

data_gme-50

```
_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

13.7280(10)
13.7280(10)
10.0370(10)

90.00
90.00
120.00
1638.1(2)
1
293(2)
?
?
?
?
?
?
?
```

?

2.005

?

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 785

[]

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

0.0309

-9

0

0

19

0

14

4.41

31.02

785

785

>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 $_refine_ls_structure_factor_coef$ Fsqr
151 $_refine_ls_matrix_type$ full
152 $_refine_ls_weighting_scheme$
153 'calc $w=1/[\sigma^2(F_o^2)+(0.0612P)^2+1.7583P]$ 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
?
785
51
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

0.0389
 0.0389
 0.1100
 0.1100

1.070

1.070

1.070

1.070

1.457

0.229

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 0.43956(4) 0.10482(4) 0.09427(5) 0.0148(2) Uani 0.31 d P .
 187 Si1 Si 0.43956(4) 0.10482(4) 0.09427(5) 0.0148(2) Uani 0.69 d P .
 188 O1 O 0.42056(22) 0.21028(11) 0.05875(28) 0.0380(6) Uani 1 d S .
 189 O2 O 0.85510(22) 0.42755(11) 0.06103(24) 0.0308(5) Uani 1 d S .
 190 O3 O 0.40896(21) 0.06592(23) 0.2500 0.0352(6) Uani 1 d S .
 191 O4 O 0.35266(17) 0.0000 0.0000 0.0335(6) Uani 1 d S .
 192 Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0598(4) 0.0516(13) Uani 1 d SP .
 193 Na2 Na 0.1244(5) 0.2488(10) 0.0865(11) 0.144(5) Uani 0.322(7) d SP .
 194 W1 O 0.2085(11) 0.5464(12) 0.2500 0.126(6) Uani 0.362(8) d SP .
 195 W2 O 0.3320(16) 0.1660(8) -0.2500 0.191(6) Uani 0.76(2) d SP .
 196 W3 O 0.1456(26) 0.0728(13) 0.1120(28) 0.530(23) Uani 0.65(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 0.0184(3) 0.0142(3) 0.0131(3) -0.0028(2) -0.0023(2) 0.0091(2)
 207 Si1 0.0184(3) 0.0142(3) 0.0131(3) -0.0028(2) -0.0023(2) 0.0091(2)
 208 O1 0.047(2) 0.0242(8) 0.050(2) -0.0062(6) -0.0124(13) 0.0234(8)
 209 O2 0.0394(14) 0.0276(8) 0.0294(11) -0.0021(5) -0.0042(11) 0.0197(7)
 210 O3 0.0324(13) 0.049(2) 0.0164(9) 0.000 0.000 0.0142(12)
 211 O4 0.0349(9) 0.0246(11) 0.0375(12) -0.0162(10) -0.0081(5) 0.0123(5)
 212 Na1 0.052(2) 0.052(2) 0.051(2) 0.000 0.000 0.0258(8)
 213 Na2 0.193(10) 0.116(8) 0.097(8) 0.040(6) 0.020(3) 0.058(4)
 214 W1 0.092(9) 0.150(11) 0.035(5) 0.000 0.000 -0.015(8)
 215 W2 0.278(23) 0.211(12) 0.202(17) 0.000 0.000 0.139(11)
 216 W3 0.275(23) 0.746(51) 0.411(35) 0.059(10) 0.118(20) 0.137(11)

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 O1 1.6337(8) . ?
 238 Al1 O4 1.6348(8) . ?
 239 Al1 O3 1.6372(10) . ?
 240 Al1 O2 1.6546(10) 5_665 ?
 241 Al1 Na2 3.305(9) 15 ?
 242 Al1 Na1 3.489(2) 13_665 ?
 243 Al1 W1 3.746(5) 21 ?
 244 Al1 W3 3.84(3) . ?
 245 Al1 W2 4.007(7) . ?
 246 Al1 W2 4.0518(6) 15 ?
 247 Al1 W1 4.110(11) 14_556 ?
 248 Al1 W1 4.354(10) 2_654 ?
 249 Si1 O1 1.6337(8) . ?
 250 Si1 O4 1.6348(8) . ?
 251 Si1 O3 1.6372(10) . ?
 252 Si1 O2 1.6546(10) 5_665 ?
 253 Si1 Na2 3.305(9) 15 ?
 254 Si1 Na1 3.489(2) 13_665 ?
 255 Si1 W1 3.746(5) 21 ?
 256 Si1 W3 3.84(3) . ?
 257 Si1 W2 4.007(7) . ?
 258 Si1 W2 4.0518(6) 15 ?
 259 Si1 W1 4.110(11) 14_556 ?
 260 Si1 W1 4.354(10) 2_654 ?
 261 O1 Si1 1.6336(8) 11 ?
 262 O1 Al1 1.6336(8) 11 ?
 263 O1 Na2 2.508(10) 15 ?
 264 O1 W2 3.273(8) . ?
 265 O1 W3 3.31(3) . ?
 266 O1 W1 3.554(9) 21 ?
 267 O1 W1 3.554(9) 15 ?
 268 O2 Si1 1.6546(10) 3_655 ?
 269 O2 Al1 1.6546(10) 3_655 ?
 270 O2 Si1 1.6551(10) 9_665 ?

271 O2 Al1 1.6551(10) 9_665 ?
 272 O2 Na1 2.548(3) 13_665 ?
 273 O2 W1 3.309(6) 8_654 ?
 274 O2 W1 3.309(6) 13_665 ?
 275 O2 W1 4.223(10) 2_654 ?
 276 O2 W1 4.224(10) 19_665 ?
 277 O3 Si1 1.6372(10) 16_556 ?
 278 O3 Al1 1.6372(10) 16_556 ?
 279 O3 W2 3.264(3) 15 ?

