

data\_kilchoanite\_0m

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'Ca6 O14 Si4'  
\_chemical\_formula\_weight 576.84

loop\_  
\_atom\_type\_symbol  
\_atom\_type\_description  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_real  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_imag  
\_atom\_type\_scatter\_source  
'O' 'O' 0.0106 0.0060  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'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'  
\_symmetry\_cell\_setting ?  
\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M ?

loop\_  
\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz  
'x, y, z'  
'x, -y, -z'  
'x, -y, z+1/2'  
'x, y, -z+1/2'  
'x+1/2, y+1/2, z+1/2'  
'x+1/2, -y+1/2, -z+1/2'  
'x+1/2, -y+1/2, z+1'  
'x+1/2, y+1/2, -z+1'

\_cell\_length\_a 11.4525(2)  
\_cell\_length\_b 5.08670(10)  
\_cell\_length\_c 21.9963(3)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 90.00  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 1281.40(4)  
\_cell\_formula\_units\_Z 4  
\_cell\_measurement\_temperature 296(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    2.990
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            1152
_exptl_absorpt_coefficient_mu    2.945
_exptl_absorpt_correction_type  ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details  ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature      296(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_type  ?
_diffn_measurement_method       ?
_diffn_detector_area_resol_mean ?
_diffn_standards_number         ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time  ?
_diffn_standards_decay_%        ?
_diffn_reflns_number            18573
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0331
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0259
_diffn_reflns_limit_h_min       -20
_diffn_reflns_limit_h_max       20
_diffn_reflns_limit_k_min       -9
_diffn_reflns_limit_k_max       9
_diffn_reflns_limit_l_min       -39
_diffn_reflns_limit_l_max       37
_diffn_reflns_theta_min         1.85
_diffn_reflns_theta_max         40.24
_reflns_number_total            4083
_reflns_number_gt               3757
_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^)+(0.0228P)^2^+0.0000P] 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 0.21(2)  
\_refine\_ls\_number\_reflns 4083  
\_refine\_ls\_number\_parameters 117  
\_refine\_ls\_number\_restraints 1  
\_refine\_ls\_R\_factor\_all 0.0233  
\_refine\_ls\_R\_factor\_gt 0.0200  
\_refine\_ls\_wR\_factor\_ref 0.0470  
\_refine\_ls\_wR\_factor\_gt 0.0455  
\_refine\_ls\_goodness\_of\_fit\_ref 1.033  
\_refine\_ls\_restrained\_S\_all 1.033  
\_refine\_ls\_shift/su\_max 0.001  
\_refine\_ls\_shift/su\_mean 0.000

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

Ca1 Ca 0.01150(3) 0.0000 0.0000 0.00918(5) Uani 1 2 d S . .  
 Ca2 Ca 0.31064(3) 0.99909(6) 0.2500 0.00740(5) Uani 1 2 d S . .  
 Ca3 Ca 0.03527(2) 0.00353(4) 0.168222(10) 0.00937(4) Uani 1 1 d . . .  
 Ca4 Ca 0.241867(19) 0.49751(4) 0.104083(10) 0.00734(4) Uani 1 1 d . . .  
 Si1 Si 0.12152(4) 0.42774(8) 0.2500 0.00589(7) Uani 1 2 d S . .  
 Si2 Si 0.43213(3) 0.94159(6) 0.100328(14) 0.00624(5) Uani 1 1 d . . .  
 Si3 Si 0.26486(4) 0.0000 0.0000 0.00626(7) Uani 1 2 d S . .  
 O1 O 0.18816(8) 0.29836(15) 0.19132(4) 0.00859(13) Uani 1 1 d . . .  
 O2 O 0.99064(11) 0.2935(2) 0.2500 0.00872(19) Uani 1 2 d S . .  
 O3 O 0.12178(13) 0.7475(2) 0.2500 0.00947(19) Uani 1 2 d S . .  
 O4 O 0.36993(8) 0.80255(16) 0.15865(4) 0.00880(13) Uani 1 1 d . . .  
 O5 O 0.05900(8) 0.69266(17) 0.09191(4) 0.00949(14) Uani 1 1 d . . .  
 O6 O 0.35498(8) 0.81255(16) 0.04103(4) 0.00821(12) Uani 1 1 d . . .  
 O7 O 0.42751(9) 0.25721(16) 0.09613(4) 0.00901(13) Uani 1 1 d . . .  
 O8 O 0.18431(8) 0.17820(17) 0.04188(4) 0.01153(14) Uani 1 1 d . . .

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

Ca1 0.00699(12) 0.01065(12) 0.00991(12) 0.00053(9) 0.000 0.000  
 Ca2 0.00655(11) 0.00839(11) 0.00727(11) 0.000 0.000 0.00055(8)  
 Ca3 0.01124(9) 0.00687(7) 0.01001(8) -0.00149(6) -0.00375(7) 0.00010(6)  
 Ca4 0.00696(8) 0.00721(7) 0.00783(7) -0.00018(6) 0.00062(6) -0.00073(6)  
 Si1 0.00658(17) 0.00511(15) 0.00598(16) 0.000 0.000 -0.00013(13)  
 Si2 0.00661(12) 0.00527(10) 0.00685(11) 0.00003(8) -0.00017(10) 0.00017(10)  
 Si3 0.00650(17) 0.00613(15) 0.00616(16) -0.00015(12) 0.000 0.000  
 O1 0.0098(3) 0.0087(3) 0.0073(3) 0.0000(2) 0.0013(3) 0.0004(3)  
 O2 0.0064(5) 0.0091(5) 0.0106(5) 0.000 0.000 -0.0004(3)  
 O3 0.0118(5) 0.0061(4) 0.0105(5) 0.000 0.000 0.0003(4)  
 O4 0.0104(4) 0.0089(3) 0.0070(3) 0.0000(2) 0.0014(3) -0.0010(2)  
 O5 0.0069(3) 0.0091(3) 0.0125(3) -0.0010(3) 0.0007(3) -0.0009(3)  
 O6 0.0097(3) 0.0075(3) 0.0074(3) 0.0003(2) -0.0019(2) -0.0001(2)  
 O7 0.0096(3) 0.0061(3) 0.0113(3) -0.0001(2) -0.0011(3) 0.0003(3)  
 O8 0.0089(3) 0.0125(3) 0.0132(4) -0.0055(3) 0.0008(3) -0.0001(3)

