

Table 5. Hydrogen-bond data with e.s.d.'s given in parentheses

Donor	Acceptor		Donor	Acceptor	
N <sub>1</sub> ...H	O(W3)	2.902 (7) Å	O(W1)...H	O <sub>2</sub>	2.762 (7) Å
N <sub>2</sub> ...H	O <sub>7</sub>	2.840 (7)	O(W1)...H	O <sub>3</sub>	2.895 (7)
N <sub>3</sub> ...H	O <sub>1</sub>	2.851 (7)	O(W2)...H	O <sub>4</sub>	2.873 (7)
N <sub>4</sub> ...H	O(W1)	2.863 (7)	O(W2)...H	O(W1)	2.935 (7)
			O(W3)...H	O <sub>5</sub>	2.885 (7)
			O(W3)...H	O <sub>6</sub>	2.778 (7)

(see Table 4). These similarities are borne out by the calculated r.m.s. differences between *c*(-L-Ala-L-Pro-D-Phe-L-Pro-) and molecules (1) and (2), which are 0.34 and 0.16 Å, respectively.

We thank Drs C. M. Deber, V. Olsher and E. R. Blout for supplying the sample. This work was supported by the National Science Foundation (grants CHE-8210536 and PCM-77-11398 awarded to WNL) and the National Institutes of Health (grant GM-06920 awarded to WNL). In addition, SKB thanks the Medical Foundation Inc. for research support, and GS thanks the Bat-Sheva Foundation of Israel for general financial support. Finally, we thank Referee IV, who noted the similarity between the title compound and *c*(-L-Pro-L-Ala-L-Pro-D-Phe-).

## References

BENEDETTI, E. (1982). *Chemistry and Biochemistry of Amino Acids, Peptides and Proteins* 6, edited by B. WEINSTEIN, pp. 105–184. New York: Marcel Dekker.

- CHIANG, C. C. & KARLE, I. L. (1982). *Int. J. Pept. Protein Res.* **20**, 133–138.
- CHIU, Y. H., BROWN, L. D. & LIPSCOMB, W. N. (1977). *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 4799–4803.
- DEBER, C. M., FOSSEL, E. T. & BLOUT, E. R. (1974). *J. Am. Chem. Soc.* **96**, 4015–4017.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974) Vol. IV, pp. 72–72. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.)
- IUPAC-IUB COMMISSION ON BIOCHEMICAL NOMENCLATURE (1970). *J. Mol. Biol.* **52**, 1–17.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEP*II. Report ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
- KABSCH, W. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 922–923.
- KABSCH, W. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 827–828.
- KARLE, I. L. (1978). *Int. J. Quantum Chem. Quantum Biol. Symp.* **5**, 91–101.
- KARLE, I. L. (1981). *Peptides*, **4**, 1–53.
- KARLE, I. L. (1982). *Molecular Structure and Biological Activity*, edited by J. F. GRIFFIN & W. L. DUAX, pp. 215–227. New York: Elsevier North-Holland.
- KARTHA, G., VARUGHESE, K. I. & AIMOTO, S. (1982). *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **79**, 4519–4522.
- KOLASKAR, A. S., LAKSHMINARAYANAN, A. V., SARATHY, K. P. & SASISEKHARAN, V. (1975). *Biopolymers*, **14**, 1081–1094.
- MADISON, V., DEBER, C. M. & BLOUT, E. R. (1977). *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 4788–4798.
- MOMANY, F. A., MCGUIRE, R. F., BURGESS, A. W. & SCHERAGA, H. A. (1975). *J. Phys. Chem.* **79**, 2361–2374.
- NORTH, A. C. T., PHILLIPS, D. C. & MATHEWS, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
- SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
- SHELDRIK, G. M. (1985). *SHELXS86*. In *Crystallographic Computing 3*, edited by G. M. SHELDRIK, C. KRÜGER & R. GODDARD, pp. 175–189. Oxford Univ. Press.
- VON DREELE, R. B. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 966–970.

