

Table 6. Some least-squares planes through the atoms marked with an asterisk

The atomic deviations are in Å.

Ring A	(1)	(2)	Ring B	(1)	(2)	Ring C	(1)	(2)	Ring D	(1)	(2)
C(7a)*	0.000 (5)	-0.004 (5)	N(6)*	0.007 (4)	-0.044 (3)	C(4a)*	0.122 (5)	0.051 (4)	C(1)*	-0.014 (6)	0.167 (3)
C(8)*	-0.011 (5)	0.006 (5)	C(7)*	0.002 (5)	0.046 (5)	C(5)*	-0.203 (5)	-0.222 (5)	C(2)*	0.108 (9)	-0.349 (6)
C(9)*	0.011 (6)	0.001 (6)	C(7a)*	-0.010 (5)	-0.020 (4)	N(6)*	0.055 (4)	0.227 (3)	C(3)*	-0.135 (9)	0.292 (6)
C(10)*	-0.001 (6)	-0.011 (6)	C(11a)*	0.010 (5)	-0.007 (5)	N(13)*	0.186 (4)	-0.055 (4)	C(4)*	0.066 (6)	-0.064 (6)
C(11)*	-0.010 (6)	0.013 (6)	C(12)*	-0.001 (5)	0.012 (5)	C(14)*	-0.266 (6)	-0.109 (5)	C(4a)*	0.018 (5)	-0.084 (5)
C(11a)*	0.010 (5)	-0.005 (5)	N(13)*	-0.007 (4)	0.013 (4)	C(14a)*	0.106 (5)	0.108 (4)	C(14a)*	-0.043 (5)	0.038 (5)
Cl	-0.055 (2)	0.002 (1)	O(16)	0.006 (4)	0.190 (4)				O(15)	-1.236 (4)	-1.253 (3)
			O(17)	-0.029 (4)	-0.011 (4)						

The geometries of the epoxide rings, as far as their areas are concerned, agree with those reported elsewhere (Foces-Foces, Cano & García-Blanco, 1977a). In the present work, $A_1 = 0.915$ and $A_2 = 0.920 \text{ \AA}^2$.

Some least-squares planes are given in Table 6. The Cl atoms do not deviate, within the limits of error, from their respective benzene rings [0.055 for molecule (1) and 0.002 Å for molecule (2)]. The atoms in the diazaquinone rings are coplanar, including the attached O atoms.

The molecules considered as strips can be described with reference to intrinsic orthonormal axes $\{T, N, B\}$ (Foces-Foces, Cano & García-Blanco, 1977b), with the unit normal taken as that to the aromatic rings on each molecule and B towards the Cl atom in the aromatic plane. The parameters θ reflect the angular separation of the normal characterizing each ring, to give an idea of the overall twist, about 17° from end to end in both molecules (Table 5).

No significant intermolecular distances $< 4 \text{ \AA}$ were found.

We thank Dr Lora-Tamayo and co-workers for providing the material and the Centro de Procesos de

Datos del Ministerio de Educación y Ciencia, Madrid, for computer facilities.

References

- ABRAHAM, S. C. & KEVE, E. T. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 157–165.
- BUCOURT, R. & HAITNAUT, D. (1965). *Bull. Soc. Chim. Fr.* pp. 1366–1378.
- CANO, F. H., FOCES-FOCES, C. & GARCÍA-BLANCO, S. (1977). *Tetrahedron*, **33**, 797–802.
- FOCES-FOCES, C., CANO, F. H. & GARCÍA-BLANCO, S. (1977a). *Acta Cryst.* **B33**, 3521–3524.
- FOCES-FOCES, C., CANO, F. H. & GARCÍA-BLANCO, S. (1977b). *Acta Cryst.* **B33**, 3957–3959.
- FOCES-FOCES, C., CANO, F. H. & GARCÍA-BLANCO, S. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 991–993.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.
- MAIN, P., LESSINGER, L., WOLFFSON, M. M., GERMAIN, G. & DECLERCQ, J. P. (1977). *MULTAN 77. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. of York, England, and Louvain, Belgium.
- SCHWARZENBACH, D. (1972). *ORABS* program, Zürich.
- WINKLER, F. K. & DUNITZ, J. D. (1971). *J. Mol. Biol.* **59**, 169–182.

