

diphényl-2,5 dipyrazinyl-3,4 pyrrole parallèles à l'axe *b*. Entre deux molécules consécutives d'une même colonne s'intercale une molécule d'éthanol. Par l'intermédiaire des molécules d'eau et d'éthanol, les liaisons hydrogène unissent les molécules de deux colonnes qui se déduisent l'une de l'autre par la transformation (i) ou par la transformation (ii).

Références

FRENZ, B. A. & ASSOCIATES, INC. (1982). *SDP, Structure Determination Package*. College Station, Texas, et Enraf-Nonius, Delft.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Tome IV, p. 72. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)

JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Rapport ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
 KITANO, Y., ASHIDA, T., OHTA, A., WATANABE, T. & AKITA, Y. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 136–139.
 LAING, M. & SOMMERVILLE, P. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 2764–2767.
 MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN*11/82. *A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
 NYGAARD, L., NIELSEN, J. T., KIRCHHEINER, J., MALTESEN, G., RASTRUP-ANDERSEN, J. & SORENSEN, G. O. (1969). *J. Mol. Struct.* **3**, 491–506.
 SHELDRICK, W. S., BORKENSTEIN, A. & ENGEL, J. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1248–1253.
 WITH, G. DE, HARKEMA, S. & FEIL, D. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 3178–3184.

Acta Cryst. (1986). **C42**, 230–233

Formylamino-1 (Hydroxy-2 phényl)-2 Phényl-1 Ethylène

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Minérale, UER de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

ET J. ANDRIEUX ET M. PLAT

Laboratoire de Pharmacie Chimique, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

(Reçu le 10 mai 1985, accepté le 23 septembre 1985)

Abstract. $C_{15}H_{13}NO_2$, $M_r = 239.3$, triclinic, $P\bar{1}$, $a = 9.428$ (3), $b = 9.769$ (1), $c = 16.364$ (3) Å, $\alpha = 89.89$ (2), $\beta = 99.47$ (2), $\gamma = 121.44$ (2)°, $V = 1262$ Å³, $Z = 4$, $D_m = 1.28$ (2), $D_x = 1.259$ Mg m⁻³, $\lambda(Mo K\alpha) = 0.71069$ Å, $\mu = 0.078$ mm⁻¹, $F(000) = 504$, $T = 293$ (1) K, $R = 0.034$ for 2093 independent observed reflections. In the two molecules of the asymmetric unit, the bond lengths and angles are nearly identical. There is a non-located orbital along the N–C–O fragment of the *N*-formylamino group. The π electrons of the ethylenic bond are not conjugated with those of the benzenic cycles or with those of the *N*-formylamino group. The molecules are linked together by hydrogen bonds and form chains parallel either with **a** or with **a + b**.

Introduction. Le produit étudié est issu de la décomposition thermique de l'azido-2 Δ -3 isoflavène, lui-même

obtenu par action du perchlorate d'isoflavylium (Bouvier, Andrieux & Molho, 1974; Bouvier, Andrieux, Cunha & Molho, 1977) sur l'azidure de sodium dans le THF anhydre. Il se présente sous la forme de cristaux incolores fondant à 421–423 K. Sa masse molaire et sa formule brute ont été déduites du spectre de masse et des résultats de la microanalyse. Les méthodes spectroscopiques usuelles (IR, RMN de ¹H et de ¹³C) n'ont pas permis de déterminer complètement sa structure moléculaire. C'est la raison pour laquelle l'étude par diffraction X a été entreprise. Les monocristaux utilisés ont été obtenus par évaporation lente d'une solution dans l'éther-oxyde d'éthyle additionné d'une petite quantité de dichlorométhane.

Partie expérimentale. Masse volumique par flottaison. Cristal parallélépipédique: 0,22 × 0,25 × 0,30 mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal

avec 25 réflexions telles que $5,16 \leq \theta \leq 12,82^\circ$. Diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4. $0 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,550 \text{ \AA}^{-1}$; $-10 \leq h \leq 10$, $0 \leq k \leq 10$, $-17 \leq l \leq 17$. Réflexions de contrôle: 200, 113 et $\bar{2}24$; $\sigma(I)/I = 2 \times 10^{-4}$, diminution de I : 1,4%. 3519 réflexions indépendantes mesurées, 1426 réflexions inobservées [$I \leq 2\sigma(I)$]. Pas de correction d'absorption.

