

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/239738840>

N',N'-Dibenzyl-N-(2-bromoéthyl)sulfamide

Article in *Acta Crystallographica Section E Structure Reports Online* · July 2002

DOI: 10.1107/S1600536802009492

CITATIONS

2

READS

21

3 authors, including:



Nourredine Benali-Cherif

University of Science and Technology Houari Boumediene

172 PUBLICATIONS 530 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)



Abdaoui Mohamed

Université 8 mai 1945 - Guelma

38 PUBLICATIONS 418 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)

Some of the authors of this publication are also working on these related projects:



Intermolecular interactions in proton transfer compounds [View project](#)



Pharmacomodulation de biomolécules et leur vectorisation : Etude théorique et expérimentale [View project](#)

N,N'-Dibenzyl-*N*-(2-bromoéthyl)sulfamide

Nouredine Benali-Cherif,^{a*}
Sohere Dokhane^a et Mohamed
Abdaoui^b

^aLaboratoire de Chimie Moléculaire, du
Contrôle de l'Environnement, et des Mesures
Physico-Chimiques, Faculté des Sciences,
Département de Chimie, Université Mentouri de
Constantine, 25000 Constantine, Algeria, and

^bLaboratoire de Chimie Appliquée, Université
de Guelma, BP 401, 24000 Guelma, Algeria

Correspondence e-mail:
benalicherif@hotmail.com

Key indicators

Single-crystal X-ray study

T = 293 K

Mean σ (C–C) = 0.005 Å

R factor = 0.039

w*R* factor = 0.108

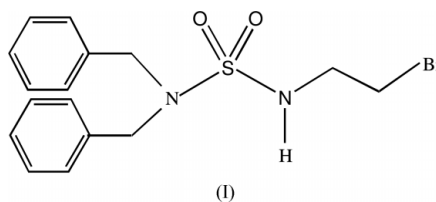
Data-to-parameter ratio = 20.4

For details of how these key indicators were
automatically derived from the article, see
<http://journals.iucr.org/e>.

The title compound, C₁₆H₁₉BrN₂O₂S, is an intermediate in the set of reactions leading to 2-bromoethylnitrososulfamides, a new family of promising therapeutic compounds. The molecules are linked by an N–H···O hydrogen-bond interaction.

Commentaire

Le *N*-(2-bromoéthyl)-*N,N'*-dibenzylsulfamide (Dewynter & Montero, 1992; Abdaoui, Dewynter, Aouf, Favre *et al.*, 1996; Abdaoui, Dewynter, Aouf & Montero, 1996; Abdaoui, Dewynter & Montero, 1996; Dewynter *et al.*, 1996; Abdaoui *et al.*, 2000) est un homologue du *N*-(2-chloroéthyl)-*N,N'*-dibenzylsulfamide (Dokhane *et al.*, 2002). C'est un produit intermédiaire et précurseur du *N*-nitroso-*N*-(2-bromoéthyl)-*N,N'*-dibenzylsulfamide dont la préparation rentre dans le cadre de la synthèse des 2-chloroéthylnitrososulfamides. Des tests préliminaires montrent qu'on peut escompter un effet anti-HIV. La synthèse du composé *N,N'*-dibenzyl-*N*-(2-bromoéthyl)sulfamide, (I), objet de cette étude structurale, s'articule autour de l'aménagement polyfonctionnel de l'isocyanate de chlorosulfonyle (ICS) et comporte trois étapes.



Les plans des cycles phényle font un angle dièdre de 16,35 (4)°. Les distances C–C dans les cycles varient autour des valeurs moyennes suivantes: 1,377 (2) et 1,376 (3) Å. Sur le motif sulfamide N1–S–N2, on observe la dissymétrie des liaisons S–N, avec les valeurs respectives de 1,603 (2) et 1,638 (2) Å; la liaison la plus courte est adjacente au groupement bromoéthyle. On note un changement des angles de torsion Br–C1–C2–N1 et C2–N1–S–N2 [63,5 (2) et 72,7 (3)°] par rapport à ceux du *N*-(2-chloroéthyl)-*N,N'*-dibenzylsulfamide [72,3 (2) et 56,1 (2)°; Dokhane *et al.*, 2002]. Les liaisons hydrogènes N1–H5···O1 s'établissent entre deux molécules reliées par un centre d'inversion, créant ainsi des pseudo-dimères qui s'empilent suivant la diagonale du plan *ac*.

