

Références

- AVERBUCH-POUCHOT, M. T. & GUITEL, J. C. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 2270–2274.
 BONNEMAN-BÉMIA, P. (1941). *Chim. Anal.* **16**, 395–476.
 CORBRIDGE, D. E. C. & TROMANS, F. R. (1958). *Anal. Chem.* **30**, 1101–1110.
 HUBER, H. (1937). *Angew. Chem.* **50**, 323–330.
 PREWITT, C. T. (1966). *SFLS-5*. A Fortran IV full-matrix crystallographic least-squares program.
 QUIMBY, O. T. & MCCUNE, M. W. (1957). *Anal. Chem.* **29**, 248–253.
 SCHWARZ, F. (1895). *Anorg. Chem.* **9**, 249–266.
 STANGE, M. (1896). *Anorg. Chem.* **12**, 444–463.

Acta Cryst. (1977). **B33**, 1431–1435

Existence d'un Nouvel Anion Condensé: $\text{Cr}_2\text{PO}_{10}$. Structures Cristallines de Deux Phosphochromates de Baryum: $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ et $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$

PAR M. T. AVERBUCH-POUCHOT, A. DURIF ET J. C. GUITEL

Laboratoire de Cristallographie, CNRS, 166 X, Centre de Tri, 38042 Grenoble Cédex, France

(Reçu le 5 octobre 1976, accepté le 15 octobre 1976)

$\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ and $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ are both triclinic; space group $P\bar{1}$, $Z = 2$. Unit-cell dimensions are, for the monohydrate: $a = 9.333$ (5), $b = 7.779$ (5), $c = 7.526$ (5) Å; $\alpha = 106.28$ (3), $\beta = 105.37$ (3), $\gamma = 94.14$ (3)°; for the trihydrate: $a = 10.189$ (5), $b = 8.207$ (5), $c = 7.749$ (5) Å; $\alpha = 108.80$ (3), $\beta = 107.14$ (3), $\gamma = 89.04$ (3)°. The crystal structures of these two salts have been solved from 1643 independent reflexions for the first salt ($R = 0.041$) and 2340 independent reflexions for the second ($R = 0.059$). The atomic arrangements of these two salts show the existence of a new type of condensed anion: $\text{Cr}_2\text{PO}_{10}$.

Introduction

Ce travail s'insère dans le cadre d'une recherche sur les anions condensés mixtes contenant du phosphore, commencée par l'étude du phosphobéryllate d'ammonium, $\text{NH}_4\text{Be}_2\text{P}_3\text{O}_{10}$ (Averbuch-Pouchot, Durif, Coing-Boyat & Guitel, 1977). Les deux sels faisant l'objet de la présente étude sont les premiers exemples de composés à tripolyanions mixtes: $\text{Cr}_2\text{PO}_{10}$.

données enregistrées au diffractomètre automatique, sont respectivement pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$: $a = 9,333$, $b = 7,779$, $c = 7,526$ Å; $\alpha = 106,28$, $\beta = 105,37$, $\gamma = 94,14$ °; $V = 496,2$ Å³; et pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$: $a = 10,189$, $b = 8,207$, $c = 7,749$ Å; $\alpha = 108,80$, $\beta = 107,14$, $\gamma = 89,04$ °; $V = 584,0$ Å³.

Les deux mailles contiennent deux unités formulaires.

Préparation chimique

Les deux composés ont été préparés à partir d'une solution d'anhydride chromique dans l'acide monophosphorique. L'introduction de carbonate de baryum dans cette liqueur provoque au bout de quelques jours une première précipitation de cristaux orangés de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$. La solution filtrée est de nouveau abandonnée pendant plusieurs jours, au bout desquels apparaissent des cristaux, également orangés, du composé trihydraté: $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

Caractéristiques cristallines

Les deux composés cristallisent dans le système triclinique. Leurs paramètres de maille, obtenus à partir de

Techniques expérimentales

Les différentes conditions expérimentales utilisées sont rassemblées Tableau 1. En raison des dimensions suffisamment petites des deux cristaux et de la longueur d'onde utilisée, aucune correction d'absorption n'a été faite.

