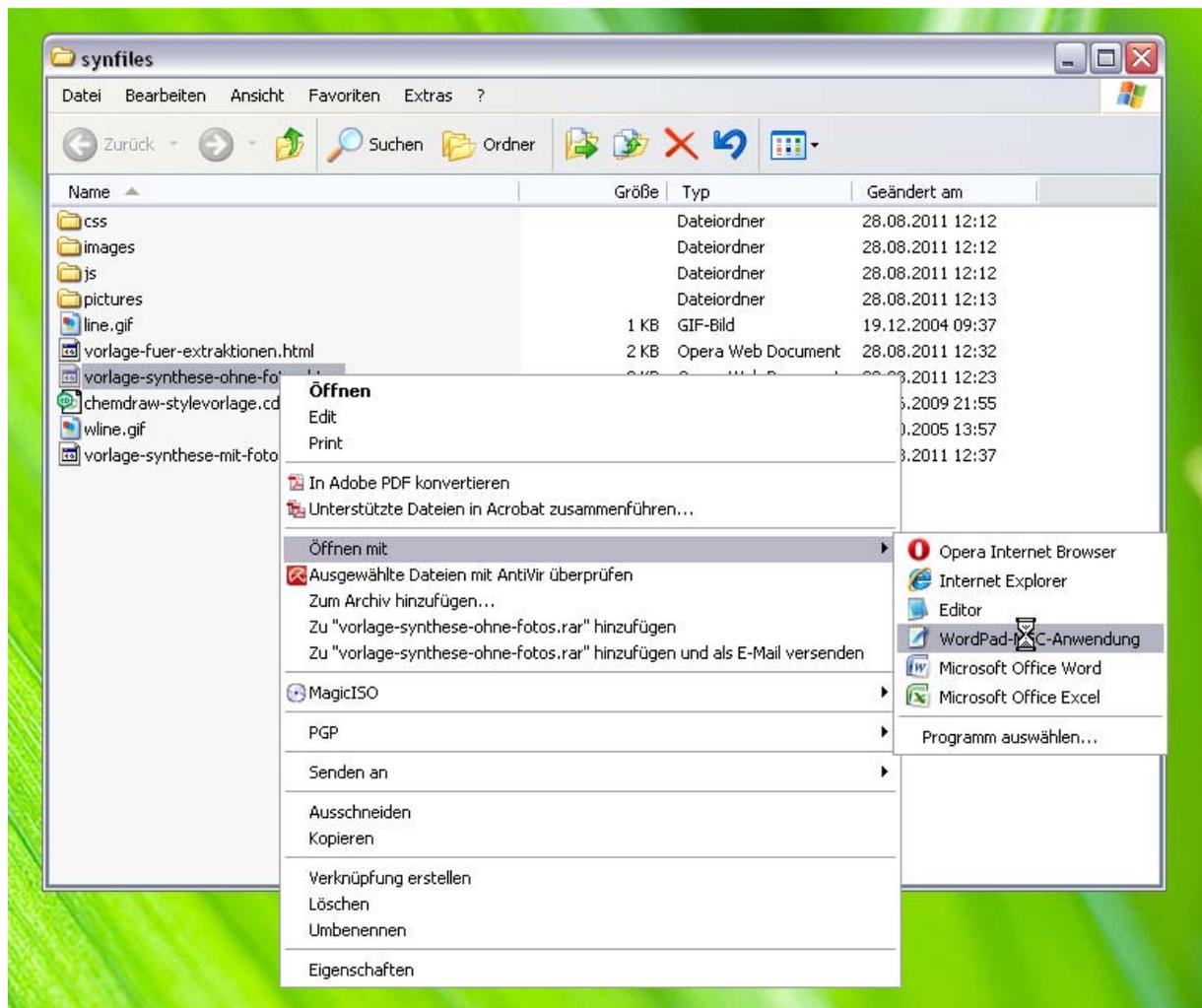


In diesem Ordner befinden sich neben ein paar "Systemdateien" für die Darstellung (CSS und JS-Gallery) die Vorlagen für Synthesen und Extraktionen.

vorlage-synthese-ohne-fotos.htm
vorlage-synthese-mit-fotos.htm
vorlage-fuer-extraktionen.html

Der Ordner muss "synfiles" heißen, sonst funktionieren einige Dinge nicht mehr. Neue Dateien bitte immer klein und ohne Umlaute benennen.

