

data_mn_pargasite

_audit_creation_method SHELXL-97

_chemical_name_systematic

;

?

;

_chemical_name_common ?

_chemical_melting_point ?

_chemical_formula_moiety ?

_chemical_formula_sum

'H2 Ca2 Mg5 Mn0.50 Na3 O224 Si6'

_chemical_formula_weight 852.68

loop_

_atom_type_symbol

_atom_type_description

_atom_type_scatter_dispersion_real

_atom_type_scatter_dispersion_imag

_atom_type_scatter_source

'O' 'O2' 0.0080 0.0060

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'H' 'H' 0.0000 0.0000

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Na' 'Na' 0.0362 0.0249

'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'

'Si' 'Si' 0.0817 0.0704

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Ca' 'Ca' 0.2262 0.3064

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Mn' 'Mn' 0.3368 0.7283

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting ?

_symmetry_space_group_name_H-M ?

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x, y, z'

'-x, y, -z'

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

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

'-x, -y, -z'

'x, -y, z'

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

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

_cell_length_a 9.9448(5)

_cell_length_b 18.0171(9)

_cell_length_c 5.2829(3)

_cell_angle_alpha	90.00
_cell_angle_beta	105.445(2)
_cell_angle_gamma	90.00
_cell_volume	912.39(8)
_cell_formula_units_Z	2
_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	0.12
_exptl_crystal_size_mid	0.10
_exptl_crystal_size_min	0.05
_exptl_crystal_density_meas	?
_exptl_crystal_density_diffn	3.104
_exptl_crystal_density_method	'not measured'
_exptl_crystal_F_000	943
_exptl_absorpt_coefficient_mu	2.035
_exptl_absorpt_correction_type	?
_exptl_absorpt_correction_T_min	0.7923
_exptl_absorpt_correction_T_max	0.9051
_exptl_absorpt_process_details	?
_exptl_special_details	
;	
?	
;	
_diffn_ambient_temperature	293(2)
_diffn_radiation_wavelength	0.71073
_diffn_radiation_type	MoK\alpha
_diffn_radiation_source	'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator	graphite
_diffn_measurement_device_type	?
_diffn_measurement_method	?
_diffn_detector_area_resol_mean	?
_diffn_standards_number	?
_diffn_standards_interval_count	?
_diffn_standards_interval_time	?
_diffn_standards_decay_%	?
_diffn_reflns_number	23890
_diffn_reflns_av_R_equivalents	0.0172
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI	0.0109
_diffn_reflns_limit_h_min	-16
_diffn_reflns_limit_h_max	14
_diffn_reflns_limit_k_min	-32
_diffn_reflns_limit_k_max	31
_diffn_reflns_limit_l_min	-9
_diffn_reflns_limit_l_max	9
_diffn_reflns_theta_min	2.26
_diffn_reflns_theta_max	39.39
_reflns_number_total	2675

_reflns_number_gt 2429
_reflns_threshold_expression >2sigma(I)

_computing_data_collection ?
_computing_cell_refinement ?
_computing_data_reduction ?
_computing_structure_solution 'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics ?
_computing_publication_material ?

_refine_special_details

;

Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor wR and goodness of fit S are based on F^2 , conventional R-factors R are based on F, with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-factors based on ALL data will be even larger.

;

