

data_camn Pressure = 4.34 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 9.8080(3)

_cell_length_b 8.9909(3)

_cell_length_c 5.2009(6)

_cell_angle_alpha 90.00

_cell_angle_beta 104.264(3)

_cell_angle_gamma 90.00

_cell_volume 444.49(6)

_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    3.694
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            484
_exptl_absorpt_coefficient_mu    4.612
_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            303
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0816
_diffn_reflns_limit_h_min       -12
_diffn_reflns_limit_h_max       10
_diffn_reflns_limit_k_min       0
_diffn_reflns_limit_k_max       9
_diffn_reflns_limit_l_min       0
_diffn_reflns_limit_l_max       7
_diffn_reflns_theta_min         3.11
_diffn_reflns_theta_max         29.93
_reflns_number_total            303
_reflns_number_gt               293
_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 F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor wR and goodness of fit S are based on F^2 , conventional R-factors R are based on F, with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-factors based on ALL data will be even larger.

;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type full
_refine_ls_weighting_scheme calc
_refine_ls_weighting_details
'calc w=1/[\s^2(Fo^2)+(0.0000P)^2+0.9490P] 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 0.0199(17)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns 303
_refine_ls_number_parameters 22
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0330
_refine_ls_R_factor_gt 0.0323
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0728
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0726
_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 0.30319(15) 0.2500 0.0095(3) Uiso 1 2 d S . .
Mn Mn 0.0000 0.90681(10) 0.2500 0.0079(3) Uiso 1 2 d S . .
Si Si 0.28781(12) 0.09308(13) 0.2343(2) 0.0065(3) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.1210(3) 0.0944(3) 0.1537(5) 0.0087(6) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.3624(3) 0.2459(4) 0.3340(5) 0.0113(7) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.3504(3) 0.0246(4) -0.0116(5) 0.0091(7) Uiso 1 1 d . . .

```

