

C12	0.5578 (4)	0.0110 (5)	0.3547 (10)	0.053 (11)
C13	0.5263 (5)	0.0741 (5)	0.3295 (12)	0.074 (14)
C14	0.6067 (5)	0.0180 (6)	0.4705 (12)	0.076 (14)
C15	0.6085 (4)	-0.0865 (4)	0.2326 (9)	0.039 (9)
C16	0.6326 (4)	-0.1133 (4)	0.0899 (11)	0.041 (10)
C17	0.5966 (4)	-0.1162 (5)	-0.0351 (13)	0.052 (11)
C18	0.6184 (5)	-0.1437 (6)	-0.1611 (12)	0.065 (13)
C19	0.6730 (6)	-0.1688 (6)	-0.1677 (14)	0.072 (15)
C20	0.7103 (6)	-0.1684 (6)	-0.0430 (17)	0.084 (17)
C21	0.6886 (5)	-0.1392 (6)	0.0854 (13)	0.070 (14)
C22	0.5692 (4)	-0.1355 (4)	0.3091 (10)	0.042 (10)
C23	0.5914 (4)	-0.1719 (5)	0.4199 (12)	0.054 (12)
C24	0.5560 (6)	-0.2188 (5)	0.4901 (11)	0.067 (14)
C25	0.4985 (6)	-0.2286 (5)	0.4413 (13)	0.067 (14)
C26	0.4760 (5)	-0.1925 (5)	0.3327 (13)	0.064 (14)
C27	0.5105 (5)	-0.1454 (4)	0.2656 (11)	0.054 (12)

Table 4. Geometric parameters (Å, °) for compound (10)

C1—C2	1.512 (14)	C15—C16	1.524 (13)
C1—O9	1.173 (13)	C15—C22	1.519 (12)
C1—O10	1.350 (13)	C16—C17	1.406 (14)
C2—C3	1.531 (13)	C16—C21	1.367 (13)
C3—C4	1.518 (16)	C17—C18	1.380 (16)
C3—N5	1.475 (12)	C18—C19	1.332 (17)
N5—C6	1.345 (13)	C19—C20	1.418 (19)
C6—O7	1.207 (15)	C20—C21	1.413 (18)
C6—C8	1.547 (14)	C22—C23	1.362 (13)
O10—C11	1.468 (10)	C22—C27	1.391 (13)
C11—C12	1.495 (13)	C23—C24	1.411 (15)
C11—C15	1.524 (12)	C24—C25	1.380 (19)
C12—C13	1.506 (15)	C25—C26	1.347 (16)
C12—C14	1.535 (15)	C26—C27	1.391 (14)
C2—C1—O9	123.9 (10)	C11—C15—C22	113.5 (7)
C2—C1—O10	110.2 (8)	C16—C15—C22	111.1 (7)
O9—C1—O10	125.8 (10)	C15—C16—C17	121.1 (8)
C1—C2—C3	116.0 (9)	C15—C16—C21	119.7 (8)
C2—C3—C4	111.7 (8)	C17—C16—C21	119.0 (9)
C2—C3—N5	108.8 (8)	C16—C17—C18	120.1 (9)
C4—C3—N5	109.0 (8)	C17—C18—C19	121.7 (11)
C3—N5—C6	119.9 (8)	C18—C19—C20	120.2 (12)
N5—C6—O7	127.3 (10)	C19—C20—C21	118.4 (11)
N5—C6—C8	112.2 (9)	C16—C21—C20	120.7 (10)
O7—C6—C8	120.6 (9)	C15—C22—C23	120.5 (8)
C1—O10—C11	117.5 (7)	C15—C22—C27	120.9 (8)
O10—C11—C12	108.9 (7)	C23—C22—C27	118.6 (9)
O10—C11—C15	107.7 (7)	C22—C23—C24	121.3 (9)
C12—C11—C15	117.2 (7)	C23—C24—C25	118.6 (10)
C11—C12—C13	113.7 (8)	C24—C25—C26	120.6 (11)
C11—C12—C14	113.0 (8)	C25—C26—C27	120.8 (10)
C13—C12—C14	111.0 (8)	C22—C27—C26	120.1 (9)
C11—C15—C16	113.9 (7)		
O10—C1—C2—C3	57.2 (9)	O10—C11—C12—C13	61.3 (8)
C1—C2—C3—C4	53.5 (10)	O10—C11—C12—C14	-66.4 (9)
C1—C2—C3—N5	173.9 (11)	O10—C11—C15—C16	-53.6 (7)
C2—C3—N5—C6	90.7 (10)	O10—C11—C15—C22	178.0 (9)
C3—N5—C6—O7	-0.4 (9)	C11—C15—C16—C17	-51.7 (8)
C3—N5—C6—C8	178.6 (12)	C11—C15—C16—C21	133.1 (11)
C2—C1—O10—C11	174.1 (11)	C11—C15—C22—C23	-130.9 (10)
C1—O10—C11—C12	-106.7 (9)	C11—C15—C22—C27	50.6 (8)
C1—O10—C11—C15	125.3 (9)		

