# ANALYSE STRUCTURALE EN SERIE CYCLOBUTANIQUE

# Partie 1. Dérivés monosubstitués et gem disubstitués du cyclobutane

# MOHAMED KARIMINE, JACQUELINE GALSOMIAS, JEAN-PIERRE LERE-PORTE et JEAN PETRISSANS

Laboratoire de Chimie Générale, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, Place Eugène Batillon, 34060 Montpellier Cédex (France)

(Received 1 June 1987)

#### ABSTRACT

Methylene bending mode analysis of some cyclobutane- $d_2$  molecules reveals that in the dissolved state (solvent CCl<sub>4</sub>), bromocyclobutane occurs exclusively in a pseudo-equatorial form, whereas, under the same conditions, cyclobutanol and 1-bromocyclobutane carbonitrile exist both in pseudo-axial and pseudo-equatorial conformations. NMR spectroscopy confirms the results obtained for bromocyclobutane and leads to the conclusion that the pseudo-equatorial conformer is predominant in the case of cyclobutanol as well as in that of cyclobutane carbonitrile. A theoretical study of cyclobutanol in the gaseous state by the P.C.I.L.O. method gives results which are consistent with a pseudo-equatorial conformer.

#### RÉSUMÉ

L'analyse des vibrations de cisaillement  $\delta(CH_2)$  de quelques dérivés du cyclobutane- $d_2$ révèle qu'à l'état dissous (solvant CCl<sub>4</sub>) le bromocyclobutane se présente exclusivement sous une conformation pseudo-équatoriale tandis que dans les mêmes conditions le cyclobutanol et le bromo-1 cyclobutane carbonitrile existent sous des conformations pseudoaxiale et pseudo-équatoriale. Une étude par spectroscopie de R.M.N., tout en confirmant les résultats relatifs au bromocyclobutane, amène à conclure à la prédominance du conformère pseudo-équatorial aussi bien dans le cas du cyclobutane carbonitrile que dans celui du cyclobutanol. L'étude théorique du cyclobutanol à l'état gazeux par la méthode P.C.I.L.O. conduit à prévoir la présence exclusive d'un conformère pseudoéquatorial.

#### INTRODUCTION

Nos études antérieures ont montré que le mode  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) constitue un auxiliaire approprié à l'étude structurale des molécules [1-7]. Les résultats obtenus dans le cadre de ces analyses ont en effet révélé l'existence de corrélations entre les fréquences des vibrations de cisaillement  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) des groupes méthylène et l'orientation des liaisons C-X (X = O, F, Cl, Br, I), C=C ou C=O placées en  $\alpha$  de ces groupes. Ainsi l'étude des cyclanones à cinq et six chainons a permis d'établir que la fréquence  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) d'un méthylène soumis à l'influence d'une liaison C-X axiale (ou pseudo-axiale) est inférieure à celle

0022-2860/87/\$03.50 © 1987 Elsevier Science Publishers B.V.

d'un méthylène adjacent à une liaison C—X équatoriale, l'écart observé étant de l'ordre de 15 à 20 cm<sup>-1</sup>.

Dans ce premier mémoire consacré à l'étude des dérivés du cyclobutane, nous présentons des données structurales déduites de l'analyse des vibrations de cisaillement  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) et dans une moindre mesure de l'interprétation des spectres de résonance magnétique nucléaire. Ces déterminations ont porté sur des dérivés monosubstitués C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>X (X = OH, CN, Br) pour lesquels l'examen des documents bibliographiques révèle des divergences, les auteurs concluant suivant les cas à l'existence de conformères pseudo-équatoriaux bloqués [8–13] ou de molécules en interconversion [14–18]. Nous avons joint à cette étude celle du bromo-1 cyclobutane carbonitrile, composé apparemment non décrit à ce jour, ainsi qu'une approche théorique de cyclobutanol par la méthode P.C.I.L.O.

