

Die alkalische Verseifung liefert kein Methylamin, sondern nur n-Amylamin, was auf sehr bevorzugte Amylwanderung deutet.

Einige Thioamide, vor allem die noch nicht vorherbeschriebenen, wurden analysiert:

Cyclododecanon-thio-isoxim (VII, $n = 11$): In 73 % Reinausb. kamen die farbl. Blättchen vom Schmp. 106.5–107° aus Aceton/Wasser.

$C_{12}H_{23}NS$ (213.4) Ber. C 67.54 H 10.87 Gef. C 67.88 H 11.11

Thioacet-[2.4-dimethoxy-anilid]: Nach Umlösen aus Benzol/Ligroin wurden blaßgelbe Kristalle vom Schmp. 91–92° erhalten.

$C_{10}H_{13}NO_2S$ (211.3) Ber. C 56.85 H 6.20 Gef. C 57.07 H 6.04

Thiocapron-anilid: Die Reinigung erfolgte durch Tieftemperaturkristallisation aus Petroläther (30–60°). Farbl. Blättchen mit Schmp. 43–45°.

$C_{12}H_{17}NS$ (207.3) Ber. C 69.51 H 8.27 Gef. C 69.47 H 7.96

N-Äthyl-thiopropionamid (VI, $R = R' = C_2H_5$): Gelbes Öl vom Sdp._{0,1} 84°.

$C_5H_{11}NS$ (117.2) Ber. C 51.24 H 9.46 N 11.95 Gef. C 51.74 H 9.65 N 12.41

Thiopropion-anilid:

$C_9H_{11}NS$ (165.3) Ber. C 65.41 H 6.71 Gef. C 65.60 H 6.56

Thio-p-toluylsäure-p-toluidid:

$C_{15}H_{15}NS$ (241.3) Ber. C 74.64 H 6.26 Gef. C 74.62 H 6.00

HERMANN STETTER und URSULA MILBERS

Über ein sterisch *cis*-fixiertes Enol

Aus dem Institut für Organische Chemie der Universität München

(Eingegangen am 13. Februar 1958)

Dekalindion-(1.8) wurde durch Ringsynthese aus γ -[3-Oxo-cyclohexyl]-buttersäure-äthylester hergestellt. Die Verbindung liegt vollständig in der sterisch *cis*-fixierten Enol-Form vor und zeigt infolge der starken Beanspruchung des Wasserstoffs in der Chelat-Form eine nur sehr geringe Acidität.

Bei den Enolen von β -Dicarbonylverbindungen unterscheidet man zwischen *trans*- und *cis*-fixierten Enolen¹⁾. Zu den *trans*-fixierten Enolen gehören z. B. die Enole der Cyclohexandione-(1.3), bei denen aus sterischen Gründen nur eine *trans*-Lage von Carbonylgruppe und enolischer Hydroxylgruppe in Bezug auf die enolische Doppelbindung möglich ist. Als *cis*-fixierte Enole werden die Enole solcher β -Dicarbonylverbindungen bezeichnet, bei denen die *cis*-Lage sterisch begünstigt ist, wobei aller-

¹⁾ S. z. B. B. EISTERT und W. REISS, Chem. Ber. **87**, 92 [1954].

dings die Fixierung dieser *cis*-Lage durch die Chelatisierung mittels Wasserstoffbrückenbindung bedingt ist. Diese Unterscheidung hat zweifellos ihre Berechtigung, dürfte aber für die bis jetzt bekannten *cis*-fixierten Enole nur mit einer gewissen Einschränkung gelten, da solche Enole sterisch durchaus noch in der Lage sind, die *trans*-Lage einzunehmen.

Es schien nun von Interesse, zum Vergleich einmal eine β -Dicarbonylverbindung herzustellen, bei welcher ähnlich wie bei den *trans*-fixierten Enolen eine wirkliche, sterische *cis*-Fixierung der Enol-Form vorhanden ist. Eine solche β -Dicarbonylverbindung müßte das Dekalindion-(1.8) (VI) sein.