Data collection: Enraf-Nonius CAD-4 software. Data reduction: *NONIUS* (Riche, 1989). Program(s) used to solve structure: *SHELXS86* (Sheldrick, 1985). Program(s) used to refine structure: *SHELX76* (Sheldrick, 1976). Molecular graphics: *R3M* (Riche, 1983); *ORTEP* (Johnson, 1965). Software used to prepare material for publication: *ACTACIF* (Riche, 1992).

Lists of structure factors, anisotropic displacement parameters, H-atom coordinates and complete geometry have been deposited with the British Library Document Supply Centre as Supplementary Publication No. SUP 71497 (16 pp.). Copies may be obtained through The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England. [CIF reference: PA1050]

References

- d'Angelo, J. & Maddaluno, J. (1986). *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 8112–8114.
- Giessner-Prettre, C., Gresh, N. & Maddaluno, J. (1992). *J. Magn. Reson.* **99**, 605–610.
- Johnson, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
- Potin, D., Dumas, F. & d'Angelo, J. (1990). *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 3484–3486.
- Riche, C. (1983). *R3M. Représentation et Manipulation de Modèles Moléculaires*. Institut de Chimie des Substances Naturelles du CNRS, Gif sur Yvette, France.
- Riche, C. (1989). *NONIUS. Program for Data Reduction for Nonius CAD-4 Diffractometers*. Institut de Chimie des Substances Naturelles du CNRS, Gif sur Yvette, France.
- Riche, C. (1992). *ACTACIF*. Institut de Chimie des Substances Naturelles du CNRS, Gif sur Yvette, France.
- Sheldrick, G. M. (1976). *SHELX76. Program for Crystal Structure Determination*. Univ. of Cambridge, England.
- Sheldrick, G. M. (1985). *SHELXS86. Program for the Solution of Crystal Structures*. Univ. of Göttingen, Germany.

Acta Cryst. (1995). **C51**, 970–974

Un sel de Maprotiline (Ludiomil), Médicament Psychotrope, C₂₀H₂₄N⁺.C₂₁H₂₂NO₂⁻.0.5H₂O

PIERRE BROUANT ET JEAN-PIERRE REBOUL

*GERCTOP, URA CNRS 1411, Faculté de Pharmacie,
27 Boulevard Jean-Moulin, 13385 Marseille
CEDEX 5, France*

DIDIER SIRI

*Université de Provence, URA CNRS 1412, Radicaux
Libres et Synthèse, 13397 Marseille CEDEX 13,
France*

JEAN-CLAUDE SOYFER ET JACQUES BARBE

*GERCTOP, URA CNRS 1411, Faculté de Pharmacie,
27 Boulevard Jean-Moulin, 13385 Marseille
CEDEX 5, France*

GÉRARD PÈPE

*CRMC2-CNRS, Campus de Luminy, Case 913,
13288 Marseille CEDEX 9, France*

(Reçu le 7 février 1994, accepté le 26 mai 1994)

Abstract

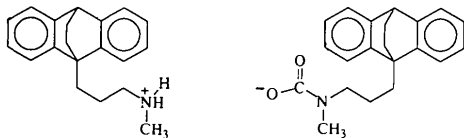
Maprotiline (ludiomil) is a tetracyclic antidepressant drug which crystallized in DMF as the salt [3-(9,10-dihydro-9,10-ethano-9-anthracenyl)propyl]methylammo-

nium *N*-[3-(9,10-dihydro-9,10-ethano-9-anthracenyl)-propyl]-*N*-methylcarbamate hemihydrate. The asymmetric unit contains a $C_{20}H_{24}N^+$ cation and a $C_{21}H_{22}NO_2^-$ anion. The dihedral angle between the planes of the benzene rings is $117.8(3)^\circ$ in the cation and $121.5(3)^\circ$ in the anion. Conformational parameters were calculated and compared to those of similar compounds and tricyclic antidepressant drugs.

