

negative conclusion is reinforced by noting that the differences in the S—O bond lengths are *not* in the expected direction, suggesting that crystal packing forces may play a dominant role. The corresponding C—S bond length in 3-MeO-4-MeSO₂C₆H₃-CONHCH₂CH₂NEt₂ is 1.760 (3) Å (Houttemane, Boivin, Nowogrocki, Thomas, Bonte & Debaert, 1983) and in 2,4-(MeO)₂C₆H₃SO₂CH(SO₂Me)₂ it is 1.730 (4) Å (Grossert, Hoyle, Cameron, Roe & Vincent, 1987).

It is of some interest to compare the packing diagrams for the two sulfones (Figs. 2 and 4). In the methoxy-substituted compounds the molecules are 'paired' with clear π - π interactions between the aromatic rings. Longer range interactions are also of the 'head-to-head' and 'tail-to-tail' variety. The structure of methyl phenyl sulfone is in sharp contrast, with no obvious π - π interactions and anti-parallel chains of molecules in a 'head-to-tail' arrangement. There is no obvious explanation for this difference. Further studies of this type of compound are underway.

We thank the SERC for a grant (to RMH) and the London Borough of Richmond for a grant (to RTP).

References

- FRENZ, B. A. (1984). *Enraf-Nonius Structure Determination Package*. College Station, Texas, USA, and Enraf-Nonius, Delft, The Netherlands.
- GROSSERT, J. S., HOYLE, J., CAMERON, T. S., ROE, S. P. & VINCENT, B. R. (1987). *Can. J. Chem.* **65**, 1407-1415.
- HAUBACK, B. C., HELGEMO, K. M. & MO, F. (1988). *Acta Chem. Scand. Ser. A*, **42**, 37-44.
- HOUTTEMANE, C., BOIVIN, J. C., NOWOGROCKI, G., THOMAS, D. J., BONTE, J. P. & DEBAERT, M. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 585-586.
- MO, F. & THORKILDSEN, G. (1986). *Acta Chem. Scand. Ser. A*, **40**, 481-486.
- MOTHERWELL, W. D. S. (1976). *PLUTO*. Program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.
- SHELDRICK, G. M. (1985). *SHELXS86. Crystallographic Computing 3*, edited by G. M. SHELDRICK, C. KRÜGER & R. GODDARD, pp. 175-189. Oxford Univ. Press.
- VORONTSOVA, L. G. (1965). *Kristallografiya*, **10**, 187-193.
- ZHAO, S. H., SAMUEL, O. & KAGAN, H. B. (1989). *Org. Synth.* **68**, 49-54.

Acta Cryst. (1992). **C48**, 720-723

Structures Cristallines de Deux Dérivés de l'Oxaphénalène: les 2-Benzoyl- et 2-(4-Méthoxybenzoyl)-6-méthoxynaphto[1,8-*bc*]pyranes

PAR H. ALLOUCHI, J.-P. BIDEAU ET M. COTRAIT

Laboratoire de Cristallographie, URA 144 du CNRS, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Libération,
F-33405 Talence CEDEX, France

ET J.-P. BUISSON ET P. DEMERSEMAN

Service de Chimie, Institut Curie, 26 rue d'Ulm, URA 1387 du CNRS, F-75231 Paris CEDEX, France

(Reçu le 18 avril 1991, accepté le 30 septembre 1991)

Abstract. 6-Methoxynaphtho[1,8-*bc*]pyran-2-yl phenyl ketone, (I), C₂₀H₁₄O₃, monoclinic, $M_r = 302.3$, $P2_1/n$, $a = 10.522$ (9), $b = 12.63$ (2), $c = 11.644$ (6) Å, $\beta = 103.40$ (3)°, $V = 1505$ Å³, $Z = 4$, $D_x = 1.334$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Cu } K\alpha) = 1.54178$ Å, graphite monochromator, $\mu = 0.733$ mm⁻¹, $F(000) = 632$, $T = 298$ K, $R = 0.042$ for the 2058 observed reflections. 6-Methoxynaphtho[1,8-*bc*]pyran-2-yl 4-methoxyphenyl ketone, (II), C₂₁H₁₆O₄, monoclinic, $M_r = 332.4$, $P2_1/n$, $a = 14.310$ (2), $b = 16.260$ (1), $c = 7.62$ (1) Å, $\beta = 115.20$ (1)°, $V = 1604$ Å³, $Z = 4$, $D_x = 1.376$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Cu } K\alpha) = 1.54178$ Å, graphite monochromator, $\mu = 0.74$ mm⁻¹, $F(000) = 696$, $T = 298$ K, $R = 0.044$ for the 2540 observed reflections.

