

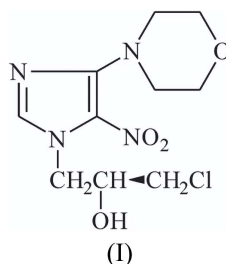
Andrzej Gzella,\* Justyna  
Żwawiak and Lucjusz ZaprutkoLehrstuhl für Organische Chemie der K.  
Marcinkowski Universität der Medizinischen  
Wissenschaften Poznań, ul. Grunwaldzka 6,  
60-780 Poznań, Polen

Correspondence e-mail: akgzella@amp.edu.pl

## Key indicators

Single-crystal X-ray study  
 $T = 293$  K  
Mean  $\sigma(\text{C}-\text{C}) = 0.004$  Å  
 $R$  factor = 0.044  
 $wR$  factor = 0.123  
Data-to-parameter ratio = 11.7For details of how these key indicators were  
automatically derived from the article, see  
<http://journals.iucr.org/e>.**(S)-(-)-3-Chlor-1-(4-morpholino-5-nitro-1*H*-imidazol-1-yl)propan-2-ol**The optically active title morpholinonitroimidazole derivative,  $\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{ClN}_4\text{O}_4$ , was synthesized and the absolute configuration has been determined as *S*.Eingegangen am 15. November  
2005  
Angenommen am 17. November  
2005  
Internet 23. November 2005Azole, Teil L.  
Teil XLIX: Gzella *et al.* (2005).

## Kommentar

Die Einwirkung von *R*-(-)-Epichlorhydrin auf 4,5-Dinitroimidazol führt zum optisch aktiven 3-Chlor-1-(4,5-dinitroimidazol-1-yl)propan-2-ol. Bei der Umsetzung dieser Verbindung mit Morpholin im Molverhältnis von 1:2 entsteht (-)-3-Chlor-1-(4-morpholino-5-nitroimidazol-1-yl)propan-2-ol, (I).Die Röntgenstrukturanalyse ergibt, daß das asymmetrische Kohlenstoffatom  $\text{C}7$  *S*-konfiguriert ist (Abbildung 1). Die Torsionswinkel  $\text{N}1-\text{C}6-\text{C}7-\text{O}10$  und  $\text{O}10-\text{C}7-\text{C}8-\text{C}19$  betragen  $-60,2$  (3) und  $-62,5$  (3)°.Das *R*-Isomer dieser Verbindung ist bereits von uns beschrieben worden (Gzella *et al.*, 2005).

## Experimentelles

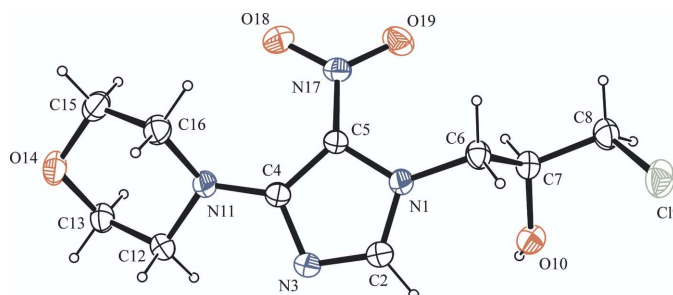
Verbindung (I), Schmp. 423–427 K,  $[\alpha]_D = -57,90^\circ$  ( $c = 0,30$ ;  $\text{CHCl}_3$ ), wurde nach der Methode von Żwawiak *et al.* (2000) hergestellt. Die Einkristalle wurden aus Methanol erhalten.

Abbildung 1

Molekülstruktur von (I) mit Nummerierung. (Wahrscheinlichkeitsniveau der Ellipsoide 30%.)

