

data_hpmix392

_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 9.186(5)
_cell_length_b 18.140(5)
_cell_length_c 5.283(2)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume              880.3(6)
_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 3.667
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.462
_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        4947
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.1000
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0568
_diffrn_reflns_limit_h_min   -6
_diffrn_reflns_limit_h_max    6
_diffrn_reflns_limit_k_min    -23
_diffrn_reflns_limit_k_max    23
_diffrn_reflns_limit_l_min    -7
_diffrn_reflns_limit_l_max    7
_diffrn_reflns_theta_min     4.02
_diffrn_reflns_theta_max     28.53
_reflns_number_total         328
_reflns_number_gt            194
_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^)+(0.1612P)^2^+0.1171P] 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        328
_refine_ls_number_parameters     34
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.1287
_refine_ls_R_factor_gt           0.0905
_refine_ls_wR_factor_ref         0.3233
_refine_ls_wR_factor_gt          0.2405
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.455
_refine_ls_restrained_S_all      1.455
_refine_ls_shift/su_max          3.081
_refine_ls_shift/su_mean         0.779

```

```
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 0.0858(2) 0.5000 0.0089(12) Uiso 0.82 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.0858(2) 0.5000 0.0089(12) Uiso 0.18 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1777(3) 0.0000 0.0089(12) Uiso 0.71 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1777(3) 0.0000 0.0089(12) Uiso 0.29 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0089(12) Uiso 0.78 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0089(12) Uiso 0.22 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.2605(2) 0.5000 0.0089(12) Uiso 0.71 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.2605(2) 0.5000 0.0089(12) Uiso 0.29 2 d SP . .
T1 Si 0.2927(15) 0.0843(3) 0.1582(13) 0.0067(14) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.2999(14) 0.1677(3) 0.6519(11) 0.0067(14) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.112(5) 0.0866(8) 0.154(4) 0.012(2) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.136(4) 0.1704(8) 0.663(3) 0.012(2) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.121(5) 0.0000 0.656(4) 0.012(2) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.133(3) 0.2517(9) 0.181(3) 0.012(2) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.348(3) 0.1259(8) 0.400(3) 0.012(2) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.350(3) 0.1225(8) 0.902(3) 0.012(2) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.341(5) 0.0000 0.159(4) 0.012(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 O3 2.08(3) 5_556 ?
Fe1 O3 2.08(3) . ?
Fe1 O1 2.10(3) . ?
Fe1 O1 2.10(3) 2_556 ?
Fe1 O2 2.16(2) . ?
Fe1 O2 2.16(2) 2_556 ?
Fe1 Mg3 3.066(2) 1_556 ?
Fe1 Mg2 3.123(3) 1_556 ?
Fe1 Mg1 3.114(9) 5_556 ?
Fe1 Mn4 3.169(6) . ?
Fe2 O4 2.05(2) . ?
Fe2 O4 2.05(2) 2 ?
Fe2 O1 2.11(2) 2 ?
Fe2 O1 2.11(2) . ?
Fe2 O2 2.18(3) 1_554 ?

```

Fe2 O2 2.18(3) 2_556 ?
 Fe2 Mn4 3.039(3) . ?
 Fe2 Mn4 3.039(3) 1_554 ?
 Fe2 Mg1 3.123(3) 1_554 ?
 Fe2 O5 3.862(17) 3_554 ?
 Fe3 O1 2.05(2) . ?
 Fe3 O1 2.05(2) 5 ?
 Fe3 O1 2.05(2) 6 ?
 Fe3 O1 2.05(2) 2 ?
 Fe3 O3 2.13(3) 5_556 ?
 Fe3 O3 2.13(3) 1_554 ?
 Fe3 Mg1 3.066(2) 5 ?
 Fe3 Mg1 3.066(2) 1_554 ?
 Fe3 Mg1 3.066(2) 5_556 ?
 Fe3 Mg2 3.223(5) 5 ?
 Mn4 O4 2.09(2) 2_556 ?
 Mn4 O4 2.09(2) . ?
 Mn4 O2 2.23(2) 2_556 ?
 Mn4 O2 2.23(2) . ?
 Mn4 O6 2.584(19) 3_554 ?
 Mn4 O6 2.584(19) 4_456 ?
 Mn4 T2 2.908(10) 3_554 ?
 Mn4 T2 2.908(10) 4_456 ?
 T1 O5 1.569(17) . ?
 T1 O7 1.592(15) . ?
 T1 O6 1.606(18) 1_554 ?
 T1 O1 1.66(4) . ?
 T1 Mn4 3.500(10) 3_554 ?
 T1 O5 4.053(15) 6 ?
 T1 O5 4.108(16) 1_554 ?
 T1 O5 4.11(3) 2_656 ?
 T1 O5 4.49(2) 2_655 ?
 T2 O2 1.51(3) . ?
 T2 O5 1.594(18) . ?
 T2 O4 1.60(2) 3 ?
 T2 O6 1.623(18) . ?
 T2 Mn4 2.908(10) 3 ?
 T2 O5 3.33(3) 2_656 ?
 T2 O5 4.049(15) 1_556 ?
 T2 Mn4 4.115(8) 3_554 ?
 T2 O5 4.192(17) 3 ?
 O1 O5 2.63(5) . ?
