

data\_casio1\_0m

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'Ca8 O18 Si5'  
\_chemical\_formula\_weight 749.09

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+1/2, -y+1/2, z+1/2'  
'x+1/2, -y+1/2, -z'  
'-x, y, -z+1/2'  
'-x, -y, -z'  
'x-1/2, y-1/2, -z-1/2'  
'-x-1/2, y-1/2, z'  
'x, -y, z-1/2'

\_cell\_length\_a 5.08510(10)  
\_cell\_length\_b 11.4165(3)  
\_cell\_length\_c 28.6408(8)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 90.00  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 1662.71(7)  
\_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         ?
_exptl_crystal_size_mid         ?
_exptl_crystal_size_min         ?
_exptl_crystal_density_meas     ?
_exptl_crystal_density_diffn    2.992
_exptl_crystal_density_method   'not measured'
_exptl_crystal_F_000            1496
_exptl_absorpt_coefficient_mu    2.996
_exptl_absorpt_correction_type  ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details  ?

_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_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            14962
_diffn_reflns_av_R_equivalents  0.0698
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0741
_diffn_reflns_limit_h_min       -6
_diffn_reflns_limit_h_max       7
_diffn_reflns_limit_k_min       -16
_diffn_reflns_limit_k_max       16
_diffn_reflns_limit_l_min       -34
_diffn_reflns_limit_l_max       40
_diffn_reflns_theta_min         1.42
_diffn_reflns_theta_max         30.50
_reflns_number_total            2543
_reflns_number_gt               1685
_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^)+(0.0000P)^2^+1.8156P] 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\_number\_reflns 2543  
\_refine\_ls\_number\_parameters 143  
\_refine\_ls\_number\_restraints 0  
\_refine\_ls\_R\_factor\_all 0.0669  
\_refine\_ls\_R\_factor\_gt 0.0387  
\_refine\_ls\_wR\_factor\_ref 0.1012  
\_refine\_ls\_wR\_factor\_gt 0.0878  
\_refine\_ls\_goodness\_of\_fit\_ref 1.021  
\_refine\_ls\_restrained\_S\_all 1.021  
\_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  
Si1 Si 0.57130(16) 0.40471(8) 0.44237(3) 0.01033(17) Uani 1 1 d . . .  
Si2 Si 0.44100(16) 0.59487(8) 0.32685(3) 0.01072(18) Uani 1 1 d . . .  
Si3 Si 0.5000 0.76288(10) 0.2500 0.0104(2) Uani 1 2 d S . .

Ca1 Ca 0.49692(12) 0.71708(5) 0.44226(2) 0.01152(13) Uani 1 1 d . . .  
 Ca2 Ca 0.0000 0.5000 0.5000 0.01216(18) Uani 1 2 d S . .  
 Ca3 Ca 0.99397(13) 0.48889(6) 0.37768(2) 0.01380(14) Uani 1 1 d . . .  
 Ca4 Ca 0.50366(12) 0.28416(5) 0.33030(2) 0.01147(14) Uani 1 1 d . . .  
 Ca5 Ca 0.0000 0.51645(8) 0.2500 0.01329(18) Uani 1 2 d S . .  
 O1 O 0.7049(4) 0.53615(19) 0.44034(8) 0.0129(4) Uani 1 1 d . . .  
 O2 O 0.7027(4) 0.3358(2) 0.39786(8) 0.0138(5) Uani 1 1 d . . .  
 O3 O 0.7018(4) 0.34189(19) 0.48832(8) 0.0129(5) Uani 1 1 d . . .  
 O4 O 0.2523(4) 0.4051(2) 0.44082(8) 0.0124(4) Uani 1 1 d . . .  
 O5 O 0.3015(4) 0.6569(2) 0.37139(8) 0.0141(5) Uani 1 1 d . . .  
 O6 O 0.3092(4) 0.4676(2) 0.32021(9) 0.0142(5) Uani 1 1 d . . .  
 O7 O 0.3118(4) 0.67239(19) 0.28132(8) 0.0123(5) Uani 1 1 d . . .  
 O8 O 0.7570(4) 0.5992(2) 0.32323(8) 0.0129(5) Uani 1 1 d . . .  
 O9 O 0.6745(4) 0.8431(2) 0.28283(9) 0.0168(5) 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

Si1 0.0098(3) 0.0098(4) 0.0113(4) 0.0006(4) -0.0004(3) 0.0004(3)  
 Si2 0.0098(4) 0.0102(4) 0.0122(4) 0.0008(4) -0.0001(3) -0.0005(3)  
 Si3 0.0113(5) 0.0093(5) 0.0106(6) 0.000 -0.0009(5) 0.000  
 Ca1 0.0123(3) 0.0096(3) 0.0127(3) 0.0003(2) 0.0001(3) -0.0002(2)  
 Ca2 0.0107(4) 0.0137(4) 0.0121(4) -0.0021(3) -0.0021(3) -0.0007(3)  
 Ca3 0.0112(3) 0.0150(3) 0.0152(3) 0.0045(3) 0.0013(3) 0.0004(2)  
 Ca4 0.0116(3) 0.0100(3) 0.0128(3) -0.0008(2) 0.0002(3) -0.0005(2)  
 Ca5 0.0142(4) 0.0105(4) 0.0152(4) 0.000 0.0004(4) 0.000  
 O1 0.0121(9) 0.0107(10) 0.0158(12) 0.0013(10) 0.0005(9) 0.0002(8)  
 O2 0.0121(10) 0.0151(11) 0.0141(12) -0.0018(10) -0.0003(9) 0.0013(9)  
 O3 0.0124(10) 0.0126(11) 0.0138(12) 0.0006(10) -0.0008(9) 0.0008(9)  
 O4 0.0082(9) 0.0151(11) 0.0140(11) -0.0003(10) -0.0007(8) 0.0018(8)  
 O5 0.0126(10) 0.0165(12) 0.0133(12) -0.0004(10) 0.0004(9) 0.0006(9)  
 O6 0.0119(10) 0.0120(11) 0.0186(13) -0.0001(10) -0.0005(9) 0.0007(9)  
 O7 0.0096(9) 0.0126(11) 0.0146(12) 0.0016(10) 0.0005(9) -0.0005(8)  
 O8 0.0109(9) 0.0123(11) 0.0155(12) 0.0021(10) 0.0002(8) -0.0008(8)  
 O9 0.0176(11) 0.0130(11) 0.0199(14) 0.0005(10) -0.0060(10) 0.0000(9)

