

Acta Crystallographica Section E

Structure Reports

Online

ISSN 1600-5368

Lithium vanado(V)molybdate(VI), Li[VMoO₆]

 Safa Ezzine Yahmed, Rawia Nasri, Mohamed Faouzi Zid*
and Ahmed Driss

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

Received 27 May 2013; accepted 9 August 2013

 Key indicators: single-crystal X-ray study; $T = 298$ K; mean $\sigma(I) = 0.000$ Å; disorder in main residue; R factor = 0.018; wR factor = 0.052; data-to-parameter ratio = 11.8.

Brannerite-type Li[VMoO₆] has been synthesized by a solid state reaction route. The V and Mo atoms statistically occupy the same site with mirror symmetry and are octahedrally surrounded by O atoms. The framework is two-dimensional and is built up from edge-sharing (V,Mo)O₆ octahedra forming (VMoO₆)_∞ layers that run parallel to the (001) plane. Li⁺ ions are situated in position with symmetry $2/m$ in the interlayer space. The bond-valence analysis reveals that the Li⁺ ionic conductivity is along the [010] and [110] directions, and shows that this material may have interesting conduction properties. This simulation proposes a model of the lithium conduction pathways.

Related literature

For background to lithium-ion batteries, see: Delmas *et al.* (1999); Cabana *et al.* (2003); Yin *et al.* (2003); Morgan *et al.* (2002); Gaubicher *et al.* (2000); Sato *et al.* (2000); Fu *et al.* (2010); Mikhailova *et al.* (2010). For details of structural relationships with other compounds, see: Andersson & Magnéli (1950); Darriet & Galy (1968); Karen *et al.* (2006); Knyazev *et al.* (2009); Mocala & Ziolkowski (1987); Mucha *et al.* (1999); Ruh & Wadsley (1966); Shklover *et al.* (1996). For details of the bond-valence method, see: Brown, (2002). For BVS pathway simulation, see: Mazza *et al.* (2002); Ben Smida *et al.* (2013); Mazza (2001); Ouerfelli *et al.* (2007a,b).

Experimental

Crystal data

LiMoVO ₆	$V = 211.87(4) \text{ \AA}^3$
$M_r = 249.82$	$Z = 2$
Monoclinic, $C2/m$	Mo $K\alpha$ radiation
$a = 9.3555(9) \text{ \AA}$	$\mu = 5.10 \text{ mm}^{-1}$
$b = 3.6432(5) \text{ \AA}$	$T = 298 \text{ K}$
$c = 6.6887(7) \text{ \AA}$	$0.29 \times 0.22 \times 0.14 \text{ mm}$
$\beta = 111.669(6)^\circ$	

Data collection

Enraf–Nonius CAD4	354 independent reflections
diffractometer	350 reflections with $I > 2\sigma(I)$
Absorption correction: ψ scan	$R_{\text{int}} = 0.018$
(North <i>et al.</i> , 1968)	2 standard reflections
$T_{\text{min}} = 0.274$, $T_{\text{max}} = 0.498$	every 120 min
876 measured reflections	intensity decay: 1.1%

Refinement

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.018$	30 parameters
$wR(F^2) = 0.052$	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0.90 \text{ e \AA}^{-3}$
$S = 1.16$	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0.57 \text{ e \AA}^{-3}$
354 reflections	

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, 1998); software used to prepare material for publication: *WinGX* (Farrugia, 2012).

Supplementary data and figures for this paper are available from the IUCr electronic archives (Reference: RU2052).