 O1 O5 4.61(3) 6 ?
 O1 O5 4.59(3) 1_554 ?
 O2 Mg2 2.18(3) 1_556 ?
 O2 Fe2 2.18(3) 1_556 ?
 O2 O5 2.52(4) . ?
 O2 O5 3.90(2) 3 ?
 O2 Mn4 3.99(3) 3 ?
 O2 O5 4.43(3) 1_556 ?
 O2 O5 4.53(4) 2_556 ?
 O3 Mg1 2.08(3) 5_556 ?
 O3 Fe1 2.08(3) 5_556 ?
 O3 Mg3 2.13(3) 1_556 ?

O3 Fe3 2.13(3) 1_556 ?
 O3 O5 3.38(4) 6 ?
 O3 O5 3.38(4) . ?
 O4 T2 1.60(2) 3_554 ?
 O4 O5 2.68(2) 3_554 ?
 O4 O5 3.24(3) . ?
 O4 O5 3.46(4) 4_455 ?
 O4 Mn4 3.51(3) 3_554 ?
 O4 Mn4 3.799(16) 1_554 ?
 O4 O5 4.41(2) 3 ?
 O5 O7 2.615(19) . ?
 O5 O6 2.63(2) 1_554 ?
 O5 O6 2.65(2) . ?
 O5 O4 2.68(2) 3 ?
 O5 O5 2.98(5) 2_656 ?
 O5 O6 3.20(3) 2_656 ?
 O5 Fe4 3.264(17) 3_554 ?
 O5 Mn4 3.264(17) 3_554 ?
 O5 T2 3.33(3) 2_656 ?
 O5 O4 3.46(4) 4 ?
 O5 Mg2 3.862(17) 3 ?
 O5 Fe2 3.862(17) 3 ?
 O6 T1 1.606(18) 1_556 ?
 O6 Mn4 2.584(19) 3 ?
 O6 O5 2.63(2) 1_556 ?
 O6 O5 3.20(3) 2_656 ?
 O6 O5 4.61(3) 2_657 ?
 O7 T1 1.592(15) 6 ?
 O7 O5 2.615(19) 6 ?
 O7 O5 4.33(4) 2_656 ?
 O7 O5 4.33(4) 5_656 ?
 O7 O5 4.62(2) 6_554 ?
 O7 O5 4.62(2) 1_554 ?

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
 O3 Fe1 O3 83.2(17) 5_556 . ?
 O3 Fe1 O1 85.5(13) 5_556 . ?
 O3 Fe1 O1 95.0(14) . . ?
 O3 Fe1 O1 95.0(14) 5_556 2_556 ?
 O3 Fe1 O1 85.5(13) . 2_556 ?
 O1 Fe1 O1 179.2(8) . 2_556 ?
 O3 Fe1 O2 176.6(11) 5_556 . ?
 O3 Fe1 O2 93.7(12) . . ?
 O1 Fe1 O2 93.4(12) . . ?
 O1 Fe1 O2 86.1(12) 2_556 . ?
 O3 Fe1 O2 93.7(12) 5_556 2_556 ?
 O3 Fe1 O2 176.6(11) . 2_556 ?

O1 Fe1 O2 86.1(12) . 2_556 ?
 O1 Fe1 O2 93.4(12) 2_556 2_556 ?
 O2 Fe1 O2 89.4(13) . 2_556 ?
 O3 Fe1 Mg3 87.8(6) 5_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg3 43.9(9) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg3 138.9(7) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg3 41.6(7) 2_556 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg3 91.0(4) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg3 134.8(7) 2_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg2 137.2(10) 5_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg2 93.7(6) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg2 137.2(7) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg2 42.2(7) 2_556 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg2 44.2(7) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg2 87.6(5) 2_556 1_556 ?
 Mg3 Fe1 Mg2 62.76(8) 1_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg1 41.6(8) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe1 Mg1 41.6(8) . 5_556 ?
 O1 Fe1 Mg1 90.4(4) . 5_556 ?
 O1 Fe1 Mg1 90.4(4) 2_556 5_556 ?
 O2 Fe1 Mg1 135.3(7) . 5_556 ?
 O2 Fe1 Mg1 135.3(7) 2_556 5_556 ?
 Mg3 Fe1 Mg1 59.49(7) 1_556 5_556 ?
 Mg2 Fe1 Mg1 122.25(9) 1_556 5_556 ?
 O3 Fe1 Mn4 138.4(8) 5_556 . ?
 O3 Fe1 Mn4 138.4(8) . . ?
 O1 Fe1 Mn4 89.6(4) . . ?
 O1 Fe1 Mn4 89.6(4) 2_556 . ?
 O2 Fe1 Mn4 44.7(7) . . ?
 O2 Fe1 Mn4 44.7(7) 2_556 . ?
 Mg3 Fe1 Mn4 120.51(7) 1_556 . ?
 Mg2 Fe1 Mn4 57.75(9) 1_556 . ?
 Mg1 Fe1 Mn4 180.0 5_556 . ?
 O4 Fe2 O4 98.1(12) . 2 ?
 O4 Fe2 O1 169.4(9) . 2 ?
 O4 Fe2 O1 92.5(10) 2 2 ?
 O4 Fe2 O1 92.5(10) . . ?
