

SUPPLEMENTARY MATERIALS :
Evidence of Bi³⁺/M²⁺/O²⁻ infinite ribbons, n>3 O(Bi,M)₄
tetrahedra wide, in new oxyphosphates :

Part. 2: Crystal structure refinement of the n = 4, 5 and 6 cases

Supplementary materials.

Table 2: Atomic positions and isotropic equivalents of temperature factors for Bi_{15.32}Cd₁₀(PO₄)₁₀O₁₈

Atom	Site	Occ.	x	y	z	U or Ueq
Bi(1)	4h	1	0.30694(8)	0.2709(4)	1/2	0.0208(7)
Bi(2)	8i	1	0.30517(6)	0.7390(3)	0.62955(6)	0.0198(5)
Bi(3)	8i	1	0.19631(6)	0.7454(3)	0.76371(7)	0.0237(5)
Bi(4)	4h	1	0.43672(10)	0.7093(4)	1/2	0.0371(8)
Bi(5)	8i	0.334(9)	0.2972(6)	0.749(3)	0.8972(9)	0.014(3)
Cd(5)	8i	0.665(9)	0.2933(7)	0.747(4)	0.9017(11)	0.052(5)
Bi(6)	4g	1	0.04987(8)	1.2501(4)	1.00000	0.0259(7)
Cd(7)	8i	1	0.54976(16)	-0.2506(6)	0.1288(2)	0.0765(17)
P(2)	8i	1	0.4140(4)	0.2089(19)	0.3815(6)	0.036(4)
Op(21)	8i	1	0.3510(9)	0.249(4)	0.3694(11)	0.039(6)
Op(22)	8i	0.665(9)	0.428(2)	-0.043(7)	0.393(3)	0.045(13)
Op(23)	8i	0.665(9)	0.445(2)	0.279(8)	0.319(2)	0.057(12)
Op(24)	8i	0.665(9)	0.443(2)	0.335(8)	0.445(3)	0.087(16)
Op(25)	8i	0.334(9)	0.444(3)	0.442(10)	0.410(4)	0.016(16)
Op(26)	8i	0.334(9)	0.443(3)	0.143(11)	0.306(3)	0.021(17)
Op(27)	8i	0.334(9)	0.419(6)	-0.05(2)	0.426(6)	0.09(4)
P(1)	4g	1	0.3279(5)	0.253(4)	0	0.037(5)
Op(11)	8i	0.334(9)	0.297(3)	0.318(11)	0.063(3)	0.002(14)
Op(14)	4g	0.334(9)	0.319(4)	-0.059(14)	0	0.01(2)
Op(12)	4g	1	0.3915(14)	0.248(6)	0	0.052(10)
Op(13)	4g	0.665(9)	0.316(4)	0.521(15)	0	0.10(3)
Op(15)	8i	0.665(9)	0.298(2)	0.19(1)	0.064(3)	0.066(15)
P(3)	8i	1	0.4027(4)	0.749(2)	0.8051(5)	0.032(3)
Op(31)	8i	1	0.3657(12)	0.747(5)	0.7436(15)	0.072(8)
Op(35)	8i	1	0.390(2)	0.521(6)	0.840(2)	0.099(13)
Op(33)	8i	1	0.387(2)	0.972(6)	0.845(2)	0.113(15)
Op(34)	8i	1	0.4682(11)	0.751(5)	0.7962(14)	0.057(8)
Cd(a)	8i	0.661(8)	0.5302(4)	0.3034(16)	0.3138(5)	0.141(4)
Cd(b)	4f	0.339(17)	1/2	0	0.2901(10)	0.091(8)
O(1)	8i	1	0.2488(14)	0.500(3)	0.6976(10)	0.024(5)
O(2)	4f	1	1/2	0	0.066(2)	0.035(17)
O(3)	4e	1	1/2	-1/2	0.069(2)	0.035(17)
O(4)	8i	1	0.2520(12)	0.481(3)	0.4317(10)	0.016(4)
O(5)	8i	1	0.2507(14)	0.998(4)	0.8282(10)	0.026(8)
O(6)	4h	1	0.3499(16)	0.678(7)	1/2	0.056(11)