Tableau 1. Conditions expérimentales

	$\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$	$\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$
Longueur d'onde	Ag ($K\alpha$)	Ag ($K\alpha$)
Vitesse de balayage ($^\circ\text{s}^{-1}$)	0,04	0,03
Domaine de balayage ($^\circ$)	1,60	1,20
Mode de balayage	θ/ω	ω
Durée totale de balayage du fond continu (s)	10	20
Domaine de mesure ($^\circ$)	3–20	3–25
Dimension du cristal (mm)	0,16 × 0,16 × 0,16	0,11 × 0,08 × 0,13
Nombre de mesures	1643	2390

Détermination des structures

Elles ont été déterminées au moyen des méthodes classiques: interprétation de la fonction de Patterson pour la position des atomes de baryum, puis exploitation de synthèses de Fourier successives pour l'emplacement de tous les autres atomes de la maille. En ce qui concerne $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$, après avoir écarté six réflexions mal mesurées, quelques cycles d'affinement (Prewitt, 1966) amènent le facteur R à une valeur de 0,059.*

* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 32262: 27 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

Pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$, ce même facteur R a une valeur de 0,041 après quelques cycles d'affinement effectués en ayant éliminé 209 réflexions telles que $F_o < 10$ à l'échelle absolue.

En dernier lieu, des synthèses de Fourier-différence permettent de confirmer l'exactitude des formules chimiques des deux composés.

Les Tableaux 2 et 3 donnent respectivement les coordonnées des positions atomiques ainsi que les facteurs thermiques isotropes, B_{eq} et anisotropes, β_{ij} , de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ et de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

On peut trouver dans le Tableau 4 les longueurs et directions des axes des ellipsoïdes de vibration thermique du monohydrate, celles du trihydrate dans le Tableau 5.

Tableau 2. Paramètres des positions atomiques ($\times 10^4$), B_{eq} et paramètres thermiques anisotropes, β_{ij} ($\times 10^5$), de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$

Les écarts standard sont donnés entre parenthèses.

	x	y	z	B_{eq}	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ba	1179,9 (7)	4575,6 (8)	2656,8 (9)	1,3	506 (7)	524 (11)	711 (13)	85 (6)	205 (7)	225 (8)
Cr(1)	7503 (2)	7264 (2)	2443 (2)	1,8	665 (21)	655 (29)	981 (35)	155 (20)	222 (22)	277 (25)
P	7823 (3)	1499 (3)	3165 (3)	1,4	551 (33)	468 (44)	761 (54)	28 (30)	198 (34)	161 (39)
Cr(2)	2536 (2)	9304 (2)	1187 (2)	1,9	707 (23)	666 (29)	979 (35)	45 (20)	200 (22)	252 (25)
O(E11)	5879 (8)	7032 (10)	974 (10)	2,6	681 (101)	1117 (154)	1661 (192)	203 (102)	120 (112)	547 (139)
O(E12)	8613 (8)	6208 (9)	1316 (10)	2,2	796 (103)	816 (138)	1334 (171)	181 (96)	316 (107)	429 (125)
O(E13)	7362 (8)	6521 (10)	4181 (10)	2,5	858 (109)	1226 (156)	1056 (167)	95 (105)	209 (108)	457 (129)
O(L1)	8264 (9)	9696 (9)	3456 (10)	2,6	1111 (118)	566 (133)	1373 (178)	213 (100)	32 (116)	330 (123)
O(E1)	6731 (8)	2170 (10)	4409 (10)	2,3	835 (107)	1087 (150)	1062 (165)	96 (101)	479 (108)	130 (126)
O(E2)	9135 (7)	2970 (9)	3904 (10)	1,8	551 (90)	639 (127)	1122 (156)	-12 (86)	290 (96)	91 (113)
O(L2)	6894 (8)	1135 (9)	1023 (9)	2,2	786 (104)	1128 (150)	798 (154)	62 (99)	167 (100)	216 (123)
O(E21)	1462 (8)	7499 (9)	1032 (10)	2,4	835 (107)	917 (144)	1456 (180)	-37 (100)	361 (111)	434 (129)
O(E22)	1629 (9)	1009 (10)	1312 (10)	3,1	1431 (136)	788 (145)	1802 (202)	554 (115)	557 (134)	425 (140)
O(E22)	4036 (9)	9781 (10)	2983 (10)	3,1	948 (117)	1980 (196)	968 (173)	-144 (121)	39 (112)	636 (149)
O(W)	4155 (8)	4657 (10)	2877 (10)	3,3	492 (100)	2146 (207)	1530 (198)	-124 (114)	237 (112)	98 (160)