Zur Darstellung dieses Diketons versuchten wir zuerst die katalytische Hydrierung des 1.8-Dihydroxy-naphthalins in Gegenwart von einem Mol. Alkali, ähnlich der Dihydroresorcin-Darstellung aus Resorcin. Es zeigte sich jedoch, daß in alkalischem Milieu eine Wasserstoffaufnahme auch unter Druck und erhöhter Temperatur nicht zu erreichen war.

Auf einem zweiten Wege versuchten wir dann, 1.8-Dihydroxy-naphthalin durch katalytische Hydrierung in neutralem Milieu in Dekalindiol-(1.8) überzuführen. Durch anschließende Dehydrierung des Diols erhofften wir das gesuchte β -Diketon zu erhalten. Alle Versuche der Hydrierung ergaben aber immer unter Eliminierung einer Hydroxylgruppe *trans*- α -Dekalol. Dieser Verlauf der Hydrierung kann nicht überraschen, da das primär entstehende Tetralindiol-(1.8) die Hydroxylgruppe des hydrierten Ringes in der Benzyl-Stellung enthält. Offensichtlich erfolgt die hydrierende Abspaltung der Hydroxylgruppe leichter als die Kernhydrierung des zweiten Benzolkerns. Auch die Verwendung von 1.8-Diacetoxy-naphthalin in der katalytischen Hydrierung zeigte einen ähnlichen Reaktionsverlauf. Es wurde in diesem Falle 5-Acetoxy-tetralin isoliert.

Die Herstellung des gesuchten Diketons gelang schließlich durch Ringsynthese. Als Ausgangsverbindung diente β -[3-Hydroxy-benzoyl]-propionsäure (I), deren Darstellung bereits beschrieben wurde²⁾. Durch WOLFF-KISHNER-Reduktion wurde hieraus γ -[3-Hydroxy-phenyl]-buttersäure (II) hergestellt und diese Säure der Kernhydrierung mit Platinoxid als Katalysator unterworfen. Die rohe γ -[3-Hydroxy-cyclohexyl]-buttersäure (III) ergab bei der Dehydrierung mit Chromtrioxyd in Eisessig γ -[3-Oxo-cyclohexyl]-buttersäure (IV). Die Esterkondensation des Äthylesters V mit Natriumäthylat führte in 71-proz. Ausbeute zum gesuchten Dekalindion-(1.8) (VI). Die Verbindung schmilzt bei 55–56° und gibt mit Metallen Chelat-Komplexe, von denen die Kupfer- und Beryllium-Verbindung hergestellt wurden. Mit 2.4-Dinitro-phenylhydrazin erhält man ein Mono-2.4-dinitro-phenylhydrazon, während mit Hydrazin das Pyrazol VII und mit Hydroxylamin das Isoxazol VIII entstehen.

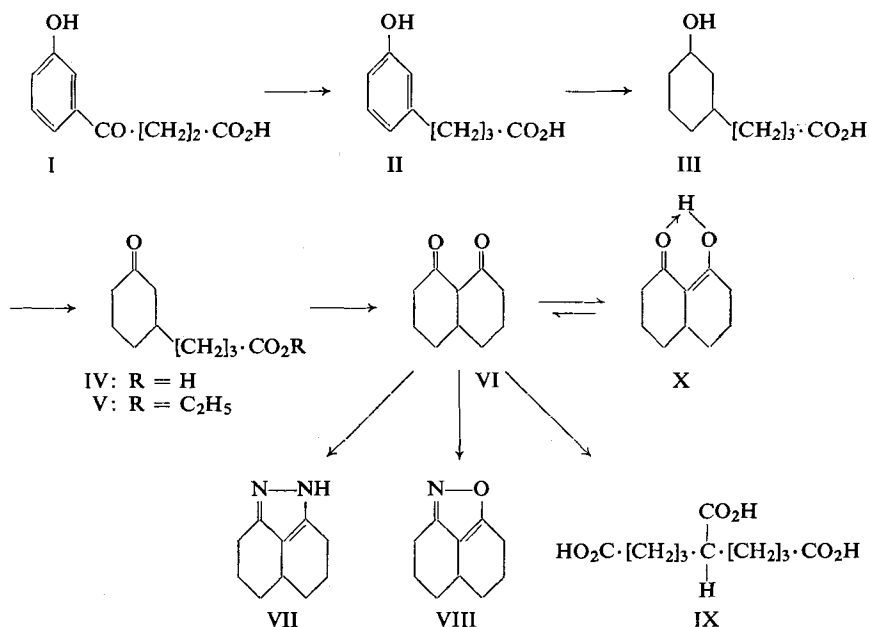
Oxydation mit Perjodsäure führt unter oxydativer Ringspaltung zu der bereits bekannten³⁾ Heptan-tricarbonsäure-(1.4.7) (IX).