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type full
_refine_ls_weighting_scheme calc
_refine_ls_weighting_details
'calc w=1/[\sigma^2(Fo^2)+(0.0250P)^2+1.4869P] 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 0.0029(3)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4^'
_refine_ls_number_reflns 2675
_refine_ls_number_parameters 111
_refine_ls_number_restraints 1
_refine_ls_R_factor_all 0.0264
_refine_ls_R_factor_gt 0.0233
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0599
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0586
_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.058
_refine_ls_restrained_S_all 1.057
_refine_ls_shift/su_max 0.001
_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv

```

_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
A2 Na 0.0000 0.47416(10) 0.0000 0.0639(8) Uani 0.723(5) 2 d SP . .
M1 Mg 0.0000 0.08888(2) 0.5000 0.00625(11) Uani 1.078(3) 2 d SP . .
M2 Mg 0.0000 0.17595(2) 0.0000 0.00512(10) Uani 1.147(3) 2 d SP . .
M3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.00577(15) Uani 1.059(4) 4 d SP . .
M4 Ca 0.0000 0.27952(3) 0.5000 0.00906(7) Uani 0.9660(19) 2 d SP . .
M4' Mn 0.0000 0.2628(8) 0.5000 0.011(2) Uiso 0.0340(19) 2 d SP . .
T1 Si 0.27974(3) 0.084887(14) 0.30315(5) 0.00699(7) Uani 0.9694(18) 1 d P . .
T2 Si 0.28968(3) 0.172538(13) 0.81127(5) 0.00629(6) Uani 1 1 d . . .
O1 O2 0.10767(7) 0.08634(4) 0.21947(13) 0.00906(11) Uani 1 1 d . . .
O2 O2 0.12024(7) 0.17250(4) 0.72790(12) 0.00764(10) Uani 1 1 d . . .
O3 O2 0.10770(10) 0.0000 0.71802(19) 0.00891(15) Uani 1 2 d S . .
H3 H 0.210(3) 0.0000 0.766(5) 0.013 Uiso 1 2 d S . .
O4 O2 0.36588(8) 0.24907(4) 0.78694(13) 0.01007(11) Uani 1 1 d . . .
O5 O2 0.34870(7) 0.13969(4) 0.11256(13) 0.01141(12) Uani 1 1 d . . .
O6 O2 0.34450(8) 0.11446(4) 0.61330(14) 0.01185(12) Uani 1 1 d . . .
O7 O2 0.34069(11) 0.0000 0.2734(2) 0.01322(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
A2 0.0289(8) 0.0484(10) 0.124(2) 0.000 0.0377(10) 0.000
M1 0.00750(19) 0.00632(17) 0.00527(16) 0.000 0.00227(13) 0.000
M2 0.00560(18) 0.00512(15) 0.00486(15) 0.000 0.00175(11) 0.000
M3 0.0067(3) 0.0056(2) 0.0050(2) 0.000 0.00165(18) 0.000
M4 0.01127(13) 0.00743(15) 0.01008(11) 0.000 0.00564(8) 0.000
T1 0.00661(12) 0.00708(10) 0.00712(10) -0.00030(7) 0.00154(8) -0.00048(7)
T2 0.00609(11) 0.00688(9) 0.00595(9) 0.00010(6) 0.00168(7) -0.00047(7)
O1 0.0078(3) 0.0108(2) 0.0084(2) 0.00018(18) 0.0017(2) -0.0010(2)
O2 0.0057(3) 0.0091(2) 0.0079(2) 0.00034(18) 0.00138(19) 0.00018(18)
O3 0.0069(4) 0.0095(3) 0.0102(3) 0.000 0.0019(3) 0.000
O4 0.0115(3) 0.0085(2) 0.0109(2) -0.00036(19) 0.0041(2) -0.0026(2)
O5 0.0093(3) 0.0150(3) 0.0089(2) 0.0048(2) 0.0004(2) -0.0004(2)
O6 0.0088(3) 0.0139(3) 0.0129(3) -0.0051(2) 0.0029(2) 0.0008(2)
O7 0.0094(4) 0.0129(4) 0.0169(4) 0.000 0.0029(3) 0.000

```

_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
A2 A2 0.931(4) 5_565 ?
A2 O7 2.4558(11) 7 ?
A2 O7 2.4558(11) 3_455 ?
A2 O5 2.7022(16) 8_455 ?
A2 O5 2.7022(16) 7 ?
A2 O6 2.7261(13) 8_454 ?
A2 O6 2.7261(13) 7_556 ?
A2 T1 3.2192(7) 8_455 ?
A2 T1 3.2192(7) 7 ?
A2 T2 3.3533(14) 8_454 ?
A2 T2 3.3533(14) 7_556 ?
M1 O1 2.0469(7) . ?
M1 O1 2.0469(7) 2_556 ?
M1 O3 2.0932(7) . ?
M1 O3 2.0932(7) 5_556 ?
M1 O2 2.0933(7) . ?
M1 O2 2.0934(7) 2_556 ?
M1 M2 3.0721(3) 1_556 ?
M1 M2 3.0721(3) . ?
M1 M3 3.0890(2) . ?
M1 M3 3.0890(2) 1_556 ?
M1 M1 3.2028(8) 5_556 ?
M2 O4 2.0176(7) 7_556 ?
M2 O4 2.0176(7) 8_454 ?
M2 O2 2.1013(7) 2_556 ?
M2 O2 2.1013(7) 1_554 ?
M2 O1 2.1062(7) . ?
M2 O1 2.1062(7) 2 ?
M2 M1 3.0721(3) 1_554 ?
M2 M3 3.1701(4) . ?
M2 M4 3.2341(4) . ?
M3 O3 2.0534(10) 5_556 ?
M3 O3 2.0534(10) 1_554 ?
M3 O1 2.0614(7) 5 ?
M3 O1 2.0614(7) 6 ?
M3 O1 2.0614(7) 2 ?
M3 O1 2.0615(7) . ?
M3 M1 3.0890(2) 5 ?
M3 M1 3.0890(2) 5_556 ?
M3 M1 3.0890(2) 1_554 ?
M3 M2 3.1701(4) 5 ?
M4 O4 2.3279(7) 8_455 ?
M4 O4 2.3279(7) 7_556 ?
M4 O2 2.4147(8) 2_556 ?
M4 O2 2.4147(8) . ?

