

Acta Crystallographica Section E

Structure Reports

Online

ISSN 1600-5368

Non-centrosymmetric $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$

Chahira Bouzidi, Mohamed Faouzi Zid, Ahmed Driss and Amira Souilem*

Laboratoire de Matériaux et Cristallographie, Faculté des Sciences de Tunis, Université de Tunis ElManar, 2092 Manar II Tunis, Tunisia

Correspondence e-mail: souilem_amira@yahoo.fr

Received 7 May 2014; accepted 5 June 2014

Key indicators: single-crystal X-ray study; $T = 298$ K; mean $\sigma(\text{Mn}-\text{O}) = 0.012$ Å; R factor = 0.035; wR factor = 0.079; data-to-parameter ratio = 15.5.

The title compound, dirubidium dimanganese(II) tris(tetraoxomolybdate), $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$, was prepared by solid-state reactions. The structure can be described as being composed of MnO_6 octahedra sharing corners with MoO_4 tetrahedra. The three-dimensional framework contains cavities in which the rubidium ions are located. The Rb^+ cations are within distorted nine- and 12-vertex polyhedra. The pairs of different Mn^{2+} and Rb^+ cations are each located on threefold rotation axes. $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$ is isotypic with compounds of the $\text{Cs}_2M_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ($M = \text{Ni}, \text{Fe}$) family. A comparative structural description is provided between the structure of the title compound and those of related phases. Differences with structures such as alluaudite are discussed.

Related literature

For isotypic structures, see: Zolotova *et al.* (2011); Namsaraeva *et al.* (2011). For background to the physico-chemical properties of related compounds, see: Chaalia *et al.* (2012); Prabakaran *et al.* (1997); Ouerfelli *et al.* (2007); Hansen *et al.* (1988); Masquelier *et al.* (1995). For details of of the preparation and for structurally related compounds, see: Solodovnikov *et al.* (1986, 1998); Solodovnikov & Solodovnikova (1997); Tsyrenova *et al.* (2004); Bouzidi *et al.* (2014). For details of structurally different compounds, see: Brahim & Amor (2003); Warner *et al.* (1993); Korzenski *et al.* (1998); Chouaibi *et al.* (2001); Pertlik (1987); Antenucci *et al.* (1995); Zid *et al.* (2005); Hatert *et al.* (2004); Lii & Shih (1994). For bond lengths, see: Souilem *et al.* (2014); Frigui *et al.* (2012); Leclaire & Raveau (1988); Sebastian *et al.* (2003) and for bond-valence sums, see: Brown & Altermatt (1985).

Experimental

Crystal data

$\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$
 $M_r = 760.64$
 Cubic, $P2_13$

$a = 10.9002$ (9) Å
 $V = 1295.10$ (19) Å³
 $Z = 4$

Mo $K\alpha$ radiation
 $\mu = 12.24$ mm⁻¹

$T = 298$ K
 $0.25 \times 0.15 \times 0.10$ mm

Data collection

Enraf–Nonius CAD-4 diffractometer
 Absorption correction: ψ scan (North *et al.*, 1968)
 $T_{\min} = 0.071$, $T_{\max} = 0.210$
 2949 measured reflections

916 independent reflections
 838 reflections with $I > 2\sigma(I)$
 $R_{\text{int}} = 0.044$
 2 standard reflections every 120 min
 intensity decay: 1.3%

Refinement

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.035$
 $wR(F^2) = 0.079$
 $S = 1.10$
 916 reflections
 59 parameters
 $\Delta\rho_{\max} = 1.03$ e Å⁻³

$\Delta\rho_{\min} = -0.96$ e Å⁻³
 Absolute structure: Flack (1983), 264 Friedel pairs
 Absolute structure parameter: 0.04 (2)

Data collection: *CAD-4 EXPRESS* (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); cell refinement: *CAD-4 EXPRESS*; data reduction: *XCAD4* (Harms & Wocadlo, 1995); program(s) used to solve structure: *SHELXS97* (Sheldrick, 2008); program(s) used to refine structure: *SHELXL97* (Sheldrick, 2008); molecular graphics: *DIAMOND* (Brandenburg & Putz, 2001); software used to prepare material for publication: *WinGX* (Farrugia, 2012).

Supporting information for this paper is available from the IUCr electronic archives (Reference: RU2059).

