

this can be used for a quantification of the geometry (Wunderlich, 1978) giving an 87% rp for this structure.

Due to the chelation and probable packing effects the benzene rings show some deviations from standard geometries. As in all spirocyclic oxyphosphoranes the benzene rings are squeezed towards the center of the molecule. The five- and six-membered rings are planar within 0.05 and 0.01 Å respectively. The condensed rings at each side of the P atom are coplanar within 2°.

References

- BERRY, R. S. (1960). *J. Chem. Phys.* **32**, 933–938.
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1974). *International Tables for X-ray Crystallography*, Vol. IV, pp. 71–98. Birmingham: Kynoch Press.
 GILLESPIE, P., HOFFMANN, P., KLUSACEK, H., MARQUARDING, D., PFOHL, S., RAMIREZ, F., TSOLIS, E. A. & UGI, I. (1971). *Angew. Chem.* **83**, 691–721.
 HOWARD, J. A., RUSSELL, D. R. & TRIPPETT, S. (1973). *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* pp. 856–857.
 JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEP II*. Report ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 MARQUARDING, D., RAMIREZ, F., UGI, I. & GILLESPIE, P. (1973). *Angew. Chem.* **85**, 99–127.
 SARMA, R., RAMIREZ, F., MCKEEVER, B., MARECEK, J. F. & LEE, S. (1976). *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 4691.
 WIEBER, M., FOROUGH, K. & KLINGL, H. (1974). *Chem. Ber.* **107**, 639–643.
 WUNDERLICH, H. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 939–945.
 WUNDERLICH, H. (1976). Third European Crystallographic Meeting, Zurich, Switzerland. Abstract 0 54 D.
 WUNDERLICH, H. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 342–344.
 WUNDERLICH, H. & MOOTZ, D. (1973). First European Crystallographic Meeting, Bordeaux, France. Group C6.
 WUNDERLICH, H. & WUSSOW, H.-G. (1978). *Acta Cryst.* **B34**. In the press.
 WUSSOW, H.-G. (1977). Diplomarbeit, Universität Düsseldorf.
 ZEMANN, J. (1963). *Z. Anorg. Allg. Chem.* **324**, 241–249.

Acta Cryst. (1978). **B34**, 2017–2020

Acétyl-1 *O*-Acétyl-6 Laurelliptine

PAR R. ROQUES

Laboratoire de Cristallographie, Faculté des Sciences d'Abidjan, BP 4322, Abidjan, Côte d'Ivoire

ET J. P. DECLERCQ ET G. GERMAIN

Laboratoire de Chimie-Physique et de Cristallographie, Université de Louvain, B-1348, Louvain-la-Neuve, Belgique

(Reçu le 21 octobre 1977, accepté le 27 octobre 1977)

Abstract. C₂₂H₂₃NO₆, *M_r* = 397, orthorhombic, *P*2₁2₁2₁, *a* = 15.88₈, *b* = 11.52₉, *c* = 21.47₂ Å, *V* = 3927.7 Å³, *Z* = 8 (two independent molecules), *D_m* = 1.32₂, *D_c* = 1.34 g cm⁻³, *F*(000) = 1680, 2448 observed reflexions, λ(Cu *K*α) = 1.54178 Å, *T* = 294 K. Agreement between the bond distances in the two independent molecules is good.

Introduction. Cet alcaloïde, dérivé de la laurelliptine extraite de *Monodora tenuifolia* de la famille des Annonaceae de la flore ivoirienne, nous a été donné par le Laboratoire de Chimie Organique de l'Université d'Abidjan pour identifier et préciser sa structure qui, par voie chimique, présentait de grandes difficultés. En effet, l'alcaloïde de base, la laurelliptine, n'était pas identifié. Cette identification n'a pu s'effectuer qu'après

détermination de sa structure cristalline (Roques, Djakoure & Rossi, 1978).