\_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  
 Ca1 O8 2.3637(9) 2 ?  
 Ca1 O8 2.3637(9) . ?  
 Ca1 O6 2.5603(9) 7\_454 ?  
 Ca1 O6 2.5603(9) 8\_444 ?  
 Ca1 O5 2.6129(9) 1\_545 ?  
 Ca1 O5 2.6129(9) 2\_565 ?  
 Ca1 O7 2.6309(9) 8\_444 ?  
 Ca1 O7 2.6309(9) 7\_454 ?  
 Ca1 Si3 2.9017(6) . ?  
 Ca1 Si2 3.2774(3) 8\_444 ?  
 Ca1 Si2 3.2774(3) 7\_454 ?  
 Ca1 Ca3 3.7103(2) 2 ?  
 Ca2 O2 2.3156(13) 6\_465 ?  
 Ca2 O4 2.3449(9) 4 ?  
 Ca2 O4 2.3449(9) . ?  
 Ca2 O1 2.4395(9) 4\_565 ?  
 Ca2 O1 2.4395(9) 1\_565 ?  
 Ca2 O3 2.5132(14) . ?  
 Ca2 Si1 3.0734(6) 1\_565 ?  
 Ca2 Si1 3.5796(6) 6\_565 ?  
 Ca2 Si2 3.5861(3) . ?  
 Ca2 Si2 3.5862(3) 4 ?  
 Ca2 Si1 3.6247(6) . ?  
 Ca2 Ca3 3.6308(4) 1\_565 ?  
 Ca3 O5 2.3220(9) 1\_545 ?  
 Ca3 O7 2.3492(9) 7\_454 ?  
 Ca3 O1 2.3608(9) . ?  
 Ca3 O2 2.3819(8) 1\_455 ?  
 Ca3 O3 2.4317(9) 1\_545 ?  
 Ca3 O4 2.4605(9) 7\_454 ?  
 Ca3 Si2 2.9584(4) 7\_454 ?  
 Ca3 Si1 2.9778(4) . ?  
 Ca3 Si2 3.4047(4) 7\_464 ?  
 Ca3 Si1 3.5762(4) 1\_545 ?  
 Ca3 Ca3 3.5977(4) 4 ?  
 Ca3 Ca2 3.6307(4) 1\_545 ?  
 Ca4 O8 2.2237(9) . ?  
 Ca4 O1 2.2553(9) . ?  
 Ca4 O5 2.3331(9) . ?  
 Ca4 O4 2.4493(9) . ?  
 Ca4 O7 2.4587(10) . ?  
 Ca4 O6 2.4839(9) . ?  
 Ca4 Si2 3.1397(4) . ?  
 Ca4 Si3 3.4228(2) . ?  
 Ca4 Si3 3.4415(2) 1\_565 ?  
 Ca4 Si1 3.5110(3) . ?  
 Ca4 Si2 3.5617(5) 7\_464 ?  
 Ca4 Si2 3.5709(4) 1\_545 ?  
 Si1 O3 1.6265(12) . ?  
 Si1 O1 1.6376(9) . ?  
 Si1 O1 1.6377(9) 4 ?  
 Si1 O2 1.6470(13) 1\_455 ?

Si1 Ca3 2.9779(4) 4 ?  
 Si1 Ca2 3.0734(6) 1\_545 ?  
 Si1 Ca4 3.5111(3) 4 ?  
 Si1 Ca3 3.5763(4) 4\_565 ?  
 Si1 Ca3 3.5763(4) 1\_565 ?  
 Si1 Ca2 3.5797(6) 6\_465 ?  
 Si2 O7 1.6090(9) 1\_565 ?  
 Si2 O5 1.6160(10) 7\_564 ?  
 Si2 O4 1.6288(9) . ?  
 Si2 O6 1.7067(9) . ?  
 Si2 Ca3 2.9584(4) 7\_554 ?  
 Si2 Ca1 3.2775(3) 7\_554 ?  
 Si2 Ca3 3.4047(4) 7\_564 ?  
 Si2 Ca4 3.5617(5) 7\_564 ?  
 Si2 Ca4 3.5709(4) 1\_565 ?  
 Si3 O8 1.5879(9) 2 ?  
 Si3 O8 1.5879(9) . ?  
 Si3 O6 1.6700(9) 2\_565 ?  
 Si3 O6 1.6700(9) 1\_545 ?  
 Si3 Ca4 3.4227(2) 2 ?  
 Si3 Ca4 3.4415(2) 2\_565 ?  
 Si3 Ca4 3.4415(2) 1\_545 ?  
 O1 Ca2 2.4395(9) 1\_545 ?  
 O2 Si1 1.6470(13) 1\_655 ?  
 O2 Ca2 2.3156(13) 6\_565 ?  
 O2 Ca3 2.3819(8) 1\_655 ?  
 O2 Ca3 2.3819(8) 4\_655 ?  
 O3 Ca3 2.4318(9) 4\_565 ?  
 O3 Ca3 2.4318(9) 1\_565 ?  
 O4 Ca3 2.4605(9) 7\_554 ?  
 O5 Si2 1.6160(10) 7\_464 ?  
 O5 Ca3 2.3221(9) 1\_565 ?  
 O5 Ca1 2.6128(9) 1\_565 ?  
 O6 Si3 1.6700(9) 1\_565 ?  
 O6 Ca1 2.5604(9) 7\_554 ?  
 O7 Si2 1.6090(9) 1\_545 ?  
 O7 Ca3 2.3492(9) 7\_554 ?  
 O7 Ca1 2.6308(9) 7\_554 ?

