

data_gme-75r

| | |
|------------------------------|------------------------|
| _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 | 13.6857(10) |
| _cell_length_b | 13.6857(10) |
| _cell_length_c | 9.9916(10) |
| _cell_angle_alpha | 90.00 |

4351_1_supp_69396_10k3z1.txt

```

_cell_angle_beta          90.00
_cell_angle_gamma        120.00
_cell_volume             1620.7(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 2.027
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_F_000      981
_exptl_absorpt_coefficient_mu 0.614
_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       637
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0458
_diffn_reflns_limit_h_min  -9
_diffn_reflns_limit_h_max   0
_diffn_reflns_limit_k_min   0
_diffn_reflns_limit_k_max  21
_diffn_reflns_limit_l_min   0
_diffn_reflns_limit_l_max  14
_diffn_reflns_theta_min     2.98
_diffn_reflns_theta_max    34.73
_reflns_number_total        637
_reflns_number_observed     637
_reflns_observed_criterion  >2sigma(I)

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

```

_refine_special_details

;

Refinement on F^2 for ALL reflections except for 0 with very negative F^2 or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors wR and all goodnesses of fit S are based on F^2 , conventional R-factors R are based on F , with F set to zero for negative F^2 . The observed criterion

of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating $R_{\text{factor_obs}}$ etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R -factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F , and R -factors based on ALL data will be even larger.

;

```
_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme
'calc w=1/[\s^2^(Fo^2)+(0.0913P)^2+0.5082P] 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          637
_refine_ls_number_parameters      50
_refine_ls_number_restraints      0
_refine_ls_R_factor_all            0.0554
_refine_ls_R_factor_obs            0.0554
_refine_ls_wR_factor_all          0.1440
_refine_ls_wR_factor_obs          0.1440
_refine_ls_goodness_of_fit_all    1.131
_refine_ls_goodness_of_fit_obs    1.131
_refine_ls_restrained_S_all       1.131
_refine_ls_restrained_S_obs       1.131
_refine_ls_shift/esd_max          -2.109
_refine_ls_shift/esd_mean         0.242
```

```
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 0.43909(7) 0.10499(7) 0.09394(9) 0.0207(3) Uani 0.31 d P .
Si1 Si 0.43909(7) 0.10499(7) 0.09394(9) 0.0207(3) Uani 0.69 d P .
O1 O 0.42520(34) 0.21260(17) 0.05386(40) 0.0442(11) Uani 1 d S .
O2 O 0.85660(34) 0.42830(17) 0.06342(40) 0.0416(9) Uani 1 d S .
O3 O 0.40756(36) 0.06849(37) 0.2500 0.0416(10) Uani 1 d S .
O4 O 0.35223(26) 0.0000 0.0000 0.0400(10) Uani 1 d S .
Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0389(6) 0.0699(15) Uani 1 d S .
Na2 Na 0.1383(8) 0.2766(16) 0.1082(24) 0.244(14) Uani 0.32(1) d SP .
W1 O 0.2226(56) 0.5208(56) 0.2500 0.064(24) Uiso 0.09(1) d SP .
W2 O 0.1850(37) 0.3700(74) 0.2500 0.197(27) Uiso 0.19(2) d SP .
W3 O 0.1660(163) 0.0827(82) 0.0965(208) 0.314(94) Uiso 0.09(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 0.0224(5) 0.0184(5) 0.0226(5) -0.0043(4) -0.0029(4) 0.0111(3)
Si1 0.0224(5) 0.0184(5) 0.0226(5) -0.0043(4) -0.0029(4) 0.0111(3)
O1 0.055(3) 0.0303(15) 0.055(2) -0.0045(11) -0.009(2) 0.0275(13)
O2 0.045(2) 0.0321(14) 0.044(2) -0.0013(9) -0.003(2) 0.0224(11)
O3 0.042(2) 0.048(2) 0.028(2) 0.000 0.000 0.017(2)
O4 0.038(2) 0.031(2) 0.049(2) -0.020(2) -0.0101(9) 0.0156(9)
```

Na1 0.058(2) 0.058(2) 0.094(4) 0.000 0.000 0.0289(9)
 Na2 0.351(34) 0.124(14) 0.180(18) 0.054(15) 0.027(7) 0.062(7)

_geom_special_details

;

All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

;

loop_

_geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag

A11 O1 1.6262(13) . ?
 A11 O4 1.6281(13) . ?
 A11 O3 1.628(2) . ?
 A11 O2 1.645(2) 5_665 ?
 A11 Na2 3.20(2) 15 ?
 A11 Na1 3.390(3) 13_665 ?
 A11 W3 3.62(17) . ?
 A11 W1 3.72(3) 21 ?
 A11 W2 3.87(2) 15 ?
 A11 W2 4.056(9) 14_556 ?
 A11 W1 4.13(4) 15 ?
 A11 W1 4.20(6) 14_556 ?
 S11 O1 1.6262(13) . ?
 S11 O4 1.6281(13) . ?
 S11 O3 1.628(2) . ?
 S11 O2 1.645(2) 5_665 ?
 S11 Na2 3.20(2) 15 ?
 S11 Na1 3.390(3) 13_665 ?
 S11 W3 3.62(17) . ?
 S11 W1 3.72(3) 21 ?
 S11 W2 3.87(2) 15 ?
 S11 W2 4.056(9) 14_556 ?
 S11 W1 4.13(4) 15 ?
 S11 W1 4.20(6) 14_556 ?
 O1 S11 1.6267(13) 11 ?
 O1 A11 1.6267(13) 11 ?
 O1 Na2 2.39(2) 15 ?
 O1 Na1 3.008(5) 13_665 ?
 O1 W3 3.11(19) . ?
 O1 W2 3.10(2) 15 ?
 O1 W1 3.28(3) 21 ?
 O1 W1 3.28(3) 15 ?
 O2 S11 1.645(2) 3_655 ?
 O2 A11 1.645(2) 3_655 ?
 O2 S11 1.647(2) 9_665 ?
 O2 A11 1.647(2) 9_665 ?
 O2 Na1 2.472(5) 13_665 ?
 O2 W1 3.50(3) 8_654 ?
 O2 W1 3.50(3) 13_665 ?
 O2 W1 4.03(4) 2_654 ?
 O2 W1 4.03(4) 19_665 ?
 O3 S11 1.628(2) 16_556 ?
 O3 A11 1.628(2) 16_556 ?
 O3 W2 3.276(10) 14_556 ?
 O3 W1 3.49(7) 14_556 ?
 O3 W3 3.77(17) . ?
 O3 W3 3.77(17) 16_556 ?
 O3 W1 4.35(7) 20_556 ?
 O4 S11 1.6281(13) 19 ?

