

data\_hambergite

\_audit\_creation\_method SHELXL-97  
\_chemical\_name\_systematic  
;  
?  
;  
\_chemical\_name\_common ?  
\_chemical\_melting\_point ?  
\_chemical\_formula\_moiety ?  
\_chemical\_formula\_sum  
'H B Be2 F0 O4'  
\_chemical\_formula\_weight 46.00

loop\_  
\_atom\_type\_symbol  
\_atom\_type\_description  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_real  
\_atom\_type\_scatter\_dispersion\_imag  
\_atom\_type\_scatter\_source 'Sears (1986)'  
\_symmetry\_cell\_setting ?  
\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M ?

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

\_cell\_length\_a 9.762(2)  
\_cell\_length\_b 12.201(2)  
\_cell\_length\_c 4.4300(10)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 90.00  
\_cell\_angle\_gamma 90.00  
\_cell\_volume 527.64(18)  
\_cell\_formula\_units\_Z 8  
\_cell\_measurement\_temperature 298(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   ?
_exptl_crystal_density_method  ?
_exptl_crystal_F_000           ?
_exptl_absorpt_coefficient_mu   ?
_exptl_absorpt_correction_type  ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details  ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature      298(2)
_diffn_radiation_wavelength      'polychromatic (Laue), lambda min/max =0.82/3.0 A, dmin=0.48 A'
_diffn_radiation_type            'neutron'
_diffn_radiation_source          ?
_diffn_radiation_monochromator   ?
_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             23236
_diffn_reflns_av_R_equivalents   0.0751
_diffn_reflns_av_sigma/netI      0.0695
_diffn_reflns_limit_h_min        -17
_diffn_reflns_limit_h_max        17
_diffn_reflns_limit_k_min        -25
_diffn_reflns_limit_k_max        24
_diffn_reflns_limit_l_min        -9
_diffn_reflns_limit_l_max        6
_diffn_reflns_theta_min          ?
_diffn_reflns_theta_max          ?
_reflns_number_total             1731
_reflns_number_gt                1430
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     ?
_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)+(0.0100P)^2+0.0000P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary    direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment    mixed
_refine_ls_extinction_method    SHELXL
_refine_ls_extinction_coef    0.030(2)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc*^=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns    1731
_refine_ls_number_parameters    76
_refine_ls_number_restraints    0
_refine_ls_R_factor_all    0.0733
_refine_ls_R_factor_gt    0.0504
_refine_ls_wR_factor_ref    0.0850
_refine_ls_wR_factor_gt    0.0832
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.839
_refine_ls_restrained_S_all    1.839
_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
Be1 Be 0.00261(4) 0.18871(4) 0.26018(8) 0.00651(9) Uani 1 1 d . . .
Be2 Be 0.23724(5) 0.06757(3) 0.27717(8) 0.00650(8) Uani 1 1 d . . .
B B 0.10617(6) 0.10704(4) 0.77298(10) 0.00451(10) Uani 1 1 d . . .
O1 O 0.03760(6) 0.18766(4) 0.61914(10) 0.00697(9) Uani 1 1 d . . .
O2 O 0.10120(6) 0.10302(4) 0.08204(10) 0.00665(9) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.18691(6) 0.03450(4) 0.61701(10) 0.00731(9) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.33976(7) 0.17302(4) 0.29600(12) 0.00839(14) Uani 0.980(4) 1 d P . .
H H 0.31378(16) 0.22275(10) 0.4574(3) 0.0238(4) Uani 0.954(9) 1 d P . .
```

```

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
Be1 0.0072(2) 0.00603(15) 0.00627(15) -0.00011(8) -0.00018(10) 0.00033(10)
Be2 0.0078(2) 0.00595(13) 0.00577(13) -0.00002(9) 0.00018(10) 0.00084(11)
B 0.0049(3) 0.00461(15) 0.00408(16) 0.00026(11) -0.00007(13) 0.00153(15)
O1 0.0101(2) 0.00564(14) 0.00520(16) -0.00024(11) -0.00102(15) 0.00259(15)
O2 0.0080(2) 0.00718(15) 0.00472(15) -0.00002(11) -0.00017(13) 0.00258(14)
O3 0.0100(2) 0.00676(15) 0.00513(16) 0.00087(11) 0.00087(13) 0.00388(15)
O4 0.0065(3) 0.00812(19) 0.0106(2) -0.00153(13) 0.00105(16) -0.00168(16)
H 0.0231(8) 0.0226(5) 0.0258(6) -0.0108(4) 0.0060(4) -0.0015(5)

```

```
_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
Be1 O4 1.6204(8) 8_556 ?
Be1 O2 1.6255(7) . ?
Be1 O1 1.6265(7) . ?
Be1 O1 1.6680(7) 6_565 ?
Be1 B 2.5833(7) 1_554 ?
Be1 Be1 2.6726(7) 6_566 ?
Be1 Be1 2.6726(7) 6_565 ?
Be1 B 2.6788(7) . ?
Be1 B 2.6899(8) 6_565 ?
Be1 Be2 2.7271(7) . ?
Be1 O1 2.8603(8) 1_554 ?
