

data\_hogbomite2n4s

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'H0.50 Al5.50 Fe0.50 Mg2 O12 Ti0.50'  
\_chemical\_formula\_weight 441.39

loop\_  
\_atom\_type\_symbol  
\_atom\_type\_description  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_real  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_imag  
\_atom\_type\_scatter\_source  
'H' 'H' 0.0000 0.0000  
'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'  
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Ti' 'Ti' 0.2776 0.4457  
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'  
'Fe' 'Fe' 0.3463 0.8444  
'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+1/2'  
'-y, x-y, z'  
'-x+y, -x, z'  
'x-y, x, z+1/2'  
'y, -x+y, z+1/2'  
'-x+y, y, z'  
'x, x-y, z'  
'-y, -x, z'  
'y, x, z+1/2'  
'-x, -x+y, z+1/2'  
'x-y, -y, z+1/2'

\_cell\_length\_a 5.710(5)

_cell_length_b	5.710(5)
_cell_length_c	27.676(5)
_cell_angle_alpha	90.000(5)
_cell_angle_beta	90.000(5)
_cell_angle_gamma	120.000(5)
_cell_volume	781.5(10)
_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	3.752
_exptl_crystal_density_method	'not measured'
_exptl_crystal_F_000	864
_exptl_absorpt_coefficient_mu	2.383
_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	0.71069
_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	19743
_diffn_reflns_av_R_equivalents	0.0332
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI	0.0271
_diffn_reflns_limit_h_min	-12
_diffn_reflns_limit_h_max	10
_diffn_reflns_limit_k_min	-11
_diffn_reflns_limit_k_max	11
_diffn_reflns_limit_l_min	-59
_diffn_reflns_limit_l_max	48
_diffn_reflns_theta_min	1.47

```
_diffrn_reflms_theta_max      49.41
_reflms_number_total          2643
_reflms_number_gt             2424
_reflms_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)+(0.0315P)^2+0.3427P] 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     SHELXL
_refine_ls_extinction_coef       0.0026(8)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_abs_structure_details
'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack  0.91(3)
_refine_ls_number_reflms        2643
_refine_ls_number_parameters     104
_refine_ls_number_restraints     1
_refine_ls_R_factor_all          0.0310
_refine_ls_R_factor_gt           0.0274
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0775
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0751
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.169
_refine_ls_restrained_S_all      1.169
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_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  
 T1A Mg 0.0000 0.0000 0.02080(3) 0.00651(15) Uani 0.793(4) 6 d SP . .  
 T1B Fe 0.0000 0.0000 0.02080(3) 0.00651(15) Uani 0.207(4) 6 d SP . .  
 M2 Al 0.6667 0.3333 0.04250(3) 0.00468(11) Uani 1 6 d S . .  
 T3A Mg 0.3333 0.6667 0.06323(3) 0.00606(18) Uani 0.859(5) 6 d SP . .  
 T3B Fe 0.3333 0.6667 0.06323(3) 0.00606(18) Uani 0.141(5) 6 d SP . .  
 M4 Al 0.83320(6) 0.66640(12) 0.126485(17) 0.00475(6) Uani 1 2 d S . .  
 T5A Mg 0.3333 0.6667 0.19014(3) 0.00648(18) Uani 0.842(5) 6 d SP . .  
 T5B Fe 0.3333 0.6667 0.19014(3) 0.00648(18) Uani 0.158(5) 6 d SP . .  
 M6 Al 0.0000 0.0000 0.20999(3) 0.00497(10) Uani 1 6 d S . .  
 T7A Mg 0.6667 0.3333 0.23366(3) 0.00609(17) Uani 0.835(4) 6 d SP . .  
 T7B Fe 0.6667 0.3333 0.23366(3) 0.00609(17) Uani 0.165(4) 6 d SP . .  
 M8 Al 0.16800(5) 0.83200(5) 0.295077(17) 0.00577(7) Uani 1 2 d S . .  
 M9 Ti -0.3333 -0.6667 0.362934(19) 0.00564(5) Uani 1 6 d S . .  
 T10A Mg 0.0000 0.0000 0.39699(3) 0.00489(17) Uani 0.888(4) 6 d SP . .  
 T10B Fe 0.0000 0.0000 0.39699(3) 0.00489(17) Uani 0.112(4) 6 d SP . .  
 M11 Al 0.50243(5) 0.49757(5) 0.457952(19) 0.00628(7) Uani 1 2 d S . .  
 O1 O 0.3671(2) 0.18357(12) -0.00154(4) 0.00929(15) Uani 1 2 d S . .  
 O2 O 0.3333 0.6667 -0.00701(7) 0.0082(3) Uani 1 6 d S . .  
 O3 O 0.0000 0.0000 0.08999(7) 0.0063(2) Uani 1 6 d S . .  
 O4 O 0.96276(19) 0.48138(10) 0.08711(4) 0.00549(12) Uani 1 2 d S . .  
 O5 O 0.6667 0.3333 0.16339(8) 0.0067(2) Uani 1 6 d S . .  
 O6 O 0.7027(2) 0.85137(11) 0.16542(4) 0.00547(12) Uani 1 2 d S . .  
 O7 O 0.2967(3) 0.14834(13) 0.25303(4) 0.00868(15) Uani 1 2 d S . .  
 O8 O 0.3333 0.6667 0.26033(7) 0.0070(2) Uani 1 6 d S . .  
 O9 O 0.0000 0.0000 0.33088(8) 0.0086(3) Uani 1 6 d S . .  
 O10 O 0.0011(3) 0.50056(13) 0.33104(4) 0.00893(14) Uani 1 2 d S . .  
 O11 O -0.6667 -0.3333 0.42227(7) 0.0090(2) Uani 1 6 d S . .  
 O12 O -0.6460(2) -0.82302(12) 0.41775(4) 0.01043(17) 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  
 T1A 0.00661(18) 0.00661(18) 0.0063(3) 0.000 0.000 0.00331(9)  
 T1B 0.00661(18) 0.00661(18) 0.0063(3) 0.000 0.000 0.00331(9)  
 M2 0.00496(16) 0.00496(16) 0.0041(2) 0.000 0.000 0.00248(8)  
 T3A 0.0062(2) 0.0062(2) 0.0058(3) 0.000 0.000 0.00310(10)  
 T3B 0.0062(2) 0.0062(2) 0.0058(3) 0.000 0.000 0.00310(10)

M4 0.00482(11) 0.00438(13) 0.00490(12) -0.00040(9) -0.00020(5) 0.00219(6)  
 T5A 0.0065(2) 0.0065(2) 0.0065(3) 0.000 0.000 0.00323(11)  
 T5B 0.0065(2) 0.0065(2) 0.0065(3) 0.000 0.000 0.00323(11)  
 M6 0.00506(14) 0.00506(14) 0.0048(2) 0.000 0.000 0.00253(7)  
 T7A 0.00523(19) 0.00523(19) 0.0078(3) 0.000 0.000 0.00261(10)  
 T7B 0.00523(19) 0.00523(19) 0.0078(3) 0.000 0.000 0.00261(10)  
 M8 0.00542(11) 0.00542(11) 0.00674(15) -0.00035(6) 0.00035(6) 0.00291(12)  
 M9 0.00575(7) 0.00575(7) 0.00541(11) 0.000 0.000 0.00288(3)  
 T10A 0.0048(2) 0.0048(2) 0.0052(3) 0.000 0.000 0.00238(10)  
 T10B 0.0048(2) 0.0048(2) 0.0052(3) 0.000 0.000 0.00238(10)  
 M11 0.00640(10) 0.00640(10) 0.00639(15) -0.00016(7) 0.00016(7) 0.00346(11)  
 O1 0.0092(4) 0.0099(3) 0.0086(3) -0.00103(14) -0.0021(3) 0.00460(18)  
 O2 0.0097(4) 0.0097(4) 0.0053(6) 0.000 0.000 0.0049(2)  
 O3 0.0056(3) 0.0056(3) 0.0078(5) 0.000 0.000 0.00279(16)  
 O4 0.0050(3) 0.0052(2) 0.0062(3) -0.00002(12) 0.0000(2) 0.00252(14)  
 O5 0.0055(3) 0.0055(3) 0.0092(6) 0.000 0.000 0.00274(17)  
 O6 0.0046(3) 0.0050(2) 0.0067(3) 0.00003(12) 0.0001(2) 0.00232(15)  
 O7 0.0105(4) 0.0088(3) 0.0074(3) -0.00142(15) -0.0028(3) 0.0052(2)  
 O8 0.0074(3) 0.0074(3) 0.0061(5) 0.000 0.000 0.00370(16)  
 O9 0.0079(4) 0.0079(4) 0.0101(7) 0.000 0.000 0.00393(19)  
 O10 0.0087(3) 0.0086(2) 0.0095(3) 0.00122(14) 0.0024(3) 0.00434(16)  
 O11 0.0112(4) 0.0112(4) 0.0047(5) 0.000 0.000 0.00560(19)  
 O12 0.0130(4) 0.0115(3) 0.0072(4) 0.00001(14) 0.0000(3) 0.0065(2)

\_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  
 T1A O3 1.915(2) . ?  
