

data\_camn Pressure = 5.27 GPa

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'Ca Mn O6 Si2'  
\_chemical\_formula\_weight 247.20

loop\_  
\_atom\_type\_symbol  
\_atom\_type\_description  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_real  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_imag  
\_atom\_type\_scatter\_source  
'Ca' 'Ca' 0.2262 0.3064  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Mn' 'Mn' 0.3368 0.7283  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Si' 'Si' 0.0817 0.0704  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'O' 'O' 0.0106 0.0060  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

\_symmetry\_cell\_setting ?  
\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M ?

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'x, y, z'  
'-x, y, -z+1/2'  
'x+1/2, y+1/2, z'  
'-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'  
'-x, -y, -z'  
'x, -y, z-1/2'  
'-x+1/2, -y+1/2, -z'  
'x+1/2, -y+1/2, z-1/2'

\_cell\_length\_a 9.7895(5)  
\_cell\_length\_b 8.9603(5)  
\_cell\_length\_c 5.1886(3)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 104.145(4)  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 441.33(4)  
\_cell\_formula\_units\_Z 4  
\_cell\_measurement\_temperature 293(2)

```

_cell_measurement_reflns_used    ?
_cell_measurement_theta_min      ?
_cell_measurement_theta_max      ?

_exptl_crystal_description      ?
_exptl_crystal_colour           ?
_exptl_crystal_size_max         ?
_exptl_crystal_size_mid         ?
_exptl_crystal_size_min         ?
_exptl_crystal_density_meas     ?
_exptl_crystal_density_diffn    3.720
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            484
_exptl_absorpt_coefficient_mu    4.645
_exptl_absorpt_correction_type  ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details  ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature      293(2)
_diffn_radiation_wavelength     0.70926
_diffn_radiation_type           ?
_diffn_radiation_source         'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator  graphite
_diffn_measurement_device_type  ?
_diffn_measurement_method       ?
_diffn_detector_area_resol_mean ?
_diffn_standards_number         ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time  ?
_diffn_standards_decay_%        ?
_diffn_reflns_number            298
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0656
_diffn_reflns_limit_h_min       -12
_diffn_reflns_limit_h_max       11
_diffn_reflns_limit_k_min       0
_diffn_reflns_limit_k_max       9
_diffn_reflns_limit_l_min       0
_diffn_reflns_limit_l_max       7
_diffn_reflns_theta_min         3.12
_diffn_reflns_theta_max         29.86
_reflns_number_total            298
_reflns_number_gt               295
_reflns_threshold_expression     >2sigma(I)

_computing_data_collection      ?
_computing_cell_refinement      ?
_computing_data_reduction       ?

```

```

_computing_structure_solution    ?
_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics   ?
_computing_publication_material ?

_refine_special_details
;
Refinement of F2 against ALL reflections. The weighted R-factor wR and
goodness of fit S are based on F2, conventional R-factors R are based
on F, with F set to zero for negative F2. The threshold expression of
F2 > 2sigma(F2) is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is
not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based
on F2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-
factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type          full
_refine_ls_weighting_scheme     calc
_refine_ls_weighting_details
'calc w=1/[sigma^2(Fo^2)+(0.0000P)^2+1.7317P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary    direct
_atom_sites_solution_secondary  difmap
_atom_sites_solution_hydrogens  geom
_refine_ls_hydrogen_treatment   mixed
_refine_ls_extinction_method     SHELXL
_refine_ls_extinction_coef       0.0164(18)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2/l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        298
_refine_ls_number_parameters     22
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0315
_refine_ls_R_factor_gt           0.0313
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0738
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0735
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.116
_refine_ls_restrained_S_all      1.116
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly

```

```

_atom_site_disorder_group
Ca Ca 0.0000 0.30380(16) 0.2500 0.0090(3) Uiso 1 2 d S . .
Mn Mn 0.0000 0.90724(11) 0.2500 0.0077(3) Uiso 1 2 d S . .
Si Si 0.28803(12) 0.09322(13) 0.2340(2) 0.0060(3) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.1211(3) 0.0941(4) 0.1543(6) 0.0093(7) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.3620(3) 0.2462(4) 0.3341(6) 0.0117(7) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.3504(3) 0.0252(4) -0.0135(5) 0.0090(7) Uiso 1 1 d . . .

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

```
;
```

```
loop_
```

```

_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Ca O2 2.293(3) 8_455 ?
Ca O2 2.293(3) 7_556 ?
Ca O1 2.339(3) 2 ?
Ca O1 2.339(3) . ?
Ca O3 2.622(3) 7 ?
Ca O3 2.622(3) 8_456 ?
Ca O3 2.640(4) 4 ?
Ca O3 2.640(4) 3_455 ?
Ca Si 3.1001(12) 7_556 ?
Ca Si 3.1001(12) 8_455 ?
Ca Mn 3.2103(10) 5_565 ?
Ca Mn 3.2103(10) 5_566 ?
Mn O2 2.094(3) 3_455 ?
Mn O2 2.094(3) 4 ?
Mn O1 2.143(3) 6_566 ?
Mn O1 2.143(3) 5_565 ?
Mn O1 2.178(3) 1_565 ?
Mn O1 2.178(3) 2_565 ?
Mn Mn 3.0812(11) 5_576 ?
Mn Mn 3.0812(11) 5_575 ?
Mn Ca 3.2103(10) 5_565 ?
Mn Ca 3.2103(10) 5_566 ?
Mn O3 3.403(3) 6_566 ?
Mn O3 3.403(3) 5_565 ?
Si O2 1.578(3) . ?
Si O1 1.584(3) . ?
Si O3 1.666(3) . ?
Si O3 1.681(3) 6_556 ?
Si Ca 3.1001(12) 7_556 ?
Si Ca 3.3097(15) 3_545 ?

```

Si O3 3.534(3) 2\_655 ?  
Si O3 3.752(4) 7 ?  
Si O3 3.850(3) 1\_556 ?  
Si O3 4.116(3) 5\_655 ?  
Si O3 4.207(3) 6 ?  
O1 Mn 2.143(3) 5\_565 ?  
O1 Mn 2.178(3) 1\_545 ?  
O1 O3 2.671(4) . ?  
O1 O3 2.695(4) 6\_556 ?  
O1 O3 3.514(5) 7 ?  
O1 O3 4.269(5) 4 ?  
O1 O3 4.396(4) 1\_556 ?  
O1 O3 4.620(4) 5 ?  
O1 O3 4.645(5) 3\_455 ?  
O1 O3 4.689(4) 6 ?  
O2 Mn 2.094(3) 3\_545 ?  
O2 Ca 2.293(3) 7\_556 ?  
O2 O3 2.569(5) 6\_556 ?  
O2 O3 2.662(4) . ?  
O2 O3 3.098(5) 7 ?  
O2 O3 3.381(4) 2\_655 ?  
O2 O3 3.520(4) 4 ?  
O2 O3 3.947(4) 1\_556 ?  
O2 O3 4.347(4) 5\_655 ?  
O2 O3 4.628(4) 5\_656 ?  
O2 O3 4.937(4) 4\_554 ?  
O3 Si 1.681(3) 6 ?  
O3 O2 2.569(5) 6 ?  
O3 Ca 2.622(3) 7 ?  
O3 O3 2.6334(13) 6 ?  
O3 O3 2.6334(13) 6\_556 ?  
O3 Ca 2.640(4) 3\_545 ?  
O3 O1 2.695(4) 6 ?  
O3 O3 2.932(5) 5\_655 ?  
O3 O2 3.098(5) 7 ?  
O3 O2 3.381(4) 2\_655 ?  
O3 Mn 3.403(3) 5\_565 ?  
O3 O3 3.484(5) 2\_655 ?  
O3 O1 3.514(5) 7 ?  
O3 O2 3.520(4) 4\_545 ?  
O3 Si 3.534(3) 2\_655 ?  
O3 Si 3.752(4) 7 ?  
O3 Mn 3.841(4) 3\_545 ?  
O3 Si 3.850(3) 1\_554 ?  
O3 O2 3.947(4) 1\_554 ?  
O3 Si 4.116(3) 5\_655 ?  
O3 Mn 4.129(3) 1\_545 ?  
O3 Ca 4.165(3) 7\_556 ?  
O3 Si 4.207(3) 6\_556 ?  
O3 O3 4.255(5) 2\_654 ?  
O3 O1 4.269(5) 4\_545 ?  
O3 O2 4.347(4) 5\_655 ?  
O3 O1 4.396(4) 1\_554 ?  
O3 Mn 4.421(4) 7 ?

O3 Si 4.459(4) 4\_545 ?  
O3 Ca 4.462(3) 5 ?  
O3 O3 4.500(7) 7 ?  
O3 Mn 4.591(3) 1\_544 ?  
O3 O1 4.620(4) 5 ?  
O3 O2 4.628(4) 5\_656 ?  
O3 O1 4.645(5) 3\_545 ?  
O3 O1 4.689(4) 6\_556 ?  
O3 Si 4.798(3) 5\_656 ?  
O3 Ca 4.839(3) 3\_544 ?  
O3 O1 4.885(4) 8 ?  
O3 O2 4.937(4) 4\_544 ?  
O3 O2 4.953(4) 7\_556 ?

