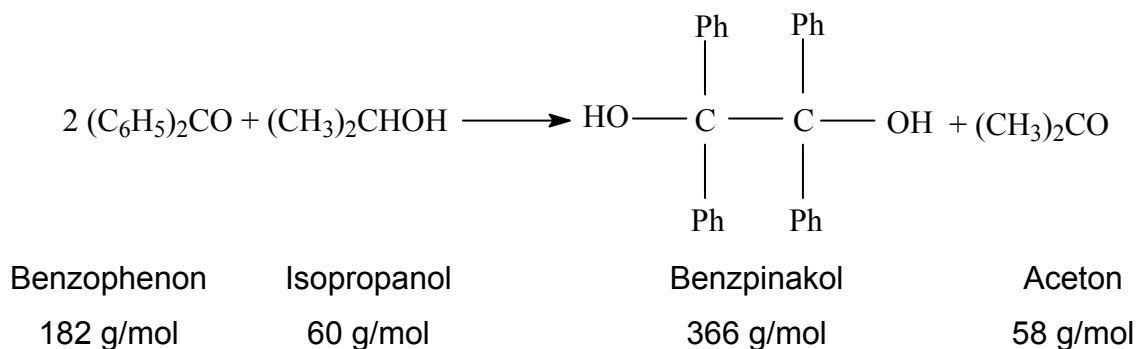


Darstellung von Benzpinakol (1)

Präparat 9

1. Reaktionstyp: Photoreduktion von Ketonen

2. Reaktionsgleichung:



R-und S-Sätze der im Versuch verwendeten und entstehenden Chemikalien:

1. Benzophenon

- N (umweltgefährlich)
- R 50/53

2. Isopropanol

- F (leichtentzündlich), Xi (reizend)
- R 11-36-67
- S 7-16-24/25-26

3. Durchführung der Reaktion:

3.1. Berechnung des Ansatzes

Der Literaturansatz aus dem Vogel, der bei einer Ausbeute von 81% für 8,1 g Benzpinakol gut ist, sollte übernommen werden.

3.2. Durchführung

Unter geringfügigem Erwärmen wurden 10 g Benzophenon in 50 ml Isopropanol in einem 100 ml Rundkolben gelöst; dazu wurde ein Tropfen gefrorene Essigsäure gegeben. Nachdem der Kolben mit weiterem Isopropanol bis einen halben Zentimeter unter den Hals gefüllt worden ist, wurde der Kolben verschlossen, der Stopfen mit

Alu-Folie bedeckt und der Kolben auf dem Dach im direkten Sonnenlicht platziert. 14 Tage wurde er diesem mehr oder weniger ausgesetzt.

Ausbeute:	10 g	=	100%
	8,14 g	=	81,4% (Literatur: 81%)

4. Physikalische Daten des Produktes

Benzpinakol	Fp. in °C	
	Literaturwert:	185
	exp. erm. Wert	184

5. Spektrenauswertung

Im Folgenden werden die wichtigsten Banden des Spektrums genannt:

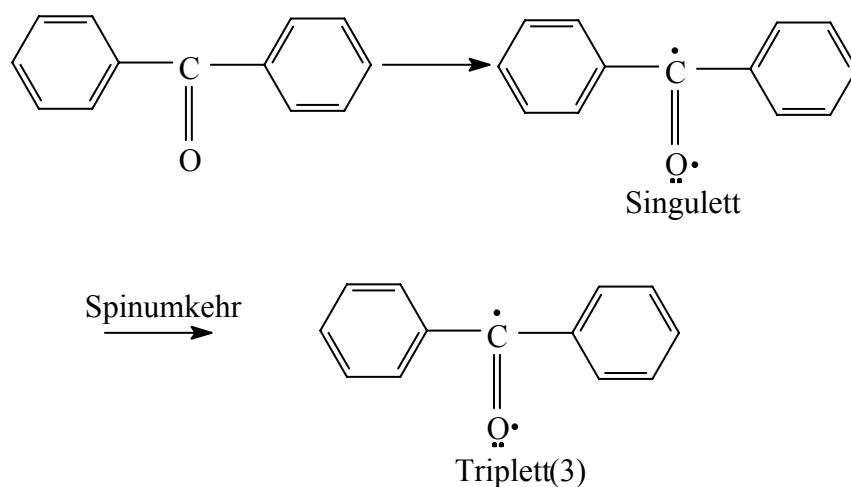
Nr.	Wellenzahl in cm^{-1}	Zuordnung	Schwingungsart
1	3520	-O-H	O-H-Valenz (unassoziiert)
2	3060	Ar-H	C-H-Valenz
3	1580	Ar-H	-C=C-Valenzschwingung
4	1495	Ar-H	Ringschwingung
5	1440	Ar-H	Ringschwingung
6	1030	-C-O	-C-O-Valenzschwingung
7	745	5 benachbarte aromatische H-Atome	C-H-Deformationsschwingung
8	700	5 benachbarte aromatische H-Atome	C-H-Deformationsschwingung

