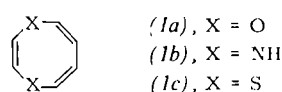


# 1,4-Dioxocin

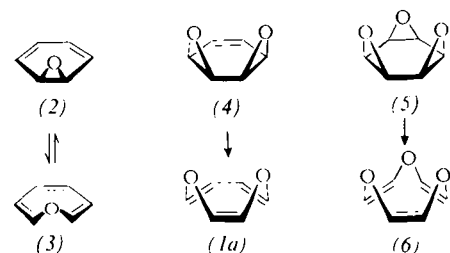
Von Emanuel Vogel, H.-J. Altenbach und Dieter Cremer<sup>[\*]</sup>

Herrn Professor R. Criegee zum 70. Geburtstag in Verehrung gewidmet

Die Existenz und Aromatizität des Cyclooctatetraen-Dianions<sup>[1]</sup> regte in den letzten Jahren zu zahlreichen Versuchen an, die mit dem Dianion isoelektronischen 10 $\pi$ -Heterocyklen (1a)–(1c), die 1,4-Diheterocine (1,4-Dihetero[8]annulene)<sup>[2]</sup>, zu synthetisieren. Diese Bemühungen führten inzwischen zwar zur Darstellung einiger nicht-aromatischer Benzoderivate der 1,4-Diheterocine<sup>[3]</sup>, doch gelang es bisher nicht, die Stammverbindungen zu gewinnen<sup>[4]</sup>.



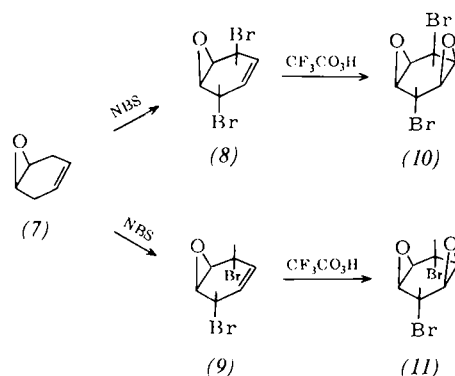
Unser Interesse an derartigen 10 $\pi$ -Heterocyklen, speziell am 1,4-Dioxocin (1a), ergab sich zwangsläufig aus der Weiterentwicklung schon vor längerer Zeit begonnener Arbeiten über Synthese und Valenzisomerisierungen von Arenoxiden<sup>[5,6]</sup>. Während sich Benzolmonoxid (2) bei Raumtemperatur in schnellem, energetisch ausgewogenem Gleichgewicht mit Oxepin (3) befindet<sup>[5]</sup>, ist für das bislang unbekannte *syn*-Benzoldioxid (4) zu erwarten, daß es relativ leicht eine orbitalsymmetrie-erlaubte [ $\pi_2 + \sigma_2 + \sigma_2$ ]-Cycloreversion (Retro-Diels-Alder-Reaktion) zum 1,4-Dioxocin (1) erfährt. Dem ebenfalls noch hypothetischen *syn*-Benzoltrioxid (5) schließlich steht eine [ $\sigma_2 + \sigma_2 + \sigma_2$ ]-Cycloreversion (Retro-Homo-Diels-Alder-Reaktion) unter Bildung des interessanten Heterocyclus *all-cis*-1,4,7-Trioxonin (6) offen<sup>[7,8]</sup>. Wir können nunmehr



über die Synthese des 1,4-Dioxocins (1a) via einer thermischen *syn*-Benzoldioxid-Valenzisomerisierung berichten.

