

```

data_mend

_audit_creation_method          SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common           ?
_chemical_melting_point         ?
_chemical_formula_moiety        ?
_chemical_formula_sum
'Ca3.30 Ce Cs3.30 F0.80 K2 O45 Si7'
_chemical_formula_weight        1721.02

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'O' 'O' 0.0106 0.0060
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Si' 'Si' 0.0817 0.0704
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ce' 'Ce' -0.2486 2.6331
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'K' 'K' 0.2009 0.2494
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Cs' 'Cs' -0.3680 2.1192
'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'
'F' 'F' 0.0171 0.0103
'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, y, -z'
'x, -y, -z'
'z, x, y'
'z, -x, -y'
'-z, -x, y'
'-z, x, -y'
'y, z, x'
'-y, z, -x'
'y, -z, -x'
'-y, -z, x'
'-x, -y, -z'
'x, y, -z'
'x, -y, z'
'-x, y, z'

```

```

'-z, -x, -y'
'-z, x, y'
'z, x, -y'
'z, -x, y'
'-y, -z, -x'
'y, -z, x'
'-y, z, x'
'y, z, -x'

_cell_length_a          21.9148(4)
_cell_length_b          21.9148(4)
_cell_length_c          21.9148(4)
_cell_angle_alpha       90.00
_cell_angle_beta        90.00
_cell_angle_gamma       90.00
_cell_volume            10524.8(3)
_cell_formula_units_Z   10
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used ?
_cell_measurement_theta_min ?
_cell_measurement_theta_max ?

_exptl_crystal_description ?
_exptl_crystal_colour    ?
_exptl_crystal_size_max  ?
_exptl_crystal_size_mid  ?
_exptl_crystal_size_min  ?
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_diffn 2.715
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000      8087
_exptl_absorpt_coefficient_mu 4.823
_exptl_absorpt_correction_type ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffn_ambient_temperature 293(2)
_diffn_radiation_wavelength 0.71073
_diffn_radiation_type      MoK\alpha
_diffn_radiation_source    'fine-focus sealed tube'
_diffn_radiation_monochromator graphite
_diffn_measurement_device_type ?
_diffn_measurement_method ?
_diffn_detector_area_resol_mean ?
_diffn_standards_number    ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_%   ?
_diffn_reflns_number       50513
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0512
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0149

```

```

_diffn_reflms_limit_h_min      -23
_diffn_reflms_limit_h_max      23
_diffn_reflms_limit_k_min      -23
_diffn_reflms_limit_k_max      23
_diffn_reflms_limit_l_min      -23
_diffn_reflms_limit_l_max      23
_diffn_reflms_theta_min        0.93
_diffn_reflms_theta_max        22.48
_reflms_number_total           2523
_reflms_number_gt              2274
_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^)+(0.0699P)^2^+93.4016P] 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        0.00031(3)
_refine_ls_extinction_expression   'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2^l^3^/sin(2\q)]^-1/4^'
_refine_ls_number_reflms         2523
_refine_ls_number_parameters      274
_refine_ls_number_restraints      0
_refine_ls_R_factor_all           0.0487
_refine_ls_R_factor_gt            0.0415
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1357
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1203
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.391
_refine_ls_restrained_S_all       1.391
_refine_ls_shift/su_max           7.087
_refine_ls_shift/su_mean          0.237

```

```
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
M1 Ce 0.28869(2) 0.29333(2) 0.16693(2) 0.01081(16) Uani 1.01 1 d P . . .
M2A Ce 0.40430(5) 0.40992(4) 0.11371(4) 0.0181(3) Uani 0.697(2) 1 d P . . .
M2B Ce 0.3844(4) 0.4123(4) 0.1193(4) 0.0181(9) Uani 0.083(2) 1 d P . . .
M3 Ce 0.30685(10) 0.31416(10) 0.0000 0.0207(7) Uani 0.363(3) 2 d SP . . .
A1 Cs 0.23200(7) 0.5000 0.24858(7) 0.0448(4) Uani 0.77 2 d SP . . .
B1 Cs 0.0892(4) 0.3728(5) 0.0000 0.044(3) Uani 0.132(4) 2 d SP . . .
B2 Cs 0.078(5) 0.404(6) 0.0000 0.044(3) Uani 0.011(3) 2 d SP . . .
A2 Cs 0.5000 0.4200(2) 0.3981(3) 0.0459(13) Uani 0.22 2 d SP . . .
Si1 Si 0.42893(16) 0.5000 0.24647(16) 0.0132(8) Uani 1 2 d S . . .
Si2 Si 0.23758(11) 0.43094(10) 0.07310(11) 0.0112(5) Uani 1 1 d . . . .
Si3 Si 0.06963(10) 0.26204(11) 0.16567(11) 0.0110(5) Uani 1 1 d . . . .
Si4 Si 0.42934(11) 0.25606(11) 0.07078(11) 0.0124(5) Uani 1 1 d . . . .
Si5 Si 0.14260(10) 0.37357(11) 0.15483(10) 0.0116(5) Uani 1 1 d . . . .
Si6 Si 0.36548(13) 0.38330(12) 0.27932(12) 0.0219(6) Uani 1 1 d . . . .
Si7 Si 0.16716(10) 0.16716(10) 0.16716(10) 0.0098(9) Uani 1 3 d S . . .
O1 O 0.1704(3) 0.4079(3) 0.0957(3) 0.0161(14) Uani 1 1 d . . . .
O2 O 0.4035(4) 0.5000 0.1785(4) 0.020(2) Uani 1 2 d S . . .
O3 O 0.1940(3) 0.3439(3) 0.1973(3) 0.0152(14) Uani 1 1 d . . . .
O4 O 0.0000 0.2518(4) 0.1432(4) 0.015(2) Uani 1 2 d S . . .
O5 O 0.3860(3) 0.3043(3) 0.1037(3) 0.0178(15) Uani 1 1 d . . . .
O6 O 0.4257(3) 0.1900(3) 0.1037(3) 0.0195(15) Uani 1 1 d . . . .
O7 O 0.0961(3) 0.3221(3) 0.1288(3) 0.0193(15) Uani 1 1 d . . . .
O8 O 0.2891(3) 0.3841(3) 0.0941(3) 0.0203(15) Uani 1 1 d . . . .
O9 O 0.2706(3) 0.2376(3) 0.0762(3) 0.0192(15) Uani 1 1 d . . . .
O10 O 0.5000 0.2773(4) 0.0719(4) 0.017(2) Uani 1 2 d S . . .
O11 O 0.3490(3) 0.3729(3) 0.2098(3) 0.0330(19) Uani 1 1 d . . . .
O12 O 0.2342(4) 0.4333(4) 0.0000 0.022(2) Uani 1 2 d S . . .
O13 O 0.2477(4) 0.5000 0.0992(4) 0.014(2) Uani 1 2 d S . . .
O14 O 0.3992(3) 0.3238(3) 0.3079(3) 0.0304(18) Uani 1 1 d . . . .
O15 O 0.4111(4) 0.4411(3) 0.2855(3) 0.050(2) Uani 1 1 d . . . .
O16 O 0.4077(4) 0.2479(5) 0.0000 0.022(2) Uani 1 2 d S . . .
O17 O 0.1413(3) 0.1073(3) 0.2030(3) 0.0166(14) Uani 1 1 d . . . .
O18 O 0.2095(3) 0.2095(3) 0.2095(3) 0.014(2) Uani 1 3 d S . . .
O19 O 0.5000 0.5177(7) 0.2475(9) 0.029(6) Uani 0.50 2 d SP . . .
F F 0.2778(2) 0.2778(2) 0.2778(2) 0.0142(18) Uani 1 3 d S . . .
O20 O 0.3779(4) 0.5000 0.0512(5) 0.025(2) Uiso 1 2 d S . . .
O21 O 0.5000 0.4304(5) 0.0567(6) 0.060(3) Uiso 1 2 d S . . .
O22 O 0.5000 0.0000 0.0000 0.048(8) Uiso 0.67 8 d SP . . .
O23 O 0.5000 0.3849(6) 0.1678(5) 0.054(3) Uiso 1 2 d S . . .
O24 O 0.1829(7) 0.3036(7) 0.0000 0.045(4) Uiso 0.77 2 d SP . . .
O25 O 0.0000 0.3869(5) 0.4029(5) 0.057(3) Uiso 1 2 d S . . .
O26 O 0.5000 0.5000 0.5000 0.03(3) Uiso 0.33 24 d SP . . .
O27 O 0.0000 0.305(2) 0.0000 0.063(11) Uiso 0.33 4 d SP . . .

```

```

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
M1 0.0117(3) 0.0104(3) 0.0103(3) -0.00011(19) 0.00054(19) 0.00058(19)
M2A 0.0179(6) 0.0159(4) 0.0206(5) -0.0035(3) 0.0023(4) -0.0045(4)
M2B 0.018(2) 0.0159(6) 0.0206(4) -0.0035(5) 0.0023(3) -0.0045(4)
M3 0.0266(13) 0.0201(12) 0.0155(12) 0.000 0.000 0.0021(9)
A1 0.0444(8) 0.0454(8) 0.0446(8) 0.000 -0.0135(7) 0.000
B1 0.055(6) 0.047(6) 0.030(4) 0.000 0.000 0.006(4)
B2 0.0553(19) 0.047(6) 0.030(6) 0.000 0.000 0.006(4)
A2 0.048(3) 0.035(3) 0.054(3) 0.002(2) 0.000 0.000
Si1 0.0130(17) 0.0134(17) 0.0132(17) 0.000 -0.0005(14) 0.000
Si2 0.0167(12) 0.0079(11) 0.0091(11) 0.0004(9) 0.0003(10) 0.0006(10)
Si3 0.0087(11) 0.0109(12) 0.0135(12) -0.0004(10) -0.0007(9) 0.0004(10)
Si4 0.0088(11) 0.0178(12) 0.0105(11) 0.0019(10) 0.0009(9) -0.0006(10)
Si5 0.0106(12) 0.0114(12) 0.0126(12) 0.0023(10) -0.0002(10) -0.0010(10)
Si6 0.0354(16) 0.0157(13) 0.0147(13) -0.0020(11) -0.0009(12) -0.0104(12)
Si7 0.0098(9) 0.0098(9) 0.0098(9) 0.0010(10) 0.0010(10) 0.0010(10)
O1 0.017(3) 0.017(3) 0.014(3) 0.005(3) -0.002(3) -0.001(3)
O2 0.025(5) 0.019(5) 0.016(5) 0.000 -0.001(4) 0.000
O3 0.015(3) 0.017(3) 0.014(3) 0.003(3) 0.001(3) 0.003(3)
O4 0.008(4) 0.024(5) 0.014(4) -0.006(4) 0.000 0.000
O5 0.012(3) 0.018(3) 0.023(3) 0.002(3) 0.005(3) -0.001(3)
O6 0.018(3) 0.019(3) 0.022(3) -0.002(3) 0.006(3) 0.002(3)
O7 0.021(3) 0.017(3) 0.020(3) 0.004(3) -0.007(3) -0.006(3)
O8 0.026(4) 0.012(3) 0.023(3) 0.005(3) 0.003(3) 0.005(3)
O9 0.028(4) 0.013(3) 0.017(3) -0.004(3) -0.004(3) -0.003(3)
O10 0.010(4) 0.024(5) 0.016(4) 0.003(4) 0.000 0.000
O11 0.050(5) 0.032(4) 0.017(4) -0.007(3) 0.004(3) -0.023(4)
O12 0.029(5) 0.024(5) 0.012(5) 0.000 0.000 -0.010(4)
O13 0.020(5) 0.015(4) 0.008(4) 0.000 0.001(4) 0.000
O14 0.020(4) 0.024(4) 0.047(4) 0.002(3) 0.009(3) -0.002(3)
O15 0.098(7) 0.030(4) 0.023(4) 0.009(3) -0.023(4) -0.040(5)
O16 0.015(5) 0.041(6) 0.011(5) 0.000 0.000 -0.006(4)
O17 0.016(3) 0.018(3) 0.015(3) 0.005(3) -0.001(3) -0.001(3)
O18 0.014(2) 0.014(2) 0.014(2) -0.002(3) -0.002(3) -0.002(3)
O19 0.018(9) 0.028(16) 0.042(12) 0.009(8) 0.000 0.000
F 0.0142(18) 0.0142(18) 0.0142(18) -0.001(2) -0.001(2) -0.001(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
M1 O9 2.368(6) . ?
M1 O11 2.382(7) . ?
M1 O3 2.444(6) . ?
M1 F 2.465(4) . ?
M1 O3 2.498(6) 9 ?
M1 O8 2.550(6) . ?
M1 O5 2.556(6) . ?
M1 O18 2.694(6) . ?
M1 M2B 3.505(9) . ?
M1 M3 3.7079(6) . ?
M1 M2A 3.7825(11) . ?
M1 M1 3.8477(8) 5 ?
M2A O5 2.360(6) . ?
M2A O2 2.432(5) . ?
M2A O23 2.471(6) . ?
M2A O20 2.472(6) . ?
M2A O21 2.482(7) . ?
M2A O25 2.525(2) 9 ?
M2A O11 2.560(7) . ?
M2A O8 2.624(6) . ?
M2A O10 3.699(7) . ?
M2A O15 3.830(7) . ?
M2A M3 3.8954(19) . ?
M2B O8 2.248(11) . ?
M2B O11 2.296(11) . ?
M2B O2 2.356(11) . ?
M2B O5 2.393(11) . ?
M2B O20 2.438(11) . ?
M2B O25 2.624(10) 9 ?
M2B O23 2.812(11) . ?
M2B O21 2.908(11) . ?
M2B Si2 3.397(10) . ?
M2B O13 3.585(12) . ?
M2B O15 3.742(12) . ?
M3 O9 2.497(6) 14 ?
M3 O9 2.497(6) . ?
M3 O8 2.597(6) . ?
M3 O8 2.597(6) 14 ?
M3 O25 2.620(11) 9 ?
M3 O16 2.645(10) . ?
M3 O24 2.726(16) . ?
M3 O5 2.867(6) . ?
M3 O5 2.867(6) 14 ?
M3 O12 3.059(10) . ?
M3 Si4 3.352(3) . ?
M3 Si4 3.352(3) 14 ?
A1 O14 3.219(7) 20_565 ?
A1 O14 3.219(7) 5 ?
A1 O13 3.291(8) . ?
A1 O23 3.302(12) 5 ?
A1 O6 3.493(6) 5 ?
A1 O6 3.493(6) 20_565 ?
A1 O10 3.565(9) 5 ?
A1 O3 3.696(6) . ?

```

A1 O3 3.696(6) 15_565 ?
A1 Si4 3.861(3) 5 ?
A1 Si4 3.861(3) 20_565 ?
A1 O11 3.880(8) 15_565 ?
B1 B2 0.72(12) . ?
B1 O27 2.46(3) . ?
B1 O24 2.553(19) . ?
B1 O1 2.856(8) . ?
B1 O1 2.856(8) 14 ?
B1 O7 3.037(7) . ?
B1 O7 3.037(7) 14 ?
B1 O22 3.404(11) 5 ?
B1 O12 3.442(13) . ?
B1 Si5 3.589(4) . ?
B1 Si5 3.589(4) 14 ?
B1 B2 3.72(11) 3 ?
B2 O22 2.71(12) 5 ?
B2 O27 2.75(12) . ?
B2 O1 2.92(8) . ?
B2 O1 2.92(8) 14 ?
B2 O24 3.18(12) . ?
B2 O7 3.36(7) 14 ?
B2 O7 3.36(7) . ?
B2 B2 3.4(2) 3 ?
B2 O12 3.49(11) . ?
B2 B1 3.72(11) 3 ?
B2 Si5 3.74(5) . ?
A2 O26 2.840(5) . ?
A2 A2 2.881(6) 18_655 ?
A2 A2 2.881(6) 10_656 ?
A2 A2 2.881(6) 9 ?
A2 A2 2.881(6) 5 ?
A2 O15 3.176(9) . ?
A2 O15 3.176(9) 16_655 ?
A2 O15 3.229(9) 9 ?
A2 O15 3.229(9) 23_655 ?
A2 A2 3.508(10) 2_665 ?
A2 O19 3.57(2) 2_665 ?
A2 O14 3.638(8) . ?
A2 O14 3.638(8) 16_655 ?
A2 O19 3.933(19) . ?
A2 O15 4.375(9) 2_665 ?
Si1 O2 1.590(9) . ?
Si1 O15 1.596(7) 15_565 ?
Si1 O15 1.596(7) . ?
Si1 O19 1.605(5) . ?
Si1 O19 1.605(5) 2_665 ?
Si1 O11 3.386(7) . ?
Si1 O11 3.386(7) 15_565 ?
Si1 O23 3.429(11) 2_665 ?
Si1 O23 3.429(11) . ?
Si2 O8 1.593(7) . ?
Si2 O12 1.605(2) . ?
Si2 O1 1.634(6) . ?
Si2 O13 1.633(4) . ?
Si2 O12 3.380(8) 15_565 ?
Si2 O24 3.433(14) . ?

Si2 O20 3.460(9) . ?
Si2 O3 3.459(6) . ?
Si2 O25 3.696(10) 9 ?
Si3 O9 1.593(6) 5 ?
Si3 O4 1.619(4) . ?
Si3 O17 1.624(6) 9 ?
Si3 O7 1.650(6) . ?
Si3 O3 3.336(6) . ?
Si3 O18 3.413(5) . ?
Si3 O9 3.568(6) 18 ?
Si4 O5 1.592(6) . ?
Si4 O10 1.617(3) . ?
Si4 O6 1.619(7) . ?
Si4 O16 1.632(4) . ?
Si4 O9 3.505(7) . ?
Si4 O10 3.520(8) 14 ?
Si4 O3 3.530(6) 9 ?
Si4 O6 3.564(7) 16_655 ?
Si4 A1 3.861(3) 9 ?
Si5 O3 1.600(7) . ?
Si5 O1 1.617(6) . ?
Si5 O6 1.621(6) 5 ?
Si5 O7 1.624(6) . ?
Si5 O9 3.240(7) 5 ?
Si5 O5 3.396(6) 5 ?
Si5 O8 3.482(7) . ?
Si6 O11 1.583(7) . ?
Si6 O15 1.620(8) . ?
Si6 O14 1.624(7) . ?
Si6 O14 1.632(8) 5 ?
Si6 O14 3.235(7) 9 ?
Si6 O2 3.481(7) . ?
Si6 A1 4.299(3) 9 ?
Si7 O18 1.607(11) . ?
Si7 O17 1.630(6) 9 ?
Si7 O17 1.630(6) 5 ?
Si7 O17 1.630(6) . ?
Si7 O9 3.390(6) . ?
Si7 O9 3.390(6) 5 ?
Si7 O9 3.390(6) 9 ?
O1 O6 2.561(9) 5 ?
O1 O12 2.582(8) . ?
O1 O7 2.591(8) . ?
O1 O13 2.637(8) . ?
O1 O8 2.653(8) . ?
O1 O3 2.682(8) . ?
O1 O24 3.114(13) . ?
O1 O1 4.037(12) 15_565 ?
O2 M2B 2.356(11) 15_565 ?
O2 M2A 2.432(5) 15_565 ?
O2 O19 2.628(15) . ?
O2 O19 2.628(15) 2_665 ?
O2 O15 2.681(10) 15_565 ?
O2 O15 2.681(10) . ?
O2 O20 2.847(13) . ?
O2 O11 3.106(8) . ?
O2 O11 3.106(8) 15_565 ?

02 O23 3.300(11) 2_665 ?
02 O23 3.300(11) . ?
02 Si6 3.481(7) 15_565 ?
03 M1 2.498(6) 5 ?
03 O7 2.663(9) . ?
03 O6 2.676(8) 5 ?
03 F 2.929(7) . ?
03 O18 2.976(7) . ?
03 O9 3.167(9) 5 ?
03 O8 3.199(8) . ?
03 O5 3.205(8) 5 ?
03 O11 3.467(10) . ?
03 Si4 3.530(6) 5 ?
04 Si3 1.619(4) 16 ?
04 O17 2.584(7) 23 ?
04 O17 2.584(7) 9 ?
04 O7 2.627(8) . ?
04 O7 2.627(8) 16 ?
04 O9 2.690(9) 5 ?
04 O9 2.690(9) 18 ?
04 O27 3.347(18) . ?
04 O24 3.827(18) 5 ?
04 M3 3.937(8) 5 ?
04 O16 4.115(12) 5 ?
04 B1 4.549(10) 3 ?
05 O16 2.629(8) . ?
05 O6 2.651(9) . ?
05 O10 2.659(7) . ?
05 O8 2.760(9) . ?
05 O11 2.886(9) . ?
05 O9 2.984(9) . ?
05 O25 3.136(10) 9 ?
05 O3 3.205(8) 9 ?
05 O23 3.367(10) . ?
05 Si5 3.396(6) 9 ?
06 Si5 1.621(7) 9 ?
06 O1 2.561(9) 9 ?
06 O10 2.607(9) . ?
06 O16 2.632(8) . ?
06 O7 2.643(9) 9 ?
06 O3 2.676(8) 9 ?
06 O6 3.256(12) 16_655 ?
06 A1 3.493(6) 9 ?
06 Si4 3.564(7) 16_655 ?
06 O9 3.607(9) . ?
06 O13 4.071(10) 9 ?
06 B2 4.23(2) 9 ?
07 O17 2.635(8) 9 ?
07 O6 2.643(9) 5 ?
07 O9 2.674(9) 5 ?
07 O24 3.428(11) . ?
07 O27 3.541(8) . ?
07 O16 3.843(10) 5 ?
07 O18 3.924(7) . ?
07 M1 3.994(6) 5 ?
08 O12 2.619(9) . ?
08 O13 2.700(7) . ?

08 O11 2.867(9) . ?
08 O25 3.004(10) 9 ?
08 O9 3.259(8) . ?
08 O20 3.336(9) . ?
09 Si3 1.593(6) 9 ?
09 O17 2.666(8) 5 ?
09 O7 2.674(9) 9 ?
09 O4 2.690(9) 9 ?
09 O24 2.928(14) . ?
09 O3 3.167(9) 9 ?
09 Si5 3.240(7) 9 ?
09 O18 3.272(6) . ?
09 O9 3.339(12) 14 ?
09 O16 3.445(10) . ?
O10 Si4 1.617(3) 16_655 ?
O10 O6 2.607(9) 16_655 ?
O10 O16 2.644(9) . ?
O10 O16 2.644(9) 3_655 ?
O10 O5 2.659(7) 16_655 ?
O10 O10 3.151(17) 14 ?
O10 O23 3.158(15) . ?
O10 O21 3.370(15) . ?
O10 Si4 3.520(8) 14 ?
O10 Si4 3.520(8) 3_655 ?
O10 A1 3.565(9) 9 ?
O10 M2A 3.699(7) 16_655 ?
O11 O15 2.616(10) . ?
O11 O14 2.644(10) . ?
O11 O14 2.718(9) 5 ?
O11 F 3.001(8) . ?
O11 O23 3.444(8) . ?
O11 O3 3.866(9) 9 ?
O12 Si2 1.605(2) 14 ?
O12 O1 2.582(8) 14 ?
O12 O8 2.619(9) 14 ?
O12 O13 2.637(8) . ?
O12 O13 2.637(8) 14 ?
O12 O12 2.923(18) 15_565 ?
O12 O24 3.056(18) . ?
O12 Si2 3.380(8) 15_565 ?
O12 Si2 3.380(8) 4_565 ?
O12 O25 3.413(14) 9 ?
O13 Si2 1.633(4) 15_565 ?
O13 O1 2.637(8) 15_565 ?
O13 O12 2.637(8) 15_565 ?
O13 O8 2.700(7) 15_565 ?
O13 O20 3.040(13) . ?
O13 M2B 3.585(12) 15_565 ?
O13 M2A 3.972(7) 15_565 ?
O14 Si6 1.632(8) 9 ?
O14 O15 2.583(12) 9 ?
O14 O14 2.618(12) 5 ?
O14 O14 2.618(12) 9 ?
O14 O15 2.631(10) . ?
O14 O11 2.718(9) 9 ?
O14 F 2.919(10) . ?
O14 A1 3.219(7) 9 ?

O14 Si6 3.235(7) 5 ?
O14 O3 3.921(9) 9 ?
O14 O23 4.013(12) . ?
O15 O19 2.302(13) 2_665 ?
O15 O15 2.580(15) 15_565 ?
O15 O14 2.583(12) 5 ?
O15 O19 2.702(14) . ?
O15 A2 3.229(9) 5 ?
O15 O23 3.459(13) . ?
O15 O15 3.895(19) 16_655 ?
O16 Si4 1.632(4) 14 ?
O16 O5 2.629(8) 14 ?
O16 O6 2.632(8) 14 ?
O16 O10 2.644(9) 14 ?
O16 O9 3.445(10) 14 ?
O16 O25 3.429(15) 9 ?
O16 O7 3.843(10) 24 ?
O16 O7 3.843(10) 9 ?
O16 O16 4.045(17) 3_655 ?
O17 Si3 1.624(6) 5 ?
O17 O4 2.584(7) 5 ?
O17 O17 2.605(10) 9 ?
O17 O17 2.605(10) 5 ?
O17 O7 2.635(8) 5 ?
O17 O9 2.666(8) 9 ?
O17 O18 2.695(10) . ?
O17 O3 3.826(8) 5 ?
O17 O9 3.926(9) 5 ?
O17 M1 4.040(6) 9 ?
O17 O24 4.146(12) 5 ?
O17 O24 4.287(14) 9 ?
O17 O27 4.49(2) 5 ?
O17 B1 4.857(10) 5 ?
O18 F 2.592(13) . ?
O18 M1 2.694(6) 9 ?
O18 M1 2.694(6) 5 ?
O18 O17 2.695(10) 9 ?
O18 O17 2.695(10) 5 ?
O18 O3 2.976(7) 9 ?
O18 O3 2.976(7) 5 ?
O18 O9 3.272(6) 9 ?
O18 O9 3.272(6) 5 ?
O18 Si3 3.412(5) 9 ?
O19 O19 0.78(3) 2_665 ?
O19 Si1 1.605(5) 2_665 ?
O19 O15 2.302(13) 2_665 ?
O19 O15 2.302(13) 15_565 ?
O19 O2 2.628(15) 2_665 ?
O19 O15 2.702(14) 16_655 ?
O19 O23 2.76(2) 2_665 ?
O19 O23 3.39(2) . ?
O19 A2 3.57(2) 2_665 ?
O19 M2A 3.938(16) 2_665 ?
O19 M2A 3.938(16) 15_565 ?
F M1 2.465(4) 9 ?
F M1 2.465(4) 5 ?
F O14 2.919(10) 9 ?

F O14 2.919(10) 5 ?
F O3 2.929(7) 5 ?
F O3 2.929(7) 9 ?
F O11 3.001(8) 5 ?
F O11 3.001(8) 9 ?
O20 O20 2.24(2) 14 ?
O20 O25 2.413(11) 22_565 ?
O20 O25 2.413(11) 9 ?
O20 M2B 2.438(11) 15_565 ?
O20 M2A 2.472(6) 15_565 ?
O20 O21 3.084(10) 2_665 ?
O20 O21 3.084(10) . ?
O20 O8 3.336(9) 15_565 ?
O20 Si2 3.460(9) 15_565 ?
O21 M2A 2.482(7) 16_655 ?
O21 O21 2.49(2) 14 ?
O21 O23 2.630(17) . ?
O21 O25 2.836(12) 9 ?
O21 O25 2.836(12) 10_655 ?
O21 M2B 2.908(11) 16_655 ?
O21 O21 3.05(2) 2_665 ?
O21 O20 3.084(10) 2_665 ?
O21 O2 3.732(13) 2_665 ?
O22 B2 2.71(12) 23_655 ?
O22 B2 2.71(12) 11 ?
O22 B2 2.71(12) 21_655 ?
O22 B2 2.71(12) 9 ?
O22 B1 3.404(11) 11 ?
O22 B1 3.404(11) 23_655 ?
O22 B1 3.404(11) 21_655 ?
O22 B1 3.404(11) 9 ?
O22 O27 4.27(5) 9 ?
O22 O27 4.27(5) 21_655 ?
O23 M2A 2.471(6) 16_655 ?
O23 O19 2.76(2) 2_665 ?
O23 M2B 2.812(11) 16_655 ?
O23 O2 3.300(11) 2_665 ?
O23 A1 3.302(12) 9 ?
O23 O5 3.367(10) 16_655 ?
O23 Si1 3.429(11) 2_665 ?
O24 O9 2.928(14) 14 ?
O24 O1 3.114(13) 14 ?
O24 O7 3.428(11) 14 ?
O24 Si2 3.433(14) 14 ?
O24 O8 3.573(14) 14 ?
O24 O4 3.827(18) 9 ?
O25 O20 2.413(11) 5 ?
O25 O20 2.413(11) 18 ?
O25 M2A 2.525(2) 18 ?
O25 M2A 2.525(2) 5 ?
O25 M3 2.620(11) 5 ?
O25 M2B 2.624(10) 18 ?
O25 M2B 2.624(10) 5 ?
O25 O21 2.836(12) 5 ?
O25 O21 2.836(12) 18 ?
O25 O8 3.004(10) 18 ?
O25 O8 3.004(10) 5 ?

