

We thank UCT and the CSIR for financial support. SC thanks the Beit Trust for a scholarship.

### References

- BOND, D. R., MODRO, T. A. & NASSIMBENI, L. R. (1985). *J. Org. Chem.* **50**, 2281–2287.  
 COCKS, S. & MODRO, T. A. (1985). *J. Org. Chem.* In the press.  
 CROMER, D. T. & LIBERMAN, D. (1970). *J. Chem. Phys.* **53**, 1891–1898.  
 CROMER, D. T. & MANN, J. B. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 321–324.  
 MOTHERWELL, W. D. S. (1974). *PLUTO*. Program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.

- NARDELLI, M. (1983). *Comput. Chem.* **7**, 95–98.  
 ROBERTS, P. & SHELDRIK, G. M. (1975). *XANADU*. Program for crystallographic calculations. Univ. of Cambridge, England.  
 SCHMIDT, G. M. J. (1971). *Pure Appl. Chem.* **27**, 647–678.  
 SHELDRIK, G. M. (1978). *SHELX76*. In *Computing in Crystallography*, edited by H. SCHENK, R. OLTJOF-HAZEKAMP, H. VAN KONINGSVELD & G. C. BASSI, pp. 34–42. Delft Univ. Press.  
 SHELDRIK, G. M. (1983). *SHELXS84*. Direct-methods program. Private communication.  
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.  
 SUKENIK, C. N., BONAPACE, J. A. P., MANDEL, N. S., LAU, P. Y., WOOD, G. & BERGMAN, R. G. (1977). *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 851–858.

*Acta Cryst.* (1986). **C42**, 1055–1058

## Structure du *N*-(*tert*-Butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide à 200 K

PAR F. BRISSE, S. RAYMOND ET J.-C. RICHER

*Département de Chimie, Université de Montréal, CP 6210 Succ. A, Montréal, Québec, H3C 3V1, Canada*

(Reçu le 30 août 1985, accepté le 10 février 1986)

**Abstract.**  $C_{17}H_{25}NO_2$ ,  $M_r = 275.39$ , rhombohedral,  $R\bar{3}$ ,  $a = 14.385$  (4) Å,  $\alpha = 65.34$  (6)° (rhombohedral axes),  $a = b = 15.530$  (7),  $c = 33.747$  (14) Å,  $V = 7048.7$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 18$ ,  $D_m = 1.15$ ,  $D_x = 1.167$  Mg m<sup>-3</sup>,  $F(000) = 900$  (hexagonal axes),  $\lambda(Mo K\alpha) = 0.71069$  Å,  $\mu = 0.071$  mm<sup>-1</sup>,  $T = 200$  K,  $R = 0.044$  for 1242 observed reflections. The cyclohexane ring, which is in the chair conformation, is slightly affected by the presence of the *tert*-butyl substituent which is 2.3 (5)° from the perfectly staggered position. The plane of the amide group is tilted by 19 (1)° from that of the benzene ring. Two types of hydrogen bonds,  $O(1)\cdots O(2') = 2.707$  (4) and  $O(1)\cdots N(1') = 3.052$  (4) Å, link the molecules together. The molecules are associated in groups of three through the  $O(1)\cdots N(1')$  hydrogen bonds. This 'trimer' is, in turn, H-bonded to others by the  $O(1)\cdots O(2')$  bond. This results in a two-dimensional network parallel to the *ab* plane.

**Introduction.** Dans le cadre de nos travaux (Richer & Freppel, 1969, 1970, 1971) sur les dérivés 1,2-disubstitués du *tert*-butyl-3 cyclohexène et à la suite de nos observations antérieures sur les pK des divers isomères des amino-2 *tert*-butyl-3 (ou 6) cyclohexanol-1 (Richer, Freppel, Tchalpa & Welwart, 1973), nous avons voulu examiner la structure cristalline du *N*-(*tert*-butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide (Tapin, 1978) et en comparer la conformation à celles de molécules apparentées préparées tant dans nos laboratoires (Brisse, Beauchamp, Richer, Belluci &

Ingrosso, 1976) que par Bellucci, Berti, Colapietro, Spagna & Zambonelli (1976). Une première étude à la température ambiante ayant révélé une forte agitation thermique, surtout au niveau du groupe *tert*-butyle, la détermination présentée ici a été conduite à 200 K (Pascard & Cesario, 1980).

