

data_gme-90

_audit_creation_method	SHELXL
_chemical_name_systematic	
;	
?	
;	
_chemical_name_common	?
_chemical_formula_moiety	?
_chemical_formula_structural	?
_chemical_formula_analytical	?
_chemical_formula_sum	'Al8 Ca0 Na7 O72 Si16'
_chemical_formula_weight	1978.21
_chemical_melting_point	?
_chemical_compound_source	?

loop_

_atom_type_symbol	
_atom_type_description	
_atom_type_scatter_dispersion_real	
_atom_type_scatter_dispersion_imag	
_atom_type_scatter_source	
'Si' 'Si'	0.0817 0.0704
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'	
'Ca' 'Ca'	0.2262 0.3064
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'	
'Al' 'Al'	0.0645 0.0514
'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'	
'Na' 'Na'	0.0362 0.0249
'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, x, z+1/2'	
'-y, x-y, z'	
'-x, -y, z+1/2'	
'-x+y, -x, z'	
'y, -x+y, z+1/2'	
'-x+y, y, z'	
'-x, -x+y, z+1/2'	
'-y, -x, z'	
'x-y, -y, z+1/2'	
'x, x-y, z'	
'y, x, z+1/2'	
'-x, -y, -z'	
'-x+y, -x, -z-1/2'	
'y, -x+y, -z'	
'x, y, -z-1/2'	
'x-y, x, -z'	
'-y, x-y, -z-1/2'	
'x-y, -y, -z'	
'x, x-y, -z-1/2'	
'y, x, -z'	
'-x+y, y, -z-1/2'	
'-x, -x+y, -z'	
'-y, -x, -z-1/2'	

_cell_length_a	13.7834(10)
_cell_length_b	13.7834(10)
_cell_length_c	10.0381(10)
_cell_angle_alpha	90.00

4351_1_supp_69398_10k3zm.txt

```

_cell_angle_beta          90.00
_cell_angle_gamma        120.00
_cell_volume             1651.6(2)
_cell_formula_units_Z     1
_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 1.989
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_F_000      981
_exptl_absorpt_coefficient_mu 0.602
_exptl_absorpt_correction_type ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71073
_diffn_radiation_type      MoK\alpha
_diffn_radiation_source    'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator graphite
_diffn_measurement_device  ?
_diffn_measurement_method  ?
_diffn_standards_number    ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_%   ?
_diffn_reflns_number       789
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0339
_diffn_reflns_limit_h_min  -10
_diffn_reflns_limit_h_max   0
_diffn_reflns_limit_k_min   0
_diffn_reflns_limit_k_max  22
_diffn_reflns_limit_l_min   0
_diffn_reflns_limit_l_max  14
_diffn_reflns_theta_min     2.96
_diffn_reflns_theta_max    34.90
_reflns_number_total        789
_reflns_number_observed     789
_reflns_observed_criterion  >2sigma(I)

_computing_data_collection ?
_computing_cell_refinement ?
_computing_data_reduction  ?
_computing_structure_solution 'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics ?
_computing_publication_material ?

```

_refine_special_details

;

Refinement on F^2 for ALL reflections except for 0 with very negative F^2 or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors wR and all goodnesses 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 observed criterion

of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating $R_{\text{factor_obs}}$ 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 w=1/[\s^2^(Fo^2)+(0.0669P)^2+0.7470P] 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     ?
_refine_ls_extinction_method       none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          789
_refine_ls_number_parameters       66
_refine_ls_number_restraints       0
_refine_ls_R_factor_all            0.0439
_refine_ls_R_factor_obs            0.0439
_refine_ls_wR_factor_all           0.1172
_refine_ls_wR_factor_obs           0.1172
_refine_ls_goodness_of_fit_all     1.138
_refine_ls_goodness_of_fit_obs     1.138
_refine_ls_restrained_S_all        1.138
_refine_ls_restrained_S_obs        1.138
_refine_ls_shift/esd_max           0.076
_refine_ls_shift/esd_mean          0.012
```

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_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Al1 Al 0.43924(5) 0.10529(5) 0.09367(6) 0.0177(2) Uani 0.31 d P .
Si1 Si 0.43924(5) 0.10529(5) 0.09367(6) 0.0177(2) Uani 0.69 d P .
O1 O 0.42552(24) 0.21276(12) 0.05201(30) 0.0411(7) Uani 1 d S .
O2 O 0.85636(24) 0.42818(12) 0.06450(29) 0.0369(6) Uani 1 d S .
O3 O 0.40693(25) 0.06976(26) 0.2500 0.0389(7) Uani 1 d S .
O4 O 0.35298(19) 0.0000 0.0000 0.0376(7) Uani 1 d S .
Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0336(5) 0.0666(11) Uani 1 d S .
Na2 Na 0.1407(9) 0.2814(18) 0.0960(24) 0.146(8) Uani 0.188(9) d SP .
Na2B Na 0.0917(33) 0.2987(41) 0.1481(30) 0.222(21) Uani 0.100(7) d P .
W1 O 0.2273(43) 0.5364(44) 0.2500 0.058(15) Uiso 0.063(7) d SP .
W2 O 0.1502(45) 0.3782(48) 0.2500 0.126(19) Uiso 0.103(9) d SP .
W3 O 0.2102(154) 0.1051(77) 0.0903(180) 0.47(10) Uiso 0.12(3) d SP .
```

loop_

```
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Al1 0.0204(3) 0.0162(3) 0.0180(3) -0.0040(2) -0.0029(2) 0.0103(2)
Si1 0.0204(3) 0.0162(3) 0.0180(3) -0.0040(2) -0.0029(2) 0.0103(2)
O1 0.054(2) 0.0284(9) 0.049(2) -0.0049(8) -0.0098(15) 0.0271(9)
O2 0.042(2) 0.0305(9) 0.042(2) -0.0010(7) -0.0019(13) 0.0211(8)
O3 0.040(2) 0.047(2) 0.0244(13) 0.000 0.000 0.0171(13)
```

O4 0.0373(10) 0.0275(12) 0.0446(15) -0.0189(12) -0.0094(6) 0.0138(6)
 Na1 0.0524(13) 0.0524(13) 0.095(3) 0.000 0.000 0.0262(6)
 Na2A 0.193(18) 0.134(18) 0.093(12) 0.026(12) 0.013(6) 0.067(9)
 Na2B 0.201(26) 0.279(36) 0.122(18) 0.005(21) 0.110(19) 0.072(26)

_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
 A11 O4 1.6367(10) . ?
 A11 O3 1.6379(11) . ?
 A11 O1 1.6386(10) . ?
 A11 O2 1.6548(11) 5_665 ?
 A11 W3 3.16(16) . ?
 A11 Na2B 3.04(4) 5 ?
 A11 Na2B 3.05(4) 21 ?
 A11 Na2A 3.11(2) 15 ?
 A11 Na1 3.389(2) 13_665 ?
 A11 W2 3.62(5) 14_556 ?
 A11 W2 3.68(2) 21 ?
 A11 W1 3.78(2) 21 ?
 Si1 O4 1.6367(10) . ?
 Si1 O3 1.6379(11) . ?
 Si1 O1 1.6386(10) . ?
 Si1 O2 1.6548(11) 5_665 ?
 Si1 W3 3.16(16) . ?
 Si1 Na2B 3.04(4) 5 ?
 Si1 Na2B 3.05(4) 21 ?
 Si1 Na2A 3.11(2) 15 ?
 Si1 Na1 3.389(2) 13_665 ?
 Si1 W2 3.62(5) 14_556 ?
 Si1 W2 3.68(2) 21 ?
 Si1 W1 3.78(2) 21 ?
 O1 Si1 1.6386(10) 11 ?
 O1 A11 1.6386(10) 11 ?
 O1 Na2A 2.27(2) 15 ?
 O1 W3 2.60(19) . ?
 O1 Na2B 2.64(3) 21 ?
 O1 Na2B 2.64(3) 15 ?
 O1 Na1 3.004(3) 13_665 ?
 O1 W2 3.130(14) 21 ?
 O1 W2 3.130(14) 15 ?
 O1 W1 3.36(2) 21 ?
 O2 Si1 1.6548(11) 9_665 ?
 O2 A11 1.6548(11) 9_665 ?
 O2 A11 1.6548(11) 3_655 ?
 O2 Si1 1.6548(11) 3_655 ?
 O2 Na1 2.469(4) 13_665 ?
 O2 W1 3.48(2) 13_665 ?
 O2 W1 3.48(2) 8_654 ?
 O2 Na2B 4.07(4) 13_665 ?
 O2 Na2B 4.07(4) 23_655 ?
 O2 W1 4.06(3) 19_665 ?
 O2 W1 4.06(3) 2_654 ?
 O2 W2 4.16(4) 13_665 ?
 O3 Si1 1.6379(11) 16_556 ?