### RÉSULTATS

# Géométrie des dérivés du cyclobutane

Les travaux antérieurs effectués sur des dérivés monosubstitués du cyclobutane montrent que ces molécules présentent un angle du plissement ( $\Phi$ ) dont la valeur évolue avec la nature du substituant; il est de 29°22′ dans le cas du bromocyclobutane [13] et de 20° pour les dérivés chlorés [19] et cyanés [9]. Dans ces molécules, les angles de torsion  $\gamma$  formés par les liaisons C—C du cycle supposé symétrique (Fig. 1) sont liés à l'angle ( $\Phi$ ) par la relation:

 $\cos \gamma = \cos^2{(\Phi/2)}.$ 

L'examen de la Fig. 1 montre par ailleurs que l'angle  $\theta$  définissant la position du substituant X par rapport au méthylène voisin dépend de la valeur de  $\gamma$  et par voie de conséquence de l'angle  $\Phi$ . Les angles  $\theta$  calculés pour des valeurs de  $\Phi$  compatibles avec les données expérimentales citées ci-dessus permettent de constater que les substituants du cyclobutane occupent, suivant le conformère envisagé, des positions pseudo-axiale ou pseudoéquatoriale.



Fig. 1. Dérivés du cyclobutane: représentation des angles de plissement et de torsion du cycle tétragonal.

Φ	20	30	40
γ	14,1	21,1	28
θ	45,9	38,9	32

Analyse des vibrations de cisaillement  $\delta(CH_2)$ 

Les molécules étudiées possèdent trois groupes méthylène différemment influencés par les substituants introduits sur le cycle et dont les vibrations peuvent être couplées. En vue de faciliter l'analyse des spectres, nous avons préparé des dérivés deutériés du cyclobutane où ne subsistent que les groupes méthylène soumis à une influence similaire des substituants:



Les vibrations des dérivés du cyclobutane- $d_0$  ou - $d_2$ , molécules de symétrie  $C_s$ , sont théoriquement actives en spectroscopie d'absorption infrarouge et de diffusion Raman.

#### Cyclobutane carbonitrile $(d_2-3,3)$

De nos précédents travaux [5, 19], il ressort que la fréquence  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) associée au groupe CCN-CH<sub>2</sub>Y est sensiblement indépendante de l'orientation spatiale de la liaison C-CN et par ailleurs analogue à celle d'un méthylène adjacent à une liaison C-X (X = OH, Br) présentant une orientation équatoriale.

Dans le cas du cyclobutane carbonitrile, il apparaît donc que l'existence éventuelle d'une isomérie de rotation ne peut être déduite de l'analyse des vibrations  $\delta$  (CH<sub>2</sub>). Toutefois, les spectres de vibration de ce composé présentent un interêt particulier dans la mesure où les deux absorptions relevées à 1461 et 1436 cm<sup>-1</sup>, auxquelles correspondent les bandes de diffusion à 1464 et 1439 cm<sup>-1</sup>, peuvent être considérées comme caractéristiques d'un conformère pseudo-équatorial. Ces deux bandes dénotent par ailleurs l'existence d'un couplage entre les vibrations des groupes méthylène.

## Bromo-1 cyclobutane $(d_2-3,3)$ et cyclobutanol $(d_2-3,3)$

Dans l'éventualité d'une isomérie de rotation, les données relatives au cyclobutane carbonitrile et les résultats de nos précédents travaux présentés plus haut conduisent à prévoir: (i) deux bandes caractéristiques du conformère pseudo-équatorial dont les fréquences doivent être comparables à celles

du cyclobutane carbonitrile; (ii) deux bandes correspondant au conformère pseudo-axial, déplacées de façon similaire vers les basse fréquences par rapport aux précédentes.

En fait, les spectres de vibration du dérivé bromé ne présentent que deux bandes d'absorption (ou de diffusion) dont les fréquences sont très voisines de celles que l'on observe pour le cyclobutane carbonitrile (Tableau 1). Il apparaît donc qu'à l'état dissous (solvant  $CCl_4$ ) cette molécule se présente exclusivement sous une conformation pseudo-équatoriale\*.