Tableau 3. Paramètres des positions atomiques ($\times 10^3$), B_{eq} et paramètres thermiques anisotropes, β_{ij} ($\times 10^5$), de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$

Les écarts standard sont donnés entre parenthèses.

	x	y	z	B_{eq}	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ba	167,28 (6)	235,36 (8)	165,67 (8)	1,4	325 (5)	600 (9)	608 (10)	-15 (5)	114 (6)	67 (7)
Cr(1)	591,9 (2)	402,3 (2)	302,7 (2)	1,9	416 (16)	765 (25)	971 (31)	26 (16)	172 (18)	49 (23)
Cr(2)	-3,9 (2)	714,9 (2)	384,0 (2)	1,8	493 (16)	764 (25)	758 (29)	39 (16)	123 (17)	231 (22)
P	799,8 (2)	142,7 (3)	202,1 (3)	1,3	316 (22)	536 (36)	532 (42)	-9 (23)	157 (25)	-17 (32)
O(E1)	907,0 (6)	123,6 (8)	103,4 (8)	1,7	370 (65)	765 (110)	806 (127)	36 (68)	246 (73)	27 (96)
O(E2)	702,1 (7)	971,8 (8)	107,3 (9)	2,0	520 (72)	733 (111)	811 (130)	-234 (72)	210 (79)	-204 (97)
O(L1)	712,2 (6)	293,3 (9)	174,5 (9)	2,1	435 (70)	1177 (129)	833 (135)	229 (76)	1481 (78)	336 (108)
O(L2)	851,3 (6)	170,4 (8)	418,0 (8)	1,8	474 (69)	814 (113)	692 (126)	-59 (71)	113 (76)	114 (97)
O(E11)	324,3 (7)	517 (1)	475 (1)	3,2	547 (82)	1615 (162)	1067 (157)	-200 (91)	89 (91)	-386 (128)
O(E12)	531,2 (9)	550 (1)	213 (1)	3,5	1003 (106)	1162 (149)	2186 (215)	341 (102)	529 (122)	645 (149)
O(E13)	470,7 (7)	263,9 (9)	271 (1)	2,7	529 (78)	891 (126)	1830 (124)	-89 (79)	326 (97)	107 (123)
O(E21)	864,8 (7)	751 (1)	461 (1)	2,6	576 (79)	1279 (141)	1236 (157)	182 (85)	298 (91)	200 (120)
O(E22)	985,8 (7)	793,3 (9)	217 (1)	2,7	799 (89)	1258 (141)	986 (147)	-83 (89)	49 (91)	591 (118)
O(E23)	13,3 (7)	510,9 (9)	311 (1)	2,6	814 (91)	703 (117)	1347 (162)	50 (83)	308 (98)	71 (111)
O(W1)	285,5 (8)	964,8 (9)	305 (1)	2,8	847 (92)	1145 (140)	1447 (168)	77 (91)	389 (101)	607 (127)
O(W2)	237,8 (9)	512 (1)	64 (1)	4,1	1007 (110)	1965 (190)	2011 (217)	-490 (115)	-29 (122)	1134 (170)
O(W3)	558,6 (7)	898,5 (9)	294 (1)	2,7	635 (83)	924 (129)	1813 (183)	7 (83)	449 (101)	366 (125)

Description des structures

La Fig. 1 représente la projection de l'arrangement atomique de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ sur le plan bc , la Fig. 2 celui de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ sur le plan ab .

