

References

- Bossert, V. F., Horstmann, H., Meyer, H. & Vater, W. (1979). *Arzneim. Forsch./Drug Res.* **29**, 226–229.
- Hayase, N., Itagaki, Y., Ogawa, S., Akutsu, S., Inagaki, S. & Abiko, Y. (1994). *J. Pharm. Sci.* **83**, 532–538.
- Hurwitz, L., Partridge, L. D. & Leach, J. K. (1991). *Calcium Channels: Their Properties, Functions, Regulation and Clinical Relevance*. Boca Raton, Florida, USA: CRC Press.
- Loev, B., Goodman, M. M., Snader, K. M., Tedeschi, R. & Macko, E. (1974). *J. Med. Chem.* **17**, 956–965.
- Núñez-Vergara, L. J., Sunkel, C. & Squella, J. A. (1994). *J. Pharm. Sci.* **83**, 502–507.
- Rodenkirchen, R., Bayer, R., Steiner, R., Bossert, F., Meyer, H. & Moeller, E. (1979). *Naunyn-Schiedeberg's Arch. Pharmacol.* **310**, 69–78.
- Rowan, K. R. & Holt, E. M. (1995). *Acta Cryst.* **C51**, 2554–2559.
- Rowan, K. R. & Holt, E. M. (1996a). *Acta Cryst.* **C52**, 1565–1570.
- Rowan, K. R. & Holt, E. M. (1996b). *Acta Cryst.* **C52**, 2207–2212.
- Sadana, G. S. & Ghogare, A. B. (1991). *J. Indian Chem. Soc.* **68**, 237–239.
- Sheldrick, G. M. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, 467–473.
- Sheldrick, G. M. (1993). *SHELXL93. Program for the Refinement of Crystal Structures*. University of Göttingen, Germany.
- Shibanuma, T., Iwanami, M., Fujimoto, M., Takenaka, T. & Murakami, M. (1980). *Chem. Pharm. Bull.* **28**, 2609–2613.
- Siemens (1990). *XP. Interactive Molecular Graphics Program*. Version 4.1. Siemens Analytical X-ray Instruments Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- Siemens (1991). *XSCANS Users Manual*. Siemens Analytical X-ray Instruments Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- Squella, J. A., Zanocco, A., Perna, S. & Núñez-Vergara, L. J. (1990). *J. Pharm. Biomed. Anal.* **3**, 43–47.
- Triggle, D. J., Langs, D. A. & Janis, R. A. (1989). *Med. Res. Rev.* **9**, 123–180.

Acta Cryst. (1997). **C53**, 261–264

Triterpenoide. X.† Über neue isomere Triterpenlactone

ANDRZEJ GZELLA, LUCJUSZ ZAPRUTKO UND URSZULA WRZECIONO

Lehrstuhl für Organische Chemie der K. Marcinkowski Universität der Medizinischen Wissenschaften Poznań, ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Polen

(Eingegangen am 2. August 1996; angenommen am 15. Oktober 1996)