The oxaphenalene nuclei of compounds (I) and (II) are quasiplanar and the double bond between C(2) and C(3) shows a greater ethylenic character than that observed in the naphthofuran series, in good agreement with ¹H and ¹³C NMR data.

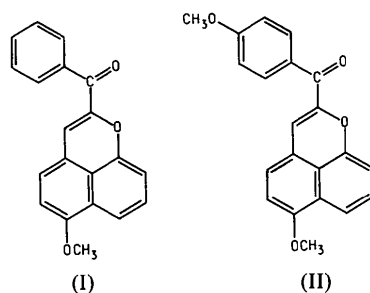
Introduction. Parmi les substances les plus génotoxiques actuellement connues figurent certains dérivés des arénofuranes et particulièrement des 2-nitronaphto[2,1-*b*]furanes (Royer & Buisson, 1986; Ajana, Bideau, Cotrait, Buisson, Demerseman, Einhorn & Royer, 1988).

Plus récemment, il a été montré que des 2-nitroxaphénalènes, méthoxylés ou non, possèdent

également un très haut pouvoir génotoxique (Royer, Buisson, Vlemingx & Moens, 1986) et cancérigène *in vivo* (Salmon, Buisson, Hendrickx, Vielh, Aussepé, Moens & Royer, 1989).

Ces oxaphénalènes substitués en 2 dérivent d'un squelette qui possède certaines analogies avec celui des arénofuranes déjà évoqués. Au cours des études spectroscopiques dont ils ont fait l'objet (Platzer, Buisson & Demerseman, 1992), il est apparu en RMN du proton et du ^{13}C , des déplacements chimiques assez surprenants de certains signaux caractéristiques de ces molécules, qui impliquent des distributions perturbées et un faible degré d'aromaticité. Cependant c'est toujours le carbone situé en α de l'hétéroatome qui subit les attaques des réactifs électrophiles.

Nous avons donc souhaité étudier l'influence sur l'aromaticité globale de la molécule, de l'adjonction de groupements susceptibles d'augmenter la conjugaison. C'est pourquoi nous avons entrepris une étude structurale radiocristallographique d'oxaphénalènes portant sur la position α de l'hétérocycle des substituants aroyles d'effets donneurs différents en électron π : les 2-benzoyl-6-méthoxynaphtho[1,8-*bc*]pyrane (I) et 2-(4-méthoxybenzyl)-6-méthoxynaphtho[1,8-*bc*]pyrane (II).



Partie expérimentale. Les composés (I) et (II) ont été préparés selon le protocole que nous avons récemment décrit (Buisson & Royer, 1988). Des cristaux de couleur orangée [(I) et (II)], ont été obtenus par lente évaporation de solutions dans l'éthanol. Dimensions des cristaux: $0,2 \times 0,4 \times 0,6$ (I) et $0,15 \times 0,35 \times 0,7$ mm (II); 25 réflexions avec θ compris entre 20 et 40° (I), 25 et 45° (II) ont été utilisées pour le réglage des deux cristaux; largeur de balayage de $(1,0 + 0,15\text{tg}\theta)$ (I) et $(1,0 + 0,75\text{tg}\theta)$ (II); largeur de fente du détecteur de $(1,8 + 0,5\text{tg}\theta)$ (I) et $(1,3 + 1,2\text{tg}\theta)$ mm (II); mesure des intensités diffractées avec un diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4 pour $\sin\theta/\lambda < 0,59 \text{ \AA}^{-1}$ ($h \leq 12$, $k \leq 14$, $l \leq 13$) (I) et $\sin\theta/\lambda < 0,62 \text{ \AA}^{-1}$ ($-17 \leq h \leq 17$, $k \leq 20$, $l \leq 9$) (II) avec un balayage $\omega-2\theta$; correction d'absorption expérimentale; pas de décroissance des intensités de référence 060 et 311 (I), 117, 251 et 342 (II); 2692 (I)

