

**Li<sub>3</sub>Al(MoO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>**

Mounir Hajji, Mohamed Faouzi Zid\* et Ahmed Driss

Laboratoire de Matériaux et Cristallographie, Faculté des Sciences, Université de Tunis ElManar, 2092 ElManar Tunis, Tunisie  
Correspondence e-mail: faouzi.zid@fst.rnu.tn

Reçu le 12 février 2009; accepté le 20 février 2009

Key indicators: single-crystal X-ray study;  $T = 298$  K; mean  $\sigma(\text{As-O}) = 0.002$  Å;  $R$  factor = 0.013;  $wR$  factor = 0.039; data-to-parameter ratio = 10.4.

Single crystals of trilithium(I) aluminium(III) bis[dioxidomolybdenum(VI)] dioxide bis[arsenate(V)], Li<sub>3</sub>Al-Mo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub>, have been prepared by solid-state reaction at 788 K. The structure consists of AsO<sub>4</sub> tetrahedra, AlO<sub>6</sub> octahedra and Mo<sub>2</sub>O<sub>10</sub> groups sharing corners to form a three-dimensional framework containing channels running respectively along the [100] and [010] directions, where the Li<sup>+</sup> ions are located. This structure is compared with compounds having (MX<sub>2</sub>O<sub>12</sub>)<sub>n</sub> chains ( $M = \text{Mo, Al and } X = \text{P, As}$ ) and others containing M<sub>2</sub>O<sub>10</sub> ( $M = \text{Mo, Fe}$ ) dimers.

**Littérature associée**

Pour le détail de la préparation, voir: Hajji *et al.* (2004, 2005); Zid *et al.* (1997, 1998). Pour le détail des composés avec structures reliées, voir: Lii *et al.* (1989); Leclaire *et al.* (1990); Driss & Jouini (1989); Guesdon *et al.* (1994); Borel *et al.* (1994); LeBail *et al.* (1995). Pour le détail des propriétés des composés reliés, voir: Manthiram & Goodenough, 1989; Tarascon *et al.*, 1991; Sigala *et al.*, 1997; Padhi *et al.*, 1997; Masquelier *et al.*, 1998. Pour le calcul des valences des liaisons, voir: Brown & Altermatt (1985)

**Partie expérimentale***Données cristallines*

Li <sub>3</sub> Al(MoO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>2</sub> (AsO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	$\gamma = 105.30$ (1)°
$M_r = 613.52$	$V = 248.92$ (9) Å <sup>3</sup>
Triclinique, $P\bar{1}$	$Z = 1$
$a = 5.213$ (1) Å	Mo $K\alpha$ radiation
$b = 5.426$ (1) Å	$\mu = 9.29$ mm <sup>-1</sup>
$c = 9.474$ (2) Å	$T = 298$ K
$\alpha = 95.98$ (2)°	$0.20 \times 0.15 \times 0.12$ mm
$\beta = 102.25$ (1)°	

*Collection des données*

Diffractomètre Enraf-Nonius TurboCAD-4	1084 réflexions indépendantes 1077 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$
Correction d'absorption: $\psi$ scan (North <i>et al.</i> , 1968)	$R_{\text{int}} = 0.007$ 2 réflexions de référence
$T_{\text{min}} = 0.209$ , $T_{\text{max}} = 0.328$	fréquence: 120 min
1663 réflexions mesurées	décroissance d'intensité: 1.1%

*Affinement*

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.013$	104 paramètres
$wR(F^2) = 0.039$	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0.64$ e Å <sup>-3</sup>
$S = 1.06$	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0.41$ e Å <sup>-3</sup>
1084 réflexions	

Collection des données: CAD-4 EXPRESS (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); affinement des paramètres de la maille: CAD-4 EXPRESS; réduction des données: XCAD4 (Harms & Wocadlo, 1995); programme(s) pour la solution de la structure: SHELXS97 (Sheldrick, 2008); programme(s) pour l'affinement de la structure: SHELXL97 (Sheldrick, 2008); graphisme moléculaire: DIAMOND (Brandenburg, 1998); logiciel utilisé pour préparer le matériel pour publication: WinGX (Farrugia, 1999).