*Acta Cryst.* (1989). **C45**, 1948–1951

## Structure Cristalline de (*p*-Chlorophényl)-3 [(Diméthyl-4,6 pyridyl-2) méthyl]-4 Diphényl-4,6 Oxo-2 Tétrahydro-1,2,3,4 Triazine-1,3,5

PAR BERNARD VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Générale, UFR de Médecine et de Pharmacie, 34, Rue du Jardin des Plantes, F-86034 Poitiers CEDEX, France

NGUYEN-HUY DUNG

Laboratoire de Physique (Laboratoire de Chimie Minérale Structurale associé au CNRS UA 200), Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques de Paris V, 4, Avenue de l'Observatoire, F-75270 Paris CEDEX 06, France

ET PAUL-LOUIS COMPAGNON ET TAN KIMNY

Laboratoire de Chimie Organique et Pharmacie Chimique, Université de Bourgogne, Faculté de Pharmacie, 7, Boulevard Jeanne d'Arc, F-21100 Dijon, France

(Reçu le 13 juillet 1988, accepté le 20 mars 1989)

**Abstract.** C<sub>29</sub>H<sub>25</sub>ClN<sub>4</sub>O, *M<sub>r</sub>* = 481.0, monoclinic, *P*2<sub>1</sub>/*n*, *a* = 21.63 (1), *b* = 8.072 (7), *c* = 15.46 (1) Å, β = 108.57 (6)°, *V* = 2558.7 (3) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *D<sub>m</sub>* =

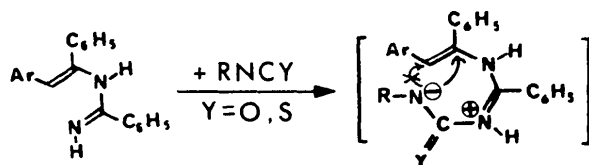
1.27 (2), *D<sub>x</sub>* = 1.25 Mg m<sup>-3</sup>, λ(Mo Kα) = 0.7107 Å, μ = 0.183 mm<sup>-1</sup>, *F*(000) = 1008, room temperature, *R* = 0.072 for 1008 independent reflections [*I* >

0108-2701/89/121948-04\$03.00

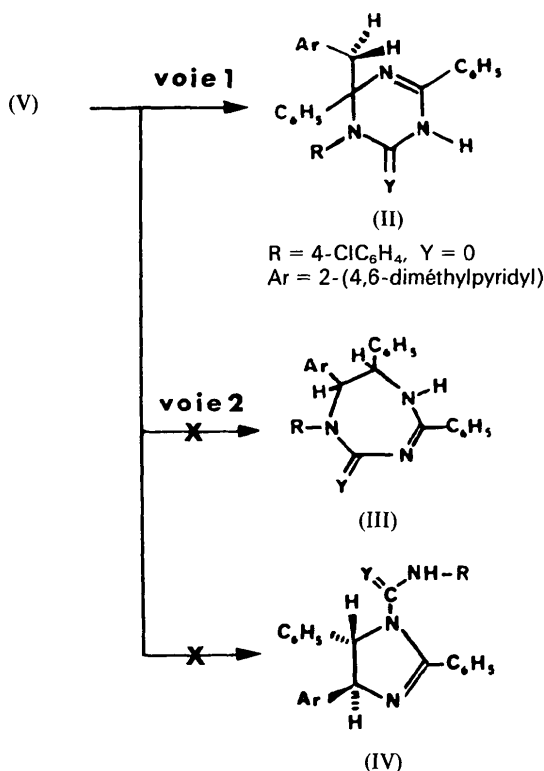
© 1989 International Union of Crystallography

$3\sigma(I)$ . The title compound is built up of one sofa-conformation 1,2,3,4-tetrahydro-1,3,5-triazine ring, three phenyl rings and one pyridine ring; this latter is folded on the triazine ring. Two molecules which are related by a symmetry centre are linked by intermolecular hydrogen bonding, thus forming an octagonal contour.

