

Acta Crystallographica Section E

## Structure Reports

Online

ISSN 1600-5368

## 2-[(4-Benzhydrylpiperazin-1-yl)méthyl]-acrylonitrile

Fatma Ben Amor,<sup>a</sup> Mohamed Ould M'hamed,<sup>b</sup> Hédi Mrabet,<sup>b</sup> Ahmed Driss<sup>a\*</sup> et Mohamed Lotfi Efrif<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de Matériaux et Cristallochimie, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, 2092 El Manar I Tunis, Tunisie, et <sup>b</sup>Laboratoire de Synthèse Organique et Hétérocyclique, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis El Manar, 2092 El Manar I Tunis, Tunisie  
Correspondence e-mail: ahmed.driss@fst.rnu.tn

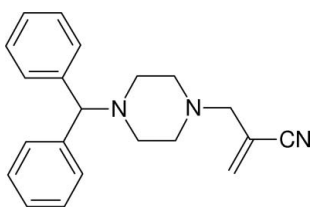
Reçu le 31 juillet 2008; accepté le 6 août 2008

Key indicators: single-crystal X-ray study;  $T = 298$  K; mean  $\sigma(\text{C}-\text{C}) = 0.004$  Å;  $R$  factor = 0.055;  $wR$  factor = 0.156; data-to-parameter ratio = 11.6.

In the title compound, 2-[(4-benzhydrylpiperazin-1-yl)méthyl]acrylonitrile,  $\text{C}_{21}\text{H}_{23}\text{N}_3$ , the substituted piperazine ring adopts a chair conformation and the dihedral angle between the mean planes of the aromatic rings is  $71.61(8)^\circ$ .

## Littérature associée

Pour littérature associée, voir: Mikami *et al.* (1991); Mrabet & Zantour (2004); Ould M'hamed *et al.* (2007, 2008); Toumi *et al.* (2007).



## Partie expérimentale

## Données cristallines

$\text{C}_{21}\text{H}_{23}\text{N}_3$   
 $M_r = 317.42$

Monoclinique,  $P2_1/c$   
 $a = 17.443(5)$  Å

$b = 6.183(3)$  Å  
 $c = 17.717(5)$  Å  
 $\beta = 107.00(3)^\circ$   
 $V = 1827.4(12)$  Å<sup>3</sup>  
 $Z = 4$

Radiation Mo  $K\alpha$   
 $\mu = 0.07$  mm<sup>-1</sup>  
 $T = 298(2)$  K  
 $0.72 \times 0.58 \times 0.22$  mm

## Collection des données

Diffractomètre Enraf-Nonius  
CAD-4  
Correction d'absorption:  $\psi$  scan  
(North *et al.*, 1968)  
 $T_{\text{min}} = 0.904$ ,  $T_{\text{max}} = 0.985$   
3708 réflexions mesurées

3587 réflexions indépendantes  
1625 réflexions avec  $I > 2\sigma(I)$   
 $R_{\text{int}} = 0.052$   
2 réflexions de référence  
fréquence: 120 min  
déclin d'intensité: 7%

## Affinement

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.054$   
 $wR(F^2) = 0.156$   
 $S = 0.97$   
3587 réflexions  
309 paramètres

Tous les paramètres des atomes H affinis  
 $\Delta\rho_{\text{max}} = 0.17$  e Å<sup>-3</sup>  
 $\Delta\rho_{\text{min}} = -0.20$  e Å<sup>-3</sup>

Collection des données: *CAD-4 EXPRESS* (Enraf-Nonius, 1994); affinement des paramètres de la maille: *CAD-4 EXPRESS*; réduction des données: *XCAD4* (Harms & Wocadlo, 1995); programme(s) pour la solution de la structure: *SHELXS97* (Sheldrick, 2008); programme(s) pour l'affinement de la structure: *SHELXL97* (Sheldrick, 2008); graphisme moléculaire: *DIAMOND* (Brandenburg, 1998); logiciel utilisé pour préparer le matériel pour publication: *SHELXL97*.

Des documents complémentaires et figures concernant cette structure peuvent être obtenus à partir des archives électroniques de l'UICr (Référence: HB2772).