Table 2a: Anisotropic displacement parameters (in Å²) for Bi_{15.32}Cd₁₀(PO₄)₁₀O₁₈

Atom	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
Bi(1)	0.0235(10)	0.0164(11)	0.0226(12)	0.0032(11)	0.00000	0.00000
Bi(2)	0.0247(8)	0.0134(7)	0.0214(9)	-0.0013(7)	-0.0029(6)	0.0021(9)
Bi(3)	0.0313(8)	0.0172(7)	0.0224(9)	0.0004(8)	0.0040(7)	0.0008(9)
Bi(4)	0.0203(10)	0.0203(10)	0.0708(19)	-0.0002(14)	0.00000	0.00000
Bi(5)	0.017(5)	0.016(6)	0.008(6)	0.001(6)	0.001(4)	-0.007(6)
Cd(5)	0.066(10)	0.054(9)	0.035(9)	-0.003(10)	0.002(6)	0.013(8)
Bi(6)	0.0195(12)	0.0209(11)	0.0373(14)	0.0000(11)	0.00000	0.00000
Cd(7)	0.084(3)	0.038(2)	0.107(4)	0.005(2)	-0.064(2)	-0.005(2)
P(2)	0.034(6)	0.035(6)	0.039(7)	-0.005(6)	0.009(5)	0.003(6)
P(1)	0.023(8)	0.046(10)	0.043(10)	-0.007(11)	0.00000	0.00000
P(3)	0.035(5)	0.030(5)	0.031(6)	0.002(6)	-0.005(4)	0.002(6)
Cd(a)	0.142(7)	0.148(7)	0.133(8)	-0.047(6)	0.020(6)	-0.018(7)
Cd(b)	0.104(15)	0.074(10)	0.094(18)	-0.007(10)	0.00000	0.00000
O(2)	0.02(3)	0.017(16)	0.07(4)	-0.003(17)	0.00000	0.00000
O(3)	0.02(3)	0.030(18)	0.05(4)	0.021(18)	0.00000	0.00000
O(5)	0.018(11)	0.023(13)	0.037(16)	0.002(9)	-0.01(2)	0.001(13)

Table 1b: Atomic positions and isotropic equivalents of temperature factors for $\text{Bi}_{5.625}\text{Cu}_{2.062}(\text{PO}_4)_2\text{O}_6$

