

than the mean of the N(1)–C distances, can be regarded as a weakened N–C single bond. The weakening is due to the effect of the two strong N(sp^2/sp^3)–C(sp^2) multiple bonds in the succinimide group.

The authors thank Professor E. R. Wölfel (Darmstadt) for providing one of them (Gy. A.) with technical and computing facilities and recommending him for a Fellowship granted by the DAAD. Thanks are due to Dr A. Kálmán (Budapest) for stimulating discussions, to Dr E. Carstensen-Oeser (Darmstadt) for help in the computing and to Dr Z. Mészáros, Research Manager of the Chinoin Factory for Pharmaceutical and Chemical Products (Budapest), for his interest.

References

- ARGAY, G. & CARSTENSEN-OESER, E. (1973). *Acta Cryst.* In the press.
- ARGAY, G. & KÁLMÁN, A. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 636–638.
- ARONEY, M. J., CHEN, C. Y., LE FÉVRE, R. J. W. & SAXBY, J. D. (1964). *J. Chem. Soc.* pp. 4269–4274.
- BAUDOUR, J. L. & MESSENGER, J. C. (1971). *Acta Cryst.* **B27**, 799–806.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Report ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- COREY, E. J. & SNEEN, R. A. (1955). *J. Amer. Chem. Soc.* **77**, 2505–2509.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- LONG, R. E. (1965). *A Program for Phase Determination by Iterative Application of Sayre's Equation*. Ph.D. Thesis, UCLA.
- MASON, R. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 720–724.
- PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*. Ithaca: Cornell Univ. Press.
- SERES, J. (1970). *Investigations in the Field of Substituted Succinimides* (Dr techn. Thesis, Technical Univ., Budapest).
- SERES, J., TARDOS, L. & LESZKOVSKI, G. (1962). Hungarian patent, No. 151425.
- STOUT, G. H. & JENSEN, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*. p. 396. London: Macmillan.
- X-RAY-63 Program System for X-ray Crystallography (1964). Department of Chemistry, Univ. of Washington, Seattle and Univ. of Maryland, College Park.

Acta Cryst. (1973). **B29**, 1149

N-Méthyl Dipropylacétamide

PAR ANDRÉ GRAND ET CLAUDINE COHEN-ADDAD

Université Scientifique et Médicale de Grenoble, Laboratoire de Spectrométrie Physique, B.P. 53, Centre de Tri, 38041 Grenoble Cedex, France

(Reçu le 15 décembre 1972, accepté le 16 janvier 1973)

Abstract. *N*-Methyldipropylacetamide, $C_9H_{19}NO$, which belongs to a series of pharmaceutical compounds derived from dipropylacetic acid, crystallizes in the orthorhombic space group $Pna2_1$, $a=15.498$ (3), $b=14.163$ (2), $c=4.8505$ (5) Å, $Z=4$. The dipropyl part is planar and fully extended to a total length of 7.568 Å. The molecules are linked by a hydrogen bond N–H...O of length 2.817 Å, which lies approximately along the c direction.

Introduction. Ce travail fait partie d'une étude structurale systématique des dérivés de l'acide dipropylacétique présentant des activités pharmacologiques variées (Cohen-Addad, Lajzéróvicz, Benoit-Guyod & Boucherle, 1972; Cohen-Addad, 1973).

Ces dérivés sont synthétisés au laboratoire de Chimie et Toxicologie de l'Université de Grenoble par J. L. Benoit-Guyod.

Le *N*-méthyl dipropylacétamide est un anticonvulsif.