03 Al1 1.6379(11) 16_556 ?
 03 Na2B 2.73(4) 5 ?
 03 Na2B 2.73(4) 14_556 ?
 03 W2 2.79(5) 14_556 ?
 03 W3 3.39(15) . ?
 03 W3 3.39(15) 16_556 ?
 03 W1 3.61(5) 14_556 ?
 03 Na2A 3.691(12) 5 ?
 03 Na2A 3.691(12) 14_556 ?
 04 Si1 1.6367(10) 19 ?
 04 Al1 1.6367(10) 19 ?
 04 Na2B 2.31(4) 21 ?
 04 Na2B 2.31(4) 5 ?
 04 Na2A 2.753(10) 5 ?
 04 Na2A 2.753(10) 15 ?
 04 W3 3.11(12) . ?
 04 W3 3.10(12) 15 ?
 04 W2 3.16(3) 14_556 ?
 04 W2 3.16(3) 21 ?
 Na1 O2 2.469(4) 13_665 ?
 Na1 O2 2.469(4) 17 ?
 Na1 O2 2.469(4) 15_565 ?
 Na1 W1 2.73(3) 14_566 ?
 Na1 W1 2.73(3) 20_566 ?
 Na1 W1 2.73(3) 9_665 ?
 Na1 W1 2.73(3) . ?
 Na1 W1 2.73(3) 3_665 ?
 Na1 W1 2.73(3) 7 ?
 Na1 O1 3.004(3) 15_565 ?
 Na1 O1 3.004(3) 17 ?
 Na1 O1 3.004(3) 13_665 ?
 Na2A Na2B 0.97(4) 7 ?
 Na2A Na2B 0.97(4) . ?
 Na2A W3 2.05(18) 17 ?
 Na2A W2 2.00(4) 7 ?
 Na2A W2 2.00(4) . ?
 Na2A O1 2.27(2) 17 ?
 Na2A Na2B 2.70(4) 22_556 ?
 Na2A Na2B 2.70(4) 16_556 ?
 Na2A O4 2.753(10) 17 ?
 Na2A O4 2.753(10) 3 ?
 Na2A Na2A 3.09(5) 16_556 ?
 Na2A W3 3.03(5) 3 ?
 Na2A W3 3.02(5) . ?
 Na2B W2 1.42(5) . ?
 Na2B Na2B 1.59(8) 7 ?
 Na2B W2 1.93(6) 7 ?
 Na2B Na2B 2.05(6) 16_556 ?
 Na2B O4 2.31(4) 3 ?
 Na2B W3 2.73(18) 17 ?
 Na2B Na2B 2.59(8) 22_556 ?
 Na2B O1 2.64(3) 17 ?
 Na2B Na2A 2.70(4) 16_556 ?
 Na2B O3 2.73(4) 3 ?
 Na2B W3 2.76(6) 3 ?
 Na2B W1 3.02(7) . ?
 W1 W1 1.13(10) 7 ?
 W1 W2 1.89(8) . ?
 W1 W1 2.13(11) 20_566 ?
 W1 W2 2.18(8) 7 ?
 W1 Na1 2.73(3) 14_566 ?
 W1 W1 2.87(9) 3_665 ?
 W1 W1 2.87(9) 14_566 ?
 W1 Na2B 3.02(7) 16_556 ?
 W1 Na2B 3.31(7) 7 ?
 W1 Na2B 3.31(7) 22_556 ?
 W1 W1 3.26(10) 9_665 ?
 W2 W2 1.07(10) 7 ?

W2 Na2B 1.42(5) 16_556 ?
 W2 Na2B 1.93(6) 7 ?
 W2 Na2B 1.93(6) 22_556 ?
 W2 Na2A 2.00(4) 16_556 ?
 W2 W1 2.18(8) 7 ?
 W2 O3 2.79(5) 3 ?
 W2 O1 3.130(14) 2 ?
 W2 O1 3.130(14) 17 ?
 W2 O4 3.16(3) 3 ?
 W3 Na2A 2.05(18) 15 ?
 W3 Na2B 2.74(18) 21 ?
 W3 Na2B 2.73(18) 15 ?
 W3 Na2B 2.76(6) 5 ?
 W3 Na2B 2.75(6) 7 ?
 W3 O4 3.10(12) 17 ?
 W3 Si1 3.15(16) 11 ?
 W3 Al1 3.15(16) 11 ?
 W3 Na2A 3.03(5) 5 ?

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
 O4 Al1 O3 108.47(11) . . ?
 O4 Al1 O1 107.09(12) . . ?
 O3 Al1 O1 112.2(2) . . ?
 O4 Al1 O2 112.23(13) . 5_665 ?
 O3 Al1 O2 110.91(14) . 5_665 ?
 O1 Al1 O2 105.92(14) . 5_665 ?
 O4 Al1 W3 73.2(23) . . ?
 O3 Al1 W3 83.6(32) . . ?
 O1 Al1 W3 55.2(20) . . ?
 O2 Al1 W3 160.4(24) 5_665 . ?
 O4 Al1 Na2B 48.5(5) . 5 ?
 O3 Al1 Na2B 63.4(6) . 5 ?
 O1 Al1 Na2B 107.9(9) . 5 ?
 O2 Al1 Na2B 145.0(9) 5_665 5 ?
 W3 Al1 Na2B 52.9(22) . 5 ?
 O4 Al1 Na2B 48.0(7) . 21 ?
 O3 Al1 Na2B 132.4(9) . 21 ?
 O1 Al1 Na2B 59.7(7) . 21 ?
 O2 Al1 Na2B 116.4(9) 5_665 21 ?
 W3 Al1 Na2B 52.2(33) . 21 ?
 Na2B Al1 Na2B 74.7(15) 5 21 ?
 O4 Al1 Na2A 62.1(2) . 15 ?
 O3 Al1 Na2A 121.8(5) . 15 ?
 O1 Al1 Na2A 45.2(2) . 15 ?
 O2 Al1 Na2A 126.1(5) 5_665 15 ?
 W3 Al1 Na2A 38.3(32) . 15 ?
 Na2B Al1 Na2A 75.1(9) 5 15 ?
 Na2B Al1 Na2A 18.1(7) 21 15 ?
 O4 Al1 Na1 122.07(8) . 13_665 ?
 O3 Al1 Na1 128.72(13) . 13_665 ?
 O1 Al1 Na1 62.40(11) . 13_665 ?
 O2 Al1 Na1 43.57(10) 5_665 13_665 ?
 W3 Al1 Na1 117.1(21) . 13_665 ?
 Na2B Al1 Na1 165.8(8) 5 13_665 ?
 Na2B Al1 Na1 91.2(8) 21 13_665 ?
 Na2A Al1 Na1 91.1(4) 15 13_665 ?
 O4 Al1 W2 60.8(4) . 14_556 ?
 O3 Al1 W2 47.7(4) . 14_556 ?
 O1 Al1 W2 126.2(9) . 14_556 ?
 O2 Al1 W2 127.6(9) 5_665 14_556 ?
 W3 Al1 W2 71.8(25) . 14_556 ?