Acta Cryst. (1979). **B35**, 1501–1504

Structure de l'Isopropyl-1 {[[(Chloro-3 phénylthio)-4 pyridyl-3]sulfonyl]-3 Urée

PAR L. DUPONT, O. DIDEBERG ET M. VERMEIRE

Laboratoire de Cristallographie, Institut de Physique B5, Université de Liège au Sart Tilman, B-4000 Liège, Belgique

(Reçu le 13 septembre 1978, accepté le 21 février 1979)

Abstract. C₁₅H₁₆ClN₂O₃S₂, monoclinic, $P2_1/a$, $a = 21.079 (5)$, $b = 8.813 (3)$, $c = 10.008 (3) \text{ \AA}$, $\beta = 106.18 (2)^\circ$, $V = 1785.5 \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $D_x = 1.435 \text{ Mg m}^{-3}$, $\mu(\text{Cu } K\alpha) = 4.155 \text{ mm}^{-1}$. The structure was refined to an R of 0.055 for 2430 unique diffractometer data. Comparison with the molecules of torasemide confirms that there is no correlation between the conformation of the $-\text{SO}_2-\text{NH}-\text{CO}-$ group and the de-

protonation of N atoms which occurs in three of the four molecules of torasemide. The conformation is not determined by the stacking of the molecules in the crystal.

Introduction. Dans le cadre de l'étude de composés diurétiques ayant des actions supposées analogues, nous avons récemment publié les structures de deux

variétés cristallographiques (appelées I et II) de la torasémide (Dupont, Lamotte, Campsteyn & Vermeire, 1978; Dupont, Campsteyn, Lamotte & Vermeire, 1978). On a ainsi observé que la torasémide pouvait présenter au moins trois conformations différentes pour le groupement $-\text{SO}_2-\text{NH}-\text{CO}-\text{NH}-$. Dans la structure de la torasémide I, il y a deux molécules indépendantes dans l'unité asymétrique; ces deux molécules appelées TIA et TIB ont deux conformations différentes et sont liées entre elles par des contacts courts N(pyridyle)-N(pyridyle) dont l'interprétation a conduit à l'hypothèse d'une déprotonation de l'atome N du groupement $-\text{SO}_2-\text{NH}-\text{CO}-$ de TIB au profit de l'azote pyridylique de cette même molécule. Cela se traduit par des différences significatives au niveau des longueurs et des angles de liaisons entre TIA et TIB. Dans la structure de la torasémide II, les deux molécules indépendantes TIIA et TIIB ont une même conformation, mais différente des deux précédentes. Ici, le mode de liaison intermoléculaire demande une déprotonation de $-\text{SO}_2-\text{NH}-\text{CO}-$ de chacune des deux molécules et on observe effectivement les mêmes distances et les mêmes angles dans TIIA et TIIB, avec des valeurs proches de celles calculées pour TIB.

La torasémide est un composé diurétique qui agit à des concentrations plus faibles que les diurétiques connus antérieurement, et avec une toxicité faible, même à forte dose. De simples substitutions en certains points de la molécule de torasémide conduisent cependant à des composés inactifs. Ainsi le remplacement de l'azote qui joint le cycle benzénique au cycle pyridyle, par un atome de soufre ou par un atome d'oxygène, supprime l'activité du composé. Il était intéressant de comparer la conformation et les autres paramètres géométriques d'un tel composé inactif avec ceux des diverses conformations de la torasémide. Le présent travail a été effectué dans ce but: il s'agit de la détermination de la structure cristalline et moléculaire de l'isopropyl-1 {[(chloro-3 phénylthio)-4 pyridyl-3]sulfonyl}-3 urée (Fig. 1). Il y a une seconde différence entre cette molécule et la torasémide: le méthylbenzène de cette dernière est maintenant un chlorobenzène, mais

