

Estructura cristalina y molecular de la 4 Etoxi isonitrosoacetanilida*

por F. PLANA,*** C. MIRAVITLLES,** J. L. BRIANSÓ ** y M. FONT-ALTABA **

RESUMEN

Esta estructura pertenece a la serie de las isonitrosoacetanilidas, serie que constituye una línea de investigación de la Sección de Cristalografía del C. S. I. C. de Barcelona. En ella el radical etoxi, sustituye al hidrógeno de posición PARA del anillo bencénico. La estructura fue resuelta por medio de la difracción de los rayos X y de la Adición Simbólica, Grupo espacial P2₁/C. Dimensiones de la celda elemental: $a = 11.788 \text{ \AA}$, $b = 9.999 \text{ \AA}$, $c = 8.895 \text{ \AA}$, $\beta = 100,35^\circ$, $Z = 4$.

SUMMARY

This structure is part of the isonitrosoacetanilide serie, this serie is a research field of the Crystallographic Department of the C. S. I. C. in Barcelona. In this structure the ethoxy group is in the PARA position of the benzene ring. This structure has been solved by X-Ray diffraction and direct methods. Space group: P2₁/C. Unit cell dimensions: $a = 11.788 \text{ \AA}$, $b = 9.999 \text{ \AA}$, $c = 8.895 \text{ \AA}$, $\beta = 100,35^\circ$, $Z = 4$.

INTRODUCCIÓN

La 4 etoxi isonitrosoacetanilida, $C_{10}H_{12}N_2O_3$ fue sintetizada en los laboratorios del Departamento de

Química Analítica de la Universidad de Barcelona, para su utilización como reactivo analítico específico del paladio y cobalto (F. BUSCARONS y R. MENA, 1963). En la fig. 1 damos la fórmula desarrollada del compuesto.

La determinación de la estructura cristalina, configuración molecular y uniones entre moléculas, es de interés en el estudio cristaloquímico de los derivados de la isonitrosoacetanilida, por sustitución de los H del anillo bencénico por grupos funcionales.

CONSTANTES CRISTALOGRÁFICAS

Los cristales fueron obtenidos a temperatura ambiente por medio de la evaporación de una solución de polvo cristalino en etanol. En dichos cristales se efectuó el estudio morfológico, óptico y roentgenográfico previo a la determinación de la estructura cristalina. Los índices de refracción se determinaron por inmersión de los cristales orientados según las direcciones principales de vibración en series de líquido.

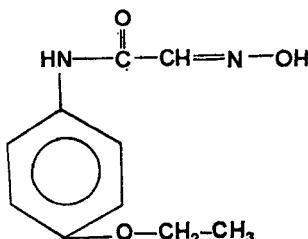


FIG. 1.—Fórmula desarrollada de la 4etoxi isonitrosoacetanilida.

* Este trabajo forma parte de la tesis doctoral del primero que suscribe.

** Sección de Cristalografía del Instituto "Jaime Almerá", C. S. I. C.

*** Departamento de Cristalografía y Mineralogía, Universidad de Barcelona.

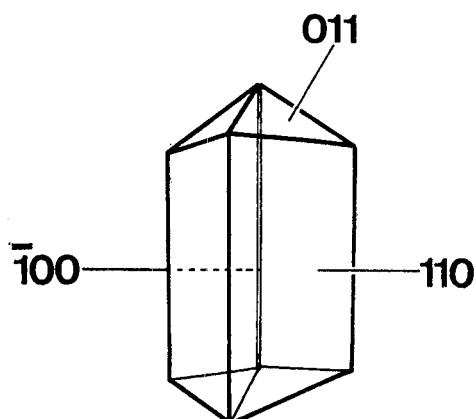


FIG. 2.—Cristal de 4-ethoxi isonitrosoacetanilida,

dos de índices de refracción conocidos, Cargille, cuyos incrementos eran de 0,002 y a 23° C de temperatura. Las demás constantes ópticas se determinaron por medio de una platina universal en fotomicroscopio Zeiss. (M. FONT-ALTABA 1967).

En la fig. 2 mostramos el dibujo de un cristal de 4 etoxi-isonitrosoacetanilida, la cara (110) se presenta como forma dominante y la (011) como subdominante.

La relación paramétrica morfológica es: 1,17895 : 1:0,88950. En la fig. 3 damos la proyección estereográfica del cristal.

Todas las constantes físico-cristalográficas están resumidas en la tabla 1.