Le spectre Raman du cyclobutanol- $d_2$  à l'état liquide ou dissous (solvant CCl<sub>4</sub>) comporte quatre bandes de diffusion qui selon nos prévisions constituent les composantes de deux doublets: 1463—1434 cm<sup>-1</sup> et 1448—1417 cm<sup>-1</sup> caractéristiques des conformères pseudo-équatorial et pseudo-axial.

L'absence du doublet  $1448-1417 \text{ cm}^{-1}$  dans le spectre du solide enregistré à  $110^{\circ}$  C confirme par ailleurs l'origine conformationnelle de la surabondance de fréquences observée pour le composé à l'état dissous. Notons que des travaux de spectroscopies infrarouge et Raman ont permis à Durig et coll. [15, 16] de conclure à l'existence d'un équilibre conformationnel pour le composé à l'état gazeux.

# Bromo-1 cyclobutane carbonitrile $(d_2-3,3)$

Les remarques formulées précédemment conduisent à prévoir pour le groupe  $C < _{Br}^{CN}$  une influence sur les méthylènes comparable à celle des liaisons C-Br ou C-OH. Dans l'hypothèse d'une isomérie de rotation, le spectre du composé doit donc présenter quatre bandes d'absorption.

Conformément à ces prévisions, on observe la présence de deux doublets à  $1460-1437 \text{ cm}^{-1}$  et 1449 et  $1425 \text{ cm}^{-1}$  correspondant respectivement aux conformères à brome équatorial et axial. A basse température, le spectre du composé examiné à l'état solide ne comporte plus que le doublet  $1460-1437 \text{ cm}^{-1}$ , simplification qui est attribuable à la disparition du conformère à brome axial.

### Analyse des spectres de résonance magnétique nucléaire

Une étude complémentaire effectuée par spectroscopie de résonance magnétique nucléaire confirme les résultats relatifs au dérivé bromé. L'examen du Tableau 2 révèle en effet que la constante de couplage  ${}^{3}J_{\rm HH}$ -trans (Fig. 2) mesurée sur le spectre du bromocyclobutane est voisine de celle que l'on détermine pour l'isomère (Z) du bromo-1 t-butyl-3 cyclobutane qui possède un atome de brome pseudo-équatorial.

De même, dans la mesure où le dérivé tertio-butylé constitue un modèle de référence pour le cyclobutane carbonitrile et le cyclobutanol, la comparaison

<sup>\*</sup>Les trois absorptions relevées dans le spectre du bromocyclobutane- $d_0$  (Tableau 1) sont donc liées à l'existence d'un couplage entre les vibrations  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) des méthylènes.

D
A
Ξ
R B
È

Fréquences des vibrations de cisaillement  $\delta(CH_2)$  de quelques dérivés monosubstitués du cyclobutane dissous dans le tétrachlorure de carbone<sup>a</sup>

Composes	Cyclobutan	ie carbonitrile		Bromo cycl	obutane		Cyclobuta	nol	
	$d_{_0}$	$d_2$		$d_{_0}$	$d_2$		$d_{o}$	$d_2$	
Fréquences $\delta(CH_2)$ (cm <sup>-1</sup> )	I.R.	I.R.	Rb	I.R.	I.R.	R <sup>b</sup>	I.R.	I.R.	Rb
	1460(en)	1461/10)	1 46 4/FV	1462(9)	1457(9)	1462(m)	1461(18)	1458(F)	1463 1448
	1445(18)	(01)1011	( ) = 0 = 1	1445(22)			1444(18)	4211	
		1436(9)	1439	1434(15)	1435(13)	1445(ep) <sup>c</sup>	1434(14)	1404 1	
			(ep, t.f.)					1426(f)	1417(f)
<sup>a</sup> F = fort; f = faible; faisant partie d'un m	m = moyenn assif mal réso	e; t.f. = très fi olu. La préser	aible; ep = ép 1ce d'une trc	aulement. <sup>b</sup> F isième bande	réquences rel de diffusion	evées sur le sp liée à un artéf	ectre du liqui act spectrosce	ide pur. <sup>c</sup> Ep opique est s:	aulement ins doute
à l'origine de la fréqu	ence anormal	lement élevée	de l'épaulem	ient.					

