

data_sad

_audit_creation_method SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety ?
_chemical_formula_sum
'C2 Al Ba2 Ca O19 Si4 V'
_chemical_formula_weight 833.06

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'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'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'
'V' 'V' 0.3005 0.5294
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ba' 'Ba' -0.3244 2.2819
'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'
'C' 'C' 0.0033 0.0016
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M C2

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

_cell_length_a 5.2050(12)
_cell_length_b 9.033(2)
_cell_length_c 32.077(8)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 93.492(5)
_cell_angle_gamma 90.00
_cell_volume 1505.4(6)

```

_cell_formula_units_Z      4
_cell_measurement_temperature  293(2)
_cell_measurement_reflns_used  3227
_cell_measurement_theta_min   3.82
_cell_measurement_theta_max   33.48

_exptl_crystal_description    sheet
_exptl_crystal_colour         green
_exptl_crystal_size_max       0.25
_exptl_crystal_size_mid       0.15
_exptl_crystal_size_min       0.02
_exptl_crystal_density_meas    0
_exptl_crystal_density_diffn   3.676
_exptl_crystal_density_method  'not measured'
_exptl_crystal_F_000          1552
_exptl_absorpt_coefficient_mu  6.616
_exptl_absorpt_correction_type none
_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 'CCD area detector'
_diffn_measurement_method     'phi and omega scans'
_diffn_detector_area_resol_mean ?
_diffn_standards_number      ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_%     ?
_diffn_reflns_number          3530
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0499
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI  0.0661
_diffn_reflns_limit_h_min     -6
_diffn_reflns_limit_h_max     6
_diffn_reflns_limit_k_min     -9
_diffn_reflns_limit_k_max     11
_diffn_reflns_limit_l_min     -40
_diffn_reflns_limit_l_max     38
_diffn_reflns_theta_min       1.91
_diffn_reflns_theta_max       26.37
_reflns_number_total          2640
_reflns_number_gt             2516
_reflns_threshold_expression   >2sigma(I)

_computing_data_collection    'Bruker SMART'

```

```

_computing_cell_refinement      'Bruker SMART'
_computing_data_reduction      'Bruker SAINT'
_computing_structure_solution   'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics   'Bruker SHELXTL'
_computing_publication_material 'Bruker SHELXTL'

```

```
_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^)+(0.0389P)^2^+242.7441P] 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        2640
_refine_ls_number_parameters     219
_refine_ls_number_restraints     593
_refine_ls_R_factor_all          0.0877
_refine_ls_R_factor_gt           0.0847
_refine_ls_wR_factor_ref         0.2029
_refine_ls_wR_factor_gt          0.2008
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.147
_refine_ls_restrained_S_all      1.041
_refine_ls_shift/su_max          3.337
_refine_ls_shift/su_mean         0.081

```

```
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
 Ba1 Ba 0.9632(2) 0.53413(14) 0.41571(4) 0.0117(3) Uani 1 1 d U . .
 Ba2 Ba 0.5257(3) 0.2287(2) 0.08456(6) 0.0356(6) Uani 1 1 d U . .
 Ca1 Ca 0.5000 0.3635(7) 0.5000 0.016 Uani 1 2 d SU . .
 Ca2 Ca -0.5000 0.5642(7) 0.0000 0.0170(15) Uani 1 2 d SU . .
 V1 V 0.7418(8) 0.0512(6) 0.25007(13) 0.012 Uani 0.623(13) 1 d PU . .
 Al1 Al 0.7418(8) 0.0512(6) 0.25007(13) 0.012 Uani 0.38 1 d PU . .
 V2 V 1.2403(7) 0.2150(6) 0.25020(14) 0.0145(13) Uani 0.700(19) 1 d PU . .
 Al2 Al 1.2403(7) 0.2150(6) 0.25020(14) 0.0145(13) Uani 0.30 1 d PU . .
 Si1 Si 1.4347(13) -0.2929(10) 0.3356(2) 0.014 Uani 1.00(2) 1 d U . .
 Si2 Si 0.9266(14) -0.1185(9) 0.3360(3) 0.0142(9) Uani 0.50 1 d PU . .
 Al3 Al 0.9266(14) -0.1185(9) 0.3360(3) 0.0142(9) Uani 0.50 1 d PU . .
 Si3 Si 1.0353(12) 0.0588(7) 0.1647(2) 0.0142(9) Uani 0.50 1 d PU . .
 Al4 Al 1.0353(12) 0.0588(7) 0.1647(2) 0.0142(9) Uani 0.50 1 d PU . .
 Si4 Si 1.5509(13) -0.1093(9) 0.1648(2) 0.014(2) Uani 0.98(3) 1 d PU . .
 O1 O 1.221(3) -0.174(3) 0.3513(7) 0.023(4) Uani 1 1 d U . .
 O2 O 0.724(3) -0.239(2) 0.3562(6) 0.020(4) Uani 1 1 d U . .
 O3 O 0.886(3) 0.042(3) 0.3570(5) 0.019(3) Uani 1 1 d U . .
 O4 O 0.880(3) -0.116(2) 0.2845(5) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O5 O 0.432(3) 0.0691(18) 0.2829(5) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O6 O 0.938(3) 0.198(2) 0.2844(6) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O7 O 0.544(3) 0.210(2) 0.2176(6) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O8 O 1.038(3) 0.0704(19) 0.2164(5) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O9 O 0.599(3) -0.118(2) 0.2153(5) 0.0153(9) Uani 1 1 d U . .
 O10 O 1.088(3) 0.223(2) 0.1445(6) 0.025(3) Uani 1 1 d U . .
 O11 O 0.761(3) -0.004(2) 0.1437(7) 0.024(3) Uani 1 1 d U . .
 O12 O 1.259(3) -0.055(2) 0.1494(7) 0.027(4) Uani 1 1 d U . .
 O13 O 0.015(4) 0.256(2) 0.0481(8) 0.044(5) Uani 1 1 d U . .
 O14 O -0.194(3) 0.468(3) 0.0517(7) 0.035(4) Uani 1 1 d U . .
 O15 O 0.238(3) 0.458(2) 0.0483(7) 0.035(4) Uani 1 1 d U . .
 O16 O 0.481(3) 0.5568(19) 0.4501(5) 0.022(3) Uani 1 1 d U . .
 O17 O 0.270(3) 0.773(2) 0.4493(6) 0.021(4) Uani 1 1 d U . .
 O18 O 0.689(3) 0.769(2) 0.4496(6) 0.024(3) Uani 1 1 d U . .
