

Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions (1965). Supplement, p. S19s. Spec. Publ. No. 18. London: The Chemical Society.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.

OKAYA, Y. (1966). *Acta Cryst.* B20, 712–715.
 SCHOMAKER, V. & STEVENSON, D. P. (1941). *J. Am. Chem. Soc.* 63, 37–40.
 XRAY SYSTEM (1970). Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.

Acta Cryst. (1978). B34, 242–248

Structure Cristalline du Turanose [$O\text{-}\alpha\text{-D-Glucosyl-(1 \rightarrow 3)\text{-}\beta\text{-D-fructose}$]

PAR ALAIN NEUMAN, DANIELE AVENEL ET HÉLÈNE GILLIER-PANDRAUD

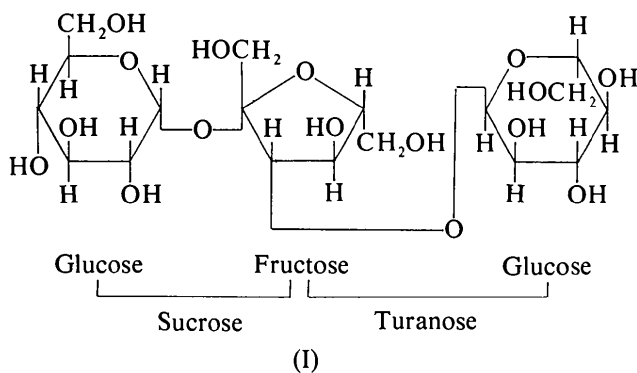
UER Expérimentale de Médecine et de Biologie Humaine (Université Paris XIII), 74 rue Marcel Cachin, 93000 Bobigny, France

(Reçu le 1 juillet 1977, accepté le 13 juillet 1977)

The crystal structure of turanose has been determined by direct methods and refined by least-squares calculations to a final R value of 0.039. The space group is $P2_12_12_1$. The lattice parameters are $a = 8.124$ (1), $b = 9.212$ (2), $c = 19.254$ (3) Å. The glucosyl unit is in the 4C_1 chair conformation. The fructose ring adopts a pyran form with a 2C_5 conformation as in $\beta\text{-D-fructopyranose}$. The conformation of the $\alpha(1 \rightarrow 3)$ linkage is compared with the $\alpha(1 \rightarrow 2)$ linkage in aldetriouronic acid. There exists an intramolecular hydrogen bond.

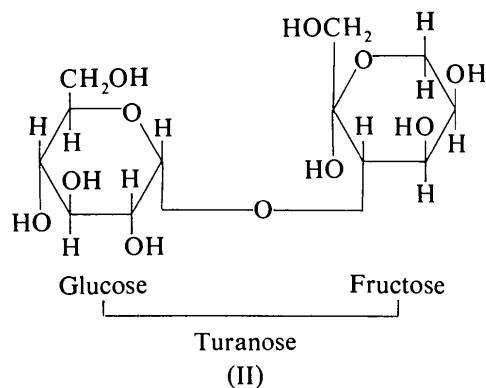
Introduction

Le turanose [$O\text{-}\alpha\text{-D-glucosyl-(1 \rightarrow 3)\text{-}\beta\text{-D-fructose}$] est un produit d'hydrolyse du mélézitose (I) [$O\text{-}\alpha\text{-D-glucopyrannosyl-(1 \rightarrow 2)\text{-}O\text{-}\beta\text{-D-fructofurannosyl-(3 \rightarrow 1)\text{-}\alpha\text{-D-glucopyrannoside}$].



A partir de la structure du mélézitose (Avenel, Neuman & Gillier-Pandraud, 1976a) et de trois trisaccharides déjà étudiés, raffinose pentahydraté (Berman, 1970), L-kestose (Jeffrey & Park, 1972) et plantéose dihydraté (Rohrer, 1972), une comparaison de la stéréochimie de la partie sucrose a été proposée (Avenel, Neuman & Gillier-Pandraud, 1976b). Il nous a semblé intéressant d'étendre cette étude à la partie turanose et de mettre en évidence les modifications conformationnelles provoquées par l'adjonction d'un

nouveau cycle. Ce but primitif a dû être abandonné car notre travail a montré que le résidu fructosyl, présent dans le turanose, n'existe pas sous forme furannique mais sous forme pyranique (II).