loop\_  
\_geom\_angle\_atom\_site\_label\_1  
\_geom\_angle\_atom\_site\_label\_2  
\_geom\_angle\_atom\_site\_label\_3  
\_geom\_angle  
\_geom\_angle\_site\_symmetry\_1  
\_geom\_angle\_site\_symmetry\_3  
\_geom\_angle\_publ\_flag  
O2 Ca O2 157.45(18) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca O1 80.22(11) 8\_455 2 ?  
O2 Ca O1 81.70(12) 7\_556 2 ?  
O2 Ca O1 81.70(12) 8\_455 . ?  
O2 Ca O1 80.22(11) 7\_556 . ?  
O1 Ca O1 73.11(16) 2 . ?  
O2 Ca O3 86.66(10) 8\_455 7 ?  
O2 Ca O3 106.66(10) 7\_556 7 ?  
O1 Ca O3 159.85(11) 2 7 ?  
O1 Ca O3 89.99(10) . 7 ?  
O2 Ca O3 106.66(10) 8\_455 8\_456 ?  
O2 Ca O3 86.66(10) 7\_556 8\_456 ?  
O1 Ca O3 89.99(10) 2 8\_456 ?  
O1 Ca O3 159.85(11) . 8\_456 ?  
O3 Ca O3 108.49(15) 7 8\_456 ?  
O2 Ca O3 139.37(11) 8\_455 4 ?  
O2 Ca O3 62.29(11) 7\_556 4 ?  
O1 Ca O3 137.68(9) 2 4 ?  
O1 Ca O3 117.89(10) . 4 ?  
O3 Ca O3 60.06(5) 7 4 ?  
O3 Ca O3 67.73(10) 8\_456 4 ?  
O2 Ca O3 62.29(11) 8\_455 3\_455 ?  
O2 Ca O3 139.37(11) 7\_556 3\_455 ?  
O1 Ca O3 117.89(10) 2 3\_455 ?  
O1 Ca O3 137.68(9) . 3\_455 ?  
O3 Ca O3 67.73(10) 7 3\_455 ?  
O3 Ca O3 60.06(5) 8\_456 3\_455 ?  
O3 Ca O3 82.57(14) 4 3\_455 ?  
O2 Ca Si 170.77(9) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.47(9) 7\_556 7\_556 ?  
O1 Ca Si 108.83(8) 2 7\_556 ?  
O1 Ca Si 98.94(8) . 7\_556 ?

O3 Ca Si 84.13(7) 7 7\_556 ?  
O3 Ca Si 75.78(7) 8\_456 7\_556 ?  
O3 Ca Si 32.82(7) 4 7\_556 ?  
O3 Ca Si 113.15(8) 3\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.47(9) 8\_455 8\_455 ?  
O2 Ca Si 170.77(9) 7\_556 8\_455 ?  
O1 Ca Si 98.94(8) 2 8\_455 ?  
O1 Ca Si 108.83(8) . 8\_455 ?  
O3 Ca Si 75.78(7) 7 8\_455 ?  
O3 Ca Si 84.13(7) 8\_456 8\_455 ?  
O3 Ca Si 113.15(8) 4 8\_455 ?  
O3 Ca Si 32.82(7) 3\_455 8\_455 ?  
Si Ca Si 145.37(7) 7\_556 8\_455 ?  
O2 Ca Mn 40.59(8) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Mn 121.94(9) 7\_556 5\_565 ?  
O1 Ca Mn 78.38(8) 2 5\_565 ?  
O1 Ca Mn 41.85(8) . 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 81.70(7) 7 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 146.37(6) 8\_456 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 138.73(5) 4 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 97.68(6) 3\_455 5\_565 ?  
Si Ca Mn 137.82(3) 7\_556 5\_565 ?  
Si Ca Mn 67.02(3) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Mn 121.94(9) 8\_455 5\_566 ?  
O2 Ca Mn 40.59(8) 7\_556 5\_566 ?  
O1 Ca Mn 41.85(8) 2 5\_566 ?  
O1 Ca Mn 78.38(8) . 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 146.37(6) 7 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 81.70(7) 8\_456 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 97.68(6) 4 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 138.73(5) 3\_455 5\_566 ?  
Si Ca Mn 67.02(3) 7\_556 5\_566 ?  
Si Ca Mn 137.82(3) 8\_455 5\_566 ?  
Mn Ca Mn 107.82(5) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Mn O2 92.90(18) 3\_455 4 ?  
O2 Mn O1 91.32(11) 3\_455 6\_566 ?  
O2 Mn O1 88.25(12) 4 6\_566 ?  
O2 Mn O1 88.25(12) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn O1 91.32(11) 4 5\_565 ?  
O1 Mn O1 179.37(18) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Mn O1 172.78(13) 3\_455 1\_565 ?  
O2 Mn O1 93.85(12) 4 1\_565 ?  
O1 Mn O1 91.46(12) 6\_566 1\_565 ?  
O1 Mn O1 89.02(12) 5\_565 1\_565 ?  
O2 Mn O1 93.85(12) 3\_455 2\_565 ?  
O2 Mn O1 172.78(13) 4 2\_565 ?  
O1 Mn O1 89.02(12) 6\_566 2\_565 ?  
O1 Mn O1 91.46(12) 5\_565 2\_565 ?  
O1 Mn O1 79.54(17) 1\_565 2\_565 ?  
O2 Mn Mn 93.64(8) 3\_455 5\_576 ?  
O2 Mn Mn 132.84(8) 4 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 44.98(9) 6\_566 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 135.51(9) 5\_565 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 83.65(9) 1\_565 5\_576 ?

O1 Mn Mn 44.05(8) 2\_565 5\_576 ?  
O2 Mn Mn 132.84(8) 3\_455 5\_575 ?  
O2 Mn Mn 93.64(8) 4 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 135.51(9) 6\_566 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 44.98(9) 5\_565 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 44.05(8) 1\_565 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 83.65(9) 2\_565 5\_575 ?  
Mn Mn Mn 114.70(6) 5\_576 5\_575 ?  
O2 Mn Ca 83.69(9) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn Ca 45.43(8) 4 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 132.73(9) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 46.76(9) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 99.26(8) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 138.12(8) 2\_565 5\_565 ?  
Mn Mn Ca 176.56(5) 5\_576 5\_565 ?  
Mn Mn Ca 68.74(3) 5\_575 5\_565 ?  
O2 Mn Ca 45.43(8) 3\_455 5\_566 ?  
O2 Mn Ca 83.69(9) 4 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 46.76(9) 6\_566 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 132.73(9) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 138.12(8) 1\_565 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 99.26(8) 2\_565 5\_566 ?  
Mn Mn Ca 68.74(3) 5\_576 5\_566 ?  
Mn Mn Ca 176.56(5) 5\_575 5\_566 ?  
Ca Mn Ca 107.82(5) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Mn O3 133.79(10) 3\_455 6\_566 ?  
O2 Mn O3 63.44(10) 4 6\_566 ?  
O1 Mn O3 51.69(9) 6\_566 6\_566 ?  
O1 Mn O3 128.46(9) 5\_565 6\_566 ?  
O1 Mn O3 52.30(10) 1\_565 6\_566 ?  
O1 Mn O3 109.77(11) 2\_565 6\_566 ?  
Mn Mn O3 78.93(5) 5\_576 6\_566 ?  
Mn Mn O3 90.01(5) 5\_575 6\_566 ?  
Ca Mn O3 101.36(5) 5\_565 6\_566 ?  
Ca Mn O3 90.71(5) 5\_566 6\_566 ?  
O2 Mn O3 63.44(10) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn O3 133.79(10) 4 5\_565 ?  
O1 Mn O3 128.46(9) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Mn O3 51.69(9) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Mn O3 109.77(11) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Mn O3 52.30(10) 2\_565 5\_565 ?  
Mn Mn O3 90.01(5) 5\_576 5\_565 ?  
Mn Mn O3 78.93(5) 5\_575 5\_565 ?  
Ca Mn O3 90.71(5) 5\_565 5\_565 ?  
Ca Mn O3 101.36(5) 5\_566 5\_565 ?  
O3 Mn O3 159.52(13) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Si O1 116.29(17) . . ?  
O2 Si O3 110.25(16) . . ?  
O1 Si O3 110.45(15) . . ?  
O2 Si O3 103.99(17) . 6\_556 ?  
O1 Si O3 111.21(17) . 6\_556 ?  
O3 Si O3 103.76(11) . 6\_556 ?  
O2 Si Ca 45.61(12) . 7\_556 ?  
O1 Si Ca 130.84(12) . 7\_556 ?



O3 Si Ca 118.70(11) . 7\_556 ?  
O3 Si Ca 58.38(12) 6\_556 7\_556 ?  
O2 Si Ca 115.97(12) . 3\_545 ?  
O1 Si Ca 127.63(13) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 52.21(12) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 51.64(10) 6\_556 3\_545 ?  
Ca Si Ca 85.89(4) 7\_556 3\_545 ?  
O2 Si Ca 80.04(12) . . ?  
O1 Si Ca 36.65(12) . . ?  
O3 Si Ca 133.00(11) . . ?  
O3 Si Ca 118.40(10) 6\_556 . ?  
Ca Si Ca 101.37(3) 7\_556 . ?  
Ca Si Ca 161.78(5) 3\_545 . ?  
O2 Si O3 71.43(13) . 2\_655 ?  
O1 Si O3 166.73(13) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 74.59(12) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 55.56(13) 6\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 45.98(5) 7\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 45.24(6) 3\_545 2\_655 ?  
Ca Si O3 146.75(6) . 2\_655 ?  
