

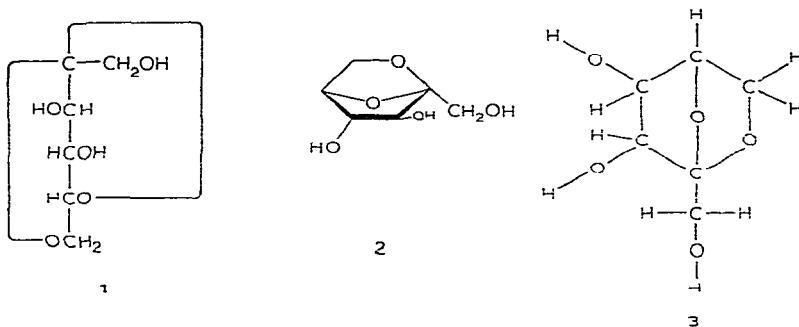
**Note****Zur Konformation des Moleküls der 2,6-Anhydro- $\beta$ -D-Fructofuranose**

W. DREISSIG UND P. LUGER

Institut für Kristallographie, Freie Universität Berlin, I Berlin 33 (Deutschland)

(Eingegangen am 19. Oktober 1971; angenommen in revidierter Form am 23. Februar 1972)

Bei der trockenen Erhitzung von Saccharose entsteht das monomere Fructoseanhydrid<sup>1</sup> **1**, das zuerst von Goldschmid und Perlin<sup>2</sup> beschrieben wurde. Von diesen Verfassern wurde die Konformation des Moleküls in der Form **2** vermutet. Durch eine dreidimensionale Röntgenstrukturanalyse konnten wir diese Vermutung bestätigen.



Die Raumgruppe des Fructoseanhydrids ist rhombisch  $P\bar{2}_1\bar{2}_1\bar{2}_1$ , die Gitterkonstanten sind  $a = 21,446 (\pm 0,003)$  Å,  $b = 10,732 (\pm 0,002)$  Å und  $c = 5,874 (\pm 0,002)$  Å; das Molekulargewicht ist 162. Es kristallisiert 8 Moleküle in der Elementarzelle. Die Anzahl der gemessenen Reflexe beträgt 1542, davon sind 61 als unbeobachtet eingestuft ( $4,5^\circ \leq \theta \leq 70,1^\circ$ ). Der Zuverlässigkeitssfaktor ist  $R = 0,409$ .

Abbildung 1 zeigt ein mit Hilfe eines Plotterprogramms<sup>3</sup> gezeichnetes Modell des Moleküls. Deutlich erkennbar sind zwei Fünfringe aus C-2, C-3, C-4, C-5, O-2 und C-2, O-2, C-5, C-6, O-6, während die Atome C-2, C-3, C-4, C-5, C-6, O-6 einen bootförmigen Sechsring bilden. Die beiden Atomgruppen C-2, C-3, C-4, C-5 und C-2, C-5, C-6, O-6 können als eben angesehen werden. Die durch diese beiden Gruppen berechneten Ausgleichsebenen bilden miteinander einen Winkel von ca. 113°. Die Abweichungen der Atome von den Ebenen betragen im Mittel  $\pm 0,01$  Å.

Zur besseren Verdeutlichung der räumlichen Struktur des Moleküls wäre die

Strichformel des Fructoseanhydrids anstelle in der Form 1 besser in der Form 3 zu schreiben.

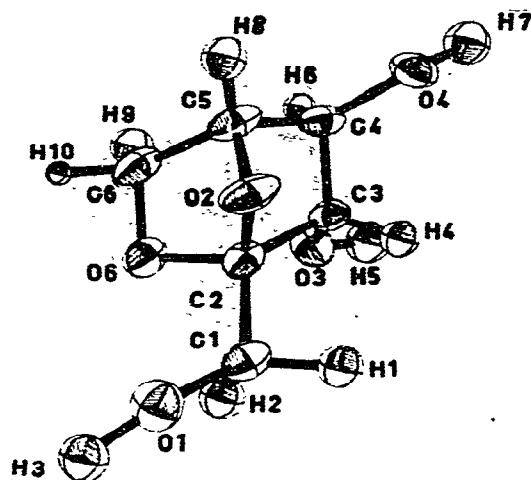


Abb. 1. Molekülmodell von 2,6-Anhydro- $\beta$ -D-fructofuranose.

Der Abbildung 2 können die Bindungslängen und -winkel aller C–C und C–O-Bindungen entnommen werden, wobei jeweils über die beiden kristallographisch unabhängigen Moleküle gemittelt wurde. Die Standardabweichungen betragen etwa  $\pm 0,006 \text{ \AA}$  bzw.  $0,4^\circ$ . Die Mittelwerte der C–C und C–O-Bindungslängen entsprechen

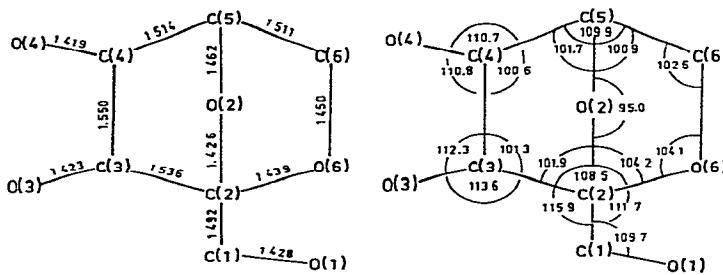


Abb. 2. Bindungslängen und -winkel von 2,6-Anhydro- $\beta$ -D-fructofuranose.

mit  $1,521 \text{ \AA}$  bzw.  $1,435 \text{ \AA}$  etwa den im allgemeinen bei Saccharidstrukturen gefundenen Werten<sup>4,5</sup>. Wegen der Sauerstoffbrücke weichen in den beiden Fünfringen die Bindungswinkel stark von der Tetraederkonfiguration ab. Sie betragen im Mittel  $102,2^\circ$ . Der Mittelwert der anderen Winkel liegt dann mit  $111,5^\circ$  oberhalb des Tetraederwinkels.

Bindungslängen und -winkel, an denen Wasserstoffatome beteiligt sind, können röntgenographisch naturgemäß nicht so genau bestimmt werden. Die mittleren C–H und O–H-Abstände betragen  $1,05$  bzw.  $0,89 \text{ \AA}$ .

## DANK

Herrn Prof. Dr. K. Plieth vom Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin, auf dessen Diffraktometer die Messungen durchgeführt wurden, danken wir für die Unterstützung dieser Arbeit. Wir danken ferner dem Institut für Zuckerindustrie der Technischen Universität Berlin, dem die Kristallisation des Fructoseanhydrids gelang, für die Bereitstellung der Kristalle für die röntgenographischen Untersuchungen.

## LITERATUR

- 1 D. BOLLMANN, *Die ersten Zersetzungprodukte trocken erhitzter Saccharose*, Dissertation TU Berlin, 1964.
- 2 H. R. GOLDSCHMID UND A. S. PERLIN, *Can. J. Chem.*, 38 (1960) 2178.
- 3 C. K. JOHNSON, *ORTEP Report ORNL 3794*, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1965.
- 4 G. A. JEFFREY UND H. S. KIM, *Acta Cryst.*, B27 (1971) 1812.
- 5 G. A. JEFFREY UND H. S. KIM, *Carbohydr. Res.*, 14 (1970) 207.

*Carbohydr. Res.*, 23 (1972) 447–449