

data\_gme-25r-3d

```
_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'
```

```

55 'x, y, -z-1/2'
56 'x-y, x, -z'
57 '-y, x-y, -z-1/2'
58 'x-y, -y, -z'
59 'x, x-y, -z-1/2'
60 'y, x, -z'
```

```

61 '-x+y, y, -z-1/2'
62 '-x, -x+y, -z'
63 '-y, -x, -z-1/2'
64
65 _cell_length_a
66 _cell_length_b
67 _cell_length_c
68 _cell_angle_alpha
69 _cell_angle_beta
70 _cell_angle_gamma
71 _cell_volume
72 _cell_formula_units_Z
73 _cell_measurement_temperature
74 _cell_measurement_reflns_used
75 _cell_measurement_theta_min
76 _cell_measurement_theta_max
77
78 _exptl_crystal_description
79 _exptl_crystal_colour
80 _exptl_crystal_size_max
81 _exptl_crystal_size_mid
82 _exptl_crystal_size_min
83 _exptl_crystal_density_meas
84 _exptl_crystal_density_diffn
85 _exptl_crystal_density_method
86 _exptl_crystal_F_000
87 _exptl_absorpt_coefficient_mu
88 _exptl_absorpt_correction_type
89 _exptl_absorpt_correction_T_min
90 _exptl_absorpt_correction_T_max
91
92 _exptl_special_details
93 ;
94 ?
95 ;
96
97 _diffn_ambient_temperature
98 _diffn_radiation_wavelength
99 _diffn_radiation_type
100 _diffn_radiation_source
101 _diffn_radiation_monochromator
102 _diffn_measurement_device
103 _diffn_measurement_method
104 _diffn_standards_number

13.7256(10)
13.7256(10)
10.0493(10)

90.00
90.00
120.00
1639.6(2)
1
293(2)
?
?
?
?
?
?
?
```

?

2.004

?

981

0.607

?

?

?

293(2)

0.71073

MoK\alpha

'fine-focus sealed tube'

graphite

?

?

?

105 \_diffn\_standards\_interval\_count ?

106 \_diffn\_standards\_interval\_time ?

107 \_diffn\_standards\_decay\_% ?

108 \_diffn\_reflns\_number 547

[]

109 \_diffn\_reflns\_av\_R\_equivalents

110 \_diffn\_reflns\_av\_sigmaI/netI

111 \_diffn\_reflns\_limit\_h\_min

112 \_diffn\_reflns\_limit\_h\_max

113 \_diffn\_reflns\_limit\_k\_min

114 \_diffn\_reflns\_limit\_k\_max

115 \_diffn\_reflns\_limit\_l\_min

116 \_diffn\_reflns\_limit\_l\_max

117 \_diffn\_reflns\_theta\_min

118 \_diffn\_reflns\_theta\_max

119 \_reflns\_number\_total

120 \_reflns\_number\_observed

121 \_reflns\_observed\_criterion

122

123 \_computing\_data\_collection

124 \_computing\_cell\_refinement

125 \_computing\_data\_reduction

126 \_computing\_structure\_solution

127 \_computing\_structure\_refinement

128 \_computing\_molecular\_graphics

129 \_computing\_publication\_material

130

131 \_refine\_special\_details

132 ;

0.0000

0.0711

-10

0

1

22

0

14

2.65

36.05

547

547

>2sigma(I)

?  
?  
?  
'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'  
'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'  
?  
?

133 Refinement on  $F^2$  for ALL reflections except for 0 with very negative  
134  $F^2$   
135 or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R136  
factors  
137  $wR$  and all goodnesses of fit  $S$  are based on  $F^2$ , conventional R-factors  
138 R  
139 are based on  $F$ , with  $F$  set to zero for negative  $F^2$ . The observed  
140 criterion  
141 of  $F^2 > 2\sigma(F^2)$  is used only for calculating  $_R\_factor\_obs$  etc.  
142 and is  
143 not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors  
144 based  
145 on  $F^2$  are statistically about twice as large as those based on  $F$ , and  
146 R-  
147 factors based on ALL data will be even larger.  
148 ;

149  
150  $_refine\_ls\_structure\_factor\_coef$   $Fsqd$   
151  $_refine\_ls\_matrix\_type$  full  
152  $_refine\_ls\_weighting\_scheme$   
153 'calc  $w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0662P)^2+0.0000P]$  where  $P=(F_o^2+2F_c^2)/3$ '

154  $_atom\_sites\_solution\_primary$   
155  $_atom\_sites\_solution\_secondary$   
156  $_atom\_sites\_solution\_hydrogens$   
157  $_refine\_ls\_hydrogen\_treatment$   
158  $_refine\_ls\_extinction\_method$   
159  $_refine\_ls\_extinction\_coef$   
160  $_refine\_ls\_number\_reflns$   
161  $_refine\_ls\_number\_parameters$   
162  $_refine\_ls\_number\_restraints$

direct  
difmap  
geom  
?  
none  
?  
547  
62  
0

□  
163  $_refine\_ls\_R\_factor\_all$   
164  $_refine\_ls\_R\_factor\_obs$   
165  $_refine\_ls\_wR\_factor\_all$   
166  $_refine\_ls\_wR\_factor\_obs$   
167  $_refine\_ls\_goodness\_of\_fit\_all$   
168  $_refine\_ls\_goodness\_of\_fit\_obs$   
169  $_refine\_ls\_restrained\_S\_all$   
170  $_refine\_ls\_restrained\_S\_obs$   
171  $_refine\_ls\_shift/esd\_max$   
172  $_refine\_ls\_shift/esd\_mean$   
173  
174 loop\_

175 \_atom\_site\_label  
 176 \_atom\_site\_type\_symbol  
 177 \_atom\_site\_fract\_x  
 178 \_atom\_site\_fract\_y  
 179 \_atom\_site\_fract\_z  
 180 \_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

