

a fusion of two cyclohexane moieties. Obviously, the most 'strain-free' configuration of such a system would be chair-chair. However, this system is highly flexible under the influence of bulky substituents and can adopt either boat-chair or boat-boat conformations. However, energetically boat-boat is very unstable. In the present study this system has boat-chair conformation. Ring *A* (Fig. 1) is in a chair conformation. Ring *A* adopts a boat conformation rather than the preferred chair in order to avoid steric interaction between the external ring substituents at C(2) and C(4). An analysis of the conformation of the bicyclo[3.3.1]nonane system by Bhattacharjee & Chacko (1979) indicated that bulky substituents at C(3) and C(7) would result in a chair-boat configuration. In the present study, it is seen that even substitution on the same ring (ring *A*, Fig. 1) at C(2) and C(4) also results in a boat-chair conformation. This conformation purely occurs because of steric reasons and enables a less distorted configuration to be adopted.

The morpholine ring has a chair conformation. The phenyl ring at C(4) is at an angle of $73.0(1)^\circ$ to the C(3), C(4), C(5) plane while the morpholine ring at C(2) [plane through C(10), N, C(13)] makes an angle of $69.5(1)^\circ$ with the plane through C(1), C(2), C(3)

respectively. The molecules are held together by van der Waals interactions.

We thank Drs L. M. Pant and N. N. Dhaneshwar for discussions and encouragement.

References

- BHATTACARJEE, S. K. & CHACKO, K. K. (1979). *Tetrahedron*, **35**, 1999–2007.
 EVANS, E. H., HEWSON, A. T. & WADSWORTH, A. H. (1985). *Synth. Commun.* **15**, 243.
 GANTZEL, P. K., SPARKS, R. A. & TRUEBLOOD, K. N. (1961). *LALS*. A program for the full-matrix least-squares refinement of positional and thermal parameters and scale factors. Univ. of California, Los Angeles.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
 KRETSCHMOR & HERBERT, C. (1970). *Chem. Abstr.* **73**, 87533e.
 LAKSHMY, K. V., GEETHA, K. V. & TRIVEDI, G. K. (1985). Unpublished work.
 MAIN, P., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1978). *MULTAN78. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. of York, England, and Louvain, Belgium.
 TAVALE, S. S. & GURU ROW, T. N. (1986). *Proc. Indian Acad. Sci. (Chem. Sci.)*, **97**, 209–211.

Acta Cryst. (1987). **C43**, 1313–1316

***trans*-Isomeres des cyclischen Hydrazidophosphorsäurephenylester-Dimeren mit Twistkonformation**

VON UDO ENGELHARDT UND ANDREA FRANZMANN

*Institut für Anorganische und Analytische Chemie der Freien Universität Berlin, Fabeckstrasse 34-36,
 D-1000 Berlin 33, Bundesrepublik Deutschland*

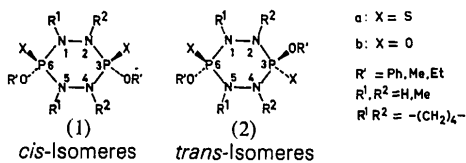
(Eingegangen am 28. Oktober 1986; angenommen am 17. Februar 1987)

Abstract. *trans*-3,6-Dioxo-3,6-diphenoxy-1,2,4,5-tetraaza-3 λ^5 ,6 λ^5 -diphosphacyclohexane, C₁₂H₁₄N₄O₄P₂, *M_r* = 340.216, monoclinic, *P*2₁/*c*, *a* = 9.318 (6), *b* = 5.854 (5), *c* = 29.261 (13) Å, β = 95.5 (4)°, *V* = 1589 (4) Å³, *Z* = 4, *D_x* = 1.423 g cm⁻³, *F*(000) = 704, μ = 2.69 cm⁻¹, *R* = 0.049 (*wR* = 0.053) for 2087 unique contributing reflections. Mo *K* α (monochromator), λ = 0.71069 Å, *T* = 293 K. The compound has been prepared in our laboratory for comparison with the corresponding 3,6-dithioxo compound. The molecule is the *trans* isomer. The six-membered saturated heterocycle adopts a twist conformation in the crystal in contrast to the *trans* isomer of the *N*-unsubstituted 3,6-dithioxo compound, which has a chair conformation. Strong hydrogen bridges

between hydrazine H's and terminal O's at P of adjacent molecules are apparently the reason for this ring distortion: interplanar (torsion) angles $\pm 59.5(4)$ and $\pm 63.5(4)^\circ$, NNPN $\pm 29.6(20)^\circ$ (mean). Mean bond distances N–N 1.419 (6), P–N 1.63 (1), P=O 1.476 (3), P–O 1.585 (6) and O–C 1.401 (8) Å.