280 O3 W1 3.387(12) 14_556 ?
 281 O3 W3 3.92(3) . ?
 282 O3 W3 3.92(3) 16_556 ?
 283 O3 W1 4.11(2) 9_655 ?
 284 O4 Si1 1.6348(8) 19 ?
 285 O4 Al1 1.6348(8) 19 ?
 286 O4 Na2 2.852(6) 15 ?
 287 O4 Na2 2.852(6) 5 ?
 288 O4 W2 3.494(2) . ?
 289 O4 W2 3.496(2) 15 ?
 290 O4 W3 3.63(2) 15 ?
 291 O4 W3 3.63(2) . ?
 292 O4 W1 3.735(9) 14_556 ?
 293 O4 W1 3.735(9) 21 ?
 294 Na1 W1 2.545(9) 14_566 ?
 295 Na1 W1 2.545(9) 20_566 ?
 296 Na1 W1 2.545(9) 9_665 ?
 297 Na1 W1 2.545(9) . ?
 298 Na1 W1 2.545(9) 3_665 ?
 299 Na1 W1 2.545(8) 7 ?
 300 Na1 O2 2.548(3) 13_665 ?
 301 Na1 O2 2.548(3) 17 ?
 302 Na1 O2 2.548(3) 15_565 ?
 303 Na1 Al1 3.489(2) 15_565 ?
 304 Na1 Si1 3.489(2) 15_565 ?
 305 Na1 Al1 3.489(2) 19_565 ?
 306 Na2 W2 1.92(2) 2 ?
 307 Na2 W3 2.34(3) 17 ?
 308 Na2 O1 2.508(10) 17 ?
 309 Na2 W3 2.582(10) . ?
 310 Na2 W3 2.593(10) 3 ?
 311 Na2 O4 2.852(6) 17 ?
 312 Na2 O4 2.852(6) 3 ?
 313 Na2 Na2 3.28(2) 16_556 ?
 314 Na2 Al1 3.305(9) 17 ?
 315 Na2 Si1 3.305(9) 17 ?
 316 Na2 Al1 3.305(9) 21 ?
 317 Na2 Si1 3.305(9) 21 ?
 318 W1 W1 1.59(3) 20_566 ?
 319 W1 W1 1.77(3) 7 ?
 320 W1 Na1 2.545(8) 14_566 ?
 321 W1 W2 2.70(3) 2 ?
 322 W1 W1 2.92(2) 3_665 ?
 323 W1 W1 2.92(2) 14_566 ?
 324 W1 O2 3.309(6) 13_665 ?

□

325 W1 O2 3.309(6) 4_665 ?
 326 W1 W1 3.37(2) 9_665 ?
 327 W2 Na2 1.92(2) 15 ?
 328 W2 Na2 1.92(2) 6_554 ?
 329 W2 W1 2.70(3) 15 ?
 330 W2 W1 2.70(3) 21 ?
 331 W2 O3 3.261(3) 19 ?
 332 W2 O3 3.264(3) 2_554 ?
 333 W2 O1 3.273(8) 16 ?
 334 W2 O4 3.494(2) 16 ?
 335 W2 O4 3.496(2) 17 ?
 336 W3 Na2 2.34(3) 15 ?
 337 W3 Na2 2.593(10) 5 ?
 338 W3 W3 2.77(6) 16_556 ?
 339 W3 W3 2.84(5) 15 ?
 340 W3 W3 2.84(5) 17 ?
 341 W3 W3 3.00(5) 5 ?
 342 W3 W3 3.00(5) 3 ?
 343 W3 O4 3.63(2) 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 O1 A11 O4 106.51(11) . . ?
 354 O1 A11 O3 111.64(14) . . ?
 355 O4 A11 O3 108.07(10) . . ?
 356 O1 A11 O2 107.41(13) . 5_665 ?
 357 O4 A11 O2 111.96(12) . 5_665 ?
 358 O3 A11 O2 111.19(12) . 5_665 ?
 359 O1 A11 Na2 47.46(13) . 15 ?
 360 O4 A11 Na2 59.66(11) . 15 ?
 361 O3 A11 Na2 117.8(2) . 15 ?
 362 O2 A11 Na2 130.4(2) 5_665 15 ?
 363 O1 A11 Na1 64.74(10) . 13_665 ?
 364 O4 A11 Na1 117.75(6) . 13_665 ?
 365 O3 A11 Na1 133.21(11) . 13_665 ?
 366 O2 A11 Na1 43.17(8) 5_665 13_665 ?
 367 Na2 A11 Na1 94.1(2) 15 13_665 ?
 368 O1 A11 w1 70.6(3) . 21 ?
 369 O4 A11 w1 77.0(2) . 21 ?
 370 O3 A11 w1 173.0(2) . 21 ?
 371 O2 A11 w1 62.0(3) 5_665 21 ?
 372 Na2 A11 w1 68.8(3) 15 21 ?
 373 Na1 A11 w1 41.0(2) 13_665 21 ?
 374 O1 A11 w3 59.1(2) . . ?
 375 O4 A11 w3 70.4(4) . . ?
 376 O3 A11 w3 80.5(4) . . ?
 377 O2 A11 w3 165.5(3) 5_665 . ?
 378 Na2 A11 w3 37.3(4) 15 . ?

□

379 Na1 A11 w3 122.6(2) 13_665 . ?
 380 w1 A11 w3 106.0(5) 21 . ?
 381 O1 A11 w2 52.24(10) . . ?
 382 O4 A11 w2 60.1(2) . . ?
 383 O3 A11 w2 146.1(3) . . ?
 384 O2 A11 w2 102.5(3) 5_665 . ?
 385 Na2 A11 w2 28.3(3) 15 . ?
 386 Na1 A11 w2 71.7(3) 13_665 . ?
 387 w1 A11 w2 40.5(4) 21 . ?
 388 w3 A11 w2 65.6(5) . . ?
 389 O1 A11 w2 114.3(3) . 15 ?
 390 O4 A11 w2 58.78(6) . 15 ?
 391 O3 A11 w2 50.46(9) . 15 ?
 392 O2 A11 w2 138.2(3) 5_665 15 ?
 393 Na2 A11 w2 83.0(3) 15 15 ?
 394 Na1 A11 w2 176.31(8) 13_665 15 ?
 395 w1 A11 w2 135.4(2) 21 15 ?
 396 w3 A11 w2 55.9(4) . 15 ?
 397 w2 A11 w2 104.8(4) . 15 ?
 398 O1 A11 w1 152.8(2) . 14_556 ?
 399 O4 A11 w1 65.31(13) . 14_556 ?
 400 O3 A11 w1 52.99(12) . 14_556 ?
 401 O2 A11 w1 99.6(2) 5_665 14_556 ?
 402 Na2 A11 w1 115.2(3) 15 14_556 ?
 403 Na1 A11 w1 142.5(2) 13_665 14_556 ?
 404 w1 A11 w1 127.8(2) 21 14_556 ?
 405 w3 A11 w1 94.4(3) . 14_556 ?
 406 w2 A11 w1 125.4(2) . 14_556 ?
 407 w2 A11 w1 38.6(4) 15 14_556 ?
 408 O1 A11 w1 86.2(2) . 2_654 ?
 409 O4 A11 w1 85.0(2) . 2_654 ?
 410 O3 A11 w1 152.6(2) . 2_654 ?