M4 O6 2.6250(8) 7_556 ?
 M4 O6 2.6250(8) 8_455 ?
 M4 O5 2.6329(8) 7_556 ?
 M4 O5 2.6329(8) 8_455 ?
 M4 T2 3.1076(3) 7_556 ?
 M4 T2 3.1076(3) 8_455 ?
 M4 M2 3.2341(4) 1_556 ?
 M4' O2 2.1823(108) 2_556 ?
 M4' O2 2.1823(108) . ?
 M4' O4 2.2803(15) 8_455 ?
 M4' O4 2.2803(15) 7_556 ?
 T1 O1 1.6497(7) . ?
 T1 O7 1.6679(5) . ?
 T1 O6 1.6797(7) . ?
 T1 O5 1.6812(7) . ?
 T1 A2 3.2192(7) 7 ?
 T1 M4 3.2610(5) 7_556 ?
 T2 O4 1.5950(7) . ?
 T2 O2 1.6242(7) . ?
 T2 O5 1.6525(7) 1_556 ?
 T2 O6 1.6702(7) . ?
 T2 M4 3.1075(3) 7_556 ?
 T2 A2 3.3533(14) 7_556 ?
 O2 M2 2.1013(7) 1_556 ?
 O3 M3 2.0533(10) 1_556 ?
 O3 M1 2.0931(7) 5_556 ?
 O3 H3 0.98(2) . ?
 O4 M2 2.0177(7) 7_556 ?
 O4 M4 2.3279(7) 7_556 ?
 O5 T2 1.6525(7) 1_554 ?
 O5 M4 2.6328(8) 7_556 ?
 O5 A2 2.7022(16) 7 ?
 O6 M4 2.6250(8) 7_556 ?
 O6 A2 2.7262(13) 7_556 ?
 O7 T1 1.6679(5) 6 ?
 O7 A2 2.4559(11) 3_545 ?
 O7 A2 2.4559(11) 7 ?

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
 A2 A2 O7 79.07(4) 5_565 7 ?
 A2 A2 O7 79.07(4) 5_565 3_455 ?
 O7 A2 O7 158.15(8) 7 3_455 ?
 A2 A2 O5 139.38(3) 5_565 8_455 ?
 O7 A2 O5 139.25(6) 7 8_455 ?
 O7 A2 O5 61.98(2) 3_455 8_455 ?
 A2 A2 O5 139.38(3) 5_565 7 ?
 O7 A2 O5 61.98(2) 7 7 ?

