

Le présent travail entre dans le cadre de l'axe de recherche que nous développons sur les hétérocycles [1]. Nous nous intéressons, à leur structure (Stabilité,...) et à leur réactivité chimique (Phénomène de tautomérie, mécanisme de réaction), du point de vue théorique, en effectuant des calculs quantiques, au moyen des méthodes semi-empiriques, essentiellement de type MNDO [2], AM1 [3] et PM3 [4], ab initio avec une base étendue, au moyen de la chaîne de programme Gaussian 94 [5]. Nous avons effectué également des calculs qui utilisent la méthode, dite de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT/B3LYP/6-311+G**) [6-10].

Ce travail de recherche, constitue une contribution quantique à l'étude de la structure et de la réactivité des hétérocycles, qui jouent un rôle important en biologie, en pharmacologie et en synthèse [11].