

planar molecules we suspect that intramolecular rather than intermolecular steric forces may be responsible. After all a most striking distortion was noted in NiL³ (Akhtar & Drew, 1982); here, although the metal coordination sphere was square planar, the structure was bowed with the two chelate Ni,O,C,C,C,N rings intersecting at an angle of 37.0 (1)° (*cf.* 6.1° in CuL²). This distortion can only be due to intermolecular forces. Steric forces have more effect on Cu^{II} than on Ni^{II} coordination spheres and therefore the variation observed in (2) is presumably due to packing forces.

It remains to consider the packing of these types of planar molecules. Several types of bonding can be differentiated from Table 5. In several examples (those where an additional bond length is given in the table) two molecules pack together such that two weak axial M...O interactions are formed. With solvent molecules or ions in the unit cell, these can then interact with the metal or the donor N and O atoms and the packing becomes more complicated. However, in some of these, there are still some close M...M contacts. The more usual type of packing is when the molecules line up either in pairs or in a chain so that the M...M vector forms the closest contact and the vector is approximately perpendicular to the molecules. This arrangement is found in CuL³, NiL⁴, NiL³ and also (1) and (2). However, in the former two, there are just two molecules packing in this way. In NiL³ chains are formed with 4.07 Å between metal atoms. (1) and (2) are similar to each other but exceptional in that the ...M...M...M... distances are short at 3.366 (1) Å in (1) and 3.445 (1) Å in (2). This does not in our view represent a metal...metal bond or even an interaction but rather an efficient way of packing the relatively planar molecules. However, against this it could be

argued that the uniqueness of the packing may be indicative of such an interaction.

We thank SERC for support for the diffractometer and A. W. Johans for his help with the crystallographic investigations. We thank Professor K. C. Joshi, Head, Department of Chemistry, University of Rahasthan, Jaipur, for providing laboratory facilities and the CSIR, New Delhi, for the award of SRF to RPS.

References

- AKHTAR, F. (1981). *Acta Cryst.* **B37**, 84–88.
 AKHTAR, F. & DREW, M. G. B. (1982). *Acta Cryst.* **B38**, 1149–1154.
 BAKER, E. N., HALL, D. & WATERS, T. N. (1970a). *J. Chem. Soc. A*, pp. 400–405.
 BAKER, E. N., HALL, D. & WATERS, T. N. (1970b). *J. Chem. Soc. A*, pp. 406–409.
 Cambridge Structural Database (1984). Univ. Chemical Laboratory, Lensfield Road, Cambridge, England.
 FERRARI, M. B., FAVA, G. G. & PELIZZI, C. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 901–908.
 FRIEBURG, C., REICHERT, W., MEKHERS, M. & ENGELEN, B. (1980). *Acta Cryst.* **B36**, 1209–1211.
 HALL, D. & WATERS, T. N. (1960). *J. Chem. Soc.* pp. 2644–2648.
 HOLM, R. H. (1960). *J. Am. Chem. Soc.* **82**, 5632–5635.
 IIDA, K., OONISHI, I., NAKAHARA, A. & KOMIYAMA, Y. (1970). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **43**, 2347–2354.
International Tables for X-ray Crystallography (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
 PAHOR, N. B., CALLIGARIS, M., DELISE, P., NARDIN, G., RANDACCIO, L., ZOTTI, E., FACHINETTI, G. & FLORIANI, C. (1976). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* pp. 2310–2316.
 SHELDRICK, G. M. (1976). *SHELX76*. A program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
 SHKOL'NIKOVA, L. M., YUMAL, E. M., SHUGAM, E. A. & VOBLIKOVA, V. A. (1970). *Zh. Strukt. Khim.* **11**, 886–890.
 WEI, C. H. (1972). *Inorg. Chem.* **11**, 2315–2321.

