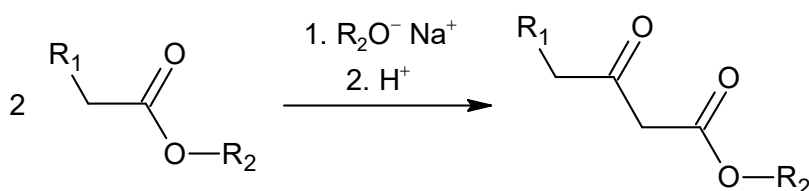


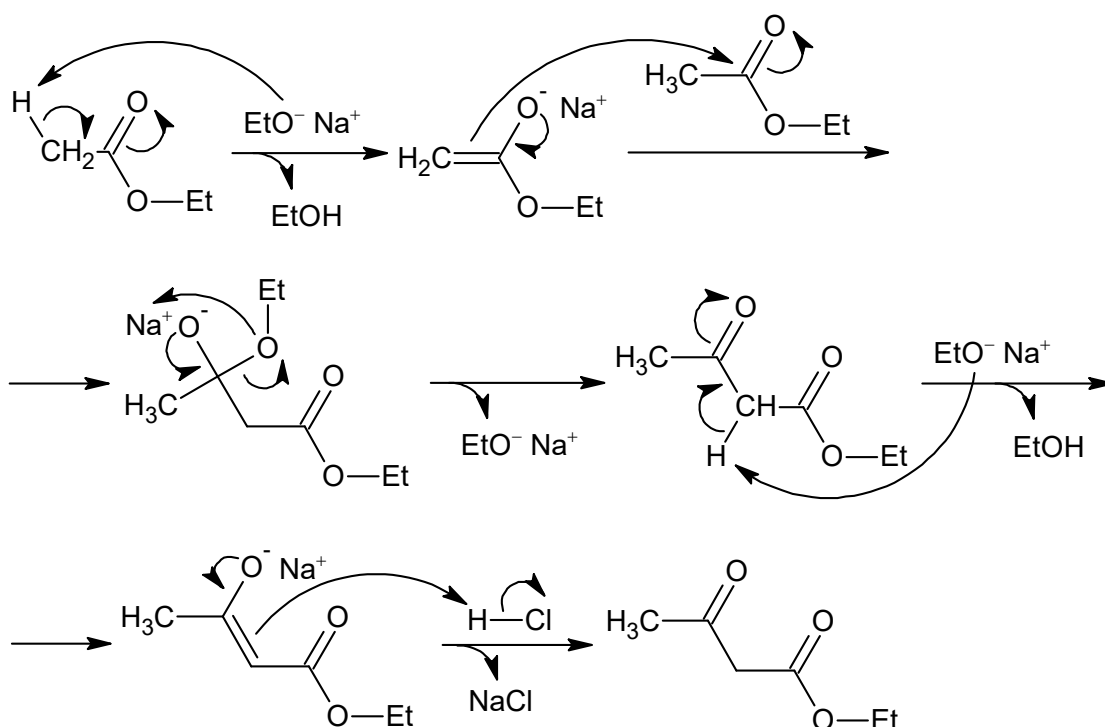
Claisenova kondenzácia

(Claisen condensation)



Claisenova kondenzácia je kaplingová reakcia dvoch esterov alebo esteru s ketónom v prítomnosti bázy za vzniku β-ketoesteru alebo β-diketónu.

