

data\_hpdac0

\_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 9.450(4)  
\_cell\_length\_b 18.368(7)  
\_cell\_length\_c 5.354(2)  
\_cell\_angle\_alpha 90.00  
\_cell\_angle\_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume              929.3(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 3.474
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.174
_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        2181
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0674
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0416
_diffrn_reflns_limit_h_min   -5
_diffrn_reflns_limit_h_max    5
_diffrn_reflns_limit_k_min   -22
_diffrn_reflns_limit_k_max    22
_diffrn_reflns_limit_l_min   -7
_diffrn_reflns_limit_l_max    7
_diffrn_reflns_theta_min     3.96
_diffrn_reflns_theta_max     28.07
_reflns_number_total         235
_reflns_number_gt            163
_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)+(0.1017P)^2+16.7105P] 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        0.0004(19)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns         235
_refine_ls_number_parameters      33
_refine_ls_number_restraints      0
_refine_ls_R_factor_all           0.0896
_refine_ls_R_factor_gt            0.0641
_refine_ls_wR_factor_ref          0.2114
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1645
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.244
_refine_ls_restrained_S_all       1.244
_refine_ls_shift/su_max           1.781
_refine_ls_shift/su_mean          0.415

```

```
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 0.0880(2) 0.5000 0.0103(10) Uiso 0.83 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.0880(2) 0.5000 0.0103(10) Uiso 0.17 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1793(3) 0.0000 0.0103(10) Uiso 0.73 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1793(3) 0.0000 0.0103(10) Uiso 0.27 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0103(10) Uiso 0.80 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0103(10) Uiso 0.20 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.2604(2) 0.5000 0.0103(10) Uiso 0.72 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.2604(2) 0.5000 0.0103(10) Uiso 0.28 2 d SP . .
T1 Si 0.2833(16) 0.0835(3) 0.1671(13) 0.0084(12) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.2952(14) 0.1675(3) 0.6614(12) 0.0084(12) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.109(4) 0.0867(7) 0.165(2) 0.0084(18) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.123(4) 0.1729(7) 0.669(2) 0.0084(18) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.105(5) 0.0000 0.662(4) 0.0084(18) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.389(4) 0.2440(7) 0.688(2) 0.0084(18) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.353(3) 0.1242(7) 0.412(3) 0.0084(18) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.343(3) 0.1238(7) 0.916(3) 0.0084(18) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.332(4) 0.0000 0.163(4) 0.0084(18) 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 2.07(2) 2_556 ?
Fe1 O1 2.07(2) . ?
Fe1 O3 2.09(2) 5_556 ?
Fe1 O3 2.09(2) . ?
Fe1 O2 2.14(2) . ?
Fe1 O2 2.14(2) 2_556 ?
Fe1 Mg3 3.127(2) 1_556 ?
Fe1 Mg2 3.159(3) 1_556 ?
Fe1 Mn4 3.167(6) . ?
Fe1 Mg1 3.232(9) 5_556 ?
Fe2 O4 2.03(2) 3_554 ?
Fe2 O4 2.03(2) 4_455 ?
Fe2 O2 2.12(2) 2_556 ?
Fe2 O2 2.12(2) 1_554 ?
Fe2 O1 2.17(2) 2 ?

```

Fe2 O1 2.17(2) . ?  
 Fe2 Mn4 3.063(3) . ?  
 Fe2 Mn4 3.063(3) 1\_554 ?  
 Fe2 Mg1 3.159(3) 1\_554 ?  
 Fe2 O6 3.43(3) 2\_556 ?  
 Fe3 O3 2.06(3) 5\_556 ?  
 Fe3 O3 2.06(3) 1\_554 ?  
 Fe3 O1 2.09(2) 5 ?  
 Fe3 O1 2.09(2) . ?  
 Fe3 O1 2.09(2) 6 ?  
 Fe3 O1 2.09(2) 2 ?  
 Fe3 Mg1 3.127(2) 5 ?  
 Fe3 Mg1 3.127(2) 1\_554 ?  
 Fe3 Mg1 3.127(2) 5\_556 ?  
 Fe3 O7 3.25(4) . ?  
 Fe3 O7 3.25(4) 5 ?  
 Mn4 O4 1.98(2) 4\_456 ?  
 Mn4 O4 1.98(2) 3\_554 ?  
 Mn4 O2 2.18(2) 2\_556 ?  
 Mn4 O2 2.18(2) . ?  
 Mn4 O6 2.63(2) 3\_554 ?  
 Mn4 O6 2.63(2) 4\_456 ?  
 Mn4 T2 2.964(10) 3\_554 ?  
 Mn4 T2 2.964(10) 4\_456 ?  
 Mn4 Mg2 3.063(3) 1\_556 ?  
 Mn4 Fe2 3.063(3) 1\_556 ?  
 T1 O7 1.601(14) . ?  
 T1 O5 1.644(19) . ?  
 T1 O6 1.635(19) 1\_554 ?  
 T1 O1 1.65(4) . ?  
 T1 O6 3.64(3) 2\_656 ?  
 T1 Mn4 3.635(10) 3\_554 ?  
 T1 O5 4.087(15) 6 ?  
 T1 O6 4.077(14) 6\_554 ?  
 T1 O6 4.114(16) . ?  
 T1 O5 4.164(17) 1\_554 ?  
 T2 O2 1.63(4) . ?  
 T2 O5 1.65(2) . ?  
 T2 O4 1.66(2) . ?  
 T2 O6 1.644(18) . ?  
 T2 Mn4 2.964(10) 3 ?  
 T2 O5 3.44(3) 2\_656 ?  
 T2 O7 4.088(14) . ?  
 T2 O6 4.097(16) 1\_554 ?  
 T2 O7 4.099(15) 1\_556 ?  
 T2 O5 4.132(16) 1\_556 ?  
 O1 O7 2.64(5) . ?  
 O1 O6 2.67(4) 1\_554 ?  
 O1 O5 2.75(4) . ?  
 O1 O6 4.34(5) 2\_556 ?  
 O2 Mg2 2.12(2) 1\_556 ?  
 O2 Fe2 2.12(2) 1\_556 ?  
 O2 O6 2.62(4) . ?  
 O2 O5 2.72(4) . ?

O2 O5 3.955(19) 3 ?  
O2 O6 3.988(18) 3\_554 ?  
O2 Mn4 4.17(3) 3 ?  
O3 Mg3 2.06(3) 1\_556 ?  
O3 Fe3 2.06(3) 1\_556 ?  
O3 Mg1 2.09(2) 5\_556 ?  
O3 Fe1 2.09(2) 5\_556 ?  
O3 O7 3.43(5) . ?  
O3 O7 3.43(5) 1\_556 ?  
O3 O6 3.47(4) . ?  
O3 O6 3.47(4) 6 ?  
O3 O5 3.53(4) 6 ?  
O3 O5 3.53(4) . ?  
O4 Fe4 1.98(2) 3 ?  
O4 Mn4 1.98(2) 3 ?  
O4 Mg2 2.03(2) 3 ?  
O4 Fe2 2.03(2) 3 ?  
O4 O6 2.561(19) . ?  
O4 O5 2.67(2) . ?  
O4 O5 3.33(4) 2\_656 ?  
O4 O5 3.54(4) 3 ?  
O4 O6 3.58(4) 3\_554 ?  
O4 Mn4 3.829(13) 3\_554 ?  
O5 O7 2.649(18) . ?  
O5 O6 2.66(2) 1\_554 ?  
O5 O6 2.70(2) . ?  
O5 O5 2.94(6) 2\_656 ?  
O5 O4 3.33(4) 2\_656 ?  
O5 O6 3.37(4) 2\_656 ?  
O5 Fe4 3.361(18) 3\_554 ?  
O5 Mn4 3.361(18) 3\_554 ?  
O5 T2 3.44(3) 2\_656 ?  
O5 O4 3.54(4) 3\_554 ?  
O5 Mg2 3.898(16) 3 ?  
O5 Fe2 3.898(16) 3 ?  
O6 T1 1.635(19) 1\_556 ?  
O6 Fe4 2.63(2) 3 ?  
O6 Mn4 2.63(2) 3 ?  
O6 O7 2.633(18) 1\_556 ?  
O6 O5 2.66(2) 1\_556 ?  
O6 O1 2.67(4) 1\_556 ?  
O6 O6 3.11(6) 2\_657 ?  
O6 O5 3.37(4) 2\_656 ?  
O6 Mg2 3.43(3) 1\_556 ?  
O6 Fe2 3.43(3) 1\_556 ?  
O6 O4 3.58(4) 3 ?  
O6 T1 3.64(3) 2\_656 ?  
O6 O7 3.85(5) 5\_656 ?  
O6 O4 3.98(3) 2\_657 ?  
O6 O2 3.988(19) 3 ?  
O7 T1 1.601(14) 6 ?  
O7 O5 2.649(18) 6 ?  
O7 O6 2.633(18) 6\_554 ?  
O7 O6 2.633(18) 1\_554 ?

O7 O1 2.64(5) 6 ?  
O7 O3 3.43(5) 1\_554 ?  
O7 O7 3.63(8) 5\_655 ?  
O7 O6 3.85(5) 2\_656 ?  
O7 O6 3.85(5) 5\_656 ?  
O7 Mg1 3.96(3) 5\_556 ?  
O7 Fe1 3.96(3) 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 178.7(7) 2\_556 . ?  
O1 Fe1 O3 96.7(13) 2\_556 5\_556 ?  
O1 Fe1 O3 82.3(13) . 5\_556 ?  