Acta Cryst. (1985). **C41**, 1758–1761

Structure du Bis(benzènetétracarboxylate-1,2,4,5) de Pentaneptunyle(V) et de Triammonium à Sept Molécules d'Eau

PAR ALAIN COUSSON

Institut Curie, Section de Physique et Chimie, UA CNRS 448, 11 rue Pierre et Marie Curie, 75231 Paris CEDEX 05, France

(Reçu le 22 février 1985, accepté le 13 septembre 1985)

Abstract. [NH₄]₃[NpO₂]₅[C₁₀H₂O₈]₂·7H₂O, *M_r* = 3888.86 Å³, *Z* = 4, *D_x* = 3.46 Mg m⁻³, λ(Mo Kα) = 0.7107 Å, μ(Mo Kα) = 10.3 mm⁻¹, *F*(000) = 3420.84, room temperature, *R*(*F*) = 0.039, *wR* = 0.057 for 9458

0108-2701/85/121758-04\$01.50

© 1985 International Union of Crystallography

independent reflexions. Crystals were obtained from a mixture of NpO_2OH , 1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid and NH_4OH , by hydrothermal synthesis ($T = 450 \text{ K}$, $P = 200 \text{ MPa}$, 4 d). The structure consists of infinite chains of neptunyl cations separated by 1,2,4,5-benzenetetracarboxylate ligands. This structure shows a new form of cation-cation interaction.

Introduction. Ce travail s'inscrit dans le cadre d'une étude générale sur la complexation du neptunium pentavalent par les acides benzène polycarboxyliques en milieu basique. La complexation du neptunium par l'acide mellitique (benzènehexacarboxylique) en présence d'hydroxyde de sodium conduit à la formation de dimères de neptunium caractérisés par une distance Np-Np égale à 3,4824 (8) Å (Cousson, Dabos, Abazli, Nectoux, Pagès & Choppin, 1984). Dans le cas de l'acide pyromellitique (benzène tétracarboxylique-1,2,4,5) on n'observe pas ces dimères et les groupements neptunyles sont très éloignés les uns des autres (>6 Å) (Nectoux, Abazli, Jové, Cousson, Pagès, Gasperin & Choppin, 1984). Afin d'établir les conditions de formation et d'existence des dimères ou complexes 'cation-cation' de neptunium nous avons fait varier la taille de l'élément monovalent. Cet article concerne l'étude structurale d'un complexe de neptunium pentavalent et d'acide pyromellitique en présence d'hydroxyde d'ammonium obtenu par synthèse hydrothermale.

Partie expérimentale. Cristal en forme de plaquette limitée par les faces $(\bar{1}00)$ et (100) distantes de 60 μm , (001) et $(00\bar{1})$ distantes de 230 μm , $(0\bar{1}0)$ et (010) distantes de 160 μm . Diffractomètre Philips PW 1100, monochromateur en graphite, méthode d'intégration $\omega/2\theta$, vitesse de balayage: $0,015^\circ \text{ s}^{-1}$. Paramètres affinés par moindres carrés à partir de 25 réflexions. 11 324 réflexions indépendantes mesurées entre 4 et 38° avec $-33 \leq h \leq 33$, $0 \leq k \leq 34$ et $0 \leq l \leq 10$; $[(\sin\theta)/\lambda]_{\text{max}}$: $0,866 \text{ \AA}^{-1}$. 9458 réflexions indépendantes non nulles [$I \geq 3\sigma(I)$]. Trois réflexions de référence toutes les heures, facteur moyen d'appareillage: 0,003. Les conditions d'extinction conduisent au groupe $P2_1/c$. Absorption corrigée par la méthode analytique de de Meulenaer & Tompa (1965) à l'aide du programme *AGNOST* (Ahmed, 1974); minimum de transmission: 0,219, maximum: 0,583. Atomes de neptunium situés à partir des sections de Patterson tridimensionnelles. Des affinements par moindres carrés (*AFFINE*, modification du programme de Busing, Martin & Levy, 1962) des paramètres de positions atomiques et du facteur de température isotrope de ces atomes sont effectués suivis de séries de Fourier et de séries-différences. Les autres atomes sont alors localisés. Table de diffusion convenable attribuée à chaque atome après examen des distances interatomiques: les atomes d'oxygène font

partie soit du groupement neptunyle soit des fonctions carboxyliques. Deux groupements pyromellitiques par maille sont mis en évidence pour cinq groupements neptunyles; l'équilibre des charges est assuré par trois ions ammonium; les autres atomes sont des molécules d'eau. La formule chimique a été déterminée par l'étude structurale. Facteurs de température anisotropes des atomes de neptunium, d'oxygène et des molécules d'eau en fin d'affinement. Finalement $R = 0,039$, $wR =$

