

**Supporting information for**  
**A novel phosphate with Co<sup>II</sup> square planar coordination, BaCo<sub>0.5</sub>Fe(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>:**  
**Structural and magnetic features**

Fouad Alloun <sup>a</sup>, Mohammed Hadouchi <sup>a,\*</sup>, Sirine El Arni, Abderrazzak Assani <sup>a</sup>, Mohamed Saadi <sup>a</sup>, Mimoun El Marssi <sup>b</sup>, Abdelilah Lahmar <sup>b</sup>, and Lahcen El Ammari <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Laboratoire de Chimie Appliquée des Matériaux, Centre des Sciences des Matériaux, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Avenue Ibn Battouta, BP 1014, Rabat, Morocco*

<sup>b</sup> *Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, 33 Rue saint-Leu, 80033 Amiens, France*

**\*Corresponding author:**

[m.hadouchi@um5r.ac.ma](mailto:m.hadouchi@um5r.ac.ma) (M. Hadouchi)

**Table S1:** Atomic displacement parameters (Å<sup>2</sup>) of BCFP

**Table S2 :** Geometric parameters (Å, °) of BCFP

**Table S3:** Refined profile parameters of BCFP phosphate powder

**Fig. S1:** EDS spectrum showing the elemental composition of the BCFP phosphate powder.

**Table S1:** Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) of BCFP

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ba1	0.01461 (8)	0.01338 (8)	0.01214 (7)	-0.00609 (6)	0.00058 (6)	0.00037 (6)
Ba2	0.01249 (7)	0.01281 (7)	0.00904 (7)	-0.00458 (6)	0.00042 (5)	0.00033 (5)
Ba3	0.01309 (8)	0.01995 (9)	0.01940 (9)	0.00516 (6)	0.00557 (6)	0.00018 (7)
Fe1	0.00654 (15)	0.00758 (15)	0.00719 (16)	-0.00002 (12)	-0.00090 (12)	0.00091 (12)
Fe2	0.01154 (17)	0.00665 (16)	0.01011 (17)	0.00223 (13)	-0.00064 (13)	-0.00109 (13)
Fe3	0.00766 (16)	0.00649 (15)	0.00806 (16)	-0.00094 (12)	-0.00143 (13)	0.00057 (12)
Co1A	0.0167 (9)	0.0092 (7)	0.0264 (11)	0.0032 (5)	-0.0007 (6)	0.0069 (6)
Co1B	0.0167 (9)	0.0092 (7)	0.0264 (11)	0.0032 (5)	-0.0007 (6)	0.0069 (6)
Co2	0.00953 (16)	0.01423 (18)	0.01679 (19)	0.00179 (13)	0.00131 (14)	-0.00564 (14)
