

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что разработанная композиция ПЭ, вулканизуемая без избыточного давления, по своим тепловым характеристикам не уступает серийно выпускаемым композициям ВПЭ. Использование ТАЦ как соагента для вулканизации ПЭ позволяет не только повысить термостабильность, но и уменьшить количество перекиси.

Характеристики ПЭ, сшитого различными способами

Таблица

№ образца	Темп. пика плавления, °С	Темп. начала потери, °С	Темп. экзот. пика, °С	Порядок реакции, (n)	Энергия активации, кДж/моль	Степень ош.%, %
I	110	255	278	0,6	121,8	85
II	107	258	270	0,6	113,4	83,5
III	109	243	244	0,6	105	78

### ЛИТЕРАТУРА

1. Вулканизация эластомеров /Под ред. Г. Аллигера, И. Съетуна. М., Химия, 1967, 428 с.
2. Махлис Ф. А. — Радиационная физика и химия полимеров. М., Атомиздат, 1972, 362 с.
3. Сирота А. Г. — Модификация структуры и свойств полиолефинов. Л., Химия, 1974, 176 с.
4. Гофман В. — Вулканизация и вулканизирующие агенты. Л., Химия, 1968, 464 с.
5. Химические реакции полимеров. М., Химия, 1967, т. 2, 536 с.
6. Новое в методах исследования полимеров/Под ред. Роговина З. А., М, Мир, 1968, 374 с.

Армянский химический журнал, т. 41, № 6, стр. 381—383 (1988 г.)

УДК 548+548.3

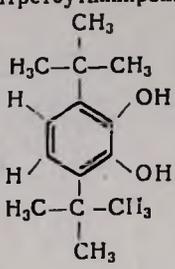
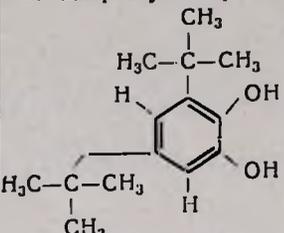
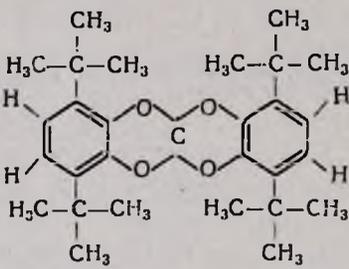
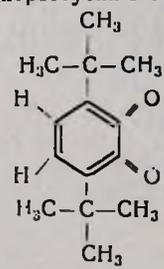
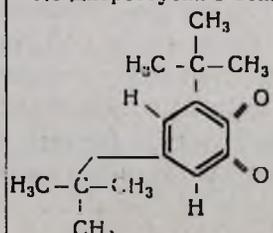
## ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК И ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ НЕКОТОРЫХ АЛКИЛПИРОКАТЕХИНОВ

З. А. АКОПЯН и Э. В. ДЖУАРЯН

Ереванский государственный университет  
Ленинканский филиал Ереванского политехнического  
института им. К. Маркса

Поступило 11 III 1986

Цель исследования — получить кристаллографические характеристики для пяти кристаллических алкилпирокатехинов (табл.). Данные настоящего исследования являются необходимой первичной информацией для дальнейшего рентгеноструктурного анализа с выяснением реальной геометрии и конформации изучаемых молекул. Особый интерес при этом представляют соединения I [1] и IV [2], относящиеся к пространственно затрудненным фенолам.

