

Structure Cristalline du Complexe 1 : 1 Sulfacétamide–Caféine

PAR JEAN MICHEL LEGER

Laboratoire de Chimie Analytique, Faculté de Pharmacie ERA n° 626 CNRS, Université de Bordeaux II,
91 rue Leyteire, 33000 Bordeaux, France

SERGE ALBEROLA

Laboratoire de Chimie générale et minérale, UER des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, Montpellier I,
France

ET ALAIN CARPY

Laboratoire de Cristallographie associé au CNRS, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Libération,
33405 Talence, France

(Reçu le 27 octobre 1976, accepté le 28 octobre 1976)

The crystal structure of the 1 : 1 complex of sulphacetamide with caffeine has been solved by X-ray diffraction methods. The crystals are monoclinic, space group $P2_1/c$, with $a = 7.30$ (8), $b = 30.76$ (7), $c = 8.89$ (7) Å, $\beta = 108.1$ (5)°, and four sulphacetamide and four caffeine molecules in the cell. The full-matrix least-squares refinement of 332 atomic positional and thermal parameters, based on 3365 X-ray intensity data, gave a final R of 0.05. The structure consists of ribbons of sulphacetamide molecules linked by $\text{NH} \cdots \text{O}$ hydrogen bonds. Caffeine molecules bridge two different sulphacetamide ribbons by $\text{NH} \cdots \text{N}$ and $\text{NH} \cdots \text{O}$ hydrogen bonds. A strong van der Waals force is also involved in the complex formation.

Introduction

Dans le cadre des recherches poursuivies sur les associations de substances chimiques à caractère médicamenteux, Alberola, Rambaud & Sabon (1976) ont mis en évidence un composé moléculaire 1 : 1 entre la sulfacétamide et la caféine, par analyse enthalpique différentielle.

Afin de préciser et de comparer la nature des liaisons dans le solide et en solution, la détermination de la structure cristalline de ce complexe (Fig. 1) a été entreprise dans un premier temps.

Partie expérimentale

Les cristaux ont été obtenus par évaporation lente à partir d'une solution dans l'alcool éthylique (Alberola *et al.*, 1976). Les données cristallographiques sont: système monoclinique; groupe spatial $P2_1/c$; paramètres de la maille: $a = 7,30$ (8), $b = 30,76$ (7), $c = 8,89$ (7) Å, $\beta = 108,1$ (5)°; $V = 1900$ Å³, $d_m = 1,46$, $d_c = 1,43$ g cm⁻³, $Z = 4$. Nombre de réflexions: 3385, dont 2614 observées.

Les intensités diffractées ont été mesurées sur diffractomètre automatique Siemens équipé d'un compteur à scintillations, en balayage $\theta-2\theta$ et en utilisant le rayonnement $\text{Cu K}\alpha$.

Détermination de la structure

Les coordonnées de l'atome de soufre ont été déterminées par déconvolution de la fonction de Patterson tridimensionnelle en E^2 . Des sections de Fourier effectuées avec les signes du soufre ont permis de localiser l'ensemble des autres atomes. L'affinement par la

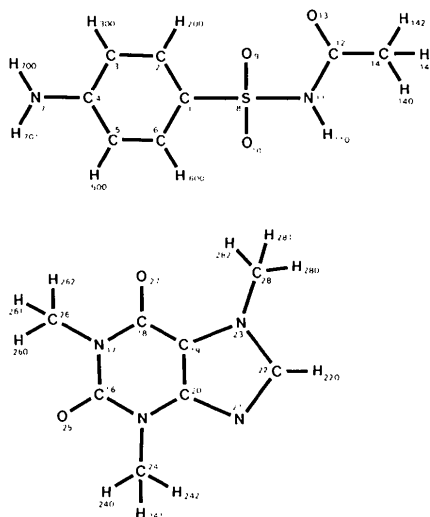


Fig. 1. Numération atomique.

méthode des moindres carrés a été conduit de la façon décrite dans le Tableau 1.*

Résultats

Le Tableau 2 rassemble les paramètres de position et d'agitation thermique des atomes. Dans les Tableaux 3 et 4 sont regroupés les distances interatomiques et les angles de liaisons.

