

Acta Crystallographica Section E

Structure Reports

Online

ISSN 1600-5368

Na₃Al(AsO₄)₂

Noura Fakhur Bourguiba, Mohamed Faouzi Zid* and Ahmed Driss

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

Received 15 January 2013; accepted 22 January 2013

Key indicators: single-crystal X-ray study; $T = 298$ K; mean $\sigma(\text{As}-\text{O}) = 0.002$ Å; R factor = 0.022; wR factor = 0.058; data-to-parameter ratio = 12.5.

The structure of the title compound trisodium aluminium bis(arsenate), Na₃Al(AsO₄)₂, is built up from AlO₄ and AsO₄ corner-sharing tetrahedra, forming an undulating two-dimensional framework parallel to (100). The layers are constituted of large Al₆As₆O₃₆ rings made up from six AlO₄ and AsO₄ tetrahedra in which two sodium cations are situated, the third sodium cation being located in the interlayer space. The structural relationships between the title compound and Na₃Fe(PO₄)₂, NaAlCo(PO₄)₂ and Al₅Co₃(PO₄)₈ are discussed.

Related literature

For open-framework structures, see: Colombari (1986); Brunet *et al.* (2003); Alamo & Roy (1984); Delmas *et al.* (1987). For details of the preparation, see: Driss & Jouini (1994); Masquelier *et al.* (1995). For closely related structures, see: Belkhiria *et al.* (1998); Chen *et al.* (1997); Bennet & Marcus (1988). For bond-valence calculations, see: Brown & Altermatt (1985).

Experimental

Crystal data

Na₃Al(AsO₄)₂
 $M_r = 373.79$
Monoclinic, $P2_1/c$
 $a = 6.5948$ (7) Å
 $b = 11.8018$ (9) Å
 $c = 9.4692$ (8) Å
 $\beta = 96.52$ (1)°

$V = 732.23$ (12) Å³
 $Z = 4$
Mo $K\alpha$ radiation
 $\mu = 9.44$ mm⁻¹
 $T = 298$ K
0.28 × 0.18 × 0.12 mm

Data collection

Enraf–Nonius CAD-4
diffractometer

Absorption correction: ψ scan
(North *et al.*, 1968)
 $T_{\min} = 0.15$, $T_{\max} = 0.32$

2484 measured reflections
1596 independent reflections
1484 reflections with $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.032$
2 standard reflections every 120 min
intensity decay: 1.2%

Refinement

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.022$
 $wR(F^2) = 0.058$
 $S = 1.09$
1596 reflections

128 parameters
 $\Delta\rho_{\max} = 0.81$ e Å⁻³
 $\Delta\rho_{\min} = -1.02$ e Å⁻³

Table 1

Selected bond lengths (Å).

Al1—O2 ⁱ	1.771 (2)	As1—O5 ^{iv}	1.649 (2)
Al1—O4	1.755 (2)	As2—O3	1.655 (2)
Al1—O6 ⁱⁱ	1.769 (2)	As2—O4 ^v	1.723 (2)
Al1—O8 ⁱⁱⁱ	1.755 (2)	As2—O6	1.734 (2)
As1—O1	1.654 (2)	As2—O7	1.655 (2)
As1—O2	1.732 (2)		

Symmetry codes: (i) $-x + 1, -y + 1, -z + 1$; (ii) $x, -y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$; (iii) $-x + 1, y - \frac{1}{2}, -z + \frac{1}{2}$; (iv) $x + 1, y, z$; (v) $-x + 1, y + \frac{1}{2}, -z + \frac{1}{2}$.

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

Supplementary data and figures for this paper are available from the IUCr electronic archives (Reference: VN2065).

References

- Alamo, J. & Roy, R. (1984). *J. Am. Ceram. Soc.* **67**, 78–80.
Belkhiria, M. S., Laaribi, S., Ben Hadj Amara, A. & Ben Amara, M. (1998). *Ann. Chim. Sci. Mat.* **23**, 117–120.
Bennet, J. M. & Marcus, B. K. (1988). *Stud. Surf. Sci. Catal.* **37**, 269–279.
Brandenburg, K. (1998). *DIAMOND*. University of Bonn, Germany.
Brown, I. D. & Altermatt, D. (1985). *Acta Cryst.* **B41**, 244–247.
Brunet, F., Bagdasarov, N. & Miletich, R. (2003). *Solid State Ionics*, **159**, 35–47.
Chen, X.-A., Zhao, L., Li, Y., Guo, F. & Chen, B.-M. (1997). *Acta Cryst.* **C53**, 1754–1756.
Colombari, Ph. (1986). *Solid State Ionics*, **21**, 97–115.
Delmas, C., Cherkaoui, F., Nadiri, A. & Hagenmuller, P. (1987). *Mater. Res. Bull.* **22**, 631–639.
Driss, A. & Jouini, T. (1994). *J. Solid State Chem.* **112**, 277–280.
Duisenberg, A. J. M. (1992). *J. Appl. Cryst.* **25**, 92–96.
Farrugia, L. J. (2012). *J. Appl. Cryst.* **45**, 849–854.
Harms, K. & Wocadlo, S. (1995). *XCAD4*. University of Marburg, Germany.
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.
North, A. C. T., Phillips, D. C. & Mathews, F. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 351–359.
Sheldrick, G. M. (2008). *Acta Cryst.* **A64**, 112–122.

