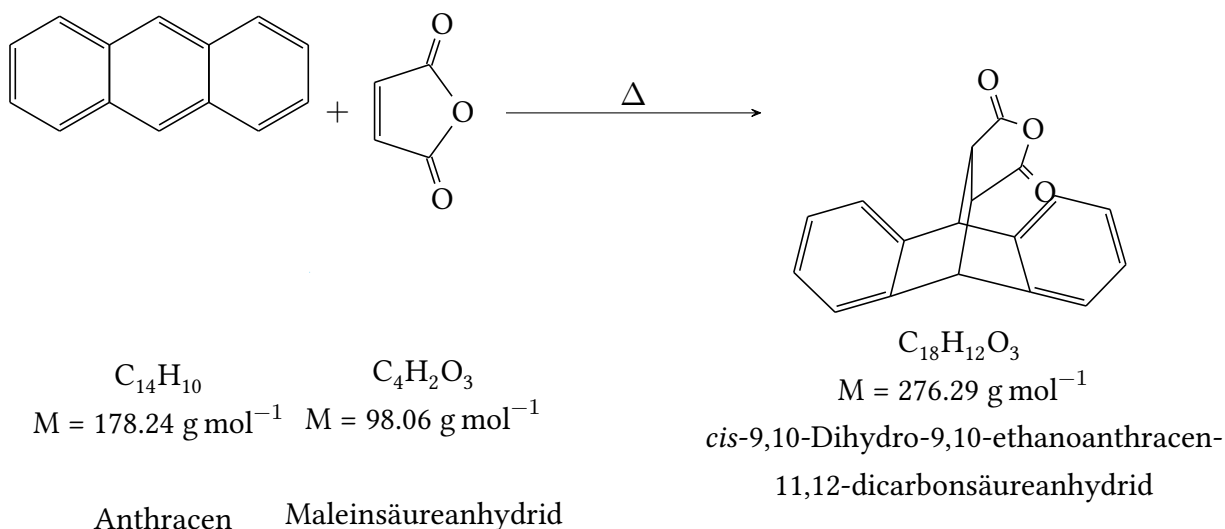


### 1. Reaktionstyp: Diels-Alder-Reaktion



### 2. Berechnung des Ansatzes:

Es sollten 5.000 g (18.10 mmol) *cis*-9,10-Dihydro-9,10-ethanoanthracen-11,12-dicarbonsäureanhydrid hergestellt werden. Die Umrechnung des Literaturansatzes<sup>?</sup> ergab folgenden Ansatz:

Anthracen	1.00 eq	22.02 mmol	3.925 g
Maleinsäureanhydrid	1.00 eq	22.02 mmol	2.150 g
Xylol			300 ml

### 3. Durchführung<sup>?</sup>

Zuerst wurden 3.925 g (22.02 mmol) Anthracen und 2.150 g (22.02 mmol) Maleinsäureanhydrid in 300 ml Xylol gelöst. Im Anschluss wurden beide Komponenten in einem 500 ml-Dreihalskolben, ausgestattet mit Rückflusskühler und Thermometer, vorgelegt und zum Sieden erhitzt. Das Reaktionsgemisch wurde für 10 Minuten gerührt und anschließend abgekühlt. Es fiel dabei ein Feststoff aus. Danach wurde das Rohprodukt/Xylol Gemisch destillativ aufgereinigt und das Rohprodukt aus Xylol kristallisiert. Das Produkt wurde als farbloser Feststoff erhalten.

#### 4. Ausbeute

5.556 g (20.10 mmol) = 100 %

3.959 g (14.32 mmol) = 71 % (Lit.<sup>?</sup> : 90 %)

#### 5. Physikalische Daten des Produktes

*cis-9,10-Dihydro-9,10-ethanoanthracen-11,12-dicarbonsäureanhydrid*

Schmelzpunkt

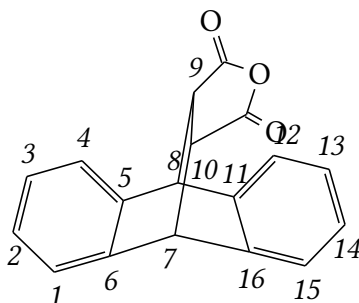
Lit.<sup>?</sup> : 262 °C

Exp. : 260 °C

#### 6. Spektrenauswertung

**IR-Spektrum** (KBr, fest):  $\tilde{\nu}$  = 3080 (=C-H-Valenzschwingung, Aromat), 1868, 1772 (-C=O-Valenzschwingung), 1460 (-C=C-Valenzschwingung, Aromat)  $\text{cm}^{-1}$ .

300 MHz:  $\delta$  = 3.62 (s, 2, -9, -10), 4.88 (s, 2, -7, -8), 7.18–7.41 (m, 8, -1, -2, -3, -4, -12, -13, -14, -15) ppm.



#### 7. Mechanismus<sup>???</sup>

Die Diels-Alder-Reaktion verläuft in einem Schritt. In einer konzertierten Cycloaddition vereinigen sich Anthracen (**1**) und Maleinsäureanhydrid (**2**) unter Bildung eines sechsgliedrigen Übergangszustandes das *cis*-9,10-Dihydro-9,10-ethanoanthracen-11,12-dicarbonsäureanhydrid (**3**). Werden der Übergangszustand der Reaktion anhand der MO-

Theorie betrachtet, so wird das Anthracen (**1**) als Dien und das Maleinsäureanhydrid (**2**) Dienophil bezeichnet. Dabei treten das höchstbesetzte Orbital (HOMO) des Diens **1** und das niedrigste unbesetzte Orbital (LUMO) des Dienophils **2** in Wechselwirkung. Unter Aufhebung zweier  $\pi$ -Bindungen werden zwei neue  $\sigma$ -Bindungen gebildet. Dies ist die Triebkraft der Reaktion. Da die neuen  $\sigma$ -Bindungen jeweils von einer Seite der  $\pi$ -Systeme aus gebildet werden, wird die Diels-Alder-Reaktion als suprafaciale Addition bezeichnet.

## 8. Abfallentsorgung

Das Lösungsmittel wurde im Behälter für halogenfreie Kohlenwasserstoffe entsorgt.

## 9. Literatur

- [1] H. Becker, W. Berger, G. Domschke, E. Fanghänel, J. Faust, M. Fischer, F. Gentz, K. Gewalt, R. Gluch, R. Mayer, K. Müller, D. Pavel, H. Schmidt, K. Schollberg, K. Schwetlick, E. Seiler, G. Zeppenfeld, R. Beckert, G. Domschke, W. Habicher, P. Metz, *Organikum*, 21. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim **2009**, S. 333.
- [2] S. Hauptmann, *Organischen Chemie*, 1. Aufl., Verlag Harri, Frankfurt **1985**, S. 247.
- [3] R. Grossman, *The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanism*, 2. Aufl., Springer-Verlag, New York **2002**, S. 173.