

Affinement des Structures Cristallines de $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$

PAR M. LAÜGT, I. TORDJMAN, G. BASSI ET J. C. GUITEL

Laboratoire de Rayons X, CNRS, B.P. 166, Centre de Tri, 38042 Grenoble Cedex, France

(Reçu le 8 octobre 1973, accepté le 10 décembre 1973)

The crystal structures of $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ and $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ have been refined by single-crystal X-ray methods. The unit cells are monoclinic and contain four formula units. The space group is *Cc*. The final *R* values are 0.043 for the copper salt and 0.051 for the cobalt salt. $(\text{PO}_3)_\infty$ chains cross the cell in the *a* + *c* direction. Their period is of eight PO_4 tetrahedra. Cation sites are linked by faces and edges forming planes perpendicular to *b*. This study confirms the model previously proposed for the copper salt and shows that the two salts are isotopic.

Les polyphosphates mixtes de cuivre-potassium: $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ (Laügt, Guitel, Durif & Martin, 1967) et de cobalt-potassium: $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ (Thonnerieux, Tranqui, Durif & Averbuch-Pouchot, 1968) ont des mailles très voisines et le même groupe spatial; ce qui laisse présager l'isotypie de ces deux sels.

Paramètres de maille

	$\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$	$\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$
<i>a</i>	10,924 (1) Å	11,127 (1) Å
<i>b</i>	12,227 (1)	12,579 (3)
<i>c</i>	7,900 (1)	7,636 (1)
β	100,55 (1)°	102,89 (1)°
<i>V</i>	1037,3 (3) Å ³	1041,8 (5) Å ³
<i>Z</i>	4	4
Groupe spatial	<i>Cc</i>	<i>Cc</i>

Une structure cristalline a été proposée par Tordjman, Tranqui & Laügt (1970) pour le sel de cuivre. Compte tenu du comportement de l'ion Cu^{2+} , il était nécessaire d'effectuer une étude précise de l'arrangement atomique du sel de cobalt potassium pour affirmer son isotypie avec le sel correspondant de cuivre. Au cours de ce même travail, nous avons affiné avec des données plus précises la structure du sel de cuivre.

Données expérimentales

Les cristaux utilisés sont des prismes allongés à section presque losangique, taillés de façon telle que les arêtes soient à peu près égales (0,10 mm environ). Ces cristaux ont été orientés de manière que l'axe *c* (axe d'allongement du cristal) soit parallèle à l'axe φ du goniomètre. Les intensités ont été mesurées sur diffractomètre automatique à la longueur d'onde du molybdène suivant le procédé mis au point par Bassi (1973).

	$\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$	$\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$
Nombre de réflexions mesurées	2594	2612
Angle θ limite	35°	35°
Nombre de réflexions utilisées pour l'affinement	849	649

Les réflexions conservées pour l'affinement sont celles pour lesquelles, lors des mesures, on comptait 30 coups/seconde au moins au sommet de la raie.

Résultats

Le groupe spatial de $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ a été vérifié: l'examen d'une synthèse de Fourier montre que, bien que les cations soient tous en position centrosymétrique, les atomes d'oxygène ne le sont pas. L'origine a été fixée en imposant les paramètres $0, y, \frac{1}{4}$ aux positions des atomes de cuivre ou de cobalt, car ce choix d'origine permet une mise en évidence facile de la quasi-centrosymétrie des positions des cations.

Une première série d'affinements au moyen du programme *SFSL-5* de Prewitt (1966) des paramètres des deux structures, avec des facteurs de température isotropes, a conduit à des valeurs de *R* de 0,067 et 0,076 pour $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$. Les facteurs de température anisotropes ont ensuite été calculés, et après deux nouveaux cycles d'affinement, on obtient 0,043 et 0,051 comme valeurs de *R*.

