

## Étude expérimentale et théorique des déplacements chimiques (RMN <sup>13</sup>C) de quelques produits cycliques par la méthode DFT

### [ Experimental and theoretical studie of the chemicals shifts (<sup>13</sup>C NMR) of some cyclic products by the method DFT ]

Abdellah ZEROUAL<sup>1</sup>, Ahemd BENHARREF<sup>2</sup>, and Abdeslam EL HAJBI<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Chimie Physique, Département de Chimie,  
Faculté des Sciences Université ChouaibDoukkali,  
BP 20, 24000 EL Jadida, Maroc

<sup>2</sup>Laboratoire de Chimie Biomoléculaire, Substances Naturelles et Réactivité,  
URAC 16, Faculté des Sciences Semlalia, Université Cadi Ayyad,  
BP 2390, 40000 Marrakech, Maroc

Copyright © 2014 ISSR Journals. This is an open access article distributed under the **Creative Commons Attribution License**, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**ABSTRACT:** In this work, we determined the tensors of screen as well as the chemicals shifts of the nuclear magnetic resonance of the carbon 13 (RMN <sup>13</sup>C) of organic product: P<sub>1</sub> :[(1S, 3R, 8R)-2,2- dichloro -3, 7, 7, 10-tetra- methyl-tricyclo [6, 4, 0, 0<sup>1,3</sup>] dodec-9-ene], using methods: CSGT (Continuous Set of Gauge Transformations), IGAIM (a slight variation on the CSGT method) and GIAO (Gauge-Independent Atomic Orbital), using the method DFT by means of functional B3LYP / 6-311 (2d, p) for the geometrical optimization of this product. These methods are implanted in the software Gaussian09. The comparison of the theoretical results to the experimental results shows that the method GIAO is the most reliable. On the other hand we calculate the chemicals shifts of the carbon 13 (<sup>13</sup>C) of the compound P<sub>2</sub> :[(1S, 3R, 8R) -2, 2- dichloro-3, 7, 7, 10 -tetramethyl- tricycle [6, 4, 0, 0<sup>1,3</sup>] dodec-9-én-11- one)], This calculation was performed using the B3LYP functional, using the method GIAO at the level of the following bases: 6-311, 6-311 (d, p), 6-311 (2d, p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d, p), 6-31 (2d, 2p), 6-31 (3d, 3p), 6-31 (df, pd), this study shows that the closer to the experimental result of theoretical calculation values are those obtained by the base 6-31 (d).