O4 Al1 1.6281(13) 19 ?
 O4 Na2 2.791(10) 15 ?
 O4 Na2 2.782(10) 5 ?
 O4 W3 3.38(14) 15 ?
 O4 W3 3.45(14) . ?
 O4 W2 3.476(6) 14_556 ?
 O4 W2 3.480(6) 15 ?
 O4 W1 3.72(5) 21 ?
 O4 W1 3.72(5) 14_556 ?
 Na1 O2 2.472(5) 13_665 ?
 Na1 O2 2.472(5) 17 ?
 Na1 O2 2.472(5) 15_565 ?
 Na1 W1 2.78(4) 14_566 ?
 Na1 W1 2.78(4) 20_566 ?
 Na1 W1 2.78(4) 9_665 ?
 Na1 W1 2.78(4) . ?
 Na1 W1 2.78(4) 3_665 ?
 Na1 W1 2.78(4) 7 ?
 Na1 O1 3.008(5) 15_565 ?
 Na1 O1 3.008(5) 17 ?
 Na1 O1 3.008(5) 13_665 ?
 Na2 W2 1.80(5) . ?
 Na2 O1 2.39(2) 17 ?
 Na2 W3 2.44(20) 17 ?
 Na2 O4 2.791(10) 17 ?
 Na2 O4 2.782(10) 3 ?
 Na2 Na2 2.83(5) 16_556 ?
 Na2 W3 2.82(3) . ?
 Na2 W3 2.91(3) 3 ?
 Na2 Si1 3.20(2) 17 ?
 Na2 Al1 3.20(2) 17 ?
 Na2 Si1 3.19(2) 21 ?
 Na2 Al1 3.19(2) 21 ?
 W1 W1 1.04(14) 7 ?
 W1 W2 1.85(10) . ?
 W1 W1 2.48(14) 20_566 ?
 W1 Na1 2.78(4) 14_566 ?
 W1 W1 3.13(11) 3_665 ?
 W1 W1 3.13(11) 14_566 ?
 W1 Na2 3.25(6) 16_556 ?
 W1 O1 3.28(3) 17 ?
 W1 O1 3.28(3) 2 ?
 W1 W1 3.51(13) 9_665 ?
 W1 O2 3.50(3) 13_665 ?
 W2 Na2 1.80(5) 16_556 ?
 W2 W1 1.86(10) 7 ?
 W2 O1 3.10(2) 17 ?
 W2 O1 3.10(2) 2 ?
 W2 O3 3.276(10) 3 ?
 W2 O3 3.282(10) 20_556 ?
 W2 O4 3.476(6) 3 ?
 W2 O4 3.480(6) 2 ?
 W2 O4 3.480(6) 17 ?
 W2 O4 3.476(6) 18_556 ?
 W2 Al1 3.87(2) 2 ?
 W3 Na2 2.44(20) 15 ?
 W3 W3 3.07(42) 16_556 ?
 W3 Na2 2.91(3) 5 ?
 W3 W3 2.75(33) 15 ?
 W3 W3 2.75(33) 17 ?
 W3 O4 3.38(14) 17 ?
 W3 Si1 3.58(17) 11 ?
 W3 Al1 3.58(17) 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
01 A11 O4 107.0(2) . . ?
01 A11 O3 112.4(2) . . ?
04 A11 O3 108.5(2) . . ?
01 A11 O2 105.9(2) . 5_665 ?
04 A11 O2 112.1(2) . 5_665 ?
03 A11 O2 110.9(2) . 5_665 ?
01 A11 Na2 46.3(2) . 15 ?
04 A11 Na2 60.8(2) . 15 ?
03 A11 Na2 123.6(5) . 15 ?
02 A11 Na2 124.7(5) 5_665 15 ?
01 A11 Na1 62.52(15) . 13_665 ?
04 A11 Na1 121.11(11) . 13_665 ?
03 A11 Na1 129.6(2) . 13_665 ?
02 A11 Na1 43.53(14) 5_665 13_665 ?
Na2 A11 Na1 90.1(4) 15 13_665 ?
01 A11 w3 58.8(16) . . ?
04 A11 w3 70.6(23) . . ?
03 A11 w3 82.3(32) . . ?
02 A11 w3 163.6(23) 5_665 . ?
Na2 A11 w3 41.3(33) 15 . ?
Na1 A11 w3 120.6(19) 13_665 . ?
01 A11 w1 61.8(11) . 21 ?
04 A11 w1 77.2(9) . 21 ?
03 A11 w1 173.3(10) . 21 ?
02 A11 w1 69.2(10) 5_665 21 ?
Na2 A11 w1 55.5(11) 15 21 ?
Na1 A11 w1 45.7(9) 13_665 21 ?
w3 A11 w1 96.5(32) . 21 ?
01 A11 w2 50.80(15) . 15 ?
04 A11 w2 64.2(8) . 15 ?
03 A11 w2 150.9(11) . 15 ?
02 A11 w2 97.5(12) 5_665 15 ?
Na2 A11 w2 27.4(11) 15 15 ?
Na1 A11 w2 68.4(12) 13_665 15 ?
w3 A11 w2 68.7(34) . 15 ?
w1 A11 w2 28.2(15) 21 15 ?
01 A11 w2 123.4(12) . 14_556 ?
04 A11 w2 57.87(12) . 14_556 ?
03 A11 w2 50.6(2) . 14_556 ?
02 A11 w2 130.6(12) 5_665 14_556 ?
Na2 A11 w2 94.0(10) 15 14_556 ?
Na1 A11 w2 174.0(12) 13_665 14_556 ?
w3 A11 w2 65.1(22) . 14_556 ?
w1 A11 w2 134.7(9) 21 14_556 ?
w2 A11 w2 114.2(17) 15 14_556 ?
01 A11 w1 48.2(9) . 15 ?
04 A11 w1 86.0(8) . 15 ?
03 A11 w1 159.6(9) . 15 ?
02 A11 w1 74.9(9) 5_665 15 ?
Na2 A11 w1 50.8(10) 15 15 ?
Na1 A11 w1 41.8(9) 13_665 15 ?
w3 A11 w1 89.5(29) . 15 ?
w1 A11 w1 13.9(18) 21 15 ?
w2 A11 w1 26.5(14) 15 15 ?
w2 A11 w1 140.4(10) 14_556 15 ?
01 A11 w1 149.3(9) . 14_556 ?
04 A11 w1 61.9(5) . 14_556 ?
03 A11 w1 53.6(4) . 14_556 ?
02 A11 w1 104.7(10) 5_665 14_556 ?
Na2 A11 w1 114.1(9) 15 14_556 ?
Na1 A11 w1 148.2(9) 13_665 14_556 ?
w3 A11 w1 90.8(19) . 14_556 ?
w1 A11 w1 133.1(7) 21 14_556 ?
w2 A11 w1 126.0(10) 15 14_556 ?

```

W2 Al1 w1 25.9(14) 14_556 14_556 ?
