

**Abstract****Table 1**

Experimental details

Crystal data	
Chemical formula	$\text{Ca}_{10}\text{H}_2\text{O}_{26}\text{P}_6$
$M_r$	1004.63
Crystal system, space group	Hexagonal, $P6_3/m$
Temperature (K)	300
$a, c$ (Å)	9.3801 (3), 6.8748 (3)
$V$ (Å <sup>3</sup> )	523.85 (4)
$Z$	1
Radiation type	Mo $K\alpha$
$\mu$ (mm <sup>-1</sup> )	3.09
Crystal size (mm)	0.10 × 0.08 × 0.06
Data collection	
Diffractometer	Bruker D8 Venture Photon 100 CMOS
Absorption correction	Multi-scan ( <i>SADABS</i> ; Krause et al., 2015)
$T_{\min}, T_{\max}$	0.660, 0.746
No. of measured, independent and observed [ $I > 2\sigma(I)$ ] reflections	18610, 438, 401
$R_{\text{int}}$	0.054
$(\sin \theta/\lambda)_{\max}$ (Å <sup>-1</sup> )	0.650
Refinement	
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$	0.021, 0.050, 1.14
No. of reflections	438
No. of parameters	41
No. of restraints	1
H-atom treatment	Only H-atom coordinates refined
$\Delta\rho_{\max}, \Delta\rho_{\min}$ (e Å <sup>-3</sup> )	0.53, -0.48

Computer programs: *SHELXL2019/1* (Sheldrick, 2019).**References**

NOT FOUND

## full crystallographic data

## Computing details

Program(s) used to refine structure: *SHELXL2019/1* (Sheldrick, 2019).

(linhuishi\_TB\_xunchengkuangwu\_lvse\_20230803\_S1)

## Crystal data

$\text{Ca}_{10}\text{H}_2\text{O}_{26}\text{P}_6$	$D_x = 3.185 \text{ Mg m}^{-3}$
$M_r = 1004.63$	Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$
Hexagonal, $P6_3/m$	Cell parameters from 9205 reflections
$a = 9.3801 (3) \text{ \AA}$	$\theta = 2.5\text{--}27.5^\circ$
$c = 6.8748 (3) \text{ \AA}$	$\mu = 3.09 \text{ mm}^{-1}$
$V = 523.85 (4) \text{ \AA}^3$	$T = 300 \text{ K}$
$Z = 1$	Lump, green
$F(000) = 500$	$0.10 \times 0.08 \times 0.06 \text{ mm}$

## Data collection

Bruker D8 Venture Photon 100 CMOS diffractometer	438 independent reflections
phi and $\omega$ scans	401 reflections with $I > 2\sigma(I)$
Absorption correction: multi-scan ( <i>SADABS</i> ; Krause et al., 2015)	$R_{\text{int}} = 0.054$
$T_{\text{min}} = 0.660$ , $T_{\text{max}} = 0.746$	$\theta_{\text{max}} = 27.5^\circ$ , $\theta_{\text{min}} = 2.5^\circ$
18610 measured reflections	$h = -12 \rightarrow 12$
	$k = -12 \rightarrow 12$
	$l = -8 \rightarrow 8$

## Refinement

Refinement on $F^2$	Hydrogen site location: difference Fourier map
Least-squares matrix: full	Only H-atom coordinates refined
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.021$	$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0235P)^2 + 0.6832P]$
$wR(F^2) = 0.050$	where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
$S = 1.14$	$(\Delta/\sigma)_{\text{max}} < 0.001$
438 reflections	$\Delta\rho_{\text{max}} = 0.53 \text{ e \AA}^{-3}$
41 parameters	$\Delta\rho_{\text{min}} = -0.48 \text{ e \AA}^{-3}$
1 restraint	

## 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.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for  
(linhuishi\_TB\_xunchengkuangwu\_lvse\_20230803\_S1)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$	Occ. (<1)
Ca1	0.666667	0.333333	0.00111 (10)	0.00998 (18)	
Ca2	−0.00719 (7)	0.24222 (7)	0.250000	0.00843 (17)	
P1	0.36906 (9)	0.39864 (8)	0.250000	0.00646 (18)	
O1	0.4849 (2)	0.3274 (3)	0.250000	0.0110 (4)	
O2	0.4665 (3)	0.5876 (2)	0.250000	0.0134 (5)	

O3	0.25741 (17)	0.34203 (19)	0.0705 (2)	0.0159 (3)	
O4	0.000000	0.000000	0.272 (4)	0.008 (4)	0.5
H1	0.000000	0.000000	0.153 (5)	0.009*	0.5

*Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for (linhuishi\_TB\_xunchengkuangwu\_lvse\_20230803\_S1)*

