

УДК 547.584:513.83

**Направленный синтез диеновых аддуктов
1, 2, 3, 4 –тетрахлор- 5, 5 -диалкоксициклопентадиена
с ангидридами 4 – циклогексен -
1, 2 –дикарбоновых кислот на основе зависимости
структура-свойство**

М.С. Салахов*,
О.Т. Гречкина, Б.Т. Багманов
*Институт полимерных материалов
Национальной академии наук Азербайджана,
Азербайджан az 5004, г. Сумгайыт, ул. С. Вургуна, 124¹*

Received 10.12.2012, received in revised form 17.12.2012, accepted 24.12.2012

Исследована возможность существования зависимости теоретико-информационных индексов и температуры плавления диеновых аддуктов 1,2,3,4–тетрахлор-5,5-диалкоксициклопентадиена с ангидридами 4-циклогексен-1,2–дикарбоновых кислот, приведены итоги синтеза с целью подтверждения полученных теоретических результатов экспериментальными данными, проведена попытка численно описать связь аддентов и аддуктов реакции диенового синтеза.

Ключевые слова: 1,2,3,4-тетрахлор-5,5-диалкоксициклопентадиен, ангидрид 4-циклогексен-1, 2–дикарбоновой кислоты, N-алкилкарбоксимид диалкокси-1, 8,9,10–тетрахлор–11,11-трицикло/6,2,1,0^{2,7}/-ундец–9–ен-4,5–дикарбоновой кислоты, температура плавления, теоретико-информационные индексы, диеновый синтез.

Одной из важных задач химии является направленный синтез соединений, позволяющий ускорить путь к конечному продукту, для осуществления которого необходим рациональный предварительный отбор наиболее приемлемых структур в соответствии с требованиями конкретной задачи. Самый успешный путь к решению этой проблемы – математическое моделирование связи между структурой и свойствами органических соединений, так как полученные данные позволяют прогнозировать свойства новых соединений по их структуре и могут быть использованы для их целенаправленного синтеза.

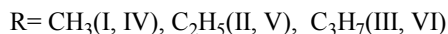
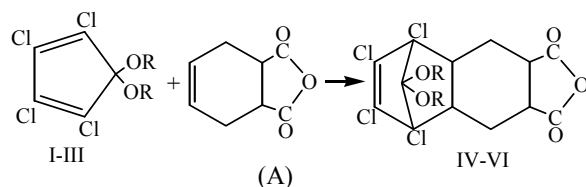
* Corresponding author E-mail address: salahov_mustafa@mail.ru

¹ © Siberian Federal University. All rights reserved

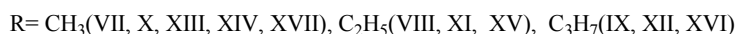
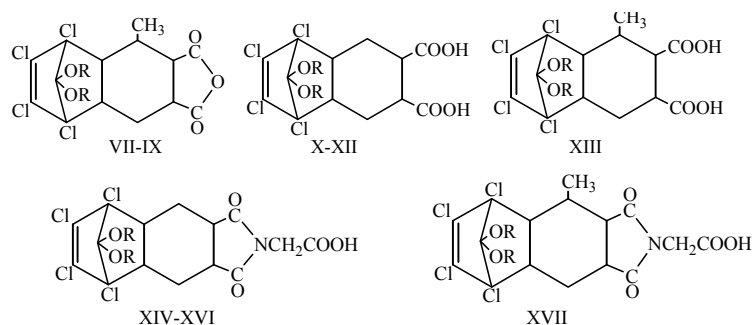
Ранее в наших работах по систематическому исследованию и анализу взаимосвязи физико-химических свойств аддуктов диенового синтеза от структуры их молекул, описываемых с помощью теоретико-информационных индексов (ТИ), мы показали возможность использования ТИ для установления зависимости между структурой и свойствами диеновых аддуктов гексахлорциклопентадиена с би-, три- и тетрациклическими 1,2-дикарбоновыми кислотами [1-4], а также для синтеза новых аддуктов со свойствами, прогнозируемыми на основе анализа зависимости «ТИ – свойство» [5, 6].

