

$S = 1,87$   
 1167 réflexions  
 191 paramètres  
 Les atomes d'hydrogène en position théorique  
 $w = 1/(\{[F^2 + 2F\sigma(F)]^{1/2} - F\}^2 + 3,5)$

Correction d'extinction:  
 Stout & Jensen (1968)  
 Coefficient d'extinction:  
 $5(1) \times 10^{-7}$   
 Facteurs de diffusion des  
*International Tables for X-ray Crystallography*  
 (1974, Tome IV)

les paramètres des atomes d'hydrogène n'ont pas été affinés. La Fig. 1 a été réalisée avec le programme *ORTEPII* (Johnson, 1976). Tous les programmes utilisés appartiennent au système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc. 1982).

Tableau 1. *Coordonnées atomiques et facteurs d'agitation thermique isotropes équivalents* ( $\text{Å}^2$ )

$$B_{\text{eq}} = \frac{4}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	x	y	z	$B_{\text{eq}}$
N(1)	0,8154 (2)	0,2242 (7)	0,4982 (4)	3,26 (8)
C(2)	0,8425 (2)	0,0524 (8)	0,5450 (4)	3,1 (1)
C(3)	0,8046 (3)	-0,0963 (9)	0,5989 (4)	3,5 (1)
C(4)	0,7314 (3)	-0,0710 (9)	0,6057 (7)	3,6 (1)
C(5)	0,7023 (3)	0,109 (1)	0,5566 (5)	4,0 (1)
C(6)	0,7451 (2)	0,2500 (9)	0,5026 (4)	3,5 (1)
N(7)	0,9180 (2)	0,0331 (7)	0,5386 (4)	3,03 (8)
C(8)	0,9678 (2)	0,1650 (8)	0,5838 (4)	3,1 (1)
N(9)	1,0310 (2)	0,1155 (7)	0,5521 (4)	3,67 (9)
N(10)	1,0238 (2)	-0,0589 (7)	0,4852 (4)	3,9 (1)
C(11)	0,9559 (3)	-0,1031 (8)	0,4766 (4)	3,2 (1)
C(12)	0,9523 (2)	0,3371 (8)	0,6583 (4)	3,3 (1)
C(13)	0,9914 (3)	0,5274 (9)	0,6557 (5)	4,0 (1)
C(14)	0,9819 (3)	0,6867 (9)	0,7284 (6)	4,9 (1)
C(15)	0,9313 (3)	0,662 (1)	0,8055 (5)	5,2 (1)
C(16)	0,8910 (3)	0,471 (1)	0,8077 (5)	5,3 (2)
C(17)	0,9017 (3)	0,3092 (9)	0,7342 (5)	4,3 (1)
C(18)	0,9244 (3)	-0,276 (1)	0,4131 (5)	4,2 (1)
C(19)	0,8812 (3)	-0,192 (1)	0,3238 (5)	5,6 (2)
C(20)	0,6861 (3)	-0,231 (1)	0,6652 (5)	5,5 (1)
C(21)	0,7152 (3)	0,439 (1)	0,4419 (6)	4,9 (1)

Tableau 2. *Paramètres géométriques* ( $\text{Å}, ^\circ$ )