Für die Bearbeitung einer HTM(L)-Datei, die Datei mit Rechtsklick anklicken, "Öffnen mit" und das WordPad auswählen. Auch der Editor in Windows oder natürlich zusätzliche HTML-Editoren sind geeignet, mein Favorit ist allerdings das WordPad, weil es auf jedem Windows-Rechner zu finden ist.



So sieht das Zwischenergebnis aus:

Λ » LambdaSyn – Synthese von Benz...

SYNTHESE VON BENZYLIDENACETON [122-57-6]

Benzyldenacetone [122-57-6-A] $C_{11}H_{12}O_3$

In einem 250-ml-Zweihalsrundkolben mit Innenthermometer werden 26.5 g (0.25 mol) frisch destilliertes Benzaldehyd und 55.5 ml (0.75 mol) Aceton mit 50 ml Methanol gemischt. Unter gutem Röhren werden innerhalb von 15 Minuten 4.1 ml (13 mmol) 15%-ige Kalilauge so zugetropft, dass die Innentemperatur 25 °C nicht überschreitet. Dazu wird der Kolben mit einem Eisbad geköhlt. Nach beendeter Zugabe wird drei Stunden bei 20 °C geröhrt. Das Reaktionsgemisch wird mit Eisessig neutralisiert, wobei der pH-Wert mit Indikatorpapier überprüft wird, und anschließend mit 400 ml Wasser verdünnt. Man extrahiert dreimal mit je 150 ml Ether, wäscht die vereinigten Etherphasen mit Wasser und trocknet sie über wasserfreiem Natriumsulfat. Man filtriert vom Trockenmittel ab, entfernt das Solvens im Vakuum und destilliert den Rückstand im Wasserstrahl-Vakuum. Bei der Destillation wird lediglich Luft durch den Kühler geleitet, da das Produkt, bei Verwendung von Wasser als Kühlmittel, im Kühler auskristallisieren und diesen verstopfen kann. Das Produkt geht bei einem Unterdruck von 16 Torr bzw. 21 mbar bei 140-142 °C über. Es werden 23.7-25.6 g (65-70%) Benzyldenacetone als schwach gelbliches Öl erhalten, das beim Abköhlen unterhalb von 40 °C kristallin erstarrt. Zur Einleitung der Kristallisation ist gegebenenfalls ein Animpfen oder Reiben nötig.

Beschreibung: Benzyldenacetone bildet farblose nach Cumarin riechende Tafeln. Es schmilzt bei 42 °C und siedet bei Normaldruck zwischen 260 und 262 °C. Benzyldenacetone ist löslich in Alkohol, Benzol, Chloroform und Ether, während es in Wasser kaum löslich ist. In der organischen Chemie ist es ein wichtiger Synthese-Baustein für Michael-Additionen, Kondensation-, Cycloadditions- und Grignard-Reaktionen.

