

approximate D_{2h} symmetry. The origin of such a variation in bond distances is not understood. The porphyrin core is essentially planar and the displacement of Rh is only 0.024 Å from the mean four-nitrogen plane toward the methyl group.

This work was supported by the Korea Science and Engineering Foundation.

References

Enraf-Nonius (1980). *Structure Determination Package*. Enraf-Nonius, Delft, The Netherlands.
 FARNOS, M. D., WOODS, B. A. & WAYLAND, B. B. (1986). *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 3659–3663.

HOARD, J. L. (1975). In *Porphyryns and Metalloporphyryns*, edited by K. M. SMITH, pp. 317–380. Amsterdam: Elsevier.
 JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEP*. Report ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA.
 MOTHERWELL, W. D. S. & CLEGG, W. (1978). *PLUTO*. Program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.
 OGOSHI, H., OMURA, T. & YOSHIDA, Z. (1973). *J. Am. Chem. Soc.* **95**, 1666–1668.
 SCHEIDT, W. R. (1978). In *Porphyryns*, Vol. III, edited by D. DOLPHIN, pp. 463–512. New York: Academic Press.
 SCHEIDT, W. R. & LEE, Y. J. (1987). *Struct. Bonding (Berlin)*, **67**, 1–70.
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.
 TAKENAKA, A., SYAL, S. K., SASADA, Y., OMURA, T., OGOSHI, H. & YOSHIDA, Z. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 62–65.

Acta Cryst. (1991). **C47**, 2550–2553

Complexation d'un Agent Trichomonacide (Ténonitrozole) par l'Acétate de Rhodium: Structure Cristalline du Tétrakis(μ -acétato)-bis[5-nitro-2-(2-thénylamino)-1,3-thiazole]dirhodium(II) Dichlorométhane

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Générale, UFR de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

NGUYEN-HUY DUNG

Laboratoire de Physique (URA 200), Faculté de Pharmacie, 4 avenue de l'Observatoire, 75270 Paris CEDEX 06, France

F. ROBERT

Laboratoire de Chimie des Métaux de Transition (URA 419), Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, 75230 Paris CEDEX 05, France

ET J. C. LANCELOT ET M. ROBBA

Laboratoire de Chimie Thérapeutique, UFR de Pharmacie, 1 rue Vaubénard, 14032 Caen CEDEX, France

(Reçu le 8 mars 1991, accepté le 28 juin 1991)

Abstract. $[\text{Rh}(\text{CH}_3\text{CO}_2)_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{N}_3\text{O}_3\text{S}_2)]_2 \cdot \text{CH}_2\text{Cl}_2$, $M_r = 1037.5$, monoclinic, $P2_1/n$, $a = 8.074$ (2), $b = 19.088$ (4), $c = 12.007$ (2) Å, $\beta = 95.39$ (2)°, $V = 1842.3$ (1) Å³, $Z = 2$, $D_m = 1.82$ (3), $D_x = 1.86$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo K}\alpha) = 0.7107$ Å, $\mu = 1.3$ mm⁻¹, $F(000) = 1032$, $T = 294$ (1) K, $R = 0.028$ for 2323 independent reflections. The unit-cell contains two discrete molecules, which present an inversion centre. In the adduct, the Rh—N bond length of 2.242 (8) Å is slightly shorter than that observed in a complex formed from rhodium acetate and diphenyltriazene. The Rh—Rh distance [2.383 (1) Å] and other parameters for the rhodium acetate cage show no major

deviations from those reported in the complex with diphenyltriazene. In the title complex, the atoms O(27) and S(21) of the thenoyl group are in an *E* conformation relative to the C(22)—C(26) bond, while in the free ligand and its dimethylformamide solvate the corresponding conformation is *Z*.

Introduction. Les carboxylates de rhodium(II) suscitent un intérêt soutenu depuis quelques années, tant pour leurs propriétés catalytiques en synthèse organique, que pour leur action comme agents antitumoraux potentiels, par inhibition de la synthèse de l'ADN (Howard, Kimball & Bear, 1979; Erck,

Rainen, Whileyman, Chang, Kimball & Bear, 1974). Par ailleurs, certains complexes du type $[\text{Rh}_2(\text{acetate})_4]_2L$ où L est un dérivé du nitroimidazole présentent des propriétés radiosensibilisatrices; elles permettent de diminuer la résistance aux radiations ionisantes lors du traitement anticancéreux, rendant ainsi la radiothérapie plus efficace (Chibber, Stratford, Ahmed, Robbins, Goodgame & Lee, 1984; Goodgame, Lawrence, Slawin, Williams & Stratford, 1986).