O1 Fe1 O3 82.3(13) 2\_556 . ?  
O1 Fe1 O3 96.7(13) . . ?  
O3 Fe1 O3 78.4(16) 5\_556 . ?  
O1 Fe1 O2 84.9(11) 2\_556 . ?  
O1 Fe1 O2 96.1(11) . . ?  
O3 Fe1 O2 175.4(11) 5\_556 . ?  
O3 Fe1 O2 97.5(12) . . ?  
O1 Fe1 O2 96.1(11) 2\_556 2\_556 ?  
O1 Fe1 O2 84.9(11) . 2\_556 ?  
O3 Fe1 O2 97.5(12) 5\_556 2\_556 ?  
O3 Fe1 O2 175.4(11) . 2\_556 ?  
O2 Fe1 O2 86.7(13) . 2\_556 ?  
O1 Fe1 Mg3 41.5(7) 2\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg3 137.5(7) . 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg3 87.5(5) 5\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg3 40.8(9) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg3 90.8(3) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg3 137.5(7) 2\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg2 43.2(7) 2\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg2 137.9(7) . 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg2 139.8(9) 5\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg2 93.4(5) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg2 41.9(7) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg2 88.4(4) 2\_556 1\_556 ?  
Mg3 Fe1 Mg2 63.19(8) 1\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mn4 90.7(4) 2\_556 . ?  
O1 Fe1 Mn4 90.7(4) . . ?  
O3 Fe1 Mn4 140.8(8) 5\_556 . ?  
O3 Fe1 Mn4 140.8(8) . . ?  
O2 Fe1 Mn4 43.3(6) . . ?  
O2 Fe1 Mn4 43.3(6) 2\_556 . ?  
Mg3 Fe1 Mn4 121.12(7) 1\_556 . ?  
Mg2 Fe1 Mn4 57.93(9) 1\_556 . ?  
O1 Fe1 Mg1 89.3(4) 2\_556 5\_556 ?  
O1 Fe1 Mg1 89.3(4) . 5\_556 ?

O3 Fe1 Mg1 39.2(8) 5\_556 5\_556 ?  
 O3 Fe1 Mg1 39.2(8) . 5\_556 ?  
 O2 Fe1 Mg1 136.7(6) . 5\_556 ?  
 O2 Fe1 Mg1 136.7(6) 2\_556 5\_556 ?  
 Mg3 Fe1 Mg1 58.88(7) 1\_556 5\_556 ?  
 Mg2 Fe1 Mg1 122.07(9) 1\_556 5\_556 ?  
 Mn4 Fe1 Mg1 180.0 . 5\_556 ?  
 O4 Fe2 O4 91.8(12) 3\_554 4\_455 ?  
 O4 Fe2 O2 84.8(10) 3\_554 2\_556 ?  
 O4 Fe2 O2 99.7(11) 4\_455 2\_556 ?  
 O4 Fe2 O2 99.7(11) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O2 84.8(10) 4\_455 1\_554 ?  
 O2 Fe2 O2 173.6(7) 2\_556 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O1 172.4(6) 3\_554 2 ?  
 O4 Fe2 O1 95.6(10) 4\_455 2 ?  
 O2 Fe2 O1 92.2(11) 2\_556 2 ?  
 O2 Fe2 O1 82.8(11) 1\_554 2 ?  
 O4 Fe2 O1 95.6(10) 3\_554 . ?  
 O4 Fe2 O1 172.4(6) 4\_455 . ?  
 O2 Fe2 O1 82.8(11) 2\_556 . ?  
 O2 Fe2 O1 92.2(11) 1\_554 . ?  
 O1 Fe2 O1 77.0(14) 2 . ?  
 O4 Fe2 Mn4 39.5(7) 3\_554 . ?  
 O4 Fe2 Mn4 95.4(4) 4\_455 . ?  
 O2 Fe2 Mn4 45.3(6) 2\_556 . ?  
 O2 Fe2 Mn4 139.2(7) 1\_554 . ?  
 O1 Fe2 Mn4 137.4(6) 2 . ?  
 O1 Fe2 Mn4 91.4(3) . . ?  
 O4 Fe2 Mn4 95.4(4) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mn4 39.5(7) 4\_455 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mn4 139.2(7) 2\_556 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mn4 45.3(6) 1\_554 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mn4 91.4(3) 2 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mn4 137.4(6) . 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mn4 121.8(2) . 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mg1 142.1(7) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mg1 87.1(3) 4\_455 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mg1 132.7(6) 2\_556 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mg1 42.5(6) 1\_554 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mg1 40.6(7) 2 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mg1 85.9(4) . 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mg1 177.02(18) . 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mg1 61.16(9) 1\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O6 129.3(8) 3\_554 2\_556 ?  
 O4 Fe2 O6 77.3(9) 4\_455 2\_556 ?  
 O2 Fe2 O6 49.9(8) 2\_556 2\_556 ?  
 O2 Fe2 O6 127.6(8) 1\_554 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O6 51.3(9) 2 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O6 99.2(10) . 2\_556 ?  
 Mn4 Fe2 O6 91.7(2) . 2\_556 ?  
 Mn4 Fe2 O6 105.1(3) 1\_554 2\_556 ?  
 Mg1 Fe2 O6 87.3(3) 1\_554 2\_556 ?  
 O3 Fe3 O3 180.000(2) 5\_556 1\_554 ?  
 O3 Fe3 O1 97.7(12) 5\_556 5 ?



O3 Fe3 O1 82.3(12) 1\_554 5 ?  
 O3 Fe3 O1 82.3(12) 5\_556 . ?  
 O3 Fe3 O1 97.7(12) 1\_554 . ?  
 O1 Fe3 O1 180.0(8) 5 . ?  
 O3 Fe3 O1 82.3(12) 5\_556 6 ?  
 O3 Fe3 O1 97.7(12) 1\_554 6 ?  
 O1 Fe3 O1 80.8(14) 5 6 ?  
 O1 Fe3 O1 99.2(14) . 6 ?  
 O3 Fe3 O1 97.7(12) 5\_556 2 ?  
 O3 Fe3 O1 82.3(12) 1\_554 2 ?  
 O1 Fe3 O1 99.2(14) 5 2 ?  
 O1 Fe3 O1 80.8(14) . 2 ?  
 O1 Fe3 O1 180.0(4) 6 2 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.6(7) 5\_556 5 ?  
 O3 Fe3 Mg1 41.4(7) 1\_554 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 40.9(7) 5 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 139.1(7) . 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 88.2(4) 6 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 91.8(4) 2 5 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.6(7) 5\_556 1\_554 ?  
 O3 Fe3 Mg1 41.4(7) 1\_554 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 91.8(4) 5 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 88.2(4) . 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 139.1(7) 6 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 40.9(7) 2 1\_554 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 62.23(14) 5 1\_554 ?  
 O3 Fe3 Mg1 41.4(7) 5\_556 5\_556 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.6(7) 1\_554 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 88.2(4) 5 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 91.8(4) . 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 40.9(7) 6 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 139.1(7) 2 5\_556 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 117.77(14) 5 5\_556 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(14) 1\_554 5\_556 ?  
 O3 Fe3 O7 103.2(13) 5\_556 . ?  
 O3 Fe3 O7 76.8(13) 1\_554 . ?  
 O1 Fe3 O7 125.9(9) 5 . ?  
 O1 Fe3 O7 54.1(9) . . ?  
 O1 Fe3 O7 54.1(9) 6 . ?  
 O1 Fe3 O7 125.9(9) 2 . ?  
 Mg1 Fe3 O7 103.3(3) 5 . ?  
 Mg1 Fe3 O7 103.3(3) 1\_554 . ?  
 Mg1 Fe3 O7 76.7(3) 5\_556 . ?  
 O3 Fe3 O7 76.8(13) 5\_556 5 ?  
 O3 Fe3 O7 103.2(13) 1\_554 5 ?  
 O1 Fe3 O7 54.1(9) 5 5 ?  
 O1 Fe3 O7 125.9(9) . 5 ?  
 O1 Fe3 O7 125.9(9) 6 5 ?  
 O1 Fe3 O7 54.1(9) 2 5 ?  
 Mg1 Fe3 O7 76.7(3) 5 5 ?  
 Mg1 Fe3 O7 76.7(3) 1\_554 5 ?  
 Mg1 Fe3 O7 103.3(3) 5\_556 5 ?  
 O7 Fe3 O7 180.0 . 5 ?  
 O4 Mn4 O4 175.3(9) 4\_456 3\_554 ?

O4 Mn4 O2 92.2(10) 4\_456 2\_556 ?  
O4 Mn4 O2 84.4(10) 3\_554 2\_556 ?  
O4 Mn4 O2 84.4(10) 4\_456 . ?  
O4 Mn4 O2 92.2(10) 3\_554 . ?  
O2 Mn4 O2 84.9(12) 2\_556 . ?  
O4 Mn4 O6 118.5(7) 4\_456 3\_554 ?  
O4 Mn4 O6 65.7(6) 3\_554 3\_554 ?  
O2 Mn4 O6 145.6(5) 2\_556 3\_554 ?  
O2 Mn4 O6 111.5(10) . 3\_554 ?  
O4 Mn4 O6 65.7(6) 4\_456 4\_456 ?  
O4 Mn4 O6 118.5(7) 3\_554 4\_456 ?  
O2 Mn4 O6 111.5(10) 2\_556 4\_456 ?  
O2 Mn4 O6 145.6(5) . 4\_456 ?  
O6 Mn4 O6 72.2(11) 3\_554 4\_456 ?  