6. Mechanismus

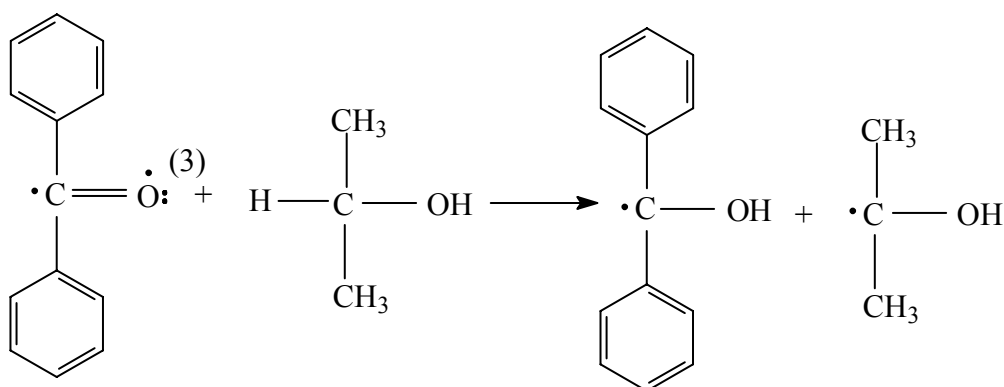
Bei der hier vorliegenden Reaktion handelt es sich um eine Photoreduktion von Ketonen. Der Mechanismus lautet wie folgt:

Der reaktionseinleitende Schritt ist die Anregung des Ketons (hier: Benzophenon) in den Triplett-Zustand, in dem das Molekül zwei Elektronen mit parallelem Spin besitzt. Von diesem Zustand kann das Molekül wieder in den Grundzustand zurückkehren,

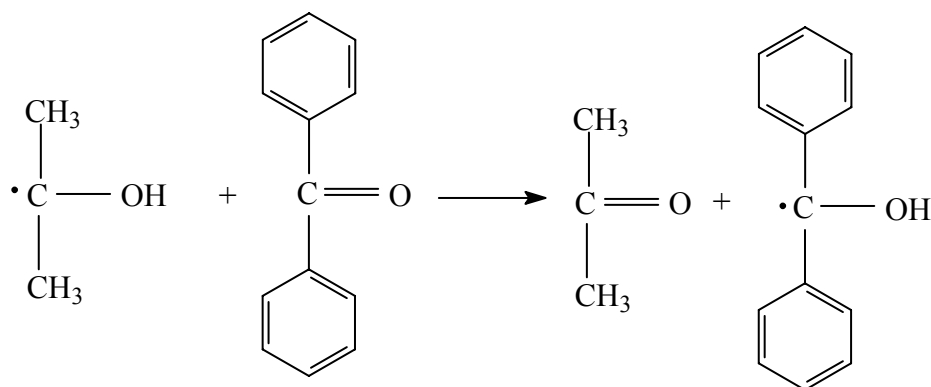
wobei wieder eine Spininversion auftritt; geschieht dies beim Zusammenstoß mit einem anderem Molekül (hier: Isopropanol), kann eine chemische Reaktion ausgelöst werden.



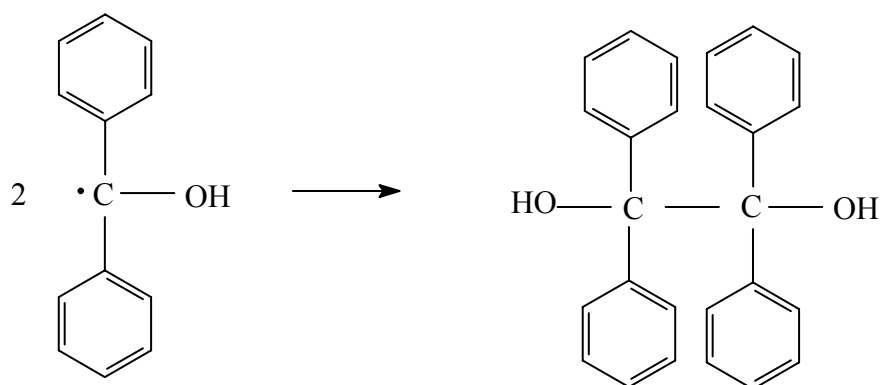
Bei genügend reaktionsfähigen Substraten können in dieser Art angeregte Ketone H-Atome abspalten und dadurch Radikale bilden, in diesem speziellen Fall von Isopropanol unter Bildung der beiden folgenden Radikale:



Das Hydroxypropanradikal, das nicht durch Delokalisierung stabilisiert wird, reagiert mit einem weiteren Molekül Benzophenon:



Im abschließenden Schritt des Mechanismus dimerisieren die beiden Diphenylhydroxymethan-Radikale zu Benzpinakol:



7. Abfallentsorgung

- Das abgenutzte Lösungsmittelgemisch ist im Abfallbehälter „Lösungsmittel, halogenfrei“ entsorgt worden.

8. Literatur

- (1) Arthur Vogel, Textbook of practical organic chemistry (4. ed.rev.), Longman 1981, New York, S. 909
- (2) Sadtler Standard Spektra, Sadtler Research Laboratories, Infrared Grating Spectrum 18176K, Philadelphia 1970