Les valeurs trouvées sont en bon accord avec celles avancées pour les sulfanilamides par Alléaume (1967) et pour la caféine hydratée par Sutor (1958) (Tableau 5).

* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 32277: 35 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

L'utilisation du programme de Schomaker, Waser, Marsh & Bergman (1959) a permis de déterminer les plans moyens suivants (Tableau 6): plan 1, constitué par les atomes C(1) à C(6); plan 2, constitué par les atomes C(16), N(17), C(19), C(20); et plan 3, constitué par les atomes S(8), N(11), C(12).

Tableau 1. *Affinement de la structure*

Affinement avec le schéma de pondération: $w = 1$ si $|F_o| < P$, et $w = P^2/F_o$ si $|F_o| > P$, avec $P = \sqrt{(F_o^2(\max.)/10)}$.

	R
Affinement avec agitation thermique isotrope sur les atomes S, O, N, C; après cinq cycles	0,12
Affinement avec agitation thermique anisotrope sur ces mêmes atomes; après trois cycles	0,07
Localisation des atomes d'hydrogène par fonction différence de Cochran	
Affinement avec agitation thermique isotrope sur les atomes d'hydrogène et anisotrope sur les autres atomes: après trois cycles	0,05

Tableau 2. *Les coordonnées atomiques ($\times 10^4$) et les facteurs d'agitation thermique β_{ij} ($\times 10^4$)*

	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
C(1)	1449 (4)	1594 (1)	-533 (3)	172 (7)	9 (0)	101 (4)	0 (2)	57 (8)	2 (2)
C(2)	1198 (4)	1850 (1)	-1860 (4)	199 (7)	10 (0)	118 (4)	9 (2)	63 (8)	10 (2)
C(3)	1104 (5)	1661 (1)	-3290 (3)	224 (8)	10 (0)	107 (4)	5 (3)	60 (9)	9 (2)
C(4)	1300 (4)	1209 (1)	-3397 (4)	194 (7)	11 (0)	120 (4)	-12 (3)	72 (9)	-5 (2)
C(5)	1564 (5)	954 (1)	-2041 (4)	243 (8)	10 (0)	140 (5)	-13 (3)	96 (10)	-1 (2)
C(6)	1625 (5)	1142 (1)	-628 (4)	221 (8)	10 (0)	123 (4)	-9 (3)	82 (9)	5 (2)
N(7)	1198 (5)	1014 (1)	-4808 (3)	360 (9)	14 (0)	127 (4)	-14 (3)	155 (10)	-20 (2)
S(8)	1578 (1)	1826 (0)	1277 (1)	189 (2)	11 (0)	100 (1)	-2 (1)	68 (2)	-2 (0)
O(9)	1007 (4)	1508 (1)	2221 (3)	269 (6)	18 (0)	122 (3)	-35 (2)	135 (7)	5 (2)
O(10)	628 (4)	2235 (1)	1006 (3)	266 (6)	14 (0)	161 (4)	36 (2)	90 (8)	-13 (2)
N(11)	3892 (4)	1897 (1)	2227 (3)	192 (6)	11 (0)	109 (4)	-12 (2)	15 (7)	4 (2)
C(12)	5057 (5)	2196 (1)	1819 (4)	248 (8)	10 (0)	125 (5)	-14 (3)	74 (10)	-4 (2)
O(13)	4486 (4)	2422 (1)	664 (3)	331 (7)	14 (0)	169 (4)	-35 (3)	55 (9)	15 (2)
C(14)	7093 (6)	2211 (1)	2950 (5)	218 (9)	18 (1)	197 (7)	-25 (4)	58 (12)	-4 (3)
N(15)	3415 (4)	-605 (1)	-4509 (3)	235 (7)	13 (0)	127 (4)	7 (2)	71 (8)	6 (2)
C(16)	2732 (5)	-218 (1)	-5238 (4)	226 (8)	12 (0)	157 (6)	1 (3)	53 (11)	-1 (2)
N(17)	2408 (4)	-192 (1)	-6850 (3)	246 (7)	10 (0)	156 (5)	10 (2)	29 (9)	13 (2)
C(18)	2726 (5)	-524 (1)	-7833 (4)	200 (8)	12 (0)	155 (5)	4 (3)	62 (10)	14 (2)
C(19)	3393 (5)	-907 (1)	-6994 (4)	179 (7)	11 (0)	144 (5)	4 (3)	57 (9)	4 (2)
C(20)	3704 (5)	-950 (1)	-5400 (4)	186 (7)	11 (0)	151 (5)	4 (3)	50 (9)	5 (2)
N(21)	4287 (5)	-1351 (1)	-4883 (4)	269 (8)	12 (0)	183 (5)	12 (3)	58 (10)	21 (2)
C(22)	4331 (6)	-1567 (1)	-6210 (5)	274 (10)	13 (0)	199 (7)	16 (3)	105 (12)	12 (3)
N(23)	3781 (4)	-1308 (1)	-7520 (3)	212 (7)	14 (0)	145 (4)	0 (2)	94 (8)	-8 (2)
C(24)	3596 (7)	-667 (2)	-2835 (4)	370 (13)	19 (1)	130 (6)	9 (4)	96 (13)	8 (3)
O(25)	2435 (5)	92 (1)	-4475 (3)	410 (9)	13 (0)	213 (5)	24 (3)	99 (11)	-20 (2)
C(26)	1550 (7)	218 (1)	-7612 (6)	421 (14)	11 (0)	226 (8)	42 (4)	21 (16)	28 (3)
O(27)	2401 (4)	-468 (1)	-9268 (3)	358 (8)	19 (0)	139 (4)	18 (3)	91 (9)	21 (2)
C(28)	3667 (6)	-1448 (2)	-9106 (5)	257 (10)	21 (1)	176 (7)	6 (4)	131 (13)	-23 (3)

