

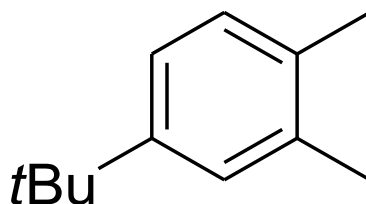
ORGANISCH-CHEMISCHES GRUNDPRAKTIKUM

PRAKTIKUMSPROTOKOLL

SoSe 2016

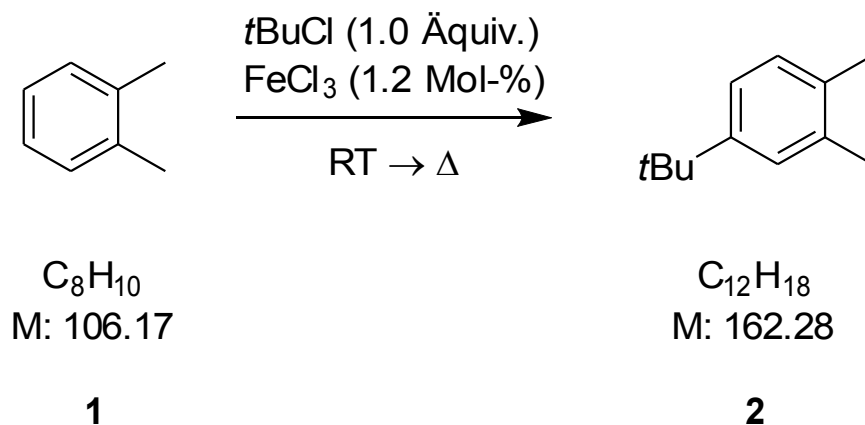
Versuch 5.4

4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol



Guido Petri		Name des Assistenten: Stefan Grätz				
Saal C160	Platz 16	Datum der Abgabe: 2. August 2016				
		Abgabe Nr.: 2				
		Bewertung	++	+	0	-
			☐	☐	☐	☐
		Testat				

1. Reaktionsgleichung



Gleichung 1: Darstellung von 4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol.

Das Produkt 4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol wird aus *o*-Xylol und *tert*-Butylchlorid mit Eisen(III)-Chlorid als Katalysator hergestellt.

2. Durchführung

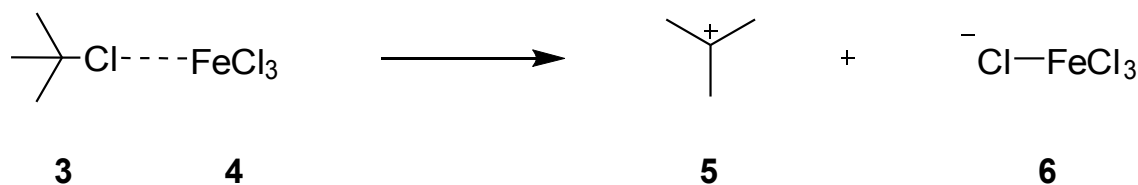
Im Reaktionskolben wurde *tert*-Butylchlorid (13.8 mL, 11.6 g, 125 mmol, 1.00 Äquiv.) in *ortho*-Xylol (15.1 mL, 13.3 g, 125 mmol, 1.00 Äquiv.) gelöst. Wasserfreies FeCl_3 (0.24 g, 1.5 mmol, 1.2 Mol-%) wurde vorsichtig zugegeben. Nach Abklingen der Gasentwicklung wurde die Reaktionsmischung mit weiterem *tert*-Butylchlorid (2.8 mL, 2.3 g, 25 mmol, 0.20 Äquiv.) versetzt. Die Mischung wurde 1 h lang bei Raumtemperatur gerührt und anschließend weitere 15 min unter Rückfluss erhitzt. Die Reaktionsmischung wurde mit wässriger gesättigter NaHCO_3 -Lösung (15 mL) und wässriger gesättigter NaCl -Lösung (15 mL) gewaschen. Die organische Phase wurde über gemörsertem CaCl_2 getrocknet. Das Trockenmittel wurde abfiltriert und mit MTBE (3 x) gewaschen. Das Lösungsmittel wurde bei vermindertem Druck am Rotationsverdampfer entfernt. Eine Vakuumdestillation (Kopftemperatur: 88 °C/17 mbar, Lit.: 100 °C/20 mbar^[1]) liefert 4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol (6.6 g, 40.6 mmol, 33% (Lit.: 65-80%^[1])) als farblose Flüssigkeit.

