

## Ammine-trans-dichloro(diméthylsulfoxyde)platine(II)

PAR B. VIOSSAT

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté 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 22 juin 1990; accepté le 5 décembre 1990)

**Abstract.** C<sub>2</sub>H<sub>9</sub>Cl<sub>2</sub>NOPtS, *M<sub>r</sub>* = 361.2, monoclinic, C2/c, *a* = 13.403 (4), *b* = 10.103 (3), *c* = 14.149 (4) Å, β = 122.24 (2)°, *V* = 1621 (2) Å<sup>3</sup>, *Z* = 8, *D<sub>m</sub>* = 2.92 (3), *D<sub>x</sub>* = 2.96 Mg m<sup>-3</sup>, λ(MoKα) = 0.7107 Å, μ = 18.33 mm<sup>-1</sup>, *F*(000) = 1312, *T* = 294 (1) K, *R* = 0.021 for 1565 independent observed reflections. H atoms were located but not refined. The Pt atom exhibits a square planar coordination. All molecular parameters are similar to those obtained for other related compounds [Pt—Cl = 2.297 (1) and 2.306 (1), Pt—S = 2.209 (1) and Pt—N = 2.053 (4) Å]. The molecules are linked together by two N—H...O and one N—H...Cl hydrogen bonds which form a three-dimensional network.

**Partie expérimentale.** Masse volumique par flottaison. Cristal approximativement parallélépipédique: 0,09 × 0,16 × 0,37 mm. Diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4. Dimensions de la maille déterminées avec 25 réflexions telles que 8,18 ≤ θ ≤ 14,80°. 0,060 ≤ (sin θ)/λ ≤ 0,639 Å<sup>-1</sup>. Balayage θ/2θ d'amplitude s(°) = 0,90 + 0,35tgθ. 0 ≤ *h* ≤ 17, 0 ≤ *k* ≤ 12, -18 ≤ *l* ≤ 15. Réflexions de contrôle de l'intensité: 444, 206 et 404. Variations non significatives de l'intensité au cours des mesures. 1769 réflexions indépendantes mesurées, 204 inobservées [*I* < 3σ(*I*)]. Programme MULTAN11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et série de Fourier des Δ*F*. 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). Paramètres affinés: *x*, *y*, *z* et β<sub>*ij*</sub> de Pt, Cl, S, O, N et C. *B*(H) = *B*<sub>eq</sub> de l'atome lié à H + 1 Å<sup>2</sup>. Corrections d'absorption: programme DIFABS (Walker & Stuart, 1983). Valeurs maximale et minimale du coefficient de correction: 1,463 et 0,888. *R* = 0,021, *wR* = 0,027, *w* = 1/σ<sup>2</sup>(*F*), *S* = 1,13, (Δ/σ)<sub>max</sub> = 0,01, |Δρ|<sub>max</sub> = 0,7 (2) e Å<sup>-3</sup>. Programmes de calcul du système SDP (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982). Fig. 1 et 2: programme ORTEPII (Johnson, 1976). Ordinateur DEC PDP11/44.

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

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

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>B</i> <sub>eq</sub> (Å <sup>2</sup> )
Pt	0,33972 (1)	0,11055 (2)	0,41721 (1)	1,869 (4)
Cl(1)	0,51127 (9)	0,1942 (2)	0,44159 (9)	3,26 (3)
Cl(2)	0,17307 (9)	0,0299 (1)	0,40664 (9)	3,09 (3)
S	0,28014 (8)	0,0552 (1)	0,24379 (8)	2,13 (2)
O	0,3406 (3)	-0,0635 (4)	0,2376 (3)	3,54 (8)
N	0,4076 (3)	0,1549 (5)	0,5822 (3)	2,58 (9)
C(1)	0,2975 (5)	0,1855 (6)	0,1696 (4)	3,5 (1)
C(2)	0,1278 (4)	0,0274 (7)	0,1568 (4)	3,6 (1)

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

Les distances et les angles signalés par un astérisque correspondent aux liaisons hydrogène.

Pt—Cl(1)	2,296 (1)	S—C(1)	1,775 (7)
Pt—Cl(2)	2,306 (1)	S—C(2)	1,756 (5)
Pt—S	2,209 (1)	N—Cl(2) <sup>i</sup>	3,394 (5)*
Pt—N	2,053 (4)	N—O <sup>ii</sup>	3,093 (4)*
S—O	1,476 (5)	N—O <sup>iii</sup>	2,931 (7)*
Cl(1)—Pt—Cl(2)	175,71 (4)	Pt—S—C(2)	114,5 (2)
Cl(1)—Pt—S	89,98 (5)	O—S—C(1)	108,5 (3)
Cl(1)—Pt—N	87,0 (1)	O—S—C(2)	107,3 (3)
Cl(2)—Pt—S	94,29 (4)	C(1)—S—C(2)	100,1 (3)
Cl(2)—Pt—N	88,7 (1)	N—H(N)—O <sup>iii</sup>	150*
S—Pt—N	175,5 (1)	N—H'(N)—Cl(2) <sup>i</sup>	164*
Pt—S—O	112,8 (1)	N—H''(N)—O <sup>ii</sup>	167*
Pt—S—C(1)	112,7 (2)		

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

Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1,\* les longueurs et les angles des

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des coordonnées non affinées des atomes d'hydrogène, des distances N—H et C—H, des distances des atomes au plan moyen et des distances interatomiques intermoléculaires ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 53799: 11 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.

