```
data_Na5Pr4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email       zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone       +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax         +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
```

'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety 'H Na5 O17 Pr4 Si4'
_chemical_formula_sum 'H Na5 O17 Pr4 Si4'
_chemical_formula_weight 1063.96

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Pr Pr -0.2180 2.8214 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system tetragonal
_space_group_IT_number 82
_space_group_name_H-M_alt 'I -4'
_space_group_name_Hall 'I -4'

_shelx_space_group_comment
;
The symmetry employed for this shelxl refinement is uniquely defined
by the following loop, which should always be used as a source of
symmetry information in preference to the above space-group names.
They are only intended as comments.
;

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'

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

_cell_length_a 12.0588(3)
_cell_length_b 12.0588(3)
_cell_length_c 5.4668(2)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 794.95(5)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 2820
_cell_measurement_theta_min 2.388
_cell_measurement_theta_max 33.996

_exptl_crystal_description cube
_exptl_crystal_colour 'light green'
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 4.445
_exptl_crystal_F_000 968
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.080
_exptl_crystal_size_mid 0.080
_exptl_crystal_size_min 0.060
_exptl_absorpt_coefficient_mu 12.573
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.433
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.519
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.7211
_exptl_absorpt_correction_T_max 1.0000
_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)

```
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_source                   ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number            9092
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0351
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0374
_diffrn_reflns_limit_h_min       -20
_diffrn_reflns_limit_h_max       18
_diffrn_reflns_limit_k_min       -17
_diffrn_reflns_limit_k_max       19
_diffrn_reflns_limit_l_min       -9
_diffrn_reflns_limit_l_max       8
_diffrn_reflns_theta_min         2.389
_diffrn_reflns_theta_max         36.276
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 0.999
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.998
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 0.999
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.998
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 0.999
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.999
_reflns_number_total             1852
_reflns_number_gt                1691
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.845
_reflns_Friedel_fraction_max     1.000
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
```

```
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0374P)^2^+0.8588P]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.48(5)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1852
_refine_ls_number_parameters     70
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0379
_refine_ls_R_factor_gt           0.0328
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0703
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0679
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.039
_refine_ls_restrained_S_all      1.039
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
```

```
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Pr1 Pr 0.11806(2) 0.18538(2) 0.49185(8) 0.01392(10) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24816(12) 0.10028(12) 0.0032(5) 0.0120(3) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1054(2) 0.4110(2) 0.0020(9) 0.0236(5) Uani 1 1 d . . . . .
Na2A Na 0.0000 0.0000 0.101(3) 0.0239(18) Uiso 0.288(11) 2 d S . P . .
Na2B Na 0.0000 0.0000 0.0000 0.0239(18) Uiso 0.424(11) 4 d S . P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.029(2) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2055(7) 0.0390(6) 0.2491(12) 0.0234(14) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1068(3) 0.6173(3) 0.0044(15) 0.0215(9) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2008(4) 0.2276(3) 0.0213(16) 0.0205(11) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3008(8) 0.4568(6) 0.2605(12) 0.0241(14) Uani 1 1 d . . . . .

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
Pr1 0.00905(13) 0.01006(13) 0.02265(16) 0.0005(2) 0.00031(19) 0.00050(8)
Si1 0.0139(6) 0.0100(5) 0.0120(7) 0.0007(10) -0.0002(9) -0.0004(5)
Na1 0.0188(11) 0.0212(11) 0.0309(15) -0.002(2) 0.003(2) 0.0001(9)
O1 0.014(2) 0.014(2) 0.059(8) 0.000 0.000 0.000
O2 0.040(5) 0.015(3) 0.015(3) 0.001(2) 0.011(3) -0.002(3)
O3 0.0168(18) 0.0147(17) 0.033(3) 0.001(3) -0.001(4) -0.0024(13)
O4 0.0149(17) 0.0103(16) 0.036(3) 0.000(3) 0.002(3) 0.0011(13)
O5 0.044(5) 0.015(3) 0.014(3) -0.001(2) 0.006(3) -0.001(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
Pr1 O2 2.377(7) 4_556 ?
Pr1 O5 2.390(7) 7_455 ?
Pr1 O4 2.429(4) 6 ?
Pr1 O2 2.448(8) . ?
Pr1 O5 2.460(8) 6 ?
Pr1 O3 2.507(4) 7_455 ?
Pr1 O1 2.6507(3) . ?
Pr1 O4 2.806(8) . ?
Pr1 Si1 3.0475(14) 6 ?
Pr1 Si1 3.264(3) . ?
Pr1 Si1 3.366(3) 1_556 ?
Pr1 Na2A 3.403(12) . ?
Si1 O5 1.607(7) 6_554 ?
Si1 O2 1.618(7) . ?
Si1 O3 1.624(4) 4_655 ?
Si1 O4 1.641(4) . ?
Si1 Pr1 3.0475(14) 6_554 ?
Si1 Na1 3.164(3) 3 ?
Si1 Na2B 3.2276(14) . ?
Si1 Na1 3.251(5) 6 ?
Si1 Na1 3.263(5) 6_554 ?
Si1 Na2A 3.272(3) . ?
Si1 Na2A 3.278(4) 3 ?
Na1 O3 2.489(5) . ?
Na1 O4 2.495(5) . ?
Na1 O3 2.581(5) 2_565 ?
Na1 O3 2.711(9) 7_455 ?
Na1 O2 2.734(9) 6_554 ?
Na1 O3 2.780(9) 7_454 ?
Na1 O5 2.802(9) . ?
Na1 Si1 3.164(3) 4 ?
Na1 Si1 3.251(5) 6_554 ?
Na1 Si1 3.263(5) 6 ?
Na1 Na1 3.327(5) 2_565 ?
Na1 Pr1 3.532(2) 6_554 ?
Na2A Na2B 0.554(18) . ?
Na2A Na2A 1.11(4) 3 ?
Na2A O1 2.179(18) . ?

Na2A O5 2.572(10) 7_455 ?
Na2A O5 2.572(10) 8_545 ?
Na2A O2 2.649(10) 2 ?
Na2A O2 2.649(10) . ?
Na2A Si1 3.272(3) 2 ?
Na2A Si1 3.278(4) 3 ?
Na2A Si1 3.278(4) 4 ?
Na2A Pr1 3.403(12) 2 ?
Na2B Na2A 0.554(18) 3 ?
Na2B O1 2.73340(10) 1_554 ?
Na2B O1 2.73340(10) . ?
Na2B O5 2.785(9) 5_444 ?
Na2B O5 2.785(9) 7_455 ?
Na2B O5 2.785(9) 6_554 ?
Na2B O5 2.785(9) 8_545 ?
Na2B O2 2.867(8) 3 ?
Na2B O2 2.867(8) 2 ?
Na2B O2 2.867(8) 4 ?
Na2B O2 2.867(8) . ?
O1 Na2A 2.179(18) 3_556 ?
O1 Pr1 2.6507(3) 2 ?
O1 Pr1 2.6507(3) 4_556 ?
O1 Pr1 2.6507(3) 3_556 ?
O1 Na2B 2.73340(10) 1_556 ?
O2 Pr1 2.377(7) 3_556 ?
O2 Na1 2.734(9) 6 ?
O3 Si1 1.624(4) 3_565 ?
O3 Pr1 2.506(4) 8 ?
O3 Na1 2.581(5) 2_565 ?
O3 Na1 2.711(9) 8 ?
O3 Na1 2.780(9) 8_554 ?
O4 Pr1 2.429(4) 6_554 ?
O5 Si1 1.607(7) 6 ?
O5 Pr1 2.390(7) 8 ?
O5 Pr1 2.460(8) 6_554 ?
O5 Na2A 2.572(10) 7 ?
O5 Na2B 2.785(9) 5 ?

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

O2 Pr1 O5 71.85(16) 4_556 7_455 ?
O2 Pr1 O4 129.3(3) 4_556 6 ?
O5 Pr1 O4 137.7(3) 7_455 6 ?
O2 Pr1 O2 137.7(3) 4_556 . ?
O5 Pr1 O2 95.06(18) 7_455 . ?
O4 Pr1 O2 87.7(2) 6 . ?
O2 Pr1 O5 91.9(2) 4_556 6 ?
O5 Pr1 O5 135.8(3) 7_455 6 ?
O4 Pr1 O5 84.5(2) 6 6 ?
O2 Pr1 O5 69.49(16) . 6 ?
O2 Pr1 O3 83.7(3) 4_556 7_455 ?
O5 Pr1 O3 86.1(3) 7_455 7_455 ?
O4 Pr1 O3 64.57(13) 6 7_455 ?
O2 Pr1 O3 136.7(2) . 7_455 ?
O5 Pr1 O3 133.9(2) 6 7_455 ?
O2 Pr1 O1 69.4(2) 4_556 . ?
O5 Pr1 O1 68.4(2) 7_455 . ?
O4 Pr1 O1 147.81(10) 6 . ?
O2 Pr1 O1 68.42(15) . . ?
O5 Pr1 O1 67.42(16) 6 . ?
O3 Pr1 O1 147.28(9) 7_455 . ?
O2 Pr1 O4 144.2(2) 4_556 . ?
O5 Pr1 O4 75.37(19) 7_455 . ?
O4 Pr1 O4 70.28(15) 6 . ?
O2 Pr1 O4 58.71(17) . . ?
O5 Pr1 O4 122.2(2) 6 . ?
O3 Pr1 O4 80.0(2) 7_455 . ?
O1 Pr1 O4 111.06(10) . . ?
O2 Pr1 Si1 108.8(2) 4_556 6 ?
O5 Pr1 Si1 112.5(2) 7_455 6 ?
O4 Pr1 Si1 32.45(10) 6 6 ?
O2 Pr1 Si1 113.25(16) . 6 ?
O5 Pr1 Si1 111.60(16) 6 6 ?
O3 Pr1 Si1 32.17(10) 7_455 6 ?
O1 Pr1 Si1 177.81(5) . 6 ?
O4 Pr1 Si1 71.13(11) . 6 ?
O2 Pr1 Si1 154.53(19) 4_556 . ?
O5 Pr1 Si1 86.60(16) 7_455 . ?
O4 Pr1 Si1 75.98(19) 6 . ?
O2 Pr1 Si1 28.62(15) . . ?
O5 Pr1 Si1 94.5(2) 6 . ?
O3 Pr1 Si1 108.83(17) 7_455 . ?
O1 Pr1 Si1 90.39(3) . . ?
O4 Pr1 Si1 30.19(9) . . ?
Si1 Pr1 Si1 91.65(5) 6 . ?
O2 Pr1 Si1 84.70(17) 4_556 1_556 ?

O5 Pr1 Si1 151.63(19) 7_455 1_556 ?
O4 Pr1 Si1 69.97(18) 6 1_556 ?
O2 Pr1 Si1 91.69(19) . 1_556 ?
O5 Pr1 Si1 26.67(15) 6 1_556 ?
O3 Pr1 Si1 107.44(17) 7_455 1_556 ?
O1 Pr1 Si1 88.81(3) . 1_556 ?
O4 Pr1 Si1 130.63(10) . 1_556 ?
Si1 Pr1 Si1 89.71(6) 6 1_556 ?
Si1 Pr1 Si1 111.09(4) . 1_556 ?
O2 Pr1 Na2A 96.2(3) 4_556 . ?
O5 Pr1 Na2A 49.0(2) 7_455 . ?
O4 Pr1 Na2A 134.6(2) 6 . ?
O2 Pr1 Na2A 50.7(2) . . ?
O5 Pr1 Na2A 94.8(2) 6 . ?
O3 Pr1 Na2A 131.3(2) 7_455 . ?
O1 Pr1 Na2A 39.8(2) . . ?
O4 Pr1 Na2A 72.1(3) . . ?
Si1 Pr1 Na2A 142.3(2) 6 . ?
Si1 Pr1 Na2A 58.74(18) . . ?
Si1 Pr1 Na2A 121.04(19) 1_556 . ?
O5 Si1 O2 111.9(3) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 111.5(5) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 111.1(4) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 108.8(4) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 105.5(4) . . ?
O3 Si1 O4 107.7(2) 4_655 . ?
O5 Si1 Pr1 122.7(3) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Pr1 124.9(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Pr1 55.25(15) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Pr1 52.57(15) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 83.4(3) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 81.2(3) . 3 ?
O3 Si1 Na1 54.40(15) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 161.83(18) . 3 ?
Pr1 Si1 Na1 109.65(6) 6_554 3 ?
O5 Si1 Na2B 59.6(3) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2B 62.5(3) . . ?
O3 Si1 Na2B 160.68(17) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2B 91.60(16) . . ?
Pr1 Si1 Na2B 143.94(5) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2B 106.36(6) 3 . ?
O5 Si1 Na1 150.9(3) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 57.1(3) . 6 ?
O3 Si1 Na1 58.7(3) 4_655 6 ?
O4 Si1 Na1 100.2(3) . 6 ?
Pr1 Si1 Na1 76.41(6) 6_554 6 ?

Na1 Si1 Na1 68.76(14) 3 6 ?
Na2B Si1 Na1 119.50(10) . 6 ?
O5 Si1 Na1 59.2(3) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 148.3(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 56.0(3) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 106.1(3) . 6_554 ?
Pr1 Si1 Na1 74.44(6) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 67.91(13) 3 6_554 ?
Na2B Si1 Na1 118.79(10) . 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.12(8) 6 6_554 ?
O5 Si1 Pr1 129.3(3) 6_554 . ?
O2 Si1 Pr1 46.4(3) . . ?
O3 Si1 Pr1 119.1(3) 4_655 . ?
O4 Si1 Pr1 59.3(3) . . ?
Pr1 Si1 Pr1 90.25(6) 6_554 . ?
Na1 Si1 Pr1 123.52(12) 3 . ?
Na2B Si1 Pr1 71.13(4) . . ?
Na1 Si1 Pr1 65.65(8) 6 . ?
Na1 Si1 Pr1 163.89(6) 6_554 . ?
O5 Si1 Na2A 69.0(4) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2A 53.4(4) . . ?
O3 Si1 Na2A 159.3(2) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2A 90.99(17) . . ?
Pr1 Si1 Na2A 143.22(8) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2A 106.22(6) 3 . ?
Na1 Si1 Na2A 110.1(3) 6 . ?
Na1 Si1 Na2A 128.1(3) 6_554 . ?
Pr1 Si1 Na2A 62.8(3) . . ?
O5 Si1 Na2A 50.4(4) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2A 71.7(4) . 3 ?
O3 Si1 Na2A 157.7(3) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2A 92.16(17) . 3 ?
Pr1 Si1 Na2A 142.43(10) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2A 106.01(7) 3 3 ?
Na1 Si1 Na2A 128.8(3) 6 3 ?
Na1 Si1 Na2A 109.4(3) 6_554 3 ?
Pr1 Si1 Na2A 79.6(3) . 3 ?
O3 Na1 O4 152.02(18) . . ?
O3 Na1 O3 97.98(14) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 109.84(16) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 94.2(2) . 7_455 ?
O4 Na1 O3 82.1(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 92.1(2) 2_565 7_455 ?
O3 Na1 O2 77.1(2) . 6_554 ?
O4 Na1 O2 80.4(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 149.1(3) 2_565 6_554 ?

O3 Na1 O2 118.5(2) 7_455 6_554 ?
O3 Na1 O3 94.7(2) . 7_454 ?
O4 Na1 O3 87.1(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.7(2) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.22(19) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 58.02(19) 6_554 7_454 ?
O3 Na1 O5 78.2(2) . . ?
O4 Na1 O5 76.5(2) . . ?
O3 Na1 O5 149.0(3) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 57.92(19) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 60.68(14) 6_554 . ?
O3 Na1 O5 118.3(2) 7_454 . ?
O3 Na1 Si1 128.75(13) . 4 ?
O4 Na1 Si1 79.14(12) . 4 ?
O3 Na1 Si1 30.77(10) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.08(15) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.9(2) 6_554 4 ?
O3 Na1 Si1 89.08(14) 7_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.8(2) . 4 ?
O3 Na1 Si1 92.4(2) . 6_554 ?
O4 Na1 Si1 75.41(18) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 122.5(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 143.39(13) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 29.80(14) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Si1 29.96(10) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Si1 88.54(17) . 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 113.10(13) 4 6_554 ?
O3 Na1 Si1 91.9(2) . 6 ?
O4 Na1 Si1 71.22(19) . 6 ?
O3 Na1 Si1 121.8(3) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 29.77(11) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 89.00(17) 6_554 6 ?
O3 Na1 Si1 143.61(13) 7_454 6 ?
O5 Na1 Si1 29.50(15) . 6 ?
Si1 Na1 Si1 113.95(13) 4 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.12(8) 6_554 6 ?
O3 Na1 Na1 50.20(11) . 2_565 ?
O4 Na1 Na1 157.53(17) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 47.79(11) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 95.25(10) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 119.6(2) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Na1 95.12(10) 7_454 2_565 ?
O5 Na1 Na1 121.01(19) . 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 78.55(9) 4 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.22(7) 6_554 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.13(7) 6 2_565 ?

O3 Na1 Pr1 108.83(12) . 6_554 ?
O4 Na1 Pr1 43.43(10) . 6_554 ?
O3 Na1 Pr1 153.18(13) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Pr1 86.53(13) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Pr1 43.72(17) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Pr1 84.85(12) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Pr1 43.85(16) . 6_554 ?
Si1 Na1 Pr1 122.41(8) 4 6_554 ?
Si1 Na1 Pr1 57.34(6) 6_554 6_554 ?
Si1 Na1 Pr1 59.23(6) 6 6_554 ?
Na1 Na1 Pr1 159.01(12) 2_565 6_554 ?
Na2B Na2A Na2A 0.000(1) . 3 ?
Na2B Na2A O1 180.0 . . ?
Na2A Na2A O1 180.0 3 . ?
Na2B Na2A O5 107.1(4) . 7_455 ?
Na2A Na2A O5 107.1(4) 3 7_455 ?
O1 Na2A O5 72.9(4) . 7_455 ?
Na2B Na2A O5 107.1(4) . 8_545 ?
Na2A Na2A O5 107.1(4) 3 8_545 ?
O1 Na2A O5 72.9(4) . 8_545 ?
O5 Na2A O5 145.9(8) 7_455 8_545 ?
Na2B Na2A O2 107.8(4) . 2 ?
Na2A Na2A O2 107.8(4) 3 2 ?
O1 Na2A O2 72.2(4) . 2 ?
O5 Na2A O2 83.5(4) 7_455 2 ?
O5 Na2A O2 86.2(4) 8_545 2 ?
Na2B Na2A O2 107.8(4) . . ?
Na2A Na2A O2 107.8(4) 3 . ?
O1 Na2A O2 72.2(4) . . ?
O5 Na2A O2 86.2(4) 7_455 . ?
O5 Na2A O2 83.5(4) 8_545 . ?
O2 Na2A O2 144.5(8) 2 . ?
Na2B Na2A Si1 80.6(3) . . ?
Na2A Na2A Si1 80.6(3) 3 . ?
O1 Na2A Si1 99.4(3) . . ?
O5 Na2A Si1 83.59(17) 7_455 . ?
O5 Na2A Si1 102.00(18) 8_545 . ?
O2 Na2A Si1 166.3(5) 2 . ?
O2 Na2A Si1 29.38(15) . . ?
Na2B Na2A Si1 80.6(3) . 2 ?
Na2A Na2A Si1 80.6(3) 3 2 ?
O1 Na2A Si1 99.4(3) . 2 ?
O5 Na2A Si1 102.00(18) 7_455 2 ?
O5 Na2A Si1 83.59(17) 8_545 2 ?
O2 Na2A Si1 29.38(15) 2 2 ?
O2 Na2A Si1 166.3(5) . 2 ?

Si1 Na2A Si1 161.1(6) . 2 ?
Na2B Na2A Si1 80.0(3) . 3 ?
Na2A Na2A Si1 80.0(3) 3 3 ?
O1 Na2A Si1 100.0(3) . 3 ?
O5 Na2A Si1 168.2(4) 7_455 3 ?
O5 Na2A Si1 28.78(17) 8_545 3 ?
O2 Na2A Si1 103.68(17) 2 3 ?
O2 Na2A Si1 82.52(17) . 3 ?
Si1 Na2A Si1 88.36(11) . 3 ?
Si1 Na2A Si1 88.36(11) 2 3 ?
Na2B Na2A Si1 80.0(3) . 4 ?
Na2A Na2A Si1 80.0(3) 3 4 ?
O1 Na2A Si1 100.0(3) . 4 ?
O5 Na2A Si1 28.78(17) 7_455 4 ?
O5 Na2A Si1 168.2(4) 8_545 4 ?
O2 Na2A Si1 82.52(17) 2 4 ?
O2 Na2A Si1 103.68(17) . 4 ?
Si1 Na2A Si1 88.36(11) . 4 ?
Si1 Na2A Si1 88.36(11) 2 4 ?
Si1 Na2A Si1 159.9(6) 3 4 ?
Na2B Na2A Pr1 128.8(2) . 2 ?
Na2A Na2A Pr1 128.8(2) 3 2 ?
O1 Na2A Pr1 51.2(2) . 2 ?
O5 Na2A Pr1 110.2(5) 7_455 2 ?
O5 Na2A Pr1 44.5(2) 8_545 2 ?
O2 Na2A Pr1 45.6(2) 2 2 ?
O2 Na2A Pr1 108.5(5) . 2 ?
Si1 Na2A Pr1 136.7(4) . 2 ?
Si1 Na2A Pr1 58.50(10) 2 2 ?
Si1 Na2A Pr1 70.37(12) 3 2 ?
Si1 Na2A Pr1 123.7(3) 4 2 ?
Na2A Na2B Na2A 180.0 . 3 ?
Na2A Na2B O1 180.0 . 1_554 ?
Na2A Na2B O1 0.000(1) 3 1_554 ?
Na2A Na2B O1 0.000(1) . . ?
Na2A Na2B O1 180.0 3 . ?
O1 Na2B O1 180.0 1_554 . ?
Na2A Na2B O5 118.04(14) . 5_444 ?
Na2A Na2B O5 61.96(14) 3 5_444 ?
O1 Na2B O5 61.96(14) 1_554 5_444 ?
O1 Na2B O5 118.04(14) . 5_444 ?
Na2A Na2B O5 61.96(14) . 7_455 ?
Na2A Na2B O5 118.04(14) 3 7_455 ?
O1 Na2B O5 118.04(14) 1_554 7_455 ?
O1 Na2B O5 61.96(14) . 7_455 ?
O5 Na2B O5 102.77(12) 5_444 7_455 ?

Na2A Na2B O5 118.04(14) . 6_554 ?
Na2A Na2B O5 61.96(14) 3 6_554 ?
O1 Na2B O5 61.96(14) 1_554 6_554 ?
O1 Na2B O5 118.04(14) . 6_554 ?
O5 Na2B O5 123.9(3) 5_444 6_554 ?
O5 Na2B O5 102.77(12) 7_455 6_554 ?
Na2A Na2B O5 61.96(14) . 8_545 ?
Na2A Na2B O5 118.04(14) 3 8_545 ?
O1 Na2B O5 118.04(14) 1_554 8_545 ?
O1 Na2B O5 61.96(14) . 8_545 ?
O5 Na2B O5 102.77(12) 5_444 8_545 ?
O5 Na2B O5 123.9(3) 7_455 8_545 ?
O5 Na2B O5 102.77(12) 6_554 8_545 ?
Na2A Na2B O2 118.36(13) . 3 ?
Na2A Na2B O2 61.64(13) 3 3 ?
O1 Na2B O2 61.64(13) 1_554 3 ?
O1 Na2B O2 118.36(13) . 3 ?
O5 Na2B O2 75.9(3) 5_444 3 ?
O5 Na2B O2 178.6(3) 7_455 3 ?
O5 Na2B O2 78.3(3) 6_554 3 ?
O5 Na2B O2 56.42(13) 8_545 3 ?
Na2A Na2B O2 61.64(13) . 2 ?
Na2A Na2B O2 118.36(13) 3 2 ?
O1 Na2B O2 118.36(13) 1_554 2 ?
O1 Na2B O2 61.64(13) . 2 ?
O5 Na2B O2 56.42(13) 5_444 2 ?
O5 Na2B O2 75.9(3) 7_455 2 ?
O5 Na2B O2 178.6(3) 6_554 2 ?
O5 Na2B O2 78.3(3) 8_545 2 ?
O2 Na2B O2 103.04(11) 3 2 ?
Na2A Na2B O2 118.36(13) . 4 ?
Na2A Na2B O2 61.64(13) 3 4 ?
O1 Na2B O2 61.64(13) 1_554 4 ?
O1 Na2B O2 118.36(13) . 4 ?
O5 Na2B O2 78.3(3) 5_444 4 ?
O5 Na2B O2 56.42(13) 7_455 4 ?
O5 Na2B O2 75.9(3) 6_554 4 ?
O5 Na2B O2 178.6(3) 8_545 4 ?
O2 Na2B O2 123.3(3) 3 4 ?
O2 Na2B O2 103.04(11) 2 4 ?
Na2A Na2B O2 61.64(13) . . ?
Na2A Na2B O2 118.36(13) 3 . ?
O1 Na2B O2 118.36(13) 1_554 . ?
O1 Na2B O2 61.64(13) . . ?
O5 Na2B O2 178.6(3) 5_444 . ?
O5 Na2B O2 78.3(3) 7_455 . ?

O5 Na2B O2 56.42(13) 6_554 . ?
O5 Na2B O2 75.9(3) 8_545 . ?
O2 Na2B O2 103.04(11) 3 . ?
O2 Na2B O2 123.3(3) 2 . ?
O2 Na2B O2 103.04(11) 4 . ?
Na2A O1 Na2A 180.0 3_556 . ?
Na2A O1 Pr1 90.963(10) 3_556 . ?
Na2A O1 Pr1 89.037(10) . . ?
Na2A O1 Pr1 90.963(10) 3_556 2 ?
Na2A O1 Pr1 89.037(10) . 2 ?
Pr1 O1 Pr1 178.074(19) . 2 ?
Na2A O1 Pr1 89.037(10) 3_556 4_556 ?
Na2A O1 Pr1 90.963(10) . 4_556 ?
Pr1 O1 Pr1 90.0 . 4_556 ?
Pr1 O1 Pr1 90.0 2 4_556 ?
Na2A O1 Pr1 89.037(10) 3_556 3_556 ?
Na2A O1 Pr1 90.963(10) . 3_556 ?
Pr1 O1 Pr1 90.0 . 3_556 ?
Pr1 O1 Pr1 90.0 2 3_556 ?
Pr1 O1 Pr1 178.074(19) 4_556 3_556 ?
Na2A O1 Na2B 180.0 . 1_556 ?
Pr1 O1 Na2B 90.963(10) . 1_556 ?
Pr1 O1 Na2B 90.963(10) 2 1_556 ?
Pr1 O1 Na2B 89.037(10) 4_556 1_556 ?
Pr1 O1 Na2B 89.037(10) 3_556 1_556 ?
Na2A O1 Na2B 180.0 3_556 . ?
Pr1 O1 Na2B 89.037(10) . . ?
Pr1 O1 Na2B 89.037(10) 2 . ?
Pr1 O1 Na2B 90.963(10) 4_556 . ?
Pr1 O1 Na2B 90.963(10) 3_556 . ?
Na2B O1 Na2B 180.0 1_556 . ?
Si1 O2 Pr1 153.1(5) . 3_556 ?
Si1 O2 Pr1 104.9(4) . . ?
Pr1 O2 Pr1 102.0(2) 3_556 . ?
Si1 O2 Na2A 97.2(5) . . ?
Pr1 O2 Na2A 86.8(3) 3_556 . ?
Pr1 O2 Na2A 83.7(4) . . ?
Si1 O2 Na1 93.1(3) . 6 ?
Pr1 O2 Na1 87.7(3) 3_556 6 ?
Pr1 O2 Na1 85.8(2) . 6 ?
Na2A O2 Na1 166.8(5) . 6 ?
Si1 O2 Na2B 87.4(3) . . ?
Pr1 O2 Na2B 93.7(2) 3_556 . ?
Pr1 O2 Na2B 90.2(3) . . ?
Na1 O2 Na2B 175.9(3) 6 . ?
Si1 O3 Na1 176.4(3) 3_565 . ?

```
Si1 O3 Pr1 92.58(18) 3_565 8 ?
Na1 O3 Pr1 90.58(14) . 8 ?
Si1 O3 Na1 94.83(19) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.02(14) . 2_565 ?
Pr1 O3 Na1 172.59(19) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 94.3(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 87.2(3) . 8 ?
Pr1 O3 Na1 94.1(2) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.4(2) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 91.3(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 86.7(3) . 8_554 ?
Pr1 O3 Na1 94.9(2) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.9(2) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.22(19) 8 8_554 ?
Si1 O4 Pr1 94.98(19) . 6_554 ?
Si1 O4 Na1 170.8(4) . . ?
Pr1 O4 Na1 91.65(15) 6_554 . ?
Si1 O4 Pr1 90.5(3) . . ?
Pr1 O4 Pr1 117.3(3) 6_554 . ?
Na1 O4 Pr1 92.1(2) . . ?
Si1 O5 Pr1 148.3(5) 6 8 ?
Si1 O5 Pr1 109.9(4) 6 6_554 ?
Pr1 O5 Pr1 101.2(2) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2A 100.8(5) 6 7 ?
Pr1 O5 Na2A 86.5(3) 8 7 ?
Pr1 O5 Na2A 86.8(4) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na2B 90.5(3) 6 5 ?
Pr1 O5 Na2B 93.4(2) 8 5 ?
Pr1 O5 Na2B 93.9(3) 6_554 5 ?
Si1 O5 Na1 91.3(3) 6 . ?
Pr1 O5 Na1 85.9(3) 8 . ?
Pr1 O5 Na1 84.0(2) 6_554 . ?
Na2A O5 Na1 166.8(5) 7 . ?
Na2B O5 Na1 177.6(3) 5 . ?

_refine_diff_density_max         1.687
_refine_diff_density_min        -1.217
_refine_diff_density_rms         0.254

#===END

data_Na5Nd4(OH)[SiO4]
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
```

Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety 'H Na5 Nd4 O17 Si4'
_chemical_formula_sum 'H Na5 Nd4 O17 Si4'
_chemical_formula_weight 1077.28

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Nd Nd -0.1943 3.0179 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system tetragonal
_space_group_IT_number 82
_space_group_name_H-M_alt 'I -4'
_space_group_name_Hall 'I -4'

_shelx_space_group_comment
;
The symmetry employed for this shelxl refinement is uniquely defined
by the following loop, which should always be used as a source of
symmetry information in preference to the above space-group names.
They are only intended as comments.
;

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'

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

_cell_length_a 11.9726(3)
_cell_length_b 11.9726(3)
_cell_length_c 5.4824(2)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 785.86(5)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 7694
_cell_measurement_theta_min 2.406
_cell_measurement_theta_max 36.085

_exptl_crystal_description cube
_exptl_crystal_colour 'light blue'
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 4.553
_exptl_crystal_F_000 976
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.060
_exptl_crystal_size_mid 0.060
_exptl_crystal_size_min 0.050
_exptl_absorpt_coefficient_mu 13.532
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.497
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.551
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.8136
_exptl_absorpt_correction_T_max 1.0000
_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)

```
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_source                   ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number            12490
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0204
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0275
_diffrn_reflns_limit_h_min       -19
_diffrn_reflns_limit_h_max       19
_diffrn_reflns_limit_k_min       -19
_diffrn_reflns_limit_k_max       17
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       9
_diffrn_reflns_theta_min         2.406
_diffrn_reflns_theta_max         36.293
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.998
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.998
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.999
_reflns_number_total             1888
_reflns_number_gt                1859
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.845
_reflns_Friedel_fraction_max     1.001
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
```

```
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0272P)^2^+0.6209P]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.53(2)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1888
_refine_ls_number_parameters     72
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0200
_refine_ls_R_factor_gt           0.0195
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0454
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0452
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.086
_refine_ls_restrained_S_all      1.086
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
```

```
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Nd1 Nd 0.11766(2) 0.18506(2) 0.48281(4) 0.01047(6) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24759(9) 0.10078(9) 0.0076(2) 0.00995(18) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.10534(15) 0.41080(16) 0.0063(5) 0.0221(4) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.0714(14) 0.037(2) Uani 0.5 2 d S T P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.0226(15) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2087(3) 0.0359(3) 0.2520(6) 0.0178(7) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1066(2) 0.6165(2) 0.0125(7) 0.0173(6) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2013(3) 0.2288(2) 0.0441(6) 0.0137(5) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3063(3) 0.4536(3) 0.2653(6) 0.0177(6) Uani 1 1 d . . . . .

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
Nd1 0.00781(9) 0.00877(9) 0.01484(9) 0.00030(7) 0.00038(6) 0.00041(6)
Si1 0.0113(4) 0.0091(4) 0.0094(4) -0.0001(4) -0.0001(4) -0.0005(3)
Na1 0.0177(8) 0.0193(8) 0.0294(10) 0.0011(9) 0.0015(9) 0.0004(6)
Na2 0.033(4) 0.016(3) 0.061(6) 0.000 0.000 -0.001(4)
O1 0.0145(16) 0.0145(16) 0.039(4) 0.000 0.000 0.000
O2 0.0284(19) 0.0123(15) 0.0127(13) 0.0023(11) 0.0049(12) 0.0014(13)
O3 0.0137(12) 0.0117(11) 0.0266(16) 0.0002(13) -0.0027(14) -0.0015(9)
O4 0.0143(12) 0.0075(11) 0.0192(13) -0.0012(11) 0.0019(11) 0.0009(9)
O5 0.0297(19) 0.0115(14) 0.0119(13) 0.0019(11) 0.0056(12) -0.0005(14)

_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
Nd1 O2 2.361(3) 4_556 ?
Nd1 O5 2.391(3) 7_455 ?
Nd1 O4 2.424(3) 6 ?
Nd1 O2 2.445(4) . ?
Nd1 O5 2.446(4) 6 ?
Nd1 O3 2.494(3) 7_455 ?
Nd1 O1 2.6273(2) . ?
Nd1 O4 2.657(3) . ?
Nd1 Si1 3.0324(11) 6 ?
Nd1 Si1 3.1976(12) . ?
Nd1 Si1 3.4230(12) 1_556 ?
Nd1 Na2 3.462(5) . ?
Si1 O5 1.614(3) 6_554 ?
Si1 O2 1.617(3) . ?
Si1 O3 1.632(3) 4_655 ?
Si1 O4 1.642(3) . ?
Si1 Nd1 3.0324(11) 6_554 ?
Si1 Na1 3.149(2) 3 ?
Si1 Na2 3.2195(13) . ?
Si1 Na2 3.2297(15) 3 ?
Si1 Na1 3.255(3) 6 ?
Si1 Na1 3.267(3) 6_554 ?
Si1 Nd1 3.4230(12) 1_554 ?
Na1 O3 2.463(3) . ?
Na1 O4 2.472(3) . ?
Na1 O3 2.559(3) 2_565 ?
Na1 O3 2.650(5) 7_455 ?
Na1 O2 2.703(4) 6_554 ?
Na1 O5 2.841(5) . ?
Na1 O3 2.855(5) 7_454 ?
Na1 Si1 3.149(2) 4 ?
Na1 Si1 3.255(3) 6_554 ?
Na1 Si1 3.267(3) 6 ?
Na1 Na1 3.305(4) 2_565 ?
Na1 Nd1 3.5117(18) 6_554 ?
Na2 Na2 0.783(16) 3 ?
Na2 O1 2.350(8) . ?
Na2 O5 2.547(5) 7_455 ?

