

Appendix D1: Refined Atomic Parameters, Bond Lengths and Angles for As-made TNU-9 with Energy Minimised Template Locations

Atom	x	y	z	frac	Uiso	Mult
Si1	0.1017(4)	0.1881(7)	0.7077(6)	1	0.0183(11)	8
Si2	0.0033(4)	0.3105(7)	0.1449(6)	1	0.0183(11)	8
Si3	0.1528(4)	0.1861(7)	0.1679(6)	1	0.0183(11)	8
Si4	0.0900(5)	0.1201(7)	0.9296(6)	1	0.0183(11)	8
Si5	0.1059(4)	0.3092(7)	0.0853(6)	1	0.0183(11)	8
Si6	0.0048(5)	0.0769(5)	0.1467(7)	1	0.0183(11)	8
Si7	0.1041(5)	0.4253(5)	0.7112(7)	1	0.0183(11)	8
Si8	0.1511(4)	0.4243(5)	0.1716(7)	1	0.0183(11)	8
Si9	0.1020(5)	0.0774(5)	0.0850(7)	1	0.0183(11)	8
Si10	0.2524(4)	0.3799(7)	0.2277(7)	1	0.0183(11)	8
Si11	0.1465(5)	0.0770(5)	0.8033(7)	1	0.0183(11)	8
Si12	0.1665(4)	0.3830(7)	0.4393(6)	1	0.0183(11)	8
Si13	0.1009(5)	0.3796(7)	0.3055(6)	1	0.0183(11)	8
Si14	0.2372(5)	0.0746(5)	0.6154(7)	1	0.0183(11)	8
Si15	0.0002(5)	0.4222(5)	0.2571(7)	1	0.0183(11)	8
Si16	1.0010(4)	0.1902(7)	0.2531(6)	1	0.0183(11)	8
Si17	0.2368(4)	0.3107(7)	0.6214(7)	1	0.0183(11)	8
Si18	0.1419(4)	0.3093(6)	0.7995(6)	1	0.0183(11)	8
Si19	0.1643(4)	0.2225(7)	0.4346(6)	1	0.0183(11)	8
Si20	0.1028(4)	0.2191(7)	0.3042(6)	1	0.0183(11)	8
Si21	0.1674(5)	0.4249(5)	0.5865(7)	1	0.0183(11)	8
Si22	0.0857(5)	0.2787(7)	0.9314(6)	1	0.0183(11)	8
Si23	0.1658(4)	0.1888(7)	0.5840(7)	1	0.0183(11)	8
Si24	0.2529(4)	0.2199(7)	0.2233(7)	1	0.0183(11)	8
O1	0.0404(6)	0.0897(11)	0.9036(11)	1	0.0169(19)	8
O2	0.0850(8)	0.1993(6)	0.9320(12)	1	0.0169(19)	8
O3	0.1282(7)	0.0975(12)	0.8769(8)	1	0.0169(19)	8
O4	0.1045(7)	0.0932(12)	0.0048(6)	1	0.0169(19)	8
O5	0.1225(6)	0.1889(13)	0.6330(7)	1	0.0169(19)	8
O6	0.1217(9)	0.2510(9)	0.7507(12)	1	0.0169(19)	8
O7	0.1191(8)	0.1204(9)	0.7450(11)	1	0.0169(19)	8
O8	0.0449(4)	0.1928(13)	0.7016(9)	1	0.0169(19)	8
O9	0.0508(5)	0.0978(12)	0.1081(11)	1	0.0169(19)	8
O10	0.1094(11)	0	0.0996(16)	1	0.0169(19)	4
O11	0.1417(6)	0.1173(8)	0.1289(11)	1	0.0169(19)	8
O12	0.2015(5)	0.0923(12)	0.8055(12)	1	0.0169(19)	8
O13	0.1365(11)	0	0.7899(17)	1	0.0169(19)	4
O14	0.1199(7)	0.3039(12)	0.8735(8)	1	0.0169(19)	8
O15	0.1060(7)	0.3055(11)	0.0038(6)	1	0.0169(19)	8
O16	0.0347(5)	0.3088(11)	0.9175(8)	1	0.0169(19)	8
O17	0.2092(4)	0.1926(11)	0.1772(10)	1	0.0169(19)	8
O18	0.3016(4)	0.1948(12)	0.1935(11)	1	0.0169(19)	8
O19	0.2484(8)	0.1901(12)	0.2985(6)	1	0.0169(19)	8
O20	0.2531(8)	0.3000(6)	0.2255(12)	1	0.0169(19)	8
O21	0.0523(4)	0.3104(14)	0.1076(10)	1	0.0169(19)	8
O22	0.9994(9)	0.2474(10)	0.1951(10)	1	0.0169(19)	8
O23	-0.0014(9)	0.3773(9)	0.1890(10)	1	0.0169(19)	8
O24	0.1324(8)	0.2459(9)	0.1201(11)	1	0.0169(19)	8
O25	0.1302(7)	0.1868(11)	0.2421(8)	1	0.0169(19)	8

O26	0.1303(8)	0.3775(8)	0.1113(10)	1	0.0169(19)	8
O27	0.0071(12)	0	0.1668(15)	1	0.0169(19)	4
O28	1.0005(8)	0.1197(8)	0.2150(9)	1	0.0169(19)	8
O29	0.1274(7)	0.4109(14)	0.6397(9)	1	0.0169(19)	8
O30	0.0484(4)	0.4115(14)	0.7053(11)	1	0.0169(19)	8
O31	0.1287(8)	0.3807(8)	0.7693(10)	1	0.0169(19)	8
O32	0.1160(12)	0.5	0.7328(17)	1	0.0169(19)	4
O33	0.1243(8)	0.4124(11)	0.2408(8)	1	0.0169(19)	8
O34	0.1455(10)	0.5	0.1478(14)	1	0.0169(19)	4
O35	0.2061(5)	0.4074(12)	0.1867(11)	1	0.0169(19)	8
O36	0.2507(9)	0.4051(12)	0.3060(7)	1	0.0169(19)	8
O37	0.1690(8)	0.3025(6)	0.4415(12)	1	0.0169(19)	8
O38	0.2171(5)	0.4138(11)	0.4269(11)	1	0.0169(19)	8
O39	0.1485(6)	0.4111(12)	0.5098(6)	1	0.0169(19)	8
O40	0.1284(7)	0.4003(10)	0.3767(8)	1	0.0169(19)	8
O41	0.0463(5)	0.4033(12)	0.3047(10)	1	0.0169(19)	8
O42	0.1040(8)	0.2994(6)	0.2966(11)	1	0.0169(19)	8
O43	0.1932(7)	0.1190(8)	0.5888(12)	1	0.0169(19)	8
O44	0.2195(9)	0	0.6103(17)	1	0.0169(19)	4
O45	0.0031(12)	0.5	0.2362(16)	1	0.0169(19)	4
O46	0.0486(4)	0.1950(12)	0.3012(10)	1	0.0169(19)	8
O47	0.2126(6)	0.3810(8)	0.6063(12)	1	0.0169(19)	8
O48	0.2844(5)	0.3063(12)	0.5799(10)	1	0.0169(19)	8
O49	0.2006(7)	0.2505(9)	0.6029(13)	1	0.0169(19)	8
O50	0.1460(6)	0.1949(12)	0.5059(6)	1	0.0169(19)	8
O51	0.1271(6)	0.1984(10)	0.3759(7)	1	0.0169(19)	8
O52	0.1843(11)	0.5	0.5940(18)	1	0.0169(19)	4
1N1	0.4924	0.1431	0.5019	0.25	0.024(10)	8
1C1	0.4522	0.1892	0.4815	0.25	0.024(10)	8
1H1C1	0.4221	0.1823	0.5155	0.25	0.024(10)	8
1H2C1	0.4379	0.1806	0.4286	0.25	0.024(10)	8
1C2	0.4705	0.2610	0.4915	0.25	0.024(10)	8
1H1C2	0.4825	0.2816	0.4425	0.25	0.024(10)	8
1H2C2	0.4427	0.2950	0.5094	0.25	0.024(10)	8
1C3	0.5121	0.2550	0.5437	0.25	0.024(10)	8
1H1C3	0.5059	0.2848	0.5899	0.25	0.024(10)	8
1H2C3	0.5450	0.2744	0.5218	0.25	0.024(10)	8
1C4	0.5170	0.1800	0.5601	0.25	0.024(10)	8
1H1C4	0.5545	0.1651	0.5686	0.25	0.024(10)	8
1H2C4	0.4996	0.1700	0.6090	0.25	0.024(10)	8
1C5	0.4739	0.0747	0.5226	0.25	0.024(10)	8
1H1C5	0.4500	0.0818	0.5655	0.25	0.024(10)	8
1H2C5	0.4498	0.0549	0.4811	0.25	0.024(10)	8
1C6	0.5092	0.0181	0.5455	0.25	0.024(10)	8
1H1C6	0.5404	0.0409	0.5727	0.25	0.024(10)	8
1H2C6	0.4927	-0.0117	0.5858	0.25	0.024(10)	8
1C7	0.5272	-0.0303	0.4897	0.25	0.024(10)	8
1H1C7	0.5393	-0.0008	0.4459	0.25	0.024(10)	8
1H2C7	0.5600	-0.0544	0.5102	0.25	0.024(10)	8
1C8	0.4925	-0.0853	0.4612	0.25	0.024(10)	8
1H1C8	0.4992	-0.0900	0.4060	0.25	0.024(10)	8
1H2C8	0.4558	-0.0654	0.4610	0.25	0.024(10)	8
1C9	0.4842	-0.1505	0.5674	0.25	0.024(10)	8
1H1C9	0.4509	-0.1231	0.5750	0.25	0.024(10)	8
1H2C9	0.4810	-0.1997	0.5926	0.25	0.024(10)	8

