

data\_cazn Pressure = 3.50 GPa

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'Ca O6 Si2 Zn'  
\_chemical\_formula\_weight 257.63

loop\_  
\_atom\_type\_symbol  
\_atom\_type\_description  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_real  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_imag  
\_atom\_type\_scatter\_source  
'Ca' 'Ca' 0.2262 0.3064  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Zn' 'Zn' 0.2839 1.4301  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Si' 'Si' 0.0817 0.0704  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'O' 'O' 0.0106 0.0060  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

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

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

\_cell\_length\_a 9.7164(3)  
\_cell\_length\_b 8.8653(2)  
\_cell\_length\_c 5.2011(7)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 105.266(3)  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 432.21(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    3.959
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            504
_exptl_absorpt_coefficient_mu    7.371
_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            241
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0597
_diffn_reflns_limit_h_min       -13
_diffn_reflns_limit_h_max       12
_diffn_reflns_limit_k_min       0
_diffn_reflns_limit_k_max       12
_diffn_reflns_limit_l_min       0
_diffn_reflns_limit_l_max       3
_diffn_reflns_theta_min         3.16
_diffn_reflns_theta_max         29.94
_reflns_number_total            241
_reflns_number_gt               232
_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)+(0.0189P)^2+0.0000P] 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       0.0016(15)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        241
_refine_ls_number_parameters     22
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0336
_refine_ls_R_factor_gt           0.0319
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0725
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0711
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.140
_refine_ls_restrained_S_all      1.140
_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 0.30216(16) 0.2500 0.0079(4) Uiso 1 2 d S . .
Zn Zn 0.0000 0.90695(9) 0.2500 0.0072(3) Uiso 1 2 d S . .
Si Si 0.28656(15) 0.09343(14) 0.2266(6) 0.0055(4) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.1162(4) 0.0900(4) 0.1421(15) 0.0057(8) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.3593(4) 0.2505(4) 0.3267(16) 0.0071(8) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.3518(4) 0.0221(4) -0.0100(17) 0.0071(9) 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 2.313(7) 8_455 ?
Ca O2 2.313(7) 7_556 ?
Ca O1 2.337(4) 2 ?
Ca O1 2.337(4) . ?
Ca O3 2.584(5) 4 ?
Ca O3 2.584(5) 3_455 ?
Ca O3 2.647(5) 7 ?
Ca O3 2.647(5) 8_456 ?
Ca Si 3.098(3) 7_556 ?
Ca Si 3.098(2) 8_455 ?
Ca Zn 3.1936(10) 5_565 ?
Ca Zn 3.1936(10) 5_566 ?
Zn O1 2.055(7) 5_565 ?
Zn O1 2.055(7) 6_566 ?
Zn O2 2.059(4) 4 ?
Zn O2 2.059(4) 3_455 ?
Zn O1 2.135(4) 1_565 ?
Zn O1 2.135(4) 2_565 ?
Zn Zn 3.0798(9) 5_576 ?
Zn Zn 3.0798(9) 5_575 ?
Zn Ca 3.1936(10) 5_565 ?
Zn Ca 3.1936(10) 5_566 ?
Zn O3 3.375(4) 6_566 ?
Zn O3 3.375(4) 5_565 ?
Si O2 1.586(4) . ?
Si O1 1.597(4) . ?
Si O3 1.651(8) . ?
Si O3 1.694(7) 6_556 ?
Si Ca 3.098(2) 7_556 ?
Si Ca 3.2940(17) 3_545 ?

```

Si O3 3.492(5) 2\_655 ?  
Si O3 3.728(4) 7 ?  
Si O3 3.904(9) 1\_556 ?  
Si O3 4.093(5) 5\_655 ?  
Si O3 4.172(9) 6 ?  
O1 Zn 2.055(7) 5\_565 ?  
O1 Zn 2.135(4) 1\_545 ?  
O1 O3 2.679(7) . ?  
O1 O3 2.705(8) 6\_556 ?  
O1 O3 3.537(5) 7 ?  
O1 O3 4.257(6) 4 ?  
O1 O3 4.442(12) 1\_556 ?  
O1 O3 4.527(5) 5 ?  
O1 O3 4.564(5) 3\_455 ?  
O1 O3 4.670(10) 6 ?  
O2 Zn 2.058(4) 3\_545 ?  
O2 Ca 2.313(7) 7\_556 ?  
O2 O3 2.569(6) 6\_556 ?  
O2 O3 2.666(8) . ?  
O2 O3 3.034(6) 7 ?  
O2 O3 3.388(5) 2\_655 ?  
O2 O3 3.456(7) 4 ?  
O2 O3 4.018(10) 1\_556 ?  
O2 O3 4.344(7) 5\_655 ?  
O2 O3 4.593(9) 5\_656 ?  
O2 O3 4.843(10) 4\_554 ?  
O3 Si 1.694(7) 6 ?  
O3 O2 2.569(6) 6 ?  
O3 Ca 2.584(5) 3\_545 ?  
O3 O3 2.6298(10) 6 ?  
O3 O3 2.6298(10) 6\_556 ?  
O3 Ca 2.647(5) 7 ?  
O3 O1 2.705(8) 6 ?  
O3 O3 2.882(7) 5\_655 ?  
O3 O2 3.034(6) 7 ?  
O3 Zn 3.375(4) 5\_565 ?  
O3 O2 3.388(5) 2\_655 ?  
O3 O3 3.393(13) 2\_655 ?  
O3 O2 3.456(7) 4\_545 ?  
O3 Si 3.492(5) 2\_655 ?  
O3 O1 3.537(5) 7 ?  
O3 Si 3.728(4) 7 ?  
O3 Zn 3.811(4) 3\_545 ?  
O3 Si 3.904(9) 1\_554 ?  
O3 O2 4.018(10) 1\_554 ?  
O3 Si 4.093(5) 5\_655 ?  
O3 Zn 4.121(5) 1\_545 ?  
O3 Ca 4.139(8) 7\_556 ?  
O3 Si 4.172(9) 6\_556 ?  
O3 O1 4.257(6) 4\_545 ?  
O3 O3 4.280(12) 2\_654 ?  
O3 O2 4.344(7) 5\_655 ?  
O3 Zn 4.364(4) 7 ?  
O3 Ca 4.388(4) 5 ?

O3 Si 4.412(5) 4\_545 ?  
O3 O1 4.442(12) 1\_554 ?  
O3 O3 4.512(7) 7 ?  
O3 O1 4.527(5) 5 ?  
O3 Zn 4.540(7) 1\_544 ?  
O3 O1 4.564(5) 3\_545 ?  
O3 O2 4.593(9) 5\_656 ?  
O3 O1 4.670(10) 6\_556 ?  
O3 Si 4.739(7) 5\_656 ?  
O3 O2 4.843(10) 4\_544 ?  
O3 Ca 4.859(7) 3\_544 ?  
O3 O1 4.896(7) 2\_554 ?  
O3 O1 4.915(7) 8 ?

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 156.70(18) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca O1 82.2(2) 8\_455 2 ?  
O2 Ca O1 79.09(18) 7\_556 2 ?  
O2 Ca O1 79.09(18) 8\_455 . ?  
O2 Ca O1 82.2(2) 7\_556 . ?  
O1 Ca O1 72.8(2) 2 . ?  
O2 Ca O3 139.35(19) 8\_455 4 ?  
O2 Ca O3 62.99(17) 7\_556 4 ?  
O1 Ca O3 136.0(2) 2 4 ?  
O1 Ca O3 119.66(12) . 4 ?  
O2 Ca O3 62.99(17) 8\_455 3\_455 ?  
O2 Ca O3 139.35(19) 7\_556 3\_455 ?  
O1 Ca O3 119.66(12) 2 3\_455 ?  
O1 Ca O3 136.0(2) . 3\_455 ?  
O3 Ca O3 82.1(2) 4 3\_455 ?  
O2 Ca O3 85.9(2) 8\_455 7 ?  
O2 Ca O3 108.01(18) 7\_556 7 ?  
O1 Ca O3 160.79(19) 2 7 ?  
O1 Ca O3 90.18(16) . 7 ?  
O3 Ca O3 60.34(6) 4 7 ?  
O3 Ca O3 66.84(14) 3\_455 7 ?  
O2 Ca O3 108.01(18) 8\_455 8\_456 ?  
O2 Ca O3 85.9(2) 7\_556 8\_456 ?  
O1 Ca O3 90.18(16) 2 8\_456 ?  
O1 Ca O3 160.79(19) . 8\_456 ?  
O3 Ca O3 66.84(14) 4 8\_456 ?  
O3 Ca O3 60.34(6) 3\_455 8\_456 ?  
O3 Ca O3 107.9(2) 7 8\_456 ?  
O2 Ca Si 171.13(13) 8\_455 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.84(9) 7\_556 7\_556 ?  
O1 Ca Si 106.47(18) 2 7\_556 ?  
O1 Ca Si 101.39(15) . 7\_556 ?

O3 Ca Si 33.15(16) 4 7\_556 ?  
O3 Ca Si 112.73(15) 3\_455 7\_556 ?  
O3 Ca Si 85.24(17) 7 7\_556 ?  
O3 Ca Si 74.41(15) 8\_456 7\_556 ?  
O2 Ca Si 29.84(9) 8\_455 8\_455 ?  
O2 Ca Si 171.13(13) 7\_556 8\_455 ?  
O1 Ca Si 101.39(15) 2 8\_455 ?  
O1 Ca Si 106.47(18) . 8\_455 ?  
O3 Ca Si 112.73(15) 4 8\_455 ?  
O3 Ca Si 33.15(15) 3\_455 8\_455 ?  
O3 Ca Si 74.41(14) 7 8\_455 ?  
O3 Ca Si 85.24(17) 8\_456 8\_455 ?  
Si Ca Si 145.23(7) 7\_556 8\_455 ?  
O2 Ca Zn 40.03(10) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Zn 122.09(12) 7\_556 5\_565 ?  
O1 Ca Zn 80.33(18) 2 5\_565 ?  
O1 Ca Zn 39.98(17) . 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 138.12(14) 4 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 97.54(17) 3\_455 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 80.86(14) 7 5\_565 ?  
O3 Ca Zn 147.38(14) 8\_456 5\_565 ?  
Si Ca Zn 138.21(4) 7\_556 5\_565 ?  
Si Ca Zn 66.51(4) 8\_455 5\_565 ?  
O2 Ca Zn 122.09(12) 8\_455 5\_566 ?  
O2 Ca Zn 40.03(10) 7\_556 5\_566 ?  
O1 Ca Zn 39.98(17) 2 5\_566 ?  