Des documents complémentaires et figures concernant cette structure peuvent être obtenus à partir des archives électroniques de 'UICr (Référence: BR2097).

**Références**

- Borel, M. M., Guesdon, A., Leclaire, A., Grandin, A. & Raveau, B. (1994). *Z. Anorg. Allg. Chem.* **620**, 569–573.
- Brandenburg, K. (1998). *DIAMOND*. University of Bonn, Germany.
- Brown, I. D. & Altermatt, D. (1985). *Acta Cryst.* **B41**, 244–247.
- Driss, A. & Jouini, T. (1989). *Acta Cryst.* **C45**, 356–360.
- Duisenberg, A. J. M. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 92–96.
- Farrugia, L. J. (1999). *J. Appl. Cryst.* **32**, 837–838.
- Guesdon, A., Borel, M. M., Leclaire, A., Grandin, A. & Raveau, B. (1994). *J. Solid State Chem.* **109**, 145–151.
- Hajji, M., Zid, M. F., Driss, A. & Jouini, T. (2004). *Acta Cryst.* **C60**, i76–i78.
- Hajji, M., Zid, M. F. & Jouini, T. (2005). *Acta Cryst.* **C61**, i57–i58.
- Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. University of Marburg, Germany.
- LeBail, A., Perrier, L. & Lalignant, Y. (1995). *Eur. J. Solid State Inorg. Chem.* **32**, 883–892.
- Leclaire, A., Borel, M. M., Grandin, A. & Raveau, B. (1990). *Acta Cryst.* **C46**, 1368–1370.
- Lii, K.-H., Chen, J. J. & Wang, S.-L. (1989). *J. Solid State Chem.* **78**, 178–183.
- Macíček, J. & Yordanov, A. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 73–80.
- Manthiram, A. & Goodenough, J. B. (1989). *J. Power Sources*, **26**, 403–408.
- Masquelier, C., Padhi, A. K., Nanjundaswamy, K. S. & Goodenough, J. B. (1998). *J. Solid State Chem.* **135**, 228–234.
- North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
- Padhi, A. K., Nanjundaswamy, K. S., Masquelier, C. & Goodenough, J. B. (1997). *J. Electrochem. Soc.* **144**, 2581–2586.
- Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* **A64**, 112–122.
- Sigala, C., Verbaere, A., Mansot, J. L., Guyomard, D., Piffard, Y. & Tournoux, M. (1997). *J. Solid State Chem.* **132**, 372–381.
- Tarascon, J.-M., Wang, E., Shokoohi, F. K., McKinnon, W. R. & Colson, S. (1991). *J. Electrochem. Soc.* **138**, 2859–2864.
- Zid, M. F., Driss, A. & Jouini, T. (1997). *J. Solid State Chem.* **133**, 386–390.
- Zid, M. F., Driss, A. & Jouini, T. (1998). *J. Solid State Chem.* **141**, 500–507.

**supplementary materials**

*Acta Cryst.* (2009). E65, i21 [ doi:10.1107/S160053680900631X ]

## **Li<sub>3</sub>Al(MoO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>(AsO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>**

**M. Hajji, M. F. Zid et A. Driss**

### **Comment**

Les oxydes mixtes au lithium présentent un intérêt pratique potentiel du fait de leurs utilisations comme électrolytes solides ou électrodes positives dans les batteries au lithium (Manthiram & Goodenough, 1989; Tarascon *et al.*, 1991; Sigala *et al.*, 1997; Padhi *et al.*, 1997; Masquelier *et al.*, 1998). Dans ce cadre, nous avons entrepris l'exploration du diagramme Li–Mo–As–O dans lequel nous avons précédemment caractérisé les composés  $\beta$ -LiMoO<sub>2</sub>AsO<sub>4</sub> (Hajji *et al.*, 2004) et Li(MoO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>OAsO<sub>4</sub> (Hajji *et al.*, 2005). Un nouvel oxyde mixte de formulation Li<sub>3</sub>AlMo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub> a été également obtenu par réaction à l'état solide au cours de la synthèse de la phase visée Li<sub>2</sub>MoO<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>7</sub> de formulation analogue à K<sub>2</sub>MoO<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (Zid *et al.*, 1997) ou bien Rb<sub>2</sub>MoO<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (Zid *et al.*, 1998) ayant des structures à charpentes anioniques bidimensionnelles.

