

data_hp602

_audit_creation_method SHELXL-97

_chemical_name_systematic

;

?

;

_chemical_name_common ?

_chemical_melting_point ?

_chemical_formula_moiety ?

_chemical_formula_sum

'H2 Fe4.70 Mg0.90 Mn1.40 O24 Si8'

_chemical_formula_weight 972.03

loop_

_atom_type_symbol

_atom_type_description

_atom_type_scatter_dispersion_real

_atom_type_scatter_dispersion_imag

_atom_type_scatter_source

'Mn' 'Mn' 0.3368 0.7283

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Fe' 'Fe' 0.3463 0.8444

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Mg' 'Mg' 0.0486 0.0363

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Si' 'Si' 0.0817 0.0704

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'O' 'O' 0.0106 0.0060

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'H' 'H' 0.0000 0.0000

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting ?

_symmetry_space_group_name_H-M ?

loop_

_symmetry_equiv_pos_as_xyz

'x, y, z'

'-x, y, -z'

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

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

'-x, -y, -z'

'x, -y, z'

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

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

_cell_length_a 9.101(6)

_cell_length_b 17.990(4)

_cell_length_c 5.2592(17)

_cell_angle_alpha 90.00

_cell_angle_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume               861.1(7)
_cell_formula_units_Z      2
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used ?
_cell_measurement_theta_min ?
_cell_measurement_theta_max ?

_exptl_crystal_description ?
_exptl_crystal_colour      ?
_exptl_crystal_size_max    ?
_exptl_crystal_size_mid    ?
_exptl_crystal_size_min    ?
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_diffn 3.749
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.584
_exptl_absorpt_correction_type ?
_exptl_absorpt_correction_T_min ?
_exptl_absorpt_correction_T_max ?
_exptl_absorpt_process_details ?

_exptl_special_details
;
?
;

_diffrn_ambient_temperature 293(2)
_diffrn_radiation_wavelength 0.71073
_diffrn_radiation_type      MoK\alpha
_diffrn_radiation_source     'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator graphite
_diffrn_measurement_device_type ?
_diffrn_measurement_method   ?
_diffrn_detector_area_resol_mean ?
_diffrn_standards_number     ?
_diffrn_standards_interval_count ?
_diffrn_standards_interval_time ?
_diffrn_standards_decay_%    ?
_diffrn_reflns_number        3906
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.1163
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0711
_diffrn_reflns_limit_h_min   -4
_diffrn_reflns_limit_h_max    4
_diffrn_reflns_limit_k_min   -23
_diffrn_reflns_limit_k_max    23
_diffrn_reflns_limit_l_min   -6
_diffrn_reflns_limit_l_max    6
_diffrn_reflns_theta_min     4.04
_diffrn_reflns_theta_max     27.98
_reflns_number_total         377
_reflns_number_gt            224
_reflns_threshold_expression  >2sigma(I)

```

```

_computing_data_collection      ?
_computing_cell_refinement      ?
_computing_data_reduction      ?
_computing_structure_solution   'SHELXS-97 (Sheldrick, 1990)'
_computing_structure_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics   ?
_computing_publication_material ?

```

```
_refine_special_details
```

```
;
```

Refinement of F^2 against ALL reflections. The weighted R-factor wR and goodness of fit S are based on F^2 , conventional R-factors R are based on F, with F set to zero for negative F^2 . The threshold expression of $F^2 > 2\sigma(F^2)$ is used only for calculating R-factors(gt) etc. and is not relevant to the choice of reflections for refinement. R-factors based on F^2 are statistically about twice as large as those based on F, and R-factors based on ALL data will be even larger.

```
;
```

```

_refine_ls_structure_factor_coef Fsqd
_refine_ls_matrix_type          full
_refine_ls_weighting_scheme     calc
_refine_ls_weighting_details
'calc w=1/[\s^2*(Fo^2)+(0.1509P)^2+48.9508P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary    direct
_atom_sites_solution_secondary  difmap
_atom_sites_solution_hydrogens  geom
_refine_ls_hydrogen_treatment   mixed
_refine_ls_extinction_method     SHELXL
_refine_ls_extinction_coef       0.000(3)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/\sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        377
_refine_ls_number_parameters     33
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.1352
_refine_ls_R_factor_gt           0.0991
_refine_ls_wR_factor_ref         0.2741
_refine_ls_wR_factor_gt          0.2403
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   0.944
_refine_ls_restrained_S_all      0.944
_refine_ls_shift/su_max          6.184
_refine_ls_shift/su_mean         0.737

```

```
loop_
```

```

_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_adp_type
_atom_site_occupancy

```

```

_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Fe1 Fe 0.0000 0.0853(3) 0.5000 0.0125(13) Uiso 0.82 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.0853(3) 0.5000 0.0125(13) Uiso 0.18 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1777(3) 0.0000 0.0125(13) Uiso 0.71 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1777(3) 0.0000 0.0125(13) Uiso 0.29 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0125(13) Uiso 0.78 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0125(13) Uiso 0.22 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.2608(3) 0.5000 0.0125(13) Uiso 0.71 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.2608(3) 0.5000 0.0125(13) Uiso 0.29 2 d SP . .
T1 Si 0.289(2) 0.0841(3) 0.1501(11) 0.0093(14) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.2987(19) 0.1679(3) 0.6514(12) 0.0093(14) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.115(5) 0.0873(9) 0.158(3) 0.016(2) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.125(5) 0.1722(8) 0.660(3) 0.016(2) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.132(6) 0.0000 0.650(4) 0.016(2) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.377(4) 0.2493(9) 0.674(3) 0.016(2) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.353(4) 0.1270(9) 0.400(3) 0.016(2) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.360(4) 0.1207(9) 0.897(3) 0.016(2) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.346(6) 0.0000 0.167(4) 0.016(2) Uiso 1 2 d S . .

```

_geom_special_details

;

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

;

loop_