O1 Ca Zn 80.33(17) . 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 97.54(17) 4 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 138.12(14) 3\_455 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 147.38(14) 7 5\_566 ?  
O3 Ca Zn 80.86(14) 8\_456 5\_566 ?  
Si Ca Zn 66.51(4) 7\_556 5\_566 ?  
Si Ca Zn 138.21(4) 8\_455 5\_566 ?  
Zn Ca Zn 109.03(5) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Zn O1 178.47(18) 5\_565 6\_566 ?  
O1 Zn O2 92.1(2) 5\_565 4 ?  
O1 Zn O2 89.0(2) 6\_566 4 ?  
O1 Zn O2 89.0(2) 5\_565 3\_455 ?  
O1 Zn O2 92.1(2) 6\_566 3\_455 ?  
O2 Zn O2 95.3(2) 4 3\_455 ?  
O1 Zn O1 85.39(17) 5\_565 1\_565 ?  
O1 Zn O1 93.45(17) 6\_566 1\_565 ?  
O2 Zn O1 92.11(16) 4 1\_565 ?  
O2 Zn O1 170.84(16) 3\_455 1\_565 ?  
O1 Zn O1 93.45(17) 5\_565 2\_565 ?  
O1 Zn O1 85.39(17) 6\_566 2\_565 ?  
O2 Zn O1 170.84(16) 4 2\_565 ?  
O2 Zn O1 92.11(16) 3\_455 2\_565 ?  
O1 Zn O1 81.1(2) 1\_565 2\_565 ?  
O1 Zn Zn 135.12(11) 5\_565 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 43.70(11) 6\_566 5\_576 ?  
O2 Zn Zn 132.2(2) 4 5\_576 ?  
O2 Zn Zn 92.8(2) 3\_455 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 86.13(19) 1\_565 5\_576 ?

O1 Zn Zn 41.68(19) 2\_565 5\_576 ?  
O1 Zn Zn 43.70(11) 5\_565 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 135.12(12) 6\_566 5\_575 ?  
O2 Zn Zn 92.8(2) 4 5\_575 ?  
O2 Zn Zn 132.2(2) 3\_455 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 41.68(19) 1\_565 5\_575 ?  
O1 Zn Zn 86.13(19) 2\_565 5\_575 ?  
Zn Zn Zn 115.21(5) 5\_576 5\_575 ?  
O1 Zn Ca 46.96(11) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 134.27(11) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Zn Ca 46.27(19) 4 5\_565 ?  
O2 Zn Ca 84.8(2) 3\_455 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 96.52(19) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 140.24(18) 2\_565 5\_565 ?  
Zn Zn Ca 176.91(4) 5\_576 5\_565 ?  
Zn Zn Ca 67.88(3) 5\_575 5\_565 ?  
O1 Zn Ca 134.27(11) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 46.96(11) 6\_566 5\_566 ?  
O2 Zn Ca 84.8(2) 4 5\_566 ?  
O2 Zn Ca 46.27(19) 3\_455 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 140.24(18) 1\_565 5\_566 ?  
O1 Zn Ca 96.52(19) 2\_565 5\_566 ?  
Zn Zn Ca 67.88(3) 5\_576 5\_566 ?  
Zn Zn Ca 176.91(4) 5\_575 5\_566 ?  
Ca Zn Ca 109.03(5) 5\_565 5\_566 ?  
O1 Zn O3 127.1(2) 5\_565 6\_566 ?  
O1 Zn O3 52.5(2) 6\_566 6\_566 ?  
O2 Zn O3 62.48(14) 4 6\_566 ?  
O2 Zn O3 135.51(19) 3\_455 6\_566 ?  
O1 Zn O3 53.21(17) 1\_565 6\_566 ?  
O1 Zn O3 108.39(14) 2\_565 6\_566 ?  
Zn Zn O3 79.22(12) 5\_576 6\_566 ?  
Zn Zn O3 89.27(13) 5\_575 6\_566 ?  
Ca Zn O3 101.09(12) 5\_565 6\_566 ?  
Ca Zn O3 91.39(12) 5\_566 6\_566 ?  
O1 Zn O3 52.5(2) 5\_565 5\_565 ?  
O1 Zn O3 127.1(2) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Zn O3 135.51(19) 4 5\_565 ?  
O2 Zn O3 62.48(14) 3\_455 5\_565 ?  
O1 Zn O3 108.39(14) 1\_565 5\_565 ?  
O1 Zn O3 53.21(17) 2\_565 5\_565 ?  
Zn Zn O3 89.27(13) 5\_576 5\_565 ?  
Zn Zn O3 79.22(12) 5\_575 5\_565 ?  
Ca Zn O3 91.39(12) 5\_565 5\_565 ?  
Ca Zn O3 101.09(12) 5\_566 5\_565 ?  
O3 Zn O3 158.50(11) 6\_566 5\_565 ?  
O2 Si O1 116.6(2) . . ?  
O2 Si O3 110.8(3) . . ?  
O1 Si O3 111.1(3) . . ?  
O2 Si O3 103.0(3) . 6\_556 ?  
O1 Si O3 110.5(3) . 6\_556 ?  
O3 Si O3 103.65(14) . 6\_556 ?  
O2 Si Ca 46.5(3) . 7\_556 ?  
O1 Si Ca 130.8(3) . 7\_556 ?



O3 Si Ca 118.0(2) . 7\_556 ?  
 O3 Si Ca 56.53(18) 6\_556 7\_556 ?  
 O2 Si Ca 117.01(14) . 3\_545 ?  
 O1 Si Ca 126.29(15) . 3\_545 ?  
 O3 Si Ca 50.6(2) . 3\_545 ?  
 O3 Si Ca 53.0(2) 6\_556 3\_545 ?  
 Ca Si Ca 86.13(5) 7\_556 3\_545 ?  
 O2 Si Ca 78.89(14) . . ?  
 O1 Si Ca 38.25(16) . . ?  
 O3 Si Ca 136.0(2) . . ?  
 O3 Si Ca 116.0(2) 6\_556 . ?  
 Ca Si Ca 99.92(6) 7\_556 . ?  
 Ca Si Ca 161.20(7) 3\_545 . ?  
 O2 Si O3 73.04(16) . 2\_655 ?  
 O1 Si O3 165.4(2) . 2\_655 ?  
 O3 Si O3 72.8(3) . 2\_655 ?  
 O3 Si O3 55.2(2) 6\_556 2\_655 ?  
 Ca Si O3 46.90(12) 7\_556 2\_655 ?  
 Ca Si O3 44.65(7) 3\_545 2\_655 ?  
 Ca Si O3 146.40(12) . 2\_655 ?  
 O2 Si O3 52.5(2) . 7 ?  
 O1 Si O3 70.69(15) . 7 ?  
 O3 Si O3 107.68(15) . 7 ?  
 O3 Si O3 145.62(16) 6\_556 7 ?  
 Ca Si O3 95.56(11) 7\_556 7 ?  
 Ca Si O3 154.34(12) 3\_545 7 ?  
 Ca Si O3 43.42(8) . 7 ?  
 O3 Si O3 122.40(8) 2\_655 7 ?  
 O2 Si O3 82.5(3) . 1\_556 ?  
 O1 Si O3 99.0(3) . 1\_556 ?  
 O3 Si O3 134.8(2) . 1\_556 ?  
 O3 Si O3 32.2(2) 6\_556 1\_556 ?  
 Ca Si O3 42.51(7) 7\_556 1\_556 ?  
 Ca Si O3 84.45(7) 3\_545 1\_556 ?  
 Ca Si O3 88.08(8) . 1\_556 ?  
 O3 Si O3 70.46(16) 2\_655 1\_556 ?  
 O3 Si O3 113.86(12) 7 1\_556 ?  
 O2 Si O3 88.23(19) . 5\_655 ?  
 O1 Si O3 145.3(3) . 5\_655 ?  
 O3 Si O3 34.2(3) . 5\_655 ?  
 O3 Si O3 84.6(3) 6\_556 5\_655 ?  
 Ca Si O3 83.80(11) 7\_556 5\_655 ?  
 Ca Si O3 40.20(7) 3\_545 5\_655 ?  
 Ca Si O3 157.55(10) . 5\_655 ?  
 O3 Si O3 39.58(5) 2\_655 5\_655 ?  
 O3 Si O3 114.39(15) 7 5\_655 ?  
 O3 Si O3 108.55(13) 1\_556 5\_655 ?  
 O2 Si O3 110.8(3) . 6 ?  
 O1 Si O3 98.0(3) . 6 ?  
 O3 Si O3 16.42(17) . 6 ?  
 O3 Si O3 118.7(2) 6\_556 6 ?  
 Ca Si O3 130.69(7) 7\_556 6 ?  
 Ca Si O3 66.12(7) 3\_545 6 ?  
 Ca Si O3 119.63(10) . 6 ?

O3 Si O3 87.93(18) 2\_655 6 ?  
O3 Si O3 94.40(11) 7 6 ?  
O3 Si O3 150.57(7) 1\_556 6 ?  
O3 Si O3 48.46(16) 5\_655 6 ?  
Si O1 Zn 122.1(4) . 5\_565 ?  
Si O1 Zn 121.6(3) . 1\_545 ?  
Zn O1 Zn 94.61(17) 5\_565 1\_545 ?  
Si O1 Ca 116.7(2) . . ?  
Zn O1 Ca 93.07(16) 5\_565 . ?  
Zn O1 Ca 103.1(2) 1\_545 . ?  
Si O1 O3 35.1(2) . . ?  
Zn O1 O3 89.9(3) 5\_565 . ?  
Zn O1 O3 117.33(15) 1\_545 . ?  
Ca O1 O3 139.12(16) . . ?  
Si O1 O3 35.91(18) . 6\_556 ?  
Zn O1 O3 144.7(3) 5\_565 6\_556 ?  
Zn O1 O3 87.6(2) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O1 O3 120.8(3) . 6\_556 ?  
O3 O1 O3 58.48(11) . 6\_556 ?  
Si O1 O3 84.09(16) . 7 ?  
Zn O1 O3 81.24(18) 5\_565 7 ?  
Zn O1 O3 150.43(18) 1\_545 7 ?  
Ca O1 O3 48.46(12) . 7 ?  
O3 O1 O3 92.04(15) . 7 ?  
O3 O1 O3 112.63(15) 6\_556 7 ?  
Si O1 O3 84.91(19) . 4 ?  
Zn O1 O3 112.96(15) 5\_565 4 ?  
Zn O1 O3 123.1(2) 1\_545 4 ?  
Ca O1 O3 31.84(8) . 4 ?  
O3 O1 O3 111.59(15) . 4 ?  
