

Tableau 2. *Contacts intermoléculaires courts*

$A-H \cdots B$	$A \cdots B$	$\angle A-H \cdots B$
C(24)—H(24a)···O(25 <sup>i</sup> )	2,44 (4) Å	169 (5)°
C(12)—H(12)···O(25 <sup>ii</sup> )	2,50 (4)	161 (5)
C(24)—H(24b)···C(6 <sup>iii</sup> )	2,71 (4)	137 (5)
C(24)—H(24b)···C(7 <sup>m</sup> )	2,87 (4)	153 (4)

Code de symétrie: (i)  $1 - x, 1 - y, -z$ ; (ii)  $1 - x, -y, -z$ ; (iii)  $1 - x, 1 - y, 1 - z$ .

La désignation des atomes, les principales longueurs de liaisons, les principaux angles de valence, les angles de torsion de la chaîne sont regroupés Fig. 1(a,b). La Fig. 2 est une représentation stéréoscopique de la molécule obtenue à l'aide du programme *ORTEP* (Johnson, 1965). Le Tableau 2 donne les contacts intermoléculaires courts.

**Discussion.** La cohésion du cristal est assurée par des liaisons de van der Waals. L'énergie d'interaction intermoléculaire pour des contacts inférieurs à 5,5 Å calculée à l'aide des potentiels de Coiro, Giglio, Lucano & Puliti (1973) prend pour valeur  $-249 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Les atomes C(18), C(19), C(20) sont en dehors du plan moyen défini par les atomes C(6) à C(17) de la chaîne polyénique; leurs distances respectives à ce plan sont: 0,33 (1); 0,26 (1); 0,67 (1) Å. Cette chaîne est constituée par alternance de liaisons de longueur moyenne 1,444 (6) Å et de doubles liaisons de longueur moyenne 1,345 (6) Å. Toutes les doubles liaisons sont de

configuration *E* et les simples liaisons dans une conformation *s-trans* à l'exception de la dernière qui est *s-cis*. Les angles C—C—C de la chaîne ont des valeurs supérieures à 126° pouvant même atteindre 131° et 135° du côté des méthyles C(21) et C(22). Du côté opposé à ces deux méthyles, les angles C—C—C sont voisins de 120°. En moyenne, les distances C—CH<sub>3</sub> pour les quatre méthyles attachés à la chaîne ont pour valeur 1,506 (6) Å.

Nos résultats sont en parfait accord avec l'étude faite préalablement par RMN [<sup>1</sup>H (270 MHz)] et <sup>13</sup>C (Rebuffat *et al.*, 1980) et précisent la conformation de la chaîne polyéthylénique.

### Références

- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Report ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- COIRO, V. M., GIGLIO, E., LUCANO, A. & PULITI, R. (1973). *Acta Cryst.* B29, 1404–1409.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- MAIN, P., LESSINGER, L., WOOLFSON, M. M., GERMAIN, G. & DECLERCQ, J. P. (1977). *MULTAN. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
- MORNON, J. P., LEPICARD, G. & DELETTRE, J. (1981). En préparation.
- REBUFFAT, S., DAVOUST, D., MOLHO, L. & MOLHO, D. (1980). *Phytochemistry*, 19, 427–431.

*Acta Cryst.* (1982). B38, 1626–1629

## Structure du Chlorure de L-Tyrosyl-L-phénylalanine

PAR MICHEL COTRAIT, YVETTE BARRANS ET FRANÇOISE LEROY

Laboratoire de Cristallographie et Physique Cristalline (LA 144, CNRS), 351 cours de la Libération, 33405 Talence CEDEX, France

(Reçu le 27 octobre 1981, accepté le 15 décembre 1981)

**Abstract.** L-Tyr-L-Phe.HCl, C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub><sup>+</sup>.Cl<sup>-</sup>, monoclinic, *P*2<sub>1</sub>,  $a = 10.432 (4)$ ,  $b = 10.188 (3)$ ,  $c = 8.561 (3)$  Å,  $\beta = 94.45 (2)^\circ$ ,  $V = 907.1 \text{ Å}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $D_c = 1.335 \text{ Mg m}^{-3}$ . The structure has been solved by direct methods and the final *R* value is 0.045 for 1810 reflexions. This dipeptide exists as a cation which is bound to the neighbouring cations and Cl<sup>-</sup> ions through a few hydrogen bonds. The molecular conformation is a rather stretched one; the Phe residue is in a similar conformation to that of the Tyr residue in the dipeptide *N*-acetyl-L-Phe-L-Tyr. The dipeptide L-Tyr-

