

## Structure Cristalline de SrFeF<sub>5</sub>

RÉGNAULT VON DER MÜHLL, FRANÇOISE DAUT, ET JEAN RAVEZ

*Service de Chimie Minérale structurale de l'Université de Bordeaux I, associé au C.N.R.S., 351 cours de la Libération, 33 405—Talence, France*

Received February 6, 1973

The crystal structure of SrFeF<sub>5</sub> has been determined by single crystal X-ray diffraction methods.

The unit cell is monoclinic (space group *P2<sub>1</sub>/c*) with  $a = 7.062 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.289 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ,  $c = 14.704 \pm 0.001 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 95.40 \pm 0.01^\circ$  and  $Z = 8$ .

The lattice is built up of spiral chains of octahedra parallel to the *Oy* axis. These chains are formed by (FeF<sub>6</sub>)<sup>3-</sup> octahedra sharing corners of the same edge. The strontium atoms bridge three neighbouring chains. The SrTiF<sub>5</sub>, SrVF<sub>5</sub>, SrCoF<sub>5</sub>, and BaInF<sub>5</sub> phases are isostructural with SrFeF<sub>5</sub>.

L'étude au laboratoire des composés fluorés ternaires des métaux alcalino-terreux ou du plomb avait permis la mise en évidence d'un certain nombre de phases de composition M<sup>II</sup>T<sup>III</sup>F<sub>5</sub> (M = Ca, Sr, Ba, Pb) (T = Al, Ga, Ti, V, Cr, Fe, Co) (1-9). Ces phases se rattachent à divers types structuraux, comme le montre le Tableau I.

Les structures des phases CaCrF<sub>5</sub> et BaFeF<sub>5</sub> ont été déterminées par R. Von Der Mühl et al. (10, 11). Ce travail apporte une nouvelle contribution à l'étude cristallographique des

composés M<sup>II</sup>T<sup>III</sup>F<sub>5</sub>; il concerne en effet la détermination de la structure SrFeF<sub>5</sub>.

### Préparation D'un Monocristal de SrFeF<sub>5</sub>. Données Radiocristallographiques

SrFeF<sub>5</sub> est obtenu par action de SrF<sub>2</sub> sur FeF<sub>3</sub> à 700°C en tube d'or scellé sous argon. Il fond de manière congruente à 775 ± 10°C. Des monocristaux incolores ont été préparés par refroidissement lent de la phase fondue; le cristal utilisé est un prisme allongé suivant l'axe *b* de rayon moyen  $r = 0.0175 \text{ mm}$  et de hauteur  $h = 0.25 \text{ mm}$  ( $\mu_r = 0.91$  pour le rayonnement  $K\alpha$  du molybdène).

TABLEAU I

TYPES STRUCTURAUX DES PHASES M<sup>II</sup>T<sup>III</sup>F<sub>5</sub>

Types structuraux	Phases obtenues
CaCrF <sub>5</sub> monoclinique	CaTF <sub>5</sub> (T = Al, Ga, Ti, V, Cr, Co)
CaFeF <sub>5</sub> orthorhombique	CaTF <sub>5</sub> (T = Al, Ga, Fe)
SrFeF <sub>5</sub> monoclinique	SrTF <sub>5</sub> (T = Ti, V, Fe, Co) BaInF <sub>5</sub>
BaFeF <sub>5</sub> quadratique	SrTF <sub>5</sub> (T = Al, Ga, Cr) BaTF <sub>5</sub> (T = Ti, V, Fe) PbTF <sub>5</sub> (T = Al, Ga)

TABLEAU II

DONNÉES CRISTALLOGRAPHIQUES DE SrFeF<sub>5</sub>

Symétrie:	Monoclinique
Groupe spatial:	<i>P2<sub>1</sub>/c</i>
Paramètres:	$a = 7.062 \pm 0.001 \text{ \AA}$ $b = 7.289 \pm 0.001 \text{ \AA}$ $c = 14.704 \pm 0.001 \text{ \AA}$ $\beta = 95.40 \pm 0.05^\circ$
Densité expérimentale:	$d_{\text{exp}} = 4.17 \pm 0.05$
Densité calculée:	$d_{\text{calc}} = 4.205$
Nombre de motifs SrFeF <sub>5</sub> par maille:	$Z = 8$