```

_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_publ_flag

```

```

Fe1 O1 2.08(3) . ?
Fe1 O1 2.08(3) 2_556 ?
Fe1 O3 2.10(3) 5_556 ?
Fe1 O3 2.10(3) . ?
Fe1 O2 2.11(3) . ?
Fe1 O2 2.11(3) 2_556 ?
Fe1 Mg3 3.045(3) 1_556 ?
Fe1 Mg1 3.070(10) 5_556 ?
Fe1 Mg2 3.111(4) 1_556 ?
Fe1 Mn4 3.157(7) . ?
Fe2 O4 1.96(2) 3_554 ?
Fe2 O4 1.96(2) 4_455 ?
Fe2 O1 2.11(3) 2 ?
Fe2 O1 2.11(3) . ?
Fe2 O2 2.12(3) 1_554 ?

```

Fe2 O2 2.12(3) 2_556 ?
 Fe2 Mn4 3.025(4) . ?
 Fe2 Mn4 3.025(4) 1_554 ?
 Fe2 Mg1 3.111(4) 1_554 ?
 Fe2 O6 3.48(4) 2_556 ?
 Fe3 O1 2.06(3) 5 ?
 Fe3 O1 2.06(3) . ?
 Fe3 O1 2.06(3) 2 ?
 Fe3 O1 2.06(3) 6 ?
 Fe3 O3 2.20(4) 5_556 ?
 Fe3 O3 2.20(4) 1_554 ?
 Fe3 Mg1 3.045(3) 5 ?
 Fe3 Mg1 3.045(3) 5_556 ?
 Fe3 Mg1 3.045(3) 1_554 ?
 Fe3 Mg2 3.197(5) 5 ?
 Mn4 O4 2.06(2) 4_456 ?
 Mn4 O4 2.06(2) 3_554 ?
 Mn4 O2 2.13(3) 2_556 ?
 Mn4 O2 2.13(3) . ?
 Mn4 O6 2.54(2) 3_554 ?
 Mn4 O6 2.54(2) 4_456 ?
 Mn4 T2 2.891(12) 4_456 ?
 Mn4 T2 2.891(12) 3_554 ?
 Mn4 Mg2 3.025(4) 1_556 ?
 Mn4 Fe2 3.025(4) 1_556 ?
 T1 O7 1.60(2) . ?
 T1 O6 1.62(2) 1_554 ?
 T1 O1 1.58(4) . ?
 T1 O5 1.63(2) . ?
 T1 O6 3.26(4) 2_656 ?
 T1 Mn4 3.475(12) 3_554 ?
 T1 O6 3.971(18) 6_554 ?
 T1 O7 4.01(5) 5_655 ?
 T1 O6 4.034(17) . ?
 T2 O2 1.58(4) . ?
 T2 O5 1.59(2) . ?
 T2 O6 1.64(2) . ?
 T2 O4 1.63(2) . ?
 T2 Fe4 2.891(12) 3 ?
 T2 Mn4 2.891(12) 3 ?
 T2 O5 3.27(4) 2_656 ?
 T2 O7 3.977(15) . ?
 T2 O6 4.00(3) 2_657 ?
 T2 O5 4.037(17) 1_556 ?
 O1 O5 2.61(5) . ?
 O1 O7 2.62(6) . ?
 O1 O6 2.69(5) 1_554 ?
 O1 O6 4.38(6) 2_556 ?
 O2 Mg2 2.12(3) 1_556 ?
 O2 Fe2 2.12(3) 1_556 ?
 O2 O5 2.61(5) . ?
 O2 O6 2.64(5) . ?
 O2 O5 3.83(2) 3 ?
 O2 O6 3.98(2) 3_554 ?

O2 Mn4 4.03(4) 3 ?
O3 Mg1 2.10(3) 5_556 ?
O3 Fe1 2.10(3) 5_556 ?
O3 Mg3 2.20(4) 1_556 ?
O3 Fe3 2.20(4) 1_556 ?
O3 O7 3.20(5) . ?
O3 O6 3.27(4) . ?
O3 O6 3.27(4) 6 ?
O3 O5 3.31(4) . ?
O3 O5 3.31(4) 6 ?
O3 O7 3.34(5) 1_556 ?
O4 Mg2 1.96(2) 3 ?
O4 Fe2 1.96(2) 3 ?
O4 Fe4 2.06(2) 3 ?
O4 Mn4 2.06(2) 3 ?
O4 O6 2.60(2) . ?
O4 O5 2.64(2) . ?
O4 O5 3.28(4) 3 ?
O4 O5 3.32(4) 2_656 ?
O4 O6 3.50(4) 3_554 ?
O4 Mn4 3.723(18) 3_554 ?
O5 O7 2.595(18) . ?
O5 O6 2.61(2) . ?
O5 O6 2.65(2) 1_554 ?
O5 O5 2.87(7) 2_656 ?
O5 O6 3.04(5) 2_656 ?
O5 O4 3.28(4) 3_554 ?
O5 Fe4 3.21(2) 3_554 ?
O5 Mn4 3.21(2) 3_554 ?
O5 T2 3.27(4) 2_656 ?
O5 O4 3.32(4) 2_656 ?
O5 Mg2 3.80(2) 3 ?
O5 Fe2 3.80(2) 3 ?
O6 T1 1.62(2) 1_556 ?
O6 Fe4 2.54(2) 3 ?
O6 Mn4 2.54(2) 3 ?
O6 O7 2.60(2) 1_556 ?
O6 O5 2.65(2) 1_556 ?
O6 O1 2.69(5) 1_556 ?
O6 O6 2.76(7) 2_657 ?
O6 O5 3.04(5) 2_656 ?
O6 T1 3.26(4) 2_656 ?
O6 O4 3.50(4) 3 ?
O6 O7 3.46(5) 5_656 ?
O6 Mg2 3.48(4) 1_556 ?
O6 Fe2 3.48(4) 1_556 ?
O7 T1 1.60(2) 6 ?
O7 O5 2.595(18) 6 ?
O7 O6 2.60(2) 1_554 ?
O7 O6 2.60(2) 6_554 ?
O7 O1 2.62(6) 6 ?
O7 O7 3.30(9) 5_655 ?
O7 O3 3.34(5) 1_554 ?
O7 O6 3.46(5) 2_656 ?

O7 O6 3.46(5) 5_656 ?
O7 Mg1 3.92(4) 5_556 ?
O7 Fe1 3.92(4) 5_556 ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle_publ_flag
O1 Fe1 O1 178.1(9) . 2_556 ?
O1 Fe1 O3 88.7(13) . 5_556 ?
O1 Fe1 O3 92.7(14) 2_556 5_556 ?
O1 Fe1 O3 92.7(14) . . ?
O1 Fe1 O3 88.7(13) 2_556 . ?
O3 Fe1 O3 86.3(19) 5_556 . ?
O1 Fe1 O2 93.4(12) . . ?
O1 Fe1 O2 85.2(13) 2_556 . ?
O3 Fe1 O2 177.7(14) 5_556 . ?
O3 Fe1 O2 94.7(13) . . ?
O1 Fe1 O2 85.2(13) . 2_556 ?
O1 Fe1 O2 93.4(12) 2_556 2_556 ?
O3 Fe1 O2 94.7(13) 5_556 2_556 ?
O3 Fe1 O2 177.7(14) . 2_556 ?
O2 Fe1 O2 84.4(16) . 2_556 ?
O1 Fe1 Mg3 138.9(9) . 1_556 ?
O1 Fe1 Mg3 42.5(8) 2_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 87.5(5) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 46.3(10) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 91.7(4) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 135.8(8) 2_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mg1 90.9(4) . 5_556 ?
O1 Fe1 Mg1 90.9(4) 2_556 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 43.1(9) 5_556 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 43.1(9) . 5_556 ?
O2 Fe1 Mg1 137.8(8) . 5_556 ?
O2 Fe1 Mg1 137.8(8) 2_556 5_556 ?
Mg3 Fe1 Mg1 59.72(8) 1_556 5_556 ?
O1 Fe1 Mg2 136.1(8) . 1_556 ?
O1 Fe1 Mg2 42.4(8) 2_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 135.0(10) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 94.2(5) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 42.9(8) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 86.6(5) 2_556 1_556 ?
Mg3 Fe1 Mg2 62.57(8) 1_556 1_556 ?
Mg1 Fe1 Mg2 122.30(11) 5_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mn4 89.1(4) . . ?
O1 Fe1 Mn4 89.1(4) 2_556 . ?
O3 Fe1 Mn4 136.9(9) 5_556 . ?
O3 Fe1 Mn4 136.9(9) . . ?
O2 Fe1 Mn4 42.2(8) . . ?
O2 Fe1 Mn4 42.2(8) 2_556 . ?

Mg3 Fe1 Mn4 120.28(8) 1_556 . ?
Mg1 Fe1 Mn4 180.0 5_556 . ?
Mg2 Fe1 Mn4 57.70(11) 1_556 . ?
O4 Fe2 O4 95.6(14) 3_554 4_455 ?
O4 Fe2 O1 171.6(10) 3_554 2 ?
O4 Fe2 O1 92.7(11) 4_455 2 ?
O4 Fe2 O1 92.7(11) 3_554 . ?
O4 Fe2 O1 171.6(10) 4_455 . ?
O1 Fe2 O1 78.9(17) 2 . ?
O4 Fe2 O2 96.7(12) 3_554 1_554 ?
O4 Fe2 O2 86.9(11) 4_455 1_554 ?
O1 Fe2 O2 84.3(12) 2 1_554 ?
O1 Fe2 O2 91.6(12) . 1_554 ?
O4 Fe2 O2 86.9(11) 3_554 2_556 ?
O4 Fe2 O2 96.7(12) 4_455 2_556 ?
O1 Fe2 O2 91.6(12) 2 2_556 ?
O1 Fe2 O2 84.3(12) . 2_556 ?
O2 Fe2 O2 174.7(9) 1_554 2_556 ?