Dans le cas du monohydrate, l'atome de baryum est entouré de neuf atomes d'oxygène dont un appartient à une molécule d'eau. Le Tableau 6 donne les distances Ba—O.

Les atomes de baryum sont liés entre eux par deux atomes d'oxygène et forment ici un ruban infini (Fig. 3a).

En ce qui concerne le trihydrate le baryum a un voisinage constitué par dix atomes d'oxygène dont deux appartenant à des molécules d'eau. Les distances Ba—O sont données dans le Tableau 7. Ici les atomes de baryum sont liés deux à deux par deux atomes d'oxygène et forment des groupements isolés (Fig. 3b).

Tableau 4. Longueurs des axes principaux des ellipsoïdes de vibration des atomes et orientation par rapport aux axes cristallographiques pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$

	$U(\text{Å})$ ($\times 10^2$)	θ°/a	θ°/b	θ°/c
Ba	14	22	94	84
	13	112	79	27
	12	86	11	117
Cr(1)	16	13	82	112
	15	87	92	25
	13	102	8	102
P	15	19	105	88
	14	107	101	5
	11	82	19	95
Cr(2)	17	9	101	109
	15	85	101	21
	13	82	16	100
O(E11)	21	121	90	22
	18	61	39	94
	15	45	129	69
O(E12)	18	68	85	45
	18	23	89	128
	14	97	5	110
O(E13)	19	32	122	108
	18	58	43	92
	15	89	116	18
O(L1)	24	25	84	130
	17	68	88	43
	12	100	6	104
O(E1)	20	54	131	59
	17	54	43	100
	14	124	78	33
O(E2)	18	74	123	35
	15	26	103	124
	13	70	36	87
O(L2)	19	144	50	87
	18	54	40	117
	14	87	88	27
O(E21)	19	30	120	83
	19	101	81	26
	14	63	31	115
O(E22)	24	22	76	98
	21	99	102	9
	12	110	18	93
O(E23)	25	126	37	80
	19	37	57	111
	14	82	104	24
O(W)	27	99	15	118
	19	108	78	29
	14	21	81	94

Tableau 5. Longueurs des axes principaux des ellipsoïdes de vibration des atomes et orientation par rapport aux axes cristallographiques pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$

	$U(\text{Å})$ ($\times 10^2$)	θ°/a	θ°/b	θ°/c
Ba	15	93	24	130
	13	19	95	122
	11	71	66	57
Cr(1)	18	100	142	33
	14	16	105	106
	14	77	56	62
	16	18	76	123
	15	102	14	100
	14	77	92	35
P	15	96	29	132
	12	16	77	102
	10	104	65	44
O(E1)	18	91	29	135
	14	49	67	74
	12	139	73	49
O(E2)	21	69	143	55
	15	153	99	45
	10	74	54	65
O(L1)	20	67	23	109
	15	122	83	30
	13	41	111	68
O(L2)	17	114	27	107
	15	151	111	48
	13	75	74	48
O(E11)	27	89	23	130
	18	23	98	123
	12	67	69	57
O(E12)	23	72	83	43
	22	147	116	47
	17	116	27	97
O(E13)	23	92	123	20
	17	133	52	70
	14	43	55	93
O(E21)	22	74	22	128
	17	64	82	51
	15	31	10	118
O(E22)	22	142	61	67
	18	53	43	97
	14	85	118	24
O(E23)	20	120	123	22
	20	31	103	77
	14	95	36	73
O(W1)	20	29	89	80
	20	112	53	56
	16	107	143	35
O(W2)	30	132	56	63
	19	65	103	43
	17	52	37	121
O(W3)	22	82	108	25
	17	130	47	75
	16	41	49	110