Ausgangspunkt des Weges zu (1a) ist das Monoepoxid von 1,4-Cyclohexadien (7)<sup>[9]</sup>. Wird (7) in siedendem Tetrachlorkohlenstoff mit *N*-Bromsuccinimid (NBS) (Molverhältnis 1:2) umgesetzt, so entsteht ein Gemisch von Bromierungsprodukten, aus dem sich durch fraktionierende Kristallisation aus Äther/Methylenchlorid (1:1) 1,2-Epoxy-*trans*-3,6-dibrom-4-cyclohexen (8) [Fp=117°C; Ausb. 18%; NMR (CDCl<sub>3</sub>): breite Multipletts bei  $\tau$ =4.25 (2 ole-

finische Protonen), 4.95 und 5.10 (2 CHBr-Protonen) sowie 6.09 und 6.30 ppm (2 epoxidische Protonen)] neben einem seiner beiden *cis*-3,6-Dibrom-Isomeren, sehr wahrscheinlich dem *anti*-1,2-Epoxy-*cis*-3,6-dibrom-4-cyclohexen (9) [Fp=97°C; Ausb. 5%; NMR (CDCl<sub>3</sub>): enge Multipletts bei  $\tau$ =4.17 (2 olefinische Protonen), 5.12 (2 CHBr-Protonen) und 6.28 ppm (2 epoxidische Protonen)], isolieren läßt.

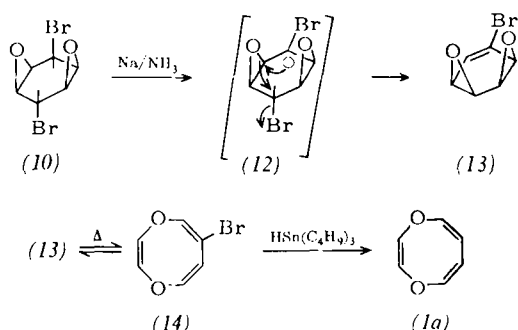


Die Konfigurationszuordnung für diese Epoxydibromide ergibt sich aus der Gegenüberstellung ihrer NMR-Spektren. Bei der Verbindung vom Fp=117°C zeigen epoxidische und CHBr-Protonen jeweils unterschiedliche chemische Verschiebungen, woraus auf die Gegenwart von (8) zu schließen ist, während beim Isomeren vom Fp=97°C, der Symmetrie einer Konfiguration mit *cis*-ständigen Bromatomen entsprechend, die genannten Typen von Protonen nur zu je einem engen Multiplett Anlaß geben. Die Konfiguration (9) für das Isomere vom Fp=97°C kann aus dem NMR-Befund<sup>[10]</sup> gefolgert werden, daß bei Cyclohexenepoxiden, die *syn*- bzw. *anti*-ständige Substituenten (OH- und OAc-Gruppen) in Nachbarstellung zum Epoxidring besitzen, die Resonanzen der Epoxid-Protonen bei *anti*-Anordnung der Substituenten bei höherer Feldstärke auftreten. Für das Vorliegen von (9) spricht nicht zuletzt das Argument, daß die Bildung dieses Epoxydibromids gegenüber der seines *syn*-1,2-Epoxy-*cis*-3,6-dibrom-Isomeren aus sterischen Gründen bevorzugt sein sollte<sup>[11]</sup>.

Die Epoxydibromide (8) und (9) konnten mit Trifluorperessigsäure nicht dagegen mit anderen Persäuren – in Na<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>-gepufferter Methylenchlorid-Lösung epoxidiert werden, wobei jeweils ein sterisch einheitliches Diepoxydibromid in nahezu quantitativer Ausbeute entstand. Bei dem aus (9) gebildeten Diepoxydibromid muß es sich um (11) handeln, denn das NMR-Spektrum der Verbindung [(CDCl<sub>3</sub>): enge Multipletts bei  $\tau$ =5.13 (2 CHBr-Protonen) und 6.44 ppm (4 epoxidische Protonen)] zeigt an, daß die vier epoxidischen Protonen äquivalent sind. Die *syn*-Stereospezifität der Epoxidation von (9) ist offenbar darauf zurückzuführen, daß die vorhandene Epoxidfunktion den Übergangszustand der Reaktion durch Wasserstoffbrückenbindung zu stabilisieren vermag<sup>[12]</sup>. Im Falle des von (8) abgeleiteten Diepoxydibromids ist eine Konfigurationszuordnung durch das NMR-Spektrum [(CDCl<sub>3</sub>): Triplets bei  $\tau$ =5.15 und 5.31 (2 CHBr-Protonen) sowie Multipletts bei  $\tau$ =6.27 und 6.49 ppm (4 epoxidische Protonen)] problematisch, doch kann auch für diese Verbindung, einerseits aus Analogiegründen und andererseits

