

data_gme-75

_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	13.7470(10)
_cell_length_b	13.7470(10)
_cell_length_c	10.0450(10)
_cell_angle_alpha	90.00

4351_1_supp_69395_10k3z1.txt

```

_cell_angle_beta          90.00
_cell_angle_gamma        120.00
_cell_volume             1644.0(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 1.998
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_F_000      981
_exptl_absorpt_coefficient_mu 0.605
_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        994
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0283
_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   16
_diffn_reflns_theta_min     4.40
_diffn_reflns_theta_max     34.96
_reflns_number_total        994
_reflns_number_observed     994
_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 F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion

```

of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating $_R$ _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)+(0.0943P)^2+0.3540P] 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          994
_refine_ls_number_parameters       50
_refine_ls_number_restraints       0
_refine_ls_R_factor_all            0.0487
_refine_ls_R_factor_obs            0.0487
_refine_ls_wR_factor_all           0.1560
_refine_ls_wR_factor_obs           0.1560
_refine_ls_goodness_of_fit_all     1.279
_refine_ls_goodness_of_fit_obs     1.279
_refine_ls_restrained_S_all        1.279
_refine_ls_restrained_S_obs        1.279
_refine_ls_shift/esd_max           -1.512
_refine_ls_shift/esd_mean          0.256
```

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 0.43910(4) 0.10468(4) 0.09418(5) 0.0161(2) Uani 0.31 d P .
Si1 Si 0.43910(4) 0.10468(4) 0.09418(5) 0.0161(2) Uani 0.69 d P .
O1 O 0.42284(24) 0.21142(12) 0.05596(30) 0.0410(6) Uani 1 d S .
O2 O 0.85610(24) 0.42805(12) 0.06225(26) 0.0350(6) Uani 1 d S .
O3 O 0.40837(23) 0.06704(25) 0.2500 0.0380(6) Uani 1 d S .
O4 O 0.35114(18) 0.0000 0.0000 0.0348(6) Uani 1 d S .
Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0485(4) 0.0619(9) Uani 1 d S .
Na2 Na 0.1324(5) 0.2648(11) 0.0881(12) 0.154(5) Uani 0.312(8) d SP .
W1 O 0.2187(26) 0.5457(27) 0.2500 0.137(13) Uiso 0.21(1) d SP .
W2 O 0.1771(18) 0.3542(36) 0.2500 0.152(16) Uiso 0.23(2) d SP .
W3 O 0.1480(48) 0.0740(24) 0.0907(44) 0.315(25) Uiso 0.25(2) 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 0.0197(3) 0.0151(3) 0.0150(3) -0.0033(2) -0.0027(2) 0.0099(2)
Si1 0.0197(3) 0.0151(3) 0.0150(3) -0.0033(2) -0.0027(2) 0.0099(2)
O1 0.054(2) 0.0263(8) 0.052(2) -0.0060(7) -0.0121(14) 0.0269(8)
O2 0.0421(14) 0.0291(8) 0.0383(12) -0.0017(6) -0.0034(12) 0.0211(7)
O3 0.0360(13) 0.053(2) 0.0170(9) 0.000 0.000 0.0160(13)
O4 0.0368(9) 0.0259(11) 0.0380(12) -0.0152(10) -0.0076(5) 0.0130(5)
```

Na1 0.0551(13) 0.0551(13) 0.075(3) 0.000 0.000 0.0275(6)
 Na2 0.192(11) 0.110(9) 0.132(10) 0.044(8) 0.022(4) 0.055(5)

_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
 Al1 O3 1.6363(10) . ?
 Al1 O1 1.6363(9) . ?
 Al1 O4 1.6395(9) . ?
 Al1 O2 1.6558(11) 5_665 ?
 Al1 Na2 3.186(9) 15 ?
 Al1 Na1 3.448(2) 13_665 ?
 Al1 W3 3.81(5) . ?
 Al1 W1 3.776(13) 21 ?
 Al1 W2 3.933(11) 15 ?
 Al1 W2 4.056(3) 14_556 ?
 Al1 W1 4.21(3) 14_556 ?
 Al1 W1 4.35(2) 15 ?
 Si1 O3 1.6363(10) . ?
 Si1 O1 1.6363(9) . ?
 Si1 O4 1.6395(9) . ?
 Si1 O2 1.6558(11) 5_665 ?
 Si1 Na2 3.186(9) 15 ?
 Si1 Na1 3.448(2) 13_665 ?
 Si1 W3 3.81(5) . ?
 Si1 W1 3.776(13) 21 ?
 Si1 W2 3.933(11) 15 ?
 Si1 W2 4.056(3) 14_556 ?
 Si1 W1 4.21(3) 14_556 ?
 Si1 W1 4.35(2) 15 ?
 O1 Si1 1.6370(9) 11 ?
 O1 Al1 1.6370(9) 11 ?
 O1 Na2 2.372(11) 15 ?
 O1 W2 3.178(12) 15 ?
 O1 W3 3.29(6) . ?
 O1 W1 3.484(14) 15 ?
 O1 W1 3.484(14) 21 ?
 O2 Si1 1.6572(11) 9_665 ?
 O2 Al1 1.6572(11) 9_665 ?
 O2 Al1 1.6558(11) 3_655 ?
 O2 Si1 1.6558(11) 3_655 ?
 O2 Na1 2.515(4) 13_665 ?
 O2 W1 3.376(10) 8_654 ?
 O2 W1 3.376(10) 13_665 ?
 O2 W1 4.15(2) 2_654 ?
 O2 W1 4.15(2) 19_665 ?
 O3 Si1 1.6363(10) 16_556 ?
 O3 Al1 1.6363(10) 16_556 ?
 O3 W2 3.268(4) 14_556 ?
 O3 W1 3.50(3) 14_556 ?
 O3 W3 3.97(5) . ?
 O3 W3 3.97(5) 16_556 ?
 O3 W1 4.28(3) 9_655 ?
 O4 Si1 1.6395(9) 19 ?
 O4 Al1 1.6395(9) 19 ?

O4 Na2 2.767(5) 5 ?
 O4 Na2 2.769(5) 15 ?
 O4 W2 3.4859(10) 15 ?
 O4 W2 3.4808(10) 14_556 ?
 O4 W3 3.53(4) 15 ?
 O4 W3 3.54(4) . ?
