

International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
 LINDQVIST, I. (1963). *Inorganic Adduct Molecules of Oxo-Compounds*, p. 73. Berlin: Springer Verlag.
 RUZICKA, S. J. & MERBACH, A. E. (1977). *Inorg. Chim. Acta*, **22**, 191–200.

SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. A program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
 VISWAMITRA, M. A. & KANNAN, K. K. (1966). *Nature (London)*, **209**, 1016–1017.
 ZAHROBSKY, R. T. (1971). *J. Am. Chem. Soc.* **93**, 3313–3319.
 ZUBIETA, J. A. & ZUCKERMAN, J. J. (1978). *Prog. Inorg. Chem.* **24**, 251–475.

Acta Cryst. (1985). **C41**, 702–703

Structure du Chlorure de *trans*-Diamminechloro(diméthylsulfoxyde)platine(II), $[\text{PtCl}(\text{NH}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5\text{OS})]\text{Cl}$

PAR J.-M. DELAFONTAINE, P. KHODADAD, P. TOFFOLI ET N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément,
 92290 Châtenay-Malabry, France

(Reçu le 2 juillet 1984, accepté le 1 janvier 1985)

Abstract. $M_r = 378.2$, monoclinic, $P2_1/c$, $a = 6.718$ (1), $b = 15.108$ (3), $c = 9.426$ (2) Å, $\beta = 104.31$ (2)°, $V = 927.0$ (2) Å³, $Z = 4$, $D_m = 2.64$ (4), $D_x = 2.71$ Mg m⁻³, Mo $K\alpha$, $\lambda = 0.7107$ Å, $\mu = 16.03$ mm⁻¹, $F(000) = 696$, $T = 294$ (1) K, $R = 0.023$ for 1271 independent reflections [$I > 3\sigma(I)$]. The coordination around the Pt atom is 'square planar'. The Pt atoms are almost situated in the $x = \frac{1}{2}$ plane. The $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}\{(\text{CH}_3)_2\text{SO}\}]^+$ cations form columns parallel to the a axis; they are linked within each column by $\text{NH}\cdots\text{O}$ hydrogen bonds and between columns by $\text{NH}\cdots\text{Cl}$ hydrogen bonds.

Introduction. L'étude structurale du chlorure de *trans*-diamminechloro(diméthylsulfoxyde)platine(II) a été entreprise dans le but de connaître l'environnement et le rôle de la molécule de diméthylsulfoxyde. Le produit utilisé a été préparé à la température ambiante par action du *trans*-diamminedichloroplatine(II) sur le diméthylsulfoxyde (Khodadad, 1984). Les teneurs en platine, azote, carbone et hydrogène du produit obtenu ont été déterminées par analyse chimique. L'évaporation lente de la solution aqueuse donne des cristaux prismatiques, presque incolores, parmi lesquels a été prélevé le monocristal étudié.

Partie expérimentale. Mesure de D_m sur monocristal, poussée d'Archimède. Cristal parallélépipédique: $0,035 \times 0,070 \times 0,300$ mm. Diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4. Dimensions de la maille déterminées avec 25 réflexions telles que $4,13 \leq \theta \leq 17,91$ °. Corrections d'absorption empiriques selon Walker & Stuart (1983). Valeurs extrêmes de la correction d'absorption: 0,816 et 1,224. $0,037 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,639$ Å⁻¹. $0 \leq h \leq 8$; $0 \leq k \leq 19$; $-12 \leq l \leq 12$. Réflexions de contrôle des intensités 120, 040 et 120. Diminution d'intensité: 1%. $\sigma(I)/I$: 0,0024. 2023 réflexions indépen-

dantes mesurées, 752 réflexions inobservées [$I < 3\sigma(I)$]. Méthodes directes, programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Affinement sur F , programme à matrice entière. Atomes H non localisés avec certitude. Paramètres affinés: x , y , z et β_{ij} de Pt, Cl, S, O, N et C. $wR = 0,025$,* $S = 1,08$, $w = 1$ si $F \leq 0,8 F_{\text{max}}$, $w = (0,8 F_{\text{max}}/F)^2$ si $F > 0,8 F_{\text{max}}$. $(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,03$. $\Delta\rho_{\text{max}} = 1,0$ (2), $\Delta\rho_{\text{min}} = -0,9$ (2) e Å⁻³. Facteur de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974), corrigées des f' et f'' . Programmes de calcul du système *SDP* de Enraf-Nonius (1979).

Discussion. Les noms des atomes sont indiqués sur la Fig. 1. Le Tableau 1 rassemble les coordonnées atomiques et les facteurs de température isotropes équivalents et le Tableau 2 les principales distances interatomiques et les angles des liaisons.