O25 O5 3.136(10) 18 ?
O25 O5 3.136(10) 5 ?
O25 O12 3.413(14) 5 ?
O25 O16 3.429(15) 5 ?
O26 A2 2.840(5) 21_666 ?
O26 A2 2.840(5) 17_666 ?
O26 A2 2.840(5) 13_666 ?
O26 A2 2.840(5) 22_565 ?
O26 A2 2.840(5) 14_556 ?
O26 A2 2.840(5) 18_655 ?
O26 A2 2.840(5) 5 ?
O26 A2 2.840(5) 9 ?
O26 A2 2.840(5) 6_566 ?
O26 A2 2.840(5) 2_665 ?
O26 A2 2.840(5) 10_656 ?
O27 B1 2.46(3) 3 ?
O27 B2 2.75(12) 3 ?
O27 O4 3.347(18) 14 ?
O27 O7 3.541(8) 16 ?
O27 O7 3.541(8) 3 ?
O27 O7 3.541(8) 14 ?
O27 O24 4.009(16) 3 ?
O27 O22 4.27(5) 5 ?
O27 O17 4.49(2) 10 ?
O27 O17 4.49(2) 9 ?

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
O9 M1 O11 143.3(2) . . ?
O9 M1 O3 108.7(2) . . ?
O11 M1 O3 91.8(2) . . ?
O9 M1 F 137.8(2) . . ?
O11 M1 F 76.5(2) . . ?
O3 M1 F 73.24(15) . . ?
O9 M1 O3 81.1(2) . 9 ?
O11 M1 O3 104.7(2) . 9 ?
O3 M1 O3 136.7(2) . 9 ?
F M1 O3 72.32(14) . 9 ?
O9 M1 O8 82.9(2) . . ?
O11 M1 O8 71.0(2) . . ?
O3 M1 O8 79.6(2) . . ?
F M1 O8 136.49(18) . . ?
O3 M1 O8 143.50(19) 9 . ?
O9 M1 O5 74.5(2) . . ?
O11 M1 O5 71.4(2) . . ?
O3 M1 O5 144.47(19) . . ?
F M1 O5 128.95(19) . . ?
O3 M1 O5 78.69(19) 9 . ?
O8 M1 O5 65.4(2) . . ?
O9 M1 O18 80.3(2) . . ?
O11 M1 O18 136.1(2) . . ?

O3 M1 O18 70.61(14) . . ?
F M1 O18 60.1(2) . . ?
O3 M1 O18 69.83(14) 9 . ?
O8 M1 O18 138.64(18) . . ?
O5 M1 O18 142.15(16) . . ?
O9 M1 M2B 103.5(2) . . ?
O11 M1 M2B 40.6(2) . . ?
O3 M1 M2B 104.6(2) . . ?
F M1 M2B 117.0(2) . . ?
O3 M1 M2B 114.1(2) 9 . ?
O8 M1 M2B 39.8(2) . . ?
O5 M1 M2B 43.1(2) . . ?
O18 M1 M2B 174.77(18) . . ?
O9 M1 M3 41.65(15) . . ?
O11 M1 M3 103.83(16) . . ?
O3 M1 M3 107.71(14) . . ?
F M1 M3 178.95(5) . . ?
O3 M1 M3 106.63(14) 9 . ?
O8 M1 M3 44.43(14) . . ?
O5 M1 M3 50.48(14) . . ?
O18 M1 M3 119.65(18) . . ?
M2B M1 M3 63.30(16) . . ?
O9 M1 M2A 101.65(15) . . ?
O11 M1 M2A 41.83(16) . . ?
O3 M1 M2A 110.27(14) . . ?
F M1 M2A 117.53(17) . . ?
O3 M1 M2A 108.54(13) 9 . ?
O8 M1 M2A 43.79(14) . . ?
O5 M1 M2A 37.83(14) . . ?
O18 M1 M2A 177.35(15) . . ?
M2B M1 M2A 5.71(15) . . ?
M3 M1 M2A 62.66(4) . . ?
O9 M1 M1 118.35(15) . 5 ?
O11 M1 M1 96.93(16) . 5 ?
O3 M1 M1 39.38(14) . 5 ?
F M1 M1 38.69(10) . 5 ?
O3 M1 M1 98.18(14) 9 5 ?
O8 M1 M1 118.27(14) . 5 ?
O5 M1 M1 166.41(14) . 5 ?
O18 M1 M1 44.43(12) . 5 ?
M2B M1 M1 130.45(16) . 5 ?
M3 M1 M1 141.99(4) . 5 ?
M2A M1 M1 134.779(19) . 5 ?
O5 M2A O2 148.2(2) . . ?
O5 M2A O23 88.3(3) . . ?
O2 M2A O23 84.6(3) . . ?
O5 M2A O20 133.8(2) . . ?
O2 M2A O20 71.0(3) . . ?
O23 M2A O20 130.0(3) . . ?
O5 M2A O21 105.9(3) . . ?
O2 M2A O21 98.8(3) . . ?
O23 M2A O21 64.2(3) . . ?
O20 M2A O21 77.0(3) . . ?
O5 M2A O25 79.8(3) . 9 ?
O2 M2A O25 128.6(3) . 9 ?
O23 M2A O25 126.0(4) . 9 ?
O20 M2A O25 57.7(3) . 9 ?

O21 M2A O25 69.0(3) . 9 ?
O5 M2A O11 71.7(2) . . ?
O2 M2A O11 76.9(2) . . ?
O23 M2A O11 86.4(3) . . ?
O20 M2A O11 126.7(3) . . ?
O21 M2A O11 150.5(3) . . ?
O25 M2A O11 136.1(3) 9 . ?
O5 M2A O8 67.0(2) . . ?
O2 M2A O8 105.3(3) . . ?
O23 M2A O8 148.0(3) . . ?
O20 M2A O8 81.7(3) . . ?
O21 M2A O8 140.3(3) . . ?
O25 M2A O8 71.3(3) 9 . ?
O11 M2A O8 67.1(2) . . ?
O5 M2A O10 45.75(17) . . ?
O2 M2A O10 141.8(2) . . ?
O23 M2A O10 57.5(3) . . ?
O20 M2A O10 128.5(3) . . ?
O21 M2A O10 62.5(3) . . ?
O25 M2A O10 78.1(3) 9 . ?
O11 M2A O10 102.9(2) . . ?
O8 M2A O10 109.60(16) . . ?
O5 M2A M1 41.63(14) . . ?
O2 M2A M1 111.31(19) . . ?
O23 M2A M1 105.7(3) . . ?
O20 M2A M1 123.6(2) . . ?
O21 M2A M1 147.5(3) . . ?
O25 M2A M1 99.3(2) 9 . ?
O11 M2A M1 38.35(15) . . ?
O8 M2A M1 42.27(13) . . ?
O10 M2A M1 85.73(10) . . ?
O5 M2A O15 105.88(19) . . ?
O2 M2A O15 44.0(2) . . ?
O23 M2A O15 62.3(3) . . ?
O20 M2A O15 114.3(2) . . ?
O21 M2A O15 115.4(3) . . ?
O25 M2A O15 170.7(3) 9 . ?
O11 M2A O15 42.84(19) . . ?
O8 M2A O15 103.7(2) . . ?
O10 M2A O15 111.20(19) . . ?
M1 M2A O15 81.01(12) . . ?
O5 M2A M3 47.06(15) . . ?
O2 M2A M3 143.8(2) . . ?
O23 M2A M3 130.8(3) . . ?
O20 M2A M3 86.96(19) . . ?
O21 M2A M3 103.8(3) . . ?
O25 M2A M3 41.7(2) 9 . ?
O11 M2A M3 95.51(16) . . ?
O8 M2A M3 41.49(14) . . ?
O10 M2A M3 74.29(10) . . ?
M1 M2A M3 57.73(3) . . ?
O15 M2A M3 138.30(13) . . ?
O8 M2B O11 78.2(4) . . ?
O8 M2B O2 121.7(5) . . ?
O11 M2B O2 83.8(4) . . ?
O8 M2B O5 72.9(3) . . ?
O11 M2B O5 75.9(4) . . ?

O2 M2B O5 152.0(5) . . ?
O8 M2B O20 90.7(4) . . ?
O11 M2B O20 143.6(5) . . ?
O2 M2B O20 72.9(4) . . ?
O5 M2B O20 133.8(5) . . ?
O8 M2B O25 75.7(4) . 9 ?
O11 M2B O25 146.9(5) . 9 ?
O2 M2B O25 127.5(5) . 9 ?
O5 M2B O25 77.2(4) . 9 ?
O20 M2B O25 56.8(4) . 9 ?
O8 M2B O23 150.6(5) . . ?
O11 M2B O23 84.1(4) . . ?
O2 M2B O23 78.8(4) . . ?
O5 M2B O23 80.2(4) . . ?
O20 M2B O23 116.9(5) . . ?
O25 M2B O23 109.9(5) 9 . ?
O8 M2B O21 136.9(5) . . ?
O11 M2B O21 138.8(5) . . ?
O2 M2B O21 89.7(4) . . ?
O5 M2B O21 93.1(4) . . ?
O20 M2B O21 69.8(4) . . ?
O25 M2B O21 61.4(4) 9 . ?
O23 M2B O21 54.7(3) . . ?
O8 M2B Si2 23.04(19) . . ?
O11 M2B Si2 89.0(3) . . ?
O2 M2B Si2 103.6(4) . . ?
O5 M2B Si2 95.2(3) . . ?
O20 M2B Si2 70.6(3) . . ?
O25 M2B Si2 74.5(3) 9 . ?
O23 M2B Si2 172.5(4) . . ?
O21 M2B Si2 131.9(4) . . ?
O8 M2B M1 46.6(2) . . ?
O11 M2B M1 42.4(2) . . ?
O2 M2B M1 123.3(4) . . ?
O5 M2B M1 46.8(2) . . ?
O20 M2B M1 137.2(4) . . ?
O25 M2B M1 104.5(4) 9 . ?
O23 M2B M1 105.5(4) . . ?
O21 M2B M1 139.7(4) . . ?
Si2 M2B M1 67.14(17) . . ?
O8 M2B O13 48.8(2) . . ?
O11 M2B O13 91.5(4) . . ?
O2 M2B O13 77.3(3) . . ?
O5 M2B O13 121.7(4) . . ?
O20 M2B O13 56.9(3) . . ?
O25 M2B O13 86.4(4) 9 . ?
O23 M2B O13 156.0(4) . . ?
O21 M2B O13 126.7(4) . . ?
Si2 M2B O13 26.88(11) . . ?
M1 M2B O13 86.3(2) . . ?
O8 M2B O15 115.6(4) . . ?
O11 M2B O15 43.6(3) . . ?
O2 M2B O15 45.5(3) . . ?
O5 M2B O15 107.7(4) . . ?
O20 M2B O15 118.2(4) . . ?
O25 M2B O15 168.5(4) 9 . ?
O23 M2B O15 61.8(3) . . ?

O21 M2B O15 107.4(4) . . ?
Si2 M2B O15 114.7(3) . . ?
M1 M2B O15 86.0(2) . . ?
O13 M2B O15 99.2(3) . . ?
O9 M3 O9 83.9(3) 14 . ?
O9 M3 O8 151.5(2) 14 . ?
O9 M3 O8 79.52(19) . . ?
O9 M3 O8 79.52(19) 14 14 ?
O9 M3 O8 151.5(2) . 14 ?
O8 M3 O8 105.0(3) . 14 ?
O9 M3 O25 135.42(16) 14 9 ?
O9 M3 O25 135.42(16) . 9 ?
O8 M3 O25 70.29(19) . 9 ?
O8 M3 O25 70.29(19) 14 9 ?
O9 M3 O16 84.1(2) 14 . ?
O9 M3 O16 84.1(2) . . ?
O8 M3 O16 116.70(18) . . ?
O8 M3 O16 116.70(18) 14 . ?
O25 M3 O16 81.3(3) 9 . ?
O9 M3 O24 68.0(3) 14 . ?
O9 M3 O24 68.0(3) . . ?
O8 M3 O24 84.3(2) . . ?
O8 M3 O24 84.3(2) 14 . ?
O25 M3 O24 136.9(4) 9 . ?
O16 M3 O24 141.8(4) . . ?
O9 M3 O5 132.2(2) 14 . ?
O9 M3 O5 67.18(19) . . ?
O8 M3 O5 60.44(19) . . ?
O8 M3 O5 139.8(2) 14 . ?
O25 M3 O5 69.54(18) 9 . ?
O16 M3 O5 56.81(14) . . ?
O24 M3 O5 126.64(13) . . ?
O9 M3 O5 67.18(19) 14 14 ?
O9 M3 O5 132.2(2) . 14 ?
O8 M3 O5 139.8(2) . 14 ?
O8 M3 O5 60.44(19) 14 14 ?
O25 M3 O5 69.54(18) 9 14 ?
O16 M3 O5 56.81(14) . 14 ?
O24 M3 O5 126.64(13) . 14 ?
O5 M3 O5 104.8(2) . 14 ?
O9 M3 O12 114.09(19) 14 . ?
O9 M3 O12 114.09(19) . . ?
O8 M3 O12 54.43(15) . . ?
O8 M3 O12 54.43(15) 14 . ?
O25 M3 O12 73.4(3) 9 . ?
O16 M3 O12 154.7(3) . . ?
O24 M3 O12 63.5(4) . . ?
O5 M3 O12 112.32(16) . . ?
O5 M3 O12 112.32(16) 14 . ?
O9 M3 Si4 107.99(16) 14 . ?
O9 M3 Si4 71.95(16) . . ?
O8 M3 Si4 88.68(15) . . ?
O8 M3 Si4 135.36(16) 14 . ?
O25 M3 Si4 75.3(2) 9 . ?
O16 M3 Si4 28.60(7) . . ?
O24 M3 Si4 140.0(2) . . ?
O5 M3 Si4 28.32(13) . . ?

O5 M3 Si4 81.55(14) 14 . ?
O12 M3 Si4 137.85(14) . . ?
O9 M3 Si4 71.95(16) 14 14 ?
O9 M3 Si4 107.99(16) . 14 ?
O8 M3 Si4 135.36(16) . 14 ?
O8 M3 Si4 88.68(15) 14 14 ?
O25 M3 Si4 75.3(2) 9 14 ?
O16 M3 Si4 28.60(7) . 14 ?
O24 M3 Si4 140.0(2) . 14 ?
O5 M3 Si4 81.55(14) . 14 ?
O5 M3 Si4 28.32(13) 14 14 ?
O12 M3 Si4 137.85(14) . 14 ?
Si4 M3 Si4 55.13(9) . 14 ?
O14 A1 O14 86.7(3) 20_565 5 ?
O14 A1 O13 117.06(16) 20_565 . ?
O14 A1 O13 117.06(16) 5 . ?
O14 A1 O23 75.94(19) 20_565 5 ?
O14 A1 O23 75.94(19) 5 5 ?
O13 A1 O23 160.8(3) . 5 ?
O14 A1 O6 157.47(17) 20_565 5 ?
O14 A1 O6 106.49(16) 5 5 ?
O13 A1 O6 73.67(17) . 5 ?
O23 A1 O6 89.4(2) 5 5 ?
O14 A1 O6 106.49(16) 20_565 20_565 ?
O14 A1 O6 157.47(17) 5 20_565 ?
O13 A1 O6 73.67(17) . 20_565 ?
O23 A1 O6 89.4(2) 5 20_565 ?
O6 A1 O6 55.5(2) 5 20_565 ?
O14 A1 O10 114.70(17) 20_565 5 ?
O14 A1 O10 114.70(17) 5 5 ?
O13 A1 O10 106.2(2) . 5 ?
O23 A1 O10 54.6(3) 5 5 ?
O6 A1 O10 43.34(15) 5 5 ?
O6 A1 O10 43.34(15) 20_565 5 ?
O14 A1 O3 155.14(16) 20_565 . ?
O14 A1 O3 68.68(16) 5 . ?
O13 A1 O3 73.82(10) . . ?
O23 A1 O3 100.31(12) 5 . ?
O6 A1 O3 43.59(14) 5 . ?
O6 A1 O3 97.96(14) 20_565 . ?
O10 A1 O3 80.33(11) 5 . ?
O14 A1 O3 68.68(16) 20_565 15_565 ?
O14 A1 O3 155.14(16) 5 15_565 ?
O13 A1 O3 73.82(10) . 15_565 ?
O23 A1 O3 100.31(12) 5 15_565 ?
O6 A1 O3 97.96(14) 5 15_565 ?
O6 A1 O3 43.59(14) 20_565 15_565 ?
O10 A1 O3 80.33(11) 5 15_565 ?
O3 A1 O3 135.55(19) . 15_565 ?
O14 A1 Si4 136.57(14) 20_565 5 ?
O14 A1 Si4 100.11(14) 5 5 ?
O13 A1 Si4 97.93(14) . 5 ?
O23 A1 Si4 64.64(19) 5 5 ?
O6 A1 Si4 24.79(11) 5 5 ?
O6 A1 Si4 57.72(11) 20_565 5 ?
O10 A1 Si4 24.75(5) 5 5 ?
O3 A1 Si4 55.64(10) . 5 ?

O3 A1 Si4 100.26(10) 15_565 5 ?
O14 A1 Si4 100.11(14) 20_565 20_565 ?
O14 A1 Si4 136.57(14) 5 20_565 ?
O13 A1 Si4 97.93(14) . 20_565 ?
O23 A1 Si4 64.64(19) 5 20_565 ?
O6 A1 Si4 57.72(11) 5 20_565 ?
O6 A1 Si4 24.79(11) 20_565 20_565 ?
O10 A1 Si4 24.75(5) 5 20_565 ?
O3 A1 Si4 100.26(10) . 20_565 ?
O3 A1 Si4 55.64(10) 15_565 20_565 ?
Si4 A1 Si4 47.29(7) 5 20_565 ?
O14 A1 O11 43.80(15) 20_565 15_565 ?
O14 A1 O11 105.27(17) 5 15_565 ?
O13 A1 O11 73.31(14) . 15_565 ?
O23 A1 O11 118.68(16) 5 15_565 ?
O6 A1 O11 141.81(14) 5 15_565 ?
O6 A1 O11 96.73(14) 20_565 15_565 ?
O10 A1 O11 133.58(11) 5 15_565 ?
O3 A1 O11 138.29(14) . 15_565 ?
O3 A1 O11 54.40(14) 15_565 15_565 ?
Si4 A1 O11 154.42(11) 5 15_565 ?
Si4 A1 O11 109.05(11) 20_565 15_565 ?
B2 B1 O27 107(9) . . ?
B2 B1 O24 147(9) . . ?
O27 B1 O24 106.3(10) . . ?
B2 B1 O1 88(6) . . ?
O27 B1 O1 131.2(3) . . ?
O24 B1 O1 70.1(3) . . ?
B2 B1 O1 88(6) . 14 ?
O27 B1 O1 131.2(3) . 14 ?
O24 B1 O1 70.1(3) . 14 ?
O1 B1 O1 94.5(4) . 14 ?
B2 B1 O7 111.1(8) . . ?
O27 B1 O7 79.5(4) . . ?
O24 B1 O7 75.1(3) . . ?
O1 B1 O7 52.05(17) . . ?
O1 B1 O7 138.6(4) 14 . ?
B2 B1 O7 111.1(8) . 14 ?
O27 B1 O7 79.5(4) . 14 ?
O24 B1 O7 75.1(3) . 14 ?
O1 B1 O7 138.6(4) . 14 ?
O1 B1 O7 52.05(17) 14 14 ?
O7 B1 O7 136.6(4) . 14 ?
B2 B1 O22 15(9) . 5 ?
O27 B1 O22 92.2(9) . 5 ?
O24 B1 O22 161.5(5) . 5 ?
O1 B1 O22 97.9(3) . 5 ?
O1 B1 O22 97.9(3) 14 5 ?
O7 B1 O22 109.2(2) . 5 ?
O7 B1 O22 109.2(2) 14 5 ?
B2 B1 O12 88(9) . . ?
O27 B1 O12 165.4(10) . . ?
O24 B1 O12 59.1(4) . . ?
O1 B1 O12 47.27(18) . . ?
O1 B1 O12 47.27(18) 14 . ?
O7 B1 O12 95.5(2) . . ?
O7 B1 O12 95.5(2) 14 . ?

O22 B1 O12 102.4(3) 5 . ?
B2 B1 Si5 96(3) . . ?
O27 B1 Si5 105.2(2) . . ?
O24 B1 Si5 74.96(18) . . ?
O1 B1 Si5 26.01(12) . . ?
O1 B1 Si5 119.4(3) 14 . ?
O7 B1 Si5 26.75(12) . . ?
O7 B1 Si5 149.8(4) 14 . ?
O22 B1 Si5 100.57(18) 5 . ?
O12 B1 Si5 72.39(14) . . ?
B2 B1 Si5 96(3) . 14 ?
O27 B1 Si5 105.2(2) . 14 ?
O24 B1 Si5 74.96(18) . 14 ?
O1 B1 Si5 119.4(3) . 14 ?
O1 B1 Si5 26.01(12) 14 14 ?
O7 B1 Si5 149.8(4) . 14 ?
O7 B1 Si5 26.75(12) 14 14 ?
O22 B1 Si5 100.57(18) 5 14 ?
O12 B1 Si5 72.39(14) . 14 ?
Si5 B1 Si5 141.9(3) . 14 ?
B2 B1 B2 59(9) . 3 ?
O27 B1 B2 48(2) . 3 ?
O24 B1 B2 154.0(19) . 3 ?
O1 B1 B2 124.3(8) . 3 ?
O1 B1 B2 124.3(8) 14 3 ?
O7 B1 B2 96.6(7) . 3 ?
O7 B1 B2 96.6(7) 14 3 ?
O22 B1 B2 44.5(19) 5 3 ?
O12 B1 B2 146.9(18) . 3 ?
Si5 B1 B2 108.65(16) . 3 ?
Si5 B1 B2 108.65(16) 14 3 ?
B1 B2 O22 161(10) . 5 ?
B1 B2 O27 58(8) . . ?
O22 B2 O27 103(4) 5 . ?
B1 B2 O1 78(6) . . ?
O22 B2 O1 114(3) 5 . ?
O27 B2 O1 117(3) . . ?
B1 B2 O1 78(6) . 14 ?
O22 B2 O1 114(3) 5 14 ?
O27 B2 O1 117(3) . 14 ?
O1 B2 O1 92(3) . 14 ?
B1 B2 O24 26(7) . . ?
O22 B2 O24 173(4) 5 . ?
O27 B2 O24 85(3) . . ?
O1 B2 O24 61(2) . . ?
O1 B2 O24 61(2) 14 . ?
B1 B2 O7 57.3(19) . 14 ?
O22 B2 O7 119(2) 5 14 ?
O27 B2 O7 70(2) . 14 ?
O1 B2 O7 122(4) . 14 ?
O1 B2 O7 48.1(9) 14 14 ?
O24 B2 O7 63.1(19) . 14 ?
B1 B2 O7 57.3(19) . . ?
O22 B2 O7 119(2) 5 . ?
O27 B2 O7 70(2) . . ?
O1 B2 O7 48.1(9) . . ?
O1 B2 O7 122(4) 14 . ?

O24 B2 O7 63.1(19) . . ?
O7 B2 O7 114(4) 14 . ?
B1 B2 B2 110(9) . 3 ?
O22 B2 B2 51(2) 5 3 ?
O27 B2 B2 52(3) . 3 ?
O1 B2 B2 134.0(16) . 3 ?
O1 B2 B2 134.0(16) 14 3 ?
O24 B2 B2 136(2) . 3 ?
O7 B2 B2 96.8(19) 14 3 ?
O7 B2 B2 96.8(19) . 3 ?
B1 B2 O12 81(9) . . ?
O22 B2 O12 118(4) 5 . ?
O27 B2 O12 139(4) . . ?
O1 B2 O12 46.5(16) . . ?
O1 B2 O12 46.5(16) 14 . ?
O24 B2 O12 54.3(18) . . ?
O7 B2 O12 89(2) 14 . ?
O7 B2 O12 89(2) . . ?
B2 B2 O12 169(2) 3 . ?
B1 B2 B1 100(10) . 3 ?
O22 B2 B1 62(2) 5 3 ?
O27 B2 B1 41.2(17) . 3 ?
O1 B2 B1 133.5(17) . 3 ?
O1 B2 B1 133.5(17) 14 3 ?
O24 B2 B1 126(4) . 3 ?
O7 B2 B1 91(2) 14 3 ?
O7 B2 B1 91(2) . 3 ?
B2 B2 B1 10.5(19) 3 3 ?
O12 B2 B1 180(4) . 3 ?
B1 B2 Si5 73(3) . . ?
O22 B2 Si5 112.1(19) 5 . ?
O27 B2 Si5 96(2) . . ?
O1 B2 Si5 24.4(4) . . ?
O1 B2 Si5 113(3) 14 . ?
O24 B2 Si5 66.6(17) . . ?
O7 B2 Si5 129(4) 14 . ?
O7 B2 Si5 25.8(4) . . ?
B2 B2 Si5 112.3(16) 3 . ?
O12 B2 Si5 70.1(17) . . ?
B1 B2 Si5 110.0(17) 3 . ?
O26 A2 A2 59.529(14) . 18_655 ?
O26 A2 A2 59.529(14) . 10_656 ?
A2 A2 A2 60.0 18_655 10_656 ?
O26 A2 A2 59.529(14) . 9 ?
A2 A2 A2 116.38(10) 18_655 9 ?
A2 A2 A2 75.0(2) 10_656 9 ?
O26 A2 A2 59.529(14) . 5 ?
A2 A2 A2 101.72(14) 18_655 5 ?
A2 A2 A2 116.38(10) 10_656 5 ?
A2 A2 A2 60.0 9 5 ?
O26 A2 O15 121.4(2) . . ?
A2 A2 O15 121.1(3) 18_655 . ?
A2 A2 O15 178.8(3) 10_656 . ?
A2 A2 O15 104.67(18) 9 . ?
A2 A2 O15 64.2(2) 5 . ?
O26 A2 O15 121.4(2) . 16_655 ?
A2 A2 O15 64.2(2) 18_655 16_655 ?