TABLA 1

Sistema cristalino	Monoclínico
Grupo espacial	P2 ₁ /c
Relación paramétrica morfológica	1,1789 : 1:0,8895
Relación paramétrica estructural	1,1789 : 1:0,8895
<i>a</i>	11,788 Å
<i>b</i>	9,999 Å
<i>c</i>	8,895 Å
β	103,35°
<i>V</i>	1.031,11 Å ³
<i>Z</i>	4
λ (K _a Cu)	1,54178 Å
D _c	1,308 g · cm ⁻³
D _m	1,310 g · cm ⁻³
Punto de fusión	201°C
Índices de refracción:	
Signo óptico:	(—)
Plano de los ejes ópticos	(100)
α [100]	14°
Ángulo de los ejes ópticos	2V = 72°

A partir de los cristales de 0,12 × 0,07 × 0,22 milímetros se calcularon los parámetros de la celda elemental sobre diagramas Weissenberg y a partir de un difractómetro automático de cristal único (Siemens A.E.D.).

Por medio de dicho difractómetro se recogieron las intensidades de 2.083 reflexiones, de las cuales se dieron por observadas 1.957. Se realizaron las correcciones de Lorentz-polarización. (No se estimó

necesaria la de absorción.) Los factores de temperatura (B) y de escala (K) resultaron ser de:

$$\begin{aligned} B & \dots \dots \dots 3,89 \text{ Å}^{-2} \\ K & \dots \dots \dots 0,05 \end{aligned}$$

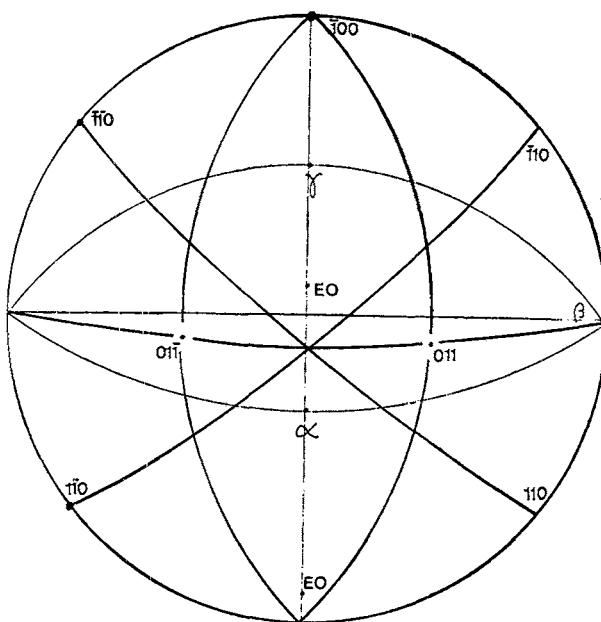


FIG. 3. — Proyección estereográfica de la 4 etoxi isonitrosoacetanilida.

DETERMINACIÓN DE LA ESTRUCTURA

La estructura cristalina fue determinada empleando métodos directos. La adición simbólica, se utilizó de acuerdo con los programas de la serie L. S. A. M., originales de GERMAIN, MAIN y WOOLFSON (1970). Se emplearon 499 |E_{hkl}| con valor superior a 1,1224. En la tabla 2 damos la estadística de los E_{hkl}.

TABLA 2

E _{hkl} > 3	0,53 %
E _{hkl} > 2	4,37 %
E _{hkl} > 1	21,76 %

Las reflexiones (221) (437) (383) nos fijan el origen. Los tres símbolos A, B, C correspondieron a las reflexiones:

$$A = (220) \quad B = (\bar{2}20) \quad C = (222)$$

El símbolo A interviene en 144 relaciones entre símbolos, el B en 1, y el C en 171, de los que se deduce que el símbolo B no juega papel alguno en la adición simbólica.

Los conjuntos de signos y sus probabilidades están expresados en la tabla 3.

TABLA 3

A	B	C	Criterios de probabilidad			
+	+	+	1.645,4	2.572,7	1.866	445
+	-	+	1.645,4	2.572,7	1.866	445
-	+	-	1.762,5	2.929,8	1.920	444
-	-	-	1.762,5	2.929,8	1.920	444
-	+	+	1.260,2	2.126,5	1.655	446
-	-	+	1.242,0	2.107,1	1.633	434
+	+	-	1.205,3	2.055,6	1.635	446
+	-	-	1.197,6	2.043,0	1.606	445

El conjunto de signos número 4 nos dio la solución, después de una síntesis tridimensional de Fourier.

