$1/[\sigma^2(F) + (0{\cdot}02\ F_o)^2]$, residual electron density between $-2{\cdot}0$ and $+1{\cdot}6$ e $Å^{-3}$ with the largest residuals in the vicinity of the Rh atoms. Scattering factors for non-H atoms from Cromer & Waber (1965) and for H atoms from Stewart, Davidson & Simpson (1965). Table 1* gives the atomic parameters. Fig. 1 shows the molecular complex and Table 2 lists the rhodium coordination, nucleoside conformation, and hydrogen-bonding distances. Calculations performed on a MicroVAX II computer using locally developed programs (Rao, Haromy, McAlister & Merritt, unpublished).

Related literature. Rhodium(II) carboxylates such as the title compound comprise a series of platinum-group metal complexes which are active anti-cancer agents. These compounds are believed to inhibit tumor cell division by reacting covalently with cellular nucleic acids (Rosenberg, 1978). The crystal structure of a dirhodium tetraacetate $tRNA^{Phe}$ complex has also been determined where the dirhodium tetraacetate forms an intermolecular crosslink between the N(7) atoms of the adenine bases of two symmetry related tRNA molecules (Rubin & Sundaralingam, 1984). The mode of complexation observed in these structures suggests that dirhodium tetraacetate may act by forming interstrand crosslinks to the N(7) positions of two adenine bases in double stranded nucleic acids.

This research was supported in part by the National Cancer Institute, DHHS, contract N01-C01-74101 with ABL-BRP (JRB) and in part by the National Institutes of Health, grant GM-17378 (MS). The contents of this publication do not necessarily reflect the views or policies of the Department of Health and Human Services, nor does mention of trade names, commercial products, or organizations imply endorsement by the US Government.

* Lists of structure factors, anisotropic thermal parameters and H-atom parameters have been deposited with the British Library Document Supply Centre as Supplementary Publication No. SUP 53895 (17 pp.). Copies may be obtained through The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England.

References

CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 104–109.
ROSENBERG, B. (1978). *Nucleic-Acid Metal Ion Interactions*, edited by T. G. SPIRO, pp. 1–29. New York: John Wiley.
RUBIN, J. R. & SUNDARALINGAM, M. (1984). *J. Biomol. Struct. Dyn.* **2**, 525–530.
STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.

Acta Cryst. (1991). C**47**, 1714–1716

Structure du Diammine(oxo-5 prolinato)platine(II)

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Minérale, UFR 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* 1 *août* 1990; *accepté le* 17 *janvier* 1990)

Abstract. Diammine(5-oxoprolinato)platinum(II), $[Pt(C_5H_5NO_3)(NH_3)_2]$, $M_r = 356{\cdot}25$, monoclinic, $P2_1$, $a = 8{\cdot}399$ (2), $b = 7{\cdot}204$ (2), $c = 14{\cdot}508$ (3) Å, $\beta = 103{\cdot}64$ (2)°, $V = 853{\cdot}1$ (7) $Å^3$, $Z = 4$, $D_x = 2{\cdot}77$ Mg m^{-3}, λ(Mo $K\bar{\alpha}$) = 0·7107 Å, $\mu = 16{\cdot}6$ mm^{-1}, $F(000) = 656$, $T = 294$ (1) K, $R = 0{\cdot}021$ for 2037 independent observed reflections. The two independent molecules in the asymmetric unit have similar geometries. In both, the Pt atom displays a square-planar *cis* coordination with two N atoms from the NH_3 groups, one N atom and one O atom from the 5-oxoprolinato ligand. The amide function exhibits the tautomeric iminoalcohol form and loses the proton of the OH group. Formal local charges on the Pt atom and the 5-oxoprolinato ligand are not compensated and the molecule has a zwitterionic character. One of the two NH_3 ligands is involved in an intramolecular hydrogen bond with the O atom of the iminoalcohol group. This structure was solved in order to establish the relationship between the Pt atom and the 5-oxoproline ligand.