Be1 Be2 2.9871(8) 8_556 ?
Be2 O3 1.6132(6) 4_554 ?
Be2 O4 1.6321(7) . ?
Be2 O3 1.6342(7) . ?
Be2 O2 1.6426(7) . ?
Be2 B 2.5872(8) . ?
Be2 B 2.6188(8) 1_554 ?
Be2 B 2.6221(7) 4_554 ?
Be2 Be2 2.7725(7) 4_554 ?

```

Be2 Be2 2.7725(7) 4 ?  
 Be2 O1 2.8706(8) . ?  
 Be2 O2 2.9399(7) 4 ?  
 Be2 H 2.1865(13) . ?  
 B O2 1.3709(7) 1\_556 ?  
 B O1 1.3712(7) . ?  
 B O3 1.3718(7) . ?  
 B Be1 2.5833(7) 1\_556 ?  
 B Be2 2.6188(8) 1\_556 ?  
 B Be2 2.6221(7) 4 ?  
 B Be1 2.6899(8) 6\_566 ?  
 B O1 3.0124(8) 6\_566 ?  
 B O2 3.0617(9) . ?  
 B O3 3.0635(8) 4 ?  
 O1 Be1 1.6680(7) 6\_566 ?  
 O1 O3 2.3699(8) . ?  
 O1 O2 2.3785(7) 1\_556 ?  
 O1 O4 2.6002(9) 3\_456 ?  
 O1 O2 2.6335(8) 6\_566 ?  
 O1 O2 2.6671(8) . ?  
 O1 O4 2.6728(9) 8\_556 ?  
 O1 O1 2.6871(7) 6\_566 ?  
 O1 O1 2.6871(7) 6\_565 ?  
 O1 Be1 2.8603(8) 1\_556 ?  
 O2 B 1.3709(7) 1\_554 ?  
 O2 O3 2.3755(7) 1\_554 ?  
 O2 O1 2.3785(7) 1\_554 ?  
 O2 O1 2.6335(8) 6\_565 ?  
 O2 O3 2.6487(8) . ?  
 O2 O4 2.6554(9) . ?  
 O2 O3 2.6679(8) 4\_554 ?  
 O2 O4 2.7450(10) 8\_556 ?  
 O2 Be2 2.9399(7) 4\_554 ?  
 O3 Be2 1.6132(6) 4 ?  
 O3 O2 2.3755(8) 1\_556 ?  
 O3 O4 2.6655(8) . ?  
 O3 O4 2.6660(8) 4 ?  
 O3 O2 2.6679(8) 4 ?  
 O3 O3 2.6706(7) 4 ?  
 O3 O3 2.6706(7) 4\_554 ?  
 O3 Be2 2.9928(9) 1\_556 ?  
 O4 Be1 1.6204(8) 8\_656 ?  
 O4 O1 2.6002(9) 3\_556 ?  
 O4 O3 2.6660(8) 4\_554 ?  
 O4 O1 2.6728(9) 8\_656 ?  
 O4 O2 2.7450(10) 8\_656 ?  
 O4 O4 2.9043(8) 6\_566 ?  
 O4 O4 2.9043(8) 6\_565 ?  
 O4 Be1 3.0396(8) 3\_556 ?  
 O4 H 0.9714(12) . ?

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 Be1 O2 115.49(4) 8\_556 . ?  
 O4 Be1 O1 110.81(4) 8\_556 . ?  
 O2 Be1 O1 110.19(4) . . ?  
 O4 Be1 O1 104.49(4) 8\_556 6\_565 ?  
 O2 Be1 O1 106.18(3) . 6\_565 ?  
 O1 Be1 O1 109.29(3) . 6\_565 ?  
 O4 Be1 B 102.13(3) 8\_556 1\_554 ?  
 O2 Be1 B 27.69(2) . 1\_554 ?  
 O1 Be1 B 137.02(3) . 1\_554 ?  
 O1 Be1 B 87.46(3) 6\_565 1\_554 ?  
 O4 Be1 Be1 101.15(2) 8\_556 6\_566 ?  
 O2 Be1 Be1 139.67(2) . 6\_566 ?  
 O1 Be1 Be1 36.308(18) . 6\_566 ?  
 O1 Be1 Be1 78.72(3) 6\_565 6\_566 ?  
 B Be1 Be1 155.27(2) 1\_554 6\_566 ?  
 O4 Be1 Be1 86.49(2) 8\_556 6\_565 ?  
 O2 Be1 Be1 87.57(2) . 6\_565 ?  
 O1 Be1 Be1 144.56(4) . 6\_565 ?  
 O1 Be1 Be1 35.27(2) 6\_565 6\_565 ?  
 B Be1 Be1 61.538(18) 1\_554 6\_565 ?  
 Be1 Be1 Be1 111.95(4) 6\_566 6\_565 ?  
 O4 Be1 B 117.16(3) 8\_556 . ?  
 O2 Be1 B 87.07(3) . . ?  
 O1 Be1 B 24.31(2) . . ?  
 O1 Be1 B 125.22(3) 6\_565 . ?  
 B Be1 B 114.67(3) 1\_554 . ?  