 T1A O1 1.918(2) . ?  
 T1A O1 1.918(2) 4 ?  
 T1A O1 1.918(2) 3 ?  
 T1A M11 3.343(2) 5\_544 ?  
 T1A M11 3.343(2) 6\_554 ?  
 T1A M11 3.343(2) 2\_554 ?  
 T1A M11 3.343(2) 2\_664 ?  
 T1A M11 3.343(2) 6\_454 ?  
 T1A M11 3.343(2) 5\_554 ?  
 T1A T10A 3.4266(12) 2\_554 ?  
 T1A T3A 3.500(3) 1\_545 ?  
 M2 O4 1.9153(15) 4\_665 ?  
 M2 O4 1.9153(15) 3\_655 ?

M2 O4 1.9154(15) . ?  
M2 O1 1.9182(16) . ?  
M2 O1 1.9182(16) 3\_655 ?  
M2 O1 1.9182(16) 4\_665 ?  
M2 M4 2.8488(12) 4\_665 ?  
M2 M4 2.8488(12) . ?  
M2 M4 2.8489(12) 3\_655 ?  
M2 M11 2.8761(12) 5\_654 ?  
M2 M11 2.8761(12) 6\_554 ?  
M2 M11 2.8761(12) 2\_664 ?  
T3A O2 1.944(2) . ?  
T3A O4 1.9481(18) 3\_655 ?  
T3A O4 1.9481(18) 1\_455 ?  
T3A O4 1.9481(18) 4\_675 ?  
T3A M11 3.3357(13) 2\_664 ?  
T3A M11 3.3357(13) 6\_564 ?  
T3A M11 3.3358(13) 5\_554 ?  
T3A M2 3.346(3) 1\_455 ?  
T3A M2 3.346(3) 1\_565 ?  
T3A M4 3.349(2) 3\_655 ?  
T3A M4 3.349(2) . ?  
M4 O6 1.9021(14) 3\_765 ?  
M4 O6 1.9022(14) . ?  
M4 O4 1.9058(13) . ?  
M4 O4 1.9059(13) 3\_655 ?  
M4 O3 1.9344(17) 1\_665 ?  
M4 O5 1.9381(18) . ?  
M4 M6 2.8394(13) 1\_665 ?  
M4 M4 2.853(3) 4\_665 ?  
M4 M4 2.853(3) 3\_655 ?  
M4 M4 2.857(3) 3\_765 ?  
M4 M4 2.857(3) 4\_675 ?  
T5A O8 1.943(2) . ?  
T5A O6 1.9506(19) . ?  
T5A O6 1.9507(19) 4\_565 ?  
T5A O6 1.9507(19) 3\_665 ?  
T5A M8 3.3329(12) 4\_565 ?  
T5A M8 3.3329(12) 3\_665 ?  
T5A M8 3.3330(12) . ?  
T5A M6 3.342(3) 1\_665 ?  
T5A M6 3.342(3) . ?  
T5A M6 3.342(3) 1\_565 ?  
T5A T7A 3.510(3) . ?  
T5A T7A 3.510(3) 1\_565 ?  
M6 O7 1.8898(16) 4 ?  
M6 O7 1.8898(16) . ?  
M6 O7 1.8899(16) 3 ?  
M6 O6 1.9190(16) 3\_655 ?  
M6 O6 1.9190(16) 1\_445 ?  
M6 O6 1.9190(16) 4\_565 ?  
M6 M4 2.8395(13) 3\_655 ?  
M6 M4 2.8395(13) 1\_445 ?  
M6 M4 2.8395(13) 4\_565 ?  
M6 M8 2.8818(13) 1\_545 ?

M6 M8 2.8819(13) 3\_665 ?  
M6 M8 2.8819(13) 4\_455 ?  
T7A O7 1.906(2) 3\_655 ?  
T7A O7 1.907(2) . ?  
T7A O7 1.907(2) 4\_665 ?  
T7A O5 1.945(3) . ?  
T7A M8 3.323(2) 3\_765 ?  
T7A M8 3.323(2) 4 ?  
T7A M8 3.323(2) 1\_655 ?  
T7A M8 3.323(2) 1\_545 ?  
T7A M8 3.323(2) 4\_565 ?  
T7A M8 3.323(2) 3\_665 ?  
T7A T5A 3.510(3) 1\_545 ?  
T7A T5A 3.510(3) 1\_655 ?  
M8 O8 1.8969(16) . ?  
M8 O10 1.9175(15) 4\_565 ?  
M8 O10 1.9175(15) . ?  
M8 O9 1.9345(17) 1\_565 ?  
M8 O7 1.9569(14) 4\_565 ?  
M8 O7 1.9569(14) 1\_565 ?  
M8 M8 2.832(3) 3\_665 ?  
M8 M8 2.832(3) 4\_565 ?  
M8 M8 2.878(3) 4\_465 ?  
M8 M8 2.878(3) 3\_675 ?  
M8 M6 2.8821(13) 1\_565 ?  
M8 T10A 3.2734(12) 1\_565 ?  
M9 O10 1.8747(18) 4\_445 ?  
M9 O10 1.8747(18) 1\_545 ?  
M9 O10 1.8748(18) 3 ?  
M9 O12 2.1662(16) 3\_445 ?  
M9 O12 2.1662(16) 4\_545 ?  
M9 O12 2.1663(16) . ?  
M9 M11 3.0909(11) 3\_545 ?  
M9 M11 3.0909(11) 4 ?  
M9 M11 3.0909(11) 1\_445 ?  
M9 T10A 3.429(3) 1\_545 ?  
M9 T10A 3.429(3) 1\_445 ?  
M9 T10A 3.429(3) . ?  
T10A O9 1.830(2) . ?  
T10A O12 1.8421(19) 4\_545 ?  
T10A O12 1.8421(19) 1\_665 ?  
T10A O12 1.8421(19) 3\_455 ?  
T10A M8 3.2737(12) 1\_545 ?  
T10A M8 3.2737(12) 4\_455 ?  
T10A M8 3.2737(12) 3\_665 ?  
T10A M11 3.316(2) 3\_655 ?  
T10A M11 3.316(2) 4 ?  
T10A M11 3.316(2) . ?  
T10A M11 3.316(2) 1\_445 ?  
T10A M11 3.316(2) 4\_565 ?  
M11 O2 1.8917(17) 2\_665 ?  
M11 O12 1.9380(14) 4\_655 ?  
M11 O12 1.9381(14) 1\_665 ?  
M11 O1 1.9418(14) 5 ?

M11 O1 1.9418(14) 2\_665 ?  
 M11 O11 1.9423(17) 1\_665 ?  
 M11 M11 2.813(3) 3\_655 ?  
 M11 M11 2.813(3) 4\_665 ?  
 M11 M2 2.8760(12) 2\_665 ?  
 M11 M11 2.897(3) 4\_565 ?  
 M11 M11 2.897(3) 3\_665 ?  
 M11 M9 3.0910(11) 1\_665 ?  
 O1 M11 1.9418(14) 6\_554 ?  
 O1 M11 1.9418(14) 2\_664 ?  
 O2 M11 1.8918(17) 2\_664 ?  
 O2 M11 1.8918(17) 6\_564 ?  
 O2 M11 1.8918(17) 5\_554 ?  
 O3 M4 1.9343(17) 3\_655 ?  
 O3 M4 1.9344(17) 1\_445 ?  
 O3 M4 1.9344(17) 4\_565 ?  
 O4 M4 1.9058(13) 4\_665 ?  
 O4 T3A 1.9482(18) 1\_655 ?  
 O4 T3B 1.9482(18) 1\_655 ?  
 O5 M4 1.9380(18) 4\_665 ?  
 O5 M4 1.9381(18) 3\_655 ?  
 O6 M4 1.9022(14) 4\_675 ?  
 O6 M6 1.9189(16) 1\_665 ?  
 O7 M8 1.9568(14) 1\_545 ?  
 O7 M8 1.9568(14) 3\_665 ?  
 O8 M8 1.8968(16) 3\_665 ?  
 O8 M8 1.8969(16) 4\_565 ?  
 O9 M8 1.9346(17) 1\_545 ?  
 O9 M8 1.9346(17) 4\_455 ?  
 O9 M8 1.9346(17) 3\_665 ?  
 O10 M9 1.8746(18) 1\_565 ?  
 O10 M8 1.9176(15) 3\_665 ?  
 O11 M11 1.9422(17) 1\_445 ?  
 O11 M11 1.9423(17) 4\_455 ?  
 O11 M11 1.9423(17) 3 ?  
 O12 T10B 1.8422(19) 1\_445 ?  
 O12 T10A 1.8422(19) 1\_445 ?  