**Partie expérimentale.** Synthèse décrite par Tapin (1978), recristallisation dans l'éther, PF = 460 K; dimensions du cristal 0,10 × 0,42 × 0,52 mm; maille à partir de 25 réflexions;  $13 \leq 2\theta \leq 23^\circ$ ; diffractomètre Nonius CAD-4; radiation du molybdène monochromatisée au graphite; densité par flottaison dans une solution aqueuse de ZnCl<sub>2</sub>; balayage  $\omega - 2\theta$ , largeur de balayage  $\Delta\omega = (1,00 + 0,35 \text{tg}\theta)^\circ$ , durée maximum 50 s;  $2\theta_{\text{max}} = 45,0^\circ$  ( $0 \leq h \leq 16$ ,  $0 \leq k \leq 16$ ,  $-36 \leq l \leq 36$ , avec  $-h + k + l = 3n$ ); intensités de six réflexions de référence mesurées toutes les 2 h; orientation du cristal vérifiée après chaque 250 mesures, décroissance linéaire de l'intensité due à un début de sublimation (7% pendant la durée des mesures). 2325 réflexions mesurées 1242 réflexions (60%) répondant au critère  $I \geq 1,96\sigma(I)$  ont servi à la détermination et à l'affinement de la structure,  $\sigma(I)$  calculé à partir de la statistique de comptage. Correction Lp, pas de correction d'absorption; méthodes directes (*MULTAN*);\* affinement par moindres carrés (approximation par blocs diagonaux); quantité minimisée  $\sum w(|F_o| - |F_c|)^2$ ; les atomes

\* Les programmes utilisés dans ce travail sont listés dans Wyss, Brisse & Hanessian (1984).

Tableau 1. Coordonnées atomiques fractionnaires et facteurs d'agitation thermique  $U_{eq}(\text{Å}^2 \times 10^4)$  (avec leurs écarts-type)

$$U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	$U_{eq}$
O(1)	8218 (2)	-1273 (2)	8679 (1)	359
O(2)	6934 (2)	-453 (2)	8111 (1)	429
N(1)	8314 (2)	485 (2)	8468 (1)	275
C(1)	8271 (3)	-608 (3)	8983 (1)	303
C(2)	7849 (2)	44 (2)	8846 (1)	268
C(3)	7965 (2)	809 (3)	9165 (1)	282
C(4)	7513 (3)	240 (3)	9554 (1)	370
C(5)	7931 (3)	-414 (3)	9684 (1)	402
C(6)	7794 (3)	-1151 (3)	9363 (1)	377
C(7)	7564 (3)	1525 (3)	9062 (1)	324
C(8)	8083 (3)	2183 (3)	8705 (1)	525
C(9)	6447 (3)	955 (3)	8979 (1)	505
C(10)	7766 (3)	2236 (3)	9413 (1)	515
C(11)	7831 (3)	156 (3)	8124 (1)	301
C(12)	8403 (3)	579 (2)	7748 (1)	274
C(13)	7858 (3)	469 (3)	7408 (1)	336
C(14)	8313 (3)	784 (3)	7045 (1)	385
C(15)	9332 (3)	1219 (3)	7020 (1)	439
C(16)	9891 (3)	1348 (3)	7357 (1)	414
C(17)	9429 (3)	1028 (3)	7721 (1)	334

C, N, O ont des facteurs thermiques anisotropes; les atomes H trouvés par synthèse différence de Fourier ont des facteurs thermiques isotropes.  $R = 0,048$ ,  $wR = 0,044$ ; poids dérivés de  $\sigma(I)$ ,  $S = 1,226$ . Valeur max. de  $\Delta/\sigma = 0,55$ , valeur moyenne de  $\Delta/\sigma = 0,18$ ; fluctuations extrêmes de la densité électronique résiduelle  $-0,21$  et  $+0,24 \text{ e Å}^{-3}$ . Courbes de diffusion pour C, N et O de Cromer & Mann (1968) et de Stewart, Davidson & Simpson (1965) pour H.