411 O2 Al1 w1 41.8(2) 5_665 2_654 ?
 412 Na2 Al1 w1 89.6(3) 15 2_654 ?
 413 Na1 Al1 w1 35.8(2) 13_665 2_654 ?
 414 W1 Al1 w1 21.0(4) 21 2_654 ?
 415 W3 Al1 w1 126.9(4) . 2_654 ?
 416 W2 Al1 w1 61.2(3) . 2_654 ?
 417 W2 Al1 w1 141.6(2) 15 2_654 ?
 418 W1 Al1 w1 117.37(14) 14_556 2_654 ?
 419 O1 Si1 O4 106.51(11) . . ?
 420 O1 Si1 O3 111.64(14) . . ?
 421 O4 Si1 O3 108.07(10) . . ?
 422 O1 Si1 O2 107.41(13) . 5_665 ?
 423 O4 Si1 O2 111.96(12) . 5_665 ?
 424 O3 Si1 O2 111.19(12) . 5_665 ?
 425 O1 Si1 Na2 47.46(13) . 15 ?
 426 O4 Si1 Na2 59.66(11) . 15 ?
 427 O3 Si1 Na2 117.8(2) . 15 ?
 428 O2 Si1 Na2 130.4(2) 5_665 15 ?
 429 O1 Si1 Na1 64.74(10) . 13_665 ?
 430 O4 Si1 Na1 117.75(6) . 13_665 ?
 431 O3 Si1 Na1 133.21(11) . 13_665 ?
 432 O2 Si1 Na1 43.17(8) 5_665 13_665 ?

□

433 Na2 Si1 Na1 94.1(2) 15 13_665 ?
 434 O1 Si1 w1 70.6(3) . 21 ?
 435 O4 Si1 w1 77.0(2) . 21 ?
 436 O3 Si1 w1 173.0(2) . 21 ?
 437 O2 Si1 w1 62.0(3) 5_665 21 ?
 438 Na2 Si1 w1 68.8(3) 15 21 ?
 439 Na1 Si1 w1 41.0(2) 13_665 21 ?
 440 O1 Si1 w3 59.1(2) . . ?
 441 O4 Si1 w3 70.4(4) . . ?
 442 O3 Si1 w3 80.5(4) . . ?
 443 O2 Si1 w3 165.5(3) 5_665 . ?
 444 Na2 Si1 w3 37.3(4) 15 . ?
 445 Na1 Si1 w3 122.6(2) 13_665 . ?
 446 W1 Si1 w3 106.0(5) 21 . ?
 447 O1 Si1 w2 52.24(10) . . ?
 448 O4 Si1 w2 60.1(2) . . ?
 449 O3 Si1 w2 146.1(3) . . ?
 450 O2 Si1 w2 102.5(3) 5_665 . ?
 451 Na2 Si1 w2 28.3(3) 15 . ?
 452 Na1 Si1 w2 71.7(3) 13_665 . ?
 453 W1 Si1 w2 40.5(4) 21 . ?
 454 W3 Si1 w2 65.6(5) . . ?
 455 O1 Si1 w2 114.3(3) . 15 ?
 456 O4 Si1 w2 58.78(6) . 15 ?
 457 O3 Si1 w2 50.46(9) . 15 ?
 458 O2 Si1 w2 138.2(3) 5_665 15 ?
 459 Na2 Si1 w2 83.0(3) 15 15 ?
 460 Na1 Si1 w2 176.31(8) 13_665 15 ?
 461 W1 Si1 w2 135.4(2) 21 15 ?
 462 W3 Si1 w2 55.9(4) . 15 ?
 463 W2 Si1 w2 104.8(4) . 15 ?
 464 O1 Si1 w1 152.8(2) . 14_556 ?
 465 O4 Si1 w1 65.31(13) . 14_556 ?
 466 O3 Si1 w1 52.99(12) . 14_556 ?
 467 O2 Si1 w1 99.6(2) 5_665 14_556 ?
 468 Na2 Si1 w1 115.2(3) 15 14_556 ?
 469 Na1 Si1 w1 142.5(2) 13_665 14_556 ?
 470 W1 Si1 w1 127.8(2) 21 14_556 ?
 471 W3 Si1 w1 94.4(3) . 14_556 ?
 472 W2 Si1 w1 125.4(2) . 14_556 ?
 473 W2 Si1 w1 38.6(4) 15 14_556 ?
 474 O1 Si1 w1 86.2(2) . 2_654 ?
 475 O4 Si1 w1 85.0(2) . 2_654 ?
 476 O3 Si1 w1 152.6(2) . 2_654 ?

477 O2 Si1 W1 41.8(2) 5_665 2_654 ?
 478 Na2 Si1 W1 89.6(3) 15 2_654 ?
 479 Na1 Si1 W1 35.8(2) 13_665 2_654 ?
 480 W1 Si1 W1 21.0(4) 21 2_654 ?
 481 W3 Si1 W1 126.9(4) . 2_654 ?
 482 W2 Si1 W1 61.2(3) . 2_654 ?
 483 W2 Si1 W1 141.6(2) 15 2_654 ?
 484 W1 Si1 W1 117.37(14) 14_556 2_654 ?
 485 Si1 O1 Al1 0.00(6) 11 11 ?
 486 Si1 O1 Al1 150.0(2) 11 . ?

