



STRUCTURAL SCIENCE
CRYSTAL ENGINEERING
MATERIALS

Volume 77 (2021)

Supporting information for article:

Novel aluminophosphate $\text{Na}_6[\text{Al}_3\text{P}_5\text{O}_{20}]$ with the original microporous crystal structure established in the study of a pseudomerohedric microtwin

Olga V. Yakubovich, Galina V. Kiriukhina, Anatoliy S. Volkov, Olga V. Dimitrova and Elena Yu. Borovikova

Table S1 Bond-valence data (I).

	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8	P9	P10	P11	A11	A12
O1								1.326					
O2	1.240 ×2↓												
O3	1.256 ×2↓												0.493
O4							1.244						
O5							1.238						
O6			1.155										
O7										1.304			
O8							1.338						
O9										1.151			
O10		1.104											
O11		1.321											
O12											1.288		
O13						1.021							
O14			1.294										
O15											1.064		
O16							1.044						
O17					1.118								
O18											1.267		
O19								1.05					
O20											1.167		
O21						1.316							
O22										1.204		0.51 ×2↓	
O23		1.253											0.572
O24		1.329											0.502
O25				1.214								0.55 ×2↓	
O26								1.246					0.5
O27								1.264					
O28								1.251					
O29					1.242								0.534
O30			1.192									0.511 ×2↓	
O31				1.175									
O32								1.289					
O33				1.196									
O34			1.196										
O35										1.225			
O36									1.194 ×2↓				
O37									1.217 ×2↓				
O38					1.223								
O39					1.304								
O40				1.170									0.499
Σ	4.99	5.01	4.84	4.76	4.89	4.85	4.86	4.91	4.82	4.88	4.79	3.14	3.10

The arrows ↓ show the doubling of the corresponding contributions due to the symmetry

Table S2 Bond-valence data (II).

	A13	A14	A15	A16	A17	A18	A19	Na1	Na2	Na3	Na4	Na5
O1												
O2	0.504 ×2↓									0.083		
O3										0.154		
O4	0.519 ×2↓											
O5	0.458 ×2↓									0.191		
O6							0.753 ×2↓					0.061
O7								0.337			0.187	
O8									0.315	0.181, 0.14		
O9					0.773 ×2↓							0.169
O10							0.787 ×2↓		0.151	0.093		
O11												0.309
O12												0.326
O13				0.813								
O14									0.316		0.156	
O15					0.792 ×2↓			0.137				
O16				0.835								
O17				0.803				0.146				
O18						0.547						
O19				0.777					0.181		0.099	
O20						0.549		0.14				
O21								0.292				
O22											0.185	0.157
O23									0.242			
O24										0.076		
O25											0.105	
O26									0.106			
O27			0.516 ×2↓									
O28			0.503 ×2↓									
O29												
O30												0.251
O31						0.48					0.169	
O32						0.513						
O33		0.446 ×2↓										
O34		0.54 ×2↓										
O35		0.564 ×2↓										
O36			0.489 ×2↓									
O37						0.503						
O38						0.495		0.214				
O39												
O40												
Σ	2.96	3.10	3.02	3.23	3.13	3.09	3.08	1.30	1.31	0.92	0.90	1.27

Table S3 Bond-valence data (III).

	Na6	Na7	Na8	Na9 72%	Na9' 28%	Na10 50%	Na11 50%	Na12 50%	Na13 50%	Na14 50%	Na15 50%	Σ
O1							0.275	0.271	0.294	0.411	0.082	1.99
O2										0.191		1.92
O3										0.133	0.186	2.06
O4							0.242			0.077	0.192	2.02
O5							0.147					1.96
O6			0.094									2.06
O7		0.177										2.01
O8												1.97
O9	0.075											2.17
O10												2.14
O11	0.216, 0.151											2.0
O12			0.168, 0.162									1.94
O13						0.105		0.137, 0.095	0.108			2.06
O14		0.162										1.93
O15				0.084	0.049							2.08
O16							0.172, 0.064			0.090	0.071	2.08
O17		0.081										2.15
O18				0.198	0.335							2.05
O19												2.11
O20			0.182									2.04
O21				0.302, 0.115	0.301							1.99
O22												2.06
O23												2.07
O24	0.153											2.06
O25												1.87
O26										0.098		1.90
O27						0.12		0.325	0.079			2.04
O28				0.069	0.07	0.141		0.082				1.93
O29		0.122									0.067	1.93
O30			0.075									2.03
O31			0.107									1.93
O32					0.098				0.173			1.92
O33		0.114	0.164									1.92
O34		0.221										1.96
O35	0.191											1.98
O36				0.199	0.218				0.141			1.96
O37				0.045		0.154			0.116			1.89
O38		0.068										2.0
O39						0.475	0.196	0.229	0.086	0.059	0.444	2.05
O40	0.182	0.12										1.97
Σ	0.97	1.07	0.88	1.01	1.07	1.00	1.10	1.14	1.00	1.00	1.04	