

data_timroseite

_audit_creation_method SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety ?
_chemical_formula_sum
'H Cu2.50 O7 Pb Te'
_chemical_formula_weight 606.65

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'Pb' 'Pb' -3.3944 10.1111
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Te' 'Te' -0.5308 1.6751
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Cu' 'Cu' 0.3201 1.2651
'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'
'H' 'H' 0.0000 0.0000
'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, -z'
'x+1/2, -y, -z+1/2'
'x+1/2, -y, z+1/2'

_cell_length_a 5.1999(2)
_cell_length_b 9.6225(4)
_cell_length_c 11.5340(5)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 90.00
_cell_angle_gamma 90.00
_cell_volume 577.13(4)
_cell_formula_units_Z 4
_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         0.05
_exptl_crystal_size_mid         0.03
_exptl_crystal_size_min         0.03
_exptl_crystal_density_meas     ?
_exptl_crystal_density_diffn    6.982
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            1054
_exptl_absorpt_coefficient_mu   43.137
_exptl_absorpt_correction_type  ?
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.2216
_exptl_absorpt_correction_T_max 0.4119
_exptl_absorpt_process_details  ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature     293(2)
_diffrn_radiation_wavelength    0.71075
_diffrn_radiation_type          MoK\alpha
_diffrn_radiation_source        'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator graphite
_diffrn_measurement_device_type ?
_diffrn_measurement_method      ?
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_standards_number        ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time ?
_diffrn_standards_decay_%       ?
_diffrn_reflns_number           12601
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0766
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI   0.0358
_diffrn_reflns_limit_h_min      -6
_diffrn_reflns_limit_h_max      6
_diffrn_reflns_limit_k_min      -12
_diffrn_reflns_limit_k_max      12
_diffrn_reflns_limit_l_min      -14
_diffrn_reflns_limit_l_max      14
_diffrn_reflns_theta_min        4.12
_diffrn_reflns_theta_max        26.36
_reflns_number_total            1227
_reflns_number_gt               1181
_reflns_threshold_expression     >2sigma(I)

_computing_data_collection      ?
_computing_cell_refinement      ?
_computing_data_reduction       ?
_computing_structure_solution   'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

```

_computing_molecular_graphics ?
_computing_publication_material ?

_refine_special_details

;

Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor wR and goodness 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 threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) 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
_refine_ls_weighting_details
'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0333P)^2^+3.4705P] 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 mixed
_refine_ls_extinction_method none
_refine_ls_extinction_coef ?
_refine_ls_abs_structure_details
'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack 0.00
_refine_ls_number_reflns 1227
_refine_ls_number_parameters 128
_refine_ls_number_restraints 1
_refine_ls_R_factor_all 0.0300
_refine_ls_R_factor_gt 0.0287
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0641
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0636
_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.064
_refine_ls_restrained_S_all 1.064
_refine_ls_shift/su_max 0.006
_refine_ls_shift/su_mean 0.001

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_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group

Pb1 Pb 0.1230(4) 0.0357(5) 0.0000 0.0229(7) Uani 0.94(3) 2 d SP . .
 Pb1A Pb 0.125(9) 0.078(8) 0.0000 0.060(11) Uani 0.09(3) 2 d SP . .
 Pb2 Pb 0.3820(7) 0.38682(17) 0.5000 0.0208(11) Uani 0.84(3) 2 d SP . .
 Pb2A Pb 0.279(13) 0.396(3) 0.5000 0.062(7) Uani 0.17(3) 2 d SP . .
 Te Te 0.2005(4) 0.74917(7) 0.24990(7) 0.0122(2) Uani 1 1 d . . .
 Cu1 Cu 0.6694(4) 0.89920(14) 0.18488(13) 0.0146(4) Uani 1 1 d . . .
 Cu2 Cu 0.7204(4) 0.59878(15) 0.32206(14) 0.0155(4) Uani 1 1 d . . .
 Cu3 Cu 0.1304(7) 0.7144(2) 0.5000 0.0222(5) Uani 1 2 d S . .
 O1 O 0.3817(19) 0.6747(8) 0.3817(7) 0.0160(17) Uani 1 1 d . . .
 O2 O 0.0013(18) 0.8259(9) 0.1236(7) 0.0143(17) Uani 1 1 d . . .
 O3 O 0.3533(19) 0.9309(7) 0.2788(8) 0.0189(19) Uani 1 1 d . . .
 O4 O -0.0808(17) 0.7716(8) 0.3612(8) 0.0135(18) Uani 1 1 d . . .
 O5 O 0.0365(18) 0.5718(8) 0.2178(8) 0.0160(19) Uani 1 1 d . . .
 O6 O 0.5044(19) 0.7173(9) 0.1587(8) 0.018(2) Uani 1 1 d . . .
 OH1 O 0.530(3) 0.9473(14) 0.0000 0.021(3) Uani 1 2 d S . .
 OH2 O 0.798(3) 0.5066(15) 0.5000 0.024(3) Uani 1 2 d S . .

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

Pb1 0.0198(11) 0.0213(13) 0.0277(6) 0.000 0.000 0.0041(7)
 Pb1A 0.11(3) 0.037(19) 0.035(8) 0.000 0.000 0.032(13)
 Pb2 0.0170(17) 0.0178(13) 0.0277(7) 0.000 0.000 0.0013(6)
 Pb2A 0.07(2) 0.075(8) 0.045(5) 0.000 0.000 -0.018(8)
 Te 0.0109(3) 0.0092(4) 0.0165(4) 0.0003(3) 0.0001(3) -0.0004(2)
 Cu1 0.0131(9) 0.0093(7) 0.0214(8) -0.0021(5) 0.0017(6) 0.0003(6)
 Cu2 0.0136(7) 0.0108(7) 0.0220(9) -0.0022(6) 0.0036(6) -0.0026(7)
 Cu3 0.0194(11) 0.0267(11) 0.0204(11) 0.000 0.000 0.0026(10)
 O1 0.006(4) 0.021(4) 0.021(4) 0.001(3) 0.004(4) 0.009(4)
 O2 0.015(4) 0.014(4) 0.014(4) 0.006(4) -0.005(4) -0.005(3)
 O3 0.021(5) 0.010(4) 0.025(5) -0.002(3) -0.005(5) -0.004(4)
 O4 0.010(4) 0.014(4) 0.016(4) 0.002(3) -0.003(4) -0.006(4)
 O5 0.011(4) 0.006(4) 0.031(5) -0.001(4) 0.008(4) 0.005(3)
 O6 0.022(5) 0.005(4) 0.026(5) -0.009(4) 0.007(4) -0.005(3)
 OH1 0.017(6) 0.023(7) 0.023(7) 0.000 0.000 0.002(6)
 OH2 0.010(6) 0.040(8) 0.022(7) 0.000 0.000 0.003(6)

_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
 Pb1 OH1 2.280(14) 1_545 ?
 Pb1 O2 2.550(9) 2_545 ?
 Pb1 O2 2.550(9) 1_545 ?
 Pb1 O4 2.894(10) 3_565 ?
 Pb1 O4 2.894(10) 4_564 ?
 Pb1 O3 2.929(9) 4_464 ?
 Pb1 O3 2.929(9) 3_465 ?
 Pb1 OH1 3.199(14) 1_445 ?
 Pb1 O1 3.347(9) 3_465 ?
 Pb1 O1 3.347(9) 4_464 ?
 Pb1 Cu1 3.440(2) 2_445 ?
 Pb1 Cu1 3.440(2) 1_445 ?
 Pb1 Cu3 3.513(5) 3_465 ?
 Pb1 Cu3 3.571(4) 3_565 ?
 Pb1 O3 3.577(9) 1_545 ?
 Pb1 O3 3.577(9) 2_545 ?
 Pb1 Cu1 3.6961(17) 3_465 ?
 Pb1 Cu1 3.6961(17) 4_464 ?
 Pb1 Cu1 3.787(3) 1_545 ?
 Pb1 Cu1 3.787(3) 2_545 ?
 Pb1A OH1 2.45(5) 1_545 ?
 Pb1A O4 2.65(6) 3_565 ?
 Pb1A O4 2.65(6) 4_564 ?
 Pb1A O2 2.88(7) 2_545 ?
 Pb1A O2 2.88(7) 1_545 ?
 Pb1A O3 2.92(2) 4_464 ?
 Pb1A O3 2.92(2) 3_465 ?
 Pb1A O1 3.02(6) 3_465 ?
 Pb1A O1 3.02(6) 4_464 ?
 Pb1A Cu3 3.26(5) 3_465 ?
 Pb1A Cu3 3.30(7) 3_565 ?
 Pb1A OH1 3.34(6) 1_445 ?
 Pb1A Cu1 3.62(6) 2_445 ?
 Pb1A Cu1 3.62(6) 1_445 ?
 Pb1A Cu1 3.649(7) 3_465 ?
 Pb1A Cu1 3.649(7) 4_464 ?
 Pb1A O3 3.71(3) 2_545 ?
 Pb1A O3 3.71(3) 1_545 ?
 Pb1A Cu2 3.76(7) 3_465 ?
 Pb1A Cu2 3.76(7) 4_464 ?
 Pb2 Pb2A 0.54(7) . ?
 Pb2 OH2 2.452(15) . ?
 Pb2 O2 2.571(9) 3_565 ?
 Pb2 O2 2.571(9) 4_565 ?
 Pb2 O5 2.668(10) 4_565 ?
 Pb2 O5 2.668(10) 3_565 ?
 Pb2 O6 2.865(10) 3_465 ?
 Pb2 O6 2.865(10) 4_465 ?
 Pb2 O1 3.088(8) . ?
 Pb2 O1 3.088(8) 2_556 ?

Pb2 OH2 3.247(14) 1_455 ?
 Pb2 Cu2 3.386(4) . ?
 Pb2 Cu2 3.387(4) 2_556 ?
 Pb2 Cu3 3.413(3) . ?
 Pb2 Te 3.572(3) 4_565 ?
 Pb2 Te 3.572(3) 3_565 ?
 Pb2 Cu1 3.653(3) 3_465 ?
 Pb2 Cu1 3.653(3) 4_465 ?
 Pb2 OH1 3.700(14) 3_465 ?
 Pb2 Cu2 3.8110(19) 3_465 ?
 Pb2A O6 2.56(3) 3_465 ?
 Pb2A O6 2.56(3) 4_465 ?
 Pb2A OH2 2.72(7) 1_455 ?
 Pb2A O2 2.81(5) 3_565 ?
 Pb2A O2 2.81(5) 4_565 ?
 Pb2A O5 2.86(3) 4_565 ?
 Pb2A O5 2.86(3) 3_565 ?
 Pb2A OH2 2.90(6) . ?
 Pb2A O1 3.059(16) . ?
 Pb2A O1 3.059(16) 2_556 ?
 Pb2A Cu3 3.16(4) . ?
 Pb2A OH1 3.55(2) 3_465 ?
 Pb2A Cu1 3.594(13) 3_465 ?
 Pb2A Cu1 3.594(13) 4_465 ?
 Pb2A Cu2 3.65(3) . ?
 Pb2A Cu2 3.65(3) 2_556 ?
 Pb2A Cu2 3.728(6) 3_465 ?
 Pb2A Cu2 3.728(6) 4_465 ?
 Pb2A Te 3.88(5) 4_565 ?
 Te O6 1.924(10) . ?
 Te O1 1.927(9) . ?
 Te O2 1.934(8) . ?
 Te O5 1.943(9) . ?
 Te O3 1.949(8) . ?
 Te O4 1.958(9) . ?
 Te Cu3 2.9268(9) . ?
 Te Cu1 2.9313(17) . ?
 Te Cu2 3.0032(18) 1_455 ?
 Te Cu2 3.1774(18) . ?
 Te Cu1 3.2050(17) 1_455 ?
 Te Cu2 3.4511(16) 3_465 ?
 Cu1 O3 1.940(8) 3_575 ?
 Cu1 O6 1.972(8) . ?
 Cu1 O3 1.992(10) . ?
 Cu1 O2 1.994(10) 1_655 ?
 Cu1 OH1 2.300(5) . ?
 Cu1 O4 2.707(8) 1_655 ?
 Cu2 O5 1.954(8) 3_565 ?
 Cu2 O4 2.010(8) 1_655 ?
 Cu2 O1 2.027(9) . ?
 Cu2 O5 2.053(9) 1_655 ?
 Cu2 OH2 2.272(6) . ?
 Cu2 O6 2.473(10) . ?