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  
 O8 Ca1 O8 66.29(4) 2 . ?  
 O8 Ca1 O6 119.04(3) 2 7\_454 ?  
 O8 Ca1 O6 133.39(3) . 7\_454 ?  
 O8 Ca1 O6 133.39(3) 2 8\_444 ?  
 O8 Ca1 O6 119.04(3) . 8\_444 ?  
 O6 Ca1 O6 91.13(4) 7\_454 8\_444 ?  
 O8 Ca1 O5 84.13(3) 2 1\_545 ?

O8 Ca1 O5 75.73(3) . 1\_545 ?  
 O6 Ca1 O5 60.10(3) 7\_454 1\_545 ?  
 O6 Ca1 O5 142.19(3) 8\_444 1\_545 ?  
 O8 Ca1 O5 75.73(3) 2 2\_565 ?  
 O8 Ca1 O5 84.13(3) . 2\_565 ?  
 O6 Ca1 O5 142.19(3) 7\_454 2\_565 ?  
 O6 Ca1 O5 60.10(3) 8\_444 2\_565 ?  
 O5 Ca1 O5 155.97(4) 1\_545 2\_565 ?  
 O8 Ca1 O7 79.21(3) 2 8\_444 ?  
 O8 Ca1 O7 143.07(3) . 8\_444 ?  
 O6 Ca1 O7 74.68(3) 7\_454 8\_444 ?  
 O6 Ca1 O7 75.65(3) 8\_444 8\_444 ?  
 O5 Ca1 O7 114.65(3) 1\_545 8\_444 ?  
 O5 Ca1 O7 74.64(3) 2\_565 8\_444 ?  
 O8 Ca1 O7 143.07(3) 2 7\_454 ?  
 O8 Ca1 O7 79.21(3) . 7\_454 ?  
 O6 Ca1 O7 75.65(3) 7\_454 7\_454 ?  
 O6 Ca1 O7 74.68(3) 8\_444 7\_454 ?  
 O5 Ca1 O7 74.64(3) 1\_545 7\_454 ?  
 O5 Ca1 O7 114.65(3) 2\_565 7\_454 ?  
 O7 Ca1 O7 137.11(5) 8\_444 7\_454 ?  
 O8 Ca1 Si3 33.14(2) 2 . ?  
 O8 Ca1 Si3 33.15(2) . . ?  
 O6 Ca1 Si3 134.44(2) 7\_454 . ?  
 O6 Ca1 Si3 134.44(2) 8\_444 . ?  
 O5 Ca1 Si3 77.98(2) 1\_545 . ?  
 O5 Ca1 Si3 77.98(2) 2\_565 . ?  
 O7 Ca1 Si3 111.44(2) 8\_444 . ?  
 O7 Ca1 Si3 111.44(2) 7\_454 . ?  
 O8 Ca1 Si2 103.45(2) 2 8\_444 ?  
 O8 Ca1 Si2 103.40(2) . 8\_444 ?  
 O6 Ca1 Si2 117.96(2) 7\_454 8\_444 ?  
 O6 Ca1 Si2 31.01(2) 8\_444 8\_444 ?  
 O5 Ca1 Si2 171.41(2) 1\_545 8\_444 ?  
 O5 Ca1 Si2 29.15(2) 2\_565 8\_444 ?  
 O7 Ca1 Si2 71.286(19) 8\_444 8\_444 ?  
 O7 Ca1 Si2 96.78(2) 7\_454 8\_444 ?  
 Si3 Ca1 Si2 106.100(9) . 8\_444 ?  
 O8 Ca1 Si2 103.40(2) 2 7\_454 ?  
 O8 Ca1 Si2 103.45(2) . 7\_454 ?  
 O6 Ca1 Si2 31.01(2) 7\_454 7\_454 ?  
 O6 Ca1 Si2 117.96(2) 8\_444 7\_454 ?  
 O5 Ca1 Si2 29.15(2) 1\_545 7\_454 ?  
 O5 Ca1 Si2 171.41(2) 2\_565 7\_454 ?  
 O7 Ca1 Si2 96.78(2) 8\_444 7\_454 ?  
 O7 Ca1 Si2 71.286(19) 7\_454 7\_454 ?  
 Si3 Ca1 Si2 106.100(9) . 7\_454 ?  
 Si2 Ca1 Si2 147.800(18) 8\_444 7\_454 ?  
 O8 Ca1 Ca3 63.13(2) 2 2 ?  
 O8 Ca1 Ca3 109.21(2) . 2 ?  
 O6 Ca1 Ca3 113.573(19) 7\_454 2 ?  
 O6 Ca1 Ca3 72.712(19) 8\_444 2 ?  
 O5 Ca1 Ca3 138.89(2) 1\_545 2 ?  
 O5 Ca1 Ca3 38.369(19) 2\_565 2 ?

