

# ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ ТЕТРАЭТИЛОВЫХ ЭФИРОВ 1,3,4,6-ТЕТРАЗАМЕЩЕННЫХ 3-ГЕКСЕН-1,1,6,6-ТЕТРАКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

З. А. АКОПЯН и С. Н. НАВАСАРДЯН

Ереванский государственный университет

Поступило 3 V 1976

Определены параметры решеток и пространственные группы симметрии шести тетраэтиловых эфиров 1,3,4,6-тетразамещенных 3-гексен-1,1,6,6-тетракарбонových кислот рентгенографическим методом. Обсуждаются *цис*- и *транс*-конфигурации указанных молекул.

Табл. 1. библи. ссылок 2.

Проведено рентгенографическое изучение шести тетраэтиловых эфиров 1,3,4,6-тетразамещенных 3-гексен-1,1,6,6-тетракарбонových кислот. Методами качания в камере РКОП и фотографирования обратной решетки в камере КФОР (сняты нулевая и первая слоевые линии) определены сингония, параметры элементарной ячейки и пространственная группа симметрии. Измерены плотности кристаллов и рассчитаны рентгеновская плотность и число молекул в элементарной ячейке.

Пригодные для рентгенографической съемки монокристаллы были получены перекристаллизацией этих веществ из спирта и снимались на медном излучении. Результаты рентгенографического исследования приведены в таблице.

Представлялось интересным также определение *цис*- или *транс*-конфигурации молекул. Для эфиров № 1—4 пространственная группа и число молекул в ячейке позволяют однозначно определить симметрию молекулы, отвечающую 1, а следовательно, и *транс*-конфигурацию. Молекулы соединений № 5, 6 занимают общее положение в ячейке и их конфигурация может быть однозначно установлена лишь при полном определении структуры. Вышеуказанные соединения были синтезированы на кафедре органической химии ЕГУ [1,2]\*.

\* Авторы выражают благодарность Л. А. Хачатрян за предоставление образцов для исследования и Ж. Г. Гаваян за участие в эксперименте.

Таблица

## Результаты рентгенографического исследования

| № соединения | Название веществ                                                                              | Параметры решетки                                                                                                                                                                                                                   | Плотность |      | Пространственная группа | n |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------|-------------------------|---|
|              |                                                                                               |                                                                                                                                                                                                                                     | изм.      | выч. |                         |   |
| 1            | Тетраэтиловый эфир 1,6-дибензил-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты                      | $a=11,38 \text{ \AA} \pm 0,07$<br>$b=16,33 \text{ \AA} \pm 0,08$<br>$c=13,84 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$\angle \beta = 139^\circ 39'$<br>$V=1665,13 \text{ \AA}^3$                                                                   | 1,11      | 1,12 | $P 2_1/C$               | 2 |
| 2            | Тетраэтиловый эфир 1,6-изоамил-3,4-дихлор-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты            | $a=11,39 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$b=14,81 \text{ \AA} \pm 0,09$<br>$c=10,24 \text{ \AA} \pm 0,01$<br>$\angle \beta = 114^\circ 30'$<br>$V=1571,32 \text{ \AA}^3$                                                                   | 1,19      | 1,23 | $P 2_1/C$               | 2 |
| 3            | Тетраэтиловый эфир 1,6-изоамил-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты                       | $a=11,08 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$b=13,97 \text{ \AA} \pm 0,05$<br>$c=10,53 \text{ \AA} \pm 0,09$<br>$\angle \beta = 118^\circ$<br>$V=1439,07 \text{ \AA}^3$                                                                       | 1,14      | 1,19 | $P 2_1/C$               | 2 |
| 4            | Тетраэтиловый эфир 1,6-дибутил-3,4-дихлор-3,4-дихлор-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты | $a=11,18 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$b=14,81 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$c=10,04 \text{ \AA} \pm 0,01$<br>$\angle \beta = 114^\circ$<br>$V=1518,62 \text{ \AA}^3$                                                                       | 1,23      | 1,22 | $P 2_1/C$               | 2 |
| 5            | Тетраэтиловый эфир 1,6-дипропил-3,4-дихлор-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты           | $a=11,17 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$b=8,05 \text{ \AA} \pm 0,06$<br>$c=16,29 \text{ \AA} \pm 0,07$<br>$\angle \alpha = 94^\circ 33'$<br>$\angle \beta = 95^\circ 49'$<br>$\angle \gamma = 90^\circ 12'$<br>$V=1452,62 \text{ \AA}^3$ | 1,19      | 1,21 | $P \bar{1}$ или $P 1$   | 2 |
| 6            | Тетраэтиловый эфир 1,6-диэтил-3,4-дихлор-3-гексен-1,1,6,6-тетракарбоновой кислоты             | $a=21,92 \text{ \AA} \pm 0,12$<br>$b=16,29 \text{ \AA} \pm 0,05$<br>$c=15,11 \text{ \AA} \pm 0,07$<br>$V=5395,41 \text{ \AA}^3$                                                                                                     | 1,21      | 1,23 | $P_{всп}$               | 3 |

1,3,4,6-ՔԱՌԱՏԵՂԱԿԱԿԱՎԱԾ 3-ՀԵՔՍԵՆ-1,1,6,6-ՏԵՏՐԱԿԱՐ-  
ԲՈՆԱԹԹՈՒՆԵՐԻ ՏԵՏՐԱԷԹԻԼԵՍԹԵՐՆԵՐԻ ՏԱՐԱԿԱՆ  
ԲՋԻՋՆԵՐԻ ՊԱՐԱՄԵՏՐԵՐԸ ԵՎ ՏԱՐԱՍԱԿԱՆ  
ԽՄԲԵՐԻ ՍԻՄԵՏՐԻԱՆ

Ջ. Ա. ՀԱԿՈՔՅԱՆ և Ս. Ն. ՆԱՎԱՍԱՐԴՅԱՆ

Ռենտգենոգրաֆիական մեթոդով որոշված են 1,3,4,6-քառատեղակաված 3-հեքսեն-1,1,6,6-տետրակարբոնաթթուների տետրաէթիլէսթերների ցանցի պարամետրերը, սիմետրիայի տարածական խմբերը և քննարկված է նշված մոլեկուլներում ցիս- և տրանս-կոնֆորմացիաների հնարավորությունը:

PARAMETERS OF ELEMENTARY CELLS AND SYMMETRY OF  
SPACE GROUPS IN TETRAETHYL 1,3,4,6-TETRA-  
SUBSTITUTED 3-HEXEN-1,1,6,6-TETRACARBOXYLATES

Z. A. HAKOPIAN and S. N. NAVASSARDIAN

The lattice parameters and symmetry of space groups in six tetraethyl 1,3,4,6-tetrasubstituted 3-hexen-1,1,6,6-tetracarboxylates were determined by X-ray analysis. The possibility of cis and trans configurations of the mentioned molecules was discussed.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Л. А. Хачатрян, А. А. Ахназарян, М. А. Манукян, М. Т. Дангян, ЖОрХ, 11, 35 (1975).
2. Авт. свид. № 350784 (1972), Бюлл. ноябр. № 27 (1972).