

Shared Instrumentation Award No. RR-03354 for purchase of a graphics workstation.

References

- ADAMS, J. M. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1218–1220.
 AMMON, H. L., MAZZOCCHI, P. H., KOPECKY, W. J. JR, TAMBURIN, H. J. & WATTS, P. H. JR (1973). *J. Am. Chem. Soc.* **95**, 1968–1977.
 Cambridge Structural Database (1990). June release. Univ. Chemical Laboratory, Lensfield Road, Cambridge, England.
 JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
 LUO, J., AMMON, H. L. & GILLILAND, G. L. (1989). *J. Appl. Cryst.* **22**, 186.
 MAZZOCCHI, P. H. & HARRISON, A. M. (1978). *J. Med. Chem.* **21**, 238–240.
 Molecular Structure Corporation (1985). *TEXSAN. TEXRAY Structure Analysis Package*. MSC, 3200A Research Forest Drive, The Woodlands, TX 77381, USA.
 NEWKOME, G. R., THERIOT, K. J. & FRONCZEK, F. R. (1986). *Acta Cryst.* **C42**, 1539–1541.
 STEWART, J. M., MACHIN, P. A., DICKINSON, C. W., AMMON, H. L., HECK, H. & FLACK, H. (1976). *The XRAY76 system*. Tech. Rep. TR-446. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland, USA.
 THOMAS, J. O. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 2156–2158.
 THOMAS, J. O. & LIMINGA, R. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 3686–3690.
 THOMAS, J. O. & PRAMATUS, S. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 2159–2161.
 THOMAS, J. O. & RENNE, N. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 2162–2163.
 VIJAYALAKSHMI, J. & SRINIVASAN, R. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 908–909.

Acta Cryst. (1991). **C47**, 1528–1531

Structures de Trois Pyrroles Substitués Dérivés de Munchnones

PAR L. TOUPET

Groupe de Physique Cristalline, UA au CNRS 040804, Université de Rennes I, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes CEDEX, France

M. MAZARI

Laboratoire de Synthèse Organique, Université d'Oran, Es Senia, Algérie

F. TEXIER

Laboratoire de Synthèse Organique et d'Electrochimie, Université d'Angers, 2 Bd Lavoisier, 49045 Angers CEDEX, France

ET R. CARRIÉ

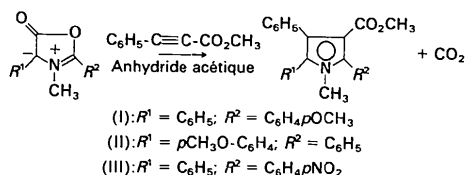
Groupe de Physicochimie Structurale, UA au CNRS 040704, Université de Rennes I, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes CEDEX, France

(Reçu le 2 mars 1990, accepté le 10 décembre 1990)

Abstract. Methyl 2-methoxyphenyl-1-methyl-4,5-diphenylpyrrole-3-carboxylate (I), C₂₆H₂₃NO₃, *M_r* = 281.3, orthorhombic, *Pbcn*, *a* = 13.086 (9), *b* = 11.805 (9), *c* = 19.580 (7) Å, *V* = 3025 (2) Å³, *Z* = 8, *D_x* = 1.23 Mg m⁻³, λ(Mo *Kα*) = 0.71073 Å, μ = 0.76 cm⁻¹, *F*(000) = 1296, *T* = 293 K, *R* = 0.037 for 1058 observations. Methyl 5-methoxyphenyl-1-methyl-2,4-diphenylpyrrole-3-carboxylate (II), C₂₆H₂₃NO₃, *M_r* = 281.3, orthorhombic, *Pbcn*, *a* = 13.086 (9), *b* = 11.805 (9), *c* = 19.580 (7) Å, *V* = 3025 (2) Å³, *Z* = 8, *D_x* = 1.23 Mg m⁻³, λ(Mo *Kα*) = 0.71073 Å, μ = 0.76 cm⁻¹, *F*(000) = 1296, *T* = 293 K, *R* = 0.043 for 1058 observations. Methyl 1-methyl-2-nitrophenyl-4,5-diphenylpyrrole-3-carboxylate (III), C₂₅H₂₀N₂O₄, *M_r* = 281.3, orthorhombic, *Pbcn*, *a* = 13.086 (9), *b* = 11.805 (9), *c* = 19.580 (7) Å, *V* = 3025 (2) Å³, *Z* = 8, *D_x* = 1.23 Mg m⁻³,

λ(Mo *Kα*) = 0.71073 Å, μ = 0.76 cm⁻¹, *F*(000) = 1296, *T* = 293 K, *R* = 0.042 for 1058 observations. These studies confirm the orientation of the reaction predicted by theoretical calculations. The lactone substituent controls the reaction.