O7 Ca1 Ca3 39.01(2) 8\_444 2 ?  
 O7 Ca1 Ca3 146.17(2) 7\_454 2 ?  
 Si3 Ca1 Ca3 85.792(6) . 2 ?  
 Si2 Ca1 Ca3 49.621(7) 8\_444 2 ?  
 Si2 Ca1 Ca3 133.515(7) 7\_454 2 ?  
 O2 Ca2 O4 86.36(3) 6\_465 4 ?  
 O2 Ca2 O4 86.36(3) 6\_465 . ?  
 O4 Ca2 O4 117.95(4) 4 . ?  
 O2 Ca2 O1 103.16(3) 6\_465 4\_565 ?  
 O4 Ca2 O1 88.80(3) 4 4\_565 ?  
 O4 Ca2 O1 152.38(3) . 4\_565 ?  
 O2 Ca2 O1 103.16(3) 6\_465 1\_565 ?  
 O4 Ca2 O1 152.38(3) 4 1\_565 ?  
 O4 Ca2 O1 88.80(3) . 1\_565 ?  
 O1 Ca2 O1 63.90(4) 4\_565 1\_565 ?  
 O2 Ca2 O3 176.49(4) 6\_465 . ?  
 O4 Ca2 O3 91.84(3) 4 . ?  
 O4 Ca2 O3 91.84(3) . . ?  
 O1 Ca2 O3 79.80(3) 4\_565 . ?  
 O1 Ca2 O3 79.80(3) 1\_565 . ?  
 O2 Ca2 Si1 107.71(3) 6\_465 1\_565 ?  
 O4 Ca2 Si1 120.43(2) 4 1\_565 ?  
 O4 Ca2 Si1 120.43(2) . 1\_565 ?  
 O1 Ca2 Si1 32.01(2) 4\_565 1\_565 ?  
 O1 Ca2 Si1 32.01(2) 1\_565 1\_565 ?  
 O3 Ca2 Si1 75.80(3) . 1\_565 ?  
 O2 Ca2 Si1 21.13(3) 6\_465 6\_565 ?  
 O4 Ca2 Si1 75.90(2) 4 6\_565 ?  
 O4 Ca2 Si1 75.90(2) . 6\_565 ?  
 O1 Ca2 Si1 120.46(2) 4\_565 6\_565 ?  
 O1 Ca2 Si1 120.46(2) 1\_565 6\_565 ?  
 O3 Ca2 Si1 155.36(3) . 6\_565 ?  
 Si1 Ca2 Si1 128.843(12) 1\_565 6\_565 ?  
 O2 Ca2 Si2 72.047(11) 6\_465 . ?  
 O4 Ca2 Si2 129.76(3) 4 . ?  
 O4 Ca2 Si2 20.96(2) . . ?  
 O1 Ca2 Si2 139.44(2) 4\_565 . ?  
 O1 Ca2 Si2 77.77(2) 1\_565 . ?  
 O3 Ca2 Si2 107.000(11) . . ?  
 Si1 Ca2 Si2 109.348(7) 1\_565 . ?  
 Si1 Ca2 Si2 67.827(8) 6\_565 . ?  
 O2 Ca2 Si2 72.047(11) 6\_465 4 ?  
 O4 Ca2 Si2 20.96(2) 4 4 ?  
 O4 Ca2 Si2 129.76(3) . 4 ?  
 O1 Ca2 Si2 77.77(2) 4\_565 4 ?  
 O1 Ca2 Si2 139.44(2) 1\_565 4 ?  
 O3 Ca2 Si2 107.000(11) . 4 ?  
 Si1 Ca2 Si2 109.348(7) 1\_565 4 ?  
 Si1 Ca2 Si2 67.827(8) 6\_565 4 ?  
 Si2 Ca2 Si2 133.285(16) . 4 ?  
 O2 Ca2 Si1 153.79(3) 6\_465 . ?  
 O4 Ca2 Si1 80.28(2) 4 . ?  
 O4 Ca2 Si1 80.28(2) . . ?  
 O1 Ca2 Si1 99.02(2) 4\_565 . ?



O1 Ca2 Si1 99.02(2) 1\_565 . ?  
 O3 Ca2 Si1 22.69(3) . . ?  
 Si1 Ca2 Si1 98.494(16) 1\_565 . ?  
 Si1 Ca2 Si1 132.663(12) 6\_565 . ?  
 Si2 Ca2 Si1 99.581(8) . . ?  
 Si2 Ca2 Si1 99.581(7) 4 . ?  
 O2 Ca2 Ca3 140.39(2) 6\_465 1\_565 ?  
 O4 Ca2 Ca3 132.75(2) 4 1\_565 ?  
 O4 Ca2 Ca3 80.19(2) . 1\_565 ?  
 O1 Ca2 Ca3 76.04(2) 4\_565 1\_565 ?  
 O1 Ca2 Ca3 40.05(2) 1\_565 1\_565 ?  
 O3 Ca2 Ca3 41.89(2) . 1\_565 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 51.933(9) 1\_565 1\_565 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 149.685(5) 6\_565 1\_565 ?  
 Si2 Ca2 Ca3 83.262(8) . 1\_565 ?  
 Si2 Ca2 Ca3 142.407(10) 4 1\_565 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 59.065(9) . 1\_565 ?  
 O5 Ca3 O7 85.77(3) 1\_545 7\_454 ?  
 O5 Ca3 O1 120.09(3) 1\_545 . ?  
 O7 Ca3 O1 101.88(3) 7\_454 . ?  
 O5 Ca3 O2 173.13(4) 1\_545 1\_455 ?  
 O7 Ca3 O2 94.37(3) 7\_454 1\_455 ?  
 O1 Ca3 O2 66.62(4) . 1\_455 ?  
 O5 Ca3 O3 97.03(3) 1\_545 1\_545 ?  
 O7 Ca3 O3 172.22(5) 7\_454 1\_545 ?  
 O1 Ca3 O3 83.04(4) . 1\_545 ?  
 O2 Ca3 O3 81.98(3) 1\_455 1\_545 ?  
 O5 Ca3 O4 66.25(3) 1\_545 7\_454 ?  
 O7 Ca3 O4 82.28(3) 7\_454 7\_454 ?  
 O1 Ca3 O4 172.40(3) . 7\_454 ?  
 O2 Ca3 O4 106.94(4) 1\_455 7\_454 ?  
 O3 Ca3 O4 92.18(4) 1\_545 7\_454 ?  
 O5 Ca3 Si2 32.92(2) 1\_545 7\_454 ?  
 O7 Ca3 Si2 81.14(2) 7\_454 7\_454 ?  
 O1 Ca3 Si2 153.00(3) . 7\_454 ?  
 O2 Ca3 Si2 140.32(3) 1\_455 7\_454 ?  
 O3 Ca3 Si2 97.25(3) 1\_545 7\_454 ?  
 O4 Ca3 Si2 33.41(2) 7\_454 7\_454 ?  
 O5 Ca3 Si1 153.04(3) 1\_545 . ?  
 O7 Ca3 Si1 101.92(2) 7\_454 . ?  
 O1 Ca3 Si1 33.24(2) . . ?  
 O2 Ca3 Si1 33.51(3) 1\_455 . ?  
 O3 Ca3 Si1 78.82(3) 1\_545 . ?  
 O4 Ca3 Si1 139.95(2) 7\_454 . ?  
 Si2 Ca3 Si1 172.731(14) 7\_454 . ?  
 O5 Ca3 Si2 106.74(2) 1\_545 7\_464 ?  
 O7 Ca3 Si2 24.80(2) 7\_454 7\_464 ?  
 O1 Ca3 Si2 79.93(2) . 7\_464 ?  
 O2 Ca3 Si2 75.13(2) 1\_455 7\_464 ?  
 O3 Ca3 Si2 155.48(2) 1\_545 7\_464 ?  
 O4 Ca3 Si2 102.71(2) 7\_454 7\_464 ?  
 Si2 Ca3 Si2 105.933(12) 7\_454 7\_464 ?  
 Si1 Ca3 Si2 77.251(10) . 7\_464 ?  
 O5 Ca3 Si1 76.91(2) 1\_545 1\_545 ?