```
_geom_special_details
```

```
;
```

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

```
;
```

```
loop_
```

```

_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag
Ca O2 2.293(3) 8_455 ?
Ca O2 2.293(3) 7_556 ?
Ca O1 2.340(3) 2 ?
Ca O1 2.340(3) . ?
Ca O3 2.643(3) 7 ?
Ca O3 2.643(3) 8_456 ?
Ca O3 2.643(3) 4 ?
Ca O3 2.643(3) 3_455 ?
Ca Si 3.1055(12) 7_556 ?
Ca Si 3.1055(12) 8_455 ?
Ca Mn 3.2136(9) 5_565 ?
Ca Mn 3.2136(9) 5_566 ?
Mn O2 2.097(3) 3_455 ?
Mn O2 2.097(3) 4 ?
Mn O1 2.142(3) 5_565 ?
Mn O1 2.142(3) 6_566 ?
Mn O1 2.190(3) 2_565 ?
Mn O1 2.190(3) 1_565 ?
Mn Mn 3.0936(10) 5_576 ?
Mn Mn 3.0936(10) 5_575 ?
Mn Ca 3.2136(9) 5_565 ?
Mn Ca 3.2136(9) 5_566 ?
Mn O3 3.410(3) 6_566 ?
Mn O3 3.410(3) 5_565 ?
Si O2 1.583(3) . ?
Si O1 1.586(3) . ?
Si O3 1.666(3) . ?
Si O3 1.686(3) 6_556 ?
Si Ca 3.1055(12) 7_556 ?
Si Ca 3.3238(16) 3_545 ?

```

Si O3 3.540(3) 2_655 ?
Si O3 3.771(4) 7 ?
Si O3 3.867(3) 1_556 ?
Si O3 4.133(3) 5_655 ?
Si O3 4.209(3) 6 ?
O1 Mn 2.142(3) 5_565 ?
O1 Mn 2.190(3) 1_545 ?
O1 O3 2.673(4) . ?
O1 O3 2.703(4) 6_556 ?
O1 O3 3.530(4) 7 ?
O1 O3 4.272(4) 4 ?
O1 O3 4.415(4) 1_556 ?
O1 O3 4.623(4) 5 ?
O1 O3 4.650(5) 3_455 ?
O1 O3 4.692(4) 6 ?
O2 Mn 2.097(3) 3_545 ?
O2 Ca 2.293(3) 7_556 ?
O2 O3 2.574(4) 6_556 ?
O2 O3 2.664(4) . ?
O2 O3 3.114(4) 7 ?
O2 O3 3.386(4) 2_655 ?
O2 O3 3.526(4) 4 ?
O2 O3 3.969(4) 1_556 ?
O2 O3 4.358(4) 5_655 ?
O2 O3 4.624(4) 5_656 ?
O2 O3 4.953(4) 4_554 ?
O3 Si 1.686(3) 6 ?
O3 O2 2.574(4) 6 ?
O3 O3 2.6379(12) 6 ?
O3 O3 2.6379(12) 6_556 ?
O3 Ca 2.643(3) 7 ?
O3 Ca 2.643(3) 3_545 ?
O3 O1 2.703(4) 6 ?
O3 O3 2.942(5) 5_655 ?
O3 O2 3.114(4) 7 ?
O3 O2 3.386(4) 2_655 ?
O3 Mn 3.410(3) 5_565 ?
O3 O3 3.476(5) 2_655 ?
O3 O2 3.526(4) 4_545 ?
O3 O1 3.530(4) 7 ?
O3 Si 3.540(3) 2_655 ?
O3 Si 3.771(4) 7 ?
O3 Mn 3.851(3) 3_545 ?
O3 Si 3.867(3) 1_554 ?
O3 O2 3.969(4) 1_554 ?
O3 Mn 4.133(2) 1_545 ?
O3 Si 4.133(3) 5_655 ?
O3 Ca 4.168(3) 7_556 ?
O3 Si 4.209(3) 6_556 ?
O3 O1 4.272(4) 4_545 ?
O3 O3 4.284(5) 2_654 ?
O3 O2 4.358(4) 5_655 ?
O3 O1 4.415(4) 1_554 ?
O3 Mn 4.431(3) 7 ?

O3 Ca 4.465(3) 5 ?
O3 Si 4.465(3) 4_545 ?
O3 O3 4.520(7) 7 ?
O3 Mn 4.602(3) 1_544 ?
O3 O1 4.623(4) 5 ?
O3 O2 4.624(4) 5_656 ?
O3 O1 4.650(5) 3_545 ?
O3 O1 4.692(4) 6_556 ?
O3 Si 4.794(3) 5_656 ?
O3 Ca 4.863(3) 3_544 ?
O3 O1 4.908(4) 8 ?
O3 O2 4.953(4) 4_544 ?
O3 O2 4.965(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 157.80(17) 8_455 7_556 ?
O2 Ca O1 80.56(10) 8_455 2 ?
O2 Ca O1 81.67(11) 7_556 2 ?
O2 Ca O1 81.67(11) 8_455 . ?
O2 Ca O1 80.56(10) 7_556 . ?
O1 Ca O1 73.30(14) 2 . ?
O2 Ca O3 86.32(9) 8_455 7 ?
O2 Ca O3 106.84(9) 7_556 7 ?
O1 Ca O3 160.02(10) 2 7 ?
O1 Ca O3 90.00(9) . 7 ?
O2 Ca O3 106.84(9) 8_455 8_456 ?
O2 Ca O3 86.32(9) 7_556 8_456 ?
O1 Ca O3 90.00(9) 2 8_456 ?
O1 Ca O3 160.02(10) . 8_456 ?
O3 Ca O3 108.30(15) 7 8_456 ?
O2 Ca O3 138.92(11) 8_455 4 ?
O2 Ca O3 62.37(10) 7_556 4 ?
O1 Ca O3 137.79(9) 2 4 ?
O1 Ca O3 117.91(9) . 4 ?
O3 Ca O3 59.87(5) 7 4 ?
O3 Ca O3 67.63(10) 8_456 4 ?
O2 Ca O3 62.37(10) 8_455 3_455 ?
O2 Ca O3 138.92(11) 7_556 3_455 ?
O1 Ca O3 117.91(9) 2 3_455 ?
O1 Ca O3 137.79(9) . 3_455 ?
O3 Ca O3 67.63(10) 7 3_455 ?
O3 Ca O3 59.87(5) 8_456 3_455 ?
O3 Ca O3 82.24(13) 4 3_455 ?
O2 Ca Si 170.43(8) 8_455 7_556 ?
O2 Ca Si 29.49(8) 7_556 7_556 ?
O1 Ca Si 108.86(7) 2 7_556 ?
O1 Ca Si 99.13(7) . 7_556 ?

O3 Ca Si 84.14(6) 7 7_556 ?
O3 Ca Si 75.54(6) 8_456 7_556 ?
O3 Ca Si 32.88(7) 4 7_556 ?
O3 Ca Si 112.79(8) 3_455 7_556 ?
O2 Ca Si 29.49(8) 8_455 8_455 ?
O2 Ca Si 170.43(8) 7_556 8_455 ?
O1 Ca Si 99.13(7) 2 8_455 ?
O1 Ca Si 108.86(7) . 8_455 ?
O3 Ca Si 75.54(6) 7 8_455 ?
O3 Ca Si 84.14(6) 8_456 8_455 ?
O3 Ca Si 112.79(8) 4 8_455 ?
O3 Ca Si 32.88(7) 3_455 8_455 ?
Si Ca Si 145.05(7) 7_556 8_455 ?
O2 Ca Mn 40.60(8) 8_455 5_565 ?
O2 Ca Mn 122.21(8) 7_556 5_565 ?
O1 Ca Mn 78.64(7) 2 5_565 ?
O1 Ca Mn 41.78(7) . 5_565 ?
O3 Ca Mn 81.59(7) 7 5_565 ?
O3 Ca Mn 146.57(6) 8_456 5_565 ?
O3 Ca Mn 138.45(5) 4 5_565 ?
O3 Ca Mn 97.86(6) 3_455 5_565 ?
Si Ca Mn 137.88(3) 7_556 5_565 ?
Si Ca Mn 67.12(2) 8_455 5_565 ?
O2 Ca Mn 122.21(8) 8_455 5_566 ?
O2 Ca Mn 40.60(8) 7_556 5_566 ?
O1 Ca Mn 41.78(7) 2 5_566 ?
O1 Ca Mn 78.64(7) . 5_566 ?
O3 Ca Mn 146.57(6) 7 5_566 ?
O3 Ca Mn 81.59(7) 8_456 5_566 ?
O3 Ca Mn 97.86(6) 4 5_566 ?
O3 Ca Mn 138.45(5) 3_455 5_566 ?
Si Ca Mn 67.12(2) 7_556 5_566 ?
Si Ca Mn 137.88(3) 8_455 5_566 ?
Mn Ca Mn 108.04(4) 5_565 5_566 ?
O2 Mn O2 92.75(17) 3_455 4 ?
O2 Mn O1 88.35(11) 3_455 5_565 ?
O2 Mn O1 91.26(10) 4 5_565 ?
O2 Mn O1 91.26(10) 3_455 6_566 ?
O2 Mn O1 88.35(11) 4 6_566 ?
O1 Mn O1 179.44(16) 5_565 6_566 ?
O2 Mn O1 94.06(11) 3_455 2_565 ?
O2 Mn O1 172.70(12) 4 2_565 ?
O1 Mn O1 91.58(11) 5_565 2_565 ?
O1 Mn O1 88.85(11) 6_566 2_565 ?
O2 Mn O1 172.70(12) 3_455 1_565 ?
O2 Mn O1 94.06(11) 4 1_565 ?
O1 Mn O1 88.85(11) 5_565 1_565 ?
O1 Mn O1 91.58(11) 6_566 1_565 ?
O1 Mn O1 79.28(15) 2_565 1_565 ?
O2 Mn Mn 93.74(8) 3_455 5_576 ?
O2 Mn Mn 133.01(7) 4 5_576 ?
O1 Mn Mn 135.39(8) 5_565 5_576 ?
O1 Mn Mn 45.05(8) 6_566 5_576 ?
O1 Mn Mn 43.81(7) 2_565 5_576 ?

O1 Mn Mn 83.54(8) 1_565 5_576 ?
O2 Mn Mn 133.01(8) 3_455 5_575 ?
O2 Mn Mn 93.74(8) 4 5_575 ?
O1 Mn Mn 45.05(8) 5_565 5_575 ?
O1 Mn Mn 135.39(8) 6_566 5_575 ?
O1 Mn Mn 83.54(8) 2_565 5_575 ?
O1 Mn Mn 43.81(7) 1_565 5_575 ?
Mn Mn Mn 114.41(6) 5_576 5_575 ?
O2 Mn Ca 83.77(8) 3_455 5_565 ?
O2 Mn Ca 45.39(7) 4 5_565 ?
O1 Mn Ca 46.72(8) 5_565 5_565 ?
O1 Mn Ca 132.83(8) 6_566 5_565 ?
O1 Mn Ca 138.21(7) 2_565 5_565 ?
O1 Mn Ca 99.16(7) 1_565 5_565 ?
Mn Mn Ca 176.82(4) 5_576 5_565 ?
Mn Mn Ca 68.78(3) 5_575 5_565 ?
O2 Mn Ca 45.39(7) 3_455 5_566 ?
O2 Mn Ca 83.77(8) 4 5_566 ?
O1 Mn Ca 132.83(8) 5_565 5_566 ?
O1 Mn Ca 46.72(8) 6_566 5_566 ?
O1 Mn Ca 99.16(7) 2_565 5_566 ?
O1 Mn Ca 138.21(7) 1_565 5_566 ?
Mn Mn Ca 68.78(3) 5_576 5_566 ?
Mn Mn Ca 176.82(4) 5_575 5_566 ?
Ca Mn Ca 108.04(4) 5_565 5_566 ?
O2 Mn O3 133.77(10) 3_455 6_566 ?
O2 Mn O3 63.74(10) 4 6_566 ?
O1 Mn O3 128.51(8) 5_565 6_566 ?
O1 Mn O3 51.63(8) 6_566 6_566 ?
O1 Mn O3 109.38(10) 2_565 6_566 ?
O1 Mn O3 52.39(9) 1_565 6_566 ?
Mn Mn O3 78.76(5) 5_576 6_566 ?
