

stacking of molecules is not possible which is the mode of packing of flat coumarin derivatives (Gaultier & Hauw, 1965; Stemple & Watson, 1972; Lai & Marsh, 1974; Ueno & Saito, 1977; Bravic & Bideau, 1978; Bideau, Bravic & Desvergne, 1979; Dall'Acqua, Benetollo & Bombieri, 1981).

The authors thank Dr W. Cisowski for providing the compound. This research was supported by project No. RP.II.13.2.16.

#### References

- BEURSKENS, P. T., BOSMAN, W. P., DOESBURG, H. M., GOULD, R. O., VAN DEN HARK, TH. E., PRICK, P. A. J., NOORDIK, H. J., BEURSKENS, G. & PARTHASARATHI, V. (1981). *DIRDIF. Direct Methods for Difference Structures*. Tech. Rep. 1981/2. Crystallography Laboratory, Toernooiveld, 6525 ED Nijmegen, The Netherlands.
- BIDEAU, J.-P., BRAVIC, G. & DESVERGNE, J.-P. (1979). *Cryst. Struct. Commun.* **8**, 695–698.
- BRAVIC, G. & BIDEAU, J. P. (1978). *Cryst. Struct. Commun.* **7**, 633–636.
- CISOWSKI, W. (1987). Private communication.
- DALL'ACQUA, F., BENETOLLO, F. & BOMBIERI, G. (1981). *Cryst. Struct. Commun.* **10**, 505–509.
- GAULTIER, J. & HAUW, CH. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 927–933.
- GAVUZZO, E., MAZZA, F. & GIGLIO, E. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 1351–1357.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.)
- JASKÓLSKI, M. (1982). *Collected Abstracts of the Fourth Symposium on Organic Crystal Chemistry*, Poznań, September 1982, edited by Z. KALUSKI, pp. 70–71. A. Mickiewicz Univ., Poznań, Poland.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Report ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
- LAI, T. F. & MARSH, R. E. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 1570–1575.
- LEHMANN, M. S. & LARSEN, F. K. (1974). *Acta Cryst.* **A30**, 580–584.
- MAIN, P., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1978). *MULTAN78. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. of York, England, and Louvain, Belgium.
- SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
- STEMPLE, N. R. & WATSON, W. H. (1972). *Acta Cryst.* **B28**, 2485–2489.
- UENO, K. & SAITO, N. (1977). *Acta Cryst.* **B33**, 283–285.

*Acta Cryst.* (1989). **C45**, 622–625

### Structure d'Aryl-3 Diphényl-1,4*t* (*E*-Aryl-2 éthényl)-4*c* Cyclohexènes (Aryl = Phényl ou $\alpha$ -Thiényl)

PAR ABODOU JULES TENON, N'DÉDÉ EBBY, ABRAHAM VOGLOZIN, ETCHIE DEGNY ET THOMAS YAO N'GUESSAN  
Départements de Physique et de Chimie, Université Nationale de Côte d'Ivoire, 22 BP 582 Abidjan 22,  
Côte d'Ivoire

ANDRÉ BALDY ET MARCEL PIERROT

Service de Cristallographie, Faculté des Sciences et Techniques de St Jérôme, 13397 Marseille CEDEX 13, France

ET HUBERT BODOT

Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires, UA CNRS 773, Université de Provence, Centre de St Jérôme,  
13397 Marseille CEDEX 13, France

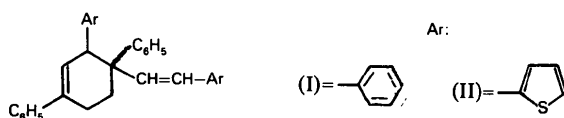
(Reçu le 11 juillet 1988, accepté le 13 octobre 1988)