N(1)—C(2)	1,326 (7)	C(8)—C(12)	1,471 (7)
N(1)—C(6)	1,338 (6)	N(9)—N(10)	1,393 (6)
C(2)—C(3)	1,360 (7)	N(10)—C(11)	1,317 (6)
C(2)—N(7)	1,434 (6)	C(11)—C(18)	1,478 (8)
C(3)—C(4)	1,395 (7)	C(12)—C(13)	1,387 (8)
C(4)—C(5)	1,395 (8)	C(12)—C(17)	1,390 (8)
C(4)—C(20)	1,520 (9)	C(13)—C(14)	1,379 (9)
C(5)—C(6)	1,381 (8)	C(14)—C(15)	1,398 (9)
C(6)—C(21)	1,518 (9)	C(15)—C(16)	1,404 (9)
N(7)—C(8)	1,377 (6)	C(16)—C(17)	1,399 (9)
N(7)—C(11)	1,369 (7)	C(18)—C(19)	1,516 (9)
C(8)—N(9)	1,300 (6)		
C(2)—N(1)—C(6)	117,3 (4)	N(7)—C(8)—C(12)	125,2 (4)
N(1)—C(2)—C(3)	125,1 (4)	N(9)—C(8)—C(12)	124,3 (4)
N(1)—C(2)—N(7)	115,1 (4)	C(8)—N(9)—N(10)	107,1 (4)
C(3)—C(2)—N(7)	119,8 (5)	N(9)—N(10)—C(11)	107,9 (4)
C(2)—C(3)—C(4)	118,6 (5)	N(7)—C(11)—N(10)	109,3 (4)
C(3)—C(4)—C(5)	116,7 (5)	N(7)—C(11)—C(18)	124,5 (4)
C(3)—C(4)—C(20)	121,2 (5)	N(10)—C(11)—C(18)	126,1 (5)
C(5)—C(4)—C(20)	122,1 (5)	C(8)—C(12)—C(13)	119,2 (5)
C(4)—C(5)—C(6)	120,5 (5)	C(8)—C(12)—C(17)	121,4 (5)
N(1)—C(6)—C(5)	121,8 (5)	C(13)—C(12)—C(17)	119,3 (5)
N(1)—C(6)—C(21)	115,9 (5)	C(12)—C(13)—C(14)	121,1 (5)
C(5)—C(6)—C(21)	122,3 (4)	C(13)—C(14)—C(15)	120,7 (5)
C(2)—N(7)—C(8)	127,2 (4)	C(14)—C(15)—C(16)	118,4 (6)
C(2)—N(7)—C(11)	127,2 (4)	C(15)—C(16)—C(17)	120,4 (6)
C(8)—N(7)—C(11)	105,1 (4)	C(12)—C(17)—C(16)	120,2 (5)
N(7)—C(8)—N(9)	110,5 (4)	C(11)—C(18)—C(19)	113,8 (5)

La structure a été résolue avec le programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Les atomes d'hydrogène liés à C(20) et à C(21) ont été localisés en calculant la série de Fourier des différences ( $F_o - F_c$ ). Les positions des autres atomes d'hydrogène ont été calculées. En raison du nombre insuffisant de réflexions observées,

Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées des atomes d'hydrogène, des distances C—H, des distances interatomiques intermoléculaires et des angles de torsion ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 71676: 13 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre. [Référence de CIF: PA1067]

## Références

- B. A. Frenz & Associates, Inc. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU.  
 Johnson, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.  
 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.  
 Rodier, N., Robert, J.-M. & Le Baut, G. (1993). *Acta Cryst.* **C49**, 161–163.  
 Stout, G. H. & Jensen, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*, pp. 410–412. Londres: MacMillan.

*Acta Cryst.* (1994). **C50**, 957–960

## *N*-(2,6-Diméthylphényl)-6-hydroxy-2,5,7,8-tétraméthyl-3,4-dihydro-2*H*-1-benzopyran-2-carboxamide

N. RODIER

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques et biologiques, 5 Rue J.-B. Clément, 2296 Châtenay-Malabry CEDEX, France*

J.-P. BABINGUI, M. DUFLOS ET G. LE BAUT

*Laboratoire de Chimie thérapeutique, Faculté de Pharmacie, 1 Rue Gaston-Veil, 44035 Nantes CEDEX, France*

(Reçu le 1 juillet 1993, accepté le 1 novembre 1993)

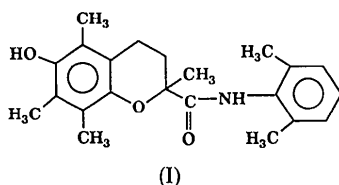
## Abstract

The title compound,  $C_{22}H_{27}NO_3$ , belongs to a class of compounds which are potent inhibitors of lipid peroxidation. Furthermore, it is very effective at

inhibiting leukotrienes biosynthesis. The benzenic rings are planar or approximately planar and the pyran ring displays a half-chair conformation. There is a delocalized orbital over the amide group. An intramolecular N—H...O hydrogen bond [2.558 (3) Å, 112 (3)°] forms a pseudo-cycle. The molecules are linked together by O—H...O hydrogen bonds [2.824 (3) Å, 160 (4)°] which form infinite chains in the direction of the *c* axis.