La laurelliptine a été purifiée par chromatographie sur colonne d'alumine neutre par élution au chlorure de méthylène à 0,5% de méthanol. Ce composé a été obtenu par acétylation de l'alcaloïde laurelliptine, et cristallisé dans le chlorure de méthylène. Les cristaux obtenus sont parallélépipédiques; celui utilisé pour les mesures d'intensité diffractée avait les dimensions suivantes: 0,50 × 0,30 × 0,25 mm.

Une étude sur chambre de Weissenberg et de précession nous a permis de déterminer le groupe spatial, ainsi qu'une première valeur des paramètres. Les intensités de diffraction ont été enregistrées à l'aide d'un diffractomètre automatique CAD-3 Enraf-Nonius. Ces mesures ont été effectuées à 294 K en

Tableau 1. *Coordonnées atomiques* ($\times 10^4$)

| Molécule 1 | x | y | z | Molécule 2 | x | y | z |
|------------|----------|-----------|----------|------------|----------|----------|-----------|
| C(1) | 1343 (3) | 10671 (6) | 4974 (3) | C(1) | 6203 (4) | 4718 (5) | 648 (3) |
| C(2) | 1234 (4) | 11739 (6) | 5265 (3) | C(2) | 6119 (4) | 4033 (5) | 1178 (3) |
| C(3) | 1100 (4) | 12738 (5) | 4919 (3) | C(3) | 6120 (4) | 4557 (6) | 1758 (3) |
| C(4) | 884 (5) | 13715 (6) | 3880 (3) | C(4) | 6106 (4) | 6344 (6) | 2429 (3) |
| C(5) | 507 (5) | 13341 (7) | 3254 (3) | C(5) | 5781 (4) | 7556 (6) | 2324 (3) |
| N(6) | 1090 (3) | 12545 (4) | 2946 (2) | N(6) | 6346 (3) | 8187 (5) | 1925 (2) |
| C(6a) | 1322 (4) | 11484 (5) | 3269 (3) | C(6a) | 6494 (4) | 7694 (5) | 1302 (2) |
| C(7) | 787 (4) | 10468 (5) | 3081 (3) | C(7) | 5988 (4) | 8332 (6) | 798 (3) |
| C(8) | 1223 (4) | 8372 (6) | 3043 (3) | C(8) | 6169 (4) | 8534 (5) | -356 (3) |
| C(9) | 1581 (4) | 7394 (5) | 3300 (3) | C(9) | 6410 (4) | 8079 (5) | -935 (2) |
| C(10) | 1884 (4) | 7432 (5) | 3904 (3) | C(10) | 6648 (4) | 6949 (5) | -977 (2) |
| C(11) | 1837 (3) | 8464 (5) | 4239 (3) | C(11) | 6643 (4) | 6210 (5) | -471 (3) |
| C(12) | 1464 (4) | 9437 (5) | 3989 (2) | C(12) | 6394 (3) | 6669 (5) | 114 (2) |
| C(13) | 1145 (3) | 9388 (5) | 3377 (3) | C(13) | 6193 (4) | 7808 (5) | 169 (3) |
| C(14) | 1371 (3) | 10579 (5) | 4325 (3) | C(14) | 6337 (3) | 5893 (5) | 671 (3) |
| C(15) | 1268 (4) | 11606 (5) | 3988 (3) | C(15) | 6334 (3) | 6436 (5) | 1274 (3) |
| C(16) | 1119 (4) | 12645 (5) | 4261 (3) | C(16) | 6210 (4) | 5763 (6) | 1803 (3) |
| O(17) | 1490 (3) | 9727 (4) | 5360 (2) | O(17) | 6163 (3) | 4095 (4) | 77 (2) |
| O(18) | 1247 (3) | 11735 (4) | 5909 (2) | O(18) | 6025 (3) | 2868 (4) | 1086 (2) |
| C(19) | 1267 (5) | 12826 (7) | 6210 (4) | C(19) | 6092 (5) | 2107 (6) | 1591 (3) |
| O(20) | 1673 (3) | 6405 (4) | 2937 (2) | O(20) | 6407 (3) | 8809 (4) | -1449 (2) |
| O(21) | 2221 (3) | 6417 (4) | 4113 (2) | O(21) | 6897 (3) | 6629 (4) | -1586 (2) |
| C(22) | 2508 (6) | 6337 (8) | 4748 (3) | C(22) | 7146 (5) | 5488 (6) | -1680 (3) |
| C(23) | 820 (4) | 9089 (6) | 5537 (3) | C(23) | 5374 (4) | 3838 (6) | -137 (3) |
| C(24) | 1069 (6) | 8080 (7) | 5921 (3) | C(24) | 5429 (7) | 3115 (9) | -693 (4) |
| O(25) | 119 (4) | 9307 (5) | 5367 (3) | O(25) | 4765 (3) | 4169 (5) | 115 (2) |
| C(26) | 1436 (4) | 12736 (5) | 2370 (3) | C(26) | 6794 (4) | 9136 (5) | 2106 (3) |
| O(27) | 1926 (3) | 12021 (4) | 2142 (2) | O(27) | 7296 (3) | 9587 (4) | 1763 (2) |
| C(28) | 1184 (5) | 13798 (6) | 2017 (3) | C(28) | 6639 (5) | 9631 (7) | 2751 (3) |

