

## Preliminary communication

### Röntgenstrukturanalyse eines Additionsproduktes von $\text{TeCl}_4$ an Propylen

D. KOBELT und E.F. PAULUS

Farbwerke Hoechst AG, vormals Meister Lucius & Brüning, Frankfurt/M (Deutschland)

(Eingegangen den 22. Januar 1971)

Beim Einleiten von Propylen in eine 30%ige Suspension von  $\text{TeCl}_4$  in  $\text{CCl}_4$  bei  $20-60^\circ\text{C}$  entsteht unter anderem ein kristallines Produkt der Zusammensetzung  $\text{TeCl}_4 \cdot 2 \text{C}_3\text{H}_6$ <sup>1</sup>. Das NMR-Spektrum konnte nicht mit Sicherheit entscheiden, ob eine Addition der Markownikoff-Regel entsprechend stattgefunden hatte und wie die Liganden um das Telluratome angeordnet sind. Wir führten deshalb eine Röntgenkristallstrukturanalyse durch.

Da sich die Kristalle\* an der Luft geringfügig zersetzen, wurden sie in ein Markröhrchen eingeschmolzen. Die nadelförmigen Kristalle haben die Raumgruppe  $P\bar{1}$  mit 2 Molekülen in der Elementarzelle und den Zellkonstanten  $a = 11.70_7 \pm 0.01 \text{ \AA}$ ;  $b = 9.81_7 \pm 0.01 \text{ \AA}$ ;  $c = 5.82_6 \pm 0.01 \text{ \AA}$ ;  $\alpha = 95.0 \pm 0.3^\circ$ ;  $\beta = 108.3 \pm 0.3^\circ$ ;  $\gamma = 102.3 \pm 0.3^\circ$ .

Die Röntgenintensitäten (2818 Reflexe) wurden auf einem automatischen Siemens-Einkristalldiffraktometer nach W. Hoppe mit Mo- $K\alpha$ -Strahlung vermessen. Das Strukturproblem wurde mit der üblichen Schweratommethode gelöst und die Strukturparameter (anisotrope Temperaturfaktoren nur für Te und Cl) einer Kleinste-Quadrate-Verfeinerung unterzogen. Der *R*-Faktor liegt bei 4.7%.

Figur 1 gibt die Struktur der Verbindung wieder. Das  $\text{TeCl}_4$  wird also im Sinne der Regel von Markownikoff an zwei Moleküle Propylen addiert. Der Winkel C(4)–Te–C(1)

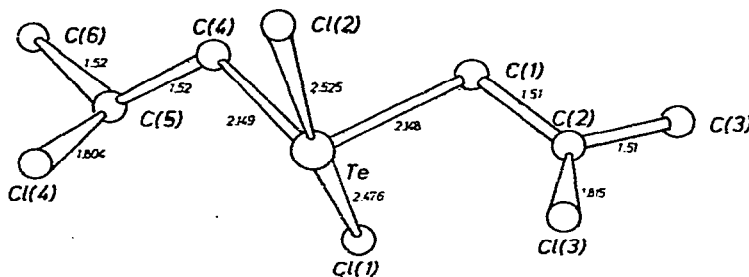


Fig. 1. Bis(2-chloropropyl)tellur-dichlorid. Standardabw.  $\sigma$ : Te–Cl, 0.0015; Te–C, 0.0054; Cl–C, 0.0067, C–C, 0.0085. Längenangaben in  $\text{Å}$ .

\*Herrn Dr. H. Kuckertz (Farbwerke Hoechst) danken wir für die Kristalle.

beträgt  $98.2^\circ$  und der Winkel  $\text{Cl}(1)\text{--Te--Cl}(2)$   $169.1^\circ$ . Wie in  $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_2$ <sup>2</sup> sind die beiden Chloratome auf die Alkylgruppen hin geneigt und zeigen signifikante Unterschiede in den Bindungslängen zum Telluratome. Die Ebene durch die Atome Te, Cl(1) und Cl(2) stellt innerhalb der Fehlergrenze eine Spiegelebene des Moleküls dar: C(2) und C(5) besitzen *R*- bzw. *S*-Konfiguration. In den vermessenen Kristallen liegt also von den 3 möglichen Stereoisomeren die *meso*-Form vor.

Die Elektronenkonfiguration des Telluratoms ist wohl  $sp^3d_z^2$ , was bedeutet, dass die Liganden des Telluratoms an den Ecken einer trigonalen Bipyramide angeordnet sind, wobei die Chloratome die axialen Positionen und die beiden Alkylgruppen und ein freies Elektronenpaar die äquatorialen Positionen besetzen.

Diese Strukturanalyse beweist, dass das Telluratome in Tellur-Chlor-Verbindungen mindestens 3 verschiedene Koordinationszahlen annehmen kann: In  $\text{TeCl}_4$  mit keiner Te-C-Bindung hat das Tellur zumindest im Kristall<sup>3</sup> die Koordinationszahl 6, in  $\text{TeCl}_3(\text{CH}_2\text{--CH}_2\text{--Cl})$  mit einer Te-C-Bindung<sup>4</sup> die Koordinationszahl 5 (wie im  $\text{TeF}_4$ <sup>5</sup>) und in  $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_2$ <sup>2</sup> genau wie in der untersuchten Verbindung die Koordinationszahl 4.

#### BIBLIOGRAPHIE

- 1 H.J. Arpe und H. Kuckertz, *Angew. Chem.*, 83 (1971) 81.
- 2 G.D. Christoffersen, R.A. Sparks und J.D. McCullough, *Acta Cryst.*, 11 (1958) 782.
- 3 B. Buss und B. Krebs, *Angew. Chem.*, 82 (1970) 446.
- 4 D. Kobelt und E.F. Paulus, *Angew. Chem.*, 83 (1971) 81.
- 5 A.J. Edwards und F.J. Hedwaidy, *J. Chem. Soc. A*, (1968) 2977.

*J. Organometal. Chem.*, 27 (1971) C63–C64