supporting information

Acta Cryst. (2013). E69, i14 [doi:10.1107/S1600536813002213]

Na₃Al(AsO₄)₂**Noura Fakhar Bourguiba, Mohamed Faouzi Zid and Ahmed Driss****S1. Comment**

Les phosphates et les arsénates mixtes de métaux trivalents et des alcalins présentent de nombreuses propriétés physico-chimiques en relation avec leurs structures. La famille des composés de type $M'M(XO_4)_3$ (M' =alcalin; M =Al, Fe, Cr, Ga, etc; X =P, As) de structure nasicon sont des matériaux attractifs dans des domaines variés de la chimie des solides: conductivité ionique, céramique à faible coefficient de dilatation thermique et intercalation (Colomban, 1986; Brunet *et al.*, 2003; Alamo *et al.*, 1984; Delmas *et al.*, 1987). Dans ce cadre et en vue de synthétiser de nouveaux matériaux à charpentes ouvertes, nous avons entrepris l'exploration du système Na–Al–As–O dans lequel différentes phases ont été isolées: NaAl₂As₂O₇ (Driss *et al.*, 1994), Na₃Al₂(AsO₄)₃ (Masquelier *et al.*, 1995). Une nouvelle phase de formulation Na₃Al(AsO₄)₂ a été synthétisée par réaction à l'état solide. L'unité asymétrique, dans le composé étudié, renferme un tétraèdre AlO₄ lié par mise en commun de sommets à deux pyramides AsO₄ (Fig. 1). Il en résulte l'unité linéaire AlAs₂O₁₀. La jonction de ces dernières, par formation de ponts mixtes Al–O–As, conduit vers des couches ondulées parallèles au plan (100) (Fig. 2). En effet, l'examen de ces feuilletts révèle la présence de larges cycles de formulation Al₆As₆O₃₆ constitués par six pyramides AsO₄ et six AlO₄ (Fig 3). De plus, on peut signaler qu'au sein d'une couche, chaque tétraèdre AlO₄ partage tous ses sommets oxygène avec respectivement quatre tétraèdres AsO₄ différents. Cependant une pyramide AsO₄ n'engage que deux de ses sommets dans les ponts mixtes As–O–Al. Les deux autres restant libres sont orientés vers l'espace intercouches où résident les cations Na⁺ (Fig. 4). L'examen des facteurs géométriques dans la structure montre qu'ils sont conformes à ceux rencontrés dans la littérature (Driss *et al.*, 1994; Masquelier *et al.*, 1995). 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: Al1(2,846), As1(4,971), As2(4,923), Na1(1,069), Na2(1,038) et Na3(1,027). La comparaison de la structure de Na₃Al(AsO₄)₂ avec celle rencontrée dans la littérature et de formulation analogue Na₃Fe(PO₄)₂ (Belkhiria *et al.*, 1998) révèle une différence nette dans la disposition des polyèdres. En effet, on note que la structure de l'arséniate est formée uniquement par un assemblage de tétraèdres AsO₄ et AlO₄ alors que celle du phosphate de fer est constituée par une succession de couches parallèles formées d'octaèdres FeO₆ et de tétraèdres AsO₄ partageant des sommets. Par contre, la comparaison de la structure étudiée avec celles des phosphates de cobalt de formulation NaAlCo(PO₄)₂ (Chen *et al.*, 1997) et Al₅Co₃(PO₄)₈ (Bennet *et al.*, 1988), montre des points de ressemblance. En effet, dans chacune des structures les couches sont formées uniquement par des tétraèdres (As/P)O₄ et (Al/Co)O₄ mettant en commun des sommets. Cependant, ces structures présentent des différences: dans notre composé, on distingue que la connexion entre couches est assurée par les polyèdres de cations alcalins conduisant à une structure bidimensionnelle. Par contre, dans les composés NaAlCo(PO₄)₂ et Al₅Co₃(PO₄)₈, on remarque que la connexion entre les couches est réalisée uniquement par ponts (As/P)–O–(Al/Co) permettant de décrire la structure comme une structure tridimensionnelle. Dans notre composé, seuls les tétraèdres AsO₄ engagent tous leurs sommets dans des liaisons de type As–O–Al, alors que les tétraèdres AlO₄ n'engagent que deux de leurs sommets dans ce type de liaisons. Cependant, dans les composés NaAlCo(PO₄)₂ et Al₅Co₃(PO₄)₈, tous les tétraèdres

PO_4 et $(\text{Al/Co})\text{O}_4$ engagent tous leurs sommets dans les ponts mixtes P-O-(Al/Co) .