O3 O1 O3 94.64(18) 6\_556 4 ?  
O3 O1 O3 38.04(5) 7 4 ?  
Si O1 O3 60.2(2) . 1\_556 ?  
Zn O1 O3 172.72(13) 5\_565 1\_556 ?  
Zn O1 O3 78.8(2) 1\_545 1\_556 ?  
Ca O1 O3 91.5(2) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 90.3(2) . 1\_556 ?  
O3 O1 O3 33.09(16) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O1 O3 106.02(16) 7 1\_556 ?  
O3 O1 O3 73.62(12) 4 1\_556 ?  
Si O1 O3 166.6(2) . 5 ?  
Zn O1 O3 65.45(14) 5\_565 5 ?  
Zn O1 O3 45.03(10) 1\_545 5 ?  
Ca O1 O3 71.54(10) . 5 ?  
O3 O1 O3 143.89(19) . 5 ?  
O3 O1 O3 131.30(19) 6\_556 5 ?  
O3 O1 O3 108.66(12) 7 5 ?  
O3 O1 O3 102.54(12) 4 5 ?  
O3 O1 O3 110.81(15) 1\_556 5 ?  
Si O1 O3 121.80(16) . 3\_455 ?  
Zn O1 O3 71.31(15) 5\_565 3\_455 ?  
Zn O1 O3 111.76(14) 1\_545 3\_455 ?  
Ca O1 O3 23.16(13) . 3\_455 ?  
O3 O1 O3 128.5(2) . 3\_455 ?

O3 O1 O3 139.7(3) 6\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 39.15(11) 7 3\_455 ?  
O3 O1 O3 45.07(17) 4 3\_455 ?  
O3 O1 O3 113.9(2) 1\_556 3\_455 ?  
O3 O1 O3 70.16(9) 5 3\_455 ?  
Si O1 O3 62.2(2) . 6 ?  
Zn O1 O3 61.87(19) 5\_565 6 ?  
Zn O1 O3 115.07(18) 1\_545 6 ?  
Ca O1 O3 134.9(2) . 6 ?  
O3 O1 O3 28.11(15) . 6 ?  
O3 O1 O3 85.29(17) 6\_556 6 ?  
O3 O1 O3 88.90(14) 7 6 ?  
O3 O1 O3 121.74(12) 4 6 ?  
O3 O1 O3 117.99(11) 1\_556 6 ?  
O3 O1 O3 120.52(15) 5 6 ?  
O3 O1 O3 114.4(2) 3\_455 6 ?  
Si O2 Zn 142.1(4) . 3\_545 ?  
Si O2 Ca 103.6(3) . 7\_556 ?  
Zn O2 Ca 93.70(18) 3\_545 7\_556 ?  
Si O2 O3 40.0(2) . 6\_556 ?  
Zn O2 O3 140.91(19) 3\_545 6\_556 ?  
Ca O2 O3 63.7(2) 7\_556 6\_556 ?  
Si O2 O3 35.4(2) . . ?  
Zn O2 O3 106.8(3) 3\_545 . ?  
Ca O2 O3 112.3(2) 7\_556 . ?  
O3 O2 O3 60.28(9) 6\_556 . ?  
Si O2 O3 103.1(3) . 7 ?  
Zn O2 O3 80.53(17) 3\_545 7 ?  
Ca O2 O3 142.8(3) 7\_556 7 ?  
O3 O2 O3 136.92(17) 6\_556 7 ?  
O3 O2 O3 104.5(3) . 7 ?  
Si O2 O3 80.35(16) . 2\_655 ?  
Zn O2 O3 85.07(14) 3\_545 2\_655 ?  
Ca O2 O3 51.20(15) 7\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 55.84(15) 6\_556 2\_655 ?  
O3 O2 O3 66.9(2) . 2\_655 ?  
O3 O2 O3 160.3(4) 7 2\_655 ?  
Si O2 O3 117.2(2) . 4 ?  
Zn O2 O3 93.25(13) 3\_545 4 ?  
Ca O2 O3 97.1(3) 7\_556 4 ?  
O3 O2 O3 119.6(2) 6\_556 4 ?  
O3 O2 O3 142.63(17) . 4 ?  
O3 O2 O3 47.26(7) 7 4 ?  
O3 O2 O3 147.9(4) 2\_655 4 ?  
Si O2 O3 74.5(3) . 1\_556 ?  
Zn O2 O3 132.0(3) 3\_545 1\_556 ?  
Ca O2 O3 38.80(12) 7\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 39.95(17) 6\_556 1\_556 ?  
O3 O2 O3 100.23(17) . 1\_556 ?  
O3 O2 O3 129.7(2) 7 1\_556 ?  
O3 O2 O3 70.02(19) 2\_655 1\_556 ?  
O3 O2 O3 88.16(18) 4 1\_556 ?  
Si O2 O3 70.36(18) . 5\_655 ?  
Zn O2 O3 76.88(16) 3\_545 5\_655 ?

Ca O2 O3 88.27(14) 7\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 71.3(2) 6\_556 5\_655 ?  
O3 O2 O3 40.28(15) . 5\_655 ?  
O3 O2 O3 125.2(3) 7 5\_655 ?  
O3 O2 O3 37.25(8) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O2 O3 169.1(2) 4 5\_655 ?  
O3 O2 O3 101.83(15) 1\_556 5\_655 ?  
Si O2 O3 85.5(2) . 5\_656 ?  
Zn O2 O3 101.70(17) 3\_545 5\_656 ?  
Ca O2 O3 21.50(9) 7\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 46.7(2) 6\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 90.8(2) . 5\_656 ?  
O3 O2 O3 163.3(3) 7 5\_656 ?  
O3 O2 O3 34.47(9) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O2 O3 116.1(3) 4 5\_656 ?  
O3 O2 O3 38.38(12) 1\_556 5\_656 ?  
O3 O2 O3 71.12(8) 5\_655 5\_656 ?  
Si O2 O3 95.7(3) . 4\_554 ?  
Zn O2 O3 69.18(19) 3\_545 4\_554 ?  
Ca O2 O3 160.55(13) 7\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 135.7(2) 6\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 82.5(2) . 4\_554 ?  
O3 O2 O3 28.83(12) 7 4\_554 ?  
O3 O2 O3 132.2(3) 2\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 75.56(13) 4 4\_554 ?  
O3 O2 O3 154.73(11) 1\_556 4\_554 ?  
O3 O2 O3 96.4(2) 5\_655 4\_554 ?  
O3 O2 O3 166.3(2) 5\_656 4\_554 ?  
Si O3 Si 134.4(2) . 6 ?  
Si O3 O2 131.1(3) . 6 ?  
Si O3 O2 36.99(17) 6 6 ?  
Si O3 Ca 99.8(4) . 3\_545 ?  
Si O3 Ca 90.32(14) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Ca 53.33(17) 6 3\_545 ?  
Si O3 O3 153.4(3) . 6 ?  
Si O3 O3 37.6(2) 6 6 ?  
O2 O3 O3 61.7(3) 6 6 ?  
Ca O3 O3 105.1(2) 3\_545 6 ?  
Si O3 O3 38.8(2) . 6\_556 ?  
Si O3 O3 127.8(3) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O3 101.2(3) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O3 61.02(19) 3\_545 6\_556 ?  
O3 O3 O3 162.9(3) 6 6\_556 ?  
Si O3 Ca 119.27(18) . 7 ?  
Si O3 Ca 96.2(3) 6 7 ?  
O2 O3 Ca 109.3(3) 6 7 ?  
Ca O3 Ca 113.16(14) 3\_545 7 ?  
O3 O3 Ca 58.64(17) 6 7 ?  
O3 O3 Ca 134.1(2) 6\_556 7 ?  
Si O3 O2 33.79(15) . . ?  
Si O3 O2 158.5(3) 6 . ?  
O2 O3 O2 159.0(4) 6 . ?  
Ca O3 O2 108.3(3) 3\_545 . ?  
O3 O3 O2 139.1(3) 6 . ?

O3 O3 O2 58.0(2) 6\_556 . ?  
 Ca O3 O2 86.46(16) 7 . ?  
 Si O3 O1 33.77(17) . . ?  
 Si O3 O1 102.0(2) 6 . ?  
 O2 O3 O1 114.21(17) 6 . ?  
 Ca O3 O1 114.6(3) 3\_545 . ?  
 O3 O3 O1 123.2(2) 6 . ?  
 O3 O3 O1 61.3(2) 6\_556 . ?  
 Ca O3 O1 128.32(16) 7 . ?  
 O2 O3 O1 60.88(18) . . ?  
 Si O3 O1 102.5(2) . 6 ?  
 Si O3 O1 33.56(15) 6 6 ?  
 O2 O3 O1 61.73(18) 6 6 ?  
 Ca O3 O1 109.26(14) 3\_545 6 ?  
 O3 O3 O1 60.3(2) 6 6 ?  
 O3 O3 O1 112.7(2) 6\_556 6 ?  
 Ca O3 O1 111.7(3) 7 6 ?  
 O2 O3 O1 126.20(19) . 6 ?  
 O1 O3 O1 69.03(14) . 6 ?  
 Si O3 O3 127.0(5) . 5\_655 ?  
 Si O3 O3 96.0(3) 6 5\_655 ?  
 O2 O3 O3 76.63(18) 6 5\_655 ?  
 Ca O3 O3 57.63(16) 3\_545 5\_655 ?  
 O3 O3 O3 75.8(3) 6 5\_655 ?  
 O3 O3 O3 101.8(3) 6\_556 5\_655 ?  
 Ca O3 O3 55.53(18) 7 5\_655 ?  
 O2 O3 O3 103.0(3) . 5\_655 ?  
 O1 O3 O3 160.6(5) . 5\_655 ?  
 O1 O3 O3 129.5(4) 6 5\_655 ?  
 Si O3 O2 79.2(2) . 7 ?  
 Si O3 O2 84.7(3) 6 7 ?  
 O2 O3 O2 121.3(3) 6 7 ?  
 Ca O3 O2 171.63(16) 3\_545 7 ?  
 O3 O3 O2 74.8(2) 6 7 ?  
 O3 O3 O2 117.4(2) 6\_556 7 ?  
 Ca O3 O2 74.15(17) 7 7 ?  
 O2 O3 O2 75.5(3) . 7 ?  
 O1 O3 O2 60.2(2) . 7 ?  
 O1 O3 O2 63.19(17) 6 7 ?  
 O3 O3 O2 129.5(3) 5\_655 7 ?  
 Si O3 Zn 69.77(14) . 5\_565 ?  
 Si O3 Zn 71.76(16) 6 5\_565 ?  
