

**Etude par spectrométrie Mössbauer des alluaudites synthétiques,  
 $\text{Na}_2\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x(\text{PO}_4)_3$ , où  $x = 0.5, 1, 1.5$ , et 2**

Leila Rebbouh<sup>a</sup>, Raphaël P. Hermann<sup>a</sup>, Frédéric Hatert<sup>b</sup>, André-Mathieu Fransolet<sup>b</sup>, Gary J. Long<sup>c</sup>, Fernande Grandjean<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Institut de Physique, B5, Université de Liège, B-4000 Sart-Tilman, Belgique*

<sup>b</sup>*Laboratoire de Minéralogie, B18, Université de Liège, B-4000 Sart-Tilman, Belgique*

<sup>c</sup>*Department of Chemistry, University of Missouri-Rolla, Rolla, MO 65409-0010, USA*

La structure monoclinique de l'alluaudite consiste en des chaînes d'octaèdres partageant leurs arêtes empilés parallèlement à  $\{101\}$ . Ces chaînes sont formées par des paires d'octaèdres M(2) liés par des octaèdres M(1) fortement distordus. Des chaînes équivalentes sont connectées dans la direction b par des tétraèdres phosphates P(1) et P(2) pour former des feuillets perpendiculaires à  $[010]$ . Ces feuillets interconnectés produisent des canaux parallèles à l'axe c, canaux qui contiennent les sites X(1) cubique distordu et X(2) de coordination quatre, complètement occupés par Na. Les cations  $\text{Mn}^{2+}$  sont attendus sur le site M(1), alors que les cations  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{3+}$  sont attendus sur le site M(2).

Les spectres Mössbauer de  $\text{Na}_2\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x(\text{PO}_4)_3$ , où  $x = 0.5, 1, 1.5$ , et 2, ont été enregistrés entre 90 et 295 K et analysés avec un modèle qui tient compte des interactions entre voisins dans la structure alluaudite. Plus spécifiquement, les composantes  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{3+}$  ont été subdivisées en doublets résultant de la distribution des cations du manganèse et du fer parmi les premiers voisins du fer. Pour réduire le nombre de paramètres ajustables, les déplacements isomériques de tous les doublets  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{3+}$ , respectivement, ont été maintenus égaux. Les surfaces relatives des doublets  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{3+}$  sont en accord avec la composition chimique. La dépendance en température des déplacements isomériques et éclatements quadripolaires supporte l'adéquation du modèle. Une comparaison des paramètres hyperfins avec ceux obtenus pour les composés alluaudites,  $\text{NaMn}(\text{Fe}_{1-x}\text{In}_x)(\text{PO}_4)_3$  et  $\text{Na}_{1-x}\text{Li}_x\text{MnFe}_2(\text{PO}_4)_3$ , sera présentée.