**Introduction.** La condensation d'un iso(thio)cyanate avec une (hét)arylvinylamidine (I) conduit dans des conditions particulières (Kimny, Gasquez & Compagnon, 1988) à une structure de (thi)oxo-2 tétrahydro-1,2,3,4 triazine-1,3,5 (II) comme nous le démontrons ci-dessous. Cependant, les données des spectres de masse, de RMN- $^1\text{H}$  et IR étaient également compatibles avec une structure de (thi)oxo-2 tétrahydro-1,3 ou 5,6,7-2*H*-triazépine (III), primitivement retenue (Kimny *et al.*, 1988). L'intermédiaire (V) pouvait aussi conduire à l'imidazole (IV) facilement écartée à partir de ces mêmes



(I) Ar = phényle  
Ar = 2-(4,6-diméthylpyridyl) (V)



données (schéma). D'après Peet (1984), les erreurs structurales concernant les systèmes (oxo)hydro-triazépiniques-1,3,5 sont fréquentes. Cet hétérocycle se révèle en réalité difficile à synthétiser. Lorsque la possibilité de se former est offerte à un cycle plus petit, celui-ci apparaît souvent préférentiellement comme ici.

**Partie expérimentale.** Après différents essais de cristallisation dans divers solvants, notre choix s'est fixé sur le mélange éthanol-méthanol à parties égales; toutefois dans ces conditions, les rares monocristaux obtenus sont de qualité médiocre, ce qui explique la valeur relativement élevée du  $R$  final obtenu pour ce cristal. Masse volumique par flottaison. Cristal parallélépipédique:  $0,35 \times 0,30 \times 0,22$  mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal à partir de 25 réflexions judicieusement choisies ( $10 \leq \theta \leq 12^\circ$ ). Diffractomètre Philips PW1100.  $0,05 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,48 \text{ \AA}^{-1}$ .  $-20 \leq h \leq 19$ ;  $0 \leq k \leq 7$ ;  $0 \leq l \leq 9$ . Réflexions de contrôle:  $11,0\bar{3}, \bar{2}4\bar{1}$  mesurées toutes les 2 h. Mode de balayage  $\omega/2\theta$ ; domaine de balayage:  $0,90 + 0,35\text{tg}\theta^\circ$ . 1723 réflexions indépendantes mesurées, 715 réflexions inobservées [ $I \leq 3\sigma(I)$ ]. Pas de correction d'absorption. Méthodes directes, programme MULTAN11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Affinement en matrice complète sur  $F$ . Facteurs de diffusion de *International Tables for X-ray Crystallography* (1974), corrigés de  $f'$  et  $f''$ . Programmes de calcul: chaîne CRYSTALS (Carruthers & Watkin, 1984) adaptée sur un VAX 11/725. Paramètres affinés:  $x, y, z$  et  $U_{ij}$  de Cl, O, N et C, à l'exception des groupements phényles affinés en groupes rigides hexagonaux (CRYSTALS). Atomes d'hydrogène inclus dans le modèle à partir de leurs positions calculées.  $R = 0,072$ ,  $wR = 0,090$  ( $w = 1$  pour toutes les réflexions);  $S = 1,16$ ;  $(\Delta/\sigma)_{\text{moyen}} = 0,134$ . Pas de résidu significatif sur la série de Fourier des différences. Figs. 1 et 2: programme ORTEPII (Johnson, 1976).\*

**Discussion.** Les coordonnées atomiques et les facteurs de température isotrope équivalents sont rassemblés dans le Tableau 1, les principales distances interatomiques et les angles des liaisons dans le Tableau 2. La molécule représentée en perspective Fig. 1 (avec le numérotage adopté par la suite) correspond à la formule (IIa). Sur le cycle tétrahydro-1,2,3,4 *s*-triazinique  $A$  défini par les

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des paramètres des atomes d'hydrogène et des plans moyens ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 52095: 13 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 et facteurs d'agitation thermique

