Structure du Chlorhydrate de Norgalanthamine

PAR R. ROQUES

Laboratoire de Cristallographie de l'Université Nationale de Côte d'Ivoire, BP 4322 Abidjan, Côte d'Ivoire

J. C. Rossi

Laboratoire de Chimie Pharmaceutique, Université Paul Sabatier, Faculté des Sciences Pharmaceutiques, 31 Allée J. Guesde, 31077 Toulouse, France

ET J. P. DECLERCQ ET G. GERMAIN

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

(Reçu le 19 février 1979, accepté le 11 février 1980)

Abstract

The crystal structure of norgalanthamine hydrochloride (Amaryllidaceae alkaloid), $C_{16}H_{20}NO_3^+$. $Cl^-.2H_2O$ ($M_r = 345.8$; m.p. = 439-443 K) has been determined from three-dimensional diffractometer data with Mo K α radiation ($\lambda = 0.71069$ Å). The unit cell is triclinic, space group P1, with two molecules per unit cell and a = 9.939 (1), b = 10.820 (2), c =9.597 (4) Å, $\alpha = 90.55$ (3), $\beta = 72.19$ (3), $\gamma =$ 61.43 (1)°; $d_m = 1.36$, $d_x = 1.16$ Mg m⁻³, V = 847.8Å³. The structure was solved by direct methods with the random approach (R = 5.2% for 3172 independent observed reflexions). The stereochemistry and conformation in norgalanthamine hydrochloride are the same as for the base norgalanthamine.

Introduction

Dans une précédente publication, nous avions déterminé la structure de la (\pm) -norgalanthamine (Roques & Lapasset, 1976), encore appelée (\pm) -N-désméthyl-galanthamine (I) (Fig. 1), de formule brute C₁₆H₁₉NO₃ (Roques, Lapasset, Rogers & Williams, 1976). Cet alcaloïde extrait de *Crinum jagus*, Amaryllidacées de

 $\begin{array}{c} 5 & 4a & 4 & 3 & 0H \\ H_{1}C-O & 6 & 12 & 18 \\ 16 & 17 & 7 & 8 & 9 & 12 \\ 7 & 8 & 9 & 10 & 11 \\ 8 & 9 & 10 & 11 \\ R & = H \\ (II) R & = CH_{3} \end{array}$

Fig. 1. Numérotation adoptée pour la norgalanthamine (I) et son chlorhydrate (III), ainsi que la galanthamine (II).

0567-7408/80/071589-05\$01.00

Côte d'Ivoire, est utilisé en pharmacopée locale principalement pour ses propriétés analgésiques. La norgalanthamine (I) que nous avions étudiée était racémique, comme le prouvait son groupe cristallographique centrosymétrique $P2_1/c$.

Or, à côté des cristaux correspondants à la (\pm) norgalanthamine (I), que cristallisent dans un système monoclinique holoèdre $P2_1/c$ (Roques & Lapasset, 1976), nous avons isolé quelques cristaux appartenant au système triclinique, de groupe spatial P1. Ces derniers correspondent au chlorhydrate de norgalanthamine (III) (Fig. 1) de formule brute $C_{16}H_{20}$ - $NO_3^+.Cl^-.2H_2O.*$

Détermination de la structure

Le spectre de diffraction a été enregistré sur un diffractomètre automatique à quatre cercles Syntex $P2_1$ (rayonnement Mo Ka). Pour une valeur maximum de $2\theta = 54^{\circ}$, nous avons mesuré 3345 réflexions, dont 3172 ont une intensité suffisante pour être considérées comme observées $[I > 1, 5\sigma(I)]$. Nous les avons corrigées des facteurs de Lorentz-polarisation.

La structure a été résolue par affinement de phases aléatoires au moyen d'équations linéaires (Baggio, Woolfson, Declercq & Germain, 1978). L'affinement

© 1980 International Union of Crystallography

^{*} La très faible quantité de cristaux ainsi séparée n'a pas permis d'effectuer les déterminations structurales usuelles. Par contre, le spectre de masse de ce composé (MS9, *T* de la source = 433 K, 70 eV) présente un pic moléculaire $M^{++} = 273$ et correspond en tous points à celui de la (\pm)-norgalanthamine: C₁₆H₁₉NO₃. Cependant on note la présence de deux pics à m/e = 36 et 38, dans un rapport isotopique 3/1, correspondant à H³⁵Cl et H³⁷Cl. Il est courant, en effet, que les sels d'alcaloïdes donnent le spectre de masse de la base après décomposition. Les auteurs remercient P. Longevialle (ICSN, Gif-sur-Yvette) pour les discussions de ce problème.