Nous avons alors étudié les rapports entre la partie fructose du turanose et le fructose libre qui se présente dans le cristal sous forme pyranique (Kanters, Roelofsen, Alblas & Meinders, 1977). Par ailleurs, la liaison $\alpha(1 \rightarrow 3)$ existant dans le turanose est l'analogue de la liaison $\alpha(1 \rightarrow 2)$ reliant l'acide glucuronique et un des xylozes de l'acide aldetriouronique (Moran & Richards, 1973). Ces deux composés constituent les seuls exemples d'une telle liaison étudiée par diffraction des rayons X. Il était donc intéressant de comparer les résultats obtenus dans ces deux cas.

Tableau 1. *Données cristallographiques*

Turanose, C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	$a = 8,124 (1) \text{ \AA}$
$M_r = 342$	$b = 9,212 (2)$
Système cristallin: orthorhombique	$c = 19,254 (3)$
Groupe spatial: $P2_12_12_1$	$V = 1440,95 \text{ \AA}^3$
$D_c = 1,577 \text{ g cm}^{-3}$	

Données cristallographiques

A partir du produit commercial microcristallin (Baker, USA) et par diffusion de vapeur d'éther dans une solution d'éthanol, nous avons obtenu de petits cristaux de turanose de forme hexagonale légèrement allongée: $0,05 \times 0,8 \times 0,5 \text{ mm}$. Les paramètres de la maille orthorhombique (Tableau 1) ont été d'abord mesurés sur films, puis affinés par moindres carrés (XRAY: Stewart, Kruger, Ammon, Dickinson & Hall, 1972) à partir de 80 mesures indépendantes effectuées sur diffractomètre automatique. Parmi les 2893 réflexions mesurées, 1556 sont indépendantes et 12 inobservées [$I \leq 2\sigma(I)$]. 316 E de modules les plus forts ($E \geq 1,25$) ont été utilisés pour déterminer la structure par méthodes directes (*MULTAN*: Germain & Woolfson, 1968; Germain, Main & Woolfson, 1970, 1971). L'hypothèse qui s'est révélée exacte (ABSFOM: 1,09, RESID: 37,18) a permis de localiser tous les atomes de carbone et d'oxygène. Après affinement et calcul d'une série différence (Stewart *et al.*, 1972), tous les atomes d'hydrogène ont été localisés, les valeurs de la fonction de densité électronique allant de $0,70 \text{ e \AA}^{-3}$ pour le pic le plus fort à $0,30 \text{ e \AA}^{-3}$ pour le pic le plus faible.

Après affinement portant sur tous les atomes, y compris les atomes d'hydrogène (en excluant les coefficients d'agitation thermique de ceux-ci supposés égaux au facteur de température global), une série différence finale n'a pas montré de pic supérieur à $0,25 \text{ e \AA}^{-3}$. Le facteur $R(F)$ final est de $0,039$. Les écarts-

Tableau 2. *Coordonnées réduites* ($\times 10^5$; pour les H, $\times 10^3$)

Entre parenthèses est donné l'écart-type de chaque quantité ramenée à l'ordre de grandeur de la dernière décimale fournie. (Le paramètre U d'agitation thermique isotrope des atomes d'hydrogène a été maintenu constant et égal à $0,048 \text{ \AA}^2$.)

	x	y	z
C(1)	8261 (29)	5041 (27)	73657 (12)
C(2)	3445 (31)	-2347 (29)	66829 (12)
C(3)	16958 (32)	-12181 (28)	64263 (12)
C(4)	32973 (30)	-3555 (28)	63710 (13)
C(5)	37009 (30)	3079 (28)	70735 (12)
C(6)	52124 (31)	12803 (32)	70741 (14)
O(1)	8821 (20)	-5700 (18)	78889 (7)
O(2)	-11637 (23)	-10017 (24)	68105 (10)
O(3)	11867 (24)	-17659 (21)	57645 (9)
O(4)	46189 (25)	-12718 (25)	61639 (10)
O(5)	23540 (20)	12096 (18)	72963 (8)
O(6)	51020 (21)	24192 (21)	65776 (10)
C'(1)	29595 (29)	5638 (34)	90729 (13)
C'(2)	15222 (28)	-4898 (29)	91222 (12)
C'(3)	2468 (27)	-1624 (26)	85548 (11)
C'(4)	-13226 (27)	-10268 (26)	86753 (12)
C'(5)	-19924 (28)	-8052 (26)	94056 (13)
C'(6)	-6261 (30)	-11289 (31)	99148 (12)
O'(1)	42031 (20)	2601 (26)	95680 (9)
O'(2)	20044 (20)	-19539 (21)	90897 (10)
O'(4)	-25524 (21)	-6394 (21)	81767 (8)
O'(5)	-25532 (20)	6572 (20)	95061 (10)
O'(6)	7842 (20)	-2266 (21)	97780 (8)
HC(1)	6 (5)	130 (4)	749 (2)
HC(2)	20 (4)	53 (4)	634 (2)
HC(3)	186 (4)	-197 (4)	679 (2)
HC(4)	318 (4)	42 (4)	601 (2)
HC(5)	388 (4)	-47 (4)	742 (2)
H1C(6)	540 (4)	162 (4)	757 (2)
H2C(6)	620 (4)	70 (4)	694 (2)
HO(2)	-156 (4)	-106 (4)	642 (2)
HO(3)	174 (4)	-256 (4)	569 (2)
HO(4)	463 (4)	-127 (4)	570 (2)
HO(6)	433 (4)	296 (4)	667 (2)
H1C'(1)	251 (4)	163 (4)	913 (2)
H2C'(1)	345 (4)	48 (4)	861 (2)
HC'(3)	-3 (4)	89 (4)	855 (2)
HC'(4)	-92 (4)	-209 (4)	863 (2)
HC'(5)	-293 (4)	-147 (4)	951 (2)
H1C'(6)	-92 (4)	-87 (4)	1040 (2)
H2C'(6)	-20 (4)	-214 (4)	989 (2)
HO'(1)	396 (4)	60 (4)	1001 (2)
HO'(2)	285 (4)	-197 (4)	882 (2)
HO'(4)	-228 (4)	-83 (4)	773 (2)
HO'(5)	-358 (4)	61 (4)	947 (2)

