

Fig. 2. Molecular packing diagram as viewed down the *a* axis. The eight molecules of *G* are viewed approximately along the folding axis whereas the four molecules of *T* are viewed perpendicular to the folding axis.

References

- CORDES, A. W. (1983). Personal communication.
 EISNER, A. & WAGNER, E. C. (1934). *J. Am. Chem. Soc.* **56**, 1938–1943.
 FARRAR, W. V. (1964). *J. Appl. Chem.* **14**, 389–399.
 GADOL, S. M. & DAVIS, R. E. (1982). *Organometallics*, **1**, 1607–1613.
 GOECKE, G. (1903). *Z. Elektrochem.* **9**, 470–473.
 GREENBERG, A., MOLINARO, N. & LANG, M. (1984). *J. Org. Chem.* **49**, 1127–1134.
 HENSLEE, W. H. & DAVIS, R. E. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 1511–1519.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
 MAIN, P., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1978). *MULTAN78. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. of York, England, and Louvain, Belgium.
 MILLER, T. R. & WAGNER, E. C. (1938). *J. Am. Chem. Soc.* **60**, 1738–1741.
 MILLER, T. R. & WAGNER, E. C. (1941). *J. Am. Chem. Soc.* **63**, 832–836.
 PRELOG, V. & WIELAND, P. (1944). *Helv. Chim. Acta*, **27**, 1127–1134.
 RILEY, P. E. & DAVIS, R. E. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 381–386.
 SHELDRICK, G. M. (1976). *SHELX76*. A crystallographic computing package. Univ. of Cambridge, England.
 SPIELMAN, M. A. (1935). *J. Am. Chem. Soc.* **57**, 583–585.
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.
 TRÖGER, J. (1887). *J. Prakt. Chem.* **36**, 225–245.
 WAGNER, E. C. (1937). *J. Org. Chem.* **2**, 157–166.
 WAGNER, E. C. (1954). *J. Org. Chem.* **19**, 1862–1881.

Acta Cryst. (1986). **C42**, 227–230

Diphényl-2,5 Dipyrazinyl-3,4 Pyrrole Ethanol Monohydrate

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Minérale, UER de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

ET J. LEHUEDE ET J.-M. VIERFOND

Laboratoire de Chimie Organique, UER de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

(Reçu le 16 avril 1985, accepté le 23 septembre 1985)

Abstract. $C_{24}H_{17}N_5 \cdot C_2H_6O \cdot H_2O$, $M_r = 439.5$, monoclinic, $P2_1/c$, $a = 18.751(8)$, $b = 8.493(2)$, $c = 14.896(8)$ Å, $\beta = 93.06(4)^\circ$, $V = 2369(2)$ Å³, $Z = 4$, $D_x = 1.232$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$ Å, $\mu = 7.53$ mm⁻¹, $F(000) = 928$, $T = 295(2)$ K, $R = 0.050$ for 1840 independent observed reflections. The ethanol molecule occupies, in statistical disorder, four positions. In the molecule of 2,5-diphenyl-3,4-dipyrazinylpyrrole, interatomic distances and bond angles are in good agreement with previously published values. The five rings are planar. Hydrogen bonds O—H...N, N—H...O

and O—H...O take part in the cohesion of the structure.

Introduction. Les essais de cyclisation de l'amino-1 phényl-1 pyrazinyl-2 éthylène conduisent à un produit inattendu dont l'étude par les méthodes spectrographiques habituelles (masse, IR, RMN de ¹H et de ¹³C) n'a pas permis de déterminer la structure moléculaire. Par exemple, les spectres de RMN révèlent seulement la présence de protons (ou d'atomes de carbone) aromatiques et d'un proton échangeable par

D₂O vers 12 p.p.m. C'est la raison pour laquelle l'étude par diffraction X a été entreprise. Des cristaux ont été obtenus par évaporation lente d'une solution dans l'éthanol.