utilisant le rayonnement Cu $K\alpha$ filtré par un monochromateur au graphite. 2448 réflexions indépendantes non nulles ont pu être mesurées. Les corrections de Lorentz et de polarisation ont été effectuées, mais non celles d'absorption.

La structure a été résolue en utilisant le programme de Braun, Hornstra & Leenhouts (1969) qui utilise une méthode d'investigation de la fonction de Patterson. Le modèle introduit dans ce programme est le squelette de la laurelliptine, composé de 19 atomes. La deuxième solution proposée par ce programme nous a permis de reconnaître 37 atomes lourds sur un Fourier pondéré portant sur 1800 réflexions. Nous avons alors un

facteur $R = 0,43$. Un deuxième Fourier pondéré a révélé l'ensemble des 58 atomes avec un $R = 0,30$.

L'affinement des coordonnées a été effectué par la méthode des moindres carrés (blocs diagonaux) en utilisant le programme de Ahmed, Hall, Pippy & Huber (1966) jusqu'à une valeur de $R = 0,089$ pour l'ensemble des réflexions observées. Les atomes d'hydrogène n'ont pu être déterminés par série de Fourier-différence.

Le Tableau 1 donne les coordonnées des atomes des deux molécules. La Fig. 1 donne la numérotation des atomes.*

Discussion. La partie asymétrique du motif cristallin est constituée de deux molécules indépendantes. On en trouve les distances interatomiques et les angles dans les Tableaux 2 et 3. La concordance des distances homologues dans les deux molécules est assez remarquable: La différence ne dépasse 0,04 Å que pour trois liaisons.

Le Tableau 4 donne les angles de torsion des deux molécules. Il est intéressant de constater que les

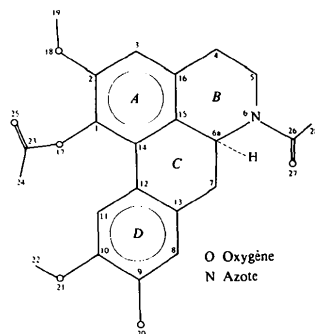


Fig. 1. La numérotation des atomes.

* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique anisotrope ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 33134: 13 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.