TABLEAU III

DISTANCES RÉCULAIRES DE SrFeF<sub>5</sub> EN Å

$d_{\text{obs}}$ (Å)	$d_{\text{calc}}$ (Å)	$hkl$	$I/I_0$	$d_{\text{obs}}$ (Å)	$d_{\text{calc}}$ (Å)	$hkl$	$I/I_0$
4.01	4.036	1 1 2	27		1.973	1 3 $\bar{4}$	
3.63	{ 3.659	0 0 4	100	1.960	{ 1.966	2 3 1	48
	{ 3.638	1 1 $\bar{3}$			{ 1.955	2 3 $\bar{2}$	
3.51	3.537	0 2 1	89		1.921	2 0 6	12
3.36	3.379	1 0 $\bar{4}$	27	1.915	{ 1.909	1 2 6	
3.25	3.271	0 1 4	35		{ 1.885	2 3 $\bar{3}$	27
3.13	3.150	2 1 $\bar{1}$	21	1.875	{ 1.870	0 3 5	
3.03	{ 3.058	2 0 2	25	1.849	{ 1.853	2 2 5	29
	{ 3.042	2 1 1			{ 1.822	0 4 0	
2.98	3.008	1 2 $\bar{2}$	62		{ 1.817	2 1 7	
2.91	2.920	0 2 3	36	1.811	{ 1.814	0 2 7	14
2.81	2.820	2 1 2	31		{ 1.813	1 0 8	
2.75	2.765	2 1 $\bar{3}$	33		{ 1.808	0 4 1	
2.69	2.716	0 1 5	15		{ 1.780	1 3 5	
2.34	{ 2.343	3 0 0	25	1.772	{ 1.779	3 2 3	6
	{ 2.343	2 2 2			{ 1.776	3 0 $\bar{6}$	
2.268	2.279	1 3 $\bar{1}$	31		{ 1.775	0 1 8	
2.211	2.219	1 2 5	17	1.747	{ 1.758	4 0 0	14
	{ 2.150	2 2 4			{ 1.747	4 0 2	
2.133	{ 2.142	1 1 6	27		{ 1.707	0 4 3	
	{ 2.126	1 2 5		1.693	{ 1.699	3 2 5	12
2.045	2.053	1 3 3	23		{ 1.693	2 3 5	
	{ 2.024	0 3 4		1.625	{ 1.631	4 1 2	12
2.010	{ 2.018	2 2 4	33		{ 1.631	0 4 4	
	{ 2.017	2 1 $\bar{6}$		1.586	{ 1.588	4 2 $\bar{1}$	8
					{ 1.585	0 3 7	

Les données cristallographiques affinées sur monocristal sont reportées au Tableau II; elles permettent d'indexer parfaitement le spectre de poudre (Tableau III).

Le cristal est monté suivant l'axe  $b$ . Les intensités de 1141 réflexions d'indices  $hkl$  et  $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$  correspondant à des angles  $\theta \leq 30^\circ$  sont mesurées à l'aide d'un diffractomètre automatique ENRAF NONIUS CAD 3. La radiation utilisée correspond à la raie  $K\alpha$  du molybdène, isolée au moyen d'un monochromateur de graphite. Les corrections usuelles des facteurs de Lorentz-polarisation sont appliquées et, dans le stade ultime de l'affinement, l'effet d'extinction secondaire est corrigé. Les facteurs de diffusion des ions  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ , et  $\text{F}^-$  sont tirés des Tables Publiées par D. T. Cromer et J. T. Waber, les deux premiers ont été corrigés de l'effet de dispersion anormale (12). Les calculs sont effectués sur I.B.M. 360-44. Le programme

d'affinement des paramètres atomiques utilisant la matrice complète est une adaptation de celui de W. R. Busing, K. O. Martin, et H. A. Levy (13).