Partie expérimentale. Cristal parallélépipédique: 0,19 × 0,27 × 0,34 mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal avec 25 réflexions telles que $5,47 \leq \theta \leq 15,51^\circ$. Diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4. Scan $\theta/2\theta$ d'amplitude $s(^\circ) = 0,80 + 0,55 \operatorname{tg} \theta$. $0,032 \leq (\sin \theta)/\lambda \leq 0,550 \text{ \AA}^{-1}$; $-20 \leq h \leq 20$; $0 \leq k \leq 9$; $0 \leq l \leq 16$. Réflexions de contrôle: 31 $\bar{3}$, 811 et 004; $\sigma(I)/I$ moyen: 0,0024. 3294 réflexions indépendantes mesurées, 1454 réflexions inobservées [$I < 3\sigma(I)$]. Pas de correction d'absorption. C et N de C₂₄H₁₇N₅: méthodes directes, programme MULTAN11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Atomes de H₂O, de C₂H₅OH et H de C₂₄H₁₇N₅: série de Fourier des ΔF . Affinement en matrice complète sur F . Facteurs de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Paramètres affinés: x, y, z de tous les

atomes, β_{ij} de C et N de C₂₄H₁₇N₅, O de H₂O, O(301), C(311) et C(321) de C₂H₅OH, B des atomes présents sur les autres positions de C₂H₅OH. $R = 0,050$, $wR = 0,065$, $w = 1/\sigma^2(F)$. $S = 2,1$. $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,92$. $|\Delta\rho|_{\max} = 0,28 (4) \text{ e \AA}^{-3}$. Programmes de calcul du système SDP (Frenz & Associates, Inc., 1982). Dessin de la molécule de C₂₄H₁₇N₅: programme ORTEP (Johnson, 1965).

Discussion. Les paramètres atomiques sont rassemblés dans le Tableau 1 et les distances et angles dans le Tableau 2.*

* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées relatives des atomes d'hydrogène, des distances O—H et C—H, des distances des atomes aux plans moyens et des distances interatomiques intermoléculaires ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 42546: 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 atomiques relatives, facteurs de température isotropes équivalents et écarts-type

$B_{\text{eq}} = \frac{1}{3}(\beta_{11}a^2 + \beta_{22}b^2 + \beta_{33}c^2 + \beta_{12}ab\cos\gamma + \beta_{13}accos\beta + \beta_{23}bccos\alpha)$. L'agitation thermique des atomes signalés par une astérisque a été supposée isotrope.