Mechanizmus

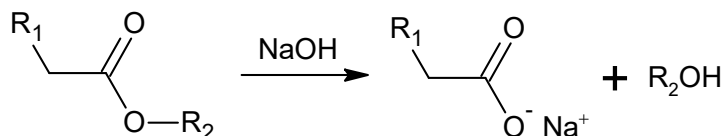


Claisenova kondenzácia začína odtrhnutím protónu vodíka z esteru bázou, ktorý sa nachádza na α-uhlíku. Vzniknutý enolátový anión nukleofilne atakuje karbonylový uhlík druhej molekuly esteru za vzniku aduktu. V ďalšom kroku dochádza k uvoľneniu alkoxykupiny za vzniku β-ketoesteru. Vzniknutý β-ketoester je silnejšou kyselinou ako vznikajúci alkohol, čo priaznivo ovplyvňuje rovnovážnu konštantu reakcie smerom k produktu. Nakoľko sa však reakcia uskutočňuje v bázických podmienkach a väzba C–H na novovzniknutom α-uhlíku je ešte viac polarizovaná ako na pôvodnom α-uhlíku v estere, dochádza k vytvoreniu nového stabilného enolátu. Posledným krokom Claisenovej kondenzácie je prídavok minerálnej kyseliny (najčastejšie kyselina chlorovodíková, kyselina sírová, kyselina fosforečná), ktorá zabezpečí neutralizáciu

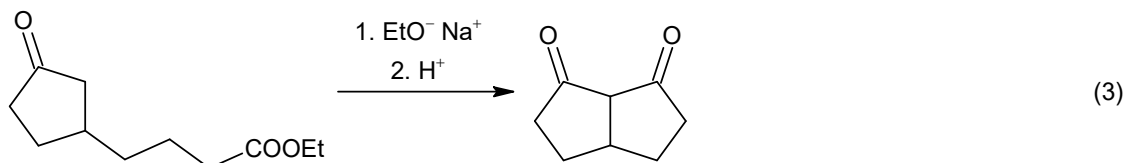
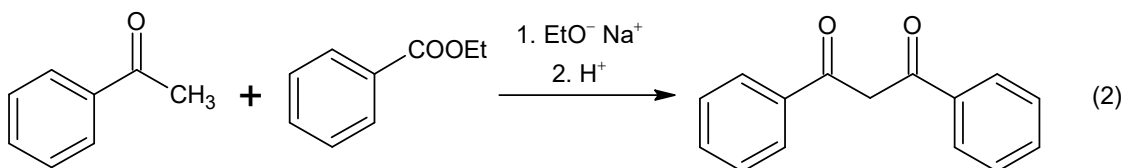
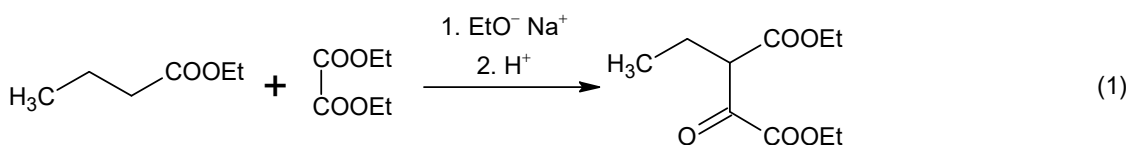
použitej bázy (alkoholát, hydroxid, amid a i.) a protonáciu novovzniknutého enolátu za vzniku konečného produktu, ktorým je β -ketoester.

Poznámka:

Pri využití hydroxidov (napr. hydroxid sodný) ako katalyzátora Claisenovej kondenzácie môže dôjsť k nežiaducej vedľajšej reakcii, ktorou je hydrolyza esteru.



Reakciu esteru s odlišným esterom, ketónom alebo nitrilom nazývame skrížená Claisenova kondenzácia. Uplatňuje sa v prípadoch, kedy jeden z reaktantov neobsahuje vodík na α -uhlíku. Podobne môže prebiehať aj intramolekulová skřížená Claisenova kondenzácia. Môže sa jednať napríklad o reakciu etylesteru kyseliny butánovej s dietylsterom kyseliny šťaveľovej (1), reakciu fenylmetylketónu s etylesterom kyseliny benzoovej (2) alebo o intramolekulovú reakciu etylesteru kyseliny 4-(3-oxocyklopentyl)butánovej (3).



Reakcia je pomenovaná po nemeckom chemikovi Rainer Ludwig Claisenovi (1851 – 1930).

Červinka O., Doležal S., Dudek V., Fábryová A., Hub L.: *Mechanismy organických reakcí*. 1. vyd. SNTL, Praha, 1976, s. 375-376.

Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P.: *Organic Chemistry*. 1. vyd. Oxford University Press, UK, 2001, s. 723-735. ISBN 0-19-850356-6.