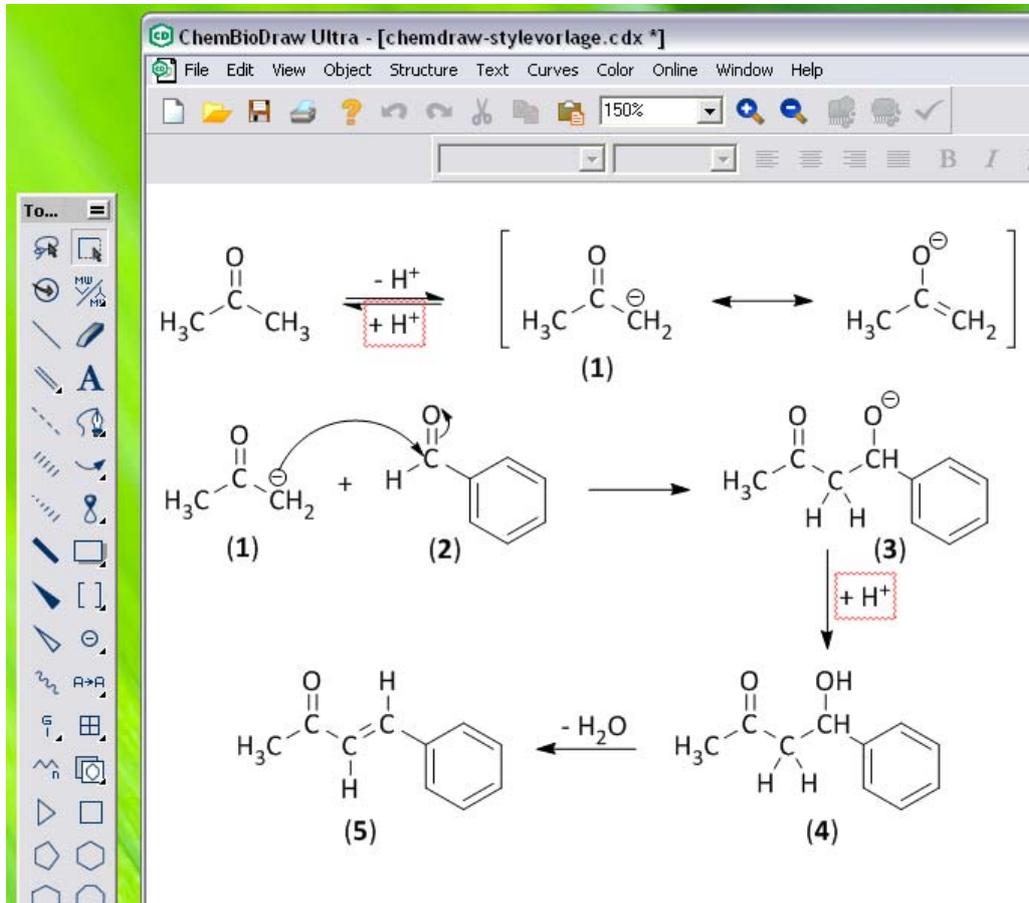
Quelle: In Anlehnung an: L. F. Tietze und Th. Eicher, Organisch-chemisches Praktikum unter Berücksichtigung der Gefahrstoffverordnung, Georg Thieme Verlag, 2. Auflage, Stuttgart 1995
Delivered by: Mephisto
Letzte Aktualisierung: 11/06/11

Andere Bezeichnungen: Benzalacetone; Monobenzylidenacetone; 4-Phenyl-3-buten-2-on

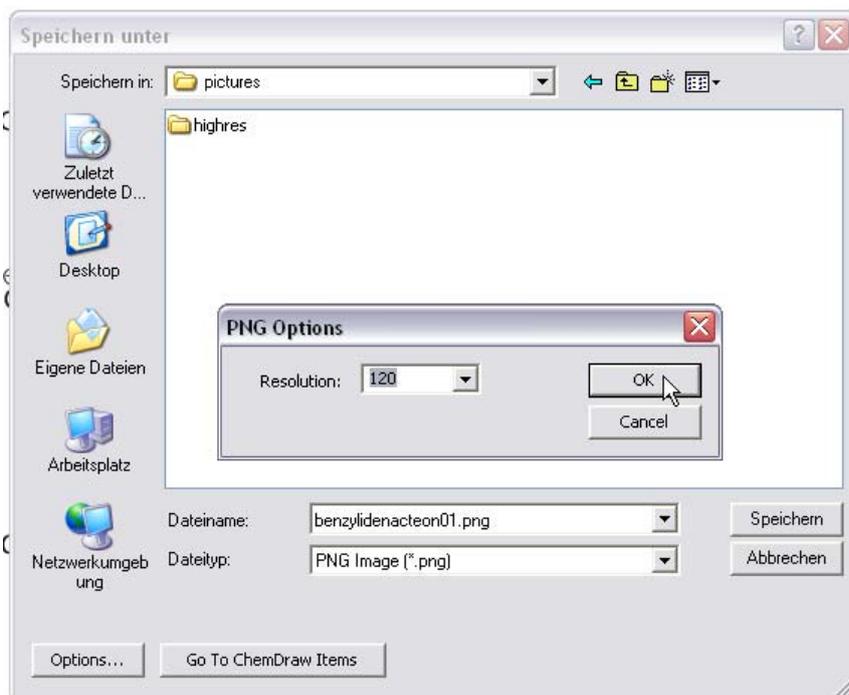
[LambdaForum] | [LambdaSyn-Startseite] | [Synthesen-Übersicht] | [diese Seite ausdrucken]

Für den Anfang nicht schlecht ☺ Man sieht, dass noch eine Struktur der Verbindung fehlt und die Summenformel eingetragen werden muss.