## Références

- Brandenburg, K. (1998). *DIAMOND*. Université de Bonn, Allemagne.  
Enraf-Nonius (1994). *CAD-4 EXPRESS*. Enraf-Nonius, Delft, les Pays-Bas.  
Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. Université de Marburg, Allemagne.  
Mikami, K., Terada, M., Motoyama, Y. & Nakai, T. (1991). *Tetrahedron Asymmetry*, **2**, 643–646.  
Mrabet, H. & Zantour, H. (2004). *J. Soc. Alger. Chim.* **14**, 197–204.  
North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.  
Ould M'hamed, M., Mrabet, H. & Efrif, M. L. (2007). *C. R. Chim.* **10**, 1147–1156.  
Ould M'hamed, M., Mrabet, H. & Efrif, M. L. (2008). *J. Soc. Chim. Tunis.* **10**, 31–37.  
Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* **A64**, 112–122.  
Toumi, M., Ben Amor, F., Raouafi, N., Bordeau, M., Driss, A. & Boujlel, K. (2007). *Acta Cryst.* **E63**, o2735.

## supporting information

*Acta Cryst.* (2008). E64, o1872 [doi:10.1107/S1600536808025403]

## 2-[(4-Benzhydrylpipérazin-1-yl)méthyl]acrylonitrile

Fatma Ben Amor, Mohamed Ould M'hamed, Hédi Mrabet, Ahmed Driss et Mohamed Lotfi Efrit

### S1. Comment

Des travaux récents réalisés dans notre laboratoire ont montré que les dérivés acryliques sont d'excellents agents bi-électrophiles-1,3. Ils constituent des précurseurs d'une large gamme d'hétérocycles (Mrabet & Zantour, 2004; Ould M'hamed *et al.*, 2007). Ces synthons sont également de bons diénophiles dans la réaction de Diels–Alder (Ould M'hamed *et al.*, 2008), ce qui permet d'obtenir des composés bicycliques très recherchés en tant qu'analogues de substances naturelles (Mikami *et al.*, 1991).

La molécule  $C_{21}H_{23}N_3$  est caractérisée par la présence d'un groupement pipérazinyle ayant chaque atome d'azote substitué. L'atome d'azote N3 est lié au carbone C9 qui est lui-même lié à deux noyaux phényles. L'autre atome d'azote N2 est lié au carbone C4 qui porte le groupement 1-cyanovinyle (C1, C2, C3, N1).

Le noyau phényle formé par les atomes C10, C11, C12, C13, C14 et C15 (phényle 1) est sur un plan moyen d'équation:  $12,26(1)x - 2,226(7)y - 14,04(1)z = 0,493(8)$ .

La déviation moyenne de ses atomes est de 0,002 Å. Les atomes de carbone C16, C17, C18, C19, C20 et C21 du deuxième phényle (phényle 2) définissent un plan moyen d'équation  $13,76(1)x - 1,692(8)y + 5,23(2)z = 4,399(4)$ . Ils dévient en moyenne de ce plan de 0,007 Å. L'atome de carbone C9 qui porte les deux phényles dévie de leurs plans de 0,037(4) Å et 0,073(4) Å respectivement. Les deux phényles forment entre eux un angle de 71,61(8)°. Les atomes N1, C1, C2 et C3 du groupement 1-cyanovinyle forment eux aussi un plan d'équation:  $-11,20(4)x + 2,303(9)y + 14,68(4)z = 4,062(6)$ . Leur déviation moyenne est de 0,0006 Å. Ce groupement fait un angle de 4,8(3)° avec le premier phényle et un angle de 76,1(2)° avec le deuxième phényle. La valeur de la distance N1—C1 [1,139(3) Å] et les valeurs moyennes des distances N—C [1,469(3) Å] et C—C [1,518(4) Å] du groupement pipérazinyle sont en accord avec celles rencontrées dans des composés ayant ces types de liaisons (Toumi *et al.*, 2007).

