

Structure d'un Phosphate Tellurate de Sodium: $\text{Te}(\text{OH})_6 \cdot \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot \text{NaH}_2\text{PO}_4$

PAR M. T. AVERBUCH-POUCHOT

Laboratoire de Cristallographie, CNRS, 166 X, 38042 Grenoble CEDEX, France

(Reçu le 3 janvier 1980, accepté le 19 juin 1980)

Abstract. $\text{Te}(\text{OH})_6 \cdot \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot \text{NaH}_2\text{PO}_4$, hexagonal, $P6_322$, $a = 7.883$ (5), $c = 10.863$ (9) Å, $Z = 2$. The crystal structure of this new phosphate tellurate has been solved using 666 independent reflexions (final $R = 0.020$). As in the previously described phosphates tellurates, independent TeO_6 octahedra and PO_4 tetrahedra coexist in the atomic arrangement.

Introduction. La détermination de la structure cristalline du phosphate tellurate de sodium $\text{Te}(\text{OH})_6 \cdot \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot \text{NaH}_2\text{PO}_4$, objet du présent travail, fait partie d'une étude des phosphates tellurates alcalins (Durif, Averbuch-Pouchot & Guitel, 1979; Averbuch-Pouchot, Durif & Guitel, 1979, 1980; Averbuch-Pouchot & Durif, 1979).

Les préparations chimiques de ce sel et de l'arséniate correspondant, qui lui est isotype, ainsi que leurs principales caractéristiques cristallographiques seront décrites ailleurs (Averbuch-Pouchot & Durif, 1980).

Le cristal utilisé pour la détermination de la structure était une bipyramide hexagonale trapue de dimensions $0,26 \times 0,26 \times 0,26$ mm. Un total de 6056 réflexions a été mesuré à l'aide d'un diffractomètre Philips PW 1100 [$\lambda(\text{Ag } K\alpha_1, \alpha_2) = 0,5608$ Å]. De cet ensemble de données, 685 réflexions indépendantes ont été extraites. Les valeurs conservées pour les réflexions indépendantes sont les valeurs moyennées des séries de réflexions équivalentes. Les mesures étaient effectuées en balayage ω dans un domaine angulaire de $1,30^\circ$ (θ) à chaque extrémité duquel le fond continu était mesuré durant 10 s. La vitesse de balayage, constante, était de $0,02^\circ \text{ s}^{-1}$. Les deux réflexions de référence (264 et 428) mesurées toutes les deux heures n'ont subi aucune variation significative durant les mesures qui ont été

Tableau 2. Principales distances interatomiques (Å) et angles de liaison ($^\circ$)

Pour la coordination du tellure l'atome O(1) est numéroté O(1, j), j étant le numéro de la position de l'atome O(1) dans l'ordre des positions du site 12(i) des *International Tables for X-ray Crystallography* (1952).

Octaèdre TeO_6			
	$6 \times \text{Te}-\text{O}(1)$	1.923 (1)	
	$6 \times \text{O}(1.1)-\text{Te}-\text{O}(1.2)$	92.22 (6)	$6 \times \text{O}(1.1)-\text{O}(1.2)$ 2.772 (3)
	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{Te}-\text{O}(1.10)$	91.60 (6)	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{O}(1.10)$ 2.757 (3)
	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{Te}-\text{O}(1.11)$	84.19 (6)	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{O}(1.11)$ 2.578 (3)
	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{Te}-\text{O}(1.12)$	174.86 (6)	$3 \times \text{O}(1.1)-\text{O}(1.12)$ 3.842 (3)
Tétraèdre PO_4			
	$\text{P}-\text{O}(2)$	1.503 (2)	
	$3 \times \text{P}-\text{O}(3)$	1.566 (2)	
	$3 \times \text{O}(2)-\text{P}-\text{O}(3)$	112.09 (5)	$3 \times \text{O}(2)-\text{O}(3)$ 2.546 (2)
	$3 \times \text{O}(3)-\text{P}-\text{O}(3)$	106.73 (6)	$3 \times \text{O}(3)-\text{O}(3)$ 2.514 (2)
Voisinage de l'atome de sodium			
	$2 \times \text{Na}-\text{O}(1)$	2.594 (1)	$2 \times \text{Na}-\text{O}(3)$ 2.404 (1)
	$2 \times \text{Na}-\text{O}(2)$	2.371 (1)	

effectuées entre 3 et 30° (θ). Les intensités ont été corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation. L'absorption a été négligée. L'étude de la fonction de Patterson conduit rapidement à la localisation des atomes de tellure et de phosphore. Une synthèse de Fourier permet alors de préciser la totalité de l'arrangement. Quelques cycles d'affinement effectués avec des facteurs d'agitation thermique anisotropes conduisent rapidement à une valeur finale du facteur R de 0,020 pour un ensemble de 666 réflexions telles que $I/\sigma(I) > 2$.*

Le Tableau 1 donne les coordonnées atomiques de cet arrangement.

