ORGANOMETALLICS
Organometallics, 1998, 17(14), 3101-3104, DOI:10.1021/om980217q

OM9802172Q

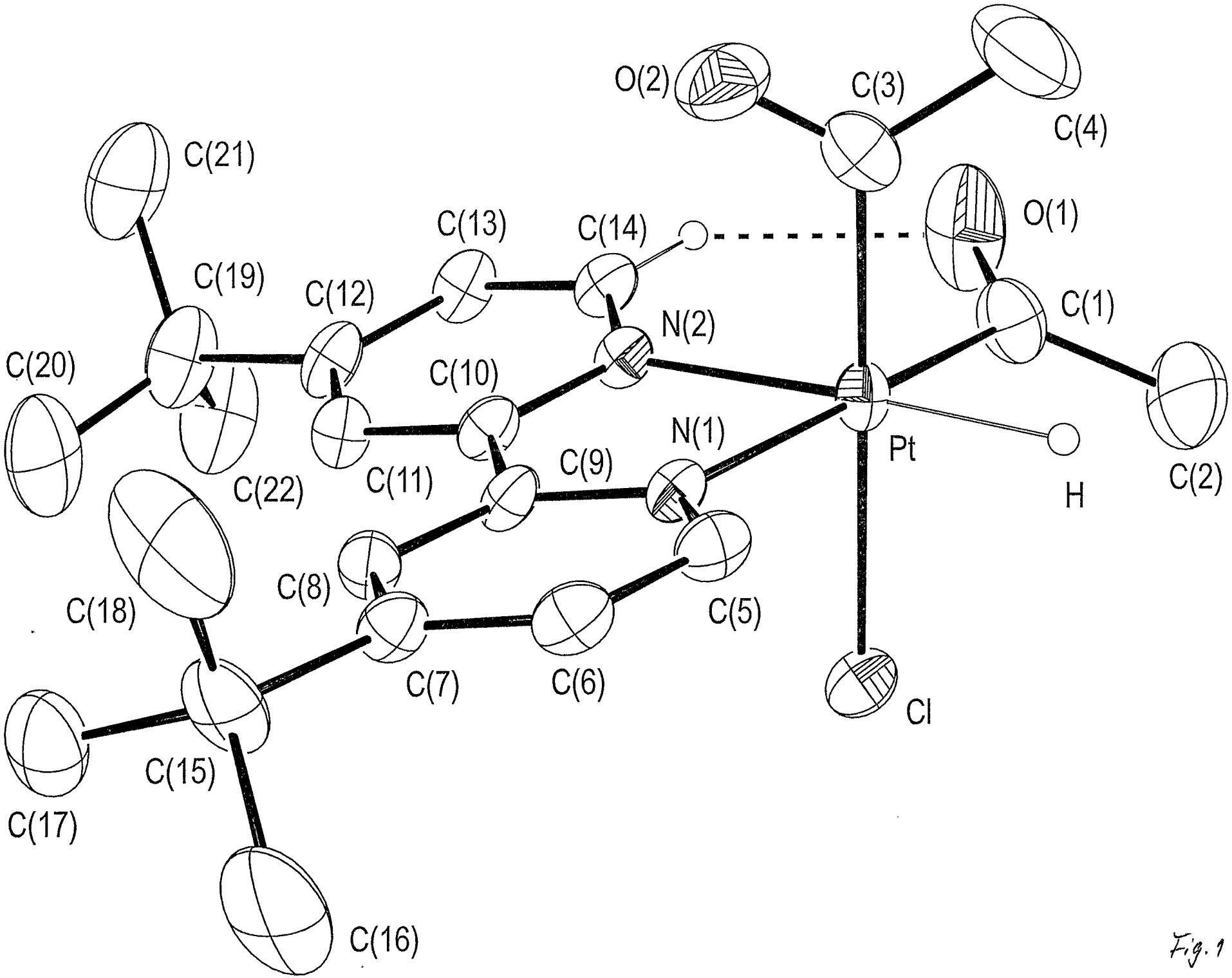

Fig. 1

Table 1. Crystal data and structure refinement for 1.