Die Bestimmung des Enolgehalts zeigte, daß die Verbindung praktisch vollständig in der Enol-Form X vorliegt. Andererseits ist die Acidität äußerst gering. Mit Diazo-

²⁾ CH.-K. CHUANG und Y.-T. HUANG, Ber. dtsch. chem. Ges. **69**, 1505 [1936].

³⁾ A. HORLAN, C. R. hebd. Séances Acad. Sci. **228**, 2039 [1949].

methan tritt keine Reaktion ein. In wäßrigem Alkali ist die Verbindung unlöslich. Die Aciditätsbestimmung durch potentiometrische Titration versagte, da auch in alkoholisch-wäßriger Lösung kein Alkaliverbrauch festzustellen war. Die Bestimmung des p_K -Wertes von 11.1 erfolgte deshalb mit Hilfe der UV-Spektren nach der Methode von B. EISTERT und W. REISS⁴⁾.



Diese Befunde stellen einen weiteren Beitrag zur Frage der Beziehung von Enolisierung und Acidität bei β -Dicarbonylverbindungen dar. Die ausgeprägte Enolisierung ist dadurch bedingt, daß hier einerseits ähnlich wie bei den Cyclohexandionen-(1.3) die Ausbildung der enolischen Doppelbindung keine Einschränkung der freien Drehbarkeit erfordert und andererseits die sterische Fixierung der Chelat-Form X ebenfalls die Enolisierung begünstigt. Diese starke Beanspruchung des Wasserstoffs in der Chelatbindung erschwert in starkem Maße die Abdissoziation des Protons und gibt damit eine Erklärung für die sehr schwache Acidität im Gegensatz zu den *trans*-fixierten Enolen, bei denen diese Erschwerung der Dissoziation nicht vorhanden ist und die demzufolge eine hohe Acidität aufweisen.

Der BADISCHEN ANILIN- & SODA-FABRIK danken wir für Chemikalien.

⁴⁾ B. EISTERT und W. REISS, Chem. Ber. **87**, 115 [1954]; s. a. B. EISTERT, E. MERKEL und W. REISS, ebenda **87**, 1513 [1954].

BESCHREIBUNG DER VERSUCHE

Hydrierung von 1.8-Dihydroxy-naphthalin: 4 g 1.8-Dihydroxy-naphthalin werden in 50 ccm Äthanol gelöst und unter Zusatz von Raney-Nickel bei 40° hydriert, wobei der Katalysator 2mal erneuert wird. Nach Beendigung der *Wasserstoff*-Aufnahme wird der Katalysator abgetrennt und das Lösungsmittel abdestilliert. Man erhält farbl. Kristalle, die aus Petroläther (im Methanol/CO₂-Kältegemisch) umkristallisiert werden können. Schmp. 62°. Es handelt sich um *trans-α-Dekalol*, das durch sein Phenylurethan vom Schmp. 172° (Lit.⁵⁾: 172° charakterisiert werden konnte.

Hydrierung von 1.8-Diacetoxy-naphthalin: 10 g 1.8-Diacetoxy-naphthalin⁶⁾ werden in 50 ccm Eisessig gelöst und unter Zusatz von Platinoxid bei 50° bis zur Beendigung der *Wasserstoff*-Aufnahme hydriert. Nach dem Abtrennen des Katalysators und Entfernen des Eisessigs i. Vak. bleiben farbl. Kristalle, die aus wenig Äthanol umkristallisiert werden können. Schmp. 41°. Bei dieser Verbindung handelt es sich um das bereits bekannte *5-Acetoxy-tetralin*⁷⁾.

C₁₂H₁₄O₂ (190.2) Ber. C 75.76 H 7.42 Gef. C 75.75 H 7.44

Die Identifizierung erfolgte durch Verseifung zu 5-Hydroxy-tetralin⁸⁾.