 O12 M11 1.9380(14) 3\_545 ?  
 O12 M11 1.9380(14) 1\_445 ?

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  
 O3 T1A O1 108.81(4) . . ?  
 O3 T1A O1 108.81(5) . 4 ?  
 O1 T1A O1 110.13(4) . 4 ?  
 O3 T1A O1 108.81(5) . 3 ?  
 O1 T1A O1 110.13(4) . 3 ?  
 O1 T1A O1 110.13(4) 4 3 ?



O3 T1A M11 121.35(3) . 5\_544 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) . 5\_544 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) 4 5\_544 ?  
 O1 T1A M11 122.39(5) 3 5\_544 ?  
 O3 T1A M11 121.35(3) . 6\_554 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) . 6\_554 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) 4 6\_554 ?  
 O1 T1A M11 122.40(5) 3 6\_554 ?  
 M11 T1A M11 49.77(2) 5\_544 6\_554 ?  
 O3 T1A M11 121.35(3) . 2\_554 ?  
 O1 T1A M11 122.40(5) . 2\_554 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) 4 2\_554 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) 3 2\_554 ?  
 M11 T1A M11 51.34(2) 5\_544 2\_554 ?  
 M11 T1A M11 95.39(4) 6\_554 2\_554 ?  
 O3 T1A M11 121.35(3) . 2\_664 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) . 2\_664 ?  
 O1 T1A M11 122.40(5) 4 2\_664 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) 3 2\_664 ?  
 M11 T1A M11 95.39(4) 5\_544 2\_664 ?  
 M11 T1A M11 51.34(2) 6\_554 2\_664 ?  
 M11 T1A M11 117.29(5) 2\_554 2\_664 ?  
 O3 T1A M11 121.35(3) . 6\_454 ?  
 O1 T1A M11 122.40(5) . 6\_454 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) 4 6\_454 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) 3 6\_454 ?  
 M11 T1A M11 95.39(4) 5\_544 6\_454 ?  
 M11 T1A M11 117.29(5) 6\_554 6\_454 ?  
 M11 T1A M11 49.76(2) 2\_554 6\_454 ?  
 M11 T1A M11 95.39(3) 2\_664 6\_454 ?  
 O3 T1A M11 121.35(3) . 5\_554 ?  
 O1 T1A M11 79.95(3) . 5\_554 ?  
 O1 T1A M11 122.39(5) 4 5\_554 ?  
 O1 T1A M11 30.19(2) 3 5\_554 ?  
 M11 T1A M11 117.29(5) 5\_544 5\_554 ?  
 M11 T1A M11 95.39(4) 6\_554 5\_554 ?  
 M11 T1A M11 95.39(4) 2\_554 5\_554 ?  
 M11 T1A M11 49.76(2) 2\_664 5\_554 ?  
 M11 T1A M11 51.34(2) 6\_454 5\_554 ?  
 O3 T1A T10A 180.0 . 2\_554 ?  
 O1 T1A T10A 71.19(5) . 2\_554 ?  
 O1 T1A T10A 71.19(5) 4 2\_554 ?  
 O1 T1A T10A 71.19(4) 3 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 5\_544 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 6\_554 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 2\_554 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 2\_664 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 6\_454 2\_554 ?  
 M11 T1A T10A 58.65(3) 5\_554 2\_554 ?  
 O3 T1A T3A 70.40(3) . 1\_545 ?  
 O1 T1A T3A 70.26(2) . 1\_545 ?  
 O1 T1A T3A 70.26(2) 4 1\_545 ?  
 O1 T1A T3A 179.20(5) 3 1\_545 ?  
 M11 T1A T3A 58.30(4) 5\_544 1\_545 ?

M11 T1A T3A 58.30(4) 6\_554 1\_545 ?  
M11 T1A T3A 100.448(18) 2\_554 1\_545 ?  
M11 T1A T3A 100.448(18) 2\_664 1\_545 ?  
M11 T1A T3A 150.211(14) 6\_454 1\_545 ?  
M11 T1A T3A 150.212(14) 5\_554 1\_545 ?  
T10A T1A T3A 109.60(2) 2\_554 1\_545 ?  
O4 M2 O4 82.91(6) 4\_665 3\_655 ?  
O4 M2 O4 82.91(6) 4\_665 . ?  
O4 M2 O4 82.91(6) 3\_655 . ?  
O4 M2 O1 96.57(5) 4\_665 . ?  
O4 M2 O1 96.57(5) 3\_655 . ?  
O4 M2 O1 179.30(6) . . ?  
O4 M2 O1 96.57(5) 4\_665 3\_655 ?  
O4 M2 O1 179.31(6) 3\_655 3\_655 ?  
O4 M2 O1 96.58(5) . 3\_655 ?  
O1 M2 O1 83.94(7) . 3\_655 ?  
O4 M2 O1 179.31(6) 4\_665 4\_665 ?  
O4 M2 O1 96.57(5) 3\_655 4\_665 ?  
O4 M2 O1 96.58(5) . 4\_665 ?  
O1 M2 O1 83.94(7) . 4\_665 ?  
O1 M2 O1 83.94(7) 3\_655 4\_665 ?  
O4 M2 M4 41.67(3) 4\_665 4\_665 ?  
O4 M2 M4 85.18(7) 3\_655 4\_665 ?  
O4 M2 M4 41.67(3) . 4\_665 ?  
O1 M2 M4 137.87(3) . 4\_665 ?  
O1 M2 M4 94.13(6) 3\_655 4\_665 ?  
O1 M2 M4 137.87(3) 4\_665 4\_665 ?  
O4 M2 M4 85.18(7) 4\_665 . ?  
O4 M2 M4 41.67(3) 3\_655 . ?  
O4 M2 M4 41.67(3) . . ?  
O1 M2 M4 137.87(3) . . ?  
O1 M2 M4 137.87(3) 3\_655 . ?  
O1 M2 M4 94.13(6) 4\_665 . ?  
M4 M2 M4 60.09(5) 4\_665 . ?  
O4 M2 M4 41.67(3) 4\_665 3\_655 ?  
O4 M2 M4 41.67(3) 3\_655 3\_655 ?  
O4 M2 M4 85.18(7) . 3\_655 ?  
O1 M2 M4 94.13(6) . 3\_655 ?  
O1 M2 M4 137.87(3) 3\_655 3\_655 ?  
O1 M2 M4 137.87(3) 4\_665 3\_655 ?  
M4 M2 M4 60.09(5) 4\_665 3\_655 ?  
M4 M2 M4 60.09(5) . 3\_655 ?  
O4 M2 M11 138.31(3) 4\_665 5\_654 ?  
O4 M2 M11 138.31(3) 3\_655 5\_654 ?  
O4 M2 M11 94.59(6) . 5\_654 ?  
O1 M2 M11 86.11(7) . 5\_654 ?  
O1 M2 M11 42.15(3) 3\_655 5\_654 ?  
O1 M2 M11 42.14(3) 4\_665 5\_654 ?  
M4 M2 M11 119.72(4) 4\_665 5\_654 ?  
M4 M2 M11 119.72(4) . 5\_654 ?  
M4 M2 M11 179.77(3) 3\_655 5\_654 ?  
O4 M2 M11 94.59(6) 4\_665 6\_554 ?  
O4 M2 M11 138.31(3) 3\_655 6\_554 ?  
O4 M2 M11 138.31(3) . 6\_554 ?

O1 M2 M11 42.15(3) . 6\_554 ?  
 O1 M2 M11 42.14(3) 3\_655 6\_554 ?  
 O1 M2 M11 86.10(7) 4\_665 6\_554 ?  
 M4 M2 M11 119.72(4) 4\_665 6\_554 ?  
 M4 M2 M11 179.76(3) . 6\_554 ?  
 M4 M2 M11 119.72(4) 3\_655 6\_554 ?  
 M11 M2 M11 60.47(5) 5\_654 6\_554 ?  
 O4 M2 M11 138.31(3) 4\_665 2\_664 ?  
 O4 M2 M11 94.58(6) 3\_655 2\_664 ?  
 O4 M2 M11 138.31(3) . 2\_664 ?  
 O1 M2 M11 42.15(3) . 2\_664 ?  
 O1 M2 M11 86.10(7) 3\_655 2\_664 ?  
 O1 M2 M11 42.15(3) 4\_665 2\_664 ?  
 M4 M2 M11 179.76(3) 4\_665 2\_664 ?  
 M4 M2 M11 119.72(4) . 2\_664 ?  
 M4 M2 M11 119.72(4) 3\_655 2\_664 ?  
 M11 M2 M11 60.47(5) 5\_654 2\_664 ?  
 M11 M2 M11 60.47(5) 6\_554 2\_664 ?  
 O2 T3A O4 109.84(4) . 3\_655 ?  
 O2 T3A O4 109.83(4) . 1\_455 ?  
 O4 T3A O4 109.11(4) 3\_655 1\_455 ?  