**Discussion.** Les coordonnées atomiques sont présentées dans le Tableau 1.\*

Comme il est possible de l'observer Fig. 1, la molécule est constituée d'un cycle cyclohexanique de conformation chaise substituée en 2 par un groupe benzamido en position équatoriale, en 1 par un groupement alcool équatorial et finalement en 3 par un groupement *tert*-butyle aussi en position équatoriale. Les résultats obtenus avec le *N*-(*tert*-butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide (*trans-trans*) confirment les données obtenues antérieurement (Brisse *et al.*, 1976) avec le *p*-nitrobenzoate du bromo-2 *tert*-butyl-6 cyclohexanol-1 (*trans-trans*) qui lui est apparenté. Ce travail confirme aussi les résultats obtenus par Bellucci *et al.* (1976) avec le *p*-nitrobenzoate du dibromo-2-*c*,3-*t tert*-butyl-4-*c* cyclohexanol-1-*r*. En effet, l'existence à

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs thermiques anisotropes, les coordonnées des atomes d'hydrogène et les plans moyens ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 42825: 12 pp.). On peut obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

l'état cristallin de cette molécule sous forme croisée est due à l'interaction entre deux gros substituants, le groupe *tert*-butyle en 4 et l'atome de brome fixé sur le carbone adjacent. L'effet de ces substituants sur la conformation du groupement cyclohexanique peut être plus clairement appréciés par les projections de Newman le long de C(1)–C(2) et C(2)–C(3) représentées sur la Fig. 2.

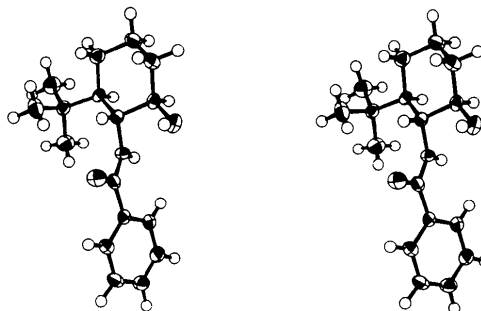


Fig. 1. Paire stéréoscopique d'une molécule de *N*-(*tert*-butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide. Les ellipsoïdes des facteurs thermiques anisotropes correspondent à un niveau de probabilité de 50%.