L'unité asymétrique dans le composé Li<sub>3</sub>AlMo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub> est constituée de deux octaèdres MoO<sub>6</sub> reliés par une arête, de deux tétraèdres AsO<sub>4</sub> et d'un octaèdre AlO<sub>6</sub> partageant des sommets (Fig. 1). La structure peut être décrite à partir de chaînes infinies (AlAs<sub>2</sub>O<sub>12</sub>), parallèles à la direction [100], reliées entre elles par des bioctaèdres Mo<sub>2</sub>O<sub>10</sub> pour former une charpente tridimensionnelle délimitant des tunnels, disposés respectivement selon *a* (Fig. 2) et suivant la direction *b* (Fig. 3), où résident les cations Li<sup>+</sup>. Le calcul des différentes valences des liaisons utilisant la formule empirique de Brown (Brown & Altermatt, 1985) vérifie bien les valeurs de charges des ions Mo (5,95), As (4,88), Al (3,02) et Li (1,05) dans la phase étudiée.

La comparaison de la structure du composé étudié avec celles des travaux antérieurs montre quelques points communs. En effet, les chaînes de type (MX<sub>2</sub>O<sub>12</sub>)<sub>n</sub> sont rencontrées dans les composés de formulation AM<sub>2</sub>(X<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)<sub>2</sub> (M = Mo, Al; X = P, As; A = Na et K) (Lii *et al.*, 1989; Leclaire *et al.*, 1990; Driss & Jouini, 1989). Dans ces derniers un octaèdre MO<sub>6</sub> partage ses sommets avec quatre groupements X<sub>2</sub>O<sub>7</sub>. Par contre, il met en commun dans la phase étudiée, ses six sommets avec seulement quatre unités AsMoO<sub>9</sub> différentes. Cette différence est essentiellement due au remplacement d'un tétraèdre XO<sub>4</sub> par un octaèdre MoO<sub>6</sub>. De même, les groupements M<sub>2</sub>O<sub>10</sub> sont rencontrés dans les composés de formulation AMo<sub>3</sub>P<sub>2</sub>O<sub>14</sub> (A = Na, K) sous forme de Mo<sub>2</sub>O<sub>10</sub> (Guesdon *et al.*, 1994; Borel *et al.*, 1994) ou bien dans la structure du FeVMoO<sub>7</sub> sous forme de Fe<sub>2</sub>O<sub>10</sub> (LeBail *et al.*, 1995). Ces derniers phosphates présentent des structures bidimensionnelles dont les groupements Mo<sub>2</sub>O<sub>10</sub> partagent leurs sommets avec les polyèdres PO<sub>4</sub> et MoO<sub>6</sub>. Dans le composé FeVMoO<sub>7</sub>, chaque dimère Fe<sub>2</sub>O<sub>10</sub> partage ses dix sommets avec quatre tétraèdres MoO<sub>4</sub> et six tétraèdres VO<sub>4</sub>. Une différence nette est donc observée dans le comportement des dimères M<sub>2</sub>O<sub>10</sub> rencontrés dans notre structure et celles de la bibliographie. En effet, chaque groupement Mo<sub>2</sub>O<sub>10</sub> dans la charpente de Li<sub>3</sub>AlMo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub> ne partage ses sommets qu'avec seulement deux tétraèdres AsO<sub>4</sub> et deux octaèdres AlO<sub>6</sub> et conduit, contrairement aux autres composés, à une structure très ouverte. Cette caractéristique structurale, ainsi que la disposition des cations Li<sup>+</sup> dans des larges canaux (Fig. 2 et 3), favorisent la mobilité de ces ions Li<sup>+</sup> et laisse présager la propriété de conductivité ionique pour le composé Li<sub>3</sub>AlMo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub>. Afin d'utiliser ces données structurales et les relier aux propriétés physico-chimiques, en particulier de conduction ionique, et dès l'obtention d'une phase polycristalline pure du Li<sub>3</sub>AlMo<sub>2</sub>As<sub>2</sub>O<sub>14</sub>, des mesures électriques moyennant un pont d'impédance complexe de type HP4192A seront réalisées.