Méthodes directes, programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Coordonnées des H calculées sauf celles de H(O6), série des ΔF . Facteurs de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Affinement sur F . Paramètres affinés: x, y, z de tous les atomes et β_{ij} de O, N et C. B des H fixés à $5,0 \text{ \AA}^2$. $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,09$. $R = 0,034$, $wR = 0,035$, $w = 1/\sigma^2(F)$. $S = 1,09$. $|\Delta\rho|_{\max} = 0,12 (3) \text{ e \AA}^{-3}$. Programmes de calculs du système *SDP* de Enraf-Nonius (1979). Dessin de la molécule (Fig. 1): programme *ORTEP* (Johnson, 1965).

Discussion. Les coordonnées atomiques relatives sont rassemblées dans le Tableau 1, les principales distances interatomiques et les angles de liaison dans le Tableau 2.* La Fig. 1 représente une vue en perspective de l'une des molécules de l'unité asymétrique et précise la numérotation atomique utilisée. On ajoute, aux numéros indiqués sur la Fig. 1, le nombre 100 ou le nombre 200 selon que les atomes appartiennent à la molécule (I) ou à la molécule (II). Les cycles de la première molécule sont nommés $A1$ et $B1$, ceux de la deuxième $A2$ et $B2$ et les plans moyens des mêmes cycles $P(A1)$ et $P(B1)$ ou $P(A2)$ et $P(B2)$.

* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées relatives des atomes d'hydrogène, des distances C-H, N-H et O-H, des distances intermoléculaires, des distances des atomes aux plans moyens et des angles de torsion ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 42547: 24 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.

Tableau 1. Coordonnées atomiques relatives, facteurs de température isotropes équivalents et écarts-type

$$B_{eq} = \frac{4}{3}(\beta_{11}a^2 + \beta_{22}b^2 + \beta_{33}c^2 + \beta_{12}ab \cos\gamma + \beta_{13}ac \cos\beta + \beta_{23}bc \times \cos\alpha).$$

	x	y	z	$B_{eq}(\text{\AA}^2)$
C(101)	0,3411 (3)	0,7475 (2)	0,0611 (2)	3,40 (6)
C(102)	0,2546 (2)	0,5885 (2)	0,0669 (1)	3,13 (6)
N(103)	0,1602 (2)	0,5243 (2)	0,1316 (1)	3,43 (5)
C(104)	0,0169 (3)	0,3822 (2)	0,1258 (2)	3,53 (6)
O(105)	-0,0612 (2)	0,3279 (2)	0,1828 (1)	4,19 (5)
O(106)	0,6372 (2)	1,0335 (2)	0,1233 (1)	4,54 (5)
C(111)	0,3400 (2)	0,8735 (2)	0,1085 (1)	3,22 (6)
C(112)	0,4913 (3)	1,0192 (2)	0,1385 (2)	3,36 (6)
C(113)	0,4948 (3)	1,1393 (3)	0,1839 (2)	4,03 (7)
C(114)	0,3457 (3)	1,1186 (3)	0,1989 (2)	4,36 (7)
C(115)	0,1926 (3)	0,9789 (3)	0,1686 (2)	4,39 (7)
C(116)	0,1920 (3)	0,8582 (3)	0,1239 (2)	3,93 (7)
C(121)	0,2592 (2)	0,4729 (2)	0,0110 (2)	3,18 (6)
C(122)	0,2583 (3)	0,3377 (3)	0,0382 (2)	4,03 (7)
C(123)	0,2663 (3)	0,2344 (3)	-0,0153 (2)	4,81 (7)
C(124)	0,2749 (3)	0,2630 (3)	-0,0968 (2)	5,00 (7)
C(125)	0,2762 (3)	0,3957 (3)	-0,1247 (2)	4,72 (7)
C(126)	0,2675 (3)	0,4987 (3)	-0,0719 (2)	3,88 (7)
C(201)	0,1925 (2)	0,4010 (2)	0,4246 (2)	3,59 (6)
C(202)	0,0268 (2)	0,3293 (2)	0,4243 (2)	3,33 (6)
N(203)	-0,0736 (2)	0,3667 (2)	0,3652 (1)	3,51 (5)
C(204)	-0,1898 (3)	0,3943 (3)	0,3816 (2)	3,84 (6)
O(205)	-0,2709 (2)	0,4320 (2)	0,3307 (1)	4,43 (4)
O(206)	0,4608 (2)	0,4157 (2)	0,3742 (1)	5,02 (5)
C(211)	0,2962 (2)	0,5317 (2)	0,3771 (2)	3,30 (6)
C(212)	0,4350 (2)	0,5367 (2)	0,3529 (2)	3,45 (6)
C(213)	0,5395 (3)	0,6590 (3)	0,3096 (2)	3,93 (7)
C(214)	0,5104 (3)	0,7793 (3)	0,2904 (2)	4,12 (7)
C(215)	0,3782 (3)	0,7808 (2)	0,3146 (2)	3,96 (7)
C(216)	0,2725 (2)	0,6583 (2)	0,3574 (2)	3,55 (6)
C(221)	-0,0605 (3)	0,2042 (2)	0,4797 (2)	3,44 (6)
C(222)	0,0265 (3)	0,2013 (3)	0,5559 (2)	4,45 (7)
C(223)	-0,0517 (3)	0,0832 (3)	0,6069 (2)	5,53 (9)
C(224)	-0,2200 (3)	-0,0345 (3)	0,5832 (2)	5,56 (8)
C(225)	-0,3074 (3)	-0,0337 (3)	0,5085 (2)	5,51 (9)
C(226)	-0,2300 (3)	0,0841 (3)	0,4568 (2)	4,45 (7)