O4 Mn4 T2 152.0(6) 4\_456 3\_554 ?  
O4 Mn4 T2 32.2(5) 3\_554 3\_554 ?  
O2 Mn4 T2 115.0(6) 2\_556 3\_554 ?  
O2 Mn4 T2 103.7(8) . 3\_554 ?  
O6 Mn4 T2 33.5(4) 3\_554 3\_554 ?  
O6 Mn4 T2 96.4(5) 4\_456 3\_554 ?  
O4 Mn4 T2 32.2(5) 4\_456 4\_456 ?  
O4 Mn4 T2 152.0(6) 3\_554 4\_456 ?  
O2 Mn4 T2 103.7(8) 2\_556 4\_456 ?  
O2 Mn4 T2 115.0(5) . 4\_456 ?  
O6 Mn4 T2 96.4(5) 3\_554 4\_456 ?  
O6 Mn4 T2 33.5(4) 4\_456 4\_456 ?  
T2 Mn4 T2 126.9(3) 3\_554 4\_456 ?  
O4 Mn4 Fe2 136.0(7) 4\_456 . ?  
O4 Mn4 Fe2 40.6(7) 3\_554 . ?  
O2 Mn4 Fe2 43.8(6) 2\_556 . ?  
O2 Mn4 Fe2 90.3(4) . . ?  
O6 Mn4 Fe2 104.1(3) 3\_554 . ?  
O6 Mn4 Fe2 122.8(4) 4\_456 . ?  
T2 Mn4 Fe2 71.50(15) 3\_554 . ?  
T2 Mn4 Fe2 138.7(2) 4\_456 . ?  
O4 Mn4 Mg2 40.6(7) 4\_456 1\_556 ?  
O4 Mn4 Mg2 136.0(7) 3\_554 1\_556 ?  
O2 Mn4 Mg2 90.3(4) 2\_556 1\_556 ?  
O2 Mn4 Mg2 43.8(6) . 1\_556 ?  
O6 Mn4 Mg2 122.8(4) 3\_554 1\_556 ?  
O6 Mn4 Mg2 104.1(3) 4\_456 1\_556 ?  
T2 Mn4 Mg2 138.7(2) 3\_554 1\_556 ?  
T2 Mn4 Mg2 71.50(15) 4\_456 1\_556 ?  
Fe2 Mn4 Mg2 121.8(2) . 1\_556 ?  
O4 Mn4 Fe2 40.6(7) 4\_456 1\_556 ?  
O4 Mn4 Fe2 136.0(7) 3\_554 1\_556 ?  
O2 Mn4 Fe2 90.3(4) 2\_556 1\_556 ?  
O2 Mn4 Fe2 43.8(6) . 1\_556 ?  
O6 Mn4 Fe2 122.8(4) 3\_554 1\_556 ?  
O6 Mn4 Fe2 104.1(3) 4\_456 1\_556 ?  
T2 Mn4 Fe2 138.7(2) 3\_554 1\_556 ?  
T2 Mn4 Fe2 71.50(15) 4\_456 1\_556 ?  
Fe2 Mn4 Fe2 121.8(2) . 1\_556 ?  
Mg2 Mn4 Fe2 0.00(16) 1\_556 1\_556 ?

O7 T1 O5 109.4(14) . . ?  
 O7 T1 O6 108.9(13) . 1\_554 ?  
 O5 T1 O6 108.3(11) . 1\_554 ?  
 O7 T1 O1 108.6(15) . . ?  
 O5 T1 O1 112.8(12) . . ?  
 O6 T1 O1 108.8(13) 1\_554 . ?  
 O7 T1 O6 85.2(15) . 2\_656 ?  
 O5 T1 O6 67.5(11) . 2\_656 ?  
 O6 T1 O6 58.2(12) 1\_554 2\_656 ?  
 O1 T1 O6 164.4(6) . 2\_656 ?  
 O7 T1 Mn4 126.3(15) . 3\_554 ?  
 O5 T1 Mn4 67.3(7) . 3\_554 ?  
 O6 T1 Mn4 41.2(7) 1\_554 3\_554 ?  
 O1 T1 Mn4 122.3(5) . 3\_554 ?  
 O6 T1 Mn4 42.5(3) 2\_656 3\_554 ?  
 O7 T1 O5 20.6(9) . 6 ?  
 O5 T1 O5 96.0(8) . 6 ?  
 O6 T1 O5 129.1(9) 1\_554 6 ?  
 O1 T1 O5 101.2(7) . 6 ?  
 O6 T1 O5 94.2(5) 2\_656 6 ?  
 Mn4 T1 O5 136.5(6) 3\_554 6 ?  
 O7 T1 O6 20.1(9) . 6\_554 ?  
 O5 T1 O6 129.2(9) . 6\_554 ?  
 O6 T1 O6 95.9(8) 1\_554 6\_554 ?  
 O1 T1 O6 99.7(7) . 6\_554 ?  
 O6 T1 O6 90.9(5) 2\_656 6\_554 ?  
 Mn4 T1 O6 125.3(5) 3\_554 6\_554 ?  
 O5 T1 O6 38.0(3) 6 6\_554 ?  
 O7 T1 O6 98.4(9) . . ?  
 O5 T1 O6 24.2(8) . . ?  
 O6 T1 O6 132.4(10) 1\_554 . ?  
 O1 T1 O6 97.8(7) . . ?  
 O6 T1 O6 87.1(5) 2\_656 . ?  
 Mn4 T1 O6 91.2(3) 3\_554 . ?  
 O5 T1 O6 80.4(3) 6 . ?  
 O6 T1 O6 118.1(4) 6\_554 . ?  
 O7 T1 O5 96.5(9) . 1\_554 ?  
 O5 T1 O5 129.0(10) . 1\_554 ?  
 O6 T1 O5 20.9(7) 1\_554 1\_554 ?  
 O1 T1 O5 98.3(7) . 1\_554 ?  
 O6 T1 O5 72.1(5) 2\_656 1\_554 ?  
 Mn4 T1 O5 62.0(3) 3\_554 1\_554 ?  
 O5 T1 O5 117.0(4) 6 1\_554 ?  
 O6 T1 O5 79.9(3) 6\_554 1\_554 ?  
 O6 T1 O5 153.2(5) . 1\_554 ?  
 O2 T2 O5 112.2(12) . . ?  
 O2 T2 O4 118.5(12) . . ?  
 O5 T2 O4 107.5(13) . . ?  
 O2 T2 O6 106.3(12) . . ?  
 O5 T2 O6 110.2(11) . . ?  
 O4 T2 O6 101.4(11) . . ?  
 O2 T2 Mn4 127.5(6) . 3 ?  
 O5 T2 Mn4 119.8(12) . 3 ?  
 O4 T2 Mn4 39.2(7) . 3 ?

O6 T2 Mn4 62.2(8) . 3 ?  
O2 T2 Mn4 32.1(5) . . ?  
O5 T2 Mn4 107.9(10) . . ?  
O4 T2 Mn4 91.9(11) . . ?  
O6 T2 Mn4 133.1(11) . . ?  
Mn4 T2 Mn4 118.01(19) 3 . ?  
O2 T2 O5 168.8(6) . 2\_656 ?  
O5 T2 O5 58.5(12) . 2\_656 ?  
O4 T2 O5 72.1(11) . 2\_656 ?  
O6 T2 O5 73.6(11) . 2\_656 ?  
Mn4 T2 O5 62.7(3) 3 2\_656 ?  
Mn4 T2 O5 152.2(3) . 2\_656 ?  
O2 T2 O7 98.4(8) . . ?  
O5 T2 O7 22.9(8) . . ?  
O4 T2 O7 130.2(10) . . ?  
O6 T2 O7 98.6(6) . . ?  
Mn4 T2 O7 132.9(7) 3 . ?  
Mn4 T2 O7 106.4(6) . . ?  
O5 T2 O7 70.8(7) 2\_656 . ?  
O2 T2 O6 98.4(7) . 1\_554 ?  
O5 T2 O6 22.9(7) . 1\_554 ?  
O4 T2 O6 100.9(6) . 1\_554 ?  
O6 T2 O6 132.9(9) . 1\_554 ?  
Mn4 T2 O6 127.7(5) 3 1\_554 ?  
Mn4 T2 O6 86.6(4) . 1\_554 ?  
O5 T2 O6 74.8(5) 2\_656 1\_554 ?  
O7 T2 O6 37.5(3) . 1\_554 ?  
O2 T2 O7 96.5(8) . 1\_556 ?  
O5 T2 O7 98.1(6) . 1\_556 ?  
O4 T2 O7 122.3(9) . 1\_556 ?  
O6 T2 O7 21.1(7) . 1\_556 ?  
Mn4 T2 O7 83.1(5) 3 1\_556 ?  
Mn4 T2 O7 128.0(7) . 1\_556 ?  
O5 T2 O7 79.6(7) 2\_656 1\_556 ?  
O7 T2 O7 81.69(14) . 1\_556 ?  
O6 T2 O7 118.8(3) 1\_554 1\_556 ?  
O2 T2 O5 96.8(7) . 1\_556 ?  
O5 T2 O5 130.7(10) . 1\_556 ?  
O4 T2 O5 90.7(6) . 1\_556 ?  
O6 T2 O5 20.7(6) . 1\_556 ?  
Mn4 T2 O5 53.5(3) 3 1\_556 ?  
Mn4 T2 O5 117.0(5) . 1\_556 ?  
O5 T2 O5 86.5(5) 2\_656 1\_556 ?  
O7 T2 O5 118.6(4) . 1\_556 ?  