#### Détermination de la Structure

La fonction de Patterson tridimensionnelle  $P(u, v, w)$  a été calculée à partir des 700 réflexions les plus intenses. Une projection cotée de cette fonction sur le plan ( $uOw$ ) est donnée à la Fig. 1 a: l'aire des cercles est proportionnelle à l'intensité des pics. La plupart des pics de forte intensité sont en cote  $v = 0$  ou  $1/2$ ; cette remarque implique que les cations se trouvent dans des plans distants d'une demi-période suivant  $Oy$ . Le maximum important situé en  $u = 0$ ,  $v = 0.18$ ,  $w = 1/2$  permet de déterminer la cote  $y_0$  des plans cationiques parallèles à  $xOz$ :  $y_0 = 0.16$  et  $y_0 = 0.66$ . Les valeurs correspondantes, géométriquement

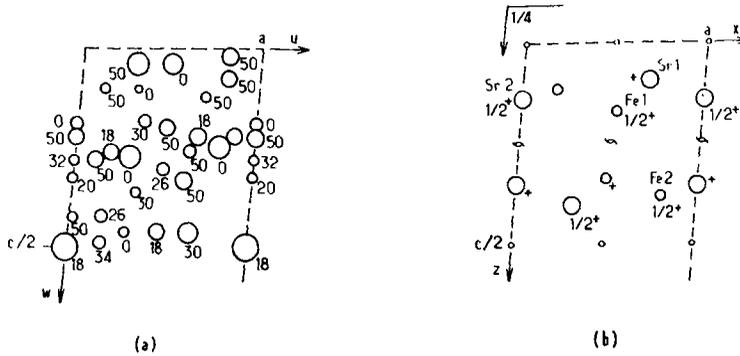


FIG. 1. (a) Projection de la fonction de Patterson (cotes  $v$  en centièmes de maille). (b) Hypothèse de départ pour les cations.

possibles, des coordonnées  $x$  et  $z$  des atomes de strontium et de fer sont données ci-dessous et représentées à la Fig. 1 b.

Atomes en $4e$	$x$	$y$	$z$
Sr <sub>1</sub>	0.69	0.16	0.09
Sr <sub>2</sub>	0.00	0.66	0.13
Fe <sub>1</sub>	0.52	0.66	0.17
Fe <sub>2</sub>	0.82	0.66	0.38

Ces valeurs expliquent notamment le pic très important observé en  $u = 0.31$ ;  $v = 1/2$ ;  $w = 0.04$  par suite de la superposition des vecteurs  $\overrightarrow{Sr_1Sr_2}$  et  $\overrightarrow{Fe_1Fe_2}$ . Les coordonnées proposées pour les cations conduisent à un facteur de reliabilité  $R = 0.20$  pour les 700 réflexions les plus intenses. Un calcul de densité électronique permet alors de localiser sans ambiguïté les dix atomes de fluor en position générale. Les coordonnées atomiques et le facteur d'agitation thermique isotrope de chaque atome sont ensuite affinés en utilisant la totalité de 1141 réflexions mesurées. Quelques cycles d'affinement permettent d'abaisser le facteur de reliabilité à la valeur  $R = 0.060$ . Un calcul de distances interatomiques montre alors que si la structure proposée est cohérente, elle présente cependant quelques anomalies en ce qui concerne les distances Fe-F. Ce résultat nous conduit à examiner la liste des facteurs de structure observés et calculés. La plupart des réflexions d'intensité élevée sont telles que  $F_c > F_o$ , montrant ainsi que le phénomène d'extinction secondaire entre en jeu. Le tracé du diagramme  $F_c/F_o = f(I_{obs})$  permet d'expliciter le phénomène selon une relation  $I_{corr} = I_{obs} (1 + gI_{obs})^2$  avec  $g = 1.136 \times 10^{-5}$ ;  $I_{corr}$  est l'intensité corrigée et  $I_{obs}$  est l'intensité observée.

