

NOTAS PRÉVIAS
PRELIMINARY NOTES

ANNONCE PRELIMINAIRE

ETUDE DE L' AROMATICITÉ DE JULG.

J.P. GASTMANS*
D.F. GASTMANS*
C.A. Paulinetti da CÂMARA**

GASTMANS, J.P. et alii. Etude de l'aromatic Julg. *Ecl. Quim.*, São Paulo, 6:43-44, 1981. (Annonce préliminaire).

KEY-WORDS: *Aromaticité; indice de Julg.*

L'indice d' aromaticité de Julg (1) présuppose la connaissance des distances de liaison et des charges électroniques; deux donnés qui sont difficilement mesurables. C'est probablement la raison pour laquelle l'indice de Julg est rarement employé.

Cependant, pour avoir une idée sur la validité des conclusions que l'on pourrait tirer de l'indice de Julg, nous nous som-

mes servis des valeurs théoriques de distance et de charges de quelques hydrocarbures non alternants. Ces données ont été calculées par la théorie HMOSCF généralisée (2,3). Nous rappelons que les valeurs obtenues par cette théorie sont très semblables à celles des théories P.P.P. mais à un coût opérationnel moindre (inférieur à la moitié).

Les données obtenues se trouvent dans le tableau I.

TABLEAU I

hydrocarbure	indice théoriques	indice expérimental
fulvène	0,58	0,53
azulène	0,94	0,94
acépleiadiène	0,85	0,85
cycloheptazulène	0,76	—
cyclopentazulène	0,79	—
pentaénoheptalène	0,77	—
heptafulvène	0,73	—
fulvalène	0,65	—
heptafulvalène	0,65	—
radical benzyl	0,95	—
radical cyclopentadiényl	0,74	—
radical cycloheptatriényl	0,78	—

* Departamento de Química Orgânica — Instituto de Química — UNESP — Campus de Araraquara.

** Monografista do Instituto de Química — UNESP — Campus de Araraquara.

Pour les trois premiers hydrocarbures nous avons calculé, outre l'indice théorique, également l'indice expérimental obtenu à partir des résultats de R.X. et des valeurs de charges calculés par ASMO. On peut voir que les indices sont pratiquement identiques. On peut donc considérer les indices théoriques comme dignes de crédibilité.

Lés résultats présentés montrent clairement que du point de vue chimique, l'indice de Julg n'est certainement pas le plus apte à doser le caractère aromatique

d'un hydrocarbure. De fait, le fulvène est stable à température ordinaire, contrairement à l'heptafulvène qui polymérise rapidement l'ordre des indices est donc inversé. Les trois radicaux dont nous avons calculé les indices possèdent des valeurs très élevées, cependant aucun des trois n'existe réellement.

Comme la base expérimentale de l'indice de Julg est le comportement des protons 'aromatiques' en RMN, nous pouvons donc conclure que celui-ci n'est pas un bon critère d'aromaticité chimique.

GASTMANS, J.P. et alii. — Estudo da aromaticidade de Julg. *Ecl. Quim.*, São Paulo, 6:43-44, 1981. (nota prévia).

UNITERMOS: Aromaticidade, índice de Julg.

BIBLIOGRAPHIE

1. JULG, A. — *Jerusalem Symp. Quantu, Chem. Biochem.*, 1971, 3, 383
2. GASTMANS, J.P.; GASTMANS, D.F. — *Tetrahedron*, 1970, 26, 3495.
3. GASTMANS, J.P.; GASTMANS, D.F.; TOKEYAMA, O.; DE GROTE, R.A.M. — *Rel. Quim.*, 1976, 1, 47.