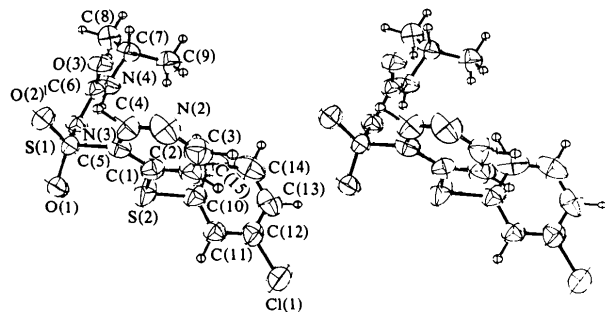


Fig. 1. Vue stéréoscopique de $\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{ClN}_3\text{O}_3\text{S}_2$ montrant la numérotation des atomes.

cette substitution n'a pas d'influence sur l'activité et l'étude cristallographique préliminaire de l'isopropyl-1 {[(méthyl-3 phénylthio)-4 pyridyl-3]sulfonyl}-3 urée montre qu'il a la même maille et la même symétrie que le dérivé chloré. Ces composés ont été préparés par le Dr Delarge au Laboratoire de Chimie pharmaceutique de l'Université de Liège (Professeur Ch. Lapière). Les cristaux ont été obtenus par évaporation lente d'une solution dans l'éthanol. La structure a été déterminée par méthode directe avec *MULTAN 77* (Main, Lessinger, Woolfson, Germain & Declercq, 1977). L'affinement a été réalisé avec l'approximation des blocs diagonaux jusqu'à une valeur finale du facteur R^* égale à 0,055 pour 2430 réflexions uniques. Les positions des atomes d'hydrogène ont été calculées avec des valeurs standard des distances et des angles de valence; elles ont été introduites dans les calculs des facteurs de structure, mais pas dans l'affinement.

Les coordonnées finales sont données dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons covalentes, respectivement dans les Tableaux 2 et 3. On trouvera les angles de torsion dans le Tableau 4 et les angles entre quelques plans moyens dans le Tableau 5. La Fig. 3* montre une vue stéréoscopique de la molécule étudiée à laquelle on a superposé suivant le

* Les listes des facteurs de structure, des positions atomiques des atomes d'hydrogène et des facteurs d'agitation thermique anisotrope et Fig. 3 ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 34266: 21 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. Coordonnées des atomes non-hydrogène ($\times 10^4$)

	x	y	z
S(1)	2862 (0)	837 (1)	7430 (1)
S(2)	3878 (1)	-1873 (1)	7111 (2)
Cl(1)	6082 (1)	-5324 (2)	8121 (2)
O(1)	2735 (1)	-456 (3)	8176 (3)
O(2)	2574 (1)	2262 (3)	7604 (3)
O(3)	2956 (1)	2510 (2)	4966 (2)
N(2)	4619 (2)	2811 (4)	8852 (3)
N(3)	2627 (1)	323 (3)	5801 (3)
N(4)	2707 (2)	424 (3)	3570 (3)
C(1)	4166 (2)	-55 (4)	7746 (4)
C(2)	4835 (2)	285 (4)	8210 (4)
C(3)	5034 (2)	1693 (5)	8747 (4)
C(4)	3979 (2)	2497 (4)	8400 (4)
C(5)	3723 (2)	1101 (4)	7856 (3)
C(6)	2770 (2)	1176 (4)	4746 (3)
C(7)	2857 (2)	1110 (4)	2347 (4)
C(8)	2272 (2)	930 (5)	1076 (4)
C(9)	3475 (2)	382 (5)	2132 (5)
C(10)	4569 (2)	-2587 (4)	6601 (4)
C(11)	4997 (2)	-3582 (4)	7473 (4)
C(12)	5530 (2)	-4109 (4)	7047 (4)
C(13)	5641 (2)	-3672 (5)	5828 (5)
C(14)	5215 (3)	-2704 (6)	4981 (5)
C(15)	4669 (3)	-2147 (5)	5349 (5)