Les coordonnées des atomes dans $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ sont, dans l'ensemble, très proches de celles qui ont été données par Tordjman *et al.* (1970). Elles sont données dans le Tableau 1. Le Tableau 2 donne les coordonnées cristallographiques des atomes dans $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$. Les facteurs de température anisotropes β_{ij} sont donnés dans les Tableaux 3 et 4.*

Description de la structure

Dans $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$, la maille est traversée par deux chaînes de tétraèdres PO_4 qui se développent le long de la direction *a* + *c* et ont une période de huit tétraèdres. La Fig. 1 représente la projection (001) de l'ensemble de la structure. Les tétraèdres de coordination du phosphore sont irréguliers: les distances phos-

* Les tableaux de facteurs de structure ont été déposés à la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 30315, 32 pp., 1 microfiche). Des copies peuvent être obtenues en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

Tableau 1. *Coordonnées cristallographiques des atomes dans CuK₂(PO₃)₄*

	x	y	z	B
Cu	0	0,1580 (1)	0,75	0,826
K(1)	0,1367 (3)	0,3712 (3)	0,0987 (5)	1,728
K(2)	0,3340 (3)	0,1355 (2)	0,9087 (5)	1,554
P(1)	0,3855 (4)	0,4282 (3)	0,8315 (5)	0,548
P(2)	0,1647 (3)	0,3400 (3)	0,5788 (6)	0,681
P(3)	0,3197 (4)	0,1854 (3)	0,4220 (6)	0,959
P(4)	0,1152 (4)	0,0743 (3)	0,1916 (6)	0,861
O(1)	0,0739 (8)	0,4192 (7)	0,4888 (13)	1,664
O(2)	0,1307 (8)	0,2650 (8)	0,7101 (14)	1,319
O(3)	0,2834 (9)	0,4081 (8)	0,6631 (11)	1,343
O(4)	0,2160 (8)	0,2747 (6)	0,4300 (11)	1,109
O(5)	0,3915 (9)	0,2199 (8)	0,2865 (14)	1,406
O(6)	0,3891 (8)	0,1530 (8)	0,5951 (11)	1,643
O(7)	0,2357 (8)	0,0819 (7)	0,3422 (13)	1,104
O(8)	0,1329 (8)	0,1468 (8)	0,0471 (12)	0,970
O(9)	0,0964 (10)	-0,0463 (8)	0,1647 (14)	1,122
O(10)	0,0085 (9)	0,1231 (7)	0,2787 (15)	1,257
O(11)	0,3575 (9)	0,3619 (8)	0,9766 (14)	1,311
O(12)	0,3972 (9)	0,5490 (7)	0,8501 (13)	0,900

Tableau 2. *Coordonnées cristallographiques des atomes dans CoK₂(PO₃)₄*

	x	y	z	B
Co	0	0,1544 (1)	0,75	0,827
K(1)	0,1340 (5)	0,3741 (4)	0,0805 (8)	1,887
K(2)	0,3348 (6)	0,1328 (4)	0,9166 (9)	1,692
P(1)	0,3923 (7)	0,4241 (5)	0,8351 (9)	0,808
P(2)	0,1658 (5)	0,3376 (5)	0,5721 (8)	0,624
P(3)	0,3184 (6)	0,1880 (4)	0,4206 (9)	0,858
P(4)	0,1122 (6)	0,0762 (4)	0,1812 (4)	0,658
O(1)	0,0736 (11)	0,4162 (8)	0,4758 (15)	1,451
O(2)	0,1348 (11)	0,2659 (10)	0,7085 (19)	1,266
O(3)	0,2859 (12)	0,4027 (11)	0,6634 (18)	1,775
O(4)	0,2163 (10)	0,2760 (8)	0,4190 (15)	1,213
O(5)	0,3911 (12)	0,2205 (11)	0,2826 (19)	1,653
O(6)	0,3890 (10)	0,1542 (10)	0,6009 (14)	1,564
O(7)	0,2342 (10)	0,0868 (9)	0,3339 (16)	0,767
O(8)	0,1225 (12)	0,1500 (12)	0,0259 (19)	1,278
O(9)	0,0998 (13)	-0,0412 (12)	0,1542 (20)	1,099
O(10)	0,0113 (14)	0,1226 (8)	0,2736 (20)	1,209
O(11)	0,3727 (11)	0,3570 (12)	0,9868 (17)	0,870
O(12)	0,4008 (14)	0,5416 (10)	0,8537 (20)	0,885

Tableau 3. *Facteurs de température anisotropes $\beta_{ij} \times 10^5$ dans CuK₂(PO₃)₄*