1H3C9	0.5129	-0.1235	0.5955	0.25	0.024(10)	8
1C10	0.4576	-0.1999	0.4571	0.25	0.024(10)	8
1H1C10	0.4558	-0.1911	0.4009	0.25	0.024(10)	8
1H2C10	0.4212	-0.1916	0.4745	0.25	0.024(10)	8
1C11	0.4743	-0.2719	0.4706	0.25	0.024(10)	8
1H1C11	0.4641	-0.3062	0.4282	0.25	0.024(10)	8
1H2C11	0.4582	-0.2921	0.5170	0.25	0.024(10)	8
1C12	0.5281	-0.2665	0.4822	0.25	0.024(10)	8
1H1C12	0.5470	-0.2935	0.4423	0.25	0.024(10)	8
1H2C12	0.5394	-0.2894	0.5319	0.25	0.024(10)	8
1C13	0.5394	-0.1912	0.4819	0.25	0.024(10)	8
1H1C13	0.5676	-0.1783	0.5209	0.25	0.024(10)	8
1H2C13	0.5539	-0.1781	0.4316	0.25	0.024(10)	8
1C14	0.5246	0.1351	0.4432	0.25	0.024(10)	8
1H1C14	0.5068	0.1054	0.4021	0.25	0.024(10)	8
1H2C14	0.5352	0.1832	0.4204	0.25	0.024(10)	8
1H3C14	0.5577	0.1088	0.4590	0.25	0.024(10)	8
2N1	0.5729	0.5093	0.4091	0.25	0.024(10)	8
2C1	0.6098	0.5425	0.4561	0.25	0.024(10)	8
2H1C1	0.6028	0.5361	0.5112	0.25	0.024(10)	8
2H2C2	0.6110	0.5971	0.4483	0.25	0.024(10)	8
2C2	0.6583	0.5116	0.4421	0.25	0.024(10)	8
2H1C2	0.6680	0.4739	0.4818	0.25	0.024(10)	8
2H2C2	0.6872	0.5489	0.4429	0.25	0.024(10)	8
2C3	0.6512	0.4779	0.3724	0.25	0.024(10)	8
2H1C3	0.6761	0.4362	0.3650	0.25	0.024(10)	8
2H2C3	0.6560	0.5141	0.3304	0.25	0.024(10)	8
2C4	0.5995	0.4549	0.3739	0.25	0.024(10)	8
2H1C4	0.5847	0.4427	0.3218	0.25	0.024(10)	8
2H2C4	0.5984	0.4076	0.4032	0.25	0.024(10)	8
2C5	0.5326	0.4797	0.4485	0.25	0.024(10)	8
2H1C5	0.5094	0.4501	0.4127	0.25	0.024(10)	8
2H2C5	0.5474	0.4421	0.4853	0.25	0.024(10)	8
2C6	0.5006	0.5277	0.4891	0.25	0.024(10)	8
2H1C6	0.5224	0.5581	0.5258	0.25	0.024(10)	8
2H2C6	0.4825	0.5636	0.4539	0.25	0.024(10)	8
2C7	0.4631	0.4889	0.5282	0.25	0.024(10)	8
2H1C7	0.4412	0.4594	0.4909	0.25	0.024(10)	8
2H2C7	0.4818	0.4518	0.5615	0.25	0.024(10)	8
2C8	0.4306	0.5328	0.5725	0.25	0.024(10)	8
2H1C8	0.4155	0.5735	0.5397	0.25	0.024(10)	8
2H2C8	0.4532	0.5592	0.6117	0.25	0.024(10)	8
2C9	0.4107	0.4426	0.6536	0.25	0.024(10)	8
2H1C9	0.3829	0.4189	0.6837	0.25	0.024(10)	8
2H2C9	0.4274	0.4023	0.6243	0.25	0.024(10)	8
2H3C9	0.4380	0.4619	0.6910	0.25	0.024(10)	8
2N2	0.3906	0.4969	0.6074	0.25	0.024(10)	8
2C10	0.3541	0.4698	0.5557	0.25	0.024(10)	8
2H1C10	0.3541	0.4147	0.5543	0.25	0.024(10)	8
2H2C10	0.3607	0.4851	0.5023	0.25	0.024(10)	8
2C11	0.3051	0.4957	0.5745	0.25	0.024(10)	8
2H1C11	0.2770	0.4577	0.5673	0.25	0.024(10)	8
2H2C11	0.2946	0.5388	0.5416	0.25	0.024(10)	8
2C12	0.3119	0.5180	0.6489	0.25	0.024(10)	8
2H1C12	0.3082	0.4753	0.6844	0.25	0.024(10)	8