AFINAMIENTO DE LA ESTRUCTURA

Cinco ciclos de afinamientos isotrópicos por mínimos cuadrados, nos dieron un índice R de: 14,27 %. Ocho nuevos ciclos anisotrópicos, incluyendo un test para eliminar reflexiones con un elevado porcentaje de error, nos redujeron el índice R a 7,12 % (con 1.814 reflexiones).

Un Fourier de diferencias nos permitió localizar los hidrógenos en una celda elemental.

Tres ciclos de afinamientos globales, con B_{iso} para los hidrógenos y anisotrópicos para los restantes átomos, nos hicieron descender el índice R a: 6,95 % incluyendo todas las reflexiones observadas (2.083 re-

TABLA 4

SiM	Nº	X/a	Y/b	Z/c	B _{iso}	B ₁₁	B ₂₂	B ₃₃	B ₁₂	B ₁₃	B ₂₃
C	1	0.30880 (31)	-0.02564 (36)	0.54272 (42)	2.50	0.00453 (25)	0.00657 (34)	0.00675 (43)	-0.00057 (63)	0.00165 (53)	0.00143 (48)
C	2	0.29585 (34)	0.02303 (42)	0.68462 (43)	2.87	0.00478 (28)	0.00895 (41)	0.00657 (46)	-0.00185 (70)	-0.00087 (57)	0.00251 (54)
C	3	0.20676 (36)	0.10915 (46)	0.69921 (45)	3.33	0.00554 (29)	0.00992 (44)	0.00807 (48)	-0.00350 (78)	-0.00005 (61)	-0.00430 (59)
C	4	0.12769 (33)	0.14657 (40)	0.56638 (44)	2.99	0.00462 (27)	0.00797 (39)	0.00898 (51)	-0.00034 (71)	0.00139 (60)	0.00146 (51)
C	5	0.13902 (34)	0.09612 (45)	0.42661 (45)	3.23	0.00594 (31)	0.00942 (45)	0.00678 (49)	0.00203 (76)	0.00072 (62)	0.00400 (60)
C	6	0.23017 (35)	0.01090 (44)	0.41345 (44)	3.12	0.00575 (29)	0.00937 (45)	0.00632 (45)	0.00153 (75)	0.00146 (59)	0.00333 (56)
C	7	-0.04923 (38)	0.25917 (53)	0.46553 (54)	3.81	0.00623 (30)	0.01168 (55)	0.00975 (57)	0.00381 (90)	0.00067 (69)	0.00578 (70)
C	8	-0.13382 (50)	0.34805 (71)	0.52827 (69)	5.25	0.00896 (47)	0.01722 (85)	0.01400 (91)	-0.00079 (139)	0.00188 (107)	0.01406 (105)
C	9	0.43642 (29)	-0.17377 (34)	0.42211 (37)	2.28	0.00429 (23)	0.00538 (33)	0.00574 (41)	-0.00015 (58)	0.00123 (49)	-0.00010 (44)
C	10	0.52891 (31)	-0.27559 (36)	0.46991 (41)	2.50	0.00514 (26)	0.00670 (39)	0.00646 (43)	-0.0046 (63)	0.00048 (54)	0.00115 (48)
N	1	0.40117 (27)	-0.11718 (33)	0.54220 (34)	2.82	0.00501 (23)	0.00821 (33)	0.00622 (37)	0.00020 (58)	0.00142 (48)	0.00353 (44)
N	2	0.54683 (26)	-0.35693 (32)	0.36550 (34)	2.53	0.00426 (22)	0.00706 (31)	0.00730 (39)	0.00037 (55)	0.00067 (48)	0.00169 (41)
O	1	0.04202 (25)	0.23257 (35)	0.59167 (36)	3.83	0.00613 (22)	0.01184 (40)	0.01072 (41)	-0.00579 (64)	-0.00248 (50)	0.00785 (48)
O	2	0.39722 (25)	-0.15161 (28)	0.28744 (29)	2.91	0.00701 (23)	0.00788 (28)	0.00583 (32)	0.00090 (48)	0.00179 (44)	0.00340 (46)
O	3	0.63130 (26)	-0.45045 (31)	0.42259 (34)	3.51	0.00686 (23)	0.00944 (33)	0.00964 (40)	-0.00384 (59)	-0.00127 (50)	0.00759 (46)
H	12	0.3499 (59)	-0.0140 (66)	0.7793 (77)	3.71						
H	13	0.1927 (55)	0.1326 (65)	0.8096 (70)	3.71						
H	15	0.0795 (53)	0.1314 (67)	0.3542 (70)	3.71						
H	16	0.2389 (56)	-0.0451 (68)	0.3338 (77)	3.71						
H	21	0.4329 (56)	-0.1355 (67)	0.6458 (70)	3.71						
H	33	0.6214 (53)	-0.4963 (65)	0.3276 (75)	3.71						
H	110	0.5722 (54)	-0.3028 (64)	0.5794 (79)	3.71						
H	171	-0.0772 (57)	0.1554 (67)	0.4000 (73)	3.71						
H	172	-0.0145 (53)	0.2919 (66)	0.3645 (74)	3.71						
H	181	-0.1169 (52)	0.4147 (66)	0.5451 (72)	3.71						
H	182	-0.1974 (54)	0.3510 (68)	0.5067 (70)	3.71						
H	183	-0.1240 (58)	0.2737 (65)	0.6092 (72)	3.71						

