

Monoklin	Gitterparameter aus 47
C2	Reflexen
$a = 29,143 (4) \text{ \AA}$	$\theta = 14,9\text{--}27,3^\circ$
$b = 7,456 (2) \text{ \AA}$	$\mu = 0,696 \text{ mm}^{-1}$
$c = 14,855 (2) \text{ \AA}$	$T = 293 (2) \text{ K}$
$\beta = 116,33 (2)^\circ$	Nadel
$V = 2893,0 (10) \text{ \AA}^3$	$0,52 \times 0,18 \times 0,06 \text{ mm}$
$Z = 4$	Farblos
$D_x = 1,246 \text{ Mg m}^{-3}$	
$D_m$ nicht gemessen	
<b>Datensammlung</b>	
Kuma KM-4 Diffraktometer	$\theta_{\max} = 70,13^\circ$
$\omega$ - $2\theta$ Abtastung	$h = -32 \rightarrow 31$
Absorptionskorrektur:	$k = -8 \rightarrow 8$
keine	$l = 0 \rightarrow 16$
5708 gemessene Reflexe	2 Kontrollreflexe
5109 unabhängige Reflexe	alle 100 Reflexen
4677 Reflexe mit	Intensitätsschwankung:
$I > 2\sigma(I)$	3,4%
$R_{\text{int}} = 0,065$	
<b>Verfeinerung</b>	
Verfeinerung auf $F^2$	$\Delta\rho_{\max} = 0,25 \text{ e \AA}^{-3}$
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0,033$	$\Delta\rho_{\min} = -0,16 \text{ e \AA}^{-3}$
$wR(F^2) = 0,095$	Extinktionskorrektur:
$S = 1,038$	<i>SHELXL97</i> (Sheldrick, 1997a)
5109 Reflexe	Extinktionskoeffizient:
362 Parameter	0,00079 (12)
H atome: siehe unten	Atomformfaktoren aus
Berechnete Gewichten	<i>International Tables for</i>
$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0639P)^2 + 0,551P]$	<i>Crystallography</i> (Vol. C)
wobei $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$	Absolute Konfiguration:
$(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,002$	Flack (1983)
	Flack-Parameter = 0,09 (15)

Tabelle 1. Wasserstoff-Brücken-Geometrie ( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ ) für (2)

D—H...A	D—H	H...A	D...A	D—H...A
C1—H1A...O2	0,97	2,41	3,298 (2)	152
C1—H1B...O5	0,97	2,38	2,902 (2)	113
C25—H25C...O5	0,96	2,37	3,050 (2)	127
C32—H32B...O1'	0,96	2,40	3,124 (3)	132
C21—H21A...O3''	0,97	2,53	3,497 (2)	172

Symmetriebezeichnungen: (i)  $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, -z$ ; (ii)  $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, 1 - z$ .

Alle H-Atome wurden aus Differenz-Fourier-Synthesen ermittelt und mit Hilfe des Reitermodells verfeinert. Die H-Atome der Methylgruppen wurden als starre Gruppen betrachtet;  $U(\text{H}) = 1,2U_{\text{eq}}(\text{C})$ . Bei der Bestimmung der absoluten Konfiguration wurden 2238 Friedel-Reflexenpaare ausgewertet. Der Ursprung wurde nach der Methode von Flack & Schwarzenbach (1988) festgelegt.

Datensammlung: *Kuma KM-4 Software* (Kuma, 1991). Zellverfeinerung: *Kuma KM-4 Software*. Datenreduktion: *Kuma KM-4 Software*. Lösung der Strukturen: *SHELXS97* (Sheldrick, 1997b). Verfeinerung der Strukturen: *SHELXL97* (Sheldrick, 1997a). Molekülgrafik: *ORTEPII* (Johnson, 1976) und *PLUTO* (Motherwell & Clegg, 1978). Programm für die Herstellung von Veröffentlichungsmaterialien: *SHELXL97*.

Ich danke Dr hab. L. Zaprutko für die Überlassung der untersuchten Verbindung.