Dans ce contexte, nous avons effectué la synthèse et l'étude cristallographique d'un complexe du tétraacétate de dirhodium(II) avec un dérivé nitré [5-nitro-2-(2-thénylamino)-1,3-thiazole] utilisé pour ses propriétés trichomonocides et antimycotiques, le ténonitrozole (®Atrican).

Partie expérimentale. Le complexe $[\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4 \cdot (\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3\text{N}_3\text{S}_2)_2] \cdot \text{CH}_2\text{Cl}_2$ a été préparé par addition de 0,1 mmol (dissous dans 5 ml de méthanol) à une solution méthanolique saturée en acétate de rhodium (0,05 mmol). Après plusieurs heures d'agitation, le précipité obtenu est recueilli puis redissous dans du dichlorométhane. La solution est évaporée lentement et les cristaux de couleur brun rouge sont recueillis. L'analyse élémentaire indique un rapport $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4/\text{ténonitrozole} = \frac{1}{2}$.

Mesure de la masse volumique par flottaison; dimensions du cristal: $350 \times 280 \times 225 \mu\text{m}$; dimensions de la maille déterminées sur monocristal à partir de 25 réflexions avec le rayonnement $\text{Mo K}\alpha$ ($15^\circ \leq \theta \leq 16^\circ$); diffractomètre automatique Enraf-Nonius CAD-4; balayage $\omega-2\theta$ d'amplitude $s = 1,00 + 0,34 \text{tg} \theta^\circ$; $1,5 \leq \theta \leq 25^\circ$; $-12 \leq h \leq 12$, $0 \leq k \leq 24$, $0 \leq l \leq 15$; pas de corrections d'absorption; réflexions choisies pour contrôler les intensités: 040, 200; nombre de réflexions indépendantes mesurées 3220; nombre de réflexions considérées comme observées [$I \geq 3\sigma(I)$] 2323. Résolution de la structure par méthodes directes à l'aide de *MULTAN*11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et affinement basé sur les F à l'aide du programme *CRYSTALS* (Carruthers & Watkin, 1984). Les coordonnées des atomes (exceptées celles de l'hydrogène) et leurs facteurs d'agitation thermique, d'abord isotrope puis anisotrope affinés. La molécule de solvate (dichlorométhane) se trouve en désordre statistique de part et d'autre du centre d'inversion [2(c)] du groupe spatial. Les coordonnées des atomes d'hydrogène (autres que celles des atomes de solvate) déterminées à partir de la série de Fourier des différences ($F_o - F_c$) ont été affinées, ainsi que le facteur d'agitation thermique général B qui leur a été initialement affecté. $R = 0,028$, $wR = 0,029$ ($w = 1$); $S = 1,08$; valeur maximum du $\Delta/\sigma = 0,35$; aucun résidu significatif sur la série de Fourier des différences; facteurs de diffusion utilisés issus de *Internation-*

tional Tables for X-ray Crystallography (1974, Tome IV, pp. 99 et 149) et corrigés de la dispersion anormale. Corrections d'absorption: programme *DIFABS* (Walker & Stuart, 1983). Les dessins de la structure ont été obtenus à l'aide du programme *ORTEPII* (Johnson, 1976).

Discussion. Les coordonnées atomiques relatives sont rassemblées dans le Tableau 1,* les principales distances interatomiques et les angles de liaisons dans le Tableau 2. La Fig. 1 représente la vue en perspective de la molécule dimère et indique la numérotation utilisée dans l'unité asymétrique. La maille contient deux masses formulaires (vue stéréoscopique, Fig. 2). Le complexe présente un centre d'inversion en position 2(a) du groupe d'espace. Les deux ligands acétates indépendants sont numérotés de 1 à 4; le ligand ténonitrozole de 11 à 25; enfin la molécule de solvate de 30 à 32.