\_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  
 Si1 O4 1.623(2) . ?  
 Si1 O3 1.639(2) . ?  
 Si1 O2 1.640(3) . ?  
 Si1 O1 1.648(2) . ?  
 Si1 Ca2 2.9428(9) 1\_655 ?  
 Si1 Ca3 2.9961(11) . ?  
 Si1 Ca1 3.0675(10) 7\_755 ?  
 Si1 Ca4 3.5093(11) . ?  
 Si1 Ca2 3.5139(9) . ?  
 Si1 Ca1 3.5861(11) . ?  
 Si1 Ca1 3.5969(11) 7\_655 ?  
 Si1 Ca1 3.6015(11) 5\_666 ?  
 Si2 O8 1.611(2) . ?  
 Si2 O6 1.611(2) . ?  
 Si2 O5 1.623(3) . ?  
 Si2 O7 1.707(2) . ?  
 Si2 Ca3 2.9581(11) 1\_455 ?  
 Si2 Ca4 3.1293(11) 7\_665 ?  
 Si2 Ca5 3.2673(9) . ?  
 Si2 Ca3 3.3897(11) . ?  
 Si2 Ca4 3.5573(11) 7\_765 ?  
 Si2 Ca4 3.5629(11) . ?  
 Si2 Ca1 3.5991(11) . ?  
 Si3 O9 1.584(2) . ?  
 Si3 O9 1.584(2) 4\_655 ?  
 Si3 O7 1.670(2) . ?  
 Si3 O7 1.670(2) 4\_655 ?  
 Si3 Ca5 2.8949(15) 6\_666 ?  
 Si3 Ca4 3.4234(6) 7\_765 ?  
 Si3 Ca4 3.4234(6) 6\_566 ?  
 Si3 Ca4 3.4509(6) 7\_665 ?  
 Si3 Ca4 3.4509(7) 6\_666 ?  
 Ca1 O1 2.321(2) . ?  
 Ca1 O3 2.330(2) 5\_666 ?  
 Ca1 O5 2.362(2) . ?  
 Ca1 O2 2.406(2) 7\_765 ?  
 Ca1 O3 2.473(2) 7\_765 ?  
 Ca1 O4 2.493(2) 7\_665 ?  
 Ca1 Si1 3.0675(11) 7\_765 ?  
 Ca1 Si1 3.5969(11) 7\_665 ?  
 Ca1 Si1 3.6015(11) 5\_666 ?  
 Ca1 Ca3 3.6129(9) 7\_765 ?  
 Ca2 O1 2.311(2) 5\_666 ?  
 Ca2 O1 2.311(2) 1\_455 ?  
 Ca2 O3 2.381(2) 1\_455 ?  
 Ca2 O3 2.381(2) 5\_666 ?  
 Ca2 O4 2.386(2) 5\_566 ?  
 Ca2 O4 2.386(2) . ?  
 Ca2 Si1 2.9428(9) 1\_455 ?  
 Ca2 Si1 2.9429(9) 5\_666 ?  
 Ca2 Ca3 3.5059(7) 1\_455 ?

Ca2 Ca3 3.5059(7) 5\_666 ?  
 Ca2 Si1 3.5139(9) 5\_566 ?  
 Ca3 O6 2.310(2) 1\_655 ?  
 Ca3 O8 2.339(2) . ?  
 Ca3 O2 2.363(2) . ?  
 Ca3 O1 2.382(2) . ?  
 Ca3 O4 2.431(2) 1\_655 ?  
 Ca3 O5 2.482(2) 1\_655 ?  
 Ca3 Si2 2.9581(11) 1\_655 ?  
 Ca3 Ca2 3.5058(7) 1\_655 ?  
 Ca3 Si1 3.6021(11) 1\_655 ?  
 Ca3 Ca1 3.6128(9) 7\_755 ?  
 Ca4 O9 2.232(2) 7\_755 ?  
 Ca4 O2 2.262(2) . ?  
 Ca4 O6 2.334(2) . ?  
 Ca4 O5 2.429(2) 7\_655 ?  
 Ca4 O8 2.445(2) 7\_755 ?  
 Ca4 O7 2.484(2) 7\_655 ?  
 Ca4 Si2 3.1293(11) 7\_655 ?  
 Ca4 Si3 3.4233(6) 6\_656 ?  
 Ca4 Si3 3.4508(6) 6\_556 ?  
 Ca4 Si2 3.5574(10) 7\_755 ?  
 Ca5 O9 2.364(2) 7\_655 ?  
 Ca5 O9 2.364(2) 6\_556 ?  
 Ca5 O7 2.547(2) . ?  
 Ca5 O7 2.547(2) 4 ?  
 Ca5 O8 2.611(2) 1\_455 ?  
 Ca5 O8 2.611(2) 4\_655 ?  
 Ca5 O6 2.613(2) . ?  
 Ca5 O6 2.613(2) 4 ?  
 Ca5 Si3 2.8948(15) 6\_556 ?  
 Ca5 Si2 3.2673(9) 4 ?  
 Ca5 Ca3 3.6704(7) 4\_655 ?  
 O1 Ca2 2.311(2) 1\_655 ?  
 O2 Ca1 2.406(2) 7\_755 ?  
 O3 Ca1 2.330(2) 5\_666 ?  
 O3 Ca2 2.381(2) 1\_655 ?  
 O3 Ca1 2.473(2) 7\_755 ?  
 O4 Ca3 2.431(2) 1\_455 ?  
 O4 Ca1 2.493(2) 7\_655 ?  
 O5 Ca4 2.429(2) 7\_665 ?  
 O5 Ca3 2.482(2) 1\_455 ?  
 O6 Ca3 2.310(2) 1\_455 ?  
 O7 Ca4 2.484(2) 7\_665 ?  
 O8 Ca4 2.445(2) 7\_765 ?  
 O8 Ca5 2.611(2) 1\_655 ?  
 O9 Ca4 2.232(2) 7\_765 ?  
 O9 Ca5 2.364(2) 6\_666 ?

