

data_gme-100k

```

_audit_creation_method          SHELXL
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common           ?
_chemical_formula_moiety        ?
_chemical_formula_structural    ?
_chemical_formula_analytical    ?
_chemical_formula_sum           'Al8 Ca0 Na8 O72 Si16'
_chemical_formula_weight        2001.20
_chemical_melting_point         ?
_chemical_compound_source       ?

```

```

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scatter_dispersion_real
_atom_type_scatter_dispersion_imag
_atom_type_scatter_source
'Si' 'Si' 0.0817 0.0704
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Ca' 'Ca' 0.2262 0.3064
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Al' 'Al' 0.0645 0.0514
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'O' 'O' 0.0106 0.0060
'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
'Na' 'Na' 0.0362 0.0249
'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, x, z+1/2'
'-y, x-y, z'
'-x, -y, z+1/2'
'-x+y, -x, z'
'y, -x+y, z+1/2'
'-x+y, y, z'
'-x, -x+y, z+1/2'
'-y, -x, z'
'x-y, -y, z+1/2'
'x, x-y, z'
'y, x, z+1/2'
'-x, -y, -z'
'-x+y, -x, -z-1/2'
'y, -x+y, -z'
'x, y, -z-1/2'
'x-y, x, -z'
'-y, x-y, -z-1/2'
'x-y, -y, -z'
'x, x-y, -z-1/2'
'y, x, -z'
'-x+y, y, -z-1/2'
'-x, -x+y, -z'
'-y, -x, -z-1/2'

```

```

_cell_length_a                  13.7430(3)
_cell_length_b                  13.7430(3)
_cell_length_c                  10.0430(2)
_cell_angle_alpha               90.00

```

4351_1_supp_69399_10k3zm.txt

```

_cell_angle_beta          90.00
_cell_angle_gamma        120.00
_cell_volume              1642.70(6)
_cell_formula_units_Z    1
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used ?
_cell_measurement_theta_min ?
_cell_measurement_theta_max ?

_expt1_crystal_description ?
_expt1_crystal_colour     ?
_expt1_crystal_size_max  ?
_expt1_crystal_size_mid  ?
_expt1_crystal_size_min  ?
_expt1_crystal_density_meas ?
_expt1_crystal_density_diffn 2.023
_expt1_crystal_density_method ?
_expt1_crystal_F_000      992
_expt1_absorpt_coefficient_mu 0.612
_expt1_absorpt_correction_type ?
_expt1_absorpt_correction_T_min ?
_expt1_absorpt_correction_T_max ?

_expt1_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 ?
_diffn_measurement_method ?
_diffn_standards_number    ?
_diffn_standards_interval_count ?
_diffn_standards_interval_time ?
_diffn_standards_decay_%   ?
_diffn_reflns_number       1146
_diffn_reflns_av_R_equivalents 0.0000
_diffn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0224
_diffn_reflns_limit_h_min  -10
_diffn_reflns_limit_h_max   0
_diffn_reflns_limit_k_min   0
_diffn_reflns_limit_k_max  22
_diffn_reflns_limit_l_min   0
_diffn_reflns_limit_l_max  16
_diffn_reflns_theta_min     2.96
_diffn_reflns_theta_max    34.89
_reflns_number_total        1146
_reflns_number_observed     1146
_reflns_observed_criterion  >2sigma(I)

_computing_data_collection ?
_computing_cell_refinement ?
_computing_data_reduction ?
_computing_structure_solution 'SHELXS-86 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-93 (Sheldrick, 1993)'
_computing_molecular_graphics ?
_computing_publication_material ?

```

_refine_special_details

```

;
Refinement on F2 for ALL reflections except for 0 with very negative F2
or flagged by the user for potential systematic errors. Weighted R-factors
wR and all goodnesses of fit S are based on F2, conventional R-factors R
are based on F, with F set to zero for negative F2. The observed criterion

```

of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating `_R_factor_obs` 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 w=1/[\s^2^(Fo^2)+(0.0641P)^2+1.2444P] 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     ?
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns         1146
_refine_ls_number_parameters      74
_refine_ls_number_restraints      0
_refine_ls_R_factor_all           0.0396
_refine_ls_R_factor_obs           0.0396
_refine_ls_wR_factor_all          0.1084
_refine_ls_wR_factor_obs          0.1084
_refine_ls_goodness_of_fit_all    1.070
_refine_ls_goodness_of_fit_obs    1.070
_refine_ls_restrained_S_all       1.070
_refine_ls_restrained_S_obs       1.070
_refine_ls_shift/esd_max          -3.548
_refine_ls_shift/esd_mean         0.151
```

```
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_thermal_displace_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_group
Al1 Al 0.44107(3) 0.10587(3) 0.09384(3) 0.01144(13) Uani 0.31 d P .
Si1 Si 0.44107(3) 0.10587(3) 0.09384(3) 0.01144(13) Uani 0.69 d P .
O1 O 0.41612(16) 0.20806(8) 0.05859(23) 0.0344(4) Uani 1 d S .
O2 O 0.85016(14) 0.42508(7) 0.05850(15) 0.0227(3) Uani 1 d S .
O3 O 0.41192(15) 0.06547(19) 0.2500 0.0316(4) Uani 1 d S .
O4 O 0.35533(13) 0.0000 0.0000 0.0300(4) Uani 1 d S .
Na1 Na 0.3333 0.6667 0.0697(2) 0.0336(4) Uani 1 d S .
Na2 Na 0.1238(3) 0.2476(7) 0.0698(9) 0.075(2) Uani 0.246(4) d SP .
Na3 Na 0.2614(41) 0.4530(47) 0.2500 0.134(18) Uiso 0.062(6) d SP .
W1 O 0.2123(5) 0.5378(6) 0.2500 0.0462(14) Uani 0.418(6) d SP .
W2 O 0.3304(8) 0.1361(6) -0.2500 0.088(3) Uani 0.418(7) d SP .
W4 O 0.0855(5) 0.1710(10) 0.0235(20) 0.148(7) Uani 0.290(8) d SP .
W5 O 0.1715(54) 0.5857(27) 0.2500 0.037(12) Uiso 0.032(10) d SP .
W6 O 0.1445(51) -0.0357(49) -0.2500 0.033(12) Uiso 0.037(5) d SP .
W7 O 0.5003(93) 0.4032(106) -0.2500 0.148(41) Uiso 0.054(10) d SP .
W8 O -0.2170(45) -0.0287(49) 0.2500 0.047(12) Uiso 0.048(6) 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
Al1 0.0139(2) 0.0113(2) 0.0097(2) -0.00228(11) -0.00152(11) 0.00668(13)
```

4351_1_supp_69399_10k3zm.txt

```

Si1 0.0139(2) 0.0113(2) 0.0097(2) -0.00228(11) -0.00152(11) 0.00668(13)
O1 0.0348(10) 0.0192(5) 0.0544(11) -0.0041(4) -0.0082(9) 0.0174(5)
O2 0.0304(8) 0.0218(5) 0.0187(6) -0.0030(3) -0.0061(6) 0.0152(4)
O3 0.0213(7) 0.0497(11) 0.0124(6) 0.000 0.000 0.0091(8)
O4 0.0293(6) 0.0244(8) 0.0346(9) -0.0171(7) -0.0085(4) 0.0122(4)
Na1 0.0338(6) 0.0338(6) 0.0331(9) 0.000 0.000 0.0169(3)
Na2 0.081(4) 0.057(4) 0.079(5) 0.036(4) 0.018(2) 0.029(2)
W1 0.041(3) 0.067(4) 0.024(2) 0.000 0.000 0.022(3)
W2 0.123(8) 0.045(3) 0.107(6) 0.000 0.000 0.051(4)
W4 0.165(12) 0.039(6) 0.197(17) 0.055(9) 0.028(5) 0.020(3)

```

_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
A11 O4 1.6368(6) . ?
A11 O1 1.6422(7) . ?
A11 O3 1.6450(7) . ?
A11 O2 1.6624(7) 5_665 ?
A11 Na2 3.238(6) 15 ?
A11 Na1 3.5201(11) 13_665 ?
A11 W2 3.707(6) 19 ?
A11 W1 3.727(2) 21 ?
A11 W4 3.770(10) 15 ?
A11 W2 3.879(4) . ?
A11 W1 4.142(5) 14_556 ?
A11 W2 4.191(4) 20 ?
Si1 O4 1.6368(6) . ?
Si1 O1 1.6422(7) . ?
Si1 O3 1.6450(7) . ?
Si1 O2 1.6624(7) 5_665 ?
Si1 Na2 3.238(6) 15 ?
Si1 Na1 3.5201(11) 13_665 ?
Si1 W2 3.707(6) 19 ?
Si1 W1 3.727(2) 21 ?
Si1 W4 3.770(10) 15 ?
Si1 W2 3.879(4) . ?
Si1 W1 4.142(5) 14_556 ?
Si1 W2 4.191(4) 20 ?
O1 Si1 1.6422(7) 11 ?
O1 A11 1.6422(7) 11 ?
O1 Na2 2.385(7) 15 ?
O1 W4 3.033(11) 15 ?
O1 W2 3.287(4) 20 ?
O1 W2 3.287(4) . ?
O1 W1 3.508(4) 21 ?
O1 W1 3.508(4) 15 ?
O1 W4 4.327(3) 5 ?
O1 W4 4.325(3) . ?
O2 Si1 1.6624(7) 3_655 ?
O2 A11 1.6624(7) 3_655 ?
O2 Si1 1.6622(7) 9_665 ?
O2 A11 1.6622(7) 9_665 ?
O2 Na1 2.535(2) 13_665 ?
O2 W1 3.322(3) 8_654 ?
O2 W1 3.322(3) 13_665 ?