## Experimental

La stoechiométrie du mélange réactionnel est destinée en premier à la synthèse du composé  $\text{Li}_2\text{MoAs}_2\text{O}_9$ . Les réactifs de départ  $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$  (préparé au laboratoire, ASTM 01-0775),  $(\text{NH}_4)_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$  (Fluka, 85%),  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  (Fluka, 99%) ont été pris dans les proportions  $\text{Li}:\text{Mo}:\text{As} = 2:1:2$ . Le mélange, finement broyé, a été mis dans un creuset en porcelaine, placé dans un four puis préchauffé à l'air à 623 K pendant 24 heures en vue d'éliminer les composés volatils. Le résidu final est porté à la fusion (813 K) par accident, où une attaque du creuset en porcelaine a eu lieu, puis refroidi lentement jusqu'à 778 K. Il est abondonné à cette température durant trois jours pour favoriser la cristallisation. Le résidu final a subi en premier un refroidissement lent ( $5^\circ/\text{h}$ ) jusqu'à 738 K puis un second rapide ( $50^\circ/\text{h}$ ) jusqu'à la température ambiante. Quelques cristaux jaunâtres, de taille suffisante pour les mesures des intensités, ont été séparés du flux par l'eau bouillante. L'analyse des données de diffraction des rayons-X sur monocristal, les paramètres géométriques ainsi que la qualité des résultats trouvés confirment la présence de l'aluminium dans la structure. Cet élément est probablement diffusé dans le cristal choisi, à partir du creuset en porcelaine.

## Figures

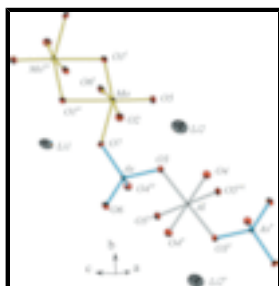


Fig. 1. Unité structurale dans  $\text{Li}_3\text{AlMo}_2\text{As}_2\text{O}_{14}$ . Les ellipsoïdes d'agitation thermique ont 50% de probabilité. [Codes de symétrie: (i)  $x, y + 1, z$ ; (ii)  $-x + 1, -y + 1, -z + 1$ ; (iii)  $-x + 1, -y + 2, -z + 1$ ; (iv)  $x - 1, y, z$ ; (v)  $-x + 1, -y, -z$ ; (vi)  $x, y - 1, z$ ; (vii)  $-x + 1, -y + 1, -z$ .]

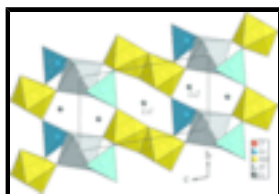


Fig. 2. Projection de la structure de  $\text{Li}_3\text{AlMo}_2\text{As}_2\text{O}_{14}$  selon  $a$  montrant les deux types de canaux où logent les cations  $\text{Li}^+$ .

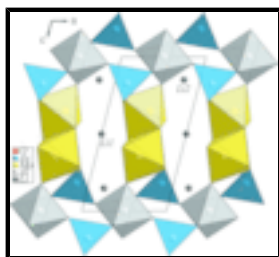


Fig. 3. Projection de la structure de  $\text{Li}_3\text{AlMo}_2\text{As}_2\text{O}_{14}$  selon  $b$  montrant les larges canaux où résident les cations  $\text{Li}^+$ .

## trilithium(I) aluminium(III) bis[dioxidomolybdenum(VI)] dioxide bis[arsenate(V)]

### Crystal data

$\text{Li}_3\text{Al}(\text{MoO}_2)_2\text{O}_2(\text{AsO}_4)_2$

$M_r = 613.52$

Triclinic,  $P\bar{1}$

$Z = 1$

$F_{000} = 284$

$D_x = 4.093 \text{ Mg m}^{-3}$

Hall symbol: -P 1

$a = 5.213$  (1) Å

$b = 5.426$  (1) Å

$c = 9.474$  (2) Å

$\alpha = 95.98$  (2)°

$\beta = 102.25$  (1)°

$\gamma = 105.30$  (1)°

$V = 248.92$  (9) Å<sup>3</sup>

Mo  $K\alpha$  radiation

$\lambda = 0.71073$  Å

Cell parameters from 25 reflections

$\theta = 10\text{--}16^\circ$

$\mu = 9.29$  mm<sup>-1</sup>

$T = 298$  K

Prism, yellow

$0.20 \times 0.15 \times 0.12$  mm

### Data collection

Enraf–Nonius TurboCAD-4  
diffractometer

Radiation source: fine-focus sealed tube

Monochromator: graphite

$T = 298$  K

$\omega/2\theta$  scans

Absorption correction:  $\psi$  scan  
(North *et al.*, 1968)

