

& Van Roey, 1979c). This suggests that the conformation observed in the crystal is the result of intramolecular interactions and therefore will probably persist in solution.

Thermal motion

The shapes of the thermal ellipsoids refined from the room-temperature data suggest that librational motion makes a dominant contribution to the thermal parameters of the thiobenzoyl portion of the molecule. In the morpholine ring, the main component of the thermal parameters is a large amplitude of vibration perpendicular to the plane of the ring. It would appear that this is indeed thermal motion rather than static disorder since the amplitude of vibration is considerably reduced at 200 K. An examination of the thermal ellipsoids in Fig. 1 suggests that the librational motion of the molecule has been largely frozen out at 200 K. However, the U_{33} parameters of four atoms on the morpholine ring remain high. For C(9), O, C(10) and C(11), the values are 0.064, 0.082, 0.075 and 0.067 Å², respectively (e.s.d. \approx 0.002 Å²). These can be compared with the room-temperature values of 0.122, 0.138, 0.138 and 0.124 Å².

Computer programs used in this study include CUDLS (J. Stephens), ORTEP (Johnson, 1965) and several from the Los Alamos Scientific Laboratory

system of programs (A. C. Larson). The authors would like to thank Drs M. N. G. James and M. Cowie of the University of Alberta for providing various components of the cooling systems used in this work.

References

- BERG, U. (1976). *Acta Chem. Scand. Ser. B*, **30**, 695–704.
 BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1967). *Acta Cryst.* **22**, 457–464.
 GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 368–376.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.
 ITO, T. & SAKURI, T. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 1594–1603.
 JOHNSON, C. K. (1965). ORTEP. Report ORNL-3794, revised. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 KERR, K. A. & VAN ROEY, P. M. A. O. (1979a). *Acta Cryst.* **B35**, 1250–1252.
 KERR, K. A. & VAN ROEY, P. M. A. O. (1979b). *Acta Cryst.* **B35**. In the press.
 KERR, K. A. & VAN ROEY, P. M. A. O. (1979c). In preparation.
 KERR, K. A. & VAN ROODE, J. H. G. (1979). *Acta Cryst.* **B35**, 783–785.
 KRUEGER, P. J. & FULEA, A. O. (1975). *Tetrahedron*, **31**, 1813–1816.
 RUDMAN, R. (1976). *Low Temperature X-ray Diffraction*. New York: Plenum.
 WALTER, W., HARTO, S. & VOSS, J. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 2876–2877.

Acta Cryst. (1979). **B35**, 2347–2351

Etude Structurale et Energétique à l'Etat Cristallin du Composé Smectogène Hexanoyl-7 Nonyl-2 Dihydro-9,10 Phénanthrène

PAR MICHEL COTRAIT ET PIERRE MARSAU

Laboratoire de Cristallographie et de Physique Cristalline associé au CNRS, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Libération, 33405 Talence, France

ET MICHEL PESQUER

Laboratoire de Chimie Physique A, ERA n° 312 du CNRS, Université du Bordeaux I, 351 cours de la Libération, 33405 Talence, France

(Reçu le 29 janvier 1979, accepté le 19 juin 1979)

Abstract

The crystal structure of the smectogenic compound 7-hexanoyl-2-nonyl-9,10-dihydrophenanthrene, C₂₉H₄₀O, has been established. It crystallizes in space group $P2_1/c$ with $a = 12.774$ (5), $b = 36.66$ (1), $c =$

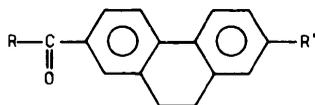
5.439 (4) Å, $\beta = 100.58$ (8)°. The molecules are non-linear and adopt a 'banana'-type conformation, unlike other smectogenic molecules with similar formulae. Molecules are stacked in the Ox direction with an average separation of 3.6 Å and quite a high association energy of -130.5 kJ mol⁻¹ resulting from

0567-7408/79/102347-05\$01.00

© 1979 International Union of Crystallography

numerous van der Waals interactions. Interaction energies for other molecules are rather smaller. The question arises as to whether this unidimensional arrangement persists in the smectic phase.