```

O2 W1 4.113(4) 2_654 ?
O2 W1 4.113(4) 19_665 ?
O3 Si1 1.6450(7) 16_556 ?
O3 A11 1.6450(7) 16_556 ?
O3 W2 2.887(7) 19 ?
O3 W1 3.384(6) 14_556 ?
O3 W2 3.685(7) 15 ?
O3 W1 4.206(6) 9_655 ?
O4 Si1 1.6368(6) 19 ?
O4 A11 1.6368(6) 19 ?
O4 Na2 2.846(4) 5 ?
O4 Na2 2.846(4) 15 ?
O4 W2 3.250(5) 19 ?
O4 W2 3.250(5) . ?
O4 W4 3.293(8) 5 ?
O4 W4 3.291(8) 15 ?
O4 W1 3.714(4) 14_556 ?
O4 W1 3.714(4) 21 ?
Na1 W1 2.497(5) 14_566 ?
Na1 W1 2.497(5) 20_566 ?
Na1 W1 2.497(5) 9_665 ?
Na1 W1 2.497(5) . ?
Na1 W1 2.497(5) 3_665 ?
Na1 W1 2.497(5) 7 ?
Na1 O2 2.535(2) 13_665 ?
Na1 O2 2.535(2) 17 ?
Na1 O2 2.535(2) 15_565 ?
Na1 W5 2.64(5) 14_566 ?
Na1 W5 2.64(5) . ?
Na1 W5 2.64(5) 3_665 ?
Na2 W4 1.02(2) . ?
Na2 W2 2.099(11) 2 ?
Na2 W2 2.099(11) 21 ?
Na2 W8 2.15(3) 9 ?
Na2 W8 2.15(3) 14_556 ?
Na2 O1 2.385(7) 17 ?
Na2 W6 2.64(4) 21 ?
Na2 W6 2.64(4) 2 ?
Na2 W4 2.774(12) 17 ?
Na2 W4 2.776(12) 15 ?
Na2 O4 2.846(4) 3 ?
Na2 O4 2.846(4) 17 ?
Na3 Na3 0.96(9) 7 ?
Na3 W1 1.05(5) 7 ?
Na3 W2 1.46(5) 2 ?
Na3 W1 1.61(5) . ?
Na3 W2 1.70(5) 21 ?
Na3 W7 1.72(12) 21 ?
Na3 W5 1.98(5) 3_665 ?
Na3 W7 2.64(12) 2 ?
Na3 W5 2.66(6) . ?
Na3 W7 2.86(12) 13_665 ?
Na3 W8 2.88(8) 14_556 ?
Na3 W1 2.91(6) 3_665 ?
W1 Na3 1.05(5) 7 ?
W1 W5 1.06(3) . ?
W1 W7 1.40(11) 2 ?
W1 W1 1.555(12) 7 ?
W1 W1 1.879(14) 20_566 ?
W1 W7 2.11(11) 19_565 ?
W1 Na1 2.497(5) 14_566 ?
W1 W2 2.498(11) 21 ?
W1 W5 2.51(5) 3_665 ?
W1 W2 2.736(11) 2 ?
W1 Na3 2.91(6) 14_566 ?
W2 W2 0.800(14) 20 ?
W2 Na3 1.46(5) 15 ?
W2 W8 1.52(5) 13 ?

W2 Na3 1.70(5) 21 ?
W2 W8 2.01(6) 8_554 ?
W2 Na2 2.099(11) 6_554 ?
W2 Na2 2.099(11) 15 ?
W2 W6 2.46(6) ?
W2 W1 2.498(11) 21 ?
W2 W7 2.64(11) 20 ?
W2 W1 2.736(11) 15 ?
W2 O3 2.887(7) 19 ?
W2 W6 2.91(6) 20 ?
W4 W4 2.09(2) 17 ?
W4 W4 2.09(2) 15 ?
W4 W8 2.58(3) 14_556 ?
W4 W8 2.58(3) 9 ?
W4 W6 2.73(4) 2 ?
W4 W6 2.73(4) 21 ?
W4 Na2 2.776(12) 17 ?
W4 Na2 2.774(12) 15 ?
W4 W6 2.85(2) 3 ?
W4 W6 2.85(3) 20 ?
W4 W2 2.99(2) 2 ?
W4 W2 2.99(2) 21 ?
W5 W1 1.06(3) 20_566 ?
W5 W7 1.11(11) 19_565 ?
W5 W7 1.10(11) 2 ?
W5 Na3 1.98(5) 14_566 ?
W5 Na3 1.97(5) 7 ?
W5 W1 2.51(5) 14_566 ?
W5 W1 2.51(5) 7 ?
W5 Na1 2.64(5) 14_566 ?
W5 Na3 2.67(6) 20_566 ?
W6 W8 0.95(7) 13 ?
W6 W6 1.49(12) 9 ?
W6 Na2 2.64(4) 15 ?
W6 Na2 2.64(4) 6_554 ?
W6 W4 2.73(4) 15 ?
W6 W4 2.73(4) 6_554 ?
W6 W4 2.85(3) 14 ?
W6 W4 2.85(3) 5 ?
W6 W2 2.91(6) 20 ?
W6 W4 3.57(5) 4_554 ?
W6 W4 3.57(5) 13 ?
W7 W5 1.10(11) 15 ?
W7 W7 1.33(22) 9_665 ?
W7 W1 1.40(11) 15 ?
W7 Na3 1.72(12) 21 ?
W7 W1 2.11(11) 19_665 ?
W7 Na3 2.64(12) 15 ?
W7 W2 2.64(11) 20 ?
W7 Na3 2.86(12) 13_665 ?
W7 W1 2.92(12) 21 ?
W7 W1 3.61(11) 13_665 ?
W7 W2 3.96(11) 14_665 ?
W8 W6 0.95(7) 13 ?
W8 W2 1.52(5) 13 ?
W8 W2 2.01(6) 8 ?
W8 Na2 2.15(3) 3 ?
W8 Na2 2.15(3) 18_556 ?
W8 W4 2.58(3) 3 ?
W8 W4 2.58(3) 18_556 ?
W8 Na3 2.88(8) 3 ?
W8 W4 3.23(3) 2 ?
W8 W4 3.23(3) 17 ?
W8 W1 3.83(5) 9 ?
W8 W1 4.25(5) 3 ?

loop_
_geom_angle_atom_site_label_1

_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle_publ_flag
O4 A11 O1 105.71(8) . . ?
O4 A11 O3 107.66(7) . . ?
O1 A11 O3 111.99(11) . . ?
O4 A11 O2 111.97(8) . 5_665 ?
O1 A11 O2 108.03(9) . 5_665 ?
O3 A11 O2 111.39(8) . 5_665 ?
O4 A11 Na2 61.43(8) . 15 ?
O1 A11 Na2 45.18(9) . 15 ?
O3 A11 Na2 116.0(2) . 15 ?
O2 A11 Na2 131.7(2) 5_665 15 ?
O4 A11 Na1 116.34(4) . 13_665 ?
O1 A11 Na1 66.91(7) . 13_665 ?
O3 A11 Na1 134.62(8) . 13_665 ?
O2 A11 Na1 41.79(5) 5_665 13_665 ?
Na2 A11 Na1 95.04(15) 15 13_665 ?
O4 A11 W2 61.13(6) . 19 ?
O1 A11 W2 111.7(2) . 19 ?
O3 A11 W2 48.30(8) . 19 ?
O2 A11 W2 140.0(2) 5_665 19 ?
Na2 A11 W2 82.2(2) 15 19 ?
Na1 A11 W2 176.95(8) 13_665 19 ?
O4 A11 W1 76.85(9) . 21 ?
O1 A11 W1 69.55(12) . 21 ?
O3 A11 W1 174.17(12) . 21 ?
O2 A11 W1 63.05(12) 5_665 21 ?
Na2 A11 W1 69.2(2) 15 21 ?
Na1 A11 W1 40.18(9) 13_665 21 ?
W2 A11 W1 136.97(10) 19 21 ?
O4 A11 W4 60.61(15) . 15 ?
O1 A11 W4 51.50(11) . 15 ?
O3 A11 W4 102.0(3) . 15 ?
O2 A11 W4 146.1(3) 5_665 15 ?
Na2 A11 W4 14.4(3) 15 15 ?
Na1 A11 W4 108.5(2) 13_665 15 ?
W2 A11 W4 68.9(3) 19 15 ?
W1 A11 W4 83.4(3) 21 15 ?
O4 A11 W2 55.66(11) . . ?
O1 A11 W2 57.03(13) . . ?
O3 A11 W2 147.41(15) . . ?
O2 A11 W2 101.13(14) 5_665 . ?
Na2 A11 W2 32.8(2) 15 . ?
Na1 A11 W2 73.02(13) 13_665 . ?
W2 A11 W2 103.9(2) 19 . ?
W1 A11 W2 38.3(2) 21 . ?
W4 A11 W2 46.0(3) 15 . ?
O4 A11 W1 63.51(5) . 14_556 ?
O1 A11 W1 148.28(12) . 14_556 ?
O3 A11 W1 51.87(9) . 14_556 ?
O2 A11 W1 103.60(11) 5_665 14_556 ?
Na2 A11 W1 112.10(14) 15 14_556 ?
Na1 A11 W1 144.76(9) 13_665 14_556 ?
W2 A11 W1 36.6(2) 19 14_556 ?
W1 A11 W1 129.68(8) 21 14_556 ?
W4 A11 W1 101.3(2) 15 14_556 ?
W2 A11 W1 119.09(12) . 14_556 ?
O4 A11 W2 65.10(12) . 20 ?
O1 A11 W2 46.62(11) . 20 ?
O3 A11 W2 145.18(13) . 20 ?
O2 A11 W2 102.41(13) 5_665 20 ?
Na2 A11 W2 29.4(2) 15 20 ?
Na1 A11 W2 69.16(14) 13_665 20 ?
W2 A11 W2 107.9(2) 19 20 ?