**Abstract.**  $C_{32}H_{28}$ ,  $M_r = 412.57$ , monoclinic,  $P2_1/c$ ,  $a = 9.858$  (3),  $b = 11.951$  (2),  $c = 20.133$  (3) Å,  $\beta = 100.72$  (2)°,  $V = 2351.6$  (2) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $D_x = 1.163$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\mu = 3.3$  mm<sup>-1</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$  Å,  $F(000) = 880$ ,  $T = 295$  K,  $R = 0.053$  for 1245 observed reflections.  $C_{28}H_{24}S_2$ ,  $M_r = 424.63$ , triclinic,  $P\bar{1}$ ,  $a = 9.944$  (7),  $b = 11.137$  (4),  $c = 12.095$  (4) Å,  $\alpha = 67.58$  (4),  $\beta = 85.73$  (5),  $\gamma = 66.10$  (4)°,  $V = 1126.9$  (10) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $D_x = 1.251$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$  Å,  $\mu = 20.6$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 448$ ,  $T =$

295 K,  $R = 0.060$  for 2962 observed reflections. Both compounds present the same configurational and conformational features with the 3-aryl group being pseudoaxial, a position which limits its steric constraints with the vicinal substituents. For the first compound, the cyclohexene ring adopts a sofa conformation which allows the remaining *gauche* interaction to be reduced. The less intense intramolecular nonbonded interactions of the second compound do not require such a conformational adaptation; therefore, the

cyclohexene ring stays in a half-chair conformation. In both compounds, the 3-aryl and 4-phenyl groups lie in perpendicular planes.

**Introduction.** La régiosélectivité de la réaction de Diels–Alder (Epiotis, 1973) est favorable à l'obtention d'isomères stériquement contraints (Metlyaeva, Rudenko & Kucherov, 1973) d'intérêt structural (Viani, Lapasset, Aycard & Bodot, 1979) et susceptibles d'être exploités d'un point de vue synthétique. Les deux composés étudiés (I) (aryl = phényl) et (II) (aryl =  $\alpha$ -thiényl) pourraient être obtenus par autocondensation des aryl-1 phényl-3 butadiène-1,3 correspondants.



En fait, pour accéder à ces dérivés, il a été choisi de faire agir l'ylure dérivé de l'iodure de méthyl triphényl phosphonium sur la chalcone correspondante (diphényl-1,3 propène-2 one et phényl-1  $\alpha$ -thiényl-3 propène-2 one respectivement) (Voglozin, 1985). L'addition est manifestement suivie d'une condensation puisque les produits de la réaction présentent, après séparation par chromatographie sur gel de silice, des spectres de masse et des spectres RMN ( $^1\text{H}$ ) en accord avec les formules développées proposées. Certaines données RMN permettent une identification partielle du composé (I) à savoir la configuration *E* de la double liaison exocyclique dont les protons donnent une figure de couplage de type *AB* avec une constante égale à 16,5 Hz, et la vicinalité des substituants en positions 3 et 4 compte tenu du spectre de type *AB* ( $J_{AB} = 4$  Hz) des protons  $\text{H}_2$  ( $\delta = 6,3$  p.p.m.) et  $\text{H}_3$  ( $\delta = 4,1$  p.p.m.).

L'analyse cristallographique a été entreprise pour confirmer ces identifications, pour préciser la diastéréoisomérisation cyclique (groupements aryl-3 et phényl-4 *cis* ou *trans*) et pour analyser les adaptations géométriques et conformationnelles aux fortes contraintes stériques intramoléculaires résultant de la proximité des groupements fixés en positions 3 et 4.