flexiones). En la tabla 4 damos las coordenadas de los átomos y sus parámetros de agitación térmica.

DESCRIPCIÓN DE LA ESTRUCTURA

A partir de los parámetros atómicos, calculamos todas las distancias intramoleculares, puentes de hidrógeno y ángulos de enlace, que se encuentran en la tabla 5.

TABLA 5

DISTANCIAS INTRAMOLECULARES Y ANGULOS DE ENLACE

$C_1 - C_2$	1.387 (5) Å	$C_6 - C_1 - C_2$	119.5 (3)°
$C_2 - C_3$	1.383 (6) Å	$C_1 - C_2 - C_3$	121.1 (3)°
$C_3 - C_4$	1.414 (5) Å	$C_2 - C_3 - C_4$	118.8 (3)°
$C_4 - C_5$	1.370 (5) Å	$C_3 - C_4 - C_5$	120.0 (3)°
$C_5 - C_6$	1.394 (6) Å	$C_4 - C_5 - C_6$	120.4 (3)°
$C_1 - N_1$	1.424 (4) Å	$C_5 - C_6 - C_1$	120.0 (3)°
$N_1 - C_9$	1.340 (4) Å	$C_3 - C_4 - O_1$	114.8 (3)°
$C_6 - C_1$	1.387 (5) Å	$O_1 - C_4 - C_5$	125.1 (3)°
$C_9 - O_2'$	1.222 (4) Å	$C_4 - O_1 - C_7$	117.2 (3)°
$C_9 - C_{10}$	1.496 (5) Å	$O_1 - C_7 - C_8$	105.7 (4)°
$C_{10} - N_2$	1.281 (4) Å	$C_1 - N_1 - C_9$	128.6 (3)°
$N_2 - O_3$	1.393 (4) Å	$N_1 - C_9 - O_2$	125.9 (3)°
$C_4 - O_1$	1.377 (5) Å	$N_1 - C_9 - C_{10}$	112.2 (3)°
$O_1 - C_7$	1.429 (5) Å	$O_2 - C_9 - C_{10}$	121.7 (3)°
$C_7 - C_8$	1.517 (8) Å	$C_9 - C_{10} - N_2$	115.8 (3)°
$C_2 - H_{12}$	1.02 (6) Å	$C_{10} - N_2 - O_3$	111.4 (3)°
$C_3 - H_{13}$	1.05 (6) Å	$C_6 - C_1 - N_1$	124.2 (3)°
$C_5 - H_{15}$	0.93 (6) Å	$C_2 - C_1 - N_1$	116.1 (3)°
$C_6 - H_{16}$	0.92 (6) Å	$C_1 - C_2 - H_{12}$	118. (4)°
$N_1 - H_{21}$	0.94 (6) Å	$C_3 - C_2 - H_{12}$	121. (4)°
$O_3 - H_{33}$	0.94 (6) Å	$C_2 - C_3 - H_{13}$	119. (6)°
$C_{10} - H_{110}$	1.04 (6) Å	$C_4 - C_3 - H_{13}$	122. (3)°
$C_7 - H_{172}$	1.10 (6) Å	$C_4 - C_5 - H_{15}$	107. (4)°
$C_7 - H_{171}$	1.20 (6) Å	$C_6 - C_5 - H_{15}$	132. (4)°
$C_8 - H_{181}$	0.70 (6) Å	$C_5 - C_6 - H_{16}$	129. (4)°
$C_8 - H_{182}$	0.74 (6) Å	$C_1 - C_6 - H_{16}$	108. (4)°
$C_8 - H_{183}$	1.02 (6) Å	$C_1 - N_1 - H_{21}$	106. (4)°
		$C_9 - N_1 - H_{21}$	124. (4)°
		$C_9 - C_{10} - H_{110}$	130. (4)°
		$N_2 - C_2 - H_{110}$	113. (4)°
		$N_2 - O_3 - H_{33}$	92. (4)°
		$O_1 - C_7 - H_{171}$	108. (3)°
		$C_8 - C_7 - H_{171}$	123. (3)°
		$H_{171} - C_7 - H_{172}$	88. (4)°
		$O_1 - C_7 - H_{172}$	111. (3)°
		$C_8 - C_7 - H_{172}$	119. (3)°
		$C_7 - C_8 - H_{181}$	117. (5)°
		$C_7 - C_8 - H_{182}$	129. (5)°
		$C_7 - C_8 - H_{183}$	81. (5)°
		$H_{181} - C_8 - H_{182}$	104. (7)°
		$H_{181} - C_8 - H_{183}$	123. (7)°
		$H_{182} - C_8 - H_{183}$	101. (7)°