Commentaire

Dans le cadre d'un programme d'études cristallographiques menées sur des médicaments psychotropes nous avons résolu la structure de différents tricycliques et/ou de leur support (Reboul, Cristau, Estienne & Astier, 1980; Reboul, Cristau, Soyfer & Estienne, 1980; Reboul, Cristau & Pèpe, 1981, 1982; Reboul, Soyfer, Cristau, Caranoni & Pèpe, 1982; Reboul, 1983; Reboul, Soyfer, Cristau, Darbon, Oddon & Pèpe, 1983; Reboul, Oddon, Caranoni, Soyfer, Barbe & Pèpe, 1987). A la suite de la résolution structurale de la benzocétamine (Brouant, Pierrot, Baldy, Soyfer & Barbe, 1984) nous présentons ici celle de la maprotiline sous une forme saline particulière.

La maprotiline, découverte en 1970, est utilisée en psychiatrie en tant qu'antidépresseur sédatif majeur. Elle est à rapprocher des tricycliques imipraminiques aussi bien par sa structure chimique que pour ses propriétés thérapeutiques (et son incidence anticholinergique). Du point de vue pharmacologique, son mécanisme d'action est apparenté à celui des antidépresseurs, à savoir une forte inhibition à la recapture de la noradrénaline. La formule chimique de la forme saline étudiée est la suivante:



La Fig. 1 est une vue de la molécule avec la numérotation atomique adoptée. Les atomes (C1–C6), (C8–C14), (C7, C10, C15, C16), (C1'–C6'), (C8'–C14') et (C7', C10', C15', C16') ont permis de définir respectivement les plans moyens *A*, *B*, *C*, *A'*, *B'*, *C'*.

La valeur du déplacement maximum des atomes à leur plan moyen [0,015(3) Å] traduit la planéité des cycles aromatiques et du pont éthane intervenant dans les deux formes anionique et cationique. Les plans moyens des cycles aromatiques *A* et *B* du noyau dibenzobicyclo[2,2,2]octadiène (DBO) font un angle $\alpha(A,B) = 117,8(3)^\circ$ dans la forme cationique et un angle $\alpha(A',B') = 121,5(3)^\circ$ dans la forme anionique. On retrouve des valeurs analogues pour des molécules renfermant le noyau DBO telles la benzocétamine [$\alpha = 118,0(3)^\circ$] et son dérivé méthylé [$\alpha = 119,4(2)^\circ$] (Brouant, Pierrot, Baldy, Soyfer & Barbe, 1984). Les

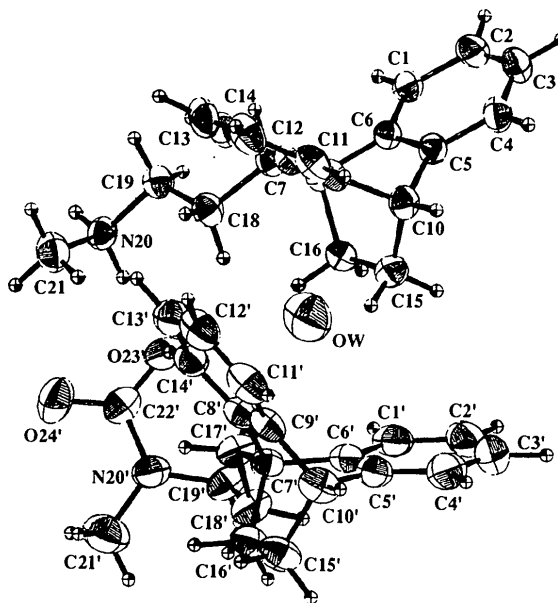


Fig. 1. Géométrie moléculaire du sel de maprotiline (ORTEP; Johnson, 1965). Les ellipsoïdes de vibration des atomes non hydrogène ont une probabilité de 50%. Les atomes d'hydrogène sont représentés par des sphères de rayon arbitraire.

plans moyens *C* et *C'* se confondent à $2,6(5)^\circ$ près avec les plans bissecteurs respectifs du noyau DBO de la forme cationique et anionique du sel de maprotiline.