cycle pyridyle les molécules TIA, TIB et TIIB. Pour ne pas surcharger ce dessin, on n'a pas inclus la molécule TIIA dont la conformation est proche de celle de TIIB (Dupont, Campsteyn, Lamotte & Vermeire, 1978).

Discussion. La comparaison des distances interatomiques et des angles de valence du composé étudié avec leurs valeurs dans la torasémide (Dupont, Lamotte, Campsteyn & Vermeire, 1978; Dupont,

Campsteyn, Lamotte & Vermeire, 1978) et dans la galosémide (Campsteyn, Dupont, Lamotte, Dideberg & Vermeire, 1978) amène quelques conclusions intéressantes. La molécule $C_{15}H_{16}ClN_3O_3S_2$, comme TIA et GB (molécule B de la galosémide) n'a pas son atome N(3) déprotoné au profit de N(2). On peut ainsi déduire quelques effets de cette déprotonation: dans l'anneau pyridyle, il y a raccourcissement systématique de N(2)-C(3), N(2)-C(4), C(1)-C(2) et C(1)-C(5), et allongement de C(2)-C(3) et C(4)-C(5); l'angle en N(2) passe de 116 à 120°; au niveau de la chaîne sulfonylurée, la déprotonation conduit à des distances N(3)-S(1) et N(3)-C(6) plus courtes avec une distance S(1)-C(6), remarquablement constante, égale à 2,52 (0) Å; cette distance vaut par contre 2,66 (1) Å lorsque N(3) conserve son hydrogène. La déprotonation de N(3) semble liée à la fermeture de l'angle O(1)-S(1)-O(2) [116 (1)° au lieu de 119 (1)°] et de l'angle S(1)-N(3)-C(6) [117 (1)° au lieu de 122 (1)°]; la distance C(6)-O(3) est, dans ce cas, significativement plus longue, avec des angles O(3)-C(6)-N(3) plus grands et O(3)-C(6)-N(4) plus petits. Le fait, pour N(3), de garder ou de perdre son hydrogène ne paraît pas avoir d'influence au niveau de C(6)-N(4). L'effet de la déprotonation de N(3) sur les longueurs des liaisons peut être interprété comme le résultat d'une résonance entre différentes formules décrites par la Fig. 2. Ce schéma montre en particulier qu'on devrait observer un allongement des liaisons S-O; c'est effectivement le cas, mais d'une manière peu significative, alors que l'allongement de la liaison C=O, par exemple, est très marqué. Ceci résulte de ce que le schéma proposé est incomplet; il faudrait introduire dans la résonance d'autres formules qui tiendraient compte, notamment, de l'effet de conjugaison dû à l'alignement à des degrés variables de la liaison S(1)-O(2) sur l'anneau pyridyle: l'angle de torsion C(1)-C(5)-S(1)-O(2) est compris entre 170 et 180° pour $C_{15}H_{16}ClN_3O_3S_2$, TIIA, TIIB et GB et entre 140 et 160° pour TIA, TIB et GA. La valeur, petite, de la distance S(2)-O(1) (3,152 Å) est la résultante de cet effet de conjugaison et des répulsions stériques, la

Tableau 2. Longueurs des liaisons (Å)

