

## Structure cristalline du polyphosphate de baryum-potassium, $\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$

par C. MARTIN, I. TORDJMAN et A. DURIF

Laboratoire des Rayons X, Grenoble\*

(Reçu le 12 decembre 1973)

### Abstract

$\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$  is monoclinic, space group  $Pc$ , with cell constants  $a = 8.646(2)$ ;  $b = 7.329(1)$ ;  $c = 13.884(2)$  Å,  $\beta = 129.17(1)^\circ$  and  $Z = 2$ . The crystal structure has been determined from Picker automatic diffractometer data using Patterson and Fourier syntheses and refined by a least-squares method. The final  $R$  value is 0.053. This compound is a long-chain polyphosphate. The period of the chain (ten tetrahedra) is the longest ever observed in this class of compounds.

### Auszug

Die Kristallstruktur von  $\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$  wurde auf Grund der mit einem automatischen Diffraktometer gemessenen Intensitäten mittels Patterson- und Fourier-Synthesen bestimmt und bis zu  $R = 0,053$  verfeinert. Die Gitterkonstanten sind  $a = 8,646(2)$ ,  $b = 7,329(1)$ ,  $c = 13,884(2)$  Å,  $\beta = 129,17(1)^\circ$ ,  $Z = 2$ . Raumgruppe ist  $Pc$ . Die Verbindung ist ein Langketten-Polyphosphat; sie hat mit 10 Tetraedern in der Zelle die längste bisher beobachtete Kettenperiode.

### Résumé

Le polyphosphate de baryum-potassium  $\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$  est monoclinique avec une maille:  $a = 8,646(2)$ ,  $b = 7,329(1)$ ,  $c = 13,884(2)$  Å,  $\beta = 129,17^\circ(1)$  renfermant deux unités formulaires. Le groupe spatial est  $Pc$ . La structure cristalline a été déterminée à l'aide de données recueillies sur un diffractomètre automatique Picker. La valeur finale de  $R$  est 0,053. Ce composé est un polyphosphate à longues chaînes. La période de la chaîne (dix tétraèdres) est la plus longue jamais observée dans le domaine des polyphosphates.

Le polyphosphate mixte de baryum-potassium  $\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$  est le seul composé défini qui apparaît dans l'étude<sup>1</sup> du diagramme d'équilibre  $\text{Ba}(\text{PO}_3)_2$ — $\text{KPO}_3$ .

\* 38042 Grenoble-cédex, France, B. P. 166, Centre de Tri.

<sup>1</sup> C. MARTIN, Contribution à l'étude de phosphates mixtes de strontium, baryum et de métaux alcalins. Thèse-Université de Grenoble (1972).

### I. Préparation

Les cristaux s'obtiennent facilement en calcinant à 480°C durant 24 heures 1 gramme de carbonate de baryum et 5 grammes de carbonate de potassium additionnés à 10 cm<sup>3</sup> d'acide orthophosphorique à 85<sup>0</sup>/<sub>0</sub>. Les cristaux obtenus sont des plaquettes épaisses à contours hexagonaux.

### II. Données cristallographiques

L'étude d'un monocristal montre que ce composé est monoclinique. Les seules extinctions observées:  $h0l$  n'existent qu'avec  $l = 2n$  conduisent à deux groupes spatiaux possibles:  $Pc$  ou  $P2/c$ . Après affinement par une méthode de moindres carrés des données angulaires recueillies à l'aide d'un diffractogramme effectué à vitesse [ $1/8^\circ$  ( $\theta$ )/minute] en utilisant la longueur d'onde du cuivre  $K\alpha$ , on est conduit aux dimensions suivantes pour la maille:  $a = 8,646(2)$  Å;  $b = 7,329(2)$ ;  $c = 13,833(5)$ ;  $\beta = 129,16(5)^\circ$ . Il y a deux unités  $Ba_2K(PO_3)_5$  par maille\*.