### Commentaire

Le composé étudié, (I), manifeste une activité inhibitrice sur la lipoperoxydation comparable à celle des 2-(aminométhyl)chromanes décrits par Jacobsen, van Doornick, Ayer, Belonga, Braugher, Hall & Houser (1992). De ce fait, il est susceptible d'être utilisé pour lutter contre l'ischémie de diverses pathologies cardio et cérébrovasculaires. C'est aussi un bon inhibiteur de la formation de leucotriènes. Son étude cristallographique a été entreprise dans le but de préciser la géométrie de sa molécule et de la comparer à celles de composés présentant le même type d'activité pharmacologique.



Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2. Les noms des atomes et les lettres utilisées pour désigner les cycles sont indiqués sur la Fig. 1.

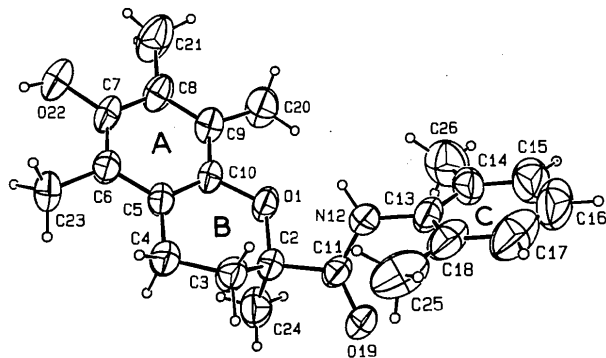


Fig. 1. Dessin de la molécule, numéros attribués à ses atomes et lettres utilisées pour désigner les cycles.

Les cycles benzéniques *A* et *C* sont plans ou très proches de la planéité. En effet, les angles de torsion endocycliques ont des valeurs absolues comprises entre 0,0 (5) et 2,9 (5)° dans le cycle *A* et entre 0,5 (6) et 2,5 (6)° dans le cycle *C*. L'angle  $P(A)P(C)$  que font entre eux les plans moyens des deux cycles est égal à 45,0 (1)°. Dans le cycle *B*, C(4), C(5), C(10) et O(1) sont coplanaires puisque l'angle de torsion endocyclique autour de C(5)—C(10) est égal à 0,5 (5)°. Si  $P(B)$  désigne le plan moyen défini par ces quatre atomes, C(2) et C(3) sont situés de part et d'autre de  $P(B)$ . Ils en sont distants respectivement de 0,263 (3) et de 0,436 (4) Å. Ainsi, le cycle *B* possède la forme demi-chaîse.

La longueur de C(11)—N(12) [1,333 (4) Å] exprime l'existence d'une orbitale délocalisée qui s'étend sur l'ensemble du groupement amide. La liaison hydrogène intramoléculaire N(12)—H(12)...O(1) [2,558 (3) Å, 112 (3)°] esquisse un cycle supplémentaire et contribue à la rigidité de l'ensemble formé par les groupements amide et dihydrobenzopyrane.