P1	0.0064 (3)	0.0071 (3)	0.0072 (3)	0.0006 (2)	-0.0007 (2)	-0.0011 (2)
P2	0.0067 (3)	0.0081 (3)	0.0081 (3)	-0.0001 (2)	-0.0002 (2)	0.0014 (2)
P3	0.0066 (3)	0.0060 (3)	0.0104 (3)	0.0002 (2)	0.0001 (2)	0.0018 (2)
P4	0.0073 (3)	0.0062 (3)	0.0097 (3)	0.0013 (2)	0.0013 (2)	0.0011 (2)
P5	0.0080 (3)	0.0077 (3)	0.0092 (3)	0.0004 (2)	-0.0007 (2)	0.0011 (2)
P6	0.0055 (3)	0.0069 (3)	0.0082 (3)	-0.0001 (2)	0.0011 (2)	0.0009 (2)
O1	0.0110 (9)	0.0158 (9)	0.0123 (9)	0.0029 (7)	0.0042 (7)	0.0007 (7)
O2	0.0143 (9)	0.0120 (9)	0.0164 (10)	-0.0039 (7)	0.0016 (8)	-0.0053 (7)
O3	0.0176 (10)	0.0290 (12)	0.0093 (9)	0.0063 (9)	-0.0051 (8)	-0.0007 (8)
O4	0.0116 (9)	0.0079 (8)	0.0159 (9)	0.0018 (7)	0.0046 (7)	0.0002 (7)
O5	0.0208 (12)	0.0355 (14)	0.0346 (14)	-0.0038 (10)	-0.0178 (10)	-0.0012 (11)
O6	0.0172 (10)	0.0083 (8)	0.0176 (10)	0.0025 (7)	-0.0021 (8)	-0.0011 (7)
O7	0.0434 (16)	0.0377 (15)	0.0193 (12)	0.0179 (12)	0.0180 (11)	0.0074 (10)
O8	0.0172 (10)	0.0106 (9)	0.0380 (14)	-0.0032 (8)	0.0060 (9)	0.0053 (9)
O9	0.0161 (9)	0.0114 (9)	0.0130 (9)	-0.0008 (7)	0.0052 (7)	0.0028 (7)
O10	0.0072 (8)	0.0277 (11)	0.0102 (9)	-0.0024 (8)	-0.0005 (7)	0.0035 (8)
O11	0.0177 (10)	0.0142 (10)	0.0225 (11)	0.0068 (8)	0.0033 (8)	0.0102 (8)
O12	0.0140 (9)	0.0122 (9)	0.0257 (11)	-0.0022 (7)	0.0035 (8)	-0.0083 (8)
O13	0.0083 (9)	0.0167 (9)	0.0143 (9)	0.0050 (7)	0.0026 (7)	0.0044 (7)
O14	0.0105 (8)	0.0084 (8)	0.0101 (8)	0.0015 (7)	0.0004 (7)	-0.0016 (6)
O15	0.0135 (9)	0.0137 (9)	0.0131 (9)	0.0001 (7)	-0.0035 (7)	-0.0044 (7)
O16	0.0170 (10)	0.0131 (10)	0.0362 (13)	0.0039 (8)	0.0121 (9)	0.0132 (9)
O17	0.0118 (9)	0.0072 (8)	0.0165 (9)	-0.0013 (7)	0.0000 (7)	-0.0014 (7)
O18	0.0144 (10)	0.0362 (14)	0.0373 (15)	0.0046 (10)	0.0056 (10)	0.0183 (11)
O19	0.0201 (10)	0.0164 (10)	0.0160 (10)	-0.0040 (8)	-0.0083 (8)	0.0049 (8)
O20	0.0556 (17)	0.0126 (10)	0.0153 (11)	-0.0096 (10)	0.0096 (11)	-0.0051 (8)
O21	0.0076 (8)	0.0251 (11)	0.0117 (9)	-0.0048 (8)	-0.0001 (7)	0.0004 (8)
O22	0.0122 (9)	0.0104 (8)	0.0124 (9)	0.0020 (7)	0.0036 (7)	0.0044 (7)