$T_{\min} = 0.209$ ,  $T_{\max} = 0.328$

1663 measured reflections

1084 independent reflections

1077 reflections with  $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.007$

$\theta_{\max} = 27.0^\circ$

$\theta_{\min} = 2.2^\circ$

$h = -2 \rightarrow 6$

$k = -6 \rightarrow 6$

$l = -12 \rightarrow 12$

2 standard reflections

every 120 min

intensity decay: 1.1%

### Refinement

Refinement on  $F^2$

Least-squares matrix: full

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.013$

$wR(F^2) = 0.039$

$S = 1.06$

1084 reflections

104 parameters

Primary atom site location: structure-invariant direct  
methods

Secondary atom site location: difference Fourier map

$$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.021P)^2 + 0.6735P]$$

where  $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$

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

$\Delta\rho_{\max} = 0.64$  e Å<sup>-3</sup>

$\Delta\rho_{\min} = -0.41$  e Å<sup>-3</sup>

Extinction correction: SHELXL97 (Sheldrick, 2008),

$$F_c^* = kFc[1 + 0.001xFc^2\lambda^3/\sin(2\theta)]^{-1/4}$$

Extinction coefficient: 0.0263 (14)

### 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  $R$ -

## supplementary materials

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 ( $\text{\AA}^2$ )

	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Mo	0.49876 (4)	0.84099 (4)	0.35495 (2)	0.00633 (9)
As	0.15020 (5)	0.23501 (5)	0.17692 (3)	0.00601 (10)
Al	0.5000	0.0000	0.0000	0.0026 (2)
Li1	0.0000	0.5000	0.5000	0.0225 (16)
Li2	0.8077 (14)	0.6121 (14)	0.1486 (9)	0.0392 (16)
O1	0.6756 (4)	0.1635 (4)	0.4618 (2)	0.0099 (4)
O2	0.7195 (4)	0.6684 (4)	0.4132 (2)	0.0132 (4)
O3	0.4158 (4)	0.2923 (4)	0.0959 (2)	0.0109 (4)
O4	0.8654 (4)	0.2067 (4)	0.0441 (2)	0.0110 (4)
O5	0.5596 (4)	0.8659 (4)	0.1781 (2)	0.0098 (4)
O6	0.1363 (4)	-0.0156 (4)	0.2672 (2)	0.0101 (4)
O7	0.1633 (4)	0.5095 (4)	0.2895 (2)	0.0106 (4)

### Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Mo	0.00695 (13)	0.00664 (13)	0.00518 (13)	0.00175 (8)	0.00146 (8)	0.00074 (8)
As	0.00626 (14)	0.00629 (14)	0.00524 (14)	0.00179 (10)	0.00123 (10)	0.00057 (9)
Al	0.0027 (5)	0.0038 (4)	0.0011 (4)	0.0005 (4)	0.0004 (3)	0.0002 (3)
Li1	0.018 (4)	0.018 (4)	0.031 (4)	0.007 (3)	-0.001 (3)	0.011 (3)
Li2	0.031 (3)	0.031 (3)	0.063 (5)	0.017 (3)	0.014 (3)	0.017 (3)
O1	0.0108 (9)	0.0086 (9)	0.0086 (8)	0.0001 (7)	0.0024 (7)	0.0012 (7)
O2	0.0137 (10)	0.0127 (9)	0.0146 (10)	0.0055 (8)	0.0035 (8)	0.0044 (8)
O3	0.0115 (9)	0.0094 (9)	0.0126 (9)	0.0020 (7)	0.0067 (7)	0.0010 (7)
O4	0.0086 (9)	0.0135 (9)	0.0092 (9)	0.0025 (7)	-0.0009 (7)	0.0025 (7)
O5	0.0093 (9)	0.0115 (9)	0.0083 (9)	0.0020 (7)	0.0025 (7)	0.0020 (7)
O6	0.0099 (9)	0.0110 (9)	0.0114 (9)	0.0044 (7)	0.0032 (7)	0.0061 (7)
O7	0.0109 (9)	0.0086 (9)	0.0108 (9)	0.0004 (7)	0.0048 (7)	-0.0023 (7)