**Partie expérimentale.** Monocristaux de dimensions  $0,4 \times 0,2 \times 0,2$  (I) et  $0,4 \times 0,3 \times 0,2$  mm (II). Mesures faites à la température ambiante sur diffractomètre automatique Enraf–Nonius CAD-4. Paramètres des mailles déterminés à partir de 25 réflexions de base [ $8,2 \leq \theta \leq 12,6^\circ$  pour (I) et  $10,4 \leq \theta \leq 18,5^\circ$  pour (II)]. 1860<sup>I</sup> et 3572<sup>II</sup> réflexions indépendantes mesurées [balayage  $\theta/2\theta$ ;  $(\sin\theta/\lambda)_{\text{max}}^{\text{I}} = 0,4576 \text{ \AA}^{-1}$ ;  $0 \leq h \leq 9$ ;  $0 \leq k \leq 10$ ;  $-18 \leq l \leq 18$ ; et  $(\sin\theta/\lambda)_{\text{max}}^{\text{II}} = 0,5938 \text{ \AA}^{-1}$ ;  $0 \leq h \leq 8$ ;  $-9 \leq k \leq 9$ ;  $-10 \leq l \leq 10$ ]. 1245<sup>I</sup> et 2962<sup>II</sup> réflexions avec  $I > 2,5\sigma(I)$  considérées comme observées et corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation. Pas de correction d'absorption. Contrôle

d'intensité et d'orientation faites avec 060, 0,0,10, 400 pour (I) et 056, 550, 106 pour (II) toutes les 300 mesures. Fluctuations d'intensité inférieure à 3%. Structures résolues par *MULTAN80* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1980). Affinements par moindres carrés à matrice complète basés sur *F* avec *SHELX76* (Sheldrick, 1976). Pondération unitaire. Affinement anisotrope des atomes autres que les hydrogènes. Hydrogènes placés en position théorique et affinés, puis maintenus fixes en leur attribuant les facteurs d'agitation thermique isotropes des atomes auxquels ils sont attachés.  $(\Delta/\sigma)_{\text{max}}^{\text{I}} = 0,050$  et  $(\Delta/\sigma)_{\text{max}}^{\text{II}} = 0,139$  dans les derniers cycles d'affinement. Pour les derniers calculs de synthèse Fourier différence  $(\Delta\rho)_{\text{max}}^{\text{I}} = 0,0661$ ,  $(\Delta\rho)_{\text{min}}^{\text{I}} = 0,0856 \text{ e \AA}^{-3}$  et  $(\Delta\rho)_{\text{max}}^{\text{II}} = 0,075$ ,  $(\Delta\rho)_{\text{min}}^{\text{II}} = 0,102 \text{ e \AA}^{-3}$ . Facteurs de diffusion atomique issus de *SHELX76*.\*

**Discussion.** Les Tableaux 1 et 2 donnent les coordonnées cristallographiques et les facteurs d'agitation thermique isotrope équivalents. Les longueurs de liaison sont dans le Tableau 3 et les angles de valence dans le Tableau 4.

Les composés (I) et (II) sont directement comparables d'un point de vue structural, puisqu'il s'agit du même diastéréoisomère et du même conformère (Figs. 1 et 2). Pour les longueurs de liaison, les seules remarques intéressantes concernent la double liaison exocyclique  $\text{C}(25)=\text{C}(26)$  [raccourcissement accentué pour le composé (II); mais cette valeur est conforme à celles observées pour ce type de structure (Hanson, 1975; Ruban & Zobel, 1975; Bryan & Freyberg, 1975; Bernstein, 1975)], la liaison  $\text{C}(3)-\text{C}(4)$  (allongement résultant des interactions intramoléculaires de non-liaison entre les groupements vicinaux liés aux carbones en positions 3 et 4) et les liaisons dans les cycles  $\alpha$ -thiényles. Dans ce dernier cas, on observe des différences de longueur de liaison carbone–carbone allant jusqu'à 0,04 Å. Le cycle fixé au carbone  $\text{C}(3)$  présente une forte dissymétrie [ $\text{C}(13)-\text{C}(18) = 1,403$  (5);  $\text{C}(16)-\text{C}(17) = 1,316$  (6) Å] déjà observée dans des structures similaires (Hawley & Ferguson, 1971; Towns & Simonsen, 1975) et qui résulte de la substitution. Pour le cycle fixé au carbone  $\text{C}(26)$ , cette dissymétrie est fortement atténuée [ $\text{C}(27)-\text{C}(28) = 1,361$  (5);  $\text{C}(29)-\text{C}(30) = 1,337$  (7) Å] à cause de la conjugaison avec la double liaison exocyclique  $\text{C}(25) =$