Tableau 3. *Angles de valence concernant les atomes d'hydrogène*

C(2)-C(1)-HC(1)	112°	C'(2)-C'(1)-H1C'(1)	109°
O(1)-C(1)-HC(1)	111	C'(2)-C'(1)-H2C'(1)	109
O(5)-C(1)-HC(1)	103	O'(1)-C'(1)-H1C'(1)	111
C(3)-C(2)-HC(2)	108	O'(1)-C'(1)-H2C'(1)	108
C(1)-C(2)-HC(2)	107	H1C'(1)-C'(1)-H2C'(1)	108
O(2)-C(2)-HC(2)	112	O(1)-C'(3)-HC'(3)	110
C(4)-C(3)-HC(3)	107	C'(2)-C'(3)-HC'(3)	110
C(2)-C(3)-HC(3)	107	C'(4)-C'(3)-HC'(3)	109
O(3)-C(3)-HC(3)	114	C'(3)-C'(4)-HC'(4)	103
C(3)-C(4)-HC(4)	110	O'(4)-C'(4)-HC'(4)	113
C(5)-C(4)-HC(4)	111	C'(5)-C'(4)-HC'(4)	108
O(4)-C(4)-HC(4)	107	C'(4)-C'(5)-HC'(5)	112
C(4)-C(5)-HC(5)	110	O'(5)-C'(5)-HC'(5)	108
C(6)-C(5)-HC(5)	108	C'(6)-C'(5)-HC'(5)	108
O(5)-C(5)-HC(5)	109	C'(5)-C'(6)-H1C'(6)	113
C(5)-C(6)-H1C(6)	108	C'(5)-C'(6)-H2C'(6)	114
C(5)-C(6)-H2C(6)	109	O'(6)-C'(6)-1C(6)	103
H1C(6)-C(6)-H2C(6)	106	O'(6)-C'(6)-H2C'(6)	105
O(6)-C(6)-H1C(6)	114	H1C'(6)-C'(6)-H2C'(6)	111
O(6)-C(6)-H2C(6)	106	C'(1)-O'(1)-HO'(1)	114
C(2)-O(2)-HO(2)	102	C'(2)-O'(2)-HO'(2)	105
C(3)-O(3)-HO(3)	107	C'(4)-O'(4)-HO'(4)	115
C(4)-O(4)-HO(4)	106	C'(5)-O'(5)-HO'(5)	105
C(6)-O(6)-HO(6)	110		