	Taux d'occupation	x	y	z	$B_{\text{eq}}(\text{\AA}^2)$
O(1)		0,7693 (1)	0,1221 (4)	0,4824 (2)	6,29 (8)
N(1)		0,7661 (1)	0,0358 (4)	0,2968 (2)	4,37 (7)
N(7)		0,6813 (2)	0,1042 (4)	0,0099 (2)	5,30 (8)
N(10)		0,5727 (2)	-0,1185 (5)	0,0011 (2)	6,8 (1)
N(13)		0,8249 (2)	-0,1637 (4)	0,0350 (2)	5,54 (9)
N(16)		0,9215 (2)	0,0500 (5)	-0,0293 (2)	6,7 (1)
C(2)		0,7041 (2)	0,0351 (5)	0,2442 (2)	4,02 (9)
C(3)		0,7222 (2)	0,0153 (5)	0,1569 (2)	3,77 (8)
C(4)		0,7973 (2)	0,0036 (5)	0,1571 (2)	3,80 (8)
C(5)		0,8238 (2)	0,0163 (5)	0,2453 (2)	4,04 (9)
C(6)		0,6727 (2)	0,0054 (5)	0,0771 (2)	3,95 (8)
C(8)		0,6338 (2)	0,0920 (6)	-0,0608 (3)	6,6 (1)
C(9)		0,5816 (2)	-0,0172 (7)	-0,0640 (3)	6,6 (1)
C(11)		0,6193 (2)	-0,1049 (5)	0,0704 (3)	5,8 (1)
C(12)		0,8375 (2)	-0,0284 (5)	0,0771 (2)	4,05 (9)
C(14)		0,8611 (2)	-0,1920 (6)	-0,0386 (3)	6,6 (1)
C(15)		0,9079 (2)	-0,0859 (6)	-0,0696 (3)	6,7 (1)
C(17)		0,8862 (2)	0,0763 (5)	0,0432 (3)	5,5 (1)
C(18)		0,8966 (2)	0,0112 (5)	0,2851 (2)	4,06 (9)
C(19)		0,9172 (2)	0,1020 (5)	0,3604 (2)	4,48 (9)
C(20)		0,9857 (2)	0,0965 (5)	0,3980 (3)	5,0 (1)
C(21)		1,0352 (2)	0,0010 (6)	0,3620 (3)	5,5 (1)
C(22)		1,0173 (2)	-0,0892 (5)	0,2881 (3)	5,6 (1)
C(23)		0,9484 (2)	-0,0847 (5)	0,2502 (3)	5,0 (1)
C(24)		0,6347 (2)	0,0499 (4)	0,2827 (2)	4,10 (9)
C(25)		0,5817 (2)	0,1472 (5)	0,2424 (2)	4,8 (1)
C(26)		0,5154 (2)	0,1568 (6)	0,2784 (3)	5,7 (1)
C(27)		0,5002 (2)	0,0735 (6)	0,3537 (3)	6,2 (1)
C(28)		0,5510 (2)	-0,0233 (6)	0,3939 (3)	6,0 (1)
C(29)		0,6175 (2)	-0,0339 (5)	0,3585 (3)	5,1 (1)
O(301)	0,67 (2)	0,7359 (3)	-0,1028 (5)	0,6123 (3)	7,0 (1)
O(302)	0,33	0,7668 (7)	-0,090 (2)	0,6266 (9)	12,4 (4)*
C(311)	0,47 (2)	0,7539 (6)	-0,104 (1)	0,7101 (7)	7,8 (3)
C(312)	0,20	0,716 (1)	-0,049 (4)	0,701 (2)	8,6 (7)*
C(313)	0,33	0,7842 (8)	-0,078 (2)	0,721 (1)	7,5 (4)*
C(321)	0,47	0,7650 (6)	0,056 (2)	0,7541 (9)	9,4 (4)
C(322)	0,20	0,773 (1)	0,070 (4)	0,726 (2)	9,1 (8)*
C(323)	0,20 (2)	0,723 (1)	0,031 (4)	0,738 (2)	8,8 (7)*
C(324)	0,13	0,719 (2)	0,109 (5)	0,771 (3)	8 (1)*