### S2. Experimental

La réaction est effectuée dans un ballon de 250 ml muni d'un barreau aimanté surmonté d'un séparateur à eau et d'un réfrigérant ascendant. Le reflux est réalisé à l'aide d'un bain d'huile. La réaction est terminée lorsqu'il ne se forme plus d'eau (environ 2 heures). A une solution d'acide cyanoacétique (0,3 mol) dans 300 ml de benzène, sont ajoutés 0,72 mol de paraformaldéhyde et 0,3 mol de 1-(diphénylméthyl)pipérazine. Le mélange est chauffé à reflux pendant 4 heures. Après refroidissement, le solvant est évaporé sous sec et le résidu est repris par 80 ml de chloroforme, lavé à l'eau ( $2 \times 20$  ml) et séché sur du sulfate de magnésium. Le solvant est évaporé sous sec et le produit obtenu est purifié par chromatographie sur colonne en utilisant l'éther diéthylique comme éluant.

### S3. Refinement

[Please give range of refined C—H distances]

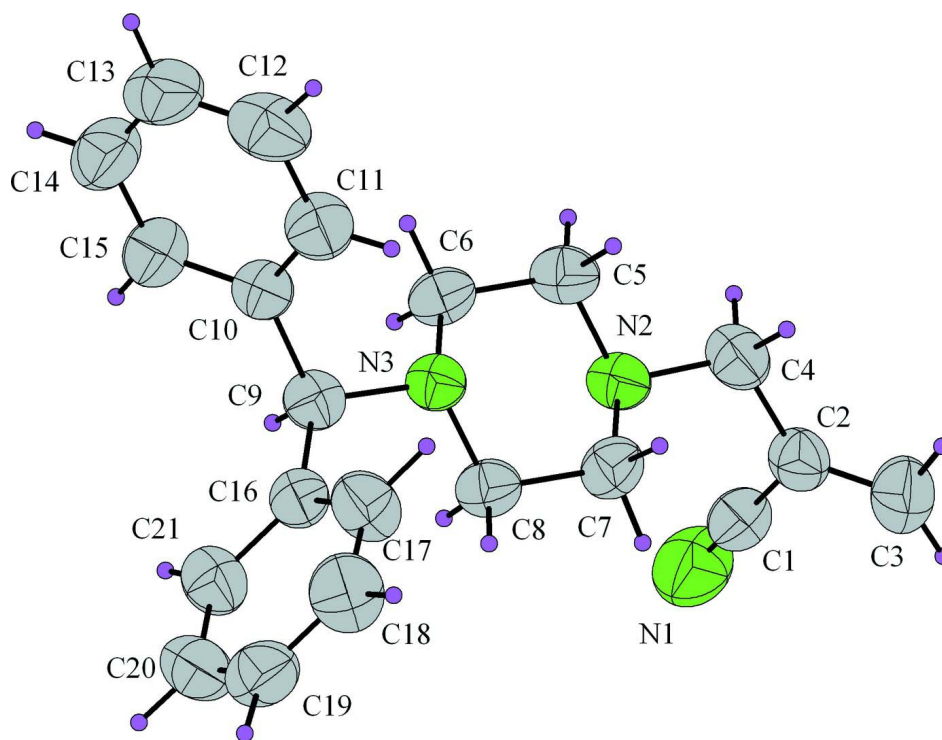


Figure 1

Représentation de la molécule  $C_{21}H_{23}N_3$ . Les ellipsoïdes d'agitation thermique ont 50% de probabilité de présence.

## 2-[(4-benzhydrylpiperazin-1-yl)methyl]acrylonitrile

### Crystal data

$C_{21}H_{23}N_3$   
 $M_r = 317.42$   
 Monoclinic,  $P2_1/c$   
 Hall symbol: -P 2ybc  
 $a = 17.443 (5) \text{ \AA}$   
 $b = 6.183 (3) \text{ \AA}$   
 $c = 17.717 (5) \text{ \AA}$   
 $\beta = 107.00 (3)^\circ$   
 $V = 1827.4 (12) \text{ \AA}^3$   
 $Z = 4$