Atom	Site	Occ.	x	y	z	U or
Bi(1)	2e	1	0.8804(3)	0.25	0.39233(13)	0.0173(12)
Bi(2)	2e	1	1.1058(3)	-0.25	0.39212(13)	0.0167(12)
Bi(3)	2e	1	0.8887(3)	-0.25	0.50060(14)	0.0188(11)
Bi(4)	2e	1	-0.1232(3)	-0.25	0.28313(13)	0.0184(11)
Bi(5)	2e	1	-0.3796(3)	-0.75	-0.10166(14)	0.0198(13)
Bi(6)	2e	1	-0.6133(4)	-0.75	-0.00275(15)	0.0276(12)
Bi(7)	2e	1	0.0961(3)	-0.75	0.28220(15)	0.0217(12)
Bi(8)	2e	1	-0.4049(3)	-0.75	0.11395(14)	0.0171(11)
Bi(9)	2e	1	-0.1281(3)	-0.75	0.00954(13)	0.0205(11)
Bi(10)	2e	1	0.0618(3)	-0.25	0.16771(14)	0.0321(13)
Cu/Bi(11)	2e	0.81(1)/0.19	0.3855(9)	-0.75	0.2027(5)	0.067(5)
Cu(12)	2e	1	0.8997(11)	-0.75	0.1764(5)	0.042(5)
Cu/Bi(13)	2e	0.81(1)/0.19	-0.4245(8)	-0.25	0.2077(4)	0.034(3)
Bi(14)	2e	1	1.3722(3)	-0.25	0.49857(18)	0.0401(14)
O(1)	4f	1	0.997(3)	-0.508(6)	0.4457(15)	0.017(8)
O(2)	4f	1	-0.012(3)	-0.492(6)	0.3365(13)	0.014(8)
O(3)	4f	1	-0.497(4)	-0.502(6)	-0.0553(16)	0.026(9)
O(4)	4f	1	0.985(3)	-0.493(6)	0.2267(14)	0.024(9)
O(5)	4f	1	-0.517(3)	-0.495(6)	0.1623(14)	0.020(9)
O(6)	2e	1	1.200(7)	-0.25	0.495(3)	0.07(2)
O(7)	2e	1	-0.299(5)	-0.75	0.005(2)	0.028(14)
P(1)	2e	1	0.2863(19)	-1.25	0.2542(9)	0.024(7)
Op(11)	2e	1	0.198(6)	-1.25	0.295(2)	0.047(18)
Op(12)	2e	1	0.415(7)	-1.25	0.271(3)	0.07(2)
Op(13)	4f	1	0.265(5)	-1.469(8)	0.221(2)	0.070(15)
P(2)	2e	1	-0.821(2)	-0.75	-0.1046(11)	0.045(11)
Op(21)	2e	1	-0.696(5)	-0.75	-0.109(2)	0.030(15)
Op(22)	2e	1	-0.850(4)	-0.75	-0.0406(19)	0.016(12)
Op(23)	4f	1	-0.865(6)	-0.49637(9)	-0.125(3)	0.10(2)
P(3)	2e	1	0.676(3)	-0.25	0.6018(14)	0.073(15)
Op(31)	2e	1	0.812(7)	-0.25	0.610(3)	0.09(3)
Op(32)	4f	1	0.637(8)	-0.445(12)	0.567(4)	0.17(3)
Op(33)	2e	1	0.604(10)	-0.25	0.653(4)	0.12(4)
P(4)	2e	1	-0.319(2)	-0.75	0.2596(11)	0.035(7)
Op(41)	2e	1	-0.210(4)	-0.75	0.294(2)	0.021(13)
Op(42)	4f	1	-0.307(6)	-0.497(10)	0.225(3)	0.10(2)
Op(43)	2e	1	-0.421(14)	-0.75	0.285(6)	0.23(6)
P(5)	2e	1	-0.847(2)	-0.75	0.0869(9)	0.018(5)
Op(51)	2e	1	-0.712(5)	-0.75	0.089(2)	0.026(14)
Op(52)	4f	1	-0.900(3)	-0.520(6)	0.0615(15)	0.028(10)
Op(53)	2e	1	-0.895(5)	-0.75	0.144(2)	0.041(17)
P(6)	2e	1	0.335(3)	0.25	0.5914(15)	0.069(15)
Op(61)	2e	1	0.203(6)	0.25	0.609(2)	0.044(18)
Op(62)	4f	1	0.393(9)	0.25	0.642(4)	0.11(3)
Op(63)	4f	1	0.379(16)	0.50363(9)	0.571(7)	0.35(8)
Cu(a)	4f	0.62(2)	0.509(2)	-0.480(7)	0.6607(9)	0.129(13)
Cu(b)	2e	0.64(3)	0.551(3)	-0.75	0.6569(14)	0.129(13)
Cu(c)	2e	0.31(4)	0.458(6)	-0.25	0.646(3)	0.129(13)

Table 2b: Anisotropic displacement parameters (in Å²) for Bi_{5.62}Cu_{2.07}(PO₄)₃O₆