Partie expérimentale

Le *N*-(2-bromoéthyl)-*N,N'*-dibenzylsulfamide est obtenu à la fin des trois réactions en chaîne suivantes:

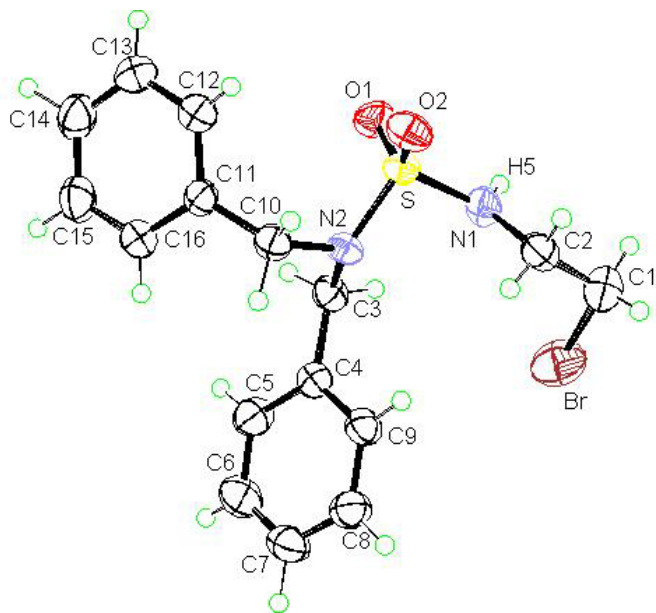


Figure 1
Dessin ORTEPIII (Burnett & Johnson, 1996) de la molécule. Les ellipsoïdes de vibration des atomes ont une probabilité de 50%.

(i) Carbamoylation–sulfamoylation à partir de l'ICS: à une solution de 1,1 équivalents de dibenzylamine dans 100 ml de dichlorométhane est ajoutée une solution de *N*-chlorosulfonylcarbamate de tertio-butyle préparée préalablement par addition de tertio-butanol à une solution de 1 équivalent d'isocyanate de chlorosulfonyle (ICS); la réaction s'effectue à 273 K, et le produit obtenu est le *N*-tert-butylloxycarbonyl-*N',N'*-dibenzylsulfamide.

(ii) Bromoéthylation selon Mitsunobu (Mitsunobu, 1981; Hughes, 1992): à température ambiante et sous agitation magnétique, une solution de 1,1 équivalents d'azodicarboxylate de diéthyle est ajoutée à une solution de: 1,1 équivalents de bromoéthanol, 1,1 équivalents de triphénylphosphine dissoute dans du tétrahydrofurane et 1 équivalent de *N*-tert-butylloxycarbonyl-*N',N'*-dibenzylsulfamide. La

réaction donne le *N*-tert-butylloxycarbonyl-*N*-(2-bromoéthyl)-*N',N'*-dibenzylsulfamide, moins polaire que le précurseur.

(iii) Déprotection (clivage du tertio-butylloxycarbonyl) (Dewynter & Montero, 1992): le *N*-tert-butylloxycarbonyl-*N',N'*-dibenzylsulfamide additionné de dichlorométhane anhydre est placé sous agitation magnétique à 273 K. Une solution à 50% d'acide trifluoroacétique dans du dichlorométhane anhydre est ajoutée goutte à goutte jusqu'à disparition de l'ester carbamique et l'apparition d'un composé plus polaire. Le solvant est évaporé sous pression réduite et le résidu est lavé plusieurs fois à l'éther diéthylique anhydre puis recristallisé dans l'éthanol.

