

BASE DE DONNEES STRUCTURALES

ANGD – RECIPROCS
6-7 juillet 2009

Dr. Jean-Claude DARAN
LCC, Toulouse

Intérêt des Bases de Données Structurales

Les bases de données structurales contiennent les informations sur les structures de composés organiques, organométalliques et inorganiques mais aussi sur les métaux et les alliages.

Leur rôle est multiple:

- vérifier que la structure cristalline en cours n'a pas déjà été étudiée
- récupérer une ou plusieurs structures pour des études de modélisation
- rechercher des structures possédant des fragments structuraux définis
- explorer les interactions moléculaires d'une série de composés
- visualiser les structures en 3D

Principales Bases de Données Structurales

- **CSD** (Cambridge Structural Database):

C'est la seule base regroupant les données structurales complètes de composés organiques et organométalliques.

<http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/>

- **ICSD** (Inorganic Crystal Structure DataFile):

C'est l'équivalent de la CSD pour l'ensemble des structures inorganiques.

<http://icsdweb.fiz-karlsruhe.de/>

- **CRYSTMET** (MDF – Metals Data File):

Elle contient les données structurales pour les métaux et les alliages.

<http://www.tothcanada.com/>

- **CDIF** (Crystal Data Identification File):

Elle fournit les symétries, les paramètres de maille, la composition et les références bibliographiques pour plus de 237000 composés.

<http://www.nist.gov/index.html>

- **ICDD** (International Centre for Diffraction Data):

Elle contient l'ensemble des données structurales sur poudre.

<http://www.icdd.com/index.htm>

Inorganic Crystal Structure Database (ICSD)

ICSD est la base de données de références complètes pour tout ce qui concerne les structures de composés inorganiques depuis 1913.

Elle contenait **120794** structures inorganiques en avril 2009. Elle vient en complément de la base de données structurales sur les composés organiques et organométalliques. Elle fournit les informations suivantes:

- Données structurales sur les minéraux, les métaux et les composés Intermetalliques.
- Descripteurs structuraux (*Pearson symbol, ANX formula, Wyckoff sequences*)
- Données bibliographiques
- Conditions de synthèse

Son accès est payant, l'ordre de grandeur étant de **1700 €** (accès web) pour une licence multi sites dans le cas d'un institut de recherche. Ce coût passe à **3100 €** si on souhaite une distribution CD.

Authors smith	Years 1999	Journal	Title	Help Search Reset
Elements	Element Count	Mineral Name	ANX Formula	Pearson Symbol
System any	Laue Class any	Space Group	Cell Volume	Density
Remarks	Min. Distance	Distance Select	Distance Range	Co-ordin.

Select All / None 14 Results

References

EndNote

Details

Bonds

Pattern

Structure

Year ▲	Authors	Struct. Formula	sgr	Mineral Name
<input type="checkbox"/> 1999	Barker, M.G.;Blake, A.J.;Edwards, P.P.;Gregory, D.H.;Hamor, T.A.;Siddons, D.J.;Smith, S.E.	Li Ni N	P6-M2	
<input type="checkbox"/> 1999	Barker, M.G.;Blake, A.J.;Edwards, P.P.;Gregory, D.H.;Hamor, T.A.;Siddons, D.J.;Smith, S.E.	Li5 Ni3 N3	P6-2M	
<input type="checkbox"/> 1999	Bastow, T.J.;Botton, G.A.;Etheridge, J.;Smith, M.E.;Whitfield, H.J.	Li2 (Ti O) (Si O4)	P4/NMMZ	
<input type="checkbox"/> 1999	Sinclair, D.C.;Skakle, J.M.S.;Morrison, F.D.;Smith, R.I.;Beales, T.P.	Ba Ti O2.97	P63/MMC	
<input type="checkbox"/> 1999	Sinclair, D.C.;Skakle, J.M.S.;Morrison, F.D.;Smith, R.I.;Beales, T.P.	Ba Ti O2.916	P63/MMC	
<input type="checkbox"/> 1999	Sinclair, D.C.;Skakle, J.M.S.;Morrison, F.D.;Smith, R.I.;Beales, T.P.	Ba Ti O2.88	P63/MMC	
<input type="checkbox"/> 1999	Sinclair, D.C.;Skakle, J.M.S.;Morrison, F.D.;Smith, R.I.;Beales, T.P.	Ba Ti O2.848	P63/MMC	
<input type="checkbox"/> 1999	Sinclair, D.C.;Skakle, J.M.S.;Morrison, F.D.;Smith, R.I.;Beales, T.P.	Ba Ti O2.827	P63/MMC	
<input type="checkbox"/> 1999	Peter, S.;Parise, J.B.;Smith, R.I.;Lutz, H.D.	Pb (O D) Br	PNMA	
<input type="checkbox"/> 1999	Peter, S.;Parise, J.B.;Smith, R.I.;Lutz, H.D.	Pb (O D) Br	PNMA	

Pages : [1] 2(14 results) 10 results per page.

Cambridge Structural Database (CSD)

Elle contient l'ensemble des structures de petites molécules organiques et Organométalliques. Toutes ces structures ayant été analysées soit par diffraction des rayons X, soit par diffraction des neutrons.

La base contient plus de 322.000 composés. Sa mise à jour est effectuée tous les deux mois.

Des logiciels pour la recherche, la récupération, l'examen et l'analyse des informations fournis par la CSD sont à la disposition des utilisateurs.

Ces logiciels sont utilisés dans le monde entier, aussi bien par le monde académique que par la recherche industrielle et sont développés en permanence par le personnel du Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) à Cambridge.

LOGICIELS de la (CSD)

- **ConQuest**: programme pour la recherche et la récupération d'informations à partir de la base CSD. Il propose une large gamme d'outils de recherche:
 - ❖ Sous structures chimiques
 - ❖ Géométries
 - ❖ Contact intermoléculaires (non liants)

Principales caractéristiques:

- Editeur graphique pour dessiner les structures et définir les paramètres géométriques
- Possibilité de combiner plusieurs recherches
- Examen interactif des résultats obtenus
- Possibilité de nombreux formats (CIF, PDB, MOL2, SHELX, etc.)
- Documentation complète et 'tutorial'

▪ **Vista** (VIvisual STAistics): propose l'analyse et la présentation de statistiques en relation avec les résultats de la recherche.

