



Received 18 October 2021 Accepted 29 October 2021

Edited by A. M. Chippindale, University of Reading, England

**Keywords:** caesium lutetium(III) silicate; crystal structure; single-chain silicate.

CCDC reference: 2118472

**Supporting information**: this article has supporting information at journals.iucr.org/e



# Crystal structure of chain silicate Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>

## Hiromitsu Kimura<sup>a</sup> and Hisanori Yamane<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>Inorganic Materials Laboratory, Science & Innovation Center, Mitsubishi Chemical Corporation, 1000 Kamoshida-cho, Aoba-ku, Yokohama-shi, Kanagawa, 227-8502, Japan, and <sup>b</sup>Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Material, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577, Japan. \*Correspondence e-mail: hisanori.yamane.a1@tohoku.ac.jp

A caesium lutetium(III) silicate,  $Cs_3LuSi_3O_9$ , was synthesized by heating a pelletized mixture of  $Cs_2CO_3$ ,  $Lu_2O_3$  and  $SiO_2$  at 1273 K. Single crystals of the title compound were grown in a melted area of the pellet.  $Cs_3LuSi_3O_9$  is a single-chain silicate (orthorhombic space group *Pna2*<sub>1</sub>) with a chain periodicity of six and is isostructural with  $Cs_3RE^{III}Ge_3O_9$  (RE = Pr, Nd and Sm–Yb). The two symmetry-dependent  $[Si_6O_{18}]^{12-}$  chains in the unit cell lie parallel to the [011] direction. The  $Lu^{3+}$  ions are octahedrally coordinated by O atoms of the silicate chains, generating a three-dimensional framework.  $Cs^+$  ions are located in the voids in the framework.

### 1. Chemical context

A lutetium(III) silicate, Lu<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>, containing the highest atomic weight rare-earth element, has been studied as the host crystal of a scintillator for radiation detection (Dorenbos et al., 1994; Melcher & Schweitzer, 1992). Our research group recently reported the syntheses and crystal structures of a new oxide and oxynitride containing Lu; namely, Lu<sub>4</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>9</sub> (Simura & Yamane, 2020a) and  $Ba_{0.9}Ce_{0.1}LuAl_{0.2}Si_{3.8}N_{6.9}O_{0.1}$ (Simura & Yamane, 2020b). In the present study, a new quaternary single-chain silicate, Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>, was found during an exploratory study of the Cs-Lu-Si-O system. In other quaternary silicate systems containing alkali-metal (A) and rare-earth (RE) elements, a number of single-chain silicates have recently been reported: LiScSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> (space groups C2/c,  $P2_1/c$ ; Arlt & Angel, 2000; Redhammer & Roth, 2004), NaYSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> ( $P2_1/c$ ; Többens et al., 2005), NaTbSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> ( $P2_1/c$ ; Schäfer et al., 2012), Na<sub>3</sub>YSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>; Maksimov et al., 1980), Na<sub>3</sub>*RE*Si<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (*RE* = Y, Dy, Gd,  $P2_12_12_1$ ; Shannon *et al.*, 1980), Na<sub>3</sub>*RE*Si<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (*RE* = Y, Er, *P*2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>; Ananias *et al.*, 2002), Na<sub>3</sub>TmSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>; Kahlenberg et al., 2015), K<sub>3</sub>HoSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>  $(Pm2_1n; Ponomarev et al., 1988), K_3RESi_3O_9 (RE = Ho, Tm,$ Lu,  $Pm2_1n$ ; Filipenko et al., 1988), K<sub>3</sub>TbSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> ( $Pm2_1n$ ; Kostova et al., 2007), and K<sub>2.9</sub>Rb<sub>0.1</sub>ErSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (P1; Wierzbicka-Wieczorek et al., 2010). Na<sup>+</sup> ion conduction and photoluminescence have been investigated on doping Eu, Tb and Tm into Na<sub>3</sub>YSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (Shannon et al., 1980; Kim et al., 1985; Banks & Kim, 1985; Ananias et al., 2006; Zhang et al., 2008a,b). Photoluminescence properties have also been characterized for Na<sub>3</sub>ErSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (Ananias *et al.*, 2002) and K<sub>3</sub>*RE* Si<sub>3</sub>O<sub>9</sub> (*RE* = Y, Eu, Tb; Kostova et al., 2007). A series of germanates with a new structure type,  $Cs_3RE^{III}Ge_3O_9$  (*RE* = Pr, Nd and Sm-Yb, space group  $Pna2_1$ ) have recently been reported (Morrison *et* al., 2019). In the present study, we report the synthesis and structural characterization of Cs3LuSi3O9, the first silicate found to be isostructural with the germanates.

#### 2. Structural commentary

Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> is a sechser single-chain silicate, which crystallizes in the orthorhombic space group, Pna21. The chains of Si1-, Si2- and Si3-centered oxygen tetrahedra are aligned along the [110] direction (Figs. 1 and 2). The period of the  $SiO_4$  zigzag chain is Si1-Si2-Si3-Si1-Si2-Si3, and the chain can be described as an unbranched (**uB**) single chain  $1^{1}_{\infty}$  with a six- $[SiO_4]$ -tetrahedra repeat unit  $[{}^6Si_6O_{18}]$ :  $\{uB, 1^1_\infty\}[{}^6Si_6O_{18}]$ , in accordance with the classification of Liebau (1985). The Si-O<sub>bridge</sub> bond lengths in the title compound lie in the range 1.650 (4)–1.664 (4) Å, and are slightly longer than the Si- $O_{\text{terminal}}$  bond lengths [in the range 1.594 (4)–1.609 (4) Å; Table 1) and are in agreement with values found in other silicates. The bond-valence sums (BVSs) calculated for Si1, Si2, and Si3 using the bond-valence parameters presented by Gagné & Hawthorne (2015), are 3.903, 3.966, and 3.948, respectively, which closely match the value of 4 expected for Si<sup>IV</sup>.

The angles Si1–Si2–Si3, Si2–Si3–Si1 and Si3–Si1–Si2 in the SiO<sub>4</sub>-linked zigzag chain in Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> are 133.26 (7), 128.41 (7) and 134.64 (7)°, respectively. These values are larger than the angles observed in K<sub>6</sub>Lu<sub>2</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>18</sub> (space group  $Pm2_1n$ , Filipenko *et al.*, 1988), a sechser single-chain silicate with an Si1–Si2–Si3–Si3–Si2–Si1 sequence (and angles: Si1– Si2–Si3 = 80.45, Si2–Si3–Si3 = 123.65 and Si3–Si3–Si2 = 123.65°), reflecting the difference in ionic size between Cs<sup>+</sup> and K<sup>+</sup>.

Lu1 has sixfold coordination and is located in a distorted O octahedron, which connects two SiO<sub>4</sub> single chains, as shown in Fig. 2. All the oxygen atoms of the Lu1-based octahedron are shared with SiO<sub>4</sub> tetrahedra. The Lu1–O bond distances range from 2.203 (4) to 2.255 (4) Å, and the average distance (2.2282 Å) is in good agreement with the corresponding value reported for K<sub>6</sub>Lu<sub>2</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>18</sub> (Filipenko *et al.*, 1988). A BVS value of 2.939 was obtained, which is close to the valence of 3 expected for Lu<sup>III</sup>.



Figure 1

Atomic arrangement of Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> shown with displacement ellipsoids at the 99% probability level. [Symmetry codes: (i)  $-x + \frac{1}{2}$ ,  $y + \frac{1}{2}$ ,  $z + \frac{1}{2}$ ; (ii) -x, -y,  $z + \frac{1}{2}$ ; (iii)  $x + \frac{1}{2}$ ,  $-y + \frac{1}{2}$ , z; (iv) x, y, z + 1; (v)  $-x + \frac{1}{2}$ ,  $y - \frac{1}{2}$ ,  $z + \frac{1}{2}$ ; (vi) -x, 2 - y,  $z + \frac{1}{2}$ ; (vii)  $x - \frac{1}{2}$ ,  $-y + \frac{1}{2}$ , z; (ivii) x, y + 1, z; (ix)  $-x + \frac{1}{2}$ ,  $y - \frac{1}{2}$ ,  $z - \frac{1}{2}$ ; (x) -x, 1 - y,  $z - \frac{1}{2}$ ; (xi) x, y, z - 1].

Table 1			
Selected	bond	lengths	(Å).

	0 ()		
Cs1-O3	2.869 (4)	Cs3–O5	3.057 (4)
$Cs1-O4^{i}$	2.972 (4)	Cs3–O4	3.066 (4)
$Cs1-O1^{ii}$	3.028 (4)	Cs3–O3 <sup>viii</sup>	3.335 (5)
Cs1-O8 <sup>iii</sup>	3.069 (4)	Cs3–O8	3.354 (4)
$Cs1-O2^{ii}$	3.074 (5)	Cs3-O6	3.599 (5)
$Cs1-O7^{iv}$	3.485 (4)	$Cs3-O6^{ix}$	3.857 (5)
$Cs1-O2^{v}$	3.570 (5)	$Cs3-O7^{x}$	3.942 (4)
Cs1-O9 <sup>iii</sup>	4.044 (4)	Cs3–O7	4.030 (4)
$Cs1-O1^{i}$	4.050 (4)	$Lu1 - O3^{xi}$	2.203 (4)
Cs1-O6	4.084 (4)	Lu1-O2	2.210 (4)
Cs1-O5 <sup>iii</sup>	4.092 (4)	$Lu1 - O9^{vi}$	2.212 (4)
Cs1-O7 <sup>iii</sup>	4.156 (4)	Lu1-O4	2.236 (4)
$Cs1-O6^{vi}$	4.354 (4)	Lu1-O5	2.247 (4)
$Cs2-O2^{ii}$	2.980 (4)	Lu1-O1	2.255 (4)
Cs2–O9 <sup>iii</sup>	3.095 (4)	Si1-O5	1.606 (4)
Cs2-O6	3.130 (4)	Si1-O9	1.609 (4)
Cs2-O8	3.143 (4)	Si1-O7	1.661 (4)
$Cs2-O5^{m}$	3.170 (5)	$Si1 - O6^{vii}$	1.662 (4)
Cs2-O7	3.221 (4)	Si2-O4 <sup>iii</sup>	1.599 (4)
Cs2–O3 <sup>vii</sup>	3.752 (5)	Si2-O2 <sup>iv</sup>	1.605 (4)
Cs2-O1	3.824 (4)	Si2-O6	1.650 (4)
$Cs2-O4^{iii}$	3.926 (4)	Si2-O8	1.659 (4)
$Cs2-O4^{i}$	4.106 (4)	Si3–O3 <sup>vii</sup>	1.594 (4)
$Cs2-O8^{vi}$	4.224 (4)	Si3–O1 <sup>xii</sup>	1.608 (4)
$Cs2-O9^{iv}$	4.228 (4)	Si3-07	1.655 (4)
Cs3-O1	2.936 (4)	Si3-O8	1.664 (4)
Cs3–O9 <sup>iv</sup>	2.983 (4)		

Symmetry codes: (i)  $-x, -y + 1, z + \frac{1}{2}$ ; (ii)  $-x, -y, z + \frac{1}{2}$ ; (iii)  $-x + \frac{1}{2}, y - \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ ; (iv)  $-x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ ; (v) x, y, z + 1; (vi)  $x - \frac{1}{2}, -y + \frac{1}{2}, z$ ; (vii)  $-x + \frac{1}{2}, y - \frac{1}{2}, z - \frac{1}{2}$ ; (viii)  $-x, -y + 1, z - \frac{1}{2}$ ; (ix)  $-x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z - \frac{1}{2}$ ; (x) x, y + 1, z; (xi) x, y, z - 1; (xii)  $x + \frac{1}{2}, -y + \frac{1}{2}, z$ .

The three distinct Cs sites, Cs1, Cs2 and Cs3, are situated in the voids of the three-dimensional framework composed of the silicate single chains connected by the Lu atoms. The Cs1 and Cs2 ions are surrounded by twelve O atoms, while the Cs3 ion is surrounded by ten O atoms. The BVS values for Cs1,





A polyhedral representation of  $Cs_3LuSi_3O_9$  showing the Lu1-centered oxygen octahedra (green) and Si-centered oxygen tetrahedra (blue) linked together to form a 3-D framework with Cs ions (purple) contained in the framework voids.

The Madelung energy per formula unit for Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>, calculated using the structure parameters determined here within the *VESTA* program (Momma & Izumi, 2011), is  $-57,100 \text{ kJ mol}^{-1}$ , which is close to the value of  $-56,700 \text{ kJ mol}^{-1}$  (difference  $\Delta = 0.6\%$ ) calculated from the equation: 3/2Cs<sub>2</sub>O + 1/2 Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 3SiO<sub>2</sub> = Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> using enthalpy values within *VESTA* of -2,200, -15,600 and  $-15,200 \text{ kJ mol}^{-1}$  for Cs<sub>2</sub>O, Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SiO<sub>2</sub>, respectively, together with crystal-structure data for Cs<sub>2</sub>O (Tsai *et al.*, 1956), Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Saiki *et al.*, 1985) and SiO<sub>2</sub> (d'Amour *et al.*, 1979). The Madelung potentials for Cs1–Cs3 (-8.7 to -9.2 V), Lu1 (-32.8 V), and Si1–Si3 (-48.0 V) in Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub> are in good agreement with those obtained in *VESTA* for Cs (-9.0 V) in Cs<sub>2</sub>O, Lu (-31.3, -31.6 V) in Lu<sub>2</sub>O, and Si (-48.1 V) in SiO<sub>2</sub>.

### 3. Synthesis and crystallization

Powders of Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (99.9%, Kojundo Chemical Lab. Co., Ltd.), Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (99.999%, Nippon Yttrium Co., Ltd.) and SiO<sub>2</sub> (99.999%, Mitsuwa Chemicals Co., Ltd.) were used as starting materials. The Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and SiO<sub>2</sub> powders were heated at 1273 K for 10 h in air, and stored in an air oven heated at 453 K, while the Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> powder was heated at 673 K for 10 h and stored in an Ar-gas-filled glove box prior to use. 0.1955 g of Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> powder were weighed in the glove box, and mixed with 0.0796 g of Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and 0.00120 g of SiO<sub>2</sub> (Cs:Lu:Si molar ratio = 3:1:0.5) in an agate mortar and pestle in air, and then pressed into a 5 mm diameter pellet. The pellet was heated at 1273 K for 3 h on a Pt plate in air, and cooled in the furnace by shutting off the power to the heater. The shape of the pellet was maintained; however, part of the sample had melted and solidified around the pellet on the Pt plate. Colourless transparent prismatic single crystals of around 0.1 mm in length were obtained from the melted part of the pellet. The unmelted part of the pellet consisted of Lu2O3 and Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>, which was verified by powder X-ray diffraction using a Bruker AXS, D2 PHASER diffractometer with Cu Ka radiation.

### 4. Refinement

Crystal data, data collection and structure refinement details are summarized in Table 2. Atomic coordinates and site labels were standardized with *Structure Tidy* (Gelato & Parthé, 1987) implemented in *PLATON* (Spek, 2020). The crystal structure was refined with consideration of twinning by inversion, which revealed a minor contribution of 3.1 (8)% for the inversionrelated twin component.