La structure cristalline du DBO n'ayant pas été résolue à ce jour, nous avons entrepris une minimisation énergétique de ce noyau à l'aide du programme GENMOL (Pèpe & Siri, 1990). Le minimum énergétique obtenu correspond à une conformation dans laquelle α est de l'ordre de 120° . Cette valeur est en fait une moyenne des valeurs observées. On remarquera que l'angle de pliage α du DBO est sensiblement proportionnel à l'encombrement stérique du substituant porté par l'atome C7.

D'autre part, si l'on compare l'angle de pliage α de $144,5(2)^\circ$ du dihydro 9,10-anthracène (Reboul, Oddon, Caranoni, Soyfer, Barbe & Pèpe, 1987) à celui du DBO où α est voisin de 120° , on notera une nette fermeture de cet angle pour le DBO. Ceci s'explique par la présence du pont éthane sur le système tricyclique.

La symétrie de ces noyaux tétracycliques type DBO peut être appréhendée par l'angle de gauchissement γ des cycles aromatiques latéraux. Quand le noyau est parfaitement symétrique, $\gamma = 0^\circ$. C'est le cas du DBO calculé théoriquement. Pour la benzocétamine, $\gamma = 1,5(2)^\circ$ et pour la benzocétamine méthylée, $\gamma = 0,8(2)^\circ$. Pour la partie cationique de la maprotiline, $\gamma = 2,9(3)^\circ$ et pour la partie anionique, $\gamma = 3,4(3)^\circ$. Plus le substituant porté par l'atome C7 devient stériquement encombrant, plus la molécule se gauchit dans des limites relativement étroites du fait de la structure en cage du DBO.