▪ **Mercury** : permet une visualisation aisée de la structure en 3 dimensions et l'examen de l'empilement cristallin.

LOGICIELS de la (CSD)

Bases d'informations

▪ ***IsoStar***: base de données contenant des informations expérimentales et théoriques sur les interactions non liantes contenues dans la CSD. Il a été élaboré pour jouer un rôle important dans la mise au point de nouvelles molécules. Il présente un intérêt tout particulier pour les chercheurs engagés dans l'élaboration rationnelle de médicaments (Drug design).

Cette base de données contient des informations extraites de la CSD, de la PDB (Protein Data Bank) et de calculs théoriques.

▪ ***Mogul*** : propose un accès aisé aux informations concernant les longueurs de liaisons, les angles de valence, les angles de torsion acyclique en utilisant les données issues de la CSD.

En demandant à ***Mogul*** de rechercher les données pour une géométrie spécifique de la structure étudiée (liaisons, angle, etc.), il va automatiquement générer le modèle qui décrit cette molécule. Ce modèle sera alors utilisé pour rechercher automatiquement dans la CSD toutes les molécules qui contiennent cette spécificité et présenter le résultat interactivement sous la forme d'un interface graphique ou le passer au format ASCII pour l'interfacer avec d'autres programmes.

File Searches Help

Build query Results and analysis View structures

Results Navigator

All hits: 237

Accepted hits: 237

Showing hits with R-factor: Any

Relevance	Number	Contribution
<input checked="" type="checkbox"/> 1.00	237	100.0%

View diagrams...

More hits...

Statistics

Total : 237

Selected : 237

Mean : 123.693°

Standard deviation : 1.385°

Minimum : 115.525°

Lower quartile : 123.184°

Median : 123.782°

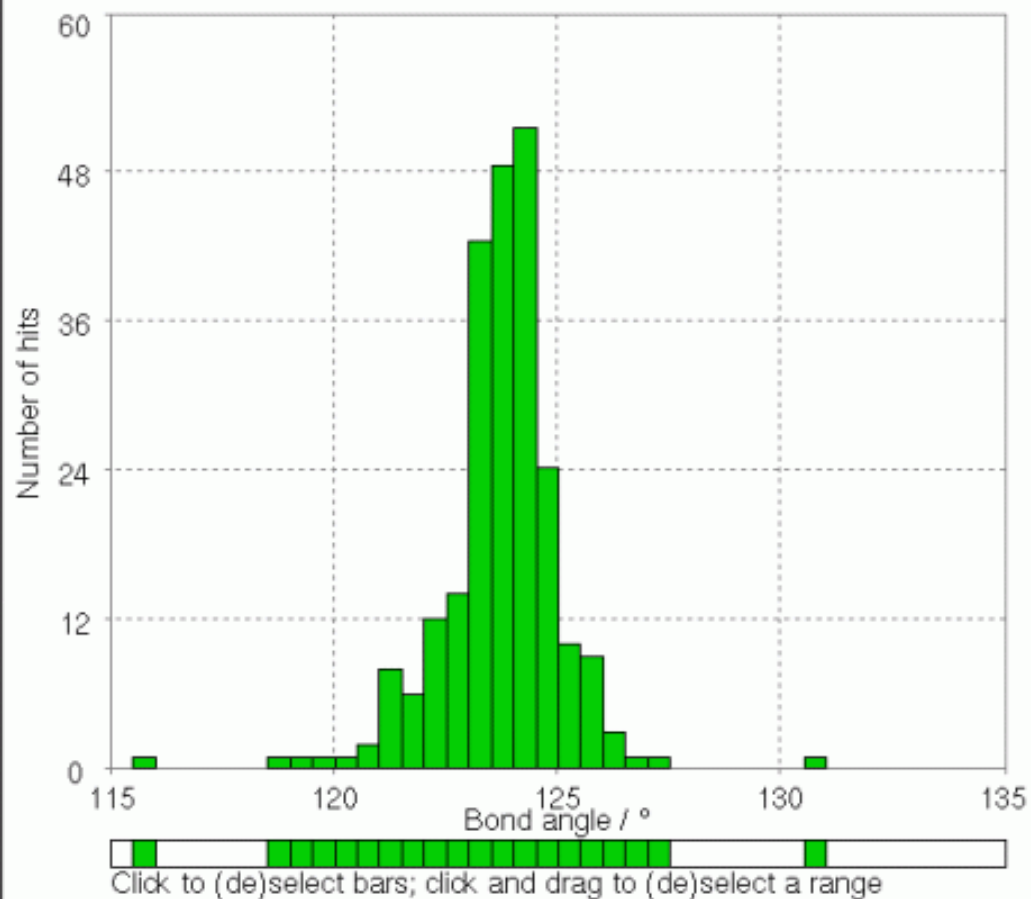
Upper quartile : 124.381°

Maximum : 130.896°

All fragments...

View query...