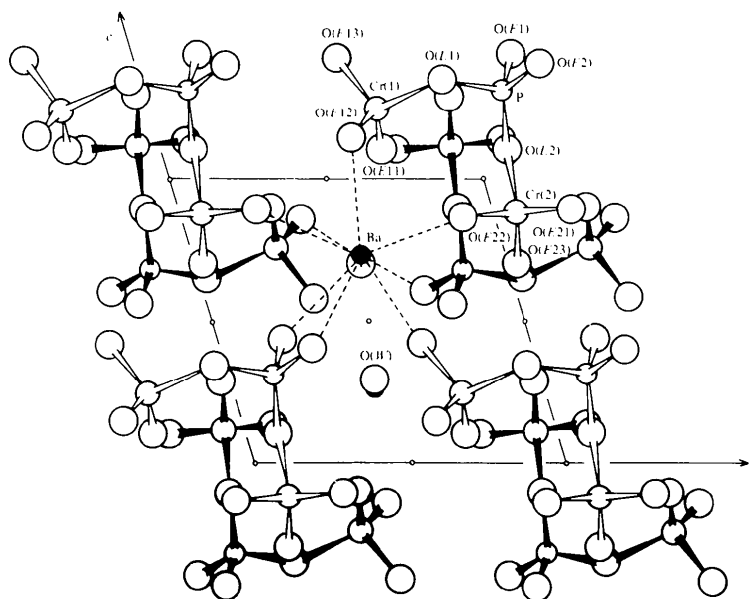
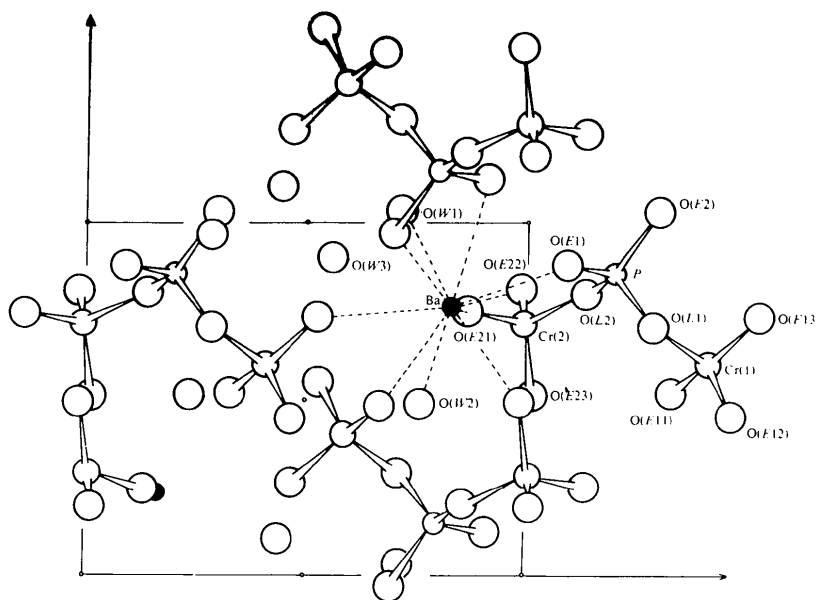

 Fig. 1. Projection de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ sur le plan bc .

 Fig. 2. Projection de $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ sur le plan ab .