Na2B Al1 w2 22.5(10) 5 14_556 ?
 Na2B Al1 w2 96.2(10) 21 14_556 ?
 Na2A Al1 w2 97.6(8) 15 14_556 ?
 Na1 Al1 w2 170.9(8) 13_665 14_556 ?
 O4 Al1 w2 58.9(8) . 21 ?
 O3 Al1 w2 154.0(8) . 21 ?
 O1 Al1 w2 57.9(8) . 21 ?
 O2 Al1 w2 95.1(8) 5_665 21 ?
 W3 Al1 w2 71.1(33) . 21 ?
 Na2B Al1 w2 95.3(13) 5 21 ?
 Na2B Al1 w2 21.9(11) 21 21 ?
 Na2A Al1 w2 33.0(9) 15 21 ?
 Na1 Al1 w2 71.0(9) 13_665 21 ?
 W2 Al1 w2 115.5(10) 14_556 21 ?
 O4 Al1 w1 79.0(7) . 21 ?
 O3 Al1 w1 172.3(7) . 21 ?
 O1 Al1 w1 62.6(8) . 21 ?
 O2 Al1 w1 66.9(8) 5_665 21 ?
 W3 Al1 w1 97.0(33) . 21 ?
 Na2B Al1 w1 122.9(10) 5 21 ?
 Na2B Al1 w1 51.2(11) 21 21 ?
 Na2A Al1 w1 59.4(9) 15 21 ?
 Na1 Al1 w1 44.4(7) 13_665 21 ?
 W2 Al1 w1 139.7(8) 14_556 21 ?
 W2 Al1 w1 29.3(11) 21 21 ?
 O4 Si1 O3 108.47(11) . . ?
 O4 Si1 O1 107.09(12) . . ?
 O3 Si1 O1 112.2(2) . . ?
 O4 Si1 O2 112.23(13) . 5_665 ?
 O3 Si1 O2 110.91(14) . 5_665 ?
 O1 Si1 O2 105.92(14) . 5_665 ?
 O4 Si1 W3 73.2(23) . . ?
 O3 Si1 W3 83.6(32) . . ?
 O1 Si1 W3 55.2(20) . . ?
 O2 Si1 W3 160.4(24) 5_665 . ?
 O4 Si1 Na2B 48.5(5) . 5 ?
 O3 Si1 Na2B 63.4(6) . 5 ?
 O1 Si1 Na2B 107.9(9) . 5 ?
 O2 Si1 Na2B 145.0(9) 5_665 5 ?
 W3 Si1 Na2B 52.9(22) . 5 ?
 O4 Si1 Na2B 48.0(7) . 21 ?
 O3 Si1 Na2B 132.4(9) . 21 ?
 O1 Si1 Na2B 59.7(7) . 21 ?
 O2 Si1 Na2B 116.4(9) 5_665 21 ?
 W3 Si1 Na2B 52.2(33) . 21 ?
 Na2B Si1 Na2B 74.7(15) 5 21 ?
 O4 Si1 Na2A 62.1(2) . 15 ?
 O3 Si1 Na2A 121.8(5) . 15 ?
 O1 Si1 Na2A 45.2(2) . 15 ?
 O2 Si1 Na2A 126.1(5) 5_665 15 ?
 W3 Si1 Na2A 38.3(32) . 15 ?
 Na2B Si1 Na2A 75.1(9) 5 15 ?
 Na2B Si1 Na2A 18.1(7) 21 15 ?
 O4 Si1 Na1 122.07(8) . 13_665 ?
 O3 Si1 Na1 128.72(13) . 13_665 ?
 O1 Si1 Na1 62.40(11) . 13_665 ?
 O2 Si1 Na1 43.57(10) 5_665 13_665 ?
 W3 Si1 Na1 117.1(21) . 13_665 ?
 Na2B Si1 Na1 165.8(8) 5 13_665 ?
 Na2B Si1 Na1 91.2(8) 21 13_665 ?
 Na2A Si1 Na1 91.1(4) 15 13_665 ?
 O4 Si1 W2 60.8(4) . 14_556 ?
 O3 Si1 W2 47.7(4) . 14_556 ?
 O1 Si1 W2 126.2(9) . 14_556 ?
 O2 Si1 W2 127.6(9) 5_665 14_556 ?
 W3 Si1 W2 71.8(25) . 14_556 ?
 Na2B Si1 W2 22.5(10) 5 14_556 ?
 Na2B Si1 W2 96.2(10) 21 14_556 ?

Na2A Si1 W2 97.6(8) 15 14_556 ?
 Na1 Si1 W2 170.9(8) 13_665 14_556 ?
 O4 Si1 W2 58.9(8) . 21 ?
 O3 Si1 W2 154.0(8) . 21 ?
 O1 Si1 W2 57.9(8) . 21 ?
 O2 Si1 W2 95.1(8) 5_665 21 ?
 W3 Si1 W2 71.1(33) . 21 ?
 Na2B Si1 W2 95.3(13) 5 21 ?
 Na2B Si1 W2 21.9(11) 21 21 ?
 Na2A Si1 W2 33.0(9) 15 21 ?
 Na1 Si1 W2 71.0(9) 13_665 21 ?
 W2 Si1 W2 115.5(10) 14_556 21 ?
 O4 Si1 W1 79.0(7) . 21 ?
 O3 Si1 W1 172.3(7) . 21 ?
 O1 Si1 W1 62.6(8) . 21 ?
 O2 Si1 W1 66.9(8) 5_665 21 ?
 W3 Si1 W1 97.0(33) . 21 ?
 Na2B Si1 W1 122.9(10) 5 21 ?
 Na2B Si1 W1 51.2(11) 21 21 ?
 Na2A Si1 W1 59.4(9) 15 21 ?
 Na1 Si1 W1 44.4(7) 13_665 21 ?
 W2 Si1 W1 139.7(8) 14_556 21 ?
 W2 Si1 W1 29.3(11) 21 21 ?
 Si1 O1 Al1 0.00(6) . . ?
 Si1 O1 Si1 148.2(2) . 11 ?
 Al1 O1 Si1 148.2(2) . 11 ?
 Si1 O1 Al1 148.2(2) . 11 ?
 Al1 O1 Al1 148.2(2) . 11 ?
 Si1 O1 Al1 0.00(7) 11 11 ?
 Si1 O1 Na2A 104.03(13) . 15 ?
 Al1 O1 Na2A 104.03(13) . 15 ?
 Si1 O1 Na2A 104.03(13) 11 15 ?
 Al1 O1 Na2A 104.03(13) 11 15 ?
 Si1 O1 W3 93.7(11) . . ?
 Al1 O1 W3 93.7(11) . . ?
 Si1 O1 W3 93.3(11) 11 . ?
 Al1 O1 W3 93.3(11) 11 . ?
 Na2A O1 W3 49.3(39) 15 . ?
 Si1 O1 Na2B 87.8(9) . 21 ?
 Al1 O1 Na2B 87.8(9) . 21 ?
 Si1 O1 Na2B 122.8(10) 11 21 ?
 Al1 O1 Na2B 122.8(10) 11 21 ?
 Na2A O1 Na2B 21.2(10) 15 21 ?
 W3 O1 Na2B 63.0(38) . 21 ?
 Si1 O1 Na2B 122.8(10) . 15 ?
 Al1 O1 Na2B 122.8(10) . 15 ?
 Si1 O1 Na2B 87.8(9) 11 15 ?
 Al1 O1 Na2B 87.8(9) 11 15 ?
 Na2A O1 Na2B 21.2(10) 15 15 ?
 W3 O1 Na2B 62.9(38) . 15 ?
 Na2B O1 Na2B 35.0(19) 21 15 ?
 Si1 O1 Na1 88.69(11) . 13_665 ?
 Al1 O1 Na1 88.69(11) . 13_665 ?
 Si1 O1 Na1 88.69(11) 11 13_665 ?
 Al1 O1 Na1 88.69(11) 11 13_665 ?
 Na2A O1 Na1 122.6(6) 15 13_665 ?
 W3 O1 Na1 171.9(39) . 13_665 ?
 Na2B O1 Na1 109.4(10) 21 13_665 ?
 Na2B O1 Na1 109.4(10) 15 13_665 ?
 Si1 O1 W2 95.8(9) . 21 ?
 Al1 O1 W2 95.8(9) . 21 ?
 Si1 O1 W2 115.5(9) 11 21 ?
 Al1 O1 W2 115.5(9) 11 21 ?
 Na2A O1 W2 39.7(12) 15 21 ?
 W3 O1 W2 88.0(39) . 21 ?
 Na2B O1 W2 26.8(12) 21 21 ?
 Na2B O1 W2 37.9(12) 15 21 ?
 Na1 O1 W2 84.0(10) 13_665 21 ?