0.0548  
 0.0548  
 0.1200  
 0.1200

1.080

1.080

1.080

1.080

0.000

0.000

181 \_atom\_site\_thermal\_displace\_type  
 182 \_atom\_site\_occupancy  
 183 \_atom\_site\_calc\_flag  
 184 \_atom\_site\_refinement\_flags  
 185 \_atom\_site\_disorder\_group  
 186 Al1 Al 0.44113(8) 0.10576(7) 0.09415(10) 0.0155(3) Uani 0.33 d P .  
 187 Si1 Si 0.44113(8) 0.10576(7) 0.09415(10) 0.0155(3) Uani 0.67 d P .  
 188 O1 O 0.41704(32) 0.20852(16) 0.06034(39) 0.0326(11) Uani 1 d S .  
 189 O2 O 0.85128(30) 0.42564(15) 0.06118(36) 0.0276(9) Uani 1 d S .  
 190 O3 O 0.41159(31) 0.06599(33) 0.2500 0.0317(9) Uani 1 d S .  
 191 O4 O 0.35590(25) 0.0000 0.0000 0.0294(9) Uani 1 d S .  
 192 Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0748(4) 0.0550(11) Uani 1 d SP .  
 193 Na2 Na 0.1185(5) 0.2370(10) 0.0672(13) 0.092(7) Uani 0.28(1) d SP .  
 194 W1 O 0.1982(8) 0.5448(8) 0.2500 0.068(3) Uani 0.50 d SP .  
 195 W2 O 0.3386(8) 0.1693(4) -0.2500 0.139(4) Uani 1 d S .  
 196 W3 O 0.1600(8) 0.0800(4) 0.1157(18) 0.274(13) Uani 0.81(3) d SP .  
 197  
 198 loop\_  
 199 \_atom\_site\_aniso\_label  
 200 \_atom\_site\_aniso\_U\_11  
 201 \_atom\_site\_aniso\_U\_22  
 202 \_atom\_site\_aniso\_U\_33  
 203 \_atom\_site\_aniso\_U\_23  
 204 \_atom\_site\_aniso\_U\_13  
 205 \_atom\_site\_aniso\_U\_12  
 206 Al1 0.0174(5) 0.0157(5) 0.0140(5) -0.0024(4) -0.0019(4) 0.0088(4)  
 207 Si1 0.0174(5) 0.0157(5) 0.0140(5) -0.0024(4) -0.0019(4) 0.0088(4)  
 208 O1 0.036(2) 0.0210(14) 0.046(3) -0.0036(9) -0.007(2) 0.0182(11)  
 209 O2 0.035(2) 0.0237(14) 0.028(2) -0.0031(8) -0.006(2) 0.0174(11)  
 210 O3 0.032(2) 0.042(2) 0.018(2) 0.000 0.000 0.015(2)  
 211 O4 0.031(2) 0.022(2) 0.032(2) -0.013(2) -0.0065(9) 0.0108(9)  
 212 Na1 0.047(2) 0.047(2) 0.034(3) 0.000 0.000 0.0234(8)  
 213 Na2 0.132(10) 0.065(8) 0.057(9) 0.021(6) 0.010(3) 0.033(4)  
 214 W1 0.056(6) 0.073(7) 0.031(6) 0.000 0.000 -0.001(5)  
 215 W2 0.107(9) 0.191(10) 0.091(8) 0.000 0.000 0.053(4)  
 216 W3 0.059(7) 0.250(13) 0.453(29) 0.015(4) 0.030(8) 0.029(3)

```

□
217
218 _geom_special_details
219 ;
220 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
221 are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
222 into account individually in the estimation of esds in distances, angles
223 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
224 only
225 used when they are defined by crystal symmetry. An approximate
226 (isotropic)
227 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
228 planes.
229 ;
230
231 loop_
232 _geom_bond_atom_site_label_1
233 _geom_bond_atom_site_label_2
234 _geom_bond_distance
235 _geom_bond_site_symmetry_2
236 _geom_bond_publ_flag
237 Al1 O4 1.6348(13) . ?
238 Al1 O1 1.6372(13) . ?
239 Al1 O3 1.641(2) . ?
240 Al1 O2 1.650(2) 5_665 ?
241 Al1 Na2 3.316(10) 15 ?
242 Al1 Na1 3.543(2) 13_665 ?
243 Al1 w3 3.701(8) . ?
244 Al1 w1 3.714(3) 21 ?
245 Al1 w2 3.991(3) . ?
246 Al1 w1 4.017(8) 14_556 ?
247 Al1 w2 4.0671(10) 15 ?
248 Al1 w1 4.285(6) 2_654 ?
249 Si1 O4 1.6348(13) . ?
250 Si1 O1 1.6372(13) . ?
251 Si1 O3 1.641(2) . ?
252 Si1 O2 1.650(2) 5_665 ?
253 Si1 Na2 3.316(10) 15 ?
254 Si1 w3 3.701(8) . ?
255 Si1 w1 3.714(3) 21 ?
256 Si1 w2 3.991(3) . ?
257 Si1 w1 4.017(8) 14_556 ?
258 Si1 w2 4.0671(10) 15 ?
259 Si1 w1 4.285(6) 2_654 ?
260 Si1 w1 4.496(6) 15 ?
261 O1 Si1 1.6372(13) 11 ?
262 O1 Al1 1.6372(13) 11 ?
263 O1 Na2 2.493(12) 15 ?
264 O1 w3 3.106(10) . ?
265 O1 w2 3.255(4) . ?
266 O1 w1 3.616(6) 21 ?
267 O1 w1 3.616(6) 15 ?
268 O2 Si1 1.650(2) 9_665 ?
269 O2 Al1 1.650(2) 9_665 ?
270 O2 Al1 1.650(2) 3_655 ?

```

```

□
271 O2 Si1 1.650(2) 3_655 ?
272 O2 Na1 2.585(4) 13_665 ?
273 O2 w1 3.268(4) 8_654 ?
274 O2 w1 3.268(4) 13_665 ?
275 O2 w1 4.292(7) 2_654 ?
276 O2 w1 4.292(7) 19_665 ?
277 O3 Si1 1.641(2) 16_556 ?
278 O3 Al1 1.641(2) 16_556 ?
279 O3 w1 3.273(9) 14_556 ?

```

280 O3 W2 3.279(4) 15 ?  
 281 O3 W3 3.801(11) . ?  
 282 O3 W3 3.801(11) 16\_556 ?  
 283 O3 W1 3.960(10) 9\_655 ?  
 284 O4 Si1 1.6348(13) 19 ?  
 285 O4 Al1 1.6348(13) 19 ?  
 286 O4 Na2 2.901(7) 15 ?  
 287 O4 Na2 2.901(7) 5 ?  
 288 O4 W2 3.5101(14) 15 ?  
 289 O4 W2 3.5101(14) . ?  
 290 O4 W3 3.570(9) 15 ?  
 291 O4 W3 3.570(9) . ?  
 292 O4 W1 3.658(7) 21 ?  
 293 O4 W1 3.658(7) 14\_556 ?  
 294 Na1 W1 2.497(7) 14\_566 ?  
 295 Na1 W1 2.497(7) 20\_566 ?  
 296 Na1 W1 2.497(7) 9\_665 ?  
 297 Na1 W1 2.497(7) . ?  
 298 Na1 W1 2.497(7) 3\_665 ?  
 299 Na1 W1 2.497(7) 7 ?  
 300 Na1 O2 2.585(4) 13\_665 ?  
 301 Na1 O2 2.585(4) 17 ?  
 302 Na1 O2 2.585(4) 15\_565 ?  
 303 Na1 Na1 3.521(9) 14\_566 ?  
 304 Na1 Al1 3.543(2) 15\_565 ?  
 305 Na1 Al1 3.543(2) 19\_565 ?  
 306 Na2 W3 2.05(2) 17 ?  
 307 Na2 W2 2.197(14) 2 ?  
 308 Na2 O1 2.493(12) 17 ?  
 309 Na2 W3 2.537(9) . ?  
 310 Na2 W3 2.537(9) 3 ?  
 311 Na2 O4 2.901(7) 17 ?  
 312 Na2 O4 2.901(7) 3 ?  
 313 Na2 Na2 3.13(2) 17 ?  
 314 Na2 Na2 3.13(2) 15 ?  
 315 Na2 Al1 3.316(10) 17 ?  
 316 Na2 Si1 3.316(10) 17 ?  
 317 Na2 Al1 3.316(10) 21 ?  
 318 W1 W1 1.49(2) 20\_566 ?  
 319 W1 W1 2.04(2) 7 ?  
 320 W1 Na1 2.497(7) 14\_566 ?  
 321 W1 W2 2.655(11) 2 ?  
 322 W1 W1 3.066(15) 14\_566 ?  
 323 W1 W1 3.066(15) 3\_665 ?  
 324 W1 O2 3.268(4) 13\_665 ?