	x	y	z	B		x	y	z	B
H(140)	7904 (57)	2356 (12)	2421 (49)	7,0	H(262)	210 (59)	279 (13)	-7474 (49)	7,5
H(141)	7552 (55)	1938 (13)	3366 (45)	6,8	H(280)	4638 (55)	-1282 (13)	-9399 (45)	6,5
H(142)	7088 (58)	2387 (14)	3880 (48)	7,7	H(281)	4336 (63)	-1729 (13)	-8910 (52)	7,9
H(200)	1139 (50)	2168 (10)	-1765 (40)	4,6	H(282)	2420 (62)	-1439 (13)	-9854 (52)	7,9
H(220)	4751 (56)	-1884 (12)	-6217 (47)	6,4	H(300)	933 (53)	1852 (11)	-4250 (45)	5,6
H(240)	2604 (56)	-821 (12)	-2619 (48)	6,9	H(500)	1765 (54)	616 (12)	-2095 (43)	5,6
H(241)	3695 (56)	-403 (12)	-2386 (46)	6,6	H(110)	4450 (54)	1716 (12)	3109 (44)	5,8
H(242)	4791 (60)	-828 (13)	-2331 (50)	7,7	H(600)	1747 (49)	949 (11)	291 (42)	4,9
H(260)	2181 (56)	506 (12)	-7249 (48)	6,7	H(700)	1667 (55)	741 (12)	-4865 (45)	6,3
H(261)	1656 (55)	221 (12)	-8580 (45)	6,5	H(701)	1293 (54)	1180 (13)	-5603 (45)	6,3

Les résultats obtenus conduisent aux remarques suivantes:

– le cycle benzénique de la sulfacétamide est parfaitement plan;

– les deux cycles de la caféine sont pratiquement

plans [l'atome C(22) présentant le plus grand écart avec le plan est distant de 0,07 Å].