L-Tyr, C<sub>18</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, is orthorhombic, *C*222<sub>1</sub>, with  $a = 12.118 (3)$ ,  $b = 12.800 (4)$ ,  $c = 24.523 (3)$  Å,  $V = 3803.8 \text{ Å}^3$ ,  $Z = 8$ , and  $D_c = 1.202 \text{ Mg m}^{-3}$ ; its structure has not been solved yet.

**Introduction.** Dans la séquence de plusieurs peptides biologiques importants, on note la présence de deux restes aromatiques contigus: par exemple, Phe-Phe dans la substance *P*, la somatostatine et le fibrinopeptide B; Phe-His dans l'angiotensine et le CRF; His-Phe dans l'ACTH; Tyr-Phe dans la vasopressine;

Phe-Tyr dans l'élédoisine; ... La juxtaposition de deux restes aromatiques encombrants se traduit par une liberté conformationnelle restreinte due à la gêne stérique entre chaînes latérales. Actuellement, on ne connaît que deux structures cristallines de dipeptides de ce type: *N*-acétyl-L-Phe-L-Tyr (Stenkamp & Jensen, 1973) et *N*-(haloacétyl)-L-Phe-L-Phe-O-Et (Wei, Doherty & Einstein, 1972), tous deux substrats de la pepsine.

C'est pourquoi nous avons tenté de déterminer la structure cristalline des deux dipeptides suivants: L-Tyr-L-Tyr et L-Tyr-L-Phe.HCl, pour lesquels les mesures de diffraction ont été faites sur diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4, en utilisant la radiation Cu  $K\alpha$  monochromatisée.

Le dipeptide L-Tyr-L-Tyr, dissous dans un mélange méthanol-eau, a cristallisé par diffusion de méthanol dans la solution. La structure cristalline n'a pu être résolue ni par les méthodes directes avec le programme *MULTAN* 1978 (Main, Woolfson, Lessinger, Germain & Declercq, 1978), ni par analyse de la fonction de Patterson. Un fragment de la molécule,  $N-C_\alpha-C_\beta-C_6H_4-O$ , seulement apparaît sur les synthèses de Fourier, le cycle phénol étant pratiquement parallèle au plan  $yOz$  avec une cote moyenne  $x$  proche de 0,25.

Le composé L-Tyr-L-Phe.HCl a cristallisé par lente évaporation d'une solution chlorhydrique 0,1 *M* en présence de HCl 1 *M*. Les paramètres cristallins ont été

Tableau 1. Coordonnées atomiques ( $\times 10^4$ ) avec leurs écarts-type et les facteurs de température équivalents (atomes d'hydrogène exceptés)

$$B_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} a_i \cdot a_j$$

	$x$	$y$	$z$	$B_{eq}$ ( $\text{\AA}^2$ )
Cl(50)	4188 (1)	3487	4487 (1)	3,4 (0)
N(1)	3460 (3)	-1057 (4)	7120 (3)	2,9 (1)
C(2)	3633 (3)	671 (4)	6931 (3)	2,5 (1)
C(3)	2525 (3)	1589 (5)	7504 (4)	3,3 (2)
C(4)	1209 (3)	1419 (5)	6739 (3)	3,0 (1)
C(5)	160 (3)	637 (5)	7231 (4)	3,2 (1)
C(6)	-1062 (3)	554 (5)	6545 (4)	3,1 (1)
C(7)	-1252 (3)	1267 (5)	5350 (4)	3,2 (1)
O(8)	-2434 (3)	1269 (4)	4632 (3)	4,4 (1)
C(9)	-218 (4)	2032 (6)	4841 (4)	4,0 (2)
C(10)	996 (4)	2098 (6)	5540 (4)	3,7 (2)
C(11)	4946 (3)	1122 (5)	7630 (3)	2,4 (1)
O(12)	5392 (2)	440 (4)	8608 (2)	3,3 (1)
N(13)	5515 (3)	2375 (4)	7166 (2)	2,5 (1)
C(14)	6612 (3)	3131 (4)	7902 (3)	2,5 (1)
C(15)	6205 (3)	3631 (5)	9220 (3)	2,7 (1)
O(16)	5051 (3)	4338 (4)	9153 (2)	4,2 (1)
O(17)	6884 (2)	3430 (4)	10202 (2)	3,5 (1)
C(18)	7051 (4)	4545 (5)	7126 (3)	3,2 (1)
C(19)	8085 (4)	5519 (5)	7877 (3)	3,2 (1)
C(20)	9391 (4)	5111 (6)	7927 (5)	4,8 (2)
C(21)	10329 (4)	6015 (8)	8665 (6)	6,3 (3)
C(22)	9931 (6)	7302 (8)	9331 (5)	6,2 (3)
C(23)	8650 (6)	7716 (7)	9273 (5)	6,0 (3)
C(24)	7719 (5)	6839 (6)	8543 (4)	4,5 (2)