[\*] Prof. Dr. E. Vogel, Dipl.-Chem. H.-J. Altenbach und Dipl.-Chem. D. Cremer  
 Institut für Organische Chemie der Universität  
 5 Köln 1, Zulpicher Straße 47

aufgrund ihrer Folgereaktionen, eine *syn*-Anordnung der beiden Epoxidringe – gemäß Struktur (10) – als gesichert gelten<sup>[11]</sup>.



Das Diepoxydibromid (10) unterliegt bei der Einwirkung von 1 g-Atom Natrium pro mol (10) in flüssigem Ammoniak bei  $-78^{\circ}\text{C}$  einer bemerkenswerten Umwandlung:

Unter Eliminierung von einem mol Bromwasserstoff entsteht – vermutlich über die anionische Zwischenstufe (12) – 1-Brom-*syn*-benzoldioxid (13) vom  $\text{Fp} = 73^{\circ}\text{C}$  (Zers.); Ausb. 63% [NMR ( $\text{CDCl}_3$ ): Dublett von Dubletts bei  $\tau = 3.21$  (1 olefinisches Proton) und Multiplett bei  $\tau = 6.41$  ppm (4 epoxidische Protonen)]. Die *syn*-Konfiguration dieses Benzoldioxids folgt mit großer Sicherheit aus der relativ niedrigen Aktivierungsenergie von 28.5 kcal/mol ( $A = 3.8 \times 10^{13}$ ), mit der sich die Verbindung in Tetrachlorkohlenstoff thermisch bis zur Erreichung eines Gleichgewichts in 6-Brom-1,4-dioxocin (14) umlagert [bei  $77^{\circ}\text{C}$  (in  $\text{CCl}_4$ ) 35% (13) und 65% (14) (Aktivierungsparameter der Rückreaktion  $E_a = 25.6$  kcal/mol und  $A = 3.2 \times 10^{12}$ )]. Das Gleichgewicht ist von beiden Seiten einstellbar. Die Isolierung von (14) [ $\text{Kp} = 35^{\circ}\text{C}/0.5$  Torr; NMR ( $\text{CCl}_4$ ): Singulett bei  $\tau = 3.15$  (H-5), AB-System bei  $\tau = 4.06$  und 4.20 mit  $J = 4.2$  Hz (H-2, H-3) und weiteres AB-System bei  $\tau = 3.72$  und 4.63 ppm mit  $J = 7.5$  Hz (H-7, H-8)] gelang durch sorgfältige Destillation unterhalb der Isomerisierungstemperatur. (14) läßt sich durch reduktive Eliminierung des Bromatoms mit Tri-*n*-butyl-zinnhydrid bei Raumtemperatur leicht in 1,4-Dioxocin (1a), eine farblose Flüssigkeit vom  $\text{Kp} = 39^{\circ}\text{C}/14$  Torr,  $n_D^{20} = 1.5215$ , überführen (Ausb. 32%).

1,4-Dioxocin (1a) wird sowohl durch seine Spektren als auch durch sein chemisches Verhalten eindeutig als olefinische Verbindung ausgewiesen. Das NMR-Spektrum (100 MHz,  $\text{CCl}_4$ ) der Verbindung besteht im Einklang mit der angenommenen Struktur lediglich aus einem Singulett bei  $\tau = 4.0$  (H-2, H-3) und einem  $\text{AA}'\text{XX}'$ -System bei  $\tau_A = 3.41$  und  $\tau_X = 4.88$  ppm (H-5, H-8 bzw. H-6, H-7). Wie durch Analyse des  $\text{AA}'\text{XX}'$ -Systems ermittelt wurde, besitzen die Protonen des Dien-Molekülteils die folgenden Kopplungskonstanten:  $J_{5,6} = 8.00$ ,  $J_{5,7} = -0.17$ ,  $J_{5,8} = 0.76$  und  $J_{6,7} = 9.22$  Hz. Die gleiche Größenordnung der vicinalen Kopplungen  $J_{\text{AX}}$  und  $J_{\text{X'X'}}$  ist angesichts der Absorption sämtlicher Protonen im olefinischen Bereich sicher nicht Ausdruck eines weitgehenden Bindungsausgleichs in (1a)<sup>[13b]</sup>, sondern dürfte auf die unterschiedliche Beeinflussung der beiden Kopplungen durch die Sauerstoffatome<sup>[13]</sup> sowie auf eine koplanare Anordnung der konjugierten Doppelbindungen<sup>[14]</sup> zurückzuführen sein. Eine Aussage über die bevorzugte Konformation des gesamten Moleküls läßt das NMR-Spektrum nicht zu.