S(1)-O(2)	1,427 (3)	C(1)-C(2)	1,389 (6)
S(1)-O(1)	1,428 (3)	C(1)-C(5)	1,406 (5)
S(1)-N(3)	1,631 (3)	C(2)-C(3)	1,370 (6)
S(1)-C(5)	1,760 (4)	C(4)-C(5)	1,392 (5)
S(2)-C(1)	1,767 (4)	C(7)-C(8)	1,512 (5)
S(2)-C(10)	1,788 (4)	C(7)-C(9)	1,521 (6)
Cl(1)-C(12)	1,721 (4)	C(10)-C(11)	1,379 (5)
O(3)-C(6)	1,239 (4)	C(10)-C(15)	1,383 (6)
N(2)-C(3)	1,342 (6)	C(11)-C(12)	1,389 (5)
N(2)-C(4)	1,328 (6)	C(12)-C(13)	1,361 (6)
N(3)-C(6)	1,396 (4)	C(13)-C(14)	1,352 (7)
N(4)-C(6)	1,325 (4)	C(14)-C(15)	1,391 (8)
N(4)-C(7)	1,475 (5)		

Tableau 3. Angles des liaisons (°)

O(1)-S(1)-O(2)	119,4 (2)	C(1)-C(5)-S(1)	123,1 (3)
O(2)-S(1)-N(3)	110,2 (1)	O(3)-C(6)-N(4)	125,5 (3)
O(1)-S(1)-N(3)	104,6 (1)	O(3)-C(6)-N(3)	120,1 (3)
O(2)-S(1)-C(5)	107,4 (2)	N(3)-C(6)-N(4)	114,4 (3)
O(1)-S(1)-C(5)	108,1 (2)	N(4)-C(7)-C(8)	110,0 (3)
N(3)-S(1)-C(5)	106,6 (1)	N(4)-C(7)-C(9)	109,5 (3)
C(1)-S(2)-C(10)	101,3 (2)	C(8)-C(7)-C(9)	111,5 (3)
C(3)-N(2)-C(4)	116,4 (4)	S(2)-C(10)-C(11)	119,0 (3)
S(1)-N(3)-C(6)	122,5 (2)	S(2)-C(10)-C(15)	120,1 (3)
C(6)-N(4)-C(7)	122,8 (3)	C(11)-C(10)-C(15)	121,0 (4)
S(2)-C(1)-C(2)	122,1 (3)	C(10)-C(11)-C(12)	117,4 (3)
S(2)-C(1)-C(5)	121,1 (3)	Cl(1)-C(12)-C(11)	118,8 (3)
C(2)-C(1)-C(5)	116,8 (3)	Cl(1)-C(12)-C(13)	118,8 (3)
C(1)-C(2)-C(3)	119,9 (4)	C(11)-C(12)-C(13)	122,5 (4)
C(2)-C(3)-N(2)	124,1 (4)	C(12)-C(13)-C(14)	119,3 (4)
N(2)-C(4)-C(5)	124,3 (4)	C(13)-C(14)-C(15)	120,8 (5)
C(4)-C(5)-C(1)	118,6 (3)	C(10)-C(15)-C(14)	119,1 (5)
C(4)-C(5)-S(1)	118,1 (3)		