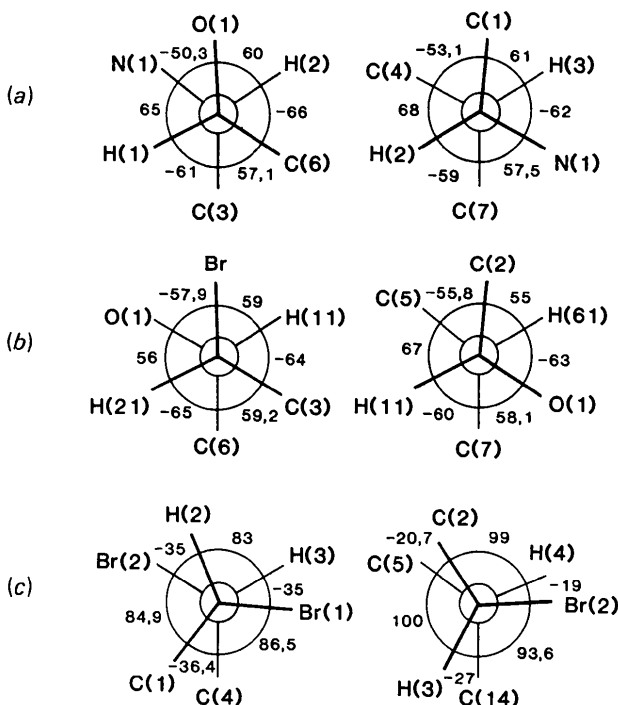


Fig. 2. Représentations de Newman, le long de C(1)–C(2) (première colonne) et de C(2)–C(3) (deuxième colonne) pour: (a) le *N*-(*tert*-butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide; (b) *p*-nitrobenzoate du bromo-2 *tert*-butyl-6 cyclohexanol-1 (*trans-trans*) [le long de C(2)–C(1) et C(1)–C(6)]; et (c) *p*-nitrobenzoate du dibromo-2-*c*,3-*t tert*-butyl-4-*c* cyclohexanol-1-*r* [le long de C(2)–C(3) et C(3)–C(4)].

Tableau 2. Distances (Å), angles de valence (°) et angles de torsion (°) du *N*-(*tert*-butyl-2 hydroxy-6 cyclohexyl)-benzamide à 200 K

C(1)–C(2)	1,528 (6)	C(2)–N(1)	1,458 (4)
C(2)–C(3)	1,545 (5)	N(1)–C(11)	1,339 (4)
C(3)–C(4)	1,540 (5)	C(11)–O(2)	1,233 (5)
C(4)–C(5)	1,519 (6)	C(11)–C(12)	1,498 (5)
C(5)–C(6)	1,513 (5)	C(12)–C(13)	1,385 (5)
C(6)–C(1)	1,509 (5)	C(13)–C(14)	1,377 (5)
C(1)–O(1)	1,429 (4)	C(14)–C(15)	1,377 (7)
C(3)–C(7)	1,562 (6)	C(15)–C(16)	1,382 (6)
C(7)–C(8)	1,525 (5)	C(16)–C(17)	1,385 (5)
C(7)–C(9)	1,529 (6)	C(12)–C(17)	1,386 (6)
C(7)–C(10)	1,539 (5)		
C(1)–C(2)–C(3)	112,0 (3)	C(1)–C(2)–N(1)	107,4 (3)
C(2)–C(3)–C(4)	107,8 (3)	C(3)–C(2)–N(1)	114,1 (3)
C(3)–C(4)–C(5)	114,0 (3)	C(2)–N(1)–C(11)	121,9 (3)
C(4)–C(5)–C(6)	110,6 (3)	N(1)–C(11)–O(2)	121,8 (4)
C(5)–C(6)–C(1)	110,0 (3)	N(1)–C(11)–C(12)	118,0 (3)
C(6)–C(1)–C(2)	111,9 (3)	O(2)–C(11)–C(12)	120,1 (3)
C(2)–C(3)–C(7)	117,2 (3)	C(11)–C(12)–C(13)	117,0 (3)
C(4)–C(3)–C(7)	111,6 (3)	C(11)–C(12)–C(17)	123,9 (3)
C(3)–C(7)–C(8)	112,8 (3)	C(17)–C(12)–C(13)	119,1 (3)
C(3)–C(7)–C(9)	111,7 (3)	C(12)–C(13)–C(14)	121,3 (4)
C(3)–C(7)–C(10)	109,2 (3)	C(13)–C(14)–C(15)	119,3 (4)
C(8)–C(7)–C(9)	108,0 (3)	C(14)–C(15)–C(16)	120,3 (4)
C(8)–C(7)–C(10)	106,1 (3)	C(15)–C(16)–C(17)	120,2 (4)
C(9)–C(7)–C(10)	108,8 (3)	C(16)–C(17)–C(12)	119,9 (4)
C(2)–C(1)–O(1)	111,9 (3)		
C(6)–C(1)–O(1)	111,8 (3)		
C(1)–C(2)–C(3)–C(4)	–53,1 (4)	C(1)–C(2)–C(3)–C(7)	179,9 (3)
C(2)–C(3)–C(4)–C(5)	53,8 (4)	C(5)–C(4)–C(3)–C(7)	–175,9 (3)
C(3)–C(4)–C(5)–C(6)	–56,8 (4)	C(4)–C(3)–C(2)–N(1)	175,5 (3)
C(4)–C(5)–C(6)–C(1)	56,5 (4)	C(6)–C(1)–C(2)–N(1)	–176,7 (3)
C(5)–C(6)–C(1)–C(2)	–57,5 (4)	C(3)–C(2)–C(1)–O(1)	–176,4 (3)
C(6)–C(1)–C(2)–C(3)	57,1 (4)	C(5)–C(6)–C(1)–O(1)	176,0 (3)

