Crystal structure of diethyl-1-hydroxyimine-2-(3-indolyl)-ethan-phosphonate monohydrate, $C_{14}H_{21}N_2O_5P \cdot H_2O$

M. Cirilli, E. Gavuzzo

Istituto Strutturistica Chimica - CNR, C.P. 10, I-00016 Monterotondo Stazione (Roma), Italy

C. Giordano

Università di Roma "La Sapienza", Centro di Chimica del Farmaco-CNR, P. le A. Moro, 5, I-00185 Roma, Italy

and B. Gorini

Università di Roma "La Sapienza", Dipartimento di Studi Farmaceutici, P.le A. Moro, 5, I-00185 Roma, Italy

Received January 31, 1997, CSD-No. 402818

Table 3. Final atomic coordinates and displacement parameters (in Å²)

Atom	Site	x	y	z	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
P(1)	2a	0.7471(3)	0.4492(1)	0.4592(2)	0.056(2)	0.047(2)	0.040(2)	−0.003(1)	0.009(1)	0.004(1)
O(1)	2a	0.6870(7)	0.5108(5)	0.3654(6)	0.059(4)	0.056(4)	0.051(4)	0.007(4)	0.001(3)	0.008(4)
O(2)	2a	0.8947(7)	0.4818(5)	0.4928(6)	0.068(5)	0.053(4)	0.048(4)	0.000(4)	0.007(3)	0.008(4)
O(3)	2a	0.6758(7)	0.4570(5)	0.5730(6)	0.052(4)	0.066(5)	0.047(4)	0.001(4)	0.014(3)	0.002(4)
O(4)	2a	0.6960(7)	0.1809(4)	0.4593(7)	0.066(4)	0.036(4)	0.070(5)	−0.014(4)	0.002(4)	0.006(4)
N(1)	2a	1.095(1)	0.4253(6)	0.2119(8)	0.082(7)	0.046(5)	0.068(7)	−0.006(5)	0.039(5)	0.003(5)
N(2)	2a	0.7057(8)	0.2756(6)	0.4924(7)	0.041(4)	0.045(5)	0.063(6)	0.008(4)	−0.004(4)	0.004(5)
C(1)	2a	0.7477(8)	0.3312(7)	0.4174(8)	0.023(4)	0.067(7)	0.045(5)	0.006(4)	−0.007(4)	0.008(5)
C(2)	2a	0.789(1)	0.3054(8)	0.2991(7)	0.090(7)	0.048(5)	0.036(5)	−0.006(6)	0.011(5)	−0.002(5)
C(3)	2a	0.924(1)	0.3403(8)	0.2779(9)	0.069(7)	0.052(6)	0.038(6)	−0.005(6)	0.007(5)	0.001(5)
C(4)	2a	1.054(1)	0.3074(7)	0.3290(9)	0.068(6)	0.036(5)	0.056(7)	−0.007(5)	0.026(5)	−0.002(5)
C(5)	2a	1.094(1)	0.2330(8)	0.407(1)	0.074(8)	0.052(6)	0.076(8)	−0.006(6)	0.010(6)	0.025(6)
C(6)	2a	1.225(1)	0.223(1)	0.440(1)	0.055(7)	0.11(1)	0.086(9)	0.001(7)	0.003(6)	0.043(7)
C(7)	2a	1.324(1)	0.275(1)	0.394(1)	0.076(9)	0.18(2)	0.078(9)	0.042(9)	−0.006(7)	0.02(1)
C(8)	2a	1.294(1)	0.346(1)	0.321(1)	0.053(6)	0.081(9)	0.088(8)	−0.014(6)	0.022(6)	−0.022(7)
C(9)	2a	1.156(1)	0.3643(8)	0.285(1)	0.062(6)	0.049(6)	0.066(8)	−0.009(5)	0.018(5)	−0.005(6)
C(10)	2a	0.954(1)	0.4149(7)	0.2090(9)	0.082(7)	0.036(5)	0.049(6)	0.009(5)	0.021(6)	0.007(4)
C(11)	2a	0.976(1)	0.442(1)	0.593(1)	0.085(9)	0.09(1)	0.062(7)	−0.023(8)	−0.004(6)	0.029(7)
C(12)	2a	1.119(1)	0.470(1)	0.594(1)	0.076(8)	0.11(1)	0.11(1)	0.008(8)	0.004(7)	−0.020(9)
C(13)	2a	0.532(1)	0.457(1)	0.5744(9)	0.081(8)	0.15(1)	0.067(7)	0.019(8)	0.025(6)	0.050(7)
C(14)	2a	0.489(1)	0.3863(9)	0.665(1)	0.068(6)	0.16(1)	0.114(9)	0.023(6)	0.036(5)	0.093(8)
P(21)	2a	0.7465(3)	0.1276(1)	−0.0410(2)	0.055(2)	0.046(2)	0.041(2)	−0.002(1)	0.011(1)	−0.003(1)