□

325 W1 O2 3.268(4) 4\_665 ?  
 326 W1 O3 3.273(9) 3 ?  
 327 W2 Na2 2.197(14) 6\_554 ?  
 328 W2 Na2 2.197(14) 15 ?  
 329 W2 W1 2.655(11) 15 ?  
 330 W2 W1 2.655(11) 21 ?  
 331 W2 O1 3.255(4) 16 ?  
 332 W2 O3 3.279(4) 2\_554 ?  
 333 W2 O3 3.279(4) 19 ?  
 334 W2 O4 3.5101(14) 17 ?  
 335 W2 O4 3.5101(14) 16 ?  
 336 W3 Na2 2.05(2) 15 ?  
 337 W3 Na2 2.537(9) 5 ?  
 338 W3 W3 2.70(3) 16\_556 ?  
 339 W3 W3 3.00(3) 15 ?  
 340 W3 W3 3.00(3) 17 ?  
 341 W3 W3 3.29(2) 5 ?  
 342 W3 W3 3.29(2) 3 ?  
 343 W3 O4 3.570(9) 17 ?  
 344  
 345 loop\_

346 \_geom\_angle\_atom\_site\_label\_1  
 347 \_geom\_angle\_atom\_site\_label\_2  
 348 \_geom\_angle\_atom\_site\_label\_3  
 349 \_geom\_angle  
 350 \_geom\_angle\_site\_symmetry\_1  
 351 \_geom\_angle\_site\_symmetry\_3  
 352 \_geom\_angle\_publ\_flag  
 353 O4 A11 O1 106.4(2) . . ?  
 354 O4 A11 O3 108.00(14) . . ?  
 355 O1 A11 O3 111.2(2) . . ?  
 356 O4 A11 O2 112.0(2) . 5\_665 ?  
 357 O1 A11 O2 108.4(2) . 5\_665 ?  
 358 O3 A11 O2 110.8(2) . 5\_665 ?  
 359 O4 A11 Na2 61.04(14) . 15 ?  
 360 O1 A11 Na2 46.6(2) . 15 ?  
 361 O3 A11 Na2 114.2(3) . 15 ?  
 362 O2 A11 Na2 134.2(3) 5\_665 15 ?  
 363 O4 A11 Na1 115.30(10) . 13\_665 ?  
 364 O1 A11 Na1 66.73(14) . 13\_665 ?  
 365 O3 A11 Na1 135.4(2) . 13\_665 ?  
 366 O2 A11 Na1 42.71(11) 5\_665 13\_665 ?  
 367 Na2 A11 Na1 96.2(2) 15 13\_665 ?  
 368 O4 A11 W3 72.6(2) . . ?  
 369 O1 A11 W3 56.2(2) . . ?  
 370 O3 A11 W3 80.8(3) . . ?  
 371 O2 A11 W3 164.2(2) 5\_665 . ?  
 372 Na2 A11 W3 33.5(3) 15 . ?  
 373 Na1 A11 W3 121.5(2) 13\_665 . ?  
 374 O4 A11 W1 75.31(14) . 21 ?  
 375 O1 A11 W1 73.8(2) . 21 ?  
 376 O3 A11 W1 172.3(2) . 21 ?  
 377 O2 A11 W1 61.6(2) 5\_665 21 ?  
 378 Na2 A11 W1 73.5(3) 15 21 ?

□

379 Na1 A11 W1 40.16(14) 13\_665 21 ?  
 380 W3 A11 W1 106.9(3) . 21 ?  
 381 O4 A11 W2 61.22(9) . . ?  
 382 O1 A11 W2 52.18(13) . . ?  
 383 O3 A11 W2 147.6(2) . . ?  
 384 O2 A11 W2 101.4(2) 5\_665 . ?  
 385 Na2 A11 W2 33.4(3) 15 . ?  
 386 Na1 A11 W2 68.92(13) 13\_665 . ?  
 387 W3 A11 W2 66.8(3) . . ?  
 388 W1 A11 W2 40.1(2) 21 . ?  
 389 O4 A11 W1 65.62(9) . 14\_556 ?  
 390 O1 A11 W1 151.2(2) . 14\_556 ?  
 391 O3 A11 W1 52.03(13) . 14\_556 ?  
 392 O2 A11 W1 100.0(2) 5\_665 14\_556 ?  
 393 Na2 A11 W1 113.8(2) 15 14\_556 ?  
 394 Na1 A11 W1 142.06(13) 13\_665 14\_556 ?  
 395 W3 A11 W1 95.6(2) . 14\_556 ?  
 396 W1 A11 W1 125.99(14) 21 14\_556 ?  
 397 W2 A11 W1 126.78(12) . 14\_556 ?  
 398 O4 A11 W2 58.78(6) . 15 ?  
 399 O1 A11 W2 113.1(2) . 15 ?  
 400 O3 A11 W2 50.54(13) . 15 ?  
 401 O2 A11 W2 138.4(2) 5\_665 15 ?  
 402 Na2 A11 W2 80.2(2) 15 15 ?  
 403 Na1 A11 W2 174.02(7) 13\_665 15 ?  
 404 W3 A11 W2 57.3(2) . 15 ?  
 405 W1 A11 W2 133.86(13) 21 15 ?  
 406 W2 A11 W2 106.0(2) . 15 ?  
 407 W1 A11 W2 38.3(2) 14\_556 15 ?  
 408 O4 A11 W1 82.79(14) . 2\_654 ?  
 409 O1 A11 W1 88.7(2) . 2\_654 ?  
 410 O3 A11 W1 152.5(2) . 2\_654 ?



411 O2 Al1 w1 42.6(2) 5\_665 2\_654 ?  
 412 Na2 Al1 w1 93.3(3) 15 2\_654 ?  
 413 Na1 Al1 w1 35.63(12) 13\_665 2\_654 ?  
 414 W3 Al1 w1 126.7(3) . 2\_654 ?  
 415 W1 Al1 w1 19.9(2) 21 2\_654 ?  
 416 W2 Al1 w1 59.9(2) . 2\_654 ?  
 417 W1 Al1 w1 116.17(9) 14\_556 2\_654 ?  
 418 W2 Al1 w1 139.30(14) 15 2\_654 ?  
 419 O4 Si1 O1 106.4(2) . . ?  
 420 O4 Si1 O3 108.00(14) . . ?  
 421 O1 Si1 O3 111.2(2) . . ?  
 422 O4 Si1 O2 112.0(2) . 5\_665 ?  
 423 O1 Si1 O2 108.4(2) . 5\_665 ?  
 424 O3 Si1 O2 110.8(2) . 5\_665 ?  
 425 O4 Si1 Na2 61.04(14) . 15 ?  
 426 O1 Si1 Na2 46.6(2) . 15 ?  
 427 O3 Si1 Na2 114.2(3) . 15 ?  
 428 O2 Si1 Na2 134.2(3) 5\_665 15 ?  
 429 O4 Si1 W3 72.6(2) . . ?  
 430 O1 Si1 W3 56.2(2) . . ?  
 431 O3 Si1 W3 80.8(3) . . ?  
 432 O2 Si1 W3 164.2(2) 5\_665 . ?