Si1 01 w2 115.5(9) . 15 ?
 Al1 01 w2 115.5(9) . 15 ?
 Si1 01 w2 95.8(9) 11 15 ?
 Al1 01 w2 95.8(9) 11 15 ?
 Na2A 01 w2 39.7(12) 15 15 ?
 W3 01 w2 88.0(39) . 15 ?
 Na2B 01 w2 37.9(12) 21 15 ?
 Na2B 01 w2 26.8(12) 15 15 ?
 Na1 01 w2 84.0(10) 13_665 15 ?
 W2 01 w2 19.7(19) 21 15 ?
 Si1 01 w1 91.7(9) . 21 ?
 Al1 01 w1 91.7(9) . 21 ?
 Si1 01 w1 110.6(9) 11 21 ?
 Al1 01 w1 110.6(9) 11 21 ?
 Na2A 01 w1 73.0(10) 15 21 ?
 W3 01 w1 121.6(40) . 21 ?
 Na2B 01 w1 59.2(13) 21 21 ?
 Na2B 01 w1 65.7(12) 15 21 ?
 Na1 01 w1 50.5(8) 13_665 21 ?
 W2 01 w1 33.6(13) 21 21 ?
 W2 01 w1 39.2(13) 15 21 ?
 Si1 02 Al1 0.00(7) 9_665 9_665 ?
 Si1 02 Al1 141.7(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Al1 141.7(2) 9_665 3_655 ?
 Si1 02 Si1 141.7(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Si1 141.7(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Si1 0.00(6) 3_655 3_655 ?
 Si1 02 Na1 108.92(10) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na1 108.92(10) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na1 108.92(10) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 Na1 108.92(10) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 w1 87.2(8) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 w1 87.2(8) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 w1 122.0(8) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 w1 122.0(8) 3_655 13_665 ?
 Na1 02 w1 51.3(8) 13_665 13_665 ?
 Si1 02 w1 122.0(8) 9_665 8_654 ?
 Al1 02 w1 122.0(8) 9_665 8_654 ?
 Al1 02 w1 87.2(8) 3_655 8_654 ?
 Si1 02 w1 87.2(8) 3_655 8_654 ?
 Na1 02 w1 51.3(8) 13_665 8_654 ?
 W1 02 w1 35.7(17) 13_665 8_654 ?
 Si1 02 Na2B 42.2(6) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na2B 42.2(6) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na2B 147.3(5) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 Na2B 147.3(5) 3_655 13_665 ?
 Na1 02 Na2B 86.0(6) 13_665 13_665 ?
 W1 02 Na2B 46.5(10) 13_665 13_665 ?
 W1 02 Na2B 79.9(10) 8_654 13_665 ?
 Si1 02 Na2B 147.3(5) 9_665 23_655 ?
 Al1 02 Na2B 147.3(5) 9_665 23_655 ?
 Al1 02 Na2B 42.2(6) 3_655 23_655 ?
 Si1 02 Na2B 42.2(6) 3_655 23_655 ?
 Na1 02 Na2B 86.0(6) 13_665 23_655 ?
 W1 02 Na2B 79.9(10) 13_665 23_655 ?
 W1 02 Na2B 46.5(10) 8_654 23_655 ?
 Na2B 02 Na2B 113.8(11) 13_665 23_655 ?
 Si1 02 w1 83.9(7) 9_665 19_665 ?
 Al1 02 w1 83.9(7) 9_665 19_665 ?
 Al1 02 w1 130.6(7) 3_655 19_665 ?
 Si1 02 w1 130.6(7) 3_655 19_665 ?
 Na1 02 w1 41.0(7) 13_665 19_665 ?
 W1 02 w1 14.7(14) 13_665 19_665 ?
 W1 02 w1 43.8(14) 8_654 19_665 ?
 Na2B 02 w1 48.0(9) 13_665 19_665 ?
 Na2B 02 w1 90.1(8) 23_655 19_665 ?
 Si1 02 w1 130.6(7) 9_665 2_654 ?
 Al1 02 w1 130.6(7) 9_665 2_654 ?

Al1 02 w1 83.9(7) 3_655 2_654 ?
 Si1 02 w1 83.9(7) 3_655 2_654 ?
 Na1 02 w1 41.0(7) 13_665 2_654 ?
 W1 02 w1 43.8(14) 13_665 2_654 ?
 W1 02 w1 14.7(14) 8_654 2_654 ?
 Na2B 02 w1 90.1(8) 13_665 2_654 ?
 Na2B 02 w1 48.0(9) 23_655 2_654 ?
 W1 02 w1 47.2(14) 19_665 2_654 ?
 Si1 02 w2 61.6(6) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 w2 61.6(6) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 w2 139.0(6) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 w2 139.0(6) 3_655 13_665 ?
 Na1 02 w2 71.4(8) 13_665 13_665 ?
 W1 02 w2 26.7(11) 13_665 13_665 ?
 W1 02 w2 60.4(10) 8_654 13_665 ?
 Na2B 02 w2 19.8(7) 13_665 13_665 ?
 Na2B 02 w2 98.7(8) 23_655 13_665 ?
 W1 02 w2 30.8(10) 19_665 13_665 ?
 W1 02 w2 70.3(9) 2_654 13_665 ?
 Si1 03 Al1 0.00(9) 16_556 16_556 ?
 Si1 03 Al1 146.7(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Al1 146.7(2) 16_556 . ?
 Si1 03 Si1 146.7(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 146.7(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 0.00(8) . . ?
 Si1 03 Na2B 128.0(7) 16_556 5 ?
 Al1 03 Na2B 128.0(7) 16_556 5 ?
 Al1 03 Na2B 84.1(7) . 5 ?
 Si1 03 Na2B 84.1(7) . 5 ?
 Si1 03 Na2B 84.1(7) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 Na2B 84.1(7) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 Na2B 128.0(7) . 14_556 ?
 Si1 03 Na2B 128.0(7) . 14_556 ?
 Na2B 03 Na2B 44.0(14) 5 14_556 ?
 Si1 03 w2 106.57(11) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.57(11) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.57(11) . 14_556 ?
 Si1 03 w2 106.57(11) . 14_556 ?
 Na2B 03 w2 29.7(10) 5 14_556 ?
 Na2B 03 w2 29.7(10) 14_556 14_556 ?
 Si1 03 w3 121.8(26) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 121.8(26) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 67.7(32) . . ?
 Si1 03 w3 67.7(32) . . ?
 Na2B 03 w3 52.2(21) 5 . ?
 Na2B 03 w3 75.0(31) 14_556 . ?
 W2 03 w3 79.8(24) 14_556 . ?
 Si1 03 w3 67.7(32) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 67.7(32) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 121.8(26) . 16_556 ?
 Si1 03 w3 121.8(26) . 16_556 ?
 Na2B 03 w3 75.0(31) 5 16_556 ?
 Na2B 03 w3 52.2(21) 14_556 16_556 ?
 W2 03 w3 79.8(24) 14_556 16_556 ?
 W3 03 w3 56.4(60) . 16_556 ?
 Si1 03 w1 103.3(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 103.3(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 103.3(2) . 14_556 ?
 Si1 03 w1 103.3(2) . 14_556 ?
 Na2B 03 w1 54.8(12) 5 14_556 ?
 Na2B 03 w1 54.8(12) 14_556 14_556 ?
 W2 03 w1 31.0(14) 14_556 14_556 ?
 W3 03 w1 107.0(18) . 14_556 ?
 W3 03 w1 107.0(18) 16_556 14_556 ?
 Si1 03 Na2A 130.6(4) 16_556 5 ?
 Al1 03 Na2A 130.6(4) 16_556 5 ?
 Al1 03 Na2A 81.3(4) . 5 ?
 Si1 03 Na2A 81.3(4) . 5 ?