W1 A11 W2 39.89(14) 21 20 ?
W4 A11 W2 43.7(3) 15 20 ?
W2 A11 W2 10.5(2) . 20 ?
W1 A11 W2 127.94(14) 14_556 20 ?
O4 Si1 O1 105.71(8) . . ?
O4 Si1 O3 107.66(7) . . ?
O1 Si1 O3 111.99(11) . . ?
O4 Si1 O2 111.97(8) . 5_665 ?
O1 Si1 O2 108.03(9) . 5_665 ?
O3 Si1 O2 111.39(8) . 5_665 ?
O4 Si1 Na2 61.43(8) . 15 ?
O1 Si1 Na2 45.18(9) . 15 ?
O3 Si1 Na2 116.0(2) . 15 ?
O2 Si1 Na2 131.7(2) 5_665 15 ?
O4 Si1 Na1 116.34(4) . 13_665 ?
O1 Si1 Na1 66.91(7) . 13_665 ?
O3 Si1 Na1 134.62(8) . 13_665 ?
O2 Si1 Na1 41.79(5) 5_665 13_665 ?
Na2 Si1 Na1 95.04(15) 15 13_665 ?
O4 Si1 W2 61.13(6) . 19 ?
O1 Si1 W2 111.7(2) . 19 ?
O3 Si1 W2 48.30(8) . 19 ?
O2 Si1 W2 140.0(2) 5_665 19 ?
Na2 Si1 W2 82.2(2) 15 19 ?
Na1 Si1 W2 176.95(8) 13_665 19 ?
O4 Si1 W1 76.85(9) . 21 ?
O1 Si1 W1 69.55(12) . 21 ?
O3 Si1 W1 174.17(12) . 21 ?
O2 Si1 W1 63.05(12) 5_665 21 ?
Na2 Si1 W1 69.2(2) 15 21 ?
Na1 Si1 W1 40.18(9) 13_665 21 ?
W2 Si1 W1 136.97(10) 19 21 ?
O4 Si1 W4 60.61(15) . 15 ?
O1 Si1 W4 51.50(11) . 15 ?
O3 Si1 W4 102.0(3) . 15 ?
O2 Si1 W4 146.1(3) 5_665 15 ?
Na2 Si1 W4 14.4(3) 15 15 ?
Na1 Si1 W4 108.5(2) 13_665 15 ?
W2 Si1 W4 68.9(3) 19 15 ?
W1 Si1 W4 83.4(3) 21 15 ?
O4 Si1 W2 55.66(11) . . ?
O1 Si1 W2 57.03(13) . . ?
O3 Si1 W2 147.41(15) . . ?
O2 Si1 W2 101.13(14) 5_665 . ?
Na2 Si1 W2 32.8(2) 15 . ?
Na1 Si1 W2 73.02(13) 13_665 . ?
W2 Si1 W2 103.9(2) 19 . ?
W1 Si1 W2 38.3(2) 21 . ?
W4 Si1 W2 46.0(3) 15 . ?
O4 Si1 W1 63.51(5) . 14_556 ?
O1 Si1 W1 148.28(12) . 14_556 ?
O3 Si1 W1 51.87(9) . 14_556 ?
O2 Si1 W1 103.60(11) 5_665 14_556 ?
Na2 Si1 W1 112.10(14) 15 14_556 ?
Na1 Si1 W1 144.76(9) 13_665 14_556 ?
W2 Si1 W1 36.6(2) 19 14_556 ?
W1 Si1 W1 129.68(8) 21 14_556 ?
W4 Si1 W1 101.3(2) 15 14_556 ?
W2 Si1 W1 119.09(12) . 14_556 ?
O4 Si1 W2 65.10(12) . 20 ?
O1 Si1 W2 46.62(11) . 20 ?
O3 Si1 W2 145.18(13) . 20 ?
O2 Si1 W2 102.41(13) 5_665 20 ?
Na2 Si1 W2 29.4(2) 15 20 ?
Na1 Si1 W2 69.16(14) 13_665 20 ?
W2 Si1 W2 107.9(2) 19 20 ?
W1 Si1 W2 39.89(14) 21 20 ?
W4 Si1 W2 43.7(3) 15 20 ?

W2 Si1 W2 10.5(2) . 20 ?
 W1 Si1 W2 127.94(14) 14_556 20 ?
 Si1 01 A11 0.00(4) 11 11 ?
 Si1 01 A11 147.32(14) 11 . ?
 A11 01 A11 147.32(14) 11 . ?
 Si1 01 Si1 147.32(14) 11 . ?
 A11 01 Si1 147.32(14) 11 . ?
 A11 01 Si1 0.00(3) . . ?
 Si1 01 Na2 105.59(7) 11 15 ?
 A11 01 Na2 105.59(7) 11 15 ?
 A11 01 Na2 105.58(7) . 15 ?
 Si1 01 Na2 105.58(7) . 15 ?
 Si1 01 W4 103.47(9) 11 15 ?
 A11 01 W4 103.47(9) 11 15 ?
 A11 01 W4 103.43(9) . 15 ?
 Si1 01 W4 103.43(9) . 15 ?
 Na2 01 W4 17.0(4) 15 15 ?
 Si1 01 W2 98.20(15) 11 20 ?
 A11 01 W2 98.20(15) 11 20 ?
 A11 01 W2 112.09(14) . 20 ?
 Si1 01 W2 112.09(14) . 20 ?
 Na2 01 W2 39.6(3) 15 20 ?
 W4 01 W2 56.3(4) 15 20 ?
 Si1 01 W2 112.09(14) 11 . ?
 A11 01 W2 112.09(14) 11 . ?
 A11 01 W2 98.20(15) . . ?
 Si1 01 W2 98.20(15) . . ?
 Na2 01 W2 39.6(3) 15 . ?
 W4 01 W2 56.3(4) 15 . ?
 W2 01 W2 14.0(2) 20 . ?
 Si1 01 W1 109.17(13) 11 21 ?
 A11 01 W1 109.17(13) 11 21 ?
 A11 01 W1 84.44(12) . 21 ?
 Si1 01 W1 84.44(12) . 21 ?
 Na2 01 W1 82.5(2) 15 21 ?
 W4 01 W1 99.0(4) 15 21 ?
 W2 01 W1 47.3(2) 20 21 ?
 W2 01 W1 43.0(2) . 21 ?
 Si1 01 W1 84.44(12) 11 15 ?
 A11 01 W1 84.44(12) 11 15 ?
 A11 01 W1 109.17(13) . 15 ?
 Si1 01 W1 109.17(13) . 15 ?
 Na2 01 W1 82.5(2) 15 15 ?
 W4 01 W1 99.1(4) 15 15 ?
 W2 01 W1 43.0(2) 20 15 ?
 W2 01 W1 47.3(2) . 15 ?
 W1 01 W1 25.6(2) 21 15 ?
 Si1 01 W4 124.9(2) 11 5 ?
 A11 01 W4 124.9(2) 11 5 ?
 A11 01 W4 78.0(2) . 5 ?
 Si1 01 W4 78.0(2) . 5 ?
 Na2 01 W4 36.0(3) 15 5 ?
 W4 01 W4 26.1(4) 15 5 ?
 W2 01 W4 72.0(3) 20 5 ?
 W2 01 W4 65.9(3) . 5 ?
 W1 01 W4 102.3(2) 21 5 ?
 W1 01 W4 113.2(3) 15 5 ?
 Si1 01 W4 78.0(2) 11 . ?
 A11 01 W4 78.0(2) 11 . ?
 A11 01 W4 124.9(2) . . ?
 Si1 01 W4 124.9(2) . . ?
 Na2 01 W4 36.0(3) 15 . ?
 W4 01 W4 26.2(4) 15 . ?
 W2 01 W4 65.9(3) 20 . ?
 W2 01 W4 72.0(3) . . ?
 W1 01 W4 113.2(3) 21 . ?
 W1 01 W4 102.3(2) 15 . ?
 W4 01 W4 48.0(3) 5 . ?