References

- Andersson, G. & Magnéli, A. (1950). *Acta Chem. Scand.* **4**, 793–797.
 Ben Smida, Y., Guesmi, A. & Driss, A. (2013). *Acta Cryst.* **E69**, i39.
 Brandenburg, K. (1998). *DIAMOND*. University of Bonn, Germany.
 Brown, I. D. (2002). *The Chemical Bond in Inorganic Chemistry – The Bond Valence Model*, IUCr Monographs on Crystallography, No. 12. Oxford University Press.
 Cabana, J., Rousse, G., Fuentès, A. & Rosa Palacin, M. (2003). *J. Mater. Chem.* **13**, 2402–2404.
 Darriet, B. & Galy, J. (1968). *Bull. Soc. Fr. Minér. Crist.* **91**, 325–331.
 Delmas, C., Ménétrier, M., Croguennec, L., Levasseur, S., Pèrès, J. P., Poullierie, C., Prado, G., Fournès, L. & Weill, F. (1999). *Int. J. Inorg. Mater.* **1**, 11–19.
 Duisenberg, A. J. M. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 92–96.
 Farrugia, L. J. (2012). *J. Appl. Cryst.* **45**, 849–854.
 Fu, P., Zhao, Y., Dong, Y. & Hou, X. (2010). *J. Phys. Chem. Solids*, **71**, 394–399.
 Gaubicher, J., Wurm, C., Goward, G., Masquelier, C. & Nazar, L. (2000). *Chem. Mater.* **12**, 3240–3242.
 Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. University of Marburg, Germany.
 Karen, P., Moodenbaugh, A. R., Goldberger, J., Santhosh, P. N. & Woodward, P. M. (2006). *J. Solid State Chem.* **197**, 2120–2125.
 Knyazev, A. V., Maczka, M., Smirnova, N. N., Macalik, L., Kurznetsova, N. Yu. & Letyanina, I. A. (2009). *J. Solid State Chem.* **182**, 3003–3012.
 Macíček, J. & Yordanov, A. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 73–80.
 Mazza, D. (2001). *J. Solid State Chem.* **156**, 154–160.
 Mazza, D., Ronchetti, S., Bohnkè, O., Duroy, H. & Fourquet, J. L. (2002). *Solid State Ionics*, **149**, 81–88.
 Mikhailova, D., Sarapulova, A., Voss, A., Thomas, A., Oswald, S., Gruner, W., Trots, D. M., Bramnik, N. N. & Ehrenberg, H. (2010). *Chem. Mater.* **22**, 3165–3173.
 Mocala, K. & Ziolkowski, J. (1987). *J. Solid State Chem.* **69**, 299–311.
 Morgan, D., Ceder, G., Saidi, M. Y., Swoyer, J., Huang, H. & Adamson, G. (2002). *Chem. Mater.* **14**, 4684–4693.
 Mucha, D., Olszewski, P. K. & Napruszewska, B. (1999). *J. Solid State Chem.* **146**, 197–201.
 North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
 Ouerfelli, N., Guesmi, A., Mazza, D., Madani, A., Zid, M. F. & Driss, A. (2007a). *J. Solid State Chem.* **180**, 1224–1229.
 Ouerfelli, N., Guesmi, A., Mazza, D., Madani, A., Zid, M. F. & Driss, A. (2007b). *J. Solid State Chem.* **180**, 2942–2947.
 Ruh, R. & Wadsley, A. D. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 974–978.

Sato, M., Ohkawa, H., Yoshida, K., Saito, M., Uematsu, K. & Toda, K. (2000). *Solid State Ionics*, **135**, 137–142.

Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* **A64**, 112–122.

Shklover, V., Haibach, T., Ried, F., Nesper, R. & Novak, P. (1996). *J. Solid State Chem.* **123**, 317–323.

Yin, S. C., Grondy, H., Strobel, P., Anne, M. & Nazar, L. F. (2003). *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 10402–10411.

supplementary materials

Acta Cryst. (2013). E69, i57–i58 [doi:10.1107/S1600536813022411]

Lithium vanado(V)molybdate(VI), Li[VMoO₆]

Safa Ezzine Yahmed, Rawia Nasri, Mohamed Faouzi Zid and Ahmed Driss

1. Comment

Les batteries Lithium-ion sont considérées comme source d'énergie intéressante, en raison de leurs densités d'énergie plus élevées par rapport aux autres systèmes de batteries rechargeables (Delmas *et al.*, 1999). Dans le but d'améliorer les propriétés électrochimiques de la cathode dans ce type de batteries, plusieurs travaux antérieurs ont été effectués, (Cabana *et al.*, 2003; Yin *et al.*, 2003; Morgan *et al.*, 2002; Gaubicher *et al.*, 2000; Sato *et al.*, 2000; Fu *et al.*, 2010; Mikhailova *et al.*, 2010). En particulier, les matériaux à base de lithium et vanadium ont été largement étudiés vu leurs structures ouvertes, possédant des canaux (structure tridimensionnelle) ou des espaces intercouches (structure bidimensionnelle) suffisant pour une bonne mobilité de l'ion Li⁺ et en raison de la capacité du vanadium d'adopter plusieurs degrés d'oxydation. Ces matériaux présentent des performances électriques intéressantes en relation avec leurs structures.

Dans ce cadre, l'exploration du système Li–V–Mo–O nous a conduit à la phase monocristalline de formulation LiMoVO₆ qui a été synthétisée par réaction à l'état solide.

La résolution de la structure révèle que les atomes de vanadium et de molybdène occupent le même site (position spéciale 4i). L'unité asymétrique du composé étudié LiMoVO₆ renferme deux octaèdres MO₆ (M = Mo/V) liés par une arête pour former l'unité classique M₂O₉ (Fig. 1).

La structure, du vanadomolybdate synthétisé, peut être décrite à partir de la jonction de deux octaèdres MO₆ (M = Mo/V) partageant des sommets et formant les groupements M₂O₁₁. Ces derniers se lient entre eux par ponts mixtes M—O—M pour former des chaînes simples classiques (M₂O₉)_∞ (M = Mo/V) se propageant selon *b* (Fig. 2a). L'association par partage d'arêtes de celles-ci mène à des chaînes doubles (M₄O₂₁)_∞ (Fig. 2 b) en zigzag qui s'étendent selon la direction [010]. La liaison de part et d'autre, entre ces dernières par pont O—M—O le long du plan *ac* (Fig. 3), conduit à des couches ondulées MoVO₆ qui se présentent en dents de scies (Fig. 4). Il en résulte une structure bidimensionnelle dans laquelle les cation Li⁺ sont situés dans les espaces intercouches (Fig. 5).