Introduction. Les pyrroles (I), (II) et (III) sont obtenus par cycloaddition des munchnones correspondantes au phénylpropiolate de méthyle (Mazari, 1989; Texier, Mazari, Yebdri, Tonnard & Carrié, 1990).



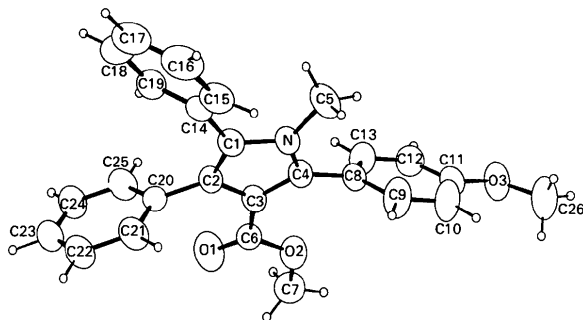


Fig. 1. Vue ORTEP (Johnson, 1965) du composé (I).

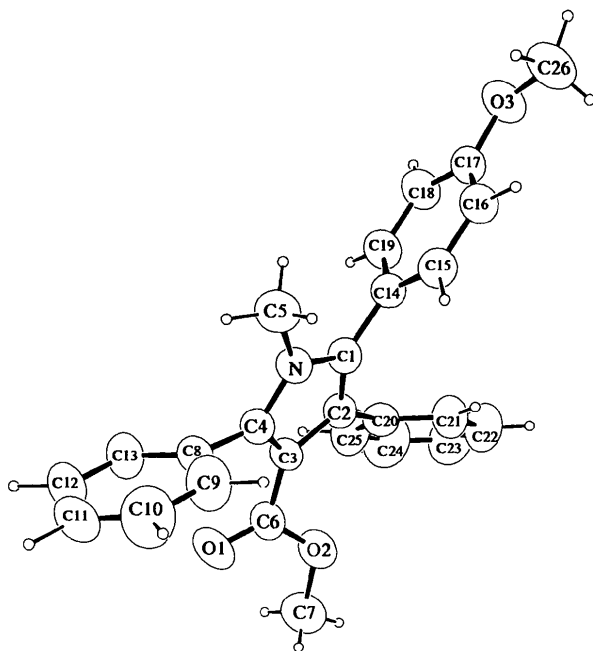


Fig. 2. Vue ORTEP (Johnson, 1965) du composé (II).

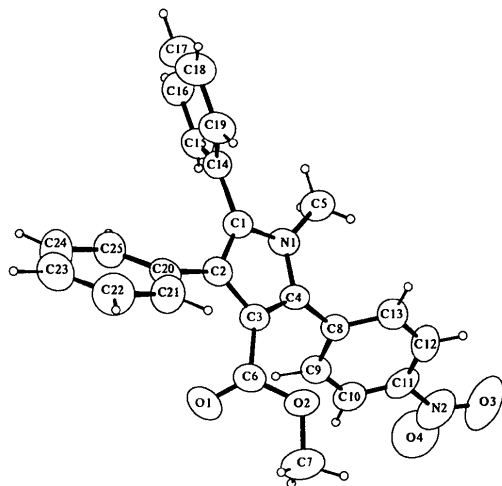


Fig. 3. Vue ORTEP (Johnson, 1965) du composé (III).