В продолжение этих исследований в данной статье описаны результаты исследования возможности существования взаимосвязи между ТИ и температурой плавления ($T_{пл}$) диеновых аддуктов 1,2,3,4-тетрахлор-5,5-диалкоксциклопентадиенов (5,5 – ДАОТХЦПД) с ангидридами 4-циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты (IV – XVII) и приведены результаты синтеза с целью подтверждения полученных теоретических результатов экспериментальными данными.

Характерной особенностью 5,5 – ДАОТХЦПД является высокая диеновая активность в реакции Дильса-Альдера со многими диенофилами.



Было установлено, что ангидрид цис-4-ЦГДК легко вступает в диеновую конденсацию (A) с 5,5-ДАОТХЦПД, содержащими такие заместители, как $-\text{OCH}_3$, $-\text{OC}_2\text{H}_5$ и $-\text{OC}_3\text{H}_7$ (I-III), образуя цис-аддукт с высоким выходом [7], и проанализирована корреляционная зависимость между реакционной способностью, физико-химическими свойствами и ТИ 5,5-ДАОТХЦПД (I-III) [8].



ТИ информационного содержания графа относительно окрестности k -го порядка в расчете на одну вершину (IC_k), полного информационного содержания (ТИC_k), структурного информационного содержания (СIC_k) и комплементарного информационного содержания (СIC_k) ($k = 0-2$) для (I – VII, X – XVII) рассчитаны по известной методике [9] и приведены в табл. 1.

Используя данные по $T_{пл}$ ранее синтезированных ангидридов диалкокси-1,8,9,10-тетрахлор-11,11-трицикло/6,2,1,0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновых кислот (ТХТЦУДК) (IV – VI) [10], мы получили линейные уравнения, описывающие зависимость $f(\text{ТИ}) - T_{пл}$ для различающихся

Таблица 1. Значения теоретико-информационных индексов IC_k , TIC_k , CIC_k , SIC_k ($k=0-2$) (I – VII, X – XVII), T_{nl} (IV – VII, X – XIV, XVII) и кислотных чисел (XIV, XVII)

№	IC_0	TIC_0	CIC_0	SIC_0	IC_1	TIC_1	CIC_1
I	1,871	35,558	2,377	0,44	2,643	50,219	1,605
II	1,854	46,35	2,79	0,399	2,491	62,275	2,153
III	1,685	52,235	3,269	0,34	2,823	87,513	2,131
IV	1,787	67,905	3,461	0,341	3,056	116,118	2,192
V	1,729	76,06	3,731	0,317	3,026	133,156	2,433
VI	1,675	83,765	3,969	0,297	2,892	144,576	2,752
VII	1,757	72,05	3,6	0,328	3,162	129,66	2,195
X	1,794	73,547	3,564	0,335	3,016	123,66	2,341
XI	1,736	81,631	3,817	0,313	2,992	140,627	2,563
XII	1,685	89,32	4,043	0,294	2,869	152,031	2,859
XIII	1,765	77,647	3,695	0,323	2,99	131,547	3,313
XIV	1,351	60,775	4,141	0,246	3,22	144,892	2,272
XV	1,821	92,826	3,851	0,32	3,182	162,3	2,49
XVI	1,765	100,63	4,067	0,303	3,151	179,623	2,682
XVII	1,849	88,799	3,734	0,331	3,187	153,003	2,397
№	SIC_1	IC_2	TIC_2	CIC_2	SIC_2	$T_{nl}(^{\circ}C)$	к.ч.
I	0,622	2,851	54,169	1,397	0,671	–	–
II	0,537	3,386	84,65	1,258	0,729	–	–
III	0,57	3,297	102,21	1,657	0,666	–	–
IV	0,582	3,662	137,42	1,631	0,689	237	–
V	0,554	3,004	132,2	2,455	0,55	203	–
VI	0,512	4,01	200,52	1,634	0,711	188	–
VII	0,59	3,842	157,15	1,516	0,717	219	–
X	0,543	3,955	162,15	1,403	0,738	239	–
XI	0,539	4,118	193,55	1,437	0,741	206	–
XII	0,501	4,115	218,07	1,613	0,718	191	–
XIII	0,548	4,19	184,34	1,27	0,767	217	–
XIV	0,586	4,303	193,62	1,189	0,783	280	118,3
XV	0,561	4,387	223,78	1,285	0,744	–	–
XVI	0,54	4,368	248,97	1,465	0,749	–	–
XVII	0,371	4,463	214,2	1,122	0,799	275	117,5