### III. Données expérimentales

Le cristal choisi était approximativement un cube ( $0,08 \times 0,08 \times 0,10$  mm). 3563 réflexions indépendantes répondant au critère  $\sigma(I)/I < 0,4$  ont été retenues. Toutes les mesures d'intensité ont été effectuées à l'aide d'un diffractomètre automatique »Picker« utilisant la longueur d'onde du molybdène. La technique de mesure était identique à celle déjà utilisée par MARTIN et MITSCHLER<sup>2</sup> lors de la détermination de la structure cristalline du trimétaphosphate de baryum-sodium.

### IV. Détermination de la structure

L'étude de la fonction de Patterson permet de localiser les quatre atomes de baryum en position centrosymétrique,  $4g$ , du groupe  $P2/c$ . Une synthèse de Fourier, calculée à partir des facteurs de structure des atomes de Ba, révèle un atome de phosphore à proximité de l'axe 2; les vecteurs P—Ba sont d'ailleurs confirmés de façon certaine sur les sections de Patterson. Cet axe 2 induit à partir du P, un deuxième atome de phosphore P'; P étant trop proche de l'axe 2, la liaison

\* La liste des facteurs de structure calculés et observés peut être obtenue sur simple demande aux auteurs.

<sup>2</sup> C. MARTIN et A. MITSCHLER, Structure cristalline du trimétaphosphate de baryum-sodium:  $BaN_2P_3O_9$ . Acta Crystallogr. B **28** (1972) 2348—2352.

P—P' se révèle alors beaucoup trop courte: nous sommes ainsi amenés à rejeter le groupe  $P2/c$  et à travailler dans le groupe non centrosymétrique  $Pc$ . D'autres considérations stériques du même genre, appuyées par l'étude des sections de Patterson viennent confirmer ce choix et nous permettent de plus, de localiser sans ambiguïté trois atomes (K, P<sub>2</sub> et P<sub>3</sub>). Les synthèses de Fourier, réalisées à partir des phases des seules contributions des atomes de baryum contiennent donc la structure réelle et son énantiomorphe; mais en y ajoutant celles des autres atomes déjà localisés, on réduit, dans des proportions notables, la pseudo-symétrie et cela d'autant plus, qu'un premier affinement écarte quelque peu les atomes de baryum de leurs positions initiales centrosymétriques. Sur les sections de Fourier ainsi obtenues, on peut faire la distinction entre atomes et pseudo-atomes et révéler la totalité de la structure.

Tableau 1. *Coordonnées atomiques pour Ba<sub>2</sub>K(PO<sub>3</sub>)<sub>5</sub> dans le groupe spatial Pc.*  
Les écarts standards sont donnés entre parenthèses

Atome	X	Y	Z
Ba(1)	0,7500	0,16205(7)	0
Ba(2)	1614(1)	12709(7)	0,91089(6)
K	1745(3)	6455(2)	1204(2)
P(1)	7589(4)	6598(3)	1024(2)
P(2)	7438(3)	5510(3)	3058(2)
P(3)	6562(3)	1565(3)	2423(2)
P(4)	2988(3)	0999(3)	2281(2)
P(5)	3219(3)	3509(3)	4010(2)
O <sub>i</sub> (12)	6764(14)	6103(16)	1755(8)
O <sub>i</sub> (23)	7809(10)	3385(10)	3075(9)
O <sub>i</sub> (34)	4652(16)	1991(13)	2336(12)
O <sub>i</sub> (45)	2253(12)	2641(11)	2627(7)
O <sub>i</sub> (51)	5549(11)	2885(14)	4727(7)
O <sub>e</sub> (11)	8851(13)	8265(11)	1526(9)
O <sub>e</sub> (12)	8473(14)	4941(13)	0941(9)
O <sub>e</sub> (21)	9385(11)	6245(10)	4109(7)
O <sub>e</sub> (22)	5728(13)	5877(12)	3023(8)
O <sub>e</sub> (31)	7742(12)	0034(12)	3285(8)
O <sub>e</sub> (32)	5793(15)	1473(13)	1116(8)
O <sub>e</sub> (41)	1312(13)	0527(12)	0949(7)
O <sub>e</sub> (42)	3759(11)	—0497(10)	3199(6)
O <sub>e</sub> (51)	2396(13)	2403(12)	4501(8)
O <sub>e</sub> (52)	3034(21)	5518(23)	3915(12)