Données cristallines

$C_{16}H_{19}BrN_2O_2S$	$D_x = 1,516 \text{ Mg m}^{-3}$
$M_r = 383,30$	Mok α radiation
Monoclinique, $P2_1/n$	Paramètres de la maille à l'aide de 25 réflexions
$a = 15,334 (3) \text{ \AA}$	$\theta = 10\text{--}15^\circ$
$b = 5,606 (2) \text{ \AA}$	$\mu = 2,58 \text{ mm}^{-1}$
$c = 20,450 (2) \text{ \AA}$	$T = 293 (2) \text{ K}$
$\beta = 107,20 (2)^\circ$	Prisme, incolore
$V = 1679,3 (6) \text{ \AA}^3$	$0,50 \times 0,30 \times 0,20 \text{ mm}$
$Z = 4$	

Collection des données

Diffractomètre Enraf–Nonius CAD-4	$R_{\text{int}} = 0,063$
Balayage $\theta/2\theta$	$\theta_{\text{max}} = 30,0^\circ$
Correction d'absorption: ψ scan (North <i>et al.</i> , 1968)	$h = 0 \rightarrow 21$
$T_{\text{min}} = 0,411, T_{\text{max}} = 0,597$	$k = -7 \rightarrow 0$
4976 réflexions mesurées	$l = -28 \rightarrow 27$
4813 réflexions indépendantes	3 réflexions de référence
2073 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$	fréquence: 120 min
	variation d'intensité: 5%

Affinement

Affinement à partir des F^2	$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0457P)^2]$ ou
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0,039$	$P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
$wR(F^2) = 0,108$	$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,001$
$S = 0,91$	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0,30 \text{ e \AA}^{-3}$
4813 réflexions	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0,29 \text{ e \AA}^{-3}$
236 paramètres	Correction d'extinction: SHELXL97
Affinement des atomes d'hydrogène: combinaisons de cycles avec ou sans contraintes	Coefficient d'extinction: 0,0123 (8)

Tableau 1

Distances et liaisons hydrogène ($\text{\AA}, ^\circ$).

$D\text{--}H\cdots A$	$D\text{--}H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D\text{--}H\cdots A$
$N1\text{--}H5\cdots O1^i$	0,80 (3)	2,19 (3)	2,982 (5)	168,4 (5)

Code de symétrie: (i) $-x, 1 - y, -z$.

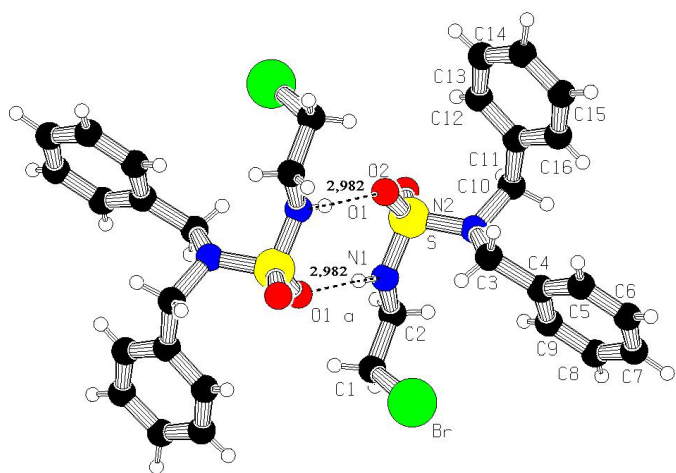


Figure 2
Vue PLATON (Spek, 1990) montrant les liaisons hydrogène $N\text{--}H\cdots O$ dans le pseudo-dimère.

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, 1997); programme(s) pour l'affinement de la structure: SHELXL97 (Sheldrick, 1997); graphisme moléculaire: ORTEP-3 for Windows (Farrugia, 1997); logiciel utilisé pour préparer le matériel pour publication: WinGX (Farrugia, 1999).

Références

Abdaoui, M., Dewynter, G., Aouf, N., Favre, G., Morere, A. & Montero, J. L. (1996). *Bioorg. Med. Chem.* **4**, 1227–1235.