Einleitung. *cis*- und *trans*-Isomere des Titel-Ringsystems (1) und (2) mit verschiedenen Substituenten an den Phosphor- bzw. Stickstoffatomen sind in unserer Arbeitsgruppe in größerer Zahl dargestellt worden. Die Thiophosphorsäure-Derivate (1a) bzw. (2a) lassen sich relative leicht kristallisieren und Strukturuntersuchungen an den Isomeren-Paaren haben interessante konformative Besonderheiten

ergeben. Bei den *cis*-Isomeren findet man eine Twist-Konformation des sechsgliedrigen Heterocyclus, bei *trans*-Isomeren dagegen nur, wenn Substituenten an den Stickstoffatomen einen hohen P–N–N–P Interplanarwinkel begünstigen. Die Isomeren-Paare stellen offensichtlich geeignete Modellsubstanzen dar, um Einflüsse zu studieren, die eine Twist-Konformation gegenüber der normalerweise stabileren Sessel-Konformation begünstigen (Engelhardt & Giersdorf, 1986; Engelhardt & Stromburg, 1987; und die dort zitierte Literatur). In dieser Arbeit wird erstmals über die Struktur eines *N*-unsubstituierten Isomeren (2b) ($R^1 = R^2 = \text{H}$, $R' = \text{C}_6\text{H}_5$) berichtet.



Experimentelles. Die Titelverbindung wurde aus Phenoxyposphoryldichlorid und Hydrazin dargestellt (Engelhardt, 1969). Aus den Lösungen in Tetrahydrofuran erhält man zwei verschiedene Kristallformen: sehr dünne, lange Nadeln und dünne Plättchen, die sich in ihren Spektren (IR, Raman, ¹H-NMR, MS) überhaupt nicht oder nur sehr geringfügig unterscheiden. Da die nadelförmigen Kristalle sehr zerbrechlich sind, gelang es uns bisher nur, von den flachen Plättchen geeignete Einkristalle für die Röntgenstrukturanalyse zu montieren. Kristallabmessungen 0,83 × 0,55 × 0,03 mm, automatisches Stoe-Vierkreis-Diffraktometer (ω -Abtastung), Gitterparameter aus 30 Reflexen ($15 \leq \theta \leq 17,5^\circ$, Kleinste-Quadrat-Verfeinerung), Absorptionskorrektur, Beschreibung der Kristallform durch zehn Flächen, Transmissionsfaktoren für F^2 $0,926 \leq A \leq 0,992$ (für Reflexe 8, $\bar{1}$, $\bar{1}\bar{5}$ bzw. 0 $\bar{1}\bar{1}$), $\sin(\theta_{\max})/\lambda$ 0,5952 Å⁻¹, $11 \geq h \geq 0$, $-6 \leq k \leq 0$, $34 \geq l \geq -34$, zwei Standardreflexe alle 90 min, Intensitätsabnahme während der gesamten Messung 3%, lineare Korrektur, 3424 Reflexe vermessen, davon 2779 kristallographisch unabhängig, 812 Reflexe mit $I < 2\sigma(I)$ 'unbeobachtet', 120 davon mit $|F_c| > |F_o|$ wurden bei der Verfeinerung unter Minimalisierung von $\sum w(|F_o| - |F_c|)^2$ mit einbezogen, Lösung der Struktur mit Hilfe direkter Methoden mit MULTAN77 (Main, Lessinger, Woolfson, Germain & Declercq, 1977), H-Atomlagen aus Differenz-Fourier-Synthesen. Die Verfeinerung aller 256 Parameter einschließlich eines isotropen Extinktionsfaktors $g = 8,7(12) \times 10^{-3}$ (Larson, 1967) mit anisotropen Temperaturfaktoren (H-Atome isotrop) und einer Gewichtung mit $w = K/(A + DF_o + EF_o^2)$ ($K = 13,9$ für 'beobachtete' und $K = 6,8$ für 'unbeobachtete', zur Verfeinerung beitragende Reflexe; $A = 21,688$; $D = -1,095$; $E =$

0,0219) ergab $R = 0,049$ und $wR = 0,053$; $S = 1,08$; $R_I = \sum |I - \langle I \rangle| / \sum I = 0,036$ für äquivalente Reflexe. Atomformfaktoren für die neutralen Atome (Cromer & Mann, 1968), für H-Atome (Stewart, Davidson & Simpson, 1965), f' für P aus *International Tables for X-ray Crystallography* (1962), maximales Δ/σ im letzten Verfeinerungszyclus 0,03, Restelektronendichte-Maxima $\leq 0,220$, -Minima $\geq -0,254 \text{ e \AA}^{-3}$, Programmsystem XRAY76 (Stewart, Machin, Dickinson, Ammon, Heck & Flack, 1976).