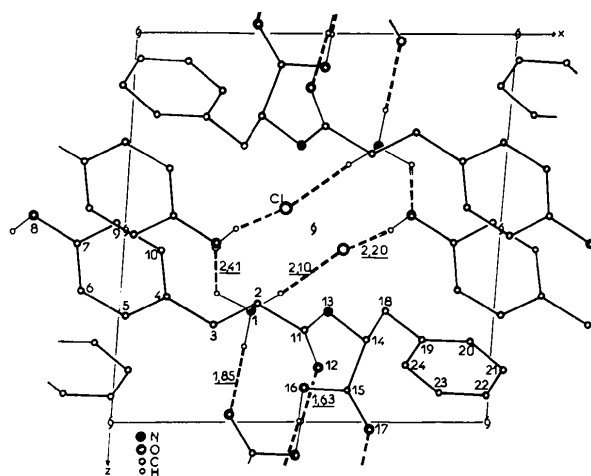


Fig. 1. Projection de la structure parallèlement à l'axe  $Oy$  (les atomes d'hydrogène qui ne participent pas au réseau de liaisons hydrogène ont été omis).  $O(16) \cdots O(12, II + c)$  2,592;  $Cl \cdots N(1, II)$  3,061;  $Cl \cdots O(8, II - a)$  3,157;  $O(8) \cdots N(1, II - a)$  3,058;  $O(17) \cdots N(1, II - c)$  2,878 Å. [ $\sigma = 0,004$ ,  $\sigma(A \cdots H) = 0,01$  Å; (II):  $1 - x, \frac{1}{2} + y, 1 - z$ .]

obtenus par optimisation des angles d'Euler d'une douzaine de réflexions. Les intensités diffractées  $I$  ont été mesurées jusqu'à  $2\theta = 120^\circ$ . La structure cristalline a été résolue par méthodes directes et affinée sur 1810 réflexions non nulles en utilisant des facteurs d'agitation thermique anisotropes  $\beta_{ij}$  pour les atomes C, N, O et Cl. Après introduction des atomes d'hydrogène, l'affinement a été poursuivi jusqu'à la valeur du facteur de reliabilité  $R = 0,045$ .\* Le Tableau 1 réunit les coordonnées atomiques et les coefficients d'agitation thermique équivalents  $B_{eq}$  et la Fig. 1 représente la projection de la structure parallèlement à l'axe  $Oy$ .

**Discussion.** Le dipeptide existe dans le cristal sous sa forme chargée avec les groupements ammonium  $-NH_3^+$  et acide  $-COOH$ , et se trouve en présence d'ions  $Cl^-$ . Il en résulte un réseau de liaisons hydrogène assez dense en accord avec une densité relativement élevée ( $D_c = 1,335 \text{ Mg m}^{-3}$ ). La plupart des groupes donneurs et accepteurs de proton sont engagés dans ces liaisons hydrogène intermoléculaires, comme c'est le cas dans les structures où les peptides sont sous forme de zwitterions (Cotrait, Geoffre, Hospital & Précigoux, 1979; Prangé & Pascard, 1979; Précigoux, Geoffre, Hospital & Leroy, 1982). Notons toutefois que le

\* Les listes des facteurs de structure, des paramètres d'agitation thermique anisotropes et des paramètres des atomes d'hydrogène ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 36604: 13 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 2. Longueurs (Å) et angles (°) de liaisons intramoléculaires avec leurs écarts-type