	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Cu	172 (11)	86 (8)	593 (22)	-8 (12)	163 (12)	-15 (19)
K(1)	312 (24)	209 (20)	1130 (70)	-14 (18)	160 (33)	101 (26)
K(2)	274 (20)	262 (18)	829 (54)	-29 (22)	181 (25)	26 (30)
P(1)	86 (21)	104 (17)	336 (57)	-17 (18)	41 (27)	19 (26)
P(2)	122 (22)	98 (24)	381 (53)	-5 (20)	16 (26)	39 (28)
P(3)	211 (28)	135 (18)	458 (65)	-56 (20)	48 (32)	28 (31)
P(4)	204 (26)	107 (21)	427 (62)	-11 (20)	134 (34)	-3 (28)
O(1)	343 (73)	171 (56)	978 (178)	71 (49)	-171 (89)	-33 (77)
O(2)	265 (73)	161 (57)	753 (172)	-124 (53)	229 (93)	38 (76)
O(3)	410 (83)	234 (62)	372 (173)	-236 (57)	52 (95)	42 (80)
O(4)	265 (72)	156 (55)	546 (154)	49 (47)	37 (83)	-88 (69)
O(5)	377 (85)	224 (63)	521 (169)	-83 (57)	150 (96)	-83 (80)
O(6)	318 (69)	338 (60)	462 (154)	39 (64)	-189 (80)	-98 (85)
O(7)	321 (78)	122 (56)	434 (164)	42 (51)	-48 (84)	8 (73)
O(8)	250 (66)	137 (53)	418 (157)	12 (59)	28 (79)	82 (76)
O(9)	306 (79)	194 (65)	395 (213)	105 (60)	196 (91)	8 (82)
O(10)	232 (77)	130 (45)	842 (222)	-28 (63)	217 (106)	-21 (83)
O(11)	298 (65)	232 (68)	586 (168)	-35 (60)	181 (89)	-6 (79)
O(12)	297 (74)	35 (56)	647 (197)	-88 (56)	143 (95)	-69 (78)

Tableau 4. *Facteurs de température anisotropes $\beta_{ij} \times 10^5$ dans CoK₂(PO₃)₄*

	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Co	182 (17)	109 (14)	464 (29)	-13 (20)	122 (19)	-25 (35)
K(1)	442 (41)	196 (30)	1023 (91)	6 (28)	111 (49)	136 (40)
K(2)	258 (29)	363 (28)	734 (72)	30 (32)	138 (34)	18 (47)
P(1)	145 (39)	155 (34)	313 (79)	2 (31)	-29 (46)	53 (41)
P(2)	111 (31)	93 (31)	325 (70)	-21 (24)	-22 (38)	-12 (40)
P(3)	178 (38)	165 (29)	356 (70)	-17 (27)	100 (41)	-30 (45)
P(4)	101 (35)	132 (32)	338 (74)	-32 (28)	99 (46)	9 (39)
O(1)	426 (102)	104 (71)	797 (199)	58 (66)	191 (108)	16 (100)
O(2)	220 (93)	207 (87)	792 (231)	-86 (69)	233 (123)	-34 (103)
O(3)	313 (112)	336 (102)	739 (248)	-226 (74)	-102 (129)	94 (121)
O(4)	216 (88)	124 (73)	896 (211)	92 (56)	163 (110)	42 (95)
O(5)	389 (123)	293 (95)	719 (237)	-40 (80)	272 (143)	-181 (123)
O(6)	290 (85)	326 (80)	409 (161)	30 (78)	-143 (98)	-12 (108)
O(7)	130 (88)	42 (79)	570 (218)	-6 (56)	-4 (102)	-69 (97)
O(8)	347 (108)	206 (87)	416 (223)	-35 (88)	89 (127)	293 (127)
O(9)	150 (105)	240 (114)	658 (298)	-48 (92)	292 (136)	41 (131)
O(10)	244 (126)	236 (71)	475 (273)	-85 (84)	54 (139)	-67 (116)
O(11)	139 (84)	195 (81)	466 (212)	-1 (72)	180 (110)	-50 (112)
O(12)	239 (109)	21 (83)	708 (277)	-56 (88)	163 (132)	-127 (127)

phore-oxygène de liaison sont de l'ordre de 1,59 Å alors que les distances phosphore-oxygène extérieur valent en moyenne 1,49 Å. Les Tableaux 5 et 6 donnent les distances P-O dans $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ re-

Tableau 5. $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$: distances interatomiques, à l'intérieur de la chaîne $(\text{PO}_3)_\infty$