I

i

ł

| | !

. ... ... .

#### **TABLEAU 2**

Dérivés monosubstitués du cyclobutane- $d_2$  et du t-butyl-3 cyclobutane: constantes de couplage  ${}^{3}J_{\rm HH}$  (Hz)<sup>a</sup> entre portons vicinaux portés par les carbones en position 1 et 2 (Fig. 2)

Composés	Cyclobutanol <sup>b</sup> $(d_2 - 3, 3)$	Bromo-1-t cyclobuta	-butyl-3 ne	Bromo-1 cyclobutane <sup>c</sup>	Cyclobutane carbonitrile
Constantes de couplage ( <sup>3</sup> J <sub>HH</sub> )		Z (Cis)	E (Trans)	$(d_2 - 3, 3)$	$(d_2 - 3, 3)$
$J_{\rm HH}(trans)^{\rm d} J_{\rm HH}^{\rm a}(cis)^{\rm e}$	8,00 6,90	8,75(J <sub>aa</sub> ) 7,50	$5,25(J_{ee})$ 7,50	8,36 7,35	8,50 7,78

<sup>a</sup>Spectres à 360 MHz (solv. CCl<sub>4</sub>, CDCl<sub>3</sub> 10%). <sup>b</sup>Litt. (20):  $J_{\rm HH}(trans) = 8,03$  Hz;  $J_{\rm HH}(cis) = 6,94$  Hz. <sup>c</sup>Litt. (20):  $J_{\rm HH}(trans) = 8,32$  Hz;  $J_{\rm HH}(cis) = 7,36$  Hz. <sup>d</sup> $J_{\rm HH}(trans) = J_{\rm ee}$  ou  $J_{\rm aa}$  si la molécule est bloquée;  $J_{\rm aa} < J_{\rm HH} < J_{\rm ee}$  dans l'éventualité d'un équilibre conformationnel. <sup>e</sup> $J_{\rm HH}(cis) = J_{\rm ea}$  ou  $J_{\rm ae}$ .



Fig. 2. Dérivés du cyclobutane: définition de la constante de couplage  $J_{HH}^3$ .

des constantes  ${}^{3}J_{\rm HH}$  (Tableau 2) donne à penser qu'il existe pour ces deux composés une forte proportion de forme pseudo-équatoriale<sup>\*</sup>. Enfin, si la modification de la valeur intrinsèque des constantes de couplage avec la nature du substituant est négligeable, les résultats du Tableau 2 conduisent à admettre que la proportion de forme équatoriale est plus importante pour le dérivé hydroxylé que pour les deux autres composés (OH > CN > Br).

#### Etude théorique du cyclobutanol

L'étude conformationnelle théorique du cyclobutanol a déjà été abordée par une méthode ab initio [21]. Les résultats obtenus pour l'état gazeux amènent à prévoir la présence quasi-exclusive du conformère pseudo-équatorial, l'énergie de cette forme étant inférieure à celle du conformère pseudoaxial de 8,1 kJ mol<sup>-1</sup>.

<sup>\*</sup>Dans le cas du cyclobutanol, la méconnaissance des surfaces intrinsèques des bandes de diffusion et la complexité du massif  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) ne permettent pas une évaluation quantitative la proportion des conformères en présence. Toutefois, l'examen du spectre Raman donne à penser que le conformère équatorial est prépondérant.

Dans le cadre de cette étude, nous avons calculé les énergies conformationnelles du cyclobutanol par la méthode P.C.I.L.O. pour différentes valeurs de l'angle de plissement du cycle, en supposant l'hydrogène du groupe hydroxyle successivement en position trans et gauche\*. Pour chacune des valeurs de  $\Phi$ , nous avons procédé à une optimisation de l'énergie de la molécule par rapport à l'ensemble des paramètres structuraux à l'exception des liaisons C—H.