Na2 O5 2.547(5) 8_545 ?
Na2 O2 2.722(5) . ?
Na2 O2 2.722(5) 2 ?
Na2 O5 2.916(6) 5_444 ?
Na2 O5 2.916(6) 6_554 ?
Na2 Si1 3.2195(13) 2 ?
Na2 Si1 3.2296(15) 3 ?
Na2 Si1 3.2296(15) 4 ?
O1 Na2 2.350(8) 3_556 ?
O1 Nd1 2.6273(2) 2 ?
O1 Nd1 2.6273(2) 4_556 ?
O1 Nd1 2.6273(2) 3_556 ?
O2 Nd1 2.361(3) 3_556 ?
O2 Na1 2.703(4) 6 ?
O3 Si1 1.632(3) 3_565 ?
O3 Nd1 2.494(3) 8 ?
O3 Na1 2.559(3) 2_565 ?
O3 Na1 2.650(5) 8 ?
O3 Na1 2.855(5) 8_554 ?
O4 Nd1 2.424(3) 6_554 ?
O5 Si1 1.614(3) 6 ?
O5 Nd1 2.391(3) 8 ?
O5 Nd1 2.446(4) 6_554 ?
O5 Na2 2.547(5) 7 ?
O5 Na2 2.916(6) 5 ?

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
O2 Nd1 O5 72.87(11) 4_556 7_455 ?
O2 Nd1 O4 124.06(12) 4_556 6 ?
O5 Nd1 O4 142.65(12) 7_455 6 ?
O2 Nd1 O2 138.89(16) 4_556 . ?
O5 Nd1 O2 95.93(12) 7_455 . ?
O4 Nd1 O2 89.08(12) 6 . ?
O2 Nd1 O5 88.93(13) 4_556 6 ?
O5 Nd1 O5 134.03(16) 7_455 6 ?
O4 Nd1 O5 82.44(11) 6 6 ?
O2 Nd1 O5 70.49(11) . 6 ?
O2 Nd1 O3 82.50(12) 4_556 7_455 ?
O5 Nd1 O3 87.60(12) 7_455 7_455 ?

O4 Nd1 O3 65.04(9) 6 7_455 ?
O2 Nd1 O3 137.57(11) . 7_455 ?
O5 Nd1 O3 132.40(12) 6 7_455 ?
O2 Nd1 O1 70.21(10) 4_556 . ?
O5 Nd1 O1 67.44(10) 7_455 . ?
O4 Nd1 O1 146.45(7) 6 . ?
O2 Nd1 O1 69.00(8) . . ?
O5 Nd1 O1 66.69(8) 6 . ?
O3 Nd1 O1 147.13(7) 7_455 . ?
O2 Nd1 O4 145.80(11) 4_556 . ?
O5 Nd1 O4 77.64(10) 7_455 . ?
O4 Nd1 O4 72.83(7) 6 . ?
O2 Nd1 O4 60.49(10) . . ?
O5 Nd1 O4 124.51(11) 6 . ?
O3 Nd1 O4 79.31(10) 7_455 . ?
O1 Nd1 O4 113.61(6) . . ?
O2 Nd1 Si1 106.58(10) 4_556 6 ?
O5 Nd1 Si1 115.21(10) 7_455 6 ?
O4 Nd1 Si1 32.67(7) 6 6 ?
O2 Nd1 Si1 113.80(9) . 6 ?
O5 Nd1 Si1 110.34(8) 6 6 ?
O3 Nd1 Si1 32.54(7) 7_455 6 ?
O1 Nd1 Si1 175.36(3) . 6 ?
O4 Nd1 Si1 70.96(7) . 6 ?
O2 Nd1 Si1 156.68(9) 4_556 . ?
O5 Nd1 Si1 87.12(9) 7_455 . ?
O4 Nd1 Si1 79.17(8) 6 . ?
O2 Nd1 Si1 29.66(8) . . ?
O5 Nd1 Si1 96.92(9) 6 . ?
O3 Nd1 Si1 109.06(9) 7_455 . ?
O1 Nd1 Si1 91.371(19) . . ?
O4 Nd1 Si1 30.85(6) . . ?
Si1 Nd1 Si1 92.56(3) 6 . ?
O2 Nd1 Si1 82.63(9) 4_556 1_556 ?
O5 Nd1 Si1 149.78(9) 7_455 1_556 ?
O4 Nd1 Si1 66.58(8) 6 1_556 ?
O2 Nd1 Si1 90.98(9) . 1_556 ?
O5 Nd1 Si1 25.67(8) 6 1_556 ?
O3 Nd1 Si1 106.78(9) 7_455 1_556 ?
O1 Nd1 Si1 87.989(18) . 1_556 ?
O4 Nd1 Si1 130.37(7) . 1_556 ?
Si1 Nd1 Si1 88.27(3) 6 1_556 ?
Si1 Nd1 Si1 111.76(3) . 1_556 ?
O2 Nd1 Na2 99.27(11) 4_556 . ?
O5 Nd1 Na2 47.36(10) 7_455 . ?
O4 Nd1 Na2 136.61(10) 6 . ?

O2 Nd1 Na2 51.44(9) . . ?
O5 Nd1 Na2 97.44(10) 6 . ?
O3 Nd1 Na2 130.13(11) 7_455 . ?
O1 Nd1 Na2 42.72(10) . . ?
O4 Nd1 Na2 71.91(12) . . ?
Si1 Nd1 Na2 141.91(10) 6 . ?
Si1 Nd1 Na2 57.66(7) . . ?
Si1 Nd1 Na2 122.96(8) 1_556 . ?
O5 Si1 O2 111.90(18) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 111.1(2) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 111.3(2) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 109.99(19) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 104.48(18) . . ?
O3 Si1 O4 107.74(16) 4_655 . ?
O5 Si1 Nd1 121.13(14) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Nd1 126.61(14) . 6_554 ?
O3 Si1 Nd1 55.27(11) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Nd1 52.84(11) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 84.94(15) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 79.77(15) . 3 ?
O3 Si1 Na1 54.09(11) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 160.75(13) . 3 ?
Nd1 Si1 Na1 109.36(4) 6_554 3 ?
O5 Si1 Nd1 127.11(15) 6_554 . ?
O2 Si1 Nd1 48.43(14) . . ?
O3 Si1 Nd1 121.77(15) 4_655 . ?
O4 Si1 Nd1 56.08(12) . . ?
Nd1 Si1 Nd1 91.63(3) 6_554 . ?
Na1 Si1 Nd1 124.68(6) 3 . ?
O5 Si1 Na2 64.5(2) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2 57.66(19) . . ?
O3 Si1 Na2 160.26(11) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 91.46(11) . . ?
Nd1 Si1 Na2 144.25(4) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.28(4) 3 . ?
Nd1 Si1 Na2 65.29(12) . . ?
O5 Si1 Na2 51.09(19) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2 70.58(19) . 3 ?
O3 Si1 Na2 157.20(16) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 93.15(11) . 3 ?
Nd1 Si1 Na2 142.95(5) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.88(5) 3 3 ?
Nd1 Si1 Na2 77.33(12) . 3 ?
O5 Si1 Na1 152.92(15) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 55.90(15) . 6 ?
O3 Si1 Na1 61.28(14) 4_655 6 ?

O4 Si1 Na1 96.90(13) . 6 ?
Nd1 Si1 Na1 77.64(4) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.60(8) 3 6 ?
Nd1 Si1 Na1 65.94(4) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 113.01(14) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 126.39(14) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.40(15) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 146.29(15) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 53.68(15) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 108.91(13) . 6_554 ?
Nd1 Si1 Na1 73.23(4) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 67.16(7) 3 6_554 ?
Nd1 Si1 Na1 163.94(5) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 124.87(14) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 111.47(14) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.41(6) 6 6_554 ?
O2 Si1 Nd1 135.01(15) . 1_554 ?
O3 Si1 Nd1 112.55(14) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Nd1 70.95(12) . 1_554 ?
Nd1 Si1 Nd1 87.41(3) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Nd1 119.51(6) 3 1_554 ?
Nd1 Si1 Nd1 111.76(3) . 1_554 ?
Na2 Si1 Nd1 77.48(13) . 1_554 ?
Na2 Si1 Nd1 65.18(12) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Nd1 164.68(5) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Nd1 63.27(4) 6_554 1_554 ?
O3 Na1 O4 151.32(13) . . ?
O3 Na1 O3 97.69(11) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 110.30(12) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 93.72(13) . 7_455 ?
O4 Na1 O3 79.84(12) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 91.54(13) 2_565 7_455 ?
O3 Na1 O2 76.46(13) . 6_554 ?
O4 Na1 O2 82.45(12) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 148.62(16) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.37(12) 7_455 6_554 ?
O3 Na1 O5 78.88(12) . . ?
O4 Na1 O5 73.97(11) . . ?
O3 Na1 O5 148.93(15) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 58.25(10) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 61.15(10) 6_554 . ?
O3 Na1 O3 94.96(12) . 7_454 ?
O4 Na1 O3 89.84(11) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.88(12) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.65(14) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 57.65(10) 6_554 7_454 ?

O5 Na1 O3 118.13(11) . 7_454 ?
O3 Na1 Si1 128.74(10) . 4 ?
O4 Na1 Si1 79.58(9) . 4 ?
O3 Na1 Si1 31.10(7) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.85(9) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.21(11) 6_554 4 ?
O5 Na1 Si1 142.01(11) . 4 ?
O3 Na1 Si1 88.12(9) 7_454 4 ?
O3 Na1 Si1 92.90(11) . 6_554 ?
O4 Na1 Si1 77.38(9) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 122.83(13) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 143.67(10) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 29.69(8) 6_554 6_554 ?
O5 Na1 Si1 88.24(9) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 30.09(7) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 112.16(7) 4 6_554 ?
O3 Na1 Si1 91.57(11) . 6 ?
O4 Na1 Si1 69.01(9) . 6 ?
O3 Na1 Si1 121.20(13) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 29.76(7) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 90.00(9) 6_554 6 ?
O5 Na1 Si1 29.61(7) . 6 ?
O3 Na1 Si1 144.07(9) 7_454 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.62(7) 4 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.41(6) 6_554 6 ?
O3 Na1 Na1 50.11(8) . 2_565 ?
O4 Na1 Na1 157.55(13) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 47.61(8) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 95.13(7) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 118.43(11) 6_554 2_565 ?
O5 Na1 Na1 121.99(11) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.76(7) 7_454 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 78.64(7) 4 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.13(5) 6_554 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.02(5) 6 2_565 ?
O3 Na1 Nd1 108.74(9) . 6_554 ?
O4 Na1 Nd1 43.63(8) . 6_554 ?
O3 Na1 Nd1 153.54(10) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Nd1 87.89(9) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Nd1 43.98(8) 6_554 6_554 ?
O5 Na1 Nd1 43.73(8) . 6_554 ?
O3 Na1 Nd1 83.99(8) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Nd1 122.44(6) 4 6_554 ?
Si1 Na1 Nd1 56.25(4) 6_554 6_554 ?
Si1 Na1 Nd1 60.53(4) 6 6_554 ?
Na1 Na1 Nd1 158.73(10) 2_565 6_554 ?

Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 110.58(18) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 69.42(18) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 110.58(18) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 69.42(18) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 138.8(4) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 111.34(17) 3 . ?
O1 Na2 O2 68.66(17) . . ?
O5 Na2 O2 85.89(17) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 79.39(16) 8_545 . ?
Na2 Na2 O2 111.34(17) 3 2 ?
O1 Na2 O2 68.66(17) . 2 ?
O5 Na2 O2 79.39(16) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 85.89(17) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 137.3(3) . 2 ?
Na2 Na2 O5 54.86(14) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.14(14) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 101.67(8) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 101.67(8) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 165.8(3) . 5_444 ?
O2 Na2 O5 56.58(9) 2 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.86(14) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.14(14) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 101.67(8) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 101.67(8) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 56.58(9) . 6_554 ?
O2 Na2 O5 165.8(3) 2 6_554 ?
O5 Na2 O5 109.7(3) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 Si1 83.77(14) 3 2 ?
O1 Na2 Si1 96.23(14) . 2 ?
O5 Na2 Si1 100.30(9) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.12(9) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 160.7(2) . 2 ?
O2 Na2 Si1 30.13(7) 2 2 ?
O5 Na2 Si1 29.99(7) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 137.8(3) 6_554 2 ?
Na2 Na2 Si1 83.77(14) 3 . ?
O1 Na2 Si1 96.23(14) . . ?
O5 Na2 Si1 84.12(9) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 100.30(9) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 30.13(7) . . ?
O2 Na2 Si1 160.7(2) 2 . ?
O5 Na2 Si1 137.8(3) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 29.99(7) 6_554 . ?
Si1 Na2 Si1 167.5(3) 2 . ?
Na2 Na2 Si1 82.29(14) 3 3 ?

O1 Na2 Si1 97.71(14) . 3 ?
O5 Na2 Si1 164.6(3) 7_455 3 ?
O5 Na2 Si1 29.55(8) 8_545 3 ?
O2 Na2 Si1 81.42(8) . 3 ?
O2 Na2 Si1 104.28(9) 2 3 ?
O5 Na2 Si1 92.59(13) 5_444 3 ?
O5 Na2 Si1 78.49(11) 6_554 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.17(3) 2 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.17(3) . 3 ?
Na2 Na2 Si1 82.29(14) 3 4 ?
O1 Na2 Si1 97.71(14) . 4 ?
O5 Na2 Si1 29.55(8) 7_455 4 ?
O5 Na2 Si1 164.6(3) 8_545 4 ?
O2 Na2 Si1 104.29(9) . 4 ?
O2 Na2 Si1 81.42(8) 2 4 ?
O5 Na2 Si1 78.49(11) 5_444 4 ?
O5 Na2 Si1 92.59(13) 6_554 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.17(3) 2 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.17(3) . 4 ?
Si1 Na2 Si1 164.6(3) 3 4 ?
Na2 O1 Na2 180.0 . 3_556 ?
Na2 O1 Nd1 87.944(5) . 2 ?
Na2 O1 Nd1 92.056(4) 3_556 2 ?
Na2 O1 Nd1 92.056(4) . 4_556 ?
Na2 O1 Nd1 87.944(4) 3_556 4_556 ?
Nd1 O1 Nd1 90.1 2 4_556 ?
Na2 O1 Nd1 92.056(4) . 3_556 ?
Na2 O1 Nd1 87.944(4) 3_556 3_556 ?
Nd1 O1 Nd1 90.1 2 3_556 ?
Nd1 O1 Nd1 175.889(9) 4_556 3_556 ?
Na2 O1 Nd1 87.945(4) . . ?
Na2 O1 Nd1 92.055(4) 3_556 . ?
Nd1 O1 Nd1 175.889(9) 2 . ?
Nd1 O1 Nd1 90.1 4_556 . ?
Nd1 O1 Nd1 90.1 3_556 . ?
Si1 O2 Nd1 156.7(2) . 3_556 ?
Si1 O2 Nd1 101.91(17) . . ?
Nd1 O2 Nd1 101.34(13) 3_556 . ?
Si1 O2 Na1 94.41(17) . 6 ?
Nd1 O2 Na1 87.99(13) 3_556 6 ?
Nd1 O2 Na1 85.87(12) . 6 ?
Si1 O2 Na2 92.2(2) . . ?
Nd1 O2 Na2 89.48(15) 3_556 . ?
Nd1 O2 Na2 83.94(15) . . ?
Na1 O2 Na2 168.8(2) 6 . ?
Si1 O3 Na1 174.5(2) 3_565 . ?

```
Si1 O3 Nd1 92.19(13) 3_565 8 ?
Na1 O3 Nd1 90.69(11) . 8 ?
Si1 O3 Na1 94.81(14) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.28(11) . 2_565 ?
Nd1 O3 Na1 172.97(14) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 96.57(17) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 87.86(13) . 8 ?
Nd1 O3 Na1 93.95(12) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.90(13) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 88.63(16) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 86.50(13) . 8_554 ?
Nd1 O3 Na1 94.80(12) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.74(12) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.64(14) 8 8_554 ?
Si1 O4 Nd1 94.49(14) . 6_554 ?
Si1 O4 Na1 165.8(2) . . ?
Nd1 O4 Na1 91.64(10) 6_554 . ?
Si1 O4 Nd1 93.08(14) . . ?
Nd1 O4 Nd1 123.10(13) 6_554 . ?
Na1 O4 Nd1 94.27(11) . . ?
Si1 O5 Nd1 144.8(2) 6 8 ?
Si1 O5 Nd1 113.31(18) 6 6_554 ?
Nd1 O5 Nd1 100.45(12) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 99.4(2) 6 7 ?
Nd1 O5 Na2 88.95(15) 8 7 ?
Nd1 O5 Na2 91.82(17) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na1 89.99(17) 6 . ?
Nd1 O5 Na1 84.29(12) 8 . ?
Nd1 O5 Na1 82.88(11) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 170.5(2) 7 . ?
Si1 O5 Na2 85.48(19) 6 5 ?
Nd1 O5 Na2 97.86(14) 8 5 ?
Nd1 O5 Na2 101.40(16) 6_554 5 ?
Na1 O5 Na2 174.71(19) . 5 ?

_refine_diff_density_max         2.250
_refine_diff_density_min        -0.790
_refine_diff_density_rms         0.202

#===END

data_Na5Sm4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
```

Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

```
_audit_creation_method          SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common           ?
_chemical_melting_point         ?
_chemical_formula_moiety         'H Na5 O17 Si4 Sm4'
_chemical_formula_sum           'H Na5 O17 Si4 Sm4'
_chemical_formula_weight         1101.72

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
H H 0.0000 0.0000 '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'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Sm Sm -0.1638 3.4418 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system      tetragonal
_space_group_IT_number          82
_space_group_name_H-M_alt        'I -4'
_space_group_name_Hall          'I -4'


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

_cell_length_a                 11.8467(14)
_cell_length_b                 11.8467(14)
_cell_length_c                 5.4846(13)
_cell_angle_alpha               90
_cell_angle_beta                90
```

```
_cell_angle_gamma                90
_cell_volume                     769.7(3)
_cell_formula_units_Z            2
_cell_measurement_temperature    296(2)
_cell_measurement_reflns_used    2252
_cell_measurement_theta_min      2.432
_cell_measurement_theta_max      29.512

_exptl_crystal_description       fragment
_exptl_crystal_colour            colorless
_exptl_crystal_density_meas      ?
_exptl_crystal_density_method    ?
_exptl_crystal_density_diffrn    4.753
_exptl_crystal_F_000             992
_exptl_transmission_factor_min   ?
_exptl_transmission_factor_max   ?
_exptl_crystal_size_max          0.050
_exptl_crystal_size_mid          0.040
_exptl_crystal_size_min          0.040
_exptl_absorpt_coefficient_mu    15.583
_shelx_estimated_absorpt_T_min   0.510
_shelx_estimated_absorpt_T_max   0.575
_exptl_absorpt_correction_type   multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min  0.7560
_exptl_absorpt_correction_T_max  1.0000
_exptl_absorpt_process_details   'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature      296(2)
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_source                   ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number            8856
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0463
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0471
_diffrn_reflns_limit_h_min       -19
_diffrn_reflns_limit_h_max       19
_diffrn_reflns_limit_k_min       -17
_diffrn_reflns_limit_k_max       19
```

```
_diffrn_reflns_limit_l_min       -9
_diffrn_reflns_limit_l_max       8
_diffrn_reflns_theta_min         2.431
_diffrn_reflns_theta_max         36.255
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 0.994
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 0.994
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 0.994
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.999
_reflns_number_total             1811
_reflns_number_gt                1690
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.846
_reflns_Friedel_fraction_max     0.994
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
```

```
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0287P)^2^+0.3331P]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.41(3)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1811
_refine_ls_number_parameters     72
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0372
_refine_ls_R_factor_gt           0.0322
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0602
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0585
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.042
_refine_ls_restrained_S_all      1.042
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Sm1 Sm 0.11719(3) 0.18469(3) 0.47901(6) 0.00941(9) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24738(15) 0.10173(15) 0.0100(4) 0.0104(3) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1048(3) 0.4105(2) 0.0085(8) 0.0217(7) Uani 1 1 d . . . . .
```

Na2 Na 0.0000 0.0000 0.0726(18) 0.030(2) Uani 0.5 2 d S T P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.015(2) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2087(6) 0.0345(5) 0.2545(10) 0.0157(12) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1076(4) 0.6151(4) 0.0149(11) 0.0146(10) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2016(4) 0.2318(4) 0.0549(10) 0.0131(10) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3092(6) 0.4518(5) 0.2674(10) 0.0154(11) Uani 1 1 d . . . . .

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
Sm1 0.00741(14) 0.00834(14) 0.01249(14) 0.00040(12) 0.00051(12) 0.00060(11)
Si1 0.0114(7) 0.0088(7) 0.0112(9) 0.0007(8) 0.0000(8) -0.0005(6)
Na1 0.0176(13) 0.0175(13) 0.0299(18) 0.0035(17) 0.0026(15) -0.0001(11)
Na2 0.028(7) 0.022(6) 0.038(7) 0.000 0.000 -0.002(6)
O1 0.013(3) 0.013(3) 0.020(6) 0.000 0.000 0.000
O2 0.027(3) 0.009(3) 0.011(2) 0.0020(19) 0.003(2) 0.000(2)
O3 0.011(2) 0.011(2) 0.022(3) 0.000(2) 0.000(2) -0.0027(16)
O4 0.012(2) 0.010(2) 0.018(2) 0.0021(19) 0.0038(19) 0.0020(17)
O5 0.026(3) 0.012(3) 0.009(2) 0.0023(19) 0.002(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
Sm1 O2 2.334(6) 4_556 ?
Sm1 O5 2.381(5) 7_455 ?
Sm1 O4 2.400(5) 6 ?
Sm1 O2 2.420(6) . ?
Sm1 O5 2.424(6) 6 ?

Sm1 O3 2.461(5) 7_455 ?
Sm1 O4 2.593(5) . ?
Sm1 O1 2.5938(4) . ?
Sm1 Si1 3.0008(18) 6 ?
Sm1 Si1 3.156(2) . ?
Sm1 Na2 3.418(7) . ?
Sm1 Si1 3.439(2) 1_556 ?
Si1 O5 1.619(6) 6_554 ?
Si1 O2 1.625(6) . ?
Si1 O3 1.636(5) 4_655 ?
Si1 O4 1.652(5) . ?
Si1 Sm1 3.0008(18) 6_554 ?
Si1 Na1 3.119(3) 3 ?
Si1 Na2 3.187(2) . ?
Si1 Na2 3.201(2) 3 ?
Si1 Na1 3.250(5) 6 ?
Si1 Na1 3.263(5) 6_554 ?
Si1 Sm1 3.439(2) 1_554 ?
Na1 O4 2.421(5) . ?
Na1 O3 2.425(5) . ?
Na1 O3 2.535(5) 2_565 ?
Na1 O3 2.626(7) 7_455 ?
Na1 O2 2.692(7) 6_554 ?
Na1 O5 2.850(7) . ?
Na1 O3 2.881(7) 7_454 ?
Na1 Si1 3.119(3) 4 ?
Na1 Si1 3.250(5) 6_554 ?
Na1 Si1 3.263(5) 6 ?
Na1 Na1 3.266(6) 2_565 ?
Na1 Sm1 3.485(3) 6_554 ?
Na2 Na2 0.80(2) 3 ?
Na2 O1 2.344(10) . ?
Na2 O5 2.491(7) 7_455 ?
Na2 O5 2.491(7) 8_545 ?
Na2 O2 2.698(8) . ?
Na2 O2 2.698(8) 2 ?
Na2 O5 2.870(9) 5_444 ?
Na2 O5 2.870(9) 6_554 ?
Na2 Si1 3.187(2) 2 ?
Na2 Si1 3.201(2) 3 ?
Na2 Si1 3.201(2) 4 ?
O1 Na2 2.344(10) 3_556 ?
O1 Sm1 2.5938(4) 2 ?
O1 Sm1 2.5938(4) 3_556 ?
O1 Sm1 2.5938(4) 4_556 ?
O2 Sm1 2.334(6) 3_556 ?

O2 Na1 2.692(7) 6 ?
O3 Si1 1.636(5) 3_565 ?
O3 Sm1 2.461(5) 8 ?
O3 Na1 2.535(5) 2_565 ?
O3 Na1 2.626(7) 8 ?
O3 Na1 2.881(7) 8_554 ?
O4 Sm1 2.400(5) 6_554 ?
O5 Si1 1.619(6) 6 ?
O5 Sm1 2.381(5) 8 ?
O5 Sm1 2.424(6) 6_554 ?
O5 Na2 2.491(7) 7 ?
O5 Na2 2.870(9) 5 ?

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
O2 Sm1 O5 73.62(18) 4_556 7_455 ?
O2 Sm1 O4 122.0(2) 4_556 6 ?
O5 Sm1 O4 145.29(19) 7_455 6 ?
O2 Sm1 O2 138.9(3) 4_556 . ?
O5 Sm1 O2 95.86(19) 7_455 . ?
O4 Sm1 O2 89.45(19) 6 . ?
O2 Sm1 O5 87.1(2) 4_556 6 ?
O5 Sm1 O5 133.3(3) 7_455 6 ?
O4 Sm1 O5 80.80(19) 6 6 ?
O2 Sm1 O5 71.37(18) . 6 ?
O2 Sm1 O3 82.1(2) 4_556 7_455 ?
O5 Sm1 O3 88.3(2) 7_455 7_455 ?
O4 Sm1 O3 66.07(16) 6 7_455 ?
O2 Sm1 O3 138.27(18) . 7_455 ?
O5 Sm1 O3 131.42(19) 6 7_455 ?
O2 Sm1 O4 146.37(18) 4_556 . ?
O5 Sm1 O4 78.57(17) 7_455 . ?
O4 Sm1 O4 73.85(11) 6 . ?
O2 Sm1 O4 61.89(16) . . ?
O5 Sm1 O4 126.18(18) 6 . ?
O3 Sm1 O4 78.51(17) 7_455 . ?
O2 Sm1 O1 70.31(16) 4_556 . ?
O5 Sm1 O1 67.06(16) 7_455 . ?
O4 Sm1 O1 144.96(12) 6 . ?
O2 Sm1 O1 69.05(14) . . ?

O5 Sm1 O1 66.47(14) 6 . ?
O3 Sm1 O1 146.88(11) 7_455 . ?
O4 Sm1 O1 115.33(11) . . ?
O2 Sm1 Si1 105.87(17) 4_556 6 ?
O5 Sm1 Si1 116.53(16) 7_455 6 ?
O4 Sm1 Si1 33.32(12) 6 6 ?
O2 Sm1 Si1 114.14(15) . 6 ?
O5 Sm1 Si1 109.47(14) 6 6 ?
O3 Sm1 Si1 33.01(12) 7_455 6 ?
O4 Sm1 Si1 70.30(12) . 6 ?
O1 Sm1 Si1 174.21(5) . 6 ?
O2 Sm1 Si1 157.62(16) 4_556 . ?
O5 Sm1 Si1 87.08(14) 7_455 . ?
O4 Sm1 Si1 80.36(13) 6 . ?
O2 Sm1 Si1 30.39(13) . . ?
O5 Sm1 Si1 98.53(15) 6 . ?
O3 Sm1 Si1 109.10(14) 7_455 . ?
O4 Sm1 Si1 31.50(11) . . ?
O1 Sm1 Si1 92.01(3) . . ?
Si1 Sm1 Si1 92.72(5) 6 . ?
O2 Sm1 Na2 100.01(18) 4_556 . ?
O5 Sm1 Na2 46.77(16) 7_455 . ?
O4 Sm1 Na2 137.75(15) 6 . ?
O2 Sm1 Na2 51.66(15) . . ?
O5 Sm1 Na2 98.31(16) 6 . ?
O3 Sm1 Na2 130.16(16) 7_455 . ?
O4 Sm1 Na2 73.11(17) . . ?
O1 Sm1 Na2 43.25(13) . . ?
Si1 Sm1 Na2 142.54(14) 6 . ?
Si1 Sm1 Na2 57.83(10) . . ?
O2 Sm1 Si1 81.37(15) 4_556 1_556 ?
O5 Sm1 Si1 149.12(14) 7_455 1_556 ?
O4 Sm1 Si1 64.52(13) 6 1_556 ?
O2 Sm1 Si1 91.14(15) . 1_556 ?
O5 Sm1 Si1 25.25(13) 6 1_556 ?
O3 Sm1 Si1 106.18(14) 7_455 1_556 ?
O4 Sm1 Si1 130.41(12) . 1_556 ?
O1 Sm1 Si1 87.79(3) . 1_556 ?
Si1 Sm1 Si1 87.32(5) 6 1_556 ?
Si1 Sm1 Si1 112.46(5) . 1_556 ?
Na2 Sm1 Si1 123.47(10) . 1_556 ?
O5 Si1 O2 111.7(3) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 111.1(3) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 111.7(3) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 110.6(3) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 104.0(3) . . ?

O3 Si1 O4 107.4(3) 4_655 . ?
O5 Si1 Sm1 120.3(2) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Sm1 127.6(2) . 6_554 ?
O3 Si1 Sm1 55.05(17) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Sm1 52.95(19) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 85.6(2) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 79.5(2) . 3 ?
O3 Si1 Na1 54.13(18) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 160.0(2) . 3 ?
Sm1 Si1 Na1 109.17(7) 6_554 3 ?
O5 Si1 Sm1 126.1(2) 6_554 . ?
O2 Si1 Sm1 48.9(2) . . ?
O3 Si1 Sm1 122.8(2) 4_655 . ?
O4 Si1 Sm1 55.08(19) . . ?
Sm1 Si1 Sm1 92.57(5) 6_554 . ?
Na1 Si1 Sm1 124.99(10) 3 . ?
O5 Si1 Na2 63.9(3) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2 57.8(3) . . ?
O3 Si1 Na2 160.14(18) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 92.00(19) . . ?
Sm1 Si1 Na2 144.74(6) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.05(7) 3 . ?
Sm1 Si1 Na2 65.20(16) . . ?
O5 Si1 Na2 50.0(3) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2 71.0(3) . 3 ?
O3 Si1 Na2 156.3(2) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 94.12(19) . 3 ?
Sm1 Si1 Na2 143.03(8) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.50(7) 3 3 ?
Sm1 Si1 Na2 77.59(16) . 3 ?
O5 Si1 Na1 153.8(2) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 55.7(2) . 6 ?
O3 Si1 Na1 62.3(2) 4_655 6 ?
O4 Si1 Na1 95.3(2) . 6 ?
Sm1 Si1 Na1 78.29(7) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 70.05(12) 3 6 ?
Sm1 Si1 Na1 65.88(8) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 112.82(19) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 126.55(19) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.8(2) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 145.6(2) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 53.0(2) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 110.1(2) . 6_554 ?
Sm1 Si1 Na1 72.71(7) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.77(12) 3 6_554 ?
Sm1 Si1 Na1 164.32(8) . 6_554 ?

Na2 Si1 Na1 124.57(19) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 110.81(19) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.71(10) 6 6_554 ?
O2 Si1 Sm1 135.4(3) . 1_554 ?
O3 Si1 Sm1 111.3(2) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Sm1 73.3(2) . 1_554 ?
Sm1 Si1 Sm1 87.19(5) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Sm1 118.33(10) 3 1_554 ?
Sm1 Si1 Sm1 112.46(5) . 1_554 ?
Na2 Si1 Sm1 77.70(17) . 1_554 ?
Na2 Si1 Sm1 64.99(16) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Sm1 165.19(8) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Sm1 62.59(7) 6_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 150.0(2) . . ?
O4 Na1 O3 111.4(2) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 97.64(17) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 78.6(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 93.8(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 91.3(2) 2_565 7_455 ?
O4 Na1 O2 83.0(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 75.77(19) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 148.3(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.8(2) 7_455 6_554 ?
O4 Na1 O5 72.26(19) . . ?
O3 Na1 O5 79.02(19) . . ?
O3 Na1 O5 149.0(2) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 58.56(17) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 61.24(16) 6_554 . ?
O4 Na1 O3 91.12(19) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 95.1(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.69(19) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.7(2) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 57.82(17) 6_554 7_454 ?
O5 Na1 O3 118.23(18) . 7_454 ?
O4 Na1 Si1 80.41(15) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.08(16) . 4 ?
O3 Na1 Si1 31.53(12) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 91.05(15) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 140.97(19) 6_554 4 ?
O5 Na1 Si1 142.11(18) . 4 ?
O3 Na1 Si1 87.41(14) 7_454 4 ?
O4 Na1 Si1 78.13(15) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 92.82(18) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 122.8(2) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 143.99(15) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 29.91(13) 6_554 6_554 ?

O5 Na1 Si1 88.22(14) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 30.19(11) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.57(11) 4 6_554 ?
O4 Na1 Si1 67.58(16) . 6 ?
O3 Na1 Si1 91.43(17) . 6 ?
O3 Na1 Si1 121.0(2) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 29.82(12) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 90.38(15) 6_554 6 ?
O5 Na1 Si1 29.75(12) . 6 ?
O3 Na1 Si1 144.44(14) 7_454 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.88(11) 4 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.71(10) 6_554 6 ?
O4 Na1 Na1 158.1(2) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 50.29(13) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 47.38(13) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 95.07(12) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 117.83(18) 6_554 2_565 ?
O5 Na1 Na1 122.33(18) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.62(11) 7_454 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 78.80(11) 4 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.01(8) 6_554 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 115.90(8) 6 2_565 ?
O4 Na1 Sm1 43.47(13) . 6_554 ?
O3 Na1 Sm1 108.14(14) . 6_554 ?
O3 Na1 Sm1 154.17(15) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Sm1 88.62(14) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Sm1 43.84(14) 6_554 6_554 ?
O5 Na1 Sm1 43.57(13) . 6_554 ?
O3 Na1 Sm1 83.66(12) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Sm1 122.64(9) 4 6_554 ?
Si1 Na1 Sm1 55.76(6) 6_554 6_554 ?
Si1 Na1 Sm1 61.17(7) 6 6_554 ?
Na1 Na1 Sm1 158.24(15) 2_565 6_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 110.6(2) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 69.4(2) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 110.6(2) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 69.4(2) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 138.7(5) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 111.7(2) 3 . ?
O1 Na2 O2 68.3(2) . . ?
O5 Na2 O2 86.7(3) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 78.3(2) 8_545 . ?
Na2 Na2 O2 111.7(2) 3 2 ?
O1 Na2 O2 68.3(2) . 2 ?
O5 Na2 O2 78.3(2) 7_455 2 ?

O5 Na2 O2 86.7(2) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 136.6(5) . 2 ?
Na2 Na2 O5 54.3(2) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.7(2) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 101.86(12) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 101.86(12) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 165.4(4) . 5_444 ?
O2 Na2 O5 57.57(16) 2 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.3(2) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.7(2) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 101.86(12) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 101.86(12) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 57.57(16) . 6_554 ?
O2 Na2 O5 165.4(4) 2 6_554 ?
O5 Na2 O5 108.6(4) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 Si1 83.81(19) 3 . ?
O1 Na2 Si1 96.19(19) . . ?
O5 Na2 Si1 84.60(14) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.80(15) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 30.65(12) . . ?
O2 Na2 Si1 160.1(3) 2 . ?
O5 Na2 Si1 137.4(4) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 30.44(12) 6_554 . ?
Na2 Na2 Si1 83.81(19) 3 2 ?
O1 Na2 Si1 96.19(19) . 2 ?
O5 Na2 Si1 99.80(15) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.60(14) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 160.1(3) . 2 ?
O2 Na2 Si1 30.65(12) 2 2 ?
O5 Na2 Si1 30.44(12) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 137.4(4) 6_554 2 ?
Si1 Na2 Si1 167.6(4) . 2 ?
Na2 Na2 Si1 81.87(18) 3 3 ?
O1 Na2 Si1 98.13(18) . 3 ?
O5 Na2 Si1 165.2(4) 7_455 3 ?
O5 Na2 Si1 29.87(13) 8_545 3 ?
O2 Na2 Si1 81.14(13) . 3 ?
O2 Na2 Si1 104.99(14) 2 3 ?
O5 Na2 Si1 91.82(18) 5_444 3 ?
O5 Na2 Si1 78.65(16) 6_554 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.13(4) . 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.13(4) 2 3 ?
Na2 Na2 Si1 81.87(18) 3 4 ?
O1 Na2 Si1 98.13(18) . 4 ?
O5 Na2 Si1 29.87(13) 7_455 4 ?
O5 Na2 Si1 165.2(4) 8_545 4 ?