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

$$B_{eq} = (8\pi^2/3) \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	x	y	z	B_{eq}				
C1	1,1820 (3)	0,3134 (2)	0,6803 (2)	3,1 (1)	C2—C1—C6	119,4 (3)	C2'—C1'—C6'	119,6 (4)
C2	1,3091 (3)	0,3726 (2)	0,6879 (2)	3,7 (1)	C1—C2—C3	120,5 (3)	C1'—C2'—C3'	120,8 (4)
C3	1,3811 (3)	0,3403 (3)	0,7509 (2)	3,8 (1)	C2—C3—C4	120,3 (3)	C2'—C3'—C4'	120,4 (4)
C4	1,3290 (3)	0,2476 (3)	0,8068 (2)	3,4 (1)	C3—C4—C5	119,6 (3)	C3'—C4'—C5'	119,3 (4)
C5	1,2011 (3)	0,1898 (2)	0,8006 (2)	2,7 (1)	C4—C5—C6	120,4 (3)	C4'—C5'—C6'	120,8 (3)
C6	1,1264 (3)	0,2229 (2)	0,7375 (1)	2,5 (1)	C4—C5—C10	125,8 (3)	C4'—C5'—C10'	125,5 (3)
C7	0,9854 (3)	0,1514 (2)	0,7401 (1)	2,5 (1)	C6—C5—C10	113,8 (3)	C6'—C5'—C10'	113,7 (3)
C8	0,8878 (3)	0,1680 (2)	0,8209 (2)	2,6 (1)	C1—C6—C5	119,7 (3)	C1'—C6'—C5'	119,0 (3)
C9	0,9638 (3)	0,1331 (2)	0,8832 (2)	2,8 (1)	C1—C6—C7	126,5 (2)	C1'—C6'—C7'	127,1 (3)
C10	1,1288 (3)	0,0895 (2)	0,8576 (2)	2,9 (2)	C5—C6—C7	113,8 (2)	C5'—C6'—C7'	113,8 (3)
C11	0,8908 (3)	0,1425 (3)	0,9601 (2)	3,6 (1)	C6—C7—C8	104,5 (2)	C6'—C7'—C8'	105,3 (3)
C12	0,7403 (3)	0,1891 (3)	0,9753 (2)	4,2 (1)	C6—C7—C16	105,0 (2)	C6'—C7'—C16'	105,5 (2)
C13	0,6660 (3)	0,2275 (3)	0,9139 (2)	4,1 (1)	C6—C7—C17	113,1 (2)	C6'—C7'—C17'	115,3 (3)
C14	0,7382 (3)	0,2169 (2)	0,8365 (2)	3,3 (1)	C8—C7—C16	106,3 (2)	C8'—C7'—C16'	104,9 (2)
C15	1,1305 (3)	-0,0216 (2)	0,8108 (2)	3,3 (1)	C8—C7—C17	115,4 (2)	C8'—C7'—C17'	113,2 (3)
C16	1,0462 (3)	0,0147 (2)	0,7420 (2)	3,0 (1)	C16—C7—C17	111,7 (2)	C16'—C7'—C17'	111,8 (3)
C17	0,9057 (3)	0,1884 (2)	0,6708 (2)	3,0 (2)	C7—C8—C9	114,1 (3)	C7'—C8'—C9'	113,8 (3)
C18	0,7825 (3)	0,1053 (2)	0,6619 (2)	3,1 (1)	C7—C8—C14	126,6 (3)	C7'—C8'—C14'	126,4 (3)
C19	0,6945 (3)	0,1619 (2)	0,5995 (2)	3,2 (1)	C9—C8—C14	119,2 (3)	C9'—C8'—C14'	119,8 (3)
N20	0,5929 (2)	0,0770 (2)	0,5775 (1)	3,1 (1)	C8—C9—C10	113,7 (3)	C8'—C9'—C10'	114,0 (3)
C21	0,4693 (3)	0,0356 (3)	0,6420 (2)	4,3 (1)	C8—C9—C11	121,0 (3)	C8'—C9'—C11'	120,2 (3)
C1'	1,2005 (4)	-0,2976 (3)	0,7058 (2)	4,2 (1)	C10—C9—C11	125,2 (3)	C10'—C9'—C11'	125,9 (3)
C2'	1,3482 (4)	-0,2975 (3)	0,7200 (3)	5,2 (2)	C5—C10—C9	106,0 (3)	C5'—C10'—C9'	107,8 (3)
C3'	1,3801 (4)	-0,3345 (3)	0,7929 (3)	5,8 (2)	C5—C10—C15	107,0 (3)	C5'—C10'—C15'	106,6 (3)
C4'	1,2653 (4)	-0,3707 (3)	0,8540 (2)	4,9 (1)	C9—C10—C15	107,3 (3)	C9'—C10'—C15'	106,6 (3)
C5'	1,1170 (3)	-0,3692 (2)	0,8409 (2)	3,7 (1)	C9—C11—C12	119,4 (3)	C9'—C11'—C12'	119,7 (4)
