

C(13)	0,4161 (1)	0,3147 (6)	0,2302 (4)	0,056 (1)
Cl(14)	0,44690 (5)	0,1660 (2)	0,1819 (1)	0,0921 (5)
Cl(15)	0,36979 (4)	0,2340 (2)	0,2224 (1)	0,0843 (5)
Cl(16)	0,42749 (4)	0,3449 (2)	0,3447 (1)	0,0727 (5)
C(17)	0,3481 (1)	0,5267 (7)	0,0563 (4)	0,057 (1)
O(18)	0,3676 (1)	0,4325 (5)	0,0167 (3)	0,086 (1)
O(19)	0,3144 (1)	0,5697 (5)	0,0278 (3)	0,082 (1)
C(20)	0,3025 (2)	0,499 (1)	-0,0615 (5)	0,110 (3)
C(21)	0,2654 (2)	0,559 (1)	-0,0760 (6)	0,165 (4)
C(22)	0,2991 (1)	0,7980 (6)	0,1670 (4)	0,054 (1)
O(23)	0,2955 (1)	0,9160 (5)	0,1205 (3)	0,089 (1)
O(24)	0,27148 (8)	0,7121 (4)	0,2037 (3)	0,064 (1)
C(25)	0,2336 (1)	0,7716 (8)	0,1828 (5)	0,091 (3)
C(26)	0,3485 (1)	0,8830 (6)	0,3393 (4)	0,054 (1)
O(27)	0,31877 (9)	0,9488 (5)	0,3412 (3)	0,084 (1)
O(28)	0,3757 (1)	0,9067 (5)	0,3995 (2)	0,071 (1)
C(29)	0,3674 (2)	1,0159 (9)	0,4761 (4)	0,096 (3)

Tableau 2. Paramètres géométriques (Å, °)

N(1)—N(2)	1,339 (5)	C(11)—C(12)	1,455 (9)
N(1)—C(5)	1,376 (6)	C(13)—Cl(14)	1,778 (5)
N(1)—C(6)	1,477 (6)	C(13)—Cl(15)	1,779 (5)
N(2)—C(3)	1,342 (6)	C(13)—Cl(16)	1,738 (5)
C(3)—C(4)	1,393 (7)	C(17)—O(18)	1,185 (6)
C(3)—C(26)	1,469 (7)	C(17)—O(19)	1,318 (6)
C(4)—C(5)	1,379 (7)	O(19)—C(20)	1,487 (8)
C(4)—C(22)	1,500 (7)	C(20)—C(21)	1,43 (1)
C(5)—C(17)	1,461 (7)	C(22)—O(23)	1,182 (6)
C(6)—N(7)	1,423 (5)	C(22)—O(24)	1,321 (6)
C(6)—C(13)	1,531 (7)	O(24)—C(25)	1,465 (6)
N(7)—C(8)	1,353 (6)	C(26)—O(27)	1,188 (6)
C(8)—O(9)	1,193 (6)	C(26)—O(28)	1,322 (6)
C(8)—O(10)	1,350 (6)	O(28)—C(29)	1,457 (7)
O(10)—C(11)	1,465 (7)		
N(2)—N(1)—C(5)	113,0 (4)	O(10)—C(11)—C(12)	107,7 (5)
N(2)—N(1)—C(6)	119,5 (4)	C(6)—C(13)—Cl(14)	106,6 (4)
C(5)—N(1)—C(6)	127,3 (4)	C(6)—C(13)—Cl(15)	110,1 (3)
N(1)—N(2)—C(3)	104,5 (4)	C(6)—C(13)—Cl(16)	113,9 (4)
N(2)—C(3)—C(4)	111,4 (4)	Cl(14)—C(13)—Cl(15)	107,2 (2)
N(2)—C(3)—C(26)	123,3 (4)	Cl(14)—C(13)—Cl(16)	109,4 (3)
C(4)—C(3)—C(26)	125,3 (4)	Cl(15)—C(13)—Cl(16)	109,3 (3)
C(3)—C(4)—C(5)	105,9 (4)	C(5)—C(17)—O(18)	126,8 (4)
C(3)—C(4)—C(22)	127,0 (4)	C(5)—C(17)—O(19)	109,7 (4)
C(5)—C(4)—C(22)	127,0 (4)	O(18)—C(17)—O(19)	123,5 (5)
N(1)—C(5)—C(4)	105,1 (4)	C(17)—O(19)—C(20)	115,7 (4)
N(1)—C(5)—C(17)	123,8 (4)	O(19)—C(20)—C(21)	105,1 (6)
C(4)—C(5)—C(17)	131,0 (4)	C(4)—C(22)—O(23)	123,8 (5)
N(1)—C(6)—N(7)	111,3 (4)	C(4)—C(22)—O(24)	110,8 (4)
N(1)—C(6)—C(13)	111,7 (4)	O(23)—C(22)—O(24)	125,4 (5)
N(7)—C(6)—C(13)	109,5 (4)	C(22)—O(24)—C(25)	115,3 (4)
C(6)—N(7)—C(8)	119,3 (4)	C(3)—C(26)—O(27)	122,0 (5)
N(7)—C(8)—O(9)	125,8 (5)	C(3)—C(26)—O(28)	113,1 (4)
N(7)—C(8)—O(10)	108,9 (4)	O(27)—C(26)—O(28)	124,9 (5)
O(9)—C(8)—O(10)	125,3 (5)	C(26)—O(28)—C(29)	116,8 (4)
C(8)—O(10)—C(11)	117,3 (4)		