Partie expérimentale. Cristal approximativement parallélépipédique: 0,06 × 0,10 × 0,27 mm. Diffrac-

0108-2701/91/081714-03$03.00

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

$B_{éq} = 4/3(\beta_{11}a^2 + \beta_{22}b^2 + \beta_{33}c^2 + \beta_{12}ab\cos\gamma + \beta_{13}ac\cos\beta + \beta_{23}bc\cos\alpha)$.

	x	y	z	$B_{éq}$(Å^2)
Pt(1)	0,87909 (3)	0,0*	0,15291 (2)	1,711 (5)
N(1)	1,0058 (8)	0,215 (1)	0,2126 (4)	2,0 (1)
C(2)	1,018 (1)	0,386 (1)	0,1892 (6)	2,6 (2)
C(3)	1,108 (1)	0,503 (1)	0,2714 (7)	3,3 (2)
C(4)	1,094 (1)	0,381 (2)	0,3576 (6)	3,1 (2)
C(5)	1,0795 (9)	0,187 (1)	0,3130 (5)	1,9 (1)
O(6)	0,9644 (8)	0,452 (1)	0,1051 (4)	3,3 (1)
C(7)	0,985 (1)	0,039 (1)	0,3521 (5)	2,4 (2)
O(8)	0,9010 (7)	−0,0760 (9)	0,2903 (4)	2,4 (1)
O(9)	0,9954 (8)	0,025 (1)	0,4381 (4)	3,0 (1)
N(10)	0,8504 (9)	0,106 (1)	0,0185 (4)	2,8 (1)
N(11)	0,7458 (9)	−0,235 (1)	0,1036 (5)	2,5 (1)
Pt(21)	0,63570 (3)	0,40499 (5)	0,35194 (2)	1,861 (6)
N(21)	0,5378 (8)	0,177 (1)	0,2849 (4)	2,2 (1)
C(22)	0,471 (1)	0,023 (1)	0,3083 (6)	2,3 (1)
C(23)	0,381 (1)	−0,073 (1)	0,2193 (6)	2,8 (2)
C(24)	0,368 (1)	0,068 (2)	0,1403 (5)	2,5 (2)
C(25)	0,5146 (9)	0,192 (1)	0,1825 (5)	1,9 (1)
O(26)	0,4784 (8)	−0,027 (1)	0,3928 (4)	3,4 (1)
C(27)	0,5101 (9)	0,393 (1)	0,1538 (5)	2,0 (1)
O(28)	0,5716 (7)	0,5130 (9)	0,2193 (4)	2,4 (1)
O(29)	0,4623 (8)	0,440 (1)	0,0703 (4)	3,4 (1)
N(30)	0,6959 (9)	0,287 (1)	0,4798 (4)	2,5 (1)
N(31)	0,7299 (9)	0,658 (1)	0,4069 (5)	2,7 (2)

* Coordonnée choisie arbitrairement.

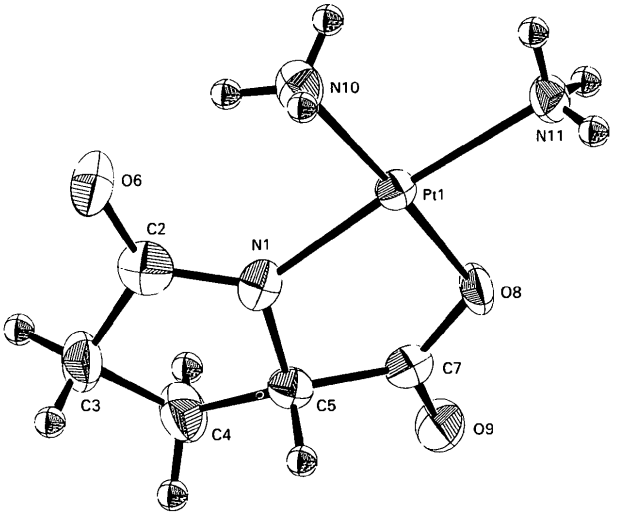

Fig. 1. Vue en perspective de l'une des molécules contenues dans l'unité asymétrique et numéros attribués à ses atomes.