 Be1 Be1 B 60.352(18) 6\_566 . ?  
 Be1 Be1 B 155.64(2) 6\_565 . ?  
 O4 Be1 B 118.78(3) 8\_556 6\_565 ?  
 O2 Be1 B 112.56(3) . 6\_565 ?  
 O1 Be1 B 84.71(3) . 6\_565 ?  
 O1 Be1 B 24.93(2) 6\_565 6\_565 ?  
 B Be1 B 103.17(3) 1\_554 6\_565 ?  
 Be1 Be1 B 57.59(2) 6\_566 6\_565 ?  
 Be1 Be1 B 59.94(2) 6\_565 6\_565 ?  
 B Be1 B 100.65(2) . 6\_565 ?  
 O4 Be1 Be2 139.84(3) 8\_556 . ?  
 O2 Be1 Be2 33.64(2) . . ?  
 O1 Be1 Be2 78.02(3) . . ?  
 O1 Be1 Be2 109.18(3) 6\_565 . ?  
 B Be1 Be2 59.020(18) 1\_554 . ?  
 Be1 Be1 Be2 106.286(12) 6\_566 . ?  
 Be1 Be1 Be2 109.037(12) 6\_565 . ?  
 B Be1 Be2 57.179(18) . . ?  
 B Be1 Be2 100.71(2) 6\_565 . ?  
 O4 Be1 O1 87.95(3) 8\_556 1\_554 ?  
 O2 Be1 O1 56.25(2) . 1\_554 ?  
 O1 Be1 O1 161.01(4) . 1\_554 ?  
 O1 Be1 O1 66.90(2) 6\_565 1\_554 ?

B Be1 O1 28.602(16) 1\_554 1\_554 ?  
 Be1 Be1 O1 145.62(3) 6\_566 1\_554 ?  
 Be1 Be1 O1 34.883(14) 6\_565 1\_554 ?  
 B Be1 O1 142.68(2) . 1\_554 ?  
 B Be1 O1 88.866(18) 6\_565 1\_554 ?  
 Be2 Be1 O1 85.679(17) . 1\_554 ?  
 O4 Be1 Be2 23.40(2) 8\_556 8\_556 ?  
 O2 Be1 Be2 99.69(3) . 8\_556 ?  
 O1 Be1 Be2 103.44(3) . 8\_556 ?  
 O1 Be1 Be2 127.18(3) 6\_565 8\_556 ?  
 B Be1 Be2 95.87(2) 1\_554 8\_556 ?  
 Be1 Be1 Be2 108.832(11) 6\_566 8\_556 ?  
 Be1 Be1 Be2 103.356(12) 6\_565 8\_556 ?  
 B Be1 Be2 100.96(2) . 8\_556 ?  
 B Be1 Be2 141.77(2) 6\_565 8\_556 ?  
 Be2 Be1 Be2 117.50(3) . 8\_556 ?  
 O1 Be1 Be2 92.657(18) 1\_554 8\_556 ?  
 O3 Be2 O4 110.47(4) 4\_554 . ?  
 O3 Be2 O3 110.65(3) 4\_554 . ?  
 O4 Be2 O3 109.38(3) . . ?  
 O3 Be2 O2 110.05(3) 4\_554 . ?  
 O4 Be2 O2 108.36(4) . . ?  
 O3 Be2 O2 107.86(4) . . ?  
 O3 Be2 B 138.08(3) 4\_554 . ?  
 O4 Be2 B 96.49(3) . . ?  
 O3 Be2 B 27.77(2) . . ?  
 O2 Be2 B 89.88(3) . . ?  
 O3 Be2 B 89.49(3) 4\_554 1\_554 ?  
 O4 Be2 B 101.43(3) . 1\_554 ?  
 O3 Be2 B 133.18(4) . 1\_554 ?  
 O2 Be2 B 26.83(2) . 1\_554 ?  
 B Be2 B 116.63(3) . 1\_554 ?  
 O3 Be2 B 26.12(2) 4\_554 4\_554 ?  
 O4 Be2 B 106.46(4) . 4\_554 ?  
 O3 Be2 B 88.92(3) . 4\_554 ?  
 O2 Be2 B 132.97(3) . 4\_554 ?  
 B Be2 B 116.46(2) . 4\_554 ?  
 B Be2 B 115.36(2) 1\_554 4\_554 ?  
 O3 Be2 Be1 142.35(3) 4\_554 . ?  
 O4 Be2 Be1 95.11(3) . . ?  
 O3 Be2 Be1 84.65(3) . . ?  
 O2 Be2 Be1 33.24(2) . . ?  
 B Be2 Be1 60.471(19) . . ?  
 B Be2 Be1 57.750(18) 1\_554 . ?  
 B Be2 Be1 158.41(3) 4\_554 . ?  
 O3 Be2 Be2 31.61(2) 4\_554 4\_554 ?  
 O4 Be2 Be2 117.04(3) . 4\_554 ?  
 O3 Be2 Be2 128.04(3) . 4\_554 ?  
 O2 Be2 Be2 78.98(2) . 4\_554 ?  
 B Be2 Be2 146.45(3) . 4\_554 ?  