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des paramètres des atomes d'hydrogène et des tableaux donnant les distances intramoléculaires de non liaison mettant en évidence les contraintes stériques et les angles dièdres des cyclohexènes et des autres cycles les uns par rapport aux autres ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 51492: 46 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. Coordonnées cristallographiques ( $\times 10^4$ ) et facteurs d'agitation thermique isotrope équivalents du composé (I)
$$B_{eq} = \frac{1}{3} \pi^2 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	B <sub>eq</sub> (Å <sup>2</sup> )
C(1)	2596 (7)	-3590 (5)	-430 (3)	2,9 (6)
C(2)	1634 (7)	-3183 (5)	-107 (3)	3,5 (7)
C(3)	1711 (6)	-2083 (5)	241 (3)	2,9 (7)
C(4)	2729 (7)	-1262 (5)	-40 (3)	3,3 (7)
C(5)	4091 (7)	-1920 (5)	4 (3)	3,6 (7)
C(6)	3907 (7)	-2954 (6)	-424 (4)	4,3 (8)
C(7)	2365 (7)	-4644 (6)	-809 (3)	3,1 (7)
C(8)	3446 (8)	-5273 (7)	-970 (4)	5,4 (9)
C(9)	3222 (10)	-6287 (7)	-1315 (4)	5,8 (10)
C(10)	1916 (11)	-6672 (7)	-1512 (4)	5,1 (9)
C(11)	834 (8)	-6071 (7)	-1368 (4)	4,4 (8)
C(12)	1058 (7)	-5074 (6)	-1031 (4)	3,9 (8)
C(13)	2075 (7)	-2201 (6)	1006 (4)	3,5 (7)
C(14)	2983 (8)	-3020 (6)	1313 (4)	4,1 (9)
C(15)	3310 (8)	-3075 (7)	2001 (4)	5,0 (9)
C(16)	2757 (10)	-2352 (8)	2394 (4)	5,8 (9)
C(17)	1825 (9)	-1567 (7)	2100 (4)	5,5 (9)
C(18)	1484 (7)	-1472 (6)	1408 (4)	4,3 (8)
C(19)	2203 (8)	-909 (6)	-758 (4)	3,5 (7)
C(20)	919 (8)	-1194 (6)	-1124 (4)	3,9 (8)
C(21)	531 (8)	-819 (7)	-1775 (4)	4,8 (9)
C(22)	1361 (11)	-144 (8)	-2075 (4)	5,5 (9)
C(23)	2630 (10)	118 (6)	-1723 (4)	5,1 (9)
C(24)	3054 (7)	-250 (6)	-1082 (4)	4,2 (8)
C(25)	2976 (6)	-249 (6)	411 (3)	3,2 (7)
C(26)	2442 (6)	757 (7)	278 (3)	3,5 (7)
C(27)	2630 (6)	1752 (6)	713 (4)	3,2 (8)
C(28)	2329 (7)	2815 (7)	441 (3)	3,8 (7)
C(29)	2511 (8)	3752 (6)	830 (5)	4,7 (9)
C(30)	3013 (9)	3675 (7)	1498 (5)	5,7 (10)
C(31)	3309 (9)	2655 (8)	1780 (9)	5,7 (9)
C(32)	3139 (8)	1681 (7)	1401 (4)	4,9 (9)

Tableau 3. Longueurs de liaison (Å) des composés (I) et (II)