tomètre Enraf–Nonius CAD-4. Dimensions de la maille déterminées sur monocristal avec 25 réflexions telles que $6,57 \le \theta \le 18,83°$. $0,060 \le (\sin\theta)/\lambda \le 0,661$ Å^{-1}. Balayage $\theta/2\theta$ d'amplitude $s(°) = 0,90 + 0,35\text{tg}\theta$. $0 \le h \le 11$, $0 \le k \le 9$, $-19 \le l \le 18$. Réflexions de contrôle de l'intensité: $03\bar{1}$, $1\bar{4}2$ et $22\bar{1}$. Dimunition de I au cours des mesures: 1,2%. Corrections de décroissance. 2222 réflexions indépendantes mesurées, 185 inobservées [$I < 3\sigma(I)$]. Programme *MULTAN*11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). H des NH_3: série de Fourier des ΔF; autres H: coordonnées calculées.

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

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

P(1)—N(1)	1,959 (7)	Pt(21)—N(21)	1,985 (7)
Pt(1)—O(8)	2,033 (5)	Pt(21)—O(28)	2,027 (5)
Pt(1)—N(10)	2,054 (7)	Pt(21)—N(30)	1,994 (6)
Pt(1)—N(11)	2,062 (7)	Pt(21)—N(31)	2,070 (8)
N(1)—C(2)	1,29 (1)	N(21)—C(22)	1,32 (1)
N(1)—C(5)	1,455 (9)	N(21)—C(25)	1,457 (9)
C(2)—C(3)	1,51 (1)	C(22)—C(23)	1,50 (1)
C(2)—O(6)	1,29 (1)	C(22)—O(26)	1,27 (1)
C(3)—C(4)	1,56 (1)	C(23)—C(24)	1,52 (1)
C(4)—C(5)	1,53 (1)	C(24)—C(25)	1,53 (1)
C(5)—C(7)	1,52 (1)	C(25)—C(27)	1,50 (1)
C(7)—O(8)	1,30 (1)	C(27)—O(28)	1,301 (9)
C(7)—O(9)	1,23 (1)	C(27)—O(29)	1,232 (9)
N(10)—O(6)	2,85 (1)*	N(30)—O(9^{iv})	3,10 (1)*
N(10)—O(6^{ii})	2,86 (1)*	N(30)—O(26)	3,00 (1)*
N(10)—O(29^{i})	2,90 (1)*	N(30)—O(26^{v})	2,94 (1)*
N(11)—O(6^{iii})	2,90 (1)*	N(31)—O(8^{iv})	3,12 (1)*
N(11)—O(28^{iii})	3,07 (1)*	N(31)—O(9^{iv})	2,974 (8)*
N(11)—O(29^{i})	2,989 (9)*	N(31)—O(26^{vi})	3,07 (1)*