- Abdaoui, M., Dewynter, G., Aouf, N. & Montero, J. L. (1996). *Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem.* **118**, 39–45.
- Abdaoui, M., Dewynter, G. & Montero, J. L. (1996). *Tetrahedron Lett.* **37**, 5695–5698.
- Abdaoui, M., Dewynter, G., Toupet, L. & Montero, J. L. (2000). *Tetrahedron*, **56**, 2427–2435.
- Burnett, M. N. & Johnson, C. K. (1996). *ORTEPIII*. Report ORNL-6895. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- Dewynter, G., Abdaoui, M., Regainia, Z. & Montero, J. L. (1996). *Tetrahedron*, **52**, 14217–14224.
- Dewynter, G. & Montero, J. L. (1992). *C. R. Acad. Sci. Paris Ser II*, **315**, 1675–1682.
- Dokhane, S., Benali-Cherif, N. & Abdaoui, M. (2002). *Acta Cryst.* **E58**, o570–o572.
- Enraf–Nonius (1994). *CAD-4 EXPRESS*. Enraf–Nonius, Delft, Les Pays-Bas.
- Farrugia, L. J. (1997). *J. Appl. Cryst.* **30**, 565.
- Farrugia, L. J. (1999). *J. Appl. Cryst.* **32**, 837–838.
- Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. Université de Marburg, Allemagne.
- Hughes, D. L. (1992). *Org. React.* **42**, 335–339.
- Mitsunobu, O. (1981). *Synthesis*, pp. 1–28.
- North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
- Sheldrick, G. M. (1997). *SHELXS97* and *SHELXL97*. Université de Göttingen, Allemagne.
- Spek, A. L. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, C-34.

supporting information

Acta Cryst. (2002). E58, o723–o725 [https://doi.org/10.1107/S1600536802009492]

***N',N'*-Dibenzyl-*N*-(2-bromoéthyl)sulfamide**

Nourredine Benali-Cherif, Sohere Dokhane et Mohamed Abdaoui

N',N'*-Dibenzylsulfamide-*N*-(2-bromoéthyl)Crystal data*

$C_{16}H_{19}BrN_2O_2S$

$M_r = 383.30$

Monoclinic, $P2_1/n$

Hall symbol: -P 2yn

$a = 15.334$ (3) Å

$b = 5.606$ (2) Å

$c = 20.450$ (2) Å

$\beta = 107.20$ (2)°

$V = 1679.3$ (6) Å³

$Z = 4$

$F(000) = 784$

$D_x = 1.516$ Mg m⁻³

Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073$ Å

Cell parameters from 25 reflections

$\theta = 10$ – 15°

$\mu = 2.58$ mm⁻¹

$T = 293$ K

Prism, colorless

$0.50 \times 0.30 \times 0.20$ mm

Data collection

Enraf-Nonius CAD-4
diffractometer

Radiation source: Enraf Nonius FR590

Graphite monochromator

$\theta/2\theta$ scans

Absorption correction: ψ scan

ψ scan(North et al., 1968) Number of ψ scan
sets used was 2 Theta correction was applied.

Averaged transmission function was used. No
Fourier smoothing was applied.

$T_{\min} = 0.411$, $T_{\max} = 0.597$

4976 measured reflections

4813 independent reflections

2073 reflections with $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.063$

$\theta_{\max} = 30.0^\circ$, $\theta_{\min} = 2.1^\circ$

$h = 0 \rightarrow 21$

$k = -7 \rightarrow 0$

$l = -28 \rightarrow 27$

3 standard reflections every 120 min

intensity decay: 5%

Refinement

Refinement on F^2

Least-squares matrix: full

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.039$

$wR(F^2) = 0.108$

$S = 0.91$

4813 reflections

236 parameters

0 restraints

Primary atom site location: structure-invariant
direct methods

Secondary atom site location: difference Fourier
map

Hydrogen site location: difference Fourier map

H atoms treated by a mixture of independent
and constrained refinement

$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0457P)^2]$

where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$

$(\Delta/\sigma)_{\max} = 0.001$

$\Delta\rho_{\max} = 0.30$ e Å⁻³

$\Delta\rho_{\min} = -0.29$ e Å⁻³

Extinction correction: SHELXL97,

$F_c^* = kF_c[1 + 0.001 \times F_c^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$

