

High uncertainties in the angular parameters are connected with poor data; especially, as the  $k$  Miller indices of the observed reflexions are  $\leq 1$ ,  $\theta_1$  and  $\theta_3$  are badly determined. The temperature factor is higher than previously assumed. We have found a similar result for a high-pressure crystal structure of chlorobenzene (André, Fourme & Renaud, 1971) and it seems that high pressure has little effect on the amplitude of atomic vibrations.

The atomic coordinates are given in Table 1; the uncertainties are computed according to the formula given by Busing, Martin & Levy (1964). Any error in the model itself is neglected. Table 2 gives the observed and calculated structure factors.

Table 1. Atomic coordinates of benzene II

	$x$	$y$	$z$
C(1)	-0.2556 (49)	-0.0397 (101)	-0.1213 (13)
C(2)	-0.0604 (99)	-0.2124 (39)	-0.1119 (82)
C(3)	0.1951 (55)	-0.1726 (68)	0.0094 (84)
H(1)	-0.4321 (83)	-0.0672 (171)	-0.2051 (22)
H(2)	-0.1022 (167)	-0.3590 (65)	-0.1892 (139)
H(3)	0.3299 (94)	-0.2918 (116)	0.0159 (142)

Table 2. Observed and calculated structure factors

$h$	$k$	$l$	$F_o$	$F_c$
1	0	0	24.8	22.3
2	0	0	12.6	-11.8
0	0	2	19.3	18.1
1	0	2	12.1	-13.5
2	0	2	9.0	-11.1

Table 2 (cont.)

$h$	$k$	$l$	$F_o$	$F_c$
1	0	-2	31.6	33.1
0	0	4	5.9	-5.8
3	1	0	7.4	-7.2
0	1	1	22.9	23.8
2	1	1	9.8	-7.3
1	1	-1	15.8	16.7
2	1	-1	11.0	-11.1
0	1	2	16.4	-16.6
1	1	-2	25.7	25.7
2	1	-2	11.8	10.0
1	1	-3	11.5	11.2
3	1	-3	7.7	-6.8
1	1	-4	11.1	12.0
2	1	-4	10.4	9.2

The authors would like to express their appreciation to G. J. Piermarini for some helpful criticism.

## Reference

- ANDRÉ, D., FOURME, R. & RENAUD, M. (1971). *Acta Cryst.* To be published.  
 BRIDGMAN, P. W. (1914). *Phys. Rev.* **3**, 153.  
 BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *ORFFE*. Report ORNL-TM-306, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.  
 HAMILTON, W. C. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 502.  
 PIERMARINI, G. J., MIGHELL, A. D., WEIR, C. E. & BLOCK, S. (1969). *Science*, **165**, 1250.

*Acta Cryst.* (1971). B27, 1276

**Paramètres et groupe spatial de dérivés de la staphylomycine.** Par J. P. DECLERCQ, P. PIRET et M. VAN MEERSSCHE, *Laboratoire de Chimie physique et de Cristallographie, Université de Louvain, 39 Schapenstraat, 3000 Leuven, Belgique*

(Reçu le 15 janvier 1971)

Lattice parameters and space groups of three derivatives of staphylomycin are recorded. Structural investigations of one derivative are in progress.

La staphylomycine est un antibiotique dont la structure chimique a été décrite par Vanderhaeghe & Parmentier (1959). Un modèle de la molécule en solution a été proposé par Warner (1961). L'étude cristallographique du facteur  $S_1$  ( $C_{43}N_7O_{10}H_{49}$ ) de la staphylomycine et du composé d'addition  $S_1 \cdot LiBr$  a été entreprise. Pour le facteur  $S_1$  non complexé, deux formes de cristallisation ont été obtenues. Les résultats sont donnés dans le Tableau 1.

Les intensités de 3436 réflexions du composé  $S_1 \cdot LiBr$  ont

été mesurées au moyen d'un diffractomètre automatique Picker utilisant le rayonnement  $K\alpha$  du cuivre, et la détermination de la structure est en cours.

## Références

- VANDERHAEGHE, H. & PARMENTIER, G. (1959). *Bull. Soc. Chim. Belg.* **68**, 716.  
 WARNER, D. T. (1961). *J. Theoret. Biol.* **1**, 514.

Tableau 1. Mesures cristallographiques effectuées sur trois dérivés de la staphylomycine

Dérivé	$S_1(1)$	$S_1(2)$	$S_1 \cdot LiBr$
Solvant	DMF + acétone	Méthanol	Méthanol
Mesure des paramètres	Weissenberg	Weissenberg	Diffractomètre
Groupe spatial	$P3_121$	$P2_12_12_1$	$P2_12_12_1$
Paramètres (Å)	$a=20,62$ $c=22,9$	$a=19,39$ $b=10,6$ $c=22,37$	$a=20,770$ $b=10,441$ $c=22,435$
Densité mesurée ( $g \cdot cm^{-3}$ )	—	1,09	1,21
Densité calculée ( $g \cdot cm^{-3}$ )	1,25	1,12	1,24
$Z$	6	4	4