Mogul search – Bond angle – C5 C4 C3

**Histogram display**

Displayed hits: 237

Selected hits: 237

Select

all hits in histogram

Deselect

all hits in histogram

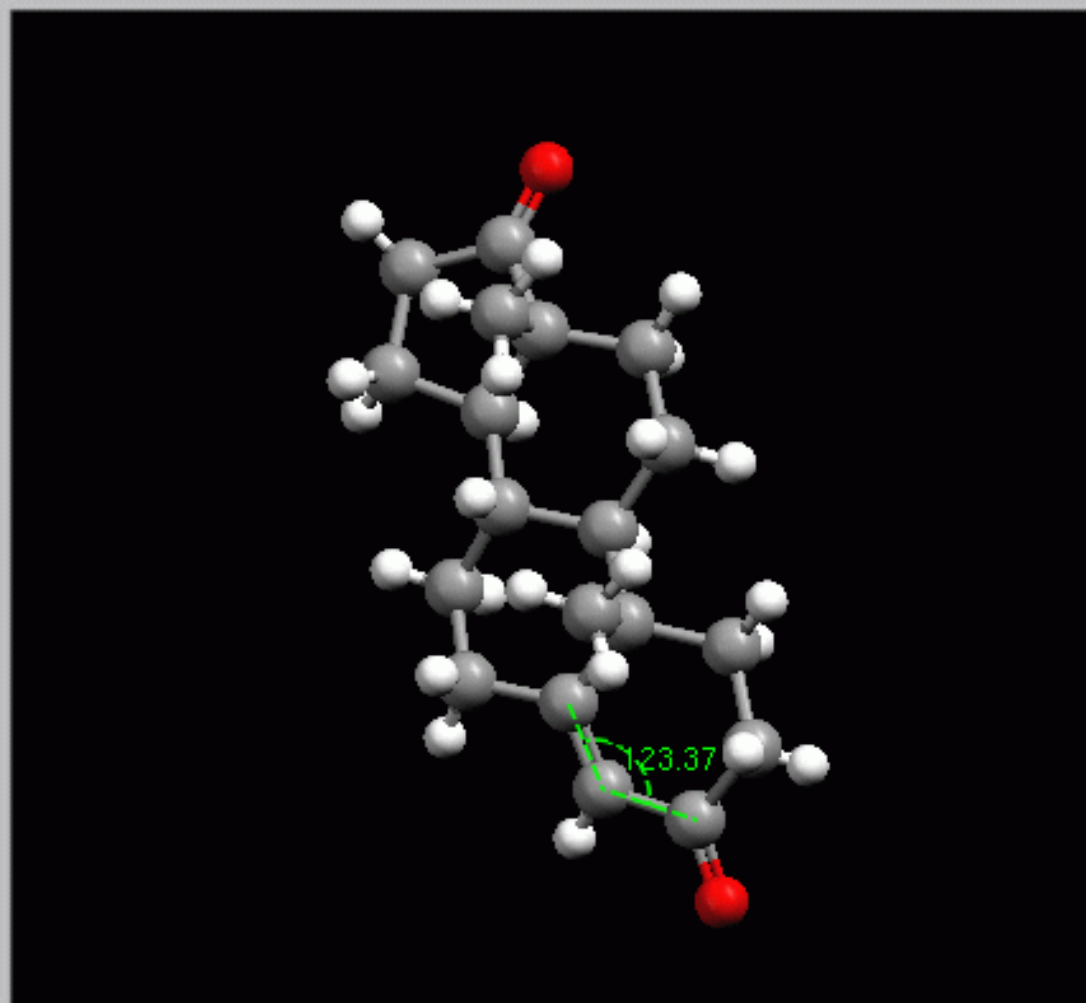
R-factor filter

Information

Diagram

3D Visualiser

Refcode: ANDSEO



Reset display

 Display fragments

ANDSEO

ABEPIG

ACPRET

ACPRET03

ALDAHA 10

ANDIDO

ANDREO

ANDSEO

ATPRCL01

ATPRCL 10

BARCOX

BARYAU

BAWFEK

BAYFAI

BAZLIX

BEBFOD

BEBSUW

BEJVAN

BERHUB

BERJAJ

BERLAL

BERLEP

BEZTAB

BFHMPR

BHPRG

BIJTAP

<<

>>

211 structures

Build Queries

Combine Queries

Manage Hitlists

View Results

Draw

Peptide

Author/Journal

Name/Class

Elements

Formula

Space Group

Unit Cell

Z/Density

Experimental

All Text

Refcode (entry ID)

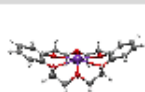
Search

Reset

Build Query Draw (1) - New



File Edit Atoms Bonds 3D Options Help



Click and drag to create a bond.
Drag to an existing atom to make a connection.

Next Atom: C
Next Bond: Single

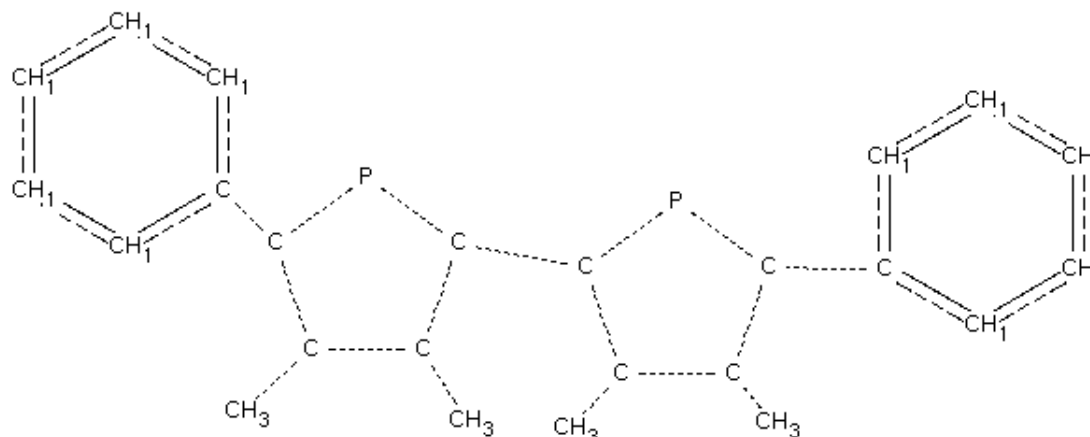
DRAW

EDIT

ERASE

ADD 3D

CONTACT



3D Parameters:

Options...

Delete

Contacts:

Options...

Delete



RingMaker

Templates...

C H O N S P F Cl Any More... Groups...