□

433 Na2 Si1 W3 33.5(3) 15 . ?  
 434 O4 Si1 W1 75.31(14) . 21 ?  
 435 O1 Si1 W1 73.8(2) . 21 ?  
 436 O3 Si1 W1 172.3(2) . 21 ?  
 437 O2 Si1 W1 61.6(2) 5\_665 21 ?  
 438 Na2 Si1 W1 73.5(3) 15 21 ?  
 439 W3 Si1 W1 106.9(3) . 21 ?  
 440 O4 Si1 W2 61.22(9) . . ?  
 441 O1 Si1 W2 52.18(13) . . ?  
 442 O3 Si1 W2 147.6(2) . . ?  
 443 O2 Si1 W2 101.4(2) 5\_665 . ?  
 444 Na2 Si1 W2 33.4(3) 15 . ?  
 445 W3 Si1 W2 66.8(3) . . ?  
 446 W1 Si1 W2 40.1(2) 21 . ?  
 447 O4 Si1 W1 65.62(9) . 14\_556 ?  
 448 O1 Si1 W1 151.2(2) . 14\_556 ?  
 449 O3 Si1 W1 52.03(13) . 14\_556 ?  
 450 O2 Si1 W1 100.0(2) 5\_665 14\_556 ?  
 451 Na2 Si1 W1 113.8(2) 15 14\_556 ?  
 452 W3 Si1 W1 95.6(2) . 14\_556 ?  
 453 W1 Si1 W1 125.99(14) 21 14\_556 ?  
 454 W2 Si1 W1 126.78(12) . 14\_556 ?  
 455 O4 Si1 W2 58.78(6) . 15 ?  
 456 O1 Si1 W2 113.1(2) . 15 ?  
 457 O3 Si1 W2 50.54(13) . 15 ?  
 458 O2 Si1 W2 138.4(2) 5\_665 15 ?  
 459 Na2 Si1 W2 80.2(2) 15 15 ?  
 460 W3 Si1 W2 57.3(2) . 15 ?  
 461 W1 Si1 W2 133.86(13) 21 15 ?  
 462 W2 Si1 W2 106.0(2) . 15 ?  
 463 W1 Si1 W2 38.3(2) 14\_556 15 ?  
 464 O4 Si1 W1 82.79(14) . 2\_654 ?  
 465 O1 Si1 W1 88.7(2) . 2\_654 ?  
 466 O3 Si1 W1 152.5(2) . 2\_654 ?  
 467 O2 Si1 W1 42.6(2) 5\_665 2\_654 ?  
 468 Na2 Si1 W1 93.3(3) 15 2\_654 ?  
 469 W3 Si1 W1 126.7(3) . 2\_654 ?  
 470 W1 Si1 W1 19.9(2) 21 2\_654 ?  
 471 W2 Si1 W1 59.9(2) . 2\_654 ?  
 472 W1 Si1 W1 116.17(9) 14\_556 2\_654 ?  
 473 W2 Si1 W1 139.30(14) 15 2\_654 ?  
 474 O4 Si1 W1 91.76(10) . 15 ?  
 475 O1 Si1 W1 48.2(2) . 15 ?

476 O3 Si1 w1 156.0(2) . 15 ?  
 477 O2 Si1 w1 72.3(2) 5\_665 15 ?  
 478 Na2 Si1 w1 63.3(2) 15 15 ?  
 479 W3 Si1 w1 92.7(2) . 15 ?  
 480 W1 Si1 w1 26.6(2) 21 15 ?  
 481 W2 Si1 w1 35.85(14) . 15 ?  
 482 W1 Si1 w1 152.00(12) 14\_556 15 ?  
 483 W2 Si1 w1 141.73(14) 15 15 ?  
 484 W1 Si1 w1 40.8(2) 2\_654 15 ?  
 485 Si1 O1 Al1 0.00(10) . . ?  
 486 Si1 O1 Si1 148.5(3) . 11 ?

□

487 Al1 O1 Si1 148.5(3) . 11 ?  
 488 Si1 O1 Al1 148.5(3) . 11 ?  
 489 Al1 O1 Al1 148.5(3) . 11 ?  
 490 Si1 O1 Al1 0.00(11) 11 11 ?  
 491 Si1 O1 Na2 104.88(13) . 15 ?  
 492 Al1 O1 Na2 104.88(13) . 15 ?  
 493 Si1 O1 Na2 104.88(13) 11 15 ?  
 494 Al1 O1 Na2 104.88(13) 11 15 ?  
 495 Si1 O1 W3 97.8(2) . . ?  
 496 Al1 O1 W3 97.8(2) . . ?  
 497 Si1 O1 W3 97.8(2) 11 . ?  
 498 Al1 O1 W3 97.8(2) 11 . ?  
 499 Na2 O1 W3 41.3(4) 15 . ?  
 500 Si1 O1 W2 104.41(14) . . ?  
 501 Al1 O1 W2 104.41(14) . . ?  
 502 Si1 O1 W2 104.41(14) 11 . ?  
 503 Al1 O1 W2 104.41(14) 11 . ?  
 504 Na2 O1 W2 42.4(3) 15 . ?  
 505 W3 O1 W2 83.7(3) . . ?  
 506 Si1 O1 W1 80.5(2) . 21 ?  
 507 Al1 O1 W1 80.5(2) . 21 ?  
 508 Si1 O1 W1 112.1(2) 11 21 ?  
 509 Al1 O1 W1 112.1(2) 11 21 ?  
 510 Na2 O1 W1 85.2(3) 15 21 ?  
 511 W3 O1 W1 124.6(3) . 21 ?  
 512 W2 O1 W1 45.1(2) . 21 ?  
 513 Si1 O1 W1 112.1(2) . 15 ?  
 514 Al1 O1 W1 112.1(2) . 15 ?  
 515 Si1 O1 W1 80.5(2) 11 15 ?  
 516 Al1 O1 W1 80.5(2) 11 15 ?  
 517 Na2 O1 W1 85.2(3) 15 15 ?  
 518 W3 O1 W1 124.6(3) . 15 ?  
 519 W2 O1 W1 45.1(2) . 15 ?  
 520 W1 O1 W1 32.7(3) 21 15 ?  
 521 Si1 O2 Al1 0.00(11) 9\_665 9\_665 ?  
 522 Si1 O2 Al1 136.7(2) 9\_665 3\_655 ?  
 523 Al1 O2 Al1 136.7(2) 9\_665 3\_655 ?  
 524 Si1 O2 Si1 136.7(2) 9\_665 3\_655 ?  
 525 Al1 O2 Si1 136.7(2) 9\_665 3\_655 ?  
 526 Al1 O2 Si1 0.00(10) 3\_655 3\_655 ?  
 527 Si1 O2 Na1 111.64(12) 9\_665 13\_665 ?  
 528 Al1 O2 Na1 111.64(12) 9\_665 13\_665 ?  
 529 Al1 O2 Na1 111.64(12) 3\_655 13\_665 ?  
 530 Si1 O2 Na1 111.64(12) 3\_655 13\_665 ?  
 531 Si1 O2 W1 117.4(2) 9\_665 8\_654 ?  
 532 Al1 O2 W1 117.4(2) 9\_665 8\_654 ?  
 533 Al1 O2 W1 92.1(2) 3\_655 8\_654 ?  
 534 Si1 O2 W1 92.1(2) 3\_655 8\_654 ?  
 535 Na1 O2 W1 48.8(2) 13\_665 8\_654 ?  
 536 Si1 O2 W1 92.1(2) 9\_665 13\_665 ?  
 537 Al1 O2 W1 92.1(2) 9\_665 13\_665 ?  
 538 Al1 O2 W1 117.4(2) 3\_655 13\_665 ?  
 539 Si1 O2 W1 117.4(2) 3\_655 13\_665 ?  
 540 Na1 O2 W1 48.8(2) 13\_665 13\_665 ?

