

Fig. 4. Projection orthogonale de la molécule suivant un axe passant par les atomes C(4) et C(43).

C(4) et C(43) et par chacun des autres atomes du double cycle (plans 3 et 4, 5 et 6, 7 et 8 du Tableau 2).

La valeur moyenne de l'angle de torsion θ est de 2°. Cette torsion est certainement due à l'encombrement stérique des atomes H du double cycle placés face à face qui tendent ainsi à s'éloigner. Ces résultats sont à rapprocher de ceux obtenus par spectrographie micro-onde pour le fluoro-1 bicyclo[2.2.2]octane (Hirota, 1971) où un angle de torsion θ de 16° a été constaté pour le double cycle. L'angle beaucoup plus faible obtenu dans notre cas s'explique par le blocage de la molécule par le cycle C(1), C(2), C(3), C(4), C(5), C(6). Un calcul de mécanique moléculaire devrait permettre l'interprétation de ces résultats.

La cohésion cristalline est assurée par des contacts

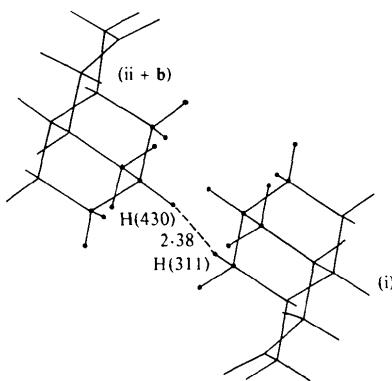


Fig. 5. Projection des molécules voisines (i) et (ii + b) suivant [010l]; les positions (i) et (ii) sont définies comme pour la Fig. 1.

de van der Waals faibles hydrogène-hydrogène. En effet, seuls les atomes d'hydrogène H(311) de la molécule i et H(430) de la molécule ii (Fig. 5) se rapprochent à une distance 2.38 Å légèrement inférieure à la somme des rayons de van der Waals.

Nous remercions les membres du laboratoire de cristallographie de Créteil, Université de Paris, Val de Marne pour la collection des intensités, ainsi que la direction de l'OCM à Abidjan qui nous a permis d'effectuer les calculs sur ses ordinateurs 370-145.

Références

- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). ORFLS. Report ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 GERMAIN, G. & WOOLFSON, M. M. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 91-94.
 HIROTA, E. (1971). *J. Mol. Spectrosc.* **38**, 367-386.

SHORT COMMUNICATION

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible.

Acta Cryst. (1977). **B33**, 2000

The crystal structure of trans-1-amino-1,3-dicarboxycyclopentane: erratum. By BARBARA GALLEN, H. L. CARRELL, DAVID E. ZACHARIAS and JENNY PICKWORTH GLUSKER, *Institute for Cancer Research, Fox Chase Cancer Center, Philadelphia, PA 19111, USA* and RALPH A. STEPHANI, *Department of Biochemistry, Cornell University Medical College, New York 10021, USA*

(Received 3 February 1977; accepted 3 February 1977)

In Gallen, Carrell, Zacharias, Glusker & Stephani [*Acta Cryst.* (1975), **B31**, 2056-2060] delete the third sentence of the *Experimental* section, which reads: 'Since the crystals ... formed in a noncentrosymmetric space group, it appears that the racemic mixture was resolved into its optical isomers on crystallization'. This statement is not correct. The part of the sentence: 'Crystals were grown as colorless needles in glacial acetic acid' should be retained.

All information is contained in the abstract.