 O4 W1 3.80(2) 14_556 ?
 O4 W1 3.80(2) 21 ?
 Na1 O2 2.515(4) 13_665 ?
 Na1 O2 2.515(4) 17 ?
 Na1 O2 2.515(4) 15_565 ?
 Na1 W1 2.59(2) 14_566 ?
 Na1 W1 2.59(2) 20_566 ?
 Na1 W1 2.59(2) 9_665 ?
 Na1 W1 2.59(2) . ?
 Na1 W1 2.59(2) 3_665 ?
 Na1 W1 2.59(2) 7 ?
 Na1 A11 3.448(2) 15_565 ?
 Na1 Si1 3.448(2) 15_565 ?
 Na1 A11 3.448(2) 19_565 ?
 Na2 W2 1.95(3) . ?
 Na2 W3 2.27(6) 17 ?
 Na2 O1 2.372(11) 17 ?
 Na2 W3 2.728(11) . ?
 Na2 W3 2.748(11) 3 ?
 Na2 O4 2.769(5) 17 ?
 Na2 O4 2.767(5) 3 ?
 Na2 Si1 3.186(9) 17 ?
 Na2 A11 3.186(9) 17 ?
 Na2 A11 3.185(9) 21 ?
 Na2 Si1 3.185(9) 21 ?
 Na2 Na2 3.25(2) 16_556 ?
 W1 W1 1.49(6) 7 ?
 W1 W1 1.75(6) 20_566 ?
 W1 W2 2.39(5) . ?
 W1 Na1 2.59(2) 14_566 ?
 W1 W1 2.81(6) 3_665 ?
 W1 W1 2.81(6) 14_566 ?
 W1 W1 3.24(6) 9_665 ?
 W1 O2 3.376(10) 13_665 ?
 W1 O2 3.376(10) 4_665 ?
 W1 O1 3.484(14) 17 ?
 W1 O1 3.484(14) 2 ?
 W1 O3 3.50(3) 3 ?
 W2 Na2 1.95(3) 16_556 ?
 W2 W1 2.39(5) 7 ?
 W2 O1 3.178(12) 2 ?
 W2 O1 3.178(12) 17 ?
 W2 O3 3.275(4) 20_556 ?
 W2 O3 3.268(4) 3 ?
 W2 O4 3.4859(10) 2 ?
 W2 O4 3.4859(10) 17 ?
 W2 O4 3.4808(10) 3 ?
 W2 O4 3.4808(10) 18_556 ?
 W2 A11 3.933(11) 2 ?
 W3 Na2 2.27(6) 15 ?
 W3 W3 2.53(7) 15 ?
 W3 W3 2.53(7) 17 ?
 W3 Na2 2.748(11) 5 ?
 W3 W3 3.05(10) 5 ?
 W3 W3 3.05(10) 3 ?
 W3 W3 3.20(9) 16_556 ?
 W3 O4 3.53(4) 17 ?
 W3 Si1 3.80(5) 11 ?
 W3 A11 3.80(5) 11 ?

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
03 A11 O1 112.24(14) . . ?
03 A11 O4 108.29(11) . . ?
01 A11 O4 106.27(12) . . ?
03 A11 O2 110.89(13) . 5_665 ?
01 A11 O2 106.57(14) . 5_665 ?
04 A11 O2 112.53(13) . 5_665 ?
03 A11 Na2 119.8(3) . 15 ?
01 A11 Na2 46.33(14) . 15 ?
04 A11 Na2 60.34(12) . 15 ?
02 A11 Na2 128.5(3) 5_665 15 ?
03 A11 Na1 131.22(12) . 13_665 ?
01 A11 Na1 63.48(11) . 13_665 ?
04 A11 Na1 119.69(8) . 13_665 ?
02 A11 Na1 43.33(9) 5_665 13_665 ?
Na2 A11 Na1 92.6(2) 15 13_665 ?
03 A11 W3 83.3(7) . . ?
01 A11 W3 59.2(4) . . ?
04 A11 W3 68.1(5) . . ?
02 A11 W3 163.7(6) 5_665 . ?
Na2 A11 W3 36.5(7) 15 . ?
Na1 A11 W3 121.3(5) 13_665 . ?
03 A11 W1 172.9(5) . 21 ?
01 A11 W1 67.2(4) . 21 ?
04 A11 W1 78.4(4) . 21 ?
02 A11 W1 63.4(4) 5_665 21 ?
Na2 A11 W1 65.3(5) 15 21 ?
Na1 A11 W1 41.8(5) 13_665 21 ?
W3 A11 W1 101.8(8) . 21 ?
03 A11 W2 149.2(6) . 15 ?
01 A11 W2 51.33(10) . 15 ?
04 A11 W2 62.3(4) . 15 ?
02 A11 W2 99.4(6) 5_665 15 ?
Na2 A11 W2 29.4(6) 15 15 ?
Na1 A11 W2 69.6(6) 13_665 15 ?
W3 A11 W2 65.9(9) . 15 ?
W1 A11 W2 36.1(7) 21 15 ?
03 A11 W2 50.46(10) . 14_556 ?
01 A11 W2 119.6(6) . 14_556 ?
04 A11 W2 58.12(7) . 14_556 ?
02 A11 W2 133.8(6) 5_665 14_556 ?
Na2 A11 W2 88.7(5) 15 14_556 ?
Na1 A11 W2 176.3(5) 13_665 14_556 ?
W3 A11 W2 61.3(7) . 14_556 ?
W1 A11 W2 136.4(4) 21 14_556 ?
W2 A11 W2 110.5(9) 15 14_556 ?
03 A11 W1 53.9(2) . 14_556 ?
01 A11 W1 153.1(4) . 14_556 ?
04 A11 W1 64.4(2) . 14_556 ?
02 A11 W1 100.2(4) 5_665 14_556 ?
Na2 A11 W1 116.1(4) 15 14_556 ?
Na1 A11 W1 143.4(4) 13_665 14_556 ?
W3 A11 W1 94.5(5) . 14_556 ?
W1 A11 W1 129.8(4) 21 14_556 ?
W2 A11 W1 126.7(4) 15 14_556 ?
W2 A11 W1 33.5(7) 14_556 14_556 ?
03 A11 W1 157.6(3) . 15 ?
01 A11 W1 48.2(4) . 15 ?
04 A11 W1 90.0(3) . 15 ?
02 A11 W1 71.8(4) 5_665 15 ?
Na2 A11 W1 57.9(5) 15 15 ?
