

Table 5. Selected interatomic distances (Å) and polyhedral volumes (Å<sup>3</sup>)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
T-O(1)	1.659 (2)	1.661 (2)	1.651 (2)	1.659 (3)	1.657 (2)	1.651 (5)	1.652 (4)	1.654 (5)	1.660 (2)	1.660 (2)	1.660 (2)	1.658
T-O(1')	1.656 (2)	1.660 (2)	1.650 (2)	1.661 (3)	1.661 (2)	1.660 (5)	1.661 (4)	1.655 (5)	1.661 (2)	1.657 (2)	1.662 (2)	1.659
T-O(2)	1.660 (1)	1.665 (1)	1.651 (1)	1.659 (2)	1.660 (1)	1.660 (4)	1.662 (3)	1.650 (3)	1.662 (1)	1.660 (1)	1.662 (1)	1.660
T-O(3)	1.660 (2)	1.656 (2)	1.654 (2)	1.663 (3)	1.663 (2)	1.659 (5)	1.661 (3)	1.658 (4)	1.661 (2)	1.664 (2)	1.665 (2)	1.667
<T-O>	1.659	1.660	1.652	1.661	1.660	1.658	1.659	1.654	1.661	1.660	1.662	1.661
T Volume	2.342	2.348	2.311	2.349	2.348	2.336	2.341	2.322	2.351	2.348	2.356	2.352
M1-O(4)(x2)	2.058 (2)	2.044 (3)	2.042 (3)	2.049 (4)	2.047 (2)	2.025 (8)	2.054 (5)	2.050 (7)	2.046 (2)	2.040 (3)	2.048 (2)	2.048
M1-O(3)(x4)	2.093 (2)	2.085 (2)	2.090 (2)	2.094 (3)	2.089 (2)	2.088 (5)	2.088 (3)	2.086 (4)	2.087 (2)	2.091 (2)	2.088 (2)	2.095
<M1-O>	2.081	2.071	2.074	2.079	2.075	2.067	2.077	2.074	2.074	2.074	2.075	2.079
M1 Volume	11.80	11.65	11.66	11.77	11.70	11.56	11.74	11.66	11.67	11.67	11.70	11.76
M2-O(4)(x2)	2.048 (2)	2.048 (2)	2.019 (2)	2.025 (3)	2.030 (2)	2.020 (6)	2.040 (4)	2.005 (5)	2.031 (2)	2.022 (2)	2.033 (2)	2.014
M2-O(3)(x2)	2.079 (2)	2.074 (2)	2.092 (2)	2.095 (3)	2.089 (2)	2.089 (5)	2.079 (3)	2.094 (5)	2.085 (2)	2.091 (2)	2.084 (2)	2.104
M2-O(3')(x2)	2.077 (2)	2.083 (2)	2.078 (2)	2.085 (2)	2.084 (2)	2.079 (5)	2.079 (3)	2.076 (4)	2.081 (2)	2.085 (2)	2.078 (2)	2.085
<M2-O>	2.068	2.068	2.063	2.069	2.068	2.063	2.066	2.058	2.065	2.066	2.065	2.068
M2 Volume	11.60	11.61	11.49	11.60	11.59	11.49	11.58	11.42	11.55	11.55	11.54	11.58
K-O(1)(x4)	2.977 (2)	2.959 (2)	3.003 (2)	2.955 (3)	2.956 (2)	2.968 (6)	2.985 (4)	2.972 (5)	2.947 (2)	2.942 (2)	2.949 (2)	2.955
K-O(1')(x4)	3.369 (2)	3.396 (2)	3.264 (2)	3.365 (3)	3.371 (2)	3.337 (6)	3.341 (4)	3.330 (5)	3.373 (2)	3.374 (2)	3.385 (2)	3.354
K-O(2)(x2)	2.970 (3)	2.950 (3)	2.998 (3)	2.956 (4)	2.955 (3)	2.953 (8)	2.973 (5)	2.978 (6)	2.945 (3)	2.944 (3)	2.945 (3)	2.957
K-O(2')(x2)	3.379 (3)	3.399 (3)	3.269 (3)	3.375 (4)	3.378 (3)	3.347 (8)	3.345 (5)	3.344 (7)	3.378 (3)	3.376 (3)	3.393 (3)	3.360
<K-Oinner>	2.974	2.956	3.001	2.956	2.955	2.963	2.981	2.974	2.946	2.942	2.948	2.955
<K-Oouter>	3.373	3.397	3.266	3.368	3.374	3.340	3.343	3.335	3.375	3.375	3.387	3.356
<K-O>	3.173	3.176	3.133	3.162	3.165	3.152	3.162	3.154	3.161	3.159	3.168	3.156