Tableau 1. Coordonnées atomiques $(\times 10^4)$ des atomes de carbone, azote, oxygène et chlore et facteurs de température $U(\times 10^2)$

	Molécule 1					Molécule 2				
	x	У	Ζ	$U(\dot{\mathrm{A}}^2)$:	r	y	Ζ	$U(\dot{\mathrm{A}}^2)$
C(101)	-3996 (5)	6946 (5)	4936 (4)	4,0 (2)	C(201)	142	0 (5)	4936 (4)	7223 (4)	4,2 (2)
C(102)	-3819(6)	6260 (5)	3667 (5)	5,1(2)	C(202)	12	2 (6)	5597 (5)	8459 (5)	5,1 (2)
C(103)	-2227 (6)	5079 (5)	2605 (5)	4,9 (2)	C(203)	-19	1 (6)	6825 (5)	9484 (4)	4,9 (2)
C(104)	-764 (6)	4853 (6)	3017 (5)	5,1 (2)	C(204)	126	1 (6)	7034 (5)	9177 (5)	5,1 (2)
C(104a)	-1119(5)	5110 (4)	4685 (4)	3,8 (2)	C(204a)	219	5 (5)	6798 (5)	7544 (5)	4,5 (2)
C(104b)	-2659 (5)	6535 (4)	5570 (4)	3,8 (2)	C(204b)	268	0 (5)	5376 (4)	6611 (4)	3,7 (2)
O(105)	-1340(4)	3983 (3)	5344 (3)	4,2 (1)	O(205)	124	2 (4)	7944 (3)	6874 (3)	4,4 (1)
C(106)	-2559 (5)	3828 (4)	7898 (5)	4,2 (2)	C(206)	125	9 (5)	8132 (4)	4340 (5)	4,3 (2)
C(107)	-3573 (6)	4610 (5)	9313 (5)	4,6 (2)	C(207)	174	6 (5)	7381 (5)	2952 (4)	4,4 (2)
C(108)	-4372 (6)	6107 (5)	9595 (5)	4,5 (2)	C(208)	264	9 (5)	5874 (5)	2654 (4)	4,3 (2)
C(109)	-5132 (6)	8470 (5)	8806 (5)	5,5(2)	C(209)	400	8 (6)	3495 (5)	3403 (5)	5,0 (2)
N(110)	-4098 (5)	9134 (4)	8260 (5)	5,3 (2)	N(210)	547	7 (5)	2845 (4)	3874 (4)	4,8 (2)
C(111)	-3564 (7)	9143 (5)	6625 (6)	5,9 (2)	C(211)	513	7 (6)	2783 (5)	5492 (5)	4,7 (2)
C(112)	-2208(5)	7689 (5)	5678 (5)	4,3 (2)	C(212)	441	6 (5)	4217 (5)	6474 (5)	4,2 (2)
C(113)	-2340 (5)	4596 (4)	6790 (4)	3,8 (2)	C(213)	168	4 (5)	7347 (4)	5439 (4)	4.3 (2)
C(114)	-3131(5)	6074 (4)	7050 (4)	3,7 (2)	C(214)	255	5 (5)	5870 (4)	5149 (4)	3.8 (2)
C(115)	-4171(5)	6855 (4)	8469 (4)	4,1 (2)	C(215)	306	6 (5)	5109 (4)	3747 (4)	4.0 (2)
C(116)	-2100(7)	1584 (6)	8556 (7)	6,0 (3)	C(216)	9	2 (7)	10406 (5)	3653 (7)	5,8 (2)
O(117)	-1771(4)	2377 (3)	7474 (4)	5,6 (2)	O(217)	36	7 (5)	9589 (3)	4785 (4)	5,7 (2)
O(118)	-2314(4)	3785 (4)	2557 (4)	5,4 (2)	O(218)	-162	0 (4)	8119 (4)	9430 (4)	6,2 (2)
Cl(119)	3655 (2)	2308 (1)	9900 (2)	6,1 (1)	Cl(219)	726	0 (2)	9668 (1)	2585 (2)	6,1 (1)
				x	У	z	U			
		O(120)		1951 (5)	1821 (4)	5218 (5)	6,6 (2)			
		O(220)		1987 (5)	10167 (4)	7385 (5)	6,8 (2)			