La structure a été résolue à l'aide du programme MULTAN11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et la Fig. 1 réalisée avec le programme ORTEPII (Johnson, 1976). Tous les programmes utilisés appartiennent au système SDP (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982). Les atomes de C et de N du cycle ont pu être différenciés grâce aux valeurs obtenues pour leurs facteurs de température isotropes.

Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées des atomes d'hydrogène, des distances C—H et N—H, des angles de torsion, des distances interatomiques intermoléculaires et des distances des atomes aux plans moyens ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 71801: 19 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 1076]

Références

- Allen, F. H., Kennard, O., Watson, D. G., Brammer, L., Orpen, A. G. & Taylor, R. (1987). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, S1—S19.
- B. A. Frenz & Associates, Inc. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU.
- Bondi, A. (1964). *J. Phys. Chem.* **68**, 441—451.
- 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.
- Stout, G. H. & Jensen, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*, pp. 410—412. Londres: MacMillan.

Acta Cryst. (1994). **C50**, 1173—1176

Bis[2-(3-morpholinobenzofuranyl)]phénylméthane, C₃₁H₃₀N₂O₄

N. RODIER

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

M. M'SADDEK ET M. RAMMAH

Département de Chimie, Faculté des Sciences et des Techniques, Université du Centre, Route de Kairouan, 5000 Monastir, Tunisie

K. CIAMALA

Laboratoire de Chimie organique, UFR des Sciences et des Techniques, Université de Franche-Comté, La Bouloie, 25030 Besançon CEDEX, France

(Reçu le 23 juillet 1993, accepté le 1 novembre 1993)

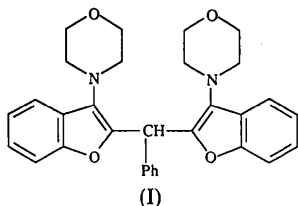
Abstract

The benzofuranyl groups and the phenyl rings are planar while the morpholinyl rings adopt chair conformations. There are very significant differences between the relative positions of the groups which form the two molecules of the asymmetric unit. However, the homologous bond lengths and angles are nearly identical. The cohesion of the crystal structure results from van der Waals interactions.

Commentaire

Le composé étudié (I) a été obtenu par action de la C-phényl-N-phénylnitronne sur le 3-morpholino-

benzofurane. C'est un produit inattendu dont les paramètres spectroscopiques (IR, RMN de ¹H et de ¹³C) n'ont pas permis d'établir la structure moléculaire. L'étude cristallographique a été entreprise dans le but de résoudre ce problème.



Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1, les principales distances interatomiques et les angles valencielles dans le Tableau 2. Les deux molécules contenues dans l'unité asymétrique sont appelées molécule (1) et molécule (2). La Fig. 1 représente la molécule (1). Les numéros attribués aux atomes s'obtiennent en ajoutant aux numéros indiqués sur la Fig. 1 les nombres (100) ou (200) selon que les atomes appartiennent à la molécule (1) ou à la molécule (2). Les plans moyens des groupements benzofuranyle, c'est-à-dire les plans moyens calculés avec les atomes dont les numéros vont de (1) à (9) d'une part et de (11) à (19) d'autre part sont nommés respectivement *P(A)* et *P(B)*. Le plan *P(C)* est le plan moyen du groupement phényle tandis que *P(D)* est défini par C(27), C(28), C(30) et C(31) et *P(E)* par C(33), C(34), C(36) et C(37). Lorsque deux valeurs sont indiquées pour une même grandeur, la première concerne la molécule (1), la seconde la molécule (2).

Les groupements benzofuranyle et phényle sont plans ou très proches de la planéité puisque les distances des atomes qui constituent chacun d'eux au plan moyen correspondant restent de l'ordre des incertitudes. Les cycles morpholinyle possèdent la forme chaise. En effet, les valeurs absolues des angles de torsion endocycliques appartiennent à l'intervalle

56,2 (4)–61,9 (4)° et leurs signes changent lorsqu'on passe d'une liaison à la liaison immédiatement voisine. Les distances de N(26) et de O(29) au plan *P(D)* et celles de N(32) et de O(35) au plan *P(E)* sont comprises entre 0,644 (2) et 0,679 (2) Å. Cette conformation a été observée dans le dichlorhydrate de la morpholinoéthylamino-3-diphényl-4,6-pyridazine (Michel, Gustin, Evrard & Durant, 1982) et dans le niflumate de morpholinoéthyle (Toffoli, Coquillay, Rodier, Céolin, Teulon & Guéchet, 1988).

Les géométries des deux molécules présentes dans l'unité asymétrique diffèrent par les positions relatives des groupements qui les constituent. C'est ce qu'expriment les angles dièdres *P(A)P(B)* [105,82 (7) et 74,95 (7)°], *P(A)P(C)* [78,58 (8) et 98,94 (9)°] et *P(B)P(C)* [91,8 (1) et 49,7 (1)°]. Seuls *P(A)P(D)* [33,2 (2) et 35,9 (2)°] et *P(B)P(E)* [50,13 (9) et 50,0 (2)°] ont à peu près les mêmes valeurs dans les deux molécules. Ces différences s'expriment aussi dans les angles de torsion autour des liaisons C(8)—N(32), C(9)—C(10), C(10)—C(11) et C(10)—C(20). On peut citer, à titre d'exemples, les valeurs de C(7)—C(8)—N(32)—C(33) [77,3 (4) et -51,7 (4)°], de O(1)—C(9)—C(10)—C(20) [88,3 (3) et -97,3 (3)°], de C(9)—C(10)—C(11)—C(12) [-90,8 (4) et 93,0 (4)°] ou de C(20)—C(10)—C(11)—O(19) [-37,2 (3) et 43,8 (4)°].