Mn Mn O3 89.95(5) 5_575 6_566 ?
Ca Mn O3 101.51(5) 5_565 6_566 ?
Ca Mn O3 90.73(5) 5_566 6_566 ?
O2 Mn O3 63.74(10) 3_455 5_565 ?
O2 Mn O3 133.77(10) 4 5_565 ?
O1 Mn O3 51.63(8) 5_565 5_565 ?
O1 Mn O3 128.51(8) 6_566 5_565 ?
O1 Mn O3 52.39(9) 2_565 5_565 ?
O1 Mn O3 109.38(10) 1_565 5_565 ?
Mn Mn O3 89.95(5) 5_576 5_565 ?
Mn Mn O3 78.76(5) 5_575 5_565 ?
Ca Mn O3 90.73(5) 5_565 5_565 ?
Ca Mn O3 101.51(5) 5_566 5_565 ?
O3 Mn O3 159.17(12) 6_566 5_565 ?
O2 Si O1 116.34(16) . . ?
O2 Si O3 110.13(15) . . ?
O1 Si O3 110.53(14) . . ?
O2 Si O3 103.81(16) . 6_556 ?
O1 Si O3 111.36(15) . 6_556 ?
O3 Si O3 103.77(10) . 6_556 ?
O2 Si Ca 45.50(11) . 7_556 ?
O1 Si Ca 130.88(10) . 7_556 ?

O3 Si Ca 118.59(10) . 7_556 ?
O3 Si Ca 58.31(11) 6_556 7_556 ?
O2 Si Ca 115.90(12) . 3_545 ?
O1 Si Ca 127.68(12) . 3_545 ?
O3 Si Ca 51.87(11) . 3_545 ?
O3 Si Ca 51.97(10) 6_556 3_545 ?
Ca Si Ca 86.10(4) 7_556 3_545 ?
O2 Si Ca 80.20(11) . . ?
O1 Si Ca 36.59(11) . . ?
O3 Si Ca 133.28(11) . . ?
O3 Si Ca 118.15(10) 6_556 . ?
Ca Si Ca 101.26(3) 7_556 . ?
Ca Si Ca 161.74(5) 3_545 . ?
O2 Si O3 71.43(13) . 2_655 ?
O1 Si O3 167.03(12) . 2_655 ?
O3 Si O3 74.14(12) . 2_655 ?
O3 Si O3 55.74(12) 6_556 2_655 ?
Ca Si O3 46.30(5) 7_556 2_655 ?
Ca Si O3 45.16(6) 3_545 2_655 ?
Ca Si O3 146.95(6) . 2_655 ?
O2 Si O3 53.94(12) . 7 ?
O1 Si O3 69.08(12) . 7 ?
O3 Si O3 105.85(12) . 7 ?
O3 Si O3 147.85(12) 6_556 7 ?
Ca Si O3 96.04(5) 7_556 7 ?
Ca Si O3 153.87(5) 3_545 7 ?
Ca Si O3 42.81(4) . 7 ?
O3 Si O3 122.13(6) 2_655 7 ?
O2 Si O3 82.01(12) . 1_556 ?
O1 Si O3 99.49(11) . 1_556 ?
O3 Si O3 136.32(15) . 1_556 ?
O3 Si O3 33.80(14) 6_556 1_556 ?
Ca Si O3 42.84(5) 7_556 1_556 ?
Ca Si O3 84.75(5) 3_545 1_556 ?
Ca Si O3 89.38(5) . 1_556 ?
O3 Si O3 70.52(6) 2_655 1_556 ?
O3 Si O3 114.32(5) 7 1_556 ?
O2 Si O3 87.41(12) . 5_655 ?
O1 Si O3 145.99(11) . 5_655 ?
O3 Si O3 35.56(12) . 5_655 ?
O3 Si O3 83.53(11) 6_556 5_655 ?
Ca Si O3 83.11(5) 7_556 5_655 ?
Ca Si O3 39.68(5) 3_545 5_655 ?
Ca Si O3 156.99(6) . 5_655 ?
O3 Si O3 39.27(3) 2_655 5_655 ?
O3 Si O3 114.56(7) 7 5_655 ?
O3 Si O3 108.12(5) 1_556 5_655 ?
O2 Si O3 111.08(12) . 6 ?
O1 Si O3 97.66(10) . 6 ?
O3 Si O3 15.23(9) . 6 ?
O3 Si O3 117.20(14) 6_556 6 ?
Ca Si O3 130.74(5) 7_556 6 ?
Ca Si O3 65.98(4) 3_545 6 ?
Ca Si O3 118.05(5) . 6 ?

O3 Si O3 88.43(6) 2_655 6 ?
O3 Si O3 93.96(5) 7 6 ?
O3 Si O3 150.70(5) 1_556 6 ?
O3 Si O3 49.24(6) 5_655 6 ?
Si O1 Mn 123.05(14) . 5_565 ?
Si O1 Mn 121.05(16) . 1_545 ?
Mn O1 Mn 91.15(11) 5_565 1_545 ?
Si O1 Ca 119.58(15) . . ?
Mn O1 Ca 91.50(11) 5_565 . ?
Mn O1 Ca 103.71(11) 1_545 . ?
Si O1 O3 35.72(9) . . ?
Mn O1 O3 89.46(10) 5_565 . ?
Mn O1 O3 116.06(14) 1_545 . ?
Ca O1 O3 140.19(15) . . ?
Si O1 O3 35.52(10) . 6_556 ?
Mn O1 O3 143.27(14) 5_565 6_556 ?
Mn O1 O3 87.69(11) 1_545 6_556 ?
Ca O1 O3 124.40(13) . 6_556 ?
O3 O1 O3 58.76(8) . 6_556 ?
Si O1 O3 86.11(13) . 7 ?
Mn O1 O3 81.55(9) 5_565 7 ?
Mn O1 O3 150.55(13) 1_545 7 ?
Ca O1 O3 48.48(6) . 7 ?
O3 O1 O3 92.49(12) . 7 ?
O3 O1 O3 114.98(11) 6_556 7 ?
Si O1 O3 86.47(12) . 4 ?
Mn O1 O3 113.12(11) 5_565 4 ?
Mn O1 O3 125.37(10) 1_545 4 ?
Ca O1 O3 33.14(5) . 4 ?
O3 O1 O3 112.46(12) . 4 ?
O3 O1 O3 97.05(11) 6_556 4 ?
O3 O1 O3 38.04(3) 7 4 ?
Si O1 O3 59.76(10) . 1_556 ?
Mn O1 O3 171.18(13) 5_565 1_556 ?
Mn O1 O3 80.75(8) 1_545 1_556 ?
Ca O1 O3 93.77(8) . 1_556 ?
O3 O1 O3 91.00(10) . 1_556 ?
O3 O1 O3 33.78(7) 6_556 1_556 ?
O3 O1 O3 107.22(8) 7 1_556 ?
O3 O1 O3 74.76(6) 4 1_556 ?
Si O1 O3 165.09(15) . 5 ?
Mn O1 O3 63.36(8) 5_565 5 ?
Mn O1 O3 44.08(7) 1_545 5 ?
Ca O1 O3 71.35(8) . 5 ?
O3 O1 O3 141.43(10) . 5 ?
O3 O1 O3 130.69(12) 6_556 5 ?
O3 O1 O3 108.62(10) 7 5 ?
O3 O1 O3 103.60(8) 4 5 ?
O3 O1 O3 111.81(6) 1_556 5 ?
Si O1 O3 124.03(14) . 3_455 ?
Mn O1 O3 70.73(8) 5_565 3_455 ?
Mn O1 O3 111.48(10) 1_545 3_455 ?
Ca O1 O3 22.45(5) . 3_455 ?
O3 O1 O3 128.53(13) . 3_455 ?

O3 O1 O3 142.64(12) 6_556 3_455 ?
O3 O1 O3 39.23(7) 7 3_455 ?
O3 O1 O3 45.61(7) 4 3_455 ?
O3 O1 O3 115.42(9) 1_556 3_455 ?
O3 O1 O3 70.14(8) 5 3_455 ?
Si O1 O3 62.77(9) . 6 ?
Mn O1 O3 61.74(7) 5_565 6 ?
Mn O1 O3 112.24(10) 1_545 6 ?
Ca O1 O3 134.54(10) . 6 ?
O3 O1 O3 27.75(4) . 6 ?
O3 O1 O3 84.86(9) 6_556 6 ?
O3 O1 O3 89.40(7) 7 6 ?
O3 O1 O3 122.39(7) 4 6 ?
O3 O1 O3 118.17(8) 1_556 6 ?
O3 O1 O3 118.14(7) 5 6 ?
O3 O1 O3 114.14(7) 3_455 6 ?
Si O2 Mn 143.14(17) . 3_545 ?
Si O2 Ca 105.01(16) . 7_556 ?
Mn O2 Ca 94.01(11) 3_545 7_556 ?
Si O2 O3 39.52(11) . 6_556 ?
Mn O2 O3 142.99(15) 3_545 6_556 ?
Ca O2 O3 65.49(10) 7_556 6_556 ?
Si O2 O3 35.96(9) . . ?
Mn O2 O3 107.37(12) 3_545 . ?
Ca O2 O3 114.24(14) 7_556 . ?
O3 O2 O3 60.45(8) 6_556 . ?
Si O2 O3 101.80(14) . 7 ?
Mn O2 O3 79.11(10) 3_545 7 ?
Ca O2 O3 142.76(13) 7_556 7 ?
O3 O2 O3 135.90(12) 6_556 7 ?
O3 O2 O3 102.65(12) . 7 ?
Si O2 O3 82.27(14) . 2_655 ?
Mn O2 O3 85.82(11) 3_545 2_655 ?
Ca O2 O3 51.16(8) 7_556 2_655 ?
O3 O2 O3 57.22(11) 6_556 2_655 ?
O3 O2 O3 68.95(12) . 2_655 ?
O3 O2 O3 159.74(13) 7 2_655 ?
Si O2 O3 116.57(15) . 4 ?
Mn O2 O3 90.98(12) 3_545 4 ?
Ca O2 O3 97.96(10) 7_556 4 ?
O3 O2 O3 120.95(12) 6_556 4 ?
O3 O2 O3 140.96(10) . 4 ?
O3 O2 O3 46.30(5) 7 4 ?
O3 O2 O3 148.46(12) 2_655 4 ?
Si O2 O3 74.74(12) . 1_556 ?
Mn O2 O3 132.93(11) 3_545 1_556 ?
Ca O2 O3 39.59(6) 7_556 1_556 ?
O3 O2 O3 41.00(9) 6_556 1_556 ?
O3 O2 O3 101.45(14) . 1_556 ?
O3 O2 O3 129.52(9) 7 1_556 ?
O3 O2 O3 70.74(9) 2_655 1_556 ?
O3 O2 O3 89.26(7) 4 1_556 ?
Si O2 O3 71.32(12) . 5_655 ?
Mn O2 O3 78.14(9) 3_545 5_655 ?

Ca O2 O3 88.25(9) 7_556 5_655 ?
O3 O2 O3 71.11(11) 6_556 5_655 ?
O3 O2 O3 41.33(9) . 5_655 ?
O3 O2 O3 124.99(10) 7 5_655 ?
O3 O2 O3 37.22(4) 2_655 5_655 ?
O3 O2 O3 167.87(10) 4 5_655 ?
O3 O2 O3 102.05(8) 1_556 5_655 ?
Si O2 O3 86.47(13) . 5_656 ?
Mn O2 O3 102.65(10) 3_545 5_656 ?
Ca O2 O3 22.06(7) 7_556 5_656 ?
O3 O2 O3 48.01(9) 6_556 5_656 ?
O3 O2 O3 92.21(10) . 5_656 ?
O3 O2 O3 163.84(12) 7 5_656 ?
O3 O2 O3 34.24(4) 2_655 5_656 ?
O3 O2 O3 117.58(10) 4 5_656 ?
O3 O2 O3 39.11(7) 1_556 5_656 ?
O3 O2 O3 70.69(7) 5_655 5_656 ?
Si O2 O3 95.40(12) . 4_554 ?
Mn O2 O3 68.09(8) 3_545 4_554 ?
Ca O2 O3 159.55(13) 7_556 4_554 ?