O2 Si O3 53.94(12) . 7 ?  
O1 Si O3 69.10(13) . 7 ?  
O3 Si O3 105.75(13) . 7 ?  
O3 Si O3 148.05(12) 6\_556 7 ?  
Ca Si O3 96.19(6) 7\_556 7 ?  
Ca Si O3 154.06(5) 3\_545 7 ?  
Ca Si O3 42.61(4) . 7 ?  
O3 Si O3 122.22(7) 2\_655 7 ?  
O2 Si O3 81.79(13) . 1\_556 ?  
O1 Si O3 99.41(12) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 136.59(16) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 34.13(14) 6\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 42.64(5) 7\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 84.69(5) 3\_545 1\_556 ?  
Ca Si O3 89.43(5) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 70.23(7) 2\_655 1\_556 ?  
O3 Si O3 114.16(6) 7 1\_556 ?  
O2 Si O3 87.64(13) . 5\_655 ?  
O1 Si O3 146.16(12) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 35.85(13) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 83.12(12) 6\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 82.95(5) 7\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 39.51(5) 3\_545 5\_655 ?  
Ca Si O3 157.17(6) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 39.35(3) 2\_655 5\_655 ?  
O3 Si O3 114.93(8) 7 5\_655 ?  
O3 Si O3 107.87(5) 1\_556 5\_655 ?  
O2 Si O3 111.37(12) . 6 ?  
O1 Si O3 97.66(12) . 6 ?  
O3 Si O3 15.02(9) . 6 ?  
O3 Si O3 116.89(14) 6\_556 6 ?  
Ca Si O3 130.84(5) 7\_556 6 ?  
Ca Si O3 66.05(5) 3\_545 6 ?  
Ca Si O3 117.98(5) . 6 ?

O3 Si O3 88.76(6) 2\_655 6 ?  
O3 Si O3 94.12(5) 7 6 ?  
O3 Si O3 150.71(5) 1\_556 6 ?  
O3 Si O3 49.48(7) 5\_655 6 ?  
Si O1 Mn 122.98(17) . 5\_565 ?  
Si O1 Mn 121.40(18) . 1\_545 ?  
Mn O1 Mn 90.98(12) 5\_565 1\_545 ?  
Si O1 Ca 119.50(17) . . ?  
Mn O1 Ca 91.39(12) 5\_565 . ?  
Mn O1 Ca 103.68(13) 1\_545 . ?  
Si O1 O3 35.78(10) . . ?  
Mn O1 O3 89.30(12) 5\_565 . ?  
Mn O1 O3 116.40(16) 1\_545 . ?  
Ca O1 O3 139.90(16) . . ?  
Si O1 O3 35.56(10) . 6\_556 ?  
Mn O1 O3 143.06(15) 5\_565 6\_556 ?  
Mn O1 O3 87.94(13) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O1 O3 124.69(14) . 6\_556 ?  
O3 O1 O3 58.79(9) . 6\_556 ?  
Si O1 O3 85.99(14) . 7 ?  
Mn O1 O3 81.66(10) 5\_565 7 ?  
Mn O1 O3 150.32(14) 1\_545 7 ?  
Ca O1 O3 48.26(7) . 7 ?  
O3 O1 O3 92.35(13) . 7 ?  
O3 O1 O3 114.97(12) 6\_556 7 ?  
Si O1 O3 86.41(13) . 4 ?  
Mn O1 O3 113.20(12) 5\_565 4 ?  
Mn O1 O3 125.24(11) 1\_545 4 ?  
Ca O1 O3 33.14(6) . 4 ?  
O3 O1 O3 112.40(13) . 4 ?  
O3 O1 O3 97.15(12) 6\_556 4 ?  
O3 O1 O3 38.02(3) 7 4 ?  
Si O1 O3 59.77(11) . 1\_556 ?  
Mn O1 O3 171.27(14) 5\_565 1\_556 ?  
Mn O1 O3 81.02(9) 1\_545 1\_556 ?  
Ca O1 O3 93.89(9) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 91.13(11) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 33.95(7) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O1 O3 107.04(9) 7 1\_556 ?  
O3 O1 O3 74.63(6) 4 1\_556 ?  
Si O1 O3 165.26(17) . 5 ?  
Mn O1 O3 63.34(8) 5\_565 5 ?  
Mn O1 O3 43.89(8) 1\_545 5 ?  
Ca O1 O3 71.37(9) . 5 ?  
O3 O1 O3 141.45(11) . 5 ?  
O3 O1 O3 130.79(13) 6\_556 5 ?  
O3 O1 O3 108.58(11) 7 5 ?  
O3 O1 O3 103.56(9) 4 5 ?  
O3 O1 O3 111.93(7) 1\_556 5 ?  
Si O1 O3 123.89(15) . 3\_455 ?  
Mn O1 O3 70.56(9) 5\_565 3\_455 ?  
Mn O1 O3 111.38(11) 1\_545 3\_455 ?  
Ca O1 O3 22.50(5) . 3\_455 ?  
O3 O1 O3 128.13(14) . 3\_455 ?

O3 O1 O3 142.91(13) 6\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 39.12(8) 7 3\_455 ?  
O3 O1 O3 45.78(8) 4 3\_455 ?  
O3 O1 O3 115.58(9) 1\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 70.15(9) 5 3\_455 ?  
Si O1 O3 62.77(10) . 6 ?  
Mn O1 O3 61.69(8) 5\_565 6 ?  
Mn O1 O3 112.27(11) 1\_545 6 ?  
Ca O1 O3 134.36(11) . 6 ?  
O3 O1 O3 27.65(5) . 6 ?  
O3 O1 O3 84.71(9) 6\_556 6 ?  
O3 O1 O3 89.50(7) 7 6 ?  
O3 O1 O3 122.49(8) 4 6 ?  
O3 O1 O3 118.17(9) 1\_556 6 ?  
O3 O1 O3 118.08(8) 5 6 ?  
O3 O1 O3 113.91(8) 3\_455 6 ?  
Si O2 Mn 142.89(17) . 3\_545 ?  
Si O2 Ca 104.92(17) . 7\_556 ?  
Mn O2 Ca 93.97(12) 3\_545 7\_556 ?  
Si O2 O3 39.41(11) . 6\_556 ?  
Mn O2 O3 142.74(16) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O2 O3 65.51(11) 7\_556 6\_556 ?  
Si O2 O3 35.96(10) . . ?  
Mn O2 O3 107.10(13) 3\_545 . ?  
Ca O2 O3 114.20(15) 7\_556 . ?  
O3 O2 O3 60.42(8) 6\_556 . ?  
Si O2 O3 101.74(15) . 7 ?  
Mn O2 O3 79.35(11) 3\_545 7 ?  
Ca O2 O3 142.99(15) 7\_556 7 ?  
O3 O2 O3 135.80(13) 6\_556 7 ?  
O3 O2 O3 102.47(13) . 7 ?  
Si O2 O3 82.31(14) . 2\_655 ?  
Mn O2 O3 85.69(11) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O2 O3 50.73(8) 7\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 57.12(11) 6\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 69.25(13) . 2\_655 ?  
O3 O2 O3 159.99(13) 7 2\_655 ?  
Si O2 O3 116.79(15) . 4 ?  
Mn O2 O3 91.08(12) 3\_545 4 ?  
Ca O2 O3 98.07(11) 7\_556 4 ?  
O3 O2 O3 121.19(12) 6\_556 4 ?  
O3 O2 O3 141.02(11) . 4 ?  
O3 O2 O3 46.36(5) 7 4 ?  
O3 O2 O3 148.13(13) 2\_655 4 ?  
Si O2 O3 74.90(12) . 1\_556 ?  
Mn O2 O3 132.82(12) 3\_545 1\_556 ?  
Ca O2 O3 39.52(7) 7\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 41.27(9) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 101.68(14) . 1\_556 ?  
O3 O2 O3 129.49(10) 7 1\_556 ?  
O3 O2 O3 70.52(10) 2\_655 1\_556 ?  
O3 O2 O3 89.25(7) 4 1\_556 ?  
Si O2 O3 71.09(12) . 5\_655 ?  
Mn O2 O3 78.15(9) 3\_545 5\_655 ?

Ca O2 O3 87.88(10) 7\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 70.69(12) 6\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 41.31(10) . 5\_655 ?  
O3 O2 O3 125.24(11) 7 5\_655 ?  
O3 O2 O3 37.27(4) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O2 O3 168.07(10) 4 5\_655 ?  
O3 O2 O3 101.80(8) 1\_556 5\_655 ?  
Si O2 O3 86.51(13) . 5\_656 ?  
Mn O2 O3 102.57(11) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O2 O3 21.81(7) 7\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 48.11(9) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 92.43(10) . 5\_656 ?  
O3 O2 O3 163.76(13) 7 5\_656 ?  
O3 O2 O3 34.10(4) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O2 O3 117.43(10) 4 5\_656 ?  
O3 O2 O3 38.98(7) 1\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 70.56(7) 5\_655 5\_656 ?  
Si O2 O3 95.34(13) . 4\_554 ?  
Mn O2 O3 68.20(8) 3\_545 4\_554 ?  
Ca O2 O3 159.68(13) 7\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 134.74(10) 6\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 81.55(7) . 4\_554 ?  
O3 O2 O3 27.88(5) 7 4\_554 ?  
O3 O2 O3 132.92(10) 2\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 73.55(8) 4 4\_554 ?  