**KEYWORDS:** CSGT, IGAIM, GIAO, 6-31 (d), B3LYP, β-himachalène, Quantum chemistry.

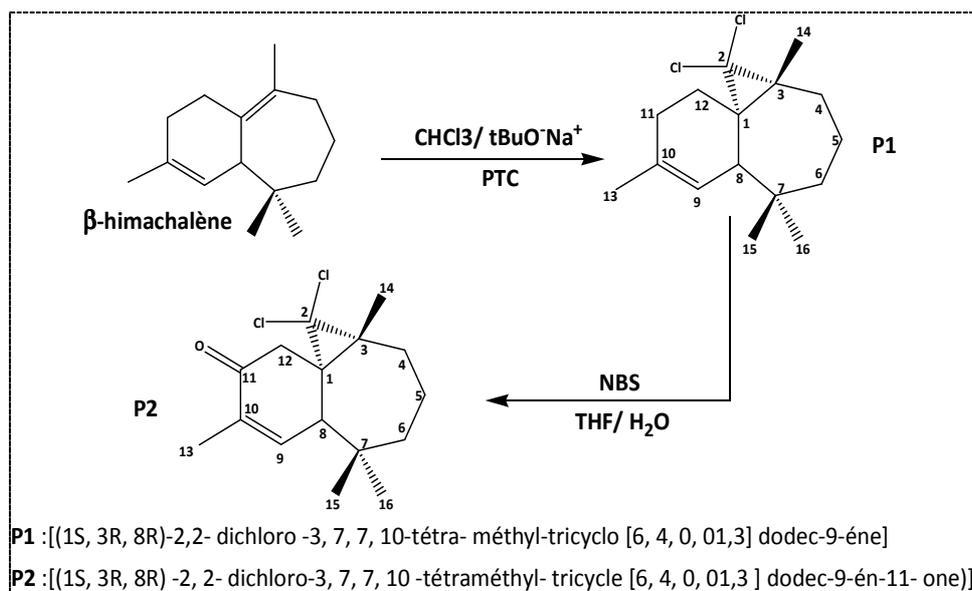
**RESUME:** Dans ce travail, nous avons déterminé les tenseurs d'écran ainsi que les déplacements chimiques de la résonance magnétique nucléaire du carbone (RMN <sup>13</sup>C) de produit organique: P<sub>1</sub> :[(1S, 3R, 8R)-2,2- dichloro -3, 7, 7, 10-tétra- méthyl-tricyclo [6, 4, 0, 0<sup>1,3</sup>] dodec-9-ène], à l'aide des méthodes: CSGT (Continuous Set of Gauge Transformations), IGAIM (a slight variation on the CSGT method) et GIAO (Gauge-Independent Atomic Orbital) en utilisant la méthode DFT au moyen de la fonctionnelles B3LYP/ 6-311 (2d, p) pour l'optimisation géométrique de ce produit. Ces méthodes sont implantées dans le logiciel Gaussian09. La comparaison des résultats théoriques aux résultats expérimentaux montre que la méthode GIAO est la plus fiable. D'autre part nous calculons les déplacements chimiques du carbone 13 (<sup>13</sup>C) du composé P<sub>2</sub> :[(1S, 3R, 8R) -2, 2- dichloro-3, 7, 7, 10 -tétraméthyl- tricycle [6, 4, 0, 0<sup>1,3</sup>] dodec-9-én-11- one)], ce calcul à été réalisé au moyen de la fonctionnelles B3LYP, en utilisant la méthode GIAO au niveau des bases suivantes: 6-311, 6-311 (d, p), 6-311 (2d, p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d, p), 6-31 (2d, 2p), 6-31 (3d, 3p), 6-31 (df, pd), cette étude montre que les valeurs de calcul théorique les plus proches au résultat expérimental sont celles obtenues par la base 6-31(d).

**MOTS-CLEFS:** CSGT, IGAIM, GIAO, 6-31 (d), B3LYP, β-himachalène, Chimie Quantique.

## 1 INTRODUCTION

La résonance magnétique nucléaire (RMN) est une technique spectroscopique qui repose sur le magnétisme du noyau. L'interaction entre le noyau des atomes et un champ magnétique statique intense est étudiée en utilisant: **la résonance magnétique nucléaire**.

Dans ce travail nous combinons les résultats expérimentaux des structures des produits organiques (**figure 1**) avec des calculs DFT des interactions RMN, tout en modélisant et traitement des spectres RMN donnée par la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), que de tels calculs sont maintenant possibles et sur des systèmes de plusieurs atomes.



**Fig. 1.** La réaction de préparation d'une cétone ( $P_2$ ) et du produit di-halogéné ( $P_1$ ) ont été obtenu à partir du  $\beta$ -himachalène.

Le produit  $P_1$  est obtenu à partir du traitement du  $\beta$ -himachalène [1] par le dichlorocarbène, générés in situ dans les conditions de catalyse par transfert de phase liquide-solide cette réaction est hautement régio et stéréo-sélective, la structure de ce produit est déterminée à partir des données spectrales  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ . [2], [3], [4], [5]. La stéréochimie a été confirmée par les rayons X. [6], cette régio et stéréo-sélective ont été interpréter par notre étude théorique [7], ensuite le produit  $P_1$  est traité par NBS (*N*-bromosuccinimide) pour obtenir le produit  $P_2$ , sa structure a été déterminée à partir des données spectrales  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$  [4], [5] une étude radio-cristallographique par diffraction des rayons X permet de confirmer la stéréochimie du produit 2. [8].