O4 Fe2 Mn4 42.4(8) 3_554 . ?
O4 Fe2 Mn4 94.3(5) 4_455 . ?
O1 Fe2 Mn4 136.4(8) 2 . ?
O1 Fe2 Mn4 92.2(4) . . ?
O2 Fe2 Mn4 139.1(8) 1_554 . ?
O2 Fe2 Mn4 44.8(7) 2_556 . ?
O4 Fe2 Mn4 94.3(5) 3_554 1_554 ?
O4 Fe2 Mn4 42.4(8) 4_455 1_554 ?
O1 Fe2 Mn4 92.2(4) 2 1_554 ?
O1 Fe2 Mn4 136.4(8) . 1_554 ?
O2 Fe2 Mn4 44.8(7) 1_554 1_554 ?
O2 Fe2 Mn4 139.1(8) 2_556 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mn4 120.8(2) . 1_554 ?
O4 Fe2 Mg1 139.0(8) 3_554 1_554 ?
O4 Fe2 Mg1 87.9(5) 4_455 1_554 ?
O1 Fe2 Mg1 41.8(8) 2 1_554 ?
O1 Fe2 Mg1 85.4(5) . 1_554 ?
O2 Fe2 Mg1 42.5(8) 1_554 1_554 ?
O2 Fe2 Mg1 133.4(7) 2_556 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mg1 177.3(2) . 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mg1 61.92(11) 1_554 1_554 ?
O4 Fe2 O6 131.8(9) 3_554 2_556 ?
O4 Fe2 O6 74.3(10) 4_455 2_556 ?
O1 Fe2 O6 50.5(11) 2 2_556 ?
O1 Fe2 O6 100.4(12) . 2_556 ?
O2 Fe2 O6 128.6(10) 1_554 2_556 ?
O2 Fe2 O6 49.4(10) 2_556 2_556 ?
Mn4 Fe2 O6 90.6(3) . 2_556 ?
Mn4 Fe2 O6 106.3(3) 1_554 2_556 ?
Mg1 Fe2 O6 88.5(3) 1_554 2_556 ?
O1 Fe3 O1 180.0(6) 5 . ?
O1 Fe3 O1 99.1(17) 5 2 ?
O1 Fe3 O1 80.9(17) . 2 ?
O1 Fe3 O1 80.9(17) 5 6 ?
O1 Fe3 O1 99.1(17) . 6 ?
O1 Fe3 O1 180(2) 2 6 ?

O1 Fe3 O3 93.3(12) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 86.7(12) . 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 93.3(12) 2 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 86.7(12) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 86.7(12) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 93.3(12) . 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 86.7(12) 2 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 93.3(12) 6 1_554 ?
 O3 Fe3 O3 180(2) 5_556 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 43.0(8) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.0(8) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) 2 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) 6 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 136.3(8) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.7(8) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) . 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.0(8) 2 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 43.0(8) 6 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.7(8) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 136.3(8) 1_554 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 119.45(16) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) . 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 43.0(8) 2 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.0(8) 6 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 136.3(8) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.7(8) 1_554 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 60.55(16) 5 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(16) 5_556 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg2 40.5(9) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 139.5(9) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 139.5(9) 2 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 40.5(9) 6 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.72(8) 5 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.72(8) 5_556 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 120.28(8) 1_554 5 ?
 O4 Mn4 O4 169.9(9) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O2 88.3(11) 4_456 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 84.1(11) 3_554 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 84.1(11) 4_456 . ?
 O4 Mn4 O2 88.3(11) 3_554 . ?
 O2 Mn4 O2 83.3(16) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O6 121.7(7) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 67.8(7) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 144.1(6) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 116.3(13) . 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 67.8(7) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 O6 121.7(7) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 116.3(13) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 144.1(6) . 4_456 ?
 O6 Mn4 O6 65.9(14) 3_554 4_456 ?

O4 Mn4 T2 33.4(5) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 156.0(6) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 104.0(9) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 114.9(7) . 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 94.6(6) 3_554 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 34.5(5) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 156.0(6) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 33.4(5) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 114.9(7) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 104.0(9) . 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 34.5(5) 3_554 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 94.6(6) 4_456 3_554 ?
 T2 Mn4 T2 127.4(4) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 Fe2 132.9(7) 4_456 . ?
 O4 Mn4 Fe2 39.8(8) 3_554 . ?
 O2 Mn4 Fe2 44.6(8) 2_556 . ?
 O2 Mn4 Fe2 88.5(5) . . ?
 O6 Mn4 Fe2 103.2(4) 3_554 . ?