$B_{eq} = (8\pi^2/3) \text{ trace } U.$			
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Cl	0,6457 (2)	0,2077 (6)	0,5187 (3)
O	0,5223 (3)	0,4462 (9)	0,1104 (5)
N(1)	0,4206 (4)	0,5410 (9)	0,0342 (5)
C(2)	0,4671 (6)	0,480 (1)	0,1108 (9)
N(3)	0,4477 (3)	0,4597 (9)	0,1847 (7)
C(4)	0,3832 (4)	0,529 (1)	0,1902 (7)
N(5)	0,3363 (4)	0,5470 (9)	0,1001 (7)
C(6)	0,3558 (5)	0,562 (1)	0,0303 (9)
C(31)	0,4942 (3)	0,3986 (9)	0,2664 (4)
C(32)	0,4882 (3)	0,2407 (8)	0,2986 (5)
C(33)	0,5351 (3)	0,1814 (7)	0,3765 (5)
C(34)	0,5881 (3)	0,2800 (8)	0,4222 (4)
C(35)	0,5942 (3)	0,4380 (8)	0,3900 (5)
C(36)	0,5472 (3)	0,4973 (7)	0,3121 (5)
C(41)	0,3535 (3)	0,4070 (8)	0,2433 (5)
C(42)	0,3108 (3)	0,2854 (9)	0,1952 (4)
C(43)	0,2850 (3)	0,1711 (7)	0,2416 (5)
C(44)	0,3019 (3)	0,1784 (8)	0,3360 (5)
C(45)	0,3446 (3)	0,3000 (9)	0,3842 (4)
C(46)	0,3704 (3)	0,4143 (7)	0,3378 (5)
C(50)	0,3930 (5)	0,704 (1)	0,2350 (7)
C(51)	0,4113 (5)	0,831 (1)	0,1772 (7)
N(52)	0,4746 (4)	0,860 (1)	0,1938 (6)
C(53)	0,4907 (5)	0,973 (1)	0,1383 (9)
C(54)	0,4446 (6)	1,059 (1)	0,0695 (8)
C(55)	0,3789 (6)	1,026 (1)	0,0552 (8)
C(56)	0,3630 (5)	0,914 (1)	0,1114 (8)
C(57)	0,5623 (6)	1,005 (2)	0,1623 (8)
C(58)	0,3283 (6)	1,109 (1)	-0,0224 (8)
C(61)	0,3090 (3)	0,6083 (9)	-0,0600 (4)
C(62)	0,3285 (3)	0,647 (1)	-0,1349 (6)
C(63)	0,2832 (4)	0,705 (1)	-0,2147 (5)
C(64)	0,2183 (3)	0,724 (1)	-0,2196 (4)
C(65)	0,1987 (2)	0,685 (1)	-0,1447 (6)
C(66)	0,2441 (4)	0,6273 (9)	-0,0649 (4)

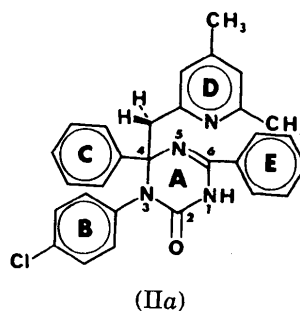
\*  $B_{iso}$  pour les atomes affinés en groupes rigides.

atomes N(1) à C(6) sont greffés les cycles benzéniques *B*: C(31) à C(36), *C*: C(41) à C(46) et *E*: C(61) à C(66), et enfin, par l'intermédiaire du méthylène C(50), le cycle diméthyl-4,6 pyridinique *D*: C(51) à C(56). Par ailleurs, ce noyau tétrahydrotriazinique comporte un groupe carbonyle en C(2); la longueur de la liaison C=O ne diffère pas significativement de celle du carbonyle dans les molécules d'urée (Wyckoff, 1966) et de *N*<sup>1</sup>,*N*<sup>5</sup>-dibenzyl oxo-4 thioxo-2 perhydrotriazépine-1,3,5 (Dobler & Petter, 1978): 1,224 Å. Les trois atomes d'azote en positions 1, 3 et 5 sont hybridés  $sp^2$ , tout comme les atomes C(2) et C(6). Mais l'hybridation  $sp^3$  de l'atome C(4) entraîne une non-planéité du cycle et une différenciation importante des longueurs des liaisons C—N. La double liaison N(5)—C(6), *a priori* particulièrement courte, correspond à la longueur observée dans un groupe amidine (Häfelinger, 1975). Quant à la simple liaison N(3)—C(4) de type  $N_{sp^2}-C_{sp^3}$ , elle se révèle très longue. Le cycle *A* adopte une forme sofa. N(1), C(2), N(3), N(5) et C(6) sont dans le plan moyen *P*(1) calculé à partir de ces mêmes atomes ou en sont extrêmement proches, alors que C(4) en est