### Groupement cyclohexanique

Les distances, angles de valence et angles de torsion sont présentés dans le Tableau 2. A première vue, la conformation chaise observée pour cette molécule est tout à fait normale. Les angles de torsion ont une moyenne de 55,8° qui se compare très bien à la valeur de 55,9° rapportée par Geise, Buys & Mijlhoff (1971) pour le cyclohexane. Cependant, les deux angles de torsion associés à l'atome C(3) porteur du groupe *tert*-butyle ont pour moyenne 53,5° alors que la moyenne des quatre autres angles de torsion est de 57°. Tout comme dans le cas de la molécule de *p*-nitrobenzoate du bromo-2 *tert*-butyl-6 cyclohexanol-1 (Brisse *et al.*, 1976) où l'on observait un pincement au niveau du carbone porteur du groupement *tert*-butyle, l'angle C(2)–C(3)–C(4) = 107,8 (3)° est aussi significativement inférieur à la moyenne des autres angles intracycliques qui est de 111,7°. Finalement, les deux liaisons C(3)–C(2) et C(3)–C(4) ont des longueurs de 1,545 (5) et 1,540 (5) Å significativement plus longues que la moyenne quatre autres distances intracycliques qui est de 1,517 Å. Tous ces effets démontrent clairement l'influence du groupe *tert*-butyle en 3 sur le cyclohexane. Des effets à tous points de vue comparables ont aussi été observés pour le *tert*-butyl-3 cyclohexanediol-1,2 (Brisse, Bélanger-Gariépy, Lectard & Richer, 1986).

### Groupement *tert*-butyle

Les longueurs des liaisons de C(7) aux trois groupes méthyles [1,525 (5), 1,529 (6), 1,539 (5) Å] et les angles de valence variant [entre 106,1 (3) et 112,8 (3)°] sont raisonnables alors que la distance C(3)–C(7) = 1,562 (6) Å est un peu plus longue que d'habitude. La déviation moyenne du groupe *tert*-butyle vis-à-vis le cyclohexane n'est que de 2,3° par rapport à une position parfaitement décalée.

### Groupement benzamide

Les atomes du groupe benzénique sont coplanaires et s'écartent au maximum de 0,006 (4) Å du plan moyen du cycle. Les atomes du groupement amido sont aussi coplanaires, cependant C(11) s'écarte de 0,013 (4) Å du plan moyen. L'angle dièdre qui mesure l'inclinaison du groupe amido par rapport au cycle benzénique est de 19°. Cette valeur ainsi que les distances et les angles du groupement amido sont en tout point comparables à celles observées pour le *N,N'*-éthylène-dibenzamide (Palmer & Brisse, 1980). L'inclinaison relative des deux groupements diffère sensiblement de ce que l'on observe dans la série des oligométhylène dibenzamides où cet angle est presque toujours aux environs de 30° (Brisson & Brisse, 1985).