O3 O2 O3 134.90(10) 6_556 4_554 ?
O3 O2 O3 81.72(7) . 4_554 ?
O3 O2 O3 27.87(5) 7 4_554 ?
O3 O2 O3 132.68(9) 2_655 4_554 ?
O3 O2 O3 73.51(8) 4 4_554 ?
O3 O2 O3 154.02(7) 1_556 4_554 ?
O3 O2 O3 97.17(8) 5_655 4_554 ?
O3 O2 O3 166.47(9) 5_656 4_554 ?
Si O3 Si 134.56(18) . 6 ?
Si O3 O2 129.97(17) . 6 ?
Si O3 O2 36.67(11) 6 6 ?
Si O3 O3 155.22(16) . 6 ?
Si O3 O3 37.84(10) 6 6 ?
O2 O3 O3 61.47(14) 6 6 ?
Si O3 O3 38.38(8) . 6_556 ?
Si O3 O3 125.4(2) 6 6_556 ?
O2 O3 O3 99.21(19) 6 6_556 ?
O3 O3 O3 160.7(3) 6 6_556 ?
Si O3 Ca 119.72(17) . 7 ?
Si O3 Ca 97.85(11) 6 7 ?
O2 O3 Ca 109.49(11) 6 7 ?
O3 O3 Ca 60.06(9) 6 7 ?
O3 O3 Ca 134.09(13) 6_556 7 ?
Si O3 Ca 98.39(12) . 3_545 ?
Si O3 Ca 88.81(14) 6 3_545 ?
O2 O3 Ca 52.14(9) 6 3_545 ?
O3 O3 Ca 104.24(16) 6 3_545 ?
O3 O3 Ca 60.06(11) 6_556 3_545 ?
Ca O3 Ca 112.37(10) 7 3_545 ?
Si O3 O2 33.91(9) . . ?
Si O3 O2 160.82(16) 6 . ?
O2 O3 O2 156.73(15) 6 . ?
O3 O3 O2 141.2(2) 6 . ?
O3 O3 O2 58.08(12) 6_556 . ?

Ca O3 O2 86.66(13) 7 . ?
Ca O3 O2 106.78(10) 3_545 . ?
Si O3 O1 33.76(8) . . ?
Si O3 O1 103.10(13) 6 . ?
O2 O3 O1 115.40(14) 6 . ?
O3 O3 O1 124.10(9) 6 . ?
O3 O3 O1 61.19(8) 6_556 . ?
Ca O3 O1 128.47(15) 7 . ?
Ca O3 O1 114.57(11) 3_545 . ?
O2 O3 O1 60.59(11) . . ?
Si O3 O1 103.60(13) . 6 ?
Si O3 O1 33.12(9) 6 6 ?
O2 O3 O1 61.30(11) 6 6 ?
O3 O3 O1 60.05(9) 6 6 ?
O3 O3 O1 111.49(13) 6_556 6 ?
Ca O3 O1 113.57(11) 7 6 ?
Ca O3 O1 107.57(13) 3_545 6 ?
O2 O3 O1 128.43(12) . 6 ?
O1 O3 O1 70.55(11) . 6 ?
Si O3 O3 125.21(17) . 5_655 ?
Si O3 O3 95.98(16) 6 5_655 ?
O2 O3 O3 75.43(14) 6 5_655 ?
O3 O3 O3 76.86(10) 6 5_655 ?
O3 O3 O3 100.18(11) 6_556 5_655 ?
Ca O3 O3 56.18(9) 7 5_655 ?
Ca O3 O3 56.18(10) 3_545 5_655 ?
O2 O3 O3 101.95(15) . 5_655 ?
O1 O3 O3 158.84(16) . 5_655 ?
O1 O3 O3 129.08(16) 6 5_655 ?
Si O3 O2 81.03(13) . 7 ?
Si O3 O2 85.85(12) 6 7 ?
O2 O3 O2 122.29(10) 6 7 ?
O3 O3 O2 75.12(11) 6 7 ?
O3 O3 O2 118.65(13) 6_556 7 ?
Ca O3 O2 74.65(9) 7 7 ?
Ca O3 O2 171.76(13) 3_545 7 ?
O2 O3 O2 77.35(12) . 7 ?
O1 O3 O2 60.82(10) . 7 ?
O1 O3 O2 64.82(10) 6 7 ?
O3 O3 O2 130.64(16) 5_655 7 ?
Si O3 O2 90.72(13) . 2_655 ?
Si O3 O2 134.43(13) 6 2_655 ?
O2 O3 O2 122.78(11) 6 2_655 ?
O3 O3 O2 99.52(10) 6 2_655 ?
O3 O3 O2 91.83(10) 6_556 2_655 ?
Ca O3 O2 42.52(6) 7 2_655 ?
Ca O3 O2 89.02(9) 3_545 2_655 ?
O2 O3 O2 58.78(12) . 2_655 ?
O1 O3 O2 118.96(14) . 2_655 ?
O1 O3 O2 155.88(13) 6 2_655 ?
O3 O3 O2 47.35(10) 5_655 2_655 ?
O2 O3 O2 99.19(9) 7 2_655 ?
Si O3 Mn 71.57(9) . 5_565 ?
Si O3 Mn 71.88(9) 6 5_565 ?

O2 O3 Mn 100.19(10) 6 5_565 ?
O3 O3 Mn 85.22(4) 6 5_565 ?
O3 O3 Mn 98.29(4) 6_556 5_565 ?
Ca O3 Mn 110.48(10) 7 5_565 ?
Ca O3 Mn 134.87(11) 3_545 5_565 ?
O2 O3 Mn 89.05(10) . 5_565 ?
O1 O3 Mn 38.91(7) . 5_565 ?
O1 O3 Mn 39.92(7) 6 5_565 ?
O3 O3 Mn 161.47(13) 5_655 5_565 ?
O2 O3 Mn 37.15(7) 7 5_565 ?
O2 O3 Mn 133.57(13) 2_655 5_565 ?
Si O3 O3 78.40(11) . 2_655 ?
Si O3 O3 133.42(13) 6 2_655 ?
O2 O3 O3 98.60(8) 6 2_655 ?
O3 O3 O3 124.50(8) 6 2_655 ?
O3 O3 O3 55.50(8) 6_556 2_655 ?
Ca O3 O3 84.71(8) 7 2_655 ?
Ca O3 O3 48.88(7) 3_545 2_655 ?
O2 O3 O3 65.39(8) . 2_655 ?
O1 O3 O3 111.33(12) . 2_655 ?
O1 O3 O3 155.84(10) 6 2_655 ?
O3 O3 O3 47.64(8) 5_655 2_655 ?
O2 O3 O3 138.25(8) 7 2_655 ?
O2 O3 O3 45.66(8) 2_655 2_655 ?
Mn O3 O3 149.96(11) 5_565 2_655 ?
Si O3 O2 73.02(11) . 4_545 ?
Si O3 O2 68.58(12) 6 4_545 ?
O2 O3 O2 59.05(12) 6 4_545 ?
O3 O3 O2 106.41(16) 6 4_545 ?
O3 O3 O2 58.58(12) 6_556 4_545 ?
Ca O3 O2 166.39(12) 7 4_545 ?
Ca O3 O2 67.62(9) 3_545 4_545 ?
O2 O3 O2 106.54(8) . 4_545 ?
O1 O3 O2 58.89(9) . 4_545 ?
O1 O3 O2 55.61(9) 6 4_545 ?
O3 O3 O2 122.08(18) 5_655 4_545 ?
O2 O3 O2 104.52(12) 7 4_545 ?
O2 O3 O2 148.46(12) 2_655 4_545 ?
Mn O3 O2 67.38(7) 5_565 4_545 ?
O3 O3 O2 103.59(8) 2_655 4_545 ?
Si O3 O1 82.28(14) . 7 ?
Si O3 O1 118.51(13) 6 7 ?
O2 O3 O1 147.11(11) 6 7 ?
O3 O3 O1 86.40(15) 6 7 ?
O3 O3 O1 112.88(17) 6_556 7 ?
Ca O3 O1 41.52(7) 7 7 ?
Ca O3 O1 140.89(11) 3_545 7 ?
O2 O3 O1 54.83(10) . 7 ?
O1 O3 O1 87.51(12) . 7 ?
O1 O3 O1 110.23(11) 6 7 ?
O3 O3 O1 91.40(14) 5_655 7 ?
O2 O3 O1 47.30(9) 7 7 ?
O2 O3 O1 51.91(9) 2_655 7 ?
Mn O3 O1 82.74(9) 5_565 7 ?

O3 O3 O1 93.92(7) 2_655 7 ?
O2 O3 O1 145.81(11) 4_545 7 ?
Si O3 Si 98.33(11) . 2_655 ?
Si O3 Si 124.26(12) 6 2_655 ?
O2 O3 Si 99.96(10) 6 2_655 ?
O3 O3 Si 100.79(4) 6 2_655 ?
O3 O3 Si 82.60(4) 6_556 2_655 ?
Ca O3 Si 58.16(5) 7 2_655 ?
Ca O3 Si 63.09(6) 3_545 2_655 ?
O2 O3 Si 73.87(9) . 2_655 ?
O1 O3 Si 131.84(11) . 2_655 ?
O1 O3 Si 157.35(11) 6 2_655 ?
O3 O3 Si 28.28(7) 5_655 2_655 ?
O2 O3 Si 125.15(11) 7 2_655 ?
O2 O3 Si 26.30(6) 2_655 2_655 ?
Mn O3 Si 159.41(12) 5_565 2_655 ?
O3 O3 Si 27.46(5) 2_655 2_655 ?
O2 O3 Si 127.97(10) 4_545 2_655 ?
O1 O3 Si 78.05(8) 7 2_655 ?
Si O3 Si 74.15(12) . 7 ?
Si O3 Si 107.31(12) 6 7 ?
O2 O3 Si 143.74(10) 6 7 ?
O3 O3 Si 86.42(14) 6 7 ?
O3 O3 Si 111.63(15) 6_556 7 ?
Ca O3 Si 61.38(7) 7 7 ?
Ca O3 Si 163.09(10) 3_545 7 ?
O2 O3 Si 58.62(9) . 7 ?
O1 O3 Si 67.53(10) . 7 ?
O1 O3 Si 89.07(10) 6 7 ?
O3 O3 Si 115.42(15) 5_655 7 ?
O2 O3 Si 24.26(6) 7 7 ?
O2 O3 Si 76.12(9) 2_655 7 ?
Mn O3 Si 57.98(5) 5_565 7 ?
O3 O3 Si 114.25(4) 2_655 7 ?
O2 O3 Si 122.49(9) 4_545 7 ?
O1 O3 Si 24.81(5) 7 7 ?
Si O3 Si 102.42(8) 2_655 7 ?
Si O3 Mn 65.15(11) . 3_545 ?
Si O3 Mn 150.49(14) 6 3_545 ?
O2 O3 Mn 155.63(11) 6 3_545 ?
O3 O3 Mn 113.93(15) 6 3_545 ?
O3 O3 Mn 83.93(13) 6_556 3_545 ?
Ca O3 Mn 55.65(6) 7 3_545 ?
Ca O3 Mn 112.05(8) 3_545 3_545 ?
O2 O3 Mn 31.31(8) . 3_545 ?
O1 O3 Mn 87.42(11) . 3_545 ?
O1 O3 Mn 139.91(12) 6 3_545 ?
O3 O3 Mn 80.23(12) 5_655 3_545 ?
O2 O3 Mn 75.26(9) 7 3_545 ?
O2 O3 Mn 32.89(6) 2_655 3_545 ?
Mn O3 Mn 103.27(8) 5_565 3_545 ?
O3 O3 Mn 63.17(4) 2_655 3_545 ?
O2 O3 Mn 137.75(9) 4_545 3_545 ?
O1 O3 Mn 33.38(6) 7 3_545 ?

Si O3 Mn 56.25(5) 2_655 3_545 ?
Si O3 Mn 51.10(5) 7 3_545 ?
Si O3 Si 136.32(15) . 1_554 ?
Si O3 Si 50.86(9) 6 1_554 ?
O2 O3 Si 80.90(9) 6 1_554 ?
O3 O3 Si 20.83(9) 6 1_554 ?
O3 O3 Si 171.15(4) 6_556 1_554 ?
Ca O3 Si 53.03(5) 7 1_554 ?
Ca O3 Si 124.83(9) 3_545 1_554 ?
O2 O3 Si 122.34(13) . 1_554 ?
O1 O3 Si 110.67(11) . 1_554 ?
O1 O3 Si 60.71(7) 6 1_554 ?
