

Table 1. Fractional atomic coordinates and isotropic temperature factors (\AA^2)Atom labels are consistent with those used to describe the structure in the subgroup $Pna2_1$.

	x	y	z	B_{iso}
Fe(1)	0-1164 (0)	0-0175 (1)	0-0159 (1)	1-31 (3)
N(1)	0-1402 (2)	0-1181 (5)	-0-0417 (4)	1-7 (2)
O(1)	0-1582 (2)	0-1822 (5)	-0-0843 (3)	3-1 (2)
C(11)	0-0841 (2)	0-1169 (6)	0-0933 (4)	1-4 (2)
N(11)	0-0633 (2)	0-1691 (5)	0-1409 (4)	2-4 (2)
C(12)	0-0638 (2)	0-0086 (6)	-0-0523 (5)	1-7 (2)
N(12)	0-0326 (2)	0-0043 (5)	-0-0957 (5)	3-1 (2)
C(13)	0-1441 (2)	-0-1056 (6)	-0-0503 (4)	1-6 (2)
N(13)	0-1596 (2)	-0-1725 (5)	-0-0943 (4)	2-9 (2)
C(14)	0-1641 (2)	0-0164 (6)	0-0972 (5)	1-8 (2)
N(14)	0-1926 (2)	0-0233 (6)	0-1456 (4)	2-7 (2)
C(15)	0-0891 (2)	-0-1051 (6)	0-0790 (5)	2-0 (2)
N(15)	0-0719 (2)	-0-1760 (5)	0-1175 (5)	3-0 (2)
Fe(2)	0-1181 (0)	0-5113 (1)	-0-0022 (1)	1-29 (3)
N(2)	0-1440 (2)	0-6147 (5)	0-0517 (4)	1-7 (2)
O(2)	0-1623 (2)	0-6838 (4)	0-0887 (3)	2-8 (2)
C(21)	0-0696 (3)	0-4908 (7)	0-0778 (5)	2-5 (3)
N(21)	0-0419 (2)	0-4799 (6)	0-1273 (5)	3-9 (3)
C(22)	0-1499 (2)	0-3869 (6)	0-0525 (4)	1-6 (2)
N(22)	0-1683 (2)	0-3125 (5)	0-0865 (5)	2-6 (2)
C(23)	0-1612 (2)	0-5143 (6)	-0-0922 (4)	1-7 (2)
N(23)	0-1878 (2)	0-5245 (5)	-0-1440 (4)	2-5 (2)
C(24)	0-0807 (2)	0-6153 (6)	-0-0667 (4)	1-7 (2)
N(24)	0-0589 (2)	0-6737 (5)	-0-1045 (5)	2-9 (2)
C(25)	0-0881 (2)	0-3905 (6)	-0-0654 (4)	1-9 (2)
N(25)	0-0696 (2)	0-3230 (5)	-0-1007 (4)	2-7 (2)
Fe(3)	0-2435 (1)	0-0217 (1)	0-75	1-59 (5)

Table 1 (cont.)

	x	y	z	B_{iso}
N(5)	0-1868 (3)	0-0233 (8)	0-75	2-5 (3)
O(5)	0-3504 (3)	0-5256 (8)	0-25	4-5 (3)
C(51)	0-2466 (4)	0-1865 (9)	0-75	2-5 (3)
N(51)	0-2495 (3)	0-283 (1)	0-75	4-0 (4)
C(52)	0-2482 (2)	0-0262 (7)	0-8704 (5)	2-1 (3)
N(52)	0-2499 (2)	0-0333 (7)	0-9413 (5)	3-4 (3)
C(53)	0-2481 (3)	-0-148 (1)	0-75	2-0 (3)
N(53)	0-2486 (3)	-0-2462 (8)	0-75	2-4 (3)
C(55)	0-3092 (4)	0-0216 (9)	0-75	2-1 (3)
N(55)	0-1532 (3)	0-5268 (9)	0-25	3-3 (3)
O(W1)	0-2506 (2)	0-8290 (8)	0-0562 (5)	7-1 (3)
O(W2)	0-0597 (3)	-0-1363 (7)	-0-25	3-5 (3)
O(W3)	0-0720 (5)	-0-493 (1)	-0-25	8-1 (4)
O(W4)	-0-0199 (3)	-0-2356 (7)	0-25	4-2 (3)
K(1)	0-2535 (1)	0-2071 (2)	0-4288 (1)	3-30 (7)
K(2)	0-0025 (1)	0-3290 (2)	0-25	2-77 (9)
K(4)	0-0230 (1)	0-9780 (2)	0-25	3-21 (9)
K(5)	0-1349 (1)	0-6993 (3)	-0-25	3-8 (1)
K(6)	0-1475 (1)	0-2404 (3)	0-25	3-6 (1)
K(7)	0-0685 (1)	0-6509 (2)	0-25	3-07 (9)
K(8)	0-0015 (1)	0-2262 (2)	0-5013 (1)	3-72 (8)
K(9)	0-2524 (1)	-0-0008 (3)	0-25	5-7 (2)

References

- CASTELLANO, E. E., RIVERO, B. E., PIRO, O. E. & AMALVY, J. I. (1989). *Acta Cryst.* **C45**, 1207-1210.
 LE PAGE, Y. (1987). *J. Appl. Cryst.* **20**, 264-269.
 LE PAGE, Y. (1988). *J. Appl. Cryst.* **21**, 983-984.

Acta Cryst. (1990). **C46**, 1578

Structure de la bétaine de carboxyméthyl-1 phénylacétylamino-4 triazolium-1,2,4. Errata. Par L.

DUPONT et O. DIDEBERG, *Laboratoire de Cristallographie, Institut de Physique B5, Université de Liège au Sart-Tilman, B-4000 Liège, Belgique* et B. PIROTTE et J. DELARGE, *Laboratoire de Chimie Pharmaceutique, Institut de Pharmacie F1, Université de Liège, rue Fusch 3-5, B-4000 Liège, Belgique*

(Reçu le 28 mai 1990)

Abstract

Some incorrect features in Fig. 1 of Dupont, Dideberg, Pirotte & Delarge [*Acta Cryst.* (1989), **C45**, 1928-1930] are corrected.

Le résumé contient tous les détails pertinents.

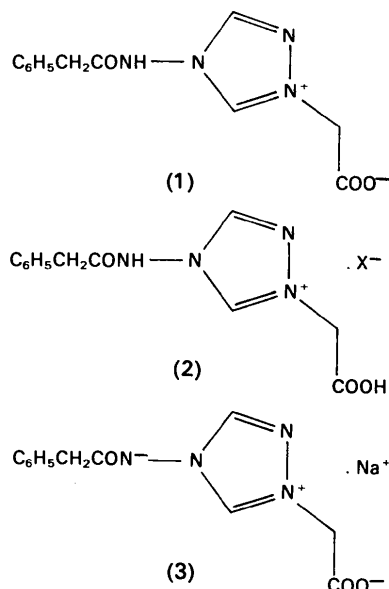


Fig. 1. Formules chimiques: (1) composé étudié, (2) halogénure acide correspondant, (3) amide anionique.