C6'	1,0840 (3)	-0,3359 (2)	0,7663 (2)	3,2 (1)	C11—C12—C13	119,9 (3)	C11'—C12'—C13'	120,3 (4)
C7'	0,9156 (3)	-0,3447 (2)	0,7617 (2)	3,0 (1)	C12—C13—C14	121,0 (3)	C12'—C13'—C14'	120,1 (3)
C8'	0,8252 (3)	-0,2668 (2)	0,8247 (2)	3,0 (1)	C8—C14—C13	119,4 (3)	C8'—C14'—C13'	119,9 (3)
C9'	0,8601 (3)	-0,2978 (3)	0,8990 (2)	3,5 (1)	C10—C15—C16	109,3 (3)	C10'—C15'—C16'	108,9 (3)
C10'	0,9792 (4)	-0,4010 (3)	0,9021 (2)	4,0 (1)	C7—C16—C15	111,6 (2)	C7'—C16'—C15'	111,6 (3)
C11'	0,7866 (4)	-0,2355 (3)	0,9618 (2)	4,5 (1)	C7—C17—C18	115,3 (3)	C7'—C17'—C18'	116,3 (3)
C12'	0,6797 (4)	-0,1409 (3)	0,9502 (2)	4,9 (1)	C17—C18—C19	110,5 (3)	C17'—C18'—C19'	111,6 (3)
C13'	0,6449 (3)	-0,1099 (3)	0,8767 (2)	4,5 (1)	C18—C19—N20	113,3 (2)	C18'—C19'—N20'	113,6 (3)
C14'	0,7164 (3)	-0,1736 (3)	0,8139 (2)	3,6 (1)	C19—N20—C21	114,6 (2)	C19'—N20'—C21'	117,8 (3)
C15'	0,9149 (4)	-0,5123 (3)	0,8758 (2)	4,5 (1)			C19'—N20'—C22'	121,8 (3)
C16'	0,8782 (3)	-0,4790 (2)	0,7930 (2)	3,6 (1)			C21'—N20'—C22'	120,3 (3)
C17'	0,8761 (3)	-0,3105 (2)	0,6816 (2)	3,5 (1)			N20'—C22'—O23'	118,0 (3)
C18'	0,9404 (4)	-0,3974 (3)	0,6188 (2)	4,0 (1)			N20'—C22'—O24'	117,6 (3)
C19'	0,9123 (3)	-0,3454 (3)	0,5385 (2)	3,8 (1)			O23'—C22'—O24'	124,3 (3)
N20'	0,7523 (3)	-0,3255 (2)	0,5341 (1)	3,9 (1)				
C21'	0,6650 (5)	-0,4307 (3)	0,5402 (2)	5,9 (2)	C1—C2—C3—C4			0,8 (5)
C22'	0,6823 (4)	-0,2111 (3)	0,5291 (2)	3,7 (1)	C1—C6—C7—C8			-126,0 (2)
O23'	0,7635 (2)	-0,1213 (2)	0,5248 (1)	5,1 (1)	C1—C6—C7—C16			122,3 (2)
O24'	0,5405 (2)	-0,2023 (2)	0,5307 (1)	5,2 (1)	C1—C6—C7—C17			0,3 (2)
OW	1,0567 (6)	-0,0622 (5)	0,5439 (3)	7,0 (3)	C2—C1—C6—C7			177,9 (3)
					C2—C3—C4—C5			-2,0 (2)
					C3—C2—C1—C6			1,2 (2)
					C3—C4—C5—C10			-178,6 (3)
					C4—C5—C10—C15			-121,2 (3)
					C6—C7—C8—C9			-55,3 (2)
					C6—C7—C8—C14			122,3 (2)
					C6—C7—C17—C18			169,3 (3)
					C7—C8—C9—C11			-179,9 (3)
					C7—C17—C18—C19			170,9 (3)
					C8—C9—C11—C12			-1,0 (2)
					C9—C11—C12—C13			-1,2 (2)
					C17—C18—C19—N20			169,5 (3)
					C18—C19—N20—C21			66,1 (2)
					C1'—C2'—C3'—C4'			-1,1 (2)
					C1'—C6'—C7'—C8'			-123,8 (3)
					C1'—C6'—C7'—C16'			125,5 (3)
					C1'—C6'—C7'—C17'			1,7 (2)
					C2'—C1'—C6'—C5'			2,4 (2)
					C2'—C1'—C6'—C7'			-178,8 (4)
					C2'—C3'—C4'—C5'			0,0 (2)
					C3'—C2'—C1'—C6'			-0,1 (2)
					C3'—C4'—C5'—C10'			-177,4 (4)
					C4'—C5'—C10'—C15'			-118,4 (3)
					C6'—C7'—C8'—C9'			-53,5 (2)
					C6'—C7'—C8'—C14'			127,0 (3)
					C6'—C7'—C17'—C18'			68,9 (2)

