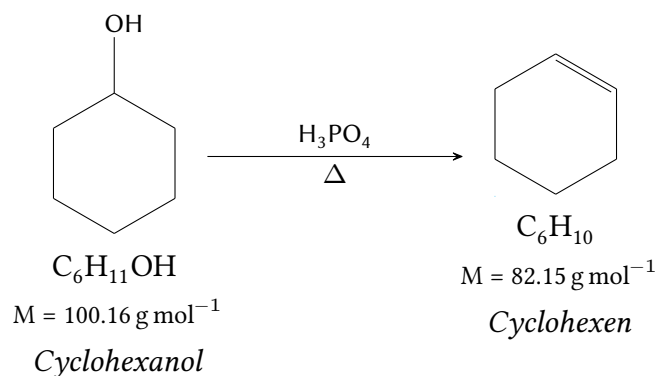


1. Reaktionstyp: E_1 , Eliminierung erster Ordnung



2. Berechnung des Ansatzes:

Es sollten 10.000 g (121.7 mmol) Cyclohexen hergestellt werden. Die Umrechnung des Literaturansatzes^[1] ergab folgenden Ansatz:

Cyclohexanol	1.00 eq	152.2 mmol	15.24 g	16.0 ml
Phosphorsäure (85%)	0.50 eq	76.74 mmol	7.52 g	5.3 ml

3. Durchführung^[1]

In einem 100 ml-Dreihalskolben, der an eine Destillationsapparatur angeschlossen war, wurden 16.0 ml (152.2 mmol) Cyclohexanol mit 5.3 ml (76.74 mmol) Phosphorsäure (85% in Wasser) vorgelegt. Die Vorlage wurde mittels eines Eisbades auf 0 °C gekühlt. Das Reaktionsgemisch wurde destillativ aufgereinigt. Das Rohprodukt wurde bei einer Kopftemperatur von 83 °C erhalten. Da im Rohprodukt Wasser vorhanden war, wurde dieses zunächst im Scheidetrichter entfernt. Die organische Phase wurde über Magnesiumsulfat getrocknet. Der Feststoff wurde abfiltriert. Das Produkt wurde als klare farblose Flüssigkeit erhalten.

4. Ausbeute

$$\begin{aligned}
 12.500 \text{ g (152.16 mmol)} &= 100\% \\
 8.397 \text{ g (102.21 mmol)} &= 67\% \text{ (Lit.}^{[1]} : 80\%)
 \end{aligned}$$

5. Physikalische Daten des Produktes

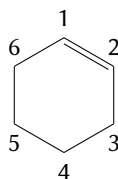
Cyclohexen

Siedepunkt	Brechungsindex
Lit. ^[1] : 83 °C	Lit.: ^[1] $n_D^{20} = 1.4465$
Exp.: 83 °C	Exp.: $n_D^{21} = 1.4480$
	Umr.: $n_D^{20} = 1.4460$

6. Spektrenauswertung

IR-Spektrum (NaCl, flüssig): $\tilde{\nu} = 3022$ (=C-H Valenz-Schwingung, -C=C-), 2925, 2858, 2838 (-C-H Valenz-Schwingung, -CH₂-), 1652 (-C=C Valenz-Schwingung, -C=C-), 1437 (-C-H Deformation-Schwingung, -CH₂-) cm⁻¹.

300 MHz: $\delta = 1.57\text{--}1.65$ (m, 4, -4, -5), $1.85\text{--}2.01$ (m, 4, -3, -6), $5.60\text{--}5.80$ (m, 2, -1, -2) ppm.



7. Mechanismus^[2]

Die Reaktion von Cyclohexanol (**1**) mit Phosphorsäure verläuft in zwei Schritten. In dem ersten Schritt wird die Hydroxylgruppe protoniert. Dabei entsteht das Oxonium-Ion **2**. Danach wird das H₂O-Molekül abgespalten und so wird ein Carbeniumion **3** erzeugt. Es wird im zweiten Schritt durch die Abspaltung eines Protons in β -Position zur Ladung entsteht eine C=C-Doppelbindung **4**.

8. Abfallentsorgung

Die wässrige Phase wurde nach einer pH-Wertbestimmung im Behälter für saure Abfälle entsorgt. Das Trocknungsmittel und das Filterpapier wurde in den Feststoffbehälter gegeben.

9. Literatur

- [1] H. Becker, W. Berger, G. Domschke, E. Fanghänel, J. Faust, M. Fischer, F. Gentz, K. Gewalt, R. Gluch, R. Mayer, K. Müller, D. Pavel, H. Schmidt, K. Schollberg, K. Schwetlick, E. Seiler, G. Zeppenfeld, R. Beckert, G. Domschke, W. Habicher, P. Metz, *Organikum*, 21. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim **2009**, S. 275.
- [2] A. Gossauer, *Einführung in der Organische Chemie*, 1. Aufl., Wiley-VCH, Zurich **2006**, S. 203.