2H2C12	0.2862	0.5565	0.6635	0.25	0.024(10)	8
2C13	0.363	0.544	0.6505	0.25	0.024(10)	8
2H1C13	0.3624	0.5943	0.6280	0.25	0.024(10)	8
2H2C13	0.3780	0.5501	0.7036	0.25	0.024(10)	8
2C14	0.5533	0.5575	0.3557	0.25	0.024(10)	8
2H1C14	0.5366	0.6015	0.3792	0.25	0.024(10)	8
2H2C14	0.5812	0.5771	0.3228	0.25	0.024(10)	8
2H3C14	0.5261	0.5340	0.3210	0.25	0.024(10)	8
3N1	0.2967	0.9941	0.0523	0.25	0.024(10)	8
3C1	0.2963	0.9339	0.0985	0.25	0.024(10)	8
3H1C1	0.3325	0.9216	0.1181	0.25	0.024(10)	8
3H1C2	0.2829	0.8879	0.0728	0.25	0.024(10)	8
3C2	0.2668	0.9526	0.16	0.25	0.024(10)	8
3H1C2	0.2757	0.9227	0.2063	0.25	0.024(10)	8
3H2C2	0.2285	0.9458	0.1476	0.25	0.024(10)	8
3C3	0.2788	1.026	0.1703	0.25	0.024(10)	8
3H1C3	0.3134	1.0312	0.1983	0.25	0.024(10)	8
3H2C3	0.2522	1.0529	0.2001	0.25	0.024(10)	8
3C4	0.2813	1.0515	0.0966	0.25	0.024(10)	8
3H1C4	0.2451	1.0686	0.0817	0.25	0.024(10)	8
3H2C4	0.3043	1.0961	0.0937	0.25	0.024(10)	8
3C5	0.3452	1.0055	0.0226	0.25	0.024(10)	8
3H1C5	0.3533	0.9625	-0.0107	0.25	0.024(10)	8
3H2C5	0.3425	1.0477	-0.0142	0.25	0.024(10)	8
3C6	0.3897	1.0201	0.0705	0.25	0.024(10)	8
3H1C6	0.4039	1.0699	0.0582	0.25	0.024(10)	8
3H2C6	0.3793	1.0249	0.1243	0.25	0.024(10)	8
3C7	0.43	0.9678	0.0683	0.25	0.024(10)	8
3H1C7	0.4137	0.9191	0.0782	0.25	0.024(10)	8
3H2C7	0.4549	0.9753	0.1128	0.25	0.024(10)	8
3C8	0.458	0.9633	0.0009	0.25	0.024(10)	8
3H1C8	0.4345	0.9807	-0.0423	0.25	0.024(10)	8
3H2C8	0.4625	0.9096	-0.0108	0.25	0.024(10)	8
3C9	0.502	1.0689	0.0173	0.25	0.024(10)	8
3H1C9	0.4913	1.0719	0.0708	0.25	0.024(10)	8
3H2C9	0.4751	1.0958	-0.0152	0.25	0.024(10)	8
3H3C9	0.5358	1.0965	0.0150	0.25	0.024(10)	8
3C10	0.5449	0.9637	0.0385	0.25	0.024(10)	8
3H1C10	0.5393	0.9090	0.0387	0.25	0.024(10)	8
3H2C10	0.5464	0.9792	0.0931	0.25	0.024(10)	8
3C11	0.5915	0.979	0.0027	0.25	0.024(10)	8
3H1C11	0.6163	0.9363	0.0044	0.25	0.024(10)	8
3H2C11	0.6103	1.0213	0.0280	0.25	0.024(10)	8
3C12	0.5777	0.999	-0.0709	0.25	0.024(10)	8
3H1C12	0.5940	0.9664	-0.1092	0.25	0.024(10)	8
3H2C12	0.5889	1.0508	-0.0815	0.25	0.024(10)	8
3C13	0.5236	0.9932	-0.0736	0.25	0.024(10)	8
3H1C13	0.5063	1.0296	-0.1085	0.25	0.024(10)	8
3H2C13	0.5152	0.9438	-0.0946	0.25	0.024(10)	8
3C14	0.2614	0.9842	-0.007	0.25	0.024(10)	8
3H1C14	0.2594	1.0282	-0.0414	0.25	0.024(10)	8
3H2C14	0.2706	0.9408	-0.0392	0.25	0.024(10)	8
3H3C14	0.2250	0.9752	0.0104	0.25	0.024(10)	8
3N2	0.5061	0.9975	-0.0029	0.25	0.024(10)	8

4N1	0.2405	0.5805	0.9807	0.25	0.024(10)	8
4C1	0.1987	0.6247	0.9915	0.25	0.024(10)	8
4H1C1	0.1834	0.6153	1.0419	0.25	0.024(10)	8
4H2C1	0.1692	0.6153	0.9538	0.25	0.024(10)	8
4C2	0.2167	0.697	0.9915	0.25	0.024(10)	8
4H1C2	0.1931	0.7325	1.0167	0.25	0.024(10)	8
4H2C2	0.2212	0.7153	0.9386	0.25	0.024(10)	8
4C3	0.2644	0.6904	1.0298	0.25	0.024(10)	8
4H1C3	0.2597	0.6902	1.0859	0.25	0.024(10)	8
4H2C3	0.2889	0.7316	1.0186	0.25	0.024(10)	8
4C4	0.2822	0.6223	1.0061	0.25	0.024(10)	8
4H1C4	0.3073	0.6313	0.9651	0.25	0.024(10)	8
4H2C4	0.3030	0.5984	1.0485	0.25	0.024(10)	8
4C5	0.2355	0.5162	1.0213	0.25	0.024(10)	8
4H1C5	0.2314	0.5292	1.0759	0.25	0.024(10)	8
4H2C5	0.2014	0.4914	1.0067	0.25	0.024(10)	8
4C6	0.2758	0.4636	1.0216	0.25	0.024(10)	8
4H1C6	0.3105	0.4892	1.0240	0.25	0.024(10)	8
4H2C6	0.2757	0.4364	1.0705	0.25	0.024(10)	8
4C7	0.2755	0.4132	0.9619	0.25	0.024(10)	8
4H1C7	0.2759	0.4402	0.9128	0.25	0.024(10)	8
4H2C7	0.3101	0.3889	0.9644	0.25	0.024(10)	8
4C8	0.2376	0.3575	0.9544	0.25	0.024(10)	8
4H1C8	0.2018	0.3798	0.9586	0.25	0.024(10)	8
4H2C8	0.2384	0.3443	0.9004	0.25	0.024(10)	8
4C9	0.2312	0.3100	1.0674	0.25	0.024(10)	8
4H1C9	0.1986	0.3402	1.0703	0.25	0.024(10)	8
4H2C9	0.2259	0.2647	1.0969	0.25	0.024(10)	8
4H3C9	0.2609	0.3368	1.0935	0.25	0.024(10)	8
4N2	0.2416	0.2932	0.9959	0.25	0.024(10)	8
4C10	0.2068	0.2411	0.9695	0.25	0.024(10)	8
4H1C10	0.1969	0.2475	0.9150	0.25	0.024(10)	8
4H2C10	0.1735	0.2401	0.9966	0.25	0.024(10)	8
4C11	0.2303	0.1732	0.9775	0.25	0.024(10)	8
4H1C11	0.2145	0.1349	0.9428	0.25	0.024(10)	8
4H2C11	0.2269	0.1561	1.0307	0.25	0.024(10)	8
4C12	0.2812	0.1896	0.9627	0.25	0.024(10)	8
4H1C12	0.2855	0.1921	0.9067	0.25	0.024(10)	8
4H2C12	0.3063	0.1518	0.9835	0.25	0.024(10)	8
4C13	0.2891	0.2587	0.9944	0.25	0.024(10)	8
4H1C13	0.3061	0.2522	1.0463	0.25	0.024(10)	8
4H2C13	0.3154	0.2865	0.9659	0.25	0.024(10)	8
4C14	0.2434	0.5654	0.9053	0.25	0.024(10)	8
4H1C14	0.2158	0.5295	0.8870	0.25	0.024(10)	8
4H2C14	0.2388	0.6105	0.8734	0.25	0.024(10)	8
4H3C14	0.2784	0.5448	0.8926	0.25	0.024(10)	8
Ow1	0.4516(19)	0.5	0.3930(31)	1	0.025	4
Ow2	0.1648(19)	0	0.2677(33)	1	0.025	4