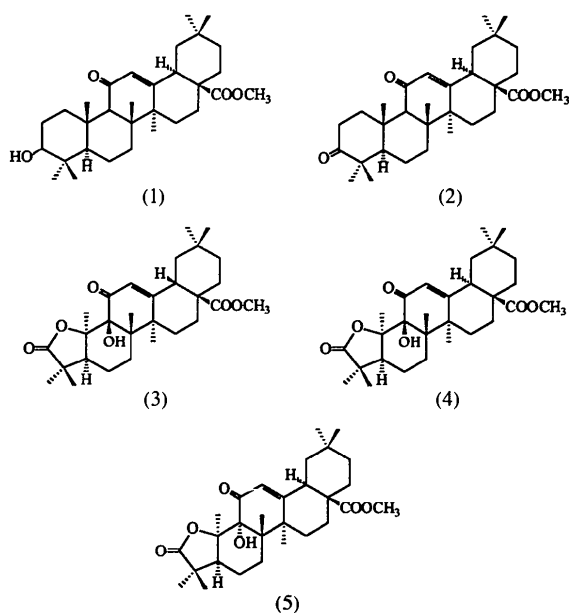
Abstract

The X-ray crystal structure analyses of three new triterpene lactones ($C_{29}H_{42}O_6$), namely 9β -hydroxy-28-methoxy-11,28-dioxo-1,2-dinor- $10\alpha,18\beta$ -olean-12-en-3,10 β -olide, (3), and its 18α - and $9\alpha,18\alpha$ -isomers, (4) and (5) [9β -hydroxy-28-methoxy-11,28-dioxo-1,2-dinor- $10\alpha,18\alpha$ -olean-12-en-3,10 β -olide and 9α -hydroxy-28-methoxy-11,28-dioxo-1,2-dinor- $10\alpha,18\alpha$ -olean-12-en-3,10 β -olide, respectively], are described. Compounds (3)–(5) were obtained by treatment of 3β -hydroxy-11-

oxo- 18α -olean-12-en-28-oic acid methyl ester, (1), with sodium dichromate in acetic acid. In compounds (3)–(5), the six-membered ring A of (1) is replaced by a γ -lactone ring. In contrast to compound (1), the C25 methyl group at C10 has an α configuration. The newly introduced hydroxyl group at C9 is β oriented in compounds (3) and (4), and α oriented in (5). Ring B in (3) has a boat form, but in (4) and (5) it has different equivalent chair conformations. Ring C in (3) has a sofa form, in (4), it has a slightly distorted half-chair form and in (5), it has a conformation intermediate between the half-chair and sofa forms. Rings D and E have chair conformations in all three compounds and are *trans*-fused in compounds (4), (5) and (1), and *cis*-fused in (3). In contrast to compound (1), rings A/B in compounds (3)–(5) and rings B/C in compounds (3) and (4) are *cis*-fused. In compounds (3)–(5), formation of hydrogen bonds has been observed. Inversion of the α configuration to a β configuration at C18 in oleanolic acid derivatives [transformation of (1) to (3)] has been observed for the first time. The triterpene lactones (3)–(5) are the first known oleanane derivatives with *cis*-fused A/B [(3)–(5)] and B/C rings [(3) and (4)].

Kommentar

Die Einwirkung von Natriumdichromat in Eisessig auf 3β -Hydroxy-11-oxo- 18α -olean-12-en-28-säuremethylester, (1), führt neben dem bekannten 3-Oxo-derivat, (2) (Wrzeciono, Zaprutko, Budzianowski, Wójtowicz & Dubowska, 1987) zu drei weiteren isomeren Verbindungen (3)–(5) mit der Summenformel $C_{29}H_{42}O_6$ (MS: $M^{+} = 486$). Aufgrund spektroskopischer Untersuchungen (IR, MS, ^{13}C sowie 2D NMR) konnten die Strukturen dieser Verbindungen nicht eindeutig aufgeklärt werden. In dieser Mitteilung soll über



† Teil IX. Zaprutko (1995).

die Röntgenstrukturanalyse von (3)–(5) berichtet werden.

Die Einwirkung von Natriumdichromat verursacht weitgehende Änderungen in den Ringen A und B von (1). Der sechsgliedrige Ring A wird in einen fünfgliedrigen Laktonring umgewandelt. Die Laktonbrücke in (3)–(5) mit dem C4-Atom benachbarten Carbonylgruppe verbindet die C4 und C10-Atome. Die am C10 haftende Methylgruppe hat in (3)–(5) α -, im Substrat (1) β -Konfiguration. Die Ringe A und B sind in (3)–(5) *cis*- und nicht wie im Substrat (1) *trans*-verknüpft. Die Ebenenwinkel betragen 42,6 (1) [Verbindung (3)], 56,0 (1) [Verbindung (4)] und 60,8 (1)° [Verbindung (5)].