Tableau 2. Distances interatomiques (Å)

| | Molécule 1 | Molécule 2 | | Molécule 1 | Molécule 2 | | Molécule 1 | Molécule 2 |
|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|-------------|------------|------------|
| C(1)–C(2) | 1,392 (9) | 1,391 (9) | C(6a)–C(7) | 1,502 (8) | 1,533 (8) | C(12)–C(13) | 1,411 (8) | 1,355 (9) |
| C(1)–C(14) | 1,398 (8) | 1,372 (9) | C(6a)–C(15) | 1,552 (8) | 1,473 (9) | C(12)–C(14) | 1,507 (8) | 1,496 (8) |
| C(1)–O(17) | 1,387 (8) | 1,420 (7) | C(7)–C(13) | 1,509 (8) | 1,515 (8) | C(14)–C(15) | 1,396 (8) | 1,439 (8) |
| C(2)–C(3) | 1,387 (9) | 1,384 (9) | C(8)–C(9) | 1,377 (9) | 1,403 (8) | C(15)–C(16) | 1,354 (9) | 1,388 (8) |
| C(2)–O(18) | 1,382 (7) | 1,365 (8) | C(8)–C(13) | 1,377 (9) | 1,405 (8) | O(17)–C(23) | 1,348 (8) | 1,369 (8) |
| C(3)–C(16) | 1,418 (9) | 1,400 (9) | C(9)–C(10) | 1,384 (8) | 1,358 (8) | O(18)–C(19) | 1,414 (10) | 1,397 (8) |
| C(4)–C(5) | 1,534 (11) | 1,505 (10) | C(9)–O(20) | 1,387 (7) | 1,388 (7) | O(21)–C(22) | 1,440 (9) | 1,387 (9) |
| C(4)–C(16) | 1,524 (10) | 1,511 (9) | C(10)–C(11) | 1,392 (8) | 1,381 (8) | C(23)–C(24) | 1,480 (11) | 1,459 (12) |
| C(5)–N(6) | 1,461 (9) | 1,437 (9) | C(10)–O(21) | 1,362 (8) | 1,415 (7) | C(23)–O(25) | 1,197 (9) | 1,172 (9) |
| N(6)–C(6a) | 1,453 (8) | 1,473 (7) | C(11)–C(12) | 1,377 (8) | 1,418 (8) | C(26)–O(27) | 1,233 (8) | 1,204 (7) |
| N(6)–C(26) | 1,371 (8) | 1,361 (8) | | | | C(26)–C(28) | 1,494 (9) | 1,517 (9) |

Tableau 3. Angles de valence (°)