Selected Bond Lengths

Atom 1	Atom 2	Bond distance Å
Si1	O5	1.593(8)
Si1	O6	1.604(8)
Si1	O7	1.609(8)

Si1	O8	1.607(8)
Si2	O16	1.587(8)
Si2	O21	1.592(8)
Si2	O22	1.609(8)
Si2	O23	1.602(8)
Si3	O11	1.603(8)
Si3	O17	1.603(8)
Si3	O24	1.610(8)
Si3	O25	1.607(8)
Si4	O1	1.590(8)
Si4	O2	1.599(8)
Si4	O3	1.590(8)
Si4	O4	1.598(8)
Si5	O15	1.589(8)
Si5	O21	1.596(8)
Si5	O24	1.610(8)
Si5	O26	1.608(8)
Si6	O1	1.597(8)
Si6	O9	1.588(8)
Si6	O27	1.596(8)
Si6	O28	1.592(8)
Si7	O29	1.595(8)
Si7	O30	1.597(8)
Si7	O31	1.579(8)
Si7	O32	1.591(8)
Si8	O26	1.596(8)
Si8	O33	1.592(8)
Si8	O34	1.598(8)
Si8	O35	1.606(8)
Si9	O4	1.598(8)
Si9	O9	1.589(8)
Si9	O10	1.593(8)
Si9	O11	1.596(8)
Si10	O12	1.582(8)
Si10	O20	1.608(8)
Si10	O35	1.601(8)
Si10	O36	1.610(8)
Si11	O3	1.600(8)
Si11	O7	1.604(8)
Si11	O12	1.583(8)
Si11	O13	1.593(8)
Si12	O37	1.620(8)
Si12	O38	1.587(8)
Si12	O39	1.590(8)
Si12	O40	1.627(8)
Si13	O33	1.593(8)
Si13	O40	1.613(8)
Si13	O41	1.617(8)
Si13	O42	1.624(8)
Si14	O36	1.606(8)
Si14	O38	1.580(8)
Si14	O43	1.599(8)
Si14	O44	1.583(8)
Si15	O23	1.604(8)
Si15	O30	1.601(8)
Si15	O41	1.611(8)

Si15	O45	1.619(8)
Si16	O8	1.604(8)
Si16	O22	1.610(8)
Si16	O28	1.599(8)
Si16	O46	1.607(8)
Si17	O19	1.597(8)
Si17	O47	1.591(8)
Si17	O48	1.603(8)
Si17	O49	1.614(8)
Si18	O6	1.600(8)
Si18	O14	1.598(8)
Si18	O18	1.600(8)
Si18	O31	1.589(8)
Si19	O37	1.618(8)
Si19	O48	1.599(8)
Si19	O50	1.603(8)
Si19	O51	1.593(8)
Si20	O25	1.602(8)
Si20	O42	1.622(8)
Si20	O46	1.606(8)
Si20	O51	1.585(8)
Si21	O29	1.591(8)
Si21	O39	1.589(8)
Si21	O47	1.587(8)
Si21	O52	1.589(8)
Si22	O2	1.598(8)
Si22	O14	1.600(8)
Si22	O15	1.593(8)
Si22	O16	1.576(8)
Si23	O5	1.587(8)
Si23	O43	1.602(8)
Si23	O49	1.616(8)
Si23	O50	1.603(8)
Si24	O17	1.592(8)
Si24	O18	1.597(8)
Si24	O19	1.594(8)
Si24	O20	1.609(8)

Selected O-T-O Angles

O5	Si1	O6	109.4(10)
O5	Si1	O7	107.6(10)
O5	Si1	O8	109.9(9)
O6	Si1	O7	109.8(10)
O6	Si1	O8	108.6(10)
O7	Si1	O8	111.6(10)
O16	Si2	O21	103.0(9)
O16	Si2	O22	112.6(10)
O16	Si2	O23	111.0(10)
O21	Si2	O22	111.3(10)
O21	Si2	O23	109.9(10)
O22	Si2	O23	109.0(10)
O11	Si3	O17	107.3(9)
O11	Si3	O24	108.2(10)
O11	Si3	O25	110.8(10)
O17	Si3	O24	109.5(10)

O17	Si3	O25	109.4(9)
O24	Si3	O25	111.5(10)
O1	Si4	O2	108.3(10)
O1	Si4	O3	107.4(10)
O1	Si4	O4	110.4(10)
O2	Si4	O3	111.6(10)
O2	Si4	O4	109.2(10)
O3	Si4	O4	110.0(9)
O15	Si5	O21	108.5(9)
O15	Si5	O24	111.2(10)
O15	Si5	O26	109.5(9)
O21	Si5	O24	109.0(10)
O21	Si5	O26	107.5(10)
O24	Si5	O26	111.0(10)
O1	Si6	O9	108.5(10)
O1	Si6	O27	109.1(10)
O1	Si6	O28	109.7(10)
O9	Si6	O27	110.4(11)
O9	Si6	O28	110.3(10)
O27	Si6	O28	108.8(8)
O29	Si7	O30	110.5(9)
O29	Si7	O31	109.7(10)
O29	Si7	O32	108.2(11)
O30	Si7	O31	110.7(10)
O30	Si7	O32	112.2(11)
O31	Si7	O32	105.4(9)
O26	Si8	O33	111.2(10)
O26	Si8	O34	108.6(9)
O26	Si8	O35	109.3(10)
O33	Si8	O34	110.1(11)
O33	Si8	O35	107.9(10)
O34	Si8	O35	109.7(9)
O4	Si9	O9	107.8(10)
O4	Si9	O10	111.0(11)
O4	Si9	O11	111.3(10)
O9	Si9	O10	108.4(10)
O9	Si9	O11	110.2(10)
O10	Si9	O11	108.2(8)
O12	Si10	O20	109.3(10)
O12	Si10	O35	110.1(9)
O12	Si10	O36	109.7(10)
O20	Si10	O35	110.0(10)
O20	Si10	O36	109.9(10)
O35	Si10	O36	107.7(10)
O3	Si11	O7	109.2(10)
O3	Si11	O12	106.5(9)
O3	Si11	O13	109.5(11)
O7	Si11	O12	110.8(10)
O7	Si11	O13	109.6(9)
O12	Si11	O13	111.2(11)
O37	Si12	O38	110.9(10)
O37	Si12	O39	110.3(10)
O37	Si12	O40	105.0(9)
O38	Si12	O39	108.6(10)
O38	Si12	O40	111.9(10)
O39	Si12	O40	110.1(9)