 Cu3 O1 1.927(9) 2_556 ?

Cu3 O1 1.927(9) . ?
 Cu3 O4 2.019(9) . ?
 Cu3 O4 2.019(9) 2_556 ?
 Cu3 OH2 2.643(15) 1_455 ?
 O1 Pb1A 3.02(6) 3_565 ?
 O1 Pb1 3.347(9) 3_565 ?
 O1 Cu2 3.582(10) 1_455 ?
 O1 Cu2 3.627(8) 3_465 ?
 O1 Cu2 3.913(9) 2_556 ?
 O1 Cu3 4.143(10) 1_655 ?
 O2 Cu1 1.994(10) 1_455 ?
 O2 Pb1 2.550(9) 1_565 ?
 O2 Pb2 2.571(9) 3_465 ?
 O2 Pb2A 2.81(5) 3_465 ?
 O2 Pb1A 2.88(7) 1_565 ?
 O2 Cu2 3.486(8) 1_455 ?
 O2 Cu1 3.555(9) 3_475 ?
 O2 Cu1 4.017(8) 2_455 ?
 O3 Cu1 1.940(8) 3_475 ?
 O3 Pb1A 2.92(3) 3_565 ?
 O3 Pb1 2.929(9) 3_565 ?
 O3 Pb1 3.577(9) 1_565 ?
 O3 Pb1A 3.71(3) 1_565 ?
 O3 Cu1 3.730(10) 1_455 ?
 O4 Cu2 2.010(8) 1_455 ?
 O4 Pb1A 2.65(6) 3_465 ?
 O4 Cu1 2.707(8) 1_455 ?
 O4 Pb1 2.894(10) 3_465 ?
 O4 Cu1 3.465(8) 3_475 ?
 O4 Cu2 4.146(9) 2_456 ?
 O5 Cu2 1.954(8) 3_465 ?
 O5 Cu2 2.053(9) 1_455 ?
 O5 Pb2 2.668(10) 3_465 ?
 O5 Pb2A 2.86(3) 3_465 ?
 O5 Cu1 3.703(8) 1_455 ?
 O6 Pb2A 2.56(3) 3_565 ?
 O6 Pb2 2.865(10) 3_565 ?
 O6 OH1 2.875(14) . ?
 O6 Cu2 3.389(8) 3_465 ?
 O6 Pb2 3.851(11) 3_465 ?
 O6 Pb1 4.083(11) 1_565 ?
 O6 OH2 4.685(13) . ?
 OH1 Pb1 2.280(14) 1_565 ?
 OH1 Cu1 2.300(5) 2 ?
 OH1 Pb1A 2.45(5) 1_565 ?
 OH1 Pb1 3.199(14) 1_665 ?
 OH1 Cu3 3.297(14) 3_575 ?
 OH1 Pb1A 3.34(6) 1_665 ?
 OH1 Pb2A 3.55(2) 3_565 ?
 OH1 Pb2 3.700(14) 3_565 ?
 OH2 Cu2 2.272(6) 2_556 ?
 OH2 Cu3 2.643(15) 1_655 ?
 OH2 Pb2A 2.72(7) 1_655 ?
 OH2 Pb2 3.247(14) 1_655 ?

OH2 Pb1A 4.10(8) 3_565 ?

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

OH1 Pb1 O2 86.3(4) 1_545 2_545 ?

OH1 Pb1 O2 86.3(4) 1_545 1_545 ?

O2 Pb1 O2 68.0(4) 2_545 1_545 ?

OH1 Pb1 O4 75.2(3) 1_545 3_565 ?

O2 Pb1 O4 161.5(3) 2_545 3_565 ?

O2 Pb1 O4 109.3(3) 1_545 3_565 ?

OH1 Pb1 O4 75.2(3) 1_545 4_564 ?

O2 Pb1 O4 109.3(3) 2_545 4_564 ?

O2 Pb1 O4 161.5(3) 1_545 4_564 ?

O4 Pb1 O4 67.2(3) 3_565 4_564 ?

OH1 Pb1 O3 119.0(2) 1_545 4_464 ?

O2 Pb1 O3 58.8(2) 2_545 4_464 ?

O2 Pb1 O3 117.1(3) 1_545 4_464 ?

O4 Pb1 O3 131.8(3) 3_565 4_464 ?

O4 Pb1 O3 72.7(2) 4_564 4_464 ?

OH1 Pb1 O3 119.0(2) 1_545 3_465 ?

O2 Pb1 O3 117.1(3) 2_545 3_465 ?

O2 Pb1 O3 58.8(2) 1_545 3_465 ?

O4 Pb1 O3 72.7(2) 3_565 3_465 ?

O4 Pb1 O3 131.8(3) 4_564 3_465 ?

O3 Pb1 O3 121.2(4) 4_464 3_465 ?

OH1 Pb1 OH1 142.7(6) 1_545 1_445 ?

O2 Pb1 OH1 63.3(3) 2_545 1_445 ?

O2 Pb1 OH1 63.3(3) 1_545 1_445 ?

O4 Pb1 OH1 133.1(2) 3_565 1_445 ?

O4 Pb1 OH1 133.1(2) 4_564 1_445 ?

O3 Pb1 OH1 64.4(2) 4_464 1_445 ?

O3 Pb1 OH1 64.4(2) 3_465 1_445 ?

OH1 Pb1 O1 131.2(4) 1_545 3_465 ?

O2 Pb1 O1 142.5(3) 2_545 3_465 ?

O2 Pb1 O1 109.8(3) 1_545 3_465 ?

O4 Pb1 O1 56.0(2) 3_565 3_465 ?

O4 Pb1 O1 83.8(3) 4_564 3_465 ?

O3 Pb1 O1 94.8(2) 4_464 3_465 ?

O3 Pb1 O1 51.2(2) 3_465 3_465 ?

OH1 Pb1 O1 81.9(3) 1_445 3_465 ?

OH1 Pb1 O1 131.2(4) 1_545 4_464 ?

O2 Pb1 O1 109.8(3) 2_545 4_464 ?

O2 Pb1 O1 142.5(3) 1_545 4_464 ?

O4 Pb1 O1 83.8(3) 3_565 4_464 ?

O4 Pb1 O1 56.0(2) 4_564 4_464 ?

O3 Pb1 O1 51.2(2) 4_464 4_464 ?

O3 Pb1 O1 94.8(2) 3_465 4_464 ?

OH1 Pb1 O1 81.9(3) 1_445 4_464 ?

O1 Pb1 O1 48.1(3) 3_465 4_464 ?
 OH1 Pb1 Cu1 119.6(3) 1_545 2_445 ?
 O2 Pb1 Cu1 35.1(2) 2_545 2_445 ?
 O2 Pb1 Cu1 82.8(2) 1_545 2_445 ?
 O4 Pb1 Cu1 162.3(2) 3_565 2_445 ?
 O4 Pb1 Cu1 105.45(17) 4_564 2_445 ?
 O3 Pb1 Cu1 34.29(16) 4_464 2_445 ?
 O3 Pb1 Cu1 104.7(2) 3_465 2_445 ?
 OH1 Pb1 Cu1 40.32(8) 1_445 2_445 ?
 O1 Pb1 Cu1 108.27(17) 3_465 2_445 ?
 O1 Pb1 Cu1 78.94(15) 4_464 2_445 ?
 OH1 Pb1 Cu1 119.6(3) 1_545 1_445 ?
 O2 Pb1 Cu1 82.8(2) 2_545 1_445 ?
 O2 Pb1 Cu1 35.1(2) 1_545 1_445 ?
 O4 Pb1 Cu1 105.45(17) 3_565 1_445 ?
 O4 Pb1 Cu1 162.3(2) 4_564 1_445 ?
 O3 Pb1 Cu1 104.7(2) 4_464 1_445 ?
 O3 Pb1 Cu1 34.29(16) 3_465 1_445 ?
 OH1 Pb1 Cu1 40.32(8) 1_445 1_445 ?
 O1 Pb1 Cu1 78.94(15) 3_465 1_445 ?
 O1 Pb1 Cu1 108.27(17) 4_464 1_445 ?
 Cu1 Pb1 Cu1 76.61(7) 2_445 1_445 ?
 OH1 Pb1 Cu3 158.7(4) 1_545 3_465 ?
 O2 Pb1 Cu3 111.2(2) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1 Cu3 111.2(2) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1 Cu3 87.1(2) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1 Cu3 87.1(2) 4_564 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu3 64.89(18) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu3 64.89(18) 3_465 3_465 ?
 OH1 Pb1 Cu3 58.6(2) 1_445 3_465 ?
 O1 Pb1 Cu3 32.51(15) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1 Cu3 32.51(15) 4_464 3_465 ?
 Cu1 Pb1 Cu3 76.20(6) 2_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1 Cu3 76.20(6) 1_445 3_465 ?
 OH1 Pb1 Cu3 64.2(4) 1_545 3_565 ?
 O2 Pb1 Cu3 135.8(2) 2_545 3_565 ?
 O2 Pb1 Cu3 135.8(2) 1_545 3_565 ?
 O4 Pb1 Cu3 34.42(17) 3_565 3_565 ?
 O4 Pb1 Cu3 34.42(17) 4_564 3_565 ?
 O3 Pb1 Cu3 106.25(19) 4_464 3_565 ?
 O3 Pb1 Cu3 106.25(19) 3_465 3_565 ?
 OH1 Pb1 Cu3 153.1(3) 1_445 3_565 ?
 O1 Pb1 Cu3 73.51(18) 3_465 3_565 ?
 O1 Pb1 Cu3 73.51(18) 4_464 3_565 ?
 Cu1 Pb1 Cu3 139.80(7) 2_445 3_565 ?
 Cu1 Pb1 Cu3 139.80(7) 1_445 3_565 ?
 Cu3 Pb1 Cu3 94.45(13) 3_465 3_565 ?
 OH1 Pb1 O3 65.43(17) 1_545 1_545 ?
 O2 Pb1 O3 111.3(3) 2_545 1_545 ?
 O2 Pb1 O3 50.0(2) 1_545 1_545 ?
 O4 Pb1 O3 60.3(2) 3_565 1_545 ?
 O4 Pb1 O3 120.0(2) 4_564 1_545 ?
 O3 Pb1 O3 167.0(3) 4_464 1_545 ?
 O3 Pb1 O3 53.71(10) 3_465 1_545 ?

OH1 Pb1 O3 104.35(19) 1_445 1_545 ?
 O1 Pb1 O3 89.64(19) 3_465 1_545 ?
 O1 Pb1 O3 136.6(2) 4_464 1_545 ?
 Cu1 Pb1 O3 132.79(18) 2_445 1_545 ?
 Cu1 Pb1 O3 64.19(16) 1_445 1_545 ?
 Cu3 Pb1 O3 115.92(15) 3_465 1_545 ?
 Cu3 Pb1 O3 86.70(15) 3_565 1_545 ?
 OH1 Pb1 O3 65.43(17) 1_545 2_545 ?
 O2 Pb1 O3 50.0(2) 2_545 2_545 ?
 O2 Pb1 O3 111.3(3) 1_545 2_545 ?
 O4 Pb1 O3 120.0(2) 3_565 2_545 ?
 O4 Pb1 O3 60.3(2) 4_564 2_545 ?
 O3 Pb1 O3 53.71(10) 4_464 2_545 ?
 O3 Pb1 O3 167.0(3) 3_465 2_545 ?
 OH1 Pb1 O3 104.35(19) 1_445 2_545 ?
 O1 Pb1 O3 136.6(2) 3_465 2_545 ?
 O1 Pb1 O3 89.64(19) 4_464 2_545 ?
 Cu1 Pb1 O3 64.19(16) 2_445 2_545 ?
 Cu1 Pb1 O3 132.79(18) 1_445 2_545 ?
 Cu3 Pb1 O3 115.92(15) 3_465 2_545 ?
 Cu3 Pb1 O3 86.70(15) 3_565 2_545 ?
 O3 Pb1 O3 128.1(3) 1_545 2_545 ?
 OH1 Pb1 Cu1 90.15(8) 1_545 3_465 ?
 O2 Pb1 Cu1 134.4(2) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1 Cu1 66.48(19) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1 Cu1 46.56(17) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1 Cu1 113.63(19) 4_564 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu1 150.4(2) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu1 32.4(2) 3_465 3_465 ?
 OH1 Pb1 Cu1 96.20(5) 1_445 3_465 ?