L'angle dièdre formé par le cycle φ (plan 1) et le départ de la chaîne de la sulfacétamide (plan 3) est égal à $\varphi_1 = 102,86^\circ$.

Quant à l'angle dièdre formé par les plans moyens 1 et 2, il est égal à $\varphi_2 = 12,56^\circ$, ce qui montre que le cycle φ de la sulfacétamide et les deux cycles de la caféine sont pratiquement parallèles.

Tableau 3. Distances interatomiques (Å)

C(1)	C(2)	1,383 (4)	N(17)	C(26)	1,476 (5)
C(2)	C(3)	1,380 (4)	C(18)	O(27)	1,236 (4)
C(3)	C(4)	1,404 (4)	N(23)	C(28)	1,453 (5)
C(4)	C(5)	1,403 (5)	N(15)	C(20)	1,380 (5)
C(5)	C(6)	1,372 (5)	C(2)	H(200)	0,984 (32)
C(6)	C(1)	1,401 (4)	C(3)	H(300)	1,012 (37)
C(1)	S(8)	1,737 (3)	C(5)	H(500)	1,053 (36)
S(8)	O(9)	1,434 (3)	C(6)	H(600)	0,993 (35)
S(8)	O(10)	1,422 (3)	N(7)	H(700)	0,914 (37)
S(8)	N(11)	1,652 (3)	N(7)	H(701)	0,894 (39)
N(11)	C(12)	1,376 (4)	N(11)	H(110)	0,945 (37)
C(12)	O(13)	1,203 (4)	C(14)	H(140)	0,973 (42)
C(12)	C(14)	1,515 (6)	C(14)	H(141)	0,937 (40)
C(4)	N(7)	1,372 (4)	C(14)	H(142)	0,988 (41)
N(15)	C(16)	1,374 (5)	C(22)	H(220)	1,023 (39)
C(16)	N(17)	1,382 (5)	C(28)	H(280)	0,973 (41)
N(17)	C(18)	1,411 (5)	C(28)	H(281)	0,981 (42)
C(18)	C(19)	1,398 (5)	C(28)	H(282)	0,947 (46)
C(19)	C(20)	1,371 (5)	C(26)	H(260)	1,005 (39)
C(20)	N(21)	1,339 (4)	C(26)	H(261)	0,888 (39)
N(21)	C(22)	1,363 (5)	C(26)	H(262)	1,042 (46)
C(22)	N(23)	1,365 (5)	C(24)	H(240)	0,935 (42)
N(23)	C(19)	1,380 (4)	C(24)	H(241)	0,898 (39)
N(15)	C(24)	1,466 (5)	C(24)	H(242)	0,982 (44)
C(16)	O(25)	1,227 (5)			

Cohésion cristalline

La structure cristalline du complexe est caractérisée par des chaînes formées de molécules de sulfacétamide liées entre elles par liaison hydrogène $N(7^{iii})-H(701^{iii}) \cdots O(9^i)$, parallèles au plan (100) (Figs. 2 et 3). L'angle $N(7^{iii})-H(701^{iii}) \cdots O(9^i)$ est égal à $168,33^\circ$ (Tableau 7).

Les molécules de caféine s'insèrent entre deux chaînes périodiques de sulfacétamide et les relient dans les directions (010) et (001) par l'intermédiaire des liaisons hydrogène $O(25^i) \cdots H(700^i)-N(7^i)$ et $N(21^{iv}) \cdots H(110^i)-N(11^i)$ respectivement. Les angles $O(25^i)-H(700^i)-N(7^i)$ et $N(11^i)-H(110^i) \cdots N(21^{iv})$ ont pour valeur $164,06$ et $176,99^\circ$ (Tableau 7).