Durch die Einwirkung von Natriumdichromat auf (1) wird eine Hydroxylgruppe in Stellung C9 eingeführt. Letztere weist in (3) und (4) β -, in (5) α -Konfiguration auf. Die Konfiguration der am benachbarten C8 haftenden Methylgruppe hat sowohl in (1) wie auch (3)–(5) β -Konfiguration. Die Ringe B und C sind somit in (3) und (4) *cis*-, in (5) ähnlich wie in (1) *trans*-verknüpft. Die Ebenenwinkel von 51,7 (1) [Verbindung (3)], 63,2 (1) [Verbindung (4)] und 10,4 (1)° [Verbindung (5)] entsprechen dieser Ringverknüpfung.

Die Bindungslängen C11—O4 und C12—C13 im Bereich 1,218 (2)–1,227 (2) und 1,335 (3)–1,341 (3) Å (Tabellen 2, 4, 6) zeugen dafür, daß die α,β ungesättigte Carbonylgruppe im Ring C von (3)–(5) weiterhin vorliegt. Die Estergruppe am C17-Atom ist in den Molekülen (3)–(5) ebenfalls weiterhin anwesend. Die Atome dieser Gruppe C28, O5, O6 und C31 sind koplanar, ihre Lage unterscheidet sich in (3)–(5) nur gering. Die Torsionswinkel C18—C17—C28—O5 betragen –14,5 (3) [Verbindung (3)], 1,7 (4) [Verbindung (4)] und –1,4 (3)° [Verbindung (5)].

Aus den Torsionswinkeln geht hervor, daß die Ringe B in (3) in der Bootform, in (4) und (5) in zwei verschiedenen alternativen Sesselformen vorliegen. Der Ring C nimmt in (3) Sofa-Konformation, in (4) eine gering deformierte Halbsesselform und in (5) eine Mittelform zwischen Halbsessel- und Sofa-Konformation ein [Verbindung (3): $\Delta C_s^{12} = 1,1$, $\Phi = 154,1$ (7)°;

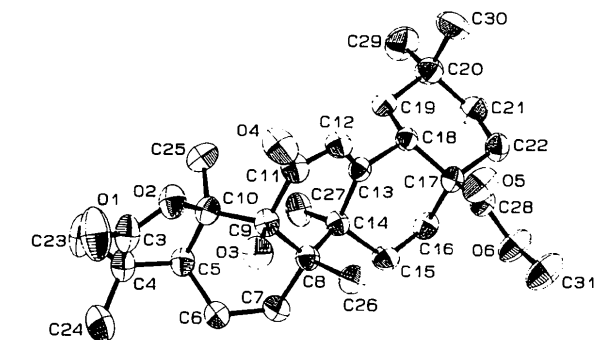


Abb. 1. Molekülstruktur von (3) (Wahrscheinlichkeitsniveau der Elipsoide 50%).

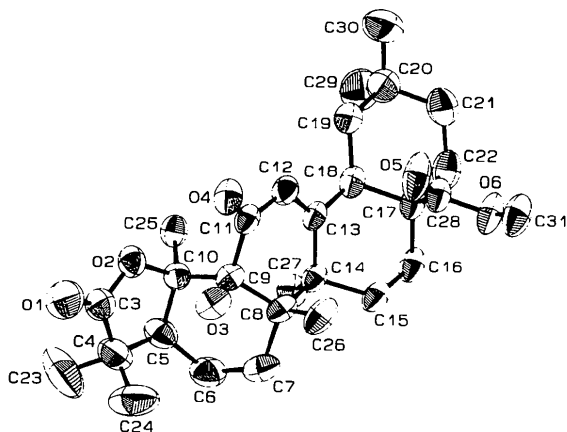


Abb. 2. Molekülstruktur von (4) (Wahrscheinlichkeitsniveau der Elipsoide 50%).

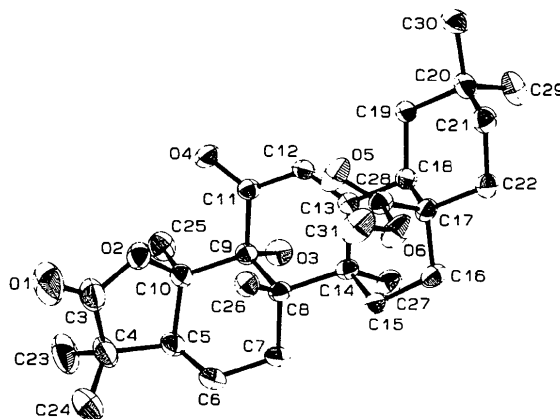


Abb. 3. Molekülstruktur von (5) (Wahrscheinlichkeitsniveau der Elipsoide 50%).

