

# Structural characterisation and optical properties of new alkaline earth phosphate $\text{CaMg}(\text{P}_4\text{O}_{12})$ and alkaline alumophosphate $\text{Cs}_3\text{Al}_4(\text{PO}_4)_5$

*Maierhaba Abudoureheman*<sup>a</sup>, *Jia Lv*<sup>a</sup>, *Menglin Zhu*<sup>b</sup>, *Hongheng Chen*<sup>b</sup>, *Bo Wei*<sup>a</sup>, *Lijun Jin*<sup>c</sup>, *Qun Jing*<sup>b,\*</sup>, *Zhaohui Chen*<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> State Key Laboratory of Chemistry and Utilization of Carbon Based Energy Resources, Xinjiang Key Laboratory of Clean Conversion and Chemical Engineering Process, School of Chemical Engineering and Technology, Xinjiang University, 777 Huarui Road, Urumqi 830017, China

<sup>b</sup> Xinjiang Key Laboratory of Solid State Physics and Devices, School of Physical Science and Technology, Xinjiang University, 777 Huarui Road, Urumqi 830017, China

<sup>c</sup> School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China

\* Corresponding authors, E-mails: [chenzhaohui686@sina.cn](mailto:chenzhaohui686@sina.cn), [qunjing@xju.edu.cn](mailto:qunjing@xju.edu.cn)

**Table S1.** The final coordinates ( $\times 10^4$ ) and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) of non-hydrogen atoms for  $\text{CaMg}(\text{P}_4\text{O}_{12})$  and  $\text{Cs}_3\text{Al}_4(\text{PO}_4)_5$ .  $U_{eq}$  is defined as one-third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor for each atom in the asymmetric unit.

Atom	$x$	$y$	$z$	$U_{eq}$	Wyck.
Ca1	0	4508(18)	2500	17	4e
Mg1	2500	2500	5000	12	4d
P1	1912(12)	29(16)	1966(16)	12	8f
P2	4950(13)	2775(16)	283(16)	12	8f
O1	4604(4)	1383(4)	825(4)	19	8f
O2	4175(4)	3831(4)	3279(4)	17	8f
O3	570(4)	2424(4)	4282(4)	16	8f
O4	1262(4)	1171(4)	546(4)	19	8f
O5	2122(4)	4177(4)	3279(4)	14	8f
O6	2309(4)	845(4)	3422(4)	17	8f

Atom	$x$	$y$	$z$	$U_{eq}$	Wyck.
Cs1	1361(5)	7200(7)	3292(3)	37	4e
Cs2	2648(5)	137(6)	193(4)	39	4e
Cs3	2838(5)	5068(6)	515(4)	37	4e
P1	224(16)	2957(2)	507(12)	18	4e
P2	1507(16)	2015(2)	3346(12)	20	4e
P3	2437(16)	8040(2)	1885(13)	18	4e
P4	5428(15)	2810(18)	495(12)	16	4e
P5	4054(16)	2938(18)	2612(12)	14	4e
Al1	1796(18)	1526(2)	1926(14)	15	4e
Al2	3943(18)	1188(2)	3967(14)	16	4e
Al3	217(17)	6295(2)	1049(13)	15	4e
Al4	5641(17)	1490(2)	1948(13)	13	4e
O1	945(5)	7771(7)	4667(4)	30	4e
O2	690(5)	4507(5)	911(4)	25	4e
O3	504(4)	2095(5)	4824(4)	21	4e
O4	933(5)	1670(5)	1019(4)	24	4e
O5	1625(5)	3603(7)	3626(4)	43	4e
O6	2559(5)	1041(7)	3672(4)	28	4e
O7	1131(4)	1914(7)	2498(4)	30	4e
O8	655(4)	1053(7)	3512(4)	26	4e
O9	2337(6)	5273(7)	7058(5)	53	4e
O10	1293(5)	7374(7)	1625(4)	34	4e
O11	7049(5)	2805(7)	3639(4)	45	4e
O12	6916(5)	2270(5)	2367(4)	25	4e
O13	5419(4)	4393(5)	850(4)	24	4e