### Geometric parameters ( $\text{\AA}$ , $^\circ$ )

Mo—O2	1.707 (2)	Al—O3 <sup>v</sup>	1.942 (2)
Mo—O5	1.782 (2)	Al—O3	1.942 (2)
Mo—O1 <sup>i</sup>	1.822 (2)	Li1—O2 <sup>ii</sup>	2.000 (2)
Mo—O7	2.080 (2)	Li1—O2 <sup>iv</sup>	2.000 (2)
Mo—O1 <sup>ii</sup>	2.123 (2)	Li1—O1 <sup>ii</sup>	2.073 (2)
Mo—O6 <sup>i</sup>	2.261 (2)	Li1—O1 <sup>iv</sup>	2.073 (2)
Mo—Mo <sup>iii</sup>	3.0849 (8)	Li1—O7 <sup>viii</sup>	2.328 (2)
As—O6	1.6737 (19)	Li1—O7	2.328 (2)
As—O4 <sup>iv</sup>	1.6903 (19)	Li2—O5	2.159 (7)
As—O3	1.6960 (19)	Li2—O3	2.225 (7)

As—O7	1.7164 (19)	Li2—O6 <sup>ix</sup>	2.272 (8)
Al—O4 <sup>v</sup>	1.870 (2)	Li2—O7 <sup>x</sup>	2.275 (7)
Al—O4	1.870 (2)	Li2—O4	2.435 (7)
Al—O5 <sup>vi</sup>	1.905 (2)	Li2—O3 <sup>vii</sup>	2.533 (8)
Al—O5 <sup>vii</sup>	1.905 (2)	Li2—O2	2.645 (8)
O2—Mo—O5	98.47 (9)	O2 <sup>ii</sup> —Li1—O2 <sup>iv</sup>	180.000 (1)
O2—Mo—O1 <sup>i</sup>	102.62 (9)	O2 <sup>ii</sup> —Li1—O1 <sup>ii</sup>	86.18 (8)
O5—Mo—O1 <sup>i</sup>	104.19 (9)	O2 <sup>iv</sup> —Li1—O1 <sup>ii</sup>	93.82 (8)
O2—Mo—O7	92.53 (9)	O2 <sup>ii</sup> —Li1—O1 <sup>iv</sup>	93.82 (8)
O5—Mo—O7	96.70 (8)	O2 <sup>iv</sup> —Li1—O1 <sup>iv</sup>	86.18 (8)
O1 <sup>i</sup> —Mo—O7	151.88 (8)	O1 <sup>ii</sup> —Li1—O1 <sup>iv</sup>	180.0
O2—Mo—O1 <sup>ii</sup>	96.79 (9)	O2 <sup>ii</sup> —Li1—O7 <sup>viii</sup>	90.24 (8)
O5—Mo—O1 <sup>ii</sup>	163.86 (8)	O2 <sup>iv</sup> —Li1—O7 <sup>viii</sup>	89.76 (8)
O1 <sup>i</sup> —Mo—O1 <sup>ii</sup>	77.39 (9)	O1 <sup>ii</sup> —Li1—O7 <sup>viii</sup>	106.95 (7)
O7—Mo—O1 <sup>ii</sup>	77.39 (7)	O1 <sup>iv</sup> —Li1—O7 <sup>viii</sup>	73.05 (7)
O2—Mo—O6 <sup>i</sup>	167.49 (8)	O2 <sup>ii</sup> —Li1—O7	89.76 (8)