On poursuit alors l'affinement avec les intensités corrigées et en affectant les atomes de fer et de strontium de facteurs d'agitation thermique anisotrope. Trois cycles d'affinement utilisant la matrice complète conduisent à un facteur de reliabilité  $R = 0.045$ .

Les distances fer-fluor deviennent alors beaucoup plus régulières. Les Tableaux IV, V,<sup>1</sup> et VI donnent respectivement les coordonnées réduites et les facteurs d'agitation thermique anisotrope, les facteurs de structure observés et

<sup>1</sup> Table V has been deposited as Document No. NAPS-02091 with the ASIS National Auxiliary Publications Service, c/o Microfiche Publications, 305 East 46th Street, New York, N. Y. 10017. A copy may be secured by citing the document number and by remitting \$— for photocopies or for microfiche. Advance payment is required. Make check or money order payable to ASIS-NAPS.

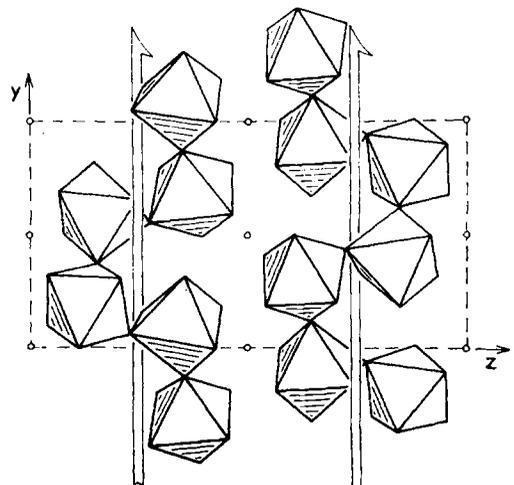


FIG. 2. Représentation idéalisée des chaînes  $(FeF_5)_n^{2-}$ .

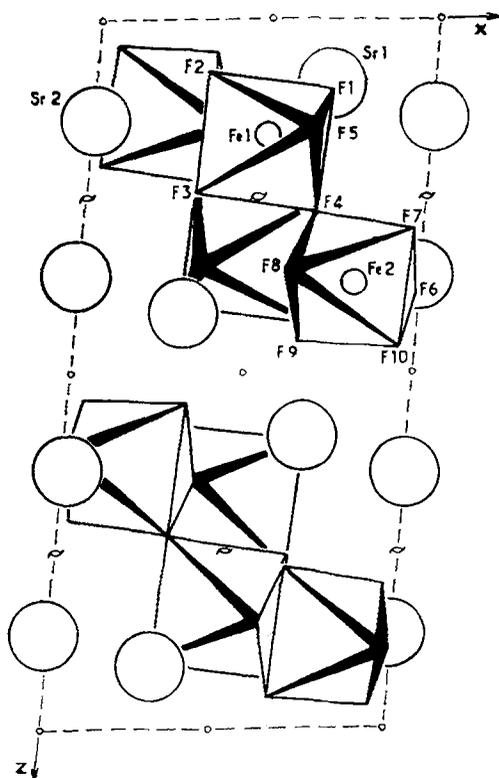
TABLEAU IV

COORDONNÉES RÉDUITES ET FACTEURS D'AGITATION THERMIQUE ANISOTROPE (LA DÉVIATION STANDARD EST DONNÉE PAR LES CHIFFRES ENTRE PARENTHÈSES SUIVANT LES COORDONNÉES)