C

Bond:

Single



Search

Store

Cancel

Search

Reset

Search Name: search2

Available Databases:

Show Updates separately

- CSD version 5.30 (November 2008) + 1 update

You can search complete database(s) or a subset (e.g., hits found in a previous search)

Select Subset

Clear Subset

Single query being used. Search will find structures:

where this query is true:

Query 2

Filters Advanced Options

3D coordinates determined

R factor

- <= 0.05
- <= 0.075
- <= 0.1

Not disordered

No errors

Not polymeric

No ions

No powder structures

Only

- Organics
- Organometallic

Start Search

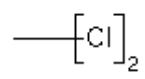
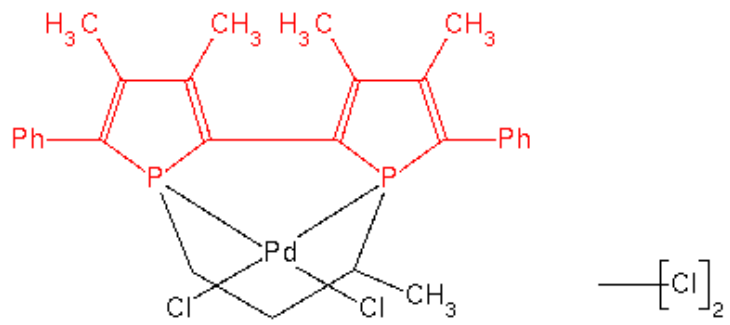
Cancel

Reset

- All Text
- Author/Journal
- Chemical
- Crystal
- Experimental
- Diagram**
- 3D Visualiser
- CSD Internals
- Search Overview

Refcode: MISJEE

CSD version 5.30 (November 2008)



MISJEE

Analyse Hitlist

- ✓ BEYYUZ
- ✓ HEJPAN
- ✓ HEJPER
- ✓ MISJEE**
- ✓ MISRAI
- ✓ NEBWIA
- ✓ NEBWOG
- ✓ RAWDEZ
- ✓ VAJHEU
- ✓ QOCQAB
- ✓ QOCQEF

<<

>>

11 hits

100%

Stop Search

Use as Query...

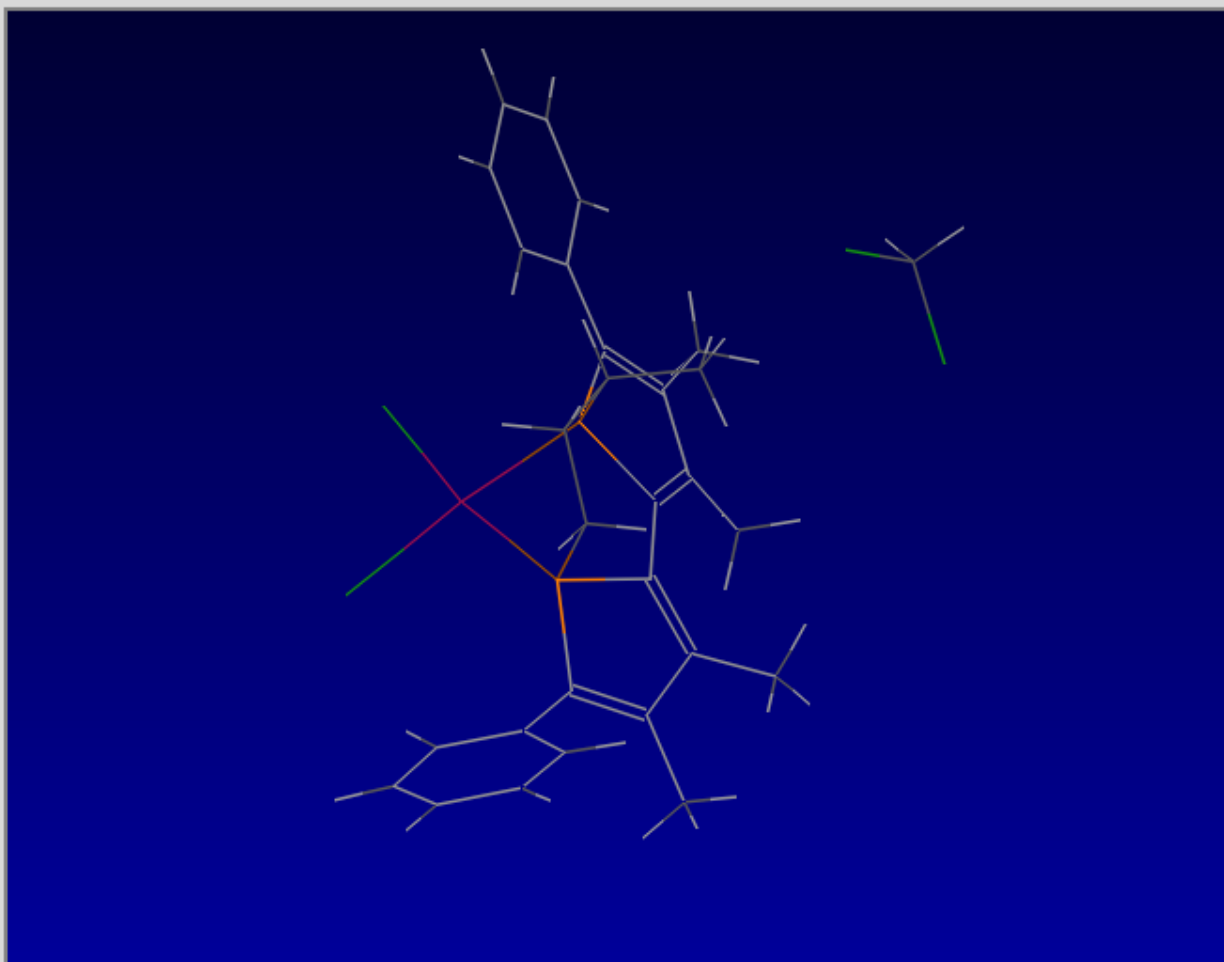
Detach

Build Queries Combine Queries Manage Hitlists **View Results**

All Text
Author/Journal
Chemical
Crystal
Experimental
Diagram
3D Visualiser
CSD Internals
Search Overview

Refcode: MISJEE

CSD version 5.30 (November 2008)

