

К. ЛЭАТС, 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-METÜÜL-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.

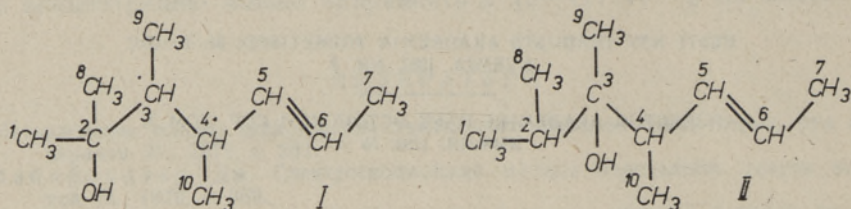
Спектры <sup>13</sup>С-ЯМР двух изомеров дают различные химические сдвиги для соответствующих атомов изомеров (таблица). Наиболее сильно

Химические сдвиги ядер <sup>13</sup>С диастереоизомеров 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-2-ола и 2,3,4-триметил-5(Е)-гептен-3-ола

Соединение	Химические сдвиги ядер <sup>13</sup> С относительно ТМС									
	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>	C <sub>8</sub>	C <sub>9</sub>	C <sub>10</sub>
2,3 <i>R</i> (S)-4 <i>S</i> ( <i>R</i> )- 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 C<sub>5</sub> и C<sub>10</sub> атомов. Конформационный анализ связи C<sub>3</sub>, C<sub>4</sub> атомов показывает, что значительную долю *R,S*(*S,R*)-изомера должна составлять конформация с 1,3-диаксиальным взаимодействием между ОН-группой и C<sub>10</sub> атомами, что должно привести к низкочастотному сдвигу резонанса C<sub>10</sub> 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. 2,3*R(S)*-4*S(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. 2,3*R(S)*-4*R(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