O6 T2 O5 153.6(5) 1\_554 1\_556 ?  
O7 T2 O5 37.6(3) 1\_556 1\_556 ?  
T1 O1 Fe1 119.4(11) . . ?  
T1 O1 Fe3 117.8(11) . . ?  
Fe1 O1 Fe3 97.6(13) . . ?  
T1 O1 Fe2 120.1(12) . . ?  
Fe1 O1 Fe2 96.3(12) . . ?  
Fe3 O1 Fe2 101.1(13) . . ?  
T1 O1 O7 35.1(7) . . ?  
Fe1 O1 O7 114.0(9) . . ?

Fe3 O1 O7 86.0(8) . . ?  
 Fe2 O1 O7 147.8(13) . . ?  
 T1 O1 O6 35.4(8) . 1\_554 ?  
 Fe1 O1 O6 147.3(13) . 1\_554 ?  
 Fe3 O1 O6 112.9(9) . 1\_554 ?  
 Fe2 O1 O6 89.3(7) . 1\_554 ?  
 O7 O1 O6 59.4(11) . 1\_554 ?  
 T1 O1 O5 33.5(7) . . ?  
 Fe1 O1 O5 89.8(8) . . ?  
 Fe3 O1 O5 143.8(12) . . ?  
 Fe2 O1 O5 113.3(8) . . ?  
 O7 O1 O5 58.9(11) . . ?  
 O6 O1 O5 58.7(10) 1\_554 . ?  
 T1 O1 Mn4 107.2(8) . . ?  
 Fe1 O1 Mn4 56.4(4) . . ?  
 Fe3 O1 Mn4 134.9(16) . . ?  
 Fe2 O1 Mn4 53.7(3) . . ?  
 O7 O1 Mn4 136.3(11) . . ?  
 O6 O1 Mn4 104.2(6) 1\_554 . ?  
 O5 O1 Mn4 77.8(5) . . ?  
 T1 O1 O6 171.1(7) . 2\_556 ?  
 Fe1 O1 O6 66.2(10) . 2\_556 ?  
 Fe3 O1 O6 66.1(10) . 2\_556 ?  
 Fe2 O1 O6 51.2(9) . 2\_556 ?  
 O7 O1 O6 151.4(9) . 2\_556 ?  
 O6 O1 O6 136.4(7) 1\_554 2\_556 ?  
 O5 O1 O6 146.5(7) . 2\_556 ?  
 Mn4 O1 O6 69.5(6) . 2\_556 ?  
 T2 O2 Mg2 124.8(11) . 1\_556 ?  
 T2 O2 Fe2 124.8(11) . 1\_556 ?  
 Mg2 O2 Fe2 0.0 1\_556 1\_556 ?  
 T2 O2 Fe1 119.1(10) . . ?  
 Mg2 O2 Fe1 95.6(12) 1\_556 . ?  
 Fe2 O2 Fe1 95.6(12) 1\_556 . ?  
 T2 O2 Mn4 124.4(11) . . ?  
 Mg2 O2 Mn4 90.8(11) 1\_556 . ?  
 Fe2 O2 Mn4 90.8(11) 1\_556 . ?  
 Fe1 O2 Mn4 94.2(12) . . ?  
 T2 O2 O6 37.0(7) . . ?  
 Mg2 O2 O6 91.8(7) 1\_556 . ?  
 Fe2 O2 O6 91.8(7) 1\_556 . ?  
 Fe1 O2 O6 113.0(7) . . ?  
 Mn4 O2 O6 152.2(11) . . ?  
 T2 O2 O5 34.1(7) . . ?  
 Mg2 O2 O5 151.3(11) 1\_556 . ?  
 Fe2 O2 O5 151.3(11) 1\_556 . ?  
 Fe1 O2 O5 88.8(7) . . ?  
 Mn4 O2 O5 117.2(8) . . ?  
 O6 O2 O5 60.6(10) . . ?  
 T2 O2 O5 90.3(9) . 3 ?  
 Mg2 O2 O5 72.9(5) 1\_556 3 ?  
 Fe2 O2 O5 72.9(5) 1\_556 3 ?  
 Fe1 O2 O5 148.9(14) . 3 ?  
 Mn4 O2 O5 58.2(5) . 3 ?

O6 O2 O5 96.4(8) . 3 ?  
O5 O2 O5 115.4(9) . 3 ?  
T2 O2 O6 88.1(8) . 3\_554 ?  
Mg2 O2 O6 106.1(7) 1\_556 3\_554 ?  
Fe2 O2 O6 106.1(7) 1\_556 3\_554 ?  
Fe1 O2 O6 125.6(8) . 3\_554 ?  
Mn4 O2 O6 37.9(6) . 3\_554 ?  
O6 O2 O6 115.4(9) . 3\_554 ?  
O5 O2 O6 94.0(8) . 3\_554 ?  
O5 O2 O6 39.1(3) 3 3\_554 ?  
T2 O2 Mn4 34.3(5) . 3 ?  
Mg2 O2 Mn4 95.5(6) 1\_556 3 ?  
Fe2 O2 Mn4 95.5(6) 1\_556 3 ?  
Fe1 O2 Mn4 149.0(10) . 3 ?  
Mn4 O2 Mn4 114.5(7) . 3 ?  
O6 O2 Mn4 37.7(6) . 3 ?  
O5 O2 Mn4 68.2(9) . 3 ?  
O5 O2 Mn4 62.1(5) 3 3 ?  
O6 O2 Mn4 78.4(6) 3\_554 3 ?  
Mg3 O3 Fe3 0.0 1\_556 1\_556 ?  
Mg3 O3 Mg1 97.8(15) 1\_556 5\_556 ?  
Fe3 O3 Mg1 97.8(15) 1\_556 5\_556 ?  
Mg3 O3 Fe1 97.8(15) 1\_556 5\_556 ?  
Fe3 O3 Fe1 97.8(15) 1\_556 5\_556 ?  
Mg1 O3 Fe1 0.00(15) 5\_556 5\_556 ?  
Mg3 O3 Fe1 97.8(15) 1\_556 . ?  
Fe3 O3 Fe1 97.8(15) 1\_556 . ?  
Mg1 O3 Fe1 101.6(16) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 Fe1 101.6(16) 5\_556 . ?  
Mg3 O3 O7 170.0(19) 1\_556 . ?  
Fe3 O3 O7 170.0(19) 1\_556 . ?  
Mg1 O3 O7 88.4(9) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O7 88.4(9) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O7 88.4(9) . . ?  
Mg3 O3 O7 67.4(9) 1\_556 1\_556 ?  
Fe3 O3 O7 67.4(9) 1\_556 1\_556 ?  
Mg1 O3 O7 128.5(6) 5\_556 1\_556 ?  
Fe1 O3 O7 128.5(6) 5\_556 1\_556 ?  
Fe1 O3 O7 128.5(6) . 1\_556 ?  
O7 O3 O7 102.7(17) . 1\_556 ?  
Mg3 O3 O6 88.2(8) 1\_556 . ?  
Fe3 O3 O6 88.2(8) 1\_556 . ?  
Mg1 O3 O6 167.9(18) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O6 167.9(18) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O6 87.9(6) . . ?  
O7 O3 O6 84.3(11) . . ?  
O7 O3 O6 44.8(6) 1\_556 . ?  
Mg3 O3 O6 88.2(8) 1\_556 6 ?  
Fe3 O3 O6 88.2(8) 1\_556 6 ?  
Mg1 O3 O6 87.9(6) 5\_556 6 ?  
Fe1 O3 O6 87.9(6) 5\_556 6 ?  
Fe1 O3 O6 167.9(18) . 6 ?  
O7 O3 O6 84.3(11) . 6 ?  
O7 O3 O6 44.8(6) 1\_556 6 ?

O6 O3 O6 81.8(11) . 6 ?  
Mg3 O3 O5 130.6(7) 1\_556 6 ?  
Fe3 O3 O5 130.6(7) 1\_556 6 ?  
Mg1 O3 O5 69.9(7) 5\_556 6 ?  
Fe1 O3 O5 69.9(7) 5\_556 6 ?  
Fe1 O3 O5 131.1(10) . 6 ?  
O7 O3 O5 44.7(6) . 6 ?  
O7 O3 O5 83.3(11) 1\_556 6 ?  
O6 O3 O5 98.2(13) . 6 ?  
O6 O3 O5 45.3(6) 6 6 ?  
Mg3 O3 O5 130.6(7) 1\_556 . ?  
Fe3 O3 O5 130.6(7) 1\_556 . ?  
Mg1 O3 O5 131.1(10) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O5 131.1(10) 5\_556 . ?  
Fe1 O3 O5 69.9(7) . . ?  
O7 O3 O5 44.7(6) . . ?  
O7 O3 O5 83.3(11) 1\_556 . ?  
O6 O3 O5 45.3(6) . . ?  
O6 O3 O5 98.2(13) 6 . ?  
O5 O3 O5 80.5(12) 6 . ?  
T2 O4 Fe4 108.6(7) . 3 ?  
T2 O4 Mn4 108.6(7) . 3 ?  
Fe4 O4 Mn4 0.0(2) 3 3 ?  
T2 O4 Mg2 145.2(7) . 3 ?  
Fe4 O4 Mg2 99.8(12) 3 3 ?  
Mn4 O4 Mg2 99.8(12) 3 3 ?  
T2 O4 Fe2 145.2(7) . 3 ?  
Fe4 O4 Fe2 99.8(12) 3 3 ?  
Mn4 O4 Fe2 99.8(12) 3 3 ?  