Discussion. Comme dans tous les phosphates tellurates déjà décrits (Durif *et al.*, 1979; Averbuch-Pouchot *et al.*, 1979, 1980; Averbuch-Pouchot & Durif, 1979), on

* Les listes des facteurs de structure et des paramètres thermiques anisotropes ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 35432; 10 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. Paramètres des positions atomiques avec leurs écarts standard et paramètres thermiques isotropes B_{eq}

Sites	x	y	z	B_{eq} (Å ²)
Te	2(b)	0	0	$\frac{1}{4}$ 1.08
P	4(f)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0,52169 (9) 0.79
Na	6(h)	0,5292 (3)	0,0583 (3)	$\frac{1}{4}$ 1.81
O(1)	12(i)	0,2090 (3)	0,0126 (4)	0,3482 (2) 1.90
O(2)	4(f)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0,3833 (3) 1.09
O(3)	12(i)	0,6469 (3)	0,1401 (3)	0,5759 (2) 1.14

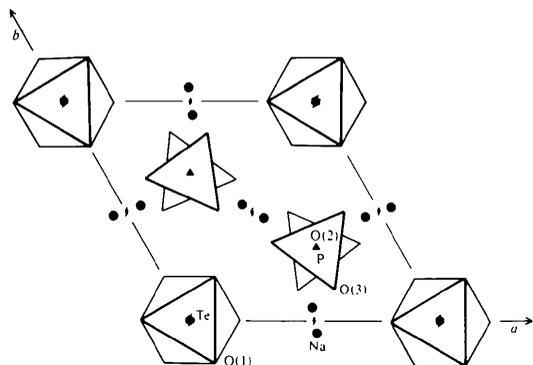


Fig. 1. Projection selon c de l'arrangement atomique de $\text{Te(OH)}_6 \cdot \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot \text{NaH}_2\text{PO}_4$.

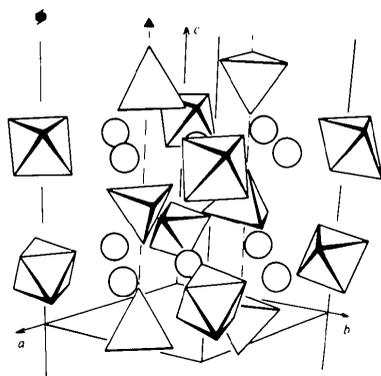


Fig. 2. Vue perspective de $\text{Te(OH)}_6 \cdot \text{Na}_2\text{HPO}_4 \cdot \text{NaH}_2\text{PO}_4$.

n'observe pas d'anion condensé phosphotellurique mais la coexistence dans l'arrangement atomique de deux types d'anions indépendants: TeO_6 et PO_4 .

Ici les octaèdres TeO_6 sont situés en $\frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$ sur les axes hélicoïdaux 6_3 , tandis que les tétraèdres PO_4 sont situés approximativement en 0 et $\frac{1}{2}$ sur les axes ternaires internes de la maille.

Les atomes de sodium en coordination octaédrique s'alignent approximativement sur les axes 2_1 en $z = \frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$. Le Tableau 2 donne les principales distances interatomiques et angles de liaison dans cet arrangement.

Les Figs. 1 et 2 fournissent respectivement une projection de la structure sur le plan xOy et une vue perspective du même arrangement.

Références

- AVERBUCH-POUCHOT, M. T. & DURIF, A. (1979). *C. R. Acad. Sci. Sér. C*, **289**, 101–104.
- AVERBUCH-POUCHOT, M. T. & DURIF, A. (1980). *C. R. Acad. Sci.* A paraître.
- AVERBUCH-POUCHOT, M. T., DURIF, A. & GUITEL, J. C. (1979). *Mater. Res. Bull.* **14**, 1219–1223.
- AVERBUCH-POUCHOT, M. T., DURIF, A. & GUITEL, J. C. (1980). *Mater. Res. Bull.* A paraître.
- DURIF, A., AVERBUCH-POUCHOT, M. T. & GUITEL, J. C. (1979). *Acta Cryst.* **B35**, 1444–1447.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1952). Tome I. Birmingham: Kynoch Press.