

Faycel Khliisa et Mokhtar Férid*

Laboratoire des Matériaux, Institut National de
Recherche Scientifique et Technique, BP 95,
2050 Hammam-Lif, TunisiaCorrespondence e-mail:
Ferid.Mokhtar@inrst.nrnt.tn

Key indicators

Single-crystal X-ray study
 $T = 298 \text{ K}$
Mean $\sigma(\text{P-O}) = 0.005 \text{ \AA}$
 $R \text{ factor} = 0.025$
 $wR \text{ factor} = 0.097$
Data-to-parameter ratio = 14.0For details of how these key indicators were
automatically derived from the article, see
<http://journals.iucr.org/e>.

Rubidium terbium polyphosphate

The title compound, $\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$, belongs to type IV of the $M^I M^{III}(\text{PO}_3)_4$ polyphosphate family. It was synthesized by the flux-growth method. In this condensed polyphosphate, PO_4 tetrahedra share vertices to produce corrugated ribbons along the a -axis direction with a repeating unit of eight tetrahedra. Isolated TbO_8 polyhedra link the phosphate anions into a three-dimensional framework with channels containing Rb^+ cations.

Reçu le 13 septembre 2006
Accepté le 6 octobre 2006

Commentaire

L'élaboration de nouveaux matériaux à base d'éléments de terres rares suscite un grand intérêt tant en optique que dans le domaine des ferroélectriques ou des conducteurs protoniques, compte tenu de leurs multiples applications potentielles. C'est dans le cadre de la recherche et l'élaboration de nouveaux luminophores, à base de terbium trivalent émettant dans le vert et l'étude de leurs performances dans le domaine de la luminescence (Otsuka *et al.*, 1975; Jouini *et al.*, 2003; Amami *et al.* 2005; Hashimoto *et al.*, 1991; Horchani-Naifer *et al.*, 2006) que le polyphosphate condensé de rubidium et de terbium $\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$, qui appartient au type IV de la famille $M^I M^{III}(\text{PO}_3)_4$ ($M^I =$ métal alcalin, $M^{III} =$ terres rares) des polyphosphates (Durif, 1995), a été synthétisé sous forme monocristalline, par la méthode de flux.

Dans ce polyphosphate les anions phosphate forment des chaînes $(\text{PO}_3)_n$, qui se développent en spirales parallèlement à la direction a avec une période de huit tétraèdres (Fig. 1). Ces chaînes partagent des oxygènes avec les cations Rb^+ et Tb^{3+} . Les cations Tb^{3+} sont coordonnés à huit atomes d'oxygène. Chaque polyèdre TbO_8 partage ses huit sommets avec quatre chaînes $(\text{PO}_3)_n$. Il en résulte une charpente tridimensionnelle, présentant des tunnels parallèles à la direction a , où se logent

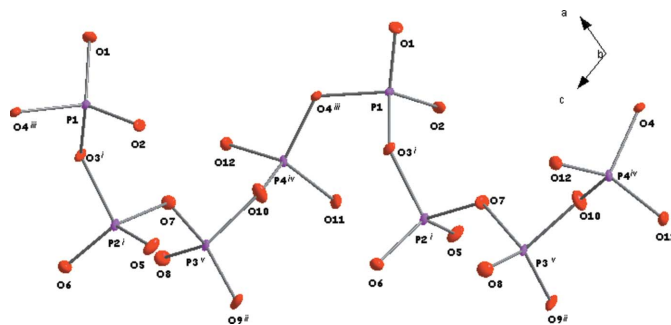


Figure 1

Représentation d'une période de la chaîne des tétraèdres PO_4 dans la structure de $\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$; les ellipsoïdes d'agitation anisotrope sont schématisés avec une probabilité de 50%. [Codes de symétrie: (i) $3 - x, -y, 2 - z$; (ii) $\frac{5}{2} - x, -\frac{5}{2} + y, \frac{5}{2} - z$; (iii) $\frac{5}{2} - x, -\frac{1}{2} + y, \frac{3}{2} - z$; (iv) $\frac{5}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{3}{2} - z$; (v) $\frac{5}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{5}{2} - z$.]