Tableau 1. Conditions d'enregistrement et d'affinement

	(I)	(II)	(III)
Dimensions (mm)	0,28 × 0,35 × 0,37	0,12 × 0,20 × 0,25	0,22 × 0,24 × 0,45
2θ (°)	2-50	2-50	2-50
h,k,l	0-13, ± 13, ± 14	0-13, 0-16, ± 17	0-17, 0-9, ± 20
Reflections standards	115, T05, 034	12, 0, 4, 10, 0, 2, 10, 0, 2	204, 204, 203
Variation	-0,4%	-0,6%	-0,9%
Réflexions mesurées	4515	4122	5081
Réflexions uniques, I > σI	2612, 3σ(I)	1781, 1,2σ(I)	2038, 2σ(I)
R _{int}	0,010	0,014	0,012
Paramètres	341	341	341
R	0,037	0,043	0,042
wR*	0,033	0,042	0,039
S	1,15	1,25	1,10
Δ/σ _{max}	0,003	0,005	0,004
Δρ _{max,min} (e Å ⁻³)	0,18, 0,05	0,15, 0,05	0,24, 0,05

$$* w = 1/\sigma^2(F_o) = [\sigma^2(I) + (0,04F_o^2)]^{-1/2}.$$

Tableau 2. Coordonnées atomiques et B_{eq} (Å²) du composé (I)

Le coefficient d'agitation thermique isotrope équivalent des atomes affinés en mode anisotrope est de la forme:

$$(4/3)[a^2\beta_{11} + b^2\beta_{22} + c^2\beta_{33} + (2abc\cos\gamma)\beta_{12} + (2accos\beta)\beta_{13} + (2bccos\alpha)\beta_{23}].$$

	x	y	z	B _{eq}
O1	0,9969 (2)	0,4719 (2)	0,3511 (2)	7,07 (5)
O2	1,1552 (2)	0,2388 (2)	0,4145 (1)	5,73 (5)
O3	1,5174 (2)	-0,3490 (1)	0,4012 (2)	5,66 (4)
N	1,3445 (2)	0,3200 (2)	0,0575 (2)	3,59 (4)
C1	1,2625 (2)	0,4719 (2)	0,0196 (2)	3,45 (4)
C2	1,1635 (2)	0,5094 (2)	0,1139 (2)	3,41 (4)
C3	1,1849 (2)	0,3768 (2)	0,2109 (2)	3,49 (4)
C4	1,2976 (2)	0,2610 (2)	0,1733 (2)	3,57 (5)
C5	1,4556 (2)	0,2340 (2)	-0,0197 (2)	4,87 (6)
C6	1,1022 (2)	0,3704 (2)	0,3299 (2)	3,92 (5)
C7	1,0767 (3)	0,2248 (3)	0,5323 (2)	5,99 (7)
C8	1,3595 (2)	0,1005 (2)	0,2341 (2)	3,60 (5)
C9	1,4941 (2)	0,0201 (2)	0,2881 (3)	6,07 (7)
C10	1,5507 (2)	-0,1308 (2)	0,3462 (3)	6,01 (7)
C11	1,4727 (2)	-0,2020 (2)	0,3487 (2)	4,05 (5)
C12	1,3369 (2)	-0,1232 (2)	0,2960 (2)	4,95 (6)
C13	1,2817 (2)	0,0260 (2)	0,2387 (2)	4,56 (5)
C14	1,2797 (2)	0,5684 (2)	-0,1036 (2)	3,70 (5)
C15	1,4127 (2)	0,5610 (2)	-0,1500 (2)	4,70 (5)
C16	1,4207 (2)	0,6582 (2)	-0,2646 (2)	5,80 (6)
C17	1,2998 (3)	0,7643 (2)	-0,3338 (2)	6,08 (7)
C18	1,1681 (3)	0,7726 (2)	-0,2902 (2)	5,56 (7)
C19	1,1576 (2)	0,6755 (2)	-0,1765 (2)	4,44 (5)
C20	1,0609 (2)	0,6616 (2)	0,1180 (2)	3,39 (4)
C21	1,1086 (2)	0,7485 (2)	0,1468 (2)	4,40 (5)
C22	1,0135 (2)	0,8896 (2)	0,1526 (2)	5,04 (6)
C23	0,8708 (2)	0,9456 (2)	0,1297 (2)	4,74 (6)
C24	0,8219 (2)	0,8604 (2)	0,1011 (2)	5,53 (7)
C25	0,9161 (2)	0,7186 (2)	0,0954 (2)	4,97 (6)
C26	1,6618 (3)	-0,4385 (2)	0,4458 (3)	6,76 (8)