	(I)	(II)
C(1)-C(2)	1,341 (8)	1,322 (5)
C(1)-C(6)	1,498 (9)	1,505 (5)
C(1)-C(7)	1,471 (9)	1,494 (5)
C(2)-C(3)	1,489 (9)	1,511 (4)
C(3)-C(4)	1,584 (9)	1,563 (5)
C(3)-C(13)	1,534 (9)	1,513 (4)
C(4)-C(5)	1,544 (9)	1,539 (5)
C(4)-C(19)	1,514 (9)	1,541 (5)
C(4)-C(25)	1,510 (9)	1,514 (4)
C(5)-C(6)	1,502 (9)	1,525 (5)
C(7)-C(8)	1,392 (10)	1,376 (5)
C(7)-C(12)	1,387 (9)	1,401 (5)
C(8)-C(9)	1,398 (11)	1,396 (6)
C(9)-C(10)	1,355 (11)	1,384 (7)
C(10)-C(11)	1,361 (10)	1,351 (7)
C(11)-C(12)	1,372 (10)	1,386 (5)
C(19)-C(20)	1,387 (9)	1,393 (5)
C(19)-C(24)	1,401 (9)	1,392 (5)
C(20)-C(21)	1,382 (10)	1,390 (5)
C(21)-C(22)	1,370 (11)	1,358 (6)
C(22)-C(23)	1,357 (11)	1,379 (7)
C(23)-C(24)	1,365 (10)	1,393 (6)
C(25)-C(26)	1,321 (9)	1,305 (5)
C(26)-C(27)	1,472 (9)	1,456 (5)

	(I)	(II)	
C(13)-C(14)	1,393 (9)	C(13)-S(14)	1,702 (3)
C(13)-C(18)	1,395 (9)	C(13)-C(18)	1,403 (5)
C(14)-C(15)	1,377 (10)	C(16)-C(17)	1,316 (6)
C(15)-C(16)	1,357 (11)	C(16)-S(14)	1,709 (4)
C(16)-C(17)	1,369 (11)	C(17)-C(18)	1,445 (5)
C(17)-C(18)	1,388 (10)	C(27)-C(28)	1,361 (5)
C(27)-C(28)	1,395 (9)	C(27)-S(32)	1,727 (4)
C(27)-C(32)	1,398 (9)	C(28)-C(29)	1,418 (6)
C(28)-C(29)	1,363 (9)	C(29)-C(30)	1,337 (7)
C(29)-C(30)	1,358 (10)	C(30)-S(32)	1,701 (5)
C(30)-C(31)	1,355 (11)		
C(31)-C(32)	1,389 (11)		

Tableau 2. Coordonnées cristallographiques ( $\times 10^4$ ) et facteurs d'agitation thermique isotrope équivalents du composé (II)
$$B_{eq} = \frac{1}{3} \pi^2 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	B <sub>eq</sub> (Å <sup>2</sup> )
S(14)	1518 (2)	7829 (1)	6215 (1)	6,9 (1)
S(32)	944 (1)	8077 (1)	10751 (1)	5,2 (1)
C(1)	2706 (4)	4010 (3)	6911 (3)	3,1 (2)
C(2)	3540 (4)	4628 (4)	7039 (3)	3,1 (2)
C(3)	3421 (4)	5244 (3)	7977 (3)	2,9 (2)
C(4)	2529 (4)	4686 (3)	9020 (3)	3,2 (2)
C(5)	1129 (4)	4808 (4)	8440 (3)	3,8 (3)
C(6)	1488 (4)	3888 (4)	7703 (3)	4,1 (3)
C(7)	2967 (4)	3351 (3)	6002 (3)	3,3 (3)
C(8)	1833 (5)	3299 (4)	5460 (3)	4,3 (3)
C(9)	2116 (6)	2675 (5)	4615 (4)	5,7 (4)
C(10)	3547 (7)	2065 (5)	4339 (4)	5,9 (4)
C(11)	4666 (6)	2094 (4)	4882 (4)	5,5 (4)
C(12)	4406 (5)	2728 (4)	5710 (3)	4,2 (3)
C(13)	2841 (4)	6850 (4)	7399 (3)	3,2 (2)
C(16)	1509 (5)	9392 (4)	6153 (4)	6,1 (4)
C(17)	2466 (5)	9191 (4)	6970 (4)	4,6 (3)
C(18)	3290 (4)	7716 (3)	7733 (3)	3,1 (4)
C(19)	3431 (4)	3122 (4)	9843 (3)	3,5 (3)
C(20)	4902 (4)	2351 (4)	9727 (3)	3,7 (3)
C(21)	5649 (5)	948 (4)	10515 (4)	4,8 (3)
C(22)	4972 (7)	296 (4)	11412 (4)	5,7 (4)
C(23)	3513 (7)	1035 (5)	11538 (4)	6,2 (5)
C(24)	2741 (5)	2442 (4)	10759 (4)	4,9 (4)
C(25)	2075 (4)	5627 (4)	9733 (3)	3,4 (3)
C(26)	2555 (4)	5336 (4)	10820 (3)	3,3 (3)
C(27)	2105 (4)	6300 (4)	11450 (3)	3,3 (3)
C(28)	2460 (4)	5990 (4)	12621 (3)	4,1 (3)
C(29)	1800 (6)	7194 (6)	12935 (4)	5,8 (5)
C(30)	959 (6)	8380 (5)	12025 (5)	6,1 (5)