L'atome de platine, tétracoordiné, a un environnement du type 'plan carré'. Il est lié aux atomes d'azote N(1) et N(2) de deux molécules d'ammoniac, à l'atome de chlore Cl(1) et à l'atome de soufre de la molécule de diméthylsulfoxyde. Le quadrilatère N(1)Cl(1)N(2)S est presque plan. Les distances des atomes qui le constituent au plan moyen correspondant sont inférieures à 0,02 Å. Il en est de même pour l'atome de platine. Les côtés du quadrilatère N(1)Cl(1)N(2)S vont de 2,963 (8) à 3,134 (7) Å et les angles de 84,7 (2) à 96,5 (2)°. Les liaisons Pt–N(1) [2,057 (7) Å] et Pt–N(2) [2,066 (8) Å] ont des longueurs comparables à celles de

* Les listes des facteurs de structure, des paramètres thermiques anisotropes et des distances des atomes du cation au plan moyen ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 39997: 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.

leurs homologues dans le *trans*-diamminedichloro-platine(II) [2,05 (4) Å] (Milburn & Truter, 1966) ou dans le *cis*-dichloro(diméthylsulfoxyde)(picoline-2)-platine(II) [2,06 (1) Å] (Melanson & Rochon, 1977). De même, les liaisons Pt—Cl(1) [2,312 (2) Å] et Pt—S [2,197 (2) Å] ne sont pas significativement différentes des liaisons semblables citées dans la littérature. Ainsi, pour la distance Pt—Cl, l'atome de chlore et le groupement diméthylsulfoxyde occupant des positions *trans*, on trouve 2,321 (5) Å dans *cis*-PtCl₂(NH₃)₂[(CH₃)₂SO] (Melanson & Rochon, 1978a), 2,318 (5) Å dans K[PtCl₃{(CH₃)₂SO}] (Melanson, Hubert & Rochon, 1976), 2,309 (3) Å (moyenne des deux valeurs) dans *cis*-PtCl₂[(CH₃)₂SO]₂ (Melanson & Rochon, 1975). La distance Pt—S mesure 2,186 (4) Å dans le *cis*-amminedichloro(diméthylsulfoxyde)platine(II), 2,200 (3) Å dans le *cis*-dichloro(diméthylsulfoxyde)-(picoline-2)platine(II) et 2,212 (3) Å dans l'homologue *trans* de ce dernier (Melanson & Rochon, 1978b). Les angles formés par les droites joignant l'atome de platine et deux atomes en positions *cis* sur les sommets du quadrilatère N(1)Cl(1)N(2)S sont compris entre 88,1 (2) et 94,9 (2)°.

La géométrie du coordinaat (CH₃)₂SO ne diffère pas sensiblement de celle de la molécule de diméthylsulfoxyde dans le produit pur (Thomas, Shoemaker & Ericks, 1966; Viswamitra & Kannan, 1966) ou dans [(CH₃)₂SOH]₂[TeCl₆].2(CH₃)₂SO (Viostat, Khodadad & Rodier, 1981). Les valeurs extrêmes des angles entre les liaisons issues de l'atome de soufre sont de 102,3 (6) et 113,8 (3)°.

Les atomes d'azote N(1) et N(2) réalisent chacun avec Cl(2) deux liaisons hydrogène N—H...Cl dont les longueurs sont comprises entre 3,273 (8) et 3,325 (9) Å [moyenne: 3,305 (8) Å]. Ces liaisons unissent chaque anion Cl⁻ à quatre cations [Pt(NH₃)₂Cl₂{(CH₃)₂SO}]⁺ et chaque cation à quatre anions. En outre, dans la direction de l'axe *a*, entre deux cations voisins, existe la liaison N(1)—H...O¹ longue de 2,83 (1) Å. La présence de cette liaison permet de considérer la structure comme formée de colonnes de cations entre lesquelles s'intercalent des anions. Les atomes de platine sont très proches du plan $x = \frac{1}{2}$ et du plan $y = 0$ ou du plan $y = \frac{1}{2}$.

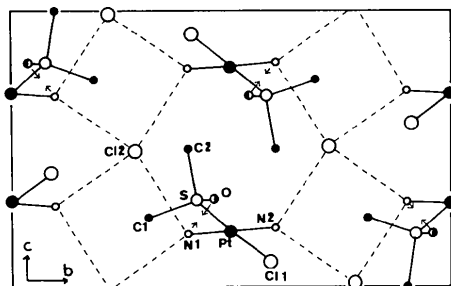


Fig. 1. Projection de la structure sur la face (100). Les tirets représentent les liaisons hydrogène. Les atomes unis par la liaison N—H...O n'appartiennent pas au même cation.