La recherche d'une corrélation entre les caractéristiques structurales de notre matériau LiMoVO₆ et ses propriétés physiques notamment de conductivité ionique, nous a encouragés à faire l'étude des chemins les plus probables de migration des cations Li⁺ par le modèle de calcul des valences (BVS) (Brown, 2002) qui a été appliqué par plusieurs auteurs notamment: pour la conduction ionique du lithium dans La_{2/3-x}Li_{3x}TiO₃ (Mazza *et al.*, 2002) et LiCo₂As₃O₁₀ (Ben Smida *et al.*, 2013), dans les structures Nasicon (Mazza, 2001) et dans les diarséniates TlFe_{0.22}Al_{0.78}As₂O₇ (Ouerfelli *et al.*, 2007a) et KFeAs₂O₇ (Ouerfelli *et al.*, 2007b): Le chemin de conduction dans un solide cristallin, peut être modélisé en calculant la somme des valences V_{i(x,y,z)} dans une grille de points à l'intérieur du réseau anionique selon une direction initiale de migration, à partir de la position cristallographique du cation, déterminée depuis la diffraction des rayons X. Les points dans cette grille correspondant à la valence idéale de l'ion sont des positions énergétiquement favorisées, ainsi une valeur plus élevée représentant une cavité trop petite, donc avec une énergie potentielle répulsive plus élevée. La somme des valences V_{i(x,y,z)} pour le cation mobile peut être tracée en fonction de la distance parcourue (*d*), obtenant

ainsi la variation de la valence calculée en fonction de la distance parcourue $d(\text{Å})$ pour les différentes directions de migration (Fig. 6a).

Ainsi, les chemins de déplacement les plus probables, dans le cas de notre matériau, sont ceux selon les directions [010] et [110]. En effet, les valences maximales calculées du lithium selon l'axe b sont proches de 1,4 u.v (unité de valence) pour une distance dépassant 10 Å (Fig. 6a) alors qu'elles atteignent 1,6 u.v selon [110] (Fig. 6a). Le mouvement de migration des cations Li^+ semble plus favorable selon l'axe b . De plus, la longueur de saut d'un site cristallographique de lithium au prochain voisin est minimale selon b (3,643 Å selon [010] et 5,02 Å selon [110]). Donc, le mouvement d'ions Li^+ le long de [110] semble être moins favorable. Quand aux directions [100] et [001], les valences calculées sont élevées ($V_{\text{max}} \approx 2$ u.v) pour des distances courtes: Le lithium est presque figé dans son site ($V=1.8$ u.v pour $d=1.1$ Å) selon c alors qu'il rencontre des barrières énergétiques pour des distances parcourues courtes selon a ($v=2.16$ u.v pour $d=5.6$ Å). Les chemins de migrations selon les directions [010] et [110] sont matérialisés dans la figure (Fig. 6 b). La synthèse de la phase pure va nous permettre d'effectuer une étude de la conductivité ionique par spectroscopie d'impédance complexe.

Un balayage bibliographique montre que le composé étudié est isotype à certains vanadates de métaux bivalents MeV_2O_6 ($\text{Me} = \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Zn}, \text{Cu}$ et Cd) (Mocala & Ziolkowski, 1987) ainsi que les matériaux NaVMoO_6 (Darriet & Galy, 1968), LiVWO_6 et NaVWO_6 (Knyazev *et al.*, 2009). Ces vanadates ont tous une structure type Brannerite ThTiO_6 (Ruh & Wadsley, 1966).

La comparaison de ce matériau avec le composé de formulation analogue KVMoO_6 (Mucha *et al.*, 1999) montre une différence nette. En effet, les facteurs géométriques ainsi que la dimensionalité du matériau ont changés en raison de l'augmentation du rayon ionique du cation alcalin. La structure du matériau au potassium est unidimensionnelle et se présente sous forme de chaînes doubles $(\text{M}_4\text{O}_{21})_\infty$ parallèles à l'axe b .

Le composé Ca_2VMoO_6 (Karen *et al.*, 2006) est caractérisé par les chaînes simples $(\text{M}_2\text{O}_9)_\infty$ ($\text{M} = \text{Mo}/\text{V}$) rencontrées dans notre matériau. Elles se lient par mise en commun de sommets pour former des couches infinies qui se joignent par ponts mixtes $\text{M}-\text{O}-\text{M}$ conduisant à une structure perovskite tridimensionnelle où les cations bivalents Ca^{2+} logent dans les canaux. Les atomes de molybdène et de vanadium, dans le matériau Ca_2VMoO_6 , occupent partiellement les mêmes sites (position 4 b).

L'examen des phases V_2O_5 (Shklover *et al.*, 1996) et MoO_3 (Andersson & Magnéli, 1950) révèle la présence des chaînes doubles formées par partage d'arêtes entre les polyèdres de vanadium (respectivement de molybdène) semblables à celles rencontrées dans notre matériau. Néanmoins, dans ces deux oxydes, les chaînes se lient par mise en commun de sommets pour former des charpentes bidimensionnelles.

2. Experimental

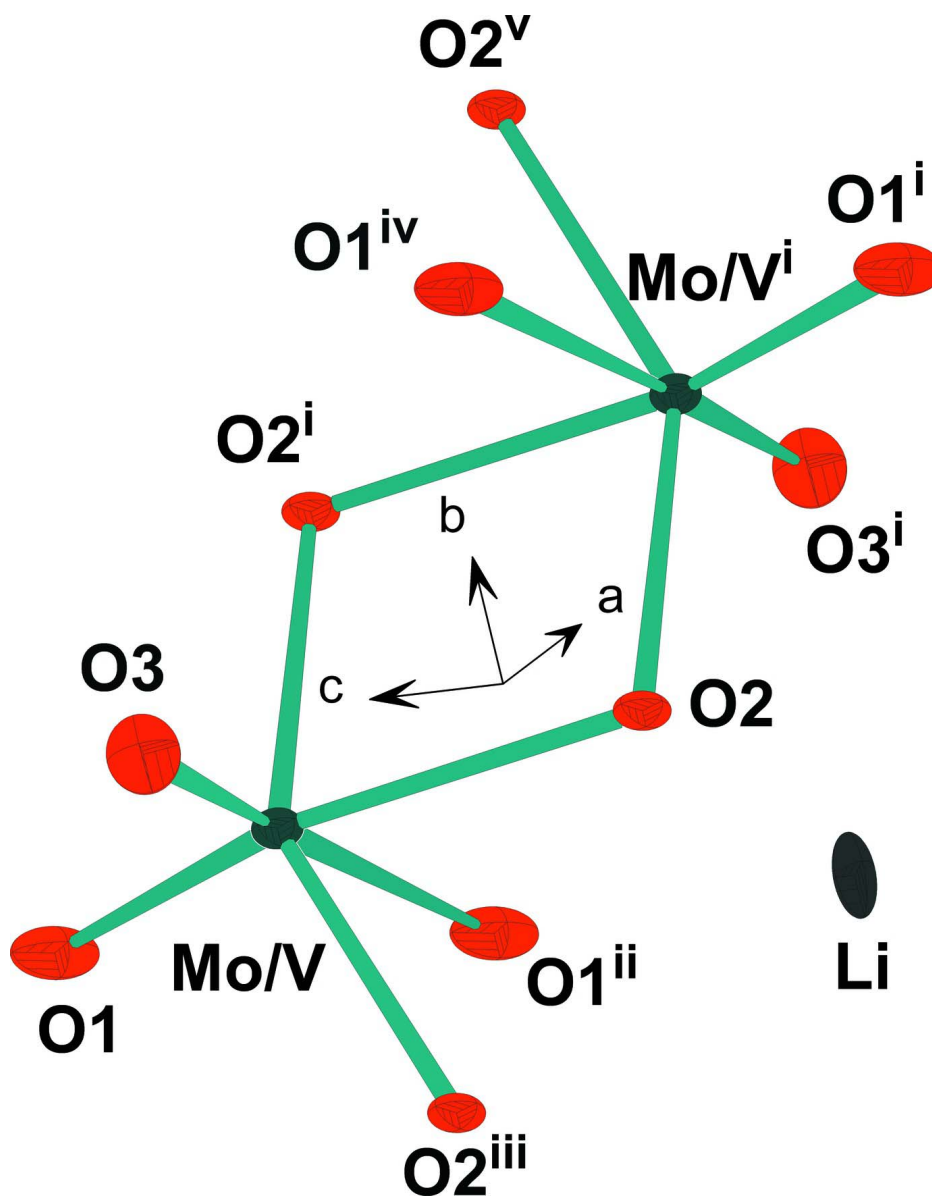
La phase LiMoVO_6 a été obtenue par réaction à l'état solide à partir des réactifs: Li_2CO_3 (AZIENDA CHIMICA, 104094819), V_2O_5 (ACROS ORGANICS, A018448201) et $(\text{NH}_4)_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ (Fluka, 69858) pris dans le rapport molaire $\text{Li}:\text{V}:\text{Mo} = 1:3:1$. Le mélange, finement broyé, est chauffé à 623 K pendant 12 h en vue d'éliminer NH_3 et CO_2 . Après un broyage fin, le résidu final est placé dans une nacelle en porcelaine puis porté à 873 K, température proche de la fusion. Après trois jours, on commence un refroidissement lent par palier de 5 degrés puis rapide jusqu'à la température ambiante. Des cristaux de couleur jaunâtre sous forme de baguettes ont été isolés.

3. Refinement

Les densités d'électrons maximum et minimum restants dans la Fourier-différence sont acceptables et sont situées respectivement à 0,83 Å de V et à 0,80 Å de V.

Computing details

Data collection: *CAD-4 EXPRESS* (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); cell refinement: *CAD-4 EXPRESS* (Duisenberg, 1992; Macíček & Yordanov, 1992); 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, 1998); software used to prepare material for publication: *WinGX* (Farrugia, 2012).


Figure 1

Unité *asymétrique* du composé LiMoVO₆. Les ellipsoïdes d'agitation thermique ont été définis avec 50% de probabilité. [Codes de symétrie: (i) $1/2 - x, 1/2 + y, 1 - z$; (ii) $-x, y, 1 - z$; (iii) $1/2 - x, -1/2 + y, 1 - z$; (iv) $1/2 + x, 1/2 + y, z$; (v) $x, 1 + y, z$.]