References

- Antenucci, D., Fransolet, A. M., Mische, G. & Tarte, P. (1995). *Eur. J. Mineral.* **7**, 175–179.
- Bouzidi, C., Zid, M. F., Driss, A. & Frigui, W. (2014). *Acta Cryst.* **E70**, i18–i19.
- Brahim, A. & Amor, H. (2003). *Acta Cryst.* **E59**, i77–i79.
- Brandenburg, K. & Putz, H. (2001). *DIAMOND*. Crystal Impact GbR, Bonn, Germany.
- Brown, I. D. & Altermatt, D. (1985). *Acta Cryst.* **B41**, 244–247.
- Chaalia, S., Ayed, B. & Haddad, A. (2012). *J. Chem. Crystallogr.* **42**, 941–946.
- Chouaibi, N., Daidouh, A., Pico, C., Santrich, A. & Veiga, M. L. (2001). *J. Solid State Chem.* **159**, 46–50.
- Duisenberg, A. J. M. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 92–96.
- Farrugia, L. J. (2012). *J. Appl. Cryst.* **45**, 849–854.
- Flack, H. D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 876–881.
- Frigui, W., Zid, M. F. & Driss, A. (2012). *Acta Cryst.* **E68**, i40–i41.
- Hansen, N. K., Protas, J. & Marnier, G. (1988). *C. R. Acad. Sci. II*, **307**, 475–478.
- Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. University of Marburg, Germany.
- Hatert, F., Long, G. J., Hautot, D., Fransolet, A. M., Delwiche, J., Hubin-Franskin, M. J. & Grandjean, F. (2004). *Phys. Chem. Miner.* **31**, 487–506.
- Korzanski, M. B., Schimek, G. L. & Kolis, J. W. (1998). *J. Solid State Chem.* **106**, 301–309.
- Leclaire, A. & Raveau, B. (1988). *Acta Cryst.* **C44**, 226–229.
- Lii, K. H. & Shih, P. F. (1994). *Inorg. Chem.* **33**, 3028–3031.
- Macíček, J. & Yordanov, A. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 73–80.
- Masquelier, C., d'Yvoire, F. & Collin, G. (1995). *J. Solid State Chem.* **118**, 33–42.
- Namsaraeva, T., Bazarov, B., Mikhailova, D., Kuratieva, N., Sarapulova, A., Senyshyn, A. & Ehrenberg, H. (2011). *Eur. J. Inorg. Chem.* **18**, 2832–2841.
- North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
- Ouerfelli, N., Guesmi, A., Molinié, D., Zid, M. F. & Driss, A. (2007). *J. Solid State Chem.* **180**, 2942–2949.
- Pertlik, F. (1987). *Acta Cryst.* **C43**, 381–383.
- Prabakaran, S. R. S., Michael, M. S., Radhakrishna, S. & Julien, C. (1997). *J. Mater. Chem.* **7**, 1791–1796.
- Sebastian, L., Piffard, Y., Shukla, A. K., Taulelle, F. & Gopalakrishnan, J. (2003). *J. Mater. Chem.* **13**, 1797–1802.

- Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* **A64**, 112–122.
- Solodovnikov, S. F., Klevtsova, R. F., Kim, V. G. & Klevtsov, P. V. (1986). *J. Struct. Chem.* **27**, 100–106.
- Solodovnikov, S. F., Klevtsov, P. V., Solodovnikova, Z. A., Glinskaya, L. A. & Klevtsova, R. F. (1998). *J. Struct. Chem.* **39**, 230–237.
- Solodovnikov, S. F. & Solodovnikova, Z. A. (1997). *J. Struct. Chem.* **38**, 914–921.
- Souilem, A., Zid, M. F. & Driss, A. (2014). *Acta Cryst.* **E70**, i9–i10.
- Tsyrenova, G. D., Solodovnikov, S. F., Khaikina, E. G., Khobrakova, E. T., Bazarova, Zh. G. & Solodovnikova, Z. A. (2004). *J. Solid State Chem.* **177**, 2158–2167.
- Warner, T. E., Milius, W. & Maier, J. (1993). *J. Solid State Chem.* **106**, 301–309.
- Zid, M. F., Driss, A. & Jouini, T. (2005). *Acta Cryst.* **E61**, i46–i48.
- Zolotova, E. S., Solodovnikova, Z. A., Ayupova, B. M. & Solodovnikova, S. F. (2011). *Russ. J. Inorg. Chem.* **56**, 1216–1221.

supporting information

Acta Cryst. (2014). E70, i36–i37 [https://doi.org/10.1107/S1600536814013099]

Non-centrosymmetric $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$ **Chahira Bouzidi, Mohamed Faouzi Zid, Ahmed Driss and Amira Souilem****S1. Comment**

Plusieurs travaux ont été consacrés à la recherche des matériaux inorganiques à charpentes ouvertes formées de tétraèdres et d'octaèdres. En effet, ils ont attiré l'attention de maints chercheurs grâce à leurs propriétés physico-chimiques notamment: conduction ionique (Chaalia *et al.*, 2012; Prabakaran *et al.*, 1997) et magnétique (Ouerfelli *et al.*, 2007; Masquelier *et al.*, 1995).

En particulier, les composés non centrosymétriques possédant des propriétés intéressantes plus précisément les propriétés d'optiques non-linéaires (ONL). En effet, ils permettent donc d'envisager différentes applications notamment le doublage de fréquences. Parmi les composés inorganiques cités dans la littérature l'orthophosphate KTiOPO_4 (Hansen *et al.*, 1988). Dans le but d'accéder à de nouveaux matériaux de ce type, nous avons entrepris l'exploration des systèmes A-Mn-Mo-O (A = ion monovalent) dans lesquels différentes phases ont été précédemment isolées: $\text{K}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ (Solodovnikov *et al.*, 1986), $\text{K}_{10}\text{MnMo}_7\text{O}_{27}$, (Solodovnikov *et al.*, 1997), $\text{K}_4\text{MnMo}_4\text{O}_{15}$ (Solodovnikov *et al.*, 1998), $\text{Ag}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ (Tsyrenova *et al.*, 2004), $\text{Mn}_{2.17}\text{Mo}_3\text{Na}_{1.67}\text{O}_{12}$ (Bouzidi *et al.*, 2014). Une nouvelle phase non centrosymétrique de formulation $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$, a été synthétisée par réaction à l'état solide.

L'unité *asymétrique* dans $\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$, renferme deux octaèdres MnO_6 et trois tétraèdres MoO_4 liés par mise en commun de sommets. La compensation de charge est assurée par les cations Rb^+ (Fig. 1). Dans cette unité, nous remarquons la présence du groupement cyclique $\text{Mn}_2\text{Mo}_2\text{O}_{16}$.