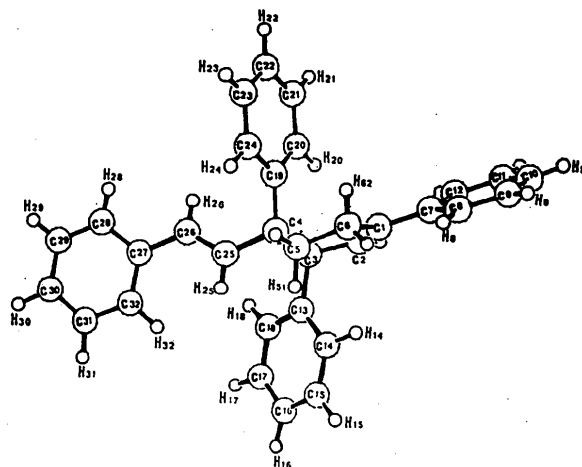


Fig. 1. Représentation ORTEP (Johnson, 1965) de la molécule du composé (I).

C(26). Un tel phénomène est également observé dans le formyl-2 thiophène thiosemicarbazone (Mathew & Palenik, 1971).

Par rapport aux valeurs de référence du cyclohexène (Chiang & Bauer, 1969) et à celles de la série du *tert*-butyl-3 cyclohexène substitué en position 4 (Viani, Lapasset, Aycard & Bodot, 1979), certains angles de valence présentent des écarts importants. La présence du substituant sur le carbone C(1) tend à ramener à 120° les angles ayant C(1) pour sommet. Signalons pour le composé (I) des écarts très marqués pour les

Tableau 4. Angles de valence (°) des composés (I) et (II)