 O6 Mn4 Fe2 126.9(5) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 140.4(3) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 70.60(15) 3_554 . ?
 O4 Mn4 Mg2 39.8(8) 4_456 1_556 ?
 O4 Mn4 Mg2 132.9(7) 3_554 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 88.5(5) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 44.6(8) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 126.9(5) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 103.2(4) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 70.60(15) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 140.4(3) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Mg2 120.8(2) . 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 39.8(8) 4_456 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 132.9(7) 3_554 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 88.5(5) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 44.6(8) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 126.9(5) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 103.2(4) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 70.60(15) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 140.4(3) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Fe2 120.8(2) . 1_556 ?
 Mg2 Mn4 Fe2 0.00(17) 1_556 1_556 ?
 O7 T1 O6 107.4(16) . 1_554 ?
 O7 T1 O1 110.9(19) . . ?
 O6 T1 O1 113.9(15) 1_554 . ?
 O7 T1 O5 106.7(15) . . ?
 O6 T1 O5 109.3(14) 1_554 . ?
 O1 T1 O5 108.5(15) . . ?
 O7 T1 O6 83(2) . 2_656 ?
 O6 T1 O6 57.8(15) 1_554 2_656 ?
 O1 T1 O6 166.0(8) . 2_656 ?
 O5 T1 O6 67.6(14) . 2_656 ?
 O7 T1 Mn4 126.3(19) . 3_554 ?
 O6 T1 Mn4 42.9(8) 1_554 3_554 ?
 O1 T1 Mn4 121.9(7) . 3_554 ?
 O5 T1 Mn4 66.9(9) . 3_554 ?

O6 T1 Mn4 44.1(4) 2_656 3_554 ?
O7 T1 O6 24.4(10) . 6_554 ?
O6 T1 O6 92.1(9) 1_554 6_554 ?
O1 T1 O6 101.8(9) . 6_554 ?
O5 T1 O6 130.7(11) . 6_554 ?
O6 T1 O6 90.2(6) 2_656 6_554 ?
Mn4 T1 O6 125.4(6) 3_554 6_554 ?
O7 T1 O7 52.9(18) . 5_655 ?
O6 T1 O7 58.8(12) 1_554 5_655 ?
O1 T1 O7 148.3(9) . 5_655 ?
O5 T1 O7 102.7(16) . 5_655 ?
O6 T1 O7 40.3(6) 2_656 5_655 ?
Mn4 T1 O7 75.7(5) 3_554 5_655 ?
O6 T1 O7 51.4(7) 6_554 5_655 ?
O7 T1 O6 92.8(9) . . ?
O6 T1 O6 132.1(14) 1_554 . ?
O1 T1 O6 97.4(9) . . ?
O5 T1 O6 23.2(9) . . ?
O6 T1 O6 83.4(7) 2_656 . ?
Mn4 T1 O6 90.1(4) 3_554 . ?
O6 T1 O6 116.9(4) 6_554 . ?
O7 T1 O6 109.5(8) 5_655 . ?
O2 T2 O5 110.8(16) . . ?
O2 T2 O6 110.1(15) . . ?
O5 T2 O6 107.9(13) . . ?
O2 T2 O4 112.8(15) . . ?
O5 T2 O4 110.0(15) . . ?
O6 T2 O4 105.0(14) . . ?
O2 T2 Fe4 126.4(7) . 3 ?
O5 T2 Fe4 122.3(16) . 3 ?
O6 T2 Fe4 61.0(9) . 3 ?
O4 T2 Fe4 44.0(8) . 3 ?
O2 T2 Mn4 126.4(7) . 3 ?
O5 T2 Mn4 122.3(16) . 3 ?
O6 T2 Mn4 61.0(9) . 3 ?
O4 T2 Mn4 44.0(8) . 3 ?
Fe4 T2 Mn4 0.00(16) 3 3 ?
O2 T2 O5 169.3(8) . 2_656 ?
O5 T2 O5 61.7(16) . 2_656 ?
O6 T2 O5 67.5(14) . 2_656 ?
O4 T2 O5 77.7(14) . 2_656 ?
Fe4 T2 O5 62.5(4) 3 2_656 ?
Mn4 T2 O5 62.5(4) 3 2_656 ?
O2 T2 Mn4 32.5(6) . . ?
O5 T2 Mn4 106.9(12) . . ?
O6 T2 Mn4 137.3(14) . . ?
O4 T2 Mn4 85.5(12) . . ?
Fe4 T2 Mn4 116.9(2) 3 . ?
Mn4 T2 Mn4 116.9(2) 3 . ?
O5 T2 Mn4 153.7(4) 2_656 . ?
O2 T2 O7 99.5(11) . . ?
O5 T2 O7 23.4(9) . . ?
O6 T2 O7 94.2(8) . . ?
O4 T2 O7 132.9(12) . . ?

Fe4 T2 O7 132.4(9) 3 . ?
 Mn4 T2 O7 132.4(9) 3 . ?
 O5 T2 O7 70.7(9) 2_656 . ?
 Mn4 T2 O7 108.7(7) . . ?
 O2 T2 O6 140.2(8) . 2_657 ?
 O5 T2 O6 98.9(14) . 2_657 ?
 O6 T2 O6 32.8(16) . 2_657 ?
 O4 T2 O6 79.0(12) . 2_657 ?
 Fe4 T2 O6 39.3(3) 3 2_657 ?
 Mn4 T2 O6 39.3(3) 3 2_657 ?
 O5 T2 O6 41.3(5) 2_656 2_657 ?
 Mn4 T2 O6 153.2(3) . 2_657 ?
 O7 T2 O6 97.8(8) . 2_657 ?
 O2 T2 O5 96.0(9) . 1_556 ?
 O5 T2 O5 133.4(12) . 1_556 ?
 O6 T2 O5 25.6(9) . 1_556 ?
 O4 T2 O5 92.2(7) . 1_556 ?
 Fe4 T2 O5 52.0(4) 3 1_556 ?
 Mn4 T2 O5 52.0(4) 3 1_556 ?
 O5 T2 O5 85.5(6) 2_656 1_556 ?
 Mn4 T2 O5 115.5(6) . 1_556 ?
 O7 T2 O5 118.3(4) . 1_556 ?
 O6 T2 O5 44.5(6) 2_657 1_556 ?
 T1 O1 Fe3 118.1(14) . . ?
 T1 O1 Fe1 121.7(14) . . ?
 Fe3 O1 Fe1 94.5(15) . . ?
 T1 O1 Fe2 121.0(14) . . ?
 Fe3 O1 Fe2 100.1(16) . . ?
 Fe1 O1 Fe2 95.8(15) . . ?
 T1 O1 O5 36.4(9) . . ?
 Fe3 O1 O5 145.8(15) . . ?
 Fe1 O1 O5 90.0(9) . . ?
 Fe2 O1 O5 113.2(10) . . ?
 T1 O1 O7 34.8(9) . . ?
 Fe3 O1 O7 87.7(11) . . ?
 Fe1 O1 O7 112.3(10) . . ?
 Fe2 O1 O7 150.2(16) . . ?
 O5 O1 O7 59.4(13) . . ?
 T1 O1 O6 33.5(9) . 1_554 ?
 Fe3 O1 O6 112.8(10) . 1_554 ?
 Fe1 O1 O6 149.7(16) . 1_554 ?
 Fe2 O1 O6 92.2(9) . 1_554 ?
 O5 O1 O6 60.1(12) . 1_554 ?
 O7 O1 O6 58.5(12) . 1_554 ?
 T1 O1 Mn4 108.8(10) . . ?
 Fe3 O1 Mn4 133.1(18) . . ?
 Fe1 O1 Mn4 57.2(5) . . ?
 Fe2 O1 Mn4 53.6(4) . . ?
 O5 O1 Mn4 76.7(7) . . ?
 O7 O1 Mn4 135.5(13) . . ?
 O6 O1 Mn4 106.9(7) 1_554 . ?
 T1 O1 O6 172.1(9) . 2_556 ?
 Fe3 O1 O6 64.8(12) . 2_556 ?
 Fe1 O1 O6 63.9(12) . 2_556 ?

Fe2 O1 O6 51.3(11) . 2_556 ?
 O5 O1 O6 144.4(10) . 2_556 ?
 O7 O1 O6 151.1(11) . 2_556 ?
 O6 O1 O6 139.1(10) 1_554 2_556 ?
 Mn4 O1 O6 68.9(7) . 2_556 ?
 T2 O2 Fe1 119.5(13) . . ?
 T2 O2 Mn4 124.1(14) . . ?
 Fe1 O2 Mn4 96.2(15) . . ?
 T2 O2 Mg2 124.2(13) . 1_556 ?
 Fe1 O2 Mg2 94.6(15) . 1_556 ?
 Mn4 O2 Mg2 90.6(14) . 1_556 ?
 T2 O2 Fe2 124.2(13) . 1_556 ?
 Fe1 O2 Fe2 94.6(15) . 1_556 ?
 Mn4 O2 Fe2 90.6(14) . 1_556 ?
 Mg2 O2 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