## 2 RESULTATS ET DISCUSSION

### 2.1 OPTIMISATION DE LA GÉOMÉTRIE

L'optimisation des paramètres géométriques (distances interatomiques, angles de liaison et angles de torsion) des molécules étudiées à température ambiante, est obtenue en utilisant le logiciel Gaussian 09 [9.] La création, la visualisation des molécules, la préparation des fichiers de données pour Gaussian 09 et la visualisation des fichiers de sortie, sont réalisées à l'aide du logiciel Gauss-View 3.1.

L'énergie potentielle minimale est calculée par l'algorithme de Berny utilisant des coordonnées internes redondantes [10]. Les calculs ont été réalisés au moyen de la théorie DFT avec le fonctionnel hybride à trois paramètres de Becke utilisant le fonctionnel de corrélation LYP (B3LYP) [11], [12], [13] et la base d'orbitales 6-311(2d, p) [14], [15], [16], [17].

## 2.2 CALCUL RMN

La résonance magnétique nucléaire est une sonde locale sélective pouvant fournir des informations précises sur les environnements atomiques proches. Pour mener cette étude, nous avons eu recours à la DFT combinée aux méthodes IGAIM [16], [18], GIAO [19], [20],[21],[22], [23] et CSGT [22], [23], [24], qui sont restreinte à des systèmes finis et isolés (molécules ou clusters), et utilisée pour le calcul des tenseurs d'écran électronique isotropes  $\sigma_{iso}$ . Il est commode de représenter ces trois valeurs indépendantes ( $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$ ) selon la convention de HAEBRELEN [24].

Le calcul des déplacements chimique isotrope  $\delta_{iso}$ , sont obtenus par la relation:

$$\delta_{iso} = -[\sigma_{iso} - \sigma_{réf}] \quad (1)$$

Où  $\sigma_{réf}$  est le tenseur d'écran électronique correspondant à la substance de référence tétra-méthyle silane (TMS).

La comparaison de la théorie avec l'expérience nous permettra à la fois d'attribuer les résonances expérimentales du  $^{13}\text{C}$  et de relever la méthode qui traduit bien ces déplacements chimiques.

## 2.3 ETUDE DE LA PRÉCISION DE LA MÉTHODE DE CALCUL

Les valeurs des déplacements  $\delta$ , calculées et expérimentales, sont reportées dans le tableau 1, les valeurs obtenues sont comparées aux données expérimentales dans le chloroforme deutéré ( $\text{CCl}_3\text{D}$ ).

**Tableau 1.** Les déplacements chimique isotrope  $\delta_{iso}$  (en ppm) obtenu par les méthodes GIAO, CSGT, IGIM au niveau de la base 6-311 (2d,p) et RMN expérimentale du produit  $P_1$  [4], [5].

	GIAO	CSGT	IGAIM	Expérimentale
<b>C1</b>	41,58	42,490	41,077	30,41
<b>C2</b>	88,165	124,670	123,258	78,36
<b>C3</b>	41,899	38,543	37,130	30,65
<b>C4</b>	38,332	55,976	54,553	33,06
<b>C5</b>	27,82	21,708	20,283	21,53
<b>C6</b>	54,251	58,838	57,414	21,11
<b>C7</b>	46,689	44,394	42,983	36,83
<b>C8</b>	51,468	55,029	53,610	47,33
<b>C9</b>	129,246	165,56	164,138	135,55
<b>C10</b>	140,207	200,026	198,611	148,6
<b>C11</b>	30,85	58,353	56,928	31,1
<b>C12</b>	28,101	10,772	9,349	29,4
<b>C13</b>	18,017	26,099	24,668	19,5
<b>C14</b>	24,559	21,426	19,997	15,37
<b>C15</b>	31,45	27,816	26,389	16,6
<b>C16</b>	23,382	26,896	25,468	30,06

D'après les données du tableau 1 nous arrivons à tracer une courbe des déplacements expérimentaux en fonction des déplacements théoriques, nous avons obtenu une droite de l'équation suivante:  $Y = a.X + b$  (figure 2)