Tableau 2. Distances interatomiques (Å), angles valencielles (°) et écarts-type

N(1) C(2)	1,367 (4)	N(16)–C(17)	1,316 (6)
N(1) C(5)	1,368 (5)	C(18)–C(19)	1,398 (5)
C(2) C(3)	1,371 (5)	C(18)–C(23)	1,390 (5)
C(2)–C(24)	1,455 (5)	C(19) C(20)	1,375 (5)
C(3)–C(4)	1,413 (5)	C(20)–C(21)	1,364 (6)
C(3) C(6)	1,470 (5)	C(21)–C(22)	1,369 (6)
C(4)–C(5)	1,384 (5)	C(22)–C(23)	1,382 (6)
C(4) C(12)	1,467 (5)	C(24)–C(25)	1,404 (5)
C(5) C(18)	1,459 (5)	C(24) C(29)	1,388 (5)
C(6) N(7)	1,322 (5)	C(25) C(26)	1,381 (6)
C(6) C(11)	1,371 (6)	C(26)–C(27)	1,369 (6)
N(7) C(8)	1,346 (5)	C(27)–C(28)	1,372 (6)
C(8)–C(9)	1,348 (7)	C(28) C(29)	1,381 (6)
C(9) N(10)	1,314 (6)	O(301) C(311)	1,48 (1)
N(10) C(11)	1,322 (5)	O(301) C(312)	1,47 (3)
C(12) N(13)	1,324 (5)	O(302) C(313)	1,44 (2)
C(12) C(17)	1,389 (6)	C(311) C(321)	1,52 (2)
N(13) C(14)	1,342 (6)	C(312) C(322)	1,50 (4)
C(14) C(15)	1,356 (7)	C(313) C(323)	1,51 (3)
C(15) N(16)	1,319 (6)	C(313)–C(324)	1,48 (4)
C(2) N(1) C(5)	110,6 (3)	N(13) C(14) C(15)	121,6 (4)
N(1) C(2) C(3)	107,4 (3)	C(14) C(15) N(16)	122,6 (4)
N(1) C(2) C(24)	121,6 (3)	C(15) N(16) C(17)	115,4 (4)
C(3) C(2) C(24)	131,0 (3)	C(12) C(17) N(16)	124,0 (4)
C(2) C(3) C(4)	107,7 (3)	C(5) C(18) C(19)	121,5 (3)
C(2) C(3) C(6)	126,6 (3)	C(5) C(18) C(23)	121,5 (3)
C(4) C(3) C(6)	125,7 (3)	C(19) C(18) C(23)	117,0 (3)
C(3) C(4) C(5)	107,7 (3)	C(18) C(19) C(20)	121,3 (4)
C(3) C(4) C(12)	124,5 (3)	C(19) C(20) C(21)	120,1 (4)
C(5) C(4) C(12)	127,7 (3)	C(20) C(21) C(22)	120,4 (4)
N(1) C(5) C(4)	106,7 (3)	C(21) C(22) C(23)	119,8 (4)
N(1) C(5) C(18)	121,7 (3)	C(18) C(23) C(22)	121,3 (4)
C(4) C(5) C(18)	131,6 (3)	C(2) C(24) C(25)	120,7 (3)
C(3) C(6) N(7)	118,6 (3)	C(2) C(24) C(29)	122,0 (3)
C(3) C(6) C(11)	121,7 (3)	C(25) C(24) C(29)	117,3 (3)
N(7) C(6) C(11)	119,7 (3)	C(24) C(25) C(26)	120,0 (4)
C(6) N(7) C(8)	116,2 (4)	C(25) C(26) C(27)	121,3 (4)
N(7) C(8) C(9)	122,0 (4)	C(26) C(27) C(28)	119,7 (4)
C(8) C(9) N(10)	123,0 (4)	C(27) C(28) C(29)	119,5 (4)
C(9) N(10) C(11)	114,4 (4)	C(24) C(29) C(28)	122,1 (4)
C(6) C(11) N(10)	124,6 (4)	O(301) C(311) C(321)	116,0 (9)
C(4) C(12) N(13)	117,3 (3)	O(301) C(312) C(322)	103 (2)
C(4) C(12) C(17)	123,5 (3)	O(302) C(313) C(323)	94 (1)
N(13) C(12) C(17)	119,1 (3)	O(302) C(313) C(324)	109 (2)
C(12) N(13) C(14)	117,2 (4)		

L'unité asymétrique contient une molécule de diphenyl-2,5 dipyrazinyl-3,4 pyrrole, une molécule d'eau et une molécule d'éthanol. Les numéros attribués aux atomes de la première molécule sont indiqués sur la Fig. 1. L'atome d'oxygène de H₂O est désigné par O(1) et les atomes de C₂H₅OH respectivement par O(30), C(31) et C(32). Ces derniers sont présents, en désordre statistique, sur plusieurs sites. On trouve O(30) sur O(301) et O(302), C(31) sur C(311), C(312) et C(313) et C(32) sur C(321), C(322), C(323) et C(324). La molécule d'éthanol peut ainsi occuper quatre positions: O(301)–C(311)–C(321), O(301)–C(312)–C(322), O(302)–C(313)–C(323) et O(302)–C(313)–C(324). Les coordonnées de ces sites ne se sont jamais parfaitement stabilisées au cours des affinements. C'est les cas, en particulier, pour O(302), C(313), C(323) et C(324).

Les cinq cycles constituant la molécule de diphenyl-2,5 dipyrazinyl-3,4 pyrrole sont tous plans. Pour chacun d'eux, les distances des atomes au plan moyen correspondant sont de l'ordre des incertitudes. Les angles entre le plan *P*(*A*) du cycle *A* et les plans *P*(*B*), *P*(*C*), *P*(*D*) et *P*(*E*) des cycles *B*, *C*, *D* et *E* (Fig. 1) sont compris entre 34 et 64° environ. Les valeurs des angles de torsion C(2)–C(3)–C(6)–C(11) [–56,5 (6)°], C(3)–C(4)–C(12)–N(13) [–61,2 (5)°], C(4)–C(5)–C(18)–C(23) [–34,5 (7)°] et N(1)–C(2)–C(24)–C(29) [–44,7 (6)°] indiquent les orientations relatives des cycles *B*, *C*, *D* et *E* par rapport au cycle *A*.