---

O14	6427(5)	2555(7)	376(4)	31	4e
O15	4391(5)	2238(5)	4781(4)	28	4e
O16	5225(5)	1595(5)	1002(4)	25	4e
O17	2860(5)	2839(7)	2120(4)	29	4e
O18	4324(5)	1986(7)	3299(4)	33	4e
O19	4672(5)	2382(7)	2175(4)	32	4e
O20	4351(5)	4592(5)	2819(4)	37	4e

---

**Table S2.** Selected bond distances (Å) and bond angles (deg.) for CaMg(P<sub>4</sub>O<sub>12</sub>) and Cs<sub>3</sub>Al<sub>4</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>5</sub>.

Cs1-O1	3.033(5)	O5 <sup>3</sup> -Cs2-O16 <sup>4</sup>	108.05(13)
Cs1-O5	3.170(6)	O11-Cs2-O1 <sup>3</sup>	65.88(14)
Cs1-O6 <sup>2</sup>	3.637(5)	O11-Cs2-O3	117.51(13)
Cs1-O7 <sup>1</sup>	3.101(4)	O11-Cs2-O4	79.00(13)
Cs1-O8 <sup>2</sup>	3.538(5)	O11-Cs2-O5 <sup>3</sup>	154.19(16)
Cs1-O8 <sup>1</sup>	3.671(5)	O11-Cs2-O14 <sup>5</sup>	79.67(15)
Cs1-O10 <sup>1</sup>	3.274(5)	O11-Cs2-O15 <sup>4</sup>	134.95(13)
Cs1-O12 <sup>1</sup>	3.079(5)	O11-Cs2-O16 <sup>4</sup>	94.76(13)
Cs1-O14 <sup>1</sup>	3.116(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O1 <sup>3</sup>	68.55(13)
Cs2-O1 <sup>3</sup>	3.282(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O3	147.42(12)
Cs2-O3	3.594(4)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O4	151.97(12)
Cs2-O4	3.570(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O5 <sup>3</sup>	88.92(14)
Cs2-O5 <sup>3</sup>	3.058(6)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O15 <sup>4</sup>	89.96(12)
Cs2-O11	2.974(6)	O14 <sup>5</sup> -Cs2-O16 <sup>4</sup>	88.21(12)
Cs2-O14 <sup>4</sup>	3.058(5)	O15 <sup>4</sup> -Cs2-O3	94.42(11)
Cs2-O15 <sup>5</sup>	3.582(5)	O16 <sup>4</sup> -Cs2-O3	115.59(11)
Cs2-O16 <sup>5</sup>	3.432(5)	O16 <sup>4</sup> -Cs2-O4	111.48(11)
Cs3-O1 <sup>3</sup>	3.069(5)	O16 <sup>4</sup> -Cs2-O15 <sup>4</sup>	40.77(11)
Cs3-O2 <sup>6</sup>	3.316(5)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O2 <sup>6</sup>	66.84(12)
Cs3-O3 <sup>6</sup>	3.440(4)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O3 <sup>6</sup>	71.54(12)
Cs3-O6 <sup>8</sup>	3.652(5)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	82.90(12)
Cs3-O11	2.868(6)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O13 <sup>7</sup>	142.41(12)
Cs3-O13 <sup>7</sup>	3.319(4)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O14 <sup>5</sup>	70.61(13)
Cs3-O14 <sup>4</sup>	3.116(5)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O15 <sup>7</sup>	127.31(12)
Cs3-O15 <sup>7</sup>	3.587(5)	O1 <sup>3</sup> -Cs3-O17	120.65(12)
Cs3-O17	3.710(5)	O2 <sup>6</sup> -Cs3-O3 <sup>6</sup>	43.18(10)
P1-O1	1.481(5)	O2 <sup>6</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	116.34(11)
P1-O2	1.559(5)	O2 <sup>6</sup> -Cs3-O13 <sup>7</sup>	150.22(11)
P1-O3	1.544(4)	O2 <sup>6</sup> -Cs3-O15 <sup>7</sup>	135.78(11)
P1-O4	1.552(5)	O2 <sup>6</sup> -Cs3-O17	55.48(10)
P2-O5	1.466(6)	O3 <sup>6</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	75.04(10)
P2-O6	1.552(5)	O3 <sup>6</sup> -Cs3-O15 <sup>7</sup>	97.05(10)
P2-O7	1.556(5)	O3 <sup>6</sup> -Cs3-O17	75.86(10)
P2-O8	1.553(5)	O6 <sup>8</sup> -Cs3-O17	133.22(11)
P3-O9	1.516(5)	O11-Cs3-O1 <sup>3</sup>	70.05(15)
P3-O10	1.529(5)	O11-Cs3-O2 <sup>6</sup>	80.36(13)