261 (6)

1953 (7)

2336 (6)

240 (6)

3897 (6)

537(7)



O(320)

O(420)

Fig. 2. Tracé ORTEP (Johnson, 1965) du chlorhydrate de norgalanthamine.

par moindres carrés avec matrice complète a été effectué au moyen du programme XRAY 72 (Stewart, Kruger, Ammon, Dickinson & Hall, 1972). Le poids de chaque réflexion a été calculé d'après la relation proposée par Cruickshank (1965):

$$W = (2,00 + |F_o| + 0,025|F_o|^2)^{-1}.$$



8,5 (2)

7,1 (3)

Fig. 3. Distances interatomiques (Å) du chlorhydrate de norgalanthamine. L'écart-type maximum est de 0,009 Å.

Après quatre cycles d'affinement avec agitation thermique isotrope et deux cycles avec agitation thermique anisotrope, une série de Fourier-différence a fourni les positions des atomes d'hydrogène de la molécule. Deux derniers cycles d'affinement anisotrope nous ont donné un facteur résiduel R = 5,2%. Les coordonnées des atomes d'hydrogène, auxquels nous avons attribué l'agitation thermique moyenne de l'ensemble de la molécule, ont été également affinées.*

La Fig. 2 représente le tracé ORTEP (Johnson, 1965) de la molécule de chlorhydrate (III).

* 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 35146: 20 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 2. Coordonnées atomiques (\times 10³) des atomes d'hydrogène

Facteur	thermiqu	e global.	B = 4	Ų
I uctour	cher miqu	ie Biooui,		

Molécule 1					Molécule 2				
	x	у	z		x	У	Z		
H(C101)	-523 (6)	777 (6)	556 (6)	H(C201)	163 (6)	406 (6)	661 (6)		
H(C102)	-475 (7)	646 (6)	343 (6)	H(C202)	-69 (6)	530 (6)	885 (6)		
H(C103)	-207(6)	540 (6)	157 (6)	H(C203)	-53 (6)	671 (6)	1051 (6)		
H(C104)	-52 (7)	555 (6)	272 (6)	H(C204)	-898 (6)	804 (6)	972 (6)		
H'(C104)	18 (7)	397 (6)	258 (6)	H'(C204)	208 (7)	637 (6)	958 (6)		
H(C104a)	-19 (7)	505 (6)	489 (6)	H(C204a)	303 (7)	694 (6)	745 (6)		
H(C107)	-383 (7)	411 (6)	1017 (6)	H(C207)	-844 (7)	779 (6)	223 (6)		
H(C108)	-495 (7)	663 (6)	1053 (6)	H(C208)	316 (7)	533 (6)	155 (6)		
H(C109)	-565 (7)	884 (6)	985 (6)	H(C209)	-666 (7)	304 (6)	385 (6)		
H ² (C109)	-603 (6)	891 (6)	826 (6)	H'(C209)	-563 (7)	324 (6)	242 (6)		
H(N110)	-334 (6)	880 (6)	856 (6)	H(N210)	608 (6)	322 (6)	364 (6)		
H'(N11Ó)	-455 (6)	996 (6)	885 (6)	H'(N210)	616 (6)	206 (6)	351 (6)		
H(C111)	-306(7)	977 (6)	646 (6)	H(C211)	-390 (6)	214 (6)	556 (6)		
H ² (C111)	-448 (7)	949 (6)	628 (6)	H'(C211)	-549 (7)	240 (6)	577 (6)		
H(C112)	-132(7)	734 (6)	603 (6)	H(C212)	-489 (7)	476 (6)	610 (6)		
H'(C112)	-180(7)	781 (6)	469 (6)	H'(C212)	-565 (7)	399 (6)	740 (6)		
H(C116)	-202(7)	173 (6)	937 (6)	H(C216)	-59 (7)	1025 (6)	325 (6)		
H'(C116)	-328(7)	189 (6)	903 (6)	H′(C216)	109 (7)	1011 (6)	269 (6)		
H"(C116)	-161 (7)	70 (6)	810 (6)	H"(C216)	-65 (7)	1122 (6)	405 (6)		
H(O118)	-172 (7)	333 (6)	187 (6)	H(O218)	-204(7)	859 (6)	1045 (6)		
H(O120)	263 (7)	118 (6)	410 (6)	H(O320)	380 (7)	6 (6)	332 (6)		
H'(O120)	89 (7)	222 (6)	515 (6)	H'(O320)	382 (7)	104 (6)	-828 (6)		
H(0220)	197 (7)	83 (6)	665 (6)	H(O420)	34 (7)	253 (6)	972 (6)		
H ¹ (0220)	142 (7)	-32 (6)	715 (6)	H'(0420)	93 (7)	138 (6)	927 (6		