P(1)-O(3)	1,591 (9) Å	P(2)-O(1)	1,472 (9) Å
P(1)-O(10)	1,605 (12)	P(2)-O(2)	1,483 (12)
P(1)-O(11)	1,481 (12)	P(2)-O(3)	1,582 (10)
P(1)-O(12)	1,487 (9)	P(2)-O(4)	1,604 (10)
P(3)-O(4)	1,584 (9)	P(4)-O(7)	1,607 (10)
P(3)-O(5)	1,499 (12)	P(4)-O(8)	1,485 (10)
P(3)-O(6)	1,491 (9)	P(4)-O(9)	1,499 (11)
P(3)-O(7)	1,621 (9)	P(4)-O(10)	1,576 (12)

Tableau 6. $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$: distances interatomiques, à l'intérieur de la chaîne $(\text{PO}_3)_\infty$

P(1)-O(3)	1,581 (14) Å	P(2)-O(1)	1,494 (12) Å
P(1)-O(10)	1,612 (18)	P(2)-O(2)	1,476 (16)
P(1)-O(11)	1,487 (16)	P(2)-O(3)	1,590 (14)
P(1)-O(12)	1,486 (13)	P(2)-O(4)	1,605 (14)
P(3)-O(4)	1,585 (12)	P(4)-O(7)	1,586 (12)
P(3)-O(5)	1,520 (17)	P(4)-O(8)	1,530 (16)
P(3)-O(6)	1,487 (12)	P(4)-O(9)	1,493 (16)
P(3)-O(7)	1,631 (12)	P(4)-O(10)	1,566 (18)

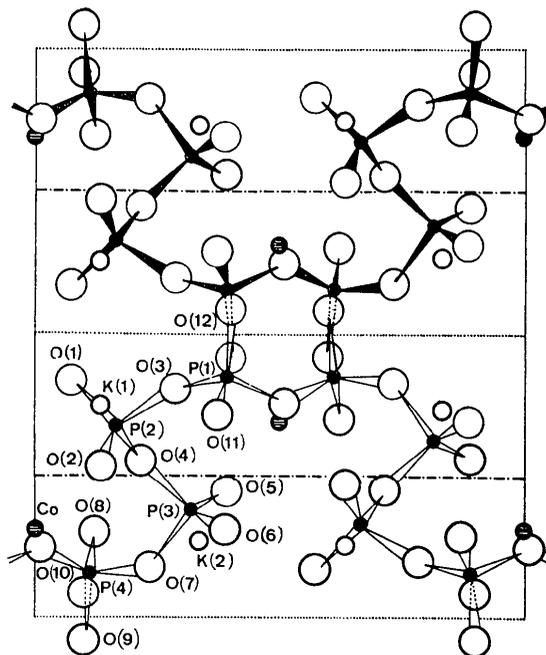


Fig. 1. Projection (001) de la structure de $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$.

Tableau 7. $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$: angles entre vecteurs interatomiques, à l'intérieur de la chaîne $(\text{PO}_3)_\infty$

O(3)-P(1)-O(10)	102,4 (5)°	O(10)-P(1)-O(11)	106,8 (6)°
O(3)-P(1)-O(11)	110,5 (6)	O(10)-P(1)-O(12)	110,7 (6)
O(3)-P(1)-O(12)	105,7 (6)	O(11)-P(1)-O(12)	119,5 (6)
O(1)-P(2)-O(2)	120,8 (6)	O(2)-P(2)-O(3)	108,8 (6)
O(1)-P(2)-O(3)	106,6 (6)	O(2)-P(2)-O(4)	111,7 (5)
O(1)-P(2)-O(4)	105,6 (5)	O(3)-P(2)-O(4)	101,6 (5)
O(4)-P(3)-O(5)	107,8 (6)	O(5)-P(3)-O(6)	119,1 (6)
O(4)-P(3)-O(6)	113,2 (5)	O(5)-P(3)-O(7)	105,9 (6)
O(4)-P(3)-O(7)	101,3 (5)	O(6)-P(3)-O(7)	107,8 (5)
O(7)-P(4)-O(8)	109,3 (6)	O(8)-P(4)-O(9)	120,8 (6)
O(7)-P(4)-O(9)	103,5 (6)	O(8)-P(4)-O(10)	108,7 (6)
O(7)-P(4)-O(10)	103,1 (5)	O(9)-P(4)-O(10)	109,9 (6)
P(1)-O(3)-P(2)	145,9 (7)		
P(2)-O(4)-P(3)	136,2 (6)		
P(3)-O(7)-P(4)	131,4 (6)		
P(4)-O(10)-P(1)	133,4 (7)		