 O2 T3A O4 109.83(4) . 4\_675 ?  
 O4 T3A O4 109.11(4) 3\_655 4\_675 ?  
 O4 T3A O4 109.10(4) 1\_455 4\_675 ?  
 O2 T3A M11 29.14(2) . 2\_664 ?  
 O4 T3A M11 80.70(5) 3\_655 2\_664 ?  
 O4 T3A M11 121.69(4) 1\_455 2\_664 ?  
 O4 T3A M11 121.69(4) 4\_675 2\_664 ?  
 O2 T3A M11 29.14(2) . 6\_564 ?  
 O4 T3A M11 121.70(4) 3\_655 6\_564 ?  
 O4 T3A M11 121.69(4) 1\_455 6\_564 ?  
 O4 T3A M11 80.70(5) 4\_675 6\_564 ?  
 M11 T3A M11 49.88(4) 2\_664 6\_564 ?  
 O2 T3A M11 29.14(2) . 5\_554 ?  
 O4 T3A M11 121.70(4) 3\_655 5\_554 ?  
 O4 T3A M11 80.70(5) 1\_455 5\_554 ?  
 O4 T3A M11 121.69(4) 4\_675 5\_554 ?  
 M11 T3A M11 49.88(4) 2\_664 5\_554 ?  
 M11 T3A M11 49.88(4) 6\_564 5\_554 ?  
 O2 T3A M2 80.13(2) . . ?  
 O4 T3A M2 29.71(4) 3\_655 . ?  
 O4 T3A M2 121.437(7) 1\_455 . ?  
 O4 T3A M2 121.437(7) 4\_675 . ?  
 M11 T3A M2 50.99(2) 2\_664 . ?  
 M11 T3A M2 95.17(3) 6\_564 . ?  
 M11 T3A M2 95.17(3) 5\_554 . ?  
 O2 T3A M2 80.13(2) . 1\_455 ?  
 O4 T3A M2 121.437(7) 3\_655 1\_455 ?  
 O4 T3A M2 29.71(4) 1\_455 1\_455 ?  
 O4 T3A M2 121.435(7) 4\_675 1\_455 ?  
 M11 T3A M2 95.17(3) 2\_664 1\_455 ?  
 M11 T3A M2 95.17(3) 6\_564 1\_455 ?  
 M11 T3A M2 50.99(2) 5\_554 1\_455 ?  
 M2 T3A M2 117.124(13) . 1\_455 ?

O2 T3A M2 80.13(2) . 1\_565 ?  
O4 T3A M2 121.437(7) 3\_655 1\_565 ?  
O4 T3A M2 121.435(7) 1\_455 1\_565 ?  
O4 T3A M2 29.71(4) 4\_675 1\_565 ?  
M11 T3A M2 95.17(3) 2\_664 1\_565 ?  
M11 T3A M2 50.99(2) 6\_564 1\_565 ?  
M11 T3A M2 95.17(3) 5\_554 1\_565 ?  
M2 T3A M2 117.124(13) . 1\_565 ?  
M2 T3A M2 117.121(13) 1\_455 1\_565 ?  
O2 T3A M4 121.52(3) . 3\_655 ?  
O4 T3A M4 29.30(2) 3\_655 3\_655 ?  
O4 T3A M4 79.80(3) 1\_455 3\_655 ?  
O4 T3A M4 121.13(5) 4\_675 3\_655 ?  
M11 T3A M4 95.57(4) 2\_664 3\_655 ?  
M11 T3A M4 144.69(2) 6\_564 3\_655 ?  
M11 T3A M4 117.18(3) 5\_554 3\_655 ?  
M2 T3A M4 50.37(3) . 3\_655 ?  
M2 T3A M4 95.165(16) 1\_455 3\_655 ?  
M2 T3A M4 144.76(2) 1\_565 3\_655 ?  
O2 T3A M4 121.52(3) . . ?  
O4 T3A M4 29.30(2) 3\_655 . ?  
O4 T3A M4 121.13(5) 1\_455 . ?  
O4 T3A M4 79.81(3) 4\_675 . ?  
M11 T3A M4 95.57(4) 2\_664 . ?  
M11 T3A M4 117.18(3) 6\_564 . ?  
M11 T3A M4 144.69(2) 5\_554 . ?  
M2 T3A M4 50.36(3) . . ?  
M2 T3A M4 144.76(2) 1\_455 . ?  
M2 T3A M4 95.166(16) 1\_565 . ?  
M4 T3A M4 50.42(3) 3\_655 . ?  
O6 M4 O6 84.01(8) 3\_765 . ?  
O6 M4 O4 96.28(5) 3\_765 . ?  
O6 M4 O4 179.62(5) . . ?  
O6 M4 O4 179.62(6) 3\_765 3\_655 ?  
O6 M4 O4 96.29(5) . 3\_655 ?  
O4 M4 O4 83.41(7) . 3\_655 ?  
O6 M4 O3 83.44(6) 3\_765 1\_665 ?  
O6 M4 O3 83.44(6) . 1\_665 ?  
O4 M4 O3 96.37(6) . 1\_665 ?  
O4 M4 O3 96.36(6) 3\_655 1\_665 ?  
O6 M4 O5 96.32(6) 3\_765 . ?  
O6 M4 O5 96.32(6) . . ?  
O4 M4 O5 83.88(6) . . ?  
O4 M4 O5 83.88(6) 3\_655 . ?  
O3 M4 O5 179.67(9) 1\_665 . ?  
O6 M4 M6 42.23(4) 3\_765 1\_665 ?  
O6 M4 M6 42.23(4) . 1\_665 ?  
O4 M4 M6 138.10(4) . 1\_665 ?  
O4 M4 M6 138.10(4) 3\_655 1\_665 ?  
O3 M4 M6 85.96(7) 1\_665 1\_665 ?  
O5 M4 M6 93.71(8) . 1\_665 ?  
O6 M4 M2 137.75(4) 3\_765 . ?  
O6 M4 M2 137.75(4) . . ?  
O4 M4 M2 41.92(4) . . ?

O4 M4 M2 41.92(4) 3\_655 . ?  
 O3 M4 M2 93.84(7) 1\_665 . ?  
 O5 M4 M2 86.49(8) . . ?  
 M6 M4 M2 179.80(3) 1\_665 . ?  
 O6 M4 M4 94.69(3) 3\_765 4\_665 ?  
 O6 M4 M4 138.68(4) . 4\_665 ?  
 O4 M4 M4 41.55(3) . 4\_665 ?  
 O4 M4 M4 85.23(3) 3\_655 4\_665 ?  
 O3 M4 M4 137.61(4) 1\_665 4\_665 ?  
 O5 M4 M4 42.61(4) . 4\_665 ?  
 M6 M4 M4 120.21(2) 1\_665 4\_665 ?  
 M2 M4 M4 59.95(2) . 4\_665 ?  
 O6 M4 M4 138.68(4) 3\_765 3\_655 ?  
 O6 M4 M4 94.69(3) . 3\_655 ?  
 O4 M4 M4 85.23(3) . 3\_655 ?  
 O4 M4 M4 41.55(3) 3\_655 3\_655 ?  
 O3 M4 M4 137.61(4) 1\_665 3\_655 ?  
 O5 M4 M4 42.61(4) . 3\_655 ?  
 M6 M4 M4 120.21(2) 1\_665 3\_655 ?  
 M2 M4 M4 59.96(2) . 3\_655 ?  
 M4 M4 M4 60.001(1) 4\_665 3\_655 ?  
 O6 M4 M4 41.32(4) 3\_765 3\_765 ?  
 O6 M4 M4 85.30(3) . 3\_765 ?  
 O4 M4 M4 94.77(3) . 3\_765 ?  
 O4 M4 M4 138.45(3) 3\_655 3\_765 ?  
 O3 M4 M4 42.39(4) 1\_665 3\_765 ?  
 O5 M4 M4 137.39(4) . 3\_765 ?  
 M6 M4 M4 59.79(2) 1\_665 3\_765 ?  
 M2 M4 M4 120.05(2) . 3\_765 ?  
 M4 M4 M4 120.0 4\_665 3\_765 ?  
 M4 M4 M4 180.0 3\_655 3\_765 ?  
 O6 M4 M4 85.31(3) 3\_765 4\_675 ?  
 O6 M4 M4 41.32(4) . 4\_675 ?  
 O4 M4 M4 138.45(3) . 4\_675 ?  
 O4 M4 M4 94.77(3) 3\_655 4\_675 ?  
 O3 M4 M4 42.39(4) 1\_665 4\_675 ?  
 O5 M4 M4 137.39(4) . 4\_675 ?  
 M6 M4 M4 59.79(2) 1\_665 4\_675 ?  
 M2 M4 M4 120.05(2) . 4\_675 ?  
 M4 M4 M4 180.0 4\_665 4\_675 ?  
 M4 M4 M4 120.0 3\_655 4\_675 ?  