L'étude structurale du hexanoyl-7 nonyl-2 dihydro-9,10 phénanthrène composé smectogène fait partie d'une étude plus générale de molécules présentant des phases smectique et/ou nématique et notamment des acyl-alkyl dihydro-9,10 phénanthrènes de formule générale suivante:



dont la synthèse et l'étude des propriétés physiques ont été réalisées par MM Jacques, Billard et Malhete du Collège de France. A ce jour, nous avons résolu les structures des dérivés avec $R = C_4H_9$ et $R' = CH_2-CH(CH_3)-C_2H_5$ (Cotrait, Destrade & Gasparoux, 1975), $R' = C_3H_7$ (Cotrait, 1977b) et $R' = C_4H_9$ (Cotrait & Marsau, 1976), désignés ici respectivement par DHP1, DHP2 et DHP3. Pour le composé dont la structure est présentée ici et désignée par DHP5: $R = C_5H_{11}$ et $R' = C_9H_{19}$.

Le corps présente les transitions suivantes:



Partie expérimentale

Le groupe spatial est $P2_1/c$, $Z = 4$, $V = 2501 \text{ \AA}^3$. La densité calculée, $d_c = 1,073 \text{ Mg m}^{-3}$, est très faible mais du même ordre de grandeur pour DHP1, DHP2 et DHP3.

Par suite de la décroissance rapide des intensités avec l'angle θ de Bragg, seules les réflexions avec $\theta < 45^\circ$ (environ 2200) ont été collectées à l'aide d'un diffractomètre Siemens et le rayonnement $K\alpha$ du cuivre ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$). Etant donné les faibles dimensions du cristal utilisé (environ $0,1 \times 0,2 \times 0,4 \text{ mm}$) aucune correction d'absorption n'a été effectuée. Le coefficient moyen d'agitation thermique B_M évalué par la méthode de Wilson, égal à $6,6 \text{ \AA}^2$, est relativement élevé.

Résolution de la structure et affinement

La structure a été en partie résolue par la méthode de la multirésolution. Les sections de Fourier correspondant à l'ensemble le plus probable des phases affinées, firent apparaître plusieurs molécules superposées, translattées les unes par rapport aux autres. En fait, seule la partie centrale de la molécule était aisément identifiable. Les atomes de carbone manquants ont alors été introduits en supposant arbitrairement les deux chaînes complète-

Tableau 1. Coordonnées atomiques des atomes C et O avec écarts types ($\times 10^4$) entre parenthèses

	x	y	z	$B_i (\text{\AA}^2)$
C(1)	2,6904 (19)	0,3761 (9)	0,4068 (3)	8,7
C(2)	2,5131 (17)	0,2882 (8)	0,3888 (3)	6,8
C(3)	2,3113 (15)	0,3272 (7)	0,3587 (2)	5,4
C(4)	2,1297 (14)	0,2405 (7)	0,3422 (2)	5,0
C(5)	1,9234 (15)	0,2833 (6)	0,3112 (2)	4,8
C(6)	1,7290 (15)	0,2026 (6)	0,2961 (2)	4,9
O(7)	1,7483 (11)	0,1124 (4)	0,3073 (2)	6,9
C(8)	1,5139 (14)	0,2330 (6)	0,2667 (2)	4,6
C(9)	1,3372 (15)	0,1581 (6)	0,2526 (2)	4,9
C(10)	1,1323 (15)	0,1823 (6)	0,2249 (2)	4,9
C(11)	1,1001 (14)	0,2846 (6)	0,2113 (2)	4,3
C(12)	1,2782 (15)	0,3597 (6)	0,2252 (2)	5,2
C(13)	1,4833 (16)	0,3342 (6)	0,2527 (2)	5,1
C(14)	0,9348 (18)	0,0999 (7)	0,2108 (3)	6,8
C(15)	0,8170 (20)	0,1170 (7)	0,1706 (3)	7,5
C(16)	0,7322 (16)	0,2303 (6)	0,1636 (2)	5,3
C(17)	0,8779 (15)	0,3105 (6)	0,1828 (2)	4,6
C(18)	0,8010 (16)	0,4130 (7)	0,1745 (2)	5,7
C(19)	0,5922 (16)	0,4360 (7)	0,1486 (2)	5,5
C(20)	0,4471 (15)	0,3568 (7)	0,1295 (2)	5,1
C(21)	0,5200 (16)	0,2542 (7)	0,1377 (2)	5,7
C(22)	0,2076 (16)	0,3762 (7)	0,1006 (2)	6,1
C(23)	0,1715 (16)	0,4907 (7)	0,0886 (2)	6,0
C(24)	-0,0641 (16)	0,5049 (7)	0,0589 (2)	6,0
C(25)	-0,0946 (16)	0,6169 (8)	0,0452 (3)	6,4
C(26)	-0,3311 (16)	0,6375 (8)	0,0171 (2)	6,3
C(27)	-0,3569 (18)	0,7488 (8)	0,0037 (3)	7,5
C(28)	-0,5956 (19)	0,7717 (8)	-0,0236 (3)	7,8
C(29)	-0,6258 (24)	0,8804 (10)	-0,0370 (4)	10,9
C(30)	-0,8584 (23)	0,9073 (11)	-0,0619 (4)	12,4