 O2 O3 Zn 99.65(18) 6 5\_565 ?  
 Ca O3 Zn 134.82(14) 3\_545 5\_565 ?  
 O3 O3 Zn 85.74(14) 6 5\_565 ?  
 O3 O3 Zn 97.46(14) 6\_556 5\_565 ?  
 Ca O3 Zn 109.9(2) 7 5\_565 ?  
 O2 O3 Zn 87.22(13) . 5\_565 ?  
 O1 O3 Zn 37.51(16) . 5\_565 ?  
 O1 O3 Zn 39.20(10) 6 5\_565 ?  
 O3 O3 Zn 160.7(5) 5\_655 5\_565 ?  
 O2 O3 Zn 36.99(9) 7 5\_565 ?  
 Si O3 O2 90.8(3) . 2\_655 ?  
 Si O3 O2 134.0(3) 6 2\_655 ?

O2 O3 O2 124.16(15) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O2 89.85(15) 3\_545 2\_655 ?  
O3 O3 O2 98.7(2) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 91.5(2) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O2 42.90(14) 7 2\_655 ?  
O2 O3 O2 58.9(2) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 119.4(2) . 2\_655 ?  
O1 O3 O2 154.1(3) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O2 47.53(14) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O2 98.46(11) 7 2\_655 ?  
Zn O3 O2 132.53(12) 5\_565 2\_655 ?  
Si O3 O3 79.5(4) . 2\_655 ?  
Si O3 O3 134.66(16) 6 2\_655 ?  
O2 O3 O3 99.86(17) 6 2\_655 ?  
Ca O3 O3 48.97(12) 3\_545 2\_655 ?  
O3 O3 O3 124.6(2) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 55.4(2) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 O3 85.56(13) 7 2\_655 ?  
O2 O3 O3 66.8(2) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 112.1(4) . 2\_655 ?  
O1 O3 O3 157.59(19) 6 2\_655 ?  
O3 O3 O3 48.72(17) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 O3 138.03(15) 7 2\_655 ?  
Zn O3 O3 149.3(3) 5\_565 2\_655 ?  
O2 O3 O3 46.30(12) 2\_655 2\_655 ?  
Si O3 O2 71.9(2) . 4\_545 ?  
Si O3 O2 71.30(19) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O2 60.4(2) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O2 67.64(12) 3\_545 4\_545 ?  
O3 O3 O2 108.9(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 57.9(2) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O2 167.5(3) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O2 105.3(2) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 57.31(13) . 4\_545 ?  
O1 O3 O2 57.98(19) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O2 123.8(2) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O2 104.31(16) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O2 67.36(10) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 O2 147.9(4) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 O2 102.8(3) 2\_655 4\_545 ?  
Si O3 Si 99.0(3) . 2\_655 ?  
Si O3 Si 124.8(2) 6 2\_655 ?  
O2 O3 Si 101.34(14) 6 2\_655 ?  
Ca O3 Si 63.61(10) 3\_545 2\_655 ?  
O3 O3 Si 100.51(14) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 82.62(14) 6\_556 2\_655 ?  
Ca O3 Si 58.69(9) 7 2\_655 ?  
O2 O3 Si 74.59(16) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 132.6(3) . 2\_655 ?  
O1 O3 Si 158.3(3) 6 2\_655 ?  
O3 O3 Si 28.84(18) 5\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 124.76(13) 7 2\_655 ?  
Zn O3 Si 158.58(12) 5\_565 2\_655 ?  
O2 O3 Si 26.61(8) 2\_655 2\_655 ?

O3 O3 Si 27.70(10) 2\_655 2\_655 ?  
O2 O3 Si 127.9(2) 4\_545 2\_655 ?  
Si O3 O1 80.95(18) . 7 ?  
Si O3 O1 117.6(3) 6 7 ?  
O2 O3 O1 147.0(3) 6 7 ?  
Ca O3 O1 140.34(18) 3\_545 7 ?  
O3 O3 O1 86.0(2) 6 7 ?  
O3 O3 O1 111.1(2) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O1 41.36(10) 7 7 ?  
O2 O3 O1 53.1(2) . 7 ?  
O1 O3 O1 87.96(15) . 7 ?  
O1 O3 O1 109.2(2) 6 7 ?  
O3 O3 O1 90.05(17) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O1 47.92(11) 7 7 ?  
Zn O3 O1 83.05(11) 5\_565 7 ?  
O2 O3 O1 50.56(11) 2\_655 7 ?  
O3 O3 O1 93.16(12) 2\_655 7 ?  
O2 O3 O1 145.08(16) 4\_545 7 ?  
Si O3 O1 77.04(10) 2\_655 7 ?  
Si O3 Si 72.32(15) . 7 ?  
Si O3 Si 106.3(3) 6 7 ?  
O2 O3 Si 143.1(3) 6 7 ?  
Ca O3 Si 162.7(2) 3\_545 7 ?  
O3 O3 Si 86.05(18) 6 7 ?  
O3 O3 Si 109.93(19) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Si 61.11(9) 7 7 ?  
O2 O3 Si 56.58(16) . 7 ?  
O1 O3 Si 67.40(12) . 7 ?  
O1 O3 Si 87.68(16) 6 7 ?  
O3 O3 Si 114.4(2) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Si 24.49(9) 7 7 ?  
Zn O3 Si 57.88(7) 5\_565 7 ?  
O2 O3 Si 75.20(9) 2\_655 7 ?  
O3 O3 Si 113.81(10) 2\_655 7 ?  
O2 O3 Si 121.83(12) 4\_545 7 ?  
Si O3 Si 101.80(9) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Si 25.22(7) 7 7 ?  
Si O3 Zn 64.90(14) . 3\_545 ?  
Si O3 Zn 148.7(3) 6 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 156.72(15) 6 3\_545 ?  
Ca O3 Zn 112.5(2) 3\_545 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 112.69(18) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 83.15(17) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 Zn 55.84(7) 7 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 31.14(12) . 3\_545 ?  
O1 O3 Zn 88.08(15) . 3\_545 ?  
O1 O3 Zn 137.76(16) 6 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 80.09(16) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 74.69(11) 7 3\_545 ?  
Zn O3 Zn 102.45(8) 5\_565 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 32.56(8) 2\_655 3\_545 ?  
O3 O3 Zn 63.56(9) 2\_655 3\_545 ?  
O2 O3 Zn 136.2(3) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 Zn 56.19(7) 2\_655 3\_545 ?

O1 O3 Zn 32.20(12) 7 3\_545 ?  
Si O3 Zn 50.28(5) 7 3\_545 ?  
Si O3 Si 134.8(2) . 1\_554 ?  
Si O3 Si 49.4(2) 6 1\_554 ?  
O2 O3 Si 80.1(3) 6 1\_554 ?  
Ca O3 Si 125.0(2) 3\_545 1\_554 ?  
O3 O3 Si 20.06(9) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 170.95(6) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 Si 52.25(14) 7 1\_554 ?  
O2 O3 Si 120.9(2) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 110.0(3) . 1\_554 ?  
O1 O3 Si 59.8(2) 6 1\_554 ?  
O3 O3 Si 87.2(3) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 Si 55.58(19) 7 1\_554 ?  
Zn O3 Si 73.52(14) 5\_565 1\_554 ?  
O2 O3 Si 95.2(2) 2\_655 1\_554 ?  
O3 O3 Si 133.4(2) 2\_655 1\_554 ?  
O2 O3 Si 116.4(2) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 Si 106.01(15) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 Si 69.14(16) 7 1\_554 ?  
Si O3 Si 66.14(12) 7 1\_554 ?  
Zn O3 Si 99.25(12) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 123.0(2) . 1\_554 ?  
Si O3 O2 72.4(3) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O2 100.5(3) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O2 134.10(19) 3\_545 1\_554 ?  
O3 O3 O2 38.84(13) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 158.3(2) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O2 33.19(11) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O2 100.23(17) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 110.5(2) . 1\_554 ?  
O1 O3 O2 79.3(3) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O2 81.7(3) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O2 50.3(2) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O2 80.45(16) 5\_565 1\_554 ?  
O2 O3 O2 74.9(2) 2\_655 1\_554 ?  
O3 O3 O2 118.74(18) 2\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O2 137.3(2) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 91.56(12) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O2 47.21(15) 7 1\_554 ?  
Si O3 O2 50.68(11) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O2 76.27(11) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O2 23.05(8) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 Si 145.8(3) . 5\_655 ?  
Si O3 Si 77.97(18) 6 5\_655 ?  
O2 O3 Si 64.67(13) 6 5\_655 ?  
Ca O3 Si 63.55(8) 3\_545 5\_655 ?  
O3 O3 Si 57.80(12) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 117.29(13) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 Si 53.44(9) 7 5\_655 ?  
O2 O3 Si 119.58(15) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 178.2(2) . 5\_655 ?  
O1 O3 Si 111.1(3) 6 5\_655 ?  
O3 O3 Si 18.8(2) 5\_655 5\_655 ?



O2 O3 Si 121.6(3) 7 5\_655 ?  
Zn O3 Si 143.5(2) 5\_565 5\_655 ?  
O2 O3 Si 61.26(12) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O3 Si 66.98(14) 2\_655 5\_655 ?  
O2 O3 Si 121.11(11) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 47.15(6) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 Si 93.67(13) 7 5\_655 ?  
Si O3 Si 114.39(15) 7 5\_655 ?  
Zn O3 Si 92.86(8) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 Si 71.45(13) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 Si 71.25(12) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 Zn 48.42(12) . 1\_545 ?  
Si O3 Zn 87.13(15) 6 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 88.51(14) 6 1\_545 ?  
Ca O3 Zn 92.16(15) 3\_545 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 120.24(13) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 54.74(11) 6\_556 1\_545 ?  
Ca O3 Zn 154.38(13) 7 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 81.63(17) . 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 27.40(9) . 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 60.00(17) 6 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 149.5(3) 5\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 80.92(13) 7 1\_545 ?  
Zn O3 Zn 47.23(5) 5\_565 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 138.8(3) 2\_655 1\_545 ?  
O3 O3 Zn 110.0(3) 2\_655 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 29.91(8) 4\_545 1\_545 ?  
Si O3 Zn 137.4(2) 2\_655 1\_545 ?  
O1 O3 Zn 115.30(12) 7 1\_545 ?  
Si O3 Zn 93.52(8) 7 1\_545 ?  
Zn O3 Zn 111.96(15) 3\_545 1\_545 ?  
Si O3 Zn 116.57(14) 1\_554 1\_545 ?  
O2 O3 Zn 127.65(15) 1\_554 1\_545 ?  
Si O3 Zn 151.01(9) 5\_655 1\_545 ?  