O(21)	2a	0.6888(7)	0.0695(5)	−0.1349(6)	0.076(5)	0.054(4)	0.047(4)	−0.010(4)	0.016(4)	−0.005(4)
O(22)	2a	0.8979(7)	0.0995(5)	−0.0056(6)	0.060(4)	0.051(4)	0.052(4)	0.014(4)	0.003(3)	−0.001(4)
O(23)	2a	0.6788(9)	0.1217(6)	0.0750(6)	0.092(6)	0.067(5)	0.045(4)	0.004(5)	0.027(4)	0.008(4)
O(24)	2a	0.6985(9)	0.3957(5)	−0.0394(6)	0.102(6)	0.055(5)	0.052(5)	0.009(5)	0.019(4)	−0.005(4)
N(21)	2a	1.096(1)	0.1520(8)	−0.2870(8)	0.077(7)	0.076(6)	0.057(6)	0.012(6)	0.021(5)	−0.017(6)
N(22)	2a	0.7000(8)	0.3039(6)	−0.0060(7)	0.062(5)	0.052(5)	0.047(5)	0.016(4)	0.015(4)	−0.003(4)
C(21)	2a	0.743(1)	0.2506(6)	−0.0837(8)	0.063(6)	0.033(5)	0.045(5)	0.013(4)	0.021(4)	−0.003(4)
C(22)	2a	0.7881(7)	0.2776(8)	−0.2002(8)	0.031(4)	0.059(6)	0.059(6)	0.003(4)	0.005(4)	0.004(5)
C(23)	2a	0.931(1)	0.2381(7)	−0.2231(9)	0.051(5)	0.042(5)	0.046(6)	0.006(5)	0.023(4)	0.006(5)
C(24)	2a	1.056(1)	0.2714(8)	−0.1737(9)	0.051(5)	0.056(6)	0.043(6)	0.000(5)	0.007(4)	−0.001(5)
C(25)	2a	1.091(1)	0.3409(8)	−0.096(1)	0.070(7)	0.060(7)	0.065(7)	0.003(6)	0.015(6)	0.007(6)
C(26)	2a	1.227(1)	0.3588(9)	−0.065(1)	0.10(1)	0.056(7)	0.10(1)	−0.020(7)	0.003(8)	0.000(7)
C(27)	2a	1.331(1)	0.3029(8)	−0.107(1)	0.055(6)	0.058(6)	0.13(1)	0.008(5)	0.015(7)	0.003(7)
C(28)	2a	1.297(1)	0.232(1)	−0.189(1)	0.065(7)	0.078(8)	0.100(9)	0.008(7)	0.027(6)	−0.013(7)
C(29)	2a	1.162(1)	0.2199(8)	−0.2155(9)	0.073(7)	0.048(6)	0.056(7)	−0.002(5)	0.031(6)	−0.001(5)
C(30)	2a	0.960(1)	0.1687(9)	−0.2928(9)	0.068(7)	0.074(8)	0.043(6)	−0.001(6)	0.013(5)	0.004(6)
C(31)	2a	0.976(1)	0.138(1)	0.092(1)	0.066(7)	0.085(9)	0.070(8)	0.000(7)	−0.027(6)	0.006(7)
C(32)	2a	1.112(1)	0.109(1)	0.096(1)	0.081(9)	0.13(1)	0.11(1)	0.034(8)	−0.028(8)	−0.036(9)
C(33)	2a	0.526(1)	0.135(1)	0.0837(9)	0.067(7)	0.112(9)	0.084(8)	−0.010(6)	0.040(6)	0.024(7)
C(34)	2a	0.496(2)	0.130(2)	0.181(1)	0.10(1)	0.73(7)	0.09(1)	−0.08(2)	0.044(8)	−0.06(2)
O(31)	2a	0.575(1)	0.4709(7)	0.1400(8)	0.101(7)	0.083(6)	0.062(6)	0.049(6)	0.008(5)	−0.006(5)
O(32)	2a	0.5785(9)	0.1024(8)	0.6385(7)	0.078(5)	0.118(8)	0.060(6)	−0.036(6)	0.000(4)	0.019(5)

References

1. Subotkowski, W.; Kowalik, J.; Tyka, R.; Mastalerz, P.: *Pol. J. Chem.* **55** (1981) 853-857.
2. Altomare, A.; Cascarano, G.; Giacovazzo, C.; Guagliardi, A.; Burla, C.; Polidori, G.; Camalli, M.: *SIR92 - a program for automatic solution of crystal structures by direct methods*. *J. Appl. Crystallogr.* **27** (1994) 435.
3. Sheldrick, G.M.: *SHELXL-93, a program for refining crystals structures*. University of Göttingen, Germany 1993.
4. TEXSAN: *Single Crystal Structure Analysis Software, Version 5.X*. Molecular Structure Corporation, The Woodlands, TX. 77381, USA 1989.