γ-[3-Hydroxy-phenyl]-buttersäure (II): 112 g feingepulvertes Kaliumhydroxyd werden in 500 ccm Diäthylenglykol unter schwachem Erwärmen gelöst. Zu dieser Lösung gibt man 194 g β-[3-Hydroxy-benzoyl]-propionsäure (I)²⁾ und 135 ccm 85-proz. *Hydrazin*. Das Reaktionsgemisch wird 5 Stdn. unter Rückfluß erhitzt, wobei man durch Zugabe von kleinen Mengen Methanol die Innentemperatur der siedenden Lösung auf ca. 110° einstellt. Nach dieser Zeit fügt man weitere 76 g feingepulvertes Kaliumhydroxyd hinzu und destilliert das gebildete Wasser und überschüss. *Hydrazin* soweit ab, bis die Temperatur der siedenden Lösung auf 180° gestiegen ist. Bei dieser Temperatur erhitzt man weitere 12 Stdn. unter Rückfluß. Zu dem erkalteten Reaktionsgemisch gibt man 500 ccm Wasser und säuert mit konz. Salzsäure an. Die reduzierte Säure wird mit Äther extrahiert und mit Natriumsulfat getrocknet. Nach dem Abdestillieren des Äthers bleibt ein Öl, das bald krist. erstarrt und aus Benzol unter Zusatz von Tierkohle umkristallisiert werden kann. Ausb. 146 g (81 % d. Th.), Schmp. 87–89°, Sdp._{0.001} 170–173°.

Leicht lösl. in Äthanol, Eisessig, Chloroform und Äther, lösl. in Wasser, schwer lösl. in Kohlenstofftetrachlorid und Benzol, unlösl. in Ligroin.

C₁₀H₁₂O₃ (180.2) Ber. C 66.65 H 6.71 Gef. C 66.74 H 6.83

γ-[3-Hydroxy-cyclohexyl]-buttersäure (III): 100 g II werden in 200 ccm Äthanol gelöst und unter Zusatz von ca. 4 g Platinoxid als Katalysator bis zur Aufnahme der berechneten *Wasserstoff*-Menge bei 30–40° und Atmosphärendruck hydriert. Der nach dem Abtrennen des Katalysators und Abdestillieren des Lösungsmittels zurückbleibende, zähe Rückstand wurde ohne weitere Reinigung direkt für die Oxydation zu IV benutzt.

γ-[3-Oxo-cyclohexyl]-buttersäure (IV): 18.6 g der rohen Säure III werden in 120 ccm Eisessig gelöst und tropfenweise unter Rühren mit einer Lösung von 6 g Chromtrioxyd in 150 ccm Eisessig und 8 ccm Wasser versetzt. Dabei wird die Innentemperatur durch Wasser-

⁵⁾ M. H. LEROUX, Ann. Chimie (8) **21**, 458 [1910].

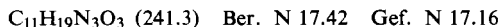
⁶⁾ A. GREEN, J. chem. Soc. [London] **1927**, 2341.

⁷⁾ S. J. SERGIEWSKAJA und L. M. MOROZOWSKAJA, J. allg. Chem. (russ.) **14**, 1107 [1944].

⁸⁾ G. SCHROETER, Liebigs Ann. Chem. **426**, 83 [1922].

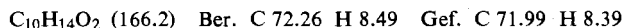
kühlung auf 20–23° gehalten. Nach beendeter Zugabe läßt man noch 2 Stdn. bei Zimmertemp. stehen, versetzt dann mit 600 ccm Wasser und schüttelt mit Chloroform aus. Die Chloroformlösung wird mit Wasser gewaschen und mit Calciumchlorid getrocknet. Nach dem Abdestillieren des Lösungsmittels erhält man 10.5 g (57 % d. Th.) der rohen Säure, die durch ihr Semicarbazon charakterisiert wurde.