 O1 Pb1 Cu1 58.83(15) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1 Cu1 106.50(17) 4_464 3_465 ?
 Cu1 Pb1 Cu1 135.98(7) 2_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1 Cu1 60.00(3) 1_445 3_465 ?
 Cu3 Pb1 Cu1 86.07(7) 3_465 3_465 ?
 Cu3 Pb1 Cu1 80.65(6) 3_565 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu1 30.88(13) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1 Cu1 155.52(18) 2_545 3_465 ?
 OH1 Pb1 Cu1 90.15(8) 1_545 4_464 ?
 O2 Pb1 Cu1 66.48(19) 2_545 4_464 ?
 O2 Pb1 Cu1 134.4(2) 1_545 4_464 ?
 O4 Pb1 Cu1 113.63(19) 3_565 4_464 ?
 O4 Pb1 Cu1 46.56(17) 4_564 4_464 ?
 O3 Pb1 Cu1 32.4(2) 4_464 4_464 ?
 O3 Pb1 Cu1 150.4(2) 3_465 4_464 ?
 OH1 Pb1 Cu1 96.20(5) 1_445 4_464 ?
 O1 Pb1 Cu1 106.50(17) 3_465 4_464 ?
 O1 Pb1 Cu1 58.83(15) 4_464 4_464 ?
 Cu1 Pb1 Cu1 60.00(3) 2_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1 Cu1 135.98(7) 1_445 4_464 ?
 Cu3 Pb1 Cu1 86.07(7) 3_465 4_464 ?
 Cu3 Pb1 Cu1 80.65(6) 3_565 4_464 ?
 O3 Pb1 Cu1 155.52(18) 1_545 4_464 ?
 O3 Pb1 Cu1 30.88(13) 2_545 4_464 ?

Cu1 Pb1 Cu1 159.06(14) 3_465 4_464 ?
OH1 Pb1 Cu1 34.37(4) 1_545 1_545 ?
O2 Pb1 Cu1 103.1(3) 2_545 1_545 ?
O2 Pb1 Cu1 66.2(2) 1_545 1_545 ?
O4 Pb1 Cu1 60.75(16) 3_565 1_545 ?
O4 Pb1 Cu1 97.73(17) 4_564 1_545 ?
O3 Pb1 Cu1 152.6(2) 4_464 1_545 ?
O3 Pb1 Cu1 84.66(19) 3_465 1_545 ?
OH1 Pb1 Cu1 129.13(19) 1_445 1_545 ?
O1 Pb1 Cu1 109.90(16) 3_465 1_545 ?
O1 Pb1 Cu1 143.07(19) 4_464 1_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 136.97(15) 2_445 1_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 91.89(7) 1_445 1_545 ?
Cu3 Pb1 Cu1 141.65(8) 3_465 1_545 ?
Cu3 Pb1 Cu1 71.28(5) 3_565 1_545 ?
O3 Pb1 Cu1 31.22(16) 1_545 1_545 ?
O3 Pb1 Cu1 99.05(17) 2_545 1_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 57.05(3) 3_465 1_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 124.30(7) 4_464 1_545 ?
OH1 Pb1 Cu1 34.37(4) 1_545 2_545 ?
O2 Pb1 Cu1 66.2(2) 2_545 2_545 ?
O2 Pb1 Cu1 103.1(3) 1_545 2_545 ?
O4 Pb1 Cu1 97.73(17) 3_565 2_545 ?
O4 Pb1 Cu1 60.75(16) 4_564 2_545 ?
O3 Pb1 Cu1 84.66(19) 4_464 2_545 ?
O3 Pb1 Cu1 152.6(2) 3_465 2_545 ?
OH1 Pb1 Cu1 129.13(19) 1_445 2_545 ?
O1 Pb1 Cu1 143.07(19) 3_465 2_545 ?
O1 Pb1 Cu1 109.90(16) 4_464 2_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 91.89(7) 2_445 2_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 136.97(15) 1_445 2_545 ?
Cu3 Pb1 Cu1 141.65(8) 3_465 2_545 ?
Cu3 Pb1 Cu1 71.28(5) 3_565 2_545 ?
O3 Pb1 Cu1 99.05(17) 1_545 2_545 ?
O3 Pb1 Cu1 31.22(16) 2_545 2_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 124.30(7) 3_465 2_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 57.05(3) 4_464 2_545 ?
Cu1 Pb1 Cu1 68.53(7) 1_545 2_545 ?
OH1 Pb1A O4 77.5(13) 1_545 3_565 ?
OH1 Pb1A O4 77.5(13) 1_545 4_564 ?
O4 Pb1A O4 74.4(19) 3_565 4_564 ?
OH1 Pb1A O2 76.2(18) 1_545 2_545 ?
O4 Pb1A O2 153(2) 3_565 2_545 ?
O4 Pb1A O2 106.9(8) 4_564 2_545 ?
OH1 Pb1A O2 76.2(18) 1_545 1_545 ?
O4 Pb1A O2 106.9(8) 3_565 1_545 ?
O4 Pb1A O2 153(2) 4_564 1_545 ?
O2 Pb1A O2 59.3(16) 2_545 1_545 ?
OH1 Pb1A O3 113.7(13) 1_545 4_464 ?
O4 Pb1A O3 145(3) 3_565 4_464 ?
O4 Pb1A O3 76.5(7) 4_564 4_464 ?
O2 Pb1A O3 55.7(9) 2_545 4_464 ?
O2 Pb1A O3 108(2) 1_545 4_464 ?
OH1 Pb1A O3 113.7(13) 1_545 3_465 ?

O4 Pb1A O3 76.5(7) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1A O3 145(3) 4_564 3_465 ?
 O2 Pb1A O3 108(2) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1A O3 55.7(9) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1A O3 122.0(17) 4_464 3_465 ?
 OH1 Pb1A O1 140(2) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1A O1 62.4(14) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1A O1 95(2) 4_564 3_465 ?
 O2 Pb1A O1 142.4(18) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1A O1 110.2(9) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1A O1 102.4(15) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1A O1 54.9(7) 3_465 3_465 ?
 OH1 Pb1A O1 140(2) 1_545 4_464 ?
 O4 Pb1A O1 95(2) 3_565 4_464 ?
 O4 Pb1A O1 62.4(14) 4_564 4_464 ?
 O2 Pb1A O1 110.2(9) 2_545 4_464 ?
 O2 Pb1A O1 142.4(18) 1_545 4_464 ?
 O3 Pb1A O1 54.9(7) 4_464 4_464 ?
 O3 Pb1A O1 102.4(15) 3_465 4_464 ?
 O1 Pb1A O1 53.6(12) 3_465 4_464 ?
 OH1 Pb1A Cu3 173(3) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu3 97(2) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu3 97(2) 4_564 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu3 109.9(15) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu3 109.9(15) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu3 68.6(9) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu3 68.6(9) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu3 35.5(6) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu3 35.5(6) 4_464 3_465 ?
 OH1 Pb1A Cu3 68.1(13) 1_545 3_565 ?
 O4 Pb1A Cu3 37.7(9) 3_565 3_565 ?
 O4 Pb1A Cu3 37.7(9) 4_564 3_565 ?
 O2 Pb1A Cu3 133.3(12) 2_545 3_565 ?
 O2 Pb1A Cu3 133.3(12) 1_545 3_565 ?
 O3 Pb1A Cu3 113.7(16) 4_464 3_565 ?
 O3 Pb1A Cu3 113.7(16) 3_465 3_565 ?
 O1 Pb1A Cu3 81.7(19) 3_465 3_565 ?
 O1 Pb1A Cu3 81.7(19) 4_464 3_565 ?
 Cu3 Pb1A Cu3 105(2) 3_465 3_565 ?
 OH1 Pb1A OH1 127(3) 1_545 1_445 ?
 O4 Pb1A OH1 137.8(9) 3_565 1_445 ?
 O4 Pb1A OH1 137.8(9) 4_564 1_445 ?
 O2 Pb1A OH1 58.5(13) 2_545 1_445 ?
 O2 Pb1A OH1 58.5(13) 1_545 1_445 ?
 O3 Pb1A OH1 62.7(10) 4_464 1_445 ?
 O3 Pb1A OH1 62.7(10) 3_465 1_445 ?
 O1 Pb1A OH1 84.7(10) 3_465 1_445 ?
 O1 Pb1A OH1 84.7(10) 4_464 1_445 ?
 Cu3 Pb1A OH1 60.0(8) 3_465 1_445 ?
 Cu3 Pb1A OH1 165(2) 3_565 1_445 ?
 OH1 Pb1A Cu1 109(2) 1_545 2_445 ?
 O4 Pb1A Cu1 174(2) 3_565 2_445 ?
 O4 Pb1A Cu1 106.4(3) 4_564 2_445 ?
 O2 Pb1A Cu1 33.3(6) 2_545 2_445 ?

O2 Pb1A Cu1 75.3(17) 1_545 2_445 ?
 O3 Pb1A Cu1 32.3(6) 4_464 2_445 ?
 O3 Pb1A Cu1 100.7(17) 3_465 2_445 ?
 O1 Pb1A Cu1 111.5(12) 3_465 2_445 ?
 O1 Pb1A Cu1 80.5(7) 4_464 2_445 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 77.0(9) 3_465 2_445 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 143.9(7) 3_565 2_445 ?
 OH1 Pb1A Cu1 38.3(7) 1_445 2_445 ?
 OH1 Pb1A Cu1 109(2) 1_545 1_445 ?
 O4 Pb1A Cu1 106.4(3) 3_565 1_445 ?
 O4 Pb1A Cu1 174(2) 4_564 1_445 ?
 O2 Pb1A Cu1 75.3(17) 2_545 1_445 ?
 O2 Pb1A Cu1 33.3(6) 1_545 1_445 ?
 O3 Pb1A Cu1 100.7(17) 4_464 1_445 ?
 O3 Pb1A Cu1 32.3(6) 3_465 1_445 ?
 O1 Pb1A Cu1 80.5(7) 3_465 1_445 ?
 O1 Pb1A Cu1 111.5(12) 4_464 1_445 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 77.0(9) 3_465 1_445 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 143.9(7) 3_565 1_445 ?
 OH1 Pb1A Cu1 38.3(7) 1_445 1_445 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 72.2(13) 2_445 1_445 ?
 OH1 Pb1A Cu1 88.7(7) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu1 47.7(3) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu1 122(2) 4_564 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu1 124(2) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu1 64.7(5) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu1 154.6(15) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu1 33.0(2) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu1 61.9(5) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu1 115.3(17) 4_464 3_465 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 90.7(9) 3_465 3_465 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 85.0(11) 3_565 3_465 ?
 OH1 Pb1A Cu1 94.7(9) 1_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 131.1(17) 2_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 58.9(4) 1_445 3_465 ?
 OH1 Pb1A Cu1 88.7(7) 1_545 4_464 ?
 O4 Pb1A Cu1 122(2) 3_565 4_464 ?
 O4 Pb1A Cu1 47.7(3) 4_564 4_464 ?
 O2 Pb1A Cu1 64.7(5) 2_545 4_464 ?
 O2 Pb1A Cu1 124(2) 1_545 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu1 33.0(2) 4_464 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu1 154.6(15) 3_465 4_464 ?
 O1 Pb1A Cu1 115.3(17) 3_465 4_464 ?
 O1 Pb1A Cu1 61.9(5) 4_464 4_464 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 90.7(9) 3_465 4_464 ?
 Cu3 Pb1A Cu1 85.0(11) 3_565 4_464 ?
 OH1 Pb1A Cu1 94.7(9) 1_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 58.9(4) 2_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 131.1(17) 1_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu1 170(2) 3_465 4_464 ?
 OH1 Pb1A O3 62.0(8) 1_545 2_545 ?
 O4 Pb1A O3 123.2(16) 3_565 2_545 ?
 O4 Pb1A O3 59.9(4) 4_564 2_545 ?
 O2 Pb1A O3 47.4(6) 2_545 2_545 ?

O2 Pb1A O3 100(2) 1_545 2_545 ?
 O3 Pb1A O3 52.1(4) 4_464 2_545 ?
 O3 Pb1A O3 155(3) 3_465 2_545 ?
 O1 Pb1A O3 145.6(17) 3_465 2_545 ?
 O1 Pb1A O3 92.5(5) 4_464 2_545 ?
 Cu3 Pb1A O3 119.1(6) 3_465 2_545 ?
 Cu3 Pb1A O3 88.6(9) 3_565 2_545 ?