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  
 O4 Si1 O3 115.34(12) . . ?  
 O4 Si1 O2 112.78(13) . . ?  
 O3 Si1 O2 104.43(12) . . ?  
 O4 Si1 O1 114.10(12) . . ?  
 O3 Si1 O1 105.06(12) . . ?  
 O2 Si1 O1 103.96(12) . . ?  
 O4 Si1 Ca2 139.00(10) . 1\_655 ?  
 O3 Si1 Ca2 53.95(8) . 1\_655 ?  
 O2 Si1 Ca2 108.15(9) . 1\_655 ?  
 O1 Si1 Ca2 51.53(8) . 1\_655 ?  
 O4 Si1 Ca3 134.37(10) . . ?  
 O3 Si1 Ca3 110.26(9) . . ?  
 O2 Si1 Ca3 51.76(9) . . ?  
 O1 Si1 Ca3 52.44(8) . . ?  
 Ca2 Si1 Ca3 72.35(2) 1\_655 . ?  
 O4 Si1 Ca1 135.85(9) . 7\_755 ?  
 O3 Si1 Ca1 53.52(8) . 7\_755 ?  
 O2 Si1 Ca1 51.15(9) . 7\_755 ?  
 O1 Si1 Ca1 109.92(8) . 7\_755 ?  
 Ca2 Si1 Ca1 74.25(2) 1\_655 7\_755 ?  
 Ca3 Si1 Ca1 73.13(3) . 7\_755 ?  
 O4 Si1 Ca4 83.00(9) . . ?  
 O3 Si1 Ca4 127.05(9) . . ?  
 O2 Si1 Ca4 30.78(8) . . ?  
 O1 Si1 Ca4 111.41(9) . . ?  
 Ca2 Si1 Ca4 136.94(3) 1\_655 . ?  
 Ca3 Si1 Ca4 68.31(2) . . ?  
 Ca1 Si1 Ca4 78.19(3) 7\_755 . ?  
 O4 Si1 Ca2 35.46(8) . . ?  
 O3 Si1 Ca2 95.34(9) . . ?  
 O2 Si1 Ca2 148.24(9) . . ?  
 O1 Si1 Ca2 94.33(8) . . ?  
 Ca2 Si1 Ca2 103.57(3) 1\_655 . ?  
 Ca3 Si1 Ca2 141.65(3) . . ?  
 Ca1 Si1 Ca2 143.95(3) 7\_755 . ?  
 Ca4 Si1 Ca2 118.03(3) . . ?  
 O4 Si1 Ca1 83.77(9) . . ?  
 O3 Si1 Ca1 118.59(9) . . ?  
 O2 Si1 Ca1 121.28(9) . . ?  
 O1 Si1 Ca1 30.47(8) . . ?  
 Ca2 Si1 Ca1 73.20(2) 1\_655 . ?  
 Ca3 Si1 Ca1 75.89(3) . . ?  
 Ca1 Si1 Ca1 140.35(3) 7\_755 . ?  
 Ca4 Si1 Ca1 112.26(3) . . ?  
 Ca2 Si1 Ca1 66.756(19) . . ?  
 O4 Si1 Ca1 36.75(9) . 7\_655 ?  
 O3 Si1 Ca1 93.75(8) . 7\_655 ?  
 O2 Si1 Ca1 92.34(9) . 7\_655 ?  
 O1 Si1 Ca1 150.84(9) . 7\_655 ?  
 Ca2 Si1 Ca1 144.66(3) 1\_655 7\_655 ?  
 Ca3 Si1 Ca1 140.06(3) . 7\_655 ?

Ca1 Si1 Ca1 99.16(3) 7\_755 7\_655 ?  
 Ca4 Si1 Ca1 71.75(2) . 7\_655 ?  
 Ca2 Si1 Ca1 61.357(17) . 7\_655 ?  
 Ca1 Si1 Ca1 120.50(2) . 7\_655 ?  
 O4 Si1 Ca1 85.98(9) . 5\_666 ?  
 O3 Si1 Ca1 29.95(8) . 5\_666 ?  
 O2 Si1 Ca1 124.55(9) . 5\_666 ?  
 O1 Si1 Ca1 115.06(9) . 5\_666 ?  
 Ca2 Si1 Ca1 72.51(2) 1\_655 5\_666 ?  
 Ca3 Si1 Ca1 139.49(3) . 5\_666 ?  
 Ca1 Si1 Ca1 78.48(2) 7\_755 5\_666 ?  
 Ca4 Si1 Ca1 132.71(3) . 5\_666 ?  
 Ca2 Si1 Ca1 66.981(19) . 5\_666 ?  
 Ca1 Si1 Ca1 112.00(3) . 5\_666 ?  
 Ca1 Si1 Ca1 72.15(2) 7\_655 5\_666 ?  
 O8 Si2 O6 115.79(13) . . ?  
 O8 Si2 O5 118.24(13) . . ?  
 O6 Si2 O5 107.73(13) . . ?  
 O8 Si2 O7 108.59(12) . . ?  
 O6 Si2 O7 102.55(12) . . ?  
 O5 Si2 O7 101.88(12) . . ?  
 O8 Si2 Ca3 144.17(10) . 1\_455 ?  
 O6 Si2 Ca3 50.92(9) . 1\_455 ?  
 O5 Si2 Ca3 57.03(9) . 1\_455 ?  
 O7 Si2 Ca3 106.99(8) . 1\_455 ?  
 O8 Si2 Ca4 134.55(10) . 7\_665 ?  
 O6 Si2 Ca4 109.02(9) . 7\_665 ?  
 O5 Si2 Ca4 50.03(9) . 7\_665 ?  
 O7 Si2 Ca4 52.28(8) . 7\_665 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 73.24(3) 1\_455 7\_665 ?  
 O8 Si2 Ca5 130.52(9) . . ?  
 O6 Si2 Ca5 52.26(9) . . ?  
 O5 Si2 Ca5 110.44(9) . . ?  
 O7 Si2 Ca5 50.47(8) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca5 72.06(2) 1\_455 . ?  
 Ca4 Si2 Ca5 73.42(2) 7\_665 . ?  
 O8 Si2 Ca3 37.92(9) . . ?  
 O6 Si2 Ca3 94.24(9) . . ?  
 O5 Si2 Ca3 100.42(9) . . ?  
 O7 Si2 Ca3 146.32(8) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca3 106.27(3) 1\_455 . ?  
 Ca4 Si2 Ca3 146.34(4) 7\_665 . ?  
 Ca5 Si2 Ca3 139.54(3) . . ?  
 O8 Si2 Ca4 36.03(9) . 7\_765 ?  
 O6 Si2 Ca4 151.80(9) . 7\_765 ?  
 O5 Si2 Ca4 93.44(9) . 7\_765 ?  
 O7 Si2 Ca4 90.68(8) . 7\_765 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 147.65(4) 1\_455 7\_765 ?  
 Ca4 Si2 Ca4 98.81(3) 7\_665 7\_765 ?  
 Ca5 Si2 Ca4 136.89(3) . 7\_765 ?  
 Ca3 Si2 Ca4 63.02(2) . 7\_765 ?  
 O8 Si2 Ca4 86.74(9) . . ?  
 O6 Si2 Ca4 30.99(8) . . ?  
 O5 Si2 Ca4 116.87(9) . . ?