---

P3-O11	1.473(5)	O11-Cs3-O3 <sup>6</sup>	120.68(13)
P3-O12	1.542(5)	O11-Cs3-O6 <sup>8</sup>	139.64(14)
P4-O13	1.541(5)	O11-Cs3-O13 <sup>7</sup>	102.64(13)
P4-O14	1.470(5)	O11-Cs3-O14 <sup>5</sup>	80.33(14)
P4-O15	1.546(5)	O11-Cs3-O15 <sup>7</sup>	142.26(13)
P4-O16	1.551(5)	O11-Cs3-O17	86.96(13)
P5-O17	1.518(5)	O13 <sup>7</sup> -Cs3-O3 <sup>6</sup>	134.60(11)
P5-O18	1.507(5)	O13 <sup>7</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	80.75(10)
P5-O19	1.498(5)	O13 <sup>7</sup> -Cs3-O15 <sup>7</sup>	41.58(10)
P5-O20	1.497(5)	O13 <sup>7</sup> -Cs3-O17	94.85(11)
A11-O4	1.719(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O2 <sup>6</sup>	137.08(12)
A11-O7 <sup>1</sup>	1.732(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O3 <sup>6</sup>	125.22(12)
A11-O9	1.693(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	62.31(12)
A11-O17 <sup>2</sup>	1.746(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O13 <sup>7</sup>	71.81(12)
A12-O6	1.721(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O15 <sup>7</sup>	76.69(12)
A12-O13 <sup>9</sup>	1.740(5)	O14 <sup>5</sup> -Cs3-O17	158.84(12)
A12-O15 <sup>10</sup>	1.738(5)	O15 <sup>7</sup> -Cs3-O6 <sup>8</sup>	45.07(10)
A12-O18 <sup>1</sup>	1.742(5)	O15 <sup>7</sup> -Cs3-O17	104.54(11)
A13-O2 <sup>6</sup>	1.734(5)	O1-P1-O2	112.9(3)
A13-O3 <sup>3</sup>	1.758(5)	O1-P1-O3	113.4(3)
A13-O8	1.727(5)	O1-P1-O4	113.4(3)
A13-O10	1.721(5)	O3-P1-O2	106.7(3)
A14-O12	1.720(5)	O3-P1-O4	104.6(3)
A14-O16	1.736(5)	O4-P1-O2	105.3(2)
A14-O19 <sup>5</sup>	1.720(5)	O5-P2-O6	114.0(3)
A14-O20	1.704(5)	O5-P2-O7	113.7(3)
O1-Cs1-O5	90.97(14)	O5-P2-O8	113.6(3)
O1-Cs1-O6 <sup>2</sup>	83.65(12)	O6-P2-O7	105.8(3)
O1-Cs1-O7 <sup>1</sup>	85.42(12)	O6-P2-O8	104.5(3)
O1-Cs1-O8 <sup>1</sup>	126.33(11)	O8-P2-O7	104.3(3)
O1-Cs1-O8 <sup>2</sup>	65.29(12)	O9-P3-O10	105.7(3)
O1-Cs1-O10 <sup>1</sup>	163.50(13)	O9-P3-O12	105.3(3)
O1-Cs1-O12 <sup>1</sup>	144.69(13)	O10-P3-O12	105.8(3)
O1-Cs1-O14 <sup>1</sup>	71.08(13)	O11-P3-O9	113.6(4)
O5-Cs1-O6 <sup>2</sup>	148.03(12)	O11-P3-O10	113.6(3)
O5-Cs1-O8 <sup>2</sup>	155.66(13)	O11-P3-O12	112.0(3)
O5-Cs1-O8 <sup>1</sup>	85.26(13)	O13-P4-O15	105.9(3)
O5-Cs1-O10 <sup>1</sup>	102.25(14)	O13-P4-O16	105.7(3)