O3 O3 Si 88.44(10) 5_655 1_554 ?
O2 O3 Si 55.29(7) 7 1_554 ?
O2 O3 Si 95.54(8) 2_655 1_554 ?
Mn O3 Si 73.05(5) 5_565 1_554 ?
O3 O3 Si 133.33(10) 2_655 1_554 ?
O2 O3 Si 114.99(9) 4_545 1_554 ?
O1 O3 Si 68.54(7) 7 1_554 ?
Si O3 Si 106.15(6) 2_655 1_554 ?
Si O3 Si 65.68(5) 7 1_554 ?
Mn O3 Si 99.66(7) 3_545 1_554 ?
Si O3 O2 124.56(16) . 1_554 ?
Si O3 O2 74.00(11) 6 1_554 ?
O2 O3 O2 101.11(12) 6 1_554 ?
O3 O3 O2 39.79(12) 6 1_554 ?
O3 O3 O2 159.5(2) 6_556 1_554 ?
Ca O3 O2 33.57(5) 7 1_554 ?
Ca O3 O2 133.54(9) 3_545 1_554 ?
O2 O3 O2 101.45(14) . 1_554 ?
O1 O3 O2 111.30(12) . 1_554 ?
O1 O3 O2 80.90(9) 6 1_554 ?
O3 O3 O2 82.55(11) 5_655 1_554 ?
O2 O3 O2 50.48(9) 7 1_554 ?
O2 O3 O2 74.98(10) 2_655 1_554 ?
Mn O3 O2 80.66(7) 5_565 1_554 ?
O3 O3 O2 118.25(9) 2_655 1_554 ?
O2 O3 O2 136.49(8) 4_545 1_554 ?
O1 O3 O2 46.64(7) 7 1_554 ?
Si O3 O2 91.35(7) 2_655 1_554 ?
Si O3 O2 50.51(6) 7 1_554 ?
Mn O3 O2 76.49(8) 3_545 1_554 ?
Si O3 O2 23.26(5) 1_554 1_554 ?
Si O3 Mn 49.38(8) . 1_545 ?
Si O3 Mn 85.74(10) 6 1_545 ?
O2 O3 Mn 88.06(10) 6 1_545 ?
O3 O3 Mn 118.90(8) 6 1_545 ?
O3 O3 Mn 55.29(5) 6_556 1_545 ?
Ca O3 Mn 155.15(12) 7 1_545 ?
Ca O3 Mn 92.22(8) 3_545 1_545 ?
O2 O3 Mn 82.62(8) . 1_545 ?
O1 O3 Mn 28.42(7) . 1_545 ?
O1 O3 Mn 58.87(7) 6 1_545 ?
O3 O3 Mn 148.22(16) 5_655 1_545 ?

O2 O3 Mn 81.14(8) 7 1_545 ?
O2 O3 Mn 139.83(9) 2_655 1_545 ?
Mn O3 Mn 47.23(3) 5_565 1_545 ?
O3 O3 Mn 110.65(9) 2_655 1_545 ?
O2 O3 Mn 30.48(5) 4_545 1_545 ?
O1 O3 Mn 115.67(9) 7 1_545 ?
Si O3 Mn 137.89(7) 2_655 1_545 ?
Si O3 Mn 94.00(6) 7 1_545 ?
Mn O3 Mn 112.82(7) 3_545 1_545 ?
Si O3 Mn 115.95(6) 1_554 1_545 ?
O2 O3 Mn 127.84(8) 1_554 1_545 ?
Si O3 Si 144.44(12) . 5_655 ?
Si O3 Si 77.95(10) 6 5_655 ?
O2 O3 Si 64.02(8) 6 5_655 ?
O3 O3 Si 58.14(5) 6 5_655 ?
O3 O3 Si 116.22(8) 6_556 5_655 ?
Ca O3 Si 53.42(5) 7 5_655 ?
Ca O3 Si 62.94(6) 3_545 5_655 ?
O2 O3 Si 118.81(10) . 5_655 ?
O1 O3 Si 177.37(12) . 5_655 ?
O1 O3 Si 110.73(9) 6 5_655 ?
O3 O3 Si 19.23(7) 5_655 5_655 ?
O2 O3 Si 121.76(9) 7 5_655 ?
O2 O3 Si 60.84(6) 2_655 5_655 ?
Mn O3 Si 143.35(7) 5_565 5_655 ?
O3 O3 Si 66.52(7) 2_655 5_655 ?
O2 O3 Si 119.72(11) 4_545 5_655 ?
O1 O3 Si 94.10(7) 7 5_655 ?
Si O3 Si 46.75(4) 2_655 5_655 ?
Si O3 Si 114.56(7) 7 5_655 ?
Mn O3 Si 92.79(6) 3_545 5_655 ?
Si O3 Si 71.88(5) 1_554 5_655 ?
O2 O3 Si 71.28(6) 1_554 5_655 ?
Mn O3 Si 150.17(10) 1_545 5_655 ?
Si O3 Ca 40.86(8) . 7_556 ?
Si O3 Ca 162.32(16) 6 7_556 ?
O2 O3 Ca 127.96(11) 6 7_556 ?
O3 O3 Ca 156.01(11) 6 7_556 ?
O3 O3 Ca 37.92(9) 6_556 7_556 ?
Ca O3 Ca 97.01(8) 7 7_556 ?
Ca O3 Ca 76.69(6) 3_545 7_556 ?
O2 O3 Ca 30.11(7) . 7_556 ?
O1 O3 Ca 74.61(8) . 7_556 ?
O1 O3 Ca 143.26(9) 6 7_556 ?
O3 O3 Ca 84.43(10) 5_655 7_556 ?
O2 O3 Ca 107.34(10) 7 7_556 ?
O2 O3 Ca 56.50(6) 2_655 7_556 ?
Mn O3 Ca 111.46(7) 5_565 7_556 ?
O3 O3 Ca 39.15(5) 2_655 7_556 ?
O2 O3 Ca 96.18(7) 4_545 7_556 ?
O1 O3 Ca 79.11(8) 7 7_556 ?
Si O3 Ca 57.68(4) 2_655 7_556 ?
Si O3 Ca 88.23(7) 7 7_556 ?
Mn O3 Ca 47.05(4) 3_545 7_556 ?

Si O3 Ca 146.66(10) 1_554 7_556 ?
O2 O3 Ca 123.42(10) 1_554 7_556 ?
Mn O3 Ca 84.78(4) 1_545 7_556 ?
Si O3 Ca 103.64(6) 5_655 7_556 ?
Si O3 Si 38.81(9) . 6_556 ?
Si O3 Si 117.20(14) 6 6_556 ?
O2 O3 Si 94.49(10) 6 6_556 ?
O3 O3 Si 154.38(19) 6 6_556 ?
O3 O3 Si 9.55(7) 6_556 6_556 ?
Ca O3 Si 143.47(9) 7 6_556 ?
Ca O3 Si 61.63(5) 3_545 6_556 ?
O2 O3 Si 63.79(8) . 6_556 ?
O1 O3 Si 55.76(7) . 6_556 ?
O1 O3 Si 101.94(10) 6 6_556 ?
O3 O3 Si 107.16(12) 5_655 6_556 ?
O2 O3 Si 115.62(9) 7 6_556 ?
O2 O3 Si 101.35(8) 2_655 6_556 ?
Mn O3 Si 91.03(5) 5_565 6_556 ?
O3 O3 Si 64.24(7) 2_655 6_556 ?
O2 O3 Si 49.46(6) 4_545 6_556 ?
O1 O3 Si 118.30(9) 7 6_556 ?
Si O3 Si 91.57(6) 2_655 6_556 ?
Si O3 Si 112.92(7) 7 6_556 ?
Mn O3 Si 91.62(5) 3_545 6_556 ?
Si O3 Si 162.19(8) 1_554 6_556 ?
O2 O3 Si 163.37(10) 1_554 6_556 ?
Mn O3 Si 46.41(3) 1_545 6_556 ?
Si O3 Si 121.61(7) 5_655 6_556 ?
Ca O3 Si 46.75(3) 7_556 6_556 ?
Si O3 O1 89.84(12) . 4_545 ?
Si O3 O1 75.25(13) 6 4_545 ?
O2 O3 O1 43.69(9) 6 4_545 ?
O3 O3 O1 105.15(18) 6 4_545 ?
O3 O3 O1 55.55(14) 6_556 4_545 ?
Ca O3 O1 138.61(11) 7 4_545 ?
Ca O3 O1 28.95(6) 3_545 4_545 ?
O2 O3 O1 113.27(10) . 4_545 ?
O1 O3 O1 92.44(9) . 4_545 ?
O1 O3 O1 82.95(11) 6 4_545 ?
O3 O3 O1 83.56(14) 5_655 4_545 ?
O2 O3 O1 142.94(10) 7 4_545 ?
O2 O3 O1 116.88(10) 2_655 4_545 ?
Mn O3 O1 105.93(8) 5_565 4_545 ?
O3 O3 O1 72.95(6) 2_655 4_545 ?
O2 O3 O1 38.93(7) 4_545 4_545 ?
O1 O3 O1 165.88(11) 7 4_545 ?
Si O3 O1 91.61(8) 2_655 4_545 ?
Si O3 O1 159.95(8) 7 4_545 ?
Mn O3 O1 132.50(7) 3_545 4_545 ?
Si O3 O1 124.26(9) 1_554 4_545 ?
O2 O3 O1 144.57(10) 1_554 4_545 ?
Mn O3 O1 66.13(6) 1_545 4_545 ?
Si O3 O1 85.49(8) 5_655 4_545 ?
Ca O3 O1 87.27(6) 7_556 4_545 ?

Si O3 O1 51.66(5) 6_556 4_545 ?
Si O3 O3 151.47(13) . 2_654 ?
Si O3 O3 73.45(10) 6 2_654 ?
O2 O3 O3 74.26(8) 6 2_654 ?
O3 O3 O3 42.52(7) 6 2_654 ?
O3 O3 O3 137.48(7) 6_556 2_654 ?
Ca O3 O3 35.85(7) 7 2_654 ?
Ca O3 O3 85.71(7) 3_545 2_654 ?
O2 O3 O3 117.89(10) . 2_654 ?
O1 O3 O3 159.56(12) . 2_654 ?
O1 O3 O3 101.97(10) 6 2_654 ?
O3 O3 O3 37.30(6) 5_655 2_654 ?
O2 O3 O3 98.74(9) 7 2_654 ?
O2 O3 O3 61.00(7) 2_655 2_654 ?
Mn O3 O3 124.22(9) 5_565 2_654 ?
O3 O3 O3 83.46(10) 2_655 2_654 ?
O2 O3 O3 133.28(7) 4_545 2_654 ?
O1 O3 O3 77.14(6) 7 2_654 ?
Si O3 O3 58.31(6) 2_655 2_654 ?
Si O3 O3 93.89(4) 7 2_654 ?
Mn O3 O3 87.05(5) 3_545 2_654 ?
Si O3 O3 51.17(5) 1_554 2_654 ?
O2 O3 O3 48.26(6) 1_554 2_654 ?
Mn O3 O3 159.11(8) 1_545 2_654 ?
Si O3 O3 23.02(4) 5_655 2_654 ?
Ca O3 O3 114.77(8) 7_556 2_654 ?
Si O3 O3 144.07(9) 6_556 2_654 ?
O1 O3 O3 105.74(6) 4_545 2_654 ?
Si O3 O2 153.70(14) . 5_655 ?
Si O3 O2 59.53(10) 6 5_655 ?
O2 O3 O2 43.00(9) 6 5_655 ?
O3 O3 O2 50.95(9) 6 5_655 ?
O3 O3 O2 116.27(14) 6_556 5_655 ?
Ca O3 O2 70.12(8) 7 5_655 ?
Ca O3 O2 56.49(6) 3_545 5_655 ?
O2 O3 O2 138.67(9) . 5_655 ?
O1 O3 O2 158.38(13) . 5_655 ?
O1 O3 O2 92.61(10) 6 5_655 ?
O3 O3 O2 36.73(10) 5_655 5_655 ?
O2 O3 O2 124.99(10) 7 5_655 ?
O2 O3 O2 81.92(10) 2_655 5_655 ?
Mn O3 O2 130.55(8) 5_565 5_655 ?
O3 O3 O2 78.45(8) 2_655 5_655 ?
O2 O3 O2 100.63(8) 4_545 5_655 ?