La structure est caractérisée par une charpente tridimensionnelle, dans laquelle chaque octaèdre $\text{Mn}(2)\text{O}_6$ partage ses six sommets avec respectivement six tétraèdres MoO_4 différents formant l'unité $\text{Mn}(2)\text{Mo}_6\text{O}_{24}$ (Fig. 2a). Dans la charpente anionique, l'insertion des groupements $\text{Mn}(1)\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ (Fig. 2 b) entre les unités $\text{Mn}(2)\text{Mo}_6\text{O}_{24}$ renforce d'avantage leur connexion conduisant à des chaînes disposées selon la direction *a* (Fig. 2c). La jonction entre ces dernières, assurée par formation de ponts mixtes de type Mn-O-Mo conduit à une charpente tridimensionnelle possédant des cavités où résident les cations Rb^+ (Fig. 3). Il est à signaler, que les cations $\text{Rb}(1)$ et $\text{Rb}(2)$ sont entourés respectivement par douze et neuf atomes d'oxygène (Fig. 4a) et (Fig. 4b).

Les distances moyennes $d(\text{Mo-O})$, $d(\text{Mn-O})$ et (Rb-O) sont égales respectivement à 1,726 (2) Å, 2,136 (2) Å et 3,274 (2) Å, conformément à celles observées dans la littérature (Souilem *et al.*, 2014; Sebastian *et al.*, 2003; Frigui *et al.*, 2012; Leclaire *et al.*, 1988).

De plus, l'utilisation de la méthode BVS, pour le calcul des différentes valences des liaisons, en utilisant la formule empirique de Brown (Brown & Altermatt, 1985) vérifie bien les valeurs attendues de charges des ions $\text{Mo}1(6,14)$, $\text{Mn}1(2,14)$, $\text{Mn}2(2,11)$, $\text{Rb}1(0,52)$, $\text{Rb}2(0,74)$.

Un examen rigoureux de différentes structures trouvées dans la littérature révèle que le matériau étudié est isostructural à ceux de formulation $\text{Cs}_2\text{M}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ($M = \text{Ni, Fe}$) (Zolotova *et al.*, 2011; Touyana *et al.*, 2011).

Les matériaux $\text{Cs}_2\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ (Solodovnikov *et al.*, 1986) et $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ (Solodovnikov *et al.*, 1997) isomorphes à celle de notre composé présentent d'autres variétés cristallographiques. En effet, ils cristallisent respectivement dans le système orthorhombique groupe d'espace $P2_12_12_1$ et dans le système monoclinique (GS: $C2/c$).

Une comparaison de la structure du composé étudié $\text{Rb}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ($a = 10.9002$ (9) Å) avec celle de $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ($a = 27,698$ Å, $b = 5,102$ Å, $c = 19,292$ Å, $\beta = 107,26^\circ$) (Solodovnikov *et al.*, 1997) montre une différence nette dans la disposition des polyèdres dans la charpente anionique. En effet, on remarque que pour $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ les octaèdres $\text{Cu}(1)\text{O}_6$ et $\text{Cu}(2)\text{O}_6$ sont liés par mise en commun d'arêtes formant des chaînes d'octaèdres. Ces dernières sont connectées à leur tour par partage de sommets avec les tétraèdres $\text{Mo}(1)\text{O}_4$ conduisant à des rubans disposés selon [010]. Il en résulte, dans le cas de $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$, une structure unidimensionnelle (one-dimensional) où les cations Rb^+ résident dans les espaces inter-rubans (Fig. 5).

La recherche de structures présentant des aspects communs avec celle de $\text{Rb}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$, nous a conduit à la famille des alluaudites de formule générale $\text{AA}'\text{M}'\text{M}_2(\text{XO}_4)_3$ dont A et A' sont des alcalins et M et M' sont des métaux de transition (Brahim & Amor, 2003; Warner *et al.*, 1993; Korzenski *et al.*, 1998; Chouaibi *et al.*, 2001; Pertlik, 1987; Antenucci *et al.*, 1995; Zid *et al.*, 2005; Chaalia *et al.*, 2012; Hatert *et al.*, 2004; Lii & Shih, 1994) (Fig. 6). La comparaison a montré une différence significative dans la charpente et en particulier dans les modes de connection des polyèdres MO_6 . En effet, dans les structures alluaudites les octaèdres sont liés par partage d'arêtes formant des chaînes qui se lient aux tétraèdres XO_4 par mise en commun de sommets pour conduire à des couches. Ces dernières se regroupent moyennant des ponts mixtes $\text{M}-\text{O}-\text{X}$ pour donner des charpentes tridimensionnelles possédant des tunnels où logent les cations monovalents. On peut donc conclure que notre matériau diffère d'une forme alluaudite (Fig. 6).

S2. Experimental

La synthèse a été faite par voie sèche à partir d'un mélange $\text{C}_9\text{H}_9\text{MnO}_6 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Fluka, 63538), $(\text{NH}_4)_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ (Fluka, 69858) et Rb_2CO_3 , pris dans les proportions molaires $\text{Rb}:\text{Mn}:\text{Mo} = 2:2:3$. Le traitement thermique a été réalisé en deux étapes: la première consiste à préchauffer les réactifs à 673 K pendant 24 heures en vue d'éliminer les composés volatils. Puis, le résidu a été porté à 923 K (proche de la température de fusion) et il est porté à cette température pendant une semaine pour favoriser la germination et la croissance des cristaux. Le résidu final a subi en premier lieu un refroidissement lent (5 K/24 h) jusqu'à 900 K suivi d'un autre plus rapide (50 K/jour) jusqu'à la température ambiante. Des cristaux de couleur jaunâtre ont été séparés par l'eau chaude.