Les principales liaisons de van der Waals sont rassemblées dans le Tableau 7. Il est à noter un contact plus important que les autres, $O(13^i)-C(22^{vi}) = 3,225$ Å.

Tableau 4. Angles de liaisons ($^\circ$)

C(1)–C(2)–C(3)	120,18 (03)	H(110)–N(11)–C(12)	118,02 (24)	H(280)–C(28)–H(281)	98,37 (37)
C(2)–C(3)–C(4)	120,15 (03)	N(11)–C(12)–O(13)	122,22 (03)	H(280)–C(28)–H(282)	114,74 (37)
C(3)–C(4)–C(5)	119,11 (03)	N(11)–C(12)–C(14)	113,94 (03)	H(281)–C(28)–H(282)	117,86 (40)
C(4)–C(5)–C(6)	120,47 (03)	O(13)–C(12)–C(14)	123,84 (03)	C(28)–N(23)–C(19)	129,71 (03)
C(5)–C(6)–C(1)	119,82 (03)	C(12)–C(14)–H(140)	108,24 (26)	N(23)–C(19)–C(18)	130,29 (03)
S(8)–C(1)–C(2)	120,78 (02)	C(12)–C(14)–H(141)	113,03 (25)	C(19)–C(18)–O(27)	126,29 (03)
C(1)–C(2)–H(200)	119,38 (22)	C(12)–C(14)–H(142)	108,31 (25)	O(27)–C(18)–N(17)	121,51 (03)
H(200)–C(2)–C(3)	120,40 (22)	H(140)–C(14)–H(141)	113,83 (36)	C(18)–N(17)–C(26)	117,61 (03)
C(2)–C(3)–H(300)	119,47 (23)	H(140)–C(14)–H(142)	108,47 (36)	N(17)–C(26)–H(260)	121,28 (25)
H(300)–C(3)–C(4)	120,36 (23)	H(141)–C(14)–H(142)	104,70 (36)	N(17)–C(26)–H(261)	107,47 (27)
C(3)–C(4)–N(7)	121,26 (03)	N(15)–C(16)–N(17)	117,40 (03)	N(17)–C(26)–H(262)	112,32 (25)
C(4)–N(7)–H(700)	122,65 (26)	C(16)–N(17)–C(18)	126,34 (03)	H(260)–C(26)–H(261)	97,71 (36)
H(700)–N(7)–H(701)	111,06 (37)	N(17)–C(18)–C(19)	112,19 (03)	H(260)–C(26)–H(262)	99,07 (35)
C(4)–N(7)–H(701)	118,48 (26)	C(18)–C(19)–C(20)	123,51 (03)	H(261)–C(26)–H(262)	118,83 (36)
N(7)–C(4)–C(5)	119,61 (03)	C(19)–C(20)–N(15)	120,87 (03)	N(17)–C(16)–O(25)	121,76 (03)
C(4)–C(5)–H(500)	119,88 (22)	C(20)–N(15)–C(16)	119,65 (03)	O(25)–C(16)–N(15)	120,84 (03)
H(500)–C(5)–C(6)	119,62 (22)	N(21)–C(20)–C(19)	112,17 (03)	C(16)–N(15)–C(24)	119,82 (03)
C(5)–C(6)–H(600)	117,99 (22)	C(20)–C(19)–N(23)	106,14 (03)	N(15)–C(24)–H(240)	116,41 (26)
H(600)–C(6)–C(1)	122,14 (22)	C(19)–N(23)–C(22)	105,67 (03)	N(15)–C(24)–H(241)	107,68 (27)
C(6)–C(1)–S(8)	118,97 (02)	N(23)–C(22)–N(21)	111,99 (03)	N(15)–C(24)–H(242)	108,42 (27)
C(1)–S(8)–O(9)	108,69 (01)	C(22)–N(21)–C(20)	104,02 (03)	H(240)–C(24)–H(241)	109,04 (38)
C(1)–S(8)–O(10)	108,93 (01)	N(21)–C(20)–C(19)	112,17 (03)	H(240)–C(24)–H(242)	106,71 (37)
O(10)–S(8)–O(9)	119,18 (01)	N(21)–C(22)–H(220)	123,87 (24)	H(241)–C(24)–H(242)	108,35 (38)
C(1)–S(8)–N(11)	106,26 (01)	H(220)–C(22)–N(23)	124,14 (24)	C(24)–N(15)–C(20)	120,07 (03)
O(9)–S(8)–N(11)	103,23 (01)	C(22)–N(23)–C(28)	124,62 (03)	N(15)–C(20)–N(21)	126,96 (03)
O(10)–S(8)–N(11)	109,76 (01)	N(23)–C(28)–H(280)	106,18 (24)	C(6)–C(1)–C(2)	120,25 (03)
S(8)–N(11)–H(110)	117,11 (24)	N(23)–C(28)–H(281)	102,39 (28)	C(26)–N(17)–C(16)	115,95 (03)
S(8)–N(11)–C(12)	124,87 (02)	N(23)–C(28)–H(282)	115,18 (28)		