O5—Mo—O6 <sup>i</sup>	83.83 (8)	O2 <sup>iv</sup> —Li1—O7	90.24 (7)
O1 <sup>i</sup> —Mo—O6 <sup>i</sup>	88.62 (8)	O1 <sup>ii</sup> —Li1—O7	73.05 (7)
O7—Mo—O6 <sup>i</sup>	74.97 (8)	O1 <sup>iv</sup> —Li1—O7	106.95 (7)
O1 <sup>ii</sup> —Mo—O6 <sup>i</sup>	80.14 (7)	O7 <sup>viii</sup> —Li1—O7	180.0
O6—As—O4 <sup>iv</sup>	115.31 (9)	O5—Li2—O3	85.6 (3)
O6—As—O3	112.28 (9)	O5—Li2—O6 <sup>ix</sup>	79.0 (2)
O4 <sup>iv</sup> —As—O3	106.27 (9)	O3—Li2—O6 <sup>ix</sup>	158.9 (4)
O6—As—O7	111.28 (10)	O5—Li2—O7 <sup>x</sup>	136.7 (4)
O4 <sup>iv</sup> —As—O7	100.31 (10)	O3—Li2—O7 <sup>x</sup>	112.7 (3)
O3—As—O7	110.70 (9)	O6 <sup>ix</sup> —Li2—O7 <sup>x</sup>	71.1 (2)
O4 <sup>v</sup> —Al—O4	180.00 (15)	O5—Li2—O4	151.9 (4)
O4 <sup>v</sup> —Al—O5 <sup>vi</sup>	88.07 (8)	O3—Li2—O4	68.8 (2)
O4—Al—O5 <sup>vi</sup>	91.93 (8)	O6 <sup>ix</sup> —Li2—O4	128.6 (3)
O4 <sup>v</sup> —Al—O5 <sup>vii</sup>	91.93 (8)	O7 <sup>x</sup> —Li2—O4	67.36 (19)
O4—Al—O5 <sup>vii</sup>	88.07 (8)	O5—Li2—O3 <sup>vii</sup>	69.4 (2)
O5 <sup>vi</sup> —Al—O5 <sup>vii</sup>	180.00 (10)	O3—Li2—O3 <sup>vii</sup>	81.2 (3)
O4 <sup>v</sup> —Al—O3 <sup>v</sup>	87.61 (9)	O6 <sup>ix</sup> —Li2—O3 <sup>vii</sup>	106.3 (3)
O4—Al—O3 <sup>v</sup>	92.39 (9)	O7 <sup>x</sup> —Li2—O3 <sup>vii</sup>	148.8 (4)
O5 <sup>vi</sup> —Al—O3 <sup>v</sup>	88.69 (8)	O4—Li2—O3 <sup>vii</sup>	94.6 (3)
O5 <sup>vii</sup> —Al—O3 <sup>v</sup>	91.31 (8)	O5—Li2—O2	65.9 (2)
O4 <sup>v</sup> —Al—O3	92.39 (9)	O3—Li2—O2	84.0 (2)
O4—Al—O3	87.61 (9)	O6 <sup>ix</sup> —Li2—O2	76.6 (3)
O5 <sup>vi</sup> —Al—O3	91.31 (8)	O7 <sup>x</sup> —Li2—O2	77.0 (2)
O5 <sup>vii</sup> —Al—O3	88.69 (8)	O4—Li2—O2	120.1 (3)
O3 <sup>v</sup> —Al—O3	180.00 (12)	O3 <sup>vii</sup> —Li2—O2	133.7 (3)