 OH1 Pb1A O3 98.9(14) 1_445 2_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 61.2(7) 2_445 2_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 123(2) 1_445 2_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 150.1(15) 3_465 2_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 30.57(18) 4_464 2_545 ?
 OH1 Pb1A O3 62.0(8) 1_545 1_545 ?
 O4 Pb1A O3 59.9(4) 3_565 1_545 ?
 O4 Pb1A O3 123.2(16) 4_564 1_545 ?
 O2 Pb1A O3 100(2) 2_545 1_545 ?
 O2 Pb1A O3 47.4(6) 1_545 1_545 ?
 O3 Pb1A O3 155(3) 4_464 1_545 ?
 O3 Pb1A O3 52.1(4) 3_465 1_545 ?
 O1 Pb1A O3 92.5(5) 3_465 1_545 ?
 O1 Pb1A O3 145.6(17) 4_464 1_545 ?
 Cu3 Pb1A O3 119.1(6) 3_465 1_545 ?
 Cu3 Pb1A O3 88.6(9) 3_565 1_545 ?
 OH1 Pb1A O3 98.9(14) 1_445 1_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 123(2) 2_445 1_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 61.2(7) 1_445 1_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 30.57(18) 3_465 1_545 ?
 Cu1 Pb1A O3 150.1(15) 4_464 1_545 ?
 O3 Pb1A O3 120.3(16) 2_545 1_545 ?
 OH1 Pb1A Cu2 108.1(17) 1_545 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu2 30.7(8) 3_565 3_465 ?
 O4 Pb1A Cu2 78.5(19) 4_564 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu2 174.0(15) 2_545 3_465 ?
 O2 Pb1A Cu2 117.1(2) 1_545 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu2 124(2) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu2 67.0(10) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu2 32.5(7) 3_465 3_465 ?
 O1 Pb1A Cu2 69.4(15) 4_464 3_465 ?
 Cu3 Pb1A Cu2 66.1(12) 3_465 3_465 ?
 Cu3 Pb1A Cu2 52.7(11) 3_565 3_465 ?
 OH1 Pb1A Cu2 115.7(11) 1_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 143.1(15) 2_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 99.1(6) 1_445 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 53.0(6) 3_465 3_465 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 119(2) 4_464 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu2 138.2(19) 2_545 3_465 ?
 O3 Pb1A Cu2 78.4(6) 1_545 3_465 ?
 OH1 Pb1A Cu2 108.1(17) 1_545 4_464 ?
 O4 Pb1A Cu2 78.5(19) 3_565 4_464 ?
 O4 Pb1A Cu2 30.7(8) 4_564 4_464 ?
 O2 Pb1A Cu2 117.1(2) 2_545 4_464 ?
 O2 Pb1A Cu2 174.0(15) 1_545 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu2 67.0(10) 4_464 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu2 124(2) 3_465 4_464 ?

O1 Pb1A Cu2 69.4(15) 3_465 4_464 ?
 O1 Pb1A Cu2 32.5(7) 4_464 4_464 ?
 Cu3 Pb1A Cu2 66.1(12) 3_465 4_464 ?
 Cu3 Pb1A Cu2 52.7(11) 3_565 4_464 ?
 OH1 Pb1A Cu2 115.7(11) 1_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 99.1(6) 2_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 143.1(15) 1_445 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 119(2) 3_465 4_464 ?
 Cu1 Pb1A Cu2 53.0(6) 4_464 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu2 78.4(6) 2_545 4_464 ?
 O3 Pb1A Cu2 138.2(19) 1_545 4_464 ?
 Cu2 Pb1A Cu2 66.1(14) 3_465 4_464 ?
 Pb2A Pb2 OH2 143(2) . . ?
 Pb2A Pb2 O2 111.2(17) . 3_565 ?
 OH2 Pb2 O2 99.3(4) . 3_565 ?
 Pb2A Pb2 O2 111.2(17) . 4_565 ?
 OH2 Pb2 O2 99.3(4) . 4_565 ?
 O2 Pb2 O2 67.3(4) 3_565 4_565 ?
 Pb2A Pb2 O5 105.9(4) . 4_565 ?
 OH2 Pb2 O5 70.4(2) . 4_565 ?
 O2 Pb2 O5 124.6(3) 3_565 4_565 ?
 O2 Pb2 O5 61.6(3) 4_565 4_565 ?
 Pb2A Pb2 O5 105.9(4) . 3_565 ?
 OH2 Pb2 O5 70.4(2) . 3_565 ?
 O2 Pb2 O5 61.6(3) 3_565 3_565 ?
 O2 Pb2 O5 124.6(3) 4_565 3_565 ?
 O5 Pb2 O5 140.7(4) 4_565 3_565 ?
 Pb2A Pb2 O6 51.5(12) . 3_465 ?
 OH2 Pb2 O6 140.3(2) . 3_465 ?
 O2 Pb2 O6 62.1(3) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2 O6 103.9(3) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 O6 149.3(3) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 O6 69.9(3) 3_565 3_465 ?
 Pb2A Pb2 O6 51.5(12) . 4_465 ?
 OH2 Pb2 O6 140.3(2) . 4_465 ?
 O2 Pb2 O6 103.9(3) 3_565 4_465 ?
 O2 Pb2 O6 62.1(3) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2 O6 69.9(3) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2 O6 149.3(3) 3_565 4_465 ?
 O6 Pb2 O6 79.4(4) 3_465 4_465 ?
 Pb2A Pb2 O1 82.0(18) . . ?
 OH2 Pb2 O1 65.1(3) . . ?
 O2 Pb2 O1 118.0(2) 3_565 . ?
 O2 Pb2 O1 163.7(4) 4_565 . ?
 O5 Pb2 O1 106.4(2) 4_565 . ?
 O5 Pb2 O1 56.6(2) 3_565 . ?
 O6 Pb2 O1 91.8(3) 3_465 . ?
 O6 Pb2 O1 126.6(3) 4_465 . ?
 Pb2A Pb2 O1 82.0(18) . 2_556 ?
 OH2 Pb2 O1 65.1(3) . 2_556 ?
 O2 Pb2 O1 163.7(4) 3_565 2_556 ?
 O2 Pb2 O1 118.0(2) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2 O1 56.6(2) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2 O1 106.4(2) 3_565 2_556 ?

O6 Pb2 O1 126.6(3) 3_465 2_556 ?
O6 Pb2 O1 91.8(3) 4_465 2_556 ?
O1 Pb2 O1 52.4(3) . 2_556 ?
Pb2A Pb2 OH2 12(2) . 1_455 ?
OH2 Pb2 OH2 131.2(6) . 1_455 ?
O2 Pb2 OH2 120.6(3) 3_565 1_455 ?
O2 Pb2 OH2 120.6(3) 4_565 1_455 ?
O5 Pb2 OH2 103.2(2) 4_565 1_455 ?
O5 Pb2 OH2 103.2(2) 3_565 1_455 ?
O6 Pb2 OH2 58.9(3) 3_465 1_455 ?
O6 Pb2 OH2 58.9(3) 4_465 1_455 ?
O1 Pb2 OH2 71.4(3) . 1_455 ?
O1 Pb2 OH2 71.4(3) 2_556 1_455 ?
Pb2A Pb2 Cu2 114.8(15) . . ?
OH2 Pb2 Cu2 42.12(15) . . ?
O2 Pb2 Cu2 91.0(2) 3_565 . ?
O2 Pb2 Cu2 133.7(3) 4_565 . ?
O5 Pb2 Cu2 108.9(2) 4_565 . ?
O5 Pb2 Cu2 35.19(18) 3_565 . ?
O6 Pb2 Cu2 100.3(2) 3_465 . ?
O6 Pb2 Cu2 162.5(2) 4_465 . ?
O1 Pb2 Cu2 36.12(17) . . ?
O1 Pb2 Cu2 74.20(18) 2_556 . ?
OH2 Pb2 Cu2 105.8(2) 1_455 . ?
Pb2A Pb2 Cu2 114.8(15) . 2_556 ?
OH2 Pb2 Cu2 42.12(15) . 2_556 ?
O2 Pb2 Cu2 133.7(3) 3_565 2_556 ?
O2 Pb2 Cu2 91.0(2) 4_565 2_556 ?
O5 Pb2 Cu2 35.20(18) 4_565 2_556 ?
O5 Pb2 Cu2 108.9(2) 3_565 2_556 ?
O6 Pb2 Cu2 162.5(2) 3_465 2_556 ?
O6 Pb2 Cu2 100.3(2) 4_465 2_556 ?
O1 Pb2 Cu2 74.20(18) . 2_556 ?
O1 Pb2 Cu2 36.12(17) 2_556 2_556 ?
OH2 Pb2 Cu2 105.8(2) 1_455 2_556 ?
Cu2 Pb2 Cu2 74.61(10) . 2_556 ?
Pb2A Pb2 Cu3 59(2) . . ?
OH2 Pb2 Cu3 84.5(3) . . ?
O2 Pb2 Cu3 145.91(19) 3_565 . ?
O2 Pb2 Cu3 145.91(19) 4_565 . ?
O5 Pb2 Cu3 88.71(18) 4_565 . ?
O5 Pb2 Cu3 88.71(18) 3_565 . ?
O6 Pb2 Cu3 93.5(2) 3_465 . ?
O6 Pb2 Cu3 93.5(2) 4_465 . ?
O1 Pb2 Cu3 34.03(16) . . ?
O1 Pb2 Cu3 34.03(16) 2_556 . ?
OH2 Pb2 Cu3 46.7(3) 1_455 . ?
Cu2 Pb2 Cu3 69.08(5) . . ?
Cu2 Pb2 Cu3 69.07(5) 2_556 . ?
Pb2A Pb2 Te 121.0(7) . 4_565 ?
OH2 Pb2 Te 76.3(2) . 4_565 ?
O2 Pb2 Te 92.5(2) 3_565 4_565 ?
O2 Pb2 Te 31.68(19) 4_565 4_565 ?
O5 Pb2 Te 32.35(18) 4_565 4_565 ?

O5 Pb2 Te 132.4(3) 3_565 4_565 ?
 O6 Pb2 Te 134.82(19) 3_465 4_565 ?
 O6 Pb2 Te 71.0(2) 4_465 4_565 ?
 O1 Pb2 Te 133.3(2) . 4_565 ?
 O1 Pb2 Te 88.42(16) 2_556 4_565 ?
 OH2 Pb2 Te 124.29(10) 1_455 4_565 ?
 Cu2 Pb2 Te 117.95(15) . 4_565 ?
 Cu2 Pb2 Te 59.39(6) 2_556 4_565 ?
 Cu3 Pb2 Te 121.06(4) . 4_565 ?
 Pb2A Pb2 Te 121.0(7) . 3_565 ?
 OH2 Pb2 Te 76.3(2) . 3_565 ?
 O2 Pb2 Te 31.68(19) 3_565 3_565 ?
 O2 Pb2 Te 92.5(2) 4_565 3_565 ?
 O5 Pb2 Te 132.4(3) 4_565 3_565 ?
 O5 Pb2 Te 32.35(18) 3_565 3_565 ?
 O6 Pb2 Te 71.0(2) 3_465 3_565 ?
 O6 Pb2 Te 134.8(2) 4_465 3_565 ?
 O1 Pb2 Te 88.42(16) . 3_565 ?
 O1 Pb2 Te 133.3(2) 2_556 3_565 ?
 OH2 Pb2 Te 124.29(10) 1_455 3_565 ?
 Cu2 Pb2 Te 59.39(6) . 3_565 ?
 Cu2 Pb2 Te 117.95(15) 2_556 3_565 ?
 Cu3 Pb2 Te 121.06(4) . 3_565 ?
 Te Pb2 Te 107.57(11) 4_565 3_565 ?
 Pb2A Pb2 Cu1 79.5(17) . 3_465 ?
 OH2 Pb2 Cu1 128.4(2) . 3_465 ?
 O2 Pb2 Cu1 31.7(2) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2 Cu1 78.27(19) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 Cu1 138.89(18) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 Cu1 69.75(17) 3_565 3_465 ?
 O6 Pb2 Cu1 32.46(17) 3_465 3_465 ?
 O6 Pb2 Cu1 84.4(2) 4_465 3_465 ?
 O1 Pb2 Cu1 114.70(17) . 3_465 ?
 O1 Pb2 Cu1 159.0(2) 2_556 3_465 ?
 OH2 Pb2 Cu1 89.1(2) 1_455 3_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu1 104.91(4) . 3_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu1 164.75(14) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2 Cu1 125.44(12) . 3_465 ?