Tableau 5. Distances (Å) et angles (°) interatomiques pour quelques sulfanilamides et pour la caféine hydratée

Configuration moyenne de sulfanilamides (Alléaume, 1967)			
C(1)–C(2)	1,381	C(1)–C(2)–C(3)	120,7
C(2)–C(3)	1,382	C(2)–C(3)–C(4)	120,2
C(3)–C(4)	1,399	C(3)–C(4)–C(5)	118,0
C(4)–N(7)	1,380	C(4)–C(5)–C(6)	120,0
C(4)–C(5)	1,399	C(5)–C(6)–C(1)	120,7
C(5)–C(6)	1,382	C(6)–C(1)–C(2)	120,0
C(6)–C(1)	1,381	C(2)–C(1)–S(8)	119,8
C(1)–S(8)	1,751	C(6)–C(1)–S(8)	119,8
S(8)–O(9)	1,442	C(1)–S(8)–O(9)	107,3
S(8)–O(10)	1,442	C(1)–S(8)–O(10)	107,3
S(8)–N(11)	1,635	C(1)–S(8)–N(11)	109,8
		O(9)–S(8)–N(11)	106,8
		O(10)–S(8)–N(11)	106,8
		O(9)–S(8)–O(10)	118,3
		C(3)–C(4)–N(7)	120,9
		C(5)–C(4)–N(7)	120,9
Configuration de la caféine hydratée (Sutor, 1958)			
N(15)–C(16)	1,35	C(20)–N(15)–C(16)	122,8
C(16)–N(17)	1,42	N(15)–C(16)–N(17)	112,9
N(17)–C(18)	1,36	C(16)–N(17)–C(18)	127,6
C(18)–C(19)	1,44	N(17)–C(18)–C(19)	115,8
C(19)–C(20)	1,32	C(18)–C(19)–C(20)	119,9
C(20)–N(21)	1,31	C(19)–C(20)–N(21)	121,4
N(21)–C(22)	1,34	C(19)–C(20)–N(21)	110,9
C(22)–N(23)	1,32	C(20)–N(21)–C(22)	105,7
N(23)–C(19)	1,41	N(21)–C(22)–N(23)	112,3
N(15)–C(20)	1,42	C(22)–N(23)–C(19)	103,4
N(15)–C(24)	1,50	N(23)–C(19)–C(20)	107,2
C(16)–O(25)	1,19	C(20)–N(15)–C(24)	119,2
N(17)–C(26)	1,48	C(24)–N(15)–C(16)	117,9
C(18)–O(27)	1,26	N(15)–C(16)–O(25)	124,1
N(23)–C(28)	1,47	C(16)–N(17)–C(26)	112,0
		C(26)–N(17)–C(18)	120,3
		N(17)–C(18)–O(27)	118,4
		C(19)–C(18)–O(27)	126,4
		C(19)–N(23)–C(28)	128,7
		C(22)–N(23)–C(28)	127,5

Discussion et conclusion

Les résultats obtenus montrent que la formation du complexe en phase solide est assurée par deux liaisons hydrogène. D'autre part, soit *C* la caféine et *S* la sulfacétamide, les associations dans le cristal sont du type $S \cdots C \cdots S'$ et $C \cdots S \cdots C'$.