Les résultats obtenus (Tableau 3) montrent que quelle que soit la position du groupe O—H, le puits de potentiel correspond à un conformère pseudoéquatorial dont les paramètres structuraux optimisés sont précisés sur la Fig. 3. Notons que l'analyse des spectres de vibration de la molécule à l'état gazeux [16] amène à conclure à la coexistence du conformère précité et d'une molécule à conformation pseudo-axiale présentant un groupe O—H en position gauche. Le moment dipolaire calculé pour le composé, soit: 1,85 D (orientation gauche) et 1,87 D (orientation trans) est proche du moment mesuré  $\mu = 1,62$  D [12]. On observe cependant que l'angle de plissement évalué théoriquement (10°) diffère notablement des valeurs expérimentales déterminées pour les dérivés bromés et cyanés.

## CONCLUSION

En conclusion, l'individualisation des fréquences  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) associées aux conformères du cyclobutanol ou du bromo-1 cyclobutane carbonitrile

## **TABLEAU 3**

Group OH en posi	tion gauche	Groupe OH en posi	tion trans
Angle de plissement $\Phi$ (°)	E (kcal mol <sup>-1</sup> )	Angle de plissement $\Phi$ (°)	E (kcal mol <sup>-1</sup> )
OH équatorial		····	
30	-33 446,58 (2,22)	30	-33446.14(2.32)
20	-33448,51(0.29)	20	-33 447,69 (0,77)
12	-33 448,65 (0,15)	_	- , , , , ,
10	-33 448,80 (0,0)	10	-33448.46(0.0)
8	-33 448,66 (0,14)	-	
0	-33 448,52 (0,28)	0	-33 447,90 (0,56)
OH axial			
-10	-33 448,06 (0,74)	-10	-33447.34(1.12)
20	-33 447,00 (1,8)	-20	-33 446,22 (2,24)

Cyclobutanol: energies moleculaires en fonction de l'angle de pliseement  $\Phi$  du cycle, calculées par la méthode P.C.I.L.O.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Les valeurs placées () correspondent à  $\Delta E = E_{\Phi} - E_{10}^{\circ}$ .

\*Angle de torsion HC,OH éqal à 60° pour le conformère gauche et 180° pour le conformère trans.



Fig. 3. Cyclobutanol: géométrie optimisée du conformère pseudo-équatorial. <sup>a</sup>Angle de rotation du méthylène dans son plan observé lors de l'optimisation. Les fléches donnent le sens de rotation. <sup>b, c</sup>Valeur de l'angle COC pour le groupement hydroxyle en position *trans* (b) et gauche (c).

confirme l'existence de molécules plissées. Il apparaît par ailleurs que l'analyse des vibrations de cisaillement  $\delta$  (CH<sub>2</sub>) des groupes méthylène et le formalisme P.C.I.L.O. constituent deux méthodes d'investigation appropriées à l'étude des structures moléculaires en série cyclobutanique.

#### PARTIE EXPÉRIMENTALE

## Origine et purification des composés

# Dérivés du cyclobutane-d<sub>2</sub> et du t-butyl-cyclobutane

Les différentes étapes conduisant à la formation des dérivés du cyclobutane- $d_2$  et du t-butyl-cyclobutane sont constituées par des réactions dont les protocoles expérimentaux sont aujourd'hui bien connus. En conséquence, nous ne donnons ici qu'une représentation schématique des méthodes de synthèse utilisées (Schémas 4 et 5). La pureté isotopique des dérivés deutériés déterminée par spectroscopie de résonance magnétique nucléaire est supérieure à 98%.

# Dérivés du cyclobutane-d<sub>0</sub>

Le cyclobutane carbonitrile et le bromocyclobutane ont été préparés de la même manière que leurs homologues deutériés. Le cyclobutanol a été obtenu par action de l'acide chlorhydrique concentré sur le cyclopropyl carbinol [31]. Les techniques de purification utilisées pour les différents composés ainsi que les déplacements chimiques des protons sont précisés dans le Tableau 4.