Na2B 03 Na2A 2.9(8) 5 5 ?
 Na2B 03 Na2A 46.7(8) 14_556 5 ?
 W2 03 Na2A 32.4(8) 14_556 5 ?
 W3 03 Na2A 50.5(18) . 5 ?
 W3 03 Na2A 76.1(28) 16_556 5 ?
 W1 03 Na2A 56.5(8) 14_556 5 ?
 Si1 03 Na2A 81.3(4) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 Na2A 81.3(4) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 Na2A 130.6(4) . 14_556 ?
 Si1 03 Na2A 130.6(4) . 14_556 ?
 Na2B 03 Na2A 46.7(8) 5 14_556 ?
 Na2B 03 Na2A 2.9(8) 14_556 14_556 ?
 W2 03 Na2A 32.4(8) 14_556 14_556 ?
 W3 03 Na2A 76.1(28) . 14_556 ?
 W3 03 Na2A 50.5(18) 16_556 14_556 ?
 W1 03 Na2A 56.5(8) 14_556 14_556 ?
 Na2A 03 Na2A 49.5(7) 5 14_556 ?
 Si1 04 Al1 0.00(7) 19 19 ?
 Si1 04 Al1 147.1(2) 19 . ?
 Al1 04 Al1 147.1(2) 19 . ?
 Si1 04 Si1 147.1(2) 19 . ?
 Al1 04 Si1 147.1(2) 19 . ?
 Al1 04 Si1 0.00(8) . . ?
 Si1 04 Na2B 99.4(8) 19 21 ?
 Al1 04 Na2B 99.4(8) 19 21 ?
 Al1 04 Na2B 100.1(9) . 21 ?
 Si1 04 Na2B 100.1(9) . 21 ?
 Si1 04 Na2B 100.1(9) 19 5 ?
 Al1 04 Na2B 100.1(9) 19 5 ?
 Al1 04 Na2B 99.4(8) . 5 ?
 Si1 04 Na2B 99.4(8) . 5 ?
 Na2B 04 Na2B 106.4(24) 21 5 ?
 Si1 04 Na2A 86.2(4) 19 5 ?
 Al1 04 Na2A 86.2(4) 19 5 ?
 Al1 04 Na2A 117.9(4) . 5 ?
 Si1 04 Na2A 117.9(4) . 5 ?
 Na2B 04 Na2A 95.2(12) 21 5 ?
 Na2B 04 Na2A 19.8(7) 5 5 ?
 Si1 04 Na2A 117.9(4) 19 15 ?
 Al1 04 Na2A 117.9(4) 19 15 ?
 Al1 04 Na2A 86.2(4) . 15 ?
 Si1 04 Na2A 86.2(4) . 15 ?
 Na2B 04 Na2A 19.8(7) 21 15 ?
 Na2B 04 Na2A 95.2(12) 5 15 ?
 Na2A 04 Na2A 89.4(9) 5 15 ?
 Si1 04 W3 136.4(31) 19 . ?
 Al1 04 W3 136.4(31) 19 . ?
 Al1 04 W3 76.5(31) . . ?
 Si1 04 W3 76.5(31) . . ?
 Na2B 04 W3 58.4(32) 21 . ?
 Na2B 04 W3 59.1(31) 5 . ?
 Na2A 04 W3 61.9(27) 5 . ?
 Na2A 04 W3 40.4(29) 15 . ?
 Si1 04 W3 76.6(31) 19 15 ?
 Al1 04 W3 76.6(31) 19 15 ?
 Al1 04 W3 136.3(31) . 15 ?
 Si1 04 W3 136.3(31) . 15 ?
 Na2B 04 W3 58.9(31) 21 15 ?
 Na2B 04 W3 58.5(32) 5 15 ?
 Na2A 04 W3 40.6(29) 5 15 ?
 Na2A 04 W3 61.8(27) 15 15 ?
 W3 04 W3 59.8(61) . 15 ?
 Si1 04 W2 94.7(9) 19 14_556 ?
 Al1 04 W2 94.7(9) 19 14_556 ?
 Al1 04 W2 92.3(8) . 14_556 ?
 Si1 04 W2 92.3(8) . 14_556 ?
 Na2B 04 W2 130.7(16) 21 14_556 ?
 Na2B 04 W2 24.2(15) 5 14_556 ?

Na2A O4 W2 38.8(10) 5 14_556 ?
 Na2A O4 W2 118.0(12) 15 14_556 ?
 W3 O4 W2 79.1(32) . 14_556 ?
 W3 O4 W2 79.4(31) 15 14_556 ?
 Si1 O4 W2 92.3(8) 19 21 ?
 Al1 O4 W2 92.3(8) 19 21 ?
 Al1 O4 W2 94.7(9) . 21 ?
 Si1 O4 W2 94.7(9) . 21 ?
 Na2B O4 W2 24.2(15) 21 21 ?
 Na2B O4 W2 130.7(16) 5 21 ?
 Na2A O4 W2 118.0(12) 5 21 ?
 Na2A O4 W2 38.8(10) 15 21 ?
 W3 O4 W2 79.2(31) . 21 ?
 W3 O4 W2 78.9(32) 15 21 ?
 W2 O4 W2 154.9(20) 14_556 21 ?
 O2 Na1 O2 105.16(13) 13_665 17 ?
 O2 Na1 O2 105.16(13) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 O2 105.16(13) 17 15_565 ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 13_665 14_566 ?
 O2 Na1 W1 83.8(9) 17 14_566 ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 15_565 14_566 ?
 O2 Na1 W1 83.8(10) 13_665 20_566 ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 17 20_566 ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 15_565 20_566 ?
 W1 Na1 W1 23.8(22) 14_566 20_566 ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 13_665 9_665 ?
 O2 Na1 W1 83.8(9) 17 9_665 ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 15_565 9_665 ?
 W1 Na1 W1 45.9(21) 14_566 9_665 ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) 20_566 9_665 ?
 O2 Na1 W1 83.8(10) 13_665 . ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 17 . ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 15_565 . ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) 14_566 . ?
 W1 Na1 W1 45.9(21) 20_566 . ?
 W1 Na1 W1 73.2(18) 9_665 . ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 13_665 3_665 ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 17 3_665 ?
 O2 Na1 W1 83.8(9) 15_565 3_665 ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) 14_566 3_665 ?
 W1 Na1 W1 73.2(18) 20_566 3_665 ?
 W1 Na1 W1 23.8(22) 9_665 3_665 ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) . 3_665 ?
 O2 Na1 W1 102.7(11) 13_665 7 ?
 O2 Na1 W1 147.1(10) 17 7 ?
 O2 Na1 W1 83.8(9) 15_565 7 ?
 W1 Na1 W1 73.2(18) 14_566 7 ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) 20_566 7 ?
 W1 Na1 W1 63.3(14) 9_665 7 ?
 W1 Na1 W1 23.8(22) . 7 ?
 W1 Na1 W1 45.9(21) 3_665 7 ?
 O2 Na1 O1 56.40(4) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 O1 56.40(4) 17 15_565 ?
 O2 Na1 O1 139.9(2) 15_565 15_565 ?
 W1 Na1 O1 71.4(9) 14_566 15_565 ?
 W1 Na1 O1 71.4(9) 20_566 15_565 ?
 W1 Na1 O1 109.2(11) 9_665 15_565 ?
 W1 Na1 O1 109.2(11) . 15_565 ?
 W1 Na1 O1 132.2(10) 3_665 15_565 ?
 W1 Na1 O1 132.2(10) 7 15_565 ?
 O2 Na1 O1 56.40(4) 13_665 17 ?
 O2 Na1 O1 139.9(2) 17 17 ?
 O2 Na1 O1 56.40(4) 15_565 17 ?
 W1 Na1 O1 132.2(10) 14_566 17 ?
 W1 Na1 O1 109.2(11) 20_566 17 ?
 W1 Na1 O1 132.2(10) 9_665 17 ?
 W1 Na1 O1 71.4(9) . 17 ?
 W1 Na1 O1 109.2(11) 3_665 17 ?