A2 A2 O15 104.67(18) 10_656 16_655 ?
A2 A2 O15 178.8(3) 9 16_655 ?
A2 A2 O15 121.1(3) 5 16_655 ?
O15 A2 O15 75.6(3) . 16_655 ?
O26 A2 O15 119.6(2) . 9 ?
A2 A2 O15 148.3(2) 18_655 9 ?
A2 A2 O15 91.3(3) 10_656 9 ?
A2 A2 O15 62.3(2) 9_9 ?
A2 A2 O15 103.35(18) 5 9 ?
O15 A2 O15 87.6(3) . 9 ?
O15 A2 O15 116.6(2) 16_655 9 ?
O26 A2 O15 119.6(2) . 23_655 ?
A2 A2 O15 103.35(18) 18_655 23_655 ?
A2 A2 O15 62.3(2) 10_656 23_655 ?
A2 A2 O15 91.3(3) 9 23_655 ?
A2 A2 O15 148.3(2) 5 23_655 ?
O15 A2 O15 116.6(2) . 23_655 ?
O15 A2 O15 87.6(3) 16_655 23_655 ?
O15 A2 O15 47.1(3) 9 23_655 ?
O26 A2 A2 51.87(10) . 2_665 ?
A2 A2 A2 52.50(12) 18_655 2_665 ?
A2 A2 A2 99.60(14) 10_656 2_665 ?
A2 A2 A2 99.60(14) 9 2_665 ?
A2 A2 A2 52.50(12) 5 2_665 ?
O15 A2 A2 81.60(16) . 2_665 ?
O15 A2 A2 81.60(16) 16_655 2_665 ?
O15 A2 A2 155.85(14) 9 2_665 ?
O15 A2 A2 155.85(14) 23_655 2_665 ?
O26 A2 O19 119.4(3) . 2_665 ?
A2 A2 O19 85.5(3) 18_655 2_665 ?
A2 A2 O19 141.30(17) 10_656 2_665 ?
A2 A2 O19 141.30(17) 9 2_665 ?
A2 A2 O19 85.5(3) 5 2_665 ?
O15 A2 O19 39.35(18) . 2_665 ?
O15 A2 O19 39.35(18) 16_655 2_665 ?
O15 A2 O19 115.5(3) 9 2_665 ?
O15 A2 O19 115.5(3) 23_655 2_665 ?
A2 A2 O19 67.5(3) 2_665 2_665 ?
O26 A2 O14 141.73(13) . . ?
A2 A2 O14 156.1(2) 18_655 . ?
A2 A2 O14 134.0(3) 10_656 . ?
A2 A2 O14 87.41(13) 9 . ?
A2 A2 O14 88.41(12) 5 . ?
O15 A2 O14 44.80(18) . . ?
O15 A2 O14 92.0(2) 16_655 . ?
O15 A2 O14 43.7(2) 9 . ?
O15 A2 O14 76.2(2) 23_655 . ?
A2 A2 O14 125.41(13) 2_665 . ?
O19 A2 O14 73.7(3) 2_665 . ?
O26 A2 O14 141.73(13) . 16_655 ?
A2 A2 O14 88.41(12) 18_655 16_655 ?
A2 A2 O14 87.41(13) 10_656 16_655 ?
A2 A2 O14 134.0(3) 9 16_655 ?
A2 A2 O14 156.1(2) 5 16_655 ?
O15 A2 O14 92.0(2) . 16_655 ?
O15 A2 O14 44.80(18) 16_655 16_655 ?
O15 A2 O14 76.2(2) 9 16_655 ?

O15 A2 O14 43.7(2) 23_655 16_655 ?
A2 A2 O14 125.41(13) 2_665 16_655 ?
O19 A2 O14 73.7(3) 2_665 16_655 ?
O14 A2 O14 74.8(2) . 16_655 ?
O26 A2 O19 108.9(3) . . ?
A2 A2 O19 78.9(2) 18_655 . ?
A2 A2 O19 137.8(2) 10_656 . ?
A2 A2 O19 137.8(2) 9 . ?
A2 A2 O19 78.9(2) 5 . ?
O15 A2 O19 43.05(19) . . ?
O15 A2 O19 43.05(19) 16_655 . ?
O15 A2 O19 124.9(3) 9 . ?
O15 A2 O19 124.9(3) 23_655 . ?
A2 A2 O19 57.0(3) 2_665 . ?
O19 A2 O19 10.5(4) 2_665 . ?
O14 A2 O19 82.0(3) . . ?
O14 A2 O19 82.0(3) 16_655 . ?
O26 A2 O15 90.79(14) . 2_665 ?
A2 A2 O15 47.56(19) 18_655 2_665 ?
A2 A2 O15 106.39(19) 10_656 2_665 ?
A2 A2 O15 145.51(19) 9 2_665 ?
A2 A2 O15 90.9(2) 5 2_665 ?
O15 A2 O15 74.5(3) . 2_665 ?
O15 A2 O15 35.7(2) 16_655 2_665 ?
O15 A2 O15 149.6(3) 9 2_665 ?
O15 A2 O15 120.5(2) 23_655 2_665 ?
A2 A2 O15 45.91(12) 2_665 2_665 ?
O19 A2 O15 38.1(2) 2_665 2_665 ?
O14 A2 O15 111.6(2) . 2_665 ?
O14 A2 O15 80.01(17) 16_655 2_665 ?
O19 A2 O15 31.60(18) . 2_665 ?
O2 Si1 O15 114.6(3) . 15_565 ?
O2 Si1 O15 114.6(3) . . ?
O15 Si1 O15 107.8(6) 15_565 . ?
O2 Si1 O19 110.7(8) . . ?
O15 Si1 O19 91.9(7) 15_565 . ?
O15 Si1 O19 115.1(7) . . ?
O2 Si1 O19 110.7(8) . 2_665 ?
O15 Si1 O19 115.1(7) 15_565 2_665 ?
O15 Si1 O19 91.9(7) . 2_665 ?
O19 Si1 O19 28.0(11) . 2_665 ?
O2 Si1 O11 66.19(19) . . ?
O15 Si1 O11 131.7(4) 15_565 . ?
O15 Si1 O11 48.4(3) . . ?
O19 Si1 O11 134.8(6) . . ?
O19 Si1 O11 107.8(6) 2_665 . ?
O2 Si1 O11 66.19(19) . 15_565 ?
O15 Si1 O11 48.4(3) 15_565 15_565 ?
O15 Si1 O11 131.7(4) . 15_565 ?
O19 Si1 O11 107.8(6) . 15_565 ?
O19 Si1 O11 134.8(6) 2_665 15_565 ?
O11 Si1 O11 110.6(3) . 15_565 ?
O2 Si1 O23 71.8(3) . 2_665 ?
O15 Si1 O23 77.6(4) 15_565 2_665 ?
O15 Si1 O23 167.1(4) . 2_665 ?
O19 Si1 O23 52.3(6) . 2_665 ?
O19 Si1 O23 75.2(6) 2_665 2_665 ?

O11 Si1 O23 136.1(2) . 2_665 ?
O11 Si1 O23 60.70(17) 15_565 2_665 ?
O2 Si1 O23 71.8(3) . . ?
O15 Si1 O23 167.1(4) 15_565 . ?
O15 Si1 O23 77.6(4) . . ?
O19 Si1 O23 75.2(6) . . ?
O19 Si1 O23 52.3(6) 2_665 . ?
O11 Si1 O23 60.70(17) . . ?
O11 Si1 O23 136.1(2) 15_565 . ?
O23 Si1 O23 94.7(4) 2_665 . ?
O2 Si1 A1 70.1(3) . . ?
O15 Si1 A1 75.5(4) 15_565 . ?
O15 Si1 A1 75.5(4) . . ?
O19 Si1 A1 165.9(6) . . ?
O19 Si1 A1 165.9(6) 2_665 . ?
O11 Si1 A1 59.03(14) . . ?
O11 Si1 A1 59.03(14) 15_565 . ?
O23 Si1 A1 117.36(11) 2_665 . ?
O23 Si1 A1 117.36(11) . . ?
O8 Si2 O12 110.0(4) . . ?
O8 Si2 O1 110.6(3) . . ?
O12 Si2 O1 105.7(4) . . ?
O8 Si2 O13 113.6(4) . . ?
O12 Si2 O13 109.0(4) . . ?
O1 Si2 O13 107.6(4) . . ?
O8 Si2 M3 48.0(2) . . ?
O12 Si2 M3 64.7(3) . . ?
O1 Si2 M3 108.3(2) . . ?
O13 Si2 M3 143.8(3) . . ?
O8 Si2 O12 136.0(3) . 15_565 ?
O12 Si2 O12 59.8(4) . 15_565 ?
O1 Si2 O12 113.3(3) . 15_565 ?
O13 Si2 O12 49.7(3) . 15_565 ?
M3 Si2 O12 116.86(12) . 15_565 ?
O8 Si2 M2B 33.5(3) . . ?
O12 Si2 M2B 110.2(4) . . ?
O1 Si2 M2B 136.5(3) . . ?
O13 Si2 M2B 83.0(3) . . ?
M3 Si2 M2B 67.98(17) . . ?
O12 Si2 M2B 105.5(2) 15_565 . ?
O8 Si2 O24 81.8(3) . . ?
O12 Si2 O24 62.9(3) . . ?
O1 Si2 O24 64.9(3) . . ?
O13 Si2 O24 164.6(4) . . ?
M3 Si2 O24 47.2(3) . . ?
O12 Si2 O24 119.11(19) 15_565 . ?
M2B Si2 O24 111.8(3) . . ?
O8 Si2 O20 72.1(3) . . ?
O12 Si2 O20 83.6(4) . . ?
O1 Si2 O20 168.0(3) . . ?
O13 Si2 O20 61.5(3) . . ?
M3 Si2 O20 82.32(11) . . ?
O12 Si2 O20 64.45(19) 15_565 . ?
M2B Si2 O20 41.6(2) . . ?
O24 Si2 O20 126.9(3) . . ?
O8 Si2 O3 67.2(3) . . ?
O12 Si2 O3 142.3(4) . . ?

01 Si2 O3 48.8(2) . . ?
013 Si2 O3 105.8(3) . . ?
M3 Si2 O3 94.55(11) . . ?
012 Si2 O3 148.49(16) 15_565 . ?
M2B Si2 O3 87.73(19) . . ?
024 Si2 O3 79.79(16) . . ?
020 Si2 O3 126.6(2) . . ?
08 Si2 O25 52.5(3) . 9 ?
012 Si2 O25 67.3(4) . 9 ?
01 Si2 O25 151.5(3) . 9 ?
013 Si2 O25 100.7(4) . 9 ?
M3 Si2 O25 43.19(17) . 9 ?
012 Si2 O25 87.7(2) 15_565 9 ?
M2B Si2 O25 43.16(18) . 9 ?
024 Si2 O25 88.4(3) . 9 ?
020 Si2 O25 39.24(19) . 9 ?
03 Si2 O25 119.61(17) . 9 ?
08 Si2 B1 120.4(3) . . ?
012 Si2 B1 63.6(3) . . ?
01 Si2 B1 42.4(2) . . ?
013 Si2 B1 124.6(3) . . ?
M3 Si2 B1 86.07(16) . . ?
012 Si2 B1 94.3(2) 15_565 . ?
M2B Si2 B1 152.4(2) . . ?
024 Si2 B1 40.6(3) . . ?
020 Si2 B1 147.03(19) . . ?
03 Si2 B1 84.94(14) . . ?
025 Si2 B1 120.92(16) 9 . ?
09 Si3 O4 113.7(4) 5 . ?
09 Si3 O17 111.9(3) 5 9 ?
04 Si3 O17 105.6(4) . 9 ?
09 Si3 O7 111.1(3) 5 . ?
04 Si3 O7 107.0(4) . . ?
017 Si3 O7 107.2(3) 9 . ?
09 Si3 O3 70.0(3) 5 . ?
04 Si3 O3 155.2(3) . . ?
017 Si3 O3 94.6(3) 9 . ?
07 Si3 O3 52.1(2) . . ?
09 Si3 O18 71.4(3) 5 . ?
04 Si3 O18 152.3(3) . . ?
017 Si3 O18 50.7(3) 9 . ?
07 Si3 O18 95.3(2) . . ?
03 Si3 O18 52.33(17) . . ?
09 Si3 O9 68.8(3) 5 18 ?
04 Si3 O9 45.4(3) . 18 ?
017 Si3 O9 130.0(3) 9 18 ?
07 Si3 O9 119.3(3) . 18 ?
03 Si3 O9 127.72(16) . 18 ?
018 Si3 O9 134.27(12) . 18 ?
05 Si4 O10 111.9(4) . . ?
05 Si4 O6 111.3(3) . . ?
010 Si4 O6 107.3(4) . . ?
05 Si4 O16 109.3(4) . . ?
010 Si4 O16 108.9(4) . . ?
06 Si4 O16 108.1(4) . . ?
05 Si4 M3 58.7(2) . . ?
010 Si4 M3 131.6(3) . . ?

06 Si4 M3 120.4(3) . . ?
016 Si4 M3 50.9(3) . . ?
05 Si4 O9 58.0(2) . . ?
010 Si4 O9 169.5(3) . . ?
06 Si4 O9 80.4(3) . . ?
016 Si4 O9 74.4(3) . . ?
M3 Si4 O9 42.65(11) . . ?
05 Si4 O10 125.2(3) . 14 ?
010 Si4 O10 63.5(4) . 14 ?
06 Si4 O10 122.4(3) . 14 ?
016 Si4 O10 45.4(3) . 14 ?
M3 Si4 O10 83.74(9) . 14 ?
09 Si4 O10 118.82(14) . 14 ?
05 Si4 O3 65.1(2) . 9 ?
010 Si4 O3 127.0(3) . 9 ?
06 Si4 O3 46.1(2) . 9 ?
016 Si4 O3 122.2(3) . 9 ?
M3 Si4 O3 93.88(11) . 9 ?
09 Si4 O3 53.51(14) . 9 ?
010 Si4 O3 164.02(18) 14 9 ?
05 Si4 O6 135.1(3) . 16_655 ?
010 Si4 O6 42.3(3) . 16_655 ?
06 Si4 O6 65.8(3) . 16_655 ?
016 Si4 O6 114.0(4) . 16_655 ?
M3 Si4 O6 164.08(13) . 16_655 ?
09 Si4 O6 146.19(16) . 16_655 ?
010 Si4 O6 80.88(14) 14 16_655 ?
03 Si4 O6 99.79(15) 9 16_655 ?
05 Si4 A1 81.6(2) . 9 ?
010 Si4 A1 67.3(3) . 9 ?
06 Si4 A1 64.8(2) . 9 ?
016 Si4 A1 169.0(4) . 9 ?
M3 Si4 A1 139.54(7) . 9 ?
09 Si4 A1 111.24(12) . 9 ?
010 Si4 A1 129.94(9) 14 9 ?
03 Si4 A1 59.81(10) 9 9 ?
06 Si4 A1 55.96(11) 16_655 9 ?
03 Si5 O1 113.0(3) . . ?
03 Si5 O6 112.4(3) . 5 ?
01 Si5 O6 104.6(3) . 5 ?
03 Si5 O7 111.4(3) . . ?
01 Si5 O7 106.1(3) . . ?
06 Si5 O7 109.1(3) 5 . ?
03 Si5 O9 73.0(2) . 5 ?
01 Si5 O9 160.3(3) . 5 ?
06 Si5 O9 89.3(3) 5 5 ?
07 Si5 O9 55.3(2) . 5 ?
03 Si5 O5 69.4(2) . 5 ?
01 Si5 O5 146.1(3) . 5 ?
06 Si5 O5 49.6(2) 5 5 ?
07 Si5 O5 103.7(3) . 5 ?
09 Si5 O5 53.38(15) 5 5 ?
03 Si5 O8 66.5(2) . . ?
01 Si5 O8 46.8(2) . . ?
06 Si5 O8 128.3(3) 5 . ?
07 Si5 O8 119.3(3) . . ?
09 Si5 O8 132.38(17) 5 . ?

05 Si5 O8 126.53(16) 5 . ?
03 Si5 B1 141.1(3) . . ?
01 Si5 B1 50.8(3) . . ?
06 Si5 B1 106.3(3) 5 . ?
07 Si5 B1 57.3(3) . . ?
09 Si5 B1 112.30(19) 5 . ?
05 Si5 B1 146.12(19) 5 . ?
08 Si5 B1 86.51(18) . . ?
03 Si5 B2 150.2(17) . . ?
01 Si5 B2 48.2(17) . . ?
06 Si5 B2 96.2(18) 5 . ?
07 Si5 B2 64.2(18) . . ?
09 Si5 B2 117.4(18) 5 . ?
05 Si5 B2 140.0(17) 5 . ?
08 Si5 B2 89.5(16) . . ?
B1 Si5 B2 11.1(18) . . ?
03 Si5 A1 68.6(2) . . ?
01 Si5 A1 84.5(2) . . ?
06 Si5 A1 61.4(2) 5 . ?
07 Si5 A1 167.7(3) . . ?
09 Si5 A1 114.74(12) 5 . ?
05 Si5 A1 64.43(11) 5 . ?
08 Si5 A1 72.35(11) . . ?
B1 Si5 A1 130.83(17) . . ?
B2 Si5 A1 122.3(19) . . ?
O11 Si6 O15 109.5(4) . . ?
O11 Si6 O14 111.1(4) . . ?
O15 Si6 O14 108.4(4) . . ?
O11 Si6 O14 115.4(4) . 5 ?
O15 Si6 O14 105.1(4) . 5 ?
O14 Si6 O14 107.0(5) . 5 ?
O11 Si6 O14 130.1(3) . 9 ?
O15 Si6 O14 120.4(3) . 9 ?
O14 Si6 O14 53.5(2) . 9 ?
O14 Si6 O14 53.5(2) 5 9 ?
O11 Si6 O2 63.2(3) . . ?
O15 Si6 O2 48.0(3) . . ?
O14 Si6 O2 136.5(3) . . ?
O14 Si6 O2 114.1(3) 5 . ?
O14 Si6 O2 163.40(19) 9 . ?
O11 Si6 A1 76.1(3) . . ?
O15 Si6 A1 88.0(3) . . ?
O14 Si6 A1 157.5(3) . . ?
O14 Si6 A1 52.4(2) 5 . ?
O14 Si6 A1 105.10(15) 9 . ?
O2 Si6 A1 65.97(15) . . ?
O11 Si6 A1 79.9(3) . 9 ?
O15 Si6 A1 97.7(4) . 9 ?
O14 Si6 A1 39.6(3) . 9 ?
O14 Si6 A1 145.1(3) 5 9 ?
O14 Si6 A1 92.21(14) 9 9 ?
O2 Si6 A1 100.80(14) . 9 ?
A1 Si6 A1 155.90(7) . 9 ?
O18 Si7 O17 112.7(2) . 9 ?
O18 Si7 O17 112.7(2) . 5 ?
O17 Si7 O17 106.0(3) 9 5 ?
O18 Si7 O17 112.7(2) . . ?

O17 Si7 O17 106.0(3) 9 . ?
O17 Si7 O17 106.0(3) 5 . ?
O18 Si7 O9 71.98(12) . . ?
O17 Si7 O9 96.5(2) 9 . ?
O17 Si7 O9 50.4(2) 5 . ?
O17 Si7 O9 151.9(2) . . ?
O18 Si7 O9 72.00(12) . 5 ?
O17 Si7 O9 50.4(2) 9 5 ?
O17 Si7 O9 151.9(2) 5 5 ?
O17 Si7 O9 96.5(2) . 5 ?
O9 Si7 O9 110.89(11) . 5 ?
O18 Si7 O9 71.99(12) . 9 ?
O17 Si7 O9 151.9(2) 9 9 ?
O17 Si7 O9 96.5(2) 5 9 ?
O17 Si7 O9 50.4(2) . 9 ?
O9 Si7 O9 110.89(11) . 9 ?
O9 Si7 O9 110.89(11) 5 9 ?
Si5 O1 Si2 136.6(4) . . ?
Si5 O1 O6 37.8(2) . 5 ?
Si2 O1 O6 135.4(4) . 5 ?
Si5 O1 O12 162.8(4) . . ?
Si2 O1 O12 36.7(2) . . ?
O6 O1 O12 158.7(4) 5 . ?
Si5 O1 O7 37.0(2) . . ?
Si2 O1 O7 151.1(4) . . ?
O6 O1 O7 61.7(2) 5 . ?
O12 O1 O7 136.4(3) . . ?
Si5 O1 O13 125.1(4) . . ?
Si2 O1 O13 36.2(2) . . ?
O6 O1 O13 103.1(3) 5 . ?
O12 O1 O13 60.7(3) . . ?
O7 O1 O13 162.1(3) . . ?
Si5 O1 O8 106.8(3) . . ?
Si2 O1 O8 34.2(2) . . ?
O6 O1 O8 126.9(3) 5 . ?
O12 O1 O8 60.0(3) . . ?
O7 O1 O8 118.5(3) . . ?
O13 O1 O8 61.4(2) . . ?
Si5 O1 O3 33.32(19) . . ?
Si2 O1 O3 103.9(3) . . ?
O6 O1 O3 61.3(2) 5 . ?
O12 O1 O3 133.1(3) . . ?
O7 O1 O3 60.6(2) . . ?
O13 O1 O3 104.6(3) . . ?
O8 O1 O3 73.7(2) . . ?
Si5 O1 B1 103.2(3) . . ?
Si2 O1 B1 114.9(3) . . ?
O6 O1 B1 106.2(3) 5 . ?
O12 O1 B1 78.4(3) . . ?
O7 O1 B1 67.6(2) . . ?
O13 O1 B1 128.9(3) . . ?
O8 O1 B1 123.2(3) . . ?
O3 O1 B1 126.1(3) . . ?
Si5 O1 B2 107.4(18) . . ?
Si2 O1 B2 114.7(17) . . ?
O6 O1 B2 100.8(17) 5 . ?
O12 O1 B2 78.4(16) . . ?

O7 O1 B2 75(2) . . ?
O13 O1 B2 119(2) . . ?
O8 O1 B2 131.7(18) . . ?
O3 O1 B2 136(2) . . ?
B1 O1 B2 14(2) . . ?
Si5 O1 O24 103.4(3) . . ?
Si2 O1 O24 86.7(4) . . ?
O6 O1 O24 134.9(4) 5 . . ?
O12 O1 O24 64.1(3) . . ?
O7 O1 O24 73.2(3) . . ?
O13 O1 O24 121.7(4) . . ?
O8 O1 O24 76.1(3) . . ?
O3 O1 O24 99.1(3) . . ?
B1 O1 O24 50.4(3) . . ?
B2 O1 O24 64(2) . . ?
Si5 O1 M1 68.5(2) . . ?
Si2 O1 M1 74.0(2) . . ?
O6 O1 M1 98.8(2) 5 . . ?
O12 O1 M1 95.9(3) . . ?
O7 O1 M1 80.8(2) . . ?
O13 O1 M1 93.1(2) . . ?
O8 O1 M1 39.95(15) . . ?
O3 O1 M1 37.74(15) . . ?
B1 O1 M1 122.0(3) . . ?
B2 O1 M1 136(2) . . ?
O24 O1 M1 75.0(3) . . ?
Si5 O1 O1 117.7(2) . 15_565 ?
Si2 O1 O1 72.0(2) . 15_565 ?
O6 O1 O1 81.22(19) 5 15_565 ?
O12 O1 O1 77.5(2) . 15_565 ?
O7 O1 O1 136.53(19) . 15_565 ?
O13 O1 O1 40.04(19) . 15_565 ?
O8 O1 O1 101.35(18) . 15_565 ?
O3 O1 O1 121.53(18) . 15_565 ?
B1 O1 O1 105.6(2) . 15_565 ?
B2 O1 O1 92(2) . 15_565 ?
O24 O1 O1 137.2(2) . 15_565 ?
M1 O1 O1 129.68(9) . 15_565 ?
Si5 O1 A1 72.6(2) . . ?
Si2 O1 A1 78.5(2) . . ?
O6 O1 A1 57.22(18) 5 . . ?
O12 O1 A1 112.1(2) . . ?
O7 O1 A1 109.4(2) . . ?
O13 O1 A1 52.6(2) . . ?
O8 O1 A1 77.7(2) . . ?
O3 O1 A1 61.31(17) . . ?
B1 O1 A1 158.3(3) . . ?
B2 O1 A1 145(2) . . ?
O24 O1 A1 151.0(3) . . ?
M1 O1 A1 77.00(10) . . ?
O1 O1 A1 60.80(8) 15_565 . ?
Si5 O1 M3 116.2(3) . . ?
Si2 O1 M3 49.95(19) . . ?
O6 O1 M3 152.4(2) 5 . . ?
O12 O1 M3 46.6(2) . . ?
O7 O1 M3 103.5(2) . . ?
O13 O1 M3 86.1(2) . . ?

O8 O1 M3 36.59(16) . . ?
O3 O1 M3 91.23(19) . . ?
B1 O1 M3 86.8(2) . . ?
B2 O1 M3 96.9(19) . . ?
O24 O1 M3 40.6(3) . . ?
M1 O1 M3 54.21(8) . . ?
O1 O1 M3 119.35(8) 15_565 . ?
A1 O1 M3 114.30(14) . . ?
Si1 O2 M2B 125.3(3) . . ?
Si1 O2 M2B 125.3(3) . 15_565 ?
M2B O2 M2B 109.3(6) . 15_565 ?
Si1 O2 M2A 123.0(2) . 15_565 ?
M2B O2 M2A 110.0(4) . 15_565 ?
M2B O2 M2A 10.8(2) 15_565 15_565 ?
Si1 O2 M2A 123.0(2) . . ?
M2B O2 M2A 10.8(2) . . ?
M2B O2 M2A 110.0(4) 15_565 . ?
M2A O2 M2A 108.5(3) 15_565 . ?
Si1 O2 O19 34.8(4) . . ?
M2B O2 O19 125.5(5) . . ?
M2B O2 O19 109.8(5) 15_565 . ?
M2A O2 O19 102.1(4) 15_565 . ?
M2A O2 O19 116.8(4) . . ?
Si1 O2 O19 34.8(4) . 2_665 ?
M2B O2 O19 109.8(5) . 2_665 ?
M2B O2 O19 125.5(5) 15_565 2_665 ?
M2A O2 O19 116.8(4) 15_565 2_665 ?
M2A O2 O19 102.1(4) . 2_665 ?
O19 O2 O19 17.0(7) . 2_665 ?
Si1 O2 O15 32.8(2) . 15_565 ?
M2B O2 O15 152.2(4) . 15_565 ?
M2B O2 O15 95.8(3) 15_565 15_565 ?
M2A O2 O15 96.88(19) 15_565 15_565 ?
M2A O2 O15 154.3(3) . 15_565 ?
O19 O2 O15 51.4(4) . 15_565 ?
O19 O2 O15 61.2(4) 2_665 15_565 ?
Si1 O2 O15 32.8(2) . . ?
M2B O2 O15 95.8(3) . . ?
M2B O2 O15 152.2(4) 15_565 . ?
M2A O2 O15 154.3(3) 15_565 . ?
M2A O2 O15 96.88(19) . . ?
O19 O2 O15 61.2(4) . . ?
O19 O2 O15 51.4(4) 2_665 . ?
O15 O2 O15 57.5(4) 15_565 . ?
Si1 O2 O20 170.9(6) . . ?
M2B O2 O20 54.9(3) . . ?
M2B O2 O20 54.9(3) 15_565 . ?
M2A O2 O20 55.17(17) 15_565 . ?
M2A O2 O20 55.17(17) . . ?
O19 O2 O20 136.3(5) . . ?
O19 O2 O20 136.3(5) 2_665 . ?
O15 O2 O20 150.4(2) 15_565 . ?
O15 O2 O20 150.4(2) . . ?
Si1 O2 O11 85.9(2) . . ?
M2B O2 O11 47.3(3) . . ?
M2B O2 O11 141.6(4) 15_565 . ?
M2A O2 O11 149.2(4) 15_565 . ?