$F(000) = 680$   
 $D_x = 1.154 \text{ Mg m}^{-3}$   
 Mo  $K\alpha$  radiation,  $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$   
 Cell parameters from 25 reflections  
 $\theta = 11.6\text{--}15.0^\circ$   
 $\mu = 0.07 \text{ mm}^{-1}$   
 $T = 298 \text{ K}$   
 Slab, colourless  
 $0.72 \times 0.58 \times 0.22 \text{ mm}$

### Data collection

Enraf–Nonius CAD-4  
 diffractometer  
 Radiation source: fine-focus sealed tube  
 Graphite monochromator  
 Non-profiled  $\omega/2\theta$  scans  
 Absorption correction:  $\psi$  scan  
 (North *et al.*, 1968)  
 $T_{\min} = 0.904$ ,  $T_{\max} = 0.985$   
 3708 measured reflections

3587 independent reflections  
 1625 reflections with  $I > 2\sigma(I)$   
 $R_{\text{int}} = 0.052$   
 $\theta_{\max} = 26.0^\circ$ ,  $\theta_{\min} = 2.4^\circ$   
 $h = -21 \rightarrow 1$   
 $k = 0 \rightarrow 7$   
 $l = -21 \rightarrow 21$   
 2 standard reflections every 120 min  
 intensity decay: 7%

Refinement

Refinement on  $F^2$   
 Least-squares matrix: full  
 $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.054$   
 $wR(F^2) = 0.156$   
 $S = 0.98$   
 3587 reflections  
 309 parameters  
 0 restraints  
 Primary atom site location: structure-invariant  
 direct methods

Secondary atom site location: difference Fourier  
 map  
 Hydrogen site location: inferred from  
 neighbouring sites  
 All H-atom parameters refined  
 $w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0682P)^2]$   
 where  $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$   
 $(\Delta/\sigma)_{\max} < 0.001$   
 $\Delta\rho_{\max} = 0.17 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$   
 $\Delta\rho_{\min} = -0.20 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$

Special details

**Geometry.** All e.s.d.'s (except the e.s.d. in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell e.s.d.'s are taken into account individually in the estimation of e.s.d.'s in distances, angles and torsion angles; correlations between e.s.d.'s in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell e.s.d.'s is used for estimating e.s.d.'s involving l.s. planes.

**Refinement.** Refinement of  $F^2$  against ALL reflections. The weighted  $R$ -factor  $wR$  and goodness of fit  $S$  are based on  $F^2$ , conventional  $R$ -factors  $R$  are based on  $F$ , with  $F$  set to zero for negative  $F^2$ . The threshold expression of  $F^2 > \sigma(F^2)$  is used only for calculating  $R$ -factors(gt) *etc.* and is not relevant to the choice of reflections for refinement.  $R$ -factors based on  $F^2$  are statistically about twice as large as those based on  $F$ , and  $R$ -factors based on ALL data will be even larger.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ )

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
N1	−0.13498 (16)	0.4548 (5)	0.10237 (17)	0.0949 (9)
N2	0.08178 (11)	0.5724 (3)	0.18358 (11)	0.0514 (5)
N3	0.22797 (11)	0.3529 (3)	0.17780 (11)	0.0484 (5)
C1	−0.09372 (17)	0.6013 (5)	0.11096 (15)	0.0625 (7)
C2	−0.04111 (15)	0.7881 (4)	0.12169 (16)	0.0564 (7)
C3	−0.0645 (2)	0.9613 (6)	0.0767 (2)	0.0792 (9)
C4	0.03676 (16)	0.7713 (5)	0.18724 (18)	0.0616 (7)
C5	0.15513 (15)	0.5667 (5)	0.25155 (16)	0.0558 (7)
C6	0.20291 (16)	0.3636 (5)	0.24995 (15)	0.0535 (7)
C7	0.10589 (17)	0.5601 (5)	0.11123 (16)	0.0560 (7)
C8	0.15533 (15)	0.3575 (5)	0.11019 (15)	0.0545 (7)
C9	0.27587 (14)	0.1535 (4)	0.17883 (14)	0.0492 (6)
C10	0.35248 (13)	0.1564 (4)	0.24803 (14)	0.0504 (6)
C11	0.40273 (16)	0.3359 (5)	0.26327 (17)	0.0642 (8)
C12	0.47357 (17)	0.3339 (7)	0.3254 (2)	0.0781 (10)
C13	0.4938 (2)	0.1530 (7)	0.3721 (2)	0.0842 (11)
C14	0.4453 (2)	−0.0264 (7)	0.3578 (2)	0.0816 (10)
C15	0.37478 (18)	−0.0246 (6)	0.29607 (17)	0.0660 (8)
C16	0.29580 (13)	0.1168 (4)	0.10145 (14)	0.0495 (6)
C17	0.32827 (19)	0.2798 (5)	0.06644 (17)	0.0685 (8)
C18	0.3497 (2)	0.2389 (6)	−0.00144 (19)	0.0807 (10)
C19	0.33888 (18)	0.0384 (6)	−0.03670 (18)	0.0738 (9)
C20	0.30501 (19)	−0.1234 (6)	−0.00327 (19)	0.0746 (9)
C21	0.28447 (16)	−0.0861 (5)	0.06555 (18)	0.0623 (7)
H13	−0.0285 (19)	1.088 (5)	0.0898 (18)	0.098 (11)*