Na1 A11 W1 36.6(4) 13_665 15 ?
W3 A11 W1 92.0(7) . 15 ?

```

W1 A11 W1 19.5(7) 21 15 ?
 W2 A11 W1 33.0(7) 15 15 ?
 W2 A11 W1 143.4(5) 14_556 15 ?
 W1 A11 W1 148.5(4) 14_556 15 ?
 O3 Si1 O1 112.24(14) . . ?
 O3 Si1 O4 108.29(11) . . ?
 O1 Si1 O4 106.27(12) . . ?
 O3 Si1 O2 110.89(13) . 5_665 ?
 O1 Si1 O2 106.57(14) . 5_665 ?
 O4 Si1 O2 112.53(13) . 5_665 ?
 O3 Si1 Na2 119.8(3) . 15 ?
 O1 Si1 Na2 46.33(14) . 15 ?
 O4 Si1 Na2 60.34(12) . 15 ?
 O2 Si1 Na2 128.5(3) 5_665 15 ?
 O3 Si1 Na1 131.22(12) . 13_665 ?
 O1 Si1 Na1 63.48(11) . 13_665 ?
 O4 Si1 Na1 119.69(8) . 13_665 ?
 O2 Si1 Na1 43.33(9) 5_665 13_665 ?
 Na2 Si1 Na1 92.6(2) 15 13_665 ?
 O3 Si1 W3 83.3(7) . . ?
 O1 Si1 W3 59.2(4) . . ?
 O4 Si1 W3 68.1(5) . . ?
 O2 Si1 W3 163.7(6) 5_665 . ?
 Na2 Si1 W3 36.5(7) 15 . ?
 Na1 Si1 W3 121.3(5) 13_665 . ?
 O3 Si1 W1 172.9(5) . 21 ?
 O1 Si1 W1 67.2(4) . 21 ?
 O4 Si1 W1 78.4(4) . 21 ?
 O2 Si1 W1 63.4(4) 5_665 21 ?
 Na2 Si1 W1 65.3(5) 15 21 ?
 Na1 Si1 W1 41.8(5) 13_665 21 ?
 W3 Si1 W1 101.8(8) . 21 ?
 O3 Si1 W2 149.2(6) . 15 ?
 O1 Si1 W2 51.33(10) . 15 ?
 O4 Si1 W2 62.3(4) . 15 ?
 O2 Si1 W2 99.4(6) 5_665 15 ?
 Na2 Si1 W2 29.4(6) 15 15 ?
 Na1 Si1 W2 69.6(6) 13_665 15 ?
 W3 Si1 W2 65.9(9) . 15 ?
 W1 Si1 W2 36.1(7) 21 15 ?
 O3 Si1 W2 50.46(10) . 14_556 ?
 O1 Si1 W2 119.6(6) . 14_556 ?
 O4 Si1 W2 58.12(7) . 14_556 ?
 O2 Si1 W2 133.8(6) 5_665 14_556 ?
 Na2 Si1 W2 88.7(5) 15 14_556 ?
 Na1 Si1 W2 176.3(5) 13_665 14_556 ?
 W3 Si1 W2 61.3(7) . 14_556 ?
 W1 Si1 W2 136.4(4) 21 14_556 ?
 W2 Si1 W2 110.5(9) 15 14_556 ?
 O3 Si1 W1 53.9(2) . 14_556 ?
 O1 Si1 W1 153.1(4) . 14_556 ?
 O4 Si1 W1 64.4(2) . 14_556 ?
 O2 Si1 W1 100.2(4) 5_665 14_556 ?
 Na2 Si1 W1 116.1(4) 15 14_556 ?
 Na1 Si1 W1 143.4(4) 13_665 14_556 ?
 W3 Si1 W1 94.5(5) . 14_556 ?
 W1 Si1 W1 129.8(4) 21 14_556 ?
 W2 Si1 W1 126.7(4) 15 14_556 ?
 W2 Si1 W1 33.5(7) 14_556 14_556 ?
 O3 Si1 W1 157.6(3) . 15 ?
 O1 Si1 W1 48.2(4) . 15 ?
 O4 Si1 W1 90.0(3) . 15 ?
 O2 Si1 W1 71.8(4) 5_665 15 ?
 Na2 Si1 W1 57.9(5) 15 15 ?
 Na1 Si1 W1 36.6(4) 13_665 15 ?
 W3 Si1 W1 92.0(7) . 15 ?
 W1 Si1 W1 19.5(7) 21 15 ?
 W2 Si1 W1 33.0(7) 15 15 ?

W2 Si1 W1 143.4(5) 14_556 15 ?
 W1 Si1 W1 148.5(4) 14_556 15 ?
 Si1 01 Al1 0.00(5) 11 11 ?
 Si1 01 Al1 149.5(2) 11 . ?
 Al1 01 Al1 149.5(2) 11 . ?
 Si1 01 Si1 149.5(2) 11 . ?
 Al1 01 Si1 149.5(2) 11 . ?
 Al1 01 Si1 0.00(5) . . ?
 Si1 01 Na2 103.67(10) 11 15 ?
 Al1 01 Na2 103.67(10) 11 15 ?
 Al1 01 Na2 103.74(10) . 15 ?
 Si1 01 Na2 103.74(10) . 15 ?
 Si1 01 W2 104.82(11) 11 15 ?
 Al1 01 W2 104.82(11) 11 15 ?
 Al1 01 W2 104.97(11) . 15 ?
 Si1 01 W2 104.97(11) . 15 ?
 Na2 01 W2 37.6(8) 15 15 ?
 Si1 01 W3 95.1(2) 11 . ?
 Al1 01 W3 95.1(2) 11 . ?
 Al1 01 W3 95.5(2) . . ?
 Si1 01 W3 95.5(2) . . ?
 Na2 01 W3 43.7(9) 15 . ?
 W2 01 W3 81.3(10) 15 . ?
 Si1 01 W1 87.2(4) 11 15 ?
 Al1 01 W1 87.2(4) 11 15 ?
 Al1 01 W1 111.3(5) . 15 ?
 Si1 01 W1 111.3(5) . 15 ?
 Na2 01 W1 78.1(6) 15 15 ?
 W2 01 W1 41.7(8) 15 15 ?