 O4 Fe2 O1 169.4(9) 2 . ?
 O1 Fe2 O1 76.9(15) 2 . ?
 O4 Fe2 O2 94.5(10) . 1_554 ?
 O4 Fe2 O2 90.0(10) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 O2 85.3(12) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 O2 89.3(11) . 1_554 ?
 O4 Fe2 O2 90.0(10) . 2_556 ?
 O4 Fe2 O2 94.5(10) 2 2_556 ?
 O1 Fe2 O2 89.3(11) 2 2_556 ?
 O1 Fe2 O2 85.3(12) . 2_556 ?
 O2 Fe2 O2 173.0(8) 1_554 2_556 ?
 O4 Fe2 Mn4 43.2(6) . . ?
 O4 Fe2 Mn4 94.6(4) 2 . ?
 O1 Fe2 Mn4 136.2(8) 2 . ?
 O1 Fe2 Mn4 93.0(5) . . ?
 O2 Fe2 Mn4 137.7(7) 1_554 . ?
 O2 Fe2 Mn4 47.2(6) 2_556 . ?

O4 Fe2 Mn4 94.6(4) . 1_554 ?
 O4 Fe2 Mn4 43.2(6) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 93.0(5) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 136.2(8) . 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 47.2(6) 1_554 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 137.7(7) 2_556 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mn4 120.7(2) . 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 138.0(7) . 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 87.5(4) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 41.9(8) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 84.7(5) . 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 43.7(7) 1_554 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 131.2(6) 2_556 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 177.39(17) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 61.88(10) 1_554 1_554 ?
 O4 Fe2 O5 40.9(5) . 3_554 ?
 O4 Fe2 O5 63.0(8) 2 3_554 ?
 O1 Fe2 O5 147.8(5) 2 3_554 ?
 O1 Fe2 O5 126.8(11) . 3_554 ?
 O2 Fe2 O5 74.7(5) 1_554 3_554 ?
 O2 Fe2 O5 112.0(5) 2_556 3_554 ?
 Mn4 Fe2 O5 70.3(2) . 3_554 ?
 Mn4 Fe2 O5 54.9(3) 1_554 3_554 ?
 Mg1 Fe2 O5 112.1(2) 1_554 3_554 ?
 O1 Fe3 O1 180.0(11) . 5 ?
 O1 Fe3 O1 100.3(15) . 6 ?
 O1 Fe3 O1 79.7(15) 5 6 ?
 O1 Fe3 O1 79.7(15) . 2 ?
 O1 Fe3 O1 100.3(15) 5 2 ?
 O1 Fe3 O1 180(2) 6 2 ?
 O1 Fe3 O3 85.6(13) . 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 94.4(13) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 85.6(13) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 94.4(13) 2 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 94.4(13) . 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 85.6(13) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 94.4(13) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 85.6(13) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 O3 180(2) 5_556 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.1(8) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 42.9(8) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.3(5) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.7(5) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.3(8) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.7(8) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.3(5) . 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.7(5) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.1(8) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 42.9(8) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.3(8) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.7(8) 1_554 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 61.03(14) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.7(5) . 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.3(5) 5 5_556 ?

O1 Fe3 Mg1 42.9(8) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 137.1(8) 2 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.7(8) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.3(8) 1_554 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 118.97(14) 5 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(14) 1_554 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.1(8) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.9(8) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.9(8) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.1(8) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.49(7) 5 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 120.51(7) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.49(7) 5_556 5 ?
 O4 Mn4 O4 171.2(10) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O2 85.9(10) 2_556 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 87.6(10) . 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 87.6(10) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O2 85.9(10) . . ?
 O2 Mn4 O2 85.8(13) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O6 122.4(6) 2_556 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 65.8(7) . 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 145.5(6) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 112.3(11) . 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 65.8(7) 2_556 4_456 ?
 O4 Mn4 O6 122.4(6) . 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 112.3(11) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 145.5(6) . 4_456 ?
 O6 Mn4 O6 69.6(10) 3_554 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 156.2(6) 2_556 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 32.2(5) . 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 116.0(6) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 102.6(8) . 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 33.7(4) 3_554 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 95.6(5) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 32.2(5) 2_556 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 156.2(6) . 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 102.6(8) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 116.0(6) . 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 95.6(5) 3_554 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 33.7(4) 4_456 4_456 ?
 T2 Mn4 T2 126.8(3) 3_554 4_456 ?
 O4 Mn4 Fe2 131.7(6) 2_556 . ?
 O4 Mn4 Fe2 42.2(6) . . ?
 O2 Mn4 Fe2 45.8(7) 2_556 . ?
 O2 Mn4 Fe2 88.5(4) . . ?
 O6 Mn4 Fe2 103.5(3) 3_554 . ?
 O6 Mn4 Fe2 125.4(4) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 70.82(15) 3_554 . ?
 T2 Mn4 Fe2 140.4(2) 4_456 . ?
 O5 T1 O7 111.6(14) . . ?
 O5 T1 O6 111.8(10) . 1_554 ?
 O7 T1 O6 109.0(13) . 1_554 ?

O5 T1 O1 108.9(13) . . ?
O7 T1 O1 107.7(16) . . ?
O6 T1 O1 107.7(13) 1_554 . ?