Mg2 O4 Fe2 0.0(2) 3 3 ?  
T2 O4 O6 39.0(6) . . ?  
Fe4 O4 O6 69.6(6) 3 . ?  
Mn4 O4 O6 69.6(6) 3 . ?  
Mg2 O4 O6 157.6(16) 3 . ?  
Fe2 O4 O6 157.6(16) 3 . ?  
T2 O4 O5 36.0(7) . . ?  
Fe4 O4 O5 120.1(9) 3 . ?  
Mn4 O4 O5 120.1(9) 3 . ?  
Mg2 O4 O5 111.4(7) 3 . ?  
Fe2 O4 O5 111.4(7) 3 . ?  
O6 O4 O5 62.1(5) . . ?  
T2 O4 O5 79.6(9) . 2\_656 ?  
Fe4 O4 O5 73.6(9) 3 2\_656 ?  
Mn4 O4 O5 73.6(9) 3 2\_656 ?  
Mg2 O4 O5 89.9(11) 3 2\_656 ?  
Fe2 O4 O5 89.9(11) 3 2\_656 ?  
O6 O4 O5 68.3(7) . 2\_656 ?  
O5 O4 O5 57.4(10) . 2\_656 ?  
T2 O4 O5 105.3(15) . 3 ?  
Fe4 O4 O5 94.8(6) 3 3 ?  
Mn4 O4 O5 94.8(6) 3 3 ?  
Mg2 O4 O5 91.5(6) 3 3 ?  
Fe2 O4 O5 91.5(6) 3 3 ?  
O6 O4 O5 108.6(9) . 3 ?

O5 O4 O5 132.0(11) . 3 ?  
O5 O4 O5 168.4(8) 2\_656 3 ?  
T2 O4 O6 102.4(14) . 3\_554 ?  
Fe4 O4 O6 134.2(7) 3 3\_554 ?  
Mn4 O4 O6 134.2(7) 3 3\_554 ?  
Mg2 O4 O6 69.1(6) 3 3\_554 ?  
Fe2 O4 O6 69.1(6) 3 3\_554 ?  
O6 O4 O6 132.6(12) . 3\_554 ?  
O5 O4 O6 104.9(8) . 3\_554 ?  
O5 O4 O6 146.3(5) 2\_656 3\_554 ?  
O5 O4 O6 43.9(5) 3 3\_554 ?  
T2 O4 Mn4 62.3(11) . . ?  
Fe4 O4 Mn4 137.5(10) 3 . ?  
Mn4 O4 Mn4 137.5(10) 3 . ?  
Mg2 O4 Mn4 108.3(8) 3 . ?  
Fe2 O4 Mn4 108.3(8) 3 . ?  
O6 O4 Mn4 91.8(10) . . ?  
O5 O4 Mn4 78.3(9) . . ?  
O5 O4 Mn4 135.7(6) 2\_656 . ?  
O5 O4 Mn4 54.2(6) 3 . ?  
O6 O4 Mn4 41.6(6) 3\_554 . ?  
T2 O4 Mn4 92.7(5) . 3\_554 ?  
Fe4 O4 Mn4 131.7(13) 3 3\_554 ?  
Mn4 O4 Mn4 131.7(13) 3 3\_554 ?  
Mg2 O4 Mn4 52.8(3) 3 3\_554 ?  
Fe2 O4 Mn4 52.8(3) 3 3\_554 ?  
O6 O4 Mn4 119.1(5) . 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 59.1(5) . 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 68.3(4) 2\_656 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 121.2(6) 3 3\_554 ?  
O6 O4 Mn4 78.0(4) 3\_554 3\_554 ?  
Mn4 O4 Mn4 90.8(4) . 3\_554 ?  
T1 O5 T2 137(2) . . ?  
T1 O5 O7 34.7(8) . . ?  
T2 O5 O7 143.1(13) . . ?  
T1 O5 O6 35.7(6) . 1\_554 ?  
T2 O5 O6 143.2(12) . 1\_554 ?  
O7 O5 O6 59.5(6) . 1\_554 ?  
T1 O5 O4 149.9(11) . . ?  
T2 O5 O4 36.5(8) . . ?  
O7 O5 O4 175.3(12) . . ?  
O6 O5 O4 124.0(7) 1\_554 . ?  
T1 O5 O6 141.4(13) . . ?  
T2 O5 O6 34.9(6) . . ?  
O7 O5 O6 119.8(7) . . ?  
O6 O5 O6 176.0(17) 1\_554 . ?  
O4 O5 O6 57.0(5) . . ?  
T1 O5 O2 103.6(15) . . ?  
T2 O5 O2 33.7(9) . . ?  
O7 O5 O2 118.5(13) . . ?  
O6 O5 O2 118.6(11) 1\_554 . ?  
O4 O5 O2 63.4(10) . . ?  
O6 O5 O2 57.9(8) . . ?  
T1 O5 O1 33.7(9) . . ?



T2 O5 O1 103.6(15) . . ?  
O7 O5 O1 58.6(10) . . ?  
O6 O5 O1 59.3(9) 1\_554 . ?  
O4 O5 O1 125.4(11) . . ?  
O6 O5 O1 116.8(12) . . ?  
O2 O5 O1 69.9(11) . . ?  
T1 O5 O5 129.3(15) . 2\_656 ?  
T2 O5 O5 92.9(10) . 2\_656 ?  
O7 O5 O5 103.4(11) . 2\_656 ?  
O6 O5 O5 110.7(13) 1\_554 2\_656 ?  
O4 O5 O5 72.7(8) . 2\_656 ?  
O6 O5 O5 73.2(8) . 2\_656 ?  
O2 O5 O5 126.4(8) . 2\_656 ?  
O1 O5 O5 161.8(9) . 2\_656 ?  
T1 O5 O4 117.7(9) . 2\_656 ?  
T2 O5 O4 93.0(8) . 2\_656 ?  
O7 O5 O4 122.9(11) . 2\_656 ?  
O6 O5 O4 82.4(8) 1\_554 2\_656 ?  
O4 O5 O4 56.7(9) . 2\_656 ?  
O6 O5 O4 100.8(8) . 2\_656 ?  
O2 O5 O4 116.7(7) . 2\_656 ?  
O1 O5 O4 134.9(6) . 2\_656 ?  
O5 O5 O4 49.9(7) 2\_656 2\_656 ?  
T1 O5 O6 85.7(9) . 2\_656 ?  
T2 O5 O6 134.8(13) . 2\_656 ?  
O7 O5 O6 78.5(9) . 2\_656 ?  
O6 O5 O6 60.6(10) 1\_554 2\_656 ?  
O4 O5 O6 100.4(10) . 2\_656 ?  
O6 O5 O6 123.3(10) . 2\_656 ?  
O2 O5 O6 160.9(7) . 2\_656 ?  
O1 O5 O6 117.8(7) . 2\_656 ?  
O5 O5 O6 50.1(9) 2\_656 2\_656 ?  
O4 O5 O6 44.9(6) 2\_656 2\_656 ?  
T1 O5 Fe4 85.9(6) . 3\_554 ?  
T2 O5 Fe4 111.3(6) . 3\_554 ?  
O7 O5 Fe4 104.1(7) . 3\_554 ?  
O6 O5 Fe4 50.3(5) 1\_554 3\_554 ?  
O4 O5 Fe4 77.9(5) . 3\_554 ?  
O6 O5 Fe4 132.2(8) . 3\_554 ?  
O2 O5 Fe4 117.1(6) . 3\_554 ?  
O1 O5 Fe4 101.0(6) . 3\_554 ?  
O5 O5 Fe4 79.5(8) 2\_656 3\_554 ?  
O4 O5 Fe4 34.4(3) 2\_656 3\_554 ?  
O6 O5 Fe4 46.1(4) 2\_656 3\_554 ?  
T1 O5 Mn4 85.9(6) . 3\_554 ?  
T2 O5 Mn4 111.3(6) . 3\_554 ?  
O7 O5 Mn4 104.1(7) . 3\_554 ?  
O6 O5 Mn4 50.3(5) 1\_554 3\_554 ?  
O4 O5 Mn4 77.9(5) . 3\_554 ?  
O6 O5 Mn4 132.2(8) . 3\_554 ?  
O2 O5 Mn4 117.1(6) . 3\_554 ?  
O1 O5 Mn4 101.0(6) . 3\_554 ?  
O5 O5 Mn4 79.5(8) 2\_656 3\_554 ?  
O4 O5 Mn4 34.4(3) 2\_656 3\_554 ?

O6 O5 Mn4 46.1(4) 2\_656 3\_554 ?  
 Fe4 O5 Mn4 0.00(11) 3\_554 3\_554 ?  
 T1 O5 Fe1 68.6(10) . . ?  
 T2 O5 Fe1 70.3(11) . . ?  
 O7 O5 Fe1 80.2(10) . . ?  
 O6 O5 Fe1 95.9(9) 1\_554 . ?  
 O4 O5 Fe1 102.0(9) . . ?  
 O6 O5 Fe1 80.1(8) . . ?  
 O2 O5 Fe1 38.7(6) . . ?  
 O1 O5 Fe1 37.0(6) . . ?  
 O5 O5 Fe1 151.1(7) 2\_656 . ?  
 O4 O5 Fe1 149.6(8) 2\_656 . ?  
 O6 O5 Fe1 154.2(6) 2\_656 . ?  
 Fe4 O5 Fe1 128.0(7) 3\_554 . ?  
 Mn4 O5 Fe1 128.0(7) 3\_554 . ?  
