

## Ba<sub>15</sub>Zr<sub>14</sub>Te<sub>42</sub>: a new complex ternary telluride structure with low thermal conductivity

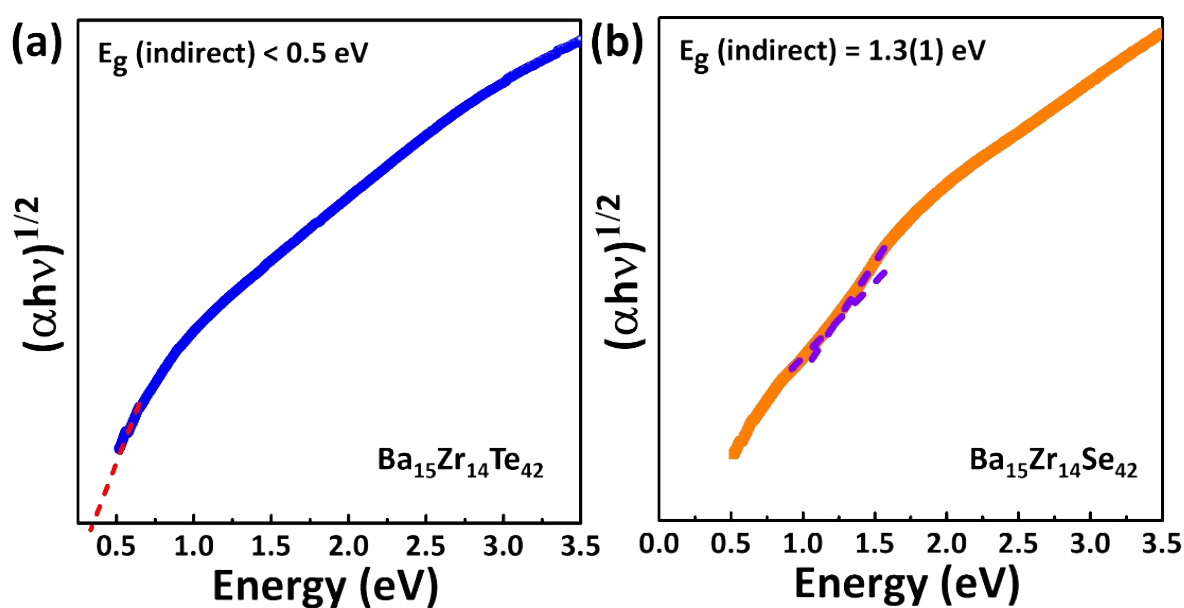
Sweta Yadav,<sup>a</sup> Manish K. Niranjana,<sup>b</sup> and Jai Prakash<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Department of Chemistry, Indian Institute of Technology Hyderabad, Kandi, Sangareddy, Telangana 502284, India

<sup>b</sup>Department of Physics, Indian Institute of Technology Hyderabad, Kandi, Sangareddy, Telangana 502284, India

\*Corresponding author, E-mail address: [jaiprakash@chy.iith.ac.in](mailto:jaiprakash@chy.iith.ac.in) (Jai Prakash)

### Electronic Supplementary Information (ESI)



**Fig. S11.** The indirect bandgap Tauc plots for the polycrystalline (a) Ba<sub>15</sub>Zr<sub>14</sub>Te<sub>42</sub> and (b) Ba<sub>15</sub>Zr<sub>14</sub>Se<sub>42</sub> samples.

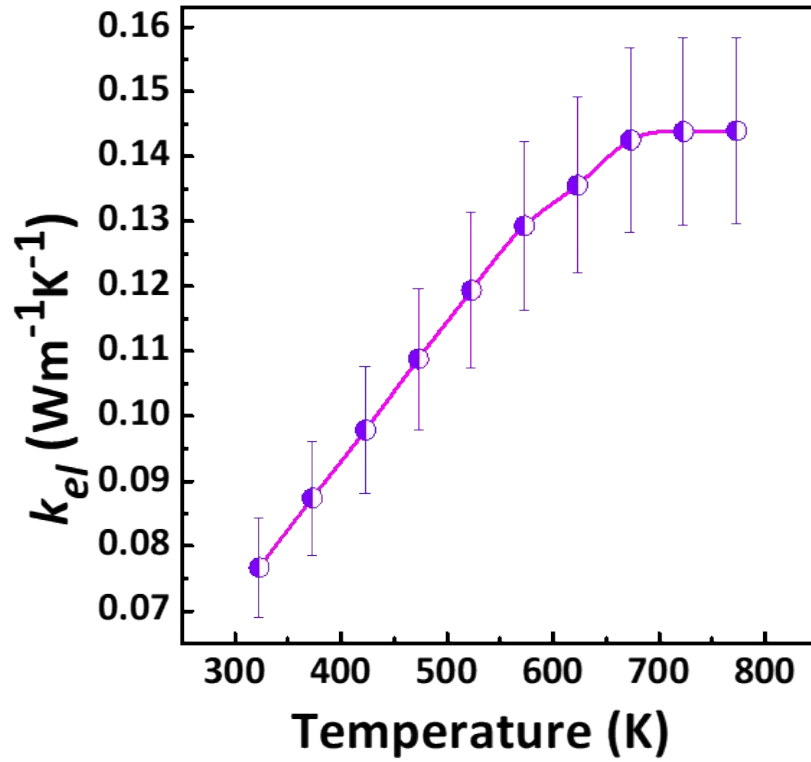


Fig. SI2. The temperature-dependent electrical thermal conductivity for the polycrystalline  $\text{Ba}_{15}\text{Zr}_{14}\text{Te}_{42}$  sample.