O3 O2 O3 154.06(8) 1\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 97.41(8) 5\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 166.57(9) 5\_656 4\_554 ?  
Si O3 Si 134.40(19) . 6 ?  
Si O3 O2 129.45(18) . 6 ?  
Si O3 O2 36.60(11) 6 6 ?  
Si O3 Ca 119.92(18) . 7 ?  
Si O3 Ca 98.19(11) 6 7 ?  
O2 O3 Ca 109.73(11) 6 7 ?  
Si O3 O3 155.53(16) . 6 ?  
Si O3 O3 37.93(10) 6 6 ?  
O2 O3 O3 61.55(15) 6 6 ?  
Ca O3 O3 60.32(10) 7 6 ?  
Si O3 O3 38.31(8) . 6\_556 ?  
Si O3 O3 124.9(2) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O3 98.7(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O3 134.09(14) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O3 160.2(3) 6 6\_556 ?  
Si O3 Ca 97.87(12) . 3\_545 ?  
Si O3 Ca 88.80(15) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Ca 52.20(10) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Ca 112.27(10) 7 3\_545 ?  
O3 O3 Ca 104.34(17) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Ca 59.62(12) 6\_556 3\_545 ?  
Si O3 O2 33.79(10) . . ?  
Si O3 O2 160.91(17) 6 . ?  
O2 O3 O2 156.21(16) 6 . ?  
Ca O3 O2 86.92(13) 7 . ?  
O3 O3 O2 141.7(2) 6 . ?

O3 O3 O2 58.03(13) 6\_556 . ?  
Ca O3 O2 106.35(11) 3\_545 . ?  
Si O3 O1 33.77(9) . . ?  
Si O3 O1 103.04(14) 6 . ?  
O2 O3 O1 115.02(15) 6 . ?  
Ca O3 O1 128.87(16) 7 . ?  
O3 O3 O1 124.28(9) 6 . ?  
O3 O3 O1 61.06(9) 6\_556 . ?  
Ca O3 O1 114.12(12) 3\_545 . ?  
O2 O3 O1 60.48(12) . . ?  
Si O3 O1 103.48(14) . 6 ?  
Si O3 O1 33.24(10) 6 6 ?  
O2 O3 O1 61.32(12) 6 6 ?  
Ca O3 O1 113.93(12) 7 6 ?  
O3 O3 O1 60.15(9) 6 6 ?  
O3 O3 O1 111.19(13) 6\_556 6 ?  
Ca O3 O1 107.63(14) 3\_545 6 ?  
O2 O3 O1 128.27(13) . 6 ?  
O1 O3 O1 70.43(12) . 6 ?  
Si O3 O3 124.70(18) . 5\_655 ?  
Si O3 O3 96.23(16) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O3 75.52(15) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O3 56.44(10) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O3 77.31(10) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O3 99.60(11) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 O3 55.83(11) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 O3 101.86(16) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 158.29(17) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 129.46(17) 6 5\_655 ?  
Si O3 O2 81.24(13) . 7 ?  
Si O3 O2 86.01(13) 6 7 ?  
O2 O3 O2 122.35(11) 6 7 ?  
Ca O3 O2 74.98(10) 7 7 ?  
O3 O3 O2 75.29(11) 6 7 ?  
O3 O3 O2 118.74(14) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O2 171.67(14) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O2 77.53(13) . 7 ?  
O1 O3 O2 60.98(10) . 7 ?  
O1 O3 O2 64.77(12) 6 7 ?  
O3 O3 O2 131.25(17) 5\_655 7 ?  
Si O3 O2 90.63(14) . 2\_655 ?  
Si O3 O2 134.75(13) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O2 122.88(11) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O2 42.61(6) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O2 99.87(10) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 91.71(11) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O2 88.77(10) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 O2 58.87(13) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 118.98(14) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 156.32(14) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 47.36(11) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O2 99.51(10) 7 2\_655 ?  
Si O3 Mn 71.68(10) . 5\_565 ?  
Si O3 Mn 71.88(10) 6 5\_565 ?

O2 O3 Mn 100.01(11) 6 5\_565 ?  
Ca O3 Mn 110.88(10) 7 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 85.30(4) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 98.22(4) 6\_556 5\_565 ?  
Ca O3 Mn 134.65(11) 3\_545 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 89.10(11) . 5\_565 ?  
O1 O3 Mn 39.01(8) . 5\_565 ?  
O1 O3 Mn 39.76(8) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 162.09(14) 5\_655 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 37.20(7) 7 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 133.88(12) 2\_655 5\_565 ?  
Si O3 O3 77.95(11) . 2\_655 ?  
Si O3 O3 133.43(13) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O3 98.61(9) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O3 84.78(9) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O3 124.81(8) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 55.19(8) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O3 48.71(7) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 O3 65.15(9) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 110.87(13) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 155.64(11) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 47.50(8) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O3 138.31(9) 7 2\_655 ?  
O2 O3 O3 45.61(8) 2\_655 2\_655 ?  
Mn O3 O3 149.62(11) 5\_565 2\_655 ?  
Si O3 O1 82.40(15) . 7 ?  
Si O3 O1 118.90(14) 6 7 ?  
O2 O3 O1 147.53(12) 6 7 ?  
Ca O3 O1 41.74(8) 7 7 ?  
O3 O3 O1 86.73(15) 6 7 ?  
O3 O3 O1 112.98(18) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O1 140.81(12) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O1 54.99(10) . 7 ?  
O1 O3 O1 87.65(13) . 7 ?  
O1 O3 O1 110.37(12) 6 7 ?  
O3 O3 O1 91.77(15) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O1 47.43(10) 7 7 ?  
O2 O3 O1 52.10(9) 2\_655 7 ?  
Mn O3 O1 82.91(9) 5\_565 7 ?  
O3 O3 O1 93.96(7) 2\_655 7 ?  
Si O3 O2 72.80(12) . 4\_545 ?  
Si O3 O2 68.40(12) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O2 58.81(12) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O2 166.52(12) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O2 106.31(16) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 58.35(12) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O2 67.55(9) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 O2 106.21(8) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 58.65(11) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 55.50(10) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 121.71(18) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O2 104.41(13) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O2 148.13(13) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O2 67.22(7) 5\_565 4\_545 ?

O3 O3 O2 103.30(9) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O2 145.73(12) 7 4\_545 ?  
Si O3 Si 98.03(12) . 2\_655 ?  
Si O3 Si 124.44(13) 6 2\_655 ?  
O2 O3 Si 100.04(11) 6 2\_655 ?  
Ca O3 Si 58.24(6) 7 2\_655 ?  
O3 O3 Si 101.12(4) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 82.32(5) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 Si 62.87(6) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 Si 73.81(10) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 131.57(12) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 157.66(12) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 28.21(8) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 125.45(13) 7 2\_655 ?  
O2 O3 Si 26.26(6) 2\_655 2\_655 ?  
Mn O3 Si 159.61(12) 5\_565 2\_655 ?  
O3 O3 Si 27.46(5) 2\_655 2\_655 ?  
O1 O3 Si 78.21(9) 7 2\_655 ?  
O2 O3 Si 127.67(11) 4\_545 2\_655 ?  
Si O3 Si 74.25(13) . 7 ?  
Si O3 Si 107.60(13) 6 7 ?  
O2 O3 Si 143.99(11) 6 7 ?  
Ca O3 Si 61.73(7) 7 7 ?  
O3 O3 Si 86.74(14) 6 7 ?  
O3 O3 Si 111.70(16) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Si 162.93(11) 3\_545 7 ?  
O2 O3 Si 58.75(10) . 7 ?  
O1 O3 Si 67.61(10) . 7 ?  
O1 O3 Si 89.09(11) 6 7 ?  
O3 O3 Si 115.93(16) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Si 24.32(7) 7 7 ?  
O2 O3 Si 76.39(9) 2\_655 7 ?  
Mn O3 Si 58.05(6) 5\_565 7 ?  
O3 O3 Si 114.27(5) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Si 24.91(6) 7 7 ?  
O2 O3 Si 122.35(9) 4\_545 7 ?  
Si O3 Si 102.65(9) 2\_655 7 ?  
Si O3 Mn 65.13(12) . 3\_545 ?  
Si O3 Mn 151.00(14) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 155.76(12) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Mn 55.80(7) 7 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 114.33(16) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 83.92(13) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 Mn 111.74(9) 3\_545 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 31.40(8) . 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 87.46(11) . 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 140.07(13) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 80.27(13) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 75.50(10) 7 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 32.93(6) 2\_655 3\_545 ?  
Mn O3 Mn 103.47(9) 5\_565 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 63.03(4) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 33.50(6) 7 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 137.51(9) 4\_545 3\_545 ?

Si O3 Mn 56.21(5) 2\_655 3\_545 ?  
Si O3 Mn 51.27(5) 7 3\_545 ?  
Si O3 Si 136.59(16) . 1\_554 ?  
Si O3 Si 51.11(9) 6 1\_554 ?  
O2 O3 Si 81.13(9) 6 1\_554 ?  
Ca O3 Si 53.23(5) 7 1\_554 ?  
O3 O3 Si 20.98(10) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 171.12(5) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 Si 125.07(10) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 Si 122.64(13) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 110.88(11) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 60.87(8) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 88.98(10) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 Si 55.35(7) 7 1\_554 ?  
O2 O3 Si 95.83(8) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 Si 73.15(5) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 Si 133.68(11) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 Si 68.69(7) 7 1\_554 ?  