Tableau 1. Paramètres atomiques ($\times 10^5$ pour les atomes de neptunium, $\times 10^4$ pour les autres) et B_{eq} ou B_{iso} (\AA^2)

$$B_{\text{eq}} = \frac{4}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	B_{eq} ou B_{iso}
Np(1)	13600 (2)	-243 (2)	10859 (4)	0,92 (0,02)
Np(2)	28313 (2)	14867 (2)	16734 (4)	1,10 (0,02)
Np(3)	75861 (2)	35804 (2)	14486 (4)	0,84 (0,02)
Np(4)	75752 (2)	15856 (2)	3646 (4)	0,72 (0,02)
Np(5)	68345 (2)	84663 (2)	21418 (5)	1,66 (0,02)
C(1)	5374 (6)	605 (5)	-10 (12)	1,7 (0,2)
C(2)	5612 (5)	4641 (5)	255 (11)	1,4 (0,2)
C(3)	9568 (5)	8057 (5)	753 (10)	1,1 (0,1)
C(4)	4425 (6)	-35 (5)	704 (12)	1,7 (0,2)
C(5)	4806 (6)	570 (5)	707 (11)	1,5 (0,2)
C(6)	4471 (5)	4936 (5)	814 (11)	1,4 (0,2)
C(7)	5096 (6)	4576 (5)	1056 (12)	1,7 (0,2)
C(8)	263 (5)	7935 (4)	1174 (10)	1,0 (0,1)
C(9)	9054 (5)	7642 (4)	1158 (10)	1,0 (0,1)
C(10)	8713 (5)	6551 (5)	2261 (11)	1,4 (0,2)
C(11)	442 (5)	7406 (4)	2014 (10)	1,1 (0,1)
C(12)	9234 (5)	7069 (4)	1890 (10)	1,1 (0,1)
C(13)	3913 (6)	4852 (5)	1745 (12)	1,8 (0,2)
C(14)	9928 (5)	6958 (5)	2345 (11)	1,3 (0,1)
C(15)	4201 (6)	8774 (5)	213 (12)	2,0 (0,2)
C(16)	836 (5)	8360 (4)	692 (10)	1,0 (0,1)
C(17)	6283 (5)	4270 (5)	620 (11)	1,5 (0,2)
C(18)	8313 (5)	7898 (5)	840 (11)	1,3 (0,1)
C(19)	8838 (5)	2362 (4)	2274 (10)	1,0 (0,1)
C(20)	4569 (7)	1150 (6)	1495 (13)	2,5 (0,2)
O(1)	8998 (4)	9623 (4)	407 (8)	1,9 (0,3)
O(2)	8288 (4)	4517 (3)	2400 (7)	1,4 (0,3)
O(3)	694 (4)	8974 (3)	413 (8)	1,7 (0,3)
O(4)	7865 (3)	695 (3)	172 (7)	1,2 (0,3)
O(5)	1085 (4)	1020 (4)	2198 (9)	2,4 (0,3)
O(6)	2425 (4)	678 (3)	1036 (8)	1,8 (0,3)
O(7)	3177 (4)	2282 (3)	2402 (9)	2,2 (0,3)
O(8)	3997 (4)	1084 (4)	1972 (9)	2,6 (0,4)
O(9)	8081 (4)	6693 (4)	1941 (9)	1,9 (0,3)
O(10)	3380 (4)	1679 (4)	-349 (8)	2,3 (0,4)
O(11)	1930 (4)	2141 (4)	336 (8)	2,1 (0,3)
O(12)	2110 (4)	6171 (4)	90 (7)	1,6 (0,3)
O(13)	2709 (4)	8330 (4)	1949 (7)	1,4 (0,3)
O(14)	7274 (3)	2463 (3)	552 (7)	1,2 (0,2)
O(15)	8621 (3)	2914 (3)	1779 (7)	1,4 (0,3)
O(16)	6777 (4)	4577 (4)	1268 (9)	2,3 (0,3)
O(17)	6334 (4)	3644 (4)	433 (9)	2,3 (0,3)
O(18)	6410 (4)	1230 (4)	290 (9)	2,4 (0,4)
O(19)	1391 (4)	8075 (3)	563 (8)	1,5 (0,3)
O(20)	8538 (4)	1794 (3)	2126 (7)	1,4 (0,3)
O(21)	2893 (6)	3598 (5)	1113 (10)	3,5 (0,5)
O(22)	3976 (4)	4374 (4)	2562 (10)	2,8 (0,4)
O(23)	8031 (4)	8189 (4)	1744 (8)	2,0 (0,3)
O(24)	4444 (6)	8313 (5)	948 (15)	6,2 (0,6)
O(25)	3423 (5)	5267 (5)	1667 (10)	3,5 (0,5)
O(26)	4937 (6)	1661 (6)	1668 (18)	7,7 (0,8)
NH ₄ (1)	9709 (6)	3830 (5)	972 (11)	2,9 (0,2)
NH ₄ (2)	1834 (7)	4741 (7)	340 (14)	4,3 (0,3)
NH ₄ (3)	3860 (10)	7296 (9)	2192 (20)	7,4 (0,5)
H ₂ O(1)	177 (4)	9883 (4)	2069 (9)	2,1 (0,3)
H ₂ O(2)	6908 (5)	5933 (4)	1198 (9)	3,0 (0,4)
H ₂ O(3)	7232 (5)	1329 (4)	2527 (8)	2,5 (0,4)
H ₂ O(4)	4368 (5)	3011 (5)	2502 (12)	4,1 (0,5)
H ₂ O(5)	7464 (6)	9560 (4)	1809 (10)	3,7 (0,5)
H ₂ O(6)	818 (6)	5615 (5)	1529 (12)	4,2 (0,5)
H ₂ O(7)	1159 (7)	3500 (5)	1052 (12)	4,7 (0,6)