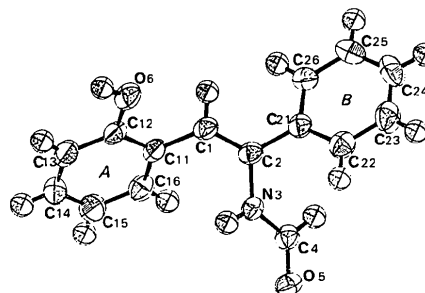


Fig. 1. Vue en perspective de la molécule (I) et numéros attribués aux atomes.

Tableau 2. Distances interatomiques (\AA), angles des liaisons ($^\circ$) et écarts-type

Molécule (I)		Molécule (II)		Molécule (I)		Molécule (II)		Molécule (I)		Molécule (II)	
C(1)-C(2)	1,338 (3)	1,337 (3)	C(11)-C(12)	1,399 (2)	1,405 (4)	C(21)-C(22)	1,389 (4)	1,383 (3)			
C(1)-C(11)	1,462 (4)	1,461 (3)	C(11)-C(16)	1,389 (4)	1,395 (4)	C(21)-C(26)	1,386 (3)	1,385 (2)			
C(2)-N(3)	1,426 (3)	1,422 (3)	C(12)-C(13)	1,372 (4)	1,378 (3)	C(22)-C(23)	1,376 (4)	1,373 (4)			
C(2)-C(21)	1,476 (4)	1,479 (3)	C(13)-C(14)	1,376 (4)	1,365 (4)	C(23)-C(24)	1,370 (4)	1,373 (3)			
N(3)-C(4)	1,327 (2)	1,323 (4)	C(14)-C(15)	1,379 (2)	1,376 (4)	C(24)-C(25)	1,367 (4)	1,358 (4)			
C(4)-O(5)	1,229 (3)	1,223 (3)	C(15)-C(16)	1,386 (4)	1,378 (3)	C(25)-C(26)	1,371 (4)	1,377 (4)			
O(6)-C(12)	1,373 (3)	1,360 (3)									
C(2)-C(1)-C(11)	128,3 (2)	128,6 (2)	C(12)-C(11)-C(16)	116,9 (2)	117,0 (2)	C(2)-C(21)-C(22)	122,6 (2)	120,7 (2)			
C(1)-C(2)-N(3)	120,4 (2)	119,3 (2)	O(6)-C(12)-C(11)	116,6 (2)	116,9 (2)	C(2)-C(21)-C(26)	120,0 (2)	121,6 (2)			
N(3)-C(2)-C(21)	116,9 (2)	117,7 (2)	O(6)-C(12)-C(13)	121,6 (2)	121,9 (2)	C(22)-C(21)-C(26)	117,4 (2)	117,7 (2)			
C(1)-C(2)-C(21)	122,6 (2)	122,8 (2)	C(11)-C(12)-C(13)	121,7 (2)	121,2 (2)	C(21)-C(22)-C(23)	121,0 (2)	121,3 (2)			
C(2)-N(3)-C(4)	125,7 (2)	125,2 (2)	C(12)-C(13)-C(14)	119,6 (2)	120,0 (2)	C(22)-C(23)-C(24)	120,4 (3)	120,1 (3)			
N(3)-C(4)-O(5)	124,7 (2)	124,4 (2)	C(13)-C(14)-C(15)	120,8 (3)	120,6 (2)	C(23)-C(24)-C(25)	119,4 (3)	119,4 (2)			
C(1)-C(11)-C(12)	120,3 (2)	118,6 (2)	C(14)-C(15)-C(16)	118,7 (2)	119,7 (3)	C(24)-C(25)-C(26)	120,6 (2)	120,9 (2)			
C(1)-C(11)-C(16)	122,8 (2)	124,3 (2)	C(11)-C(16)-C(15)	122,2 (2)	121,5 (2)	C(21)-C(26)-C(25)	121,2 (2)	120,5 (2)			