Tabelle 1. Atomkoordinaten und Mittelwerte der thermischen Parameter $U_{\text{äq}}$ (nach Hamilton, 1959) mit Standardabweichungen (Koordinaten $\times 10^4$, thermische Parameter $\text{\AA}^2 \times 10^3$)

	x	y	z	$U_{\text{äq}}$
P(1)	8446 (1)	1796 (2)	2060,4 (0,3)	42,9 (6)
P(2)	6601 (1)	1882 (2)	2953,6 (0,3)	42,8 (6)
O(1)	7503 (3)	1915 (5)	1581,1 (0,8)	54 (2)
O(2)	10008 (2)	1655 (5)	2017,7 (0,9)	50 (2)
O(3)	7540 (3)	2246 (5)	3429,8 (0,9)	56 (2)
O(4)	5049 (2)	1615 (5)	3005,4 (0,9)	52 (2)
N(1)	8120 (4)	3978 (6)	2375 (1)	45 (2)
N(2)	6828 (4)	3946 (6)	2598 (1)	49 (2)
N(3)	7509 (4)	-249 (6)	2764 (1)	47 (2)
N(4)	7599 (4)	-341 (6)	2284 (1)	49 (2)
C(1)	7917 (4)	3347 (8)	1230 (1)	54 (2)
C(2)	7208 (5)	5384 (9)	1157 (2)	64 (3)
C(3)	7539 (7)	6775 (11)	802 (2)	87 (4)
C(4)	8563 (8)	6135 (14)	532 (2)	106 (5)
C(5)	9284 (7)	4094 (16)	608 (2)	101 (5)
C(6)	8973 (6)	2670 (11)	964 (2)	75 (4)
C(7)	7079 (4)	3534 (8)	3789 (1)	57 (3)
C(8)	7371 (8)	2724 (13)	4220 (2)	110 (5)
C(9)	6938 (12)	3990 (19)	4584 (2)	148 (7)
C(10)	6277 (9)	6012 (17)	4518 (3)	124 (6)
C(11)	5995 (8)	6797 (14)	4088 (3)	115 (5)
C(12)	6391 (7)	5571 (10)	3720 (2)	90 (4)
H(1)	8726 (43)	4716 (78)	2532 (14)	58 (14)
H(7)	6193 (38)	4485 (65)	2449 (12)	36 (11)
H(13)	8144 (46)	-967 (81)	2914 (15)	69 (16)
H(14)	6993 (39)	-960 (71)	2148 (13)	45 (13)

Tabelle 2. Relevante Bindungsabstände (Å) und -winkel ($^\circ$)

P(1)–N(1)	1,621 (4)	P(1)–O(1)	1,583 (6)
P(1)–N(4)	1,646 (4)	P(2)–O(3)	1,587 (6)
P(2)–N(2)	1,621 (4)	P(1)–O(2)	1,475 (3)
P(2)–N(3)	1,634 (4)	P(2)–O(4)	1,476 (3)
N(1)–N(2)	1,423 (6)	O(1)–C(1)	1,409 (6)
N(3)–N(4)	1,415 (5)	O(3)–C(7)	1,393 (6)
C–C (Mittelwert) 1,37 (2); Bereich: 1,340 (15) bis 1,390 (12)			
O(1)–P(1)–O(2)	113,3 (2)	O(3)–P(2)–O(4)	112,8 (2)
O(1)–P(1)–N(1)	110,5 (2)	O(3)–P(2)–N(2)	111,6 (2)
O(1)–P(1)–N(4)	98,0 (2)	O(3)–P(2)–N(3)	98,1 (2)
O(2)–P(1)–N(1)	109,4 (2)	O(4)–P(2)–N(2)	109,5 (2)
O(2)–P(1)–N(4)	120,4 (2)	O(4)–P(2)–N(3)	119,9 (2)
N(1)–P(1)–N(4)	104,4 (2)	N(2)–P(2)–N(3)	104,3 (2)
P(1)–O(1)–C(1)	120,4 (2)	P(2)–O(3)–C(7)	123,4 (2)
P(1)–N(1)–N(2)	117,6 (3)	P(2)–N(2)–N(1)	118,2 (3)
P(1)–N(1)–H(1)	125 (3)	P(2)–N(2)–H(7)	122 (3)
N(2)–N(1)–H(1)	109 (3)	N(1)–N(2)–H(7)	112 (3)
Winkelsumme um N(1): 352 (4)		Winkelsumme um N(2): 352 (4)	
P(2)–N(3)–N(4)	116,6 (3)	P(1)–N(4)–N(3)	116,2 (3)
P(2)–N(3)–H(13)	126 (3)	P(1)–N(4)–H(14)	121 (3)
N(4)–N(3)–H(13)	114 (3)	N(3)–N(4)–H(14)	116 (3)
Winkelsumme um N(3): 357 (4)		Winkelsumme um N(4): 353 (4)	