 W1 Al1 w1 145.6(10) 15 14_556 ?
 O1 Si1 O4 107.0(2) . . ?
 O1 Si1 O3 112.4(2) . . ?
 O4 Si1 O3 108.5(2) . . ?
 O1 Si1 O2 105.9(2) . 5_665 ?
 O4 Si1 O2 112.1(2) . 5_665 ?
 O3 Si1 O2 110.9(2) . 5_665 ?
 O1 Si1 Na2 46.3(2) . 15 ?
 O4 Si1 Na2 60.8(2) . 15 ?
 O3 Si1 Na2 123.6(5) . 15 ?
 O2 Si1 Na2 124.7(5) 5_665 15 ?
 O1 Si1 Na1 62.52(15) . 13_665 ?
 O4 Si1 Na1 121.11(11) . 13_665 ?
 O3 Si1 Na1 129.6(2) . 13_665 ?
 O2 Si1 Na1 43.53(14) 5_665 13_665 ?
 Na2 Si1 Na1 90.1(4) 15 13_665 ?
 O1 Si1 w3 58.8(16) . . ?
 O4 Si1 w3 70.6(23) . . ?
 O3 Si1 w3 82.3(32) . . ?
 O2 Si1 w3 163.6(23) 5_665 . ?
 Na2 Si1 w3 41.3(33) 15 . ?
 Na1 Si1 w3 120.6(19) 13_665 . ?
 O1 Si1 w1 61.8(11) . 21 ?
 O4 Si1 w1 77.2(9) . 21 ?
 O3 Si1 w1 173.3(10) . 21 ?
 O2 Si1 w1 69.2(10) 5_665 21 ?
 Na2 Si1 w1 55.5(11) 15 21 ?
 Na1 Si1 w1 45.7(9) 13_665 21 ?
 W3 Si1 w1 96.5(32) . 21 ?
 O1 Si1 w2 50.80(15) . 15 ?
 O4 Si1 w2 64.2(8) . 15 ?
 O3 Si1 w2 150.9(11) . 15 ?
 O2 Si1 w2 97.5(12) 5_665 15 ?
 Na2 Si1 w2 27.4(11) 15 15 ?
 Na1 Si1 w2 68.4(12) 13_665 15 ?
 W3 Si1 w2 68.7(34) . 15 ?
 W1 Si1 w2 28.2(15) 21 15 ?
 O1 Si1 w2 123.4(12) . 14_556 ?
 O4 Si1 w2 57.87(12) . 14_556 ?
 O3 Si1 w2 50.6(2) . 14_556 ?
 O2 Si1 w2 130.6(12) 5_665 14_556 ?
 Na2 Si1 w2 94.0(10) 15 14_556 ?
 Na1 Si1 w2 174.0(12) 13_665 14_556 ?
 W3 Si1 w2 65.1(22) . 14_556 ?
 W1 Si1 w2 134.7(9) 21 14_556 ?
 W2 Si1 w2 114.2(17) 15 14_556 ?
 O1 Si1 w1 48.2(9) . 15 ?
 O4 Si1 w1 86.0(8) . 15 ?
 O3 Si1 w1 159.6(9) . 15 ?
 O2 Si1 w1 74.9(9) 5_665 15 ?
 Na2 Si1 w1 50.8(10) 15 15 ?
 Na1 Si1 w1 41.8(9) 13_665 15 ?
 W3 Si1 w1 89.5(29) . 15 ?
 W1 Si1 w1 13.9(18) 21 15 ?
 W2 Si1 w1 26.5(14) 15 15 ?
 W2 Si1 w1 140.4(10) 14_556 15 ?
 O1 Si1 w1 149.3(9) . 14_556 ?
 O4 Si1 w1 61.9(5) . 14_556 ?
 O3 Si1 w1 53.6(4) . 14_556 ?
 O2 Si1 w1 104.7(10) 5_665 14_556 ?
 Na2 Si1 w1 114.1(9) 15 14_556 ?
 Na1 Si1 w1 148.2(9) 13_665 14_556 ?
 W3 Si1 w1 90.8(19) . 14_556 ?
 W1 Si1 w1 133.1(7) 21 14_556 ?
 W2 Si1 w1 126.0(10) 15 14_556 ?
 W2 Si1 w1 25.9(14) 14_556 14_556 ?
 W1 Si1 w1 145.6(10) 15 14_556 ?

Si1 01 Al1 0.00(9) . . ?
 Si1 01 Si1 149.1(3) . 11 ?
 Al1 01 Si1 149.1(3) . 11 ?
 Si1 01 Al1 149.1(3) . 11 ?
 Al1 01 Al1 149.1(3) . 11 ?
 Si1 01 Al1 0.00(10) 11 11 ?
 Si1 01 Na2 104.1(2) . 15 ?
 Al1 01 Na2 104.1(2) . 15 ?
 Si1 01 Na2 103.8(2) 11 15 ?
 Al1 01 Na2 103.8(2) 11 15 ?
 Si1 01 Na1 88.8(2) . 13_665 ?
 Al1 01 Na1 88.8(2) . 13_665 ?
 Si1 01 Na1 88.8(2) 11 13_665 ?
 Al1 01 Na1 88.8(2) 11 13_665 ?
 Na2 01 Na1 119.3(6) 15 13_665 ?
 Si1 01 W3 94.7(10) . . ?
 Al1 01 W3 94.7(10) . . ?
 Si1 01 W3 93.0(10) 11 . ?
 Al1 01 W3 93.0(10) 11 . ?
 Na2 01 W3 50.6(40) 15 . ?
 Na1 01 W3 169.9(38) 13_665 . ?
 Si1 01 W2 105.3(2) . 15 ?
 Al1 01 W2 105.3(2) . 15 ?
 Si1 01 W2 105.1(2) 11 15 ?
 Al1 01 W2 105.1(2) 11 15 ?
 Na2 01 W2 35.2(15) 15 15 ?
 Na1 01 W2 84.1(16) 13_665 15 ?
 W3 01 W2 85.8(42) . 15 ?
 Si1 01 W1 92.3(12) . 21 ?
 Al1 01 W1 92.3(12) . 21 ?
 Si1 01 W1 110.2(12) 11 21 ?
 Al1 01 W1 110.2(12) 11 21 ?
 Na2 01 W1 68.0(12) 15 21 ?
 Na1 01 W1 52.2(11) 13_665 21 ?
 W3 01 W1 118.1(39) . 21 ?
 W2 01 W1 33.6(17) 15 21 ?
 Si1 01 W1 110.2(12) . 15 ?
 Al1 01 W1 110.2(12) . 15 ?
 Si1 01 W1 92.3(12) 11 15 ?
 Al1 01 W1 92.3(12) 11 15 ?
 Na2 01 W1 68.0(12) 15 15 ?
 Na1 01 W1 52.2(11) 13_665 15 ?
 W3 01 W1 117.8(39) . 15 ?
 W2 01 W1 33.6(17) 15 15 ?
 W1 01 W1 18.2(24) 21 15 ?
 Si1 02 Al1 0.00(9) 3_655 3_655 ?