Table 2	
Experimental	details

Crystal data	
Chemical formula	Cs <sub>3</sub> LuSi <sub>3</sub> O <sub>9</sub>
Mr	801.97
Crystal system, space group	Orthorhombic, Pna21
Temperature (K)	300
a, b, c (Å)	13.3322 (3), 6.8618 (2), 12.2313 (3)
$V(Å^3)$	1118.95 (5)
Ζ	4
Radiation type	Μο Κα
$\mu \text{ (mm}^{-1})$	18.79
Crystal size (mm)	$0.09 \times 0.05 \times 0.03$
Data collection	
Diffractometer	Bruker APEXII CCD
Absorption correction	Multi-scan ( <i>SADABS</i> ; Bruker, 2018)
$T_{\min}, T_{\max}$	0.39, 0.58
No. of measured, independent and observed $[I > 2\sigma(I)]$ reflections	24311, 3094, 3085
R <sub>int</sub>	0.034
$(\sin \theta / \lambda)_{\max} ( \mathring{A}^{-1} )$	0.695
Refinement	
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$	0.014, 0.036, 1.11
No. of reflections	3094
No. of parameters	147
No. of restraints	1
$\Delta \rho_{\rm max},  \Delta \rho_{\rm min}  ({\rm e}  {\rm \AA}^{-3})$	1.87, -1.18
Absolute structure	Refined as an inversion twin
Absolute structure parameter	0.031 (8)

Computer programs: *BIS*, *APEX3* and *SAINT* (Bruker, 2018), *SHELXT2014/5* (Sheldrick, 2015*a*), *SHELXL2014/7* (Sheldrick, 2015*b*), *VESTA* (Momma & Izumi, 2011) and *publCIF* (Westrip, 2010).

### Acknowledgements

The authors thank Eiko Kobayashi and Yuko Suzuki for their assistance with the sample preparation.

### **Funding information**

This work was supported in part by Mitsubishi Chemical Corporation (a joint research project of Tohoku University and Mitsubishi Chemical Corporation, J190002825).

### References

- Amour, H. d', Denner, W. & Schulz, H. (1979). Acta Cryst. B35, 550–555.
- Ananias, D., Carlos, L. D. & Rocha, J. (2006). Opt. Mater. 28, 582-586.
- Ananias, D., Rainho, J. P., Ferreira, A., Lopes, M., Morais, C. M., Rocha, J. & Carlos, L. D. (2002). *Chem. Mater.* **14**, 1767–1772.
- Arlt, T. & Angel, R. J. (2000). Phys. Chem. Miner. 27, 719-731.
- Banks, E. & Kim, C. H. (1985). J. Electrochem. Soc. 132, 2617–2621.
- Bruker (2018). *BIS, APEX3, SAINT* and *SADABS*. Bruker AXS inc., Madison, Wisconsin, USA.
- Dorenbos, P., van Eijk, C. W. E., Bos, A. J. J. & Melcher, C. L. (1994). *J. Lumin.* **60–61**, 979–982.
- Filipenko, O. S., Ponomarev, V. I., Dimitrova, O.V. & Atovmyan, L. O. (1988). *Kristallografiya*, **33**, 1122–1127.
- Gagné, O. C. & Hawthorne, F. C. (2015). Acta Cryst. B71, 562–578.
- Gelato, L. M. & Parthé, E. (1987). J. Appl. Cryst. 20, 139-143.
- Kahlenberg, V., Mörtl, A. & Krüger, H. (2015). Z. Kristallogr. 230, 87–95.
- Kim, C. H., Qiu, B. & Banks, E. (1985). J. Electrochem. Soc. 132, 1340–1345.

# research communications

- Kostova, M. H., Ananias, D., Paz, F. A. A., Ferreira, A., Rocha, J. & Carlos, L. D. (2007). J. Phys. Chem. B, **111**, 3576–3582.
- Liebau, F. (1985). Structural Chemistry of Silicates. Berlin: Springer-Verlag.
- Maksimov, B. A., Kalinin, V. R., Merinov, B. V., Ilyukhin, V. V. & Belov, N. V. (1980). Dokl. Akad. Nauk SSSR, 252, 875–879.
- Melcher, C. L. & Schweitzer, J. S. (1992). *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **39**, 502–505.
- Momma, K. & Izumi, F. (2011). J. Appl. Cryst. 44, 1272-1276.
- Morrison, G., Spagnuolo, N. R., Karakalos, S. G. & Zur Loye, H.-C. (2019). *Inorg. Chem.* 58, 8702–8709.
- Ponomarev, V. I., Filipenko, O. S. & Atovmyan, L. O. (1988). *Kristallografiya*, **33**, 98–104.
- Redhammer, G. J. & Roth, G. (2004). Z. Krist. Cryst. Mater. 219, 585–605.
- Saiki, A., Ishizawa, N., Mizutani, N. & Kato, M. (1985). Yogyo Kyokaishi **93**, 649–654.
- Schäfer, M. C., Zitzer, S. & Schleid, T. (2012). Z. Kristallogr. 227, 476– 482.

- Shannon, R. D., Gier, T. E., Foris, C. M., Nelen, J. A. & Appelman, D. E. (1980). Phys. Chem. Miner. 5, 245–253.
- Sheldrick, G. M. (2015a). Acta Cryst. A71, 3-8.
- Sheldrick, G. M. (2015b). Acta Cryst. C71, 3-8.
- Simura, R. & Yamane, H. (2020a). Acta Cryst. E76, 752-755.
- Simura, R. & Yamane, H. (2020b). Acta Cryst. E76, 1708-1711.
- Spek, A. L. (2020). Acta Cryst. E76, 1-11.
- Többens, D. M., Kahlenberg, V. & Kaindl, R. (2005). *Inorg. Chem.* 44, 9554–9560.
- Tsai, K.-R., Harris, P. M. & Lassettre, E. N. (1956). J. Phys. Chem. 60, 338–344.
- Westrip, S. P. (2010). J. Appl. Cryst. 43, 920-925.
- Wierzbicka-Wieczorek, M., Kolitsch, U., Nasdala, L. & Tillmanns, E. (2010). Miner. Mag. 74, 979–990.
- Zhang, Z., Wang, Y. & Zhang, J. (2008b). Mater. Lett. 62, 846–848.
- Zhang, Z., Wang, Y., Zhang, J. & Hao, Y. (2008a). Mater. Res. Bull. 43, 926–931.

# supporting information

Acta Cryst. (2021). E77, 1239-1242 [https://doi.org/10.1107/S2056989021011439]

Crystal structure of chain silicate Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>

# Hiromitsu Kimura and Hisanori Yamane

## **Computing details**

Data collection: *BIS* (Bruker, 2018); cell refinement: *APEX3* (Bruker, 2018); data reduction: *SAINT* (Bruker, 2018); program(s) used to solve structure: *SHELXT2014/5* (Sheldrick, 2015a); program(s) used to refine structure: *SHELXL2014/7* (Sheldrick, 2015b); molecular graphics: *VESTA* (Momma & Izumi, 2011); software used to prepare material for publication: *publCIF* (Westrip, 2010).

Tricaesium lutetium trisilicate

## Crystal data

Cs<sub>3</sub>LuSi<sub>3</sub>O<sub>9</sub>  $M_r = 801.97$ Orthorhombic, *Pna*2<sub>1</sub> a = 13.3322 (3) Å b = 6.8618 (2) Å c = 12.2313 (3) Å V = 1118.95 (5) Å<sup>3</sup> Z = 4F(000) = 1400

### Data collection

Bruker APEXII CCD
diffractometer
Radiation source: micro focus sealed tube
Detector resolution: 7.3910 pixels mm <sup>-1</sup>
$\varphi$ and $\omega$ scans
Absorption correction: multi-scan
(SADABS; Bruker, 2018)
$T_{\min} = 0.39, T_{\max} = 0.58$

### Refinement

Refinement on  $F^2$ Least-squares matrix: full  $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.014$  $wR(F^2) = 0.036$ S = 1.113094 reflections 147 parameters 1 restraint  $D_x = 4.761 \text{ Mg m}^{-3}$ Mo Ka radiation,  $\lambda = 0.71073 \text{ Å}$ Cell parameters from 351 reflections  $\theta = 3.1-31.4^{\circ}$  $\mu = 18.79 \text{ mm}^{-1}$ T = 300 KPrismatic, translucent colourless  $0.09 \times 0.05 \times 0.03 \text{ mm}$ 

24311 measured reflections 3094 independent reflections 3085 reflections with  $I > 2\sigma(I)$  $R_{int} = 0.034$  $\theta_{max} = 29.6^{\circ}, \theta_{min} = 3.1^{\circ}$  $h = -18 \rightarrow 18$  $k = -9 \rightarrow 9$  $l = -16 \rightarrow 16$ 

$$\begin{split} &w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + 2.7745P] \\ &where P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3 \\ &(\Delta/\sigma)_{max} < 0.001 \\ &\Delta\rho_{max} = 1.87 \text{ e } \text{Å}^{-3} \\ &\Delta\rho_{min} = -1.18 \text{ e } \text{Å}^{-3} \\ &\text{Extinction correction: SHELXL2017/1} \\ &(\text{Sheldrick 2015b}) \\ &\text{Extinction coefficient: } 0.00160 (14) \\ &\text{Absolute structure: Refined as an inversion twin} \\ &\text{Absolute structure parameter: } 0.031 (8) \end{split}$$

## Special details

**Geometry**. 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.

Refinement. Refined as a two-component inversion twin.

	x	у	Ζ	$U_{ m iso}$ */ $U_{ m eq}$
Cs1	0.06219 (4)	0.10542 (6)	0.71151 (4)	0.02535 (10)
Cs2	0.16894 (3)	0.05816 (7)	0.42547 (4)	0.02637 (11)
Cs3	0.17391 (3)	0.55846 (6)	0.28251 (3)	0.02153 (9)
Lu1	0.04370 (2)	0.34863 (3)	0.03915 (2)	0.00583 (6)
Sil	0.28028 (11)	0.1098 (2)	0.08655 (12)	0.0070 (2)
Si2	0.38805 (11)	0.3492 (2)	0.49763 (13)	0.0064 (2)
Si3	0.41034 (10)	0.1056 (2)	0.29080 (12)	0.0068 (2)
01	0.0020 (3)	0.3178 (6)	0.2170 (3)	0.0118 (7)
O2	0.0386 (3)	0.0346 (6)	-0.0005 (4)	0.0113 (7)
O3	0.0643 (3)	0.4213 (6)	0.8652 (3)	0.0144 (8)
O4	0.0722 (3)	0.6662 (6)	0.0659 (3)	0.0122 (8)
05	0.2041 (3)	0.2910 (6)	0.0854 (4)	0.0133 (8)
O6	0.2752 (3)	0.4080 (5)	0.5419 (4)	0.0138 (7)
O7	0.3124 (3)	0.0510 (6)	0.2136 (3)	0.0123 (7)
08	0.3669 (3)	0.2855 (6)	0.3688 (3)	0.0099 (7)
O9	0.3794 (3)	0.1463 (6)	0.0142 (3)	0.0137 (9)

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters  $(A^2)$ 

Atomic displacement parameters  $(Å^2)$ 

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Cs1	0.0370 (2)	0.01343 (17)	0.0257 (2)	0.00434 (16)	-0.01766 (18)	-0.00375 (16)
Cs2	0.02074 (19)	0.0252 (2)	0.0331 (2)	-0.00933 (15)	0.00863 (16)	-0.00168 (17)
Cs3	0.01763 (17)	0.0304 (2)	0.01654 (17)	0.00004 (14)	-0.00250 (13)	-0.00726 (16)
Lu1	0.00583 (9)	0.00579 (9)	0.00586 (9)	-0.00008 (6)	0.00064 (8)	0.00022 (8)
Si1	0.0049 (6)	0.0097 (6)	0.0063 (6)	-0.0004 (5)	-0.0006 (5)	-0.0016 (5)
Si2	0.0071 (6)	0.0052 (6)	0.0069 (5)	0.0001 (4)	0.0003 (5)	-0.0005 (5)
Si3	0.0076 (6)	0.0080 (6)	0.0047 (6)	0.0004 (5)	-0.0004 (5)	-0.0005 (5)
01	0.0123 (17)	0.0161 (17)	0.0070 (16)	0.0002 (15)	0.0029 (15)	0.0011 (15)
O2	0.0087 (16)	0.0064 (16)	0.0189 (18)	0.0019 (13)	0.0002 (15)	-0.0011 (15)
O3	0.023 (2)	0.0113 (17)	0.0088 (18)	-0.0047 (16)	0.0032 (16)	0.0011 (15)
O4	0.020(2)	0.0069 (17)	0.0092 (18)	0.0002 (14)	0.0028 (14)	0.0005 (13)
05	0.0085 (17)	0.0122 (17)	0.019 (2)	0.0029 (14)	-0.0036 (14)	-0.0031 (16)
O6	0.0117 (16)	0.0112 (15)	0.0186 (18)	-0.0005 (13)	0.0073 (18)	-0.007(2)
07	0.0124 (17)	0.0167 (19)	0.0079 (17)	-0.0043 (14)	-0.0009 (14)	0.0010 (16)
08	0.0121 (16)	0.0098 (16)	0.0077 (16)	0.0056 (14)	-0.0002 (14)	-0.0013 (14)
09	0.0071 (16)	0.026 (2)	0.008 (2)	-0.0012 (15)	0.0023 (12)	0.0015 (14)

Geometric parameters (Å, °)

$\overline{Cs1-O3}$	2.869 (4)	Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	4.3209 (16)
Cs1—O4 <sup>i</sup>	2.972 (4)	Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	4.3218 (5)
Cs1—O1 <sup>ii</sup>	3.028 (4)	Cs2—Si1	4.4174 (15)
Cs1—O8 <sup>iii</sup>	3.069 (4)	$Cs2$ — $Si3^{v}$	4.4636 (15)
$Cs1-O2^{ii}$	3.074 (5)	$C_{83} - O_1$	2.936 (4)
$Cs1 - O7^{iv}$	3485(4)	$C_{83} - O_{9iv}$	2.983 (4)
$Cs1-Si2^{v}$	3 5115 (16)	$C_{3}$	3,057,(4)
$Cs1 - O2^{vi}$	3 570 (5)	$C_{3} - 04$	3,066 (4)
$C_{s1}$ $C_{s2}$	3 5829 (15)	$C_{s3}$ $O_{1x}$	3 335 (5)
$C_{s1}$ $S_{i3iv}$	3.5852(15)	$C_{83} = 0.5$	3.355(3)
$C_{s1}$ $C_{s3}$	3 6383 (6)	Cs306	3 500 (5)
$C_{s1} = C_{s3}$	3,7000 (7)	$C_{s3} = S_{i3}$	3.599(3)
$C_{S1} = C_{S2}$	3.7303(7)	$C_{83} = -513$	3.0912(14) 3.7345(5)
$C_{S1}$ $C_{C_{S1}}$ $C_{C_{S1}}$	3.3722(10)	$C_{2}$ Siliv	3.7343(3)
Cal Luli	5.9977 (0) 4.0170 (5)	$C_{s3}$	2.7631(13)
Cs1—Lu1"	4.01/9(3)	$C_{s3} = 00^{-3}$	5.657(5)
$C_{s1} = 0^{1i}$	4.044 (4)	$C_{s3} = 07$	5.942 (4) 4.020 (4)
	4.050 (4)	$C_{ss} = 0/$	4.030 (4)
Cs1 = O6	4.084 (4)	$C_{s3}$ —S12 <sup>4</sup>	4.0992 (16)
$Cs1 = O5^{m}$	4.092 (4)	$C_{s3}$ —S12	4.1396 (15)
Cs1 = O/m	4.156 (4)		4.1512 (15)
$Cs1 - Cs2^n$	4.1958 (7)	Cs3—Lul <sup>1</sup>	4.3217 (5)
Cs1—S11 <sup>m</sup>	4.2791 (15)	$Cs3-O5^{W}$	4.349 (4)
$Cs1$ — $S11^{W}$	4.3275 (16)	$Cs3-O3^{x}$	4.405 (5)
Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	4.3481 (5)	Cs3—Si3	4.4276 (15)
Cs1—O6 <sup>v</sup>	4.354 (4)	$Cs3-O2^{iv}$	4.665 (4)
Cs2—O2 <sup>ii</sup>	2.980 (4)	Lu1—O3 <sup>xii</sup>	2.203 (4)
Cs2—O9 <sup>iii</sup>	3.095 (4)	Lu1—O2	2.210 (4)
Cs2—O6	3.130 (4)	Lu1—O9 <sup>v</sup>	2.212 (4)
Cs2—O8	3.143 (4)	Lu1—O4	2.236 (4)
Cs2—O5 <sup>iii</sup>	3.170 (5)	Lu1—O5	2.247 (4)
Cs2—O7	3.221 (4)	Lu1—O1	2.255 (4)
Cs2—Si3	3.6301 (15)	Si1—O5	1.606 (4)
Cs2—Si2	3.6470 (15)	Si1—O9	1.609 (4)
Cs2—Si1 <sup>iii</sup>	3.7153 (16)	Si1—O7	1.661 (4)
Cs2—O3 <sup>vii</sup>	3.752 (5)	Si1—O6 <sup>vii</sup>	1.662 (4)
Cs2—O1	3.824 (4)	Si2—O4 <sup>iii</sup>	1.599 (4)
Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	3.8495 (6)	Si2—O2 <sup>iv</sup>	1.605 (4)
Cs2—Cs3	3.8532 (7)	Si2—O6	1.650 (4)
Cs2—Si2 <sup>v</sup>	3.8996 (15)	Si2—08	1.659 (4)
Cs2—O4 <sup>iii</sup>	3.926 (4)	Si3—O3 <sup>vii</sup>	1.594 (4)
Cs2—O4 <sup>i</sup>	4.106 (4)	Si3—O1 <sup>xiii</sup>	1.608 (4)
Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	4.2145 (5)	Si3—O7	1.655 (4)
Cs2—O8 <sup>v</sup>	4.224 (4)	Si3—O8	1.664 (4)
Cs2—O9 <sup>iv</sup>	4.228 (4)		
O3—Cs1—O4 <sup>i</sup>	89.99 (12)	Cs2—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	77.894 (10)