Las moléculas del 4 etoxi isonitrosoacetanilida están ligadas por medio de dos puentes de hidrógeno. Dichos puentes quedan establecidos entre:

$$N_1 - H_{21} \text{ (i)} \dots N_2 \text{ (iii)} = 3.076 \text{ (4) } \text{\AA}$$

$$O_3 - H_{33} \text{ (ii)} \dots O_2 \text{ (i)} = 2.723 \text{ (4) } \text{\AA}$$

siendo: (i) = x, y, z (ii) = 1-x, 1/2+y, 1/2-z
(iii) = x, y + 1/2, 1/2+z

El enlace que encontramos en el caso de la isonitrosoacetanilida establecido entre N-H ... O, aquí lo encontramos establecido entre nitrógenos de moléculas vecinas deducidas una de otra por el plano de deslizamiento C.

En cuanto al enlace O-H ... O, es el constante en todas las estructuras de la serie resueltas hasta el momento presente.

isonitrosoacetanilida	2.743 Å
2 etoxi iso. acetanilida	2.675 Å
4 etoxi iso. acetanilida	2.723 Å

Los átomos de la presente estructura, definen tres planos medios moleculares.

Plano 1. — Queda determinado por los átomos del anillo bencénico. Su ecuación es la siguiente:

$$0,6076 X + 0,7829 Y - 0,1339 Z - 0,8416 = 0$$

Las distancias de todos los átomos al plano que definen no sobrepasan las 35 milésimas.

Plano 2. — Lo constituyen los tres átomos del grupo etoxi. La ecuación es:

$$0,5463 X + 0,8087 Y - 0,2180 Z - 0,4909 = 0$$

Plano 3. — Queda formado por los átomos del grupo isonitroso acetil. Su ecuación:

$$0,7607 X + 0,6489 Y - 0,0159 Z - 2,1800 = 0$$

Las distancias de los átomos al plano son:

N_1	-0,0810 (22)
N_2	-0,0858 (21)
O_2	0,0138 (19)
O_3	-0,0192 (21)
C_9	0,0299 (24)
C_{10}	0,1424 (25)

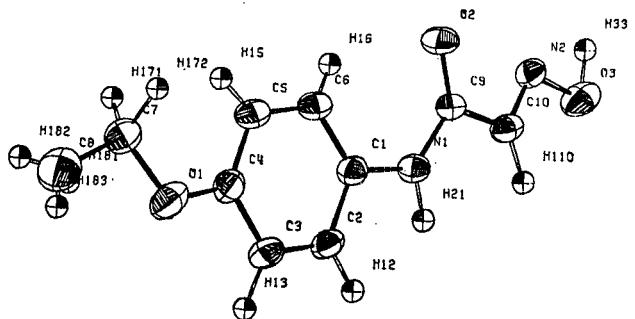


FIG. 4. — Perspectiva de una molécula con los elipsoides de agitación térmica de los átomos.