□

487 Al1 O1 Al1 150.0(2) 11 . ?
 488 Si1 O1 Si1 150.0(2) 11 . ?
 489 Al1 O1 Si1 150.0(2) 11 . ?
 490 Al1 O1 Si1 0.00(5) . . ?
 491 Si1 O1 Na2 103.86(10) 11 15 ?
 492 Al1 O1 Na2 103.86(10) 11 15 ?
 493 Al1 O1 Na2 103.85(10) . 15 ?
 494 Si1 O1 Na2 103.85(10) . 15 ?
 495 Si1 O1 W2 104.57(10) 11 . ?
 496 Al1 O1 W2 104.57(10) 11 . ?
 497 Al1 O1 W2 104.52(10) . . ?
 498 Si1 O1 W2 104.52(10) . . ?
 499 Na2 O1 W2 35.7(4) 15 . ?
 500 Si1 O1 W3 95.7(2) 11 . ?
 501 Al1 O1 W3 95.7(2) 11 . ?
 502 Al1 O1 W3 95.9(2) . . ?
 503 Si1 O1 W3 95.9(2) . . ?
 504 Na2 O1 W3 44.8(6) 15 . ?
 505 W2 O1 W3 80.5(6) . . ?
 506 Si1 O1 W1 111.9(2) 11 21 ?
 507 Al1 O1 W1 111.9(2) 11 21 ?
 508 Al1 O1 W1 83.7(3) . 21 ?
 509 Si1 O1 W1 83.7(3) . 21 ?
 510 Na2 O1 W1 80.5(3) 15 21 ?
 511 W2 O1 W1 46.3(4) . 21 ?
 512 W3 O1 W1 123.8(5) . 21 ?
 513 Si1 O1 W1 83.7(3) 11 15 ?
 514 Al1 O1 W1 83.7(3) 11 15 ?
 515 Al1 O1 W1 111.9(2) . 15 ?
 516 Si1 O1 W1 111.9(2) . 15 ?
 517 Na2 O1 W1 80.5(3) 15 15 ?
 518 W2 O1 W1 46.3(4) . 15 ?
 519 W3 O1 W1 123.8(5) . 15 ?
 520 W1 O1 W1 28.9(5) 21 15 ?
 521 Si1 O2 Al1 0.00(5) 3_655 3_655 ?
 522 Si1 O2 Si1 138.8(2) 3_655 9_665 ?
 523 Al1 O2 Si1 138.8(2) 3_655 9_665 ?
 524 Si1 O2 Al1 138.8(2) 3_655 9_665 ?
 525 Al1 O2 Al1 138.8(2) 3_655 9_665 ?
 526 Si1 O2 Al1 0.00(6) 9_665 9_665 ?
 527 Si1 O2 Na1 110.45(8) 3_655 13_665 ?
 528 Al1 O2 Na1 110.45(8) 3_655 13_665 ?
 529 Si1 O2 Na1 110.43(8) 9_665 13_665 ?
 530 Al1 O2 Na1 110.43(8) 9_665 13_665 ?
 531 Si1 O2 W1 91.8(3) 3_655 8_654 ?
 532 Al1 O2 W1 91.8(3) 3_655 8_654 ?
 533 Si1 O2 W1 118.7(3) 9_665 8_654 ?
 534 Al1 O2 W1 118.7(3) 9_665 8_654 ?
 535 Na1 O2 W1 49.4(2) 13_665 8_654 ?
 536 Si1 O2 W1 118.8(3) 3_655 13_665 ?
 537 Al1 O2 W1 118.8(3) 3_655 13_665 ?
 538 Si1 O2 W1 91.8(3) 9_665 13_665 ?
 539 Al1 O2 W1 91.8(3) 9_665 13_665 ?
 540 Na1 O2 W1 49.4(2) 13_665 13_665 ?

□

541 w1 o2 w1 27.8(5) 8_654 13_665 ?
 542 Si1 o2 w1 86.1(2) 3_655 2_654 ?
 543 Al1 o2 w1 86.1(2) 3_655 2_654 ?
 544 Si1 o2 w1 132.7(2) 9_665 2_654 ?
 545 Al1 o2 w1 132.7(2) 9_665 2_654 ?
 546 Na1 o2 w1 34.0(2) 13_665 2_654 ?
 547 w1 o2 w1 23.5(4) 8_654 2_654 ?
 548 w1 o2 w1 43.5(3) 13_665 2_654 ?
 549 Si1 o2 w1 132.7(2) 3_655 19_665 ?
 550 Al1 o2 w1 132.7(2) 3_655 19_665 ?
 551 Si1 o2 w1 86.1(2) 9_665 19_665 ?
 552 Al1 o2 w1 86.1(2) 9_665 19_665 ?
 553 Na1 o2 w1 34.0(2) 13_665 19_665 ?
 554 w1 o2 w1 43.5(3) 8_654 19_665 ?
 555 w1 o2 w1 23.5(4) 13_665 19_665 ?
 556 w1 o2 w1 47.0(3) 2_654 19_665 ?
 557 Si1 o3 Al1 0.00(7) 16_556 16_556 ?
 558 Si1 o3 Al1 145.4(2) 16_556 . ?
 559 Al1 o3 Al1 145.4(2) 16_556 . ?
 560 Si1 o3 Si1 145.4(2) 16_556 . ?
 561 Al1 o3 Si1 145.4(2) 16_556 . ?
 562 Al1 o3 Si1 0.00(7) . . ?
 563 Si1 o3 w2 106.78(9) 16_556 15 ?
 564 Al1 o3 w2 106.78(9) 16_556 15 ?
 565 Al1 o3 w2 106.78(9) . 15 ?
 566 Si1 o3 w2 106.78(9) . 15 ?
 567 Si1 o3 w1 104.31(11) 16_556 14_556 ?
 568 Al1 o3 w1 104.31(11) 16_556 14_556 ?
 569 Al1 o3 w1 104.31(11) . 14_556 ?
 570 Si1 o3 w1 104.31(11) . 14_556 ?
 571 w2 o3 w1 47.8(5) 15 14_556 ?
 572 Si1 o3 w3 114.7(4) 16_556 . ?
 573 Al1 o3 w3 114.7(4) 16_556 . ?
 574 Al1 o3 w3 75.2(4) . . ?
 575 Si1 o3 w3 75.2(4) . . ?
 576 w2 o3 w3 61.2(4) 15 . ?
 577 w1 o3 w3 105.8(3) 14_556 . ?
 578 Si1 o3 w3 75.2(4) 16_556 16_556 ?
 579 Al1 o3 w3 75.2(4) 16_556 16_556 ?
 580 Al1 o3 w3 114.7(4) . 16_556 ?
 581 Si1 o3 w3 114.7(4) . 16_556 ?
 582 w2 o3 w3 61.2(4) 15 16_556 ?
 583 w1 o3 w3 105.8(3) 14_556 16_556 ?
 584 w3 o3 w3 41.4(7) . 16_556 ?
 585 Si1 o3 w1 99.64(11) 16_556 9_655 ?
 586 Al1 o3 w1 99.64(11) 16_556 9_655 ?
 587 Al1 o3 w1 99.64(11) . 9_655 ?
 588 Si1 o3 w1 99.64(11) . 9_655 ?
 589 w2 o3 w1 69.7(4) 15 9_655 ?
 590 w1 o3 w1 21.9(4) 14_556 9_655 ?
 591 w3 o3 w1 125.9(3) . 9_655 ?
 592 w3 o3 w1 125.9(3) 16_556 9_655 ?
 593 Si1 o4 Al1 0.00(7) . . ?
 594 Si1 o4 Si1 146.3(2) . 19 ?