Identification code	ipds561
Empirical formula	C22 H31 Cl N2 O2 Pt
Formula weight	586.03
Temperature	220(2) K
Wavelength	0.71073 A
Crystal system	Orthorhombic
Space group	P 2(1) n b
Unit cell dimensions	a = 10.937(3) A alpha = 90 deg. b = 13.523(4) A beta = 90 deg. c = 16.267(5) A gamma = 90 deg.
Volume	2406.0(11) A^3
Z	4
Density (calculated)	1.618 Mg/m^3
Absorption coefficient	5.961 mm^-1
F(000)	1152
Crystal size	0.30 x 0.10 x 0.10 mm
Theta range for data collection	2.70 to 24.99 deg.
Index ranges	-12<=h<=12, -17<=k<=17, -20<=l<=20
Reflections collected	14936
Independent reflections	4004 [R(int) = 0.0809]
Absorption correction	Numerically
Max. and min. transmission	0.24 and 0.15
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2
Data / restraints / parameters	4004 / 1 / 257
Goodness-of-fit on F^2	0.988
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0296, wR2 = 0.0672
R indices (all data)	R1 = 0.0395, wR2 = 0.0709
Absolute structure parameter	-0.006(11)
Largest diff. peak and hole	1.561 and -0.561 e.A^-3

Table 2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized Uij tensor.

	x	y	z	U(eq)
C(1)	1007(9)	5832(6)	2591(6)	63(2)
C(2)	155(13)	5478(10)	3291(9)	111(4)
C(3)	1350(9)	4879(5)	1030(6)	58(2)
C(4)	27(14)	4736(12)	977(10)	124(6)
C(5)	3446(8)	2921(4)	1553(4)	45(2)
C(6)	4382(8)	2337(5)	1254(4)	47(2)
C(7)	5469(8)	2743(5)	1023(4)	43(2)
C(8)	5590(7)	3762(5)	1110(4)	42(2)
C(9)	4635(8)	4325(4)	1406(4)	38(2)
C(10)	4671(7)	5421(5)	1460(4)	40(2)
C(11)	5693(8)	5970(4)	1276(4)	45(2)
C(12)	5651(9)	6995(5)	1275(4)	49(2)
C(13)	4549(8)	7421(4)	1458(4)	48(2)
C(14)	3549(8)	6845(5)	1659(4)	44(2)
C(15)	6474(10)	2091(6)	677(7)	64(3)
C(16)	6698(11)	1198(7)	1236(10)	136(6)
C(17)	7709(9)	2606(8)	609(8)	84(4)
C(18)	6085(13)	1778(10)	-197(8)	134(6)
C(19)	6741(10)	7635(6)	1051(6)	77(4)
C(20)	7914(13)	7062(10)	936(11)	113(5)
C(21)	6435(14)	8179(9)	231(9)	126(6)
C(22)	6929(15)	8424(7)	1702(7)	108(6)
Cl	3268(2)	4861(1)	3461(1)	53(1)
N(1)	3574(6)	3903(4)	1638(3)	36(1)
N(2)	3615(6)	5865(3)	1678(3)	36(1)
O(1)	959(9)	6670(5)	2356(6)	116(3)
O(2)	1935(10)	4992(4)	410(4)	80(3)
Pt	2197(1)	4875(1)	2120(1)	40(1)

Table 3. Bond lengths [A] and angles [deg] for 1.