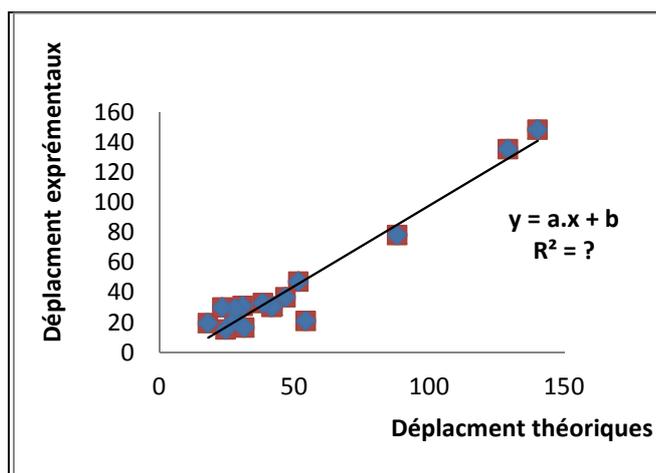


Fig. 2. Corrélation graphique du déplacement chimique entre les valeurs calculées par les méthodes GIAO, CSGT et IGIM au niveau de la base 6-311(2d, p) et expérimentales.

Les paramètres de l'équation présentée dans la figure 2 (a, b et R<sup>2</sup>) sont répertoriés dans le tableau 2.

Tableau 2. Les paramètres de l'équation a, b et R<sup>2</sup> des méthodes GIAO, CSGT, IGIM au niveau de la base 6-311 (2d, p).

	3 GIAO	CSGT	4 IGAIM
a	0,7049	0,718	0,7188
b	3,6245	1,376	2,4005
R <sup>2</sup>	0,94	0,93	0,93

L'analyse de la régression linéaire donne une pente de 0.7049, 0.718 et 0.7188 correspondants respectivement aux **GIAO**, **CSGT** et **IGAIM**. Ce qui montre la linéarité entre les valeurs théoriques et expérimentales. Le coefficient de régression est de R<sup>2</sup> = **0,94**, 0,93, 0,93 respectivement à la méthode **GIAO**, **CSGT** et **IGAIM**. Ce qui indique une bonne correspondance entre la courbe et les données. L'ordonnée à l'origine est de **3,6245** ppm pour **GIAO**, 1,376 ppm pour **CSGT** et **IGAIM** 2,4005 ppm (Tableau 2).

Le fait de passer de la méthode IGAIM à la méthode CSGT et puis la méthode GIAO avec le fonctionnel hybride B3LYP permet d'augmenter significativement la corrélation : on passe ainsi d'un coefficient de 0,93 au niveau des méthodes IGAIM et CSGT à 0,94 au niveau de la méthode GIAO, on observe une évolution au niveau de la méthode GIAO, on constate ainsi que la corrélation est d'autant meilleure pour la méthode GIAO, alors cette méthode est la plus fiable pour calculer les déplacements chimiques théoriques.