Fig. 4. Angles de valence (°) du chlorhydrate de norgalanthamine. L'écart-type maximum est de 0,5°.

Dans les Tableaux 1 et 2 sont consignées les coordonnées atomiques. Les distances interatomiques et les angles de valence sont portés respectivement sur les Figs. 3 et 4. L'écart-type maximum sur les distances et les angles est respectivement de 0,009 Å et 0,5°. Les angles de torsion, suivant la convention de Klyne & Prelog (1960), sont consignés sur la Fig. 5, l'écart type maximum est de 1°.

Discussion

Le mode de fusion des cycles B et D dans l'alcaloïde base (I) et son chlorhydrate (III) (Fig. 5) est *cis* et correspond à la configuration la plus stable.



Fig. 5. Angles de torsion (°) de la (\pm) -norgalanthamine (I) et de son chlorhydrate (III). L'écart-type maximum est de 1°.

L'orientation axiale [β par rapport à l'oxygène O(5)] du groupement hydroxyle fixé sur le carbone C(3), est conservée dans les deux structures (I) et (III).

Les composés (I) et (III) ont pour les cycles B, C et D des conformations très voisines, ainsi que le

montrent les angles de torsion (Fig. 5). On constate que le cycle aromatique A est plan, que l'hétérocycle oxygéné B est en conformation demi-chaise avec des angles de torsion O(5)-C(4a)-C(4b)-C(14) de 24° pour le composé (I), 27 et 23° pour le composé (III). L'hétérocycle azoté C présente dans les trois cas une conformation chaise très voisine puisque les quatre atomes C(4b), C(14), C(15), C(9) sont sensiblement dans le même plan, et qu'ils présentent un angle de torsion de 6° pour la (\pm)-norgalanthamine et respectivement 1 et 4° pour chaque molécule du sel (III).

Le cycle D, adopte dans la base libre (I) et son chlorhydrate (III) des conformations demi-chaise analogues et ceci malgré le remplacement dans le composé (III) (Tableau 3) de la liaison hydrogène intramoléculaire $O(18)-H\cdots O(5)$ [présente en solution et à l'état solide, dans la galanthamine (Barton & Kirby, 1962) et son (-)-iodométhylate (Williams & Rogers, 1964), ainsi que dans le composé (I) (Roques & Lapasset, 1976)] par une liaison hydrogène intermoléculaire. Les projections de Newman (Fig. 6) suivant les liaisons C(2)-C(3) en rendent compte. Les distances entre les atomes d'oxygène O(5) et O(18)valent respectivement pour les deux molécules de chlorhydrate de norgalanthamine: $O(5) \cdots O(18) = 3,15$ Å pour un angle $O(5)-C(4a)-O(18) = 72^{\circ}$ et $O(205) \cdots O(218) = 3,0$ Å pour un angle O(205)- $C(204a) - O(218) = 71^{\circ}$. Ces observations doivent être rapprochées de celles faites pour la (±)-norgalanthamine (I) où la distance $O(5) \cdots O(18) = 3.10$ Å (Roques & Lapasset, 1976), ainsi que pour le (-)iodométhylate de galanthamine où Williams & Rogers (1964) trouvaient une distance $O(5) \cdots O(18) = 2.95$ Å. Enfin, la cohésion du cristal de chlorhydrate (III) est assurée par les liaisons hydrogène et les forces de van der Waals (Tableau 3).