Verbindung (4): $\Delta C_s^{13} = 15,4$, $\Delta C_2^{12,13} = 4,9$, $\Phi = 150,1$ (6)°; Verbindung (5): $\Delta C_s^{12} = 10,9$, $\Delta C_2^{12,13} = 12,9$, $\Phi = 180,2$ (6)°]. Die Ringe D und E liegen in den drei Verbindungen in der Sesselform vor und sind in (4) und (5) ähnlich wie im Substrat (1) *trans*-, in (3) aber *cis*-verknüpft. Die Ebenenwinkel betragen 5,3 (1) [Verbindung (4)], 4,6 (1) [Verbindung (5)] und 57,9 (1)° [Verbindung (3)]. Im letzten Falle erfolgte somit unter Einwirkung von Natriumdichromat auf (1) eine Umwandlung von *trans*- zur *cis*-Verknüpfung der Ringe D/E, was unseres Erachtens zum ersten Mal bei Oleanolsäurederivaten beobachtet wurde.

In (3) und (4) nehmen die β -orientierten Hydroxylgruppen am C9-Atom eine Mittellage zwischen synplanarer und synklinarer Stellung zur C11=O4 Carbonylgruppe ein [O3—C9—C11—O4 –37,0 (3) und –24,3 (2)°], was die Bildung einer intramolekularen Wasserstoffbrücke O3—H(O3)··O4 ermöglicht (Tabelle 4). Die α -orientierte Hydroxylgruppe am C9-Atom in (5) nimmt dagegen eine Mittellage zwischen synklinarer und antiklinarer Stellung zur oben erwähnten Carbonylgruppe ein [O3—C9—C11—O4 96,9 (2)° und

beteiligt sich nur an einer intermolekularen Wasserstoffbrücke $O3-H(O3)\cdots O5^1$ (Tabelle 4). Die Mittel-lage zwischen synperiplanarer und synklinarer Stellung des $O3$ -Atoms der Hydroxylgruppe in (3) und (4) gegenüber dem $O2$ -Atom der Laktongruppe [$O3-C9-C10-O2$ 35,4 (2); 42,0 (2)°] führt zu kurzen Kontak-ten zwischen den erwähnten Atomen von 2,491 (2) Å [Verbindung (3)] und 2,530 (2) Å [Verbindung (4)]. Außerdem wurden folgende kurze Atomabstände zwis-chen $O3\cdots C6$ in (3) [2,858 (3) Å], $O3\cdots C26$ in (3) und (4) [2,619 (3); 2,666 (3) Å], $O3\cdots C25$ und $O3\cdots C27$ in (5) [2,645 (3); 2,853 (3) Å] beobachtet. Unseres Erachtens wurden Oleananderivate mit *cis* verknüpften *A/B* [(3)–(5)] und *B/C* Ringen [(3) und (4)] zum ersten Mal beschrieben.

Experimentelles

Die Herstellung von (2)–(5) wurde von Zaprutko (1996) beschrieben.

Verbindung (3)

Kristalldaten

$C_{29}H_{42}O_6$
 $M_r = 486,63$
 Orthorhombisch
 $P2_12_12_1$
 $a = 6,776$ (1) Å
 $b = 17,928$ (1) Å
 $c = 21,642$ (1) Å
 $V = 2629,1$ (4) Å³
 $Z = 4$
 $D_x = 1,229$ Mg m⁻³
 D_m nicht gemessen

Datensammlung

Kuma Diffraction KM-4
 Diffraktometer
 $\omega/2\theta$ Abtastung
 Absorptionskorrektur:
 keine
 5004 gemessene Reflexe
 4433 unabhängige Reflexe
 3964 Reflexe mit
 $I > 2\sigma(I)$