Tableau 1. *Coordonnées cristallographiques des atomes lourds et composantes de vibration thermique le long des trois axes principaux en (Å)*

	x	y	z	a	b	c
C(0)	0,1160 (5)	0,3006 (4)	0,1511 (24)	0,248 (5)	0,343 (7)	0,387 (8)
C(1)	0,1607 (3)	0,2130 (4)	0,0646 (16)	0,258 (4)	0,290 (6)	0,328 (6)
C(2)	0,1161 (3)	0,1233 (3)	0,1686 (14)	0,245 (4)	0,274 (6)	0,288 (6)
C(3)	0,1601 (2)	0,0334 (3)	0,0747 (9)	0,213 (4)	0,234 (4)	0,256 (4)
C(4)	0,1123 (3)	–0,0546 (2)	0,1715 (14)	0,235 (4)	0,261 (4)	0,285 (5)
C(5)	0,1523 (4)	–0,1476 (4)	0,0654 (16)	0,256 (6)	0,316 (6)	0,328 (8)
C(6)	0,1044 (6)	–0,2335 (4)	0,1554 (2)	0,275 (6)	0,355 (8)	0,386 (9)
C(7)	0,2521 (2)	0,0315 (3)	0,1770 (10)	0,192 (5)	0,249 (4)	0,252 (5)
O	0,2689 (2)	0,0316 (3)	0,4271	0,185 (4)	0,283 (3)	0,347 (3)
N	0,3140 (2)	0,0312 (2)	–0,0100 (9)	0,202 (4)	0,228 (3)	0,290 (3)
C(8)	0,4044 (2)	0,0296 (4)	0,0632 (13)	0,230 (4)	0,290 (6)	0,319 (5)

vant. Des aiguilles incolores cristallisent dans le système orthorhombique, groupe d'espace $Pna2_1$. Les paramètres de maille indiqués ci-dessus, ont été affinés avec des mesures effectuées au diffractomètre automatique. Les intensités de 728 réflexions significatives ont été collectées selon une méthode à cinq points avec le diffractomètre à quatre cercles Siemens (Cu $K\alpha$) de l'Institut Laue Langevin de Grenoble.

Le caractère non-centrosymétrique du cristal a été déterminé par l'observation d'un signal de second harmonique optique généré par le composé recevant un faisceau laser (Kurtz & Perry, 1968).

Résultats. Les phases de 141 réflexions ont été déterminées par une méthode directe de multisolutions à l'aide du programme *MULTAN* (Germain, Main & Woolfson, 1971).

Des sections de Fourier réalisées à partir de la solution ayant la meilleure figure de mérite (Germain *et al.*, 1971) ont conduit à une structure correcte dont les paramètres ont été affinés par une méthode de moindres carrés avec le programme *ORFLS* (Busing & Levy, 1959). Un affinement final a été effectué dans les conditions suivantes:

- 728 réflexions non nulles.
- paramètres de position et facteurs de température anisotropes de la forme $\exp[-(h^2\beta_{11} + k^2\beta_{22} + l^2\beta_{33} + 2hk\beta_{12} + 2hl\beta_{13} + 2kl\beta_{23})]$, variables pour les atomes lourds.
- paramètres de position variables et facteurs de température isotropes de 6 \AA^2 maintenus fixes pour les atomes d'hydrogène.

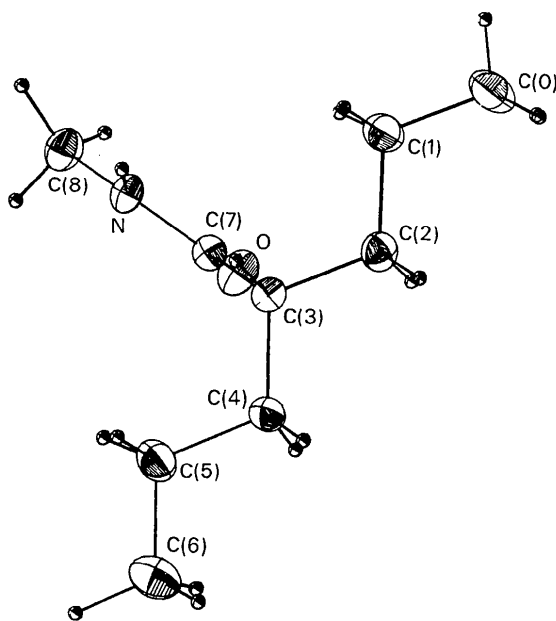


Fig. 1. Structure du *N*-méthyl dipropylacétamide: représentation de la molécule et des ellipsoïdes de vibration thermique avec une probabilité de 50 %.