S2. Experimental

Les cristaux relatifs à la phase $\text{Na}_3\text{Al}(\text{AsO}_4)_2$ ont été obtenus à partir des réactifs: NaHCO_3 (Prolabo, 27778), Al_2O_3 (Riedel-De Haen, 167305), $\text{NH}_4\text{H}_2\text{AsO}_4$ (préparé au laboratoire, JCPDS-775), pris dans les proportions molaires: $\text{Na}:\text{Al}:\text{As}=5:1:3$. 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. Il est ensuite porté, par palier de 100 degrés suivi de broyage, jusqu'à une température de synthèse proche de la fusion, 973 K. Le mélange est alors abandonné à cette température pendant une semaine pour favoriser la germination et la croissance des cristaux. Le résidu final a subi en premier un refroidissement lent ($5^\circ/\text{demi}$ journée, à 873 K) puis un second rapide ($50^\circ/\text{h}$) jusqu'à la température ambiante. Des cristaux transparents, de forme prismatique, de contour net et de taille suffisante pour les mesures des intensités, ont été séparés du flux par des lavages successifs à l'eau chaude.

S3. Refinement

La collecte a été effectuée dans le système monoclinique de groupe d'espace $P2_1/a$. L'affinement a été conduit sans problème. Une transformation vers le groupe conventionnel $P2_1/c$ s'avère nécessaire avant l'affinement final. À la fin de l'affinement structural un examen de la Fourier différence finale ne révèle la présence d'aucun pic d'intensité significative. L'affinement de tous les facteurs thermiques anisotropes conduit à des ellipsoïdes bien définis. De plus, les densités d'électrons maximum et minimum restants dans la Fourier différence sont acceptables et sont situées respectivement à 0,86 Å de As1 et à 0,87 Å de As2.