O5 T1 Mn4 68.3(7) . 3_554 ?
O7 T1 Mn4 128.4(16) . 3_554 ?
O6 T1 Mn4 43.5(7) 1_554 3_554 ?
O1 T1 Mn4 121.4(7) . 3_554 ?
O5 T1 O5 99.0(8) . 6 ?
O7 T1 O5 20.0(9) . 6 ?
O6 T1 O5 129.0(8) 1_554 6 ?
O1 T1 O5 98.8(7) . 6 ?
Mn4 T1 O5 139.8(6) 3_554 6 ?
O5 T1 O5 131.7(10) . 1_554 ?
O7 T1 O5 98.4(8) . 1_554 ?
O6 T1 O5 19.9(8) 1_554 1_554 ?
O1 T1 O5 96.1(8) . 1_554 ?
Mn4 T1 O5 63.4(3) 3_554 1_554 ?
O5 T1 O5 117.7(4) 6 1_554 ?
O5 T1 O5 35.8(12) . 2_656 ?
O7 T1 O5 87.1(15) . 2_656 ?
O6 T1 O5 97.9(10) 1_554 2_656 ?
O1 T1 O5 143.7(8) . 2_656 ?
Mn4 T1 O5 63.3(3) 3_554 2_656 ?
O5 T1 O5 83.9(5) 6 2_656 ?
O5 T1 O5 114.9(4) 1_554 2_656 ?
O5 T1 O5 102.4(9) . 2_655 ?
O7 T1 O5 87.6(13) . 2_655 ?
O6 T1 O5 30.2(10) 1_554 2_655 ?
O1 T1 O5 136.2(8) . 2_655 ?
Mn4 T1 O5 46.2(2) 3_554 2_655 ?
O5 T1 O5 105.8(4) 6 2_655 ?
O5 T1 O5 40.3(6) 1_554 2_655 ?
O5 T1 O5 75.6(5) 2_656 2_655 ?
O2 T2 O5 109.0(12) . . ?
O2 T2 O4 110.9(13) . 3 ?
O5 T2 O4 114.0(12) . 3 ?
O2 T2 O6 105.4(12) . . ?
O5 T2 O6 111.2(10) . . ?
O4 T2 O6 106.0(11) 3 . ?
O2 T2 Mn4 126.3(8) . 3 ?
O5 T2 Mn4 124.4(11) . 3 ?
O4 T2 Mn4 44.3(8) 3 3 ?
O6 T2 Mn4 62.1(8) . 3 ?
O2 T2 Mn4 33.5(6) . . ?
O5 T2 Mn4 105.6(9) . . ?
O4 T2 Mn4 83.2(11) 3 . ?
O6 T2 Mn4 133.3(10) . . ?
Mn4 T2 Mn4 116.7(2) 3 . ?
O2 T2 O5 168.4(8) . 2_656 ?
O5 T2 O5 63.5(11) . 2_656 ?
O4 T2 O5 80.7(12) 3 2_656 ?
O6 T2 O5 71.2(10) . 2_656 ?
Mn4 T2 O5 62.6(4) 3 2_656 ?
Mn4 T2 O5 154.0(3) . 2_656 ?

O2 T2 O5 94.4(9) . 1_556 ?
O5 T2 O5 134.0(9) . 1_556 ?
O4 T2 O5 92.1(6) 3 1_556 ?
O6 T2 O5 22.9(7) . 1_556 ?
Mn4 T2 O5 52.9(3) 3 1_556 ?
Mn4 T2 O5 114.9(4) . 1_556 ?
O5 T2 O5 86.1(5) 2_656 1_556 ?
O2 T2 Mn4 118.0(7) . 3_554 ?
O5 T2 Mn4 47.8(6) . 3_554 ?
O4 T2 Mn4 67.4(7) 3 3_554 ?
O6 T2 Mn4 135.7(11) . 3_554 ?
Mn4 T2 Mn4 96.1(3) 3 3_554 ?
Mn4 T2 Mn4 90.47(14) . 3_554 ?
O5 T2 Mn4 64.5(3) 2_656 3_554 ?
O5 T2 Mn4 145.8(5) 1_556 3_554 ?
O2 T2 O5 68.6(7) . 3 ?
O5 T2 O5 140.9(7) . 3 ?
O4 T2 O5 43.8(12) 3 3 ?
O6 T2 O5 106.7(6) . 3 ?
Mn4 T2 O5 66.9(4) 3 3 ?
Mn4 T2 O5 49.9(3) . 3 ?
O5 T2 O5 122.9(6) 2_656 3 ?
O5 T2 O5 84.1(4) 1_556 3 ?
Mn4 T2 O5 97.1(3) 3_554 3 ?
T1 O1 Fe3 119.3(13) . . ?
T1 O1 Fe1 118.6(13) . . ?
Fe3 O1 Fe1 95.4(14) . . ?
T1 O1 Fe2 120.8(14) . . ?
Fe3 O1 Fe2 101.7(14) . . ?
Fe1 O1 Fe2 95.8(13) . . ?
T1 O1 O5 34.4(8) . . ?
Fe3 O1 O5 145.1(13) . . ?
Fe1 O1 O5 88.6(8) . . ?
Fe2 O1 O5 112.4(9) . . ?