	14	15	16	17	18	19	21	22	23	24	25	26
T-O(1)	1.649 (5)	1.650 (5)	1.659 (4)	1.661 (2)	1.655 (2)	1.664 (5)	1.654 (2)	1.660 (4)	1.654 (2)	1.666 (4)	1.664 (4)	1.658
T-O(1')	1.659 (5)	1.651 (5)	1.659 (4)	1.660 (2)	1.656 (2)	1.662 (5)	1.655 (2)	1.651 (4)	1.655 (2)	1.669 (4)	1.669 (4)	1.660
T-O(2)	1.651 (4)	1.660 (3)	1.660 (3)	1.669 (1)	1.659 (1)	1.662 (3)	1.654 (1)	1.649 (3)	1.653 (1)	1.667 (3)	1.667 (3)	1.660
T-O(3)	1.662 (4)	1.667 (4)	1.668 (3)	1.652 (2)	1.653 (2)	1.659 (3)	1.666 (2)	1.676 (3)	1.670 (2)	1.662 (3)	1.657 (3)	1.662
<T-O>	1.655	1.657	1.661	1.661	1.656	1.662	1.657	1.659	1.658	1.666	1.665	1.660
T Volume	2.325	2.334	2.353	2.339	2.329	2.355	2.334	2.342	2.338	2.372	2.365	2.347
M1-O(4)(x2)	2.051 (7)	2.066 (8)	2.030 (6)	2.054 (3)	2.047 (4)	2.050 (7)	2.058 (2)	2.050 (7)	2.069 (4)	2.064 (6)	2.051 (6)	2.055
M1-O(3)(x4)	2.094 (4)	2.098 (4)	2.092 (3)	2.094 (2)	2.084 (2)	2.088 (3)	2.114 (2)	2.109 (3)	2.112 (2)	2.095 (3)	2.093 (3)	2.095
<M1-O>	2.080	2.088	2.071	2.081	2.071	2.075	2.095	2.089	2.098	2.084	2.080	2.082
M1 Volume	11.76	11.89	11.60	11.80	11.64	11.72	11.99	11.90	12.05	11.87	11.80	11.82
M2-O(4)(x2)	2.013 (5)	2.038 (6)	1.991 (4)	2.032 (2)	2.032 (3)	2.044 (5)	1.969 (2)	1.977 (5)	1.982 (2)	2.057 (4)	2.059 (4)	2.020
M2-O(3)(x2)	2.097 (5)	2.089 (5)	2.109 (4)	2.096 (3)	2.086 (2)	2.102 (4)	2.131 (2)	2.132 (4)	2.128 (3)	2.085 (3)	2.085 (3)	2.105
M2-O(3')(x2)	2.077 (4)	2.068 (4)	2.082 (3)	2.088 (2)	2.078 (2)	2.089 (4)	2.082 (2)	2.081 (3)	2.081 (2)	2.090 (3)	2.093 (3)	2.085
<M2-O>	2.062	2.065	2.061	2.072	2.065	2.079	2.061	2.063	2.064	2.077	2.079	2.070
M2 Volume	11.49	11.55	11.44	11.67	11.55	11.77	11.45	11.49	11.51	11.76	11.79	11.64
K-O(1)(x4)	2.993 (6)	3.002 (4)	2.938 (4)	2.987 (3)	2.957 (2)	2.986 (5)	2.992 (2)	2.988 (4)	3.004 (3)	2.973 (4)	2.971 (4)	2.972
K-O(1')(x4)	3.322 (7)	3.338 (5)	3.378 (4)	3.341 (3)	3.343 (2)	3.348 (5)	3.249 (2)	3.244 (4)	3.240 (3)	3.389 (4)	3.390 (4)	3.361
K-O(2)(x2)	2.991 (8)	2.992 (8)	2.937 (5)	2.989 (4)	2.950 (3)	2.990 (7)	2.994 (3)	2.995 (5)	3.001 (4)	2.979 (5)	2.977 (5)	2.970
K-O(2')(x2)	3.329 (8)	3.348 (8)	3.388 (5)	3.344 (4)	3.353 (3)	3.351 (7)	3.268 (3)	3.262 (5)	3.260 (4)	3.384 (5)	3.383 (5)	3.373
<K-Oinner>	2.993	2.999	2.938	2.987	2.955	2.988	2.993	2.990	3.003	2.975	2.973	2.971
<K-Oouter>	3.324	3.341	3.382	3.342	3.346	3.349	3.255	3.250	3.247	3.387	3.388	3.365
<K-O>	3.158	3.170	3.160	3.165	3.151	3.169	3.124	3.120	3.125	3.181	3.180	3.168

Note: Estimated standard deviations in parentheses refer to the last digit.