Crystal structure of 1-amino-4-phenyl-2-(3,5-diphenyl-pyrazol-1-yl)-imidazolium picrate–picric acid (1/2), $[C_{24}H_{20}N_5]^+[C_6H_2N_3O_7]^- \cdot 2C_6H_3N_3O_7$

K. Peters, E.-M. Peters

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstraße 1, D-70506 Stuttgart, Germany

J. Ulbricht and A. Hetzheim

Universität Greifswald, Institut für Organische Chemie, Soldtmannstraße 16, D-17487 Greifswald, Germany

Received October 15, 1997, CSD-No. 409128

Fig. 1. $[C_{24}H_{20}N_5]^+[C_6H_2N_3O_7]^-$

Table 2. (Continued)

Atom	Site	x	y	z	U _{iso}
H(42)	2i	0.3865	1.0952	0.7826	0.08
H(44)	2i	0.4217(3)	0.8508(3)	1.0869(3)	0.08
H(46)	2i	0.1376(4)	0.9965(3)	1.1573(3)	0.08

Table 2. (Continued)

Atom	Site	x	y	z	U _{iso}
H(54)	2i	0.5017	0.3533	0.1969	0.08
H(56)	2i	0.7493(3)	0.6796(3)	-0.0373(3)	0.08
H(58)	2i	0.8435(3)	0.3680(3)	0.0156(3)	0.08