T1 O1 Mn4 106.6(9) . . ?
Fe3 O1 Mn4 134.0(16) . . ?
Fe1 O1 Mn4 56.8(5) . . ?
Fe2 O1 Mn4 53.2(4) . . ?
O5 O1 Mn4 76.1(5) . . ?
T1 O1 O5 60.3(7) . 6 ?
Fe3 O1 O5 72.9(6) . 6 ?
Fe1 O1 O5 88.8(6) . 6 ?
Fe2 O1 O5 173.3(7) . 6 ?
O5 O1 O5 72.5(9) . 6 ?
Mn4 O1 O5 133.5(5) . 6 ?
T1 O1 O5 62.9(9) . 1_554 ?
Fe3 O1 O5 90.7(7) . 1_554 ?
Fe1 O1 O5 171.4(6) . 1_554 ?
Fe2 O1 O5 77.0(7) . 1_554 ?
O5 O1 O5 89.9(12) . 1_554 ?
Mn4 O1 O5 114.7(5) . 1_554 ?
O5 O1 O5 98.8(8) 6 1_554 ?
T2 O2 Fe1 122.7(12) . . ?
T2 O2 Mg2 127.4(12) . 1_556 ?

Fe1 O2 Mg2 92.1(12) . 1_556 ?
 T2 O2 Fe2 127.4(12) . 1_556 ?
 Fe1 O2 Fe2 92.1(12) . 1_556 ?
 Mg2 O2 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
 T2 O2 Mn4 124.6(12) . . ?
 Fe1 O2 Mn4 92.4(12) . . ?
 Mg2 O2 Mn4 87.1(11) 1_556 . ?
 Fe2 O2 Mn4 87.1(11) 1_556 . ?
 T2 O2 O5 36.7(8) . . ?
 Fe1 O2 O5 90.0(8) . . ?
 Mg2 O2 O5 155.7(11) 1_556 . ?
 Fe2 O2 O5 155.7(11) 1_556 . ?
 Mn4 O2 O5 117.0(9) . . ?
 T2 O2 O5 90.3(9) . 3 ?
 Fe1 O2 O5 145.3(13) . 3 ?
 Mg2 O2 O5 72.7(5) 1_556 3 ?
 Fe2 O2 O5 72.7(5) 1_556 3 ?
 Mn4 O2 O5 56.7(5) . 3 ?
 O5 O2 O5 116.8(10) . 3 ?
 T2 O2 Mn4 36.0(6) . 3 ?
 Fe1 O2 Mn4 152.5(10) . 3 ?
 Mg2 O2 Mn4 95.6(7) 1_556 3 ?
 Fe2 O2 Mn4 95.6(7) 1_556 3 ?
 Mn4 O2 Mn4 114.3(7) . 3 ?
 O5 O2 Mn4 72.5(10) . 3 ?
 O5 O2 Mn4 61.9(5) 3 3 ?
 T2 O2 O5 65.8(9) . 1_556 ?
 Fe1 O2 O5 118.4(6) . 1_556 ?
 Mg2 O2 O5 62.9(5) 1_556 1_556 ?
 Fe2 O2 O5 62.9(5) 1_556 1_556 ?
 Mn4 O2 O5 136.0(6) . 1_556 ?
 O5 O2 O5 95.0(11) . 1_556 ?
 O5 O2 O5 82.8(5) 3 1_556 ?
 Mn4 O2 O5 45.3(4) 3 1_556 ?
 T2 O2 O5 166.3(9) . 2_556 ?
 Fe1 O2 O5 43.6(8) . 2_556 ?
 Mg2 O2 O5 60.5(9) 1_556 2_556 ?
 Fe2 O2 O5 60.5(9) 1_556 2_556 ?
 Mn4 O2 O5 63.4(8) . 2_556 ?
 O5 O2 O5 131.3(9) . 2_556 ?
 O5 O2 O5 103.2(8) 3 2_556 ?
 Mn4 O2 O5 155.6(6) 3 2_556 ?
 O5 O2 O5 117.6(7) 1_556 2_556 ?
 Mg1 O3 Fe1 0.00(16) 5_556 5_556 ?
 Mg1 O3 Fe1 96.8(17) 5_556 . ?
 Fe1 O3 Fe1 96.8(17) 5_556 . ?
 Mg1 O3 Mg3 93.4(15) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Mg3 93.4(15) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Mg3 93.4(15) . 1_556 ?
 Mg1 O3 Fe3 93.4(15) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 93.4(15) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 93.4(15) . 1_556 ?
 Mg3 O3 Fe3 0.0 1_556 1_556 ?
 Mg1 O3 O5 70.5(7) 5_556 6 ?

Fe1 O3 O5 70.5(7) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 132.6(10) . 6 ?
 Mg3 O3 O5 131.6(6) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O5 131.6(6) 1_556 6 ?
 Mg1 O3 O5 132.6(10) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 132.6(10) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 70.5(7) . . ?
 Mg3 O3 O5 131.6(6) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O5 131.6(6) 1_556 . ?
 O5 O3 O5 85.2(12) 6 . ?
 T2 O4 Fe2 142.0(11) 3_554 . ?
 T2 O4 Mn4 103.5(9) 3_554 . ?
 Fe2 O4 Mn4 94.6(12) . . ?
