

Étude vibrationnelle du 3,4'-bitriazole et de quelques-uns de ses dérivés C-monosubstitués

N. Ouijja¹, F. Guédira¹, S. Zaydoun¹, M. Aouial¹,
M. Saidi Idrissi^{1,*} et A. Lautié²

¹ Laboratoire de Spectroscopie Infrarouge, Département de Chimie,
Faculté des Sciences, Rabat, Maroc

² Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman, Section de Thiais,
2 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

(Reçu le 17 décembre 1998 ; accepté le 24 mars 1999)

* Correspondance et tirés-à-part.

RÉSUMÉ

L'étude vibrationnelle des 3,4'-bitriazole, 5-méthyl-3,4'-bitriazole et 5-bromo-3,4'-bitriazole a été effectuée et une attribution de leurs vibrations fondamentales a été proposée sur la base de l'existence d'une seule forme à l'état solide. La substitution de l'hydrogène en position 3 du cycle triazolique {1H} par un groupement 4-triazolyle entraîne une diminution de la force de la liaison hydrogène NH...N comparativement au 1,2,4-triazole et à ses dérivés C-monosubstitués. L'introduction d'un substituant en position 5 du bihétérocycle augmente la force de l'autoassociation surtout dans le cas où le substituant est un groupement attracteur d'électrons. A partir des fréquences ν_{NH} , l'estimation des distances N...N dans ces dérivés a été effectuée.

La distinction entre les vibrations du cycle triazolique et celles du groupement 4-triazolyle semble impossible, probablement à cause de la conjugaison des deux cycles. La fréquence plus élevée obtenue pour la vibration de valence de la liaison intercyclique dans le cas du BrbTA est explicable par une conjugaison plus forte et une liaison C-N plus courte dans ce dernier.

mots clés : -3,4'-bitriazoles, Spectres de vibration, Association, Tautomérie.

ABSTRACT

The vibrational study of 3,4'-bitriazole, 5-methyl-3,4'-bitriazole and 5-bromo-3,4'-bitriazole is reported and an assignment of their fundamentals is proposed on the basis of the existence of only one form in the solid state. The substitution of the hydrogen in 3 position of the {1H} triazolic ring by 4-triazolyl group induces a

decrease in the strength of the NH...N hydrogen bond comparatively to 1,2,4-triazole and its C-monosubstituted derivatives. The introduction of a substituent in position 5 of the biheterocycle increases the strength of the self association mainly when the substituent is an electron-attractor group. Using the ν N-H wave number values, the estimation of N...N distances in these derivatives is possible.

The distinction between the triazolic ring's vibrations and those of 4-triazolyl group seems impossible, probably because of the conjugation of the two rings. The higher frequency value obtained for the intercyclic bond stretching mode in the BrbTA is explained by an important conjugation and a shorter C-N bond in this case.

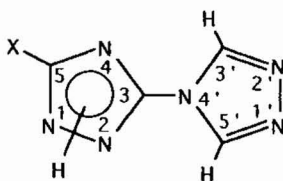
key words : 3,4'-bitriazoles, Vibrational spectra, Association, Tautomerism.

INTRODUCTION

Les composés renfermant un cycle 1,2,4-triazolique* ont des applications importantes dans des domaines aussi variés que la pharmacologie [1,2], l'agriculture [3,4] et l'industrie [5]. De plus, une imprécision de structure existe pour les triazoles non N-substitués. Dans le cadre de nos recherches sur ces systèmes [6-11] et les différents types de sels et complexes qu'ils peuvent former [12-15], nous nous sommes intéressés à la série des 1,2,4-bitriazoles. Le 1,2,4-bitriazole de jonction N-N', à savoir le 4,4'-bi-1,2,4-triazole, ayant déjà fait l'objet d'une étude vibrationnelle approfondie [16], nous nous sommes attachés à l'analyse des spectres IR et Raman du 1,2,4-bitriazole de jonction C-N': le 3,4'-bi-1,2,4-triazole (bTA)** et de quelques-uns de ses dérivés C-substitués à savoir le 5-méthyl-3,4'-bitriazole (MebTA)** et le 5-bromo-3,4'-bitriazole (BrbTA)** dans le but de préciser leurs structures. En effet, contrairement au 4,4'-bi-1,2,4-triazole, ces molécules sont susceptibles d'exister sous plusieurs formes tautomères selon la position de l'atome d'hydrogène lié à l'azote.

La numérotation des atomes utilisée est donnée sur le schéma ci-après

X= H, CH₃ ou Br



*Tous les triazoles étudiés sont des 1,2,4-triazoles.

()**Abréviation utilisée

