

*Acta Cryst.* (1975). B31, 1495***trans*-Cinnamyl-1 Diphénylméthyl-4 Pipérazine (Cinnarizine)**

PAR Y. MOUILLÉ, M. COTRAIT, M. HOSPITAL ET P. MARSAU

*Laboratoire de Cristallographie et Physique Cristalline, 351 cours de la Libération, 33405-Talence, France**(Reçu le 27 novembre 1974, accepté le 14 janvier 1975)*

**Abstract.** C<sub>26</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>, monoclinic, *P*2<sub>1</sub>/*c*, *Z*=4, *a*=20.629 (8), *b*=5.987 (3), *c*=17.530 (5) Å, β=104.83 (7)°. *R*=0.046, 2928 reflexions.

**Introduction.** L'étude des conformations cristallines de molécules de type 'dibenzyle' et présentant une activité antihistaminique se poursuit au laboratoire par les résultats concernant la cinnarizine qui est un produit couramment utilisé en thérapeutique.

Les cristaux ont été obtenus par lente évaporation d'une solution dans l'acétone. Les dimensions de la maille et les intensités des réflexions ont été mesurées sur diffractomètre Siemens. La multisolution a été appliquée sur 279 valeurs de *E* supérieures à 1,60. La solution présentant la meilleure figure de mérite parmi les huit possibles a fourni une carte de densité faisant apparaître 28 atomes localisables sans ambiguïté. Les

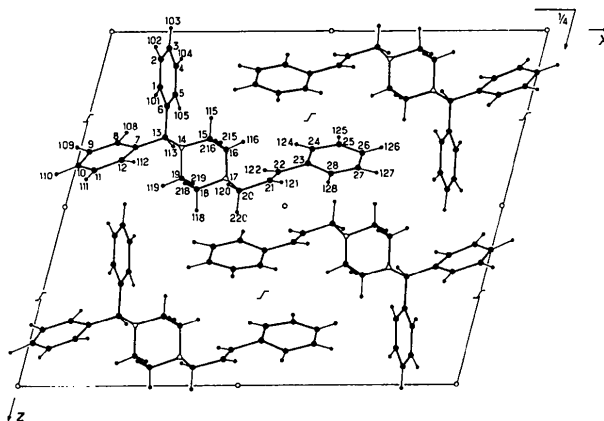
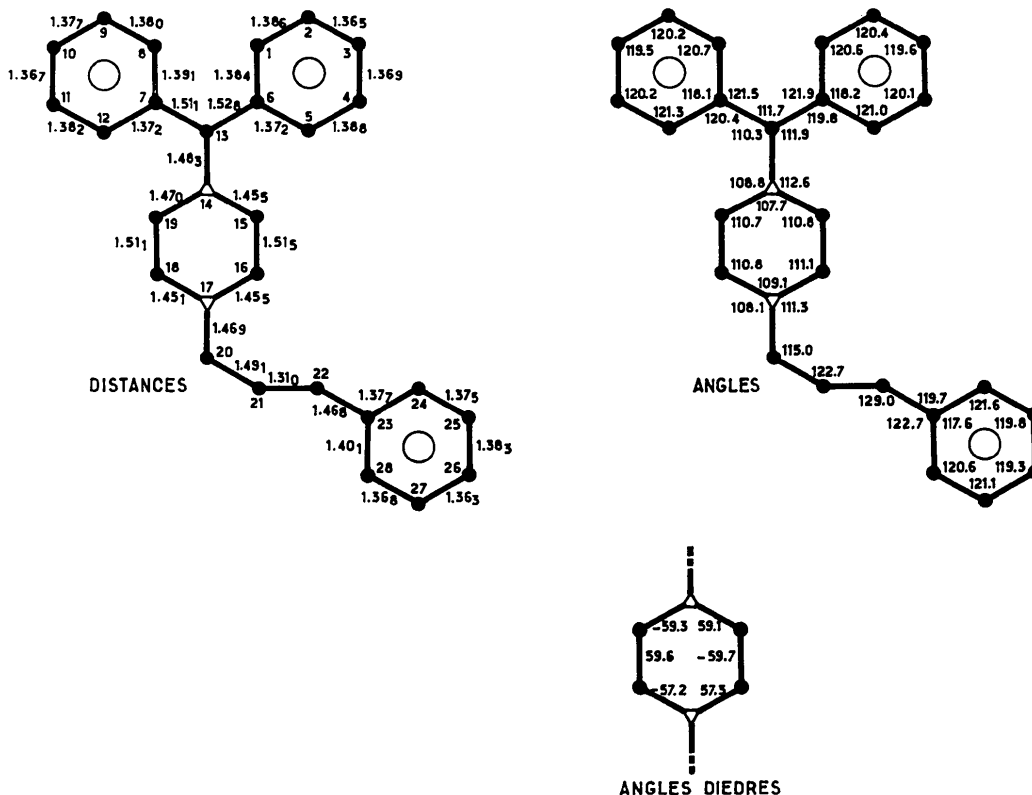
Fig. 2. Projection de la structure suivant l'axe *b*.