0,057* [$w = 1/\sigma^2(F_o)$], $S = 2,967$ pour 9458 réflexions indépendantes. Facteur d'extinction: $0,257 \times 10^{-7}$; $\Delta/\sigma < 0,6$; ρ_{\max} : $0,2 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$ localisé sur le site de Np(2). Il n'a pas été possible de situer les atomes d'hydrogène voisins des atomes de carbone C(3), C(4), C(7) et C(14). Facteurs de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974); valeurs moyennes calculées à partir des données concernant Np⁴⁺ et Np⁶⁺. Dispersion anormale prise en compte pour les atomes de neptunium.

Discussion. Les paramètres atomiques et les facteurs de température isotropes ou équivalents sont reportés dans le Tableau 1. Les distances cation-anion figurent dans le Tableau 2 ainsi que les distances entre atomes de neptunium. Toutes les distances et angles entre atomes

* Les listes des facteurs de structure, des paramètres thermiques anisotropes et des distances interatomiques et angles valentiels de la partie organique et des interactions anion-anion ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 42474: 64 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. Distances (Å) et angles (°) (cation-anion et Np-Np)

Np(1)—O(1)	1.808 (8)	NH ₄ (1)—H ₂ O(7)	2.87 (2)
Np(1)—O(2)	1.873 (7)	NH ₄ (1)—H ₂ O(1)	2.88 (1)
Np(1)—O(3)	2.417 (7)	NH ₄ (1)—H ₂ O(6)	2.89 (2)
Np(1)—O(5)	2.431 (8)	NH ₄ (1)—O(15)	2.94 (1)
Np(1)—O(4)	2.451 (7)	<NH ₄ (1)—O>	2.895
Np(1)—O(6)	2.481 (7)		
Np(1)—H ₂ O(1)	2.589 (8)	NH ₄ (2)—O(12)	2.88 (2)
<Np(1)—O>	2.293	NH ₄ (2)—H ₂ O(7)	2.89 (2)
		NH ₄ (2)—H ₂ O(6)	2.96 (2)
Np(2)—O(7)	1.833 (7)	NH ₄ (2)—O(21)	3.09 (2)
Np(2)—O(6)	1.865 (7)	NH ₄ (2)—H ₂ O(5)	3.14 (2)
Np(2)—O(8)	2.379 (8)	NH ₄ (2)—O(2)	3.17 (2)
Np(2)—O(9)	2.401 (8)	NH ₄ (2)—H ₂ O(2)	3.30 (2)
Np(2)—O(10)	2.451 (9)	NH ₄ (2)—O(25)	3.40 (2)
Np(2)—H ₂ O(2)	2.457 (9)	<NH ₄ (2)—O>	3.10
Np(2)—O(11)	2.478 (8)		