 B Be2 Be2 58.120(18) 1\_554 4\_554 ?  
 B Be2 Be2 57.24(2) 4\_554 4\_554 ?  
 Be1 Be2 Be2 112.07(2) . 4\_554 ?  
 O3 Be2 Be2 81.43(3) 4\_554 4 ?

O4 Be2 Be2 111.89(3) . 4 ?  
O3 Be2 Be2 31.153(19) . 4 ?  
O2 Be2 Be2 130.52(4) . 4 ?  
B Be2 Be2 58.457(18) . 4 ?  
B Be2 Be2 146.58(3) 1\_554 4 ?  
B Be2 Be2 58.00(2) 4\_554 4 ?  
Be1 Be2 Be2 114.82(2) . 4 ?  
Be2 Be2 Be2 106.06(3) 4\_554 4 ?  
O3 Be2 O1 159.67(3) 4\_554 . ?  
O4 Be2 O1 89.25(3) . . ?  
O3 Be2 O1 55.65(2) . . ?  
O2 Be2 O1 66.07(3) . . ?  
B Be2 O1 28.498(15) . . ?  
B Be2 O1 91.40(2) 1\_554 . ?  
B Be2 O1 144.51(2) 4\_554 . ?  
Be1 Be2 O1 33.660(15) . . ?  
Be2 Be2 O1 141.83(3) 4\_554 . ?  
Be2 Be2 O1 86.73(2) 4 . ?  
O3 Be2 O2 53.80(2) 4\_554 4 ?  
O4 Be2 O2 101.87(3) . 4 ?  
O3 Be2 O2 64.11(3) . 4 ?  
O2 Be2 O2 149.53(2) . 4 ?  
B Be2 O2 90.41(2) . 4 ?  
B Be2 O2 141.64(2) 1\_554 4 ?  
B Be2 O2 27.791(15) 4\_554 4 ?  
Be1 Be2 O2 147.88(2) . 4 ?  
Be2 Be2 O2 84.14(2) 4\_554 4 ?  
Be2 Be2 O2 33.258(17) 4 4 ?  
O1 Be2 O2 118.89(2) . 4 ?  
O3 Be2 H 132.24(5) 4\_554 . ?  
O4 Be2 H 24.38(4) . . ?  
O3 Be2 H 88.86(4) . . ?  
O2 Be2 H 103.91(5) . . ?  
B Be2 H 72.41(4) . . ?  
B Be2 H 108.61(4) 1\_554 . ?  
B Be2 H 120.46(5) 4\_554 . ?  
Be1 Be2 H 80.08(4) . . ?  
Be2 Be2 H 140.90(4) 4\_554 . ?  
Be2 Be2 H 101.10(4) 4 . ?  
O1 Be2 H 66.25(4) . . ?  
O2 Be2 H 105.19(5) 4 . ?  
O2 B O1 120.32(5) 1\_556 . ?  
O2 B O3 120.02(5) 1\_556 . ?  
O1 B O3 119.54(4) . . ?  
O2 B Be1 33.44(3) 1\_556 1\_556 ?  
O1 B Be1 86.99(3) . 1\_556 ?  
O3 B Be1 153.45(4) . 1\_556 ?  
O2 B Be2 149.17(4) 1\_556 . ?  
O1 B Be2 87.31(3) . . ?  
O3 B Be2 33.71(2) . . ?  
Be1 B Be2 167.08(3) 1\_556 . ?  
O2 B Be2 32.74(3) 1\_556 1\_556 ?  
O1 B Be2 142.60(4) . 1\_556 ?  
O3 B Be2 91.73(4) . 1\_556 ?



Be1 B Be2 63.23(2) 1\_556 1\_556 ?  
 Be2 B Be2 116.63(3) . 1\_556 ?  
 O2 B Be2 89.11(3) 1\_556 4 ?  
 O1 B Be2 150.57(4) . 4 ?  
 O3 B Be2 31.18(2) . 4 ?  
 Be1 B Be2 122.39(2) 1\_556 4 ?  
 Be2 B Be2 64.307(17) . 4 ?  
 Be2 B Be2 63.877(17) 1\_556 4 ?  
 O2 B Be1 147.88(4) 1\_556 . ?  
 O1 B Be1 29.24(2) . . ?  
 O3 B Be1 91.70(3) . . ?  
 Be1 B Be1 114.67(3) 1\_556 . ?  
 Be2 B Be1 62.35(2) . . ?  
 Be2 B Be1 167.45(3) 1\_556 . ?  
 Be2 B Be1 121.89(2) 4 . ?  
 O2 B Be1 92.35(3) 1\_556 6\_566 ?  
 O1 B Be1 30.84(2) . 6\_566 ?  
 O3 B Be1 143.42(4) . 6\_566 ?  
 Be1 B Be1 60.867(16) 1\_556 6\_566 ?  
 Be2 B Be1 109.90(2) . 6\_566 ?  
 Be2 B Be1 111.84(2) 1\_556 6\_566 ?  
 Be2 B Be1 166.40(3) 4 6\_566 ?  
 Be1 B Be1 59.711(16) . 6\_566 ?  