Ces associations sont comparables à celles trouvées par Craven & Gartland (1970) pour le complexe 2:1 barbital-caféine. Dans ce cas cependant, la caféine n'est liée aux chaînes de barbital que par une seule liaison hydrogène et par deux contacts de van der Waals à 3,16 et 3,35 Å.

Le complexe 1:1 sulfacétamide-caféine subsistant en solution (Alberola, 1976), une étude par spectroscopie IR a été entreprise pour tenter de préciser si la liaison hydrogène qui demeure est du type $NH \cdots O$ ou du type $NH \cdots N$.

Tableau 6. Plans moyens d'atomes

$$\text{Plan 1: } (0,9694)X + (0,0993)Y + (0,2246)Z = 1,5554$$

Atomes définissant le plan

C(1)	0,001 Å	C(3)	-0,007 Å	C(5)	0,005 Å
C(2)	0,006	C(4)	0,002	C(6)	-0,006

Autres atomes

N(7)	-0,011 Å	O(10)	-0,509 Å	O(13)	2,311 Å
S(8)	0,020	N(11)	1,604	C(14)	3,919
O(9)	-0,559	C(12)	2,554		

$$\text{Plan 2: } (0,9353)X + (0,3090)Y + (0,1724)Z = 2,2453$$

Atomes définissant le plan

C(16)	0,006 Å	C(19)	0,005 Å
N(17)	-0,004	C(20)	-0,005

Autres atomes

C(18)	0,008 Å	N(23)	-0,055 Å	C(26)	-0,113 Å
N(15)	0,024	C(24)	-0,105	O(27)	0,001
N(21)	-0,043	O(25)	0,015	C(28)	-0,077
C(22)	-0,074				

$$\text{Plan 3: } (-0,4361)X + (0,6786)Y + (0,5910)Z = 4,1020$$

Atomes définissant le plan

S(1)		N(11)		C(12)	
------	--	-------	--	-------	--

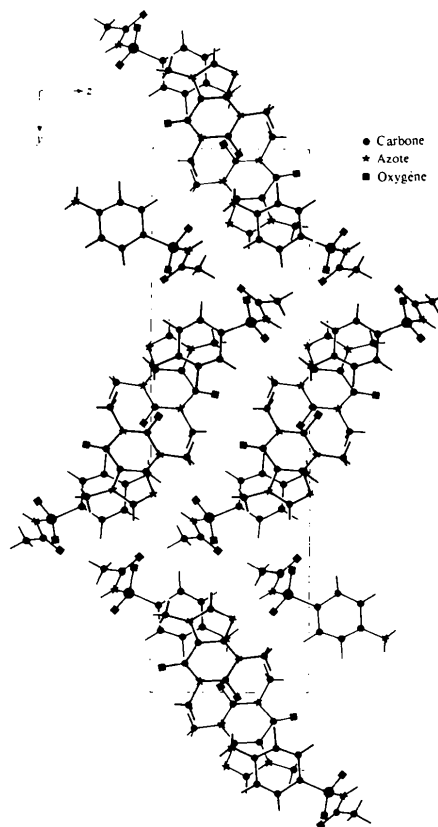


Fig. 2. Projection de la structure sur le plan (100).