O2 Na2 Si1 104.99(14) . 4 ?
O2 Na2 Si1 81.14(13) 2 4 ?
O5 Na2 Si1 78.65(16) 5_444 4 ?
O5 Na2 Si1 91.82(18) 6_554 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.13(4) . 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.13(4) 2 4 ?
Si1 Na2 Si1 163.7(4) 3 4 ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 . ?
Na2 O1 Sm1 92.544(7) 3_556 . ?
Na2 O1 Sm1 87.456(7) . . ?
Na2 O1 Sm1 92.544(7) 3_556 2 ?
Na2 O1 Sm1 87.456(7) . 2 ?
Sm1 O1 Sm1 174.911(14) . 2 ?
Na2 O1 Sm1 87.456(7) 3_556 3_556 ?
Na2 O1 Sm1 92.544(7) . 3_556 ?
Sm1 O1 Sm1 90.114(1) . 3_556 ?
Sm1 O1 Sm1 90.113(1) 2 3_556 ?
Na2 O1 Sm1 87.456(7) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Sm1 92.544(7) . 4_556 ?
Sm1 O1 Sm1 90.112(1) . 4_556 ?
Sm1 O1 Sm1 90.113(1) 2 4_556 ?
Sm1 O1 Sm1 174.911(15) 3_556 4_556 ?
Si1 O2 Sm1 158.2(4) . 3_556 ?
Si1 O2 Sm1 100.7(3) . . ?
Sm1 O2 Sm1 101.1(2) 3_556 . ?
Si1 O2 Na1 94.4(3) . 6 ?
Sm1 O2 Na1 87.8(2) 3_556 6 ?
Sm1 O2 Na1 85.78(19) . 6 ?
Si1 O2 Na2 91.6(3) . . ?
Sm1 O2 Na2 90.2(2) 3_556 . ?
Sm1 O2 Na2 83.6(2) . . ?
Na1 O2 Na2 168.6(3) 6 . ?
Si1 O3 Na1 173.5(4) 3_565 . ?
Si1 O3 Sm1 91.9(2) 3_565 8 ?
Na1 O3 Sm1 91.36(17) . 8 ?
Si1 O3 Na1 94.3(2) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.33(17) . 2_565 ?
Sm1 O3 Na1 173.7(2) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 97.2(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.1(2) . 8 ?
Sm1 O3 Na1 93.92(19) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.8(2) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.5(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 86.7(2) . 8_554 ?
Sm1 O3 Na1 95.07(19) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.69(19) 2_565 8_554 ?

```
Na1 O3 Na1 169.7(2) 8 8_554 ?
Si1 O4 Sm1 93.7(2) . 6_554 ?
Si1 O4 Na1 162.8(3) . . ?
Sm1 O4 Na1 92.58(18) 6_554 . ?
Si1 O4 Sm1 93.4(2) . . ?
Sm1 O4 Sm1 126.1(2) 6_554 . ?
Na1 O4 Sm1 95.7(2) . . ?
Si1 O5 Sm1 143.2(4) 6 8 ?
Si1 O5 Sm1 115.1(3) 6 6_554 ?
Sm1 O5 Sm1 99.66(19) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 100.1(3) 6 7 ?
Sm1 O5 Na2 89.1(2) 8 7 ?
Sm1 O5 Na2 93.2(3) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na1 89.4(3) 6 . ?
Sm1 O5 Na1 83.35(19) 8 . ?
Sm1 O5 Na1 82.30(18) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 170.4(3) 7 . ?
Si1 O5 Na2 85.7(3) 6 5 ?
Sm1 O5 Na2 98.2(2) 8 5 ?
Sm1 O5 Na2 103.3(3) 6_554 5 ?
Na1 O5 Na2 173.7(3) . 5 ?

_refine_diff_density_max         1.641
_refine_diff_density_min        -1.247
_refine_diff_density_rms         0.311

#===END

data_Na5Eu4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email       zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone       +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax         +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
```

631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety ?
_chemical_formula_sum 'Eu4 H Na5 O17 Si4'
_chemical_formula_weight 1108.16

loop_

```
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Eu Eu -0.1578 3.6682 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system      tetragonal
_space_group_IT_number           82
_space_group_name_H-M_alt        'I -4'
_space_group_name_Hall           'I -4'


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

_cell_length_a                   11.7872(2)
_cell_length_b                   11.7872(2)
_cell_length_c                   5.4813(2)
_cell_angle_alpha                 90
_cell_angle_beta                  90
_cell_angle_gamma                    90
_cell_volume                     761.56(4)
_cell_formula_units_Z            2
_cell_measurement_temperature    296(2)
_cell_measurement_reflns_used    5451
_cell_measurement_theta_min      2.444
_cell_measurement_theta_max      36.083

_exptl_crystal_description       'square plate'
_exptl_crystal_colour            colorless
_exptl_crystal_density_meas      ?
_exptl_crystal_density_method    ?
_exptl_crystal_density_diffrn    4.833
```

```
_exptl_crystal_F_000            1000
_exptl_transmission_factor_min   ?
_exptl_transmission_factor_max   ?
_exptl_crystal_size_max         0.070
_exptl_crystal_size_mid         0.060
_exptl_crystal_size_min         0.040
_exptl_absorpt_coefficient_mu    16.801
_shelx_estimated_absorpt_T_min   0.386
_shelx_estimated_absorpt_T_max   0.553
_exptl_absorpt_correction_type   multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min  0.6148
_exptl_absorpt_correction_T_max  1.0000
_exptl_absorpt_process_details   'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature      296(2)
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_source                   ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number            11811
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0284
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0348
_diffrn_reflns_limit_h_min       -19
_diffrn_reflns_limit_h_max       18
_diffrn_reflns_limit_k_min       -19
_diffrn_reflns_limit_k_max       18
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       9
_diffrn_reflns_theta_min         2.444
_diffrn_reflns_theta_max         36.322
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.999
_reflns_number_total             1849
_reflns_number_gt                1802
```

```
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.847
_reflns_Friedel_fraction_max     1.000
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0283P)^2^]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
```

_refine_ls_abs_structure_Flack 0.58(2)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns 1849
_refine_ls_number_parameters 72
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0245
_refine_ls_R_factor_gt 0.0235
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0488
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0485
_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.059
_refine_ls_restrained_S_all 1.059
_refine_ls_shift/su_max 0.000
_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Eu1 Eu 0.11726(2) 0.18465(2) 0.47794(4) 0.00976(7) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24698(11) 0.10185(11) 0.0108(3) 0.0111(2) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.10479(18) 0.41091(18) 0.0079(6) 0.0214(5) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.0729(15) 0.0270(17) Uani 0.5 2 d S T P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.0161(16) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2075(4) 0.0337(3) 0.2547(8) 0.0157(8) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1070(3) 0.6142(3) 0.0144(8) 0.0155(7) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2019(3) 0.2328(3) 0.0581(8) 0.0135(7) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3109(4) 0.4515(3) 0.2674(7) 0.0147(7) Uani 1 1 d . . . . .

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
Eu1 0.00828(10) 0.00915(10) 0.01186(10) 0.00042(8) 0.00049(8) 0.00080(7)
Si1 0.0120(5) 0.0104(5) 0.0109(6) 0.0003(6) 0.0004(5) -0.0010(4)
Na1 0.0160(9) 0.0160(9) 0.0322(15) 0.0007(11) 0.0024(11) 0.0000(7)
Na2 0.030(4) 0.020(4) 0.031(5) 0.000 0.000 0.000(4)
O1 0.0127(18) 0.0127(18) 0.023(5) 0.000 0.000 0.000
O2 0.023(2) 0.0126(18) 0.0112(17) 0.0011(14) 0.0041(15) 0.0000(15)
O3 0.0119(15) 0.0116(14) 0.023(2) -0.0009(16) -0.0008(16) 0.0013(11)
O4 0.0135(15) 0.0111(14) 0.0158(18) 0.0007(14) 0.0017(14) -0.0001(12)
O5 0.022(2) 0.0105(16) 0.0114(17) 0.0016(13) 0.0029(14) 0.0004(15)

_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
Eu1 O2 2.321(4) 4_556 ?
Eu1 O5 2.373(4) 7_455 ?
Eu1 O4 2.383(4) 6 ?
Eu1 O2 2.408(4) . ?
Eu1 O5 2.410(4) 6 ?
Eu1 O3 2.456(3) 7_455 ?
Eu1 O4 2.572(4) . ?
Eu1 O1 2.5811(2) . ?
Eu1 Si1 2.9877(13) 6 ?
Eu1 Si1 3.1380(16) . ?
Eu1 Na2 3.402(5) . ?
Eu1 Si1 3.4382(17) 1_556 ?
Si1 O5 1.625(4) 6_554 ?
Si1 O2 1.628(4) . ?
Si1 O3 1.643(4) 4_655 ?
Si1 O4 1.653(4) . ?
Si1 Eu1 2.9877(13) 6_554 ?
Si1 Na1 3.111(3) 3 ?

Si1 Na2 3.1674(15) . ?
Si1 Na2 3.1823(17) 3 ?
Si1 Na1 3.240(3) 6 ?
Si1 Na1 3.267(3) 6_554 ?
Si1 Eu1 3.4382(17) 1_554 ?
Na1 O3 2.397(4) . ?
Na1 O4 2.407(4) . ?
Na1 O3 2.514(4) 2_565 ?
Na1 O3 2.629(6) 7_455 ?
Na1 O2 2.692(5) 6_554 ?
Na1 O5 2.856(5) . ?
Na1 O3 2.873(6) 7_454 ?
Na1 Si1 3.111(3) 4 ?
Na1 Si1 3.240(3) 6_554 ?
Na1 Na1 3.242(4) 2_565 ?
Na1 Si1 3.267(3) 6 ?
Na1 Eu1 3.468(2) 6_554 ?
Na2 Na2 0.800(16) 3 ?
Na2 O1 2.341(8) . ?
Na2 O5 2.462(5) 7_455 ?
Na2 O5 2.462(5) 8_545 ?
Na2 O2 2.671(6) 2 ?
Na2 O2 2.671(6) . ?
Na2 O5 2.846(6) 5_444 ?
Na2 O5 2.846(6) 6_554 ?
Na2 Si1 3.1674(15) 2 ?
Na2 Si1 3.1823(17) 3 ?
Na2 Si1 3.1823(17) 4 ?
O1 Na2 2.341(8) 3_556 ?
O1 Eu1 2.5811(2) 2 ?
O1 Eu1 2.5811(2) 4_556 ?
O1 Eu1 2.5811(2) 3_556 ?
O2 Eu1 2.321(4) 3_556 ?
O2 Na1 2.692(5) 6 ?
O3 Si1 1.643(4) 3_565 ?
O3 Eu1 2.456(3) 8 ?
O3 Na1 2.515(4) 2_565 ?
O3 Na1 2.629(6) 8 ?
O3 Na1 2.873(6) 8_554 ?
O4 Eu1 2.383(4) 6_554 ?
O5 Si1 1.625(4) 6 ?
O5 Eu1 2.373(4) 8 ?
O5 Eu1 2.410(4) 6_554 ?
O5 Na2 2.462(5) 7 ?
O5 Na2 2.846(6) 5 ?

```
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
O2 Eu1 O5 73.98(14) 4_556 7_455 ?
O2 Eu1 O4 121.45(15) 4_556 6 ?
O5 Eu1 O4 146.29(14) 7_455 6 ?
O2 Eu1 O2 138.22(18) 4_556 . ?
O5 Eu1 O2 95.29(14) 7_455 . ?
O4 Eu1 O2 90.00(14) 6 . ?
O2 Eu1 O5 86.04(15) 4_556 6 ?
O5 Eu1 O5 132.61(18) 7_455 6 ?
O4 Eu1 O5 80.58(14) 6 6 ?
O2 Eu1 O5 71.77(14) . 6 ?
O2 Eu1 O3 82.06(14) 4_556 7_455 ?
O5 Eu1 O3 88.61(14) 7_455 7_455 ?
O4 Eu1 O3 66.54(12) 6 7_455 ?
O2 Eu1 O3 138.94(14) . 7_455 ?
O5 Eu1 O3 131.26(14) 6 7_455 ?
O2 Eu1 O4 146.81(13) 4_556 . ?
O5 Eu1 O4 78.90(13) 7_455 . ?
O4 Eu1 O4 74.20(8) 6 . ?
O2 Eu1 O4 62.41(12) . . ?
O5 Eu1 O4 126.85(13) 6 . ?
O3 Eu1 O4 78.47(13) 7_455 . ?
O2 Eu1 O1 70.00(11) 4_556 . ?
O5 Eu1 O1 66.68(11) 7_455 . ?
O4 Eu1 O1 144.52(9) 6 . ?
O2 Eu1 O1 68.73(10) . . ?
O5 Eu1 O1 66.16(10) 6 . ?
O3 Eu1 O1 146.56(8) 7_455 . ?
O4 Eu1 O1 115.85(8) . . ?
O2 Eu1 Si1 105.94(12) 4_556 6 ?
O5 Eu1 Si1 117.18(11) 7_455 6 ?
O4 Eu1 Si1 33.51(9) 6 6 ?
O2 Eu1 Si1 114.61(10) . 6 ?
O5 Eu1 Si1 109.45(10) 6 6 ?
O3 Eu1 Si1 33.35(9) 7_455 6 ?
O4 Eu1 Si1 70.13(9) . 6 ?
O1 Eu1 Si1 173.86(4) . 6 ?
O2 Eu1 Si1 157.67(11) 4_556 . ?
O5 Eu1 Si1 86.88(10) 7_455 . ?
```

O4 Eu1 Si1 80.88(10) 6 . ?
O2 Eu1 Si1 30.68(10) . . ?
O5 Eu1 Si1 99.15(10) 6 . ?
O3 Eu1 Si1 109.38(11) 7_455 . ?
O4 Eu1 Si1 31.73(8) . . ?
O1 Eu1 Si1 92.11(2) . . ?
Si1 Eu1 Si1 92.87(4) 6 . ?
O2 Eu1 Na2 100.08(13) 4_556 . ?
O5 Eu1 Na2 46.34(11) 7_455 . ?
O4 Eu1 Na2 138.12(11) 6 . ?
O2 Eu1 Na2 51.32(11) . . ?
O5 Eu1 Na2 98.41(12) 6 . ?
O3 Eu1 Na2 130.15(12) 7_455 . ?
O4 Eu1 Na2 73.45(13) . . ?
O1 Eu1 Na2 43.41(10) . . ?
Si1 Eu1 Na2 142.73(11) 6 . ?
Si1 Eu1 Na2 57.76(8) . . ?
O2 Eu1 Si1 80.65(11) 4_556 1_556 ?
O5 Eu1 Si1 148.65(10) 7_455 1_556 ?
O4 Eu1 Si1 64.00(10) 6 1_556 ?
O2 Eu1 Si1 91.46(11) . 1_556 ?
O5 Eu1 Si1 25.26(9) 6 1_556 ?
O3 Eu1 Si1 106.00(11) 7_455 1_556 ?
O4 Eu1 Si1 130.56(9) . 1_556 ?
O1 Eu1 Si1 87.65(2) . 1_556 ?
Si1 Eu1 Si1 87.11(4) 6 1_556 ?
Si1 Eu1 Si1 112.84(4) . 1_556 ?
Na2 Eu1 Si1 123.60(8) . 1_556 ?
O5 Si1 O2 111.3(2) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 111.3(2) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 111.8(2) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 110.8(2) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 103.9(2) . . ?
O3 Si1 O4 107.4(2) 4_655 . ?
O5 Si1 Eu1 120.09(16) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Eu1 128.20(17) . 6_554 ?
O3 Si1 Eu1 55.27(13) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Eu1 52.75(13) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 86.04(17) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 79.51(17) . 3 ?
O3 Si1 Na1 53.68(13) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 159.38(16) . 3 ?
Eu1 Si1 Na1 108.95(5) 6_554 3 ?
O5 Si1 Eu1 125.84(17) 6_554 . ?
O2 Si1 Eu1 49.02(16) . . ?
O3 Si1 Eu1 122.84(18) 4_655 . ?

O4 Si1 Eu1 54.92(15) . . ?
Eu1 Si1 Eu1 92.76(4) 6_554 . ?
Na1 Si1 Eu1 124.96(8) 3 . ?
O5 Si1 Na2 63.6(2) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2 57.5(2) . . ?
O3 Si1 Na2 159.77(14) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 92.41(14) . . ?
Eu1 Si1 Na2 144.89(5) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.12(5) 3 . ?
Eu1 Si1 Na2 65.31(13) . . ?
O5 Si1 Na2 49.6(2) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2 70.8(2) . 3 ?
O3 Si1 Na2 155.90(18) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 94.66(14) . 3 ?
Eu1 Si1 Na2 143.04(6) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.55(6) 3 3 ?
Eu1 Si1 Na2 77.83(13) . 3 ?
O5 Si1 Na1 154.00(16) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 55.98(17) . 6 ?
O3 Si1 Na1 62.32(17) 4_655 6 ?
O4 Si1 Na1 94.86(16) . 6 ?
Eu1 Si1 Na1 78.52(5) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.90(10) 3 6 ?
Eu1 Si1 Na1 65.86(6) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 112.81(15) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 126.66(15) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.93(17) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 145.39(17) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 53.00(17) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 110.30(16) . 6_554 ?
Eu1 Si1 Na1 72.63(5) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.67(9) 3 6_554 ?
Eu1 Si1 Na1 164.45(6) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 124.39(15) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 110.50(15) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.77(7) 6 6_554 ?
O2 Si1 Eu1 135.30(17) . 1_554 ?
O3 Si1 Eu1 111.15(17) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Eu1 74.05(15) . 1_554 ?
Eu1 Si1 Eu1 87.01(4) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Eu1 118.07(8) 3 1_554 ?
Eu1 Si1 Eu1 112.84(4) . 1_554 ?
Na2 Si1 Eu1 77.89(13) . 1_554 ?
Na2 Si1 Eu1 65.02(13) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Eu1 165.31(6) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Eu1 62.23(5) 6_554 1_554 ?

O3 Na1 O4 149.88(16) . . ?
O3 Na1 O3 97.39(13) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 111.59(14) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 93.73(16) . 7_455 ?
O4 Na1 O3 78.22(15) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 91.06(15) 2_565 7_455 ?
O3 Na1 O2 75.88(15) . 6_554 ?
O4 Na1 O2 83.08(14) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 148.42(19) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.87(15) 7_455 6_554 ?
O3 Na1 O5 79.38(14) . . ?
O4 Na1 O5 71.60(14) . . ?
O3 Na1 O5 149.03(19) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 58.76(13) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 61.12(12) 6_554 . ?
O3 Na1 O3 95.05(15) . 7_454 ?
O4 Na1 O3 91.79(14) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.52(15) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 170.01(17) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 58.15(13) 6_554 7_454 ?
O5 Na1 O3 118.41(14) . 7_454 ?
O3 Na1 Si1 129.06(12) . 4 ?
O4 Na1 Si1 80.48(11) . 4 ?
O3 Na1 Si1 31.76(9) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.92(11) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.01(14) 6_554 4 ?
O5 Na1 Si1 141.87(13) . 4 ?
O3 Na1 Si1 87.24(10) 7_454 4 ?
O3 Na1 Si1 93.04(14) . 6_554 ?
O4 Na1 Si1 78.41(12) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 122.81(16) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 144.17(11) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 30.07(9) 6_554 6_554 ?
O5 Na1 Si1 88.16(10) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 30.43(8) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.45(9) 4 6_554 ?
O3 Na1 Na1 50.27(10) . 2_565 ?
O4 Na1 Na1 158.03(15) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 47.15(10) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.84(9) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 117.97(13) 6_554 2_565 ?
O5 Na1 Na1 122.66(12) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.43(8) 7_454 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 78.80(8) 4 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.16(6) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Si1 91.58(13) . 6 ?

O4 Na1 Si1 66.98(12) . 6 ?
O3 Na1 Si1 120.90(15) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 29.93(9) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 90.38(11) 6_554 6 ?
O5 Na1 Si1 29.83(9) . 6 ?
O3 Na1 Si1 144.75(11) 7_454 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.70(9) 4 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.77(7) 6_554 6 ?
Na1 Na1 Si1 115.93(6) 2_565 6 ?
O3 Na1 Eu1 108.36(11) . 6_554 ?
O4 Na1 Eu1 43.34(9) . 6_554 ?
O3 Na1 Eu1 154.20(11) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Eu1 88.91(10) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Eu1 43.79(10) 6_554 6_554 ?
O5 Na1 Eu1 43.47(9) . 6_554 ?
O3 Na1 Eu1 83.82(9) 7_454 6_554 ?
Si1 Na1 Eu1 122.43(7) 4 6_554 ?
Si1 Na1 Eu1 55.65(4) 6_554 6_554 ?
Na1 Na1 Eu1 158.44(11) 2_565 6_554 ?
Si1 Na1 Eu1 61.30(5) 6 6_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 110.8(2) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 69.2(2) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 110.8(2) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 69.2(2) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 138.4(4) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 111.90(19) 3 2 ?
O1 Na2 O2 68.10(19) . 2 ?
O5 Na2 O2 77.83(17) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 86.88(19) 8_545 2 ?
Na2 Na2 O2 111.90(19) 3 . ?
O1 Na2 O2 68.10(19) . . ?
O5 Na2 O2 86.88(19) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 77.83(17) 8_545 . ?
O2 Na2 O2 136.2(4) 2 . ?
Na2 Na2 O5 53.95(15) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 126.05(15) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.08(10) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.08(10) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 58.16(12) 2 5_444 ?
O2 Na2 O5 165.2(3) . 5_444 ?
Na2 Na2 O5 53.95(15) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 126.05(15) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 102.08(10) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 102.08(10) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 165.2(3) 2 6_554 ?

O2 Na2 O5 58.15(12) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 107.9(3) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 Si1 83.83(15) 3 2 ?
O1 Na2 Si1 96.17(15) . 2 ?
O5 Na2 Si1 99.67(11) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.75(10) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 30.91(9) 2 2 ?
O2 Na2 Si1 159.8(3) . 2 ?
O5 Na2 Si1 30.77(9) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 137.1(3) 6_554 2 ?
Na2 Na2 Si1 83.83(15) 3 . ?
O1 Na2 Si1 96.17(15) . . ?
O5 Na2 Si1 84.75(10) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.67(11) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 159.8(3) 2 . ?
O2 Na2 Si1 30.91(9) . . ?
O5 Na2 Si1 137.1(3) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 30.77(9) 6_554 . ?
Si1 Na2 Si1 167.7(3) 2 . ?
Na2 Na2 Si1 81.71(15) 3 3 ?
O1 Na2 Si1 98.29(15) . 3 ?
O5 Na2 Si1 165.3(3) 7_455 3 ?
O5 Na2 Si1 30.17(10) 8_545 3 ?
O2 Na2 Si1 105.27(10) 2 3 ?
O2 Na2 Si1 81.04(10) . 3 ?
O5 Na2 Si1 91.53(14) 5_444 3 ?
O5 Na2 Si1 78.67(12) 6_554 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.11(4) 2 3 ?
Si1 Na2 Si1 89.11(4) . 3 ?
Na2 Na2 Si1 81.71(15) 3 4 ?
O1 Na2 Si1 98.29(15) . 4 ?
O5 Na2 Si1 30.17(10) 7_455 4 ?
O5 Na2 Si1 165.3(3) 8_545 4 ?
O2 Na2 Si1 81.04(10) 2 4 ?
O2 Na2 Si1 105.27(10) . 4 ?
O5 Na2 Si1 78.67(12) 5_444 4 ?
O5 Na2 Si1 91.53(14) 6_554 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.11(4) 2 4 ?
Si1 Na2 Si1 89.11(4) . 4 ?
Si1 Na2 Si1 163.4(3) 3 4 ?
Na2 O1 Na2 180.0 . 3_556 ?
Na2 O1 Eu1 87.315(5) . 2 ?
Na2 O1 Eu1 92.685(5) 3_556 2 ?
Na2 O1 Eu1 92.685(5) . 4_556 ?
Na2 O1 Eu1 87.315(5) 3_556 4_556 ?
Eu1 O1 Eu1 90.126(1) 2 4_556 ?

Na2 O1 Eu1 92.685(5) . 3_556 ?
Na2 O1 Eu1 87.315(5) 3_556 3_556 ?
Eu1 O1 Eu1 90.126(1) 2 3_556 ?
Eu1 O1 Eu1 174.630(11) 4_556 3_556 ?
Na2 O1 Eu1 87.315(5) . . ?
Na2 O1 Eu1 92.685(5) 3_556 . ?
Eu1 O1 Eu1 174.631(11) 2 . ?
Eu1 O1 Eu1 90.125(1) 4_556 . ?
Eu1 O1 Eu1 90.126(1) 3_556 . ?
Si1 O2 Eu1 158.5(3) . 3_556 ?
Si1 O2 Eu1 100.3(2) . . ?
Eu1 O2 Eu1 101.20(16) 3_556 . ?
Si1 O2 Na2 91.6(2) . . ?
Eu1 O2 Na2 90.87(17) 3_556 . ?
Eu1 O2 Na2 83.95(17) . . ?
Si1 O2 Na1 94.0(2) . 6 ?
Eu1 O2 Na1 87.48(16) 3_556 6 ?
Eu1 O2 Na1 85.52(14) . 6 ?
Na2 O2 Na1 168.8(2) . 6 ?
Si1 O3 Na1 173.7(3) 3_565 . ?
Si1 O3 Eu1 91.39(15) 3_565 8 ?
Na1 O3 Eu1 91.47(12) . 8 ?
Si1 O3 Na1 94.55(16) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.59(13) . 2_565 ?
Eu1 O3 Na1 174.05(17) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 97.1(2) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.37(17) . 8 ?
Eu1 O3 Na1 93.67(14) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.95(16) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.25(19) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 86.88(16) . 8_554 ?
Eu1 O3 Na1 95.23(14) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.73(15) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 170.01(17) 8 8_554 ?
Si1 O4 Eu1 93.74(17) . 6_554 ?
Si1 O4 Na1 161.7(2) . . ?
Eu1 O4 Na1 92.78(13) 6_554 . ?
Si1 O4 Eu1 93.35(17) . . ?
Eu1 O4 Eu1 127.01(17) 6_554 . ?
Na1 O4 Eu1 96.33(15) . . ?
Si1 O5 Eu1 142.5(2) 6 8 ?
Si1 O5 Eu1 115.5(2) 6 6_554 ?
Eu1 O5 Eu1 99.64(15) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 100.3(3) 6 7 ?
Eu1 O5 Na2 89.44(17) 8 7 ?
Eu1 O5 Na2 94.05(19) 6_554 7 ?

```
Si1 O5 Na2 85.6(2) 6 5 ?
Eu1 O5 Na2 98.68(16) 8 5 ?
Eu1 O5 Na2 104.24(18) 6_554 5 ?
Si1 O5 Na1 89.25(19) 6 . ?
Eu1 O5 Na1 82.78(14) 8 . ?
Eu1 O5 Na1 81.92(13) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 170.5(2) 7 . ?
Na2 O5 Na1 173.3(2) 5 . ?

_refine_diff_density_max         1.556
_refine_diff_density_min        -0.914
_refine_diff_density_rms         0.237

#===END

data_Na5Tb4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email       zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone       +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax         +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
```

Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety 'H Na5 O17 Si4 Tb4'
_chemical_formula_sum 'H Na5 O17 Si4 Tb4'
_chemical_formula_weight 1136.00

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
Na Na 0.0362 0.0249 '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'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Tb Tb -0.1723 4.1537 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting Tetragonal
_symmetry_space_group_name_H-M 'I -4'

```
_symmetry_space_group_name_Hall  'I -4'

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

_cell_length_a                 11.6845(7)
_cell_length_b                 11.6845(7)
_cell_length_c                 5.4574(6)
_cell_angle_alpha               90.00
_cell_angle_beta                90.00
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                   745.09(10)
_cell_formula_units_Z           2
_cell_measurement_temperature    296(2)
_cell_measurement_reflns_used    4450
_cell_measurement_theta_min      2.465
_cell_measurement_theta_max      37.770

_exptl_crystal_description       'square block'
_exptl_crystal_colour            colorless
_exptl_crystal_size_max          0.06
_exptl_crystal_size_mid          0.06
_exptl_crystal_size_min          0.04
_exptl_crystal_density_meas      ?
_exptl_crystal_density_diffrn    5.064
_exptl_crystal_density_method    'not measured'
_exptl_crystal_F_000             1016
_exptl_absorpt_coefficient_mu    19.319
_exptl_absorpt_correction_type   multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min  0.607237
_exptl_absorpt_correction_T_max  1.000000
_exptl_absorpt_process_details   'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
 ?
;
```

```
_diffrn_ambient_temperature      296(2)
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_radiation_source         'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator  graphite
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_standards_number         ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time  ?
_diffrn_standards_decay_%        ?
_diffrn_reflns_number            10635
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0467
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI    0.0439
_diffrn_reflns_limit_h_min       -20
_diffrn_reflns_limit_h_max       20
_diffrn_reflns_limit_k_min       -20
_diffrn_reflns_limit_k_max       20
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       9
_diffrn_reflns_theta_min         2.47
_diffrn_reflns_theta_max         38.57
_reflns_number_total             2112
_reflns_number_gt                2009
_reflns_threshold_expression     >2sigma(I)

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  'SHELXTL Version 6.14 (Bruker, 2000)'

_refine_special_details
;
Crystal refined as inversion twin based on value of Flack parameter after
anisotropic refinement of all located atoms. The Flack parameter was
included in the refinement as the twin fraction. The final value is
0.507(17), indicating a nearly perfect two-component inversion twin.

The compound is assumed to be a hydroxide to satisfy charge balance
requirements (crystal electroneutrality). The hydroxy proton could not be
located in the X-ray data. It is assumed to be bonded to the non-silicate
oxygen atom O(5).
```

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^ > 2sigma(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^)+(0.0258P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3'
_atom_sites_solution_primary direct
_atom_sites_solution_secondary difmap
_atom_sites_solution_hydrogens ?
_refine_ls_hydrogen_treatment ?
_refine_ls_extinction_method none
_refine_ls_extinction_coef ?
_refine_ls_abs_structure_details 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack ?
_refine_ls_number_reflns 2112
_refine_ls_number_parameters 72
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0334
_refine_ls_R_factor_gt 0.0300
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0551
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0537
_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.030
_refine_ls_restrained_S_all 1.030
_refine_ls_shift/su_max 0.000
_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_calc_flag

```
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Tb1 Tb 0.116610(15) 0.316098(15) 0.27318(3) 0.00900(5) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.25264(10) 0.10251(9) 0.2386(3) 0.0109(2) Uani 1 1 d . . .
Na1 Na 0.39557(16) 0.41057(16) 0.2416(5) 0.0210(4) Uani 1 1 d . . .
Na2 Na 0.0000 0.5000 0.6759(12) 0.0272(15) Uani 0.50 2 d SP . .
O1 O 0.1136(2) 0.1083(2) 0.2641(7) 0.0134(6) Uani 1 1 d . . .
O2 O 0.3117(3) 0.0488(3) 0.4831(6) 0.0132(6) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.2975(3) 0.2345(3) 0.1869(6) 0.0128(6) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.2930(3) 0.0336(3) -0.0058(6) 0.0137(6) Uani 1 1 d . . .
O5 O 0.0000 0.5000 0.2500 0.0150(13) Uani 1 4 d S . .

loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Tb1 0.00777(8) 0.00847(8) 0.01076(8) 0.00022(6) -0.00039(6) -0.00060(6)
Si1 0.0119(4) 0.0101(4) 0.0107(6) 0.0010(5) -0.0001(5) 0.0008(4)
Na1 0.0163(8) 0.0154(8) 0.0312(12) -0.0016(10) 0.0008(9) -0.0005(6)
Na2 0.027(4) 0.023(3) 0.031(4) 0.000 0.000 0.004(3)
O1 0.0113(11) 0.0089(11) 0.0199(17) -0.0008(13) -0.0020(13) -0.0004(9)
O2 0.0210(16) 0.0097(14) 0.0088(14) 0.0010(11) -0.0056(12) 0.0014(13)
O3 0.0139(13) 0.0104(12) 0.0141(15) -0.0006(11) 0.0019(12) 0.0016(10)
O4 0.0216(17) 0.0099(14) 0.0094(14) -0.0010(11) 0.0038(12) 0.0005(12)
O5 0.0101(14) 0.0101(14) 0.025(4) 0.000 0.000 0.000

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are taken
 into account individually in the estimation of esds in distances, angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate (isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.
;

loop_
_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
```

_geom_bond_publ_flag
Tb1 O4 2.298(3) 4 ?
Tb1 O2 2.347(3) 4_556 ?
Tb1 O3 2.366(3) . ?
Tb1 O4 2.378(4) 7 ?
Tb1 O2 2.387(3) 7_554 ?
Tb1 O1 2.429(3) . ?
Tb1 O3 2.541(3) 7 ?
Tb1 O5 2.5475(2) . ?
Tb1 Si1 2.9649(11) . ?
Tb1 Si1 3.1128(14) 7 ?
Tb1 Na2 3.362(4) . ?
Tb1 Si1 3.4279(15) 7_554 ?
Si1 O4 1.628(4) . ?
Si1 O2 1.628(3) . ?
Si1 O1 1.632(3) . ?
Si1 O3 1.653(3) . ?
Si1 Na1 3.081(2) 8_545 ?
Si1 Tb1 3.1128(14) 7_554 ?
Si1 Na2 3.1473(13) 5_544 ?
Si1 Na2 3.1632(15) 2_556 ?
Si1 Na1 3.222(3) 7_554 ?
Si1 Na1 3.249(3) 7 ?
Si1 Tb1 3.4279(14) 7 ?
Na1 O1 2.373(3) 8 ?
Na1 O3 2.374(4) . ?
Na1 O1 2.502(3) 6 ?
Na1 O1 2.617(5) 7_554 ?
Na1 O4 2.680(4) 7 ?
Na1 O2 2.843(4) 7_554 ?
Na1 O1 2.862(5) 7 ?
Na1 Si1 3.081(2) 6 ?
Na1 Na1 3.213(4) 3_665 ?
Na1 Si1 3.222(3) 7 ?
Na1 Si1 3.249(3) 7_554 ?
Na2 Na2 0.808(13) 6_456 ?
Na2 O5 2.325(7) . ?
Na2 O2 2.433(4) 4_556 ?
Na2 O2 2.433(4) 2_566 ?
Na2 O4 2.643(5) 5_455 ?
Na2 O4 2.643(5) 7 ?
Na2 O2 2.824(6) 7 ?
Na2 O2 2.824(6) 5_455 ?
Na2 Si1 3.1472(13) 7 ?
Na2 Si1 3.1472(13) 5_455 ?
Na2 Si1 3.1632(15) 2_566 ?

Na2 Si1 3.1632(15) 4_556 ?
O1 Na1 2.373(3) 6_455 ?
O1 Na1 2.502(3) 8_545 ?
O1 Na1 2.617(5) 7 ?
O1 Na1 2.862(5) 7_554 ?
O2 Tb1 2.347(3) 2_556 ?
O2 Tb1 2.387(3) 7 ?
O2 Na2 2.433(4) 2_556 ?
O2 Na2 2.824(6) 5_544 ?
O2 Na1 2.843(4) 7 ?
O3 Tb1 2.541(3) 7_554 ?
O4 Tb1 2.298(3) 2 ?
O4 Tb1 2.378(4) 7_554 ?
O4 Na2 2.643(5) 5_544 ?
O4 Na1 2.680(4) 7_554 ?
O5 Na2 2.325(7) 6_455 ?
O5 Tb1 2.5475(2) 6_455 ?
O5 Tb1 2.5475(2) 8 ?
O5 Tb1 2.5475(2) 3_565 ?