Si O3 Ca 41.35(19) . 7\_556 ?  
Si O3 Ca 164.2(3) 6 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 129.6(3) 6 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 77.20(19) 3\_545 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 155.48(12) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 37.08(10) 6\_556 7\_556 ?  
Ca O3 Ca 97.64(14) 7 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 31.13(16) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 75.1(2) . 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 142.9(3) 6 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 85.6(3) 5\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 106.49(19) 7 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 110.30(15) 5\_565 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 56.77(17) 2\_655 7\_556 ?  
O3 O3 Ca 39.62(17) 2\_655 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 94.7(2) 4\_545 7\_556 ?  
Si O3 Ca 58.00(11) 2\_655 7\_556 ?  
O1 O3 Ca 78.06(15) 7 7\_556 ?  
Si O3 Ca 87.21(11) 7 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 47.15(8) 3\_545 7\_556 ?

Si O3 Ca 146.38(10) 1\_554 7\_556 ?  
O2 O3 Ca 123.35(11) 1\_554 7\_556 ?  
Si O3 Ca 104.41(11) 5\_655 7\_556 ?  
Zn O3 Ca 83.68(14) 1\_545 7\_556 ?  
Si O3 Si 39.54(19) . 6\_556 ?  
Si O3 Si 118.7(2) 6 6\_556 ?  
O2 O3 Si 95.6(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 Si 62.15(16) 3\_545 6\_556 ?  
O3 O3 Si 155.66(17) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 10.22(8) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 Si 144.1(2) 7 6\_556 ?  
O2 O3 Si 64.4(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 55.7(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 Si 102.6(2) 6 6\_556 ?  
O3 O3 Si 109.0(4) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 114.7(2) 7 6\_556 ?  
Zn O3 Si 90.09(12) 5\_565 6\_556 ?  
O2 O3 Si 101.7(2) 2\_655 6\_556 ?  
O3 O3 Si 64.6(2) 2\_655 6\_556 ?  
O2 O3 Si 48.01(16) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 92.07(18) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 Si 117.34(19) 7 6\_556 ?  
Si O3 Si 111.84(15) 7 6\_556 ?  
Zn O3 Si 91.63(16) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 Si 161.90(12) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 Si 162.51(12) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 Si 122.70(14) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 Si 45.44(7) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 Si 46.70(10) 7\_556 6\_556 ?  
Si O3 O1 90.4(2) . 4\_545 ?  
Si O3 O1 77.72(18) 6 4\_545 ?  
O2 O3 O1 45.3(2) 6 4\_545 ?  
Ca O3 O1 28.50(7) 3\_545 4\_545 ?  
O3 O3 O1 107.0(2) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 55.98(17) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 O1 139.23(13) 7 4\_545 ?  
O2 O3 O1 113.7(3) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 92.09(17) . 4\_545 ?  
O1 O3 O1 85.36(18) 6 4\_545 ?  
O3 O3 O1 84.70(19) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 143.22(14) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O1 106.33(11) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 O1 117.02(18) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 O1 72.27(14) 2\_655 4\_545 ?  
O2 O3 O1 39.42(9) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 91.55(13) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 O1 164.3(3) 7 4\_545 ?  
Si O3 O1 159.48(16) 7 4\_545 ?  
Zn O3 O1 132.1(2) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 O1 125.18(16) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 O1 145.48(19) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 O1 86.11(9) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 O1 66.32(9) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 O1 86.77(16) 7\_556 4\_545 ?

Si O3 O1 51.47(11) 6\_556 4\_545 ?  
Si O3 O3 152.1(2) . 2\_654 ?  
Si O3 O3 72.2(3) 6 2\_654 ?  
O2 O3 O3 74.03(19) 6 2\_654 ?  
Ca O3 O3 86.40(10) 3\_545 2\_654 ?  
O3 O3 O3 41.23(18) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 138.77(18) 6\_556 2\_654 ?  
Ca O3 O3 36.06(10) 7 2\_654 ?  
O2 O3 O3 118.47(14) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 158.5(3) . 2\_654 ?  
O1 O3 O3 101.0(4) 6 2\_654 ?  
O3 O3 O3 36.97(17) 5\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 98.4(3) 7 2\_654 ?  
Zn O3 O3 123.8(3) 5\_565 2\_654 ?  
O2 O3 O3 61.91(15) 2\_655 2\_654 ?  
O3 O3 O3 84.51(15) 2\_655 2\_654 ?  
O2 O3 O3 134.47(16) 4\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 59.28(11) 2\_655 2\_654 ?  
O1 O3 O3 77.27(13) 7 2\_654 ?  
Si O3 O3 93.91(16) 7 2\_654 ?  
Zn O3 O3 87.56(7) 3\_545 2\_654 ?  
Si O3 O3 50.26(17) 1\_554 2\_654 ?  
O2 O3 O3 48.07(15) 1\_554 2\_654 ?  
Si O3 O3 23.21(7) 5\_655 2\_654 ?  
Zn O3 O3 159.2(2) 1\_545 2\_654 ?  
Ca O3 O3 116.02(17) 7\_556 2\_654 ?  
Si O3 O3 145.5(2) 6\_556 2\_654 ?  
O1 O3 O3 106.35(9) 4\_545 2\_654 ?  
Si O3 O2 155.3(3) . 5\_655 ?  
Si O3 O2 59.89(16) 6 5\_655 ?  
O2 O3 O2 43.42(14) 6 5\_655 ?  
Ca O3 O2 56.77(12) 3\_545 5\_655 ?  
O3 O3 O2 51.24(16) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 117.42(17) 6\_556 5\_655 ?  
Ca O3 O2 70.27(14) 7 5\_655 ?  
O2 O3 O2 139.72(15) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 157.59(15) . 5\_655 ?  
O1 O3 O2 93.4(2) 6 5\_655 ?  
O3 O3 O2 36.73(19) 5\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 125.2(3) 7 5\_655 ?  
Zn O3 O2 131.0(2) 5\_565 5\_655 ?  
O2 O3 O2 82.47(14) 2\_655 5\_655 ?  
O3 O3 O2 78.72(15) 2\_655 5\_655 ?  
O2 O3 O2 101.94(9) 4\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 65.28(9) 2\_655 5\_655 ?  
O1 O3 O2 111.64(17) 7 5\_655 ?  
Si O3 O2 127.7(2) 7 5\_655 ?  
Zn O3 O2 114.27(10) 3\_545 5\_655 ?  
Si O3 O2 69.66(15) 1\_554 5\_655 ?  
O2 O3 O2 78.17(15) 1\_554 5\_655 ?  
Si O3 O2 21.41(6) 5\_655 5\_655 ?  
Zn O3 O2 131.39(9) 1\_545 5\_655 ?  
Ca O3 O2 118.33(14) 7\_556 5\_655 ?  
Si O3 O2 118.77(14) 6\_556 5\_655 ?

O1 O3 O2 72.05(12) 4\_545 5\_655 ?  
O3 O3 O2 34.65(8) 2\_654 5\_655 ?  
Si O3 Zn 140.1(3) . 7 ?  
Si O3 Zn 47.41(10) 6 7 ?  
O2 O3 Zn 17.30(9) 6 7 ?  
Ca O3 Zn 46.51(8) 3\_545 7 ?  
O3 O3 Zn 60.10(16) 6 7 ?  
O3 O3 Zn 103.84(18) 6\_556 7 ?  
Ca O3 Zn 96.70(15) 7 7 ?  
O2 O3 Zn 153.6(3) . 7 ?  
O1 O3 Zn 130.71(12) . 7 ?  
O1 O3 Zn 76.91(14) 6 7 ?  
O3 O3 Zn 59.33(14) 5\_655 7 ?  
O2 O3 Zn 130.6(3) 7 7 ?  
Zn O3 Zn 115.79(14) 5\_565 7 ?  
O2 O3 Zn 106.86(12) 2\_655 7 ?  
O3 O3 Zn 87.31(8) 2\_655 7 ?  
O2 O3 Zn 74.71(10) 4\_545 7 ?  
Si O3 Zn 84.69(8) 2\_655 7 ?  
O1 O3 Zn 137.68(19) 7 7 ?  
Si O3 Zn 146.1(2) 7 7 ?  
Zn O3 Zn 139.42(10) 3\_545 7 ?  
Si O3 Zn 80.08(13) 1\_554 7 ?  
O2 O3 Zn 96.41(16) 1\_554 7 ?  
Si O3 Zn 48.03(5) 5\_655 7 ?  
Zn O3 Zn 104.05(7) 1\_545 7 ?  
Ca O3 Zn 122.90(14) 7\_556 7 ?  
Si O3 Zn 100.96(10) 6\_556 7 ?  
O1 O3 Zn 49.74(10) 4\_545 7 ?  
O3 O3 Zn 60.63(7) 2\_654 7 ?  
O2 O3 Zn 27.35(6) 5\_655 7 ?  
Si O3 Ca 92.30(15) . 5 ?  
Si O3 Ca 43.67(12) 6 5 ?  
O2 O3 Ca 51.52(11) 6 5 ?  
Ca O3 Ca 86.55(8) 3\_545 5 ?  
O3 O3 Ca 79.87(14) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 88.91(14) 6\_556 5 ?  
Ca O3 Ca 137.0(3) 7 5 ?  
O2 O3 Ca 124.70(17) . 5 ?  
O1 O3 Ca 64.49(11) . 5 ?  
O1 O3 Ca 27.23(14) 6 5 ?  
O3 O3 Ca 128.1(2) 5\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 85.20(12) 7 5 ?  
Zn O3 Ca 51.67(6) 5\_565 5 ?  
O2 O3 Ca 175.62(12) 2\_655 5 ?  
O3 O3 Ca 131.38(19) 2\_655 5 ?  
O2 O3 Ca 31.54(13) 4\_545 5 ?  
Si O3 Ca 149.39(10) 2\_655 5 ?  
O1 O3 Ca 133.11(15) 7 5 ?  
Si O3 Ca 108.73(11) 7 5 ?  
Zn O3 Ca 151.74(11) 3\_545 5 ?  
Si O3 Ca 84.90(13) 1\_554 5 ?  
O2 O3 Ca 105.96(18) 1\_554 5 ?  
Si O3 Ca 114.76(12) 5\_655 5 ?

Zn O3 Ca 43.95(4) 1\_545 5 ?  
Ca O3 Ca 124.57(16) 7\_556 5 ?  
Si O3 Ca 78.77(8) 6\_556 5 ?  
O1 O3 Ca 59.84(8) 4\_545 5 ?  
O3 O3 Ca 115.3(2) 2\_654 5 ?  
O2 O3 Ca 93.47(10) 5\_655 5 ?  