 T2 O4 O5 33.0(7) 3_554 3_554 ?
 Fe2 O4 O5 109.0(8) . 3_554 ?
 Mn4 O4 O5 115.0(10) . 3_554 ?
 T2 O4 O5 116.2(16) 3_554 . ?
 Fe2 O4 O5 93.9(6) . . ?
 Mn4 O4 O5 97.0(6) . . ?
 O5 O4 O5 138.0(11) 3_554 . ?
 T2 O4 O5 72.2(10) 3_554 4_455 ?
 Fe2 O4 O5 85.1(10) . 4_455 ?
 Mn4 O4 O5 67.0(8) . 4_455 ?
 O5 O4 O5 56.6(9) 3_554 4_455 ?
 O5 O4 O5 163.7(9) . 4_455 ?
 T2 O4 Mn4 70.0(11) 3_554 3_554 ?
 Fe2 O4 Mn4 113.8(8) . 3_554 ?
 Mn4 O4 Mn4 141.7(9) . 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 80.7(8) 3_554 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 57.7(7) . 3_554 ?
 O5 O4 Mn4 137.2(6) 4_455 3_554 ?
 T2 O4 Mn4 89.8(6) 3_554 1_554 ?
 Fe2 O4 Mn4 52.9(4) . 1_554 ?
 Mn4 O4 Mn4 125.1(11) . 1_554 ?
 O5 O4 Mn4 57.5(5) 3_554 1_554 ?
 O5 O4 Mn4 124.4(6) . 1_554 ?
 O5 O4 Mn4 67.3(5) 4_455 1_554 ?
 Mn4 O4 Mn4 93.1(4) 3_554 1_554 ?
 T2 O4 O5 66.7(6) 3_554 3 ?
 Fe2 O4 O5 139.1(10) . 3 ?
 Mn4 O4 O5 44.5(5) . 3 ?
 O5 O4 O5 93.3(6) 3_554 3 ?
 O5 O4 O5 91.2(6) . 3 ?
 O5 O4 O5 79.2(6) 4_455 3 ?
 Mn4 O4 O5 103.1(6) 3_554 3 ?
 Mn4 O4 O5 143.9(6) 1_554 3 ?
 T1 O5 T2 145(2) . . ?
 T1 O5 O2 110.6(17) . . ?
 T2 O5 O2 34.3(7) . . ?
 T1 O5 O7 34.5(8) . . ?
 T2 O5 O7 144.6(11) . . ?
 O2 O5 O7 121.9(14) . . ?
 T1 O5 O1 36.7(8) . . ?
 T2 O5 O1 108.3(16) . . ?

O2 O5 O1 73.9(13) . . ?
O7 O5 O1 60.1(10) . . ?
T1 O5 O6 34.6(6) . 1_554 ?
T2 O5 O6 147.9(11) . 1_554 ?
O2 O5 O6 124.2(12) . 1_554 ?
O7 O5 O6 59.6(7) . 1_554 ?
O1 O5 O6 60.2(9) . 1_554 ?
T1 O5 O6 143.6(12) . . ?
T2 O5 O6 34.8(6) . . ?
O2 O5 O6 57.4(9) . . ?
O7 O5 O6 117.8(8) . . ?
O1 O5 O6 119.5(12) . . ?
O6 O5 O6 177.2(11) 1_554 . ?
T1 O5 O4 150.7(12) . 3 ?
T2 O5 O4 33.0(7) . 3 ?
O2 O5 O4 58.7(9) . 3 ?
O7 O5 O4 174.8(11) . 3 ?
O1 O5 O4 123.7(12) . 3 ?
O6 O5 O4 125.0(8) 1_554 3 ?
O6 O5 O4 57.7(5) . 3 ?
T1 O5 O5 126.3(14) . 2_656 ?
T2 O5 O5 87.9(10) . 2_656 ?
O2 O5 O5 121.8(9) . 2_656 ?
O7 O5 O5 101.2(11) . 2_656 ?
O1 O5 O5 161.3(9) . 2_656 ?
O6 O5 O5 110.4(12) 1_554 2_656 ?
O6 O5 O5 69.0(8) . 2_656 ?
O4 O5 O5 75.0(8) 3 2_656 ?
T1 O5 O6 82.3(10) . 2_656 ?
T2 O5 O6 131.8(13) . 2_656 ?
O2 O5 O6 161.6(9) . 2_656 ?
O7 O5 O6 76.2(10) . 2_656 ?
O1 O5 O6 117.6(8) . 2_656 ?
O6 O5 O6 59.7(9) 1_554 2_656 ?
O6 O5 O6 119.5(9) . 2_656 ?
O4 O5 O6 103.6(9) 3 2_656 ?
O5 O5 O6 50.7(8) 2_656 2_656 ?
T1 O5 O4 81.3(10) . . ?
T2 O5 O4 78.1(8) . . ?
O2 O5 O4 60.0(8) . . ?
O7 O5 O4 115.3(11) . . ?
O1 O5 O4 60.6(8) . . ?
O6 O5 O4 70.2(7) 1_554 . ?
O6 O5 O4 112.2(8) . . ?
O4 O5 O4 69.8(7) 3 . ?
O5 O5 O4 134.4(6) 2_656 . ?
O6 O5 O4 111.4(7) 2_656 . ?