et 2978 (II) réflexions mesurés, et 2058 (I) et 2540 (II) réflexions indépendantes avec $I > 2,5\sigma(I)$ ont été retenues; les structures ont été résolues grâce au programme MITHRIL (Gilmore, 1984), les paramètres affinés par la méthode des moindres carrés (blocs diagonaux sur les F) avec des facteurs d'agitation thermique anisotrope pour les atomes C et O; les atomes d'hydrogène ont été localisés sur les sections différence de Fourier et affinés avec des facteurs d'agitation thermique isotrope, les facteurs de diffusion de Cromer & Waber (1974) pour les atomes non-hydrogène, de Stewart, Davidson & Simpson (1965) pour les hydrogènes, densité résiduelle ρ de $0,3$ et $-0,2$ pour (I), de $0,35$ et $-0,2$ e \AA^{-3} pour (II); $R = 0,042$, $wR = 0,049$ [$w = 1/\sigma^2(F)$], $S = 0,86$, $(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,5$, 210 paramètres, pour (I), et $R = 0,044$, $wR = 0,055$, $S = 0,67$, $(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,3$, 289 paramètres, pour (II).

Discussion. Les paramètres atomiques sont donnés dans le Tableau 1.* Les projections des structures (I) et (II) suivant les axes Oy et Oz sont représentées sur les Figs. 1(a) et 1(b). Les longueurs de liaison et angles de valence sont rassemblés dans le Tableau 2; les molécules (I) et (II) ne diffèrent que par les cétones aryles fixées en position 2, benzoyl pour (I), 4'-méthoxybenzoyl pour (II). Il existe une remarquable concordance des longueurs de liaison et des angles de valence au niveau du noyau oxaphénalène substitué en position 2 par une cétone ou un ester et en position 6 par un groupe méthoxy (Bideau, Cotrait, Buisson & Demerseman, 1991). Les tracés ORTEP (Johnson, 1965) des deux molécules sont représentés sur la Fig. 2. On peut remarquer que:

(a) La liaison C(2)—C(3), voisine de $1,33 \text{ \AA}$ correspond à une double liaison; celle-ci est à rapprocher de celle du groupement oxyvinylique des nitro-2-naphthofuranes (Ajana, 1987).

(b) Les distances O—C sont proches de $1,38 \text{ \AA}$.

(c) Les distances C—C adoptent des valeurs comprises entre $1,37$ et $1,44 \text{ \AA}$. Ces dernières peuvent s'écarter plus ou moins des valeurs observées dans les structures connues de quelques molécules aromatiques polycycliques: pyrène, chrysène, tetracène, triphénylène, *etc.* (*Molecular Structures and Dimensions*, 1972). C'est le cas en particulier des distances C(5)—C(6), C(7)—C(8), C(9)—C(10) et C(4)—C(13) qui sont ici très proches de $1,37 \text{ \AA}$ et peuvent valoir $1,32 \text{ \AA}$ dans le pyrène, $1,39$ à $1,40 \text{ \AA}$ dans le triphénylène, *etc.*

* Les listes des facteurs de structure, des paramètres d'agitation thermique anisotrope et des paramètres des atomes d'hydrogène ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 54703: 39 pp.). On peut obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. Coordonnées atomiques et coefficients d'agitation thermique équivalents (Å²) avec leurs écarts-types entre parenthèses
$$B_{eq} = (4/3) \sum_i \sum_j \beta_{ij} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