Zn O3 Ca 68.83(6) 7 5 ?  
Si O3 Si 82.57(19) . 4\_545 ?  
Si O3 Si 70.60(17) 6 4\_545 ?  
O2 O3 Si 48.55(18) 6 4\_545 ?  
Ca O3 Si 49.62(8) 3\_545 4\_545 ?  
O3 O3 Si 106.36(18) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 57.46(15) 6\_556 4\_545 ?  
Ca O3 Si 156.35(15) 7 4\_545 ?  
O2 O3 Si 113.1(3) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 74.68(14) . 4\_545 ?  
O1 O3 Si 68.21(15) 6 4\_545 ?  
O3 O3 Si 105.10(18) 5\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 122.13(13) 7 4\_545 ?  
Zn O3 Si 85.20(8) 5\_565 4\_545 ?  
O2 O3 Si 136.3(2) 2\_655 4\_545 ?  
O3 O3 Si 90.17(18) 2\_655 4\_545 ?  
O2 O3 Si 18.66(6) 4\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 112.10(15) 2\_655 4\_545 ?  
O1 O3 Si 162.28(17) 7 4\_545 ?  
Si O3 Si 140.47(11) 7 4\_545 ?  
Zn O3 Si 140.6(2) 3\_545 4\_545 ?  
Si O3 Si 119.82(14) 1\_554 4\_545 ?  
O2 O3 Si 142.86(19) 1\_554 4\_545 ?  
Si O3 Si 103.63(7) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 Si 47.56(6) 1\_545 4\_545 ?  
Ca O3 Si 93.74(16) 7\_556 4\_545 ?  
Si O3 Si 49.34(8) 6\_556 4\_545 ?  
O1 O3 Si 21.13(6) 4\_545 4\_545 ?  
O3 O3 Si 120.40(7) 2\_654 4\_545 ?  
O2 O3 Si 86.08(8) 5\_655 4\_545 ?  
Zn O3 Si 59.83(5) 7 4\_545 ?  
Ca O3 Si 41.22(4) 5 4\_545 ?  
Si O3 O1 119.3(2) . 1\_554 ?  
Si O3 O1 45.1(2) 6 1\_554 ?  
O2 O3 O1 81.5(3) 6 1\_554 ?  
Ca O3 O1 133.8(2) 3\_545 1\_554 ?  
O3 O3 O1 34.16(10) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 150.20(9) 6\_556 1\_554 ?  
Ca O3 O1 69.76(18) 7 1\_554 ?  
O2 O3 O1 117.9(2) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 90.3(2) . 1\_554 ?  
O1 O3 O1 42.41(18) 6 1\_554 ?  
O3 O3 O1 107.6(4) 5\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 43.37(18) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O1 53.18(11) 5\_565 1\_554 ?  
O2 O3 O1 111.7(2) 2\_655 1\_554 ?  
O3 O3 O1 154.0(3) 2\_655 1\_554 ?  
O2 O3 O1 100.39(17) 4\_545 1\_554 ?

Si O3 O1 126.34(19) 2\_655 1\_554 ?  
O1 O3 O1 73.98(16) 7 1\_554 ?  
Si O3 O1 61.68(11) 7 1\_554 ?  
Zn O3 O1 106.19(13) 3\_545 1\_554 ?  
Si O3 O1 20.80(8) 1\_554 1\_554 ?  
O2 O3 O1 36.91(11) 1\_554 1\_554 ?  
Si O3 O1 90.91(17) 5\_655 1\_554 ?  
Zn O3 O1 95.99(11) 1\_545 1\_554 ?  
Ca O3 O1 148.86(9) 7\_556 1\_554 ?  
Si O3 O1 141.43(11) 6\_556 1\_554 ?  
O1 O3 O1 121.72(14) 4\_545 1\_554 ?  
O3 O3 O1 70.8(2) 2\_654 1\_554 ?  
O2 O3 O1 85.08(19) 5\_655 1\_554 ?  
Zn O3 O1 87.52(15) 7 1\_554 ?  
Ca O3 O1 69.35(10) 5 1\_554 ?  
Si O3 O1 109.02(12) 4\_545 1\_554 ?  
Si O3 O3 51.92(12) . 7 ?  
Si O3 O3 119.2(3) 6 7 ?  
O2 O3 O3 154.3(3) 6 7 ?  
Ca O3 O3 148.3(4) 3\_545 7 ?  
O3 O3 O3 105.7(2) 6 7 ?  
O3 O3 O3 89.8(2) 6\_556 7 ?  
Ca O3 O3 77.28(12) 7 7 ?  
O2 O3 O3 40.62(15) . 7 ?  
O1 O3 O3 51.57(11) . 7 ?  
O1 O3 O3 92.61(17) 6 7 ?  
O3 O3 O3 124.10(19) 5\_655 7 ?  
O2 O3 O3 34.88(15) 7 7 ?  
Zn O3 O3 55.55(9) 5\_565 7 ?  
O2 O3 O3 78.10(12) 2\_655 7 ?  
O3 O3 O3 105.5(2) 2\_655 7 ?  
O2 O3 O3 108.79(17) 4\_545 7 ?  
Si O3 O3 103.08(14) 2\_655 7 ?  
O1 O3 O3 36.39(10) 7 7 ?  
Si O3 O3 20.40(10) 7 7 ?  
Zn O3 O3 46.91(8) 3\_545 7 ?  
Si O3 O3 85.6(2) 1\_554 7 ?  
O2 O3 O3 71.07(18) 1\_554 7 ?  
Si O3 O3 130.06(16) 5\_655 7 ?  
Zn O3 O3 78.93(12) 1\_545 7 ?  
Ca O3 O3 71.65(18) 7\_556 7 ?  
Si O3 O3 91.4(2) 6\_556 7 ?  
O1 O3 O3 140.9(3) 4\_545 7 ?  
O3 O3 O3 112.3(2) 2\_654 7 ?  
O2 O3 O3 146.9(2) 5\_655 7 ?  
Zn O3 O3 165.2(3) 7 7 ?  
Ca O3 O3 106.26(12) 5 7 ?  
Si O3 O3 126.15(18) 4\_545 7 ?  
O1 O3 O3 77.72(19) 1\_554 7 ?  
Si O3 O1 68.28(16) . 5 ?  
Si O3 O1 66.29(15) 6 5 ?  
O2 O3 O1 81.87(14) 6 5 ?  
Ca O3 O1 108.25(13) 3\_545 5 ?  
O3 O3 O1 94.52(14) 6 5 ?

O3 O3 O1 81.71(13) 6\_556 5 ?  
Ca O3 O1 135.0(2) 7 5 ?  
O2 O3 O1 96.85(14) . 5 ?  
O1 O3 O1 36.11(19) . 5 ?  
O1 O3 O1 34.8(2) 6 5 ?  
O3 O3 O1 158.5(2) 5\_655 5 ?  
O2 O3 O1 63.57(12) 7 5 ?  
Zn O3 O1 26.58(7) 5\_565 5 ?  
O2 O3 O1 153.97(15) 2\_655 5 ?  
O3 O3 O1 136.8(3) 2\_655 5 ?  
O2 O3 O1 40.84(11) 4\_545 5 ?  
Si O3 O1 164.3(2) 2\_655 5 ?  
O1 O3 O1 108.66(12) 7 5 ?  
Si O3 O1 83.51(9) 7 5 ?  
Zn O3 O1 121.40(11) 3\_545 5 ?  
Si O3 O1 89.64(15) 1\_554 5 ?  
O2 O3 O1 103.01(17) 1\_554 5 ?  
Si O3 O1 143.55(16) 5\_655 5 ?  
Zn O3 O1 26.97(10) 1\_545 5 ?  
Ca O3 O1 108.10(16) 7\_556 5 ?  
Si O3 O1 72.31(12) 6\_556 5 ?  
O1 O3 O1 79.77(9) 4\_545 5 ?  
O3 O3 O1 135.6(3) 2\_654 5 ?  
O2 O3 O1 122.96(14) 5\_655 5 ?  
Zn O3 O1 99.17(9) 7 5 ?  
Ca O3 O1 30.35(6) 5 5 ?  
Si O3 O1 58.63(7) 4\_545 5 ?  
O1 O3 O1 69.19(15) 1\_554 5 ?  
O3 O3 O1 76.77(10) 7 5 ?  
Si O3 Zn 111.53(19) . 1\_544 ?  
Si O3 Zn 30.76(13) 6 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 65.73(19) 6 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 117.74(14) 3\_545 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 47.48(8) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 127.51(10) 6\_556 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 96.6(2) 7 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 127.75(16) . 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 77.9(2) . 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 15.17(17) 6 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 121.5(4) 5\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 55.85(15) 7 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 42.72(8) 5\_565 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 139.1(2) 2\_655 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 165.36(13) 2\_655 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 73.04(15) 4\_545 1\_544 ?  
Si O3 Zn 148.0(2) 2\_655 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 97.99(17) 7 1\_544 ?  
Si O3 Zn 79.54(12) 7 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 129.20(13) 3\_545 1\_544 ?  
Si O3 Zn 44.75(8) 1\_554 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 64.23(13) 1\_554 1\_544 ?  
Si O3 Zn 102.70(16) 5\_655 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 73.64(7) 1\_545 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 152.79(11) 7\_556 1\_544 ?

Si O3 Zn 117.45(9) 6\_556 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 97.38(11) 4\_545 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 88.7(2) 2\_654 1\_544 ?  
O2 O3 Zn 88.33(16) 5\_655 1\_544 ?  
Zn O3 Zn 78.06(10) 7 1\_544 ?  
Ca O3 Zn 41.88(5) 5 1\_544 ?  
Si O3 Zn 82.07(7) 4\_545 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 27.47(6) 1\_554 1\_544 ?  
O3 O3 Zn 89.10(17) 7 1\_544 ?  
O1 O3 Zn 47.16(11) 5 1\_544 ?  
Si O3 O1 120.1(3) . 3\_545 ?  
Si O3 O1 72.93(14) 6 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.25(16) 6 3\_545 ?  
Ca O3 O1 20.83(11) 3\_545 3\_545 ?  
O3 O3 O1 84.26(19) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 81.40(19) 6\_556 3\_545 ?  
Ca O3 O1 102.96(13) 7 3\_545 ?  
O2 O3 O1 127.4(3) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 128.5(2) . 3\_545 ?  
O1 O3 O1 98.41(12) 6 3\_545 ?  
O3 O3 O1 50.80(12) 5\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 157.1(3) 7 3\_545 ?  
Zn O3 O1 133.61(11) 5\_565 3\_545 ?  