Semicarbazon von IV: 0.5 g der rohen Säure *IV* werden in wenig Äthanol gelöst und in der Wärme mit einer Lösung von 0.5 g *Semicarbazid-hydrochlorid* und 0.75 g Natriumacetat versetzt. Die Lösung wird kurze Zeit zum Sieden erhitzt und in ein heißes Wasserbad gestellt. Beim Abkühlen kristallisiert das *Semicarbazon* aus. Schmp. 173° (aus Äthanol).

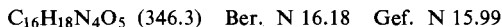


γ -[3-Oxo-cyclohexyl]-buttersäure-äthylester (V): Die Veresterung der rohen Säure *IV* erfolgte mit absol. Äthanol unter Zusatz von 10 % Schwefelsäure. Sdp._{0,01} 104°; Ausb. 68 % d. Th.

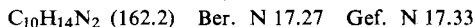
Dekalindion-(1.8) (VI): 2.5 g Natrium werden unter Xylol pulverisiert, durch Dekantieren vom Xylol abgetrennt, mit Äther gewaschen und darauf mit 45 ccm absol. Äther versetzt. Nach Zugabe von 5.1 g absol. Äthanol wird unter Verwendung eines Hershberg-Rührers bis zum Verschwinden des metallischen Natriums unter Rückfluß erhitzt (ca. 8 Stdn.). Nun läßt man innerhalb 2 Stdn. 21.2 g des *Esters V* zutropfen und erhitzt noch weitere 3 Stdn. Das Lösungsmittel wird abdestilliert und der Kolbeninhalt anschließend 30 Min. im Ölbad auf 100° erhitzt. Das gelbe, sirupöse Reaktionsgemisch wird nach dem Abkühlen unter Eiskühlung mit verd. Schwefelsäure (1:10) angesäuert und mit Äther extrahiert. Die äther. Lösung wird mit Wasser gewaschen und mit Calciumchlorid getrocknet. Nach dem Abdestillieren des Äthers bleibt ein bräunliches Öl, das nach kurzer Zeit krist. erstarrt. Zur Reinigung wird aus Ligroin (Sdp. 60–80°) umkristallisiert, wobei zur Vervollständigung der Kristallisation in einem Methanol/CO₂-Kältegemisch gekühlt werden muß. Ausb. 11.7 g (71 % d. Th.), Schmp. 55–56°. Die farbl. wasserdampf-flüchtigen Blättchen geben mit Eisen(III)-chlorid in alkohol. Lösung eine violette Färbung. Sie sind leicht lösl. in Äther, Äthanol, Benzol, Chloroform, Kohlenstofftetrachlorid, Essigester; lösl. in Ligroin; unlösl. in Wasser.



Mono-2.4-dinitro-phenylhydrazon von VI: Die Lösung von 0.5 g *VI* in 5 ccm Äthanol wird mit 0.6 g *2.4-Dinitro-phenylhydrazin*, das unter Zusatz von einem Tropfen Eisessig in 30 ccm Äthanol gelöst wurde, versetzt und 7 Stdn. unter Rückfluß erhitzt. Die nach dem Erkalten auskristallisierte Verbindung wird aus wenig Äthanol umkristallisiert. Ausb. 0.85 g (87 % d. Th.); Schmp. 184–185°.



Pyrazol VII: 1 g *VI* wird in 3 ccm Äthanol gelöst, mit einer Lösung von 0.8 g Natriumhydroxyd in 7 ccm Wasser und darauf mit 1.3 g 85-proz. *Hydrazinhydrat* versetzt. Nach dem Verdünnen mit Wasser erhält man farbl. Kristalle, die durch Umkristallisieren aus Ligroin (Sdp. 60–80°) oder durch Sublimation gereinigt werden können. Ausb. 0.8 g (82 % d. Th.), Schmp. 150°.



Isoxazol VIII: 1 g *VI* und 0.5 g *Hydroxylamin-hydrochlorid* werden in 12 ccm 90-proz. Äthanol gelöst und 2 Stdn. auf dem Dampfbad unter Rückfluß erhitzt. Nach dem Erkalten versetzt man unter Eiskühlung mit verd. Natronlauge bis zur alkalischen Reaktion. Die sich

hierbei abscheidenden Kristalle können durch Sublimation gereinigt werden. Ausb. 0.82 g (84 % d. Th.), Schmp. 48–49°. Die Verbindung zersetzt sich nach mehrtägigem Aufbewahren.