Verfeinerung

Verfeinerung auf F^2
 $R(F) = 0,0404$
 $wR(F^2) = 0,1224$
 $S = 1,061$
 4433 Reflexe
 321 Parameter
 H-Atomparameter nicht
 verfeinert, außer H(O3)
 $w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0735P)^2 + 0,1372P]$ wobei $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
 $(\Delta/\sigma)_{\max} = -0,002$

Cu $K\alpha$ Strahlung
 $\lambda = 1,54178$ Å
 Gitterparameter aus 53
 Reflexen
 $\theta = 14,0-30,0^\circ$
 $\mu = 0,678$ mm⁻¹
 $T = 293$ (2) K
 Nadel
 $0,50 \times 0,20 \times 0,10$ mm
 Farblos

$R_{\text{int}} = 0,0277$
 $\theta_{\max} = 70,17^\circ$
 $h = -8 \rightarrow 7$
 $k = 0 \rightarrow 21$
 $l = 0 \rightarrow 26$
 2 Kontrollreflexe
 alle 100 Reflexen
 Intensitätsschwankung:
 2,0%

$\Delta\rho_{\max} = 0,292$ e Å⁻³
 $\Delta\rho_{\min} = -0,245$ e Å⁻³
 Extinktionskorrektur:
 SHELXL93 (Sheldrick,
 1993)
 Extinktionskoeffizient:
 0,0053 (5)
 Atomformfaktoren aus
International Tables for
Crystallography (Vol. C)
 Absolute-Konfiguration:
 Flack (1983)
 Flack-Parameter = $-0,1$ (2)

Tabelle 1. Ausgewählte Geometrische Parameter (Å, °) für (3)

O1—C3	1,201 (3)	C3—C4	1,499 (4)
O2—C3	1,344 (3)	C4—C5	1,543 (3)
O2—C10	1,470 (2)	C5—C10	1,555 (3)
O3—C9	1,431 (3)	C11—C12	1,441 (3)
O4—C11	1,222 (3)	C12—C13	1,341 (3)
C3—O2—C10	112,0 (2)	O2—C10—C25	104,1 (2)
O2—C3—C4	111,2 (2)	O2—C10—C5	104,2 (2)
C3—C4—C5	102,9 (2)	C12—C11—C9	119,8 (2)
O3—C9—C11	105,6 (2)	C13—C12—C11	124,7 (2)
O3—C9—C10	106,3 (2)	C12—C13—C14	122,0 (2)
O3—C9—C8	106,4 (2)		

Verbindung (4)

Kristalldaten

$C_{29}H_{42}O_6$
 $M_r = 486,63$
 Monoklin
 $P2_1$
 $a = 10,303$ (1) Å
 $b = 6,864$ (1) Å
 $c = 18,844$ (1) Å
 $\beta = 90,88$ (1)°
 $V = 1332,5$ (2) Å³
 $Z = 2$
 $D_x = 1,213$ Mg m⁻³
 D_m nicht gemessen

Datensammlung

Kuma Diffraction KM-4
 Diffraktometer
 $\omega/2\theta$ Abtastung
 Absorptionskorrektur:
 keine
 5409 gemessene Reflexe
 4808 unabhängige Reflexe
 4446 Reflexe mit
 $I > 2\sigma(I)$

Verfeinerung

Verfeinerung auf F^2
 $R(F) = 0,0466$
 $wR(F^2) = 0,1398$
 $S = 1,051$
 4808 Reflexe
 321 Parameter
 H-Atomparameter nicht
 verfeinert, außer H(O3)
 $w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0993P)^2 + 0,1343P]$ wobei $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
 $(\Delta/\sigma)_{\max} = -0,032$

Tabelle 2. Ausgewählte Geometrische Parameter (Å, °) für (4)

O1—C3	1,202 (3)	C3—C4	1,496 (4)
O2—C3	1,331 (3)	C4—C5	1,546 (4)
O2—C10	1,463 (2)	C5—C10	1,549 (3)
O3—C9	1,417 (2)	C11—C12	1,439 (3)
O4—C11	1,227 (2)	C12—C13	1,335 (3)
C3—O2—C10	112,5 (2)	O3—C9—C10	104,9 (2)
O2—C3—C4	111,7 (2)	O2—C10—C5	104,4 (2)