 T2 O2 O5 34.7(9) . . ?
 Fe1 O2 O5 89.4(8) . . ?
 Mn4 O2 O5 116.9(9) . . ?
 Mg2 O2 O5 151.7(14) 1_556 . ?
 Fe2 O2 O5 151.7(14) 1_556 . ?
 T2 O2 O6 35.7(9) . . ?
 Fe1 O2 O6 111.4(9) . . ?
 Mn4 O2 O6 151.7(15) . . ?
 Mg2 O2 O6 93.1(9) 1_556 . ?
 Fe2 O2 O6 93.1(9) 1_556 . ?
 O5 O2 O6 59.7(12) . . ?
 T2 O2 O5 90.2(11) . 3 ?
 Fe1 O2 O5 149.1(17) . 3 ?
 Mn4 O2 O5 56.8(6) . 3 ?
 Mg2 O2 O5 72.9(6) 1_556 3 ?
 Fe2 O2 O5 72.9(6) 1_556 3 ?
 O5 O2 O5 115.2(11) . 3 ?
 O6 O2 O5 97.7(10) . 3 ?
 T2 O2 O6 90.2(11) . 3_554 ?
 Fe1 O2 O6 125.0(10) . 3_554 ?
 Mn4 O2 O6 34.9(7) . 3_554 ?
 Mg2 O2 O6 105.5(8) 1_556 3_554 ?
 Fe2 O2 O6 105.5(8) 1_556 3_554 ?
 O5 O2 O6 94.8(9) . 3_554 ?
 O6 O2 O6 117.8(12) . 3_554 ?
 O5 O2 O6 39.6(3) 3 3_554 ?
 T2 O2 Mn4 35.2(6) . 3 ?
 Fe1 O2 Mn4 148.7(12) . 3 ?
 Mn4 O2 Mn4 113.8(8) . 3 ?
 Mg2 O2 Mn4 93.8(8) 1_556 3 ?
 Fe2 O2 Mn4 93.8(8) 1_556 3 ?
 O5 O2 Mn4 69.8(12) . 3 ?
 O6 O2 Mn4 38.0(7) . 3 ?
 O5 O2 Mn4 61.9(6) 3 3 ?
 O6 O2 Mn4 81.2(7) 3_554 3 ?
 Mg1 O3 Fe1 0.00(18) 5_556 5_556 ?
 Mg1 O3 Fe1 93.7(19) 5_556 . ?
 Fe1 O3 Fe1 93.7(19) 5_556 . ?
 Mg1 O3 Mg3 90.0(17) 5_556 1_556 ?

Fe1 O3 Mg3 90.0(17) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Mg3 90.0(17) . 1_556 ?
 Mg1 O3 Fe3 90.0(17) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 90.0(17) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 90.0(17) . 1_556 ?
 Mg3 O3 Fe3 0.0 1_556 1_556 ?
 Mg1 O3 O7 92.9(9) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O7 92.9(9) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O7 92.9(9) . . ?
 Mg3 O3 O7 176(2) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O7 176(2) 1_556 . ?
 Mg1 O3 O6 174.7(17) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 174.7(17) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 91.6(6) . . ?
 Mg3 O3 O6 90.9(8) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O6 90.9(8) 1_556 . ?
 O7 O3 O6 85.9(14) . . ?
 Mg1 O3 O6 91.6(6) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 91.6(6) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 174.7(17) . 6 ?
 Mg3 O3 O6 90.9(8) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O6 90.9(8) 1_556 6 ?
 O7 O3 O6 85.9(14) . 6 ?
 O6 O3 O6 83.2(14) . 6 ?
 Mg1 O3 O5 134.5(10) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 134.5(10) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 72.3(8) . . ?
 Mg3 O3 O5 131.6(6) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O5 131.6(6) 1_556 . ?
 O7 O3 O5 46.9(7) . . ?
 O6 O3 O5 46.8(7) . . ?
 O6 O3 O5 103.3(17) 6 . ?
 Mg1 O3 O5 72.3(8) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 72.3(8) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 134.5(10) . 6 ?
 Mg3 O3 O5 131.6(6) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O5 131.6(6) 1_556 6 ?
 O7 O3 O5 46.9(7) . 6 ?
 O6 O3 O5 103.3(17) . 6 ?
 O6 O3 O5 46.8(7) 6 6 ?
 O5 O3 O5 87.2(14) . 6 ?
 Mg1 O3 O7 129.6(6) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 O7 129.6(6) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 O7 129.6(6) . 1_556 ?
 Mg3 O3 O7 68.8(10) 1_556 1_556 ?
 Fe3 O3 O7 68.8(10) 1_556 1_556 ?
 O7 O3 O7 107(2) . 1_556 ?
 O6 O3 O7 46.2(7) . 1_556 ?
 O6 O3 O7 46.2(7) 6 1_556 ?
 O5 O3 O7 88.2(13) . 1_556 ?
 O5 O3 O7 88.2(13) 6 1_556 ?
 T2 O4 Mg2 144.9(11) . 3 ?
 T2 O4 Fe2 144.9(11) . 3 ?
 Mg2 O4 Fe2 0.0(2) 3 3 ?

T2 O4 Fe4 102.7(9) . 3 ?
Mg2 O4 Fe4 97.8(14) 3 3 ?
Fe2 O4 Fe4 97.8(14) 3 3 ?
T2 O4 Mn4 102.7(9) . 3 ?
Mg2 O4 Mn4 97.8(14) 3 3 ?
Fe2 O4 Mn4 97.8(14) 3 3 ?
Fe4 O4 Mn4 0.0(3) 3 3 ?
T2 O4 O6 37.7(8) . . ?
Mg2 O4 O6 147.4(19) 3 . ?
Fe2 O4 O6 147.4(19) 3 . ?
Fe4 O4 O6 65.0(8) 3 . ?
Mn4 O4 O6 65.0(8) 3 . ?
T2 O4 O5 34.5(8) . . ?
Mg2 O4 O5 110.6(10) 3 . ?
Fe2 O4 O5 110.6(10) 3 . ?
Fe4 O4 O5 115.2(10) 3 . ?
Mn4 O4 O5 115.2(10) 3 . ?
O6 O4 O5 59.9(6) . . ?
T2 O4 O5 111.1(18) . 3 ?
Mg2 O4 O5 94.6(7) 3 3 ?
Fe2 O4 O5 94.6(7) 3 3 ?
Fe4 O4 O5 96.1(7) 3 3 ?
Mn4 O4 O5 96.1(7) 3 3 ?
O6 O4 O5 113.9(12) . 3 ?
O5 O4 O5 135.5(14) . 3 ?
T2 O4 O5 73.7(11) . 2_656 ?
Mg2 O4 O5 88.0(12) 3 2_656 ?
Fe2 O4 O5 88.0(12) 3 2_656 ?
Fe4 O4 O5 68.6(9) 3 2_656 ?
Mn4 O4 O5 68.6(9) 3 2_656 ?
O6 O4 O5 60.4(10) . 2_656 ?
O5 O4 O5 56.2(13) . 2_656 ?
O5 O4 O5 164.7(9) 3 2_656 ?
T2 O4 O6 107.6(16) . 3_554 ?
Mg2 O4 O6 73.1(8) 3 3_554 ?
Fe2 O4 O6 73.1(8) 3 3_554 ?
Fe4 O4 O6 137.9(7) 3 3_554 ?
Mn4 O4 O6 137.9(7) 3 3_554 ?
O6 O4 O6 138.4(14) . 3_554 ?
O5 O4 O6 106.2(10) . 3_554 ?
O5 O4 O6 45.9(5) 3 3_554 ?
O5 O4 O6 148.2(7) 2_656 3_554 ?
T2 O4 Mn4 67.3(13) . . ?
Mg2 O4 Mn4 113.2(9) 3 . ?
Fe2 O4 Mn4 113.2(9) 3 . ?
Fe4 O4 Mn4 138.3(11) 3 . ?
Mn4 O4 Mn4 138.3(11) 3 . ?
O6 O4 Mn4 96.5(13) . . ?
O5 O4 Mn4 80.2(11) . . ?
O5 O4 Mn4 55.9(8) 3 . ?
O5 O4 Mn4 136.3(7) 2_656 . ?
O6 O4 Mn4 42.2(6) 3_554 . ?
T2 O4 Mn4 91.0(7) . 3_554 ?
Mg2 O4 Mn4 54.1(4) 3 3_554 ?

Fe2 O4 Mn4 54.1(4) 3 3_554 ?
 Fe4 O4 Mn4 128.6(14) 3 3_554 ?
 Mn4 O4 Mn4 128.6(14) 3 3_554 ?
 O6 O4 Mn4 113.8(7) . 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 57.6(5) . 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 124.8(6) 3 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 68.4(5) 2_656 3_554 ?
 O6 O4 Mn4 79.7(5) 3_554 3_554 ?