 Si1 02 Si1 141.1(3) 3_655 9_665 ?
 Al1 02 Si1 141.1(3) 3_655 9_665 ?
 Si1 02 Al1 141.1(3) 3_655 9_665 ?
 Al1 02 Al1 141.1(3) 3_655 9_665 ?
 Si1 02 Al1 0.00(10) 9_665 9_665 ?
 Si1 02 Na1 109.19(14) 3_655 13_665 ?
 Al1 02 Na1 109.19(14) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 Na1 109.15(14) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 Na1 109.15(14) 9_665 13_665 ?
 Si1 02 W1 84.6(11) 3_655 8_654 ?
 Al1 02 W1 84.6(11) 3_655 8_654 ?
 Si1 02 W1 125.0(11) 9_665 8_654 ?
 Al1 02 W1 125.0(11) 9_665 8_654 ?
 Na1 02 W1 52.1(11) 13_665 8_654 ?
 Si1 02 W1 125.1(11) 3_655 13_665 ?
 Al1 02 W1 125.1(11) 3_655 13_665 ?
 Si1 02 W1 84.6(11) 9_665 13_665 ?
 Al1 02 W1 84.6(11) 9_665 13_665 ?
 Na1 02 W1 52.1(11) 13_665 13_665 ?
 W1 02 W1 41.5(21) 8_654 13_665 ?
 Si1 02 W1 81.9(9) 3_655 2_654 ?
 Al1 02 W1 81.9(9) 3_655 2_654 ?

Si1 02 w1 132.9(8) 9_665 2_654 ?
 Al1 02 w1 132.9(8) 9_665 2_654 ?
 Na1 02 w1 42.7(10) 13_665 2_654 ?
 w1 02 w1 13.6(18) 8_654 2_654 ?
 w1 02 w1 48.4(17) 13_665 2_654 ?
 Si1 02 w1 132.9(8) 3_655 19_665 ?
 Al1 02 w1 132.9(8) 3_655 19_665 ?
 Si1 02 w1 81.9(9) 9_665 19_665 ?
 Al1 02 w1 81.9(9) 9_665 19_665 ?
 Na1 02 w1 42.6(10) 13_665 19_665 ?
 w1 02 w1 48.4(17) 8_654 19_665 ?
 w1 02 w1 13.5(18) 13_665 19_665 ?
 w1 02 w1 51.6(17) 2_654 19_665 ?
 Si1 03 Al1 0.00(12) 16_556 16_556 ?
 Si1 03 Al1 146.5(3) 16_556 . ?
 Al1 03 Al1 146.5(3) 16_556 . ?
 Si1 03 Si1 146.5(3) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 146.5(3) 16_556 . ?
 Al1 03 Si1 0.00(12) . . ?
 Si1 03 w2 106.7(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.7(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w2 106.7(2) . 14_556 ?
 Si1 03 w2 106.7(2) . 14_556 ?
 Si1 03 w1 104.3(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 104.3(2) 16_556 14_556 ?
 Al1 03 w1 104.3(2) . 14_556 ?
 Si1 03 w1 104.3(2) . 14_556 ?
 w2 03 w1 31.6(18) 14_556 14_556 ?
 Si1 03 w3 118.5(28) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 118.5(28) 16_556 . ?
 Al1 03 w3 72.4(31) . . ?
 Si1 03 w3 72.4(31) . . ?
 w2 03 w3 71.8(23) 14_556 . ?
 w1 03 w3 100.6(18) 14_556 . ?
 Si1 03 w3 72.4(31) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 72.4(31) 16_556 16_556 ?
 Al1 03 w3 118.5(28) . 16_556 ?
 Si1 03 w3 118.5(28) . 16_556 ?
 w2 03 w3 71.8(23) 14_556 16_556 ?
 w1 03 w3 100.6(18) 14_556 16_556 ?
 w3 03 w3 48.0(61) . 16_556 ?
 Si1 03 w1 105.4(2) 16_556 20_556 ?
 Al1 03 w1 105.4(2) 16_556 20_556 ?
 Al1 03 w1 105.4(2) . 20_556 ?
 Si1 03 w1 105.4(2) . 20_556 ?
 w2 03 w1 23.2(16) 14_556 20_556 ?
 w1 03 w1 8.5(12) 14_556 20_556 ?
 w3 03 w1 92.9(18) . 20_556 ?
 w3 03 w1 92.9(18) 16_556 20_556 ?
 Si1 04 Al1 0.00(12) . . ?
 Si1 04 Si1 146.4(2) . 19 ?
 Al1 04 Si1 146.4(2) . 19 ?
 Si1 04 Al1 146.4(2) . 19 ?
 Al1 04 Al1 146.4(2) . 19 ?
 Si1 04 Al1 0.00(10) 19 19 ?
 Si1 04 Na2 88.6(3) . 15 ?
 Al1 04 Na2 88.6(3) . 15 ?
 Si1 04 Na2 115.6(4) 19 15 ?
 Al1 04 Na2 115.6(4) 19 15 ?
 Si1 04 Na2 115.5(4) . 5 ?
 Al1 04 Na2 115.5(4) . 5 ?
 Si1 04 Na2 88.8(3) 19 5 ?
 Al1 04 Na2 88.8(3) 19 5 ?
 Na2 04 Na2 89.8(9) 15 5 ?
 Si1 04 w3 129.9(30) . 15 ?
 Al1 04 w3 129.9(30) . 15 ?
 Si1 04 w3 83.6(31) 19 15 ?
 Al1 04 w3 83.6(31) 19 15 ?

Na2 04 w3 53.4(23) 15 15 ?
 Na2 04 w3 45.4(31) 5 15 ?
 Si1 04 w3 82.9(30) . . ?
 Al1 04 w3 82.9(30) . . ?
 Si1 04 w3 130.6(30) 19 . ?
 Al1 04 w3 130.6(30) 19 . ?
 Na2 04 w3 44.5(30) 15 . ?
 Na2 04 w3 54.5(23) 5 . ?
 W3 04 w3 47.5(64) 15 . ?