N(1)—Pt(1)—O(8)	82,2 (3)	N(21)—Pt(21)—O(28)	82,3 (3)
N(1)—Pt(1)—N(10)	93,2 (3)	N(21)—Pt(21)—N(30)	95,0 (3)
N(1)—Pt(1)—N(11)	174,3 (3)	N(21)—Pt(21)—N(31)	173,4 (3)
O(8)—Pt(1)—N(10)	173,6 (3)	O(28)—Pt(21)—N(30)	177,3 (3)
O(8)—Pt(1)—N(11)	92,0 (3)	O(28)—Pt(21)—N(31)	91,1 (3)
N(10)—Pt(1)—N(11)	92,5 (3)	N(30)—Pt(21)—N(31)	91,6 (3)
Pt(1)—N(1)—C(2)	135,0 (5)	Pt(21)—N(21)—C(22)	136,0 (6)
Pt(1)—N(1)—C(5)	113,1 (6)	Pt(21)—N(21)—C(25)	112,2 (6)
C(2)—N(1)—C(5)	110,8 (7)	C(22)—N(21)—C(25)	111,2 (7)
N(1)—C(2)—C(3)	112,5 (7)	N(21)—C(22)—C(23)	108,9 (7)
N(1)—C(2)—O(6)	124,9 (8)	N(21)—C(22)—O(26)	124,1 (7)
C(3)—C(2)—O(6)	122,6 (9)	C(23)—C(22)—O(26)	127,0 (8)
C(2)—C(3)—C(4)	101,6 (8)	C(22)—C(23)—C(24)	105,8 (8)
C(3)—C(4)—C(5)	100,9 (7)	C(23)—C(24)—C(25)	100,4 (6)
N(1)—C(5)—C(4)	105,6 (7)	N(21)—C(25)—C(24)	105,4 (7)
N(1)—C(5)—C(7)	109,5 (6)	N(21)—C(25)—C(27)	110,1 (7)
C(4)—C(5)—C(7)	118,5 (7)	C(24)—C(25)—C(27)	119,1 (6)
C(5)—C(7)—O(8)	115,8 (7)	C(25)—C(27)—O(28)	117,3 (6)
C(5)—C(7)—O(9)	121,1 (7)	C(25)—C(27)—O(29)	121,5 (7)
O(8)—C(7)—O(9)	123,0 (9)	O(28)—C(27)—O(29)	120,9 (8)
Pt(1)—O(8)—C(7)	114,4 (5)	Pt(21)—O(28)—C(27)	114,1 (5)

N(10)—H(10)···O(6)	149*	N(30)—H′(30)···O(9^{iv})	146*
N(10)—H″(10)···O(6^{ii})	169*	N(30)—H(30)···O(26)	142*
N(10)—H′(10)···O(29^{i})	167*	N(30)—H″(30)···O(26^{v})	177*
N(11)—H(11)···O(6^{iii})	171*	N(31)—H″(31)···O(8^{iv})	159*
N(11)—H″(11)···O(28^{iii})	143*	N(31)—H(31)···O(9^{iv})	164*
N(11)—H′(11)···O(29^{i})	156*	N(31)—H′(31)···O(26^{vi})	140*

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

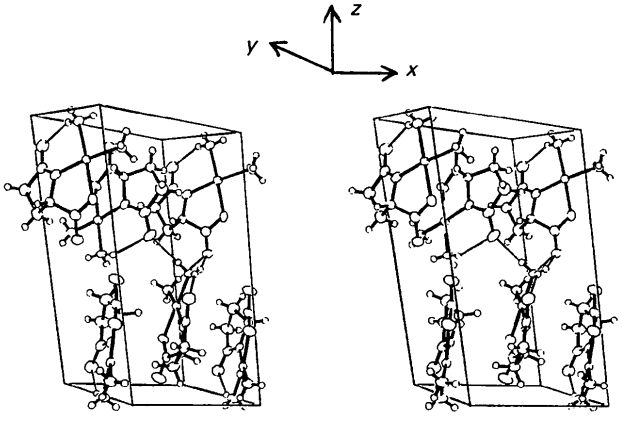

Fig. 2. Vue stéréoscopique de la structure.

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_{ij} de Pt, O, N et C. Corrections d'absorption: programme *DIFABS* (Walker & Stuart, 1983). Valeurs maximale et minimale du coefficient de correction: 1,364 et 0,845. $R = 0{,}021$, $wR = 0{,}029$, $w = 1/\sigma^2(F)$, $S = 1{,}175$, $(\Delta/\sigma)_{max} = 0{,}01$, $|\Delta\rho|_{max} = 0{,}9$ (2) e Å^{-3}. Programmes de calcul du système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982). Fig. 1 et 2: *ORTEP*II (Johnson, 1976). Angles entre les plans moyens: *BP*7C (Ito & Sugawara, 1983). Ordinateur DEC PDP11/44.

Il a été vérifié qu'en remplaçant les coordonnées x, y et 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 indiquée ci-dessus. Les atomes de carbone asymétriques C(5) et C(25) ont la configuration *S*.

Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2.* La Fig. 1 représente la molécule édifiée autour de Pt(1) et indique les numéros attribués à ses atomes. La Fig. 2 est une vue stéréoscopique de la structure.

Les numéros utilisés pour désigner les atomes de la deuxième molécule s'obtiennent en ajoutant le nombre 20 aux numéros des atomes homologues de la première.

Littérature associée. Structures associées: structure de l'acide L-pyroglutamique (van Zoeren, Oonk & Kroon, 1978); structure cristalline et moléculaire de l'acide pyroglutamique (Pattabhi & Venkatesan, 1974) (ce mémoire décrit le racémique); bis(oxo-5 proline)platinate(II) de sodium dihydrate (Viossat, Khodadad & Rodier, 1990); structure du bis[μ-(oxo-5 prolinato-N^1,O^5)]-bis[chloro(diméthylsulfoxyde)-platine(II)] trihydrate (Viossat, Khodadad, Rodier & Guillard, 1990); tétra[bis(oxo-5 proline)platinate(II) de potassium] pentahydrate (Viossat, Rodier, Nguyen Huy Dung & Guillard, 1986).

* Les listes des facteurs de structure observés et calculés, des coefficients d'agitation thermique anisotrope, des paramètres des atomes d'hydrogène, des distances des atomes aux plans moyens et des distances interatomiques intermoléculaires ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 53930: 15 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.

References

B. A. Frenz & Associates, Inc. (1982). *Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU, et Enraf–Nonius, Delft, Pays-Bas.

Ito, T. & Sugawara, Y. (1983). *BP7C*. Institut de Recherches en Physique et en Chimie, Wako-Shi, Saitama 351, Japon.

Johnson, C. K. (1976). *ORTEP*II. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.

Main, P., Fiske, S. J., Hull, S. E., Lessinger, L., Germain, G., Declercq, 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.

Pattabhi, V. & Venkatesan, K. (1974). *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* 2, pp. 1085–1089.

Viossat, B., Khodadad, P. & Rodier, N. (1990). *Acta Cryst.* C**46**, 2062–2065.

Viossat, B., Khodadad, P., Rodier, N. & Guillard, O. (1990). *Acta Cryst.* C**46**, 894–896.

Viossat, B., Rodier, N., Nguyen Huy Dung & Guillard, O. (1986). *Acta Cryst.* C**42**, 659–662.

Walker, N. & Stuart, D. (1983). *Acta Cryst.* A**39**, 159–166.

Zoeren, E. van, Oonk, H. A. & Kroon, J. (1978). *Acta Cryst.* B**34**, 1898–1900.

Acta Cryst. (1991). C**47**, 1716–1718

Structure of $Nb_4(\mu_3\text{-}Cl)_2(\mu_2\text{-}Cl)_4Cl_4(PMe_3)_6$

By Elizabeth Babaian-Kibala and F. Albert Cotton*

Department of Chemistry and Laboratory for Molecular Structure and Bonding, Texas A&M University, College Station, TX 77843, *USA*

(*Received* 24 *September* 1990; *accepted* 1 *February* 1991)

Abstract. Bis(μ_3-chloro)-tetrakis(μ_2-chloro)-tetrachlorohexakis(trimethylphosphine)tetrakisniobium, $Nb_4(\mu_3\text{-}Cl)_2(\mu_2\text{-}Cl)_4Cl_4(PMe_3)_6$, $M_r = 1182{\cdot}63$, orthorhombic, *Pbca*, $a = 15{\cdot}911$ (8), $b = 22{\cdot}21$ (1), $c = 12{\cdot}054$ (4) Å, $V = 4260$ (3) Å^3, $Z = 4$, $D_x = 1{\cdot}844$ g cm^{-3}, λ(Mo $K\alpha$) = 0·71069 Å, $\mu = 18{\cdot}8$ cm^{-1}, $F(000) = 2344$, $T = 295$ K, $R = 0{\cdot}069$, 3030 unique observed reflections. Synthesis by reduc-

* Author to whom all correspondence should be addressed.

0108-2701/91/081716-03$03.00