M2A O2 O11 53.40(13) . . ?
O19 O2 O11 108.4(4) . . ?
O19 O2 O11 92.9(4) 2_665 . ?
O15 O2 O11 105.2(3) 15_565 . ?
O15 O2 O11 53.1(2) . . ?
O20 O2 O11 98.1(2) . . ?
Si1 O2 O11 85.9(2) . 15_565 ?
M2B O2 O11 141.6(4) . 15_565 ?
M2B O2 O11 47.3(3) 15_565 15_565 ?
M2A O2 O11 53.40(13) 15_565 15_565 ?
M2A O2 O11 149.2(4) . 15_565 ?
O19 O2 O11 92.9(4) . 15_565 ?
O19 O2 O11 108.4(4) 2_665 15_565 ?
O15 O2 O11 53.1(2) 15_565 15_565 ?
O15 O2 O11 105.2(3) . 15_565 ?
O20 O2 O11 98.1(2) . 15_565 ?
O11 O2 O11 127.4(4) . 15_565 ?
Si1 O2 O23 80.9(3) . 2_665 ?
M2B O2 O23 134.3(5) . 2_665 ?
M2B O2 O23 56.7(3) 15_565 2_665 ?
M2A O2 O23 48.2(2) 15_565 2_665 ?
M2A O2 O23 125.1(4) . 2_665 ?
O19 O2 O23 54.0(4) . 2_665 ?
O19 O2 O23 68.8(4) 2_665 2_665 ?
O15 O2 O23 69.8(3) 15_565 2_665 ?
O15 O2 O23 113.0(4) . 2_665 ?
O20 O2 O23 93.3(3) . 2_665 ?
O11 O2 O23 161.3(4) . 2_665 ?
O11 O2 O23 65.0(2) 15_565 2_665 ?
Si1 O2 O23 80.9(3) . . ?
M2B O2 O23 56.7(3) . . ?
M2B O2 O23 134.3(5) 15_565 . ?
M2A O2 O23 125.1(4) 15_565 . ?
M2A O2 O23 48.2(2) . . ?
O19 O2 O23 68.8(4) . . ?
O19 O2 O23 54.0(4) 2_665 . ?
O15 O2 O23 113.0(4) 15_565 . ?
O15 O2 O23 69.8(3) . . ?
O20 O2 O23 93.3(3) . . ?
O11 O2 O23 65.0(2) . . ?
O11 O2 O23 161.3(4) 15_565 . ?
O23 O2 O23 99.7(4) 2_665 . ?
Si1 O2 Si6 59.30(19) . 15_565 ?
M2B O2 Si6 155.0(4) . 15_565 ?
M2B O2 Si6 73.0(2) 15_565 15_565 ?
M2A O2 Si6 77.05(8) 15_565 15_565 ?
M2A O2 Si6 165.6(3) . 15_565 ?
O19 O2 Si6 73.7(4) . 15_565 ?
O19 O2 Si6 86.3(4) 2_665 15_565 ?
O15 O2 Si6 26.68(17) 15_565 15_565 ?
O15 O2 Si6 79.2(3) . 15_565 ?
O20 O2 Si6 125.09(19) . 15_565 ?
O11 O2 Si6 115.3(3) . 15_565 ?
O11 O2 Si6 27.05(13) 15_565 15_565 ?
O23 O2 Si6 68.7(2) 2_665 15_565 ?
O23 O2 Si6 139.5(3) . 15_565 ?
Si5 O3 M1 128.6(3) . . ?

Si5 O3 M1 121.3(3) . 5 ?
M1 O3 M1 102.2(2) . 5 ?
Si5 O3 O7 34.6(2) . . ?
M1 O3 O7 116.7(3) . . ?
M1 O3 O7 101.3(2) 5 . ?
Si5 O3 O6 34.1(2) . 5 ?
M1 O3 O6 156.2(3) . 5 ?
M1 O3 O6 101.5(2) 5 5 ?
O7 O3 O6 59.3(2) . 5 ?
Si5 O3 O1 33.71(19) . . ?
M1 O3 O1 100.1(2) . . ?
M1 O3 O1 155.0(3) 5 . ?
O7 O3 O1 58.0(2) . . ?
O6 O3 O1 57.1(2) 5 . ?
Si5 O3 F 173.2(4) . . ?
M1 O3 F 53.70(13) . . ?
M1 O3 F 53.31(12) 5 . ?
O7 O3 F 139.1(3) . . ?
O6 O3 F 146.2(3) 5 . ?
O1 O3 F 151.6(3) . . ?
Si5 O3 O18 122.3(3) . . ?
M1 O3 O18 58.62(14) . . ?
M1 O3 O18 58.18(14) 5 . ?
O7 O3 O18 88.0(3) . . ?
O6 O3 O18 138.8(3) 5 . ?
O1 O3 O18 127.9(3) . . ?
F O3 O18 52.1(2) . . ?
Si5 O3 O9 78.1(3) . 5 ?
M1 O3 O9 122.6(2) . 5 ?
M1 O3 O9 47.63(15) 5 5 ?
O7 O3 O9 53.8(2) . 5 ?
O6 O3 O9 75.7(2) 5 5 ?
O1 O3 O9 109.8(3) . 5 ?
F O3 O9 95.3(2) . 5 ?
O18 O3 O9 64.29(19) . 5 ?
Si5 O3 O8 86.3(3) . . ?
M1 O3 O8 51.64(15) . . ?
M1 O3 O8 152.1(3) 5 . ?
O7 O3 O8 100.1(3) . . ?
O6 O3 O8 104.8(3) 5 . ?
O1 O3 O8 52.73(19) . . ?
F O3 O8 98.9(2) . . ?
O18 O3 O8 105.2(2) . . ?
O9 O3 O8 150.2(3) 5 . ?
Si5 O3 O5 82.7(3) . 5 ?
M1 O3 O5 148.7(3) . 5 ?
M1 O3 O5 51.45(15) 5 5 ?
O7 O3 O5 88.1(2) . 5 ?
O6 O3 O5 52.7(2) 5 5 ?
O1 O3 O5 109.7(3) . 5 ?
F O3 O5 95.1(2) . 5 ?
O18 O3 O5 106.9(2) . 5 ?
O9 O3 O5 55.85(18) 5 5 ?
O8 O3 O5 147.2(3) . 5 ?
Si5 O3 Si3 61.5(2) . . ?
M1 O3 Si3 113.2(2) . . ?
M1 O3 Si3 73.78(15) 5 . ?

07 03 Si3 29.27(15) . . ?
06 03 Si3 75.1(2) 5 . ?
01 03 Si3 87.2(2) . . ?
F 03 Si3 111.8(2) . . ?
O18 03 Si3 65.16(19) . . ?
09 03 Si3 28.21(12) 5 . ?
08 03 Si3 122.2(2) . . ?
05 03 Si3 78.59(17) 5 . ?
Si5 03 Si2 60.8(2) . . ?
M1 03 Si2 78.53(15) . . ?
M1 03 Si2 174.5(2) 5 . ?
07 03 Si2 82.9(2) . . ?
06 03 Si2 77.7(2) 5 . ?
01 03 Si2 27.30(14) . . ?
F 03 Si2 125.0(2) . . ?
O18 03 Si2 125.79(19) . . ?
09 03 Si2 136.4(2) 5 . ?
08 03 Si2 27.34(12) . . ?
05 03 Si2 126.0(2) 5 . ?
Si3 03 Si2 111.00(18) . . ?
Si5 03 O11 131.4(3) . . ?
M1 03 O11 43.37(15) . . ?
M1 03 O11 104.8(2) 5 . ?
07 03 O11 150.1(3) . . ?
06 03 O11 127.3(3) 5 . ?
01 03 O11 99.1(2) . . ?
F 03 O11 55.21(18) . . ?
O18 03 O11 93.6(2) . . ?
09 03 O11 150.5(3) 5 . ?
08 03 O11 50.74(18) . . ?
05 03 O11 119.7(2) 5 . ?
Si3 03 O11 156.3(2) . . ?
Si2 03 O11 71.95(16) . . ?
Si5 03 Si4 57.2(2) . 5 ?
M1 03 Si4 171.6(2) . 5 ?
M1 03 Si4 76.58(15) 5 5 ?
07 03 Si4 71.59(19) . 5 ?
06 03 Si4 25.86(15) 5 5 ?
01 03 Si4 83.0(2) . 5 ?
F 03 Si4 121.50(19) . 5 ?
O18 03 Si4 125.42(19) . 5 ?
09 03 Si4 62.84(16) 5 5 ?
08 03 Si4 127.6(2) . 5 ?
05 03 Si4 26.80(12) 5 5 ?
Si3 03 Si4 74.68(13) . 5 ?
Si2 03 Si4 101.86(16) . 5 ?
O11 03 Si4 128.6(2) . 5 ?
Si3 04 Si3 140.9(6) 16 . ?
Si3 04 O17 37.26(19) 16 23 ?
Si3 04 O17 156.9(5) . 23 ?
Si3 04 O17 156.9(5) 16 9 ?
Si3 04 O17 37.26(19) . 9 ?
O17 04 O17 131.1(4) 23 9 ?
Si3 04 O7 135.3(5) 16 . ?
Si3 04 O7 36.9(2) . . ?
O17 04 O7 165.9(4) 23 . ?
O17 04 O7 60.73(19) 9 . ?

Si3 04 07 36.9(2) 16 16 ?
Si3 04 07 135.3(5) . 16 ?
O17 04 07 60.73(19) 23 16 ?
O17 04 07 165.9(4) 9 16 ?
O7 04 07 106.5(4) . 16 ?
Si3 04 09 109.2(4) 16 5 ?
Si3 04 09 32.8(2) . 5 ?
O17 04 09 129.8(4) 23 5 ?
O17 04 09 60.7(2) 9 5 ?
O7 04 09 60.4(2) . 5 ?
O7 04 09 120.0(4) 16 5 ?
Si3 04 09 32.8(2) 16 18 ?
Si3 04 09 109.2(4) . 18 ?
O17 04 09 60.7(2) 23 18 ?
O17 04 09 129.8(4) 9 18 ?
O7 04 09 120.0(4) . 18 ?
O7 04 09 60.4(2) 16 18 ?
O9 04 09 76.7(3) 5 18 ?
Si3 04 027 103.7(4) 16 . ?
Si3 04 027 103.7(4) . . ?
O17 04 027 97.5(4) 23 . ?
O17 04 027 97.5(4) 9 . ?
O7 04 027 71.5(5) . . ?
O7 04 027 71.5(5) 16 . ?
O9 04 027 131.9(5) 5 . ?
O9 04 027 131.9(5) 18 . ?
Si3 04 024 77.0(3) 16 5 ?
Si3 04 024 77.0(3) . 5 ?
O17 04 024 81.4(2) 23 5 ?
O17 04 024 81.4(2) 9 5 ?
O7 04 024 110.0(3) . 5 ?
O7 04 024 110.0(3) 16 5 ?
O9 04 024 49.7(2) 5 5 ?
O9 04 024 49.7(2) 18 5 ?
O27 04 024 177.2(8) . 5 ?
Si3 04 M3 70.6(3) 16 5 ?
Si3 04 M3 70.6(3) . 5 ?
O17 04 M3 98.1(2) 23 5 ?
O17 04 M3 98.1(2) 9 5 ?
O7 04 M3 86.3(2) . 5 ?
O7 04 M3 86.3(2) 16 5 ?
O9 04 M3 38.84(17) 5 5 ?
O9 04 M3 38.84(17) 18 5 ?
O27 04 M3 141.8(8) . 5 ?
O24 04 M3 41.1(2) 5 5 ?
Si3 04 016 73.5(3) 16 5 ?
Si3 04 016 73.5(3) . 5 ?
O17 04 016 110.6(2) 23 5 ?
O17 04 016 110.6(2) 9 5 ?
O7 04 016 65.2(2) . 5 ?
O7 04 016 65.2(2) 16 5 ?
O9 04 016 56.2(2) 5 5 ?
O9 04 016 56.2(2) 18 5 ?
O27 04 016 103.5(8) . 5 ?
O24 04 016 79.4(3) 5 5 ?
M3 04 016 38.28(16) 5 5 ?
Si3 04 B1 74.0(3) 16 3 ?

Si3 O4 B1 122.3(4) . 3 ?
O17 O4 B1 80.7(2) 23 3 ?
O17 O4 B1 128.4(3) 9 3 ?
O7 O4 B1 85.4(3) . 3 ?
O7 O4 B1 39.8(2) 16 3 ?
O9 O4 B1 135.1(3) 5 3 ?
O9 O4 B1 100.1(2) 18 3 ?
O27 O4 B1 31.8(4) . 3 ?
O24 O4 B1 149.73(19) 5 3 ?
M3 O4 B1 118.6(2) 5 3 ?
O16 O4 B1 84.3(2) 5 3 ?
Si3 O4 B1 122.3(4) 16 . ?
Si3 O4 B1 74.0(3) . . ?
O17 O4 B1 128.4(3) 23 . ?
O17 O4 B1 80.7(2) 9 . ?
O7 O4 B1 39.8(2) . . ?
O7 O4 B1 85.4(3) 16 . ?
O9 O4 B1 100.1(2) 5 . ?
O9 O4 B1 135.1(3) 18 . ?
O27 O4 B1 31.8(4) . . ?
O24 O4 B1 149.73(19) 5 . ?
M3 O4 B1 118.6(2) 5 . ?
O16 O4 B1 84.3(2) 5 . ?
B1 O4 B1 50.9(2) 3 . ?
Si3 O4 B2 115.5(14) 16 . ?
Si3 O4 B2 76.8(12) . . ?
O17 O4 B2 126.2(12) 23 . ?
O17 O4 B2 87.4(14) 9 . ?
O7 O4 B2 40.8(11) . . ?
O7 O4 B2 78.7(14) 16 . ?
O9 O4 B2 100.0(10) 5 . ?
O9 O4 B2 127.4(13) 18 . ?
O27 O4 B2 32.9(11) . . ?
O24 O4 B2 149.3(10) 5 . ?
M3 O4 B2 113.8(10) 5 . ?
O16 O4 B2 78.0(11) 5 . ?
B1 O4 B2 46.3(13) 3 . ?
B1 O4 B2 7.8(13) . . ?
Si4 O5 M2A 126.3(3) . . ?
Si4 O5 M2B 136.9(4) . . ?
M2A O5 M2B 11.0(2) . . ?
Si4 O5 M1 132.9(3) . . ?
M2A O5 M1 100.5(2) . . ?
M2B O5 M1 90.1(3) . . ?
Si4 O5 O16 35.9(2) . . ?
M2A O5 O16 120.8(3) . . ?
M2B O5 O16 126.3(4) . . ?
M1 O5 O16 125.1(3) . . ?
Si4 O5 O6 34.7(2) . . ?
M2A O5 O6 150.6(3) . . ?
M2B O5 O6 160.0(4) . . ?
M1 O5 O6 100.7(2) . . ?
O16 O5 O6 59.8(3) . . ?
Si4 O5 O10 34.4(2) . . ?
M2A O5 O10 94.8(3) . . ?
M2B O5 O10 105.8(4) . . ?
M1 O5 O10 154.8(3) . . ?

O16 O5 O10 60.0(3) . . ?
O6 O5 O10 58.8(3) . . ?
Si4 O5 O8 147.6(4) . . ?
M2A O5 O8 61.07(19) . . ?
M2B O5 O8 51.1(3) . . ?
M1 O5 O8 57.18(18) . . ?
O16 O5 O8 111.8(3) . . ?
O6 O5 O8 148.3(3) . . ?
O10 O5 O8 147.6(3) . . ?
Si4 O5 M3 93.0(3) . . ?
M2A O5 M3 95.9(2) . . ?
M2B O5 M3 91.7(3) . . ?
M1 O5 M3 86.08(18) . . ?
O16 O5 M3 57.3(2) . . ?
O6 O5 M3 105.7(2) . . ?
O10 O5 M3 112.2(3) . . ?
O8 O5 M3 54.94(18) . . ?
Si4 O5 O11 151.4(4) . . ?
M2A O5 O11 57.38(19) . . ?
M2B O5 O11 50.5(3) . . ?
M1 O5 O11 51.48(18) . . ?
O16 O5 O11 172.7(3) . . ?
O6 O5 O11 125.8(3) . . ?
O10 O5 O11 126.2(3) . . ?
O8 O5 O11 61.0(2) . . ?
M3 O5 O11 115.4(3) . . ?
Si4 O5 O9 95.1(3) . . ?
M2A O5 O9 130.0(3) . . ?
M2B O5 O9 120.1(3) . . ?
M1 O5 O9 49.88(16) . . ?
O16 O5 O9 75.4(3) . . ?
O6 O5 O9 79.4(2) . . ?
O10 O5 O9 129.4(3) . . ?
O8 O5 O9 69.0(2) . . ?
M3 O5 O9 50.48(16) . . ?
O11 O5 O9 100.4(3) . . ?
Si4 O5 O25 97.2(3) . 9 ?
M2A O5 O25 52.42(19) . 9 ?
M2B O5 O25 54.7(3) . 9 ?
M1 O5 O25 117.6(3) . 9 ?
O16 O5 O25 72.4(3) . 9 ?
O6 O5 O25 130.5(3) . 9 ?
O10 O5 O25 87.6(3) . 9 ?
O8 O5 O25 60.9(3) . 9 ?
M3 O5 O25 51.5(2) . 9 ?
O11 O5 O25 103.1(3) . 9 ?
O9 O5 O25 101.4(3) . 9 ?
Si4 O5 O3 88.1(3) . 9 ?
M2A O5 O3 135.1(3) . 9 ?
M2B O5 O3 129.1(3) . 9 ?
M1 O5 O3 49.86(15) . 9 ?
O16 O5 O3 104.0(3) . 9 ?
O6 O5 O3 53.4(2) . 9 ?
O10 O5 O3 105.7(3) . 9 ?
O8 O5 O3 106.8(2) . 9 ?
M3 O5 O3 111.7(2) . 9 ?
O11 O5 O3 78.6(2) . 9 ?

O9 O5 O3 61.43(19) . 9 ?
O25 O5 O3 162.5(3) 9 9 ?
Si4 O5 O23 95.5(3) . . ?
M2A O5 O23 47.2(2) . . ?
M2B O5 O23 55.4(3) . . ?
M1 O5 O23 116.2(3) . . ?
O16 O5 O23 118.3(3) . . ?
O6 O5 O23 104.6(3) . . ?
O10 O5 O23 61.9(3) . . ?
O8 O5 O23 105.7(3) . . ?
M3 O5 O23 137.8(3) . . ?
O11 O5 O23 66.3(2) . . ?
O9 O5 O23 166.0(3) . . ?
O25 O5 O23 86.3(3) 9 . ?
O3 O5 O23 109.9(3) 9 . ?
Si4 O5 Si5 61.4(2) . 9 ?
M2A O5 Si5 159.5(3) . 9 ?
M2B O5 Si5 156.5(3) . 9 ?
M1 O5 Si5 72.89(15) . 9 ?
O16 O5 Si5 77.2(2) . 9 ?
O6 O5 Si5 27.77(15) . 9 ?
O10 O5 Si5 85.8(2) . 9 ?
O8 O5 Si5 124.6(2) . 9 ?
M3 O5 Si5 102.90(18) . 9 ?
O11 O5 Si5 106.1(2) . 9 ?
O9 O5 Si5 60.65(17) . 9 ?
O25 O5 Si5 147.9(3) 9 9 ?
O3 O5 Si5 27.87(13) 9 9 ?
O23 O5 Si5 117.4(3) . 9 ?
Si4 O6 Si5 134.0(4) . 9 ?
Si4 O6 O1 169.4(4) . 9 ?
Si5 O6 O1 37.7(2) 9 9 ?
Si4 O6 O10 36.3(2) . . ?
Si5 O6 O10 158.4(4) 9 . ?
O1 O6 O10 147.1(3) 9 . ?
Si4 O6 O16 36.1(3) . . ?
Si5 O6 O16 125.3(4) 9 . ?
O1 O6 O16 149.2(4) 9 . ?
O10 O6 O16 60.6(3) . . ?
Si4 O6 O7 117.9(3) . 9 ?
Si5 O6 O7 35.5(2) 9 9 ?
O1 O6 O7 59.7(2) 9 9 ?
O10 O6 O7 153.2(3) . 9 ?
O16 O6 O7 93.5(3) . 9 ?
Si4 O6 O5 34.0(2) . . ?
Si5 O6 O5 102.6(3) 9 . ?
O1 O6 O5 135.4(3) 9 . ?
O10 O6 O5 60.7(2) . . ?
O16 O6 O5 59.7(3) . . ?
O7 O6 O5 101.4(3) 9 . ?
Si4 O6 O3 108.0(3) . 9 ?
Si5 O6 O3 33.6(2) 9 9 ?
O1 O6 O3 61.6(2) 9 9 ?
O10 O6 O3 124.9(3) . 9 ?
O16 O6 O3 120.6(3) . 9 ?
O7 O6 O3 60.1(2) 9 9 ?
O5 O6 O3 74.0(2) . 9 ?

Si4 O6 O6 87.2(2) . 16_655 ?
Si5 O6 O6 134.8(2) 9 16_655 ?
O1 O6 O6 98.78(19) 9 16_655 ?
O10 O6 O6 51.36(18) . 16_655 ?
O16 O6 O6 98.6(2) . 16_655 ?
O7 O6 O6 149.22(19) 9 16_655 ?
O5 O6 O6 109.15(18) . 16_655 ?
O3 O6 O6 132.08(19) 9 16_655 ?
Si4 O6 A1 90.4(3) . 9 ?
Si5 O6 A1 94.6(3) 9 9 ?
O1 O6 A1 84.7(2) 9 9 ?
O10 O6 A1 69.8(2) . 9 ?
O16 O6 A1 126.0(3) . 9 ?
O7 O6 A1 129.6(2) 9 9 ?
O5 O6 A1 78.8(2) . 9 ?
O3 O6 A1 72.23(19) 9 9 ?
O6 O6 A1 62.23(10) 16_655 9 ?
Si4 O6 Si4 60.2(2) . 16_655 ?
Si5 O6 Si4 158.1(3) 9 16_655 ?
O1 O6 Si4 125.4(2) 9 16_655 ?
O10 O6 Si4 24.70(14) . 16_655 ?
O16 O6 Si4 76.3(2) . 16_655 ?
O7 O6 Si4 163.6(3) 9 16_655 ?
O5 O6 Si4 84.8(2) . 16_655 ?
O3 O6 Si4 136.3(3) 9 16_655 ?
O6 O6 Si4 26.98(11) 16_655 16_655 ?
A1 O6 Si4 66.32(12) 9 16_655 ?
Si4 O6 O9 73.3(2) . . ?
Si5 O6 O9 63.9(2) 9 . ?
O1 O6 O9 100.6(2) 9 . ?
O10 O6 O9 109.4(2) . . ?
O16 O6 O9 64.9(2) . . ?
O7 O6 O9 47.65(19) 9 . ?
O5 O6 O9 54.40(19) . . ?
O3 O6 O9 58.3(2) 9 . ?
O6 O6 O9 160.50(14) 16_655 . ?
A1 O6 O9 117.88(19) 9 . ?
Si4 O6 O9 133.5(2) 16_655 . ?
Si4 O6 M1 71.7(2) . . ?
Si5 O6 M1 63.8(2) 9 . ?
O1 O6 M1 98.3(2) 9 . ?
O10 O6 M1 98.4(2) . . ?
O16 O6 M1 85.1(2) . . ?
O7 O6 M1 70.42(18) 9 . ?
O5 O6 M1 38.81(15) . . ?
O3 O6 M1 37.65(15) 9 . ?
O6 O6 M1 138.52(9) 16_655 . ?
A1 O6 M1 82.14(12) 9 . ?
Si4 O6 M1 120.55(17) 16_655 . ?
O9 O6 M1 35.74(11) . . ?
Si4 O6 O13 139.7(3) . 9 ?
Si5 O6 O13 69.0(2) 9 9 ?
O1 O6 O13 39.12(18) 9 9 ?
O10 O6 O13 108.4(2) . 9 ?
O16 O6 O13 164.8(3) . 9 ?
O7 O6 O13 98.3(2) 9 9 ?
O5 O6 O13 126.4(3) . 9 ?

O3 O6 O13 74.0(2) 9 9 ?
O6 O6 O13 66.43(10) 16_655 9 ?
A1 O6 O13 50.89(14) 9 9 ?
Si4 O6 O13 89.94(15) 16_655 9 ?
O9 O6 O13 130.4(2) . 9 ?
M1 O6 O13 107.91(16) . 9 ?
Si4 O6 B2 145.7(15) . 9 ?
Si5 O6 B2 61.4(17) 9 9 ?
O1 O6 B2 42.7(15) 9 9 ?
O10 O6 B2 139.3(17) . 9 ?
O16 O6 B2 110.0(15) . 9 ?
O7 O6 B2 52.7(17) 9 9 ?
O5 O6 B2 153.2(17) . 9 ?
O3 O6 B2 94.7(17) 9 9 ?
O6 O6 B2 96.5(17) 16_655 9 ?
A1 O6 B2 121.5(15) 9 9 ?
Si4 O6 B2 118.3(17) 16_655 9 ?
O9 O6 B2 98.9(17) . 9 ?
M1 O6 B2 121.1(17) . 9 ?
O13 O6 B2 70.6(15) 9 9 ?
Si5 O7 Si3 127.0(4) . . ?
Si5 O7 O1 36.8(2) . . ?
Si3 O7 O1 159.5(4) . . ?
Si5 O7 O4 150.2(4) . . ?
Si3 O7 O4 36.1(2) . . ?
O1 O7 O4 164.3(3) . . ?
Si5 O7 O17 126.3(3) . 9 ?
Si3 O7 O17 36.1(2) . 9 ?
O1 O7 O17 133.5(3) . 9 ?
O4 O7 O17 58.8(2) . 9 ?
Si5 O7 O6 35.4(2) . 5 ?
Si3 O7 O6 117.3(3) . 5 ?
O1 O7 O6 58.6(2) . 5 ?
O4 O7 O6 119.5(3) . 5 ?
O17 O7 O6 142.3(3) 9 5 ?
Si5 O7 O3 34.0(2) . . ?
Si3 O7 O3 98.6(3) . . ?
O1 O7 O3 61.4(2) . . ?
O4 O7 O3 133.1(3) . . ?
O17 O7 O3 92.5(3) 9 . ?
O6 O7 O3 60.6(2) 5 . ?
Si5 O7 O9 94.7(3) . 5 ?
Si3 O7 O9 33.8(2) . 5 ?
O1 O7 O9 131.2(3) . 5 ?
O4 O7 O9 61.0(3) . 5 ?
O17 O7 O9 60.3(2) 9 5 ?
O6 O7 O9 85.4(3) 5 5 ?
O3 O7 O9 72.8(2) . 5 ?
Si5 O7 B1 95.9(3) . . ?
Si3 O7 B1 136.9(4) . . ?
O1 O7 B1 60.4(2) . . ?
O4 O7 B1 106.6(3) . . ?
O17 O7 B1 117.7(3) 9 . ?
O6 O7 B1 99.2(3) 5 . ?
O3 O7 B1 119.9(3) . . ?
O9 O7 B1 167.2(3) 5 . ?
Si5 O7 B2 90.0(19) . . ?

Si3 07 B2 142.5(19) . . ?
O1 07 B2 56.9(19) . . ?
O4 07 B2 108.5(19) . . ?
O17 07 B2 128.7(18) 9 . ?
O6 07 B2 88.7(18) 5 . ?
O3 07 B2 118.3(19) . . ?
O9 07 B2 162.3(19) 5 . ?
B1 07 B2 11.5(17) . . ?
Si5 07 O24 91.3(4) . . ?
Si3 07 O24 120.3(4) . . ?
O1 07 O24 60.4(3) . . ?
O4 07 O24 118.3(4) . . ?
O17 07 O24 85.2(3) 9 . ?
O6 07 O24 119.0(4) 5 . ?
O3 07 O24 92.2(3) . . ?
O9 07 O24 140.8(4) 5 . ?
B1 07 O24 46.0(3) . . ?
B2 07 O24 55.8(19) . . ?
Si5 07 O27 136.6(7) . . ?
Si3 07 O27 95.6(7) . . ?
O1 07 O27 103.1(6) . . ?
O4 07 O27 63.7(5) . . ?
O17 07 O27 92.0(8) 9 . ?
O6 07 O27 122.2(7) 5 . ?
O3 07 O27 161.4(3) . . ?
O9 07 O27 124.7(5) 5 . ?
B1 07 O27 43.0(5) . . ?
B2 07 O27 47(2) . . ?
O24 07 O27 70.2(3) . . ?
Si5 07 O16 76.5(3) . 5 ?
Si3 07 O16 82.2(3) . 5 ?
O1 07 O16 100.4(3) . 5 ?
O4 07 O16 76.4(2) . 5 ?
O17 07 O16 117.6(3) 9 5 ?
O6 07 O16 43.12(19) 5 5 ?
O3 07 O16 88.3(2) . 5 ?
O9 07 O16 60.7(2) 5 5 ?
B1 07 O16 115.2(3) . 5 ?
B2 07 O16 104.2(18) . 5 ?
O24 07 O16 157.1(3) . 5 ?
O27 07 O16 105.5(4) . 5 ?
Si5 07 O18 83.1(3) . . ?
Si3 07 O18 60.0(2) . . ?
O1 07 O18 100.6(2) . . ?
O4 07 O18 94.9(2) . . ?
O17 07 O18 43.2(2) 9 . ?
O6 07 O18 105.7(3) 5 . ?
O3 07 O18 49.3(2) . . ?
O9 07 O18 55.66(17) 5 . ?
B1 07 O18 132.9(3) . . ?
B2 07 O18 142.0(19) . . ?
O24 07 O18 86.9(3) . . ?
O27 07 O18 132.1(7) . . ?
O16 07 O18 110.4(2) 5 . ?
Si5 07 M1 64.3(2) . 5 ?
Si3 07 M1 63.1(2) . 5 ?
O1 07 M1 98.1(2) . 5 ?