O33	Si13	O40	111.9(10)
O33	Si13	O41	107.5(10)
O33	Si13	O42	107.5(10)
O40	Si13	O41	110.8(9)
O40	Si13	O42	108.8(10)
O41	Si13	O42	110.3(10)
O36	Si14	O38	108.4(10)
O36	Si14	O43	107.2(10)
O36	Si14	O44	110.8(11)
O38	Si14	O43	112.9(10)
O38	Si14	O44	111.8(11)
O43	Si14	O44	105.6(9)
O23	Si15	O30	108.1(10)
O23	Si15	O41	109.5(10)
O23	Si15	O45	109.7(10)
O30	Si15	O41	113.2(9)
O30	Si15	O45	107.5(10)
O41	Si15	O45	108.8(10)
O8	Si16	O22	111.3(10)
O8	Si16	O28	107.1(10)
O8	Si16	O46	110.7(9)
O22	Si16	O28	108.0(10)
O22	Si16	O46	111.3(10)
O28	Si16	O46	108.2(10)
O19	Si17	O47	106.3(10)
O19	Si17	O48	107.7(9)
O19	Si17	O49	110.2(10)
O47	Si17	O48	108.6(9)
O47	Si17	O49	111.2(10)
O48	Si17	O49	112.5(10)
O6	Si18	O14	110.0(10)
O6	Si18	O18	109.9(10)
O6	Si18	O31	111.7(10)
O14	Si18	O18	110.4(9)
O14	Si18	O31	107.5(10)
O18	Si18	O31	107.2(10)
O37	Si19	O48	107.7(10)
O37	Si19	O50	107.5(10)
O37	Si19	O51	114.2(10)
O48	Si19	O50	111.1(10)
O48	Si19	O51	109.8(10)
O50	Si19	O51	106.6(9)
O25	Si20	O42	108.8(10)
O25	Si20	O46	110.1(10)
O25	Si20	O51	110.7(10)
O42	Si20	O46	108.7(10)
O42	Si20	O51	109.3(10)
O46	Si20	O51	109.2(9)
O29	Si21	O39	111.3(9)
O29	Si21	O47	109.4(10)
O29	Si21	O52	109.2(11)
O39	Si21	O47	111.4(10)
O39	Si21	O52	109.8(11)
O47	Si21	O52	105.6(9)
O2	Si22	O14	109.3(10)
O2	Si22	O15	109.6(10)

O2	Si22	O16	111.8(10)
O14	Si22	O15	108.2(9)
O14	Si22	O16	109.6(10)
O15	Si22	O16	108.2(9)
O5	Si23	O43	110.6(10)
O5	Si23	O49	109.9(10)
O5	Si23	O50	108.9(9)
O43	Si23	O49	111.8(10)
O43	Si23	O50	105.7(9)
O49	Si23	O50	109.9(10)
O17	Si24	O18	110.2(9)
O17	Si24	O19	107.2(9)
O17	Si24	O20	111.2(10)
O18	Si24	O19	108.7(10)
O18	Si24	O20	108.9(10)
O19	Si24	O20	110.6(10)

Appendix D2: Refined Cell and Atomic Parameters, Bond Lengths and Angles for As-made TNU-9 with Refined Template Locations

$$a = 23.239(1) \quad b = 20.0792(5) \quad c = 19.4540(6) \quad \beta = 92.593(2) \quad \text{volume} = 11019.4(6) \text{ \AA}^3$$

atom	x	y	z	occupancy	$U_{\text{iso}}, \text{ \AA}^2$	Multiplicity
Si1	0.1012(7)	0.1880(10)	0.7071(9)	1	0.0130(17)	8
Si2	0.0039(7)	0.3105(11)	0.1464(10)	1	0.0130(17)	8
Si3	0.1529(7)	0.1852(10)	0.1684(10)	1	0.0130(17)	8
Si4	0.0897(7)	0.1176(11)	0.9306(10)	1	0.0130(17)	8
Si5	0.1062(6)	0.3091(10)	0.0855(9)	1	0.0130(17)	8
Si6	0.0049(7)	0.0770(7)	0.1476(11)	1	0.0130(17)	8
Si7	0.1043(7)	0.4274(9)	0.7122(11)	1	0.0130(17)	8
Si8	0.1512(7)	0.4237(8)	0.1724(10)	1	0.0130(17)	8
Si9	0.1014(7)	0.0776(7)	0.0871(10)	1	0.0130(17)	8
Si10	0.2532(7)	0.3797(11)	0.2287(10)	1	0.0130(17)	8
Si11	0.1463(7)	0.0766(7)	0.8041(11)	1	0.0130(17)	8
Si12	0.1661(7)	0.3815(11)	0.4396(10)	1	0.0130(17)	8
Si13	0.1010(7)	0.3772(10)	0.3059(10)	1	0.0130(17)	8
Si14	0.2370(7)	0.0745(8)	0.6148(11)	1	0.0130(17)	8
Si15	0.0006(7)	0.4235(8)	0.2557(12)	1	0.0130(17)	8
Si16	1.0017(7)	0.1893(10)	0.2546(10)	1	0.0130(17)	8
Si17	0.2375(7)	0.3113(11)	0.6219(10)	1	0.0130(17)	8
Si18	0.1420(6)	0.3091(10)	0.7988(9)	1	0.0130(17)	8
Si19	0.1640(7)	0.2210(10)	0.4341(10)	1	0.0130(17)	8
Si20	0.1031(7)	0.2168(10)	0.3047(10)	1	0.0130(17)	8
Si21	0.1681(8)	0.4252(8)	0.5874(11)	1	0.0130(17)	8
Si22	0.0857(7)	0.2771(10)	0.9313(10)	1	0.0130(17)	8
Si23	0.1662(7)	0.1892(11)	0.5838(10)	1	0.0130(17)	8
Si24	0.2524(7)	0.2198(11)	0.2242(10)	1	0.0130(17)	8
O1	0.0402(9)	0.0869(17)	0.9038(17)	1	0.0135(30)	8
O2	0.0850(12)	0.1972(10)	0.9326(19)	1	0.0135(30)	8
O3	0.1283(11)	0.0949(19)	0.8783(13)	1	0.0135(30)	8
O4	0.1035(11)	0.0911(19)	0.0064(10)	1	0.0135(30)	8