O7 A2 O5 139.25(6) 3_455 7 ?
 O5 A2 O5 81.23(6) 8_455 7 ?
 A2 A2 O6 125.86(3) 5_565 8_454 ?
 O7 A2 O6 89.79(3) 7 8_454 ?
 O7 A2 O6 103.04(3) 3_455 8_454 ?
 O5 A2 O6 58.82(3) 8_455 8_454 ?
 O5 A2 O6 68.19(4) 7 8_454 ?
 A2 A2 O6 125.86(3) 5_565 7_556 ?
 O7 A2 O6 103.04(3) 7 7_556 ?
 O7 A2 O6 89.79(3) 3_455 7_556 ?
 O5 A2 O6 68.19(4) 8_455 7_556 ?
 O5 A2 O6 58.82(3) 7 7_556 ?
 O6 A2 O6 108.29(7) 8_454 7_556 ?
 A2 A2 T1 109.30(3) 5_565 8_455 ?
 O7 A2 T1 170.47(6) 7 8_455 ?
 O7 A2 T1 30.581(13) 3_455 8_455 ?
 O5 A2 T1 31.473(16) 8_455 8_455 ?
 O5 A2 T1 110.56(6) 7 8_455 ?
 O6 A2 T1 81.60(3) 8_454 8_455 ?
 O6 A2 T1 76.05(3) 7_556 8_455 ?
 A2 A2 T1 109.30(3) 5_565 7 ?
 O7 A2 T1 30.581(13) 7 7 ?
 O7 A2 T1 170.47(6) 3_455 7 ?
 O5 A2 T1 110.56(6) 8_455 7 ?
 O5 A2 T1 31.473(16) 7 7 ?
 O6 A2 T1 76.05(3) 8_454 7 ?
 O6 A2 T1 81.60(3) 7_556 7 ?
 T1 A2 T1 141.40(6) 8_455 7 ?
 A2 A2 T2 142.020(19) 5_565 8_454 ?
 O7 A2 T2 115.06(4) 7 8_454 ?
 O7 A2 T2 82.84(3) 3_455 8_454 ?
 O5 A2 T2 29.22(2) 8_455 8_454 ?
 O5 A2 T2 71.10(4) 7 8_454 ?
 O6 A2 T2 29.66(2) 8_454 8_454 ?
 O6 A2 T2 86.88(5) 7_556 8_454 ?
 T1 A2 T2 55.54(2) 8_455 8_454 ?
 T1 A2 T2 92.57(4) 7 8_454 ?
 A2 A2 T2 142.02(2) 5_565 7_556 ?
 O7 A2 T2 82.84(3) 7 7_556 ?
 O7 A2 T2 115.06(4) 3_455 7_556 ?
 O5 A2 T2 71.10(4) 8_455 7_556 ?
 O5 A2 T2 29.22(2) 7 7_556 ?
 O6 A2 T2 86.88(5) 8_454 7_556 ?
 O6 A2 T2 29.66(2) 7_556 7_556 ?
 T1 A2 T2 92.57(4) 8_455 7_556 ?
 T1 A2 T2 55.54(2) 7 7_556 ?
 T2 A2 T2 75.96(4) 8_454 7_556 ?
 O1 M1 O1 177.44(4) . 2_556 ?
 O1 M1 O3 95.26(3) . . ?
 O1 M1 O3 82.77(3) 2_556 . ?
 O1 M1 O3 82.77(3) . 5_556 ?
 O1 M1 O3 95.25(3) 2_556 5_556 ?
 O3 M1 O3 80.17(4) . 5_556 ?
 O1 M1 O2 95.95(3) . . ?

O1 M1 O2 85.90(3) 2_556 . ?
 O3 M1 O2 95.96(3) . . ?
 O3 M1 O2 175.77(3) 5_556 . ?
 O1 M1 O2 85.90(3) . 2_556 ?
 O1 M1 O2 95.95(3) 2_556 2_556 ?
 O3 M1 O2 175.78(3) . 2_556 ?
 O3 M1 O2 95.96(3) 5_556 2_556 ?
 O2 M1 O2 87.95(4) . 2_556 ?
 O1 M1 M2 138.91(2) . 1_556 ?
 O1 M1 M2 43.04(2) 2_556 1_556 ?
 O3 M1 M2 91.99(2) . 1_556 ?
 O3 M1 M2 138.30(3) 5_556 1_556 ?
 O2 M1 M2 43.013(19) . 1_556 ?
 O2 M1 M2 89.79(2) 2_556 1_556 ?
 O1 M1 M2 43.04(2) . . ?
 O1 M1 M2 138.91(2) 2_556 . ?
 O3 M1 M2 138.30(3) . . ?
 O3 M1 M2 91.99(2) 5_556 . ?
 O2 M1 M2 89.79(2) . . ?
 O2 M1 M2 43.014(19) 2_556 . ?
 M2 M1 M2 118.591(18) 1_556 . ?
 O1 M1 M3 41.425(19) . . ?
 O1 M1 M3 136.60(2) 2_556 . ?
 O3 M1 M3 87.56(3) . . ?
 O3 M1 M3 41.35(3) 5_556 . ?
 O2 M1 M3 137.293(18) . . ?
 O2 M1 M3 90.651(18) 2_556 . ?
 M2 M1 M3 179.477(14) 1_556 . ?
 M2 M1 M3 61.932(7) . . ?
 O1 M1 M3 136.60(2) . 1_556 ?
 O1 M1 M3 41.425(19) 2_556 1_556 ?
 O3 M1 M3 41.35(3) . 1_556 ?
 O3 M1 M3 87.56(3) 5_556 1_556 ?
 O2 M1 M3 90.650(18) . 1_556 ?
 O2 M1 M3 137.293(18) 2_556 1_556 ?
 M2 M1 M3 61.932(7) 1_556 1_556 ?
 M2 M1 M3 179.478(14) . 1_556 ?
 M3 M1 M3 117.546(13) . 1_556 ?
 O1 M1 M1 88.72(2) . 5_556 ?
 O1 M1 M1 88.72(2) 2_556 5_556 ?
 O3 M1 M1 40.09(2) . 5_556 ?
 O3 M1 M1 40.09(2) 5_556 5_556 ?
 O2 M1 M1 136.025(19) . 5_556 ?
 O2 M1 M1 136.027(19) 2_556 5_556 ?
 M2 M1 M1 120.705(9) 1_556 5_556 ?
 M2 M1 M1 120.705(9) . 5_556 ?
 M3 M1 M1 58.773(7) . 5_556 ?
 M3 M1 M1 58.773(7) 1_556 5_556 ?
 M4' M1 M1 180.0 . 5_556 ?
 O4 M2 O4 95.94(4) 7_556 8_454 ?
 O4 M2 O2 92.88(3) 7_556 2_556 ?
 O4 M2 O2 89.39(3) 8_454 2_556 ?
 O4 M2 O2 89.39(3) 7_556 1_554 ?
 O4 M2 O2 92.88(3) 8_454 1_554 ?