 O2 B O1 60.89(3) 1\_556 6\_566 ?  
 O1 B O1 63.13(3) . 6\_566 ?  
 O3 B O1 157.00(4) . 6\_566 ?  
 Be1 B O1 33.586(15) 1\_556 6\_566 ?  
 Be2 B O1 134.18(2) . 6\_566 ?  
 Be2 B O1 80.06(2) 1\_556 6\_566 ?  
 Be2 B O1 143.28(2) 4 6\_566 ?  
 Be1 B O1 92.21(2) . 6\_566 ?  
 Be1 B O1 32.524(14) 6\_566 6\_566 ?  
 O2 B O2 175.82(5) 1\_556 . ?  
 O1 B O2 60.45(3) . . ?  
 O3 B O2 59.68(3) . . ?  
 Be1 B O2 146.64(3) 1\_556 . ?  
 Be2 B O2 32.445(17) . . ?  
 Be2 B O2 149.03(3) 1\_556 . ?  
 Be2 B O2 90.188(18) 4 . ?  
 Be1 B O2 32.022(15) . . ?  
 Be1 B O2 89.302(17) 6\_566 . ?  
 O1 B O2 121.25(2) 6\_566 . ?  
 O2 B O3 60.42(3) 1\_556 4 ?  
 O1 B O3 166.79(4) . 4 ?  
 O3 B O3 60.53(3) . 4 ?  
 Be1 B O3 93.43(2) 1\_556 4 ?  
 Be2 B O3 89.50(2) . 4 ?  
 Be2 B O3 31.773(14) 1\_556 4 ?  
 Be2 B O3 32.232(14) 4 4 ?  
 Be1 B O3 151.69(2) . 4 ?  
 Be1 B O3 141.31(2) 6\_566 4 ?  
 O1 B O3 111.22(2) 6\_566 4 ?  
 O2 B O3 119.92(2) . 4 ?  
 B O1 Be1 126.45(4) . . ?

B O1 Be1 124.23(4) . 6\_566 ?  
 Be1 O1 Be1 108.42(3) . 6\_566 ?  
 B O1 O3 30.24(3) . . ?  
 Be1 O1 O3 97.56(3) . . ?  
 Be1 O1 O3 147.19(4) 6\_566 . ?  
 B O1 O2 29.84(2) . 1\_556 ?  
 Be1 O1 O2 154.31(3) . 1\_556 ?  
 Be1 O1 O2 97.08(3) 6\_566 1\_556 ?  
 O3 O1 O2 60.03(2) . 1\_556 ?  
 B O1 O4 139.44(4) . 3\_456 ?  
 Be1 O1 O4 88.87(3) . 3\_456 ?  
 Be1 O1 O4 37.11(2) 6\_566 3\_456 ?  
 O3 O1 O4 166.63(3) . 3\_456 ?  
 O2 O1 O4 110.68(3) 1\_556 3\_456 ?  
 B O1 O2 127.71(4) . 6\_566 ?  
 Be1 O1 O2 88.90(3) . 6\_566 ?  
 Be1 O1 O2 36.36(2) 6\_566 6\_566 ?  
 O3 O1 O2 128.27(3) . 6\_566 ?  
 O2 O1 O2 114.42(3) 1\_556 6\_566 ?  
 O4 O1 O2 63.26(2) 3\_456 6\_566 ?  
 B O1 O2 92.98(3) . . ?  
 Be1 O1 O2 34.89(2) . . ?  
 Be1 O1 O2 137.05(3) 6\_566 . ?  
 O3 O1 O2 63.125(19) . . ?  
 O2 O1 O2 122.70(3) 1\_556 . ?  
 O4 O1 O2 123.71(3) 3\_456 . ?  
 O2 O1 O2 105.36(2) 6\_566 . ?  
 B O1 O4 130.30(4) . 8\_556 ?  
 Be1 O1 O4 34.52(2) . 8\_556 ?  
 Be1 O1 O4 99.80(3) 6\_566 8\_556 ?  
 O3 O1 O4 112.89(3) . 8\_556 ?  
 O2 O1 O4 138.84(3) 1\_556 8\_556 ?  
 O4 O1 O4 66.83(3) 3\_456 8\_556 ?  
 O2 O1 O4 101.08(2) 6\_566 8\_556 ?  
 O2 O1 O4 61.87(2) . 8\_556 ?  
 B O1 O1 89.80(3) . 6\_566 ?  
 Be1 O1 O1 143.27(3) . 6\_566 ?  
 Be1 O1 O1 34.84(2) 6\_566 6\_566 ?  
 O3 O1 O1 116.722(19) . 6\_566 ?  
 O2 O1 O1 62.298(19) 1\_556 6\_566 ?  
 O4 O1 O1 60.71(2) 3\_456 6\_566 ?  
 O2 O1 O1 60.16(2) 6\_566 6\_566 ?  
 O2 O1 O1 162.67(2) . 6\_566 ?  
 O4 O1 O1 127.23(2) 8\_556 6\_566 ?  
 B O1 O1 144.67(3) . 6\_565 ?  
 Be1 O1 O1 35.867(19) . 6\_565 ?  