O3—Cs1—O1 <sup>ii</sup>	135.45 (11)	O6 <sup>x</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	125.50 (6)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O1 <sup>ii</sup>	110.40 (11)	O7 <sup>xi</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	110.07 (6)
O3—Cs1—O8 <sup>iii</sup>	97.28 (11)	Cs1 <sup>ix</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	62.878 (9)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O8 <sup>iiii</sup>	159.80 (11)	O7—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	125.93 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O8 <sup>iii</sup>	52.20 (10)	Si2 <sup>x</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	114.23 (2)
O3—Cs1—O2 <sup>ii</sup>	142.44 (12)	Si2—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	93.01 (2)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O2 <sup>ii</sup>	52.85 (11)	Si1—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	139.30 (2)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O2 <sup>ii</sup>	66.14 (11)	O1—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	136.94 (10)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O2 <sup>ii</sup>	116.10 (11)	O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	37.42 (9)
$O3$ — $Cs1$ — $O7^{iv}$	47.76 (10)	O5—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	147.45 (6)
$O4^{i}$ —Cs1— $O7^{iv}$	80.27 (11)	$O4$ — $Cs3$ — $O5^{iv}$	144.37 (9)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O7 <sup>iv</sup>	167.63 (10)	O3 <sup>ix</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	94.74 (9)
$O8^{iii}$ —Cs1—O7 <sup>iv</sup>	118.38 (10)	$08$ —Cs3— $05^{iv}$	69.50 (9)
$O2^{ii}$ —Cs1—O7 <sup>iv</sup>	119.34 (11)	$06$ —Cs3— $05^{iv}$	38.20 (8)
$O3-Cs1-Si2^{v}$	115.30 (10)	$Cs1^{x}$ — $Cs3$ — $O5^{iv}$	79.00 (5)
$O4^{i}$ —Cs1—Si2 <sup>v</sup>	26.94 (8)	$Si3^v$ —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	116.40 (6)
$O1^{ii}$ —Cs1—Si2 <sup>v</sup>	85.11 (8)	Lu1—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	173.83 (5)
$O8^{iii}$ —Cs1—Si2 <sup>v</sup>	137.25 (8)	$Si1^{iv}$ —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	21.35 (6)
$O2^{ii}$ —Cs1—Si2 <sup>v</sup>	27.18 (8)	$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $O5^{iv}$	44.99 (6)
$07^{iv}$ —Cs1—Si2 <sup>v</sup>	104.17 (7)	$Cs2$ — $Cs3$ — $O5^{iv}$	86.95 (6)
O3—Cs1—O2 <sup>vi</sup>	57.13 (11)	$O6^{x}$ —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	110.86 (8)
$O4^{i}$ —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	127.58 (10)	O7 <sup>xi</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	72.09 (8)
$O1^{ii}$ —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	79.78 (10)	Cs1 <sup>ix</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	105.54 (6)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	46.44 (10)	O7—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	108.90 (8)
$O2^{ii}$ —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	138.69 (4)	Si2 <sup>x</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	128.38 (6)
$O7^{iv}$ —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	98.89 (10)	Si2—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	47.77 (6)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O2 <sup>vi</sup>	133.55 (7)	Si1—Cs3—O5 <sup>iv</sup>	129.50 (6)
O3—Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	123.02 (9)	Lu1 <sup>i</sup> —Cs3—O5 <sup>iv</sup>	65.06 (5)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	136.76 (8)	O1—Cs3—O3 <sup>x</sup>	177.42 (10)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	26.49 (8)	$O9^{iv}$ —Cs3—O3 <sup>x</sup>	81.75 (10)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	27.61 (8)	O5—Cs3—O3 <sup>x</sup>	114.58 (10)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	88.50 (8)	O4—Cs3—O3 <sup>x</sup>	114.36 (10)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	142.07 (7)	$O3^{ix}$ — $Cs3$ — $O3^{x}$	131.40 (8)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	110.74 (3)	O8—Cs3—O3 <sup>x</sup>	68.61 (9)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Si3 <sup>iii</sup>	67.14 (7)	O6—Cs3—O3 <sup>x</sup>	70.28 (8)
O3—Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	25.66 (9)	$Cs1^{x}$ — $Cs3$ — $O3^{x}$	40.39 (6)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	73.67 (8)	Si3 <sup>v</sup> —Cs3—O3 <sup>x</sup>	156.99 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	160.19 (8)	Lu1—Cs3—O3 <sup>x</sup>	140.28 (6)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	118.94 (8)	Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—O3 <sup>x</sup>	66.05 (6)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	124.88 (8)	$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $O3^{x}$	53.56 (6)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	27.02 (7)	$Cs2$ — $Cs3$ — $O3^{x}$	114.39 (5)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	100.61 (3)	$O6^{x}$ —Cs3—O3 <sup>x</sup>	71.59 (8)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	82.67 (7)	$O7^{xi}$ —Cs3—O3 <sup>x</sup>	36.25 (8)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si3 <sup>iv</sup>	146.38 (5)	$Cs1^{ix}$ — $Cs3$ — $O3^{x}$	110.35 (5)
O3—Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	84.33 (9)	O7—Cs3—O3 <sup>x</sup>	99.98 (8)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	140.57 (9)	Si2 <sup>x</sup> —Cs3—O3 <sup>x</sup>	94.57 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	100.56 (8)	Si2—Cs3—O3 <sup>x</sup>	60.24 (6)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	59.28 (7)	Si1—Cs3—O3 <sup>x</sup>	106.31 (6)

O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	126.61 (7)	Lu1 <sup>i</sup> —Cs3—O3 <sup>x</sup>	106.38 (6)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	67.16 (7)	$O5^{iv}$ —Cs3—O3 <sup>x</sup>	45.64 (8)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	145.59 (3)	O1—Cs3—Si3	99.62 (8)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	80.65 (6)	O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Si3	106.83 (8)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	75.63 (3)	O5—Cs3—Si3	60.20 (8)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs3 <sup>iii</sup>	85.49 (3)	O4—Cs3—Si3	120.26 (8)
O3—Cs1—Cs2	131.73 (8)	O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Si3	134.44 (8)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Cs2	73.65 (8)	O8—Cs3—Si3	18.99 (7)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs2	92.56 (8)	O6—Cs3—Si3	60.75 (6)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2	113.70 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Si3	51.62 (2)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs2	50.14 (8)	Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Si3	117.585 (15)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs2	84.35 (7)	Lu1—Cs3—Si3	94.51 (2)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Cs2	64.42 (3)	Sil <sup>iv</sup> —Cs3—Si3	85.87 (3)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Cs2	158.76 (6)	Cs2 <sup>xi</sup> —Cs3—Si3	128.83 (2)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2	97.44 (3)	Cs2—Cs3—Si3	51.43 (2)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs2	107.05 (3)	O6 <sup>x</sup> —Cs3—Si3	109.18 (6)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2	81.354 (14)	O7 <sup>xi</sup> —Cs3—Si3	105.86 (6)
O3—Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	75.86 (9)	Cs1 <sup>ix</sup> —Cs3—Si3	166.04 (2)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	149.52 (9)	O7—Cs3—Si3	21.92 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	66.62 (8)	Si2 <sup>x</sup> —Cs3—Si3	120.30 (3)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	22.99 (8)	Si2—Cs3—Si3	41.49 (3)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	132.67 (8)	Si1—Cs3—Si3	41.37 (3)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	107.56 (7)	Lu1 <sup>i</sup> —Cs3—Si3	124.39 (2)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	143.711 (19)	O5 <sup>iv</sup> —Cs3—Si3	88.38 (6)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	23.80 (7)	O3 <sup>x</sup> —Cs3—Si3	80.05 (6)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	47.22 (3)	O1—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	140.96 (10)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	99.69 (3)	O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	70.26 (10)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	65.73 (2)	O5—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	108.64 (9)
Cs2—Cs1—Si2 <sup>iii</sup>	135.44 (3)	O4—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	149.71 (10)
O3—Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	55.21 (9)	$O3^{ix}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	127.68 (9)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	49.57 (8)	O8—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	33.98 (8)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	109.01 (8)	O6—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	34.93 (8)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	121.27 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	49.04 (6)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	91.10 (7)	Si3 <sup>v</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	139.09 (6)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	82.54 (7)	Lu1—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	145.27 (5)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	65.80 (3)	Sil <sup>iv</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	46.50 (6)
$O2^{vi}$ —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	78.16 (6)	$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	77.70 (5)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	125.02 (3)	Cs2—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	74.01 (5)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	57.95 (2)	$O6^{x}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	108.15 (8)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	139.522 (15)	$O7^{xi}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	76.54 (8)
Cs2—Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	123.056 (15)	$Cs1^{ix}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	142.26 (5)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs3 <sup>i</sup>	101.27 (2)	O7—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	73.28 (8)
O3—Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	158.89 (9)	Si2 <sup>x</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	131.79 (6)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	83.27 (8)	Si2—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	19.87 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	33.77 (8)	Si1—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	91.25 (6)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	83.25 (7)	Lu1 <sup>i</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	98.25 (5)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	33.03 (8)	$O5^{iv}$ — $Cs3$ — $O2^{iv}$	38.83 (8)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	148.51 (7)	O3 <sup>x</sup> —Cs3—O2 <sup>iv</sup>	40.38 (7)

Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	56.33 (2)	Si3—Cs3—O2 <sup>iv</sup>	51.49 (6)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	112.41 (7)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—O2	90.72 (17)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	55.64 (2)	$O3^{xii}$ —Lu1— $O9^{v}$	89.23 (16)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	156.94 (3)	O2—Lu1—O9 <sup>v</sup>	87.41 (15)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	113.351 (13)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—O4	84.26 (15)
Cs2—Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	65.251 (10)	O2—Lu1—O4	171.01 (16)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	100.24 (2)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—O4	99.95 (16)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—Lu1 <sup>ii</sup>	106.540 (13)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—O5	99.47 (17)
O3—Cs1—O9 <sup>iii</sup>	167.84 (11)	O2—Lu1—O5	85.00 (15)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	99.76 (10)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—O5	168.50 (16)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	47.21 (10)	O4—Lu1—O5	88.46 (16)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	75.96 (9)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—O1	169.68 (16)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	48.52 (9)	O2—Lu1—O1	96.45 (16)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	126.54 (9)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—O1	83.71 (14)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	75.64 (6)	O4—Lu1—O1	89.54 (15)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	119.97 (9)	O5—Lu1—O1	88.57 (16)
$Si3^{iii}$ —Cs1—O9 <sup>iiii</sup>	52.85 (6)	$O3^{xii}$ —Lu1—Cs3	128.68 (11)
$Si3^{iv}$ —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	152.56 (7)	02—Lu1—Cs3	124.41 (12)
$Cs3^{iii}$ — $Cs1$ — $O9^{iii}$	83.52 (6)	$O9^{v}$ —Lu1—Cs3	124.34 (10)
$Cs2$ — $Cs1$ — $O9^{iii}$	46.40 (6)	04—Lu1—Cs3	55.15 (11)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	98.55 (6)	05—Lu1—Cs3	54.89 (11)
$Cs3^{i}$ — $Cs1$ — $O9^{iii}$	136.95 (6)	01—Lu1—Cs3	51.82 (10)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—O9 <sup>iii</sup>	31.85 (6)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	136.55 (11)
$03-Cs1-O1^{i}$	41.66 (10)	O2—Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	49.32 (12)
$O4^{i}$ —Cs1—O1 <sup>i</sup>	50.75 (9)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	74.72 (11)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	151.28 (13)	O4—Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	137.59 (10)
$O8^{iii}$ — $Cs1$ — $O1^{i}$	138.93 (10)	O5—Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	93.78 (12)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	103.12 (9)	O1—Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	48.28 (11)
$O7^{iv}$ —Cs1—O1 <sup>i</sup>	40.89 (8)	Cs3—Lu1—Cs1 <sup>xiv</sup>	92.527 (12)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	77.64 (6)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	85.11 (11)
$O2^{vi}$ —Cs1—O1 <sup>i</sup>	95.63 (9)	O2—Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	42.36 (10)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	162.28 (6)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	45.48 (11)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	23.30 (6)	O4—Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	143.89 (12)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	106.68 (6)	O5—Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	127.35 (11)
Cs2—Cs1—O1 <sup>i</sup>	100.27 (6)	O1—Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	95.18 (11)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	116.95 (6)	Cs3—Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	146.201 (13)
$Cs3^i$ — $Cs1$ — $O1^i$	42.79 (6)	Cs1 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs2 <sup>xiv</sup>	54.773 (11)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	133.81 (6)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	60.24 (12)
O9 <sup>iiii</sup> —Cs1—O1 <sup>i</sup>	144.29 (8)	$O2$ —Lu1—Cs $2^x$	106.33 (10)
O3—Cs1—O6	86.68 (10)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	145.93 (11)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O6	81.18 (11)	O4—Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	64.69 (11)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O6	134.06 (9)	O5—Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	45.24 (12)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O6	117.91 (9)	O1—Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	124.05 (10)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—O6	91.97 (10)	Cs3—Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	73.508 (9)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—O6	39.11 (9)	Cs1 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	137.582 (10)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O6	92.07 (7)	Cs2 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs2 <sup>x</sup>	135.276 (14)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—O6	129.18 (9)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	49.34 (12)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—O6	123.58 (6)	O2—Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	87.93 (11)
	× · /		