T1 O5 Fe4 85.1(7) . 3_554 ?
T2 O5 Fe4 111.0(8) . 3_554 ?
O2 O5 Fe4 119.0(7) . 3_554 ?
O7 O5 Fe4 104.3(7) . 3_554 ?
O1 O5 Fe4 101.8(6) . 3_554 ?
O6 O5 Fe4 50.6(5) 1_554 3_554 ?
O6 O5 Fe4 131.3(8) . 3_554 ?

O4 O5 Fe4 78.8(6) 3 3_554 ?
O5 O5 Fe4 80.2(7) 2_656 3_554 ?
O6 O5 Fe4 47.1(4) 2_656 3_554 ?
O4 O5 Fe4 65.5(5) . 3_554 ?
T1 O5 Mn4 85.1(7) . 3_554 ?
T2 O5 Mn4 111.0(8) . 3_554 ?
O2 O5 Mn4 119.0(7) . 3_554 ?
O7 O5 Mn4 104.3(7) . 3_554 ?
O1 O5 Mn4 101.8(6) . 3_554 ?
O6 O5 Mn4 50.6(5) 1_554 3_554 ?
O6 O5 Mn4 131.3(8) . 3_554 ?
O4 O5 Mn4 78.8(6) 3 3_554 ?
O5 O5 Mn4 80.2(7) 2_656 3_554 ?
O6 O5 Mn4 47.1(4) 2_656 3_554 ?
O4 O5 Mn4 65.5(5) . 3_554 ?
Fe4 O5 Mn4 0.00(12) 3_554 3_554 ?
T1 O5 Fe1 73.3(10) . . ?
T2 O5 Fe1 72.8(10) . . ?
O2 O5 Fe1 40.5(7) . . ?
O7 O5 Fe1 82.1(11) . . ?
O1 O5 Fe1 39.2(7) . . ?
O6 O5 Fe1 99.2(8) 1_554 . ?
O6 O5 Fe1 80.9(8) . . ?
O4 O5 Fe1 99.1(8) 3 . ?
O5 O5 Fe1 147.6(7) 2_656 . ?
O6 O5 Fe1 155.4(6) 2_656 . ?
O4 O5 Fe1 67.8(7) . . ?
Fe4 O5 Fe1 130.8(7) 3_554 . ?
Mn4 O5 Fe1 130.8(7) 3_554 . ?
T1 O5 T2 110.9(11) . 2_656 ?
T2 O5 T2 103.3(11) . 2_656 ?
O2 O5 T2 136.1(9) . 2_656 ?
O7 O5 T2 100.5(11) . 2_656 ?
O1 O5 T2 145.3(9) . 2_656 ?
O6 O5 T2 85.3(8) 1_554 2_656 ?
O6 O5 T2 94.7(8) . 2_656 ?
O4 O5 T2 78.0(8) 3 2_656 ?
O5 O5 T2 28.6(5) 2_656 2_656 ?
O6 O5 T2 28.7(4) 2_656 2_656 ?
O4 O5 T2 113.8(7) . 2_656 ?
Fe4 O5 T2 52.3(3) 3_554 2_656 ?
Mn4 O5 T2 52.3(3) 3_554 2_656 ?
Fe1 O5 T2 175.5(5) . 2_656 ?
T1 O5 O4 117.0(10) . 4 ?
T2 O5 O4 90.4(9) . 4 ?
O2 O5 O4 116.5(8) . 4 ?
O7 O5 O4 121.3(12) . 4 ?
O1 O5 O4 137.5(7) . 4 ?
O6 O5 O4 83.6(7) 1_554 4 ?
O6 O5 O4 97.7(8) . 4 ?
O4 O5 O4 59.0(9) 3 4 ?
O5 O5 O4 48.4(6) 2_656 4 ?
O6 O5 O4 45.2(6) 2_656 4 ?
O4 O5 O4 88.0(4) . 4 ?

Fe4 O5 O4 36.1(3) 3_554 4 ?
 Mn4 O5 O4 36.1(3) 3_554 4 ?
 Fe1 O5 O4 152.7(8) . 4 ?
 T2 O5 O4 27.1(5) 2_656 4 ?
 T1 O5 O3 78.5(9) . . ?
 T2 O5 O3 79.4(9) . . ?
 O2 O5 O3 61.3(9) . . ?
 O7 O5 O3 65.7(8) . . ?
 O1 O5 O3 60.3(9) . . ?
 O6 O5 O3 112.8(8) 1_554 . ?
 O6 O5 O3 65.6(8) . . ?
 O4 O5 O3 112.4(8) 3 . ?
 O5 O5 O3 115.9(8) 2_656 . ?
 O6 O5 O3 136.2(8) 2_656 . ?
 O4 O5 O3 104.0(12) . . ?
 Fe4 O5 O3 161.9(9) 3_554 . ?
 Mn4 O5 O3 161.9(9) 3_554 . ?
 Fe1 O5 O3 36.2(7) . . ?
 T2 O5 O3 141.9(10) 2_656 . ?
 O4 O5 O3 162.1(8) 4 . ?
 T1 O5 Mg2 132.3(7) . 3 ?
 T2 O5 Mg2 63.1(6) . 3 ?
 O2 O5 Mg2 84.8(6) . 3 ?