Tableau 2. *Facteurs d'agitation thermique*

	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
Ba(1)	0,00715(7)	0,00591(9)	0,00217(3)	-0,00086(8)	0,00281(2)	-0,00044(3)
Ba(2)	756(8)	542(6)	261(3)	91(7)	334(4)	37(4)
K	40(36)	43(2)	287(11)	-114(18)	223(15)	- 47(13)
P(1)	54(3)	38(3)	157(12)	4(3)	199(18)	16(15)
P(2)	61(4)	41(3)	198(13)	- 4(3)	275(20)	- 8(16)
P(3)	46(3)	38(3)	169(13)	- 3(2)	198(18)	21(15)
P(4)	44(3)	39(3)	166(13)	- 1(2)	207(18)	21(15)
P(5)	41(3)	20(3)	164(12)	1(2)	203(17)	55(13)
O <sub>i</sub> (12)	114(18)	189(22)	29(6)	- 27(16)	33(9)	25(9)
O <sub>i</sub> (23)	30(10)	68(11)	49(6)	- 17(8)	24(7)	6(7)
O <sub>i</sub> (34)	154(20)	88(14)	105(11)	6(14)	115(14)	9(10)
O <sub>i</sub> (45)	100(14)	78(12)	26(5)	29(11)	34(7)	1(6)
O <sub>i</sub> (51)	56(12)	149(16)	21(5)	- 12(11)	118(6)	9(7)
O <sub>e</sub> (11)	103(15)	59(11)	44(6)	- 21(10)	40(9)	- 57(7)
O <sub>e</sub> (12)	133(18)	78(12)	48(6)	37(12)	50(9)	- 4(7)
O <sub>e</sub> (21)	72(12)	61(10)	33(5)	- 16(9)	33(7)	1(6)
O <sub>e</sub> (22)	105(15)	78(12)	50(6)	- 16(11)	59(9)	- 23(7)
O <sub>e</sub> (31)	108(15)	92(13)	36(6)	47(12)	43(8)	40(7)
O <sub>e</sub> (32)	135(18)	133(16)	28(5)	27(13)	50(9)	12(7)
O <sub>e</sub> (41)	124(16)	100(14)	18(4)	- 7(12)	31(7)	- 5(6)
O <sub>e</sub> (42)	73(12)	60(10)	21(4)	- 4(9)	20(6)	10(5)
O <sub>e</sub> (51)	124(16)	70(12)	42(6)	- 13(11)	55(9)	0(6)
O <sub>e</sub> (52)	255(12)	362(32)	73(11)	193(20)	111(12)	32(14)

Tableau 3. Distances interatomiques et angles des liaisons dans Ba<sub>2</sub>K(PO<sub>3</sub>)<sub>5</sub>