O1 O3 O2 111.63(8) 7 5_655 ?
Si O3 O2 64.88(6) 2_655 5_655 ?
Si O3 O2 127.44(8) 7 5_655 ?
Mn O3 O2 114.06(7) 3_545 5_655 ?
Si O3 O2 69.79(6) 1_554 5_655 ?
O2 O3 O2 77.95(8) 1_554 5_655 ?
Mn O3 O2 130.71(9) 1_545 5_655 ?
Si O3 O2 21.27(5) 5_655 5_655 ?
Ca O3 O2 117.59(7) 7_556 5_655 ?
Si O3 O2 117.97(8) 6_556 5_655 ?

O1 O3 O2 71.51(8) 4_545 5_655 ?
O3 O3 O2 34.63(6) 2_654 5_655 ?
Si O3 O1 120.50(13) . 1_554 ?
Si O3 O1 47.12(10) 6 1_554 ?
O2 O3 O1 83.03(9) 6 1_554 ?
O3 O3 O1 34.73(7) 6 1_554 ?
O3 O3 O1 150.40(5) 6_556 1_554 ?
Ca O3 O1 70.29(7) 7 1_554 ?
Ca O3 O1 134.18(10) 3_545 1_554 ?
O2 O3 O1 118.98(12) . 1_554 ?
O1 O3 O1 91.00(10) . 1_554 ?
O1 O3 O1 44.04(9) 6 1_554 ?
O3 O3 O1 108.86(11) 5_655 1_554 ?
O2 O3 O1 42.68(7) 7 1_554 ?
O2 O3 O1 111.90(9) 2_655 1_554 ?
Mn O3 O1 52.62(5) 5_565 1_554 ?
O3 O3 O1 153.78(10) 2_655 1_554 ?
O2 O3 O1 99.64(8) 4_545 1_554 ?
O1 O3 O1 72.78(8) 7 1_554 ?
Si O3 O1 126.35(7) 2_655 1_554 ?
Si O3 O1 60.72(6) 7 1_554 ?
Mn O3 O1 106.16(8) 3_545 1_554 ?
Si O3 O1 20.75(4) 1_554 1_554 ?
O2 O3 O1 36.98(6) 1_554 1_554 ?
Mn O3 O1 95.54(6) 1_545 1_554 ?
Si O3 O1 91.46(6) 5_655 1_554 ?
Ca O3 O1 148.93(10) 7_556 1_554 ?
Si O3 O1 141.94(7) 6_556 1_554 ?
O1 O3 O1 121.33(9) 4_545 1_554 ?
O3 O3 O1 71.73(7) 2_654 1_554 ?
O2 O3 O1 85.53(7) 5_655 1_554 ?
Si O3 Mn 138.41(15) . 7 ?
Si O3 Mn 46.60(10) 6 7 ?
O2 O3 Mn 16.55(7) 6 7 ?
O3 O3 Mn 59.78(13) 6 7 ?
O3 O3 Mn 102.08(16) 6_556 7 ?
Ca O3 Mn 96.94(8) 7 7 ?
Ca O3 Mn 45.92(5) 3_545 7 ?
O2 O3 Mn 151.62(10) . 7 ?
O1 O3 Mn 131.17(12) . 7 ?
O1 O3 Mn 75.74(9) 6 7 ?
O3 O3 Mn 58.91(12) 5_655 7 ?
O2 O3 Mn 130.80(9) 7 7 ?
O2 O3 Mn 106.26(9) 2_655 7 ?
Mn O3 Mn 115.47(8) 5_565 7 ?
O3 O3 Mn 86.85(5) 2_655 7 ?
O2 O3 Mn 73.10(8) 4_545 7 ?
O1 O3 Mn 137.89(8) 7 7 ?
Si O3 Mn 84.16(6) 2_655 7 ?
Si O3 Mn 146.17(6) 7 7 ?
Mn O3 Mn 139.14(7) 3_545 7 ?
Si O3 Mn 80.57(5) 1_554 7 ?
O2 O3 Mn 96.71(7) 1_554 7 ?
Mn O3 Mn 103.14(7) 1_545 7 ?

Si O3 Mn 48.00(4) 5_655 7 ?
Ca O3 Mn 121.85(7) 7_556 7 ?
Si O3 Mn 99.86(7) 6_556 7 ?
O1 O3 Mn 48.58(5) 4_545 7 ?
O3 O3 Mn 61.09(3) 2_654 7 ?
O2 O3 Mn 27.58(4) 5_655 7 ?
O1 O3 Mn 88.44(6) 1_554 7 ?
Si O3 Ca 93.05(11) . 5 ?
Si O3 Ca 42.40(8) 6 5 ?
O2 O3 Ca 51.73(8) 6 5 ?
O3 O3 Ca 78.59(10) 6 5 ?
O3 O3 Ca 88.62(11) 6_556 5 ?
Ca O3 Ca 137.28(8) 7 5 ?
Ca O3 Ca 86.41(8) 3_545 5 ?
O2 O3 Ca 125.70(9) . 5 ?
O1 O3 Ca 65.98(8) . 5 ?
O1 O3 Ca 25.63(7) 6 5 ?
O3 O3 Ca 127.15(16) 5_655 5 ?
O2 O3 Ca 85.41(8) 7 5 ?
O2 O3 Ca 174.46(12) 2_655 5 ?
Mn O3 Ca 51.73(4) 5_565 5 ?
O3 O3 Ca 131.39(6) 2_655 5 ?
O2 O3 Ca 30.58(5) 4_545 5 ?
O1 O3 Ca 132.69(9) 7 5 ?
Si O3 Ca 148.61(10) 2_655 5 ?
Si O3 Ca 108.83(6) 7 5 ?
Mn O3 Ca 152.56(8) 3_545 5 ?
Si O3 Ca 84.52(5) 1_554 5 ?
O2 O3 Ca 106.03(7) 1_554 5 ?
Mn O3 Ca 43.68(3) 1_545 5 ?
Si O3 Ca 114.10(7) 5_655 5 ?
Ca O3 Ca 125.16(6) 7_556 5 ?
Si O3 Ca 79.22(5) 6_556 5 ?
O1 O3 Ca 59.12(6) 4_545 5 ?
O3 O3 Ca 115.43(6) 2_654 5 ?
O2 O3 Ca 92.92(7) 5_655 5 ?
O1 O3 Ca 69.50(5) 1_554 5 ?
Mn O3 Ca 68.26(5) 7 5 ?
Si O3 Si 82.80(11) . 4_545 ?
Si O3 Si 68.10(11) 6 4_545 ?
O2 O3 Si 47.18(8) 6 4_545 ?
O3 O3 Si 104.25(16) 6 4_545 ?
O3 O3 Si 57.45(13) 6_556 4_545 ?
Ca O3 Si 155.28(11) 7 4_545 ?
Ca O3 Si 49.71(6) 3_545 4_545 ?
O2 O3 Si 113.43(9) . 4_545 ?
O1 O3 Si 75.73(9) . 4_545 ?
O1 O3 Si 66.01(9) 6 4_545 ?
O3 O3 Si 103.60(15) 5_655 4_545 ?
O2 O3 Si 122.23(9) 7 4_545 ?
O2 O3 Si 136.12(10) 2_655 4_545 ?
Mn O3 Si 85.16(6) 5_565 4_545 ?
O3 O3 Si 90.70(5) 2_655 4_545 ?
O2 O3 Si 18.49(6) 4_545 4_545 ?

O1 O3 Si 163.16(9) 7 4_545 ?
Si O3 Si 111.91(8) 2_655 4_545 ?
Si O3 Si 140.96(7) 7 4_545 ?
Mn O3 Si 141.35(6) 3_545 4_545 ?
Si O3 Si 118.75(7) 1_554 4_545 ?
O2 O3 Si 142.00(9) 1_554 4_545 ?
Mn O3 Si 47.77(4) 1_545 4_545 ?
Si O3 Si 102.58(7) 5_655 4_545 ?
Ca O3 Si 94.57(5) 7_556 4_545 ?
Si O3 Si 50.14(4) 6_556 4_545 ?
O1 O3 Si 20.77(4) 4_545 4_545 ?
O3 O3 Si 119.52(4) 2_654 4_545 ?
O2 O3 Si 85.16(7) 5_655 4_545 ?
O1 O3 Si 108.62(7) 1_554 4_545 ?
Mn O3 Si 58.49(5) 7 4_545 ?
Ca O3 Si 40.70(3) 5 4_545 ?
Si O3 O3 53.37(10) . 7 ?
Si O3 O3 120.45(15) 6 7 ?
O2 O3 O3 155.44(13) 6 7 ?
O3 O3 O3 106.42(16) 6 7 ?
O3 O3 O3 91.07(14) 6_556 7 ?
Ca O3 O3 77.48(10) 7 7 ?
Ca O3 O3 148.43(11) 3_545 7 ?
O2 O3 O3 42.24(8) . 7 ?
O1 O3 O3 51.29(9) . 7 ?
O1 O3 O3 94.20(11) 6 7 ?
O3 O3 O3 124.80(19) 5_655 7 ?
O2 O3 O3 35.11(7) 7 7 ?
O2 O3 O3 78.73(11) 2_655 7 ?
Mn O3 O3 56.02(6) 5_565 7 ?
O3 O3 O3 105.58(7) 2_655 7 ?
O2 O3 O3 109.91(10) 4_545 7 ?
O1 O3 O3 36.22(7) 7 7 ?
Si O3 O3 103.46(10) 2_655 7 ?
Si O3 O3 20.77(4) 7 7 ?
Mn O3 O3 47.25(6) 3_545 7 ?
Si O3 O3 85.59(8) 1_554 7 ?
O2 O3 O3 71.25(9) 1_554 7 ?
Mn O3 O3 79.53(7) 1_545 7 ?
Si O3 O3 130.30(11) 5_655 7 ?
Ca O3 O3 72.27(7) 7_556 7 ?
Si O3 O3 92.16(7) 6_556 7 ?
O1 O3 O3 141.50(9) 4_545 7 ?
O3 O3 O3 112.36(7) 2_654 7 ?
O2 O3 O3 146.90(11) 5_655 7 ?
O1 O3 O3 77.24(8) 1_554 7 ?
Mn O3 O3 165.64(9) 7 7 ?
Ca O3 O3 106.79(8) 5 7 ?
Si O3 O3 127.00(8) 4_545 7 ?
Si O3 Mn 112.65(11) . 1_544 ?
Si O3 Mn 31.66(8) 6 1_544 ?
O2 O3 Mn 66.68(8) 6 1_544 ?
O3 O3 Mn 47.16(4) 6 1_544 ?
O3 O3 Mn 127.06(9) 6_556 1_544 ?

Ca O3 Mn 97.47(7) 7 1_544 ?
Ca O3 Mn 117.51(10) 3_545 1_544 ?
O2 O3 Mn 129.40(11) . 1_544 ?
O1 O3 Mn 78.91(8) . 1_544 ?
O1 O3 Mn 16.16(6) 6 1_544 ?
O3 O3 Mn 122.13(12) 5_655 1_544 ?
O2 O3 Mn 55.92(7) 7 1_544 ?
O2 O3 Mn 139.72(9) 2_655 1_544 ?
Mn O3 Mn 42.24(3) 5_565 1_544 ?
O3 O3 Mn 165.04(6) 2_655 1_544 ?
O2 O3 Mn 71.74(7) 4_545 1_544 ?
O1 O3 Mn 97.49(8) 7 1_544 ?
Si O3 Mn 147.94(6) 2_655 1_544 ?
Si O3 Mn 79.37(5) 7 1_544 ?
Mn O3 Mn 129.90(8) 3_545 1_544 ?
Si O3 Mn 44.84(3) 1_554 1_544 ?
O2 O3 Mn 64.76(6) 1_554 1_544 ?
Mn O3 Mn 72.86(4) 1_545 1_544 ?
Si O3 Mn 102.90(5) 5_655 1_544 ?
Ca O3 Mn 153.41(7) 7_556 1_544 ?
Si O3 Mn 117.57(6) 6_556 1_544 ?
O1 O3 Mn 96.35(7) 4_545 1_544 ?
O3 O3 Mn 89.66(7) 2_654 1_544 ?
O2 O3 Mn 88.34(6) 5_655 1_544 ?
O1 O3 Mn 28.01(4) 1_554 1_544 ?
Mn O3 Mn 78.21(5) 7 1_544 ?
Ca O3 Mn 41.48(3) 5 1_544 ?
Si O3 Mn 81.13(5) 4_545 1_544 ?
O3 O3 Mn 89.32(7) 7 1_544 ?
Si O3 O1 70.46(10) . 5 ?
Si O3 O1 64.73(9) 6 5 ?
O2 O3 O1 81.50(10) 6 5 ?
O3 O3 O1 92.66(6) 6 5 ?