□

541 W1 O2 W1 26.3(3) 8\_654 13\_665 ?  
 542 Si1 O2 W1 134.2(2) 9\_665 2\_654 ?  
 543 Al1 O2 W1 134.2(2) 9\_665 2\_654 ?  
 544 Al1 O2 W1 86.2(2) 3\_655 2\_654 ?  
 545 Si1 O2 W1 86.2(2) 3\_655 2\_654 ?  
 546 Na1 O2 W1 31.74(13) 13\_665 2\_654 ?  
 547 W1 O2 W1 27.2(2) 8\_654 2\_654 ?  
 548 W1 O2 W1 45.4(2) 13\_665 2\_654 ?  
 549 Si1 O2 W1 86.2(2) 9\_665 19\_665 ?  
 550 Al1 O2 W1 86.2(2) 9\_665 19\_665 ?  
 551 Al1 O2 W1 134.2(2) 3\_655 19\_665 ?  
 552 Si1 O2 W1 134.2(2) 3\_655 19\_665 ?  
 553 Na1 O2 W1 31.74(13) 13\_665 19\_665 ?  
 554 W1 O2 W1 45.4(2) 8\_654 19\_665 ?  
 555 W1 O2 W1 27.2(2) 13\_665 19\_665 ?  
 556 W1 O2 W1 48.5(2) 2\_654 19\_665 ?  
 557 Si1 O3 Al1 0.00(13) 16\_556 16\_556 ?  
 558 Si1 O3 Al1 145.2(3) 16\_556 . ?  
 559 Al1 O3 Al1 145.2(3) 16\_556 . ?  
 560 Si1 O3 Si1 145.2(3) 16\_556 . ?  
 561 Al1 O3 Si1 145.2(3) 16\_556 . ?  
 562 Al1 O3 Si1 0.00(12) . . ?  
 563 Si1 O3 W1 104.69(13) 16\_556 14\_556 ?  
 564 Al1 O3 W1 104.69(13) 16\_556 14\_556 ?  
 565 Al1 O3 W1 104.69(13) . 14\_556 ?  
 566 Si1 O3 W1 104.69(13) . 14\_556 ?  
 567 Si1 O3 W2 106.72(13) 16\_556 15 ?  
 568 Al1 O3 W2 106.72(13) 16\_556 15 ?  
 569 Al1 O3 W2 106.72(13) . 15 ?  
 570 Si1 O3 W2 106.72(13) . 15 ?  
 571 W1 O3 W2 47.8(2) 14\_556 15 ?  
 572 Si1 O3 W3 113.7(2) 16\_556 . ?  
 573 Al1 O3 W3 113.7(2) 16\_556 . ?  
 574 Al1 O3 W3 74.0(3) . . ?  
 575 Si1 O3 W3 74.0(3) . . ?  
 576 W1 O3 W3 107.8(2) 14\_556 . ?  
 577 W2 O3 W3 63.3(2) 15 . ?  
 578 Si1 O3 W3 74.0(3) 16\_556 16\_556 ?  
 579 Al1 O3 W3 74.0(3) 16\_556 16\_556 ?  
 580 Al1 O3 W3 113.7(2) . 16\_556 ?  
 581 Si1 O3 W3 113.7(2) . 16\_556 ?  
 582 W1 O3 W3 107.8(2) 14\_556 16\_556 ?  
 583 W2 O3 W3 63.3(2) 15 16\_556 ?  
 584 W3 O3 W3 41.6(5) . 16\_556 ?  
 585 Si1 O3 W1 100.32(13) 16\_556 9\_655 ?  
 586 Al1 O3 W1 100.32(13) 16\_556 9\_655 ?  
 587 Al1 O3 W1 100.32(13) . 9\_655 ?  
 588 Si1 O3 W1 100.32(13) . 9\_655 ?  
 589 W1 O3 W1 21.2(3) 14\_556 9\_655 ?  
 590 W2 O3 W1 69.0(2) 15 9\_655 ?  
 591 W3 O3 W1 127.1(2) . 9\_655 ?  
 592 W3 O3 W1 127.1(2) 16\_556 9\_655 ?  
 593 Si1 O4 Al1 0.00(12) . . ?  
 594 Si1 O4 Si1 148.5(2) . 19 ?

□

595 Al1 O4 Si1 148.5(2) . 19 ?  
 596 Si1 O4 Al1 148.5(2) . 19 ?  
 597 Al1 O4 Al1 148.5(2) . 19 ?  
 598 Si1 O4 Al1 0.00(11) 19 19 ?  
 599 Si1 O4 Na2 89.4(2) . 15 ?  
 600 Al1 O4 Na2 89.4(2) . 15 ?  
 601 Si1 O4 Na2 117.9(2) 19 15 ?  
 602 Al1 O4 Na2 117.9(2) 19 15 ?  
 603 Si1 O4 Na2 117.9(2) . 5 ?  
 604 Al1 O4 Na2 117.9(2) . 5 ?

605 Si1 04 Na2 89.4(2) 19 5 ?  
 606 Al1 04 Na2 89.4(2) 19 5 ?  
 607 Na2 04 Na2 65.2(5) 15 5 ?  
 608 Si1 04 W2 97.75(5) . 15 ?  
 609 Al1 04 W2 97.75(5) . 15 ?  
 610 Si1 04 W2 94.68(11) 19 15 ?  
 611 Al1 04 W2 94.68(11) 19 15 ?  
 612 Na2 04 W2 96.3(3) 15 15 ?  
 613 Na2 04 W2 38.6(3) 5 15 ?  
 614 Si1 04 W2 94.68(11) . . ?  
 615 Al1 04 W2 94.68(11) . . ?  
 616 Si1 04 W2 97.75(5) 19 . ?  
 617 Al1 04 W2 97.75(5) 19 . ?  
 618 Na2 04 W2 38.6(3) 15 . ?  
 619 Na2 04 W2 96.3(3) 5 . ?  
 620 W2 04 W2 133.0(3) 15 . ?  
 621 Si1 04 W3 129.8(2) . 15 ?  
 622 Al1 04 W3 129.8(2) . 15 ?  
 623 Si1 04 W3 81.5(2) 19 15 ?  
 624 Al1 04 W3 81.5(2) 19 15 ?  
 625 Na2 04 W3 44.7(2) 15 15 ?  
 626 Na2 04 W3 35.1(3) 5 15 ?  
 627 W2 04 W3 73.7(2) 15 15 ?  
 628 W2 04 W3 63.7(3) . 15 ?  
 629 Si1 04 W3 81.5(2) . . ?  
 630 Al1 04 W3 81.5(2) . . ?  
 631 Si1 04 W3 129.8(2) 19 . ?  
 632 Al1 04 W3 129.8(2) 19 . ?  
 633 Na2 04 W3 35.1(3) 15 . ?  
 634 Na2 04 W3 44.7(2) 5 . ?  
 635 W2 04 W3 63.7(3) 15 . ?  
 636 W2 04 W3 73.7(2) . . ?  
 637 W3 04 W3 49.8(4) 15 . ?  
 638 Si1 04 W1 79.09(11) . 21 ?  
 639 Al1 04 W1 79.09(11) . 21 ?  
 640 Si1 04 W1 90.37(13) 19 21 ?  
 641 Al1 04 W1 90.37(13) 19 21 ?  
 642 Na2 04 W1 79.1(3) 15 21 ?  
 643 Na2 04 W1 139.2(3) 5 21 ?  
 644 W2 04 W1 174.4(2) 15 21 ?  
 645 W2 04 W1 43.4(2) . 21 ?  
 646 W3 04 W1 104.7(3) 15 21 ?  
 647 W3 04 W1 111.0(2) . 21 ?  
 648 Si1 04 W1 90.37(13) . 14\_556 ?