Dans les noyaux *B* et *C*, les distances C–N entre deux atomes voisins vont de 1,314 (6) à 1,346 (5) Å et leur longueur moyenne [1,326 (6) Å] n'est pas significativement différente de celle de leurs homologues dans la pyrazine (1,334 Å) (de With, Harkema & Feil, 1976) ou dans la diphenyl-2,3 pyrazine (1,336 Å) (Kitano, Ashida, Ohta, Watanabe & Akita, 1983). Dans les mêmes cycles, la moyenne des distances C–C est de 1,365 (7) Å. Les valeurs des angles C–N–C sont comprises entre 114,4 (4) et 117,2 (4)° [moyenne: 115,8 (4)°] et celles des angles C–C–N entre 119,1 (3) et 124,6 (4)° [moyenne: 122,1 (4)°]. Ces valeurs sont comparables à celles rencontrées dans les noyaux

pyrazine des deux composés précédemment cités. Elles traduisent un allongement des cycles *B* et *C* dans la direction N–N.

Les distances C–C entre deux atomes voisins admettent pratiquement les mêmes longueurs moyennes dans les cycles benzéniques *D* et *E*, soit respectivement 1,380 (5) et 1,382 (6) Å. Ces deux cycles sont légèrement déformés; les angles C(19)–C(18)–C(23) [117,0 (3)°] et C(25)–C(24)–C(29) [117,3 (3)°] différent de la valeur idéale d'une quantité sensiblement supérieure à l'incertitude.

La géométrie du noyau pyrrole est très proche de celle rencontrée dans le pyrrole (Nygaard, Nielsen, Kirchheiner, Maltesen, Rastrup-Andersen & Sorensen, 1969) ou dans l'acétyl-4 hydroxyméthyl-3 pyrrole (Sheldrick, Borkenstein & Engel, 1978). Les deux distances C–N sont voisines de 1,37 Å. Les longueurs des quatre liaisons 'simples' *Csp*²–*Csp*² qui unissent le noyau pyrrole aux quatre autres noyaux sont comprises entre 1,455 (5) et 1,470 (5) Å [moyenne: 1,463 (5) Å]. On trouve des liaisons comparables entre les noyaux de la diphenyl-2,5 pyrazine (1,454 Å) (Laing & Sommerville, 1976).

Plusieurs liaisons hydrogène interviennent dans la cohésion de la structure. Ainsi, la molécule d'eau est liée à l'atome d'azote du groupement pyrrole par N(1)–H(N1)···O(1) [2,858 (4) Å, 171 (3)°], à N(7ⁱ) [(i) *x*, $\frac{1}{2} - y$, $\frac{1}{2} + z$] par O(1)–H'(O1)···N(7ⁱ) [2,893 (5) Å, 173 (3)°], à la molécule d'éthanol par O(1)–H(O1)···O(301) [2,814 (5) Å, 149 (3)°] et par O(1)–H(O1)···O(302) [2,81 (1) Å, 133 (3)°] et la molécule d'éthanol à N(13ⁱⁱ) [(ii) *x*, $-\frac{1}{2} - y$, $\frac{1}{2} + z$] distant de O(301) de 2,872 (6) Å et de O(302) de 2,75 (2) Å.

La Fig. 2 représente la structure vue parallèlement à l'axe *b*. Une seule position a été représentée pour la molécule d'alcool. Il s'agit de celle qui correspond au taux d'occupation le plus élevé. La structure peut être considérée comme formée de colonnes de molécules de

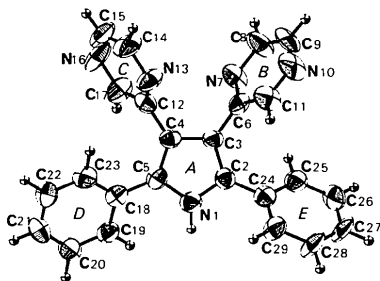


Fig. 1. Représentation de la molécule de diphenyl-2,5 dipyrazinyl-3,4 pyrrole et numéros attribués à ses atomes.