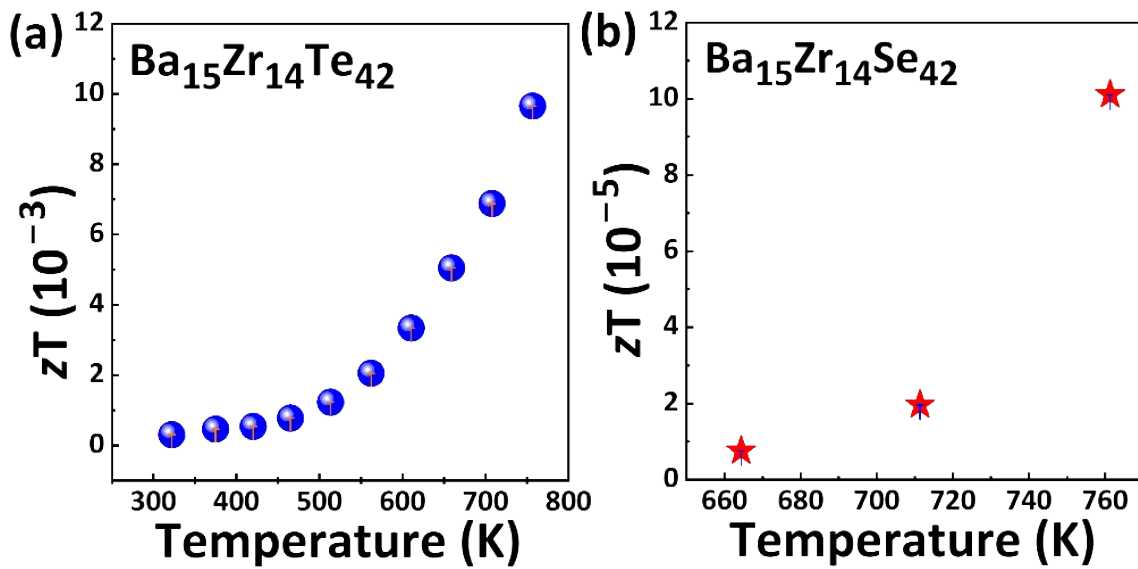
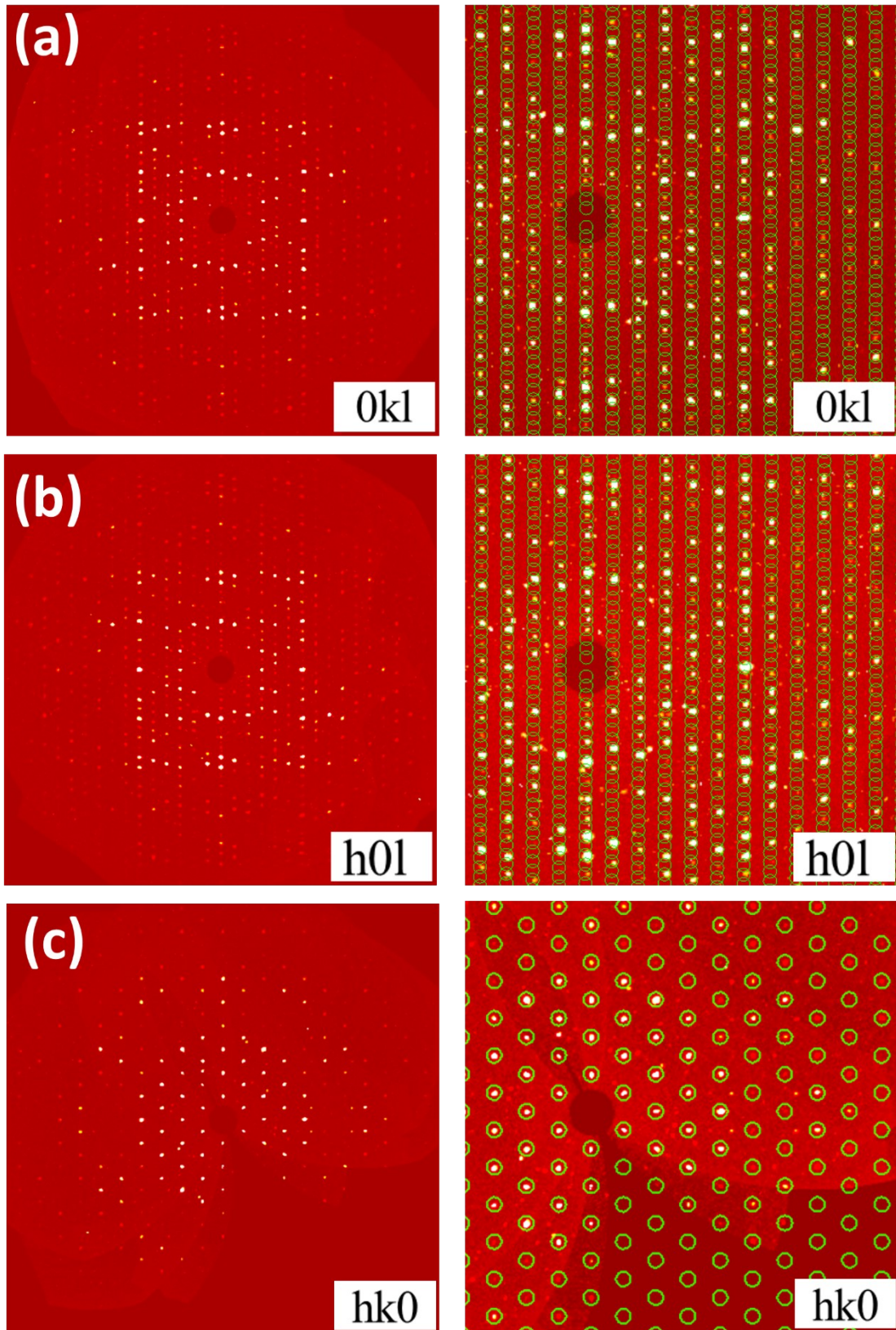


Fig. SI3. The temperature-dependent  $zT$  plots for the polycrystalline  $\text{Ba}_{15}\text{Zr}_{14}\text{Q}_{42}$  samples.