ment étendues dans la même direction. La molécule ainsi obtenue occupait toutefois une position décalée par rapport à sa position réelle.

Une première fonction différence de Fourier permit de replacer avec précision les atomes de carbone de la chaîne hexanoyl, tandis que la présence de plusieurs pics disposés en zig-zag indiquaient que la chaîne nonyle avait été mal orientée. Une rotation de 180° de cette dernière autour de la première liaison C—C s'accordait mieux avec les pics observés. L'affinement des coordonnées atomiques avec des facteurs d'agitation thermique B_i isotropes ($R \simeq 0,13$), puis anisotropes β_{ij} ($R \simeq 0,090$) a été effectué selon le schéma simplifié des blocs diagonaux (programme dérivé de celui d'Ahmed). Tous les atomes d'hydrogène ont alors été introduits en position théorique;* l'affinement des coordonnées x, y, z et B_{ij} pour les seuls atomes C et O a alors été poursuivi. L'indice résiduel final est $R = 0,061$.† Les paramètres atomiques sont représentés

* Les distances C—H ont été prises égales à $1,07 \text{ \AA}$ pour les carbonés sp^2 et $1,09 \text{ \AA}$ pour les carbonés sp^3 , les angles C—C—H étant pris égaux à 120 et 109° respectivement, conformément aux résultats de la diffraction neutronique.

† Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 34548: 16 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