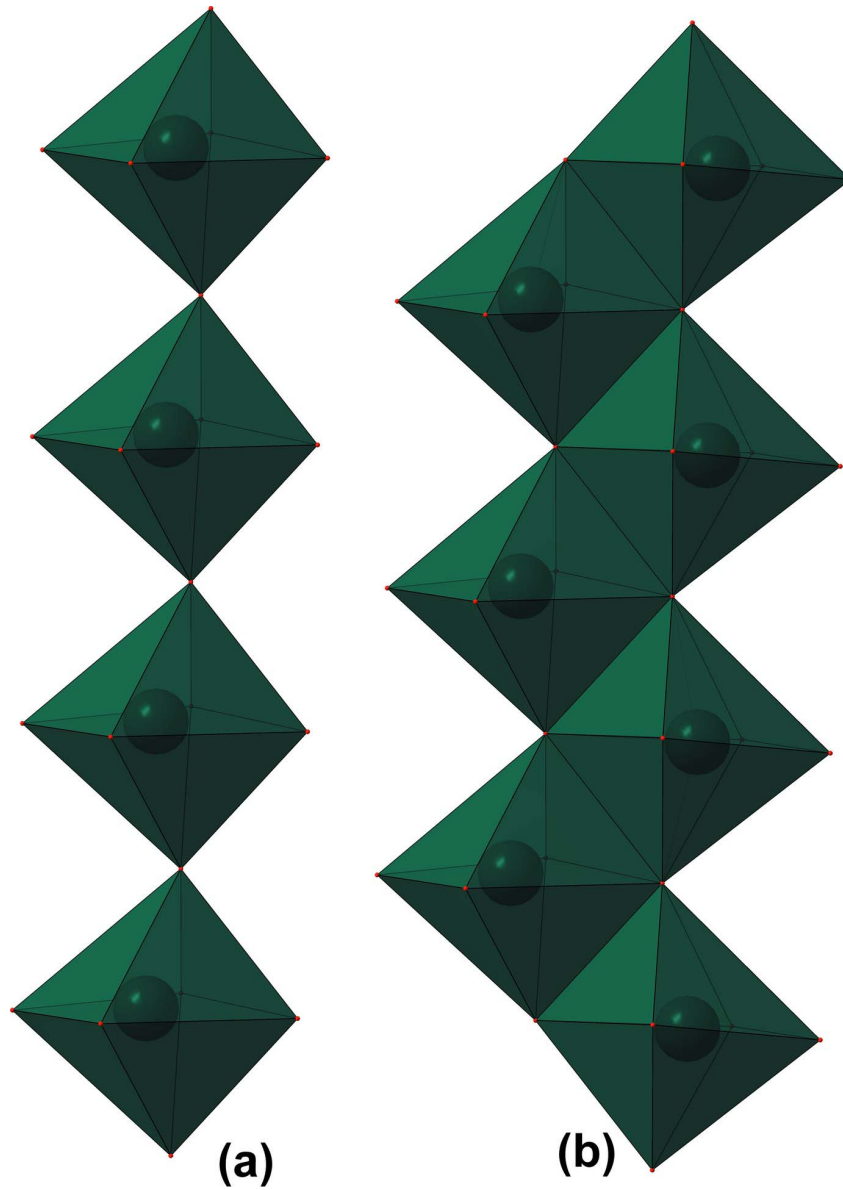


Figure 2

(a) Représentation d'une chaîne simple formée par les octaèdres MO_6 ($M=Mo/V$). (b) Représentation d'une chaîne double.