□

595 Al1 o4 Si1 146.3(2) . 19 ?
 596 Si1 o4 Al1 146.3(2) . 19 ?
 597 Al1 o4 Al1 146.3(2) . 19 ?
 598 Si1 o4 Al1 0.00(6) 19 19 ?
 599 Si1 o4 Na2 90.7(2) . 15 ?
 600 Al1 o4 Na2 90.7(2) . 15 ?
 601 Si1 o4 Na2 116.8(2) 19 15 ?
 602 Al1 o4 Na2 116.8(2) 19 15 ?
 603 Si1 o4 Na2 116.8(2) . 5 ?
 604 Al1 o4 Na2 116.8(2) . 5 ?
 605 Si1 o4 Na2 90.7(2) 19 5 ?
 606 Al1 o4 Na2 90.7(2) 19 5 ?

607 Na2 04 Na2 73.9(5) 15 5 ?
 608 Si1 04 w2 95.9(2) . . ?
 609 Al1 04 w2 95.9(2) . . ?
 610 Si1 04 w2 97.62(6) 19 . ?
 611 Al1 04 w2 97.62(6) 19 . ?
 612 Na2 04 w2 33.2(3) 15 . ?
 613 Na2 04 w2 100.7(5) 5 . ?
 614 Si1 04 w2 97.65(6) . 15 ?
 615 Al1 04 w2 97.65(6) . 15 ?
 616 Si1 04 w2 95.9(2) 19 15 ?
 617 Al1 04 w2 95.9(2) 19 15 ?
 618 Na2 04 w2 100.7(5) 15 15 ?
 619 Na2 04 w2 33.2(3) 5 15 ?
 620 w2 04 w2 132.0(6) . 15 ?
 621 Si1 04 w3 128.8(5) . 15 ?
 622 Al1 04 w3 128.8(5) . 15 ?
 623 Si1 04 w3 84.6(5) 19 15 ?
 624 Al1 04 w3 84.6(5) 19 15 ?
 625 Na2 04 w3 45.0(4) 15 15 ?
 626 Na2 04 w3 40.2(4) 5 15 ?
 627 w2 04 w3 62.4(4) . 15 ?
 628 w2 04 w3 73.4(4) 15 15 ?
 629 Si1 04 w3 84.6(5) . . ?
 630 Al1 04 w3 84.6(5) . . ?
 631 Si1 04 w3 128.9(5) 19 . ?
 632 Al1 04 w3 128.9(5) 19 . ?
 633 Na2 04 w3 40.1(4) 15 . ?
 634 Na2 04 w3 45.1(4) 5 . ?
 635 w2 04 w3 73.3(4) . . ?
 636 w2 04 w3 62.5(4) 15 . ?
 637 w3 04 w3 46.0(10) 15 . ?
 638 Si1 04 w1 91.3(2) . 14_556 ?
 639 Al1 04 w1 91.3(2) . 14_556 ?
 640 Si1 04 w1 77.74(13) 19 14_556 ?
 641 Al1 04 w1 77.74(13) 19 14_556 ?
 642 Na2 04 w1 144.2(4) 15 14_556 ?
 643 Na2 04 w1 73.4(4) 5 14_556 ?
 644 w2 04 w1 172.3(4) . 14_556 ?
 645 w2 04 w1 43.7(4) 15 14_556 ?
 646 w3 04 w1 110.7(4) 15 14_556 ?
 647 w3 04 w1 104.7(4) . 14_556 ?
 648 Si1 04 w1 77.74(13) . 21 ?

□

649 Al1 04 w1 77.74(13) . 21 ?
 650 Si1 04 w1 91.3(2) 19 21 ?
 651 Al1 04 w1 91.3(2) 19 21 ?
 652 Na2 04 w1 73.4(4) 15 21 ?
 653 Na2 04 w1 144.2(4) 5 21 ?
 654 w2 04 w1 43.7(4) . 21 ?
 655 w2 04 w1 172.3(4) 15 21 ?
 656 w3 04 w1 104.6(4) 15 21 ?
 657 w3 04 w1 110.6(4) . 21 ?
 658 w1 04 w1 141.6(5) 14_556 21 ?
 659 w1 Na1 w1 40.8(7) 14_566 20_566 ?
 660 w1 Na1 w1 36.4(7) 14_566 9_665 ?
 661 w1 Na1 w1 69.9(3) 20_566 9_665 ?
 662 w1 Na1 w1 69.9(3) 14_566 . ?
 663 w1 Na1 w1 36.4(7) 20_566 . ?
 664 w1 Na1 w1 82.8(4) 9_665 . ?
 665 w1 Na1 w1 69.9(3) 14_566 3_665 ?
 666 w1 Na1 w1 82.8(4) 20_566 3_665 ?
 667 w1 Na1 w1 40.8(7) 9_665 3_665 ?
 668 w1 Na1 w1 69.9(3) . 3_665 ?
 669 w1 Na1 w1 82.8(4) 14_566 7 ?
 670 w1 Na1 w1 69.9(3) 20_566 7 ?
 671 w1 Na1 w1 69.9(3) 9_665 7 ?
 672 w1 Na1 w1 40.8(7) . 7 ?