 Si1 04 w2 98.8(2) . 14_556 ?
 Al1 04 w2 98.8(2) . 14_556 ?
 Si1 04 w2 90.9(9) 19 14_556 ?
 Al1 04 w2 90.9(9) 19 14_556 ?
 Na2 04 w2 116.4(16) 15 14_556 ?
 Na2 04 w2 30.9(10) 5 14_556 ?
 W3 04 w2 76.2(31) 15 14_556 ?
 W3 04 w2 73.7(30) . 14_556 ?
 Si1 04 w2 90.9(9) . 15 ?
 Al1 04 w2 90.9(9) . 15 ?
 Si1 04 w2 98.8(2) 19 15 ?
 Al1 04 w2 98.8(2) 19 15 ?
 Na2 04 w2 30.9(10) 15 15 ?
 Na2 04 w2 116.3(16) 5 15 ?
 W3 04 w2 72.7(30) 15 15 ?
 W3 04 w2 75.3(31) . 15 ?
 W2 04 w2 146.0(27) 14_556 15 ?
 Si1 04 w1 77.5(7) . 21 ?
 Al1 04 w1 77.5(7) . 21 ?
 Si1 04 w1 95.4(8) 19 21 ?
 Al1 04 w1 95.4(8) 19 21 ?
 Na2 04 w1 58.0(12) 15 21 ?
 Na2 04 w1 146.0(12) 5 21 ?
 W3 04 w1 101.5(29) 15 21 ?
 W3 04 w1 99.8(28) . 21 ?
 W2 04 w1 173.0(16) 14_556 21 ?
 W2 04 w1 29.7(16) 15 21 ?
 Si1 04 w1 95.4(8) . 14_556 ?
 Al1 04 w1 95.4(8) . 14_556 ?
 Si1 04 w1 77.5(7) 19 14_556 ?
 Al1 04 w1 77.5(7) 19 14_556 ?
 Na2 04 w1 146.0(12) 15 14_556 ?
 Na2 04 w1 58.0(12) 5 14_556 ?
 W3 04 w1 100.8(28) 15 14_556 ?
 W3 04 w1 102.4(29) . 14_556 ?
 W2 04 w1 29.6(16) 14_556 14_556 ?
 W2 04 w1 173.0(16) 15 14_556 ?
 W1 04 w1 155.6(21) 21 14_556 ?
 O2 Na1 02 104.1(2) 13_665 17 ?
 O2 Na1 02 104.1(2) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 02 104.1(2) 17 15_565 ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 13_665 14_566 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 17 14_566 ?
 O2 Na1 w1 151.8(12) 15_565 14_566 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 13_665 20_566 ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 17 20_566 ?
 O2 Na1 w1 151.8(12) 15_565 20_566 ?
 W1 Na1 w1 21.5(28) 14_566 20_566 ?
 O2 Na1 w1 151.8(12) 13_665 9_665 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 17 9_665 ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 15_565 9_665 ?
 W1 Na1 w1 53.0(27) 14_566 9_665 ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) 20_566 9_665 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 13_665 . ?
 O2 Na1 w1 151.8(12) 17 . ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 15_565 . ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) 14_566 . ?
 W1 Na1 w1 53.0(27) 20_566 . ?
 W1 Na1 w1 78.5(21) 9_665 . ?

O2 Na1 w1 151.8(12) 13_665 3_665 ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 17 3_665 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 15_565 3_665 ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) 14_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 78.5(21) 20_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 21.5(28) 9_665 3_665 ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) . 3_665 ?
 O2 Na1 w1 100.2(14) 13_665 7 ?
 O2 Na1 w1 151.8(12) 17 7 ?
 O2 Na1 w1 83.3(12) 15_565 7 ?
 W1 Na1 w1 78.5(21) 14_566 7 ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) 20_566 7 ?
 W1 Na1 w1 68.5(17) 9_665 7 ?
 W1 Na1 w1 21.5(28) . 7 ?
 W1 Na1 w1 53.0(27) 3_665 7 ?
 O2 Na1 o1 55.89(5) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 o1 55.93(5) 17 15_565 ?
 O2 Na1 o1 137.6(3) 15_565 15_565 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) 14_566 15_565 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) 20_566 15_565 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) 9_665 15_565 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) . 15_565 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) 3_665 15_565 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) 7 15_565 ?