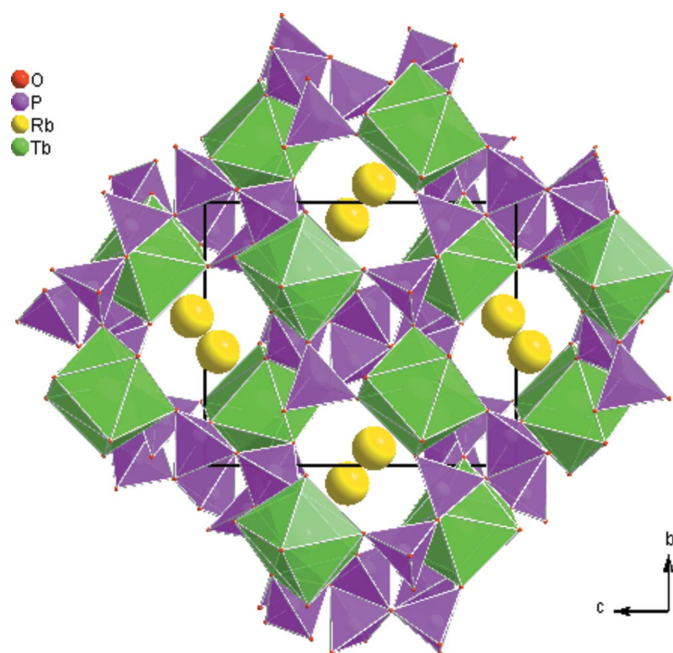


Figure 2
Projection de la structure de $\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$ sur le plan bc .

les ions rubidium (Fig. 2). Notons que la plus courte distance entre deux cations Tb^{3+} est de 5,701 (4) Å et que les polyèdres TbO_8 sont isolés les uns des autres et ne partagent, par conséquent, aucun atome d'oxygène. Par ailleurs, les ions rubidium sont environnés par 11 atomes d'oxygène avec des distances $\text{Rb}-\text{O}$ variant entre 2,923 (4) Å et 3,474 (5) Å (Tableau 1).

Partie expérimentale

Des monocristaux du polyphosphate condensé, $\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$, ont été synthétisés par la méthode de flux. A cet effet, un mélange de 0,4 g de Rb_2CO_3 , 0,3 g de Tb_4O_7 et 12 ml de H_3PO_4 (85%) a été placé dans un creuset en carbone vitreux et introduit dans un four à 623 K, pendant 10 jours. Après refroidissement les cristaux formés ont été extraits du mélange réactionnel par lavage à l'eau bouillante.

Données cristallines

$\text{RbTb}(\text{PO}_3)_4$	$Z = 4$
$M_r = 560,27$	$D_x = 3,846 \text{ Mg m}^{-3}$
Monoclinique, $P2_1/n$	Mo $K\alpha$ radiation
$a = 10,3224$ (2) Å	$\mu = 13,03 \text{ mm}^{-1}$
$b = 8,9071$ (3) Å	$T = 298$ (2) K
$c = 10,9608$ (3) Å	Prisme, incolore
$\beta = 106,211$ (2)°	0,18 × 0,17 × 0,17 mm
$V = 967,70$ (5) Å ³	

Collection des données

Diffractionnètre Enraf-Nonius CAD-4	2289 réflexions indépendantes
Balayage $\omega/2\theta$	2138 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$
Correction d'absorption: ψ scan (North <i>et al.</i> , 1968)	$R_{\text{int}} = 0,040$
$T_{\text{min}} = 0,325$, $T_{\text{max}} = 0,403$ (attendu = 0,088–0,109)	$\theta_{\text{max}} = 27,8^\circ$
6667 réflexions mesurées	2 réflexions de référence
	fréquence: 120 min
	variation d'intensité: 2%

Affinement

Affinement à partir des F^2	$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,001$
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0,025$	$\Delta\rho_{\text{max}} = 1,51 \text{ e} \text{ \AA}^{-3}$
$wR(F^2) = 0,097$	$\Delta\rho_{\text{min}} = -2,12 \text{ e} \text{ \AA}^{-3}$
$S = 1,27$	Correction d'extinction: <i>SHELXL97</i>
2289 réflexions	Coefficient d'extinction: 0,0243 (9)
164 paramètres	
$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0,0501P)^2 + 5,0496P]$	
où $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$	

Tableau 1
Distances interatomiques (Å).