 Tableau 6. Distances interatomiques (Å) de l'environnement du baryum pour $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$

Ba—O(E12)	2,866 (7)	Ba—O(E1)	2,984 (6)
Ba—O(E12)	2,942 (8)	Ba—O(E21)	2,881 (8)
Ba—O(E2)	2,706 (8)	Ba—O(E13)	2,795 (8)
Ba—O(E2)	2,849 (7)	Ba—O(W)	2,732 (8)
Ba—O(E22)	2,762 (7)		

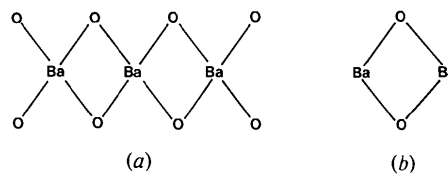

 Fig. 3. Enchaînements des atomes de baryum (a) dans $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot\text{H}_2\text{O}$ et (b) dans $\text{BaHCr}_2\text{PO}_{10}\cdot 3\text{H}_2\text{O}$.

Tableau 7. Distances interatomiques (Å) dans l'environnement du baryum pour BaHCr₂PO₁₀·3H₂O

Ba—O(E1)	2,674 (6)	Ba—O(E2)	2,899 (7)
Ba—O(E1)	2,964 (6)	Ba—O(E22)	2,846 (7)
Ba—O(E11)	2,818 (6)	Ba—O(E23)	2,850 (7)
Ba—O(E21)	2,972 (8)	Ba—O(W1)	2,869 (8)
Ba—O(E13)	2,948 (7)	Ba—O(W2)	2,80 (1)

Tableau 8. Distances interatomiques (Å) et principaux angles (°) de liaison dans l'anion Cr₂PO₁₀ de BaHCr₂PO₁₀·H₂O

Les valeurs soulignées sont les distances Cr—O et P—O.

Cr(1)	O(E11)	O(E12)	O(E13)	O(L1)
O(E11)	<u>1,585 (7)</u>	2,64 (1)	2,60 (1)	2,768 (9)
O(E12)	<u>110,2 (4)</u>	<u>1,630 (8)</u>	2,67 (1)	2,818 (9)
O(E13)	109,1 (4)	<u>111,8 (4)</u>	<u>1,600 (9)</u>	2,78 (1)
O(L1)	108,3 (4)	109,1 (4)	<u>108,2 (4)</u>	<u>1,826 (7)</u>
P	O(E1)	O(E2)	O(L1)	O(L2)
O(E1)	<u>1,579 (9)</u>	2,44 (1)	2,53 (1)	2,50 (1)
O(E2)	<u>105,7 (4)</u>	<u>1,478 (6)</u>	2,50 (1)	2,556 (8)
O(L1)	108,3 (4)	<u>112,1 (4)</u>	<u>1,538 (8)</u>	2,52 (1)
O(L2)	106,0 (4)	115,2 (4)	<u>109,2 (4)</u>	<u>1,549 (7)</u>
Cr(2)	O(E21)	O(E22)	O(E23)	O(L2)
O(E21)	<u>1,616 (8)</u>	2,65 (1)	2,666 (9)	2,79 (1)
O(E22)	<u>110,5 (4)</u>	<u>1,611 (8)</u>	2,65 (1)	2,78 (1)
O(E23)	111,9 (4)	<u>111,0 (4)</u>	<u>1,602 (7)</u>	2,77 (1)
O(L2)	108,2 (4)	107,6 (4)	<u>107,5 (4)</u>	<u>1,828 (8)</u>
Cr(1)—P	3,142 (3)	Cr(1)—O(L1)—P	138,0 (5)	
Cr(2)—P	3,078 (3)	Cr(2)—O(L2)—P	131,2 (5)	

Dans les deux structures, les atomes d'oxygène formant le voisinage du baryum sont des atomes d'oxygène O(E_{ij}) qui n'ont qu'une seule liaison avec le phosphore ou le chrome.

Dans les deux arrangements atomiques les atomes de baryum maintiennent la cohésion entre les groupements anioniques Cr₂PO₁₀.