Das UV-Spektrum von (1a) [ $\lambda_{\text{max}}$  (in Cyclohexan) = 238 ( $\epsilon = 7400$ ) und 285 nm (320, Schulter)] läßt in seinem Habitus Verwandtschaft mit dem von 1,3,6-Cyclooctatrien<sup>[16]</sup> erkennen.

Chemisch manifestiert sich die olefinische Natur des 1,4-Dioxocins vor allem in seiner Neigung, bereits nach kurzem Stehen zu polymerisieren. Der neue Heterocyclus ist überdies mit Palladium/Kohle in Äther leicht hydrierbar, wobei eine als 1,4-Dioxacyclooctan [ $\text{Kp} = 149^{\circ}\text{C}$ ; NMR ( $\text{CCl}_4$ ): Multipletts bei  $\tau = 6.22$  (4 Protonen) und 8.27 (4 Protonen) und Singulett bei  $\tau = 6.43$  ppm (4 Protonen)] angesprochene Verbindung (95%) neben einem noch nicht identifizierten Hydrierungsprodukt (5%) entsteht.

Ein thermisches Gleichgewicht zwischen 1,4-Dioxocin (1a) und dem valenzisomeren *syn*-Benzoldioxid (4), das sich nach den Erfahrungen bei (14) oberhalb ca.  $60^{\circ}\text{C}$  einstellen dürfte, konnte experimentell bisher nicht nachgewiesen werden. Falls ein derartiges Gleichgewicht vorliegt, so beträgt der Anteil der *syn*-Benzoldioxid-Komponente in  $\text{CCl}_4$ -Lösung unterhalb  $100^{\circ}\text{C}$  mit Sicherheit weniger als 5% (NMR-Erfassungsgrenze). Dies folgt ebenfalls aus den thermischen und spektroskopischen Eigenschaften des inzwischen auf unabhängigem Wege synthetisierten *syn*-Benzoldioxids (4)<sup>[17]</sup>.

Eingegangen am 13. März 1972 [Z 607]

Auf Wunsch der Autoren erst jetzt veröffentlicht

[1] T. J. Katz, J. Amer. Chem. Soc. 82, 3784, 3785 (1960).

[2] Zur Nomenklatur siehe: P. J. Garratt, A. B. Holmes, F. Sondheimer u. K. P. C. Vollhardt, Chem. Commun. 1971, 947.

[3] a) W. Schroth u. B. Werner, Angew. Chem. 79, 684 (1967); Angew. Chem. internat. Edit. 6, 697 (1967); W. Schroth, F. Billig u. A. Zschunke, Z. Chem. 9, 184 (1969); b) H.-J. Shue u. F. W. Fowler, Tetrahedron Lett. 1971, 2437; c) D. L. Coffen, Y. C. Poon u. M. L. Lee, J. Amer. Chem. Soc. 93, 4627 (1971).

[4] 1,4-Dithiocin (1c), das 1,4-Diheterocin, für das am ehesten aromatischer Charakter vorauszusehen war, fragmentiert nach D. L. Coffen et al. [3c] bereits unter Bildungsbedingungen, vermutlich via *syn*-Benzolbisepisulfid, in Benzol und Schwefel; über ein mehrfach substituiertes, stabiles 1,4-Dithiocin berichteten dagegen M. O. Riley u. J. D. Park, Tetrahedron Lett. 1971, 2871.