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 Tb1 O2 74.24(12) 4 4_556 ?
O4 Tb1 O3 120.56(12) 4 . ?
O2 Tb1 O3 147.11(11) 4_556 . ?
O4 Tb1 O4 138.41(15) 4 7 ?
O2 Tb1 O4 95.41(12) 4_556 7 ?
O3 Tb1 O4 90.11(12) . 7 ?
O4 Tb1 O2 85.66(12) 4 7_554 ?
O2 Tb1 O2 132.77(15) 4_556 7_554 ?
O3 Tb1 O2 79.70(12) . 7_554 ?
O4 Tb1 O2 72.09(11) 7 7_554 ?
O4 Tb1 O1 81.88(12) 4 . ?
O2 Tb1 O1 88.74(12) 4_556 . ?
O3 Tb1 O1 66.79(10) . . ?
O4 Tb1 O1 139.03(11) 7 . ?
O2 Tb1 O1 130.73(12) 7_554 . ?
O4 Tb1 O3 146.99(11) 4 7 ?
O2 Tb1 O3 79.43(11) 4_556 7 ?
O3 Tb1 O3 74.35(7) . 7 ?

O4 Tb1 O3 62.97(10) 7 7 ?
O2 Tb1 O3 127.21(11) 7_554 7 ?
O1 Tb1 O3 77.95(11) . 7 ?
O4 Tb1 O5 70.07(9) 4 . ?
O2 Tb1 O5 66.79(9) 4_556 . ?
O3 Tb1 O5 143.89(7) . . ?
O4 Tb1 O5 68.88(8) 7 . ?
O2 Tb1 O5 66.23(8) 7_554 . ?
O1 Tb1 O5 146.57(7) . . ?
O3 Tb1 O5 116.84(7) 7 . ?
O4 Tb1 Si1 105.67(10) 4 . ?
O2 Tb1 Si1 117.35(9) 4_556 . ?
O3 Tb1 Si1 33.82(8) . . ?
O4 Tb1 Si1 114.58(9) 7 . ?
O2 Tb1 Si1 109.04(8) 7_554 . ?
O1 Tb1 Si1 33.37(7) . . ?
O3 Tb1 Si1 69.46(8) 7 . ?
O5 Tb1 Si1 173.50(3) . . ?
O4 Tb1 Si1 158.24(9) 4 7 ?
O2 Tb1 Si1 87.05(9) 4_556 7 ?
O3 Tb1 Si1 81.20(8) . 7 ?
O4 Tb1 Si1 30.96(8) 7 7 ?
O2 Tb1 Si1 99.62(9) 7_554 7 ?
O1 Tb1 Si1 109.21(9) . 7 ?
O3 Tb1 Si1 32.01(7) 7 7 ?
O5 Tb1 Si1 92.60(2) . 7 ?
Si1 Tb1 Si1 92.64(3) . 7 ?
O4 Tb1 Na2 100.41(11) 4 . ?
O2 Tb1 Na2 46.34(9) 4_556 . ?
O3 Tb1 Na2 138.56(10) . . ?
O4 Tb1 Na2 51.42(9) 7 . ?
O2 Tb1 Na2 98.81(10) 7_554 . ?
O1 Tb1 Na2 130.27(10) . . ?
O3 Tb1 Na2 74.19(11) 7 . ?
O5 Tb1 Na2 43.67(9) . . ?
Si1 Tb1 Na2 142.83(9) . . ?
Si1 Tb1 Na2 58.01(7) 7 . ?
O4 Tb1 Si1 80.35(9) 4 7_554 ?
O2 Tb1 Si1 148.81(8) 4_556 7_554 ?
O3 Tb1 Si1 62.90(8) . 7_554 ?
O4 Tb1 Si1 91.66(9) 7 7_554 ?
O2 Tb1 Si1 25.28(8) 7_554 7_554 ?
O1 Tb1 Si1 105.46(9) . 7_554 ?
O3 Tb1 Si1 130.17(8) 7 7_554 ?
O5 Tb1 Si1 87.827(19) . 7_554 ?
Si1 Tb1 Si1 86.58(3) . 7_554 ?

Si1 Tb1 Si1 113.01(3) 7 7_554 ?
Na2 Tb1 Si1 124.03(7) . 7_554 ?
O4 Si1 O2 110.98(18) . . ?
O4 Si1 O1 112.28(19) . . ?
O2 Si1 O1 111.6(2) . . ?
O4 Si1 O3 103.29(18) . . ?
O2 Si1 O3 111.37(18) . . ?
O1 Si1 O3 106.96(16) . . ?
O4 Si1 Tb1 128.61(14) . . ?
O2 Si1 Tb1 119.96(14) . . ?
O1 Si1 Tb1 54.96(10) . . ?
O3 Si1 Tb1 52.83(11) . . ?
O4 Si1 Na1 79.62(14) . 8_545 ?
O2 Si1 Na1 86.07(14) . 8_545 ?
O1 Si1 Na1 54.09(11) . 8_545 ?
O3 Si1 Na1 159.13(13) . 8_545 ?
Tb1 Si1 Na1 109.06(5) . 8_545 ?
O4 Si1 Tb1 48.74(13) . 7_554 ?
O2 Si1 Tb1 125.33(15) . 7_554 ?
O1 Si1 Tb1 123.07(15) . 7_554 ?
O3 Si1 Tb1 54.56(12) . 7_554 ?
Tb1 Si1 Tb1 93.32(3) . 7_554 ?
Na1 Si1 Tb1 124.90(6) 8_545 7_554 ?
O4 Si1 Na2 57.08(18) . 5_544 ?
O2 Si1 Na2 63.44(18) . 5_544 ?
O1 Si1 Na2 159.93(11) . 5_544 ?
O3 Si1 Na2 92.58(12) . 5_544 ?
Tb1 Si1 Na2 145.04(4) . 5_544 ?
Na1 Si1 Na2 105.87(4) 8_545 5_544 ?
Tb1 Si1 Na2 64.97(11) 7_554 5_544 ?
O4 Si1 Na2 70.65(18) . 2_556 ?
O2 Si1 Na2 49.14(18) . 2_556 ?
O1 Si1 Na2 155.88(15) . 2_556 ?
O3 Si1 Na2 95.07(12) . 2_556 ?
Tb1 Si1 Na2 143.05(5) . 2_556 ?
Na1 Si1 Na2 105.26(5) 8_545 2_556 ?
Tb1 Si1 Na2 77.74(11) 7_554 2_556 ?
O4 Si1 Na1 56.12(14) . 7_554 ?
O2 Si1 Na1 154.13(13) . 7_554 ?
O1 Si1 Na1 62.54(14) . 7_554 ?
O3 Si1 Na1 94.09(13) . 7_554 ?
Tb1 Si1 Na1 78.78(4) . 7_554 ?
Na1 Si1 Na1 70.10(8) 8_545 7_554 ?
Tb1 Si1 Na1 65.88(5) 7_554 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 112.59(13) 5_544 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 126.68(13) 2_556 7_554 ?

O4 Si1 Na1 145.42(14) . 7 ?
O2 Si1 Na1 61.02(14) . 7 ?
O1 Si1 Na1 53.07(14) . 7 ?
O3 Si1 Na1 110.92(14) . 7 ?
Tb1 Si1 Na1 72.55(4) . 7 ?
Na1 Si1 Na1 66.65(8) 8_545 7 ?
Tb1 Si1 Na1 164.86(5) 7_554 7 ?
Na2 Si1 Na1 124.29(13) 5_544 7 ?
Na2 Si1 Na1 110.16(13) 2_556 7 ?
Na1 Si1 Na1 114.99(6) 7_554 7 ?
O4 Si1 Tb1 134.86(14) . 7 ?
O2 Si1 Tb1 38.76(12) . 7 ?
O1 Si1 Tb1 111.06(14) . 7 ?
O3 Si1 Tb1 75.22(13) . 7 ?
Tb1 Si1 Tb1 87.20(3) . 7 ?
Na1 Si1 Tb1 117.62(6) 8_545 7 ?
Tb1 Si1 Tb1 113.01(3) 7_554 7 ?
Na2 Si1 Tb1 77.80(11) 5_544 7 ?
Na2 Si1 Tb1 64.68(11) 2_556 7 ?
Na1 Si1 Tb1 165.76(5) 7_554 7 ?
Na1 Si1 Tb1 62.07(5) 7 7 ?
O1 Na1 O3 148.84(14) 8 . ?
O1 Na1 O1 97.57(11) 8 6 ?
O3 Na1 O1 112.33(13) . 6 ?
O1 Na1 O1 94.04(13) 8 7_554 ?
O3 Na1 O1 77.41(13) . 7_554 ?
O1 Na1 O1 91.08(13) 6 7_554 ?
O1 Na1 O4 75.38(12) 8 7 ?
O3 Na1 O4 83.05(12) . 7 ?
O1 Na1 O4 148.30(16) 6 7 ?
O1 Na1 O4 119.93(12) 7_554 7 ?
O1 Na1 O2 79.07(11) 8 7_554 ?
O3 Na1 O2 70.80(12) . 7_554 ?
O1 Na1 O2 149.22(16) 6 7_554 ?
O1 Na1 O2 59.01(10) 7_554 7_554 ?
O4 Na1 O2 60.93(10) 7 7_554 ?
O1 Na1 O1 95.13(13) 8 7 ?
O3 Na1 O1 92.31(12) . 7 ?
O1 Na1 O1 92.35(12) 6 7 ?
O1 Na1 O1 169.70(14) 7_554 7 ?
O4 Na1 O1 58.35(10) 7 7 ?
O2 Na1 O1 118.38(11) 7_554 7 ?
O1 Na1 Si1 129.36(10) 8 6 ?
O3 Na1 Si1 81.18(9) . 6 ?
O1 Na1 Si1 31.89(8) 6 6 ?
O1 Na1 Si1 90.86(9) 7_554 6 ?

O4 Na1 Si1 141.06(12) 7 6 ?
O2 Na1 Si1 142.12(11) 7_554 6 ?
O1 Na1 Si1 86.95(9) 7 6 ?
O1 Na1 Na1 50.52(8) 8 3_665 ?
O3 Na1 Na1 158.49(13) . 3_665 ?
O1 Na1 Na1 47.07(8) 6 3_665 ?
O1 Na1 Na1 94.94(7) 7_554 3_665 ?
O4 Na1 Na1 117.78(11) 7 3_665 ?
O2 Na1 Na1 122.59(10) 7_554 3_665 ?
O1 Na1 Na1 94.51(7) 7 3_665 ?
Si1 Na1 Na1 78.85(7) 6 3_665 ?
O1 Na1 Si1 92.76(11) 8 7 ?
O3 Na1 Si1 78.77(10) . 7 ?
O1 Na1 Si1 122.63(13) 6 7 ?
O1 Na1 Si1 144.30(9) 7_554 7 ?
O4 Na1 Si1 30.28(8) 7 7 ?
O2 Na1 Si1 88.15(8) 7_554 7 ?
O1 Na1 Si1 30.39(7) 7 7 ?
Si1 Na1 Si1 111.28(7) 6 7 ?
Na1 Na1 Si1 116.05(5) 3_665 7 ?
O1 Na1 Si1 91.47(11) 8 7_554 ?
O3 Na1 Si1 66.17(10) . 7_554 ?
O1 Na1 Si1 120.91(13) 6 7_554 ?
O1 Na1 Si1 29.89(7) 7_554 7_554 ?
O4 Na1 Si1 90.45(9) 7 7_554 ?
O2 Na1 Si1 30.06(7) 7_554 7_554 ?
O1 Na1 Si1 144.89(9) 7 7_554 ?
Si1 Na1 Si1 114.76(7) 6 7_554 ?
Na1 Na1 Si1 115.81(5) 3_665 7_554 ?
Si1 Na1 Si1 115.00(6) 7 7_554 ?
O1 Na1 Tb1 107.63(9) 8 . ?
O3 Na1 Tb1 43.29(8) . . ?
O1 Na1 Tb1 154.73(10) 6 . ?
O1 Na1 Tb1 89.08(9) 7_554 . ?
O4 Na1 Tb1 43.49(8) 7 . ?
O2 Na1 Tb1 43.30(7) 7_554 . ?
O1 Na1 Tb1 83.68(8) 7 . ?
Si1 Na1 Tb1 122.84(6) 6 . ?
Na1 Na1 Tb1 157.95(10) 3_665 . ?
Si1 Na1 Tb1 55.54(4) 7 . ?
Si1 Na1 Tb1 61.51(4) 7_554 . ?
O5 Na2 O2 69.10(17) . 4_556 ?
O5 Na2 O2 69.10(17) . 2_566 ?
O2 Na2 O2 138.2(3) 4_556 2_566 ?
O5 Na2 O4 67.97(16) . 5_455 ?
O2 Na2 O4 77.63(15) 4_556 5_455 ?

O2 Na2 O4 86.94(16) 2_566 5_455 ?
O5 Na2 O4 67.97(16) . 7 ?
O2 Na2 O4 86.94(16) 4_556 7 ?
O2 Na2 O4 77.63(15) 2_566 7 ?
O4 Na2 O4 135.9(3) 5_455 7 ?
O5 Na2 O2 126.41(13) . 7 ?
O2 Na2 O2 102.23(8) 4_556 7 ?
O2 Na2 O2 102.23(8) 2_566 7 ?
O4 Na2 O2 164.9(3) 5_455 7 ?
O4 Na2 O2 58.66(10) 7 7 ?
O5 Na2 O2 126.41(13) . 5_455 ?
O2 Na2 O2 102.23(8) 4_556 5_455 ?
O2 Na2 O2 102.23(8) 2_566 5_455 ?
O4 Na2 O2 58.66(10) 5_455 5_455 ?
O4 Na2 O2 164.9(3) 7 5_455 ?
O2 Na2 O2 107.2(3) 7 5_455 ?
O5 Na2 Si1 96.24(13) . 7 ?
O2 Na2 Si1 84.84(8) 4_556 7 ?
O2 Na2 Si1 99.64(9) 2_566 7 ?
O4 Na2 Si1 159.6(2) 5_455 7 ?
O4 Na2 Si1 31.13(8) 7 7 ?
O2 Na2 Si1 31.04(7) 7 7 ?
O2 Na2 Si1 136.7(2) 5_455 7 ?
O5 Na2 Si1 96.24(13) . 5_455 ?
O2 Na2 Si1 99.64(9) 4_556 5_455 ?
O2 Na2 Si1 84.84(8) 2_566 5_455 ?
O4 Na2 Si1 31.13(8) 5_455 5_455 ?
O4 Na2 Si1 159.6(2) 7 5_455 ?
O2 Na2 Si1 136.7(2) 7 5_455 ?
O2 Na2 Si1 31.04(7) 5_455 5_455 ?
Si1 Na2 Si1 167.5(3) 7 5_455 ?
O5 Na2 Si1 98.48(12) . 2_566 ?
O2 Na2 Si1 165.4(2) 4_556 2_566 ?
O2 Na2 Si1 30.41(8) 2_566 2_566 ?
O4 Na2 Si1 105.44(8) 5_455 2_566 ?
O4 Na2 Si1 81.05(8) 7 2_566 ?
O2 Na2 Si1 78.59(10) 7 2_566 ?
O2 Na2 Si1 91.31(12) 5_455 2_566 ?
Si1 Na2 Si1 89.08(3) 7 2_566 ?
Si1 Na2 Si1 89.08(3) 5_455 2_566 ?
O5 Na2 Si1 98.48(12) . 4_556 ?
O2 Na2 Si1 30.41(8) 4_556 4_556 ?
O2 Na2 Si1 165.4(2) 2_566 4_556 ?
O4 Na2 Si1 81.05(8) 5_455 4_556 ?
O4 Na2 Si1 105.44(8) 7 4_556 ?
O2 Na2 Si1 91.31(12) 7 4_556 ?

O2 Na2 Si1 78.59(10) 5_455 4_556 ?
Si1 Na2 Si1 89.08(3) 7 4_556 ?
Si1 Na2 Si1 89.08(3) 5_455 4_556 ?
Si1 Na2 Si1 163.0(2) 2_566 4_556 ?
Si1 O1 Na1 173.4(2) . 6_455 ?
Si1 O1 Tb1 91.66(12) . . ?
Na1 O1 Tb1 91.93(11) 6_455 . ?
Si1 O1 Na1 94.02(13) . 8_545 ?
Na1 O1 Na1 82.41(11) 6_455 8_545 ?
Tb1 O1 Na1 174.32(14) . 8_545 ?
Si1 O1 Na1 97.04(16) . 7 ?
Na1 O1 Na1 88.31(14) 6_455 7 ?
Tb1 O1 Na1 93.71(12) . 7 ?
Na1 O1 Na1 85.64(13) 8_545 7 ?
Si1 O1 Na1 87.08(16) . 7_554 ?
Na1 O1 Na1 87.01(13) 6_455 7_554 ?
Tb1 O1 Na1 95.61(12) . 7_554 ?
Na1 O1 Na1 84.65(12) 8_545 7_554 ?
Na1 O1 Na1 169.70(14) 7 7_554 ?
Si1 O2 Tb1 142.3(2) . 2_556 ?
Si1 O2 Tb1 115.96(17) . 7 ?
Tb1 O2 Tb1 99.27(12) 2_556 7 ?
Si1 O2 Na2 100.5(2) . 2_556 ?
Tb1 O2 Na2 89.39(14) 2_556 2_556 ?
Tb1 O2 Na2 94.28(16) 7 2_556 ?
Si1 O2 Na2 85.51(18) . 5_544 ?
Tb1 O2 Na2 98.80(13) 2_556 5_544 ?
Tb1 O2 Na2 104.72(15) 7 5_544 ?
Si1 O2 Na1 88.91(16) . 7 ?
Tb1 O2 Na1 82.80(12) 2_556 7 ?
Tb1 O2 Na1 81.92(11) 7 7 ?
Na2 O2 Na1 170.6(2) 2_556 7 ?
Na2 O2 Na1 172.73(17) 5_544 7 ?
Si1 O3 Tb1 93.36(14) . . ?
Si1 O3 Na1 160.1(2) . . ?
Tb1 O3 Na1 93.25(12) . . ?
Si1 O3 Tb1 93.44(14) . 7_554 ?
Tb1 O3 Tb1 128.55(14) . 7_554 ?
Na1 O3 Tb1 97.05(13) . 7_554 ?
Si1 O4 Tb1 158.8(2) . 2 ?
Si1 O4 Tb1 100.30(16) . 7_554 ?
Tb1 O4 Tb1 100.94(13) 2 7_554 ?
Si1 O4 Na2 91.8(2) . 5_544 ?
Tb1 O4 Na2 91.00(15) 2 5_544 ?
Tb1 O4 Na2 83.89(14) 7_554 5_544 ?
Si1 O4 Na1 93.60(17) . 7_554 ?

Tb1 O4 Na1 87.47(13) 2 7_554 ?
Tb1 O4 Na1 85.66(12) 7_554 7_554 ?
Na2 O4 Na1 168.95(19) 5_544 7_554 ?
Na2 O5 Tb1 87.153(4) 6_455 6_455 ?
Na2 O5 Tb1 92.846(5) . 6_455 ?
Na2 O5 Tb1 87.154(5) 6_455 8 ?
Na2 O5 Tb1 92.846(4) . 8 ?
Tb1 O5 Tb1 174.308(9) 6_455 8 ?
Na2 O5 Tb1 92.847(4) 6_455 3_565 ?
Na2 O5 Tb1 87.154(4) . 3_565 ?
Tb1 O5 Tb1 90.1 6_455 3_565 ?
Tb1 O5 Tb1 90.1 8 3_565 ?
Na2 O5 Tb1 92.845(4) 6_455 . ?
Na2 O5 Tb1 87.154(4) . . ?
Tb1 O5 Tb1 90.1 6_455 . ?
Tb1 O5 Tb1 90.142(1) 8 . ?
Tb1 O5 Tb1 174.308(9) 3_565 . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_reflns_theta_full 38.57
_diffrn_measured_fraction_theta_full 1.000
_refine_diff_density_max 1.826
_refine_diff_density_min -1.337
_refine_diff_density_rms 0.338

#===END

data_Na5Dy4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name 'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry

631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-97

_chemical_name_systematic
;

?

;

_chemical_name_common ?

_chemical_melting_point ?

_chemical_formula_moiety
'Dy4 H Na5 O17 Si4'

_chemical_formula_sum
'Dy4 H Na5 O17 Si4'

_chemical_formula_weight 1150.32

loop_

_atom_type_symbol

_atom_type_description

_atom_type_scat_dispersion_real

_atom_type_scat_dispersion_imag

_atom_type_scat_source

Dy Dy -0.1892 4.4098 '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'
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'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting Tetragonal

_symmetry_space_group_name_H-M 'I -4'

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

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

_cell_length_a 11.6435(3)

_cell_length_b 11.6435(3)

_cell_length_c 5.4322(3)

_cell_angle_alpha 90.00

_cell_angle_beta 90.00

_cell_angle_gamma 90.00

_cell_volume 736.45(5)

_cell_formula_units_Z 2

_cell_measurement_temperature 296(2)

_cell_measurement_reflns_used 4894

_cell_measurement_theta_min 2.474

_cell_measurement_theta_max 36.195

_exptl_crystal_description fragment

_exptl_crystal_colour 'light yellow'

_exptl_crystal_size_max 0.18

_exptl_crystal_size_mid 0.12

_exptl_crystal_size_min 0.06

_exptl_crystal_density_meas ?

_exptl_crystal_density_diffrn 5.187

_exptl_crystal_density_method 'not measured'

_exptl_crystal_F_000 1024

_exptl_absorpt_coefficient_mu 20.632

_exptl_absorpt_correction_type multi-scan

_exptl_absorpt_correction_T_min 0.53773

_exptl_absorpt_correction_T_max 1.00000

_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;

?

;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)

_diffrn_radiation_wavelength 0.71073

_diffrn_radiation_type MoK\a

_diffrn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'

_diffrn_radiation_monochromator graphite

_diffrn_measurement_device_type 'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'

_diffrn_measurement_method 'omega and phi scans'

_diffrn_detector_area_resol_mean ?

_diffrn_standards_number ?

_diffrn_standards_interval_count ?

_diffrn_standards_interval_time ?

_diffrn_standards_decay_% ?