Diskussion. Tabelle 1 enthält die Lageparameter der Atome (ohne H-Atome der Phenylringe). Wichtige Bindungsabstände und -winkel sind in Tabelle 2 zusammengefaßt.*

Die asymmetrische Einheit wird durch ein Molekül der Titelverbindung gebildet. Es handelt sich um das *trans*-Isomere (*E*-Isomere). Der gesättigte Phosphor-Hydrazin-Sechsring besitzt wider Erwarten und im Gegensatz zum *trans*-Isomeren der entsprechenden Dithio-Verbindung (2a) (Engelhardt & Hartl, 1975) eine Twist-Konformation (Fig. 1). Die Interplanarwinkel ("Torsionswinkel") um die Bindungen im Ring: P(1)–N(1)–N(2)–P(2) 59,4 (4), N(1)–N(2)–P(2)–N(3) –28,5 (4), N(2)–P(2)–N(3)–N(4) –31,0 (3), P(2)–N(3)–N(4)–P(1) 63,5 (4), N(3)–N(4)–P(1)–N(1) –32,1 (3) und N(4)–P(1)–N(1)–N(2) –26,9 (4)° entsprechen mit Abweichungen von weniger als $\pm 3^\circ$ denen für eine idealisierte Twist-konformation, wie sie aus der Beziehung $\varphi = \varphi_{\max}(\Delta +$

$120^\circ)$ (Bucourt, 1974) mit $\varphi_{\max} = 61^\circ$, $\Delta = 121^\circ$ und $\beta = 0, 1, 2$ berechnet werden können: $61,0, -31,4$ und $-29,6^\circ$. Da intramolekulare sterische Wechselwirkungen für eine Destabilisierung der Sessel-Konformation nicht ausreichen dürften, müssen intermolekulare Effekte für die Ausbildung der Twist-Konformation verantwortlich sein. In der Tat wird das Molekül durch starke Wasserstoffbrücken im Kristall in die Twist-Konformation verzerrt (Fig. 2). Jedes Molekül ist über acht Wasserstoffbrücken mit vier Nachbarmolekülen in Richtung von *a*- und *b*-Achse verbunden (die Hälfte der Wasserstoffbrücken gehört zur asymmetrischen Einheit): $rN(1)\cdots O(2^i)$ 2,838 (9), $rH(1)\cdots O(2^i)$ 2,03 (4), $rN(3)\cdots O(2^{ii})$ 2,960 (6), $rH(13)\cdots O(2^{ii})$ 2,21 (4), $rN(2)\cdots O(4^{iii})$ 2,833 (9), $rH(7)\cdots O(4^{iii})$ 2,09 (4), $rN(4)\cdots O(4^{iv})$ 3,099 (9) und $rH(14)\cdots O(4^{iv})$ 2,38 (4) Å; entsprechende Wasserstoffbrücken zwischen $O(2)\cdots H(1^{ii})$, $O(2)\cdots H(13^i)$, $O(4)\cdots H(7^{iv})$ und $O(4)\cdots H(14^{iii})$ [(i) $2 - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; (ii) $2 - x, -\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; (iii) $1 - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$; (iv) $1 - x, -\frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$]. Offensichtlich führen die Wasserstoffbrücken auch zu deutlichen Winkelverzerrungen in der tetraedrischen Koordinationssphäre um die P-Atome. Jeweils benachbarte Winkel O–P–N unterscheiden sich um mehr als 10° . Der Intramolekulare P...P-Kontaktabstand ist mit 3,26 (1) Å denen in anderen Twist-Konformationen von Phosphor-Hydrazin-Heterocyclen sehr ähnlich (Engelhardt & Giersdorf, 1986) und deutlich kleiner als die Summe der van der Waals-Radien von 3,6 Å (Bondi, 1964). Die gefundenen Bindungsabstände entsprechen in Größe und Schwankungsbreite weitgehend denen in entsprechenden Ringen mit Twist-Konformation (Engelhardt & Giersdorf, 1986; und die dort zitierte Literatur).