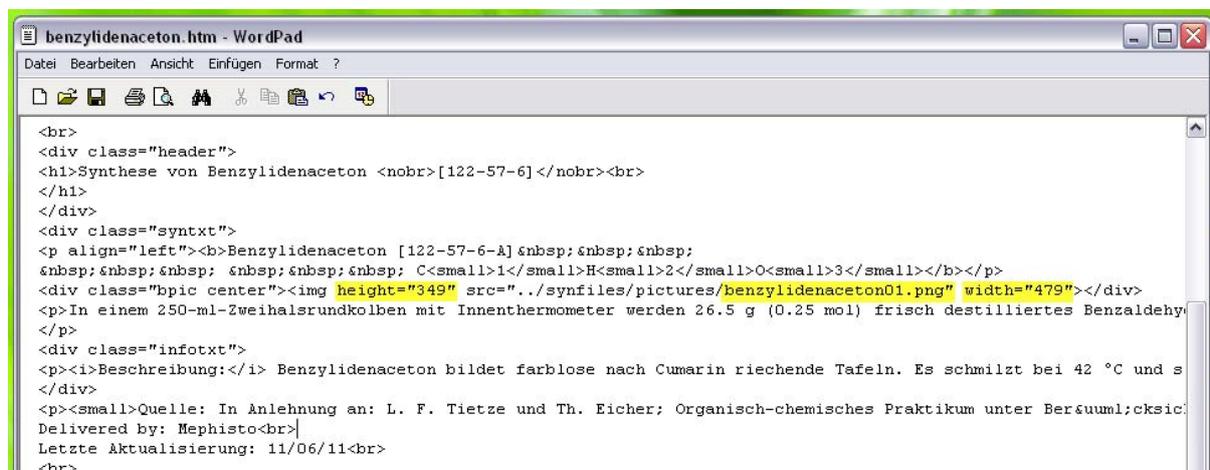
Schritt 6: Was in dem oberen Beispiel mit Benzylidenaceton fehlt, sind noch eine Struktur oder ein Reaktionsmechanismus. Dazu die Datei "chemdraw-stylevorlage.cdx" öffnen (es wird ChemDraw oder ChemBioDraw benötigt) und die Struktur oder hier den Mechanismus zeichnen. Achtung: nicht zu sehr in die Breite zeichnen. Der Style entspricht dem für wissenschaftliche Publikationen gebräuchlichem ACS-Standard mit angepassten Größeneinstellungen für LambdaSyn.



Schritt 7: Datei -> Speichern als -> Dateiname (im Beispiel "benzylidenaceton01"), Dateiformat "PNG Image" (Options: Resolution 120), in ../synfiles/pictures



Schritt 8: Die HTML-Synthesevorschrift mit dem WordPad öffnen (benzylidenaceton.htm). Dort befindet sich bereits eine Stelle für eine Struktur oder einen Mechanismus. Es müssen Höhe, Breite und der Dateiname eingetragen werden (gelbe Markierung).