 Show substructure matches

Q2

Right-click in visualiser for options menu

Detach

MISJEE

Analyse Hitlist

- ✓ BEYYUZ
- ✓ HEJPAN
- ✓ HEJPER
- ✓ MISJEE
- ✓ MISRAI
- ✓ NEBWIA
- ✓ NEBWOG
- ✓ RAWDEZ
- ✓ VAJHEU
- ✓ QOCQAB
- ✓ QOCQEF

<<

>>

11 hits

100%

Stop Search

All Text

Author/Journal

Chemical

Crystal

Experimental

Diagram

3D Visualiser

CSD Internals

Search Overview

Refcode: MISJEE

CSD version 5.30 (November 2008)

Spacegroup

Name: P21 Number: 4

Cell Parameters

a: 8.933(<1) b: 12.160(<1) c: 14.009(<1)

alpha: 90.00 beta: 103.68(<1) gamma: 90.00

Volume: 1478.579

Reduced Cell Parameters

a: 8.933 b: 12.160 c: 14.009

alpha: 90.00 beta: 103.68 gamma: 90.00

Volume: 1478.579

Other Parameters

Molecular Volume: 739.289 Z: 2.0

Chemical Units: 2 Z': 1.0

Additional Information

From:

Habit: needle

Polymorph:

Notes:

MISJEE

Analyse Hitlist

- BEYYUZ
- HEJPAN
- HEJPER
- MISJEE
- MISRAI
- NEBWIA
- NEBWOG
- RAWDEZ
- VAJHEU
- QOCQAB
- QOCQEF

<<

>>

11 hits

100%

Stop Search

Detach

Select atoms to define 3D Parameters or Objects

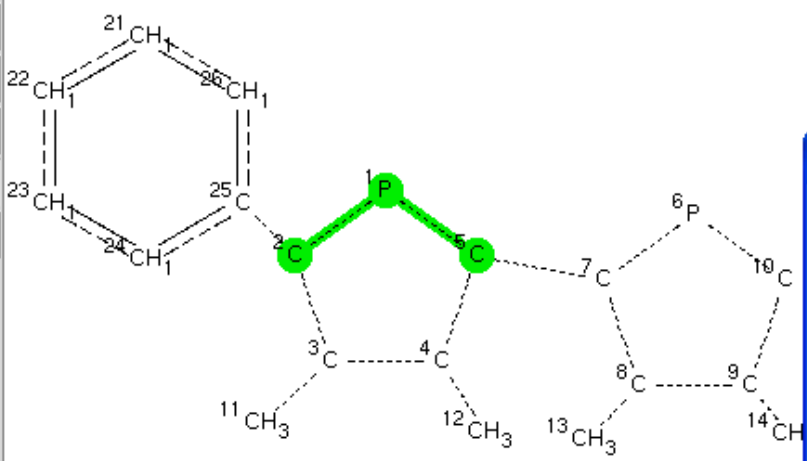
Defined Angle [ANG2]: C2 P1 C5

3D Parameters:

- DIST1
- DIST2
- DIST3
- DIST4
- ANG1
- ANG2

Edit...
Delete

- DRAW
- EDIT
- ERASE
- ADD 3D
- CONTACT



To construct Parameter/Object:

Select atoms (main window) or object (list below)
Hit 'Options...' to set constraints or change options

Current Selection:

Valid Parameters

Angle: ANG2

Options...

All Parameters...

Defined Objects:

- CENT1
- CENT2

Delete

Reset

Done

- RingMaker

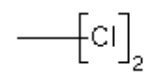
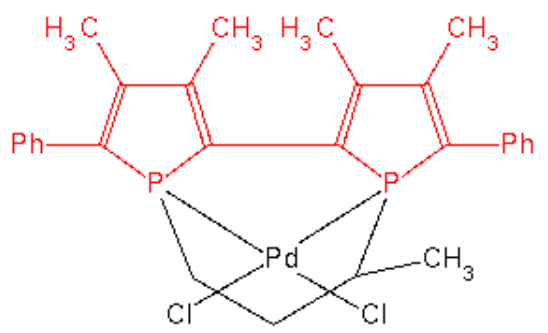
C H O N S P F Cl Any More... Groups... C

Search Reset

- All Text
- Author/Journal
- Chemical
- Crystal
- Experimental
- Diagram**
- 3D Visualiser
- CSD Internals
- Search Overview

Refcode: MISRAI

CSD version 5.30 (November 2008)



Parameters

- DIST1** 1.812
- DIST2** 1.815
- DIST3** 1.799
- DIST4** 1.851
- ANG1** 95.742
- ANG2** 92.697

MISRAI

Analyse Hitlist

- ✓ BEYYUZ
- ✓ HEJPAN
- ✓ HEJPER
- ✓ MISJEE
- ✓ MISRAI**
- ✓ NEBWIA
- ✓ NEBWOG
- ✓ RAWDEZ
- ✓ VAJHEU
- ✓ QOCQAB
- ✓ QOCQEF

<< >>

11 hits

100%

Stop Search

Show Parameters

Use as Query...

Detach

Write PDF File

Select what to export:

Current entry only All selected entries

No Summary Page Summary Page

No parameter information Include parameter information

Per Page:

1 2

4 8

List

Select components to write:

Reference Chemical

Crystal Experimental

Diagram

Options:

Colour

Scale Diagram to Fit

Compress

US Letter

Either: Edit Filename and Write

Or: Write via

Version 5.30 (November 2008)

Parameters

- DIST1 1.812
- DIST2 1.815
- DIST3 1.799
- DIST4 1.851
- ANG1 95.742
- ANG2 92.697

MISRAI

Analyse Hitlist

- BEYUZZ
- HEJPAN
- HEJPER
- MISJEE
- MISRAI
- NEBWIA
- NEBWOG
- RAWDEZ
- VAJHEU
- QOCQAB
- QOCQEF

<< >>

11 hits

100%

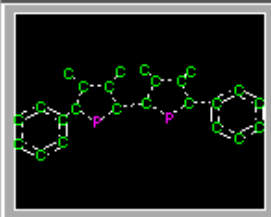
Stop Search

Show Parameters

Use as Query...