 O19 O 0.5000 0.194(3) 0.0000 0.041(5) Uani 1 2 d SU . .
 O20 O 1.0000 0.505(4) 0.5000 0.041(6) Uani 1 2 d SU . .
 C1 C 0.475(5) 0.704(3) 0.4516(8) 0.024(3) Uani 1 1 d U . .
 C2 C 0.013(5) 0.396(3) 0.0502(8) 0.024(3) Uani 1 1 d U . .

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
 Ba1 0.0113(6) 0.0000(5) 0.0233(6) -0.0013(6) -0.0020(4) -0.0028(6)
 Ba2 0.0174(9) 0.0445(13) 0.0450(12) -0.0009(9) 0.0027(7) 0.0017(8)
 Ca1 0.033 0.005 0.010 0.000 0.000 0.000
 Ca2 0.019(3) 0.015(5) 0.018(3) 0.000 0.003(2) 0.000
 V1 0.010 0.010 0.015 0.000 0.000 0.000

Al1 0.010 0.010 0.015 0.000 0.000 0.000
 V2 0.0064(17) 0.011(2) 0.026(2) -0.0044(17) 0.0002(14) -0.0011(14)
 Al2 0.0064(17) 0.011(2) 0.026(2) -0.0044(17) 0.0002(14) -0.0011(14)
 Si1 0.013 0.020 0.009 0.001 0.000 0.000
 Si2 0.0052(17) 0.007(2) 0.031(2) 0.0013(17) 0.0019(15) -0.0042(15)
 Al3 0.0052(17) 0.007(2) 0.031(2) 0.0013(17) 0.0019(15) -0.0042(15)
 Si3 0.0052(17) 0.007(2) 0.031(2) 0.0013(17) 0.0019(15) -0.0042(15)
 Al4 0.0052(17) 0.007(2) 0.031(2) 0.0013(17) 0.0019(15) -0.0042(15)
 Si4 0.007(3) 0.021(4) 0.015(3) -0.003(3) -0.002(2) 0.000(2)
 O1 0.008(4) 0.023(9) 0.035(8) 0.002(8) -0.007(5) -0.001(5)
 O2 0.014(5) 0.024(8) 0.021(7) 0.011(7) -0.011(6) -0.013(6)
 O3 0.017(6) 0.018(6) 0.022(6) -0.004(6) 0.004(6) -0.003(6)
 O4 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O5 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O6 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O7 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O8 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O9 0.0091(19) 0.014(2) 0.023(2) 0.0009(18) 0.0002(14) -0.0030(17)
 O10 0.022(8) 0.016(6) 0.037(8) 0.011(6) 0.003(7) -0.005(6)
 O11 0.008(5) 0.025(8) 0.038(7) -0.013(5) -0.003(5) 0.000(4)
 O12 0.013(5) 0.023(8) 0.045(9) -0.016(8) 0.000(6) 0.008(6)
 O13 0.019(6) 0.027(6) 0.082(15) 0.015(10) -0.012(6) -0.005(6)
 O14 0.013(6) 0.034(9) 0.056(12) 0.004(9) -0.010(7) -0.009(6)
 O15 0.018(7) 0.029(8) 0.057(12) 0.000(7) 0.002(7) -0.002(5)
 O16 0.025(6) 0.011(6) 0.029(8) 0.004(5) 0.004(5) -0.009(5)
 O17 0.017(6) 0.018(8) 0.028(9) -0.014(7) -0.002(6) -0.006(6)
 O18 0.025(7) 0.011(6) 0.036(10) -0.006(6) 0.012(7) -0.009(5)
 O19 0.073(15) 0.012(13) 0.039(7) 0.000 0.007(8) 0.000
 O20 0.040(8) 0.063(19) 0.018(7) 0.000 -0.006(8) 0.000
 C1 0.020(4) 0.017(5) 0.035(8) 0.003(6) -0.001(5) -0.004(4)
 C2 0.020(4) 0.017(5) 0.035(8) 0.003(6) -0.001(5) -0.004(4)

_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
 Ba1 O20 2.712(4) . ?
 Ba1 O16 2.808(17) . ?
 Ba1 O18 2.814(18) . ?
 Ba1 O17 2.81(2) 3_545 ?
 Ba1 O17 2.852(18) 1_655 ?
 Ba1 O18 2.85(2) 3_545 ?

Ba1 O16 2.858(18) 1_655 ?
 Ba1 O3 2.984(15) 3 ?
 Ba1 O1 3.01(2) 3_455 ?
 Ba1 O2 3.019(19) 1_565 ?
 Ba1 C1 3.20(3) 3_545 ?
 Ba1 C1 3.22(3) 1_655 ?
 Ba2 O19 2.726(4) . ?
 Ba2 O15 2.77(2) . ?
 Ba2 O14 2.80(2) 3_545 ?
 Ba2 O13 2.85(2) . ?
 Ba2 O14 2.84(2) 1_655 ?
 Ba2 O13 2.88(2) 1_655 ?
 Ba2 O15 2.95(2) 3_545 ?
 Ba2 O11 3.04(2) . ?
 Ba2 O12 3.05(2) 3_455 ?
 Ba2 O10 3.072(18) 1_455 ?
 Ba2 C2 3.20(3) 3_545 ?
 Ba2 C2 3.20(3) . ?
 Ca1 O17 2.362(18) 3_545 ?
 Ca1 O17 2.362(18) 4_546 ?
 Ca1 O16 2.368(17) 2_656 ?
 Ca1 O16 2.368(17) . ?
 Ca1 O18 2.38(2) 3_445 ?
 Ca1 O18 2.376(19) 4_646 ?
 Ca1 O20 2.901(17) . ?
 Ca1 O20 2.901(16) 1_455 ?
 Ca1 Ba1 4.017(5) 3_445 ?
 Ca1 Ba1 4.017(5) 4_646 ?
 Ca1 Ba1 4.037(3) 2_656 ?
 Ca2 O15 2.33(2) 2 ?
 Ca2 O15 2.33(2) 1_455 ?
 Ca2 O13 2.32(3) 3_455 ?
 Ca2 O13 2.32(3) 4_455 ?
 Ca2 O14 2.39(2) . ?
 Ca2 O14 2.39(2) 2_455 ?
 Ca2 O19 2.854(13) 3_455 ?
 Ca2 O19 2.854(13) 3_355 ?
 Ca2 Ba2 4.019(3) 3_455 ?
 Ca2 Ba2 4.019(3) 4_455 ?
 Ca2 Ba2 4.059(3) 3_355 ?