w1 Na1 01 71.4(9) 7 17 ?
 01 Na1 01 112.17(9) 15_565 17 ?
 02 Na1 01 139.9(2) 13_665 13_665 ?
 02 Na1 01 56.40(4) 17 13_665 ?
 02 Na1 01 56.40(4) 15_565 13_665 ?
 w1 Na1 01 109.2(11) 14_566 13_665 ?
 w1 Na1 01 132.2(10) 20_566 13_665 ?
 w1 Na1 01 71.4(9) 9_665 13_665 ?
 w1 Na1 01 132.2(10) . 13_665 ?
 w1 Na1 01 71.4(9) 3_665 13_665 ?
 w1 Na1 01 109.2(11) 7 13_665 ?
 01 Na1 01 112.17(9) 15_565 13_665 ?
 01 Na1 01 112.17(9) 17 13_665 ?
 Na2B Na2A Na2B 109.4(53) 7 . ?
 Na2B Na2A w3 125.5(27) 7 17 ?
 Na2B Na2A w3 125.0(27) . 17 ?
 Na2B Na2A w2 40.9(30) 7 7 ?
 Na2B Na2A w2 71.4(33) . 7 ?
 w3 Na2A w2 160.4(35) 17 7 ?
 Na2B Na2A w2 71.4(33) 7 . ?
 Na2B Na2A w2 40.9(30) . . ?
 w3 Na2A w2 160.1(35) 17 . ?
 w2 Na2A w2 31.1(29) 7 . ?
 Na2B Na2A 01 101.0(31) 7 17 ?
 Na2B Na2A 01 101.0(31) . 17 ?
 w3 Na2A 01 73.6(52) 17 17 ?
 w2 Na2A 01 93.9(16) 7 17 ?
 w2 Na2A 01 93.9(16) . 17 ?
 Na2B Na2A Na2B 39.8(19) 7 22_556 ?
 Na2B Na2A Na2B 73.3(32) . 22_556 ?
 w3 Na2A Na2B 154.2(40) 17 22_556 ?
 w2 Na2A Na2B 30.9(17) 7 22_556 ?
 w2 Na2A Na2B 45.6(16) . 22_556 ?
 01 Na2A Na2B 124.4(15) 17 22_556 ?
 Na2B Na2A Na2B 73.3(32) 7 16_556 ?
 Na2B Na2A Na2B 39.8(19) . 16_556 ?
 w3 Na2A Na2B 153.9(40) 17 16_556 ?
 w2 Na2A Na2B 45.6(16) 7 16_556 ?
 w2 Na2A Na2B 30.9(17) . 16_556 ?
 01 Na2A Na2B 124.4(15) 17 16_556 ?
 Na2B Na2A Na2B 34.3(19) 22_556 16_556 ?
 Na2B Na2A 04 53.2(23) 7 17 ?
 Na2B Na2A 04 147.5(36) . 17 ?
 w3 Na2A 04 79.2(23) 17 17 ?
 w2 Na2A 04 81.6(14) 7 17 ?
 w2 Na2A 04 109.1(17) . 17 ?
 01 Na2A 04 62.4(4) 17 17 ?
 Na2B Na2A 04 92.8(9) 22_556 17 ?
 Na2B Na2A 04 124.8(13) 16_556 17 ?
 Na2B Na2A 04 147.5(36) 7 3 ?
 Na2B Na2A 04 53.2(23) . 3 ?
 w3 Na2A 04 78.8(23) 17 3 ?
 w2 Na2A 04 109.1(17) 7 3 ?
 w2 Na2A 04 81.6(14) . 3 ?
 01 Na2A 04 62.4(4) 17 3 ?
 Na2B Na2A 04 124.8(13) 22_556 3 ?
 Na2B Na2A 04 92.8(9) 16_556 3 ?
 04 Na2A 04 124.2(8) 17 3 ?
 Na2B Na2A Na2A 57.5(25) 7 16_556 ?
 Na2B Na2A Na2A 57.5(25) . 16_556 ?
 w3 Na2A Na2A 155.6(51) 17 16_556 ?
 w2 Na2A Na2A 39.5(14) 7 16_556 ?
 w2 Na2A Na2A 39.5(14) . 16_556 ?
 01 Na2A Na2A 130.8(6) 17 16_556 ?
 Na2B Na2A Na2A 17.7(10) 22_556 16_556 ?
 Na2B Na2A Na2A 17.7(10) 16_556 16_556 ?
 04 Na2A Na2A 110.5(5) 17 16_556 ?
 04 Na2A Na2A 110.5(5) 3 16_556 ?

Na2B Na2A w3 138.1(53) 7 3 ?
 Na2B Na2A w3 64.6(43) . 3 ?
 w3 Na2A w3 72.1(60) 17 3 ?
 w2 Na2A w3 127.5(37) 7 3 ?
 w2 Na2A w3 102.9(38) . 3 ?
 o1 Na2A w3 121.0(37) 17 3 ?
 Na2B Na2A w3 106.4(40) 22_556 3 ?
 Na2B Na2A w3 81.9(35) 16_556 3 ?
 o4 Na2A w3 147.5(34) 17 3 ?
 o4 Na2A w3 64.8(35) 3 3 ?
 Na2A Na2A w3 91.1(35) 16_556 3 ?
 Na2B Na2A w3 64.6(43) 7 . ?
 Na2B Na2A w3 138.1(53) . . ?
 w3 Na2A w3 72.4(60) 17 . ?
 w2 Na2A w3 102.9(38) 7 . ?
 w2 Na2A w3 127.5(37) . . ?
 o1 Na2A w3 120.9(38) 17 . ?
 Na2B Na2A w3 81.9(35) 22_556 . ?
 Na2B Na2A w3 106.4(40) 16_556 . ?
 o4 Na2A w3 64.8(35) 17 . ?
 o4 Na2A w3 147.6(34) 3 . ?
 Na2A Na2A w3 91.1(35) 16_556 . ?
 w3 Na2A w3 91.8(67) 3 . ?
 Na2A Na2B w2 112.4(43) . . ?
 Na2A Na2B Na2B 35.3(26) . 7 ?
 w2 Na2B Na2B 79.5(27) . 7 ?
 Na2A Na2B w2 80.0(34) . 7 ?
 w2 Na2B w2 33.2(33) . 7 ?
 Na2B Na2B w2 46.4(18) 7 7 ?
 Na2A Na2B Na2B 122.5(25) . 16_556 ?
 w2 Na2B Na2B 43.9(23) . 16_556 ?
 Na2B Na2B Na2B 90.000(5) 7 16_556 ?
 w2 Na2B Na2B 58.0(12) 7 16_556 ?
 Na2A Na2B o4 107.0(23) . 3 ?
 w2 Na2B o4 113.9(35) . 3 ?
 Na2B Na2B o4 135.3(8) 7 3 ?
 w2 Na2B o4 134.0(28) 7 3 ?
 Na2B Na2B o4 130.2(9) 16_556 3 ?
 Na2A Na2B w3 38.0(21) . 17 ?
 w2 Na2B w3 146.9(39) . 17 ?
 Na2B Na2B w3 73.3(15) 7 17 ?
 w2 Na2B w3 117.1(27) 7 17 ?
 Na2B Na2B w3 151.2(32) 16_556 17 ?
 o4 Na2B w3 75.4(24) 3 17 ?
 Na2A Na2B Na2B 85.6(35) . 22_556 ?
 w2 Na2B Na2B 47.1(26) . 22_556 ?
 Na2B Na2B Na2B 52.2(16) 7 22_556 ?
 w2 Na2B Na2B 32.6(20) 7 22_556 ?
 Na2B Na2B Na2B 37.8(16) 16_556 22_556 ?
 o4 Na2B Na2B 161.0(17) 3 22_556 ?
 w3 Na2B Na2B 121.0(27) 17 22_556 ?
 Na2A Na2B o1 57.8(23) . 17 ?
 w2 Na2B o1 96.3(25) . 17 ?
 Na2B Na2B o1 72.5(10) 7 17 ?
 w2 Na2B o1 85.0(16) 7 17 ?
 Na2B Na2B o1 139.6(9) 16_556 17 ?
 o4 Na2B o1 64.0(9) 3 17 ?
 w3 Na2B o1 57.8(38) 17 17 ?
 Na2B Na2B o1 114.6(18) 22_556 17 ?
 Na2A Na2B Na2A 104.8(33) . 16_556 ?
 w2 Na2B Na2A 46.5(23) . 16_556 ?
 Na2B Na2B Na2A 72.9(9) 7 16_556 ?
 w2 Na2B Na2A 47.9(14) 7 16_556 ?
 Na2B Na2B Na2A 17.7(10) 16_556 16_556 ?
 o4 Na2B Na2A 147.7(20) 3 16_556 ?
 w3 Na2B Na2A 136.1(31) 17 16_556 ?
 Na2B Na2B Na2A 21.1(8) 22_556 16_556 ?
 o1 Na2B Na2A 132.9(18) 17 16_556 ?

