

Bis[μ -(oxo-5 prolinato- N^1, O^5)]-bis[chloro(diméthylsulfoxyde)platine(II)] Monohydrate*

PAR B. VIOSSAT

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté de Médecine et de Pharmacie, 34 Rue du Jardin des Plantes,
86034 Poitiers CEDEX, France*

ET P. KHODADAD ET N. RODIER

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques et biologiques, 5 Rue J.-B. Clément,
92296 Châtenay-Malabry CEDEX, France*

(Reçu le 8 avril 1990; accepté le 30 mai 1990)

Abstract. $[\text{Pt}(\text{C}_5\text{H}_6\text{NO}_3)(\text{C}_2\text{H}_6\text{OS})\text{Cl}]_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $M_r = 891.6$, monoclinic, $P2_1$, $a = 8.865$ (2), $b = 9.691$ (2), $c = 14.817$ (4) Å, $\beta = 107.22$ (2)°, $V = 1216$ (1) Å³, $Z = 2$, $D_m = 2.36$ (3), $D_x = 2.43$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo K}\alpha) = 0.7107$ Å, $\mu = 12.0$ mm⁻¹, $F(000) = 836$, $T = 294$ (1) K, $R = 0.025$ for 3514 independent reflections. The complex is a dimer where each Pt atom is surrounded by four atoms in a square-planar coordination: one Cl atom, one S atom from a dimethyl sulfoxide molecule, one N atom and one O atom from two 5-oxoproline ligands shared with the other Pt atom. Both squares face each other. The two 5-oxoproline ligands bridging them are in a *cis* position with respect to the Pt atoms and arranged head to tail. The amide function takes the tautomeric iminoalcohol form. The two 5-oxopyrrolidine groups are almost planar. Their least-squares planes make a dihedral angle of 87.0 (3)°. The Pt—Pt distance is 3.0825 (3) Å. The geometry of this organometallic molecule compares well with that found for its trihydrate.

Partie expérimentale. Mesure de la masse volumique par flottaison. Cristal parallélépipédique: $0,24 \times 0,36 \times 0,42$ mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal avec 25 réflexions pour lesquelles $7,50 \leq \theta \leq 15,88^\circ$. Diffractomètre automatique Enraf-Nonius CAD-4. Balayage $\theta/2\theta$ d'amplitude $s(\theta) = 0,80 + 0,35\text{tg}\theta$. $0,050 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,710$ Å⁻¹, $0 \leq h \leq 12$, $0 \leq k \leq 13$, $-20 \leq l \leq 19$. Réflexions de contrôle de l'intensité: 015, 224 et 615. Variations non significatives de I au cours des mesures. 3730 réflexions indépendantes mesurées, 216 inobservées [$I < 3\sigma(I)$]. Corrections d'absorption: programme *DIFABS* (Walker & Stuart, 1983); valeurs maximale

* Ce travail a été réalisé dans le cadre du contrat DR89-05 consenti par Direction de la Recherche du Centre d'Etudes pharmaceutiques de Châtenay-Malabry (Université de Paris XI).

et minimale du coefficient de correction: 1,514 et 0,807. Programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et série de Fourier des ΔF . H non localisés. Affinement basé sur les F , programme à matrice complète. Facteurs de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974, Tome IV, pp. 99, 149) corrigés de f' et de f'' . Paramètres affinés: x , y , z et β_{ij} de Pt, Cl, S, O, N et C. $R = 0,025$, $wR = 0,033$, $w = 1/\sigma^2(F)$, $S = 1,38$, $(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,03$, $|\Delta\rho|_{\text{max}} = 1,0$ (2) e Å⁻³. Programmes de calcul du système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc 1982). Fig. 1: programme *ORTEPII* (Johnson, 1976). Angles entre les plans moyens: *BP7C* (Ito & Sugawara, 1983). Ordinateur DEC PDP 11/44.

Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rassemblés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2. La Fig. 1† représente la molécule organométallique et indique les numéros attribués à ses atomes. O(41) désigne l'atome d'oxygène de la molécule d'eau.