Les molécules sont associées les unes aux autres par la liaison hydrogène O(22)—H(22)...O(19<sup>i</sup>) [ $i$   $x$ ,  $-y$ ,  $\frac{1}{2} + z$ ; 2,824 (3) Å, 160 (4)°]. La Fig. 2 montre qu'elles forment des chaînes dont la direction générale est celle de l'axe *c*. Les molécules appartenant à deux chaînes voisines sont disposées tête-bêche. La molécule du composé étudié dérive de celle du *N*-phényltroloxamide (Rodier, Cense, Babingui, Courant & Le Baut, 1994) par substitution d'un groupement diméthylbenzène à un cycle benzénique. Ce remplacement a pour effet de modifier les orientations relatives des cycles *A* et *C* ainsi que l'empilement moléculaire. Dans le *N*-phényltroloxamide, l'angle  $P(A)P(C)$  est égal à 98,17 (7)°, les molécules forment des dimères, la maille est triclinique et le groupe spatial  $P\bar{1}$ .

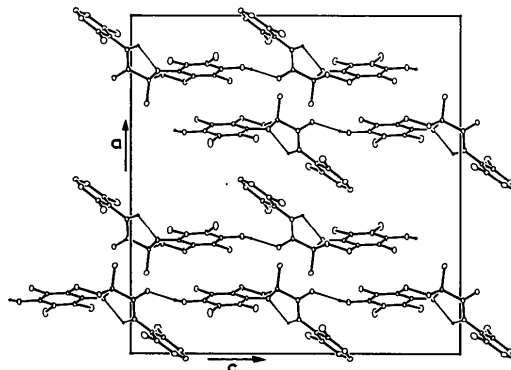


Fig. 2. Projection de la structure sur la face (010) et représentation des liaisons hydrogène intra et intermoléculaires. Les seuls atomes d'H qui apparaissent sur le dessin sont ceux qui participent aux liaisons hydrogène.

**Partie expérimentale***Données cristallines*C<sub>22</sub>H<sub>27</sub>NO<sub>3</sub>M<sub>r</sub> = 353,47

Monoclinique

C2/c

a = 21,502 (6) Å

b = 8,590 (2) Å

c = 21,188 (4) Å

β = 90,19 (2)°

V = 3913 (3) Å<sup>3</sup>

Z = 8

D<sub>x</sub> = 1,200 Mg m<sup>-3</sup>

Mo Kα radiation

λ = 0,7107 Å

Paramètres de la maille à

l'aide de 25 réflexions

θ = 6,03–11,59°

μ = 0,074 mm<sup>-1</sup>

T = 293 K

Approximativement

parallélépipédique

0,35 × 0,32 × 0,20 mm

Blanche

Source du cristal:

évaporation d'une solu-

tion dans un mélange

acétone/méthanol

*Collection des données*

Diffractomètre Enraf-Nonius

CAD-4

Balayage θ/2θ

Pas de correction

d'absorption

2722 réflexions mesurées

2722 réflexions

indépendantes

1501 réflexions observées

|I| ≥ 1,5σ(I)

θ<sub>max</sub> = 23°

h = -23 → 23

k = 0 → 9

l = 0 → 23

3 réflexions de référence

fréquence: 120 min

variation d'intensité: non

significatives

*Affinement*

Affinement basé sur les F

R = 0,051

wR = 0,050

S = 1,47

1501 réflexions

317 paramètres

Affinement des atomes d'H

sur x, y, z seulement

w = 1/σ<sup>2</sup>(F)(Δ/σ)<sub>max</sub> = 0,02Δρ<sub>max</sub> = 0,19 (4) e Å<sup>-3</sup>Δρ<sub>min</sub> = -0,16 (4) e Å<sup>-3</sup>

Correction d'extinction:

Stout &amp; Jensen (1968)

Coefficient d'extinction:

2,9 (6) × 10<sup>-7</sup>

Facteurs de diffusion des

International Tables for

X-ray Crystallography

(1974, Tome IV)

