

Diffuse scattering in silver hypodiphosphate, $\text{Ag}_4(\text{P}_2\text{O}_6)$, probed by 3D ED

Autorzy

Vasyl Kinzhybalo
Jakub Wojciechowski
Dorota A. Kowalska
Vladyslav Maliuzhenko
Katarzyna A. Ślepokura

Rok wydania

2026

Czasopismo

Acta Crystallographica
Section C: Structural
Chemistry

Numer woluminu

82

Strony

277-284

DOI

10.1107/s2053229626005012

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

The crystal structure of silver hypodiphosphate, $\text{Ag}_4(\text{P}_2\text{O}_6)$, was determined using 3D ED. The average structure is hexagonal, described in the space group $P6_3/mcm$, and is isomorphous with the average structure of known $\text{Li}_4(\text{P}_2\text{S}_6)$. The silver cations form hexagonal atomic ring layers and the hypodiphosphate anions occupy channels that centre every hexagonal ring, with the P—P bond oriented along the unique c axis. The hypodiphosphate $\text{P}_2\text{O}_6^{4-}$ anions are disordered, with the P atoms occupying two positions having 50% occupancy each and with O atoms common for both positions of the anion. The O atoms form an octahedral coordination environment for the silver cations. The hypodiphosphate anions are stacked into columns along the unique axis direction. Neighbouring hypodiphosphate columns may have P—P bonds on the same (ferro-type) or on different (antiferro-type) levels. This correlated disorder manifests itself in diffuse scattering observed on hkl layers with uneven l values. Simulations based on an Ising-type model with geometric frustration align well with the experimental data, providing insight into the short-range anti-ferro-like arrangement of disordered hypodiphosphate anions.

Słowa kluczowe

powder diffraction, electron diffraction, silver hypodiphosphate, diffuse scattering, real structure, geometric frustration

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1107/S2053229626005012>

Plik został wygenerowany dnia 2026-08-20 16:13:37

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/OYREb6d>.