Ergänzende Daten für diese Veröffentlichung können vom elektronischen Archiv des IUCr (Referenz: JZ1358) bezogen werden. Zugangsmöglichkeiten für diese Daten werden auf der dritten Umschlagseite beschrieben.

## Literatur

- Cremer, D. & Pople, J. A. (1975). *J. Am. Chem. Soc.* **97**, 1354–1358.
- Duax, W. L. & Norton, D. A. (1975). In *Atlas of Steroid Structures*. New York: Plenum Press.
- Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876–881.
- Flack, H. D. & Schwarzenbach, D. (1988). *Acta Cryst.* **A44**, 499–506.
- Gzella, A. (1999). *Acta Cryst.* **C55**, 1730–1733.
- Gzella, A., Linkowska, E., Zaprutko, L. & Wrzeciono, U. (1999). *Acta Cryst.* **C55**, 1031–1034.
- Gzella, A., Wrzeciono, U. & Zaprutko, L. (1995). *Acta Cryst.* **C51**, 908–912.
- Gzella, A., Zaprutko, L. & Wrzeciono, U. (1997). *Acta Cryst.* **C53**, 261–264.
- Gzella, A., Zaprutko, L. & Wrzeciono, U. (1998). *Acta Cryst.* **C54**, 1309–1312.
- Gzella, A., Zaprutko, L., Wrzeciono, U. & Gdaniec, M. (1986). *Acta Cryst.* **C42**, 1859–1862.
- Gzella, A., Zaprutko, L., Wrzeciono, U. & Jaskolski, M. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 759–762.
- Johnson, C. K. (1976). *ORTEPII*. Bericht ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
- Kuma (1991). *Kuma KM-4 Software*. Kuma Diffraction, Wrocław, Polen.
- Motherwell, W. D. S. & Clegg, W. (1978). *PLUTO*. Program for Plotting Molecular and Crystal Structures. Universität Cambridge, England.
- Sheldrick, G. M. (1997a). *SHELXL97*. Program for the Refinement of Crystal Structures. Universität Göttingen, Deutschland.
- Sheldrick, G. M. (1997b). *SHELXS97*. Program for the Solution of Crystal Structures. Universität Göttingen, Deutschland.
- Zaprutko, L. (1994). *Pol. J. Chem.* **68**, 1753–1765.

*Acta Cryst.* (1999). **C55**, 2153–2156

## Triterpenoide. XVIII.† Kristallstrukturen von 2-Oxo- und 3-Oxo-18 $\beta$ -olean-12-en-28-säure-methylestern

ANDRZEJ GZELLA

*Lehrstuhl für Organische Chemie der K. Marcinkowski Universität der Medizinischen Wissenschaften Poznań, ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań, Polen. E-mail: akgzella@eucalyptus.usoms.poznan.pl*

(Eingegangen am 24. Mai 1999; angenommen am 8. September 1999)

## Abstract

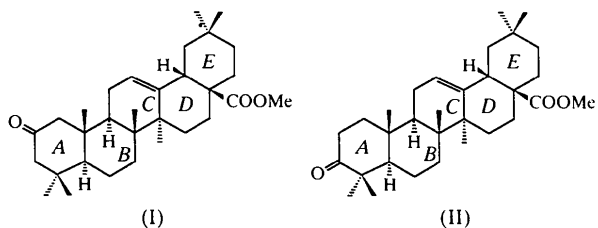
The X-ray crystal structure analyses of 2-oxo-18 $\beta$ -olean-12-en-28-oic acid methyl ester,  $\text{C}_{31}\text{H}_{48}\text{O}_3$ , (I)

† Teil XVII: Gzella (1999a).

and 3-oxo-18 $\beta$ -olean-12-en-28-oic acid methyl ester,  $C_{31}H_{48}O_3$ , (II), are described. These two isomeric triterpene derivatives differ in the structure of ring A and the orientation of the C17-ester group. In (I), ring A has a chair conformation, while in (II) ring A has a distorted flattened boat conformation. In both compounds ring C has an envelope conformation distorted towards a half-chair, rings B, D and E take a chair conformation and rings D and E are *cis*-fused.