673 w1 Na1 w1 36.4(7) 3_665 7 ?
 674 w1 Na1 o2 112.1(4) 14_566 13_665 ?
 675 w1 Na1 o2 81.0(2) 20_566 13_665 ?
 676 w1 Na1 o2 148.4(4) 9_665 13_665 ?
 677 w1 Na1 o2 81.1(2) . 13_665 ?
 678 w1 Na1 o2 148.4(4) 3_665 13_665 ?
 679 w1 Na1 o2 112.1(4) 7 13_665 ?
 680 w1 Na1 o2 81.1(2) 14_566 17 ?
 681 w1 Na1 o2 112.1(4) 20_566 17 ?
 682 w1 Na1 o2 81.0(2) 9_665 17 ?
 683 w1 Na1 o2 148.4(4) . 17 ?
 684 w1 Na1 o2 112.1(4) 3_665 17 ?
 685 w1 Na1 o2 148.4(4) 7 17 ?
 686 o2 Na1 o2 99.20(11) 13_665 17 ?
 687 w1 Na1 o2 148.4(4) 14_566 15_565 ?
 688 w1 Na1 o2 148.4(4) 20_566 15_565 ?
 689 w1 Na1 o2 112.1(4) 9_665 15_565 ?
 690 w1 Na1 o2 112.1(4) . 15_565 ?
 691 w1 Na1 o2 81.1(2) 3_665 15_565 ?
 692 w1 Na1 o2 81.0(2) 7 15_565 ?
 693 o2 Na1 o2 99.20(11) 13_665 15_565 ?
 694 o2 Na1 o2 99.20(11) 17 15_565 ?
 695 w1 Na1 A11 93.2(3) 14_566 15_565 ?
 696 w1 Na1 A11 74.9(2) 20_566 15_565 ?
 697 w1 Na1 A11 128.0(4) 9_665 15_565 ?
 698 w1 Na1 A11 91.0(3) . 15_565 ?
 699 w1 Na1 A11 157.7(2) 3_665 15_565 ?
 700 w1 Na1 A11 130.0(4) 7 15_565 ?
 701 o2 Na1 A11 26.38(2) 13_665 15_565 ?
 702 o2 Na1 A11 78.07(6) 17 15_565 ?
 □
 703 o2 Na1 A11 118.00(12) 15_565 15_565 ?
 704 w1 Na1 Si1 93.2(3) 14_566 15_565 ?
 705 w1 Na1 Si1 74.9(2) 20_566 15_565 ?
 706 w1 Na1 Si1 128.0(4) 9_665 15_565 ?
 707 w1 Na1 Si1 91.0(3) . 15_565 ?
 708 w1 Na1 Si1 157.7(2) 3_665 15_565 ?
 709 w1 Na1 Si1 130.0(4) 7 15_565 ?
 710 o2 Na1 Si1 26.38(2) 13_665 15_565 ?
 711 o2 Na1 Si1 78.07(6) 17 15_565 ?
 712 o2 Na1 Si1 118.00(12) 15_565 15_565 ?
 713 A11 Na1 Si1 0.00(3) 15_565 15_565 ?
 714 w1 Na1 A11 74.9(2) 14_566 19_565 ?
 715 w1 Na1 A11 93.2(3) 20_566 19_565 ?
 716 w1 Na1 A11 91.0(3) 9_665 19_565 ?
 717 w1 Na1 A11 128.0(4) . 19_565 ?
 718 w1 Na1 A11 130.0(4) 3_665 19_565 ?
 719 w1 Na1 A11 157.7(2) 7 19_565 ?
 720 o2 Na1 A11 78.06(6) 13_665 19_565 ?
 721 o2 Na1 A11 26.39(2) 17 19_565 ?
 722 o2 Na1 A11 118.00(12) 15_565 19_565 ?
 723 A11 Na1 A11 53.79(3) 15_565 19_565 ?
 724 Si1 Na1 A11 53.79(3) 15_565 19_565 ?
 725 w2 Na2 w3 179.4(10) 2 17 ?
 726 w2 Na2 o1 94.5(7) 2 17 ?
 727 w3 Na2 o1 86.1(9) 17 17 ?
 728 w2 Na2 w3 109.4(9) 2 . ?
 729 w3 Na2 w3 70.2(13) 17 . ?
 730 o1 Na2 w3 135.7(6) 17 . ?
 731 w2 Na2 w3 109.5(9) 2 3 ?
 732 w3 Na2 w3 70.0(13) 17 3 ?
 733 o1 Na2 w3 135.7(6) 17 3 ?
 734 w3 Na2 w3 70.8(13) . 3 ?
 735 w2 Na2 o4 92.1(4) 2 17 ?
 736 w3 Na2 o4 88.3(5) 17 17 ?
 737 o1 Na2 o4 58.1(2) 17 17 ?
 738 w3 Na2 o4 83.6(6) . 17 ?

739 W3 Na2 O4 150.6(9) 3 17 ?
 740 W2 Na2 O4 92.2(4) 2 3 ?
 741 W3 Na2 O4 88.1(5) 17 3 ?
 742 O1 Na2 O4 58.1(2) 17 3 ?
 743 W3 Na2 O4 150.7(9) . 3 ?
 744 W3 Na2 O4 83.6(6) 3 3 ?
 745 O4 Na2 O4 116.1(3) 17 3 ?
 746 W2 Na2 Na2 31.1(6) 2 16_556 ?
 747 W3 Na2 Na2 148.3(8) 17 16_556 ?
 748 O1 Na2 Na2 125.5(3) 17 16_556 ?
 749 W3 Na2 Na2 84.3(7) . 16_556 ?
 750 W3 Na2 Na2 84.3(7) 3 16_556 ?
 751 O4 Na2 Na2 107.7(2) 17 16_556 ?
 752 O4 Na2 Na2 107.7(2) 3 16_556 ?
 753 W2 Na2 Al1 96.7(6) 2 17 ?
 754 W3 Na2 Al1 83.9(7) 17 17 ?
 755 O1 Na2 Al1 28.68(8) 17 17 ?
 756 W3 Na2 Al1 109.4(6) . 17 ?