 Ca2 Ba2 4.059(3) 4 ?
 V1 O8 1.942(16) . ?
 V1 O6 1.967(19) . ?
 V1 O4 1.982(19) . ?
 V1 O5 1.986(16) . ?
 V1 O9 2.006(19) . ?
 V1 O7 2.019(18) . ?
 V1 V2 2.987(5) . ?
 V1 Al2 3.001(5) 1_455 ?
 V1 V2 3.001(5) 1_455 ?
 V1 Al2 3.037(5) 3_445 ?
 V1 V2 3.037(5) 3_445 ?
 V2 O5 1.926(17) 1_655 ?
 V2 O7 1.946(16) 1_655 ?

V2 O8 1.964(17) . ?
V2 O6 1.978(16) . ?
V2 O9 1.992(19) 3 ?
V2 O4 1.992(19) 3 ?
V2 V1 3.001(5) 1_655 ?
V2 Al1 3.001(5) 1_655 ?
V2 V1 3.037(5) 3 ?
V2 Al1 3.037(5) 3 ?
Si1 O6 1.645(19) 3_545 ?
Si1 O1 1.65(2) . ?
Si1 O3 1.67(2) 3_545 ?
Si1 O2 1.679(18) 1_655 ?
Si2 O3 1.61(2) . ?
Si2 O4 1.655(19) . ?
Si2 O1 1.66(2) . ?
Si2 O2 1.67(2) . ?
Si3 O11 1.643(18) . ?
Si3 O10 1.65(2) . ?
Si3 O12 1.650(19) . ?
Si3 O8 1.659(18) . ?
Si4 O11 1.63(2) 1_655 ?
Si4 O9 1.627(18) 1_655 ?
Si4 O12 1.644(19) . ?
Si4 O10 1.66(2) 3_545 ?
O1 Ba1 3.01(2) 3_545 ?
O2 Si1 1.679(18) 1_455 ?
O2 Ba1 3.019(19) 1_545 ?
O3 Si1 1.67(2) 3_455 ?
O3 Ba1 2.984(15) 3_445 ?
O4 Al2 1.992(19) 3_445 ?
O4 V2 1.992(19) 3_445 ?
O5 Al2 1.926(17) 1_455 ?
O5 V2 1.926(17) 1_455 ?
O6 Si1 1.645(19) 3_455 ?
O7 Al2 1.946(16) 1_455 ?
O7 V2 1.946(16) 1_455 ?
O9 Si4 1.627(18) 1_455 ?
O9 Al2 1.992(19) 3_445 ?
O9 V2 1.992(19) 3_445 ?
O10 Si4 1.66(2) 3_455 ?
O10 Ba2 3.072(18) 1_655 ?
O11 Si4 1.63(2) 1_455 ?
O12 Ba2 3.05(2) 3_545 ?
O13 C2 1.26(3) . ?
O13 Ca2 2.32(3) 3_545 ?
O13 Ba2 2.88(2) 1_455 ?
O14 C2 1.27(3) . ?
O14 Ba2 2.80(2) 3_455 ?
O14 Ba2 2.84(2) 1_455 ?
O15 C2 1.31(3) . ?
O15 Ca2 2.33(2) 1_655 ?
O15 Ba2 2.95(2) 3_455 ?
O16 C1 1.33(3) . ?
O16 Ba1 2.858(17) 1_455 ?

O17 C1 1.23(3) . ?
O17 Ca1 2.362(17) 3_455 ?
O17 Ba1 2.81(2) 3_455 ?
O17 Ba1 2.852(17) 1_455 ?
O18 C1 1.27(3) . ?
O18 Ca1 2.376(19) 3 ?
O18 Ba1 2.85(2) 3_455 ?
O19 Ba2 2.726(4) 2_655 ?
O19 Ca2 2.854(13) 3_545 ?
O19 Ca2 2.854(13) 3_645 ?
O20 Ba1 2.712(4) 2_756 ?
O20 Ca1 2.901(16) 1_655 ?
C1 Ba1 3.20(3) 3_455 ?
C1 Ba1 3.22(2) 1_455 ?
C2 Ba2 3.20(3) 3_455 ?
C2 Ba2 3.21(2) 1_455 ?

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
O20 Ba1 O16 68.0(4) . . ?
O20 Ba1 O18 72.2(8) . . ?
O16 Ba1 O18 46.1(5) . . ?
O20 Ba1 O17 62.8(8) . 3_545 ?
O16 Ba1 O17 64.0(5) . 3_545 ?
O18 Ba1 O17 106.6(5) . 3_545 ?
O20 Ba1 O17 72.1(7) . 1_655 ?
O16 Ba1 O17 106.8(5) . 1_655 ?
O18 Ba1 O17 64.5(5) . 1_655 ?
O17 Ba1 O17 134.1(7) 3_545 1_655 ?
O20 Ba1 O18 62.4(8) . 3_545 ?
O16 Ba1 O18 105.6(5) . 3_545 ?
O18 Ba1 O18 133.9(7) . 3_545 ?
O17 Ba1 O18 45.3(4) 3_545 3_545 ?
O17 Ba1 O18 106.4(5) 1_655 3_545 ?
O20 Ba1 O16 67.3(4) . 1_655 ?
O16 Ba1 O16 133.5(7) . 1_655 ?
O18 Ba1 O16 106.6(5) . 1_655 ?
O17 Ba1 O16 105.3(5) 3_545 1_655 ?
O17 Ba1 O16 46.1(5) 1_655 1_655 ?
O18 Ba1 O16 63.7(5) 3_545 1_655 ?
O20 Ba1 O3 128.5(3) . 3 ?
O16 Ba1 O3 163.1(5) . 3 ?
O18 Ba1 O3 129.6(6) . 3 ?
O17 Ba1 O3 123.8(6) 3_545 3 ?
O17 Ba1 O3 78.7(5) 1_655 3 ?
O18 Ba1 O3 87.5(5) 3_545 3 ?
O16 Ba1 O3 61.8(5) 1_655 3 ?
O20 Ba1 O1 128.6(8) . 3_455 ?

O16 Ba1 O1 88.1(5) . 3_455 ?
 O18 Ba1 O1 122.3(6) . 3_455 ?
 O17 Ba1 O1 65.9(5) 3_545 3_455 ?
 O17 Ba1 O1 158.7(6) 1_655 3_455 ?
 O18 Ba1 O1 83.3(6) 3_545 3_455 ?
 O16 Ba1 O1 131.0(5) 1_655 3_455 ?
 O3 Ba1 O1 82.9(5) 3 3_455 ?