# supporting information

Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—O6	65.15 (6)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	39.89 (10)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—O6	59.59 (6)	O4—Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	94.39 (11)
Cs2—Cs1—O6	46.65 (6)	O5—Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	147.96 (11)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O6	123.81 (7)	O1—Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	123.31 (10)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—O6	111.38 (5)	Cs3—Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	146.522 (6)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—O6	111.84 (6)	Cs1 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	105.046 (10)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—O6	87.65 (8)	Cs2 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	53.592 (9)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—O6	70.04 (8)	Cs2 <sup>x</sup> —Lu1—Cs3 <sup>ix</sup>	108.201 (11)
O3—Cs1—O5 <sup>iii</sup>	129.64 (11)	O3 <sup>xii</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	35.84 (11)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	120.73 (10)	O2—Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	54.92 (12)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	73.63 (10)	O9 <sup>v</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	86.28 (10)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	67.96 (10)	O4—Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	119.97 (10)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	81.39 (9)	O5—Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	96.34 (11)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	95.73 (9)	O1—Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	150.11 (11)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	105.63 (7)	Cs3—Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	148.898 (10)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	111.55 (9)	Cs1 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	101.881 (6)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	61.28 (7)	Cs2 <sup>xiv</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	58.658 (10)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	121.93 (6)	Cs2 <sup>x</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	77.345 (10)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	46.12 (6)	Cs3 <sup>ix</sup> —Lu1—Cs1 <sup>xii</sup>	54.916 (9)
Cs2—Cs1—O5 <sup>iii</sup>	47.24 (6)	O5—Si1—O9	113.2 (2)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	88.37 (7)	O5—Si1—O7	111.1 (2)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	170.29 (7)	O9—Si1—O7	109.9 (2)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	70.18 (6)	O5—Si1—O6 <sup>vii</sup>	111.1 (2)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	38.52 (8)	O9—Si1—O6 <sup>vii</sup>	108.3 (2)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—O5 <sup>iii</sup>	133.04 (9)	O7—Si1—O6 <sup>vii</sup>	102.7 (2)
O6—Cs1—O5 <sup>iii</sup>	63.06 (8)	O5—Si1—Cs2 <sup>x</sup>	57.96 (17)
O3—Cs1—O7 <sup>iii</sup>	133.13 (11)	O9—Si1—Cs2 <sup>x</sup>	55.27 (16)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	136.79 (10)	O7—Si1—Cs2 <sup>x</sup>	130.56 (15)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	40.17 (9)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2 <sup>x</sup>	126.64 (19)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	38.49 (9)	O5—Si1—Cs3 <sup>vii</sup>	99.52 (17)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	83.98 (10)	O9—Si1—Cs3 <sup>vii</sup>	48.86 (15)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	127.58 (11)	O7—Si1—Cs3 <sup>vii</sup>	148.73 (16)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	110.60 (6)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3 <sup>vii</sup>	70.82 (18)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	84.53 (9)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs3 <sup>vii</sup>	61.75 (3)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	23.21 (6)	O5—Si1—Cs3	38.26 (16)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	146.46 (6)	O9—Si1—Cs3	118.85 (17)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	61.85 (6)	O7—Si1—Cs3	74.22 (15)
Cs2—Cs1—O7 <sup>iii</sup>	77.07 (6)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3	130.97 (16)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	61.46 (6)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs3	75.78 (3)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	147.53 (6)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3	133.75 (4)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	55.59 (6)	O5—Si1—Cs1 <sup>x</sup>	72.45 (16)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	38.09 (8)	O9—Si1—Cs1 <sup>x</sup>	70.73 (16)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	168.40 (8)	O7—Si1—Cs1 <sup>x</sup>	74.49 (15)
O6—Cs1—O7 <sup>iii</sup>	100.87 (8)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs1 <sup>x</sup>	176.18 (16)
O5 <sup>iii</sup> —Cs1—O7 <sup>iii</sup>	38.11 (8)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs1 <sup>x</sup>	56.08 (2)
O3—Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	78.50 (8)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs1 <sup>x</sup>	110.23 (4)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	94.13 (9)	Cs3—Si1—Cs1 <sup>x</sup>	51.107 (19)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	61.44 (8)	O5—Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	140.66 (16)

O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	69.12 (7)	O9—Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	75.93 (16)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	96.98 (8)	O7—Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	99.98 (15)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	125.63 (7)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	35.89 (14)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	90.16 (3)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	117.07 (4)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	44.23 (6)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	56.30 (2)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	69.52 (3)	Cs3—Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	165.12 (4)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	99.35 (3)	Cs1 <sup>x</sup> —Si1—Cs2 <sup>vii</sup>	141.46 (4)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	122.524 (16)	O5—Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	158.36 (17)
Cs2—Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	145.944 (14)	O9—Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	85.41 (16)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	56.96 (2)	O7—Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	49.49 (15)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	55.983 (11)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	70.45 (15)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	82.056 (12)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	139.56 (4)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	107.77 (6)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	101.20 (3)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	95.50 (6)	Cs3—Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	123.71 (4)
O6—Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	164.48 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	105.74 (3)
O5 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	130.80 (6)	Cs2 <sup>vii</sup> —Si1—Cs1 <sup>vii</sup>	51.995 (19)
O7 <sup>iii</sup> —Cs1—Cs2 <sup>ii</sup>	92.69 (6)	O5—Si1—Cs2	81.83 (17)
O3-Cs1-Si1 <sup>iii</sup>	146.06 (10)	09—Si1—Cs2	143.52 (16)
$O4^{i}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	120.06 (8)	07—Si1—Cs2	35.83 (15)
$O1^{ii}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	52.03 (8)	$O6^{\text{vii}}$ Si1—Cs2	95.27 (19)
$08^{iii}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	60.28 (8)	$Cs^{2x}$ —Si1—Cs2	128.71 (4)
$O2^{ii}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	70.43 (8)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2	165.63 (4)
$07^{iv}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	117.66 (7)	Cs3— $Si1$ — $Cs2$	53.34 (2)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	97.41 (3)	$Cs1^{x}$ — $Si1$ — $Cs2$	83.89 (3)
$O2^{vi}$ —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	106.70 (7)	Cs2 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2	114.22 (3)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	44.42 (3)	Cs1 <sup>vii</sup> —Si1—Cs2	76.55 (3)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	143.83 (3)	O5—Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	115.92 (17)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	62.63 (2)	09—Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	130.79 (17)
Cs2—Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	54.42 (2)	07—Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	53.48 (14)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	83.16 (3)	O6 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	50.38 (18)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	157.30 (2)	Cs2 <sup>x</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	172.92 (4)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	50.86 (2)	Cs3 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	118.36 (4)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	22.07 (6)	Cs3—Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	101.51 (3)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	152.41 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	127.30 (3)
O6—Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	83.18 (6)	Cs2 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	64.81 (2)
O5 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	21.97 (6)	Cs1 <sup>vii</sup> —Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	47.326 (17)
O7 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	22.66 (6)	Cs2—Si1—Cs3 <sup>viii</sup>	49.844 (18)
Cs2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iii</sup>	111.76 (2)	$O4^{iii}$ —Si2— $O2^{iv}$	114.4 (2)
O3—Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	67.82 (8)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—O6	108.9 (2)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	70.07 (9)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—O6	110.9 (2)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	155.79 (8)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—O8	110.2 (2)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	130.11 (7)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—O8	109.0 (2)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	99.45 (8)	O6—Si2—O8	102.8 (2)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	21.25 (7)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs1 <sup>xiii</sup>	57.38 (15)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	89.24 (3)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs1 <sup>xiii</sup>	61.05 (17)
O2 <sup>vi</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	120.01 (7)	O6—Si2—Cs1 <sup>xiii</sup>	109.69 (19)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	144.25 (3)	O8—Si2—Cs1 <sup>xiii</sup>	147.47 (15)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	43.97 (3)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs2	87.84 (16)
	× /		× /

Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	71.69 (2)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs2	157.77 (17)
Cs2—Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	63.91 (2)	O6—Si2—Cs2	58.84 (15)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	125.74 (3)	O8—Si2—Cs2	59.33 (14)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	89.85 (2)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs2	139.33 (5)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	127.26 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	85.86 (17)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	108.59 (6)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	44.67 (15)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	47.69 (6)	O6—Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	155.59 (15)
O6—Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	22.56 (6)	O8—Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	89.49 (14)
O5 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	85.35 (6)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	61.26 (3)
O7 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	122.62 (6)	Cs2—Si2—Cs2 <sup>xiii</sup>	143.49 (4)
Cs2 <sup>ii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	142.25 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs1 <sup>x</sup>	138.82 (17)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs1—Si1 <sup>iv</sup>	105.74 (3)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs1 <sup>x</sup>	63.90 (17)
O3—Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	26.72 (8)	O6—Si2—Cs1 <sup>x</sup>	109.48 (18)
O4 <sup>i</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	108.40 (8)	O8—Si2—Cs1 <sup>x</sup>	46.25 (14)
O1 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	109.36 (8)	$Cs1^{xiii}$ —Si2— $Cs1^{x}$	120.44 (4)
O8 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	73.39 (7)	Cs2—Si2—Cs1 <sup>x</sup>	99.38 (4)
O2 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	150.75 (7)	$Cs2^{xiii}$ —Si2—Cs1 <sup>x</sup>	64.41 (3)
O7 <sup>iv</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	71.56 (7)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	40.57 (16)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	127.96 (3)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	119.76 (18)
$O2^{vi}$ —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	30.44 (7)	O6—Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	69.88 (18)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	97.11 (3)	O8—Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	130.14 (15)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	52.34 (2)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	62.82 (3)
Cs3 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	82.461 (11)	Cs2—Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	77.16 (3)
Cs2—Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	154.785 (14)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	117.73 (4)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	50.75 (2)	Cs1 <sup>x</sup> —Si2—Cs3 <sup>iii</sup>	176.34 (4)
Cs3 <sup>i</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	62.206 (10)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs3	146.46 (17)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	139.577 (14)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs3	98.88 (17)
O9 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	149.30 (6)	O6—Si2—Cs3	59.64 (19)
O1 <sup>i</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	66.27 (6)	O8—Si2—Cs3	51.01 (13)
O6—Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	108.21 (6)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3	153.99 (4)
O5 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	126.37 (6)	Cs2—Si2—Cs3	58.92 (2)
O7 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	111.62 (6)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3	117.51 (4)
Cs2 <sup>ii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	59.080 (10)	Cs1 <sup>x</sup> —Si2—Cs3	53.25 (2)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	131.45 (2)	Cs3 <sup>iii</sup> —Si2—Cs3	124.76 (4)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs1—Lu1 <sup>vi</sup>	92.64 (2)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs1	76.58 (17)
O3—Cs1—O6 <sup>v</sup>	109.67 (11)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs1	137.47 (17)
$O4^{i}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	36.49 (10)	O6—Si2—Cs1	34.26 (15)
$O1^{ii}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	75.04 (9)	O8—Si2—Cs1	104.15 (15)
$O8^{iii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	123.67 (9)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs1	101.58 (3)
$O2^{ii}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	37.56 (9)	Cs2—Si2—Cs1	45.200 (19)
$O7^{iv}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	116.34 (8)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs1	160.60 (4)
Si2 <sup>v</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	20.90 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —Si2—Cs1	134.92 (4)
$O2^{vi}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	112.95 (9)	Cs3 <sup>iii</sup> —Si2—Cs1	42.877 (16)
Si3 <sup>iii</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	101.46 (5)	Cs3—Si2—Cs1	81.89 (2)
Si3 <sup>iv</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	103.82 (6)	O4 <sup>iii</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	67.32 (16)
$Cs3^{iii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	164.12 (6)	O2 <sup>iv</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	89.29 (16)
Cs2—Cs1—O6 <sup>v</sup>	83.59 (6)	O6—Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	158.25 (15)
Si2 <sup>iii</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	123.87 (6)	O8—Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	61.41 (14)

$Cs3^{i}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	54.80 (6)	Cs1 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	86.70 (3)
$Lu1^{ii}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	54.89 (5)	Cs2—Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	99.41 (3)
$O9^{iii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	82.45 (8)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	45.395 (17)
$O1^{i}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	80.95 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	71.50 (2)
O6—Cs1—O6 <sup>v</sup>	112.32 (11)	Cs3 <sup>iii</sup> —Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	107.68 (3)
$O5^{iii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	118.59 (9)	Cs3—Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	110.86 (3)
$O7^{iii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	109.72 (8)	Cs1—Si2—Cs3 <sup>xiii</sup>	130.50 (3)
$Cs2^{ii}$ — $Cs1$ — $O6^{v}$	69.27 (6)	O3 <sup>vii</sup> —Si3—O1 <sup>xiii</sup>	114.7 (2)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	104.15 (6)	O3 <sup>vii</sup> —Si3—O7	108.3 (2)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs1—O6 <sup>v</sup>	105.97 (6)	O1 <sup>xiii</sup> —Si3—O7	110.7 (2)
$Lu1^{vi}$ —Cs1—O6 <sup>v</sup>	113.42 (6)	O3 <sup>vii</sup> —Si3—O8	109.6 (2)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—O9 <sup>iii</sup>	60.35 (11)	O1 <sup>xiii</sup> —Si3—O8	110.1 (2)
$O2^{ii}$ —Cs2—O6	116.46 (11)	07—Si3—08	102.7 (2)
$O9^{iii}$ —Cs2—O6	129.40 (12)	$O3^{vii}$ —Si3—Cs1 <sup>x</sup>	153.15 (18)
$O2^{ii}$ —Cs2—O8	162.29 (11)	$O1^{xiii}$ Si3 $Cs1^x$	57.13 (16)
$09^{iii}$ Cs2 $08^{iii}$	134.84 (10)	07—Si3—Cs1 <sup>x</sup>	98.21 (15)
$06-Cs^2-08$	48 68 (10)	08—Si3—Cs1 <sup>x</sup>	58 73 (14)
$02^{ii}$ Cs2 $030^{iii}$	100.65(11)	$03^{\text{vii}}$ Si3 $Cs1^{\text{vii}}$	51 18 (16)
$02^{11} - 032^{11} = 05^{111}$	50 71 (10)	$01^{\text{xiii}}$ Si3 $Cs1^{\text{vii}}$	94 80 (16)
$06-C_{2}^{2}-05^{11}$	85 47 (11)	07—Si3—Cs1 <sup>vii</sup>	73 12 (15)
0.00 = 0.000 = 0.0000000000000000000000	88 54 (10)	08—Si3—Cs1 <sup>vii</sup>	154 24 (16)
$02^{ii}$ Cs2 05	142 42 (12)	$C_{s1x}$ $S_{i3}$ $C_{s1vii}$	146 38 (5)
$02^{-1} = 032^{-1} = 07^{-1}$	112.12(12) 113.07(10)	$O_3^{\text{vii}}$ Si3— $C_8^2$	81 85 (18)
$06-C_{2}-07$	96 27 (10)	$01^{xii}$ Si3 Cs2	163 35 (17)
$08 - Cs^2 - 07$	48.07 (10)	$07 - 513 - Cs^2$	6253(15)
$05^{iii}$ $05^{2}$ $07$	99.82 (11)	$08 - 513 - Cs^2$	59 86 (14)
$02^{ii}$ $Cs2$ $07$	168 59 (9)	$C_{s1x}$ $S_{i3}$ $C_{s2}$	107 41 (4)
$02^{011} - C_{2}^{011} - S_{1}^{011}$	115 18 (8)	$C_{s1}^{vii}$ Si3 $C_{s2}^{vii}$	97 32 (4)
$06-C_{2}-S_{13}$	74 72 (8)	$O_3^{\text{vii}}$ $S_1^{\text{vii}}$ $C_8^{3^{\text{xiii}}}$	64.63(17)
$08 - Cs^2 - Si^3$	27 25 (7)	03 - 513 - 033	50 25 (15)
$05^{iii}$ Cs2 515	21.25 (7) 81.86 (8)	$07$ $513$ $Cs3^{xiii}$	131.83 (16)
0.5 - 0.52 - 0.53	27 12 (7)	$08$ Si3 $Cs3^{xiii}$	124.96 (15)
$O^{ii} = C_{s2} = S_{i2}$	$141 \ 91 \ (9)$	$C_{s1x}$ $S_{i3}$ $C_{s3x}$	124.90(13) 100.79(4)
$O_2 = C_{32} = S_{12}$	125 57 (8)	$C_{s1}^{vii}$ $S_{i3}$ $C_{s3}^{viii}$	66 63 (3)
06-032 - 512	26.81 (7)	$C_{32} = S_{13} = C_{33}^{33}$	$146\ 01\ (5)$
$08 - C_{s2} - S_{i2}$	27.00(7)	$O_3^{\text{vii}}$ $S_1^{\text{i}}$ $C_3^{\text{i}}$	13615(18)
05 - 052 - 0512	74.91 (8)	03 = 513 = 033	107 39 (16)
0.5 = 0.52 = 0.512 0.7 = 0.52 = 0.512	74.19(7)	07 - 513 - Cs3	65 40 (15)
$Si_3 = C_{s2} = Si_2$	49 50 (3)	08 = 513 = Cs3	40.97 (13)
$02^{ii}$ $Cs^2$ $Si^{1ii}$	49.50 (5) 80.29 (8)	$C_{s1x}$ $S_{13}$ $C_{s3}$	5275(2)
$O_2 = C_3 = S_1 = 0$	25 30 (8)	$C_{s1} \xrightarrow{-513} C_{s3}$	137.60(4)
$0^{-}$ $ 0^{-}$ $0^{-}$ $ 0^{-}$ $ 0^{-}$ $0^{-}$ $ 0^{-}$ $0^{-}$ $ 0^{-}$ $0^{-$	23.30(8) 108 13 (9)	$C_{2} = S_{13} = C_{23}$	157.00(4)
$O_8 C_{s2} S_{i1}^{iii}$	112 01 (7)	$C_{32}$ $S_{13}$ $C_{33}$	153.02(4)
$05^{iii}$ $Cs2$ $Si1^{iii}$	25.42 (8)	$O_{3}^{\text{vii}} = S_{13} = C_{33}^{\text{viii}}$	92.04(17)
0.5 - 0.52 - 0.511	107.81 (8)	$01^{xiii} S_{13} C_{2}^{xiii}$	56 69 (15)
$S_{1} = C_{2} = S_{11}$	08.82 (3)	$07 - 5i3 - C_{s}2^{xiii}$	159 60 (15)
Si2 = Cs2 = Si1	100.32(3)	$08 \text{ Si3 } C_{8}2^{\text{xiii}}$	70.05(13)
$512 - C_52 - 511$	100.32(3) 152 44 (10)	$C_{0} = \frac{1}{2} = \frac{1}{2$	(0.55(14))
$02 - 03 - 03^{}$	152.44 (10)	US1 — 513—US2 ·····	01./1(2)