$C_{10}H_{13}NO$ (163.2) Ber. N 8.58 Gef. N 8.58

Kupfersalz von VI: Zu einer Lösung von 1 g VI in 10 ccm Äthanol gibt man eine gesättigte, wäbr. Lösung von *Kupferacetat*. Die Fällung des sich hierbei abscheidenden *Kupfer-Chelates* wird durch Zugabe von einigen Tropfen Ammoniak vervollständigt. Der Niederschlag wird abfiltriert, getrocknet und in Chloroform aufgenommen. Nach dem Abdestillieren des Chloroforms bleibt als Rückstand das Kupfersalz, das durch Umkristallisieren aus wenig Benzol oder durch Füllen mit Äther aus der benzolischen Lösung gereinigt werden kann. Schmp. 256° (Zers.), grünlich-graue Nadeln. Lösl. in Benzol, Chloroform, Kohlenstofftetrachlorid; unlösl. in Wasser, Äther und Ligroin.

$CuC_{20}H_{26}O_4$ (394.0) Ber. Cu 16.13 Gef. Cu 15.77

Berylliumsatz von VI: Die alkohol. Lösung von VI wird, wie vorstehend beschrieben, mit einer gesätt. Lösung von *Berylliumsulfat* in Wasser versetzt. Aufarbeitung wie oben. Das *Berylliumsatz* fällt in Form von schwach gelb gefärbten Prismen an, die in Äther löslich sind und hieraus bei Kühlung im Methanol/Kohlendioxid-Kältegemisch umkristallisiert werden können. Schmp. 275° (Zers.). Lösl. in Benzol, Chloroform und Kohlenstofftetrachlorid; unlösl. in Wasser und Ligroin.

$BeC_{20}H_{26}O_4$ (339.5) Ber. Be 2.66 Gef. Be 2.68 (als Sulfat bestimmt)

Heptan-tricarbonensäure-(1.4.7) (IX): Die Lösung von 4.15 g (0.025 Mol) VI in 350 ccm Methanol wird innerhalb von 15 Min. unter Rühren mit einer Lösung von 35 g *Natriumperjodat* in 350 ccm Wasser versetzt, wobei die Temperatur auf 30° steigt. Man rührt noch weitere 8 Stdn. bei 40° Wasserbadtemperatur, filtriert das ausgeschiedene Natriumjodat ab und wäscht mit Methanol. Die vereinigten Filtrate werden i. Vak. eingengt, bis das gesamte Methanol und ein Teil des Wassers entfernt ist; dabei beobachtet man das Übergehen einer kleinen Menge von nicht umgesetztem Ausgangsmaterial. Der Rückstand wird mit Äther extrahiert und die äther. Lösung mit Tierkohle behandelt. Die Säure wird aus den eingengten Extrakten durch Ligroinzusatz gefällt. Durch mehrfache Wiederholung dieser Ligroinfällung erhält man die *Säure* in reiner Form. Ausb. 3.7 g (64 % d. Th.), Schmp. 121–122°. Lit.³⁾: 120°.

$C_{10}H_{16}O_6$ (232.2) Ber. C 51.72 H 6.95 Gef. C 52.07 H 6.97

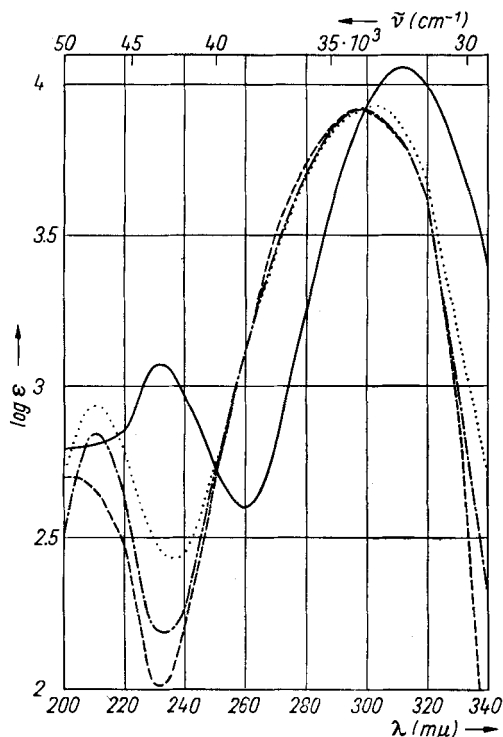
Bestimmung des Enolgehalts von VI: Die Enol-Bestimmung erfolgte nach der indirekten Titrationsmethode⁹⁾ in Methanol.