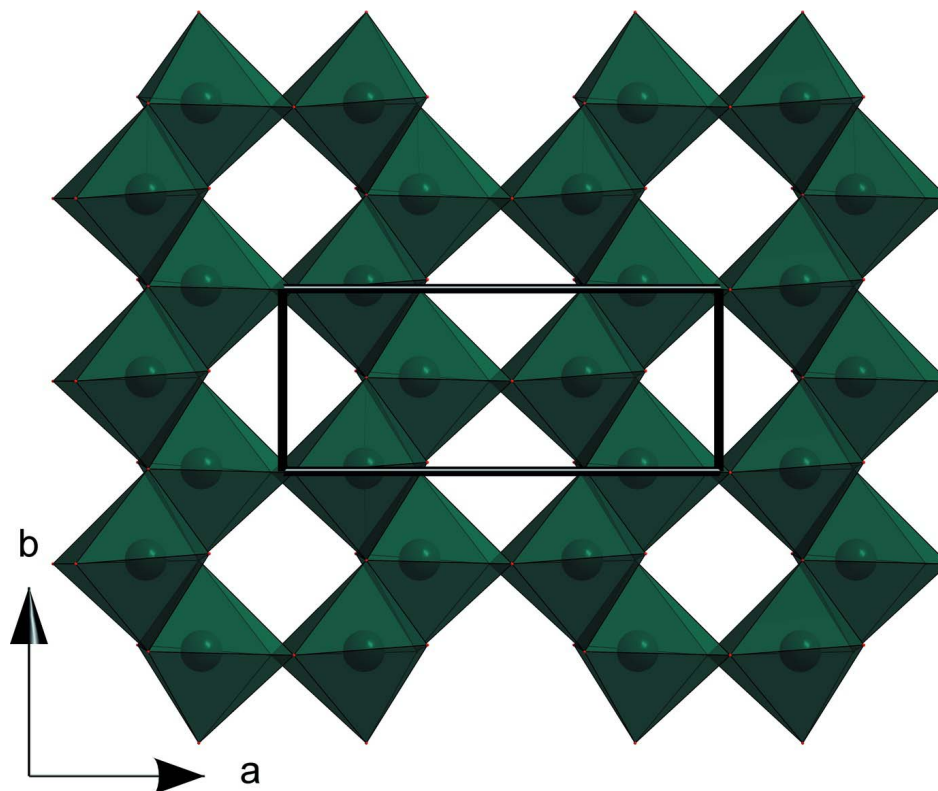


Figure 3
Projection d'une couche (VMoO_6) selon c dans LiMoVO_6 .

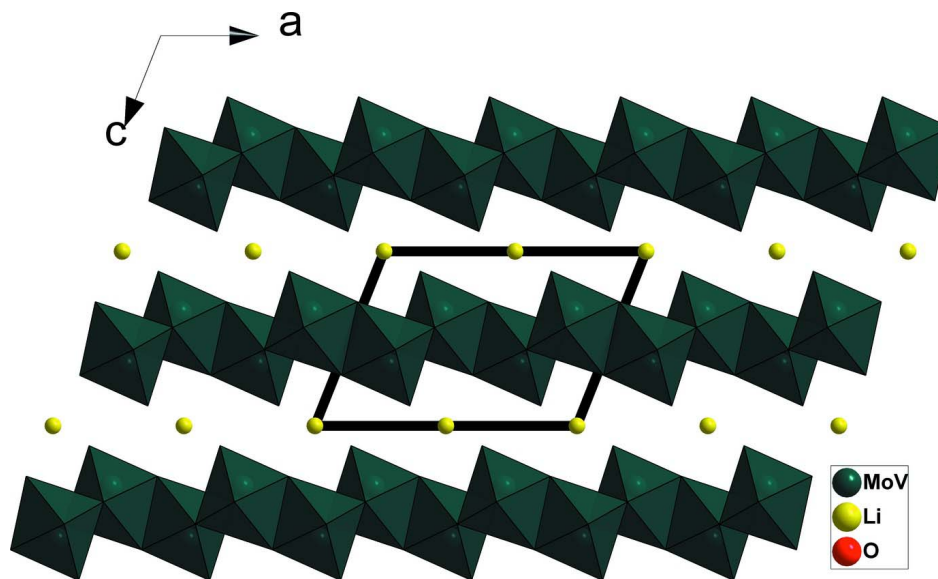


Figure 4
Projection de la structure du composé LiMoVO_6 selon b .

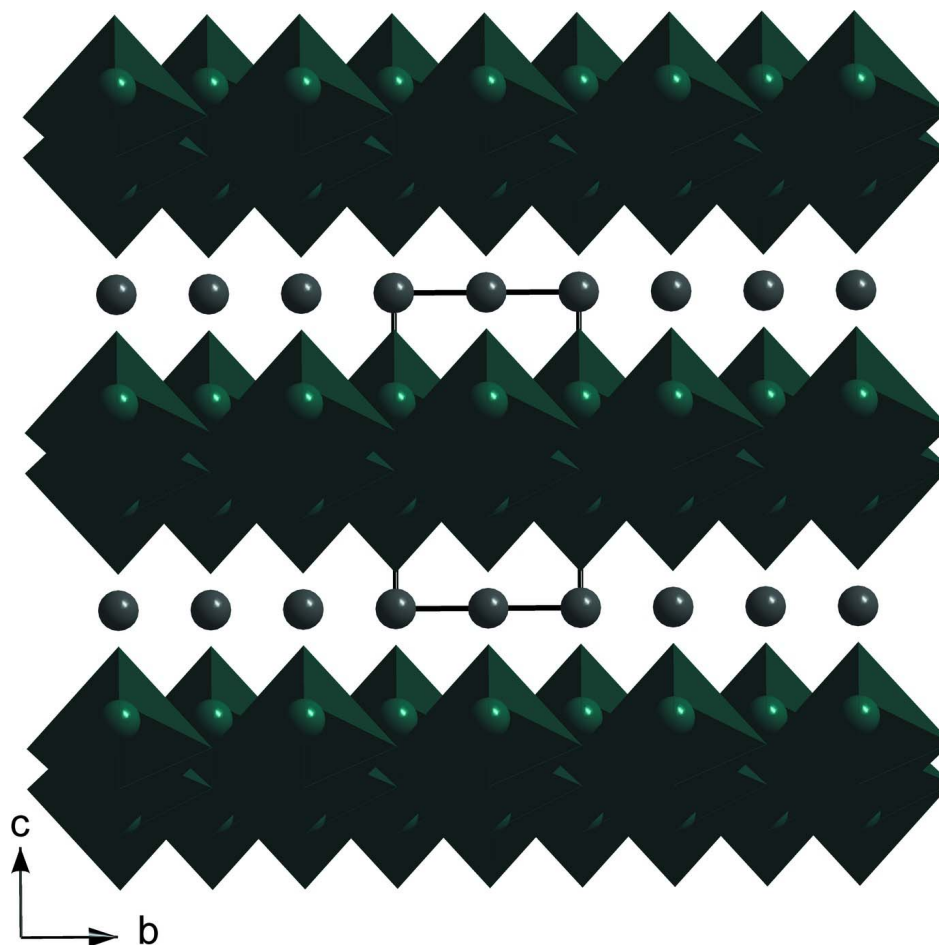


Figure 5

Projection de la structure du composé LiMoVO_6 selon a .