(I)	x	y	z	B _{eq}
O(1)	0,1961 (1)	0,0929 (1)	1,0103 (1)	4,1 (1)
C(2)	0,2730 (2)	0,1822 (1)	1,0129 (2)	3,5 (1)
C(3)	0,3703 (2)	0,1872 (1)	0,9574 (2)	3,6 (1)
C(4)	0,4978 (2)	0,0991 (2)	0,8280 (2)	4,2 (1)
C(5)	0,5224 (2)	0,0084 (2)	0,7667 (2)	4,4 (1)
C(6)	0,4522 (2)	-0,0826 (1)	0,7695 (2)	3,9 (1)
C(7)	0,2743 (2)	-0,1791 (1)	0,8368 (2)	4,3 (1)
C(8)	0,1771 (2)	-0,1764 (2)	0,8962 (2)	4,6 (1)
C(9)	0,1508 (2)	-0,0848 (2)	0,9549 (2)	4,2 (1)
C(10)	0,2251 (2)	0,0036 (1)	0,9525 (2)	3,5 (1)
C(11)	0,3265 (2)	0,0053 (1)	0,8920 (1)	3,2 (1)
C(12)	0,3514 (2)	-0,0877 (1)	0,8329 (2)	3,5 (1)
C(13)	0,4021 (2)	0,0989 (1)	0,8905 (2)	3,4 (1)
O(14)	0,4682 (1)	-0,1741 (1)	0,7120 (1)	4,9 (1)
C(15)	0,5514 (2)	-0,1706 (2)	0,6308 (2)	5,7 (1)
C(16)	0,2382 (2)	0,2654 (1)	1,0893 (2)	3,9 (1)
O(17)	0,1658 (2)	0,2454 (1)	1,1545 (1)	5,9 (1)
C(18)	0,2935 (2)	0,3741 (1)	1,0874 (2)	3,8 (1)
C(19)	0,2936 (2)	0,4266 (2)	0,9828 (2)	4,6 (1)
C(20)	0,3324 (3)	0,5320 (2)	0,9857 (3)	6,5 (1)
C(21)	0,3737 (3)	0,5824 (2)	1,0916 (3)	7,7 (1)
C(22)	0,3760 (3)	0,5307 (2)	1,1955 (3)	7,2 (1)
C(23)	0,3345 (2)	0,4267 (2)	1,1944 (2)	5,5 (1)

(II)	x	y	z	B _{eq}
O(1)	0,1332 (1)	0,4005 (1)	0,2839 (2)	3,5 (1)
C(2)	0,0705 (1)	0,3404 (1)	0,3026 (3)	3,1 (1)
C(3)	-0,0202 (1)	0,3572 (1)	0,3058 (3)	2,9 (1)
C(4)	-0,1545 (1)	0,4626 (1)	0,2714 (3)	3,2 (1)
C(5)	-0,1892 (1)	0,5447 (1)	0,2334 (3)	3,5 (1)
C(6)	-0,1289 (1)	0,6037 (1)	0,2057 (3)	3,5 (1)
C(7)	0,0389 (2)	0,6443 (1)	0,2012 (3)	3,7 (1)
C(8)	0,1334 (2)	0,6208 (1)	0,2145 (3)	4,1 (1)
C(9)	0,1651 (1)	0,5389 (1)	0,2422 (3)	3,8 (1)
C(10)	0,0997 (1)	0,4811 (1)	0,2587 (2)	3,0 (1)
C(11)	0,0026 (1)	0,5016 (1)	0,2503 (2)	2,8 (1)
C(12)	-0,0292 (1)	0,5849 (1)	0,2186 (3)	3,2 (1)
C(13)	-0,0609 (1)	0,4397 (1)	0,2768 (2)	2,8 (1)
O(14)	-0,1560 (1)	0,6849 (1)	0,1667 (2)	4,8 (1)
C(15)	-0,2606 (2)	0,7060 (2)	0,1151 (5)	6,7 (1)
C(16)	0,1208 (1)	0,2591 (1)	0,3299 (3)	3,7 (1)
O(17)	0,2151 (1)	0,2560 (1)	0,3923 (3)	6,1 (1)
C(18)	0,0592 (1)	0,1822 (1)	0,2812 (3)	3,1 (1)
C(19)	-0,0451 (1)	0,1774 (1)	0,1500 (3)	3,3 (1)
C(20)	-0,0954 (1)	0,1029 (1)	0,1077 (3)	3,8 (1)
C(21)	-0,0434 (2)	0,0311 (1)	0,1943 (3)	3,9 (1)
C(22)	0,0603 (2)	0,0346 (1)	0,3207 (3)	4,1 (1)
C(23)	0,1102 (1)	0,1093 (1)	0,3614 (3)	3,8 (1)
O(24)	-0,1009 (1)	-0,0387 (1)	0,1458 (3)	5,6 (1)
C(25)	-0,0505 (2)	-0,1154 (1)	0,2140 (5)	6,1 (1)

(d) Les noyaux oxaphénalènes sont approximativement plans: les atomes C(15), C(16) et O(17) s'écartent significativement du plan oxaphénalène, respectivement de -0,286 (3), 0,138 (3) et 0,383 (3) Å (I); les atomes O(14), C(15), C(16), O(17) et C(18) s'écartent notablement du noyau oxaphénalène respectivement de -0,129 (2), -0,430 (2), 0,050 (3), 0,368 (3) et 0,567 (3) Å (II). Les écarts sont particulièrement élevés pour les atomes O(14) et C(16), qui devraient normalement se situer dans le plan du noyau oxaphénalène comme c'est le cas pour les structures des deux dérivés de l'oxaphénalène précités. Ceci peut s'expliquer par une forte contrainte stérique due au branchement d'un cycle phényl au niveau de l'atome C(16).