Quelques angles valencielles extracycliques homologues sont significativement différents. Ces angles ont pour sommets l'un des atomes C(8), C(9), C(10), C(11), C(20), N(26) et N(32). Les écarts les plus importants s'observent pour C(7)—C(8)—N(32) [122,7 (2) et 131,1 (3)°], C(9)—C(8)—N(32) [130,6 (3) et 122,3 (3)°] et C(8)—N(32)—C(37) [118,9 (2) et 113,1 (3)°]. Par contre, les angles valencielles endocycliques homologues ont pratiquement les mêmes valeurs ou des valeurs très voisines. Il en est de même pour les longueurs des liaisons. Dans les cycles morpholinyle, les distances O—C sont comprises entre 1,404 (5) et 1,431 (4) Å, les distances N—C entre 1,455 (4) et 1,473 (4) Å et les distances C—C entre 1,500 (5) et 1,523 (6) Å. C(8)—C(9) [1,345 (4) et 1,346 (4) Å] et C(11)—C(12) [1,348 (4) et 1,343 (4) Å] sont des doubles liaisons. Les électrons π de chacune d'entre elles sont conjugués, d'une part avec ceux du cycle benzénique appartenant au même groupement benzofuranyle, d'autre part avec les doublets non partagés de O(1) et de N(32) ou de O(19) et de N(26). Ainsi s'expliquent les raccourcissements des liaisons C(8)—C(9), C(12)—C(13), C(12)—N(26), C(8)—N(32) et de celles formées par O(1) et O(19).

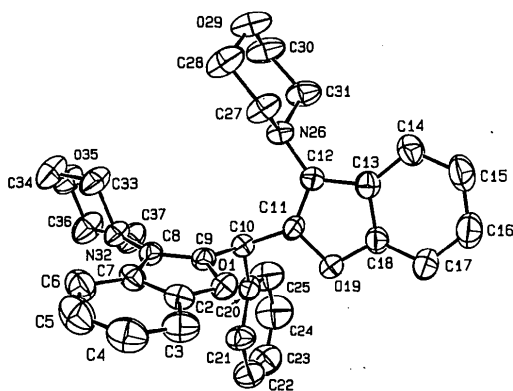


Fig. 1. Dessin de la molécule (1) vue en perspective et numéros attribués à ses atomes.

Partie expérimentale

Données cristallines

C₃₁H₃₀N₂O₄
M_r = 494,60

Cu Kα radiation
λ = 1,5418 Å

Monoclinique
*P*2₁/*c*
a = 10,229 (1) Å
b = 27,275 (6) Å
c = 18,897 (2) Å
 β = 100,40 (1)°
V = 5186 (1) Å³
Z = 8
D_x = 1,267 Mg m⁻³

Paramètres de la maille à
 l'aide de 25 réflexions
 θ = 15,84–26,86°
 μ = 0,637 mm⁻¹
T = 294 K
 Prisme à bases triangulaires
 0,36 × 0,17 × 0,08 mm
 Blanche
 Source du cristal:
 évaporation d'une
 solution éthanolique