**Fig. SI4.** The synthesized precession images for the  $\text{Ba}_{15}\text{Zr}_{14}\text{Te}_{42}$  crystal calculated using the SCXRD dataset.

**Table S11:** Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for the  $\text{Ba}_{15}\text{Zr}_{14}\text{Te}_{42}$ .

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ba1	0.0253(6)	0.0407(7)	0.0262(6)	0.0195(5)	0.0132(5)	0.0172(5)
Ba2	0.0157(5)	0.0154(5)	0.0240(5)	0.0065(4)	0.0001(4)	0.0070(4)
Ba3	0.0256(6)	0.0256(6)	0.0478(10)	0.0102(7)	-0.0084(4)	0.0084(4)
Zr1	0.0147(8)	0.0147(8)	0.0135(12)	0.0073(4)	0.000	0.000
Zr2	0.0140(8)	0.0140(8)	0.0092(11)	0.0070(4)	0.000	0.000
Zr3	0.0156(8)	0.0156(8)	0.0112(12)	0.0078(4)	0.000	0.000
Zr4	0.0150(8)	0.0150(8)	0.0132(12)	0.0075(4)	0.000	0.000
Zr5	0.0150(8)	0.0150(8)	0.0122(12)	0.0075(4)	0.000	0.000
Zr6	0.0129(8)	0.0129(8)	0.0114(12)	0.0065(4)	0.000	0.000
Zr7	0.0157(12)	0.0157(12)	0.0180(18)	0.0079(6)	0.000	0.000
Zr8	0.0138(11)	0.0138(11)	0.0201(19)	0.0069(6)	0.000	0.000
Te1	0.0259(6)	0.0144(5)	0.0134(5)	0.0134(5)	0.0045(4)	0.0021(4)
Te2	0.0182(6)	0.0192(6)	0.0163(5)	-0.0010(5)	-0.0003(4)	0.0041(4)
Te3	0.0241(6)	0.0117(5)	0.0102(5)	0.0109(4)	0.0006(4)	0.0015(4)
Te4	0.0112(5)	0.0170(5)	0.0124(4)	0.0079(4)	-0.0016(4)	-0.0010(4)
Te5	0.0614(9)	0.0119(5)	0.0169(5)	0.0170(6)	-0.0159(6)	-0.0026(4)
Te6	0.0122(5)	0.0152(5)	0.0105(4)	0.0081(4)	0.0007(4)	0.0003(4)
Te7	0.0123(6)	0.1037(15)	0.0335(7)	0.0154(8)	-0.0035(5)	-0.0418(9)

**Table S12:** Geometric parameters ( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ ) for the  $\text{Ba}_{15}\text{Zr}_{14}\text{Te}_{42}$ .

Ba1–Te5 <sup>i</sup>	3.4903(16)	Zr3–Te3 <sup>xviii</sup>	2.8861(19)
Ba1–Te4 <sup>ii</sup>	3.5793(15)	Zr3–Te3 <sup>xix</sup>	2.8861(18)
Ba1–Te1 <sup>iii</sup>	3.6444(18)	Zr3–Te3	2.8862(18)
Ba1–Te6 <sup>iii</sup>	3.6452(15)	Zr3–Te4	2.9125(19)
Ba1–Te2 <sup>iv</sup>	3.647(2)	Zr3–Te4 <sup>xix</sup>	2.9126(19)
Ba1–Te5 <sup>v</sup>	3.654(2)	Zr3–Te4 <sup>xviii</sup>	2.9126(19)
Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	3.8050(17)	Zr3–Zr4	3.528(4)
Ba1–Te2 <sup>i</sup>	3.8791(19)	Zr4–Te5	2.843(2)
Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	3.8843(16)	Zr4–Te5 <sup>xviii</sup>	2.843(2)
Ba2–Te2 <sup>viii</sup>	3.4748(15)	Zr4–Te5 <sup>xix</sup>	2.843(2)
Ba2–Te7 <sup>ix</sup>	3.499(2)	Zr4–Te4 <sup>xix</sup>	2.9452(19)