O23	0.0156 (10)	0.0113 (9)	0.0186 (10)	0.0059 (7)	0.0032 (8)	0.0033 (8)
O24	0.0165 (10)	0.0175 (10)	0.0128 (9)	-0.0083 (8)	0.0015 (8)	-0.0046 (8)

**Table S2** : Geometric parameters (Å, °) of BCFP

Distance (Å)			
Ba1—O23 <sup>i</sup>	2.711 (2)	Fe3—O21	1.9581 (19)
Ba1—O4	2.7210 (19)	Fe3—O5 <sup>vii</sup>	1.963 (2)
Ba1—O13 <sup>ii</sup>	2.773 (2)	Fe3—O4 <sup>vii</sup>	2.009 (2)
Ba1—O12 <sup>ii</sup>	2.793 (2)	Fe3—O2 <sup>ix</sup>	2.0484 (19)
Ba1—O22 <sup>iii</sup>	2.8599 (19)	Fe3—O11 <sup>xi</sup>	2.055 (2)
Ba1—O1	2.881 (2)	Co1A—O16 <sup>i</sup>	1.901 (2)
Ba1—O15 <sup>ii</sup>	3.049 (2)	Co1A—O16	1.901 (2)
Ba1—O2 <sup>iv</sup>	3.066 (2)	Co1A—O18	2.205 (3)
Ba1—O24 <sup>iii</sup>	3.096 (2)	Co1A—O18 <sup>i</sup>	2.205 (3)
Ba1—O5	3.290 (3)	Co1B—O16	1.924 (3)
Ba2—O14 <sup>v</sup>	2.6514 (19)	Co1B—O16 <sup>i</sup>	1.945 (3)
Ba2—O10	2.674 (2)	Co1B—O18	2.137 (4)
Ba2—O14 <sup>vi</sup>	2.8181 (19)	Co1B—O18 <sup>i</sup>	2.328 (4)
Ba2—O19 <sup>vii</sup>	2.842 (2)	Co2—O1	1.9547 (19)
Ba2—O20 <sup>vii</sup>	2.855 (2)	Co2—O8 <sup>xii</sup>	2.063 (2)
Ba2—O9 <sup>v</sup>	2.871 (2)	Co2—O24 <sup>i</sup>	2.093 (2)
Ba2—O22 <sup>vii</sup>	2.965 (2)	Co2—O23 <sup>ii</sup>	2.104 (2)
Ba2—O11 <sup>v</sup>	2.985 (2)	Co2—O18 <sup>ii</sup>	2.237 (3)
Ba2—O6 <sup>vi</sup>	3.005 (2)	P1—O3	1.519 (2)
Ba2—O16 <sup>vi</sup>	3.210 (2)	P1—O1	1.523 (2)
Ba3—O12	2.584 (2)	P1—O2	1.532 (2)
Ba3—O8 <sup>vii</sup>	2.766 (2)	P1—O4	1.5424 (19)
Ba3—O24 <sup>viii</sup>	2.786 (2)	P2—O7	1.519 (2)
Ba3—O15 <sup>vi</sup>	2.847 (2)	P2—O5	1.522 (2)
Ba3—O21 <sup>viii</sup>	2.850 (2)	P2—O6	1.523 (2)
Ba3—O17	2.917 (2)	P2—O8	1.526 (2)
Ba3—O4 <sup>ix</sup>	2.984 (2)	P3—O11	1.514 (2)
Ba3—O2 <sup>ix</sup>	3.264 (2)	P3—O10	1.527 (2)
Ba3—O5 <sup>vii</sup>	3.320 (3)	P3—O12	1.531 (2)
Fe1—O3	1.884 (2)	P3—O9	1.551 (2)
Fe1—O6	1.979 (2)	P4—O16	1.508 (2)
Fe1—O10 <sup>v</sup>	2.006 (2)	P4—O13	1.524 (2)
Fe1—O22 <sup>i</sup>	2.043 (2)	P4—O15	1.545 (2)
Fe1—O14 <sup>x</sup>	2.0904 (19)	P4—O14	1.5494 (19)
Fe1—O15 <sup>x</sup>	2.120 (2)	P5—O17	1.524 (2)

Fe2—O7	1.872 (2)	P5—O18	1.527 (2)
Fe2—O17	1.9780 (19)	P5—O19	1.532 (2)
Fe2—O9	1.987 (2)	P5—O20	1.544 (2)
Fe2—O13	2.0250 (19)	P6—O23	1.522 (2)
Fe2—O19 <sup>vii</sup>	2.060 (2)	P6—O21	1.530 (2)
Fe2—O12	2.346 (2)	P6—O24	1.531 (2)
Fe3—O20	1.947 (2)	P6—O22	1.551 (2)