 O2 Na1 o1 55.93(5) 13_665 17 ?
 O2 Na1 o1 137.6(3) 17 17 ?
 O2 Na1 o1 55.89(5) 15_565 17 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) 14_566 17 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) 20_566 17 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) 9_665 17 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) . 17 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) 3_665 17 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) 7 17 ?
 O1 Na1 o1 110.95(12) 15_565 17 ?
 O2 Na1 o1 137.6(3) 13_665 13_665 ?
 O2 Na1 o1 55.89(5) 17 13_665 ?
 O2 Na1 o1 55.93(5) 15_565 13_665 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) 14_566 13_665 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) 20_566 13_665 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) 9_665 13_665 ?
 W1 Na1 o1 133.2(14) . 13_665 ?
 W1 Na1 o1 69.0(11) 3_665 13_665 ?
 W1 Na1 o1 112.1(14) 7 13_665 ?
 O1 Na1 o1 110.95(12) 15_565 13_665 ?
 O1 Na1 o1 110.95(12) 17 13_665 ?
 W2 Na2 o1 94.8(23) . 17 ?
 W2 Na2 w3 175.0(53) . 17 ?
 O1 Na2 w3 80.3(48) 17 17 ?
 W2 Na2 o4 96.3(11) . 17 ?
 O1 Na2 o4 60.1(3) 17 17 ?
 W3 Na2 o4 82.1(24) 17 17 ?
 W2 Na2 o4 96.4(11) . 3 ?
 O1 Na2 o4 60.3(3) 17 3 ?
 W3 Na2 o4 80.4(24) 17 3 ?
 O4 Na2 o4 119.8(7) 17 3 ?
 W2 Na2 Na2 37.9(23) . 16_556 ?
 O1 Na2 Na2 132.7(6) 17 16_556 ?
 W3 Na2 Na2 147.0(47) 17 16_556 ?
 O4 Na2 Na2 112.8(5) 17 16_556 ?
 O4 Na2 Na2 112.9(5) 3 16_556 ?
 W2 Na2 w3 121.7(45) . . ?
 O1 Na2 w3 124.1(41) 17 . ?
 W3 Na2 w3 62.5(73) 17 . ?
 O4 Na2 w3 74.0(39) 17 . ?
 O4 Na2 w3 138.9(41) 3 . ?
 Na2 Na2 w3 92.4(42) 16_556 . ?
 W2 Na2 w3 121.9(44) . 3 ?
 O1 Na2 w3 124.5(40) 17 3 ?

W3 Na2 W3 61.1(73) 17 3 ?
 O4 Na2 W3 138.7(40) 17 3 ?
 O4 Na2 W3 74.5(38) 3 3 ?
 Na2 Na2 W3 92.3(41) 16_556 3 ?
 W3 Na2 W3 72.6(77) . 3 ?
 W2 Na2 Si1 97.4(20) . 17 ?
 O1 Na2 Si1 29.5(2) 17 17 ?
 W3 Na2 Si1 78.8(42) 17 17 ?
 O4 Na2 Si1 30.6(2) 17 17 ?
 O4 Na2 Si1 89.4(5) 3 17 ?
 Na2 Na2 Si1 129.2(4) 16_556 17 ?
 W3 Na2 Si1 99.4(40) . 17 ?
 W3 Na2 Si1 138.4(41) 3 17 ?
 W2 Na2 Al1 97.4(20) . 17 ?
 O1 Na2 Al1 29.5(2) 17 17 ?
 W3 Na2 Al1 78.8(42) 17 17 ?
 O4 Na2 Al1 30.6(2) 17 17 ?
 O4 Na2 Al1 89.4(5) 3 17 ?
 Na2 Na2 Al1 129.2(4) 16_556 17 ?
 W3 Na2 Al1 99.4(40) . 17 ?
 W3 Na2 Al1 138.4(41) 3 17 ?
 Si1 Na2 Al1 0.00(6) 17 17 ?
 W2 Na2 Si1 97.5(20) . 21 ?
 O1 Na2 Si1 29.7(2) 17 21 ?
 W3 Na2 Si1 77.8(42) 17 21 ?
 O4 Na2 Si1 89.3(5) 17 21 ?
 O4 Na2 Si1 30.7(2) 3 21 ?
 Na2 Na2 Si1 129.2(4) 16_556 21 ?
 W3 Na2 Si1 138.3(42) . 21 ?
 W3 Na2 Si1 99.8(39) 3 21 ?
 Si1 Na2 Si1 58.8(3) 17 21 ?
 Al1 Na2 Si1 58.8(3) 17 21 ?
 W2 Na2 Al1 97.5(20) . 21 ?
 O1 Na2 Al1 29.7(2) 17 21 ?
 W3 Na2 Al1 77.8(42) 17 21 ?
 O4 Na2 Al1 89.3(5) 17 21 ?
 O4 Na2 Al1 30.7(2) 3 21 ?
 Na2 Na2 Al1 129.2(4) 16_556 21 ?
 W3 Na2 Al1 138.3(42) . 21 ?
 W3 Na2 Al1 99.8(39) 3 21 ?
 Si1 Na2 Al1 58.8(3) 17 21 ?
 Al1 Na2 Al1 58.8(3) 17 21 ?
 Si1 Na2 Al1 0.00(5) 21 21 ?
 W1 W1 W2 73.9(22) 7 . ?
 W1 W1 W1 120.00(3) 7 20_566 ?
 W2 W1 W1 166.1(21) . 20_566 ?
 W1 W1 Na1 79.2(14) 7 . ?
 W2 W1 Na1 123.1(18) . . ?
 W1 W1 Na1 63.5(13) 20_566 . ?
 W1 W1 Na1 79.2(14) 7 14_566 ?
 W2 W1 Na1 123.1(18) . 14_566 ?
 W1 W1 Na1 63.5(13) 20_566 14_566 ?
 Na1 W1 Na1 98.9(21) . 14_566 ?
 W1 W1 W1 43.3(22) 7 3_665 ?
 W2 W1 W1 117.2(42) . 3_665 ?
 W1 W1 W1 76.7(22) 20_566 3_665 ?
 Na1 W1 W1 55.7(8) . 3_665 ?