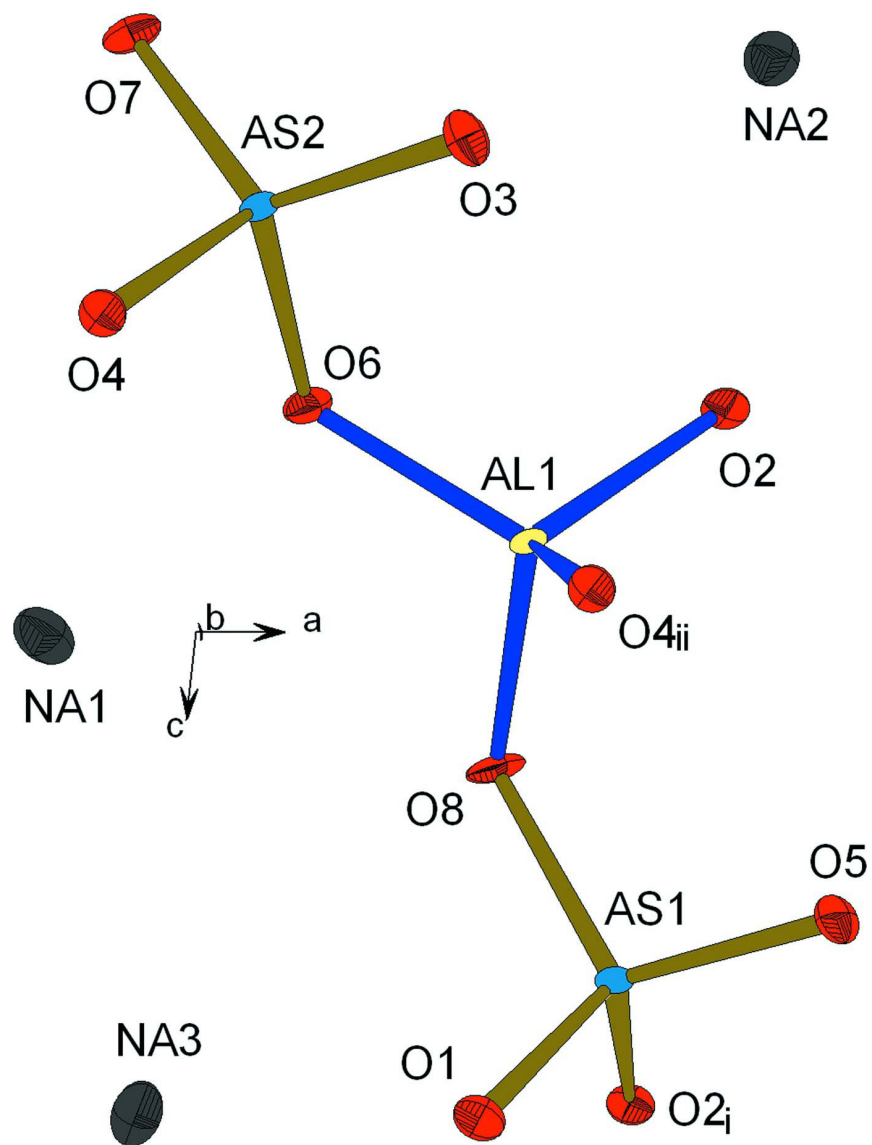


Figure 1

Unité *asymétrique* dans $\text{Na}_3\text{Al}(\text{AsO}_4)_2$. Les ellipsoïdes ont été définis avec 50% de probabilités. [codes de symétrie:(i) $x, 1/2 - y, 1/2 + z$; (ii) $2 - x, 2 - y, 1 - z$].

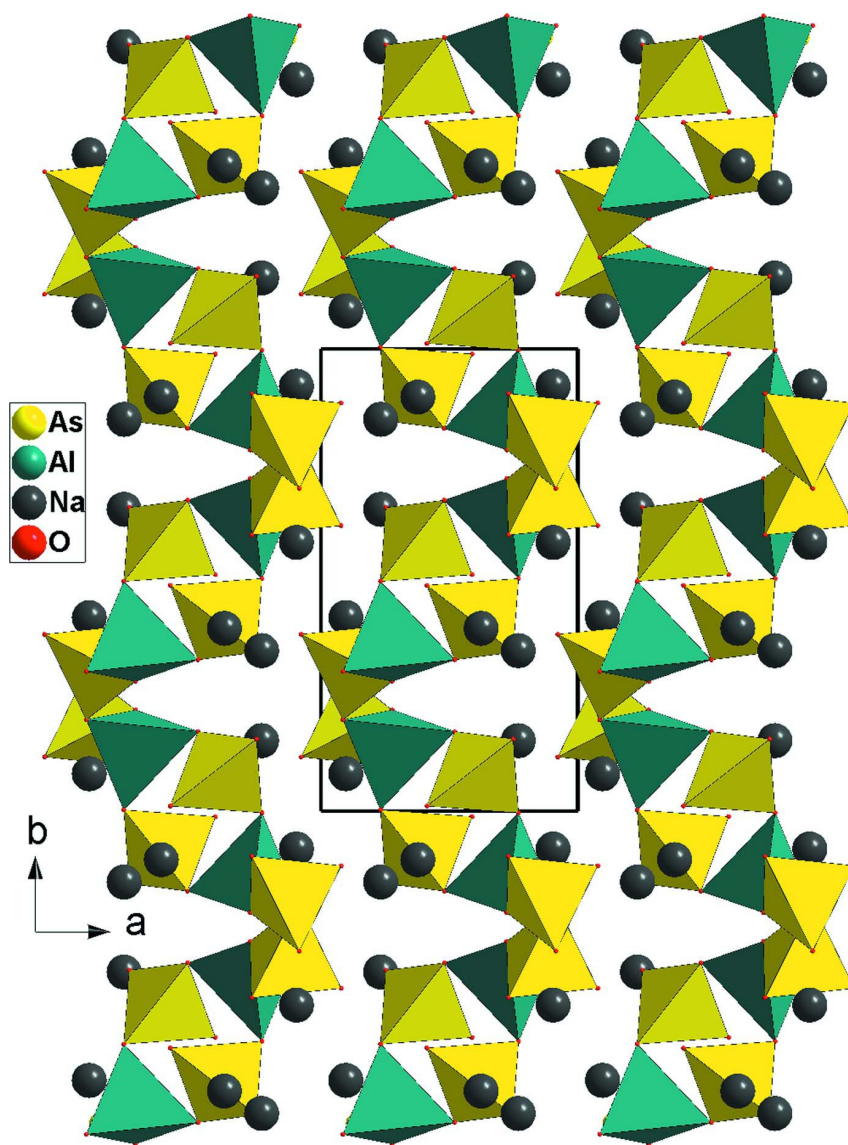


Figure 2

Projection de la structure selon la direction [001] montrant les couches ondulées disposées selon le plan (100).