Atomes en 4e	x	y	z	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
Sr <sub>1</sub>	0.6896 (2)	0.1536 (2)	0.08726 (8)	0.0051 (2)	0.0025 (2)	0.00048 (5)	0.0002 (2)	0.00026 (8)	-0.00006 (8)
Sr <sub>2</sub>	0.0015 (2)	0.6529 (2)	0.13736 (8)	0.0045 (2)	0.0032 (2)	0.00055 (5)	-0.0004 (2)	0.00018 (8)	0.00011 (8)
Fe <sub>1</sub>	0.5062 (3)	0.6185 (2)	0.1614 (1)	0.0031 (3)	0.0014 (3)	0.00029 (7)	0.0003 (3)	0.0002 (1)	-0.0001 (1)
Fe <sub>2</sub>	0.8107 (3)	0.6832 (2)	0.3750 (1)	0.0028 (4)	0.0018 (3)	0.00030 (8)	0.0000 (3)	0.0001 (1)	0.0003 (1)
F <sub>1</sub>	0.6977 (3)	0.4951 (12)	0.0986 (6)	0.0071	0.0066	0.0016	0.0	0.0003	0.0
F <sub>2</sub>	0.3190 (12)	0.6978 (12)	0.0678 (6)	0.0053	0.0050	0.0012	0.0	0.0002	0.0
F <sub>3</sub>	0.3145 (11)	0.6658 (12)	0.2414 (5)	0.0055	0.0051	0.0013	0.0	0.0002	0.0
F <sub>4</sub>	0.6797 (12)	0.5565 (12)	0.2715 (6)	0.0066	0.0061	0.0015	0.0	0.0003	0.0
F <sub>5</sub>	0.6548 (12)	0.8301 (12)	0.1503 (6)	0.0062	0.0057	0.0014	0.0	0.0003	0.0
F <sub>6</sub>	0.9935 (14)	0.4878 (13)	0.3911 (6)	0.0077	0.0072	0.0018	0.0	0.0003	0.0
F <sub>7</sub>	0.9680 (13)	0.8067 (12)	0.2936 (6)	0.0076	0.0071	0.0017	0.0	0.0003	0.0
F <sub>8</sub>	0.6113 (12)	0.8693 (12)	0.3540 (5)	0.0059	0.0055	0.0013	0.0	0.0002	0.0
F <sub>9</sub>	0.6531 (12)	0.5802 (12)	0.4594 (6)	0.0057	0.0053	0.0013	0.0	0.0002	0.0
F <sub>10</sub>	0.9559 (12)	0.8206 (12)	0.4657 (6)	0.0069	0.0064	0.0016	0.0	0.0003	0.0

TABLEAU VI  
PRINCIPALES DISTANCES INTERATOMIQUES EN Å (INCERTITUDE MAXIMALE  $\pm 0.01$  Å)