Le Tableau 2 montre que les distances entre les atomes homologues des deux molécules sont pratiquement identiques. Par exemple, la liaison éthylénique C(1)–C(2) mesure 1,338 (3) Å dans un cas et 1,337 (3) Å dans l'autre. Les angles valenciels homologues ont aussi des valeurs très voisines. La différence la plus importante s'observe entre C(102)–C(121)–C(122) |122,6 (2)°| et C(202)–C(221)–C(222) |120,7 (2)°|.

Les cycles *A* et *B* sont plans ou quasi-plans. Ainsi, les atomes les plus éloignés de *P*(A1), C(111) et C(112), en sont distants de 0,012 (2) Å. Les distances entre deux atomes de carbone contigus appartenant à *A* ou à *B* sont comprises entre 1,358 (4) et 1,405 (4) Å et leur longueur moyenne est de 1,383 (4) Å dans les cycles *A* et de 1,375 (4) Å dans les cycles *B*. Les angles C(12)–C(11)–C(16) et C(22)–C(21)–C(26) sont voisins de 117°, ce qui traduit un léger allongement des cycles *A* dans la direction C(11)–C(14) et des cycles *B* dans la direction C(21)–C(24).

O(106) est situé dans le plan *P*(A1) et O(206) est à 0,033 (2) Å de *P*(A2). Les distances C(112)–O(106) |1,373 (3) Å| et C(212)–O(206) |1,360 (3) Å| sont comparables aux longueurs citées pour ce type de liaisons dans *International Tables for X-ray Crystallography* (1968) (1,36 Å) ou par Wyckoff (1969) à propos de l'*o*-dihydroxybenzène (1,364 et 1,380 Å).

Les longueurs moyennes des liaisons N(3)–C(4) |1,325 (3) Å| et C(4)–O(5) |1,226 (3) Å| sont peu différentes de celles de leurs homologues respectives dans le groupement amide de la *N*-formyl-L-méthionine |1,322 (6) et 1,242 (6) Å| (Chen & Parthasarathy, 1977). Les premières sont aussi du même ordre que les distances N–C dans la pyridine (1,3402 Å) (Bak, Hansen-Nygaard & Rastrup-Andersen, 1958). On peut admettre l'existence sur N(3)–C(4)–O(5) d'une orbitale délocalisée à laquelle participent les électrons π du

groupement carbonyle et le doublet non partagé de N(3). La longueur moyenne des deux liaisons C(2)–N(3) |1,424 (3) Å| exclut toute conjugaison entre cette orbitale et les électrons π de C(1)–C(2).

Les atomes C(1), C(2), C(11), C(21) et N(3) ne sont pas rigoureusement dans le même plan. Les angles de torsion C(11)–C(1)–C(2)–C(21) et C(11)–C(1)–C(2)–N(3) valent respectivement 175,9 (2) et –7,6 (4)° dans la molécule (I), –176,2 (3) et 7,6 (4)° dans la molécule (II).