C(1)-O(1)	1.196(11)
C(1)-C(2)	1.548(14)
C(1)-Pt	1.990(9)
C(2)-H(2A)	0.97
C(2)-H(2B)	0.97
C(2)-H(2C)	0.97
C(3)-O(2)	1.204(12)
C(3)-C(4)	1.46(2)
C(3)-Pt	2.001(10)
C(4)-H(4A)	0.97
C(4)-H(4B)	0.97
C(4)-H(4C)	0.97
C(5)-N(1)	1.343(8)
C(5)-C(6)	1.381(11)
C(5)-H(5)	0.94
C(6)-C(7)	1.363(11)
C(6)-H(6)	0.94
C(7)-C(8)	1.391(9)
C(7)-C(15)	1.518(11)
C(8)-C(9)	1.380(10)
C(8)-H(8)	0.94
C(9)-N(1)	1.347(9)
C(9)-C(10)	1.485(9)
C(10)-N(2)	1.349(9)
C(10)-C(11)	1.375(10)
C(11)-C(12)	1.387(9)
C(11)-H(11)	0.94
C(12)-C(13)	1.369(12)
C(12)-C(19)	1.518(12)
C(13)-C(14)	1.382(11)
C(13)-H(13)	0.94
C(14)-N(2)	1.328(8)
C(14)-H(14)	0.94
C(15)-C(17)	1.524(14)
C(15)-C(16)	1.531(13)
C(15)-C(18)	1.54(2)
C(16)-H(16A)	0.97
C(16)-H(16B)	0.97
C(16)-H(16C)	0.97
C(17)-H(17A)	0.97
C(17)-H(17B)	0.97
C(17)-H(17C)	0.97
C(18)-H(18A)	0.97
C(18)-H(18B)	0.97
C(18)-H(18C)	0.97
C(19)-C(20)	1.51(2)
C(19)-C(22)	1.517(12)
C(19)-C(21)	1.56(2)
C(20)-H(20A)	0.97
C(20)-H(20B)	0.97
C(20)-H(20C)	0.97
C(21)-H(21A)	0.97
C(21)-H(21B)	0.97
C(21)-H(21C)	0.97
C(22)-H(22A)	0.97
C(22)-H(22B)	0.97
C(22)-H(22C)	0.97
Cl-Pt	2.476(2)
N(1)-Pt	2.147(6)
N(2)-Pt	2.172(6)

Pt-H	1.72(5)
O(1)-C(1)-C(2)	120.1(9)
O(1)-C(1)-Pt	121.5(7)
C(2)-C(1)-Pt	118.4(7)
C(1)-C(2)-H(2A)	109.5(7)
C(1)-C(2)-H(2B)	109.5(6)
H(2A)-C(2)-H(2B)	109.5
C(1)-C(2)-H(2C)	109.5(6)
H(2A)-C(2)-H(2C)	109.5
H(2B)-C(2)-H(2C)	109.5
O(2)-C(3)-C(4)	119.6(11)
O(2)-C(3)-Pt	119.8(8)
C(4)-C(3)-Pt	120.6(9)
C(3)-C(4)-H(4A)	109.5(7)
C(3)-C(4)-H(4B)	109.5(7)
H(4A)-C(4)-H(4B)	109.5
C(3)-C(4)-H(4C)	109.5(8)
H(4A)-C(4)-H(4C)	109.5
H(4B)-C(4)-H(4C)	109.5
N(1)-C(5)-C(6)	121.7(7)
N(1)-C(5)-H(5)	119.2(4)
C(6)-C(5)-H(5)	119.2(4)
C(7)-C(6)-C(5)	120.8(6)
C(7)-C(6)-H(6)	119.6(4)
C(5)-C(6)-H(6)	119.6(4)
C(6)-C(7)-C(8)	117.0(6)
C(6)-C(7)-C(15)	120.0(6)
C(8)-C(7)-C(15)	123.0(7)
C(9)-C(8)-C(7)	120.7(7)
C(9)-C(8)-H(8)	119.7(4)
C(7)-C(8)-H(8)	119.7(4)
N(1)-C(9)-C(8)	121.1(6)
N(1)-C(9)-C(10)	115.4(6)
C(8)-C(9)-C(10)	123.5(7)
N(2)-C(10)-C(11)	120.9(6)
N(2)-C(10)-C(9)	115.9(6)
C(11)-C(10)-C(9)	123.2(7)
C(10)-C(11)-C(12)	120.9(7)
C(10)-C(11)-H(11)	119.6(4)
C(12)-C(11)-H(11)	119.6(5)
C(13)-C(12)-C(11)	116.7(7)
C(13)-C(12)-C(19)	120.3(7)
C(11)-C(12)-C(19)	123.0(8)
C(12)-C(13)-C(14)	120.8(6)
C(12)-C(13)-H(13)	119.6(4)
C(14)-C(13)-H(13)	119.6(4)
N(2)-C(14)-C(13)	121.7(7)
N(2)-C(14)-H(14)	119.2(4)
C(13)-C(14)-H(14)	119.2(4)
C(7)-C(15)-C(17)	113.8(7)
C(7)-C(15)-C(16)	110.8(8)
C(17)-C(15)-C(16)	105.2(9)
C(7)-C(15)-C(18)	107.5(8)
C(17)-C(15)-C(18)	107.6(11)
C(16)-C(15)-C(18)	112.0(10)
C(15)-C(16)-H(16A)	109.5(6)
C(15)-C(16)-H(16B)	109.5(6)
H(16A)-C(16)-H(16B)	109.5
C(15)-C(16)-H(16C)	109.5(7)
H(16A)-C(16)-H(16C)	109.5
H(16B)-C(16)-H(16C)	109.5
C(15)-C(17)-H(17A)	109.5(6)
C(15)-C(17)-H(17B)	109.5(4)