O5	0.1225(9)	0.1883(20)	0.6327(12)	1	0.0135(30)	8
O6	0.1220(13)	0.2511(15)	0.7490(18)	1	0.0135(30)	8
O7	0.1184(13)	0.1211(14)	0.7466(17)	1	0.0135(30)	8
O8	0.0446(6)	0.1941(20)	0.7005(14)	1	0.0135(30)	8
O9	0.0508(8)	0.1013(16)	0.1102(18)	1	0.0135(30)	8
O10	0.1063(17)	0	0.1043(24)	1	0.0135(30)	4
O11	0.1426(9)	0.1159(12)	0.1294(16)	1	0.0135(30)	8
O12	0.2013(7)	0.0920(18)	0.8058(18)	1	0.0135(30)	8
O13	0.1367(17)	0	0.7887(25)	1	0.0135(30)	4
O14	0.1203(11)	0.3013(19)	0.8731(12)	1	0.0135(30)	8
O15	0.1051(10)	0.3049(18)	0.0039(9)	1	0.0135(30)	8
O16	0.0346(8)	0.3068(18)	0.9160(13)	1	0.0135(30)	8
O17	0.2091(7)	0.1929(18)	0.1769(15)	1	0.0135(30)	8
O18	0.3013(6)	0.1932(19)	0.1958(17)	1	0.0135(30)	8
O19	0.2457(12)	0.1901(18)	0.2990(10)	1	0.0135(30)	8
O20	0.2533(12)	0.2998(10)	0.2265(19)	1	0.0135(30)	8
O21	0.0527(7)	0.3120(21)	0.1086(16)	1	0.0135(30)	8
O22	1.0014(14)	0.2477(15)	0.1977(16)	1	0.0135(30)	8
O23	-0.0027(13)	0.3783(14)	0.1879(15)	1	0.0135(30)	8
O24	0.1321(13)	0.2449(14)	0.1205(18)	1	0.0135(30)	8
O25	0.1305(11)	0.1846(16)	0.2426(12)	1	0.0135(30)	8
O26	0.1312(12)	0.3774(13)	0.1110(15)	1	0.0135(30)	8
O27	0.0100(17)	0	0.1671(23)	1	0.0135(30)	4
O28	0.9988(13)	0.1189(12)	0.2161(14)	1	0.0135(30)	8
O29	0.1280(11)	0.4129(22)	0.6409(13)	1	0.0135(30)	8
O30	0.0483(7)	0.4171(23)	0.7061(17)	1	0.0135(30)	8
O31	0.1270(12)	0.3806(11)	0.7703(15)	1	0.0135(30)	8
O32	0.1192(19)	0.5	0.7369(26)	1	0.0135(30)	4
O33	0.1249(12)	0.4094(17)	0.2414(13)	1	0.0135(30)	8
O34	0.1450(16)	0.5	0.1500(22)	1	0.0135(30)	4
O35	0.2062(7)	0.4072(19)	0.1885(17)	1	0.0135(30)	8
O36	0.2521(13)	0.4056(19)	0.3066(11)	1	0.0135(30)	8
O37	0.1683(12)	0.3010(10)	0.4401(19)	1	0.0135(30)	8
O38	0.2166(8)	0.4131(18)	0.4262(17)	1	0.0135(30)	8
O39	0.1495(10)	0.4095(19)	0.5108(10)	1	0.0135(30)	8
O40	0.1275(11)	0.3989(15)	0.3777(13)	1	0.0135(30)	8
O41	0.0466(7)	0.4023(19)	0.3028(16)	1	0.0135(30)	8
O42	0.1042(13)	0.2970(9)	0.2987(18)	1	0.0135(30)	8
O43	0.1933(10)	0.1192(13)	0.5873(19)	1	0.0135(30)	8
O44	0.2190(14)	0	0.6082(27)	1	0.0135(30)	4
O45	0.0061(19)	0.5	0.2323(25)	1	0.0135(30)	4
O46	0.0493(7)	0.1913(19)	0.3026(15)	1	0.0135(30)	8
O47	0.2135(9)	0.3820(12)	0.6085(19)	1	0.0135(30)	8
O48	0.2845(8)	0.3084(18)	0.5787(16)	1	0.0135(30)	8
O49	0.2010(12)	0.2510(14)	0.6037(21)	1	0.0135(30)	8
O50	0.1457(10)	0.1948(18)	0.5060(9)	1	0.0135(30)	8
O51	0.1277(10)	0.1944(16)	0.3758(11)	1	0.0135(30)	8
O52	0.1857(17)	0.5	0.5928(28)	1	0.0135(30)	4
1N1	0.505(9)	0.121(4)	0.491(14)	0.25	0.0147	8
1C1	0.481(13)	0.170(9)	0.445(17)	0.25	0.0147	8
1C2	0.491(21)	0.240(6)	0.475(24)	0.25	0.0147	8
1C3	0.510(19)	0.228(10)	0.550(23)	0.25	0.0147	8
1C4	0.507(13)	0.151(12)	0.560(14)	0.25	0.0147	8
1C5	0.481(9)	0.056(6)	0.488(19)	0.25	0.0147	8
1C6	0.507(13)	0.0000	0.527(15)	0.5	0.0147	4

1C7	0.514(13)	-0.064(5)	0.485(20)	0.25	0.0147	8
1C8	0.480(8)	-0.120(5)	0.501(19)	0.25	0.0147	8
1C9	0.510(12)	-0.200(14)	0.584(11)	0.25	0.0147	8
1N2	0.497(7)	-0.187(5)	0.511(11)	0.25	0.0147	8
1C10	0.460(8)	-0.236(6)	0.490(16)	0.25	0.0147	8
1C11	0.485(11)	-0.303(5)	0.479(16)	0.25	0.0147	8
1C12	0.538(11)	-0.285(9)	0.475(17)	0.25	0.0147	8
1C13	0.539(9)	-0.207(9)	0.473(16)	0.25	0.0147	8
1C14	0.554(9)	0.112(13)	0.470(18)	0.25	0.0147	8
2N1	0.576(4)	0.5000	0.486(6)	0.5	0.0147	4
2C1	0.625(5)	0.5000	0.516(7)	0.5	0.0147	4
2C2	0.658(5)	0.503(21)	0.454(12)	0.25	0.0147	8
2C3	0.626(9)	0.485(17)	0.390(8)	0.25	0.0147	8
2C4	0.578(7)	0.466(8)	0.419(8)	0.25	0.0147	8
2C5	0.542(6)	0.471(7)	0.532(12)	0.25	0.0147	8
2C6	0.501(7)	0.518(9)	0.548(15)	0.25	0.0147	8
2C7	0.464(6)	0.487(17)	0.594(13)	0.25	0.0147	8
2C8	0.417(6)	0.527(13)	0.591(13)	0.25	0.0147	8
2C9	0.389(9)	0.423(12)	0.635(16)	0.25	0.0147	8
2N2	0.380(4)	0.495(14)	0.628(6)	0.25	0.0147	8
2C10	0.333(5)	0.504(25)	0.593(7)	0.25	0.0147	8
2C11	0.296(4)	0.499(32)	0.650(11)	0.25	0.0147	8
2C12	0.325(8)	0.508(23)	0.719(8)	0.25	0.0147	8
2C13	0.376(7)	0.523(15)	0.698(8)	0.25	0.0147	8
2C14	0.563(5)	0.5698(23)	0.471(9)	0.25	0.0147	8
3N1	0.2967	0.9941	0.0523	0.25	0.0147	8
3C1	0.2963	0.9339	0.0985	0.25	0.0147	8
3C2	0.2668	0.9526	0.1600	0.25	0.0147	8
3C3	0.2788	1.0260	0.1703	0.25	0.0147	8
3C4	0.2813	1.0515	0.0966	0.25	0.0147	8
3C5	0.3452	1.0055	0.0226	0.25	0.0147	8
3C6	0.3897	1.0201	0.0705	0.25	0.0147	8
3C7	0.4300	0.9678	0.0683	0.25	0.0147	8
3C8	0.4580	0.9633	0.0009	0.25	0.0147	8
3C9	0.5020	1.0689	0.0173	0.25	0.0147	8
3N2	0.5061	0.9975	-0.0029	0.25	0.0147	8
3C10	0.5449	0.9637	0.0385	0.25	0.0147	8
3C11	0.5915	0.979	0.0027	0.25	0.0147	8
3C12	0.5777	0.999	-0.0709	0.25	0.0147	8
3C13	0.5236	0.9932	-0.0736	0.25	0.0147	8
3C14	0.2614	0.9842	-0.007	0.25	0.0147	8
4N1	0.2405	0.5805	0.9807	0.25	0.0147	8
4C1	0.1987	0.6247	0.9915	0.25	0.0147	8
4C2	0.2167	0.6970	0.9915	0.25	0.0147	8
4C3	0.2644	0.6904	1.0298	0.25	0.0147	8
4C4	0.2822	0.6223	1.0061	0.25	0.0147	8
4C5	0.2355	0.5162	1.0213	0.25	0.0147	8
4C6	0.2758	0.4636	1.0216	0.25	0.0147	8
4C7	0.2755	0.4132	0.9619	0.25	0.0147	8
4C8	0.2376	0.3575	0.9544	0.25	0.0147	8
4C9	0.2312	0.31	1.0674	0.25	0.0147	8
4N2	0.2416	0.2932	0.9959	0.25	0.0147	8
4C10	0.2068	0.2411	0.9695	0.25	0.0147	8

4C11	0.2303	0.1732	0.9775	0.25	0.0147	8
4C12	0.2812	0.1896	0.9627	0.25	0.0147	8
4C13	0.2891	0.2587	0.9944	0.25	0.0147	8
4C14	0.2434	0.5654	0.9053	0.25	0.0147	8
Na1	0.456(4)	0.5	0.392(7)	0.5	0.025	4