<Np(2)—O>	2.266	NH ₄ (3)—O(24)	2.68 (2)
		NH ₄ (3)—O(26)	2.80 (2)
Np(3)—O(12)	1.806 (8)	NH ₄ (3)—H ₂ O(3)	2.87 (2)
Np(3)—O(13)	1.860 (8)	NH ₄ (3)—O(13)	3.01 (2)
Np(3)—O(15)	2.388 (7)	NH ₄ (3)—O(17)	3.26 (2)
Np(3)—O(14)	2.435 (6)	NH ₄ (3)—O(14)	3.35 (2)
Np(3)—O(2)	2.437 (7)	NH ₄ (3)—O(18)	3.41 (2)
Np(3)—O(16)	2.500 (7)	NH ₄ (3)—O(14)	3.45 (2)
Np(3)—O(17)	2.549 (8)	<NH ₄ (3)—O>	3.10
<Np(3)—O>	2.282		
Np(4)—O(14)	1.835 (6)	Np(1)—Np(4)	4.0529 (5)
Np(4)—O(4)	1.854 (6)	Np(1)—Np(2)	4.1150 (6)
Np(4)—O(18)	2.352 (8)	Np(1)—Np(3)	4.1409 (5)
Np(4)—O(19)	2.386 (7)	Np(2)—Np(5)	4.0395 (7)
Np(4)—O(13)	2.401 (7)	Np(2)—Np(5)	4.1080 (6)
Np(4)—H ₂ O(3)	2.433 (9)	Np(3)—Np(4)	4.0467 (6)
Np(4)—O(20)	2.509 (7)	Np(3)—Np(4)	4.0732 (6)
<Np(4)—O>	2.253		
		O(1)—Np(1)—O(2)	177.0 (3)
Np(5)—O(21)	1.84 (1)	O(7)—Np(2)—O(6)	175.2 (4)
Np(5)—O(10)	1.876 (8)	O(12)—Np(3)—O(13)	178.8 (3)
Np(5)—O(7)	2.373 (7)	O(14)—Np(4)—O(4)	179.1 (3)
Np(5)—O(22)	2.411 (8)	O(21)—Np(5)—O(10)	176.2 (4)
Np(5)—O(23)	2.446 (8)		
Np(5)—H ₂ O(5)	2.51 (1)	Np(1)—O(2)—Np(3)	147.5 (4)
Np(5)—H ₂ O(4)	2.55 (1)	Np(4)—O(4)—Np(1)	140.2 (4)
<Np(5)—O>	2.287	Np(2)—O(7)—Np(5)	155.1 (4)
		Np(5)—O(10)—Np(2)	137.6 (4)
		Np(3)—O(13)—Np(4)	143.2 (4)
		Np(4)—O(14)—Np(3)	144.7 (3)

de carbone ont été calculées et sont caractéristiques des cycles benzéniques. Les distances entre atomes d'oxygène des fonctions carboxyliques sont comprises entre 2,17 (1) et 2,25 (1) Å. La plus courte des autres distances entre anions est égale à 2,61 (1) Å. Le polyèdre des atomes lourds est la bipyramide à base pentagonale aplatie. L'atome Np(5) a deux molécules d'eau dans son proche environnement et ceci explique sans doute la valeur élevée de l'agitation thermique pour cet atome. Les atomes d'oxygène des fonctions carboxyliques [O(24), O(25) et O(26)] non liés aux atomes de Np ont également des facteurs de température élevés.