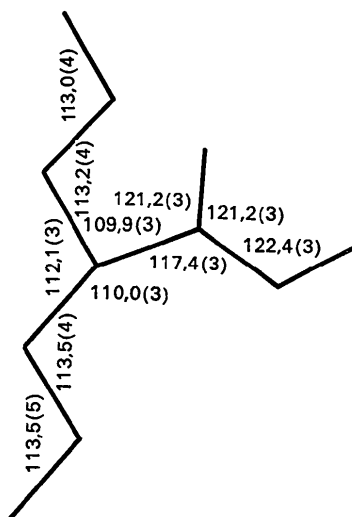
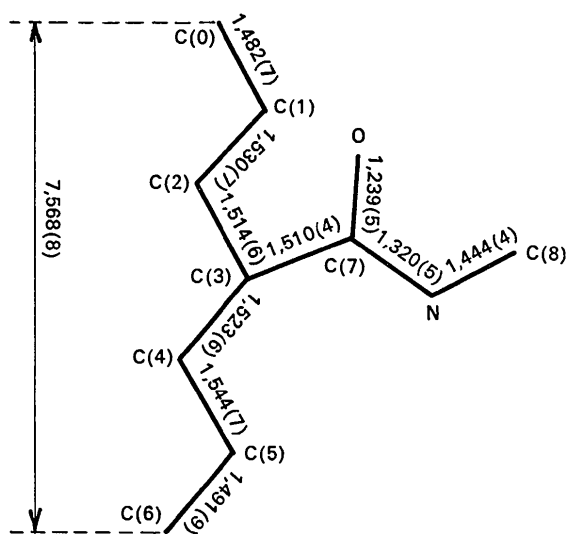


Fig. 2. Structure du *N*-méthyl dipropylacétamide: distances interatomiques (Å) et angles ($^{\circ}$).

- loi de pondération pour la méthode à cinq points (Troughton, 1969).

Les indices de reliabilité valent:

- $R_{\text{pondéré}} = 0,074$

- $R_{\text{non pondéré}} = 0,053$

Les coordonnées cristallographiques des atomes lourds et leurs composantes de vibration thermique selon les trois axes principaux, sont données dans le Tableau 1; les coordonnées cristallographiques des atomes d'hydrogène dans le Tableau 2 et les écarts standards, entre parenthèses.*

* La table des facteurs de structure observés et calculés a été déposée à la National Lending Library, Angleterre, comme Publication Supplémentaire No. SUP 30056 et peut être obtenue à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

La Fig. 1 représente la molécule et les ellipsoïdes de vibration thermique avec une probabilité de 50% tracées avec le programme *ORTEP* (Johnson, 1965). Sur la Fig. 2, sont reportées les distances interatomiques et les angles; les écarts standards sont indiqués entre parenthèses.

Tableau 2. *Coordonnées cristallographiques des atomes d'hydrogène*

	x	y	z
H(1)	0,107 (3)	0,307 (3)	0,366 (11)
H(2)	0,048 (3)	0,308 (3)	0,060 (10)
H(3)	0,151 (3)	0,349 (3)	0,095 (11)
H(4)	0,218 (3)	0,204 (3)	0,121 (11)
H(5)	0,157 (3)	0,211 (4)	-0,180 (12)
H(6)	0,114 (3)	0,118 (3)	0,367 (13)
H(7)	0,054 (3)	0,126 (3)	0,096 (11)
H(8)	0,163 (3)	0,041 (4)	-0,138 (12)
H(9)	0,108 (3)	-0,066 (3)	0,361 (13)
H(10)	0,054 (3)	-0,054 (3)	0,098 (12)
H(11)	0,215 (3)	-0,159 (4)	0,102 (11)
H(12)	0,148 (3)	-0,150 (4)	-0,173 (12)
H(13)	0,039 (3)	-0,228 (3)	0,071 (11)
H(14)	0,102 (3)	-0,220 (4)	0,339 (11)
H(15)	0,137 (3)	-0,301 (3)	0,103 (12)
H(16)	0,298 (3)	0,047 (3)	-0,181 (13)
H(17)	0,435 (3)	0,054 (3)	-0,128 (12)
H(18)	0,414 (3)	-0,034 (3)	0,068 (10)
H(19)	0,414 (3)	0,063 (3)	0,224 (11)

Discussion. Une distance intermoléculaire N-O de 2,817 Å et l'observation d'une bande d'absorption très intense à 3300 cm⁻¹ caractéristique de la vibration de valence du groupement N-H lié, montrent l'existence d'une liaison hydrogène N-H...O. Les molécules s'enchaînent d'une maille élémentaire à l'autre selon cette liaison, dont la direction est proche de l'axe *c*.