O2 M2 O2 176.61(4) 2_556 1_554 ?
O4 M2 O1 92.43(3) 7_556 . ?
O4 M2 O1 169.71(3) 8_454 . ?
O2 M2 O1 84.22(3) 2_556 . ?
O2 M2 O1 93.18(3) 1_554 . ?
O4 M2 O1 169.71(3) 7_556 2 ?
O4 M2 O1 92.43(3) 8_454 2 ?
O2 M2 O1 93.18(3) 2_556 2 ?
O2 M2 O1 84.22(3) 1_554 2 ?
O1 M2 O1 79.91(4) . 2 ?
O4 M2 M1 90.78(2) 7_556 . ?
O4 M2 M1 132.08(2) 8_454 . ?
O2 M2 M1 42.813(19) 2_556 . ?
O2 M2 M1 134.70(2) 1_554 . ?
O1 M2 M1 41.554(19) . . ?
O1 M2 M1 88.02(2) 2 . ?
O4 M2 M1 132.08(2) 7_556 1_554 ?
O4 M2 M1 90.78(2) 8_454 1_554 ?
O2 M2 M1 134.70(2) 2_556 1_554 ?
O2 M2 M1 42.813(19) 1_554 1_554 ?
O1 M2 M1 88.02(2) . 1_554 ?
O1 M2 M1 41.554(19) 2 1_554 ?
M1 M2 M1 118.590(18) . 1_554 ?
O4 M2 M3 132.03(2) 7_556 . ?
O4 M2 M3 132.03(2) 8_454 . ?
O2 M2 M3 88.31(2) 2_556 . ?
O2 M2 M3 88.31(2) 1_554 . ?
O1 M2 M3 39.956(19) . . ?
O1 M2 M3 39.956(19) 2 . ?
M1 M2 M3 59.295(9) . . ?
M1 M2 M3 59.295(9) 1_554 . ?
O4 M2 M4 45.72(2) 7_556 . ?
O4 M2 M4 85.73(2) 8_454 . ?
O2 M2 M4 48.285(19) 2_556 . ?
O2 M2 M4 134.39(2) 1_554 . ?
O1 M2 M4 95.926(19) . . ?
O1 M2 M4 141.383(19) 2 . ?
M1 M2 M4 65.945(10) . . ?
M1 M2 M4 175.466(15) 1_554 . ?
M3 M2 M4 125.240(9) . . ?
O3 M3 O3 180.00(4) 5_556 1_554 ?
O3 M3 O1 96.60(3) 5_556 5 ?
O3 M3 O1 83.40(3) 1_554 5 ?
O3 M3 O1 83.40(3) 5_556 6 ?
O3 M3 O1 96.60(3) 1_554 6 ?
O1 M3 O1 82.01(4) 5 6 ?
O3 M3 O1 96.60(3) 5_556 2 ?
O3 M3 O1 83.40(3) 1_554 2 ?
O1 M3 O1 97.99(4) 5 2 ?
O1 M3 O1 180.00(4) 6 2 ?
O3 M3 O1 83.40(3) 5_556 . ?
O3 M3 O1 96.60(3) 1_554 . ?
O1 M3 O1 180.00(3) 5 . ?
O1 M3 O1 97.99(4) 6 . ?