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
C(1)	2i	0.1374(2)	0.4089(3)	0.4135(2)	0.034(2)	0.051(2)	0.046(2)	0.003(2)	-0.009(1)	-0.020(2)
C(2)	2i	0.0784(3)	0.3141(3)	0.4596(3)	0.039(2)	0.055(2)	0.057(2)	-0.007(2)	-0.013(2)	-0.019(2)
C(3)	2i	0.1267(2)	0.2436(3)	0.5333(2)	0.034(2)	0.046(2)	0.052(2)	-0.002(2)	-0.005(2)	-0.023(2)
N(4)	2i	0.2116(2)	0.2906(2)	0.5351(2)	0.044(2)	0.041(1)	0.047(2)	-0.004(1)	-0.011(1)	-0.013(1)
N(5)	2i	0.2166(2)	0.3926(2)	0.4619(2)	0.040(2)	0.038(1)	0.047(2)	-0.004(1)	-0.014(1)	-0.011(1)
C(6)	2i	0.3021(3)	0.4609(2)	0.4390(2)	0.041(2)	0.035(2)	0.036(2)	-0.002(1)	-0.014(1)	-0.009(1)
N(7)	2i	0.4033(2)	0.4408(2)	0.4017(2)	0.038(2)	0.033(1)	0.043(1)	-0.002(1)	-0.011(1)	-0.014(1)
C(8)	2i	0.4665(2)	0.5265(2)	0.3865(2)	0.045(2)	0.033(2)	0.035(2)	-0.003(1)	-0.016(1)	-0.008(1)
C(9)	2i	0.3996(3)	0.5995(2)	0.4169(2)	0.044(2)	0.038(2)	0.042(2)	-0.006(2)	-0.013(1)	-0.012(1)
N(10)	2i	0.2978(2)	0.5563(2)	0.4494(2)	0.043(2)	0.036(1)	0.040(1)	0.002(1)	-0.013(1)	-0.014(1)
N(11)	2i	0.2006(2)	0.6017(2)	0.4870(2)	0.045(2)	0.048(2)	0.060(2)	0.007(1)	-0.008(1)	-0.025(1)
C(12)	2i	0.1311(3)	0.5110(3)	0.3301(2)	0.041(2)	0.049(2)	0.046(2)	-0.001(2)	-0.017(2)	-0.018(2)
C(13)	2i	0.0378(3)	0.5708(3)	0.3340(3)	0.040(2)	0.061(2)	0.060(2)	0.002(2)	-0.016(2)	-0.019(2)
C(14)	2i	0.0317(3)	0.6673(3)	0.2553(3)	0.055(2)	0.057(2)	0.075(3)	0.004(2)	-0.028(2)	-0.021(2)
C(15)	2i	0.1184(3)	0.7040(3)	0.1711(3)	0.076(3)	0.058(2)	0.063(2)	-0.008(2)	-0.036(2)	-0.008(2)
C(16)	2i	0.2107(3)	0.6449(3)	0.1681(3)	0.055(2)	0.082(3)	0.048(2)	-0.005(2)	-0.014(2)	-0.011(2)
C(17)	2i	0.2173(3)	0.5494(3)	0.2458(2)	0.045(2)	0.074(2)	0.047(2)	0.002(2)	-0.012(2)	-0.020(2)
C(18)	2i	0.0965(3)	0.1313(3)	0.6031(3)	0.041(2)	0.046(2)	0.055(2)	-0.003(2)	-0.003(2)	-0.022(2)
C(19)	2i	0.1342(3)	0.0848(3)	0.6876(3)	0.061(2)	0.045(2)	0.068(2)	-0.004(2)	-0.010(2)	-0.015(2)
C(20)	2i	0.1082(4)	-0.0213(3)	0.7525(3)	0.082(3)	0.054(2)	0.075(3)	0.002(2)	-0.012(2)	-0.008(2)
C(21)	2i	0.0431(4)	-0.0818(3)	0.7319(4)	0.081(3)	0.043(2)	0.098(4)	-0.019(2)	0.013(3)	-0.015(2)
C(22)	2i	0.0036(4)	-0.0363(4)	0.6504(4)	0.073(3)	0.064(3)	0.106(4)	-0.029(2)	0.000(3)	-0.035(3)
C(23)	2i	0.0285(3)	0.0696(3)	0.5854(3)	0.057(2)	0.063(2)	0.075(3)	-0.017(2)	-0.006(2)	-0.027(2)
C(24)	2i	0.5826(2)	0.5331(2)	0.3415(2)	0.041(2)	0.039(2)	0.036(2)	-0.005(1)	-0.013(1)	-0.009(1)
C(25)	2i	0.6366(3)	0.6297(3)	0.3167(3)	0.052(2)	0.042(2)	0.069(2)	-0.006(2)	-0.015(2)	-0.021(2)
C(26)	2i	0.7441(3)	0.6396(3)	0.2713(3)	0.048(2)	0.052(2)	0.078(3)	-0.018(2)	-0.007(2)	-0.020(2)
C(27)	2i	0.8003(3)	0.5554(3)	0.2480(3)	0.043(2)	0.061(2)	0.064(2)	-0.006(2)	-0.009(2)	-0.021(2)
C(28)	2i	0.7476(3)	0.4581(3)	0.2743(2)	0.048(2)	0.048(2)	0.054(2)	-0.000(2)	-0.009(2)	-0.018(2)
C(29)	2i	0.6397(3)	0.4470(3)	0.3208(2)	0.046(2)	0.037(2)	0.045(2)	-0.007(2)	-0.009(2)	-0.012(1)