S3. Refinement

L'affinement de tous les paramètres variables conduit à des ellipsoïdes bien définis. Les densités d'électrons maximum et minimum restants dans la Fourier-différence sont situées respectivement à 0,97 Å de O4 et à 0,39 Å de Rb2.

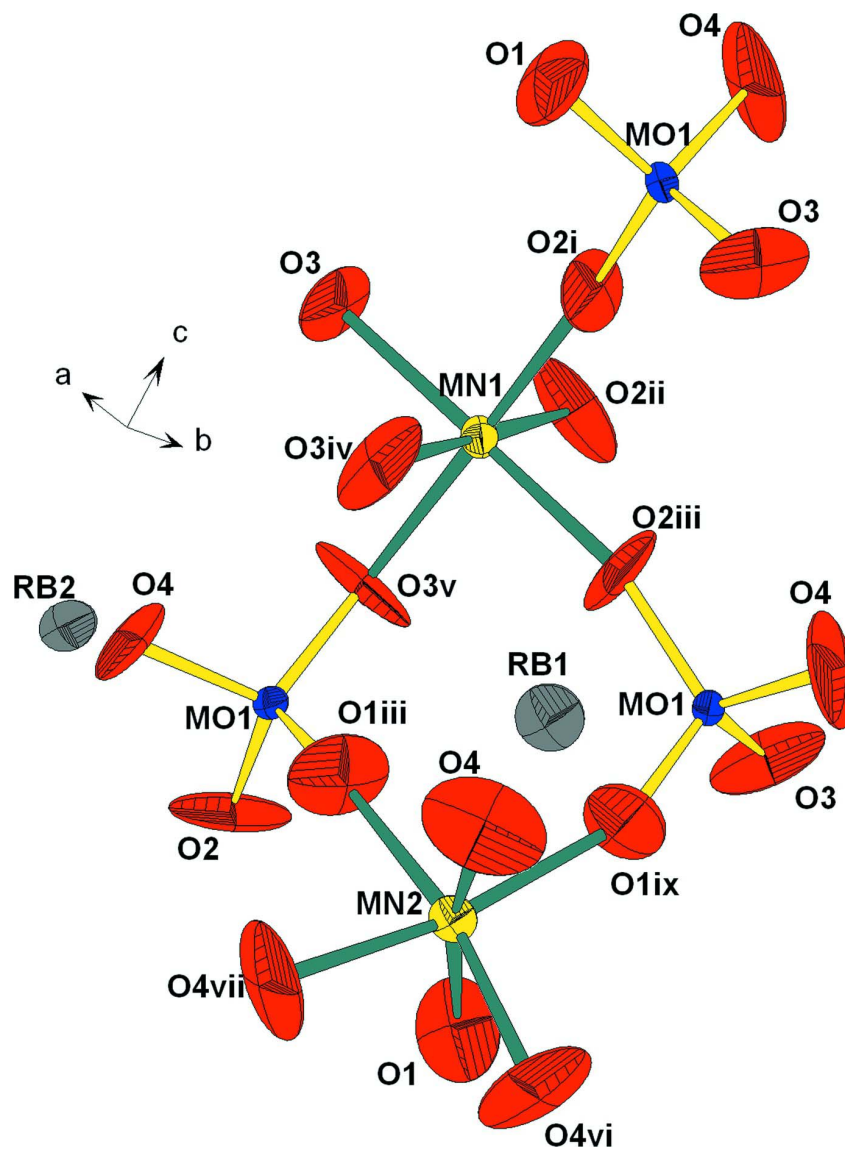


Figure 1

Unité *asymétrique* dans le composé $\text{Rb}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$. Les éllipsoïdes ont été définis avec 50% de probabilité. [Code de symétrie]: (i) $y, z, 1 + x$; (ii) $1/2 - x, 1 - y, z + 1/2$; (iii) $1 - z, 1/2 + x, 3/2 - y$; (iv) $1 + y, -1/2 + z, 3/2 - x$; (v) $3/2 - z, 1 - x, 1/2 + y$; (vi) $1 - x, 1/2 + y, 3/2 - z$; (vii) y, z, x ; (viii) $z - 1/2, 3/2 - x, 1 - y$; (ix) $y - 1/2, 3/2 - z, 1 - x$.