### Kommentar

In dieser Mitteilung wird über die röntgenographisch aufgeklärten Strukturen von zwei Ketotriterpenderivaten und zwar von 2-Oxo- und 3-Oxo-18 $\beta$ -olean-12-en-28-säure-methylestern, (I) und (II), berichtet.



Die untersuchten isomeren Verbindungen (I) und (II) unterscheiden sich durch die Konformation des Ringes A. Im 2-Oxoderivat (I) liegt der Ring A, ähnlich wie in den von uns bereits beschriebenen 3-Acetoxy-12-oleanenderivaten (Gzella *et al.*, 1986, 1987), in der Sesselform vor (Tabelle 1). Bei dem 3-Oxoderivat (II) weisen die erhöhten  $U_{11}$  Komponente der anisotropen Verschiebungsfaktoren der C2, C3 und O1 Atome [ $U_{11} = 0,274(5)$ ,  $0,133(2)$  und  $0,422(7) \text{ \AA}^2$ ] im Ring A auf Fehlordnung und/bzw. thermische Schwingungen der erwähnten Atome hin. Demzufolge werden wesentliche Verkürzungen der Bindungslängen C2—C3 [ $1,422(4) \text{ \AA}$ ] und C3=O1 [ $1,179(3) \text{ \AA}$ ] um etwa 21 und  $10\sigma$  im Vergleich zu den Literaturdaten für die Bindungslängen  $Csp^3-Csp^2$  [ $1,509(1) \text{ \AA}$ ] und C=O [ $1,211(1) \text{ \AA}$ ] (Allen *et al.*, 1987) beobachtet. Die Konformation des Ringes A im 3-Oxoderivat (II) lässt sich als deformierte 'flattened boat' Konformation (FB<sup>3</sup>-K.; Tsuda & Kiuchi, 1984) bezeichnen. Die Verzerrung geht in Richtung auf eine Mittelform zwischen Halbsessel- und 1,3-Diplanar-Konformation hin [Cremer & Pople (1975) Puckering-Parameter:  $Q = 0,505(2) \text{ \AA}$ ,  $\theta = 60,9(3)^\circ$  und  $\varphi = 289,3(3)^\circ$ ; Tabelle 2].

Ein weiterer Unterschied in den Strukturen der Verbindungen (I) und (II) betrifft die Stellung der C17-Estergruppe. Die Atome C28, C31, O2 und O3 der erwähnten Gruppe sind in beiden Verbindungen koplanar, doch ihre Lage unterscheidet sich wesentlich. Die Torsionswinkel C18—C17—C28—O2 betragen  $150,62(16)^\circ$  [Verbindung (I)] und  $-22,4(2)^\circ$  [Verbindung (II)]. Die Carbonylgruppe C28=O2 weist dementsprechend in (I) eine Mittellage zwischen anti-

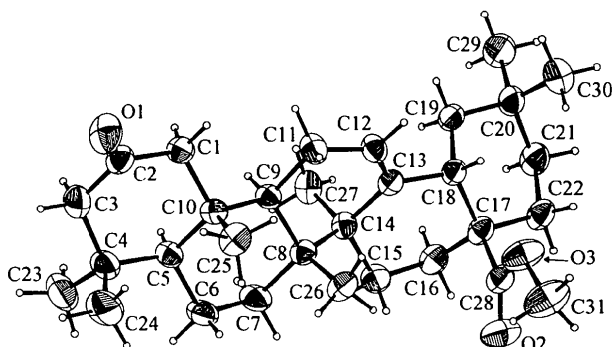


Abb. 1. Molekülstruktur von (I) (Wahrscheinlichkeitsniveau der Ellipsoide 50%).