 M4 M4 M4 60.0 3\_765 4\_675 ?  
 O8 T5A O6 110.53(4) . . ?  
 O8 T5A O6 110.53(4) . 4\_565 ?  
 O6 T5A O6 108.39(4) . 4\_565 ?  
 O8 T5A O6 110.53(4) . 3\_665 ?  
 O6 T5A O6 108.39(4) . 3\_665 ?  
 O6 T5A O6 108.39(4) 4\_565 3\_665 ?  
 O8 T5A M8 29.38(2) . 4\_565 ?  
 O6 T5A M8 81.15(5) . 4\_565 ?  
 O6 T5A M8 122.37(4) 4\_565 4\_565 ?  
 O6 T5A M8 122.37(4) 3\_665 4\_565 ?  
 O8 T5A M8 29.38(2) . 3\_665 ?  
 O6 T5A M8 122.36(4) . 3\_665 ?

O6 T5A M8 81.15(5) 4\_565 3\_665 ?  
O6 T5A M8 122.37(4) 3\_665 3\_665 ?  
M8 T5A M8 50.29(4) 4\_565 3\_665 ?  
O8 T5A M8 29.38(2) . . ?  
O6 T5A M8 122.36(4) . . ?  
O6 T5A M8 122.37(4) 4\_565 . ?  
O6 T5A M8 81.15(5) 3\_665 . ?  
M8 T5A M8 50.28(4) 4\_565 . ?  
M8 T5A M8 50.28(4) 3\_665 . ?  
O8 T5A M6 80.54(2) . 1\_665 ?  
O6 T5A M6 29.99(4) . 1\_665 ?  
O6 T5A M6 121.301(8) 4\_565 1\_665 ?  
O6 T5A M6 121.300(8) 3\_665 1\_665 ?  
M8 T5A M6 51.16(2) 4\_565 1\_665 ?  
M8 T5A M6 95.67(3) 3\_665 1\_665 ?  
M8 T5A M6 95.66(3) . 1\_665 ?  
O8 T5A M6 80.54(2) . . ?  
O6 T5A M6 121.301(8) . . ?  
O6 T5A M6 29.99(4) 4\_565 . ?  
O6 T5A M6 121.301(8) 3\_665 . ?  
M8 T5A M6 95.66(3) 4\_565 . ?  
M8 T5A M6 51.16(2) 3\_665 . ?  
M8 T5A M6 95.66(3) . . ?  
M6 T5A M6 117.352(13) 1\_665 . ?  
O8 T5A M6 80.54(2) . 1\_565 ?  
O6 T5A M6 121.301(8) . 1\_565 ?  
O6 T5A M6 121.300(8) 4\_565 1\_565 ?  
O6 T5A M6 29.99(4) 3\_665 1\_565 ?  
M8 T5A M6 95.66(3) 4\_565 1\_565 ?  
M8 T5A M6 95.66(3) 3\_665 1\_565 ?  
M8 T5A M6 51.16(2) . 1\_565 ?  
M6 T5A M6 117.352(13) 1\_665 1\_565 ?  
M6 T5A M6 117.352(13) . 1\_565 ?  
O8 T5A T7A 69.93(2) . . ?  
O6 T5A T7A 71.37(3) . . ?  
O6 T5A T7A 71.37(3) 4\_565 . ?  
O6 T5A T7A 179.54(5) 3\_665 . ?  
M8 T5A T7A 58.033(16) 4\_565 . ?  
M8 T5A T7A 58.033(16) 3\_665 . ?  
M8 T5A T7A 99.31(4) . . ?  
M6 T5A T7A 58.691(7) 1\_665 . ?  
M6 T5A T7A 58.690(7) . . ?  
M6 T5A T7A 150.47(4) 1\_565 . ?  
O8 T5A T7A 69.93(2) . 1\_565 ?  
O6 T5A T7A 71.37(3) . 1\_565 ?  
O6 T5A T7A 179.54(5) 4\_565 1\_565 ?  
O6 T5A T7A 71.37(3) 3\_665 1\_565 ?  
M8 T5A T7A 58.033(16) 4\_565 1\_565 ?  
M8 T5A T7A 99.31(4) 3\_665 1\_565 ?  
M8 T5A T7A 58.033(16) . 1\_565 ?  
M6 T5A T7A 58.691(7) 1\_665 1\_565 ?  
M6 T5A T7A 150.47(4) . 1\_565 ?  
M6 T5A T7A 58.689(7) 1\_565 1\_565 ?  
T7A T5A T7A 108.87(2) . 1\_565 ?

O7 M6 O7 84.49(8) 4 . ?  
O7 M6 O7 84.49(8) 4 3 ?  
O7 M6 O7 84.49(8) . 3 ?  
O7 M6 O6 96.20(5) 4 3\_655 ?  
O7 M6 O6 96.19(5) . 3\_655 ?  
O7 M6 O6 179.07(7) 3 3\_655 ?  
O7 M6 O6 96.19(5) 4 1\_445 ?  
O7 M6 O6 179.07(7) . 1\_445 ?  
O7 M6 O6 96.19(5) 3 1\_445 ?  
O6 M6 O6 83.11(7) 3\_655 1\_445 ?  
O7 M6 O6 179.07(7) 4 4\_565 ?  
O7 M6 O6 96.19(5) . 4\_565 ?  
O7 M6 O6 96.19(5) 3 4\_565 ?  
O6 M6 O6 83.11(7) 3\_655 4\_565 ?  
O6 M6 O6 83.11(7) 1\_445 4\_565 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) 4 3\_655 ?  
O7 M6 M4 93.56(6) . 3\_655 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) 3 3\_655 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 3\_655 3\_655 ?  
O6 M6 M4 85.51(7) 1\_445 3\_655 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 4\_565 3\_655 ?  
O7 M6 M4 93.56(6) 4 1\_445 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) . 1\_445 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) 3 1\_445 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 3\_655 1\_445 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 1\_445 1\_445 ?  
O6 M6 M4 85.51(7) 4\_565 1\_445 ?  
M4 M6 M4 60.42(5) 3\_655 1\_445 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) 4 4\_565 ?  
O7 M6 M4 137.61(3) . 4\_565 ?  
O7 M6 M4 93.55(6) 3 4\_565 ?  
O6 M6 M4 85.51(7) 3\_655 4\_565 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 1\_445 4\_565 ?  
O6 M6 M4 41.78(3) 4\_565 4\_565 ?  
M4 M6 M4 60.41(5) 3\_655 4\_565 ?  
M4 M6 M4 60.41(5) 1\_445 4\_565 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) 4 1\_545 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) . 1\_545 ?  
O7 M6 M8 86.13(7) 3 1\_545 ?  
O6 M6 M8 94.80(6) 3\_655 1\_545 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 1\_445 1\_545 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 4\_565 1\_545 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 3\_655 1\_545 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 1\_445 1\_545 ?  
M4 M6 M8 179.69(3) 4\_565 1\_545 ?  
O7 M6 M8 86.13(7) 4 3\_665 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) . 3\_665 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) 3 3\_665 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 3\_655 3\_665 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 1\_445 3\_665 ?  
O6 M6 M8 94.80(6) 4\_565 3\_665 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 3\_655 3\_665 ?  
M4 M6 M8 179.69(3) 1\_445 3\_665 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 4\_565 3\_665 ?

M8 M6 M8 59.91(5) 1\_545 3\_665 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) 4\_455 ?  
O7 M6 M8 86.13(7) . 4\_455 ?  
O7 M6 M8 42.37(4) 3\_4\_455 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 3\_655 4\_455 ?  
O6 M6 M8 94.80(6) 1\_445 4\_455 ?  
O6 M6 M8 138.25(3) 4\_565 4\_455 ?  
M4 M6 M8 179.69(3) 3\_655 4\_455 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 1\_445 4\_455 ?  
M4 M6 M8 119.84(4) 4\_565 4\_455 ?  
M8 M6 M8 59.91(5) 1\_545 4\_455 ?  
M8 M6 M8 59.91(5) 3\_665 4\_455 ?  
O7 T7A O7 112.41(4) 3\_655 . ?  
O7 T7A O7 112.42(4) 3\_655 4\_665 ?  
O7 T7A O7 112.41(4) . 4\_665 ?  
O7 T7A O5 106.34(5) 3\_655 . ?  
O7 T7A O5 106.34(5) . . ?  
O7 T7A O5 106.34(5) 4\_665 . ?  
O7 T7A M8 31.12(2) 3\_655 3\_765 ?  
O7 T7A M8 124.90(5) . 3\_765 ?  
O7 T7A M8 81.51(3) 4\_665 3\_765 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 3\_765 ?  
O7 T7A M8 31.12(2) 3\_655 4 ?  
O7 T7A M8 81.51(3) . 4 ?  
O7 T7A M8 124.90(5) 4\_665 4 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 4 ?  
M8 T7A M8 51.32(2) 3\_765 4 ?  