 Na1 W1 W1 55.7(8) 14_566 3_665 ?
 W1 W1 W1 103.3(22) 7 14_566 ?
 W2 W1 W1 177.2(42) . 14_566 ?
 W1 W1 W1 16.7(22) 20_566 14_566 ?
 Na1 W1 W1 55.7(8) . 14_566 ?
 Na1 W1 W1 55.7(8) 14_566 14_566 ?
 W1 W1 W1 60.000(10) 3_665 14_566 ?
 W1 W1 Na2 80.9(12) 7 . ?
 W2 W1 Na2 26.5(6) . . ?
 W1 W1 Na2 147.8(9) 20_566 . ?
 Na1 W1 Na2 101.1(9) . . ?

Na1 w1 Na2 148.6(21) 14_566 . ?
 w1 w1 Na2 119.6(29) 3_665 . ?
 w1 w1 Na2 154.0(8) 14_566 . ?
 w1 w1 Na2 80.9(12) 7 16_556 ?
 w2 w1 Na2 26.5(6) . 16_556 ?
 w1 w1 Na2 147.8(9) 20_566 16_556 ?
 Na1 w1 Na2 148.6(21) . 16_556 ?
 Na1 w1 Na2 101.1(9) 14_566 16_556 ?
 w1 w1 Na2 119.6(29) 3_665 16_556 ?
 w1 w1 Na2 154.0(8) 14_566 16_556 ?
 Na2 w1 Na2 51.6(13) . 16_556 ?
 w1 w1 o1 80.9(12) 7 17 ?
 w2 w1 o1 67.9(11) . 17 ?
 w1 w1 o1 112.2(11) 20_566 17 ?
 Na1 w1 o1 58.8(3) . 17 ?
 Na1 w1 o1 152.7(23) 14_566 17 ?
 w1 w1 o1 97.0(17) 3_665 17 ?
 w1 w1 o1 111.9(10) 14_566 17 ?
 Na2 w1 o1 42.8(7) . 17 ?
 Na2 w1 o1 94.1(17) 16_556 17 ?
 w1 w1 o1 80.9(12) 7 2 ?
 w2 w1 o1 67.9(11) . 2 ?
 w1 w1 o1 112.2(11) 20_566 2 ?
 Na1 w1 o1 152.7(23) . 2 ?
 Na1 w1 o1 58.8(3) 14_566 2 ?
 w1 w1 o1 97.0(17) 3_665 2 ?
 w1 w1 o1 111.9(10) 14_566 2 ?
 Na2 w1 o1 94.1(17) . 2 ?
 Na2 w1 o1 42.8(7) 16_556 2 ?
 o1 w1 o1 135.4(22) 17 2 ?
 w1 w1 w1 60.00(2) 7 9_665 ?
 w2 w1 w1 133.9(22) . 9_665 ?
 w1 w1 w1 60.000(13) 20_566 9_665 ?
 Na1 w1 w1 50.8(11) . 9_665 ?
 Na1 w1 w1 50.8(11) 14_566 9_665 ?
 w1 w1 w1 16.7(22) 3_665 9_665 ?
 w1 w1 w1 43.3(22) 14_566 9_665 ?
 Na2 w1 w1 133.5(11) . 9_665 ?
 Na2 w1 w1 133.5(11) 16_556 9_665 ?
 o1 w1 w1 102.7(11) 17 9_665 ?
 o1 w1 w1 102.7(11) 2 9_665 ?
 w1 w1 o2 114.2(10) 7 13_665 ?
 w2 w1 o2 106.2(13) . 13_665 ?
 w1 w1 o2 69.2(11) 20_566 13_665 ?
 Na1 w1 o2 44.6(4) . 13_665 ?
 Na1 w1 o2 130.5(22) 14_566 13_665 ?
 w1 w1 o2 100.3(11) 3_665 13_665 ?
 w1 w1 o2 74.8(16) 14_566 13_665 ?
 Na2 w1 o2 80.1(7) . 13_665 ?
 Na2 w1 o2 127.4(17) 16_556 13_665 ?
 o1 w1 o2 45.2(2) 17 13_665 ?
 o1 w1 o2 162.4(22) 2 13_665 ?
 w1 w1 o2 93.2(11) 9_665 13_665 ?
 Na2 w2 Na2 104.2(47) . 16_556 ?
 Na2 w2 w1 126.2(21) . . ?
 Na2 w2 w1 126.2(21) 16_556 . ?
 Na2 w2 w1 126.2(21) . 7 ?
 Na2 w2 w1 126.2(21) 16_556 7 ?
 w1 w2 w1 32.4(43) . 7 ?
 Na2 w2 o1 50.0(9) . 17 ?
 Na2 w2 o1 154.1(39) 16_556 17 ?
 w1 w2 o1 78.4(16) . 17 ?
 w1 w2 o1 78.4(16) 7 17 ?
 Na2 w2 o1 154.1(39) . 2 ?
 Na2 w2 o1 50.0(9) 16_556 2 ?
 w1 w2 o1 78.4(16) . 2 ?
 w1 w2 o1 78.4(16) 7 2 ?
 o1 w2 o1 155.9(32) 17 2 ?

Na2 W2 O3 85.9(11) . 3 ?
 Na2 W2 O3 85.9(11) 16_556 3 ?
 W1 W2 O3 80.4(23) . 3 ?
 W1 W2 O3 112.8(30) 7 3 ?
 O1 W2 O3 91.42(14) 17 3 ?
 O1 W2 O3 91.42(14) 2 3 ?
 Na2 W2 O3 86.1(11) . 20_556 ?
 Na2 W2 O3 86.1(11) 16_556 20_556 ?
 W1 W2 O3 112.6(30) . 20_556 ?
 W1 W2 O3 80.2(23) 7 20_556 ?
 O1 W2 O3 91.29(14) 17 20_556 ?
 O1 W2 O3 91.29(14) 2 20_556 ?
 O3 W2 O3 167.0(30) 3 20_556 ?
 Na2 W2 O4 52.7(3) . 3 ?
 Na2 W2 O4 121.9(24) 16_556 3 ?
 W1 W2 O4 82.4(18) . 3 ?
 W1 W2 O4 104.7(23) 7 3 ?
 O1 W2 O4 46.44(4) 17 3 ?
 O1 W2 O4 135.8(5) 2 3 ?
 O3 W2 O4 45.96(11) 3 3 ?
 O3 W2 O4 132.9(6) 20_556 3 ?
 Na2 W2 O4 121.9(24) . 2 ?
 Na2 W2 O4 52.9(3) 16_556 2 ?
 W1 W2 O4 104.6(23) . 2 ?
 W1 W2 O4 82.2(17) 7 2 ?
 O1 W2 O4 135.6(5) 17 2 ?
 O1 W2 O4 46.39(4) 2 2 ?
 O3 W2 O4 133.0(6) 3 2 ?
 O3 W2 O4 45.89(11) 20_556 2 ?
 O4 W2 O4 172.9(29) 3 2 ?
 Na2 W2 O4 52.9(3) . 17 ?
 Na2 W2 O4 121.9(24) 16_556 17 ?
 W1 W2 O4 104.6(23) . 17 ?
 W1 W2 O4 82.2(17) 7 17 ?