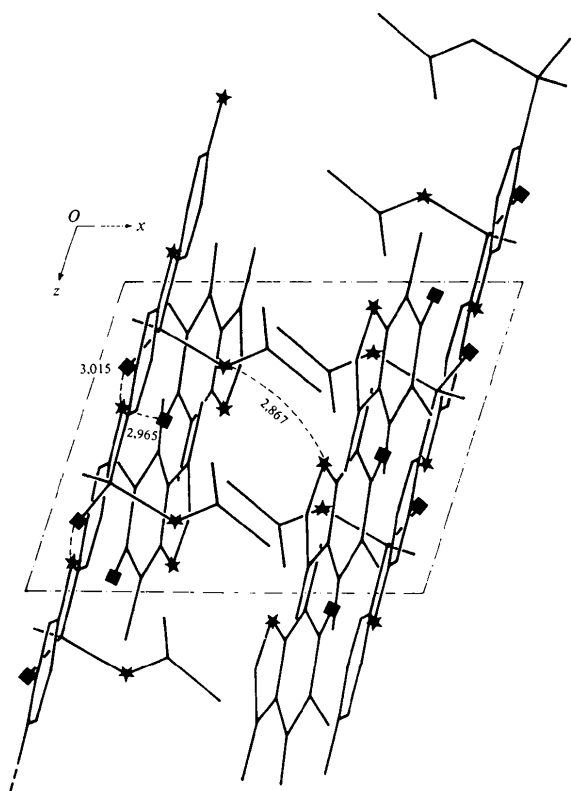


Fig. 3. Projection de la structure sur le plan (010).

Tableau 7. Liaisons hydrogène et de van der Waals

Code de symétrie

(i)	\bar{x}	\bar{y}	z	(v)	\bar{x}	\bar{y}	$\bar{z} - 2$
(ii)	\bar{x}	y	$z - 1$	(vi)	x	$y + \frac{1}{2}$	$z + \frac{1}{2}$
(iii)	x	\bar{y}	$z + 1$	(vii)	$\bar{x} + 1$	$\bar{y} + \frac{1}{2}$	$\bar{z} - \frac{1}{2}$
(iv)	$x + 1$	y	z	(viii)	$\bar{x} + 1$	y	$\bar{z} - 1$

Liaisons hydrogène

O(25 ⁱ)...N(7 ⁱ)	2,965 Å	O(25 ⁱ)...H(700 ⁱ)—N(7 ⁱ)	164,06°
O(25 ⁱ)...H(700 ⁱ)	2,075		
O(9 ⁱ)...N(7 ⁱⁱⁱ)	3,015	O(9 ⁱ)...H(701 ⁱⁱⁱ)—N(7 ⁱ)	168,33
O(9 ⁱ)...H(701 ⁱⁱⁱ)	2,135		
N(11 ⁱ)...N(21 ^{iv})	2,867	N(11 ⁱ)—H(110 ⁱ)...N(21 ^{iv})	176,99
H(110 ⁱ)...N(21 ^{iv})	1,922		

Liaisons de van der Waals

C(5 ⁱ)—C(19 ⁱⁱ)	3,456 Å	C(14 ^j)—N(21 ^{iv})	3,472 Å
N(15 ⁱ)—N(7 ⁱⁱ)	3,470	C(26 ⁱ)—O(27 ^v)	3,412
C(4 ⁱ)—N(23 ^{viii})	3,443	O(10 ^j)—C(2 ^{vi})	3,348
C(4 ⁱ)—C(22 ^{viii})	3,496	O(13 ^j)—C(22 ^{vii})	3,225
C(16 ⁱ)—C(16 ^{viii})	3,476		

Références

- ALBEROLA, S. (1976). Communication privée.
- ALBEROLA, S., RAMBAUD, J. & SABON, F. (1976). *Bull. Soc. Chim. Fr.* pp. 362–364.
- ALLÉAUME, M. (1967). Thèse Doctorat ès Sciences Physiques, Bordeaux I.
- CRAVEN, B. M. & GARTLAND, G. L. (1970). *J. Pharm. Sci.* **59**, 1666–1670.
- SCHOMAKER, V., WASER, J., MARSH, R. E. & BERGMAN, G. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 600–604.
- SUTOR, J. D. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 453–458.