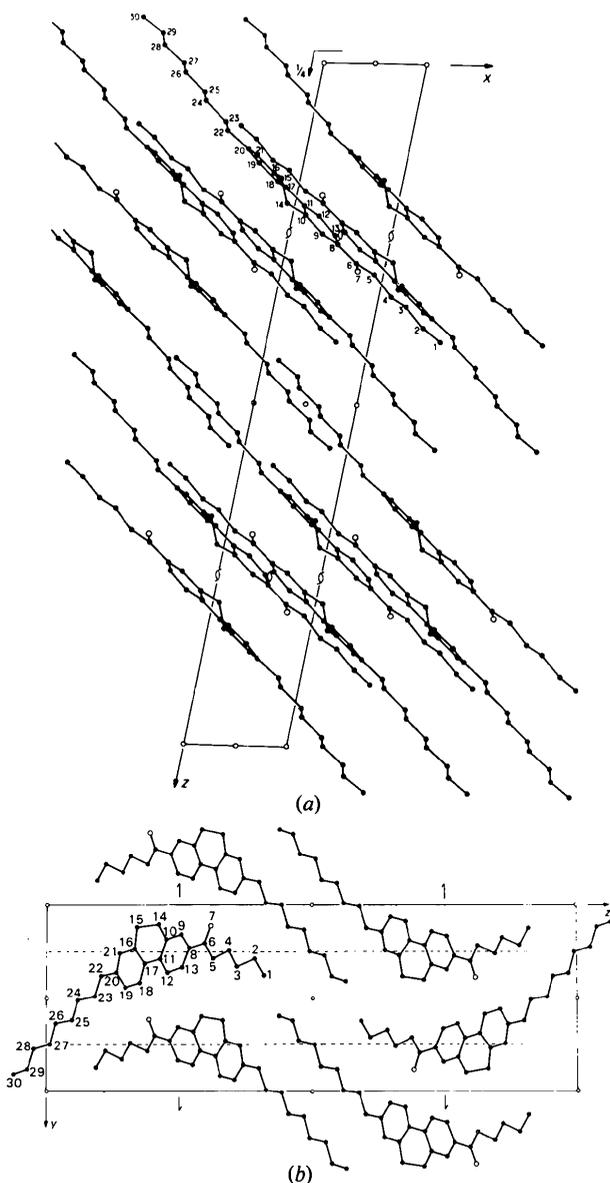


Fig. 1. Projection de la structure (a) le long de l'axe Oy , (b) le long de l'axe Ox .

dans le Tableau 1; les projections de la structure suivant Oy et Ox sont représentées sur la Fig. 1(a,b).

Description de la molécule

Les longueurs et angles de liaison sont rassemblés avec leurs écarts types dans le Tableau 2. Ils sont en bon accord dans l'ensemble avec ceux trouvés pour les molécules analogues (DHP1, DHP2, DHP3).

Les liaisons C(28)–C(29) et C(29)–C(30) sont anormalement courtes tandis que les angles C(27)–C(28)–C(29) et C(28)–C(29)–C(30) sont anormalement grands. Ceci doit être attribué à une certaine

Tableau 2. Longueurs de liaisons (Å) et angles de valence ($^{\circ}$) avec écarts types ($\times 10^3$) entre parenthèses

C(1)–C(2)	1,523 (8)	C(14)–C(15)	1,472 (7)
C(2)–C(3)	1,517 (7)	C(15)–C(16)	1,515 (7)
C(3)–C(4)	1,533 (6)	C(16)–C(17)	1,401 (6)
C(4)–C(5)	1,524 (6)	C(17)–C(18)	1,389 (6)
C(5)–C(6)	1,513 (6)	C(18)–C(19)	1,389 (6)
C(6)–O(7)	1,218 (5)	C(19)–C(20)	1,388 (6)
		C(20)–C(21)	1,385 (6)
C(6)–C(8)	1,490 (6)	C(20)–C(22)	1,523 (6)
C(8)–C(9)	1,391 (6)	C(22)–C(23)	1,510 (7)
C(8)–C(13)	1,391 (6)	C(23)–C(24)	1,526 (7)
C(9)–C(10)	1,386 (6)	C(24)–C(25)	1,509 (7)
C(10)–C(11)	1,408 (6)	C(25)–C(26)	1,514 (7)
C(10)–C(14)	1,511 (7)	C(26)–C(27)	1,506 (7)
C(11)–C(12)	1,398 (6)	C(27)–C(28)	1,514 (8)
C(11)–C(17)	1,477 (6)	C(28)–C(29)	1,465 (9)
C(12)–C(13)	1,386 (6)	C(29)–C(30)	1,460 (10)
C(1)–C(2)–C(3)	113,0 (4)	C(15)–C(16)–C(17)	118,2 (4)
C(2)–C(3)–C(4)	113,4 (4)	C(15)–C(16)–C(21)	121,8 (4)
C(3)–C(4)–C(5)	111,5 (4)	C(17)–C(16)–C(21)	120,0 (4)
C(4)–C(5)–C(6)	113,5 (4)	C(11)–C(17)–C(16)	119,9 (4)
C(5)–C(6)–O(7)	120,2 (4)	C(11)–C(17)–C(18)	122,4 (4)
C(5)–C(6)–C(8)	120,0 (4)	C(16)–C(17)–C(18)	117,7 (4)
O(7)–C(6)–C(8)	119,9 (4)	C(17)–C(18)–C(19)	121,6 (4)
C(6)–C(8)–C(13)	122,3 (4)	C(18)–C(19)–C(20)	121,1 (4)
C(6)–C(8)–C(9)	119,3 (4)	C(19)–C(20)–C(21)	117,4 (4)
C(9)–C(8)–C(13)	118,4 (4)	C(19)–C(20)–C(22)	123,3 (4)
C(9)–C(10)–C(11)	119,8 (4)	C(21)–C(20)–C(22)	119,3 (4)
C(9)–C(10)–C(14)	121,5 (4)	C(16)–C(21)–C(20)	122,2 (4)
C(11)–C(10)–C(14)	118,7 (4)	C(20)–C(22)–C(23)	115,6 (4)
C(10)–C(11)–C(12)	118,4 (4)	C(22)–C(23)–C(24)	113,3 (4)
C(10)–C(11)–C(17)	119,7 (4)	C(23)–C(24)–C(25)	112,7 (4)
C(12)–C(11)–C(17)	121,8 (4)	C(24)–C(25)–C(26)	114,7 (4)
C(11)–C(12)–C(13)	120,9 (4)	C(25)–C(26)–C(27)	113,6 (4)
C(8)–C(13)–C(12)	120,8 (4)	C(26)–C(27)–C(28)	114,6 (5)
C(10)–C(14)–C(15)	113,0 (4)	C(27)–C(28)–C(29)	116,0 (5)
C(14)–C(15)–C(16)	113,1 (4)	C(28)–C(29)–C(30)	118,5 (5)