_diffrn_reflns_number 8918

_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0314

_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0281

_diffrn_reflns_limit_h_min -16

_diffrn_reflns_limit_h_max 19

_diffrn_reflns_limit_k_min -17

_diffrn_reflns_limit_k_max 18

_diffrn_reflns_limit_l_min -8

_diffrn_reflns_limit_l_max 9

_diffrn_reflns_theta_min 2.47

_diffrn_reflns_theta_max 36.29

_reflns_number_total 1693

_reflns_number_gt 1647

```
_reflns_threshold_expression     >2sigma(I)

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics    various
_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^ > 2sigma(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^)+(0.0362P)^2^+0.4530P] where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3'

_atom_sites_solution_primary direct

_atom_sites_solution_secondary difmap

_atom_sites_solution_hydrogens ?

_refine_ls_hydrogen_treatment ?

_refine_ls_extinction_method none

_refine_ls_extinction_coef ?

_refine_ls_number_reflns 1693

_refine_ls_number_parameters 72

_refine_ls_number_restraints 0

_refine_ls_R_factor_all 0.0278

_refine_ls_R_factor_gt 0.0262

_refine_ls_wR_factor_ref 0.0589

_refine_ls_wR_factor_gt 0.0583

_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.091

_refine_ls_restrained_S_all 1.091

_refine_ls_shift/su_max 0.000

_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_

_atom_site_label

_atom_site_type_symbol

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_U_iso_or_equiv

_atom_site_adp_type

_atom_site_occupancy

_atom_site_symmetry_multiplicity

_atom_site_calc_flag

_atom_site_refinement_flags

_atom_site_disorder_assembly

_atom_site_disorder_group

Dy1 Dy 0.117088(16) 0.184207(17) 0.47657(4) 0.00960(6) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.24633(11) 0.10249(11) 0.0108(3) 0.0120(2) Uani 1 1 d . . .
Na1 Na 0.10438(18) 0.41058(18) 0.0062(5) 0.0204(5) Uani 1 1 d . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.0623(17) 0.034(2) Uani 0.50 2 d SP . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.0223(18) Uani 1 4 d S . .
O2 O 0.2054(4) 0.0333(3) 0.2562(7) 0.0151(7) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.1084(3) 0.6135(3) 0.0120(8) 0.0150(7) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.2018(3) 0.2351(3) 0.0631(7) 0.0138(6) Uani 1 1 d . . .
O5 O 0.3118(4) 0.4515(3) 0.2645(7) 0.0139(7) Uani 1 1 d . . .

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

Dy1 0.00812(9) 0.00967(9) 0.01102(9) 0.00069(7) 0.00060(6) 0.00151(6)
Si1 0.0122(5) 0.0112(5) 0.0125(6) 0.0003(6) -0.0002(5) -0.0008(4)
Na1 0.0166(9) 0.0144(8) 0.0301(14) 0.0003(10) 0.0015(10) 0.0003(7)
Na2 0.028(5) 0.029(5) 0.046(7) 0.000 0.000 0.004(5)
O1 0.018(2) 0.018(2) 0.031(5) 0.000 0.000 0.000
O2 0.0225(19) 0.0102(16) 0.0128(16) 0.0027(13) 0.0019(14) -0.0010(14)
O3 0.0126(14) 0.0109(13) 0.021(2) -0.0021(14) -0.0033(15) 0.0008(11)
O4 0.0137(14) 0.0106(13) 0.0173(17) 0.0021(13) 0.0021(13) -0.0002(11)
O5 0.0206(18) 0.0109(15) 0.0101(15) -0.0002(13) 0.0025(13) -0.0004(15)

_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

Dy1 O2 2.288(4) 4_556 ?
Dy1 O5 2.331(4) 6_455 ?
Dy1 O4 2.356(4) 7 ?
Dy1 O2 2.361(4) . ?
Dy1 O5 2.372(4) 7 ?
Dy1 O3 2.416(3) 6_455 ?
Dy1 O4 2.523(4) . ?
Dy1 O1 2.5446(2) . ?
Dy1 Si1 2.9549(13) 7 ?
Dy1 Si1 3.0939(16) . ?
Dy1 Na2 3.395(6) . ?

Dy1 Si1 3.4045(16) 1_556 ?
Si1 O5 1.626(4) 7_554 ?
Si1 O2 1.629(4) . ?
Si1 O3 1.638(4) 4_655 ?
Si1 O4 1.653(4) . ?
Si1 Dy1 2.9550(13) 7_554 ?
Si1 Na1 3.077(3) 2 ?
Si1 Na2 3.1191(15) . ?
Si1 Na2 3.1317(17) 2 ?
Si1 Na1 3.208(3) 7 ?
Si1 Na1 3.249(3) 7_554 ?
Si1 Dy1 3.4045(16) 1_554 ?
Na1 O4 2.358(4) . ?
Na1 O3 2.363(4) . ?
Na1 O3 2.494(4) 3_565 ?
Na1 O3 2.628(5) 6_455 ?
Na1 O2 2.679(5) 7_554 ?
Na1 O3 2.826(5) 6_454 ?
Na1 O5 2.833(5) . ?
Na1 Si1 3.077(3) 4 ?
Na1 Na1 3.201(4) 3_565 ?
Na1 Si1 3.207(3) 7_554 ?
Na1 Si1 3.249(3) 7 ?
Na1 Dy1 3.429(2) 7_554 ?
Na2 Na2 0.677(18) 2 ?
Na2 O1 2.378(9) . ?
Na2 O5 2.451(5) 6_455 ?
Na2 O5 2.451(5) 8_545 ?
Na2 O2 2.642(6) 3 ?
Na2 O2 2.642(6) . ?
Na2 O5 2.782(7) 5_444 ?
Na2 O5 2.782(7) 7_554 ?
Na2 O2 2.977(7) 2 ?
Na2 O2 2.977(7) 4 ?
Na2 Si1 3.1191(15) 3 ?
O1 Na2 2.378(9) 2_556 ?
O1 Dy1 2.5446(2) 3 ?
O1 Dy1 2.5446(2) 4_556 ?
O1 Dy1 2.5446(2) 2_556 ?
O2 Dy1 2.288(4) 2_556 ?
O2 Na1 2.679(5) 7 ?
O2 Na2 2.977(7) 2 ?
O3 Si1 1.638(4) 2_565 ?
O3 Dy1 2.416(3) 8 ?
O3 Na1 2.494(4) 3_565 ?
O3 Na1 2.628(5) 8 ?

O3 Na1 2.826(5) 8_554 ?
O4 Dy1 2.356(4) 7_554 ?
O5 Si1 1.626(4) 7 ?
O5 Dy1 2.331(4) 8 ?
O5 Dy1 2.372(4) 7_554 ?
O5 Na2 2.451(5) 6 ?
O5 Na2 2.782(7) 5 ?

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

O2 Dy1 O5 73.80(14) 4_556 6_455 ?
O2 Dy1 O4 121.03(14) 4_556 7 ?
O5 Dy1 O4 147.61(13) 6_455 7 ?
O2 Dy1 O2 137.31(18) 4_556 . ?
O5 Dy1 O2 95.18(14) 6_455 . ?
O4 Dy1 O2 90.48(13) 7 . ?
O2 Dy1 O5 85.45(14) 4_556 7 ?
O5 Dy1 O5 132.24(18) 6_455 7 ?
O4 Dy1 O5 79.74(13) 7 7 ?
O2 Dy1 O5 71.74(13) . 7 ?
O2 Dy1 O3 82.11(14) 4_556 6_455 ?
O5 Dy1 O3 88.86(13) 6_455 6_455 ?
O4 Dy1 O3 67.15(12) 7 6_455 ?

O2 Dy1 O3 139.83(13) . 6_455 ?
O5 Dy1 O3 130.91(14) 7 6_455 ?
O2 Dy1 O4 146.99(13) 4_556 . ?
O5 Dy1 O4 79.56(12) 6_455 . ?
O4 Dy1 O4 74.58(8) 7 . ?
O2 Dy1 O4 63.46(12) . . ?
O5 Dy1 O4 127.34(13) 7 . ?
O3 Dy1 O4 78.17(13) 6_455 . ?
O2 Dy1 O1 69.45(11) 4_556 . ?
O5 Dy1 O1 66.53(10) 6_455 . ?
O4 Dy1 O1 143.69(9) 7 . ?
O2 Dy1 O1 68.38(9) . . ?
O5 Dy1 O1 65.96(9) 7 . ?
O3 Dy1 O1 146.30(8) 6_455 . ?
O4 Dy1 O1 116.85(8) . . ?
O2 Dy1 Si1 106.35(11) 4_556 7 ?
O5 Dy1 Si1 117.63(11) 6_455 7 ?
O4 Dy1 Si1 33.95(9) 7 7 ?
O2 Dy1 Si1 115.01(10) . 7 ?
O5 Dy1 Si1 109.30(10) 7 7 ?
O3 Dy1 Si1 33.66(9) 6_455 7 ?
O4 Dy1 Si1 69.41(9) . 7 ?
O1 Dy1 Si1 173.53(3) . 7 ?
O2 Dy1 Si1 157.56(11) 4_556 . ?
O5 Dy1 Si1 87.08(10) 6_455 . ?
O4 Dy1 Si1 81.41(10) 7 . ?
O2 Dy1 Si1 31.23(10) . . ?
O5 Dy1 Si1 99.47(10) 7 . ?
O3 Dy1 Si1 109.68(10) 6_455 . ?
O4 Dy1 Si1 32.24(8) . . ?
O1 Dy1 Si1 92.42(2) . . ?
Si1 Dy1 Si1 92.76(4) 7 . ?
O2 Dy1 Na2 100.44(13) 4_556 . ?
O5 Dy1 Na2 46.22(10) 6_455 . ?
O4 Dy1 Na2 138.06(11) 7 . ?
O2 Dy1 Na2 50.86(10) . . ?
O5 Dy1 Na2 99.00(13) 7 . ?
O3 Dy1 Na2 129.91(13) 6_455 . ?
O4 Dy1 Na2 73.45(14) . . ?
O1 Dy1 Na2 44.39(12) . . ?
Si1 Dy1 Na2 142.08(12) 7 . ?
Si1 Dy1 Na2 57.24(9) . . ?
O2 Dy1 Si1 80.08(11) 4_556 1_556 ?
O5 Dy1 Si1 148.20(10) 6_455 1_556 ?
O4 Dy1 Si1 62.99(10) 7 1_556 ?
O2 Dy1 Si1 91.82(10) . 1_556 ?

O5 Dy1 Si1 25.54(9) 7 1_556 ?
O3 Dy1 Si1 105.38(10) 6_455 1_556 ?
O4 Dy1 Si1 130.65(9) . 1_556 ?
O1 Dy1 Si1 87.63(2) . 1_556 ?
Si1 Dy1 Si1 86.76(4) 7 1_556 ?
Si1 Dy1 Si1 113.34(4) . 1_556 ?
Na2 Dy1 Si1 124.47(9) . 1_556 ?
O5 Si1 O2 111.1(2) 7_554 . ?
O5 Si1 O3 111.6(2) 7_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 112.0(2) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 111.8(2) 7_554 . ?
O2 Si1 O4 103.2(2) . . ?
O3 Si1 O4 106.6(2) 4_655 . ?
O5 Si1 Dy1 119.81(15) 7_554 7_554 ?
O2 Si1 Dy1 128.64(16) . 7_554 ?
O3 Si1 Dy1 54.80(12) 4_655 7_554 ?
O4 Si1 Dy1 52.75(13) . 7_554 ?
O5 Si1 Na1 86.07(16) 7_554 2 ?
O2 Si1 Na1 79.60(16) . 2 ?
O3 Si1 Na1 53.95(13) 4_655 2 ?
O4 Si1 Na1 158.61(16) . 2 ?
Dy1 Si1 Na1 108.76(5) 7_554 2 ?
O5 Si1 Dy1 126.12(16) 7_554 . ?
O2 Si1 Dy1 48.72(15) . . ?
O3 Si1 Dy1 122.24(17) 4_655 . ?
O4 Si1 Dy1 54.52(14) . . ?
Dy1 Si1 Dy1 93.14(4) 7_554 . ?
Na1 Si1 Dy1 124.58(7) 2 . ?
O5 Si1 Na2 62.8(2) 7_554 . ?
O2 Si1 Na2 57.9(2) . . ?
O3 Si1 Na2 159.89(14) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 93.06(14) . . ?
Dy1 Si1 Na2 145.29(5) 7_554 . ?
Na1 Si1 Na2 105.95(5) 2 . ?
Dy1 Si1 Na2 66.24(15) . . ?
O5 Si1 Na2 50.7(2) 7_554 2 ?
O2 Si1 Na2 69.3(2) . 2 ?
O3 Si1 Na2 156.76(18) 4_655 2 ?
O4 Si1 Na2 95.18(14) . 2 ?
Dy1 Si1 Na2 143.63(7) 7_554 2 ?
Na1 Si1 Na2 105.49(5) 2 2 ?
Dy1 Si1 Na2 77.02(15) . 2 ?
Na2 Si1 Na2 12.4(3) . 2 ?
O5 Si1 Na1 153.87(15) 7_554 7 ?
O2 Si1 Na1 56.52(16) . 7 ?
O3 Si1 Na1 61.68(16) 4_655 7 ?

O4 Si1 Na1 94.01(16) . 7 ?
Dy1 Si1 Na1 78.52(5) 7_554 7 ?
Na1 Si1 Na1 69.58(9) 2 7 ?
Dy1 Si1 Na1 65.92(5) . 7 ?
Na2 Si1 Na1 113.89(17) . 7 ?
Na2 Si1 Na1 125.77(17) 2 7 ?
O5 Si1 Na1 60.69(16) 7_554 7_554 ?
O2 Si1 Na1 145.47(16) . 7_554 ?
O3 Si1 Na1 53.50(16) 4_655 7_554 ?
O4 Si1 Na1 110.90(16) . 7_554 ?
Dy1 Si1 Na1 72.45(5) 7_554 7_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.77(9) 2 7_554 ?
Dy1 Si1 Na1 164.69(6) . 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 123.35(17) . 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 111.42(17) 2 7_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.56(7) 7 7_554 ?
O5 Si1 Dy1 38.97(14) 7_554 1_554 ?
O2 Si1 Dy1 134.95(17) . 1_554 ?
O3 Si1 Dy1 111.35(16) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Dy1 75.35(15) . 1_554 ?
Dy1 Si1 Dy1 87.10(4) 7_554 1_554 ?
Na1 Si1 Dy1 117.90(7) 2 1_554 ?
Dy1 Si1 Dy1 113.34(4) . 1_554 ?
Na2 Si1 Dy1 77.11(16) . 1_554 ?
Na2 Si1 Dy1 66.03(15) 2 1_554 ?
Na1 Si1 Dy1 165.47(6) 7 1_554 ?
Na1 Si1 Dy1 62.00(5) 7_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 148.78(16) . . ?
O4 Na1 O3 112.27(15) . 3_565 ?
O3 Na1 O3 97.59(13) . 3_565 ?
O4 Na1 O3 77.12(15) . 6_455 ?
O3 Na1 O3 94.01(15) . 6_455 ?
O3 Na1 O3 91.03(15) 3_565 6_455 ?
O4 Na1 O2 83.11(14) . 7_554 ?
O3 Na1 O2 75.32(14) . 7_554 ?
O3 Na1 O2 148.80(18) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 O2 119.46(14) 6_455 7_554 ?
O4 Na1 O3 92.56(14) . 6_454 ?
O3 Na1 O3 95.22(15) . 6_454 ?
O3 Na1 O3 92.36(14) 3_565 6_454 ?
O3 Na1 O3 169.66(17) 6_455 6_454 ?
O2 Na1 O3 58.87(12) 7_554 6_454 ?
O4 Na1 O5 70.77(13) . . ?
O3 Na1 O5 78.95(13) . . ?
O3 Na1 O5 149.27(18) 3_565 . ?
O3 Na1 O5 59.12(12) 6_455 . ?

O2 Na1 O5 60.35(12) 7_554 . ?
O3 Na1 O5 118.32(13) 6_454 . ?
O4 Na1 Si1 80.90(11) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.60(12) . 4 ?
O3 Na1 Si1 32.08(9) 3_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.52(11) 6_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.59(13) 7_554 4 ?
O3 Na1 Si1 87.18(10) 6_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.87(13) . 4 ?
O4 Na1 Na1 158.33(15) . 3_565 ?
O3 Na1 Na1 50.56(10) . 3_565 ?
O3 Na1 Na1 47.05(10) 3_565 3_565 ?
O3 Na1 Na1 94.90(9) 6_455 3_565 ?
O2 Na1 Na1 117.99(12) 7_554 3_565 ?
O3 Na1 Na1 94.56(8) 6_454 3_565 ?
O5 Na1 Na1 122.55(12) . 3_565 ?
Si1 Na1 Na1 79.04(8) 4 3_565 ?
O4 Na1 Si1 78.94(12) . 7_554 ?
O3 Na1 Si1 92.74(13) . 7_554 ?
O3 Na1 Si1 122.94(15) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 Si1 144.05(11) 6_455 7_554 ?
O2 Na1 Si1 30.48(9) 7_554 7_554 ?
O3 Na1 Si1 30.69(8) 6_454 7_554 ?
O5 Na1 Si1 87.79(10) . 7_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.69(8) 4 7_554 ?
Na1 Na1 Si1 116.26(6) 3_565 7_554 ?
O4 Na1 Si1 65.88(12) . 7 ?
O3 Na1 Si1 91.42(13) . 7 ?
O3 Na1 Si1 121.04(15) 3_565 7 ?
O3 Na1 Si1 30.07(9) 6_455 7 ?
O2 Na1 Si1 89.81(11) 7_554 7 ?
O3 Na1 Si1 144.75(11) 6_454 7 ?
O5 Na1 Si1 30.02(8) . 7 ?
Si1 Na1 Si1 114.52(8) 4 7 ?
Na1 Na1 Si1 115.90(6) 3_565 7 ?
Si1 Na1 Si1 114.56(7) 7_554 7 ?
O4 Na1 Dy1 43.30(10) . 7_554 ?
O3 Na1 Dy1 107.67(11) . 7_554 ?
O3 Na1 Dy1 154.69(11) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 Dy1 88.94(10) 6_455 7_554 ?
O2 Na1 Dy1 43.35(9) 7_554 7_554 ?
O3 Na1 Dy1 83.83(9) 6_454 7_554 ?
O5 Na1 Dy1 43.22(8) . 7_554 ?
Si1 Na1 Dy1 122.61(7) 4 7_554 ?
Na1 Na1 Dy1 158.05(11) 3_565 7_554 ?
Si1 Na1 Dy1 55.45(4) 7_554 7_554 ?

Si1 Na1 Dy1 61.23(5) 7 7_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 2 . ?
Na2 Na2 O5 112.6(2) 2 6_455 ?
O1 Na2 O5 67.4(2) . 6_455 ?
Na2 Na2 O5 112.6(2) 2 8_545 ?
O1 Na2 O5 67.4(2) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 134.8(4) 6_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 113.5(2) 2 3 ?
O1 Na2 O2 66.5(2) . 3 ?
O5 Na2 O2 76.68(18) 6_455 3 ?
O5 Na2 O2 85.7(2) 8_545 3 ?
Na2 Na2 O2 113.5(2) 2 . ?
O1 Na2 O2 66.5(2) . . ?
O5 Na2 O2 85.7(2) 6_455 . ?
O5 Na2 O2 76.67(18) 8_545 . ?
O2 Na2 O2 133.0(4) 3 . ?
Na2 Na2 O5 54.44(17) 2 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.56(17) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.91(9) 6_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.91(9) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 59.27(12) 3 5_444 ?
O2 Na2 O5 167.1(3) . 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.44(17) 2 7_554 ?
O1 Na2 O5 125.56(17) . 7_554 ?
O5 Na2 O5 102.91(9) 6_455 7_554 ?
O5 Na2 O5 102.91(9) 8_545 7_554 ?
O2 Na2 O5 167.1(3) 3 7_554 ?
O2 Na2 O5 59.27(12) . 7_554 ?
O5 Na2 O5 108.9(3) 5_444 7_554 ?
Na2 Na2 O2 54.47(16) 2 2 ?
O1 Na2 O2 125.53(16) . 2 ?
O5 Na2 O2 166.3(3) 6_455 2 ?
O5 Na2 O2 58.33(13) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 103.40(9) 3 2 ?
O2 Na2 O2 103.40(9) . 2 ?
O5 Na2 O2 66.52(17) 5_444 2 ?
O5 Na2 O2 73.9(2) 7_554 2 ?
Na2 Na2 O2 54.47(16) 2 4 ?
O1 Na2 O2 125.53(16) . 4 ?
O5 Na2 O2 58.33(13) 6_455 4 ?
O5 Na2 O2 166.3(3) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 103.40(9) 3 4 ?
O2 Na2 O2 103.40(9) . 4 ?
O5 Na2 O2 73.9(2) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.52(17) 7_554 4 ?
O2 Na2 O2 108.9(3) 2 4 ?

Na2 Na2 Si1 84.85(17) 2 . ?
O1 Na2 Si1 95.15(17) . . ?
O5 Na2 Si1 84.51(10) 6_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.47(11) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 157.6(3) 3 . ?
O2 Na2 Si1 31.48(9) . . ?
O5 Na2 Si1 138.6(3) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 31.33(8) 7_554 . ?
O2 Na2 Si1 97.78(15) 2 . ?
O2 Na2 Si1 76.14(12) 4 . ?
Na2 Na2 Si1 84.85(17) 2 3 ?
O1 Na2 Si1 95.15(17) . 3 ?
O5 Na2 Si1 99.47(11) 6_455 3 ?
O5 Na2 Si1 84.51(10) 8_545 3 ?
O2 Na2 Si1 31.48(9) 3 3 ?
O2 Na2 Si1 157.6(3) . 3 ?
O5 Na2 Si1 31.33(8) 5_444 3 ?
O5 Na2 Si1 138.6(3) 7_554 3 ?
O2 Na2 Si1 76.14(12) 2 3 ?
O2 Na2 Si1 97.78(15) 4 3 ?
Si1 Na2 Si1 169.7(3) . 3 ?
Na2 O1 Na2 180.000(1) . 2_556 ?
Na2 O1 Dy1 87.132(5) . 3 ?
Na2 O1 Dy1 92.868(5) 2_556 3 ?
Na2 O1 Dy1 92.867(5) . 4_556 ?
Na2 O1 Dy1 87.133(5) 2_556 4_556 ?
Dy1 O1 Dy1 90.1 3 4_556 ?
Na2 O1 Dy1 92.867(5) . 2_556 ?
Na2 O1 Dy1 87.133(5) 2_556 2_556 ?
Dy1 O1 Dy1 90.1 3 2_556 ?
Dy1 O1 Dy1 174.266(9) 4_556 2_556 ?
Na2 O1 Dy1 87.133(5) . . ?
Na2 O1 Dy1 92.867(5) 2_556 . ?
Dy1 O1 Dy1 174.265(9) 3 . ?
Dy1 O1 Dy1 90.143(1) 4_556 . ?
Dy1 O1 Dy1 90.1 2_556 . ?
Si1 O2 Dy1 158.3(2) . 2_556 ?
Si1 O2 Dy1 100.05(18) . . ?
Dy1 O2 Dy1 101.59(15) 2_556 . ?
Si1 O2 Na2 90.6(2) . . ?
Dy1 O2 Na2 92.46(18) 2_556 . ?
Dy1 O2 Na2 85.26(17) . . ?
Si1 O2 Na1 93.00(19) . 7 ?
Dy1 O2 Na1 87.37(15) 2_556 7 ?
Dy1 O2 Na1 85.50(13) . 7 ?
Na2 O2 Na1 170.5(2) . 7 ?

Si1 O2 Na2 79.9(2) . 2 ?
Dy1 O2 Na2 100.51(17) 2_556 2 ?
Dy1 O2 Na2 92.40(16) . 2 ?
Na2 O2 Na2 12.0(3) . 2 ?
Na1 O2 Na2 172.11(18) 7 2 ?
Si1 O3 Na1 173.8(2) 2_565 . ?
Si1 O3 Dy1 91.54(15) 2_565 8 ?
Na1 O3 Dy1 92.16(13) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.96(16) 2_565 3_565 ?
Na1 O3 Na1 82.39(13) . 3_565 ?
Dy1 O3 Na1 174.49(17) 8 3_565 ?
Si1 O3 Na1 96.43(19) 2_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.36(16) . 8 ?
Dy1 O3 Na1 93.40(14) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.67(15) 3_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.64(18) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 86.99(15) . 8_554 ?
Dy1 O3 Na1 95.99(14) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.57(14) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.66(17) 8 8_554 ?
Si1 O4 Dy1 93.30(17) . 7_554 ?
Si1 O4 Na1 159.7(2) . . ?
Dy1 O4 Na1 93.36(13) 7_554 . ?
Si1 O4 Dy1 93.25(16) . . ?
Dy1 O4 Dy1 128.39(17) 7_554 . ?
Na1 O4 Dy1 97.59(15) . . ?
Si1 O5 Dy1 142.2(2) 7 8 ?
Si1 O5 Dy1 115.49(19) 7 7_554 ?
Dy1 O5 Dy1 100.00(14) 8 7_554 ?
Si1 O5 Na2 98.4(3) 7 6 ?
Dy1 O5 Na2 90.41(18) 8 6 ?
Dy1 O5 Na2 95.4(2) 7_554 6 ?
Si1 O5 Na2 85.9(2) 7 5 ?
Dy1 O5 Na2 98.22(16) 8 5 ?
Dy1 O5 Na2 104.11(18) 7_554 5 ?
Na2 O5 Na2 13.0(4) 6 5 ?
Si1 O5 Na1 89.29(18) 7 . ?
Dy1 O5 Na1 82.99(13) 8 . ?
Dy1 O5 Na1 81.90(12) 7_554 . ?
Na2 O5 Na1 172.3(3) 6 . ?
Na2 O5 Na1 173.5(2) 5 . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max 0.995

_diffrn_reflns_theta_full 36.29

_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.995

_refine_diff_density_max 2.239

_refine_diff_density_min -1.428

_refine_diff_density_rms 0.318

#===END

data_Na5Ho4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name 'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-97

_chemical_name_systematic
;

?

;

_chemical_name_common ?

_chemical_melting_point ?

_chemical_formula_moiety 'H Ho4 Na5 O17 Si4'

_chemical_formula_sum
'H Ho4 Na5 O17 Si4'

_chemical_formula_weight 1160.04

loop_

_atom_type_symbol

_atom_type_description

_atom_type_scat_dispersion_real

_atom_type_scat_dispersion_imag

_atom_type_scat_source

Ho Ho -0.2175 4.6783 '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'
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'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting Tetragonal

_symmetry_space_group_name_H-M 'I -4'

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

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

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

_cell_length_a 11.6002(3)

_cell_length_b 11.6002(3)

_cell_length_c 5.4231(3)

_cell_angle_alpha 90.00

_cell_angle_beta 90.00

_cell_angle_gamma 90.00

_cell_volume 729.76(5)

_cell_formula_units_Z 2

_cell_measurement_temperature 296(2)

_cell_measurement_reflns_used 6601

_cell_measurement_theta_min 2.483

_cell_measurement_theta_max 36.348

_exptl_crystal_description 'square plate'

_exptl_crystal_colour 'light pink'

_exptl_crystal_size_max 0.12

_exptl_crystal_size_mid 0.10

_exptl_crystal_size_min 0.04

_exptl_crystal_density_meas ?

_exptl_crystal_density_diffrn 5.279

_exptl_crystal_density_method 'not measured'

_exptl_crystal_F_000 1032

_exptl_absorpt_coefficient_mu 22.027

_exptl_absorpt_correction_type multi-scan

_exptl_absorpt_correction_T_min 0.40896

_exptl_absorpt_correction_T_max 1.00000

_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;

?

;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)

_diffrn_radiation_wavelength 0.71073

_diffrn_radiation_type MoK\a

_diffrn_radiation_source 'fine-focus sealed tube'

_diffrn_radiation_monochromator graphite

_diffrn_measurement_device_type 'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'

_diffrn_measurement_method 'omega and phi scans'

_diffrn_detector_area_resol_mean ?

_diffrn_standards_number ?

_diffrn_standards_interval_count ?

_diffrn_standards_interval_time ?

_diffrn_standards_decay_% ?

_diffrn_reflns_number 11389

_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0383

_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0264

_diffrn_reflns_limit_h_min -17

_diffrn_reflns_limit_h_max 17

_diffrn_reflns_limit_k_min -17

_diffrn_reflns_limit_k_max 19

_diffrn_reflns_limit_l_min -9

_diffrn_reflns_limit_l_max 8

_diffrn_reflns_theta_min 2.48

_diffrn_reflns_theta_max 36.38

_reflns_number_total 1734

_reflns_number_gt 1713

_reflns_threshold_expression >2sigma(I)

_computing_data_collection 'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'

_computing_cell_refinement 'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'

_computing_data_reduction 'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'

_computing_structure_solution 'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'

_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_computing_molecular_graphics various

_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^ > 2sigma(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^)+(0.0342P)^2^+3.0461P] where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3'

_atom_sites_solution_primary     direct

_atom_sites_solution_secondary   difmap

_atom_sites_solution_hydrogens   ?

_refine_ls_hydrogen_treatment    ?

_refine_ls_extinction_method     none

_refine_ls_extinction_coef       ?

_refine_ls_number_reflns 1734

_refine_ls_number_parameters 72

_refine_ls_number_restraints 0

_refine_ls_R_factor_all 0.0254

_refine_ls_R_factor_gt 0.0248

_refine_ls_wR_factor_ref 0.0597

_refine_ls_wR_factor_gt 0.0594

_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.104

_refine_ls_restrained_S_all 1.104

_refine_ls_shift/su_max 0.000

_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_

_atom_site_label

_atom_site_type_symbol

_atom_site_fract_x

_atom_site_fract_y

_atom_site_fract_z

_atom_site_U_iso_or_equiv

_atom_site_adp_type

_atom_site_occupancy

_atom_site_symmetry_multiplicity

_atom_site_calc_flag

_atom_site_refinement_flags

_atom_site_disorder_assembly

_atom_site_disorder_group

Ho1 Ho 0.117224(15) 0.184020(16) 0.47581(4) 0.01122(6) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.24596(11) 0.10258(11) 0.0111(3) 0.0138(2) Uani 1 1 d . . .
Na1 Na 0.10468(18) 0.41070(18) 0.0053(6) 0.0216(5) Uani 1 1 d . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.0619(19) 0.038(3) Uani 0.50 2 d SP . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.0251(19) Uani 1 4 d S . .
O2 O 0.2047(4) 0.0322(3) 0.2568(8) 0.0171(7) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.1089(3) 0.6130(3) 0.0130(8) 0.0167(7) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.2015(3) 0.2357(3) 0.0649(8) 0.0155(6) Uani 1 1 d . . .
O5 O 0.3121(4) 0.4513(3) 0.2639(7) 0.0159(7) Uani 1 1 d . . .

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

Ho1 0.00968(8) 0.01145(9) 0.01254(9) 0.00070(6) 0.00057(6) 0.00146(6)
Si1 0.0149(5) 0.0130(5) 0.0136(6) 0.0001(5) 0.0000(5) -0.0008(4)
Na1 0.0175(8) 0.0157(8) 0.0315(14) 0.0013(10) 0.0029(10) 0.0007(7)
Na2 0.036(5) 0.024(4) 0.052(9) 0.000 0.000 0.002(4)
O1 0.021(2) 0.021(2) 0.033(5) 0.000 0.000 0.000
O2 0.0263(19) 0.0128(15) 0.0121(15) 0.0004(13) 0.0024(14) -0.0018(14)
O3 0.0140(13) 0.0137(13) 0.022(2) -0.0015(14) -0.0014(15) -0.0006(10)
O4 0.0164(14) 0.0121(13) 0.0181(18) 0.0014(13) 0.0037(13) -0.0006(11)
O5 0.0222(18) 0.0115(14) 0.0140(16) 0.0019(13) 0.0039(14) 0.0011(13)

_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

Ho1 O2 2.272(4) 4_556 ?
Ho1 O5 2.323(4) 6_455 ?
Ho1 O4 2.350(4) 7 ?
Ho1 O2 2.355(4) . ?
Ho1 O5 2.361(4) 7 ?
Ho1 O3 2.404(3) 6_455 ?
Ho1 O4 2.506(4) . ?
Ho1 O1 2.5344(2) . ?
Ho1 Si1 2.9467(13) 7 ?
Ho1 Si1 3.0778(16) . ?
Ho1 Na2 3.383(7) . ?
Ho1 Si1 3.3987(16) 1_556 ?
Si1 O5 1.625(4) 7_554 ?
Si1 O2 1.634(4) . ?
Si1 O3 1.643(4) 4_655 ?
Si1 O4 1.654(4) . ?
Si1 Ho1 2.9468(13) 7_554 ?
Si1 Na1 3.073(3) 2 ?
Si1 Na2 3.1036(16) . ?
Si1 Na2 3.1167(18) 2 ?
Si1 Na1 3.195(3) 7 ?
Si1 Na1 3.248(3) 7_554 ?
Si1 Ho1 3.3986(16) 1_554 ?
Na1 O4 2.343(4) . ?
Na1 O3 2.348(4) . ?
Na1 O3 2.493(4) 3_565 ?
Na1 O3 2.624(5) 6_455 ?

Na1 O2 2.673(5) 7_554 ?
Na1 O3 2.822(5) 6_454 ?
Na1 O5 2.824(5) . ?
Na1 Si1 3.073(3) 4 ?
Na1 Na1 3.192(4) 3_565 ?
Na1 Si1 3.195(3) 7_554 ?
Na1 Si1 3.248(3) 7 ?
Na1 Ho1 3.412(2) 7_554 ?
Na2 Na2 0.67(2) 2 ?
Na2 O1 2.376(10) . ?
Na2 O5 2.442(6) 6_455 ?
Na2 O5 2.442(6) 8_545 ?
Na2 O2 2.626(6) 3 ?
Na2 O2 2.626(6) . ?
Na2 O5 2.772(7) 5_444 ?
Na2 O5 2.772(7) 7_554 ?
Na2 O2 2.960(7) 2 ?
Na2 O2 2.960(7) 4 ?
Na2 Si1 3.1037(16) 3 ?
O1 Na2 2.376(10) 2_556 ?
O1 Ho1 2.5344(2) 3 ?
O1 Ho1 2.5344(2) 2_556 ?
O1 Ho1 2.5344(2) 4_556 ?
O2 Ho1 2.272(4) 2_556 ?
O2 Na1 2.673(5) 7 ?
O2 Na2 2.960(7) 2 ?
O3 Si1 1.643(4) 2_565 ?
O3 Ho1 2.404(3) 8 ?
O3 Na1 2.493(4) 3_565 ?
O3 Na1 2.624(5) 8 ?
O3 Na1 2.822(5) 8_554 ?
O4 Ho1 2.350(4) 7_554 ?
O5 Si1 1.625(4) 7 ?
O5 Ho1 2.323(4) 8 ?
O5 Ho1 2.361(4) 7_554 ?
O5 Na2 2.442(6) 6 ?
O5 Na2 2.772(7) 5 ?

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

O2 Ho1 O5 73.93(14) 4_556 6_455 ?
O2 Ho1 O4 120.61(15) 4_556 7 ?
O5 Ho1 O4 148.08(14) 6_455 7 ?
O2 Ho1 O2 136.85(18) 4_556 . ?
O5 Ho1 O2 95.13(14) 6_455 . ?
O4 Ho1 O2 90.85(14) 7 . ?
O2 Ho1 O5 84.99(14) 4_556 7 ?
O5 Ho1 O5 132.13(18) 6_455 7 ?
O4 Ho1 O5 79.44(13) 7 7 ?
O2 Ho1 O5 71.76(14) . 7 ?
O2 Ho1 O3 82.12(15) 4_556 6_455 ?
O5 Ho1 O3 88.73(14) 6_455 6_455 ?
O4 Ho1 O3 67.47(12) 7 6_455 ?
O2 Ho1 O3 140.29(13) . 6_455 ?
O5 Ho1 O3 130.89(14) 7 6_455 ?
O2 Ho1 O4 147.12(13) 4_556 . ?
O5 Ho1 O4 79.71(13) 6_455 . ?
O4 Ho1 O4 74.86(8) 7 . ?
O2 Ho1 O4 64.03(12) . . ?
O5 Ho1 O4 127.71(13) 7 . ?
O3 Ho1 O4 77.96(13) 6_455 . ?
O2 Ho1 O1 69.31(11) 4_556 . ?
O5 Ho1 O1 66.47(10) 6_455 . ?
O4 Ho1 O1 143.45(9) 7 . ?
O2 Ho1 O1 68.11(10) . . ?
O5 Ho1 O1 65.94(9) 7 . ?
O3 Ho1 O1 146.06(8) 6_455 . ?
O4 Ho1 O1 117.18(8) . . ?
O2 Ho1 Si1 106.29(12) 4_556 7 ?

O5 Ho1 Si1 117.80(10) 6_455 7 ?
O4 Ho1 Si1 34.08(9) 7 7 ?
O2 Ho1 Si1 115.42(10) . 7 ?
O5 Ho1 Si1 109.16(10) 7 7 ?
O3 Ho1 Si1 33.87(9) 6_455 7 ?
O4 Ho1 Si1 69.31(9) . 7 ?
O1 Ho1 Si1 173.30(3) . 7 ?
O2 Ho1 Si1 157.66(11) 4_556 . ?
O5 Ho1 Si1 87.13(10) 6_455 . ?
O4 Ho1 Si1 81.72(10) 7 . ?
O2 Ho1 Si1 31.59(10) . . ?
O5 Ho1 Si1 99.74(10) 7 . ?
O3 Ho1 Si1 109.72(11) 6_455 . ?
O4 Ho1 Si1 32.44(8) . . ?
O1 Ho1 Si1 92.53(2) . . ?
Si1 Ho1 Si1 92.85(4) 7 . ?
O2 Ho1 Na2 100.58(14) 4_556 . ?
O5 Ho1 Na2 46.21(11) 6_455 . ?
O4 Ho1 Na2 138.27(12) 7 . ?
O2 Ho1 Na2 50.68(11) . . ?
O5 Ho1 Na2 99.16(13) 7 . ?
O3 Ho1 Na2 129.74(14) 6_455 . ?
O4 Ho1 Na2 73.61(15) . . ?
O1 Ho1 Na2 44.54(13) . . ?
Si1 Ho1 Na2 142.16(13) 7 . ?
Si1 Ho1 Na2 57.19(10) . . ?
O2 Ho1 Si1 79.59(11) 4_556 1_556 ?
O5 Ho1 Si1 147.93(10) 6_455 1_556 ?
O4 Ho1 Si1 62.70(10) 7 1_556 ?
O2 Ho1 Si1 91.93(11) . 1_556 ?
O5 Ho1 Si1 25.52(9) 7 1_556 ?
O3 Ho1 Si1 105.38(11) 6_455 1_556 ?
O4 Ho1 Si1 130.88(9) . 1_556 ?
O1 Ho1 Si1 87.56(2) . 1_556 ?
Si1 Ho1 Si1 86.63(4) 7 1_556 ?
Si1 Ho1 Si1 113.63(4) . 1_556 ?
Na2 Ho1 Si1 124.61(10) . 1_556 ?
O5 Si1 O2 111.0(2) 7_554 . ?
O5 Si1 O3 111.3(2) 7_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 112.3(2) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 112.0(2) 7_554 . ?
O2 Si1 O4 103.4(2) . . ?
O3 Si1 O4 106.4(2) 4_655 . ?
O5 Si1 Ho1 119.50(16) 7_554 7_554 ?
O2 Si1 Ho1 129.10(16) . 7_554 ?
O3 Si1 Ho1 54.62(12) 4_655 7_554 ?

O4 Si1 Ho1 52.76(13) . 7_554 ?
O5 Si1 Na1 86.16(16) 7_554 2 ?
O2 Si1 Na1 79.33(16) . 2 ?
O3 Si1 Na1 54.07(13) 4_655 2 ?
O4 Si1 Na1 158.36(16) . 2 ?
Ho1 Si1 Na1 108.69(5) 7_554 2 ?
O5 Si1 Ho1 126.33(16) 7_554 . ?
O2 Si1 Ho1 49.00(15) . . ?
O3 Si1 Ho1 122.32(18) 4_655 . ?
O4 Si1 Ho1 54.39(14) . . ?
Ho1 Si1 Ho1 93.25(4) 7_554 . ?
Na1 Si1 Ho1 124.46(7) 2 . ?
O5 Si1 Na2 62.9(2) 7_554 . ?
O2 Si1 Na2 57.8(2) . . ?
O3 Si1 Na2 159.99(14) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 93.21(14) . . ?
Ho1 Si1 Na2 145.38(5) 7_554 . ?
Na1 Si1 Na2 105.92(5) 2 . ?
Ho1 Si1 Na2 66.36(16) . . ?
O5 Si1 Na2 50.9(2) 7_554 2 ?
O2 Si1 Na2 69.2(2) . 2 ?
O3 Si1 Na2 156.72(19) 4_655 2 ?
O4 Si1 Na2 95.38(14) . 2 ?
Ho1 Si1 Na2 143.66(7) 7_554 2 ?
Na1 Si1 Na2 105.48(6) 2 2 ?
Ho1 Si1 Na2 77.12(17) . 2 ?
Na2 Si1 Na2 12.4(4) . 2 ?
O5 Si1 Na1 153.92(16) 7_554 7 ?
O2 Si1 Na1 56.70(16) . 7 ?
O3 Si1 Na1 61.90(17) 4_655 7 ?
O4 Si1 Na1 93.78(16) . 7 ?
Ho1 Si1 Na1 78.64(5) 7_554 7 ?
Na1 Si1 Na1 69.48(9) 2 7 ?
Ho1 Si1 Na1 65.87(6) . 7 ?
Na2 Si1 Na1 113.93(19) . 7 ?
Na2 Si1 Na1 125.77(19) 2 7 ?
O5 Si1 Na1 60.40(16) 7_554 7_554 ?
O2 Si1 Na1 145.17(16) . 7_554 ?
O3 Si1 Na1 53.39(17) 4_655 7_554 ?
O4 Si1 Na1 111.07(16) . 7_554 ?
Ho1 Si1 Na1 72.40(5) 7_554 7_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.83(9) 2 7_554 ?
Ho1 Si1 Na1 164.76(6) . 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 123.17(19) . 7_554 ?
Na2 Si1 Na1 111.28(19) 2 7_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.64(7) 7 7_554 ?

O5 Si1 Ho1 38.74(14) 7_554 1_554 ?
O2 Si1 Ho1 134.95(17) . 1_554 ?
O3 Si1 Ho1 110.93(16) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Ho1 75.77(15) . 1_554 ?
Ho1 Si1 Ho1 87.00(4) 7_554 1_554 ?
Na1 Si1 Ho1 117.77(7) 2 1_554 ?
Ho1 Si1 Ho1 113.63(4) . 1_554 ?
Na2 Si1 Ho1 77.19(17) . 1_554 ?
Na2 Si1 Ho1 66.13(17) 2 1_554 ?
Na1 Si1 Ho1 165.51(6) 7 1_554 ?
Na1 Si1 Ho1 61.72(5) 7_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 148.63(17) . . ?
O4 Na1 O3 112.25(15) . 3_565 ?
O3 Na1 O3 97.51(13) . 3_565 ?
O4 Na1 O3 76.70(15) . 6_455 ?
O3 Na1 O3 93.91(16) . 6_455 ?
O3 Na1 O3 90.60(15) 3_565 6_455 ?
O4 Na1 O2 83.55(14) . 7_554 ?
O3 Na1 O2 75.16(14) . 7_554 ?
O3 Na1 O2 149.07(19) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 O2 119.54(15) 6_455 7_554 ?
O4 Na1 O3 92.93(15) . 6_454 ?
O3 Na1 O3 95.59(15) . 6_454 ?
O3 Na1 O3 92.39(15) 3_565 6_454 ?
O3 Na1 O3 169.58(17) 6_455 6_454 ?
O2 Na1 O3 59.29(13) 7_554 6_454 ?
O4 Na1 O5 70.57(14) . . ?
O3 Na1 O5 78.87(13) . . ?
O3 Na1 O5 148.95(18) 3_565 . ?
O3 Na1 O5 59.26(12) 6_455 . ?
O2 Na1 O5 60.29(12) 7_554 . ?
O3 Na1 O5 118.61(13) 6_454 . ?
O4 Na1 Si1 80.81(11) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.68(12) . 4 ?
O3 Na1 Si1 32.25(9) 3_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.22(11) 6_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.89(14) 7_554 4 ?
O3 Na1 Si1 87.00(10) 6_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.69(13) . 4 ?
O4 Na1 Na1 158.01(15) . 3_565 ?
O3 Na1 Na1 50.74(10) . 3_565 ?
O3 Na1 Na1 46.81(10) 3_565 3_565 ?
O3 Na1 Na1 94.83(9) 6_455 3_565 ?
O2 Na1 Na1 117.93(13) 7_554 3_565 ?
O3 Na1 Na1 94.49(8) 6_454 3_565 ?
O5 Na1 Na1 122.68(12) . 3_565 ?

Si1 Na1 Na1 78.95(8) 4 3_565 ?
O4 Na1 Si1 79.27(12) . 7_554 ?
O3 Na1 Si1 92.97(14) . 7_554 ?
O3 Na1 Si1 123.20(15) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 Si1 144.19(11) 6_455 7_554 ?
O2 Na1 Si1 30.73(9) 7_554 7_554 ?
O3 Na1 Si1 30.90(8) 6_454 7_554 ?
O5 Na1 Si1 87.85(10) . 7_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.71(8) 4 7_554 ?
Na1 Na1 Si1 116.35(6) 3_565 7_554 ?
O4 Na1 Si1 65.58(12) . 7 ?
O3 Na1 Si1 91.23(13) . 7 ?
O3 Na1 Si1 120.72(15) 3_565 7 ?
O3 Na1 Si1 30.17(9) 6_455 7 ?
O2 Na1 Si1 89.79(11) 7_554 7 ?
O3 Na1 Si1 145.00(11) 6_454 7 ?
O5 Na1 Si1 30.02(9) . 7 ?
Si1 Na1 Si1 114.36(9) 4 7 ?
Na1 Na1 Si1 115.89(6) 3_565 7 ?
Si1 Na1 Si1 114.64(7) 7_554 7 ?
O4 Na1 Ho1 43.44(10) . 7_554 ?
O3 Na1 Ho1 107.64(11) . 7_554 ?
O3 Na1 Ho1 154.81(11) 3_565 7_554 ?
O3 Na1 Ho1 89.08(10) 6_455 7_554 ?
O2 Na1 Ho1 43.45(9) 7_554 7_554 ?
O3 Na1 Ho1 83.97(9) 6_454 7_554 ?
O5 Na1 Ho1 43.23(8) . 7_554 ?
Si1 Na1 Ho1 122.56(7) 4 7_554 ?
Na1 Na1 Ho1 158.19(11) 3_565 7_554 ?
Si1 Na1 Ho1 55.41(4) 7_554 7_554 ?
Si1 Na1 Ho1 61.31(5) 7 7_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 2 . ?
Na2 Na2 O5 112.8(2) 2 6_455 ?
O1 Na2 O5 67.2(2) . 6_455 ?
Na2 Na2 O5 112.8(2) 2 8_545 ?
O1 Na2 O5 67.2(2) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 134.5(5) 6_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 113.7(2) 2 3 ?
O1 Na2 O2 66.3(2) . 3 ?
O5 Na2 O2 76.22(19) 6_455 3 ?
O5 Na2 O2 85.8(2) 8_545 3 ?
Na2 Na2 O2 113.7(2) 2 . ?
O1 Na2 O2 66.3(2) . . ?
O5 Na2 O2 85.8(2) 6_455 . ?
O5 Na2 O2 76.22(19) 8_545 . ?
O2 Na2 O2 132.5(5) 3 . ?

Na2 Na2 O5 54.34(19) 2 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.66(19) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.04(10) 6_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.04(10) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 59.63(12) 3 5_444 ?
O2 Na2 O5 167.1(4) . 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.34(19) 2 7_554 ?
O1 Na2 O5 125.66(19) . 7_554 ?
O5 Na2 O5 103.04(10) 6_455 7_554 ?
O5 Na2 O5 103.04(10) 8_545 7_554 ?
O2 Na2 O5 167.1(4) 3 7_554 ?
O2 Na2 O5 59.63(12) . 7_554 ?
O5 Na2 O5 108.7(4) 5_444 7_554 ?
Na2 Na2 O2 54.29(18) 2 2 ?
O1 Na2 O2 125.71(18) . 2 ?
O5 Na2 O2 166.2(4) 6_455 2 ?
O5 Na2 O2 58.71(14) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 103.59(10) 3 2 ?
O2 Na2 O2 103.59(10) . 2 ?
O5 Na2 O2 66.12(19) 5_444 2 ?
O5 Na2 O2 74.0(2) 7_554 2 ?
Na2 Na2 O2 54.29(18) 2 4 ?
O1 Na2 O2 125.71(18) . 4 ?
O5 Na2 O2 58.71(14) 6_455 4 ?
O5 Na2 O2 166.2(4) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 103.59(10) 3 4 ?
O2 Na2 O2 103.59(10) . 4 ?
O5 Na2 O2 74.0(2) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.12(19) 7_554 4 ?
O2 Na2 O2 108.6(4) 2 4 ?
Na2 Na2 Si1 84.91(19) 2 . ?
O1 Na2 Si1 95.09(19) . . ?
O5 Na2 Si1 84.54(10) 6_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.42(11) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 157.2(3) 3 . ?
O2 Na2 Si1 31.77(9) . . ?
O5 Na2 Si1 138.5(4) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 31.47(9) 7_554 . ?
O2 Na2 Si1 98.04(17) 2 . ?
O2 Na2 Si1 75.91(13) 4 . ?
Na2 Na2 Si1 84.91(19) 2 3 ?
O1 Na2 Si1 95.09(19) . 3 ?
O5 Na2 Si1 99.42(11) 6_455 3 ?
O5 Na2 Si1 84.54(10) 8_545 3 ?
O2 Na2 Si1 31.77(9) 3 3 ?
O2 Na2 Si1 157.2(3) . 3 ?

O5 Na2 Si1 31.47(9) 5_444 3 ?
O5 Na2 Si1 138.5(4) 7_554 3 ?
O2 Na2 Si1 75.91(13) 2 3 ?
O2 Na2 Si1 98.04(17) 4 3 ?
Si1 Na2 Si1 169.8(4) . 3 ?
Na2 O1 Na2 180.000(1) . 2_556 ?
Na2 O1 Ho1 87.033(5) . . ?
Na2 O1 Ho1 92.967(5) 2_556 . ?
Na2 O1 Ho1 87.034(5) . 3 ?
Na2 O1 Ho1 92.966(5) 2_556 3 ?
Ho1 O1 Ho1 174.067(10) . 3 ?
Na2 O1 Ho1 92.967(5) . 2_556 ?
Na2 O1 Ho1 87.033(5) 2_556 2_556 ?
Ho1 O1 Ho1 90.2 . 2_556 ?
Ho1 O1 Ho1 90.2 3 2_556 ?
Na2 O1 Ho1 92.967(5) . 4_556 ?
Na2 O1 Ho1 87.033(5) 2_556 4_556 ?
Ho1 O1 Ho1 90.153(1) . 4_556 ?
Ho1 O1 Ho1 90.153(1) 3 4_556 ?
Ho1 O1 Ho1 174.067(9) 2_556 4_556 ?
Si1 O2 Ho1 158.8(2) . 2_556 ?
Si1 O2 Ho1 99.41(18) . . ?
Ho1 O2 Ho1 101.72(16) 2_556 . ?
Si1 O2 Na2 90.4(3) . . ?
Ho1 O2 Na2 93.04(19) 2_556 . ?
Ho1 O2 Na2 85.39(18) . . ?
Si1 O2 Na1 92.57(19) . 7 ?
Ho1 O2 Na1 87.39(15) 2_556 7 ?
Ho1 O2 Na1 85.22(13) . 7 ?
Na2 O2 Na1 170.5(2) . 7 ?
Si1 O2 Na2 79.8(2) . 2 ?
Ho1 O2 Na2 101.05(18) 2_556 2 ?
Ho1 O2 Na2 92.47(17) . 2 ?
Na2 O2 Na2 12.0(4) . 2 ?
Na1 O2 Na2 171.54(19) 7 2 ?
Si1 O3 Na1 173.3(3) 2_565 . ?
Si1 O3 Ho1 91.50(15) 2_565 8 ?
Na1 O3 Ho1 92.39(13) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.68(16) 2_565 3_565 ?
Na1 O3 Na1 82.46(13) . 3_565 ?
Ho1 O3 Na1 174.81(17) 8 3_565 ?
Si1 O3 Na1 96.43(19) 2_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.80(17) . 8 ?
Ho1 O3 Na1 93.57(14) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.78(16) 3_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.20(19) 2_565 8_554 ?

Na1 O3 Na1 86.93(16) . 8_554 ?
Ho1 O3 Na1 96.11(15) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.24(15) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.58(17) 8 8_554 ?
Si1 O4 Na1 159.1(3) . . ?
Si1 O4 Ho1 93.16(17) . 7_554 ?
Na1 O4 Ho1 93.28(13) . 7_554 ?
Si1 O4 Ho1 93.16(17) . . ?
Na1 O4 Ho1 98.20(15) . . ?
Ho1 O4 Ho1 128.82(17) 7_554 . ?
Si1 O5 Ho1 142.0(2) 7 8 ?
Si1 O5 Ho1 115.74(19) 7 7_554 ?
Ho1 O5 Ho1 100.01(15) 8 7_554 ?
Si1 O5 Na2 98.0(3) 7 6 ?
Ho1 O5 Na2 90.42(19) 8 6 ?
Ho1 O5 Na2 95.7(2) 7_554 6 ?
Si1 O5 Na2 85.6(2) 7 5 ?
Ho1 O5 Na2 98.16(17) 8 5 ?
Ho1 O5 Na2 104.37(18) 7_554 5 ?
Na2 O5 Na2 12.9(4) 6 5 ?
Si1 O5 Na1 89.58(18) 7 . ?
Ho1 O5 Na1 82.92(13) 8 . ?
Ho1 O5 Na1 81.76(13) 7_554 . ?
Na2 O5 Na1 172.3(3) 6 . ?
Na2 O5 Na1 173.4(2) 5 . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000

_diffrn_reflns_theta_full 36.38

_diffrn_measured_fraction_theta_full 1.000

_refine_diff_density_max 2.348

_refine_diff_density_min -1.398

_refine_diff_density_rms 0.339

#===END

data_Na5Er4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name 'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address

;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208