N(1)—C(2)	1,502 (5)	C(11)—N(13)	1,328 (4)
C(2)—C(3)	1,536 (5)	N(13)—C(14)	1,457 (4)
C(3)—C(4)	1,513 (5)	C(14)—C(15)	1,530 (5)
C(4)—C(5)	1,394 (5)	C(15)—O(16)	1,320 (5)
C(4)—C(10)	1,380 (6)	C(15)—O(17)	1,202 (4)
C(5)—C(6)	1,389 (5)	C(14)—C(18)	1,541 (5)
C(6)—C(7)	1,387 (6)	C(18)—C(19)	1,513 (5)
C(7)—O(8)	1,368 (5)	C(19)—C(20)	1,374 (6)
C(7)—C(9)	1,383 (5)	C(20)—C(21)	1,410 (8)
C(9)—C(10)	1,387 (6)	C(21)—C(22)	1,380 (8)
C(2)—C(11)	1,522 (5)	C(22)—C(23)	1,350 (9)
C(11)—O(12)	1,231 (4)	C(23)—C(24)	1,389 (8)
		C(24)—C(19)	1,392 (6)
N(1)—C(2)—C(3)	110,7 (3)	O(12)—C(11)—N(13)	122,7 (3)
C(3)—C(2)—C(11)	109,3 (3)	C(11)—N(13)—C(14)	120,3 (3)
N(1)—C(2)—C(11)	107,1 (3)	N(13)—C(14)—C(15)	110,2 (3)
C(2)—C(3)—C(4)	113,3 (3)	C(15)—C(14)—C(18)	111,3 (3)
C(3)—C(4)—C(5)	121,8 (3)	N(13)—C(14)—C(18)	108,3 (3)
C(4)—C(5)—C(6)	121,3 (4)	C(14)—C(15)—O(16)	112,7 (3)
C(5)—C(6)—C(7)	119,7 (4)	C(14)—C(15)—O(17)	123,2 (3)
C(6)—C(7)—C(9)	119,8 (4)	O(16)—C(15)—O(17)	124,1 (3)
C(6)—C(7)—O(8)	123,1 (4)	C(14)—C(18)—C(19)	112,3 (3)
O(8)—C(7)—C(9)	117,0 (4)	C(18)—C(19)—C(20)	120,9 (4)
C(7)—C(9)—C(10)	119,5 (4)	C(18)—C(19)—C(24)	120,0 (4)
C(9)—C(10)—C(4)	121,9 (4)	C(20)—C(19)—C(24)	119,0 (4)
C(10)—C(4)—C(5)	117,7 (4)	C(19)—C(20)—C(21)	119,7 (5)
C(10)—C(4)—C(3)	120,4 (3)	C(20)—C(21)—C(22)	119,9 (5)
C(2)—C(11)—O(12)	122,0 (3)	C(21)—C(22)—C(23)	120,6 (6)
C(2)—C(11)—N(13)	115,0 (3)	C(22)—C(23)—C(24)	120,0 (5)
		C(23)—C(24)—C(19)	120,8 (5)

groupement —NH peptidique et l'oxygène du groupement phénol sont libres de toute liaison. Le réseau des liaisons hydrogène est schématiquement représenté sur la Fig. 1.

Les longueurs et angles de liaisons sont rassemblés dans le Tableau 2. Ils sont en bon accord avec les valeurs trouvées dans les structures de peptides (Benedetti, 1977). Notons toutefois la distance N(1)—C(2) égale à 1,50 Å au lieu de 1,45 Å pour la distance N—C<sub>α</sub> d'un peptide protégé et due à la protonation de l'atome d'azote.

La conformation moléculaire est entièrement décrite par les angles de torsion (°) définis par les conventions IUPAC—IUB Commission on Biochemical Nomenclature (1970), soit:

$$\begin{aligned} \text{Tyr: } \psi &= 153,6 & \omega &= 166,5 \\ \chi_1 &= -71,4 & \chi_2 &= 112,7 \\ \text{Phe: } \phi &= -57,6 & \psi &= 135,7 \\ \chi_1 &= 173,5 & \chi_2 &= 83,3, \end{aligned}$$

avec un écart-type moyen  $\sigma = 0,9^\circ$ .