O7 Ca3 Si1 155.35(2) 7\_454 1\_545 ?  
 O1 Ca3 Si1 101.96(2) . 1\_545 ?  
 O2 Ca3 Si1 100.76(2) 1\_455 1\_545 ?  
 O3 Ca3 Si1 22.60(3) 1\_545 1\_545 ?  
 O4 Ca3 Si1 74.77(2) 7\_454 1\_545 ?  
 Si2 Ca3 Si1 74.775(9) 7\_454 1\_545 ?  
 Si1 Ca3 Si1 101.421(9) . 1\_545 ?  
 Si2 Ca3 Si1 174.488(13) 7\_464 1\_545 ?  
 O5 Ca3 Ca3 136.29(2) 1\_545 4 ?  
 O7 Ca3 Ca3 132.45(2) 7\_454 4 ?  
 O1 Ca3 Ca3 77.57(2) . 4 ?  
 O2 Ca3 Ca3 40.96(2) 1\_455 4 ?  
 O3 Ca3 Ca3 42.29(2) 1\_545 4 ?  
 O4 Ca3 Ca3 94.91(2) 7\_454 4 ?  
 Si2 Ca3 Ca3 120.319(7) 7\_454 4 ?  
 Si1 Ca3 Ca3 52.838(7) . 4 ?  
 Si2 Ca3 Ca3 116.017(6) 7\_464 4 ?  
 Si1 Ca3 Ca3 59.802(5) 1\_545 4 ?  
 O5 Ca3 Ca2 104.61(2) 1\_545 1\_545 ?  
 O7 Ca3 Ca2 142.56(3) 7\_454 1\_545 ?  
 O1 Ca3 Ca2 41.68(2) . 1\_545 ?  
 O2 Ca3 Ca2 79.40(3) 1\_455 1\_545 ?  
 O3 Ca3 Ca2 43.64(3) 1\_545 1\_545 ?  
 O4 Ca3 Ca2 134.99(2) 7\_454 1\_545 ?  
 Si2 Ca3 Ca2 126.310(11) 7\_454 1\_545 ?  
 Si1 Ca3 Ca2 54.346(11) . 1\_545 ?  
 Si2 Ca3 Ca2 121.589(10) 7\_464 1\_545 ?  
 Si1 Ca3 Ca2 60.384(10) 1\_545 1\_545 ?  
 Ca3 Ca3 Ca2 60.302(5) 4 1\_545 ?  
 O8 Ca4 O1 96.58(3) . . ?  
 O8 Ca4 O5 88.51(3) . . ?  
 O1 Ca4 O5 92.52(3) . . ?  
 O8 Ca4 O4 160.35(3) . . ?  
 O1 Ca4 O4 91.77(3) . . ?  
 O5 Ca4 O4 108.92(3) . . ?  
 O8 Ca4 O7 81.34(3) . . ?  
 O1 Ca4 O7 94.19(3) . . ?  
 O5 Ca4 O7 168.41(3) . . ?  
 O4 Ca4 O7 80.33(3) . . ?  
 O8 Ca4 O6 106.40(3) . . ?  
 O1 Ca4 O6 155.10(3) . . ?  
 O5 Ca4 O6 97.44(3) . . ?  
 O4 Ca4 O6 63.42(3) . . ?  
 O7 Ca4 O6 80.21(3) . . ?  
 O8 Ca4 Si2 135.65(3) . . ?  
 O1 Ca4 Si2 122.33(2) . . ?  
 O5 Ca4 Si2 108.29(2) . . ?  
 O4 Ca4 Si2 30.85(2) . . ?  
 O7 Ca4 Si2 75.86(2) . . ?  
 O6 Ca4 Si2 32.77(2) . . ?  
 O8 Ca4 Si3 21.75(2) . . ?  
 O1 Ca4 Si3 104.95(2) . . ?  
 O5 Ca4 Si3 107.87(2) . . ?  
 O4 Ca4 Si3 138.60(2) . . ?

