



Fig. 2. Projection des molécules sur la face (010). Les liaisons hydrogène sont représentées en pointillé. (i) $1-x, -y, -z$; (ii) $1-x, -y, 1-z$; (iii) $x, y, 1+z$.

chacune des deux chaînes. Participent à ces orbitales, les doublets libres des atomes d'azote, les électrons π des groupements carbonyle et un électron de chacun des autres atomes de carbone. La liaison C(6)–N(1) [1,418 (5) Å], légèrement plus courte que la liaison 'simple' C(3)–N(4) [1,467 (6) Å], possède un caractère π très partiel. Les orbitales délocalisées dont il a été question précédemment interviennent peu dans cette liaison, ce qui peut s'expliquer par l'angle que font entre eux les plans $P(1)$ et $P(2)$.

Dans les noyaux C et D, les distances entre deux atomes de carbone voisins sont comprises entre 1,368 et 1,418 Å et admettent pour longueur moyenne

1,386 Å. La longueur de la liaison C(7)–C(8) [1,499 (5) Å] est comparable aux longueurs généralement observées pour les liaisons Csp^2-Csp^2 . Il n'y a donc pas d'interaction entre l'orbitale délocalisée de la chaîne N(4)C(5)C(6)C(7)O(7) et celle du noyau C.

La Fig. 2 montre que la structure est formée de couches de molécules dont les positions moyennes sont les plans (001). A l'intérieur d'une couche, la cohésion est due à des interactions de van der Waals. Entre deux couches consécutives, on a aussi la liaison hydrogène N(4)–H(N4)···O(15^{iv}). O(15^{iv}) se déduit de O(15) par la transformation $x, y, z \rightarrow x, y, -1+z$. La distance N(4)–O(15^{iv}) est égale à 2,831 (4) Å et l'angle N(4)–H(N4)···O(15^{iv}) vaut 167 (5)°.

Références

- AHMED, F. R., HALL, S. R., PIPPY, M. E. & HUBER, C. P. (1966). NRC Crystallographic Programs for the IBM/360 System. *World List of Crystallographic Computer Programs*, p. 52. Utrecht: Oosthoek.
- BAK, B., HANSEN, L. & RASTRUP-ANDERSEN, J. (1954). *J. Chem. Phys.* **22**, 2013–2017.
- BECKER, P. & COPPENS, P. (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 417–425.
- BUSING, W. R. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 683–684.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *ORFFE*. Report ORNL-TM-306. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV, p. 72. Birmingham: Kynoch Press.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1980). *MULTAN80. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- RAYMOND, K. N., CORFIELD, P. W. R. & IBERS, J. A. (1968). *Inorg. Chem.* **7**, 1362–1373.

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. (1984). **C40**, 334

Structure of 1-(5'-O-acetyl-2',3'-O-isopropylidene- β -D-ribofuranosyl)-5-ditosylaminoimidazole-4-carbonitrile, C₂₈H₃₀N₄O₉S₂. By K. KITAMURA, H. MIZUNO, S. SUGIO, N. OKABE, M. IKEHARA and K. TOMITA, Faculty of Pharmaceutical Sciences, Osaka University, 1-6 Yamada-oka, Suita, Osaka 565, Japan

(Received 5 December 1983)

Abstract

In Kitamura, Mizuno, Sugio, Okabe, Ikehara & Tomita [*Acta Cryst.* (1983). **C39**, 1551–1553] the y coordinate of N(1) was held fixed to define the origin.

The *Abstract* includes all relevant information.