Tableau 8. $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$: angles entre vecteurs interatomiques, à l'intérieur de la chaîne $(\text{PO}_3)_\infty$

O(3)-P(1)-O(10)	102,0 (8)°	O(10)-P(1)-O(11)	107,0 (8)°
O(3)-P(1)-O(11)	109,7 (8)	O(10)-P(1)-O(12)	110,6 (8)
O(3)-P(1)-O(12)	105,5 (8)	O(11)-P(1)-O(12)	120,4 (9)
O(1)-P(2)-O(2)	120,6 (8)	O(2)-P(2)-O(3)	108,1 (8)
O(1)-P(2)-O(3)	107,0 (8)	O(2)-P(2)-O(4)	113,2 (8)
O(1)-P(2)-O(4)	105,9 (7)	O(3)-P(2)-O(4)	99,9 (7)
O(4)-P(3)-O(5)	107,3 (8)	O(5)-P(3)-O(6)	117,8 (8)
O(4)-P(3)-O(6)	115,9 (7)	O(5)-P(3)-O(7)	105,9 (8)
O(4)-P(3)-O(7)	101,3 (7)	O(6)-P(3)-O(7)	106,8 (7)
O(7)-P(4)-O(8)	108,6 (8)	O(8)-P(4)-O(9)	120,9 (9)
O(7)-P(4)-O(9)	102,8 (8)	O(8)-P(4)-O(10)	108,0 (8)
O(7)-P(4)-O(10)	102,7 (8)	O(9)-P(4)-O(10)	112,1 (9)
P(1)-O(3)-P(2)	148,4 (1,0)		
P(2)-O(4)-P(3)	134,3 (0,8)		
P(3)-O(7)-P(4)	133,1 (0,8)		
P(4)-O(10)-P(1)	135,6 (1,0)		

spectivement. Les Tableaux 7 et 8 donnent les angles entre vecteurs interatomiques à l'intérieur des chaînes phosphorées, dont une période est représentée sur la Fig. 2.

Les ions Cu^{2+} et Co^{2+} ont un environnement octaédrique d'oxygène. Dans le cas du cuivre, cet environnement est déformé: l'ion Cu^{2+} est entouré de quatre atomes d'oxygène à courte distance (1,92 à 2,00 Å) formant approximativement un carré et deux à longue distance (2,43 et 2,53 Å) qui complètent l'octaèdre.

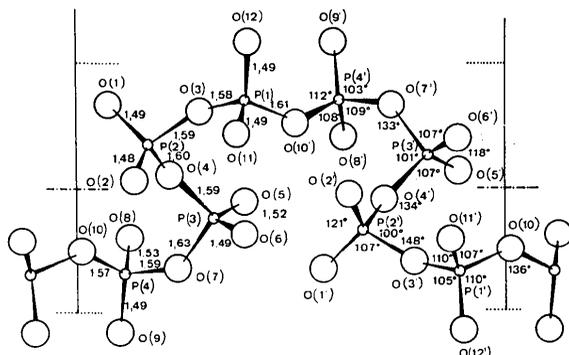


Fig. 2. Projection (001) d'une période de la chaîne $(\text{PO}_3)_\infty$ dans $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$.

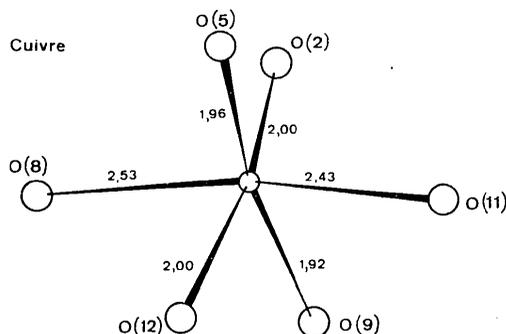


Fig. 3. Environnement du cuivre: projection (100).