O7 Si2 Ca4 124.87(9) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca4 69.38(2) 1\_455 . ?  
 Ca4 Si2 Ca4 138.70(3) 7\_665 . ?  
 Ca5 Si2 Ca4 78.89(3) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca4 63.80(2) . . ?  
 Ca4 Si2 Ca4 122.21(2) 7\_765 . ?  
 O8 Si2 Ca1 88.18(9) . . ?  
 O6 Si2 Ca1 119.39(10) . . ?  
 O5 Si2 Ca1 31.04(8) . . ?  
 O7 Si2 Ca1 122.07(9) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca1 76.54(3) 1\_455 . ?  
 Ca4 Si2 Ca1 76.13(2) 7\_665 . ?  
 Ca5 Si2 Ca1 141.18(3) . . ?  
 Ca3 Si2 Ca1 71.24(2) . . ?  
 Ca4 Si2 Ca1 71.11(2) 7\_765 . ?  
 Ca4 Si2 Ca1 110.69(3) . . ?  
 O9 Si3 O9 109.36(18) . 4\_655 ?  
 O9 Si3 O7 111.09(12) . . ?  
 O9 Si3 O7 110.83(11) 4\_655 . ?  
 O9 Si3 O7 110.83(11) . 4\_655 ?  
 O9 Si3 O7 111.09(12) 4\_655 4\_655 ?  
 O7 Si3 O7 103.55(16) . 4\_655 ?  
 O9 Si3 Ca5 54.68(9) . 6\_666 ?  
 O9 Si3 Ca5 54.68(9) 4\_655 6\_666 ?  
 O7 Si3 Ca5 128.22(8) . 6\_666 ?  
 O7 Si3 Ca5 128.22(8) 4\_655 6\_666 ?  
 O9 Si3 Ca4 31.50(8) . 7\_765 ?  
 O9 Si3 Ca4 140.40(10) 4\_655 7\_765 ?  
 O7 Si3 Ca4 96.06(8) . 7\_765 ?  
 O7 Si3 Ca4 88.99(8) 4\_655 7\_765 ?  
 Ca5 Si3 Ca4 85.93(2) 6\_666 7\_765 ?  
 O9 Si3 Ca4 140.40(10) . 6\_566 ?  
 O9 Si3 Ca4 31.50(8) 4\_655 6\_566 ?  
 O7 Si3 Ca4 88.98(8) . 6\_566 ?  
 O7 Si3 Ca4 96.06(8) 4\_655 6\_566 ?  
 Ca5 Si3 Ca4 85.93(2) 6\_666 6\_566 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 171.86(4) 7\_765 6\_566 ?  
 O9 Si3 Ca4 88.82(9) . 7\_665 ?  
 O9 Si3 Ca4 86.52(9) 4\_655 7\_665 ?  
 O7 Si3 Ca4 42.28(8) . 7\_665 ?  
 O7 Si3 Ca4 145.80(9) 4\_655 7\_665 ?  
 Ca5 Si3 Ca4 85.96(2) 6\_666 7\_665 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 95.417(17) 7\_765 7\_665 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 84.008(17) 6\_566 7\_665 ?  
 O9 Si3 Ca4 86.52(9) . 6\_666 ?  
 O9 Si3 Ca4 88.82(9) 4\_655 6\_666 ?  
 O7 Si3 Ca4 145.79(9) . 6\_666 ?  
 O7 Si3 Ca4 42.28(8) 4\_655 6\_666 ?  
 Ca5 Si3 Ca4 85.96(2) 6\_666 6\_666 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 84.008(17) 7\_765 6\_666 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 95.417(17) 6\_566 6\_666 ?  
 Ca4 Si3 Ca4 171.93(4) 7\_665 6\_666 ?  
 O1 Ca1 O3 87.76(8) . 5\_666 ?  
 O1 Ca1 O5 84.99(8) . . ?

O3 Ca1 O5 117.83(8) 5\_666 . ?  
 O1 Ca1 O2 101.50(8) . 7\_765 ?  
 O3 Ca1 O2 152.80(8) 5\_666 7\_765 ?  
 O5 Ca1 O2 88.66(8) . 7\_765 ?  
 O1 Ca1 O3 104.07(8) . 7\_765 ?  
 O3 Ca1 O3 88.85(5) 5\_666 7\_765 ?  
 O5 Ca1 O3 152.43(8) . 7\_765 ?  
 O2 Ca1 O3 64.16(8) 7\_765 7\_765 ?  
 O1 Ca1 O4 175.87(8) . 7\_665 ?  
 O3 Ca1 O4 92.43(8) 5\_666 7\_665 ?  
 O5 Ca1 O4 91.28(8) . 7\_665 ?  
 O2 Ca1 O4 80.15(8) 7\_765 7\_665 ?  
 O3 Ca1 O4 80.06(7) 7\_765 7\_665 ?  
 O1 Ca1 Si1 107.17(6) . 7\_765 ?  
 O3 Ca1 Si1 120.76(6) 5\_666 7\_765 ?  
 O5 Ca1 Si1 120.33(6) . 7\_765 ?  
 O2 Ca1 Si1 32.07(6) 7\_765 7\_765 ?  
 O3 Ca1 Si1 32.20(6) 7\_765 7\_765 ?  
 O4 Ca1 Si1 76.26(5) 7\_665 7\_765 ?  
 O1 Ca1 Si1 21.11(6) . . ?  
 O3 Ca1 Si1 75.98(6) 5\_666 . ?  
 O5 Ca1 Si1 75.88(6) . . ?  
 O2 Ca1 Si1 119.58(6) 7\_765 . ?  
 O3 Ca1 Si1 120.47(6) 7\_765 . ?  
 O4 Ca1 Si1 155.49(6) 7\_665 . ?  
 Si1 Ca1 Si1 128.24(2) 7\_765 . ?  
 O1 Ca1 Si1 153.64(6) . 7\_665 ?  
 O3 Ca1 Si1 79.79(6) 5\_666 7\_665 ?  
 O5 Ca1 Si1 80.55(6) . 7\_665 ?  
 O2 Ca1 Si1 100.08(6) 7\_765 7\_665 ?  
 O3 Ca1 Si1 98.86(6) 7\_765 7\_665 ?  
 O4 Ca1 Si1 22.92(5) 7\_665 7\_665 ?  
 Si1 Ca1 Si1 99.16(3) 7\_765 7\_665 ?  
 Si1 Ca1 Si1 132.61(2) . 7\_665 ?  
 O1 Ca1 Si2 70.69(6) . . ?  
 O3 Ca1 Si2 129.60(6) 5\_666 . ?  
 O5 Ca1 Si2 20.74(6) . . ?  
 O2 Ca1 Si2 77.47(6) 7\_765 . ?  
 O3 Ca1 Si2 139.65(6) 7\_765 . ?  
 O4 Ca1 Si2 106.17(6) 7\_665 . ?  
 Si1 Ca1 Si2 109.16(3) 7\_765 . ?  
 Si1 Ca1 Si2 67.89(2) . . ?  
 Si1 Ca1 Si2 99.68(2) 7\_665 . ?  
 O1 Ca1 Si1 73.87(6) . 5\_666 ?  
 O3 Ca1 Si1 20.57(6) 5\_666 5\_666 ?  
 O5 Ca1 Si1 129.47(6) . 5\_666 ?  
 O2 Ca1 Si1 139.78(6) 7\_765 5\_666 ?  
 O3 Ca1 Si1 78.04(6) 7\_765 5\_666 ?  
 O4 Ca1 Si1 107.37(6) 7\_665 5\_666 ?  
 Si1 Ca1 Si1 109.73(3) 7\_765 5\_666 ?  
 Si1 Ca1 Si1 68.01(3) . 5\_666 ?  
 Si1 Ca1 Si1 98.73(3) 7\_665 5\_666 ?  
 Si2 Ca1 Si1 133.26(3) . 5\_666 ?  
 O1 Ca1 Ca3 138.27(6) . 7\_765 ?