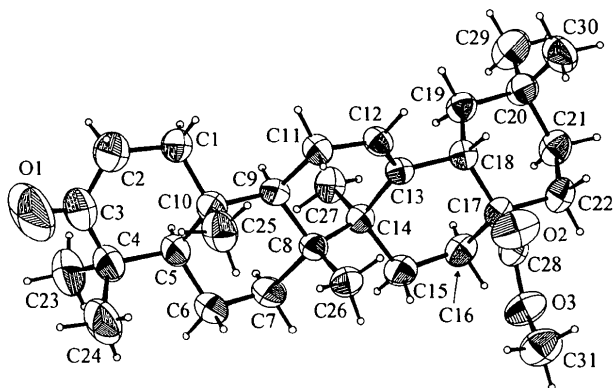


Abb. 2. Molekülstruktur von (II) (Wahrscheinlichkeitsniveau der Ellipsoide 50%).

klinarer und antiperiplanarer, in (II) dagegen eine Mittellage zwischen synperiplanarer und synklinarer Stellung zur C17—C18 Bindung auf.

Der Ring C mit der C12—C13 Doppelbindung [(I)  $1,324(2)$  und (II)  $1,322(2) \text{ \AA}$ ] liegt in beiden Verbindungen in der in Richtung der Halbsessel-Form verzerrten Halbboot-Konformation (Envelope-K.) vor [Cremer & Pople Puckering-Parameter für (I):  $Q = 0,571(1) \text{ \AA}$ ,  $\theta = 54,9(2)^\circ$  und  $\varphi = 351,72(19)^\circ$ ; für (II):  $Q = 0,547(2) \text{ \AA}$ ,  $\theta = 50,6(2)^\circ$  und  $\varphi = 9,8(2)^\circ$ ]. Die Ringe B, D und E nehmen in (I) und (II) Sesselkonformation ein. Die Ringe D/E sind *cis* verknüpft. Die Interplanarwinkel betragen  $56,40(5)^\circ$  [Verbindung (I)] und  $59,67(5)^\circ$  [Verbindung (II)].

Die relativ großen Bindungswinkel C4—C5—C10 im Ring A [(I)  $116,89(12)$  und (II)  $115,73(18)^\circ$ ] und C8—C9—C10 im Ring B [(I)  $117,02(11)$  und (II)  $118,21(12)^\circ$ ] wie auch die nichtbindenden Atomabstände zwischen den Kohlenstoffatomen C24/C25 und C25/C26 [(I)  $3,224(3)$  und  $3,203(2) \text{ \AA}$ ; (II)  $3,392(4)$  und  $3,363(3) \text{ \AA}$ ] sind durch sterische Abstoßung zwischen den axialen Methylgruppen C24, C25 und C26 hervorgerufen. Ähnliche Beobachtungen haben wir bereits in anderen Oleanolsäurederivaten gemacht (Gzella, 1999b; Gzella *et al.*, 1986, 1987, 1995, 1999).

**Experimentelles**

Die Herstellung der Verbindungen (I) und (II) wurde von Zaprutko (1995) und Ruzicka & Hofmann (1936) beschrieben.

**Verbindung (I)***Kristalldaten*M<sub>r</sub> = 468,69

Orthorhombisch

P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>

a = 11,3083 (12) Å

b = 13,5950 (12) Å

c = 17,9710 (14) Å

V = 2762,8 (4) Å<sup>3</sup>

Z = 4

D<sub>x</sub> = 1,127 Mg m<sup>-3</sup>D<sub>m</sub> nicht gemessen*Datensammlung*

Kuma Diffraction KM-4

Diffraktometer

ω-2θ Abtastung

Absorptionskorrektur:

keine

5247 gemessene Reflexe

4890 unabhängige Reflexe

4478 Reflexe mit

I &gt; 2σ(I)

*Verfeinerung*Verfeinerung auf F<sup>2</sup>R[F<sup>2</sup> > 2σ(F<sup>2</sup>)] = 0,031wR(F<sup>2</sup>) = 0,090

S = 1,058

4890 Reflexe

316 Parameter

H-Atome: siehe unten

Berechnete Gewichtungen

w = 1/[σ<sup>2</sup>(F<sub>o</sub><sup>2</sup>) + (0,0504P)<sup>2</sup>

+ 0,3475P] wobei

P = (F<sub>o</sub><sup>2</sup> + 2F<sub>c</sub><sup>2</sup>)/3(Δ/σ)<sub>max</sub> = 0,001