H(17A)-C(17)-H(17B)	109.5
C(15)-C(17)-H(17C)	109.5(7)
H(17A)-C(17)-H(17C)	109.5
H(17B)-C(17)-H(17C)	109.5
C(15)-C(18)-H(18A)	109.5(6)
C(15)-C(18)-H(18B)	109.5(7)
H(18A)-C(18)-H(18B)	109.5
C(15)-C(18)-H(18C)	109.5(6)
H(18A)-C(18)-H(18C)	109.5
H(18B)-C(18)-H(18C)	109.5
C(20)-C(19)-C(22)	109.4(11)
C(20)-C(19)-C(12)	113.9(7)
C(22)-C(19)-C(12)	109.9(9)
C(20)-C(19)-C(21)	108.6(11)
C(22)-C(19)-C(21)	107.1(9)
C(12)-C(19)-C(21)	107.8(9)
C(19)-C(20)-H(20A)	109.5(7)
C(19)-C(20)-H(20B)	109.5(8)
H(20A)-C(20)-H(20B)	109.5
C(19)-C(20)-H(20C)	109.5(5)
H(20A)-C(20)-H(20C)	109.5
H(20B)-C(20)-H(20C)	109.5
C(19)-C(21)-H(21A)	109.5(7)
C(19)-C(21)-H(21B)	109.5(6)
H(21A)-C(21)-H(21B)	109.5
C(19)-C(21)-H(21C)	109.5(6)
H(21A)-C(21)-H(21C)	109.5
H(21B)-C(21)-H(21C)	109.5
C(19)-C(22)-H(22A)	109.5(8)
C(19)-C(22)-H(22B)	109.5(6)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5
C(19)-C(22)-H(22C)	109.5(7)
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5
C(5)-N(1)-C(9)	118.7(6)
C(5)-N(1)-Pt	124.8(5)
C(9)-N(1)-Pt	116.5(4)
C(14)-N(2)-C(10)	119.0(6)
C(14)-N(2)-Pt	125.8(5)
C(10)-N(2)-Pt	115.1(4)
C(1)-Pt-C(3)	92.1(4)
C(1)-Pt-N(1)	176.3(3)
C(3)-Pt-N(1)	90.2(3)
C(1)-Pt-N(2)	101.1(3)
C(3)-Pt-N(2)	92.0(3)
N(1)-Pt-N(2)	75.9(2)
C(1)-Pt-Cl	88.6(3)
C(3)-Pt-Cl	179.3(3)
N(1)-Pt-Cl	89.2(2)
N(2)-Pt-Cl	87.6(2)
C(1)-Pt-H	78(2)
C(3)-Pt-H	91(2)
N(1)-Pt-H	105(2)
N(2)-Pt-H	177(2)
Cl-Pt-H	90(2)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

Table 4. Anisotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1.
The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
-2 pi^2 [h^2 a*^2 U11 + ... + 2 h k a* b* U12]