 W3 01 W1 120.7(8) . 15 ?
 Si1 01 W1 111.3(5) 11 21 ?
 Al1 01 W1 111.3(5) 11 21 ?
 Al1 01 W1 87.2(4) . 21 ?
 Si1 01 W1 87.2(4) . 21 ?
 Na2 01 W1 78.1(6) 15 21 ?
 W2 01 W1 41.8(8) 15 21 ?
 W3 01 W1 120.8(8) . 21 ?
 W1 01 W1 24.7(9) 15 21 ?
 Si1 02 Al1 0.00(6) 9_665 9_665 ?
 Si1 02 Al1 140.0(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Al1 140.0(2) 9_665 3_655 ?
 Si1 02 Si1 140.0(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Si1 140.0(2) 9_665 3_655 ?
 Al1 02 Si1 0.00(5) 3_655 3_655 ?
 Si1 02 Na1 109.75(9) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na1 109.75(9) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na1 109.80(9) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 Na1 109.80(9) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 W1 119.8(5) 9_665 8_654 ?
 Al1 02 W1 119.8(5) 9_665 8_654 ?
 Al1 02 W1 90.6(5) 3_655 8_654 ?
 Si1 02 W1 90.6(5) 3_655 8_654 ?
 Na1 02 W1 49.7(5) 13_665 8_654 ?
 Si1 02 W1 90.6(5) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 W1 90.6(5) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 W1 119.9(5) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 W1 119.9(5) 3_655 13_665 ?
 Na1 02 W1 49.7(5) 13_665 13_665 ?
 W1 02 W1 30.1(10) 8_654 13_665 ?
 Si1 02 W1 131.4(4) 9_665 2_654 ?
 Al1 02 W1 131.4(4) 9_665 2_654 ?
 Al1 02 W1 85.9(4) 3_655 2_654 ?
 Si1 02 W1 85.9(4) 3_655 2_654 ?
 Na1 02 W1 36.3(4) 13_665 2_654 ?
 W1 02 W1 19.6(7) 8_654 2_654 ?
 W1 02 W1 42.3(9) 13_665 2_654 ?
 Si1 02 W1 85.8(4) 9_665 19_665 ?
 Al1 02 W1 85.8(4) 9_665 19_665 ?

Al1 02 w1 131.4(4) 3_655 19_665 ?
 Si1 02 w1 131.4(4) 3_655 19_665 ?
 Na1 02 w1 36.3(4) 13_665 19_665 ?
 W1 02 w1 42.3(9) 8_654 19_665 ?
 W1 02 w1 19.6(7) 13_665 19_665 ?
 W1 02 w1 46.0(8) 2_654 19_665 ?
 Si1 03 Al1 0.00(8) 16_556 16_556 ?
 Si1 03 Al1 146.1(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Al1 146.1(2) 16_556 . ?
 Si1 03 Si1 146.1(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 146.1(2) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 0.00(7) . . ?
 Si1 03 w2 106.82(10) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.82(10) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.82(10) . 14_556 ?
 Si1 03 w2 106.82(10) . 14_556 ?
 Si1 03 w1 103.98(13) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 103.98(13) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 103.98(13) . 14_556 ?
 Si1 03 w1 103.98(13) . 14_556 ?
 W2 03 w1 41.1(9) 14_556 14_556 ?
 Si1 03 w3 118.1(6) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 118.1(6) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 72.5(7) . . ?
 Si1 03 w3 72.5(7) . . ?
 W2 03 w3 66.6(8) 14_556 . ?
 W1 03 w3 104.1(5) 14_556 . ?
 Si1 03 w3 72.5(7) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 72.5(7) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 118.1(6) . 16_556 ?
 Si1 03 w3 118.1(6) . 16_556 ?
 W2 03 w3 66.6(8) 14_556 16_556 ?
 W1 03 w3 104.1(5) 14_556 16_556 ?
 W3 03 w3 47.6(14) . 16_556 ?
 Si1 03 w1 99.03(15) 16_556 9_655 ?
 Al1 03 w1 99.03(15) 16_556 9_655 ?
 Al1 03 w1 99.03(15) . 9_655 ?
 Si1 03 w1 99.03(15) . 9_655 ?
 W2 03 w1 64.5(9) 14_556 9_655 ?
 W1 03 w1 23.4(8) 14_556 9_655 ?
 W3 03 w1 125.0(6) . 9_655 ?
 W3 03 w1 125.0(6) 16_556 9_655 ?
 Si1 04 Al1 0.00(7) . . ?
 Si1 04 Si1 145.2(2) . 19 ?
 Al1 04 Si1 145.2(2) . 19 ?
 Si1 04 Al1 145.2(2) . 19 ?
 Al1 04 Al1 145.2(2) . 19 ?
 Si1 04 Al1 0.00(6) 19 19 ?
 Si1 04 Na2 118.3(2) . 5 ?
 Al1 04 Na2 118.3(2) . 5 ?
 Si1 04 Na2 88.7(2) 19 5 ?
 Al1 04 Na2 88.7(2) 19 5 ?
 Si1 04 Na2 88.7(2) . 15 ?
 Al1 04 Na2 88.7(2) . 15 ?
 Si1 04 Na2 118.3(2) 19 15 ?
 Al1 04 Na2 118.3(2) 19 15 ?
 Na2 04 Na2 81.6(6) 5 15 ?
 Si1 04 w2 93.1(5) . 15 ?
 Al1 04 w2 93.1(5) . 15 ?
 Si1 04 w2 98.39(9) 19 15 ?
 Al1 04 w2 98.39(9) 19 15 ?
 Na2 04 w2 108.8(8) 5 15 ?
 Na2 04 w2 33.9(6) 15 15 ?
 Si1 04 w2 98.30(9) . 14_556 ?
 Al1 04 w2 98.30(9) . 14_556 ?
 Si1 04 w2 93.2(5) 19 14_556 ?
 Al1 04 w2 93.2(5) 19 14_556 ?
 Na2 04 w2 33.9(6) 5 14_556 ?

Na2 04 w2 108.8(8) 15 14_556 ?
 W2 04 w2 140.8(13) 15 14_556 ?
 Si1 04 w3 128.0(7) . 15 ?
 Al1 04 w3 128.0(7) . 15 ?
 Si1 04 w3 86.7(7) 19 15 ?