H23	-0.1189 (16)	0.972 (4)	0.0391 (16)	0.068 (8)*
H14	0.0235 (14)	0.767 (4)	0.2404 (16)	0.074 (8)*
H24	0.0693 (16)	0.909 (4)	0.1835 (15)	0.075 (8)*
H15	0.1394 (13)	0.573 (4)	0.2995 (14)	0.058 (7)*
H25	0.1883 (16)	0.704 (4)	0.2488 (15)	0.078 (8)*
H16	0.1723 (15)	0.231 (4)	0.2543 (14)	0.068 (8)*
H26	0.2498 (14)	0.361 (3)	0.2972 (13)	0.053 (6)*
H17	0.0579 (14)	0.552 (4)	0.0641 (15)	0.057 (7)*
H27	0.1379 (14)	0.692 (4)	0.1039 (13)	0.060 (7)*
H18	0.1224 (15)	0.228 (4)	0.1109 (14)	0.068 (8)*
H28	0.1719 (13)	0.360 (4)	0.0624 (14)	0.055 (7)*
H19	0.2430 (12)	0.032 (3)	0.1842 (11)	0.039 (6)*
H111	0.3885 (13)	0.460 (4)	0.2327 (14)	0.056 (8)*
H112	0.5043 (17)	0.462 (5)	0.3322 (17)	0.088 (10)*
H113	0.5413 (19)	0.155 (5)	0.4162 (18)	0.093 (10)*
H114	0.4583 (19)	-0.147 (5)	0.3893 (18)	0.096 (11)*
H115	0.3425 (16)	-0.147 (5)	0.2845 (15)	0.078 (10)*
H117	0.3375 (17)	0.426 (5)	0.0924 (18)	0.094 (10)*
H118	0.3684 (18)	0.350 (5)	-0.0223 (17)	0.086 (10)*
H119	0.3571 (17)	0.006 (5)	-0.0838 (19)	0.100 (10)*
H120	0.2960 (16)	-0.263 (5)	-0.0260 (17)	0.084 (9)*
H121	0.2654 (16)	-0.199 (4)	0.0925 (15)	0.072 (9)*