 O20 Ba1 O2 134.2(8) . 1_565 ?
 O16 Ba1 O2 81.6(5) . 1_565 ?
 O18 Ba1 O2 62.0(6) . 1_565 ?
 O17 Ba1 O2 132.1(5) 3_545 1_565 ?
 O17 Ba1 O2 85.7(5) 1_655 1_565 ?
 O18 Ba1 O2 162.9(6) 3_545 1_565 ?
 O16 Ba1 O2 122.6(5) 1_655 1_565 ?
 O3 Ba1 O2 83.0(5) 3 1_565 ?
 O1 Ba1 O2 81.5(5) 3_455 1_565 ?
 O20 Ba1 C1 63.4(9) . 3_545 ?
 O16 Ba1 C1 85.7(6) . 3_545 ?
 O18 Ba1 C1 124.4(6) . 3_545 ?
 O17 Ba1 C1 22.5(5) 3_545 3_545 ?
 O17 Ba1 C1 124.8(6) 1_655 3_545 ?
 O18 Ba1 C1 23.3(5) 3_545 3_545 ?
 O16 Ba1 C1 86.1(5) 1_655 3_545 ?
 O3 Ba1 C1 104.5(6) 3 3_545 ?
 O1 Ba1 C1 70.2(6) 3_455 3_545 ?
 O2 Ba1 C1 149.3(6) 1_565 3_545 ?
 O20 Ba1 C1 71.5(6) . 1_655 ?
 O16 Ba1 C1 124.3(6) . 1_655 ?
 O18 Ba1 C1 86.1(6) . 1_655 ?
 O17 Ba1 C1 124.8(6) 3_545 1_655 ?
 O17 Ba1 C1 22.4(6) 1_655 1_655 ?
 O18 Ba1 C1 87.1(6) 3_545 1_655 ?
 O16 Ba1 C1 24.3(6) 1_655 1_655 ?
 O3 Ba1 C1 65.8(6) 3 1_655 ?
 O1 Ba1 C1 147.6(6) 3_455 1_655 ?
 O2 Ba1 C1 101.8(6) 1_565 1_655 ?
 C1 Ba1 C1 108.5(8) 3_545 1_655 ?
 O19 Ba2 O15 71.1(7) . . ?
 O19 Ba2 O14 62.2(8) . 3_545 ?
 O15 Ba2 O14 105.9(6) . 3_545 ?
 O19 Ba2 O13 67.2(6) . . ?
 O15 Ba2 O13 45.2(6) . . ?
 O14 Ba2 O13 64.5(6) 3_545 . ?
 O19 Ba2 O14 73.4(7) . 1_655 ?
 O15 Ba2 O14 63.3(6) . 1_655 ?
 O14 Ba2 O14 135.1(9) 3_545 1_655 ?
 O13 Ba2 O14 105.5(6) . 1_655 ?
 O19 Ba2 O13 66.2(5) . 1_655 ?
 O15 Ba2 O13 103.4(6) . 1_655 ?
 O14 Ba2 O13 105.8(7) 3_545 1_655 ?
 O13 Ba2 O13 130.7(10) . 1_655 ?
 O14 Ba2 O13 45.3(6) 1_655 1_655 ?
 O19 Ba2 O15 60.6(7) . 3_545 ?
 O15 Ba2 O15 131.3(8) . 3_545 ?

O14 Ba2 O15 46.3(5) 3_545 3_545 ?
 O13 Ba2 O15 105.9(7) . 3_545 ?
 O14 Ba2 O15 105.7(6) 1_655 3_545 ?
 O13 Ba2 O15 63.2(6) 1_655 3_545 ?
 O19 Ba2 O11 122.4(7) . . ?
 O15 Ba2 O11 165.1(6) . . ?
 O14 Ba2 O11 78.0(6) 3_545 . ?
 O13 Ba2 O11 130.4(6) . . ?
 O14 Ba2 O11 124.1(5) 1_655 . ?
 O13 Ba2 O11 88.9(6) 1_655 . ?
 O15 Ba2 O11 61.8(6) 3_545 . ?
 O19 Ba2 O12 138.2(7) . 3_455 ?
 O15 Ba2 O12 89.3(6) . 3_455 ?
 O14 Ba2 O12 158.9(7) 3_545 3_455 ?
 O13 Ba2 O12 123.1(6) . 3_455 ?
 O14 Ba2 O12 64.8(6) 1_655 3_455 ?
 O13 Ba2 O12 84.1(6) 1_655 3_455 ?
 O15 Ba2 O12 131.0(5) 3_545 3_455 ?
 O11 Ba2 O12 83.6(5) . 3_455 ?
 O19 Ba2 O10 128.9(4) . 1_455 ?
 O15 Ba2 O10 82.7(6) . 1_455 ?
 O14 Ba2 O10 85.4(6) 3_545 1_455 ?
 O13 Ba2 O10 63.2(6) . 1_455 ?
 O14 Ba2 O10 131.4(6) 1_655 1_455 ?
 O13 Ba2 O10 164.8(6) 1_655 1_455 ?
 O15 Ba2 O10 122.9(6) 3_545 1_455 ?
 O11 Ba2 O10 83.3(5) . 1_455 ?
 O12 Ba2 O10 82.1(5) 3_455 1_455 ?
 O19 Ba2 C2 63.3(8) . 3_545 ?
 O15 Ba2 C2 124.1(7) . 3_545 ?
 O14 Ba2 C2 23.1(6) 3_545 3_545 ?
 O13 Ba2 C2 86.7(6) . 3_545 ?
 O14 Ba2 C2 125.9(7) 1_655 3_545 ?
 O13 Ba2 C2 86.7(6) 1_655 3_545 ?
 O15 Ba2 C2 24.1(5) 3_545 3_545 ?
 O11 Ba2 C2 64.2(6) . 3_545 ?
 O12 Ba2 C2 146.6(6) 3_455 3_545 ?
 O10 Ba2 C2 101.5(6) 1_455 3_545 ?
 O19 Ba2 C2 73.9(6) . . ?
 O15 Ba2 C2 23.9(6) . . ?
 O14 Ba2 C2 87.4(6) 3_545 . ?
 O13 Ba2 C2 23.1(6) . . ?
 O14 Ba2 C2 87.1(6) 1_655 . ?
 O13 Ba2 C2 123.9(6) 1_655 . ?
 O15 Ba2 C2 125.4(7) 3_545 . ?
 O11 Ba2 C2 146.8(6) . . ?
 O12 Ba2 C2 102.8(6) 3_455 . ?