Cu-Kα Strahlung

λ = 1,54178 Å

Gitterparameter aus 45

Reflexen

θ = 15,3–26,8°

μ = 0,540 mm<sup>-1</sup>

T = 293 (2) K

Stäbchen

0,52 × 0,35 × 0,29 mm

Farblos

R<sub>int</sub> = 0,016θ<sub>max</sub> = 70,11°

h = -13 → 13

k = 0 → 16

l = 0 → 21

2 Kontrollreflexe

alle 100 Reflexen

Intensitätsschwankung:

2,6%

Δρ<sub>max</sub> = 0,17 e Å<sup>-3</sup>Δρ<sub>min</sub> = -0,14 e Å<sup>-3</sup>

Extinktionskorrektur:

SHELXL97 (Sheldrick, 1997)

Extinktionskoeffizient:

0,00185 (18)

Atomformfaktoren aus

International Tables for Crystallography (Vol. C)

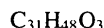
Absolute Konfiguration:

Flack (1983)

Flack-Parameter = 0,2 (2)

Tabelle 1. Geometrische Parameter (Å, °) für (I)

O1—C2	1,210 (2)	C3—C4	1,540 (2)
C1—C2	1,505 (2)	C4—C5	1,553 (2)
C1—C10	1,5496 (19)	C5—C10	1,5542 (18)
C2—C3	1,496 (2)		
C2—C1—C10	112,29 (12)	C3—C4—C5	108,91 (12)
C1—C2—C3	114,69 (13)	C4—C5—C10	116,89 (12)
C2—C3—C4	115,11 (14)	C1—C10—C5	108,61 (11)
C10—C1—C2—C3	-53,82 (17)	C3—C4—C5—C10	49,03 (17)
C1—C2—C3—C4	51,5 (2)	C2—C1—C10—C5	52,01 (16)
C2—C3—C4—C5	-46,61 (19)	C4—C5—C10—C1	-52,31 (16)

**Verbindung (II)***Kristalldaten*M<sub>r</sub> = 468,69

Cu-Kα Strahlung

λ = 1,54178 Å

Orthorhombisch

P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>

a = 6,8765 (12) Å

b = 13,6070 (14) Å

c = 29,118 (3) Å

V = 2724,5 (6) Å<sup>3</sup>

Z = 4

D<sub>x</sub> = 1,143 Mg m<sup>-3</sup>D<sub>m</sub> nicht gemessen*Datensammlung*

Kuma Diffraction KM-4

Diffraktometer

ω-2θ Abtastung

Absorptionskorrektur:

keine

5352 gemessene Reflexe

4945 unabhängige Reflexe

4326 Reflexe mit

I &gt; 2σ(I)

*Verfeinerung*Verfeinerung auf F<sup>2</sup>R[F<sup>2</sup> > 2σ(F<sup>2</sup>)] = 0,037wR(F<sup>2</sup>) = 0,111

S = 1,045

4945 Reflexe

315 Parameter

H-Atome: siehe unten

Berechnete Gewichtungen

w = 1/[σ<sup>2</sup>(F<sub>o</sub><sup>2</sup>) + (0,0663P)<sup>2</sup>

+ 0,2904P] wobei

P = (F<sub>o</sub><sup>2</sup> + 2F<sub>c</sub><sup>2</sup>)/3

Gitterparameter aus 57

Reflexen

θ = 15,3–29,0°

μ = 0,548 mm<sup>-1</sup>

T = 293 (2) K

Nadel

0,53 × 0,25 × 0,16 mm

Farblos

R<sub>int</sub> = 0,012θ<sub>max</sub> = 70,12°

h = -7 → 7

k = 0 → 16

l = 0 → 35

2 Kontrollreflexe

alle 100 Reflexen

Intensitätsschwankung:

2,0%

(Δ/σ)<sub>max</sub> < 0,001Δρ<sub>max</sub> = 0,15 e Å<sup>-3</sup>Δρ<sub>min</sub> = -0,14 e Å<sup>-3</sup>