O9 <sup>iiii</sup> —Cs2—O3 <sup>vii</sup>	92.16 (10)	Cs1 <sup>vii</sup> —Si3—Cs2 <sup>xiii</sup>	121.05 (4)
O6—Cs2—O3 <sup>vii</sup>	81.52 (9)	Cs2—Si3—Cs2 <sup>xiii</sup>	124.31 (4)
O8—Cs2—O3 <sup>vii</sup>	44.34 (10)	Cs3 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs2 <sup>xiii</sup>	55.42 (2)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—O3 <sup>vii</sup>	58.02 (10)	Cs3—Si3—Cs2 <sup>xiii</sup>	101.28 (3)
O7—Cs2—O3 <sup>vii</sup>	43.55 (10)	O3 <sup>vii</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	62.66 (17)
Si3—Cs2—O3 <sup>vii</sup>	24.87 (7)	O1 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	136.69 (16)
Si2—Cs2—O3 <sup>vii</sup>	54.92 (7)	O7—Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	46.17 (14)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O3 <sup>vii</sup>	73.99 (7)	O8—Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	110.86 (15)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Cs1	52.35 (9)	Cs1 <sup>x</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	142.47 (4)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1	71.11 (8)	Cs1 <sup>vii</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	47.709 (19)
O6—Cs2—Cs1	71.60 (8)	Cs2—Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	51.00 (2)
O8—Cs2—Cs1	118.44 (7)	Cs3 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	112.21 (3)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1	71.37 (8)	Cs3—Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	94.54 (3)
O7—Cs2—Cs1	165.18 (7)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs3 <sup>viii</sup>	154.16 (4)
Si3—Cs2—Cs1	138.07 (3)	O3 <sup>vii</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	160.88 (17)
Si2—Cs2—Cs1	91.75 (3)	$O1^{xiii}$ Si3—Cs $2^{x}$	60.62 (16)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1	69.50 (2)	O7—Si3—Cs2 <sup>x</sup>	61.07 (14)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Cs1	123.97 (7)	O8—Si3—Cs2 <sup>x</sup>	88.89 (14)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—O1	76.22 (10)	Cs1 <sup>x</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	42.697 (19)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—O1	122.55 (10)	Cs1 <sup>vii</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	109.74 (3)
O6—Cs2—O1	102.09 (11)	Cs2—Si3—Cs2 <sup>x</sup>	104.30 (3)
O8—Cs2—O1	96.35 (9)	Cs3 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	109.29 (3)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—O1	172.44 (10)	Cs3—Si3—Cs2 <sup>x</sup>	56.810 (18)
O7—Cs2—O1	79.40 (9)	Cs2 <sup>xiii</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	98.93 (3)
Si3—Cs2—O1	99.88 (6)	Cs3 <sup>viii</sup> —Si3—Cs2 <sup>x</sup>	106.84 (3)
Si2—Cs2—O1	111.86 (7)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Lu1	134.3 (2)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O1	147.70 (7)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs3	104.8 (2)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—O1	122.49 (9)	Lu1—O1—Cs3	91.04 (13)
Cs1—Cs2—O1	110.92 (6)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs1 <sup>xiv</sup>	96.38 (18)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	87.93 (8)	Lu1—O1—Cs1 <sup>xiv</sup>	97.95 (14)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	49.43 (7)	Cs3—O1—Cs1 <sup>xiv</sup>	140.01 (15)
O6—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	151.89 (7)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs2	102.74 (17)
O8—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	109.11 (7)	Lu1—O1—Cs2	122.93 (14)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	75.88 (8)	Cs3—O1—Cs2	68.04 (8)
O7—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	67.09 (7)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O1—Cs2	74.50 (9)
Si3—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	81.86 (3)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs1 <sup>ix</sup>	61.90 (14)
Si2—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	125.72 (3)	Lu1—O1—Cs1 <sup>ix</sup>	86.80 (12)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	60.02 (2)	Cs3—O1—Cs1 <sup>ix</sup>	67.65 (8)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	70.81 (7)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O1—Cs1 <sup>ix</sup>	151.28 (13)
Cs1—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	120.123 (14)	Cs2—O1—Cs1 <sup>ix</sup>	126.11 (11)
O1—Cs2—Cs3 <sup>viii</sup>	97.01 (7)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs2 <sup>xiv</sup>	102.96 (17)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Cs3	110.12 (8)	Lu1—O1—Cs2 <sup>xiv</sup>	57.87 (9)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3	167.48 (8)	Cs3—O1—Cs2 <sup>xiv</sup>	148.00 (12)
O6—Cs2—Cs3	61.02 (9)	$Cs1^{xiv}$ — $O1$ — $Cs2^{xiv}$	49.83 (6)
O8—Cs2—Cs3	56.18 (7)	Cs2—O1—Cs2 <sup>xiv</sup>	120.32 (10)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3	141.80 (8)	Cs1 <sup>ix</sup> —O1—Cs2 <sup>xiv</sup>	113.54 (9)
O7—Cs2—Cs3	68.79 (7)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs3 <sup>v</sup>	55.25 (14)
Si3—Cs2—Cs3	72.48 (2)	Lu1—O1—Cs3 <sup>v</sup>	114.01 (13)

Si2—Cs2—Cs3	66.93 (2)	Cs3—O1—Cs3 <sup>v</sup>	154.67 (12)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs3	167.22 (3)	$Cs1^{xiv}$ — $O1$ — $Cs3^{v}$	44.07 (5)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Cs3	96.75 (7)	Cs2—O1—Cs3 <sup>v</sup>	99.05 (8)
Cs1—Cs2—Cs3	110.429 (14)	Cs1 <sup>ix</sup> —O1—Cs3 <sup>v</sup>	108.26 (8)
O1—Cs2—Cs3	44.97 (6)	$Cs2^{xiv}$ — $O1$ — $Cs3^{v}$	57.29 (5)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—Cs3	125.956 (16)	Si3 <sup>v</sup> —O1—Cs2 <sup>v</sup>	11.56 (12)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	22.24 (8)	Lu1—O1—Cs2 <sup>v</sup>	132.00 (14)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	82.51 (8)	Cs3—O1—Cs2 <sup>v</sup>	116.19 (11)
O6—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	101.92 (7)	$Cs1^{xiv}$ — $O1$ — $Cs2^{v}$	85.77 (8)
O8—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	140.84 (7)	Cs2—O1—Cs2 <sup>v</sup>	104.28 (8)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	117.87 (8)	$Cs1^{ix}$ — $O1$ — $Cs2^{v}$	70.55 (6)
O7—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	138.99 (8)	$Cs2^{xiv}$ — $O1$ — $Cs2^{v}$	92.60 (7)
Si3—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	159.96 (3)	$Cs3^v$ — $O1$ — $Cs2^v$	43.78 (3)
Si2—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	128.69 (3)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Lu1	139.2 (2)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	100.95 (3)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs2 <sup>xiv</sup>	113.1 (2)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	174.67 (7)	Lu1—O2—Cs2 <sup>xiv</sup>	107.66 (14)
Cs1—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	54.31 (2)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs1 <sup>xiv</sup>	91.77 (19)
O1—Cs2—Si2 <sup>v</sup>	61.06 (6)	Lu1—O2—Cs1 <sup>xiv</sup>	97.65 (15)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—Si2 <sup>v</sup>	105.34 (2)	$Cs2^{xiv}$ — $O2$ — $Cs1^{xiv}$	77.51 (10)
$Cs3$ — $Cs2$ — $Si2^v$	88.51 (2)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs1 <sup>xii</sup>	92.29 (19)
$O2^{ii}$ —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	136.35 (11)	Lu1—O2—Cs1 <sup>xii</sup>	94.64 (14)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	101.65 (10)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs1 <sup>xii</sup>	79.10 (10)
O6—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	42.12 (9)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs1 <sup>xii</sup>	155.96 (14)
O8—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	42.65 (9)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs3 <sup>vii</sup>	61.25 (14)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	50.93 (9)	Lu1—O2—Cs3 <sup>vii</sup>	93.74 (12)
O7—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	80.39 (10)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>vii</sup>	126.68 (13)
Si3—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	53.29 (7)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>vii</sup>	148.21 (12)
Si2—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	24.01 (6)	Cs1 <sup>xii</sup> —O2—Cs3 <sup>vii</sup>	50.31 (5)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	76.35 (6)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs3 <sup>ix</sup>	144.7 (2)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	45.57 (9)	Lu1—O2—Cs3 <sup>ix</sup>	64.56 (10)
Cs1—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	84.84 (6)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>ix</sup>	53.55 (7)
O1—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	135.67 (8)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>ix</sup>	113.05 (10)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	110.60 (6)	Cs1 <sup>xii</sup> —O2—Cs3 <sup>ix</sup>	54.90 (6)
Cs3—Cs2—O4 <sup>iii</sup>	90.87 (6)	Cs3 <sup>vii</sup> —O2—Cs3 <sup>ix</sup>	98.65 (9)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—O4 <sup>iii</sup>	135.59 (7)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	44.36 (14)
$O2^{ii}$ —Cs2—O4 <sup>i</sup>	40.92 (10)	Lu1—O2—Cs3 <sup>viii</sup>	117.77 (15)
$O9^{iii}$ — $Cs2$ — $O4^{i}$	96.37 (10)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	113.50 (11)
O6—Cs2—O4 <sup>i</sup>	79.08 (9)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	51.75 (7)
$O8$ — $Cs2$ — $O4^i$	121.40 (9)	Cs1 <sup>xii</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	136.66 (10)
$O5^{iii}$ — $Cs2$ — $O4^{i}$	115.22 (9)	Cs3 <sup>vii</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	96.80 (7)
$O7$ — $Cs2$ — $O4^{i}$	143.93 (9)	Cs3 <sup>ix</sup> —O2—Cs3 <sup>viii</sup>	164.19 (9)
Si3—Cs2—O4 <sup>i</sup>	147.41 (6)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	15.48 (12)
Si2—Cs2—O4 <sup>i</sup>	105.88 (6)	Lu1—O2—Cs2 <sup>vii</sup>	129.20 (13)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O4 <sup>i</sup>	107.58 (6)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	120.81 (11)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—O4 <sup>i</sup>	159.99 (9)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	106.26 (10)
$Cs1$ — $Cs2$ — $O4^i$	43.99 (6)	Cs1 <sup>xii</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	81.19 (8)
O1—Cs2—O4 <sup>i</sup>	66.98 (8)	Cs3 <sup>vii</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	45.79 (4)
$Cs3^{viii}$ — $Cs2$ — $O4^i$	127.87 (6)	$Cs3^{ix}$ — $O2$ — $Cs2^{vii}$	135.98 (10)