Tableau 1. Coordonnées atomiques relatives, facteurs de température isotropes équivalents et écarts-type

$$B_{eq} = \frac{1}{3}(\beta_{11}a^2 + \beta_{22}b^2 + \beta_{33}c^2 + \beta_{12}ab \cos \gamma + \beta_{13}ac \cos \beta + \beta_{23}bc \cos \alpha).$$

	x	y	z	$B_{eq}(\text{Å}^2)$
Pt	0,48322 (4)	0,49712 (2)	0,20383 (3)	1,995 (5)
Cl(1)	0,2147 (4)	0,5897 (2)	0,0951 (3)	3,59 (5)
Cl(2)	0,2801 (4)	0,2777 (2)	0,4892 (3)	3,08 (5)
S	0,7477 (3)	0,4162 (1)	0,3148 (2)	2,24 (4)
O	0,9482 (9)	0,4567 (4)	0,3116 (7)	3,0 (1)
N(1)	0,272 (1)	0,3973 (5)	0,1922 (8)	2,4 (1)
N(2)	0,684 (1)	0,6016 (5)	0,2105 (9)	3,3 (2)
C(1)	0,748 (2)	0,3990 (9)	0,503 (1)	4,2 (2)
C(2)	0,741 (2)	0,3053 (6)	0,247 (1)	3,6 (2)

Tableau 2. Distances interatomiques (Å), angles valentiels (°) et écarts-type

Pt—Cl(1)	2,312 (2)	S—O	1,486 (6)
Pt—S	2,197 (2)	S—C(1)	1,79 (1)
Pt—N(1)	2,057 (7)	S—C(2)	1,79 (1)
Pt—N(2)	2,066 (8)		
N(1)—O ¹	2,83 (1)	N(1)—Cl(1)	3,042 (7)
N(1)—Cl(2)	3,320 (8)	N(1)—S	3,134 (7)
N(1)—Cl(2 ^{II})	3,274 (8)		
N(2)—Cl(2 ^{III})	3,325 (9)	N(2)—Cl(1)	3,075 (8)
N(2)—Cl(2 ^{IV})	3,303 (8)	N(2)—S	2,963 (8)
Cl(1)—Pt—S	176,48 (8)	S—Pt—N(1)	94,9 (2)
Cl(1)—Pt—N(1)	88,1 (2)	S—Pt—N(2)	88,0 (2)
Cl(1)—Pt—N(2)	89,0 (2)	N(1)—Pt—N(2)	177,1 (3)
Pt—S—O	113,1 (3)	O—S—C(1)	107,6 (4)
Pt—S—C(1)	110,7 (4)	O—S—C(2)	108,6 (5)
Pt—S—C(2)	113,8 (3)	C(1)—S—C(2)	102,3 (6)
Cl(1)—N(1)—S	93,7 (2)	Cl(1)—N(2)—S	96,5 (2)
N(1)—Cl(1)—N(2)	84,7 (2)	N(1)—S—N(2)	85,0 (2)

Code de symétrie: (i) $-1+x, y, z$; (ii) $x, \frac{1}{2}-y, -\frac{1}{2}+z$; (iii) $1-x, 1-y, 1-z$; (iv) $1-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$.

Références

- Enraf-Nonius (1979). *Structure Determination Package*. Enraf-Nonius, Delft.
- International Tables for X-ray Crystallography (1974). Tome IV, pp. 99 et 149. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)
- KHODADAD, P. (1984). A paraître.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCO, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN*11/82. *A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain, Belgique.
- MELANSON, R., HUBERT, J. & ROCHON, F. D. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 1914–1916.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1975). *Can. J. Chem.* **53**, 2371–2374.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1977). *Acta Cryst.* **B33**, 3571–3573.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1978a). *Acta Cryst.* **B34**, 941–943.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1978b). *Acta Cryst.* **B34**, 1125–1127.
- MILBURN, G. H. W. & TRUTER, M. R. (1966). *J. Chem. Soc. A*, pp. 1609–1616.
- THOMAS, R., SHOEMAKER, C. B. & ERICKS, K. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 12–20.
- VIOSAT, B., KHODADAD, P. & RODIER, N. (1981). *J. Mol. Struct.* **71**, 237–244.
- VISWAMITRA, M. A. & KANNAN, K. K. (1966). *Nature (London)*, **209**, 1016–1017.
- WALKER, N. & STUART, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 159–166.