Wir danken Herrn Kollegen J. Fuchs für seine freundliche Hilfe bei den Messungen. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie gilt unser Dank für finanzielle Unterstützung.

Literatur

- BONDI, A. (1964). *J. Phys. Chem.* **68**, 441–451.
 BUCOURT, R. (1974). *Topics in Stereochemistry*. Bd. 8, herausgegeben von E. L. ELIEL & N. L. ALLINGER, S. 159–224. New York: Wiley-Interscience.
 CROMER, D. T. & MANN, J. B. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 321–324.
 ENGELHARDT, U. (1969). *Z. Naturforsch. Teil B*, **24**, 254–256.
 ENGELHARDT, U. & GIERSDORF, K. (1986). *Acta Cryst.* **C42**, 1830–1833.
 ENGELHARDT, U. & HARTL, H. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 2098–2105.
 ENGELHARDT, U. & STROMBURG, B. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 170–171.
 HAMILTON, W. C. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 609–610.
International Tables for X-ray Crystallography (1962). Bd. III, S. 213. Birmingham: Kynoch Press. (Gegenwärtiger Verteiler D. Reidel, Dordrecht.)
 JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEP II*. Bericht ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.

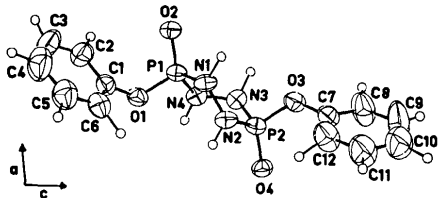


Fig. 1. Molekülgestalt und Numerierung der Atome der asymmetrischen Einheit. Die Ellipsoide enthalten 50% der Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit. H-Atome in den Phenylgruppen haben die gleiche Nummer wie das betreffende C-Atom; H(1) an N(1), H(7) an N(2), H(13) an N(3) und H(14) an N(4) gebunden. [ORTEP-Zeichnung (Johnson, 1976).]

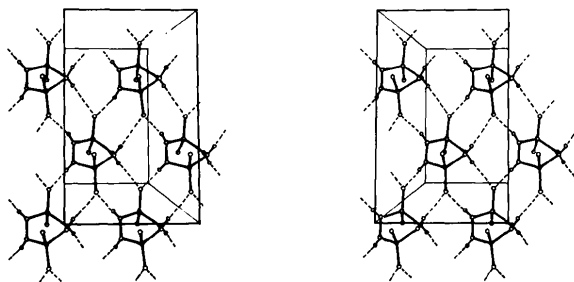


Fig. 2. Anordnung der Moleküle in der Elementarzelle mit Wasserstoffbrücken (gestrichelt). ORTEP-Stereoezeichnung (Johnson, 1976) mit Blickrichtung in Richtung der *c*-Achse, *a*-Achse von unten nach oben. Die Phenylringe sind wegen der besseren Übersichtlichkeit weggelassen.

- LARSON, A. C. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 664–669.
- MAIN, P., LESSINGER, L., WOOLFSON, M. M., GERMAIN, G. & DECLERCQ, J.-P. (1977). *MULTAN77. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. York, England, und Louvain, Belgien.
- STEWART, J. M., MACHIN, P. A., DICKINSON, C. W., AMMON, H. L., HECK, H. & FLACK, H. (1976). *XRAY System – Version März 1976*. Tech. Ber. TR-446. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.
- STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.