заместителями ($-OCH_3$, $-OC_2H_5$ и $-OC_3H_7$) ангидридов 5,5-диалкокси-ТХТЦУДК (IV-VI), выраженные уравнениями (1-8):

$$T_{nl} = 439,33 \cdot IC_0 - 550,86 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 6,87 \quad (1)$$

$$T_{nl} = -3,1 \cdot TIC_0 + 444,66 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 6,92 \quad (2)$$

$$T_{nl} = -97,114 \cdot CIC_0 + 570,63 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 6,20 \quad (3)$$

$$T_{пл} = 1123,6 \cdot SIC_0 - 148,35 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,15 \quad (4)$$

$$T_{пл} = -1,7431 \cdot TIC_1 + 438,18 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,55 \quad (5)$$

$$T_{пл} = -84,707 \cdot CIC_1 + 419,99 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,72 \quad (6)$$

$$T_{пл} = 672,93 \cdot SIC_1 - 160,33 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 8,14 \quad (7)$$

$$T_{пл} = -23,5 \cdot IC_2 + 257 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 7,04 \quad (8)$$

Как следует из значений величин остаточной погрешности $\bar{\sigma}_{осм}$, наиболее точной является зависимость (4). Рассчитав значения ТИ SIC₀ для (VIII, IX), с помощью этого уравнения мы получили значения T_{пл} для ангидридов диалкокси-3-метил-ГХТЦУДК (VII –IX) (табл. 2). Прогнозируемые нами значения T_{пл} подтверждаются экспериментальными данными (табл. 2). Ангидрид диметокси-3-метил-ГХТЦУДК (VII) был получен ранее [10], синтез соединений (VIII, IX) описан в данной статье.

Также нами была установлена корреляционная зависимость (9-15) между ТИ и T_{пл} ранее полученных [10] 1,2,3,4-тетрахлор-11,11-диалкокситрицикло/6,2,1,0^{5,10}/-2-ундецен-7,8-дикарбоновых кислот (X – XII):

$$T_{пл} = 424,58 \cdot IC_0 - 526,72 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,12 \quad (9)$$

$$T_{пл} = -2,924 \cdot TIC_0 + 449,66 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,30 \quad (10)$$

$$T_{пл} = -96,559 \cdot CIC_0 + 579,03 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,14 \quad (11)$$

$$T_{пл} = 1129,5 \cdot SIC_0 - 143,32 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 6,08 \quad (12)$$

$$T_{пл} = -1,6373 \cdot TIC_1 + 438,54 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 5,40 \quad (13)$$

$$T_{пл} = -86,7042 \cdot CIC_1 + 435,79 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 7,15 \quad (14)$$

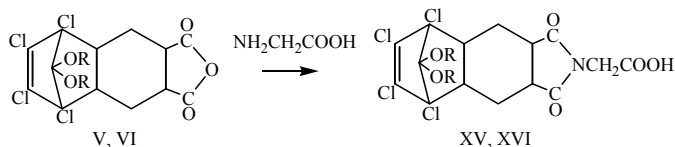
$$T_{пл} = -0,8302 \cdot TIC_2 + 370,11 \quad \bar{\sigma}_{осм} = 5,65 \quad (15)$$

Рассчитав по уравнению (13), имеющему наименьшее $\bar{\sigma}_{осм}$, значение T_{пл} для соединения (XIII), равное 223 °С, получили отклонение от ее истинной T_{пл} (табл. 1) на 5 °С, что и соответствует значению остаточной погрешности этого уравнения.