Lorsqu'on remplace les coordonnées x , y , z de chacun des atomes respectivement par $1 - x$, $1 - y$ et $1 - z$, on obtient pour le facteur R une valeur significativement plus élevée que celle rapportée ci-dessus. Les atomes de carbone asymétriques C(5) et C(15) possèdent la configuration *S*.

Le bis[μ -(oxo-5 prolinato- N^1, O^5)]-bis[chloro(diméthylsulfoxyde)platine(II)] monohydrate s'est formé dans le résidu de la préparation du trihydrate

† Les listes des facteurs de structure observés et calculés, des coefficients d'agitation thermique anisotrope, des distances des atomes aux plans moyens et des distances interatomiques intermoléculaires ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre as Supplementary Publication No. SUP 53198 (22 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

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

$$B_{eq} = (4/3)(\beta_{11}a^2 + \beta_{22}b^2 + \beta_{33}c^2 + \beta_{12}abc\cos\gamma + \beta_{13}accos\beta + \beta_{23}bccos\alpha).$$

	x	y	z	B _{eq} (Å ²)
N(1)	0,6171 (7)	0,5420 (7)	0,7960 (4)	1,6 (1)
C(2)	0,5017 (8)	0,4578 (9)	0,7885 (5)	1,7 (1)
C(3)	0,552 (1)	0,3071 (9)	0,7900 (6)	2,5 (2)
C(4)	0,726 (1)	0,317 (1)	0,8335 (7)	3,1 (2)
C(5)	0,7645 (8)	0,4678 (9)	0,8090 (6)	2,0 (1)
O(6)	0,3575 (7)	0,4880 (6)	0,7824 (4)	2,3 (1)
C(7)	0,820 (1)	0,468 (1)	0,7207 (5)	2,3 (1)
O(8)	0,7385 (9)	0,493 (1)	0,6431 (4)	4,7 (2)
O(9)	0,9649 (7)	0,425 (1)	0,7416 (5)	3,8 (2)
N(11)	0,2969 (7)	0,6664 (7)	0,6288 (4)	1,6 (1)
C(12)	0,4190 (8)	0,7086 (9)	0,6035 (5)	1,8 (1)
C(13)	0,3930 (9)	0,689 (1)	0,4976 (5)	2,8 (2)
C(14)	0,220 (1)	0,660 (1)	0,4586 (6)	3,0 (2)
C(15)	0,1726 (8)	0,608 (1)	0,5465 (5)	2,2 (1)
O(16)	0,5487 (6)	0,7549 (9)	0,6566 (3)	2,20 (9)
C(17)	0,1684 (9)	0,454 (1)	0,5585 (5)	2,3 (1)
O(18)	0,0824 (7)	0,3997 (9)	0,5976 (4)	3,6 (1)
O(19)	0,2647 (7)	0,3845 (9)	0,5240 (5)	3,5 (1)
Pt(20)	0,61314 (3)	0,750*	0,79986 (2)	1,328 (4)
Cl(21)	0,6152 (3)	0,9861 (3)	0,7949 (2)	3,83 (6)
S(22)	0,7040 (3)	0,7493 (3)	0,9528 (1)	2,92 (4)
O(23)	0,726 (1)	0,617 (1)	0,9996 (5)	5,8 (2)
C(24)	0,574 (1)	0,854 (2)	1,0005 (6)	5,0 (3)
C(25)	0,885 (1)	0,849 (2)	0,9853 (7)	5,1 (3)
Pt(30)	0,25940 (3)	0,67943 (4)	0,75394 (2)	1,381 (4)
Cl(31)	0,2116 (2)	0,6787 (3)	0,8990 (1)	2,82 (4)
S(32)	0,1269 (2)	0,8705 (2)	0,7138 (1)	1,78 (3)
O(33)	0,1119 (7)	0,9246 (8)	0,6196 (4)	2,9 (1)
C(34)	-0,0655 (9)	0,848 (1)	0,7227 (7)	3,7 (2)
C(35)	0,199 (2)	1,002 (1)	0,8009 (9)	5,0 (3)
O(41)	0,7572 (9)	0,6152 (9)	0,4751 (5)	4,0 (2)

* La coordonnée y de Pt(20) a été choisie arbitrairement.

