



MULTAN (Germain, Main & Woolfson, 1971). Les atomes d'hydrogène ont été localisés sur une série de Fourier différence et introduits dans l'affinement avec un facteur de température équivalent à celui de l'atome porteur. Les divers paramètres de la structure ont été affinés par la méthode des moindres carrés (matrice complète) en minimisant l'expression:  $\sum w(F_o - F_c)$ , jusqu'à une valeur finale du facteur résiduel de 0,059.\* Les facteurs de diffusion atomique de Doyle & Turner (1968) pour les atomes de carbone, d'azote et d'oxygène, de Stewart, Davidson & Simpson (1965) pour les atomes d'hydrogène, ont été utilisés.

Les coordonnées atomiques et les facteurs de température sont rassemblés dans les Tableaux 2 et 3.

### Discussion

La Fig. 1 représente la molécule vue en perspective et donne la numérotation des atomes. Sur la Fig. 2 sont reportés les distances interatomiques, les angles de valence et les angles de torsion endocycliques.

Par rapport au pont méthylénique C(7)–C(8)–C(9), les atomes d'hydrogène reliés à C(6) et C(11) sont respectivement en position *cis* et *trans*, et le doublet de l'atome d'azote N(16) en position *cis*. Cela entraîne une jonction *trans* des cycles C et D.

Une forte conjugaison existe entre le doublet de l'atome d'azote N(1) et la fonction cétone. Ce fait se traduit d'une part, par la planéité des atomes N(1), C(2), C(6) et C(10) (Tableau 4), leur plan moyen faisant un angle de 6° avec le plan de la cétone N(1)–C(2)–O(18)–C(3) et d'autre part, par le raccourcisse-

ment de la liaison N(1)–C(2) (1,353 Å) et l'allongement de la liaison C(2)–O(18) (1,236 Å).

Tableau 3. Coordonnées ( $\times 10^3$ ) et facteurs de température isotropes des atomes d'hydrogène

	x	y	z	B
H(3A)	618	825	163	4,4
H(3B)	532	790	232	4,4
H(4A)	550	554	138	5,0
H(4B)	517	648	46	5,0
H(5A)	385	595	187	4,5
H(5B)	370	514	80	4,5
H(6)	325	747	3	3,6
H(7)	188	656	79	3,8
H(8A)	72	889	60	4,2
H(8B)	150	882	-19	4,2
H(9)	159	1164	38	3,7
H(10A)	311	1073	-20	4,2
H(10B)	353	1175	74	4,2
H(11)	267	1110	218	3,1
H(12A)	51	1222	171	4,6
H(12B)	155	1353	175	4,6
H(13A)	70	1362	322	4,9
H(13B)	187	1302	349	4,9
H(14A)	3	1084	327	4,8
H(14B)	83	1117	423	4,8
H(17A)	286	806	245	3,6
H(17B)	182	691	243	3,6
H(15A)	224	990	368	4,3
H(15B)	124	852	362	4,3

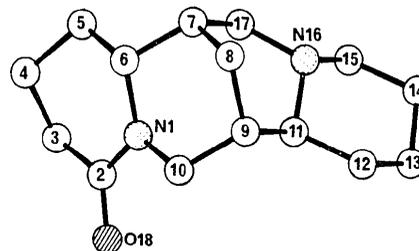


Fig. 1. Vue en perspective de la lupanine.

\* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 31918: 14 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.

Tableau 2. Paramètres atomiques des atomes non-hydrogène ( $\times 10^4$ )

Les facteurs d'agitation thermique anisotrope sont de la forme:  $T = \exp(-\sum_i \sum_j \beta_{ij} h_i h_j)$ . Les écarts-type sont indiqués entre parenthèses.

	x	y	z	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
N(1)	3757 (2)	9298 (2)	948 (1)	60 (1)	125 (3)	48 (1)	-1 (2)	16 (1)	6 (2)
C(2)	4782 (2)	9552 (3)	1267 (2)	65 (2)	172 (5)	42 (1)	-8 (2)	21 (1)	-11 (2)
C(3)	5418 (2)	8041 (3)	1636 (2)	57 (2)	230 (6)	56 (1)	14 (3)	15 (1)	8 (2)
C(4)	5090 (2)	6401 (4)	1100 (2)	83 (2)	206 (6)	71 (2)	38 (3)	26 (2)	5 (3)
C(5)	3936 (2)	6121 (3)	1169 (2)	80 (2)	144 (5)	72 (2)	17 (2)	21 (2)	-8 (2)
C(6)	3281 (2)	7597 (3)	725 (2)	67 (2)	150 (4)	44 (1)	-1 (2)	13 (1)	-5 (2)
C(7)	2159 (2)	7599 (3)	1010 (2)	65 (2)	139 (4)	53 (1)	-10 (2)	4 (1)	-19 (2)
C(8)	1510 (2)	8992 (3)	457 (2)	72 (2)	237 (6)	41 (1)	6 (3)	1 (1)	-15 (2)
C(9)	2013 (2)	10685 (3)	774 (2)	64 (2)	158 (4)	47 (1)	20 (2)	3 (1)	14 (2)
C(10)	3136 (2)	10739 (3)	516 (2)	78 (2)	153 (4)	49 (1)	8 (3)	15 (1)	23 (2)
C(11)	1955 (2)	10956 (3)	1879 (2)	46 (1)	134 (4)	51 (1)	2 (2)	2 (1)	4 (2)
C(12)	1273 (2)	12497 (3)	2063 (2)	77 (2)	162 (5)	70 (2)	23 (3)	16 (1)	2 (2)
C(13)	1182 (2)	12761 (4)	3136 (2)	67 (2)	225 (6)	80 (2)	11 (3)	18 (2)	-39 (3)
C(14)	805 (2)	11119 (4)	3568 (2)	65 (2)	258 (6)	56 (2)	0 (3)	19 (1)	-24 (2)
C(15)	1504 (2)	9633 (3)	3358 (2)	62 (2)	219 (5)	46 (1)	-2 (3)	12 (1)	10 (2)
N(16)	1529 (1)	9416 (2)	2308 (1)	54 (1)	136 (3)	45 (1)	1 (2)	8 (1)	4 (2)
C(17)	2139 (2)	7897 (3)	2107 (2)	63 (2)	146 (4)	52 (1)	-4 (2)	13 (1)	9 (2)
O(18)	5173 (2)	11006 (2)	1281 (1)	86 (2)	199 (4)	70 (1)	-35 (2)	17 (1)	-11 (2)

