

Teilnehmer: Alexander Wolf, Mario Leimer, Otto Scipal

Synthese disubstituierter Spiroverbindungen

Betreuer: Mag. Dr. Herbert Angleitner

The purpose of this project is to synthesize disubstituted compounds with a spiro-system. Spiro forms of lactones and oxazines are frequently used as leuco dyes, displaying chromism, the reversible structural change between forms giving rise to colorless and colored appearances, especially in solution.

The aim of this project was to activate different compounds with a non-nucleophilic base and letting them react with themselves as a result of a Diels-Alder-Reaction. At the beginning a dibrominated o-xylene was used for cyclization. After implementation the experiment mixtures emerged that the product could not be separate, therefore it was decided to pursue the reaction with a 2,3-bis(brommethyl) nitrobenzene. First the dibrominated nitro-xylene had to be synthesis via a Wohl-Ziegler-reaction of nitro-xylene. Also this produced experiment mixture emerged that the product could not be separate. So it was decided to use a dibrominated o-xylene which holds a methoxy-group. After methylation of a dimethyl phenol with dimethyl-sulfate the received 2,3-dimethylanisol was implemented to a 2,3-bis(brommethyl)anisole through a Wohl-Ziegler-reaction. Thereupon it was separated and could react with itself after activation with potassium tert-butoxide to form a spiro compound. Subsequently the received product was characterized via NMR and IR spectroscopy.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Synthese von disubstituierten Spiroverbindungen. Diese Verbindungsklasse wird mittlerweile in verschiedenen Lactonen und Oxazinen als Leucofarbstoff eingesetzt, also in Verbindungen, welche Chromie zeigen – Möglichkeit zur reversiblen Änderungen der Struktur, welche zu Farbänderungen führen und oft in Lösungen unter pH-Änderung auftreten.

Ziel dieser wissenschaftlichen Arbeit war es verschiedene Edukte durch Aktivierung mit einer starken nicht nucleophilen Base mit sich selbst, infolge einer Diels-Alder-Reaktion, reagieren zu lassen. Zu Beginn wurde ein dibromiertes o-Xylol für die Cyclisierung eingesetzt. Da bei den Versuchen jedoch ein Produktgemisch entstand, welches nicht separiert werden konnte, wurde

beschlossen, die Reaktion mit 2,3-Bisbrom(methyl)nitrobenzol zu wiederholen. Zuerst musste das dibromierte nitro-Xylol über eine Wohl-Ziegler-Reaktion hergestellt werden. Jedoch ergab sich auch hier ein Produktgemisch, welches nicht aufgetrennt werden konnte. So wurde entschieden, noch ein dibromiertes Anisol einzusetzen. Nach der Methylierung von Dimethylphenol mit Dimethylsulfat wurde das erhaltene Dimethylanisol über eine Wohl-Ziegler-Reaktion zum 2,3-Bis(brommethyl)anisol umgesetzt. Daraufhin wurde es separiert und konnte nach der Aktivierung mit Kalium-tert-Butoxid zu einer Spiroverbindung umgesetzt werden. Im Anschluss wurde das erhaltene Produkt noch mittels NMR und IR charakterisiert.