O(30)	2i	0.4158(2)	0.2733(2)	0.3470(2)	0.068(2)	0.040(1)	0.044(1)	-0.016(1)	-0.006(1)	-0.013(1)
C(30)	2i	0.3818(3)	0.1767(2)	0.3945(2)	0.045(2)	0.035(2)	0.042(2)	-0.003(1)	0.000(1)	-0.018(1)
C(31)	2i	0.3909(3)	0.1117(2)	0.4949(2)	0.045(2)	0.037(2)	0.044(2)	0.001(1)	-0.005(2)	-0.019(1)
N(31)	2i	0.4432(2)	0.1582(2)	0.5456(2)	0.060(2)	0.043(2)	0.046(2)	-0.002(1)	-0.014(1)	-0.014(1)
C(32)	2i	0.3510(3)	0.0081(2)	0.5488(2)	0.049(2)	0.036(2)	0.050(2)	0.002(2)	-0.003(2)	-0.014(1)
C(33)	2i	0.2995(3)	-0.0407(3)	0.5066(3)	0.057(2)	0.034(2)	0.059(2)	-0.005(2)	0.000(2)	-0.018(2)
N(33)	2i	0.2561(3)	-0.1501(3)	0.5650(3)	0.077(2)	0.042(2)	0.082(2)	-0.012(2)	0.008(2)	-0.027(2)
C(34)	2i	0.2863(3)	0.0136(3)	0.4111(3)	0.060(2)	0.053(2)	0.064(2)	-0.013(2)	-0.005(2)	-0.034(2)
C(35)	2i	0.3265(3)	0.1186(3)	0.3574(2)	0.048(2)	0.052(2)	0.042(2)	-0.006(2)	-0.002(2)	-0.021(2)
N(35)	2i	0.3047(3)	0.1729(3)	0.2587(2)	0.074(2)	0.073(2)	0.058(2)	-0.022(2)	-0.017(2)	-0.023(2)
O(36)	2i	0.5073(2)	0.2320(2)	0.4982(2)	0.081(2)	0.060(2)	0.066(2)	-0.024(1)	-0.024(1)	-0.014(1)
O(37)	2i	0.4191(3)	0.1213(3)	0.6368(2)	0.145(3)	0.109(2)	0.045(2)	-0.052(2)	-0.025(2)	-0.012(2)
O(38)	2i	0.2694(3)	-0.1959(2)	0.6492(3)	0.109(3)	0.042(2)	0.090(2)	-0.011(2)	-0.007(2)	-0.004(2)
O(39)	2i	0.2062(3)	-0.1902(2)	0.5270(2)	0.134(3)	0.063(2)	0.105(2)	-0.045(2)	-0.009(2)	-0.038(2)
O(40)	2i	0.2515(3)	0.1256(3)	0.2325(2)	0.112(3)	0.137(3)	0.073(2)	-0.055(2)	-0.030(2)	-0.028(2)
O(41)	2i	0.3462(4)	0.2588(3)	0.2031(3)	0.209(4)	0.089(2)	0.089(2)	-0.060(3)	-0.089(3)	0.011(2)
O(42)	2i	0.3017(3)	1.0909(2)	0.8371(2)	0.112(2)	0.085(2)	0.049(2)	0.014(2)	-0.021(2)	-0.007(1)
C(42)	2i	0.2978(3)	1.0327(3)	0.9319(3)	0.084(3)	0.048(2)	0.048(2)	0.003(2)	-0.021(2)	-0.013(2)
C(43)	2i	0.3761(3)	0.9605(3)	0.9654(3)	0.078(3)	0.054(2)	0.052(2)	-0.001(2)	-0.011(2)	-0.025(2)
N(43)	2i	0.4725(3)	0.9462(3)	0.8932(3)	0.101(3)	0.071(2)	0.072(3)	0.004(2)	-0.015(2)	-0.022(2)
C(44)	2i	0.3672(3)	0.9007(3)	1.0659(3)	0.082(3)	0.053(2)	0.060(2)	0.009(2)	-0.029(2)	-0.015(2)
C(45)	2i	0.2775(4)	0.9150(3)	1.1350(3)	0.088(3)	0.051(2)	0.047(2)	0.003(2)	-0.022(2)	-0.016(2)
N(45)	2i	0.2660(4)	0.8499(3)	1.2422(3)	0.119(3)	0.066(2)	0.059(2)	0.013(2)	-0.034(3)	-0.017(2)
C(46)	2i	0.1987(4)	0.9863(3)	1.1078(3)	0.088(3)	0.058(2)	0.051(2)	0.011(2)	-0.017(2)	-0.020(2)
C(47)	2i	0.2105(3)	1.0426(3)	1.0069(3)	0.081(3)	0.057(2)	0.059(2)	0.018(2)	-0.023(2)	-0.021(2)
N(47)	2i	0.1248(4)	1.1167(4)	0.9788(3)	0.114(4)	0.120(4)	0.072(3)	0.050(3)	-0.041(3)	-0.033(3)
O(48)	2i	0.4846(3)	0.9994(3)	0.8042(2)	0.128(3)	0.125(3)	0.056(2)	0.024(2)	0.002(2)	-0.014(2)
O(49)	2i	0.5399(3)	0.8844(3)	0.9252(3)	0.114(3)	0.115(3)	0.111(3)	0.045(3)	-0.007(2)	-0.022(2)
O(50)	2i	0.3424(4)	0.7981(3)	1.2647(2)	0.157(4)	0.150(4)	0.076(2)	0.055(3)	-0.049(2)	-0.003(2)

