

Acta Crystallographica Section E

Structure Reports

Online

ISSN 1600-5368

Li₃Al(MoO₂)₂O₂(AsO₄)₂

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)], Li₃Al-Mo₂As₂O₁₄, have been prepared by solid-state reaction at 788 K. The structure consists of AsO₄ tetrahedra, AlO₆ octahedra and Mo₂O₁₀ groups sharing corners to form a three-dimensional framework containing channels running respectively along the [100] and [010] directions, where the Li⁺ ions are located. This structure is compared with compounds having (MX₂O₁₂)_n chains ($M = \text{Mo, Al and } X = \text{P, As}$) and others containing M₂O₁₀ ($M = \text{Mo, Fe}$) 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 ₃ Al(MoO ₂) ₂ O ₂ (AsO ₄) ₂	$\gamma = 105.30$ (1)°
$M_r = 613.52$	$V = 248.92$ (9) Å ³
Triclinique, $P\bar{1}$	$Z = 1$
$a = 5.213$ (1) Å	Mo $K\alpha$ radiation
$b = 5.426$ (1) Å	$\mu = 9.29$ mm ⁻¹
$c = 9.474$ (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	1084 réflexions indépendantes
TurboCAD-4	1077 réflexions avec $I > 2\sigma(I)$
Correction d'absorption: ψ scan	$R_{\text{int}} = 0.007$
(North <i>et al.</i> , 1968)	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 ⁻³
$S = 1.06$	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0.41$ e Å ⁻³
1084 réflexions	

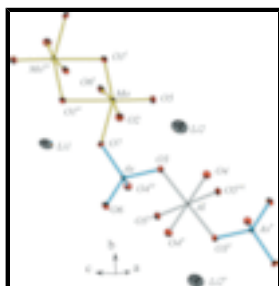
Collection des données: CAD-4 EXPRESS (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); affinement des paramètres de la maille: CAD-4 EXPRESS; réduction des données: XCAD4 (Harms & Wocadlo, 1995); programme(s) pour la solution de la structure: SHELXS97 (Sheldrick, 2008); programme(s) pour l'affinement de 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).

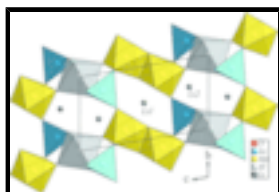
Références

- 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.

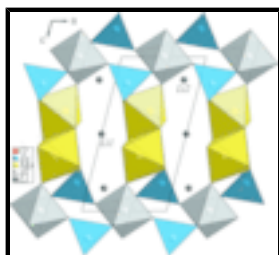
% !+ % !! ! ! >(5 6! ? %% \$
 189 5 68 ' 5/.(8 Q0 6 = KD9 O ,; RM 6 D O P !
 ! Q(Q5 J Q Q !+ \$! ! ' ! ! %
 ! \$ % \$\$ > 3 > C = @ ! ! 8 ! & 3 ! %
 > \$! , = @ %% ! F ! # % ! % !
 R ' ! !! > % ! : \$ & % !
 \$! ! ;ST : # 3> 0=, @ ! % ! ; ST : # 3>
 : !V \$\$! ! ! ! ! \$
 !! \$\$ % ! ! W ! % ? + # ! #
 % ! \$! ! % 3 ! ! % M ! ' ! \$ \$
 % ! % !



D + <! % =5 (5 16 8 X 3 + ! # !
 ; P ' ' M G -Q G G G - G
 G G - & - & G - & - & G G



D + 1 : % ! =5 (% 6 8 ! ! !
 % ! F + ! G% !



D + = 1 : % ! =5 (% 6 8 ! ! ! + % ! F
 ! % G !

=5 (6 6 5 6

J C = ;

. % ! %

J

J , 8

J 8 = (7