 Al1 04 w3 86.7(7) 19 15 ?
 Na2 04 w3 40.1(7) 5 15 ?
 Na2 04 w3 49.6(6) 15 15 ?
 W2 04 w3 69.5(9) 15 15 ?
 W2 04 w3 73.9(8) 14_556 15 ?
 Si1 04 w3 86.5(7) . . ?
 Al1 04 w3 86.5(7) . . ?
 Si1 04 w3 128.2(7) 19 . ?
 Al1 04 w3 128.2(7) 19 . ?
 Na2 04 w3 49.8(6) 5 . ?
 Na2 04 w3 39.9(7) 15 . ?
 W2 04 w3 73.7(8) 15 . ?
 W2 04 w3 69.8(9) 14_556 . ?
 W3 04 w3 42.0(14) 15 . ?
 Si1 04 w1 92.7(3) . 14_556 ?
 Al1 04 w1 92.7(3) . 14_556 ?
 Si1 04 w1 76.6(3) 19 14_556 ?
 Al1 04 w1 76.6(3) 19 14_556 ?
 Na2 04 w1 68.4(5) 5 14_556 ?
 Na2 04 w1 146.6(5) 15 14_556 ?
 W2 04 w1 174.1(6) 15 14_556 ?
 W2 04 w1 38.0(8) 14_556 14_556 ?
 W3 04 w1 106.8(8) 15 14_556 ?
 W3 04 w1 106.8(7) . 14_556 ?
 Si1 04 w1 76.6(3) . 21 ?
 Al1 04 w1 76.6(3) . 21 ?
 Si1 04 w1 92.7(3) 19 21 ?
 Al1 04 w1 92.7(3) 19 21 ?
 Na2 04 w1 146.6(5) 5 21 ?
 Na2 04 w1 68.4(5) 15 21 ?
 W2 04 w1 38.0(8) 15 21 ?
 W2 04 w1 174.1(6) 14_556 21 ?
 W3 04 w1 106.6(7) 15 21 ?
 W3 04 w1 106.6(8) . 21 ?
 W1 04 w1 144.1(8) 14_556 21 ?
 O2 Na1 02 101.93(14) 13_665 17 ?
 O2 Na1 02 101.93(14) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 02 101.93(14) 17 15_565 ?
 O2 Na1 w1 108.6(6) 13_665 14_566 ?
 O2 Na1 w1 82.7(6) 17 14_566 ?
 O2 Na1 w1 147.5(6) 15_565 14_566 ?
 O2 Na1 w1 82.7(6) 13_665 20_566 ?
 O2 Na1 w1 108.6(6) 17 20_566 ?
 O2 Na1 w1 147.5(6) 15_565 20_566 ?
 W1 Na1 w1 33.4(12) 14_566 20_566 ?
 O2 Na1 w1 147.5(6) 13_665 9_665 ?
 O2 Na1 w1 82.7(6) 17 9_665 ?
 O2 Na1 w1 108.6(6) 15_565 9_665 ?
 W1 Na1 w1 39.4(12) 14_566 9_665 ?
 W1 Na1 w1 65.6(9) 20_566 9_665 ?
 O2 Na1 w1 82.7(6) 13_665 . ?
 O2 Na1 w1 147.5(6) 17 . ?
 O2 Na1 w1 108.6(6) 15_565 . ?
 W1 Na1 w1 65.6(9) 14_566 . ?
 W1 Na1 w1 39.4(12) 20_566 . ?
 W1 Na1 w1 77.3(11) 9_665 . ?
 O2 Na1 w1 147.5(6) 13_665 3_665 ?
 O2 Na1 w1 108.6(6) 17 3_665 ?
 O2 Na1 w1 82.7(6) 15_565 3_665 ?
 W1 Na1 w1 65.6(9) 14_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 77.3(11) 20_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 33.4(12) 9_665 3_665 ?
 W1 Na1 w1 65.6(9) . 3_665 ?

O2 Na1 W1 108.6(6) 13_665 7 ?
 O2 Na1 W1 147.5(6) 17 7 ?
 O2 Na1 W1 82.7(6) 15_565 7 ?
 W1 Na1 W1 77.3(11) 14_566 7 ?
 W1 Na1 W1 65.6(9) 20_566 7 ?
 W1 Na1 W1 65.6(9) 9_665 7 ?
 W1 Na1 W1 33.4(12) . 7 ?
 W1 Na1 W1 39.4(12) 3_665 7 ?
 O2 Na1 A11 26.86(2) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 A11 79.62(7) 17 15_565 ?
 O2 Na1 A11 121.39(15) 15_565 15_565 ?
 W1 Na1 A11 91.1(6) 14_566 15_565 ?
 W1 Na1 A11 75.9(6) 20_566 15_565 ?
 W1 Na1 A11 129.3(6) 9_665 15_565 ?
 W1 Na1 A11 93.5(6) . 15_565 ?
 W1 Na1 A11 153.2(6) 3_665 15_565 ?
 W1 Na1 A11 125.7(6) 7 15_565 ?
 O2 Na1 Si1 26.86(2) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 Si1 79.62(7) 17 15_565 ?
 O2 Na1 Si1 121.39(15) 15_565 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 91.1(6) 14_566 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 75.9(6) 20_566 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 129.3(6) 9_665 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 93.5(6) . 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 153.2(6) 3_665 15_565 ?
 W1 Na1 Si1 125.7(6) 7 15_565 ?
 A11 Na1 Si1 0.00(3) 15_565 15_565 ?
 O2 Na1 A11 79.59(7) 13_665 19_565 ?
 O2 Na1 A11 26.90(2) 17 19_565 ?
 O2 Na1 A11 121.41(15) 15_565 19_565 ?
 W1 Na1 A11 75.9(6) 14_566 19_565 ?
 W1 Na1 A11 91.1(6) 20_566 19_565 ?
 W1 Na1 A11 93.5(6) 9_665 19_565 ?
 W1 Na1 A11 129.3(6) . 19_565 ?
 W1 Na1 A11 125.7(6) 3_665 19_565 ?
 W1 Na1 A11 153.2(6) 7 19_565 ?
 A11 Na1 A11 54.52(4) 15_565 19_565 ?
 Si1 Na1 A11 54.52(4) 15_565 19_565 ?
 W2 Na2 W3 175.6(16) . 17 ?
 W2 Na2 O1 94.3(12) . 17 ?