L'angle  $\psi$  des deux restes, voisin de  $140^\circ$ , est situé dans la vaste zone de la représentation  $E = f(\phi, \psi)$  de Ramachandran, Ramakrishnan & Sasisekharan (1963). Toutefois, la valeur de l'angle  $\phi$ (Phe) s'écarte notablement de celle d'une structure complètement étendue  $\beta_p$ , voisine de  $-150^\circ$ . La conformation de la molécule est représentée sur la Fig. 2. La chaîne principale du reste Phe adopte une conformation très

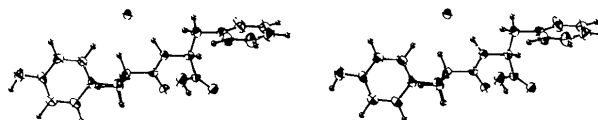


Fig. 2. Vue stéréoscopique de la molécule.

proche de celle du reste Tyr dans le peptide N-acétyl-L-Phe-L-Tyr, caractérisée par les angles de torsion (°):

$$\begin{aligned} \text{Phe: } \phi &= -109,9 & \psi &= 150,6 \\ \chi_1 &= -62,3 & \chi_2 &= 104,9 & \omega &= 164,8 \\ \text{Tyr: } \phi &= -50,2 & \psi &= 134,7 \\ \chi_1 &= 180,4 & \chi_2 &= 78,6. \end{aligned}$$

Les chaînes latérales des restes Phe et Tyr, définies par les couples ( $\chi_1, \chi_2$ ), prennent une conformation proche du couple ( $-70, 100^\circ$ ) pour le premier reste et voisine du couple ( $180, 80^\circ$ ) pour le second reste. Dans les structures de dipeptides modèles ayant un reste Phe, Tyr ou Trp, les chaînes latérales adoptent préférentiellement l'une des trois configurations définies par  $\chi_1 \simeq -60, 60$  et  $180^\circ$  avec  $\chi_2 \sim 90^\circ$  (Cotrait & Barrans, 1974; Cotrait & Bideau, 1974). Dans les protéines enfin, une étude statistique récente (Janin, Wodak, Levitt & Maigret, 1978) établit qu'il en va de même, avec toutefois une nette prédominance du couple ( $-70, 100^\circ$ ). De leur côté, les calculs conformationnels sur dipeptides modèles montrent que les résidus Tyr et Phe sont préférentiellement étendus au niveau de la chaîne principale avec  $\phi \sim -150$  et  $\psi \sim 150^\circ$ ; pour les chaînes latérales, ils confirment l'existence de trois conformères définis par ( $180, 80$ ), ( $-70, 100$ ) et ( $60, 90^\circ$ ) (Lewis, Momany & Scheraga, 1973). Par contre, aucune étude partielle ou complète de peptides du type de ceux étudiés ici n'a été publiée.

#### Références

- BENEDETTI, E. (1977). *Peptides (Proceedings of the Fifth American Peptide Symposium)*, édité par GOODMAN & MEINHOFER, pp. 257–273. New York: John Wiley.
- COTRAIT, M. & BARRANS, Y. (1974). *Acta Cryst.* B30, 1018–1023.
- COTRAIT, M. & BIDEAU, J. P. (1974). *Acta Cryst.* B30, 1024–1028.
- COTRAIT, M., GEOFFRE, S., HOSPITAL, M. & PRÉCIGOUX, G. (1979). *Acta Cryst.* B35, 114–118.
- IUPAC—IUB COMMISSION ON BIOCHEMICAL NOMENCLATURE (1970). *Biochemistry*, 9, 3471–3478.
- JANIN, J., WODAK, S., LEVITT, M. & MAIGRET, B. (1978). *J. Mol. Biol.* 125, 357–386.
- LEWIS, N., MOMANY, F. A. & SCHERAGA, H. A. (1973). *Isr. J. Chem.* pp. 121–152.

- MAIN, P., WOOLFSON, M. M., LESSINGER, L., GERMAIN, G. & DECLERCQ, J. P. (1978). *MULTAN. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
- PRANGÉ, T. & PASCARD, C. (1979). *Acta Cryst.* B35, 1812–1819.
- PRÉCIGOUX, G., GEOFFRE, S., HOSPITAL, M. & LEROY, F. (1982). *Acta Cryst.* B38. Sous presse.
- RAMACHANDRAN, G. N., RAMAKRISHNAN, C. & SASISEKHARAN, V. (1963). *J. Mol. Biol.* 7, 95.
- STENKAMP, R. E. & JENSEN, L. H. (1973). *Acta Cryst.* B29, 2872–2878.
- WEI, C. H., DOHERTY, D. G. & EINSTEIN, J. R. (1972). *Acta Cryst.* B28, 907–915.