O4 O7 M1 95.5(2) . 5 ?
O17 O7 M1 71.81(19) 9 5 ?
O6 O7 M1 71.00(18) 5 5 ?
O3 O7 M1 37.83(15) . 5 ?
O9 O7 M1 35.00(15) 5 5 ?
B1 O7 M1 157.7(3) . 5 ?
B2 O7 M1 154.3(19) . 5 ?
O24 O7 M1 120.4(3) . 5 ?
O27 O7 M1 158.7(6) . 5 ?
O16 O7 M1 71.90(16) 5 5 ?
O18 O7 M1 39.77(12) . 5 ?
Si2 O8 M2B 123.4(4) . . ?
Si2 O8 M1 132.9(3) . . ?
M2B O8 M1 93.6(3) . . ?
Si2 O8 M3 104.9(3) . . ?
M2B O8 M3 102.6(3) . . ?
M1 O8 M3 92.2(2) . . ?
Si2 O8 O12 35.2(2) . . ?
M2B O8 O12 120.5(4) . . ?
M1 O8 O12 144.4(3) . . ?
M3 O8 O12 71.8(2) . . ?
Si2 O8 M2A 126.1(3) . . ?
M2B O8 M2A 6.1(2) . . ?
M1 O8 M2A 93.9(2) . . ?
M3 O8 M2A 96.5(2) . . ?
O12 O8 M2A 118.8(3) . . ?
Si2 O8 O1 35.2(2) . . ?
M2B O8 O1 148.6(4) . . ?
M1 O8 O1 98.2(2) . . ?
M3 O8 O1 105.9(3) . . ?
O12 O8 O1 58.6(3) . . ?
M2A O8 O1 154.0(3) . . ?
Si2 O8 O13 33.7(2) . . ?
M2B O8 O13 92.4(4) . . ?
M1 O8 O13 134.9(3) . . ?
M3 O8 O13 129.7(3) . . ?
O12 O8 O13 59.4(3) . . ?
M2A O8 O13 96.5(3) . . ?
O1 O8 O13 59.0(2) . . ?
Si2 O8 O5 167.3(4) . . ?
M2B O8 O5 56.0(3) . . ?
M1 O8 O5 57.38(17) . . ?
M3 O8 O5 64.62(19) . . ?
O12 O8 O5 132.4(3) . . ?
M2A O8 O5 51.91(17) . . ?
O1 O8 O5 151.5(3) . . ?
O13 O8 O5 148.4(3) . . ?
Si2 O8 O11 129.4(4) . . ?
M2B O8 O11 51.6(3) . . ?
M1 O8 O11 51.77(18) . . ?
M3 O8 O11 125.7(3) . . ?
O12 O8 O11 160.3(3) . . ?
M2A O8 O11 55.38(19) . . ?
O1 O8 O11 117.0(3) . . ?
O13 O8 O11 101.3(3) . . ?
O5 O8 O11 61.7(2) . . ?
Si2 O8 O25 102.7(3) . 9 ?

M2B 08 025 57.8(3) . 9 ?
M1 08 025 122.6(3) . 9 ?
M3 08 025 55.2(2) . 9 ?
O12 08 025 74.4(3) . 9 ?
M2A 08 025 52.80(18) . 9 ?
O1 08 025 133.0(3) . 9 ?
O13 08 025 98.0(3) . 9 ?
O5 08 025 65.8(3) . 9 ?
O11 08 025 106.9(3) . 9 ?
Si2 08 03 85.4(3) . . ?
M2B 08 03 120.4(4) . . ?
M1 08 03 48.73(15) . . ?
M3 08 03 119.8(2) . . ?
O12 08 03 111.8(3) . . ?
M2A 08 03 124.7(3) . . ?
O1 08 03 53.6(2) . . ?
O13 08 03 90.6(3) . . ?
O5 08 03 105.8(2) . . ?
O11 08 03 69.5(2) . . ?
O25 08 03 171.2(3) 9 . ?
Si2 08 09 120.8(3) . . ?
M2B 08 09 114.6(3) . . ?
M1 08 09 46.13(15) . . ?
M3 08 09 48.88(16) . . ?
O12 08 09 104.7(3) . . ?
M2A 08 09 110.6(2) . . ?
O1 08 09 94.2(2) . . ?
O13 08 09 152.9(3) . . ?
O5 08 09 58.7(2) . . ?
O11 08 09 94.6(2) . . ?
O25 08 09 98.2(3) 9 . ?
O3 08 09 74.5(2) . . ?
Si2 08 020 80.8(3) . . ?
M2B 08 020 47.0(3) . . ?
M1 08 020 140.5(3) . . ?
M3 08 020 97.9(2) . . ?
O12 08 020 74.5(3) . . ?
M2A 08 020 47.17(19) . . ?
O1 08 020 115.2(3) . . ?
O13 08 020 59.4(2) . . ?
O5 08 020 93.1(2) . . ?
O11 08 020 92.7(3) . . ?
O25 08 020 44.4(3) 9 . ?
O3 08 020 142.1(3) . . ?
O9 08 020 142.1(3) . . ?
Si2 08 Si5 60.0(2) . . ?
M2B 08 Si5 141.3(4) . . ?
M1 08 Si5 72.91(15) . . ?
M3 08 Si5 113.8(2) . . ?
O12 08 Si5 84.5(2) . . ?
M2A 08 Si5 147.0(2) . . ?
O1 08 Si5 26.40(14) . . ?
O13 08 Si5 74.7(2) . . ?
O5 08 Si5 129.7(2) . . ?
O11 08 Si5 94.5(2) . . ?
O25 08 Si5 158.4(3) 9 . ?
O3 08 Si5 27.29(13) . . ?

09 08 Si5 82.33(18) . . ?
O20 08 Si5 134.1(2) . . ?
Si3 09 M1 127.3(3) 9 . ?
Si3 09 M3 129.9(3) 9 . ?
M1 09 M3 99.3(2) . . ?
Si3 09 O17 34.4(2) 9 5 ?
M1 09 O17 106.6(3) . 5 ?
M3 09 O17 151.6(3) . 5 ?
Si3 09 O7 35.2(2) 9 9 ?
M1 09 O7 104.6(3) . 9 ?
M3 09 O7 125.0(3) . 9 ?
O17 09 O7 59.1(2) 5 9 ?
Si3 09 O4 33.44(19) 9 9 ?
M1 09 O4 160.7(3) . 9 ?
M3 09 O4 98.7(2) . 9 ?
O17 09 O4 57.7(2) 5 9 ?
O7 09 O4 58.7(2) 9 9 ?
Si3 09 O24 111.1(4) 9 . ?
M1 09 O24 109.5(3) . . ?
M3 09 O24 59.7(3) . . ?
O17 09 O24 100.0(4) 5 . ?
O7 09 O24 144.2(4) 9 . ?
O4 09 O24 85.8(3) 9 . ?
Si3 09 O5 127.0(4) 9 . ?
M1 09 O5 55.63(17) . . ?
M3 09 O5 62.33(19) . . ?
O17 09 O5 143.8(3) 5 . ?
O7 09 O5 92.6(3) 9 . ?
O4 09 O5 129.2(3) 9 . ?
O24 09 O5 115.4(4) . . ?
Si3 09 O3 81.8(3) 9 9 ?
M1 09 O3 51.22(16) . 9 ?
M3 09 O3 124.8(3) . 9 ?
O17 09 O3 81.5(2) 5 9 ?
O7 09 O3 53.5(2) 9 9 ?
O4 09 O3 111.7(3) 9 9 ?
O24 09 O3 159.3(3) . 9 ?
O5 09 O3 62.7(2) . 9 ?
Si3 09 Si5 64.5(2) 9 9 ?
M1 09 Si5 78.15(17) . 9 ?
M3 09 Si5 117.1(2) . 9 ?
O17 09 Si5 80.2(2) 5 9 ?
O7 09 Si5 29.97(15) 9 9 ?
O4 09 Si5 87.4(2) 9 9 ?
O24 09 Si5 171.8(3) . 9 ?
O5 09 Si5 65.98(18) . 9 ?
O3 09 Si5 28.90(13) 9 9 ?
Si3 09 O8 178.2(4) 9 . ?
M1 09 O8 50.94(16) . . ?
M3 09 O8 51.59(16) . . ?
O17 09 O8 144.8(3) 5 . ?
O7 09 O8 143.7(3) 9 . ?
O4 09 O8 148.3(3) 9 . ?
O24 09 O8 70.3(3) . . ?
O5 09 O8 52.25(19) . . ?
O3 09 O8 96.5(2) 9 . ?
Si5 09 O8 114.2(2) 9 . ?

Si3 09 018 81.2(3) 9 . ?
M1 09 018 54.2(2) . . ?
M3 09 018 148.6(3) . . ?
O17 09 018 52.8(2) 5 . ?
O7 09 018 81.9(2) 9 . ?
O4 09 018 110.3(3) 9 . ?
O24 09 018 109.5(3) . . ?
O5 09 018 105.0(3) . . ?
O3 09 018 55.03(18) 9 . ?
Si5 09 018 77.20(15) 9 . ?
O8 09 018 97.4(2) . . ?
Si3 09 09 84.8(2) 9 14 ?
M1 09 09 147.14(15) . 14 ?
M3 09 09 48.05(14) . 14 ?
O17 09 09 104.84(19) 5 14 ?
O7 09 09 99.39(19) 9 14 ?
O4 09 09 51.64(17) 9 14 ?
O24 09 09 55.2(2) . 14 ?
O5 09 09 101.64(17) . 14 ?
O3 09 09 144.65(16) 9 14 ?
Si5 09 09 116.70(12) 9 14 ?
O8 09 09 96.90(15) . 14 ?
O18 09 09 153.2(2) . 14 ?
Si3 09 Si7 61.6(2) 9 . ?
M1 09 Si7 81.54(18) . . ?
M3 09 Si7 155.8(3) . . ?
O17 09 Si7 28.12(15) 5 . ?
O7 09 Si7 77.3(2) 9 . ?
O4 09 Si7 85.0(2) 9 . ?
O24 09 Si7 97.0(3) . . ?
O5 09 Si7 132.2(2) . . ?
O3 09 Si7 74.50(17) 9 . ?
Si5 09 Si7 86.95(15) 9 . ?
O8 09 Si7 117.4(2) . . ?
O18 09 Si7 27.84(19) . . ?
O9 09 Si7 126.02(12) 14 . ?
Si3 09 016 97.1(3) 9 . ?
M1 09 016 103.1(2) . . ?
M3 09 016 49.80(19) . . ?
O17 09 016 131.3(3) 5 . ?
O7 09 016 76.7(3) 9 . ?
O4 09 016 83.3(3) 9 . ?
O24 09 016 105.3(3) . . ?
O5 09 016 47.62(19) . . ?
O3 09 016 88.3(2) 9 . ?
Si5 09 016 69.32(18) 9 . ?
O8 09 016 83.4(2) . . ?
O18 09 016 143.3(2) . . ?
O9 09 016 61.02(12) 14 . ?
Si7 09 016 153.9(3) . . ?
Si4 010 Si4 146.4(6) 16_655 . ?
Si4 010 O6 36.4(2) 16_655 16_655 ?
Si4 010 O6 113.0(4) . 16_655 ?
Si4 010 O6 113.0(4) 16_655 . ?
Si4 010 O6 36.4(2) . . ?
O6 010 O6 77.3(4) 16_655 . ?
Si4 010 O16 130.8(5) 16_655 . ?

Si4 O10 O16 35.7(2) . . ?
O6 O10 O16 117.2(4) 16_655 . ?
O6 O10 O16 60.2(2) . . ?
Si4 O10 O16 35.7(2) 16_655 3_655 ?
Si4 O10 O16 130.8(5) . 3_655 ?
O6 O10 O16 60.2(2) 16_655 3_655 ?
O6 O10 O16 117.2(4) . 3_655 ?
O16 O10 O16 99.8(4) . 3_655 ?
Si4 O10 O5 33.8(2) 16_655 16_655 ?
Si4 O10 O5 165.3(5) . 16_655 ?
O6 O10 O5 60.4(2) 16_655 16_655 ?
O6 O10 O5 132.8(4) . 16_655 ?
O16 O10 O5 158.2(4) . 16_655 ?
O16 O10 O5 59.5(2) 3_655 16_655 ?
Si4 O10 O5 165.3(5) 16_655 . ?
Si4 O10 O5 33.8(2) . . ?
O6 O10 O5 132.8(4) 16_655 . ?
O6 O10 O5 60.4(2) . . ?
O16 O10 O5 59.5(2) . . ?
O16 O10 O5 158.2(4) 3_655 . ?
O5 O10 O5 139.9(4) 16_655 . ?
Si4 O10 O10 89.1(3) 16_655 14 ?
Si4 O10 O10 89.1(3) . 14 ?
O6 O10 O10 105.5(2) 16_655 14 ?
O6 O10 O10 105.5(2) . 14 ?
O16 O10 O10 53.42(19) . 14 ?
O16 O10 O10 53.42(19) 3_655 14 ?
O5 O10 O10 105.2(2) 16_655 14 ?
O5 O10 O10 105.2(2) . 14 ?
Si4 O10 O23 103.0(3) 16_655 . ?
Si4 O10 O23 103.0(3) . . ?
O6 O10 O23 111.7(3) 16_655 . ?
O6 O10 O23 111.7(3) . . ?
O16 O10 O23 125.4(3) . . ?
O16 O10 O23 125.4(3) 3_655 . ?
O5 O10 O23 70.1(2) 16_655 . ?
O5 O10 O23 70.1(2) . . ?
O10 O10 O23 131.7(3) 14 . ?
Si4 O10 O21 106.6(3) 16_655 . ?
Si4 O10 O21 106.6(3) . . ?
O6 O10 O21 139.2(2) 16_655 . ?
O6 O10 O21 139.2(2) . . ?
O16 O10 O21 100.6(3) . . ?
O16 O10 O21 100.6(3) 3_655 . ?
O5 O10 O21 78.7(2) 16_655 . ?
O5 O10 O21 78.7(2) . . ?
O10 O10 O21 84.3(3) 14 . ?
O23 O10 O21 47.4(3) . . ?
Si4 O10 Si4 111.7(4) 16_655 14 ?
Si4 O10 Si4 61.8(3) . 14 ?
O6 O10 Si4 114.5(3) 16_655 14 ?
O6 O10 Si4 82.3(2) . 14 ?
O16 O10 Si4 26.08(15) . 14 ?
O16 O10 Si4 77.0(2) 3_655 14 ?
O5 O10 Si4 132.5(3) 16_655 14 ?
O5 O10 Si4 81.30(19) . 14 ?
O10 O10 Si4 27.35(8) 14 14 ?

O23 O10 Si4 133.6(3) . 14 ?
O21 O10 Si4 92.5(3) . 14 ?
Si4 O10 Si4 61.8(3) 16_655 3_655 ?
Si4 O10 Si4 111.7(4) . 3_655 ?
O6 O10 Si4 82.3(2) 16_655 3_655 ?
O6 O10 Si4 114.5(3) . 3_655 ?
O16 O10 Si4 77.0(2) . 3_655 ?
O16 O10 Si4 26.08(15) 3_655 3_655 ?
O5 O10 Si4 81.30(19) 16_655 3_655 ?
O5 O10 Si4 132.5(3) . 3_655 ?
O10 O10 Si4 27.35(8) 14 3_655 ?
O23 O10 Si4 133.6(3) . 3_655 ?
O21 O10 Si4 92.5(3) . 3_655 ?
Si4 O10 Si4 52.19(14) 14 3_655 ?
Si4 O10 A1 87.9(3) 16_655 9 ?
Si4 O10 A1 87.9(3) . 9 ?
O6 O10 A1 66.9(2) 16_655 9 ?
O6 O10 A1 66.9(2) . 9 ?
O16 O10 A1 122.9(2) . 9 ?
O16 O10 A1 122.9(2) 3_655 9 ?
O5 O10 A1 77.4(2) 16_655 9 ?
O5 O10 A1 77.4(2) . 9 ?
O10 O10 A1 169.82(14) 14 9 ?
O23 O10 A1 58.5(3) . 9 ?
O21 O10 A1 105.9(3) . 9 ?
Si4 O10 A1 148.30(17) 14 9 ?
Si4 O10 A1 148.30(17) 3_655 9 ?
Si4 O10 M2A 71.8(2) 16_655 16_655 ?
Si4 O10 M2A 140.6(4) . 16_655 ?
O6 O10 M2A 99.00(17) 16_655 16_655 ?
O6 O10 M2A 149.8(3) . 16_655 ?
O16 O10 M2A 140.7(4) . 16_655 ?
O16 O10 M2A 84.6(2) 3_655 16_655 ?
O5 O10 M2A 39.48(17) 16_655 16_655 ?
O5 O10 M2A 107.1(3) . 16_655 ?
O10 O10 M2A 104.34(13) 14 16_655 ?
O23 O10 M2A 41.31(15) . 16_655 ?
O21 O10 M2A 40.78(14) . 16_655 ?
Si4 O10 M2A 125.0(2) 14 16_655 ?
Si4 O10 M2A 94.28(14) 3_655 16_655 ?
A1 O10 M2A 83.98(17) 9 16_655 ?
Si6 O11 M2B 134.5(5) . . ?
Si6 O11 M1 127.7(4) . . ?
M2B O11 M1 97.0(3) . . ?
Si6 O11 M2A 129.7(4) . . ?
M2B O11 M2A 8.8(2) . . ?
M1 O11 M2A 99.8(2) . . ?
Si6 O11 O15 35.7(2) . . ?
M2B O11 O15 99.1(4) . . ?
M1 O11 O15 163.2(3) . . ?
M2A O11 O15 95.4(3) . . ?
Si6 O11 O14 35.0(2) . . ?
M2B O11 O14 135.6(4) . . ?
M1 O11 O14 104.6(3) . . ?
M2A O11 O14 126.9(3) . . ?
O15 O11 O14 60.0(3) . . ?
Si6 O11 O14 32.8(2) . 5 ?

M2B O11 O14 145.7(4) . 5 ?
M1 O11 O14 109.4(3) . 5 ?
M2A O11 O14 147.8(3) . 5 ?
O15 O11 O14 57.9(3) . 5 ?
O14 O11 O14 58.4(3) . 5 ?
Si6 O11 O8 160.8(5) . . ?
M2B O11 O8 50.2(3) . . ?
M1 O11 O8 57.25(19) . . ?
M2A O11 O8 57.50(18) . . ?
O15 O11 O8 138.7(3) . . ?
O14 O11 O8 160.8(4) . . ?
O14 O11 O8 130.0(3) 5 . ?
Si6 O11 O5 141.9(5) . . ?
M2B O11 O5 53.5(3) . . ?
M1 O11 O5 57.09(18) . . ?
M2A O11 O5 50.92(17) . . ?
O15 O11 O5 131.5(4) . . ?
O14 O11 O5 109.0(3) . . ?
O14 O11 O5 160.8(3) 5 . ?
O8 O11 O5 57.3(2) . . ?
Si6 O11 F 74.9(3) . . ?
M2B O11 F 149.9(4) . . ?
M1 O11 F 53.0(2) . . ?
M2A O11 F 151.0(3) . . ?
O15 O11 F 110.6(3) . . ?
O14 O11 F 61.9(2) . . ?
O14 O11 F 61.2(2) 5 . ?
O8 O11 F 105.1(3) . . ?
O5 O11 F 100.6(3) . . ?
Si6 O11 O2 89.8(3) . . ?
M2B O11 O2 48.9(3) . . ?
M1 O11 O2 141.6(3) . . ?
M2A O11 O2 49.7(2) . . ?
O15 O11 O2 55.1(3) . . ?
O14 O11 O2 112.6(3) . . ?
O14 O11 O2 98.1(3) 5 . ?
O8 O11 O2 84.6(3) . . ?
O5 O11 O2 100.5(3) . . ?
F O11 O2 158.8(3) . . ?
Si6 O11 Si1 62.3(2) . . ?
M2B O11 Si1 73.8(3) . . ?
M1 O11 Si1 169.4(3) . . ?
M2A O11 Si1 71.97(17) . . ?
O15 O11 Si1 27.17(18) . . ?
O14 O11 Si1 85.8(2) . . ?
O14 O11 Si1 77.3(2) 5 . ?
O8 O11 Si1 112.2(3) . . ?
O5 O11 Si1 118.3(3) . . ?
F O11 Si1 136.2(3) . . ?
O2 O11 Si1 27.92(18) . . ?
Si6 O11 O23 91.6(4) . . ?
M2B O11 O23 54.3(3) . . ?
M1 O11 O23 118.9(3) . . ?
M2A O11 O23 45.7(2) . . ?
O15 O11 O23 68.0(3) . . ?
O14 O11 O23 81.3(3) . . ?
O14 O11 O23 123.2(3) 5 . ?

O8 O11 O23 101.4(3) . . ?
O5 O11 O23 63.5(3) . . ?
F O11 O23 133.3(3) . . ?
O2 O11 O23 60.2(3) . . ?
Si1 O11 O23 60.3(2) . . ?
Si6 O11 O3 109.0(3) . . ?
M2B O11 O3 109.4(4) . . ?
M1 O11 O3 44.81(16) . . ?
M2A O11 O3 117.2(3) . . ?
O15 O11 O3 131.7(3) . . ?
O14 O11 O3 113.3(3) . . ?
O14 O11 O3 77.6(3) 5 . ?
O8 O11 O3 59.8(2) . . ?
O5 O11 O3 96.7(2) . . ?
F O11 O3 53.25(18) . . ?
O2 O11 O3 121.6(3) . . ?
Si1 O11 O3 132.6(3) . . ?
O23 O11 O3 159.1(3) . . ?
Si6 O11 O3 103.6(3) . 9 ?
M2B O11 O3 107.9(3) . 9 ?
M1 O11 O3 38.68(15) . 9 ?
M2A O11 O3 104.8(2) . 9 ?
O15 O11 O3 129.8(3) . 9 ?
O14 O11 O3 71.3(2) . 9 ?
O14 O11 O3 106.4(3) 5 9 ?
O8 O11 O3 89.6(2) . 9 ?
O5 O11 O3 54.36(19) . 9 ?
F O11 O3 48.50(16) . 9 ?
O2 O11 O3 152.1(3) . 9 ?
Si1 O11 O3 148.8(3) . 9 ?
O23 O11 O3 94.6(3) . 9 ?
O3 O11 O3 77.4(2) . 9 ?
Si2 O12 Si2 173.5(7) . 14 ?
Si2 O12 O1 37.5(2) . . ?
Si2 O12 O1 146.0(5) 14 . ?
Si2 O12 O1 146.0(5) . 14 ?
Si2 O12 O1 37.5(2) 14 14 ?
O1 O12 O1 108.7(4) . 14 ?
Si2 O12 O8 138.7(5) . 14 ?
Si2 O12 O8 34.9(2) 14 14 ?
O1 O12 O8 143.0(4) . 14 ?
O1 O12 O8 61.3(2) 14 14 ?
Si2 O12 O8 34.9(2) . . ?
Si2 O12 O8 138.7(5) 14 . ?
O1 O12 O8 61.3(2) . . ?
O1 O12 O8 143.0(4) 14 . ?
O8 O12 O8 103.8(4) 14 . ?
Si2 O12 O13 35.8(2) . . ?
Si2 O12 O13 146.7(5) 14 . ?
O1 O12 O13 60.7(2) . . ?
O1 O12 O13 148.3(5) 14 . ?
O8 O12 O13 145.7(4) 14 . ?
O8 O12 O13 61.82(19) . . ?
Si2 O12 O13 146.7(5) . 14 ?
Si2 O12 O13 35.8(2) 14 14 ?
O1 O12 O13 148.3(5) . 14 ?
O1 O12 O13 60.7(2) 14 14 ?

O8 O12 O13 61.82(19) 14 14 ?
O8 O12 O13 145.7(4) . 14 ?
O13 O12 O13 111.1(4) . 14 ?
Si2 O12 O12 91.9(3) . 15_565 ?
Si2 O12 O12 91.9(3) 14 15_565 ?
O1 O12 O12 102.5(2) . 15_565 ?
O1 O12 O12 102.5(2) 14 15_565 ?
O8 O12 O12 114.3(2) 14 15_565 ?
O8 O12 O12 114.3(2) . 15_565 ?
O13 O12 O12 56.34(19) . 15_565 ?
O13 O12 O12 56.34(19) 14 15_565 ?
Si2 O12 O24 89.2(3) . . ?
Si2 O12 O24 89.2(3) 14 . ?
O1 O12 O24 66.4(3) . . ?
O1 O12 O24 66.4(3) 14 . ?
O8 O12 O24 77.6(3) 14 . ?
O8 O12 O24 77.6(3) . . ?
O13 O12 O24 123.8(2) . . ?
O13 O12 O24 123.8(2) 14 . ?
O12 O12 O24 158.4(3) 15_565 . ?
Si2 O12 M3 87.0(3) . . ?
Si2 O12 M3 87.0(3) 14 . ?
O1 O12 M3 95.6(3) . . ?
O1 O12 M3 95.6(3) 14 . ?
O8 O12 M3 53.8(2) 14 . ?
O8 O12 M3 53.8(2) . . ?
O13 O12 M3 114.5(3) . . ?
O13 O12 M3 114.5(3) 14 . ?
O12 O12 M3 148.62(17) 15_565 . ?
O24 O12 M3 52.9(3) . . ?
Si2 O12 Si2 63.5(3) . 15_565 ?
Si2 O12 Si2 120.1(4) 14 15_565 ?
O1 O12 Si2 79.4(2) . 15_565 ?
O1 O12 Si2 126.0(3) 14 15_565 ?
O8 O12 Si2 136.5(3) 14 15_565 ?
O8 O12 Si2 88.83(19) . 15_565 ?
O13 O12 Si2 28.20(14) . 15_565 ?
O13 O12 Si2 84.3(3) 14 15_565 ?
O12 O12 Si2 28.33(8) 15_565 15_565 ?
O24 O12 Si2 145.8(2) . 15_565 ?
M3 O12 Si2 137.7(2) . 15_565 ?
Si2 O12 Si2 120.1(4) . 4_565 ?
Si2 O12 Si2 63.5(3) 14 4_565 ?
O1 O12 Si2 126.0(3) . 4_565 ?
O1 O12 Si2 79.4(2) 14 4_565 ?
O8 O12 Si2 88.83(19) 14 4_565 ?
O8 O12 Si2 136.5(3) . 4_565 ?
O13 O12 Si2 84.3(3) . 4_565 ?
O13 O12 Si2 28.20(14) 14 4_565 ?
O12 O12 Si2 28.33(8) 15_565 4_565 ?
O24 O12 Si2 145.8(2) . 4_565 ?
M3 O12 Si2 137.7(2) . 4_565 ?
Si2 O12 Si2 56.59(16) 15_565 4_565 ?
Si2 O12 O25 87.0(3) . 9 ?
Si2 O12 O25 87.0(3) 14 9 ?
O1 O12 O25 119.3(3) . 9 ?
O1 O12 O25 119.3(3) 14 9 ?