---

**Angles (°)**


---

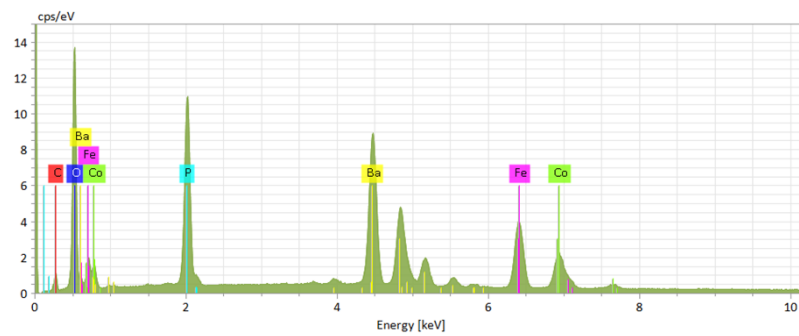
O3—Fe1—O6	118.72 (9)	O16—Co1B—O18	97.65 (14)
O3—Fe1—O10 <sup>v</sup>	87.76 (9)	O16 <sup>i</sup> —Co1B—O18	84.80 (13)
O6—Fe1—O10 <sup>v</sup>	89.08 (9)	O16—Co1B—O18 <sup>i</sup>	80.21 (12)
O3—Fe1—O22 <sup>i</sup>	102.95 (9)	O16 <sup>i</sup> —Co1B—O18 <sup>i</sup>	91.00 (13)
O6—Fe1—O22 <sup>i</sup>	84.94 (8)	O18—Co1B—O18 <sup>i</sup>	162.20 (7)
O10 <sup>v</sup> —Fe1—O22 <sup>i</sup>	169.24 (8)	O1—Co2—O8 <sup>xii</sup>	151.54 (9)
O3—Fe1—O14 <sup>x</sup>	153.16 (9)	O1—Co2—O24 <sup>i</sup>	86.70 (8)
O6—Fe1—O14 <sup>x</sup>	86.83 (8)	O8 <sup>xii</sup> —Co2—O24 <sup>i</sup>	89.09 (9)
O10 <sup>v</sup> —Fe1—O14 <sup>x</sup>	84.40 (8)	O1—Co2—O23 <sup>ii</sup>	113.47 (8)
O22 <sup>i</sup> —Fe1—O14 <sup>x</sup>	86.35 (8)	O8 <sup>xii</sup> —Co2—O23 <sup>ii</sup>	94.66 (9)
O3—Fe1—O15 <sup>x</sup>	86.02 (9)	O24 <sup>i</sup> —Co2—O23 <sup>ii</sup>	90.09 (8)
O6—Fe1—O15 <sup>x</sup>	155.03 (8)	O1—Co2—O18 <sup>ii</sup>	90.64 (8)
O10 <sup>v</sup> —Fe1—O15 <sup>x</sup>	95.64 (9)	O8 <sup>xii</sup> —Co2—O18 <sup>ii</sup>	73.77 (9)
O22 <sup>i</sup> —Fe1—O15 <sup>x</sup>	86.19 (8)	O24 <sup>i</sup> —Co2—O18 <sup>ii</sup>	137.44 (9)
O14 <sup>x</sup> —Fe1—O15 <sup>x</sup>	69.33 (7)	O23 <sup>ii</sup> —Co2—O18 <sup>ii</sup>	129.12 (9)
O7—Fe2—O17	113.08 (11)	O3—P1—O1	109.85 (12)
O7—Fe2—O9	99.26 (11)	O3—P1—O2	111.55 (13)
O17—Fe2—O9	147.05 (8)	O1—P1—O2	113.26 (12)
O7—Fe2—O13	92.89 (10)	O3—P1—O4	110.18 (12)
O17—Fe2—O13	94.67 (8)	O1—P1—O4	104.67 (11)
O9—Fe2—O13	89.69 (8)	O2—P1—O4	107.06 (11)
O7—Fe2—O19 <sup>vii</sup>	95.48 (11)	O7—P2—O5	110.89 (16)
O17—Fe2—O19 <sup>vii</sup>	81.86 (8)	O7—P2—O6	112.27 (13)
O9—Fe2—O19 <sup>vii</sup>	89.17 (8)	O5—P2—O6	110.74 (14)
O13—Fe2—O19 <sup>vii</sup>	171.62 (9)	O7—P2—O8	105.23 (15)
O7—Fe2—O12	163.04 (10)	O5—P2—O8	106.61 (15)
O17—Fe2—O12	82.55 (8)	O6—P2—O8	110.82 (12)
O9—Fe2—O12	66.29 (8)	O11—P3—O10	113.82 (12)
O13—Fe2—O12	78.74 (8)	O11—P3—O12	112.49 (13)
O19 <sup>vii</sup> —Fe2—O12	93.22 (8)	O10—P3—O12	109.96 (12)
O20—Fe3—O21	92.00 (10)	O11—P3—O9	109.24 (12)
O20—Fe3—O5 <sup>vii</sup>	97.05 (12)	O10—P3—O9	108.97 (11)
O21—Fe3—O5 <sup>vii</sup>	169.03 (11)	O12—P3—O9	101.61 (12)
O20—Fe3—O4 <sup>vii</sup>	174.27 (10)	O16—P4—O13	115.24 (12)