Fig. 1. Distances (Å) et angles (°) interatomiques et dièdres.

Tableau 1. Paramètres atomiques

Les valeurs, sauf les  $B$  isotropes, ont été multipliées par  $10^4$ 

	$x$	$y$	$z$	$B_{11}$	$B_{22}$	$B_{33}$	$B_{12}$	$B_{13}$	$B_{23}$
C(1)	1430 (2)	7682 (5)	1596 (2)	40 (1)	314 (11)	32 (1)	-28 (6)	2 (2)	4 (6)
C(2)	1282 (2)	8012 (6)	787 (2)	42 (1)	396 (13)	34 (1)	-6 (6)	3 (2)	-30 (7)
C(3)	1397 (2)	10036 (6)	488 (2)	34 (1)	483 (14)	32 (1)	59 (6)	13 (2)	40 (7)
C(4)	1669 (2)	11733 (6)	991 (2)	39 (1)	403 (13)	44 (2)	13 (6)	19 (2)	85 (7)
C(5)	1811 (2)	11413 (5)	1801 (2)	28 (1)	298 (11)	39 (1)	-20 (5)	7 (2)	20 (6)
C(6)	1701 (1)	9389 (4)	2112 (2)	18 (1)	259 (9)	31 (1)	7 (4)	-1 (1)	3 (5)
C(7)	1207 (1)	8990 (5)	3277 (2)	18 (1)	279 (9)	26 (1)	18 (4)	-4 (1)	15 (5)
C(8)	805 (1)	7094 (5)	3152 (2)	23 (1)	341 (11)	43 (1)	-6 (5)	7 (2)	-9 (6)
C(9)	223 (2)	7021 (6)	3402 (2)	21 (1)	470 (14)	50 (2)	-34 (6)	2 (2)	49 (8)
C(10)	37 (2)	8821 (6)	3787 (2)	22 (1)	557 (16)	45 (2)	52 (6)	15 (2)	69 (8)
C(11)	430 (2)	10693 (6)	3912 (2)	32 (1)	463 (14)	48 (2)	61 (6)	23 (2)	2 (7)
C(12)	1006 (1)	10780 (5)	3649 (2)	26 (1)	319 (11)	42 (1)	9 (5)	14 (2)	-3 (6)
C(13)	1845 (1)	9106 (4)	3006 (2)	20 (1)	234 (9)	29 (1)	-7 (4)	-1 (1)	-12 (5)
N(14)	2270 (1)	7125 (4)	3288 (1)	17 (1)	300 (8)	25 (1)	12 (3)	2 (1)	2 (4)
C(15)	2881 (1)	7107 (5)	3018 (2)	21 (1)	345 (11)	26 (1)	7 (5)	7 (1)	15 (5)
C(16)	3303 (1)	5075 (5)	3333 (2)	20 (1)	343 (11)	27 (1)	11 (5)	5 (1)	3 (5)
N(17)	3489 (1)	5052 (4)	4192 (1)	19 (1)	328 (8)	26 (1)	22 (4)	0 (1)	9 (4)
C(18)	2886 (1)	5114 (5)	4472 (2)	21 (1)	363 (11)	27 (1)	6 (5)	4 (1)	20 (5)
C(19)	2467 (1)	7144 (5)	4155 (2)	21 (1)	362 (11)	25 (1)	9 (5)	9 (1)	7 (5)
C(20)	3863 (1)	3015 (5)	4500 (2)	21 (1)	360 (11)	37 (1)	23 (5)	2 (2)	23 (6)
C(21)	4492 (1)	2658 (5)	4245 (2)	20 (1)	347 (11)	35 (1)	7 (5)	-2 (2)	26 (6)
C(22)	4641 (1)	745 (5)	3970 (2)	21 (1)	362 (12)	37 (1)	5 (5)	-2 (2)	20 (6)
C(23)	5262 (1)	73 (5)	3771 (2)	22 (1)	350 (11)	31 (1)	22 (5)	0 (2)	31 (6)
C(24)	5275 (2)	-1865 (6)	3351 (2)	29 (1)	413 (13)	37 (1)	14 (6)	3 (2)	-10 (7)
C(25)	5856 (2)	-2627 (6)	3192 (2)	42 (1)	485 (15)	37 (1)	59 (7)	19 (2)	-29 (7)
C(26)	6442 (2)	-1410 (7)	3446 (2)	31 (1)	683 (19)	33 (1)	57 (7)	21 (2)	25 (8)
C(27)	6436 (2)	525 (7)	3853 (2)	27 (1)	593 (17)	40 (1)	-14 (6)	16 (2)	-7 (8)
C(28)	5861 (2)	1282 (6)	4017 (2)	25 (1)	402 (13)	43 (1)	5 (5)	9 (2)	-4 (7)

