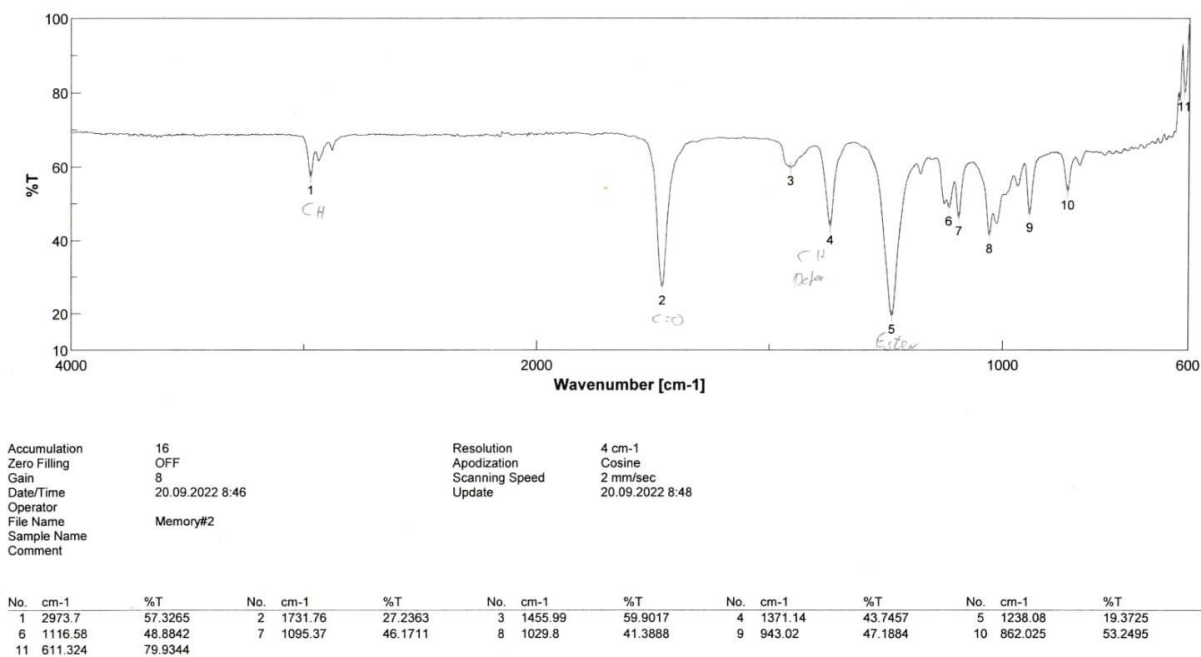


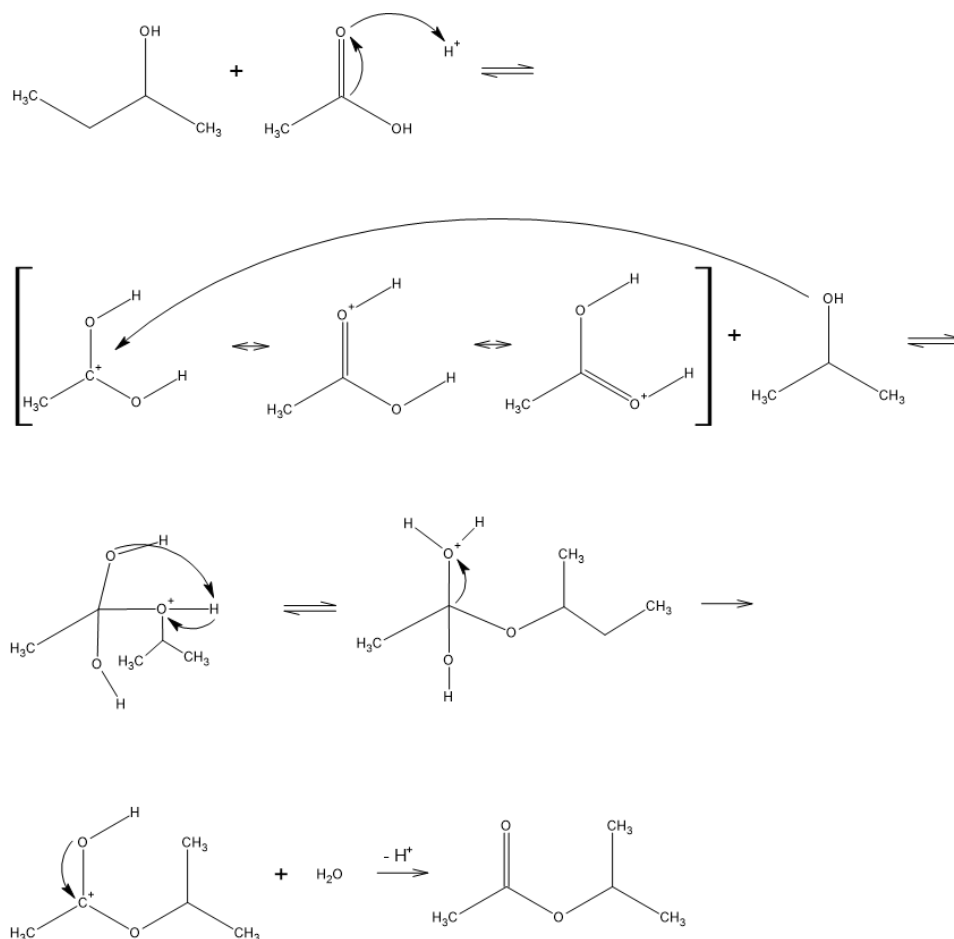
Abb. 4: IR-Spektrum des hergestellten Essigsäure-2-butylester

5. Reaktionsmechanismus

Bei der folgenden Reaktion handelt es sich um eine Veresterung.

Das H⁺ greift elektrophil an der Doppelbindung der Carboxylgruppe des Eisessigs an. Dadurch entsteht ein Carbenium-Ion (mesomere Grenzstruktur). 2-Butanol greift nun nucleophil mit seiner OH-Gruppe

an dem positiv geladenen Kohlenstoff des Carbenium-Ions an, dadurch verschiebt sich die positive Ladung auf den Sauerstoff der ehemaligen Hydroxygruppe, es entsteht ein Oxonium-Ion. Durch intramolekulare Wechselwirkungen kommt es zur Abspaltung eines Wassermoleküls. Zum Schluss wird das Molekül deprotoniert und ein Ester entsteht.



6. Literatur

- (1) Thomas Seilnacht: Destillation <https://www.seilnacht.com/versuche/destill.html>
- (2) Versuchsanleitung „Synthese von Essigsäure-2-butylester“. Goethe-Universität Frankfurt am Main
- (3) David R. Lide (Hrsg.): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 90. Auflage. (Internet-Version: 2010), CRC Press / Taylor and Francis, Boca Raton FL, *Physical Constants of Organic Compounds*, S. 3-76