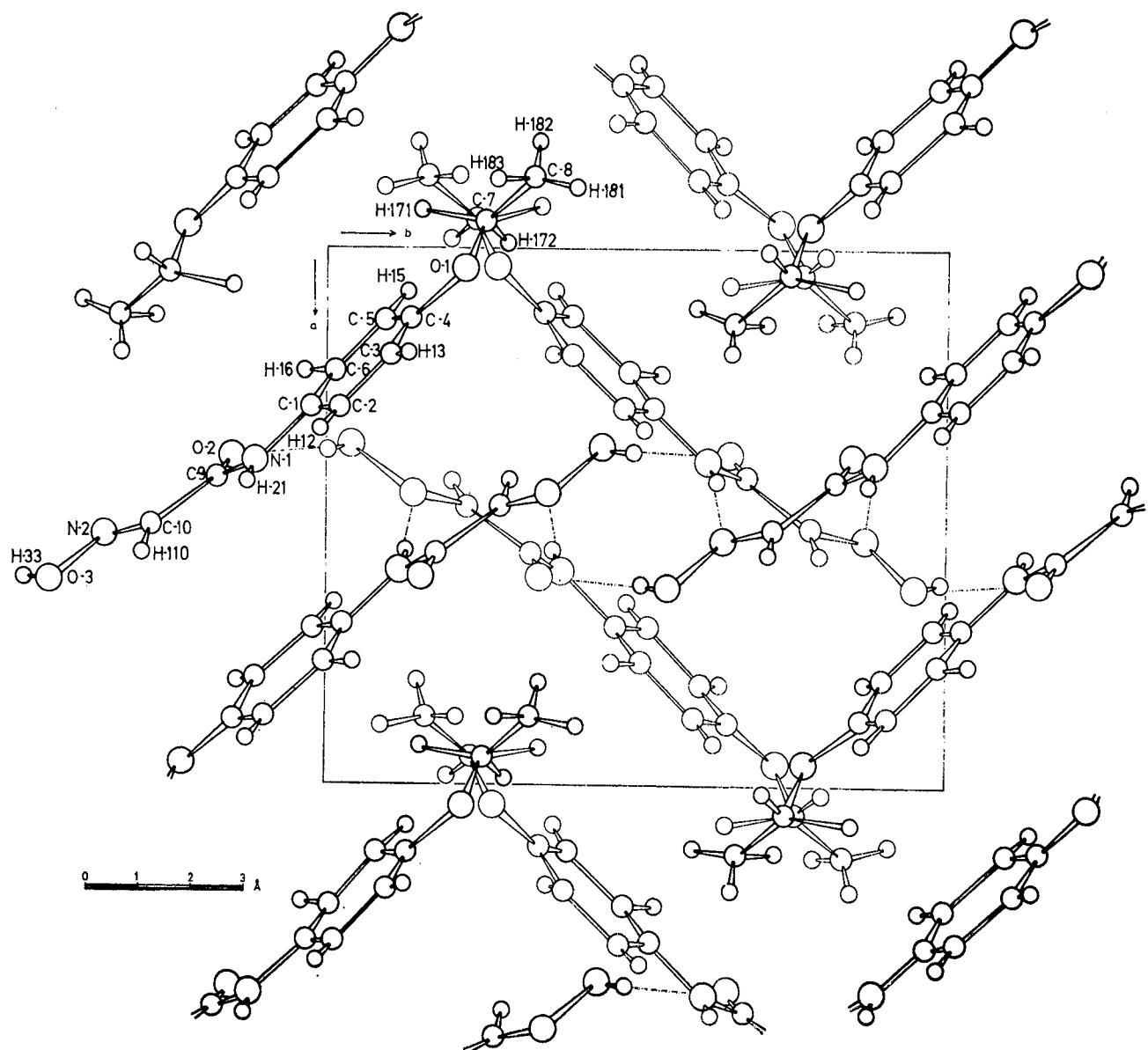


FIG. 5. — Proyección XV del contenido de una celda elemental.