```
;

_audit_creation_method          SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common           ?
_chemical_melting_point         ?
_chemical_formula_moiety        'Er4 H Na5 O17 Si4'
_chemical_formula_sum           'Er4 H Na5 O17 Si4'
_chemical_formula_weight        1169.36

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Er Er -0.2586 4.9576 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system     tetragonal
_space_group_IT_number          82
_space_group_name_H-M_alt       'I -4'
_space_group_name_Hall          'I -4'

_shelx_space_group_comment
;
The symmetry employed for this shelxl refinement is uniquely defined
by the following loop, which should always be used as a source of
symmetry information in preference to the above space-group names.
They are only intended as comments.
;

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'y, -x, -z'
'-y, x, -z'
'x+1/2, y+1/2, z+1/2'
'-x+1/2, -y+1/2, z+1/2'
```

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

_cell_length_a 11.5731(3)
_cell_length_b 11.5731(3)
_cell_length_c 5.4107(2)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 724.69(5)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 4436
_cell_measurement_theta_min 2.489
_cell_measurement_theta_max 33.100

_exptl_crystal_description plate
_exptl_crystal_colour pink
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 5.359
_exptl_crystal_F_000 1040
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.060
_exptl_crystal_size_mid 0.050
_exptl_crystal_size_min 0.050
_exptl_absorpt_coefficient_mu 23.506
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.333
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.386
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.5819
_exptl_absorpt_correction_T_max 1.0000
_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)
_diffrn_radiation_wavelength 0.71073
_diffrn_radiation_type MoK\a
_diffrn_source ?
_diffrn_measurement_device_type 'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method 'omega and phi scans'

```
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number           10726
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0286
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0369
_diffrn_reflns_limit_h_min       -19
_diffrn_reflns_limit_h_max       19
_diffrn_reflns_limit_k_min       -19
_diffrn_reflns_limit_k_max       17
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       8
_diffrn_reflns_theta_min         2.489
_diffrn_reflns_theta_max         36.281
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.998
_reflns_number_total             1652
_reflns_number_gt                1611
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.841
_reflns_Friedel_fraction_max     1.000
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  'SHELXTL Version 6.14 (Bruker, 2000)'

_refine_special_details
```

;
Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type full
_refine_ls_weighting_scheme calc
_refine_ls_weighting_details
;
w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0395P)^2^+3.8969P]
where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary ?
_atom_sites_solution_secondary ?
_atom_sites_solution_hydrogens .
_refine_ls_hydrogen_treatment undef
_refine_ls_extinction_method none
_refine_ls_extinction_coef .
_refine_ls_abs_structure_details
;
Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack 0.44(3)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns 1652
_refine_ls_number_parameters 69
_refine_ls_number_restraints 0
_refine_ls_R_factor_all 0.0292
_refine_ls_R_factor_gt 0.0279
_refine_ls_wR_factor_ref 0.0660
_refine_ls_wR_factor_gt 0.0655
_refine_ls_goodness_of_fit_ref 1.066
_refine_ls_restrained_S_all 1.066
_refine_ls_shift/su_max 0.000
_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag

```
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Er1 Er 0.11786(3) 0.18444(3) 0.47556(6) 0.01096(9) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.2457(2) 0.1024(2) 0.0111(6) 0.0166(4) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1043(3) 0.4110(3) 0.0044(9) 0.0215(8) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.055(3) 0.033(3) Uiso 0.5 2 d S . P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.031(4) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2026(6) 0.0319(5) 0.2571(13) 0.0174(12) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1086(5) 0.6124(5) 0.0097(13) 0.0162(11) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2006(5) 0.2374(5) 0.0649(13) 0.0157(11) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3128(6) 0.4518(5) 0.2608(12) 0.0153(11) Uani 1 1 d . . . . .

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
Er1 0.00886(13) 0.01120(14) 0.01282(14) 0.00113(11) 0.00076(10) 0.00226(10)
Si1 0.0180(9) 0.0142(9) 0.0176(12) -0.0002(10) 0.0003(9) -0.0010(7)
Na1 0.0181(15) 0.0130(13) 0.033(2) 0.0014(17) 0.0023(16) -0.0001(11)
O1 0.023(4) 0.023(4) 0.047(12) 0.000 0.000 0.000
O2 0.025(3) 0.011(3) 0.016(3) 0.002(2) 0.004(2) 0.000(2)
O3 0.010(2) 0.016(2) 0.022(3) -0.001(2) -0.002(2) -0.0006(17)
O4 0.015(2) 0.012(2) 0.020(3) 0.003(2) 0.002(2) -0.0006(19)
O5 0.021(3) 0.012(3) 0.013(3) 0.000(2) 0.001(2) 0.000(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
Er1 O2 2.267(6) 4_556 ?
Er1 O5 2.308(6) 7_455 ?
Er1 O4 2.338(6) 6 ?
Er1 O2 2.340(7) . ?
Er1 O5 2.348(6) 6 ?
Er1 O3 2.398(5) 7_455 ?
Er1 O4 2.496(7) . ?
Er1 O1 2.5366(3) . ?
Er1 Si1 2.935(2) 6 ?
Er1 Si1 3.067(3) . ?
Er1 Si1 3.390(3) 1_556 ?
Er1 Na1 3.404(3) 6 ?
Si1 O2 1.639(7) . ?
Si1 O5 1.639(7) 6_554 ?
Si1 O3 1.647(6) 4_655 ?
Si1 O4 1.673(6) . ?
Si1 Er1 2.935(2) 6_554 ?
Si1 Na1 3.064(4) 3 ?
Si1 Na2 3.090(2) . ?
Si1 Na2 3.101(3) 3 ?
Si1 Na1 3.188(5) 6 ?
Si1 Na1 3.249(5) 6_554 ?
Si1 Er1 3.389(3) 1_554 ?
Na1 O4 2.322(7) . ?
Na1 O3 2.331(7) . ?
Na1 O3 2.478(6) 2_565 ?
Na1 O3 2.641(9) 7_455 ?
Na1 O2 2.687(8) 6_554 ?
Na1 O3 2.792(9) 7_454 ?
Na1 O5 2.824(8) . ?
Na1 Si1 3.064(4) 4 ?
Na1 Na1 3.172(7) 2_565 ?
Na1 Si1 3.188(5) 6_554 ?
Na1 Si1 3.249(5) 6 ?
Na1 Er1 3.404(3) 6_554 ?
Na2 Na2 0.59(3) 3 ?
Na2 O1 2.410(14) . ?
Na2 O5 2.450(9) 7_455 ?
Na2 O5 2.450(9) 8_545 ?
Na2 O2 2.615(10) 2 ?
Na2 O2 2.615(10) . ?
Na2 O5 2.744(10) 5_444 ?
Na2 O5 2.744(10) 6_554 ?
Na2 O2 2.912(11) 3 ?

```
Na2 O2 2.912(11) 4 ?
Na2 O1 3.001(14) 1_554 ?
O1 Na2 2.410(14) 3_556 ?
O1 Er1 2.5366(3) 2 ?
O1 Er1 2.5366(3) 3_556 ?
O1 Er1 2.5366(3) 4_556 ?
O1 Na2 3.001(14) 1_556 ?
O1 Na2 3.001(14) 3 ?
O2 Er1 2.267(6) 3_556 ?
O2 Na1 2.687(8) 6 ?
O2 Na2 2.912(11) 3 ?
O3 Si1 1.647(6) 3_565 ?
O3 Er1 2.398(5) 8 ?
O3 Na1 2.478(6) 2_565 ?
O3 Na1 2.641(9) 8 ?
O3 Na1 2.792(9) 8_554 ?
O4 Er1 2.338(6) 6_554 ?
O5 Si1 1.639(7) 6 ?
O5 Er1 2.308(6) 8 ?
O5 Er1 2.348(6) 6_554 ?
O5 Na2 2.450(9) 7 ?
O5 Na2 2.744(10) 5 ?

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
O2 Er1 O5 73.5(2) 4_556 7_455 ?
O2 Er1 O4 121.3(2) 4_556 6 ?
O5 Er1 O4 149.0(2) 7_455 6 ?
O2 Er1 O2 135.4(3) 4_556 . ?
O5 Er1 O2 94.6(2) 7_455 . ?
O4 Er1 O2 91.1(2) 6 . ?
O2 Er1 O5 84.5(2) 4_556 6 ?
O5 Er1 O5 131.1(3) 7_455 6 ?
O4 Er1 O5 79.5(2) 6 6 ?
O2 Er1 O5 71.5(2) . 6 ?
O2 Er1 O3 82.3(2) 4_556 7_455 ?
O5 Er1 O3 89.0(2) 7_455 7_455 ?
O4 Er1 O3 68.3(2) 6 7_455 ?
O2 Er1 O3 141.4(2) . 7_455 ?
O5 Er1 O3 131.2(2) 6 7_455 ?
```

O2 Er1 O4 147.0(2) 4_556 . ?
O5 Er1 O4 79.8(2) 7_455 . ?
O4 Er1 O4 75.19(13) 6 . ?
O2 Er1 O4 64.8(2) . . ?
O5 Er1 O4 128.2(2) 6 . ?
O3 Er1 O4 78.1(2) 7_455 . ?
O2 Er1 O1 68.51(19) 4_556 . ?
O5 Er1 O1 65.97(17) 7_455 . ?
O4 Er1 O1 142.95(15) 6 . ?
O2 Er1 O1 67.48(16) . . ?
O5 Er1 O1 65.43(16) 6 . ?
O3 Er1 O1 145.57(14) 7_455 . ?
O4 Er1 O1 117.34(14) . . ?
O2 Er1 Si1 106.94(19) 4_556 6 ?
O5 Er1 Si1 118.19(18) 7_455 6 ?
O4 Er1 Si1 34.70(15) 6 6 ?
O2 Er1 Si1 116.22(17) . 6 ?
O5 Er1 Si1 109.74(17) 6 6 ?
O3 Er1 Si1 34.13(15) 7_455 6 ?
O4 Er1 Si1 69.25(15) . 6 ?
O1 Er1 Si1 173.25(6) . 6 ?
O2 Er1 Si1 156.96(18) 4_556 . ?
O5 Er1 Si1 87.24(17) 7_455 . ?
O4 Er1 Si1 81.71(17) 6 . ?
O2 Er1 Si1 31.81(16) . . ?
O5 Er1 Si1 99.54(17) 6 . ?
O3 Er1 Si1 110.45(17) 7_455 . ?
O4 Er1 Si1 33.01(14) . . ?
O1 Er1 Si1 92.38(4) . . ?
Si1 Er1 Si1 93.13(7) 6 . ?
O2 Er1 Si1 79.31(18) 4_556 1_556 ?
O5 Er1 Si1 147.24(16) 7_455 1_556 ?
O4 Er1 Si1 62.57(17) 6 1_556 ?
O2 Er1 Si1 92.15(18) . 1_556 ?
O5 Er1 Si1 25.93(16) 6 1_556 ?
O3 Er1 Si1 105.25(17) 7_455 1_556 ?
O4 Er1 Si1 131.48(15) . 1_556 ?
O1 Er1 Si1 87.38(4) . 1_556 ?
Si1 Er1 Si1 86.83(7) 6 1_556 ?
Si1 Er1 Si1 113.77(7) . 1_556 ?
O2 Er1 Na1 136.3(2) 4_556 6 ?
O5 Er1 Na1 144.71(18) 7_455 6 ?
O4 Er1 Na1 42.89(15) 6 6 ?
O2 Er1 Na1 51.8(2) . 6 ?
O5 Er1 Na1 55.18(18) 6 6 ?
O3 Er1 Na1 110.35(15) 7_455 6 ?

O4 Er1 Na1 75.99(16) . 6 ?
O1 Er1 Na1 103.44(6) . 6 ?
Si1 Er1 Na1 76.22(7) 6 6 ?
Si1 Er1 Na1 58.75(10) . 6 ?
Si1 Er1 Na1 57.14(9) 1_556 6 ?
O2 Si1 O5 110.8(3) . 6_554 ?
O2 Si1 O3 112.4(4) . 4_655 ?
O5 Si1 O3 111.9(4) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O4 103.2(4) . . ?
O5 Si1 O4 111.9(3) 6_554 . ?
O3 Si1 O4 106.4(3) 4_655 . ?
O2 Si1 Er1 129.4(3) . 6_554 ?
O5 Si1 Er1 119.3(3) 6_554 6_554 ?
O3 Si1 Er1 54.75(19) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Er1 52.7(2) . 6_554 ?
O2 Si1 Na1 79.9(3) . 3 ?
O5 Si1 Na1 86.4(3) 6_554 3 ?
O3 Si1 Na1 53.8(2) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 158.2(3) . 3 ?
Er1 Si1 Na1 108.56(9) 6_554 3 ?
O2 Si1 Er1 48.8(2) . . ?
O5 Si1 Er1 126.6(3) 6_554 . ?
O3 Si1 Er1 121.6(3) 4_655 . ?
O4 Si1 Er1 54.4(2) . . ?
Er1 Si1 Er1 93.03(7) 6_554 . ?
Na1 Si1 Er1 124.44(13) 3 . ?
O2 Si1 Na2 57.8(4) . . ?
O5 Si1 Na2 62.3(4) 6_554 . ?
O3 Si1 Na2 159.9(2) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 93.3(2) . . ?
Er1 Si1 Na2 145.31(8) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.12(9) 3 . ?
Er1 Si1 Na2 67.2(2) . . ?
O2 Si1 Na2 67.9(4) . 3 ?
O5 Si1 Na2 51.7(3) 6_554 3 ?
O3 Si1 Na2 157.3(3) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 95.2(2) . 3 ?
Er1 Si1 Na2 143.78(11) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.75(9) 3 3 ?
Er1 Si1 Na2 76.7(2) . 3 ?
O2 Si1 Na1 57.4(3) . 6 ?
O5 Si1 Na1 153.9(3) 6_554 6 ?
O3 Si1 Na1 61.1(3) 4_655 6 ?
O4 Si1 Na1 94.0(3) . 6 ?
Er1 Si1 Na1 78.63(9) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.19(15) 3 6 ?

Er1 Si1 Na1 65.91(9) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 114.8(3) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 125.2(3) 3 6 ?
O2 Si1 Na1 145.5(3) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 60.4(3) 6_554 6_554 ?
O3 Si1 Na1 54.0(3) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 111.0(3) . 6_554 ?
Er1 Si1 Na1 72.39(8) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.79(14) 3 6_554 ?
Er1 Si1 Na1 164.59(10) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 122.5(3) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 112.0(3) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.40(12) 6 6_554 ?
O2 Si1 Er1 134.5(3) . 1_554 ?
O3 Si1 Er1 111.4(3) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Er1 75.6(2) . 1_554 ?
Er1 Si1 Er1 86.74(7) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Er1 117.90(13) 3 1_554 ?
Er1 Si1 Er1 113.77(7) . 1_554 ?
Na2 Si1 Er1 76.7(2) . 1_554 ?
Na2 Si1 Er1 67.0(2) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Er1 165.28(10) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Er1 61.66(9) 6_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 148.6(3) . . ?
O4 Na1 O3 112.4(2) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 97.5(2) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 76.6(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 94.2(3) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 90.8(2) 2_565 7_455 ?
O4 Na1 O2 83.3(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 75.1(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 149.2(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.2(2) 7_455 6_554 ?
O4 Na1 O3 93.1(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 95.3(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.1(2) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.6(3) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 59.7(2) 6_554 7_454 ?
O4 Na1 O5 70.4(2) . . ?
O3 Na1 O5 79.0(2) . . ?
O3 Na1 O5 149.6(3) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 59.6(2) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 59.5(2) 6_554 . ?
O3 Na1 O5 118.3(2) 7_454 . ?
O4 Na1 Si1 80.68(18) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.89(19) . 4 ?

O3 Na1 Si1 32.45(15) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.08(18) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 142.1(2) 6_554 4 ?
O3 Na1 Si1 87.04(17) 7_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.7(2) . 4 ?
O4 Na1 Na1 158.0(3) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 50.76(16) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 46.76(16) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.76(14) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 118.3(2) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.50(14) 7_454 2_565 ?
O5 Na1 Na1 122.80(19) . 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 79.14(13) 4 2_565 ?
O4 Na1 Si1 79.3(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 92.7(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 123.1(2) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 144.10(18) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 30.92(15) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Si1 31.09(14) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Si1 87.36(17) . 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.82(14) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Si1 116.48(9) 2_565 6_554 ?
O4 Na1 Si1 65.4(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 91.5(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 121.1(2) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 30.30(14) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 89.28(18) 6_554 6 ?
O3 Na1 Si1 144.95(18) 7_454 6 ?
O5 Na1 Si1 30.30(14) . 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.23(14) 4 6 ?
Na1 Na1 Si1 115.95(9) 2_565 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.40(12) 6_554 6 ?
O4 Na1 Er1 43.26(16) . 6_554 ?
O3 Na1 Er1 107.75(18) . 6_554 ?
O3 Na1 Er1 154.69(19) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Er1 89.09(17) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Er1 43.21(15) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Er1 84.04(15) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Er1 43.05(14) . 6_554 ?
Si1 Na1 Er1 122.23(11) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Er1 158.34(18) 2_565 6_554 ?
Si1 Na1 Er1 55.34(7) 6_554 6_554 ?
Si1 Na1 Er1 61.20(8) 6 6_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 114.1(3) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 65.9(3) . 7_455 ?

Na2 Na2 O5 114.1(3) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 65.9(3) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 131.9(7) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 114.8(3) 3 2 ?
O1 Na2 O2 65.2(3) . 2 ?
O5 Na2 O2 75.5(3) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 84.7(3) 8_545 2 ?
Na2 Na2 O2 114.8(3) 3 . ?
O1 Na2 O2 65.2(3) . . ?
O5 Na2 O2 84.7(3) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 75.5(3) 8_545 . ?
O2 Na2 O2 130.4(6) 2 . ?
Na2 Na2 O5 54.6(3) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.4(3) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.66(15) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.66(15) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 60.4(2) 2 5_444 ?
O2 Na2 O5 168.4(5) . 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.6(3) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.4(3) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.66(15) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.66(15) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 168.4(5) 2 6_554 ?
O2 Na2 O5 60.4(2) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 109.2(5) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 O2 54.6(3) 3 3 ?
O1 Na2 O2 125.4(3) . 3 ?
O5 Na2 O2 167.7(5) 7_455 3 ?
O5 Na2 O2 59.7(2) 8_545 3 ?
O2 Na2 O2 104.05(15) 2 3 ?
O2 Na2 O2 104.05(15) . 3 ?
O5 Na2 O2 66.5(3) 5_444 3 ?
O5 Na2 O2 74.2(3) 6_554 3 ?
Na2 Na2 O2 54.6(3) 3 4 ?
O1 Na2 O2 125.4(3) . 4 ?
O5 Na2 O2 59.7(2) 7_455 4 ?
O5 Na2 O2 167.7(5) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 104.05(15) 2 4 ?
O2 Na2 O2 104.05(15) . 4 ?
O5 Na2 O2 74.2(3) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.5(3) 6_554 4 ?
O2 Na2 O2 109.2(5) 3 4 ?
Na2 Na2 O1 0.000(1) 3 1_554 ?
O1 Na2 O1 180.0 . 1_554 ?
O5 Na2 O1 114.1(3) 7_455 1_554 ?
O5 Na2 O1 114.1(3) 8_545 1_554 ?

O2 Na2 O1 114.8(3) 2 1_554 ?
O2 Na2 O1 114.8(3) . 1_554 ?
O5 Na2 O1 54.6(3) 5_444 1_554 ?
O5 Na2 O1 54.6(3) 6_554 1_554 ?
O2 Na2 O1 54.6(3) 3 1_554 ?
O2 Na2 O1 54.6(3) 4 1_554 ?
Na2 Na2 Si1 85.6(3) 3 . ?
O1 Na2 Si1 94.4(3) . . ?
O5 Na2 Si1 84.34(17) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.25(18) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 155.7(5) 2 . ?
O2 Na2 Si1 32.03(15) . . ?
O5 Na2 Si1 139.5(5) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 31.94(15) 6_554 . ?
O2 Na2 Si1 98.5(2) 3 . ?
O2 Na2 Si1 76.35(19) 4 . ?
O1 Na2 Si1 85.6(3) 1_554 . ?
Na2 O1 Na2 180.0 . 3_556 ?
Na2 O1 Er1 87.012(8) . 2 ?
Na2 O1 Er1 92.988(8) 3_556 2 ?
Na2 O1 Er1 92.988(8) . 3_556 ?
Na2 O1 Er1 87.012(8) 3_556 3_556 ?
Er1 O1 Er1 90.156(1) 2 3_556 ?
Na2 O1 Er1 92.988(8) . 4_556 ?
Na2 O1 Er1 87.012(8) 3_556 4_556 ?
Er1 O1 Er1 90.156(1) 2 4_556 ?
Er1 O1 Er1 174.024(15) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Er1 87.012(8) . . ?
Na2 O1 Er1 92.988(8) 3_556 . ?
Er1 O1 Er1 174.024(15) 2 . ?
Er1 O1 Er1 90.157(1) 3_556 . ?
Er1 O1 Er1 90.155(1) 4_556 . ?
Na2 O1 Na2 180.0 . 1_556 ?
Er1 O1 Na2 92.988(8) 2 1_556 ?
Er1 O1 Na2 87.012(8) 3_556 1_556 ?
Er1 O1 Na2 87.012(8) 4_556 1_556 ?
Er1 O1 Na2 92.988(8) . 1_556 ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 3 ?
Er1 O1 Na2 87.012(8) 2 3 ?
Er1 O1 Na2 92.988(8) 3_556 3 ?
Er1 O1 Na2 92.988(8) 4_556 3 ?
Er1 O1 Na2 87.012(8) . 3 ?
Na2 O1 Na2 180.0 1_556 3 ?
Si1 O2 Er1 157.9(4) . 3_556 ?
Si1 O2 Er1 99.4(3) . . ?
Er1 O2 Er1 102.5(3) 3_556 . ?

Si1 O2 Na2 90.2(4) . . ?
Er1 O2 Na2 94.4(3) 3_556 . ?
Er1 O2 Na2 86.7(3) . . ?
Si1 O2 Na1 91.7(3) . 6 ?
Er1 O2 Na1 87.0(3) 3_556 6 ?
Er1 O2 Na1 84.9(2) . 6 ?
Na2 O2 Na1 171.6(4) . 6 ?
Si1 O2 Na2 80.7(3) . 3 ?
Er1 O2 Na2 101.4(3) 3_556 3 ?
Er1 O2 Na2 92.9(3) . 3 ?
Na1 O2 Na2 171.6(3) 6 3 ?
Si1 O3 Na1 174.1(4) 3_565 . ?
Si1 O3 Er1 91.1(2) 3_565 8 ?
Na1 O3 Er1 92.8(2) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.7(3) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.5(2) . 2_565 ?
Er1 O3 Na1 175.1(3) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 95.7(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.6(3) . 8 ?
Er1 O3 Na1 93.1(2) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.5(2) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.8(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 87.3(3) . 8_554 ?
Er1 O3 Na1 96.6(2) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.5(2) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.6(3) 8 8_554 ?
Si1 O4 Na1 159.0(4) . . ?
Si1 O4 Er1 92.6(3) . 6_554 ?
Na1 O4 Er1 93.9(2) . 6_554 ?
Si1 O4 Er1 92.6(3) . . ?
Na1 O4 Er1 98.8(3) . . ?
Er1 O4 Er1 128.6(3) 6_554 . ?
Si1 O5 Er1 141.4(4) 6 8 ?
Si1 O5 Er1 115.3(3) 6 6_554 ?
Er1 O5 Er1 101.0(2) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 96.6(4) 6 7 ?
Er1 O5 Na2 91.4(3) 8 7 ?
Er1 O5 Na2 96.8(3) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na2 85.7(4) 6 5 ?
Er1 O5 Na2 98.1(3) 8 5 ?
Er1 O5 Na2 104.3(3) 6_554 5 ?
Si1 O5 Na1 89.3(3) 6 . ?
Er1 O5 Na1 83.0(2) 8 . ?
Er1 O5 Na1 81.8(2) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 173.9(4) 7 . ?
Na2 O5 Na1 173.4(3) 5 . ?

```
_refine_diff_density_max         2.811
_refine_diff_density_min        -2.088
_refine_diff_density_rms         0.364

#===END

data_Na5Tm4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal          Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name        'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email       zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone       +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax         +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
```

'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety 'H Na5 O17 Si4 Tm4'
_chemical_formula_sum 'H Na5 O17 Si4 Tm4'
_chemical_formula_weight 1175.03

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Tm Tm -0.3139 5.2483 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system tetragonal
_space_group_IT_number 82
_space_group_name_H-M_alt 'I -4'
_space_group_name_Hall 'I -4'

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'

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

_cell_length_a 11.5275(4)
_cell_length_b 11.5275(4)
_cell_length_c 5.3951(4)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 716.92(7)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 3028
_cell_measurement_theta_min 2.498
_cell_measurement_theta_max 32.152

_exptl_crystal_description 'square plate'
_exptl_crystal_colour colorless
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 5.443
_exptl_crystal_F_000 1046
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.040
_exptl_crystal_size_mid 0.040
_exptl_crystal_size_min 0.020
_exptl_absorpt_coefficient_mu 25.100
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.433
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.634
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.480562
_exptl_absorpt_correction_T_max 1.000000
_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)
_diffrn_radiation_wavelength 0.71073

```
_diffrn_radiation_type          MoK\a
_diffrn_source                  ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method      'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number           10447
_diffrn_reflns_av_unetI/netI    0.0372
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0433
_diffrn_reflns_limit_h_min      -19
_diffrn_reflns_limit_h_max      19
_diffrn_reflns_limit_k_min      -18
_diffrn_reflns_limit_k_max      17
_diffrn_reflns_limit_l_min      -8
_diffrn_reflns_limit_l_max      8
_diffrn_reflns_theta_min        2.499
_diffrn_reflns_theta_max        36.344
_diffrn_reflns_theta_full       25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 0.998
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 0.998
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 0.998
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.998
_reflns_number_total            1735
_reflns_number_gt               1655
_reflns_threshold_expression    'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage        0.844
_reflns_Friedel_fraction_max    0.999
_reflns_Friedel_fraction_full   1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection      'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement      'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution   'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
```

```
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0330P)^2^]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.54(3)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1735
_refine_ls_number_parameters     72
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0320
_refine_ls_R_factor_gt           0.0291
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0603
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0593
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.062
_refine_ls_restrained_S_all      1.062
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
```

```
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Tm1 Tm 0.11651(2) 0.18374(3) 0.47653(6) 0.01052(8) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24583(17) 0.10295(17) 0.0115(5) 0.0117(4) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1052(3) 0.4104(3) 0.0060(8) 0.0196(7) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.060(2) 0.031(4) Uani 0.5 2 d S T P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.026(3) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2044(6) 0.0328(5) 0.2586(12) 0.0148(11) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1091(4) 0.6131(4) 0.0116(13) 0.0149(11) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2019(5) 0.2362(4) 0.0662(12) 0.0124(10) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3131(6) 0.4512(5) 0.2633(11) 0.0140(11) Uani 1 1 d . . . . .

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
Tm1 0.00856(13) 0.01085(14) 0.01214(13) 0.00040(10) 0.00040(10) 0.00103(9)
Si1 0.0120(8) 0.0100(8) 0.0131(10) -0.0001(9) -0.0005(9) -0.0008(6)
Na1 0.0168(14) 0.0143(13) 0.028(2) 0.0024(16) 0.0025(15) 0.0016(10)
Na2 0.020(7) 0.028(7) 0.044(12) 0.000 0.000 -0.005(7)
O1 0.021(3) 0.021(3) 0.035(9) 0.000 0.000 0.000
O2 0.021(3) 0.012(3) 0.012(3) 0.003(2) 0.002(2) 0.000(2)
O3 0.011(2) 0.010(2) 0.023(3) -0.003(2) 0.001(2) -0.0006(16)
O4 0.010(2) 0.009(2) 0.017(3) 0.003(2) 0.001(2) 0.0006(16)
O5 0.022(3) 0.010(3) 0.011(3) 0.000(2) 0.002(2) 0.000(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
Tm1 O2 2.250(6) 4_556 ?
Tm1 O5 2.303(6) 7_455 ?
Tm1 O2 2.331(6) . ?
Tm1 O4 2.338(5) 6 ?
Tm1 O5 2.339(6) 6 ?
Tm1 O3 2.390(5) 7_455 ?
Tm1 O4 2.497(6) . ?
Tm1 O1 2.5112(3) . ?
Tm1 Si1 2.933(2) 6 ?
Tm1 Si1 3.063(3) . ?
Tm1 Na2 3.366(9) . ?
Tm1 Si1 3.379(3) 1_556 ?
Si1 O5 1.626(6) 6_554 ?
Si1 O2 1.631(7) . ?
Si1 O3 1.633(6) 4_655 ?
Si1 O4 1.644(6) . ?
Si1 Tm1 2.933(2) 6_554 ?
Si1 Na1 3.061(4) 3 ?
Si1 Na2 3.084(2) . ?
Si1 Na2 3.097(3) 3 ?
Si1 Na1 3.176(5) 6 ?
Si1 Na1 3.227(5) 6_554 ?
Si1 Tm1 3.379(3) 1_554 ?
Na1 O4 2.320(6) . ?
Na1 O3 2.336(6) . ?
Na1 O3 2.485(6) 2_565 ?
Na1 O3 2.614(8) 7_455 ?
Na1 O2 2.651(7) 6_554 ?
Na1 O3 2.803(8) 7_454 ?
Na1 O5 2.809(7) . ?
Na1 Si1 3.061(4) 4 ?
Na1 Si1 3.176(5) 6_554 ?
Na1 Na1 3.185(6) 2_565 ?
Na1 Si1 3.227(5) 6 ?
Na1 Tm1 3.390(3) 6_554 ?
Na2 Na2 0.65(3) 3 ?
Na2 O1 2.371(13) . ?
Na2 O5 2.421(8) 7_455 ?
Na2 O5 2.421(8) 8_545 ?
```

Na2 O2 2.614(9) . ?
Na2 O2 2.615(9) 2 ?
Na2 O5 2.744(10) 5_444 ?
Na2 O5 2.744(10) 6_554 ?
Na2 O2 2.942(10) 3 ?
Na2 O2 2.942(10) 4 ?
Na2 Si1 3.084(2) 2 ?
O1 Na2 2.371(13) 3_556 ?
O1 Tm1 2.5112(3) 2 ?
O1 Tm1 2.5112(3) 4_556 ?
O1 Tm1 2.5112(3) 3_556 ?
O2 Tm1 2.250(6) 3_556 ?
O2 Na1 2.651(7) 6 ?
O2 Na2 2.942(10) 3 ?
O3 Si1 1.633(6) 3_565 ?
O3 Tm1 2.390(5) 8 ?
O3 Na1 2.485(6) 2_565 ?
O3 Na1 2.614(8) 8 ?
O3 Na1 2.803(8) 8_554 ?
O4 Tm1 2.338(5) 6_554 ?
O5 Si1 1.626(6) 6 ?
O5 Tm1 2.303(6) 8 ?
O5 Tm1 2.339(6) 6_554 ?
O5 Na2 2.421(8) 7 ?
O5 Na2 2.744(10) 5 ?