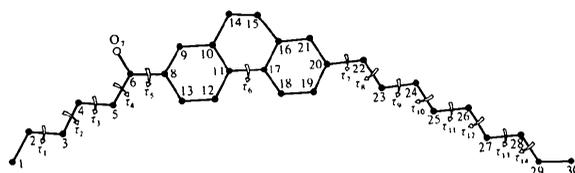


Fig. 2. Molécule de DHP5 avec ses angles de torsion ($^{\circ}$).

imprécision sur la position des atomes C(29) et C(30) par suite d'une agitation thermique élevée du groupement éthyle terminal, phénomène couramment observé pour ce type de composé; c'est le cas notamment du TBBA (Doucet, Mornon, Chevalier & Lifchitz, 1977).

La conformation de la molécule est entièrement décrite par les angles de torsion τ , autour de simples liaisons, ainsi définies: l'origine ($\tau = 0^{\circ}$) correspond à la position éclipsée, la rotation positive autour de la liaison correspondant au sens des aiguilles d'une montre, l'ensemble étant regardé dans le sens de la numérotation croissante. Pour l'un des énantiomères,* représentés sur la Fig. 2, la conformation est définie par

* Les valeurs des angles de torsion sont de signe contraire pour l'autre énantiomère.

Tableau 3. Angles de torsion ($^{\circ}$) et écarts types

Les écarts types ont été calculés par une formule du type de celle proposée par Huber-Buser & Dunitz (1961).

τ_1 182,8 (1,4)	τ_2 180,8 (1,3)	τ_3 184,5 (1,2)	τ_4 178,3 (1,2)	τ_5 179,8 (1,2)
τ_6 165,1 (1,1)	τ_7 192,3 (1,1)	τ_8 178,2 (1,2)	τ_9 182,9 (1,2)	τ_{10} 182,1 (1,2)
τ_{11} 180,3 (1,3)	τ_{12} 181,6 (1,3)	τ_{13} 179,4 (1,4)	τ_{14} 182,9 (1,5)	

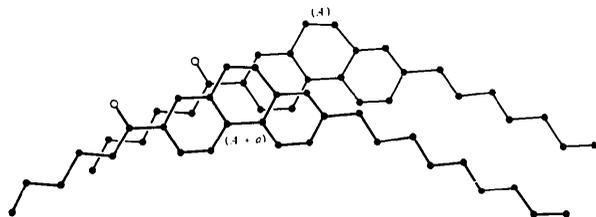


Fig. 3. Projection des molécules 1 et 2 sur le plan moyen du cycle φ_1 de la molécule 1.

les valeurs des angles de torsion rassemblées dans le Tableau 3.

Les chaînes aliphatiques ont une conformation quasi-étendue, tous les angles τ étant proches de 180° . L'angle formé par les deux cycles benzéniques est de $14,9 (1,1)^{\circ}$, valeur très proche de celle observée pour DHP1 et DHP3. Les molécules de la série étudiée adoptent des conformations différentes par suite d'une certaine liberté rotationnelle autour des liaisons contiguës avec le noyau central, ici C(6)–C(8) et C(20)–C(22) (voir Fig. 3). Dans le cas présent la molécule adopte une conformation de type 'banane' nettement plus prononcée que pour DHP3. Notons que des conformations non linéaires, de type zig-zag notamment ont été trouvées dans le cristal d'acide heptyloxybenzoïque (Bryan, Shen & Miller, 1977).