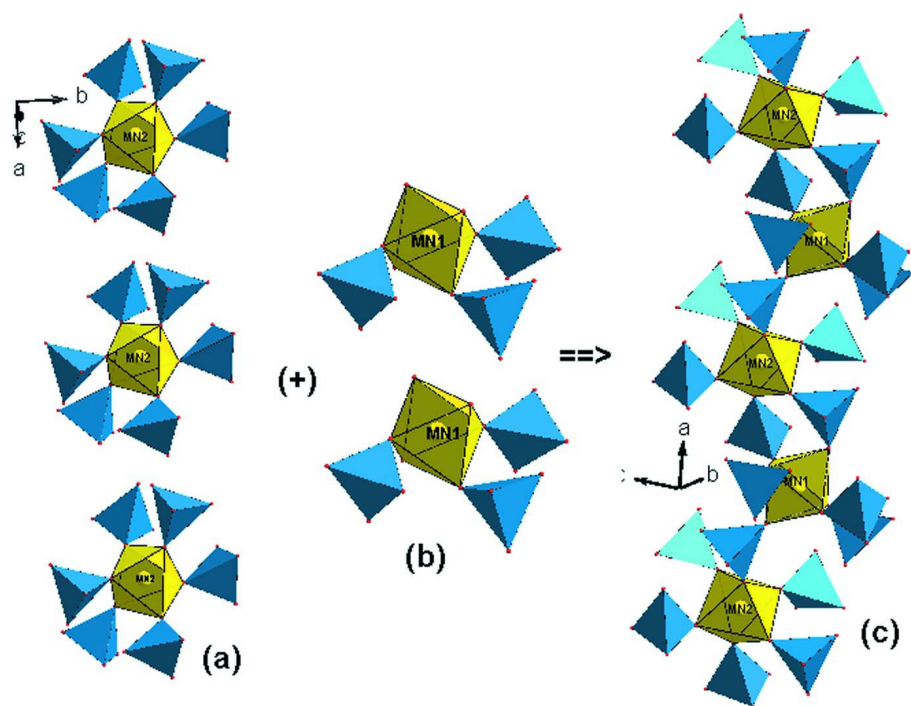


Figure 2

(a) Projection de l'unité $\text{Mn}(2)\text{Mo}_6\text{O}_{24}$; (b) Projection de l'unité $\text{Mn}(1)\text{Mo}_3\text{O}_{12}$; (c) Projection d'une chaîne.

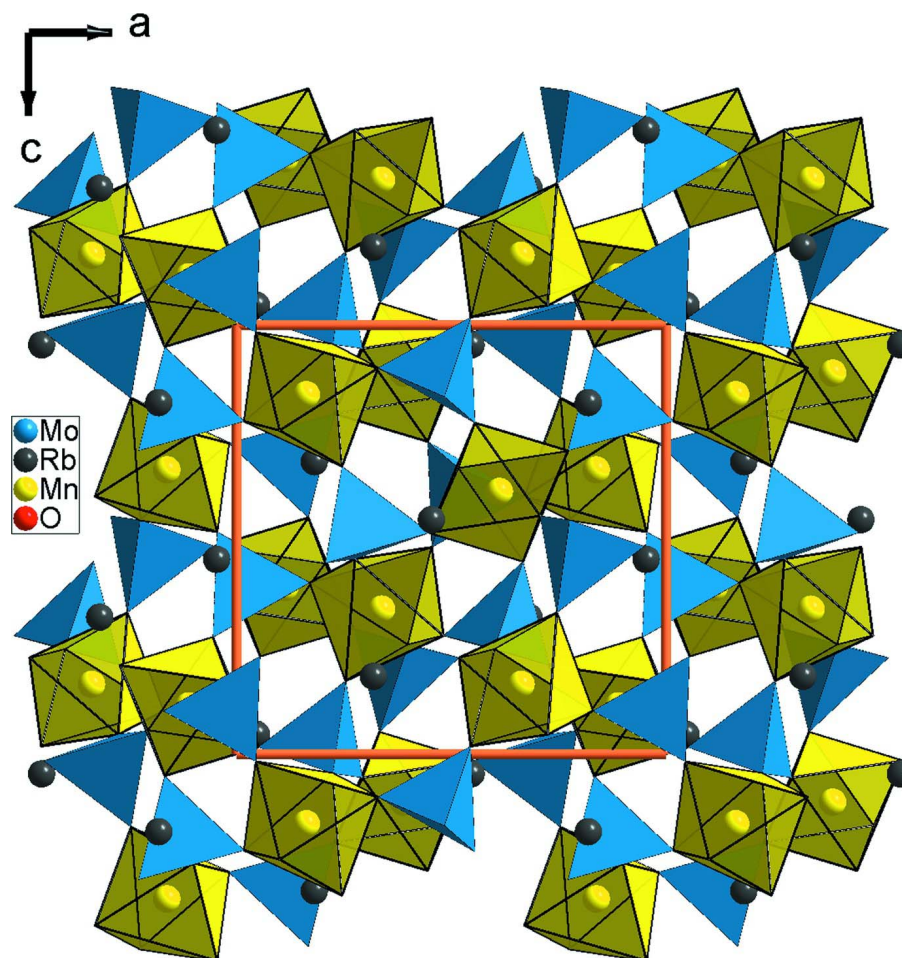


Figure 3
Projection de la structure de $\text{Rb}_2\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ selon b .