*Atomic displacement parameters (Å<sup>2</sup>)*

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
N1	0.0769 (18)	0.088 (2)	0.102 (2)	-0.0164 (16)	-0.0001 (16)	0.0096 (17)
N2	0.0447 (11)	0.0591 (14)	0.0510 (11)	-0.0024 (10)	0.0149 (9)	-0.0069 (10)
N3	0.0423 (11)	0.0535 (13)	0.0495 (11)	-0.0019 (10)	0.0135 (9)	-0.0029 (10)
C1	0.0554 (16)	0.067 (2)	0.0588 (16)	0.0055 (16)	0.0067 (14)	0.0023 (14)
C2	0.0517 (15)	0.0572 (17)	0.0614 (15)	0.0058 (14)	0.0182 (13)	-0.0068 (14)
C3	0.077 (2)	0.067 (2)	0.089 (2)	0.0144 (19)	0.016 (2)	0.0031 (19)
C4	0.0583 (17)	0.0565 (18)	0.0700 (18)	0.0005 (15)	0.0187 (14)	-0.0111 (15)
C5	0.0483 (14)	0.0703 (19)	0.0507 (15)	-0.0033 (14)	0.0173 (13)	-0.0077 (14)
C6	0.0451 (14)	0.0679 (18)	0.0462 (14)	-0.0038 (14)	0.0116 (12)	0.0029 (13)
C7	0.0476 (14)	0.0635 (19)	0.0549 (16)	0.0044 (14)	0.0116 (13)	0.0034 (14)
C8	0.0485 (15)	0.0639 (19)	0.0496 (15)	-0.0018 (15)	0.0118 (12)	-0.0023 (13)
C9	0.0439 (13)	0.0488 (16)	0.0553 (15)	-0.0116 (13)	0.0151 (11)	0.0002 (12)
C10	0.0430 (13)	0.0553 (16)	0.0538 (14)	-0.0007 (13)	0.0156 (11)	-0.0040 (13)
C11	0.0516 (16)	0.066 (2)	0.0726 (19)	-0.0047 (15)	0.0145 (15)	-0.0038 (16)
C12	0.0488 (18)	0.094 (3)	0.089 (2)	-0.0114 (19)	0.0162 (17)	-0.029 (2)
C13	0.0546 (19)	0.115 (3)	0.073 (2)	0.021 (2)	0.0031 (17)	-0.019 (2)
C14	0.074 (2)	0.092 (3)	0.071 (2)	0.023 (2)	0.0090 (18)	0.007 (2)
C15	0.0605 (18)	0.068 (2)	0.0673 (19)	0.0052 (17)	0.0149 (15)	0.0057 (16)
C16	0.0382 (13)	0.0520 (16)	0.0557 (14)	-0.0013 (11)	0.0097 (11)	-0.0020 (12)
C17	0.086 (2)	0.0594 (19)	0.0687 (18)	-0.0062 (16)	0.0367 (16)	-0.0035 (15)
C18	0.098 (2)	0.079 (2)	0.078 (2)	0.002 (2)	0.0455 (19)	0.008 (2)
C19	0.0669 (19)	0.098 (3)	0.0570 (18)	0.0194 (18)	0.0184 (15)	-0.0029 (18)

C20	0.0671 (19)	0.075 (2)	0.077 (2)	0.0013 (18)	0.0152 (16)	-0.0247 (19)
C21	0.0546 (16)	0.0583 (19)	0.0751 (19)	-0.0043 (14)	0.0208 (14)	-0.0071 (16)