Ba(1)—O <sub>e</sub> (11)	2.963(10) Å	P(1)—O <sub>e</sub> (11)	1.487(10) Å
Ba(1)—O <sub>e</sub> (12)	2.637(10)	P(1)—O <sub>e</sub> (12)	1.478(10)
Ba(1)—O <sub>e</sub> (21)	3.029(10)	P(2)—O <sub>e</sub> (21)	1.466(10)
Ba(1)—O <sub>e</sub> (22)	2.817(10)	P(2)—O <sub>e</sub> (22)	1.473(10)
Ba(1)—O <sub>e</sub> (31)	2.795(10)		
Ba(1)—O <sub>e</sub> (32)	2.735(10)	P(3)—O <sub>e</sub> (31)	1.481(10) Å
Ba(1)—O <sub>e</sub> (41)	2.785(10)	P(3)—O <sub>e</sub> (32)	1.488(10)
Ba(1)—O <sub>e</sub> (42)	2.679(10)	P(4)—O <sub>e</sub> (41)	1.502(10)
		P(4)—O <sub>e</sub> (42)	1.483(10)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (11)	2.804(10) Å	P(5)—O <sub>e</sub> (51)	1.497(10)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (21)	2.652(10)	P(5)—O <sub>e</sub> (52)	1.478(10)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (31)	2.933(10)		
Ba(2)—O <sub>e</sub> (32)	2.850(10)	O <sub>i</sub> (12)—O <sub>i</sub> (23)	2.460(14) Å
Ba(2)—O <sub>e</sub> (41)	2.781(10)	O <sub>i</sub> (23)—O <sub>i</sub> (34)	2.451(14)
		O <sub>i</sub> (34)—O <sub>i</sub> (45)	2.398(14)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (42)	2.884(10)	O <sub>i</sub> (45)—O <sub>i</sub> (51)	2.482(14)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (51)	2.746(10)	O <sub>i</sub> (51)—O <sub>i</sub> (12)	2.418(14)
Ba(2)—O <sub>e</sub> (52)	2.746(10)	O <sub>i</sub> (12)—O <sub>e</sub> (11)	2.568(12)
		O <sub>i</sub> (12)—O <sub>e</sub> (12)	2.509(12)
K—O <sub>e</sub> (11)	3.104(10) Å	O <sub>i</sub> (12)—O <sub>e</sub> (21)	2.544(12)
K—O <sub>e</sub> (12)	2.840(10)	O <sub>i</sub> (12)—O <sub>e</sub> (22)	2.433(12)
K—O <sub>e</sub> (21)	3.007(10)		
K—O <sub>e</sub> (22)	2.725(10)	O <sub>i</sub> (23)—O <sub>e</sub> (21)	2.417(12) Å
K—O <sub>e</sub> (41)	3.002(10)	O <sub>i</sub> (23)—O <sub>e</sub> (22)	2.533(12)
		O <sub>i</sub> (23)—O <sub>e</sub> (31)	2.480(12)
K—O <sub>e</sub> (42)	3.099(10)	O <sub>i</sub> (23)—O <sub>e</sub> (32)	2.532(12)
K—O <sub>e</sub> (51)	2.879(10)	O <sub>i</sub> (34)—O <sub>e</sub> (31)	2.546(12)
K—O <sub>e</sub> (52)	3.254(10)	O <sub>i</sub> (34)—O <sub>e</sub> (32)	2.468(12)
		O <sub>i</sub> (34)—O <sub>e</sub> (41)	2.485(12)
P(1)—P(2)	3.016(4) Å	O <sub>i</sub> (34)—O <sub>e</sub> (42)	2.555(12)
P(2)—P(3)	2.978(4)	O <sub>i</sub> (45)—O <sub>e</sub> (41)	2.469(12)
P(3)—P(4)	2.998(4)		
P(4)—P(5)	2.929(4)	O <sub>i</sub> (45)—O <sub>e</sub> (42)	2.512(12) Å
P(5)—P(1)	2.958(4)	O <sub>i</sub> (45)—O <sub>e</sub> (51)	2.532(12)
		O <sub>i</sub> (45)—O <sub>e</sub> (52)	2.565(12)
P(1)—O <sub>i</sub> (12)	1.608(10) Å	O <sub>i</sub> (51)—O <sub>e</sub> (51)	2.564(12)
P(1)—O <sub>i</sub> (51)	1.576(10)	O <sub>i</sub> (51)—O <sub>e</sub> (52)	2.575(12)
P(2)—O <sub>i</sub> (12)	1.572(10)	O <sub>i</sub> (51)—O <sub>e</sub> (11)	2.468(12)
P(2)—O <sub>i</sub> (23)	1.587(10)	O <sub>i</sub> (51)—O <sub>e</sub> (12)	2.418(12)
P(3)—O <sub>i</sub> (23)	1.590(10)		
P(3)—O <sub>i</sub> (34)	1.608(10)	O <sub>e</sub> (11)—O <sub>e</sub> (12)	2.524(12) Å
P(4)—O <sub>i</sub> (34)	1.570(10)	O <sub>e</sub> (21)—O <sub>e</sub> (22)	2.514(12)
		O <sub>e</sub> (31)—O <sub>e</sub> (32)	2.574(12)
P(4)—O <sub>i</sub> (45)	1.571(10) Å	O <sub>e</sub> (41)—O <sub>e</sub> (42)	2.538(12)
P(5)—O <sub>i</sub> (45)	1.662(10)	O <sub>e</sub> (51)—O <sub>e</sub> (52)	2.591(12)
P(5)—O <sub>i</sub> (51)	1.651(10)		