Environnement fluoré de Fe <sub>1</sub>		Distances fluor-fluor dans les octaédres	
Fe <sub>1</sub> -F <sub>1</sub>	1.93	F <sub>1</sub> -F <sub>2</sub>	3.05
Fe <sub>1</sub> -F <sub>2</sub>	1.91	F <sub>2</sub> -F <sub>3</sub>	2.57
Fe <sub>1</sub> -F <sub>3</sub>	1.91	F <sub>3</sub> -F <sub>4</sub>	2.70
Fe <sub>1</sub> -F <sub>4</sub>	1.99	F <sub>4</sub> -F <sub>1</sub>	2.60
Fe <sub>1</sub> -F <sub>5</sub>	1.88	F <sub>4</sub> -F <sub>9</sub>	2.79
Fe <sub>1</sub> -F <sub>8</sub> (7)	1.99	F <sub>5</sub> -F <sub>1</sub>	2.58
Environnement fluoré de Fe <sub>2</sub>		F <sub>5</sub> -F <sub>4</sub>	2.67
Fe <sub>2</sub> -F <sub>4</sub>	1.94	F <sub>5</sub> -F <sub>3</sub>	3.10
Fe <sub>2</sub> -F <sub>7</sub>	1.93	F <sub>5</sub> -F <sub>2</sub>	2.73
Fe <sub>2</sub> -F <sub>6</sub>	1.92	F <sub>8</sub> -F <sub>4</sub>	2.65
Fe <sub>2</sub> -F <sub>10</sub>	1.89	F <sub>8</sub> -F <sub>9</sub>	2.62
Fe <sub>2</sub> -F <sub>9</sub>	1.90	F <sub>8</sub> -F <sub>10</sub>	2.83
Fe <sub>2</sub> -F <sub>8</sub>	1.96	F <sub>8</sub> -F <sub>7</sub>	2.79
Environnement fluoré de Sr <sub>1</sub> et Sr <sub>2</sub>		F <sub>7</sub> -F <sub>4</sub>	2.73
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>9</sub>	2.53	F <sub>6</sub> -F <sub>7</sub>	2.73
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>2</sub> (7)	2.52	F <sub>6</sub> -F <sub>10</sub>	2.69
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>7</sub> (5)	3.06	F <sub>6</sub> -F <sub>4</sub>	2.74
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>3</sub> (4)	2.52	F <sub>6</sub> -F <sub>9</sub>	2.77
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>8</sub> (4)	2.84	F <sub>10</sub> -F <sub>7</sub>	2.54
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>9</sub> (4)	2.51	F <sub>9</sub> -F <sub>10</sub>	2.76
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>1</sub> (2)	2.49	F <sub>8</sub> (7)-F <sub>1</sub>	2.58
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>10</sub> (5)	2.95	F <sub>8</sub> (7)-F <sub>2</sub>	2.74
Sr <sub>1</sub> (2)-F <sub>6</sub> (5)	2.54	F <sub>8</sub> (7)-F <sub>3</sub>	2.58
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>10</sub>	2.52	F <sub>8</sub> (7)-F <sub>4</sub>	2.88
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>5</sub> (6)	2.54	Distances intercationiques	
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>10</sub> (1)	2.89	Sr <sub>1</sub> (2)-Sr <sub>2</sub> (3)	4.29
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>7</sub> (6)	2.56	Sr <sub>1</sub> (2)-Sr <sub>1</sub> (4)	4.18
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>1</sub> (6)	2.45	Sr <sub>2</sub> -Sr <sub>2</sub>	4.92
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>7</sub> (1)	2.72	Fe <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub> (7)	4.57
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>2</sub> (3)	2.57	Fe <sub>2</sub> -Fe <sub>1</sub>	3.66
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>3</sub> (3)	2.71	Principaux angles interatomiques en degrés (incertitude maximale $\pm 0.1^\circ$ )	
Sr <sub>2</sub> (3)-F <sub>6</sub> (5)	2.48	F <sub>8</sub> (7)-Fe <sub>1</sub> -F <sub>4</sub>	92.7
Principaux angles interatomiques en degrés (incertitude maximale $\pm 0.1^\circ$ )		F <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub> -F <sub>2</sub>	105.5
F <sub>8</sub> (7)-Fe <sub>1</sub> -F <sub>4</sub>	92.7	F <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub> -F <sub>4</sub>	83.0
Fe <sub>1</sub> -F <sub>4</sub> -Fe <sub>2</sub>	137.9	F <sub>7</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>8</sub>	91.5
F <sub>8</sub> (7)-F <sub>4</sub> -F <sub>8</sub>	121.8	F <sub>8</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>9</sub>	85.4
F <sub>4</sub> (7)-F <sub>8</sub> (7)-F <sub>4</sub>	108.9	F <sub>9</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>6</sub>	93.1
F <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub> -F <sub>8</sub> (7)	82.2	F <sub>6</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>7</sub>	90.2
F <sub>8</sub> (7)-Fe <sub>1</sub> -F <sub>3</sub>	82.7	F <sub>4</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>7</sub>	89.7
F <sub>3</sub> -Fe <sub>1</sub> -F <sub>5</sub>	109.8	F <sub>1</sub> -Fe <sub>2</sub> -F <sub>10</sub>	83.4
F <sub>5</sub> -Fe <sub>1</sub> -F <sub>1</sub>	85.3		
Remarque: les coordonnées des atomes suivis d'un chiffre entre parenthèses se déduisent de celles du tableau IV par les translations suivantes:			
(1) = 2 + x, 2 - y, 1 - z	(5) = 2 - x, 1 - y, 1 - z		
(2) = x, 1/2 - y, 1/2 + z	(6) = x, 3/2 - y, 1/2 + z		
(3) = 1 + x, 3/2 - y, 1/2 + z	(7) = 1 - x, y - 1/2, 1/2 - z		
(4) = 1 - x, 1 - y, 1 - z	(8) = 3/2 - x, 2 - y, 1 - z		