Moyenne C-O-H = 108° Moyenne C-C-H = 109°

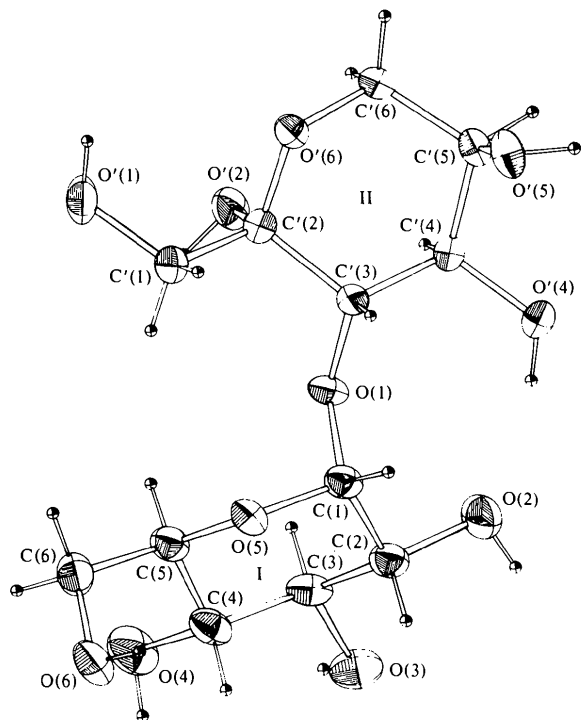


Fig. 1. Numérotage des atomes de la molécule de turanose.

type sont en moyenne de 0,003 Å sur les liaisons C—C et C—O, 0,03 Å sur les liaisons C—H et O—H, 0,15° sur les angles valenciel relatifs aux atomes de carbone et d'oxygène et 1° sur les angles faisant intervenir deux atomes lourds et un atome d'hydrogène. Le numérotage adopté pour les différents atomes et cycles est explicité sur une représentation de la molécule (Fig. 1) obtenue sur une représentation de la molécule (Fig. 1) obtenue par le programme *ORTEP* (Johnson, 1965). Les coordonnées atomiques sont reportées dans le Tableau 2. Les distances et angles de valence sont indiqués sur le Fig. 2(a) et (b). Le Tableau 3 regroupe les angles concernant les atomes d'hydrogène.*

Description de la structure

Distances interatomiques et angles de valence

La moyenne des distances C—C du cycle II, 1,521 Å, est tout à fait comparable à celle obtenue pour le β -D-fructopyranose (1,519 Å) (Kanters *et al.*, 1977). La

* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique anisotrope ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 32941: 23 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

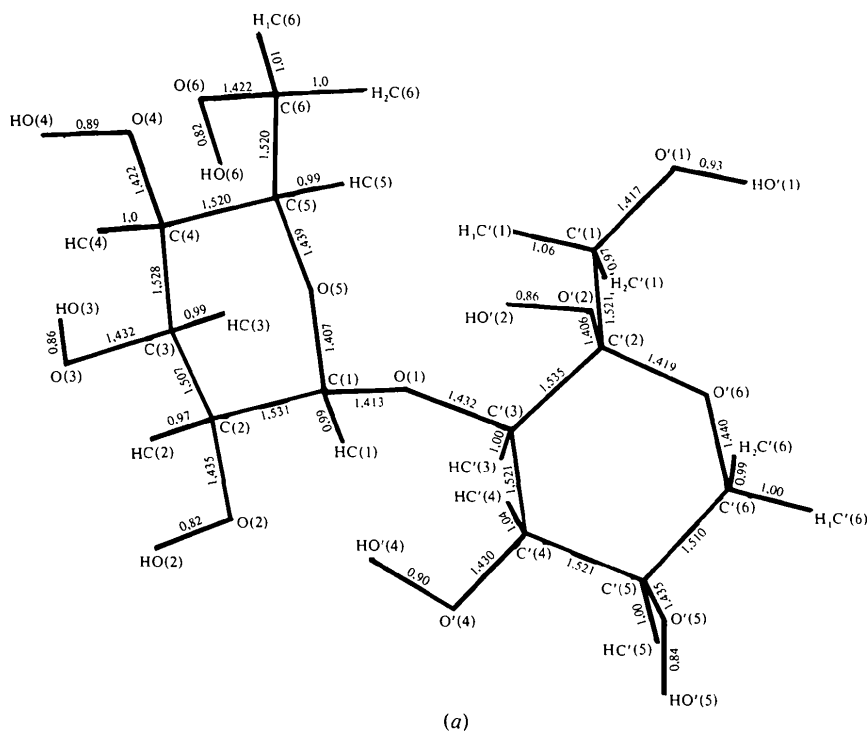


Fig. 2. (a) Distances interatomiques en Å dans la molécule de turanose. Moyenne C—H = 1,00 Å; moyenne O—H = 0,87 Å.

retrouve cet effet au niveau du cycle II: C'(6)–O'(6) (1,440 Å) est significativement plus longue que C'(2)–O'(6) (1,419 Å) et la liaison anomérique C'(2)–O'(2) (1,406 Å) est nettement raccourcie.

La valeur élevée de l'angle intracyclique C–O–C des cycles I et II (115,6° et 113,6°) se retrouve pour les cycles pyraniques. Elle est de 114,3° pour le β -D-fructose. L'écart angulaire de 3,3° entre O(1)–C(1)–O(5) et O(1)–C(1)–C(2) est caractéristique des anomères α (Longchambon, Avenel & Neuman, 1976).