Cu $K\alpha$ Strahlung

$\lambda = 1,54178$ Å
 Gitterparameter aus 49
 Reflexen
 $\theta = 15,0-30,0^\circ$
 $\mu = 0,669$ mm⁻¹
 $T = 293$ (2) K
 Nadel
 $0,50 \times 0,20 \times 0,14$ mm
 Farblos

$R_{\text{int}} = 0,0215$
 $\theta_{\max} = 70,30^\circ$
 $h = -12 \rightarrow 12$
 $k = -8 \rightarrow 8$
 $l = 0 \rightarrow 22$
 2 Kontrollreflexe
 alle 100 Reflexen
 Intensitätsschwankung:
 2,0%

$\Delta\rho_{\max} = 0,361$ e Å⁻³
 $\Delta\rho_{\min} = -0,184$ e Å⁻³
 Extinktionskorrektur:
 SHELXL93
 Extinktionskoeffizient:
 0,0006 (5)
 Atomformfaktoren aus
International Tables for
Crystallography (Vol. C)
 Absolute-Konfiguration:
 Flack (1983)
 Flack-Parameter = $0,2$ (2)

C3—C4—C5	104,1 (2)	C12—C11—C9	118,4 (2)
C4—C5—C10	104,9 (2)	C13—C12—C11	124,4 (2)
O3—C9—C11	108,1 (2)	C12—C13—C14	123,0 (2)
O3—C9—C8	107,29 (15)		

Verbindung (5)**Kristalldaten**

C ₂₉ H ₄₂ O ₆	Cu K α Strahlung
$M_r = 486,63$	$\lambda = 1,54178 \text{ \AA}$
Orthorhombisch	Gitterparameter aus 35 Reflexen
$P2_12_12_1$	$\theta = 15,0\text{--}30,0^\circ$
$a = 10,701 (1) \text{ \AA}$	$\mu = 0,696 \text{ mm}^{-1}$
$b = 12,771 (2) \text{ \AA}$	$T = 293 (2) \text{ K}$
$c = 18,751 (2) \text{ \AA}$	Nadel
$V = 2562,4 (5) \text{ \AA}^3$	$0,50 \times 0,20 \times 0,15 \text{ mm}$
$Z = 4$	Farblos
$D_x = 1,261 \text{ Mg m}^{-3}$	
D_m nicht gemessen	

Datensammlung

Kuma Diffraction KM-4	$R_{\text{int}} = 0,0183$
Diffraktometer	$\theta_{\text{max}} = 70,11^\circ$
$\omega/2\theta$ Abtastung	$h = -13 \rightarrow 13$
Absorptionskorrektur:	$k = -15 \rightarrow 15$
keine	$l = -22 \rightarrow 22$
5129 gemessene Reflexe	2 Kontrollreflexe
4527 unabhängige Reflexe	alle 100 Reflexen
3984 Reflexe mit	Intensitätsschwankung:
$I > 2\sigma(I)$	2,0%

Verfeinerung

Verfeinerung auf F^2	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0,220 \text{ e \AA}^{-3}$
$R(F) = 0,0411$	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0,283 \text{ e \AA}^{-3}$
$wR(F^2) = 0,1222$	Extinktionskorrektur:
$S = 1,086$	<i>SHELXL93</i>
4527 Reflexe	Extinktionskoeffizient:
321 Parameter	0,0009 (2)
H-Atomparameter nicht	Atomformfaktoren aus
verfeinert, außer H(O3)	<i>International Tables for</i>
$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0780P)^2$	<i>Crystallography</i> (Vol. C)
$+ 0,4294P]$ wobei $P =$	Absolute-Konfiguration:
$(F_o^2 + 2F_c^2)/3$	Flack (1983)
$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} < 0,001$	Flack-Parameter = $-0,1 (2)$

Tabelle 3. Ausgewählte Geometrische Parameter (\AA , $^\circ$) für (5)