 Te Pb2 Cu1 109.59(5) 4_565 3_465 ?
 Te Pb2 Cu1 52.65(3) 3_565 3_465 ?
 Pb2A Pb2 Cu1 79.5(17) . 4_465 ?
 OH2 Pb2 Cu1 128.4(2) . 4_465 ?
 O2 Pb2 Cu1 78.27(19) 3_565 4_465 ?
 O2 Pb2 Cu1 31.7(2) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2 Cu1 69.75(17) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2 Cu1 138.89(18) 3_565 4_465 ?
 O6 Pb2 Cu1 84.4(2) 3_465 4_465 ?
 O6 Pb2 Cu1 32.46(17) 4_465 4_465 ?
 O1 Pb2 Cu1 159.0(2) . 4_465 ?
 O1 Pb2 Cu1 114.70(17) 2_556 4_465 ?
 OH2 Pb2 Cu1 89.1(2) 1_455 4_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu1 164.75(14) . 4_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu1 104.91(4) 2_556 4_465 ?
 Cu3 Pb2 Cu1 125.44(12) . 4_465 ?

Te Pb2 Cu1 52.65(3) 4_565 4_465 ?
 Te Pb2 Cu1 109.59(5) 3_565 4_465 ?
 Cu1 Pb2 Cu1 71.43(7) 3_465 4_465 ?
 Pb2A Pb2 OH1 69(2) . 3_465 ?
 OH2 Pb2 OH1 147.7(4) . 3_465 ?
 O2 Pb2 OH1 55.1(3) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2 OH1 55.1(3) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 OH1 106.19(18) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 OH1 106.19(18) 3_565 3_465 ?
 O6 Pb2 OH1 50.0(2) 3_465 3_465 ?
 O6 Pb2 OH1 50.0(2) 4_465 3_465 ?
 O1 Pb2 OH1 141.2(3) . 3_465 ?
 O1 Pb2 OH1 141.2(3) 2_556 3_465 ?
 OH2 Pb2 OH1 81.1(3) 1_455 3_465 ?
 Cu2 Pb2 OH1 141.31(6) . 3_465 ?
 Cu2 Pb2 OH1 141.31(6) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2 OH1 127.8(3) . 3_465 ?
 Te Pb2 OH1 84.90(13) 4_565 3_465 ?
 Te Pb2 OH1 84.90(13) 3_565 3_465 ?
 Cu1 Pb2 OH1 36.44(5) 3_465 3_465 ?
 Cu1 Pb2 OH1 36.44(5) 4_465 3_465 ?
 Pb2A Pb2 Cu2 77.09(8) . 3_465 ?
 OH2 Pb2 Cu2 100.23(9) . 3_465 ?
 O2 Pb2 Cu2 62.73(18) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2 Cu2 128.51(19) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 Cu2 168.2(2) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2 Cu2 31.02(19) 3_565 3_465 ?
 O6 Pb2 Cu2 40.4(2) 3_465 3_465 ?
 O6 Pb2 Cu2 119.0(2) 4_465 3_465 ?
 O1 Pb2 Cu2 62.39(16) . 3_465 ?
 O1 Pb2 Cu2 113.45(15) 2_556 3_465 ?
 OH2 Pb2 Cu2 77.35(8) 1_455 3_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu2 60.13(3) . 3_465 ?
 Cu2 Pb2 Cu2 133.11(8) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2 Cu2 83.22(5) . 3_465 ?
 Te Pb2 Cu2 154.41(9) 4_565 3_465 ?
 Te Pb2 Cu2 47.87(3) 3_565 3_465 ?
 Cu1 Pb2 Cu2 52.53(4) 3_465 3_465 ?
 Cu1 Pb2 Cu2 121.98(10) 4_465 3_465 ?
 OH1 Pb2 Cu2 85.55(8) 3_465 3_465 ?
 Pb2 Pb2A O6 119(2) . 3_465 ?
 Pb2 Pb2A O6 119(2) . 4_465 ?
 O6 Pb2A O6 91.1(15) 3_465 4_465 ?
 Pb2 Pb2A OH2 166(2) . 1_455 ?
 O6 Pb2A OH2 69.7(17) 3_465 1_455 ?
 O6 Pb2A OH2 69.7(17) 4_465 1_455 ?
 Pb2 Pb2A O2 58(2) . 3_565 ?
 O6 Pb2A O2 63.0(5) 3_465 3_565 ?
 O6 Pb2A O2 105.6(7) 4_465 3_565 ?
 OH2 Pb2A O2 132.5(14) 1_455 3_565 ?
 Pb2 Pb2A O2 58(2) . 4_565 ?
 O6 Pb2A O2 105.6(7) 3_465 4_565 ?
 O6 Pb2A O2 63.0(5) 4_465 4_565 ?
 OH2 Pb2A O2 132.5(14) 1_455 4_565 ?

O2 Pb2A O2 60.9(12) 3_565 4_565 ?
 Pb2 Pb2A O5 63.6(12) . 4_565 ?
 O6 Pb2A O5 158.9(6) 3_465 4_565 ?
 O6 Pb2A O5 71.4(3) 4_465 4_565 ?
 OH2 Pb2A O5 112.7(13) 1_455 4_565 ?
 O2 Pb2A O5 110(2) 3_565 4_565 ?
 O2 Pb2A O5 56.4(9) 4_565 4_565 ?
 Pb2 Pb2A O5 63.6(12) . 3_565 ?
 O6 Pb2A O5 71.4(3) 3_465 3_565 ?
 O6 Pb2A O5 158.9(6) 4_465 3_565 ?
 OH2 Pb2A O5 112.7(13) 1_455 3_565 ?
 O2 Pb2A O5 56.4(9) 3_565 3_565 ?
 O2 Pb2A O5 110(2) 4_565 3_565 ?
 O5 Pb2A O5 123(2) 4_565 3_565 ?
 Pb2 Pb2A OH2 30.5(15) . . ?
 O6 Pb2A OH2 132.4(14) 3_465 . ?
 O6 Pb2A OH2 132.4(14) 4_465 . ?
 OH2 Pb2A OH2 135.3(10) 1_455 . ?
 O2 Pb2A OH2 84.1(19) 3_565 . ?
 O2 Pb2A OH2 84.1(19) 4_565 . ?
 O5 Pb2A OH2 61.7(11) 4_565 . ?
 O5 Pb2A OH2 61.7(11) 3_565 . ?
 Pb2 Pb2A O1 88.0(15) . . ?
 O6 Pb2A O1 98.7(9) 3_465 . ?
 O6 Pb2A O1 142(2) 4_465 . ?
 OH2 Pb2A O1 79.3(13) 1_455 . ?
 O2 Pb2A O1 111.6(11) 3_565 . ?
 O2 Pb2A O1 145(2) 4_565 . ?
 O5 Pb2A O1 102.3(7) 4_565 . ?
 O5 Pb2A O1 55.3(4) 3_565 . ?
 OH2 Pb2A O1 61.0(7) . . ?
 Pb2 Pb2A O1 88.0(15) . 2_556 ?
 O6 Pb2A O1 142(2) 3_465 2_556 ?
 O6 Pb2A O1 98.7(9) 4_465 2_556 ?
 OH2 Pb2A O1 79.3(13) 1_455 2_556 ?
 O2 Pb2A O1 145(2) 3_565 2_556 ?
 O2 Pb2A O1 111.6(11) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2A O1 55.3(4) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2A O1 102.3(7) 3_565 2_556 ?
 OH2 Pb2A O1 61.0(7) . 2_556 ?
 O1 Pb2A O1 53.0(4) . 2_556 ?
 Pb2 Pb2A Cu3 113.1(18) . . ?
 O6 Pb2A Cu3 105.9(19) 3_465 . ?
 O6 Pb2A Cu3 105.9(19) 4_465 . ?
 OH2 Pb2A Cu3 52.7(10) 1_455 . ?
 O2 Pb2A Cu3 146.7(5) 3_565 . ?
 O2 Pb2A Cu3 146.7(5) 4_565 . ?
 O5 Pb2A Cu3 90.4(4) 4_565 . ?
 O5 Pb2A Cu3 90.4(4) 3_565 . ?
 OH2 Pb2A Cu3 82.6(5) . . ?
 O1 Pb2A Cu3 36.0(4) . . ?
 O1 Pb2A Cu3 36.0(4) 2_556 . ?
 Pb2 Pb2A OH1 103(3) . 3_465 ?
 O6 Pb2A OH1 53.2(4) 3_465 3_465 ?

O6 Pb2A OH1 53.2(4) 4_465 3_465 ?
 OH2 Pb2A OH1 91.7(14) 1_455 3_465 ?
 O2 Pb2A OH1 56.3(4) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2A OH1 56.3(4) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A OH1 105.8(6) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A OH1 105.8(6) 3_565 3_465 ?
 OH2 Pb2A OH1 133(2) . 3_465 ?
 O1 Pb2A OH1 151.7(9) . 3_465 ?
 O1 Pb2A OH1 151.7(9) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2A OH1 144(2) . 3_465 ?
 Pb2 Pb2A Cu1 92(3) . 3_465 ?
 O6 Pb2A Cu1 32.2(4) 3_465 3_465 ?
 O6 Pb2A Cu1 90.0(6) 4_465 3_465 ?
 OH2 Pb2A Cu1 99.4(14) 1_455 3_465 ?
 O2 Pb2A Cu1 33.5(2) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2A Cu1 76.6(7) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A Cu1 133.0(15) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A Cu1 68.9(4) 3_565 3_465 ?
 OH2 Pb2A Cu1 116.0(18) . 3_465 ?
 O1 Pb2A Cu1 117.12(16) . 3_465 ?
 O1 Pb2A Cu1 170.1(3) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2A Cu1 136.6(14) . 3_465 ?
 OH1 Pb2A Cu1 37.57(14) 3_465 3_465 ?
 Pb2 Pb2A Cu1 92(3) . 4_465 ?
 O6 Pb2A Cu1 90.0(6) 3_465 4_465 ?
 O6 Pb2A Cu1 32.2(4) 4_465 4_465 ?
 OH2 Pb2A Cu1 99.4(14) 1_455 4_465 ?
 O2 Pb2A Cu1 76.6(7) 3_565 4_465 ?
 O2 Pb2A Cu1 33.5(2) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2A Cu1 68.9(4) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2A Cu1 133.0(15) 3_565 4_465 ?
 OH2 Pb2A Cu1 116.0(18) . 4_465 ?
 O1 Pb2A Cu1 170.1(3) . 4_465 ?
 O1 Pb2A Cu1 117.13(16) 2_556 4_465 ?
 Cu3 Pb2A Cu1 136.6(14) . 4_465 ?
 OH1 Pb2A Cu1 37.57(14) 3_465 4_465 ?
 Cu1 Pb2A Cu1 72.8(3) 3_465 4_465 ?
 Pb2 Pb2A Cu2 57.5(12) . . ?
 O6 Pb2A Cu2 100.1(3) 3_465 . ?
 O6 Pb2A Cu2 168.4(7) 4_465 . ?
 OH2 Pb2A Cu2 111.6(10) 1_455 . ?
 O2 Pb2A Cu2 82.1(12) 3_565 . ?
 O2 Pb2A Cu2 116(2) 4_565 . ?
 O5 Pb2A Cu2 98.1(14) 4_565 . ?
 O5 Pb2A Cu2 32.2(4) 3_565 . ?
 OH2 Pb2A Cu2 38.5(5) . . ?
 O1 Pb2A Cu2 33.8(4) . . ?
 O1 Pb2A Cu2 70.8(5) 2_556 . ?
 Cu3 Pb2A Cu2 68.5(3) . . ?
 OH1 Pb2A Cu2 136.8(11) 3_465 . ?
 Cu1 Pb2A Cu2 100.9(7) 3_465 . ?
 Cu1 Pb2A Cu2 149(2) 4_465 . ?
 Pb2 Pb2A Cu2 57.5(12) . 2_556 ?
 O6 Pb2A Cu2 168.4(7) 3_465 2_556 ?

O6 Pb2A Cu2 100.1(3) 4_465 2_556 ?
 OH2 Pb2A Cu2 111.6(10) 1_455 2_556 ?
 O2 Pb2A Cu2 116(2) 3_565 2_556 ?
 O2 Pb2A Cu2 82.1(12) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2A Cu2 32.2(4) 4_565 2_556 ?
 O5 Pb2A Cu2 98.1(14) 3_565 2_556 ?