O1 M3 O1 82.01(4) 2 . ?
 O3 M3 M1 137.661(18) 5_556 5 ?
 O3 M3 M1 42.339(18) 1_554 5 ?
 O1 M3 M1 41.070(19) 5 5 ?
 O1 M3 M1 88.365(19) 6 5 ?
 O1 M3 M1 91.635(19) 2 5 ?
 O1 M3 M1 138.930(19) . 5 ?
 O3 M3 M1 42.339(18) 5_556 5_556 ?
 O3 M3 M1 137.661(18) 1_554 5_556 ?
 O1 M3 M1 88.365(19) 5 5_556 ?
 O1 M3 M1 41.070(19) 6 5_556 ?
 O1 M3 M1 138.930(19) 2 5_556 ?
 O1 M3 M1 91.636(19) . 5_556 ?
 M1 M3 M1 117.547(13) 5 5_556 ?
 O3 M3 M1 137.661(18) 5_556 1_554 ?
 O3 M3 M1 42.339(18) 1_554 1_554 ?
 O1 M3 M1 91.635(19) 5 1_554 ?
 O1 M3 M1 138.930(19) 6 1_554 ?
 O1 M3 M1 41.070(19) 2 1_554 ?
 O1 M3 M1 88.364(19) . 1_554 ?
 M1 M3 M1 62.453(13) 5 1_554 ?
 M1 M3 M1 180.000(13) 5_556 1_554 ?
 O3 M3 M1 42.339(18) 5_556 . ?
 O3 M3 M1 137.661(18) 1_554 . ?
 O1 M3 M1 138.930(19) 5 . ?
 O1 M3 M1 91.636(19) 6 . ?
 O1 M3 M1 88.364(19) 2 . ?
 O1 M3 M1 41.070(19) . . ?
 M1 M3 M1 180.0 5 . ?
 M1 M3 M1 62.454(13) 5_556 . ?
 M1 M3 M1 117.546(13) 1_554 . ?
 O3 M3 M2 90.0 5_556 5 ?
 O3 M3 M2 90.0 1_554 5 ?
 O1 M3 M2 41.007(19) 5 5 ?
 O1 M3 M2 41.007(19) 6 5 ?
 O1 M3 M2 138.993(19) 2 5 ?
 O1 M3 M2 138.994(19) . 5 ?
 M1 M3 M2 58.773(6) 5 5 ?
 M1 M3 M2 58.773(7) 5_556 5 ?
 M1 M3 M2 121.227(7) 1_554 5 ?
 M1 M3 M2 121.227(7) . 5 ?
 O3 M3 M2 90.0 5_556 . ?
 O3 M3 M2 90.0 1_554 . ?
 O1 M3 M2 138.993(19) 5 . ?
 O1 M3 M2 138.993(19) 6 . ?
 O1 M3 M2 41.007(19) 2 . ?
 O1 M3 M2 41.006(19) . . ?
 M1 M3 M2 121.227(6) 5 . ?
 M1 M3 M2 121.227(7) 5_556 . ?
 M1 M3 M2 58.773(7) 1_554 . ?
 M1 M3 M2 58.773(7) . . ?
 M2 M3 M2 180.0 5 . ?
 O4 M4 O4 154.42(4) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 O2 81.63(3) 8_455 2_556 ?