O7 T7A M8 81.51(3) 3\_655 1\_655 ?  
O7 T7A M8 124.90(5) . 1\_655 ?  
O7 T7A M8 31.12(2) 4\_665 1\_655 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 1\_655 ?  
M8 T7A M8 50.45(2) 3\_765 1\_655 ?  
M8 T7A M8 96.17(4) 4\_1\_655 ?  
O7 T7A M8 81.51(3) 3\_655 1\_545 ?  
O7 T7A M8 31.12(2) . 1\_545 ?  
O7 T7A M8 124.89(5) 4\_665 1\_545 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 1\_545 ?  
M8 T7A M8 96.17(4) 3\_765 1\_545 ?  
M8 T7A M8 50.45(2) 4\_1\_545 ?  
M8 T7A M8 118.46(6) 1\_655 1\_545 ?  
O7 T7A M8 124.90(5) 3\_655 4\_565 ?  
O7 T7A M8 81.51(3) . 4\_565 ?  
O7 T7A M8 31.12(2) 4\_665 4\_565 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 4\_565 ?  
M8 T7A M8 96.17(4) 3\_765 4\_565 ?  
M8 T7A M8 118.46(6) 4\_4\_565 ?  
M8 T7A M8 51.32(2) 1\_655 4\_565 ?  
M8 T7A M8 96.17(4) 1\_545 4\_565 ?  
O7 T7A M8 124.90(5) 3\_655 3\_665 ?  
O7 T7A M8 31.12(2) . 3\_665 ?  
O7 T7A M8 81.50(3) 4\_665 3\_665 ?  
O5 T7A M8 120.77(3) . 3\_665 ?  
M8 T7A M8 118.46(6) 3\_765 3\_665 ?  
M8 T7A M8 96.17(4) 4\_3\_665 ?



M8 T7A M8 96.17(4) 1\_655 3\_665 ?  
M8 T7A M8 51.32(2) 1\_545 3\_665 ?  
M8 T7A M8 50.45(2) 4\_565 3\_665 ?  
O7 T7A T5A 69.26(2) 3\_655 1\_545 ?  
O7 T7A T5A 69.26(2) . 1\_545 ?  
O7 T7A T5A 176.27(5) 4\_665 1\_545 ?  
O5 T7A T5A 69.93(2) . 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 100.328(18) 3\_765 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 58.31(4) 4 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 150.765(14) 1\_655 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 58.32(4) 1\_545 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 150.765(14) 4\_565 1\_545 ?  
M8 T7A T5A 100.328(18) 3\_665 1\_545 ?  
O7 T7A T5A 69.26(2) 3\_655 1\_655 ?  
O7 T7A T5A 176.27(5) . 1\_655 ?  
O7 T7A T5A 69.26(2) 4\_665 1\_655 ?  
O5 T7A T5A 69.93(2) . 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 58.31(4) 3\_765 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 100.328(18) 4 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 58.32(4) 1\_655 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 150.765(14) 1\_545 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 100.327(18) 4\_565 1\_655 ?  
M8 T7A T5A 150.765(14) 3\_665 1\_655 ?  
T5A T7A T5A 108.87(2) 1\_545 1\_655 ?  
O8 M8 O10 84.11(6) . 4\_565 ?  
O8 M8 O10 84.11(6) . . ?  
O10 M8 O10 95.80(9) 4\_565 . ?  
O8 M8 O9 179.65(8) . 1\_565 ?  
O10 M8 O9 95.66(6) 4\_565 1\_565 ?  
O10 M8 O9 95.66(6) . 1\_565 ?  
O8 M8 O7 96.16(6) . 4\_565 ?  
O10 M8 O7 172.57(6) 4\_565 4\_565 ?  
O10 M8 O7 91.61(6) . 4\_565 ?  
O9 M8 O7 84.10(6) 1\_565 4\_565 ?  
O8 M8 O7 96.16(6) . 1\_565 ?  
O10 M8 O7 91.61(6) 4\_565 1\_565 ?  
O10 M8 O7 172.57(6) . 1\_565 ?  
O9 M8 O7 84.10(6) 1\_565 1\_565 ?  
O7 M8 O7 80.97(8) 4\_565 1\_565 ?  
O8 M8 M8 41.71(4) . 3\_665 ?  
O10 M8 M8 90.20(4) 4\_565 3\_665 ?  
O10 M8 M8 42.40(4) . 3\_665 ?  
O9 M8 M8 138.06(4) 1\_565 3\_665 ?  
O7 M8 M8 94.93(4) 4\_565 3\_665 ?  
O7 M8 M8 137.33(4) 1\_565 3\_665 ?  
O8 M8 M8 41.71(4) . 4\_565 ?  
O10 M8 M8 42.40(4) 4\_565 4\_565 ?  
O10 M8 M8 90.20(4) . 4\_565 ?  
O9 M8 M8 138.06(4) 1\_565 4\_565 ?  
O7 M8 M8 137.33(4) 4\_565 4\_565 ?  
O7 M8 M8 94.93(4) 1\_565 4\_565 ?  
M8 M8 M8 60.0 3\_665 4\_565 ?  
O8 M8 M8 138.29(4) . 4\_465 ?  
O10 M8 M8 137.61(4) 4\_565 4\_465 ?

O10 M8 M8 89.80(4) . 4\_465 ?  
O9 M8 M8 41.94(4) 1\_565 4\_465 ?  
O7 M8 M8 42.66(4) 4\_565 4\_465 ?  
O7 M8 M8 85.06(4) 1\_565 4\_465 ?  
M8 M8 M8 120.0 3\_665 4\_465 ?  
M8 M8 M8 179.995(1) 4\_565 4\_465 ?  
O8 M8 M8 138.29(4) . 3\_675 ?  
O10 M8 M8 89.80(4) 4\_565 3\_675 ?  
O10 M8 M8 137.61(4) . 3\_675 ?  
O9 M8 M8 41.94(4) 1\_565 3\_675 ?  
O7 M8 M8 85.06(4) 4\_565 3\_675 ?  
O7 M8 M8 42.66(4) 1\_565 3\_675 ?  
M8 M8 M8 179.995(1) 3\_665 3\_675 ?  
M8 M8 M8 120.0 4\_565 3\_675 ?  
M8 M8 M8 60.0 4\_465 3\_675 ?  
O8 M8 M6 94.75(7) . 1\_565 ?  
O10 M8 M6 131.97(4) 4\_565 1\_565 ?  
O10 M8 M6 131.97(4) . 1\_565 ?  
O9 M8 M6 85.60(7) 1\_565 1\_565 ?  
O7 M8 M6 40.60(4) 4\_565 1\_565 ?  
O7 M8 M6 40.60(4) 1\_565 1\_565 ?  
M8 M8 M6 119.95(2) 3\_665 1\_565 ?  
M8 M8 M6 119.95(2) 4\_565 1\_565 ?  
M8 M8 M6 60.05(2) 4\_465 1\_565 ?  
M8 M8 M6 60.05(2) 3\_675 1\_565 ?  
O8 M8 T10A 150.96(6) . 1\_565 ?  
O10 M8 T10A 76.60(5) 4\_565 1\_565 ?  
O10 M8 T10A 76.60(5) . 1\_565 ?  
O9 M8 T10A 28.69(5) 1\_565 1\_565 ?  
O7 M8 T10A 105.76(5) 4\_565 1\_565 ?  
O7 M8 T10A 105.76(5) 1\_565 1\_565 ?  
M8 M8 T10A 116.08(2) 3\_665 1\_565 ?  
M8 M8 T10A 116.08(2) 4\_565 1\_565 ?  
M8 M8 T10A 63.93(2) 4\_465 1\_565 ?  
M8 M8 T10A 63.93(2) 3\_675 1\_565 ?  
M6 M8 T10A 114.29(5) 1\_565 1\_565 ?  
O10 M9 O10 99.64(6) 4\_445 1\_545 ?  
O10 M9 O10 99.64(6) 4\_445 3 ?  
O10 M9 O10 99.64(6) 1\_545 3 ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 4\_445 3\_445 ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 1\_545 3\_445 ?  
O10 M9 O12 163.64(6) 3 3\_445 ?  
O10 M9 O12 163.64(6) 4\_445 4\_545 ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 1\_545 4\_545 ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 3 4\_545 ?  
O12 M9 O12 76.37(6) 3\_445 4\_545 ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 4\_445 . ?  
O10 M9 O12 163.64(6) 1\_545 . ?  
O10 M9 O12 90.85(5) 3 . ?  
O12 M9 O12 76.37(6) 3\_445 . ?  
O12 M9 O12 76.37(6) 4\_545 . ?  
O10 M9 M11 86.39(6) 4\_445 3\_545 ?  
O10 M9 M11 129.23(4) 1\_545 3\_545 ?  
O10 M9 M11 129.23(4) 3 3\_545 ?

O12 M9 M11 38.43(3) 3\_445 3\_545 ?  