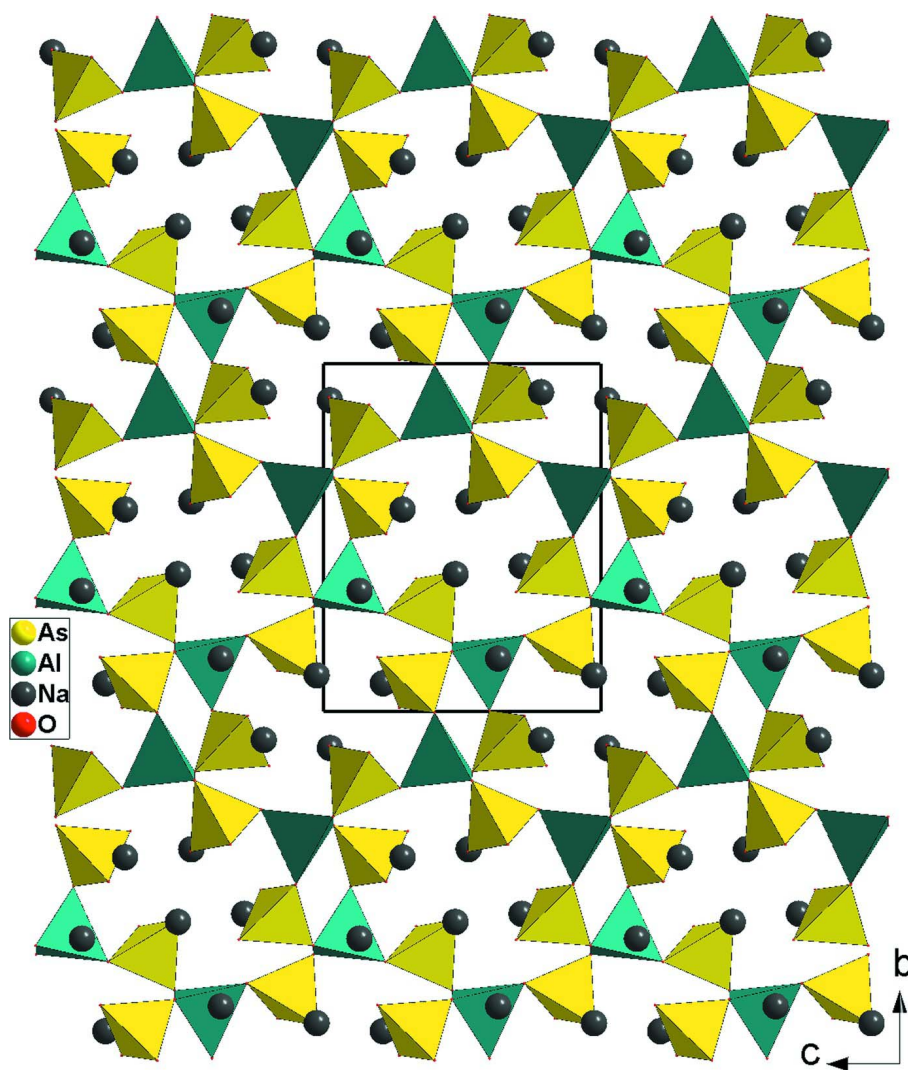


Figure 3

Vue de la structure selon $[100]$ montrant les différents cycles $\text{Al}_6\text{As}_6\text{O}_{36}$ où sont disposés les cations excentrés.