 O7 O5 Mg2 151.8(10) . 3 ?
 O1 O5 Mg2 128.1(7) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 99.0(6) 1_554 3 ?
 O6 O5 Mg2 83.3(5) . 3 ?
 O4 O5 Mg2 30.1(5) 3 3 ?
 O5 O5 Mg2 67.3(4) 2_656 3 ?
 O6 O5 Mg2 76.9(5) 2_656 3 ?
 O4 O5 Mg2 67.7(5) . 3 ?
 Fe4 O5 Mg2 49.6(2) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Mg2 49.6(2) 3_554 3 ?
 Fe1 O5 Mg2 121.9(6) . 3 ?
 T2 O5 Mg2 56.7(3) 2_656 3 ?
 O4 O5 Mg2 31.9(4) 4 3 ?
 O3 O5 Mg2 142.4(6) . 3 ?
 T1 O5 Fe2 132.3(7) . 3 ?
 T2 O5 Fe2 63.1(6) . 3 ?
 O2 O5 Fe2 84.8(6) . 3 ?
 O7 O5 Fe2 151.8(10) . 3 ?
 O1 O5 Fe2 128.1(7) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 99.0(6) 1_554 3 ?
 O6 O5 Fe2 83.3(5) . 3 ?
 O4 O5 Fe2 30.1(5) 3 3 ?
 O5 O5 Fe2 67.3(4) 2_656 3 ?
 O6 O5 Fe2 76.9(5) 2_656 3 ?
 O4 O5 Fe2 67.7(5) . 3 ?
 Fe4 O5 Fe2 49.6(2) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Fe2 49.6(2) 3_554 3 ?
 Fe1 O5 Fe2 121.9(6) . 3 ?
 T2 O5 Fe2 56.7(3) 2_656 3 ?
 O4 O5 Fe2 31.9(4) 4 3 ?
 O3 O5 Fe2 142.4(6) . 3 ?

Mg2 O5 Fe2 0.00(6) 3 3 ?
T2 O6 T1 144.3(19) . 1_556 ?
T2 O6 Mn4 84.1(7) . 3 ?
T1 O6 Mn4 111.1(8) 1_556 3 ?
T2 O6 O5 143.3(11) . 1_556 ?
T1 O6 O5 33.6(6) 1_556 1_556 ?
Mn4 O6 O5 77.5(6) 3 1_556 ?
T2 O6 O5 34.1(6) . . ?
T1 O6 O5 148.1(12) 1_556 . ?
Mn4 O6 O5 100.6(7) 3 . ?
O5 O6 O5 177.2(11) 1_556 . ?
T2 O6 O5 80.1(9) . 2_656 ?
T1 O6 O5 135.3(13) 1_556 2_656 ?
Mn4 O6 O5 67.7(6) 3 2_656 ?
O5 O6 O5 120.2(9) 1_556 2_656 ?
O5 O6 O5 60.4(9) . 2_656 ?
T2 O6 O5 144.5(10) . 2_657 ?
T1 O6 O5 62.0(8) 1_556 2_657 ?
Mn4 O6 O5 60.5(4) 3 2_657 ?
O5 O6 O5 37.3(9) 1_556 2_657 ?
O5 O6 O5 143.3(9) . 2_657 ?
O5 O6 O5 82.9(8) 2_656 2_657 ?
T1 O7 T1 148(3) 6 . ?
T1 O7 O5 33.9(6) 6 6 ?
T1 O7 O5 147.9(15) . 6 ?
T1 O7 O5 147.9(15) 6 . ?
T1 O7 O5 33.9(6) . . ?
O5 O7 O5 121.7(11) 6 . ?
T1 O7 O5 133.8(14) 6 2_656 ?
T1 O7 O5 71.3(11) . 2_656 ?
O5 O7 O5 100.6(10) 6 2_656 ?
O5 O7 O5 42.5(9) . 2_656 ?
T1 O7 O5 71.3(11) 6 5_656 ?
T1 O7 O5 133.8(14) . 5_656 ?
O5 O7 O5 42.5(9) 6 5_656 ?
O5 O7 O5 100.6(10) . 5_656 ?
O5 O7 O5 63.6(7) 2_656 5_656 ?
T1 O7 O5 61.7(7) 6 6_554 ?
T1 O7 O5 118.4(10) . 6_554 ?
O5 O7 O5 89.4(5) 6 6_554 ?
O5 O7 O5 148.7(7) . 6_554 ?
O5 O7 O5 135.9(10) 2_656 6_554 ?
O5 O7 O5 101.4(6) 5_656 6_554 ?
T1 O7 O5 118.4(10) 6 1_554 ?
T1 O7 O5 61.7(7) . 1_554 ?
O5 O7 O5 148.7(7) 6 1_554 ?
O5 O7 O5 89.4(5) . 1_554 ?
O5 O7 O5 101.4(6) 2_656 1_554 ?
O5 O7 O5 135.9(10) 5_656 1_554 ?
O5 O7 O5 59.3(5) 6_554 1_554 ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max 0.282
_diffrn_reflms_theta_full 28.53
_diffrn_measured_fraction_theta_full 0.282

_refine_diff_density_max 2.452
_refine_diff_density_min -1.863
_refine_diff_density_rms 0.539