O8 O12 O25 57.9(2) 14 9 ?
O8 O12 O25 57.9(2) . 9 ?
O13 O12 O25 89.9(3) . 9 ?
O13 O12 O25 89.9(3) 14 9 ?
O12 O12 O25 101.2(2) 15_565 9 ?
O24 O12 O25 100.3(4) . 9 ?
M3 O12 O25 47.4(2) . 9 ?
Si2 O12 O25 98.6(3) 15_565 9 ?
Si2 O12 O25 98.6(3) 4_565 9 ?
Si2 O12 B1 91.7(3) . . ?
Si2 O12 B1 91.7(3) 14 . ?
O1 O12 B1 54.3(2) . . ?
O1 O12 B1 54.3(2) 14 . ?
O8 O12 B1 105.4(3) 14 . ?
O8 O12 B1 105.4(3) . . ?
O13 O12 B1 108.5(3) . . ?
O13 O12 B1 108.5(3) 14 . ?
O12 O12 B1 112.7(2) 15_565 . ?
O24 O12 B1 45.8(4) . . ?
M3 O12 B1 98.7(3) . . ?
Si2 O12 B1 111.1(3) 15_565 . ?
Si2 O12 B1 111.1(3) 4_565 . ?
O25 O12 B1 146.1(4) 9 . ?
Si2 O13 Si2 135.8(5) 15_565 . ?
Si2 O13 O1 127.7(5) 15_565 . ?
Si2 O13 O1 36.2(2) . . ?
Si2 O13 O1 36.2(2) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 O1 127.7(5) . 15_565 ?
O1 O13 O1 99.9(4) . 15_565 ?
Si2 O13 O12 102.1(4) 15_565 . ?
Si2 O13 O12 35.1(2) . . ?
O1 O13 O12 58.6(2) . . ?
O1 O13 O12 109.1(4) 15_565 . ?
Si2 O13 O12 35.1(2) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 O12 102.1(4) . 15_565 ?
O1 O13 O12 109.1(4) . 15_565 ?
O1 O13 O12 58.6(2) 15_565 15_565 ?
O12 O13 O12 67.3(4) . 15_565 ?
Si2 O13 O8 32.7(2) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 O8 154.5(5) . 15_565 ?
O1 O13 O8 159.2(4) . 15_565 ?
O1 O13 O8 59.60(19) 15_565 15_565 ?
O12 O13 O8 121.6(3) . 15_565 ?
O12 O13 O8 58.8(2) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 O8 154.5(5) 15_565 . ?
Si2 O13 O8 32.7(2) . . ?
O1 O13 O8 59.60(19) . . ?
O1 O13 O8 159.2(4) 15_565 . ?
O12 O13 O8 58.8(2) . . ?
O12 O13 O8 121.6(3) 15_565 . ?
O8 O13 O8 140.5(4) 15_565 . ?
Si2 O13 O20 90.4(3) 15_565 . ?
Si2 O13 O20 90.4(3) . . ?
O1 O13 O20 126.4(2) . . ?
O1 O13 O20 126.4(2) 15_565 . ?
O12 O13 O20 79.6(3) . . ?
O12 O13 O20 79.6(3) 15_565 . ?

O8 O13 O20 70.8(2) 15_565 . ?
O8 O13 O20 70.8(2) . . ?
Si2 O13 A1 109.5(3) 15_565 . ?
Si2 O13 A1 109.5(3) . . ?
O1 O13 A1 87.8(2) . . ?
O1 O13 A1 87.8(2) 15_565 . ?
O12 O13 A1 143.9(2) . . ?
O12 O13 A1 143.9(2) 15_565 . ?
O8 O13 A1 94.4(2) 15_565 . ?
O8 O13 A1 94.4(2) . . ?
O20 O13 A1 116.3(3) . . ?
Si2 O13 M2B 70.1(3) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 M2B 130.8(4) . 15_565 ?
O1 O13 M2B 161.9(3) . 15_565 ?
O1 O13 M2B 97.5(2) 15_565 15_565 ?
O12 O13 M2B 119.5(4) . 15_565 ?
O12 O13 M2B 84.2(3) 15_565 15_565 ?
O8 O13 M2B 38.8(2) 15_565 15_565 ?
O8 O13 M2B 103.2(3) . 15_565 ?
O20 O13 M2B 42.2(2) . 15_565 ?
A1 O13 M2B 88.0(2) . 15_565 ?
Si2 O13 M2B 130.8(4) 15_565 . ?
Si2 O13 M2B 70.1(3) . . ?
O1 O13 M2B 97.5(2) . . ?
O1 O13 M2B 161.9(3) 15_565 . ?
O12 O13 M2B 84.2(3) . . ?
O12 O13 M2B 119.5(4) 15_565 . ?
O8 O13 M2B 103.2(3) 15_565 . ?
O8 O13 M2B 38.8(2) . . ?
O20 O13 M2B 42.2(2) . . ?
A1 O13 M2B 88.0(2) . . ?
M2B O13 M2B 64.8(3) 15_565 . ?
Si2 O13 O2 106.3(3) 15_565 . ?
Si2 O13 O2 106.3(3) . . ?
O1 O13 O2 125.9(2) . . ?
O1 O13 O2 125.9(2) 15_565 . ?
O12 O13 O2 118.3(3) . . ?
O12 O13 O2 118.3(3) 15_565 . ?
O8 O13 O2 73.7(2) 15_565 . ?
O8 O13 O2 73.7(2) . . ?
O20 O13 O2 47.2(3) . . ?
A1 O13 O2 69.0(2) . . ?
M2B O13 O2 36.85(18) 15_565 . ?
M2B O13 O2 36.85(18) . . ?
Si2 O13 M2A 71.6(3) 15_565 15_565 ?
Si2 O13 M2A 127.3(4) . 15_565 ?
O1 O13 M2A 159.7(2) . 15_565 ?
O1 O13 M2A 100.20(15) 15_565 15_565 ?
O12 O13 M2A 116.0(3) . 15_565 ?
O12 O13 M2A 83.5(3) 15_565 15_565 ?
O8 O13 M2A 41.03(18) 15_565 15_565 ?
O8 O13 M2A 100.4(3) . 15_565 ?
O20 O13 M2A 38.48(14) . 15_565 ?
A1 O13 M2A 90.63(18) . 15_565 ?
M2B O13 M2A 3.70(15) 15_565 15_565 ?
M2B O13 M2A 62.27(19) . 15_565 ?
O2 O13 M2A 36.27(10) . 15_565 ?

Si2 O13 M2A 127.3(4) 15_565 . ?
Si2 O13 M2A 71.6(3) . . ?
O1 O13 M2A 100.20(15) . . ?
O1 O13 M2A 159.7(2) 15_565 . ?
O12 O13 M2A 83.5(3) . . ?
O12 O13 M2A 116.0(3) 15_565 . ?
O8 O13 M2A 100.4(3) 15_565 . ?
O8 O13 M2A 41.03(18) . . ?
O20 O13 M2A 38.48(14) . . ?
A1 O13 M2A 90.63(18) . . ?
M2B O13 M2A 62.27(19) 15_565 . ?
M2B O13 M2A 3.70(15) . . ?
O2 O13 M2A 36.27(10) . . ?
M2A O13 M2A 59.61(13) 15_565 . ?
Si6 O14 Si6 132.9(5) . 9 ?
Si6 O14 O15 139.5(4) . 9 ?
Si6 O14 O15 37.3(3) 9 9 ?
Si6 O14 O14 36.6(3) . 5 ?
Si6 O14 O14 96.4(3) 9 5 ?
O15 O14 O14 111.1(3) 9 5 ?
Si6 O14 O14 96.6(3) . 9 ?
Si6 O14 O14 36.4(3) 9 9 ?
O15 O14 O14 60.8(3) 9 9 ?
O14 O14 O14 60.0 5 9 ?
Si6 O14 O15 35.8(3) . . ?
Si6 O14 O15 138.5(4) 9 . ?
O15 O14 O15 116.4(4) 9 . ?
O14 O14 O15 59.0(3) 5 . ?
O14 O14 O15 109.6(3) 9 . ?
Si6 O14 O11 34.0(2) . . ?
Si6 O14 O11 141.6(4) 9 . ?
O15 O14 O11 173.1(4) 9 . ?
O14 O14 O11 62.2(3) 5 . ?
O14 O14 O11 114.4(3) 9 . ?
O15 O14 O11 59.4(3) . . ?
Si6 O14 O11 140.4(4) . 9 ?
Si6 O14 O11 31.7(2) 9 9 ?
O15 O14 O11 59.1(3) 9 9 ?
O14 O14 O11 112.0(3) 5 9 ?
O14 O14 O11 59.4(3) 9 9 ?
O15 O14 O11 169.0(4) . 9 ?
O11 O14 O11 123.8(4) . 9 ?
Si6 O14 F 77.1(3) . . ?
Si6 O14 F 77.0(3) 9 . ?
O15 O14 F 114.2(3) 9 . ?
O14 O14 F 63.37(14) 5 . ?
O14 O14 F 63.37(14) 9 . ?
O15 O14 F 112.7(3) . . ?
O11 O14 F 65.1(2) . . ?
O11 O14 F 64.2(2) 9 . ?
Si6 O14 A1 121.6(4) . 9 ?
Si6 O14 A1 103.9(3) 9 9 ?
O15 O14 A1 92.4(3) 9 9 ?
O14 O14 A1 156.4(4) 5 9 ?
O14 O14 A1 139.4(4) 9 9 ?
O15 O14 A1 109.6(3) . 9 ?
O11 O14 A1 94.2(3) . 9 ?

O11 O14 A1 81.1(2) 9 9 ?
F O14 A1 109.4(2) . 9 ?
Si6 O14 Si6 66.5(2) . 5 ?
Si6 O14 Si6 66.5(2) 9 5 ?
O15 O14 Si6 86.2(3) 9 5 ?
O14 O14 Si6 29.92(15) 5 5 ?
O14 O14 Si6 30.09(15) 9 5 ?
O15 O14 Si6 84.3(3) . 5 ?
O11 O14 Si6 87.9(2) . 5 ?
O11 O14 Si6 85.3(2) 9 5 ?
F O14 Si6 58.22(15) . 5 ?
A1 O14 Si6 165.0(2) 9 5 ?
Si6 O14 A2 91.1(3) . . ?
Si6 O14 A2 93.2(3) 9 . ?
O15 O14 A2 59.7(2) 9 . ?
O14 O14 A2 91.50(12) 5 . ?
O14 O14 A2 92.60(13) 9 . ?
O15 O14 A2 58.3(2) . . ?
O11 O14 A2 117.3(3) . . ?
O11 O14 A2 118.7(3) 9 . ?
F O14 A2 151.2(3) . . ?
A1 O14 A2 99.21(18) 9 . ?
Si6 O14 A2 92.97(19) 5 . ?
Si6 O14 O3 100.5(3) . 9 ?
Si6 O14 O3 90.3(3) 9 9 ?
O15 O14 O3 116.0(3) 9 9 ?
O14 O14 O3 107.14(14) 5 9 ?
O14 O14 O3 101.38(17) 9 9 ?
O15 O14 O3 127.1(3) . 9 ?
O11 O14 O3 69.0(2) . 9 ?
O11 O14 O3 59.7(2) 9 9 ?
F O14 O3 48.00(16) . 9 ?
A1 O14 O3 61.42(15) 9 9 ?
Si6 O14 O3 105.9(2) 5 9 ?
A2 O14 O3 160.6(2) . 9 ?
Si6 O14 M1 63.9(3) . . ?
Si6 O14 M1 111.8(3) 9 . ?
O15 O14 M1 147.4(3) 9 . ?
O14 O14 M1 75.19(16) 5 . ?
O14 O14 M1 100.77(11) 9 . ?
O15 O14 M1 94.6(3) . . ?
O11 O14 M1 35.38(18) . . ?
O11 O14 M1 88.6(2) 9 . ?
F O14 M1 38.09(11) . . ?
A1 O14 M1 86.04(17) 9 . ?
Si6 O14 M1 87.14(16) 5 . ?
A2 O14 M1 152.6(2) . . ?
O3 O14 M1 36.85(11) 9 . ?
Si6 O14 O23 71.8(3) . . ?
Si6 O14 O23 155.3(4) 9 . ?
O15 O14 O23 125.6(3) 9 . ?
O14 O14 O23 108.2(4) 5 . ?
O14 O14 O23 167.6(4) 9 . ?
O15 O14 O23 58.4(3) . . ?
O11 O14 O23 58.0(2) . . ?
O11 O14 O23 132.6(3) 9 . ?
F O14 O23 116.4(3) . . ?

A1 O14 O23 52.96(19) 9 . ?
Si6 O14 O23 138.0(3) 5 . ?
A2 O14 O23 83.5(2) . . ?
O3 O14 O23 85.4(2) 9 . ?
M1 O14 O23 78.30(18) . . ?
Si1 O15 Si6 137.6(5) . . ?
Si1 O15 O19 44.2(4) . 2_665 ?
Si6 O15 O19 143.0(7) . 2_665 ?
Si1 O15 O15 36.1(3) . 15_565 ?
Si6 O15 O15 141.5(4) . 15_565 ?
O19 O15 O15 66.9(4) 2_665 15_565 ?
Si1 O15 O14 132.5(5) . 5 ?
Si6 O15 O14 37.6(3) . 5 ?
O19 O15 O14 176.6(6) 2_665 5 ?
O15 O15 O14 110.9(2) 15_565 5 ?
Si1 O15 O11 104.4(4) . . ?
Si6 O15 O11 34.8(2) . . ?
O19 O15 O11 115.8(6) 2_665 . ?
O15 O15 O11 124.8(2) 15_565 . ?
O14 O15 O11 63.0(3) 5 . ?
Si1 O15 O14 156.1(5) . . ?
Si6 O15 O14 35.9(2) . . ?
O19 O15 O14 122.3(6) 2_665 . ?
O15 O15 O14 167.8(2) 15_565 . ?
O14 O15 O14 60.3(3) 5 . ?
O11 O15 O14 60.5(3) . . ?
Si1 O15 O2 32.6(2) . . ?
Si6 O15 O2 105.3(4) . . ?
O19 O15 O2 63.1(5) 2_665 . ?
O15 O15 O2 61.24(19) 15_565 . ?
O14 O15 O2 113.6(4) 5 . ?
O11 O15 O2 71.8(3) . . ?
O14 O15 O2 128.8(3) . . ?
Si1 O15 O19 32.5(4) . . ?
Si6 O15 O19 154.8(6) . . ?
O19 O15 O19 15.3(6) 2_665 . ?
O15 O15 O19 51.6(3) 15_565 . ?
O14 O15 O19 162.3(5) 5 . ?
O11 O15 O19 122.3(5) . . ?
O14 O15 O19 137.4(5) . . ?
O2 O15 O19 58.4(4) . . ?
Si1 O15 A2 112.6(4) . . ?
Si6 O15 A2 109.2(3) . . ?
O19 O15 A2 79.6(5) 2_665 . ?
O15 O15 A2 98.40(16) 15_565 . ?
O14 O15 A2 103.5(3) 5 . ?
O11 O15 A2 136.7(3) . . ?
O14 O15 A2 76.9(3) . . ?
O2 O15 A2 141.9(4) . . ?
O19 O15 A2 83.6(4) . . ?
Si1 O15 A2 100.8(3) . 5 ?
Si6 O15 A2 109.5(4) . 5 ?
O19 O15 A2 104.4(5) 2_665 5 ?
O15 O15 A2 66.46(13) 15_565 5 ?
O14 O15 A2 76.6(3) 5 5 ?
O11 O15 A2 139.6(4) . 5 ?
O14 O15 A2 102.2(3) . 5 ?

O2 O15 A2 126.9(3) . 5 ?
O19 O15 A2 95.6(5) . 5 ?
A2 O15 A2 53.4(2) . 5 ?
Si1 O15 O23 75.6(4) . . ?
Si6 O15 O23 90.4(4) . . ?
O19 O15 O23 52.7(5) 2_665 . ?
O15 O15 O23 110.9(2) 15_565 . ?
O14 O15 O23 127.5(3) 5 . ?
O11 O15 O23 67.4(3) . . ?
O14 O15 O23 81.2(3) . . ?
O2 O15 O23 63.5(3) . . ?
O19 O15 O23 65.5(4) . . ?
A2 O15 O23 100.5(3) . . ?
A2 O15 O23 150.8(3) 5 . ?
Si1 O15 M2B 69.7(3) . . ?
Si6 O15 M2B 71.9(3) . . ?
O19 O15 M2B 81.2(5) 2_665 . ?
O15 O15 M2B 99.71(18) 15_565 . ?
O14 O15 M2B 96.8(3) 5 . ?
O11 O15 M2B 37.3(2) . . ?
O14 O15 M2B 90.0(3) . . ?
O2 O15 M2B 38.78(19) . . ?
O19 O15 M2B 85.3(5) . . ?
A2 O15 M2B 145.8(4) . . ?
A2 O15 M2B 160.3(3) 5 . ?
O23 O15 M2B 45.8(2) . . ?
Si1 O15 M2A 68.1(3) . . ?
Si6 O15 M2A 75.7(3) . . ?
O19 O15 M2A 75.4(5) 2_665 . ?
O15 O15 M2A 100.29(11) 15_565 . ?
O14 O15 M2A 102.8(3) 5 . ?
O11 O15 M2A 41.72(18) . . ?
O14 O15 M2A 90.3(3) . . ?
O2 O15 M2A 39.09(13) . . ?
O19 O15 M2A 80.6(5) . . ?
A2 O15 M2A 139.6(3) . . ?
A2 O15 M2A 164.8(3) 5 . ?
O23 O15 M2A 39.22(15) . . ?
M2B O15 M2A 6.79(14) . . ?
Si1 O15 O15 75.9(4) . 16_655 ?
Si6 O15 O15 128.1(4) . 16_655 ?
O19 O15 O15 32.2(4) 2_665 16_655 ?
O15 O15 O15 90.000(1) 15_565 16_655 ?
O14 O15 O15 151.2(2) 5 16_655 ?
O11 O15 O15 121.4(3) . 16_655 ?
O14 O15 O15 95.7(3) . 16_655 ?
O2 O15 O15 93.6(3) . 16_655 ?
O19 O15 O15 43.9(3) . 16_655 ?
A2 O15 O15 52.19(17) . 16_655 ?
A2 O15 O15 95.1(2) 5 16_655 ?
O23 O15 O15 55.74(17) . 16_655 ?
M2B O15 O15 99.0(2) . 16_655 ?
M2A O15 O15 92.24(15) . 16_655 ?
Si4 O16 Si4 143.8(6) . 14 ?
Si4 O16 O5 145.3(6) . 14 ?
Si4 O16 O5 34.9(2) 14 14 ?
Si4 O16 O5 34.9(2) . . ?

Si4 O16 O5 145.3(6) 14 . ?
O5 O16 O5 119.5(5) 14 . ?
Si4 O16 O6 146.1(5) . 14 ?
Si4 O16 O6 35.8(2) 14 14 ?
O5 O16 O6 60.51(19) 14 14 ?
O5 O16 O6 178.1(4) . 14 ?
Si4 O16 O6 35.8(2) . . ?
Si4 O16 O6 146.1(5) 14 . ?
O5 O16 O6 178.1(4) 14 . ?
O5 O16 O6 60.51(19) . . ?
O6 O16 O6 119.4(5) 14 . ?
Si4 O16 M3 100.5(4) . . ?
Si4 O16 M3 100.5(4) 14 . ?
O5 O16 M3 65.8(2) 14 . ?
O5 O16 M3 65.8(2) . . ?
O6 O16 M3 112.9(2) 14 . ?
O6 O16 M3 112.9(2) . . ?
Si4 O16 O10 35.4(2) . . ?
Si4 O16 O10 108.5(4) 14 . ?
O5 O16 O10 122.6(4) 14 . ?
O5 O16 O10 60.6(2) . . ?
O6 O16 O10 121.2(4) 14 . ?
O6 O16 O10 59.2(2) . . ?
M3 O16 O10 120.3(3) . . ?
Si4 O16 O10 108.5(4) . 14 ?
Si4 O16 O10 35.4(2) 14 14 ?
O5 O16 O10 60.6(2) 14 14 ?
O5 O16 O10 122.6(4) . 14 ?
O6 O16 O10 59.2(2) 14 14 ?
O6 O16 O10 121.2(4) . 14 ?
M3 O16 O10 120.3(3) . 14 ?
O10 O16 O10 73.2(4) . 14 ?
Si4 O16 O9 136.1(4) . 14 ?
Si4 O16 O9 78.5(3) 14 14 ?
O5 O16 O9 57.0(2) 14 14 ?
O5 O16 O9 107.0(3) . 14 ?
O6 O16 O9 71.4(2) 14 14 ?
O6 O16 O9 121.2(3) . 14 ?
M3 O16 O9 46.13(17) . 14 ?
O10 O16 O9 166.4(4) . 14 ?
O10 O16 O9 113.23(19) 14 14 ?
Si4 O16 O9 78.5(3) . . ?
Si4 O16 O9 136.1(4) 14 . ?
O5 O16 O9 107.0(3) 14 . ?
O5 O16 O9 57.0(2) . . ?
O6 O16 O9 121.2(3) 14 . ?
O6 O16 O9 71.4(2) . . ?
M3 O16 O9 46.13(17) . . ?
O10 O16 O9 113.23(19) . . ?
O10 O16 O9 166.4(4) 14 . ?
O9 O16 O9 58.0(2) 14 . ?
Si4 O16 O25 85.9(4) . 9 ?
Si4 O16 O25 85.9(4) 14 9 ?
O5 O16 O25 60.7(2) 14 9 ?
O5 O16 O25 60.7(2) . 9 ?
O6 O16 O25 119.8(2) 14 9 ?
O6 O16 O25 119.8(2) . 9 ?

M3 O16 O25 49.1(3) . 9 ?
O10 O16 O25 81.9(3) . 9 ?
O10 O16 O25 81.9(3) 14 9 ?
O9 O16 O25 87.1(3) 14 9 ?
O9 O16 O25 87.1(3) . 9 ?
Si4 O16 O7 137.5(4) . 24 ?
Si4 O16 O7 72.3(3) 14 24 ?
O5 O16 O7 76.0(2) 14 24 ?
O5 O16 O7 134.8(3) . 24 ?
O6 O16 O7 43.4(2) 14 24 ?
O6 O16 O7 102.7(3) . 24 ?
M3 O16 O7 88.0(2) . 24 ?
O10 O16 O7 150.0(4) . 24 ?
O10 O16 O7 102.3(2) 14 24 ?
O9 O16 O7 42.61(16) 14 24 ?
O9 O16 O7 78.2(2) . 24 ?
O25 O16 O7 127.5(3) 9 24 ?
Si4 O16 O7 72.3(3) . 9 ?
Si4 O16 O7 137.5(4) 14 9 ?
O5 O16 O7 134.8(3) 14 9 ?
O5 O16 O7 76.0(2) . 9 ?
O6 O16 O7 102.7(3) 14 9 ?
O6 O16 O7 43.4(2) . 9 ?
M3 O16 O7 88.0(2) . 9 ?
O10 O16 O7 102.3(2) . 9 ?
O10 O16 O7 150.0(4) 14 9 ?
O9 O16 O7 78.2(2) 14 9 ?
O9 O16 O7 42.61(16) . 9 ?
O25 O16 O7 127.5(3) 9 9 ?
O7 O16 O7 66.5(2) 24 9 ?
Si4 O16 O16 73.1(3) . 3_655 ?
Si4 O16 O16 73.1(3) 14 3_655 ?
O5 O16 O16 100.4(2) 14 3_655 ?
O5 O16 O16 100.4(2) . 3_655 ?
O6 O16 O16 81.4(2) 14 3_655 ?
O6 O16 O16 81.4(2) . 3_655 ?
M3 O16 O16 146.7(2) . 3_655 ?
O10 O16 O16 40.1(2) . 3_655 ?
O10 O16 O16 40.1(2) 14 3_655 ?
O9 O16 O16 150.73(13) 14 3_655 ?
O9 O16 O16 150.73(13) . 3_655 ?
O25 O16 O16 97.6(2) 9 3_655 ?
O7 O16 O16 119.23(16) 24 3_655 ?
O7 O16 O16 119.23(16) 9 3_655 ?
Si3 O17 Si7 132.8(4) 5 . ?
Si3 O17 O4 37.1(2) 5 5 ?
Si7 O17 O4 157.9(4) . 5 ?
Si3 O17 O17 156.5(3) 5 9 ?
Si7 O17 O17 36.98(14) . 9 ?
O4 O17 O17 162.2(3) 5 9 ?
Si3 O17 O17 128.0(4) 5 5 ?
Si7 O17 O17 36.99(14) . 5 ?
O4 O17 O17 125.8(4) 5 5 ?
O17 O17 O17 60.0 9 5 ?
Si3 O17 O7 36.7(2) 5 5 ?
Si7 O17 O7 126.1(4) . 5 ?
O4 O17 O7 60.4(3) 5 5 ?

O17 O17 O7 124.0(3) 9 5 ?
O17 O17 O7 151.4(2) 5 5 ?
Si3 O17 O9 33.7(2) 5 9 ?
Si7 O17 O9 101.5(3) . 9 ?
O4 O17 O9 61.6(3) 5 9 ?
O17 O17 O9 136.1(2) 9 9 ?
O17 O17 O9 96.3(3) 5 9 ?
O7 O17 O9 60.6(2) 5 9 ?
Si3 O17 O18 101.5(3) 5 . ?
Si7 O17 O18 33.4(2) . . ?
O4 O17 O18 136.5(3) 5 . ?
O17 O17 O18 61.11(14) 9 . ?
O17 O17 O18 61.10(14) 5 . ?
O7 O17 O18 94.8(3) 5 . ?
O9 O17 O18 75.2(2) 9 . ?
Si3 O17 O3 60.3(2) 5 5 ?
Si7 O17 O3 83.0(3) . 5 ?
O4 O17 O3 96.5(3) 5 5 ?
O17 O17 O3 96.36(17) 9 5 ?
O17 O17 O3 109.94(12) 5 5 ?
O7 O17 O3 44.06(18) 5 5 ?
O9 O17 O3 54.94(19) 9 5 ?
O18 O17 O3 50.76(18) . 5 ?
Si3 O17 O9 115.4(3) 5 5 ?
Si7 O17 O9 59.1(2) . 5 ?
O4 O17 O9 139.1(3) 5 5 ?
O17 O17 O9 42.4(2) 9 5 ?
O17 O17 O9 94.8(2) 5 5 ?
O7 O17 O9 81.7(2) 5 5 ?
O9 O17 O9 114.5(3) 9 5 ?
O18 O17 O9 55.56(14) . 5 ?
O3 O17 O9 60.58(15) 5 5 ?
Si3 O17 M1 61.6(2) 5 9 ?
Si7 O17 M1 71.2(2) . 9 ?
O4 O17 M1 95.1(2) 5 9 ?
O17 O17 M1 102.52(8) 9 9 ?
O17 O17 M1 81.58(14) 5 9 ?
O7 O17 M1 69.91(18) 5 9 ?
O9 O17 M1 34.16(15) 9 9 ?
O18 O17 M1 41.42(13) . 9 ?
O3 O17 M1 36.90(10) 5 9 ?
O9 O17 M1 85.17(15) 5 9 ?
Si3 O17 O24 91.5(3) 5 5 ?
Si7 O17 O24 101.2(3) . 5 ?
O4 O17 O24 98.9(3) 5 5 ?
O17 O17 O24 75.0(3) 9 5 ?
O17 O17 O24 134.6(3) 5 5 ?
O7 O17 O24 55.5(3) 5 5 ?
O9 O17 O24 113.5(3) 9 5 ?
O18 O17 O24 93.1(2) . 5 ?
O3 O17 O24 67.2(2) 5 5 ?
O9 O17 O24 42.4(2) 5 5 ?
M1 O17 O24 103.9(2) 9 5 ?
Si3 O17 O24 62.0(3) 5 9 ?
Si7 O17 O24 95.9(3) . 9 ?
O4 O17 O24 62.0(3) 5 9 ?
O17 O17 O24 128.7(3) 9 9 ?