 Be1 O1 O1 78.28(3) 6\_566 6\_565 ?  
 O3 O1 O1 116.302(19) . 6\_565 ?  
 O2 O1 O1 163.04(2) 1\_556 6\_565 ?  
 O4 O1 O1 75.47(2) 3\_456 6\_565 ?  
 O2 O1 O1 53.09(2) 6\_566 6\_565 ?  
 O2 O1 O1 58.924(18) . 6\_565 ?  
 O4 O1 O1 58.039(17) 8\_556 6\_565 ?  
 O1 O1 O1 111.04(3) 6\_566 6\_565 ?

B O1 Be1 64.41(3) . 1\_556 ?  
 Be1 O1 Be1 161.01(4) . 1\_556 ?  
 Be1 O1 Be1 66.40(2) 6\_566 1\_556 ?  
 O3 O1 Be1 94.64(2) . 1\_556 ?  
 O2 O1 Be1 34.628(17) 1\_556 1\_556 ?  
 O4 O1 Be1 76.40(2) 3\_456 1\_556 ?  
 O2 O1 Be1 94.920(19) 6\_566 1\_556 ?  
 O2 O1 Be1 156.24(2) . 1\_556 ?  
 O4 O1 Be1 126.67(3) 8\_556 1\_556 ?  
 O1 O1 Be1 34.820(14) 6\_566 1\_556 ?  
 O1 O1 Be1 144.67(3) 6\_565 1\_556 ?  
 B O2 Be1 118.87(4) 1\_554 . ?  
 B O2 Be2 120.42(4) 1\_554 . ?  
 Be1 O2 Be2 113.12(3) . . ?  
 B O2 O3 30.00(3) 1\_554 1\_554 ?  
 Be1 O2 O3 148.86(3) . 1\_554 ?  
 Be2 O2 O3 94.53(3) . 1\_554 ?  
 B O2 O1 29.84(3) 1\_554 1\_554 ?  
 Be1 O2 O1 89.12(3) . 1\_554 ?  
 Be2 O2 O1 141.18(4) . 1\_554 ?  
 O3 O2 O1 59.80(2) 1\_554 1\_554 ?  
 B O2 O1 92.06(3) 1\_554 6\_565 ?  
 Be1 O2 O1 37.47(2) . 6\_565 ?  
 Be2 O2 O1 114.40(3) . 6\_565 ?  
 O3 O2 O1 118.58(2) 1\_554 6\_565 ?  
 O1 O2 O1 64.607(17) 1\_554 6\_565 ?  
 B O2 O3 153.35(4) 1\_554 . ?  
 Be1 O2 O3 87.46(3) . . ?  
 Be2 O2 O3 35.96(2) . . ?  
 O3 O2 O3 123.62(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O3 172.28(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O3 108.95(2) 6\_565 . ?  
 B O2 O4 108.30(4) 1\_554 . ?  
 Be1 O2 O4 98.00(3) . . ?  
 Be2 O2 O4 35.69(2) . . ?  
 O3 O2 O4 96.54(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O4 113.39(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O4 82.68(2) 6\_565 . ?  
 O3 O2 O4 60.33(2) . . ?  
 B O2 O1 152.30(4) 1\_554 . ?  
 Be1 O2 O1 34.915(19) . . ?  
 Be2 O2 O1 79.67(3) . . ?  
 O3 O2 O1 172.72(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O1 122.70(3) 1\_554 . ?  
 O1 O2 O1 60.916(15) 6\_565 . ?  
 O3 O2 O1 52.95(2) . . ?  
 O4 O2 O1 76.18(2) . . ?  
 B O2 O3 93.04(3) 1\_554 4\_554 ?  
 Be1 O2 O3 146.66(3) . 4\_554 ?  
 Be2 O2 O3 34.61(2) . 4\_554 ?  
 O3 O2 O3 63.638(18) 1\_554 4\_554 ?  
 O1 O2 O3 121.70(3) 1\_554 4\_554 ?  
 O1 O2 O3 142.10(3) 6\_565 4\_554 ?  
 O3 O2 O3 60.306(17) . 4\_554 ?

O4 O2 O3 60.11(2) . 4\_554 ?  
O1 O2 O3 111.85(2) . 4\_554 ?  
B O2 O4 102.61(4) 1\_554 8\_556 ?  
Be1 O2 O4 32.20(2) . 8\_556 ?  
Be2 O2 O4 136.89(3) . 8\_556 ?  
O3 O2 O4 127.42(3) 1\_554 8\_556 ?  
O1 O2 O4 77.99(2) 1\_554 8\_556 ?  
O1 O2 O4 57.78(2) 6\_565 8\_556 ?  
O3 O2 O4 102.46(2) . 8\_556 ?  
O4 O2 O4 130.17(2) . 8\_556 ?  
O1 O2 O4 59.17(2) . 8\_556 ?  
O3 O2 O4 154.84(2) 4\_554 8\_556 ?  
B O2 Be2 63.10(3) 1\_554 4\_554 ?  
Be1 O2 Be2 174.88(3) . 4\_554 ?  
Be2 O2 Be2 67.77(2) . 4\_554 ?  