S11 02 A11 0.00(3) 3_655 3_655 ?
 S11 02 S11 135.29(10) 3_655 9_665 ?
 A11 02 S11 135.29(10) 3_655 9_665 ?
 S11 02 A11 135.29(10) 3_655 9_665 ?
 A11 02 A11 135.29(10) 3_655 9_665 ?
 S11 02 A11 0.00(4) 9_665 9_665 ?
 S11 02 Na1 112.30(5) 3_655 13_665 ?
 A11 02 Na1 112.30(5) 3_655 13_665 ?
 S11 02 Na1 112.31(5) 9_665 13_665 ?
 A11 02 Na1 112.31(5) 9_665 13_665 ?
 S11 02 W1 90.46(13) 3_655 8_654 ?
 A11 02 W1 90.46(13) 3_655 8_654 ?
 S11 02 W1 122.08(13) 9_665 8_654 ?
 A11 02 W1 122.08(13) 9_665 8_654 ?
 Na1 02 W1 48.19(11) 13_665 8_654 ?
 S11 02 W1 122.08(13) 3_655 13_665 ?
 A11 02 W1 122.08(13) 3_655 13_665 ?
 S11 02 W1 90.47(13) 9_665 13_665 ?
 A11 02 W1 90.47(13) 9_665 13_665 ?
 Na1 02 W1 48.19(11) 13_665 13_665 ?
 W1 02 W1 32.8(2) 8_654 13_665 ?
 S11 02 W1 86.26(10) 3_655 2_654 ?
 A11 02 W1 86.26(10) 3_655 2_654 ?
 S11 02 W1 134.98(10) 9_665 2_654 ?
 A11 02 W1 134.98(10) 9_665 2_654 ?
 Na1 02 W1 34.87(10) 13_665 2_654 ?
 W1 02 W1 20.9(2) 8_654 2_654 ?
 W1 02 W1 45.7(2) 13_665 2_654 ?
 S11 02 W1 134.98(10) 3_655 19_665 ?
 A11 02 W1 134.98(10) 3_655 19_665 ?
 S11 02 W1 86.26(10) 9_665 19_665 ?
 A11 02 W1 86.26(10) 9_665 19_665 ?
 Na1 02 W1 34.87(10) 13_665 19_665 ?
 W1 02 W1 45.7(2) 8_654 19_665 ?
 W1 02 W1 20.9(2) 13_665 19_665 ?
 W1 02 W1 49.3(2) 2_654 19_665 ?
 S11 03 A11 0.00(5) 16_556 16_556 ?
 S11 03 A11 144.88(15) 16_556 . ?
 A11 03 A11 144.88(15) 16_556 . ?
 S11 03 S11 144.88(15) 16_556 . ?
 A11 03 S11 144.88(15) 16_556 . ?
 A11 03 S11 0.00(5) . . ?
 S11 03 W2 106.53(7) 16_556 19 ?
 A11 03 W2 106.53(7) 16_556 19 ?
 A11 03 W2 106.53(7) . 19 ?
 S11 03 W2 106.53(7) . 19 ?
 S11 03 W1 105.64(8) 16_556 14_556 ?
 A11 03 W1 105.64(8) 16_556 14_556 ?
 A11 03 W1 105.64(8) . 14_556 ?
 S11 03 W1 105.64(8) . 14_556 ?
 W2 03 W1 46.1(2) 19 14_556 ?
 S11 03 W2 106.61(7) 16_556 15 ?
 A11 03 W2 106.61(7) 16_556 15 ?
 A11 03 W2 106.61(7) . 15 ?
 S11 03 W2 106.61(7) . 15 ?
 W2 03 W2 0.83(4) 19 15 ?
 W1 03 W2 45.3(2) 14_556 15 ?
 S11 03 W1 100.58(8) 16_556 9_655 ?
 A11 03 W1 100.58(8) 16_556 9_655 ?
 A11 03 W1 100.58(8) . 9_655 ?
 S11 03 W1 100.58(8) . 9_655 ?
 W2 03 W1 72.0(2) 19 9_655 ?
 W1 03 W1 25.9(2) 14_556 9_655 ?
 W2 03 W1 71.2(2) 15 9_655 ?
 S11 04 A11 0.00(5) . . ?
 S11 04 S11 148.03(12) . 19 ?
 A11 04 S11 148.03(12) . 19 ?
 S11 04 A11 148.03(12) . 19 ?

A11 04 A11 148.03(12) . 19 ?
Si1 04 A11 0.00(4) 19 19 ?
Si1 04 Na2 118.84(14) . 5 ?
A11 04 Na2 118.84(14) . 5 ?
Si1 04 Na2 88.22(13) 19 5 ?
A11 04 Na2 88.22(13) 19 5 ?
Si1 04 Na2 88.22(13) . 15 ?
A11 04 Na2 88.22(13) . 15 ?
Si1 04 Na2 118.84(14) 19 15 ?
A11 04 Na2 118.84(14) 19 15 ?
Na2 04 Na2 70.0(4) 5 15 ?
Si1 04 W2 92.70(10) . 19 ?
A11 04 W2 92.70(10) . 19 ?
Si1 04 W2 99.76(12) 19 19 ?
A11 04 W2 99.76(12) 19 19 ?
Na2 04 W2 39.6(2) 5 19 ?
Na2 04 W2 97.2(3) 15 19 ?
Si1 04 W2 99.76(12) . . ?
A11 04 W2 99.76(12) . . ?
Si1 04 W2 92.70(10) 19 . ?
A11 04 W2 92.70(10) 19 . ?
Na2 04 W2 97.2(3) 5 . ?
Na2 04 W2 39.6(2) 15 . ?
W2 04 W2 133.7(3) 19 . ?
Si1 04 W4 117.3(2) . 5 ?
A11 04 W4 117.3(2) . 5 ?
Si1 04 W4 93.7(2) 19 5 ?
A11 04 W4 93.7(2) 19 5 ?
Na2 04 W4 17.3(3) 5 5 ?
Na2 04 W4 53.2(3) 15 5 ?
W2 04 W4 54.4(4) 19 5 ?
W2 04 W4 80.6(4) . 5 ?
Si1 04 W4 93.7(2) . 15 ?
A11 04 W4 93.7(2) . 15 ?
Si1 04 W4 117.2(2) 19 15 ?
A11 04 W4 117.2(2) 19 15 ?
Na2 04 W4 53.2(3) 5 15 ?
Na2 04 W4 17.3(3) 15 15 ?
W2 04 W4 80.6(4) 19 15 ?
W2 04 W4 54.4(4) . 15 ?
W4 04 W4 37.0(4) 5 15 ?
Si1 04 W1 93.26(8) . 14_556 ?
A11 04 W1 93.26(8) . 14_556 ?
Si1 04 W1 77.74(7) 19 14_556 ?
A11 04 W1 77.74(7) 19 14_556 ?
Na2 04 W1 73.3(2) 5 14_556 ?
Na2 04 W1 138.6(2) 15 14_556 ?
W2 04 W1 41.4(2) 19 14_556 ?
W2 04 W1 166.6(2) . 14_556 ?
W4 04 W1 90.5(3) 5 14_556 ?
W4 04 W1 121.8(3) 15 14_556 ?
Si1 04 W1 77.74(7) . 21 ?
A11 04 W1 77.74(7) . 21 ?
Si1 04 W1 93.26(8) 19 21 ?
A11 04 W1 93.26(8) 19 21 ?
Na2 04 W1 138.6(2) 5 21 ?
Na2 04 W1 73.3(2) 15 21 ?
W2 04 W1 166.6(2) 19 21 ?
W2 04 W1 41.4(2) . 21 ?
W4 04 W1 121.8(3) 5 21 ?
W4 04 W1 90.5(3) 15 21 ?
W1 04 W1 147.2(2) 14_556 21 ?
W1 Na1 W1 36.3(3) 14_566 20_566 ?
W1 Na1 W1 44.2(3) 14_566 9_665 ?
W1 Na1 W1 73.2(2) 20_566 9_665 ?
W1 Na1 W1 73.2(2) 14_566 . ?
W1 Na1 W1 44.2(3) 20_566 . ?
W1 Na1 W1 86.9(2) 9_665 . ?

W1 Na1 w1 73.2(2) 14_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 86.9(2) 20_566 3_665 ?
 W1 Na1 w1 36.3(3) 9_665 3_665 ?
 W1 Na1 w1 73.2(2) . 3_665 ?
 W1 Na1 w1 86.9(2) 14_566 7 ?
 W1 Na1 w1 73.2(2) 20_566 7 ?
 W1 Na1 w1 73.2(2) 9_665 7 ?
 W1 Na1 w1 36.3(3) . 7 ?
 W1 Na1 w1 44.2(3) 3_665 7 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) 14_566 13_665 ?
 W1 Na1 O2 82.62(11) 20_566 13_665 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) 9_665 13_665 ?
 W1 Na1 O2 82.61(11) . 13_665 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) 3_665 13_665 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) 7 13_665 ?
 W1 Na1 O2 82.61(11) 14_566 17 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) 20_566 17 ?
 W1 Na1 O2 82.62(11) 9_665 17 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) . 17 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) 3_665 17 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) 7 17 ?
 O2 Na1 O2 96.49(8) 13_665 17 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) 14_566 15_565 ?
 W1 Na1 O2 153.8(2) 20_566 15_565 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) 9_665 15_565 ?
 W1 Na1 O2 109.6(2) . 15_565 ?
 W1 Na1 O2 82.61(11) 3_665 15_565 ?
 W1 Na1 O2 82.62(11) 7 15_565 ?
 O2 Na1 O2 96.49(8) 13_665 15_565 ?
 O2 Na1 O2 96.49(8) 17 15_565 ?
 W1 Na1 w5 23.5(3) 14_566 14_566 ?
 W1 Na1 w5 58.4(6) 20_566 14_566 ?
 W1 Na1 w5 23.6(3) 9_665 14_566 ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) . 14_566 ?
 W1 Na1 w5 58.5(6) 3_665 14_566 ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) 7 14_566 ?
 O2 Na1 w5 131.38(9) 13_665 14_566 ?
 O2 Na1 w5 73.7(10) 17 14_566 ?
 O2 Na1 w5 131.48(12) 15_565 14_566 ?
 W1 Na1 w5 58.5(6) 14_566 . ?
 W1 Na1 w5 23.6(3) 20_566 . ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) 9_665 . ?
 W1 Na1 w5 23.5(3) . . ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) 3_665 . ?
 W1 Na1 w5 58.4(6) 7 . ?
 O2 Na1 w5 73.7(10) 13_665 . ?
 O2 Na1 w5 131.48(11) 17 . ?
 O2 Na1 w5 131.38(10) 15_565 . ?
 W5 Na1 w5 78.3(15) 14_566 . ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) 14_566 3_665 ?
 W1 Na1 w5 87.2(9) 20_566 3_665 ?
 W1 Na1 w5 58.4(6) 9_665 3_665 ?
 W1 Na1 w5 58.5(6) . 3_665 ?
 W1 Na1 w5 23.5(3) 3_665 3_665 ?
 W1 Na1 w5 23.6(3) 7 3_665 ?
 O2 Na1 w5 131.48(10) 13_665 3_665 ?
 O2 Na1 w5 131.38(10) 17 3_665 ?
 O2 Na1 w5 73.7(10) 15_565 3_665 ?
 W5 Na1 w5 78.3(15) 14_566 3_665 ?
 W5 Na1 w5 78.3(15) . 3_665 ?
 W4 Na2 w2 144.0(11) . 2 ?
 W4 Na2 w2 144.1(11) . 21 ?
 W2 Na2 w2 22.0(4) 2 21 ?
 W4 Na2 w8 103.4(17) . 9 ?
 W2 Na2 w8 56.6(13) 2 9 ?
 W2 Na2 w8 41.9(13) 21 9 ?
 W4 Na2 w8 103.4(17) . 14_556 ?
 W2 Na2 w8 41.9(13) 2 14_556 ?