Atom	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
Bi(1)	0.018(2)	0.018(2)	0.015(2)	0	-0.0017(17)	0
Bi(2)	0.017(2)	0.015(2)	0.018(2)	0	0.0050(16)	0
Bi(3)	0.024(2)	0.0190(18)	0.014(2)	0	0.0017(17)	0
Bi(4)	0.019(2)	0.021(2)	0.0153(19)	0	-0.0027(16)	0
Bi(5)	0.023(2)	0.013(2)	0.024(2)	0	0.0055(18)	0
Bi(6)	0.020(2)	0.050(2)	0.0127(19)	0	0.0005(16)	0
Bi(7)	0.022(2)	0.020(2)	0.023(2)	0	0.0101(18)	0
Bi(8)	0.019(2)	0.0104(19)	0.022(2)	0	0.0028(16)	0
Bi(9)	0.019(2)	0.030(2)	0.013(2)	0	0.0000(15)	0
Bi(10)	0.021(2)	0.061(3)	0.014(2)	0	0.0030(16)	0
Cu(11)	0.058(8)	0.023(6)	0.120(11)	0	0.070(7)	0
Bi(11)	0.058(8)	0.023(6)	0.120(11)	0	0.070(7)	0
Cu(12)	0.044(9)	0.031(7)	0.052(9)	0	0.005(7)	0
Cu(13)	0.036(6)	0.021(5)	0.044(6)	0	-0.018(5)	0
Bi(13)	0.036(6)	0.021(5)	0.044(6)	0	-0.018(5)	0
Bi(14)	0.020(2)	0.060(3)	0.041(3)	0	-0.001(2)	0
P(1)	0.015(12)	0.044(15)	0.014(12)	0	0.013(10)	0
P(2)	0.027(16)	0.07(2)	0.038(18)	0	0.012(13)	0
P(3)	0.022(18)	0.15(4)	0.04(2)	0	0.013(16)	0
P(6)	0.030(19)	0.10(3)	0.08(3)	0	-0.025(19)	0
Cu(a)	0.055(13)	0.24(4)	0.087(12)	0	0.008(11)	0
Cu(b)	0.055(13)	0.24(4)	0.087(12)	0	0.008(11)	0
Cu(c)	0.055(13)	0.24(4)	0.087(12)	0	0.008(11)	0

Table 1c : Atomic coordinates for $\text{BiCu}_{0.11}\text{Cd}_{0.22}(\text{PO}_4)_{0.56}\text{O}_1$. The oxygen of the phosphate groups are not located.

Atom	site	occ.	x	y	z	B
Bi(1)	4b	1	0.61076(9)	1/4	0.89966	0.592(4)
Bi(2)	4b	1	0.38651(5)	1/4	0.00711(6)	0.592(4)
Bi(3)	4b	1	0.11339(6)	1/4	0.29551(6)	0.592(4)
Bi(4)	4b	1	0.60345(9)	1/4	0.11252(3)	0.592(4)
Bi(5)	4b	1	0.87360(5)	1/4	0.00522(6)	0.592(4)
Cd(6)	4b	1	0.91762(10)	1/4	0.18194(5)	0.673
Cd/Cu(7)	4b	0.14(6)/0.86	0.90749(12)	3/4	0.73259(6)	1.780(6)
Cd/Cu(t)	8c	0.41(6)	0.41457(11)	0.84788(18)	0.34209(5)	2.00
O(1)	4a	1	1/2	0	0.73601(30)	1.00
O(2)	4a	1	1/2	0	0.84877(39)	1.00
O(3)	4a	1	1/2	0	0.96651(25)	1.00
O(4)	4a	1	1/2	0	0.08242(29)	1.00
O(5)	4a	1	1/2	0	0.17412(4)	1.00
O(6)	4b	1	0.21435(5)	3/4	0.51811(4)	1.00
P(2)	4b	1	0.79512(27)	1/4	0.27578(13)	1.00
P(3)	4b	1	0.82892(47)	3/4	0.11238(19)	1.00
P(4)	4b	1	0.34815(47)	1/4	0.40619(24)	1.00