O3 O2 Be2 33.229(15) 1\_554 4\_554 ?  
O1 O2 Be2 92.94(2) 1\_554 4\_554 ?  
O1 O2 Be2 147.32(2) 6\_565 4\_554 ?  
O3 O2 Be2 91.04(2) . 4\_554 ?  
O4 O2 Be2 85.48(2) . 4\_554 ?  
O1 O2 Be2 143.98(2) . 4\_554 ?  
O3 O2 Be2 33.440(15) 4\_554 4\_554 ?  
O4 O2 Be2 144.04(2) 8\_556 4\_554 ?  
B O3 Be2 122.70(4) . 4 ?  
B O3 Be2 118.52(4) . . ?  
Be2 O3 Be2 117.24(3) 4 . ?  
B O3 O1 30.22(3) . . ?  
Be2 O3 O1 152.77(3) 4 . ?  
Be2 O3 O1 89.65(3) . . ?  
B O3 O2 29.98(2) . 1\_556 ?  
Be2 O3 O2 92.98(3) 4 1\_556 ?  
Be2 O3 O2 144.88(3) . 1\_556 ?  
O1 O3 O2 60.16(2) . 1\_556 ?  
B O3 O2 93.76(3) . . ?  
Be2 O3 O2 141.46(3) 4 . ?  
Be2 O3 O2 36.17(2) . . ?  
O1 O3 O2 63.92(2) . . ?  
O2 O3 O2 123.62(3) 1\_556 . ?  
B O3 O4 100.45(4) . . ?  
Be2 O3 O4 117.85(4) 4 . ?  
Be2 O3 O4 35.28(2) . . ?  
O1 O3 O4 81.17(3) . . ?  
O2 O3 O4 115.90(3) 1\_556 . ?  
O2 O3 O4 59.96(2) . . ?  
B O3 O4 114.00(4) . 4 ?  
Be2 O3 O4 35.00(2) 4 4 ?  
Be2 O3 O4 122.53(3) . 4 ?  
O1 O3 O4 133.44(3) . 4 ?  
O2 O3 O4 92.40(2) 1\_556 4 ?  
O2 O3 O4 122.34(2) . 4 ?  
O4 O3 O4 144.64(2) . 4 ?  
B O3 O2 151.70(4) . 4 ?  
Be2 O3 O2 35.33(2) 4 4 ?  
Be2 O3 O2 82.45(3) . 4 ?

O1 O3 O2 166.65(3) . 4 ?  
O2 O3 O2 123.01(3) 1\_556 4 ?  
O2 O3 O2 113.04(2) . 4 ?  
O4 O3 O2 86.20(3) . 4 ?  
O4 O3 O2 59.71(2) 4 4 ?  
B O3 O3 92.90(3) . 4 ?  
Be2 O3 O3 34.93(2) 4 4 ?  
Be2 O3 O3 134.69(5) . 4 ?  
O1 O3 O3 121.93(2) . 4 ?  
O2 O3 O3 63.52(2) 1\_556 4 ?  
O2 O3 O3 170.86(4) . 4 ?  
O4 O3 O3 112.60(4) . 4 ?  
O4 O3 O3 59.93(2) 4 4 ?  
O2 O3 O3 59.49(2) 4 4 ?  
B O3 O3 152.39(4) . 4\_554 ?  
Be2 O3 O3 84.82(3) 4 4\_554 ?  
Be2 O3 O3 34.420(17) . 4\_554 ?  
O1 O3 O3 122.38(2) . 4\_554 ?  
O2 O3 O3 173.06(4) 1\_556 4\_554 ?  
O2 O3 O3 60.204(19) . 4\_554 ?  
O4 O3 O3 59.95(2) . 4\_554 ?  
O4 O3 O3 89.56(3) 4 4\_554 ?  
O2 O3 O3 52.84(2) 4 4\_554 ?  
O3 O3 O3 112.07(4) 4 4\_554 ?  
B O3 Be2 61.00(3) . 1\_556 ?  
Be2 O3 Be2 66.36(2) 4 1\_556 ?  
Be2 O3 Be2 144.85(4) . 1\_556 ?  
O1 O3 Be2 89.473(19) . 1\_556 ?  
O2 O3 Be2 33.171(18) 1\_556 1\_556 ?  
O2 O3 Be2 152.09(2) . 1\_556 ?  
O4 O3 Be2 110.12(2) . 1\_556 ?  
O4 O3 Be2 81.57(2) 4 1\_556 ?  
O2 O3 Be2 90.816(19) 4 1\_556 ?  
O3 O3 Be2 32.468(13) 4 1\_556 ?  
O3 O3 Be2 141.01(3) 4\_554 1\_556 ?  
Be1 O4 Be2 133.38(4) 8\_656 . ?  
Be1 O4 O1 38.40(2) 8\_656 3\_556 ?  
Be2 O4 O1 168.01(4) . 3\_556 ?  
Be1 O4 O2 147.52(3) 8\_656 . ?  
Be2 O4 O2 35.95(2) . . ?  
O1 O4 O2 155.96(3) 3\_556 . ?  
Be1 O4 O3 134.91(4) 8\_656 . ?  