Ba2–Te4 <sup>x</sup>	3.5605(15)	Zr4–Te4 <sup>xviii</sup>	2.9452(19)
Ba2–Te3 <sup>x</sup>	3.5841(14)	Zr4–Te4	2.9453(19)
Ba2–Te6 <sup>xi</sup>	3.6051(15)	Zr4–Zr5	3.461(4)
Ba2–Te1 <sup>xii</sup>	3.6161(15)	Zr5–Te2	2.862(2)
Ba2–Te4 <sup>xiii</sup>	3.6784(15)	Zr5–Te2 <sup>xviii</sup>	2.862(2)
Ba2–Te6 <sup>xii</sup>	3.6927(15)	Zr5–Te2 <sup>xix</sup>	2.862(2)
Ba2–Te3 <sup>xii</sup>	3.9418(15)	Zr5–Te5 <sup>xviii</sup>	2.908(2)
Ba3–Te7 <sup>xiv</sup>	3.488(2)	Zr5–Te5 <sup>xix</sup>	2.908(2)
Ba3–Te7 <sup>xv</sup>	3.488(2)	Zr5–Te5	2.908(2)
Ba3–Te6	3.6863(11)	Zr5–Zr6	3.616(4)
Ba3–Te6 <sup>xvi</sup>	3.6866(10)	Zr6–Te7	2.859(2)
Ba3–Te3 <sup>xvi</sup>	3.710(2)	Zr6–Te7 <sup>xviii</sup>	2.859(2)
Ba3–Te3	3.710(2)	Zr6–Te7 <sup>xix</sup>	2.859(2)
Ba3–Te3 <sup>xvii</sup>	3.7648(12)	Zr6–Te2 <sup>xviii</sup>	2.937(2)
Ba3–Te3 <sup>xviii</sup>	3.7649(12)	Zr6–Te2 <sup>xix</sup>	2.937(2)
Zr1–Te1 <sup>xviii</sup>	2.8913(18)	Zr6–Te2	2.937(2)
Zr1–Te1 <sup>xix</sup>	2.8913(18)	Zr6–Zr8	3.557(3)
Zr1–Te1	2.8915(18)	Zr7–Te1 <sup>xx</sup>	2.9037(11)
Zr1–Te6 <sup>xix</sup>	2.9538(18)	Zr7–Te1 <sup>xxi</sup>	2.9037(11)
Zr1–Te6 <sup>xviii</sup>	2.9538(18)	Zr7–Te1 <sup>xxii</sup>	2.9038(11)
Zr1–Te6	2.9539(18)	Zr7–Te1	2.9038(11)
Zr1–Zr7	3.205(3)	Zr7–Te1 <sup>xviii</sup>	2.9040(11)
Zr1–Zr2	3.309(4)	Zr7–Te1 <sup>xix</sup>	2.9040(11)
Zr2–Te3	2.8963(18)	Zr8–Te7 <sup>xxiii</sup>	2.8806(14)
Zr2–Te3 <sup>xviii</sup>	2.8964(18)	Zr8–Te7 <sup>xxiv</sup>	2.8806(14)
Zr2–Te3 <sup>xix</sup>	2.8964(18)	Zr8–Te7 <sup>xxv</sup>	2.8806(14)
Zr2–Te6	2.8975(17)	Zr8–Te7 <sup>xviii</sup>	2.8807(14)
Zr2–Te6 <sup>xix</sup>	2.8976(18)	Zr8–Te7 <sup>xix</sup>	2.8808(14)
Zr2–Te6 <sup>xviii</sup>	2.8976(17)	Zr8–Te7	2.8809(14)
Zr2–Zr3	3.372(4)		
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te4 <sup>ii</sup>	126.49(5)	Te5 <sup>xix</sup> –Zr4–Zr5	53.85(5)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te1 <sup>iii</sup>	125.80(5)	Te4 <sup>xix</sup> –Zr4–Zr5	127.46(5)
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te1 <sup>iii</sup>	89.26(4)	Te4 <sup>xviii</sup> –Zr4–Zr5	127.46(5)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te6 <sup>iii</sup>	157.42(5)	Te4–Zr4–Zr5	127.46(5)

Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te6 <sup>iii</sup>	64.87(3)	Te5–Zr4–Zr3	126.15(5)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te6 <sup>iii</sup>	68.91(3)	Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Zr3	126.15(5)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te2 <sup>iv</sup>	77.96(4)	Te5 <sup>xix</sup> –Zr4–Zr3	126.15(5)
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te2 <sup>iv</sup>	112.20(4)	Te4 <sup>xix</sup> –Zr4–Zr3	52.54(5)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te2 <sup>iv</sup>	129.40(4)	Te4 <sup>xviii</sup> –Zr4–Zr3	52.54(5)
Te6 <sup>iii</sup> –Ba1–Te2 <sup>iv</sup>	79.54(4)	Te4–Zr4–Zr3	52.54(5)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te5 <sup>v</sup>	67.16(4)	Zr5–Zr4–Zr3	180.0
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te5 <sup>v</sup>	63.87(3)	Te2–Zr5–Te2 <sup>xviii</sup>	86.60(7)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te5 <sup>v</sup>	107.63(4)	Te2–Zr5–Te2 <sup>xix</sup>	86.60(7)
Te6 <sup>iii</sup> –Ba1–Te5 <sup>v</sup>	128.66(4)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te2 <sup>xix</sup>	86.59(7)
Te2 <sup>iv</sup> –Ba1–Te5 <sup>v</sup>	122.96(4)	Te2–Zr5–Te5 <sup>xviii</sup>	168.22(4)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	101.81(4)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te5 <sup>xviii</sup>	86.18(4)
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	130.29(4)	Te2 <sup>xix</sup> –Zr5–Te5 <sup>xviii</sup>	102.23(4)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	68.25(4)	Te2–Zr5–Te5 <sup>xix</sup>	102.23(4)
Te6 <sup>iii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	65.73(3)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te5 <sup>xix</sup>	168.22(5)
Te2 <sup>iv</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	62.94(3)	Te2 <sup>xix</sup> –Zr5–Te5 <sup>xix</sup>	86.17(4)
Te5 <sup>v</sup> –Ba1–Te1 <sup>vi</sup>	163.71(5)	Te5 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te5 <sup>xix</sup>	86.29(7)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	64.41(4)	Te2–Zr5–Te5	86.18(4)
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	74.36(3)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te5	102.24(4)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	163.14(4)	Te2 <sup>xix</sup> –Zr5–Te5	168.22(4)
Te6 <sup>iii</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	106.38(4)	Te5 <sup>xviii</sup> –Zr5–Te5	86.29(7)
Te2 <sup>iv</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	62.78(4)	Te5 <sup>xix</sup> –Zr5–Te5	86.29(7)
Te5 <sup>v</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	61.83(3)	Te2–Zr5–Zr4	127.64(5)
Te1 <sup>vi</sup> –Ba1–Te2 <sup>i</sup>	125.66(4)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Zr4	127.64(5)
Te5 <sup>i</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	63.85(4)	Te2 <sup>xix</sup> –Zr5–Zr4	127.64(5)
Te4 <sup>ii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	144.96(5)	Te5 <sup>xviii</sup> –Zr5–Zr4	52.15(5)
Te1 <sup>iii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	64.65(4)	Te5 <sup>xix</sup> –Zr5–Zr4	52.15(5)
Te6 <sup>iii</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	120.05(4)	Te5–Zr5–Zr4	52.15(5)
Te2 <sup>iv</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	102.61(4)	Te2–Zr5–Zr6	52.36(5)
Te5 <sup>v</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	100.59(4)	Te2 <sup>xviii</sup> –Zr5–Zr6	52.36(5)
Te1 <sup>vi</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	63.22(3)	Te2 <sup>xix</sup> –Zr5–Zr6	52.36(5)
Te2 <sup>i</sup> –Ba1–Te1 <sup>vii</sup>	128.12(4)	Te5 <sup>xviii</sup> –Zr5–Zr6	127.85(5)
Te2 <sup>viii</sup> –Ba2–Te7 <sup>ix</sup>	65.79(4)	Te5 <sup>xix</sup> –Zr5–Zr6	127.85(5)
Te2 <sup>viii</sup> –Ba2–Te4 <sup>x</sup>	126.50(4)	Te5–Zr5–Zr6	127.85(5)
Te7 <sup>ix</sup> –Ba2–Te4 <sup>x</sup>	127.12(5)	Zr4–Zr5–Zr6	180.0

Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3x</sup>	128.35(4)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>7xviii</sup>	86.04(7)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3x</sup>	65.64(3)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>7xix</sup>	86.04(7)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3x</sup>	73.77(3)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>7xix</sup>	86.04(7)
Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xi</sup>	82.40(3)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xviii</sup>	81.60(4)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xi</sup>	95.81(5)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xviii</sup>	154.94(6)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xi</sup>	134.07(4)	Te <sup>7xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xviii</sup>	114.56(6)
Te <sup>3x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xi</sup>	118.92(4)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xix</sup>	114.56(6)
Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>1xii</sup>	66.56(3)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xix</sup>	81.60(4)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>1xii</sup>	131.24(4)	Te <sup>7xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xix</sup>	154.94(5)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>1xii</sup>	90.02(3)	Te <sup>2xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sup>2xix</sup>	83.86(7)
Te <sup>3x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>1xii</sup>	162.60(4)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub>	154.94(5)
Te <sup>6xi</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>1xii</sup>	68.14(3)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub>	114.56(6)
Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	78.19(3)	Te <sup>7xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub>	81.60(4)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	65.70(4)	Te <sup>2xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub>	83.86(7)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	68.01(4)	Te <sup>2xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub>	83.86(7)
Te <sup>3x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	66.81(3)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	51.98(5)
Te <sup>6xi</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	157.40(4)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	51.98(5)
Te <sup>1xii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>4xiii</sup>	113.41(4)	Te <sup>7xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	51.98(5)
Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	133.53(4)	Te <sup>2xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	129.50(4)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	150.40(5)	Te <sup>2xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	129.50(4)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	64.55(3)	Te <sub>2</sub> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>8</sub>	129.50(4)
Te <sup>3x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	97.93(3)	Te <sup>7</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	128.02(5)
Te <sup>6xi</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	69.85(4)	Te <sup>7xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	128.02(5)
Te <sup>1xii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	68.71(3)	Te <sup>7xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	128.02(5)
Te <sup>4xiii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>6xii</sup>	132.53(4)	Te <sup>2xviii</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	50.50(4)
Te <sup>2viii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	128.81(4)	Te <sup>2xix</sup> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	50.50(4)
Te <sup>7ix</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	82.23(4)	Te <sub>2</sub> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	50.50(4)
Te <sup>4x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	104.59(3)	Zr <sub>8</sub> –Zr <sub>6</sub> –Zr <sub>5</sub>	180.0
Te <sup>3x</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	58.73(3)	Te <sup>1xx</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sup>1xxi</sup>	92.11(3)
Te <sup>6xi</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	61.42(3)	Te <sup>1xx</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sup>1xxii</sup>	92.11(3)
Te <sup>1xii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	121.77(4)	Te <sup>1xxi</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sup>1xxii</sup>	92.11(3)
Te <sup>4xiii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	124.44(3)	Te <sup>1xx</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sub>1</sub>	180.00(3)
Te <sup>6xii</sup> –Ba <sub>2</sub> –Te <sup>3xii</sup>	68.18(3)	Te <sup>1xxi</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sub>1</sub>	87.89(3)
Te <sup>7xiv</sup> –Ba <sub>3</sub> –Te <sup>7xv</sup>	75.98(6)	Te <sup>1xxii</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sub>1</sub>	87.89(3)
Te <sup>7xiv</sup> –Ba <sub>3</sub> –Te <sub>6</sub>	81.11(4)	Te <sup>1xx</sup> –Zr <sub>7</sub> –Te <sup>1xviii</sup>	87.90(3)

Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>6</sub>	111.20(5)	Te <sup>1xxi</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xviii</sup>	180.0
Te <sup>7xiv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup>	111.20(5)	Te <sup>1xxii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xviii</sup>	87.90(3)
Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup>	81.10(4)	Te <sup>1</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xviii</sup>	92.10(3)
Te <sub>6</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup>	164.91(7)	Te <sup>1xx</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xix</sup>	87.90(3)
Te <sup>7xiv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup>	119.26(3)	Te <sup>1xxi</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xix</sup>	87.90(3)
Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup>	151.28(4)	Te <sup>1xxii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xix</sup>	180.0
Te <sub>6</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup>	95.83(4)	Te <sup>1</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xix</sup>	92.10(3)
Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup>	70.78(3)	Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Te <sup>1xix</sup>	92.10(3)
Te <sup>7xiv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub>	151.28(4)	Te <sup>1xx</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	123.76(2)
Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub>	119.26(3)	Te <sup>1xxi</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	123.76(2)
Te <sub>6</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub>	70.78(3)	Te <sup>1xxii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	123.76(2)
Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub>	95.83(4)	Te <sup>1</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	56.24(2)
Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub>	59.89(4)	Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	56.23(2)
Te <sup>7xiv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	63.80(4)	Te <sup>1xix</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub>	56.23(2)
Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	106.32(5)	Te <sup>1xx</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	56.24(2)
Te <sub>6</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	119.26(2)	Te <sup>1xxi</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	56.24(2)
Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	62.48(2)	Te <sup>1xxii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	56.24(2)
Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	65.94(3)	Te <sup>1</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	123.76(2)
Te <sub>3</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup>	125.74(4)	Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	123.77(2)
Te <sup>7xiv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	106.32(5)	Te <sup>1xix</sup> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	123.77(2)
Te <sup>7xv</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	63.80(4)	Zr <sub>1</sub> -Zr <sub>7</sub> -Zr <sub>1</sub> <sup>xx</sup>	180.0
Te <sub>6</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	62.48(2)	Te <sup>7xxiii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xxiv</sup>	85.23(4)
Te <sub>6</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	119.26(2)	Te <sup>7xxiii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xxv</sup>	85.23(4)
Te <sub>3</sub> <sup>xvi</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	125.74(4)	Te <sup>7xxiv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xxv</sup>	85.23(4)
Te <sub>3</sub> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	65.94(3)	Te <sup>7xxiii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xviii</sup>	177.70(11)
Te <sub>3</sub> <sup>xvii</sup> -Ba <sub>3</sub> -Te <sub>3</sub> <sup>xviii</sup>	168.31(6)	Te <sup>7xxiv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xviii</sup>	93.24(9)
Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sup>1xix</sup>	92.62(7)	Te <sup>7xxv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xviii</sup>	96.36(7)
Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sup>1</sup>	92.62(7)	Te <sup>7xxiii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xix</sup>	96.36(7)
Te <sup>1xix</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sup>1</sup>	92.62(7)	Te <sup>7xxiv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xix</sup>	177.70(10)
Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xix</sup>	177.61(8)	Te <sup>7xxv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xix</sup>	93.24(9)
Te <sup>1xix</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xix</sup>	89.75(3)	Te <sup>7xviii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7xix</sup>	85.22(4)
Te <sup>1</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xix</sup>	87.58(3)	Te <sup>7xxiii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7</sup>	93.24(9)
Te <sup>1xviii</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xviii</sup>	89.75(3)	Te <sup>7xxiv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7</sup>	96.36(7)
Te <sup>1xix</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xviii</sup>	87.58(3)	Te <sup>7xxv</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7</sup>	177.70(10)
Te <sup>1</sup> -Zr <sub>1</sub> -Te <sub>6</sub> <sup>xviii</sup>	177.61(8)	Te <sup>7xviii</sup> -Zr <sub>8</sub> -Te <sup>7</sup>	85.22(4)



Te6 <sup>xix</sup> -Zr1-Te6 <sup>xviii</sup>	90.04(6)	Te7 <sup>xix</sup> -Zr8-Te7	85.22(4)
Te1 <sup>xviii</sup> -Zr1-Te6	87.58(3)	Te7 <sup>xxiii</sup> -Zr8-Zr6	128.57(3)
Te1 <sup>xix</sup> -Zr1-Te6	177.60(8)	Te7 <sup>xxiv</sup> -Zr8-Zr6	128.57(3)
Te1-Zr1-Te6	89.76(3)	Te7 <sup>xxv</sup> -Zr8-Zr6	128.57(3)
Te6 <sup>xix</sup> -Zr1-Te6	90.04(6)	Te7 <sup>xviii</sup> -Zr8-Zr6	51.42(3)
Te6 <sup>xviii</sup> -Zr1-Te6	90.04(7)	Te7 <sup>xix</sup> -Zr8-Zr6	51.42(3)
Te1 <sup>xviii</sup> -Zr1-Zr7	56.61(5)	Te7-Zr8-Zr6	51.42(3)
Te1 <sup>xix</sup> -Zr1-Zr7	56.61(5)	Te7 <sup>xxiii</sup> -Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	51.42(3)
Te1-Zr1-Zr7	56.61(5)	Te7 <sup>xxiv</sup> -Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	51.43(3)
Te6 <sup>xix</sup> -Zr1-Zr7	125.24(5)	Te7 <sup>xxv</sup> -Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	51.43(3)
Te6 <sup>xviii</sup> -Zr1-Zr7	125.24(5)	Te7 <sup>xviii</sup> -Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	128.58(3)
Te6-Zr1-Zr7	125.24(5)	Te7 <sup>xix</sup> -Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	128.58(3)
Te1 <sup>xviii</sup> -Zr1-Zr2	123.39(5)	Te7-Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	128.58(3)
Te1 <sup>xix</sup> -Zr1-Zr2	123.39(5)	Zr6-Zr8-Zr6 <sup>xxiv</sup>	180.0
Te1-Zr1-Zr2	123.39(5)	Zr1-Te1-Zr7	67.15(5)
Te6 <sup>xix</sup> -Zr1-Zr2	54.76(5)	Zr1-Te1-Ba2 <sup>xxvi</sup>	86.10(5)
Te6 <sup>xviii</sup> -Zr1-Zr2	54.76(5)	Zr7-Te1-Ba2 <sup>xxvi</sup>	153.24(4)
Te6-Zr1-Zr2	54.76(5)	Zr1-Te1-Ba1 <sup>xxvii</sup>	86.53(4)
Zr7-Zr1-Zr2	180.0	Zr7-Te1-Ba1 <sup>xxvii</sup>	89.58(3)
Te3-Zr2-Te3 <sup>xviii</sup>	89.22(6)	Ba2 <sup>xxvi</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxvii</sup>	87.83(4)
Te3-Zr2-Te3 <sup>xix</sup>	89.22(6)	Zr1-Te1-Ba1 <sup>xxviii</sup>	83.55(3)
Te3 <sup>xviii</sup> -Zr2-Te3 <sup>xix</sup>	89.22(6)	Zr7-Te1-Ba1 <sup>xxviii</sup>	86.49(4)
Te3-Zr2-Te6	95.35(3)	Ba2 <sup>xxvi</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxviii</sup>	91.57(4)
Te3 <sup>xviii</sup> -Zr2-Te6	83.68(3)	Ba1 <sup>xxvii</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxviii</sup>	170.07(4)
Te3 <sup>xix</sup> -Zr2-Te6	171.49(4)	Zr1-Te1-Ba1 <sup>xxix</sup>	152.09(6)
Te3-Zr2-Te6 <sup>xix</sup>	83.68(3)	Zr7-Te1-Ba1 <sup>xxix</sup>	85.01(3)
Te3 <sup>xviii</sup> -Zr2-Te6 <sup>xix</sup>	171.49(4)	Ba2 <sup>xxvi</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxix</sup>	121.75(4)
Te3 <sup>xix</sup> -Zr2-Te6 <sup>xix</sup>	95.35(3)	Ba1 <sup>xxvii</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxix</sup>	95.65(3)
Te6-Zr2-Te6 <sup>xix</sup>	92.29(6)	Ba1 <sup>xxviii</sup> -Te1-Ba1 <sup>xxix</sup>	93.09(3)
Te3-Zr2-Te6 <sup>xviii</sup>	171.49(4)	Zr5-Te2-Zr6	77.14(6)
Te3 <sup>xviii</sup> -Zr2-Te6 <sup>xviii</sup>	95.35(3)	Zr5-Te2-Ba2 <sup>xxx</sup>	178.77(6)
Te3 <sup>xix</sup> -Zr2-Te6 <sup>xviii</sup>	83.69(3)	Zr6-Te2-Ba2 <sup>xxx</sup>	101.86(5)
Te6-Zr2-Te6 <sup>xviii</sup>	92.29(6)	Zr5-Te2-Ba1 <sup>xxxi</sup>	82.84(4)
Te6 <sup>xix</sup> -Zr2-Te6 <sup>xviii</sup>	92.29(6)	Zr6-Te2-Ba1 <sup>xxxi</sup>	98.60(4)
Te3-Zr2-Zr1	125.81(5)	Ba2 <sup>xxx</sup> -Te2-Ba1 <sup>xxxi</sup>	96.64(4)

Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>1</sub>	125.82(5)	Zr <sub>5</sub> –Te <sub>2</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	78.70(3)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>1</sub>	125.82(5)	Zr <sub>6</sub> –Te <sub>2</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	93.65(4)
Te <sub>6</sub> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>1</sub>	56.37(5)	Ba <sup>2xxx</sup> –Te <sub>2</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	102.11(4)
Te <sup>6xix</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>1</sub>	56.37(5)	Ba <sup>1xxxii</sup> –Te <sub>2</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	154.97(5)
Te <sup>6xviii</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>1</sub>	56.37(5)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	71.35(6)
Te <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	54.19(5)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2x</sup>	84.32(5)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	54.18(5)	Zr <sub>2</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2x</sup>	153.70(5)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	54.18(5)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sub>3</sub>	89.80(3)
Te <sub>6</sub> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	123.63(5)	Zr <sub>2</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sub>3</sub>	86.34(3)
Te <sup>6xix</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	123.63(5)	Ba <sup>2x</sup> –Te <sub>3</sub> –Ba <sub>3</sub>	83.68(3)
Te <sup>6xviii</sup> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	123.63(5)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>3xix</sup>	88.72(4)
Zr <sub>1</sub> –Zr <sub>2</sub> –Zr <sub>3</sub>	180.0	Zr <sub>2</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>3xix</sup>	85.31(3)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>3xix</sup>	89.62(7)	Ba <sup>2x</sup> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>3xix</sup>	104.44(3)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub>	89.62(7)	Ba <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>3xix</sup>	171.55(3)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub>	89.62(7)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2xxvi</sup>	151.50(5)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub>	87.21(3)	Zr <sub>2</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2xxvi</sup>	81.79(5)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub>	174.05(4)	Ba <sup>2x</sup> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2xxvi</sup>	119.75(3)
Te <sub>3</sub> –Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub>	95.39(3)	Ba <sub>3</sub> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2xxvi</sup>	78.93(3)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xix</sup>	174.05(4)	Ba <sup>3xix</sup> –Te <sub>3</sub> –Ba <sup>2xxvi</sup>	98.60(3)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xix</sup>	95.39(3)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub> –Zr <sub>4</sub>	74.07(6)
Te <sub>3</sub> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xix</sup>	87.21(3)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2x</sup>	84.39(3)
Te <sub>4</sub> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xix</sup>	88.08(7)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2x</sup>	91.22(3)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xviii</sup>	95.39(3)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>1xxxiii</sup>	167.45(6)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xviii</sup>	87.21(3)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>1xxxiii</sup>	95.06(5)
Te <sub>3</sub> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xviii</sup>	174.05(4)	Ba <sup>2x</sup> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>1xxxiii</sup>	89.71(3)
Te <sub>4</sub> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xviii</sup>	88.08(7)	Zr <sub>3</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2xxxiv</sup>	82.27(3)
Te <sup>4xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Te <sup>4xviii</sup>	88.08(7)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2xxxiv</sup>	88.93(3)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	54.47(5)	Ba <sup>2x</sup> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2xxxiv</sup>	166.08(4)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	54.47(5)	Ba <sup>1xxxiii</sup> –Te <sub>4</sub> –Ba <sup>2xxxiv</sup>	104.15(4)
Te <sub>3</sub> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	54.46(5)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>5</sub> –Zr <sub>5</sub>	74.00(7)
Te <sub>4</sub> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	126.61(5)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>5</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	149.76(6)
Te <sup>4xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	126.61(5)	Zr <sub>5</sub> –Te <sub>5</sub> –Ba <sup>1xxxii</sup>	85.06(5)
Te <sup>4xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>2</sub>	126.61(5)	Zr <sub>4</sub> –Te <sub>5</sub> –Ba <sup>1xvii</sup>	95.28(4)
Te <sup>3xviii</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>4</sub>	125.53(5)	Zr <sub>5</sub> –Te <sub>5</sub> –Ba <sup>1xvii</sup>	111.47(5)
Te <sup>3xix</sup> –Zr <sub>3</sub> –Zr <sub>4</sub>	125.53(5)	Ba <sup>1xxxii</sup> –Te <sub>5</sub> –Ba <sup>1xvii</sup>	112.83(4)