□

757 W3 Na2 Al1 152.4(8) 3 17 ?
 758 O4 Na2 Al1 29.65(9) 17 17 ?
 759 O4 Na2 Al1 86.6(2) 3 17 ?
 760 Na2 Na2 Al1 123.3(2) 16_556 17 ?
 761 W2 Na2 Si1 96.7(6) 2 17 ?
 762 W3 Na2 Si1 83.9(7) 17 17 ?
 763 O1 Na2 Si1 28.68(8) 17 17 ?
 764 W3 Na2 Si1 109.4(6) . 17 ?
 765 W3 Na2 Si1 152.4(8) 3 17 ?
 766 O4 Na2 Si1 29.65(9) 17 17 ?
 767 O4 Na2 Si1 86.6(2) 3 17 ?
 768 Na2 Na2 Si1 123.3(2) 16_556 17 ?
 769 Al1 Na2 Si1 0.00(4) 17 17 ?
 770 W2 Na2 Al1 96.7(6) 2 21 ?
 771 W3 Na2 Al1 83.8(7) 17 21 ?
 772 O1 Na2 Al1 28.68(8) 17 21 ?
 773 W3 Na2 Al1 152.4(8) . 21 ?
 774 W3 Na2 Al1 109.4(6) 3 21 ?
 775 O4 Na2 Al1 86.6(2) 17 21 ?
 776 O4 Na2 Al1 29.65(9) 3 21 ?
 777 Na2 Na2 Al1 123.3(2) 16_556 21 ?
 778 Al1 Na2 Al1 57.1(2) 17 21 ?
 779 Si1 Na2 Al1 57.1(2) 17 21 ?
 780 W2 Na2 Si1 96.7(6) 2 21 ?
 781 W3 Na2 Si1 83.8(7) 17 21 ?
 782 O1 Na2 Si1 28.68(8) 17 21 ?
 783 W3 Na2 Si1 152.4(8) . 21 ?
 784 W3 Na2 Si1 109.4(6) 3 21 ?
 785 O4 Na2 Si1 86.6(2) 17 21 ?
 786 O4 Na2 Si1 29.65(9) 3 21 ?
 787 Na2 Na2 Si1 123.3(2) 16_556 21 ?
 788 Al1 Na2 Si1 57.1(2) 17 21 ?
 789 Si1 Na2 Si1 57.1(2) 17 21 ?
 790 Al1 Na2 Si1 0.00(3) 21 21 ?
 791 W1 W1 W1 120.000(6) 20_566 7 ?
 792 W1 W1 Na1 71.8(4) 20_566 . ?
 793 W1 W1 Na1 69.6(3) 7 . ?
 794 W1 W1 Na1 71.8(4) 20_566 14_566 ?
 795 W1 W1 Na1 69.6(3) 7 14_566 ?
 796 Na1 W1 Na1 97.2(4) . 14_566 ?
 797 W1 W1 W2 169.2(3) 20_566 2 ?
 798 W1 W1 W2 70.8(3) 7 2 ?
 799 Na1 W1 W2 114.6(4) . 2 ?
 800 Na1 W1 W2 114.6(4) 14_566 2 ?
 801 W1 W1 W1 91.8(6) 20_566 3_665 ?
 802 W1 W1 W1 28.2(6) 7 3_665 ?
 803 Na1 W1 W1 55.1(2) . 3_665 ?

804 Na1 w1 w1 55.1(2) 14_566 3_665 ?
 805 w2 w1 w1 99.0(8) 2 3_665 ?
 806 w1 w1 w1 31.8(6) 20_566 14_566 ?
 807 w1 w1 w1 88.2(6) 7 14_566 ?
 808 Na1 w1 w1 55.1(2) . 14_566 ?
 809 Na1 w1 w1 55.1(2) 14_566 14_566 ?
 810 w2 w1 w1 159.0(8) 2 14_566 ?