Tableau 3. Liaisons hydrogène (Å) du chlorhydratede norgalanthamine

$\sigma = 0.05 \text{ à } 0.10 \text{ Å}.$

$A - H \cdots B$	$\mathbf{H} \cdots \mathbf{B}$	$A \cdots B$
$H(110) \sim H(110) \cdots O(218)$	1,97 (7)	2,77
$H'(110) - H'(110) \cdots Cl(119)$	2,28 (5)	3,11
$O(118) - H(118) \cdots O(420)$	2,08 (8)	2,76
H(210) - H(210) - O(118)	1,98 (6)	2,81
$H'(210) H'(210) \cdots Cl(219)$	2,31 (8)	3,04
$O(218) - H(218) \cdots Cl(219)$	2,09 (7)	3,05
$H(210) - H(210) \cdots O(320)$	1,71 (7)	2,79
$H'(120) - H'(120) \cdots O(105)$	2,07 (5)	2,94
$H(220) \sim H(220) \cdots O(120)$	1,75 (5)	2,75
$H'(220) - H'(220) \cdots O(205)$	1,99 (5)	2,91
O(320) - O(219)		3,18
$H(320) \to H'(320) \cdots Cl(119)$	2,22 (7)	3,22
H(420) - H(420) - Cl(119)		3,22
H'(420) - H'(420) - O(220)	1,90 (7)	2,85



Fig. 6. Projections de Newman suivant les liaisons C(2)-C(3) de la (±)-norgalanthamine (I) et de son chlorhydrate (III).

Conclusion

L'obtention de cristaux racémiques d'alcaloïde ne signifie pas nécessairement que *Crinum jagus* produise de la (\pm) -norgalanthamine. Une telle éventualité ne peut cependant être repoussé en fonction de nos connaissances sur la biosynthèse et la grande facilité de racémisation présentée par ce groupe d'alcaloïdes appartenant à la galanthamine (II).

ainsi que la galanthamine naturelle C'est (C₁₇H₂₁NO₃), isolée des Amaryllidacées est lévogyre, $\left[\alpha\right]_{D} = -122^{\circ}$ (Williams & Rogers, 1964). Laiho & Fales (1964) signalent la présence dans certaines Amaryllidacées de (-)-N-désméthyl-galanthamine, $|\alpha|_p$ $= -62^{\circ}$, qui formerait avec le (+)-N-désméthyl-dihydrogalanthamine, $[\alpha]_{p} = +38^{\circ}$, un quasi-racémique par association équimoléculaire, auquel ces deux auteurs donnent le nom de narcissamine (Boit & Ehmke, 1956; Fales, Giuffrida & Wildman, 1956; Boit, Döpke & Beitner, 1957). Il est à noter, que dès 1960, Boit et Döpke avaient mis en évidence une forme naturelle racémique de la galanthamine qui recut le nom de bodamine, et que Barton & Kirby (1962) avaient synthétisé la (\pm) -galanthamine.

Dans notre cas, on peut faire logiquement intervenir une racémisation au cours de l'extraction, avec rupture de la liaison C(4a)—O(5) et passage par un intermédiaire désméthylé identique à celui proposé par Barton & Kirby (1960, 1962) pour la galanthamine (II), ou bien invoquer une cristallisation privilégiée des cristaux de racémique par rapport à celle de leurs énantiomères dédoublés. Dans ce dernier cas, il y aurait eu une variation du pouvoir rotatoire de la solution s'enrichissant en l'un des énantiomères, ce que nous n'avons pu contrôler.

L'isolement de quelques cristaux de chlorhydrate de norgalanthamine (III) appartenant à un système non-centrosymétrique P1 accompagnant ceux de norgalanthamine (I) racémisée en accord avec le groupe centrosymétrique $P2_1/c$ (Roques & Lapasset, 1976) n'est pas une preuve suffisante pour trancher entre, d'une part une racémisation au cours de l'extraction et (ou) des traitements ultérieurs, et d'autre part, une biosynthèse de cristaux racémiques. Les auteurs remercient Mlle José Piquion du Laboratoire de Chimie Organique de la Faculté des Sciences d'Abidjan qui a extrait ce composé; la Direction de l'Office Central de Mécanographie d'Abidjan (Côte d'Ivoire) qui nous a permis d'effectuer les calculs sur ses ordinateurs IBM 370-145. L'un de nous (JPD) remercie le Fonds National de la Recherche Scientifique pour le mandat dont il a bénéficié.