Conformation moléculaire

Angles dièdres de conformation. Le Tableau 4 regroupe les angles dièdres de conformation intra- et extracycliques.

L'angle dièdre $A_2A_1B_1B_2$ est positif si en regardant le long de la liaison A_1B_1 , la liaison B_1B_2 éclipe la liaison A_1A_2 après rotation de B_1B_2 dans le sens des aiguilles d'une montre (Gabbay, Sundarajan & Marchessault, 1972). Cette convention est inverse de celle adoptée par Sundaralingam (1968).

Le cycle I adopte la conformation 4C_1 habituelle. Les angles dièdres intracycliques varient de 53,25° à 59,17° (moyenne 56,30°). La conformation autour de la liaison C(5)–C(6) est telle que la liaison C(6)–O(6) se trouve en position *gauche* par rapport à la liaison C(4)–C(5) et *gauche* par rapport à C(5)–O(5). Cette conformation *gauche-gauche* est adoptée par plus de 50% des résidus glucosyles.

Le cycle II adopte la conformation 2C_5 , qui est également celle du β -D-fructopyranose. Cette conformation, analogue à la conformation 1C_4 d'un cycle

pyranique d'aldohexose, assure une position équatoriale à la chaîne extracyclique C'(1)H₂OH pour l'anomère β présent dans le cristal. Les angles dièdres varient de 53,31° à 64,01° (moyenne 57,16°). Les variations vont de 52,2° à 58,0° pour le β -D-fructose et de 50,0° à 65,0° pour dix structures pyraniques mentionnées par Jeffrey (1973). La conformation autour de la liaison C'(1)–C'(2) met la liaison C'(1)–O'(1) en position *gauche* par rapport à C'(2)–O'(6) et *trans* par rapport à C'(2)–C'(3), alors que dans le β -D-fructose on observe une conformation *gauche-gauche*. Deux conformations sont statistiquement présentes dans l' α -L-sorbose (Kim & Rosenstein, 1967): 63% de *gauche-trans* et 37% de *gauche-gauche*. Dans le D-tagatose (Takagi & Rosenstein, 1969), la conformation adoptée est *gauche-gauche*.

Conformation relative à la liaison osidique. L'angle de valence C(1)–O(1)–C'(3) est de 116,3° pour le turanose. L'angle correspondant de l'acide aldotriouronique (Moran & Richards, 1973), C''(1)–O(1)–C(2), est de 116°. L'angle de valence C–O–C pour les types de liaisons osidiques $\alpha(1 \rightarrow 1)$, $\alpha(1 \rightarrow 2)$, $\alpha(1 \rightarrow 4)$, $\beta(1 \rightarrow 3)$, $\beta(1 \rightarrow 4)$, établies entre deux cycles pyraniques, varie de 115,7° à 117,6° avec une moyenne de 116,5° calculée sur 13 composés. Cette valeur angulaire, aux fluctuations très réduites, n'est apparemment pas modifiée par l'existence ou non d'une liaison hydrogène intramoléculaire entre les deux cycles.

Pour un encombrement moindre, l'angle C–O–C diminue: pour les méthyl-pyranosyles, sa valeur quasi-constante est de 113,2°; dans le cas d'une liaison $\alpha(1 \rightarrow 6)$, sa valeur est de 111,4° pour les deux exemples étudiés, le mélibiose (Neuman & Gillier-

Tableau 5. Angles dièdres de torsion et de pseudo-torsion relatifs à la liaison osidique dans le turanose et l'acide aldotriouronique (°)

	Turanose	Acide aldotriouronique	Différence
Angles entre les plans moyens	46,89	57,80	10,91
Angles des plans moyens avec le plan formé par la liaison osidique	Cycle I 86,92	Cycle III 64,98	21,94
	Cycle II 83,59	Cycle I 88,05	4,46
$\varphi = C(4)–C(1)–O(1)–C'(3)$ ou $C''(4)–C''(1)–O(2)–C(2)$	–157,86	–138,38	19,48
$\psi = C(1)–O(1)–C'(3)–C'(6)$ ou $C''(1)–O(2)–C(2)–C(5)$	–172,26	–150,99	21,27
Angles de conformation			
O(5)–C(1)–O(1)–C'(3) ou O''(5)–C''(1)–O(2)–C(2)	–98,28	–78,85	19,43
C(2)–C(1)–O(1)–C'(3) ou C''(2)–C''(1)–O(2)–C(2)	+140,32	+160,35	20,03
C(1)–O(1)–C'(3)–C'(4) ou C''(1)–O(2)–C(2)–C(1)	–111,59	–95,47	16,12
C(1)–O(1)–C'(3)–C'(2) ou C''(1)–O(2)–C(2)–C(3)	+127,68	+145,50	17,82
Angles de pseudo-conformation			
O(5)–C(1)–C'(3)–C'(2) ou O''(5)–C''(1)–C(2)–C(3)	+27,47	+63,56	36,09
O(5)–C(1)–C'(3)–C'(4) ou O''(5)–C''(1)–C(2)–C(1)	+175,80	–153,11	31,09
C(2)–C(1)–C'(3)–C'(2) ou C''(2)–C''(1)–C(2)–C(3)	–120,50	–75,36	45,14
C(2)–C(1)–C'(3)–C'(4) ou C''(2)–C''(1)–C(2)–C(1)	+27,83	+67,97	40,14