Tableau 2. Distances (Å) et angles (°) de liaison dans la molécule

N(1)—C(2)	1,38 (1)	C(32)—C(33)	1,390 (8)	C(51)—C(56)	1,38 (1)
N(1)—C(6)	1,39 (1)	C(33)—C(34)	1,390 (8)	N(52)—C(53)	1,37 (2)
O—C(2)	1,23 (2)	C(34)—Cl	1,714 (6)	C(53)—C(54)	1,39 (2)
C(2)—N(3)	1,35 (2)	C(34)—C(35)	1,39 (1)	C(53)—C(57)	1,50 (2)
N(3)—C(4)	1,53 (1)	C(35)—C(36)	1,390 (9)	C(54)—C(55)	1,39 (2)
N(3)—C(31)	1,43 (1)	C(41)—C(42)	1,390 (9)	C(55)—C(56)	1,37 (2)
C(4)—N(5)	1,45 (1)	C(41)—C(46)	1,39 (1)	C(55)—C(58)	1,50 (1)
C(4)—C(41)	1,55 (1)	C(42)—C(43)	1,39 (1)	C(61)—C(62)	1,39 (1)
C(4)—C(50)	1,56 (1)	C(43)—C(44)	1,39 (1)	C(61)—C(66)	1,39 (1)
N(5)—C(6)	1,28 (2)	C(44)—C(45)	1,390 (9)	C(62)—C(63)	1,39 (1)
C(6)—C(61)	1,49 (1)	C(45)—C(46)	1,39 (1)	C(63)—C(64)	1,39 (1)
C(31)—C(32)	1,39 (1)	C(50)—C(51)	1,50 (2)	C(64)—C(65)	1,39 (1)
C(31)—C(36)	1,390 (9)	C(51)—N(52)	1,33 (1)	C(65)—C(66)	1,390 (9)
C(2)—N(1)—C(6)	122 (1)	C(31)—C(32)—C(33)	120,0 (5)		
N(1)—C(2)—N(3)	116 (1)	C(32)—C(33)—C(34)	120,0 (6)		
N(1)—C(2)—O	121 (1)	C(33)—C(34)—C(35)	120,0 (5)		
N(3)—C(2)—O	123 (1)	C(33)—C(34)—Cl	120,1 (5)		
C(2)—N(3)—C(4)	122,6 (8)	C(35)—C(34)—Cl	119,9 (5)		
C(2)—N(3)—C(31)	118,0 (8)	C(34)—C(35)—C(36)	120,0 (5)		
C(4)—N(3)—C(31)	118,3 (9)	C(35)—C(36)—C(31)	120,0 (6)		
N(3)—C(4)—N(5)	110,8 (9)	C(4)—C(50)—C(51)	112,5 (9)		
N(3)—C(4)—C(41)	109,8 (7)	C(50)—C(51)—N(52)	117,0 (8)		
N(3)—C(4)—C(50)	111,1 (7)	C(50)—C(51)—C(56)	119 (1)		
N(5)—C(4)—C(41)	107,0 (7)	N(52)—C(51)—C(56)	124 (1)		
N(5)—C(4)—C(50)	106,8 (7)	C(51)—N(52)—C(53)	116,3 (8)		
C(41)—C(4)—C(50)	111,2 (9)	N(52)—C(53)—C(54)	123 (1)		
C(4)—N(5)—C(6)	120,1 (9)	N(52)—C(53)—C(57)	114,3 (9)		
N(1)—C(6)—N(5)	123,2 (9)	C(54)—C(53)—C(57)	122 (1)		
N(1)—C(6)—C(61)	117 (1)	C(53)—C(54)—C(55)	118 (1)		
N(5)—C(6)—C(61)	120,2 (9)	C(54)—C(55)—C(56)	118 (1)		
C(42)—C(41)—C(4)	118,8 (9)	C(54)—C(55)—C(58)	119 (1)		
C(42)—C(41)—C(46)	120,0 (7)	C(56)—C(55)—C(58)	122 (1)		
C(46)—C(41)—C(4)	121,1 (6)	C(55)—C(56)—C(51)	120 (1)		
C(41)—C(42)—C(43)	120,0 (6)	C(6)—C(61)—C(62)	122,8 (7)		
C(42)—C(43)—C(44)	120,0 (5)	C(6)—C(61)—C(66)	116,9 (8)		
C(43)—C(44)—C(45)	120,0 (7)	C(62)—C(61)—C(66)	120,0 (6)		
C(44)—C(45)—C(46)	120,0 (6)	C(61)—C(62)—C(63)	120,0 (6)		
C(45)—C(46)—C(41)	120,0 (6)	C(62)—C(63)—C(64)	120,0 (7)		
N(3)—C(31)—C(32)	120,8 (6)	C(63)—C(64)—C(65)	120,0 (6)		
N(3)—C(31)—C(36)	119,2 (6)	C(64)—C(65)—C(66)	120,0 (6)		
C(32)—C(31)—C(36)	120,0 (5)	C(61)—C(66)—C(65)	120,0 (7)		