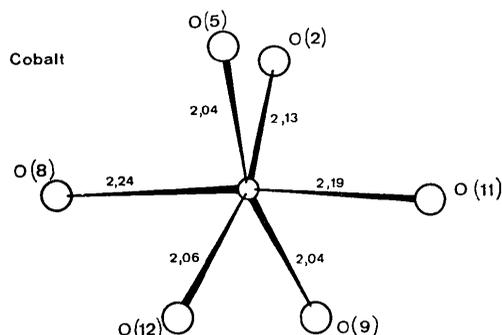


Fig. 4. Environnement du cobalt: projection (100).

Dans l'environnement du cobalt, les distances correspondantes présentent les mêmes particularités. Toutefois, les différences entre distances longues (environ 2,22 Å) et distances courtes (2,06 Å en moyenne) sont beaucoup moins marquées. Le Tableau 9 donne les distances Cu-O et Co-O dans ces environnements. Les angles entre vecteurs interatomiques sont indiqués dans les Tableaux 10 et 11. Les environnements du cuivre et du cobalt sont représentés sur les Figs. 3 et 4.

Tableau 9. Distances interatomiques dans les octaèdres CuO_6 et CoO_6

Cu-O(2)	2,003 (10) Å	Co-O(2)	2,128 (14) Å
Cu-O(5)	1,960 (10)	Co-O(5)	2,035 (14)
Cu-O(8)	2,527 (9)	Co-O(8)	2,240 (13)
Cu-O(9)	1,921 (11)	Co-O(9)	2,040 (16)
Cu-O(11)	2,432 (10)	Co-O(11)	2,190 (12)
Cu-O(12)	1,998 (10)	Co-O(12)	2,062 (15)

Tableau 10. Angles entre vecteurs interatomiques dans les octaèdres CuO_6

O(2)-Cu-O(5)	89,6 (4)°	O(5)-Cu-O(12)	92,9 (4)°
O(2)-Cu-O(8)	82,9 (4)	O(8)-Cu-O(9)	91,6 (4)
O(2)-Cu-O(9)	87,5 (4)	O(8)-Cu-O(11)	169,9 (3)
O(2)-Cu-O(11)	106,5 (4)	O(8)-Cu-O(12)	82,3 (4)
O(5)-Cu-O(8)	99,5 (4)	O(9)-Cu-O(11)	85,4 (4)
O(5)-Cu-O(11)	84,3 (4)	O(9)-Cu-O(12)	92,8 (4)
		O(11)-Cu-O(12)	88,2 (4)

Tableau 11. Angles entre vecteurs interatomiques dans les octaèdres CoO_6

O(2)-Co-O(5)	88,1 (5)°	O(5)-Co-O(12)	95,8 (6)°
O(2)-Co-O(8)	81,7 (5)	O(8)-Co-O(9)	93,1 (6)
O(2)-Co-O(9)	87,0 (6)	O(8)-Co-O(11)	174,1 (5)
O(2)-Co-O(11)	103,9 (5)	O(8)-Co-O(12)	83,5 (5)
O(5)-Co-O(8)	99,1 (5)	O(9)-Co-O(11)	85,2 (5)
O(5)-Co-O(11)	83,2 (5)	O(9)-Co-O(12)	92,2 (6)
		O(11)-Co-O(12)	90,9 (5)

Les ions K^+ sont répartis sur deux sites, K(1) et K(2). K(1) est environné de onze atomes d'oxygène, à des distances comprises entre 2,79 et 3,39 Å. K(2) est entouré de huit atomes d'oxygène, les distances

Tableau 12. $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$: distances interatomiques dans les environnements des atomes de potassium

K(1)-O(1)	3,330 (12) Å	K(2)-O(1)	2,667 (10) Å
K(1)-O(1')	2,752 (9)	K(2)-O(2)	2,936 (10)
K(1)-O(2)	3,323 (12)	K(2)-O(5)	3,111 (11)
K(1)-O(3)	3,132 (10)	K(2)-O(6)	2,663 (10)
K(1)-O(4)	2,857 (9)	K(2)-O(7)	2,879 (9)
K(1)-O(5)	3,443 (10)	K(2)-O(8)	2,631 (11)
K(1)-O(5')	3,476 (10)	K(2)-O(9)	3,131 (10)
K(1)-O(6)	2,716 (10)	K(2)-O(11)	2,823 (10)
K(1)-O(8)	2,773 (10)		
K(1)-O(11)	2,759 (11)		
K(1)-O(12)	3,305 (10)		

K(2)-O étant comprises entre 2,62 et 3,14 Å. Les atomes d'oxygène pris en compte dans ces environnements sont ceux pour lesquels la distance K-O est inférieure à la plus courte distance potassium-cation. Les distances K-O dans $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ sont données dans les Tableaux 12 et 13 respectivement. Les environnements K(1) et K(2) de $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ sont représentés sur les Figs. 5 et 6.