(e) Les angles de torsion valent respectivement: O(1)—C(2)—C(16)—O(17) = 11,3 (2) (I) et 22,5 (2)°

Tableau 2. Longueurs de liaisons (Å) et angles de valence (°) avec leurs écart-types entre parenthèses

	(I)	(II)
O(1)—C(2)	1,384 (3)	1,374 (2)
O(1)—C(10)	1,383 (3)	1,381 (2)
C(2)—C(3)	1,333 (3)	1,336 (3)
C(2)—C(16)	1,477 (4)	1,477 (3)
C(3)—C(13)	1,443 (3)	1,442 (3)
C(4)—C(5)	1,405 (3)	1,401 (2)
C(4)—C(13)	1,372 (3)	1,374 (3)
C(5)—C(6)	1,370 (3)	1,365 (3)
C(6)—C(12)	1,428 (3)	1,421 (3)
C(6)—O(14)	1,365 (3)	1,373 (3)
C(7)—C(8)	1,361 (3)	1,367 (3)
C(7)—C(12)	1,418 (3)	1,418 (3)
C(8)—C(9)	1,404 (3)	1,393 (3)
C(9)—C(10)	1,368 (3)	1,368 (3)
C(10)—C(11)	1,408 (3)	1,404 (3)
C(11)—C(12)	1,416 (3)	1,416 (3)
C(11)—C(13)	1,427 (3)	1,427 (3)
O(14)—C(15)	1,430 (3)	1,418 (3)
C(16)—O(17)	1,222 (3)	1,226 (3)
C(16)—C(18)	1,493 (3)	1,483 (3)
C(18)—C(19)	1,389 (3)	1,401 (3)
C(18)—C(23)	1,389 (3)	1,389 (3)
C(19)—C(20)	1,390 (3)	1,375 (3)
C(20)—C(21)	1,366 (3)	1,390 (3)
C(21)—C(22)	1,370 (3)	1,383 (3)
C(22)—C(23)	1,383 (3)	1,376 (3)
C(21)—O(24)		1,358 (3)
O(24)—C(25)		1,423 (3)

C(2)—O(1)—O(10)	118,8 (2)	119,2 (2)
O(1)—C(2)—C(3)	122,6 (2)	122,5 (2)
O(1)—C(2)—C(16)	111,6 (2)	110,5 (2)
C(3)—C(2)—C(16)	125,7 (2)	126,8 (2)
C(2)—C(3)—C(13)	121,7 (2)	121,3 (2)
C(5)—C(4)—C(13)	120,8 (2)	121,0 (2)
C(4)—C(5)—C(6)	120,5 (2)	120,4 (2)
C(5)—C(6)—C(12)	121,3 (2)	121,3 (2)
C(5)—C(6)—O(14)	124,8 (2)	124,8 (2)
C(12)—C(6)—O(14)	113,9 (2)	113,8 (2)
C(8)—C(7)—C(12)	119,9 (2)	120,0 (2)
C(7)—C(8)—C(9)	121,7 (2)	121,7 (2)
C(8)—C(9)—C(10)	118,9 (2)	118,7 (2)
O(1)—C(10)—C(9)	117,6 (2)	117,1 (2)
O(1)—C(10)—C(11)	120,6 (2)	120,7 (2)
C(9)—C(10)—C(11)	121,8 (2)	122,3 (2)
C(10)—C(11)—C(12)	118,5 (2)	118,4 (2)
C(10)—C(11)—C(13)	120,5 (2)	120,2 (2)
C(12)—C(11)—C(13)	121,0 (2)	121,4 (2)
C(6)—C(12)—C(7)	123,6 (2)	123,8 (2)
C(6)—C(12)—C(11)	117,2 (2)	118,9 (2)
C(7)—C(12)—C(11)	119,2 (2)	119,4 (2)
C(3)—C(13)—C(4)	125,1 (2)	125,6 (2)
C(3)—C(13)—C(11)	115,7 (2)	116,0 (3)
C(4)—C(13)—C(11)	119,2 (2)	118,5 (2)
C(6)—C(14)—C(15)	117,5 (2)	117,4 (2)
C(2)—C(16)—O(17)	120,4 (2)	118,8 (2)
C(2)—C(16)—C(18)	119,6 (2)	121,2 (2)
O(17)—C(16)—C(18)	120,1 (2)	120,0 (2)
C(16)—C(18)—C(19)	122,1 (2)	124,3 (2)
C(16)—C(18)—C(23)	117,9 (2)	117,7 (3)
C(18)—C(19)—C(20)	119,8 (2)	120,5 (2)
C(19)—C(20)—C(21)	119,3 (3)	120,5 (3)
C(20)—C(21)—C(22)	120,8 (3)	119,6 (2)
C(21)—C(22)—C(23)	120,2 (3)	119,6 (2)
C(18)—C(23)—C(22)	119,6 (2)	115,7 (2)
C(22)—C(21)—O(24)		124,7 (2)