Таблица 2. Значения SIC₀, экспериментальные и прогнозируемые значения T_{пл} соединений VII – IX

№	SIC ₀	T _{пл} (°С)	
		эксперимент.	рассчет по уравнению (4)
VII	0,328	219	220
VIII	0,306	192	195
IX	0,288	179	175

Исходя из наличия корреляционной зависимости $f(\text{ТИ}) - T_{\text{пл}}$ для N-алкилкарбоксиимидов 1,4,4,5,6,7,7-гексахлорбицикло/2.2.1/-гепт-5-ен-2,3-дикарбоновой кислоты, N-алкил-карбоксиимидов эндо-экзо-1,8,9,10,11,11-гексахлортрицикло/6,2,1,0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты и эндо-экзо-1,8,9,10,11,11-гексахлор-3-метил-трицикло/6,2,1,0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты, различающихся количеством метиленовых звеньев в алкилкарбоксильной группе [2], мы предположили подобную зависимость и у различающихся заместителями ($-\text{OCH}_3$, $-\text{OC}_2\text{H}_5$ и $-\text{OC}_3\text{H}_7$) N-алкилкарбоксиимидов диалкокси-ТХТЦУДК, в частности у N-метилкарбоксиимидов диалкокси-ТХТЦУДК (XIV-XVII). Соединения (XIV, XVII) были получены ранее [11], продукты (XV, XVI) синтезированы в рамках данной работы.



Используя новые экспериментальные данные по $T_{\text{пл}}$ и кислотным числам (к.ч.) соединений (XV, XVI) и уже имеющиеся у нас значения $T_{\text{пл}}$ и к.ч. (XIV, XVII), мы подтвердили наше предположение, получив зависимости $f(\text{ТИ}) - T_{\text{пл}}$ (16, 17) и $f(\text{ТИ}) - \text{к.ч.}$ (18 – 20) для (XIV – XVII):

$$T_{\text{пл}} = -1,6164 \cdot \text{TIC}_1 + 369,32 \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 3,05 \quad (16)$$

$$T_{\text{пл}} = -40 \cdot \text{CIC}_1 + 370,88 \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 5,80 \quad (17)$$

$$\text{к.ч.} = -0,362 \cdot \text{TIC}_1 + 171,51 \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 0,88 \quad (18)$$

$$\text{к.ч.} = -31,021 \cdot \text{CIC}_1 + 189,57 \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 0,93 \quad (19)$$

$$\text{к.ч.} = -0,229 \cdot \text{TIC}_2 + 163,57 \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 1,02 \quad (20)$$

Полученное нами соотношение $f(\text{TIC}_1) - T_{\text{пл}}$ (рис.1), показывающее идентичный характер зависимости $f(\text{ТИ}) - T_{\text{пл}}$ исследуемых ангидридов (IV – VI) и соответствующих кислот (X – XII), и выведенное уравнение, описывающее связь между ТИ указанных ангидридов (IC_0') (IV – VI) и кислот (X – XII) (IC_0) (16), подтверждают то, что теоретико-информационные индексы несут удовлетворительную информацию о структуре молекулы.

$$\text{IC}_0' = 1,0269 \cdot \text{IC}_0 - 0,0548, \quad \bar{\sigma}_{\text{осм}} = 0,013. \quad (21)$$

Установление зависимости между исходными и конечными продуктами реакций, в частности реакции диенового синтеза, – одна из интереснейших проблем органической химии. Но, как известно, невозможно напрямую оценить изменение структуры молекулы при переходе от аддентов реакции диенового синтеза к ее аддуктам. Ранее на основе принципа наименьшего изменения структуры А. М. Бутлерова [12], по которому реакция протекает преимущественно в направлении, связанном с наименьшим изменением положения атомных ядер, был предложен принцип, согласно которому наиболее благоприятны реакции, происходящие таким образом, чтобы структура исходных и конечных продуктов реакции изменялась минимально. Так, на основании этого принципа в работах [13, 14] с использованием топологического индекса Вине-