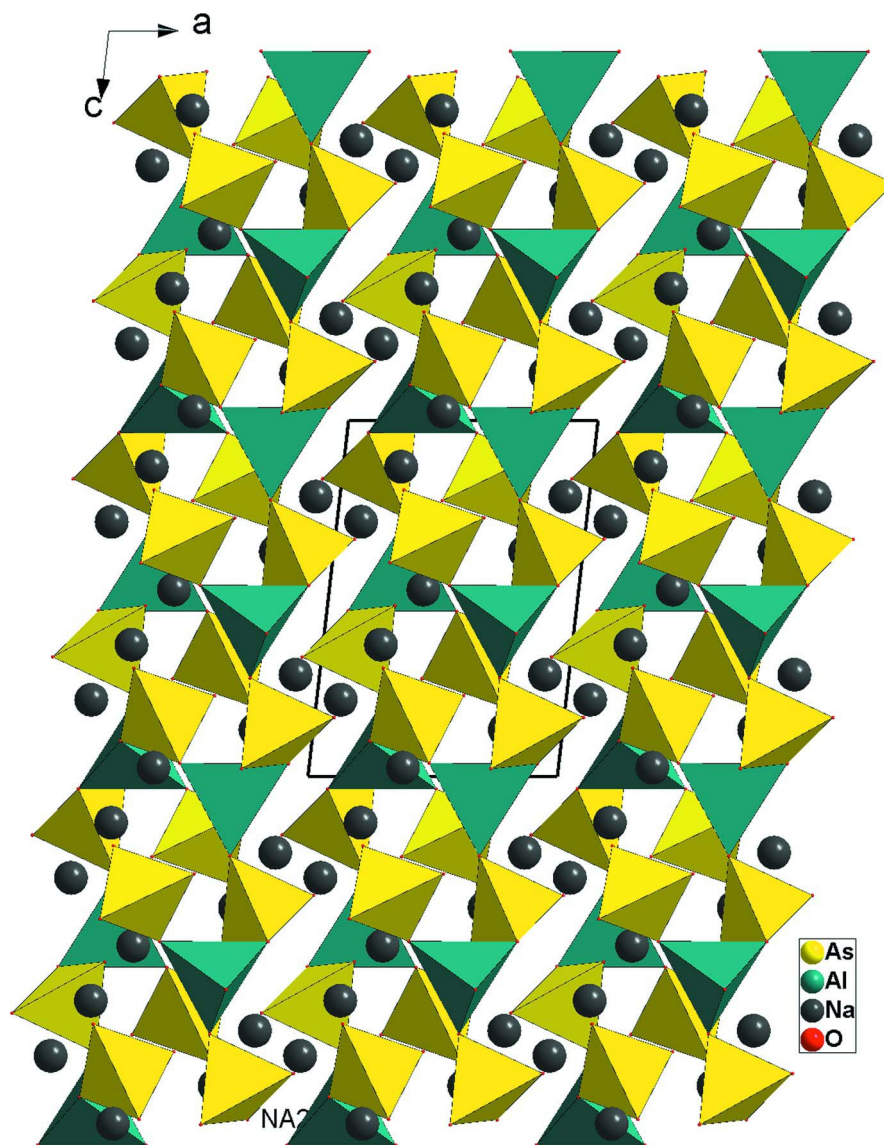


Figure 4

Projection de la structure de $\text{Na}_3\text{Al}(\text{AsO}_4)_2$ selon $[010]$ montrant l'espace intercouches où sont logés les cations Na^+ .

Trisodium aluminium bis(arsenate)

Crystal data

$\text{Na}_3\text{Al}(\text{AsO}_4)_2$

$M_r = 373.79$

Monoclinic, $P2_1/c$

Hall symbol: $-P\ 2_1/c$

$a = 6.5948\ (7)\ \text{\AA}$

$b = 11.8018\ (9)\ \text{\AA}$

$c = 9.4692\ (8)\ \text{\AA}$

$\beta = 96.52\ (1)^\circ$

$V = 732.23\ (12)\ \text{\AA}^3$

$Z = 4$

$F(000) = 704$

$D_x = 3.391\ \text{Mg m}^{-3}$

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

Cell parameters from 25 reflections

$\theta = 10\text{--}15^\circ$

$\mu = 9.44\ \text{mm}^{-1}$

$T = 298\ \text{K}$

Prism, colourless

$0.28 \times 0.18 \times 0.12\ \text{mm}$

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)

$T_{\min} = 0.15$, $T_{\max} = 0.32$

2484 measured reflections

1596 independent reflections

1484 reflections with $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.032$

$\theta_{\max} = 27.0^\circ$, $\theta_{\min} = 2.8^\circ$

$h = -8 \rightarrow 2$

$k = -15 \rightarrow 1$

$l = -12 \rightarrow 12$

2 standard reflections every 120 min

intensity decay: 1.2%

Refinement

Refinement on F^2

Least-squares matrix: full

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.022$

$wR(F^2) = 0.058$

$S = 1.09$

1596 reflections

128 parameters

0 restraints

Primary atom site location: structure-invariant
direct methods

Secondary atom site location: difference Fourier
map

$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0289P)^2 + 1.1813P]$

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

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

$\Delta\rho_{\max} = 0.81 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$

$\Delta\rho_{\min} = -1.02 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$

Extinction correction: *SHELXL*,

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

Extinction coefficient: 0.0400 (12)

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>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
As1	0.86449 (4)	0.67433 (2)	0.37764 (3)	0.00605 (12)
As2	0.60661 (4)	0.41481 (3)	0.17808 (3)	0.00626 (12)
All	0.28023 (13)	0.14677 (8)	0.43819 (9)	0.00571 (19)
Na1	0.2321 (2)	0.84727 (12)	0.63044 (15)	0.0168 (3)
Na2	0.9037 (2)	0.91868 (11)	0.21472 (15)	0.0149 (3)
Na3	0.6231 (2)	0.39550 (13)	0.52395 (16)	0.0201 (3)
O1	0.7295 (3)	0.59717 (19)	0.4790 (2)	0.0126 (5)
O2	0.9149 (3)	0.80210 (19)	0.4647 (2)	0.0091 (4)
O3	0.4121 (3)	0.4885 (2)	0.2261 (3)	0.0131 (5)
O4	0.2312 (3)	0.00301 (19)	0.4010 (2)	0.0102 (4)
O5	0.0778 (3)	0.6176 (2)	0.3349 (2)	0.0113 (4)
O6	0.5203 (3)	0.32759 (18)	0.0365 (2)	0.0098 (4)
O7	0.7477 (3)	0.34378 (19)	0.3040 (2)	0.0123 (5)
O8	0.7236 (3)	0.71895 (19)	0.2241 (2)	0.0116 (5)