(II), C(3)—C(2)—C(16)—C(18) = 14,2 (2) (I) et 26,8 (2)° (II), C(5)—C(6)—O(14)—C(15) = -8,7 (2) (I) et -12,6 (2)° (II), C(2)—C(16)—C(18)—C(19) = 47,0 (2) (I) et 23,1 (2)° (II), C(20)—C(21)—O(24)—C(25) = -6,1 (2)° (II).

Il existe une très forte gêne stérique entre les noyaux oxaphénalène et benzène au niveau des liaisons C(3)—H(103) et C(19)—H(119) pour les deux dérivés. On y retrouve la géométrie particulière des groupements méthoxyoxaphénaléniques (Bideau

et al., 1991). Il existe un recouvrement important des noyaux oxaphénalène en (x, y, z) et $(-x, 1-y, 1-z)$, distants de 3,38 Å l'un de l'autre pour les molécules (II) et beaucoup plus faible des noyaux en (x, y, z) et $(-x, 1-y, 2-z)$, distants de 3,53 Å l'un de l'autre pour les molécules (I).

La cohésion cristalline est en outre assurée par de nombreuses interactions de van der Waals entre molécules voisines.

Les deux molécules étudiées ici possèdent des géométries assez voisines. Le caractère éthylénique renforcé de la double liaison C(2)—C(3) du squelette de l'oxaphénalène, malgré l'existence d'une conjugaison avec les systèmes aroyliques, est tout à fait cohérent avec les fortes activités génotoxiques et cancérigènes des dérivés α -nitrés de cette série. Il apparaît aussi que les liaisons C—C sont légèrement différentes de celles observées dans les molécules polycycliques connues et pourraient correspondre à une diminution du

