

data\_hpmix223

\_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 9.279(4)

\_cell\_length\_b 18.226(7)

\_cell\_length\_c 5.310(2)

\_cell\_angle\_alpha 90.00

\_cell\_angle\_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume               898.0(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 3.595
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.354
_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       5296
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0971
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0524
_diffrn_reflns_limit_h_min  -6
_diffrn_reflns_limit_h_max   6
_diffrn_reflns_limit_k_min  -24
_diffrn_reflns_limit_k_max   23
_diffrn_reflns_limit_l_min  -7
_diffrn_reflns_limit_l_max   7
_diffrn_reflns_theta_min    4.00
_diffrn_reflns_theta_max    28.57
_reflns_number_total        318
_reflns_number_gt           202
_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)+(0.1053P)^2+9.1987P] 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        0.0000(18)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns         318
_refine_ls_number_parameters     34
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.1007
_refine_ls_R_factor_gt           0.0726
_refine_ls_wR_factor_ref         0.2172
_refine_ls_wR_factor_gt          0.1985
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.205
_refine_ls_restrained_S_all      1.205
_refine_ls_shift/su_max          1.696
_refine_ls_shift/su_mean         0.512

```

```
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 0.08706(18) 0.5000 0.0101(8) Uiso 0.83 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.08706(18) 0.5000 0.0101(8) Uiso 0.17 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1781(2) 0.0000 0.0101(8) Uiso 0.73 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1781(2) 0.0000 0.0101(8) Uiso 0.27 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0101(8) Uiso 0.80 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0101(8) Uiso 0.20 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.26046(18) 0.5000 0.0101(8) Uiso 0.72 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.26046(18) 0.5000 0.0101(8) Uiso 0.28 2 d SP . .
T1 Si 0.2888(11) 0.0839(2) 0.1595(10) 0.0095(9) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.2997(11) 0.1681(2) 0.6547(9) 0.0095(9) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.108(3) 0.0862(6) 0.161(2) 0.0115(13) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.127(3) 0.1716(6) 0.666(2) 0.0115(13) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.112(4) 0.0000 0.661(3) 0.0115(13) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.380(3) 0.2466(7) 0.6847(19) 0.0115(13) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.354(3) 0.1264(6) 0.398(2) 0.0115(13) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.350(3) 0.1231(6) 0.909(2) 0.0115(13) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.346(4) 0.0000 0.163(3) 0.0115(13) 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 2.061(19) . ?
Fe1 O1 2.061(19) 2_556 ?
Fe1 O3 2.08(2) 5_556 ?
Fe1 O3 2.08(2) . ?
Fe1 O2 2.130(17) . ?
Fe1 O2 2.130(17) 2_556 ?
Fe1 Mg3 3.093(2) 1_556 ?
Fe1 Mg2 3.131(3) 1_556 ?
Fe1 Mn4 3.160(4) . ?
Fe1 Mg1 3.174(7) 5_556 ?