O17 O17 O24 69.1(3) 5 9 ?
O7 O17 O24 97.9(3) 5 9 ?
O9 O17 O24 42.3(3) 9 9 ?
O18 O17 O24 90.07(19) . 9 ?
O3 O17 O24 95.1(2) 5 9 ?
O9 O17 O24 145.3(2) 5 9 ?
M1 O17 O24 62.69(18) 9 9 ?
O24 O17 O24 153.3(3) 5 9 ?
Si3 O17 O27 64.1(4) 5 5 ?
Si7 O17 O27 154.4(3) . 5 ?
O4 O17 O27 47.7(2) 5 5 ?
O17 O17 O27 118.9(3) 9 5 ?
O17 O17 O27 155.5(5) 5 5 ?
O7 O17 O27 52.1(5) 5 5 ?
O9 O17 O27 97.8(4) 9 5 ?
O18 O17 O27 142.4(5) . 5 ?
O3 O17 O27 94.6(5) 5 5 ?
O9 O17 O27 97.5(2) 5 5 ?
M1 O17 O27 120.5(5) 9 5 ?
O24 O17 O27 55.2(3) 5 5 ?
O24 O17 O27 109.66(19) 9 5 ?
Si3 O17 B1 63.8(2) 5 5 ?
Si7 O17 B1 131.0(3) . 5 ?
O4 O17 B1 67.6(2) 5 5 ?
O17 O17 B1 106.3(3) 9 5 ?
O17 O17 B1 166.3(3) 5 5 ?
O7 O17 B1 33.63(18) 5 5 ?
O9 O17 B1 93.3(2) 9 5 ?
O18 O17 B1 112.4(2) . 5 ?
O3 O17 B1 68.12(15) 5 5 ?
O9 O17 B1 72.24(17) 5 5 ?
M1 O17 B1 101.32(14) 9 5 ?
O24 O17 B1 31.7(2) 5 5 ?
O24 O17 B1 124.3(2) 9 5 ?
O27 O17 B1 30.1(4) 5 5 ?
Si7 O18 F 180.0(3) . . ?
Si7 O18 M1 124.46(17) . 9 ?
F O18 M1 55.55(17) . 9 ?
Si7 O18 M1 124.46(17) . . ?
F O18 M1 55.55(17) . . ?
M1 O18 M1 91.1(2) 9 . ?
Si7 O18 M1 124.44(17) . 5 ?
F O18 M1 55.54(17) . 5 ?
M1 O18 M1 91.1(2) 9 5 ?
M1 O18 M1 91.1(2) . 5 ?
Si7 O18 O17 33.91(17) . 9 ?
F O18 O17 146.08(17) . 9 ?
M1 O18 O17 154.9(3) 9 9 ?
M1 O18 O17 112.27(15) . 9 ?
M1 O18 O17 97.12(14) 5 9 ?
Si7 O18 O17 33.92(17) . 5 ?
F O18 O17 146.10(17) . 5 ?
M1 O18 O17 112.28(15) 9 5 ?
M1 O18 O17 97.14(14) . 5 ?
M1 O18 O17 154.9(3) 5 5 ?
O17 O18 O17 57.8(3) 9 5 ?
Si7 O18 O17 33.91(17) . . ?

F 018 017 146.09(17) . . ?
M1 018 017 97.13(14) 9 . ?
M1 018 017 154.9(3) . . ?
M1 018 017 112.26(15) 5 . ?
O17 018 017 57.8(3) 9 . ?
O17 018 017 57.8(3) 5 . ?
Si7 018 03 117.0(2) . . ?
F 018 03 63.0(2) . . ?
M1 018 03 118.6(4) 9 . ?
M1 018 03 50.78(15) . . ?
M1 018 03 51.99(15) 5 . ?
O17 018 03 84.69(18) 9 . ?
O17 018 03 117.9(2) 5 . ?
O17 018 03 138.9(3) . . ?
Si7 018 03 117.0(2) . 9 ?
F 018 03 63.0(2) . 9 ?
M1 018 03 50.78(15) 9 9 ?
M1 018 03 52.00(15) . 9 ?
M1 018 03 118.6(4) 5 9 ?
O17 018 03 138.9(3) 9 9 ?
O17 018 03 84.71(18) 5 9 ?
O17 018 03 117.9(2) . 9 ?
O3 018 03 101.0(3) . 9 ?
Si7 018 03 117.0(2) . 5 ?
F 018 03 63.0(2) . 5 ?
M1 018 03 51.99(15) 9 5 ?
M1 018 03 118.6(4) . 5 ?
M1 018 03 50.77(15) 5 5 ?
O17 018 03 117.9(2) 9 5 ?
O17 018 03 138.9(3) 5 5 ?
O17 018 03 84.70(18) . 5 ?
O3 018 03 101.0(3) . 5 ?
O3 018 03 101.0(3) 9 5 ?
Si7 018 09 80.2(2) . . ?
F 018 09 99.8(2) . . ?
M1 018 09 111.19(15) 9 . ?
M1 018 09 45.50(10) . . ?
M1 018 09 129.01(18) 5 . ?
O17 018 09 81.7(2) 9 . ?
O17 018 09 51.97(18) 5 . ?
O17 018 09 109.6(3) . . ?
O3 018 09 77.33(15) . . ?
O3 018 09 60.68(16) 9 . ?
O3 018 09 160.3(3) 5 . ?
Si7 018 09 80.2(2) . 9 ?
F 018 09 99.8(2) . 9 ?
M1 018 09 45.50(10) 9 9 ?
M1 018 09 129.02(18) . 9 ?
M1 018 09 111.18(15) 5 9 ?
O17 018 09 109.6(3) 9 9 ?
O17 018 09 81.7(2) 5 9 ?
O17 018 09 51.97(18) . 9 ?
O3 018 09 160.3(3) . 9 ?
O3 018 09 77.33(15) 9 9 ?
O3 018 09 60.68(16) 5 9 ?
O9 018 09 117.15(11) . 9 ?
Si7 018 09 80.2(2) . 5 ?

F 018 09 99.8(2) . 5 ?
M1 018 09 129.01(18) 9 5 ?
M1 018 09 111.18(15) . 5 ?
M1 018 09 45.49(10) 5 5 ?
O17 018 09 51.97(18) 9 5 ?
O17 018 09 109.6(3) 5 5 ?
O17 018 09 81.6(2) . 5 ?
O3 018 09 60.67(16) . 5 ?
O3 018 09 160.3(3) 9 5 ?
O3 018 09 77.32(15) 5 5 ?
O9 018 09 117.14(11) . 5 ?
O9 018 09 117.14(11) 9 5 ?
Si7 018 Si3 60.91(15) . 9 ?
F 018 Si3 119.11(15) . 9 ?
M1 018 Si3 104.55(4) 9 9 ?
M1 018 Si3 70.34(5) . 9 ?
M1 018 Si3 155.61(7) 5 9 ?
O17 018 Si3 76.6(2) 9 9 ?
O17 018 Si3 27.81(13) 5 9 ?
O17 018 Si3 84.6(3) . 9 ?
O3 018 Si3 103.68(12) . 9 ?
O3 018 Si3 62.52(12) 9 9 ?
O3 018 Si3 152.50(12) 5 9 ?
O9 018 Si3 27.48(11) . 9 ?
O9 018 Si3 93.03(17) 9 9 ?
O9 018 Si3 125.8(2) 5 9 ?
O19 019 Si1 76.0(6) 2_665 2_665 ?
O19 019 Si1 76.0(6) 2_665 . ?
Si1 019 Si1 151.9(11) 2_665 . ?
O19 019 O15 113.1(4) 2_665 2_665 ?
Si1 019 O15 43.9(3) 2_665 2_665 ?
Si1 019 O15 157.0(12) . 2_665 ?
O19 019 O15 113.1(4) 2_665 15_565 ?
Si1 019 O15 157.0(12) 2_665 15_565 ?
Si1 019 O15 43.9(3) . 15_565 ?
O15 019 O15 115.6(9) 2_665 15_565 ?
O19 019 O2 81.5(4) 2_665 . ?
Si1 019 O2 137.4(11) 2_665 . ?
Si1 019 O2 34.5(4) . . ?
O15 019 O2 161.2(8) 2_665 . ?
O15 019 O2 65.5(3) 15_565 . ?
O19 019 O2 81.5(3) 2_665 2_665 ?
Si1 019 O2 34.5(4) 2_665 2_665 ?
Si1 019 O2 137.4(11) . 2_665 ?
O15 019 O2 65.5(3) 2_665 2_665 ?
O15 019 O2 161.2(8) 15_565 2_665 ?
O2 019 O2 107.1(8) . 2_665 ?
O19 019 O15 51.6(4) 2_665 . ?
Si1 019 O15 123.6(8) 2_665 . ?
Si1 019 O15 32.3(4) . . ?
O15 019 O15 137.9(9) 2_665 . ?
O15 019 O15 61.5(5) 15_565 . ?
O2 019 O15 60.4(3) . . ?
O2 019 O15 131.7(7) 2_665 . ?
O19 019 O15 51.6(3) 2_665 16_655 ?
Si1 019 O15 32.3(4) 2_665 16_655 ?
Si1 019 O15 123.6(8) . 16_655 ?

O15 O19 O15 61.5(5) 2_665 16_655 ?
O15 O19 O15 137.9(9) 15_565 16_655 ?
O2 O19 O15 131.7(7) . 16_655 ?
O2 O19 O15 60.4(3) 2_665 16_655 ?
O15 O19 O15 92.2(6) . 16_655 ?
O19 O19 O23 140.7(5) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 O23 100.3(6) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 O23 100.3(6) . 2_665 ?
O15 O19 O23 85.8(5) 2_665 2_665 ?
O15 O19 O23 85.8(5) 15_565 2_665 ?
O2 O19 O23 75.5(5) . 2_665 ?
O2 O19 O23 75.5(5) 2_665 2_665 ?
O15 O19 O23 132.5(4) . 2_665 ?
O15 O19 O23 132.5(4) 16_655 2_665 ?
O19 O19 O23 31.0(4) 2_665 . ?
Si1 O19 O23 77.6(6) 2_665 . ?
Si1 O19 O23 77.6(6) . . ?
O15 O19 O23 121.5(4) 2_665 . ?
O15 O19 O23 121.5(4) 15_565 . ?
O2 O19 O23 65.0(4) . . ?
O2 O19 O23 65.0(4) 2_665 . ?
O15 O19 O23 68.0(4) . . ?
O15 O19 O23 68.0(4) 16_655 . ?
O23 O19 O23 109.7(8) 2_665 . ?
O19 O19 A2 112.5(3) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 A2 96.1(7) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 A2 96.1(7) . 2_665 ?
O15 O19 A2 61.1(5) 2_665 2_665 ?
O15 O19 A2 61.1(5) 15_565 2_665 ?
O2 O19 A2 126.0(4) . 2_665 ?
O2 O19 A2 126.0(4) 2_665 2_665 ?
O15 O19 A2 87.3(5) . 2_665 ?
O15 O19 A2 87.3(5) 16_655 2_665 ?
O23 O19 A2 106.8(6) 2_665 2_665 ?
O23 O19 A2 143.5(6) . 2_665 ?
O19 O19 M2A 113.7(2) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 M2A 64.5(5) 2_665 2_665 ?
Si1 O19 M2A 127.1(9) . 2_665 ?
O15 O19 M2A 70.2(4) 2_665 2_665 ?
O15 O19 M2A 124.2(6) 15_565 2_665 ?
O2 O19 M2A 93.4(6) . 2_665 ?
O2 O19 M2A 37.1(2) 2_665 2_665 ?
O15 O19 M2A 149.7(7) . 2_665 ?
O15 O19 M2A 95.5(3) 16_655 2_665 ?
O23 O19 M2A 38.4(2) 2_665 2_665 ?
O23 O19 M2A 87.8(4) . 2_665 ?
A2 O19 M2A 122.3(4) 2_665 2_665 ?
O19 O19 M2A 113.7(2) 2_665 15_565 ?
Si1 O19 M2A 127.1(9) 2_665 15_565 ?
Si1 O19 M2A 64.5(5) . 15_565 ?
O15 O19 M2A 124.2(6) 2_665 15_565 ?
O15 O19 M2A 70.2(4) 15_565 15_565 ?
O2 O19 M2A 37.1(2) . 15_565 ?
O2 O19 M2A 93.4(6) 2_665 15_565 ?
O15 O19 M2A 95.5(3) . 15_565 ?
O15 O19 M2A 149.7(7) 16_655 15_565 ?
O23 O19 M2A 38.4(2) 2_665 15_565 ?

O23 O19 M2A 87.8(4) . 15_565 ?
A2 O19 M2A 122.3(4) 2_665 15_565 ?
M2A O19 M2A 64.3(3) 2_665 15_565 ?
O19 O19 A2 57.0(3) 2_665 . ?
Si1 O19 A2 83.1(7) 2_665 . ?
Si1 O19 A2 83.1(7) . . ?
O15 O19 A2 84.8(5) 2_665 . ?
O15 O19 A2 84.8(5) 15_565 . ?
O2 O19 A2 113.7(4) . . ?
O2 O19 A2 113.7(4) 2_665 . ?
O15 O19 A2 53.4(4) . . ?
O15 O19 A2 53.4(4) 16_655 . ?
O23 O19 A2 162.3(7) 2_665 . ?
O23 O19 A2 88.0(4) . . ?
A2 O19 A2 55.5(3) 2_665 . ?
M2A O19 A2 147.53(15) 2_665 . ?
M2A O19 A2 147.53(15) 15_565 . ?
M1 F M1 102.6(2) 9 . ?
M1 F M1 102.6(2) 9 5 ?
M1 F M1 102.6(2) . 5 ?
M1 F O18 64.31(17) 9 . ?
M1 F O18 64.31(17) . . ?
M1 F O18 64.33(17) 5 . ?
M1 F O14 94.97(18) 9 9 ?
M1 F O14 146.4(3) . 9 ?
M1 F O14 101.10(17) 5 9 ?
O18 F O14 148.83(16) . 9 ?
M1 F O14 146.4(3) 9 5 ?
M1 F O14 101.10(17) . 5 ?
M1 F O14 94.97(18) 5 5 ?
O18 F O14 148.83(16) . 5 ?
O14 F O14 53.3(3) 9 5 ?
M1 F O14 101.10(17) 9 . ?
M1 F O14 94.97(18) . . ?
M1 F O14 146.4(3) 5 . ?
O18 F O14 148.82(16) . . ?
O14 F O14 53.3(3) 9 . ?
O14 F O14 53.3(3) 5 . ?
M1 F O3 129.2(3) 9 . ?
M1 F O3 53.06(13) . . ?
M1 F O3 54.37(14) 5 . ?
O18 F O3 64.91(18) . . ?
O14 F O3 130.8(2) 9 . ?
O14 F O3 84.20(19) 5 . ?
O14 F O3 122.4(2) . . ?
M1 F O3 54.37(14) 9 5 ?
M1 F O3 129.2(3) . 5 ?
M1 F O3 53.06(13) 5 5 ?
O18 F O3 64.91(18) . 5 ?
O14 F O3 84.20(19) 9 5 ?
O14 F O3 122.4(2) 5 5 ?
O14 F O3 130.8(2) . 5 ?
O3 F O3 103.3(2) . 5 ?
M1 F O3 53.06(13) 9 9 ?
M1 F O3 54.36(14) . 9 ?
M1 F O3 129.2(3) 5 9 ?
O18 F O3 64.90(18) . 9 ?

O14 F O3 122.4(2) 9 9 ?
O14 F O3 130.8(2) 5 9 ?
O14 F O3 84.20(19) . 9 ?
O3 F O3 103.3(2) . 9 ?
O3 F O3 103.3(2) 5 9 ?
M1 F O11 120.93(15) 9 5 ?
M1 F O11 131.38(15) . 5 ?
M1 F O11 50.51(13) 5 5 ?
O18 F O11 114.50(19) . 5 ?
O14 F O11 54.6(2) 9 5 ?
O14 F O11 53.0(2) 5 5 ?
O14 F O11 96.7(3) . 5 ?
O3 F O11 81.36(18) . 5 ?
O3 F O11 71.54(18) 5 5 ?
O3 F O11 173.90(19) 9 5 ?
M1 F O11 50.51(13) 9 9 ?
M1 F O11 120.93(15) . 9 ?
M1 F O11 131.38(15) 5 9 ?
O18 F O11 114.49(19) . 9 ?
O14 F O11 53.0(2) 9 9 ?
O14 F O11 96.7(3) 5 9 ?
O14 F O11 54.6(2) . 9 ?
O3 F O11 173.90(19) . 9 ?
O3 F O11 81.36(18) 5 9 ?
O3 F O11 71.54(18) 9 9 ?
O11 F O11 104.0(2) 5 9 ?
O20 O20 O25 62.3(2) 14 22_565 ?
O20 O20 O25 62.3(2) 14 9 ?
O25 O20 O25 123.7(5) 22_565 9 ?
O20 O20 M2B 127.8(3) 14 . ?
O25 O20 M2B 167.1(5) 22_565 . ?
O25 O20 M2B 65.5(3) 9 . ?
O20 O20 M2B 127.8(3) 14 15_565 ?
O25 O20 M2B 65.5(3) 22_565 15_565 ?
O25 O20 M2B 167.1(5) 9 15_565 ?
M2B O20 M2B 104.0(6) . 15_565 ?
O20 O20 M2A 123.7(2) 14 15_565 ?
O25 O20 M2A 62.24(14) 22_565 15_565 ?
O25 O20 M2A 160.4(5) 9 15_565 ?
M2B O20 M2A 106.0(4) . 15_565 ?
M2B O20 M2A 10.6(2) 15_565 15_565 ?
O20 O20 M2A 123.7(2) 14 . ?
O25 O20 M2A 160.4(5) 22_565 . ?
O25 O20 M2A 62.24(14) 9 . ?
M2B O20 M2A 10.6(2) . . ?
M2B O20 M2A 106.0(4) 15_565 . ?
M2A O20 M2A 106.0(4) 15_565 . ?
O20 O20 O2 168.6(3) 14 . ?
O25 O20 O2 116.1(3) 22_565 . ?
O25 O20 O2 116.1(3) 9 . ?
M2B O20 O2 52.2(3) . . ?
M2B O20 O2 52.2(3) 15_565 . ?
M2A O20 O2 53.86(19) 15_565 . ?
M2A O20 O2 53.86(19) . . ?
O20 O20 O13 110.3(2) 14 . ?
O25 O20 O13 103.8(4) 22_565 . ?
O25 O20 O13 103.8(4) 9 . ?

M2B O20 O13 81.0(3) . . ?
M2B O20 O13 81.0(3) 15_565 . ?
M2A O20 O13 91.6(3) 15_565 . ?
M2A O20 O13 91.6(3) . . ?
O2 O20 O13 81.1(3) . . ?
O20 O20 O21 92.3(3) 14 2_665 ?
O25 O20 O21 60.7(4) 22_565 2_665 ?
O25 O20 O21 112.5(5) 9 2_665 ?
M2B O20 O21 108.4(4) . 2_665 ?
M2B O20 O21 62.3(3) 15_565 2_665 ?
M2A O20 O21 51.6(3) 15_565 2_665 ?
M2A O20 O21 99.8(4) . 2_665 ?
O2 O20 O21 77.9(4) . 2_665 ?
O13 O20 O21 143.2(3) . 2_665 ?
O20 O20 O21 92.3(3) 14 . ?
O25 O20 O21 112.5(5) 22_565 . ?
O25 O20 O21 60.7(4) 9 . ?
M2B O20 O21 62.3(3) . . ?
M2B O20 O21 108.4(4) 15_565 . ?
M2A O20 O21 99.8(4) 15_565 . ?
M2A O20 O21 51.6(3) . . ?
O2 O20 O21 77.9(4) . . ?
O13 O20 O21 143.2(3) . . ?
O21 O20 O21 59.3(4) 2_665 . ?
O20 O20 O8 106.4(2) 14 . ?
O25 O20 O8 148.3(5) 22_565 . ?
O25 O20 O8 60.5(3) 9 . ?
M2B O20 O8 42.4(3) . . ?
M2B O20 O8 117.5(4) 15_565 . ?
M2A O20 O8 126.1(4) 15_565 . ?
M2A O20 O8 51.12(15) . . ?
O2 O20 O8 80.7(3) . . ?
O13 O20 O8 49.84(17) . . ?
O21 O20 O8 150.7(4) 2_665 . ?
O21 O20 O8 96.8(2) . . ?
O20 O20 O8 106.4(2) 14 15_565 ?
O25 O20 O8 60.5(3) 22_565 15_565 ?
O25 O20 O8 148.3(5) 9 15_565 ?
M2B O20 O8 117.5(4) . 15_565 ?
M2B O20 O8 42.4(3) 15_565 15_565 ?
M2A O20 O8 51.12(15) 15_565 15_565 ?
M2A O20 O8 126.1(4) . 15_565 ?
O2 O20 O8 80.7(3) . 15_565 ?
O13 O20 O8 49.84(17) . 15_565 ?
O21 O20 O8 96.8(2) 2_665 15_565 ?
O21 O20 O8 150.7(4) . 15_565 ?
O8 O20 O8 99.2(3) . 15_565 ?
O20 O20 Si2 97.99(17) 14 . ?
O25 O20 Si2 121.6(4) 22_565 . ?
O25 O20 Si2 75.7(3) 9 . ?
M2B O20 Si2 67.8(3) . . ?
M2B O20 Si2 108.2(4) 15_565 . ?
M2A O20 Si2 118.7(3) 15_565 . ?
M2A O20 Si2 77.41(18) . . ?
O2 O20 Si2 92.3(3) . . ?
O13 O20 Si2 28.17(10) . . ?
O21 O20 Si2 169.2(4) 2_665 . ?

O21 O20 Si2 123.3(2) . . ?
O8 O20 Si2 27.04(13) . . ?
O8 O20 Si2 77.0(2) 15_565 . ?
O20 O20 Si2 97.99(17) 14 15_565 ?
O25 O20 Si2 75.7(3) 22_565 15_565 ?
O25 O20 Si2 121.6(4) 9 15_565 ?
M2B O20 Si2 108.2(4) . 15_565 ?
M2B O20 Si2 67.8(3) 15_565 15_565 ?
M2A O20 Si2 77.41(18) 15_565 15_565 ?
M2A O20 Si2 118.7(3) . 15_565 ?
O2 O20 Si2 92.3(3) . 15_565 ?
O13 O20 Si2 28.17(10) . 15_565 ?
O21 O20 Si2 123.3(2) 2_665 15_565 ?
O21 O20 Si2 169.2(4) . 15_565 ?
O8 O20 Si2 77.0(2) . 15_565 ?
O8 O20 Si2 27.04(13) 15_565 15_565 ?
Si2 O20 Si2 51.88(16) . 15_565 ?
M2A O21 M2A 115.4(5) 16_655 . ?
M2A O21 O21 120.2(2) 16_655 14 ?
M2A O21 O21 120.2(2) . 14 ?
M2A O21 O23 57.7(2) 16_655 . ?
M2A O21 O23 57.7(2) . . ?
O21 O21 O23 157.7(4) 14 . ?
M2A O21 O25 157.0(5) 16_655 9 ?
M2A O21 O25 56.23(12) . 9 ?
O21 O21 O25 64.0(2) 14 9 ?
O23 O21 O25 109.0(3) . 9 ?
M2A O21 O25 56.23(12) 16_655 10_655 ?
M2A O21 O25 157.0(5) . 10_655 ?
O21 O21 O25 64.0(2) 14 10_655 ?
O23 O21 O25 109.0(3) . 10_655 ?
O25 O21 O25 121.8(5) 9 10_655 ?
M2A O21 M2B 3.47(19) 16_655 16_655 ?
M2A O21 M2B 118.3(5) . 16_655 ?
O21 O21 M2B 118.2(3) 14 16_655 ?
O23 O21 M2B 60.8(3) . 16_655 ?
O25 O21 M2B 159.9(5) 9 16_655 ?
O25 O21 M2B 54.3(2) 10_655 16_655 ?
M2A O21 M2B 118.3(5) 16_655 . ?
M2A O21 M2B 3.47(19) . . ?
O21 O21 M2B 118.2(3) 14 . ?
O23 O21 M2B 60.8(3) . . ?
O25 O21 M2B 54.3(2) 9 . ?
O25 O21 M2B 159.9(5) 10_655 . ?
M2B O21 M2B 121.2(6) 16_655 . ?
M2A O21 O21 100.4(3) 16_655 2_665 ?
M2A O21 O21 100.4(3) . 2_665 ?
O21 O21 O21 90.0 14 2_665 ?
O23 O21 O21 112.3(4) . 2_665 ?
O25 O21 O21 102.2(3) 9 2_665 ?
O25 O21 O21 102.2(3) 10_655 2_665 ?
M2B O21 O21 97.8(3) 16_655 2_665 ?
M2B O21 O21 97.8(3) . 2_665 ?
M2A O21 O20 51.36(17) 16_655 2_665 ?
M2A O21 O20 147.4(5) . 2_665 ?
O21 O21 O20 87.7(3) 14 2_665 ?
O23 O21 O20 102.9(3) . 2_665 ?

O25 O21 O20 147.8(5) 9 2_665 ?
O25 O21 O20 47.9(2) 10_655 2_665 ?
M2B O21 O20 47.9(2) 16_655 2_665 ?
M2B O21 O20 147.4(5) . 2_665 ?
O21 O21 O20 60.3(2) 2_665 2_665 ?
M2A O21 O20 147.4(5) 16_655 . ?
M2A O21 O20 51.36(17) . . ?
O21 O21 O20 87.7(3) 14 . ?
O23 O21 O20 102.9(3) . . ?
O25 O21 O20 47.9(2) 9 . ?
O25 O21 O20 147.8(5) 10_655 . ?
M2B O21 O20 147.4(5) 16_655 . ?
M2B O21 O20 47.9(2) . . ?
O21 O21 O20 60.3(2) 2_665 . ?
O20 O21 O20 120.5(4) 2_665 . ?
M2A O21 O10 76.7(3) 16_655 . ?
M2A O21 O10 76.7(3) . . ?
O21 O21 O10 95.7(3) 14 . ?
O23 O21 O10 62.1(4) . . ?
O25 O21 O10 80.4(3) 9 . ?
O25 O21 O10 80.4(3) 10_655 . ?
M2B O21 O10 79.5(3) 16_655 . ?
M2B O21 O10 79.5(3) . . ?
O21 O21 O10 174.3(3) 2_665 . ?
O20 O21 O10 119.8(2) 2_665 . ?
O20 O21 O10 119.8(2) . . ?
M2A O21 O2 40.09(18) 16_655 2_665 ?
M2A O21 O2 101.1(4) . 2_665 ?
O21 O21 O2 135.67(19) 14 2_665 ?
O23 O21 O2 59.5(3) . 2_665 ?
O25 O21 O2 153.5(4) 9 2_665 ?
O25 O21 O2 84.6(2) 10_655 2_665 ?
M2B O21 O2 39.1(2) 16_655 2_665 ?
M2B O21 O2 102.2(4) . 2_665 ?
O21 O21 O2 65.86(19) 2_665 2_665 ?
O20 O21 O2 48.2(3) 2_665 2_665 ?
O20 O21 O2 108.5(4) . 2_665 ?
O10 O21 O2 109.7(3) . 2_665 ?
M2A O21 O2 101.1(4) 16_655 . ?
M2A O21 O2 40.09(18) . . ?
O21 O21 O2 135.7(2) 14 . ?
O23 O21 O2 59.5(3) . . ?
O25 O21 O2 84.6(2) 9 . ?
O25 O21 O2 153.5(4) 10_655 . ?
M2B O21 O2 102.2(4) 16_655 . ?
M2B O21 O2 39.1(2) . . ?
O21 O21 O2 65.86(19) 2_665 . ?
O20 O21 O2 108.5(4) 2_665 . ?
O20 O21 O2 48.2(3) . . ?
O10 O21 O2 109.7(3) . . ?
O2 O21 O2 69.0(3) 2_665 . ?
M2A O21 O5 106.4(4) 16_655 . ?
M2A O21 O5 35.98(18) . . ?
O21 O21 O5 105.4(2) 14 . ?
O23 O21 O5 58.9(3) . . ?
O25 O21 O5 53.2(2) 9 . ?
O25 O21 O5 122.0(4) 10_655 . ?