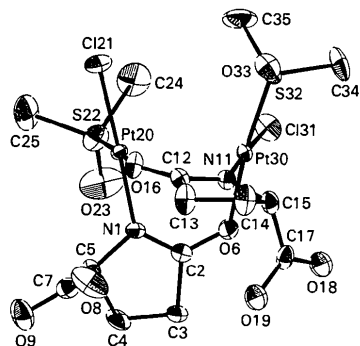


Fig. 1. Dessin de la molécule organométallique et numéros attribués à ses atomes.

correspondant (Viossat, Khodadad, Rodier & Guillard, 1990).

Littérature associée. Structure du diméthylsulfoxyde (Thomas, Shoemaker & Ericks, 1966). Structure du trichloro(diméthylsulfoxyde)platinate(II) de bis(propanediamine-1,3-*N,N'*)platine(II) (2/1) (Viossat, Toffoli, Khodadad & Rodier, 1988). Structure du chloro(diméthylsulfoxyde)[oxo-5 prolinato(2-)-*O,N*]platinate(II) de potassium oxo-5 proline monohydrate (Viossat, Michelet, Khodadad & Rodier, 1990). Structure du bis(oxo-5 proline)-platinate(II) de sodium dihydrate (Viossat, Khodadad & Rodier, 1990).