Les données spectroscopiques IR, UV, RMN et SM de ces composés pyrroles substitués obtenus ne permettent pas de déterminer avec certitude la position 2 ou 5 des substituants R¹ et R²: seules les

Tableau 3. Coordonnées atomiques et B_{eq} (\AA^2) du composé (II)

Le coefficient d'agitation thermique isotrope équivalent des atomes affinés en mode anisotrope est de la forme:

$$(4/3)[a^2\beta_{11} + b^2\beta_{22} + c^2\beta_{33} + (2abc\cos\gamma)\beta_{12} + (2accos\beta)\beta_{13} + (2bccos\alpha)\beta_{23}].$$

	x	y	z	B_{eq}
O1	1,1401 (2)	0,2363 (1)	0,6914 (2)	6,27 (5)
O2	0,9367 (2)	0,2486 (1)	0,6696 (2)	5,68 (5)
O3	0,6487 (2)	-0,3936 (1)	0,5467 (1)	5,61 (5)
N	1,0463 (2)	-0,0637 (2)	0,7103 (1)	3,62 (5)
C1	0,9298 (2)	-0,0563 (2)	0,6573 (2)	3,58 (6)
C2	0,9102 (2)	0,0403 (2)	0,6320 (2)	3,46 (6)
C3	1,0186 (2)	0,0924 (2)	0,6708 (2)	3,37 (6)
C4	1,1016 (2)	0,0258 (2)	0,7180 (2)	3,48 (6)
C5	1,1054 (3)	-0,1552 (2)	0,7469 (2)	5,13 (7)
C6	1,0410 (2)	0,1978 (2)	0,6778 (2)	3,96 (6)
C7	0,9518 (3)	0,3532 (2)	0,6792 (3)	6,91 (9)
C8	1,2252 (2)	0,0421 (2)	0,7730 (2)	3,72 (6)
C9	1,3244 (2)	0,0670 (2)	0,7302 (2)	4,92 (7)
C10	1,4381 (2)	0,0884 (2)	0,7813 (2)	5,70 (8)
C11	1,4538 (3)	0,0864 (2)	0,8758 (2)	6,47 (9)
C12	1,3582 (3)	0,0578 (3)	0,9201 (2)	8,2 (1)
C13	1,2432 (3)	0,0349 (3)	0,8690 (2)	6,38 (9)
C14	0,8531 (2)	-0,1436 (2)	0,6308 (2)	3,41 (6)
C15	0,8194 (2)	-0,1691 (2)	0,5376 (2)	4,17 (6)
C16	0,7510 (2)	-0,2522 (2)	0,5121 (2)	4,50 (7)
C17	0,7144 (2)	-0,3117 (2)	0,5794 (2)	3,98 (6)
C18	0,7446 (2)	-0,2886 (2)	0,6725 (2)	4,15 (6)
C19	0,8138 (2)	-0,2042 (2)	0,6974 (2)	4,18 (6)
C20	0,7977 (2)	0,0801 (2)	0,5742 (2)	3,81 (6)
C21	0,8072 (3)	0,1388 (3)	0,4975 (2)	5,82 (8)
C22	0,7012 (3)	0,1787 (3)	0,4454 (2)	7,5 (1)
C23	0,5886 (3)	0,1622 (3)	0,4694 (2)	7,4 (1)
C24	0,5780 (3)	0,1047 (3)	0,5437 (2)	6,68 (9)
C25	0,6816 (2)	0,0630 (2)	0,5962 (2)	4,95 (7)
C26	0,6222 (3)	0,4635 (3)	0,6137 (2)	7,12 (9)

Tableau 4. Coordonnées atomiques et B_{eq} (\AA^2) du composé (III)