 O10 Ba2 C2 65.7(6) 1_455 . ?
 C2 Ba2 C2 109.0(7) 3_545 . ?
 O17 Ca1 O17 139.3(10) 3_545 4_546 ?
 O17 Ca1 O16 136.2(6) 3_545 2_656 ?
 O17 Ca1 O16 78.0(7) 4_546 2_656 ?
 O17 Ca1 O16 78.0(7) 3_545 . ?
 O17 Ca1 O16 136.2(6) 4_546 . ?

O16 Ca1 O16 84.9(9) 2_656 . ?
 O17 Ca1 O18 79.4(6) 3_545 3_445 ?
 O17 Ca1 O18 86.3(6) 4_546 3_445 ?
 O16 Ca1 O18 136.3(6) 2_656 3_445 ?
 O16 Ca1 O18 78.8(6) . 3_445 ?
 O17 Ca1 O18 86.3(6) 3_545 4_646 ?
 O17 Ca1 O18 79.4(6) 4_546 4_646 ?
 O16 Ca1 O18 78.8(6) 2_656 4_646 ?
 O16 Ca1 O18 136.3(6) . 4_646 ?
 O18 Ca1 O18 138.0(10) 3_445 4_646 ?
 O17 Ca1 O20 65.3(6) 3_545 . ?
 O17 Ca1 O20 136.5(4) 4_546 . ?
 O16 Ca1 O20 71.0(6) 2_656 . ?
 O16 Ca1 O20 71.0(6) . . ?
 O18 Ca1 O20 137.1(4) 3_445 . ?
 O18 Ca1 O20 65.4(6) 4_646 . ?
 O17 Ca1 O20 136.5(4) 3_545 1_455 ?
 O17 Ca1 O20 65.3(6) 4_546 1_455 ?
 O16 Ca1 O20 71.0(6) 2_656 1_455 ?
 O16 Ca1 O20 71.0(6) . 1_455 ?
 O18 Ca1 O20 65.4(6) 3_445 1_455 ?
 O18 Ca1 O20 137.1(4) 4_646 1_455 ?
 O20 Ca1 O20 127.6(13) . 1_455 ?
 O17 Ca1 Ba1 44.3(4) 3_545 3_445 ?
 O17 Ca1 Ba1 101.6(5) 4_546 3_445 ?
 O16 Ca1 Ba1 179.5(4) 2_656 3_445 ?
 O16 Ca1 Ba1 95.3(4) . 3_445 ?
 O18 Ca1 Ba1 43.4(5) 3_445 3_445 ?
 O18 Ca1 Ba1 101.3(5) 4_646 3_445 ?
 O20 Ca1 Ba1 109.5(5) . 3_445 ?
 O20 Ca1 Ba1 108.7(5) 1_455 3_445 ?
 O17 Ca1 Ba1 101.6(5) 3_545 4_646 ?
 O17 Ca1 Ba1 44.3(4) 4_546 4_646 ?
 O16 Ca1 Ba1 95.3(4) 2_656 4_646 ?
 O16 Ca1 Ba1 179.5(4) . 4_646 ?
 O18 Ca1 Ba1 101.3(5) 3_445 4_646 ?
 O18 Ca1 Ba1 43.4(5) 4_646 4_646 ?
 O20 Ca1 Ba1 108.7(5) . 4_646 ?
 O20 Ca1 Ba1 109.5(5) 1_455 4_646 ?
 Ba1 Ca1 Ba1 84.43(13) 3_445 4_646 ?
 O17 Ca1 Ba1 177.8(5) 3_545 2_656 ?
 O17 Ca1 Ba1 42.8(5) 4_546 2_656 ?
 O16 Ca1 Ba1 42.8(4) 2_656 2_656 ?
 O16 Ca1 Ba1 99.8(4) . 2_656 ?
 O18 Ca1 Ba1 100.5(4) 3_445 2_656 ?
 O18 Ca1 Ba1 95.2(4) 4_646 2_656 ?
 O20 Ca1 Ba1 113.8(5) . 2_656 ?
 O20 Ca1 Ba1 42.17(7) 1_455 2_656 ?
 Ba1 Ca1 Ba1 136.70(9) 3_445 2_656 ?
 Ba1 Ca1 Ba1 80.67(4) 4_646 2_656 ?
 O17 Ca1 Ba1 42.8(5) 3_545 . ?
 O17 Ca1 Ba1 177.8(5) 4_546 . ?
 O16 Ca1 Ba1 99.8(4) 2_656 . ?
 O16 Ca1 Ba1 42.8(4) . . ?

O18 Ca1 Ba1 95.2(4) 3_445 . ?
 O18 Ca1 Ba1 100.5(4) 4_646 . ?
 O20 Ca1 Ba1 42.17(7) . . ?
 O20 Ca1 Ba1 113.8(5) 1_455 . ?
 Ba1 Ca1 Ba1 80.67(4) 3_445 . ?
 Ba1 Ca1 Ba1 136.70(9) 4_646 . ?
 Ba1 Ca1 Ba1 135.10(18) 2_656 . ?
 O15 Ca2 O15 131.6(11) 2 1_455 ?
 O15 Ca2 O13 138.7(7) 2 3_455 ?
 O15 Ca2 O13 82.1(8) 1_455 3_455 ?
 O15 Ca2 O13 82.1(8) 2 4_455 ?
 O15 Ca2 O13 138.7(7) 1_455 4_455 ?
 O13 Ca2 O13 83.1(12) 3_455 4_455 ?
 O15 Ca2 O14 85.5(8) 2 . ?
 O15 Ca2 O14 77.3(7) 1_455 . ?
 O13 Ca2 O14 79.4(8) 3_455 . ?
 O13 Ca2 O14 136.7(7) 4_455 . ?
 O15 Ca2 O14 77.3(7) 2 2_455 ?
 O15 Ca2 O14 85.5(8) 1_455 2_455 ?
 O13 Ca2 O14 136.7(7) 3_455 2_455 ?
 O13 Ca2 O14 79.4(8) 4_455 2_455 ?
 O14 Ca2 O14 137.4(12) . 2_455 ?
 O15 Ca2 O19 66.3(6) 2 3_455 ?
 O15 Ca2 O19 137.6(5) 1_455 3_455 ?
 O13 Ca2 O19 72.4(7) 3_455 3_455 ?
 O13 Ca2 O19 71.8(6) 4_455 3_455 ?
 O14 Ca2 O19 65.2(6) . 3_455 ?
 O14 Ca2 O19 135.8(5) 2_455 3_455 ?