$\text{Tb}-\text{O}11$	2,309 (4)	$\text{Rb}-\text{O}9$	3,244 (5)
$\text{Tb}-\text{O}8^i$	2,347 (4)	$\text{Rb}-\text{O}3^{vi}$	3,303 (4)
$\text{Tb}-\text{O}5^{ii}$	2,350 (5)	$\text{Rb}-\text{O}12$	3,415 (5)
$\text{Tb}-\text{O}6^{iii}$	2,386 (5)	$\text{Rb}-\text{O}9^{iii}$	3,472 (5)
$\text{Tb}-\text{O}9^i$	2,390 (4)	$\text{Rb}-\text{O}10^v$	3,474 (5)
$\text{Tb}-\text{O}1$	2,399 (4)	$\text{P}1-\text{O}1$	1,480 (4)
$\text{Tb}-\text{O}12^i$	2,413 (5)	$\text{P}1-\text{O}2$	1,494 (4)
$\text{Tb}-\text{O}2^{iv}$	2,457 (4)	$\text{P}1-\text{O}3$	1,609 (4)
$\text{Rb}-\text{O}8^{iii}$	2,923 (4)	$\text{P}1-\text{O}4$	1,610 (5)
$\text{Rb}-\text{O}6^i$	2,964 (5)	$\text{P}2-\text{O}6$	1,482 (5)
$\text{Rb}-\text{O}1$	2,970 (5)	$\text{P}2-\text{O}5$	1,482 (5)
$\text{Rb}-\text{O}2$	2,995 (4)	$\text{P}2-\text{O}3^{vii}$	1,609 (4)
$\text{Rb}-\text{O}5^v$	3,127 (5)	$\text{P}2-\text{O}7$	1,609 (5)
$\text{Rb}-\text{O}7^v$	3,188 (5)		

Codes de symétrie: (i) $x - \frac{1}{2}, -y + \frac{1}{2}, z - \frac{1}{2}$; (ii) $x - \frac{1}{2}, -y - \frac{1}{2}, z - \frac{1}{2}$; (iii) $-x + \frac{5}{2}, y + \frac{1}{2}, -z + \frac{5}{2}$; (iv) $-x + \frac{5}{2}, y - \frac{1}{2}, -z + \frac{3}{2}$; (v) $x, y + 1, z$; (vi) $-x + \frac{3}{2}, y + \frac{1}{2}, -z + \frac{3}{2}$; (vii) $-x + 3, -y, -z + 2$.

Le pic résiduel de Fourier le plus élevé est situé à 1,14 Å de l'atome O12 alors que le plus faible se trouve à une distance de 0,76 Å de l'atome de terbium.

Data collection: *CAD-4 EXPRESS* (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); cell refinement: *CAD-4 EXPRESS*; data reduction: *XCAD4* (Harms & Wocadlo, 1995); program(s) used to solve structure: *SHELXS97* (Sheldrick, 1997); program(s) used to refine structure: *SHELXL97* (Sheldrick, 1997); molecular graphics: *DIAMOND* (Brandenburg, 1998); software used to prepare material for publication: *SHELXL97*.

Références

- Amami, J., Férid, M. & Trabelsi-Ayadi, M. (2005). *Mater. Res. Bull.* **40**, 2144–2152.
- Brandenburg, K. (1998). *DIAMOND*. Version 2.0. Université de Bonn, Allemagne.
- Duisenberg, A. J. M. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 92–96.
- Durif, A. (1995). *Crystal Chemistry of Condensed Phosphates*, p. 153. New York: Plenum Press New York, 1995.
- Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. Université de Marburg, Allemagne.
- Hashimoto, N., Takada, Y., Sato, K. & Ibuki, S. (1991). *J. Lumin.* **48–49**, 893–897.
- Horchani-Naifer, K., Férid, M., Gâcon, J. C. & Trabelsi-Ayadi, M. (2006). Brevet Tunisien SN06088.
- Jouini, T., Gâcon, J. C. A., Férid, M. & Trabelsi-Ayadi, M. (2003). *Opt. Mater.* **24**, 175–180.
- Macíček, J. & Yordanov, A. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 73–80.
- North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
- Otsuka, K., Yamada, T., Saruwatari, M. & Kimura, T. (1975). *IEEE J. Quantum Electron.* **11**, 330–335.
- Sheldrick, G. M. (1997). *SHELXS97* et *SHELXL97*. Université de Göttingen, Allemagne.