O3 Ca1 Ca3 133.68(6) 5\_666 7\_765 ?  
 O5 Ca1 Ca3 79.34(6) . 7\_765 ?  
 O2 Ca1 Ca3 40.30(6) 7\_765 7\_765 ?  
 O3 Ca1 Ca3 76.72(5) 7\_765 7\_765 ?  
 O4 Ca1 Ca3 42.14(5) 7\_665 7\_765 ?  
 Si1 Ca1 Ca3 52.52(2) 7\_765 7\_765 ?  
 Si1 Ca1 Ca3 148.56(3) . 7\_765 ?  
 Si1 Ca1 Ca3 59.95(2) 7\_665 7\_765 ?  
 Si2 Ca1 Ca3 82.17(2) . 7\_765 ?  
 Si1 Ca1 Ca3 143.37(3) 5\_666 7\_765 ?  
 O1 Ca2 O1 180.00(8) 5\_666 1\_455 ?  
 O1 Ca2 O3 112.45(8) 5\_666 1\_455 ?  
 O1 Ca2 O3 67.55(8) 1\_455 1\_455 ?  
 O1 Ca2 O3 67.55(8) 5\_666 5\_666 ?  
 O1 Ca2 O3 112.45(8) 1\_455 5\_666 ?  
 O3 Ca2 O3 180.0 1\_455 5\_666 ?  
 O1 Ca2 O4 84.54(8) 5\_666 5\_566 ?  
 O1 Ca2 O4 95.45(8) 1\_455 5\_566 ?  
 O3 Ca2 O4 95.83(8) 1\_455 5\_566 ?  
 O3 Ca2 O4 84.17(7) 5\_666 5\_566 ?  
 O1 Ca2 O4 95.46(8) 5\_666 . ?  
 O1 Ca2 O4 84.54(8) 1\_455 . ?  
 O3 Ca2 O4 84.17(7) 1\_455 . ?  
 O3 Ca2 O4 95.83(8) 5\_666 . ?  
 O4 Ca2 O4 179.998(1) 5\_566 . ?  
 O1 Ca2 Si1 146.06(6) 5\_666 1\_455 ?  
 O1 Ca2 Si1 33.94(6) 1\_455 1\_455 ?  
 O3 Ca2 Si1 33.82(6) 1\_455 1\_455 ?  
 O3 Ca2 Si1 146.18(6) 5\_666 1\_455 ?  
 O4 Ca2 Si1 99.67(5) 5\_566 1\_455 ?  
 O4 Ca2 Si1 80.33(5) . 1\_455 ?  
 O1 Ca2 Si1 33.94(6) 5\_666 5\_666 ?  
 O1 Ca2 Si1 146.06(6) 1\_455 5\_666 ?  
 O3 Ca2 Si1 146.18(6) 1\_455 5\_666 ?  
 O3 Ca2 Si1 33.82(6) 5\_666 5\_666 ?  
 O4 Ca2 Si1 80.33(5) 5\_566 5\_666 ?  
 O4 Ca2 Si1 99.67(5) . 5\_666 ?  
 Si1 Ca2 Si1 180.0 1\_455 5\_666 ?  
 O1 Ca2 Ca3 137.56(6) 5\_666 1\_455 ?  
 O1 Ca2 Ca3 42.44(6) 1\_455 1\_455 ?  
 O3 Ca2 Ca3 80.02(6) 1\_455 1\_455 ?  
 O3 Ca2 Ca3 99.98(6) 5\_666 1\_455 ?  
 O4 Ca2 Ca3 136.19(5) 5\_566 1\_455 ?  
 O4 Ca2 Ca3 43.81(5) . 1\_455 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 54.53(2) 1\_455 1\_455 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 125.47(2) 5\_666 1\_455 ?  
 O1 Ca2 Ca3 42.44(6) 5\_666 5\_666 ?  
 O1 Ca2 Ca3 137.56(6) 1\_455 5\_666 ?  
 O3 Ca2 Ca3 99.98(6) 1\_455 5\_666 ?  
 O3 Ca2 Ca3 80.02(6) 5\_666 5\_666 ?  
 O4 Ca2 Ca3 43.81(5) 5\_566 5\_666 ?  
 O4 Ca2 Ca3 136.19(5) . 5\_666 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 125.48(2) 1\_455 5\_666 ?  
 Si1 Ca2 Ca3 54.52(2) 5\_666 5\_666 ?