Tableau 1. Coordonnées atomiques et facteurs d'agitation thermique isotropes équivalents (Å<sup>2</sup>)
$$B_{\text{eq}} = \frac{4}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	x	y	z	B <sub>eq</sub>
O(1)	0,3362 (1)	0,1396 (3)	0,08230 (9)	4,21 (6)
C(2)	0,3090 (2)	0,0010 (4)	0,0558 (1)	3,85 (8)
C(3)	0,3257 (2)	-0,1396 (4)	0,0960 (2)	4,57 (9)
C(4)	0,3044 (2)	-0,1186 (5)	0,1641 (2)	5,1 (1)
C(5)	0,3212 (2)	0,0398 (4)	0,1889 (1)	3,61 (8)
C(6)	0,3242 (2)	0,0699 (5)	0,2543 (2)	3,91 (8)
C(7)	0,3426 (2)	0,2146 (4)	0,2743 (1)	4,07 (9)
C(8)	0,3579 (2)	0,3333 (4)	0,2325 (2)	4,43 (9)
C(9)	0,3531 (2)	0,3063 (4)	0,1678 (2)	3,97 (8)
C(10)	0,3357 (2)	0,1592 (4)	0,1480 (1)	3,47 (8)
C(11)	0,3409 (2)	-0,0200 (4)	-0,0081 (1)	3,99 (8)
N(12)	0,3986 (1)	0,0366 (4)	-0,0114 (1)	4,22 (7)
C(13)	0,4383 (2)	0,0217 (5)	-0,0651 (2)	4,58 (9)
C(14)	0,4521 (2)	0,1540 (5)	-0,0993 (2)	5,6 (1)
C(15)	0,4918 (2)	0,1396 (7)	-0,1511 (2)	8,3 (1)
C(16)	0,5151 (2)	-0,0030 (8)	-0,1672 (2)	9,6 (2)
C(17)	0,5007 (2)	-0,1326 (7)	-0,1333 (2)	8,6 (1)
C(18)	0,4626 (2)	-0,1232 (5)	-0,0800 (2)	5,9 (1)

O(19)	0,3154 (1)	-0,0932 (3)	-0,0505 (1)	5,42 (7)
C(20)	0,3655 (2)	0,4307 (5)	0,1195 (2)	6,0 (1)
C(21)	0,3786 (3)	0,4890 (5)	0,2583 (2)	8,2 (1)
O(22)	0,3471 (1)	0,2531 (3)	0,3377 (1)	5,51 (7)
C(23)	0,3077 (2)	-0,0576 (5)	0,3007 (2)	6,1 (1)
C(24)	0,2393 (2)	0,0230 (3)	0,0474 (2)	5,9 (1)
C(25)	0,4470 (2)	-0,2666 (6)	-0,0417 (2)	7,9 (1)
C(26)	0,4252 (2)	0,3084 (6)	-0,0825 (2)	8,2 (1)

Tableau 2. Paramètres géométriques (Å, °)