Tableau 3 (suite)

O <sub>i</sub> (12)—P(1)—O <sub>e</sub> (11)	112.1(6)°	O <sub>i</sub> (51)—P(5)—O <sub>e</sub> (52)	110.6(6)°
O <sub>i</sub> (12)—P(1)—O <sub>e</sub> (12)	108.8(6)	O <sub>i</sub> (51)—P(1)—O <sub>i</sub> (12)	98.8(6)
O <sub>i</sub> (12)—P(2)—O <sub>e</sub> (21)	113.7(6)	O <sub>i</sub> (12)—P(2)—O <sub>i</sub> (23)	102.3(6)
O <sub>i</sub> (12)—P(2)—O <sub>e</sub> (22)	106.1(6)	O <sub>i</sub> (23)—P(3)—O <sub>i</sub> (34)	100.0(6)
O <sub>i</sub> (51)—P(1)—O <sub>e</sub> (11)	107.3(6)	O <sub>i</sub> (34)—P(4)—O <sub>i</sub> (45)	99.5(6)
O <sub>i</sub> (51)—P(1)—O <sub>e</sub> (12)	111.7(6)	O <sub>i</sub> (45)—P(5)—O <sub>i</sub> (51)	97.0(6)
O <sub>i</sub> (23)—P(2)—O <sub>e</sub> (21)	104.6(6)	O <sub>e</sub> (11)—P(1)—O <sub>e</sub> (12)	116.7(6)
O <sub>i</sub> (23)—P(2)—O <sub>e</sub> (22)	111.7(6)	O <sub>e</sub> (21)—P(2)—O <sub>e</sub> (22)	117.6(6)
O <sub>i</sub> (23)—P(3)—O <sub>e</sub> (31)	107.6(6)	O <sub>e</sub> (31)—P(3)—O <sub>e</sub> (32)	120.0(6)
O <sub>i</sub> (23)—P(3)—O <sub>e</sub> (32)	110.7(6)	O <sub>e</sub> (41)—P(4)—O <sub>e</sub> (42)	116.6(6)
O <sub>i</sub> (34)—P(3)—O <sub>e</sub> (31)	111.0(6)	O <sub>e</sub> (51)—P(5)—O <sub>e</sub> (52)	121.6(6)
O <sub>i</sub> (34)—P(3)—O <sub>e</sub> (32)	105.7(6)	P(1)—P(2)—P(3)	97.62(10)
O <sub>i</sub> (34)—P(4)—O <sub>e</sub> (41)	108.0(6)	P(2)—P(3)—P(4)	102.27(10)
O <sub>i</sub> (34)—P(4)—O <sub>e</sub> (42)	113.6(6)	P(3)—P(4)—P(5)	108.97(10)
O <sub>i</sub> (45)—P(4)—O <sub>e</sub> (41)	106.9(6)	P(4)—P(5)—P(1)	98.26(10)
O <sub>i</sub> (45)—P(4)—O <sub>e</sub> (42)	110.7(6)	P(5)—P(1)—P(2)	95.37(10)
O <sub>i</sub> (45)—P(5)—O <sub>e</sub> (51)	106.4(6)	P(1)—O <sub>i</sub> (12)—P(2)	143.1(3)
O <sub>i</sub> (45)—P(5)—O <sub>e</sub> (52)	109.4(6)	P(2)—O <sub>i</sub> (23)—P(3)	139.2(3)
O <sub>i</sub> (51)—P(5)—O <sub>e</sub> (51)	109.0(6)	P(3)—O <sub>i</sub> (34)—P(4)	141.2(3)
		P(4)—O <sub>i</sub> (45)—P(5)	129.9(3)
		P(5)—O <sub>i</sub> (51)—P(1)	132.9(3)

### V. Affinement

Quelques cycles d'affinement sur la totalité des 3563 réflexions utilisant la version bloc-diagonal du programme<sup>3</sup> SFLS 5 conduisent à un facteur de véracité  $R = 0,055$  sur les facteurs de structure et aux valeurs finales des coordonnées atomiques et des facteurs d'agitation thermique consignés dans les tableaux 1, 2 et 3.