| | Molécule 1 | Molécule 2 | | Molécule 1 | Molécule 2 |
|-------------------|------------|------------|-------------------|------------|------------|
| C(2)–C(1)–C(14) | 121,3 (5) | 123,0 (6) | C(11)–C(12)–C(13) | 119,0 (5) | 120,3 (5) |
| C(2)–C(1)–O(17) | 116,4 (5) | 114,5 (5) | C(11)–C(12)–C(14) | 124,5 (5) | 120,1 (5) |
| C(14)–C(1)–O(17) | 122,1 (5) | 122,4 (5) | C(13)–C(12)–C(14) | 116,4 (5) | 119,6 (5) |
| C(1)–C(2)–C(3) | 120,8 (6) | 119,3 (6) | C(7)–C(13)–C(8) | 121,1 (5) | 118,2 (5) |
| C(1)–C(2)–O(18) | 116,4 (5) | 116,7 (5) | C(7)–C(13)–C(12) | 119,7 (5) | 121,0 (5) |
| C(3)–C(2)–O(18) | 122,8 (5) | 124,0 (6) | C(8)–C(13)–C(12) | 119,1 (5) | 120,8 (5) |
| C(2)–C(3)–C(16) | 118,0 (6) | 119,6 (6) | C(1)–C(14)–C(12) | 123,0 (5) | 124,8 (5) |
| C(5)–C(4)–C(16) | 109,8 (6) | 108,4 (5) | C(1)–C(14)–C(15) | 116,7 (5) | 117,4 (5) |
| C(4)–C(5)–N(6) | 109,0 (6) | 110,2 (6) | C(12)–C(14)–C(15) | 120,2 (5) | 117,4 (5) |
| C(5)–N(6)–C(6a) | 118,2 (5) | 116,4 (5) | C(6a)–C(15)–C(14) | 115,6 (5) | 117,6 (5) |
| C(5)–N(6)–C(26) | 124,2 (5) | 124,2 (5) | C(6a)–C(15)–C(16) | 121,3 (5) | 122,8 (5) |
| C(6a)–N(6)–C(26) | 117,6 (5) | 119,1 (5) | C(14)–C(15)–C(16) | 123,1 (6) | 119,6 (5) |
| N(6)–C(6a)–C(7) | 112,5 (5) | 111,9 (5) | C(3)–C(16)–C(4) | 117,9 (6) | 119,3 (6) |
| N(6)–C(6a)–C(15) | 112,7 (5) | 112,8 (5) | C(3)–C(16)–C(15) | 120,1 (6) | 120,9 (6) |
| C(7)–C(6a)–C(15) | 107,9 (5) | 110,7 (5) | C(4)–C(16)–C(15) | 121,7 (6) | 119,7 (5) |
| C(6a)–C(7)–C(13) | 108,4 (5) | 109,0 (5) | C(1)–O(17)–C(23) | 117,6 (5) | 116,1 (5) |
| C(9)–C(8)–C(13) | 121,7 (6) | 118,7 (5) | C(2)–O(18)–C(19) | 117,0 (5) | 119,8 (5) |
| C(8)–C(9)–C(10) | 119,5 (6) | 119,6 (5) | C(10)–O(21)–C(22) | 119,4 (5) | 117,4 (5) |
| C(8)–C(9)–O(20) | 119,5 (5) | 118,5 (5) | O(17)–C(23)–C(24) | 111,9 (6) | 110,1 (6) |
| C(10)–C(9)–O(20) | 121,0 (5) | 121,9 (5) | O(17)–C(23)–O(25) | 122,3 (6) | 122,0 (6) |
| C(9)–C(10)–C(11) | 119,6 (6) | 122,5 (5) | C(24)–C(23)–O(25) | 125,7 (7) | 127,9 (7) |
| C(9)–C(10)–O(21) | 114,7 (5) | 112,9 (5) | N(6)–C(26)–O(27) | 120,2 (5) | 121,2 (5) |
| C(11)–C(10)–O(21) | 125,7 (5) | 124,6 (5) | N(6)–C(26)–C(28) | 118,7 (5) | 118,6 (5) |
| C(10)–C(11)–C(12) | 121,1 (5) | 117,9 (5) | O(27)–C(26)–C(28) | 121,0 (6) | 120,3 (6) |

conformations des deux molécules sont semblables. Toutefois, on note quelques différences assez notables au niveau des groupements acétylés fixés sur le carbone C(1) et l'azote N(6), ainsi qu'autour des liaisons des atomes C(5), N(6), C(6a), C(7), C(8), C(13), C(15).

La Fig. 2 donne une représentation stéréoscopique des conformations des deux molécules indépendantes, exécutée grâce au programme *ORTEP* (Johnson, 1965).

La comparaison des structures de la laurelliptine (Roques *et al.*, 1978) et de son acétate fait apparaître une déformation de ce dernier au niveau du cycle *B*. En effet, la comparaison des angles de torsion homologues donne des écarts minimes sur les cycles *A*, *C* et *D* alors qu'au niveau du cycle *B* nous relevons des différences comprises entre 4 et 25°. Ces écarts semblent dus au

groupement acétyle venu se substituer à l'hydrogène fixé sur l'azote de la laurelliptine.

Nous remercions le Laboratoire de Chimie Organique de la Faculté des Sciences d'Abidjan et tout particulièrement M Djakoure qui nous a soumis ce problème d'identification de ce composé; la direction de l'OCM à Abidjan pour les facilités qu'elle nous a données pour effectuer nos calculs sur ses ordinateurs IBM 370-145; et le Laboratoire de Cristallographie de Montpellier qui nous a permis d'effectuer les mesures d'intensité.