O3 O3 O1 82.87(6) 6_556 5 ?
Ca O3 O1 135.19(9) 7 5 ?
Ca O3 O1 108.33(9) 3_545 5 ?
O2 O3 O1 99.03(9) . 5 ?
O1 O3 O1 38.57(10) . 5 ?
O1 O3 O1 33.36(8) 6 5 ?
O3 O3 O1 156.93(18) 5_655 5 ?
O2 O3 O1 63.66(8) 7 5 ?
O2 O3 O1 155.71(12) 2_655 5 ?
Mn O3 O1 26.54(4) 5_565 5 ?
O3 O3 O1 138.02(10) 2_655 5 ?
O2 O3 O1 40.94(7) 4_545 5 ?
O1 O3 O1 108.62(10) 7 5 ?
Si O3 O1 165.44(8) 2_655 5 ?
Si O3 O1 83.82(6) 7 5 ?
Mn O3 O1 122.82(8) 3_545 5 ?
Si O3 O1 88.41(6) 1_554 5 ?
O2 O3 O1 102.63(7) 1_554 5 ?
Mn O3 O1 27.59(4) 1_545 5 ?
Si O3 O1 142.15(8) 5_655 5 ?
Ca O3 O1 110.00(6) 7_556 5 ?

Si O3 O1 73.87(5) 6_556 5 ?
O1 O3 O1 79.40(7) 4_545 5 ?
O3 O3 O1 135.08(9) 2_654 5 ?
O2 O3 O1 121.67(8) 5_655 5 ?
O1 O3 O1 68.19(6) 1_554 5 ?
Mn O3 O1 98.03(7) 7 5 ?
Ca O3 O1 29.78(4) 5 5 ?
Si O3 O1 58.63(5) 4_545 5 ?
O3 O3 O1 77.69(7) 7 5 ?
Mn O3 O1 45.71(4) 1_544 5 ?
Si O3 O2 83.10(11) . 5_656 ?
Si O3 O2 107.63(14) 6 5_656 ?
O2 O3 O2 71.00(11) 6 5_656 ?
O3 O3 O2 120.99(14) 6 5_656 ?
O3 O3 O2 46.24(9) 6_556 5_656 ?
Ca O3 O2 111.17(8) 7 5_656 ?
Ca O3 O2 19.02(5) 3_545 5_656 ?
O2 O3 O2 87.79(10) . 5_656 ?
O1 O3 O2 106.35(10) . 5_656 ?
O1 O3 O2 122.47(12) 6 5_656 ?
O3 O3 O2 58.34(11) 5_655 5_656 ?
O2 O3 O2 163.84(12) 7 5_656 ?
O2 O3 O2 77.96(10) 2_655 5_656 ?
Mn O3 O2 137.95(8) 5_565 5_656 ?
O3 O3 O2 33.39(5) 2_655 5_656 ?
O2 O3 O2 73.46(6) 4_545 5_656 ?
O1 O3 O2 127.23(9) 7 5_656 ?
Si O3 O2 54.52(6) 2_655 5_656 ?
Si O3 O2 144.99(8) 7 5_656 ?
Mn O3 O2 95.31(6) 3_545 5_656 ?
Si O3 O2 140.47(8) 1_554 5_656 ?
O2 O3 O2 140.89(7) 1_554 5_656 ?
Mn O3 O2 90.81(6) 1_545 5_656 ?
Si O3 O2 71.03(6) 5_655 5_656 ?
Ca O3 O2 57.68(5) 7_556 5_656 ?
Si O3 O2 50.59(5) 6_556 5_656 ?
O1 O3 O2 39.58(6) 4_545 5_656 ?
O3 O3 O2 93.75(8) 2_654 5_656 ?
O2 O3 O2 70.69(7) 5_655 5_656 ?
O1 O3 O2 153.04(10) 1_554 5_656 ?
Mn O3 O2 64.60(6) 7 5_656 ?
Ca O3 O2 98.46(7) 5 5_656 ?
Si O3 O2 58.20(5) 4_545 5_656 ?
O3 O3 O2 129.72(9) 7 5_656 ?
Mn O3 O2 134.78(9) 1_544 5_656 ?
O1 O3 O2 113.43(8) 5 5_656 ?
Si O3 O1 117.82(13) . 3_545 ?
Si O3 O1 72.76(12) 6 3_545 ?
O2 O3 O1 37.19(8) 6 3_545 ?
O3 O3 O1 84.48(13) 6 3_545 ?
O3 O3 O1 79.44(14) 6_556 3_545 ?
Ca O3 O1 102.49(8) 7 3_545 ?
Ca O3 O1 19.76(5) 3_545 3_545 ?
O2 O3 O1 124.63(10) . 3_545 ?

O1 O3 O1 128.53(13) . 3_545 ?
O1 O3 O1 97.83(10) 6 3_545 ?
O3 O3 O1 49.37(12) 5_655 3_545 ?
O2 O3 O1 157.94(10) 7 3_545 ?
O2 O3 O1 92.28(9) 2_655 3_545 ?
Mn O3 O1 134.09(10) 5_565 3_545 ?
O3 O3 O1 61.44(5) 2_655 3_545 ?
O2 O3 O1 73.02(9) 4_545 3_545 ?
O1 O3 O1 140.77(7) 7 3_545 ?
Si O3 O1 66.43(6) 2_655 3_545 ?
Si O3 O1 163.87(7) 7 3_545 ?
Mn O3 O1 121.77(7) 3_545 3_545 ?
Si O3 O1 105.10(7) 1_554 3_545 ?
O2 O3 O1 116.05(8) 1_554 3_545 ?
Mn O3 O1 102.06(8) 1_545 3_545 ?
Si O3 O1 49.33(5) 5_655 3_545 ?
Ca O3 O1 94.71(7) 7_556 3_545 ?
Si O3 O1 80.02(7) 6_556 3_545 ?
O1 O3 O1 36.18(8) 4_545 3_545 ?
O3 O3 O1 70.47(5) 2_654 3_545 ?
O2 O3 O1 38.11(5) 5_655 3_545 ?
O1 O3 O1 115.42(9) 1_554 3_545 ?
Mn O3 O1 27.15(4) 7 3_545 ?
Ca O3 O1 82.37(7) 5 3_545 ?
Si O3 O1 54.70(6) 4_545 3_545 ?
O3 O3 O1 166.77(10) 7 3_545 ?
Mn O3 O1 103.74(7) 1_544 3_545 ?
O1 O3 O1 109.86(8) 5 3_545 ?
O2 O3 O1 37.69(5) 5_656 3_545 ?
Si O3 O1 35.34(9) . 6_556 ?
Si O3 O1 106.67(12) 6 6_556 ?
O2 O3 O1 94.69(11) 6 6_556 ?
O3 O3 O1 143.62(13) 6 6_556 ?
O3 O3 O1 28.15(5) 6_556 6_556 ?
Ca O3 O1 154.45(11) 7 6_556 ?
Ca O3 O1 75.82(7) 3_545 6_556 ?
O2 O3 O1 67.82(8) . 6_556 ?
O1 O3 O1 38.92(8) . 6_556 ?
O1 O3 O1 84.86(9) 6 6_556 ?
O3 O3 O1 126.19(13) 5_655 6_556 ?
O2 O3 O1 99.72(9) 7 6_556 ?
O2 O3 O1 116.80(9) 2_655 6_556 ?
Mn O3 O1 71.70(5) 5_565 6_556 ?
O3 O3 O1 83.61(9) 2_655 6_556 ?
O2 O3 O1 38.98(6) 4_545 6_556 ?
O1 O3 O1 116.94(9) 7 6_556 ?
Si O3 O1 110.73(7) 2_655 6_556 ?
Si O3 O1 103.48(7) 7 6_556 ?
Mn O3 O1 98.82(6) 3_545 6_556 ?
Si O3 O1 143.05(8) 1_554 6_556 ?
O2 O3 O1 150.18(9) 1_554 6_556 ?
Mn O3 O1 27.16(4) 1_545 6_556 ?
Si O3 O1 138.52(8) 5_655 6_556 ?
Ca O3 O1 60.30(5) 7_556 6_556 ?

Si O3 O1 19.58(4) 6_556 6_556 ?
O1 O3 O1 57.61(7) 4_545 6_556 ?
O3 O3 O1 161.50(8) 2_654 6_556 ?
O2 O3 O1 129.00(9) 5_655 6_556 ?
O1 O3 O1 122.47(8) 1_554 6_556 ?
Mn O3 O1 105.00(8) 7 6_556 ?
Ca O3 O1 65.05(5) 5 6_556 ?
Si O3 O1 47.53(5) 4_545 6_556 ?
O3 O3 O1 83.90(7) 7 6_556 ?
Mn O3 O1 99.66(6) 1_544 6_556 ?
O1 O3 O1 54.75(7) 5 6_556 ?
O2 O3 O1 68.34(6) 5_656 6_556 ?
O1 O3 O1 91.70(7) 3_545 6_556 ?
Si O3 Ca 31.81(8) . . ?
Si O3 Ca 114.16(11) 6 . ?
O2 O3 Ca 133.22(11) 6 . ?
O3 O3 Ca 123.41(9) 6 . ?
O3 O3 Ca 68.15(8) 6_556 . ?
Ca O3 Ca 110.65(10) 7 . ?
Ca O3 Ca 127.11(7) 3_545 . ?
O2 O3 Ca 47.39(7) . . ?
O1 O3 Ca 18.53(8) . . ?
O1 O3 Ca 81.14(8) 6 . ?
O3 O3 Ca 149.20(15) 5_655 . ?
O2 O3 Ca 50.53(7) 7 . ?
O2 O3 Ca 103.05(10) 2_655 . ?
Mn O3 Ca 42.96(3) 5_565 . ?
O3 O3 Ca 108.01(8) 2_655 . ?
O2 O3 Ca 77.39(7) 4_545 . ?
O1 O3 Ca 69.29(7) 7 . ?
Si O3 Ca 121.26(8) 2_655 . ?
Si O3 Ca 51.11(4) 7 . ?
Mn O3 Ca 70.46(5) 3_545 . ?
Si O3 Ca 105.27(7) 1_554 . ?
O2 O3 Ca 99.14(8) 1_554 . ?
Mn O3 Ca 46.93(3) 1_545 . ?
Si O3 Ca 162.55(9) 5_655 . ?
Ca O3 Ca 68.88(4) 7_556 . ?
Si O3 Ca 65.52(4) 6_556 . ?
O1 O3 Ca 109.25(6) 4_545 . ?
O3 O3 Ca 144.98(5) 2_654 . ?
O2 O3 Ca 173.50(8) 5_655 . ?
O1 O3 Ca 88.70(6) 1_554 . ?
Mn O3 Ca 149.41(7) 7 . ?
Ca O3 Ca 82.24(5) 5 . ?
Si O3 Ca 93.88(5) 4_545 . ?
O3 O3 Ca 33.17(4) 7 . ?
Mn O3 Ca 85.16(4) 1_544 . ?
O1 O3 Ca 52.99(5) 5 . ?
O2 O3 Ca 114.21(6) 5_656 . ?
O1 O3 Ca 144.28(7) 3_545 . ?
O1 O3 Ca 52.59(4) 6_556 . ?
Si O3 Si 76.73(10) . 5_656 ?
Si O3 Si 124.96(15) 6 5_656 ?

O2 O3 Si 88.46(9) 6 5_656 ?
O3 O3 Si 127.90(8) 6 5_656 ?
O3 O3 Si 46.49(4) 6_556 5_656 ?
Ca O3 Si 98.26(7) 7 5_656 ?
Ca O3 Si 36.67(4) 3_545 5_656 ?
O2 O3 Si 72.28(8) . 5_656 ?
O1 O3 Si 106.71(9) . 5_656 ?
O1 O3 Si 141.39(13) 6 5_656 ?
O3 O3 Si 53.73(9) 5_655 5_656 ?
O2 O3 Si 149.19(10) 7 5_656 ?
O2 O3 Si 60.42(6) 2_655 5_656 ?
Mn O3 Si 144.77(6) 5_565 5_656 ?
O3 O3 Si 14.80(5) 2_655 5_656 ?
O2 O3 Si 89.15(8) 4_545 5_656 ?
O1 O3 Si 108.07(8) 7 5_656 ?
Si O3 Si 40.13(3) 2_655 5_656 ?
Si O3 Si 126.55(8) 7 5_656 ?
Mn O3 Si 76.15(4) 3_545 5_656 ?
Si O3 Si 142.17(6) 1_554 5_656 ?