Le coefficient d'agitation thermique isotrope équivalent des atomes affinés en mode anisotropes est de la forme:

$$(4/3)[a^2\beta_{11} + b^2\beta_{22} + c^2\beta_{33} + (2abc\cos\gamma)\beta_{12} + (2accos\beta)\beta_{13} + (2bccos\alpha)\beta_{23}].$$

	x	y	z	B_{eq}
O1	0,9384 (2)	-0,3193 (3)	0,3969 (2)	6,79 (6)
O2	1,0287 (1)	-0,1061 (3)	0,4247 (1)	5,32 (5)
O3	1,2206 (2)	0,4664 (4)	0,2443 (2)	11,25 (9)
O4	1,1995 (2)	0,2821 (4)	0,1564 (2)	11,05 (9)
N1	0,7978 (1)	0,1654 (3)	0,3463 (1)	3,97 (5)
N2	1,1812 (2)	0,3476 (4)	0,2154 (2)	7,67 (8)
C1	0,7359 (2)	0,0638 (3)	0,3750 (2)	3,73 (6)
C2	0,7816 (2)	-0,0756 (3)	0,4000 (2)	3,69 (6)
C3	0,8738 (2)	-0,0563 (3)	0,3862 (2)	3,79 (6)
C4	0,8823 (2)	0,0935 (3)	0,3531 (2)	3,81 (6)
C5	0,7767 (2)	0,3288 (4)	0,3168 (2)	5,45 (7)
C6	0,9480 (2)	-0,1758 (4)	0,4028 (2)	4,37 (6)
C7	1,1077 (2)	-0,2104 (5)	0,4389 (2)	6,74 (9)
C8	0,9603 (2)	0,1628 (3)	0,3199 (2)	3,86 (6)
C9	0,9980 (2)	0,0755 (4)	0,2638 (2)	4,61 (7)
C10	1,0704 (2)	0,1343 (4)	0,2297 (2)	5,26 (7)
C11	1,1056 (2)	0,2810 (4)	0,2526 (2)	5,00 (7)
C12	1,0711 (2)	0,3716 (4)	0,3084 (2)	5,30 (7)
C13	0,9978 (2)	0,3121 (4)	0,3424 (2)	4,68 (7)
C14	0,6393 (2)	0,1103 (3)	0,3777 (2)	3,99 (6)
C15	0,5797 (2)	0,1397 (4)	0,3106 (2)	5,14 (7)
C16	0,4900 (2)	0,1817 (4)	0,3156 (2)	6,7 (1)
C17	0,4587 (2)	0,1944 (4)	0,3856 (3)	7,8 (1)
C18	0,5166 (2)	0,1650 (4)	0,4515 (2)	7,19 (9)
C19	0,6073 (2)	0,1227 (4)	0,4489 (2)	5,39 (7)
C20	0,7407 (2)	-0,2154 (3)	0,4361 (2)	3,91 (6)
C21	0,7803 (2)	-0,2767 (4)	0,5067 (2)	5,20 (7)
C22	0,7418 (2)	-0,4068 (4)	0,5402 (2)	5,95 (8)
C23	0,6639 (2)	-0,4781 (4)	0,5043 (2)	5,60 (8)
C24	0,6235 (2)	-0,4191 (4)	0,4343 (2)	5,40 (7)
C25	0,6609 (2)	-0,2882 (4)	0,4003 (2)	4,52 (7)

idées directrices générales des cycloadditions dipolaires permettrait de faire une hypothèse. C'est pourquoi une détermination structurale à l'aide des rayons X s'est imposée pour lever toute ambiguïté sur les enchaînements des groupes d'atomes afin de pouvoir discuter la régiosélectivité de l'addition des munchnones aux alcynes.

Partie expérimentale. Cristaux préparés dans chaque cas par évaporation lente d'une solution dans le méthanol. Echantillons étudiés à l'aide d'un diffractomètre automatique Enraf-Nonius CAD-4 (radiation $\text{Mo K}\alpha$, monochromateur au graphite). Paramètres des mailles obtenus par affinement d'un jeu de 25 réflexions à θ élevé. Le Tableau 1 rassemble les conditions et les résultats des trois collections de données ($2\theta_{\text{max}} = 50^\circ$, balayage $\omega/2\theta = 1$, $t_{\text{max}} = 60$ s). Corrections de Lorentz et de polarisation (pas de correction d'absorption nécessaire), résolution par les méthodes directes (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) qui révèlent la plupart des atomes non-hydrogène du motif, les atomes manquants étant déterminés après une mise à l'échelle et une