L'un de nous (JPD) remercie le Fonds National de la Recherche Scientifique pour le mandat dont il a bénéficié.

Tableau 4. Angles de torsion (°)

| | Molécule 1 | Molécule 2 | | Molécule 1 | Molécule 2 |
|------------------------|------------|------------|-------------------------|------------|------------|
| C(14)–C(1)–C(2)–C(3) | 3,7 | 3,8 | C(7)–C(6a)–C(15)–C(14) | 46,8 | 44,8 |
| C(14)–C(1)–C(2)–O(18) | –177,7 | –177,2 | C(7)–C(6a)–C(15)–C(16) | –132,3 | –137,3 |
| O(17)–C(1)–C(2)–C(3) | 178,7 | –177,8 | C(6a)–C(7)–C(13)–C(8) | –136,3 | –148,6 |
| O(17)–C(1)–C(2)–O(18) | –2,6 | 1,0 | C(6a)–C(7)–C(13)–C(12) | 38,9 | 31,3 |
| C(2)–C(1)–C(14)–C(12) | –178,2 | –177,2 | C(13)–C(8)–C(9)–C(10) | –1,1 | 0,9 |
| C(2)–C(1)–C(14)–C(15) | –1,0 | –4,1 | C(13)–C(8)–C(9)–O(20) | –177,6 | –178,2 |
| O(17)–C(1)–C(14)–C(12) | 7,0 | 4,5 | C(9)–C(8)–C(13)–C(7) | 177,3 | 175,9 |
| O(17)–C(1)–C(14)–C(15) | –175,8 | 177,7 | C(9)–C(8)–C(13)–C(12) | 2,0 | –4,0 |
| C(2) C(1) O(17) C(23) | 93,6 | 81,7 | C(8)–C(9)–C(10)–C(11) | –1,1 | 1,7 |
| C(14)–C(1)–O(17)–C(23) | –91,2 | –100,0 | C(8)–C(9)–C(10)–O(21) | 179,7 | –178,1 |
| C(1)–C(2)–C(3)–C(16) | –2,9 | –0,3 | O(20)–C(9)–C(10)–C(11) | 175,2 | –179,1 |
| O(18)–C(2)–C(3)–C(16) | 178,5 | –179,1 | O(20)–C(9)–C(10)–O(21) | –3,8 | 0,9 |
| C(1)–C(2)–O(18)–C(19) | 170,5 | 168,2 | C(9)–C(10)–C(11)–C(12) | 2,6 | –1,2 |
| C(3)–C(2)–O(18)–C(19) | –10,9 | –12,8 | O(21)–C(10)–C(11)–C(12) | –178,3 | 178,6 |
| C(2)–C(3)–C(16)–C(4) | 173,9 | 172,6 | C(9)–C(10)–O(21)–C(22) | –176,1 | –179,4 |
| C(2)–C(3)–C(16)–C(15) | –0,2 | –2,6 | C(11)–C(10)–O(21)–C(22) | 4,7 | 0,6 |
| C(16)–C(4)–C(5)–N(6) | –53,4 | –57,1 | C(10)–C(11)–C(12)–C(13) | –1,7 | –1,8 |
| C(5)–C(4)–C(16)–C(3) | –151,1 | –150,6 | C(10)–C(11)–C(12)–C(14) | 178,7 | 177,0 |
| C(5)–C(4)–C(16)–C(15) | 22,9 | 24,7 | C(11)–C(12)–C(13)–C(7) | –175,9 | –175,4 |
| C(4)–C(5)–N(6)–C(6a) | 58,4 | 59,2 | C(11)–C(12)–C(13)–C(8) | –0,5 | 4,5 |
| C(4)–C(5)–N(6)–C(26) | –121,2 | –115,1 | C(14)–C(12)–C(13)–C(7) | 3,6 | 5,6 |
| C(5)–N(6)–C(6a)–C(7) | 95,0 | 101,7 | C(14)–C(12)–C(13)–C(8) | 179,0 | –174,3 |
| C(5)–N(6)–C(6a)–C(15) | –27,1 | –23,8 | C(11)–C(12)–C(14)–C(1) | –25,7 | –25,1 |
| C(26)–N(6)–C(6a)–C(7) | –85,2 | –83,5 | C(11)–C(12)–C(14)–C(15) | 157,2 | 161,6 |
| C(26)–N(6)–C(6a)–C(15) | 152,5 | 150,9 | C(13)–C(12)–C(14)–C(1) | 154,7 | 153,7 |
| C(5)–N(6)–C(26)–O(27) | 179,8 | 175,3 | C(13)–C(12)–C(14)–C(15) | –22,3 | –19,4 |
| C(5)–N(6)–C(26)–C(28) | –2,5 | –5,3 | C(1)–C(14)–C(15)–C(6a) | 178,6 | 178,8 |
| C(6a)–N(6)–C(26)–O(27) | 0,1 | 1,1 | C(1)–C(14)–C(15)–C(16) | –2,2 | 0,9 |
| C(6a)–N(6)–C(26)–C(28) | 177,7 | –179,6 | C(12)–C(14)–C(15)–C(6a) | –4,1 | –7,5 |
| N(6)–C(6a)–C(7)–C(13) | 172,8 | 178,0 | C(12)–C(14)–C(15)–C(16) | 174,9 | 174,6 |
| C(15)–C(6a)–C(7)–C(13) | –62,2 | –55,1 | C(6a)–C(15)–C(16)–C(3) | –177,9 | –175,3 |
| N(6)–C(6a)–C(15)–C(14) | 171,6 | 171,0 | C(6a)–C(15)–C(16)–C(4) | 8,0 | 9,3 |
| N(6)–C(6a)–C(15)–C(16) | –7,5 | –11,1 | C(14)–C(15)–C(16)–C(3) | 2,9 | 2,4 |