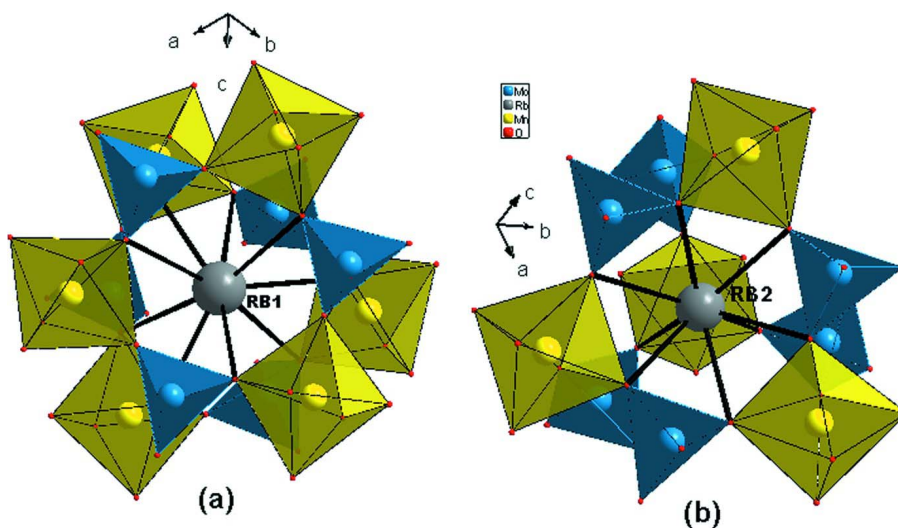


Figure 4
(a) Représentation de l'environnement de Rb(1), (b) Représentation de l'environnement de Rb(2).

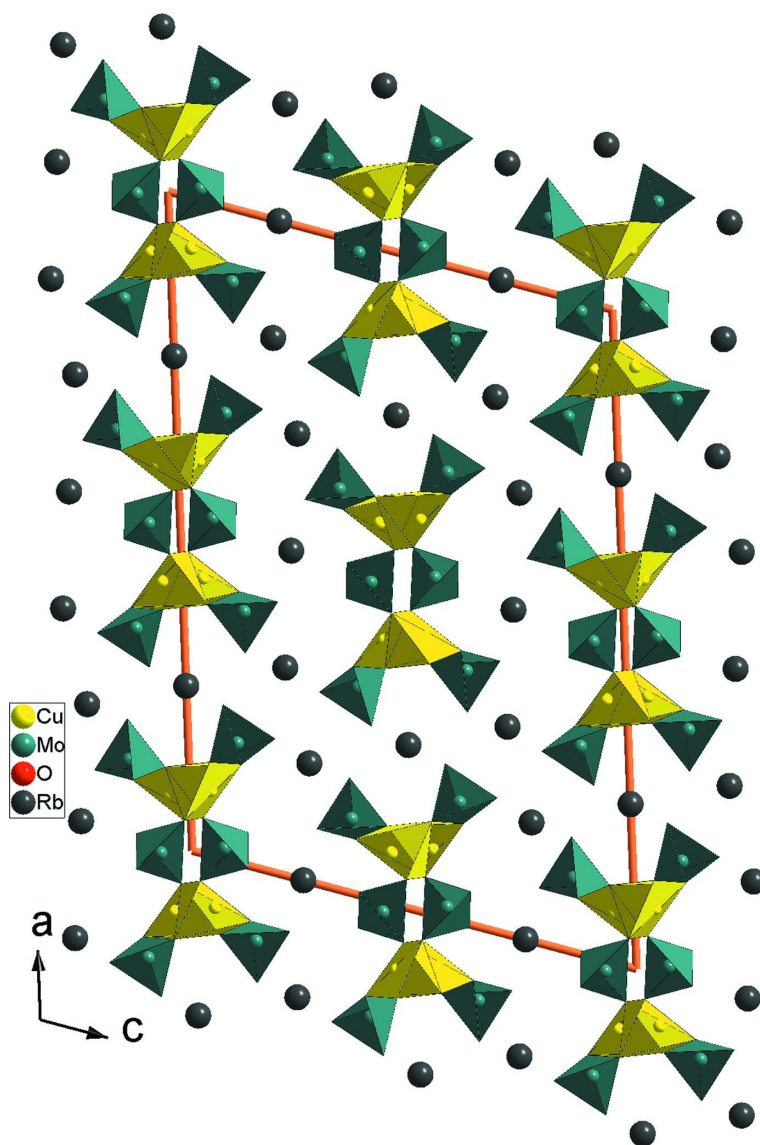


Figure 5

Projection de la structure de $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ selon b .