Na2A Na2B O3 168.9(32) . 3 ?
 W2 Na2B O3 77.5(28) . 3 ?
 Na2B Na2B O3 155.8(8) 7 3 ?
 W2 Na2B O3 110.4(20) 7 3 ?
 Na2B Na2B O3 68.0(7) 16_556 3 ?
 O4 Na2B O3 63.0(11) 3 3 ?
 W3 Na2B O3 131.0(20) 17 3 ?
 Na2B Na2B O3 105.3(17) 22_556 3 ?
 O1 Na2B O3 117.6(17) 17 3 ?
 Na2A Na2B O3 85.7(10) 16_556 3 ?
 Na2A Na2B W3 96.8(48) . 3 ?
 W2 Na2B W3 143.5(46) . 3 ?
 Na2B Na2B W3 120.1(37) 7 3 ?
 W2 Na2B W3 150.5(46) 7 3 ?
 Na2B Na2B W3 102.1(37) 16_556 3 ?
 O4 Na2B W3 75.2(40) 3 3 ?
 W3 Na2B W3 68.6(57) 17 3 ?
 Na2B Na2B W3 118.3(39) 22_556 3 ?
 O1 Na2B W3 118.2(38) 17 3 ?
 Na2A Na2B W3 106.5(40) 16_556 3 ?
 O3 Na2B W3 76.3(38) 3 3 ?
 Na2A Na2B W1 108.6(37) . . ?
 W2 Na2B W1 27.7(21) . . ?
 Na2B Na2B W1 85.6(13) 7 . ?
 W2 Na2B W1 46.1(21) 7 . ?
 Na2B Na2B W1 70.2(7) 16_556 . ?
 O4 Na2B W1 90.5(17) 3 . ?
 W3 Na2B W1 129.5(38) 17 . ?
 Na2B Na2B W1 71.7(10) 22_556 . ?
 O1 Na2B W1 72.3(12) 17 . ?
 Na2A Na2B W1 74.2(13) 16_556 . ?
 O3 Na2B W1 77.6(15) 3 . ?
 W3 Na2B W1 153.7(39) 3 . ?
 W1 W1 W2 89.2(22) 7 . ?
 W1 W1 W1 120.00(3) 7 20_566 ?
 W2 W1 W1 150.8(22) . 20_566 ?
 W1 W1 W2 59.8(20) 7 7 ?
 W2 W1 W2 29.4(29) . 7 ?
 W1 W1 W2 179.8(20) 20_566 7 ?
 W1 W1 Na1 78.1(11) 7 . ?
 W2 W1 Na1 124.5(12) . . ?
 W1 W1 Na1 67.0(10) 20_566 . ?
 W2 W1 Na1 112.8(16) 7 . ?
 W1 W1 Na1 78.1(11) 7 14_566 ?
 W2 W1 Na1 124.5(12) . 14_566 ?
 W1 W1 Na1 67.0(10) 20_566 14_566 ?
 W2 W1 Na1 112.8(16) 7 14_566 ?
 Na1 W1 Na1 105.4(18) . 14_566 ?
 W1 W1 W1 40.1(18) 7 3_665 ?
 W2 W1 W1 129.3(36) . 3_665 ?
 W1 W1 W1 79.9(18) 20_566 3_665 ?
 W2 W1 W1 99.9(32) 7 3_665 ?
 Na1 W1 W1 58.4(7) . 3_665 ?
 Na1 W1 W1 58.4(7) 14_566 3_665 ?
 W1 W1 W1 100.1(18) 7 14_566 ?
 W2 W1 W1 170.7(36) . 14_566 ?
 W1 W1 W1 19.9(18) 20_566 14_566 ?
 W2 W1 W1 159.9(33) 7 14_566 ?
 Na1 W1 W1 58.4(7) . 14_566 ?
 Na1 W1 W1 58.4(7) 14_566 14_566 ?
 W1 W1 W1 60.000(8) 3_665 14_566 ?
 W1 W1 Na2B 94.4(13) 7 . ?
 W2 W1 Na2B 20.5(8) . . ?
 W1 W1 Na2B 140.7(12) 20_566 . ?
 W2 W1 Na2B 39.5(16) 7 . ?
 Na1 W1 Na2B 106.3(8) . . ?
 Na1 W1 Na2B 145.0(15) 14_566 . ?
 W1 W1 Na2B 131.5(26) 3_665 . ?

W1 W1 Na2B 155.5(19) 14_566 . ?
 W1 W1 Na2B 94.4(13) 7 16_556 ?
 W2 W1 Na2B 20.5(8) . 16_556 ?
 W1 W1 Na2B 140.7(12) 20_566 16_556 ?
 W2 W1 Na2B 39.5(16) 7 16_556 ?
 Na1 W1 Na2B 145.0(15) . 16_556 ?
 Na1 W1 Na2B 106.3(8) 14_566 16_556 ?
 W1 W1 Na2B 131.5(26) 3_665 16_556 ?
 W1 W1 Na2B 155.5(19) 14_566 16_556 ?
 Na2B W1 Na2B 39.5(13) . 16_556 ?
 W1 W1 Na2B 65.8(12) 7 7 ?
 W2 W1 Na2B 30.3(17) . 7 ?
 W1 W1 Na2B 161.5(6) 20_566 7 ?
 W2 W1 Na2B 18.6(7) 7 7 ?
 Na1 W1 Na2B 99.1(11) . 7 ?
 Na1 W1 Na2B 130.5(16) 14_566 7 ?
 W1 W1 Na2B 103.8(25) 3_665 7 ?
 W1 W1 Na2B 156.4(17) 14_566 7 ?
 Na2B W1 Na2B 28.6(17) . 7 ?
 Na2B W1 Na2B 48.0(17) 16_556 7 ?
 W1 W1 Na2B 65.8(12) 7 22_556 ?
 W2 W1 Na2B 30.3(17) . 22_556 ?
 W1 W1 Na2B 161.5(6) 20_566 22_556 ?
 W2 W1 Na2B 18.6(7) 7 22_556 ?
 Na1 W1 Na2B 130.5(16) . 22_556 ?
 Na1 W1 Na2B 99.1(11) 14_566 22_556 ?
 W1 W1 Na2B 103.8(25) 3_665 22_556 ?
 W1 W1 Na2B 156.4(17) 14_566 22_556 ?
 Na2B W1 Na2B 48.0(17) . 22_556 ?
 Na2B W1 Na2B 28.6(17) 16_556 22_556 ?
 Na2B W1 Na2B 36.0(12) 7 22_556 ?
 W1 W1 W1 60.000(14) 7 9_665 ?
 W2 W1 W1 149.2(22) . 9_665 ?
 W1 W1 W1 60.000(11) 20_566 9_665 ?
 W2 W1 W1 119.8(20) 7 9_665 ?
 Na1 W1 W1 53.4(9) . 9_665 ?
 Na1 W1 W1 53.4(9) 14_566 9_665 ?
 W1 W1 W1 19.9(18) 3_665 9_665 ?
 W1 W1 W1 40.1(18) 14_566 9_665 ?
 Na2B W1 W1 148.3(11) . 9_665 ?
 Na2B W1 W1 148.3(11) 16_556 9_665 ?
 Na2B W1 W1 122.5(12) 7 9_665 ?
 Na2B W1 W1 122.5(12) 22_556 9_665 ?
 W2 W2 Na2B 100.5(27) 7 . ?
 W2 W2 Na2B 100.5(27) 7 16_556 ?
 Na2B W2 Na2B 92.2(46) . 16_556 ?
 W2 W2 W1 90.8(22) 7 . ?
 Na2B W2 W1 131.8(26) . . ?
 Na2B W2 W1 131.8(26) 16_556 . ?
 W2 W2 Na2B 46.4(18) 7 7 ?
 Na2B W2 Na2B 54.1(33) . 7 ?
 Na2B W2 Na2B 100.3(44) 16_556 7 ?
 W1 W2 Na2B 120.1(30) . 7 ?
 W2 W2 Na2B 46.4(18) 7 22_556 ?
 Na2B W2 Na2B 100.3(44) . 22_556 ?
 Na2B W2 Na2B 54.1(33) 16_556 22_556 ?
 W1 W2 Na2B 120.1(30) . 22_556 ?
 Na2B W2 Na2B 64.0(24) 7 22_556 ?
 W2 W2 Na2A 74.5(15) 7 . ?
 Na2B W2 Na2A 26.7(18) . . ?
 Na2B W2 Na2A 102.6(36) 16_556 . ?
 W1 W2 Na2A 125.5(18) . . ?
 Na2B W2 Na2A 28.6(12) 7 . ?
 Na2B W2 Na2A 86.6(24) 22_556 . ?
 W2 W2 Na2A 74.5(15) 7 16_556 ?
 Na2B W2 Na2A 102.6(36) . 16_556 ?
 Na2B W2 Na2A 26.7(18) 16_556 16_556 ?
 W1 W2 Na2A 125.5(18) . 16_556 ?