C(127)	0,4456 (3)	0,0272 (1)	0,5807 (2)	0,057 (1)
C(128)	0,3213 (3)	0,0495 (2)	0,6011 (2)	0,075 (1)
O(129)	0,3045 (2)	0,0328 (1)	0,6700 (1)	0,0728 (8)
C(130)	0,4148 (3)	0,0480 (2)	0,7228 (2)	0,067 (1)
C(131)	0,5421 (3)	0,0255 (1)	0,7073 (2)	0,058 (1)
N(132)	0,5748 (2)	0,20355 (9)	0,5203 (1)	0,0415 (8)
C(133)	0,4343 (3)	0,2020 (1)	0,5274 (2)	0,058 (1)
C(134)	0,3921 (3)	0,2518 (1)	0,5481 (2)	0,068 (1)
O(135)	0,4734 (2)	0,26941 (8)	0,6125 (1)	0,0629 (8)
C(136)	0,6084 (3)	0,2709 (1)	0,6042 (2)	0,065 (1)
C(137)	0,6569 (3)	0,2212 (1)	0,5864 (2)	0,056 (1)
O(201)	0,2243 (2)	0,89881 (7)	-0,0254 (1)	0,0455 (6)
C(202)	0,1610 (3)	0,8720 (1)	-0,0839 (2)	0,0441 (7)
C(203)	0,1623 (4)	0,8841 (1)	-0,1545 (2)	0,058 (1)
C(204)	0,0923 (4)	0,8529 (2)	-0,2051 (2)	0,070 (1)
C(205)	0,0264 (4)	0,8118 (2)	-0,1855 (2)	0,073 (1)
C(206)	0,0270 (4)	0,8002 (1)	-0,1135 (2)	0,058 (1)
C(207)	0,0959 (3)	0,8320 (1)	-0,0616 (2)	0,0420 (9)
C(208)	0,1218 (3)	0,8345 (1)	0,0166 (2)	0,0404 (9)
C(209)	0,1960 (3)	0,8749 (1)	0,0345 (2)	0,0376 (8)
C(210)	0,2529 (3)	0,8952 (1)	0,1070 (2)	0,0404 (9)
C(211)	0,2660 (3)	0,9495 (1)	0,1070 (2)	0,0382 (8)
C(212)	0,1821 (3)	0,9845 (1)	0,1212 (2)	0,0395 (9)
C(213)	0,2419 (3)	1,0314 (1)	0,1104 (2)	0,0412 (9)
C(214)	0,2095 (3)	1,0809 (1)	0,1147 (2)	0,056 (1)
C(215)	0,2977 (4)	1,1156 (1)	0,0990 (2)	0,064 (1)
C(216)	0,4177 (4)	1,1022 (1)	0,0786 (2)	0,063 (1)
C(217)	0,4518 (3)	1,0538 (1)	0,0740 (2)	0,057 (1)
C(218)	0,3619 (3)	1,0197 (1)	0,0896 (2)	0,0429 (1)
O(219)	0,3777 (2)	0,96963 (7)	0,0866 (1)	0,0472 (6)
C(220)	0,3793 (3)	0,8674 (1)	0,1392 (2)	0,0393 (9)
C(221)	0,3818 (3)	0,8390 (1)	0,1995 (2)	0,053 (1)
C(222)	0,4925 (4)	0,8099 (1)	0,2267 (2)	0,064 (1)
C(223)	0,6003 (4)	0,8102 (1)	0,1918 (2)	0,063 (1)
C(224)	0,6003 (3)	0,8391 (1)	0,1326 (2)	0,063 (1)
C(225)	0,4896 (3)	0,8673 (1)	0,1058 (2)	0,055 (1)
N(226)	0,0583 (2)	0,97296 (9)	0,1424 (1)	0,0418 (8)
C(227)	0,0360 (3)	0,9999 (2)	0,2066 (2)	0,068 (1)
C(228)	-0,0918 (4)	0,9825 (2)	0,2283 (2)	0,076 (1)
O(229)	-0,2005 (2)	0,9900 (1)	0,1704 (1)	0,0836 (9)
C(230)	-0,1807 (4)	0,9628 (2)	0,1101 (2)	0,094 (1)
C(231)	-0,0557 (3)	0,9795 (2)	0,0839 (2)	0,065 (1)
N(232)	0,0848 (2)	0,80276 (9)	0,0689 (1)	0,0418 (8)
C(233)	-0,0573 (3)	0,7910 (1)	0,0578 (2)	0,063 (1)
C(234)	-0,0844 (3)	0,7620 (1)	0,1214 (2)	0,070 (1)
O(235)	-0,0087 (2)	0,71808 (8)	0,1306 (1)	0,0705 (8)
C(236)	0,1299 (4)	0,7297 (1)	0,1419 (2)	0,070 (1)
C(237)	0,1634 (3)	0,7573 (1)	0,0785 (2)	0,055 (1)

Collection des données

Diffractionnaire Enraf-Nonius
 CAD-4
 Balayage $\theta/2\theta$
 Pas de correction
 d'absorption
 8090 réflexions mesurées
 8090 réflexions
 indépendantes
 4814 réflexions observées
 [*I* ≥ 2σ(*I*)]

θ_{\max} = 62°
h = 0 → 11
k = 0 → 31
l = -21 → 19
 3 réflexions de référence
 fréquence: 120 min
 variation d'intensité:
 -1,1% (correction de
 décroissance)

Affinement

Affinement basé sur les *F*
R = 0,051
wR = 0,061
S = 1,593
 4814 réflexions
 848 paramètres
 Affinement des atomes d'H
 sur *x*, *y*, *z* seulement
w = 1/σ²(*F*)
 (Δ/σ)_{max} = 0,02