La liaison éthylénique C(1)–C(2) n'a pas la même direction dans les deux molécules. En effet, si C(101) et C(201) sont très proches du plan du noyau *A* de leurs molécules respectives, C(102) est à –0,731 (2) Å de *P*(A1) et C(202) à 0,519 (2) Å de *P*(A2). De même, les distances de N(103) [–1,759 (2) Å], C(104) [–2,114 (2) Å], O(105) [–3,019 (2) Å] à *P*(A1) et celles de N(203) |1,392 (2) Å|, C(204) |1,377 (2) Å| et O(205) |2,104 (2) Å| à *P*(A2) montrent que le groupement formylamino n'a pas la même position relative dans les deux cas. L'angle de torsion C(1)–C(2)–N(3)–C(4) vaut 147,3 (3)° dans (I) et –136,2 (3)° dans (II).

Par rapport à la liaison C(1)–C(2), les noyaux *A* et *B* sont en positions *trans*. L'angle entre les plans moyens *P*(A1) et *P*(B1) est voisin de 84° et son homologue entre *P*(A2) et *P*(B2) de 64°. Les valeurs des angles de torsion C(2)–C(1)–C(11)–C(16) et C(1)–C(2)–C(21)–C(26) [–44,2 (3) et –36,1 (3)° dans (I), 35,1 (4) et –150,8 (3)° dans (II)] indiquent les orientations des noyaux *A* et *B* par rapport aux plans C(1)–C(2)–C(11) ou C(1)–C(2)–C(21). Elles montrent aussi qu'il n'y a pas de conjugaison entre les électrons π de *A* ou de *B* et ceux de C(1)–C(2). Les longueurs des liaisons C(1)–C(11) et C(2)–C(21) conduisent à la même conclusion.

La Fig. 2 représente la structure vue parallèlement à l'axe |100|. Grâce à la liaison hydrogène O(106)–H(106)···O(105ⁱ) |2,806 (2) Å, 169 (2)°| |(i) 1 + x, 1 + y, z|, les molécules (I) forment des chaînes dont la direction générale est celle du vecteur **a** + **b**. De même, la liaison hydrogène O(206)–H(206)···O(205ⁱⁱ) |2,665 (3) Å, 174 (2)°| |(ii) 1 + x, y, z| permet la réalisation de chaînes de molécules (II) parallèles à l'axe |100|. Entre les deux types de chaînes s'établit la liaison N(203)–H(203)···O(105) |3,038 (2) Å, 165 (2)°|.

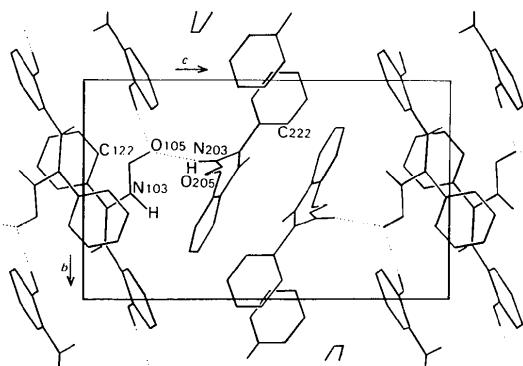


Fig. 2. Représentation de la structure vue parallèlement à l'axe |100|.

Références

- BAK, B., HANSEN-NYGAARD, L. & RASTRUP-ANDERSEN, J. (1958). *J. Mol. Spectrosc.* **2**, 361–368.
 BOUVIER, P., ANDRIEUX, J., CUNHA, H. & MOLHO, D. (1977). *Bull. Soc. Chim. Fr.* II, pp. 1187–1194.
 BOUVIER, P., ANDRIEUX, J. & MOLHO, D. (1974). *Tetrahedron Lett.* pp. 1033–1036.
 CHEN, C. & PARTHASARATHY, R. (1977). *Acta Cryst.* **B33**, 3332–3336.

Enraf-Nonius (1979). *Structure Determination Package*. Enraf-Nonius, Delft.

International Tables for X-ray Crystallography (1968). Tome III, p. 273, Tableau 4.2.5. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)

International Tables for X-ray Crystallography (1974). Tome IV, p. 72. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)

JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Rapport 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. (1982). *MULTAN11/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.

WYCKOFF, R. W. G. (1969). *Crystal Structures*, Tome 6, 1ère partie, 2ème éd., p. 201. New York: Wiley-Interscience.