Be2 O4 O3 35.34(2) . . ?  
O1 O4 O3 138.86(3) 3\_556 . ?  
O2 O4 O3 59.71(2) . . ?  
Be1 O4 O3 99.34(3) 8\_656 4\_554 ?  
Be2 O4 O3 34.54(2) . 4\_554 ?  
O1 O4 O3 137.43(3) 3\_556 4\_554 ?  
O2 O4 O3 60.18(2) . 4\_554 ?  
O3 O4 O3 60.122(18) . 4\_554 ?  
Be1 O4 O1 34.67(2) 8\_656 8\_656 ?  
Be2 O4 O1 117.42(3) . 8\_656 ?  
O1 O4 O1 61.26(2) 3\_556 8\_656 ?  
O2 O4 O1 114.18(3) . 8\_656 ?

O3 O4 O1 144.48(3) . 8\_656 ?  
 O3 O4 O1 85.95(2) 4\_554 8\_656 ?  
 Be1 O4 O2 32.31(2) 8\_656 8\_656 ?  
 Be2 O4 O2 109.56(3) . 8\_656 ?  
 O1 O4 O2 58.96(2) 3\_556 8\_656 ?  
 O2 O4 O2 141.77(3) . 8\_656 ?  
 O3 O4 O2 102.60(3) . 8\_656 ?  
 O3 O4 O2 81.60(2) 4\_554 8\_656 ?  
 O1 O4 O2 58.96(2) 8\_656 8\_656 ?  
 Be1 O4 O4 92.33(2) 8\_656 6\_566 ?  
 Be2 O4 O4 123.29(3) . 6\_566 ?  
 O1 O4 O4 57.78(2) 3\_556 6\_566 ?  
 O2 O4 O4 118.703(17) . 6\_566 ?  
 O3 O4 O4 90.18(2) . 6\_566 ?  
 O3 O4 O4 147.26(2) 4\_554 6\_566 ?  
 O1 O4 O4 118.79(2) 8\_656 6\_566 ?  
 O2 O4 O4 92.931(14) 8\_656 6\_566 ?  
 Be1 O4 O4 78.84(2) 8\_656 6\_565 ?  
 Be2 O4 O4 118.09(2) . 6\_565 ?  
 O1 O4 O4 71.78(2) 3\_556 6\_565 ?  
 O2 O4 O4 86.320(15) . 6\_565 ?  
 O3 O4 O4 144.785(18) . 6\_565 ?  
 O3 O4 O4 112.80(2) 4\_554 6\_565 ?  
 O1 O4 O4 55.390(16) 8\_656 6\_565 ?  
 O2 O4 O4 110.571(15) 8\_656 6\_565 ?  
 O4 O4 O4 99.40(3) 6\_566 6\_565 ?  
 Be1 O4 Be1 61.36(2) 8\_656 3\_556 ?  
 Be2 O4 Be1 142.30(3) . 3\_556 ?  
 O1 O4 Be1 32.345(14) 3\_556 3\_556 ?  
 O2 O4 Be1 150.24(3) . 3\_556 ?  
 O3 O4 Be1 107.43(3) . 3\_556 ?  
 O3 O4 Be1 140.41(3) 4\_554 3\_556 ?  
 O1 O4 Be1 91.72(3) 8\_656 3\_556 ?  
 O2 O4 Be1 63.839(19) 8\_656 3\_556 ?  
 O4 O4 Be1 31.536(15) 6\_566 3\_556 ?  
 O4 O4 Be1 97.72(3) 6\_565 3\_556 ?  
 Be1 O4 B 145.82(3) 8\_656 . ?  
 Be2 O4 B 53.18(2) . . ?  
 O1 O4 B 126.60(3) 3\_556 . ?  
 O2 O4 B 62.06(2) . . ?  
 O3 O4 B 24.841(15) . . ?  
 O3 O4 B 83.59(2) 4\_554 . ?  
 O1 O4 B 169.29(2) 8\_656 . ?  
 O2 O4 B 116.92(3) 8\_656 . ?  
 O4 O4 B 70.142(15) 6\_566 . ?  
 O4 O4 B 131.603(18) 6\_565 . ?  
 Be1 O4 B 94.87(2) 3\_556 . ?  
 Be1 O4 H 107.18(10) 8\_656 . ?  
 Be2 O4 H 111.72(10) . . ?  
 O1 O4 H 71.28(9) 3\_556 . ?  
 O2 O4 H 103.57(10) . . ?  
 O3 O4 H 81.80(9) . . ?  
 O3 O4 H 141.88(10) 4\_554 . ?  
 O1 O4 H 130.79(10) 8\_656 . ?

O2 O4 H 106.99(10) 8\_656 . ?  
O4 O4 H 15.13(10) 6\_566 . ?  
O4 O4 H 99.05(10) 6\_565 . ?  
Be1 O4 H 46.67(10) 3\_556 . ?  
B O4 H 59.13(9) . . ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max ?  
\_diffn\_reflns\_theta\_full ?  
\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full ?  
\_refine\_diff\_density\_max 1.745  
\_refine\_diff\_density\_min -3.069  
\_refine\_diff\_density\_rms 0.384