O2 O3 O1 93.78(11) 2\_655 3\_545 ?  
O3 O3 O1 62.66(9) 2\_655 3\_545 ?  
O2 O3 O1 73.47(11) 4\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 67.72(8) 2\_655 3\_545 ?  
O1 O3 O1 140.85(11) 7 3\_545 ?  
Si O3 O1 164.05(18) 7 3\_545 ?  
Zn O3 O1 123.16(14) 3\_545 3\_545 ?  
Si O3 O1 104.21(18) 1\_554 3\_545 ?  
O2 O3 O1 115.79(19) 1\_554 3\_545 ?  
Si O3 O1 49.66(8) 5\_655 3\_545 ?  
Zn O3 O1 102.30(12) 1\_545 3\_545 ?  
Ca O3 O1 96.43(17) 7\_556 3\_545 ?  
Si O3 O1 81.35(15) 6\_556 3\_545 ?  
O1 O3 O1 36.46(14) 4\_545 3\_545 ?  
O3 O3 O1 70.51(10) 2\_654 3\_545 ?  
O2 O3 O1 37.65(13) 5\_655 3\_545 ?  
Zn O3 O1 26.49(9) 7 3\_545 ?  
Ca O3 O1 81.97(7) 5 3\_545 ?  
Si O3 O1 55.00(8) 4\_545 3\_545 ?  
O1 O3 O1 113.9(2) 1\_554 3\_545 ?  
O3 O3 O1 167.9(3) 7 3\_545 ?  
O1 O3 O1 109.84(9) 5 3\_545 ?  
Zn O3 O1 102.83(13) 1\_544 3\_545 ?  
Si O3 O2 84.3(3) . 5\_656 ?  
Si O3 O2 109.27(17) 6 5\_656 ?  
O2 O3 O2 72.3(2) 6 5\_656 ?  
Ca O3 O2 19.15(11) 3\_545 5\_656 ?  
O3 O3 O2 121.85(17) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 46.82(13) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 O2 112.15(14) 7 5\_656 ?  
O2 O3 O2 89.2(2) . 5\_656 ?



O1 O3 O2 106.6(3) . 5\_656 ?  
O1 O3 O2 124.16(16) 6 5\_656 ?  
O3 O3 O2 59.9(3) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 163.3(3) 7 5\_656 ?  
Zn O3 O2 137.51(18) 5\_565 5\_656 ?  
O2 O3 O2 78.73(16) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O3 O2 33.44(10) 2\_655 5\_656 ?  
O2 O3 O2 72.92(15) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 55.01(10) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 O2 126.50(17) 7 5\_656 ?  
Si O3 O2 144.40(19) 7 5\_656 ?  
Zn O3 O2 95.72(15) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O2 140.77(15) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 O2 141.62(12) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 O2 71.77(10) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 O2 90.37(15) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 O2 58.06(12) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 O2 50.95(12) 6\_556 5\_656 ?  
O1 O3 O2 38.86(9) 4\_545 5\_656 ?  
O3 O3 O2 94.77(15) 2\_654 5\_656 ?  
O2 O3 O2 71.12(8) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 O2 65.31(9) 7 5\_656 ?  
Ca O3 O2 98.46(10) 5 5\_656 ?  
Si O3 O2 57.73(9) 4\_545 5\_656 ?  
O1 O3 O2 152.82(16) 1\_554 5\_656 ?  
O3 O3 O2 129.5(3) 7 5\_656 ?  
O1 O3 O2 112.76(14) 5 5\_656 ?  
Zn O3 O2 135.08(9) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 O2 39.00(13) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 O1 35.20(14) . 6\_556 ?  
Si O3 O1 107.97(18) 6 6\_556 ?  
O2 O3 O1 95.9(2) 6 6\_556 ?  
Ca O3 O1 76.81(17) 3\_545 6\_556 ?  
O3 O3 O1 144.49(14) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 28.68(11) 6\_556 6\_556 ?  
Ca O3 O1 154.0(2) 7 6\_556 ?  
O2 O3 O1 67.6(2) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 38.14(17) . 6\_556 ?  
O1 O3 O1 85.29(17) 6 6\_556 ?  
O3 O3 O1 128.4(4) 5\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 98.34(18) 7 6\_556 ?  
Zn O3 O1 70.50(10) 5\_565 6\_556 ?  
O2 O3 O1 116.8(3) 2\_655 6\_556 ?  
O3 O3 O1 84.1(3) 2\_655 6\_556 ?  
O2 O3 O1 37.96(14) 4\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 111.3(2) 2\_655 6\_556 ?  
O1 O3 O1 115.64(16) 7 6\_556 ?  
Si O3 O1 101.96(12) 7 6\_556 ?  
Zn O3 O1 98.30(17) 3\_545 6\_556 ?  
Si O3 O1 142.53(13) 1\_554 6\_556 ?  
O2 O3 O1 148.65(12) 1\_554 6\_556 ?  
Si O3 O1 140.09(16) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 O1 26.08(7) 1\_545 6\_556 ?  
Ca O3 O1 60.02(13) 7\_556 6\_556 ?

Si O3 O1 19.79(8) 6\_556 6\_556 ?  
O1 O3 O1 58.26(12) 4\_545 6\_556 ?  
O3 O3 O1 163.20(18) 2\_654 6\_556 ?  
O2 O3 O1 130.26(13) 5\_655 6\_556 ?  
Zn O3 O1 106.51(10) 7\_6\_556 ?  
Ca O3 O1 64.75(8) 5\_6\_556 ?  
Si O3 O1 47.43(8) 4\_545 6\_556 ?  
O1 O3 O1 121.80(12) 1\_554 6\_556 ?  
O3 O3 O1 82.66(18) 7\_6\_556 ?  
O1 O3 O1 53.05(16) 5\_6\_556 ?  
Zn O3 O1 99.46(9) 1\_544 6\_556 ?  
O1 O3 O1 93.26(15) 3\_545 6\_556 ?  
O2 O3 O1 69.07(15) 5\_656 6\_556 ?  
Si O3 Ca 29.86(14) . . ?  
Si O3 Ca 113.98(16) 6 . ?  
O2 O3 Ca 132.70(14) 6 . ?  
Ca O3 Ca 126.5(2) 3\_545 . ?  
O3 O3 Ca 123.52(13) 6 . ?  
O3 O3 Ca 66.73(12) 6\_556 . ?  
Ca O3 Ca 110.59(9) 7 . ?  
O2 O3 Ca 46.08(10) . . ?  
O1 O3 Ca 18.99(7) . . ?  
O1 O3 Ca 80.52(13) 6 . ?  
O3 O3 Ca 148.9(3) 5\_655 . ?  
O2 O3 Ca 50.70(16) 7 . ?  
Zn O3 Ca 42.77(5) 5\_565 . ?  
O2 O3 Ca 102.39(14) 2\_655 . ?  
O3 O3 Ca 107.4(3) 2\_655 . ?  
O2 O3 Ca 76.08(12) 4\_545 . ?  
Si O3 Ca 120.65(16) 2\_655 . ?  
O1 O3 Ca 69.52(10) 7 . ?  
Si O3 Ca 51.13(6) 7 . ?  
Zn O3 Ca 70.16(7) 3\_545 . ?  
Si O3 Ca 105.74(11) 1\_554 . ?  
O2 O3 Ca 99.20(10) 1\_554 . ?  
Si O3 Ca 162.37(9) 5\_655 . ?  
Zn O3 Ca 46.21(5) 1\_545 . ?  
Ca O3 Ca 67.85(10) 7\_556 . ?  
Si O3 Ca 64.40(9) 6\_556 . ?  
O1 O3 Ca 108.57(14) 4\_545 . ?  
O3 O3 Ca 145.04(14) 2\_654 . ?  
O2 O3 Ca 173.77(19) 5\_655 . ?  
Zn O3 Ca 149.56(9) 7 . ?  
Ca O3 Ca 81.78(7) 5 . ?  
Si O3 Ca 92.88(10) 4\_545 . ?  
O1 O3 Ca 89.46(10) 1\_554 . ?  
O3 O3 Ca 33.31(9) 7 . ?  
O1 O3 Ca 51.85(7) 5 . ?  
Zn O3 Ca 85.44(7) 1\_544 . ?  
O1 O3 Ca 144.30(19) 3\_545 . ?  
O2 O3 Ca 113.44(19) 5\_656 . ?  
O1 O3 Ca 51.04(8) 6\_556 . ?  
Si O3 Si 77.6(3) . 5\_656 ?  
Si O3 Si 126.84(17) 6 5\_656 ?

O2 O3 Si 90.1(2) 6 5\_656 ?  
Ca O3 Si 37.08(11) 3\_545 5\_656 ?  
O3 O3 Si 128.68(10) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 46.43(8) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 99.22(13) 7 5\_656 ?  
O2 O3 Si 73.3(2) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 107.0(3) . 5\_656 ?  
O1 O3 Si 143.23(18) 6 5\_656 ?  
O3 O3 Si 55.4(3) 5\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 148.5(2) 7 5\_656 ?  
Zn O3 Si 143.9(2) 5\_565 5\_656 ?  
O2 O3 Si 61.01(15) 2\_655 5\_656 ?  
O3 O3 Si 14.73(10) 2\_655 5\_656 ?  
O2 O3 Si 88.39(18) 4\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 40.55(8) 2\_655 5\_656 ?  
O1 O3 Si 107.09(15) 7 5\_656 ?  
Si O3 Si 125.73(14) 7 5\_656 ?  
Zn O3 Si 76.28(11) 3\_545 5\_656 ?  
Si O3 Si 142.60(11) 1\_554 5\_656 ?  
O2 O3 Si 132.07(11) 1\_554 5\_656 ?  
Si O3 Si 71.73(7) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 Si 98.95(16) 1\_545 5\_656 ?  
Ca O3 Si 42.89(8) 7\_556 5\_656 ?  
Si O3 Si 54.19(10) 6\_556 5\_656 ?  
O1 O3 Si 57.94(10) 4\_545 5\_656 ?  
O3 O3 Si 92.34(15) 2\_654 5\_656 ?  
O2 O3 Si 78.40(11) 5\_655 5\_656 ?  
Zn O3 Si 80.32(7) 7 5\_656 ?  
Ca O3 Si 116.66(12) 5 5\_656 ?  
Si O3 Si 75.45(11) 4\_545 5\_656 ?  
O1 O3 Si 162.62(15) 1\_554 5\_656 ?  
O3 O3 Si 113.8(2) 7 5\_656 ?  
O1 O3 Si 124.81(17) 5 5\_656 ?  
Zn O3 Si 154.51(8) 1\_544 5\_656 ?  