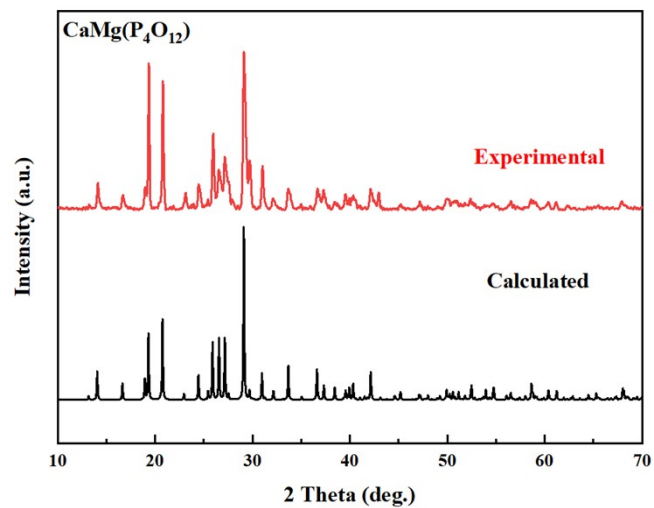
---

O6 <sup>2</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	123.01(11)	O14-P4-O13	112.3(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O5	92.12(14)	O14-P4-O15	113.5(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O6 <sup>2</sup>	118.66(12)	O14-P4-O16	114.2(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>2</sup>	81.23(12)	O15-P4-O16	104.4(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	41.46(11)	O18-P5-O17	111.4(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O10 <sup>1</sup>	84.27(12)	O19-P5-O17	107.3(3)
O7 <sup>1</sup> -Cs1-O14 <sup>1</sup>	156.37(12)	O19-P5-O18	111.0(3)
O8 <sup>2</sup> -Cs1-O6 <sup>2</sup>	39.98(10)	O20-P5-O17	109.2(3)
O8 <sup>2</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	104.08(9)	O20-P5-O18	109.4(3)
O10 <sup>1</sup> -Cs1-O6 <sup>2</sup>	90.04(11)	O20-P5-O19	108.4(3)
O10 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	46.61(11)	O4-Al1-O7 <sup>1</sup>	111.2(2)
O10 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>2</sup>	100.35(12)	O4-Al1-O17 <sup>2</sup>	109.8(2)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O5	93.85(13)	O7 <sup>1</sup> -Al1-O17 <sup>2</sup>	108.7(3)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O6 <sup>2</sup>	73.96(12)	O9-Al1-O4	107.4(3)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O7 <sup>1</sup>	129.23(12)	O9-Al1-O7 <sup>1</sup>	112.3(3)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>2</sup>	108.54(11)	O9-Al1-O17 <sup>2</sup>	107.4(3)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	88.95(11)	O6-Al2-O13 <sup>9</sup>	112.5(2)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O10 <sup>1</sup>	45.23(12)	O6-Al2-O15 <sup>12</sup>	106.6(2)
O12 <sup>1</sup> -Cs1-O14 <sup>1</sup>	74.40(12)	O6-Al2-O18 <sup>1</sup>	112.0(2)
O14 <sup>1</sup> -Cs1-O5	85.92(14)	O13 <sup>9</sup> -Al2-O18 <sup>1</sup>	104.0(3)
O14 <sup>1</sup> -Cs1-O6 <sup>2</sup>	62.50(11)	O15 <sup>12</sup> -Al2-O13 <sup>9</sup>	108.1(2)
O14 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>1</sup>	160.56(11)	O15 <sup>12</sup> -Al2-O18 <sup>1</sup>	113.7(3)
O14 <sup>1</sup> -Cs1-O8 <sup>2</sup>	90.92(12)	O2 <sup>6</sup> -Al3-O3 <sup>3</sup>	106.8(2)
O14 <sup>1</sup> -Cs1-O10 <sup>1</sup>	119.18(12)	O8-Al3-O2 <sup>6</sup>	109.7(2)
O1 <sup>3</sup> -Cs2-O3	92.41(11)	O8-Al3-O3 <sup>3</sup>	108.9(2)
O1 <sup>3</sup> -Cs2-O4	86.17(11)	O10-Al3-O2 <sup>6</sup>	108.8(3)
O1 <sup>3</sup> -Cs2-O15 <sup>4</sup>	148.28(12)	O10-Al3-O3 <sup>3</sup>	115.6(3)
O1 <sup>3</sup> -Cs2-O16 <sup>4</sup>	151.52(12)	O10-Al3-O8	107.0(3)
O4-Cs2-O3	39.99(10)	O12-Al4-O16	109.6(2)
O4-Cs2-O15 <sup>4</sup>	118.02(11)	O12-Al4-O19 <sup>4</sup>	114.4(3)
O5 <sup>3</sup> -Cs2-O1 <sup>3</sup>	88.42(14)	O19 <sup>4</sup> -Al4-O16	107.7(3)
O5 <sup>3</sup> -Cs2-O3	63.48(12)	O20-Al4-O12	110.4(3)
O5 <sup>3</sup> -Cs2-O4	102.75(12)	O20-Al4-O16	107.9(3)
O5 <sup>3</sup> -Cs2-O15 <sup>4</sup>	67.36(13)	O20-Al4-O19 <sup>4</sup>	106.6(3)