[5] Zusammenfassung: E. Vogel u. H. Günther, Angew. Chem. 79, 429 (1967); Angew. Chem. internat. Edit. 6, 385 (1967).

[6] Die im hiesigen Arbeitskreis unter vorwiegend theoretischen Aspekten initiierte Arenoxid-Oxepin-Chemie gewann unerwartet dadurch eine neue Dimension, daß Arenoxide in jüngster Zeit von B. Witkop et al. als labile Metabolite des Aromatenstoffwechsels erkannt wurden; siehe B. Witkop, 13. Paul-Karrer-Vorlesung, Experientia 27, 1121 (1971).

[7] R. B. Woodward u. R. Hoffmann, Angew. Chem. 81, 797 (1969); Angew. Chem. internat. Edit. 8, 781 (1969).

[8] Vgl. hierzu das thermische Verhalten von Bis- und Trishomobenzolen sowie deren Monohetero-Derivaten: a) W. R. Roth u. B. Peltzer, Liebigs Ann. Chem. 685, 56 (1965); b) H. Prinzbach u. D. Stusche, Angew. Chem. 82, 836 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, 799 (1970); Helv. Chim. Acta 54, 755 (1971); c) A. de Meijere, D. Kaufmann u. O. Schallner, Angew. Chem. 83, 404 (1971); Angew. Chem. internat. Edit. 10, 417 (1971); d) H. W. Whitlock Jr. u. P. F. Schatz, J. Amer. Chem. Soc. 93, 3837 (1971); e) D. L. Dalrymple u. S. P. B. Taylor, ibid. 93, 7098 (1971).

[9] M. Tiffeneau u. B. Tschoubar, C. R. Acad. Sci. Paris 212, 581 (1941).

[10] K. Jankowski u. J.-Y. Daigle, Canad. J. Chem. 49, 2594 (1971).

[11] Zur Erhärtung der den Epoxy- und Diepoxydibromiden zugeordneten Konfigurationen [(8) und (9) bzw. (10) und (11)] untersuchen wir zur Zeit die Signalverschiebungen in den NMR-Spektren der vier Verbindungen bei Zusatz von paramagnetischen Lanthanoiden-Komplexen.

[12] H. B. Henbest, Tilden Lecture of the Chemical Society, London 1962.

[13] L. M. Jackman u. S. Sternhell: Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry, Pergamon Press, Oxford 1969.

[14] Eine verdrehte Anordnung sollte aufgrund der von Karplus und Conroy untersuchten Diederwinkelabhängigkeit [15] ein umgekehrtes

Verhältnis der Kopplungskonstanten im Sinne  $J_{5,6} > J_{6,7}$  erwarten lassen.

[15] M. Karplus, J. Amer. Chem. Soc. 85, 2870 (1963); H. Conroy, Advan. Org. Chem. 2, 265 (1960).

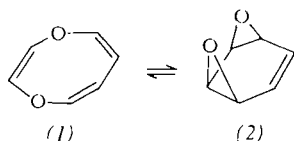
[16] A. C. Cope u. F. A. Hochstein, J. Amer. Chem. Soc. 72, 2515 (1950).

[17] Die Darstellung von *syn*-Benzoldioxid, einer beständigen farblosen Verbindung vom Fp = 93°C, gelang H. J. Altenbach ausgehend von (9) (noch unveröffentlicht).

## 1,4-Dioxocin — *syn*-Benzoldioxid-Valenztautomerie<sup>[\*\*]</sup>

Von Hans-Josef Altenbach und Emanuel Vogel<sup>[\*]</sup>

Oxepin und das valenztautomere Benzoloxid befinden sich bei Raumtemperatur in einem schnellen Gleichgewicht, in dem beide Komponenten in vergleichbarer Konzentration vorliegen<sup>[1]</sup>. Beim Übergang von Oxepin in Benzoloxid müssen sich somit die Aufhebung einer C=C-Doppelbindung und die Ausbildung einer Epoxid-C—C-Bindung energetisch annähernd die Waage halten<sup>[2]</sup>. Diese Feststellung impliziert die auf den ersten Blick überraschend erscheinende Möglichkeit, daß 1,4-Dioxocin (1) und *all-cis*-1,4,7-Trioxonin ebenfalls mit nachweisbaren Mengen ihrer Benzoloxid-Valenztautomeren, d. h. *syn*-Benzoldioxid (2) bzw. *syn*-Benzoltrioxid<sup>[3]</sup>, im Gleichgewicht stehen, denn auch bei der Isomerisierung dieser beiden Oxa-annulene entspricht dem Verlust einer Doppelbindung der Gewinn eines Epoxidrings. Wir erbringen hier den Nachweis für die Existenz einer — oberhalb ca. 50°C mobilen — 1,4-Dioxocin—*syn*-Benzoldioxid-Valenztautomerie<sup>[4, 5]</sup>.



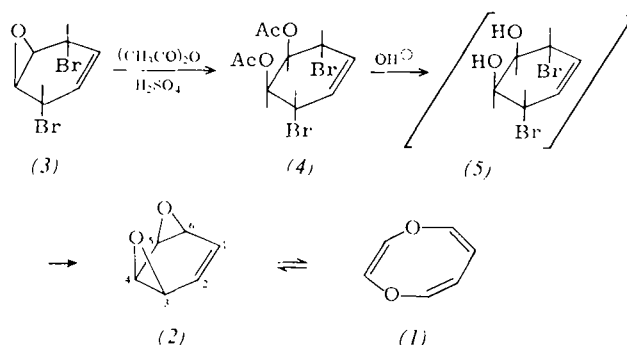
Das in der vorstehenden Mitteilung beschriebene 1,4-Dioxocin (1)<sup>[4]</sup> unterliegt, wie sich NMR-spektroskopisch leicht verfolgen läßt (Abb. 1a, 1b), bei 50–80°C in Benzol (nicht dagegen in CCl<sub>4</sub>) einer geringfügigen Isomerisierung, die sich bei fortdauernder Wärmeeinwirkung bemerkenswerterweise nicht verstärkt. Das Isomerisierungsprodukt ist einheitlich und kann nach destillativer Abtrennung (im Vakuum) des relativ flüchtigen (1) als kristalline Verbindung vom Fp = 93°C (aus Äther/Pentan) isoliert werden. Spektrenvergleich und Mischschmelzpunktsprobe beweisen die Identität des Isomeren mit dem durch eine unabhängige Synthese gewonnenen *syn*-Benzoldioxid (2).

Die Verfügbarkeit des *anti*-1,2-Epoxy-*cis*-3,6-dibrom-4-cyclohexens (3)<sup>[4, 6]</sup> ermutigte uns, die Darstellung des *syn*-Benzoldioxids auf konventionellem Wege über Benzol-bis(bromhydrine) [z. B. (5)] mit der für einen zweimaligen Epoxidringschluß geeigneten Konfiguration zu versuchen.

Wenn es gelänge, den Epoxidring in (3) einer *cis*-Öffnung unter Bildung von (5) [oder Estern von (5)] zu unterwer-

fen, hätte man ein Benzol-bis(bromhydrin) zur Hand, das bei der Einwirkung von Basen (2) liefern sollte.

Die Umsetzung von (3) mit Essigsäureanhydrid/Schwefelsäure (Raumtemperatur), bei der am ehesten mit einer *cis*-Öffnung des Epoxidrings (Diacetatbildung) gerechnet werden konnte<sup>[7]</sup>, führte in 90-proz. Ausbeute zu einem einheitlichen Diacetat vom Fp = 98°C. Bei dieser Verbindung handelt es sich jedoch offenbar nicht um das erwartete (4).



denn ihr NMR-Spektrum zeigt die Gegenwart von zwei verschiedenen Acetylgruppen an. Es liegt daher die Vermutung nahe, daß man es mit dem (4) entsprechenden *trans*-Diacetat zu tun hat. Ungeachtet der noch bestehenden Unsicherheit über Struktur<sup>[8]</sup> und Konfiguration des Diacetats vom Fp = 98°C behandelten wir die Verbindung bei Raumtemperatur mit methanolischem Kaliumhydroxid. Dabei entstand in 60-proz. Ausbeute eine nichtphenolische Substanz vom Fp = 93°C mit der Summenformel C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, die aufgrund ihres NMR- und IR-Spektrums als eines der stereoisomeren Benzoldioxide identifiziert wurde.

Das NMR-Spektrum (100 MHz; CDCl<sub>3</sub>) zeigt ein Triplett bei  $\tau = 3.53$  (H<sup>1</sup>, H<sup>2</sup>) und Multipletts bei  $\tau = 6.29$  (H<sup>4</sup>, H<sup>5</sup>) und 6.61 (H<sup>3</sup>, H<sup>6</sup>). Die Zuordnung der Epoxid-Protonen, nach der den allylischen Protonen H<sup>3</sup> und H<sup>6</sup> das Multiplett bei höherem Feld zukommt, basiert auf Doppelresonanzaufnahmen. Die Einstrahlung bei  $\tau = 6.61$  reduziert die beiden anderen Signalgruppen jeweils zu Singulets, während die bei  $\tau = 6.29$  lediglich das Multiplett bei  $\tau = 6.61$  zu einem Triplett werden läßt. Wird bei  $\tau = 3.53$  eingestrahlt, so vereinfacht sich das Multiplett bei höherem Feld in der Weise, daß es nunmehr zusammen mit dem bei tieferem Feld gelegenen Multiplett ein AA'BB'-System bildet. Durch Analyse des AA'BB'-Systems erhält man für die Epoxid-Protonen die Kopplungskonstanten  $J_{3,4} = 3.52$ ,  $J_{4,6} = 0.43$ ,  $J_{4,5} = 2.83$  und  $J_{3,6} = 0.01$  Hz<sup>[9]</sup>. Eine Wieder-gabe des NMR-Spektrums in C<sub>6</sub>D<sub>6</sub> findet sich in Abbildung 1.

Das IR-Spektrum weist im Bereich von 750 bis 950 cm<sup>-1</sup>, in dem zahlreiche Epoxide absorbieren, zwei ausgeprägte Banden auf; UV-Absorption oberhalb 220 nm ist nicht vorhanden.

Die *syn*-Konfiguration dieses Benzoldioxids folgt aus dem chemischen Befund, daß die Verbindung bei der katalytischen Hydrierung mit Pd/C in Essigester das bekannte *cis*-1,2,3,4-Diepoxy-cyclohexan<sup>[10]</sup> ergibt.

*syn*-Benzoldioxid (2) ist im kristallinen Zustand bei Raumtemperatur einige Zeit haltbar. Wie es das thermische Verhalten des 1,4-Dioxocins erwarten ließ, lagert sich (2) jedoch in Lösung oberhalb 50°C relativ rasch — bis zur Erreichung eines Gleichgewichts in das Valenztautomere mit achtegliedrigem Ring um. Unabhängig davon, von

[\*] Dipl.-Chem. H.-J. Altenbach und Prof. Dr. E. Vogel  
Institut für Organische Chemie der Universität  
5 Köln 1, Zulpicher Straße 47

[\*\*] Anmerkung bei der Korrektur (22. Sept. 1972): *anti*-Benzoldioxid, das letzte noch unbekannte Benzoloxid, konnte inzwischen ebenfalls synthetisiert werden [Fp = 58–59°C; NMR (CDCl<sub>3</sub>): Triplett bei  $\tau = 3.9$  sowie Multipletts bei  $\tau = 6.2$  und 6.9]. Die Verbindung entsteht aus 1,2-Epoxy-*trans*-3,6-dibrom-4-cyclohexen durch Reaktion mit Essigsäureanhydrid/Schwefelsäure und anschließende Behandlung des dabei erhaltenen Diacetats (Fp = 101°C) mit Natriumhydroxid in Äther.