 O12 M9 M11 77.25(6) 4\_545 3\_545 ?  
 O12 M9 M11 38.43(3) . 3\_545 ?  
 O10 M9 M11 129.23(4) 4\_445 4 ?  
 O10 M9 M11 86.39(6) 1\_545 4 ?  
 O10 M9 M11 129.23(4) 3 4 ?  
 O12 M9 M11 38.43(3) 3\_445 4 ?  
 O12 M9 M11 38.43(3) 4\_545 4 ?  
 O12 M9 M11 77.25(6) . 4 ?  
 M11 M9 M11 54.14(4) 3\_545 4 ?  
 O10 M9 M11 129.23(4) 4\_445 1\_445 ?  
 O10 M9 M11 129.23(4) 1\_545 1\_445 ?  
 O10 M9 M11 86.39(6) 3 1\_445 ?  
 O12 M9 M11 77.25(6) 3\_445 1\_445 ?  
 O12 M9 M11 38.43(3) 4\_545 1\_445 ?  
 O12 M9 M11 38.43(3) . 1\_445 ?  
 M11 M9 M11 54.14(4) 3\_545 1\_445 ?  
 M11 M9 M11 54.14(4) 4 1\_445 ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 4\_445 1\_545 ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 1\_545 1\_545 ?  
 O10 M9 T10A 167.86(5) 3 1\_545 ?  
 O12 M9 T10A 28.50(4) 3\_445 1\_545 ?  
 O12 M9 T10A 98.67(3) 4\_545 1\_545 ?  
 O12 M9 T10A 98.67(3) . 1\_545 ?  
 M11 M9 T10A 60.891(13) 3\_545 1\_545 ?  
 M11 M9 T10A 60.891(13) 4 1\_545 ?  
 M11 M9 T10A 105.75(4) 1\_445 1\_545 ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 4\_445 1\_445 ?  
 O10 M9 T10A 167.86(5) 1\_545 1\_445 ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 3 1\_445 ?  
 O12 M9 T10A 98.67(3) 3\_445 1\_445 ?  
 O12 M9 T10A 98.67(3) 4\_545 1\_445 ?  
 O12 M9 T10A 28.50(4) . 1\_445 ?  
 M11 M9 T10A 60.891(13) 3\_545 1\_445 ?  
 M11 M9 T10A 105.75(4) 4 1\_445 ?  
 M11 M9 T10A 60.890(13) 1\_445 1\_445 ?  
 T10A M9 T10A 112.749(17) 1\_545 1\_445 ?  
 O10 M9 T10A 167.86(5) 4\_445 . ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 1\_545 . ?  
 O10 M9 T10A 72.86(3) 3 . ?  
 O12 M9 T10A 98.67(3) 3\_445 . ?  
 O12 M9 T10A 28.49(4) 4\_545 . ?  
 O12 M9 T10A 98.66(3) . . ?  
 M11 M9 T10A 105.75(4) 3\_545 . ?  
 M11 M9 T10A 60.888(13) 4 . ?  
 M11 M9 T10A 60.888(13) 1\_445 . ?  
 T10A M9 T10A 112.747(17) 1\_545 . ?  
 T10A M9 T10A 112.747(18) 1\_445 . ?  
 O9 T10A O12 108.17(4) . 4\_545 ?  
 O9 T10A O12 108.17(4) . 1\_665 ?  
 O12 T10A O12 110.74(4) 4\_545 1\_665 ?  
 O9 T10A O12 108.17(4) . 3\_455 ?  
 O12 T10A O12 110.74(4) 4\_545 3\_455 ?  
 O12 T10A O12 110.74(4) 1\_665 3\_455 ?

O9 T10A M8 30.50(3) . 1\_545 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 4\_545 1\_545 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 1\_665 1\_545 ?  
 O12 T10A M8 138.67(5) 3\_455 1\_545 ?  
 O9 T10A M8 30.50(3) . 4\_455 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 4\_545 4\_455 ?  
 O12 T10A M8 138.67(5) 1\_665 4\_455 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 3\_455 4\_455 ?  
 M8 T10A M8 52.15(4) 1\_545 4\_455 ?  
 O9 T10A M8 30.50(3) . 3\_665 ?  
 O12 T10A M8 138.67(5) 4\_545 3\_665 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 1\_665 3\_665 ?  
 O12 T10A M8 91.58(4) 3\_455 3\_665 ?  
 M8 T10A M8 52.15(4) 1\_545 3\_665 ?  
 M8 T10A M8 52.15(4) 4\_455 3\_665 ?  
 O9 T10A M11 120.58(3) . 3\_655 ?  
 O12 T10A M11 81.27(3) 4\_545 3\_655 ?  
 O12 T10A M11 29.49(2) 1\_665 3\_655 ?  
 O12 T10A M11 123.11(5) 3\_455 3\_655 ?  
 M8 T10A M11 93.54(4) 1\_545 3\_655 ?  
 M8 T10A M11 144.944(19) 4\_455 3\_655 ?  
 M8 T10A M11 115.76(3) 3\_665 3\_655 ?  
 O9 T10A M11 120.58(3) . 4 ?  
 O12 T10A M11 29.49(2) 4\_545 4 ?  
 O12 T10A M11 81.27(3) 1\_665 4 ?  
 O12 T10A M11 123.11(5) 3\_455 4 ?  
 M8 T10A M11 93.54(4) 1\_545 4 ?  
 M8 T10A M11 115.76(3) 4\_455 4 ?  
 M8 T10A M11 144.94(2) 3\_665 4 ?  
 M11 T10A M11 51.79(2) 3\_655 4 ?  
 O9 T10A M11 120.58(3) . . ?  
 O12 T10A M11 123.11(5) 4\_545 . ?  
 O12 T10A M11 29.49(2) 1\_665 . ?  
 O12 T10A M11 81.27(3) 3\_455 . ?  
 M8 T10A M11 115.76(3) 1\_545 . ?  
 M8 T10A M11 144.943(19) 4\_455 . ?  
 M8 T10A M11 93.54(4) 3\_665 . ?  
 M11 T10A M11 50.19(2) 3\_655 . ?  
 M11 T10A M11 96.42(4) 4 . ?  
 O9 T10A M11 120.58(3) . 1\_445 ?  
 O12 T10A M11 29.49(2) 4\_545 1\_445 ?  
 O12 T10A M11 123.11(5) 1\_665 1\_445 ?  
 O12 T10A M11 81.27(3) 3\_455 1\_445 ?  
 M8 T10A M11 115.76(3) 1\_545 1\_445 ?  
 M8 T10A M11 93.54(4) 4\_455 1\_445 ?  
 M8 T10A M11 144.943(19) 3\_665 1\_445 ?  
 M11 T10A M11 96.42(4) 3\_655 1\_445 ?  
 M11 T10A M11 50.20(2) 4 1\_445 ?  
 M11 T10A M11 118.83(5) . 1\_445 ?  
 O9 T10A M11 120.58(3) . 4\_565 ?  
 O12 T10A M11 123.11(5) 4\_545 4\_565 ?  
 O12 T10A M11 81.27(3) 1\_665 4\_565 ?  
 O12 T10A M11 29.49(2) 3\_455 4\_565 ?  
 M8 T10A M11 144.943(19) 1\_545 4\_565 ?

M8 T10A M11 115.76(3) 4\_455 4\_565 ?  
M8 T10A M11 93.54(4) 3\_665 4\_565 ?  
M11 T10A M11 96.42(3) 3\_655 4\_565 ?  
M11 T10A M11 118.83(5) 4 4\_565 ?  
M11 T10A M11 51.79(2) . 4\_565 ?  
M11 T10A M11 96.42(3) 1\_445 4\_565 ?  
O2 M11 O12 85.26(6) 2\_665 4\_655 ?  
O2 M11 O12 85.26(6) 2\_665 1\_665 ?  
O12 M11 O12 87.42(8) 4\_655 1\_665 ?  
O2 M11 O1 96.66(6) 2\_665 5 ?  
O12 M11 O1 177.08(5) 4\_655 5 ?  
O12 M11 O1 94.92(6) 1\_665 5 ?  
O2 M11 O1 96.66(6) 2\_665 2\_665 ?  
O12 M11 O1 94.92(6) 4\_655 2\_665 ?  
O12 M11 O1 177.08(5) 1\_665 2\_665 ?  
O1 M11 O1 82.69(8) 5 2\_665 ?  
O2 M11 O11 179.73(8) 2\_665 1\_665 ?  
O12 M11 O11 94.94(6) 4\_655 1\_665 ?  
O12 M11 O11 94.94(6) 1\_665 1\_665 ?  
O1 M11 O11 83.13(6) 5 1\_665 ?  
O1 M11 O11 83.13(6) 2\_665 1\_665 ?  
O2 M11 M11 41.96(4) 2\_665 3\_655 ?  
O12 M11 M11 88.01(3) 4\_655 3\_655 ?  
O12 M11 M11 43.46(3) 1\_665 3\_655 ?  