28 atomes d'hydrogène ont été trouvés sur des cartes de fonction différence et l'affinement a porté sur les positions atomiques, les coefficients d'agitation thermique anisotropes pour les atomes lourds et isotropes pour les atomes d'hydrogène. Ces résultats sont reportés sur le Tableau 1.\*

**Discussion.** Les distances interatomiques et les angles de valence sont fournis par la Fig. 1 et sont conformes à ceux que l'on pouvait prévoir à partir de la formule. Les cycles aromatiques sont plans et la délocalisation des électrons  $\pi$  est régulière. Le cycle pipérazinique a une forme chaise classique et la double liaison de la chaîne C(21)-C(22): 1,31 Å entraîne le raccourcissement des deux simples liaisons C-C adjacentes. Les angles de valence proches de 120° pour les cycles aromatiques sont voisins de 110° pour le cycle chaise.

L'angle des deux plans moyens des cycles 'dibenzyle' est de 114° alors qu'il était de 107,6° dans la structure du chlorhydrate de diphénylpyraline (Precigoux, Barrans, Busetta & Marsau, 1975). La cohésion du cristal est uniquement assurée par des liaisons de van der Waals. La distance la plus courte observée entre deux molécules voisines est de 3,41 Å C(16)···C(26). La disposition relative des molécules est représentée sur la Fig. 2.

Tableau 1 (suite)

	$x$	$y$	$z$	$B$
H(101)	1384 (14)	6229 (48)	1803 (17)	6,1
H(102)	1078 (15)	6688 (51)	434 (18)	6,9
H(103)	1311 (16)	10196 (55)	-88 (20)	7,7
H(104)	1734 (16)	13371 (54)	800 (20)	7,8
H(105)	1988 (14)	12697 (48)	2162 (17)	5,8
H(108)	954 (13)	5805 (44)	2890 (16)	5,1
H(109)	-49 (16)	5613 (53)	3307 (19)	7,0
H(110)	-388 (15)	8750 (51)	4012 (18)	6,9
H(111)	298 (18)	11951 (59)	4189 (21)	8,8
H(112)	1288 (13)	12056 (43)	3704 (15)	4,7
H(113)	2096 (11)	10606 (36)	3245 (13)	2,6
H(115)	2772 (12)	7040 (41)	2441 (15)	4,0
H(215)	3150 (12)	8533 (39)	3187 (14)	3,8
H(116)	3689 (11)	5112 (38)	3137 (13)	3,2
H(216)	3012 (12)	3616 (41)	3124 (14)	4,0
H(118)	3004 (12)	5192 (41)	5082 (14)	3,8
H(218)	2583 (13)	3652 (44)	4297 (16)	4,9
H(119)	2097 (12)	7194 (40)	4373 (14)	3,9
H(219)	2777 (13)	8660 (41)	4325 (15)	4,3
H(120)	3575 (11)	1560 (38)	4341 (13)	3,4
H(220)	3927 (15)	3089 (50)	5108 (19)	6,6
H(121)	4787 (12)	3906 (40)	4291 (14)	3,9
H(122)	4325 (13)	-556 (44)	3943 (16)	5,1
H(124)	4871 (15)	-2899 (49)	3198 (17)	6,2
H(125)	5824 (13)	-4036 (45)	2962 (16)	5,3
H(126)	6848 (18)	-1942 (58)	3338 (21)	8,7
H(127)	6883 (17)	1595 (57)	3999 (21)	8,6
H(128)	5851 (15)	2774 (50)	4286 (18)	6,2

## Référence

PRECIGOUX, G., BARRANS, Y., BUSETTA, B. & MARS AU, P. (1975). *Acta Cryst.* B31, 1497-1499.

\* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 30872: 29 pp., 1 microfiche). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.