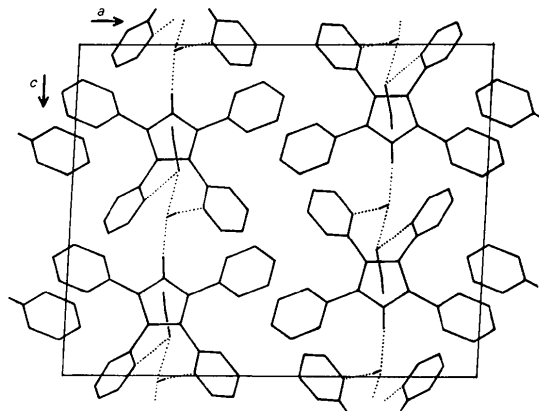


Fig. 2. Vue de la structure parallèlement à l'axe *b*.

diphényl-2,5 dipyrazinyl-3,4 pyrrole parallèles à l'axe *b*. Entre deux molécules consécutives d'une même colonne s'intercale une molécule d'éthanol. Par l'intermédiaire des molécules d'eau et d'éthanol, les liaisons hydrogène unissent les molécules de deux colonnes qui se déduisent l'une de l'autre par la transformation (i) ou par la transformation (ii).

Références

FRENZ, B. A. & ASSOCIATES, INC. (1982). *SDP, Structure Determination Package*. College Station, Texas, et Enraf-Nonius, Delft.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Tome IV, p. 72. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)

JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Rapport ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 KITANO, Y., ASHIDA, T., OHTA, A., WATANABE, T. & AKITA, Y. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 136–139.
 LAING, M. & SOMMERVILLE, P. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 2764–2767.
 MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN*11/82. *A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
 NYGAARD, L., NIELSEN, J. T., KIRCHHEINER, J., MALTESEN, G., RASTRUP-ANDERSEN, J. & SORENSEN, G. O. (1969). *J. Mol. Struct.* **3**, 491–506.
 SHELDRICK, W. S., BORKENSTEIN, A. & ENGEL, J. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1248–1253.
 WITH, G. DE, HARKEMA, S. & FEIL, D. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 3178–3184.

Acta Cryst. (1986). **C42**, 230–233

Formylamino-1 (Hydroxy-2 phényl)-2 Phényl-1 Ethylène

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Minérale, UER de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

ET J. ANDRIEUX ET M. PLAT

Laboratoire de Pharmacie Chimique, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

(Reçu le 10 mai 1985, accepté le 23 septembre 1985)

Abstract. $C_{15}H_{13}NO_2$, $M_r = 239.3$, triclinic, $P\bar{1}$, $a = 9.428$ (3), $b = 9.769$ (1), $c = 16.364$ (3) Å, $\alpha = 89.89$ (2), $\beta = 99.47$ (2), $\gamma = 121.44$ (2)°, $V = 1262$ Å³, $Z = 4$, $D_m = 1.28$ (2), $D_x = 1.259$ Mg m⁻³, $\lambda(Mo K\alpha) = 0.71069$ Å, $\mu = 0.078$ mm⁻¹, $F(000) = 504$, $T = 293$ (1) K, $R = 0.034$ for 2093 independent observed reflections. In the two molecules of the asymmetric unit, the bond lengths and angles are nearly identical. There is a non-located orbital along the N–C–O fragment of the *N*-formylamino group. The π electrons of the ethylenic bond are not conjugated with those of the benzenic cycles or with those of the *N*-formylamino group. The molecules are linked together by hydrogen bonds and form chains parallel either with **a** or with **a + b**.

Introduction. Le produit étudié est issu de la décomposition thermique de l'azido-2 Δ -3 isoflavène, lui-même

obtenu par action du perchlorate d'isoflavylum (Bouvier, Andrieux & Molho, 1974; Bouvier, Andrieux, Cunha & Molho, 1977) sur l'azidure de sodium dans le THF anhydre. Il se présente sous la forme de cristaux incolores fondant à 421–423 K. Sa masse molaire et sa formule brute ont été déduites du spectre de masse et des résultats de la microanalyse. Les méthodes spectroscopiques usuelles (IR, RMN de ¹H et de ¹³C) n'ont pas permis de déterminer complètement sa structure moléculaire. C'est la raison pour laquelle l'étude par diffraction X a été entreprise. Les monocristaux utilisés ont été obtenus par évaporation lente d'une solution dans l'éther-oxyde d'éthyle additionné d'une petite quantité de dichlorométhane.

Partie expérimentale. Masse volumique par flottaison. Cristal parallélépipédique: 0,22 × 0,25 × 0,30 mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal