

data\_camn Pressure = 5.88 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 9.7785(2)  
\_cell\_length\_b 8.9430(3)  
\_cell\_length\_c 5.18028(10)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 104.084(2)  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 439.393(19)  
\_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     3.737
_exptl_crystal_density_method    'not measured'
_exptl_crystal_F_000             484
_exptl_absorpt_coefficient_mu    4.666
_exptl_absorpt_correction_type   ?
_exptl_absorpt_correction_T_min  ?
_exptl_absorpt_correction_T_max  ?
_exptl_absorpt_process_details   ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature      293(2)
_diffrn_radiation_wavelength     0.70926
_diffrn_radiation_type           ?
_diffrn_radiation_source         'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   ?
_diffrn_measurement_method       ?
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_standards_number         ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time  ?
_diffrn_standards_decay_%        ?
_diffrn_reflns_number            294
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0000
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0914
_diffrn_reflns_limit_h_min       -11
_diffrn_reflns_limit_h_max       11
_diffrn_reflns_limit_k_min       0
_diffrn_reflns_limit_k_max       9
_diffrn_reflns_limit_l_min       0
_diffrn_reflns_limit_l_max       7
_diffrn_reflns_theta_min         3.12
_diffrn_reflns_theta_max         29.91
_reflns_number_total             294
_reflns_number_gt                286
_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+0.8677P] 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       0.0149(17)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2/l^3/sin(2*theta)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        294
_refine_ls_number_parameters     22
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0358
_refine_ls_R_factor_gt           0.0346
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0823
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0818
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.206
_refine_ls_restrained_S_all      1.206
_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 0.30392(19) 0.2500 0.0082(4) Uiso 1 2 d S . .
Mn Mn 0.0000 0.90744(13) 0.2500 0.0070(4) Uiso 1 2 d S . .
Si Si 0.28808(14) 0.09325(16) 0.2339(2) 0.0057(4) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.1214(4) 0.0945(4) 0.1542(6) 0.0081(7) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.3619(4) 0.2462(5) 0.3338(6) 0.0117(8) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.3502(3) 0.0260(4) -0.0138(5) 0.0083(8) 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 2.334(4) 2 ?
Ca O1 2.334(4) . ?
Ca O3 2.614(3) 7 ?
Ca O3 2.614(3) 8_456 ?
Ca O3 2.643(4) 4 ?
Ca O3 2.643(4) 3_455 ?
Ca Si 3.0969(13) 7_556 ?
Ca Si 3.0969(13) 8_455 ?
Ca Mn 3.2065(11) 5_565 ?
Ca Mn 3.2065(11) 5_566 ?
Mn O2 2.092(4) 3_455 ?
Mn O2 2.092(4) 4 ?
Mn O1 2.141(3) 5_565 ?
Mn O1 2.141(3) 6_566 ?
Mn O1 2.177(4) 2_565 ?
Mn O1 2.177(4) 1_565 ?
Mn Mn 3.0740(12) 5_576 ?
Mn Mn 3.0740(12) 5_575 ?
Mn Ca 3.2065(11) 5_565 ?
Mn Ca 3.2065(11) 5_566 ?
Mn O3 3.397(3) 6_566 ?
Mn O3 3.397(3) 5_565 ?
Si O2 1.574(4) . ?
Si O1 1.581(4) . ?
Si O3 1.660(3) . ?
Si O3 1.682(3) 6_556 ?
Si Ca 3.0969(13) 7_556 ?
Si Ca 3.3034(18) 3_545 ?

```

Si O3 3.533(4) 2\_655 ?  
Si O3 3.738(4) 7 ?  
Si O3 3.843(3) 1\_556 ?  
Si O3 4.113(3) 5\_655 ?  
Si O3 4.202(3) 6 ?  
O1 Mn 2.141(3) 5\_565 ?  
O1 Mn 2.177(4) 1\_545 ?  
O1 O3 2.662(4) . ?  
O1 O3 2.693(5) 6\_556 ?  
O1 O3 3.496(5) 7 ?  
O1 O3 4.264(5) 4 ?  
O1 O3 4.389(4) 1\_556 ?  
O1 O3 4.617(5) 5 ?  
O1 O3 4.643(5) 3\_455 ?  
O1 O3 4.681(4) 6 ?  
O2 Mn 2.092(4) 3\_545 ?  
O2 Ca 2.293(3) 7\_556 ?  
O2 O3 2.570(6) 6\_556 ?  
O2 O3 2.652(5) . ?  
O2 O3 3.086(5) 7 ?  
O2 O3 3.376(5) 2\_655 ?  
O2 O3 3.517(5) 4 ?  
O2 O3 3.937(4) 1\_556 ?  
O2 O3 4.345(5) 5\_655 ?  
O2 O3 4.630(5) 5\_656 ?  
O2 O3 4.931(5) 4\_554 ?  
O3 Si 1.682(3) 6 ?  
O3 O2 2.570(6) 6 ?  
O3 Ca 2.614(3) 7 ?  
O3 O3 2.6315(14) 6 ?  
O3 O3 2.6315(14) 6\_556 ?  
O3 Ca 2.643(4) 3\_545 ?  
O3 O1 2.693(5) 6 ?  
O3 O3 2.936(6) 5\_655 ?  
O3 O2 3.086(5) 7 ?  
O3 O2 3.376(5) 2\_655 ?  
O3 Mn 3.397(3) 5\_565 ?  
O3 O3 3.487(6) 2\_655 ?  
O3 O1 3.496(5) 7 ?  
O3 O2 3.517(5) 4\_545 ?  
O3 Si 3.533(4) 2\_655 ?  
O3 Si 3.738(4) 7 ?  
O3 Mn 3.831(4) 3\_545 ?  
O3 Si 3.843(3) 1\_554 ?  
O3 O2 3.937(4) 1\_554 ?  
O3 Si 4.113(3) 5\_655 ?  
O3 Mn 4.122(3) 1\_545 ?  
O3 Ca 4.159(3) 7\_556 ?  
O3 Si 4.202(3) 6\_556 ?  
O3 O3 4.251(5) 2\_654 ?  
O3 O1 4.264(5) 4\_545 ?  
O3 O2 4.345(5) 5\_655 ?  
O3 O1 4.389(4) 1\_554 ?  
O3 Mn 4.421(4) 7 ?

O3 Si 4.456(4) 4\_545 ?  
O3 Ca 4.459(4) 5 ?  
O3 O3 4.477(8) 7 ?  
O3 Mn 4.587(3) 1\_544 ?  
O3 O1 4.617(5) 5 ?  
O3 O2 4.630(5) 5\_656 ?  
O3 O1 4.643(5) 3\_545 ?  
O3 O1 4.681(4) 6\_556 ?  
O3 Si 4.797(3) 5\_656 ?  
O3 Ca 4.833(3) 3\_544 ?  
O3 O1 4.871(5) 8 ?  
O3 O2 4.931(5) 4\_544 ?  
O3 O2 4.941(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 157.4(2) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca O1 80.17(13) 8\_455 2 ?  
O2 Ca O1 81.77(13) 7\_556 2 ?  
O2 Ca O1 81.77(13) 8\_455 . ?  
O2 Ca O1 80.17(13) 7\_556 . ?  
O1 Ca O1 73.30(18) 2 . ?  
O2 Ca O3 86.71(11) 8\_455 7 ?  
O2 Ca O3 106.56(11) 7\_556 7 ?  
O1 Ca O3 159.79(13) 2 7 ?  
O1 Ca O3 89.74(11) . 7 ?  
O2 Ca O3 106.56(11) 8\_455 8\_456 ?  
O2 Ca O3 86.71(11) 7\_556 8\_456 ?  
O1 Ca O3 89.74(11) 2 8\_456 ?  
O1 Ca O3 159.79(13) . 8\_456 ?  
O3 Ca O3 108.82(17) 7 8\_456 ?  
O2 Ca O3 139.36(14) 8\_455 4 ?  
O2 Ca O3 62.30(12) 7\_556 4 ?  
O1 Ca O3 137.70(10) 2 4 ?  
O1 Ca O3 117.79(12) . 4 ?  
O3 Ca O3 60.08(6) 7 4 ?  
O3 Ca O3 67.91(12) 8\_456 4 ?  
O2 Ca O3 62.30(12) 8\_455 3\_455 ?  
O2 Ca O3 139.36(14) 7\_556 3\_455 ?  
O1 Ca O3 117.79(12) 2 3\_455 ?  
O1 Ca O3 137.70(10) . 3\_455 ?  
O3 Ca O3 67.91(12) 7 3\_455 ?  
O3 Ca O3 60.08(6) 8\_456 3\_455 ?  
O3 Ca O3 82.56(16) 4 3\_455 ?  
O2 Ca Si 170.81(10) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.42(10) 7\_556 7\_556 ?  
O1 Ca Si 108.83(9) 2 7\_556 ?  
O1 Ca Si 98.84(10) . 7\_556 ?

O3 Ca Si 84.13(7) 7 7\_556 ?  
O3 Ca Si 75.91(8) 8\_456 7\_556 ?  
O3 Ca Si 32.87(7) 4 7\_556 ?  
O3 Ca Si 113.18(10) 3\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.42(10) 8\_455 8\_455 ?  
O2 Ca Si 170.81(10) 7\_556 8\_455 ?  
O1 Ca Si 98.84(10) 2 8\_455 ?  
O1 Ca Si 108.83(9) . 8\_455 ?  
O3 Ca Si 75.91(8) 7 8\_455 ?  
O3 Ca Si 84.13(7) 8\_456 8\_455 ?  
O3 Ca Si 113.18(10) 4 8\_455 ?  
O3 Ca Si 32.87(7) 3\_455 8\_455 ?  
Si Ca Si 145.45(9) 7\_556 8\_455 ?  
O2 Ca Mn 40.61(9) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Mn 121.91(11) 7\_556 5\_565 ?  
O1 Ca Mn 78.39(9) 2 5\_565 ?  
O1 Ca Mn 41.88(8) . 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 81.64(7) 7 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 146.25(7) 8\_456 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 138.74(6) 4 5\_565 ?  
O3 Ca Mn 97.72(7) 3\_455 5\_565 ?  
Si Ca Mn 137.80(4) 7\_556 5\_565 ?  
Si Ca Mn 67.00(3) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Mn 121.91(11) 8\_455 5\_566 ?  
O2 Ca Mn 40.61(9) 7\_556 5\_566 ?  
O1 Ca Mn 41.88(8) 2 5\_566 ?  
O1 Ca Mn 78.39(9) . 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 146.25(7) 7 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 81.64(7) 8\_456 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 97.72(7) 4 5\_566 ?  
O3 Ca Mn 138.74(6) 3\_455 5\_566 ?  
Si Ca Mn 67.00(3) 7\_556 5\_566 ?  
Si Ca Mn 137.80(4) 8\_455 5\_566 ?  
Mn Ca Mn 107.76(6) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Mn O2 92.9(2) 3\_455 4 ?  
O2 Mn O1 88.00(13) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn O1 91.35(13) 4 5\_565 ?  
O2 Mn O1 91.35(13) 3\_455 6\_566 ?  
O2 Mn O1 88.00(12) 4 6\_566 ?  
O1 Mn O1 179.1(2) 5\_565 6\_566 ?  
O2 Mn O1 93.85(14) 3\_455 2\_565 ?  
O2 Mn O1 172.79(14) 4 2\_565 ?  
O1 Mn O1 91.49(14) 5\_565 2\_565 ?  
O1 Mn O1 89.24(14) 6\_566 2\_565 ?  
O2 Mn O1 172.79(14) 3\_455 1\_565 ?  
O2 Mn O1 93.85(14) 4 1\_565 ?  
O1 Mn O1 89.24(14) 5\_565 1\_565 ?  
O1 Mn O1 91.49(14) 6\_566 1\_565 ?  
O1 Mn O1 79.57(19) 2\_565 1\_565 ?  
O2 Mn Mn 93.67(9) 3\_455 5\_576 ?  
O2 Mn Mn 132.72(9) 4 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 135.63(11) 5\_565 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 45.09(10) 6\_566 5\_576 ?  
O1 Mn Mn 44.14(9) 2\_565 5\_576 ?

O1 Mn Mn 83.68(10) 1\_565 5\_576 ?  
O2 Mn Mn 132.72(9) 3\_455 5\_575 ?  
O2 Mn Mn 93.67(9) 4 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 45.09(10) 5\_565 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 135.63(11) 6\_566 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 83.68(10) 2\_565 5\_575 ?  
O1 Mn Mn 44.14(9) 1\_565 5\_575 ?  
Mn Mn Mn 114.83(7) 5\_576 5\_575 ?  
O2 Mn Ca 83.58(10) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn Ca 45.51(9) 4 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 46.69(10) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 132.55(10) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 138.09(9) 2\_565 5\_565 ?  
O1 Mn Ca 99.31(9) 1\_565 5\_565 ?  
Mn Mn Ca 176.46(6) 5\_576 5\_565 ?  
Mn Mn Ca 68.71(3) 5\_575 5\_565 ?  
O2 Mn Ca 45.51(9) 3\_455 5\_566 ?  
O2 Mn Ca 83.58(10) 4 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 132.55(10) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 46.69(10) 6\_566 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 99.31(9) 2\_565 5\_566 ?  
O1 Mn Ca 138.09(9) 1\_565 5\_566 ?  
Mn Mn Ca 68.71(3) 5\_576 5\_566 ?  
Mn Mn Ca 176.46(6) 5\_575 5\_566 ?  
Ca Mn Ca 107.76(6) 5\_565 5\_566 ?  
O2 Mn O3 133.72(12) 3\_455 6\_566 ?  
O2 Mn O3 63.29(12) 4 6\_566 ?  
O1 Mn O3 128.61(10) 5\_565 6\_566 ?  
O1 Mn O3 51.60(10) 6\_566 6\_566 ?  
O1 Mn O3 109.93(12) 2\_565 6\_566 ?  
O1 Mn O3 52.39(11) 1\_565 6\_566 ?  
Mn Mn O3 78.97(5) 5\_576 6\_566 ?  
Mn Mn O3 90.14(5) 5\_575 6\_566 ?  
Ca Mn O3 101.31(5) 5\_565 6\_566 ?  
Ca Mn O3 90.60(5) 5\_566 6\_566 ?  
O2 Mn O3 63.29(12) 3\_455 5\_565 ?  
O2 Mn O3 133.72(12) 4 5\_565 ?  
O1 Mn O3 51.60(10) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Mn O3 128.61(10) 6\_566 5\_565 ?  
O1 Mn O3 52.40(11) 2\_565 5\_565 ?  
O1 Mn O3 109.93(12) 1\_565 5\_565 ?  
Mn Mn O3 90.14(5) 5\_576 5\_565 ?  
Mn Mn O3 78.97(5) 5\_575 5\_565 ?  
Ca Mn O3 90.60(5) 5\_565 5\_565 ?  
Ca Mn O3 101.31(5) 5\_566 5\_565 ?  
O3 Mn O3 159.81(14) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Si O1 116.1(2) . . ?  
O2 Si O3 110.13(18) . . ?  
O1 Si O3 110.39(16) . . ?  
O2 Si O3 104.22(19) . 6\_556 ?  
O1 Si O3 111.21(18) . 6\_556 ?  
O3 Si O3 103.90(13) . 6\_556 ?  
O2 Si Ca 45.68(13) . 7\_556 ?  
O1 Si Ca 130.84(13) . 7\_556 ?



O3 Si Ca 118.76(12) . 7\_556 ?  
O3 Si Ca 58.55(13) 6\_556 7\_556 ?  
O2 Si Ca 115.96(15) . 3\_545 ?  
O1 Si Ca 127.79(15) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 52.45(13) . 3\_545 ?  
O3 Si Ca 51.54(11) 6\_556 3\_545 ?  
Ca Si Ca 85.81(5) 7\_556 3\_545 ?  
O2 Si Ca 80.04(14) . . ?  
O1 Si Ca 36.52(14) . . ?  
O3 Si Ca 132.79(12) . . ?  
O3 Si Ca 118.42(12) 6\_556 . ?  
Ca Si Ca 101.44(4) 7\_556 . ?  
Ca Si Ca 161.80(6) 3\_545 . ?  
O2 Si O3 71.33(15) . 2\_655 ?  
O1 Si O3 166.92(15) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 74.78(13) . 2\_655 ?  
O3 Si O3 55.74(14) 6\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 45.85(6) 7\_556 2\_655 ?  
Ca Si O3 45.33(7) 3\_545 2\_655 ?  
Ca Si O3 146.67(7) . 2\_655 ?  
O2 Si O3 53.95(14) . 7 ?  
O1 Si O3 68.93(15) . 7 ?  
O3 Si O3 105.50(14) . 7 ?  
O3 Si O3 148.23(13) 6\_556 7 ?  
Ca Si O3 96.27(7) 7\_556 7 ?  
Ca Si O3 154.06(6) 3\_545 7 ?  
Ca Si O3 42.60(5) . 7 ?  
O3 Si O3 122.14(8) 2\_655 7 ?  
O2 Si O3 81.73(13) . 1\_556 ?  
O1 Si O3 99.46(13) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 136.88(17) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 34.36(15) 6\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 42.58(5) 7\_556 1\_556 ?  
Ca Si O3 84.75(6) 3\_545 1\_556 ?  
Ca Si O3 89.39(6) . 1\_556 ?  
O3 Si O3 70.24(7) 2\_655 1\_556 ?  
O3 Si O3 114.09(6) 7 1\_556 ?  
O2 Si O3 87.70(15) . 5\_655 ?  
O1 Si O3 146.21(14) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 35.98(14) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 83.05(13) 6\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 82.90(5) 7\_556 5\_655 ?  
Ca Si O3 39.40(6) 3\_545 5\_655 ?  
Ca Si O3 157.26(6) . 5\_655 ?  
O3 Si O3 39.35(4) 2\_655 5\_655 ?  
O3 Si O3 115.03(8) 7 5\_655 ?  
O3 Si O3 107.84(5) 1\_556 5\_655 ?  
O2 Si O3 111.47(13) . 6 ?  
O1 Si O3 97.60(12) . 6 ?  
O3 Si O3 14.86(10) . 6 ?  
O3 Si O3 116.73(16) 6\_556 6 ?  
Ca Si O3 130.90(6) 7\_556 6 ?  
Ca Si O3 66.04(5) 3\_545 6 ?  
Ca Si O3 117.95(5) . 6 ?

O3 Si O3 88.86(6) 2\_655 6 ?  
O3 Si O3 94.16(5) 7 6 ?  
O3 Si O3 150.76(6) 1\_556 6 ?  
O3 Si O3 49.58(8) 5\_655 6 ?  
Si O1 Mn 123.10(17) . 5\_565 ?  
Si O1 Mn 121.3(2) . 1\_545 ?  
Mn O1 Mn 90.76(14) 5\_565 1\_545 ?  
Si O1 Ca 119.7(2) . . ?  
Mn O1 Ca 91.43(14) 5\_565 . ?  
Mn O1 Ca 103.56(13) 1\_545 . ?  
Si O1 O3 35.77(10) . . ?  
Mn O1 O3 89.33(12) 5\_565 . ?  
Mn O1 O3 116.46(18) 1\_545 . ?  
Ca O1 O3 139.95(19) . . ?  
Si O1 O3 35.60(11) . 6\_556 ?  
Mn O1 O3 142.93(17) 5\_565 6\_556 ?  
Mn O1 O3 87.77(14) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O1 O3 124.87(15) . 6\_556 ?  
O3 O1 O3 58.87(10) . 6\_556 ?  
Si O1 O3 86.11(16) . 7 ?  
Mn O1 O3 81.82(12) 5\_565 7 ?  
Mn O1 O3 150.32(16) 1\_545 7 ?  
Ca O1 O3 48.38(9) . 7 ?  
O3 O1 O3 92.27(15) . 7 ?  
O3 O1 O3 115.19(14) 6\_556 7 ?  
Si O1 O3 86.50(15) . 4 ?  
Mn O1 O3 113.35(14) 5\_565 4 ?  
Mn O1 O3 125.25(12) 1\_545 4 ?  
Ca O1 O3 33.25(7) . 4 ?  
O3 O1 O3 112.36(15) . 4 ?  
O3 O1 O3 97.32(13) 6\_556 4 ?  
O3 O1 O3 38.05(4) 7 4 ?  
Si O1 O3 59.73(12) . 1\_556 ?  
Mn O1 O3 171.12(16) 5\_565 1\_556 ?  
Mn O1 O3 81.07(10) 1\_545 1\_556 ?  
Ca O1 O3 93.86(10) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 91.19(12) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 34.03(8) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O1 O3 107.01(10) 7 1\_556 ?  
O3 O1 O3 74.57(7) 4 1\_556 ?  
Si O1 O3 165.01(19) . 5 ?  
Mn O1 O3 63.21(9) 5\_565 5 ?  
Mn O1 O3 43.76(9) 1\_545 5 ?  
Ca O1 O3 71.39(10) . 5 ?  
O3 O1 O3 141.37(13) . 5 ?  
O3 O1 O3 130.53(14) 6\_556 5 ?  
O3 O1 O3 108.71(12) 7 5 ?  
O3 O1 O3 103.69(10) 4 5 ?  
O3 O1 O3 111.90(8) 1\_556 5 ?  
Si O1 O3 124.09(18) . 3\_455 ?  
Mn O1 O3 70.62(10) 5\_565 3\_455 ?  
Mn O1 O3 111.30(12) 1\_545 3\_455 ?  
Ca O1 O3 22.52(6) . 3\_455 ?  
O3 O1 O3 128.12(16) . 3\_455 ?

O3 O1 O3 143.15(14) 6\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 39.20(9) 7 3\_455 ?  
O3 O1 O3 45.85(9) 4 3\_455 ?  
O3 O1 O3 115.57(10) 1\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 70.21(9) 5 3\_455 ?  
Si O1 O3 62.84(11) . 6 ?  
Mn O1 O3 61.70(9) 5\_565 6 ?  
Mn O1 O3 112.12(12) 1\_545 6 ?  
Ca O1 O3 134.52(12) . 6 ?  
O3 O1 O3 27.67(5) . 6 ?  
O3 O1 O3 84.71(10) 6\_556 6 ?  
O3 O1 O3 89.60(8) 7 6 ?  
O3 O1 O3 122.63(9) 4 6 ?  
O3 O1 O3 118.21(10) 1\_556 6 ?  
O3 O1 O3 117.93(9) 5 6 ?  
O3 O1 O3 114.00(9) 3\_455 6 ?  
Si O2 Mn 142.96(19) . 3\_545 ?  
Si O2 Ca 104.9(2) . 7\_556 ?  
Mn O2 Ca 93.88(13) 3\_545 7\_556 ?  
Si O2 O3 39.36(13) . 6\_556 ?  
Mn O2 O3 142.73(18) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O2 O3 65.54(12) 7\_556 6\_556 ?  
Si O2 O3 36.00(11) . . ?  
Mn O2 O3 107.12(14) 3\_545 . ?  
Ca O2 O3 114.30(17) 7\_556 . ?  
O3 O2 O3 60.49(10) 6\_556 . ?  
Si O2 O3 101.69(16) . 7 ?  
Mn O2 O3 79.45(13) 3\_545 7 ?  
Ca O2 O3 143.06(16) 7\_556 7 ?  
O3 O2 O3 135.71(14) 6\_556 7 ?  
O3 O2 O3 102.30(13) . 7 ?  
Si O2 O3 82.46(17) . 2\_655 ?  
Mn O2 O3 85.54(13) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O2 O3 50.61(9) 7\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 57.27(13) 6\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 69.49(14) . 2\_655 ?  
O3 O2 O3 159.97(14) 7 2\_655 ?  
Si O2 O3 116.91(17) . 4 ?  
Mn O2 O3 90.96(15) 3\_545 4 ?  
Ca O2 O3 98.06(11) 7\_556 4 ?  
O3 O2 O3 121.27(13) 6\_556 4 ?  
O3 O2 O3 141.02(12) . 4 ?  
O3 O2 O3 46.41(6) 7 4 ?  
O3 O2 O3 147.96(14) 2\_655 4 ?  
Si O2 O3 74.97(14) . 1\_556 ?  
Mn O2 O3 132.69(13) 3\_545 1\_556 ?  
Ca O2 O3 39.51(7) 7\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 41.39(10) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 101.88(16) . 1\_556 ?  
O3 O2 O3 129.43(10) 7 1\_556 ?  
O3 O2 O3 70.59(10) 2\_655 1\_556 ?  
O3 O2 O3 89.20(7) 4 1\_556 ?  
Si O2 O3 71.07(14) . 5\_655 ?  
Mn O2 O3 78.22(11) 3\_545 5\_655 ?

Ca O2 O3 87.77(11) 7\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 70.61(13) 6\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 41.39(11) . 5\_655 ?  
O3 O2 O3 125.31(11) 7 5\_655 ?  
O3 O2 O3 37.26(4) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O2 O3 168.08(12) 4 5\_655 ?  
O3 O2 O3 101.79(10) 1\_556 5\_655 ?  
Si O2 O3 86.47(16) . 5\_656 ?  
Mn O2 O3 102.50(12) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O2 O3 21.82(8) 7\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 48.14(11) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 92.52(12) . 5\_656 ?  
O3 O2 O3 163.84(13) 7 5\_656 ?  
O3 O2 O3 34.03(4) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O2 O3 117.45(10) 4 5\_656 ?  
O3 O2 O3 39.04(8) 1\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 70.43(8) 5\_655 5\_656 ?  
Si O2 O3 95.44(14) . 4\_554 ?  
Mn O2 O3 68.22(9) 3\_545 4\_554 ?  
Ca O2 O3 159.60(16) 7\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 134.77(12) 6\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 81.50(8) . 4\_554 ?  
O3 O2 O3 27.83(5) 7 4\_554 ?  
O3 O2 O3 132.96(10) 2\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 73.50(9) 4 4\_554 ?  
O3 O2 O3 154.06(9) 1\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 97.54(9) 5\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 166.55(10) 5\_656 4\_554 ?  
Si O3 Si 134.4(2) . 6 ?  
Si O3 O2 129.2(2) . 6 ?  
Si O3 O2 36.42(12) 6 6 ?  
Si O3 Ca 120.2(2) . 7 ?  
Si O3 Ca 98.20(12) 6 7 ?  
O2 O3 Ca 109.59(13) 6 7 ?  
Si O3 O3 155.84(17) . 6 ?  
Si O3 O3 37.76(11) 6 6 ?  
O2 O3 O3 61.29(17) 6 6 ?  
Ca O3 O3 60.51(10) 7 6 ?  
Si O3 O3 38.34(9) . 6\_556 ?  
Si O3 O3 124.5(3) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O3 98.4(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O3 134.26(15) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O3 159.7(3) 6 6\_556 ?  
Si O3 Ca 97.68(13) . 3\_545 ?  
Si O3 Ca 88.58(16) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Ca 52.16(10) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Ca 112.09(12) 7 3\_545 ?  
O3 O3 Ca 104.09(18) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Ca 59.41(13) 6\_556 3\_545 ?  
Si O3 O2 33.87(11) . . ?  
Si O3 O2 161.16(19) 6 . ?  
O2 O3 O2 156.08(17) 6 . ?  
Ca O3 O2 87.08(14) 7 . ?  
O3 O3 O2 142.1(2) 6 . ?

O3 O3 O2 58.22(14) 6\_556 . ?  
Ca O3 O2 106.27(12) 3\_545 . ?  
Si O3 O1 33.83(10) . . ?  
Si O3 O1 103.12(17) 6 . ?  
O2 O3 O1 114.99(18) 6 . ?  
Ca O3 O1 129.09(18) 7 . ?  
O3 O3 O1 124.32(10) 6 . ?  
O3 O3 O1 61.15(10) 6\_556 . ?  
Ca O3 O1 114.10(13) 3\_545 . ?  
O2 O3 O1 60.52(13) . . ?  
Si O3 O1 103.62(16) . 6 ?  
Si O3 O1 33.19(10) 6 6 ?  
O2 O3 O1 61.12(13) 6 6 ?  
Ca O3 O1 114.03(12) 7 6 ?  
O3 O3 O1 59.98(10) 6 6 ?  
O3 O3 O1 111.03(14) 6\_556 6 ?  
Ca O3 O1 107.42(15) 3\_545 6 ?  
O2 O3 O1 128.52(15) . 6 ?  
O1 O3 O1 70.57(14) . 6 ?  
Si O3 O3 124.62(19) . 5\_655 ?  
Si O3 O3 96.01(18) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O3 75.31(16) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O3 56.51(11) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O3 77.34(11) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O3 99.40(12) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 O3 55.57(12) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 O3 101.93(18) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 158.26(18) . 5\_655 ?  
O1 O3 O3 129.19(18) 6 5\_655 ?  
Si O3 O2 81.48(15) . 7 ?  
Si O3 O2 86.15(14) 6 7 ?  
O2 O3 O2 122.31(12) 6 7 ?  
Ca O3 O2 75.18(11) 7 7 ?  
O3 O3 O2 75.45(12) 6 7 ?  
O3 O3 O2 118.97(14) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O2 171.61(16) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O2 77.70(13) . 7 ?  
O1 O3 O2 61.01(12) . 7 ?  
O1 O3 O2 64.91(13) 6 7 ?  
O3 O3 O2 131.51(18) 5\_655 7 ?  
Si O3 O2 90.71(16) . 2\_655 ?  
Si O3 O2 134.72(15) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O2 122.73(13) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O2 42.68(7) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O2 100.08(11) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 91.78(11) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O2 88.59(11) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 O2 58.93(14) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 119.09(16) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 156.53(14) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 47.43(12) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O2 99.76(11) 7 2\_655 ?  
Si O3 Mn 71.87(11) . 5\_565 ?  
Si O3 Mn 71.91(11) 6 5\_565 ?

O2 O3 Mn 99.89(13) 6 5\_565 ?  
Ca O3 Mn 111.11(11) 7 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 85.28(5) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 98.29(4) 6\_556 5\_565 ?  
Ca O3 Mn 134.55(13) 3\_545 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 89.30(11) . 5\_565 ?  
O1 O3 Mn 39.08(9) . 5\_565 ?  
O1 O3 Mn 39.83(9) 6 5\_565 ?  
O3 O3 Mn 162.17(14) 5\_655 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 37.26(8) 7 5\_565 ?  
O2 O3 Mn 134.20(14) 2\_655 5\_565 ?  
Si O3 O3 77.87(11) . 2\_655 ?  
Si O3 O3 133.22(14) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O3 98.56(10) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O3 84.66(10) 7 2\_655 ?  
O3 O3 O3 124.76(9) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 55.24(9) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O3 48.72(8) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 O3 65.08(10) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 110.89(13) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 155.46(11) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 47.42(9) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O3 138.39(9) 7 2\_655 ?  
O2 O3 O3 45.43(9) 2\_655 2\_655 ?  
Mn O3 O3 149.73(12) 5\_565 2\_655 ?  
Si O3 O1 82.63(16) . 7 ?  
Si O3 O1 119.06(15) 6 7 ?  
O2 O3 O1 147.53(13) 6 7 ?  
Ca O3 O1 41.88(9) 7 7 ?  
O3 O3 O1 86.99(17) 6 7 ?  
O3 O3 O1 113.29(19) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O1 140.80(13) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O1 55.11(11) . 7 ?  
O1 O3 O1 87.73(15) . 7 ?  
O1 O3 O1 110.58(12) 6 7 ?  
O3 O3 O1 91.99(17) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O1 47.51(11) 7 7 ?  
O2 O3 O1 52.26(11) 2\_655 7 ?  
Mn O3 O1 83.06(10) 5\_565 7 ?  
O3 O3 O1 93.95(8) 2\_655 7 ?  
Si O3 O2 72.71(13) . 4\_545 ?  
Si O3 O2 68.30(13) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O2 58.73(13) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O2 166.41(13) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O2 106.05(17) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 58.14(13) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O2 67.47(10) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 O2 106.21(9) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 58.70(12) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 55.44(10) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 121.4(2) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O2 104.45(15) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O2 147.96(14) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O2 67.20(8) 5\_565 4\_545 ?

O3 O3 O2 103.27(9) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O2 145.86(13) 7 4\_545 ?  
Si O3 Si 98.00(13) . 2\_655 ?  
Si O3 Si 124.26(14) 6 2\_655 ?  
O2 O3 Si 99.92(12) 6 2\_655 ?  
Ca O3 Si 58.24(7) 7 2\_655 ?  
O3 O3 Si 101.19(5) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 82.30(5) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 Si 62.74(7) 3\_545 2\_655 ?  
O2 O3 Si 73.82(11) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 131.60(13) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 157.44(13) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 28.25(9) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 125.65(14) 7 2\_655 ?  
O2 O3 Si 26.22(7) 2\_655 2\_655 ?  
Mn O3 Si 159.88(14) 5\_565 2\_655 ?  
O3 O3 Si 27.35(6) 2\_655 2\_655 ?  
O1 O3 Si 78.33(10) 7 2\_655 ?  
O2 O3 Si 127.47(12) 4\_545 2\_655 ?  
Si O3 Si 74.50(14) . 7 ?  
Si O3 Si 107.77(13) 6 7 ?  
O2 O3 Si 143.99(12) 6 7 ?  
Ca O3 Si 61.92(8) 7 7 ?  
O3 O3 Si 86.97(15) 6 7 ?  
O3 O3 Si 112.00(17) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Si 162.98(13) 3\_545 7 ?  
O2 O3 Si 58.89(10) . 7 ?  
O1 O3 Si 67.65(12) . 7 ?  
O1 O3 Si 89.27(12) 6 7 ?  
O3 O3 Si 116.21(18) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Si 24.36(8) 7 7 ?  
O2 O3 Si 76.60(11) 2\_655 7 ?  
Mn O3 Si 58.16(6) 5\_565 7 ?  
O3 O3 Si 114.31(5) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Si 24.96(7) 7 7 ?  
O2 O3 Si 122.42(11) 4\_545 7 ?  
Si O3 Si 102.81(10) 2\_655 7 ?  
Si O3 Mn 65.28(13) . 3\_545 ?  
Si O3 Mn 151.20(15) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 155.66(13) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Mn 55.90(7) 7 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 114.63(17) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 84.14(15) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 Mn 111.65(10) 3\_545 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 31.46(9) . 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 87.55(13) . 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 140.39(14) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 80.39(15) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 75.67(10) 7 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 32.98(8) 2\_655 3\_545 ?  
Mn O3 Mn 103.71(10) 5\_565 3\_545 ?  
O3 O3 Mn 62.93(5) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 Mn 33.59(7) 7 3\_545 ?  
O2 O3 Mn 137.55(9) 4\_545 3\_545 ?

Si O3 Mn 56.23(6) 2\_655 3\_545 ?  
Si O3 Mn 51.41(5) 7 3\_545 ?  
Si O3 Si 136.88(17) . 1\_554 ?  
Si O3 Si 51.17(10) 6 1\_554 ?  
O2 O3 Si 81.06(10) 6 1\_554 ?  
Ca O3 Si 53.29(5) 7 1\_554 ?  
O3 O3 Si 21.14(10) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 171.12(6) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 Si 124.95(11) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 Si 122.84(15) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 110.95(12) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 60.88(9) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 89.06(11) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 Si 55.40(8) 7 1\_554 ?  
O2 O3 Si 95.97(9) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 Si 73.18(6) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 Si 133.64(12) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 Si 68.77(8) 7 1\_554 ?  
O2 O3 Si 114.98(10) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 Si 106.55(8) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 Si 65.91(6) 7 1\_554 ?  
Mn O3 Si 100.06(9) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 125.08(19) . 1\_554 ?  
Si O3 O2 74.36(12) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O2 101.38(14) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O2 33.92(6) 7 1\_554 ?  
O3 O3 O2 40.23(13) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 160.1(2) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O2 133.74(11) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O2 101.88(16) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 111.58(14) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 81.10(11) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 83.32(13) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O2 50.57(10) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O2 75.44(12) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O2 80.82(8) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 O2 118.57(11) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O2 46.79(9) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O2 136.52(10) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 91.81(9) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 O2 50.68(7) 7 1\_554 ?  
Mn O3 O2 76.83(9) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 23.31(6) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 Si 144.02(14) . 5\_655 ?  
Si O3 Si 78.01(11) 6 5\_655 ?  
O2 O3 Si 64.12(10) 6 5\_655 ?  
Ca O3 Si 53.35(6) 7 5\_655 ?  
O3 O3 Si 58.35(6) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 115.67(9) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 Si 62.77(6) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 Si 118.87(13) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 176.75(14) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 110.86(11) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 19.40(7) 5\_655 5\_655 ?



O2 O3 Si 122.20(10) 7 5\_655 ?  
O2 O3 Si 60.79(8) 2\_655 5\_655 ?  
Mn O3 Si 143.63(8) 5\_565 5\_655 ?  
O3 O3 Si 66.53(9) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 Si 94.39(9) 7 5\_655 ?  
O2 O3 Si 119.43(12) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 46.76(5) 2\_655 5\_655 ?  
Si O3 Si 115.03(8) 7 5\_655 ?  
Mn O3 Si 92.85(7) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 72.16(5) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 Si 71.64(7) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 Mn 49.27(10) . 1\_545 ?  
Si O3 Mn 85.56(12) 6 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 87.77(12) 6 1\_545 ?  
Ca O3 Mn 155.57(13) 7 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 118.67(9) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 55.20(5) 6\_556 1\_545 ?  
Ca O3 Mn 92.07(9) 3\_545 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 82.42(10) . 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 28.22(10) . 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 58.72(8) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 147.45(17) 5\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 81.03(9) 7 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 139.70(10) 2\_655 1\_545 ?  
Mn O3 Mn 47.05(4) 5\_565 1\_545 ?  
O3 O3 Mn 110.34(10) 2\_655 1\_545 ?  
O1 O3 Mn 115.68(10) 7 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 30.49(7) 4\_545 1\_545 ?  
Si O3 Mn 137.50(8) 2\_655 1\_545 ?  
Si O3 Mn 93.87(7) 7 1\_545 ?  
Mn O3 Mn 112.78(7) 3\_545 1\_545 ?  
Si O3 Mn 115.94(8) 1\_554 1\_545 ?  
O2 O3 Mn 127.82(9) 1\_554 1\_545 ?  
Si O3 Mn 149.90(11) 5\_655 1\_545 ?  
Si O3 Ca 40.76(9) . 7\_556 ?  
Si O3 Ca 161.52(17) 6 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 127.37(12) 6 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 97.16(10) 7 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 156.45(12) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 38.05(10) 6\_556 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 76.13(8) 3\_545 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 30.16(8) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 74.59(10) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 143.09(11) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 83.99(12) 5\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 107.74(11) 7 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 56.42(7) 2\_655 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 111.69(8) 5\_565 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 38.74(6) 2\_655 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 79.37(9) 7 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 95.85(8) 4\_545 7\_556 ?  
Si O3 Ca 57.42(5) 2\_655 7\_556 ?  
Si O3 Ca 88.55(8) 7 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 47.10(4) 3\_545 7\_556 ?

Si O3 Ca 147.12(11) 1\_554 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 123.82(12) 1\_554 7\_556 ?  
Si O3 Ca 103.35(7) 5\_655 7\_556 ?  
Mn O3 Ca 84.69(5) 1\_545 7\_556 ?  
Si O3 Si 38.49(11) . 6\_556 ?  
Si O3 Si 116.73(16) 6 6\_556 ?  
O2 O3 Si 94.02(11) 6 6\_556 ?  
Ca O3 Si 143.38(11) 7 6\_556 ?  
O3 O3 Si 153.8(2) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 9.31(7) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 Si 61.24(6) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 Si 63.56(9) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 55.64(9) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 101.72(11) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 106.34(13) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 115.71(10) 7 6\_556 ?  
O2 O3 Si 101.03(9) 2\_655 6\_556 ?  
Mn O3 Si 91.00(6) 5\_565 6\_556 ?  
O3 O3 Si 63.89(7) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 Si 118.36(10) 7 6\_556 ?  
O2 O3 Si 49.33(7) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 91.14(6) 2\_655 6\_556 ?  
Si O3 Si 112.94(8) 7 6\_556 ?  
Mn O3 Si 91.47(6) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 162.19(10) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 Si 163.57(11) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 Si 121.12(8) 5\_655 6\_556 ?  
Mn O3 Si 46.46(4) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 Si 46.55(4) 7\_556 6\_556 ?  
Si O3 O3 151.41(16) . 2\_654 ?  
Si O3 O3 73.83(11) 6 2\_654 ?  
O2 O3 O3 74.61(10) 6 2\_654 ?  
Ca O3 O3 35.59(9) 7 2\_654 ?  
O3 O3 O3 42.96(8) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 137.04(8) 6\_556 2\_654 ?  
Ca O3 O3 85.67(8) 3\_545 2\_654 ?  
O2 O3 O3 117.96(12) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 160.10(14) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 102.37(11) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 37.65(7) 5\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 99.09(9) 7 2\_654 ?  
O2 O3 O3 60.89(8) 2\_655 2\_654 ?  
Mn O3 O3 124.64(10) 5\_565 2\_654 ?  
O3 O3 O3 83.43(12) 2\_655 2\_654 ?  
O1 O3 O3 77.24(7) 7 2\_654 ?  
O2 O3 O3 133.33(8) 4\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 58.30(7) 2\_655 2\_654 ?  
Si O3 O3 94.19(5) 7 2\_654 ?  
Mn O3 O3 87.02(6) 3\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 51.46(6) 1\_554 2\_654 ?  
O2 O3 O3 48.52(7) 1\_554 2\_654 ?  
Si O3 O3 23.12(5) 5\_655 2\_654 ?  
Mn O3 O3 159.31(9) 1\_545 2\_654 ?  
Ca O3 O3 114.53(10) 7\_556 2\_654 ?

Si O3 O3 143.64(11) 6\_556 2\_654 ?  
Si O3 O1 89.29(14) . 4\_545 ?  
Si O3 O1 74.84(14) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O1 43.46(9) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O1 138.31(13) 7 4\_545 ?  
O3 O3 O1 104.7(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 54.96(15) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O1 28.96(7) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 O1 112.83(12) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 92.08(12) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 82.68(13) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 82.95(16) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 142.74(12) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O1 116.48(11) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O1 105.60(10) 5\_565 4\_545 ?  
O3 O3 O1 72.82(7) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O1 165.76(13) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O1 38.79(9) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 91.28(9) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 O1 159.70(10) 7 4\_545 ?  
Mn O3 O1 132.17(8) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 124.20(11) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 O1 144.60(12) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 O1 85.26(8) 5\_655 4\_545 ?  
Mn O3 O1 66.03(7) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O1 86.85(7) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 O1 51.42(6) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 O1 105.70(7) 2\_654 4\_545 ?  
Si O3 O2 152.98(16) . 5\_655 ?  
Si O3 O2 59.54(11) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O2 43.16(11) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O2 70.01(9) 7 5\_655 ?  
O3 O3 O2 50.96(10) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 115.59(16) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 O2 56.42(8) 3\_545 5\_655 ?  
O2 O3 O2 138.61(11) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 158.14(17) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 92.69(11) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 36.67(11) 5\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 125.31(11) 7 5\_655 ?  
O2 O3 O2 81.83(12) 2\_655 5\_655 ?  
Mn O3 O2 130.61(9) 5\_565 5\_655 ?  
O3 O3 O2 78.46(9) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 O2 111.88(10) 7 5\_655 ?  
O2 O3 O2 100.44(9) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 64.83(7) 2\_655 5\_655 ?  
Si O3 O2 127.87(9) 7 5\_655 ?  
Mn O3 O2 114.07(9) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 69.99(7) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 O2 78.21(10) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 O2 21.23(6) 5\_655 5\_655 ?  
Mn O3 O2 130.55(11) 1\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O2 117.19(9) 7\_556 5\_655 ?  
Si O3 O2 117.52(10) 6\_556 5\_655 ?

O3 O3 O2 34.78(7) 2\_654 5\_655 ?  
O1 O3 O2 71.35(9) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O1 120.90(15) . 1\_554 ?  
Si O3 O1 47.47(11) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O1 83.16(11) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O1 70.66(8) 7 1\_554 ?  
O3 O3 O1 34.94(8) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 150.36(6) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O1 134.32(12) 3\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O1 119.37(14) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 91.19(12) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 44.20(11) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 109.51(12) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 42.69(8) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O1 112.41(11) 2\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O1 52.66(6) 5\_565 1\_554 ?  
O3 O3 O1 154.15(12) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O1 72.99(10) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O1 99.62(10) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 126.82(9) 2\_655 1\_554 ?  
Si O3 O1 60.86(7) 7 1\_554 ?  
Mn O3 O1 106.57(10) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 20.82(5) 1\_554 1\_554 ?  
O2 O3 O1 37.02(7) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 O1 91.79(7) 5\_655 1\_554 ?  
Mn O3 O1 95.47(8) 1\_545 1\_554 ?  
Ca O3 O1 149.38(12) 7\_556 1\_554 ?  
Si O3 O1 141.93(9) 6\_556 1\_554 ?  
O3 O3 O1 72.10(8) 2\_654 1\_554 ?  
O1 O3 O1 121.25(12) 4\_545 1\_554 ?  
O2 O3 O1 85.78(8) 5\_655 1\_554 ?  
Si O3 Mn 137.72(17) . 7 ?  
Si O3 Mn 46.38(10) 6 7 ?  
O2 O3 Mn 16.65(8) 6 7 ?  
Ca O3 Mn 96.85(9) 7 7 ?  
O3 O3 Mn 59.55(14) 6 7 ?  
O3 O3 Mn 101.36(18) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Mn 45.95(6) 3\_545 7 ?  
O2 O3 Mn 151.24(12) . 7 ?  
O1 O3 Mn 130.84(15) . 7 ?  
O1 O3 Mn 75.64(11) 6 7 ?  
O3 O3 Mn 58.70(13) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Mn 130.90(10) 7 7 ?  
O2 O3 Mn 106.12(10) 2\_655 7 ?  
Mn O3 Mn 115.27(9) 5\_565 7 ?  
O3 O3 Mn 86.85(6) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Mn 138.16(9) 7 7 ?  
O2 O3 Mn 72.91(9) 4\_545 7 ?  
Si O3 Mn 84.07(7) 2\_655 7 ?  
Si O3 Mn 146.50(7) 7 7 ?  
Mn O3 Mn 139.09(8) 3\_545 7 ?  
Si O3 Mn 80.66(6) 1\_554 7 ?  
O2 O3 Mn 96.90(8) 1\_554 7 ?  
Si O3 Mn 47.97(4) 5\_655 7 ?

Mn O3 Mn 102.96(8) 1\_545 7 ?  
Ca O3 Mn 121.35(8) 7\_556 7 ?  
Si O3 Mn 99.48(8) 6\_556 7 ?  
O3 O3 Mn 61.26(4) 2\_654 7 ?  
O1 O3 Mn 48.44(6) 4\_545 7 ?  
O2 O3 Mn 27.60(6) 5\_655 7 ?  
O1 O3 Mn 88.55(7) 1\_554 7 ?  
Si O3 Si 82.32(13) . 4\_545 ?  
Si O3 Si 67.75(13) 6 4\_545 ?  
O2 O3 Si 46.94(9) 6 4\_545 ?  
Ca O3 Si 155.06(12) 7 4\_545 ?  
O3 O3 Si 103.85(19) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 56.89(14) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 Si 49.69(7) 3\_545 4\_545 ?  
O2 O3 Si 112.99(11) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 75.41(12) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 65.77(10) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 102.99(17) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 122.05(11) 7 4\_545 ?  
O2 O3 Si 135.67(11) 2\_655 4\_545 ?  
Mn O3 Si 84.86(7) 5\_565 4\_545 ?  
O3 O3 Si 90.50(6) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 163.04(11) 7 4\_545 ?  
O2 O3 Si 18.36(7) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 111.54(9) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 Si 140.76(9) 7 4\_545 ?  
Mn O3 Si 141.01(7) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 118.70(9) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 Si 142.01(10) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 Si 102.39(8) 5\_655 4\_545 ?  
Mn O3 Si 47.67(4) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 Si 94.17(6) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 Si 49.94(5) 6\_556 4\_545 ?  
O3 O3 Si 119.57(4) 2\_654 4\_545 ?  
O1 O3 Si 20.74(5) 4\_545 4\_545 ?  
O2 O3 Si 85.04(9) 5\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 108.56(9) 1\_554 4\_545 ?  
Mn O3 Si 58.38(5) 7 4\_545 ?  
Si O3 Ca 92.93(13) . 5 ?  
Si O3 Ca 42.21(10) 6 5 ?  
O2 O3 Ca 51.52(10) 6 5 ?  
Ca O3 Ca 137.48(9) 7 5 ?  
O3 O3 Ca 78.28(12) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 88.24(13) 6\_556 5 ?  
Ca O3 Ca 86.38(9) 3\_545 5 ?  
O2 O3 Ca 125.53(12) . 5 ?  
O1 O3 Ca 65.91(11) . 5 ?  
O1 O3 Ca 25.43(8) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 126.81(19) 5\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 85.33(10) 7 5 ?  
O2 O3 Ca 174.14(13) 2\_655 5 ?  
Mn O3 Ca 51.52(5) 5\_565 5 ?  
O3 O3 Ca 131.13(6) 2\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 132.83(10) 7 5 ?

O2 O3 Ca 30.60(6) 4\_545 5 ?  
Si O3 Ca 148.27(11) 2\_655 5 ?  
Si O3 Ca 108.81(8) 7 5 ?  
Mn O3 Ca 152.68(9) 3\_545 5 ?  
Si O3 Ca 84.49(6) 1\_554 5 ?  
O2 O3 Ca 106.03(8) 1\_554 5 ?  
Si O3 Ca 114.03(8) 5\_655 5 ?  
Mn O3 Ca 43.66(4) 1\_545 5 ?  
Ca O3 Ca 124.91(7) 7\_556 5 ?  
Si O3 Ca 79.14(6) 6\_556 5 ?  
O3 O3 Ca 115.65(7) 2\_654 5 ?  
O1 O3 Ca 59.03(7) 4\_545 5 ?  
O2 O3 Ca 92.88(8) 5\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 69.46(7) 1\_554 5 ?  
Mn O3 Ca 68.16(6) 7 5 ?  
Si O3 Ca 40.65(4) 4\_545 5 ?  
Si O3 O3 53.56(12) . 7 ?  
Si O3 O3 120.95(17) 6 7 ?  
O2 O3 O3 155.49(16) 6 7 ?  
Ca O3 O3 78.09(12) 7 7 ?  
O3 O3 O3 107.11(17) 6 7 ?  
O3 O3 O3 91.26(15) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O3 147.98(12) 3\_545 7 ?  
O2 O3 O3 42.34(10) . 7 ?  
O1 O3 O3 51.28(11) . 7 ?  
O1 O3 O3 94.39(14) 6 7 ?  
O3 O3 O3 125.4(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O3 35.36(8) 7 7 ?  
O2 O3 O3 79.11(13) 2\_655 7 ?  
Mn O3 O3 56.23(7) 5\_565 7 ?  
O3 O3 O3 105.41(8) 2\_655 7 ?  
O1 O3 O3 36.45(8) 7 7 ?  
O2 O3 O3 109.72(12) 4\_545 7 ?  
Si O3 O3 103.69(13) 2\_655 7 ?  
Si O3 O3 20.93(4) 7 7 ?  
Mn O3 O3 47.48(7) 3\_545 7 ?  
Si O3 O3 85.98(9) 1\_554 7 ?  
O2 O3 O3 71.58(10) 1\_554 7 ?  
Si O3 O3 130.79(12) 5\_655 7 ?  
Mn O3 O3 79.31(8) 1\_545 7 ?  
Ca O3 O3 72.42(8) 7\_556 7 ?  
Si O3 O3 92.02(8) 6\_556 7 ?  
O3 O3 O3 112.74(8) 2\_654 7 ?  
O1 O3 O3 141.12(11) 4\_545 7 ?  
O2 O3 O3 147.43(12) 5\_655 7 ?  
O1 O3 O3 77.52(9) 1\_554 7 ?  
Mn O3 O3 166.06(10) 7 7 ?  
Si O3 O3 126.66(10) 4\_545 7 ?  
Ca O3 O3 106.75(10) 5 7 ?  
Si O3 Mn 112.77(13) . 1\_544 ?  
Si O3 Mn 31.99(9) 6 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 66.78(10) 6 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 97.78(7) 7 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 47.12(4) 6 1\_544 ?

O3 O3 Mn 126.78(10) 6\_556 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 117.65(11) 3\_545 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 129.52(12) . 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 78.95(11) . 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 16.34(8) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 122.56(13) 5\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 55.80(8) 7 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 140.18(10) 2\_655 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 42.08(4) 5\_565 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 165.16(7) 2\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 97.61(9) 7 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 71.76(8) 4\_545 1\_544 ?  
Si O3 Mn 148.31(7) 2\_655 1\_544 ?  
Si O3 Mn 79.37(6) 7 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 130.22(9) 3\_545 1\_544 ?  
Si O3 Mn 44.86(4) 1\_554 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 64.77(6) 1\_554 1\_544 ?  
Si O3 Mn 103.17(6) 5\_655 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 72.78(5) 1\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 153.45(8) 7\_556 1\_544 ?  
Si O3 Mn 117.50(7) 6\_556 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 90.06(8) 2\_654 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 96.33(9) 4\_545 1\_544 ?  
O2 O3 Mn 88.58(7) 5\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Mn 27.97(5) 1\_554 1\_544 ?  
Mn O3 Mn 78.33(5) 7 1\_544 ?  
Si O3 Mn 81.12(6) 4\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Mn 41.49(3) 5 1\_544 ?  
O3 O3 Mn 89.40(9) 7 1\_544 ?  
Si O3 O1 70.57(12) . 5 ?  
Si O3 O1 64.64(11) 6 5 ?  
O2 O3 O1 81.26(12) 6 5 ?  
Ca O3 O1 135.58(11) 7 5 ?  
O3 O3 O1 92.45(7) 6 5 ?  
O3 O3 O1 82.80(7) 6\_556 5 ?  
Ca O3 O1 108.23(11) 3\_545 5 ?  
O2 O3 O1 99.03(12) . 5 ?  
O1 O3 O1 38.63(13) . 5 ?  
O1 O3 O1 33.21(10) 6 5 ?  
O3 O3 O1 156.5(2) 5\_655 5 ?  
O2 O3 O1 63.56(10) 7 5 ?  
O2 O3 O1 155.99(13) 2\_655 5 ?  
Mn O3 O1 26.32(6) 5\_565 5 ?  
O3 O3 O1 137.74(11) 2\_655 5 ?  
O1 O3 O1 108.71(12) 7 5 ?  
O2 O3 O1 40.99(8) 4\_545 5 ?  
Si O3 O1 165.07(9) 2\_655 5 ?  
Si O3 O1 83.77(8) 7 5 ?  
Mn O3 O1 123.00(9) 3\_545 5 ?  
Si O3 O1 88.36(7) 1\_554 5 ?  
O2 O3 O1 102.60(9) 1\_554 5 ?  
Si O3 O1 142.10(9) 5\_655 5 ?  
Mn O3 O1 27.63(4) 1\_545 5 ?  
Ca O3 O1 110.03(7) 7\_556 5 ?

Si O3 O1 73.93(6) 6\_556 5 ?  
O3 O3 O1 135.33(10) 2\_654 5 ?  
O1 O3 O1 79.29(8) 4\_545 5 ?  
O2 O3 O1 121.61(10) 5\_655 5 ?  
O1 O3 O1 68.10(8) 1\_554 5 ?  
Mn O3 O1 97.89(8) 7 5 ?  
Si O3 O1 58.55(6) 4\_545 5 ?  
Ca O3 O1 29.74(5) 5 5 ?  
O3 O3 O1 77.65(9) 7 5 ?  
Mn O3 O1 45.59(5) 1\_544 5 ?  
Si O3 O2 82.62(12) . 5\_656 ?  
Si O3 O2 107.19(16) 6 5\_656 ?  
O2 O3 O2 70.81(13) 6 5\_656 ?  
Ca O3 O2 110.84(10) 7 5\_656 ?  
O3 O3 O2 120.68(16) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 45.89(10) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 O2 18.81(6) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 O2 87.48(12) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 106.04(12) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 122.16(14) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 57.64(12) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 163.84(13) 7 5\_656 ?  
O2 O3 O2 77.57(12) 2\_655 5\_656 ?  
Mn O3 O2 137.68(9) 5\_565 5\_656 ?  
O3 O3 O2 33.30(6) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 127.18(11) 7 5\_656 ?  
O2 O3 O2 73.32(7) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 54.16(7) 2\_655 5\_656 ?  
Si O3 O2 144.98(10) 7 5\_656 ?  
Mn O3 O2 95.04(8) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 140.41(9) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 O2 140.96(8) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 O2 70.72(7) 5\_655 5\_656 ?  
Mn O3 O2 90.75(7) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 57.33(6) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 O2 50.41(5) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 O2 93.51(9) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 O2 39.55(8) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 O2 70.43(8) 5\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 152.98(11) 1\_554 5\_656 ?  
Mn O3 O2 64.43(7) 7 5\_656 ?  
Si O3 O2 58.15(6) 4\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 98.34(8) 5 5\_656 ?  
O3 O3 O2 129.50(11) 7 5\_656 ?  
Mn O3 O2 134.73(10) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 O2 113.35(9) 5 5\_656 ?  
Si O3 O1 117.12(15) . 3\_545 ?  
Si O3 O1 72.57(13) 6 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.28(10) 6 3\_545 ?  
Ca O3 O1 102.22(10) 7 3\_545 ?  
O3 O3 O1 84.31(15) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 78.78(15) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 O1 19.77(5) 3\_545 3\_545 ?  
O2 O3 O1 124.16(12) . 3\_545 ?



O1 O3 O1 128.12(16) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 97.76(11) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 48.81(13) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 158.08(12) 7 3\_545 ?  
O2 O3 O1 91.90(11) 2\_655 3\_545 ?  
Mn O3 O1 133.87(12) 5\_565 3\_545 ?  
O3 O3 O1 61.33(7) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 140.80(9) 7 3\_545 ?  
O2 O3 O1 72.89(10) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 66.13(7) 2\_655 3\_545 ?  
Si O3 O1 164.14(9) 7 3\_545 ?  
Mn O3 O1 121.45(9) 3\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 105.20(8) 1\_554 3\_545 ?  
O2 O3 O1 116.23(9) 1\_554 3\_545 ?  
Si O3 O1 49.15(6) 5\_655 3\_545 ?  
Mn O3 O1 101.93(9) 1\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 94.17(8) 7\_556 3\_545 ?  
Si O3 O1 79.65(7) 6\_556 3\_545 ?  
O3 O3 O1 70.46(6) 2\_654 3\_545 ?  
O1 O3 O1 36.15(9) 4\_545 3\_545 ?  
O2 O3 O1 38.02(6) 5\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 115.57(10) 1\_554 3\_545 ?  
Mn O3 O1 27.19(5) 7 3\_545 ?  
Si O3 O1 54.69(7) 4\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 82.36(8) 5 3\_545 ?  
O3 O3 O1 166.44(12) 7 3\_545 ?  
Mn O3 O1 103.92(9) 1\_544 3\_545 ?  
O1 O3 O1 109.79(9) 5 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.48(6) 5\_656 3\_545 ?  
Si O3 O1 35.07(12) . 6\_556 ?  
Si O3 O1 106.35(14) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O1 94.25(12) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O1 154.61(12) 7 6\_556 ?  
O3 O3 O1 143.27(14) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 28.01(6) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 O1 75.48(8) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 67.58(10) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 38.78(10) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 84.71(10) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 125.35(15) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 99.77(10) 7 6\_556 ?  
O2 O3 O1 116.53(10) 2\_655 6\_556 ?  
Mn O3 O1 71.67(7) 5\_565 6\_556 ?  
O3 O3 O1 83.24(10) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 117.00(11) 7 6\_556 ?  
O2 O3 O1 38.88(7) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 110.29(8) 2\_655 6\_556 ?  
Si O3 O1 103.47(8) 7 6\_556 ?  
Mn O3 O1 98.71(7) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 143.12(9) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 O1 150.32(11) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 O1 138.02(10) 5\_655 6\_556 ?  
Mn O3 O1 27.22(5) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 60.13(6) 7\_556 6\_556 ?

Si O3 O1 19.56(5) 6\_556 6\_556 ?  
O3 O3 O1 161.12(10) 2\_654 6\_556 ?  
O1 O3 O1 57.37(9) 4\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 128.60(11) 5\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 122.48(11) 1\_554 6\_556 ?  
Mn O3 O1 104.65(8) 7 6\_556 ?  
Si O3 O1 47.33(6) 4\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 65.00(6) 5 6\_556 ?  
O3 O3 O1 83.74(8) 7 6\_556 ?  
Mn O3 O1 99.62(8) 1\_544 6\_556 ?  
O1 O3 O1 54.84(8) 5 6\_556 ?  
O2 O3 O1 68.16(7) 5\_656 6\_556 ?  
O1 O3 O1 91.38(7) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Ca 32.17(9) . . ?  
Si O3 Ca 114.27(13) 6 . ?  
O2 O3 Ca 132.92(13) 6 . ?  
Ca O3 Ca 111.09(11) 7 . ?  
O3 O3 Ca 123.68(10) 6 . ?  
O3 O3 Ca 68.43(10) 6\_556 . ?  
Ca O3 Ca 126.81(8) 3\_545 . ?  
O2 O3 Ca 47.42(9) . . ?  
O1 O3 Ca 18.65(10) . . ?  
O1 O3 Ca 81.16(10) 6 . ?  
O3 O3 Ca 149.27(17) 5\_655 . ?  
O2 O3 Ca 50.56(7) 7 . ?  
O2 O3 Ca 103.24(11) 2\_655 . ?  
Mn O3 Ca 43.07(4) 5\_565 . ?  
O3 O3 Ca 107.77(8) 2\_655 . ?  
O1 O3 Ca 69.35(9) 7 . ?  
O2 O3 Ca 77.33(8) 4\_545 . ?  
Si O3 Ca 121.25(9) 2\_655 . ?  
Si O3 Ca 51.05(5) 7 . ?  
Mn O3 Ca 70.58(6) 3\_545 . ?  
Si O3 Ca 105.42(8) 1\_554 . ?  
O2 O3 Ca 99.24(9) 1\_554 . ?  
Si O3 Ca 162.80(10) 5\_655 . ?  
Mn O3 Ca 46.87(4) 1\_545 . ?  
Ca O3 Ca 69.06(5) 7\_556 . ?  
Si O3 Ca 65.60(4) 6\_556 . ?  
O3 O3 Ca 145.22(6) 2\_654 . ?  
O1 O3 Ca 109.06(8) 4\_545 . ?  
O2 O3 Ca 173.68(9) 5\_655 . ?  
O1 O3 Ca 88.76(7) 1\_554 . ?  
Mn O3 Ca 149.21(9) 7 . ?  
Si O3 Ca 93.71(6) 4\_545 . ?  
Ca O3 Ca 82.21(6) 5 . ?  
O3 O3 Ca 33.00(5) 7 . ?  
Mn O3 Ca 85.10(5) 1\_544 . ?  
O1 O3 Ca 53.02(6) 5 . ?  
O2 O3 Ca 114.11(7) 5\_656 . ?  
O1 O3 Ca 144.01(8) 3\_545 . ?  
O1 O3 Ca 52.64(6) 6\_556 . ?  
Si O3 Si 76.29(11) . 5\_656 ?  
Si O3 Si 124.49(16) 6 5\_656 ?

O2 O3 Si 88.24(10) 6 5\_656 ?  
Ca O3 Si 98.11(8) 7 5\_656 ?  
O3 O3 Si 127.80(10) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 46.25(4) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 36.40(5) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 72.07(10) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 106.38(10) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 140.95(14) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 53.21(9) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 149.36(12) 7 5\_656 ?  
O2 O3 Si 60.17(8) 2\_655 5\_656 ?  
Mn O3 Si 144.53(7) 5\_565 5\_656 ?  
O3 O3 Si 14.80(5) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 108.14(10) 7 5\_656 ?  
O2 O3 Si 88.86(9) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 39.90(4) 2\_655 5\_656 ?  
Si O3 Si 126.67(9) 7 5\_656 ?  
Mn O3 Si 75.99(5) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 142.27(7) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 Si 131.64(9) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 Si 70.62(5) 5\_655 5\_656 ?  
Mn O3 Si 99.52(6) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 42.54(4) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 Si 53.82(4) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O3 Si 90.83(9) 2\_654 5\_656 ?  
O1 O3 Si 58.31(6) 4\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 77.48(7) 5\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 162.39(8) 1\_554 5\_656 ?  
Mn O3 Si 79.17(6) 7 5\_656 ?  
Si O3 Si 75.70(5) 4\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 116.33(8) 5 5\_656 ?  
O3 O3 Si 114.25(10) 7 5\_656 ?  
Mn O3 Si 153.78(9) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 Si 125.75(8) 5 5\_656 ?  
O2 O3 Si 19.12(5) 5\_656 5\_656 ?  
O1 O3 Si 52.19(6) 3\_545 5\_656 ?  
O1 O3 Si 73.35(6) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 108.25(5) . 5\_656 ?  
Si O3 Ca 175.55(17) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 41.19(9) 6 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 47.44(8) 6 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 63.74(7) 7 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 22.79(9) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 140.97(19) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.11(8) 3\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 150.41(14) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 142.47(13) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 72.29(9) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 58.84(10) 5\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.07(8) 7 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 93.73(8) 2\_655 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 105.09(6) 5\_565 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 105.08(10) 2\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 100.36(8) 7 3\_544 ?

O2 O3 Ca 103.20(10) 4\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 85.88(6) 2\_655 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.87(6) 7 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 118.97(7) 3\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 42.90(4) 1\_554 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 56.66(7) 1\_554 3\_544 ?  
Si O3 Ca 39.49(3) 5\_655 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 126.28(8) 1\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 142.83(8) 7\_556 3\_544 ?  
Si O3 Ca 139.71(9) 6\_556 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 33.04(5) 2\_654 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 88.44(8) 4\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 28.30(5) 5\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 57.48(6) 1\_554 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 40.24(3) 7 3\_544 ?  
Si O3 Ca 94.25(7) 4\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.62(6) 5 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 127.73(10) 7 3\_544 ?  
Mn O3 Ca 63.72(4) 1\_544 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 105.23(7) 5 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.01(8) 5\_656 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 62.44(6) 3\_545 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 141.26(10) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 146.08(7) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 105.67(6) 5\_656 3\_544 ?  
Si O3 O1 110.69(17) . 8 ?  
Si O3 O1 106.98(13) 6 8 ?  
O2 O3 O1 118.85(11) 6 8 ?  
Ca O3 O1 9.53(6) 7 8 ?  
O3 O3 O1 69.22(13) 6 8 ?  
O3 O3 O1 126.94(15) 6\_556 8 ?  
Ca O3 O1 115.16(10) 3\_545 8 ?  
O2 O3 O1 77.58(12) . 8 ?  
O1 O3 O1 121.88(13) . 8 ?  
O1 O3 O1 119.50(13) 6 8 ?  
O3 O3 O1 60.31(13) 5\_655 8 ?  
O2 O3 O1 72.71(10) 7 8 ?  
O2 O3 O1 37.05(7) 2\_655 8 ?  
Mn O3 O1 109.78(10) 5\_565 8 ?  
O3 O3 O1 81.42(9) 2\_655 8 ?  
O1 O3 O1 34.15(9) 7 8 ?  
O2 O3 O1 174.85(11) 4\_545 8 ?  
Si O3 O1 56.59(7) 2\_655 8 ?  
Si O3 O1 56.30(6) 7 8 ?  
Mn O3 O1 46.51(5) 3\_545 8 ?  
Si O3 O1 59.88(6) 1\_554 8 ?  
O2 O3 O1 38.41(8) 1\_554 8 ?  
Si O3 O1 60.25(6) 5\_655 8 ?  
Mn O3 O1 149.74(10) 1\_545 8 ?  
Ca O3 O1 89.14(8) 7\_556 8 ?  
Si O3 O1 135.69(9) 6\_556 8 ?  
O3 O3 O1 44.43(5) 2\_654 8 ?  
O1 O3 O1 143.26(8) 4\_545 8 ?  
O2 O3 O1 78.26(8) 5\_655 8 ?

O1 O3 O1 75.36(7) 1\_554 8 ?  
Mn O3 O1 105.52(7) 7 8 ?  
Si O3 O1 162.59(9) 4\_545 8 ?  
Ca O3 O1 144.26(8) 5 8 ?  
O3 O3 O1 70.60(9) 7 8 ?  
Mn O3 O1 103.17(7) 1\_544 8 ?  
O1 O3 O1 135.69(9) 5 8 ?  
O2 O3 O1 110.63(9) 5\_656 8 ?  
O1 O3 O1 108.06(10) 3\_545 8 ?  
O1 O3 O1 145.15(11) 6\_556 8 ?  
Ca O3 O1 103.43(8) . 8 ?  
Si O3 O1 95.68(7) 5\_656 8 ?  
Ca O3 O1 73.26(6) 3\_544 8 ?  
Si O3 O2 133.91(15) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 8.93(10) 6 4\_544 ?  
O2 O3 O2 45.23(12) 6 4\_544 ?  
Ca O3 O2 93.33(8) 7 4\_544 ?  
O3 O3 O2 33.20(11) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 131.11(18) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 97.36(11) 3\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 154.33(13) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 100.83(12) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 30.34(8) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 99.61(14) 5\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 77.61(12) 7 4\_544 ?  
O2 O3 O2 132.96(10) 2\_655 4\_544 ?  
Mn O3 O2 66.60(6) 5\_565 4\_544 ?  
O3 O3 O2 140.55(9) 2\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.57(9) 7 4\_544 ?  
O2 O3 O2 73.50(9) 4\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 127.52(9) 2\_655 4\_544 ?  
Si O3 O2 98.88(8) 7 4\_544 ?  
Mn O3 O2 143.43(9) 3\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 43.63(6) 1\_554 4\_544 ?  
O2 O3 O2 66.94(5) 1\_554 4\_544 ?  
Si O3 O2 80.75(7) 5\_655 4\_544 ?  
Mn O3 O2 86.90(7) 1\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 169.15(10) 7\_556 4\_544 ?  
Si O3 O2 122.72(9) 6\_556 4\_544 ?  
O3 O3 O2 73.04(7) 2\_654 4\_544 ?  
O1 O3 O2 83.47(9) 4\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 64.07(5) 5\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 38.55(7) 1\_554 4\_544 ?  
Mn O3 O2 54.19(6) 7 4\_544 ?  
Si O3 O2 75.07(7) 4\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 45.10(5) 5 4\_544 ?  
O3 O3 O2 112.70(10) 7 4\_544 ?  
Mn O3 O2 25.06(5) 1\_544 4\_544 ?  
O1 O3 O2 63.34(7) 5 4\_544 ?  
O2 O3 O2 116.04(8) 5\_656 4\_544 ?  
O1 O3 O2 80.86(9) 3\_545 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.10(9) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 109.62(7) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 132.99(10) 5\_656 4\_544 ?

Ca O3 O2 41.96(5) 3\_544 4\_544 ?  
 O1 O3 O2 101.55(7) 8 4\_544 ?  
 Si O3 O2 4.94(10) . 7\_556 ?  
 Si O3 O2 132.91(14) 6 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 131.86(13) 6 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 118.31(12) 7 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 151.05(12) 6 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 43.16(12) 6\_556 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 102.55(8) 3\_545 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 33.50(12) . 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 30.69(9) . 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 101.11(11) 6 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 128.15(14) 5\_655 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 76.54(10) 7 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 91.67(8) 2\_655 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 67.88(6) 5\_565 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 81.94(9) 2\_655 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 79.43(10) 7 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 74.19(11) 4\_545 7\_556 ?  
 Si O3 O2 100.91(8) 2\_655 7\_556 ?  
 Si O3 O2 70.04(7) 7 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 64.47(6) 3\_545 7\_556 ?  
 Si O3 O2 131.94(10) 1\_554 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 120.71(10) 1\_554 7\_556 ?  
 Si O3 O2 147.47(9) 5\_655 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 48.94(5) 1\_545 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 44.17(5) 7\_556 7\_556 ?  
 Si O3 O2 42.91(5) 6\_556 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 151.43(8) 2\_654 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 93.20(8) 4\_545 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 157.89(12) 5\_655 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 116.13(9) 1\_554 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 141.61(9) 7 7\_556 ?  
 Si O3 O2 85.01(7) 4\_545 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 92.35(7) 5 7\_556 ?  
 O3 O3 O2 49.12(7) 7 7\_556 ?  
 Mn O3 O2 109.28(7) 1\_544 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 68.43(7) 5 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 87.56(7) 5\_656 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 121.92(9) 3\_545 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 37.71(7) 6\_556 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 27.38(4) . 7\_556 ?  
 Si O3 O2 80.95(6) 5\_656 7\_556 ?  
 Ca O3 O2 172.96(8) 3\_544 7\_556 ?  
 O1 O3 O2 108.87(9) 8 7\_556 ?  
 O2 O3 O2 131.44(10) 4\_544 7\_556 ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.455  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 29.91  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.455  
 \_refine\_diff\_density\_max 0.533  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.496  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.130