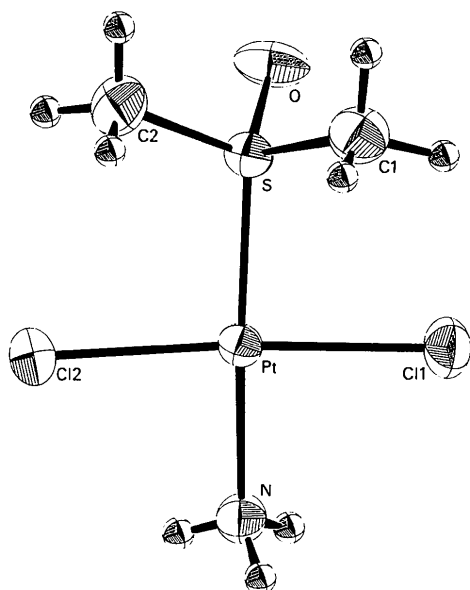


Fig. 1. Dessin de la molécule vue en perspective et noms utilisés pour désigner ses atomes.

liaisons dans le Tableau 2. La Fig. 1 représente la molécule et la Fig. 2 une vue stéréoscopique de la structure. Les numéros attribués aux atomes sont indiqués sur la Fig. 1.

**Littérature associée.** Structure du diméthylsulfoxyde (Thomas, Shoemaker & Ericks, 1966). Structure du *cis*-amminedichloro(diméthylsulfoxyde)platine(II) (Melanson & Rochon, 1978*a*). Structure du *trans*-dichloro(diméthylsulfoxyde)(picoline-2)platine(II) (Melanson & Rochon, 1978*b*). Structure du chlorure de *trans*-diamminechloro(diméthylsulfoxyde)platine(II) (Delafontaine, Khodadad, Toffoli & Rodier, 1985). Structure du bis[trichloro(diméthylsulfoxyde)-

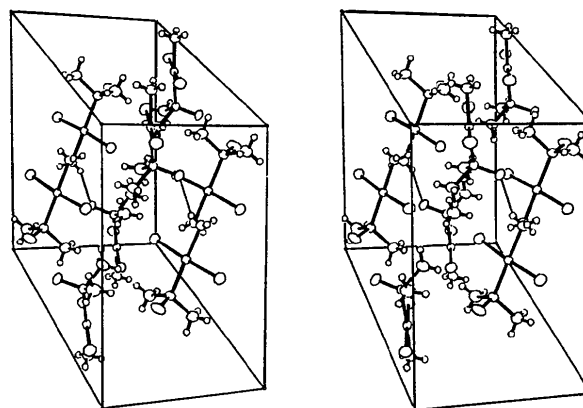


Fig. 2. Vue stéréoscopique de la structure. *x* est dirigé de l'arrière vers l'avant, *y* est horizontal et dirigé de gauche à droite et *z* est vertical ascendant.

platinate(II)] de tétraammineplatine(II) (Khodadad & Rodier, 1987).

#### Références

- B. A. FRENZ & ASSOCIATES, INC. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU, et Enraf-Nonius, Delft, Pays-Bas.
- DELAFONTAINE, J.-M., KHODADAD, P., TOFFOLI, P. & RODIER, N. (1985). *Acta Cryst.* **C41**, 702–703.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEP*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- KHODADAD, P. & RODIER, N. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 1690–1692.
- 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*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1978*a*). *Acta Cryst.* **B34**, 941–948.
- MELANSON, R. & ROCHON, F. D. (1978*b*). *Acta Cryst.* **B34**, 1125–1127.
- THOMAS, R., SHOEMAKER, C. B. & ERICKS, K. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 12–20.
- WALKER, N. & STUART, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 159–166.

*Acta Cryst.* (1991). **C47**, 1317–1319

## Structure of 11,12-Dibenzoyldibenzobarrelene\*

BY JAMES TROTTER AND FRED C. WIREKO

*Department of Chemistry, University of British Columbia, Vancouver, BC, Canada V6T 1Y6*

(Received 16 July 1990; accepted 13 November 1990)

**Abstract.**  $C_{30}H_{20}O_2$ ,  $M_r = 412.49$ , monoclinic,  $Cc$ ,  $a = 15.764$  (5),  $b = 9.202$  (2),  $c = 15.562$  (3) Å,  $\beta =$

$106.26$  (2)°,  $V = 2167$  (1) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $D_x = 1.264$  g cm<sup>-3</sup>,  $Mo K\alpha_1$ ,  $\lambda = 0.70930$  Å,  $\mu = 0.7$  cm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 864$ ,  $T = 295$  K,  $R = 0.030$  for 777 reflections. The two carbonyl groups are rotated

\* 11,12-Dibenzoyl-9,10-dihydro-9,10-ethenoanthracene.