L'atome de rhodium est au centre d'un octaèdre dont les quatre positions équatoriales sont occupées par un atome d'oxygène de chaque groupement acétate tandis que les positions axiales sont occupées par l'atome d'azote N(13) du groupement thiazole et par l'atome de rhodium homologue. La distance $\text{Rh}-\text{Rh}^i$ (Tableau 2) est conforme à celle observée dans les systèmes rhodium-carboxylate en pont (Goodgame *et al.*, 1986). La distance $\text{Rh}-\text{N}$ [2,241 (4) Å] légèrement plus courte que celle observée par Farrell, Vargas, Mascarenhas & Gambardella (1987) dans le complexe formé par l'acétate de rhodium et le diphenyltriazène [2,301 (8) Å] est néanmoins comprise entre les distances $\text{Rh}-\text{N}$ (pyridine) 2,227 (3) Å (Koh & Christoph, 1978) et $\text{Rh}-\text{N}$ (acridine) 2,413 (3) Å (Cotton & Felthouse, 1981) qui représenteraient les valeurs extrêmes observées dans ce type de composés. L'octaèdre reste peu déformé: l'écart maximal observé sur les valeurs des angles des liaisons entre le rhodium et deux atomes en position *cis* n'excède pas $2,5^\circ$ de la valeur théorique. Les distances $\text{Rh}-\text{O}$ sont conformes à celles rencontrées dans ce type de complexe.

Les distances et angles dans le ligand ténonitrozole sont très voisins de ceux décrits dans la molécule à l'état libre (Nguyen-Huy Dung, Viossat, Lancelot & Robba, 1986) ou solvaté par le diméthylformamide (DMF) (Viossat, Nguyen-Huy Dung, Lancelot, Robert & Robba, 1987). Ainsi, les plus grandes

* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des distances C—H et N—H, liaisons de van der Waals ($d \leq 3,70$ Å) et des paramètres des atomes d'hydrogène ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 54410: 21 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.

différences sur les distances n'excèdent pas 0,034 Å [distance C(16)—N(16) dans la structure ténonitrozole-DMF]. De même, les angles restent très voisins, à l'exception de ceux qui admettent l'atome C(22) comme sommet: l'écart maximal est de 6,6° pour l'angle S(21)—C(22)—C(26) dans le ténonitrozole-DMF.

En revanche, la conformation du ligand dans le complexe est différente de celle décrite dans la molécule libre. En effet les atomes O(27) et S(21) sont situés dans une conformation *E* autour de la liaison C(22)—C(26), tandis qu'ils présentent une conformation *Z* dans la molécule libre.

Les angles de torsion S(21)—C(22)—C(26)—O(27) valent respectivement -177,4 (4) et +12,3 (4)° dans le complexe et dans le ténonitrozole libre.

Dans le composé cité en titre, les distances N(28)—O(1) [3,145 (5) Å] et N(28)—O(2) [3,029 (5) Å] permettent d'envisager l'existence de

liaisons hydrogène intramoléculaires bifurquées N(28)—H(28)⋯O(1) et N(28)—H(28)⋯O(2) avec des angles respectivement égaux à 119 et 148°.

L'empilement moléculaire est constitué d'entités dinucléaires discrètes dont les contacts de van der Waals les plus proches valent 3,246 (7) Å. Les molécules de dichlorométhane participent également à la cohésion cristalline [distance la plus proche entre le solvate et la molécule de complexe O(18)—Cl(31ⁱⁱ) est 3,388 (9) Å: (ii) = 1 - x, -y, 1 - z].

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

U_{eq} est égal au tiers de la trace du tenseur U_{ij} orthogonalisé.