W2 Na2 W8 56.6(13) 21 14_556 ?
W8 Na2 W8 61.4(29) 9 14_556 ?
W4 Na2 O1 120.3(11) . 17 ?
W2 Na2 O1 94.1(4) 2 17 ?
W2 Na2 O1 94.1(4) 21 17 ?
W8 Na2 O1 126.7(15) 9 17 ?
W8 Na2 O1 126.7(15) 14_556 17 ?
W4 Na2 W6 84.1(14) . 21 ?
W2 Na2 W6 74.6(9) 2 21 ?
W2 Na2 W6 61.3(11) 21 21 ?
W8 Na2 W6 19.5(15) 9 21 ?
W8 Na2 W6 68.3(17) 14_556 21 ?
O1 Na2 W6 139.5(13) 17 21 ?
W4 Na2 W6 84.1(14) . 2 ?
W2 Na2 W6 61.3(11) 2 2 ?
W2 Na2 W6 74.6(9) 21 2 ?
W8 Na2 W6 68.3(17) 9 2 ?
W8 Na2 W6 19.5(15) 14_556 2 ?
O1 Na2 W6 139.5(13) 17 2 ?
W6 Na2 W6 68.3(23) 21 2 ?
W4 Na2 W4 39.5(2) . 17 ?
W2 Na2 W4 137.6(5) 2 17 ?
W2 Na2 W4 119.8(4) 21 17 ?
W8 Na2 W4 80.9(14) 9 17 ?
W8 Na2 W4 119.4(16) 14_556 17 ?
O1 Na2 W4 113.7(4) 17 17 ?
W6 Na2 W4 63.4(10) 21 17 ?
W6 Na2 W4 105.4(14) 2 17 ?
W4 Na2 W4 39.3(2) . 15 ?
W2 Na2 W4 119.8(4) 2 15 ?
W2 Na2 W4 137.6(5) 21 15 ?
W8 Na2 W4 119.4(16) 9 15 ?
W8 Na2 W4 80.9(14) 14_556 15 ?
O1 Na2 W4 113.7(4) 17 15 ?
W6 Na2 W4 105.4(14) 21 15 ?
W6 Na2 W4 63.4(10) 2 15 ?
W4 Na2 W4 78.8(5) 17 15 ?
W4 Na2 O4 106.9(5) . 3 ?
W2 Na2 O4 99.4(3) 2 3 ?
W2 Na2 O4 80.6(3) 21 3 ?
W8 Na2 O4 81.1(15) 9 3 ?
W8 Na2 O4 136.2(14) 14_556 3 ?
O1 Na2 O4 59.18(12) 17 3 ?
W6 Na2 O4 84.0(12) 21 3 ?
W6 Na2 O4 149.3(10) 2 3 ?
W4 Na2 O4 71.7(3) 17 3 ?
W4 Na2 O4 140.8(4) 15 3 ?
W4 Na2 O4 106.8(5) . 17 ?
W2 Na2 O4 80.6(3) 2 17 ?
W2 Na2 O4 99.5(3) 21 17 ?
W8 Na2 O4 136.2(14) 9 17 ?
W8 Na2 O4 81.1(15) 14_556 17 ?
O1 Na2 O4 59.18(12) 17 17 ?
W6 Na2 O4 149.3(10) 21 17 ?
W6 Na2 O4 84.0(12) 2 17 ?
W4 Na2 O4 140.8(4) 17 17 ?
W4 Na2 O4 71.7(3) 15 17 ?
O4 Na2 O4 118.2(2) 3 17 ?
Na3 Na3 W1 106.4(27) 7 7 ?
Na3 Na3 W2 86.9(19) 7 2 ?
W1 Na3 W2 166.7(45) 7 2 ?
Na3 Na3 W1 38.8(18) 7 . ?
W1 Na3 W1 67.7(29) 7 . ?
W2 Na3 W1 125.6(32) 2 . ?
Na3 Na3 W2 58.9(17) 7 21 ?
W1 Na3 W2 165.4(43) 7 21 ?
W2 Na3 W2 27.9(11) 2 21 ?
W1 Na3 W2 97.7(24) . 21 ?

Na3 Na3 w7 160.9(43) 7 21 ?
 W1 Na3 w7 54.5(45) 7 21 ?
 W2 Na3 w7 112.2(48) 2 21 ?
 W1 Na3 w7 122.2(53) . 21 ?
 W2 Na3 w7 140.2(51) 21 21 ?
 Na3 Na3 w5 127.0(24) 7 3_665 ?
 W1 Na3 w5 20.5(22) 7 3_665 ?
 W2 Na3 w5 146.2(38) 2 3_665 ?
 W1 Na3 w5 88.2(31) . 3_665 ?
 W2 Na3 w5 174.1(37) 21 3_665 ?
 W7 Na3 w5 33.9(38) 21 3_665 ?
 Na3 Na3 w7 12.3(28) 7 2 ?
 W1 Na3 w7 94.2(40) 7 2 ?
 W2 Na3 w7 99.2(36) 2 2 ?
 W1 Na3 w7 26.5(24) . 2 ?
 W2 Na3 w7 71.2(30) 21 2 ?
 W7 Na3 w7 148.6(71) 21 2 ?
 W5 Na3 w7 114.7(43) 3_665 2 ?
 Na3 Na3 w5 36.3(17) 7 . ?
 W1 Na3 w5 70.1(31) 7 . ?
 W2 Na3 w5 123.2(28) 2 . ?
 W1 Na3 w5 2.4(15) . . ?
 W2 Na3 w5 95.2(23) 21 . ?
 W7 Na3 w5 124.6(53) 21 . ?
 W5 Na3 w5 90.7(38) 3_665 . ?
 W7 Na3 w5 24.0(23) 2 . ?
 Na3 Na3 w7 143.2(27) 7 13_665 ?
 W1 Na3 w7 36.8(30) 7 13_665 ?
 W2 Na3 w7 129.9(36) 2 13_665 ?
 W1 Na3 w7 104.4(37) . 13_665 ?
 W2 Na3 w7 157.9(38) 21 13_665 ?
 W7 Na3 w7 17.7(35) 21 13_665 ?
 W5 Na3 w7 16.2(30) 3_665 13_665 ?
 W7 Na3 w7 130.9(47) 2 13_665 ?
 W5 Na3 w7 106.9(35) . 13_665 ?
 Na3 Na3 w8 102.4(15) 7 14_556 ?
 W1 Na3 w8 151.2(37) 7 14_556 ?
 W2 Na3 w8 15.5(16) 2 14_556 ?
 W1 Na3 w8 141.1(28) . 14_556 ?
 W2 Na3 w8 43.4(17) 21 14_556 ?
 W7 Na3 w8 96.7(46) 21 14_556 ?
 W5 Na3 w8 130.7(32) 3_665 14_556 ?
 W7 Na3 w8 114.7(33) 2 14_556 ?
 W5 Na3 w8 138.7(25) . 14_556 ?
 W7 Na3 w8 114.4(32) 13_665 14_556 ?
 Na3 Na3 w1 115.1(10) 7 3_665 ?
 W1 Na3 w1 8.7(17) 7 3_665 ?
 W2 Na3 w1 158.0(28) 2 3_665 ?
 W1 Na3 w1 76.4(20) . 3_665 ?
 W2 Na3 w1 174.1(27) 21 3_665 ?
 W7 Na3 w1 45.8(41) 21 3_665 ?
 W5 Na3 w1 11.8(19) 3_665 3_665 ?
 W7 Na3 w1 102.9(31) 2 3_665 ?
 W5 Na3 w1 78.8(20) . 3_665 ?
 W7 Na3 w1 28.1(24) 13_665 3_665 ?
 W8 Na3 w1 142.5(22) 14_556 3_665 ?
 Na3 w1 w5 139.0(40) 7 . ?
 Na3 w1 w7 87.8(55) 7 2 ?
 W5 w1 w7 51.2(46) . 2 ?
 Na3 w1 w1 73.6(27) 7 7 ?
 W5 w1 w1 147.4(31) . 7 ?
 W7 w1 w1 161.4(46) 2 7 ?
 Na3 w1 Na3 34.8(35) 7 . ?
 W5 w1 Na3 173.8(37) . . ?
 W7 w1 Na3 122.6(48) 2 . ?
 W1 w1 Na3 38.8(18) 7 . ?
 Na3 w1 w1 166.4(27) 7 20_566 ?
 W5 w1 w1 27.4(31) . 20_566 ?