Te3–Zr3–Zr4	125.54(5)	Zr2–Te6–Zr1	68.87(6)
Te4–Zr3–Zr4	53.39(5)	Zr2–Te6–Ba2 <sup>xxxv</sup>	88.01(3)
Te4 <sup>xix</sup> –Zr3–Zr4	53.39(5)	Zr1–Te6–Ba2 <sup>xxxv</sup>	85.39(3)
Te4 <sup>xviii</sup> –Zr3–Zr4	53.39(5)	Zr2–Te6–Ba1 <sup>xxvii</sup>	154.11(6)
Zr2–Zr3–Zr4	180.0	Zr1–Te6–Ba1 <sup>xxvii</sup>	85.61(5)
Te5–Zr4–Te5 <sup>xviii</sup>	88.74(7)	Ba2 <sup>xxxv</sup> –Te6–Ba1 <sup>xxvii</sup>	94.40(3)
Te5–Zr4–Te5 <sup>xix</sup>	88.74(7)	Zr2–Te6–Ba3	86.77(5)
Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Te5 <sup>xix</sup>	88.74(7)	Zr1–Te6–Ba3	152.72(6)
Te5–Zr4–Te4 <sup>xix</sup>	82.74(3)	Ba2 <sup>xxxv</sup> –Te6–Ba3	106.54(4)
Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Te4 <sup>xix</sup>	164.61(4)	Ba1 <sup>xxvii</sup> –Te6–Ba3	116.94(4)
Te5 <sup>xix</sup> –Zr4–Te4 <sup>xix</sup>	103.80(4)	Zr2–Te6–Ba2 <sup>xxvi</sup>	86.34(3)
Te5–Zr4–Te4 <sup>xviii</sup>	164.61(4)	Zr1–Te6–Ba2 <sup>xxvi</sup>	83.81(3)
Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Te4 <sup>xviii</sup>	103.80(4)	Ba2 <sup>xxxv</sup> –Te6–Ba2 <sup>xxvi</sup>	169.03(4)
Te5 <sup>xix</sup> –Zr4–Te4 <sup>xviii</sup>	82.74(3)	Ba1 <sup>xxvii</sup> –Te6–Ba2 <sup>xxvi</sup>	86.66(3)
Te4 <sup>xix</sup> –Zr4–Te4 <sup>xviii</sup>	86.86(7)	Ba3–Te6–Ba2 <sup>xxvi</sup>	82.53(4)
Te5–Zr4–Te4	103.80(4)	Zr6–Te7–Zr8	76.60(5)
Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Te4	82.74(3)	Zr6–Te7–Ba3 <sup>xv</sup>	135.09(8)
Te5 <sup>xix</sup> –Zr4–Te4	164.61(4)	Zr8–Te7–Ba3 <sup>xv</sup>	93.82(4)
Te4 <sup>xix</sup> –Zr4–Te4	86.86(7)	Zr6–Te7–Ba2 <sup>xxxvi</sup>	102.93(5)
Te4 <sup>xviii</sup> –Zr4–Te4	86.86(7)	Zr8–Te7–Ba2 <sup>xxxvi</sup>	137.49(9)
Te5–Zr4–Zr5	53.85(5)	Ba3 <sup>xv</sup> –Te7–Ba2 <sup>xxxvi</sup>	112.51(4)
Te5 <sup>xviii</sup> –Zr4–Zr5	53.85(5)		

Symmetry codes: (i)  $-x+y+2/3, y+1/3, z-1/6$ ; (ii)  $y-1/3, x-2/3, -z+5/6$ ; (iii)  $x-1, y, z$ ; (iv)  $x-1/3, x-y+1/3, z-1/6$ ; (v)  $x-y-1/3, -y+1/3, -z+5/6$ ; (vi)  $-y, x-y, z$ ; (vii)  $x-y-2/3, x-1/3, -z+2/3$ ; (viii)  $x, y+1, z$ ; (ix)  $-x+y+1, -x+2, z$ ; (x)  $-x+1, -y+1, -z+1$ ; (xi)  $x-2/3, x-y+2/3, z+1/6$ ; (xii)  $-y+1/3, -x+5/3, z+1/6$ ; (xiii)  $x-y, x, -z+1$ ; (xiv)  $-y+5/3, -x+4/3, z-1/6$ ; (xv)  $-x+2, -y+1, -z+1$ ; (xvi)  $y+2/3, x-2/3, -z+5/6$ ; (xvii)  $x-y+2/3, -y+1/3, -z+5/6$ ; (xviii)  $-y+1, x-y, z$ ; (xix)  $-x+y+1, -x+1, z$ ; (xx)  $-x+4/3, -y+2/3, -z+2/3$ ; (xxi)  $y+1/3, -x+y+2/3, -z+2/3$ ; (xxii)  $x-y+1/3, x-1/3, -z+2/3$ ; (xxiii)  $x-y+1/3, -y+2/3, -z+7/6$ ; (xxiv)  $y+1/3, x-1/3, -z+7/6$ ; (xxv)  $-x+4/3, -x+y+2/3, -z+7/6$ ; (xxvi)  $-y+5/3, -x+1/3, z-1/6$ ; (xxvii)  $x+1, y, z$ ; (xxviii)  $-x+y, -x, z$ ; (xxix)  $y+1/3, -x+y-1/3, -z+2/3$ ; (xxx)  $x, y-1, z$ ; (xxxii)  $x+1/3, x-y+2/3, z+1/6$ ; (xxxiii)  $-x+y+1/3, y-1/3, z+1/6$ ; (xxxiiii)  $y+2/3, x+1/3, -z+5/6$ ; (xxxv)  $y, -x+y, -z+1$ ; (xxxvi)  $x+2/3, x-y+4/3, z-1/6$ ; (xxxvii)  $-y+2, x-y+1, z$ .