

*Acta Cryst.* (1965). **18**, 820

**Crystallographic data for some idose derivatives.** By SHIRLEY S. C. CHU and G. A. JEFFREY, *The Crystallography Laboratory, The University of Pittsburgh, Pittsburgh 13, Pa., U.S.A.*

(Received 25 September 1964)

The suggestion by Bentley (1960) that the  $\beta$ -idopyranoside molecules exist in solution in a half-chair configuration, *HC3*, has prompted the examination of the crystal data of some methylbenzal derivatives. The data are given in Table 1. They were measured from single-crystal oscillation and Weissenberg photographs with Cu  $K\alpha$  radiation. The limits on the unit-cell dimensions are  $\pm 0.05\%$ . The densities were measured by flotation. The space groups were determined from the systematic extinctions. The derivative with the short *c* axis is being further studied.

This work was supported by U.S.P.H. grant No. GM 11293.

#### References

BENTLEY, R. (1960), *J. Amer. Chem. Soc.* **82**, 2811.

Table 1. *Crystal data of some methylbenzal idosides*

|                      | Methyl-4,<br>6-benzal<br>$\alpha$ -D-idoside          | Methyl-4,<br>6-benzal<br>$\beta$ -D-idoside<br>H <sub>2</sub> O | Methyl-4,<br>6-benzal-<br>-3-methyl<br>$\beta$ -idoside | 2, 3-dimethyl-<br>-4, 6-benzal-<br>methyl<br>$\beta$ -idoside |
|----------------------|-------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| <i>a</i>             | 16.72                                                 | 22.22                                                           | 22.38                                                   | 20.76                                                         |
| <i>b</i>             | 10.21                                                 | 11.31                                                           | 13.00                                                   | 9.10                                                          |
| <i>c</i>             | 7.92                                                  | 11.05                                                           | 5.00                                                    | 8.40                                                          |
| <i>D<sub>m</sub></i> | 1.389                                                 | 1.386                                                           | 1.359                                                   | 1.295                                                         |
| <i>D<sub>x</sub></i> | 1.387                                                 | 1.389                                                           | 1.353                                                   | 1.299                                                         |
| <i>Z</i>             | 4                                                     | 8                                                               | 4                                                       | 4                                                             |
| Space<br>group       | <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> | <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>           | <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>   | <i>P</i> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>         |

*Acta Cryst.* (1965). **18**, 820

**Données cristallographiques sur quelques diamides organiques.** Par MICHEL HOSPITAL et JACQUES HOUSTY. *Laboratoire de Minéralogie et Cristallographie Physique, Faculté des Sciences de Bordeaux, France*

(Reçu le 5 octobre 1964)

#### Malonamide, CONH<sub>2</sub> · CH<sub>2</sub> · CONH<sub>2</sub>

Le malonamide cristallise à partir d'une solution aqueuse dans le système monoclinique sous forme de fines et longues aiguilles transparentes allongées suivant la direction [001].

Les paramètres obtenus par oscillation d'un cristal autour de sa rangée [001] dans une chambre de Bragg sont les suivants:

$$a = 13,63 \pm 0,02, \quad b = 9,47 \pm 0,01, \\ c = 8,06 \pm 0,01 \text{ \AA}, \quad \beta = 113^\circ 10'$$

Nombre de molécules par maille: 8

Densité calculée: 1,416

Groupe spatial: *P*2<sub>1</sub>/*c*

#### Adipamide, CONH<sub>2</sub> · (CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub> · CONH<sub>2</sub>

L'adipamide est obtenu sous forme d'aiguilles cristallines par sublimation. La direction d'allongement est [010] dans le système monoclinique.

Les paramètres sont les suivants:

$$a = 6,89 \pm 0,01, \quad b = 5,14 \pm 0,01, \\ c = 10,67 \pm 0,01 \text{ \AA}; \quad \beta = 111^\circ$$

*Acta Cryst.* (1965). **18**, 820

**The crystal structure of lithium glycollate monohydrate.** By R. H. COLTON and D. E. HENN, *Basic Physics Division, National Physical Laboratory, Teddington, Middlesex, England*

(Received 20 October 1964)

#### Introduction

Pooley & Whiffen (1961) have studied by electron spin resonance the  $\dot{\text{H}}\text{C}(\text{OH})\text{CO}_2^-$  radical-ion in  $\gamma$ -irradiated crystals of both anhydrous lithium glycollate and its mono-

Nombre de molécules par maille: 2

Densité calculée: 1,367

Groupe spatial: *P*2/*c*

#### Suberamide, CONH<sub>2</sub> · (CH<sub>2</sub>)<sub>6</sub> · CONH<sub>2</sub>

Le suberamide cristallise à partir d'une solution dans un mélange d'alcools amylique, propylique et éthylique, sous forme de plaquettes facilement clivables suivant la direction [010]. Le système est monoclinique.

Les paramètres obtenus par oscillation d'un cristal dans une chambre de Bragg sont les suivants:

$$a = 14,44 \pm 0,02, \quad b = 5,13 \pm 0,01, \\ c = 14,17 \pm 0,02 \text{ \AA}; \quad \beta = 117^\circ 30'$$

Nombre de molécules par maille: 4

Densité calculée: 1,225

Groupe spatial: *C*2/*c*

Toutes les mesures cristallographiques ont été réalisées avec la radiation Cu  $K\alpha$ .

La détermination des structures cristallines de ces composés est actuellement en cours.

hydrate. In order to resolve the ambiguity of the sign of the isotropic H(O) coupling it was necessary to determine the structure of one of these crystals. This paper describes the determination of the crystal structure of the monohydrate.