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ca1	0.0122 (2)	0.0122 (2)	0.0056 (3)	0.00608 (12)	0.000	0.000
Ca2	0.0072 (3)	0.0107 (3)	0.0065 (3)	0.0039 (2)	0.000	0.000
P1	0.0066 (3)	0.0072 (3)	0.0064 (3)	0.0040 (3)	0.000	0.000
O1	0.0112 (10)	0.0156 (10)	0.0104 (10)	0.0099 (9)	0.000	0.000
O2	0.0109 (10)	0.0074 (10)	0.0211 (11)	0.0040 (8)	0.000	0.000
O3	0.0134 (7)	0.0275 (8)	0.0110 (7)	0.0134 (6)	−0.0041 (6)	−0.0079 (7)
O4	0.0023 (9)	0.0023 (9)	0.018 (11)	0.0012 (5)	0.000	0.000

*Geometric parameters ( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ ) for (linhuishi\_TB\_xunchengkuangwu\_lvse\_20230803\_S1)*

Ca1—O1 <sup>i</sup>	2.3968 (14)	Ca2—O3 <sup>vii</sup>	2.3466 (16)
Ca1—O1 <sup>ii</sup>	2.3968 (14)	Ca2—O3 <sup>viii</sup>	2.3466 (16)
Ca1—O1	2.3968 (14)	Ca2—O2 <sup>ix</sup>	2.372 (2)
Ca1—O2 <sup>iii</sup>	2.4527 (15)	Ca2—O3 <sup>vi</sup>	2.4971 (15)
Ca1—O2 <sup>iv</sup>	2.4527 (15)	Ca2—O3	2.4971 (15)
Ca1—O2 <sup>v</sup>	2.4527 (15)	Ca2—O1 <sup>x</sup>	2.696 (2)
Ca1—O3 <sup>v</sup>	2.8024 (16)	Ca2—P1	3.0709 (9)
Ca1—O3 <sup>iii</sup>	2.8024 (16)	Ca2—P1 <sup>x</sup>	3.2590 (9)
Ca1—O3 <sup>iv</sup>	2.8025 (16)	Ca2—P1 <sup>ix</sup>	3.4865 (9)
Ca1—P1 <sup>iii</sup>	3.2025 (7)	P1—O3	1.5315 (16)
Ca1—P1 <sup>iv</sup>	3.2025 (7)	P1—O3 <sup>vi</sup>	1.5315 (16)
Ca1—P1 <sup>v</sup>	3.2025 (7)	P1—O1	1.533 (2)
Ca2—O4 <sup>vi</sup>	2.311 (2)	P1—O2	1.536 (2)
Ca2—O4	2.311 (2)	O4—O4 <sup>vi</sup>	0.30 (6)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O1 <sup>ii</sup>	74.66 (5)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1	106.72 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O1	74.66 (5)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1	106.72 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O1	74.66 (5)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1	69.48 (5)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>iii</sup>	92.61 (5)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1	29.71 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>iii</sup>	154.30 (7)	O3—Ca2—P1	29.71 (4)
O1—Ca1—O2 <sup>iii</sup>	124.12 (6)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1	170.36 (5)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	124.12 (6)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	78.83 (2)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	92.61 (5)	O4—Ca2—P1 <sup>x</sup>	78.83 (2)
O1—Ca1—O2 <sup>iv</sup>	154.30 (7)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	77.62 (4)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	75.93 (6)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	77.62 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	154.30 (7)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	128.72 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	124.12 (6)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	144.41 (4)
O1—Ca1—O2 <sup>v</sup>	92.61 (5)	O3—Ca2—P1 <sup>x</sup>	144.41 (4)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	75.93 (6)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	27.84 (4)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	75.93 (6)	P1—Ca2—P1 <sup>x</sup>	161.79 (3)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	142.44 (5)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	172.6 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	69.01 (6)	O4—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	172.6 (4)
O1—Ca1—O3 <sup>v</sup>	86.66 (6)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	78.95 (4)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	124.58 (5)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	78.95 (4)