*Kristalldaten*

C<sub>10</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>4</sub>O<sub>4</sub>  
*M<sub>r</sub>* = 290,71  
 Monoklin, *P*<sub>2</sub><sub>1</sub>  
*a* = 9,677 (2) Å  
*b* = 5,2910 (10) Å  
*c* = 12,818 (3) Å  
 β = 106,45 (3)°  
*V* = 629,4 (2) Å<sup>3</sup>  
*Z* = 2

*D<sub>x</sub>* = 1,534 Mg m<sup>-3</sup>  
 Cu-Kα-Strahlung  
 Gitterparameter aus 42  
 Reflexen  
 θ = 9,7–27,0°  
 μ = 2,88 mm<sup>-1</sup>  
*T* = 293 (2) K  
 Nadel, gelb  
 0,60 × 0,08 × 0,05 mm

*Datensammlung*

Kuma KM-4 Diffraktometer  
 ω/2θ Scans  
 Absorptionskorrektur: ψ-Scan  
 (North *et al.*, 1968)  
*T<sub>min</sub>* = 0,401, *T<sub>max</sub>* = 0,866  
 2272 gemessene Reflexe  
 2229 unabhängige Reflexe  
 1953 Reflexe mit *I* > 2σ(*I*)

*R<sub>int</sub>* = 0,061  
 θ<sub>max</sub> = 70,2°  
*h* = -11 → 11  
*k* = -6 → 6  
*l* = 0 → 15  
 2 Kontrollreflexe  
 alle 100 Reflexen  
 Intensitätsschwankung: 2,6%

*Verfeinerung*

Verfeinerung auf *F*<sup>2</sup>  
*R*[*F*<sup>2</sup> > 2σ(*F*<sup>2</sup>)] = 0,044  
*wR*(*F*<sup>2</sup>) = 0,123  
*S* = 1,09  
 2229 Reflexe  
 191 Parameter  
 H-Atome: s.u.  
 Berechnete Gewichtungen  
*w* = 1/[σ<sup>2</sup>(*F<sub>o</sub>*<sup>2</sup>) + (0,0961*P*)<sup>2</sup>]  
 wobei *P* = (*F<sub>o</sub>*<sup>2</sup> + 2*F<sub>c</sub>*<sup>2</sup>)/3

(Δ/σ)<sub>max</sub> < 0,001  
 Δρ<sub>max</sub> = 0,42 e Å<sup>-3</sup>  
 Δρ<sub>min</sub> = -0,46 e Å<sup>-3</sup>  
 Extinktionskorrektur: *SHELXL97*  
 (Sheldrick, 1997)  
 Extinktionskoeffizient: 0,013 (2)  
 Absolute Konfiguration: Flack  
 (1983), mit 950 Friedel-Reflex-  
 paare  
 Flack-Parameter = 0,00 (2)

Das H-Atom der Hydroxylgruppe wurde frei verfeinert. Weiterhin wurden die isotropen Auslenkungsparameter aller H-Atome verfeinert; die C–H Bindungslängen wurden auf Werte zwischen 0,93 Å und 0,98 Å anhand einer Reitmodell gesetzt.

Datensammlung: *KM-4 Software* (Kuma, 1996); Zellverfeinerung: *KM-4 Software*; Datenreduktion: *KM-4 Software*; Lösung der Struktur: *SHELXS97* (Sheldrick, 1997); Verfeinerung der Struktur: *SHELXL97* (Sheldrick, 1997); Molekülgrafik: *ORTEP-3 for Windows* (Farrugia, 1997); Programm für die Herstellung von Veröffentlichungsmaterialien: *WinGX* (Farrugia, 1999).

**Literatur**

Farrugia, L. J. (1997). *J. Appl. Cryst.* **30**, 565.  
 Farrugia, L. J. (1999). *J. Appl. Cryst.* **32**, 837–838.  
 Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876–881.  
 Gzella, A., Żwawiak, J. & Zaprutko, L. (2005). *Acta Cryst.* **E61**, o4071–o4072.  
 Kuma Diffraction (1996). *KM-4 Software*. Version 8.0.1. Kuma Diffraction, Wrocław, Polen.  
 North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.  
 Sheldrick, G. M. (1997). *SHELXS97* und *SHELXL97*. Release 97–2. Universität Göttingen, Deutschland.  
 Żwawiak, J., Gzella, A. & Wrzeciono, U. (2000). *The XLIIIth Meeting of the Polish Chemical Society*, Łódź, September 10–15, Abstracts, pp. 176.