

data\_cazn Pressure = 6.16 GPa

\_audit\_creation\_method SHELXL-97

\_chemical\_name\_systematic

;

?

;

\_chemical\_name\_common ?

\_chemical\_melting\_point ?

\_chemical\_formula\_moiety ?

\_chemical\_formula\_sum

'Ca O6 Si2 Zn'

\_chemical\_formula\_weight 257.63

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'

'Zn' 'Zn' 0.2839 1.4301

'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 9.6632(3)

\_cell\_length\_b 8.7895(3)

\_cell\_length\_c 5.1702(9)

\_cell\_angle\_alpha 90.00

\_cell\_angle\_beta 104.998(6)

\_cell\_angle\_gamma 90.00

\_cell\_volume 424.17(8)

\_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    4.034
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            504
_exptl_absorpt_coefficient_mu    7.511
_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            210
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0609
_diffn_reflns_limit_h_min       -13
_diffn_reflns_limit_h_max       12
_diffn_reflns_limit_k_min       0
_diffn_reflns_limit_k_max       12
_diffn_reflns_limit_l_min       0
_diffn_reflns_limit_l_max       3
_diffn_reflns_theta_min         3.18
_diffn_reflns_theta_max         29.90
_reflns_number_total            210
_reflns_number_gt               206
_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)+(0.0238P)^2+1.0121P] 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       0.0009(13)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2/l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        210
_refine_ls_number_parameters     22
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0332
_refine_ls_R_factor_gt           0.0327
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0772
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0771
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.121
_refine_ls_restrained_S_all      1.121
_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 0.30355(18) 0.2500 0.0077(5) Uiso 1 2 d S . .
Zn Zn 0.0000 0.90768(10) 0.2500 0.0067(4) Uiso 1 2 d S . .
Si Si 0.28648(18) 0.09447(16) 0.2270(7) 0.0052(4) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.1156(4) 0.0897(4) 0.1422(17) 0.0045(9) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.3591(5) 0.2517(4) 0.3273(17) 0.0076(9) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.3519(5) 0.0234(4) -0.0123(18) 0.0064(10) 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 2.308(7) 8_455 ?
Ca O2 2.308(7) 7_556 ?
Ca O1 2.327(5) . ?
Ca O1 2.327(5) 2 ?
Ca O3 2.573(5) 4 ?
Ca O3 2.573(5) 3_455 ?
Ca O3 2.604(7) 8_456 ?
Ca O3 2.604(7) 7 ?
Ca Si 3.080(3) 7_556 ?
Ca Si 3.080(3) 8_455 ?
Ca Zn 3.1827(11) 5_565 ?
Ca Zn 3.1827(11) 5_566 ?
Zn O2 2.043(5) 4 ?
Zn O2 2.043(5) 3_455 ?
Zn O1 2.046(8) 5_565 ?
Zn O1 2.046(8) 6_566 ?
Zn O1 2.108(5) 1_565 ?
Zn O1 2.108(5) 2_565 ?
Zn Zn 3.0523(10) 5_576 ?
Zn Zn 3.0523(10) 5_575 ?
Zn Ca 3.1827(11) 5_565 ?
Zn Ca 3.1827(11) 5_566 ?
Zn O3 3.358(4) 6_566 ?
Zn O3 3.358(4) 5_565 ?
Si O2 1.576(4) . ?
Si O1 1.595(4) . ?
Si O3 1.651(9) . ?
Si O3 1.688(8) 6_556 ?
Si Ca 3.080(3) 7_556 ?
Si Ca 3.268(2) 3_545 ?

```

Si O3 3.480(5) 2\_655 ?  
Si O3 3.678(4) 7 ?  
Si O3 3.869(10) 1\_556 ?  
Si O3 4.065(6) 5\_655 ?  
Si O3 4.163(10) 6 ?  
O1 Zn 2.046(8) 5\_565 ?  
O1 Zn 2.108(5) 1\_545 ?  
O1 O3 2.671(8) . ?  
O1 O3 2.699(7) 6\_556 ?  
O1 O3 3.496(5) 7 ?  
O1 O3 4.240(7) 4 ?  
O1 O3 4.416(11) 1\_556 ?  
O1 O3 4.503(7) 5 ?  
O1 O3 4.540(5) 3\_455 ?  
O1 O3 4.653(11) 6 ?  
O2 Zn 2.043(5) 3\_545 ?  
O2 Ca 2.308(7) 7\_556 ?  
O2 O3 2.564(6) 6\_556 ?  
O2 O3 2.655(8) . ?  
O2 O3 2.999(7) 7 ?  
O2 O3 3.370(6) 2\_655 ?  
O2 O3 3.433(8) 4 ?  
O2 O3 3.977(10) 1\_556 ?  
O2 O3 4.320(10) 5\_655 ?  
O2 O3 4.590(9) 5\_656 ?  
O2 O3 4.814(11) 4\_554 ?  
O3 Si 1.688(8) 6 ?  
O3 O2 2.564(6) 6 ?  
O3 Ca 2.573(5) 3\_545 ?  
O3 Ca 2.604(7) 7 ?  
O3 O3 2.6178(12) 6 ?  
O3 O3 2.6178(12) 6\_556 ?  
O3 O1 2.699(7) 6 ?  
O3 O3 2.862(10) 5\_655 ?  
O3 O2 2.999(7) 7 ?  
O3 Zn 3.358(4) 5\_565 ?  
O3 O2 3.370(6) 2\_655 ?  
O3 O3 3.396(12) 2\_655 ?  
O3 O2 3.433(8) 4\_545 ?  
O3 Si 3.480(5) 2\_655 ?  
O3 O1 3.496(5) 7 ?  
O3 Si 3.678(4) 7 ?  
O3 Zn 3.780(4) 3\_545 ?  
O3 Si 3.869(10) 1\_554 ?  
O3 O2 3.977(10) 1\_554 ?  
O3 Si 4.065(6) 5\_655 ?  
O3 Zn 4.102(7) 1\_545 ?  
O3 Ca 4.120(8) 7\_556 ?  
O3 Si 4.163(10) 6\_556 ?  
O3 O3 4.228(16) 2\_654 ?  
O3 O1 4.240(7) 4\_545 ?  
O3 O2 4.320(10) 5\_655 ?  
O3 Zn 4.339(5) 7 ?  
O3 Ca 4.378(4) 5 ?

O3 Si 4.382(5) 4\_545 ?  
O3 O1 4.416(11) 1\_554 ?  
O3 O3 4.459(8) 7 ?  
O3 O1 4.503(7) 5 ?  
O3 Zn 4.520(6) 1\_544 ?  
O3 O1 4.540(5) 3\_545 ?  
O3 O2 4.590(9) 5\_656 ?  
O3 O1 4.653(11) 6\_556 ?  
O3 Si 4.735(7) 5\_656 ?  
O3 Ca 4.812(9) 3\_544 ?  
O3 O2 4.814(11) 4\_544 ?  
O3 O1 4.858(8) 8 ?  
O3 O1 4.873(7) 2\_554 ?

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 155.7(2) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca O1 78.8(2) 8\_455 . ?  
O2 Ca O1 81.6(2) 7\_556 . ?  
O2 Ca O1 81.6(2) 8\_455 2 ?  
O2 Ca O1 78.8(2) 7\_556 2 ?  
O1 Ca O1 72.2(3) . 2 ?  
O2 Ca O3 140.24(19) 8\_455 4 ?  
O2 Ca O3 63.11(18) 7\_556 4 ?  
O1 Ca O3 119.80(14) . 4 ?  
O1 Ca O3 135.8(3) 2 4 ?  
O2 Ca O3 63.11(18) 8\_455 3\_455 ?  
O2 Ca O3 140.24(19) 7\_556 3\_455 ?  
O1 Ca O3 135.8(3) . 3\_455 ?  
O1 Ca O3 119.80(14) 2 3\_455 ?  
O3 Ca O3 82.6(2) 4 3\_455 ?  
O2 Ca O3 107.95(17) 8\_455 8\_456 ?  
O2 Ca O3 86.43(19) 7\_556 8\_456 ?  
O1 Ca O3 160.3(2) . 8\_456 ?  
O1 Ca O3 90.11(19) 2 8\_456 ?  
O3 Ca O3 67.13(18) 4 8\_456 ?  
O3 Ca O3 60.75(8) 3\_455 8\_456 ?  
O2 Ca O3 86.43(19) 8\_455 7 ?  
O2 Ca O3 107.95(17) 7\_556 7 ?  
O1 Ca O3 90.11(19) . 7 ?  
O1 Ca O3 160.3(2) 2 7 ?  
O3 Ca O3 60.75(8) 4 7 ?  
O3 Ca O3 67.13(18) 3\_455 7 ?  
O3 Ca O3 108.6(3) 8\_456 7 ?  
O2 Ca Si 171.79(16) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.87(10) 7\_556 7\_556 ?  
O1 Ca Si 101.03(16) . 7\_556 ?  
O1 Ca Si 106.2(2) 2 7\_556 ?

O3 Ca Si 33.24(16) 4 7\_556 ?  
O3 Ca Si 113.52(15) 3\_455 7\_556 ?  
O3 Ca Si 74.98(14) 8\_456 7\_556 ?  
O3 Ca Si 85.37(18) 7 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.87(10) 8\_455 8\_455 ?  
O2 Ca Si 171.79(16) 7\_556 8\_455 ?  
O1 Ca Si 106.2(2) . 8\_455 ?  
O1 Ca Si 101.03(16) 2 8\_455 ?  
O3 Ca Si 113.52(15) 4 8\_455 ?  
O3 Ca Si 33.24(16) 3\_455 8\_455 ?  
O3 Ca Si 85.37(18) 8\_456 8\_455 ?  
O3 Ca Si 74.98(14) 7 8\_455 ?  
Si Ca Si 146.16(8) 7\_556 8\_455 ?  
O2 Ca Zn 39.83(12) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Zn 121.48(14) 7\_556 5\_565 ?  
O1 Ca Zn 39.94(18) . 5\_565 ?  
O1 Ca Zn 79.9(2) 2 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 138.54(18) 4 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 97.30(18) 3\_455 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 147.09(13) 8\_456 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 80.89(16) 7 5\_565 ?  
Si Ca Zn 137.91(4) 7\_556 5\_565 ?  
Si Ca Zn 66.26(5) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Zn 121.48(14) 8\_455 5\_566 ?  
O2 Ca Zn 39.83(12) 7\_556 5\_566 ?  
O1 Ca Zn 79.9(2) . 5\_566 ?  
O1 Ca Zn 39.94(19) 2 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 97.30(19) 4 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 138.54(18) 3\_455 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 80.89(16) 8\_456 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 147.09(13) 7 5\_566 ?  
Si Ca Zn 66.26(5) 7\_556 5\_566 ?  
Si Ca Zn 137.91(4) 8\_455 5\_566 ?  
Zn Ca Zn 108.63(5) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Zn O2 95.7(3) 4 3\_455 ?  
O2 Zn O1 92.0(3) 4 5\_565 ?  
O2 Zn O1 88.9(3) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Zn O1 88.9(3) 4 6\_566 ?  
O2 Zn O1 92.0(3) 3\_455 6\_566 ?  
O1 Zn O1 178.72(19) 5\_565 6\_566 ?  
O2 Zn O1 91.8(2) 4 1\_565 ?  
O2 Zn O1 170.71(17) 3\_455 1\_565 ?  
O1 Zn O1 85.43(18) 5\_565 1\_565 ?  
O1 Zn O1 93.59(18) 6\_566 1\_565 ?  
O2 Zn O1 170.71(17) 4 2\_565 ?  
O2 Zn O1 91.8(2) 3\_455 2\_565 ?  
O1 Zn O1 93.59(18) 5\_565 2\_565 ?  
O1 Zn O1 85.43(18) 6\_566 2\_565 ?  
O1 Zn O1 81.2(3) 1\_565 2\_565 ?  
O2 Zn Zn 132.0(2) 4 5\_576 ?  
O2 Zn Zn 92.6(2) 3\_455 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 135.53(14) 5\_565 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 43.50(13) 6\_566 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 86.4(2) 1\_565 5\_576 ?

O1 Zn Zn 41.9(2) 2\_565 5\_576 ?  
O2 Zn Zn 92.6(2) 4 5\_575 ?  
O2 Zn Zn 132.0(2) 3\_455 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 43.50(13) 5\_565 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 135.53(14) 6\_566 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 41.9(2) 1\_565 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 86.4(2) 2\_565 5\_575 ?  
Zn Zn Zn 115.76(6) 5\_576 5\_575 ?  
O2 Zn Ca 46.3(2) 4 5\_565 ?  
O2 Zn Ca 84.7(2) 3\_455 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 46.88(13) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 134.15(13) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 96.7(2) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 140.3(2) 2\_565 5\_565 ?  
Zn Zn Ca 176.43(4) 5\_576 5\_565 ?  
Zn Zn Ca 67.81(3) 5\_575 5\_565 ?  
O2 Zn Ca 84.7(2) 4 5\_566 ?  
O2 Zn Ca 46.3(2) 3\_455 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 134.15(13) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 46.88(13) 6\_566 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 140.3(2) 1\_565 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 96.7(2) 2\_565 5\_566 ?  
Zn Zn Ca 67.81(3) 5\_576 5\_566 ?  
Zn Zn Ca 176.43(4) 5\_575 5\_566 ?  
Ca Zn Ca 108.63(5) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Zn O3 61.94(16) 4 6\_566 ?  
O2 Zn O3 135.4(2) 3\_455 6\_566 ?  
O1 Zn O3 127.0(2) 5\_565 6\_566 ?  
O1 Zn O3 52.7(2) 6\_566 6\_566 ?  
O1 Zn O3 53.42(17) 1\_565 6\_566 ?  
O1 Zn O3 108.80(15) 2\_565 6\_566 ?  
Zn Zn O3 79.40(14) 5\_576 6\_566 ?  
Zn Zn O3 89.55(14) 5\_575 6\_566 ?  
Ca Zn O3 100.93(13) 5\_565 6\_566 ?  
Ca Zn O3 91.19(14) 5\_566 6\_566 ?  
O2 Zn O3 135.4(2) 4 5\_565 ?  
O2 Zn O3 61.94(16) 3\_455 5\_565 ?  
O1 Zn O3 52.7(2) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Zn O3 127.0(2) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Zn O3 108.80(15) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Zn O3 53.42(17) 2\_565 5\_565 ?  
Zn Zn O3 89.55(14) 5\_576 5\_565 ?  
Zn Zn O3 79.40(14) 5\_575 5\_565 ?  
Ca Zn O3 91.19(14) 5\_565 5\_565 ?  
Ca Zn O3 100.93(13) 5\_566 5\_565 ?  
O3 Zn O3 159.23(12) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Si O1 117.0(2) . . ?  
O2 Si O3 110.7(4) . . ?  
O1 Si O3 110.7(4) . . ?  
O2 Si O3 103.5(4) . 6\_556 ?  
O1 Si O3 110.5(3) . 6\_556 ?  
O3 Si O3 103.26(18) . 6\_556 ?  
O2 Si Ca 46.8(3) . 7\_556 ?  
O1 Si Ca 131.3(3) . 7\_556 ?



O3 Si Ca 117.95(18) . 7\_556 ?  
O3 Si Ca 56.65(18) 6\_556 7\_556 ?  
O2 Si Ca 116.81(17) . 3\_545 ?  
O1 Si Ca 126.03(15) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 51.0(2) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 52.3(3) 6\_556 3\_545 ?  
Ca Si Ca 85.56(6) 7\_556 3\_545 ?  
O2 Si Ca 78.98(18) . . ?  
O1 Si Ca 38.58(18) . . ?  
O3 Si Ca 135.6(2) . . ?  
O3 Si Ca 116.8(3) 6\_556 . ?  
Ca Si Ca 100.44(8) 7\_556 . ?  
Ca Si Ca 161.34(8) 3\_545 . ?  
O2 Si O3 72.85(18) . 2\_655 ?  
O1 Si O3 165.1(2) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 73.3(3) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 54.8(3) 6\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 46.29(13) 7\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 44.68(8) 3\_545 2\_655 ?  
Ca Si O3 146.28(13) . 2\_655 ?  
O2 Si O3 52.7(2) . 7 ?  
O1 Si O3 70.82(15) . 7 ?  
O3 Si O3 107.39(17) . 7 ?  
O3 Si O3 146.4(2) 6\_556 7 ?  
Ca Si O3 96.20(11) 7\_556 7 ?  
Ca Si O3 154.42(14) 3\_545 7 ?  
Ca Si O3 43.18(11) . 7 ?  
O3 Si O3 122.58(10) 2\_655 7 ?  
O2 Si O3 82.3(4) . 1\_556 ?  
O1 Si O3 99.2(3) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 135.0(2) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 32.9(2) 6\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 42.13(8) 7\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 84.34(8) 3\_545 1\_556 ?  
Ca Si O3 88.37(10) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 70.0(2) 2\_655 1\_556 ?  
O3 Si O3 113.90(13) 7 1\_556 ?  
O2 Si O3 88.4(2) . 5\_655 ?  
O1 Si O3 145.1(3) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 34.5(3) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 83.7(3) 6\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 83.46(11) 7\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 39.76(8) 3\_545 5\_655 ?  
Ca Si O3 157.83(10) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 39.65(6) 2\_655 5\_655 ?  
O3 Si O3 114.92(18) 7 5\_655 ?  
O3 Si O3 108.10(15) 1\_556 5\_655 ?  
O2 Si O3 111.1(4) . 6 ?  
O1 Si O3 97.7(3) . 6 ?  
O3 Si O3 16.09(17) . 6 ?  
O3 Si O3 117.8(3) 6\_556 6 ?  
Ca Si O3 130.70(8) 7\_556 6 ?  
Ca Si O3 66.06(7) 3\_545 6 ?  
Ca Si O3 119.49(10) . 6 ?

O3 Si O3 88.28(17) 2\_655 6 ?  
O3 Si O3 94.58(12) 7 6 ?  
O3 Si O3 150.38(8) 1\_556 6 ?  
O3 Si O3 48.72(15) 5\_655 6 ?  
Si O1 Zn 122.2(5) . 5\_565 ?  
Si O1 Zn 121.9(3) . 1\_545 ?  
Zn O1 Zn 94.57(18) 5\_565 1\_545 ?  
Si O1 Ca 116.1(2) . . ?  
Zn O1 Ca 93.18(17) 5\_565 . ?  
Zn O1 Ca 103.3(3) 1\_545 . ?  
Si O1 O3 35.3(3) . . ?  
Zn O1 O3 89.8(3) 5\_565 . ?  
Zn O1 O3 117.79(17) 1\_545 . ?  
Ca O1 O3 138.46(19) . . ?  
Si O1 O3 35.9(2) . 6\_556 ?  
Zn O1 O3 144.2(3) 5\_565 6\_556 ?  
Zn O1 O3 87.7(2) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O1 O3 121.0(3) . 6\_556 ?  
O3 O1 O3 58.36(11) . 6\_556 ?  
Si O1 O3 83.65(17) . 7 ?  
Zn O1 O3 81.5(2) 5\_565 7 ?  
Zn O1 O3 150.4(2) 1\_545 7 ?  
Ca O1 O3 48.16(14) . 7 ?  
O3 O1 O3 91.63(19) . 7 ?  
O3 O1 O3 112.53(16) 6\_556 7 ?  
Si O1 O3 84.4(2) . 4 ?  
Zn O1 O3 113.25(17) 5\_565 4 ?  
Zn O1 O3 123.1(3) 1\_545 4 ?  
Ca O1 O3 31.77(9) . 4 ?  
O3 O1 O3 111.21(17) . 4 ?  
O3 O1 O3 94.68(19) 6\_556 4 ?  
O3 O1 O3 38.04(6) 7 4 ?  
Si O1 O3 59.9(3) . 1\_556 ?  
Zn O1 O3 172.88(15) 5\_565 1\_556 ?  
Zn O1 O3 79.1(2) 1\_545 1\_556 ?  
Ca O1 O3 91.5(2) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 90.24(18) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 33.26(16) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O1 O3 105.63(19) 7 1\_556 ?  
O3 O1 O3 73.32(14) 4 1\_556 ?  
Si O1 O3 166.8(3) . 5 ?  
Zn O1 O3 65.49(16) 5\_565 5 ?  
Zn O1 O3 44.90(11) 1\_545 5 ?  
Ca O1 O3 71.86(13) . 5 ?  
O3 O1 O3 144.0(2) . 5 ?  
O3 O1 O3 131.4(2) 6\_556 5 ?  
O3 O1 O3 108.82(14) 7 5 ?  
O3 O1 O3 102.72(17) 4 5 ?  
O3 O1 O3 111.12(18) 1\_556 5 ?  
Si O1 O3 121.35(16) . 3\_455 ?  
Zn O1 O3 71.26(14) 5\_565 3\_455 ?  
Zn O1 O3 111.85(17) 1\_545 3\_455 ?  
Ca O1 O3 23.27(15) . 3\_455 ?  
O3 O1 O3 127.9(3) . 3\_455 ?

O3 O1 O3 140.0(3) 6\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 39.08(15) 7 3\_455 ?  
O3 O1 O3 45.34(16) 4 3\_455 ?  
O3 O1 O3 114.1(2) 1\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 70.33(10) 5 3\_455 ?  
Si O1 O3 62.5(3) . 6 ?  
Zn O1 O3 61.7(2) 5\_565 6 ?  
Zn O1 O3 115.1(2) 1\_545 6 ?  
Ca O1 O3 134.7(2) . 6 ?  
O3 O1 O3 28.07(15) . 6 ?  
O3 O1 O3 85.0(2) 6\_556 6 ?  
O3 O1 O3 89.0(2) 7 6 ?  
O3 O1 O3 121.83(16) 4 6 ?  
O3 O1 O3 117.81(11) 1\_556 6 ?  
O3 O1 O3 120.42(18) 5 6 ?  
O3 O1 O3 114.2(2) 3\_455 6 ?  
Si O2 Zn 141.9(5) . 3\_545 ?  
Si O2 Ca 103.3(3) . 7\_556 ?  
Zn O2 Ca 93.83(19) 3\_545 7\_556 ?  
Si O2 O3 39.8(3) . 6\_556 ?  
Zn O2 O3 140.5(2) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O2 O3 63.5(2) 7\_556 6\_556 ?  
Si O2 O3 35.5(3) . . ?  
Zn O2 O3 106.4(3) 3\_545 . ?  
Ca O2 O3 112.0(2) 7\_556 . ?  
O3 O2 O3 60.18(10) 6\_556 . ?  
Si O2 O3 102.5(3) . 7 ?  
Zn O2 O3 81.1(2) 3\_545 7 ?  
Ca O2 O3 143.6(3) 7\_556 7 ?  
O3 O2 O3 136.53(18) 6\_556 7 ?  
O3 O2 O3 103.9(3) . 7 ?  
Si O2 O3 80.61(18) . 2\_655 ?  
Zn O2 O3 84.82(17) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O2 O3 50.46(17) 7\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 55.70(19) 6\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 67.4(2) . 2\_655 ?  
O3 O2 O3 160.6(5) 7 2\_655 ?  
Si O2 O3 117.1(3) . 4 ?  
Zn O2 O3 93.54(16) 3\_545 4 ?  
Ca O2 O3 97.5(3) 7\_556 4 ?  
O3 O2 O3 119.9(3) 6\_556 4 ?  
O3 O2 O3 142.57(19) . 4 ?  
O3 O2 O3 47.44(9) 7 4 ?  
O3 O2 O3 147.5(4) 2\_655 4 ?  
Si O2 O3 74.6(3) . 1\_556 ?  
Zn O2 O3 131.9(3) 3\_545 1\_556 ?  
Ca O2 O3 38.54(13) 7\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 40.38(18) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 100.55(19) . 1\_556 ?  
O3 O2 O3 129.7(2) 7 1\_556 ?  
O3 O2 O3 69.7(3) 2\_655 1\_556 ?  
O3 O2 O3 88.2(2) 4 1\_556 ?  
Si O2 O3 70.2(2) . 5\_655 ?  
Zn O2 O3 76.89(19) 3\_545 5\_655 ?

Ca O2 O3 87.63(15) 7\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 70.6(2) 6\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 40.21(16) . 5\_655 ?  
O3 O2 O3 125.4(4) 7 5\_655 ?  
O3 O2 O3 37.29(10) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O2 O3 169.5(3) 4 5\_655 ?  
O3 O2 O3 101.42(18) 1\_556 5\_655 ?  
Si O2 O3 85.5(2) . 5\_656 ?  
Zn O2 O3 101.61(18) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O2 O3 21.00(10) 7\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 46.79(18) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 91.1(2) . 5\_656 ?  
O3 O2 O3 163.4(4) 7 5\_656 ?  
O3 O2 O3 34.24(10) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O2 O3 116.0(4) 4 5\_656 ?  
O3 O2 O3 38.19(16) 1\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 70.87(8) 5\_655 5\_656 ?  
Si O2 O3 95.5(3) . 4\_554 ?  
Zn O2 O3 69.4(2) 3\_545 4\_554 ?  
Ca O2 O3 161.07(15) 7\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 135.3(2) 6\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 82.1(2) . 4\_554 ?  
O3 O2 O3 28.75(15) 7 4\_554 ?  
O3 O2 O3 132.5(4) 2\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 75.59(14) 4 4\_554 ?  
O3 O2 O3 154.75(13) 1\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 96.7(3) 5\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 166.4(3) 5\_656 4\_554 ?  
Si O3 Si 133.9(3) . 6 ?  
Si O3 O2 130.3(3) . 6 ?  
Si O3 O2 36.71(17) 6 6 ?  
Si O3 Ca 99.1(4) . 3\_545 ?  
Si O3 Ca 90.11(16) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Ca 53.40(18) 6 3\_545 ?  
Si O3 Ca 119.8(2) . 7 ?  
Si O3 Ca 96.9(4) 6 7 ?  
O2 O3 Ca 109.5(3) 6 7 ?  
Ca O3 Ca 112.87(18) 3\_545 7 ?  
Si O3 O3 153.8(2) . 6 ?  
Si O3 O3 37.9(3) 6 6 ?  
O2 O3 O3 61.6(3) 6 6 ?  
Ca O3 O3 105.1(3) 3\_545 6 ?  
Ca O3 O3 59.03(17) 7 6 ?  
Si O3 O3 38.9(2) . 6\_556 ?  
Si O3 O3 126.6(3) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O3 100.2(3) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O3 60.2(2) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O3 134.3(2) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O3 161.9(3) 6 6\_556 ?  
Si O3 O2 33.72(16) . . ?  
Si O3 O2 158.8(3) 6 . ?  
O2 O3 O2 158.2(4) 6 . ?  
Ca O3 O2 107.7(3) 3\_545 . ?  
Ca O3 O2 87.0(2) 7 . ?

O3 O3 O2 139.9(3) 6 . ?  
O3 O3 O2 58.2(2) 6\_556 . ?  
Si O3 O1 33.97(19) . . ?  
Si O3 O1 101.6(2) 6 . ?  
O2 O3 O1 113.5(2) 6 . ?  
Ca O3 O1 114.1(3) 3\_545 . ?  
Ca O3 O1 129.09(17) 7 . ?  
O3 O3 O1 123.2(2) 6 . ?  
O3 O3 O1 61.4(2) 6\_556 . ?  
O2 O3 O1 61.0(2) . . ?  
Si O3 O1 102.3(3) . 6 ?  
Si O3 O1 33.62(17) 6 6 ?  
O2 O3 O1 61.78(18) 6 6 ?  
Ca O3 O1 109.39(15) 3\_545 6 ?  
Ca O3 O1 112.1(4) 7 6 ?  
O3 O3 O1 60.3(3) 6 6 ?  
O3 O3 O1 112.3(3) 6\_556 6 ?  
O2 O3 O1 126.1(2) . 6 ?  
O1 O3 O1 68.66(15) . 6 ?  
Si O3 O3 126.4(5) . 5\_655 ?  
Si O3 O3 96.3(4) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O3 76.6(2) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O3 56.97(15) 3\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O3 55.9(2) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O3 76.4(4) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O3 100.9(4) 6\_556 5\_655 ?  
O2 O3 O3 103.0(3) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 160.2(5) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 129.9(5) 6 5\_655 ?  
Si O3 O2 79.6(2) . 7 ?  
Si O3 O2 84.8(3) 6 7 ?  
O2 O3 O2 121.2(3) 6 7 ?  
Ca O3 O2 171.30(19) 3\_545 7 ?  
Ca O3 O2 74.8(2) 7 7 ?  
O3 O3 O2 75.0(3) 6 7 ?  
O3 O3 O2 117.8(3) 6\_556 7 ?  
O2 O3 O2 76.1(3) . 7 ?  
O1 O3 O2 60.3(2) . 7 ?  
O1 O3 O2 62.84(17) 6 7 ?  
O3 O3 O2 130.6(4) 5\_655 7 ?  
Si O3 Zn 70.02(16) . 5\_565 ?  
Si O3 Zn 71.58(15) 6 5\_565 ?  
O2 O3 Zn 99.29(17) 6 5\_565 ?  
Ca O3 Zn 134.50(18) 3\_545 5\_565 ?  
Ca O3 Zn 110.49(19) 7 5\_565 ?  
O3 O3 Zn 85.74(16) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Zn 97.53(16) 6\_556 5\_565 ?  
O2 O3 Zn 87.51(17) . 5\_565 ?  
O1 O3 Zn 37.55(17) . 5\_565 ?  
O1 O3 Zn 38.84(12) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Zn 161.5(5) 5\_655 5\_565 ?  
O2 O3 Zn 36.95(10) 7 5\_565 ?  
Si O3 O2 90.7(3) . 2\_655 ?  
Si O3 O2 134.7(4) 6 2\_655 ?

O2 O3 O2 124.30(19) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O2 89.46(16) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O3 O2 43.11(16) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O2 99.3(2) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 91.5(3) 6\_556 2\_655 ?  
O2 O3 O2 59.0(2) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 119.7(3) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 154.7(4) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 47.73(14) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O2 99.13(12) 7 2\_655 ?  
Zn O3 O2 133.06(13) 5\_565 2\_655 ?  
Si O3 O3 79.0(4) . 2\_655 ?  
Si O3 O3 134.6(2) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O3 99.82(17) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O3 48.70(12) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O3 O3 85.66(17) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O3 125.0(3) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 55.0(3) 6\_556 2\_655 ?  
O2 O3 O3 66.4(2) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 111.7(4) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 157.3(2) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 48.54(15) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O3 138.40(17) 7 2\_655 ?  
Zn O3 O3 149.0(4) 5\_565 2\_655 ?  
O2 O3 O3 46.21(14) 2\_655 2\_655 ?  
Si O3 O2 71.6(3) . 4\_545 ?  
Si O3 O2 70.6(2) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O2 60.1(3) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O2 67.67(14) 3\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O2 167.5(4) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O2 108.5(3) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 57.6(2) 6\_556 4\_545 ?  
O2 O3 O2 104.9(3) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 56.85(17) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 57.7(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 123.1(2) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O2 103.91(19) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O2 67.00(12) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 O2 147.5(4) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 O2 102.5(3) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 Si 98.7(3) . 2\_655 ?  
Si O3 Si 125.2(3) 6 2\_655 ?  
O2 O3 Si 101.42(16) 6 2\_655 ?  
Ca O3 Si 63.30(10) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O3 Si 58.73(10) 7 2\_655 ?  
O3 O3 Si 100.96(15) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 82.32(15) 6\_556 2\_655 ?  
O2 O3 Si 74.49(15) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 132.6(3) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 158.7(3) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 28.83(19) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 125.37(15) 7 2\_655 ?  
Zn O3 Si 158.99(13) 5\_565 2\_655 ?  
O2 O3 Si 26.54(8) 2\_655 2\_655 ?

O3 O3 Si 27.75(14) 2\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 127.6(2) 4\_545 2\_655 ?  
Si O3 O1 81.2(2) . 7 ?  
Si O3 O1 118.5(4) 6 7 ?  
O2 O3 O1 147.6(4) 6 7 ?  
Ca O3 O1 140.06(18) 3\_545 7 ?  
Ca O3 O1 41.73(13) 7 7 ?  
O3 O3 O1 86.6(2) 6 7 ?  
O3 O3 O1 111.5(3) 6\_556 7 ?  
O2 O3 O1 53.4(2) . 7 ?  
O1 O3 O1 88.37(19) . 7 ?  
O1 O3 O1 109.51(19) 6 7 ?  
O3 O3 O1 90.6(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O1 48.47(12) 7 7 ?  
Zn O3 O1 83.52(11) 5\_565 7 ?  
O2 O3 O1 50.68(12) 2\_655 7 ?  
O3 O3 O1 93.12(13) 2\_655 7 ?  
O2 O3 O1 145.0(2) 4\_545 7 ?  
Si O3 O1 77.10(12) 2\_655 7 ?  
Si O3 Si 72.61(17) . 7 ?  
Si O3 Si 106.7(3) 6 7 ?  
O2 O3 Si 143.3(3) 6 7 ?  
Ca O3 Si 162.6(2) 3\_545 7 ?  
Ca O3 Si 61.68(10) 7 7 ?  
O3 O3 Si 86.48(19) 6 7 ?  
O3 O3 Si 110.4(2) 6\_556 7 ?  
O2 O3 Si 56.97(18) . 7 ?  
O1 O3 Si 67.61(14) . 7 ?  
O1 O3 Si 87.57(15) 6 7 ?  
O3 O3 Si 115.2(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Si 24.72(9) 7 7 ?  
Zn O3 Si 58.02(7) 5\_565 7 ?  
O2 O3 Si 75.63(11) 2\_655 7 ?  
O3 O3 Si 113.99(10) 2\_655 7 ?  
O2 O3 Si 121.57(16) 4\_545 7 ?  
Si O3 Si 102.17(10) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Si 25.53(8) 7 7 ?  
Si O3 Zn 64.92(14) . 3\_545 ?  
Si O3 Zn 149.7(4) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 156.85(19) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Zn 112.01(19) 3\_545 3\_545 ?  
Ca O3 Zn 56.24(8) 7 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 113.5(2) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 83.29(19) 6\_556 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 31.23(14) . 3\_545 ?  
O1 O3 Zn 88.37(17) . 3\_545 ?  
O1 O3 Zn 138.05(16) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 80.29(16) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 75.36(12) 7 3\_545 ?  
Zn O3 Zn 102.93(10) 5\_565 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 32.57(10) 2\_655 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 63.31(8) 2\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 135.9(3) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 Zn 56.10(7) 2\_655 3\_545 ?

O1 O3 Zn 32.37(13) 7 3\_545 ?  
 Si O3 Zn 50.72(6) 7 3\_545 ?  
 Si O3 Si 135.0(2) . 1\_554 ?  
 Si O3 Si 50.1(3) 6 1\_554 ?  
 O2 O3 Si 80.5(3) 6 1\_554 ?  
 Ca O3 Si 125.4(2) 3\_545 1\_554 ?  
 Ca O3 Si 52.50(16) 7 1\_554 ?  
 O3 O3 Si 20.50(10) 6 1\_554 ?  
 O3 O3 Si 170.91(7) 6\_556 1\_554 ?  
 O2 O3 Si 121.3(2) . 1\_554 ?  
 O1 O3 Si 110.0(2) . 1\_554 ?  
 O1 O3 Si 59.9(2) 6 1\_554 ?  
 O3 O3 Si 88.1(4) 5\_655 1\_554 ?  
 O2 O3 Si 55.4(2) 7 1\_554 ?  
 Zn O3 Si 73.46(14) 5\_565 1\_554 ?  
 O2 O3 Si 95.6(2) 2\_655 1\_554 ?  
 O3 O3 Si 133.9(3) 2\_655 1\_554 ?  
 O2 O3 Si 116.3(2) 4\_545 1\_554 ?  
 Si O3 Si 106.49(19) 2\_655 1\_554 ?  
 O1 O3 Si 69.32(19) 7 1\_554 ?  
 Si O3 Si 66.10(13) 7 1\_554 ?  
 Zn O3 Si 99.65(14) 3\_545 1\_554 ?  
 Si O3 O2 123.2(2) . 1\_554 ?  
 Si O3 O2 73.2(3) 6 1\_554 ?  
 O2 O3 O2 101.0(3) 6 1\_554 ?  
 Ca O3 O2 134.5(2) 3\_545 1\_554 ?  
 Ca O3 O2 33.51(12) 7 1\_554 ?  
 O3 O3 O2 39.38(14) 6 1\_554 ?  
 O3 O3 O2 158.7(2) 6\_556 1\_554 ?  
 O2 O3 O2 100.55(19) . 1\_554 ?  
 O1 O3 O2 110.7(2) . 1\_554 ?  
 O1 O3 O2 79.5(3) 6 1\_554 ?  
 O3 O3 O2 82.6(3) 5\_655 1\_554 ?  
 O2 O3 O2 50.3(2) 7 1\_554 ?  
 Zn O3 O2 80.55(15) 5\_565 1\_554 ?  
 O2 O3 O2 75.3(2) 2\_655 1\_554 ?  
 O3 O3 O2 119.2(2) 2\_655 1\_554 ?  
 O2 O3 O2 137.2(2) 4\_545 1\_554 ?  
 Si O3 O2 91.98(16) 2\_655 1\_554 ?  
 O1 O3 O2 47.30(19) 7 1\_554 ?  
 Si O3 O2 50.64(13) 7 1\_554 ?  
 Zn O3 O2 76.59(13) 3\_545 1\_554 ?  
 Si O3 O2 23.12(9) 1\_554 1\_554 ?  
 Si O3 Si 145.5(3) . 5\_655 ?  
 Si O3 Si 78.2(2) 6 5\_655 ?  
 O2 O3 Si 64.78(15) 6 5\_655 ?  
 Ca O3 Si 63.39(12) 3\_545 5\_655 ?  
 Ca O3 Si 53.39(12) 7 5\_655 ?  
 O3 O3 Si 58.02(12) 6 5\_655 ?  
 O3 O3 Si 116.70(13) 6\_556 5\_655 ?  
 O2 O3 Si 119.73(16) . 5\_655 ?  
 O1 O3 Si 177.4(2) . 5\_655 ?  
 O1 O3 Si 111.4(3) 6 5\_655 ?  
 O3 O3 Si 19.1(2) 5\_655 5\_655 ?



O2 O3 Si 122.1(3) 7 5\_655 ?  
Zn O3 Si 143.8(3) 5\_565 5\_655 ?  
O2 O3 Si 61.41(15) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O3 Si 67.1(2) 2\_655 5\_655 ?  
O2 O3 Si 120.88(14) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 47.28(7) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 Si 93.97(18) 7 5\_655 ?  
Si O3 Si 114.92(18) 7 5\_655 ?  
Zn O3 Si 93.06(10) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 71.90(15) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 Si 71.75(14) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 Zn 48.32(15) . 1\_545 ?  
Si O3 Zn 86.6(2) 6 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 88.12(17) 6 1\_545 ?  
Ca O3 Zn 92.01(19) 3\_545 1\_545 ?  
Ca O3 Zn 154.80(14) 7 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 119.95(13) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 54.73(11) 6\_556 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 81.4(2) . 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 27.04(10) . 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 59.7(2) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 148.7(3) 5\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 80.67(18) 7 1\_545 ?  
Zn O3 Zn 47.01(8) 5\_565 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 138.7(3) 2\_655 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 109.6(4) 2\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 29.81(10) 4\_545 1\_545 ?  
Si O3 Zn 137.1(2) 2\_655 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 115.35(17) 7 1\_545 ?  
Si O3 Zn 93.36(11) 7 1\_545 ?  
Zn O3 Zn 111.86(18) 3\_545 1\_545 ?  
Si O3 Zn 116.41(12) 1\_554 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 127.54(14) 1\_554 1\_545 ?  
Si O3 Zn 150.67(10) 5\_655 1\_545 ?  
Si O3 Ca 41.33(18) . 7\_556 ?  
Si O3 Ca 162.9(3) 6 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 128.7(3) 6 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 76.41(19) 3\_545 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 97.97(14) 7 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 156.07(13) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 37.08(12) 6\_556 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 31.28(15) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 75.3(2) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 142.6(3) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 85.1(3) 5\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 107.2(2) 7 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 110.60(19) 5\_565 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 56.7(2) 2\_655 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 39.07(19) 2\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 94.3(3) 4\_545 7\_556 ?  
Si O3 Ca 57.74(11) 2\_655 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 78.38(18) 7 7\_556 ?  
Si O3 Ca 87.76(12) 7 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 47.28(8) 3\_545 7\_556 ?

Si O3 Ca 146.90(11) 1\_554 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 123.79(12) 1\_554 7\_556 ?  
Si O3 Ca 104.18(11) 5\_655 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 83.56(17) 1\_545 7\_556 ?  
Si O3 Si 39.4(2) . 6\_556 ?  
Si O3 Si 117.8(3) 6 6\_556 ?  
O2 O3 Si 94.9(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 Si 61.64(17) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O3 Si 144.2(2) 7 6\_556 ?  
O3 O3 Si 154.99(19) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 10.07(8) 6\_556 6\_556 ?  
O2 O3 Si 64.2(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 55.6(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 102.3(2) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 108.1(4) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 114.8(3) 7 6\_556 ?  
Zn O3 Si 90.06(16) 5\_565 6\_556 ?  
O2 O3 Si 101.5(3) 2\_655 6\_556 ?  
O3 O3 Si 64.1(3) 2\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 47.85(19) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 91.72(17) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 Si 117.5(2) 7 6\_556 ?  
Si O3 Si 112.01(18) 7 6\_556 ?  
Zn O3 Si 91.52(18) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 161.75(13) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 Si 162.64(14) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 Si 122.19(13) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 Si 45.49(9) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 Si 46.48(11) 7\_556 6\_556 ?  
Si O3 O3 152.1(2) . 2\_654 ?  
Si O3 O3 72.9(3) 6 2\_654 ?  
O2 O3 O3 74.5(2) 6 2\_654 ?  
Ca O3 O3 86.47(13) 3\_545 2\_654 ?  
Ca O3 O3 35.72(13) 7 2\_654 ?  
O3 O3 O3 41.66(17) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 138.34(17) 6\_556 2\_654 ?  
O2 O3 O3 118.59(17) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 159.0(3) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 101.5(4) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 37.4(2) 5\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 98.7(3) 7 2\_654 ?  
Zn O3 O3 124.1(3) 5\_565 2\_654 ?  
O2 O3 O3 61.90(18) 2\_655 2\_654 ?  
O3 O3 O3 84.6(2) 2\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 134.6(2) 4\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 59.32(12) 2\_655 2\_654 ?  
O1 O3 O3 77.31(18) 7 2\_654 ?  
Si O3 O3 94.15(18) 7 2\_654 ?  
Zn O3 O3 87.60(9) 3\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 50.66(19) 1\_554 2\_654 ?  
O2 O3 O3 48.38(16) 1\_554 2\_654 ?  
Si O3 O3 23.38(8) 5\_655 2\_654 ?  
Zn O3 O3 159.4(2) 1\_545 2\_654 ?  
Ca O3 O3 115.87(15) 7\_556 2\_654 ?

Si O3 O3 145.11(19) 6\_556 2\_654 ?  
Si O3 O1 90.0(3) . 4\_545 ?  
Si O3 O1 77.1(2) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O1 45.0(2) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O1 28.43(8) 3\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O1 138.79(18) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O1 106.6(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 55.4(2) 6\_556 4\_545 ?  
O2 O3 O1 113.3(3) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 91.74(19) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 85.32(19) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 83.92(19) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 142.93(17) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O1 106.08(14) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 O1 116.62(19) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 O1 72.00(16) 2\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 39.54(11) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 91.21(13) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O1 164.0(3) 7 4\_545 ?  
Si O3 O1 159.3(2) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O1 131.6(2) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 125.26(19) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 O1 145.6(2) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 O1 85.73(11) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 O1 66.34(12) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O1 86.18(19) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 O1 51.17(14) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 O1 106.27(13) 2\_654 4\_545 ?  
Si O3 O2 154.8(3) . 5\_655 ?  
Si O3 O2 60.0(2) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O2 43.56(17) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O2 56.79(13) 3\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O2 70.18(19) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O2 51.26(19) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 116.71(19) 6\_556 5\_655 ?  
O2 O3 O2 139.79(16) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 157.08(15) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 93.6(2) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 36.8(2) 5\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 125.4(4) 7 5\_655 ?  
Zn O3 O2 130.9(2) 5\_565 5\_655 ?  
O2 O3 O2 82.60(18) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O3 O2 78.90(19) 2\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 101.77(10) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 65.41(11) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 O2 111.9(2) 7 5\_655 ?  
Si O3 O2 128.1(2) 7 5\_655 ?  
Zn O3 O2 114.45(13) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 70.03(19) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 O2 78.58(18) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 O2 21.39(7) 5\_655 5\_655 ?  
Zn O3 O2 131.15(10) 1\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O2 117.97(14) 7\_556 5\_655 ?  
Si O3 O2 118.26(14) 6\_556 5\_655 ?

O3 O3 O2 34.89(10) 2\_654 5\_655 ?  
O1 O3 O2 71.77(14) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 Zn 139.5(3) . 7 ?  
Si O3 Zn 47.19(12) 6 7 ?  
O2 O3 Zn 17.43(11) 6 7 ?  
Ca O3 Zn 46.68(9) 3\_545 7 ?  
Ca O3 Zn 96.6(2) 7 7 ?  
O3 O3 Zn 59.90(17) 6 7 ?  
O3 O3 Zn 103.09(19) 6\_556 7 ?  
O2 O3 Zn 153.3(2) . 7 ?  
O1 O3 Zn 130.19(14) . 7 ?  
O1 O3 Zn 77.00(15) 6 7 ?  
O3 O3 Zn 59.16(17) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Zn 130.5(3) 7 7 ?  
Zn O3 Zn 115.51(14) 5\_565 7 ?  
O2 O3 Zn 106.88(16) 2\_655 7 ?  
O3 O3 Zn 87.40(11) 2\_655 7 ?  
O2 O3 Zn 74.61(13) 4\_545 7 ?  
Si O3 Zn 84.72(10) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Zn 137.9(3) 7 7 ?  
Si O3 Zn 146.4(3) 7 7 ?  
Zn O3 Zn 139.45(12) 3\_545 7 ?  
Si O3 Zn 80.33(15) 1\_554 7 ?  
O2 O3 Zn 96.72(18) 1\_554 7 ?  
Si O3 Zn 47.94(7) 5\_655 7 ?  
Zn O3 Zn 103.85(8) 1\_545 7 ?  
Ca O3 Zn 122.34(13) 7\_556 7 ?  
Si O3 Zn 100.50(10) 6\_556 7 ?  
O3 O3 Zn 60.84(9) 2\_654 7 ?  
O1 O3 Zn 49.56(11) 4\_545 7 ?  
O2 O3 Zn 27.29(6) 5\_655 7 ?  
Si O3 Ca 92.20(19) . 5 ?  
Si O3 Ca 43.09(17) 6 5 ?  
O2 O3 Ca 51.25(12) 6 5 ?  
Ca O3 Ca 86.59(9) 3\_545 5 ?  
Ca O3 Ca 137.1(3) 7 5 ?  
O3 O3 Ca 79.51(16) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 88.59(16) 6\_556 5 ?  
O2 O3 Ca 124.6(2) . 5 ?  
O1 O3 Ca 64.23(12) . 5 ?  
O1 O3 Ca 27.09(15) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 127.8(2) 5\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 84.87(12) 7 5 ?  
Zn O3 Ca 51.41(6) 5\_565 5 ?  
O2 O3 Ca 175.43(15) 2\_655 5 ?  
O3 O3 Ca 131.1(2) 2\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 31.50(14) 4\_545 5 ?  
Si O3 Ca 149.15(11) 2\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 133.34(15) 7 5 ?  
Si O3 Ca 108.62(11) 7 5 ?  
Zn O3 Ca 151.84(15) 3\_545 5 ?  
Si O3 Ca 84.83(13) 1\_554 5 ?  
O2 O3 Ca 105.97(17) 1\_554 5 ?  
Si O3 Ca 114.58(14) 5\_655 5 ?

Zn O3 Ca 43.94(5) 1\_545 5 ?  
Ca O3 Ca 124.3(2) 7\_556 5 ?  
Si O3 Ca 78.63(11) 6\_556 5 ?  
O3 O3 Ca 115.5(2) 2\_654 5 ?  
O1 O3 Ca 59.86(9) 4\_545 5 ?  
O2 O3 Ca 93.30(11) 5\_655 5 ?  
Zn O3 Ca 68.68(7) 7 5 ?  
Si O3 Si 82.2(2) . 4\_545 ?  
Si O3 Si 69.9(2) 6 4\_545 ?  
O2 O3 Si 48.18(19) 6 4\_545 ?  
Ca O3 Si 49.66(9) 3\_545 4\_545 ?  
Ca O3 Si 156.1(2) 7 4\_545 ?  
O3 O3 Si 106.0(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 56.92(16) 6\_556 4\_545 ?  
O2 O3 Si 112.7(3) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 74.23(16) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 68.04(16) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 104.48(19) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 121.73(16) 7 4\_545 ?  
Zn O3 Si 84.84(10) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 Si 136.0(2) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 Si 89.9(2) 2\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 18.67(8) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 111.85(14) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 162.2(2) 7 4\_545 ?  
Si O3 Si 140.22(15) 7 4\_545 ?  
Zn O3 Si 140.2(2) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 119.81(14) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 Si 142.93(18) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 Si 103.37(8) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 Si 47.47(7) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 Si 93.23(17) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 Si 49.06(9) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 Si 120.47(9) 2\_654 4\_545 ?  
O1 O3 Si 21.24(6) 4\_545 4\_545 ?  
O2 O3 Si 85.90(9) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 Si 59.71(6) 7 4\_545 ?  
Ca O3 Si 41.16(5) 5 4\_545 ?  
Si O3 O1 119.5(2) . 1\_554 ?  
Si O3 O1 45.5(2) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O1 81.6(2) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O1 134.1(2) 3\_545 1\_554 ?  
Ca O3 O1 70.25(19) 7 1\_554 ?  
O3 O3 O1 34.43(11) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 150.04(11) 6\_556 1\_554 ?  
O2 O3 O1 118.3(2) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 90.24(18) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 42.36(18) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 108.5(4) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 43.2(2) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O1 53.04(12) 5\_565 1\_554 ?  
O2 O3 O1 112.4(3) 2\_655 1\_554 ?  
O3 O3 O1 154.6(3) 2\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 100.10(19) 4\_545 1\_554 ?

Si O3 O1 127.0(2) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O1 74.37(19) 7 1\_554 ?  
Si O3 O1 61.72(11) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O1 106.74(13) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 20.89(9) 1\_554 1\_554 ?  
O2 O3 O1 37.13(11) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 O1 91.37(19) 5\_655 1\_554 ?  
Zn O3 O1 95.71(11) 1\_545 1\_554 ?  
Ca O3 O1 149.43(11) 7\_556 1\_554 ?  
Si O3 O1 141.20(13) 6\_556 1\_554 ?  
O3 O3 O1 71.3(2) 2\_654 1\_554 ?  
O1 O3 O1 121.62(16) 4\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O1 85.4(2) 5\_655 1\_554 ?  
Zn O3 O1 87.63(16) 7 1\_554 ?  
Ca O3 O1 69.12(10) 5 1\_554 ?  
Si O3 O1 108.79(12) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O3 51.93(14) . 7 ?  
Si O3 O3 119.6(3) 6 7 ?  
O2 O3 O3 154.3(3) 6 7 ?  
Ca O3 O3 147.7(4) 3\_545 7 ?  
Ca O3 O3 78.03(14) 7 7 ?  
O3 O3 O3 106.4(3) 6 7 ?  
O3 O3 O3 90.0(3) 6\_556 7 ?  
O2 O3 O3 40.75(18) . 7 ?  
O1 O3 O3 51.59(15) . 7 ?  
O1 O3 O3 92.51(17) 6 7 ?  
O3 O3 O3 124.8(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O3 35.31(15) 7 7 ?  
Zn O3 O3 55.71(9) 5\_565 7 ?  
O2 O3 O3 78.45(14) 2\_655 7 ?  
O3 O3 O3 105.3(2) 2\_655 7 ?  
O2 O3 O3 108.4(2) 4\_545 7 ?  
Si O3 O3 103.31(14) 2\_655 7 ?  
O1 O3 O3 36.78(12) 7 7 ?  
Si O3 O3 20.69(12) 7 7 ?  
Zn O3 O3 47.22(8) 3\_545 7 ?  
Si O3 O3 85.8(2) 1\_554 7 ?  
O2 O3 O3 71.3(2) 1\_554 7 ?  
Si O3 O3 130.7(2) 5\_655 7 ?  
Zn O3 O3 78.59(17) 1\_545 7 ?  
Ca O3 O3 71.9(2) 7\_556 7 ?  
Si O3 O3 91.3(3) 6\_556 7 ?  
O3 O3 O3 112.8(2) 2\_654 7 ?  
O1 O3 O3 140.5(3) 4\_545 7 ?  
O2 O3 O3 147.6(3) 5\_655 7 ?  
Zn O3 O3 165.6(3) 7 7 ?  
Ca O3 O3 106.12(14) 5 7 ?  
Si O3 O3 125.7(2) 4\_545 7 ?  
O1 O3 O3 77.96(19) 1\_554 7 ?  
Si O3 O1 68.37(19) . 5 ?  
Si O3 O1 65.88(18) 6 5 ?  
O2 O3 O1 81.58(14) 6 5 ?  
Ca O3 O1 108.21(16) 3\_545 5 ?  
Ca O3 O1 135.3(2) 7 5 ?

O3 O3 O1 94.26(17) 6 5 ?  
O3 O3 O1 81.73(16) 6\_556 5 ?  
O2 O3 O1 96.8(2) . 5 ?  
O1 O3 O1 36.0(2) . 5 ?  
O1 O3 O1 34.5(3) 6 5 ?  
O3 O3 O1 158.1(2) 5\_655 5 ?  
O2 O3 O1 63.24(14) 7 5 ?  
Zn O3 O1 26.30(8) 5\_565 5 ?  
O2 O3 O1 154.1(2) 2\_655 5 ?  
O3 O3 O1 136.5(4) 2\_655 5 ?  
O2 O3 O1 40.77(11) 4\_545 5 ?  
Si O3 O1 164.1(3) 2\_655 5 ?  
O1 O3 O1 108.82(14) 7 5 ?  
Si O3 O1 83.36(10) 7 5 ?  
Zn O3 O1 121.53(15) 3\_545 5 ?  
Si O3 O1 89.45(16) 1\_554 5 ?  
O2 O3 O1 102.90(17) 1\_554 5 ?  
Si O3 O1 143.42(18) 5\_655 5 ?  
Zn O3 O1 27.00(11) 1\_545 5 ?  
Ca O3 O1 108.1(2) 7\_556 5 ?  
Si O3 O1 72.37(16) 6\_556 5 ?  
O3 O3 O1 135.8(3) 2\_654 5 ?  
O1 O3 O1 79.80(12) 4\_545 5 ?  
O2 O3 O1 122.79(15) 5\_655 5 ?  
Zn O3 O1 99.01(10) 7 5 ?  
Ca O3 O1 30.33(6) 5 5 ?  
Si O3 O1 58.56(9) 4\_545 5 ?  
O1 O3 O1 68.88(18) 1\_554 5 ?  
O3 O3 O1 76.60(13) 7 5 ?  
Si O3 Zn 111.55(19) . 1\_544 ?  
Si O3 Zn 31.08(12) 6 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 65.93(18) 6 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 118.04(14) 3\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 96.8(2) 7 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 47.43(10) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 127.27(12) 6\_556 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 127.83(17) . 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 77.69(19) . 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 15.34(18) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 122.0(4) 5\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 55.45(16) 7 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 42.47(8) 5\_565 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 139.5(3) 2\_655 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 165.57(16) 2\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 72.97(16) 4\_545 1\_544 ?  
Si O3 Zn 148.4(2) 2\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 98.17(18) 7 1\_544 ?  
Si O3 Zn 79.37(11) 7 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 129.50(13) 3\_545 1\_544 ?  
Si O3 Zn 44.71(8) 1\_554 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 64.25(13) 1\_554 1\_544 ?  
Si O3 Zn 102.96(18) 5\_655 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 73.51(7) 1\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 152.81(16) 7\_556 1\_544 ?

Si O3 Zn 117.31(11) 6\_556 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 89.1(2) 2\_654 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 97.47(12) 4\_545 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 88.53(18) 5\_655 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 78.21(11) 7 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 41.87(5) 5 1\_544 ?  
Si O3 Zn 82.06(8) 4\_545 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 27.25(7) 1\_554 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 89.07(16) 7 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 46.99(12) 5 1\_544 ?  
Si O3 O1 119.5(3) . 3\_545 ?  
Si O3 O1 72.67(16) 6 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.22(16) 6 3\_545 ?  
Ca O3 O1 20.94(14) 3\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 102.78(17) 7 3\_545 ?  
O3 O3 O1 84.1(2) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 80.7(2) 6\_556 3\_545 ?  
O2 O3 O1 126.9(3) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 127.9(3) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 98.46(13) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 50.34(13) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 157.0(3) 7 3\_545 ?  
Zn O3 O1 133.23(11) 5\_565 3\_545 ?  
O2 O3 O1 93.66(12) 2\_655 3\_545 ?  
O3 O3 O1 62.66(10) 2\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 73.36(12) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 67.64(8) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 140.92(15) 7 3\_545 ?  
Si O3 O1 164.4(2) 7 3\_545 ?  
Zn O3 O1 122.95(12) 3\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 104.5(2) 1\_554 3\_545 ?  
O2 O3 O1 116.2(2) 1\_554 3\_545 ?  
Si O3 O1 49.53(10) 5\_655 3\_545 ?  
Zn O3 O1 102.08(13) 1\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 95.82(16) 7\_556 3\_545 ?  
Si O3 O1 80.86(15) 6\_556 3\_545 ?  
O3 O3 O1 70.65(12) 2\_654 3\_545 ?  
O1 O3 O1 36.21(17) 4\_545 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.61(13) 5\_655 3\_545 ?  
Zn O3 O1 26.53(10) 7 3\_545 ?  
Ca O3 O1 81.84(8) 5 3\_545 ?  
Si O3 O1 54.87(9) 4\_545 3\_545 ?  
O1 O3 O1 114.1(2) 1\_554 3\_545 ?  
O3 O3 O1 167.7(3) 7 3\_545 ?  
O1 O3 O1 109.67(10) 5 3\_545 ?  
Zn O3 O1 102.99(14) 1\_544 3\_545 ?  
Si O3 O2 84.0(3) . 5\_656 ?  
Si O3 O2 108.65(18) 6 5\_656 ?  
O2 O3 O2 72.0(2) 6 5\_656 ?  
Ca O3 O2 18.75(11) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 111.89(14) 7 5\_656 ?  
O3 O3 O2 121.6(2) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 46.42(16) 6\_556 5\_656 ?  
O2 O3 O2 88.9(2) . 5\_656 ?



O1 O3 O2 106.3(3) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 123.92(17) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 59.2(2) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 163.4(4) 7 5\_656 ?  
Zn O3 O2 137.2(2) 5\_565 5\_656 ?  
O2 O3 O2 78.51(17) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O3 O2 33.39(11) 2\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 72.85(16) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 54.82(10) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 126.43(18) 7 5\_656 ?  
Si O3 O2 144.6(2) 7 5\_656 ?  
Zn O3 O2 95.49(15) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 140.9(2) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 O2 141.81(16) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 O2 71.46(12) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 O2 90.30(18) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 57.66(14) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 O2 50.74(14) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 O2 94.60(14) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 O2 38.65(10) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 O2 70.87(8) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 O2 65.10(10) 7 5\_656 ?  
Ca O3 O2 98.28(11) 5 5\_656 ?  
Si O3 O2 57.64(9) 4\_545 5\_656 ?  
O1 O3 O2 152.72(19) 1\_554 5\_656 ?  
O3 O3 O2 129.3(3) 7 5\_656 ?  
O1 O3 O2 112.66(18) 5 5\_656 ?  
Zn O3 O2 134.99(10) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 O2 38.75(13) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O1 34.98(17) . 6\_556 ?  
Si O3 O1 107.3(3) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O1 95.3(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O1 76.5(2) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 154.3(2) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O1 144.08(15) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 28.69(9) 6\_556 6\_556 ?  
O2 O3 O1 67.3(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 37.90(17) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 85.0(2) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 127.6(4) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 98.2(2) 7 6\_556 ?  
Zn O3 O1 70.35(14) 5\_565 6\_556 ?  
O2 O3 O1 116.6(3) 2\_655 6\_556 ?  
O3 O3 O1 83.7(3) 2\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 37.83(18) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 111.0(2) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 115.7(2) 7 6\_556 ?  
Si O3 O1 101.91(15) 7 6\_556 ?  
Zn O3 O1 98.14(18) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 142.36(13) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 O1 148.56(13) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 O1 139.67(14) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 O1 26.07(9) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 59.84(14) 7\_556 6\_556 ?

Si O3 O1 19.87(8) 6\_556 6\_556 ?  
O3 O3 O1 162.98(16) 2\_654 6\_556 ?  
O1 O3 O1 58.17(16) 4\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 129.89(14) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 O1 106.21(11) 7\_6\_556 ?  
Ca O3 O1 64.67(10) 5\_6\_556 ?  
Si O3 O1 47.27(9) 4\_545 6\_556 ?  
O1 O3 O1 121.53(12) 1\_554 6\_556 ?  
O3 O3 O1 82.3(2) 7\_6\_556 ?  
O1 O3 O1 53.07(19) 5\_6\_556 ?  
Zn O3 O1 99.32(11) 1\_544 6\_556 ?  
O1 O3 O1 92.94(16) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 68.99(17) 5\_656 6\_556 ?  
Si O3 Ca 30.11(14) . . ?  
Si O3 Ca 113.88(18) 6 . ?  
O2 O3 Ca 132.33(18) 6 . ?  
Ca O3 Ca 126.2(3) 3\_545 . ?  
Ca O3 Ca 111.06(10) 7 . ?  
O3 O3 Ca 123.73(13) 6 . ?  
O3 O3 Ca 67.08(13) 6\_556 . ?  
O2 O3 Ca 46.11(12) . . ?  
O1 O3 Ca 19.28(8) . . ?  
O1 O3 Ca 80.32(16) 6 . ?  
O3 O3 Ca 149.0(3) 5\_655 . ?  
O2 O3 Ca 50.7(2) 7 . ?  
Zn O3 Ca 42.90(7) 5\_565 . ?  
O2 O3 Ca 102.46(18) 2\_655 . ?  
O3 O3 Ca 107.1(3) 2\_655 . ?  
O2 O3 Ca 75.91(16) 4\_545 . ?  
Si O3 Ca 120.58(17) 2\_655 . ?  
O1 O3 Ca 69.61(14) 7 . ?  
Si O3 Ca 51.08(8) 7 . ?  
Zn O3 Ca 70.23(9) 3\_545 . ?  
Si O3 Ca 105.67(10) 1\_554 . ?  
O2 O3 Ca 99.15(11) 1\_554 . ?  
Si O3 Ca 162.70(10) 5\_655 . ?  
Zn O3 Ca 46.15(7) 1\_545 . ?  
Ca O3 Ca 68.09(12) 7\_556 . ?  
Si O3 Ca 64.54(12) 6\_556 . ?  
O3 O3 Ca 145.22(14) 2\_654 . ?  
O1 O3 Ca 108.49(19) 4\_545 . ?  
O2 O3 Ca 173.83(19) 5\_655 . ?  
Zn O3 Ca 149.33(11) 7 . ?  
Ca O3 Ca 81.77(9) 5 . ?  
Si O3 Ca 92.71(13) 4\_545 . ?  
O1 O3 Ca 89.38(10) 1\_554 . ?  
O3 O3 Ca 33.03(12) 7 . ?  
O1 O3 Ca 51.87(10) 5 . ?  
Zn O3 Ca 85.32(7) 1\_544 . ?  
O1 O3 Ca 144.0(2) 3\_545 . ?  
O2 O3 Ca 113.4(2) 5\_656 . ?  
O1 O3 Ca 51.02(9) 6\_556 . ?  
Si O3 Si 77.3(3) . 5\_656 ?  
Si O3 Si 126.22(17) 6 5\_656 ?

O2 O3 Si 89.72(19) 6 5\_656 ?  
Ca O3 Si 36.61(10) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 99.13(12) 7 5\_656 ?  
O3 O3 Si 128.58(12) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 46.17(10) 6\_556 5\_656 ?  
O2 O3 Si 73.22(19) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 106.8(3) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 142.85(19) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 54.7(3) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 149.0(2) 7 5\_656 ?  
Zn O3 Si 143.7(2) 5\_565 5\_656 ?  
O2 O3 Si 60.90(16) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O3 Si 14.71(12) 2\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 88.20(19) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 40.41(8) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 107.13(16) 7 5\_656 ?  
Si O3 Si 126.06(15) 7 5\_656 ?  
Zn O3 Si 76.18(11) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 142.84(15) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 Si 132.34(13) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 Si 71.49(7) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 Si 98.82(17) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 42.61(7) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 Si 53.99(10) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 Si 92.18(14) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 Si 57.61(11) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 78.17(12) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 Si 80.06(7) 7 5\_656 ?  
Ca O3 Si 116.37(13) 5 5\_656 ?  
Si O3 Si 75.22(10) 4\_545 5\_656 ?  
O1 O3 Si 162.83(18) 1\_554 5\_656 ?  
O3 O3 Si 113.9(2) 7 5\_656 ?  
O1 O3 Si 124.7(2) 5 5\_656 ?  
Zn O3 Si 154.32(8) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 Si 53.79(11) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 19.38(6) 5\_656 5\_656 ?  
O1 O3 Si 73.85(14) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 107.30(18) . 5\_656 ?  
Si O3 Ca 174.9(2) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 41.2(2) 6 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 47.6(2) 6 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.94(16) 3\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 63.12(18) 7 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 22.78(10) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 142.70(17) 6\_556 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 149.9(2) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 141.0(2) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 72.6(2) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 58.5(3) 5\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 97.7(3) 7 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 105.25(19) 5\_565 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 94.0(2) 2\_655 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 105.7(2) 2\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 105.1(2) 4\_545 3\_544 ?

Si O3 Ca 86.33(14) 2\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 100.3(2) 7 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.67(19) 7 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 118.72(16) 3\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 42.52(9) 1\_554 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 56.44(13) 1\_554 3\_544 ?  
Si O3 Ca 39.48(8) 5\_655 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 127.19(11) 1\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 143.66(11) 7\_556 3\_544 ?  
Si O3 Ca 140.77(9) 6\_556 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 32.25(11) 2\_654 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 89.66(14) 4\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 28.63(12) 5\_655 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 40.29(7) 7 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 83.25(11) 5 3\_544 ?  
Si O3 Ca 95.76(9) 4\_545 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 56.76(13) 1\_554 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 127.3(3) 7 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 106.60(16) 5 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 63.50(11) 1\_544 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 62.20(13) 3\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.83(14) 5\_656 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 142.47(10) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 146.03(15) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.66(9) 5\_656 3\_544 ?  
Si O3 O2 133.3(2) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 8.16(16) 6 4\_544 ?  
O2 O3 O2 44.7(2) 6 4\_544 ?  
Ca O3 O2 98.08(15) 3\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 92.1(3) 7 4\_544 ?  
O3 O3 O2 33.45(15) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 132.70(19) 6\_556 4\_544 ?  
O2 O3 O2 152.43(18) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 99.72(19) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 31.07(18) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 99.2(4) 5\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 77.1(2) 7 4\_544 ?  
Zn O3 O2 67.02(11) 5\_565 4\_544 ?  
O2 O3 O2 132.5(4) 2\_655 4\_544 ?  
O3 O3 O2 141.0(2) 2\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 75.59(14) 4\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 127.7(2) 2\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.7(3) 7 4\_544 ?  
Si O3 O2 98.64(17) 7 4\_544 ?  
Zn O3 O2 142.4(2) 3\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 43.06(12) 1\_554 4\_544 ?  
O2 O3 O2 66.18(14) 1\_554 4\_544 ?  
Si O3 O2 80.42(16) 5\_655 4\_544 ?  
Zn O3 O2 88.10(10) 1\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 169.78(19) 7\_556 4\_544 ?  
Si O3 O2 123.34(13) 6\_556 4\_544 ?  
O3 O3 O2 71.8(2) 2\_654 4\_544 ?  
O1 O3 O2 85.07(14) 4\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 63.94(16) 5\_655 4\_544 ?

Zn O3 O2 54.18(9) 7 4\_544 ?  
Ca O3 O2 46.08(9) 5 4\_544 ?  
Si O3 O2 76.74(10) 4\_545 4\_544 ?  
O1 O3 O2 37.38(10) 1\_554 4\_544 ?  
O3 O3 O2 112.2(2) 7 4\_544 ?  
O1 O3 O2 65.07(14) 5 4\_544 ?  
Zn O3 O2 25.03(6) 1\_544 4\_544 ?  
O1 O3 O2 80.14(14) 3\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 116.69(9) 5\_656 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.74(13) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 109.89(10) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 133.89(10) 5\_656 4\_544 ?  
Ca O3 O2 41.61(11) 3\_544 4\_544 ?  
Si O3 O1 110.49(17) . 8 ?  
Si O3 O1 105.1(4) 6 8 ?  
O2 O3 O1 118.7(3) 6 8 ?  
Ca O3 O1 116.51(15) 3\_545 8 ?  
Ca O3 O1 9.30(11) 7 8 ?  
O3 O3 O1 67.23(16) 6 8 ?  
O3 O3 O1 127.40(18) 6\_556 8 ?  
O2 O3 O1 77.8(2) . 8 ?  
O1 O3 O1 121.85(11) . 8 ?  
O1 O3 O1 116.7(3) 6 8 ?  
O3 O3 O1 60.2(2) 5\_655 8 ?  
O2 O3 O1 71.75(16) 7 8 ?  
Zn O3 O1 108.49(14) 5\_565 8 ?  
O2 O3 O1 38.06(18) 2\_655 8 ?  
O3 O3 O1 83.09(17) 2\_655 8 ?  
O2 O3 O1 174.4(3) 4\_545 8 ?  
Si O3 O1 57.69(10) 2\_655 8 ?  
O1 O3 O1 33.58(17) 7 8 ?  
Si O3 O1 55.55(9) 7 8 ?  
Zn O3 O1 47.21(11) 3\_545 8 ?  
Si O3 O1 58.44(13) 1\_554 8 ?  
O2 O3 O1 37.22(12) 1\_554 8 ?  
Si O3 O1 60.54(10) 5\_655 8 ?  
Zn O3 O1 148.63(10) 1\_545 8 ?  
Ca O3 O1 90.46(12) 7\_556 8 ?  
Si O3 O1 136.93(17) 6\_556 8 ?  
O3 O3 O1 44.58(9) 2\_654 8 ?  
O1 O3 O1 144.14(12) 4\_545 8 ?  
O2 O3 O1 78.54(16) 5\_655 8 ?  
Zn O3 O1 105.31(16) 7 8 ?  
Ca O3 O1 143.1(2) 5 8 ?  
Si O3 O1 163.90(13) 4\_545 8 ?  
O1 O3 O1 74.31(16) 1\_554 8 ?  
O3 O3 O1 70.30(15) 7 8 ?  
O1 O3 O1 134.52(14) 5 8 ?  
Zn O3 O1 101.47(18) 1\_544 8 ?  
O1 O3 O1 109.16(16) 3\_545 8 ?  
O2 O3 O1 112.34(12) 5\_656 8 ?  
O1 O3 O1 145.07(19) 6\_556 8 ?  
Ca O3 O1 103.20(9) . 8 ?  
Si O3 O1 97.32(11) 5\_656 8 ?

Ca O3 O1 72.40(14) 3\_544 8 ?  
 O2 O3 O1 99.7(2) 4\_544 8 ?  
 Si O3 O1 89.3(2) . 2\_554 ?  
 Si O3 O1 56.56(15) 6 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 89.69(19) 6 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 137.33(13) 3\_545 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 98.2(2) 7 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 66.15(14) 6 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 116.23(14) 6\_556 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 102.28(17) . 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 57.1(3) . 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 28.64(12) 6 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 142.2(5) 5\_655 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 34.50(10) 7 2\_554 ?  
 Zn O3 O1 19.59(11) 5\_565 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 132.48(18) 2\_655 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 168.0(3) 2\_655 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 75.79(15) 4\_545 2\_554 ?  
 Si O3 O1 156.6(2) 2\_655 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 82.48(13) 7 2\_554 ?  
 Si O3 O1 59.16(8) 7 2\_554 ?  
 Zn O3 O1 109.42(9) 3\_545 2\_554 ?  
 Si O3 O1 54.69(13) 1\_554 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 65.48(14) 1\_554 2\_554 ?  
 Si O3 O1 124.2(2) 5\_655 2\_554 ?  
 Zn O3 O1 63.00(11) 1\_545 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 128.89(17) 7\_556 2\_554 ?  
 Si O3 O1 107.98(16) 6\_556 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 105.2(3) 2\_654 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 110.89(12) 4\_545 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 113.1(2) 5\_655 2\_554 ?  
 Zn O3 O1 103.40(14) 7 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 51.13(7) 5 2\_554 ?  
 Si O3 O1 90.97(10) 4\_545 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 33.91(17) 1\_554 2\_554 ?  
 O3 O3 O1 64.68(13) 7 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 37.43(7) 5 2\_554 ?  
 Zn O3 O1 25.58(8) 1\_544 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 126.81(13) 3\_545 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 148.47(14) 5\_656 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 88.11(17) 6\_556 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 60.83(10) . 2\_554 ?  
 Si O3 O1 161.8(2) 5\_656 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 86.14(16) 3\_544 2\_554 ?  
 O2 O3 O1 50.56(11) 4\_544 2\_554 ?  
 O1 O3 O1 98.88(14) 8 2\_554 ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.338  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 29.90  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.338  
 \_refine\_diff\_density\_max 0.440  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.422  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.135