<sup>1</sup>3/2-X, 1/2+Y, 1/2-Z; <sup>2</sup>+X, 1+Y, +Z; <sup>3</sup>1-X, 1-Y, -Z; <sup>4</sup>-1/2+X, 1/2-Y, -1/2+Z; <sup>5</sup>1/2-X, 1/2+Y, 1/2-Z; <sup>6</sup>+X, -1+Y, +Z; <sup>7</sup>1/2-X, -1/2+Y, 1/2-Z; <sup>8</sup>1-X, -Y, -Z; <sup>9</sup>3/2-X, -1/2+Y, 1/2-Z; <sup>10</sup>1/2+X, 1/2-Y, -1/2+Z; <sup>11</sup>1+X, +Y, +Z; <sup>12</sup>1/2+X, 1/2-Y, -1/2+Z; <sup>13</sup>-1/2+X, 1/2-Y, 1/2+Z.

Ca1-O5 <sup>2</sup>	2.317(3)	O5 <sup>2</sup> -Ca1-O5 <sup>1</sup>	165.81(18)
Ca1-O5 <sup>1</sup>	2.317(3)	O5 <sup>1</sup> -Ca1-O3 <sup>4</sup>	76.85(12)
Ca1-O3 <sup>4</sup>	2.380(4)	O5 <sup>2</sup> -Ca1-O3 <sup>4</sup>	92.32(12)
Ca1-O3 <sup>3</sup>	2.380(4)	O5 <sup>2</sup> -Ca1-O3 <sup>3</sup>	76.85(12)
Ca1-O1	2.198(4)	O5 <sup>1</sup> -Ca1-O3 <sup>3</sup>	92.32(12)
Ca1-O1 <sup>7</sup>	2.198(4)	O1 <sup>7</sup> -Ca1-O1	85.14(19)
P1-O5	1.490(4)	O5-P1-O2 <sup>8</sup>	107.7(2)
P1-O6	1.462(4)	O5-P1-O4	105.26(19)
P1-O2 <sup>8</sup>	1.598(4)	O6-P1-O5	118.6(2)
P1-O4	1.585(4)	O6-P1-O2 <sup>8</sup>	109.0(2)
P2-O3	1.503(3)	O6-P1-O4	111.4(2)
P2-O1	1.455(4)	O4-P1-O2 <sup>8</sup>	103.9(2)
P2-O2	1.595(4)	O3-P2-Ca1	116.36(15)
P2-O4	1.584(4)	O3-P2-O2	108.9(2)
Mg1-O5 <sup>5</sup>	2.112(3)	O3-P2-O4	110.57(19)
Mg1-O5 <sup>10</sup>	2.112(3)	O1-P2-O3	117.7(2)
Mg1-O6	2.045(3)	O1-P2-O2	109.3(2)
Mg1-O6 <sup>11</sup>	2.045(3)	O1-P2-O4	108.1(2)
Mg1-O3 <sup>12</sup>	2.090(3)	O4-P2-O2	101.1(2)
Mg1-O3 <sup>13</sup>	2.090(3)	O5 <sup>6</sup> -Mg1-O5 <sup>10</sup>	180.0
Ca1 <sup>2</sup> -O5	2.317(3)	O6-Mg1-O5 <sup>10</sup>	92.07(13)
Mg1 <sup>14</sup> -O5	2.112(3)	O6 <sup>11</sup> -Mg1-O5 <sup>10</sup>	87.93(13)