### VI. Description de la structure

La structure de Ba<sub>2</sub>K(PO<sub>3</sub>)<sub>5</sub>, est bien celled'un polyphosphate caractérisée par l'existence de chaînes infinies (PO<sub>3</sub>)<sub>∞</sub> de période 10 tétraèdres. La maille est traversée par une seule chaîne, se développant dans son ensemble parallèlement à la direction **c**. La figure 1 donne une projection de cet arrangement suivant **b**, la figure 2 une vue perspective et la figure 3 un ensemble stéréoscopique. A l'intérieur

<sup>3</sup> C. T. PREWITT, SFLS 5, a FORTRAN-IV full matrix crystallographic least squares program (1966).

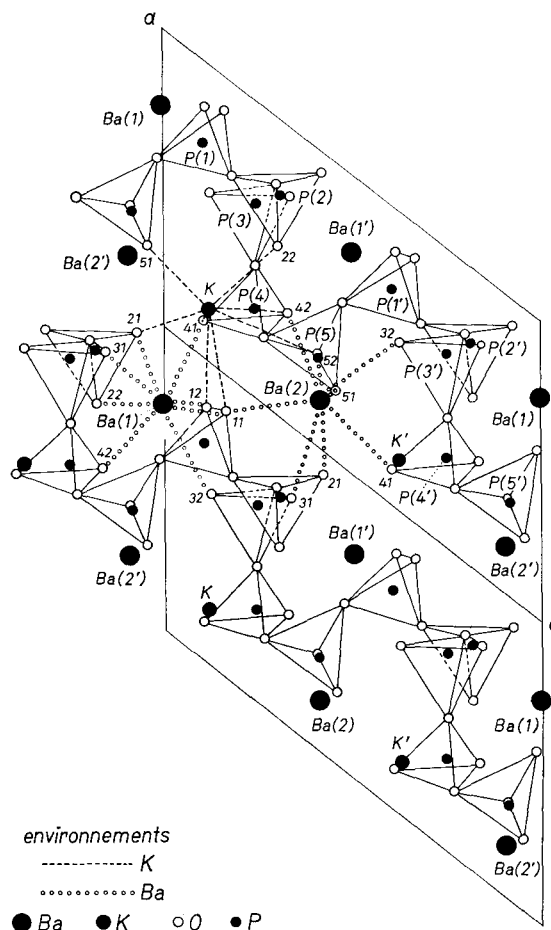


Fig. 1. Projection selon *b* de la structure cristalline de  $Ba_2K(PO_3)_5$

de chaque chaîne, nous avons deux pseudo-périodes de 5 tétraèdres  $PO_4$ , reliées entre elles par l'opération de symétrie du groupe.

Cette période de 10 tétraèdres est la plus longue observée à ce jour dans le domaine des polyphosphates. En effet, on connaît à ce jour des chaînes de période 2 tétraèdres dans  $\beta Ba(PO_3)_2$ <sup>4</sup>, 3 tétraèdres

<sup>4</sup> J. C. GRENIER, C. MARTIN, A. DURIF, D. TRANQUI et J. C. GUITEL, Une nouvelle forme du métaphosphate de baryum. Bull. Soc. franç. Minér. Cristallogr. **90** (1967) 24-31.

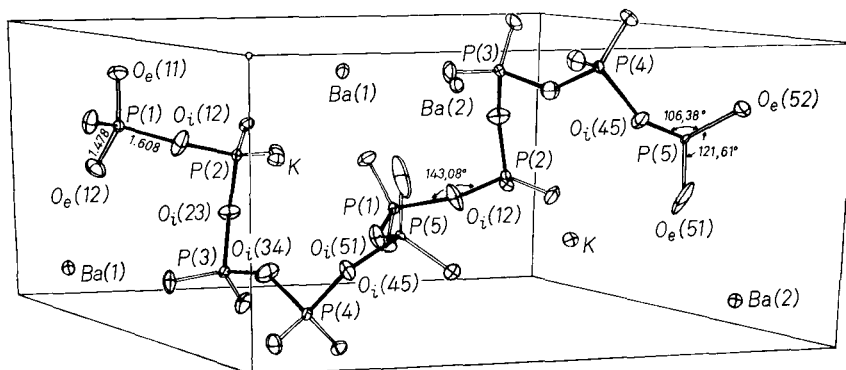


Fig. 2. Vue perspective de la structure de  $\text{Ba}_2\text{K}(\text{PO}_3)_5$ . L'axe  $c$  est le plus grand axe de base