 O1 W2 O4 46.39(4) 17 17 ?
 O1 W2 O4 135.6(5) 2 17 ?
 O3 W2 O4 133.0(6) 3 17 ?
 O3 W2 O4 45.89(11) 20_556 17 ?
 O4 W2 O4 87.7(2) 3 17 ?
 O4 W2 O4 91.7(2) 2 17 ?
 Na2 W2 O4 121.9(24) . 18_556 ?
 Na2 W2 O4 52.7(3) 16_556 18_556 ?
 W1 W2 O4 82.4(18) . 18_556 ?
 W1 W2 O4 104.7(23) 7 18_556 ?
 O1 W2 O4 135.8(5) 17 18_556 ?
 O1 W2 O4 46.44(4) 2 18_556 ?
 O3 W2 O4 45.96(11) 3 18_556 ?
 O3 W2 O4 132.9(6) 20_556 18_556 ?
 O4 W2 O4 91.9(2) 3 18_556 ?
 O4 W2 O4 87.7(2) 2 18_556 ?
 O4 W2 O4 172.9(29) 17 18_556 ?
 Na2 W2 A11 146.2(26) . 2 ?
 Na2 W2 A11 55.1(9) 16_556 2 ?
 W1 W2 A11 84.9(18) . 2 ?
 W1 W2 A11 71.6(12) 7 2 ?
 O1 W2 A11 145.6(20) 17 2 ?
 O1 W2 A11 23.95(13) 2 2 ?
 O3 W2 A11 115.3(2) 3 2 ?
 O3 W2 A11 67.67(15) 20_556 2 ?
 O4 W2 A11 159.0(11) 3 2 ?
 O4 W2 A11 24.91(13) 2 2 ?
 O4 W2 A11 111.7(3) 17 2 ?
 O4 W2 A11 69.9(2) 18_556 2 ?
 Na2 W3 W3 147.0(47) 15 16_556 ?
 Na2 W3 Na2 96.5(42) 15 . ?
 W3 W3 Na2 87.6(42) 16_556 . ?
 Na2 W3 Na2 94.3(39) 15 5 ?
 W3 W3 Na2 87.7(41) 16_556 5 ?

Na2 W3 Na2 166.5(77) . 5 ?
 Na2 W3 W3 65.6(71) 15 15 ?
 W3 W3 W3 134.5(67) 16_556 15 ?
 Na2 W3 W3 127.7(78) . 15 ?
 Na2 W3 W3 51.0(40) 5 15 ?
 Na2 W3 W3 67.9(74) 15 17 ?
 W3 W3 W3 134.5(67) 16_556 17 ?
 Na2 W3 W3 51.9(41) . 17 ?
 Na2 W3 W3 126.4(75) 5 17 ?
 W3 W3 W3 76.2(100) 15 17 ?
 Na2 W3 O1 49.1(35) 15 . ?
 W3 W3 O1 97.9(38) 16_556 . ?
 Na2 W3 O1 97.6(39) . . ?
 Na2 W3 O1 95.5(37) 5 . ?
 W3 W3 O1 103.5(56) 15 . ?
 W3 W3 O1 106.3(60) 17 . ?
 Na2 W3 O4 54.2(30) 15 17 ?
 W3 W3 O4 106.6(35) 16_556 17 ?
 Na2 W3 O4 52.6(16) . 17 ?
 Na2 W3 O4 140.9(61) 5 17 ?
 W3 W3 O4 117.5(95) 15 17 ?
 W3 W3 O4 67.5(33) 17 17 ?
 O1 W3 O4 47.3(24) . 17 ?
 Na2 W3 O4 53.4(29) 15 . ?
 W3 W3 O4 106.2(34) 16_556 . ?
 Na2 W3 O4 142.4(62) . . ?
 Na2 W3 O4 51.1(15) 5 . ?
 W3 W3 O4 65.0(30) 15 . ?
 W3 W3 O4 118.4(96) 17 . ?
 O1 W3 O4 46.7(23) . . ?
 O4 W3 O4 89.8(46) 17 . ?
 Na2 W3 Si1 60.5(38) 15 11 ?
 W3 W3 Si1 90.4(33) 16_556 11 ?
 Na2 W3 Si1 71.4(26) . 11 ?
 Na2 W3 Si1 121.2(51) 5 11 ?
 W3 W3 Si1 124.7(75) 15 11 ?
 W3 W3 Si1 94.2(30) 17 11 ?
 O1 W3 Si1 27.0(14) . 11 ?
 O4 W3 Si1 26.8(13) 17 11 ?
 O4 W3 Si1 73.6(37) . 11 ?
 Na2 W3 Al1 60.5(38) 15 11 ?
 W3 W3 Al1 90.4(33) 16_556 11 ?
 Na2 W3 Al1 71.4(26) . 11 ?
 Na2 W3 Al1 121.2(51) 5 11 ?
 W3 W3 Al1 124.7(75) 15 11 ?
 W3 W3 Al1 94.2(30) 17 11 ?
 O1 W3 Al1 27.0(14) . 11 ?
 O4 W3 Al1 26.8(13) 17 11 ?
 O4 W3 Al1 73.6(37) . 11 ?
 Si1 W3 Al1 0.00(6) 11 11 ?
 Na2 W3 Si1 59.9(37) 15 . ?
 W3 W3 Si1 90.4(33) 16_556 . ?
 Na2 W3 Si1 123.0(53) . . ?
 Na2 W3 Si1 69.7(24) 5 . ?
 W3 W3 Si1 91.3(27) 15 . ?
 W3 W3 Si1 126.7(79) 17 . ?
 O1 W3 Si1 26.6(14) . . ?
 O4 W3 Si1 73.9(38) 17 . ?
 O4 W3 Si1 26.5(12) . . ?
 Si1 W3 Si1 51.6(27) 11 . ?
 Al1 W3 Si1 51.6(27) 11 . ?
 Na2 W3 Al1 59.9(37) 15 . ?
 W3 W3 Al1 90.4(33) 16_556 . ?
 Na2 W3 Al1 123.0(53) . . ?
 Na2 W3 Al1 69.7(24) 5 . ?
 W3 W3 Al1 91.3(27) 15 . ?
 W3 W3 Al1 126.7(79) 17 . ?
 O1 W3 Al1 26.6(14) . . ?

4351_1_supp_69396_10k3z1.txt

| | | | | | | |
|-----|----|-----|----------|----|---|---|
| O4 | W3 | Al1 | 73.9(38) | 17 | . | ? |
| O4 | W3 | Al1 | 26.5(12) | . | . | ? |
| Si1 | W3 | Al1 | 51.6(27) | 11 | . | ? |
| Al1 | W3 | Al1 | 51.6(27) | 11 | . | ? |
| Si1 | W3 | Al1 | 0.00(4) | . | . | ? |

| | |
|--------------------------|--------|
| _refine_diff_density_max | 0.972 |
| _refine_diff_density_min | -0.656 |
| _refine_diff_density_rms | 0.137 |