Tableau 2. *Distances (Å), angles interatomiques (°) et angles de torsion (°)*

C1—C2	1,394 (4)	C1'—C2'	1,392 (6)	C6—C7—C8—C14	122,3 (2)
C1—C6	1,389 (4)	C1'—C6'	1,390 (5)	C6—C7—C17—C18	169,3 (3)
C2—C3	1,381 (5)	C2'—C3'	1,371 (6)	C7—C8—C9—C11	-179,9 (3)
C3—C4	1,384 (5)	C3'—C4'	1,381 (6)	C7—C17—C18—C19	170,9 (3)
C4—C5	1,385 (5)	C4'—C5'	1,389 (5)	C8—C9—C11—C12	-1,0 (2)
C5—C6	1,398 (4)	C5'—C6'	1,396 (4)	C9—C11—C12—C13	-1,2 (2)
C5—C10	1,510 (4)	C5'—C10'	1,506 (5)	C17—C18—C19—N20	169,5 (3)
C6—C7	1,536 (3)	C6'—C7'	1,537 (4)	C18—C19—N20—C21	66,1 (2)
C7—C8	1,528 (4)	C7'—C8'	1,533 (4)	C1'—C2'—C3'—C4'	-1,1 (2)
C7—C16	1,567 (4)	C7'—C16'	1,570 (4)	C1'—C6'—C7'—C8'	-123,8 (3)
C7—C17	1,524 (4)	C7'—C17'	1,510 (4)	C1'—C6'—C7'—C16'	125,5 (3)
C8—C9	1,397 (4)	C8'—C9'	1,394 (5)	C1'—C6'—C7'—C17'	1,7 (2)
C8—C14	1,390 (4)	C8'—C14'	1,385 (5)	C2'—C1'—C6'—C5'	2,4 (2)
C9—C10	1,513 (4)	C9'—C10'	1,503 (5)	C2'—C1'—C6'—C7'	-178,8 (4)
C9—C11	1,384 (5)	C9'—C11'	1,384 (5)	C2'—C3'—C4'—C5'	0,0 (2)
C10—C15	1,545 (4)	C10'—C15'	1,550 (5)	C3'—C2'—C1'—C6'	-0,1 (2)
C11—C12	1,389 (5)	C11'—C12'	1,387 (5)	C3'—C4'—C5'—C10'	-177,4 (4)
C12—C13	1,381 (5)	C12'—C13'	1,380 (5)	C4'—C5'—C10'—C15'	-118,4 (3)
C13—C14	1,392 (5)	C13'—C14'	1,388 (5)	C6'—C7'—C8'—C9'	-53,5 (2)
C15—C16	1,541 (4)	C15'—C16'	1,544 (5)	C6'—C7'—C8'—C14'	127,0 (3)
C17—C18	1,534 (4)	C17'—C18'	1,532 (5)	C6'—C7'—C17'—C18'	68,9 (2)

C7'—C8'—C9'—C11'	-179,7 (3)
C7'—C17'—C18'—C19'	-172,1 (3)
C8'—C9'—C11'—C12'	-1,0 (2)
C9'—C11'—C12'—C13'	0,9 (2)
C17'—C18'—C19'—N20'	-62,3 (2)
C18'—C19'—N20'—C21'	-68,2 (3)
C18'—C19'—N20'—C22'	107,9 (3)
C19'—N20'—C22'—O23'	3,1 (2)
C19'—N20'—C22'—O24'	-175,4 (3)

La structure a été déterminée par les méthodes directes (*MULTAN11/80*; Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1980). Les paramètres ont été affinés par la méthode moindres carrés (*SHELX76*; Sheldrick, 1976). Les dessins ont été obtenus à l'aide de programme *ORTEP* (Johnson, 1965). Tous les programmes utilisés ont été implantés sur un MicroVAX II.

Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées des atomes d'hydrogène, des distances et angles des atomes d'hydrogène et des plans moyens ont été déposées au dépôt d'archives de l'UICr (Référence: PA1112). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Managing Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Références