Acta Cryst. (1986). **C42**, 233–236

5-(2-Undecyloxyphenyl)-4,6-dithianonedioic Acid

BY DRAKE S. EGGLESTON* AND CARL D. PERCHONOCK†

Smith Kline & French Laboratories, 1500 Spring Garden Street, PO Box 7929, Philadelphia, PA 19101, USA

(Received 17 June 1985; accepted 20 October 1985)

Abstract. $C_{24}H_{38}O_5S_2$, $M_r = 470.70$, triclinic, $P\bar{1}$, $a = 12.988$ (4), $b = 19.213$ (5), $c = 5.507$ (1) Å, $\alpha = 94.80$ (2), $\beta = 97.95$ (2), $\gamma = 71.83$ (2)°, $V = 1291.8$ Å³, $Z = 2$, D_m (floatation in aqueous $ZnCl_2$) = 1.20, $D_x = 1.210$ g cm⁻³, $\lambda(Mo K\alpha_{1,2}) = 0.70926$, 0.71354 Å, $\mu = 2.26$ cm⁻¹, $F(000) = 508$, $T = 293$ K, $R = 0.041$, $wR = 0.051$ for 3400 observations. The 5-(2-undecyloxyphenyl)-4,6-dithianonedioic acid molecule is a member of a novel class of selective leukotriene antagonists. Its molecular structure in the solid state shows a highly extended (all *trans*) undecane C chain. One of the two carboxylic acid arms of the dithioacetal moiety is extended nearly parallel to the undecane chain while the other projects nearly perpendicularly to the remainder of the molecule. Both mercaptopropionate chains are highly extended; however, the fully *trans* conformation of one contrasts to the *gauche-gauche-trans* conformation of the other. Individual molecules are related through strong hydrogen bonds between carboxylic acid groups 'dimerically' across crystallographic inversion centers.

Introduction. Leukotrienes C_4 , D_4 and E_4 are now recognized as the integral components of slow reacting substance of anaphylaxis. Their release upon antigenic challenge of human and animal lung tissue (Lewis, Austen, Drazen, Clark, Marfat & Corey, 1980; Dahlen, Hansson, Hedquist, Bjorck, Granstrom & Dahlen, 1983) causes potent bronchoconstriction (Dahlen, Hedquist, Hammarstrom & Samuelson, 1980), increased microvascular permeability (Peck, Piper &

Williams, 1981; Woodward, Weichman, Gill & Wasserman, 1983) and altered mucous production and transport (Marom, Shelhamer, Bach, Morton & Kaliner, 1982). Since these symptoms are associated with such ailments as allergic asthma it is believed that leukotriene antagonists will provide novel and effective therapy for such conditions.

Guided by the structures of the natural leukotrienes we are pursuing synthetic and structural studies aimed at discovering potent leukotriene antagonists. These efforts first led to the synthesis and pharmacological characterization of (4*R*,5*S*)-5-cysteinylglycyl-4-hydroxy-(*Z*)-6-nonadecenoic acid (1) (Gleason, Ku, McCarthy, Weichman, Holden, Osborn, Zabko-Potapovich, Berkowitz & Wasserman, 1983; Weichman, Wasserman, Holden, Osborn, Woodward, Ku & Gleason, 1983) and its analogs (Perchonock, Uzinskas, Ku, McCarthy, Bondinell, Volpe, Gleason, Weichman, Muccitelli, DeVan, Tucker, Vickery & Wasserman, 1985; Ku, McCarthy, Weichman & Gleason, 1985) as modestly potent antagonists. Some of these molecules, however, also display partial agonist properties. Further research has now identified certain 5-aryl-4,6-dithianonedioic acids (2) as a novel class of selective leukotriene antagonists having potent *in vitro* and *in vivo* activity of considerable duration, in addition to being devoid of agonist activity (Perchonock, McCarthy, Erhard, Gleason, Wasserman, Muccitelli, DeVan, Tucker, Vickery, Kirchner, Weichman, Mong, Crooke & Newton, 1985). In an effort to define the features of these compounds responsible for their biological activity, we sought to obtain structural information on them, particularly with regard to the orientation of the polar head groups and the lipid tail (*R*). NMR data indicated that the methine proton was

* Author to whom correspondence should be addressed (c/o Department of Analytical, Physical and Structural Chemistry).

† Department of Medicinal Chemistry.