

Acta Cryst. (1966). **21**, 833

Données cristallographiques sur quelques dérivés de la phénothiazine utilisés en pharmacologie. Par PIERRE MARSAU et JACQUES HOUSTY, *Laboratoire de Cristallographie, Faculté des Sciences de Bordeaux-Talence (Gde), France*

(Reçu le 4 juillet 1966)

(Diméthylamino-2'-méthyl-2')-éthyl-10-phénothiazine (chlorhydrate)

Ce composé est connu en pharmacie sous le nom de Phénergan.

Les cristaux utilisés sont obtenus à partir d'une solution dans le chlorobenzène; ils sont prismatiques, allongés suivant [010].

$$\begin{aligned} a &= 15,54 \pm 0,05 \text{ \AA} \\ b &= 8,37 \pm 0,03 \\ c &= 15,60 \pm 0,05 \\ \beta &= 122^\circ \end{aligned}$$

Nombre de molécules dans la maille: 4
Densité calculée: 1,24
Groupe spatial: $P2_1/c$

(Diméthylamino-2'-méthyl-2')-éthyl-10-phénothiazine (bromhydrate)

Cristaux obtenus par évaporation d'une solution dans le dichloro-1,2-éthane.

Direction d'allongement [001]. Cristaux prismatiques.

$$a = b = 20,70 \pm 0,05 \text{ \AA} \quad c = 7,98 \pm 0,03 \text{ \AA}$$

Nombre de molécules dans la maille: 8
Densité calculée: 1,42
Groupe spatial: $I\bar{4}$

(Diéthylamino-2'-éthyl-1')-10-phénothiazine (chlorhydrate)

Ce composé est connu en pharmacie sous le nom de Diparcol.

Les cristaux utilisés ont été obtenus à partir d'une solution dans le chloroforme. Direction d'allongement [100]. Cristaux prismatiques.

$$\begin{aligned} a &= 7,37 \pm 0,03 \text{ \AA} \\ b &= 17,33 \pm 0,05 \\ c &= 15,43 \pm 0,05 \\ \beta &= 99^\circ 30' \end{aligned}$$

Nombre de molécules dans la maille: 4
Densité calculée: 1,15
Groupe spatial: $P2_1/c$

(Diéthylamino-2'-méthyl-2')-éthyl-10-phénothiazine (chlorhydrate)

Ce composé est connu en pharmacie sous le nom de Parsidol.

Les cristaux utilisés ont été obtenus à partir d'une solution dans le chloroforme. Direction d'allongement [100]. Forme prismatique.

$$\begin{aligned} a &= 8,82 \pm 0,03 \text{ \AA} \\ b &= 14,43 \pm 0,05 \\ c &= 14,62 \pm 0,05 \\ \beta &= 99^\circ 15' \end{aligned}$$

Nombre de molécules dans la maille: 4
Densité calculée: 1,27
Groupe spatial: $P2_1/c$

Methoxy-3-(diméthylamino-3'-propyl)-10-phénothiazine (maléate acide)

Ce composé est connu en pharmacie sous le nom de Mopazine.

Cristaux en plaquettes, allongés suivant [001], obtenus à partir d'une solution dans le dichloro-1,2-éthane.

$$\begin{aligned} a &= 19,00 \pm 0,05 \text{ \AA} \\ b &= 19,91 \pm 0,05 \\ c &= 11,21 \pm 0,03 \end{aligned}$$

Nombre de molécules dans la maille: 8
Densité calculée: 1,33
Groupe spatial: $Pbca$

Tous ces composés appartiennent à une longue série de produits utilisés en pharmacologie pour leur action sur le système nerveux central (neuroleptiques, antiparkinsoniens) et parfois aussi comme anti-histaminiques.

Acta Cryst. (1966). **21**, 833

A Monte Carlo method for the calculation of the transmission factors of crystals of any shape and absorption power. By A. ALBERTI, *Centro di Calcolo Elettronico dell'Università di Modena, Italy* and G. GOTTARDI, *Istituto di Mineralogia dell'Università di Modena, Italy*

(Received 31 January 1966)

In the derivation of structure factors from intensities, the major difficulty arises in the calculation of the transmission factor, given by the formula

$$T_{hkl} = \frac{1}{V} \int_V \exp(-\mu l) dV,$$

where V is the volume of the crystal, μ is the linear absorption coefficient (cm^{-1}), l is the length of the X-ray path from the crystal surface to the infinitesimal volume dV (incident beam) plus the distance from the infinitesimal volume dV to the crystal surface (diffracted beam); the integral is extended to the whole volume of the crystal.