Tableau 4. Angles de torsion (°) et écarts-type

O(1)-S(1)-N(3)-C(6)	-169,1 (2)	C(3)-N(2)-C(4)-C(5)	0,9 (4)	C(1)-C(2)-C(3)-N(2)	-0,7 (4)
O(2)-S(1)-N(3)-C(6)	61,5 (2)	S(1)-N(3)-C(6)-O(3)	-15,7 (3)	N(2)-C(4)-C(5)-S(1)	175,2 (3)
C(5)-S(1)-N(3)-C(6)	-54,7 (3)	S(1)-N(3)-C(6)-N(4)	162,4 (3)	N(2)-C(4)-C(5)-C(1)	-1,3 (4)
O(1)-S(1)-C(5)-C(1)	52,7 (3)	C(7)-N(4)-C(6)-O(3)	-0,0 (4)	S(2)-C(10)-C(11)-C(12)	-179,7 (3)
O(1)-S(1)-C(5)-C(4)	-123,5 (3)	C(7)-N(4)-C(6)-N(3)	-178,0 (4)	C(15)-C(10)-C(11)-C(12)	0,5 (5)
O(2)-S(1)-C(5)-C(1)	-177,2 (3)	C(6)-N(4)-C(7)-C(9)	110,6 (4)	S(2)-C(10)-C(15)-C(14)	179,3 (3)
O(2)-S(1)-C(5)-C(4)	6,5 (3)	C(6)-N(4)-C(7)-C(8)	-126,5 (4)	C(11)-C(10)-C(15)-C(14)	-0,9 (4)
N(3)-S(1)-C(5)-C(1)	-59,2 (3)	S(2)-C(1)-C(2)-C(3)	-177,3 (3)	C(10)-C(11)-C(12)-Cl(1)	178,8 (3)
N(3)-S(1)-C(5)-C(4)	124,5 (3)	C(5)-C(1)-C(2)-C(3)	0,3 (5)	C(10)-C(11)-C(12)-C(13)	0,4 (4)
C(10)-S(2)-C(1)-C(2)	-22,8 (3)	S(2)-C(1)-C(5)-S(1)	2,0 (3)	Cl(1)-C(12)-C(13)-C(14)	-179,3 (3)
C(10)-S(2)-C(1)-C(5)	159,6 (3)	S(2)-C(1)-C(5)-C(4)	178,2 (3)	C(11)-C(12)-C(13)-C(14)	-0,9 (4)
C(1)-S(2)-C(10)-C(11)	100,4 (3)	C(2)-C(1)-C(5)-S(1)	-175,6 (3)	C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	0,5 (4)
C(1)-S(2)-C(10)-C(15)	-79,8 (3)	C(2)-C(1)-C(5)-C(4)	0,6 (5)	C(13)-C(14)-C(15)-C(10)	0,4 (4)
C(4)-N(2)-C(3)-C(2)	0,1 (4)				

Tableau 5. *Plans moyens*

(a) Distances atomiques à quelques plans moyens ($\times 10^3 \text{ \AA}$)

Plan I	C(10)	C(11)	C(12)	C(13)	C(14)	C(15)
	-5 (4)	0 (4)	5 (4)	-5 (5)	5 (5)	0 (5)
Plan II	C(1)	C(2)	C(3)	N(2)	C(4)	C(5)
	0 (3)	4 (4)	-4 (4)	-2 (3)	6 (4)	-5 (3)
Plan III	O(3)	C(6)	N(4)	C(7)	N(3)	
	-2 (2)	13 (4)	10 (3)	-10 (4)	-11 (3)	
Plan IV	S(1)	N(3)	C(6)	N(4)	O(3)	
	-105 (1)	145 (3)	33 (3)	-96 (3)	23 (3)	

(b) Angles entre plans ($^\circ$)

I-II	86,2 (5)
I-C(1)S(2)C(10)	79,6 (4)
II-C(1)S(2)C(10)	21,9 (4)
III-IV	6,6 (3)
O(1)S(1)O(2)-C(5)S(1)N(3)	87,8 (3)
C(6)N(4)C(7)-C(7)C(8)C(9)	85,5 (5)

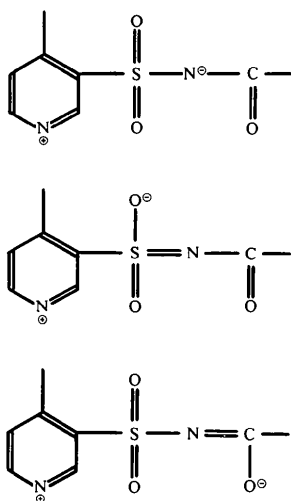


Fig. 2. Formules de résonance possibles pour décrire les effets de la déprotonation de N(3)H dans des molécules du type de la toraséamide.

somme des rayons de van der Waals ($r_s + r_o$) valant 3,3 Å.