Schéma 1. Schéma descriptif de la préparation des dérivés monosubstitués du cyclobutane  $(d_{2}$ -3,3).



Schéma 2. Schéma descriptif de la préparation du bromo-1 t-butyl-3 cyclobutane.

# TABLEAU 4

δ (ppm) <sup>b</sup> (Fig. 2)	Composés					
	Cyclobutane carbonitrile d <sub>o</sub> et d <sub>2</sub>	Cyclobutanol $d_0$ et $d_2$	Bromo cyclobutane $d_0$ et $d_2$	Bromo-1 cyclobutane carbonitrile <sup>c</sup> d <sub>2</sub>	Bromo-1 t-butyl-3 cyclobutane <sup>d</sup>	
					(Z)	(E)
$   H_{1}    H_{2}, H_{5}    H_{3}, H_{6}    H_{4} $	3,08 2,38 2,30	4,11 2,20 1,90	4,44 2,59 2,46	2,80 <sup>e</sup>	4,27 2,51 2,20 1,96	4,42 2,50 2,25 2,00
Techniques <sup>f</sup>	$C.P.V.$ $T = 130^{\circ}C$	$C.P.V.$ $T = 80^{\circ}C$	distillation Eb <sub>710</sub> = 107°C	$C.P.V.$ $T = 140^{\circ}C$	$C.P.V.$ $T = 70^{\circ}C$	

Techniques de purification des composés et déplacements chimiques des protons<sup>a</sup>

<sup>a</sup>CCl<sub>4</sub>,  $\delta$  ppm/TMS. <sup>b</sup>Déplacements chimiques relevés sur les spectres enregistrés à 360 MHz. Pour les dérivés du cyclobutane, les déplacements chimiques sont ceux des cyclobutanes  $d_2$ . Dans le cas des cyclobutanol et bromocyclobutane, les déplacements chimiques sont analogues à ceux déjà publiés [20]. <sup>c</sup>Spectre enregistré à 100 MHz. <sup>d</sup>Identification des isomères Z et E effectuée par analogie avec celle des isomères du t-butyl-3 cyclobutanol [32, 33]. <sup>e</sup>On observe pour les différents protons un massif mal résolu dont nous donnons la position de la partie centrale. <sup>f</sup>C.P.V. = Chromatographie phase vapeur — colonne XF 1150.

# Appareillage et conditions expérimentales

# Spectrométrie de vibration

Absorption dans l'infrarouge. Les conditions d'enregistrement des spectres d'absorption infrarouge ont été précisées dans nos précédents mémoires.

Diffusion Raman. Les spectres Raman ont été enregistrés à l'aide d'un spectromètre de marque Dilor équipé d'un système d'acquisition de données Tracord et d'un laser Spectra-physics émettant à 487,99 nm. La largeur spectrale de fente est de 2 à 4 cm<sup>-1</sup>.

# Spectrométrie de R.M.N.

Les enregistrements ont été effectués à l'aide d'un spectromètre Varian HA100 (dérivés du cyclobutane) et de deux spectromètres Bruker à transformée de Fourier fonctionnant à 360 et 200 MHz. Les déplacements chimiques ont été mesurés par rapport au T.M.S. pris comme référence interne. Les valeurs des constantes de couplage et des déplacements chimiques ont été déterminées par lecture au premier ordre puis affinées par moindres carrés à l'aide du programme LAOCN-3 [34].

#### REMERCIEMENTS

Nous exprimons nos plus vifs remerciements à Monsieur J. C. Rossi, Professeur à la Faculté de Pharmacie de Montpellier, (Laboratoire de Chimie Organique, U.A.1111), pour l'aide qu'il nous a apportée dans la réalisation de ce travail.