## supplementary materials

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

Fig. 1

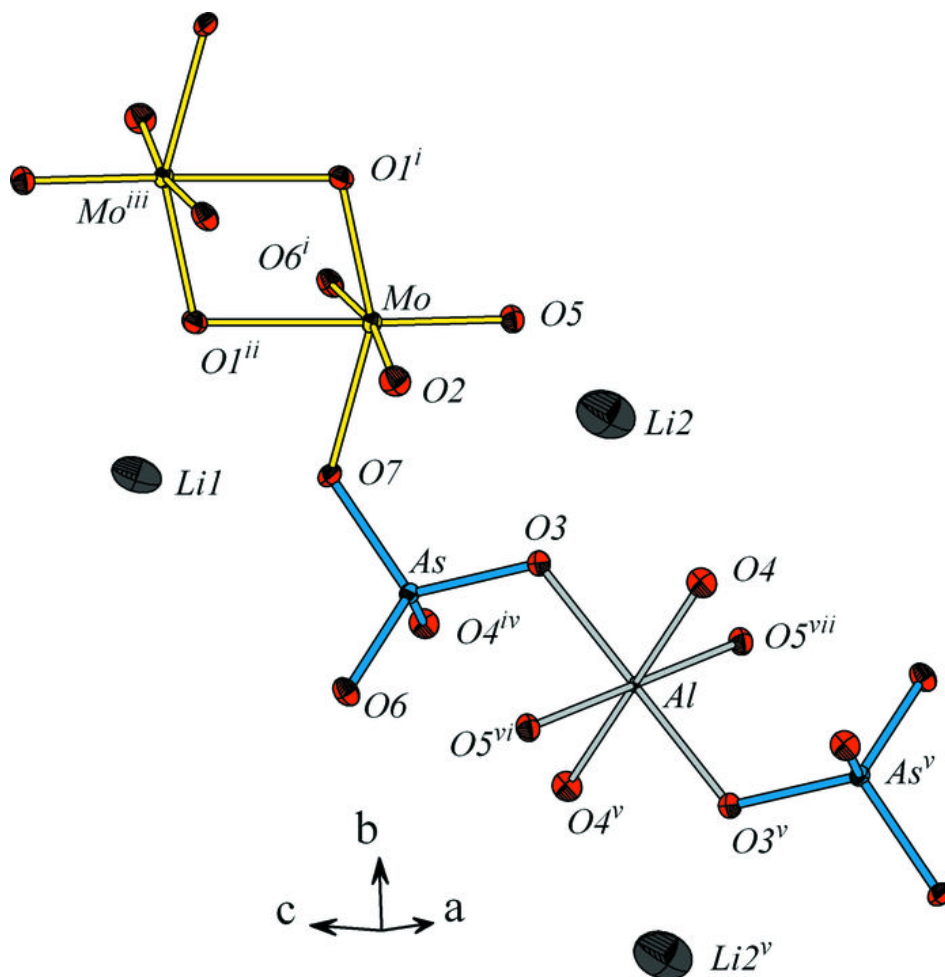




Fig. 2

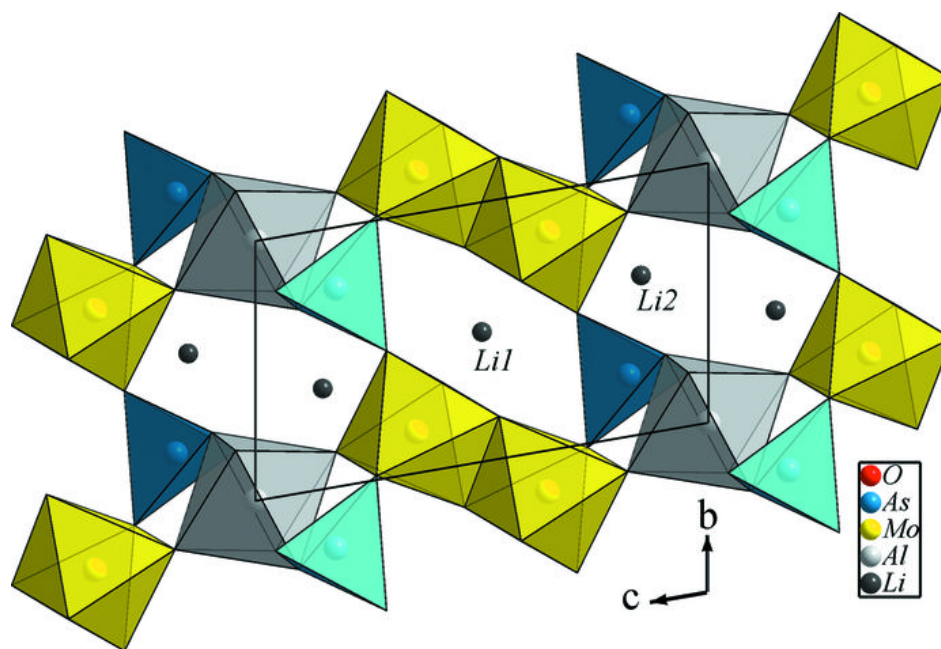


Fig. 3