Arrangement moléculaire et interactions

L'arrangement moléculaire est de type imbriqué et ne préfigure apparemment pas celui d'une phase smectique. On ne peut parler ici d'alignement des molécules suivant une direction unique comme c'est le cas notamment pour le *p*-méthoxy *n*-butyl tolane (Cotrait, 1977a).

La projection de la structure parallèlement à l'axe Ox (Fig. 1b) montre l'existence de deux zones parallèles au plan xOy avec des interactions intermoléculaires de forces différentes.

– La première située vers $z = 0$ et $\frac{1}{2}$ où n'existent que des interactions dues aux forces de dispersion entre chaînes parfois éloignées.

– La seconde située vers $z = \frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$ où coexistent des interactions de force et de nature différentes. Il existe notamment une interaction assez forte entre le groupement C=O d'une molécule et les atomes d'hydrogène portés par les carbones 12 et 18 du noyau dihydrophénanthrénique d'une molécule voisine: les distances $O \cdots H$ sont respectivement égales à 2,33 et 2,51 Å, alors que la somme des rayons de van der Waals est de 2,68 Å. De plus les molécules superposées dans la direction Ox sont séparées par une distance moyenne de 3,6 Å seulement; il en résulte un nombre important de contacts.

L'examen des interactions d'après des critères cristallographiques (distances et angles interatomiques) est manifestement trop approximatif pour pouvoir mettre en évidence les interactions les plus fortes. C'est pourquoi une évaluation des énergies correspondantes nous est apparue comme indispensible.

Etude énergétique

Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'interaction d'une molécule avec ses voisines afin de voir si des interactions spécifiques pouvaient être mises en relation avec l'organisation d'une phase de type smectique.

Nous avons employé la méthode semi-empirique de Scheraga (1968) basée sur la décomposition de l'énergie en plusieurs termes (Hopfinger, 1973). Pour ce type de calcul nous avons admis que l'énergie était égale à la somme de l'énergie de van der Waals et de l'énergie électrostatique. La méthode de calcul et les paramètres utilisés ont été décrits précédemment (Cotrait & Pesquer, 1977).

La géométrie utilisée est celle de la structure cristalline. Les valeurs des charges atomiques partielles des atomes C et O, calculées par la méthode du CNDO/2, sont rassemblées dans le Tableau 4. Les charges partielles* portées par les atomes d'hydrogène n'ont pas

* Ces charges sont conventionnellement exprimées en électrons.

Tableau 4. Charges ponctuelles réparties sur la molécule de DHP5, calculées par la méthode CNDO/2

Charge nette	Charge nette	Charge nette
C(1) –0,002	C(11) 0,025	C(21) –0,020
C(2) 0,023	C(12) –0,007	C(22) 0,008
C(3) 0,016	C(13) 0,009	C(23) 0,018
C(4) 0,023	C(14) 0,025	C(24) 0,018
C(5) –0,044	C(15) 0,019	C(25) 0,026
C(6) 0,237	C(16) 0,039	C(26) 0,025
O(7) –0,265	C(17) 0,002	C(27) 0,020
C(8) –0,024	C(18) 0,010	C(28) 0,018
C(9) 0,012	C(19) –0,010	C(29) 0,025
C(10) 0,014	C(20) 0,040	C(30) 0,024

été reportées: leur valeur absolue est inférieure à 2×10^{-2} .

Nous avons considéré l'interaction d'une molécule (x, y, z) avec ses voisines les plus proches et les énergies d'interactions correspondantes sont rassemblées dans le Tableau 5. Les valeurs ainsi calculées sont du même ordre de grandeur que celles obtenues dans l'étude de composés similaires. Cependant, l'énergie d'interaction avec la molécule 2 est très forte. Cette énergie est essentiellement due aux forces de van der Waals et traduit le fait que ces deux molécules se trouvent à une faible distance l'une de l'autre et la plupart de leurs atomes sont en interaction (voir Fig. 3). Ces molécules se déduisant l'une de l'autre par une translation d'une période dans la direction Ox , les interactions entre deux molécules voisines se répètent identiquement et l'on peut parler d'un empilement moléculaire uniforme dans cette direction. Etant donné l'ordre de grandeur de cette énergie par rapport aux autres énergies d'interaction, on peut penser que cette direction demeurera privilégiée lors du passage à la phase smectique.