### Organisation cristalline

Il n'y a que deux types de contacts courts entre molécules voisines. Il s'agit des contacts entre les atomes O(1) en (*x*, *y*, *z*) et O(2<sup>i</sup>) en ( $\frac{4}{3} - x$ ,  $-\frac{1}{3} - y$ ,  $\frac{5}{3} - z$ ) à 2,707 (4) Å et des atomes O(1) en (*x*, *y*, *z*) et N(1<sup>ii</sup>) en (1 – *y*, *x* – *y* – 1, *z*) à 3,052 (4) Å. Les autres contacts entre atomes semi-lourds sont tous supérieurs à 3,50 Å. Les liaisons de type O(1)···N(1<sup>ii</sup>) associent trois molécules entre elles pour constituer un trimère caractérisé par les paramètres géométriques suivants: N(1)–H(N1) = 0,91 (4); H(N1<sup>ii</sup>)···O(1) = 2,19 (4) Å; N(1<sup>ii</sup>)–H(N1<sup>ii</sup>)···O(1) = 158 (3) et H(N1<sup>ii</sup>)···O(1)–C(1) = 129 (1)°. Chaque trimère est lié à son tour à trois autres grâce à six liaisons, relativement plus fortes, de type O(1)···O(2<sup>i</sup>). Les caractéristiques en sont les suivantes: O(1)–H(O1) = 0,87 (4); H(O1)···O(2<sup>i</sup>) = 1,86 (4) Å; O(1)–H(O1)···O(2<sup>i</sup>) = 165 (4) et H(O1)···O(2<sup>i</sup>)–C(11<sup>i</sup>) = 163 (1)°. Les trimères ainsi reliés constituent une couche épaisse d'environ 11 Å et parallèle à *ab*. A l'intérieur d'une même couche, les trimères pointent alternativement vers le haut et vers le bas. Les groupes *tert*-butyles sont à la périphérie du trimère et forment des cavités circulaires. Ceci ne conduit pas à la présence de canaux puisque les couches successives sont décalées les unes par rapport aux autres. Il n'y a pas de liaisons autres que les forces de van der Waals pour assurer la cohésion des couches entre elles.

Les auteurs remercient vivement le CRSNG et les autorités chargées d'administrer les accords scientifiques franco-québécois pour l'aide financière apportée

sous forme d'octrois de fonctionnement et de frais de mission. Les auteurs remercient aussi Mlle D. Tapin et M. J. Olivier pour leur aide technique.

#### Références

- BELLUCCI, G., BERTI, G., COLAPIETRO, M., SPAGNA, R. & ZAMBONELLI, L. (1976). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, pp. 1213–1218.  
 BRISSE, F., BEAUCHAMP, A. L., RICHER, J.-C., BELLUCCI, G. & INGROSSO, G. (1976). *Acta Cryst. B32*, 2128–2132.  
 BRISSE, F., BÉLANGER-GARIÉPY, F., LECTARD, A. & RICHER, J.-C. (1986). A paraître.  
 BRISSON, J. & BRISSE, F. (1985). *Can. J. Chem.* **63**, 3390.  
 CROMER, D. T. & MANN, J. B. (1968). *Acta Cryst. A24*, 321–324.

- GEISE, H. J., BUYS, H. R. & MILHOFF, F. C. (1971). *J. Mol. Struct.* **9**, 447–454.  
 PALMER, A. & BRISSE, F. (1980). *Acta Cryst. B36*, 1447–1452.  
 PASCARD, C. & CESARIO, M. (1980). Communication personnelle.  
 RICHER, J.-C. & FREPPEL, C. (1969). *Tetrahedron Lett.* **51**, 4411–4414.  
 RICHER, J.-C. & FREPPEL, C. (1970). *Can. J. Chem.* **48**, 145–147.  
 RICHER, J.-C. & FREPPEL, C. (1971). *Rev. Latinoam. Quim.* **26**, 125–128.  
 RICHER, J.-C., FREPPEL, C., TCHALPA, A. & WELWART, Z. (1973). *Can. J. Chem.* **50**, 1838–1842.  
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.  
 TAPIN, D. (1978). Mémoire de Maîtrise, Univ. de Montréal.  
 WYSS, H., BRISSE, F. & HANESSIAN, S. (1984). *Acta Cryst. C40*, 1894–1897.