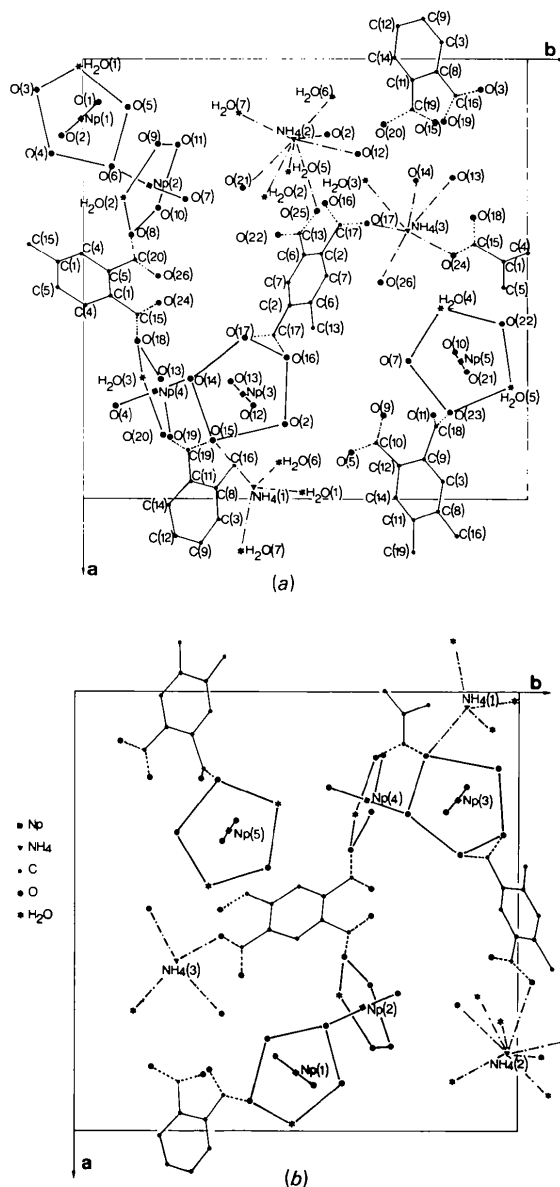
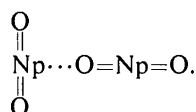


Fig. 1. Projection partielle de la structure parallèlement à *c*. (a) Pour les cations: $0 < z < \frac{1}{4}$. (b) Pour les cations: $\frac{1}{4} < z < \frac{1}{2}$.

Les Figs. 1(a) et 1(b) sont deux projections partielles de la structure parallèlement à l'axe c . Les cations dont la cote est comprise entre 0 et $\frac{1}{4}$ sont représentés avec leur cortège d'anions sur la Fig. 1(a), ceux pour lesquels $\frac{1}{4} < z < \frac{1}{2}$ sur la Fig. 1(b). Les atomes de Np et de NH_4 se répartissent en couches séparées par les acides organiques. Les groupements neptunyles sont liés entre eux et constituent des chaînes infinies bidimensionnelles. La Fig. 2 est une projection des groupements neptunyles parallèlement à l'axe a ; l'abscisse des atomes de Np est voisine de $\frac{1}{4}$. Les actinoïdes présentent la particularité de former des oxocations $(\text{AnO}_2)^{n+}$ et il fut montré que ces oxocations interagissent en solution. En particulier, Guillaume, Hahn & Narten (1983) ont évalué à environ 4,2 Å la distance entre atomes de Np dans un complexe 'cation-cation' en phase liquide. Ceci représente la somme des distances d'une liaison neptunyle et d'une liaison non neptunyle, la géométrie attendue pour ces complexes étant:



La structure décrite ici illustre ce phénomène d'interactions entre neptunyles dans un solide et la possibilité de former des polymères de Np ou complexes 'cation-cation' multiples.