Ca3 Ca2 Ca3 180.0 1\_455 5\_666 ?  
 O1 Ca2 Si1 75.83(6) 5\_666 . ?  
 O1 Ca2 Si1 104.17(6) 1\_455 . ?  
 O3 Ca2 Si1 103.05(5) 1\_455 . ?  
 O3 Ca2 Si1 76.95(5) 5\_666 . ?  
 O4 Ca2 Si1 156.76(5) 5\_566 . ?  
 O4 Ca2 Si1 23.25(5) . . ?  
 Si1 Ca2 Si1 103.57(3) 1\_455 . ?  
 Si1 Ca2 Si1 76.44(3) 5\_666 . ?  
 Ca3 Ca2 Si1 61.748(18) 1\_455 . ?  
 Ca3 Ca2 Si1 118.252(18) 5\_666 . ?  
 O1 Ca2 Si1 104.17(6) 5\_666 5\_566 ?  
 O1 Ca2 Si1 75.83(6) 1\_455 5\_566 ?  
 O3 Ca2 Si1 76.95(5) 1\_455 5\_566 ?  
 O3 Ca2 Si1 103.05(5) 5\_666 5\_566 ?  
 O4 Ca2 Si1 23.24(5) 5\_566 5\_566 ?  
 O4 Ca2 Si1 156.76(5) . 5\_566 ?  
 Si1 Ca2 Si1 76.44(3) 1\_455 5\_566 ?  
 Si1 Ca2 Si1 103.56(3) 5\_666 5\_566 ?  
 Ca3 Ca2 Si1 118.253(18) 1\_455 5\_566 ?  
 Ca3 Ca2 Si1 61.746(18) 5\_666 5\_566 ?  
 Si1 Ca2 Si1 180.0 . 5\_566 ?  
 O6 Ca3 O8 86.51(8) 1\_655 . ?  
 O6 Ca3 O2 122.10(8) 1\_655 . ?  
 O8 Ca3 O2 103.80(8) . . ?  
 O6 Ca3 O1 171.43(8) 1\_655 . ?  
 O8 Ca3 O1 93.58(8) . . ?  
 O2 Ca3 O1 66.20(8) . . ?  
 O6 Ca3 O4 96.53(8) 1\_655 1\_655 ?  
 O8 Ca3 O4 170.45(9) . 1\_655 ?  
 O2 Ca3 O4 82.29(8) . 1\_655 ?  
 O1 Ca3 O4 82.06(8) . 1\_655 ?  
 O6 Ca3 O5 65.94(8) 1\_655 1\_655 ?  
 O8 Ca3 O5 81.95(8) . 1\_655 ?  
 O2 Ca3 O5 169.95(8) . 1\_655 ?  
 O1 Ca3 O5 105.57(8) . 1\_655 ?  
 O4 Ca3 O5 91.01(8) 1\_655 1\_655 ?  
 O6 Ca3 Si2 32.78(6) 1\_655 1\_655 ?  
 O8 Ca3 Si2 81.23(6) . 1\_655 ?  
 O2 Ca3 Si2 154.78(7) . 1\_655 ?  
 O1 Ca3 Si2 138.80(6) . 1\_655 ?  
 O4 Ca3 Si2 96.42(6) 1\_655 1\_655 ?  
 O5 Ca3 Si2 33.26(6) 1\_655 1\_655 ?  
 O6 Ca3 Si1 154.77(7) 1\_655 . ?  
 O8 Ca3 Si1 102.45(6) . . ?  
 O2 Ca3 Si1 33.04(6) . . ?  
 O1 Ca3 Si1 33.27(6) . . ?  
 O4 Ca3 Si1 78.54(6) 1\_655 . ?  
 O5 Ca3 Si1 138.15(6) 1\_655 . ?  
 Si2 Ca3 Si1 170.69(4) 1\_655 . ?  
 O6 Ca3 Si2 107.89(6) 1\_655 . ?  
 O8 Ca3 Si2 25.05(6) . . ?  
 O2 Ca3 Si2 81.32(6) . . ?  
 O1 Ca3 Si2 74.38(6) . . ?

O4 Ca3 Si2 155.24(6) 1\_655 . ?  
 O5 Ca3 Si2 102.45(6) 1\_655 . ?  
 Si2 Ca3 Si2 106.27(3) 1\_655 . ?  
 Si1 Ca3 Si2 77.58(3) . . ?  
 O6 Ca3 Ca2 135.21(6) 1\_655 1\_655 ?  
 O8 Ca3 Ca2 130.64(6) . 1\_655 ?  
 O2 Ca3 Ca2 77.75(6) . 1\_655 ?  
 O1 Ca3 Ca2 40.90(6) . 1\_655 ?  
 O4 Ca3 Ca2 42.78(5) 1\_655 1\_655 ?  
 O5 Ca3 Ca2 92.24(6) 1\_655 1\_655 ?  
 Si2 Ca3 Ca2 118.05(3) 1\_655 1\_655 ?  
 Si1 Ca3 Ca2 53.12(2) . 1\_655 ?  
 Si2 Ca3 Ca2 115.06(2) . 1\_655 ?  
 O6 Ca3 Si1 76.87(6) 1\_655 1\_655 ?  
 O8 Ca3 Si1 155.03(6) . 1\_655 ?  
 O2 Ca3 Si1 100.82(6) . 1\_655 ?  
 O1 Ca3 Si1 100.13(6) . 1\_655 ?  
 O4 Ca3 Si1 21.89(5) 1\_655 1\_655 ?  
 O5 Ca3 Si1 74.34(6) 1\_655 1\_655 ?  
 Si2 Ca3 Si1 74.69(3) 1\_655 1\_655 ?  
 Si1 Ca3 Si1 100.43(3) . 1\_655 ?  
 Si2 Ca3 Si1 172.85(3) . 1\_655 ?  
 Ca2 Ca3 Si1 59.237(18) 1\_655 1\_655 ?  
 O6 Ca3 Ca1 105.40(6) 1\_655 7\_755 ?  
 O8 Ca3 Ca1 144.15(6) . 7\_755 ?  
 O2 Ca3 Ca1 41.19(6) . 7\_755 ?  
 O1 Ca3 Ca1 79.44(6) . 7\_755 ?  
 O4 Ca3 Ca1 43.48(6) 1\_655 7\_755 ?  
 O5 Ca3 Ca1 133.88(6) 1\_655 7\_755 ?  
 Si2 Ca3 Ca1 126.40(3) 1\_655 7\_755 ?  
 Si1 Ca3 Ca1 54.34(2) . 7\_755 ?  
 Si2 Ca3 Ca1 122.49(3) . 7\_755 ?  
 Ca2 Ca3 Ca1 61.273(14) 1\_655 7\_755 ?  
 Si1 Ca3 Ca1 59.81(2) 1\_655 7\_755 ?  
 O9 Ca4 O2 96.57(9) 7\_755 . ?  
 O9 Ca4 O6 87.98(8) 7\_755 . ?  
 O2 Ca4 O6 93.54(9) . . ?  
 O9 Ca4 O5 160.71(9) 7\_755 7\_655 ?  
 O2 Ca4 O5 91.56(8) . 7\_655 ?  
 O6 Ca4 O5 109.01(8) . 7\_655 ?  
 O9 Ca4 O8 81.08(8) 7\_755 7\_755 ?  
 O2 Ca4 O8 94.20(8) . 7\_755 ?  
 O6 Ca4 O8 167.25(9) . 7\_755 ?  
 O5 Ca4 O8 80.90(8) 7\_655 7\_755 ?  
 O9 Ca4 O7 106.53(8) 7\_755 7\_655 ?  
 O2 Ca4 O7 154.97(8) . 7\_655 ?  
 O6 Ca4 O7 96.74(8) . 7\_655 ?  
 O5 Ca4 O7 63.51(8) 7\_655 7\_655 ?  
 O8 Ca4 O7 80.28(7) 7\_755 7\_655 ?  
 O9 Ca4 Si2 135.97(7) 7\_755 7\_655 ?  
 O2 Ca4 Si2 122.03(7) . 7\_655 ?  
 O6 Ca4 Si2 108.03(6) . 7\_655 ?  
 O5 Ca4 Si2 30.79(6) 7\_655 7\_655 ?  
 O8 Ca4 Si2 76.15(6) 7\_755 7\_655 ?