Δρ_{max} = 0,23 e Å⁻³
 Δρ_{min} = -0,24 e Å⁻³
 Correction d'extinction:
 Stout & Jensen (1968)
 Coefficient d'extinction:
g = 1,3 (4) × 10⁻⁷
 Facteurs de diffusion des
International Tables for
X-ray Crystallography
 (1974, Tome IV)

Tableau 1. Coordonnées atomiques et facteurs d'agitation
 thermiques isotrope équivalents (Å²)

$$U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i \cdot a_j$$

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U_{eq}</i>
O(101)	0,7247 (2)	0,09495 (7)	0,4554 (1)	0,0431 (6)
C(102)	0,6558 (3)	0,1153 (1)	0,3928 (2)	0,0432 (9)
C(103)	0,6558 (3)	0,0967 (1)	0,3245 (2)	0,057 (1)
C(104)	0,5813 (4)	0,1230 (2)	0,2689 (2)	0,069 (1)
C(105)	0,5142 (4)	0,1654 (2)	0,2811 (2)	0,070 (1)
C(106)	0,5168 (3)	0,1834 (1)	0,3507 (2)	0,058 (1)
C(107)	0,5894 (3)	0,1571 (1)	0,4072 (2)	0,0403 (9)
C(108)	0,6189 (3)	0,1629 (1)	0,4848 (2)	0,0370 (7)
C(109)	0,6971 (3)	0,1249 (1)	0,5107 (2)	0,0367 (7)
C(110)	0,7648 (3)	0,1100 (1)	0,5845 (2)	0,0381 (7)
C(111)	0,7682 (3)	0,0557 (1)	0,5938 (2)	0,0372 (7)
C(112)	0,6829 (3)	0,0246 (1)	0,6172 (2)	0,0366 (7)
C(113)	0,7412 (3)	-0,0239 (1)	0,6177 (2)	0,0403 (9)
C(114)	0,7084 (3)	-0,0712 (1)	0,6366 (2)	0,055 (1)
C(115)	0,7970 (4)	-0,1086 (1)	0,6316 (2)	0,065 (1)
C(116)	0,9160 (4)	-0,1002 (1)	0,6064 (2)	0,063 (1)
C(117)	0,9490 (3)	-0,0540 (1)	0,5868 (2)	0,056 (1)
C(118)	0,8607 (3)	-0,0171 (1)	0,5930 (2)	0,0414 (9)
O(119)	0,8781 (2)	0,03128 (7)	0,5778 (1)	0,0456 (6)
C(120)	0,9027 (3)	0,1326 (1)	0,6066 (2)	0,0393 (9)
C(121)	0,9768 (3)	0,1458 (1)	0,5560 (2)	0,052 (1)
C(122)	1,1042 (3)	0,1642 (1)	0,5761 (2)	0,062 (1)
C(123)	1,1591 (4)	0,1694 (2)	0,6467 (2)	0,071 (1)
C(124)	1,0862 (4)	0,1554 (2)	0,6982 (2)	0,083 (1)
C(125)	0,9576 (4)	0,1371 (2)	0,6781 (2)	0,068 (1)
N(126)	0,5611 (2)	0,04114 (9)	0,6355 (1)	0,0399 (6)

Tableau 2. Paramètres géométriques (Å, °)