- Bargava, K. P. & Chandra, O. (1963). *Br. J. Pharmacol. Chemother.* **21**, 436–440.
- Brouant, P., Pierrot, M., Baldy, A., Soyfer, J. C. & Barbe, J. (1984). *Acta Cryst.* **C40**, 1590–1593
- Friebel, H., Flick, H. & Reichle, C. (1954). *Arzneim. Forsch.* **4**, 171–175.
- Johnson, C. K. (1965). *ORTEP*. Rapport ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- Kraus, M. A. (1973). *Synthesis*, pp. 361–362.
- Main, P., Fiske, S. J., Hull, S. E., Lessinger, L., Germain, G., Declercq, J.-P. & Woolfson, M. M. (1980). *MULTAN80. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- Oddon, Y., Darbon, B., Reboul, J.-P., Cristau, B., Soyfer, J. C. & Pèpe, G. (1984). *Acta Cryst.* **C40**, 524–526.
- Pèpe, G., Reboul, J.-P. & Oddon, Y. (1989). *Eur. J. Med. Chem.* **24**, 1–13.
- Pèpe, G. & Siri, D. (1990). *Studies in Physical and Theoretical Chemistry*, Tome 71, édité par J. L. Rivaill, pp. 93–101. Amsterdam: Elsevier.
- Reboul, J.-P. (1983). PhD thèse, Univ. d'Aix-Marseille III, Marseille, France.
- Reboul, J.-P., Cristau, B., Estienne, J. & Astier, J. P. (1980). *Acta Cryst.* **B36**, 2018–2112.
- Reboul, J.-P., Cristau, B. & Pèpe, G. (1981). *Acta Cryst.* **B37**, 394–398.
- Reboul, J.-P., Cristau, B. & Pèpe, G. (1982). *Acta Cryst.* **B38**, 1489–1495.
- Reboul, J.-P., Cristau, B., Soyfer, J. C. & Estienne, J. (1980). *Acta Cryst.* **B36**, 2683–2688.
- Reboul, J.-P., Oddon, Y., Caranoni, C., Soyfer, J. C., Barbe, J. & Pèpe, G. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 537–539.
- Reboul, J.-P. & Pèpe, G. (1993). Communication Privée.
- Reboul, J.-P., Soyfer, J. C., Cristau, B., Caranoni, C. & Pèpe, G. (1982). *Acta Cryst.* **B38**, 2633–2638.
- Reboul, J.-P., Soyfer, J. C., Cristau, B., Darbon, B., Oddon, Y. & Pèpe, G. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 600–603.
- Sharma, V. N., Pancholi, N. S. & Sharma, H. L. (1971). *Indian J. Exp. Biol.* **9**, 172–176.
- Sheldrick, G. M. (1976). *SHELX76. Program for Crystal Structure Determination*. Univ. de Cambridge, Angleterre.

Acta Cryst. (1995). **C51**, 974–976

2-Acrylamido-2-hydroxyméthylpropan-1,3-diol

YVES ODDON*

Laboratoire de Chimie Biorganique, Faculté des Sciences, 33, Louis Pasteur, 84000 Avignon CEDEX, France

JEAN-PIERRE REBOUL

GERCTOP, URA CNRS 1411, Faculté de Pharmacie, 27 Boulevard Jean-Moulin, 13385 Marseille CEDEX 5, France

GÉRARD PÈPE ET DIDIER SIRI

CRMC2-CNRS, Campus de Luminy, Case 913, 13288 Marseille CEDEX 9, France

BERNARD PUCCI ET ANDRÉ A. PAVIA

Laboratoire de Chimie Biorganique, Faculté des Sciences, 33 Louis Pasteur, 84000 Avignon CEDEX, France

(Reçu le 8 octobre 1992, accepté le 3 juin 1994)

Abstract

The atomic structure of *N*-[2-(hydroxyméthyl)-1,3-dihydroxy-2-propyl]acrylamic acid, C₇H₁₃NO₄, is described. Three hydrogen bonds link the molecules to form the crystal. Comparison with theoretical data supports the hypothesis that bitterness of the studied compound is related to the length of the hydrophobic chain.

Commentaire

L'étude structurale du 2-acrylamido-2-hydroxyméthylpropane-1,3-diol (AHP) s'inscrit dans le cadre d'un ensemble de recherches concernant la synthèse chimique de produits tensioactifs dérivés de ce composé (Pucci, Maurizis & Pavia, 1991; Pavia, Pucci, Riess & Zarif, 1991; Boyer, Lamaty, Moussamou-Missima, Pavia, Pucci & Roque, 1992). Ce substrat est utilisé en biologie et en médecine pour ses propriétés acido-basiques (Nahas, 1962) et il peut être transformé en un dérivé polymérisable ou télomérisable. Les télomères obtenus par polymérisation des monomères acrylamides en présence d'agents de transfert de chaîne de type alcanethiol ou perfluoroalcanethiol présentent des propriétés tensioactives remarquables et peuvent être utilisés comme agent solubilisant de protéines membranaires ou comme émulsionnant de fluorocarbures pour le transport d'oxygène *in vivo*.