Les anions Cr₂PO₁₀ possèdent les mêmes caractéristiques dans les deux composés (Tableaux 8 et 9). Les distances Cr—O sont en moyenne celles observées dans d'autres tripolychromates (Löfgren, 1974).

Par contre, on peut constater quelques différences dans les distances P—O du tétraèdre central PO₄ par rapport à celles rencontrées jusqu'alors dans d'autres tripolyphosphates. En effet, on a ici des distances

Tableau 9. Distances interatomiques (Å) et principaux angles (°) de liaison dans l'anion Cr₂PO₁₀ de BaHCr₂PO₁₀·3H₂O

Les valeurs soulignées sont les distances Cr—O et P—O.

Cr(1)	O(E11)	O(E12)	O(E13)	O(L1)
O(E11)	<u>1,595 (6)</u>	2,65 (1)	2,624 (9)	2,79 (1)
O(E12)	<u>111,5 (4)</u>	<u>1,612 (9)</u>	2,64 (1)	2,78 (1)
O(E13)	110,4 (4)	<u>110,7 (4)</u>	<u>1,601 (8)</u>	2,81 (1)
O(L1)	108,2 (4)	106,8 (4)	<u>109,1 (4)</u>	<u>1,843 (7)</u>
P	O(E1)	O(E2)	O(L1)	O(L2)
O(E1)	<u>1,487 (8)</u>	2,46 (1)	2,498 (9)	2,57 (1)
O(E2)	<u>107,5 (4)</u>	<u>1,565 (6)</u>	2,52 (1)	2,482 (9)
O(L1)	110,9 (4)	<u>108,0 (4)</u>	<u>1,547 (8)</u>	2,49 (1)
O(L2)	116,5 (4)	106,2 (4)	<u>107,5 (4)</u>	<u>1,538 (7)</u>
Cr(2)	O(E21)	O(E22)	O(E23)	O(L2)
O(E21)	<u>1,605 (8)</u>	2,65 (1)	2,64 (1)	2,782 (9)
O(E22)	<u>111,8 (4)</u>	<u>1,601 (9)</u>	2,63 (1)	2,751 (9)
O(E23)	110,5 (5)	<u>110,1 (4)</u>	<u>1,610 (7)</u>	2,834 (8)
O(L2)	107,7 (4)	106,1 (4)	<u>110,5 (3)</u>	<u>1,836 (5)</u>
Cr(1)—P	3,064 (3)	Cr(1)—O(L1)—P	129,1 (4)	
Cr(2)—P	3,116 (2)	Cr(2)—O(L2)—P	134,7 (4)	

Tableau 10. Distances interatomiques (Å) de O(W3) à ses plus proches voisins dans BaHCr₂PO₁₀·3H₂O

O(W3)—O(W1)	2,887 (9)	O(W3)—O(E12)	2,72 (1)
O(W3)—O(W1)	2,85 (1)	O(W3)—O(E2)	2,54 (1)

phosphore—oxygène de liaison beaucoup plus courtes (1,54 Å en moyenne pour les deux structures) que les distances habituelles: 1,60 Å pour, par exemple, Zn₂HP₃O₁₀·6H₂O (Averbuch-Pouchot & Guitel, 1976). Notons enfin la présence dans la structure de BaHCr₂PO₁₀·3H₂O d'une molécule d'eau O(W3) non liée à des cations. Le Tableau 10 donne les distances de cette molécule d'eau avec ses plus proches voisins.

Références

- AVERBUCH-POUCHOT, M. T., DURIF, A. COING-BOYAT, J. & GUITEL, J. C. (1977). *Acta Cryst.* **B33**, 203–205.
 AVERBUCH-POUCHOT, M. T. & GUITEL, J. C. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 1670–1673.
 LÖFGREN, P. (1974). *Chem. Scripta*, **5**, 91–96.
 PREWITT, C. T. (1966). *SFLS-5*. A Fortran IV full-matrix crystallographic least-squares program.