O(1)—C(2)	1,440 (4)	C(8)—C(21)	1,511 (6)
O(1)—C(10)	1,402 (4)	C(9)—C(10)	1,383 (5)
C(2)—C(3)	1,520 (5)	C(9)—C(20)	1,505 (5)
C(2)—C(11)	1,530 (4)	C(11)—N(12)	1,333 (4)
C(2)—C(24)	1,523 (5)	C(11)—O(19)	1,225 (4)
C(3)—C(4)	1,526 (5)	N(12)—C(13)	1,430 (4)
C(4)—C(5)	1,501 (5)	C(13)—C(14)	1,381 (6)
C(5)—C(6)	1,412 (4)	C(13)—C(18)	1,386 (6)
C(5)—C(10)	1,379 (5)	C(14)—C(15)	1,398 (5)
C(6)—C(7)	1,372 (5)	C(14)—C(26)	1,491 (7)
C(6)—C(23)	1,514 (5)	C(15)—C(16)	1,367 (8)
C(7)—C(8)	1,392 (5)	C(16)—C(17)	1,361 (8)
C(7)—O(22)	1,386 (4)	C(17)—C(18)	1,400 (6)
C(8)—C(9)	1,393 (5)	C(18)—C(25)	1,514 (6)
C(2)—O(1)—C(10)	118,9 (2)	C(8)—C(9)—C(20)	122,6 (3)
O(1)—C(2)—C(3)	110,1 (3)	C(10)—C(9)—C(20)	119,3 (3)
O(1)—C(2)—C(11)	105,1 (3)	O(1)—C(10)—C(5)	122,5 (3)
O(1)—C(2)—C(24)	109,9 (3)	O(1)—C(10)—C(9)	114,1 (3)
C(3)—C(2)—C(11)	107,3 (3)	C(5)—C(10)—C(9)	123,4 (3)
C(3)—C(2)—C(24)	113,2 (3)	C(2)—C(11)—N(12)	115,1 (3)
C(11)—C(2)—C(24)	110,8 (3)	C(2)—C(11)—O(19)	120,5 (3)
C(2)—C(3)—C(4)	111,4 (3)	N(12)—C(11)—O(19)	124,2 (3)
C(3)—C(4)—C(5)	111,4 (3)	C(11)—N(12)—C(13)	124,6 (3)
C(4)—C(5)—C(6)	121,2 (3)	N(12)—C(13)—C(14)	118,3 (3)
C(4)—C(5)—C(10)	120,6 (3)	N(12)—C(13)—C(18)	119,3 (3)
C(6)—C(5)—C(10)	118,1 (3)	C(14)—C(13)—C(18)	122,5 (3)
C(5)—C(6)—C(7)	118,8 (3)	C(13)—C(14)—C(15)	118,2 (4)
C(5)—C(6)—C(23)	119,7 (3)	C(13)—C(14)—C(26)	121,5 (3)
C(7)—C(6)—C(23)	121,5 (3)	C(15)—C(14)—N(12)	120,3 (4)
C(6)—C(7)—C(8)	122,4 (3)	C(14)—C(15)—C(16)	120,0 (5)
C(6)—C(7)—O(22)	122,4 (3)	C(15)—C(16)—C(17)	121,4 (4)
C(8)—C(7)—O(22)	115,2 (3)	C(16)—C(17)—C(18)	120,9 (5)
C(7)—C(8)—C(9)	119,1 (3)	C(13)—C(18)—C(17)	117,3 (4)
C(7)—C(8)—C(21)	119,2 (3)	C(13)—C(18)—C(25)	121,6 (3)
C(9)—C(8)—C(21)	121,6 (3)	C(17)—C(18)—C(25)	121,1 (4)
C(8)—C(9)—C(10)	118,1 (3)		

La structure a été résolue avec le programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et les Fig. 1 et 2 réalisées avec le programme *ORTEPII* (Johnson, 1976). Tous les programmes utilisés appartiennent au système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982).

Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des paramètres des atomes d'hydrogène, des distances C—H, N—H et O—H, des distances des atomes aux plans moyens, des angles de torsion et des distances interatomiques intermoléculaires ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 71800: 21 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre. [Référence de CIF: PA 1073]

**Références**

- B. A. Frenz & Associates, Inc. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU.
- Jacobsen, E. J., van Doornick, F. J., Ayer, D. E., Belonga, K. L., Braughler, J. M., Hall, E. D. & Houser, D. J. (1992). *J. Med. Chem.* **35**, 4464–4472.

- Johnson, C. K. (1976). *ORTEP*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- 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*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- Rodier, N., Cense, J.-M., Babingui, J.-P., Courant, J. & Le Baut, G. (1994). *Acta Cryst.* **C50**, 960–963.
- Stout, G. H. & Jensen, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*, pp. 410–412. Londres: MacMillan.