 Mn4 O4 Mn4 92.8(5) . 3_554 ?
 T2 O5 T1 141(3) . . ?
 T2 O5 O7 142.5(15) . . ?
 T1 O5 O7 36.3(9) . . ?
 T2 O5 O2 34.5(10) . . ?
 T1 O5 O2 107(2) . . ?
 O7 O5 O2 120.3(17) . . ?
 T2 O5 O6 36.7(8) . . ?
 T1 O5 O6 142.6(14) . . ?
 O7 O5 O6 115.8(9) . . ?
 O2 O5 O6 60.8(11) . . ?
 T2 O5 O1 106(2) . . ?
 T1 O5 O1 35.2(9) . . ?
 O7 O5 O1 60.6(13) . . ?
 O2 O5 O1 71.5(15) . . ?
 O6 O5 O1 119.8(16) . . ?
 T2 O5 O6 149.0(15) . 1_554 ?
 T1 O5 O6 35.2(8) . 1_554 ?
 O7 O5 O6 59.3(6) . 1_554 ?
 O2 O5 O6 123.7(16) . 1_554 ?
 O6 O5 O6 174.3(16) . 1_554 ?
 O1 O5 O6 61.4(11) . 1_554 ?
 T2 O5 O4 35.5(8) . . ?
 T1 O5 O4 149.7(14) . . ?
 O7 O5 O4 174.0(14) . . ?
 O2 O5 O4 61.3(11) . . ?
 O6 O5 O4 59.2(6) . . ?
 O1 O5 O4 124.2(16) . . ?
 O6 O5 O4 125.4(8) 1_554 . ?
 T2 O5 O5 89.2(12) . 2_656 ?
 T1 O5 O5 128.7(19) . 2_656 ?
 O7 O5 O5 101.2(15) . 2_656 ?
 O2 O5 O5 123.2(10) . 2_656 ?
 O6 O5 O5 67.1(10) . 2_656 ?
 O1 O5 O5 161.7(10) . 2_656 ?
 O6 O5 O5 110.0(17) 1_554 2_656 ?
 O4 O5 O5 74.0(10) . 2_656 ?
 T2 O5 O6 135.2(18) . 2_656 ?
 T1 O5 O6 82.7(13) . 2_656 ?
 O7 O5 O6 75.2(13) . 2_656 ?
 O2 O5 O6 163.8(10) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 119.3(14) . 2_656 ?
 O1 O5 O6 116.7(10) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 57.6(14) 1_554 2_656 ?
 O4 O5 O6 104.0(13) . 2_656 ?
 O5 O5 O6 52.3(10) 2_656 2_656 ?

T2 O5 O4 77.8(11) . 3_554 ?
T1 O5 O4 78.6(11) . 3_554 ?
O7 O5 O4 114.3(13) . 3_554 ?
O2 O5 O4 58.1(9) . 3_554 ?
O6 O5 O4 114.1(12) . 3_554 ?
O1 O5 O4 58.7(9) . 3_554 ?
O6 O5 O4 71.5(9) 1_554 3_554 ?
O4 O5 O4 71.5(9) . 3_554 ?
O5 O5 O4 136.6(7) 2_656 3_554 ?
O6 O5 O4 112.7(8) 2_656 3_554 ?
T2 O5 Fe4 112.5(8) . 3_554 ?
T1 O5 Fe4 85.2(7) . 3_554 ?
O7 O5 Fe4 104.6(8) . 3_554 ?
O2 O5 Fe4 118.5(7) . 3_554 ?
O6 O5 Fe4 132.2(11) . 3_554 ?
O1 O5 Fe4 101.4(7) . 3_554 ?
O6 O5 Fe4 50.3(6) 1_554 3_554 ?
O4 O5 Fe4 78.4(7) . 3_554 ?
O5 O5 Fe4 81.4(11) 2_656 3_554 ?
O6 O5 Fe4 47.9(5) 2_656 3_554 ?
O4 O5 Fe4 66.4(6) 3_554 3_554 ?
T2 O5 Mn4 112.5(8) . 3_554 ?
T1 O5 Mn4 85.2(7) . 3_554 ?
O7 O5 Mn4 104.6(8) . 3_554 ?
O2 O5 Mn4 118.5(7) . 3_554 ?
O6 O5 Mn4 132.2(11) . 3_554 ?
O1 O5 Mn4 101.4(7) . 3_554 ?
O6 O5 Mn4 50.3(6) 1_554 3_554 ?
O4 O5 Mn4 78.4(7) . 3_554 ?
O5 O5 Mn4 81.4(11) 2_656 3_554 ?
O6 O5 Mn4 47.9(5) 2_656 3_554 ?
O4 O5 Mn4 66.4(6) 3_554 3_554 ?
Fe4 O5 Mn4 0.00(13) 3_554 3_554 ?
T2 O5 T2 105.4(15) . 2_656 ?
T1 O5 T2 112.6(15) . 2_656 ?
O7 O5 T2 100.4(15) . 2_656 ?
O2 O5 T2 138.0(10) . 2_656 ?
O6 O5 T2 93.9(12) . 2_656 ?
O1 O5 T2 145.6(10) . 2_656 ?
O6 O5 T2 84.4(12) 1_554 2_656 ?
O4 O5 T2 77.2(11) . 2_656 ?
O5 O5 T2 29.2(7) 2_656 2_656 ?
O6 O5 T2 29.9(5) 2_656 2_656 ?
O4 O5 T2 115.8(8) 3_554 2_656 ?
Fe4 O5 T2 53.0(5) 3_554 2_656 ?
Mn4 O5 T2 53.0(5) 3_554 2_656 ?
T2 O5 O3 78.6(11) . . ?
T1 O5 O3 77.2(11) . . ?
O7 O5 O3 64.3(10) . . ?
O2 O5 O3 61.8(10) . . ?
O6 O5 O3 65.8(9) . . ?
O1 O5 O3 60.2(10) . . ?
O6 O5 O3 112.4(11) 1_554 . ?
O4 O5 O3 114.1(10) . . ?

O5 O5 O3 114.8(9) 2_656 . ?
O6 O5 O3 134.2(10) 2_656 . ?
O4 O5 O3 103.0(14) 3_554 . ?
Fe4 O5 O3 161.2(10) 3_554 . ?
Mn4 O5 O3 161.2(10) 3_554 . ?
T2 O5 O3 141.0(11) 2_656 . ?
T2 O5 Fe1 71.0(14) . . ?
T1 O5 Fe1 71.3(14) . . ?
O7 O5 Fe1 81.7(14) . . ?
O2 O5 Fe1 39.2(8) . . ?
O6 O5 Fe1 81.8(12) . . ?
O1 O5 Fe1 38.6(8) . . ?
O6 O5 Fe1 99.9(12) 1_554 . ?
O4 O5 Fe1 100.3(12) . . ?
O5 O5 Fe1 146.9(8) 2_656 . ?
O6 O5 Fe1 153.8(8) 2_656 . ?
O4 O5 Fe1 66.2(9) 3_554 . ?
Fe4 O5 Fe1 130.2(9) 3_554 . ?
Mn4 O5 Fe1 130.2(9) 3_554 . ?
T2 O5 Fe1 175.7(5) 2_656 . ?
O3 O5 Fe1 36.9(8) . . ?
T2 O5 O4 91.2(11) . 2_656 ?
T1 O5 O4 118.7(12) . 2_656 ?
O7 O5 O4 122.9(15) . 2_656 ?
O2 O5 O4 116.3(8) . 2_656 ?
O6 O5 O4 97.3(11) . 2_656 ?
O1 O5 O4 137.5(7) . 2_656 ?
O6 O5 O4 83.8(10) 1_554 2_656 ?
O4 O5 O4 56.8(11) . 2_656 ?
O5 O5 O4 49.7(8) 2_656 2_656 ?
O6 O5 O4 47.9(7) 2_656 2_656 ?
O4 O5 O4 88.8(4) 3_554 2_656 ?
Fe4 O5 O4 36.7(4) 3_554 2_656 ?
Mn4 O5 O4 36.7(4) 3_554 2_656 ?
T2 O5 O4 28.6(6) 2_656 2_656 ?
O3 O5 O4 162.1(10) . 2_656 ?
Fe1 O5 O4 151.5(9) . 2_656 ?
T2 O5 Mg2 64.3(8) . 3 ?
T1 O5 Mg2 132.4(8) . 3 ?
O7 O5 Mg2 152.7(13) . 3 ?
O2 O5 Mg2 85.3(6) . 3 ?
O6 O5 Mg2 83.8(7) . 3 ?
O1 O5 Mg2 127.8(9) . 3 ?
O6 O5 Mg2 99.7(7) 1_554 3 ?
O4 O5 Mg2 28.8(6) . 3 ?
O5 O5 Mg2 67.8(5) 2_656 3 ?
O6 O5 Mg2 78.6(7) 2_656 3 ?
O4 O5 Mg2 69.3(5) 3_554 3 ?
Fe4 O5 Mg2 50.3(3) 3_554 3 ?
Mn4 O5 Mg2 50.3(3) 3_554 3 ?
T2 O5 Mg2 57.4(4) 2_656 3 ?
O3 O5 Mg2 142.8(7) . 3 ?
Fe1 O5 Mg2 121.7(7) . 3 ?
O4 O5 Mg2 31.0(5) 2_656 3 ?

T2 O5 Fe2 64.3(8) . 3 ?
T1 O5 Fe2 132.4(8) . 3 ?
O7 O5 Fe2 152.7(13) . 3 ?
O2 O5 Fe2 85.3(6) . 3 ?
O6 O5 Fe2 83.8(7) . 3 ?
O1 O5 Fe2 127.8(9) . 3 ?
O6 O5 Fe2 99.7(7) 1_554 3 ?
O4 O5 Fe2 28.8(6) . 3 ?
O5 O5 Fe2 67.8(5) 2_656 3 ?
O6 O5 Fe2 78.6(7) 2_656 3 ?
O4 O5 Fe2 69.3(5) 3_554 3 ?
Fe4 O5 Fe2 50.3(3) 3_554 3 ?
Mn4 O5 Fe2 50.3(3) 3_554 3 ?
T2 O5 Fe2 57.4(4) 2_656 3 ?
O3 O5 Fe2 142.8(7) . 3 ?
Fe1 O5 Fe2 121.7(7) . 3 ?
O4 O5 Fe2 31.0(5) 2_656 3 ?
Mg2 O5 Fe2 0.00(6) 3 3 ?
T1 O6 T2 136(3) 1_556 . ?
T1 O6 Fe4 111.4(8) 1_556 3 ?
T2 O6 Fe4 84.6(8) . 3 ?
T1 O6 Mn4 111.4(8) 1_556 3 ?
T2 O6 Mn4 84.6(8) . 3 ?
Fe4 O6 Mn4 0.00(11) 3 3 ?
T1 O6 O7 36.1(9) 1_556 1_556 ?
T2 O6 O7 147.6(19) . 1_556 ?