Atomic displacement parameters (\AA^2)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
As1	0.00779 (17)	0.00666 (18)	0.00357 (17)	0.00099 (10)	0.00013 (11)	-0.00017 (10)
As2	0.00722 (17)	0.00686 (18)	0.00430 (18)	0.00007 (10)	-0.00108 (11)	0.00082 (10)
Al1	0.0066 (4)	0.0071 (4)	0.0032 (4)	0.0002 (3)	-0.0009 (3)	-0.0007 (3)
Na1	0.0191 (7)	0.0168 (7)	0.0155 (7)	-0.0028 (5)	0.0064 (5)	-0.0036 (6)
Na2	0.0146 (6)	0.0155 (7)	0.0145 (7)	0.0011 (5)	0.0012 (5)	0.0002 (5)
Na3	0.0125 (6)	0.0265 (8)	0.0205 (7)	0.0017 (6)	-0.0013 (5)	-0.0017 (6)
O1	0.0131 (10)	0.0150 (11)	0.0101 (11)	-0.0012 (9)	0.0033 (8)	0.0031 (9)
O2	0.0114 (10)	0.0079 (9)	0.0080 (10)	0.0004 (8)	0.0011 (8)	-0.0045 (9)
O3	0.0116 (10)	0.0130 (11)	0.0154 (11)	0.0022 (9)	0.0053 (9)	-0.0017 (9)
O4	0.0107 (10)	0.0091 (10)	0.0108 (10)	0.0014 (8)	0.0016 (8)	-0.0018 (9)
O5	0.0109 (10)	0.0119 (11)	0.0116 (11)	0.0042 (9)	0.0037 (8)	-0.0018 (9)
O6	0.0110 (10)	0.0113 (11)	0.0065 (10)	-0.0002 (8)	-0.0017 (8)	-0.0016 (8)
O7	0.0155 (11)	0.0129 (11)	0.0076 (10)	0.0010 (9)	-0.0034 (8)	0.0033 (9)
O8	0.0170 (11)	0.0123 (11)	0.0043 (10)	0.0052 (9)	-0.0037 (8)	-0.0003 (8)

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

Al1—O2 ⁱ	1.771 (2)	Na3—O1 ⁱ	2.324 (3)
Al1—O4	1.755 (2)	Na3—O7	2.403 (3)
Al1—O6 ⁱⁱ	1.769 (2)	Na3—O1	2.531 (3)
Al1—O8 ⁱⁱⁱ	1.755 (2)	Na3—O6 ⁱⁱ	2.725 (3)
As1—O1	1.654 (2)	Na3—O3 ⁱ	2.767 (3)
As1—O2	1.732 (2)	O1—Na3 ⁱ	2.324 (3)
As1—O5 ^{iv}	1.649 (2)	O1—Na2 ^{vi}	2.399 (3)
As2—O3	1.655 (2)	O2—Al1 ⁱ	1.771 (2)
As2—O4 ^v	1.723 (2)	O2—Na1 ^{iv}	2.525 (3)
As2—O6	1.734 (2)	O3—Na2 ⁱⁱⁱ	2.366 (3)
As2—O7	1.655 (2)	O3—Na1 ^{ix}	2.396 (3)
Na1—O5 ^{vi}	2.324 (3)	O3—Na3 ⁱ	2.767 (3)
Na1—O7 ⁱ	2.338 (3)	O4—As2 ⁱⁱⁱ	1.723 (2)
Na1—O3 ^{vi}	2.396 (3)	O4—Na2 ^{xiii}	2.811 (3)
Na1—O6 ^v	2.410 (3)	O4—Na1 ^{xiii}	2.845 (3)
Na1—O2 ^{vii}	2.525 (3)	O5—As1 ^{vii}	1.649 (2)
Na1—O4 ^{viii}	2.845 (3)	O5—Na3 ⁱ	2.259 (3)
Na2—O3 ^v	2.366 (3)	O5—Na1 ^{ix}	2.324 (3)
Na2—O1 ^{ix}	2.399 (3)	O5—Na2 ⁱⁱⁱ	2.400 (3)
Na2—O5 ^v	2.400 (3)	O6—Al1 ^{xiv}	1.769 (2)
Na2—O7 ^x	2.488 (3)	O6—Na1 ⁱⁱⁱ	2.410 (3)
Na2—O8	2.646 (3)	O6—Na3 ^{xiv}	2.725 (3)
Na2—O2	2.732 (3)	O7—Na1 ⁱ	2.338 (3)
Na2—O4 ^{xi}	2.811 (3)	O7—Na2 ^{xv}	2.488 (3)
Na3—O5 ⁱ	2.259 (3)	O8—Al1 ^v	1.755 (2)
O5 ^{iv} —As1—O1	116.68 (12)	O1 ^{ix} —Na2—O5 ^v	85.63 (9)
O5 ^{iv} —As1—O8	108.15 (11)	O3 ^v —Na2—O7 ^x	170.45 (10)