 O15 Ca2 O19 137.6(5) 2 3_355 ?
 O15 Ca2 O19 66.3(6) 1_455 3_355 ?
 O13 Ca2 O19 71.8(6) 3_455 3_355 ?
 O13 Ca2 O19 72.4(7) 4_455 3_355 ?
 O14 Ca2 O19 135.8(5) . 3_355 ?
 O14 Ca2 O19 65.2(6) 2_455 3_355 ?
 O19 Ca2 O19 131.5(12) 3_455 3_355 ?
 O15 Ca2 Ba2 101.5(5) 2 3_455 ?
 O15 Ca2 Ba2 96.0(5) 1_455 3_455 ?
 O13 Ca2 Ba2 44.0(5) 3_455 3_455 ?
 O13 Ca2 Ba2 99.6(5) 4_455 3_455 ?
 O14 Ca2 Ba2 43.1(6) . 3_455 ?
 O14 Ca2 Ba2 178.5(6) 2_455 3_455 ?
 O19 Ca2 Ba2 42.67(8) 3_455 3_455 ?
 O19 Ca2 Ba2 115.6(4) 3_355 3_455 ?
 O15 Ca2 Ba2 96.0(5) 2 4_455 ?
 O15 Ca2 Ba2 101.5(5) 1_455 4_455 ?
 O13 Ca2 Ba2 99.6(5) 3_455 4_455 ?
 O13 Ca2 Ba2 44.0(5) 4_455 4_455 ?
 O14 Ca2 Ba2 178.5(6) . 4_455 ?
 O14 Ca2 Ba2 43.1(6) 2_455 4_455 ?
 O19 Ca2 Ba2 115.6(4) 3_455 4_455 ?
 O19 Ca2 Ba2 42.67(8) 3_355 4_455 ?
 Ba2 Ca2 Ba2 136.60(18) 3_455 4_455 ?
 O15 Ca2 Ba2 177.1(6) 2 3_355 ?
 O15 Ca2 Ba2 45.7(6) 1_455 3_355 ?

O13 Ca2 Ba2 43.9(5) 3_455 3_355 ?
O13 Ca2 Ba2 99.9(6) 4_455 3_355 ?
O14 Ca2 Ba2 94.3(6) . 3_355 ?
O14 Ca2 Ba2 101.0(5) 2_455 3_355 ?
O19 Ca2 Ba2 116.2(4) 3_455 3_355 ?
O19 Ca2 Ba2 42.10(7) 3_355 3_355 ?
Ba2 Ca2 Ba2 80.24(7) 3_455 3_355 ?
Ba2 Ca2 Ba2 84.19(8) 4_455 3_355 ?
O15 Ca2 Ba2 45.7(6) 2 4 ?
O15 Ca2 Ba2 177.1(6) 1_455 4 ?
O13 Ca2 Ba2 99.9(6) 3_455 4 ?
O13 Ca2 Ba2 43.9(5) 4_455 4 ?
O14 Ca2 Ba2 101.0(5) . 4 ?
O14 Ca2 Ba2 94.3(6) 2_455 4 ?
O19 Ca2 Ba2 42.10(7) 3_455 4 ?
O19 Ca2 Ba2 116.2(4) 3_355 4 ?
Ba2 Ca2 Ba2 84.19(8) 3_455 4 ?
Ba2 Ca2 Ba2 80.24(7) 4_455 4 ?
Ba2 Ca2 Ba2 137.05(17) 3_355 4 ?
O8 V1 O6 81.3(6) . . ?
O8 V1 O4 96.0(7) . . ?
O6 V1 O4 92.4(7) . . ?
O8 V1 O5 170.1(7) . . ?
O6 V1 O5 93.4(7) . . ?
O4 V1 O5 92.6(7) . . ?
O8 V1 O9 92.2(7) . . ?
O6 V1 O9 170.0(7) . . ?
O4 V1 O9 80.7(8) . . ?
O5 V1 O9 94.1(7) . . ?
O8 V1 O7 92.7(7) . . ?
O6 V1 O7 92.5(8) . . ?
O4 V1 O7 170.5(7) . . ?
O5 V1 O7 79.1(6) . . ?
O9 V1 O7 95.4(7) . . ?
O8 V1 V2 40.4(5) . . ?
O6 V1 V2 40.9(5) . . ?
O4 V1 V2 95.2(5) . . ?
O5 V1 V2 133.8(5) . . ?
O9 V1 V2 132.1(5) . . ?
O7 V1 V2 93.8(5) . . ?
O8 V1 Al2 132.5(5) . 1_455 ?
O6 V1 Al2 95.2(5) . 1_455 ?
O4 V1 Al2 131.4(5) . 1_455 ?
O5 V1 Al2 39.2(5) . 1_455 ?
O9 V1 Al2 94.8(5) . 1_455 ?
O7 V1 Al2 39.9(5) . 1_455 ?
V2 V1 Al2 120.75(18) . 1_455 ?
O8 V1 V2 132.5(5) . 1_455 ?
O6 V1 V2 95.2(5) . 1_455 ?
O4 V1 V2 131.4(5) . 1_455 ?
O5 V1 V2 39.2(5) . 1_455 ?
O9 V1 V2 94.8(5) . 1_455 ?
O7 V1 V2 39.9(5) . 1_455 ?
V2 V1 V2 120.75(18) . 1_455 ?

Al2 V1 V2 0.00(18) 1_455 1_455 ?
 O8 V1 Al2 95.3(5) . 3_445 ?
 O6 V1 Al2 132.3(6) . 3_445 ?
 O4 V1 Al2 40.3(5) . 3_445 ?
 O5 V1 Al2 94.5(5) . 3_445 ?
 O9 V1 Al2 40.4(5) . 3_445 ?
 O7 V1 Al2 135.2(5) . 3_445 ?
 V2 V1 Al2 119.85(16) . 3_445 ?
 Al2 V1 Al2 119.40(16) 1_455 3_445 ?
 V2 V1 Al2 119.40(16) 1_455 3_445 ?
 O8 V1 V2 95.3(5) . 3_445 ?
 O6 V1 V2 132.3(6) . 3_445 ?
 O4 V1 V2 40.3(5) . 3_445 ?
 O5 V1 V2 94.5(5) . 3_445 ?
 O9 V1 V2 40.4(5) . 3_445 ?
 O7 V1 V2 135.2(5) . 3_445 ?
 V2 V1 V2 119.85(16) . 3_445 ?
 Al2 V1 V2 119.40(16) 1_455 3_445 ?
 V2 V1 V2 119.40(16) 1_455 3_445 ?
