

Table 8. Interatomic distances (Å) and angles (deg.)

CA	O1	2.3655 ± 0.0005	( 1 0 0 0)	
CA	O1	2.3655 ± 0.0005	( 2 0 0 0)	
CA	O2	2.3476 ± 0.0004	(-101 0 0 1)	
CA	O2	2.3476 ± 0.0004	(-102-1 0-1)	
CA	O3	2.5667 ± 0.0005	( 101-1 0-1)	
CA	O3	2.7212 ± 0.0005	(-101 0 0 1)	
CA	O3	2.5667 ± 0.0005	( 102 0 0 1)	
CA	O3	2.7212 ± 0.0005	(-102-1 0-1)	
O1	CA	O1	72.12 ± 0.02	( 1 0 0 0) ( 2 0 0 0)
O1	CA	O2	83.41 ± 0.02	( 1 0 0 0) (-101 0 0 1)
O1	CA	O2	78.34 ± 0.02	( 1 0 0 0) (-102-1 0-1)
O1	CA	O3	136.39 ± 0.01	( 1 0 0 0) ( 101-1 0-1)
O1	CA	O3	90.82 ± 0.01	( 1 0 0 0) (-101 0 0 1)
O1	CA	O3	119.57 ± 0.01	( 1 0 0 0) ( 102 0 0 1)
O1	CA	O3	160.69 ± 0.02	( 1 0 0 0) (-102-1 0-1)
O1	CA	O2	78.34 ± 0.02	( 2 0 0 0) (-101 0 0 1)
O1	CA	O2	83.41 ± 0.02	( 2 0 0 0) (-102-1 0-1)
O1	CA	O3	119.57 ± 0.01	( 2 0 0 0) ( 101-1 0-1)
O1	CA	O3	160.69 ± 0.02	( 2 0 0 0) (-101 0 0 1)
O1	CA	O3	136.39 ± 0.01	( 2 0 0 0) ( 102 0 0 1)
O1	CA	O3	90.82 ± 0.01	( 2 0 0 0) (-102-1 0-1)
O2	CA	O2	157.40 ± 0.02	(-101 0 0 1) (-102-1 0-1)
O2	CA	O3	138.35 ± 0.02	(-101 0 0 1) ( 101-1 0-1)
O2	CA	O3	109.33 ± 0.01	(-101 0 0 1) (-101 0 0 1)
O2	CA	O3	63.12 ± 0.02	(-101 0 0 1) ( 102 0 0 1)
O2	CA	O3	84.33 ± 0.02	(-101 0 0 1) (-102-1 0-1)
O2	CA	O3	63.12 ± 0.02	(-102-1 0-1) ( 101-1 0-1)
O2	CA	O3	84.33 ± 0.02	(-102-1 0-1) (-101 0 0 1)
O2	CA	O3	138.35 ± 0.02	(-102-1 0-1) ( 102 0 0 1)
O2	CA	O3	109.33 ± 0.01	(-102-1 0-1) (-102-1 0-1)
O3	CA	O3	66.92 ± 0.02	( 101-1 0-1) (-101 0 0 1)
O3	CA	O3	82.29 ± 0.02	( 101-1 0-1) ( 102 0 0 1)
O3	CA	O3	59.97 ± 0.01	( 101-1 0-1) (-102-1 0-1)
O3	CA	O3	59.97 ± 0.01	(-101 0 0 1) ( 102 0 0 1)
O3	CA	O3	107.32 ± 0.02	(-101 0 0 1) (-102-1 0-1)
O3	CA	O3	66.92 ± 0.02	( 102 0 0 1) (-102-1 0-1)
MG	O1	2.1212 ± 0.0005	( 1 0 1 0)	
MG	O1	2.0634 ± 0.0005	( -1 0 1 0)	
MG	O1	2.1212 ± 0.0005	( 2 0 1 0)	
MG	O1	2.0634 ± 0.0005	( -2 0 1 0)	
MG	O2	2.0564 ± 0.0005	( 101-1 0 0)	
MG	O2	2.0564 ± 0.0005	( 102 0 0 0)	
O1	MG	O1	84.59 ± 0.02	( 1 0 1 0) ( -1 0 1 0)
O1	MG	O1	82.06 ± 0.03	( 1 0 1 0) ( 2 0 1 0)
O1	MG	O1	93.83 ± 0.02	( 1 0 1 0) ( -2 0 1 0)
O1	MG	O2	171.40 ± 0.02	( 1 0 1 0) ( 101-1 0 0)
O1	MG	O2	92.82 ± 0.02	( 1 0 1 0) ( 102 0 0 0)
O1	MG	O1	93.83 ± 0.02	( -1 0 1 0) ( 2 0 1 0)
O1	MG	O1	177.92 ± 0.03	( -1 0 1 0) ( -2 0 1 0)
O1	MG	O2	88.89 ± 0.02	( -1 0 1 0) ( 101-1 0 0)
O1	MG	O2	92.54 ± 0.02	( -1 0 1 0) ( 102 0 0 0)
O1	MG	O1	84.59 ± 0.02	( 2 0 1 0) ( -2 0 1 0)
O1	MG	O2	92.82 ± 0.02	( 2 0 1 0) ( 101-1 0 0)
O1	MG	O2	171.40 ± 0.02	( 2 0 1 0) ( 102 0 0 0)

O1	MG	O2	92.54 ± 0.02	( -2 0 1 0)	( 101-1 0 0)
O1	MG	O2	88.89 ± 0.02	( -2 0 1 0)	( 102 0 0 0)
O2	MG	O2	93.06 ± 0.03	( 101-1 0 0)	( 102 0 0 0)
SI	O1		1.6028 ± 0.0005	( 1 0 0 0)	
SI	O2		1.5900 ± 0.0005	( 1 0 0 0)	
SI	O3		1.6681 ± 0.0005	( 1 0 0-1)	
SI	O3		1.6899 ± 0.0005	( -2 0 0-1)	
O1	SI	O2	118.16 ± 0.03	( 1 0 0 0)	( 1 0 0 0)
O1	SI	O3	110.37 ± 0.02	( 1 0 0 0)	( 1 0 0-1)
O1	SI	O3	109.92 ± 0.02	( 1 0 0 0)	( -2 0 0-1)
O2	SI	O3	109.65 ± 0.03	( 1 0 0 0)	( 1 0 0-1)
O2	SI	O3	103.64 ± 0.02	( 1 0 0 0)	( -2 0 0-1)
O3	SI	O3	104.00 ± 0.02	( 1 0 0-1)	( -2 0 0-1)