éloigné de 0,334 (9) Å. L'atome d'oxygène du carbonyle est situé de l'autre côté de *P*(1) à 0,107 (7) Å de celui-ci. Les angles de liaisons autour de C(4) ne s'écartent pas de plus de 2° de la valeur théorique.



L'atome d'azote N(3) porte un groupe *p*-chlorophényle; le plan *P*(2) de ce cycle *B* fait un angle dièdre de 66,3 (4)° avec le plan *P*(1). La longueur de la liaison C(34)—Cl ne diffère pas des valeurs décrites dans la littérature. Les atomes N(3) et Cl sont situés de part et d'autre du plan *P*(2) aux distances respectives de 0,046 (8) et 0,012 (5) Å. Le cycle *C* [plan *P*(3)] porté par l'atome C(4) fait un angle dièdre de 64,3 (3)° avec *P*(1) et de 40,4 (2)°

avec  $P(2)$ . La longueur de la liaison  $C(4)$ — $C(41)$  se révèle allongée comme conséquence probable de l'encombrement stérique autour du carbone  $C(4)$ .

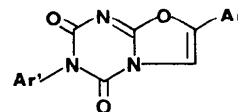
Le cycle pyridinique  $D$  [plan moyen  $P(4)$ ] porte deux groupes méthyles en positions *ortho* et *para* de l'atome d'azote  $N(52)$ . Les atomes de carbone de ces deux méthyles et du méthylène  $C(50)$  sont situés de part et d'autre du plan  $P(4)$ , à des distances inférieures à 0,1 Å. Ce méthylène situé sur l'autre position *ortho* relie le cycle  $D$  au cycle  $A$  par l'atome  $C(4)$ . Les plans  $P(1)$  et  $P(4)$  forment un angle dièdre de 33,6 (4)°. Le cycle pyridinique se trouve ainsi rabattu sur le cycle triazinique.

Le cycle  $E$  [plan  $P(5)$ ] est quasi-coplanaire au plan du cycle  $A$  [angle dièdre  $P(1)$ ,  $P(5)$ : 4,8 (4)°], ce qui le différencie des autres noyaux. Une forte conjugaison doit exister entre ce cycle et la double liaison imine  $C(6)$ — $N(5)$ .

Deux molécules homologues par un centre d'inversion, sont associées par deux liaisons hydrogène mettant en jeu l'atome d'oxygène et l'atome d'hydrogène

$H(N1)$ :  $N(1)\cdots O^i$ : 2,88 (1) Å,  $N(1)$ — $H(N1)\cdots O^i$ : 159° [code de symétrie (i):  $1-x, 1-y, -z$ ]. Ces liaisons hydrogène intermoléculaires engendrent la formation d'un contour octogonal impliquant les liaisons  $N(1)$ — $C(2)$  des cycles homologues  $A$  et  $A'$ . Il apparaît ainsi un pseudo-noyau tricyclique quasi-plan, visible à partir de la vue stéréoscopique de la Fig. 2. Cette association se révèle plus étroite que dans les cristaux d'urée.