 Al2 V1 V2 0.0(2) 3_445 3_445 ?
 O5 V2 O7 82.3(7) 1_655 1_655 ?
 O5 V2 O8 95.1(7) 1_655 . ?
 O7 V2 O8 96.5(7) 1_655 . ?
 O5 V2 O6 92.6(7) 1_655 . ?
 O7 V2 O6 173.9(8) 1_655 . ?
 O8 V2 O6 80.5(7) . . ?
 O5 V2 O9 170.4(7) 1_655 3 ?
 O7 V2 O9 90.0(7) 1_655 3 ?
 O8 V2 O9 91.5(7) . 3 ?
 O6 V2 O9 95.3(7) . 3 ?
 O5 V2 O4 93.6(7) 1_655 3 ?
 O7 V2 O4 92.0(7) 1_655 3 ?
 O8 V2 O4 168.6(7) . 3 ?
 O6 V2 O4 91.7(7) . 3 ?
 O9 V2 O4 80.8(8) 3 3 ?
 O5 V2 V1 94.8(5) 1_655 . ?
 O7 V2 V1 136.1(6) 1_655 . ?
 O8 V2 V1 39.9(5) . . ?
 O6 V2 V1 40.7(5) . . ?
 O9 V2 V1 94.8(5) 3 . ?
 O4 V2 V1 131.9(5) 3 . ?
 O5 V2 V1 40.7(5) 1_655 1_655 ?
 O7 V2 V1 41.7(5) 1_655 1_655 ?
 O8 V2 V1 96.3(5) . 1_655 ?
 O6 V2 V1 133.1(6) . 1_655 ?
 O9 V2 V1 131.6(5) 3 1_655 ?
 O4 V2 V1 95.2(5) 3 1_655 ?
 V1 V2 V1 120.75(18) . 1_655 ?
 O5 V2 Al1 40.7(5) 1_655 1_655 ?
 O7 V2 Al1 41.7(5) 1_655 1_655 ?
 O8 V2 Al1 96.3(5) . 1_655 ?
 O6 V2 Al1 133.1(6) . 1_655 ?
 O9 V2 Al1 131.6(5) 3 1_655 ?
 O4 V2 Al1 95.2(5) 3 1_655 ?

V1 V2 Al1 120.75(18) . 1_655 ?
V1 V2 Al1 0.0(3) 1_655 1_655 ?
O5 V2 V1 133.1(5) 1_655 3 ?
O7 V2 V1 91.2(6) 1_655 3 ?
O8 V2 V1 131.8(5) . 3 ?
O6 V2 V1 94.7(6) . 3 ?
O9 V2 V1 40.7(5) 3 3 ?
O4 V2 V1 40.0(5) 3 3 ?
V1 V2 V1 119.85(16) . 3 ?
V1 V2 V1 119.40(16) 1_655 3 ?
Al1 V2 V1 119.40(16) 1_655 3 ?
O5 V2 Al1 133.1(5) 1_655 3 ?
O7 V2 Al1 91.2(6) 1_655 3 ?
O8 V2 Al1 131.8(5) . 3 ?
O6 V2 Al1 94.7(6) . 3 ?
O9 V2 Al1 40.7(5) 3 3 ?
O4 V2 Al1 40.0(5) 3 3 ?
V1 V2 Al1 119.85(16) . 3 ?
V1 V2 Al1 119.40(16) 1_655 3 ?
Al1 V2 Al1 119.40(16) 1_655 3 ?
V1 V2 Al1 0.000(1) 3 3 ?
O6 Si1 O1 112.9(11) 3_545 . ?
O6 Si1 O3 112.0(10) 3_545 3_545 ?
O1 Si1 O3 109.6(10) . 3_545 ?
O6 Si1 O2 110.2(10) 3_545 1_655 ?
O1 Si1 O2 107.2(12) . 1_655 ?
O3 Si1 O2 104.7(10) 3_545 1_655 ?
O3 Si2 O4 112.9(11) . . ?
O3 Si2 O1 106.8(11) . . ?
O4 Si2 O1 112.1(11) . . ?
O3 Si2 O2 108.6(11) . . ?
O4 Si2 O2 109.8(10) . . ?
O1 Si2 O2 106.4(11) . . ?
O11 Si3 O10 108.0(11) . . ?
O11 Si3 O12 105.9(11) . . ?
O10 Si3 O12 107.9(11) . . ?
O11 Si3 O8 112.7(10) . . ?
O10 Si3 O8 110.2(10) . . ?
O12 Si3 O8 112.0(10) . . ?
O11 Si4 O9 112.0(10) 1_655 1_655 ?
O11 Si4 O12 109.4(12) 1_655 . ?
O9 Si4 O12 113.4(10) 1_655 . ?
O11 Si4 O10 105.9(10) 1_655 3_545 ?
O9 Si4 O10 109.4(11) 1_655 3_545 ?
O12 Si4 O10 106.3(10) . 3_545 ?
Si1 O1 Si2 137.4(14) . . ?
Si1 O1 Ba1 110.7(8) . 3_545 ?
Si2 O1 Ba1 110.8(11) . 3_545 ?
Si1 O2 Si2 127.4(12) 1_455 . ?
Si1 O2 Ba1 112.1(9) 1_455 1_545 ?
Si2 O2 Ba1 116.1(8) . 1_545 ?
Si2 O3 Si1 127.2(10) . 3_455 ?
Si2 O3 Ba1 111.2(9) . 3_445 ?
Si1 O3 Ba1 114.5(9) 3_455 3_445 ?

Si2 O4 V1 126.3(11) . . ?
 Si2 O4 Al2 124.6(11) . 3_445 ?
 V1 O4 Al2 99.7(8) . 3_445 ?
 Si2 O4 V2 124.6(11) . 3_445 ?
 V1 O4 V2 99.7(8) . 3_445 ?
 Al2 O4 V2 0.0(4) 3_445 3_445 ?
 Al2 O5 V2 0.0(3) 1_455 1_455 ?
 Al2 O5 V1 100.2(8) 1_455 . ?
 V2 O5 V1 100.2(8) 1_455 . ?
 Si1 O6 V1 123.8(10) 3_455 . ?
 Si1 O6 V2 127.4(9) 3_455 . ?
 V1 O6 V2 98.4(8) . . ?
 Al2 O7 V2 0.0(2) 1_455 1_455 ?
 Al2 O7 V1 98.4(8) 1_455 . ?
 V2 O7 V1 98.4(8) 1_455 . ?
 Si3 O8 V1 126.3(9) . . ?