# supporting information

$Cs3$ — $Cs2$ — $O4^i$	78.05 (6)	Cs3 <sup>viii</sup> —O2—Cs2 <sup>vii</sup>	56.35 (4)
$Si2^{v}$ —Cs2—O4 <sup>i</sup>	22.85 (6)	Si2 <sup>vii</sup> —O2—Cs3	109.84 (18)
O4 <sup>iii</sup> —Cs2—O4 <sup>i</sup>	114.71 (8)	Lu1—O2—Cs3	35.50 (8)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	56.67 (9)	Cs2 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3	131.18 (11)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	79.73 (7)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O2—Cs3	79.05 (9)
O6—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	145.22 (8)	Cs1 <sup>xii</sup> —O2—Cs3	121.43 (10)
O8—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	127.74 (7)	Cs3 <sup>vii</sup> —O2—Cs3	93.90 (7)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	128.48 (8)	Cs3 <sup>ix</sup> —O2—Cs3	99.66 (7)
O7—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	85.99 (7)	Cs3 <sup>viii</sup> —O2—Cs3	82.57 (7)
Si3—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	113.08 (3)	Cs2 <sup>vii</sup> —O2—Cs3	106.64 (7)
Si2—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	152.34 (3)	$Si2^{vii}$ — $O2$ — $Cs2^x$	94.90 (16)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	104.07 (3)	$Lu1 - O2 - Cs2^{x}$	50.45 (8)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	120.44 (7)	$Cs2^{xiv} - O2 - Cs2^{x}$	139.86 (13)
Cs1—Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	108.832 (10)	$Cs1^{xiv} - O2 - Cs2^{x}$	131.88 (12)
$O1$ — $Cs2$ — $Cs1^{xiv}$	44.06 (6)	$Cs1^{xii}$ — $O2$ — $Cs2^{x}$	71.28 (7)
$Cs3^{viii}$ — $Cs2$ — $Cs1^{xiv}$	59.406 (10)	$Cs3^{vii}$ — $O2$ — $Cs2^{x}$	44.37 (4)
$Cs3-Cs2-Cs1^{xiv}$	88.161 (13)	$Cs^{3ix} - O^2 - Cs^{2x}$	86.90 (7)
$Si2^v$ —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	58.63 (2)	$Cs3^{viii}$ $02$ $Cs2^{x}$	106.64 (7)
$O4^{iii}$ —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	165.72 (6)	$Cs2^{vii}$ — $O2$ — $Cs2^{x}$	81.15 (5)
$O4^{i}$ —Cs2—Cs1 <sup>xiv</sup>	79.01 (6)	$Cs3 - O2 - Cs2^x$	53.91 (4)
$O2^{ii}$ —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	29.98 (8)	$Si3^{iv}$ —O3—Lu1 <sup>vi</sup>	139.2 (3)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	30.64 (8)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs1	103.2 (2)
O6—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	131.47 (9)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs1	117.44 (16)
O8—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	165.07 (7)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs3 <sup>i</sup>	89.78 (19)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	76.86 (7)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs3 <sup>i</sup>	100.59 (15)
O7—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	130.90 (7)	$Cs1 - O3 - Cs3^i$	79.85 (11)
Si3—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	143.66 (3)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs2 <sup>iv</sup>	73.28 (16)
Si2—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	145.25 (3)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs2 <sup>iv</sup>	89.12 (14)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	53.07 (2)	$Cs1 - O3 - Cs2^{iv}$	109.09 (13)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	122.46 (7)	Cs3 <sup>i</sup> —O3—Cs2 <sup>iv</sup>	162.11 (13)
Cs1—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	59.975 (10)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs3 <sup>iii</sup>	98.58 (18)
O1—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	97.88 (6)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs3 <sup>iii</sup>	101.10 (14)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	64.629 (10)	Cs1—O3—Cs3 <sup>iii</sup>	55.28 (8)
Cs3—Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	138.708 (14)	Cs3 <sup>i</sup> —O3—Cs3 <sup>iii</sup>	135.11 (12)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	52.22 (2)	Cs2 <sup>iv</sup> —O3—Cs3 <sup>iii</sup>	55.62 (6)
O4 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	124.89 (6)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs2 <sup>ii</sup>	143.6 (2)
O4 <sup>i</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	68.93 (6)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs2 <sup>ii</sup>	66.29 (10)
Cs1 <sup>xiv</sup> —Cs2—Lu1 <sup>ii</sup>	62.263 (9)	Cs1—O3—Cs2 <sup>ii</sup>	63.70 (8)
$O2^{ii}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	38.65 (10)	Cs3 <sup>i</sup> —O3—Cs2 <sup>ii</sup>	55.48 (6)
$O9^{iii}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	95.23 (9)	Cs2 <sup>iv</sup> —O3—Cs2 <sup>ii</sup>	142.24 (12)
O6—Cs2—O8 <sup>v</sup>	108.13 (9)	Cs3 <sup>iii</sup> —O3—Cs2 <sup>ii</sup>	99.72 (8)
O8—Cs2—O8 <sup>v</sup>	129.66 (6)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs2 <sup>i</sup>	68.55 (16)
$O5^{iii}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	139.20 (9)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs2 <sup>i</sup>	86.51 (12)
O7—Cs2—O8 <sup>v</sup>	115.96 (9)	Cs1—O3—Cs2 <sup>i</sup>	131.12 (14)
Si3—Cs2—O8 <sup>v</sup>	138.41 (6)	$Cs3^i$ — $O3$ — $Cs2^i$	52.98 (6)
Si2—Cs2—O8 <sup>v</sup>	131.61 (6)	$Cs2^{iv}$ — $O3$ — $Cs2^{i}$	113.46 (10)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O8 <sup>v</sup>	118.10 (6)	Cs3 <sup>iii</sup> —O3—Cs2 <sup>i</sup>	166.07 (10)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—O8 <sup>v</sup>	159.22 (8)	$Cs2^{ii}$ — $O3$ — $Cs2^{i}$	94.02 (8)

Cs1—Cs2—O8 <sup>v</sup>	76.81 (5)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs1 <sup>xi</sup>	18.67 (12)
O1—Cs2—O8 <sup>v</sup>	38.53 (8)	$Lu1^{vi}$ —O3—Cs $1^{xi}$	124.64 (15)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—O8 <sup>v</sup>	99.68 (5)	Cs1—O3—Cs1 <sup>xi</sup>	117.25 (11)
Cs3—Cs2—O8 <sup>v</sup>	73.48 (5)	$Cs3^{i}$ — $O3$ — $Cs1^{xi}$	80.99 (8)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—O8 <sup>v</sup>	23.12 (6)	$Cs2^{iv}$ — $O3$ — $Cs1^{xi}$	81.13 (7)
$O4^{iii}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	149.51 (8)	Cs3 <sup>iii</sup> —O3—Cs1 <sup>xi</sup>	116.34 (9)
$O4^{i}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	37.39 (8)	Cs2 <sup>ii</sup> —O3—Cs1 <sup>xi</sup>	136.22 (10)
$Cs1^{xiv}$ — $Cs2$ — $O8^{v}$	42.75 (5)	$Cs2^{i}$ — $O3$ — $Cs1^{xi}$	50.34 (4)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs2—O8 <sup>v</sup>	65.24 (5)	Si3 <sup>iv</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	110.12 (19)
$O2^{ii}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	89.10 (10)	Lu1 <sup>vi</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	32.72 (8)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—O9 <sup>iv</sup>	138.56 (12)	Cs1—O3—Cs3 <sup>vi</sup>	138.99 (13)
O6—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	38.75 (9)	Cs3 <sup>i</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	122.52 (11)
O8—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	73.20 (9)	Cs2 <sup>iv</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	60.87 (6)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—O9 <sup>iv</sup>	118.34 (10)	Cs3 <sup>iii</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	95.80 (8)
O7—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	108.15 (9)	Cs2 <sup>ii</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	99.02 (7)
Si3—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	99.56 (6)	Cs2 <sup>i</sup> O3Cs3 <sup>vi</sup>	84.26 (7)
$Si2$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	62.44 (6)	Cs1 <sup>xi</sup> —O3—Cs3 <sup>vi</sup>	101.02 (7)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—O9 <sup>iv</sup>	132.99 (6)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Lu1	138.2 (2)
$O3^{vii}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	115.71 (9)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Cs1 <sup>ix</sup>	95.68 (18)
$Cs1$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	67.93 (6)	Lu1—O4—Cs1 <sup>ix</sup>	119.96 (17)
O1—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	68.78 (8)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Cs3	119.6 (2)
$Cs3^{viii}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	165.78 (6)	Lu1—O4—Cs3	88.09 (13)
Cs3—Cs2—O9 <sup>iv</sup>	43.01 (5)	Cs1 <sup>ix</sup> —O4—Cs3	82.89 (10)
$Si2^v$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	68.90 (6)	$Si2^{x}$ —O4—Cs $2^{x}$	68.15 (15)
$O4^{iii}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	80.87 (8)	Lu1—O4—Cs2 <sup>x</sup>	84.32 (12)
$O4^{i}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	48.22 (8)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs2^{x}$	153.06 (14)
$Cs1^{xiv}$ — $Cs2$ — $O9^{iv}$	107.67 (6)	Cs3—O4—Cs2 <sup>x</sup>	86.77 (10)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs2—O9 <sup>iv</sup>	116.42 (6)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Cs2 <sup>ix</sup>	71.29 (16)
O8 <sup>v</sup> —Cs2—O9 <sup>iv</sup>	69.78 (8)	Lu1—O4—Cs2 <sup>ix</sup>	104.76 (15)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	101.18 (9)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs2^{ix}$	62.36 (8)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	132.27 (8)	Cs3—O4—Cs2 <sup>ix</sup>	144.96 (13)
O6—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	18.14 (7)	$Cs2^{x}$ —O4— $Cs2^{ix}$	126.30 (10)
O8—Cs2—Sil <sup>iv</sup>	62.24 (7)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Cs3 <sup>ix</sup>	95.57 (17)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	98.14 (8)	Lu1—O4—Cs3 <sup>ix</sup>	59.22 (10)
O7—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	106.69 (7)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs3^{ix}$	100.48 (11)
Si3—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	89.40 (3)	Cs3—O4—Cs3 <sup>ix</sup>	144.32 (12)
Si2—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	44.31 (3)	$Cs2^{x}$ —O4— $Cs3^{ix}$	102.39 (8)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	117.07 (4)	$Cs2^{ix}$ —O4— $Cs3^{ix}$	48.73 (5)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	99.23 (7)	$Si2^{x}$ —O4—Cs $1^{x}$	86.04 (18)
Cs1—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	64.09 (2)	Lu1—O4—Cs1 <sup>x</sup>	97.52 (13)
O1—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	89.26 (7)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs1^{x}$	113.68 (11)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	169.99 (2)	Cs3—O4—Cs1 <sup>x</sup>	43.21 (6)
Cs3—Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	54.81 (2)	$Cs2^{x}$ —O4— $Cs1^{x}$	46.48 (5)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	84.51 (3)	$Cs2^{ix}$ —O4— $Cs1^{x}$	155.91 (10)
O4 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	59.82 (6)	Cs3 <sup>ix</sup> —O4—Cs1 <sup>x</sup>	145.50 (9)
O4 <sup>i</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	61.86 (6)	Si2 <sup>x</sup> —O4—Cs1 <sup>xv</sup>	29.68 (13)
$Cs1^{xiv}$ — $Cs2$ — $Si1^{iv}$	129.33 (2)	Lu1—O4—Cs1 <sup>xv</sup>	115.56 (13)
$Lu1^{ii}$ —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	122.36 (2)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs1^{xv}$	100.12 (10)

O8 <sup>v</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	90.09 (6)	Cs3—O4—Cs1 <sup>xv</sup>	149.06 (12)
O9 <sup>iv</sup> —Cs2—Si1 <sup>iv</sup>	21.67 (6)	$Cs2^{x}$ —O4— $Cs1^{xv}$	76.74 (6)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	130.86 (8)	$Cs2^{ix}$ —O4— $Cs1^{xv}$	51.25 (5)
O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	76.58 (8)	$Cs3^{ix}$ —O4— $Cs1^{xv}$	65.89 (5)
O6—Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	73.00 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —O4—Cs1 <sup>xv</sup>	110.48 (8)
O8—Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	59.44 (7)	$Si2^{x}$ —O4—Cs $2^{xi}$	87.39 (16)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	30.21 (7)	Lu1—O4—Cs2 <sup>xi</sup>	130.98 (14)
O7—Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	74.19 (7)	$Cs1^{ix}$ —O4— $Cs2^{xi}$	51.96 (6)
Si3—Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	52.40 (2)	Cs3—O4—Cs2 <sup>xi</sup>	45.55 (5)
Si2—Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	52.72 (2)	$Cs2^{x}$ — $O4$ — $Cs2^{xi}$	104.14 (9)
$Si1^{iii}$ —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	52.58 (2)	$Cs2^{ix} - O4 - Cs2^{xi}$	107.65 (8)
$O3^{\text{vii}}$ —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	30.64 (6)	$Cs^{3ix} - O4 - Cs^{2xi}$	152.42 (9)
$Cs1-Cs2-Lu1^{iii}$	93 689 (13)	$Cs1^{x}-04-Cs2^{xi}$	61.98 (5)
$01 - Cs^2 - Lu1^{iii}$	152 28 (6)	$Cs1^{xv} - 04 - Cs2^{xi}$	11336(7)
$C_{s3^{viii}}$ $C_{s2}$ $L_{u1}^{iii}$	80 477 (11)	Si1-05-1 ul	137.8(3)
$C_{3} = C_{3} = C_{3} = L_{11}^{111}$	115 287 (12)	Si1 - 05 - Cs3	127.8(2)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—Lu1 <sup>iii</sup>	146 38 (3)	$1 \times 1 - 05 - 033$	88 15 (13)
$04^{iii}$ Cs2 Lu1	30.99 (6)	$Si1_{05} Cs^{2x}$	96.62 (19)
$O4^{i}$ $Cs2$ $Lu1^{iii}$	135 44 (6)	$1 \text{ u}_{1}^{-0.5} - \text{C}_{32}^{\times}$	104.55(16)
$C_{s1}^{xiv}$ $C_{s2}$ $L_{u1}^{iii}$	139.747(0) 130.705(14)	$C_{s3} = 05 = C_{s2}^{x}$	104.33(10) 102.11(13)
$Lu1^{ii}$ $Cs2$ $Lu1^{iii}$	105.654(11)	$C_{sj} = 05 = C_{s2}$	85 58 (16)
$C_{1} = C_{2} = L_{1}$	160.10(5)	511 - 05 - 051	136.62(10)
$O_{0}^{ii}$ $C_{2}^{2}$ $L_{1}^{1ii}$	109.19(3) 11171(6)	Lu1 = 05 = Cs1	130.02(10)
$C_{3} = C_{3} = L_{1}$	111.71(0) 00.24(2)	$C_{3}^{2}$ $O_{5}^{2}$ $C_{3}^{1}$	59.09(7)
SII - Cs2 - LuI	90.34(2)	$C_{S2} = C_{S1} = C_{S1}$	50.13(14)
$O_2^{\text{m}} = C_{S_2}^{\text{m}} = S_{11}^{\text{m}}$	127.90(9)	$SII = 05 = Cs^{2}$	39.13(14)
$09^{$	110.19(0)	Lu1 = 05 = 05	101.90(14)
$06-C_{2}-S_{1}$	102.32(9)	$C_{s3} = 05 = C_{s3}$	160.28 (14)
08 - Cs2 - Sii	38.07(7)	$C_{S2} = O_{S} = C_{S3} = O_{S}$	59.15 (7)
$05^{}Cs2^{}S11$	116.48 (8)	$Cs1^{-05} - Cs3^{+1}$	103.28 (9)
0/-Cs2-S11	17.58 (8)	$SII = 05 = Cs^2$	//.40(1/)
S13 - Cs2 - S11	43.03 (3)	$Lul = 05 = Cs^2$	101.36 (14)
S12 - Cs2 - S11	85.06 (3)	$C_{s3} = O5 = C_{s2}$	57.86 (7)
$S11^{m}$ —Cs2—S11	120.19 (3)	$Cs2^{x}$ —O5—Cs2	146.59 (12)
$O3^{vn}$ —Cs2—S11	61.12 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —O5—Cs2	85.27 (8)
Cs1—Cs2—S11	170.18 (2)	$Cs3^{vn}$ — $O5$ — $Cs2$	134.35 (10)
O1—Cs2—Si1	62.13 (6)	Sil—O5—Csl <sup>xiv</sup>	91.53 (18)
$Cs3^{vin}$ — $Cs2$ — $Si1$	68.87 (2)	$Lu1 - O5 - Cs1^{xiv}$	57.94 (10)
Cs3—Cs2—Sil	59.79 (2)	$Cs3-O5-Cs1^{xiv}$	89.39 (10)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—Si1	121.47 (3)	$Cs2^{x}$ — $O5$ — $Cs1^{xiv}$	159.11 (13)
O4 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1	95.74 (6)	$Cs1^{x}$ — $O5$ — $Cs1^{xiv}$	138.73 (11)
O4 <sup>i</sup> —Cs2—Si1	128.22 (6)	$Cs3^{vii}$ — $O5$ — $Cs1^{xiv}$	110.33 (9)
Cs1 <sup>xiv</sup> —Cs2—Si1	71.51 (2)	$Cs2-O5-Cs1^{xiv}$	54.11 (5)
Lu1 <sup>ii</sup> —Cs2—Si1	126.07 (2)	Si1—O5—Cs1 <sup>xii</sup>	92.82 (17)
O8 <sup>v</sup> —Cs2—Si1	98.40 (6)	Lu1—O5—Cs1 <sup>xii</sup>	57.75 (9)
O9 <sup>iv</sup> —Cs2—Si1	102.45 (6)	Cs3—O5—Cs1 <sup>xii</sup>	143.79 (12)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs2—Si1	107.75 (3)	Cs2 <sup>x</sup> —O5—Cs1 <sup>xii</sup>	77.86 (9)
Lu1 <sup>iii</sup> —Cs2—Si1	91.76 (2)	Cs1 <sup>x</sup> O5Cs1 <sup>xii</sup>	138.65 (11)
O2 <sup>ii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	60.35 (8)	Cs3 <sup>vii</sup> —O5—Cs1 <sup>xii</sup>	44.34 (4)