Acta Cryst. (1987). **C43**, 1316–1318

The Structure of an Antisickling Agent, *N*-Phenylacetyl-L-phenylalanine Monohydrate

By S. K. BURLEY

Department of Chemistry, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA02139, USA and Harvard Medical School (Health and Sciences and Technology Division), 25 Shattuck Street, Boston, MA 02115, USA

(Received 11 November 1986; accepted 4 February 1987)

Abstract. $C_{17}H_{17}NO_3 \cdot H_2O$, $M_r = 301.3$, orthorhombic, $P2_12_12_1$, $a = 7.357$ (1), $b = 30.938$ (3), $c = 6.959$ (1) Å, $V = 1583.9$ (1) Å³, $Z = 4$, $D_x = 1.264$ g cm⁻³, $\lambda(\text{Cu } K\alpha) = 1.5418$ Å, $\mu = 6.56$ cm⁻¹, $F(000) = 640$, $T = 293$ K, $R = 0.052$ for 1021 unique observed reflections. The molecule has adopted a compact and amphipathic conformation and is very similar to the structure of *N*-phenylacetyl-L-phenylalanine. Peptide torsion angles: L-Phe: $\phi = -100.0$ (8), $\chi^1 = -55.3$ (8), $\chi^{2,1} = -66.7$ (9), $\psi_T = 2.3$ (8); phenylacetyl: $\omega = -170.4$ (8), O(acetyl)–C2(acetyl)–C1(acetyl)–C1(phenyl) = 69.8 (8), C2(acetyl)–C1(acetyl)–C1(phenyl)–C2(phenyl) = 58.4 (8)°. Intramolecular edge-to-face interaction between phenyl rings: phenyl(L-Phe)–phenyl(phenyl) centroid separation = 4.92 (1) Å and interplanar angle = 79.7 (5)°. Intermolecular edge-to-face interaction between phenyl rings: phenyl(L-Phe)–phenyl(phenyl') centroid separation = 6.21 (1) Å and interplanar angle = 79.7 (5)°. Hydrogen bonds: N(L-Phe)–H...O(W) = 2.884 (7), O(acetyl)...H–OH(L-Phe') = 2.638 (6), O(acetyl)...H–O(W') = 2.881 (7), and O(L-Phe)...H–O(W') = 3.035 (6) Å.

Introduction. The structure of the antisickling agent *N*-phenylacetyl-L-phenylalanine has been reported (Burley & Wang, 1987). I now report the solution of the structure of the monohydrate of *N*-phenylacetyl-L-phenylalanine, and provide a detailed comparison of these two unusual peptide analog structures.

Experimental. Rectangular crystal, $0.10 \times 0.30 \times 0.05$ mm, Rigaku AFC6R diffractometer, Ni-filtered radiation, ω -scan method, $(\sin\theta)/\lambda < 0.58$ Å⁻¹, lattice parameters from the 2θ values of 21 reflections with $40.8 < 2\theta < 56.3^\circ$, no absorption corrections, $h = 0$ to 9, $k = 0$ to 38, $l = 0$ to 8, reflections 180, 032 and 190

as intensity standards, intensity variation <2%. 1385 unique reflections measured, 364 excluded during refinement [$F < 3\sigma(F)$]. Structure solved by the direct method (*MULTAN78*, Main, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1978), first *E* map revealed the positions of ten non-H atoms and two successive Fourier cycles revealed all non-H atoms; least-squares refinement using *SHELX76* (Sheldrick, 1976), *F* magnitudes; isotropic and then anisotropic temperature factors with weights = $0.338/[\sigma^2(F) + 0.0015F^2]$ gave $R = 0.052$, $wR = 0.052$ and $S = 1.402$ with H atoms at positions calculated or located by difference synthesis. 206 parameters varied: x, y, z , U_{ij} for all non-H atoms, and a *U* for each group of H atoms of the two phenyl rings and the backbone atoms connecting the two phenyl rings. A *U* was varied for each H atom located by difference synthesis. In final cycle $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0.176$, $(\Delta/\sigma)_{\text{mean}} = 0.011$. Final difference synthesis $(\Delta\rho)_{\max} = 0.20$ and $(\Delta\rho)_{\min} = -0.23$ e Å⁻³. Scattering factors from *International Tables for X-ray Crystallography* (1974).

Discussion. Table 1* gives the atom parameters and Fig. 1 shows the molecular structure and the numbering scheme drawn by *ORTEPII* (Johnson, 1976). The bond lengths and bond angles agree with those of *N*-phenylacetyl-L-phenylalanine within experimental error and are typical of peptide structures (Ramachandran, Colaskar, Ramakrishnan & Saisekharan, 1974).

The molecular structure of *N*-phenylacetyl-L-phenylalanine monohydrate (PAF-H₂O) is very similar to that

* Lists of structure-factor amplitudes, anisotropic thermal parameters, bond lengths and bond angles and H-atom parameters have been deposited with the British Library Document Supply Centre as Supplementary Publication No. SUP 43772 (11 pp.). Copies may be obtained through The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England.