O1 O3 Si 54.09(11) 3\_545 5\_656 ?  
O2 O3 Si 19.49(6) 5\_656 5\_656 ?  
O1 O3 Si 73.97(14) 6\_556 5\_656 ?  
Ca O3 Si 107.30(16) . 5\_656 ?  
Si O3 O2 133.4(2) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 7.44(15) 6 4\_544 ?  
O2 O3 O2 44.3(2) 6 4\_544 ?  
Ca O3 O2 97.64(14) 3\_545 4\_544 ?  
O3 O3 O2 33.80(12) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 133.08(16) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 92.1(2) 7 4\_544 ?  
O2 O3 O2 152.36(19) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 100.0(2) . 4\_544 ?  
O1 O3 O2 30.96(17) 6 4\_544 ?  
O3 O3 O2 98.8(3) 5\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 77.6(2) 7 4\_544 ?  
Zn O3 O2 67.33(12) 5\_565 4\_544 ?  
O2 O3 O2 132.2(3) 2\_655 4\_544 ?  
O3 O3 O2 140.69(15) 2\_655 4\_544 ?  
O2 O3 O2 75.56(13) 4\_545 4\_544 ?

Si O3 O2 127.37(17) 2\_655 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.6(2) 7 4\_544 ?  
Si O3 O2 98.85(17) 7 4\_544 ?  
Zn O3 O2 142.14(19) 3\_545 4\_544 ?  
Si O3 O2 43.18(11) 1\_554 4\_544 ?  
O2 O3 O2 66.22(13) 1\_554 4\_544 ?  
Si O3 O2 80.23(14) 5\_655 4\_544 ?  
Zn O3 O2 88.19(10) 1\_545 4\_544 ?  
Ca O3 O2 170.16(15) 7\_556 4\_544 ?  
Si O3 O2 123.49(11) 6\_556 4\_544 ?  
O1 O3 O2 84.89(12) 4\_545 4\_544 ?  
O3 O3 O2 71.5(2) 2\_654 4\_544 ?  
O2 O3 O2 63.74(13) 5\_655 4\_544 ?  
Zn O3 O2 53.94(8) 7 4\_544 ?  
Ca O3 O2 46.10(9) 5 4\_544 ?  
Si O3 O2 76.64(9) 4\_545 4\_544 ?  
O1 O3 O2 37.64(9) 1\_554 4\_544 ?  
O3 O3 O2 112.2(2) 7 4\_544 ?  
O1 O3 O2 65.25(12) 5 4\_544 ?  
Zn O3 O2 25.08(6) 1\_544 4\_544 ?  
O1 O3 O2 79.86(13) 3\_545 4\_544 ?  
O2 O3 O2 116.65(8) 5\_656 4\_544 ?  
O1 O3 O2 110.85(11) 6\_556 4\_544 ?  
Ca O3 O2 110.04(10) . 4\_544 ?  
Si O3 O2 133.92(9) 5\_656 4\_544 ?  
Si O3 Ca 174.9(2) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 40.76(16) 6 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 47.19(19) 6 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 82.60(13) 3\_545 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 23.05(10) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 143.21(16) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 63.33(15) 7 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 149.60(18) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 141.1(3) . 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 72.4(2) 6 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 58.1(3) 5\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 97.8(3) 7 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 105.33(18) 5\_565 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 93.80(18) 2\_655 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 105.36(18) 2\_655 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 105.09(16) 4\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 86.09(11) 2\_655 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 100.18(18) 7 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.62(18) 7 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 118.50(13) 3\_545 3\_544 ?  
Si O3 Ca 42.44(8) 1\_554 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 56.34(11) 1\_554 3\_544 ?  
Si O3 Ca 39.33(7) 5\_655 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 127.23(12) 1\_545 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 143.74(9) 7\_556 3\_544 ?  
Si O3 Ca 141.01(8) 6\_556 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 89.61(11) 4\_545 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 32.06(11) 2\_654 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 28.41(11) 5\_655 3\_544 ?

Zn O3 Ca 40.07(6) 7 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 83.28(11) 5 3\_544 ?  
Si O3 Ca 95.68(9) 4\_545 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 56.68(12) 1\_554 3\_544 ?  
O3 O3 Ca 126.9(3) 7 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 106.69(15) 5 3\_544 ?  
Zn O3 Ca 63.40(10) 1\_544 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 61.95(12) 3\_545 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 98.83(11) 5\_656 3\_544 ?  
O1 O3 Ca 142.56(9) 6\_556 3\_544 ?  
Ca O3 Ca 146.02(16) . 3\_544 ?  
Si O3 Ca 106.68(7) 5\_656 3\_544 ?  
O2 O3 Ca 41.52(9) 4\_544 3\_544 ?  
Si O3 O1 89.0(2) . 2\_554 ?  
Si O3 O1 56.49(16) 6 2\_554 ?  
O2 O3 O1 89.8(2) 6 2\_554 ?  
Ca O3 O1 137.33(13) 3\_545 2\_554 ?  
O3 O3 O1 66.18(11) 6 2\_554 ?  
O3 O3 O1 116.13(11) 6\_556 2\_554 ?  
Ca O3 O1 97.79(19) 7 2\_554 ?  
O2 O3 O1 102.00(15) . 2\_554 ?  
O1 O3 O1 57.1(3) . 2\_554 ?  
O1 O3 O1 28.77(11) 6 2\_554 ?  
O3 O3 O1 141.6(4) 5\_655 2\_554 ?  
O2 O3 O1 34.74(10) 7 2\_554 ?  
Zn O3 O1 19.56(11) 5\_565 2\_554 ?  
O2 O3 O1 132.03(16) 2\_655 2\_554 ?  
O3 O3 O1 168.2(2) 2\_655 2\_554 ?  
O2 O3 O1 75.94(13) 4\_545 2\_554 ?  
Si O3 O1 156.15(17) 2\_655 2\_554 ?  
O1 O3 O1 82.16(13) 7 2\_554 ?  
Si O3 O1 59.17(9) 7 2\_554 ?  
Zn O3 O1 109.00(9) 3\_545 2\_554 ?  
Si O3 O1 54.83(11) 1\_554 2\_554 ?  
O2 O3 O1 65.50(13) 1\_554 2\_554 ?  
Si O3 O1 124.0(2) 5\_655 2\_554 ?  
Zn O3 O1 63.06(10) 1\_545 2\_554 ?  
Ca O3 O1 128.54(12) 7\_556 2\_554 ?  
Si O3 O1 107.94(11) 6\_556 2\_554 ?  
O1 O3 O1 110.94(10) 4\_545 2\_554 ?  
O3 O3 O1 104.9(3) 2\_654 2\_554 ?  
O2 O3 O1 113.11(19) 5\_655 2\_554 ?  
Zn O3 O1 103.49(13) 7 2\_554 ?  
Ca O3 O1 51.20(7) 5 2\_554 ?  
Si O3 O1 91.12(9) 4\_545 2\_554 ?  
O1 O3 O1 34.13(14) 1\_554 2\_554 ?  
O3 O3 O1 64.55(14) 7 2\_554 ?  
O1 O3 O1 37.52(6) 5 2\_554 ?  
Zn O3 O1 25.80(7) 1\_544 2\_554 ?  
O1 O3 O1 126.91(13) 3\_545 2\_554 ?  
O2 O3 O1 148.71(11) 5\_656 2\_554 ?  
O1 O3 O1 88.15(14) 6\_556 2\_554 ?  
Ca O3 O1 60.75(9) . 2\_554 ?  
Si O3 O1 162.01(16) 5\_656 2\_554 ?

O2 O3 O1 50.82(9) 4\_544 2\_554 ?  
 Ca O3 O1 86.22(14) 3\_544 2\_554 ?  
 Si O3 O1 110.28(16) . 8 ?  
 Si O3 O1 104.2(3) 6 8 ?  
 O2 O3 O1 118.2(2) 6 8 ?  
 Ca O3 O1 116.56(12) 3\_545 8 ?  
 O3 O3 O1 66.66(16) 6 8 ?  
 O3 O3 O1 127.18(18) 6\_556 8 ?  
 Ca O3 O1 9.00(9) 7 8 ?  
 O2 O3 O1 77.50(16) . 8 ?  
 O1 O3 O1 121.43(11) . 8 ?  
 O1 O3 O1 116.3(3) 6 8 ?  
 O3 O3 O1 59.58(17) 5\_655 8 ?  
 O2 O3 O1 71.30(14) 7 8 ?  
 Zn O3 O1 108.07(15) 5\_565 8 ?  
 O2 O3 O1 37.87(15) 2\_655 8 ?  
 O3 O3 O1 82.93(13) 2\_655 8 ?  
 O2 O3 O1 174.2(3) 4\_545 8 ?  
 Si O3 O1 57.52(9) 2\_655 8 ?  
 O1 O3 O1 33.57(12) 7 8 ?  
 Si O3 O1 55.30(8) 7 8 ?  
 Zn O3 O1 47.05(8) 3\_545 8 ?  
 Si O3 O1 58.18(13) 1\_554 8 ?  
 O2 O3 O1 37.02(11) 1\_554 8 ?  
 Si O3 O1 60.24(8) 5\_655 8 ?  
 Zn O3 O1 148.57(9) 1\_545 8 ?  
 Ca O3 O1 90.23(11) 7\_556 8 ?  
 Si O3 O1 136.92(18) 6\_556 8 ?  
 O1 O3 O1 144.28(9) 4\_545 8 ?  
 O3 O3 O1 44.58(8) 2\_654 8 ?  
 O2 O3 O1 78.28(12) 5\_655 8 ?  
 Zn O3 O1 105.11(14) 7 8 ?  
 Ca O3 O1 142.9(2) 5 8 ?  
 Si O3 O1 163.86(11) 4\_545 8 ?  
 O1 O3 O1 73.87(16) 1\_554 8 ?  
 O3 O3 O1 69.91(11) 7 8 ?  
 O1 O3 O1 134.38(14) 5 8 ?  
 Zn O3 O1 101.25(18) 1\_544 8 ?  
 O1 O3 O1 109.02(13) 3\_545 8 ?  
 O2 O3 O1 112.38(11) 5\_656 8 ?  
 O1 O3 O1 145.07(19) 6\_556 8 ?  
 Ca O3 O1 103.09(8) . 8 ?  
 Si O3 O1 97.27(11) 5\_656 8 ?  
 O2 O3 O1 99.6(2) 4\_544 8 ?  
 Ca O3 O1 72.32(13) 3\_544 8 ?  
 O1 O3 O1 98.62(13) 2\_554 8 ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.378  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 29.94  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.378  
 \_refine\_diff\_density\_max 0.423  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.637  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.131