	(I)	(II)
C(2)–C(1)–C(6)	120,0 (6)	121,6 (3)
C(2)–C(1)–C(7)	120,8 (6)	121,5 (3)
C(6)–C(1)–C(7)	119,3 (6)	116,9 (3)
C(1)–C(2)–C(3)	125,1 (6)	125,3 (3)
C(2)–C(3)–C(4)	110,8 (5)	111,6 (3)
C(2)–C(3)–C(13)	112,4 (6)	110,6 (3)
C(4)–C(3)–C(13)	112,2 (5)	114,0 (3)
C(3)–C(4)–C(5)	105,5 (5)	107,3 (3)
C(3)–C(4)–C(19)	113,1 (5)	111,6 (3)
C(3)–C(4)–C(25)	108,6 (5)	109,1 (3)
C(5)–C(4)–C(19)	109,7 (5)	109,3 (3)
C(5)–C(4)–C(25)	109,5 (5)	108,8 (3)
C(19)–C(4)–C(25)	109,7 (5)	110,6 (3)
C(4)–C(5)–C(6)	112,1 (5)	112,3 (3)
C(1)–C(6)–C(5)	115,7 (6)	112,7 (3)
C(1)–C(7)–C(8)	122,3 (7)	121,9 (3)
C(1)–C(7)–C(12)	122,2 (7)	119,7 (3)
C(8)–C(7)–C(12)	115,5 (6)	118,4 (3)
C(7)–C(8)–C(9)	122,0 (7)	120,4 (4)
C(8)–C(9)–C(10)	119,7 (7)	120,2 (4)
C(9)–C(10)–C(11)	119,8 (7)	119,5 (4)
C(10)–C(11)–C(12)	120,4 (7)	121,1 (4)
C(7)–C(12)–C(11)	122,6 (7)	120,2 (4)
C(4)–C(19)–C(20)	124,4 (7)	123,6 (3)
C(4)–C(19)–C(24)	118,8 (7)	118,3 (3)
C(20)–C(19)–C(24)	116,9 (7)	118,1 (3)
C(19)–C(20)–C(21)	119,8 (7)	120,3 (4)
C(20)–C(21)–C(22)	122,3 (7)	121,2 (4)
C(21)–C(22)–C(23)	118,1 (7)	119,7 (4)
C(22)–C(23)–C(24)	121,1 (7)	120,4 (4)
C(19)–C(24)–C(23)	121,8 (7)	120,6 (4)
C(4)–C(25)–C(26)	126,3 (6)	129,1 (3)
C(25)–C(26)–C(27)	127,7 (7)	126,7 (3)

	(I)	(II)
C(3)–C(13)–C(14)	121,9 (6)	C(3)–C(13)–S(14) 122,0 (3)
C(3)–C(13)–C(18)	119,4 (7)	S(14)–C(13)–C(18) 111,5 (2)
C(14)–C(13)–C(18)	118,7 (7)	C(3)–C(13)–C(18) 126,5 (3)
C(13)–C(14)–C(15)	119,9 (7)	C(13)–C(18)–C(17) 109,6 (3)
C(14)–C(15)–C(16)	121,5 (7)	C(16)–C(17)–C(18) 114,2 (4)
C(15)–C(16)–C(17)	119,4 (7)	C(17)–C(18)–S(14) 112,4 (3)
C(16)–C(17)–C(18)	120,9 (7)	C(13)–S(14)–C(16) 92,2 (2)
C(13)–C(18)–C(17)	119,5 (7)	C(26)–C(27)–C(28) 128,0 (3)
C(26)–C(27)–C(28)	120,3 (7)	C(26)–C(27)–S(32) 121,9 (3)
C(26)–C(27)–C(32)	122,2 (7)	C(28)–C(27)–S(32) 110,1 (3)
C(28)–C(27)–C(32)	117,5 (7)	C(27)–C(28)–C(29) 112,6 (4)
C(27)–C(28)–C(29)	121,6 (7)	C(28)–C(29)–C(30) 113,5 (4)
C(28)–C(29)–C(30)	120,5 (7)	C(29)–C(30)–S(32) 111,4 (3)
C(29)–C(30)–C(31)	119,6 (7)	C(27)–S(32)–C(30) 92,4 (2)
C(30)–C(31)–C(32)	121,7 (7)	
C(27)–C(32)–C(31)	119,2 (7)	

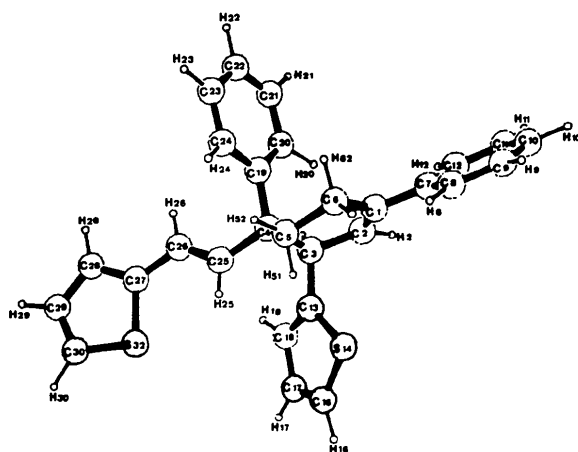


Fig. 2. Représentation ORTEP (Johnson, 1965) de la molécule du composé (II).