□

649 Al1 04 W1 90.37(13) . 14\_556 ?  
 650 Si1 04 W1 79.09(11) 19 14\_556 ?  
 651 Al1 04 W1 79.09(11) 19 14\_556 ?  
 652 Na2 04 W1 139.2(3) 15 14\_556 ?  
 653 Na2 04 W1 79.1(3) 5 14\_556 ?  
 654 W2 04 W1 43.4(2) 15 14\_556 ?  
 655 W2 04 W1 174.4(2) . 14\_556 ?  
 656 W3 04 W1 111.0(2) 15 14\_556 ?  
 657 W3 04 W1 104.7(3) . 14\_556 ?  
 658 W1 04 W1 140.6(3) 21 14\_556 ?  
 659 W1 Na1 W1 48.1(4) 14\_566 20\_566 ?  
 660 W1 Na1 W1 34.7(4) 14\_566 9\_665 ?  
 661 W1 Na1 W1 75.8(3) 20\_566 9\_665 ?  
 662 W1 Na1 W1 75.8(3) 14\_566 . ?  
 663 W1 Na1 W1 34.7(4) 20\_566 . ?  
 664 W1 Na1 W1 89.8(3) 9\_665 . ?  
 665 W1 Na1 W1 75.8(2) 14\_566 3\_665 ?  
 666 W1 Na1 W1 89.8(3) 20\_566 3\_665 ?  
 667 W1 Na1 W1 48.1(4) 9\_665 3\_665 ?  
 668 W1 Na1 W1 75.8(3) . 3\_665 ?  
 669 W1 Na1 W1 89.8(3) 14\_566 7 ?  
 670 W1 Na1 W1 75.8(3) 20\_566 7 ?

671 w1 Na1 w1 75.8(3) 9\_665 7 ?  
 672 w1 Na1 w1 48.1(4) . 7 ?  
 673 w1 Na1 w1 34.7(4) 3\_665 7 ?  
 674 w1 Na1 o2 115.2(2) 14\_566 13\_665 ?  
 675 w1 Na1 o2 80.0(2) 20\_566 13\_665 ?  
 676 w1 Na1 o2 149.9(2) 9\_665 13\_665 ?  
 677 w1 Na1 o2 80.0(2) . 13\_665 ?  
 678 w1 Na1 o2 149.9(2) 3\_665 13\_665 ?  
 679 w1 Na1 o2 115.2(2) 7 13\_665 ?  
 680 w1 Na1 o2 80.0(2) 14\_566 17 ?  
 681 w1 Na1 o2 115.2(2) 20\_566 17 ?  
 682 w1 Na1 o2 80.0(2) 9\_665 17 ?  
 683 w1 Na1 o2 149.9(2) . 17 ?  
 684 w1 Na1 o2 115.2(2) 3\_665 17 ?  
 685 w1 Na1 o2 149.9(2) 7 17 ?  
 686 o2 Na1 o2 94.6(2) 13\_665 17 ?  
 687 w1 Na1 o2 149.9(2) 14\_566 15\_565 ?  
 688 w1 Na1 o2 149.9(2) 20\_566 15\_565 ?  
 689 w1 Na1 o2 115.2(2) 9\_665 15\_565 ?  
 690 w1 Na1 o2 115.2(2) . 15\_565 ?  
 691 w1 Na1 o2 80.0(2) 3\_665 15\_565 ?  
 692 w1 Na1 o2 80.0(2) 7 15\_565 ?  
 693 o2 Na1 o2 94.6(2) 13\_665 15\_565 ?  
 694 o2 Na1 o2 94.6(2) 17 15\_565 ?  
 695 w1 Na1 Na1 45.2(2) 14\_566 14\_566 ?  
 696 w1 Na1 Na1 45.2(2) 20\_566 14\_566 ?  
 697 w1 Na1 Na1 45.2(2) 9\_665 14\_566 ?  
 698 w1 Na1 Na1 45.2(2) . 14\_566 ?  
 699 w1 Na1 Na1 45.2(2) 3\_665 14\_566 ?  
 700 w1 Na1 Na1 45.2(2) 7 14\_566 ?  
 701 o2 Na1 Na1 121.91(12) 13\_665 14\_566 ?  
 702 o2 Na1 Na1 121.91(12) 17 14\_566 ?

□

703 o2 Na1 Na1 121.91(12) 15\_565 14\_566 ?  
 704 w1 Na1 A11 94.6(2) 14\_566 15\_565 ?  
 705 w1 Na1 A11 73.60(14) 20\_566 15\_565 ?  
 706 w1 Na1 A11 127.2(2) 9\_665 15\_565 ?  
 707 w1 Na1 A11 88.6(2) . 15\_565 ?  
 708 w1 Na1 A11 163.2(2) 3\_665 15\_565 ?  
 709 w1 Na1 A11 133.8(2) 7 15\_565 ?  
 710 o2 Na1 A11 25.65(2) 13\_665 15\_565 ?  
 711 o2 Na1 A11 75.67(8) 17 15\_565 ?  
 712 o2 Na1 A11 112.9(2) 15\_565 15\_565 ?  
 713 Na1 Na1 A11 118.63(7) 14\_566 15\_565 ?  
 714 w1 Na1 A11 73.60(14) 14\_566 19\_565 ?  
 715 w1 Na1 A11 94.6(2) 20\_566 19\_565 ?  
 716 w1 Na1 A11 88.6(2) 9\_665 19\_565 ?  
 717 w1 Na1 A11 127.2(2) . 19\_565 ?  
 718 w1 Na1 A11 133.8(2) 3\_665 19\_565 ?  
 719 w1 Na1 A11 163.2(2) 7 19\_565 ?  
 720 o2 Na1 A11 75.67(8) 13\_665 19\_565 ?  
 721 o2 Na1 A11 25.65(2) 17 19\_565 ?  
 722 o2 Na1 A11 112.9(2) 15\_565 19\_565 ?  
 723 Na1 Na1 A11 118.63(7) 14\_566 19\_565 ?  
 724 A11 Na1 A11 52.82(5) 15\_565 19\_565 ?  
 725 w3 Na2 w2 173.2(7) 17 2 ?  
 726 w3 Na2 o1 85.6(5) 17 17 ?  
 727 w2 Na2 o1 87.7(5) 2 17 ?  
 728 w3 Na2 w3 81.0(8) 17 . ?  
 729 w2 Na2 w3 104.1(5) 2 . ?  
 730 o1 Na2 w3 136.9(3) 17 . ?  
 731 w3 Na2 w3 81.0(8) 17 3 ?  
 732 w2 Na2 w3 104.1(5) 2 3 ?  
 733 o1 Na2 w3 136.9(3) 17 3 ?  
 734 w3 Na2 w3 80.9(5) . 3 ?  
 735 w3 Na2 o4 90.5(4) 17 17 ?  
 736 w2 Na2 o4 85.8(3) 2 17 ?