O4 M4 O2 78.00(2) 7_556 2_556 ?
 O4 M4 O2 78.00(3) 8_455 . ?
 O4 M4 O2 81.63(3) 7_556 . ?
 O2 M4 O2 74.02(3) 2_556 . ?
 O4 M4 O6 141.63(3) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 O6 62.49(2) 7_556 7_556 ?
 O2 M4 O6 135.31(2) 2_556 7_556 ?
 O2 M4 O6 116.82(2) . 7_556 ?
 O4 M4 O6 62.49(2) 8_455 8_455 ?
 O4 M4 O6 141.63(3) 7_556 8_455 ?
 O2 M4 O6 116.82(2) 2_556 8_455 ?
 O2 M4 O6 135.31(2) . 8_455 ?
 O6 M4 O6 86.62(3) 7_556 8_455 ?
 O4 M4 O5 85.65(2) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 O5 108.70(2) 7_556 7_556 ?
 O2 M4 O5 159.02(3) 2_556 7_556 ?
 O2 M4 O5 87.09(2) . 7_556 ?
 O6 M4 O5 61.68(2) 7_556 7_556 ?
 O6 M4 O5 70.72(3) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 O5 108.70(2) 8_455 8_455 ?
 O4 M4 O5 85.65(2) 7_556 8_455 ?
 O2 M4 O5 87.09(2) 2_556 8_455 ?
 O2 M4 O5 159.02(3) . 8_455 ?
 O6 M4 O5 70.72(2) 7_556 8_455 ?
 O6 M4 O5 61.68(2) 8_455 8_455 ?
 O5 M4 O5 112.87(3) 7_556 8_455 ?
 O4 M4 T2 171.57(2) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 T2 29.985(17) 7_556 7_556 ?
 O2 M4 T2 105.772(17) 2_556 7_556 ?
 O2 M4 T2 99.908(17) . 7_556 ?
 O6 M4 T2 32.511(16) 7_556 7_556 ?
 O6 M4 T2 116.03(2) 8_455 7_556 ?
 O5 M4 T2 86.092(18) 7_556 7_556 ?
 O5 M4 T2 76.163(18) 8_455 7_556 ?
 O4 M4 T2 29.985(17) 8_455 8_455 ?
 O4 M4 T2 171.57(2) 7_556 8_455 ?
 O2 M4 T2 99.908(17) 2_556 8_455 ?
 O2 M4 T2 105.772(17) . 8_455 ?
 O6 M4 T2 116.03(2) 7_556 8_455 ?
 O6 M4 T2 32.511(16) 8_455 8_455 ?
 O5 M4 T2 76.163(18) 7_556 8_455 ?
 O5 M4 T2 86.092(18) 8_455 8_455 ?
 T2 M4 T2 147.73(2) 7_556 8_455 ?
 O4 M4 M2 121.92(2) 8_455 . ?
 O4 M4 M2 38.355(18) 7_556 . ?
 O2 M4 M2 40.510(16) 2_556 . ?
 O2 M4 M2 80.72(2) . . ?
 O6 M4 M2 96.054(16) 7_556 . ?
 O6 M4 M2 137.240(16) 8_455 . ?
 O5 M4 M2 146.061(16) 7_556 . ?
 O5 M4 M2 78.952(16) 8_455 . ?
 T2 M4 M2 65.278(7) 7_556 . ?
 T2 M4 M2 137.642(9) 8_455 . ?
 O4 M4 M2 38.355(18) 8_455 1_556 ?

O4 M4 M2 121.92(2) 7_556 1_556 ?
 O2 M4 M2 80.72(2) 2_556 1_556 ?
 O2 M4 M2 40.510(16) . 1_556 ?
 O6 M4 M2 137.241(16) 7_556 1_556 ?
 O6 M4 M2 96.054(16) 8_455 1_556 ?
 O5 M4 M2 78.952(16) 7_556 1_556 ?
 O5 M4 M2 146.061(16) 8_455 1_556 ?
 T2 M4 M2 137.642(8) 7_556 1_556 ?
 T2 M4 M2 65.278(7) 8_455 1_556 ?
 M2 M4 M2 109.520(18) . 1_556 ?
 O1 T1 O7 111.49(4) . . ?
 O1 T1 O6 110.93(4) . . ?
 O7 T1 O6 109.16(5) . . ?
 O1 T1 O5 112.93(4) . . ?
 O7 T1 O5 105.40(5) . . ?
 O6 T1 O5 106.64(4) . . ?
 O1 T1 M3 34.23(2) . . ?
 O7 T1 M3 78.71(4) . . ?
 O6 T1 M3 134.04(3) . . ?
 O5 T1 M3 114.79(3) . . ?
 O1 T1 A2 131.81(3) . 7 ?
 O7 T1 A2 48.51(5) . 7 ?
 O6 T1 A2 117.08(3) . 7 ?
 O5 T1 A2 57.05(4) . 7 ?
 M3 T1 A2 102.051(19) . 7 ?
 O1 T1 M1 33.11(2) . . ?
 O7 T1 M1 114.70(4) . . ?
 O6 T1 M1 79.49(3) . . ?
 O5 T1 M1 134.88(3) . . ?
 M3 T1 M1 57.477(7) . . ?
 A2 T1 M1 158.28(3) 7 . ?
 O1 T1 M2 34.06(2) . . ?
 O7 T1 M2 134.37(4) . . ?
 O6 T1 M2 112.02(3) . . ?
 O5 T1 M2 80.85(3) . . ?
 M3 T1 M2 58.730(8) . . ?
 A2 T1 M2 121.786(15) 7 . ?
 M1 T1 M2 56.606(7) . . ?
 O1 T1 M4 129.37(3) . 7_556 ?
 O7 T1 M4 119.13(4) . 7_556 ?
 O6 T1 M4 53.18(3) . 7_556 ?
 O5 T1 M4 53.46(3) . 7_556 ?
 M3 T1 M4 159.532(10) . 7_556 ?
 A2 T1 M4 85.30(3) 7 7_556 ?
 M1 T1 M4 116.424(10) . 7_556 ?
 M2 T1 M4 101.102(11) . 7_556 ?
 O4 T2 O2 117.35(4) . . ?
 O4 T2 O5 109.44(4) . 1_556 ?
 O2 T2 O5 109.74(4) . 1_556 ?
 O4 T2 O6 104.47(4) . . ?
 O2 T2 O6 108.54(4) . . ?
 O5 T2 O6 106.70(4) 1_556 . ?
 O4 T2 M4 46.84(3) . 7_556 ?
 O2 T2 M4 130.73(3) . 7_556 ?