Selected bond lengths

Si1	O5	1.592(13)
Si1	O6	1.605(13)
Si1	O7	1.611(12)
Si1	O8	1.604(12)
Si2	O16	1.593(13)
Si2	O21	1.592(13)
Si2	O22	1.611(12)
Si2	O23	1.598(13)
Si3	O11	1.604(13)
Si3	O17	1.595(12)
Si3	O24	1.615(13)
Si3	O25	1.601(12)
Si4	O1	1.593(12)
Si4	O2	1.604(12)
Si4	O3	1.592(13)
Si4	O4	1.599(13)
Si5	O15	1.589(12)
Si5	O21	1.596(12)
Si5	O24	1.616(12)
Si5	O26	1.611(13)
Si6	O1	1.596(12)
Si6	O9	1.591(13)
Si6	O27	1.598(12)
Si6	O28	1.591(13)
Si7	O29	1.593(13)
Si7	O30	1.596(12)
Si7	O31	1.583(13)
Si7	O32	1.587(13)
Si8	O26	1.596(12)
Si8	O33	1.589(12)
Si8	O34	1.600(12)
Si8	O35	1.605(12)
Si9	O4	1.596(12)
Si9	O9	1.591(13)
Si9	O10	1.598(12)
Si9	O11	1.594(13)
Si10	O12	1.582(13)
Si10	O20	1.605(12)
Si10	O35	1.607(13)
Si10	O36	1.604(13)
Si11	O3	1.595(13)
Si11	O7	1.609(13)
Si11	O12	1.584(12)
Si11	O13	1.588(12)
Si12	O37	1.617(12)
Si12	O38	1.592(13)

Si12	O39	1.586(13)
Si12	O40	1.627(13)
Si13	O33	1.588(13)
Si13	O40	1.614(13)
Si13	O41	1.616(13)
Si13	O42	1.619(13)
Si14	O36	1.598(13)
Si14	O38	1.585(13)
Si14	O43	1.599(13)
Si14	O44	1.583(12)
Si15	O23	1.601(13)
Si15	O30	1.601(13)
Si15	O41	1.612(13)
Si15	O45	1.611(12)
Si16	O8	1.606(13)
Si16	O22	1.614(12)
Si16	O28	1.600(13)
Si16	O46	1.602(12)
Si17	O19	1.591(13)
Si17	O47	1.589(13)
Si17	O48	1.604(13)
Si17	O49	1.617(12)
Si18	O6	1.601(12)
Si18	O14	1.603(12)
Si18	O18	1.602(12)
Si18	O31	1.589(13)
Si19	O37	1.615(12)
Si19	O48	1.600(13)
Si19	O50	1.601(13)
Si19	O51	1.587(12)
Si20	O25	1.602(13)
Si20	O42	1.615(12)
Si20	O46	1.603(13)
Si20	O51	1.584(13)
Si21	O29	1.591(13)
Si21	O39	1.589(13)
Si21	O47	1.587(13)
Si21	O52	1.585(13)
Si22	O2	1.606(12)
Si22	O14	1.604(13)
Si22	O15	1.593(13)
Si22	O16	1.577(13)
Si23	O5	1.591(12)
Si23	O43	1.600(13)
Si23	O49	1.620(12)
Si23	O50	1.601(13)
Si24	O17	1.593(13)
Si24	O18	1.600(13)
Si24	O19	1.591(13)
Si24	O20	1.607(12)
1N1	1C1	1.480(26)
1N1	1C4	1.472(26)
1N1	1C5	1.454(26)
1N1	1C	1.470(27)

1C1	1C2	1.555(27)
1C2	1C3	1.551(27)
1C3	1C4	1.558(28)
1C5	1C6	1.527(28)
1C6	1C7	1.535(28)
1C7	1C8	1.513(28)
1C10	1C11	1.553(27)
1C11	1C12	1.551(27)
1C12	1C13	1.564(28)
1N2	1C8	1.441(26)
1N2	1C9	1.475(27)
1N2	1C10	1.489(26)
1N2	1C13	1.473(26)

2N1	2C1	1.478(26)
2N1	2C4	1.481(26)
2N1	2C5	1.462(26)
2N1	2C	1.474(26)
2C1	2C2	1.555(27)
2C2	2C3	1.550(27)
2C3	2C4	1.554(28)
2C5	2C6	1.539(28)
2C6	2C7	1.538(28)
2C7	2C8	1.542(28)
2N2	2C8	1.453(26)
2N2	2C10	1.477(26)
2N2	2C13	1.479(26)
2N2	2C9	1.465(26)
2C10	2C11	1.552(28)
2C11	2C12	1.552(27)
2C12	2C13	1.549(28)

Selected Bond Angles

O5	Si1	O6	108.4(15)
O5	Si1	O7	108.6(15)
O5	Si1	O8	110.1(13)
O6	Si1	O7	108.7(15)
O6	Si1	O8	108.7(15)
O7	Si1	O8	112.3(15)
O16	Si2	O21	103.0(13)
O16	Si2	O22	112.9(15)
O16	Si2	O23	109.5(15)
O21	Si2	O22	111.3(16)
O21	Si2	O23	109.9(16)
O22	Si2	O23	110.1(15)
O11	Si3	O17	106.9(14)
O11	Si3	O24	108.5(15)
O11	Si3	O25	110.5(15)
O17	Si3	O24	108.8(15)
O17	Si3	O25	109.9(15)
O24	Si3	O25	112.1(15)
O1	Si4	O2	108.8(15)
O1	Si4	O3	107.3(15)

O1	Si4	O4	110.3(15)
O2	Si4	O3	111.1(16)
O2	Si4	O4	109.0(16)
O3	Si4	O4	110.3(14)
O15	Si5	O21	107.9(14)
O15	Si5	O24	111.5(15)
O15	Si5	O26	109.9(14)
O21	Si5	O24	109.1(15)
O21	Si5	O26	106.8(15)
O24	Si5	O26	111.5(15)
O1	Si6	O9	108.6(15)
O1	Si6	O27	109.3(16)
O1	Si6	O28	110.2(15)
O9	Si6	O27	109.8(16)
O9	Si6	O28	110.0(15)
O27	Si6	O28	108.9(13)
O29	Si7	O30	111.5(14)
O29	Si7	O31	109.9(16)
O29	Si7	O32	108.4(16)
O30	Si7	O31	110.1(15)
O30	Si7	O32	113.0(17)
O31	Si7	O32	103.6(13)
O26	Si8	O33	111.3(15)
O26	Si8	O34	108.9(14)
O26	Si8	O35	109.4(15)
O33	Si8	O34	110.7(17)
O33	Si8	O35	106.4(15)
O34	Si8	O35	110.0(13)
O4	Si9	O9	107.5(15)
O4	Si9	O10	111.4(16)
O4	Si9	O11	111.5(15)
O9	Si9	O10	107.7(16)
O9	Si9	O11	110.7(15)
O10	Si9	O11	108.0(13)
O12	Si10	O20	110.1(16)
O12	Si10	O35	109.9(15)
O12	Si10	O36	109.6(15)
O20	Si10	O35	109.6(16)
O20	Si10	O36	110.4(16)
O35	Si10	O36	107.3(15)
O3	Si11	O7	109.6(15)
O3	Si11	O12	106.7(14)
O3	Si11	O13	109.6(17)
O7	Si11	O12	110.8(15)
O7	Si11	O13	109.4(15)
O12	Si11	O13	110.7(17)
O37	Si12	O38	111.4(16)
O37	Si12	O39	111.3(16)
O37	Si12	O40	104.1(14)
O38	Si12	O39	107.8(15)
O38	Si12	O40	111.6(16)
O39	Si12	O40	110.8(14)
O33	Si13	O40	112.1(16)
O33	Si13	O41	106.3(15)
O33	Si13	O42	108.0(15)
O40	Si13	O41	110.5(14)