Tableau 5. Longueurs des liaisons avec écart-type

	(I)	(II)	(III)
O1—C6	1,192 (4)	1,193 (2)	1,199 (4)
O2—C6	1,323 (4)	1,324 (3)	1,327 (3)
O2—C7	1,441 (4)	1,441 (3)	1,440 (4)
N—C1	1,388 (4)	1,384 (2)	1,378 (3)
N—C4	1,370 (4)	1,360 (2)	1,367 (3)
N—C5	1,461 (4)	1,466 (3)	1,465 (4)
C1—C2	1,374 (4)	1,376 (3)	1,376 (4)
C1—C14	1,471 (4)	1,473 (3)	1,475 (4)
C2—C3	1,423 (4)	1,420 (3)	1,414 (4)
C2—C20	1,485 (4)	1,478 (3)	1,481 (4)
C3—C4	1,386 (4)	1,386 (3)	1,380 (4)
C3—C6	1,467 (4)	1,460 (3)	1,472 (4)
C4—C8	1,476 (4)	1,475 (3)	1,466 (4)
C8—C9	1,366 (5)	1,372 (3)	1,387 (4)
C8—C13	1,374 (4)	1,370 (3)	1,388 (4)
C9—C10	1,370 (5)	1,375 (3)	1,370 (4)
C10—C11	1,353 (5)	1,347 (4)	1,359 (5)
C11—C12	1,370 (5)	1,364 (4)	1,374 (5)
C12—C13	1,376 (5)	1,391 (4)	1,385 (4)
C14—C15	1,396 (5)	1,381 (3)	1,385 (4)
C14—C19	1,391 (5)	1,385 (4)	1,386 (5)
C15—C16	1,382 (5)	1,377 (4)	1,375 (4)
C16—C17	1,363 (6)	1,372 (4)	1,361 (6)
C17—C18	1,374 (6)	1,368 (4)	1,357 (5)
C18—C19	1,382 (5)	1,394 (4)	1,382 (4)
C20—C21	1,374 (4)	1,383 (4)	1,384 (4)
C20—C25	1,376 (4)	1,376 (4)	1,389 (4)
C21—C22	1,384 (5)	1,391 (4)	1,380 (5)
C22—C23	1,358 (5)	1,349 (5)	1,363 (4)
C23—C24	1,364 (5)	1,348 (5)	1,373 (4)
C24—C25	1,387 (5)	1,384 (4)	1,382 (4)