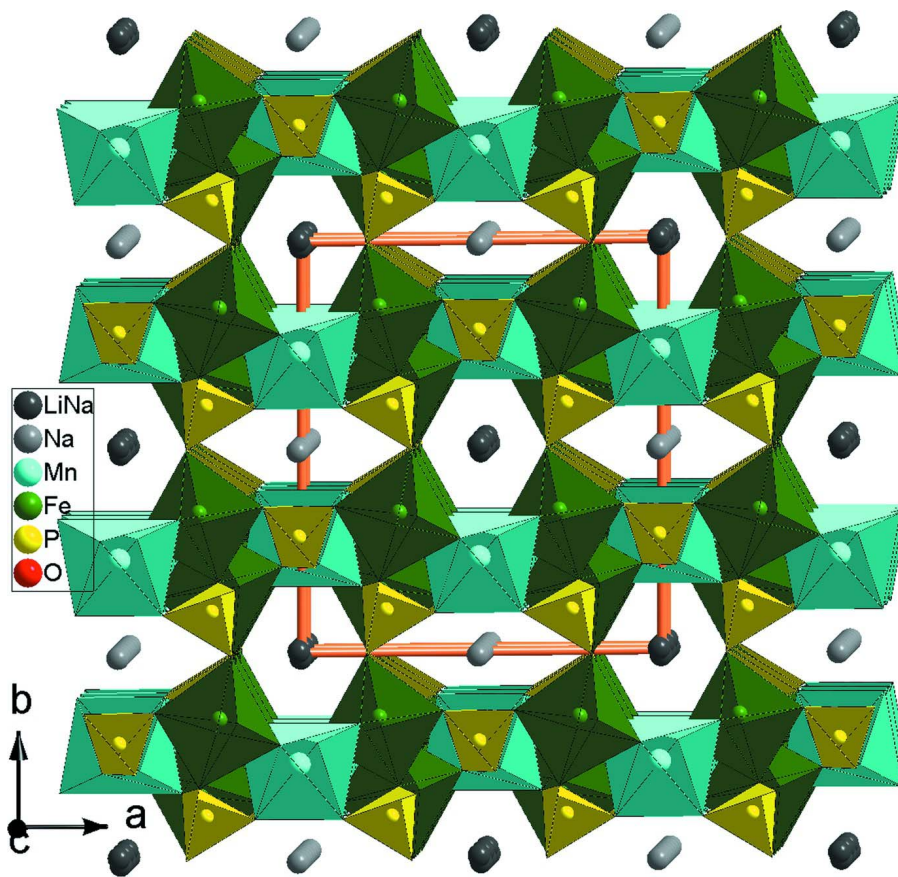


Figure 6

Projection de la structure de $\text{Na}_{0.5}\text{Li}_{0.5}\text{MnFe}_2\text{P}_3\text{O}_{12}$ type alluaudite, selon c .

Dirubidium dimanganese(II) tris(tetraoxomolybdate)

Crystal data

$\text{Rb}_2\text{Mn}_2(\text{MoO}_4)_3$

$M_r = 760.64$

Cubic, $P2_13$

Hall symbol: P 2ac 2ab 3

$a = 10.9002(9) \text{ \AA}$

$V = 1295.10(19) \text{ \AA}^3$

$Z = 4$

$F(000) = 1384$

$D_x = 3.901 \text{ Mg m}^{-3}$

Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$

Cell parameters from 25 reflections

$\theta = 11\text{--}15^\circ$

$\mu = 12.24 \text{ mm}^{-1}$

$T = 298 \text{ K}$

Prism, yellow

$0.25 \times 0.15 \times 0.10 \text{ mm}$

Data collection

Enraf–Nonius CAD-4

diffractometer

Radiation source: fine-focus sealed tube

Graphite monochromator

$\omega/2\theta$ scans

Absorption correction: ψ scan

(North *et al.*, 1968)

$T_{\min} = 0.071$, $T_{\max} = 0.210$

2949 measured reflections

916 independent reflections

838 reflections with $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.044$

$\theta_{\max} = 26.9^\circ$, $\theta_{\min} = 2.6^\circ$

$h = -13 \rightarrow 1$

$k = -1 \rightarrow 13$

$l = -13 \rightarrow 6$

2 standard reflections every 120 min

intensity decay: 1.3%

*Refinement*Refinement on F^2

Least-squares matrix: full

 $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.035$ $wR(F^2) = 0.079$ $S = 1.10$

916 reflections

59 parameters

0 restraints

Primary atom site location: structure-invariant
direct methodsSecondary atom site location: difference Fourier
map

$$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0187P)^2 + 14.7659P]$$

$$\text{where } P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$$

$$(\Delta/\sigma)_{\max} < 0.001$$

$$\Delta\rho_{\max} = 1.03 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$$

$$\Delta\rho_{\min} = -0.96 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$$

Extinction correction: *SHELXL97* (Sheldrick,
2008), $F_c^* = kF_c[1 + 0.001 \times F_c^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$

Extinction coefficient: 0.0049 (4)

Absolute structure: Flack (1983), 264 Friedel
pairs

Absolute structure parameter: 0.04 (2)

Special details

Geometry. All e.s.d.'s (except the e.s.d. in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell e.s.d.'s are taken into account individually in the estimation of e.s.d.'s in distances, angles and torsion angles; correlations between e.s.d.'s in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell e.s.d.'s is used for estimating e.s.d.'s involving l.s. planes.

Refinement. Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R -factor wR and goodness of fit S are based on F^2 , conventional R -factors R are based on F , with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > \sigma(F^2)$ is used only for calculating R -factors(gt) *etc.* and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R -factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F , and R -factors based on ALL data will be even larger.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Mo1	0.37706 (7)	0.52435 (7)	0.79714 (7)	0.0157 (2)
Mn1	0.38791 (13)	0.61209 (13)	1.11209 (13)	0.0197 (5)
Mn2	0.33762 (13)	0.83762 (13)	0.66238 (13)	0.0227 (6)
Rb1	0.04628 (12)	0.54628 (12)	0.95372 (12)	0.0487 (6)
Rb2	0.31889 (10)	0.18111 (10)	0.81889 (10)	0.0371 (5)
O1	0.3993 (13)	0.6707 (9)	0.7457 (11)	0.083 (4)
O2	0.2720 (11)	0.4448 (11)	0.7079 (10)	0.083 (4)
O3	0.3323 (11)	0.5164 (12)	0.9489 (8)	0.084 (4)
O4	0.5171 (12)	0.4546 (14)	0.7765 (13)	0.109 (5)