O5 T2 M4 119.52(3) 1_556 7_556 ?
 O6 T2 M4 57.64(3) . 7_556 ?
 O4 T2 A2 115.68(3) . 7_556 ?
 O2 T2 A2 126.88(3) . 7_556 ?
 O5 T2 A2 52.98(3) 1_556 7_556 ?
 O6 T2 A2 53.88(3) . 7_556 ?
 M4 T2 A2 85.525(15) 7_556 7_556 ?
 O4 T2 M4 80.50(3) . . ?
 O2 T2 M4 37.48(2) . . ?
 O5 T2 M4 133.48(3) 1_556 . ?
 O6 T2 M4 114.64(3) . . ?
 M4 T2 M4 100.633(8) 7_556 . ?
 A2 T2 M4 161.10(2) 7_556 . ?
 T1 O1 M1 120.77(4) . . ?
 T1 O1 M3 119.02(4) . . ?
 M1 O1 M3 97.51(3) . . ?
 T1 O1 M2 119.91(4) . . ?
 M1 O1 M2 95.40(3) . . ?
 M3 O1 M2 99.04(3) . . ?
 T2 O2 M1 123.28(4) . . ?
 T2 O2 M2 123.56(4) . 1_556 ?
 M1 O2 M2 94.18(3) . 1_556 ?
 T2 O2 M4 118.36(3) . . ?
 M1 O2 M4 99.02(3) . . ?
 M2 O2 M4 91.20(3) 1_556 . ?
 M3 O3 M1 96.31(3) 1_556 5_556 ?
 M3 O3 M1 96.31(3) 1_556 . ?
 M1 O3 M1 99.83(4) 5_556 . ?
 M3 O3 H3 121.2(14) 1_556 . ?
 M1 O3 H3 119.1(7) 5_556 . ?
 M1 O3 H3 119.1(7) . . ?
 T2 O4 M2 142.33(4) . 7_556 ?
 T2 O4 M4 103.18(4) . 7_556 ?
 M2 O4 M4 95.92(3) 7_556 7_556 ?
 T2 O5 T1 133.65(5) 1_554 . ?
 T2 O5 M4 122.25(4) 1_554 7_556 ?
 T1 O5 M4 95.68(3) . 7_556 ?
 T2 O5 A2 97.80(3) 1_554 7 ?
 T1 O5 A2 91.48(4) . 7 ?
 M4 O5 A2 110.75(3) 7_556 7 ?
 T2 O6 T1 134.85(5) . . ?
 T2 O6 M4 89.85(3) . 7_556 ?
 T1 O6 M4 96.00(3) . 7_556 ?
 T2 O6 A2 96.45(4) . 7_556 ?
 T1 O6 A2 122.60(5) . 7_556 ?
 M4 O6 A2 110.24(3) 7_556 7_556 ?
 T1 O7 T1 132.97(7) 6 . ?
 T1 O7 A2 100.91(5) 6 3_545 ?
 T1 O7 A2 122.46(6) . 3_545 ?
 T1 O7 A2 122.46(6) 6 7 ?
 T1 O7 A2 100.91(5) . 7 ?
 A2 O7 A2 21.85(8) 3_545 7 ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.955

_diffn_reflns_theta_full	39.39
_diffn_measured_fraction_theta_full	0.955
_refine_diff_density_max	1.001
_refine_diff_density_min	-1.020
_refine_diff_density_rms	0.099