Cette étude par diffraction de rayons X a permis de préciser les conditions de formation du noyau triazine-1,3,5 selon la voie 1 (schéma) et confirme par ailleurs le point de vue de Peet (1984). En outre, elle s'est révélée originale car à notre connaissance, seules quelques molécules de structure voisine ont été décrites: le noyau dihydro-1,6 triazine-1,3,5 avec un atome de carbone endocyclique hybridé  $sp^3$  (Ammon & Plastas, 1979); le noyau dioxo-2,4 tétrahydro-1,2,3,4 triazine-1,3,5 inclus dans une oxazolo[3,2-*a*]triazine-1,3,5 dione-2,4 (VI) (Shibata, Tanaka, Inoue & Ishida, 1982).



(VI) Ar =  $C_6H_5$   
Ar' = phényl-5 oxazolyl-2

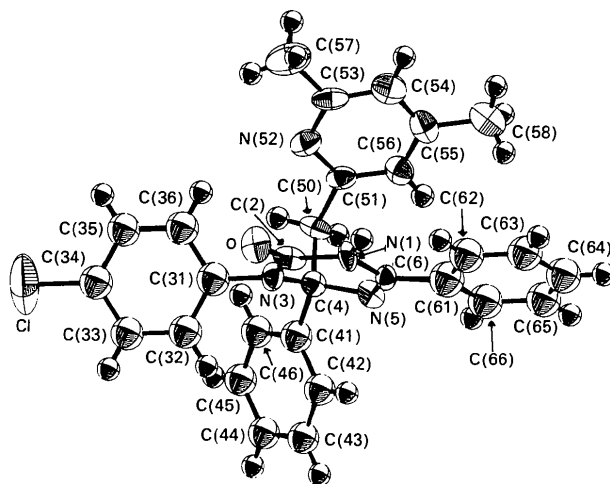


Fig. 1. Vue en perspective de la molécule et numérotage des atomes.

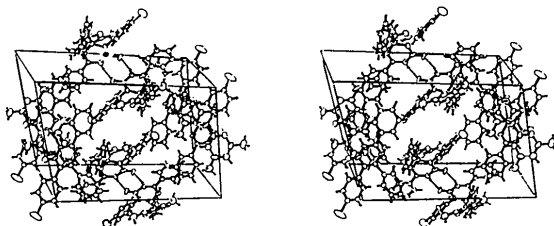


Fig. 2. Vue stéréoscopique du contenu de la maille. Origine en bas, à gauche,  $x$  horizontal,  $z$  vertical.

### Références

- AMMON, H. L. & PLASTAS, L. A. (1979). *Acta Cryst.* B35, 3106–3109.
- CARRUTHERS, J. R. & WATKIN, D. J. (1984). *CRYSTALS, an Advanced Crystallographic Program System*. Chemical Crystallography Laboratory, Oxford Univ., Angleterre.
- DOBLER, M. & PETTER, W. (1978). *Cryst. Struct. Commun.* 7(2), 321–326.
- HÄFELINGER, G. (1975). *The Chemistry of Amidines and Imidates*, édité par S. PATAI, ch. 1, pp. 5–6. London: John Wiley.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV, Tableaux 2.2B (p. 99) et 2.3.1 (p. 149). Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.)
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- KIMNY, T., GASQUEZ, F. & COMPAGNON, P. L. (1988). *Synthesis*, 5, 412–416.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN11/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- PEET, N. P. (1984). *Chem. Heterocycl. Compd.* 43, 719–772.
- SHIBATA, M., TANAKA, C., INOUE, M. & ISHIDA, T. (1982). *Chem. Pharm. Bull.* 30(2), 412–418.
- WYCKOFF, R. W. G. (1966). *Crystal Structures*, Tome 5. New York: Interscience.