

EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. 31. KÕIDE
KEEMIA. 1982, NR. 2

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ТОМ 31
ХИМИЯ. 1982, № 2

УДК 547.36 : 539.28

К. ЛЭЭТС, В. ЧЕРНЫШЕВ, Т. ПЕХК,
Х. РАНГ, А. ЭРМ

О СОСТАВЕ ПРОДУКТА ОМЫЛЕНИЯ МОНОАДДУКТА ТЕЛОМЕРА 2-МЕТИЛ-2-БУТЕНА С 4-ХЛОР-*транс*-2-ПЕНТЕНОМ

K. LAATS, V. TERNÕSEV, T. PEHK, H. RANG, A. ERM. 2-METOOL-2-BUTEENI JA 4-KLOOR-*trans*-2-PENTEENI TELOMERISATSIOONI MONOADUKTI SEEBISTAMISPRODUKTIDE KOOSTISEST

K. LAATS, V. CHERNYSHEV, T. PEHK, H. RANG, A. ERM. THE COMPOSITION OF SAPONIFICATION PRODUCT OF 2-METHYL-2-BUTENE AND 4-CHLORO-*trans*-2-PENTENE TELOMERIZATION MONOADDUCT

Ранее [1] из продукта гидролиза моноаддукта теломера 4-хлор-2-пентена с 2-метил-2-бутеном были выделены два диастереоизомерных 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-2-ола (I). Однако на основе их спектров ПМР не удалось определить конфигурации диастереомерных спиртов I, т. к. их спектры ничем не различаются.

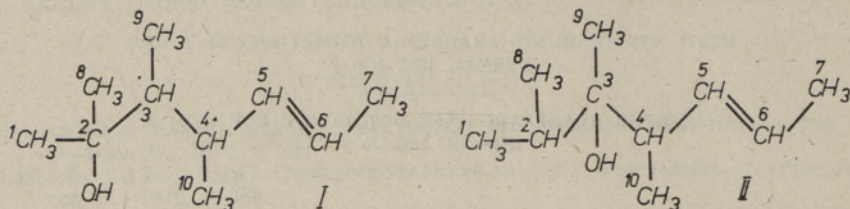
Спектры ^{13}C -ЯМР двух изомеров дают различные химические сдвиги для соответствующих атомов изомеров (таблица). Наиболее сильно

Химические сдвиги ядер ^{13}C диастереоизомеров 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-2-ола и 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-3-ола

Соединение	Химические сдвиги ядер ^{13}C относительно TMC									
	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	C ₅	C ₆	C ₇	C ₈	C ₉	C ₁₀
2,3 <i>R</i> (S)-4 <i>S</i> (R)- триметил- <i>транс</i> - -5-гептен-2-ол (I)	27,5	73,3	49,1	36,6	134,6	124,1	18,0	28,2	9,3	22,1
2,3 <i>R</i> (S)-4 <i>R</i> (S)- триметил- <i>транс</i> - -5-гептен-2-ол (I)	27,6	73,5	48,2	36,2	139,0	121,8	18,0	28,6	10,2	18,0
2,3,4-триметил- - <i>транс</i> -5-гептен- 3-ол (II)	17,5	34,0	75,0	43,8	134,0	124,4	17,9	16,6	19,7	14,6

различается экранирование C₅ и C₁₀ атомов. Конформационный анализ связи C₃, C₄ атомов показывает, что значительную долю *R,S*(*S,R*)-изомера должна составлять конформация с 1,3-диаксиальным взаимодействием между ОН-группой и C₁₀ атомами, что должно привести к низкочастотному сдвигу резонанса C₁₀ в *R,S*(*S,R*)-изомер по сравнению с *R,R*(*S,S*)-изомером. Из смеси с *R,S*(*S,R*)-изомером определено присутствие продукта нерегулярного присоединения — одного изомера 2,3,4-

триметил-5(Е)-гептен-3-ола. Отсутствие линий другого возможного диастереоизомера не позволяет в данном случае определить конфигурацию этого спирта.



Физико-химические константы

1. 2,3R(S)-4S(R)-триметил-5(Е)-гептен-2-ол — т. кип. 77,0—77,5 °С (12 мм), d_4^{20} — 0,8640, n_D^{20} — 1,4542, чистота по ГЖХ 94%, время удерживания по отношению к линалоолу 0,47.
2. 2,3R(S)-4R(S)-триметил-5(Е)-гептен-2-ол — г. кип. 79—79,6° (12 мм), d_4^{20} — 0,8700, n_D^{20} — 1,4564, чистота по ГЖХ 96%, время удерживания по отношению к линалоолу 0,65.
3. 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-3-ол, чистота по ГЖХ 60% (35% изомера I), время удерживания по отношению к линалоолу 0,49.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лээтс К. В., Чернышев В. О., Ранг Х. А., Эрм А. Ю. О составе аддукта 2-хлор-3-пентена и 2-метил-2-бутена. — ЖОрХ, 1977, т. 13, с. 1788—1791.

Институт химии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
6/Х 1981

Институт биологической и химической физики
Академии наук Эстонской ССР