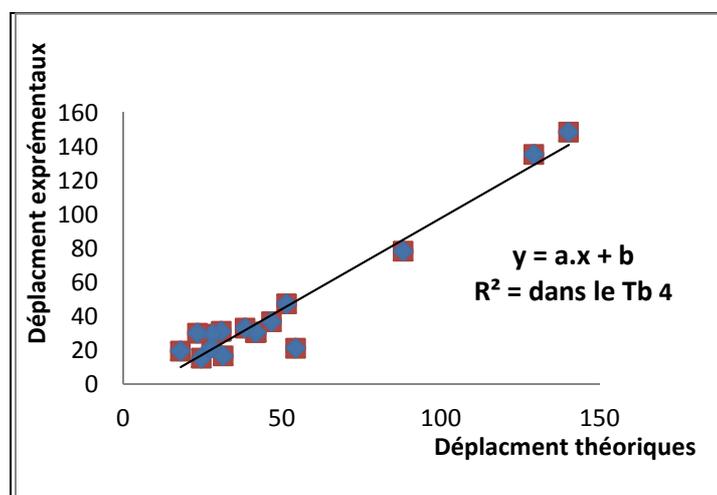
#### 4.1 ETUDE DE LA PRÉCISION DE LA BASE DE CALCUL DE LA MÉTHODE GIAO

Une fois la méthode GIAO ainsi validée, nous l'appliquons au produit 2 et pouvoir ainsi mesureront les déplacements chimiques du carbone 13 (<sup>13</sup>C). Nous utilisons **par ailleurs** la méthode GIAO (gauge indépendant atomic orbitals) implémentée dans le programme Gaussian 09, ont utilisant différentes bases : 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p), 6-31 (df,pd), dans le tableau 3 regroupant les valeurs des déplacements chimiques du <sup>13</sup>C de produit 2.

**Tableau 3.** Les déplacements chimique isotrope  $\delta_{iso}$  (ppm) obtenu par les méthodes GIAO, au niveau des bases 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p), 6-31 (df,pd) et RMN expérimentale du produit 2.

	6-311	6-311 (d,p)	6-311 (2d,p)	6-31	6-31 (d)	6-31 (d,p)	6-31 (2d,2p)	6-31 (3d,3p)	6-31 (df,pd)	Expérimentale
C1	36,78	41,33	42,93	35,49	36,47	34,60	49,67	35,20	33,60	30,44
C2	115,97	117,63	119,80	100,60	81,86	99,71	122,25	106,44	104,94	78,36
C3	32,27	36,66	36,70	30,58	37,01	29,69	43,13	28,05	28,64	29,71
C4	44,97	51,59	52,78	41,31	40,37	40,43	58,41	43,60	41,28	30,43
C5	11,75	17,26	17,81	12,59	29,27	12,59	24,93	8,587	32,26	21,15
C6	50,82	55,90	56,20	46,75	54,07	45,86	62,15	46,06	45,36	20,92
C7	36,37	41,71	42,07	34,66	40,02	33,77	48,40	36,51	32,26	38,88
C8	46,14	53,09	53,80	43,54	48,52	42,66	60,66	46,34	43,36	46,31
C9	161,08	166,10	163,99	140,93	142,04	140,04	163,86	149,41	146,96	136,23
C10	203,65	207,66	211,37	175,11	132,04	174,23	201,25	188,14	184,94	146,35
C11	210,14	210,17	207,40	180,40	191,41	179,52	207,56	193,71	189,13	198,88
C12	62,01	65,79	65,36	55,50	43,85	54,61	72,94	56,30	54,107	37,61
C13	11,57	16,98	17,47	13,50	24,38	13,50	25,02	9,710	8,93	20,55
C14	12,46	17,89	18,29	14,37	23,42	14,37	25,72	10,49	9,87	15,75
C15	18,85	23,92	24,54	20,07	28,81	20,07	31,97	15,56	16,15	15,92
C16	16,60	21,78	22,41	17,42	38,53	17,42	29,67	13,52	13,55	28,75

Nous avons pu ainsi établir mathématiquement l'équation exprimant le lien entre les valeurs théoriques et les valeurs expérimentales. À partir de ces valeurs on a représenté le graphe (figure3) qui mentionne une petite différence de résultats pour la régression linéaire  $R^2$  au niveau des bases 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p) et 6-31 (df,pd).



**Fig. 3.** Corrélation graphique du déplacement chimique entre les valeurs calculées par la méthode GIAO au niveau des bases 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p), 6-31 (df,pd) et le déplacement chimique expérimental.

Les paramètres de l'équation :  $y=a.x+b$  (a, b et  $R^2$ ) sont rassemblés dans le tableau 4.

Tableau 4. Les paramètres de l'équation a, b et R<sup>2</sup> obtenu par la méthode GIAO au niveau des bases 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p), 6-31 (df,pd).