O7 Ca4 Si3 61.20(2) . . ?  
 O6 Ca4 Si3 93.64(2) . . ?  
 Si2 Ca4 Si3 117.448(11) . . ?  
 O8 Ca4 Si3 98.97(3) . 1\_565 ?  
 O1 Ca4 Si3 156.99(2) . 1\_565 ?  
 O5 Ca4 Si3 71.11(2) . 1\_565 ?  
 O4 Ca4 Si3 79.03(2) . 1\_565 ?  
 O7 Ca4 Si3 104.82(2) . 1\_565 ?  
 O6 Ca4 Si3 27.06(2) . 1\_565 ?  
 Si2 Ca4 Si3 52.775(9) . 1\_565 ?  
 Si3 Ca4 Si3 95.639(6) . 1\_565 ?  
 O8 Ca4 Si1 111.86(3) . . ?  
 O1 Ca4 Si1 21.53(2) . . ?  
 O5 Ca4 Si1 78.20(2) . . ?  
 O4 Ca4 Si1 81.44(2) . . ?  
 O7 Ca4 Si1 110.75(2) . . ?  
 O6 Ca4 Si1 141.29(2) . . ?  
 Si2 Ca4 Si1 111.668(11) . . ?  
 Si3 Ca4 Si1 124.537(10) . . ?  
 Si3 Ca4 Si1 135.500(10) 1\_565 . ?  
 O8 Ca4 Si2 75.76(2) . 7\_464 ?  
 O1 Ca4 Si2 77.71(3) . 7\_464 ?  
 O5 Ca4 Si2 20.98(2) . 7\_464 ?  
 O4 Ca4 Si2 123.55(2) . 7\_464 ?  
 O7 Ca4 Si2 154.53(2) . 7\_464 ?  
 O6 Ca4 Si2 116.77(2) . 7\_464 ?  
 Si2 Ca4 Si2 128.905(8) . 7\_464 ?  
 Si3 Ca4 Si2 97.205(10) . 7\_464 ?  
 Si3 Ca4 Si2 89.781(10) 1\_565 7\_464 ?  
 Si1 Ca4 Si2 68.840(10) . 7\_464 ?  
 O8 Ca4 Si2 65.68(2) . 1\_545 ?  
 O1 Ca4 Si2 80.24(2) . 1\_545 ?  
 O5 Ca4 Si2 151.89(2) . 1\_545 ?  
 O4 Ca4 Si2 98.49(2) . 1\_545 ?  
 O7 Ca4 Si2 22.63(2) . 1\_545 ?  
 O6 Ca4 Si2 100.35(2) . 1\_545 ?  
 Si2 Ca4 Si2 98.373(12) . 1\_545 ?  
 Si3 Ca4 Si2 49.614(8) . 1\_545 ?  
 Si3 Ca4 Si2 121.739(10) 1\_565 1\_545 ?  
 Si1 Ca4 Si2 100.408(10) . 1\_545 ?  
 Si2 Ca4 Si2 132.538(9) 7\_464 1\_545 ?  
 O3 Si1 O1 113.64(4) . . ?  
 O3 Si1 O1 113.64(4) . 4 ?  
 O1 Si1 O1 104.04(7) . 4 ?  
 O3 Si1 O2 114.59(7) . 1\_455 ?  
 O1 Si1 O2 104.93(4) . 1\_455 ?  
 O1 Si1 O2 104.93(4) 4 1\_455 ?  
 O3 Si1 Ca3 136.49(3) . . ?  
 O1 Si1 Ca3 52.21(3) . . ?  
 O1 Si1 Ca3 109.85(4) 4 . ?  
 O2 Si1 Ca3 52.97(3) 1\_455 . ?  
 O3 Si1 Ca3 136.49(3) . 4 ?  
 O1 Si1 Ca3 109.85(4) . 4 ?  
 O1 Si1 Ca3 52.21(3) 4 4 ?

O2 Si1 Ca3 52.97(3) 1\_455 4 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 74.324(14) . 4 ?  
 O3 Si1 Ca2 135.08(5) . 1\_545 ?  
 O1 Si1 Ca2 52.15(3) . 1\_545 ?  
 O1 Si1 Ca2 52.15(3) 4 1\_545 ?  
 O2 Si1 Ca2 110.32(5) 1\_455 1\_545 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 73.720(11) . 1\_545 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 73.721(11) 4 1\_545 ?  
 O3 Si1 Ca4 84.16(2) . . ?  
 O1 Si1 Ca4 30.36(3) . . ?  
 O1 Si1 Ca4 125.33(4) 4 . ?  
 O2 Si1 Ca4 113.525(9) 1\_455 . ?  
 Ca3 Si1 Ca4 69.589(6) . . ?  
 Ca3 Si1 Ca4 139.085(14) 4 . ?  
 Ca2 Si1 Ca4 78.174(10) 1\_545 . ?  
 O3 Si1 Ca4 84.16(2) . 4 ?  
 O1 Si1 Ca4 125.32(4) . 4 ?  
 O1 Si1 Ca4 30.36(3) 4 4 ?  
 O2 Si1 Ca4 113.525(9) 1\_455 4 ?  
 Ca3 Si1 Ca4 139.084(14) . 4 ?  
 Ca3 Si1 Ca4 69.589(6) 4 4 ?  
 Ca2 Si1 Ca4 78.174(10) 1\_545 4 ?  
 Ca4 Si1 Ca4 132.172(17) . 4 ?  
 O3 Si1 Ca3 35.07(3) . 4\_565 ?  
 O1 Si1 Ca3 148.68(4) . 4\_565 ?  
 O1 Si1 Ca3 93.52(3) 4 4\_565 ?  
 O2 Si1 Ca3 95.05(4) 1\_455 4\_565 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 143.68(2) . 4\_565 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 101.419(9) 4 4\_565 ?  
 Ca2 Si1 Ca3 140.866(13) 1\_545 4\_565 ?  
 Ca4 Si1 Ca3 119.042(12) . 4\_565 ?  
 Ca4 Si1 Ca3 64.267(7) 4 4\_565 ?  
 O3 Si1 Ca3 35.07(3) . 1\_565 ?  
 O1 Si1 Ca3 93.52(3) . 1\_565 ?  
 O1 Si1 Ca3 148.68(4) 4 1\_565 ?  
 O2 Si1 Ca3 95.05(4) 1\_455 1\_565 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 101.420(9) . 1\_565 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 143.68(2) 4 1\_565 ?  
 Ca2 Si1 Ca3 140.866(13) 1\_545 1\_565 ?  
 Ca4 Si1 Ca3 64.267(6) . 1\_565 ?  
 Ca4 Si1 Ca3 119.042(12) 4 1\_565 ?  
 Ca3 Si1 Ca3 60.396(10) 4\_565 1\_565 ?  
 O3 Si1 Ca2 84.14(5) . 6\_465 ?  
 O1 Si1 Ca2 120.35(4) . 6\_465 ?  
 O1 Si1 Ca2 120.35(4) 4 6\_465 ?  
 O2 Si1 Ca2 30.45(4) 1\_455 6\_465 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 75.253(13) . 6\_465 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 75.252(13) 4 6\_465 ?  
 Ca2 Si1 Ca2 140.778(15) 1\_545 6\_465 ?  
 Ca4 Si1 Ca2 112.329(9) . 6\_465 ?  
 Ca4 Si1 Ca2 112.328(9) 4 6\_465 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 68.909(11) 4\_565 6\_465 ?  
 Ca3 Si1 Ca2 68.909(11) 1\_565 6\_465 ?  
 O7 Si2 O5 116.40(5) 1\_565 7\_564 ?