*Acta Cryst.* (1994). **C50**, 960–963

## Structure du *N*-Phényltroloxamide et du *N*-Phényltroloxthioamide, Inhibiteurs de Leucotriènes

N. RODIER

Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques et biologiques, 5 Rue J.-B. Clément, 92296 Châtenay-Malabry CEDEX, France

J.-M. CENSE

Laboratoire d'Informatique appliquée à la Chimie, ENSCP, 11 Rue P. et M. Curie, 75231 Paris CEDEX 05, France

J.-P. BABINGUI, J. COURANT ET G. LE BAUT

Laboratoire de Chimie thérapeutique, Faculté de Pharmacie, 1 Rue Gaston-Veil, 44035 Nantes CEDEX, France

(Recy le 24 juin 1993, accepté le 27 septembre 1993)

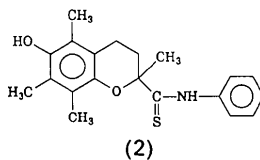
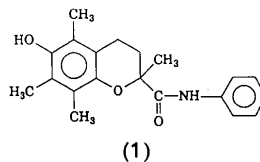
### Abstract

Both compounds [*N*-phenyl-6-hydroxy-2,5,7,8-tetramethyl-2*H*-1-benzopyran-2-carboxamide (*N*-phenyltroloxamide), C<sub>20</sub>H<sub>23</sub>NO<sub>3</sub>, and *N*-phenyl-6-hydroxy-2,5,7,8-tetramethyl-2*H*-1-benzopyran-2-carbothioamide (*N*-phenyltroloxthioamide), C<sub>20</sub>H<sub>23</sub>NO<sub>2</sub>S] have very similar molecular geometries. The dihydropyranic ring displays a half-chair conformation. There is a delocalized orbital over the amide or the thioamide group. In each molecule, a strong N—H...O and a weak C—H...O or C—H...S intramolecular hydrogen bond form two pseudocycles. The crystal structure consists of dimers in which the molecules are linked together by two intermolecular O—H...O or O—H...S hydrogen bonds.

### Commentaire

Le *N*-phényltroloxamide et le *N*-phényltroloxthioamide manifestent des propriétés inhibitrices de la lipoperoxydation et de la formation de leucotriènes. Leur étude cristallographique a été entreprise dans le cadre des relations entre la structure et l'activité pharmacologique. Elle est motivée par l'intérêt que ces deux composés sont susceptibles de présenter dans le traitement des affections d'origine allergique.

Dans ce qui suit, le *N*-phényltroloxamide et le *N*-phényltroloxthioamide sont désignés respectivement par les termes amide et thioamide ou par composé (1) et composé (2). Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rassemblés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2. La molécule de l'amide est représentée par la Fig. 1 et la projection de sa structure sur la face (010) par la Fig. 2. Les numéros des atomes et les lettres utilisées pour désigner les cycles sont les mêmes dans les deux molécules. Ces lettres sont accompagnées éventuellement du chiffre 1 ou du chiffre 2 qui rappelle le composé auquel le cycle appartient. Lorsque deux valeurs sont citées à la suite, la première se rapporte à l'amide, la seconde à la grandeur homologue du thioamide.



Les cycles *A* et *C* peuvent être considérés comme plans. En effet, les distances des atomes qui constituent chacun d'eux au plan moyen calculé avec les mêmes atomes [plan *P*(*A*1), *P*(*A*2), *P*(*C*1) ou *P*(*C*2)] restent de l'ordre des incertitudes. Les valeurs de l'angle de torsion C(4)—C(5)—C(10)—O(1) [1,0 (4) et 0,2 (3)<sup>o</sup>] indiquent que les atomes qui le forment sont coplanaires dans les deux molécules. Soit *P*(*B*) le plan moyen correspondant. C(2) et C(3) sont situés de part et d'autre de *P*(*B*). Ils sont distants respectivement de 0,369 (3) et de 0,269 (3) Å de *P*(*B*1), de 0,331 (3) et de 0,295 (3) Å de *P*(*B*2). Le cycle *B* possède donc la forme demi-chaise. La 'symétrie dominante' (Duax & Norton, 1975) est donc la symétrie par rapport à un axe binaire passant par les milieux de C(2)—C(3) et de C(5)—C(10). L'écart à la symétrie idéale s'exprime par  $\Delta C_2^2 =$