737 O1 Na2 O4 57.5(2) 17 17 ?  
 738 W3 Na2 O4 81.7(2) . 17 ?  
 739 W3 Na2 O4 161.7(5) 3 17 ?  
 740 W3 Na2 O4 90.5(4) 17 3 ?  
 741 W2 Na2 O4 85.8(3) 2 3 ?  
 742 O1 Na2 O4 57.5(2) 17 3 ?  
 743 W3 Na2 O4 161.7(5) . 3 ?  
 744 W3 Na2 O4 81.7(2) 3 3 ?  
 745 O4 Na2 O4 114.7(4) 17 3 ?  
 746 W3 Na2 Na2 54.0(3) 17 17 ?  
 747 W2 Na2 Na2 127.5(4) 2 17 ?  
 748 O1 Na2 Na2 99.5(4) 17 17 ?  
 749 W3 Na2 Na2 105.0(3) . 17 ?  
 750 W3 Na2 Na2 40.9(4) 3 17 ?  
 751 O4 Na2 Na2 140.9(6) 17 17 ?  
 752 O4 Na2 Na2 57.4(2) 3 17 ?  
 753 W3 Na2 Na2 54.0(3) 17 15 ?  
 754 W2 Na2 Na2 127.5(4) 2 15 ?  
 755 O1 Na2 Na2 99.5(4) 17 15 ?  
 756 W3 Na2 Na2 40.9(4) . 15 ?

□

757 W3 Na2 Na2 105.0(3) 3 15 ?  
 758 O4 Na2 Na2 57.4(2) 17 15 ?  
 759 O4 Na2 Na2 140.9(6) 3 15 ?  
 760 Na2 Na2 Na2 102.7(5) 17 15 ?  
 761 W3 Na2 Al1 83.6(4) 17 17 ?  
 762 W2 Na2 Al1 90.4(4) 2 17 ?  
 763 O1 Na2 Al1 28.51(9) 17 17 ?  
 764 W3 Na2 Al1 108.9(3) . 17 ?  
 765 W3 Na2 Al1 160.2(6) 3 17 ?  
 766 O4 Na2 Al1 29.54(10) 17 17 ?  
 767 O4 Na2 Al1 86.0(3) 3 17 ?  
 768 Na2 Na2 Al1 119.3(5) 17 17 ?  
 769 Na2 Na2 Al1 75.4(3) 15 17 ?  
 770 W3 Na2 Si1 83.6(4) 17 17 ?  
 771 W2 Na2 Si1 90.4(4) 2 17 ?  
 772 O1 Na2 Si1 28.51(9) 17 17 ?  
 773 W3 Na2 Si1 108.9(3) . 17 ?  
 774 W3 Na2 Si1 160.2(6) 3 17 ?  
 775 O4 Na2 Si1 29.54(10) 17 17 ?  
 776 O4 Na2 Si1 86.0(3) 3 17 ?  
 777 Na2 Na2 Si1 119.3(5) 17 17 ?  
 778 Na2 Na2 Si1 75.4(3) 15 17 ?  
 779 Al1 Na2 Si1 0.00(6) 17 17 ?  
 780 W3 Na2 Al1 83.6(4) 17 21 ?  
 781 W2 Na2 Al1 90.4(4) 2 21 ?  
 782 O1 Na2 Al1 28.51(9) 17 21 ?  
 783 W3 Na2 Al1 160.2(6) . 21 ?  
 784 W3 Na2 Al1 108.9(3) 3 21 ?  
 785 O4 Na2 Al1 86.0(3) 17 21 ?  
 786 O4 Na2 Al1 29.54(10) 3 21 ?  
 787 Na2 Na2 Al1 75.4(3) 17 21 ?  
 788 Na2 Na2 Al1 119.3(5) 15 21 ?  
 789 Al1 Na2 Al1 56.8(2) 17 21 ?  
 790 Si1 Na2 Al1 56.8(2) 17 21 ?  
 791 W1 W1 W1 120.000(4) 20\_566 7 ?  
 792 W1 W1 Na1 72.6(2) 20\_566 . ?  
 793 W1 W1 Na1 65.9(2) 7 . ?  
 794 W1 W1 Na1 72.6(2) 20\_566 14\_566 ?  
 795 W1 W1 Na1 65.9(2) 7 14\_566 ?  
 796 Na1 W1 Na1 89.7(3) . 14\_566 ?  
 797 W1 W1 W2 172.6(2) 20\_566 2 ?  
 798 W1 W1 W2 67.4(2) 7 2 ?  
 799 Na1 W1 W2 112.3(3) . 2 ?  
 800 Na1 W1 W2 112.3(3) 14\_566 2 ?  
 801 W1 W1 W1 35.1(3) 20\_566 14\_566 ?

802 w1 w1 w1 84.9(3) 7 14\_566 ?  
 803 Na1 w1 w1 52.12(13) . 14\_566 ?  
 804 Na1 w1 w1 52.12(13) 14\_566 14\_566 ?  
 805 w2 w1 w1 152.3(5) 2 14\_566 ?  
 806 w1 w1 w1 95.1(3) 20\_566 3\_665 ?  
 807 w1 w1 w1 24.9(3) 7 3\_665 ?  
 808 Na1 w1 w1 52.12(13) . 3\_665 ?  
 809 Na1 w1 w1 52.12(13) 14\_566 3\_665 ?  
 810 w2 w1 w1 92.3(5) 2 3\_665 ?