Na2B W2 Na2A 86.6(24) 7 16_556 ?
 Na2B W2 Na2A 28.6(12) 22_556 16_556 ?
 Na2A W2 Na2A 101.0(28) . 16_556 ?
 W2 W2 W1 59.8(20) 7 7 ?
 Na2B W2 W1 132.0(23) . 7 ?
 Na2B W2 W1 132.0(23) 16_556 7 ?
 W1 W2 W1 31.0(29) . 7 ?
 Na2B W2 W1 94.5(28) 7 7 ?
 Na2B W2 W1 94.5(28) 22_556 7 ?
 Na2A W2 W1 111.3(21) . 7 ?
 Na2A W2 W1 111.3(21) 16_556 7 ?
 W2 W2 O3 169.9(11) 7 3 ?
 Na2B W2 O3 72.8(26) . 3 ?
 Na2B W2 O3 72.8(26) 16_556 3 ?
 W1 W2 O3 99.3(25) . 3 ?
 Na2B W2 O3 126.4(24) 7 3 ?
 Na2B W2 O3 126.4(24) 22_556 3 ?
 Na2A W2 O3 99.4(18) . 3 ?
 Na2A W2 O3 99.4(18) 16_556 3 ?
 W1 W2 O3 130.3(27) 7 3 ?
 W2 W2 O1 80.1(9) 7 2 ?
 Na2B W2 O1 148.2(33) . 2 ?
 Na2B W2 O1 56.9(16) 16_556 2 ?
 W1 W2 O1 79.7(11) . 2 ?
 Na2B W2 O1 119.0(20) 7 2 ?
 Na2B W2 O1 57.1(10) 22_556 2 ?
 Na2A W2 O1 143.7(22) . 2 ?
 Na2A W2 O1 46.4(7) 16_556 2 ?
 W1 W2 O1 76.0(10) 7 2 ?
 O3 W2 O1 101.6(9) 3 2 ?
 W2 W2 O1 80.1(9) 7 17 ?
 Na2B W2 O1 56.9(16) . 17 ?
 Na2B W2 O1 148.2(33) 16_556 17 ?
 W1 W2 O1 79.7(11) . 17 ?
 Na2B W2 O1 57.1(10) 7 17 ?
 Na2B W2 O1 119.0(20) 22_556 17 ?
 Na2A W2 O1 46.4(7) . 17 ?
 Na2A W2 O1 143.7(22) 16_556 17 ?
 W1 W2 O1 76.0(10) 7 17 ?
 O3 W2 O1 101.6(9) 3 17 ?
 O1 W2 O1 151.2(20) 2 17 ?
 W2 W2 O4 126.9(7) 7 3 ?
 Na2B W2 O4 41.8(23) . 3 ?
 Na2B W2 O4 113.6(30) 16_556 3 ?
 W1 W2 O4 95.0(17) . 3 ?
 Na2B W2 O4 86.9(11) 7 3 ?
 Na2B W2 O4 142.0(27) 22_556 3 ?
 Na2A W2 O4 59.5(7) . 3 ?
 Na2A W2 O4 135.9(26) 16_556 3 ?
 W1 W2 O4 112.6(15) 7 3 ?
 O3 W2 O4 52.6(8) 3 3 ?
 O1 W2 O4 152.8(17) 2 3 ?
 O1 W2 O4 49.5(2) 17 3 ?
 Na2A W3 O1 57.1(47) 15 . ?
 Na2A W3 Na2B 16.8(15) 15 21 ?
 O1 W3 Na2B 59.2(40) . 21 ?
 Na2A W3 Na2B 17.0(15) 15 15 ?
 O1 W3 Na2B 59.3(40) . 15 ?
 Na2B W3 Na2B 33.8(31) 21 15 ?
 Na2A W3 Na2B 101.2(38) 15 5 ?
 O1 W3 Na2B 92.4(38) . 5 ?
 Na2B W3 Na2B 84.4(28) 21 5 ?
 Na2B W3 Na2B 118.1(51) 15 5 ?
 Na2A W3 Na2B 101.7(38) 15 7 ?
 O1 W3 Na2B 92.8(39) . 7 ?
 Na2B W3 Na2B 118.5(51) 21 7 ?
 Na2B W3 Na2B 84.8(28) 15 7 ?
 Na2B W3 Na2B 155.6(74) 5 7 ?

Na2A W3 O4 60.4(34) 15 . ?
 O1 W3 O4 54.1(29) . . ?
 Na2B W3 O4 45.9(22) 21 . ?
 Na2B W3 O4 76.1(44) 15 . ?
 Na2B W3 O4 45.8(13) 5 . ?
 Na2B W3 O4 146.7(65) 7 . ?
 Na2A W3 O4 60.6(35) 15 17 ?
 O1 W3 O4 54.2(29) . 17 ?
 Na2B W3 O4 76.2(44) 21 17 ?
 Na2B W3 O4 46.0(22) 15 17 ?
 Na2B W3 O4 146.5(65) 5 17 ?
 Na2B W3 O4 46.0(14) 7 17 ?
 O4 W3 O4 103.1(55) . 17 ?
 Na2A W3 Si1 69.5(48) 15 . ?
 O1 W3 Si1 31.2(18) . . ?
 Na2B W3 Si1 61.9(33) 21 . ?
 Na2B W3 Si1 79.6(47) 15 . ?
 Na2B W3 Si1 61.3(22) 5 . ?
 Na2B W3 Si1 120.0(54) 7 . ?
 O4 W3 Si1 30.2(14) . . ?
 O4 W3 Si1 85.4(46) 17 . ?
 Na2A W3 Al1 69.5(48) 15 . ?
 O1 W3 Al1 31.2(18) . . ?
 Na2B W3 Al1 61.9(33) 21 . ?
 Na2B W3 Al1 79.6(47) 15 . ?
 Na2B W3 Al1 61.3(22) 5 . ?
 Na2B W3 Al1 120.0(54) 7 . ?
 O4 W3 Al1 30.2(14) . . ?
 O4 W3 Al1 85.4(46) 17 . ?
 Si1 W3 Al1 0.00(3) . . ?
 Na2A W3 Si1 69.7(48) 15 11 ?
 O1 W3 Si1 31.3(18) . 11 ?
 Na2B W3 Si1 79.7(47) 21 11 ?
 Na2B W3 Si1 62.0(33) 15 11 ?
 Na2B W3 Si1 119.8(54) 5 11 ?
 Na2B W3 Si1 61.6(22) 7 11 ?
 O4 W3 Si1 85.3(45) . 11 ?
 O4 W3 Si1 30.3(14) 17 11 ?
 Si1 W3 Si1 59.9(33) . 11 ?
 Al1 W3 Si1 59.9(33) . 11 ?
 Na2A W3 Al1 69.7(48) 15 11 ?
 O1 W3 Al1 31.3(18) . 11 ?
 Na2B W3 Al1 79.7(47) 21 11 ?
 Na2B W3 Al1 62.0(33) 15 11 ?
 Na2B W3 Al1 119.8(54) 5 11 ?
 Na2B W3 Al1 61.6(22) 7 11 ?
 O4 W3 Al1 85.3(45) . 11 ?
 O4 W3 Al1 30.3(14) 17 11 ?
 Si1 W3 Al1 59.9(33) . 11 ?
 Al1 W3 Al1 59.9(33) . 11 ?
 Si1 W3 Al1 0.00(4) 11 11 ?
 Na2A W3 Na2A 97.3(37) 15 5 ?
 O1 W3 Na2A 105.7(34) . 5 ?
 Na2B W3 Na2A 80.8(26) 21 5 ?
 Na2B W3 Na2A 113.5(50) 15 5 ?
 Na2B W3 Na2A 18.6(9) 5 5 ?
 Na2B W3 Na2A 158.7(73) 7 5 ?
 O4 W3 Na2A 53.2(9) . 5 ?
 O4 W3 Na2A 155.3(64) 17 5 ?
 Si1 W3 Na2A 75.8(17) . 5 ?
 Al1 W3 Na2A 75.8(17) . 5 ?
 Si1 W3 Na2A 135.7(50) 11 5 ?
 Al1 W3 Na2A 135.7(50) 11 5 ?

_refine_diff_density_max 0.823
 _refine_diff_density_min -1.026
 _refine_diff_density_rms 0.095