O2 O3 Si 115.02(10) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 Si 106.48(7) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 Si 65.84(6) 7 1\_554 ?  
Mn O3 Si 99.92(8) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 124.76(17) . 1\_554 ?  
Si O3 O2 74.31(11) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O2 101.45(12) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O2 33.81(6) 7 1\_554 ?  
O3 O3 O2 40.04(12) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 159.7(2) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O2 133.84(10) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O2 101.68(14) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 111.49(13) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 81.06(10) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 83.15(12) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O2 50.51(10) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O2 75.27(10) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O2 80.76(7) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 O2 118.57(10) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O2 46.71(7) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O2 136.54(9) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 91.70(8) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 O2 50.60(6) 7 1\_554 ?  
Mn O3 O2 76.69(8) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 23.31(5) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 Si 144.15(13) . 5\_655 ?  
Si O3 Si 78.11(10) 6 5\_655 ?  
O2 O3 Si 64.19(9) 6 5\_655 ?  
Ca O3 Si 53.43(5) 7 5\_655 ?  
O3 O3 Si 58.33(5) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 115.88(8) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 Si 62.90(6) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 Si 118.88(11) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 176.88(13) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 111.00(10) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 19.44(7) 5\_655 5\_655 ?



O2 O3 Si 122.10(9) 7 5\_655 ?  
O2 O3 Si 60.85(7) 2\_655 5\_655 ?  
Mn O3 Si 143.63(7) 5\_565 5\_655 ?  
O3 O3 Si 66.63(8) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 Si 94.33(8) 7 5\_655 ?  
O2 O3 Si 119.62(11) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 46.81(4) 2\_655 5\_655 ?  
Si O3 Si 114.93(8) 7 5\_655 ?  
Mn O3 Si 92.86(6) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 72.13(5) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 Si 71.59(6) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 Mn 49.28(9) . 1\_545 ?  
Si O3 Mn 85.60(11) 6 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 87.83(11) 6 1\_545 ?  
Ca O3 Mn 155.34(12) 7 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 118.84(8) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 55.23(5) 6\_556 1\_545 ?  
Ca O3 Mn 92.09(8) 3\_545 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 82.38(9) . 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 28.20(8) . 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 58.71(8) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 147.72(16) 5\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 81.02(8) 7 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 139.64(9) 2\_655 1\_545 ?  
Mn O3 Mn 47.08(4) 5\_565 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 110.30(9) 2\_655 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 115.58(10) 7 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 30.47(6) 4\_545 1\_545 ?  
Si O3 Mn 137.55(7) 2\_655 1\_545 ?  
Si O3 Mn 93.83(6) 7 1\_545 ?  
Mn O3 Mn 112.68(7) 3\_545 1\_545 ?  
Si O3 Mn 115.95(7) 1\_554 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 127.79(8) 1\_554 1\_545 ?  
Si O3 Mn 150.05(10) 5\_655 1\_545 ?  
Si O3 Ca 40.75(8) . 7\_556 ?  
Si O3 Ca 161.79(16) 6 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 127.53(12) 6 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 97.09(9) 7 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 156.28(11) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 37.89(10) 6\_556 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 76.25(7) 3\_545 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 30.13(8) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 74.52(9) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 142.99(10) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 84.05(11) 5\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 107.55(11) 7 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 56.44(7) 2\_655 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 111.50(7) 5\_565 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 38.82(5) 2\_655 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 79.24(8) 7 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 95.90(8) 4\_545 7\_556 ?  
Si O3 Ca 57.47(4) 2\_655 7\_556 ?  
Si O3 Ca 88.38(7) 7 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 47.06(4) 3\_545 7\_556 ?

Si O3 Ca 146.94(10) 1\_554 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 123.64(10) 1\_554 7\_556 ?  
Si O3 Ca 103.47(6) 5\_655 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 84.64(5) 1\_545 7\_556 ?  
Si O3 Si 38.61(9) . 6\_556 ?  
Si O3 Si 116.89(14) 6 6\_556 ?  
O2 O3 Si 94.13(11) 6 6\_556 ?  
Ca O3 Si 143.35(10) 7 6\_556 ?  
O3 O3 Si 154.13(19) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 9.44(7) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 Si 61.32(5) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 Si 63.56(8) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 55.58(8) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 101.75(10) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 106.57(12) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 115.60(9) 7 6\_556 ?  
O2 O3 Si 101.11(8) 2\_655 6\_556 ?  
Mn O3 Si 90.95(6) 5\_565 6\_556 ?  
O3 O3 Si 63.89(7) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 Si 118.24(9) 7 6\_556 ?  
O2 O3 Si 49.36(6) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 91.24(6) 2\_655 6\_556 ?  
Si O3 Si 112.82(7) 7 6\_556 ?  
Mn O3 Si 91.45(6) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 162.18(9) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 Si 163.38(10) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 Si 121.30(8) 5\_655 6\_556 ?  
Mn O3 Si 46.41(3) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 Si 46.57(3) 7\_556 6\_556 ?  
Si O3 O3 151.39(15) . 2\_654 ?  
Si O3 O3 73.79(10) 6 2\_654 ?  
O2 O3 O3 74.59(9) 6 2\_654 ?  
Ca O3 O3 35.75(8) 7 2\_654 ?  
O3 O3 O3 42.80(8) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 137.20(8) 6\_556 2\_654 ?  
Ca O3 O3 85.75(7) 3\_545 2\_654 ?  
O2 O3 O3 117.99(10) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 159.99(13) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 102.37(11) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 37.60(6) 5\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 99.02(9) 7 2\_654 ?  
O2 O3 O3 60.97(8) 2\_655 2\_654 ?  
Mn O3 O3 124.55(10) 5\_565 2\_654 ?  
O3 O3 O3 83.56(11) 2\_655 2\_654 ?  
O1 O3 O3 77.27(7) 7 2\_654 ?  
O2 O3 O3 133.38(7) 4\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 58.36(6) 2\_655 2\_654 ?  
Si O3 O3 94.16(5) 7 2\_654 ?  
Mn O3 O3 87.08(5) 3\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 51.41(6) 1\_554 2\_654 ?  
O2 O3 O3 48.51(6) 1\_554 2\_654 ?  
Si O3 O3 23.09(5) 5\_655 2\_654 ?  
Mn O3 O3 159.30(8) 1\_545 2\_654 ?  
Ca O3 O3 114.64(9) 7\_556 2\_654 ?

Si O3 O3 143.80(10) 6\_556 2\_654 ?  
Si O3 O1 89.51(13) . 4\_545 ?  
Si O3 O1 75.01(13) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O1 43.47(9) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O1 138.49(11) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O1 105.02(18) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 55.26(14) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O1 28.97(6) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 O1 112.94(11) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 92.12(10) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 82.85(12) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 83.21(15) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 142.78(11) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O1 116.67(10) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O1 105.71(9) 5\_565 4\_545 ?  
O3 O3 O1 72.82(6) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O1 165.77(12) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O1 38.87(8) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 91.43(8) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 O1 159.70(9) 7 4\_545 ?  
Mn O3 O1 132.26(8) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 124.28(9) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 O1 144.69(10) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 O1 85.37(8) 5\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O1 66.07(6) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O1 86.98(7) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 O1 51.52(5) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 O1 105.74(7) 2\_654 4\_545 ?  
Si O3 O2 153.27(15) . 5\_655 ?  
Si O3 O2 59.63(10) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O2 43.19(10) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O2 70.12(7) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O2 51.03(10) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 115.90(14) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 O2 56.54(7) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 O2 138.69(10) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 158.20(15) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 92.82(11) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 36.83(10) 5\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 125.24(11) 7 5\_655 ?  
O2 O3 O2 81.93(10) 2\_655 5\_655 ?  
Mn O3 O2 130.65(9) 5\_565 5\_655 ?  
O3 O3 O2 78.57(8) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 O2 111.85(9) 7 5\_655 ?  
O2 O3 O2 100.58(8) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 64.94(6) 2\_655 5\_655 ?  
Si O3 O2 127.79(8) 7 5\_655 ?  
Mn O3 O2 114.13(8) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 69.98(6) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 O2 78.20(8) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 O2 21.27(5) 5\_655 5\_655 ?  
Mn O3 O2 130.66(10) 1\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O2 117.37(8) 7\_556 5\_655 ?  
Si O3 O2 117.72(9) 6\_556 5\_655 ?

O3 O3 O2 34.73(6) 2\_654 5\_655 ?  
O1 O3 O2 71.43(9) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O1 120.68(14) . 1\_554 ?  
Si O3 O1 47.31(10) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O1 83.17(10) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O1 70.60(7) 7 1\_554 ?  
O3 O3 O1 34.86(7) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 150.32(5) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O1 134.39(11) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O1 119.22(13) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 91.13(11) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 44.10(9) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 109.45(12) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 42.70(8) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O1 112.28(10) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O1 52.64(5) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 O1 154.21(11) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O1 72.96(9) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O1 99.59(9) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 126.77(8) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 O1 60.86(6) 7 1\_554 ?  
Mn O3 O1 106.46(9) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 20.82(5) 1\_554 1\_554 ?  
O2 O3 O1 37.07(7) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 O1 91.75(6) 5\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O1 95.46(7) 1\_545 1\_554 ?  
Ca O3 O1 149.20(10) 7\_556 1\_554 ?  
Si O3 O1 141.86(8) 6\_556 1\_554 ?  
O3 O3 O1 72.05(8) 2\_654 1\_554 ?  
O1 O3 O1 121.27(10) 4\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O1 85.73(7) 5\_655 1\_554 ?  
Si O3 Mn 137.99(15) . 7 ?  
Si O3 Mn 46.53(10) 6 7 ?  
O2 O3 Mn 16.67(7) 6 7 ?  
Ca O3 Mn 96.98(8) 7 7 ?  
O3 O3 Mn 59.76(13) 6 7 ?  
O3 O3 Mn 101.69(17) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Mn 46.03(5) 3\_545 7 ?  
O2 O3 Mn 151.38(11) . 7 ?  
O1 O3 Mn 130.90(13) . 7 ?  
O1 O3 Mn 75.84(10) 6 7 ?  
O3 O3 Mn 58.90(12) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Mn 130.91(10) 7 7 ?  
O2 O3 Mn 106.25(9) 2\_655 7 ?  
Mn O3 Mn 115.39(8) 5\_565 7 ?  
O3 O3 Mn 86.90(5) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Mn 138.15(8) 7 7 ?  
O2 O3 Mn 73.02(8) 4\_545 7 ?  
Si O3 Mn 84.18(6) 2\_655 7 ?  
Si O3 Mn 146.47(7) 7 7 ?  
Mn O3 Mn 139.17(7) 3\_545 7 ?  
Si O3 Mn 80.71(5) 1\_554 7 ?  
O2 O3 Mn 96.95(7) 1\_554 7 ?  
Si O3 Mn 48.03(4) 5\_655 7 ?

Mn O3 Mn 103.05(7) 1\_545 7 ?  
Ca O3 Mn 121.54(7) 7\_556 7 ?  
Si O3 Mn 99.63(7) 6\_556 7 ?  
O3 O3 Mn 61.23(4) 2\_654 7 ?  
O1 O3 Mn 48.49(6) 4\_545 7 ?  
O2 O3 Mn 27.62(5) 5\_655 7 ?  
O1 O3 Mn 88.55(7) 1\_554 7 ?  
Si O3 Si 82.46(12) . 4\_545 ?  
Si O3 Si 67.91(12) 6 4\_545 ?  
O2 O3 Si 46.99(9) 6 4\_545 ?  
Ca O3 Si 155.27(11) 7 4\_545 ?  
O3 O3 Si 104.16(17) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 57.13(13) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 Si 49.72(6) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 Si 113.03(10) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 75.40(10) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 65.91(10) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 103.29(16) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 122.07(10) 7 4\_545 ?  
O2 O3 Si 135.86(10) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 Si 84.94(6) 5\_565 4\_545 ?  
O3 O3 Si 90.50(5) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 162.96(10) 7 4\_545 ?  
O2 O3 Si 18.42(6) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 111.69(8) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 Si 140.74(8) 7 4\_545 ?  
Mn O3 Si 141.03(7) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 118.80(8) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 Si 142.11(9) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 Si 102.53(7) 5\_655 4\_545 ?  
Mn O3 Si 47.69(4) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 Si 94.24(6) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 Si 49.98(4) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 Si 119.62(4) 2\_654 4\_545 ?  
O1 O3 Si 20.77(5) 4\_545 4\_545 ?  
O2 O3 Si 85.15(8) 5\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 108.57(8) 1\_554 4\_545 ?  
Mn O3 Si 58.47(5) 7 4\_545 ?  
Si O3 Ca 92.95(12) . 5 ?  
Si O3 Ca 42.25(8) 6 5 ?  
O2 O3 Ca 51.57(9) 6 5 ?  
Ca O3 Ca 137.49(8) 7 5 ?  
O3 O3 Ca 78.51(11) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 88.41(12) 6\_556 5 ?  
Ca O3 Ca 86.43(9) 3\_545 5 ?  
O2 O3 Ca 125.48(10) . 5 ?  
O1 O3 Ca 65.88(9) . 5 ?  
O1 O3 Ca 25.54(8) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 127.08(17) 5\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 85.35(9) 7 5 ?  
O2 O3 Ca 174.36(11) 2\_655 5 ?  
Mn O3 Ca 51.60(5) 5\_565 5 ?  
O3 O3 Ca 131.15(6) 2\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 132.76(10) 7 5 ?

O2 O3 Ca 30.58(6) 4\_545 5 ?  
Si O3 Ca 148.46(10) 2\_655 5 ?  
Si O3 Ca 108.79(7) 7 5 ?  
Mn O3 Ca 152.54(8) 3\_545 5 ?  
Si O3 Ca 84.54(6) 1\_554 5 ?  
O2 O3 Ca 106.08(7) 1\_554 5 ?  
Si O3 Ca 114.13(8) 5\_655 5 ?  
Mn O3 Ca 43.67(3) 1\_545 5 ?  
Ca O3 Ca 124.92(6) 7\_556 5 ?  
Si O3 Ca 79.15(5) 6\_556 5 ?  
O3 O3 Ca 115.63(7) 2\_654 5 ?  
O1 O3 Ca 59.06(6) 4\_545 5 ?  
O2 O3 Ca 92.94(8) 5\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 69.45(6) 1\_554 5 ?  
Mn O3 Ca 68.23(5) 7 5 ?  
Si O3 Ca 40.67(3) 4\_545 5 ?  
Si O3 O3 53.37(10) . 7 ?  
Si O3 O3 120.75(15) 6 7 ?  
O2 O3 O3 155.48(14) 6 7 ?  
Ca O3 O3 77.87(11) 7 7 ?  
O3 O3 O3 106.84(16) 6 7 ?  
O3 O3 O3 91.02(14) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O3 147.97(12) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O3 42.24(9) . 7 ?  
O1 O3 O3 51.28(9) . 7 ?  
O1 O3 O3 94.19(12) 6 7 ?  
O3 O3 O3 125.1(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O3 35.29(7) 7 7 ?  
O2 O3 O3 78.92(11) 2\_655 7 ?  
Mn O3 O3 56.11(6) 5\_565 7 ?  
O3 O3 O3 105.39(8) 2\_655 7 ?  
O1 O3 O3 36.37(7) 7 7 ?  
O2 O3 O3 109.67(10) 4\_545 7 ?  
Si O3 O3 103.55(11) 2\_655 7 ?  
Si O3 O3 20.88(4) 7 7 ?  
Mn O3 O3 47.36(6) 3\_545 7 ?  
Si O3 O3 85.86(9) 1\_554 7 ?  
O2 O3 O3 71.46(9) 1\_554 7 ?  
Si O3 O3 130.66(11) 5\_655 7 ?  
Mn O3 O3 79.29(7) 1\_545 7 ?  
Ca O3 O3 72.29(7) 7\_556 7 ?  
Si O3 O3 91.95(7) 6\_556 7 ?  
O3 O3 O3 112.68(7) 2\_654 7 ?  
O1 O3 O3 141.15(10) 4\_545 7 ?  
O2 O3 O3 147.32(11) 5\_655 7 ?  
O1 O3 O3 77.46(8) 1\_554 7 ?  
Mn O3 O3 165.99(10) 7 7 ?  
Si O3 O3 126.66(9) 4\_545 7 ?  
Ca O3 O3 106.71(9) 5 7 ?  
Si O3 Mn 112.67(12) . 1\_544 ?  
Si O3 Mn 31.85(8) 6 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 66.80(9) 6 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 97.71(7) 7 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 47.19(4) 6 1\_544 ?

O3 O3 Mn 126.90(9) 6\_556 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 117.71(10) 3\_545 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 129.39(11) . 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 78.93(9) . 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 16.29(7) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 122.59(12) 5\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 55.82(8) 7 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 140.04(9) 2\_655 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 42.15(3) 5\_565 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 165.23(6) 2\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 97.56(8) 7 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 71.75(7) 4\_545 1\_544 ?  
Si O3 Mn 148.30(7) 2\_655 1\_544 ?  
Si O3 Mn 79.36(6) 7 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 130.08(8) 3\_545 1\_544 ?  
Si O3 Mn 44.87(3) 1\_554 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 64.79(6) 1\_554 1\_544 ?  
Si O3 Mn 103.16(6) 5\_655 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 72.80(4) 1\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 153.34(7) 7\_556 1\_544 ?  
Si O3 Mn 117.51(7) 6\_556 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 89.98(7) 2\_654 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 96.36(8) 4\_545 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 88.55(7) 5\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 27.94(5) 1\_554 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 78.34(5) 7 1\_544 ?  
Si O3 Mn 81.15(6) 4\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 41.51(3) 5 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 89.36(8) 7 1\_544 ?  
Si O3 O1 70.49(11) . 5 ?  
Si O3 O1 64.65(10) 6 5 ?  
O2 O3 O1 81.36(11) 6 5 ?  
Ca O3 O1 135.40(10) 7 5 ?  
O3 O3 O1 92.59(7) 6 5 ?  
O3 O3 O1 82.84(6) 6\_556 5 ?  
Ca O3 O1 108.31(10) 3\_545 5 ?  
O2 O3 O1 98.90(10) . 5 ?  
O1 O3 O1 38.55(11) . 5 ?  
O1 O3 O1 33.18(9) 6 5 ?  
O3 O3 O1 156.87(18) 5\_655 5 ?  
O2 O3 O1 63.52(9) 7 5 ?  
O2 O3 O1 155.74(12) 2\_655 5 ?  
Mn O3 O1 26.34(5) 5\_565 5 ?  
O3 O3 O1 137.71(10) 2\_655 5 ?  
O1 O3 O1 108.58(11) 7 5 ?  
O2 O3 O1 40.99(7) 4\_545 5 ?  
Si O3 O1 165.14(8) 2\_655 5 ?  
Si O3 O1 83.69(7) 7 5 ?  
Mn O3 O1 122.81(8) 3\_545 5 ?  
Si O3 O1 88.37(6) 1\_554 5 ?  
O2 O3 O1 102.57(8) 1\_554 5 ?  
Si O3 O1 142.22(9) 5\_655 5 ?  
Mn O3 O1 27.63(4) 1\_545 5 ?  
Ca O3 O1 109.93(6) 7\_556 5 ?

Si O3 O1 73.90(6) 6\_556 5 ?  
O3 O3 O1 135.30(10) 2\_654 5 ?  
O1 O3 O1 79.37(7) 4\_545 5 ?  
O2 O3 O1 121.71(9) 5\_655 5 ?  
O1 O3 O1 68.07(7) 1\_554 5 ?  
Mn O3 O1 98.00(8) 7 5 ?  
Si O3 O1 58.61(6) 4\_545 5 ?  
Ca O3 O1 29.79(5) 5 5 ?  
O3 O3 O1 77.56(8) 7 5 ?  
Mn O3 O1 45.62(4) 1\_544 5 ?  
Si O3 O2 82.79(11) . 5\_656 ?  
Si O3 O2 107.42(15) 6 5\_656 ?  
O2 O3 O2 70.87(12) 6 5\_656 ?  
Ca O3 O2 110.99(9) 7 5\_656 ?  
O3 O3 O2 120.91(15) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 46.03(9) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 O2 18.82(5) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 O2 87.57(10) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 106.04(11) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 122.36(13) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 57.86(11) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 163.76(13) 7 5\_656 ?  
O2 O3 O2 77.74(10) 2\_655 5\_656 ?  
Mn O3 O2 137.73(8) 5\_565 5\_656 ?  
O3 O3 O2 33.28(6) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 127.18(10) 7 5\_656 ?  
O2 O3 O2 73.38(7) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 54.29(6) 2\_655 5\_656 ?  
Si O3 O2 144.92(9) 7 5\_656 ?  
Mn O3 O2 95.12(7) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 140.52(9) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 O2 141.02(7) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 O2 70.84(6) 5\_655 5\_656 ?  
Mn O3 O2 90.75(6) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 57.44(6) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 O2 50.47(5) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 O2 93.62(8) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 O2 39.57(7) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 O2 70.56(7) 5\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 153.05(10) 1\_554 5\_656 ?  
Mn O3 O2 64.51(6) 7 5\_656 ?  
Si O3 O2 58.17(6) 4\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 98.38(8) 5 5\_656 ?  
O3 O3 O2 129.48(10) 7 5\_656 ?  
Mn O3 O2 134.80(10) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 O2 113.40(8) 5 5\_656 ?  
Si O3 O1 117.35(14) . 3\_545 ?  
Si O3 O1 72.72(12) 6 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.25(9) 6 3\_545 ?  
Ca O3 O1 102.44(8) 7 3\_545 ?  
O3 O3 O1 84.52(14) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 79.04(14) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 O1 19.82(5) 3\_545 3\_545 ?  
O2 O3 O1 124.31(11) . 3\_545 ?



O1 O3 O1 128.13(14) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 97.92(10) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 49.11(12) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 158.11(12) 7 3\_545 ?  
O2 O3 O1 92.12(9) 2\_655 3\_545 ?  
Mn O3 O1 133.95(10) 5\_565 3\_545 ?  
O3 O3 O1 61.40(6) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 140.88(8) 7 3\_545 ?  
O2 O3 O1 72.94(9) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 66.31(6) 2\_655 3\_545 ?  
Si O3 O1 164.16(8) 7 3\_545 ?  
Mn O3 O1 121.60(8) 3\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 105.28(7) 1\_554 3\_545 ?  
O2 O3 O1 116.32(8) 1\_554 3\_545 ?  
Si O3 O1 49.28(5) 5\_655 3\_545 ?  
Mn O3 O1 101.95(8) 1\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 94.34(7) 7\_556 3\_545 ?  
Si O3 O1 79.75(7) 6\_556 3\_545 ?  
O3 O3 O1 70.53(6) 2\_654 3\_545 ?  
O1 O3 O1 36.12(9) 4\_545 3\_545 ?  
O2 O3 O1 38.12(6) 5\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 115.58(9) 1\_554 3\_545 ?  
Mn O3 O1 27.20(4) 7 3\_545 ?  
Si O3 O1 54.69(6) 4\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 82.36(7) 5 3\_545 ?  
O3 O3 O1 166.48(11) 7 3\_545 ?  
Mn O3 O1 103.92(8) 1\_544 3\_545 ?  
O1 O3 O1 109.85(9) 5 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.55(6) 5\_656 3\_545 ?  
Si O3 O1 35.12(10) . 6\_556 ?  
Si O3 O1 106.47(13) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O1 94.39(11) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O1 154.41(12) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O1 143.52(13) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 28.07(6) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 O1 75.58(7) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 67.53(9) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 38.70(9) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 84.71(9) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 125.61(14) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 99.65(9) 7 6\_556 ?  
O2 O3 O1 116.54(9) 2\_655 6\_556 ?  
Mn O3 O1 71.61(6) 5\_565 6\_556 ?  
O3 O3 O1 83.24(9) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 116.83(10) 7 6\_556 ?  
O2 O3 O1 38.94(7) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 110.38(7) 2\_655 6\_556 ?  
Si O3 O1 103.33(7) 7 6\_556 ?  
Mn O3 O1 98.61(7) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 143.08(8) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 O1 150.15(9) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 O1 138.24(9) 5\_655 6\_556 ?  
Mn O3 O1 27.18(4) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 60.10(5) 7\_556 6\_556 ?

Si O3 O1 19.56(4) 6\_556 6\_556 ?  
O3 O3 O1 161.30(9) 2\_654 6\_556 ?  
O1 O3 O1 57.51(8) 4\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 128.82(10) 5\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 122.42(9) 1\_554 6\_556 ?  
Mn O3 O1 104.84(8) 7 6\_556 ?  
Si O3 O1 47.41(5) 4\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 65.03(6) 5 6\_556 ?  
O3 O3 O1 83.64(7) 7 6\_556 ?  
Mn O3 O1 99.63(7) 1\_544 6\_556 ?  
O1 O3 O1 54.81(7) 5 6\_556 ?  
O2 O3 O1 68.23(6) 5\_656 6\_556 ?  
O1 O3 O1 91.49(7) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Ca 31.99(8) . . ?  
Si O3 Ca 114.16(12) 6 . ?  
O2 O3 Ca 132.97(11) 6 . ?  
Ca O3 Ca 110.86(10) 7 . ?  
O3 O3 Ca 123.55(10) 6 . ?  
O3 O3 Ca 68.25(9) 6\_556 . ?  
Ca O3 Ca 126.82(7) 3\_545 . ?  
O2 O3 Ca 47.33(8) . . ?  
O1 O3 Ca 18.67(8) . . ?  
O1 O3 Ca 81.02(9) 6 . ?  
O3 O3 Ca 149.09(16) 5\_655 . ?  
O2 O3 Ca 50.52(7) 7 . ?  
O2 O3 Ca 103.08(9) 2\_655 . ?  
Mn O3 Ca 42.99(3) 5\_565 . ?  
O3 O3 Ca 107.72(8) 2\_655 . ?  
O1 O3 Ca 69.26(8) 7 . ?  
O2 O3 Ca 77.30(7) 4\_545 . ?  
Si O3 Ca 121.14(8) 2\_655 . ?  
Si O3 Ca 51.01(4) 7 . ?  
Mn O3 Ca 70.46(5) 3\_545 . ?  
Si O3 Ca 105.33(7) 1\_554 . ?  
O2 O3 Ca 99.14(8) 1\_554 . ?  
Si O3 Ca 162.68(9) 5\_655 . ?  
Mn O3 Ca 46.86(3) 1\_545 . ?  
Ca O3 Ca 68.93(4) 7\_556 . ?  
Si O3 Ca 65.52(4) 6\_556 . ?  
O3 O3 Ca 145.13(5) 2\_654 . ?  
O1 O3 Ca 109.11(7) 4\_545 . ?  
O2 O3 Ca 173.64(8) 5\_655 . ?  
O1 O3 Ca 88.71(6) 1\_554 . ?  
Mn O3 Ca 149.28(8) 7 . ?  
Si O3 Ca 93.71(5) 4\_545 . ?  
Ca O3 Ca 82.20(5) 5 . ?  
O3 O3 Ca 32.99(4) 7 . ?  
Mn O3 Ca 85.10(5) 1\_544 . ?  
O1 O3 Ca 52.96(5) 5 . ?  
O2 O3 Ca 114.09(6) 5\_656 . ?  
O1 O3 Ca 144.04(8) 3\_545 . ?  
O1 O3 Ca 52.54(5) 6\_556 . ?  
Si O3 Si 76.41(10) . 5\_656 ?  
Si O3 Si 124.76(15) 6 5\_656 ?

O2 O3 Si 88.33(10) 6 5\_656 ?  
Ca O3 Si 98.19(7) 7 5\_656 ?  