□

811 w1 w1 w1 60.0 14\_566 3\_665 ?  
 812 w1 w1 o2 76.8(2) 20\_566 13\_665 ?  
 813 w1 w1 o2 105.7(2) 7 13\_665 ?  
 814 Na1 w1 o2 51.18(10) . 13\_665 ?  
 815 Na1 w1 o2 136.3(3) 14\_566 13\_665 ?  
 816 w2 w1 o2 101.7(2) 2 13\_665 ?  
 817 w1 w1 o2 85.3(2) 14\_566 13\_665 ?  
 818 w1 w1 o2 101.52(14) 3\_665 13\_665 ?  
 819 w1 w1 o2 76.8(2) 20\_566 4\_665 ?  
 820 w1 w1 o2 105.7(2) 7 4\_665 ?  
 821 Na1 w1 o2 136.3(3) . 4\_665 ?  
 822 Na1 w1 o2 51.18(10) 14\_566 4\_665 ?  
 823 w2 w1 o2 101.7(2) 2 4\_665 ?  
 824 w1 w1 o2 85.3(2) 14\_566 4\_665 ?  
 825 w1 w1 o2 101.52(14) 3\_665 4\_665 ?  
 826 o2 w1 o2 146.2(3) 13\_665 4\_665 ?  
 827 w1 w1 o3 106.4(2) 20\_566 3 ?  
 828 w1 w1 o3 133.6(2) 7 3 ?  
 829 Na1 w1 o3 134.5(2) . 3 ?  
 830 Na1 w1 o3 134.5(2) 14\_566 3 ?  
 831 w2 w1 o3 66.2(2) 2 3 ?  
 832 w1 w1 o3 141.5(5) 14\_566 3 ?  
 833 w1 w1 o3 158.5(5) 3\_665 3 ?  
 834 o2 w1 o3 83.8(2) 13\_665 3 ?  
 835 o2 w1 o3 83.8(2) 4\_665 3 ?  
 836 Na2 w2 Na2 113.4(7) 6\_554 15 ?  
 837 Na2 w2 w1 120.4(3) 6\_554 15 ?  
 838 Na2 w2 w1 120.4(3) 15 15 ?  
 839 Na2 w2 w1 120.4(3) 6\_554 21 ?  
 840 Na2 w2 w1 120.4(3) 15 21 ?  
 841 w1 w2 w1 45.1(4) 15 21 ?  
 842 Na2 w2 o1 163.4(4) 6\_554 . ?  
 843 Na2 w2 o1 49.9(3) 15 . ?  
 844 w1 w2 o1 74.7(2) 15 . ?  
 845 w1 w2 o1 74.7(2) 21 . ?  
 846 Na2 w2 o1 49.9(3) 6\_554 16 ?  
 847 Na2 w2 o1 163.4(4) 15 16 ?  
 848 w1 w2 o1 74.7(2) 15 16 ?  
 849 w1 w2 o1 74.7(2) 21 16 ?  
 850 o1 w2 o1 146.7(3) . 16 ?  
 851 Na2 w2 o3 90.80(9) 6\_554 2\_554 ?  
 852 Na2 w2 o3 90.80(9) 15 2\_554 ?  
 853 w1 w2 o3 66.0(2) 15 2\_554 ?  
 854 w1 w2 o3 111.1(3) 21 2\_554 ?  
 855 o1 w2 o3 89.58(5) . 2\_554 ?  
 856 o1 w2 o3 89.58(5) 16 2\_554 ?  
 857 Na2 w2 o3 90.80(9) 6\_554 19 ?  
 858 Na2 w2 o3 90.80(9) 15 19 ?  
 859 w1 w2 o3 111.1(3) 15 19 ?  
 860 w1 w2 o3 66.0(2) 21 19 ?  
 861 o1 w2 o3 89.58(5) . 19 ?  
 862 o1 w2 o3 89.58(5) 16 19 ?  
 863 o3 w2 o3 177.1(3) 2\_554 19 ?  
 864 Na2 w2 o4 129.1(2) 6\_554 17 ?

□

865 Na2 w2 o4 55.5(2) 15 17 ?

866 w1 w2 o4 71.3(2) 15 17 ?  
 867 w1 w2 o4 102.3(2) 21 17 ?  
 868 o1 w2 o4 45.37(2) . 17 ?  
 869 o1 w2 o4 131.98(12) 16 17 ?  
 870 o3 w2 o4 45.80(2) 2\_554 17 ?  
 871 o3 w2 o4 133.96(4) 19 17 ?  
 872 Na2 w2 o4 55.5(2) 6\_554 16 ?  
 873 Na2 w2 o4 129.1(2) 15 16 ?  
 874 w1 w2 o4 102.3(2) 15 16 ?  
 875 w1 w2 o4 71.3(2) 21 16 ?  
 876 o1 w2 o4 131.98(12) . 16 ?  
 877 o1 w2 o4 45.37(2) 16 16 ?  
 878 o3 w2 o4 133.96(4) 2\_554 16 ?  
 879 o3 w2 o4 45.80(2) 19 16 ?  
 880 o4 w2 o4 173.3(3) 17 16 ?  
 881 Na2 w3 Na2 85.1(5) 15 . ?  
 882 Na2 w3 Na2 85.1(5) 15 5 ?  
 883 Na2 w3 Na2 148.3(9) . 5 ?  
 884 Na2 w3 w3 153.5(5) 15 16\_556 ?  
 885 Na2 w3 w3 101.1(5) . 16\_556 ?  
 886 Na2 w3 w3 101.1(5) 5 16\_556 ?  
 887 Na2 w3 w3 56.5(6) 15 15 ?  
 888 Na2 w3 w3 108.5(7) . 15 ?  
 889 Na2 w3 w3 42.5(3) 5 15 ?  
 890 w3 w3 w3 140.7(4) 16\_556 15 ?  
 891 Na2 w3 w3 56.5(6) 15 17 ?  
 892 Na2 w3 w3 42.5(3) . 17 ?  
 893 Na2 w3 w3 108.5(7) 5 17 ?  
 894 w3 w3 w3 140.7(4) 16\_556 17 ?  
 895 w3 w3 w3 66.5(7) 15 17 ?  
 896 Na2 w3 o1 53.2(4) 15 . ?  
 897 Na2 w3 o1 99.0(3) . . ?  
 898 Na2 w3 o1 99.0(3) 5 . ?  
 899 w3 w3 o1 100.3(3) 16\_556 . ?  
 900 w3 w3 o1 99.9(5) 15 . ?  
 901 w3 w3 o1 99.9(5) 17 . ?  
 902 Na2 w3 w3 112.7(4) 15 5 ?  
 903 Na2 w3 w3 108.2(3) . 5 ?  
 904 Na2 w3 w3 49.5(3) 5 5 ?  
 905 w3 w3 w3 90.0 16\_556 5 ?  
 906 w3 w3 w3 56.8(3) 15 5 ?  
 907 w3 w3 w3 90.0 17 5 ?  
 908 o1 w3 w3 148.43(10) . 5 ?  
 909 Na2 w3 w3 112.7(4) 15 3 ?  
 910 Na2 w3 w3 49.5(3) . 3 ?  
 911 Na2 w3 w3 108.2(3) 5 3 ?  
 912 w3 w3 w3 90.0 16\_556 3 ?  
 913 w3 w3 w3 90.0 15 3 ?  
 914 w3 w3 w3 56.8(3) 17 3 ?  
 915 o1 w3 w3 148.43(10) . 3 ?  
 916 w3 w3 w3 60.0 5 3 ?  
 917 Na2 w3 o4 54.4(2) 15 17 ?  
 918 Na2 w3 o4 53.5(2) . 17 ?  
 □  
 919 Na2 w3 o4 136.2(5) 5 17 ?  
 920 w3 w3 o4 109.0(3) 16\_556 17 ?  
 921 w3 w3 o4 109.2(7) 15 17 ?  
 922 w3 w3 o4 65.1(2) 17 17 ?  
 923 o1 w3 o4 45.55(12) . 17 ?  
 924 w3 w3 o4 155.1(2) 5 17 ?  
 925 w3 w3 o4 102.88(11) 3 17 ?  
 926  
 927 \_refine\_diff\_density\_max 0.853  
 928 \_refine\_diff\_density\_min -0.552  
 929 \_refine\_diff\_density\_rms 0.135



4351\_1\_supp\_69397\_10k3zm.txt

□