Tableau 6. Angles des liaisons avec écart-type

	(I)	(II)	(III)
C6—O2—C7	116,1 (3)	115,2 (2)	117,1 (2)
C1—N—C4	110,0 (2)	109,8 (2)	109,7 (2)
C1—N—C5	125,2 (3)	125,2 (2)	124,8 (2)
C4—N—C5	124,6 (3)	124,8 (2)	125,4 (2)
N—C1—C2	107,5 (3)	108,0 (2)	108,0 (2)
N—C1—C14	123,9 (3)	121,5 (2)	122,2 (2)
C2—C1—C14	126,5 (3)	130,4 (2)	129,7 (3)
C1—C2—C3	107,4 (3)	106,8 (2)	106,8 (2)
C1—C2—C20	125,9 (3)	125,7 (2)	125,6 (2)
C3—C2—C20	126,5 (3)	127,5 (2)	127,6 (2)
C2—C3—C4	107,8 (3)	107,9 (2)	108,2 (2)
C2—C3—C6	124,3 (3)	129,9 (2)	126,2 (3)
C4—C3—C6	127,9 (3)	121,5 (2)	125,5 (2)
N—C4—C3	107,2 (3)	107,5 (2)	107,3 (2)
N—C4—C8	122,1 (3)	122,6 (2)	122,9 (2)
C3—C4—C8	130,6 (3)	129,9 (2)	123,4 (2)
O1—C6—O2	121,7 (3)	122,1 (3)	123,1 (3)
O1—C6—C3	124,7 (3)	125,7 (2)	125,0 (3)
O2—C6—C3	113,6 (3)	112,1 (2)	111,9 (2)
C4—C8—C9	122,4 (3)	121,2 (2)	118,6 (3)
C4—C8—C13	120,4 (3)	120,5 (2)	122,5 (3)
C9—C8—C13	117,2 (3)	118,2 (2)	118,9 (3)
C8—C9—C10	121,9 (4)	121,6 (3)	121,5 (3)
C9—C10—C11	119,9 (4)	120,0 (3)	118,5 (3)
C10—C11—C12	119,2 (3)	119,5 (3)	122,2 (3)
C11—C12—C13	120,6 (3)	120,9 (3)	119,1 (3)
C8—C13—C12	121,3 (3)	119,6 (3)	119,8 (3)
C1—C14—C15	123,3 (3)	120,7 (2)	121,5 (3)
C1—C14—C19	118,8 (3)	121,9 (2)	119,2 (2)
C15—C14—C19	117,9 (3)	117,3 (2)	119,3 (3)
C14—C15—C16	120,3 (4)	121,3 (3)	119,7 (3)
C15—C16—C17	121,1 (4)	120,3 (2)	120,9 (3)
C16—C17—C18	119,4 (4)	120,3 (2)	119,7 (3)
C17—C18—C19	120,5 (4)	118,8 (3)	121,1 (3)
C18—C19—C14	120,8 (4)	122,0 (2)	119,3 (3)
C2—C20—C21	120,4 (3)	120,3 (2)	121,1 (2)
C2—C20—C25	121,4 (3)	121,7 (2)	120,9 (2)
C21—C20—C25	118,2 (3)	118,0 (2)	118,0 (3)
C20—C21—C22	120,8 (3)	119,9 (3)	120,9 (3)
C21—C22—C23	120,8 (4)	121,0 (3)	120,6 (3)
C22—C23—C24	119,0 (3)	119,8 (3)	119,4 (3)
C23—C24—C25	120,8 (4)	120,6 (3)	120,5 (3)
C24—C25—C20	120,5 (4)	120,8 (3)	120,5 (3)

différence de Fourier. Après les affinements avec des coefficients d'agitation thermique isotrope [$R(I) = 0.12$, $R(II) = 0.11$, $R(III) = 0.14$] puis anisotrope [$R(I) = 0.08$, $R(II) = 0.085$, $R(III) = 0.07$] localisation des atomes d'hydrogène par différence de Fourier. Dernier affinement par matrice entière [x , y , z , β_{ij} pour les atomes de type C, O et N, x , y , z pour les atomes d'hydrogène; $w = 1/\sigma^2(F_o)$] conduisant aux

valeurs figurant dans le Tableau 1.* Les facteurs de diffusion sont tirés de *International Tables for X-ray Crystallography* (1974, Tome IV). Calculs effectués sur un ordinateur Digital PDP 11/60 avec les programmes *SDP* (Frenz, 1985).

Discussion. Les Figs. 1, 2 et 3 donne les représentations selon *ORTEP* (Johnson, 1965) des composés (I), (II) et (III). Le Tableau 1 donne les conditions d'enregistrement, les Tableaux 2, 3 et 4 les coordonnées atomiques de chaque composé et les Tableaux 5 et 6 donnent respectivement les longueurs et les angles des liaisons pour les atomes non-hydrogène. Au vu de ces résultats, on peut observer une grande homogénéité des géométries globales des structures: faible dispersion des liaisons C—C aromatiques et influence peu perceptible des substituants électro-attracteurs ou électro-donneurs sur la géométrie des cycles. Cette étude permet de montrer que l'orientation de l'addition des munchedones de départ au phénylpropionate de méthyle est gouvernée par le groupement lactone; elle est conforme à celle attendue en ne considérant que la symétrie des orbitales frontières des réactifs.

* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope et des paramètres des atomes d'hydrogène ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 53808: 34 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Références

- FRENZ, B. A. (1985). *Enraf-Nonius Structure Determination Package; SDP Users Guide*. Version 3.0. Enraf-Nonius, Delft, Les Pays Bas.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report 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. (1982). *MULTAN1/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
- MAZARI, M. (1989). Thèse de Magister, Univ. d'Oran, Algérie.
- TEXIER, F., MAZARI, M., YEEDRI, O., TONNARD, F. & CARRIE, R. (1990). *Tetrahedron*, **46**, 3515–3526.