Dans la toraséamide et la galoséamide, le contact de van der Waals S(2)—O(1) est remplacé par une liaison hydrogène N(1)H...O(1).

La conformation de $C_{15}H_{16}ClN_3O_3S_2$ est proche de celle de TIIB avec seulement une rotation du chlorobenzène de 180° autour de S(2)—C(10). Si on caractérise la conformation du groupe sulfonurylé par les trois angles de torsion $\varphi_1 = C(1)—C(5)—S(1)—N(3)$,

Tableau 6. *Contacts intermoléculaires inférieurs à 3,5 Å*

Les positions équivalentes sont:

(i)	$\frac{1}{2} + x, -\frac{1}{2} - y, 1 + z$	(iv)	$1 - x, -y, 1 - z$
(ii)	$\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, 1 - z$	(v)	$1 - x, y, 2 - z$
(iii)	$\frac{1}{2} - x, -\frac{1}{2} - y, 1 - z$		
Cl(1)—C(9 ^b)	3,345 (4)	O(3)—C(13 ^{iv})	3,425 (5)
O(2)—N(4 ⁱⁱ)	3,018 (4)	O(3)—N(3 ⁱⁱ)	2,778 (3)
O(2)—C(9 ⁱⁱ)	3,473 (5)	O(3)—N(4 ⁱⁱ)	3,442 (4)
O(1)—C(7 ⁱⁱⁱ)	3,260 (4)	C(2)—C(2 ^v)	3,491 (5)
O(1)—C(9 ⁱⁱⁱ)	3,272 (5)	C(2)—C(3 ^v)	3,453 (6)

$\varphi_2 = C(5)—S(1)—N(3)—C(6)$ et $\varphi_3 = S(1)—N(3)—C(6)—O(3)$, l'examen des sept molécules (en incluant la galoséamide) précédemment étudiées, conduit à trois conformations *a*, *b* et *c*, définies respectivement par les angles $\varphi_1^a \simeq 100$, $\varphi_2^a \simeq -65$, $\varphi_3^a \simeq 75$, $\varphi_1^b \simeq 65$ et $\varphi_2^b \simeq 50$, $\varphi_3^b \simeq 65^\circ$, avec chaque fois un angle φ_3 voisin de 0° . On observe des molécules déprotonées en N(3) et des molécules non déprotonées aussi bien dans *a* que dans *b* et *c*.

Le Tableau 6 donne les contacts intermoléculaires inférieurs à 3,5 Å. Les deux liaisons les plus courtes sont du type hydrogène: N(3)H...O(3), 2,773 et N(4)H...O(2), 3,018 Å.

Contrairement aux molécules des composés actifs déjà étudiés, N(2) ne participe ici à aucun contact court ($< 3,5 \text{ \AA}$). L'environnement de $C_{15}H_{16}ClN_3O_3S_2$ dans la structure est fort différent de celui des molécules TIIA et TIIB. Le mode d'empilement dans le réseau cristallin ne paraît donc pas conditionner la conformation.

Les auteurs remercient MM les Professeurs J. Toussaint et C. L. Lapière, ainsi que le Dr J. Delarge, pour les discussions fructueuses et leurs suggestions à propos du problème étudié. Ils tiennent aussi à exprimer leurs remerciements à M. M. D'Archambeau dont ils ont pu apprécier l'aide technique.

Références

- CAMPSTEYN, H., DUPONT, L., LAMOTTE, J., DIDEBERG, O. & VERMEIRE, M. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 3397-3400.
 DUPONT, L., CAMPSTEYN, H., LAMOTTE, J. & VERMEIRE, M. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 2659-2662.
 DUPONT, L., LAMOTTE, J., CAMPSTEYN, H. & VERMEIRE, M. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1304-1310.
 MAIN, P., LESSINGER, L., WOOLFSON, M. M., GERMAIN, G. & DECLERCQ, J. P. (1977). *MULTAN 77. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain-la-Neuve, Belgique.