	6-311	6-311 (d,p)	6-311 (2d,p)	6-31	6-31 (d)	6-31 (d,p)	6-31 (2d,2p)	6-31 (3d,3p)	6-31 (df,pd)
a	0,793	0,806	0,805	0,941	1,102	0,946	0,862	0,855	0,884
b	2,872	-1,693	-2,024	-0,652	-12,35	-0,339	-10,17	3,194	1,521
R <sup>2</sup>	0,941	0,939	0,932	0,941	0,976	0,943	0,939	0,941	0,94

D'après la figure 3 nous observons une linéarité entre les valeurs théoriques et expérimentales et le tableau 4 montre que la base **6-31 (d)** possède une pente la plus grande 1,102 suivie par la base 6-31 (d, p) 0,946 et puis 6-31 0,941, le coefficient de régression est de R<sup>2</sup> = 0,976 pour 6-31(d), 0,943 pour 6-31(d, p), ce qui indique une bonne correspondance entre la courbe et les données.

Nous avons effectivement constaté que la méthode GIAO au niveau de la base 6-31(d) est la plus fiable pour calculer les déplacements chimiques du <sup>13</sup>C car elle possède un facteur de correction le plus grand.

## 5 CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons étudié, dans le cadre de la DFT les propriétés magnétiques nucléaires du carbone 13 (<sup>13</sup>C) de certains produits organiques et nous constatons que:

- Le calcul théorique des déplacements chimiques de produit 1 [(1S,3R,8R)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tétraméthyl-tricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-ène] montre que les valeurs les plus proches au résultat expérimental aient celle calculée par la méthode GIAO.
- les calculs des déplacements chimiques du carbone 13 (<sup>13</sup>C) de produit 2 [(1S,3R,8R)-2,2-dichloro-3,7,7,10-tétraméthyl-tricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-en-11-one] a été réalisés au moyen de la fonctionnelles B3LYP, en utilisant les bases 6-311, 6-311 (d,p), 6-311 (2d,p), 6-31, 6-31 (d), 6-31 (d,p), 6-31 (2d,2p), 6-31 (3d,3p), 6-31 (df,pd), cette étude montre que les valeurs théoriques obtenues par la base 6-31(d) sont en bon accord avec les valeurs expérimentales

## RÉFÉRENCES

- [1] K. M. Plattier and P. Teisseire, "Essential oil of the Atlas Cedar," *Recherches*, vol. 19, pp. 131-144, 1974.
- [2] F. Sbai, M. dakir, A. Auhmani, H. Eljamili, M. Akssira, A. Benharref, A. Kenz and M. Pierrot, "(1S,3R,8S,9S,10R)-2,2-Dichloro-9,10-epoxy-3,7,7,10-tetramethyl-tricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodecane and (1S,3R,8R,10R)-2,2-Dichloro-3,7,7,10-tetramethyltricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-one," *Acta Crystallographica Section C*, vol. 58, pp. o518-o520, 2002.
- [3] H. Eljamili, A. Auhmani, M. Dakir, E. Lassaba, A. Benharref, M. Pierrot, A. Chiaroni, and C. Riche, "Oxidation and addition of dihalocarbenes to b-himachalene," *Tetrahedron Letters*, vol. 43, pp. 6645-6648, 2002.
- [4] M. Dakir, A. Auhmani, M; Y. Ait Itto, N. Mazoir, M. Akssira, M. Pierrot and A. Benharref. "Optimisation of Allylic Oxidation of (1S,3R,8R)-2,2-Dichloro-3,7,7,10-tetramethyltricyclo[6,4,0,0<sup>1,3</sup>]dodec-9-ene," *Synthetic communications*, vol. 34, no. 11, pp. 2001-2008, 2004.
- [5] A. Auhmani, E. Kossareva, H. Eljamili, M. Reglier, M. Pierrot and A. Benharref, "Regiodpecific Synthesis of new N-Substituted Pyrazole using a Sesquiterpene Hydrocarbon," *Synthetic communications*, vol. 32, no. 5, pp. 707-715, 2002.
- [6] A. Auhmani, E.Kossareva, E; Lassaba, M. Réglier, M. Pierrot and A. Benharref, "Cyclopropanation reactions on α-cic-himachalene and a β-himachalene," *Acta Crystallographica Section C*, vol. 55, Part 6, (IUC9900055), 1999.
- [7] A. Zeroual, M. El Idrissi1, A. Benharref and A. El Hajbi, *International Journal of Innovation and Applied Studies* ISSN 2028-9324 Vol. 5 No. 2 Feb. 2014, pp. 120-130
- [8] N. Ourhriss, A. Benharref, A., Oukhrib, J. Claude Daran and M. Berraho, "(1S,3R,8R)-2,2-Dichloro-3,7,7,10-tetramethyltricyclo[6.4.0.01,3]dodec-9-en-11-one(1S,3R,8R)-2,2-Dichloro-3,7,7,10-tetramethyltricyclo[6.4.0.01,3]dodec-9-en-11-one," *Acta Crystallographica Section E*, vol. 69, pp. o830, 2013.
- [9] M. J. Frisch, G, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [10] C. Peng, P.Y. Ayala, H.B. Schlegel, M.J. Frisch, "Using redundant internal coordinates to optimize equilibrium geometries and transition states," *Journal of Computational Chemistry*, vol. 17, pp. 49-56, 1996.