Références

- BAGGIO, R., WOOLFSON, M. M., DECLERCQ, J. P. & GERMAIN, G. (1978). Acta Cryst. A34, 883-892.
- BARTON, D. H. R. & KIRBY, G. W. (1960). Proc. Chem. Soc. pp. 392–393.
- BARTON, D. H. R. & KIRBY, G. W. (1962). J. Chem. Soc. pp. 806-817.
- Вогт, Н. G. & Döpke, W. (1960). Naturwissenschaften, 47, 109.
- BOIT, H. G., DÖPKE, W. & BEITNER, A. (1957). Chem. Ber. 90, 2197–2202.

Воіт, Н. G. & Енмке, Н. (1956). Chem. Ber. 89, 163-167.

- CRUICKSHANK, D. W. J. (1965). Computing Methods in Crystallography, édité par J. S. ROLLETT, pp. 113–114. Oxford: Pergamon Press.
- FALES, H. M., GIUFFRIDA, L. D. & WILDMAN, W. C. (1956). J. Am. Chem. Soc. 78, 4145–4150.
- JOHNSON, C. K. (1965). ORTEP. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- KLYNE, W. & PRELOG, V. (1960). Experientia, 16, 521-523.
- LAIHO, S. M. & FALES, H. M. (1964). J. Am. Chem. Soc. 86, 4434-4438.
- ROQUES, R. & LAPASSET, J. (1976). Acta Cryst. B32, 579-582.
- ROQUES, R., LAPASSET, J., ROGERS, D. & WILLIAMS, D. J. (1976). Acta Cryst. B32, 3358.
- STEWART, J. M., KRUGER, G. J., AMMON, H. L., DICKINSON, C. & HALL, S. R. (1972). The XRAY system – version of June 1972. Tech. Rep. TR-192. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.
- WILLIAMS, D. J. & ROGERS, D. (1964). Proc. Chem. Soc. p. 357.

Acta Cryst. (1980). B36, 1593–1598

The Structure of Acetylated Napoleogenin

BY M. R. SPIRLET

Laboratoires de Cristallographie et de Physique Expérimentale, Université de Liège au Sart Tilman, B 4000 Liège, Belgium

L. DUPONT AND O. DIDEBERG

Institut de Physique B5, Université de Liège au Sart Tilman, B 4000 Liège, Belgium

AND M. KAPUNDU

Laboratoire de Chimie Organique, Institut de Chimie B6, Université de Liège au Sart Tilman, B 4000 Liège, Belgium

(Received 18 October 1979; accepted 11 February 1980)

Abstract

Acetylated napoleogenin, $C_{58}H_{84}O_{18}$, crystallizes in space group $P2_1$ with two molecules in a unit cell of dimensions $a = 19 \cdot 127$ (1), $b = 10 \cdot 812$ (1), c = $14 \cdot 879$ (1) Å, $\beta = 102 \cdot 540$ (2)°. The crystal structure was solved by direct methods. Full-matrix least-squares refinement with all atoms treated isotropically and using 3139 reflections gave an R value of $0 \cdot 108$. The compound possesses a triterpene skeleton with *cis*fused D and E rings in the chair form. A 3,4di-O-angelyl-6-deoxy- β -glucopyranosyl group sits at C(21) on the E ring. The molecular structure of 0567-7408/80/071593-06\$01.00 acetylated napoleogenin is formulated by the present analysis as 21β -(2-O-acetyl-3,4-di-O-angelyl-6-deoxy- β glucopyranosyloxy)- 3β ,16 α ,22 α ,24,28-pentaacetoxyolean-12-ene. The large distortion of the whole molecular skeleton may result from 1,3 diaxial interaction. The packing is mainly dictated by close van der Waals contacts between the molecules.

Introduction

Within the framework of chemical taxonomy studies, the acetylated form of napoleogenin, a new pentacyclic © 1980 International Union of Crystallography