Detach

Quest File : /home/daran/csds_data/searches/temp/cq_temp0



Test : 1 of 1

	Total	Selected	Suppressed
Parameters	8	0	n/a
Refcodes	11	n/a	n/a
Fragments	14	0	0

<Home>	PARAMS	1	2	3	4	5	6	7
REFCOD		NFRAG	REFCOD	DIST1	DIST2	DIST3	DIST4	ANG1
1	BEVYUZ	1	BEVYUZ	1.782	1.793	1.783	1.779	89.490
2	HEJPAN	2	HEJPAN	1.808	1.811	1.818	1.810	92.030
3	HEJPAN	3	HEJPAN	1.817	1.809	1.815	1.803	91.600
4	HEJPER	4	HEJPER	1.817	1.808	1.829	1.822	92.001
5	HEJPER	5	HEJPER	1.837	1.819	1.809	1.821	91.002
6	MISJEE	6	MISJEE	1.799	1.798	1.803	1.799	93.768
7	MISRAI	7	MISRAI	1.812	1.815	1.799	1.851	95.742
8	NEBWIA	8	NEBWIA	1.811	1.810	1.799	1.813	92.310
9	NEBWOG	9	NEBWOG	1.821	1.842	1.820	1.803	90.699
10	NEBWOG	10	NEBWOG	1.829	1.822	1.769	1.803	90.184
11	RAWDEZ	11	RAWDEZ	1.821	1.786	1.818	1.776	93.026
12	VAJHEU	12	VAJHEU	1.820	1.803	1.804	1.797	92.472
13	QOCQAB	13	QOCQAB	1.834	1.807	1.806	1.822	93.473
14	QOCQEF	14	QOCQEF	1.795	1.797	1.818	1.816	93.620
15								
16								
17								
18								
19								
20								
21								

Quest Files

Load... Save...

Data Visualization

Histogram Scattergram

Polar Histo. Polar Scatt.

View REFCODEs

Correlation/Covariance

View Quest Fragment

Parameters

Generate P.C. Scores

Create... Transform...

Search... Re-name...

Export... Swap

Select Pars. Clear Pars.

Delete Pars.

Refcodes

Select Refs. Clear Refs.

Invert Delete Refs.

Suppress Unselected

Suppress Selected

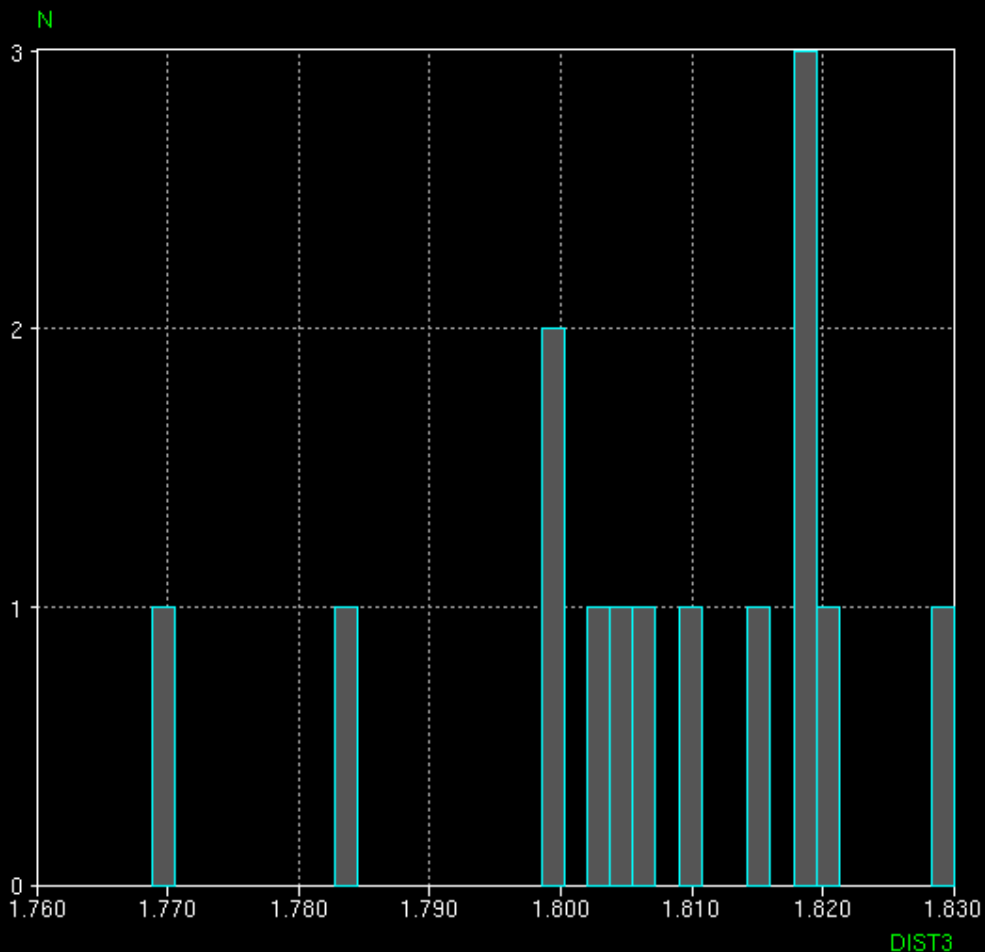
Restore Save Coords...

Miscellaneous

Text size... Refresh

Help... About...

DIST3



Plot Data

File=/home/daran/csds_data/sea
 Test=2
 Tot.Obs.=14
 Obs.=14
 Supp.=0

X-axis

Min.=1.769
 Max.=1.829
 Range=0.060
 Mean=1.806
 Mean SE=0.004
 Sample SD=0.016

Histogram

Median=1.808
 Skew=-0.846
 Quantile=10.000
 LQ=1.769
 HQ=1.820
 Bin Width=0.002
 Max. Bin =3.000

Refcodes

Clear

Set

View REFCODEs

Plot Options...