#### RÉFÉRENCES

- 1 J. Petrissans et J. Deschamps, Tetrahedron, 26 (1970) 2575.
- 2 M. F. Guimon, G. Pfister, F. Metras et J. Petrissans, J. Mol. Struct., 33 (1976) 239,
- 3 J. P. Lere-Porte, J. Petrissans et S. Gromb, J. Mol. Struct., 34 (1976) 55.
- 4 J. P. Lere-Porte et J. Petrissans. J. Mol. Struct., 48 (1978) 289.
- 5 J. P. Lere-Porte, J. Galsomias, A. Bonniol et J. Petrissans, CR Acad. Sci., 285 (1977) 57.
- 6 A. Bonniol, J. Galsomias et J. Petrissans, CR Acad. Sci., 288 (1979) 407.
- 7 J. P. Lere-Porte, C. Chorro et J. Petrissans, CR Acad. Sci., 295 (1982) 1105.
- 8 C. C. Blackwell, L. A. Carreira, J. R. Durig, J. M. Karriker et R. C. Lord, J. Chem. Phys., 56 (1972) 1706.
- 9 J. R. Durig, L. A. Carreira et W. J. Lafferty, J. Mol. Spectrosc., 46 (1973) 187.
- 10 Mei Y. Fong et M. D. Harmony, J. Chem. Phys., 58 (1973) 4260.
- 11 H. Kim et W. D. Gwinn, J. Chem. Phys., 44 (1966) 865.
- 12 J. M. Macdonald, D. Norbury et J. Sheridan, Spectrochim. Acta, Part A, 34 (1978) 815.
- 13 W. G. Rothschild et B. P. Dailey, J. Chem. Phys., 36 (1962) 2931.
- 14 J. R. Durig et W. H. Green, J. Chem. Phys., 47 (1967) 673.
- 15 J. R. Durig et W. H. Green, Spectrochim. Acta, Partie A, 25 (1969) 849.
- 16 J. R. Durig, G. A. Guirgis, W. E. Bucy et D. A. C. Compton, J. Mol. Struct., 49 (1978) 323.
- 17 W. G. Rothschild, J. Chem. Phys., 45 (1966) 1214.
- 18 W. G. Rothschild, J. Chem. Phys., 45 (1966) 3599.
- 19 J. P. Lere-Porte, Thèse de Doctorat d'Etat, Montpellier, France, 1984.
- 20 K. B. Wiberg, D. E. Barth et W. E. Pratt, J. Am. Chem. Soc., 99 (1977) 4286.
- 21 T. Jonvik et K. E. Boggs, J. Mol. Struct. (Theochem), 105 (1983) 201.
- 22 J. B. Lambert, J. Am. Chem. Soc., 89 (1967) 1836.
- 23 J. Cason et C. F. Allen, J. Org. Chem., 14 (1949) 1036.
- 24 C. H. Chang, R. F. Porter et S. H. Bauer, J. Mol. Struct., 7 (1971) 89.
- 25 R. Pinson Jr. et S. L. Friess, J. Am. Chem. Soc., 72 (1950) 5333.
- 26 S. L. Friess et R. Pinson Jr., J. Am. Chem. Soc., 74 (1952) 1302.
- 27 W. H. Perkin Jr., J. Chem. Soc., 65 (1894) 950.
- 28 Rokuro Sudo et Shigehiro Ichiliara, Bull. Chem. Soc. Jpn., 36 (1963) 145.
- 29 G. M. Lampman, E. J. Martin et L. E. Wangen, J. Org. Chem., 32 (1967) 3950.
- 30 J. S. Meek et D. T. Osuga, Org. Synth. Collec., Vol. V, (1973), 126.
- 31 M. Krumpolc et J. Rocek, Org. Synth., 60 (1981) 20.
- 32 R. Granger, J. Boussineso, J. P. Girard et J. C. Rossi, CR Acad. Sci., 266 (1968) 1670.
- 33 G. M. Lampman, G. D. Hager et G. L. Couchman, J. Org. Chem., 35 (1970) 2398.
- 34 LAOCN-3, Programme 111, Q.C.P.E. (1974), Indiana University, Bloomington, IN.