O2 O3 Si 131.41(7) 1_554 5_656 ?
Mn O3 Si 99.71(5) 1_545 5_656 ?
Si O3 Si 70.82(4) 5_655 5_656 ?
Ca O3 Si 42.83(3) 7_556 5_656 ?
Si O3 Si 54.07(4) 6_556 5_656 ?
O1 O3 Si 58.48(5) 4_545 5_656 ?
O3 O3 Si 91.01(7) 2_654 5_656 ?
O2 O3 Si 77.69(6) 5_655 5_656 ?
O1 O3 Si 162.27(7) 1_554 5_656 ?
Mn O3 Si 79.36(5) 7 5_656 ?
Ca O3 Si 116.59(7) 5 5_656 ?
Si O3 Si 75.90(5) 4_545 5_656 ?
O3 O3 Si 114.35(8) 7 5_656 ?
Mn O3 Si 153.93(9) 1_544 5_656 ?
O1 O3 Si 125.94(7) 5 5_656 ?
O2 O3 Si 19.24(4) 5_656 5_656 ?
O1 O3 Si 52.44(5) 3_545 5_656 ?
O1 O3 Si 73.61(5) 6_556 5_656 ?
Ca O3 Si 108.34(5) . 5_656 ?
Si O3 Ca 175.64(14) . 3_544 ?
Si O3 Ca 41.09(8) 6 3_544 ?
O2 O3 Ca 47.19(7) 6 3_544 ?
O3 O3 Ca 22.98(8) 6 3_544 ?
O3 O3 Ca 141.55(17) 6_556 3_544 ?
Ca O3 Ca 63.81(6) 7 3_544 ?
Ca O3 Ca 81.99(7) 3_545 3_544 ?
O2 O3 Ca 150.08(11) . 3_544 ?
O1 O3 Ca 142.34(10) . 3_544 ?
O1 O3 Ca 72.21(8) 6 3_544 ?
O3 O3 Ca 58.55(9) 5_655 3_544 ?
O2 O3 Ca 97.96(8) 7 3_544 ?
O2 O3 Ca 93.62(7) 2_655 3_544 ?
Mn O3 Ca 105.07(6) 5_565 3_544 ?
O3 O3 Ca 104.90(8) 2_655 3_544 ?
O2 O3 Ca 103.24(9) 4_545 3_544 ?

O1 O3 Ca 100.19(7) 7 3_544 ?
Si O3 Ca 85.73(5) 2_655 3_544 ?
Si O3 Ca 106.63(6) 7 3_544 ?
Mn O3 Ca 118.78(6) 3_545 3_544 ?
Si O3 Ca 42.89(3) 1_554 3_544 ?
O2 O3 Ca 56.59(6) 1_554 3_544 ?
Mn O3 Ca 126.31(7) 1_545 3_544 ?
Si O3 Ca 39.35(3) 5_655 3_544 ?
Ca O3 Ca 142.98(6) 7_556 3_544 ?
Si O3 Ca 139.98(9) 6_556 3_544 ?
O1 O3 Ca 88.46(7) 4_545 3_544 ?
O3 O3 Ca 32.82(4) 2_654 3_544 ?
O2 O3 Ca 28.12(4) 5_655 3_544 ?
O1 O3 Ca 57.40(5) 1_554 3_544 ?
Mn O3 Ca 40.12(3) 7 3_544 ?
Ca O3 Ca 82.63(5) 5 3_544 ?
Si O3 Ca 94.24(6) 4_545 3_544 ?
O3 O3 Ca 127.32(9) 7 3_544 ?
Mn O3 Ca 63.59(3) 1_544 3_544 ?
O1 O3 Ca 105.28(6) 5 3_544 ?
O2 O3 Ca 98.09(7) 5_656 3_544 ?
O1 O3 Ca 62.34(5) 3_545 3_544 ?
O1 O3 Ca 141.44(9) 6_556 3_544 ?
Ca O3 Ca 145.95(6) . 3_544 ?
Si O3 Ca 105.71(6) 5_656 3_544 ?
Si O3 O1 110.37(14) . 8 ?
Si O3 O1 106.50(11) 6 8 ?
O2 O3 O1 118.59(9) 6 8 ?
O3 O3 O1 68.66(12) 6 8 ?
O3 O3 O1 126.75(13) 6_556 8 ?
Ca O3 O1 9.38(5) 7 8 ?
Ca O3 O1 115.35(8) 3_545 8 ?
O2 O3 O1 77.30(11) . 8 ?
O1 O3 O1 121.46(11) . 8 ?
O1 O3 O1 119.00(11) 6 8 ?
O3 O3 O1 59.88(11) 5_655 8 ?
O2 O3 O1 72.29(8) 7 8 ?
O2 O3 O1 36.90(6) 2_655 8 ?
Mn O3 O1 109.24(8) 5_565 8 ?
O3 O3 O1 81.46(7) 2_655 8 ?
O2 O3 O1 174.55(9) 4_545 8 ?
O1 O3 O1 33.95(7) 7 8 ?
Si O3 O1 56.47(6) 2_655 8 ?
Si O3 O1 55.92(6) 7 8 ?
Mn O3 O1 46.38(5) 3_545 8 ?
Si O3 O1 59.58(5) 1_554 8 ?
O2 O3 O1 38.10(6) 1_554 8 ?
Mn O3 O1 149.52(9) 1_545 8 ?
Si O3 O1 60.17(5) 5_655 8 ?
Ca O3 O1 89.04(6) 7_556 8 ?
Si O3 O1 135.79(8) 6_556 8 ?
O1 O3 O1 143.44(7) 4_545 8 ?
O3 O3 O1 44.53(5) 2_654 8 ?
O2 O3 O1 78.21(7) 5_655 8 ?

O1 O3 O1 75.00(6) 1_554 8 ?
Mn O3 O1 105.45(5) 7 8 ?
Ca O3 O1 143.97(7) 5 8 ?
Si O3 O1 162.72(7) 4_545 8 ?
O3 O3 O1 70.17(8) 7 8 ?
Mn O3 O1 102.85(6) 1_544 8 ?
O1 O3 O1 135.37(8) 5 8 ?
O2 O3 O1 110.87(7) 5_656 8 ?
O1 O3 O1 108.20(8) 3_545 8 ?
O1 O3 O1 145.11(9) 6_556 8 ?
Ca O3 O1 103.17(7) . 8 ?
Si O3 O1 95.77(6) 5_656 8 ?
Ca O3 O1 73.19(5) 3_544 8 ?
Si O3 O2 133.88(12) . 4_544 ?
Si O3 O2 8.55(9) 6 4_544 ?
O2 O3 O2 45.10(10) 6 4_544 ?
O3 O3 O2 33.49(9) 6 4_544 ?
O3 O3 O2 131.61(16) 6_556 4_544 ?
Ca O3 O2 93.19(7) 7 4_544 ?
Ca O3 O2 97.22(10) 3_545 4_544 ?
O2 O3 O2 154.11(11) . 4_544 ?
O1 O3 O2 100.80(10) . 4_544 ?
O1 O3 O2 30.33(7) 6 4_544 ?
O3 O3 O2 99.37(12) 5_655 4_544 ?
O2 O3 O2 77.66(10) 7 4_544 ?
O2 O3 O2 132.68(9) 2_655 4_544 ?
Mn O3 O2 66.73(5) 5_565 4_544 ?
O3 O3 O2 140.42(8) 2_655 4_544 ?
O2 O3 O2 73.51(8) 4_545 4_544 ?
O1 O3 O2 110.40(8) 7 4_544 ?
Si O3 O2 127.33(7) 2_655 4_544 ?
Si O3 O2 98.79(7) 7 4_544 ?
Mn O3 O2 143.07(8) 3_545 4_544 ?
Si O3 O2 43.68(5) 1_554 4_544 ?
O2 O3 O2 66.94(4) 1_554 4_544 ?
Mn O3 O2 86.97(6) 1_545 4_544 ?
Si O3 O2 80.59(6) 5_655 4_544 ?
Ca O3 O2 169.52(9) 7_556 4_544 ?
Si O3 O2 122.86(8) 6_556 4_544 ?
O1 O3 O2 83.49(8) 4_545 4_544 ?
O3 O3 O2 72.72(6) 2_654 4_544 ?
O2 O3 O2 63.90(5) 5_655 4_544 ?
O1 O3 O2 38.59(6) 1_554 4_544 ?
Mn O3 O2 54.09(5) 7 4_544 ?
Ca O3 O2 45.13(4) 5 4_544 ?
Si O3 O2 75.07(6) 4_545 4_544 ?
O3 O3 O2 112.52(9) 7 4_544 ?
Mn O3 O2 25.01(4) 1_544 4_544 ?
O1 O3 O2 63.45(6) 5 4_544 ?
O2 O3 O2 116.10(7) 5_656 4_544 ?
O1 O3 O2 80.70(7) 3_545 4_544 ?
O1 O3 O2 110.18(7) 6_556 4_544 ?
Ca O3 O2 109.63(6) . 4_544 ?
Si O3 O2 133.10(9) 5_656 4_544 ?

Ca O3 O2 41.90(4) 3_544 4_544 ?
 O1 O3 O2 101.32(6) 8 4_544 ?
 Si O3 O2 4.69(8) . 7_556 ?
 Si O3 O2 132.98(12) 6 7_556 ?
 O2 O3 O2 132.37(11) 6 7_556 ?
 O3 O3 O2 150.64(11) 6 7_556 ?
 O3 O3 O2 42.95(10) 6_556 7_556 ?
 Ca O3 O2 117.95(10) 7 7_556 ?
 Ca O3 O2 103.00(7) 3_545 7_556 ?
 O2 O3 O2 33.63(10) . 7_556 ?
 O1 O3 O2 30.71(8) . 7_556 ?
 O1 O3 O2 101.13(9) 6 7_556 ?
 O3 O3 O2 128.55(12) 5_655 7_556 ?
 O2 O3 O2 76.35(8) 7 7_556 ?
 O2 O3 O2 91.68(8) 2_655 7_556 ?
 Mn O3 O2 67.73(6) 5_565 7_556 ?
 O3 O3 O2 82.30(8) 2_655 7_556 ?
 O2 O3 O2 74.34(9) 4_545 7_556 ?
 O1 O3 O2 79.31(8) 7 7_556 ?
 Si O3 O2 101.13(7) 2_655 7_556 ?
 Si O3 O2 69.96(6) 7 7_556 ?
 Mn O3 O2 64.45(5) 3_545 7_556 ?
 Si O3 O2 131.64(9) 1_554 7_556 ?
 O2 O3 O2 120.46(8) 1_554 7_556 ?
 Mn O3 O2 49.01(5) 1_545 7_556 ?
 Si O3 O2 147.71(7) 5_655 7_556 ?
 Ca O3 O2 44.14(4) 7_556 7_556 ?
 Si O3 O2 42.96(5) 6_556 7_556 ?
 O1 O3 O2 93.50(7) 4_545 7_556 ?
 O3 O3 O2 151.47(6) 2_654 7_556 ?
 O2 O3 O2 158.36(10) 5_655 7_556 ?
 O1 O3 O2 115.95(8) 1_554 7_556 ?
 Mn O3 O2 142.04(8) 7 7_556 ?
 Ca O3 O2 92.42(6) 5 7_556 ?
 Si O3 O2 85.28(5) 4_545 7_556 ?
 O3 O3 O2 49.21(6) 7 7_556 ?
 Mn O3 O2 109.27(6) 1_544 7_556 ?
 O1 O3 O2 68.36(6) 5 7_556 ?
 O2 O3 O2 87.79(6) 5_656 7_556 ?
 O1 O3 O2 122.35(8) 3_545 7_556 ?
 O1 O3 O2 37.78(6) 6_556 7_556 ?
 Ca O3 O2 27.25(4) . 7_556 ?
 Si O3 O2 81.17(5) 5_656 7_556 ?
 Ca O3 O2 172.80(7) 3_544 7_556 ?
 O1 O3 O2 108.69(7) 8 7_556 ?
 O2 O3 O2 131.45(8) 4_544 7_556 ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.463
 _diffn_reflns_theta_full 29.93
 _diffn_measured_fraction_theta_full 0.463
 _refine_diff_density_max 0.875
 _refine_diff_density_min -0.437
 _refine_diff_density_rms 0.135