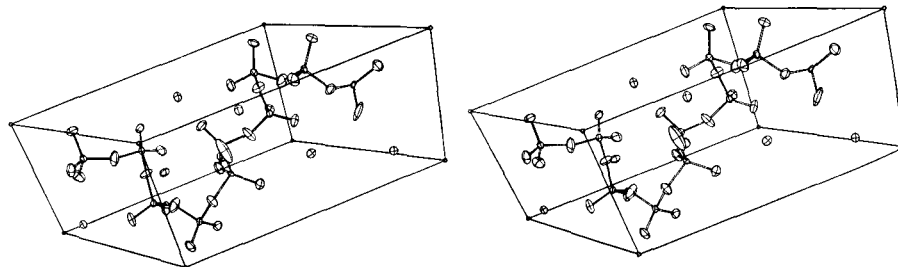


Fig. 3. Représentation stéréoscopique de la figure 1

dans  $\text{NiNH}_4(\text{PO}_3)_3$  <sup>5</sup>, 4 tétraèdres dans  $\text{Pb}(\text{PO}_3)_2$  <sup>6</sup>, 6 tétraèdres dans  $\text{CuLi}(\text{PO}_3)_3$  <sup>7</sup> et 8 tétraèdres dans  $\text{Mn}(\text{NH}_4)_2(\text{PO}_3)_4$  <sup>8</sup>. La valeur moyenne

<sup>5</sup> I. TORDJMAN, D. TRANQUI, A. DURIF et M. T. AVERBUCH-POUCHOT, Structure cristalline du métaphosphate de nickel-ammonium rhomboédrique:  $\text{NiNH}_4(\text{PO}_3)_3$ . Données cristallographiques sur les métaphosphates rhomboédriques du type  $\text{M}^{\text{II}}\text{NH}_4(\text{PO}_3)_3$  pour  $\text{M}^{\text{II}} = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Mg}$ . Bull. Soc. franç. Minér. Cristallogr. **91** (1968) 242–246.

<sup>6</sup> K. H. JOST, Die Struktur des Bleipolyphosphats  $\text{Pb}(\text{PO}_3)_2$ . Acta Crystallogr. **17** (1964) 1539–1543.

<sup>7</sup> M. LAÜGT, I. TORDJMAN, J. C. GUITEL et M. ROUDAUT, Structure cristalline du polyphosphate de cuivre-lithium  $\text{CuLi}(\text{PO}_3)_3$ . Acta Crystallogr. B **28** (1972) 2352–2358.

<sup>8</sup> DUC TRAN QUI, I. TORDJMAN, M. T. AVERBUCH-POUCHOT et G. BASSI, Structure cristalline du polyphosphate de manganèse ammonium. Bull. Soc. franç. Minér. Cristallogr. **93** (1970) 413–420.



des liaisons  $P-O_i$  est de 1,61 Å, alors que la moyenne des liaisons  $P-O_e$  est de 1,49 Å, caractéristiques que l'on retrouve bien dans tous les types répertoriés plus haut. Le tableau 3 donne les valeurs des liaisons et les angles de ces liaisons. Les atomes de potassium et de baryum ont des environnements assez peu réguliers formés uniquement des atomes d'oxygène extérieurs de la chaîne. L'atome de potassium a huit voisins à des distances comprises entre 2,84 et 3,25 Å. L'atome de baryum Ba(1) a aussi huit voisins à des distances comprises entre 2,64 et 3,03 Å de même que Ba(2) à des distances comprises entre 2,65 et 2,93 Å.