Set Axes...

Text...

Symbols...

Line Width...

Flip Axes

Re-Plot

Defaults

Miscellaneous

PostScript

Refresh

Help...

Select All

Select Range

Suppress Selected

Invert

De-Select All

De-Select Range

Suppress Un-selected

Restore

Search: search3 (Fri Jul 3 10:21:39 2009): Hits 1-4

BEYUZY

Reference: F. Mathey, F. Mercier, F. Nief, J. Fischer, A. Mitschler (1982) *J. Am. Chem. Soc.*, **104**, 2077

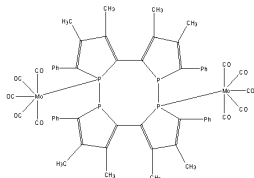
Formula: C₅₈H₄₄Mo₂O₁₀P₄

Compound Name: ((η -1,5-(1,2,3,4,5,6,7,8-tetra(2-methyl-1-phenylbut-1-en-1-yl)(P)-3-ylidene-C(1)-1,4,5,8-tetrakisphosphaene)bis(pentacarbonyl-molybdenum)

Space Group: C2/c **Cell:** a 13.121(4) b 16.390(5) c 28.821(8)
Space Group No.: 15 **(A³):** α 90.00 β 93.45(4) γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.782
DIST2 (D) 1.782
DIST3 (D) 1.783
DIST4 (D) 1.778
ANG1 (A) 93.45(4)
ANG2 (A) 91.124



HEJPAN

Reference: F. Laporte, F. Mercier, L. Ricard, F. Mathey (1994) *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 2808

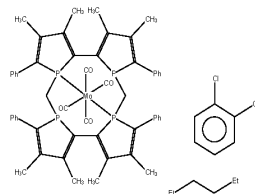
Formula: C₅₄H₄₈Mo₂O₄P₄C₆H₄Cl₂C₆H₄

Compound Name: ((η -5,9,10,16,17,20,21-Octamethyl-4,11,15,22-tetraaryl-1,3,12,14-tetraphosphatetrayclo[17.3.0.0^{7,12}.0^{14,19}]penta-3,6,8,10,15,17,18,21-octa-1,3-diylo)tetra-carbonyl-molybdenum *o*-dichlorobenzene *n*-hexane solvate

Space Group: P-1 **Cell:** a 13.315(1) b 14.442(1) c 15.825(1)
Space Group No.: 2 **(A³):** α 88.4(3) β 78.83(1) γ 91.50(1)

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.808
DIST2 (D) 1.811
DIST3 (D) 1.818
DIST4 (D) 1.810
ANG1 (A) 82.030
ANG2 (A) 81.173



Fragment 2
DIST1 (D) 1.817
DIST2 (D) 1.808
DIST3 (D) 1.815
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 81.800
ANG2 (A) 81.545

HEJPER

Reference: F. Laporte, F. Mercier, L. Ricard, F. Mathey (1994) *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 3306

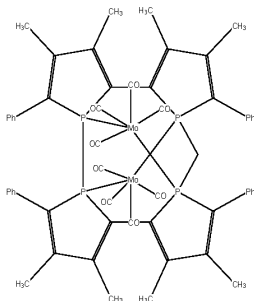
Formula: C₆₃H₄₄Mo₂O₁₀P₄

Compound Name: ((η -4,5,8,9,16,18,19,20-Octamethyl-3,10,14,21-tetraaryl-1,2,11,13-tetraphosphatetrayclo[16.3.0.0^{2,6}.0^{7,11}.0^{13,17}]penta-2,5,7,9,14,16,18,20-octa-1,2,11,13-tetra-yl)bis(tetra-carbonyl-molybdenum)

Space Group: P-1 **Cell:** a 12.286(1) b 14.511(2) c 15.017(2)
Space Group No.: 2 **(A³):** α 79.40(1) β 87.10(1) γ 88.61(1)

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.817
DIST2 (D) 1.808
DIST3 (D) 1.828
DIST4 (D) 1.822
ANG1 (A) 92.001
ANG2 (A) 91.294



Fragment 2
DIST1 (D) 1.837
DIST2 (D) 1.818
DIST3 (D) 1.808
DIST4 (D) 1.821
ANG1 (A) 91.002
ANG2 (A) 92.270

MISJEE

Reference: L. Diab, J.-C. Daran, M. Gouygou, E. Manoury, M. Urmatgoby (2008) *Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun.*, **64**, m43

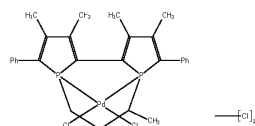
Formula: C₃₈H₃₀Cl₂P₂Pd₂C₁H₂Cl₂

Compound Name: (S)-Dichloro-(1,2,5,10,11-pentamethyl-3,9-dihydroperhydrocyclopenta(a,c)(1,4)diphosphine- κ P'P')-palladium(dichloromethane solvate

Space Group: P21 **Cell:** a 8.933(0) b 12.180(0) c 14.209(0)
Space Group No.: 4 **(A³):** α 90.00 β 103.80(1) γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.789
DIST2 (D) 1.798
DIST3 (D) 1.803
DIST4 (D) 1.799
ANG1 (A) 83.788
ANG2 (A) 82.827



Search: search3 (Fri Jul 3 10:21:39 2009): Hits 5-8

MISRAI

Reference: L. Diab, J.-C. Daran, M. Gouygou, E. Manoury, M. Urmatgoby (2008) *Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun.*, **64**, m43

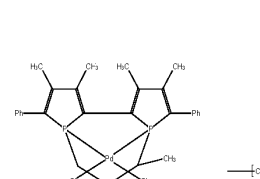
Formula: C₃₈H₃₀Cl₂P₂Pd₂C₁H₂Cl₂

Compound Name: (R)-Dichloro-(1,2,5,10,11-pentamethyl-3,9-dihydroperhydrocyclopenta(a,c)(1,4)diphosphine- κ 2P'P')-palladium(dichloromethane solvate