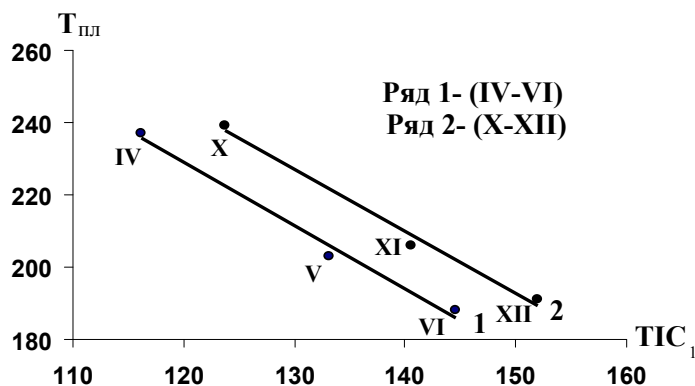


Рис. 1. Зависимость $f(TIC_1) - T_{пл}$ для ангидридов (IV-VI) (ряд 1) и соответствующих им кислот (X-XII) (ряд 2)

ра были выведены параметры, численно описывающие изменение структуры при переходе от реагентов к продуктам диенового синтеза и 1,3-диполярного циклоприсоединения. Нами также получена взаимосвязь, численно характеризующая изменение структуры, т.е. зависимость ТИ (°) аддуктов (IV – VI) от ТИ участвующих в реакции Дильса-Альдера (А) диенов (I – III), что может свидетельствовать о связи исходной и конечной структур по косвенным данным.

$$IC_0' = 0,488 \cdot IC_0 + 0,8508 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,13 \quad (22)$$

$$TIC_0' = 0,9269 \cdot TIC_0 + 34,464 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,07 \quad (23)$$

$$CIC_0' = 0,5676 \cdot CIC_0 + 2,1243 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,064 \quad (24)$$

$$SIC_0' = 0,4329 \cdot SIC_0 + 0,9759 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,08 \quad (25)$$

$$TIC_1' = 0,716 \cdot TIC_1 + 83,580 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,11 \quad (26)$$

$$SIC_2' = -2,4891 \cdot SIC_0 + 2,3642 \quad \bar{\sigma}_{ocm} = 0,04 \quad (27)$$

Экспериментальная часть

Чистоту соединений контролировали методом тонкослойной хроматографии на пластинках Silufol. Элюент: смесь бензол – дихлорэтан – уксусная кислота (4:1,5:1) по объему, проявление пятен УФ-облучением [15]. ИК-спектры записаны на спектрометре «UR-20» в виде суспензий в вазелиновом масле [16]. Значение кислотных чисел получены по методике [17].

Структура полученных соединений доказана ИК-спектрами, в которых обнаружены полосы поглощения 1590-1610 cm^{-1} , характерные для C=C связи; 1780 и 1830-1850 cm^{-1} , соответствующие валентным колебаниям C=O. Полосы поглощения в области 725-856 cm^{-1} характеризуют C-Cl-связь, 1246 cm^{-1} – C-O-C-связь, а 1310-1350 и 3320 cm^{-1} – валентные колебания соответственно C-N-связи и OH- группы.

Соединения (VIII, IX) были получены диеновой конденсацией. В ампулу загружали ангидрид цис-3-метил-4-циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты и соответственно 5,5-диэтокси- и

5,5-дипропокситетрахлорциклопентадиен в отношении 1:2. Смесь нагревали при 140 °С на масляной бане с автоматическим терморегулированием в течение 12 ч. По окончании реакции ампулу охлаждали, содержимое обрабатывали гексаном и твердую часть отделяли от жидкой отсасыванием на фильтре Шотта, промывали растворителем (гексаном) для удаления следов диена, затем – дистиллированной водой, потом перекристаллизовывали.

Ангидрид диэтокси-3-метил-1,8,9,10–тетрахлор-11,11-трицикло/6,2,1,0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты (VIII)

Выход 68 %. $R_f=0,72$, $T_{пл} = 192$ °С. Элементный состав % : С 46,25, Н 4,52, Cl 31,25 (найд.); $C_{18}H_{20}Cl_4O_5$; С 47,19, Н 4,48, Cl 30,55 (выч.); М.в. 457,20 (найд.), 458,16 (выч.).