	(1)	(2)
O(1)—C(2)	1,379 (3)	1,385 (3)
O(1)—C(9)	1,395 (4)	1,384 (4)
C(2)—C(3)	1,387 (5)	1,377 (5)
C(2)—C(7)	1,379 (4)	1,384 (4)
C(3)—C(4)	1,381 (5)	1,381 (5)
C(4)—C(5)	1,385 (6)	1,393 (6)
C(5)—C(6)	1,400 (5)	1,397 (5)
C(6)—C(7)	1,387 (4)	1,400 (4)
C(7)—C(8)	1,450 (4)	1,455 (4)
C(8)—C(9)	1,345 (4)	1,346 (4)
C(8)—N(32)	1,413 (4)	1,415 (4)
C(9)—C(10)	1,498 (4)	1,495 (4)
C(10)—C(11)	1,490 (4)	1,489 (4)
C(10)—C(20)	1,527 (4)	1,527 (4)
C(11)—C(12)	1,348 (4)	1,343 (4)
C(11)—O(19)	1,386 (4)	1,385 (4)
C(12)—C(13)	1,451 (4)	1,449 (4)
C(12)—N(26)	1,425 (4)	1,431 (4)
C(13)—C(14)	1,396 (4)	1,394 (4)
C(13)—C(18)	1,397 (5)	1,392 (5)
C(14)—C(15)	1,379 (5)	1,378 (5)
C(15)—C(16)	1,403 (6)	1,400 (6)
C(16)—C(17)	1,373 (5)	1,374 (5)
C(17)—C(18)	1,371 (5)	1,375 (5)
C(18)—O(19)	1,370 (4)	1,378 (4)
C(20)—C(21)	1,371 (5)	1,374 (4)

C(20)—C(25)	1,372 (4)	1,388 (5)
C(21)—C(22)	1,384 (5)	1,403 (5)
C(22)—C(23)	1,360 (5)	1,384 (6)
C(23)—C(24)	1,381 (6)	1,368 (5)
C(24)—C(25)	1,394 (5)	1,387 (5)
N(26)—C(27)	1,473 (4)	1,471 (5)
N(26)—C(31)	1,469 (4)	1,465 (4)
C(27)—C(28)	1,520 (5)	1,514 (5)
C(28)—O(29)	1,419 (5)	1,426 (4)
O(29)—C(30)	1,425 (4)	1,404 (5)
C(30)—C(31)	1,515 (5)	1,523 (6)
N(32)—C(33)	1,468 (4)	1,466 (4)
N(32)—C(37)	1,455 (4)	1,471 (4)
C(33)—C(34)	1,500 (5)	1,507 (6)
C(34)—O(35)	1,428 (4)	1,420 (4)
O(35)—C(36)	1,418 (4)	1,431 (4)
C(36)—C(37)	1,504 (5)	1,506 (5)
C(2)—O(1)—C(9)	105,4 (2)	105,5 (2)
O(1)—C(2)—C(3)	124,5 (3)	124,2 (3)
O(1)—C(2)—C(7)	110,9 (3)	110,8 (3)
C(3)—C(2)—C(7)	124,6 (3)	125,0 (3)
C(2)—C(3)—C(4)	115,3 (3)	115,4 (3)
C(3)—C(4)—C(5)	121,9 (3)	121,9 (3)
C(4)—C(5)—C(6)	121,6 (3)	121,7 (3)
C(5)—C(6)—C(7)	117,3 (3)	117,0 (3)
C(2)—C(7)—C(6)	119,3 (3)	119,1 (3)
C(2)—C(7)—C(8)	105,6 (2)	105,3 (2)
C(6)—C(7)—C(8)	135,0 (3)	135,7 (3)
C(7)—C(8)—C(9)	106,6 (3)	106,6 (3)
C(7)—C(8)—N(32)	122,7 (2)	131,1 (3)
C(9)—C(8)—N(32)	130,6 (3)	122,3 (3)
O(1)—C(9)—C(8)	111,4 (2)	111,8 (2)
O(1)—C(9)—C(10)	114,6 (2)	118,1 (2)
C(8)—C(9)—C(10)	133,9 (3)	130,0 (3)
C(9)—C(10)—C(11)	112,1 (2)	112,9 (2)
C(9)—C(10)—C(20)	113,2 (2)	110,0 (2)
C(11)—C(10)—C(20)	111,6 (2)	115,1 (2)
C(10)—C(11)—C(12)	131,4 (3)	130,4 (3)
C(10)—C(11)—O(19)	117,1 (2)	118,2 (3)
C(12)—C(11)—O(19)	111,5 (2)	111,3 (3)
C(11)—C(12)—C(13)	106,6 (3)	107,3 (3)
C(11)—C(12)—N(26)	121,8 (3)	121,9 (3)
C(13)—C(12)—N(26)	131,5 (3)	130,7 (3)
C(12)—C(13)—C(14)	136,7 (3)	137,2 (3)
C(12)—C(13)—C(18)	105,1 (3)	104,7 (3)
C(14)—C(13)—C(18)	118,2 (3)	118,1 (3)
C(13)—C(14)—C(15)	118,4 (3)	118,7 (3)
C(14)—C(15)—C(16)	121,6 (3)	121,4 (3)
C(15)—C(16)—C(17)	120,8 (3)	120,9 (3)
C(16)—C(17)—C(18)	116,8 (3)	116,7 (3)
C(13)—C(18)—C(17)	124,2 (3)	124,3 (3)
C(13)—C(18)—O(19)	110,6 (3)	110,8 (3)
C(17)—C(18)—O(19)	125,2 (3)	124,9 (3)
C(11)—O(19)—C(18)	106,1 (2)	105,8 (2)
C(10)—C(20)—C(21)	121,0 (3)	119,8 (3)
C(10)—C(20)—C(25)	119,9 (3)	121,3 (3)
C(21)—C(20)—C(25)	119,0 (3)	118,8 (3)
C(20)—C(21)—C(22)	121,0 (3)	121,0 (3)
C(21)—C(22)—C(23)	120,6 (4)	118,9 (3)
C(22)—C(23)—C(24)	118,9 (3)	120,7 (3)
C(23)—C(24)—C(25)	120,7 (3)	119,9 (3)