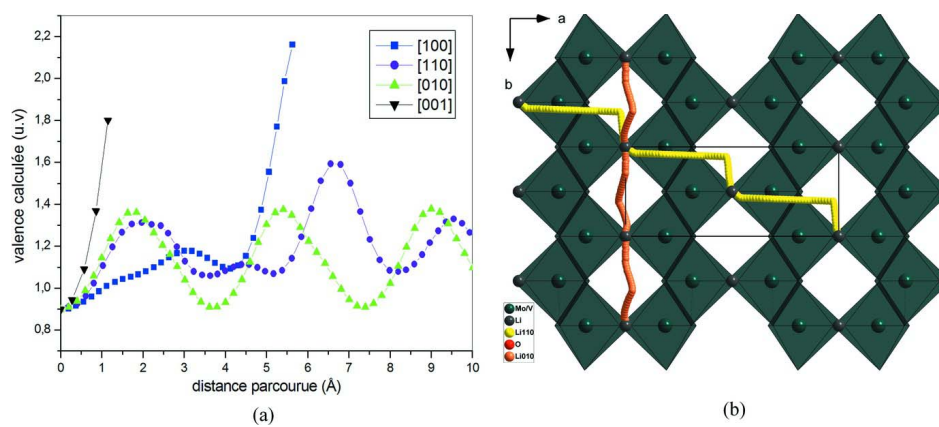


Figure 6

(a) Variation de la valence en fonction de la distance parcourue à partir de la position initiale de Li dans LiMoVO_6 . (b) Modélisation des chemins de conduction des cations Li^+ selon les directions $[010]$ et $[110]$.

Lithium vanado(V)molybdate(VI)

Crystal data

LiMoVO ₆	$F(000) = 232$
$M_r = 249.82$	$D_x = 3.916 \text{ Mg m}^{-3}$
Monoclinic, $C2/m$	Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$
Hall symbol: $-C 2y$	Cell parameters from 25 reflections
$a = 9.3555 (9) \text{ \AA}$	$\theta = 11\text{--}16^\circ$
$b = 3.6432 (5) \text{ \AA}$	$\mu = 5.10 \text{ mm}^{-1}$
$c = 6.6887 (7) \text{ \AA}$	$T = 298 \text{ K}$
$\beta = 111.669 (6)^\circ$	Prism, yellow
$V = 211.87 (4) \text{ \AA}^3$	$0.29 \times 0.22 \times 0.14 \text{ mm}$
$Z = 2$	

Data collection

Enraf Nonius CAD4 diffractometer	354 independent reflections
Radiation source: fine-focus sealed tube	350 reflections with $I > 2\sigma(I)$
Graphite monochromator	$R_{\text{int}} = 0.018$
$\omega/2\theta$ scans	$\theta_{\text{max}} = 30.0^\circ$, $\theta_{\text{min}} = 3.3^\circ$
Absorption correction: ψ scan (North <i>et al.</i> , 1968)	$h = -12 \rightarrow 12$
$T_{\text{min}} = 0.274$, $T_{\text{max}} = 0.498$	$k = -5 \rightarrow 1$
876 measured reflections	$l = -9 \rightarrow 9$
	2 standard reflections every 120 min
	intensity decay: 1.1%

Refinement

Refinement on F^2	Secondary atom site location: difference Fourier map
Least-squares matrix: full	$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0273P)^2 + 0.9791P]$
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.018$	where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
$wR(F^2) = 0.052$	$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} < 0.001$
$S = 1.16$	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0.90 \text{ e \AA}^{-3}$
354 reflections	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0.57 \text{ e \AA}^{-3}$
30 parameters	Extinction correction: <i>SHELXL97</i> (Sheldrick, 2008), $F_c^* = kF_c[1 + 0.001x F_c^2 \lambda^3 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$
0 restraints	Extinction coefficient: 0.008 (2)
Primary atom site location: structure-invariant direct methods	

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)

	x	y	z	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$	Occ. (<1)
Mo	0.18622 (4)	0.0000	0.65068 (5)	0.00752 (17)	0.50
V	0.18622 (4)	0.0000	0.65068 (5)	0.00752 (17)	0.50
Li	0.0000	0.0000	0.0000	0.0152 (17)	
O1	0.0259 (3)	0.0000	0.7107 (5)	0.0167 (5)	

O2	0.3080 (3)	0.0000	0.4362 (4)	0.0096 (4)
O3	0.3319 (3)	0.0000	0.8860 (4)	0.0173 (5)