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
O2 Tm1 O5 73.9(2) 4_556 7_455 ?
O2 Tm1 O2 137.0(3) 4_556 . ?
O5 Tm1 O2 95.0(2) 7_455 . ?
O2 Tm1 O4 120.8(2) 4_556 6 ?
O5 Tm1 O4 148.3(2) 7_455 6 ?
O2 Tm1 O4 90.6(2) . 6 ?
O2 Tm1 O5 85.2(2) 4_556 6 ?
O5 Tm1 O5 132.0(3) 7_455 6 ?
O2 Tm1 O5 71.7(2) . 6 ?
O4 Tm1 O5 79.3(2) 6 6 ?
O2 Tm1 O3 82.2(2) 4_556 7_455 ?
O5 Tm1 O3 89.2(2) 7_455 7_455 ?

O2 Tm1 O3 140.1(2) . 7_455 ?
O4 Tm1 O3 67.35(18) 6 7_455 ?
O5 Tm1 O3 130.8(2) 6 7_455 ?
O2 Tm1 O4 147.0(2) 4_556 . ?
O5 Tm1 O4 79.88(19) 7_455 . ?
O2 Tm1 O4 64.05(18) . . ?
O4 Tm1 O4 74.63(12) 6 . ?
O5 Tm1 O4 127.6(2) 6 . ?
O3 Tm1 O4 77.77(19) 7_455 . ?
O2 Tm1 O1 69.38(17) 4_556 . ?
O5 Tm1 O1 66.37(16) 7_455 . ?
O2 Tm1 O1 68.18(15) . . ?
O4 Tm1 O1 143.25(13) 6 . ?
O5 Tm1 O1 65.87(15) 6 . ?
O3 Tm1 O1 146.38(12) 7_455 . ?
O4 Tm1 O1 117.37(13) . . ?
O2 Tm1 Si1 106.54(17) 4_556 6 ?
O5 Tm1 Si1 118.07(17) 7_455 6 ?
O2 Tm1 Si1 115.03(16) . 6 ?
O4 Tm1 Si1 34.04(13) 6 6 ?
O5 Tm1 Si1 109.11(16) 6 6 ?
O3 Tm1 Si1 33.82(13) 7_455 6 ?
O4 Tm1 Si1 68.94(14) . 6 ?
O1 Tm1 Si1 173.41(6) . 6 ?
O2 Tm1 Si1 157.61(17) 4_556 . ?
O5 Tm1 Si1 86.98(16) 7_455 . ?
O2 Tm1 Si1 31.64(15) . . ?
O4 Tm1 Si1 81.59(15) 6 . ?
O5 Tm1 Si1 99.83(16) 6 . ?
O3 Tm1 Si1 109.50(16) 7_455 . ?
O4 Tm1 Si1 32.40(13) . . ?
O1 Tm1 Si1 92.59(4) . . ?
Si1 Tm1 Si1 92.54(6) 6 . ?
O2 Tm1 Na2 100.6(2) 4_556 . ?
O5 Tm1 Na2 45.99(16) 7_455 . ?
O2 Tm1 Na2 50.76(16) . . ?
O4 Tm1 Na2 138.03(17) 6 . ?
O5 Tm1 Na2 99.26(19) 6 . ?
O3 Tm1 Na2 129.80(19) 7_455 . ?
O4 Tm1 Na2 73.6(2) . . ?
O1 Tm1 Na2 44.72(17) . . ?
Si1 Tm1 Na2 141.86(18) 6 . ?
Si1 Tm1 Na2 57.09(13) . . ?
O2 Tm1 Si1 79.88(17) 4_556 1_556 ?
O5 Tm1 Si1 148.10(15) 7_455 1_556 ?
O2 Tm1 Si1 91.92(16) . 1_556 ?

O4 Tm1 Si1 62.43(15) 6 1_556 ?
O5 Tm1 Si1 25.70(15) 6 1_556 ?
O3 Tm1 Si1 105.07(16) 7_455 1_556 ?
O4 Tm1 Si1 130.55(13) . 1_556 ?
O1 Tm1 Si1 87.73(3) . 1_556 ?
Si1 Tm1 Si1 86.41(6) 6 1_556 ?
Si1 Tm1 Si1 113.64(6) . 1_556 ?
Na2 Tm1 Si1 124.90(14) . 1_556 ?
O5 Si1 O2 111.1(3) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 111.7(4) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 112.1(3) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 112.2(3) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 103.1(3) . . ?
O3 Si1 O4 106.3(3) 4_655 . ?
O5 Si1 Tm1 119.7(2) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Tm1 128.8(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Tm1 54.54(18) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Tm1 52.8(2) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 86.1(2) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 79.5(3) . 3 ?
O3 Si1 Na1 54.12(19) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 158.3(2) . 3 ?
Tm1 Si1 Na1 108.66(8) 6_554 3 ?
O5 Si1 Tm1 126.0(2) 6_554 . ?
O2 Si1 Tm1 48.6(2) . . ?
O3 Si1 Tm1 122.3(3) 4_655 . ?
O4 Si1 Tm1 54.5(2) . . ?
Tm1 Si1 Tm1 93.50(6) 6_554 . ?
Na1 Si1 Tm1 124.42(11) 3 . ?
O5 Si1 Na2 62.5(3) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2 58.0(3) . . ?
O3 Si1 Na2 159.8(2) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 93.5(2) . . ?
Tm1 Si1 Na2 145.64(7) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 105.70(8) 3 . ?
Tm1 Si1 Na2 66.4(2) . . ?
O5 Si1 Na2 50.8(3) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2 69.2(3) . 3 ?
O3 Si1 Na2 156.7(3) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 95.7(2) . 3 ?
Tm1 Si1 Na2 143.95(10) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.25(8) 3 3 ?
Tm1 Si1 Na2 76.9(2) . 3 ?
O5 Si1 Na1 154.0(2) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 56.5(3) . 6 ?
O3 Si1 Na1 61.8(3) 4_655 6 ?

O4 Si1 Na1 93.5(2) . 6 ?
Tm1 Si1 Na1 78.60(8) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.67(14) 3 6 ?
Tm1 Si1 Na1 65.79(9) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 114.0(3) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 125.5(3) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.5(3) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 145.4(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 53.7(3) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 111.1(2) . 6_554 ?
Tm1 Si1 Na1 72.41(8) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.83(13) 3 6_554 ?
Tm1 Si1 Na1 164.97(9) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 122.9(3) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 111.3(3) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.83(11) 6 6_554 ?
O2 Si1 Tm1 134.9(3) . 1_554 ?
O3 Si1 Tm1 111.2(3) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Tm1 76.1(2) . 1_554 ?
Tm1 Si1 Tm1 87.29(6) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Tm1 117.59(11) 3 1_554 ?
Tm1 Si1 Tm1 113.64(6) . 1_554 ?
Na2 Si1 Tm1 76.9(2) . 1_554 ?
Na2 Si1 Tm1 66.1(2) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Tm1 165.74(9) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Tm1 61.71(8) 6_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 148.7(3) . . ?
O4 Na1 O3 112.4(2) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 97.34(19) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 76.7(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 94.2(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 90.7(2) 2_565 7_455 ?
O4 Na1 O2 83.5(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 75.2(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 148.9(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.6(2) 7_455 6_554 ?
O4 Na1 O3 93.1(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 95.3(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.0(2) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.7(2) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 59.44(19) 6_554 7_454 ?
O4 Na1 O5 70.5(2) . . ?
O3 Na1 O5 79.0(2) . . ?
O3 Na1 O5 149.3(3) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 59.53(19) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 60.06(19) 6_554 . ?

O3 Na1 O5 118.6(2) 7_454 . ?
O4 Na1 Si1 81.04(16) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.43(18) . 4 ?
O3 Na1 Si1 32.17(13) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.26(16) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 141.9(2) 6_554 4 ?
O3 Na1 Si1 86.84(15) 7_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.99(19) . 4 ?
O4 Na1 Si1 79.38(18) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 92.8(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 122.8(2) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 144.43(17) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 30.85(14) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Si1 30.90(12) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Si1 87.82(16) . 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.58(12) 4 6_554 ?
O4 Na1 Na1 158.0(2) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 50.69(15) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 46.67(14) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.71(13) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 118.08(19) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.39(12) 7_454 2_565 ?
O5 Na1 Na1 122.76(18) . 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 78.75(12) 4 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 116.30(8) 6_554 2_565 ?
O4 Na1 Si1 65.45(18) . 6 ?
O3 Na1 Si1 91.5(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 120.9(2) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 30.21(13) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 89.81(17) 6_554 6 ?
O3 Na1 Si1 145.19(16) 7_454 6 ?
O5 Na1 Si1 30.27(13) . 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.43(13) 4 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.83(11) 6_554 6 ?
Na1 Na1 Si1 115.86(9) 2_565 6 ?
O4 Na1 Tm1 43.51(15) . 6_554 ?
O3 Na1 Tm1 107.62(16) . 6_554 ?
O3 Na1 Tm1 154.98(17) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Tm1 89.22(15) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Tm1 43.27(15) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Tm1 84.09(14) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Tm1 43.07(13) . 6_554 ?
Si1 Na1 Tm1 122.81(10) 4 6_554 ?
Si1 Na1 Tm1 55.50(7) 6_554 6_554 ?
Na1 Na1 Tm1 158.13(17) 2_565 6_554 ?
Si1 Na1 Tm1 61.36(7) 6 6_554 ?

Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 113.1(3) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 66.9(3) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 113.1(3) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 66.9(3) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 133.7(6) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 114.1(3) 3 . ?
O1 Na2 O2 65.9(3) . . ?
O5 Na2 O2 85.4(3) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 76.1(3) 8_545 . ?
Na2 Na2 O2 114.1(3) 3 2 ?
O1 Na2 O2 65.9(3) . 2 ?
O5 Na2 O2 76.1(3) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 85.4(3) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 131.7(6) . 2 ?
Na2 Na2 O5 54.2(3) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.8(3) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.27(15) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.27(15) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 167.4(5) . 5_444 ?
O2 Na2 O5 60.12(19) 2 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.2(3) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.8(3) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.27(15) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.27(15) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 60.12(19) . 6_554 ?
O2 Na2 O5 167.4(5) 2 6_554 ?
O5 Na2 O5 108.5(5) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 O2 54.2(2) 3 3 ?
O1 Na2 O2 125.8(2) . 3 ?
O5 Na2 O2 166.4(5) 7_455 3 ?
O5 Na2 O2 59.2(2) 8_545 3 ?
O2 Na2 O2 103.84(14) . 3 ?
O2 Na2 O2 103.84(14) 2 3 ?
O5 Na2 O2 66.1(3) 5_444 3 ?
O5 Na2 O2 73.8(3) 6_554 3 ?
Na2 Na2 O2 54.2(2) 3 4 ?
O1 Na2 O2 125.8(2) . 4 ?
O5 Na2 O2 59.2(2) 7_455 4 ?
O5 Na2 O2 166.4(5) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 103.84(14) . 4 ?
O2 Na2 O2 103.84(14) 2 4 ?
O5 Na2 O2 73.8(3) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.1(3) 6_554 4 ?
O2 Na2 O2 108.4(5) 3 4 ?
Na2 Na2 Si1 85.1(3) 3 2 ?

O1 Na2 Si1 94.9(3) . 2 ?
O5 Na2 Si1 99.36(17) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.53(15) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 156.7(5) . 2 ?
O2 Na2 Si1 31.93(14) 2 2 ?
O5 Na2 Si1 31.73(14) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 138.6(5) 6_554 2 ?
O2 Na2 Si1 76.11(18) 3 2 ?
O2 Na2 Si1 98.0(2) 4 2 ?
Na2 Na2 Si1 85.1(3) 3 . ?
O1 Na2 Si1 94.9(3) . . ?
O5 Na2 Si1 84.53(15) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.36(17) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 31.93(14) . . ?
O2 Na2 Si1 156.7(5) 2 . ?
O5 Na2 Si1 138.6(5) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 31.73(14) 6_554 . ?
O2 Na2 Si1 98.0(2) 3 . ?
O2 Na2 Si1 76.11(18) 4 . ?
Si1 Na2 Si1 170.2(5) 2 . ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 . ?
Na2 O1 Tm1 92.890(7) 3_556 2 ?
Na2 O1 Tm1 87.110(7) . 2 ?
Na2 O1 Tm1 87.110(7) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Tm1 92.890(7) . 4_556 ?
Tm1 O1 Tm1 90.146(1) 2 4_556 ?
Na2 O1 Tm1 87.110(7) 3_556 3_556 ?
Na2 O1 Tm1 92.890(7) . 3_556 ?
Tm1 O1 Tm1 90.146(1) 2 3_556 ?
Tm1 O1 Tm1 174.220(14) 4_556 3_556 ?
Na2 O1 Tm1 92.890(7) 3_556 . ?
Na2 O1 Tm1 87.110(7) . . ?
Tm1 O1 Tm1 174.220(14) 2 . ?
Tm1 O1 Tm1 90.146(1) 4_556 . ?
Tm1 O1 Tm1 90.145(1) 3_556 . ?
Si1 O2 Tm1 158.3(4) . 3_556 ?
Si1 O2 Tm1 99.8(3) . . ?
Tm1 O2 Tm1 101.8(2) 3_556 . ?
Si1 O2 Na2 90.1(4) . . ?
Tm1 O2 Na2 93.1(3) 3_556 . ?
Tm1 O2 Na2 85.6(3) . . ?
Si1 O2 Na1 92.7(3) . 6 ?
Tm1 O2 Na1 87.5(2) 3_556 6 ?
Tm1 O2 Na1 85.5(2) . 6 ?
Na2 O2 Na1 171.0(3) . 6 ?
Si1 O2 Na2 79.6(3) . 3 ?

Tm1 O2 Na2 100.9(3) 3_556 3 ?
Tm1 O2 Na2 92.5(2) . 3 ?
Na1 O2 Na2 171.6(3) 6 3 ?
Si1 O3 Na1 173.7(4) 3_565 . ?
Si1 O3 Tm1 91.6(2) 3_565 8 ?
Na1 O3 Tm1 92.06(19) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.7(2) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.64(19) . 2_565 ?
Tm1 O3 Na1 174.6(3) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 96.1(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.7(2) . 8 ?
Tm1 O3 Na1 93.4(2) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.6(2) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.3(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 87.3(2) . 8_554 ?
Tm1 O3 Na1 96.2(2) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.5(2) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.7(2) 8 8_554 ?
Si1 O4 Na1 158.7(4) . . ?
Si1 O4 Tm1 93.2(2) . 6_554 ?
Na1 O4 Tm1 93.4(2) . 6_554 ?
Si1 O4 Tm1 93.1(3) . . ?
Na1 O4 Tm1 98.3(2) . . ?
Tm1 O4 Tm1 129.2(3) 6_554 . ?
Si1 O5 Tm1 141.9(4) 6 8 ?
Si1 O5 Tm1 115.7(3) 6 6_554 ?
Tm1 O5 Tm1 100.0(2) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 97.9(4) 6 7 ?
Tm1 O5 Na2 90.8(3) 8 7 ?
Tm1 O5 Na2 96.1(3) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na2 85.7(3) 6 5 ?
Tm1 O5 Na2 98.4(2) 8 5 ?
Tm1 O5 Na2 104.5(3) 6_554 5 ?
Si1 O5 Na1 89.2(3) 6 . ?
Tm1 O5 Na1 82.8(2) 8 . ?
Tm1 O5 Na1 81.83(19) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 172.8(4) 7 . ?
Na2 O5 Na1 173.2(3) 5 . ?

_refine_diff_density_max 2.124
_refine_diff_density_min -1.248
_refine_diff_density_rms 0.316

#===END

data_Na5Yb4(OH)[SiO4]4

_publ_requested_journal Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name 'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina

Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety 'H Na5 O17 Si4 Yb4'
_chemical_formula_sum 'H Na5 O17 Si4 Yb4'
_chemical_formula_weight 1192.48

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Yb Yb -0.3850 5.5486 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system tetragonal
_space_group_IT_number 82
_space_group_name_H-M_alt 'I -4'
_space_group_name_Hall 'I -4'

_shelx_space_group_comment
;
The symmetry employed for this shelxl refinement is uniquely defined
by the following loop, which should always be used as a source of
symmetry information in preference to the above space-group names.
They are only intended as comments.
;

loop_
_space_group_symop_operation_xyz
'x, y, z'
'-x, -y, z'
'y, -x, -z'

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

_cell_length_a 11.5734(3)
_cell_length_b 11.5734(3)
_cell_length_c 5.4067(3)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 724.19(5)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 4372
_cell_measurement_theta_min 2.489
_cell_measurement_theta_max 33.100

_exptl_crystal_description plate
_exptl_crystal_colour colorless
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 5.469
_exptl_crystal_F_000 1056
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.060
_exptl_crystal_size_mid 0.050
_exptl_crystal_size_min 0.050
_exptl_absorpt_coefficient_mu 26.173
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.303
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.354
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min 0.6619
_exptl_absorpt_correction_T_max 1.0000
_exptl_absorpt_process_details 'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 296(2)
_diffrn_radiation_wavelength 0.71073
_diffrn_radiation_type MoK\a

```
_diffrn_source                 ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number           11352
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0321
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0390
_diffrn_reflns_limit_h_min       -18
_diffrn_reflns_limit_h_max       19
_diffrn_reflns_limit_k_min       -19
_diffrn_reflns_limit_k_max       17
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       9
_diffrn_reflns_theta_min         2.489
_diffrn_reflns_theta_max         36.323
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.998
_reflns_number_total             1750
_reflns_number_gt                1673
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.841
_reflns_Friedel_fraction_max     1.000
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.

 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
```

```
_computing_publication_material  various

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0448P)^2^+1.2022P]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.53(3)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1750
_refine_ls_number_parameters     69
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0327
_refine_ls_R_factor_gt           0.0309
_refine_ls_wR_factor_ref         0.0710
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0703
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.061
_refine_ls_restrained_S_all      1.061
_refine_ls_shift/su_max          0.000
_refine_ls_shift/su_mean         0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
```

```
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Yb1 Yb 0.11774(3) 0.18443(3) 0.47596(6) 0.01120(10) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.2455(2) 0.1024(2) 0.0106(6) 0.0139(4) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1047(3) 0.4108(3) 0.0041(9) 0.0194(8) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.051(3) 0.030(3) Uiso 0.5 2 d S . P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.029(4) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2029(6) 0.0318(5) 0.2569(13) 0.0148(12) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1089(5) 0.6127(5) 0.0095(14) 0.0147(12) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2008(5) 0.2366(5) 0.0656(13) 0.0128(11) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3133(6) 0.4508(5) 0.2615(12) 0.0141(12) Uani 1 1 d . . . . .

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
Yb1 0.00910(14) 0.01162(15) 0.01288(15) 0.00110(11) 0.00059(10) 0.00204(10)
Si1 0.0150(9) 0.0125(9) 0.0142(11) 0.0008(9) -0.0003(9) -0.0013(7)
Na1 0.0170(16) 0.0137(14) 0.027(2) 0.0011(17) 0.0025(16) 0.0011(12)
O1 0.021(4) 0.021(4) 0.046(12) 0.000 0.000 0.000
O2 0.024(3) 0.008(3) 0.012(3) 0.000(2) 0.003(2) 0.000(2)
O3 0.008(2) 0.014(2) 0.022(3) -0.003(2) -0.003(2) -0.0015(17)
O4 0.010(2) 0.009(2) 0.019(3) 0.003(2) 0.003(2) -0.0001(18)
O5 0.022(3) 0.010(3) 0.010(3) 0.000(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
Yb1 O2 2.264(7) 4_556 ?
Yb1 O5 2.320(6) 7_455 ?
Yb1 O5 2.339(7) 6 ?
Yb1 O4 2.341(6) 6 ?
Yb1 O2 2.344(7) . ?
Yb1 O3 2.394(6) 7_455 ?
Yb1 O4 2.493(7) . ?
Yb1 O1 2.5357(3) . ?
Yb1 Si1 2.937(2) 6 ?
Yb1 Si1 3.069(3) . ?
Yb1 Si1 3.383(3) 1_556 ?
Yb1 Na1 3.399(4) 6 ?
Si1 O5 1.630(7) 6_554 ?
Si1 O2 1.638(7) . ?
Si1 O3 1.646(7) 4_655 ?
Si1 O4 1.665(6) . ?
Si1 Yb1 2.937(2) 6_554 ?
Si1 Na1 3.067(4) 3 ?
Si1 Na2 3.087(2) . ?
Si1 Na2 3.097(3) 3 ?
Si1 Na1 3.185(5) 6 ?
Si1 Na1 3.244(5) 6_554 ?
Si1 Yb1 3.383(3) 1_554 ?
Na1 O4 2.326(7) . ?
Na1 O3 2.337(7) . ?
Na1 O3 2.487(7) 2_565 ?
Na1 O3 2.641(9) 7_455 ?
Na1 O2 2.681(8) 6_554 ?
Na1 O3 2.788(9) 7_454 ?
Na1 O5 2.824(8) . ?
Na1 Si1 3.067(4) 4 ?
Na1 Na1 3.184(7) 2_565 ?
Na1 Si1 3.185(5) 6_554 ?
Na1 Si1 3.244(5) 6 ?
Na1 Yb1 3.399(4) 6_554 ?
Na2 Na2 0.55(3) 3 ?
Na2 O1 2.428(14) . ?
Na2 O5 2.454(9) 7_455 ?
Na2 O5 2.454(9) 8_545 ?
Na2 O2 2.625(10) 2 ?
Na2 O2 2.625(10) . ?

Na2 O5 2.728(11) 5_444 ?
Na2 O5 2.728(11) 6_554 ?
Na2 O2 2.902(11) 3 ?
Na2 O2 2.902(11) 4 ?
Na2 O1 2.979(14) 1_554 ?
Na2 Si1 3.087(2) 2 ?
O1 Na2 2.428(14) 3_556 ?
O1 Yb1 2.5357(3) 2 ?
O1 Yb1 2.5357(3) 3_556 ?
O1 Yb1 2.5357(3) 4_556 ?
O1 Na2 2.979(14) 1_556 ?
O1 Na2 2.979(14) 3 ?
O2 Yb1 2.264(6) 3_556 ?
O2 Na1 2.681(8) 6 ?
O2 Na2 2.902(11) 3 ?
O3 Si1 1.646(7) 3_565 ?
O3 Yb1 2.394(6) 8 ?
O3 Na1 2.487(7) 2_565 ?
O3 Na1 2.641(9) 8 ?
O3 Na1 2.788(9) 8_554 ?
O4 Yb1 2.341(6) 6_554 ?
O5 Si1 1.630(7) 6 ?
O5 Yb1 2.320(6) 8 ?
O5 Yb1 2.339(7) 6_554 ?
O5 Na2 2.454(9) 7 ?
O5 Na2 2.728(11) 5 ?

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
O2 Yb1 O5 73.5(2) 4_556 7_455 ?
O2 Yb1 O5 84.4(2) 4_556 6 ?
O5 Yb1 O5 131.1(3) 7_455 6 ?
O2 Yb1 O4 121.1(2) 4_556 6 ?
O5 Yb1 O4 149.0(2) 7_455 6 ?
O5 Yb1 O4 79.5(2) 6 6 ?
O2 Yb1 O2 135.6(3) 4_556 . ?
O5 Yb1 O2 94.5(2) 7_455 . ?
O5 Yb1 O2 71.7(2) 6 . ?
O4 Yb1 O2 91.2(2) 6 . ?
O2 Yb1 O3 82.3(2) 4_556 7_455 ?

O5 Yb1 O3 89.2(2) 7_455 7_455 ?
O5 Yb1 O3 130.9(2) 6 7_455 ?
O4 Yb1 O3 68.0(2) 6 7_455 ?
O2 Yb1 O3 141.2(2) . 7_455 ?
O2 Yb1 O4 147.1(2) 4_556 . ?
O5 Yb1 O4 80.0(2) 7_455 . ?
O5 Yb1 O4 128.2(2) 6 . ?
O4 Yb1 O4 75.14(13) 6 . ?
O2 Yb1 O4 64.6(2) . . ?
O3 Yb1 O4 78.3(2) 7_455 . ?
O2 Yb1 O1 68.65(19) 4_556 . ?
O5 Yb1 O1 65.83(18) 7_455 . ?
O5 Yb1 O1 65.56(16) 6 . ?
O4 Yb1 O1 143.13(15) 6 . ?
O2 Yb1 O1 67.51(16) . . ?
O3 Yb1 O1 145.71(14) 7_455 . ?
O4 Yb1 O1 117.19(14) . . ?
O2 Yb1 Si1 106.97(19) 4_556 6 ?
O5 Yb1 Si1 118.31(18) 7_455 6 ?
O5 Yb1 Si1 109.65(17) 6 6 ?
O4 Yb1 Si1 34.48(15) 6 6 ?
O2 Yb1 Si1 116.02(17) . 6 ?
O3 Yb1 Si1 34.08(15) 7_455 6 ?
O4 Yb1 Si1 69.22(15) . 6 ?
O1 Yb1 Si1 173.41(6) . 6 ?
O2 Yb1 Si1 156.99(18) 4_556 . ?
O5 Yb1 Si1 87.20(17) 7_455 . ?
O5 Yb1 Si1 99.76(17) 6 . ?
O4 Yb1 Si1 81.84(17) 6 . ?
O2 Yb1 Si1 31.79(17) . . ?
O3 Yb1 Si1 110.36(18) 7_455 . ?
O4 Yb1 Si1 32.79(14) . . ?
O1 Yb1 Si1 92.33(4) . . ?
Si1 Yb1 Si1 93.01(7) 6 . ?
O2 Yb1 Si1 79.38(18) 4_556 1_556 ?
O5 Yb1 Si1 147.17(17) 7_455 1_556 ?
O5 Yb1 Si1 25.71(16) 6 1_556 ?
O4 Yb1 Si1 62.64(17) 6 1_556 ?
O2 Yb1 Si1 92.08(18) . 1_556 ?
O3 Yb1 Si1 105.25(18) 7_455 1_556 ?
O4 Yb1 Si1 131.30(15) . 1_556 ?
O1 Yb1 Si1 87.42(4) . 1_556 ?
Si1 Yb1 Si1 86.89(7) 6 1_556 ?
Si1 Yb1 Si1 113.76(7) . 1_556 ?
O2 Yb1 Na1 136.42(19) 4_556 6 ?
O5 Yb1 Na1 144.63(18) 7_455 6 ?

O5 Yb1 Na1 55.31(19) 6 6 ?
O4 Yb1 Na1 43.08(16) 6 6 ?
O2 Yb1 Na1 51.75(19) . 6 ?
O3 Yb1 Na1 110.22(16) 7_455 6 ?
O4 Yb1 Na1 75.75(16) . 6 ?
O1 Yb1 Na1 103.45(6) . 6 ?
Si1 Yb1 Na1 76.14(8) 6 6 ?
Si1 Yb1 Na1 58.74(10) . 6 ?
Si1 Yb1 Na1 57.15(9) 1_556 6 ?
O5 Si1 O2 110.9(4) 6_554 . ?
O5 Si1 O3 112.3(4) 6_554 4_655 ?
O2 Si1 O3 112.1(4) . 4_655 ?
O5 Si1 O4 111.7(4) 6_554 . ?
O2 Si1 O4 103.1(4) . . ?
O3 Si1 O4 106.2(3) 4_655 . ?
O5 Si1 Yb1 119.3(3) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Yb1 129.3(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Yb1 54.6(2) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Yb1 52.7(2) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 86.8(3) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na1 79.6(3) . 3 ?
O3 Si1 Na1 54.0(2) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na1 158.1(3) . 3 ?
Yb1 Si1 Na1 108.59(9) 6_554 3 ?
O5 Si1 Yb1 126.4(3) 6_554 . ?
O2 Si1 Yb1 48.9(2) . . ?
O3 Si1 Yb1 121.4(3) 4_655 . ?
O4 Si1 Yb1 54.2(2) . . ?
Yb1 Si1 Yb1 92.98(7) 6_554 . ?
Na1 Si1 Yb1 124.30(12) 3 . ?
O5 Si1 Na2 61.9(4) 6_554 . ?
O2 Si1 Na2 58.3(4) . . ?
O3 Si1 Na2 160.0(2) 4_655 . ?
O4 Si1 Na2 93.4(2) . . ?
Yb1 Si1 Na2 145.39(9) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.02(9) 3 . ?
Yb1 Si1 Na2 67.5(2) . . ?
O5 Si1 Na2 51.9(4) 6_554 3 ?
O2 Si1 Na2 67.7(4) . 3 ?
O3 Si1 Na2 157.7(3) 4_655 3 ?
O4 Si1 Na2 95.2(2) . 3 ?
Yb1 Si1 Na2 143.99(11) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.69(9) 3 3 ?
Yb1 Si1 Na2 76.4(2) . 3 ?
O5 Si1 Na1 154.3(3) 6_554 6 ?
O2 Si1 Na1 57.3(3) . 6 ?

O3 Si1 Na1 61.0(3) 4_655 6 ?
O4 Si1 Na1 93.7(3) . 6 ?
Yb1 Si1 Na1 78.49(9) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.21(15) 3 6 ?
Yb1 Si1 Na1 65.82(9) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 115.0(3) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 124.8(3) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.5(3) 6_554 6_554 ?
O2 Si1 Na1 145.4(3) . 6_554 ?
O3 Si1 Na1 54.1(3) 4_655 6_554 ?
O4 Si1 Na1 111.1(3) . 6_554 ?
Yb1 Si1 Na1 72.42(9) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.94(15) 3 6_554 ?
Yb1 Si1 Na1 164.56(10) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 122.2(3) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 112.4(3) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.47(12) 6 6_554 ?
O2 Si1 Yb1 134.6(3) . 1_554 ?
O3 Si1 Yb1 111.5(3) 4_655 1_554 ?
O4 Si1 Yb1 75.8(3) . 1_554 ?
Yb1 Si1 Yb1 86.86(7) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Yb1 118.02(13) 3 1_554 ?
Yb1 Si1 Yb1 113.76(7) . 1_554 ?
Na2 Si1 Yb1 76.4(2) . 1_554 ?
Na2 Si1 Yb1 67.3(2) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Yb1 165.25(10) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Yb1 61.68(9) 6_554 1_554 ?
O4 Na1 O3 148.7(3) . . ?
O4 Na1 O3 112.3(2) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 97.4(2) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 76.5(2) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 94.2(3) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 90.8(3) 2_565 7_455 ?
O4 Na1 O2 83.6(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 75.0(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 149.2(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.3(2) 7_455 6_554 ?
O4 Na1 O3 93.2(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 95.4(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.0(2) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.6(3) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 59.7(2) 6_554 7_454 ?
O4 Na1 O5 70.3(2) . . ?
O3 Na1 O5 79.2(2) . . ?
O3 Na1 O5 149.5(3) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 59.6(2) 7_455 . ?

O2 Na1 O5 59.7(2) 6_554 . ?
O3 Na1 O5 118.4(2) 7_454 . ?
O4 Na1 Si1 80.63(18) . 4 ?
O3 Na1 Si1 129.8(2) . 4 ?
O3 Na1 Si1 32.39(16) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 89.96(19) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 142.2(2) 6_554 4 ?
O3 Na1 Si1 87.08(17) 7_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.5(2) . 4 ?
O4 Na1 Na1 157.8(3) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 50.76(17) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 46.70(17) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.73(15) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 118.1(2) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.48(14) 7_454 2_565 ?
O5 Na1 Na1 123.0(2) . 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 79.02(14) 4 2_565 ?
O4 Na1 Si1 79.5(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 92.7(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 123.0(2) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 144.19(19) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 30.94(16) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Si1 31.10(15) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Si1 87.46(17) . 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.93(14) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Si1 116.44(10) 2_565 6_554 ?
O4 Na1 Si1 65.4(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 91.5(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 121.1(2) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 30.34(15) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 89.36(18) 6_554 6 ?
O3 Na1 Si1 145.02(19) 7_454 6 ?
O5 Na1 Si1 30.16(15) . 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.20(14) 4 6 ?
Na1 Na1 Si1 115.92(10) 2_565 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.47(12) 6_554 6 ?
O4 Na1 Yb1 43.41(16) . 6_554 ?
O3 Na1 Yb1 107.77(19) . 6_554 ?
O3 Na1 Yb1 154.7(2) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Yb1 89.07(17) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Yb1 43.37(15) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Yb1 84.13(16) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Yb1 42.92(14) . 6_554 ?
Si1 Na1 Yb1 122.35(12) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Yb1 158.36(19) 2_565 6_554 ?
Si1 Na1 Yb1 55.45(8) 6_554 6_554 ?

Si1 Na1 Yb1 61.17(8) 6 6_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 114.4(3) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 65.6(3) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 114.4(3) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 65.6(3) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 131.2(7) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 115.1(3) 3 2 ?
O1 Na2 O2 64.9(3) . 2 ?
O5 Na2 O2 75.0(3) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 84.8(3) 8_545 2 ?
Na2 Na2 O2 115.1(3) 3 . ?
O1 Na2 O2 64.9(3) . . ?
O5 Na2 O2 84.8(3) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 75.0(3) 8_545 . ?
O2 Na2 O2 129.8(7) 2 . ?
Na2 Na2 O5 55.0(3) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.0(3) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.71(15) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 103.71(15) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 60.4(2) 2 5_444 ?
O2 Na2 O5 168.9(5) . 5_444 ?
Na2 Na2 O5 55.0(3) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.0(3) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.71(15) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 103.71(15) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 168.9(5) 2 6_554 ?
O2 Na2 O5 60.4(2) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 110.0(6) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 O2 55.0(3) 3 3 ?
O1 Na2 O2 125.0(3) . 3 ?
O5 Na2 O2 168.3(5) 7_455 3 ?
O5 Na2 O2 59.7(2) 8_545 3 ?
O2 Na2 O2 104.09(15) 2 3 ?
O2 Na2 O2 104.09(15) . 3 ?
O5 Na2 O2 66.6(3) 5_444 3 ?
O5 Na2 O2 74.9(3) 6_554 3 ?
Na2 Na2 O2 55.0(3) 3 4 ?
O1 Na2 O2 125.0(3) . 4 ?
O5 Na2 O2 59.7(2) 7_455 4 ?
O5 Na2 O2 168.3(5) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 104.09(15) 2 4 ?
O2 Na2 O2 104.09(15) . 4 ?
O5 Na2 O2 74.9(3) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.6(3) 6_554 4 ?
O2 Na2 O2 110.0(5) 3 4 ?

Na2 Na2 O1 0.000(1) 3 1_554 ?
O1 Na2 O1 180.0 . 1_554 ?
O5 Na2 O1 114.4(3) 7_455 1_554 ?
O5 Na2 O1 114.4(3) 8_545 1_554 ?
O2 Na2 O1 115.1(3) 2 1_554 ?
O2 Na2 O1 115.1(3) . 1_554 ?
O5 Na2 O1 55.0(3) 5_444 1_554 ?
O5 Na2 O1 55.0(3) 6_554 1_554 ?
O2 Na2 O1 55.0(3) 3 1_554 ?
O2 Na2 O1 55.0(3) 4 1_554 ?
Na2 Na2 Si1 85.9(3) 3 2 ?
O1 Na2 Si1 94.1(3) . 2 ?
O5 Na2 Si1 98.85(19) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.53(17) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 32.06(15) 2 2 ?
O2 Na2 Si1 155.2(5) . 2 ?
O5 Na2 Si1 31.80(15) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 140.2(5) 6_554 2 ?
O2 Na2 Si1 76.45(19) 3 2 ?
O2 Na2 Si1 98.8(2) 4 2 ?
O1 Na2 Si1 85.9(3) 1_554 2 ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 . ?
Na2 O1 Yb1 92.938(8) 3_556 . ?
Na2 O1 Yb1 87.062(8) . . ?
Na2 O1 Yb1 92.938(8) 3_556 2 ?
Na2 O1 Yb1 87.062(8) . 2 ?
Yb1 O1 Yb1 174.124(16) . 2 ?
Na2 O1 Yb1 87.062(8) 3_556 3_556 ?
Na2 O1 Yb1 92.938(8) . 3_556 ?
Yb1 O1 Yb1 90.149(1) . 3_556 ?
Yb1 O1 Yb1 90.151(1) 2 3_556 ?
Na2 O1 Yb1 87.062(8) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Yb1 92.938(8) . 4_556 ?
Yb1 O1 Yb1 90.152(1) . 4_556 ?
Yb1 O1 Yb1 90.151(1) 2 4_556 ?
Yb1 O1 Yb1 174.123(16) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Na2 180.0 . 1_556 ?
Yb1 O1 Na2 92.938(8) . 1_556 ?
Yb1 O1 Na2 92.938(8) 2 1_556 ?
Yb1 O1 Na2 87.062(8) 3_556 1_556 ?
Yb1 O1 Na2 87.062(8) 4_556 1_556 ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 3 ?
Yb1 O1 Na2 87.062(8) . 3 ?
Yb1 O1 Na2 87.062(8) 2 3 ?
Yb1 O1 Na2 92.938(8) 3_556 3 ?
Yb1 O1 Na2 92.938(8) 4_556 3 ?

Na2 O1 Na2 180.0 1_556 3 ?
Si1 O2 Yb1 158.1(4) . 3_556 ?
Si1 O2 Yb1 99.3(3) . . ?
Yb1 O2 Yb1 102.4(3) 3_556 . ?
Si1 O2 Na2 89.7(4) . . ?
Yb1 O2 Na2 94.5(3) 3_556 . ?
Yb1 O2 Na2 86.8(3) . . ?
Si1 O2 Na1 91.8(3) . 6 ?
Yb1 O2 Na1 87.1(3) 3_556 6 ?
Yb1 O2 Na1 84.9(2) . 6 ?
Na2 O2 Na1 171.7(3) . 6 ?
Si1 O2 Na2 80.8(4) . 3 ?
Yb1 O2 Na2 101.1(3) 3_556 3 ?
Yb1 O2 Na2 92.6(3) . 3 ?
Na1 O2 Na2 171.8(3) 6 3 ?
Si1 O3 Na1 174.1(4) 3_565 . ?
Si1 O3 Yb1 91.3(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Yb1 92.6(2) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.6(3) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.5(2) . 2_565 ?
Yb1 O3 Na1 175.0(3) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 95.5(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.6(3) . 8 ?
Yb1 O3 Na1 93.1(2) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.5(3) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.9(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 87.3(3) . 8_554 ?
Yb1 O3 Na1 96.6(2) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.5(2) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.6(3) 8 8_554 ?
Si1 O4 Na1 158.8(4) . . ?
Si1 O4 Yb1 92.8(3) . 6_554 ?
Na1 O4 Yb1 93.5(2) . 6_554 ?
Si1 O4 Yb1 93.0(3) . . ?
Na1 O4 Yb1 98.8(3) . . ?
Yb1 O4 Yb1 128.7(3) 6_554 . ?
Si1 O5 Yb1 141.0(4) 6 8 ?
Si1 O5 Yb1 115.8(3) 6 6_554 ?
Yb1 O5 Yb1 100.8(2) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 96.5(4) 6 7 ?
Yb1 O5 Na2 91.5(3) 8 7 ?
Yb1 O5 Na2 97.3(3) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na2 86.3(4) 6 5 ?
Yb1 O5 Na2 97.7(3) 8 5 ?
Yb1 O5 Na2 104.3(3) 6_554 5 ?
Si1 O5 Na1 89.3(3) 6 . ?

Yb1 O5 Na1 82.7(2) 8 . ?
Yb1 O5 Na1 81.8(2) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 173.8(4) 7 . ?
Na2 O5 Na1 173.6(4) 5 . ?

_refine_diff_density_max 3.098
_refine_diff_density_min -1.765
_refine_diff_density_rms 0.380

#===END

data_Na5Y4(OH)[SiO4]4
_publ_requested_journal Inorg.Chem.
_publ_contact_author_name 'Hans-Conrad zur Loye'
_publ_contact_author_address
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
_publ_contact_author_email zurloye@mailbox.sc.edu
_publ_contact_author_phone +1-803-777-6916
_publ_contact_author_fax +1-803-777-8508
loop_
_publ_author_name
_publ_author_address
'zur Loye, Hans-Conrad'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Latshaw, Allison M.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Chance, W. Michael'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Morrison, Gregory'
;University of South Carolina

Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Smith, Mark D.'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;
'Yeon, Jeongho'
;University of South Carolina
Department of Chemistry and Biochemistry
631 Sumter Street
Columbia, SC 29208
;

_audit_creation_method SHELXL-2013
_chemical_name_systematic
;
?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_melting_point ?
_chemical_formula_moiety ?
_chemical_formula_sum 'H Na5 O17 Si4 Y4'
_chemical_formula_weight 855.96

loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_description
_atom_type_scat_dispersion_real
_atom_type_scat_dispersion_imag
_atom_type_scat_source
O O 0.0106 0.0060 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
H H 0.0000 0.0000 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Na Na 0.0362 0.0249 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Si Si 0.0817 0.0704 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
Y Y -2.7962 3.5667 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_space_group_crystal_system tetragonal
_space_group_IT_number 82
_space_group_name_H-M_alt 'I -4'
_space_group_name_Hall 'I -4'

_shelx_space_group_comment

;
The symmetry employed for this shelxl refinement is uniquely defined
by the following loop, which should always be used as a source of
symmetry information in preference to the above space-group names.
They are only intended as comments.
;

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

_cell_length_a 11.6025(4)
_cell_length_b 11.6025(4)
_cell_length_c 5.4264(5)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90
_cell_angle_gamma 90
_cell_volume 730.49(8)
_cell_formula_units_Z 2
_cell_measurement_temperature 296(2)
_cell_measurement_reflns_used 681
_cell_measurement_theta_min 2.482
_cell_measurement_theta_max 26.484

_exptl_crystal_description 'square plate'
_exptl_crystal_colour colorless
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_method ?
_exptl_crystal_density_diffrn 3.891
_exptl_crystal_F_000 808
_exptl_transmission_factor_min ?
_exptl_transmission_factor_max ?
_exptl_crystal_size_max 0.050
_exptl_crystal_size_mid 0.040
_exptl_crystal_size_min 0.020
_exptl_absorpt_coefficient_mu 16.310
_shelx_estimated_absorpt_T_min 0.496
_shelx_estimated_absorpt_T_max 0.736
_exptl_absorpt_correction_type multi-scan