w7 w1 w1 78.6(46) 2 20_566 ?
w1 w1 w1 120.000(2) 7 20_566 ?
Na3 w1 w1 158.8(18) . 20_566 ?
Na3 w1 w7 125.9(40) 7 19_565 ?
w5 w1 w7 13.1(46) . 19_565 ?
w7 w1 w7 38.1(67) 2 19_565 ?
w1 w1 w7 160.6(32) 7 19_565 ?
Na3 w1 w7 160.7(35) . 19_565 ?
w1 w1 w7 40.6(31) 20_566 19_565 ?
Na3 w1 Na1 120.1(15) 7 . ?
w5 w1 Na1 86.1(22) . . ?
w7 w1 Na1 119.4(26) 2 . ?
w1 w1 Na1 71.86(14) 7 . ?
Na3 w1 Na1 98.1(13) . . ?
w1 w1 Na1 67.9(2) 20_566 . ?
w7 w1 Na1 95.1(22) 19_565 . ?
Na3 w1 Na1 120.1(15) 7 14_566 ?
w5 w1 Na1 86.1(22) . 14_566 ?
w7 w1 Na1 119.4(26) 2 14_566 ?
w1 w1 Na1 71.86(14) 7 14_566 ?
Na3 w1 Na1 98.1(13) . 14_566 ?
w1 w1 Na1 67.9(2) 20_566 14_566 ?
w7 w1 Na1 95.1(22) 19_565 14_566 ?
Na1 w1 Na1 93.0(2) . 14_566 ?
Na3 w1 w2 7.7(27) 7 21 ?
w5 w1 w2 131.3(31) . 21 ?
w7 w1 w2 80.1(46) 2 21 ?
w1 w1 w2 81.3(2) 7 21 ?
Na3 w1 w2 42.6(18) . 21 ?
w1 w1 w2 158.7(2) 20_566 21 ?
w7 w1 w2 118.1(31) 19_565 21 ?
Na1 w1 w2 124.1(2) . 21 ?
Na1 w1 w2 124.1(2) 14_566 21 ?
Na3 w1 w5 86.7(30) 7 3_665 ?
w5 w1 w5 134.3(42) . 3_665 ?
w7 w1 w5 174.5(51) 2 3_665 ?
w1 w1 w5 13.2(10) 7 3_665 ?
Na3 w1 w5 51.9(21) . 3_665 ?
w1 w1 w5 106.8(10) 20_566 3_665 ?
w7 w1 w5 147.4(32) 19_565 3_665 ?
Na1 w1 w5 63.7(6) . 3_665 ?
Na1 w1 w5 63.7(6) 14_566 3_665 ?
w2 w1 w5 94.5(11) 21 3_665 ?
Na3 w1 w2 9.1(27) 7 2 ?
w5 w1 w2 148.1(31) . 2 ?
w7 w1 w2 96.9(46) 2 2 ?
w1 w1 w2 64.5(2) 7 2 ?
Na3 w1 w2 25.8(18) . 2 ?
w1 w1 w2 175.5(2) 20_566 2 ?
w7 w1 w2 134.9(31) 19_565 2 ?
Na1 w1 w2 114.9(2) . 2 ?
Na1 w1 w2 114.9(2) 14_566 2 ?
w2 w1 w2 16.8(3) 21 2 ?
w5 w1 w2 77.7(11) 3_665 2 ?
Na3 w1 Na3 161.6(37) 7 14_566 ?
w5 w1 Na3 22.6(33) . 14_566 ?
w7 w1 Na3 73.8(47) 2 14_566 ?
w1 w1 Na3 124.9(10) 7 14_566 ?
Na3 w1 Na3 163.6(20) . 14_566 ?
w1 w1 Na3 4.9(10) 20_566 14_566 ?
w7 w1 Na3 35.7(34) 19_565 14_566 ?
Na1 w1 Na3 71.0(6) . 14_566 ?
Na1 w1 Na3 71.0(6) 14_566 14_566 ?
w2 w1 Na3 153.8(10) 21 14_566 ?
w5 w1 Na3 111.7(14) 3_665 14_566 ?
w2 w1 Na3 170.6(11) 2 14_566 ?
w2 w2 Na3 93.1(19) 20 15 ?
w2 w2 w8 117.3(24) 20 13 ?

Na3 W2 W8 149.6(31) 15 13 ?
W2 W2 Na3 58.9(17) 20 21 ?
Na3 W2 Na3 34.2(34) 15 21 ?
W8 W2 Na3 176.2(30) 13 21 ?
W2 W2 W8 42.0(17) 20 8_554 ?
Na3 W2 W8 135.2(25) 15 8_554 ?
W8 W2 W8 75.3(40) 13 8_554 ?
Na3 W2 W8 101.0(23) 21 8_554 ?
W2 W2 Na2 79.0(2) 20 6_554 ?
Na3 W2 Na2 118.6(5) 15 6_554 ?
W8 W2 Na2 70.7(10) 13 6_554 ?
Na3 W2 Na2 107.7(8) 21 6_554 ?
W8 W2 Na2 62.9(5) 8_554 6_554 ?
W2 W2 Na2 79.0(2) 20 15 ?
Na3 W2 Na2 118.6(5) 15 15 ?
W8 W2 Na2 70.7(10) 13 15 ?
Na3 W2 Na2 107.7(8) 21 15 ?
W8 W2 Na2 62.9(5) 8_554 15 ?
Na2 W2 Na2 119.1(6) 6_554 15 ?
W2 W2 W6 116.1(14) 20 . ?
Na3 W2 W6 150.8(24) 15 . ?
W8 W2 W6 1.2(29) 13 . ?
Na3 W2 W6 175.0(22) 21 . ?
W8 W2 W6 74.1(21) 8_554 . ?
Na2 W2 W6 70.3(7) 6_554 . ?
Na2 W2 W6 70.3(7) 15 . ?
W2 W2 W1 98.7(2) 20 21 ?
Na3 W2 W1 5.6(19) 15 21 ?
W8 W2 W1 144.0(24) 13 21 ?
Na3 W2 W1 39.8(17) 21 21 ?
W8 W2 W1 140.7(17) 8_554 21 ?
Na2 W2 W1 119.5(3) 6_554 21 ?
Na2 W2 W1 119.5(3) 15 21 ?
W6 W2 W1 145.2(15) . 21 ?
W2 W2 W7 130.1(25) 20 20 ?
Na3 W2 W7 37.0(30) 15 20 ?
W8 W2 W7 112.6(35) 13 20 ?
Na3 W2 W7 71.2(29) 21 20 ?
W8 W2 W7 172.1(30) 8_554 20 ?
Na2 W2 W7 118.8(5) 6_554 20 ?
Na2 W2 W7 118.8(5) 15 20 ?
W6 W2 W7 113.8(29) . 20 ?
W1 W2 W7 31.4(24) 21 20 ?
W2 W2 W1 64.5(2) 20 15 ?
Na3 W2 W1 28.6(18) 15 15 ?
W8 W2 W1 178.2(24) 13 15 ?
Na3 W2 W1 5.6(17) 21 15 ?
W8 W2 W1 106.5(17) 8_554 15 ?
Na2 W2 W1 110.0(3) 6_554 15 ?
Na2 W2 W1 110.0(3) 15 15 ?
W6 W2 W1 179.4(15) . 15 ?
W1 W2 W1 34.2(3) 21 15 ?
W7 W2 W1 65.6(25) 20 15 ?
W2 W2 O3 176.2(2) 20 19 ?
Na3 W2 O3 83.1(19) 15 19 ?
W8 W2 O3 66.5(24) 13 19 ?
Na3 W2 O3 117.3(17) 21 19 ?
W8 W2 O3 141.8(17) 8_554 19 ?
Na2 W2 O3 102.8(2) 6_554 19 ?
Na2 W2 O3 102.8(2) 15 19 ?
W6 W2 O3 67.7(14) . 19 ?
W1 W2 O3 77.5(3) 21 19 ?
W7 W2 O3 46.1(25) 20 19 ?
W1 W2 O3 111.7(4) 15 19 ?
W2 W2 W6 49.6(12) 20 20 ?
Na3 W2 W6 142.7(22) 15 20 ?
W8 W2 W6 67.7(25) 13 20 ?
Na3 W2 W6 108.5(21) 21 20 ?

W8 W2 W6 7.5(22) 8_554 20 ?
 Na2 W2 W6 61.3(4) 6_554 20 ?
 Na2 W2 W6 61.3(4) 15 20 ?
 W6 W2 W6 66.5(26) . 20 ?
 W1 W2 W6 148.3(12) 21 20 ?
 W7 W2 W6 179.7(27) 20 20 ?
 W1 W2 W6 114.1(12) 15 20 ?
 O3 W2 W6 134.2(12) 19 20 ?
 Na2 W4 W4 122.4(4) . 17 ?
 Na2 W4 W4 122.5(4) . 15 ?
 W4 W4 W4 115.1(8) 17 15 ?
 Na2 W4 W8 53.9(15) . 14_556 ?
 W4 W4 W8 131.3(17) 17 14_556 ?
 W4 W4 W8 86.8(15) 15 14_556 ?
 Na2 W4 W8 53.9(15) . 9 ?
 W4 W4 W8 86.8(15) 17 9 ?
 W4 W4 W8 131.3(17) 15 9 ?
 W8 W4 W8 50.2(25) 14_556 9 ?
 Na2 W4 W6 74.0(16) . 2 ?
 W4 W4 W6 126.2(16) 17 2 ?
 W4 W4 W6 71.0(13) 15 2 ?
 W8 W4 W6 20.2(14) 14_556 2 ?
 W8 W4 W6 61.5(16) 9 2 ?
 Na2 W4 W6 74.0(16) . 21 ?
 W4 W4 W6 71.0(13) 17 21 ?
 W4 W4 W6 126.2(16) 15 21 ?
 W8 W4 W6 61.5(16) 14_556 21 ?
 W8 W4 W6 20.2(14) 9 21 ?
 W6 W4 W6 65.8(21) 2 21 ?
 Na2 W4 Na2 109.4(3) . 17 ?
 W4 W4 Na2 18.1(4) 17 17 ?
 W4 W4 Na2 126.9(9) 15 17 ?
 W8 W4 Na2 136.9(14) 14_556 17 ?
 W8 W4 Na2 87.1(13) 9 17 ?
 W6 W4 Na2 139.2(12) 2 17 ?
 W6 W4 Na2 76.0(10) 21 17 ?
 Na2 W4 Na2 109.5(3) . 15 ?
 W4 W4 Na2 127.0(9) 17 15 ?
 W4 W4 Na2 18.2(4) 15 15 ?
 W8 W4 Na2 87.2(13) 14_556 15 ?
 W8 W4 Na2 136.9(14) 9 15 ?
 W6 W4 Na2 76.1(10) 2 15 ?
 W6 W4 Na2 139.2(12) 21 15 ?
 Na2 W4 Na2 133.7(8) 17 15 ?
 Na2 W4 W6 113.7(16) . 3 ?
 W4 W4 W6 65.1(15) 17 3 ?
 W4 W4 W6 91.3(17) 15 3 ?
 W8 W4 W6 162.1(15) 14_556 3 ?
 W8 W4 W6 136.8(16) 9 3 ?
 W6 W4 W6 161.7(19) 2 3 ?
 W6 W4 W6 131.6(10) 21 3 ?
 Na2 W4 W6 56.0(12) 17 3 ?
 Na2 W4 W6 85.6(13) 15 3 ?
 Na2 W4 W6 113.8(16) . 20 ?
 W4 W4 W6 91.3(17) 17 20 ?
 W4 W4 W6 65.2(15) 15 20 ?
 W8 W4 W6 136.8(16) 14_556 20 ?
 W8 W4 W6 162.1(15) 9 20 ?
 W6 W4 W6 131.7(10) 2 20 ?
 W6 W4 W6 161.6(19) 21 20 ?
 Na2 W4 W6 85.6(13) 17 20 ?
 Na2 W4 W6 56.1(12) 15 20 ?
 W6 W4 W6 30.4(23) 3 20 ?
 Na2 W4 W2 24.3(8) . 2 ?
 W4 W4 W2 126.4(9) 17 2 ?
 W4 W4 W2 111.6(8) 15 2 ?
 W8 W4 W2 30.5(12) 14_556 2 ?
 W8 W4 W2 41.6(13) 9 2 ?