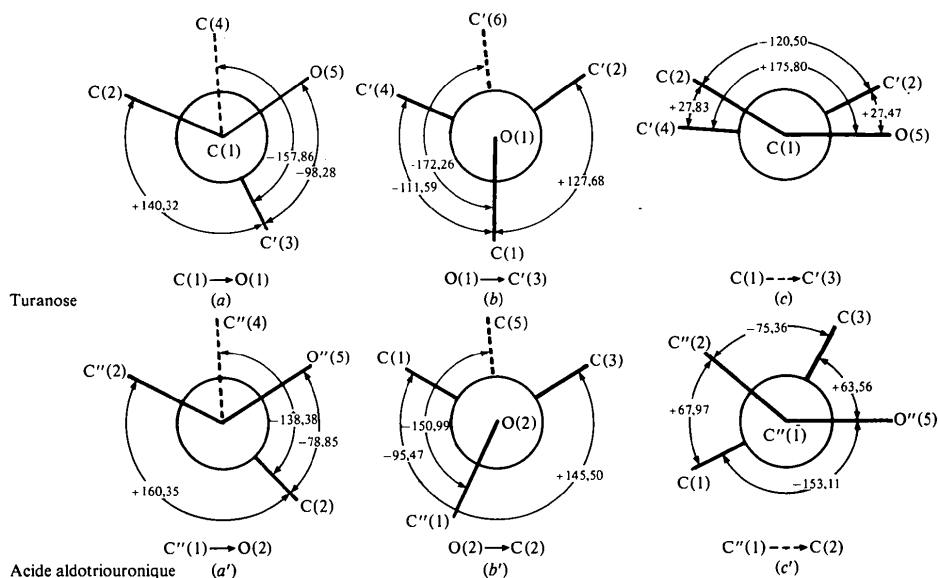


Fig. 3. Projections de Newman relatives aux liaisons $C(1)-O(1)$ et $O(1)-C'(3)$ et à la direction $C(1) \cdots C'(3)$ pour le turanose, et leurs analogues pour l'acide aldotriouronique.

Pandraud, 1976; Kanters, Roelofsen, Doesburg & Koops, 1976) et le raffinose (Berman, 1970).

L'influence des liaisons hydrogène intramoléculaires joue beaucoup plus sur les angles de conformation et de pseudo-conformation, comme le montre le Tableau 5 qui regroupe la valeur de ces angles pour la liaison osidique du turanose et la liaison $\alpha(1 \rightarrow 2)$ de l'acide aldotriouronique. Nous avons défini comme l'angle ψ l'angle dièdre $C(1)-O(1)-C'(3)-C'(6)$. En effet le carbone $C'(6)$ n'étant pas substitué pas un oxygène, nous n'avons pas utilisé l'angle dièdre $C(1)-O(1)-C'(3)-HC'(6)$ qui correspondrait à la définition généralement adoptée (Gabbay *et al.*, 1972) car la précision sur la position d'un hydrogène ne nous semble pas suffisante. De même, nous avons défini l'angle φ comme étant l'angle dièdre $C(4)-C(1)-O(1)-C'(3)$ après nous être assurés que l'écart avec l'angle dièdre $O(4)-C(1)-O(1)-C'(3)$ était inférieur au degré.