Fe4 O6 O7 127.5(12) 3 1_556 ?
Mn4 O6 O7 127.5(12) 3 1_556 ?
T1 O6 O5 146.0(18) 1_556 . ?
T2 O6 O5 35.4(7) . . ?
Fe4 O6 O5 101.0(9) 3 . ?
Mn4 O6 O5 101.0(9) 3 . ?
O7 O6 O5 125.5(9) 1_556 . ?
T1 O6 O5 35.5(8) 1_556 1_556 ?
T2 O6 O5 138.9(15) . 1_556 ?
Fe4 O6 O5 76.3(7) 3 1_556 ?
Mn4 O6 O5 76.3(7) 3 1_556 ?
O7 O6 O5 59.2(6) 1_556 1_556 ?
O5 O6 O5 174.3(16) . 1_556 ?
T1 O6 O2 102(2) 1_556 . ?
T2 O6 O2 34.2(10) . . ?
Fe4 O6 O2 102.2(8) 3 . ?
Mn4 O6 O2 102.2(8) 3 . ?
O7 O6 O2 120.8(19) 1_556 . ?
O5 O6 O2 59.6(11) . . ?
O5 O6 O2 115.8(16) 1_556 . ?
T1 O6 O4 139.1(14) 1_556 . ?
T2 O6 O4 37.4(8) . . ?
Fe4 O6 O4 47.2(7) 3 . ?
Mn4 O6 O4 47.2(7) 3 . ?
O7 O6 O4 173.7(9) 1_556 . ?
O5 O6 O4 60.8(6) . . ?
O5 O6 O4 114.5(8) 1_556 . ?
O2 O6 O4 61.4(12) . . ?

T1 O6 O1 32.6(10) 1_556 1_556 ?
T2 O6 O1 104(2) . 1_556 ?
Fe4 O6 O1 119.6(8) 3 1_556 ?
Mn4 O6 O1 119.6(8) 3 1_556 ?
O7 O6 O1 59.5(13) 1_556 1_556 ?
O5 O6 O1 119.9(17) . 1_556 ?
O5 O6 O1 58.5(11) 1_556 1_556 ?
O2 O6 O1 69.4(15) . 1_556 ?
O4 O6 O1 118.5(15) . 1_556 ?
T1 O6 O6 92.5(11) 1_556 2_657 ?
T2 O6 O6 128.5(19) . 2_657 ?
Fe4 O6 O6 57.0(7) 3 2_657 ?
Mn4 O6 O6 57.0(7) 3 2_657 ?
O7 O6 O6 80.2(13) 1_556 2_657 ?
O5 O6 O6 114.6(19) . 2_657 ?
O5 O6 O6 68.3(10) 1_556 2_657 ?
O2 O6 O6 158.3(9) . 2_657 ?
O4 O6 O6 97.2(14) . 2_657 ?
O1 O6 O6 124.2(10) 1_556 2_657 ?
T1 O6 O5 141.1(18) 1_556 2_656 ?
T2 O6 O5 82.6(12) . 2_656 ?
Fe4 O6 O5 69.5(9) 3 2_656 ?
Mn4 O6 O5 69.5(9) 3 2_656 ?
O7 O6 O5 110.7(16) 1_556 2_656 ?
O5 O6 O5 60.5(14) . 2_656 ?
O5 O6 O5 122.2(13) 1_556 2_656 ?
O2 O6 O5 116.0(9) . 2_656 ?
O4 O6 O5 71.7(11) . 2_656 ?
O1 O6 O5 169.1(9) 1_556 2_656 ?
O6 O6 O5 54.1(11) 2_657 2_656 ?
T1 O6 T1 111.7(14) 1_556 2_656 ?
T2 O6 T1 112.2(15) . 2_656 ?
Fe4 O6 T1 72.3(9) 3 2_656 ?
Mn4 O6 T1 72.3(9) 3 2_656 ?
O7 O6 T1 85.4(14) 1_556 2_656 ?
O5 O6 T1 87.6(12) . 2_656 ?
O5 O6 T1 96.2(12) 1_556 2_656 ?
O2 O6 T1 145.6(10) . 2_656 ?
O4 O6 T1 95.2(13) . 2_656 ?
O1 O6 T1 143.5(9) 1_556 2_656 ?
O6 O6 T1 29.7(7) 2_657 2_656 ?
O5 O6 T1 29.7(6) 2_656 2_656 ?
T1 O6 O3 78.7(12) 1_556 . ?
T2 O6 O3 79.3(11) . . ?
Fe4 O6 O3 163.5(10) 3 . ?
Mn4 O6 O3 163.5(10) 3 . ?
O7 O6 O3 68.4(11) 1_556 . ?
O5 O6 O3 67.4(9) . . ?
O5 O6 O3 114.1(12) 1_556 . ?
O2 O6 O3 62.1(10) . . ?
O4 O6 O3 116.6(11) . . ?
O1 O6 O3 61.8(10) 1_556 . ?
O6 O6 O3 137.7(9) 2_657 . ?
O5 O6 O3 111.4(10) 2_656 . ?

T1 O6 O3 117.1(10) 2_656 . ?
T1 O6 O4 71.5(11) 1_556 3 ?
T2 O6 O4 76.8(11) . 3 ?
Fe4 O6 O4 70.0(7) 3 3 ?
Mn4 O6 O4 70.0(7) 3 3 ?
O7 O6 O4 107.5(12) 1_556 3 ?
O5 O6 O4 111.8(11) . 3 ?
O5 O6 O4 62.6(9) 1_556 3 ?
O2 O6 O4 57.6(8) . 3 ?
O4 O6 O4 68.1(9) . 3 ?
O1 O6 O4 54.9(8) 1_556 3 ?
O6 O6 O4 113.8(7) 2_657 3 ?
O5 O6 O4 135.8(8) 2_656 3 ?
T1 O6 O4 140.2(9) 2_656 3 ?
O3 O6 O4 102.6(14) . 3 ?
T1 O6 O7 97.6(12) 1_556 5_656 ?
T2 O6 O7 120.8(13) . 5_656 ?
Fe4 O6 O7 99.3(13) 3 5_656 ?
Mn4 O6 O7 99.3(13) 3 5_656 ?
O7 O6 O7 64.2(16) 1_556 5_656 ?
O5 O6 O7 87.2(11) . 5_656 ?
O5 O6 O7 98.2(11) 1_556 5_656 ?
O2 O6 O7 143.1(8) . 5_656 ?
O4 O6 O7 118.2(14) . 5_656 ?
O1 O6 O7 123.3(9) 1_556 5_656 ?
O6 O6 O7 47.8(9) 2_657 5_656 ?
O5 O6 O7 46.5(7) 2_656 5_656 ?
T1 O6 O7 27.4(7) 2_656 5_656 ?
O3 O6 O7 92.0(10) . 5_656 ?
O4 O6 O7 159.3(9) 3 5_656 ?
T1 O6 Mg2 67.4(14) 1_556 1_556 ?
T2 O6 Mg2 69.4(13) . 1_556 ?
Fe4 O6 Mg2 101.0(7) 3 1_556 ?
Mn4 O6 Mg2 101.0(7) 3 1_556 ?
O7 O6 Mg2 96.6(15) 1_556 1_556 ?
O5 O6 Mg2 96.8(12) . 1_556 ?
O5 O6 Mg2 78.9(11) 1_556 1_556 ?
O2 O6 Mg2 37.6(8) . 1_556 ?
O4 O6 Mg2 82.0(11) . 1_556 ?
O1 O6 Mg2 37.3(8) 1_556 1_556 ?
O6 O6 Mg2 143.7(8) 2_657 1_556 ?
O5 O6 Mg2 151.3(7) 2_656 1_556 ?
T1 O6 Mg2 172.7(6) 2_656 1_556 ?
O3 O6 Mg2 70.1(10) . 1_556 ?
O4 O6 Mg2 32.5(6) 3 1_556 ?
O7 O6 Mg2 158.1(9) 5_656 1_556 ?
T1 O6 Fe2 67.4(14) 1_556 1_556 ?
T2 O6 Fe2 69.4(13) . 1_556 ?
Fe4 O6 Fe2 101.0(7) 3 1_556 ?
Mn4 O6 Fe2 101.0(7) 3 1_556 ?
O7 O6 Fe2 96.6(15) 1_556 1_556 ?
O5 O6 Fe2 96.8(12) . 1_556 ?
O5 O6 Fe2 78.9(11) 1_556 1_556 ?
O2 O6 Fe2 37.6(8) . 1_556 ?

O4 O6 Fe2 82.0(11) . 1_556 ?
O1 O6 Fe2 37.3(8) 1_556 1_556 ?
O6 O6 Fe2 143.7(8) 2_657 1_556 ?
O5 O6 Fe2 151.3(7) 2_656 1_556 ?
T1 O6 Fe2 172.7(6) 2_656 1_556 ?
O3 O6 Fe2 70.1(10) . 1_556 ?
O4 O6 Fe2 32.5(6) 3 1_556 ?
O7 O6 Fe2 158.1(9) 5_656 1_556 ?
Mg2 O6 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
T1 O6 Fe1 92.2(15) 1_556 . ?
T2 O6 Fe1 51.9(11) . . ?
Fe4 O6 Fe1 131.7(8) 3 . ?
Mn4 O6 Fe1 131.7(8) 3 . ?
O7 O6 Fe1 96.5(14) 1_556 . ?
O5 O6 Fe1 57.1(10) . . ?
O5 O6 Fe1 121.0(14) 1_556 . ?
O2 O6 Fe1 29.9(5) . . ?
O4 O6 Fe1 87.3(10) . . ?
O1 O6 Fe1 62.9(10) 1_556 . ?
O6 O6 Fe1 166.9(9) 2_657 . ?
O5 O6 Fe1 116.6(6) 2_656 . ?
T1 O6 Fe1 137.8(5) 2_656 . ?
O3 O6 Fe1 32.3(6) . . ?
O4 O6 Fe1 79.4(9) 3 . ?
O7 O6 Fe1 119.4(7) 5_656 . ?
Mg2 O6 Fe1 49.1(5) 1_556 . ?
Fe2 O6 Fe1 49.1(5) 1_556 . ?
T1 O7 T1 142(4) 6 . ?
T1 O7 O5 150(2) 6 . ?
T1 O7 O5 37.0(8) . . ?
T1 O7 O5 37.0(8) 6 6 ?
T1 O7 O5 150(2) . 6 ?
O5 O7 O5 123.4(11) . 6 ?
T1 O7 O6 140.9(17) 6 1_554 ?
T1 O7 O6 36.5(9) . 1_554 ?
O5 O7 O6 61.4(5) . 1_554 ?
O5 O7 O6 173.6(18) 6 1_554 ?
T1 O7 O6 36.5(9) 6 6_554 ?
T1 O7 O6 140.9(17) . 6_554 ?
O5 O7 O6 173.6(18) . 6_554 ?
O5 O7 O6 61.4(5) 6 6_554 ?
O6 O7 O6 113.5(10) 1_554 6_554 ?