□

811 w1 w1 w1 60.000(2) 3_665 14_566 ?
 812 w1 w1 o2 76.1(3) 20_566 13_665 ?
 813 w1 w1 o2 108.6(2) 7 13_665 ?
 814 Na1 w1 o2 49.51(11) . 13_665 ?
 815 Na1 w1 o2 140.0(5) 14_566 13_665 ?
 816 w2 w1 o2 101.2(3) 2 13_665 ?
 817 w1 w1 o2 103.7(2) 3_665 13_665 ?
 818 w1 w1 o2 85.2(4) 14_566 13_665 ?
 819 w1 w1 o2 76.1(3) 20_566 4_665 ?
 820 w1 w1 o2 108.6(2) 7 4_665 ?
 821 Na1 w1 o2 140.0(5) . 4_665 ?
 822 Na1 w1 o2 49.51(11) 14_566 4_665 ?
 823 w2 w1 o2 101.2(3) 2 4_665 ?
 824 w1 w1 o2 103.7(2) 3_665 4_665 ?
 825 w1 w1 o2 85.2(4) 14_566 4_665 ?
 826 o2 w1 o2 141.3(5) 13_665 4_665 ?
 827 w1 w1 w1 60.000(5) 20_566 9_665 ?
 828 w1 w1 w1 60.000(3) 7 9_665 ?
 829 Na1 w1 w1 48.6(2) . 9_665 ?
 830 Na1 w1 w1 48.6(2) 14_566 9_665 ?
 831 w2 w1 w1 130.8(3) 2 9_665 ?
 832 w1 w1 w1 31.8(6) 3_665 9_665 ?
 833 w1 w1 w1 28.2(6) 14_566 9_665 ?
 834 o2 w1 w1 94.5(2) 13_665 9_665 ?
 835 o2 w1 w1 94.5(2) 4_665 9_665 ?
 836 Na2 w2 Na2 117.9(12) 15 6_554 ?
 837 Na2 w2 w1 119.1(5) 15 15 ?
 838 Na2 w2 w1 119.1(5) 6_554 15 ?
 839 Na2 w2 w1 119.2(5) 15 21 ?
 840 Na2 w2 w1 119.2(5) 6_554 21 ?
 841 w1 w2 w1 38.4(6) 15 21 ?
 842 Na2 w2 o3 91.2(2) 15 19 ?
 843 Na2 w2 o3 91.2(2) 6_554 19 ?
 844 w1 w2 o3 106.9(6) 15 19 ?
 845 w1 w2 o3 68.5(4) 21 19 ?
 846 Na2 w2 o3 91.1(2) 15 2_554 ?
 847 Na2 w2 o3 91.1(2) 6_554 2_554 ?
 848 w1 w2 o3 68.5(4) 15 2_554 ?
 849 w1 w2 o3 106.9(6) 21 2_554 ?
 850 o3 w2 o3 175.4(8) 19 2_554 ?
 851 Na2 w2 o1 49.8(3) 15 . ?
 852 Na2 w2 o1 167.7(9) 6_554 . ?
 853 w1 w2 o1 72.3(3) 15 . ?
 854 w1 w2 o1 72.3(3) 21 . ?
 855 o3 w2 o1 89.29(14) 19 . ?
 856 o3 w2 o1 89.24(13) 2_554 . ?
 857 Na2 w2 o1 167.7(9) 15 16 ?
 858 Na2 w2 o1 49.8(3) 6_554 16 ?
 859 w1 w2 o1 72.3(3) 15 16 ?
 860 w1 w2 o1 72.3(3) 21 16 ?
 861 o3 w2 o1 89.29(14) 19 16 ?
 862 o3 w2 o1 89.24(13) 2_554 16 ?
 863 o1 w2 o1 142.5(7) . 16 ?
 864 Na2 w2 o4 130.7(4) 15 16 ?

□

865 Na2 w2 o4 54.7(2) 6_554 16 ?
 866 w1 w2 o4 99.3(5) 15 16 ?
 867 w1 w2 o4 72.9(3) 21 16 ?

868 O3 W2 O4 46.00(2) 19 16 ?
 869 O3 W2 O4 133.55(9) 2_554 16 ?
 870 O1 W2 O4 131.1(3) . 16 ?
 871 O1 W2 O4 45.39(5) 16 16 ?
 872 Na2 W2 O4 54.6(2) 15 17 ?
 873 Na2 W2 O4 130.6(4) 6_554 17 ?
 874 W1 W2 O4 72.9(3) 15 17 ?
 875 W1 W2 O4 99.3(5) 21 17 ?
 876 O3 W2 O4 133.59(9) 19 17 ?
 877 O3 W2 O4 45.97(2) 2_554 17 ?
 878 O1 W2 O4 45.38(5) . 17 ?
 879 O1 W2 O4 131.1(3) 16 17 ?
 880 O4 W2 O4 172.0(7) 16 17 ?
 881 Na2 W3 Na2 88.2(6) 15 . ?
 882 Na2 W3 Na2 88.0(6) 15 5 ?
 883 Na2 W3 Na2 164.1(16) . 5 ?
 884 Na2 W3 W3 148.3(8) 15 16_556 ?
 885 Na2 W3 W3 95.7(7) . 16_556 ?
 886 Na2 W3 W3 95.7(7) 5 16_556 ?
 887 Na2 W3 W3 58.9(9) 15 15 ?
 888 Na2 W3 W3 114.6(11) . 15 ?
 889 Na2 W3 W3 50.8(7) 5 15 ?
 890 W3 W3 W3 142.4(7) 16_556 15 ?
 891 Na2 W3 W3 59.2(9) 15 17 ?
 892 Na2 W3 W3 50.9(7) . 17 ?
 893 Na2 W3 W3 114.5(11) 5 17 ?
 894 W3 W3 W3 142.4(7) 16_556 17 ?
 895 W3 W3 W3 63.8(12) 15 17 ?
 896 Na2 W3 W3 116.9(7) 15 5 ?
 897 Na2 W3 W3 114.4(7) . 5 ?
 898 Na2 W3 W3 54.5(7) 5 5 ?
 899 W3 W3 W3 90.0 16_556 5 ?
 900 W3 W3 W3 58.1(6) 15 5 ?
 901 W3 W3 W3 90.0 17 5 ?
 902 Na2 W3 W3 117.2(7) 15 3 ?
 903 Na2 W3 W3 54.8(7) . 3 ?
 904 Na2 W3 W3 114.1(7) 5 3 ?
 905 W3 W3 W3 90.0 16_556 3 ?
 906 W3 W3 W3 90.0 15 3 ?
 907 W3 W3 W3 58.1(6) 17 3 ?
 908 W3 W3 W3 60.0 5 3 ?
 909 Na2 W3 O1 49.0(6) 15 . ?
 910 Na2 W3 O1 94.7(6) . . ?
 911 Na2 W3 O1 94.5(6) 5 . ?
 912 W3 W3 O1 99.3(5) 16_556 . ?
 913 W3 W3 O1 99.8(7) 15 . ?
 914 W3 W3 O1 100.1(7) 17 . ?
 915 W3 W3 O1 148.48(14) 5 . ?
 916 W3 W3 O1 148.97(14) 3 . ?
 917 Na2 W3 O4 51.8(4) 15 17 ?
 918 Na2 W3 O4 51.4(3) . 17 ?
 □
 919 Na2 W3 O4 134.0(9) 5 17 ?
 920 W3 W3 O4 108.0(5) 16_556 17 ?
 921 W3 W3 O4 108.2(11) 15 17 ?
 922 W3 W3 O4 67.1(5) 17 17 ?
 923 W3 W3 O4 157.1(5) 5 17 ?
 924 W3 W3 O4 104.9(4) 3 17 ?
 925 O1 W3 O4 44.0(3) . 17 ?
 926
 927 _refine_diff_density_max 0.761
 928 _refine_diff_density_min -0.908
 929 _refine_diff_density_rms 0.082

□