M2B O21 O5 109.9(4) 16_655 . ?
M2B O21 O5 38.2(2) . . ?
O21 O21 O5 135.65(16) 2_665 . ?
O20 O21 O5 157.7(4) 2_665 . ?
O20 O21 O5 78.66(16) . . ?
O10 O21 O5 42.45(16) . . ?
O2 O21 O5 117.9(3) 2_665 . ?
O2 O21 O5 74.68(18) . . ?
B2 O22 B2 180(5) 23_655 11 ?
B2 O22 B2 78(5) 23_655 21_655 ?
B2 O22 B2 102(5) 11 21_655 ?
B2 O22 B2 102(5) 23_655 9 ?
B2 O22 B2 78(5) 11 9 ?
B2 O22 B2 180(5) 21_655 9 ?
B2 O22 B1 176(2) 23_655 11 ?
B2 O22 B1 4(2) 11 11 ?
B2 O22 B1 106(2) 21_655 11 ?
B2 O22 B1 74(2) 9 11 ?
B2 O22 B1 4(2) 23_655 23_655 ?
B2 O22 B1 176(2) 11 23_655 ?
B2 O22 B1 74(2) 21_655 23_655 ?
B2 O22 B1 106(2) 9 23_655 ?
B1 O22 B1 180.0(3) 11 23_655 ?
B2 O22 B1 74(2) 23_655 21_655 ?
B2 O22 B1 106(2) 11 21_655 ?
B2 O22 B1 4(2) 21_655 21_655 ?
B2 O22 B1 176(2) 9 21_655 ?
B1 O22 B1 109.9(3) 11 21_655 ?
B1 O22 B1 70.1(3) 23_655 21_655 ?
B2 O22 B1 106(2) 23_655 9 ?
B2 O22 B1 74(2) 11 9 ?
B2 O22 B1 176(2) 21_655 9 ?
B2 O22 B1 4(2) 9 9 ?
B1 O22 B1 70.1(3) 11 9 ?
B1 O22 B1 109.9(3) 23_655 9 ?
B1 O22 B1 180.0(3) 21_655 9 ?
B2 O22 O27 141(2) 23_655 9 ?
B2 O22 O27 39(2) 11 9 ?
B2 O22 O27 141(2) 21_655 9 ?
B2 O22 O27 39(2) 9 9 ?
B1 O22 O27 35.05(15) 11 9 ?
B1 O22 O27 144.95(15) 23_655 9 ?
B1 O22 O27 144.95(15) 21_655 9 ?
B1 O22 O27 35.05(15) 9 9 ?
B2 O22 O27 39(2) 23_655 21_655 ?
B2 O22 O27 141(2) 11 21_655 ?
B2 O22 O27 39(2) 21_655 21_655 ?
B2 O22 O27 141(2) 9 21_655 ?
B1 O22 O27 144.95(15) 11 21_655 ?
B1 O22 O27 35.05(15) 23_655 21_655 ?
B1 O22 O27 35.05(15) 21_655 21_655 ?
B1 O22 O27 144.95(15) 9 21_655 ?
O27 O22 O27 180.0 9 21_655 ?
M2A O23 M2A 116.2(5) 16_655 . ?
M2A O23 O21 58.1(2) 16_655 . ?
M2A O23 O21 58.1(2) . . ?
M2A O23 O19 97.6(4) 16_655 2_665 ?

M2A O23 O19 97.6(4) . 2_665 ?
O21 O23 O19 107.1(6) . 2_665 ?
M2A O23 M2B 122.4(5) 16_655 . ?
M2A O23 M2B 6.6(2) . . ?
O21 O23 M2B 64.5(3) . . ?
O19 O23 M2B 94.2(4) 2_665 . ?
M2A O23 M2B 6.6(2) 16_655 16_655 ?
M2A O23 M2B 122.4(5) . 16_655 ?
O21 O23 M2B 64.5(3) . 16_655 ?
O19 O23 M2B 94.2(4) 2_665 16_655 ?
M2B O23 M2B 128.6(6) . 16_655 ?
M2A O23 O10 81.2(3) 16_655 . ?
M2A O23 O10 81.2(3) . . ?
O21 O23 O10 70.5(4) . . ?
O19 O23 O10 177.6(6) 2_665 . ?
M2B O23 O10 84.7(3) . . ?
M2B O23 O10 84.7(3) 16_655 . ?
M2A O23 O2 47.2(2) 16_655 2_665 ?
M2A O23 O2 114.1(4) . 2_665 ?
O21 O23 O2 77.1(4) . 2_665 ?
O19 O23 O2 50.5(3) 2_665 2_665 ?
M2B O23 O2 116.2(4) . 2_665 ?
M2B O23 O2 44.5(3) 16_655 2_665 ?
O10 O23 O2 128.2(3) . 2_665 ?
M2A O23 O2 114.1(4) 16_655 . ?
M2A O23 O2 47.2(2) . . ?
O21 O23 O2 77.1(4) . . ?
O19 O23 O2 50.5(3) 2_665 . ?
M2B O23 O2 44.5(3) . . ?
M2B O23 O2 116.2(4) 16_655 . ?
O10 O23 O2 128.2(3) . . ?
O2 O23 O2 79.7(4) 2_665 . ?
M2A O23 A1 113.9(3) 16_655 9 ?
M2A O23 A1 113.9(3) . 9 ?
O21 O23 A1 137.5(5) . 9 ?
O19 O23 A1 115.5(5) 2_665 9 ?
M2B O23 A1 110.7(3) . 9 ?
M2B O23 A1 110.7(3) 16_655 9 ?
O10 O23 A1 66.9(3) . 9 ?
O2 O23 A1 131.4(3) 2_665 9 ?
O2 O23 A1 131.4(3) . 9 ?
M2A O23 O5 123.1(4) 16_655 . ?
M2A O23 O5 44.48(17) . . ?
O21 O23 O5 79.2(3) . . ?
O19 O23 O5 132.11(18) 2_665 . ?
M2B O23 O5 44.5(2) . . ?
M2B O23 O5 128.5(5) 16_655 . ?
O10 O23 O5 47.96(18) . . ?
O2 O23 O5 155.0(4) 2_665 . ?
O2 O23 O5 87.45(19) . . ?
A1 O23 O5 72.7(2) 9 . ?
M2A O23 O5 44.48(17) 16_655 16_655 ?
M2A O23 O5 123.1(4) . 16_655 ?
O21 O23 O5 79.2(3) . 16_655 ?
O19 O23 O5 132.11(18) 2_665 16_655 ?
M2B O23 O5 128.5(5) . 16_655 ?
M2B O23 O5 44.5(2) 16_655 16_655 ?

O10 O23 O5 47.96(18) . 16_655 ?
O2 O23 O5 87.45(19) 2_665 16_655 ?
O2 O23 O5 155.0(4) . 16_655 ?
A1 O23 O5 72.7(2) 9 16_655 ?
O5 O23 O5 95.8(4) . 16_655 ?
M2A O23 O19 93.2(3) 16_655 . ?
M2A O23 O19 93.2(3) . . ?
O21 O23 O19 98.7(5) . . ?
O19 O23 O19 8.3(4) 2_665 . ?
M2B O23 O19 90.6(4) . . ?
M2B O23 O19 90.6(4) 16_655 . ?
O10 O23 O19 169.3(5) . . ?
O2 O23 O19 46.2(3) 2_665 . ?
O2 O23 O19 46.2(3) . . ?
A1 O23 O19 123.8(5) 9 . ?
O5 O23 O19 131.67(19) . . ?
O5 O23 O19 131.67(19) 16_655 . ?
M2A O23 Si1 72.1(2) 16_655 2_665 ?
M2A O23 Si1 117.6(4) . 2_665 ?
O21 O23 Si1 100.8(4) . 2_665 ?
O19 O23 Si1 27.43(13) 2_665 2_665 ?
M2B O23 Si1 116.2(4) . 2_665 ?
M2B O23 Si1 67.9(3) 16_655 2_665 ?
O10 O23 Si1 152.07(15) . 2_665 ?
O2 O23 Si1 27.25(18) 2_665 2_665 ?
O2 O23 Si1 72.1(3) . 2_665 ?
A1 O23 Si1 116.8(3) 9 2_665 ?
O5 O23 Si1 158.9(3) . 2_665 ?
O5 O23 Si1 105.01(13) 16_655 2_665 ?
O19 O23 Si1 27.21(11) . 2_665 ?
M2A O23 Si1 117.6(4) 16_655 . ?
M2A O23 Si1 72.1(2) . . ?
O21 O23 Si1 100.8(4) . . ?
O19 O23 Si1 27.43(13) 2_665 . ?
M2B O23 Si1 67.9(3) . . ?
M2B O23 Si1 116.2(4) 16_655 . ?
O10 O23 Si1 152.07(15) . . ?
O2 O23 Si1 72.1(3) 2_665 . ?
O2 O23 Si1 27.25(18) . . ?
A1 O23 Si1 116.8(3) 9 . ?
O5 O23 Si1 105.01(13) . . ?
O5 O23 Si1 158.9(3) 16_655 . ?
O19 O23 Si1 27.21(11) . . ?
Si1 O23 Si1 54.0(2) 2_665 . ?
B1 O24 M3 138.7(7) . . ?
B1 O24 O9 145.2(2) . 14 ?
M3 O24 O9 52.3(3) . 14 ?
B1 O24 O9 145.2(2) . . ?
M3 O24 O9 52.3(3) . . ?
O9 O24 O9 69.5(4) 14 . ?
B1 O24 O12 75.1(5) . . ?
M3 O24 O12 63.6(4) . . ?
O9 O24 O12 102.6(5) 14 . ?
O9 O24 O12 102.6(5) . . ?
B1 O24 O1 59.5(3) . . ?
M3 O24 O1 91.5(4) . . ?
O9 O24 O1 143.6(6) 14 . ?

O9 O24 O1 92.1(2) . . ?
O12 O24 O1 49.5(3) . . ?
B1 O24 O1 59.5(3) . 14 ?
M3 O24 O1 91.5(4) . 14 ?
O9 O24 O1 92.1(2) 14 14 ?
O9 O24 O1 143.6(6) . 14 ?
O12 O24 O1 49.5(3) . 14 ?
O1 O24 O1 84.7(4) . 14 ?
B1 O24 B2 7(2) . . ?
M3 O24 B2 132(2) . . ?
O9 O24 B2 144.7(4) 14 . ?
O9 O24 B2 144.7(4) . . ?
O12 O24 B2 68(2) . . ?
O1 O24 B2 55.2(12) . . ?
O1 O24 B2 55.2(12) 14 . ?
B1 O24 O7 58.9(3) . 14 ?
M3 O24 O7 122.9(3) . 14 ?
O9 O24 O7 87.32(18) 14 14 ?
O9 O24 O7 153.1(5) . 14 ?
O12 O24 O7 95.4(3) . 14 ?
O1 O24 O7 114.8(5) . 14 ?
O1 O24 O7 46.35(19) 14 14 ?
B2 O24 O7 61.1(8) . 14 ?
B1 O24 O7 58.9(3) . . ?
M3 O24 O7 122.9(3) . . ?
O9 O24 O7 153.1(5) 14 . ?
O9 O24 O7 87.32(18) . . ?
O12 O24 O7 95.4(3) . . ?
O1 O24 O7 46.35(19) . . ?
O1 O24 O7 114.8(5) 14 . ?
B2 O24 O7 61.1(8) . . ?
O7 O24 O7 110.8(5) 14 . ?
B1 O24 Si2 78.3(4) . . ?
M3 O24 Si2 65.4(3) . . ?
O9 O24 Si2 116.0(5) 14 . ?
O9 O24 Si2 84.7(3) . . ?
O12 O24 Si2 27.86(13) . . ?
O1 O24 Si2 28.37(16) . . ?
O1 O24 Si2 75.4(3) 14 . ?
B2 O24 Si2 72.1(18) . . ?
O7 O24 Si2 118.8(4) 14 . ?
O7 O24 Si2 73.4(2) . . ?
B1 O24 Si2 78.3(4) . 14 ?
M3 O24 Si2 65.4(3) . 14 ?
O9 O24 Si2 84.7(3) 14 14 ?
O9 O24 Si2 116.0(5) . 14 ?
O12 O24 Si2 27.86(13) . 14 ?
O1 O24 Si2 75.4(3) . 14 ?
O1 O24 Si2 28.37(16) 14 14 ?
B2 O24 Si2 72.1(18) . 14 ?
O7 O24 Si2 73.4(2) 14 14 ?
O7 O24 Si2 118.8(4) . 14 ?
Si2 O24 Si2 55.6(3) . 14 ?
B1 O24 O8 103.3(4) . . ?
M3 O24 O8 46.3(2) . . ?
O9 O24 O8 98.4(4) 14 . ?
O9 O24 O8 59.2(3) . . ?

O12 O24 O8 45.7(2) . . ?
O1 O24 O8 46.1(2) . . ?
O1 O24 O8 94.8(4) 14 . ?
B2 O24 O8 97.5(17) . . ?
O7 O24 O8 141.1(5) 14 . ?
O7 O24 O8 80.11(19) . . ?
Si2 O24 O8 26.19(14) . . ?
Si2 O24 O8 69.0(3) 14 . ?
B1 O24 O8 103.3(4) . 14 ?
M3 O24 O8 46.3(2) . 14 ?
O9 O24 O8 59.2(3) 14 14 ?
O9 O24 O8 98.4(4) . 14 ?
O12 O24 O8 45.7(2) . 14 ?
O1 O24 O8 94.8(4) . 14 ?
O1 O24 O8 46.1(2) 14 14 ?
B2 O24 O8 97.5(17) . 14 ?
O7 O24 O8 80.11(19) 14 14 ?
O7 O24 O8 141.1(5) . 14 ?
Si2 O24 O8 69.0(3) . 14 ?
Si2 O24 O8 26.19(14) 14 14 ?
O8 O24 O8 70.5(3) . 14 ?
B1 O24 O4 149.7(6) . 9 ?
M3 O24 O4 71.6(4) . 9 ?
O9 O24 O4 44.5(2) 14 9 ?
O9 O24 O4 44.5(2) . 9 ?
O12 O24 O4 135.2(5) . 9 ?
O1 O24 O4 135.2(3) . 9 ?
O1 O24 O4 135.2(3) 14 9 ?
B2 O24 O4 157(2) . 9 ?
O7 O24 O4 109.1(3) 14 9 ?
O7 O24 O4 109.1(3) . 9 ?
Si2 O24 O4 127.5(4) . 9 ?
Si2 O24 O4 127.5(4) 14 9 ?
O8 O24 O4 101.3(4) . 9 ?
O8 O24 O4 101.3(4) 14 9 ?
O20 O25 O20 55.4(5) 5 18 ?
O20 O25 M2A 114.7(4) 5 18 ?
O20 O25 M2A 60.0(3) 18 18 ?
O20 O25 M2A 60.0(3) 5 5 ?
O20 O25 M2A 114.7(4) 18 5 ?
M2A O25 M2A 161.3(5) 18 5 ?
O20 O25 M3 126.8(4) 5 5 ?
O20 O25 M3 126.8(4) 18 5 ?
M2A O25 M3 98.4(2) 18 5 ?
M2A O25 M3 98.4(2) 5 5 ?
O20 O25 M2B 113.1(5) 5 18 ?
O20 O25 M2B 57.7(3) 18 18 ?
M2A O25 M2B 9.9(2) 18 18 ?
M2A O25 M2B 169.1(5) 5 18 ?
M3 O25 M2B 92.5(3) 5 18 ?
O20 O25 M2B 57.7(3) 5 5 ?
O20 O25 M2B 113.1(5) 18 5 ?
M2A O25 M2B 169.1(5) 18 5 ?
M2A O25 M2B 9.9(2) 5 5 ?
M3 O25 M2B 92.5(3) 5 5 ?
M2B O25 M2B 170.7(6) 18 5 ?
O20 O25 O21 71.4(4) 5 5 ?

O20 O25 O21 95.1(5) 18 5 ?
M2A O25 O21 106.7(4) 18 5 ?
M2A O25 O21 54.8(3) 5 5 ?
M3 O25 O21 137.9(4) 5 5 ?
M2B O25 O21 116.0(5) 18 5 ?
M2B O25 O21 64.2(3) 5 5 ?
O20 O25 O21 95.1(5) 5 18 ?
O20 O25 O21 71.4(4) 18 18 ?
M2A O25 O21 54.8(3) 18 18 ?
M2A O25 O21 106.7(4) 5 18 ?
M3 O25 O21 137.9(4) 5 18 ?
M2B O25 O21 64.2(3) 18 18 ?
M2B O25 O21 116.0(5) 5 18 ?
O21 O25 O21 52.0(5) 5 18 ?
O20 O25 O8 112.4(5) 5 18 ?
O20 O25 O8 75.1(3) 18 18 ?
M2A O25 O8 55.86(16) 18 18 ?
M2A O25 O8 142.5(4) 5 18 ?
M3 O25 O8 54.5(2) 5 18 ?
M2B O25 O8 46.5(3) 18 18 ?
M2B O25 O8 132.8(5) 5 18 ?
O21 O25 O8 162.5(4) 5 18 ?
O21 O25 O8 110.6(3) 18 18 ?
O20 O25 O8 75.1(3) 5 5 ?
O20 O25 O8 112.4(5) 18 5 ?
M2A O25 O8 142.5(4) 18 5 ?
M2A O25 O8 55.86(16) 5 5 ?
M3 O25 O8 54.5(2) 5 5 ?
M2B O25 O8 132.8(5) 18 5 ?
M2B O25 O8 46.5(3) 5 5 ?
O21 O25 O8 110.6(3) 5 5 ?
O21 O25 O8 162.5(4) 18 5 ?
O8 O25 O8 86.7(4) 18 5 ?
O20 O25 O5 160.7(4) 5 18 ?
O20 O25 O5 105.7(2) 18 18 ?
M2A O25 O5 47.78(15) 18 18 ?
M2A O25 O5 139.2(4) 5 18 ?
M3 O25 O5 58.9(2) 5 18 ?
M2B O25 O5 48.1(2) 18 18 ?
M2B O25 O5 140.9(4) 5 18 ?
O21 O25 O5 118.0(4) 5 18 ?
O21 O25 O5 80.5(3) 18 18 ?
O8 O25 O5 53.38(19) 18 18 ?
O8 O25 O5 113.4(4) 5 18 ?
O20 O25 O5 105.7(2) 5 5 ?
O20 O25 O5 160.7(4) 18 5 ?
M2A O25 O5 139.2(4) 18 5 ?
M2A O25 O5 47.78(15) 5 5 ?
M3 O25 O5 58.9(2) 5 5 ?
M2B O25 O5 140.9(4) 18 5 ?
M2B O25 O5 48.1(2) 5 5 ?
O21 O25 O5 80.5(3) 5 5 ?
O21 O25 O5 118.0(4) 18 5 ?
O8 O25 O5 113.4(4) 18 5 ?
O8 O25 O5 53.38(19) 5 5 ?
O5 O25 O5 92.8(4) 18 5 ?
O20 O25 O12 75.3(4) 5 5 ?

O20 O25 O12 75.3(4) 18 5 ?
M2A O25 O12 97.8(2) 18 5 ?
M2A O25 O12 97.8(2) 5 5 ?
M3 O25 O12 59.2(3) 5 5 ?
M2B O25 O12 87.9(3) 18 5 ?
M2B O25 O12 87.9(3) 5 5 ?
O21 O25 O12 144.6(4) 5 5 ?
O21 O25 O12 144.6(4) 18 5 ?
O8 O25 O12 47.7(2) 18 5 ?
O8 O25 O12 47.7(2) 5 5 ?
O5 O25 O12 97.4(3) 18 5 ?
O5 O25 O12 97.4(3) 5 5 ?
O20 O25 O16 152.2(2) 5 5 ?
O20 O25 O16 152.2(2) 18 5 ?
M2A O25 O16 92.3(2) 18 5 ?
M2A O25 O16 92.3(2) 5 5 ?
M3 O25 O16 49.7(2) 5 5 ?
M2B O25 O16 94.6(3) 18 5 ?
M2B O25 O16 94.6(3) 5 5 ?
O21 O25 O16 95.4(4) 5 5 ?
O21 O25 O16 95.4(4) 18 5 ?
O8 O25 O16 87.6(3) 18 5 ?
O8 O25 O16 87.6(3) 5 5 ?
O5 O25 O16 46.96(18) 18 5 ?
O5 O25 O16 46.96(18) 5 5 ?
O12 O25 O16 108.9(4) 5 5 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 21_666 17_666 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 21_666 13_666 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 17_666 13_666 ?
A2 O26 A2 76.3(2) 21_666 22_565 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 17_666 22_565 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 13_666 22_565 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 21_666 14_556 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 17_666 14_556 ?
A2 O26 A2 76.3(2) 13_666 14_556 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 22_565 14_556 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 21_666 . ?
A2 O26 A2 119.06(3) 17_666 . ?
A2 O26 A2 180.0 13_666 . ?
A2 O26 A2 119.06(3) 22_565 . ?
A2 O26 A2 103.7(2) 14_556 . ?
A2 O26 A2 60.94(3) 21_666 18_655 ?
A2 O26 A2 76.3(2) 17_666 18_655 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 13_666 18_655 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 22_565 18_655 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 14_556 18_655 ?
A2 O26 A2 60.94(3) . 18_655 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 21_666 5 ?
A2 O26 A2 180.0 17_666 5 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 13_666 5 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 22_565 5 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 14_556 5 ?
A2 O26 A2 60.94(3) . 5 ?
A2 O26 A2 103.7(2) 18_655 5 ?
A2 O26 A2 180.0 21_666 9 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 17_666 9 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 13_666 9 ?

A2 O26 A2 103.7(2) 22_565 9 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 14_556 9 ?
A2 O26 A2 60.94(3) . 9 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 18_655 9 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 5 9 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 21_666 6_566 ?
A2 O26 A2 103.7(2) 17_666 6_566 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 13_666 6_566 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 22_565 6_566 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 14_556 6_566 ?
A2 O26 A2 119.06(3) . 6_566 ?
A2 O26 A2 180.000(1) 18_655 6_566 ?
A2 O26 A2 76.3(2) 5 6_566 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 9 6_566 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 21_666 2_665 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 17_666 2_665 ?
A2 O26 A2 103.7(2) 13_666 2_665 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 22_565 2_665 ?
A2 O26 A2 180.0 14_556 2_665 ?
A2 O26 A2 76.3(2) . 2_665 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 18_655 2_665 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 5 2_665 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 9 2_665 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 6_566 2_665 ?
A2 O26 A2 103.7(2) 21_666 10_656 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 17_666 10_656 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 13_666 10_656 ?
A2 O26 A2 180.000(1) 22_565 10_656 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 14_556 10_656 ?
A2 O26 A2 60.94(3) . 10_656 ?
A2 O26 A2 60.94(3) 18_655 10_656 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 5 10_656 ?
A2 O26 A2 76.3(2) 9 10_656 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 6_566 10_656 ?
A2 O26 A2 119.06(3) 2_665 10_656 ?
B1 O27 B1 105.6(18) 3 . ?
B1 O27 B2 91(3) 3 . ?
B1 O27 B2 15(2) . . ?
B1 O27 B2 15(2) 3 3 ?
B1 O27 B2 91(3) . 3 ?
B2 O27 B2 77(5) . 3 ?
B1 O27 O4 102.2(2) 3 14 ?
B1 O27 O4 102.2(2) . 14 ?
B2 O27 O4 105.9(7) . 14 ?
B2 O27 O4 105.9(7) 3 14 ?
B1 O27 O4 102.2(2) 3 . ?
B1 O27 O4 102.2(2) . . ?
B2 O27 O4 105.9(7) . . ?
B2 O27 O4 105.9(7) 3 . ?
O4 O27 O4 139.2(15) 14 . ?
B1 O27 O7 114.2(10) 3 . ?
B1 O27 O7 57.5(2) . . ?
B2 O27 O7 63.2(12) . . ?
B2 O27 O7 106.6(17) 3 . ?
O4 O27 O7 141.6(5) 14 . ?
O4 O27 O7 44.74(14) . . ?
B1 O27 O7 57.5(2) 3 16 ?

B1 027 07 114.2(10) . 16 ?
B2 027 07 106.6(17) . 16 ?
B2 027 07 63.2(12) 3 16 ?
O4 027 07 141.6(5) 14 16 ?
O4 027 07 44.74(14) . 16 ?
O7 027 07 73.0(2) . 16 ?
B1 027 07 57.5(2) 3 3 ?
B1 027 07 114.2(10) . 3 ?
B2 027 07 106.6(17) . 3 ?
B2 027 07 63.2(12) 3 3 ?
O4 027 07 44.74(14) 14 3 ?
O4 027 07 141.6(5) . 3 ?
O7 027 07 167.9(15) . 3 ?
O7 027 07 105.7(3) 16 3 ?
B1 027 07 114.2(10) 3 14 ?
B1 027 07 57.5(2) . 14 ?
B2 027 07 63.2(12) . 14 ?
B2 027 07 106.6(17) 3 14 ?
O4 027 07 44.74(14) 14 14 ?
O4 027 07 141.6(5) . 14 ?
O7 027 07 105.7(3) . 14 ?
O7 027 07 167.9(15) 16 14 ?
O7 027 07 73.0(2) 3 14 ?
B1 027 024 37.7(4) 3 3 ?
B1 027 024 143.2(16) . 3 ?
B2 027 024 129(3) . 3 ?
B2 027 024 52(3) 3 3 ?
O4 027 024 89.8(2) 14 3 ?
O4 027 024 89.8(2) . 3 ?
O7 027 024 126.55(17) . 3 ?
O7 027 024 53.57(11) 16 3 ?
O7 027 024 53.57(11) 3 3 ?
O7 027 024 126.55(17) 14 3 ?
B1 027 024 143.2(16) 3 . ?
B1 027 024 37.7(4) . . ?
B2 027 024 52(3) . . ?
B2 027 024 129(3) 3 . ?
O4 027 024 89.8(2) 14 . ?
O4 027 024 89.8(2) . . ?
O7 027 024 53.57(11) . . ?
O7 027 024 126.55(17) 16 . ?
O7 027 024 126.55(17) 3 . ?
O7 027 024 53.57(11) 14 . ?
O24 027 024 179.1(14) 3 . ?
B1 027 022 52.8(9) 3 5 ?
B1 027 022 52.8(9) . 5 ?
B2 027 022 38(3) . 5 ?
B2 027 022 38(3) 3 5 ?
O4 027 022 110.4(8) 14 5 ?
O4 027 022 110.4(8) . 5 ?
O7 027 022 84.0(7) . 5 ?
O7 027 022 84.0(7) 16 5 ?
O7 027 022 84.0(7) 3 5 ?
O7 027 022 84.0(7) 14 5 ?
O24 027 022 90.5(7) 3 5 ?
O24 027 022 90.5(7) . 5 ?
B1 027 017 83.3(3) 3 10 ?

B1 027 017 135.97(14) . 10 ?
B2 027 017 135.7(6) . 10 ?
B2 027 017 93.8(18) 3 10 ?
O4 027 017 34.8(2) 14 10 ?
O4 027 017 118.3(10) . 10 ?
O7 027 017 156.1(13) . 10 ?
O7 027 017 106.9(4) 16 10 ?
O7 027 017 35.9(3) 3 10 ?
O7 027 017 79.3(3) 14 10 ?
O24 027 017 58.1(3) 3 10 ?
O24 027 017 121.4(6) . 10 ?
O22 027 017 119.9(5) 5 10 ?
B1 027 017 135.97(14) 3 9 ?
B1 027 017 83.3(3) . 9 ?
B2 027 017 93.8(18) . 9 ?
B2 027 017 135.7(6) 3 9 ?
O4 027 017 118.3(10) 14 9 ?
O4 027 017 34.8(2) . 9 ?
O7 027 017 35.9(3) . 9 ?
O7 027 017 79.3(3) 16 9 ?
O7 027 017 156.1(13) 3 9 ?
O7 027 017 106.9(4) 14 9 ?
O24 027 017 121.4(6) 3 9 ?
O24 027 017 58.1(3) . 9 ?
O22 027 017 119.9(5) 5 9 ?
O17 027 017 120.2(10) 10 9 ?

_diffraction_measured_fraction_theta_max	1.000
_diffraction_refl_theta_full	22.48
_diffraction_measured_fraction_theta_full	1.000
_refine_diff_density_max	3.729
_refine_diff_density_min	-1.768
_refine_diff_density_rms	0.400