3. Analytik

Sdp.: 88 °C/17 mbar; Lit.: 100 °C/20 mbar^[1].
 $n_D^{20} = 1.499$; Lit.: $n_D^{20} = 1.498$ ^[2].

4. Mechanismus

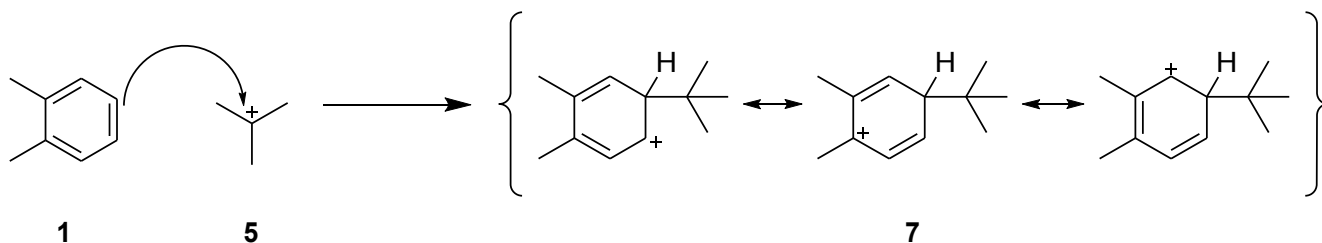
Bei der Reaktion handelt es sich um eine Friedel-Crafts-Alkylierung.



Gleichung 2: Eisenchlorid reagiert als Lewisäure zur Bildung vom Carbokation 5.

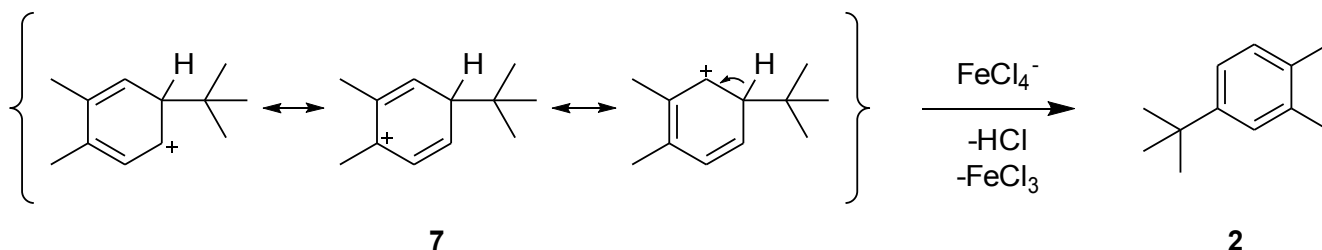
Eisenchlorid reagiert als Lewisäure in der Reaktion. Es koordiniert mit dem Chloratom der Verbindung 3 und polarisiert die Bindung zwischen dem zentralen Kohlenstoffatom und das

Chloratom. Da das *tert*-Butylchlorid ein durch Hyperkonjugation stabilisiertes Carbokation bilden kann kommt es zum Bindungsbruch zwischen dem Chloratom und das zentrale Kohlenstoffatom. Es entsteht die Verbindung **5**, die ein tertiäres Carbokation ist.



Schema 1: Reaktion des Carbokations **5** mit dem Edukt **1**, um das resonanzstabilisierte Wheland-Komplex **7** zu bilden.

Das Carbokation **5** reagiert elektrophil mit dem aromatischen System des *ortho*-Xylols **1**. Durch den +I-Effekt der Methylgruppen am Xylol erfolgt die Addition in *para*-Position. Das Wheland-Komplex **7** ist durch Resonanz stabilisiert.



Schema 2: Das Proton wird vom Wheland-Komplex **7** abgespalten und das Produkt 4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol **2** entsteht.

Nach Abspaltung des Protons in *para*-Position und Rearomatisierung entsteht das Endprodukt 4-(*tert*-Butyl)-1,2-dimethylbenzol **2**. Der Katalysator FeCl_3 wird unter Bildung von HCl regeneriert.

5. Literatur

1. Fachgruppe Organische Chemie, *Skript zum Organisch-Chemischen Grundpraktikum (BSc) SoSe 2016*, Technische Universität Berlin, **2016**, S. 102-104.
2. <http://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/425141?lang=de®ion=DE> , am 11. Juli 2016 um 19:48 abgerufen.