 OH2 Pb2A Cu2 38.5(5) . 2_556 ?
 O1 Pb2A Cu2 70.8(5) . 2_556 ?
 O1 Pb2A Cu2 33.8(4) 2_556 2_556 ?
 Cu3 Pb2A Cu2 68.5(3) . 2_556 ?
 OH1 Pb2A Cu2 136.8(11) 3_465 2_556 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 149(2) 3_465 2_556 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 100.9(7) 4_465 2_556 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 68.5(7) . 2_556 ?
 Pb2 Pb2A Cu2 94.8(11) . 3_465 ?
 O6 Pb2A Cu2 41.3(2) 3_465 3_465 ?
 O6 Pb2A Cu2 132.2(16) 4_465 3_465 ?
 OH2 Pb2A Cu2 85.3(11) 1_455 3_465 ?
 O2 Pb2A Cu2 62.6(3) 3_565 3_465 ?
 O2 Pb2A Cu2 123.4(13) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A Cu2 156(2) 4_565 3_465 ?
 O5 Pb2A Cu2 33.1(2) 3_565 3_465 ?
 OH2 Pb2A Cu2 94.1(9) . 3_465 ?
 O1 Pb2A Cu2 63.7(2) . 3_465 ?
 O1 Pb2A Cu2 116.5(5) 2_556 3_465 ?
 Cu3 Pb2A Cu2 88.0(7) . 3_465 ?
 OH1 Pb2A Cu2 89.1(3) 3_465 3_465 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 53.65(9) 3_465 3_465 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 126.1(4) 4_465 3_465 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 58.9(2) . 3_465 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 127.2(9) 2_556 3_465 ?
 Pb2 Pb2A Cu2 94.8(11) . 4_465 ?
 O6 Pb2A Cu2 132.2(16) 3_465 4_465 ?
 O6 Pb2A Cu2 41.3(2) 4_465 4_465 ?
 OH2 Pb2A Cu2 85.3(11) 1_455 4_465 ?
 O2 Pb2A Cu2 123.4(13) 3_565 4_465 ?
 O2 Pb2A Cu2 62.6(3) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2A Cu2 33.1(2) 4_565 4_465 ?
 O5 Pb2A Cu2 156(2) 3_565 4_465 ?
 OH2 Pb2A Cu2 94.1(9) . 4_465 ?
 O1 Pb2A Cu2 116.5(5) . 4_465 ?
 O1 Pb2A Cu2 63.7(2) 2_556 4_465 ?
 Cu3 Pb2A Cu2 88.0(7) . 4_465 ?
 OH1 Pb2A Cu2 89.1(3) 3_465 4_465 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 126.1(4) 3_465 4_465 ?
 Cu1 Pb2A Cu2 53.65(9) 4_465 4_465 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 127.2(9) . 4_465 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 58.9(2) 2_556 4_465 ?
 Cu2 Pb2A Cu2 170(2) 3_465 4_465 ?
 Pb2 Pb2A Te 52.2(13) . 4_565 ?
 O6 Pb2A Te 133.9(10) 3_465 4_565 ?
 O6 Pb2A Te 68.4(7) 4_465 4_565 ?
 OH2 Pb2A Te 131.3(9) 1_455 4_565 ?
 O2 Pb2A Te 82.7(15) 3_565 4_565 ?

O2 Pb2A Te 28.3(5) 4_565 4_565 ?
 O5 Pb2A Te 28.8(6) 4_565 4_565 ?
 O5 Pb2A Te 115(2) 3_565 4_565 ?
 OH2 Pb2A Te 66.9(12) . 4_565 ?
 O1 Pb2A Te 123.3(14) . 4_565 ?
 O1 Pb2A Te 83.4(8) 2_556 4_565 ?
 Cu3 Pb2A Te 119.1(4) . 4_565 ?
 OH1 Pb2A Te 82.7(7) 3_465 4_565 ?
 Cu1 Pb2A Te 104.3(11) 3_465 4_565 ?
 Cu1 Pb2A Te 50.6(5) 4_465 4_565 ?
 Cu2 Pb2A Te 104.8(16) . 4_565 ?
 Cu2 Pb2A Te 54.5(7) 2_556 4_565 ?
 Cu2 Pb2A Te 142.4(19) 3_465 4_565 ?
 Cu2 Pb2A Te 46.5(3) 4_465 4_565 ?
 O6 Te O1 88.3(4) . . ?
 O6 Te O2 95.1(4) . . ?
 O1 Te O2 176.6(4) . . ?
 O6 Te O5 96.7(4) . . ?
 O1 Te O5 92.2(4) . . ?
 O2 Te O5 87.6(4) . . ?
 O6 Te O3 84.4(4) . . ?
 O1 Te O3 90.0(4) . . ?
 O2 Te O3 90.3(4) . . ?
 O5 Te O3 177.7(4) . . ?
 O6 Te O4 171.9(4) . . ?
 O1 Te O4 83.6(3) . . ?
 O2 Te O4 93.0(4) . . ?
 O5 Te O4 83.9(4) . . ?
 O3 Te O4 95.4(4) . . ?
 O6 Te Cu3 128.6(3) . . ?
 O1 Te Cu3 40.6(3) . . ?
 O2 Te Cu3 136.0(3) . . ?
 O5 Te Cu3 91.9(3) . . ?
 O3 Te Cu3 89.1(3) . . ?
 O4 Te Cu3 43.4(3) . . ?
 O6 Te Cu1 41.8(2) . . ?
 O1 Te Cu1 88.8(3) . . ?
 O2 Te Cu1 93.7(3) . . ?
 O5 Te Cu1 138.5(3) . . ?
 O3 Te Cu1 42.5(3) . . ?
 O4 Te Cu1 137.3(2) . . ?
 Cu3 Te Cu1 114.33(7) . . ?
 O6 Te Cu2 139.3(2) . 1_455 ?
 O1 Te Cu2 90.5(3) . 1_455 ?
 O2 Te Cu2 87.0(3) . 1_455 ?
 O5 Te Cu2 42.7(3) . 1_455 ?
 O3 Te Cu2 136.4(3) . 1_455 ?
 O4 Te Cu2 41.5(2) . 1_455 ?
 Cu3 Te Cu2 64.43(6) . 1_455 ?
 Cu1 Te Cu2 178.63(5) . 1_455 ?
 O6 Te Cu2 51.1(3) . . ?
 O1 Te Cu2 37.6(3) . . ?
 O2 Te Cu2 145.8(3) . . ?
 O5 Te Cu2 91.3(3) . . ?

O3 Te Cu2 91.0(3) . . ?
 O4 Te Cu2 120.9(2) . . ?
 Cu3 Te Cu2 78.20(7) . . ?
 Cu1 Te Cu2 65.39(4) . . ?
 Cu2 Te Cu2 114.53(5) 1_455 . ?
 O6 Te Cu1 130.7(3) . 1_455 ?
 O1 Te Cu1 140.7(3) . 1_455 ?
 O2 Te Cu1 35.9(3) . 1_455 ?
 O5 Te Cu1 88.5(3) . 1_455 ?
 O3 Te Cu1 89.3(3) . 1_455 ?
 O4 Te Cu1 57.3(2) . 1_455 ?
 Cu3 Te Cu1 100.08(7) . 1_455 ?
 Cu1 Te Cu1 115.79(5) . 1_455 ?
 Cu2 Te Cu1 64.26(4) 1_455 1_455 ?
 Cu2 Te Cu1 178.26(5) . 1_455 ?
 O6 Te Cu2 71.9(2) . 3_465 ?
 O1 Te Cu2 79.3(2) . 3_465 ?
 O2 Te Cu2 101.9(3) . 3_465 ?
 O5 Te Cu2 27.8(3) . 3_465 ?
 O3 Te Cu2 154.0(3) . 3_465 ?
 O4 Te Cu2 106.7(2) . 3_465 ?
 Cu3 Te Cu2 97.46(6) . 3_465 ?
 Cu1 Te Cu2 113.04(5) . 3_465 ?
 Cu2 Te Cu2 67.92(3) 1_455 3_465 ?
 Cu2 Te Cu2 66.15(4) . 3_465 ?
 Cu1 Te Cu2 113.99(4) 1_455 3_465 ?
 O3 Cu1 O6 174.5(4) 3_575 . ?
 O3 Cu1 O3 99.23(19) 3_575 . ?
 O6 Cu1 O3 82.0(4) . . ?
 O3 Cu1 O2 87.0(4) 3_575 1_655 ?
 O6 Cu1 O2 90.5(4) . 1_655 ?
 O3 Cu1 O2 164.0(3) . 1_655 ?
 O3 Cu1 OH1 100.7(4) 3_575 . ?
 O6 Cu1 OH1 84.2(5) . . ?
 O3 Cu1 OH1 102.3(4) . . ?
 O2 Cu1 OH1 90.9(4) 1_655 . ?
 O3 Cu1 O4 89.1(3) 3_575 1_655 ?
 O6 Cu1 O4 85.5(3) . 1_655 ?
 O3 Cu1 O4 93.3(3) . 1_655 ?
 O2 Cu1 O4 72.0(3) 1_655 1_655 ?
 OH1 Cu1 O4 159.9(4) . 1_655 ?
 O5 Cu2 O4 178.3(4) 3_565 1_655 ?
 O5 Cu2 O1 87.6(4) 3_565 . ?
 O4 Cu2 O1 94.2(4) 1_655 . ?
 O5 Cu2 O5 98.5(2) 3_565 1_655 ?
 O4 Cu2 O5 79.9(4) 1_655 1_655 ?
 O1 Cu2 O5 160.1(3) . 1_655 ?
 O5 Cu2 OH2 88.4(5) 3_565 . ?
 O4 Cu2 OH2 91.7(4) 1_655 . ?
 O1 Cu2 OH2 89.4(4) . . ?
 O5 Cu2 OH2 109.7(4) 1_655 . ?
 O5 Cu2 O6 89.2(4) 3_565 . ?
 O4 Cu2 O6 91.3(3) 1_655 . ?
 O1 Cu2 O6 72.4(3) . . ?

O5 Cu2 O6 88.6(3) 1_655 . ?
 OH2 Cu2 O6 161.7(4) . . ?
 O1 Cu3 O1 90.1(5) 2_556 . ?
 O1 Cu3 O4 169.9(4) 2_556 . ?
 O1 Cu3 O4 82.0(4) . . ?
 O1 Cu3 O4 82.0(4) 2_556 2_556 ?
 O1 Cu3 O4 169.9(4) . 2_556 ?
 O4 Cu3 O4 105.0(5) . 2_556 ?
 O1 Cu3 OH2 107.1(3) 2_556 1_455 ?
 O1 Cu3 OH2 107.1(3) . 1_455 ?
 O4 Cu3 OH2 81.4(3) . 1_455 ?
 O4 Cu3 OH2 81.4(3) 2_556 1_455 ?
 O1 Cu3 Te 129.5(3) 2_556 . ?
 O1 Cu3 Te 40.6(3) . . ?
 O4 Cu3 Te 41.8(3) . . ?
 O4 Cu3 Te 144.9(3) 2_556 . ?
 OH2 Cu3 Te 99.66(5) 1_455 . ?
 Te O1 Cu3 98.8(4) . . ?
 Te O1 Cu2 106.9(4) . . ?
 Cu3 O1 Cu2 154.3(5) . . ?
 Te O1 Pb1A 105.5(11) . 3_565 ?
 Cu3 O1 Pb1A 78.9(8) . 3_565 ?
 Cu2 O1 Pb1A 94.2(11) . 3_565 ?
 Te O1 Pb2A 126.4(10) . . ?
 Cu3 O1 Pb2A 75.0(11) . . ?
 Cu2 O1 Pb2A 89.2(13) . . ?
 Pb1A O1 Pb2A 124.3(9) 3_565 . ?
 Te O1 Pb2 133.0(4) . . ?
 Cu3 O1 Pb2 82.3(3) . . ?
 Cu2 O1 Pb2 80.0(3) . . ?
 Pb1A O1 Pb2 120.5(10) 3_565 . ?
 Pb2A O1 Pb2 10.1(13) . . ?
 Te O1 Pb1 101.3(3) . 3_565 ?
 Cu3 O1 Pb1 78.5(3) . 3_565 ?
 Cu2 O1 Pb1 96.5(3) . 3_565 ?
 Pb1A O1 Pb1 4.3(12) 3_565 3_565 ?
 Pb2A O1 Pb1 127.9(4) . 3_565 ?
 Pb2 O1 Pb1 124.5(3) . 3_565 ?