Les atomes de la molécule se répartissent en deux plans:

- Le plan P_1 de la chaîne centrale (trois atomes de carbone, atomes d'azote et d'oxygène).
- Le plan P_2 du reste dipropyle (sept atomes de carbone).

Ces deux plans font un angle de 89,6°. Les deux groupements propyles s'orientent symétriquement par rapport au plan P_2 en formant une chaîne plane complètement étendue de longueur totale 7,568 Å.

Ces caractéristiques structurales et ce mode d'enchaînement intermoléculaire s'observent dans tous les composés de la série déjà étudiés, quelle que soit leur activité pharmacologique.

Nous remercions vivement Mme J. Lajzerowicz qui nous a aidé avec compétence tout au long de ce travail, M. Thomas pour sa collaboration technique, J. L. Benoit-Guyod qui a synthétisé le composé ainsi que J. Jerphagnon du Centre National d'Etudes des Télécommunications, Paris, qui a bien voulu effectuer les mesures optiques dans son laboratoire.

Références

- BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1959). *ORFLS*. Report ORNL 59-4-37, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- COHEN-ADDAD, C. (1973). *Acta Cryst.* B29, 157-161.
- COHEN-ADDAD, C., LAJZEROWICZ, J., BENOIT-GUYOD, J. L. & BOUCHERLE, A. (1972). *Chim. Ther.* 7, 384-387.
- GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* A27, 368-376.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- KURTZ, S. K. & PERRY, T. T. (1968). *J. Appl. Phys.* 39, 3798-3813.
- TROUGHTON, P. G. H. (1969). Ph. D. Thesis, Imperial College, London.

Acta Cryst. (1973). B29, 1151

Trichloro-(π -*trans*-pent-2-enylammonium)platine(II)

BY R. SPAGNA, G. UGHETTO AND L. ZAMBONELLI

Laboratorio di Strutturistica Chimica 'Giordano Giacomello', C.N.R., Città Universitaria, 00100 Roma, Italy

(Received 26 January 1973; accepted 29 January 1973)

Abstract. PtCl₃(C₅H₁₂N), monoclinic, $P2_1/c$, $a = 11.215(3)$, $b = 8.729(2)$, $c = 10.259(3)$ Å, $\beta = 90.0(1)^\circ$, $D_m = 2.56(1)$ g cm⁻³, $Z = 4$, $D_c = 2.563$ g cm⁻³. The zwitterionic complex was prepared by method (1) of Denning & Venanzi, *J. Chem. Soc.* (1963), pp. 3241-3247. The ligand *trans*-pent-2-enylamine hydrochloride was prepared from *trans*-bromopent-2-ene [Bouis (1928). *Ann. Chim.* 9, 402-465] by the Gabriel phthalimide method [Sheenan & Bolhofer (1950). *J. Amer. Chem. Soc.* 72, 2786-2788]. The *N*-pent-2-enyl-*N'*-phen-

ylthiourea derivative, recrystallized from dilute alcohol, melted at 101.5-102.5°C. (Found: C, 65.62; H, 7.41; N, 12.93; S, 14.74%. Calc. for C₁₂H₁₆N₂S: C, 65.41; H, 7.31; N, 12.70; S, 14.55%.)

Introduction. Cell constants were determined by a least-squares refinement of 35 2θ values measured on $h0l$ and $0kl$ Weissenberg photographs collected at $\sim 23^\circ\text{C}$, using Cu $K\alpha$ radiation ($\lambda = 1.5418$ Å). Systematic absences were observed for $h0l$ reflexions with l odd and