Соединение	Название и структурная формула вещества	Параметры и объем ячейки	Пространственная группа симметрии	Число молекул в ячейке	Плотность, г/см <sup>3</sup>	
					изм.	выч.
I	<p>3,6-Дитретбутилпирокатехин</p> 	$a = 21,33 \pm 0,02 \text{ \AA}$ $c = 11,98 \pm 0,01 \text{ \AA}$ $v = 5450,53 \text{ \AA}^3$	$J4,22$	16	0,99	1,09
II	<p>3,5-Дитретбутилпирокатехин</p> 	$a = 11,84 \pm 0,06 \text{ \AA}$ $b = 9,26 \pm 0,02 \text{ \AA}$ $c = 13,33 \pm 0,06 \text{ \AA}$ $\alpha = 97,08^\circ \pm 0,5^\circ$ $\beta = 96,22^\circ \pm 0,5^\circ$ $\gamma = 91,81^\circ \pm 0,5^\circ$ $v = 1440,31 \text{ \AA}^3$	$P1,$ $P\bar{1}$	4	0,96	1,03
III	<p>3,6-Дитретбутил-<i>o</i>-бензохинон</p> 	$a = 26,69 \pm 0,10 \text{ \AA}$ $b = 19,14 \pm 0,10 \text{ \AA}$ $c = 11,66 \pm 0,01 \text{ \AA}$ $\beta = 98,45^\circ \pm 0,5^\circ$ $v = 5892,14 \text{ \AA}^3$	$P2_1/C$	8	0,98	1,02
IV	<p>3,6-Дитретбутил-<i>o</i>-бензохинон</p> 	$a = 10,192 \pm 0,007 \text{ \AA}$ $c = 6,743 \pm 0,005 \text{ \AA}$ $\gamma = 700,44 \text{ \AA}^3$	$P4_{2/mmm},$ $P4_{72}$ $P4_2nm$	2	0,98	1,05
V	<p>3,5-Дитретбутил-<i>o</i>-бензохинон</p> 	$a = 13,91 \pm 0,01 \text{ \AA}$ $b = 12,27 \pm 0,10 \text{ \AA}$ $c = 9,66 \pm 0,05 \text{ \AA}$ $\beta = 121,8^\circ \pm 0,5^\circ$ $v = 1401,25 \text{ \AA}^3$	$P2_1/C$	4	0,98	1,05

Экспериментальный материал получен на медном излучении, методами Лауэ и вращения в рентгеновских камерах РК ОП и КФОР. Для выявления систематических погасаний дифракционных максимумов сняты нулевая и первая развертки слоевых линий. Результаты рентгенографических исследований и значения измеренных и вычисленных плотностей кристаллов даны в таблице.

Параметры элементарной ячейки и пространственные группы симметрии образцов I, IV подтверждены и уточнены на автоматическом дифрактометре «Syntex P2<sub>1</sub>» в Институте общей и неорганической химии АН СССР.

Как видно из таблицы, только кристаллы пространственно затрудненных молекул I, IV принадлежат тетрагональной сингонии, остальные кристаллизуются в широко распространенных для органических кристаллов моноклинной и триклинной сингониях.

Анализ симметрии молекулы соединения IV и симметрии позиций с кратностью, равной 2, в пространственных группах  $P4_2/mnm$ ,  $P\bar{4}n2$  и  $P4_2mp$  однозначно определяет пространственную группу симметрии как  $P4_2mp$  и симметрию молекулы— $C_{2v}$ . Молекула в кристалле занимает частное положение, находясь на осях второго порядка.

В противоположность молекуле соединения IV, визуальнo симметричная молекула соединения I ни в какой мере не реализует свою симметрию в кристалле, занимая общее положение. Причиной может быть как требование плотной упаковки молекул в кристалле [3], так и потеря симметрии из-за пространственных затруднений между алкильными и ОН-группами. В соединении II, вероятно, реализуется пространственная группа  $P\bar{1}$  как плотнейшая [3] с двумя кристаллохимически независимыми молекулами в ячейке.

Для соединений III и V определяется тривиальная для органических кристаллов пространственная группа  $P2_1/c$  с общим положением молекулы в кристалле, причем для соединения III—две независимые молекулы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Белостоцкая И. С., Комиссарова Н. Л., Джуарян Э. В., Ершов В. В. — Изв. АН СССР, сер. хим., 1972, № 7, с. 1594.
2. Комиссарова Н. Л., Белостоцкая И. С., Джуарян Э. В., Ершов В. В. — Изв. АН СССР, сер. хим., 1973, № 6, с. 1380.
3. Китайгородский А. И. — Органическая кристаллохимия. М., АН СССР, 1955, с. 119.