 T1 O5 T2 113.5(11) . 2\_656 ?  
 T2 O5 T2 107.4(11) . 2\_656 ?  
 O7 O5 T2 102.3(10) . 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 85.4(9) 1\_554 2\_656 ?  
 O4 O5 T2 75.5(9) . 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 98.5(9) . 2\_656 ?  
 O2 O5 T2 138.8(7) . 2\_656 ?  
 O1 O5 T2 144.6(8) . 2\_656 ?  
 O5 O5 T2 28.5(6) 2\_656 2\_656 ?  
 O4 O5 T2 28.4(5) 2\_656 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 27.9(4) 2\_656 2\_656 ?  
 Fe4 O5 T2 51.6(4) 3\_554 2\_656 ?  
 Mn4 O5 T2 51.6(4) 3\_554 2\_656 ?  
 Fe1 O5 T2 177.5(5) . 2\_656 ?  
 T1 O5 O3 75.3(9) . . ?  
 T2 O5 O3 77.7(9) . . ?  
 O7 O5 O3 65.5(8) . . ?  
 O6 O5 O3 110.8(9) 1\_554 . ?  
 O4 O5 O3 114.0(8) . . ?  
 O6 O5 O3 66.2(8) . . ?  
 O2 O5 O3 59.4(8) . . ?  
 O1 O5 O3 57.6(8) . . ?  
 O5 O5 O3 120.4(7) 2\_656 . ?  
 O4 O5 O3 166.7(7) 2\_656 . ?  
 O6 O5 O3 139.6(7) 2\_656 . ?  
 Fe4 O5 O3 158.6(9) 3\_554 . ?  
 Mn4 O5 O3 158.6(9) 3\_554 . ?  
 Fe1 O5 O3 34.8(6) . . ?  
 T2 O5 O3 146.4(9) 2\_656 . ?  
 T1 O5 O4 77.5(9) . 3\_554 ?  
 T2 O5 O4 74.5(9) . 3\_554 ?  
 O7 O5 O4 111.8(10) . 3\_554 ?  
 O6 O5 O4 68.9(7) 1\_554 3\_554 ?  
 O4 O5 O4 72.9(7) . 3\_554 ?  
 O6 O5 O4 108.6(8) . 3\_554 ?  
 O2 O5 O4 55.4(7) . 3\_554 ?  
 O1 O5 O4 57.8(7) . 3\_554 ?  
 O5 O5 O4 136.0(6) 2\_656 3\_554 ?  
 O4 O5 O4 88.1(3) 2\_656 3\_554 ?

O6 O5 O4 112.1(6) 2\_656 3\_554 ?  
Fe4 O5 O4 67.2(5) 3\_554 3\_554 ?  
Mn4 O5 O4 67.2(5) 3\_554 3\_554 ?  
Fe1 O5 O4 63.5(7) . 3\_554 ?  
T2 O5 O4 115.2(6) 2\_656 3\_554 ?  
O3 O5 O4 98.3(12) . 3\_554 ?  
T1 O5 Mg2 131.3(6) . 3 ?  
T2 O5 Mg2 64.6(6) . 3 ?  
O7 O5 Mg2 152.2(9) . 3 ?  
O6 O5 Mg2 97.8(6) 1\_554 3 ?  
O4 O5 Mg2 28.9(5) . 3 ?  
O6 O5 Mg2 83.9(5) . 3 ?  
O2 O5 Mg2 85.4(5) . 3 ?  
O1 O5 Mg2 126.2(6) . 3 ?  
O5 O5 Mg2 67.8(4) 2\_656 3 ?  
O4 O5 Mg2 31.3(4) 2\_656 3 ?  
O6 O5 Mg2 76.1(6) 2\_656 3 ?  
Fe4 O5 Mg2 49.2(2) 3\_554 3 ?  
Mn4 O5 Mg2 49.2(2) 3\_554 3 ?  
Fe1 O5 Mg2 120.7(6) . 3 ?  
T2 O5 Mg2 56.9(3) 2\_656 3 ?  
O3 O5 Mg2 142.1(7) . 3 ?  
O4 O5 Mg2 68.7(4) 3\_554 3 ?  
T1 O5 Fe2 131.3(6) . 3 ?  
T2 O5 Fe2 64.6(6) . 3 ?  
O7 O5 Fe2 152.2(9) . 3 ?  
O6 O5 Fe2 97.8(6) 1\_554 3 ?  
O4 O5 Fe2 28.9(5) . 3 ?  
O6 O5 Fe2 83.9(5) . 3 ?  
O2 O5 Fe2 85.4(5) . 3 ?  
O1 O5 Fe2 126.2(6) . 3 ?  
O5 O5 Fe2 67.8(4) 2\_656 3 ?  
O4 O5 Fe2 31.3(4) 2\_656 3 ?  
O6 O5 Fe2 76.1(6) 2\_656 3 ?  
Fe4 O5 Fe2 49.2(2) 3\_554 3 ?  
Mn4 O5 Fe2 49.2(2) 3\_554 3 ?  
Fe1 O5 Fe2 120.7(6) . 3 ?  
T2 O5 Fe2 56.9(3) 2\_656 3 ?  
O3 O5 Fe2 142.1(7) . 3 ?  
O4 O5 Fe2 68.7(4) 3\_554 3 ?  
Mg2 O5 Fe2 0.00(5) 3 3 ?  
T1 O6 T2 144(2) 1\_556 . ?  
T1 O6 O4 147.2(9) 1\_556 . ?  
T2 O6 O4 39.6(7) . . ?  
T1 O6 Fe4 114.7(8) 1\_556 3 ?  
T2 O6 Fe4 84.3(7) . 3 ?  
O4 O6 Fe4 44.7(6) . 3 ?  
T1 O6 Mn4 114.7(8) 1\_556 3 ?  
T2 O6 Mn4 84.3(7) . 3 ?  
O4 O6 Mn4 44.7(6) . 3 ?  
Fe4 O6 Mn4 0.00(11) 3 3 ?  
T1 O6 O7 35.1(8) 1\_556 1\_556 ?  
T2 O6 O7 145.9(12) . 1\_556 ?  
O4 O6 O7 172.5(16) . 1\_556 ?

Fe4 O6 O7 129.3(10) 3 1\_556 ?  
 Mn4 O6 O7 129.3(10) 3 1\_556 ?  
 T1 O6 O2 107.3(16) 1\_556 . ?  
 T2 O6 O2 36.7(9) . . ?  
 O4 O6 O2 66.3(10) . . ?  
 Fe4 O6 O2 104.8(6) 3 . ?  
 Mn4 O6 O2 104.8(6) 3 . ?  
 O7 O6 O2 121.2(14) 1\_556 . ?  
 T1 O6 O5 36.0(7) 1\_556 1\_556 ?  
 T2 O6 O5 146.7(10) . 1\_556 ?  
 O4 O6 O5 117.9(7) . 1\_556 ?  
 Fe4 O6 O5 78.9(6) 3 1\_556 ?  
 Mn4 O6 O5 78.9(6) 3 1\_556 ?  
 O7 O6 O5 60.1(6) 1\_556 1\_556 ?  
 O2 O6 O5 122.0(12) . 1\_556 ?  
 T1 O6 O5 146.7(12) 1\_556 . ?  
 T2 O6 O5 34.9(6) . . ?  
 O4 O6 O5 61.0(5) . . ?  
 Fe4 O6 O5 98.6(8) 3 . ?  
 Mn4 O6 O5 98.6(8) 3 . ?  
 O7 O6 O5 120.4(7) 1\_556 . ?  
 O2 O6 O5 61.5(8) . . ?  
 O5 O6 O5 176.0(17) 1\_556 . ?  
 T1 O6 O1 35.8(9) 1\_556 1\_556 ?  
 T2 O6 O1 108.2(16) . 1\_556 ?  
 O4 O6 O1 126.7(11) . 1\_556 ?  
 Fe4 O6 O1 126.0(7) 3 1\_556 ?  
 Mn4 O6 O1 126.0(7) 3 1\_556 ?  
 O7 O6 O1 59.7(10) 1\_556 1\_556 ?  
 O2 O6 O1 71.5(12) . 1\_556 ?  
 O5 O6 O1 62.0(9) 1\_556 1\_556 ?  
 O5 O6 O1 121.9(12) . 1\_556 ?  
 T1 O6 O6 95.2(11) 1\_556 2\_657 ?  
 T2 O6 O6 120.2(15) . 2\_657 ?  
 O4 O6 O6 88.7(10) . 2\_657 ?  
 Fe4 O6 O6 53.9(5) 3 2\_657 ?  
 Mn4 O6 O6 53.9(5) 3 2\_657 ?  
 O7 O6 O6 83.8(10) 1\_556 2\_657 ?  
 O2 O6 O6 154.8(9) . 2\_657 ?  
 O5 O6 O6 71.1(8) 1\_556 2\_657 ?  
 O5 O6 O6 104.9(12) . 2\_657 ?  
 O1 O6 O6 130.3(9) 1\_556 2\_657 ?  
 T1 O6 O5 136.3(14) 1\_556 2\_656 ?  
 T2 O6 O5 78.6(10) . 2\_656 ?  
 O4 O6 O5 66.8(8) . 2\_656 ?  
 Fe4 O6 O5 66.8(7) 3 2\_656 ?  
 Mn4 O6 O5 66.8(7) 3 2\_656 ?  
 O7 O6 O5 107.3(10) 1\_556 2\_656 ?  
 O2 O6 O5 114.5(7) . 2\_656 ?  
 O5 O6 O5 119.4(10) 1\_556 2\_656 ?  