O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	67.81 (6)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	21.16 (5)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	55.88 (6)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	92.74 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	86.66 (6)	O3—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	92.74 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	142.44 (5)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	79.72 (4)
O1—Ca1—O3 <sup>iii</sup>	69.01 (6)	P1—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	90.64 (3)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	55.88 (6)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	107.56 (3)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	124.58 (5)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	126.2 (4)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	67.81 (6)	O4—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	130.3 (4)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	116.98 (2)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	44.28 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	69.01 (5)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	95.56 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	86.66 (6)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	75.69 (5)
O1—Ca1—O3 <sup>iv</sup>	142.44 (5)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	149.80 (4)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	67.81 (6)	O3—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	115.88 (4)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	55.88 (6)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	36.41 (3)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	124.58 (5)	P1—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	136.499 (18)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	116.98 (2)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	58.546 (14)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	116.98 (2)	P1 <sup>ix</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	57.083 (13)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	92.89 (4)	O3—P1—O3 <sup>vi</sup>	107.36 (12)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	166.60 (4)	O3—P1—O1	111.07 (7)
O1—Ca1—P1 <sup>iii</sup>	97.55 (5)	O3 <sup>vi</sup> —P1—O1	111.07 (7)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	27.66 (5)	O3—P1—O2	108.02 (8)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	98.62 (4)	O3 <sup>vi</sup> —P1—O2	108.02 (8)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	66.27 (5)	O1—P1—O2	111.13 (12)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	122.14 (4)	O3—P1—Ca2	53.91 (6)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	28.57 (3)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2	53.91 (6)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	93.56 (3)	O1—P1—Ca2	133.40 (9)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	97.55 (5)	O2—P1—Ca2	115.47 (9)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	92.89 (4)	O3—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	112.62 (6)
O1—Ca1—P1 <sup>iv</sup>	166.60 (4)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca1 <sup>xii</sup>	61.05 (6)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	66.27 (5)	O1—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	135.80 (6)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	27.66 (5)	O2—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	47.86 (6)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	98.62 (4)	Ca2—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	80.137 (18)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	93.56 (3)	O3—P1—Ca1 <sup>v</sup>	61.05 (6)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	122.14 (4)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca1 <sup>v</sup>	112.62 (6)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	28.57 (3)	O1—P1—Ca1 <sup>v</sup>	135.80 (6)
P1 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	93.676 (18)	O2—P1—Ca1 <sup>v</sup>	47.86 (6)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	166.60 (4)	Ca2—P1—Ca1 <sup>v</sup>	80.137 (18)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	97.55 (5)	Ca1 <sup>xiii</sup> —P1—Ca1 <sup>v</sup>	65.24 (3)
O1—Ca1—P1 <sup>v</sup>	92.89 (4)	O3—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	79.56 (7)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	98.62 (4)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	79.56 (7)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	66.27 (5)	O1—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	55.19 (8)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	27.66 (5)	O2—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	166.33 (9)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	28.57 (3)	Ca2—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	78.21 (3)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.56 (3)	Ca1 <sup>xiii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	140.555 (17)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	122.14 (4)	Ca1 <sup>v</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	140.555 (17)
P1 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.676 (18)	O3—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	122.58 (7)
P1 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.676 (18)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	122.58 (7)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O4	7.4 (15)	O1—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	77.24 (9)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>vii</sup>	99.3 (7)	O2—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	33.89 (8)
O4—Ca2—O3 <sup>vii</sup>	106.4 (7)	Ca2—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	149.36 (3)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>viii</sup>	106.4 (7)	Ca1 <sup>xiii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	74.161 (16)

O4—Ca2—O3 <sup>viii</sup>	99.3 (7)	Ca1 <sup>v</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	74.161 (16)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3 <sup>viii</sup>	139.77 (8)	Ca2 <sup>xiii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	132.44 (3)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	152.24 (11)	P1—O1—Ca1 <sup>vi</sup>	129.85 (6)
O4—Ca2—O2 <sup>ix</sup>	152.24 (11)	P1—O1—Ca1	129.85 (6)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	85.66 (4)	Ca1 <sup>vi</sup> —O1—Ca1	91.11 (7)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	85.66 (4)	P1—O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	96.96 (10)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	83.6 (4)	Ca1 <sup>vi</sup> —O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	101.70 (6)
O4—Ca2—O3 <sup>vi</sup>	79.9 (4)	Ca1—O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	101.70 (6)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	136.14 (6)	P1—O2—Ca2 <sup>xiv</sup>	124.95 (12)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	78.05 (3)	P1—O2—Ca1 <sup>v</sup>	104.47 (8)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	74.41 (6)	Ca2 <sup>xiv</sup> —O2—Ca1 <sup>v</sup>	113.70 (6)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3	79.9 (4)	P1—O2—Ca1 <sup>xii</sup>	104.47 (8)
O4—Ca2—O3	83.6 (4)	Ca2 <sup>xiv</sup> —O2—Ca1 <sup>xii</sup>	113.70 (6)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3	78.05 (3)	Ca1 <sup>v</sup> —O2—Ca1 <sup>xii</sup>	89.48 (7)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O3	136.14 (6)	P1—O3—Ca2 <sup>iii</sup>	142.13 (8)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O3	74.41 (6)	P1—O3—Ca2	96.38 (8)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—O3	59.23 (7)	Ca2 <sup>iii</sup> —O3—Ca2	117.40 (6)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	106.61 (5)	P1—O3—Ca1 <sup>v</sup>	90.38 (7)
O4—Ca2—O1 <sup>x</sup>	106.61 (5)	Ca2 <sup>iii</sup> —O3—Ca1 <sup>v</sup>	99.94 (6)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	71.63 (4)	Ca2—O3—Ca1 <sup>v</sup>	99.16 (5)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	71.63 (4)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2 <sup>x</sup>	86.3 (7)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	100.88 (7)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2	86.3 (7)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	149.62 (4)	Ca2 <sup>x</sup> —O4—Ca2	119.59 (16)
O3—Ca2—O1 <sup>x</sup>	149.62 (4)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	86.3 (7)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1	83.01 (2)	Ca2 <sup>x</sup> —O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	119.58 (16)
O4—Ca2—P1	83.01 (2)	Ca2—O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	119.59 (16)

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