 W3 Na2 O1 90.2(13) 17 17 ?
 W2 Na2 W3 116.7(13) . . ?
 W3 Na2 W3 60.1(18) 17 . ?
 O1 Na2 W3 131.5(11) 17 . ?
 W2 Na2 W3 116.6(13) . 3 ?
 W3 Na2 W3 59.8(18) 17 3 ?
 O1 Na2 W3 131.6(11) 17 3 ?
 W3 Na2 W3 67.8(24) . 3 ?
 W2 Na2 O4 93.7(6) . 17 ?
 W3 Na2 O4 88.7(7) 17 17 ?
 O1 Na2 O4 60.7(2) 17 17 ?
 W3 Na2 O4 79.9(12) . 17 ?
 W3 Na2 O4 142.8(12) 3 17 ?
 W2 Na2 O4 93.6(6) . 3 ?
 W3 Na2 O4 88.3(7) 17 3 ?
 O1 Na2 O4 60.8(2) 17 3 ?
 W3 Na2 O4 142.9(12) . 3 ?
 W3 Na2 O4 79.9(12) 3 3 ?
 O4 Na2 O4 121.4(4) 17 3 ?
 W2 Na2 Si1 97.1(10) . 17 ?
 W3 Na2 Si1 86.9(11) 17 17 ?
 O1 Na2 Si1 29.93(10) 17 17 ?
 W3 Na2 Si1 105.6(12) . 17 ?
 W3 Na2 Si1 145.3(10) 3 17 ?
 O4 Na2 Si1 30.97(10) 17 17 ?
 O4 Na2 Si1 90.4(3) 3 17 ?
 W2 Na2 A11 97.1(10) . 17 ?
 W3 Na2 A11 86.9(11) 17 17 ?

O1 Na2 Al1 29.93(10) 17 17 ?
 W3 Na2 Al1 105.6(12) . 17 ?
 W3 Na2 Al1 145.3(10) 3 17 ?
 O4 Na2 Al1 30.97(10) 17 17 ?
 O4 Na2 Al1 90.4(3) 3 17 ?
 Si1 Na2 Al1 0.00(4) 17 17 ?
 W2 Na2 Al1 97.0(10) . 21 ?
 W3 Na2 Al1 86.7(11) 17 21 ?
 O1 Na2 Al1 29.97(10) 17 21 ?
 W3 Na2 Al1 145.3(10) . 21 ?
 W3 Na2 Al1 105.7(11) 3 21 ?
 O4 Na2 Al1 90.4(3) 17 21 ?
 O4 Na2 Al1 30.98(10) 3 21 ?
 Si1 Na2 Al1 59.4(2) 17 21 ?
 Al1 Na2 Al1 59.4(2) 17 21 ?
 W2 Na2 Si1 97.0(10) . 21 ?
 W3 Na2 Si1 86.7(11) 17 21 ?
 O1 Na2 Si1 29.97(10) 17 21 ?
 W3 Na2 Si1 145.3(10) . 21 ?
 W3 Na2 Si1 105.7(11) 3 21 ?
 O4 Na2 Si1 90.4(3) 17 21 ?
 O4 Na2 Si1 30.98(10) 3 21 ?
 Si1 Na2 Si1 59.4(2) 17 21 ?
 Al1 Na2 Si1 59.4(2) 17 21 ?
 Al1 Na2 Si1 0.00(3) 21 21 ?
 W2 Na2 Na2 33.3(11) . 16_556 ?
 W3 Na2 Na2 142.2(13) 17 16_556 ?
 O1 Na2 Na2 127.6(3) 17 16_556 ?
 W3 Na2 Na2 89.5(9) . 16_556 ?
 W3 Na2 Na2 89.5(9) 3 16_556 ?
 O4 Na2 Na2 108.6(2) 17 16_556 ?
 O4 Na2 Na2 108.7(2) 3 16_556 ?
 Si1 Na2 Na2 125.1(2) 17 16_556 ?
 Al1 Na2 Na2 125.1(2) 17 16_556 ?
 Al1 Na2 Na2 125.1(2) 21 16_556 ?
 Si1 Na2 Na2 125.1(2) 21 16_556 ?
 W1 W1 W1 120.000(15) 7 20_566 ?
 W1 W1 W2 71.9(8) 7 . ?
 W1 W1 W2 168.1(8) 20_566 . ?
 W1 W1 Na1 73.3(6) 7 . ?
 W1 W1 Na1 70.3(6) 20_566 . ?
 W2 W1 Na1 116.0(7) . . ?
 W1 W1 Na1 73.3(6) 7 14_566 ?
 W1 W1 Na1 70.3(6) 20_566 14_566 ?
 W2 W1 Na1 116.0(7) . 14_566 ?
 Na1 W1 Na1 102.6(11) . 14_566 ?
 W1 W1 W1 32.7(10) 7 3_665 ?
 W1 W1 W1 87.3(10) 20_566 3_665 ?
 W2 W1 W1 104.6(16) . 3_665 ?
 Na1 W1 W1 57.2(5) . 3_665 ?
 Na1 W1 W1 57.2(5) 14_566 3_665 ?
 W1 W1 W1 92.7(10) 7 14_566 ?
 W1 W1 W1 27.3(10) 20_566 14_566 ?
 W2 W1 W1 164.6(16) . 14_566 ?
 Na1 W1 W1 57.2(5) . 14_566 ?
 Na1 W1 W1 57.2(5) 14_566 14_566 ?
 W1 W1 W1 60.000(4) 3_665 14_566 ?
 W1 W1 W1 60.000(6) 7 9_665 ?
 W1 W1 W1 60.000(7) 20_566 9_665 ?
 W2 W1 W1 131.9(8) . 9_665 ?
 Na1 W1 W1 51.4(6) . 9_665 ?
 Na1 W1 W1 51.4(6) 14_566 9_665 ?
 W1 W1 W1 27.3(10) 3_665 9_665 ?
 W1 W1 W1 32.7(10) 14_566 9_665 ?
 W1 W1 O2 111.0(4) 7 13_665 ?
 W1 W1 O2 75.0(5) 20_566 13_665 ?
 W2 W1 O2 101.5(6) . 13_665 ?
 Na1 W1 O2 47.6(2) . 13_665 ?