Extinction coefficient: 0.0123 (8)

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. Hydrogen atoms of phenyl rings are fixed and others are refined isotropically.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
C1	0.1997 (2)	0.8875 (8)	0.1246 (2)	0.0591 (9)
C2	0.1013 (2)	0.9523 (6)	0.11232 (17)	0.0428 (7)
C3	-0.0357 (2)	0.4729 (5)	0.16906 (14)	0.0373 (7)
C4	-0.00350 (17)	0.4779 (5)	0.24642 (13)	0.0349 (6)
C5	-0.0267 (2)	0.2969 (5)	0.28398 (15)	0.0480 (8)
C6	0.0058 (2)	0.2964 (6)	0.35444 (17)	0.0570 (9)
C7	0.0614 (2)	0.4754 (7)	0.38847 (15)	0.0514 (8)
C8	0.08368 (19)	0.6589 (6)	0.35222 (14)	0.0461 (8)
C9	0.05126 (19)	0.6603 (5)	0.28165 (14)	0.0408 (7)
C10	-0.15738 (19)	0.7802 (6)	0.15536 (15)	0.0371 (6)
C11	-0.23864 (17)	0.6199 (5)	0.12623 (13)	0.0349 (6)
C12	-0.2910 (2)	0.6408 (6)	0.05893 (15)	0.0525 (8)
C13	-0.3626 (2)	0.4880 (8)	0.03124 (16)	0.0653 (10)
C14	-0.3848 (2)	0.3131 (6)	0.06967 (17)	0.0564 (9)
C15	-0.3344 (2)	0.2914 (6)	0.13781 (17)	0.0551 (8)
C16	-0.26266 (19)	0.4450 (6)	0.16492 (15)	0.0458 (8)
Br	0.23566 (3)	0.61169 (8)	0.18327 (2)	0.07587 (19)
N1	0.04295 (16)	0.7626 (5)	0.07614 (12)	0.0414 (6)
N2	-0.07226 (14)	0.7055 (4)	0.14051 (10)	0.0325 (5)
O1	-0.10013 (13)	0.5759 (4)	0.01595 (9)	0.0473 (5)
O2	-0.10454 (13)	0.9949 (4)	0.04775 (9)	0.0487 (5)
S	-0.06529 (5)	0.76415 (13)	0.06373 (3)	0.03637 (19)
H1	0.229 (2)	1.024 (6)	0.1422 (15)	0.047 (9)*
H2	0.208 (2)	0.866 (6)	0.0804 (19)	0.071 (11)*
H3	0.0862 (18)	1.087 (5)	0.0886 (15)	0.045 (9)*
H4	0.0855 (18)	0.977 (5)	0.1506 (16)	0.040 (8)*
H5	0.0574 (18)	0.688 (5)	0.0476 (14)	0.036 (8)*
H6	-0.0797 (19)	0.355 (5)	0.1548 (13)	0.039 (8)*
H7	0.0135 (17)	0.439 (4)	0.1533 (12)	0.028 (7)*
H8	-0.0650	0.1729	0.2621	0.046*
H9	-0.0051	0.1730	0.3769	0.067*
H10	0.0856	0.4688	0.4393	0.068*
H11	0.1198	0.7949	0.3774	0.034*
H12	0.0604	0.7821	0.2569	0.057*

H13	-0.1677 (19)	0.934 (5)	0.1428 (15)	0.044 (9)*
H14	-0.1411 (15)	0.788 (4)	0.2059 (12)	0.026 (6)*
H15	-0.2824	0.7553	0.0368	0.055*
H16	-0.3932	0.5096	-0.0136	0.066*
H17	-0.4438	0.2032	0.0497	0.065*
H18	-0.3504	0.1729	0.1656	0.067*
H19	-0.2283	0.4323	0.2090	0.069*