 Te O1 Cu1 57.6(2) . . ?
 Cu3 O1 Cu1 129.2(3) . . ?
 Cu2 O1 Cu1 68.2(2) . . ?
 Pb1A O1 Cu1 67.9(5) 3_565 . ?
 Pb2A O1 Cu1 155.9(11) . . ?
 Pb2 O1 Cu1 147.9(3) . . ?
 Pb1 O1 Cu1 65.60(15) 3_565 . ?
 Te O1 Cu2 57.0(2) . 1_455 ?
 Cu3 O1 Cu2 61.7(3) . 1_455 ?
 Cu2 O1 Cu2 134.1(3) . 1_455 ?
 Pb1A O1 Cu2 130.5(12) 3_565 1_455 ?
 Pb2A O1 Cu2 74.9(13) . 1_455 ?
 Pb2 O1 Cu2 84.4(2) . 1_455 ?
 Pb1 O1 Cu2 127.4(2) 3_565 1_455 ?
 Cu1 O1 Cu2 114.5(2) . 1_455 ?
 Te O1 Cu2 69.2(2) . 3_465 ?

Cu3 O1 Cu2 116.5(4) . 3_465 ?
 Cu2 O1 Cu2 73.7(2) . 3_465 ?
 Pb1A O1 Cu2 164.0(6) 3_565 3_465 ?
 Pb2A O1 Cu2 67.2(2) . 3_465 ?
 Pb2 O1 Cu2 68.63(15) . 3_465 ?
 Pb1 O1 Cu2 162.8(3) 3_565 3_465 ?
 Cu1 O1 Cu2 97.3(2) . 3_465 ?
 Cu2 O1 Cu2 60.36(15) 1_455 3_465 ?
 Te O1 Cu2 168.1(3) . 2_556 ?
 Cu3 O1 Cu2 74.0(2) . 2_556 ?
 Cu2 O1 Cu2 80.7(3) . 2_556 ?
 Pb1A O1 Cu2 64.2(10) 3_565 2_556 ?
 Pb2A O1 Cu2 61.6(7) . 2_556 ?
 Pb2 O1 Cu2 56.39(14) . 2_556 ?
 Pb1 O1 Cu2 68.33(16) 3_565 2_556 ?
 Cu1 O1 Cu2 119.5(3) . 2_556 ?
 Cu2 O1 Cu2 124.2(2) 1_455 2_556 ?
 Cu2 O1 Cu2 122.3(2) 3_465 2_556 ?
 Te O1 Cu3 133.2(3) . 1_655 ?
 Cu3 O1 Cu3 112.7(3) . 1_655 ?
 Cu2 O1 Cu3 47.8(2) . 1_655 ?
 Pb1A O1 Cu3 52.1(12) 3_565 1_655 ?
 Pb2A O1 Cu3 95.6(13) . 1_655 ?
 Pb2 O1 Cu3 86.4(2) . 1_655 ?
 Pb1 O1 Cu3 55.72(15) 3_565 1_655 ?
 Cu1 O1 Cu3 75.70(18) . 1_655 ?
 Cu2 O1 Cu3 169.8(2) 1_455 1_655 ?
 Cu2 O1 Cu3 119.8(2) 3_465 1_655 ?
 Cu2 O1 Cu3 46.11(11) 2_556 1_655 ?
 Te O2 Cu1 109.3(4) . 1_455 ?
 Te O2 Pb1 126.2(4) . 1_565 ?
 Cu1 O2 Pb1 97.7(4) 1_455 1_565 ?
 Te O2 Pb2 104.0(4) . 3_465 ?
 Cu1 O2 Pb2 105.6(4) 1_455 3_465 ?
 Pb1 O2 Pb2 112.4(3) 1_565 3_465 ?
 Te O2 Pb2A 108.2(5) . 3_465 ?
 Cu1 O2 Pb2A 95.3(13) 1_455 3_465 ?
 Pb1 O2 Pb2A 114.7(5) 1_565 3_465 ?
 Pb2 O2 Pb2A 10.3(11) 3_465 3_465 ?
 Te O2 Pb1A 125.0(9) . 1_565 ?
 Cu1 O2 Pb1A 94.1(9) 1_455 1_565 ?
 Pb1 O2 Pb1A 4.8(8) 1_565 1_565 ?
 Pb2 O2 Pb1A 116.7(8) 3_465 1_565 ?
 Pb2A O2 Pb1A 118.5(9) 3_465 1_565 ?
 Te O2 Cu2 59.3(2) . 1_455 ?
 Cu1 O2 Cu2 68.0(2) 1_455 1_455 ?
 Pb1 O2 Cu2 165.3(4) 1_565 1_455 ?
 Pb2 O2 Cu2 76.3(2) 3_465 1_455 ?
 Pb2A O2 Cu2 71.7(7) 3_465 1_455 ?
 Pb1A O2 Cu2 160.9(9) 1_565 1_455 ?
 Te O2 Cu1 71.6(2) . 3_475 ?
 Cu1 O2 Cu1 74.3(3) 1_455 3_475 ?
 Pb1 O2 Cu1 72.4(2) 1_565 3_475 ?
 Pb2 O2 Cu1 175.1(3) 3_465 3_475 ?

Pb2A O2 Cu1 168.5(12) 3_465 3_475 ?
 Pb1A O2 Cu1 68.1(8) 1_565 3_475 ?
 Cu2 O2 Cu1 99.3(2) 1_455 3_475 ?
 Te O2 Cu1 54.0(2) . . ?
 Cu1 O2 Cu1 133.9(4) 1_455 . ?
 Pb1 O2 Cu1 73.5(2) 1_565 . ?
 Pb2 O2 Cu1 119.7(3) 3_465 . ?
 Pb2A O2 Cu1 129.9(12) 3_465 . ?
 Pb1A O2 Cu1 73.7(9) 1_565 . ?
 Cu2 O2 Cu1 113.4(2) 1_455 . ?
 Cu1 O2 Cu1 59.81(14) 3_475 . ?
 Te O2 Cu1 164.7(4) . 2_455 ?
 Cu1 O2 Cu1 83.1(3) 1_455 2_455 ?
 Pb1 O2 Cu1 58.18(16) 1_565 2_455 ?
 Pb2 O2 Cu1 62.93(17) 3_465 2_455 ?
 Pb2A O2 Cu1 60.5(3) 3_465 2_455 ?
 Pb1A O2 Cu1 60.7(8) 1_565 2_455 ?
 Cu2 O2 Cu1 120.8(2) 1_455 2_455 ?
 Cu1 O2 Cu1 121.7(2) 3_475 2_455 ?
 Cu1 O2 Cu1 123.5(2) . 2_455 ?
 Cu1 O3 Te 126.3(5) 3_475 . ?
 Cu1 O3 Cu1 130.8(4) 3_475 . ?
 Te O3 Cu1 96.1(4) . . ?
 Cu1 O3 Pb1A 94.2(16) 3_475 3_565 ?
 Te O3 Pb1A 108.8(15) . 3_565 ?
 Cu1 O3 Pb1A 94.1(10) . 3_565 ?
 Cu1 O3 Pb1 87.4(3) 3_475 3_565 ?
 Te O3 Pb1 116.3(4) . 3_565 ?
 Cu1 O3 Pb1 95.5(4) . 3_565 ?
 Pb1A O3 Pb1 7.9(15) 3_565 3_565 ?
 Cu1 O3 Cu3 100.5(4) 3_475 . ?
 Te O3 Cu3 56.9(2) . . ?
 Cu1 O3 Cu3 125.4(3) . . ?
 Pb1A O3 Cu3 60.3(11) 3_565 . ?
 Pb1 O3 Cu3 65.7(2) 3_565 . ?
 Cu1 O3 Pb1 78.0(3) 3_475 1_565 ?
 Te O3 Pb1 87.9(3) . 1_565 ?
 Cu1 O3 Pb1 80.2(3) . 1_565 ?
 Pb1A O3 Pb1 163.0(13) 3_565 1_565 ?
 Pb1 O3 Pb1 155.8(3) 3_565 1_565 ?
 Cu3 O3 Pb1 135.6(3) . 1_565 ?
 Cu1 O3 Pb1A 73.0(9) 3_475 1_565 ?
 Te O3 Pb1A 93.6(13) . 1_565 ?
 Cu1 O3 Pb1A 81.4(7) . 1_565 ?
 Pb1A O3 Pb1A 157.6(7) 3_565 1_565 ?
 Pb1 O3 Pb1A 150.1(12) 3_565 1_565 ?
 Cu3 O3 Pb1A 139.0(10) . 1_565 ?
 Pb1 O3 Pb1A 6.0(11) 1_565 1_565 ?
 Cu1 O3 Cu1 70.2(3) 3_475 1_455 ?
 Te O3 Cu1 59.2(2) . 1_455 ?
 Cu1 O3 Cu1 128.0(4) . 1_455 ?
 Pb1A O3 Cu1 135.5(8) 3_565 1_455 ?
 Pb1 O3 Cu1 135.9(3) 3_565 1_455 ?
 Cu3 O3 Cu1 81.2(2) . 1_455 ?

Pb1 O3 Cu1 56.13(14) 1_565 1_455 ?
 Pb1A O3 Cu1 58.3(9) 1_565 1_455 ?
 Cu1 O3 Cu2 159.9(4) 3_475 . ?
 Te O3 Cu2 57.8(2) . . ?
 Cu1 O3 Cu2 61.5(2) . . ?
 Pb1A O3 Cu2 67.3(16) 3_565 . ?
 Pb1 O3 Cu2 74.6(2) 3_565 . ?
 Cu3 O3 Cu2 64.15(14) . . ?
 Pb1 O3 Cu2 122.0(2) 1_565 . ?
 Pb1A O3 Cu2 127.0(9) 1_565 . ?
 Cu1 O3 Cu2 117.0(2) 1_455 . ?
 Te O4 Cu2 98.4(4) . 1_455 ?
 Te O4 Cu3 94.8(4) . . ?
 Cu2 O4 Cu3 103.4(4) 1_455 . ?
 Te O4 Pb1A 152.7(14) . 3_465 ?
 Cu2 O4 Pb1A 107.0(13) 1_455 3_465 ?
 Cu3 O4 Pb1A 89.1(9) . 3_465 ?
 Te O4 Cu1 85.2(3) . 1_455 ?
 Cu2 O4 Cu1 87.7(3) 1_455 1_455 ?
 Cu3 O4 Cu1 168.7(4) . 1_455 ?
 Pb1A O4 Cu1 85.9(10) 3_465 1_455 ?
 Te O4 Pb1 146.2(4) . 3_465 ?
 Cu2 O4 Pb1 112.4(4) 1_455 3_465 ?
 Cu3 O4 Pb1 91.5(3) . 3_465 ?
 Pb1A O4 Pb1 6.6(13) 3_465 3_465 ?
 Cu1 O4 Pb1 82.5(2) 1_455 3_465 ?
 Te O4 Cu1 73.7(2) . 3_475 ?
 Cu2 O4 Cu1 156.3(4) 1_455 3_475 ?
 Cu3 O4 Cu1 99.6(3) . 3_475 ?
 Pb1A O4 Cu1 79.0(14) 3_465 3_475 ?
 Cu1 O4 Cu1 69.55(18) 1_455 3_475 ?
 Pb1 O4 Cu1 72.48(19) 3_465 3_475 ?
 Te O4 Cu2 136.0(3) . 2_456 ?
 Cu2 O4 Cu2 74.8(2) 1_455 2_456 ?
 Cu3 O4 Cu2 47.7(2) . 2_456 ?
 Pb1A O4 Cu2 62.8(13) 3_465 2_456 ?
 Cu1 O4 Cu2 136.4(3) 1_455 2_456 ?
 Pb1 O4 Cu2 68.69(19) 3_465 2_456 ?
 Cu1 O4 Cu2 126.5(2) 3_475 2_456 ?
 Te O5 Cu2 124.6(5) . 3_465 ?
 Te O5 Cu2 97.4(4) . 1_455 ?
 Cu2 O5 Cu2 129.5(4) 3_465 1_455 ?
 Te O5 Pb2 100.4(4) . 3_465 ?
 Cu2 O5 Pb2 92.9(4) 3_465 3_465 ?
 Cu2 O5 Pb2 106.9(4) 1_455 3_465 ?
 Te O5 Pb2A 106.0(10) . 3_465 ?
 Cu2 O5 Pb2A 96.5(5) 3_465 3_465 ?
 Cu2 O5 Pb2A 97.2(12) 1_455 3_465 ?