Table 3. (Continued)

Atom	Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
O(51)	2i	0.1814(3)	0.8499(3)	1.3014(2)	0.126(3)	0.111(3)	0.050(2)	0.006(2)	−0.003(2)	−0.022(2)
O(52)	2i	0.1013(5)	1.1867(4)	1.0111(4)	0.234(6)	0.154(4)	0.195(5)	0.122(4)	−0.101(4)	−0.095(4)
O(53)	2i	0.0847(4)	1.1087(5)	0.9208(5)	0.176(5)	0.248(6)	0.215(5)	0.119(4)	−0.133(5)	−0.122(5)
O(54)	2i	0.5068(2)	0.4284(2)	0.1617(2)	0.060(2)	0.054(1)	0.061(1)	−0.001(1)	−0.002(1)	−0.010(1)
C(54)	2i	0.6061(3)	0.4548(3)	0.1036(2)	0.050(2)	0.057(2)	0.041(2)	0.003(2)	−0.012(2)	−0.015(2)
C(55)	2i	0.6325(3)	0.5645(3)	0.0542(2)	0.057(2)	0.050(2)	0.046(2)	0.007(2)	−0.012(2)	−0.012(2)
N(55)	2i	0.5508(4)	0.6439(3)	0.0693(3)	0.096(3)	0.059(2)	0.067(2)	0.016(2)	−0.021(2)	−0.009(2)
C(56)	2i	0.7331(3)	0.6029(3)	−0.0062(3)	0.068(3)	0.060(2)	0.060(2)	−0.013(2)	−0.006(2)	−0.016(2)
C(57)	2i	0.8091(3)	0.5282(4)	−0.0202(3)	0.057(3)	0.075(3)	0.072(3)	−0.012(2)	−0.004(2)	−0.031(2)
N(57)	2i	0.9160(4)	0.5668(4)	−0.0886(4)	0.073(3)	0.110(4)	0.120(3)	−0.022(3)	0.020(3)	−0.052(3)
C(58)	2i	0.7885(3)	0.4190(3)	0.0257(3)	0.055(2)	0.076(3)	0.062(2)	0.008(2)	−0.012(2)	−0.036(2)
C(59)	2i	0.6881(3)	0.3829(3)	0.0864(3)	0.058(2)	0.051(2)	0.053(2)	0.002(2)	−0.014(2)	−0.019(2)
N(59)	2i	0.6684(3)	0.2654(3)	0.1306(3)	0.084(3)	0.058(2)	0.065(2)	0.006(2)	−0.016(2)	−0.020(2)
O(60)	2i	0.4697(3)	0.6423(3)	0.0465(3)	0.064(2)	0.083(2)	0.200(4)	0.010(2)	−0.031(3)	−0.030(2)
O(61)	2i	0.5729(4)	0.7103(3)	0.0987(3)	0.230(5)	0.130(3)	0.138(3)	0.107(3)	−0.118(3)	−0.091(3)
O(62)	2i	0.9306(4)	0.6623(4)	−0.1305(4)	0.118(4)	0.117(4)	0.262(6)	−0.055(3)	0.071(4)	−0.031(4)
O(63)	2i	0.9816(3)	0.4996(4)	−0.0971(3)	0.073(2)	0.168(4)	0.162(4)	−0.012(3)	0.027(2)	−0.090(3)
O(64)	2i	0.7343(3)	0.2070(2)	0.0997(2)	0.117(3)	0.070(2)	0.104(2)	0.025(2)	−0.009(2)	−0.039(2)
O(65)	2i	0.5864(3)	0.2307(2)	0.1955(3)	0.102(3)	0.058(2)	0.117(3)	−0.007(2)	0.014(2)	−0.022(2)

References

1. Hetzheim, A.; Ulbricht, J.: Cyclization Reactions of Noval 1-Amino-2-hydrazino-imidazoles with Dicarboxyl Compounds. *J. Heterocycl. Chem.* In preparation.
2. Sheldrick, G. M.: Program Package SHELXTL-plus. Release 4.1. Siemens Analytical X-Ray Instruments Inc., Madison (WI 53719), USA 1990.