angles C(1)–C(6)–C(5) (+4°) et C(3)–C(4)–C(5) (–4°). Ces écarts sont moins accentués pour le composé (II). Les angles C(4)–C(25)–C(26) et C(25)–C(26)–C(27) ont des valeurs importantes (126,3 à 129,1°), mais conformes à celles observées pour ce type de structure (Bernstein, 1975; Ruban & Zobel, 1975). L'adaptation conformationnelle aux contraintes stériques se manifeste pour le composé (I), par l'évolution du cyclohexène vers une conformation sofa (Bucourt, 1974) caractérisée par un angle dièdre C(6)–C(1)–C(2)–C(3) différent de 0° et un angle C(5)–C(6)–C(1)–C(2) voisin de 0°, et déjà observée (Viani, Lapasset, Aycard & Bodot, 1979). L'observation d'une conformation demi-chaîse pour le composé (II) suggère que les contraintes stériques sont moins fortes que dans le composé (I). Dans les deux cas, c'est le conformère présentant les substituants aryl-3 et phényl-4 en position diaxiale qui cristallise; c'est vraisemblablement le conformère le plus stable car il ne présente qu'une interaction gauche contre deux pour l'autre conformère. Les trois substituants des carbones C(3) et C(4) adoptent des conformations (rotation exocyclique) qui minimisent les interactions intramoléculaires. Ainsi, le groupement phényl-4 est à peu près perpendiculaire au groupement aryl-3 (Figs. 1 et 2).

Les différents calculs ont été effectués à l'Office Central de Mécanographie d'Abidjan sur ordinateur IBM 370/145; nous remercions cet organisme.

Références

BERNSTEIN, J. (1975). *Acta Cryst.* B31, 1268–1271.  
 BRYAN, R. F. & FREYBERG, D. P. (1975). *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* 2, pp. 1835–1840.  
 BUCOURT, R. (1974). *Top. Stereochem.* 8, 159.  
 CHIANG, J. F. & BAUER, S. H. (1969). *J. Am. Chem. Soc.* 91, 1898.  
 EPIOTIS, V. D. (1973). *J. Am. Chem. Soc.* 95, 5624–5632.  
 HANSON, A. W. (1975). *Acta Cryst.* B31, 1963–1965.  
 HAWLEY, D. M. & FERGUSON, G. (1971). *J. Chem. Soc. B*, pp. 843–846.  
 JOHNSON, C. K. (1965). ORTEP. Rapport ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.  
 MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1980). *MULTAN80. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.  
 MATHEW, M. & PALENIK, G. J. (1971). *Acta Cryst.* B27, 59–66.  
 METLYAEVA, S. Y., RUDENKO, B. A. & KUCHEROV, V. F. (1973). *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Khim.* 6, 1275–1279.  
 RUBAN, G. & ZOBEL, D. (1975). *Acta Cryst.* B31, 2632–2634.  
 SHELDRICK, G. M. (1976). *SHELX76*. Programme pour la détermination des structures cristallines. Univ. de Cambridge, Angleterre.  
 TOWNS, R. L. R. & SIMONSEN, S. H. (1975). *Cryst. Struct. Commun.* 4, 473.  
 VIANI, R., LAPASSET, J., AYCARD, J. P. & BODOT, H. (1979). *J. Org. Chem.* 44, 899–902.  
 VOGLOZIN, A. (1985). Rapport D.E.A. (Sciences Physiques des Structures). Univ. Nationale de Côte d'Ivoire.