Tableau 5. *Energie d'interaction entre une molécule A (x, y, z) et toutes ses voisines*

Molécule B*	Energie (kJ mol ⁻¹)	Molécule B*	Energie (kJ mol ⁻¹)
2	-130,5	7	-32,9
3	-48,90	8	-8,67
4	-55,10	9	-1,59
5	-6,83	10	-1,42
6	-40,6		

* Les correspondances sont les suivantes: (2) $1 + x, y, z$; (3) $1 - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; (4) $-2 - x, 1 - y, -z$; (5) $4 + x, \frac{3}{2} - y, \frac{1}{2} + z$; (6) $-x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; (7) $-3 - x, 1 - y, -z$; (8) $3 + x, \frac{3}{2} - y, \frac{1}{2} + z$; (9) $-4 - x, 2 - y, -z$; (10) $2 + x, \frac{3}{2} - y, -\frac{1}{2} + z$.

Acta Cryst. (1979). B35, 2351-2354

The Crystal and Molecular Structure of *N*-Mesitylbenzophenoneimine [*N*-(Diphenylmethylene)mesitylamine]

BY G. BOKKERS, J. KROON* AND A. L. SPEK

Rijksuniversiteit Utrecht, Laboratorium voor Structuurchemie, Padualaan 8, Utrecht, The Netherlands

(Received 11 May 1979; accepted 20 June 1979)

Abstract

$C_{22}H_{21}N$ is monoclinic, space group $P2_1/c$, with $a = 11.074$ (6), $b = 16.92$ (1), $c = 9.699$ (4) Å, $\beta = 107.23$ (4)°, $Z = 4$. Refinement of 2622 counter

Conclusion

A la différence de la plupart des composés smectogènes et plus particulièrement des composés DHP1, DHP2 et DHP3, les molécules de DHP5 adoptent une conformation non linéaire de type 'banane'. L'arrangement des molécules dans le cristal est de type imbriqué et ne préfigure pas l'arrangement d'une phase smectique. Toutefois, le calcul énergétique montre que les interactions moléculaires sont nettement prépondérantes suivant la direction Ox .

Aussi nous semble-t-il raisonnable de supposer que le type d'empilement observé pourrait subsister à l'état smectique.

Références

- BRYAN, R. F., SHEN, M. S. & MILLER, R. W. (1977). *Am. Crystallogr. Assoc. Abstr.* 5, 37-42.
 COTRAIT, M. (1977a). *C. R. Acad. Sci. Sér. C*, 285, 547-550.
 COTRAIT, M. (1977b). 4th European Crystallographic Meeting, Oxford.
 COTRAIT, M., DESTRADE, C. & GASPAROUX, H. (1975). *Acta Cryst.* B31, 2704-2706.
 COTRAIT, M. & MARS AU, P. (1976). *Acta Cryst.* B32, 2993-2997.
 COTRAIT, M. & PESQUER, M. (1977). *Acta Cryst.* B33, 2826-2832.
 DOUCET, J., MORNON, J. P., CHEVALIER, R. & LIFCHITZ, A. (1977). *Acta Cryst.* B33, 1701-1710.
 HOPFINGER, A. J. (1973). *Conformational Properties of Macromolecules*. New York: Academic Press.
 HUBER-BUSER, E. & DUNITZ, J. D. (1961). *Helv. Chim. Acta*, 44, 2027-2033.
 SCHERAGA, H. A. (1968). *Adv. Phys. Org. Chem.* 6, 103-184.

intensities led to a final R_F of 0.056 ($R_{wF} = 0.067$). Appreciable departures from planarity are found, the mesityl and *Z*-phenyl groups making dihedral angles of 75.5 (3) and 61.9 (3)°, respectively, with the plane through the bonds of the central C atom, and the *E*-phenyl group being approximately coplanar with a dihedral angle of 15.3 (3)°.

* To whom correspondence should be addressed.