O3 O3 Si 127.95(9) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 46.29(4) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 36.45(5) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 72.11(9) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 106.37(10) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 141.18(13) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 53.36(9) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 149.23(12) 7 5\_656 ?  
O2 O3 Si 60.29(7) 2\_655 5\_656 ?  
Mn O3 Si 144.51(7) 5\_565 5\_656 ?  
O3 O3 Si 14.74(5) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 108.09(9) 7 5\_656 ?  
O2 O3 Si 88.96(8) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 39.98(4) 2\_655 5\_656 ?  
Si O3 Si 126.57(8) 7 5\_656 ?  
Mn O3 Si 76.02(5) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 142.33(7) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 Si 131.61(8) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 Si 70.73(5) 5\_655 5\_656 ?  
Mn O3 Si 99.53(5) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 42.61(3) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 Si 53.87(4) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 Si 90.94(8) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 Si 58.38(6) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 77.62(6) 5\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 162.47(7) 1\_554 5\_656 ?  
Mn O3 Si 79.28(5) 7 5\_656 ?  
Si O3 Si 75.76(5) 4\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 116.41(7) 5 5\_656 ?  
O3 O3 Si 114.19(9) 7 5\_656 ?  
Mn O3 Si 153.89(9) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 Si 125.80(7) 5 5\_656 ?  
O2 O3 Si 19.17(4) 5\_656 5\_656 ?  
O1 O3 Si 52.30(5) 3\_545 5\_656 ?  
O1 O3 Si 73.40(6) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 108.19(5) . 5\_656 ?  
Si O3 Ca 175.62(15) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 41.24(8) 6 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 47.48(8) 6 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 63.81(6) 7 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 22.90(8) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 141.29(17) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.20(7) 3\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 150.34(12) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 142.45(11) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 72.40(8) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 58.89(9) 5\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.05(8) 7 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 93.75(7) 2\_655 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 105.13(6) 5\_565 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 105.15(9) 2\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 100.33(7) 7 3\_544 ?

O2 O3 Ca 103.30(9) 4\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 85.92(5) 2\_655 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.82(6) 7 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 118.94(6) 3\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 42.92(3) 1\_554 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 56.69(6) 1\_554 3\_544 ?  
Si O3 Ca 39.48(3) 5\_655 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 126.35(8) 1\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 142.94(7) 7\_556 3\_544 ?  
Si O3 Ca 139.88(9) 6\_556 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 32.97(4) 2\_654 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 88.50(8) 4\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 28.26(4) 5\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 57.47(5) 1\_554 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 40.25(3) 7 3\_544 ?  
Si O3 Ca 94.34(7) 4\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.68(5) 5 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 127.63(9) 7 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 63.71(3) 1\_544 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 105.30(7) 5 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.10(7) 5\_656 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 62.49(5) 3\_545 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 141.43(9) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 146.03(6) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 105.77(6) 5\_656 3\_544 ?  
Si O3 O1 110.44(15) . 8 ?  
Si O3 O1 106.93(11) 6 8 ?  
O2 O3 O1 118.95(10) 6 8 ?  
Ca O3 O1 9.49(6) 7 8 ?  
O3 O3 O1 69.00(12) 6 8 ?  
O3 O3 O1 126.74(14) 6\_556 8 ?  
Ca O3 O1 115.31(8) 3\_545 8 ?  
O2 O3 O1 77.45(11) . 8 ?  
O1 O3 O1 121.70(12) . 8 ?  
O1 O3 O1 119.36(12) 6 8 ?  
O3 O3 O1 60.20(12) 5\_655 8 ?  
O2 O3 O1 72.54(9) 7 8 ?  
O2 O3 O1 36.98(6) 2\_655 8 ?  
Mn O3 O1 109.55(9) 5\_565 8 ?  
O3 O3 O1 81.52(7) 2\_655 8 ?  
O1 O3 O1 34.05(8) 7 8 ?  
O2 O3 O1 174.81(10) 4\_545 8 ?  
Si O3 O1 56.58(6) 2\_655 8 ?  
Si O3 O1 56.14(6) 7 8 ?  
Mn O3 O1 46.43(5) 3\_545 8 ?  
Si O3 O1 59.80(6) 1\_554 8 ?  
O2 O3 O1 38.31(7) 1\_554 8 ?  
Si O3 O1 60.30(5) 5\_655 8 ?  
Mn O3 O1 149.54(9) 1\_545 8 ?  
Ca O3 O1 89.08(7) 7\_556 8 ?  
Si O3 O1 135.64(8) 6\_556 8 ?  
O3 O3 O1 44.55(5) 2\_654 8 ?  
O1 O3 O1 143.41(7) 4\_545 8 ?  
O2 O3 O1 78.34(7) 5\_655 8 ?

O1 O3 O1 75.30(7) 1\_554 8 ?  
Mn O3 O1 105.61(6) 7 8 ?  
Si O3 O1 162.78(8) 4\_545 8 ?  
Ca O3 O1 144.23(7) 5 8 ?  
O3 O3 O1 70.42(9) 7 8 ?  
Mn O3 O1 103.10(6) 1\_544 8 ?  
O1 O3 O1 135.50(9) 5 8 ?  
O2 O3 O1 110.75(8) 5\_656 8 ?  
O1 O3 O1 108.24(9) 3\_545 8 ?  
O1 O3 O1 144.97(10) 6\_556 8 ?  
Ca O3 O1 103.23(8) . 8 ?  
Si O3 O1 95.73(6) 5\_656 8 ?  
Ca O3 O1 73.31(5) 3\_544 8 ?  
Si O3 O2 133.88(13) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 8.80(9) 6 4\_544 ?  
O2 O3 O2 45.26(10) 6 4\_544 ?  
Ca O3 O2 93.33(8) 7 4\_544 ?  
O3 O3 O2 33.37(10) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 131.39(16) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 97.44(9) 3\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 154.18(12) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 100.81(11) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 30.46(7) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 99.70(13) 5\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 77.62(11) 7 4\_544 ?  
O2 O3 O2 132.92(10) 2\_655 4\_544 ?  
Mn O3 O2 66.67(6) 5\_565 4\_544 ?  
O3 O3 O2 140.63(8) 2\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.51(8) 7 4\_544 ?  
O2 O3 O2 73.55(8) 4\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 127.57(8) 2\_655 4\_544 ?  
Si O3 O2 98.85(7) 7 4\_544 ?  
Mn O3 O2 143.31(8) 3\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 43.66(5) 1\_554 4\_544 ?  
O2 O3 O2 66.97(5) 1\_554 4\_544 ?  
Si O3 O2 80.76(6) 5\_655 4\_544 ?  
Mn O3 O2 86.96(6) 1\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 169.27(9) 7\_556 4\_544 ?  
Si O3 O2 122.81(8) 6\_556 4\_544 ?  
O3 O3 O2 72.96(7) 2\_654 4\_544 ?  
O1 O3 O2 83.52(8) 4\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 64.05(5) 5\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 38.52(7) 1\_554 4\_544 ?  
Mn O3 O2 54.21(5) 7 4\_544 ?  
Si O3 O2 75.14(6) 4\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 45.15(4) 5 4\_544 ?  
O3 O3 O2 112.64(10) 7 4\_544 ?  
Mn O3 O2 25.05(4) 1\_544 4\_544 ?  
O1 O3 O2 63.41(6) 5 4\_544 ?  
O2 O3 O2 116.13(8) 5\_656 4\_544 ?  
O1 O3 O2 80.87(7) 3\_545 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.18(8) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 109.61(6) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 133.12(8) 5\_656 4\_544 ?

Ca O3 O2 41.96(4) 3\_544 4\_544 ?  
 O1 O3 O2 101.53(7) 8 4\_544 ?  
 Si O3 O2 4.82(9) . 7\_556 ?  
 Si O3 O2 132.84(13) 6 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 131.94(12) 6 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 118.11(11) 7 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 150.84(11) 6 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 43.01(10) 6\_556 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 102.61(8) 3\_545 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 33.49(11) . 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 30.66(8) . 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 100.97(10) 6 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 128.16(14) 5\_655 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 76.42(8) 7 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 91.61(8) 2\_655 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 67.75(6) 5\_565 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 81.95(8) 2\_655 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 79.33(9) 7 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 74.18(9) 4\_545 7\_556 ?  
 Si O3 O2 100.91(7) 2\_655 7\_556 ?  
 Si O3 O2 69.94(6) 7 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 64.40(6) 3\_545 7\_556 ?  
 Si O3 O2 131.77(9) 1\_554 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 120.53(9) 1\_554 7\_556 ?  
 Si O3 O2 147.53(8) 5\_655 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 48.91(5) 1\_545 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 44.12(4) 7\_556 7\_556 ?  
 Si O3 O2 42.89(5) 6\_556 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 151.44(7) 2\_654 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 93.28(7) 4\_545 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 158.06(10) 5\_655 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 116.02(8) 1\_554 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 141.73(8) 7 7\_556 ?  
 Si O3 O2 85.04(6) 4\_545 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 92.32(6) 5 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 49.07(6) 7 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 109.22(6) 1\_544 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 68.34(6) 5 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 87.61(6) 5\_656 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 122.01(8) 3\_545 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 37.65(6) 6\_556 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 27.31(4) . 7\_556 ?  
 Si O3 O2 80.97(5) 5\_656 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 172.89(7) 3\_544 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 108.71(8) 8 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 131.41(9) 4\_544 7\_556 ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.462  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 29.86  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.462  
 \_refine\_diff\_density\_max 0.861  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.442  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.128