*Geometric parameters (Å, °)*

N1—C1	1.139 (3)	C9—C10	1.527 (3)
N2—C7	1.463 (3)	C9—H19	0.97 (2)
N2—C4	1.471 (3)	C10—C11	1.391 (4)
N2—C5	1.479 (3)	C10—C15	1.391 (4)
N3—C8	1.467 (3)	C11—C12	1.394 (4)
N3—C6	1.469 (3)	C11—H111	0.93 (2)
N3—C9	1.486 (3)	C12—C13	1.374 (5)
C1—C2	1.453 (4)	C12—H112	0.95 (3)
C2—C3	1.326 (4)	C13—C14	1.373 (5)
C2—C4	1.511 (4)	C13—H113	0.96 (3)
C3—H13	0.99 (3)	C14—C15	1.387 (4)
C3—H23	0.99 (3)	C14—H114	0.92 (3)
C4—H14	1.03 (3)	C15—H115	0.93 (3)
C4—H24	1.03 (3)	C16—C17	1.388 (4)
C5—C6	1.512 (4)	C16—C21	1.394 (3)
C5—H15	0.97 (2)	C17—C18	1.383 (4)
C5—H25	1.03 (3)	C17—H117	1.00 (3)
C6—H16	0.99 (3)	C18—C19	1.376 (4)
C6—H26	0.99 (2)	C18—H118	0.89 (3)
C7—C8	1.524 (4)	C19—C20	1.380 (4)
C7—H17	1.00 (2)	C19—H119	1.00 (3)
C7—H27	1.02 (2)	C20—C21	1.387 (4)
C8—H18	0.99 (3)	C20—H120	0.94 (3)
C8—H28	0.97 (2)	C21—H121	0.96 (3)
C9—C16	1.527 (3)		
C7—N2—C4	112.1 (2)	N3—C9—C16	112.77 (19)
C7—N2—C5	108.08 (19)	N3—C9—C10	110.9 (2)
C4—N2—C5	109.3 (2)	C16—C9—C10	110.31 (19)
C8—N3—C6	107.69 (19)	N3—C9—H19	107.4 (12)
C8—N3—C9	111.96 (19)	C16—C9—H19	105.7 (12)
C6—N3—C9	109.63 (19)	C10—C9—H19	109.6 (12)
N1—C1—C2	179.8 (3)	C11—C10—C15	118.4 (3)
C3—C2—C1	119.4 (3)	C11—C10—C9	121.3 (2)
C3—C2—C4	124.6 (3)	C15—C10—C9	120.3 (2)
C1—C2—C4	115.9 (3)	C10—C11—C12	120.6 (3)
C2—C3—H13	115.8 (18)	C10—C11—H111	119.9 (15)
C2—C3—H23	121.7 (16)	C12—C11—H111	119.5 (15)
H13—C3—H23	122 (2)	C13—C12—C11	119.6 (3)
N2—C4—C2	113.3 (2)	C13—C12—H112	124.8 (19)
N2—C4—H14	106.4 (14)	C11—C12—H112	115.6 (19)
C2—C4—H14	108.2 (14)	C14—C13—C12	120.8 (3)
N2—C4—H24	111.9 (14)	C14—C13—H113	119.8 (18)

---

C2—C4—H24	106.4 (15)	C12—C13—H113	119.4 (18)
H14—C4—H24	111 (2)	C13—C14—C15	119.6 (4)
N2—C5—C6	110.8 (2)	C13—C14—H114	121 (2)
N2—C5—H15	108.4 (13)	C15—C14—H114	119 (2)
C6—C5—H15	110.5 (14)	C14—C15—C10	121.0 (4)
N2—C5—H25	107.7 (15)	C14—C15—H115	120.4 (17)
C6—C5—H25	111.1 (14)	C10—C15—H115	118.5 (17)
H15—C5—H25	108.3 (19)	C17—C16—C21	118.1 (3)
N3—C6—C5	111.1 (2)	C17—C16—C9	121.5 (2)
N3—C6—H16	109.6 (14)	C21—C16—C9	120.3 (2)
C5—C6—H16	111.8 (14)	C18—C17—C16	120.4 (3)
N3—C6—H26	110.7 (12)	C18—C17—H117	120.9 (17)
C5—C6—H26	109.0 (13)	C16—C17—H117	118.7 (17)
H16—C6—H26	105 (2)	C19—C18—C17	121.5 (3)
N2—C7—C8	111.2 (2)	C19—C18—H118	121.9 (19)
N2—C7—H17	110.6 (13)	C17—C18—H118	116.5 (19)
C8—C7—H17	106.9 (13)	C18—C19—C20	118.5 (3)
N2—C7—H27	112.3 (13)	C18—C19—H119	121.8 (18)
C8—C7—H27	108.8 (13)	C20—C19—H119	119.6 (18)
H17—C7—H27	106.8 (19)	C19—C20—C21	120.6 (3)
N3—C8—C7	111.3 (2)	C19—C20—H120	121.2 (17)
N3—C8—H18	109.9 (15)	C21—C20—H120	118.2 (17)
C7—C8—H18	109.5 (14)	C20—C21—C16	120.8 (3)
N3—C8—H28	107.8 (13)	C20—C21—H121	122.3 (16)
C7—C8—H28	108.2 (13)	C16—C21—H121	116.7 (16)
H18—C8—H28	110.2 (19)		

---