```
_exptl_absorpt_correction_T_min  0.6282
_exptl_absorpt_correction_T_max  1.0000
_exptl_absorpt_process_details   'SADABS Version 2.05 (Bruker, 2001)'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature      296(2)
_diffrn_radiation_wavelength     0.71073
_diffrn_radiation_type           MoK\a
_diffrn_source                   ?
_diffrn_measurement_device_type  'Bruker SMART APEX CCD diffractometer'
_diffrn_measurement_method       'omega and phi scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_reflns_number            8398
_diffrn_reflns_av_unetI/netI     0.0713
_diffrn_reflns_av_R_equivalents  0.0921
_diffrn_reflns_limit_h_min       -17
_diffrn_reflns_limit_h_max       17
_diffrn_reflns_limit_k_min       -17
_diffrn_reflns_limit_k_max       17
_diffrn_reflns_limit_l_min       -8
_diffrn_reflns_limit_l_max       8
_diffrn_reflns_theta_min         2.483
_diffrn_reflns_theta_max         32.812
_diffrn_reflns_theta_full        25.242
_diffrn_measured_fraction_theta_max 1.000
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.997
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_Laue_measured_fraction_full 0.997
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_max 1.000
_diffrn_reflns_point_group_measured_fraction_full 0.998
_reflns_number_total             1365
_reflns_number_gt                1207
_reflns_threshold_expression     'I > 2\s(I)'
_reflns_Friedel_coverage         0.832
_reflns_Friedel_fraction_max     1.000
_reflns_Friedel_fraction_full    1.000

_reflns_special_details
;
 Reflections were merged by SHELXL according to the crystal
 class for the calculation of statistics and refinement.
```

```
 _reflns_Friedel_fraction is defined as the number of unique
 Friedel pairs measured divided by the number that would be
 possible theoretically, ignoring centric projections and
 systematic absences.
;

_computing_data_collection       'SMART Version 5.625 (Bruker, 2001)'
_computing_cell_refinement       'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_data_reduction        'SAINT-Plus Version 6.45 (Bruker, 2001)'
_computing_structure_solution    'SHELXS97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement  'SHELXL-2013 (Sheldrick, 2013)'
_computing_molecular_graphics    various
_computing_publication_material  'SHELXTL Version 6.14 (Bruker, 2000)'

_refine_special_details
;
 Refined as a 2-component inversion twin.
;
_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type           full
_refine_ls_weighting_scheme      calc
_refine_ls_weighting_details
;
 w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0549P)^2^]
 where P=(Fo^2^+2Fc^2^)/3
;
_atom_sites_solution_primary     ?
_atom_sites_solution_secondary   ?
_atom_sites_solution_hydrogens   .
_refine_ls_hydrogen_treatment    undef
_refine_ls_extinction_method     none
_refine_ls_extinction_coef       .
_refine_ls_abs_structure_details
;
 Refined as an inversion twin.
;
_refine_ls_abs_structure_Flack   0.51(2)
_chemical_absolute_configuration ?
_refine_ls_number_reflns         1365
_refine_ls_number_parameters     72
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0598
_refine_ls_R_factor_gt           0.0476
_refine_ls_wR_factor_ref         0.1049
_refine_ls_wR_factor_gt          0.0998
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.024
```

_refine_ls_restrained_S_all 1.024
_refine_ls_shift/su_max 0.000
_refine_ls_shift/su_mean 0.000

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy
_atom_site_site_symmetry_order
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags_posn
_atom_site_refinement_flags_adp
_atom_site_refinement_flags_occupancy
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Y1 Y 0.11718(6) 0.18419(6) 0.47609(15) 0.0106(2) Uani 1 1 d . . . . .
Si1 Si 0.24579(19) 0.10245(19) 0.0109(6) 0.0148(5) Uani 1 1 d . . . . .
Na1 Na 0.1044(3) 0.4111(3) 0.0051(10) 0.0219(8) Uani 1 1 d . . . . .
Na2 Na 0.0000 0.0000 0.062(2) 0.034(5) Uani 0.5 2 d S T P . .
O1 O 0.0000 0.0000 0.5000 0.026(3) Uani 1 4 d S T P . .
O2 O 0.2039(7) 0.0321(6) 0.2589(13) 0.0171(15) Uani 1 1 d . . . . .
O3 O 0.1088(5) 0.6128(5) 0.0118(15) 0.0155(12) Uani 1 1 d . . . . .
O4 O 0.2017(5) 0.2365(5) 0.0651(13) 0.0150(13) Uani 1 1 d . . . . .
O5 O 0.3117(7) 0.4515(6) 0.2644(12) 0.0140(13) Uani 1 1 d . . . . .

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
Y1 0.0077(3) 0.0094(3) 0.0146(3) 0.0006(3) 0.0005(3) 0.0017(3)
Si1 0.0126(10) 0.0124(10) 0.0193(13) 0.0007(12) -0.0002(12) -0.0013(8)
Na1 0.0163(16) 0.0137(15) 0.036(2) 0.001(2) -0.001(2) 0.0000(12)
Na2 0.035(10) 0.020(9) 0.046(14) 0.000 0.000 -0.003(9)
O1 0.021(4) 0.021(4) 0.035(9) 0.000 0.000 0.000
O2 0.025(4) 0.010(3) 0.016(3) 0.002(3) 0.004(3) 0.001(3)
O3 0.009(2) 0.012(3) 0.026(4) 0.002(3) -0.004(3) 0.0002(19)
O4 0.013(3) 0.011(3) 0.021(4) 0.001(3) 0.001(3) -0.002(2)

O5 0.021(4) 0.007(3) 0.014(3) -0.001(2) 0.002(3) -0.002(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
Y1 O2 2.262(7) 4_556 ?
Y1 O5 2.324(7) 7_455 ?
Y1 O4 2.344(6) 6 ?
Y1 O2 2.349(7) . ?
Y1 O5 2.367(7) 6 ?
Y1 O3 2.403(5) 7_455 ?
Y1 O4 2.511(7) . ?
Y1 O1 2.5363(8) . ?
Y1 Si1 2.948(2) 6 ?
Y1 Si1 3.082(3) . ?
Y1 Na2 3.387(9) . ?
Y1 Si1 3.398(3) 1_556 ?
Si1 O5 1.620(7) 6_554 ?
Si1 O3 1.646(6) 4_655 ?
Si1 O2 1.648(8) . ?
Si1 O4 1.664(7) . ?
Si1 Y1 2.948(2) 6_554 ?
Si1 Na1 3.073(4) 3 ?
Si1 Na2 3.102(3) . ?
Si1 Na2 3.115(3) 3 ?
Si1 Na1 3.200(6) 6 ?
Si1 Na1 3.252(6) 6_554 ?
Si1 Y1 3.398(3) 1_554 ?
Na1 O3 2.342(6) . ?
Na1 O4 2.342(7) . ?
Na1 O3 2.490(6) 2_565 ?
Na1 O3 2.633(9) 7_455 ?
Na1 O2 2.677(9) 6_554 ?

Na1 O3 2.816(9) 7_454 ?
Na1 O5 2.826(8) . ?
Na1 Si1 3.073(4) 4 ?
Na1 Na1 3.182(7) 2_565 ?
Na1 Si1 3.200(6) 6_554 ?
Na1 Si1 3.252(6) 6 ?
Na1 Y1 3.418(3) 6_554 ?
Na2 Na2 0.67(3) 3 ?
Na2 O1 2.378(13) . ?
Na2 O5 2.445(9) 7_455 ?
Na2 O5 2.445(9) 8_545 ?
Na2 O2 2.623(10) . ?
Na2 O2 2.623(10) 2 ?
Na2 O5 2.774(11) 5_444 ?
Na2 O5 2.774(11) 6_554 ?
Na2 O2 2.960(11) 3 ?
Na2 O2 2.960(11) 4 ?
Na2 Si1 3.102(3) 2 ?
O1 Na2 2.378(13) 3_556 ?
O1 Y1 2.5363(8) 2 ?
O1 Y1 2.5363(8) 3_556 ?
O1 Y1 2.5363(8) 4_556 ?
O2 Y1 2.262(7) 3_556 ?
O2 Na1 2.677(9) 6 ?
O2 Na2 2.960(11) 3 ?
O3 Si1 1.647(6) 3_565 ?
O3 Y1 2.403(5) 8 ?
O3 Na1 2.490(6) 2_565 ?
O3 Na1 2.633(9) 8 ?
O3 Na1 2.816(9) 8_554 ?
O4 Y1 2.344(6) 6_554 ?
O5 Si1 1.620(7) 6 ?
O5 Y1 2.324(7) 8 ?
O5 Y1 2.367(7) 6_554 ?
O5 Na2 2.445(9) 7 ?
O5 Na2 2.774(11) 5 ?

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
O2 Y1 O5 73.8(2) 4_556 7_455 ?

O2 Y1 O4 121.0(3) 4_556 6 ?
O5 Y1 O4 148.1(3) 7_455 6 ?
O2 Y1 O2 136.3(3) 4_556 . ?
O5 Y1 O2 95.1(2) 7_455 . ?
O4 Y1 O2 90.8(3) 6 . ?
O2 Y1 O5 85.1(2) 4_556 6 ?
O5 Y1 O5 132.3(3) 7_455 6 ?
O4 Y1 O5 79.2(2) 6 6 ?
O2 Y1 O5 71.5(2) . 6 ?
O2 Y1 O3 82.3(3) 4_556 7_455 ?
O5 Y1 O3 88.7(2) 7_455 7_455 ?
O4 Y1 O3 67.7(2) 6 7_455 ?
O2 Y1 O3 140.7(2) . 7_455 ?
O5 Y1 O3 130.8(2) 6 7_455 ?
O2 Y1 O4 147.0(2) 4_556 . ?
O5 Y1 O4 79.6(2) 7_455 . ?
O4 Y1 O4 74.81(14) 6 . ?
O2 Y1 O4 64.4(2) . . ?
O5 Y1 O4 127.7(2) 6 . ?
O3 Y1 O4 77.9(2) 7_455 . ?
O2 Y1 O1 69.0(2) 4_556 . ?
O5 Y1 O1 66.57(19) 7_455 . ?
O4 Y1 O1 143.20(16) 6 . ?
O2 Y1 O1 67.80(18) . . ?
O5 Y1 O1 65.97(17) 6 . ?
O3 Y1 O1 146.05(14) 7_455 . ?
O4 Y1 O1 117.29(15) . . ?
O2 Y1 Si1 106.7(2) 4_556 6 ?
O5 Y1 Si1 117.7(2) 7_455 6 ?
O4 Y1 Si1 34.29(16) 6 6 ?
O2 Y1 Si1 115.60(19) . 6 ?
O5 Y1 Si1 109.15(18) 6 6 ?
O3 Y1 Si1 33.94(14) 7_455 6 ?
O4 Y1 Si1 69.10(16) . 6 ?
O1 Y1 Si1 173.39(8) . 6 ?
O2 Y1 Si1 157.3(2) 4_556 . ?
O5 Y1 Si1 86.96(17) 7_455 . ?
O4 Y1 Si1 81.70(17) 6 . ?
O2 Y1 Si1 31.83(18) . . ?
O5 Y1 Si1 99.67(19) 6 . ?
O3 Y1 Si1 109.88(19) 7_455 . ?
O4 Y1 Si1 32.62(15) . . ?
O1 Y1 Si1 92.42(5) . . ?
Si1 Y1 Si1 92.85(7) 6 . ?
O2 Y1 Na2 100.3(2) 4_556 . ?
O5 Y1 Na2 46.22(19) 7_455 . ?

O4 Y1 Na2 138.10(19) 6 . ?
O2 Y1 Na2 50.6(2) . . ?
O5 Y1 Na2 99.1(2) 6 . ?
O3 Y1 Na2 129.8(2) 7_455 . ?
O4 Y1 Na2 73.7(2) . . ?
O1 Y1 Na2 44.52(17) . . ?
Si1 Y1 Na2 142.08(18) 6 . ?
Si1 Y1 Na2 57.07(13) . . ?
O2 Y1 Si1 79.7(2) 4_556 1_556 ?
O5 Y1 Si1 148.04(18) 7_455 1_556 ?
O4 Y1 Si1 62.61(18) 6 1_556 ?
O2 Y1 Si1 91.75(19) . 1_556 ?
O5 Y1 Si1 25.47(16) 6 1_556 ?
O3 Y1 Si1 105.36(18) 7_455 1_556 ?
O4 Y1 Si1 130.88(15) . 1_556 ?
O1 Y1 Si1 87.51(4) . 1_556 ?
Si1 Y1 Si1 86.73(8) 6 1_556 ?
Si1 Y1 Si1 113.64(7) . 1_556 ?
Na2 Y1 Si1 124.54(14) . 1_556 ?
O5 Si1 O3 111.5(4) 6_554 4_655 ?
O5 Si1 O2 111.2(3) 6_554 . ?
O3 Si1 O2 112.2(4) 4_655 . ?
O5 Si1 O4 112.4(4) 6_554 . ?
O3 Si1 O4 106.1(3) 4_655 . ?
O2 Si1 O4 103.2(4) . . ?
O5 Si1 Y1 119.6(3) 6_554 6_554 ?
O3 Si1 Y1 54.6(2) 4_655 6_554 ?
O2 Si1 Y1 128.9(3) . 6_554 ?
O4 Si1 Y1 52.6(2) . 6_554 ?
O5 Si1 Na1 86.1(3) 6_554 3 ?
O3 Si1 Na1 53.9(2) 4_655 3 ?
O2 Si1 Na1 79.6(3) . 3 ?
O4 Si1 Na1 158.0(3) . 3 ?
Y1 Si1 Na1 108.50(9) 6_554 3 ?
O5 Si1 Y1 126.5(3) 6_554 . ?
O3 Si1 Y1 122.0(3) 4_655 . ?
O2 Si1 Y1 48.8(3) . . ?
O4 Si1 Y1 54.4(3) . . ?
Y1 Si1 Y1 93.16(8) 6_554 . ?
Na1 Si1 Y1 124.44(14) 3 . ?
O5 Si1 Na2 63.1(4) 6_554 . ?
O3 Si1 Na2 160.0(2) 4_655 . ?
O2 Si1 Na2 57.7(4) . . ?
O4 Si1 Na2 93.4(2) . . ?
Y1 Si1 Na2 145.41(8) 6_554 . ?
Na1 Si1 Na2 106.08(9) 3 . ?

Y1 Si1 Na2 66.4(2) . . ?
O5 Si1 Na2 51.0(4) 6_554 3 ?
O3 Si1 Na2 156.9(3) 4_655 3 ?
O2 Si1 Na2 69.2(4) . 3 ?
O4 Si1 Na2 95.6(2) . 3 ?
Y1 Si1 Na2 143.72(11) 6_554 3 ?
Na1 Si1 Na2 105.65(9) 3 3 ?
Y1 Si1 Na2 77.2(2) . 3 ?
Na2 Si1 Na2 12.4(5) . 3 ?
O5 Si1 Na1 153.7(3) 6_554 6 ?
O3 Si1 Na1 61.6(3) 4_655 6 ?
O2 Si1 Na1 56.7(3) . 6 ?
O4 Si1 Na1 93.7(3) . 6 ?
Y1 Si1 Na1 78.57(9) 6_554 6 ?
Na1 Si1 Na1 69.29(16) 3 6 ?
Y1 Si1 Na1 65.89(10) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 113.9(3) . 6 ?
Na2 Si1 Na1 125.8(3) 3 6 ?
O5 Si1 Na1 60.3(3) 6_554 6_554 ?
O3 Si1 Na1 53.6(3) 4_655 6_554 ?
O2 Si1 Na1 145.4(3) . 6_554 ?
O4 Si1 Na1 111.0(3) . 6_554 ?
Y1 Si1 Na1 72.44(9) 6_554 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 66.73(15) 3 6_554 ?
Y1 Si1 Na1 164.75(10) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 123.2(3) . 6_554 ?
Na2 Si1 Na1 111.4(3) 3 6_554 ?
Na1 Si1 Na1 114.49(12) 6 6_554 ?
O5 Si1 Y1 38.9(2) 6_554 1_554 ?
O3 Si1 Y1 111.2(3) 4_655 1_554 ?
O2 Si1 Y1 134.9(3) . 1_554 ?
O4 Si1 Y1 75.8(3) . 1_554 ?
Y1 Si1 Y1 87.01(7) 6_554 1_554 ?
Na1 Si1 Y1 117.90(14) 3 1_554 ?
Y1 Si1 Y1 113.64(7) . 1_554 ?
Na2 Si1 Y1 77.3(2) . 1_554 ?
Na2 Si1 Y1 66.2(2) 3 1_554 ?
Na1 Si1 Y1 165.47(10) 6 1_554 ?
Na1 Si1 Y1 61.81(10) 6_554 1_554 ?
O3 Na1 O4 148.4(3) . . ?
O3 Na1 O3 97.6(2) . 2_565 ?
O4 Na1 O3 112.4(2) . 2_565 ?
O3 Na1 O3 94.1(3) . 7_455 ?
O4 Na1 O3 76.6(3) . 7_455 ?
O3 Na1 O3 90.7(3) 2_565 7_455 ?
O3 Na1 O2 75.1(2) . 6_554 ?

O4 Na1 O2 83.2(2) . 6_554 ?
O3 Na1 O2 149.3(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 O2 119.2(2) 7_455 6_554 ?
O3 Na1 O3 95.6(3) . 7_454 ?
O4 Na1 O3 92.9(2) . 7_454 ?
O3 Na1 O3 92.3(3) 2_565 7_454 ?
O3 Na1 O3 169.4(3) 7_455 7_454 ?
O2 Na1 O3 59.6(2) 6_554 7_454 ?
O3 Na1 O5 78.9(2) . . ?
O4 Na1 O5 70.3(2) . . ?
O3 Na1 O5 149.0(3) 2_565 . ?
O3 Na1 O5 59.2(2) 7_455 . ?
O2 Na1 O5 60.0(2) 6_554 . ?
O3 Na1 O5 118.7(2) 7_454 . ?
O3 Na1 Si1 129.90(19) . 4 ?
O4 Na1 Si1 80.83(18) . 4 ?
O3 Na1 Si1 32.32(14) 2_565 4 ?
O3 Na1 Si1 90.13(18) 7_455 4 ?
O2 Na1 Si1 142.0(2) 6_554 4 ?
O3 Na1 Si1 87.01(17) 7_454 4 ?
O5 Na1 Si1 141.5(2) . 4 ?
O3 Na1 Na1 50.85(16) . 2_565 ?
O4 Na1 Na1 158.1(3) . 2_565 ?
O3 Na1 Na1 46.83(15) 2_565 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.89(14) 7_455 2_565 ?
O2 Na1 Na1 118.2(2) 6_554 2_565 ?
O3 Na1 Na1 94.57(13) 7_454 2_565 ?
O5 Na1 Na1 122.7(2) . 2_565 ?
Si1 Na1 Na1 79.05(13) 4 2_565 ?
O3 Na1 Si1 92.9(2) . 6_554 ?
O4 Na1 Si1 79.2(2) . 6_554 ?
O3 Na1 Si1 123.1(3) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 144.08(18) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Si1 30.96(17) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Si1 30.93(14) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Si1 87.88(17) . 6_554 ?
Si1 Na1 Si1 111.71(14) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Si1 116.45(10) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Si1 91.3(2) . 6 ?
O4 Na1 Si1 65.4(2) . 6 ?
O3 Na1 Si1 120.9(3) 2_565 6 ?
O3 Na1 Si1 30.22(14) 7_455 6 ?
O2 Na1 Si1 89.37(19) 6_554 6 ?
O3 Na1 Si1 144.88(17) 7_454 6 ?
O5 Na1 Si1 29.88(15) . 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.27(15) 4 6 ?

Na1 Na1 Si1 115.99(9) 2_565 6 ?
Si1 Na1 Si1 114.50(12) 6_554 6 ?
O3 Na1 Y1 107.65(17) . 6_554 ?
O4 Na1 Y1 43.19(16) . 6_554 ?
O3 Na1 Y1 154.65(18) 2_565 6_554 ?
O3 Na1 Y1 88.99(17) 7_455 6_554 ?
O2 Na1 Y1 43.24(17) 6_554 6_554 ?
O3 Na1 Y1 83.96(15) 7_454 6_554 ?
O5 Na1 Y1 43.28(15) . 6_554 ?
Si1 Na1 Y1 122.34(11) 4 6_554 ?
Na1 Na1 Y1 158.32(17) 2_565 6_554 ?
Si1 Na1 Y1 55.40(8) 6_554 6_554 ?
Si1 Na1 Y1 61.20(8) 6 6_554 ?
Na2 Na2 O1 180.0 3 . ?
Na2 Na2 O5 112.7(3) 3 7_455 ?
O1 Na2 O5 67.3(3) . 7_455 ?
Na2 Na2 O5 112.7(3) 3 8_545 ?
O1 Na2 O5 67.3(3) . 8_545 ?
O5 Na2 O5 134.6(6) 7_455 8_545 ?
Na2 Na2 O2 114.1(3) 3 . ?
O1 Na2 O2 65.9(3) . . ?
O5 Na2 O2 85.6(3) 7_455 . ?
O5 Na2 O2 76.2(3) 8_545 . ?
Na2 Na2 O2 114.1(3) 3 2 ?
O1 Na2 O2 65.9(3) . 2 ?
O5 Na2 O2 76.2(3) 7_455 2 ?
O5 Na2 O2 85.6(3) 8_545 2 ?
O2 Na2 O2 131.9(6) . 2 ?
Na2 Na2 O5 54.4(3) 3 5_444 ?
O1 Na2 O5 125.6(3) . 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.97(15) 7_455 5_444 ?
O5 Na2 O5 102.97(15) 8_545 5_444 ?
O2 Na2 O5 167.5(5) . 5_444 ?
O2 Na2 O5 59.9(2) 2 5_444 ?
Na2 Na2 O5 54.4(3) 3 6_554 ?
O1 Na2 O5 125.6(3) . 6_554 ?
O5 Na2 O5 102.97(15) 7_455 6_554 ?
O5 Na2 O5 102.97(15) 8_545 6_554 ?
O2 Na2 O5 59.9(2) . 6_554 ?
O2 Na2 O5 167.5(5) 2 6_554 ?
O5 Na2 O5 108.8(5) 5_444 6_554 ?
Na2 Na2 O2 54.0(2) 3 3 ?
O1 Na2 O2 126.0(2) . 3 ?
O5 Na2 O2 165.9(5) 7_455 3 ?
O5 Na2 O2 58.9(2) 8_545 3 ?
O2 Na2 O2 103.87(16) . 3 ?

O2 Na2 O2 103.87(16) 2 3 ?
O5 Na2 O2 66.1(3) 5_444 3 ?
O5 Na2 O2 73.8(3) 6_554 3 ?
Na2 Na2 O2 54.0(2) 3 4 ?
O1 Na2 O2 126.0(2) . 4 ?
O5 Na2 O2 58.9(2) 7_455 4 ?
O5 Na2 O2 165.9(5) 8_545 4 ?
O2 Na2 O2 103.87(15) . 4 ?
O2 Na2 O2 103.87(16) 2 4 ?
O5 Na2 O2 73.8(3) 5_444 4 ?
O5 Na2 O2 66.1(3) 6_554 4 ?
O2 Na2 O2 108.0(5) 3 4 ?
Na2 Na2 Si1 84.9(3) 3 . ?
O1 Na2 Si1 95.1(3) . . ?
O5 Na2 Si1 84.48(17) 7_455 . ?
O5 Na2 Si1 99.49(19) 8_545 . ?
O2 Na2 Si1 32.08(17) . . ?
O2 Na2 Si1 156.9(5) 2 . ?
O5 Na2 Si1 138.6(5) 5_444 . ?
O5 Na2 Si1 31.39(15) 6_554 . ?
O2 Na2 Si1 98.0(2) 3 . ?
O2 Na2 Si1 75.93(19) 4 . ?
Na2 Na2 Si1 84.9(3) 3 2 ?
O1 Na2 Si1 95.1(3) . 2 ?
O5 Na2 Si1 99.49(19) 7_455 2 ?
O5 Na2 Si1 84.48(17) 8_545 2 ?
O2 Na2 Si1 156.9(5) . 2 ?
O2 Na2 Si1 32.08(17) 2 2 ?
O5 Na2 Si1 31.38(15) 5_444 2 ?
O5 Na2 Si1 138.6(5) 6_554 2 ?
O2 Na2 Si1 75.93(19) 3 2 ?
O2 Na2 Si1 98.0(2) 4 2 ?
Si1 Na2 Si1 169.8(5) . 2 ?
Na2 O1 Na2 180.0 3_556 . ?
Na2 O1 Y1 92.932(18) 3_556 2 ?
Na2 O1 Y1 87.068(18) . 2 ?
Na2 O1 Y1 87.068(18) 3_556 3_556 ?
Na2 O1 Y1 92.932(18) . 3_556 ?
Y1 O1 Y1 90.150(2) 2 3_556 ?
Na2 O1 Y1 87.068(18) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Y1 92.932(18) . 4_556 ?
Y1 O1 Y1 90.150(2) 2 4_556 ?
Y1 O1 Y1 174.14(4) 3_556 4_556 ?
Na2 O1 Y1 92.932(18) 3_556 . ?
Na2 O1 Y1 87.068(18) . . ?
Y1 O1 Y1 174.14(4) 2 . ?

Y1 O1 Y1 90.149(2) 3_556 . ?
Y1 O1 Y1 90.151(2) 4_556 . ?
Si1 O2 Y1 158.2(4) . 3_556 ?
Si1 O2 Y1 99.4(3) . . ?
Y1 O2 Y1 102.3(3) 3_556 . ?
Si1 O2 Na2 90.2(4) . . ?
Y1 O2 Na2 93.4(3) 3_556 . ?
Y1 O2 Na2 85.7(3) . . ?
Si1 O2 Na1 92.3(3) . 6 ?
Y1 O2 Na1 87.4(3) 3_556 6 ?
Y1 O2 Na1 85.4(2) . 6 ?
Na2 O2 Na1 171.0(4) . 6 ?
Si1 O2 Na2 79.5(4) . 3 ?
Y1 O2 Na2 101.3(3) 3_556 3 ?
Y1 O2 Na2 92.7(3) . 3 ?
Na2 O2 Na2 11.9(5) . 3 ?
Na1 O2 Na2 171.2(3) 6 3 ?
Si1 O3 Na1 173.6(5) 3_565 . ?
Si1 O3 Y1 91.5(2) 3_565 8 ?
Na1 O3 Y1 92.5(2) . 8 ?
Si1 O3 Na1 93.7(3) 3_565 2_565 ?
Na1 O3 Na1 82.3(2) . 2_565 ?
Y1 O3 Na1 174.8(3) 8 2_565 ?
Si1 O3 Na1 96.2(3) 3_565 8 ?
Na1 O3 Na1 88.6(3) . 8 ?
Y1 O3 Na1 93.5(2) 8 8 ?
Na1 O3 Na1 85.6(3) 2_565 8 ?
Si1 O3 Na1 87.5(3) 3_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 87.0(3) . 8_554 ?
Y1 O3 Na1 96.3(3) 8 8_554 ?
Na1 O3 Na1 84.3(3) 2_565 8_554 ?
Na1 O3 Na1 169.4(3) 8 8_554 ?
Si1 O4 Na1 158.8(4) . . ?
Si1 O4 Y1 93.1(3) . 6_554 ?
Na1 O4 Y1 93.7(2) . 6_554 ?
Si1 O4 Y1 92.9(3) . . ?
Na1 O4 Y1 98.3(3) . . ?
Y1 O4 Y1 128.9(3) 6_554 . ?
Si1 O5 Y1 142.3(4) 6 8 ?
Si1 O5 Y1 115.6(3) 6 6_554 ?
Y1 O5 Y1 99.9(3) 8 6_554 ?
Si1 O5 Na2 98.0(4) 6 7 ?
Y1 O5 Na2 90.4(3) 8 7 ?
Y1 O5 Na2 95.6(3) 6_554 7 ?
Si1 O5 Na2 85.6(4) 6 5 ?
Y1 O5 Na2 98.2(3) 8 5 ?

Y1 O5 Na2 104.2(3) 6_554 5 ?
Na2 O5 Na2 12.9(5) 7 5 ?
Si1 O5 Na1 89.8(3) 6 . ?
Y1 O5 Na1 82.8(2) 8 . ?
Y1 O5 Na1 81.8(2) 6_554 . ?
Na2 O5 Na1 172.2(4) 7 . ?
Na2 O5 Na1 173.6(4) 5 . ?

_refine_diff_density_max 1.106
_refine_diff_density_min -1.178
_refine_diff_density_rms 0.229