W6 W4 W2 50.7(12) 2 2 ?
 W6 W4 W2 60.8(12) 21 2 ?
 Na2 W4 W2 120.5(4) 17 2 ?
 Na2 W4 W2 105.2(3) 15 2 ?
 W6 W4 W2 138.1(13) 3 2 ?
 W6 W4 W2 132.4(13) 20 2 ?
 Na2 W4 W2 24.3(8) . 21 ?
 W4 W4 W2 111.6(8) 17 21 ?
 W4 W4 W2 126.5(9) 15 21 ?
 W8 W4 W2 41.6(13) 14_556 21 ?
 W8 W4 W2 30.5(12) 9 21 ?
 W6 W4 W2 60.8(12) 2 21 ?
 W6 W4 W2 50.7(12) 21 21 ?
 Na2 W4 W2 105.2(3) 17 21 ?
 Na2 W4 W2 120.6(4) 15 21 ?
 W6 W4 W2 132.3(13) 3 21 ?
 W6 W4 W2 138.1(13) 20 21 ?
 W2 W4 W2 15.4(3) 2 21 ?
 W1 W5 W1 125.2(62) 20_566 . ?
 W1 W5 W7 80.4(59) 20_566 19_565 ?
 W1 W5 W7 154.4(84) . 19_565 ?
 W1 W5 W7 154.1(84) 20_566 2 ?
 W1 W5 W7 80.7(59) . 2 ?
 W7 W5 W7 73.7(100) 19_565 2 ?
 W1 W5 Na3 20.4(19) 20_566 14_566 ?
 W1 W5 Na3 145.6(53) . 14_566 ?
 W7 W5 Na3 60.0(63) 19_565 14_566 ?
 W7 W5 Na3 133.7(76) 2 14_566 ?
 W1 W5 Na3 145.7(52) 20_566 7 ?
 W1 W5 Na3 20.5(19) . 7 ?
 W7 W5 Na3 133.9(76) 19_565 7 ?
 W7 W5 Na3 60.2(63) 2 7 ?
 Na3 W5 Na3 166.1(49) 14_566 7 ?
 W1 W5 W1 19.5(21) 20_566 14_566 ?
 W1 W5 W1 105.7(42) . 14_566 ?
 W7 W5 W1 99.9(62) 19_565 14_566 ?
 W7 W5 W1 173.6(71) 2 14_566 ?
 Na3 W5 W1 39.9(17) 14_566 14_566 ?
 Na3 W5 W1 126.2(33) 7 14_566 ?
 W1 W5 W1 105.8(41) 20_566 7 ?
 W1 W5 W1 19.5(21) . 7 ?
 W7 W5 W1 173.9(71) 19_565 7 ?
 W7 W5 W1 100.2(62) 2 7 ?
 Na3 W5 W1 126.1(33) 14_566 7 ?
 Na3 W5 W1 39.9(17) 7 7 ?
 W1 W5 W1 86.2(21) 14_566 7 ?
 W1 W5 Na1 70.4(24) 20_566 . ?
 W1 W5 Na1 70.4(25) . . ?
 W7 W5 Na1 125.6(33) 19_565 . ?
 W7 W5 Na1 125.8(33) 2 . ?
 Na3 W5 Na1 84.9(18) 14_566 . ?
 Na3 W5 Na1 85.0(18) 7 . ?
 W1 W5 Na1 57.8(12) 14_566 . ?
 W1 W5 Na1 57.9(12) 7 . ?
 W1 W5 Na1 70.4(24) 20_566 14_566 ?
 W1 W5 Na1 70.4(25) . 14_566 ?
 W7 W5 Na1 125.6(33) 19_565 14_566 ?
 W7 W5 Na1 125.8(33) 2 14_566 ?
 Na3 W5 Na1 84.9(18) 14_566 14_566 ?
 Na3 W5 Na1 85.0(18) 7 14_566 ?
 W1 W5 Na1 57.8(12) 14_566 14_566 ?
 W1 W5 Na1 57.9(12) 7 14_566 ?
 Na1 W5 Na1 86.4(19) . 14_566 ?
 W1 W5 Na3 3.7(21) 20_566 20_566 ?
 W1 W5 Na3 128.9(45) . 20_566 ?
 W7 W5 Na3 76.7(63) 19_565 20_566 ?
 W7 W5 Na3 150.4(72) 2 20_566 ?
 Na3 W5 Na3 16.7(18) 14_566 20_566 ?

Na3 W5 Na3 149.4(38) 7 20_566 ?
W1 W5 Na3 23.2(11) 14_566 20_566 ?
W1 W5 Na3 109.4(26) 7 20_566 ?
Na1 W5 Na3 72.9(14) . 20_566 ?
Na1 W5 Na3 72.9(14) 14_566 20_566 ?
W1 W5 Na3 129.0(45) 20_566 . ?
W1 W5 Na3 3.7(22) . . ?
W7 W5 Na3 150.6(72) 19_565 . ?
W7 W5 Na3 77.0(63) 2 . ?
Na3 W5 Na3 149.3(38) 14_566 . ?
Na3 W5 Na3 16.7(18) 7 . ?
W1 W5 Na3 109.5(26) 14_566 . ?
W1 W5 Na3 23.2(11) 7 . ?
Na1 W5 Na3 73.0(14) . . ?
Na1 W5 Na3 73.0(14) 14_566 . ?
Na3 W5 Na3 132.6(34) 20_566 . ?
W8 W6 W6 174.2(56) 13 9 ?
W8 W6 W2 1.9(47) 13 . ?
W6 W6 W2 176.1(14) 9 . ?
W8 W6 Na2 49.2(24) 13 15 ?
W6 W6 Na2 133.1(10) 9 15 ?
W2 W6 Na2 48.4(10) . 15 ?
W8 W6 Na2 49.2(24) 13 6_554 ?
W6 W6 Na2 133.1(10) 9 6_554 ?
W2 W6 Na2 48.4(10) . 6_554 ?
Na2 W6 Na2 86.5(18) 15 6_554 ?
W8 W6 W4 70.9(28) 13 15 ?
W6 W6 W4 111.8(12) 9 15 ?
W2 W6 W4 70.0(13) . 15 ?
Na2 W6 W4 21.9(4) 15 15 ?
Na2 W6 W4 102.2(19) 6_554 15 ?
W8 W6 W4 70.9(28) 13 6_554 ?
W6 W6 W4 111.8(12) 9 6_554 ?
W2 W6 W4 70.0(13) . 6_554 ?
Na2 W6 W4 102.2(19) 15 6_554 ?
Na2 W6 W4 21.9(4) 6_554 6_554 ?
W4 W6 W4 112.6(21) 15 6_554 ?
W8 W6 W4 105.4(11) 13 14 ?
W6 W6 W4 74.8(12) 9 14 ?
W2 W6 W4 105.4(11) . 14 ?
Na2 W6 W4 146.1(20) 15 14 ?
Na2 W6 W4 60.6(4) 6_554 14 ?
W4 W6 W4 152.1(23) 15 14 ?
W4 W6 W4 43.9(4) 6_554 14 ?
W8 W6 W4 105.4(11) 13 5 ?
W6 W6 W4 74.8(11) 9 5 ?
W2 W6 W4 105.4(11) . 5 ?
Na2 W6 W4 60.6(4) 15 5 ?
Na2 W6 W4 146.1(20) 6_554 5 ?
W4 W6 W4 43.9(4) 15 5 ?
W4 W6 W4 152.1(23) 6_554 5 ?
W4 W6 W4 149.2(23) 14 5 ?
W8 W6 W2 16.2(48) 13 20 ?
W6 W6 W2 169.6(12) 9 20 ?
W2 W6 W2 14.3(5) . 20 ?
Na2 W6 W2 44.2(9) 15 20 ?
Na2 W6 W2 44.2(9) 6_554 20 ?
W4 W6 W2 64.0(12) 15 20 ?
W4 W6 W2 64.0(12) 6_554 20 ?
W4 W6 W2 104.6(11) 14 20 ?
W4 W6 W2 104.6(11) 5 20 ?
W8 W6 W4 137.0(23) 13 4_554 ?
W6 W6 W4 45.4(8) 9 4_554 ?
W2 W6 W4 136.3(11) . 4_554 ?
Na2 W6 W4 146.7(22) 15 4_554 ?
Na2 W6 W4 87.9(8) 6_554 4_554 ?
W4 W6 W4 131.3(20) 15 4_554 ?
W4 W6 W4 66.4(9) 6_554 4_554 ?

