

DÉTERMINATION DE LA STRUCTURE ANNEAU-CHAÎNE OUVERTE D'ACIDES ORTHO-CÉTONIQUES PAR SPECTROGRAPHIES INFRA-ROUGE ET ULTRA-VIOLETTE

par L. CHRISTIAENS et M. RENSON

SUMMARY

In a preceding note, we have described the synthesis and chemical properties of ortho ketonic aromatic acids, and of some of their derivatives.

We are discussing here the structure and the ring-chain tautomerism of these acids on the basis of their infra-red and ultra-violet spectra.

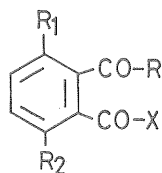
I. INTRODUCTION

Dans un travail précédent [1], nous avons décrit la synthèse et les propriétés chimiques d'acides cétoniques et de leurs dérivés.

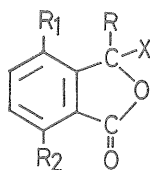
Nous allons étudier maintenant la structure de ces substances à la lumière des spectrographies infra-rouge et ultra-violettes.

2. SPECTROGRAPHIE I.R.

En principe, lorsqu'on examine le spectre infra-rouge d'un acide du type ortho-acyl ou aroyl benzoïque, on devrait pouvoir trancher le problème de sa structure sans aucune ambiguïté.



I



II

- a. X = — OH
- b. X = — Cl
- c. X = — OR₃
- d. X = R₄
- e. X = O — COCH₃
- f. X = O — COCH₃
- g. $\frac{X}{R} > C = H_2C$

En effet, la forme ouverte Ia doit montrer en pastille de KBr, une vibration carbonyle variant suivant le type de cétone de 1640-1650 cm⁻¹ (cétone diaromatique) à 1670 cm⁻¹ (cétone arylalipathique) et une vibration carboxyle située vers 1680-1700 cm⁻¹. De plus, cette forme ouverte doit avoir dans la région des hydroxyles une large absorption s'étalant de 2500 au-delà de 3000 cm⁻¹ et qui est caractéristique de tous les acides organiques en raison de leur association. Par contre, la forme cyclique IIa doit présenter théoriquement une seule vibration C = O due au car-