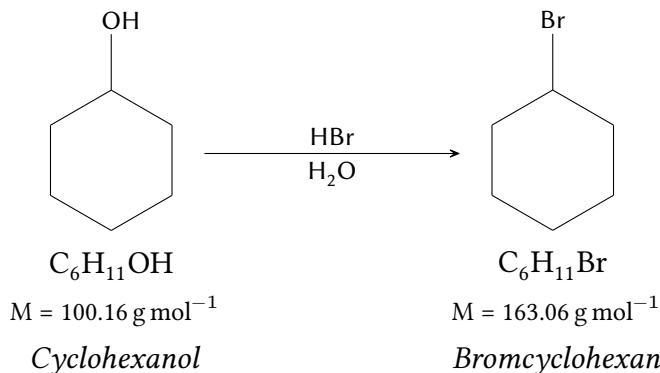


## 1. Reaktionstyp: Nucleophile Substitution $S_N1$



## 2. Berechnung des Ansatzes:

Es sollten 10.000 g (61.33 mmol) Bromcyclohexan hergestellt werden. Die Umrechnung des Literaturansatzes<sup>[1]</sup> ergab folgenden Ansatz:

Cyclohexanol	1.00 eq	94.35 mmol	9.450 g	10.0 ml
Bromwasserstoff	1.50 eq	141.53 mmol	11.450 g	16.0 ml

## 3. Durchführung<sup>[1]</sup>

In einem 100 ml-Dreihalskolben mit Rückflusskühler wurden 9.968 g (94.35 mmol) Cyclohexanol und 16 ml (141.53 mmol) Bromwasserstoff (48%) vorgelegt. Der Kolben wurde im Ölbad erhitzt und wurde unter Rückfluss fünf Stunden gerührt. Das Produkt wurde anschließend mit einer Wasserdampfdestillation aus dem Reaktionsgemisch rausgeschleppt. Das Produkt/Wasser Destillat wurde mit konz. 10 ml Schwefelsäure versetzt und die Phasen wurden getrennt. Die organische Phase wurde im Anschluss mit Wasser (2 x 75 ml) und mit 40 %igem Methanol (2 x 75 ml) gewaschen. Die organische Phase wurde mit Magnesiumsulfat getrocknet, abfiltriert und im Anschluss nochmal destilliert. Das Produkt wurde als leicht grüne Flüssigkeit erhalten.

## 4. Ausbeute

$$\begin{aligned} 15.384 \text{ g (94.34 mmol)} &= 100 \% \\ 5.500 \text{ g (33.72 mmol)} &= 36 \% (\text{Lit.}^{[1]} : 65 \%) \end{aligned}$$

## 5. Physikalische Daten des Produktes

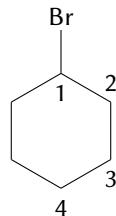
### Bromcyclohexan

Siedepunkt	Brechungsindex
Lit. <sup>[1]</sup> : 161 °C	Lit. <sup>[1]</sup> : $n_D^{20} = 1.4950$
Exp.: 161 °C	Exp.: $n_D^{27} = 1.4930$
	Umr.: $n_D^{20} = 1.4951$

## 6. Spektrenauswertung

**IR-Spektrum** (NaCl, flüssig):  $\tilde{\nu} = 2935$  (C-H Valenz-Schwingung, -CH<sub>2</sub>-) 686, (-C-Br Valenz-Schwingung, Brom) cm<sup>-1</sup>.

300 MHz:  $\delta = 1.27\text{--}1.35$  (m, 2, -4), 1.52–1.71 (m, 2, -3), 1.72–1.78 (m, 4, -2, -3), 1.81–2.10 (m, 2, -2), 4.09–4.13 (m, 1, -1) ppm.



## 7. Mechanismus<sup>[2]</sup>

Die Reaktion von Cyclohexanol (**1**) mit Bromwasserstoff verläuft in drei Schritten. Zunächst wird das Cyclohexanol (**1**) protoniert. Danach wird das H<sub>2</sub>O-Molekül abgespalten. Die Bildung des Carbenium-Ions **3** aus dem protonierten Edukt ist der geschwindigkeitbestimmenden Schritt der Reaktion. Das Cyclohexyl-Kation **3** ist eine kurzlebige reaktive Zwischenstufe der Reaktion. Das Carbenium-Ion reagiert sofort mit dem Anion der Bromwasserstoff unter Bildung von Bromcyclohexan (**4**).

## 8. Abfallentsorgung

Die nach dem Waschen mit konzentrierter Schwefelsäure verbleibenden wässrigen Phasen wurden im Behälter für saure wässrige Lösungsmittelabfälle entsorgt. Die or-

ganische Waschlösungen wurden im Behälter für halogenfreie Lösungsmittelabfälle entsorgt. Das Trocknungsmittel wurde in den Feststoffbehälter gegeben. Die Bromidabfälle, die an dem Kolben anhafteten, wurden im Behälter für halogenhaltige Lösungsmittelabfälle entsorgt.

## 9. Literatur

- [1] H. Becker, W. Berger, G. Domschke, E. Fanghänel, J. Faust, M. Fischer, F. Gentz, K. Gewald, 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. 229.
- [2] Gossauer, *Einführung in der Organische Chemie*, 1. Aufl., Wiley-VCH, Zurich **2006**, S. 197-198.