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
C(1)	52(6)	57(5)	81(7)	-10(4)	8(5)	9(4)
C(2)	87(11)	142(11)	103(10)	2(9)	45(8)	29(8)
C(3)	53(7)	44(4)	78(7)	-7(4)	-7(5)	6(4)
C(4)	67(12)	200(16)	106(12)	-23(10)	-32(8)	16(10)
C(5)	57(6)	31(3)	47(4)	5(3)	-3(4)	-7(3)
C(6)	65(6)	30(3)	46(4)	1(3)	1(4)	4(3)
C(7)	52(6)	32(3)	43(4)	3(3)	5(3)	3(3)
C(8)	42(5)	35(3)	49(4)	5(3)	7(3)	5(3)
C(9)	52(6)	30(3)	33(4)	5(3)	12(3)	2(3)
C(10)	54(6)	29(3)	36(4)	1(3)	7(3)	-1(3)
C(11)	49(6)	34(4)	51(4)	-3(3)	10(4)	-2(3)
C(12)	72(8)	37(4)	38(4)	-10(3)	17(4)	-8(4)
C(13)	68(6)	23(3)	51(5)	-3(3)	14(4)	-1(3)
C(14)	60(6)	34(4)	36(4)	-4(3)	8(4)	7(3)
C(15)	50(7)	35(4)	108(8)	2(5)	6(5)	15(4)
C(16)	85(11)	60(5)	261(18)	68(8)	39(9)	34(5)
C(17)	71(10)	62(7)	120(10)	16(7)	28(6)	18(5)
C(18)	98(11)	186(13)	120(10)	-107(10)	-5(8)	61(10)
C(19)	94(11)	47(5)	92(8)	-11(4)	29(5)	-34(5)
C(20)	85(12)	74(8)	178(15)	0(9)	43(10)	-32(7)
C(21)	138(14)	99(8)	140(12)	27(8)	49(10)	-43(8)
C(22)	122(17)	85(6)	116(8)	-47(5)	40(9)	-55(8)
Cl	68(2)	44(1)	47(1)	2(1)	2(1)	-3(1)
N(1)	43(4)	32(3)	32(3)	2(2)	3(3)	-4(2)
N(2)	47(4)	28(3)	34(3)	-3(2)	7(3)	6(2)
O(1)	103(7)	58(5)	188(10)	-3(5)	64(7)	26(4)
O(2)	94(10)	94(4)	51(3)	4(2)	-15(4)	-15(4)
Pt	38(1)	36(1)	45(1)	-3(1)	8(1)	-2(1)

Table 5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (A^2 x 10^3) for 1.

	x	y	z	U(eq)
H(2A)	576(13)	5538(10)	3813(9)	166
H(2B)	-68(13)	4793(10)	3199(9)	166
H(2C)	-578(13)	5883(10)	3299(9)	166
H(4A)	-386(14)	5271(12)	1261(10)	186
H(4B)	-191(14)	4111(12)	1231(10)	186
H(4C)	-221(14)	4730(12)	404(10)	186
H(5)	2701(8)	2623(4)	1700(4)	54
H(6)	4268(8)	1650(5)	1210(4)	56
H(8)	6331(7)	4069(5)	966(4)	51
H(11)	6429(8)	5646(4)	1149(4)	54
H(13)	4472(8)	8113(4)	1448(4)	57
H(14)	2803(8)	7155(5)	1786(4)	52
H(16A)	7339(11)	789(7)	1003(10)	203
H(16B)	5952(11)	814(7)	1282(10)	203
H(16C)	6946(11)	1425(7)	1776(10)	203
H(17A)	7673(9)	3103(8)	179(8)	126
H(17B)	8334(9)	2124(8)	475(8)	126
H(17C)	7905(9)	2920(8)	1128(8)	126
H(18A)	6503(13)	1171(10)	-347(8)	202
H(18B)	6299(13)	2295(10)	-584(8)	202
H(18C)	5209(13)	1669(10)	-209(8)	202
H(20A)	7791(13)	6551(10)	526(11)	169
H(20B)	8149(13)	6760(10)	1453(11)	169
H(20C)	8555(13)	7507(10)	755(11)	169
H(21A)	5805(14)	8669(9)	330(9)	188
H(21B)	6145(14)	7703(9)	-171(9)	188
H(21C)	7164(14)	8502(9)	24(9)	188
H(22A)	6149(15)	8722(7)	1839(7)	162
H(22B)	7478(15)	8928(7)	1493(7)	162
H(22C)	7281(15)	8126(7)	2190(7)	162
H	1107(51)	4096(33)	2519(33)	8(12)