| | x | y | z | U_{eq} |
|--------|-------------|-------------|-------------|----------|
| Rh(1) | 0,53911 (4) | 0,44023 (2) | 0,51386 (3) | 0,0318 |
| O(1) | 0,3071 (4) | 0,4124 (2) | 0,4493 (3) | 0,0426 |
| O(2) | 0,4574 (4) | 0,4459 (2) | 0,6687 (3) | 0,0439 |
| O(3) | 0,6112 (4) | 0,4411 (2) | 0,3573 (3) | 0,0414 |
| O(4) | 0,7664 (4) | 0,4750 (2) | 0,5787 (3) | 0,0441 |
| N(13) | 0,6124 (5) | 0,3274 (2) | 0,5347 (3) | 0,0395 |
| C(1) | 0,2059 (5) | 0,4597 (2) | 0,4159 (4) | 0,0404 |
| C(2) | 0,0361 (7) | 0,4378 (4) | 0,3676 (6) | 0,0620 |
| C(3) | 0,4059 (6) | 0,5041 (3) | 0,7022 (4) | 0,0415 |
| C(4) | 0,361 (1) | 0,5082 (4) | 0,8192 (6) | 0,0638 |
| S(11) | 0,6120 (2) | 0,19452 (6) | 0,5760 (1) | 0,0448 |
| C(12) | 0,5288 (6) | 0,2775 (2) | 0,5789 (4) | 0,0366 |
| C(14) | 0,7519 (6) | 0,3006 (3) | 0,4948 (4) | 0,0461 |
| C(15) | 0,7712 (6) | 0,2318 (2) | 0,5097 (4) | 0,0465 |
| N(16) | 0,9050 (6) | 0,1903 (3) | 0,4749 (4) | 0,0594 |
| O(17) | 1,0096 (6) | 0,2193 (3) | 0,4246 (4) | 0,0831 |
| O(18) | 0,9055 (6) | 0,1282 (2) | 0,4998 (4) | 0,0760 |
| S(21) | 0,0618 (2) | 0,35116 (8) | 0,7026 (1) | 0,0638 |
| C(22) | 0,1324 (6) | 0,2664 (3) | 0,7105 (4) | 0,0458 |
| C(23) | 0,0235 (7) | 0,2237 (3) | 0,7622 (5) | 0,0483 |
| C(24) | -0,1130 (7) | 0,2607 (4) | 0,7932 (5) | 0,0601 |
| C(25) | -0,1102 (8) | 0,3296 (4) | 0,7661 (6) | 0,0674 |
| C(26) | 0,2876 (6) | 0,2429 (2) | 0,6694 (4) | 0,0436 |
| O(27) | 0,3326 (5) | 0,1819 (2) | 0,6725 (4) | 0,0570 |
| N(28) | 0,3850 (6) | 0,2922 (2) | 0,6247 (4) | 0,0453 |
| C(30) | 0,441 (4) | 0,0462 (8) | 0,494 (2) | 0,2260 |
| Cl(31) | 0,327 (1) | -0,0028 (4) | 0,3907 (8) | 0,1500 |
| Cl(32) | 0,581 (1) | -0,0157 (5) | 0,5576 (7) | 0,1571 |

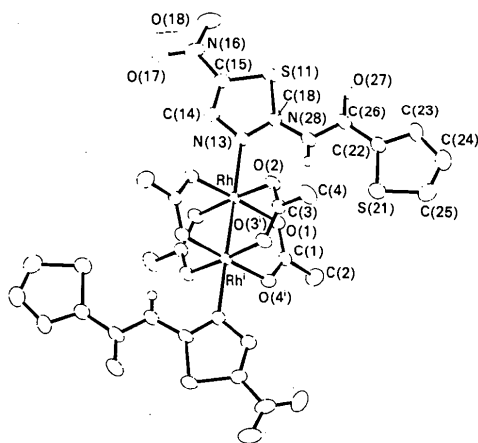


Fig. 1. Vue en perspective de la molécule dimère et numérotation des atomes.

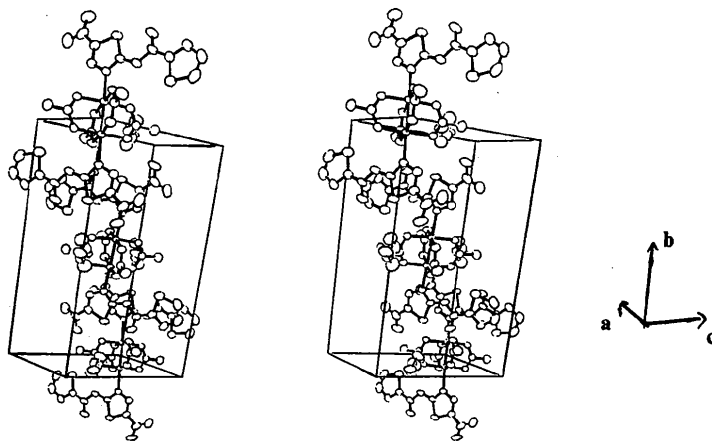


Fig. 2. Vue stéréoscopique du contenu de la maille (la molécule de CH₂Cl₂ occupe un site sur deux en désordre statistique).