Tableau 2. Longueurs des liaisons (Å), angles valencielles (°) et écarts-type

N(1)–C(2)	1,29 (1)	C(17)–O(19)	1,31 (1)
N(1)–C(5)	1,45 (1)	O(19)–O(41) ^a	2,62 (1)*
C(2)–C(3)	1,52 (1)	Pt(20)–N(1)	2,017 (7)
C(2)–O(6)	1,29 (1)	Pt(20)–O(16)	2,028 (5)
C(3)–C(4)	1,49 (1)	Pt(20)–Cl(21)	2,290 (2)
C(4)–C(5)	1,56 (1)	Pt(20)–S(22)	2,168 (2)
C(5)–C(7)	1,53 (1)	S(22)–O(23)	1,44 (1)
C(7)–O(8)	1,192 (9)	S(22)–C(24)	1,83 (1)
C(7)–O(9)	1,29 (1)	S(22)–C(25)	1,81 (1)
O(9)–O(18) ^a	2,65 (1)*	Pt(30)–O(6)	2,040 (6)
N(11)–C(12)	1,31 (1)	Pt(30)–N(11)	1,983 (6)
N(11)–C(15)	1,493 (9)	Pt(30)–Cl(31)	2,311 (2)
C(12)–C(13)	1,53 (1)	Pt(30)–S(32)	2,179 (2)
C(12)–O(16)	1,268 (8)	S(32)–O(33)	1,459 (7)
C(13)–C(14)	1,50 (1)	S(32)–C(34)	1,763 (9)
C(14)–C(15)	1,57 (1)	S(32)–C(35)	1,79 (1)
C(15)–C(17)	1,50 (1)	O(41)–O(8)	2,80 (1)*
C(17)–O(18)	1,21 (1)	O(41)–O(33) ^a	2,77 (1)*
Pt(20)–N(1)–C(2)	128,0 (6)	C(15)–C(17)–O(18)	122,2 (9)
Pt(20)–N(1)–C(5)	120,9 (5)	C(15)–C(17)–O(19)	115,1 (8)
C(2)–N(1)–C(5)	111,0 (7)	O(18)–C(17)–O(19)	123 (1)
N(1)–C(2)–C(3)	112,6 (7)	N(1)–Pt(20)–O(16)	89,7 (3)
N(1)–C(2)–O(6)	127,5 (8)	N(1)–Pt(20)–Cl(21)	175,9 (2)
C(3)–C(2)–O(6)	119,9 (7)	N(1)–Pt(20)–S(22)	91,3 (2)
C(2)–C(3)–C(4)	101,7 (7)	O(16)–Pt(20)–Cl(21)	86,9 (3)
C(3)–C(4)–C(5)	103,3 (7)	O(16)–Pt(20)–S(22)	174,7 (2)
N(1)–C(5)–C(4)	104,1 (7)	Cl(21)–Pt(20)–S(22)	91,9 (1)
N(1)–C(5)–C(7)	113,2 (6)	Pt(20)–S(22)–O(23)	117,4 (4)
C(4)–C(5)–C(7)	110,2 (8)	Pt(20)–S(22)–C(24)	108,7 (3)
Pt(30)–O(6)–C(1)	125,1 (6)	Pt(20)–S(22)–C(25)	107,6 (4)
C(3)–C(7)–O(8)	124,5 (8)	O(23)–S(22)–C(24)	108,6 (6)
C(5)–C(7)–O(9)	110,2 (6)	O(23)–S(22)–C(25)	111,1 (6)
O(8)–C(7)–O(9)	125,0 (9)	C(24)–S(22)–C(25)	102,4 (6)
Pt(30)–N(11)–C(12)	129,0 (5)	O(6)–Pt(30)–N(11)	87,5 (3)
Pt(30)–N(11)–C(15)	120,0 (5)	O(6)–Pt(30)–Cl(31)	89,4 (2)
C(12)–N(11)–C(15)	111,0 (6)	O(6)–Pt(30)–S(32)	172,7 (2)
N(11)–C(12)–C(13)	111,6 (6)	N(11)–Pt(30)–Cl(31)	176,1 (2)
N(11)–C(12)–O(16)	127,3 (7)	N(11)–Pt(30)–S(32)	91,4 (2)
C(13)–C(12)–O(16)	121,1 (7)	Cl(31)–Pt(30)–S(32)	91,40 (8)
C(12)–C(13)–C(14)	104,2 (7)	Pt(30)–S(32)–O(33)	117,1 (3)
C(13)–C(14)–C(15)	103,5 (6)	Pt(30)–S(32)–C(34)	109,3 (4)
N(11)–C(15)–C(14)	103,9 (7)	Pt(30)–S(32)–C(35)	111,2 (4)
N(11)–C(15)–C(17)	108,7 (6)	O(33)–S(32)–C(34)	107,4 (4)
C(14)–C(15)–C(17)	116,3 (8)	O(33)–S(32)–C(35)	110,2 (5)
Pt(20)–O(16)–C(12)	124,4 (5)	C(34)–S(32)–C(35)	100,2 (6)

* Les distances signalées par un astérisque sont susceptibles de correspondre à des liaisons hydrogène. Code de symétrie: (i) 1 + x, y, z; (ii) 1 - x, -½ + y, 1 - z.

Références

- B. A. FRENZ & ASSOCIATES, INC. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU.
- ITO, T. & SUGAWARA, Y. (1983). *BP7C*. Institut de Recherches en Physique et en Chimie, Wako-Shi, Saitama 351, Japon.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCO, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN11/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- THOMAS, R., SHOEMAKER, C. B. & ERICKS, K. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 12–20.
- VISSAT, B., KHODADAD, P. & RODIER, N. (1990). *Acta Cryst.* **C46**, 2062–2065.
- VISSAT, B., KHODADAD, P., RODIER, N. & GUILLARD, O. (1990). *Acta Cryst.* **C46**, 894–896.
- VISSAT, B., MICHELET, A., KHODADAD, P. & RODIER, N. (1990). *Acta Cryst.* **C46**, 1733–1735.
- VISSAT, B., TOFFOLI, P., KHODADAD, P. & RODIER, N. (1988). *Acta Cryst.* **C44**, 92–94.
- WALKER, N. & STUART, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 159–166.