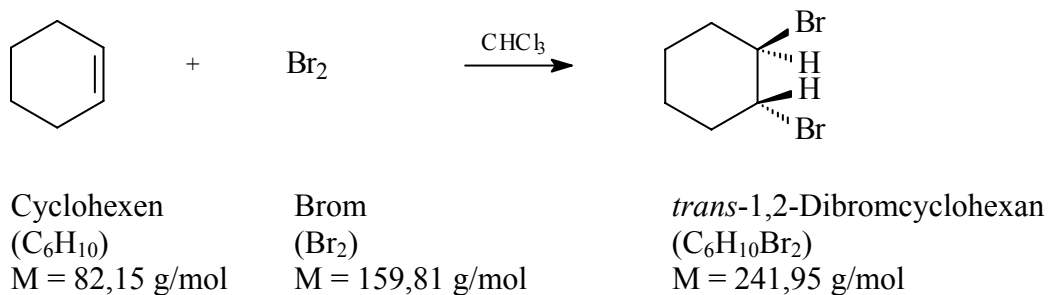


Präparat 7: Darstellung von *trans*-1,2-Dibromcyclohexan



1. Ansatz

Es sollen 10 g Produkt hergestellt werden.
Literaturausbeute [1]: 95 %

$$\begin{array}{lcl} 10 \text{ g} & = & 95 \% \\ x & = & 100 \% \rightarrow x = 10,5 \text{ g} \end{array}$$

$$10,5 \text{ g Produkt entsprechen } n = \frac{m}{M} = \frac{10,5}{241,59} \text{ mol} = 0,0435 \text{ mol}.$$

	C ₆ H ₁₀	CHCl ₃	Br ₂	CHCl ₃	Produkt
Ansatz	0,0435 mol	2,5 x 0,0435 = 0,109 mol	0,0435 – 10 % = 0,0392 mol	2xV [Br ₂]	0,0435 mol
Eingesetzte Masse [g]	3,57 g	13,01 g	6,26 g	---	
ρ [g/ml]	0,811 g/ml	1,498 g/ml	3,119 g/ml	---	
Eingesetztes Volumen [ml]	4,41 ml	8,69 ml	2,0 ml	2 x V[Br ₂] = 4,0 ml	

2. Durchführung:

In einem Dreihalskolben mit Magnetrührer, Tropftrichter und Innenthermometer wurden 4,41 ml Cyclohexen in ca. 8 ml Chloroform gelöst und diese Lösung auf 0 °C abgekühlt. Es wurden 2,0 ml Brom in ca. 4 ml Chloroform gelöst und unter Rühren so zugetropft, dass die Temperatur bei ca. 2 °C gehalten wurde und keine größere Konzentration unverbrauchten Broms im Reaktionskolben auftrat.

Anschließend wurde das Lösungsmittel am Rotationsverdampfers abgezogen und der bernsteinfarbene Rückstand durch fraktionierte Destillation im Wasserstrahlvakuum gereinigt. Bei 97 °C gingen 9,1 g einer klaren, farblosen Flüssigkeit über.

3. Ausbeute:

9,1 g *trans*-1,2-Dibromcyclohexan (87 %); Literatúrausbeute [1]: 95 %

4. Charakterisierung:

a) Siedepunktsbestimmung:

Literaturwert [2]: 145 °C (bei 133 mbar). Mithilfe entsprechender Graphiken auf
Wasserstrahlvakuum (15Torr)übertragen: ca. 95 °C

Gemessener Wert: 97 °C (im Wasserstrahlvakuum)

b) Brechungsindex:

Literaturwert [1]: $n_D^{20} = 1,5540$

Gemessener Wert: $n_D^{22} = 1,5531$, umgerechnet auf 20 °C: $n_D^{20} = 1,5541$

c) IR- Spektrum:

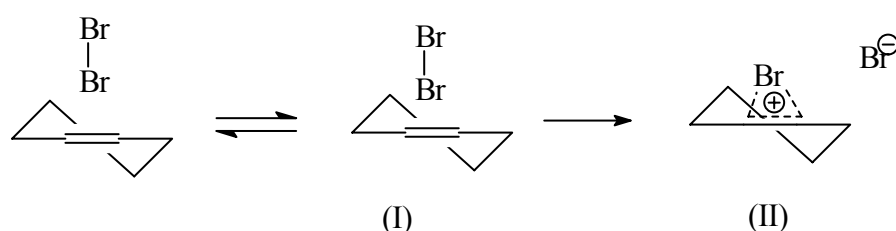
Flüssig-IR auf NaCl-Platten

Wellenzahl [cm^{-1}]	Schwingungstyp	Verbindungen
2920, 2820	-CH ₂ -Valenz	gesättigte Kohlenwasserstoffe
1430	-CH ₂ -Deformation	gesättigte Kohlenwasserstoffe
690	-C-Hal-Valenz	Halogenverbindungen

5. Mechanismus:

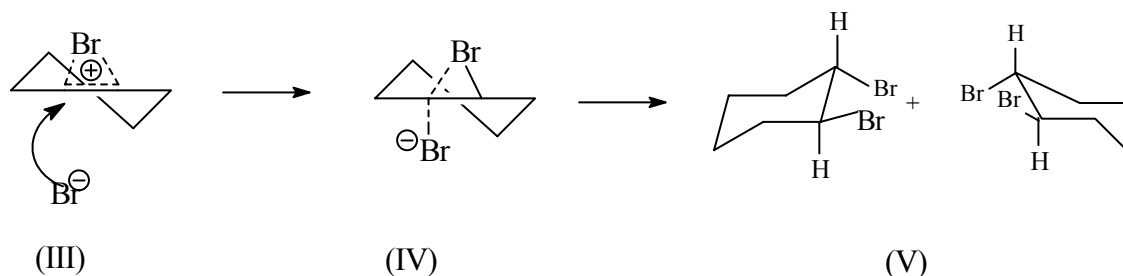
Bei der Bromierung von Cyclohexen handelt es sich mechanistisch um eine *elektrophile trans-Addition*:

In einem ersten Schritt wird das Brommolekül bei Annäherung an die π -Elektronenwolke der Doppelbindung des in Halbsesselkonformation vorliegenden Cyclohexens polarisiert (I). Das Brom tritt zunächst mit den π -Elektronen in Wechselwirkung; dabei greift das positiv polarisierte Br-Atom elektrophil an der Doppelbindung des Cyclohexens an und als Zwischenstufe bildet sich eine starre Struktur – das cyclische Bromonium-Ion (II). Im Bromonium-Ion überbrückt das Br-Atom die ursprüngliche Doppelbindung so, dass ein dreigliedriger Ring (π -Komplex) gebildet wird:



Im Folgeschritt erfolgt der nukleophile Angriff des abgespalteten Br^- - Ions von der dem π -Komplex abgewandten Seite ($\rightarrow$ *trans*-Addition), da durch den π -Komplex der Angriff auf der gleichen Seite sterisch gehindert ist (III).

Je nachdem, wohin sich das Br^- -Ion orientiert, lockert sich die $\pi\text{-Br}^+$ -Bindung und geht an das entsprechende Nachbar-C-Atom (IV); der Ring wird stereospezifische geöffnet und es entsteht ein *trans*-Additionsprodukt (V):



Bei - wie in diesem Fall - symmetrischen Bromonium-Ionen ist ein nukleophiler Angriff auf jedes der beiden am π -Komplex beteiligten C-Atome gleich wahrscheinlich und führt bei der Bildung des chiralen *trans*-1,2-Dibromcyclohexan somit zu racemischen Gemischen.

6. Literatur:

- [1] Becker, H./ Domschke, G./ Fanghänel, E.: Organikum. Organisch-chemisches Grundpraktikum. 16., bearb. Aufl. Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1986, S. 254-156.
- [2] Falbe, J./ Regitz, M.: CD Römpp Chemie Lexikon auf CD-Rom, Version 1.0. 9. korrigierte und verbesserte Aufl.. Stuttgart; New York: Georg Thieme Verlag, 1995
- [3] Vollhardt, K. P. C./ Schore, N. E.: Organische Chemie. 2. Aufl.. Weinheim; New York; Basel; Cambridge; Tokyo: VCH; 1995, S.456-459.
- [4] Sadtler Research Laboratories Inc. 1967, 28910 K

7. Anhang

- 1) IR-Spektrum der Synthesubstanz
- 2) Vergleichs-IR-Spektrum