Atomic displacement parameters (\AA^2)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Mo	0.0082 (2)	0.0049 (2)	0.0100 (2)	0.000	0.00406 (14)	0.000
V	0.0082 (2)	0.0049 (2)	0.0100 (2)	0.000	0.00406 (14)	0.000
Li	0.015 (4)	0.026 (5)	0.006 (3)	0.000	0.005 (3)	0.000
O1	0.0108 (10)	0.0092 (12)	0.0320 (14)	0.000	0.0102 (10)	0.000
O2	0.0118 (10)	0.0039 (10)	0.0159 (10)	0.000	0.0083 (8)	0.000
O3	0.0131 (11)	0.0221 (15)	0.0151 (11)	0.000	0.0032 (9)	0.000

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

Mo—O3	1.659 (3)	Li—O3 ^{vi}	2.3423 (16)
Mo—O1	1.690 (3)	Li—O3 ⁱ	2.3423 (16)
Mo—O2 ⁱ	1.9189 (8)	O1—Li ^{vii}	2.037 (3)
Mo—O2 ⁱⁱ	1.9189 (8)	O1—Mo ⁱⁱⁱ	2.497 (3)
Mo—O2	2.136 (2)	O2—V ⁱ	1.9189 (8)
Mo—O1 ⁱⁱⁱ	2.497 (3)	O2—Mo ⁱ	1.9189 (8)
Li—O1 ^{iv}	2.037 (3)	O2—V ⁱⁱ	1.9189 (8)
Li—O1 ⁱⁱⁱ	2.037 (3)	O2—Mo ⁱⁱ	1.9189 (8)
Li—O3 ⁱⁱ	2.3423 (16)	O3—Li ^{viii}	2.3423 (16)
Li—O3 ^v	2.3423 (16)	O3—Li ^{ix}	2.3423 (16)
O3—Mo—O1	105.39 (14)	O3 ⁱⁱ —Li—O3 ^{vi}	77.90 (10)
O3—Mo—O2 ⁱ	100.50 (8)	O3 ^v —Li—O3 ^{vi}	102.10 (10)
O1—Mo—O2 ⁱ	101.46 (7)	O1 ^{iv} —Li—O3 ⁱ	90.48 (8)
O3—Mo—O2 ⁱⁱ	100.50 (8)	O1 ⁱⁱⁱ —Li—O3 ⁱ	89.52 (8)
O1—Mo—O2 ⁱⁱ	101.46 (7)	O3 ⁱⁱ —Li—O3 ⁱ	102.10 (10)
O2 ⁱ —Mo—O2 ⁱⁱ	143.35 (14)	O3 ^v —Li—O3 ⁱ	77.90 (10)
O3—Mo—O2	100.49 (11)	O3 ^{vi} —Li—O3 ⁱ	180.00 (14)
O1—Mo—O2	154.13 (13)	Mo—O1—Li ^{vii}	130.75 (16)
O2 ⁱ —Mo—O2	73.43 (7)	Mo—O1—Mo ⁱⁱⁱ	103.17 (14)
O2 ⁱⁱ —Mo—O2	73.43 (7)	Li ^{vii} —O1—Mo ⁱⁱⁱ	126.08 (11)
O3—Mo—O1 ⁱⁱⁱ	177.79 (11)	V ⁱ —O2—Mo ⁱ	0.00 (2)
O1—Mo—O1 ⁱⁱⁱ	76.83 (14)	V ⁱ —O2—V ⁱⁱ	143.35 (14)
O2 ⁱ —Mo—O1 ⁱⁱⁱ	78.93 (8)	Mo ⁱ —O2—V ⁱⁱ	143.35 (14)
O2 ⁱⁱ —Mo—O1 ⁱⁱⁱ	78.93 (8)	V ⁱ —O2—Mo ⁱⁱ	143.35 (14)
O2—Mo—O1 ⁱⁱⁱ	77.30 (9)	Mo ⁱ —O2—Mo ⁱⁱ	143.35 (14)
O1 ^{iv} —Li—O1 ⁱⁱⁱ	180.00 (14)	V ⁱⁱ —O2—Mo ⁱⁱ	0.00 (2)
O1 ^{iv} —Li—O3 ⁱⁱ	90.48 (8)	V ⁱ —O2—Mo	106.57 (7)
O1 ⁱⁱⁱ —Li—O3 ⁱⁱ	89.52 (8)	Mo ⁱ —O2—Mo	106.57 (7)
O1 ^{iv} —Li—O3 ^v	89.52 (8)	V ⁱⁱ —O2—Mo	106.57 (7)
O1 ⁱⁱⁱ —Li—O3 ^v	90.48 (8)	Mo ⁱⁱ —O2—Mo	106.57 (7)
O3 ⁱⁱ —Li—O3 ^v	180.00 (14)	Mo—O3—Li ^{viii}	121.78 (8)

O1 ^{iv} —Li—O3 ^{vi}	89.52 (8)	Mo—O3—Li ^{ix}	121.78 (8)
O1 ⁱⁱⁱ —Li—O3 ^{vi}	90.48 (8)	Li ^{viii} —O3—Li ^{ix}	102.10 (10)

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