O7 Ca4 Si2 32.94(6) 7\_655 7\_655 ?  
 O9 Ca4 Si3 21.78(6) 7\_755 6\_656 ?  
 O2 Ca4 Si3 105.27(6) . 6\_656 ?  
 O6 Ca4 Si3 107.03(6) . 6\_656 ?  
 O5 Ca4 Si3 138.93(6) 7\_655 6\_656 ?  
 O8 Ca4 Si3 61.07(6) 7\_755 6\_656 ?  
 O7 Ca4 Si3 93.45(5) 7\_655 6\_656 ?  
 Si2 Ca4 Si3 117.55(3) 7\_655 6\_656 ?  
 O9 Ca4 Si3 99.18(7) 7\_755 6\_556 ?  
 O2 Ca4 Si3 157.02(6) . 6\_556 ?  
 O6 Ca4 Si3 70.50(6) . 6\_556 ?  
 O5 Ca4 Si3 78.85(6) 7\_655 6\_556 ?  
 O8 Ca4 Si3 104.68(6) 7\_755 6\_556 ?  
 O7 Ca4 Si3 26.88(5) 7\_655 6\_556 ?  
 Si2 Ca4 Si3 52.70(2) 7\_655 6\_556 ?  
 Si3 Ca4 Si3 95.418(17) 6\_656 6\_556 ?  
 O9 Ca4 Si1 111.54(7) 7\_755 . ?  
 O2 Ca4 Si1 21.79(6) . . ?  
 O6 Ca4 Si1 78.63(6) . . ?  
 O5 Ca4 Si1 81.61(6) 7\_655 . ?  
 O8 Ca4 Si1 111.44(6) 7\_755 . ?  
 O7 Ca4 Si1 141.39(6) 7\_655 . ?  
 Si2 Ca4 Si1 111.75(3) 7\_655 . ?  
 Si3 Ca4 Si1 124.76(2) 6\_656 . ?  
 Si3 Ca4 Si1 135.23(2) 6\_556 . ?  
 O9 Ca4 Si2 65.42(6) 7\_755 7\_755 ?  
 O2 Ca4 Si2 80.03(6) . 7\_755 ?  
 O6 Ca4 Si2 151.40(6) . 7\_755 ?  
 O5 Ca4 Si2 99.05(6) 7\_655 7\_755 ?  
 O8 Ca4 Si2 22.80(5) 7\_755 7\_755 ?  
 O7 Ca4 Si2 100.66(5) 7\_655 7\_755 ?  
 Si2 Ca4 Si2 98.81(3) 7\_655 7\_755 ?  
 Si3 Ca4 Si2 49.68(2) 6\_656 7\_755 ?  
 Si3 Ca4 Si2 121.86(3) 6\_556 7\_755 ?  
 Si1 Ca4 Si2 100.71(3) . 7\_755 ?  
 O9 Ca4 Si2 75.43(6) 7\_755 . ?  
 O2 Ca4 Si2 78.71(6) . . ?  
 O6 Ca4 Si2 20.82(6) . . ?  
 O5 Ca4 Si2 123.47(6) 7\_655 . ?  
 O8 Ca4 Si2 154.40(6) 7\_755 . ?  
 O7 Ca4 Si2 115.98(6) 7\_655 . ?  
 Si2 Ca4 Si2 128.47(2) 7\_655 . ?  
 Si3 Ca4 Si2 96.77(3) 6\_656 . ?  
 Si3 Ca4 Si2 89.15(3) 6\_556 . ?  
 Si1 Ca4 Si2 69.13(2) . . ?  
 Si2 Ca4 Si2 132.46(2) 7\_755 . ?  
 O9 Ca5 O9 66.32(11) 7\_655 6\_556 ?  
 O9 Ca5 O7 132.74(8) 7\_655 . ?  
 O9 Ca5 O7 119.44(7) 6\_556 . ?  
 O9 Ca5 O7 119.44(7) 7\_655 4 ?  
 O9 Ca5 O7 132.74(8) 6\_556 4 ?  
 O7 Ca5 O7 91.32(10) . 4 ?  
 O9 Ca5 O8 78.80(7) 7\_655 1\_455 ?  
 O9 Ca5 O8 143.14(8) 6\_556 1\_455 ?