W4 W6 W4 35.8(7) 14 4_554 ?
W4 W6 W4 114.7(18) 5 4_554 ?
W2 W6 W4 129.3(13) 20 4_554 ?
W8 W6 W4 137.0(23) 13 13 ?
W6 W6 W4 45.4(8) 9 13 ?
W2 W6 W4 136.3(11) . 13 ?
Na2 W6 W4 87.9(8) 15 13 ?
Na2 W6 W4 146.7(22) 6_554 13 ?
W4 W6 W4 66.4(9) 15 13 ?
W4 W6 W4 131.3(20) 6_554 13 ?
W4 W6 W4 114.7(18) 14 13 ?
W4 W6 W4 35.8(7) 5 13 ?
W2 W6 W4 129.3(13) 20 13 ?
W4 W6 W4 79.2(14) 4_554 13 ?
W5 W7 W7 53.3(65) 15 9_665 ?
W5 W7 W1 48.1(46) 15 15 ?
W7 W7 W1 101.4(46) 9_665 15 ?
W5 W7 Na3 85.8(75) 15 21 ?
W7 W7 Na3 139.1(43) 9_665 21 ?
W1 W7 Na3 37.7(36) 15 21 ?
W5 W7 W1 12.7(39) 15 19_665 ?
W7 W7 W1 40.6(31) 9_665 19_665 ?
W1 W7 W1 60.8(41) 15 19_665 ?
Na3 W7 W1 98.5(58) 21 19_665 ?
W5 W7 Na3 79.0(66) 15 15 ?
W7 W7 Na3 132.3(28) 9_665 15 ?
W1 W7 Na3 30.9(31) 15 15 ?
Na3 W7 Na3 6.8(17) 21 15 ?
W1 W7 Na3 91.7(44) 19_665 15 ?
W5 W7 W2 116.6(78) 15 20 ?
W7 W7 W2 169.9(25) 9_665 20 ?
W1 W7 W2 68.5(44) 15 20 ?
Na3 W7 W2 30.8(28) 21 20 ?
W1 W7 W2 129.3(51) 19_665 20 ?
Na3 W7 W2 37.6(19) 15 20 ?
W5 W7 Na3 30.1(50) 15 13_665 ?
W7 W7 Na3 23.2(27) 9_665 13_665 ?
W1 W7 Na3 78.2(48) 15 13_665 ?
Na3 W7 Na3 115.9(62) 21 13_665 ?
W1 W7 Na3 17.4(15) 19_665 13_665 ?
Na3 W7 Na3 109.1(47) 15 13_665 ?
W2 W7 Na3 146.7(49) 20 13_665 ?
W5 W7 W1 57.9(55) 15 21 ?
W7 W7 W1 111.2(22) 9_665 21 ?
W1 W7 W1 9.8(25) 15 21 ?
Na3 W7 W1 27.9(30) 21 21 ?
W1 W7 W1 70.6(32) 19_665 21 ?
Na3 W7 W1 21.1(16) 15 21 ?
W2 W7 W1 58.7(24) 20 21 ?
Na3 W7 W1 88.0(34) 13_665 21 ?
W5 W7 W2 105.7(72) 15 . ?
W7 W7 W2 158.9(20) 9_665 . ?
W1 W7 W2 57.6(40) 15 . ?
Na3 W7 W2 19.8(27) 21 . ?
W1 W7 W2 118.4(45) 19_665 . ?
Na3 W7 W2 26.7(16) 15 . ?
W2 W7 W2 11.0(7) 20 . ?
Na3 W7 W2 135.7(43) 13_665 . ?
W1 W7 W2 47.7(18) 21 . ?
W5 W7 W1 4.5(49) 15 13_665 ?
W7 W7 W1 48.8(18) 9_665 13_665 ?
W1 W7 W1 52.6(38) 15 13_665 ?
Na3 W7 W1 90.3(48) 21 13_665 ?
W1 W7 W1 8.2(13) 19_665 13_665 ?
Na3 W7 W1 83.5(33) 15 13_665 ?
W2 W7 W1 121.1(38) 20 13_665 ?
Na3 W7 W1 25.6(15) 13_665 13_665 ?
W1 W7 W1 62.4(21) 21 13_665 ?

W2 W7 W1 110.1(32) . 13_665 ?
 W5 W7 W2 46.5(57) 15 14_665 ?
 W7 W7 W2 6.7(17) 9_665 14_665 ?
 W1 W7 W2 94.6(50) 15 14_665 ?
 Na3 W7 W2 132.4(55) 21 14_665 ?
 W1 W7 W2 33.8(19) 19_665 14_665 ?
 Na3 W7 W2 125.5(40) 15 14_665 ?
 W2 W7 W2 163.2(41) 20 14_665 ?
 Na3 W7 W2 16.5(14) 13_665 14_665 ?
 W1 W7 W2 104.4(30) 21 14_665 ?
 W2 W7 W2 152.2(36) . 14_665 ?
 W1 W7 W2 42.1(12) 13_665 14_665 ?
 W6 W8 W2 176.9(76) 13 13 ?
 W6 W8 W2 156.2(70) 13 8 ?
 W2 W8 W2 20.7(10) 13 8 ?
 W6 W8 Na2 111.3(29) 13 3 ?
 W2 W8 Na2 67.4(16) 13 3 ?
 W2 W8 Na2 60.5(14) 8 3 ?
 W6 W8 Na2 111.3(29) 13 18_556 ?
 W2 W8 Na2 67.4(16) 13 18_556 ?
 W2 W8 Na2 60.5(14) 8 18_556 ?
 Na2 W8 Na2 114.9(27) 3 18_556 ?
 W6 W8 W4 88.9(29) 13 3 ?
 W2 W8 W4 89.7(17) 13 3 ?
 W2 W8 W4 80.1(15) 8 3 ?
 Na2 W8 W4 22.7(4) 3 3 ?
 Na2 W8 W4 124.2(27) 18_556 3 ?
 W6 W8 W4 88.9(29) 13 18_556 ?
 W2 W8 W4 89.7(17) 13 18_556 ?
 W2 W8 W4 80.1(15) 8 18_556 ?
 Na2 W8 W4 124.2(27) 3 18_556 ?
 Na2 W8 W4 22.7(4) 18_556 18_556 ?
 W4 W8 W4 123.4(24) 3 18_556 ?
 W6 W8 Na3 168.2(67) 13 3 ?
 W2 W8 Na3 14.9(16) 13 3 ?
 W2 W8 Na3 35.6(13) 8 3 ?
 Na2 W8 Na3 74.0(15) 3 3 ?
 Na2 W8 Na3 74.0(15) 18_556 3 ?
 W4 W8 Na3 96.7(14) 3 3 ?
 W4 W8 Na3 96.7(14) 18_556 3 ?
 W6 W8 W4 58.2(8) 13 2 ?
 W2 W8 W4 121.7(9) 13 2 ?
 W2 W8 W4 118.5(11) 8 2 ?
 Na2 W8 W4 154.7(26) 3 2 ?
 Na2 W8 W4 58.0(6) 18_556 2 ?
 W4 W8 W4 137.1(21) 3 2 ?
 W4 W8 W4 40.2(5) 18_556 2 ?
 Na3 W8 W4 121.2(9) 3 2 ?
 W6 W8 W4 58.2(8) 13 17 ?
 W2 W8 W4 121.7(9) 13 17 ?
 W2 W8 W4 118.5(11) 8 17 ?
 Na2 W8 W4 58.0(6) 3 17 ?
 Na2 W8 W4 154.7(26) 18_556 17 ?
 W4 W8 W4 40.2(5) 3 17 ?
 W4 W8 W4 137.1(21) 18_556 17 ?
 Na3 W8 W4 121.2(9) 3 17 ?
 W4 W8 W4 116.4(17) 2 17 ?
 W6 W8 W1 160.6(64) 13 9 ?
 W2 W8 W1 22.5(15) 13 9 ?
 W2 W8 W1 43.2(11) 8 9 ?
 Na2 W8 W1 77.8(14) 3 9 ?
 Na2 W8 W1 77.8(14) 18_556 9 ?
 W4 W8 W1 100.2(13) 3 9 ?
 W4 W8 W1 100.2(13) 18_556 9 ?
 Na3 W8 W1 7.6(10) 3 9 ?
 W4 W8 W1 120.0(9) 2 9 ?
 W4 W8 W1 120.0(9) 17 9 ?
 W6 W8 W1 178.1(63) 13 3 ?

4351_1_supp_69399_10k3zm.txt

W2 W8 W1 1.2(15) 13 3 ?
W2 W8 W1 21.8(10) 8 3 ?
Na2 W8 W1 67.9(14) 3 3 ?
Na2 W8 W1 67.9(14) 18_556 3 ?
W4 W8 W1 90.2(13) 3 3 ?
W4 W8 W1 90.2(13) 18_556 3 ?
Na3 W8 W1 13.8(10) 3 3 ?
W4 W8 W1 121.7(8) 2 3 ?
W4 W8 W1 121.7(8) 17 3 ?
W1 W8 W1 21.4(3) 9 3 ?

_refine_diff_density_max 0.847
_refine_diff_density_min -1.153
_refine_diff_density_rms 0.098