O40	Si13	O42	108.6(15)
O41	Si13	O42	111.4(16)
O36	Si14	O38	108.2(15)
O36	Si14	O43	107.0(15)
O36	Si14	O44	111.2(17)
O38	Si14	O43	112.8(16)
O38	Si14	O44	112.3(17)
O43	Si14	O44	105.3(14)
O23	Si15	O30	108.5(15)
O23	Si15	O41	109.5(15)
O23	Si15	O45	108.1(15)
O30	Si15	O41	113.9(14)
O30	Si15	O45	107.8(16)
O41	Si15	O45	109.1(16)
O8	Si16	O22	110.5(15)
O8	Si16	O28	106.4(15)
O8	Si16	O46	111.3(14)
O22	Si16	O28	108.8(15)
O22	Si16	O46	111.0(15)
O28	Si16	O46	108.6(15)
O19	Si17	O47	106.3(15)
O19	Si17	O48	106.7(14)
O19	Si17	O49	111.0(15)
O47	Si17	O48	107.6(14)
O47	Si17	O49	111.8(15)
O48	Si17	O49	113.0(15)
O6	Si18	O14	109.6(15)
O6	Si18	O18	110.0(15)
O6	Si18	O31	111.4(15)
O14	Si18	O18	111.0(15)
O14	Si18	O31	107.3(15)
O18	Si18	O31	107.4(15)
O37	Si19	O48	108.2(15)
O37	Si19	O50	106.8(15)
O37	Si19	O51	115.4(16)
O48	Si19	O50	110.4(15)
O48	Si19	O51	109.1(15)
O50	Si19	O51	106.9(13)
O25	Si20	O42	109.6(15)
O25	Si20	O46	110.0(15)
O25	Si20	O51	109.6(15)
O42	Si20	O46	109.8(15)
O42	Si20	O51	109.7(15)
O46	Si20	O51	108.1(14)
O29	Si21	O39	111.6(14)
O29	Si21	O47	109.6(15)
O29	Si21	O52	109.4(17)
O39	Si21	O47	111.4(15)
O39	Si21	O52	109.9(17)
O47	Si21	O52	104.7(14)
O2	Si22	O14	108.8(16)
O2	Si22	O15	109.8(15)
O2	Si22	O16	111.7(16)
O14	Si22	O15	108.9(14)
O14	Si22	O16	109.5(15)
O15	Si22	O16	108.1(14)

O5	Si23	O43	110.3(16)
O5	Si23	O49	110.2(15)
O5	Si23	O50	108.0(13)
O43	Si23	O49	112.3(15)
O43	Si23	O50	104.7(14)
O49	Si23	O50	111.2(15)
O17	Si24	O18	109.8(14)
O17	Si24	O19	106.3(14)
O17	Si24	O20	111.5(16)
O18	Si24	O19	109.4(15)
O18	Si24	O20	109.3(15)
O19	Si24	O20	110.6(15)
Si4	O1	Si6	156.4(23)
Si4	O2	Si22	174.1(24)
Si4	O3	Si11	154.1(24)
Si4	O4	Si9	160.9(22)
Si1	O5	Si23	151.4(22)
Si1	O6	Si18	173.4(27)
Si1	O7	Si11	157.2(25)
Si1	O8	Si16	141.7(20)
Si6	O9	Si9	142.9(24)
Si9	O10	Si9	154.2(32)
Si3	O11	Si9	140.9(20)
Si10	O12	Si11	151.3(23)
Si11	O13	Si11	151.2(31)
Si18	O14	Si22	159.3(24)
Si5	O15	Si22	153.5(22)
Si2	O16	Si22	138.5(19)
Si3	O17	Si24	145.8(21)
Si18	O18	Si24	149.5(22)
Si17	O19	Si24	148.0(22)
Si10	O20	Si24	178.9(24)
Si2	O21	Si5	168.4(24)
Si2	O22	Si16	174.4(25)
Si2	O23	Si15	153.6(25)
Si3	O24	Si5	169.0(26)
Si3	O25	Si20	154.4(23)
Si5	O26	Si8	149.4(23)
Si6	O27	Si6	151.0(30)
Si6	O28	Si16	148.7(23)
Si7	O29	Si21	151.7(28)
Si7	O30	Si15	145.9(24)
Si7	O31	Si18	151.4(24)
Si7	O32	Si7	133.6(29)
Si8	O33	Si13	166.4(24)
Si8	O34	Si8	146.5(29)
Si8	O35	Si10	159.4(24)
Si10	O36	Si14	167.1(24)
Si12	O37	Si19	172.3(22)
Si12	O38	Si14	155.9(23)
Si12	O39	Si21	142.2(20)
Si12	O40	Si13	148.4(20)
Si13	O41	Si15	147.6(22)
Si13	O42	Si20	169.7(23)
Si14	O43	Si23	150.2(23)
Si14	O44	Si14	141.7(29)

Si15	O45	Si15	144.7(32)
Si16	O46	Si20	142.5(20)
Si17	O47	Si21	149.7(23)
Si17	O48	Si19	151.1(22)
Si17	O49	Si23	177.7(27)
Si19	O50	Si23	137.0(19)
Si19	O51	Si20	140.6(20)
Si21	O52	Si21	143.0(31)

1C1	1N1	1C4	106.1(34)
1C1	1N1	1C5	111(4)
1C1	1N1	1C	108(4)
1C4	1N1	1C	108(4)
1C4	1N1	1C5	107(25)
1C5	1N1	1C	109(4)
1C8	1N2	1C9	111(4)
1C8	1N2	1C10	111(4)
1C8	1N2	1C13	117(4)
1C9	1N2	1C10	107(4)
1C9	1N2	1C13	106(4)
1C10	1N2	1C13	104.7(33)
1N1	1C1	1C2	108(4)
1C1	1C2	1C3	104.9(26)
1C2	1C3	1C4	105.1(30)
1N1	1C4	1C3	107(4)
1N1	1C5	1C6	115(4)
1C5	1C6	1C7	114(26)
1C6	1C7	1C8	114(4)
1C7	1C8	1N2	111(16)
1C11	1C10	1N2	107(4)
1C10	1C11	1C12	104.6(24)
1C11	1C12	1C13	104.6(31)
1C12	1C13	1N2	105(4)

2C1	2N1	2C4	106.1(33)
2C1	2N1	2C5	113(4)
2C1	2N1	2C	107(4)
2C4	2N1	2C5	114(4)
2C4	2N1	2C	107(4)
2C5	2N1	2C	110(4)
2N1	2C1	2C2	106(4)
2C1	2C2	2C3	105.9(26)
2C2	2C3	2C4	104.3(30)
2N1	2C4	2C3	106(4)
2N1	2C5	2C6	113(4)
2C5	2C6	2C7	114(4)
2C6	2C7	2C8	112(4)
2C7	2C8	2N2	113(4)
2C8	2N2	2C10	112(4)
2C8	2N2	2C13	112(4)
2C8	2N2	2C9	111(4)
2C10	2N2	2C9	108(4)
2C10	2N2	2C13	109(15)
2C13	2N2	2C9	108(4)
2N2	2C10	2C11	106(4)

7C10	7C11	7C12	105.8(26)
7C11	7C12	7C13	104.4(30)
7N2	7C13	7C12	106(4)