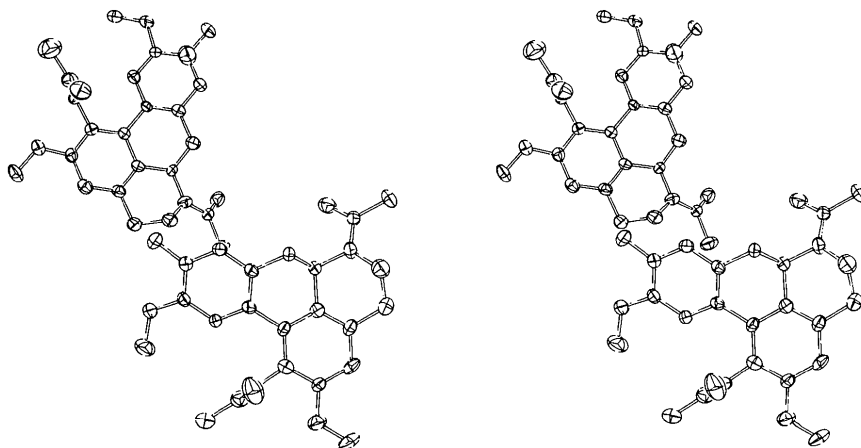


Fig. 2. Vue stéréoscopique des conformations des deux molécules indépendantes.

Références

- AHMED, F. R., HALL, S. R., PIPPY, M. E. & HUBER, C. P. (1966). NRC Crystallographic Programs for the IBM/360 System. National Research Council, Ottawa, Canada.
- BRAUN, P. B., HORNSTRA, J. & LEENHOUTS, J. I. (1969). *Philips Res. Rep.* **24**, 85–118.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- ROQUES, R., DJAKOURE, L. A. & ROSSI, J. C. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 837–841.