Na1 w1 o2 140.9(11) 14_566 13_665 ?
 w1 w1 o2 104.6(5) 3_665 13_665 ?
 w1 w1 o2 83.7(8) 14_566 13_665 ?
 w1 w1 o2 95.7(5) 9_665 13_665 ?
 w1 w1 o2 111.0(4) 7 4_665 ?
 w1 w1 o2 75.0(5) 20_566 4_665 ?
 w2 w1 o2 101.5(6) . 4_665 ?
 Na1 w1 o2 140.9(11) . 4_665 ?
 Na1 w1 o2 47.6(2) 14_566 4_665 ?
 w1 w1 o2 104.6(5) 3_665 4_665 ?
 w1 w1 o2 83.7(8) 14_566 4_665 ?
 w1 w1 o2 95.7(5) 9_665 4_665 ?
 o2 w1 o2 136.6(8) 13_665 4_665 ?
 w1 w1 o1 77.7(5) 7 17 ?
 w1 w1 o1 118.1(4) 20_566 17 ?
 w2 w1 o1 62.3(4) . 17 ?
 Na1 w1 o1 58.9(2) . 17 ?
 Na1 w1 o1 149.3(10) 14_566 17 ?
 w1 w1 o1 92.7(8) 3_665 17 ?
 w1 w1 o1 115.4(4) 14_566 17 ?
 w1 w1 o1 104.9(5) 9_665 17 ?
 o2 w1 o1 45.25(9) 13_665 17 ?
 o2 w1 o1 159.2(11) 4_665 17 ?
 w1 w1 o1 77.7(5) 7 2 ?
 w1 w1 o1 118.1(4) 20_566 2 ?
 w2 w1 o1 62.3(4) . 2 ?
 Na1 w1 o1 149.3(10) . 2 ?
 Na1 w1 o1 58.9(2) 14_566 2 ?
 w1 w1 o1 92.7(8) 3_665 2 ?
 w1 w1 o1 115.4(4) 14_566 2 ?
 w1 w1 o1 104.9(5) 9_665 2 ?
 o2 w1 o1 159.2(11) 13_665 2 ?
 o2 w1 o1 45.25(9) 4_665 2 ?
 o1 w1 o1 123.8(9) 17 2 ?
 w1 w1 o3 136.0(5) 7 3 ?
 w1 w1 o3 104.0(5) 20_566 3 ?
 w2 w1 o3 64.1(8) . 3 ?
 Na1 w1 o3 126.3(6) . 3 ?
 Na1 w1 o3 126.3(6) 14_566 3 ?
 w1 w1 o3 168.7(14) 3_665 3 ?
 w1 w1 o3 131.3(14) 14_566 3 ?
 w1 w1 o3 164.0(5) 9_665 3 ?
 o2 w1 o3 78.9(5) 13_665 3 ?
 o2 w1 o3 78.9(5) 4_665 3 ?
 o1 w1 o3 82.1(6) 17 3 ?
 o1 w1 o3 82.1(6) 2 3 ?
 Na2 w2 Na2 113.3(22) . 16_556 ?
 Na2 w2 w1 121.4(10) . 7 ?
 Na2 w2 w1 121.4(10) 16_556 7 ?
 Na2 w2 w1 121.5(10) . . ?
 Na2 w2 w1 121.5(10) 16_556 . ?
 w1 w2 w1 36.3(16) 7 . ?
 Na2 w2 o1 161.4(19) . 2 ?
 Na2 w2 o1 48.1(4) 16_556 2 ?
 w1 w2 o1 76.0(8) 7 2 ?
 w1 w2 o1 76.0(8) . 2 ?
 Na2 w2 o1 48.1(4) . 17 ?
 Na2 w2 o1 161.4(19) 16_556 17 ?
 w1 w2 o1 76.0(8) 7 17 ?
 w1 w2 o1 76.0(8) . 17 ?
 o1 w2 o1 150.5(15) 2 17 ?
 Na2 w2 o3 88.4(5) . 20_556 ?
 Na2 w2 o3 88.4(5) 16_556 20_556 ?
 w1 w2 o3 74.6(8) 7 20_556 ?
 w1 w2 o3 110.9(13) . 20_556 ?
 o1 w2 o3 90.6(2) 2 20_556 ?
 o1 w2 o3 90.6(2) 17 20_556 ?
 Na2 w2 o3 88.5(5) . 3 ?

Na2 W2 O3 88.5(5) 16_556 3 ?
 W1 W2 O3 111.0(13) 7 3 ?
 W1 W2 O3 74.8(8) . 3 ?
 O1 W2 O3 90.8(2) 2 3 ?
 O1 W2 O3 90.8(2) 17 3 ?
 O3 W2 O3 174.4(15) 20_556 3 ?
 Na2 W2 O4 126.4(10) . 2 ?
 Na2 W2 O4 52.4(2) 16_556 2 ?
 W1 W2 O4 78.2(7) 7 2 ?
 W1 W2 O4 103.1(11) . 2 ?
 O1 W2 O4 46.03(6) 2 2 ?
 O1 W2 O4 134.3(4) 17 2 ?
 O3 W2 O4 46.11(2) 20_556 2 ?
 O3 W2 O4 133.79(11) 3 2 ?
 Na2 W2 O4 52.4(2) . 17 ?
 Na2 W2 O4 126.4(10) 16_556 17 ?
 W1 W2 O4 78.2(7) 7 17 ?
 W1 W2 O4 103.1(11) . 17 ?
 O1 W2 O4 134.3(4) 2 17 ?
 O1 W2 O4 46.03(6) 17 17 ?
 O3 W2 O4 46.11(2) 20_556 17 ?
 O3 W2 O4 133.79(11) 3 17 ?
 O4 W2 O4 92.17(3) 2 17 ?
 Na2 W2 O4 52.5(2) . 3 ?
 Na2 W2 O4 126.6(11) 16_556 3 ?
 W1 W2 O4 103.2(11) 7 3 ?
 W1 W2 O4 78.3(7) . 3 ?
 O1 W2 O4 134.6(4) 2 3 ?
 O1 W2 O4 46.09(6) 17 3 ?
 O3 W2 O4 133.70(11) 20_556 3 ?
 O3 W2 O4 46.20(2) 3 3 ?
 O4 W2 O4 178.6(15) 2 3 ?
 O4 W2 O4 87.72(4) 17 3 ?
 Na2 W2 O4 126.6(11) . 18_556 ?