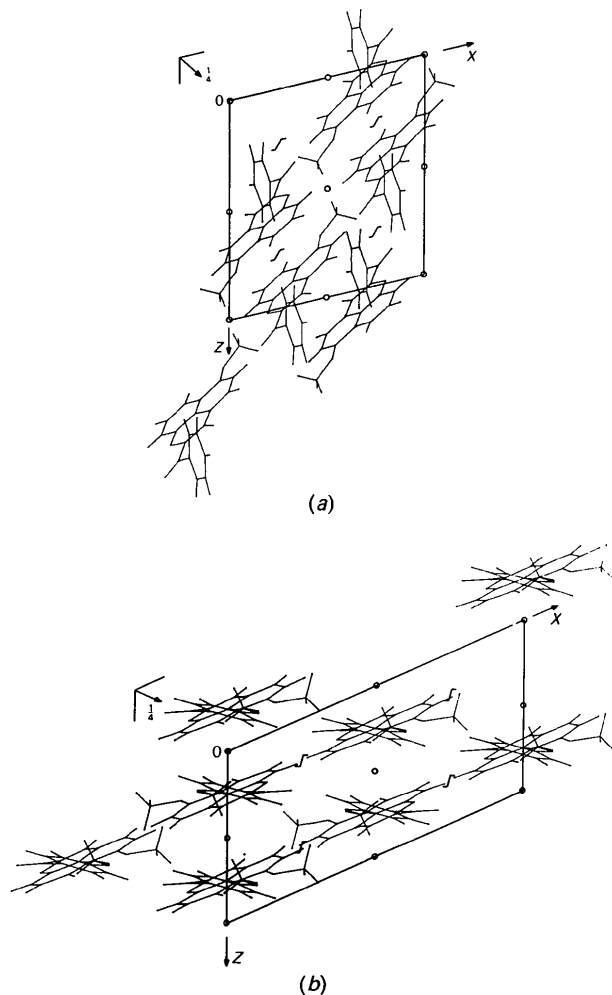


Fig. 1. Projection des structures parallèlement à l'axe Oy pour (a) (I) et (b) (II).

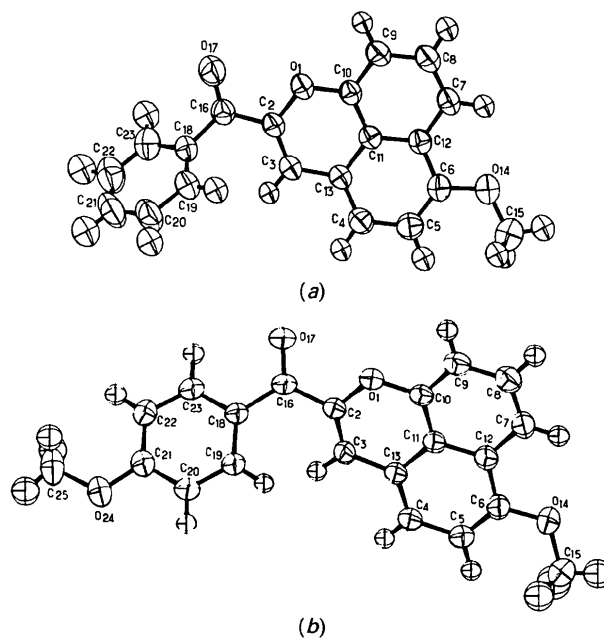


Fig. 2. Représentation ORTEP (Johnson, 1965) des molécules (a) (I) et (b) (II).

degré d'aromaticité tel qu'il avait été mis en évidence grâce aux spectres RMN du proton et du ^{13}C .

Il existe une gêne stérique notable entre les cycles oxaphénalène et benzène. Enfin, il y a une superposition plus importante des noyaux oxaphénalènes, pour (II) que pour (I).

Références

- AJANA, A. (1987). Thèse, Univ. Bordeaux I, France.
- AJANA, A., BIDEAU, J.-P., COTRAIT, M., BUISSON, J.-P., DEMERSEMAN, P., EINHORN, J. & ROYER, R. (1988). *Eur. J. Med. Chem.* **23**, 341–346.
- BIDEAU, J.-P., COTRAIT, M., BUISSON, J.-P. & DEMERSEMAN, P. (1991). *Acta Cryst.* **C47**, 1667–1670.
- BUISSON, J.-P. & ROYER, R. (1988). *J. Heterocycl. Chem.* **25**, 539–542.
- CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1974). *International Tables for X-ray Crystallography*, Tome IV. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel Kluwer Academic Publishers, Dordrecht.)
- GILMORE, C. J. (1984). *J. Appl. Cryst.* **17**, 42–46.
- JOHNSON, C. K. (1965). ORTEP. Rapport ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- Molecular Structures and Dimensions* (1972). Tome A1. Cambridge Crystallographic Data Centre, Univ. Chemical Laboratory, Cambridge CB2 1EW, Angleterre.
- PLATZER, N., BUISSON, J.-P. & DEMERSEMAN, P. (1992). *J. Heterocycl. Chem.* Sous presse.
- ROYER, R. & BUISSON, J.-P. (1986). *Ann. Pharm. Fr.* **44**, 177–189.
- ROYER, R., BUISSON, J.-P., VLEMINCKX, C. & MOENS, W. (1986). *Eur. J. Med. Chem.* **21**, 351–354.
- SALMON, R. J., BUISSON, J.-P., HENDRICKX, B., VIELH, P., AUSSEPÉ, L., MOENS, W. & ROYER, R. (1989). *Carcinogenesis*, **10**, 803–805.
- STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.