Atomic displacement parameters (\AA^2)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Mo1	0.0163 (4)	0.0156 (4)	0.0152 (4)	0.0025 (3)	-0.0033 (3)	-0.0012 (3)
Mn1	0.0197 (5)	0.0197 (5)	0.0197 (5)	0.0016 (6)	0.0016 (6)	-0.0016 (6)
Mn2	0.0227 (6)	0.0227 (6)	0.0227 (6)	-0.0053 (6)	0.0053 (6)	0.0053 (6)
Rb1	0.0487 (6)	0.0487 (6)	0.0487 (6)	-0.0082 (6)	0.0082 (6)	0.0082 (6)
Rb2	0.0371 (5)	0.0371 (5)	0.0371 (5)	0.0042 (5)	-0.0042 (5)	0.0042 (5)
O1	0.113 (10)	0.041 (5)	0.096 (9)	-0.022 (7)	-0.024 (8)	0.029 (6)
O2	0.099 (9)	0.098 (9)	0.051 (6)	-0.054 (7)	-0.058 (6)	0.026 (6)
O3	0.102 (9)	0.128 (10)	0.021 (4)	-0.055 (8)	0.022 (5)	-0.033 (6)
O4	0.084 (9)	0.129 (11)	0.113 (11)	0.089 (9)	-0.019 (8)	0.004 (9)

Geometric parameters (\AA , $^\circ$)

Mo1—O1	1.708 (10)	Rb1—O3 ⁱⁱⁱ	3.135 (12)
Mo1—O4	1.721 (11)	Rb1—O3 ^{ix}	3.135 (12)
Mo1—O3	1.726 (8)	Rb1—O2 ⁱⁱ	3.407 (13)
Mo1—O2	1.734 (10)	Rb1—O2 ^x	3.407 (13)
Mn1—O2 ⁱ	2.125 (10)	Rb1—O2 ^{xi}	3.407 (13)
Mn1—O2 ⁱⁱ	2.125 (10)	Rb1—O4 ^x	3.586 (13)
Mn1—O2 ⁱⁱⁱ	2.125 (10)	Rb1—O4 ⁱⁱ	3.586 (13)
Mn1—O3	2.150 (9)	Rb1—O4 ^{xi}	3.586 (13)
Mn1—O3 ^{iv}	2.150 (9)	Rb2—O1 ^{xii}	3.153 (15)
Mn1—O3 ^v	2.150 (9)	Rb2—O1 ^{xiii}	3.153 (15)
Mn2—O4 ^{vi}	2.139 (10)	Rb2—O1 ^{iv}	3.153 (15)
Mn2—O4 ^{vii}	2.139 (10)	Rb2—O2 ^{xiv}	3.160 (12)
Mn2—O4 ^{viii}	2.139 (10)	Rb2—O2	3.160 (12)
Mn2—O1 ^{ix}	2.142 (10)	Rb2—O2 ^x	3.160 (12)
Mn2—O1 ⁱⁱⁱ	2.142 (10)	Rb2—O4 ^{xii}	3.221 (17)
Mn2—O1	2.142 (10)	Rb2—O4 ^{iv}	3.221 (17)
Rb1—O3	3.135 (12)	Rb2—O4 ^{xiii}	3.221 (17)
O1—Mo1—O4	104.1 (7)	O2 ⁱⁱⁱ —Mn1—O3 ^v	91.9 (4)
O1—Mo1—O3	113.7 (6)	O3—Mn1—O3 ^v	88.2 (5)
O4—Mo1—O3	110.7 (6)	O3 ^{iv} —Mn1—O3 ^v	88.2 (5)
O1—Mo1—O2	112.1 (5)	O4 ^{vi} —Mn2—O4 ^{vii}	88.6 (5)
O4—Mo1—O2	107.0 (7)	O4 ^{vi} —Mn2—O4 ^{viii}	88.6 (5)
O3—Mo1—O2	109.0 (6)	O4 ^{vii} —Mn2—O4 ^{viii}	88.6 (5)
O2 ⁱ —Mn1—O2 ⁱⁱ	88.8 (5)	O4 ^{vi} —Mn2—O1 ^{ix}	168.3 (6)
O2 ⁱ —Mn1—O2 ⁱⁱⁱ	88.8 (5)	O4 ^{vii} —Mn2—O1 ^{ix}	98.2 (5)
O2 ⁱⁱ —Mn1—O2 ⁱⁱⁱ	88.8 (5)	O4 ^{viii} —Mn2—O1 ^{ix}	82.1 (6)
O2 ⁱ —Mn1—O3	179.2 (5)	O4 ^{vi} —Mn2—O1 ⁱⁱⁱ	82.1 (6)
O2 ⁱⁱ —Mn1—O3	91.9 (4)	O4 ^{vii} —Mn2—O1 ⁱⁱⁱ	168.3 (6)
O2 ⁱⁱⁱ —Mn1—O3	91.0 (6)	O4 ^{viii} —Mn2—O1 ⁱⁱⁱ	98.2 (5)
O2 ⁱ —Mn1—O3 ^{iv}	91.9 (4)	O1 ^{ix} —Mn2—O1 ⁱⁱⁱ	92.3 (6)
O2 ⁱⁱ —Mn1—O3 ^{iv}	91.0 (6)	O4 ^{vi} —Mn2—O1	98.2 (5)
O2 ⁱⁱⁱ —Mn1—O3 ^{iv}	179.2 (5)	O4 ^{vii} —Mn2—O1	82.1 (6)
O3—Mn1—O3 ^{iv}	88.2 (5)	O4 ^{viii} —Mn2—O1	168.3 (6)
O2 ⁱ —Mn1—O3 ^v	91.0 (6)	O1 ^{ix} —Mn2—O1	92.3 (6)
O2 ⁱⁱ —Mn1—O3 ^v	179.2 (5)	O1 ⁱⁱⁱ —Mn2—O1	92.3 (6)

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