Tableau 2. Distances interatomiques (Å) et angles (°)

| | | | |
|---------------------|------------|-------------------|-----------|
| Rh—Rh' | 2,3829 (6) | O(1)—C(1) | 1,260 (5) |
| Rh—O(1) | 2,031 (3) | C(1)—C(2) | 1,498 (7) |
| Rh—O(2) | 2,043 (3) | C(1)—O(4') | 1,266 (5) |
| Rh—O(3) | 2,030 (3) | O(2)—C(3) | 1,265 (5) |
| Rh—O(4) | 2,038 (3) | C(3)—C(4) | 1,495 (8) |
| Rh—N(13) | 2,241 (4) | C(3)—O(3') | 1,270 (5) |
| S(11)—C(12) | 1,722 (4) | S(21)—C(22) | 1,716 (5) |
| S(11)—C(15) | 1,730 (5) | S(21)—C(25) | 1,699 (7) |
| C(12)—N(13) | 1,310 (5) | C(22)—C(23) | 1,389 (7) |
| C(12)—N(28) | 1,360 (6) | C(22)—C(26) | 1,461 (7) |
| N(13)—C(14) | 1,365 (6) | C(23)—C(24) | 1,390 (8) |
| C(14)—C(15) | 1,332 (7) | C(24)—C(25) | 1,356 (9) |
| C(15)—N(16) | 1,434 (6) | C(26)—O(27) | 1,219 (6) |
| N(16)—O(17) | 1,219 (6) | C(26)—N(28) | 1,369 (6) |
| N(16)—O(18) | 1,223 (6) | | |
| C(30)—Cl(31) | 1,753 (9) | C(30)—Cl(32) | 1,753 (9) |
| Rh'—Rh—O(1) | 88,52 (9) | O(1)—Rh—N(13) | 90,9 (1) |
| Rh'—Rh—O(2) | 88,50 (9) | O(2)—Rh—O(3) | 175,9 (1) |
| Rh'—Rh—O(3) | 87,54 (9) | O(2)—Rh—O(4) | 89,3 (1) |
| Rh'—Rh—O(4) | 87,66 (9) | O(2)—Rh—N(13) | 93,0 (1) |
| Rh'—Rh—N(13) | 178,4 (1) | O(3)—Rh—O(4) | 91,6 (1) |
| O(1)—Rh—O(2) | 90,0 (1) | O(3)—Rh—N(13) | 90,9 (1) |
| O(1)—Rh—O(3) | 88,8 (1) | O(4)—Rh—N(13) | 92,9 (1) |
| O(1)—Rh—O(4) | 176,1 (1) | | |
| O(1)—C(1)—C(2) | 117,8 (5) | C(4)—C(3)—O(3') | 117,9 (5) |
| O(1)—C(1)—O(4') | 125,7 (4) | Rh—O(1)—C(1) | 118,8 (3) |
| C(2)—C(1)—O(4') | 116,5 (5) | Rh—O(2)—C(3) | 118,9 (3) |
| O(2)—C(3)—C(4) | 117,8 (5) | Rh—O(3)—C(3) | 120,5 (3) |
| O(2)—C(3)—O(3') | 124,4 (4) | Rh—O(4)—C(1') | 119,3 (3) |
| Rh—N(13)—C(12) | 127,1 (3) | O(17)—N(16)—O(18) | 125,2 (5) |
| Rh—N(13)—C(14) | 122,6 (3) | C(22)—S(21)—C(25) | 91,6 (3) |
| C(12)—S(11)—C(15) | 86,5 (2) | S(21)—C(22)—C(23) | 110,9 (4) |
| S(11)—C(12)—N(13) | 116,3 (4) | S(21)—C(22)—C(26) | 124,2 (4) |
| S(11)—C(12)—N(28) | 123,2 (3) | C(23)—C(22)—C(26) | 124,9 (5) |
| N(13)—C(12)—N(28) | 120,5 (4) | C(22)—C(23)—C(24) | 112,0 (5) |
| S(11)—C(15)—C(14) | 112,6 (4) | C(23)—C(24)—C(25) | 113,3 (6) |
| S(11)—C(15)—N(16) | 121,4 (4) | C(24)—C(25)—S(21) | 112,1 (5) |
| C(12)—N(13)—C(14) | 110,2 (4) | C(22)—C(26)—O(27) | 123,0 (4) |
| N(13)—C(14)—C(15) | 114,3 (5) | C(22)—C(26)—N(28) | 117,8 (4) |
| C(14)—C(15)—N(16) | 125,9 (5) | O(27)—C(26)—N(28) | 119,2 (5) |
| C(15)—N(16)—O(17) | 118,2 (5) | C(12)—N(28)—C(26) | 124,2 (4) |
| C(15)—N(16)—O(18) | 116,6 (5) | | |
| Cl(31)—C(30)—Cl(32) | 103,0 (9) | | |