O1—As1—O8	112.63 (11)	O1 ^{ix} —Na2—O7 ^x	104.75 (9)
O5 ^{iv} —As1—O2	110.31 (11)	O5 ^v —Na2—O7 ^x	105.41 (9)
O1—As1—O2	106.86 (11)	O3 ^v —Na2—O8	83.77 (9)
O8—As1—O2	101.07 (11)	O1 ^{ix} —Na2—O8	78.02 (8)
O3—As2—O7	117.25 (12)	O5 ^v —Na2—O8	155.65 (9)
O3—As2—O4 ^v	109.92 (11)	O7 ^x —Na2—O8	96.20 (8)
O7—As2—O4 ^v	107.04 (11)	O3 ^v —Na2—O2	84.72 (8)
O3—As2—O6	109.11 (11)	O1 ^{ix} —Na2—O2	136.89 (9)
O7—As2—O6	111.39 (11)	O5 ^v —Na2—O2	131.71 (9)
O4 ^v —As2—O6	100.85 (11)	O7 ^x —Na2—O2	87.06 (8)
O8 ⁱⁱⁱ —Al1—O4	108.02 (11)	O8—Na2—O2	59.34 (7)
O8 ⁱⁱⁱ —Al1—O6 ⁱⁱ	107.51 (11)	O3 ^v —Na2—O4 ^{xi}	111.25 (9)
O4—Al1—O6 ⁱⁱ	113.86 (11)	O1 ^{ix} —Na2—O4 ^{xi}	149.78 (9)
O8 ⁱⁱⁱ —Al1—O2 ⁱ	110.53 (11)	O5 ^v —Na2—O4 ^{xi}	73.97 (8)
O4—Al1—O2 ⁱ	107.78 (11)	O7 ^x —Na2—O4 ^{xi}	61.34 (7)
O6 ⁱⁱ —Al1—O2 ⁱ	109.15 (11)	O8—Na2—O4 ^{xi}	127.61 (8)
O5 ^{vi} —Na1—O7 ⁱ	88.17 (9)	O2—Na2—O4 ^{xi}	72.02 (7)
O5 ^{vi} —Na1—O3 ^{vi}	77.64 (9)	O5 ⁱ —Na3—O1 ⁱ	144.58 (11)
O7 ⁱ —Na1—O3 ^{vi}	131.97 (10)	O5 ⁱ —Na3—O7	97.69 (9)
O5 ^{vi} —Na1—O6 ^v	163.14 (10)	O1 ⁱ —Na3—O7	116.07 (10)
O7 ⁱ —Na1—O6 ^v	93.36 (9)	O5 ⁱ —Na3—O1	85.63 (9)
O3 ^{vi} —Na1—O6 ^v	88.99 (9)	O1 ⁱ —Na3—O1	105.03 (9)
O5 ^{vi} —Na1—O2 ^{vii}	98.35 (9)	O7—Na3—O1	87.95 (9)
O7 ⁱ —Na1—O2 ^{vii}	88.83 (9)	O5 ⁱ —Na3—O6 ⁱⁱ	96.48 (9)
O3 ^{vi} —Na1—O2 ^{vii}	138.21 (10)	O1 ⁱ —Na3—O6 ⁱⁱ	77.46 (8)
O6 ^v —Na1—O2 ^{vii}	98.46 (8)	O7—Na3—O6 ⁱⁱ	84.47 (9)
O5 ^{vi} —Na1—O4 ^{viii}	123.90 (9)	O1—Na3—O6 ⁱⁱ	172.34 (10)
O7 ⁱ —Na1—O4 ^{viii}	145.14 (9)	O5 ⁱ —Na3—O3 ⁱ	71.35 (8)
O3 ^{vi} —Na1—O4 ^{viii}	73.99 (8)	O1 ⁱ —Na3—O3 ⁱ	79.09 (9)
O6 ^v —Na1—O4 ^{viii}	60.27 (7)	O7—Na3—O3 ⁱ	159.60 (10)
O2 ^{vii} —Na1—O4 ^{viii}	74.45 (8)	O1—Na3—O3 ⁱ	74.37 (8)
O3 ^v —Na2—O1 ^{ix}	84.62 (9)	O6 ⁱⁱ —Na3—O3 ⁱ	113.29 (9)
O3 ^v —Na2—O5 ^v	76.78 (9)		

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