Einwaage g	Methanol ccm	Brom- Lösng. ccm	β -Naph- thol-Lösg. ccm	NaJ ccm	Zeit Min.	Temp.	0.1 n $Na_2S_2O_3$ ccm	Enol- gehalt %
0.2980	60	20.00	2.0	10.0	10	35°	36.78	102.6
0.1908	50	20.00	2.0	10.0	10	35°	22.98	100.1
0.2374	50	20.00	2.0	10.0	10	40°	28.84	101.0
0.2020	50	20.00	2.0	10.0	10	40°	28.82	102.1

Der Mittelwert liegt bei einem Enolgehalt von 101.4 %.

⁹⁾ K. H. MEYER und P. KAPPELMEIER, Ber. dtsch. chem. Ges. 44, 2718 [1911].

Bestimmung der Dissoziationskonstante von VI: Die UV-Absorption wurde von Lösungen des Dekalindions-(1.8) (VI) in 2.5% Methanol enthaltenden wäßr. Pufferlösungen aufgenommen.



Die Pufferlösungen wurden nach BRITTON-ROBINSON¹⁰⁾ hergestellt. Sie enthielten im Liter Wasser 0.04 n H₃PO₄, 0.04 n CH₃CO₂H und 0.04 n H₃BO₃. Der gewünschte p_H-Wert wurde durch Zugabe von 0.2 n NaOH an der Glaselektrode eingestellt. Die Meßlösungen wurden so hergestellt, daß ungefähr 10 mg VI in 2.5 ccm Methanol gelöst und dann mit der Pufferlösung auf 100 ccm aufgefüllt wurden. Das Spektrum der Enol-Form wurde bei p_H 5.63 und das des Enolates in 5n NaOH gemessen. Zwei weitere Messungen wurden bei p_H 9.91 und 10.48 durchgeführt.

UV-Absorptionsspektren
von Dekalindion-(1.8) (VI)

— in 5 n NaOH (Enolat),
- - - bei p_H 5.63 (Enol),
- · - · bei p_H 9.91 und
· · · · bei p_H 10.48

Es wurden die molaren Extinktionen von $\lambda = 240, 270, 280$ und $285 \text{ m}\mu$ ausgewertet. Folgende Werte für die molaren Extinktionen wurden erhalten.

$\lambda(\text{m}\mu)$	ϵ_{Enol}	$\epsilon_{\text{gef. bei p}_H 9.91}$	$\epsilon_{\text{gef. bei p}_H 10.48}$	ϵ_{Enolat}
240	167	199	288.5	706.2
270	3220	2825	2740	646.2
280	5469	5218.5	5047	1855
285	6610.5	6471	6283	3114

Daraus wurde berechnet:

		$\lambda (\text{m}\mu)$	240	270	280	285	Mittel
1.	$\log \frac{\epsilon_{\text{Enol}} - \epsilon_{\text{gef.}}}{\epsilon_{\text{gef.}} - \epsilon_{\text{Enolat}}}$	für p _H 9.91	-1.2000	-0.7417	-1.1279	-1.3814	-1.113
2.	$\log \frac{\epsilon_{\text{Enol}} - \epsilon_{\text{gef.}}}{\epsilon_{\text{gef.}} - \epsilon_{\text{Enolat}}}$	für p _H 10.48	-0.5503	-0.6396	-0.8788	-0.9857	-0.763

Entsprechend der Formel: $p_K = p_H - \log \frac{\epsilon_{\text{Enol}} - \epsilon_{\text{gef.}}}{\epsilon_{\text{gef.}} - \epsilon_{\text{Enolat}}}$

erhält man für VI den mittleren p_H-Wert 11.13.

¹⁰⁾ H. T. S. BRITTON, Hydrogen Ions, Chapman & Hall, London 1932, S. 225.