O7 Si2 O4 117.65(5) 1\_565 . ?  
 O5 Si2 O4 107.45(5) 7\_564 . ?  
 O7 Si2 O6 108.84(5) 1\_565 . ?  
 O5 Si2 O6 102.44(5) 7\_564 . ?  
 O4 Si2 O6 102.03(5) . . ?  
 O7 Si2 Ca3 143.69(4) 1\_565 7\_554 ?  
 O5 Si2 Ca3 51.35(3) 7\_564 7\_554 ?  
 O4 Si2 Ca3 56.27(3) . 7\_554 ?  
 O6 Si2 Ca3 107.35(3) . 7\_554 ?  
 O7 Si2 Ca4 134.15(4) 1\_565 . ?  
 O5 Si2 Ca4 108.84(3) 7\_564 . ?  
 O4 Si2 Ca4 50.46(3) . . ?  
 O6 Si2 Ca4 51.98(3) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca4 73.332(9) 7\_554 . ?  
 O7 Si2 Ca1 130.87(3) 1\_565 7\_554 ?  
 O5 Si2 Ca1 51.97(3) 7\_564 7\_554 ?  
 O4 Si2 Ca1 110.73(3) . 7\_554 ?  
 O6 Si2 Ca1 50.61(3) . 7\_554 ?  
 Ca3 Si2 Ca1 72.821(9) 7\_554 7\_554 ?  
 Ca4 Si2 Ca1 73.566(9) . 7\_554 ?  
 O7 Si2 Ca3 37.76(3) 1\_565 7\_564 ?  
 O5 Si2 Ca3 95.09(3) 7\_564 7\_564 ?  
 O4 Si2 Ca3 99.57(3) . 7\_564 ?  
 O6 Si2 Ca3 146.48(3) . 7\_564 ?  
 Ca3 Si2 Ca3 105.935(12) 7\_554 7\_564 ?  
 Ca4 Si2 Ca3 145.657(13) . 7\_564 ?  
 Ca1 Si2 Ca3 140.112(14) 7\_554 7\_564 ?  
 O7 Si2 Ca4 86.98(4) 1\_565 7\_564 ?  
 O5 Si2 Ca4 31.13(3) 7\_564 7\_564 ?  
 O4 Si2 Ca4 117.07(3) . 7\_564 ?  
 O6 Si2 Ca4 124.53(3) . 7\_564 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 69.954(10) 7\_554 7\_564 ?  
 Ca4 Si2 Ca4 138.867(11) . 7\_564 ?  
 Ca1 Si2 Ca4 78.406(10) 7\_554 7\_564 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 64.673(9) 7\_564 7\_564 ?  
 O7 Si2 Ca4 36.01(4) 1\_565 1\_565 ?  
 O5 Si2 Ca4 152.36(3) 7\_564 1\_565 ?  
 O4 Si2 Ca4 93.37(3) . 1\_565 ?  
 O6 Si2 Ca4 90.36(3) . 1\_565 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 146.935(12) 7\_554 1\_565 ?  
 Ca4 Si2 Ca4 98.374(12) . 1\_565 ?  
 Ca1 Si2 Ca4 136.679(11) 7\_554 1\_565 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 62.939(7) 7\_564 1\_565 ?  
 Ca4 Si2 Ca4 122.570(9) 7\_564 1\_565 ?  
 O7 Si2 Ca2 87.62(3) 1\_565 . ?  
 O5 Si2 Ca2 119.24(3) 7\_564 . ?  
 O4 Si2 Ca2 30.99(3) . . ?  
 O6 Si2 Ca2 122.15(3) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca2 75.753(9) 7\_554 . ?  
 Ca4 Si2 Ca2 76.424(10) . . ?  
 Ca1 Si2 Ca2 141.413(11) 7\_554 . ?  
 Ca3 Si2 Ca2 70.385(9) 7\_564 . ?  
 Ca4 Si2 Ca2 110.980(11) 7\_564 . ?  
 Ca4 Si2 Ca2 71.181(9) 1\_565 . ?