*Acta Cryst.* (1982). B38, 1629–1631

## Tétraphényldipyranylidène\* (DIP $\phi_4$ )

PAR D. CHASSEAU, J. GAULTIER ET C. HAUW

Laboratoire de Cristallographie, LA 144, Université de Bordeaux I, 351 cours de la Libération, 33405 Talence, France

ET R. FUGNITTO, V. GIANIS ET H. STRZELECKA

Groupe de Recherche n° 12, CNRS, 2 rue Dunant, 94320 Thiais, France

(Reçu le 3 novembre 1981, accepté le 15 décembre 1981)

**Abstract.**  $C_{34}H_{24}O_2$ , monoclinic,  $P2_1/c$ ,  $a = 6.046$  (2),  $b = 17.070$  (3),  $c = 14.139$  (2) Å,  $\beta = 123.44$  (2)°,  $V = 1217.6$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $F(000) = 488$ ,  $M_r = 464$ ,  $d_c = 1.266$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{Cu } K\alpha) = 0.62$  mm<sup>-1</sup>. The structure was solved from diffractometer data by the analysis of the Patterson function and refined by block-diagonal least squares to  $R = 0.043$  for 631 observed reflexions. The centrosymmetric molecules are nearly planar. The C(3)–C(3') bond joining the pyranylidene rings is 1.385 Å and the chemically unique bonds in the rings average 1.389 for O–C(1), 1.337 for C(1)–C(2) and 1.443 Å for C(2)–C(3). The molecules pack plane to plane in columns along **a**; adjacent stacks of parallel molecules in the **c** direction form (010) sheets.

**Introduction.** Les molécules de dipyranylidène présentent un intérêt certain dans deux domaines de recherches importants: les conducteurs organiques unidimensionnels et les mésophases discotiques. En effet, elles peuvent donner un radical cation qui associé en tant que donneur au tétracyano-*p*-quinodiméthane permet la formation de complexes de transfert de charge, conducteurs organiques unidimensionnels remarquables par leurs propriétés électriques magnétiques (Alizon *et al.*, 1976, 1977) et optiques (Strzelecka, Rivory & Schönfelder, 1979). D'autre part, par fixation

sur les cycles phényles de quatre chaînes latérales *n*-alkyles  $C_nH_{2n+1}$ , elles forment à pression ambiante, au moins pour  $n = 9$  et 12, des mésophases discotiques de symétrie binaire ou tétragonale (Fugnitto, Strzelecka, Zann, Dubois & Billard, 1980).

La synthèse du dipyranylidène fait appel à une méthode simple: la réduction par le zinc de sels de pyrylium portant en positions 2 et 6 des substituants aromatiques (Fabre, Fugnitto & Strzelecka, 1976). L'échantillon utilisé pour la mesure par diffraction X est un monocristal de couleur rouge, en forme d'aiguille de longueur 0,3 mm et de section  $0,08 \times 0,03$  mm.

Les intensités de 1299 réflexions indépendantes (631 observées) ont été mesurées sur diffractomètre automatique Nonius CAD-4 muni d'un monochromateur au graphite en utilisant la radiation Cu  $K\alpha$ . Ces intensités ont été corrigées des facteurs de Lorentz et polarisation, mais aucune correction d'absorption n'a été effectuée. Les facteurs de diffusion des atomes O, N et C sont extraits des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974) tandis que pour les atomes d'hydrogène ont été retenues les valeurs de Stewart, Davidson & Simpson (1965).

La structure a été résolue par l'analyse de la fonction de Patterson. L'affinement de la structure a été conduit de la manière suivante: affinement des paramètres de position des atomes N, O, C et de leurs coefficients d'agitation thermique isotrope ( $R = 0,13$ ) puis anisotrope ( $R = 0,065$ ) et introduction des atomes d'hydrogène pour l'affinement terminal. Le facteur  $R = \sum (|F_o|$

\* Nom alternatif: tétraphényl-2,2',6,6' bi-4*H*-pyranylidène-4 : 4'.