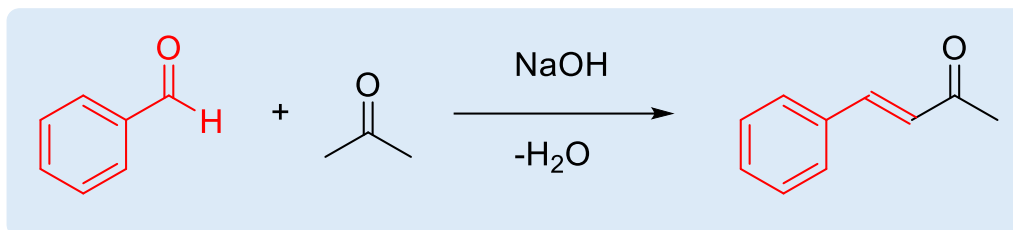


Benzylidenoaceton

(4-Fenylo-3-buten-2-on)



Odczynniki

Aldehyd benzoesowy	10,1 mL	(0,1 mola; 1 ekw.)
Aceton	20 mL	(0,275 mola; 2,75 ekw.)
Wodorotlenek sodu (10% roztwór wodny)	2,5 mL	
Kwas solny (5% roztwór wodny)	5 mL	
Toluen	10 mL	

Procedura

W kolbie kulistej o pojemności 100 mL zaopatrzonej w dipol magnetyczny, termometr oraz wkraplacz, umieszcza się aldehyd benzoesowy (10,1 mL) i aceton (20 mL). Kolbę zanurza się w łaźni z zimną wodą, a następnie wkrapla roztwór wodorotlenku sodu. Początkowo temperaturę w kolbie utrzymuje się w granicach 25-30 °C, a następnie kontynuuje mieszanie przez 1,5 godziny. Mieszaninę zakwasza się rozcieńczonym kwasem solnym do pH=2-3 i przenosi do rozdzielacza. Następnie oddziela się warstwę organiczną, a warstwę wodną ekstrahuje toluenem (10 mL). Następnie otrzymany ekstrakt dodaje się do oddzielonej warstwy organicznej. Całość przemywa się wodą (5 mL) i suszy niewielką ilością siarczanu magnezu. Roztwór przesącza się do kolby i usuwa się toluen za pomocą wyparki rotacyjnej. Pozostałość destyluje się pod zmniejszonym ciśnieniem z użyciem zestawu destylacyjnego z nasadką Claisena. Benzylidenoaceton destyluje w temperaturze 150-160 °C/25 mmHg (33 hPa) (lub 137-142 °C/16 mmHg (21 hPa), a następnie zostaje na krystaliczną masę o tt. 38-39 °C. Przedestylowany benzylidenoaceton może zawierać nieco dibenzylidenoacetonu, dlatego w kolejnym kroku krystalizuje się go z eteru naftowego.

Na tym etapie możesz przerwać i kontynuować na kolejnych zajęciach.

Wydajność: 77%

Postać: Żółte ciało stałe

Temperatura topnienia: 38-39 °C

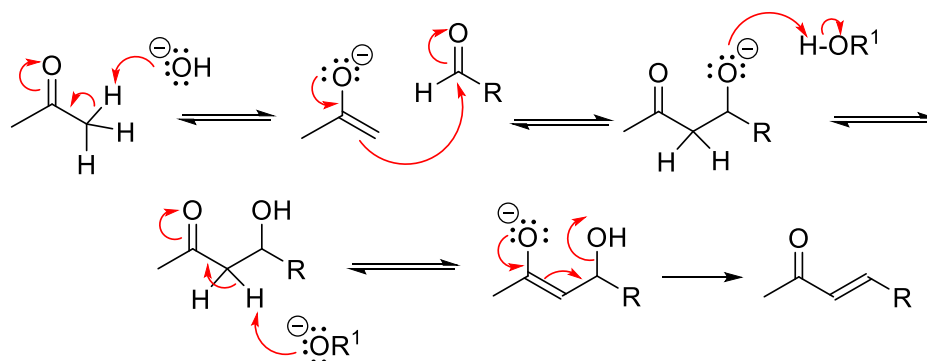
¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): 7.56-7.48 (m, 3H), 7.41-7.37 (m, 3H), 6.71 (d, J = 16.0 Hz, 1H), 2.38 (s, 3H).

IR (film, cm⁻¹): 1667, 1598, 1494.

Piktogramy określające rodzaj zagrożenia na etykietach związków chemicznych

Aldehyd benzoesowy	
Aceton	 
Wodorotlenek sodu	
Kwas solny	 
Toluen	  
Benzylidenoaceton	

Mechanizm reakcji

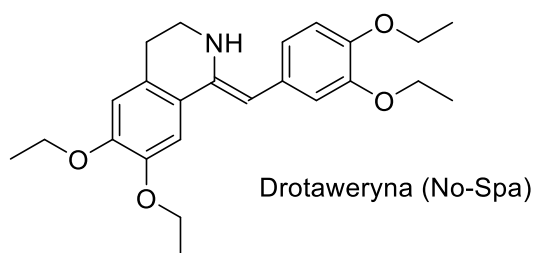


Informacje dodatkowe

Benzylidenoaceton (BA) to organiczny związek chemiczny należący do grupy α,β -nienasyconych ketonów, który znajduje szerokie zastosowanie w chemii organicznej i przemysłowej. Jego struktura składa się z pierścienia fenyłowego sprzężonego z układem enonowym, co czyni go reaktywnym w różnych procesach syntezy.

Dzięki swojej strukturze benzylidenoaceton wykazuje wysoką reaktywność, co czyni go doskonałym substratem do reakcji nukleofilowych. Jednym z najważniejszych zastosowań tego związku jest jego udział w reakcji Michaela, gdzie jako akceptor addycji nukleofilowej może reagować z enolanami, amidami czy tiolami, prowadząc do otrzymania układów β -hydroksylowych, laktonów czy heterocykli. Ta właściwość jest wykorzystywana w syntezie leków oraz biologicznie aktywnych związków.

Benzylidenoaceton (BA) odgrywa istotną rolę jako związek przejściowy w syntezie pierścienia pirydynowego, który jest kluczowym fragmentem strukturalnym drotaweryny:



W przemyśle kosmetycznym benzylidenoaceton znajduje zastosowanie jako prekursor do syntezy wonnych ketonów i alkoholi, które są składnikami kompozycji zapachowych. Jego pochodne posiadają nuty waniliowe, balsamiczne i kwiatowe, co czyni je popularnym składnikiem perfum i aromatycznych dodatków do kosmetyków.

Literatura uzupełniająca

1. S. Mandal, S. Mandal, S. K. Ghosh, A. Ghosh, R. Saha, S. Banerjee, B. Saha, *Synth. Commun.* **2016**, 46, 1327–1342

Widmo ^1H NMR