O9 <sup>iii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	116.15 (8)	Cs2—O5—Cs1 <sup>xii</sup>	134.69 (10)
O6—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	96.95 (8)	Cs1 <sup>xiv</sup> —O5—Cs1 <sup>xii</sup>	82.57 (6)
O8—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	108.11 (7)	Si2—O6—Si1 <sup>iv</sup>	135.8 (2)
O5 <sup>iii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	159.88 (8)	Si2—O6—Cs2	94.35 (17)
O7—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	99.75 (8)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs2	125.96 (19)
Si3—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	118.10(3)	Si2—O6—Cs3	97.1 (2)
Si2—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	115.15 (3)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs3	83.32 (18)
Si1 <sup>iii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	139.86 (3)	Cs2—O6—Cs3	69.46 (10)
O3 <sup>vii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	142.10 (7)	Si2—O6—Cs3 <sup>iii</sup>	86.44 (18)
Cs1—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	90.37 (2)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs3 <sup>iii</sup>	110.2 (2)
O1—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	20.57 (6)	Cs2—O6—Cs3 <sup>iii</sup>	87.13 (9)
Cs3 <sup>viii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	107.82 (2)	Cs3—O6—Cs3 <sup>iii</sup>	156.51 (11)
Cs3—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	52.07 (2)	Si2—O6—Cs1	132.60 (19)
Si2 <sup>v</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	42.05 (3)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs1	86.99 (16)
O4 <sup>iii</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	137.98 (6)	Cs2—O6—Cs1	61.75 (6)
O4 <sup>i</sup> —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	46.50 (6)	Cs3—O6—Cs1	109.44 (10)
$Cs1^{xiv}$ — $Cs2$ — $Si3^{v}$	48.76 (2)	$Cs3^{iii}$ —O6—Cs1	54.45 (6)
$Lu1^{ii}$ —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	86.82 (2)	Si2—O6—Cs1 <sup>xiii</sup>	49.41 (14)
$O8^{v}$ —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	21.86 (6)	$Si1^{iv}$ —O6—Cs $1^{xiii}$	104.59 (18)
$O9^{iv}$ —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	58.92 (6)	$Cs2-O6-Cs1^{xiii}$	126.75 (11)
$Si1^{iv}$ —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	80.59 (3)	$Cs3-O6-Cs1^{xiii}$	139.09 (11)
$Lu1^{iii}$ —Cs2—Si3 <sup>v</sup>	167.27 (2)	$Cs3^{iii}$ —O6—Cs $1^{xiii}$	57.90 (7)
Si1—Cs2—Si3 <sup>v</sup>	82.63 (3)	Cs1—O6—Cs1 <sup>xiii</sup>	111.00 (11)
$01-Cs3-O9^{iv}$	100.78 (11)	Si2—O6—Cs1 <sup>x</sup>	51.55 (15)
$01 - C_{83} - 05$	63.24 (11)	$Si1^{iv}$ —O6—Cs1 <sup>x</sup>	104.07 (18)
$O9^{iv}$ —Cs3—O5	154.42 (12)	$Cs2-O6-Cs1^{x}$	92.17 (11)
Q1—Cs3—Q4	63.56 (11)	$Cs3-O6-Cs1^{x}$	49.00 (6)
$O9^{iv}$ —Cs3—O4	131.81 (11)	$Cs3^{iii}$ —O6—Cs1 <sup>x</sup>	137.84 (9)
05—Cs3—O4	61.42 (11)	$Cs1-O6-Cs1^{x}$	152.70 (12)
O1—Cs3—O3 <sup>ix</sup>	50.44 (10)	$Cs1^{xiii}$ —O6— $Cs1^x$	90.58 (7)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O3 <sup>ix</sup>	58.46 (11)	Si2—O6—Cs2 <sup>iv</sup>	103.2 (2)
O5—Cs3—O3 <sup>ix</sup>	112.92 (10)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs2 <sup>iv</sup>	64.81 (17)
O4—Cs3—O3 <sup>ix</sup>	80.24 (11)	Cs2—O6—Cs2 <sup>iv</sup>	132.16 (13)
O1—Cs3—O8	111.75 (11)	Cs3—O6—Cs2 <sup>iv</sup>	147.93 (10)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O8	89.80 (10)	Cs3 <sup>iii</sup> —O6—Cs2 <sup>iv</sup>	50.83 (6)
O5—Cs3—O8	79.16 (10)	$Cs1 - O6 - Cs2^{iv}$	73.98 (8)
O4—Cs3—O8	138.25 (10)	Cs1 <sup>xiii</sup> —O6—Cs2 <sup>iv</sup>	53.83 (6)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—O8	131.18 (10)	$Cs1^x$ — $O6$ — $Cs2^{iv}$	133.32 (8)
O1—Cs3—O6	111.83 (10)	Si2—O6—Cs2 <sup>xi</sup>	113.05 (18)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O6	46.36 (10)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs2 <sup>xi</sup>	37.54 (14)
05—Cs3—O6	118.27 (10)	$Cs2-O6-Cs2^{xi}$	115.84 (12)
04—Cs3—O6	175.22 (10)	$Cs3-O6-Cs2^{xi}$	51.19 (5)
$O3^{ix}$ —Cs3—O6	95.85 (9)	$Cs3^{iii}$ — $O6$ — $Cs2^{xi}$	147.15 (11)
08—Cs3—O6	43.48 (9)	$Cs1-O6-Cs2^{xi}$	114.21 (8)
$O1-Cs3-Cs1^{x}$	137.68 (8)	$Cs1^{xiii}$ — $O6$ — $Cs2^{xi}$	114.35 (8)
$O9^{iv}$ —Cs3—Cs1×	116.05 (8)	$Cs1^x - Cs2^{xi}$	68.09 (6)
$05-Cs3-Cs1^{x}$	74.79 (8)	$Cs2^{iv}$ — $O6$ — $Cs2^{xi}$	97.58 (7)
04—Cs3—Cs1 <sup>x</sup>	101.55 (8)	$Si2-O6-Cs3^{iv}$	105.48 (16)
0. 000 001	101.00 (0)	512 00 065	100.10(10)

O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Cs1 <sup>x</sup>	171.62 (7)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs3 <sup>iv</sup>	35.56 (12)
O8—Cs3—Cs1 <sup>x</sup>	51.87 (7)	Cs2—O6—Cs3 <sup>iv</sup>	160.16 (11)
O6—Cs3—Cs1 <sup>x</sup>	82.71 (6)	Cs3—O6—Cs3 <sup>iv</sup>	106.91 (8)
O1—Cs3—Si3 <sup>v</sup>	24.90 (8)	Cs3 <sup>iii</sup> —O6—Cs3 <sup>iv</sup>	94.37 (9)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Si3 <sup>v</sup>	78.98 (8)	Cs1—O6—Cs3 <sup>iv</sup>	103.37 (9)
O5—Cs3—Si3 <sup>v</sup>	87.92 (8)	Cs1 <sup>xiii</sup> —O6—Cs3 <sup>iv</sup>	69.30 (6)
O4—Cs3—Si3 <sup>v</sup>	71.10 (9)	$Cs1^{x}$ — $O6$ — $Cs3^{iv}$	99.77 (7)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Si3 <sup>v</sup>	25.59 (7)	Cs2 <sup>iv</sup> —O6—Cs3 <sup>iv</sup>	43.78 (4)
O8—Cs3—Si3 <sup>v</sup>	123.47 (7)	Cs2 <sup>xi</sup> —O6—Cs3 <sup>iv</sup>	55.96 (4)
O6—Cs3—Si3 <sup>v</sup>	104.20 (7)	Si2—O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	17.22 (10)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Si3 <sup>v</sup>	162.58 (3)	Si1 <sup>iv</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	118.63 (16)
O1—Cs3—Lu1	37.14 (8)	Cs2—O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	110.49 (10)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Lu1	136.42 (8)	Cs3—O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	96.83 (9)
O5—Cs3—Lu1	36.96 (7)	Cs3 <sup>iii</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	93.24 (8)
O4—Cs3—Lu1	36.76 (7)	Cs1—O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	145.60 (10)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Lu1	79.34 (7)	Cs1 <sup>xiii</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	43.78 (3)
O8—Cs3—Lu1	113.09 (7)	Cs1 <sup>x</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	47.91 (4)
O6—Cs3—Lu1	140.02 (6)	Cs2 <sup>iv</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	95.49 (7)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Lu1	107.062 (14)	Cs2 <sup>xi</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	99.44 (7)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Lu1	57.44 (2)	Cs3 <sup>iv</sup> —O6—Cs2 <sup>xiii</sup>	89.20 (6)
O1—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	116.51 (8)	Si3—07—Si1	133.0 (3)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	23.97 (8)	Si3—O7—Cs2	90.35 (17)
O5—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	144.07 (9)	Si1—O7—Cs2	126.6 (2)
O4—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	153.85 (8)	Si3—O7—Cs1 <sup>vii</sup>	79.85 (16)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	81.49 (7)	Si1—O7—Cs1 <sup>vii</sup>	109.26 (19)
O8—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	67.60 (7)	Cs2—O7—Cs1 <sup>vii</sup>	107.70 (11)
O6—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	25.86 (6)	Si3—O7—Cs3 <sup>viii</sup>	116.20 (18)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	94.03 (2)	Si1—O7—Cs3 <sup>viii</sup>	106.73 (17)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	98.92 (3)	Cs2—O7—Cs3 <sup>viii</sup>	64.09 (7)
Lu1—Cs3—Si1 <sup>iv</sup>	153.38 (3)	Cs1 <sup>vii</sup> —O7—Cs3 <sup>viii</sup>	58.27 (6)
O1—Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	127.70 (8)	Si3—O7—Cs3	92.68 (16)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	52.01 (9)	Si1—O7—Cs3	82.41 (16)
O5—Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	153.55 (9)	Cs2—O7—Cs3	63.04 (7)
$O4$ — $Cs3$ — $Cs2^{xi}$	99.79 (7)	Cs1 <sup>vii</sup> —O7—Cs3	168.32 (12)
$O3^{ix}$ —Cs3—Cs $2^{xi}$	78.98 (7)	Cs3 <sup>viii</sup> —O7—Cs3	118.79 (10)
O8—Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	111.58 (7)	Si3—O7—Cs1 <sup>x</sup>	58.58 (13)
$O6-Cs3-Cs2^{xi}$	82.05 (6)	Si1—O7—Cs1 <sup>x</sup>	82.85 (15)
$Cs1^{x}$ — $Cs3$ — $Cs2^{xi}$	92.647 (13)	$Cs2-O7-Cs1^{x}$	103.29 (10)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	104.05 (3)	Cs1 <sup>vii</sup> —O7—Cs1 <sup>x</sup>	127.58 (11)
Lu1—Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	134.225 (14)	$Cs3^{viii}$ —O7— $Cs1^{x}$	167.06 (12)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—Cs2 <sup>xi</sup>	58.23 (2)	$Cs3-O7-Cs1^{x}$	52.75 (5)
01-Cs3-Cs2	67.00 (8)	Si3—O7—Cs2 <sup>vii</sup>	121.83 (18)
$O9^{iv}$ —Cs3—Cs2	75.21 (9)	Si1—O7—Cs2 <sup>vii</sup>	60.47 (14)
O5—Cs3—Cs2	79.94 (9)	$Cs2-O7-Cs2^{vii}$	128.36 (10)
O4— $Cs3$ — $Cs2$	126.81 (8)	Cs1 <sup>vii</sup> —O7—Cs2 <sup>vii</sup>	50.48 (5)
$O3^{ix}$ —Cs3—Cs2	83.30 (8)	$Cs3^{viii}$ — $O7$ — $Cs2^{vii}$	65.49 (6)
O8— $Cs3$ — $Cs2$	51.14 (7)	$Cs3-07-Cs2^{vii}$	140.49 (10)
06-Cs3-Cs2	49 52 (6)	$Cs1^{x} 07 Cs2^{vii}$	127 45 (9)

Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Cs2	101.762 (14)	Si3—O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	33.75 (12)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Cs2	72.51 (2)	Si1—O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	116.53 (18)
Lu1—Cs3—Cs2	90.584 (12)	Cs2—O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	116.31 (10)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—Cs2	68.89 (2)	Cs1 <sup>vii</sup> —O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	53.19 (6)
Cs2 <sup>xi</sup> —Cs3—Cs2	125.955 (16)	Cs3 <sup>viii</sup> —O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	106.82 (9)
O1—Cs3—O6 <sup>x</sup>	106.20 (10)	Cs3—O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	122.78 (9)
$O9^{iv}$ —Cs3—O6 <sup>x</sup>	129.89 (11)	Cs1 <sup>x</sup> —O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	75.41 (6)
O5—Cs3—O6 <sup>x</sup>	75.42 (11)	Cs2 <sup>vii</sup> —O7—Cs3 <sup>xiii</sup>	88.17 (7)
O4—Cs3—O6 <sup>x</sup>	43.01 (10)	Si3—O7—Cs2 <sup>x</sup>	101.95 (16)
$O3^{ix}$ —Cs3—O6 <sup>x</sup>	111.89 (9)	Si1—O7—Cs2 <sup>x</sup>	34.70 (11)
$08-Cs3-06^{x}$	116.91 (9)	$Cs2-O7-Cs2^{x}$	126.23 (11)
$O6-Cs3-O6^{x}$	141.73 (6)	$Cs1^{vii}$ — $O7$ — $Cs2^{x}$	125.89 (10)
$Cs1^{x}$ — $Cs3$ — $O6^{x}$	65.96 (6)	$Cs3^{viii}$ $07$ $Cs2^{x}$	141.00 (10)
$Si3^{v}$ —Cs3—O6 <sup>x</sup>	112.22 (6)	$Cs3 = 07 = Cs2^x$	64.24 (6)
$Lu1 - Cs3 - O6^{x}$	73 34 (6)	$Cs1^{x}-07-Cs2^{x}$	48 17 (4)
Siliv—Cs3—O6 $^{x}$	131.56(7)	$Cs^{2^{\text{vii}}}$ $O7$ $Cs^{2^{\text{x}}}$	88 32 (7)
$C_{s}^{2xi} - C_{s}^{3} - O_{s}^{x}$	78 22 (6)	$C_{s3}^{xiii}$ $07$ $C_{s2}^{x}$	100.28(7)
$C_{s2} = C_{s3} = 06^{x}$	154.60 (6)	$Si3_07_cs1^{xiv}$	100.20(7) 145.31(19)
$01 - C_{s3} - 07^{xi}$	134.00(0) 142.13(10)	Si3 = 07 = CS1 $Si1 = 07 = Cs1^{xiv}$	78 16 (15)
$O_1^{\text{iv}} C_{\text{s}3} O_7^{\text{xi}}$	142.13(10) 08 13 (10)	$C_{s2} = 0.7 = C_{s1}^{xiv}$	55 03 (6)
$05 - C_{8}3 - 07$	106 53 (10)	$C_{s2} = 07 = C_{s1}$	106 55 (9)
04 Cs3 $07$	79 38 (10)	$C_{s}^{yiii} = 07 - C_{s}^{1xiv}$	50.44(4)
$O_{1}^{ix} = C_{1}^{ix} = O_{1}^{ix}$	118 35 (10)	$C_{s3} = 07 = C_{s1}$	74 63 (6)
$\frac{08}{08} = \frac{03}{07} = \frac{07}{100}$	100.78 (0)	$C_{s1x} = 07 - C_{s1xiv}$	125 86 (0)
06 - 03 - 07	100.78 (9)	$C_{3}^{\text{vii}}$ $O_{7}^{\text{vii}}$ $C_{3}^{\text{vii}}$	123.80(9)
$C_0 = C_0 = C_0 = C_0$	105.00(8)	Cs2 = 0/-Cs1	64.31(0) 157.05(0)
$C_{S1} = C_{S3} = O7$	34.37(0)	$C_{s3} = 07 = C_{s1}$	137.03(9) 101.12(7)
$S_{13} = C_{53} = O/$	133.46 (0)	$C_{S2} = 07 = C_S1^{-1}$	101.13(7) 122.73(17)
Eu1 - Cs3 - O7	112.19(0)	SI3 - O7 - CS3 Si1 O7 Ca2vii	122.75(17)
$SII^{-} = Cs3 = O/^{-}$	95.14 (0) 48.82 (6)	$SII = 07 = Cs^{2}$	21.80(12)
$C_{s2} = C_{s3} = 07^{si}$	48.82 (0)	$C_{s2} = 07 = C_{s3} = 07$	143.34(11)
$C_{S2} = C_{S3} = 07^{m}$	150.54(0)	$Cs1^{\text{m}} = 0/=Cs3^{\text{m}}$	89.11 (8)
$00^{-1}$	38.80 (8)	$C_{s3}$ , $C_{s$	103.78 (8)
$O_1 = C_{S_2} = C_{S_1} = C_{S_2}$	09.30 (8)	$C_{S} = 07 = C_{S}^{S}$	102.51(8)
$09^{\text{IV}}$ $Cs3$ $Cs1^{\text{IV}}$	84.40 (8)	$C_{S1} - O_{-} C_{S3}$	88.34 (7)
05-05	106.18 (8)	$C_{s2}$ $C_{s2}$ $C_{s3}$ $C_{s3}$	44.34 (4)
$04-Cs3-Cs1^{ix}$	4/.54 (8)	$C_{s3}$ $C$	97.92 (7)
$O_3^{\text{III}}$ $C_{\text{IIII}}$	44.94 (8)	$Cs2^{\star}$ $O'$ $Cs3^{\star n}$	44.05 (3)
O8— $Cs3$ — $Cs1$ <sup>ix</sup>	174.19 (7)	$Cs1^{xiv} - O' - Cs3^{vii}$	91.78 (6)
O6-Cs3-Cs1	130.72 (6)	S12—O8—S13	132.9 (2)
$Cs1^{x}$ — $Cs3$ — $Cs1^{x}$	131.185 (15)	Si2—O8—Cs1 <sup>x</sup>	110.77 (19)
$Si3^{v}$ —Cs3—Cs1 <sup>ix</sup>	55.41 (2)	Si3—O8—Cs1 <sup>x</sup>	93.66 (16)
Lu1—Cs3—Cs1 <sup>1x</sup>	71.536 (10)	Si2—O8—Cs2	93.67 (16)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—Cs1 <sup>ix</sup>	106.66 (3)	Si3—O8—Cs2	92.90 (17)
$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $Cs1^{ix}$	64.613 (12)	Cs1 <sup>x</sup>	138.75 (13)
Cs2—Cs3—Cs1 <sup>ix</sup>	126.802 (14)	Si2—O8—Cs3	106.38 (17)
O6 <sup>x</sup> —Cs3—Cs1 <sup>ix</sup>	67.30 (6)	Si3—O8—Cs3	120.04 (18)
O7 <sup>xi</sup> —Cs3—Cs1 <sup>ix</sup>	80.07 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —O8—Cs3	68.85 (8)
O1—Cs3—O7	79.30 (10)	Cs2—O8—Cs3	72.67 (8)