 O5 O6 O5 56.7(10) . 2\_656 ?  
 O1 O6 O5 165.4(7) 1\_556 2\_656 ?  
 O6 O6 O5 48.2(8) 2\_657 2\_656 ?  
 T1 O6 Mg2 72.6(11) 1\_556 1\_556 ?

T2 O6 Mg2 72.8(11) . 1\_556 ?  
O4 O6 Mg2 88.0(9) . 1\_556 ?  
Fe4 O6 Mg2 105.7(5) 3 1\_556 ?  
Mn4 O6 Mg2 105.7(5) 3 1\_556 ?  
O7 O6 Mg2 98.8(10) 1\_556 1\_556 ?  
O2 O6 Mg2 38.2(6) . 1\_556 ?  
O5 O6 Mg2 84.3(8) 1\_556 1\_556 ?  
O5 O6 Mg2 99.4(9) . 1\_556 ?  
O1 O6 Mg2 39.4(6) 1\_556 1\_556 ?  
O6 O6 Mg2 150.0(6) 2\_657 1\_556 ?  
O5 O6 Mg2 151.1(6) 2\_656 1\_556 ?  
T1 O6 Fe2 72.6(11) 1\_556 1\_556 ?  
T2 O6 Fe2 72.8(11) . 1\_556 ?  
O4 O6 Fe2 88.0(9) . 1\_556 ?  
Fe4 O6 Fe2 105.7(5) 3 1\_556 ?  
Mn4 O6 Fe2 105.7(5) 3 1\_556 ?  
O7 O6 Fe2 98.8(10) 1\_556 1\_556 ?  
O2 O6 Fe2 38.2(6) . 1\_556 ?  
O5 O6 Fe2 84.3(8) 1\_556 1\_556 ?  
O5 O6 Fe2 99.4(9) . 1\_556 ?  
O1 O6 Fe2 39.4(6) 1\_556 1\_556 ?  
O6 O6 Fe2 150.0(6) 2\_657 1\_556 ?  
O5 O6 Fe2 151.1(6) 2\_656 1\_556 ?  
Mg2 O6 Fe2 0.0 1\_556 1\_556 ?  
T1 O6 O3 78.7(9) 1\_556 . ?  
T2 O6 O3 79.6(10) . . ?  
O4 O6 O3 119.2(9) . . ?  
Fe4 O6 O3 163.9(7) 3 . ?  
Mn4 O6 O3 163.9(7) 3 . ?  
O7 O6 O3 66.8(9) 1\_556 . ?  
O2 O6 O3 61.0(8) . . ?  
O5 O6 O3 114.5(9) 1\_556 . ?  
O5 O6 O3 68.5(8) . . ?  
O1 O6 O3 59.5(8) 1\_556 . ?  
O6 O6 O3 137.1(7) 2\_657 . ?  
O5 O6 O3 110.5(8) 2\_656 . ?  
Mg2 O6 O3 68.6(8) 1\_556 . ?  
Fe2 O6 O3 68.6(8) 1\_556 . ?  
T1 O6 O4 76.2(9) 1\_556 3 ?  
T2 O6 O4 80.7(9) . 3 ?  
O4 O6 O4 73.3(8) . 3 ?  
Fe4 O6 O4 74.1(5) 3 3 ?  
Mn4 O6 O4 74.1(5) 3 3 ?  
O7 O6 O4 110.9(9) 1\_556 3 ?  
O2 O6 O4 59.1(7) . 3 ?  
O5 O6 O4 67.2(7) 1\_556 3 ?  
O5 O6 O4 115.2(8) . 3 ?  
O1 O6 O4 57.6(7) 1\_556 3 ?  
O6 O6 O4 117.8(6) 2\_657 3 ?  
O5 O6 O4 137.1(7) 2\_656 3 ?  
Mg2 O6 O4 33.5(5) 1\_556 3 ?  
Fe2 O6 O4 33.5(5) 1\_556 3 ?  
O3 O6 O4 102.0(12) . 3 ?  
T1 O6 T1 110.0(12) 1\_556 2\_656 ?

T2 O6 T1 105.3(12) . 2\_656 ?  
O4 O6 T1 87.3(10) . 2\_656 ?  
Fe4 O6 T1 68.7(7) 3 2\_656 ?  
Mn4 O6 T1 68.7(7) 3 2\_656 ?  
O7 O6 T1 85.7(10) 1\_556 2\_656 ?  
O2 O6 T1 141.1(8) . 2\_656 ?  
O5 O6 T1 95.1(9) 1\_556 2\_656 ?  
O5 O6 T1 81.1(8) . 2\_656 ?  
O1 O6 T1 144.4(8) 1\_556 2\_656 ?  
O6 O6 T1 26.6(5) 2\_657 2\_656 ?  
O5 O6 T1 26.8(4) 2\_656 2\_656 ?  
Mg2 O6 T1 174.3(5) 1\_556 2\_656 ?  
Fe2 O6 T1 174.3(5) 1\_556 2\_656 ?  
O3 O6 T1 116.6(8) . 2\_656 ?  
O4 O6 T1 141.4(8) 3 2\_656 ?  
T1 O6 O7 95.6(9) 1\_556 5\_656 ?  
T2 O6 O7 114.6(11) . 5\_656 ?  
O4 O6 O7 108.8(11) . 5\_656 ?  
Fe4 O6 O7 92.6(10) 3 5\_656 ?  
Mn4 O6 O7 92.6(10) 3 5\_656 ?  
O7 O6 O7 65.0(11) 1\_556 5\_656 ?  
O2 O6 O7 141.4(7) . 5\_656 ?  
O5 O6 O7 94.8(8) 1\_556 5\_656 ?  
O5 O6 O7 82.2(8) . 5\_656 ?  
O1 O6 O7 124.5(7) 1\_556 5\_656 ?  
O6 O6 O7 42.8(6) 2\_657 5\_656 ?  
O5 O6 O7 42.4(6) 2\_656 5\_656 ?  
Mg2 O6 O7 161.1(7) 1\_556 5\_656 ?  
Fe2 O6 O7 161.1(7) 1\_556 5\_656 ?  
O3 O6 O7 95.0(8) . 5\_656 ?  
O4 O6 O7 159.1(8) 3 5\_656 ?  
T1 O6 O7 24.5(5) 2\_656 5\_656 ?  
T1 O6 O4 91.8(8) 1\_556 2\_657 ?  
T2 O6 O4 110.2(8) . 2\_657 ?  
O4 O6 O4 70.6(7) . 2\_657 ?  
Fe4 O6 O4 25.9(3) 3 2\_657 ?  
Mn4 O6 O4 25.9(3) 3 2\_657 ?  
O7 O6 O4 103.7(9) 1\_556 2\_657 ?  
O2 O6 O4 125.7(6) . 2\_657 ?  
O5 O6 O4 56.1(7) 1\_556 2\_657 ?  
O5 O6 O4 120.7(9) . 2\_657 ?  
O1 O6 O4 113.8(6) 1\_556 2\_657 ?  
O6 O6 O4 40.0(5) 2\_657 2\_657 ?  
O5 O6 O4 74.4(8) 2\_656 2\_657 ?  
Mg2 O6 O4 111.6(6) 1\_556 2\_657 ?  
Fe2 O6 O4 111.6(6) 1\_556 2\_657 ?  
O3 O6 O4 170.0(5) . 2\_657 ?  
O4 O6 O4 78.2(3) 3 2\_657 ?  
T1 O6 O4 63.8(6) 2\_656 2\_657 ?  
O7 O6 O4 82.9(9) 5\_656 2\_657 ?  
T1 O6 O2 99.9(6) 1\_556 3 ?  
T2 O6 O2 81.1(6) . 3 ?  
O4 O6 O2 48.7(4) . 3 ?  
Fe4 O6 O2 30.6(5) 3 3 ?

Mn4 O6 O2 30.6(5) 3 3 ?  
O7 O6 O2 129.9(6) 1\_556 3 ?  
O2 O6 O2 85.1(7) . 3 ?  
O5 O6 O2 69.8(5) 1\_556 3 ?  
O5 O6 O2 109.5(6) . 3 ?  
O1 O6 O2 97.8(7) 1\_556 3 ?  
O6 O6 O2 79.8(6) 2\_657 3 ?  
O5 O6 O2 96.0(8) 2\_656 3 ?  
Mg2 O6 O2 75.7(6) 1\_556 3 ?  
Fe2 O6 O2 75.7(6) 1\_556 3 ?  
O3 O6 O2 143.0(10) . 3 ?  
O4 O6 O2 43.6(8) 3 3 ?  
T1 O6 O2 98.8(8) 2\_656 3 ?  
O7 O6 O2 121.7(10) 5\_656 3 ?  
O4 O6 O2 41.1(7) 2\_657 3 ?  
T1 O7 T1 147(3) 6 . ?  
T1 O7 O5 147.1(14) 6 . ?  
T1 O7 O5 35.8(7) . . ?  
T1 O7 O5 35.8(7) 6 6 ?  
T1 O7 O5 147.1(14) . 6 ?  
O5 O7 O5 118.9(10) . 6 ?  
T1 O7 O6 36.0(7) 6 6\_554 ?  
T1 O7 O6 147.8(15) . 6\_554 ?  
O5 O7 O6 173.4(18) . 6\_554 ?  
O5 O7 O6 60.4(4) 6 6\_554 ?  
T1 O7 O6 147.8(15) 6 1\_554 ?  
T1 O7 O6 36.0(7) . 1\_554 ?  