Space Group: P21 **Cell:** a 8.983(3) b 12.130(5) c 13.986(8)
Space Group No.: 4 **(A³):** α 90.00 β 103.87(3) γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.812
DIST2 (D) 1.815
DIST3 (D) 1.789
DIST4 (D) 1.851
ANG1 (A) 95.742
ANG2 (A) 92.897



NEBWIA

Reference: F. Mercier, F. Laporte, L. Ricard, F. Mathey, M. Schroder, M. Regiz (1987) *Angew. Chem., Int. Ed.*, **26**, 2394

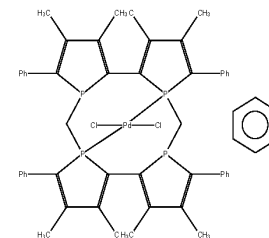
Formula: C₅₀H₄₈Cl₂P₄Pd₂Si₂H₆

Compound Name: Dichloro-(1',2',5',4',5'-tetraaryl-1,3',2',4',4',5',4'-hexamethyl-1(1',5),2(2',1',4(1',5),5',2',1')tetrahydropolycyclohexaphane-palladium teraene solvate

Space Group: C2/c **Cell:** a 21.238(2) b 19.523(2) c 20.593(2)
Space Group No.: 15 **(A³):** α 90.00 β 119.48(1) γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.811
DIST2 (D) 1.810
DIST3 (D) 1.789
DIST4 (D) 1.813
ANG1 (A) 92.310
ANG2 (A) 88.388



NEBWOJ

Reference: F. Laporte, F. Mercier, L. Ricard, F. Mathey, M. Schroder, M. Regiz (1997) *Angew. Chem., Int. Ed.*, **36**, 2394

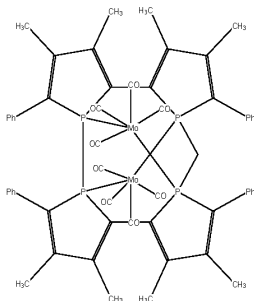
Formula: C₆₄H₄₈Cl₂Mo₂O₄P₄Pd₂

Compound Name: ((η -12,25,47,55-Tetraaryl-1,3',2',4',4',5',4'-hexamethyl-1(1',5),2(2',1',4(1',5),5',2',1')tetrahydropolycyclohexaphane)-dichloro-tetra-carbonyl-molybdenum-palladium

Space Group: P21m **Cell:** a 11.221(1) b 12.797(3) c 38.887(4)
Space Group No.: 14 **(A³):** α 90.00 β 96.88(1) γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.821
DIST2 (D) 1.822
DIST3 (D) 1.788
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 90.899
ANG2 (A) 91.705



Fragment 2
DIST1 (D) 1.829
DIST2 (D) 1.822
DIST3 (D) 1.788
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 90.184
ANG2 (A) 93.788

NEBWOG

Reference: F. Mercier, F. Laporte, L. Ricard, F. Mathey, M. Schroder, M. Regiz (1997) *Angew. Chem., Int. Ed.*, **36**, 2394

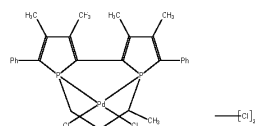
Formula: C₆₄H₄₈Cl₂Mo₂O₄P₄Pd₂

Compound Name: ((η -12,25,47,55-Tetraaryl-1,3',2',4',4',5',4'-hexamethyl-1(1',5),2(2',1',4(1',5),5',2',1')tetrahydropolycyclohexaphane)-dichloro-tetra-carbonyl-molybdenum-palladium

Space Group: P212121 **Cell:** a 9.128(0) b 12.505(1) c 24.788(2)
Space Group No.: 18 **(A³):** α 90.00 β 90.00 γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.829
DIST2 (D) 1.822
DIST3 (D) 1.788
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 90.184
ANG2 (A) 93.788



NEBWOW

Reference: E. Robe, C. Ortega, M. Mikina, M. Mikolajczyk, J.-C. Daran, M. Gouygou (2005) *Organometallics*, **24**, 5549

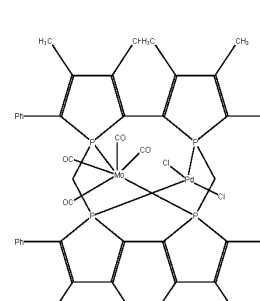
Formula: C₃₀H₃₄Cl₂P₂Pt₂

Compound Name: (S)(Pp,Sp,Rc,Rc)-(-)-3,3',4,4'-Tetramethyl-5,5'-diphenyl-1,1'-(hexane-2,5-diylo)-2,2'-biphenylol)-dichloro-platinum(0)

Space Group: P212121 **Cell:** a 9.128(0) b 12.505(1) c 24.788(2)
Space Group No.: 18 **(A³):** α 90.00 β 90.00 γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.821
DIST2 (D) 1.822
DIST3 (D) 1.788
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 90.899
ANG2 (A) 91.705



Fragment 2
DIST1 (D) 1.829
DIST2 (D) 1.822
DIST3 (D) 1.788
DIST4 (D) 1.803
ANG1 (A) 90.184
ANG2 (A) 93.788

RAWDEZ

Reference: E. Robe, C. Ortega, M. Mikina, M. Mikolajczyk, J.-C. Daran, M. Gouygou (2005) *Organometallics*, **24**, 5549

Formula: C₃₀H₃₄Cl₂P₂Pt₂

Compound Name: (S)(Pp,Sp,Rc,Rc)-(-)-3,3',4,4'-Tetramethyl-5,5'-diphenyl-1,1'-(hexane-2,5-diylo)-2,2'-biphenylol)-dichloro-platinum(0)

Space Group: P212121 **Cell:** a 9.128(0) b 12.505(1) c 24.788(2)
Space Group No.: 18 **(A³):** α 90.00 β 90.00 γ 90.00

Parameters

Fragment 1
DIST1 (D) 1.821
DIST2 (D) 1.788
DIST3 (D) 1.816
DIST4 (D) 1.776
ANG1 (A) 93.028
ANG2 (A) 93.895