O21—Fe3—O4 <sup>vii</sup>	82.93 (8)	O16—P4—O15	110.34 (13)
O5 <sup>vii</sup> —Fe3—O4 <sup>vii</sup>	87.71 (10)	O13—P4—O15	109.07 (11)
O20—Fe3—O2 <sup>ix</sup>	91.96 (9)	O16—P4—O14	108.49 (12)
O21—Fe3—O2 <sup>ix</sup>	91.27 (9)	O13—P4—O14	111.40 (11)
O5 <sup>vii</sup> —Fe3—O2 <sup>ix</sup>	82.27 (10)	O15—P4—O14	101.42 (11)
O4 <sup>vii</sup> —Fe3—O2 <sup>ix</sup>	85.50 (8)	O17—P5—O18	111.59 (13)
O20—Fe3—O11 <sup>xi</sup>	87.41 (9)	O17—P5—O19	113.22 (11)
O21—Fe3—O11 <sup>xi</sup>	87.25 (9)	O18—P5—O19	111.27 (13)
O5 <sup>vii</sup> —Fe3—O11 <sup>xi</sup>	99.30 (10)	O17—P5—O20	111.76 (12)
O4 <sup>vii</sup> —Fe3—O11 <sup>xi</sup>	94.98 (8)	O18—P5—O20	102.94 (16)
O2 <sup>ix</sup> —Fe3—O11 <sup>xi</sup>	178.37 (9)	O19—P5—O20	105.43 (13)
O16 <sup>i</sup> —Co1A—O16	180.0	O23—P6—O21	110.36 (12)
O16 <sup>i</sup> —Co1A—O18	83.96 (9)	O23—P6—O24	115.87 (12)
O16—Co1A—O18	96.04 (9)	O21—P6—O24	103.09 (11)
O16 <sup>i</sup> —Co1A—O18 <sup>i</sup>	96.04 (9)	O23—P6—O22	109.83 (11)
O16—Co1A—O18 <sup>i</sup>	83.96 (9)	O21—P6—O22	109.36 (11)
O18—Co1A—O18 <sup>i</sup>	180.0	O24—P6—O22	108.02 (11)
O16—Co1B—O16 <sup>i</sup>	158.68 (7)		

Symmetry codes: (i)  $-x, -y+1, -z+1$ ; (ii)  $x, -y+3/2, z+1/2$ ; (iii)  $x, -y+1/2, z+1/2$ ; (iv)  $-x+1, y-1/2, -z+3/2$ ; (v)  $-x+1, -y+2, -z+1$ ; (vi)  $x+1, y, z$ ; (vii)  $-x+1, -y+1, -z+1$ ; (viii)  $-x+1, y+1/2, -z+1/2$ ; (ix)  $x, -y+3/2, z-1/2$ ; (x)  $-x, -y+2, -z+1$ ; (xi)  $x, y-1, z$ ; (xii)  $-x, y+1/2, -z+3/2$ .

**Table S3:** Refined profile parameters of BCFP phosphate powder

Chemical formula	<b>BaCo<sub>0.5</sub>Fe(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub></b>
a, b, c (Å), $\beta$ (°)	8.6913 (2), 9.9764 (2), 21.9029 (1), 93.133 (1)
V (Å <sup>3</sup> )	1896.3 (2)
Data collection	
Diffractionmeter	Shimadzu 6100
Temperature (K)	298
Radiation type	Cu K $\alpha$ ( $\lambda$ = 1.54056 Å)
2 $\Theta$ values (°)	2 $\Theta_{\min}$ = 10, 2 $\Theta_{\max}$ = 100, 2 $\Theta_{\text{step}}$ = 0.02
Refinement	
R factors and goodness of fit	$R_p = 5.46$ , $R_{wp} = 7.21$ , $\chi^2 = 1.68$
No. of fitted parameters	21
No. data points	4501



**Fig. S1:** EDS spectrum showing the elemental composition of the BCFP phosphate powder.