Extinktionskorrektur: keine

Atomformfaktoren aus

International Tables for Crystallography (Vol. C)

Absolute Konfiguration:

Flack (1983)

Flack-Parameter = -0,1 (3)

Tabelle 2. Geometrische Parameter (Å, °) für (II)

O1—C3	1,179 (3)	C3—C4	1,513 (4)
C1—C2	1,486 (3)	C4—C5	1,564 (3)
C1—C10	1,543 (2)	C5—C10	1,538 (3)
C2—C3	1,422 (4)		
C2—C1—C10	114,71 (18)	C3—C4—C5	112,21 (16)
C3—C2—C1	121,3 (2)	C4—C5—C10	115,73 (18)
C2—C3—C4	122,5 (2)	C1—C10—C5	107,39 (16)
C10—C1—C2—C3	-17,4 (6)	C3—C4—C5—C10	31,4 (3)
C1—C2—C3—C4	-11,7 (6)	C2—C1—C10—C5	49,7 (3)
C2—C3—C4—C5	4,6 (4)	C4—C5—C10—C1	-57,7 (2)

Alle H-Atome wurden in (I) und (II) aus Differenz-Fourier-Synthesen ermittelt und mit Hilfe des Reitermodells verfeinert. Die H-Atome der Methylgruppen wurden als starre Gruppen betrachtet; U<sub>iso</sub>(H) = 1,2U<sub>äq</sub>(C). Bei der Bestimmung der absoluten Konfiguration von (I) und (II) wurden 1925 bzw. 2040 Friedel-Reflexenpaare ausgewertet.

Beide Verbindungen, Datensammlung: *KM-4 Software* (Kuma, 1991); Zellverfeinerung: *KM-4 Software*; Datenreduktion: *KM-4 Software*; Lösung der Strukturen: *SHELXS97* (Sheldrick, 1990); Verfeinerung der Strukturen: *SHELXL97* (Sheldrick, 1997); Molekülgrafik: *ORTEPII* (Johnson, 1976); Programm für die Herstellung von Veröffentlichungsmaterialien: *SHELXL97*.

Ich danke Dr L. Zaprutko für die Überlassung der untersuchten Verbindungen.

Ergänzende Daten für diese Veröffentlichung können vom elektronischen Archiv des IUCr (Referenz: JZ1361) bezogen werden. Zugangsmöglichkeiten für diese Daten werden auf der dritten Umschlagseite beschrieben.

## Literatur

- Allen, F. H., Kennard, O., Watson, D. G., Brammer, L., Orpen, A. G. & Taylor, R. (1987). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, pp. S1–S19.
- Cremer, D. & Pople, J. A. (1975). *J. Am. Chem. Soc.* **97**, 1354–1358.
- Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876–881.
- Gzella, A. (1999a). *Acta Cryst.* **C55**. Im Druck.
- Gzella, A. (1999b). *Acta Cryst.* **C55**, 1730–1733.
- Gzella, A., Linkowska, E., Zaprutko, L. & Wrzeciono, U. (1999). *Acta Cryst.* **C55**, 1031–1034.
- Gzella, A., Wrzeciono, U. & Zaprutko, L. (1995). *Acta Cryst.* **C51**, 908–912.
- Gzella, A., Zaprutko, L., Wrzeciono, U. & Gdaniec, M. (1986). *Acta Cryst.* **C42**, 1859–1862.
- Gzella, A., Zaprutko, L., Wrzeciono, U. & Jaskolski, M. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 759–762.
- Johnson, C. K. (1976). *ORTEP II*. Bericht ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
- Kuma (1991). *KM-4 Software. User's Guide*. Version 1991t. Kuma Diffraction, Wrocław, Polen.
- Ruzicka, L. & Hofmann, K. (1936). *Helv. Chim. Acta*, **19**, 114–128.
- Sheldrick, G. M. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, 467–473.
- Sheldrick, G. M. (1997). *SHELXL97. Program for the Refinement of Crystal Structures*. Universität Göttingen, Deutschland.
- Tsuda, Y. & Kiuchi, F. (1984). *Chem. Pharm. Bull.* **32**, 4806–4819.
- Zaprutko, L. (1995). *Pol. J. Chem.* **69**, 1003–1012.