O7 Ca5 O8 76.04(7) . 1\_455 ?  
 O7 Ca5 O8 74.66(7) 4 1\_455 ?  
 O9 Ca5 O8 143.14(8) 7\_655 4\_655 ?  
 O9 Ca5 O8 78.80(7) 6\_556 4\_655 ?  
 O7 Ca5 O8 74.66(7) . 4\_655 ?  
 O7 Ca5 O8 76.04(7) 4 4\_655 ?  
 O8 Ca5 O8 137.57(11) 1\_455 4\_655 ?  
 O9 Ca5 O6 74.99(8) 7\_655 . ?  
 O9 Ca5 O6 84.36(8) 6\_556 . ?  
 O7 Ca5 O6 60.24(7) . . ?  
 O7 Ca5 O6 142.63(8) 4 . ?  
 O8 Ca5 O6 75.15(7) 1\_455 . ?  
 O8 Ca5 O6 114.25(7) 4\_655 . ?  
 O9 Ca5 O6 84.36(8) 7\_655 4 ?  
 O9 Ca5 O6 74.99(8) 6\_556 4 ?  
 O7 Ca5 O6 142.63(8) . 4 ?  
 O7 Ca5 O6 60.24(7) 4 4 ?  
 O8 Ca5 O6 114.25(7) 1\_455 4 ?  
 O8 Ca5 O6 75.15(7) 4\_655 4 ?  
 O6 Ca5 O6 155.36(11) . 4 ?  
 O9 Ca5 Si3 33.16(6) 7\_655 6\_556 ?  
 O9 Ca5 Si3 33.16(6) 6\_556 6\_556 ?  
 O7 Ca5 Si3 134.34(5) . 6\_556 ?  
 O7 Ca5 Si3 134.34(5) 4 6\_556 ?  
 O8 Ca5 Si3 111.22(5) 1\_455 6\_556 ?  
 O8 Ca5 Si3 111.22(5) 4\_655 6\_556 ?  
 O6 Ca5 Si3 77.68(5) . 6\_556 ?  
 O6 Ca5 Si3 77.68(5) 4 6\_556 ?  
 O9 Ca5 Si2 103.87(6) 7\_655 4 ?  
 O9 Ca5 Si2 102.65(6) 6\_556 4 ?  
 O7 Ca5 Si2 118.22(6) . 4 ?  
 O7 Ca5 Si2 31.13(5) 4 4 ?  
 O8 Ca5 Si2 96.73(5) 1\_455 4 ?  
 O8 Ca5 Si2 71.61(5) 4\_655 4 ?  
 O6 Ca5 Si2 171.88(5) . 4 ?  
 O6 Ca5 Si2 29.19(5) 4 4 ?  
 Si3 Ca5 Si2 105.90(2) 6\_556 4 ?  
 O9 Ca5 Si2 102.65(6) 7\_655 . ?  
 O9 Ca5 Si2 103.87(6) 6\_556 . ?  
 O7 Ca5 Si2 31.13(5) . . ?  
 O7 Ca5 Si2 118.22(6) 4 . ?  
 O8 Ca5 Si2 71.61(5) 1\_455 . ?  
 O8 Ca5 Si2 96.73(5) 4\_655 . ?  
 O6 Ca5 Si2 29.19(5) . . ?  
 O6 Ca5 Si2 171.88(5) 4 . ?  
 Si3 Ca5 Si2 105.90(2) 6\_556 . ?  
 Si2 Ca5 Si2 148.19(4) 4 . ?  
 O9 Ca5 Ca3 109.13(6) 7\_655 4\_655 ?  
 O9 Ca5 Ca3 61.88(6) 6\_556 4\_655 ?  
 O7 Ca5 Ca3 113.92(5) . 4\_655 ?  
 O7 Ca5 Ca3 73.40(5) 4 4\_655 ?  
 O8 Ca5 Ca3 146.64(5) 1\_455 4\_655 ?  
 O8 Ca5 Ca3 39.36(5) 4\_655 4\_655 ?  
 O6 Ca5 Ca3 138.03(5) . 4\_655 ?

O6 Ca5 Ca3 38.73(5) 4 4\_655 ?  
 Si3 Ca5 Ca3 85.082(17) 6\_556 4\_655 ?  
 Si2 Ca5 Ca3 50.064(19) 4 4\_655 ?  
 Si2 Ca5 Ca3 133.54(2) . 4\_655 ?  
 Si1 O1 Ca2 94.53(10) . 1\_655 ?  
 Si1 O1 Ca1 128.42(12) . . ?  
 Ca2 O1 Ca1 115.92(10) 1\_655 . ?  
 Si1 O1 Ca3 94.29(10) . . ?  
 Ca2 O1 Ca3 96.66(8) 1\_655 . ?  
 Ca1 O1 Ca3 120.05(10) . . ?  
 Si1 O2 Ca4 127.42(12) . . ?  
 Si1 O2 Ca3 95.20(11) . . ?  
 Ca4 O2 Ca3 105.31(10) . . ?  
 Si1 O2 Ca1 96.77(11) . 7\_755 ?  
 Ca4 O2 Ca1 126.13(10) . 7\_755 ?  
 Ca3 O2 Ca1 98.51(8) . 7\_755 ?  
 Si1 O3 Ca1 129.49(12) . 5\_666 ?  
 Si1 O3 Ca2 92.23(10) . 1\_655 ?  
 Ca1 O3 Ca2 112.05(9) 5\_666 1\_655 ?  
 Si1 O3 Ca1 94.28(11) . 7\_755 ?  
 Ca1 O3 Ca1 123.88(9) 5\_666 7\_755 ?  
 Ca2 O3 Ca1 96.74(8) 1\_655 7\_755 ?  
 Si1 O4 Ca2 121.30(12) . . ?  
 Si1 O4 Ca3 124.16(12) . 1\_455 ?  
 Ca2 O4 Ca3 93.41(7) . 1\_455 ?  
 Si1 O4 Ca1 120.33(12) . 7\_655 ?  
 Ca2 O4 Ca1 96.08(8) . 7\_655 ?  
 Ca3 O4 Ca1 94.38(8) 1\_455 7\_655 ?  
 Si2 O5 Ca1 128.22(12) . . ?  
 Si2 O5 Ca4 99.18(11) . 7\_665 ?  
 Ca1 O5 Ca4 120.74(10) . 7\_665 ?  
 Si2 O5 Ca3 89.71(11) . 1\_455 ?  
 Ca1 O5 Ca3 115.31(10) . 1\_455 ?  
 Ca4 O5 Ca3 95.44(8) 7\_665 1\_455 ?  
 Si2 O6 Ca3 96.30(11) . 1\_455 ?  
 Si2 O6 Ca4 128.19(13) . . ?  
 Ca3 O6 Ca4 107.47(10) 1\_455 . ?  
 Si2 O6 Ca5 98.55(11) . . ?  
 Ca3 O6 Ca5 96.22(8) 1\_455 . ?  
 Ca4 O6 Ca5 122.80(10) . . ?  
 Si3 O7 Si2 120.70(13) . . ?  
 Si3 O7 Ca4 110.84(11) . 7\_665 ?  
 Si2 O7 Ca4 94.78(10) . 7\_665 ?  
 Si3 O7 Ca5 126.88(12) . . ?  
 Si2 O7 Ca5 98.40(10) . . ?  
 Ca4 O7 Ca5 98.97(7) 7\_665 . ?  
 Si2 O8 Ca3 117.03(12) . . ?  
 Si2 O8 Ca4 121.17(12) . 7\_765 ?  
 Ca3 O8 Ca4 98.83(8) . 7\_765 ?  
 Si2 O8 Ca5 120.83(12) . 1\_655 ?  
 Ca3 O8 Ca5 95.56(8) . 1\_655 ?  
 Ca4 O8 Ca5 98.25(8) 7\_765 1\_655 ?  
 Si3 O9 Ca4 126.72(13) . 7\_765 ?  
 Si3 O9 Ca5 92.16(11) . 6\_666 ?



Ca4 O9 Ca5 140.36(11) 7\_765 6\_666 ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 1.000  
\_diffn\_reflns\_theta\_full 30.50  
\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 1.000  
\_refine\_diff\_density\_max 0.573  
\_refine\_diff\_density\_min -0.624  
\_refine\_diff\_density\_rms 0.152