FIG. 3. Projection du réseau sur le plan  $xOz$ .

calculés, les principales distances et angles interatomiques.

### Description de la Structure

Le fer est entouré d'octaèdres de fluor. Les octaèdres  $(FeF_6)^{3-}$  mettent en commun deux sommets adjacents appartenant à une même arête pour former des chaînes hélicoïdales infinies dont l'axe est parallèle à la direction  $Oy$ ; elles peuvent se formuler  $(FeF_5)_n^{2n-}$ . La Fig. 2 donne une représentation idéalisée de ces chaînes; leur symétrie est celle d'un axe  $2_1$ , elles se développent suivant deux sens de

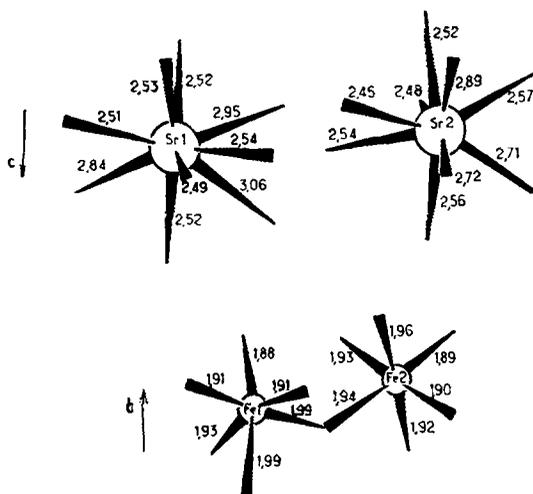


FIG. 4. Environnement fluoré des cations (les longueurs des liaisons sont données en Å).

rotation différents: une hélice droite dont l'axe a pour trace  $x = 1/2$ ,  $z = 1/4$  sur le plan  $xOz$  et une hélice gauche pour laquelle celle-ci est en  $x = 1/2$  et  $z = 3/4$ , l'une se déduisant de l'autre par un centre de symétrie. Les atomes de strontium sont entourés de neuf atomes de fluor, ils se placent entre trois chaînes voisines et assurent ainsi la cohésion de l'ensemble (Fig. 3). La Fig. 4 représente les environnements fluorés des atomes de strontium et de fer.

### Discussion

Les octaèdres fluorés sont presque réguliers; la distance moyenne Fe-F = 1.93 Å est légèrement plus courte que celle que l'on peut calculer d'après les valeurs des rayons ioniques de  $Fe^{3+}$  et  $F^-$  données par R. D. Shannon et C. T. Prewitt ( $r_{Fe^{3+}} = 0.64$  Å,  $r_{F^-} = 1.33$  Å) (14). La distance moyenne Sr-F = 2.63 Å est très légèrement inférieure à la valeur déduite du rayon ionique du strontium en coordinence dix

TABLEAU VII

PARAMÈTRES DES PHASES AYANT MÊME STRUCTURE QUE SrFeF<sub>5</sub>

	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	$\beta$
SrTiF <sub>5</sub> (3)	7.099 ± 0.006 Å	7.280 ± 0.006 Å	14.787 ± 0.008 Å	96.56 ± 0.25°
SrVF <sub>5</sub> (4)	7.01 Å	7.19 Å	14.517 Å	95.3°
SrFeF <sub>5</sub> (7)	7.062 ± 0.001 Å	7.289 ± 0.001 Å	14.704 ± 0.001 Å	95.40 ± 0.05°
SrCoF <sub>5</sub> (6)	6.993 ± 0.004 Å	7.232 ± 0.004 Å	14.602 ± 0.007 Å	94.77 ± 0.25°
BaInF <sub>5</sub> (8)	7.593 ± 0.005 Å	7.718 ± 0.004 Å	15.575 ± 0.008 Å	95.6 ± 0.5°

telles que la proposent les auteurs précédents ( $r_{Sr}^{2+} = 1.32 \text{ \AA}$ ).