O5 O7 O6 60.4(4) . 1\_554 ?  
O5 O7 O6 173.4(18) 6 1\_554 ?  
O6 O7 O6 119.4(10) 6\_554 1\_554 ?  
T1 O7 O1 36.4(11) 6 6 ?  
T1 O7 O1 110(2) . 6 ?  
O5 O7 O1 125.2(14) . 6 ?  
O5 O7 O1 62.5(8) 6 6 ?  
O6 O7 O1 60.9(9) 6\_554 6 ?  
O6 O7 O1 123.7(15) 1\_554 6 ?  
T1 O7 O1 110(2) 6 . ?  
T1 O7 O1 36.4(11) . . ?  
O5 O7 O1 62.5(8) . . ?  
O5 O7 O1 125.2(14) 6 . ?  
O6 O7 O1 123.7(15) 6\_554 . ?  
O6 O7 O1 60.9(9) 1\_554 . ?  
O1 O7 O1 74.1(16) 6 . ?  
T1 O7 Fe3 74.3(15) 6 . ?  
T1 O7 Fe3 74.3(15) . . ?  
O5 O7 Fe3 101.9(10) . . ?  
O5 O7 Fe3 101.9(10) 6 . ?  
O6 O7 Fe3 84.5(10) 6\_554 . ?  
O6 O7 Fe3 84.5(10) 1\_554 . ?  
O1 O7 Fe3 39.9(8) 6 . ?  
O1 O7 Fe3 39.9(8) . . ?  
T1 O7 O3 79.1(12) 6 . ?  
T1 O7 O3 79.1(12) . . ?  
O5 O7 O3 69.8(8) . . ?

O5 O7 O3 69.8(8) 6 . ?  
 O6 O7 O3 114.7(9) 6\_554 . ?  
 O6 O7 O3 114.7(9) 1\_554 . ?  
 O1 O7 O3 59.8(9) 6 . ?  
 O1 O7 O3 59.8(9) . . ?  
 Fe3 O7 O3 66.9(10) . . ?  
 T1 O7 O3 80.4(12) 6 1\_554 ?  
 T1 O7 O3 80.4(12) . 1\_554 ?  
 O5 O7 O3 116.1(9) . 1\_554 ?  
 O5 O7 O3 116.1(9) 6 1\_554 ?  
 O6 O7 O3 68.4(8) 6\_554 1\_554 ?  
 O6 O7 O3 68.4(8) 1\_554 1\_554 ?  
 O1 O7 O3 60.3(9) 6 1\_554 ?  
 O1 O7 O3 60.3(9) . 1\_554 ?  
 Fe3 O7 O3 35.8(8) . 1\_554 ?  
 O3 O7 O3 102.7(17) . 1\_554 ?  
 T1 O7 O7 104.9(13) 6 5\_655 ?  
 T1 O7 O7 104.9(13) . 5\_655 ?  
 O5 O7 O7 100.2(12) . 5\_655 ?  
 O5 O7 O7 100.2(12) 6 5\_655 ?  
 O6 O7 O7 73.9(8) 6\_554 5\_655 ?  
 O6 O7 O7 73.9(8) 1\_554 5\_655 ?  
 O1 O7 O7 134.6(8) 6 5\_655 ?  
 O1 O7 O7 134.6(8) . 5\_655 ?  
 Fe3 O7 O7 135.7(10) . 5\_655 ?  
 O3 O7 O7 157.4(16) . 5\_655 ?  
 O3 O7 O7 99.9(11) 1\_554 5\_655 ?  
 T1 O7 O6 142.7(19) 6 2\_656 ?  
 T1 O7 O6 70.3(12) . 2\_656 ?  
 O5 O7 O6 59.1(8) . 2\_656 ?  
 O5 O7 O6 120.3(13) 6 2\_656 ?  
 O6 O7 O6 115.0(11) 6\_554 2\_656 ?  
 O6 O7 O6 53.3(10) 1\_554 2\_656 ?  
 O1 O7 O6 173.9(8) 6 2\_656 ?  
 O1 O7 O6 106.4(7) . 2\_656 ?  
 Fe3 O7 O6 137.8(5) . 2\_656 ?  
 O3 O7 O6 125.8(7) . 2\_656 ?  
 O3 O7 O6 114.4(8) 1\_554 2\_656 ?  
 O7 O7 O6 41.1(6) 5\_655 2\_656 ?  
 T1 O7 O6 70.3(12) 6 5\_656 ?  
 T1 O7 O6 142.7(19) . 5\_656 ?  
 O5 O7 O6 120.3(13) . 5\_656 ?  
 O5 O7 O6 59.1(8) 6 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 53.3(10) 6\_554 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 115.0(11) 1\_554 5\_656 ?  
 O1 O7 O6 106.4(7) 6 5\_656 ?  
 O1 O7 O6 173.9(8) . 5\_656 ?  
 Fe3 O7 O6 137.8(5) . 5\_656 ?  
 O3 O7 O6 125.8(7) . 5\_656 ?  
 O3 O7 O6 114.4(8) 1\_554 5\_656 ?  
 O7 O7 O6 41.1(6) 5\_655 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 72.4(10) 2\_656 5\_656 ?  
 T1 O7 Mg1 51.5(11) 6 5\_556 ?  
 T1 O7 Mg1 99.1(16) . 5\_556 ?



O5 O7 Mg1 100.4(9) . 5\_556 ?  
O5 O7 Mg1 58.6(8) 6 5\_556 ?  
O6 O7 Mg1 84.7(8) 6\_554 5\_556 ?  
O6 O7 Mg1 127.8(13) 1\_554 5\_556 ?  
O1 O7 Mg1 28.4(5) 6 5\_556 ?  
O1 O7 Mg1 67.2(10) . 5\_556 ?  
Fe3 O7 Mg1 50.2(5) . 5\_556 ?  
O3 O7 Mg1 31.8(5) . 5\_556 ?  
O3 O7 Mg1 82.1(10) 1\_554 5\_556 ?  
O7 O7 Mg1 155.9(3) 5\_655 5\_556 ?  
O6 O7 Mg1 157.4(6) 2\_656 5\_556 ?  
O6 O7 Mg1 116.2(3) 5\_656 5\_556 ?  
T1 O7 Fe1 51.5(11) 6 5\_556 ?  
T1 O7 Fe1 99.1(16) . 5\_556 ?  
O5 O7 Fe1 100.4(9) . 5\_556 ?  
O5 O7 Fe1 58.6(8) 6 5\_556 ?  
O6 O7 Fe1 84.7(8) 6\_554 5\_556 ?  
O6 O7 Fe1 127.8(13) 1\_554 5\_556 ?  
O1 O7 Fe1 28.4(5) 6 5\_556 ?  
O1 O7 Fe1 67.2(10) . 5\_556 ?  
Fe3 O7 Fe1 50.2(5) . 5\_556 ?  
O3 O7 Fe1 31.8(5) . 5\_556 ?  
O3 O7 Fe1 82.1(10) 1\_554 5\_556 ?  
O7 O7 Fe1 155.9(3) 5\_655 5\_556 ?  
O6 O7 Fe1 157.4(6) 2\_656 5\_556 ?  
O6 O7 Fe1 116.2(3) 5\_656 5\_556 ?  
Mg1 O7 Fe1 0.00(12) 5\_556 5\_556 ?  
T1 O7 Fe1 99.1(16) 6 . ?  
T1 O7 Fe1 51.5(11) . . ?  
O5 O7 Fe1 58.6(8) . . ?  
O5 O7 Fe1 100.4(9) 6 . ?  
O6 O7 Fe1 127.8(13) 6\_554 . ?  
O6 O7 Fe1 84.7(8) 1\_554 . ?  
O1 O7 Fe1 67.2(10) 6 . ?  
O1 O7 Fe1 28.4(5) . . ?  
Fe3 O7 Fe1 50.2(5) . . ?  
O3 O7 Fe1 31.8(5) . . ?  
O3 O7 Fe1 82.1(10) 1\_554 . ?  
O7 O7 Fe1 155.9(3) 5\_655 . ?  
O6 O7 Fe1 116.2(3) 2\_656 . ?  
O6 O7 Fe1 157.4(6) 5\_656 . ?  
Mg1 O7 Fe1 48.2(5) 5\_556 . ?  
Fe1 O7 Fe1 48.2(5) 5\_556 . ?  
T1 O7 T2 133.5(12) 6 . ?  
T1 O7 T2 41.0(6) . . ?  
O5 O7 T2 14.0(5) . . ?  
O5 O7 T2 109.0(7) 6 . ?  
O6 O7 T2 169.0(7) 6\_554 . ?  
O6 O7 T2 71.4(4) 1\_554 . ?  
O1 O7 T2 112.6(11) 6 . ?  
O1 O7 T2 58.4(5) . . ?  
Fe3 O7 T2 95.4(7) . . ?  
O3 O7 T2 55.8(4) . . ?  
O3 O7 T2 117.2(8) 1\_554 . ?

O7 O7 T2 112.8(10) 5\_655 . ?  
O6 O7 T2 72.2(4) 2\_656 . ?  
O6 O7 T2 125.7(10) 5\_656 . ?  
Mg1 O7 T2 86.7(6) 5\_556 . ?  
Fe1 O7 T2 86.7(6) 5\_556 . ?  
Fe1 O7 T2 47.8(3) . . ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.201  
\_diffn\_reflns\_theta\_full 28.07  
\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.201  
\_refine\_diff\_density\_max 1.116  
\_refine\_diff\_density\_min -0.773  
\_refine\_diff\_density\_rms 0.223