Ca1 <sup>3</sup> -O3	2.380(4)	O6-Mg1-O5 <sup>6</sup>	87.93(13)
Mg1 <sup>12</sup> -O3	2.090(3)	O6 <sup>11</sup> -Mg1-O5 <sup>6</sup>	92.07(13)
P1 <sup>8</sup> -O2	1.598(4)	O6 <sup>11</sup> -Mg1-O6	180.0
O3 <sup>3</sup> -Ca1-O3 <sup>4</sup>	81.66(17)	O6 <sup>11</sup> -Mg1-O3 <sup>12</sup>	89.26(13)
O1-Ca1-O5 <sup>1</sup>	91.59(13)	O6 <sup>11</sup> -Mg1-O3 <sup>13</sup>	90.74(13)
O1 <sup>7</sup> -Ca1-O5 <sup>2</sup>	91.59(13)	O6-Mg1-O3 <sup>12</sup>	90.74(13)
O1-Ca1-O5 <sup>2</sup>	98.87(13)	O6-Mg1-O3 <sup>13</sup>	89.26(13)
O1 <sup>7</sup> -Ca1-O5 <sup>1</sup>	98.87(13)	O3 <sup>12</sup> -Mg1-O5 <sup>6</sup>	88.03(13)
O1-Ca1-O3 <sup>3</sup>	175.33(12)	O3 <sup>12</sup> -Mg1-O5 <sup>10</sup>	91.97(13)
O1-Ca1-O3 <sup>4</sup>	96.76(12)	O3 <sup>13</sup> -Mg1-O5 <sup>10</sup>	88.03(13)
O1 <sup>7</sup> -Ca1-O3 <sup>4</sup>	175.33(12)	O3 <sup>13</sup> -Mg1-O5 <sup>6</sup>	91.97(13)
O1 <sup>7</sup> -Ca1-O3 <sup>3</sup>	96.77(12)	O3 <sup>13</sup> -Mg1-O3 <sup>12</sup>	180.00(6)

<sup>1</sup>-1/2+X, 1/2-Y, -1/2+Z; <sup>2</sup>3/2-X, 1/2-Y, 1-Z; <sup>3</sup>1-X, -Y, 1-Z; <sup>4</sup>+X, -Y, -1/2+Z; <sup>5</sup>3/2-X, -1/2+Y, 3/2-Z; <sup>6</sup>-1/2+X, -1/2+Y, -1+Z; <sup>7</sup>1-X, +Y, 1/2-Z; <sup>8</sup>1-X, 1-Y, 1-Z; <sup>9</sup>1/2+X, 1/2+Y, 1+Z; <sup>10</sup>+X, 1-Y, 1/2+Z; <sup>11</sup>3/2-X, 1/2-Y, 2-Z; <sup>12</sup>1-X, +Y, 3/2-Z; <sup>13</sup>1/2+X, 1/2-Y, 1/2+Z; <sup>14</sup>3/2-X, 1/2+Y, 3/2-Z.



**Figure S1.** Experimental and calculated X-ray powder diffraction patterns of  $\text{CaMg}(\text{P}_4\text{O}_{12})$ .