L'ossature du réseau est donc constituée de chaînes d'octaèdres  $(\text{TF}_6)_n^{2n-}$  comme dans le cas de  $\text{CaCrF}_5$  et de  $\text{BaFeF}_5$ . Il y a cependant une différence capitale: si les octaèdres  $(\text{CrF}_6)^{3-}$  ou  $(\text{FeF}_6)^{3-}$  sont liés par des sommets opposés, en revanche dans le cas de  $\text{SrFeF}_5$  les octaèdres mettent en commun deux sommets appartenant à une même arête. Un tel type de chaînes dans lesquelles les octaèdres sont liés par les anions adjacents à une même arête (fluor en cis) se rencontre dans le cas de l'oxyfluorure  $\text{K}_2\text{VO}_2\text{F}_3$  (R. R. Ryan, S. H. Martin, et M. J. Reissfeld) (15); mais dans cette phase, contrairement à ce qui se passe pour  $\text{SrFeF}_5$ , les cations intérieurs à la chaîne sont situés sensiblement dans une même plan.

Les phases  $\text{SrTiF}_5$ ,  $\text{SrVF}_5$ ,  $\text{SrCoF}_5$  et  $\text{BaInF}_5$  ont même structure que  $\text{SrFeF}_5$ . Le Tableau VII donne les paramètres des diverses phases étudiées.

### Bibliographie

1. J. RAVEZ ET P. HAGENMULLER, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **7**, 2545 (1967).
2. J. RAVEZ, J. GRANNEC, J. PORTIER, ET P. HAGENMULLER, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **1**, 64 (1970).
3. J. RAVEZ, M. VASSILIADIS, ET P. HAGENMULLER, *C.R. Acad. Sci.* **268**, 1876 (1969).
4. J. C. CRETENET, *C.R. Acad. Sci.* **268**, 945 (1969).
5. D. DUMORA ET J. RAVEZ, *C.R. Acad. Sci.* **268**, 1246 (1969).
6. J. RAVEZ, J. GRANNEC, ET R. VON DER MÜHLL, *C.R. Acad. Sci.* **272**, 1042 (1971).
7. J. RAVEZ, J. VIOLLET, R. DE PAPE, ET P. HAGENMULLER, *Bull. Soc. Chim. Fr.* **4**, 1325 (1967).
8. J. GRANNEC ET J. RAVEZ, *C.R. Acad. Sci.* **270**, 2059 (1970).
9. J. RAVEZ, M. DARRIET, R. VON DER MÜHLL, ET P. HAGENMULLER, *J. Solid State Chem.* **3**, 234 (1971).
10. D. DUMORA, R. VON DER MÜHLL, ET J. RAVEZ, *Mater. Res. Bull.* **6**, 561 (1971).
11. R. VON DER MÜHLL, S. ANDERSSON, ET J. GALY, *Acta Crystallogr.* **B27**, 2345 (1971).
12. D. T. CROMER ET J. T. WABER, *Acta Crystallogr.* **18**, 104 (1965).
13. W. R. BUSING, K. O. MARTIN, ET H. A. LEVY, "A Fortran Crystallographic Least-Square Program," ORNL-TM-305, Oak Ridge, Tennessee, 1962.
14. R. D. SHANNON ET C. T. PREWITT, *Acta Crystallogr.* **B25**, 925 (1969).
15. R. R. RYAN, S. H. MASTIN, ET M. J. REISSFELD, *Acta Crystallogr.* **B27**, 1270 (1971).