*Acta Cryst.* (1999). **C55**, 2156–2158

## 3,5,5-Triphenyl-4,5-dihydro-1,2,4-oxadiazole

WOJCIECH SZCZEPANKIEWICZ,<sup>a</sup> JERZY SUWIŃSKI<sup>a</sup> AND JOANNA SŁOWIKOWSKA<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>Institute of Organic Chemistry and Technology, Silesian Technical University, Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice, Poland, and <sup>b</sup>Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa, Poland. E-mail: jms@ichf.edu.pl

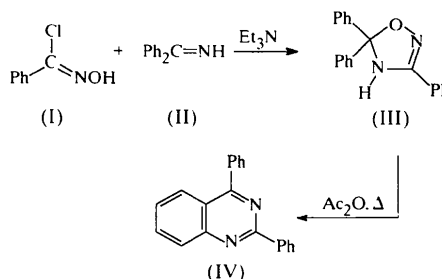
(Received 20 July 1999; accepted 30 September 1999)

## Abstract

Reaction of benzophenone imine with benzeneoximoyl chloride performed in the presence of triethylamine in diethyl ether affords the title compound, C<sub>20</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O. In the crystalline state, the product exists in two conformations differing in the orientation of the 3-phenyl substituent with respect to the heterocyclic ring. N—H···N hydrogen bonds link the molecules into chains parallel to the *b* axis.

## Comment

Benzeneoximoyl chloride, (I), in the presence of triethylamine yields benzonitrile *N*-oxide which, by undergoing a 1,3-dipolar cycloaddition reaction to benzophenone imine, (II), should easily give 3,5,5-triphenyl-4,5-dihydro-1,2,4-oxadiazole, (III) (De Micheli *et al.*, 1974). The latter when treated with hot acetic anhydride gave 2,4-triphenylquinazoline, (IV), in good yield. As it was expected that (III) would be acylated on the N atom, we suspected that transformation of (III) to (IV) either must have involved *O*-acetylation or the assumption concerning the structure of (III) must have been incorrect. The rather unexpected result of the overall reaction encouraged us to verify unequivocally the identity of (III) using crystallographic methods.



X-ray diffraction analysis of (III) has ultimately proved its structure as 3,5,5-triphenyl-4,5-dihydro-1,2,4-oxadiazole. Compound (III) exists as two conformers in the crystalline state. The key difference is the orientation of the phenyl substituent at C1 with respect to the five-membered ring. The dihedral angles between the phenyl and heterocyclic rings are 31.1 (1) and 27.1 (1)° for the first (C1–N5 and C6–C11) and the second conformer (C1A–N5A and C6A–C11A), respectively. The molecules also show slight differences in the C1–N2–C3 valence angle and in the C1–N2 bond length. It is worth noting that the latter is considerably shortened compared with a C–N single bond and can be classified as aromatic. This effect may be ascribed to the ‘background delocalization phenomenon’ (Słowikowska *et al.*, 1998) associated with the presence of a C=N double bond at C1. In both conformers, the heterocyclic ring is not planar but adopts a three-envelope conformation, as confirmed by the asymmetry parameters ( $\Delta C_3^3 = 0.3$ ,  $\Delta C_2^1 = 8.386$ ;  $\Delta C_5^{3A} = 1.651$ ,  $\Delta C_2^{5A} = 8.065^\circ$ ; Duax & Norton, 1975).

The molecules are involved in intermolecular N—H···N hydrogen bonds connecting translationally related molecules in infinite chains parallel to the *b* axis. Along *a*, chains formed alternately by the two conformers are ordered in an *A–B–A–B* fashion running, accordingly, in opposite directions. Additionally, several weaker intermolecular C—H···O, C—H···N and N—H···O contacts occur. Based on the criteria given by Pedireddi & Desiraju (1992), most of them also qualify as very weak hydrogen bonds.