*Acta Cryst.* (1986). **C42**, 1058–1061

### *tert*-Butyl-5 $\alpha$ Octahydro-2,3 $\alpha$ ,3 $\alpha$ ,4,5 $\beta$ ,6,7,7 $\alpha$ Benzofurannol-3 $\beta$ (1) et *tert*-Butyl-5 $\alpha$ Octahydro-2,3 $\beta$ ,3 $\beta$ ,4,5 $\beta$ ,6,7,7 $\alpha$ Benzofurannol-3 $\alpha$ (2)

PAR RENÉ DOLMAZON ET SUZANNE GELIN

Laboratoire de Chimie Organique, Institut National des Sciences Appliquées, 20 avenue Albert Einstein, 69621 Villeurbanne CEDEX, France

ET RENÉ FAURE ET HENRI LOISELEUR

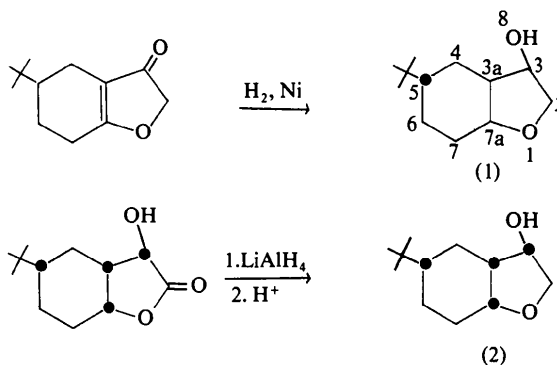
Laboratoire de Chimie Analytique II, Université Claude Bernard–Lyon I, 43 boulevard du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne CEDEX, France

(Reçu le 6 décembre 1985, accepté le 21 février 1986)

**Abstract.** C<sub>12</sub>H<sub>22</sub>O<sub>2</sub>, *M<sub>r</sub>* = 198.3, monoclinic, *P*2<sub>1</sub>/*c*, *Z* = 4,  $\lambda(\text{Cu K}\alpha) = 1.5424 \text{ \AA}$ , *F*(000) = 440, *T* = 295 K. (1): *a* = 11.791 (2), *b* = 8.712 (2), *c* = 11.696 (2) Å,  $\beta = 101.96 (1)^\circ$ , *V* = 1175.4 (7) Å<sup>3</sup>, *D<sub>x</sub>* = 1.12 Mg m<sup>-3</sup>,  $\mu = 0.58 \text{ mm}^{-1}$ , *R* = 0.070 for 1861 unique observed reflections. (2): *a* = 13.725 (2), *b* = 10.927 (2), *c* = 8.172 (1) Å,  $\beta = 101.99 (1)^\circ$ , *V* = 1198.8 (5) Å<sup>3</sup>, *D<sub>x</sub>* = 1.10 Mg m<sup>-3</sup>,  $\mu = 0.57 \text{ mm}^{-1}$ , *R* = 0.060 for 1964 unique observed reflections. The main difference between the isomers is that the ether bond is equatorial in (1) and axial in (2), with respect to the cyclohexane. The cyclohexane rings exist in a slightly flattened chair conformation, whereas the tetrahydrofuran rings show a 3 $\alpha$  envelope conformation. The flattening is more important for (1), in which it relieves the *syn* diaxial H–C(5)/hydroxyl interaction.

**Introduction.** Les isomères (1) et (2) ont été obtenus respectivement par réduction catalytique de la *tert*-butyl-5 tétrahydro-4,5,6,7 2*H*-benzofurannone-3 et par réduction au moyen de l'hydrure de lithium et d'aluminium de l'hydroxy-3 $\alpha$  *tert*-butyl-5 $\alpha$  hexahydro-

3 $\alpha\beta$ ,4,5 $\beta$ ,6,7,7 $\alpha\beta$  3*H*-benzofurannone-2 (Dolmazon & Gelin, 1985).



L'étude par diffraction des rayons X a été entreprise afin de préciser leurs configurations. Les valeurs élevées des constantes de couplage vicinal du proton H(7 $\alpha$ ) observées en RMN <sup>1</sup>H pour l'acétate de l'isomère (1) ne permettaient pas de préciser sans ambiguïté la nature *cis* de la jonction de cycles.