Atomic displacement parameters (Å²)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
C1	0.0488 (19)	0.069 (3)	0.061 (2)	-0.011 (2)	0.0174 (17)	-0.001 (2)
C2	0.0507 (18)	0.041 (2)	0.0382 (17)	-0.0028 (15)	0.0161 (14)	0.0020 (15)
C3	0.0428 (17)	0.0311 (16)	0.0389 (15)	-0.0014 (15)	0.0137 (13)	0.0014 (13)
C4	0.0352 (14)	0.0328 (15)	0.0376 (15)	0.0047 (13)	0.0119 (12)	0.0017 (13)
C5	0.0482 (17)	0.0396 (18)	0.0510 (18)	-0.0033 (14)	0.0064 (14)	0.0079 (15)
C6	0.064 (2)	0.053 (2)	0.053 (2)	0.0011 (18)	0.0158 (16)	0.0214 (17)
C7	0.0520 (18)	0.066 (2)	0.0365 (16)	0.0122 (18)	0.0130 (14)	0.0089 (16)
C8	0.0433 (16)	0.054 (2)	0.0394 (16)	0.0014 (15)	0.0094 (13)	-0.0057 (15)
C9	0.0457 (16)	0.0389 (17)	0.0386 (15)	-0.0037 (14)	0.0138 (13)	0.0036 (13)
C10	0.0402 (15)	0.0390 (18)	0.0338 (15)	-0.0005 (14)	0.0137 (12)	-0.0069 (14)
C11	0.0330 (13)	0.0396 (16)	0.0345 (14)	0.0008 (13)	0.0135 (11)	-0.0069 (13)
C12	0.0459 (17)	0.065 (2)	0.0441 (17)	-0.0073 (17)	0.0094 (14)	0.0121 (16)
C13	0.0505 (19)	0.099 (3)	0.0390 (17)	-0.022 (2)	0.0023 (15)	-0.003 (2)
C14	0.0488 (18)	0.066 (2)	0.057 (2)	-0.0174 (17)	0.0188 (16)	-0.0166 (18)
C15	0.0516 (18)	0.053 (2)	0.065 (2)	-0.0122 (16)	0.0234 (16)	0.0045 (17)
C16	0.0422 (16)	0.057 (2)	0.0394 (16)	-0.0035 (15)	0.0142 (13)	0.0019 (14)
Br	0.0639 (3)	0.0804 (3)	0.0740 (3)	0.0177 (2)	0.00595 (19)	0.0015 (2)
N1	0.0437 (14)	0.0453 (15)	0.0401 (13)	-0.0063 (12)	0.0202 (11)	-0.0117 (13)
N2	0.0380 (12)	0.0334 (13)	0.0270 (11)	0.0009 (10)	0.0109 (9)	-0.0011 (10)
O1	0.0486 (12)	0.0568 (14)	0.0344 (10)	-0.0056 (10)	0.0090 (9)	-0.0144 (9)
O2	0.0593 (13)	0.0447 (12)	0.0424 (11)	0.0075 (11)	0.0153 (10)	0.0096 (10)
S	0.0393 (4)	0.0406 (4)	0.0289 (3)	-0.0010 (3)	0.0098 (3)	-0.0014 (3)

Geometric parameters (Å, °)

C1—C2	1.498 (5)	C9—H12	0.886 (3)
C1—Br	1.934 (4)	C10—N2	1.485 (3)
C1—H1	0.90 (3)	C10—C11	1.509 (4)
C1—H2	0.96 (4)	C10—H13	0.90 (3)
C2—N1	1.445 (4)	C10—H14	0.99 (2)
C2—H3	0.89 (3)	C11—C16	1.377 (4)
C2—H4	0.90 (3)	C11—C12	1.378 (4)
C3—N2	1.470 (4)	C12—C13	1.375 (4)
C3—C4	1.512 (4)	C12—H15	0.818 (3)
C3—H6	0.93 (3)	C13—C14	1.361 (5)
C3—H7	0.92 (3)	C13—H16	0.907 (3)
C4—C5	1.381 (4)	C14—C15	1.384 (4)