T1 O7 O1 34.4(13) 6 6 ?
T1 O7 O1 108(3) . 6 ?
O5 O7 O1 124(2) . 6 ?
O5 O7 O1 60.0(11) 6 6 ?
O6 O7 O1 122(2) 1_554 6 ?
O6 O7 O1 61.9(12) 6_554 6 ?
T1 O7 O1 108(3) 6 . ?
T1 O7 O1 34.4(13) . . ?
O5 O7 O1 60.0(11) . . ?
O5 O7 O1 124(2) 6 . ?
O6 O7 O1 61.9(12) 1_554 . ?
O6 O7 O1 122(2) 6_554 . ?

O1 O7 O1 73.5(19) 6 . ?
 T1 O7 O3 81.1(15) 6 . ?
 T1 O7 O3 81.1(15) . . ?
 O5 O7 O3 68.8(9) . . ?
 O5 O7 O3 68.8(9) 6 . ?
 O6 O7 O3 117.6(13) 1_554 . ?
 O6 O7 O3 117.6(13) 6_554 . ?
 O1 O7 O3 61.7(12) 6 . ?
 O1 O7 O3 61.7(12) . . ?
 T1 O7 Fe3 70.9(19) 6 . ?
 T1 O7 Fe3 70.9(19) . . ?
 O5 O7 Fe3 98.6(15) . . ?
 O5 O7 Fe3 98.6(15) 6 . ?
 O6 O7 Fe3 84.3(14) 1_554 . ?
 O6 O7 Fe3 84.3(14) 6_554 . ?
 O1 O7 Fe3 39.0(10) 6 . ?
 O1 O7 Fe3 39.0(10) . . ?
 O3 O7 Fe3 68.0(13) . . ?
 T1 O7 O7 104.2(15) 6 5_655 ?
 T1 O7 O7 104.2(15) . 5_655 ?
 O5 O7 O7 103.4(16) . 5_655 ?
 O5 O7 O7 103.4(16) 6 5_655 ?
 O6 O7 O7 70.7(11) 1_554 5_655 ?
 O6 O7 O7 70.7(11) 6_554 5_655 ?
 O1 O7 O7 132.0(9) 6 5_655 ?
 O1 O7 O7 132.0(9) . 5_655 ?
 O3 O7 O7 160(2) . 5_655 ?
 Fe3 O7 O7 132.4(13) . 5_655 ?
 T1 O7 O3 76.5(14) 6 1_554 ?
 T1 O7 O3 76.5(14) . 1_554 ?
 O5 O7 O3 113.5(12) . 1_554 ?
 O5 O7 O3 113.5(12) 6 1_554 ?
 O6 O7 O3 65.4(9) 1_554 1_554 ?
 O6 O7 O3 65.4(9) 6_554 1_554 ?
 O1 O7 O3 61.2(12) 6 1_554 ?
 O1 O7 O3 61.2(12) . 1_554 ?
 O3 O7 O3 107(2) . 1_554 ?
 Fe3 O7 O3 38.8(10) . 1_554 ?
 O7 O7 O3 93.6(12) 5_655 1_554 ?
 T1 O7 O6 147(2) 6 2_656 ?
 T1 O7 O6 69.6(14) . 2_656 ?
 O5 O7 O6 58.3(10) . 2_656 ?
 O5 O7 O6 125.5(19) 6 2_656 ?
 O6 O7 O6 52.0(13) 1_554 2_656 ?
 O6 O7 O6 115.8(16) 6_554 2_656 ?
 O1 O7 O6 173.1(11) 6 2_656 ?
 O1 O7 O6 103.9(8) . 2_656 ?
 O3 O7 O6 123.1(8) . 2_656 ?
 Fe3 O7 O6 135.9(7) . 2_656 ?
 O7 O7 O6 45.2(9) 5_655 2_656 ?
 O3 O7 O6 111.8(9) 1_554 2_656 ?
 T1 O7 O6 69.6(14) 6 5_656 ?
 T1 O7 O6 147(2) . 5_656 ?
 O5 O7 O6 125.5(19) . 5_656 ?

O5 O7 O6 58.3(10) 6 5_656 ?
 O6 O7 O6 115.8(16) 1_554 5_656 ?
 O6 O7 O6 52.0(13) 6_554 5_656 ?
 O1 O7 O6 103.9(8) 6 5_656 ?
 O1 O7 O6 173.1(11) . 5_656 ?
 O3 O7 O6 123.1(8) . 5_656 ?
 Fe3 O7 O6 135.9(7) . 5_656 ?
 O7 O7 O6 45.2(9) 5_655 5_656 ?
 O3 O7 O6 111.8(9) 1_554 5_656 ?
 O6 O7 O6 77.8(14) 2_656 5_656 ?
 T1 O7 Mg1 52.7(14) 6 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 98(2) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 98.7(13) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 57.4(11) 6 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 127.6(19) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 87.5(12) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 29.5(6) 6 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 66.3(12) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 32.4(7) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Mg1 49.1(7) . 5_556 ?
 O7 O7 Mg1 156.8(2) 5_655 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 83.9(13) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 155.5(6) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 114.7(5) 5_656 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 52.7(14) 6 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 98(2) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 98.7(13) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 57.4(11) 6 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 127.6(19) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 87.5(12) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 29.5(6) 6 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 66.3(12) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 32.4(7) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Fe1 49.1(7) . 5_556 ?
 O7 O7 Fe1 156.8(2) 5_655 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 83.9(13) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 155.5(6) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 114.7(5) 5_656 5_556 ?
 Mg1 O7 Fe1 0.00(13) 5_556 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 98(2) 6 . ?
 T1 O7 Fe1 52.7(14) . . ?
 O5 O7 Fe1 57.4(11) . . ?
 O5 O7 Fe1 98.7(13) 6 . ?
 O6 O7 Fe1 87.5(12) 1_554 . ?
 O6 O7 Fe1 127.6(19) 6_554 . ?
 O1 O7 Fe1 66.3(12) 6 . ?
 O1 O7 Fe1 29.5(6) . . ?
 O3 O7 Fe1 32.4(7) . . ?
 Fe3 O7 Fe1 49.1(7) . . ?
 O7 O7 Fe1 156.8(2) 5_655 . ?
 O3 O7 Fe1 83.9(13) 1_554 . ?
 O6 O7 Fe1 114.7(5) 2_656 . ?
 O6 O7 Fe1 155.5(6) 5_656 . ?
 Mg1 O7 Fe1 46.1(6) 5_556 . ?

Fe1 O7 T2 46.1(6) 5_556 . ?
 T1 O7 T2 135.8(16) 6 . ?
 T1 O7 T2 44.1(6) . . ?
 O5 O7 T2 14.1(6) . . ?
 O5 O7 T2 111.6(7) 6 . ?
 O6 O7 T2 73.8(4) 1_554 . ?
 O6 O7 T2 172.2(11) 6_554 . ?
 O1 O7 T2 112.2(14) 6 . ?
 O1 O7 T2 57.9(6) . . ?
 O3 O7 T2 54.9(5) . . ?
 Fe3 O7 T2 93.8(10) . . ?
 O7 O7 T2 115.7(13) 5_655 . ?
 O3 O7 T2 117.2(11) 1_554 . ?
 O6 O7 T2 70.7(5) 2_656 . ?
 O6 O7 T2 128.6(13) 5_656 . ?
 Mg1 O7 T2 85.6(7) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 85.6(7) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 47.8(4) . . ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.352
 _diffn_reflns_theta_full 27.98
 _diffn_measured_fraction_theta_full 0.352
 _refine_diff_density_max 1.805
 _refine_diff_density_min -1.006
 _refine_diff_density_rms 0.324