C(20)—C(25)—C(24)	119,9 (4)	120,8 (3)
C(12)—N(26)—C(27)	112,0 (2)	113,4 (2)
C(12)—N(26)—C(31)	113,5 (2)	112,7 (2)
C(27)—N(26)—C(31)	110,6 (2)	109,9 (3)
N(26)—C(27)—C(28)	108,7 (3)	109,7 (3)
C(27)—C(28)—O(29)	110,5 (3)	109,9 (3)
C(28)—O(29)—C(30)	109,7 (3)	109,9 (3)
O(29)—C(30)—C(31)	110,3 (3)	111,0 (3)
N(26)—C(31)—C(30)	108,8 (3)	108,6 (3)
C(8)—N(32)—C(33)	115,0 (2)	114,7 (2)
C(8)—N(32)—C(37)	118,9 (2)	113,1 (3)
C(33)—N(32)—C(37)	110,7 (3)	109,8 (2)
N(32)—C(33)—C(34)	109,2 (3)	108,8 (3)
C(33)—C(34)—O(35)	112,1 (3)	111,4 (3)
C(34)—O(35)—C(36)	110,1 (3)	109,6 (3)
O(35)—C(36)—C(37)	111,4 (3)	110,7 (3)
N(32)—C(37)—C(36)	109,1 (3)	108,8 (3)

La structure a été résolue à l'aide du programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et la Fig. 1 réalisée avec le programme *ORTEPII* (Johnson, 1976). Tous les programmes de calcul utilisés appartiennent au système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982). Le pic résiduel le plus élevé est situé approximativement au milieu de la liaison C(110)—C(111) et les deux suivants au voisinage de C(211) et de N(226).

Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées des atomes d'hydrogène, des distances C—H, des angles de torsion, des distances interatomiques intermoléculaires et des distances des atomes aux plans moyens ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 71802: 51 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: PA1077]

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.
- Michel, A., Gustin, R., Evrard, G. & Durant, F. (1982). *Bull. Soc. Chim. Belg.* **91**, 123–129.
- Toffoli, P., Coquillay, C., Rodier, N., Céolin, R., Teulon, J.-M. & Guéchet, C. (1988). *Acta Cryst.* **C44**, 547–550.
- Stout, G. L. & Jensen, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*, pp. 410–412. Londres: MacMillan.