 Na2 W2 O4 52.5(2) 16_556 18_556 ?
 W1 W2 O4 103.2(11) 7 18_556 ?
 W1 W2 O4 78.3(7) . 18_556 ?
 O1 W2 O4 46.09(6) 2 18_556 ?
 O1 W2 O4 134.6(4) 17 18_556 ?
 O3 W2 O4 133.70(11) 20_556 18_556 ?
 O3 W2 O4 46.20(2) 3 18_556 ?
 O4 W2 O4 87.72(4) 2 18_556 ?
 O4 W2 O4 178.6(15) 17 18_556 ?
 O4 W2 O4 92.35(3) 3 18_556 ?
 Na2 W2 A11 150.9(10) . 2 ?
 Na2 W2 A11 53.5(5) 16_556 2 ?
 W1 W2 A11 68.4(5) 7 2 ?
 W1 W2 A11 83.2(8) . 2 ?
 O1 W2 A11 23.70(8) 2 2 ?
 O1 W2 A11 141.7(10) 17 2 ?
 O3 W2 A11 67.08(13) 20_556 2 ?
 O3 W2 A11 114.5(2) 3 2 ?
 O4 W2 A11 24.60(9) 2 2 ?
 O4 W2 A11 110.9(3) 17 2 ?
 O4 W2 A11 156.4(8) 3 2 ?
 O4 W2 A11 69.37(13) 18_556 2 ?
 Na2 W3 W3 68.9(17) 15 15 ?
 Na2 W3 W3 69.5(17) 15 17 ?
 W3 W3 W3 74.1(27) 15 17 ?
 Na2 W3 Na2 92.2(11) 15 . ?
 W3 W3 Na2 124.9(18) 15 . ?
 W3 W3 Na2 51.0(13) 17 . ?
 Na2 W3 Na2 91.7(11) 15 5 ?
 W3 W3 Na2 50.7(13) 15 5 ?
 W3 W3 Na2 124.6(18) 17 5 ?
 Na2 W3 Na2 172.2(24) . 5 ?
 Na2 W3 W3 121.8(10) 15 5 ?
 W3 W3 W3 53.0(14) 15 5 ?

W3 W3 W3 90.0 17 5 ?
 Na2 W3 W3 116.4(12) . 5 ?
 Na2 W3 W3 55.8(12) 5 5 ?
 Na2 W3 W3 122.3(11) 15 3 ?
 W3 W3 W3 90.0 15 3 ?
 W3 W3 W3 53.0(14) 17 3 ?
 Na2 W3 W3 56.4(12) . 3 ?
 Na2 W3 W3 115.8(12) 5 3 ?
 W3 W3 W3 60.000(1) 5 3 ?
 Na2 W3 W3 142.2(13) 15 16_556 ?
 W3 W3 W3 135.9(18) 15 16_556 ?
 W3 W3 W3 135.9(18) 17 16_556 ?
 Na2 W3 W3 90.5(9) . 16_556 ?
 Na2 W3 W3 90.5(9) 5 16_556 ?
 W3 W3 W3 90.000(4) 5 16_556 ?
 W3 W3 W3 90.000(2) 3 16_556 ?
 Na2 W3 O1 46.1(11) 15 . ?
 W3 W3 O1 105.3(13) 15 . ?
 W3 W3 O1 106.0(13) 17 . ?
 Na2 W3 O1 94.0(12) . . ?
 Na2 W3 O1 93.6(12) 5 . ?
 W3 W3 O1 148.92(14) 5 . ?
 W3 W3 O1 149.97(14) 3 . ?
 W3 W3 O1 96.1(8) 16_556 . ?
 Na2 W3 O4 51.6(9) 15 17 ?
 W3 W3 O4 117.5(23) 15 17 ?
 W3 W3 O4 69.3(7) 17 17 ?
 Na2 W3 O4 50.6(6) . 17 ?
 Na2 W3 O4 136.3(18) 5 17 ?
 W3 W3 O4 159.3(7) 5 17 ?
 W3 W3 O4 105.0(7) 3 17 ?
 W3 W3 O4 105.0(7) 16_556 17 ?
 O1 W3 O4 45.1(7) . 17 ?
 Na2 W3 O4 51.4(9) 15 . ?
 W3 W3 O4 68.7(7) 15 . ?
 W3 W3 O4 117.8(23) 17 . ?
 Na2 W3 O4 136.6(18) . . ?
 Na2 W3 O4 50.3(6) 5 . ?
 W3 W3 O4 104.1(6) 5 . ?
 W3 W3 O4 158.7(7) 3 . ?
 W3 W3 O4 104.9(7) 16_556 . ?
 O1 W3 O4 44.9(7) . . ?
 O4 W3 O4 86.1(13) 17 . ?
 Na2 W3 Si1 56.7(11) 15 11 ?
 W3 W3 Si1 124.7(18) 15 11 ?
 W3 W3 Si1 94.5(6) 17 11 ?
 Na2 W3 Si1 69.6(9) . 11 ?
 Na2 W3 Si1 118.2(15) 5 11 ?
 W3 W3 Si1 174.0(4) 5 11 ?
 W3 W3 Si1 126.0(4) 3 11 ?
 W3 W3 Si1 89.5(7) 16_556 11 ?
 O1 W3 Si1 25.4(4) . 11 ?
 O4 W3 Si1 25.5(4) 17 11 ?
 O4 W3 Si1 70.3(10) . 11 ?
 Na2 W3 Al1 56.7(11) 15 11 ?
 W3 W3 Al1 124.7(18) 15 11 ?
 W3 W3 Al1 94.5(6) 17 11 ?
 Na2 W3 Al1 69.6(9) . 11 ?
 Na2 W3 Al1 118.2(15) 5 11 ?
 W3 W3 Al1 174.0(4) 5 11 ?
 W3 W3 Al1 126.0(4) 3 11 ?
 W3 W3 Al1 89.5(7) 16_556 11 ?
 O1 W3 Al1 25.4(4) . 11 ?
 O4 W3 Al1 25.5(4) 17 11 ?
 O4 W3 Al1 70.3(10) . 11 ?
 Si1 W3 Al1 0.00(3) 11 11 ?

_refine_diff_density_max 1.255

	4351_1_supp_69395_10k3z1.txt
_refine_diff_density_min	-1.176
_refine_diff_density_rms	0.138