TABLA 6

H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	H	FO	FC	PAGE
#	7; 1+	6	3; 199	199	-	-10	11	11	3; 129	127	-	3; 123	126	-	5; 36	40	-	0; 160	-156	-	5; 53	-53	-	0; 0*	0*	3				
#	2; 103	-98	#	3; L+	7	-11	12	-9	0; 129	127	-	4; 123	113	-	4; 34	34	-	0; 17	-17	-	2; 49	-71	-	0; 47	47	32				
#	-8; 12	38	3; 1-19	-	-	7	-11	-	0; 7	11	-	6; 89	73	-	20; -28	-2	82	85	K; 7; L+	8	3; 22	24	-	0; 36	34	27				
#	-9; 38	26	4; 25	14	0; 229	-241	#	5; 1+	7	-	3; 16	16	-	31; 27	7	0*	1; 191	-191	-	4; 8	-1	-	1; 74	72	29					
#	6; 6	L+	5; 10	-	1; 161	161	0; 8	8	5	4; 53	53	-	6; 123	127	-	2; 45	-2	165	157	5; 23	63	1; 71	71	9; 50	48	11				
#	0; 35	26	6; 8	-79	2; 158	-160	0; 2	23	-2	14; 140	-141	-	5; 52	-53	197	135	0; 59	-44	2; 37	-33	-	2; 26	-2	-	4; 22	-32	36			
#	1; 103	-117	9; 9	208	-	4; 226	-224	0; 12	12	25	4; 112	111	-	3; 32	-33	5; 75	75	60	-56	40	3; 8	-1	-	3; 78	76	1;				
#	2; 18	24	3; 1-10	-	5; 1	-	5; 5	-	0; 70	72	-	3; 34	-35	7; 55	55	25	-28	51	-1	56	56	-	1; 18	-17	2;					
#	3; 31	-27	3; 1-17	-	1; 104	-	0; 7	7	16	4; 14	-14	-	3; 35	-37	7; 42	-45	-57	19	-10	38	34	-	4; 18	-21	18					
#	4; 6	-9	3; 16	2	1; 72	72	0; 7	16	-14	2; 26	-23	-	8; 4	-2	8; 26	20	16; 16	40	-	7; 70	-71	-	3; 35	-35	K; 2; L+ 1C					
#	-5; 25	-22	5; 5	21	1; 12	-	2; 128	-114	0; 11	41	-55	7; 25	-22	9; 28	-25	15; 16	40	-	7; 80	-60	-	3; 63	62	1;						
#	-6; 18	16	1; 17	11	1; 11	-	1; 15	15	17	2; 10	-10	-	4; 48	-49	15; 17	17	17; 17	22	-	10; 40	-40	-	0; 15	15	12					
#	-7; 11	-11	1; 17	104	0; 23	-23	1; 17	15	19	1; 11	11	17	9; 92	-11	1; 7	-3	0; 11	11	1; 131	130	K; 8; L+	8	E; 3; L+	9	-	1; 15	-16	1;		
#	-8; 11	-11	1; 8	40	-43	0; 112	-120	0; 10	15	14	K; 6; L+	7	K; 11	8; 4	3; 14	0; 2	115	115	10; 10	-10	-	0; 12	12	16	K; 6; L+	9	1; 15	-15	2;	
#	1; 18	16	1; 19	129	124	0; 68	68	-	5; 25	24	-	0; 30	31	-	4; 12	-12	136	0; 50	28	4; 19	-	1; 13	-13	-	0; 11	11	9;			
#	2; 21	21	1; 19	129	124	0; 68	68	-	5; 25	24	-	0; 30	31	-	4; 12	-12	136	0; 50	28	4; 19	-	1; 13	-13	-	0; 11	11	9;			
#	-7; 18	7	1; 11	119	-117	0; 12	12	-1	10	-2	1; 16	16	0; 12	12	1; 92	-89	1; 67	67	69	-2	10	6	3; 32	26	0; 41	39	-	0; 15	15	35
#	-8; 7	7	1; 12	14	1; 17	-	0; 10	13	-3	0; 31	29	-	0; 61	59	3; 29	20	3; 73	73	1; 12	12	1; 20	-20	4; 17	17	1; 15	-17	21			
#	0; 6; L+	6	K; 2; L+	7	-11	44	-49	-10	0; 31	28	-	0; 32	31	-	0; 72	72	0; 6	6	4; 39	-34	-3	1; 11	-10	-	1; 50	-50	1;			
#	0; 12	11	0; 27	-37	#	4; 1+	7	7	4; 1+	7	-	3; 54	-55	7; 27	24	5; 22	-19	4; 58	46	K; 1; L+	9	-2	5; 59	-59	-	2; 9	-9	7;		
#	1; 14	20	1; 26	-26	0; 22	22	0; 72	72	0; 28	-28	4; 62	57	0; 57	56	6; 6	-6	3; 32	37	5; 127	-127	0; 115	116	-	3; 37	-37	K; 3; L+ 1C				
#	2; 15	25	1; 24	-24	1; 25	-24	1; 20	21	0; 50	49	-6	4; 44	-45	-1	6; 24	-24	7; 95	-95	7; 41	-41	1; 61	59	-5; 43	-42	-	4; 54	-54	51		
#	3; 33	24	1; 24	-24	1; 25	-24	1; 20	21	0; 50	49	-6	4; 44	-45	-1	6; 24	-24	7; 95	-95	7; 41	-41	1; 61	59	-5; 43	-42	-	4; 54	-54	51		
#	-1; 18	-21	4; 6	71	61	0; 24	-24	2	18	-17	0; 9	2	7; 79	-74	7; 24	-24	8; 89	-89	8; 47	-47	2; 70	73	4; 43	-44	-	0; 6	6	7;		
#	-2; 18	-8	3; 8	28	-28	3; 67	65	-	0; 3	29	213	-213	4; 47	-46	4; 90	-90	0; 1	1	3; 47	43	-	4; 42	-41	K; 0; L+	10	-1	22	-27		
#	-3; 20	-21	1; 18	-17	1; 17	-17	1; 17	17	0; 28	27	3; 62	57	0; 57	56	6; 6	-6	3; 32	37	5; 127	-127	0; 115	116	-	3; 37	-37	K; 3; L+ 1C				
#	-4; 31	-31	1; 8	33	32	6; 30	30	0; 66	67	0; 26	23	-6	103	-104	7; 8	-8	4; 34	-34	0; 15	-15	2; 32	31	K; 4; L+	10	-1	39	-34			
#	-5; 17	-13	1; 34	44	7; 16	11	-1	47	-50	1; 44	48	-7	23	-17	8; 35	-34	0; 10	0	4; 34	-34	0; 15	15	-	4; 34	-34	31				
#	-6; 10; L+	6	-1; 27	-111	1; 35	34	2; 23	-20	-2	20	-10	0; 36	35	-53	-10	65	59	2; 30	26	-	0; 102	104	-	2; 53	-52	K; 4; L+ 10				
#	0; 46	11	-5; 13	-9	-5; 15	-16	-5; 61	64	-4	35	-43	9; 40	-10	0; 11	8	8; 81	84	L; 6	8	4; 08	-10	4; 80	-83	4; 51	-51	0; 16	15	19		
#	-1; 18	18	0; 62	35	-	0; 28	23	-	10	K; 0; L+	8	K; 4	8	0; 08	1	2; 15	19	-	1; 27	-27	4; 46	-46	4; 51	-51	0; 16	15	19			
#	-2; 37	-39	-8	92	-91	-8; 10	9	-6	87	85	0; 275	-267	0; 97	-92	2; 63	-60	-4; 25	-20	-	1; 78	-77	4; 85	-84	4; 51	-51	0; 16	15	42		
#	2; 14; L+	7	-9; 110	110	-7; 29	-33	0; 39	35	-6	0; 215	-111	1; 17	C	3; 43	-44	-5	61	59	2; 30	21	3; 31	34	-	2; 27	-26	30				
#	0; 231	264	-12	27	-28	-	-	-	0; 254	-241	1; 12	6	4; 112	-103	-8	15	73	2; 4	-31	K; 1; L+	10	-5	7	2						

