

4. Versuchsauswertung:

Ausbeute: 12,5 g = 100%
5,7 g = 46 % , Literaturⁱ – Ausbeute: 64%

5. Physikalische Daten des Produkts:

5 – Oxo – 5 – phenyl – pentanitril

| | Fp. [°C] |
|-------------------------|----------|
| Literatur ⁱⁱ | |
| exp. | |

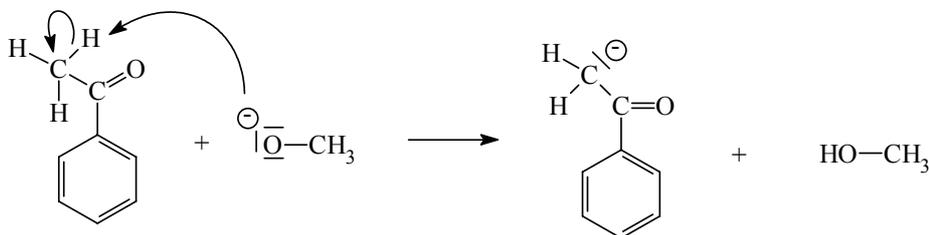
6. IR – Spektrenauswertung:

| Wichtige Banden in [cm ⁻¹] | | |
|--|-----------|----------------------|
| Literatur ⁱ - IR | exp. | |
| 2250 | 2220 | -CN – Valenz |
| 1665 | 1640 | - C=O – Valenz |
| 1600 | 1600 | - C = C - Valenz |
| 750 – 660 | 760 - 655 | =C – H – Deformation |

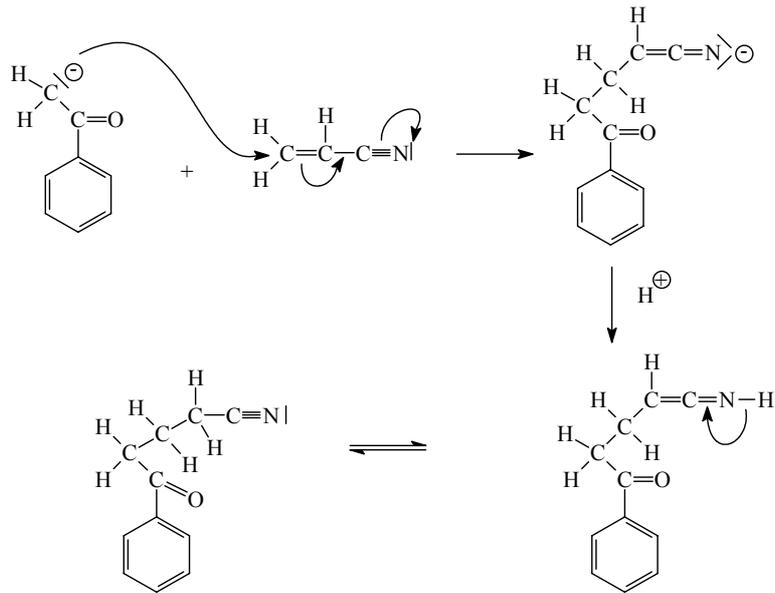
7. Mechanismus:

Der Reaktionstyp der Reaktion ist die Michael – Addition, was eine 1,4 – Addition darstellt.

Das KOH deprotoniert den Methanol und es entsteht das Alkoholat - Anion. Dieses greift nun an dem C – H – aciden Proton in α - Stellung an. Es entsteht das instabile Carbanion.



Das Carbanion greift mit seiner negativen Ladung am β - C – Atom des α,β - ungesättigten Acrylnitrils an. Die Doppelbindung verlagert sich und eine der drei Bindungen der Nitril – Gruppe verlagert sich als freies Elektronenpaar zum Stickstoff – Atom, das nun eine negative Ladung aufweist. Durch Protolyse wird an das negativ geladene Stickstoff – Atom ein Proton angefügt. Es entsteht ein zum Enolat analoges Teilchen, das einer Tautomerie unterliegt. Durch Umlagerung des Protons entsteht das gewünschte Produkt.



8. Abfallentsorgung:

| | |
|-----------------------|----------------|
| Mutterlauge | |
| Petrolether | hal. freie KW |
| Glykolmonomethylether | hal. -freie KW |

ⁱ Hünig – Märkl – Sauer, Integriertes Organisches Praktikum, Verlag Chemie, Weinheim – New York, 1979, S. 418f