La Fig. 3 montre les projections de Newman relatives aux liaisons $C(1)-O(1)$ et $O(1)-C'(3)$, et à la direction $C(1) \cdots C'(3)$ pour le turanose (a, b et c) et leurs analogues pour l'acide aldotriouronique (a', b' et c'). La comparaison des valeurs angulaires données en (a) et (a') fait apparaître un décalage de 19° par rotation autour de la liaison $C(1)-O(1)$, suivi d'après (b) et (b') d'un nouveau décalage de $17,8^\circ$ consécutif à une rotation dans le même sens autour de la liaison $O(1)-C'(3)$. Ceci se retrouve dans les valeurs des angles de pseudo-conformation (c et c'): il existe un décalage d'environ 40° par rotation autour de la direction $C(1) \cdots C'(3)$. De ce fait, les deux cycles de l'acide aldotriouronique sont plus décalés l'un par rapport à l'autre que ceux du turanose; la liaison hydrogène intramoléculaire n'existant que dans le turanose semble en être la cause.

Liaisons hydrogène

Le Tableau 6 et la Fig. 4 présentent le réseau des liaisons hydrogène auxquelles participe la molécule dont les atomes ont les coordonnées du Tableau 2. Celle-ci est associée à huit molécules voisines.

On remarque que l'atome $O(2)$ n'est pas donneur de son hydrogène, aussi avons-nous spécialement testé la position de cet atome $HO(2)$. Après affinement portant sur toutes les positions atomiques excepté celles de l'atome $HO(2)$, non introduit, nous avons calculé une série différence. Le pic le plus fort ($0,30$ e \AA^{-3}) apparaît à l'emplacement du maximum précédemment attribué à $HO(2)$. Nous avons alors calculé la distance séparant l'atome $O(2)$ des pics non interprétés de densité électronique plus faible ($0,23$ e \AA^{-3}) et constaté qu'aucun ne satisfait à une liaison $O-H$.

Un certain nombre de groupes hydroxyle, un oxygène cyclique et un oxygène pontal se situent à des distances trop grandes pour qu'il y ait interaction:

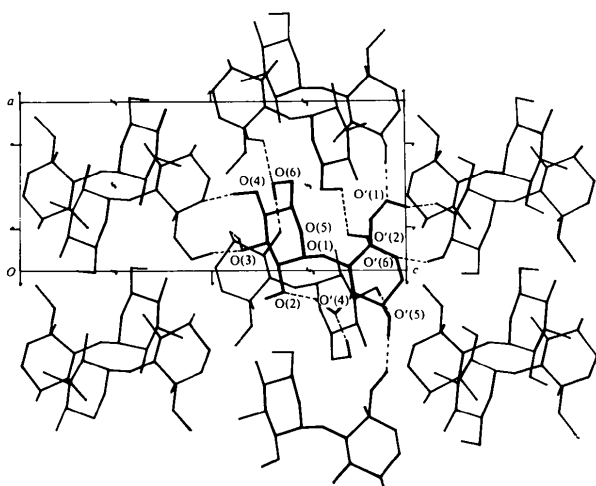
$O(2) \cdots O'(2)$	$[-x, \frac{1}{2} + y, \frac{3}{2} - z]$	4,16 Å
$O(2) \cdots O(1)$	$[-x, -\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z]$	4,25
$O(2) \cdots O'(6)$	$[-x, -\frac{1}{2} + y, \frac{3}{2} - z]$	4,95
$O(2) \cdots O'(1)$	$[-x, -\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z]$	4,99
$O(2) \cdots O(6)$	$[x - 1, y, z]$	4,39
$O(2) \cdots O(4)$	$[x - 1, y, z]$	3,65.

A la distance la plus courte (2,86 Å) correspondent les caractéristiques suivantes: $O(2) \cdots O(3)$ $[x, y, z] = 2,86$ Å; $HO(2) \cdots O(3) = 2,58$ Å; angle $O(2)-HO(2) \cdots O(3) = 97^\circ$.

Ces résultats nous conduisent à considérer qu'il n'existe qu'un simple contact entre $O(2)$ et $O(3)$; ce type de contact entre atomes d'oxygène portés par des

Tableau 6. Réseau de liaisons hydrogène auquel participe la molécule dont les coordonnées atomiques figurent dans le Tableau 2