 Pb2 O5 Pb2A 10.4(12) 3_465 3_465 ?
 Te O5 Cu3 55.1(2) . . ?
 Cu2 O5 Cu3 118.1(4) 3_465 . ?
 Cu2 O5 Cu3 61.7(2) 1_455 . ?
 Pb2 O5 Cu3 147.5(3) 3_465 . ?
 Pb2A O5 Cu3 145.3(5) 3_465 . ?

Te O5 Cu1 59.9(2) . 1_455 ?
 Cu2 O5 Cu1 160.5(4) 3_465 1_455 ?
 Cu2 O5 Cu1 62.6(2) 1_455 1_455 ?
 Pb2 O5 Cu1 67.73(19) 3_465 1_455 ?
 Pb2A O5 Cu1 64.9(3) 3_465 1_455 ?
 Cu3 O5 Cu1 80.61(17) . 1_455 ?
 Te O5 Cu2 57.6(2) . . ?
 Cu2 O5 Cu2 70.8(3) 3_465 . ?
 Cu2 O5 Cu2 124.1(4) 1_455 . ?
 Pb2 O5 Cu2 125.1(3) 3_465 . ?
 Pb2A O5 Cu2 135.6(14) 3_465 . ?
 Cu3 O5 Cu2 63.41(17) . . ?
 Cu1 O5 Cu2 117.5(2) 1_455 . ?
 Te O5 Pb2A 94.7(5) . . ?
 Cu2 O5 Pb2A 70.8(7) 3_465 . ?
 Cu2 O5 Pb2A 79.9(10) 1_455 . ?
 Pb2 O5 Pb2A 162.4(5) 3_465 . ?
 Pb2A O5 Pb2A 159.3(11) 3_465 . ?
 Cu3 O5 Pb2A 50.1(4) . . ?
 Cu1 O5 Pb2A 128.7(7) 1_455 . ?
 Cu2 O5 Pb2A 57.0(9) . . ?
 Te O5 Pb2 92.2(3) . . ?
 Cu2 O5 Pb2 67.0(3) 3_465 . ?
 Cu2 O5 Pb2 86.6(3) 1_455 . ?
 Pb2 O5 Pb2 160.0(3) 3_465 . ?
 Pb2A O5 Pb2 160.7(6) 3_465 . ?
 Cu3 O5 Pb2 52.10(14) . . ?
 Cu1 O5 Pb2 132.3(2) 1_455 . ?
 Cu2 O5 Pb2 50.63(14) . . ?
 Pb2A O5 Pb2 6.9(9) . . ?
 Te O6 Cu1 97.6(4) . . ?
 Te O6 Cu2 91.7(4) . . ?
 Cu1 O6 Cu2 95.4(4) . . ?
 Te O6 Pb2A 156.4(16) . 3_565 ?
 Cu1 O6 Pb2A 104.1(14) . 3_565 ?
 Cu2 O6 Pb2A 95.5(7) . 3_565 ?
 Te O6 Pb2 165.5(4) . 3_565 ?
 Cu1 O6 Pb2 96.3(4) . 3_565 ?
 Cu2 O6 Pb2 90.8(3) . 3_565 ?
 Pb2A O6 Pb2 9.5(14) 3_565 3_565 ?
 Te O6 OH1 105.3(5) . . ?
 Cu1 O6 OH1 52.7(3) . . ?
 Cu2 O6 OH1 145.0(5) . . ?
 Pb2A O6 OH1 81.1(6) 3_565 . ?
 Pb2 O6 OH1 80.3(3) 3_565 . ?
 Te O6 Cu2 75.5(3) . 3_465 ?
 Cu1 O6 Cu2 167.4(4) . 3_465 ?
 Cu2 O6 Cu2 74.6(2) . 3_465 ?
 Pb2A O6 Cu2 84.8(12) 3_565 3_465 ?
 Pb2 O6 Cu2 91.5(2) 3_565 3_465 ?
 OH1 O6 Cu2 138.8(4) . 3_465 ?
 Te O6 Pb2 67.1(3) . 3_465 ?
 Cu1 O6 Pb2 132.0(4) . 3_465 ?
 Cu2 O6 Pb2 128.6(3) . 3_465 ?

Pb2A O6 Pb2 91.1(14) 3_565 3_465 ?
 Pb2 O6 Pb2 100.5(2) 3_565 3_465 ?
 OH1 O6 Pb2 86.4(4) . 3_465 ?
 Cu2 O6 Pb2 55.33(14) 3_465 3_465 ?
 Te O6 Pb1 74.1(3) . 1_565 ?
 Cu1 O6 Pb1 67.3(3) . 1_565 ?
 Cu2 O6 Pb1 155.3(3) . 1_565 ?
 Pb2A O6 Pb1 105.6(4) 3_565 1_565 ?
 Pb2 O6 Pb1 108.0(3) 3_565 1_565 ?
 OH1 O6 Pb1 32.8(3) . 1_565 ?
 Cu2 O6 Pb1 119.4(3) 3_465 1_565 ?
 Pb2 O6 Pb1 64.78(17) 3_465 1_565 ?
 Te O6 OH2 82.9(3) . . ?
 Cu1 O6 OH2 96.5(4) . . ?
 Cu2 O6 OH2 8.76(18) . . ?
 Pb2A O6 OH2 103.6(6) 3_565 . ?
 Pb2 O6 OH2 99.3(3) 3_565 . ?
 OH1 O6 OH2 148.6(4) . . ?
 Cu2 O6 OH2 72.4(2) 3_465 . ?
 Pb2 O6 OH2 124.1(3) 3_465 . ?
 Pb1 O6 OH2 149.3(3) 1_565 . ?
 Pb1 OH1 Cu1 111.6(3) 1_565 . ?
 Pb1 OH1 Cu1 111.6(3) 1_565 2 ?
 Cu1 OH1 Cu1 136.0(6) . 2 ?
 Pb1 OH1 Pb1A 8.9(18) 1_565 1_565 ?
 Cu1 OH1 Pb1A 112.0(3) . 1_565 ?
 Cu1 OH1 Pb1A 112.0(3) 2 1_565 ?
 Pb1 OH1 O6 104.1(5) 1_565 . ?
 Cu1 OH1 O6 43.0(3) . . ?
 Cu1 OH1 O6 116.7(5) 2 . ?
 Pb1A OH1 O6 110.8(14) 1_565 . ?
 Pb1 OH1 Pb1 142.7(6) 1_565 1_665 ?
 Cu1 OH1 Pb1 75.5(3) . 1_665 ?
 Cu1 OH1 Pb1 75.5(3) 2 1_665 ?
 Pb1A OH1 Pb1 134(2) 1_565 1_665 ?
 O6 OH1 Pb1 104.4(4) . 1_665 ?
 Pb1 OH1 Cu3 77.2(4) 1_565 3_575 ?
 Cu1 OH1 Cu3 98.6(4) . 3_575 ?
 Cu1 OH1 Cu3 98.6(4) 2 3_575 ?
 Pb1A OH1 Cu3 68.4(19) 1_565 3_575 ?
 O6 OH1 Cu3 140.1(2) . 3_575 ?
 Pb1 OH1 Cu3 65.5(3) 1_665 3_575 ?
 Pb1 OH1 Pb1A 136.1(14) 1_565 1_665 ?
 Cu1 OH1 Pb1A 77.5(5) . 1_665 ?
 Cu1 OH1 Pb1A 77.5(5) 2 1_665 ?
 Pb1A OH1 Pb1A 127(3) 1_565 1_665 ?
 O6 OH1 Pb1A 109.4(10) . 1_665 ?
 Pb1 OH1 Pb1A 6.6(11) 1_665 1_665 ?
 Cu3 OH1 Pb1A 58.8(12) 3_575 1_665 ?
 Pb1 OH1 Pb2A 133.4(13) 1_565 3_565 ?
 Cu1 OH1 Pb2A 72.4(4) . 3_565 ?
 Cu1 OH1 Pb2A 72.4(4) 2 3_565 ?
 Pb1A OH1 Pb2A 142(2) 1_565 3_565 ?
 O6 OH1 Pb2A 45.6(6) . 3_565 ?

Pb1 OH1 Pb2A 83.9(12) 1_665 3_565 ?
 Cu3 OH1 Pb2A 149.4(13) 3_575 3_565 ?
 Pb1A OH1 Pb2A 90.6(16) 1_665 3_565 ?
 Pb1 OH1 Pb2 141.6(5) 1_565 3_565 ?
 Cu1 OH1 Pb2 70.7(3) . 3_565 ?
 Cu1 OH1 Pb2 70.7(3) 2 3_565 ?
 Pb1A OH1 Pb2 150.4(19) 1_565 3_565 ?
 O6 OH1 Pb2 49.7(3) . 3_565 ?
 Pb1 OH1 Pb2 75.7(3) 1_665 3_565 ?
 Cu3 OH1 Pb2 141.2(4) 3_575 3_565 ?
 Pb1A OH1 Pb2 82.4(12) 1_665 3_565 ?
 Pb2A OH1 Pb2 8.2(11) 3_565 3_565 ?
 Cu2 OH2 Cu2 129.2(7) . 2_556 ?
 Cu2 OH2 Pb2 91.5(4) . . ?
 Cu2 OH2 Pb2 91.5(4) 2_556 . ?
 Cu2 OH2 Cu3 79.7(4) . 1_655 ?
 Cu2 OH2 Cu3 79.7(4) 2_556 1_655 ?
 Pb2 OH2 Cu3 158.9(6) . 1_655 ?
 Cu2 OH2 Pb2A 108.5(4) . 1_655 ?
 Cu2 OH2 Pb2A 108.5(4) 2_556 1_655 ?
 Pb2 OH2 Pb2A 128.8(6) . 1_655 ?
 Cu3 OH2 Pb2A 72.3(5) 1_655 1_655 ?
 Cu2 OH2 Pb2A 88.8(5) . . ?
 Cu2 OH2 Pb2A 88.8(5) 2_556 . ?
 Pb2 OH2 Pb2A 6.4(9) . . ?
 Cu3 OH2 Pb2A 152.4(11) 1_655 . ?
 Pb2A OH2 Pb2A 135.3(10) 1_655 . ?
 Cu2 OH2 Pb2 107.8(3) . 1_655 ?
 Cu2 OH2 Pb2 107.8(3) 2_556 1_655 ?
 Pb2 OH2 Pb2 131.2(6) . 1_655 ?
 Cu3 OH2 Pb2 70.0(3) 1_655 1_655 ?
 Pb2A OH2 Pb2 2.3(3) 1_655 1_655 ?
 Pb2A OH2 Pb2 137.6(10) . 1_655 ?
 Cu2 OH2 Cu3 69.6(3) . . ?
 Cu2 OH2 Cu3 69.6(3) 2_556 . ?
 Pb2 OH2 Cu3 58.0(3) . . ?
 Cu3 OH2 Cu3 100.9(4) 1_655 . ?
 Pb2A OH2 Cu3 173.2(6) 1_655 . ?
 Pb2A OH2 Cu3 51.6(9) . . ?
 Pb2 OH2 Cu3 170.8(5) 1_655 . ?
 Cu2 OH2 Pb1A 65.2(3) . 3_565 ?
 Cu2 OH2 Pb1A 65.2(3) 2_556 3_565 ?
 Pb2 OH2 Pb1A 105.4(7) . 3_565 ?
 Cu3 OH2 Pb1A 53.5(7) 1_655 3_565 ?
 Pb2A OH2 Pb1A 125.8(8) 1_655 3_565 ?
 Pb2A OH2 Pb1A 98.9(10) . 3_565 ?
 Pb2 OH2 Pb1A 123.5(7) 1_655 3_565 ?
 Cu3 OH2 Pb1A 47.4(6) . 3_565 ?
 Cu2 OH2 O6 9.5(2) . . ?
 Cu2 OH2 O6 122.1(5) 2_556 . ?
 Pb2 OH2 O6 85.2(3) . . ?
 Cu3 OH2 O6 83.4(3) 1_655 . ?
 Pb2A OH2 O6 118.0(2) 1_655 . ?
 Pb2A OH2 O6 81.7(5) . . ?

Pb2 OH2 O6 117.3(2) 1_655 . ?
Cu3 OH2 O6 60.10(19) . . ?
Pb1A OH2 O6 60.4(2) 3_565 . ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.991
_diffn_reflns_theta_full 26.36
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.991
_refine_diff_density_max 1.928
_refine_diff_density_min -1.373
_refine_diff_density_rms 0.266