- [11] A.D. Becke, "Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior," *Phys. Rev. A*, vol. 38, pp. 3098-3100, 1988.
- [12] A.D. Becke, "A new mixing of Hartree-Fock and local density-functional theories," *Journal of Chemical Physics*, vol. 98, pp. 1372-1377, 1993.
- [13] C. Lee., W. Yang, R.G Parr, "Development of the Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron Density," *Phys. Rev. B*, vol. 37, pp. 785-789, 1988.
- [14] V. A. Rassolov, M. A. Ratner, J. A. Pople, P. C. Redfern, and L. A. Curtiss, "6-31G\* Basis Set for Third-Row Atoms," *Journal of Computational Chemistry*, vol. 22, pp. 976-984, 2001.
- [15] T. A. Keith and R. F. W. Bader, "Calculation of magnetic response properties using atoms in molecules," *Chem. Phys. Lett*, vol. 194, pp. 1-8, 1992.
- [16] T. A. Keith and R. F. W. Bader, "Calculation of magnetic response properties using a continuous set of gauge transformations," *Chem. Phys. Lett*, vol. 210, pp. 223-231, 1993.
- [17] J. R. Cheeseman, G. W. Trucks, T. A. Keith, and M. J. Frisch, "A Comparison of Models for Calculating Nuclear Magnetic Resonance Shielding Tensors," *J. Chem. Phys*, vol. 104, pp. 5497-509, 1996.
- [18] T. A. Keith and R. F. W. Bader, "Calculation of magnetic response properties using atoms in molecules," *Chem. Phys. Lett*, vol. 194, pp. 1-8, 1992.
- [19] F. London, "The quantic theory of inter-atomic currents in aromatic combinations," *J. Phys. Radium*, vol. 8, pp. 397-409, 1937.
- [20] R. McWeeny, "Perturbation Theory for Fock-Dirac Density Matrix," *Phys. Rev*, vol. 126, pp. 1028- 1034, 1962.
- [21] R. Ditchfield, "Self-consistent perturbation theory of diamagnetism. 1. Gauge-invariant LCAO method for N.M.R. chemical shifts," *Mol. Phys*, vol. 27, pp. 789-807, 1974.
- [22] K. Wolinski, J. F. Hilton, and P. Pulay, "Efficient Implementation of the Gauge-Independent Atomic Orbital Method for NMR Chemical Shift Calculations," *J. Am. Chem. Soc*, vol. 112, pp. 8251-8260, 1990.
- [23] J. R. Cheeseman, G. W. Trucks, T. A. Keith, and M. J. Frisch, "A Comparison of Models for Calculating Nuclear Magnetic Resonance Shielding Tensors," *J. Chem. Phys*, vol. 104, pp. 5497-5509, 1996.
- [24] HAEBERLEN H. high resolution NMR in solids. Selective averaging, chapter 3, 31. Academic Press, 1976. 1.1.2