 Si3 O8 V2 124.4(9) . . ?
 V1 O8 V2 99.8(8) . . ?
 Si4 O9 Al2 128.6(11) 1_455 3_445 ?
 Si4 O9 V2 128.6(11) 1_455 3_445 ?
 Al2 O9 V2 0.0(3) 3_445 3_445 ?
 Si4 O9 V1 123.2(11) 1_455 . ?
 Al2 O9 V1 98.9(8) 3_445 . ?
 V2 O9 V1 98.9(8) 3_445 . ?
 Si3 O10 Si4 129.8(12) . 3_455 ?
 Si3 O10 Ba2 114.1(10) . 1_655 ?
 Si4 O10 Ba2 109.7(9) 3_455 1_655 ?
 Si4 O11 Si3 128.2(14) 1_455 . ?
 Si4 O11 Ba2 114.2(8) 1_455 . ?
 Si3 O11 Ba2 109.1(10) . . ?
 Si4 O12 Si3 138.8(14) . . ?
 Si4 O12 Ba2 109.6(9) . 3_545 ?
 Si3 O12 Ba2 110.1(9) . 3_545 ?
 C2 O13 Ca2 142(2) . 3_545 ?
 C2 O13 Ba2 94.3(16) . . ?
 Ca2 O13 Ba2 101.5(8) 3_545 . ?
 C2 O13 Ba2 93.2(17) . 1_455 ?
 Ca2 O13 Ba2 102.1(7) 3_545 1_455 ?
 Ba2 O13 Ba2 130.7(10) . 1_455 ?
 C2 O14 Ca2 134.0(19) . . ?
 C2 O14 Ba2 96.7(16) . 3_455 ?
 Ca2 O14 Ba2 101.2(8) . 3_455 ?
 C2 O14 Ba2 94.6(17) . 1_455 ?
 Ca2 O14 Ba2 101.5(6) . 1_455 ?
 Ba2 O14 Ba2 135.1(9) 3_455 1_455 ?
 C2 O15 Ca2 140.5(18) . 1_655 ?
 C2 O15 Ba2 96.8(17) . . ?
 Ca2 O15 Ba2 105.3(7) 1_655 . ?
 C2 O15 Ba2 88.9(16) . 3_455 ?
 Ca2 O15 Ba2 99.9(8) 1_655 3_455 ?
 Ba2 O15 Ba2 131.3(8) . 3_455 ?
 C1 O16 Ca1 135.4(16) . . ?
 C1 O16 Ba1 96.5(14) . . ?
 Ca1 O16 Ba1 102.2(6) . . ?

C1 O16 Ba1 93.4(14) . 1_455 ?
 Ca1 O16 Ba1 101.9(5) . 1_455 ?
 Ba1 O16 Ba1 133.5(7) . 1_455 ?
 C1 O17 Ca1 133.0(17) . 3_455 ?
 C1 O17 Ba1 96.9(15) . 3_455 ?
 Ca1 O17 Ba1 102.3(7) 3_455 3_455 ?
 C1 O17 Ba1 95.9(16) . 1_455 ?
 Ca1 O17 Ba1 100.4(6) 3_455 1_455 ?
 Ba1 O17 Ba1 134.1(7) 3_455 1_455 ?
 C1 O18 Ca1 134.2(17) . 3 ?
 C1 O18 Ba1 97.8(16) . . ?
 Ca1 O18 Ba1 101.1(7) 3 . ?
 C1 O18 Ba1 94.0(16) . 3_455 ?
 Ca1 O18 Ba1 101.9(6) 3 3_455 ?
 Ba1 O18 Ba1 133.9(7) . 3_455 ?
 Ba2 O19 Ba2 166.8(13) 2_655 . ?
 Ba2 O19 Ca2 93.3(2) 2_655 3_545 ?
 Ba2 O19 Ca2 92.1(2) . 3_545 ?
 Ba2 O19 Ca2 92.1(2) 2_655 3_645 ?
 Ba2 O19 Ca2 93.3(2) . 3_645 ?
 Ca2 O19 Ca2 131.5(12) 3_545 3_645 ?
 Ba1 O20 Ba1 169.0(15) 2_756 . ?
 Ba1 O20 Ca1 92.9(3) 2_756 . ?
 Ba1 O20 Ca1 91.9(3) . . ?
 Ba1 O20 Ca1 91.9(3) 2_756 1_655 ?
 Ba1 O20 Ca1 92.9(3) . 1_655 ?
 Ca1 O20 Ca1 127.6(13) . 1_655 ?
 O17 C1 O18 121(3) . . ?
 O17 C1 O16 122(2) . . ?
 O18 C1 O16 116(2) . . ?
 O17 C1 Ba1 60.6(14) . 3_455 ?
 O18 C1 Ba1 62.7(14) . 3_455 ?
 O16 C1 Ba1 156.7(18) . 3_455 ?
 O17 C1 Ba1 61.7(13) . 1_455 ?
 O18 C1 Ba1 156.0(18) . 1_455 ?
 O16 C1 Ba1 62.3(13) . 1_455 ?
 Ba1 C1 Ba1 108.5(7) 3_455 1_455 ?
 O17 C1 Ba1 155.7(18) . . ?
 O18 C1 Ba1 59.4(13) . . ?
 O16 C1 Ba1 59.5(12) . . ?
 Ba1 C1 Ba1 108.1(7) 3_455 . ?
 Ba1 C1 Ba1 107.3(8) 1_455 . ?
 O13 C2 O14 122(2) . . ?
 O13 C2 O15 115(2) . . ?
 O14 C2 O15 123(3) . . ?
 O13 C2 Ba2 163(2) . 3_455 ?
 O14 C2 Ba2 60.2(15) . 3_455 ?
 O15 C2 Ba2 67.0(16) . 3_455 ?
 O13 C2 Ba2 62.6(14) . . ?
 O14 C2 Ba2 158(2) . . ?
 O15 C2 Ba2 59.3(14) . . ?
 Ba2 C2 Ba2 109.0(7) 3_455 . ?
 O13 C2 Ba2 63.7(15) . 1_455 ?
 O14 C2 Ba2 62.2(14) . 1_455 ?

O15 C2 Ba2 162.1(19) . 1_455 ?
Ba2 C2 Ba2 108.9(8) 3_455 1_455 ?
Ba2 C2 Ba2 108.7(8) . 1_455 ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.967
_diffn_reflns_theta_full 26.37
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.967
_refine_diff_density_max 5.195
_refine_diff_density_min -3.070
_refine_diff_density_rms 0.479