O9 <sup>iv</sup> —Cs3—O7	118.83 (10)	Si2—O8—Cs2 <sup>xiii</sup>	67.39 (13)
O5—Cs3—O7	41.93 (10)	Si3—O8—Cs2 <sup>xiii</sup>	87.19 (15)
O4—Cs3—O7	103.31 (9)	Cs1 <sup>x</sup> —O8—Cs2 <sup>xiii</sup>	68.13 (7)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—O7	122.38 (9)	Cs2—O8—Cs2 <sup>xiii</sup>	152.92 (12)
O8—Cs3—O7	39.81 (9)	Cs3—O8—Cs2 <sup>xiii</sup>	129.88 (11)
O6—Cs3—O7	76.39 (8)	Si2—O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	101.07 (15)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—O7	65.40 (6)	Si3—O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	38.67 (11)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—O7	100.27 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	87.23 (8)
Lu1—Cs3—O7	73.32 (6)	Cs2—O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	121.08 (10)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—O7	102.24 (6)	Cs3—O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	148.47 (11)
$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $O7$	150.75 (6)	Cs2 <sup>xiii</sup> —O8—Cs3 <sup>xiii</sup>	49.74 (4)
Cs2-Cs3-O7	48.17 (6)	Si2—O8—Cs1 <sup>xiii</sup>	22.24 (10)
$06^{x} - 083 - 07$	107.28 (8)	Si3—O8—Cs1 <sup>xiii</sup>	114.30 (16)
$07^{xi}$ Cs3 $-07$	118.79 (10)	$Cs1^{x}$ $O8$ $Cs1^{xiii}$	104.99 (10)
$Cs1^{ix}$ — $Cs3$ — $O7$	144 45 (6)	$Cs^2 - Cs^2 - Cs^{1\times iii}$	109 11 (9)
$01-Cs3-Si2^x$	83 37 (8)	$Cs3 = O8 = Cs1^{xiii}$	12551(10)
$O^{iv}$ $C^{3}$ $S^{2x}$	131 40 (9)	$C_{s2}^{xiii}$ $0.00$ $C_{s1}^{xiii}$	47 69 (4)
$05 - C_{83} - S_{12}^{x}$	69 40 (9)	$C_{3}^{\text{xiii}} = 0.8 = C_{5}^{1}^{\text{xiii}}$	79.36 (6)
$04 - C_{s3} - S_{i2x}$	19.82 (8)	$Si2 - 08 - Cs1^{vii}$	$124\ 34\ (17)$
$O_{3ix} = C_{33} = S_{12}^{3ix}$	92.60 (8)	Si2 = OO = Cs1 $Si3 = O8 = Cs1^{vii}$	12 + .5 + (17) 17 66 (11)
03 - 033 - 512 08 - 08 - 08 - 08 - 08 - 08 - 08 - 08 -	133.96(7)	$C_{s1x} = 08 = C_{s1}^{vii}$	111.00(11)
$06-C_{8}3-S_{1}2^{x}$	164 69 (6)	$C_{s2}$ $C_{s2}$ $C_{s1}$ $C$	77 66 (8)
$C_{s1x} C_{s3} S_{12x}$	87.07.(2)	$C_{32} = 08 = C_{31}$	122.06(10)
$C_{31} = C_{32} = S_{12}$	87.07 (2)	$C_{3}^{2}$	122.00(10)
$S_{13} = C_{83} = S_{12}$	54.30(2)	$C_{32} = 0^{3} = 0^{3} = 0^{3}$	90.71(7)
$Siliv C_{a2} Silx$	34.30(2) 145.32(2)	$C_{3} = 0_{0} = C_{3} I_{ii}$	47.13(4)
$S_{11} = C_{53} = S_{12}$	143.32(3)	$C_{S1} = 0_0 = C_{S1}$	110.80(7)
$C_{52} = C_{53} = S_{12}$	67.09(2) 144.67(2)	$S_{12} = 0_0 = C_{S_2} S_{12}$	30.07(12)
$C_{52} - C_{53} - S_{12}$	144.07(2)	$C_{1}$ $C_{2}$ $C_{2}$	111.34(10) 146.82(11)
$00^{$	23.08 (0)	$C_{3}^{2} = 0^{8} = C_{3}^{2}$	(140.85(11))
$O/^{}$ $C_{s}S_{s}$ $S_{s}$	59.09 (0) 51.28 (2)	$C_{s2} = 0_{s} = 0_{s} = 0_{s}$	03.83(0)
$C_{S1}^{} = C_{S3}^{} = S_{12}^{}$	51.58(2)	$C_{s3} = 0_{8} = C_{s3} = 0_{8}$	112.00(9)
$0/-C_{s3}-S_{12}^{*}$	109.57 (6)	$C_{s2}$ $C_{s2}$ $C_{s3}$ $C$	90.91 (7)
$01 - Cs_3 - Si_2$	121.10(8)	$C_{s3}$	98.70 (6)
$09^{-1} - 05 - 012$	08.31(8)	$C_{S1}$ $C$	45.48 (3)
$03 - C_{33} - S_{12}$	101.07(8)	$CS1^{\dots} = O8 = CS3^{\dots}$	96.27 (6)
$04 - C_{s3} - S_{12}$	159.68 (8)	$S11 = 09 = C_1 2^{3}$	137.7(2)
$03^{-1} - 03^{$	118.59 (8)	$S11 - 09 - Cs3^{**}$	107.17 (19)
$08 - C_{s3} - S_{12}$	22.61 (7)	$Lul^{m} = 09 = Cs3^{m}$	111./1(15)
06-053-512	23.29 (6)	$S_{11} = 09 = C_{S2^{*}}$	99.43 (19)
$Cs1^{-}Cs3 - Si2$	61.02 (2)	$Lu1^{xm}$ O9 Cs2	103.89 (15)
$S_{13}$ $C_{s3}$ $S_{12}$	122.23 (3)	$Cs3^{vn}$ —O9—Cs2 <sup>x</sup>	78.56 (10)
Lu1—Cs3—Si2	133.90 (2)	$S_1 = 09 = C_s I^*$	87.21 (16)
$S11^{1v}$ —Cs3—S12	45.30 (3)	$Lu1^{xin}$ O9 Cs1 <sup>x</sup>	73.42 (11)
Cs2 <sup>xi</sup> —Cs3—Si2	91.84 (2)	$Cs3^{vn}$ — $O9$ — $Cs1^{x}$	140.36 (14)
Cs2—Cs3—Si2	54.15 (2)	Cs2 <sup>x</sup> —O9—Cs1 <sup>x</sup>	62.49 (8)
O6 <sup>x</sup> —Cs3—Si2	125.41 (6)	S11—O9—Cs2 <sup>vn</sup>	82.40 (17)
O7 <sup>x1</sup> —Cs3—Si2	96.34 (6)	$Lu1^{xm}$ O9 Cs $2^{vii}$	101.61 (14)
Cs1 <sup>ix</sup> —Cs3—Si2	151.80 (2)	Cs3 <sup>vii</sup> —O9—Cs2 <sup>vii</sup>	61.77 (8)

O7—Cs3—Si2	61.14 (6)	$Cs2^{x}$ — $O9$ — $Cs2^{vii}$	138.56 (12)
Si2 <sup>x</sup> —Cs3—Si2	148.01 (2)	Cs1 <sup>x</sup>	157.83 (11)
O1—Cs3—Si1	72.06 (8)	Si1—O9—Cs1 <sup>vii</sup>	73.68 (16)
O9 <sup>iv</sup> —Cs3—Si1	141.23 (9)	Lu1 <sup>xiii</sup> —O9—Cs1 <sup>vii</sup>	76.55 (11)
O5—Cs3—Si1	18.98 (8)	Cs3 <sup>vii</sup> —O9—Cs1 <sup>vii</sup>	112.61 (12)
O4—Cs3—Si1	80.28 (8)	Cs2 <sup>x</sup>	168.03 (12)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Si1	122.08 (7)	Cs1 <sup>x</sup>	106.83 (9)
O8—Cs3—Si1	60.36 (7)	Cs2 <sup>vii</sup> —O9—Cs1 <sup>vii</sup>	51.41 (5)
O6—Cs3—Si1	99.67 (6)	Si1—O9—Cs1 <sup>xvi</sup>	154.9 (2)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Si1	66.26 (2)	Lu1 <sup>xiii</sup> —O9—Cs1 <sup>xvi</sup>	66.01 (10)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Si1	96.60 (3)	Cs3 <sup>vii</sup> —O9—Cs1 <sup>xvi</sup>	56.91 (6)
Lu1—Cs3—Si1	54.03 (2)	$Cs2^{x}$ — $O9$ — $Cs1^{xvi}$	60.38 (7)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—Si1	125.54 (3)	$Cs1^{x}$ — $O9$ — $Cs1^{xvi}$	94.98 (8)
Cs2 <sup>xi</sup> —Cs3—Si1	158.23 (2)	$Cs2^{vii}$ —O9— $Cs1^{xvi}$	102.73 (8)
Cs2—Cs3—Si1	66.87 (2)	Cs1 <sup>vii</sup> —O9—Cs1 <sup>xvi</sup>	128.74 (9)
O6 <sup>x</sup> —Cs3—Si1	87.73 (6)	Si1—O9—Cs3	45.19 (13)
O7 <sup>xi</sup> —Cs3—Si1	110.63 (6)	Lu1 <sup>xiii</sup> —O9—Cs3	115.62 (13)
Cs1 <sup>ix</sup> —Cs3—Si1	124.85 (2)	Cs3 <sup>vii</sup> —O9—Cs3	126.33 (12)
O7—Cs3—Si1	23.37 (6)	Cs2 <sup>x</sup> —O9—Cs3	67.01 (7)
Si2 <sup>x</sup> —Cs3—Si1	86.50 (3)	Cs1 <sup>x</sup>	44.85 (4)
Si2—Cs3—Si1	82.77 (3)	Cs2 <sup>vii</sup> —O9—Cs3	127.56 (9)
O1—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	75.95 (8)	Cs1 <sup>vii</sup> —O9—Cs3	101.81 (7)
$O9^{iv}$ —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	28.40 (8)	Cs1 <sup>xvi</sup> —O9—Cs3	125.13 (9)
O5—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	138.58 (8)	Si1—O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	103.09 (17)
O4—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	107.15 (8)	Lu1 <sup>xiii</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	35.53 (7)
O3 <sup>ix</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	30.07 (7)	Cs3 <sup>vii</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	135.25 (12)
O8—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	111.64 (7)	$Cs2^{x}$ —O9— $Cs3^{xiii}$	127.78 (11)
O6—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	69.75 (6)	Cs1 <sup>x</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	72.23 (6)
Cs1 <sup>x</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	144.048 (14)	Cs2 <sup>vii</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	91.08 (8)
Si3 <sup>v</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	52.12 (2)	Cs1 <sup>vii</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	47.25 (4)
Lu1—Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	108.890 (9)	Cs1 <sup>xvi</sup> —O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	101.38 (7)
Si1 <sup>iv</sup> —Cs3—Lu1 <sup>i</sup>	51.75 (2)	Cs3—O9—Cs3 <sup>xiii</sup>	98.38 (7)
$Cs2^{xi}$ — $Cs3$ — $Lu1^{i}$	61.779 (9)		

Symmetry codes: (i) -*x*, -*y*+1, *z*+1/2; (ii) -*x*, -*y*, *z*+1/2; (iii) -*x*+1/2, *y*-1/2, *z*+1/2; (iv) -*x*+1/2, *y*+1/2, *z*+1/2; (v) *x*-1/2, -*y*+1/2, *z*; (vi) *x*, *y*, *z*+1; (vii) -*x*+1/2, *y*-1/2, *z*-1/2; (viii) *x*, *y*-1, *z*; (vii) *x*, *y*-1, *z*; (vii) -*x*, -*y*+1, *z*-1/2; (x) -*x*+1/2, *y*+1/2, *z*-1/2; (xi) *x*, *y*+1, *z*; (xiii) *x*, *y*, *z*-1; (xiii) *x*+1/2, -*y*+1/2, *z*; (xiv) -*x*, -*y*, *z*-1/2; (xv) *x*, *y*+1, *z*-1; (xvi) *x*+1/2, -*y*+1/2, *z*-1.