Ангидрид дипроокси-3-метил-1, 8, 9,10–тетрахлор-11,11-трицикло/6,2,1,0^{2,7} -ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты (IX)

Выход 57 %. $R_f=0,76$, $T_{пл} = 179$ °С. Элементный состав % : С 48,95, Н 4,89, Cl 29,99 (найд.); $C_{20}H_{24}Cl_4O_5$; С 49,41, Н 4,98, Cl 29,17 (выч.); М.в. 488,32 (найд.), 486,21 (выч.).

Соединения (XV, XVI) получены из 0,01 г.моль соответственно ангидрида диэтокси- и дипроокси- ТХТЦУДК и эквимолярного количества гликокола кипячением в 50 мл ацетона при непрерывном перемешивании в течение 2 ч. Из реакционной смеси отгоняли ацетон, затем охлаждали до температуры 10 °С. Выпавшие кристаллы отфильтровывали на фильтре Шотта и сушили в вакуум-эксикаторе. Полученный продукт перекристаллизовывали из смеси бензол : гептан – 9 : 1 (по объему).

N-(α -карбоксиметил) имид эндо-экзо-1,8,9,10-тетрахлор-11,11-диэтокситрицикло /6, 2, 1, 0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты (XV)

Выход 65 %. $R_f=0,71$, к.ч. 114 (найд.), 112 (выч.) $T_{пл} = 265$ °С. Элементный состав %: С 47,11, Н 4,32, Cl 29,50, N 2,65 (найд.); $C_{19}H_{21}Cl_4O_6N$; С 45,53, Н 4,22, Cl 28,30, N 2,79 (выч.); М.в. 498,2 (найд.), 501,18 (выч.).

N-(α -карбоксиметил) имид эндо-экзо-1,8,9,10-тетрахлор-11,11-дипропокситрицикло/6,2,1,0^{2,7}-ундец-9-ен-4,5-дикарбоновой кислоты (XVI)

Выход 59 %. $R_f=0,70$, к.ч. 103,8 (найд.), 106 (выч.) $T_{пл} = 257$ °С. Элементный состав %: С 49,24, Н 4,44, Cl 28,60, N 2,82 (найд.); $C_{21}H_{25}Cl_4O_6N$; С 47,66, Н 4,76, Cl 26,80, N 2,65 (выч.); М.в. 527,35 (найд.), 529,24 (выч.).

Выводы

В результате проведенных исследований установлена взаимосвязь между ТИ и температурой плавления соответственно, а также кислотным числом диеновых аддуктов 5,5-ДАОТХЦПД с ангидридами 4-циклогексен-1,2-дикарбоновых кислот, теоретические результаты подтверждены экспериментальными данными. Также с использованием ТИ получена зависимость, численно характеризующая изменение структуры при переходе от участвующих в реакции Дильса-Альдера (А) диенов (I – III) до соответствующих аддуктов (IV – VI).

Список литературы

1. Салахов М.С, Гречкина О.Т., Багманов Б.Т. Применение топологических индексов в корреляционном анализе N-алкилкарбоксимидов циклических 1,2-дикарбоновых кислот // Структурная химия. 2010. Т. 51, №1. С.22-28.

2. Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т. Корреляционный прогноз кислотности и температуры плавления диеновых аддуктов гексахлорциклопентадиена с N-алкилкарбоксиимидами малеиновой, циклогексен- и эндиковой 1,2-дикарбоновых кислот // Структурная химия. 2010. Т. 51. №56. С.833-838.

3. Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т. Определение теоретико-информационных индексов для диеновых аддуктов гексахлорциклопентадиена с би-, три- и тетрациклическими 1,2-дикарбоновыми кислотами // Доклады АН Азербайджана. 2010. № 1. С.55-62.

4. Salakhov M.S., Grechkina O.T., Bagmanov B.T. Use of the theoretical-information topological indices for calculation of acidic ionization constant of cyclic cis- and trans-dicarboxylic acids // International Congress on Organic Chemistry, September 18-23. Kazan, Russia. 2011. P.70.

5. Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т., Умаева В.С. Направленный синтез N-алкилкарбоксиимидов 1,4,5,6,7,7-гексахлорбицикло/2,2,1/гепт-5-ен-2,3-дикарбоновой кислоты на основе корреляционного анализа структура – свойство // Доклады АН Азербайджана. 2011. №2. С.74-81.

6. Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т. Топологические индексы в корреляционном анализе реакции Дильса–Альдера. Исследование зависимости «структура-свойство» и направленный синтез циклических соединений. Palmarium Academic Publishing. 2011. 104 с.

7. Салахов М.С., Алекперов Н.А., Гусейнов М.М., Мовсумзаде А.А. Конденсация 1,2,3,4-тетрахлор-5,5-диалкоксициклопентадиенов с ангидридом цис- Δ^4 -циклогексен-1,2-дикарбоновой кислоты // Азерб. хим. журнал. 1968. №5. С.41-45.

8. Салахов М.С., Гречкина О.Т., Багманов Б.Т., Умаева В.С. Корреляционный анализ между реакционной способностью, физическими свойствами и топологическими индексами симметрии в ряду 5,5-диалкокситетрахлорциклопентадиенов // Химические проблемы. Баку, 2008. №2. С.289-293.

9. Кинг Р. Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир, 1987. С.183.

10. Гусейнов М.М., Салахов М.С., Алекперов Н.А. Способ получения ангидрида цис-1,2,3,4-тетрахлор-11,11-диметокситрицикло/4,0,1,2/-ундецен-2-дикарбоновой-7,8-кислоты. А.С. 202923(СССР), Б.И. 1967. 320.

11. Салахов М.С., Мусаева Н.Ф., Сулейманов С.Н. Кинетика и механизм реакции диеновой конденсации гексахлорциклопентадиена с циклическими диенофилами // Реакционная способность органических соединений. Тарту, 1979. Т.16. №1(57). С.65-72.

12. Темникова Т. И., Семенова С. Н. Молекулярные перегруппировки в органической химии Л.: Химия, 1983. 256 с.

13. Урядов В.Г., Офицеров Е.Н. Принцип наименьшего изменения структуры в реакциях с участием ненасыщенных соединений // Известия вузов. Химия и химическая технология. 2005. Т. 48. № 2. С. 8183-8189.

14. Урядов В.Г., Офицеров Е.Н. Применение принципа наименьшего изменения структуры в ряду реакций циклизации с участием производных Р(III) // Известия вузов. Химия и химическая технология. 2007. Т 50, № 9. С. 7-13.

15 Березкин В.Г., Бочков А.С. Количественная тонкослойная хроматография: инструментальные методы. М.: Наука, 1980. 183 с.

16. Анисимова Н.А. Идентификация органических соединений. Горно-Алтайск, 2009. 118 с.
17. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. М.: Химия, 1991. 432 с.

**Directed Synthesis of Diene Adducts
of 1,2,3,4-Tetrachlor-5,5-Dialkoхycyclopentadiene
with Anhydrides of 4-Cyclohexene-1,
2-Dicarboxylic Acids on the Basis of Dependence
of Structure-Property**

**Mustafa S. Salakhov,
Olqa T. Grechkina and Balakishi T. Bagmanov**
*Institute of Polymer Materials
of Azerbaijan National Academy of Sciences
124 S. Vurgun St., Sumgait, az 5004 Azerbaijan Republic*

The possibility of existence of dependence of theoretical-information indices and melting point of diene adducts of 1,2,3,4-tetrachlor-5,5-dialkoхycyclopentadienes with anhydrides of 4-cyclohexene-1,2-dicarboxylic acids has been investigated, totals of synthesis with the aim of confirmation of the prepared theoretical results by experimental data have been presented, the attempt to describe numerically a bond of addends and adducts of reaction of diene synthesis has been carried out.

Keywords: 1,2,3,4-tetrachlor-5,5-dialkoхycyclopentadiene, anhydride of 4-cyclohexene-1,2-dicarboxylic acid, N-alkylcarboxyimides of dialkoхy-1,8,9,10-tetrachlor-11,11-tricyclo/6,2,1,0^{2,7}-undec-9-en-4,5- dicarboxylic acid, melting temperature, theoretical information indices, diene synthesis.