O1—C3	1,192 (3)	C3—C4	1,521 (4)
O2—C3	1,351 (3)	C4—C5	1,552 (3)
O2—C10	1,468 (3)	C5—C10	1,555 (3)
O3—C9	1,432 (2)	C11—C12	1,460 (3)
O4—C11	1,218 (2)	C12—C13	1,335 (3)
C3—O2—C10	109,9 (2)	O3—C9—C10	105,5 (2)
O2—C3—C4	112,0 (2)	O2—C10—C5	102,9 (2)
C3—C4—C5	101,4 (2)	C12—C11—C9	116,4 (2)
C4—C5—C10	103,1 (2)	C13—C12—C11	125,5 (2)
O3—C9—C11	101,9 (2)	C12—C13—C14	121,6 (2)
O3—C9—C8	111,7 (2)		

Tabelle 4. Wasserstoff-Bindung Geometrie (\AA , $^\circ$)

Verbindung	D—H...A	D—H	H...A	D...A	D—H...A
(3)	O3—HO3...O4	0,98 (4)	2,09 (4)	2,638 (3)	113 (3)
(4)	O3—HO3...O4	1,01 (5)	1,90 (4)	2,610 (2)	125 (3)
(5)	O3—HO3...O5 ⁱ	0,80 (3)	2,23 (3)	2,982 (3)	156 (3)

Symmetriebezeichnung: (i) $-x, y - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z$.

Das H(O3)-Atom wurde in (3)–(5) aus Differenz-Fourier-Synthese ermittelt und isotrop verfeinert. Die Positionen der übrigen Wasserstoffatome wurden geometrisch berechnet; $U(\text{H}) = 1,1U_{\text{aq}}(\text{C})$.

Für alle Strukturen, Datensammlung: *Kuma KM-4 User's Guide* (Kuma, 1991); Zellverfeinerung: *Kuma KM-4 User's Guide*; Datenreduktion: *Kuma KM-4 User's Guide*; Lösung der Struktur: *SHELXS86* (Sheldrick, 1985); Verfeinerung der Struktur: *SHELXL93* (Sheldrick, 1993); Molekülgrafik: *ORTEPII* (Johnson, 1976); Programm für die Herrstellung von Veröffentlichungsmaterialien: *SHELXL93*.

Die Listen der Strukturparameter, anisotropen Verschiebungsparameter, Atomkoordinaten, und vollständigen geometrischen Daten sind bei der IUCr (Aktenzeichen: CF1142) hinterlegt. Kopien sind erhältlich durch: The Managing Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England.

Literatur

- Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876–881.
 Johnson, C. K. (1976). *ORTEPII*. Protokoll ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, VStA.
 Kuma (1991). *Kuma KM-4 User's Guide*. Kuma Diffraction, Wrocław, Polen.
 Sheldrick, G. M. (1985). *SHELXS86. Program for the Solution of Crystal Structures*. Universität Göttingen, Deutschland.
 Sheldrick, G. M. (1993). *SHELXL93. Program for Crystal Structure Refinement*. Universität Göttingen, Deutschland.
 Wrzeczono, U., Zaprutko, L., Budzianowski, J., Wójtowicz, H. & Dubowska, D. (1987). *Magn. Reson. Chem.* **25**, 223–226.
 Zaprutko, L. (1995). *Pol. J. Chem.* **69**, 1003–1012.
 Zaprutko, L. (1996). *Pol. J. Chem.* Im Druck.

Acta Cryst. (1997). **C53**, 264–266

Methyl 3-Deoxy- α -D-arabino-hexopyranoside

ARTEM G. EVDOKIMOV^a AND FELIX FROLOW^b

^aStructural Biology Department, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel, and ^bChemical Services Department, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel. E-mail: nf9501@ferret.weizmann.ac.il

(Received 15 July 1996; accepted 15 October 1996)

Abstract

The structure of the title compound, C₇H₁₄O₅, shows no deviations from the geometrical parameters of pyranose carbohydrates. Crystal packing contains a dense network of hydrogen bonds linking molecules in a three-dimensional network.