O8 Si3 O8 108.95(7) 2 . ?  
 O8 Si3 O6 111.81(4) 2 2\_565 ?  
 O8 Si3 O6 110.28(4) . 2\_565 ?  
 O8 Si3 O6 110.28(4) 2 1\_545 ?  
 O8 Si3 O6 111.81(4) . 1\_545 ?  
 O6 Si3 O6 103.66(6) 2\_565 1\_545 ?  
 O8 Si3 Ca1 54.48(3) 2 . ?  
 O8 Si3 Ca1 54.48(3) . . ?  
 O6 Si3 Ca1 128.17(3) 2\_565 . ?  
 O6 Si3 Ca1 128.17(3) 1\_545 . ?  
 O8 Si3 Ca4 31.26(3) 2 2 ?  
 O8 Si3 Ca4 139.94(4) . 2 ?  
 O6 Si3 Ca4 96.21(3) 2\_565 2 ?  
 O6 Si3 Ca4 89.25(3) 1\_545 2 ?  
 Ca1 Si3 Ca4 85.587(8) . 2 ?  
 O8 Si3 Ca4 139.94(4) 2 . ?  
 O8 Si3 Ca4 31.26(3) . . ?  
 O6 Si3 Ca4 89.25(3) 2\_565 . ?  
 O6 Si3 Ca4 96.21(3) 1\_545 . ?  
 Ca1 Si3 Ca4 85.587(8) . . ?  
 Ca4 Si3 Ca4 171.174(16) 2 . ?  
 O8 Si3 Ca4 89.63(3) 2 2\_565 ?  
 O8 Si3 Ca4 85.27(3) . 2\_565 ?  
 O6 Si3 Ca4 42.58(3) 2\_565 2\_565 ?  
 O6 Si3 Ca4 146.19(4) 1\_545 2\_565 ?  
 Ca1 Si3 Ca4 85.611(8) . 2\_565 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 95.641(6) 2 2\_565 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 83.682(6) . 2\_565 ?  
 O8 Si3 Ca4 85.27(3) 2 1\_545 ?  
 O8 Si3 Ca4 89.63(3) . 1\_545 ?  
 O6 Si3 Ca4 146.19(4) 2\_565 1\_545 ?  
 O6 Si3 Ca4 42.58(3) 1\_545 1\_545 ?  
 Ca1 Si3 Ca4 85.611(8) . 1\_545 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 83.681(6) 2 1\_545 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 95.640(6) . 1\_545 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 171.221(16) 2\_565 1\_545 ?  
 Si1 O1 Ca4 128.11(5) . . ?  
 Si1 O1 Ca3 94.54(4) . . ?  
 Ca4 O1 Ca3 107.73(4) . . ?  
 Si1 O1 Ca2 95.84(4) . 1\_545 ?  
 Ca4 O1 Ca2 125.01(4) . 1\_545 ?  
 Ca3 O1 Ca2 98.27(3) . 1\_545 ?  
 Si1 O2 Ca2 128.41(6) 1\_655 6\_565 ?  
 Si1 O2 Ca3 93.52(4) 1\_655 1\_655 ?  
 Ca2 O2 Ca3 118.24(4) 6\_565 1\_655 ?  
 Si1 O2 Ca3 93.52(4) 1\_655 4\_655 ?  
 Ca2 O2 Ca3 118.24(4) 6\_565 4\_655 ?  
 Ca3 O2 Ca3 98.09(4) 1\_655 4\_655 ?  
 Si1 O3 Ca3 122.33(4) . 4\_565 ?  
 Si1 O3 Ca3 122.33(4) . 1\_565 ?  
 Ca3 O3 Ca3 95.41(5) 4\_565 1\_565 ?  
 Si1 O3 Ca2 120.72(7) . . ?  
 Ca3 O3 Ca2 94.47(4) 4\_565 . ?  
 Ca3 O3 Ca2 94.47(4) 1\_565 . ?

Si2 O4 Ca2 128.05(5) . . ?  
 Si2 O4 Ca4 98.69(4) . . ?  
 Ca2 O4 Ca4 121.10(4) . . ?  
 Si2 O4 Ca3 90.32(4) . 7\_554 ?  
 Ca2 O4 Ca3 114.79(4) . 7\_554 ?  
 Ca4 O4 Ca3 95.85(3) . 7\_554 ?  
 Si2 O5 Ca3 95.72(4) 7\_464 1\_565 ?  
 Si2 O5 Ca4 127.89(5) 7\_464 . ?  
 Ca3 O5 Ca4 108.17(4) 1\_565 . ?  
 Si2 O5 Ca1 98.88(4) 7\_464 1\_565 ?  
 Ca3 O5 Ca1 97.33(3) 1\_565 1\_565 ?  
 Ca4 O5 Ca1 122.02(4) . 1\_565 ?  
 Si3 O6 Si2 120.89(5) 1\_565 . ?  
 Si3 O6 Ca4 110.35(5) 1\_565 . ?  
 Si2 O6 Ca4 95.25(4) . . ?  
 Si3 O6 Ca1 126.63(4) 1\_565 7\_554 ?  
 Si2 O6 Ca1 98.38(4) . 7\_554 ?  
 Ca4 O6 Ca1 99.28(3) . 7\_554 ?  
 Si2 O7 Ca3 117.44(5) 1\_545 7\_554 ?  
 Si2 O7 Ca4 121.36(5) 1\_545 . ?  
 Ca3 O7 Ca4 98.55(3) 7\_554 . ?  
 Si2 O7 Ca1 120.17(4) 1\_545 7\_554 ?  
 Ca3 O7 Ca1 96.16(3) 7\_554 7\_554 ?  
 Ca4 O7 Ca1 98.05(3) . 7\_554 ?  
 Si3 O8 Ca4 126.99(5) . . ?  
 Si3 O8 Ca1 92.38(4) . . ?  
 Ca4 O8 Ca1 140.19(4) . . ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 1.000  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 40.24  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 1.000  
 \_refine\_diff\_density\_max 0.433  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.398  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.099