Enfin, il faut remarquer que ce complexe a été obtenu sous pression, ce qui n'était pas le cas du composé au sodium. La formule chimique de ce dernier est d'ailleurs très différente puisque le rapport $\text{Np}/\text{Na} = 2/6$ alors que $\text{Np}/\text{NH}_4 = 5/3$ pour un même nombre de molécules organiques. Le rapprochement des cations neptunyles n'est donc peut-être pas dû seulement à la taille de l'élément monovalent et nous nous proposons, dans un premier temps, d'étudier un complexe d'ammonium préparé dans les mêmes conditions que celui de sodium, bien que l'obtention de monocristaux semble

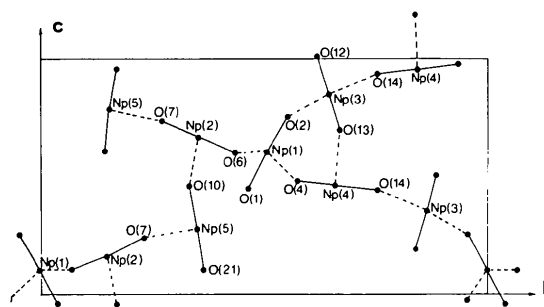


Fig. 2. Projection partielle parallèlement à a . Seuls les groupements neptunyles pour lesquels x est voisin de $\frac{1}{4}$ sont représentés.

difficile. Nous remplacerons ensuite l'ammonium par le thallium de taille plus importante.

Je remercie Françoise Nectoux et Hicham Abazli pour la préparation des monocristaux.

Un contrat de l'OTAN (n° 5/81) a permis de réaliser ce travail en collaboration avec l'Université d'Etat de Floride (Pr G. Choppin).

Références

- AHMED, F. R. (1974). *Crystallographic Computing Methods*. Copenhagen: Munksgaard.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Rapport ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- COUSSON, A., DABOS, S., ABAZLI, H., NECTOUX, F., PAGÈS, M. & CHOPPIN, G. (1984). *J. Less Common Met.* **99**, 233–240.
- GUILLAUME, B., HAHN, R. L. & NARTEN, A. H. (1983). *Inorg. Chem.* **22**, 109–111.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)
- MEULENAER, J. DE & TOMPA, H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 1014–1018.
- NECTOUX, F., ABAZLI, H., JOVÉ, J., COUSSON, A., PAGÈS, M., GASPERIN, M. & CHOPPIN, G. (1984). *J. Less Common Met.* **97**, 1–10.

Acta Cryst. (1985). **C41**, 1761–1763

Dicarbonyl(η^5 -cyclopentadienyl)(η^3 -cyclo-triphosphorus)molybdenum

BY OTTO J. SCHERER, HELMUT SITZMANN AND GOTTHELF WOLMERSHÄUSER

Fachbereich Chemie der Universität Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Strasse, D-6750 Kaiserslautern, Federal Republic of Germany

(Received 2 November 1984; accepted 10 September 1985)

Abstract. $[\text{Mo}(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)(\text{CO})_2(\eta^3\text{-P}_3)]$, $M_r = 309.98$, monoclinic, $P2_1/c$, $a = 11.459(2)$, $b = 14.553(2)$, $c = 13.603(1)$ Å, $\beta = 115.462(9)^\circ$, $V = 2048.1(4)$ Å³,

$Z = 8$, $D_x = 2.01$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo K}\alpha) = 0.71073$ Å, $\mu = 1.548$ mm⁻¹, $F(000) = 1199.65$, $T = 293$ K, $R = 0.037$ for 2915 observed reflections. The asymmetric

0108-2701/85/121761-03\$01.50

© 1985 International Union of Crystallography