C4—C9	1.383 (4)	C14—H17	1.071 (3)
C5—C6	1.378 (4)	C15—C16	1.378 (4)
C5—H8	0.934 (3)	C15—H18	0.952 (3)
C6—C7	1.367 (5)	C16—H19	0.902 (3)
C6—H9	0.873 (3)	N1—S	1.603 (2)
C7—C8	1.369 (4)	N1—H5	0.80 (3)
C7—H10	0.996 (3)	N2—S	1.638 (2)
C8—C9	1.380 (4)	O1—S	1.4299 (19)
C8—H11	0.993 (3)	O2—S	1.423 (2)
C2—C1—Br	112.7 (3)	N2—C10—C11	115.1 (2)
C2—C1—H1	102.3 (19)	N2—C10—H13	107.6 (19)
Br—C1—H1	114.5 (19)	C11—C10—H13	113.7 (18)
C2—C1—H2	106 (2)	N2—C10—H14	105.1 (13)
Br—C1—H2	113 (2)	C11—C10—H14	111.3 (13)
H1—C1—H2	107 (3)	H13—C10—H14	103 (2)
N1—C2—C1	110.4 (3)	C16—C11—C12	117.3 (3)
N1—C2—H3	108.8 (18)	C16—C11—C10	121.8 (2)
C1—C2—H3	112.6 (19)	C12—C11—C10	120.9 (3)
N1—C2—H4	105.9 (18)	C13—C12—C11	121.1 (3)
C1—C2—H4	114.2 (17)	C13—C12—H15	120.0 (3)
H3—C2—H4	105 (3)	C11—C12—H15	118.5 (3)
N2—C3—C4	111.5 (2)	C14—C13—C12	121.1 (3)
N2—C3—H6	110.6 (16)	C14—C13—H16	122.5 (4)
C4—C3—H6	108.8 (16)	C12—C13—H16	116.4 (4)
N2—C3—H7	107.5 (15)	C13—C14—C15	119.0 (3)
C4—C3—H7	108.8 (15)	C13—C14—H17	121.5 (3)
H6—C3—H7	110 (2)	C15—C14—H17	119.3 (3)
C5—C4—C9	118.0 (2)	C16—C15—C14	119.4 (3)
C5—C4—C3	120.7 (3)	C16—C15—H18	120.8 (3)
C9—C4—C3	121.3 (2)	C14—C15—H18	119.8 (3)
C6—C5—C4	120.6 (3)	C11—C16—C15	122.1 (3)
C6—C5—H8	118.8 (3)	C11—C16—H19	117.0 (3)
C4—C5—H8	120.6 (3)	C15—C16—H19	120.9 (3)
C7—C6—C5	120.6 (3)	C2—N1—S	122.2 (2)
C7—C6—H9	120.1 (3)	C2—N1—H5	120 (2)
C5—C6—H9	119.0 (4)	S—N1—H5	113 (2)
C6—C7—C8	119.6 (3)	C3—N2—C10	115.1 (2)
C6—C7—H10	119.2 (3)	C3—N2—S	115.66 (18)
C8—C7—H10	121.2 (3)	C10—N2—S	116.73 (17)
C7—C8—C9	120.0 (3)	O2—S—O1	117.81 (12)
C7—C8—H11	119.1 (3)	O2—S—N1	112.90 (13)
C9—C8—H11	120.8 (3)	O1—S—N1	105.32 (13)
C8—C9—C4	121.1 (3)	O2—S—N2	105.03 (12)
C8—C9—H12	122.3 (3)	O1—S—N2	112.94 (11)
C4—C9—H12	116.5 (3)	N1—S—N2	101.83 (12)

Hydrogen-bond geometry (Å, °)

<i>D</i> —H \cdots <i>A</i>	<i>D</i> —H	H \cdots <i>A</i>	<i>D</i> \cdots <i>A</i>	<i>D</i> —H \cdots <i>A</i>
N1—H5 \cdots O1 ⁱ	0,80 (3)	2,19 (3)	2,982 (5)	168,4 (5)

Symmetry code: (i) $-x, -y+1, -z$.