Tableau 13. $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$: distances interatomiques dans les environnements des atomes de potassium

K(1)-O(1)	3,279 (14) Å	K(2)-O(1)	2,666 (14) Å
K(1)-O(1')	2,793 (12)	K(2)-O(2)	2,950 (13)
K(1)-O(2)	3,152 (16)	K(2)-O(5)	2,939 (16)
K(1)-O(3)	3,265 (15)	K(2)-O(6)	2,626 (14)
K(1)-O(4)	2,826 (12)	K(2)-O(7)	2,994 (12)
K(1)-O(5)	3,511 (14)	K(2)-O(8)	2,685 (17)
K(1)-O(5')	3,340 (14)	K(2)-O(9)	3,138 (15)
K(1)-O(6)	2,787 (13)	K(2)-O(11)	2,884 (15)
K(1)-O(8)	2,849 (16)		
K(1)-O(11)	2,910 (15)		
K(1)-O(12)	3,395 (15)		

Les sites de cations K(1), K(2) et Cu ou Co s'enchaînent par leurs faces ou leurs arêtes: les sites K(1) et K(2) forment des chaînes planes se développant dans la direction $\mathbf{a}-\mathbf{c}$. Ces chaînes sont reliées entre pour former des plans parallèles à (a, c) par les sites de cobalt ou de cuivre. Deux de ces plans coupent la maille perpendiculairement à \mathbf{b} .

Les structures de $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$ et $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ sont très semblables, la principale différence résidant dans les environnements Cu^{2+} et Co^{2+} . Les positions des atomes d'oxygène s'écartent davantage de la centrosymétrie dans $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$ que dans $\text{CuK}_2(\text{PO}_3)_4$.

Références

- BASSI, G. (1973). *J. Appl. Cryst.* **6**, 280-284.
 LAÜGT, M., GUITEL, J. C., DURIF, A. & MARTIN, C. (1967). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **265**, 741-743.
 PREWITT, C. T. (1966). *SFLS-5*. Report ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.

- THONNERIEUX, B., TRANQUI, D., DURIF, A. & AVERBUCH-POUCHOT, M. T. (1968). *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. C*, **266**, 208-210.
 TORDJMAN, I., TRANQUI, D. & LAÜGT, M. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minér. Crist.* **93**, 160-165.

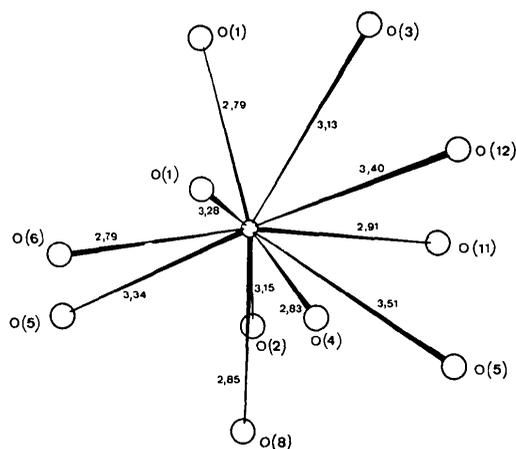


Fig. 5. Environnement de K(1) dans $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$: projection (001).

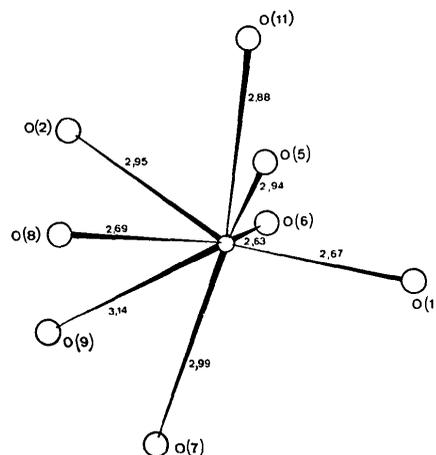


Fig. 6. Environnement de K(2) dans $\text{CoK}_2(\text{PO}_3)_4$: projection (001).