Code de symétrie: (i) 1 - x, 1 - y, 1 - z.

Acta Cryst. (1991). **C47**, 2553–2556

A Luminescent Gold Complex: Bis- μ -[bis(dicyclohexylphosphino)ethane-*P,P'*]-digold Bis(hexafluorophosphate)

BY WILLIAM P. SCHAEFER, RICHARD E. MARSH, T. MARK MCCLESKEY AND HARRY B. GRAY

Division of Chemistry and Chemical Engineering and The Beckman Institute, Mail Code 139-74, California Institute of Technology, Pasadena, California 91125, USA*

(Received 26 February 1991; accepted 25 June 1991)

Abstract. $[\text{Au}_2(\text{C}_{26}\text{H}_{48}\text{P}_2)_2](\text{PF}_6)_2$, $M_r = 1529.1$, tetragonal, $P4n2$, $a = 15.917$ (5), $c = 12.448$ (1) Å, V

L'étude radiocristallographique a montré que la structure dinucléaire de l'acétate de rhodium(II) est conservée après réaction avec le ténonitrozole et que celui-ci est lié au rhodium par l'intermédiaire de l'atome d'azote N(13) du groupement thiazole. Cependant la conformation du ligand diffère de celle observée dans la molécule du ténonitrozole libre.

Références

- CARRUTHERS, J. R. & WATKIN, D. J. (1984). *CRYSTALS*. Chemical Crystallography Laboratory, Univ. d'Oxford, Angleterre.
- CHIBBER, R., STRATFORD, I. J., AHMED, I., ROBBINS, A. B., GOODGAME, D. & LEE, B. (1984). *Int. J. Radiat. Biol. Phys.* **10**, 1213–1215.
- COTTON, F. A. & FELTHOUSE, T. R. (1981). *Inorg. Chem.* **20**, 600–608.
- ERCK, A., RAINEN, L., WHILEYMAN, J., CHANG, I. M., KIMBALL, A. P. & BEAR, J. (1974). *Proc. Soc. Exp. Biol. Med.* **145**, 1278–1283.
- FARRELL, N., VARGAS, M. D., MASCARENHAS, Y. A. & GAMBARD-ELLA, M. T. (1987). *Inorg. Chem.* **26**, 1426–1429.
- GOODGAME, D. M. L., LAWRENCE, A. S., SLAWIN, A. M. Z., WILLIAMS, D. J. & STRATFORD, I. J. (1986). *Inorg. Chim. Acta*, **125**, 143–149.
- HOWARD, R. A., KIMBALL, A. P. & BEAR, J. L. (1979). *Cancer Res.* **39**, 2568–2573.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.
- KOH, Y. B. & CHRISTOPH, G. G. (1978). *Inorg. Chem.* **17**, 2590–2596.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, 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.
- NGUYEN-HUY DUNG, VIOSAT, B., LANCELOT, J. C. & ROBBA, M. (1986). *Chem. Pharm. Bull.* **34**, 951–956.
- VIOSAT, B., NGUYEN-HUY DUNG, LANCELOT, J. C., ROBERT, F. & ROBBA, M. (1987). *Chem. Pharm. Bull.* **35**, 2419–2425.
- WALKER, N. & STUART, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 159–166.

$= 3154$ (1) Å³, $Z = 2$, $D_x = 1.61$ g cm⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71073$ Å, $\mu = 50.1$ cm⁻¹, $F(000) = 1528$, room temperature (297 K), $R = 0.064$ for 3525 reflections with $F_o^2 > 0$, 0.038 for 2440 with $F_o^2 > 3\sigma(F_o^2)$. This

* Contribution No. 8403.