Únicamente el átomo C₁₀ queda significativamente por encima de dicho plano medio del grupo. Fueron calculados los ángulos entre los tres planos medios, resultando ser dichos ángulos de:

Entre plano 1 y plano 2 . . . 6°

Entre plano 1 y plano 3 . . . 13°

Para finalizar este trabajo incluimos la figura 4, donde está representada una molécula de la 4 etoxi isonitrosoacetanilida, con sus elipsoides de agitación térmica, de la figura 5 que es la proyección XY de las moléculas de la celda elemental y de la tabla 6 donde damos la lista de los factores de estructura observados y calculados.

Los autores del presente trabajo, agradecen al Profesor R. GAY, y a los doctores Hospital y Hauw de la Universidad de Talence, Francia, las facilidades dadas en la recogida de los datos experimentales por medio de un difractómetro automático Siemens, A.E.D.

BIBLIOGRAFIA

- AHMED, F. R. (1969): Crystallographic programs for a IBM 360 systems. *National Research Council of Canada*.

BOWEN, H. J. M. (1958): Tables of Interatomic distances and configuration in molecules and ions. *The Chem. Soc. London*.

BRIANSÓ, J. L., MIRAVITLLES, C., PLANA, F. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, 3, págs. 73-76.

BRIANSÓ, J. L., MIRAVITLLES, C. y FONT-ALTABA, M. (1972): *Acta Geológica Hispánica*, VII, 3, págs. 77-82.

BROWN, C. J. (1966): *Acta Cryst.*, 21, 442.

BUSCARONS, F., MENA, R. (1963): *Chim. Anal.*, vol. 4, núm. 2, págs. 72-79.

CHRISTOPH, G. G. y FLEISCHER, E. B. (1973): *Acta Cryst.*, B 29, 121.

GERMAIN, G., MAIN, P. y WOOLFSON, M. M. (1970): *Acta Cryst.*, B 26, 274.

PAULING, L. (1945): The nature of chemical bond, Ithaca Cornell. Univ. Press.