O(2)···HO'(4)—O'(4)	(x,y,z)	
O(3)—HO(3)···O'(5)	(-x, -½ + y, ¾ - z)	2,672 (3) Å; 1,81 (3) Å; 170 (3)°
O(3)···HO'(1)—O'(1)	(½ - x, -y, -½ + z)	
O(4)—HO(4)···O'(6)	(½ - x, -y, -½ + z)	3,022 (3) Å, 2,27 (3) Å, 141 (3)°
O(6)—HO(6)···O'(4)	(-x, ½ + y, ¾ - z)	2,777 (3) Å; 1,96 (3) Å; 175 (3)°
O(6)···HO'(2)—O'(2)	(1 - x, ½ + y, ¾ - z)	
O'(1)—HO'(1)···O(3)	(½ - x, -y, ½ + z)	2,708 (3) Å; 1,81 (3) Å; 161 (3)°
O'(1)···HO'(5)—O'(5)	(1 + x, y, z)	
O'(2)—HO'(2)···O(6)	(1 - x, -½ + y, ¾ - z)	2,740 (2) Å; 1,92 (3) Å; 159 (3)°
O'(4)—HO'(4)···O(2)	(x,y,z)	
O'(4)···HO(6)—O(6)	(-x, -½ + y, ¾ - z)	2,882 (3) Å; 2,00 (3) Å; 166 (3)°
O'(5)—HO'(5)···O'(1)	(-1 + x,y,z)	2,663 (2) Å; 1,84 (3) Å; 167 (3)°
O'(5)···HO(3)—O(3)	(-x, ½ + y, ¾ - z)	
O'(6)···HO(4)—O(4)	(½ - x, -y, ½ + z)	

Fig. 4. Turanose: structure vue parallèlement à l'axe *b*. Seuls les atomes d'hydrogène portés par les oxygènes participant à des ponts hydrogène y figurent.

atomes de carbone voisins d'un même cycle est très fréquent.

Nous avons mentionné plus haut la liaison intramoléculaire O'(4)—HO'(4)···O(2) qui stabilise la position relative des deux cycles du turanose. Elle est l'analogie de la liaison O(2)—H···O'(3) signalée pour les oligosaccharides à liaison osidique α(1 → 4) étudiés par rayons X.

L'oxygène pontal O(1) n'est pas accepteur de liaison hydrogène, il en est de même pour l'oxygène cyclique O(5).

L'enregistrement des données a été effectué sur le diffractomètre automatique du laboratoire de Mme Pascard (Institut des Substances Naturelles, Gif sur Yvette). Nous la remercions ainsi que toute son équipe.

Références

AVENEL, D., NEUMAN, A. & GILLIER-PANDRAUD, H. (1976a). *Acta Cryst.* B32, 2598–2605.

AVENEL, D., NEUMAN, A. & GILLIER-PANDRAUD, H. (1976b). 3rd Eur. Crystallogr. Meet., Zürich.

BERMAN, H. M. (1970). *Acta Cryst.* B26, 290–299.

GABBAY, S. M., SUNDARAJAN, P. R. & MARCHESSAULT, R. H. (1972). *Biopolymers*, 11, 79.

GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1970). *Acta Cryst.* B26, 274–285.

GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* A27, 368–376.

GERMAIN, G. & WOOLFSON, M. M. (1968). *Acta Cryst.* B24, 91–96.

JEFFREY, G. A. (1973). *Adv. Chem. Ser.* 117, 177–196.

JEFFREY, G. A. & PARK, Y. J. (1972). *Acta Cryst.* B28, 257–267.

JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.

KANTERS, J. A., ROELOFSEN, G., ALBLAS, B. P. & MEINDERS, I. (1977). *Acta Cryst.* B33, 665–672.

KANTERS, J. A., ROELOFSEN, H. M., DOESBURG, H. M. & KOOPS, T. (1976). *Acta Cryst.* B32, 2830–2837.

KIM, S. H. & ROSENSTEIN, R. D. (1967). *Acta Cryst.* 22, 648–656.

LONGCHAMBON, F., AVENEL, D. & NEUMAN, A. (1976). *Acta Cryst.* B32, 1822–1826.

MORAN, R. A. & RICHARDS, G. F. (1973). *Acta Cryst.* B29, 2770–2783.

NEUMAN, A. & GILLIER-PANDRAUD, H. (1976). *C. R. Acad. Sci. Sér. C*, 283, 667–670.

NEUMAN, A., GILLIER-PANDRAUD, H. & LONGCHAMBON, F. (1975). *Acta Cryst.* B31, 2628–2631.

NEUMAN, A., GILLIER-PANDRAUD, H., LONGCHAMBON, F. & RABINOVICH, D. (1975). *Acta Cryst.* B31, 474–477.

POPPELTON, B. J., JEFFREY, G. A. & WILLIAMS, G. J. B. (1975). *Acta Cryst.* B31, 2400–2404.

ROHRER, D. C. (1972). *Acta Cryst.* B28, 425–433.

STEWART, J. M., KRUGER, G. J., AMMON, H. L., DICKINSON, C. & HALL, S. R. (1972). The XRAY system – version of June 1972. Tech. Rep. TR-192, Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.

SUNDARALINGAM, M. (1968). *Biopolymers*, 6, 189–213.

TAKAGI, S. & ROSENSTEIN, R. D. (1969). *Carbohydr. Res.* 11, 156–158.