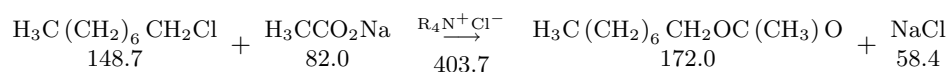
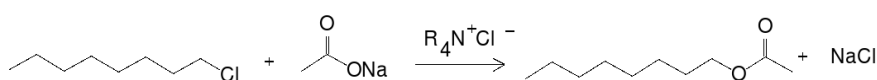


Umsetzung von 1-Chloroctan mit Natriumacetat unter Phasen-Transfer-Katalyse zu Essigsäureoctylester

Jonathan Becker

21. Februar 2007

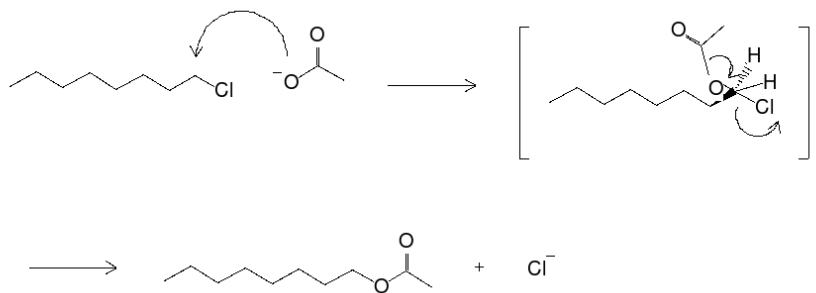
1 Reaktionsgleichung



1-Chlorooctan reagiert mit Katalyse durch Methyltrioctylammoniumchlorid mit Natriumacetat zu Essigsäureoctylester und Natriumchlorid.

2 Reaktionsmechanismus

1-Chlorooctan ist ein primäres Halogenalkan. Das Acetat-Anion ist ein Nucleophil und greift als solches am dem Chlor benachbarten Kohlenstoff an. Durch die sterisch günstige Lage reagiert das 1-Chlorooctan mit dem Acetat-Anion in einer S_N2-Reaktion. Durch den Phasen-Transfer-Katalysator kann das geladene Acetat-Anion am 1-Chlorooctan angreifen. Über einen fünfbindigen Übergangszustand bei dem die Bindung zu Chlor und dem Acetat keine volle ist, wird das Chlor als Cl⁻ verdrängt und das Gleichgewicht verschiebt sich in Richtung des Esters.



3 Durchführung

Es wurden in einem 100-ml-Dreihalskolben 17.1 ml 1-Chloroctan, 16.4 g Natriumacetat und 1.0 g Methyltrioctylammoniumchlorid gegeben. Dieser wurde mit Innenthermometer, Rückflusskühler mit Trockenrohr und einem KPG-Rührer versehen. Unter Rühren wurde das Gemisch zwei Stunden lang auf $140\text{ }^\circ\text{C}$ Innentemperatur erhitzt. Nach Abkühlen des Reaktionsgemisches wurde destilliertes Wasser hinzugegeben bis der gesamte Feststoff gelöst war. Die flüssige Mischung wurde in einen Scheidetrichter gegeben, womit die organische von der wässrigen Phase abgetrennt wurde. Zur vollständigen Trennung wurde die wässrige Phase noch zweimal mit je ungefähr 25 ml *tert*-Butylmethylether ausgeschüttelt. Die so gewonnenen Etherphasen wurden mit der anfangs abgetrennten organischen Phase vereinigt. Anschliessend wurde dieses Gemisch mit Natriumsulfat getrocknet. Das Trockenmittel wurde mit einem Büchnertrichter abgetrennt und noch mit ungefähr 10 ml *tert*-Butylmethylether nachgewaschen. Im Rotationsverdampfer wurde danach der ganze *tert*-Butylmethylether wieder abdestilliert. Mit dem zurückgebliebenen Produkt konnte eine erste Rohausbeute bestimmt werden. Das Rohprodukt wurde unter möglichst niedrigem Druck fraktioniert destilliert um eine bessere Trennung zu erhalten.

4 Ausbeute

Die Rohausbeute betrug 29.634 g und die endgültige Ausbeute nach der fraktionierten Destillation 13.650 g. Dies liegt innerhalb der in der Versuchsbeschreibung vorgegebenen Literaturausbeute von 12.4 bis 14.2 g.

5 Charakterisierung

Das Produkt war eine farblose Flüssigkeit die bei maximal im Praktikumslabor möglichem Unterdruck bei ungefähr $95\text{ }^\circ\text{C}$ siedet. Der gemessene

Brechungsindex lag mit 1.4205 vergleichsweise nahe am Literaturwert von 1.4204¹.

6 Sicherheit und Entsorgung

Substanz	Gefahrensymbol	R-Sätze	S-Sätze	Entsorgung
1-Chloroctan	N	50/53	61	Behälter für organische Lösungen
Natriumacetat	-	-	-	unbedenklicher Abfall
Methyltrioctylammoniumchlorid	Xn, N	22-38-41-50/53	26-33-51	Behälter für organische Lösungen
<i>tert</i> -Butylmethylether	F, Xi	11-38	9-16-24	Behälter für organische Lösungen
Natriumchlorid	-	-	-	unbedenklicher Abfall
Essigsäureoctylester	Xi	nicht vorhanden	nicht vorhanden	Behälter für organische Lösungen
Natriumsulfat	-	-	-	unbedenklicher Abfall

¹Organikum 20. Auflage, erschienen im Johann Ambrosius Barth Verlag Heidelberg Leipzig, Seite 444