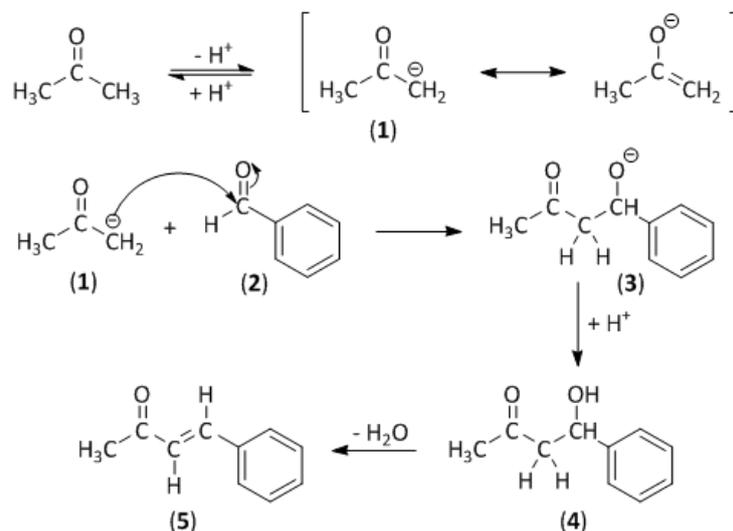


Die Breite und Höhe einer Grafik findet man bei den Dateieigenschaften unter dem Reiter "Dateiinfo".

Nach Korrektur der Summenformel, sieht die Beispiel-Synthesevorschrift wie folgt aus.

SYNTHESE VON BENZYLIDENACETON [122-57-6]

Benzylidenacetone [122-57-6-A] $C_{10}H_{10}O$



In einem 250-ml-Zweihalsrundkolben mit Innenthermometer werden 26.5 g (0.25 mol) frisch destilliertes Benzaldehyd und 55.5 ml (0.75 mol) Aceton mit 50 ml Methanol gemischt. Unter gutem Rühren werden innerhalb von 15 Minuten 4.1 ml (13 mmol) 15%-ige Kalilauge so zutropft, dass die Innentemperatur 25 °C nicht überschreitet. Dazu wird der Kolben mit einem Eisbad gekühlt. Nach beendeter Zugabe wird drei Stunden bei 20 °C gerührt. Das Reaktionsgemisch wird mit Eisessig neutralisiert, wobei der pH-Wert mit Indikatorpapier überprüft wird, und anschließend mit 400 ml Wasser verdünnt. Man extrahiert dreimal mit je 150 ml Ether, wäscht die vereinigten Etherphasen mit Wasser und trocknet sie über wasserfreiem Natriumsulfat. Man filtriert vom Trockenmittel ab, entfernt das Solvens im Vakuum und destilliert den Rückstand im Wasserstrahl-Vakuum. Bei der Destillation wird lediglich Luft durch den Kühler geleitet, da das Produkt, bei Verwendung von Wasser als Kühlmittel, im Kühler auskristallisieren und diesen verstopfen kann. Das Produkt geht bei einem Unterdruck von 16 Torr bzw. 21 mbar bei 140-142 °C über. Es werden 23.7-25.6 g (65-70%) Benzylidenacetone als schwach gelbliches Öl erhalten, das beim Abkühlen unterhalb von 40 °C kristallin erstarrt. Zur Einleitung der Kristallisation ist gegebenenfalls ein Animpfen oder Reiben nötig.

Beschreibung: Benzylidenacetone bildet farblose nach Cumarin riechende Tafeln. Es schmilzt bei 42 °C und siedet bei Normaldruck zwischen 260 und 262 °C. Benzylidenacetone ist löslich in Alkohol, Benzol, Chloroform und Ether, während es in Wasser kaum löslich ist. In der organischen Chemie ist es ein wichtiger Synthese-Baustein für Michael-Additionen, Kondensation-, Cycloadditions- und Grignard-Reaktionen.

Quelle: In Anlehnung an: L. F. Tietze und Th. Eicher, Organisch-chemisches Praktikum unter Berücksichtigung der Gefahstoffverordnung, Georg Thieme Verlag, 2. Auflage, Stuttgart 1995

Delivered by: Mephisto

Letzte Aktualisierung: 11/06/11

Andere Bezeichnungen: Benzalacetone, Monobenzylidenacetone, 4-Phenyl-3-buten-2-on

[\[LambdaForum\]](#) | [\[LambdaSyn-Startseite\]](#) | [\[Synthesen-Übersicht\]](#) | [\[diese Seite ausdrucken\]](#)

Optionale Formatierungen: Im Beispiel wird ein Absatz zum Reaktionsmechanismus eingefügt. Die folgenden zwei Screenshots zeigen beispielhaft HTML-Code für die Formatierungen fett, kursiv, Alpha und Beta (Sonderzeichen) und Hyperlink.