O1 M11 M11 94.89(3) 5 3\_655 ?  
O1 M11 M11 138.24(4) 2\_665 3\_655 ?  
O11 M11 M11 138.22(4) 1\_665 3\_655 ?  
O2 M11 M11 41.96(4) 2\_665 4\_665 ?  
O12 M11 M11 43.46(3) 4\_655 4\_665 ?  
O12 M11 M11 88.01(3) 1\_665 4\_665 ?  
O1 M11 M11 138.24(4) 5 4\_665 ?  
O1 M11 M11 94.89(3) 2\_665 4\_665 ?  
O11 M11 M11 138.22(4) 1\_665 4\_665 ?  
M11 M11 M11 60.0 3\_655 4\_665 ?  
O2 M11 M2 94.71(8) 2\_665 2\_665 ?  
O12 M11 M2 136.26(4) 4\_655 2\_665 ?  
O12 M11 M2 136.26(4) 1\_665 2\_665 ?  
O1 M11 M2 41.52(4) 5 2\_665 ?  
O1 M11 M2 41.52(4) 2\_665 2\_665 ?  
O11 M11 M2 85.01(7) 1\_665 2\_665 ?  
M11 M11 M2 120.24(2) 3\_655 2\_665 ?  
M11 M11 M2 120.24(2) 4\_665 2\_665 ?  
O2 M11 M11 138.04(4) 2\_665 4\_565 ?  
O12 M11 M11 136.54(3) 4\_655 4\_565 ?  
O12 M11 M11 91.99(3) 1\_665 4\_565 ?  
O1 M11 M11 41.76(4) 5 4\_565 ?  
O1 M11 M11 85.11(3) 2\_665 4\_565 ?  
O11 M11 M11 41.78(4) 1\_665 4\_565 ?  
M11 M11 M11 120.0 3\_655 4\_565 ?  
M11 M11 M11 180.00(4) 4\_665 4\_565 ?  
M2 M11 M11 59.76(2) 2\_665 4\_565 ?  
O2 M11 M11 138.04(4) 2\_665 3\_665 ?  
O12 M11 M11 91.99(3) 4\_655 3\_665 ?  
O12 M11 M11 136.54(3) 1\_665 3\_665 ?

O1 M11 M11 85.11(3) 5 3\_665 ?  
 O1 M11 M11 41.76(4) 2\_665 3\_665 ?  
 O11 M11 M11 41.78(4) 1\_665 3\_665 ?  
 M11 M11 M11 180.00(5) 3\_655 3\_665 ?  
 M11 M11 M11 120.0 4\_665 3\_665 ?  
 M2 M11 M11 59.76(2) 2\_665 3\_665 ?  
 M11 M11 M11 60.0 4\_565 3\_665 ?  
 O2 M11 M9 89.14(7) 2\_665 1\_665 ?  
 O12 M11 M9 44.01(4) 4\_655 1\_665 ?  
 O12 M11 M9 44.01(4) 1\_665 1\_665 ?  
 O1 M11 M9 138.02(4) 5 1\_665 ?  
 O1 M11 M9 138.02(4) 2\_665 1\_665 ?  
 O11 M11 M9 91.13(7) 1\_665 1\_665 ?  
 M11 M11 M9 62.93(2) 3\_655 1\_665 ?  
 M11 M11 M9 62.93(2) 4\_665 1\_665 ?  
 M2 M11 M9 176.14(2) 2\_665 1\_665 ?  
 M11 M11 M9 117.07(2) 4\_565 1\_665 ?  
 M11 M11 M9 117.07(2) 3\_665 1\_665 ?  
 T1A O1 M2 121.75(8) . . ?  
 T1A O1 M11 120.04(4) . 6\_554 ?  
 M2 O1 M11 96.34(6) . 6\_554 ?  
 T1A O1 M11 120.04(4) . 2\_664 ?  
 M2 O1 M11 96.34(6) . 2\_664 ?  
 M11 O1 M11 96.47(7) 6\_554 2\_664 ?  
 M11 O2 M11 96.07(8) 2\_664 6\_564 ?  
 M11 O2 M11 96.07(8) 2\_664 5\_554 ?  
 M11 O2 M11 96.07(8) 6\_564 5\_554 ?  
 M11 O2 T3A 120.84(6) 2\_664 . ?  
 M11 O2 T3A 120.84(6) 6\_564 . ?  
 M11 O2 T3A 120.84(6) 5\_554 . ?  
 T1A O3 M4 121.48(6) . 3\_655 ?  
 T1A O3 M4 121.48(6) . 1\_445 ?  
 M4 O3 M4 95.22(7) 3\_655 1\_445 ?  
 T1A O3 M4 121.48(6) . 4\_565 ?  
 M4 O3 M4 95.22(7) 3\_655 4\_565 ?  
 M4 O3 M4 95.22(7) 1\_445 4\_565 ?  
 M4 O4 M4 96.91(7) 4\_665 . ?  
 M4 O4 M2 96.41(5) 4\_665 . ?  
 M4 O4 M2 96.41(5) . . ?  
 M4 O4 T3A 120.68(4) 4\_665 1\_655 ?  
 M4 O4 T3A 120.68(4) . 1\_655 ?  
 M2 O4 T3A 120.01(7) . 1\_655 ?  
 M4 O4 T3B 120.68(4) 4\_665 1\_655 ?  
 M4 O4 T3B 120.68(4) . 1\_655 ?  
 M2 O4 T3B 120.01(7) . 1\_655 ?  
 T3A O4 T3B 0.00(5) 1\_655 1\_655 ?  
 M4 O5 M4 94.78(9) 4\_665 . ?  
 M4 O5 M4 94.78(9) 4\_665 3\_655 ?  
 M4 O5 M4 94.78(9) . 3\_655 ?  
 M4 O5 T7A 121.81(6) 4\_665 . ?  
 M4 O5 T7A 121.81(6) . . ?  
 M4 O5 T7A 121.81(6) 3\_655 . ?  
 M4 O6 M4 97.36(7) . 4\_675 ?  
 M4 O6 M6 95.99(6) . 1\_665 ?

M4 O6 M6 95.99(6) 4\_675 1\_665 ?  
M4 O6 T5A 121.08(4) . . ?  
M4 O6 T5A 121.08(4) 4\_675 . ?  
M6 O6 T5A 119.47(8) 1\_665 . ?  
M6 O7 T7A 124.59(8) . . ?  
M6 O7 M8 97.03(6) . 1\_545 ?  
T7A O7 M8 118.64(5) . 1\_545 ?  
M6 O7 M8 97.03(6) . 3\_665 ?  
T7A O7 M8 118.64(5) . 3\_665 ?  
M8 O7 M8 94.67(7) 1\_545 3\_665 ?  
M8 O8 M8 96.58(7) 3\_665 4\_565 ?  
M8 O8 M8 96.58(7) 3\_665 . ?  
M8 O8 M8 96.58(7) 4\_565 . ?  
M8 O8 T5A 120.45(6) 3\_665 . ?  
M8 O8 T5A 120.45(6) 4\_565 . ?  
M8 O8 T5A 120.46(6) . . ?  
T10A O9 M8 120.81(6) . 1\_545 ?  
T10A O9 M8 120.81(6) . 4\_455 ?  
M8 O9 M8 96.11(8) 1\_545 4\_455 ?  
T10A O9 M8 120.81(6) . 3\_665 ?  
M8 O9 M8 96.11(8) 1\_545 3\_665 ?  
M8 O9 M8 96.11(8) 4\_455 3\_665 ?  
M9 O10 M8 128.61(4) 1\_565 . ?  
M9 O10 M8 128.61(5) 1\_565 3\_665 ?  
M8 O10 M8 95.20(7) . 3\_665 ?  
M11 O11 M11 96.44(8) 1\_445 4\_455 ?  
M11 O11 M11 96.44(8) 1\_445 3 ?  
M11 O11 M11 96.44(8) 4\_455 3 ?  
T10B O12 T10A 0.00(5) 1\_445 1\_445 ?  
T10B O12 M11 122.62(4) 1\_445 3\_545 ?  
T10A O12 M11 122.62(4) 1\_445 3\_545 ?  
T10B O12 M11 122.62(4) 1\_445 1\_445 ?  
T10A O12 M11 122.62(4) 1\_445 1\_445 ?  
M11 O12 M11 93.08(7) 3\_545 1\_445 ?  
T10B O12 M9 117.37(7) 1\_445 . ?  
T10A O12 M9 117.37(7) 1\_445 . ?  
M11 O12 M9 97.56(6) 3\_545 . ?  
M11 O12 M9 97.56(6) 1\_445 . ?

\_diffrn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.994  
\_diffrn\_reflns\_theta\_full 49.41  
\_diffrn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.994  
\_refine\_diff\_density\_max 0.586  
\_refine\_diff\_density\_min -0.728  
\_refine\_diff\_density\_rms 0.112