Fe2 O4 2.020(16) 3_554 ?
Fe2 O4 2.020(16) 4_455 ?
Fe2 O1 2.130(17) 2 ?
Fe2 O1 2.130(17) . ?
Fe2 O2 2.131(17) 1_554 ?

```

Fe2 O2 2.131(17) 2\_556 ?  
 Fe2 Mn4 3.050(3) . ?  
 Fe2 Mn4 3.050(3) 1\_554 ?  
 Fe2 Mg1 3.131(3) 1\_554 ?  
 Fe2 O6 3.43(2) 2\_556 ?  
 Fe3 O1 2.050(18) 5 ?  
 Fe3 O1 2.050(18) . ?  
 Fe3 O1 2.050(18) 6 ?  
 Fe3 O1 2.050(18) 2 ?  
 Fe3 O3 2.08(2) 5\_556 ?  
 Fe3 O3 2.08(2) 1\_554 ?  
 Fe3 Mg1 3.093(2) 5 ?  
 Fe3 Mg1 3.093(2) 1\_554 ?  
 Fe3 Mg1 3.093(2) 5\_556 ?  
 Fe3 Mg2 3.247(4) 5 ?  
 Mn4 O4 2.014(16) 3\_554 ?  
 Mn4 O4 2.014(16) 4\_456 ?  
 Mn4 O2 2.189(17) 2\_556 ?  
 Mn4 O2 2.189(17) . ?  
 Mn4 O6 2.582(15) 3\_554 ?  
 Mn4 O6 2.582(15) 4\_456 ?  
 Mn4 T2 2.917(8) 3\_554 ?  
 Mn4 T2 2.917(8) 4\_456 ?  
 Mn4 Mg2 3.050(3) 1\_556 ?  
 Mn4 Fe2 3.050(3) 1\_556 ?  
 T1 O5 1.601(14) . ?  
 T1 O7 1.619(13) . ?  
 T1 O6 1.614(15) 1\_554 ?  
 T1 O1 1.68(3) . ?  
 T1 O6 3.44(3) 2\_656 ?  
 T1 Mn4 3.550(8) 3\_554 ?  
 T1 O6 4.041(11) 6\_554 ?  
 T1 O6 4.084(13) . ?  
 T1 O5 4.080(11) 6 ?  
 T1 O7 4.09(3) 5\_655 ?  
 T2 O2 1.61(3) . ?  
 T2 O5 1.642(15) . ?  
 T2 O4 1.621(17) . ?  
 T2 O6 1.648(14) . ?  
 T2 Mn4 2.917(8) 3 ?  
 T2 O5 3.31(2) 2\_656 ?  
 T2 O7 4.048(11) . ?  
 T2 O5 4.049(12) 1\_556 ?  
 T2 O6 4.07(2) 2\_657 ?  
 T2 O6 4.070(13) 1\_554 ?  
 O1 O5 2.71(3) . ?  
 O1 O7 2.71(4) . ?  
 O1 O6 2.70(3) 1\_554 ?  
 O1 O6 4.32(4) 2\_556 ?  
 O2 Mg2 2.131(17) 1\_556 ?  
 O2 Fe2 2.131(17) 1\_556 ?  
 O2 O6 2.60(3) . ?  
 O2 O5 2.68(3) . ?  
 O2 O5 3.887(15) 3 ?

O2 O6 3.989(15) 3\_554 ?  
O2 Mn4 4.08(2) 3 ?  
O3 Mg1 2.08(2) 5\_556 ?  
O3 Fe1 2.08(2) 5\_556 ?  
O3 Mg3 2.08(2) 1\_556 ?  
O3 Fe3 2.08(2) 1\_556 ?  
O3 O7 3.42(4) . ?  
O3 O6 3.41(3) . ?  
O3 O6 3.41(3) 6 ?  
O3 O7 3.44(4) 1\_556 ?  
O3 O5 3.51(3) . ?  
O3 O5 3.51(3) 6 ?  
O4 Fe4 2.014(16) 3 ?  
O4 Mn4 2.014(16) 3 ?  
O4 Mg2 2.020(16) 3 ?  
O4 Fe2 2.020(16) 3 ?  
O4 O6 2.561(16) . ?  
O4 O5 2.680(16) . ?  
O4 O5 3.37(3) 3 ?  
O4 O5 3.33(3) 2\_656 ?  
O4 O6 3.51(3) 3\_554 ?  
O4 Mn4 3.804(12) 3\_554 ?  
O5 O6 2.595(18) 1\_554 ?  
O5 O7 2.619(13) . ?  
O5 O6 2.717(18) . ?  
O5 O5 2.92(4) 2\_656 ?  
O5 O6 3.19(3) 2\_656 ?  
O5 Fe4 3.248(14) 3\_554 ?  
O5 Mn4 3.248(14) 3\_554 ?  
O5 T2 3.31(2) 2\_656 ?  
O5 O4 3.37(3) 3\_554 ?  
O5 O4 3.33(3) 2\_656 ?  
O5 Mg2 3.851(12) 3 ?  
O5 Fe2 3.851(12) 3 ?  
O6 T1 1.614(15) 1\_556 ?  
O6 Fe4 2.582(15) 3 ?  
O6 Mn4 2.582(15) 3 ?  
O6 O5 2.595(18) 1\_556 ?  
O6 O7 2.619(13) 1\_556 ?  
O6 O1 2.70(3) 1\_556 ?  
O6 O6 2.94(5) 2\_657 ?  
O6 O5 3.19(3) 2\_656 ?  
O6 T1 3.44(3) 2\_656 ?  
O6 Mg2 3.43(2) 1\_556 ?  
O6 Fe2 3.43(2) 1\_556 ?  
O6 O4 3.51(3) 3 ?  
O6 O7 3.62(4) 5\_656 ?  
O7 T1 1.619(13) 6 ?  
O7 O5 2.619(13) 6 ?  
O7 O6 2.619(13) 6\_554 ?  
O7 O6 2.619(13) 1\_554 ?  
O7 O1 2.71(4) 6 ?  
O7 O7 3.34(6) 5\_655 ?  
O7 O3 3.44(4) 1\_554 ?

O7 O6 3.62(4) 2\_556 ?  
O7 O6 3.62(4) 5\_556 ?  
O7 Mg1 4.00(3) 5\_556 ?  
O7 Fe1 4.00(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 179.2(6) . 2\_556 ?  
O1 Fe1 O3 83.0(10) . 5\_556 ?  
O1 Fe1 O3 96.3(10) 2\_556 5\_556 ?  
O1 Fe1 O3 96.3(10) . . ?  
O1 Fe1 O3 83.0(10) 2\_556 . ?  
O3 Fe1 O3 80.6(13) 5\_556 . ?  
O1 Fe1 O2 95.7(8) . . ?  
O1 Fe1 O2 84.9(8) 2\_556 . ?  
O3 Fe1 O2 176.2(8) 5\_556 . ?  
O3 Fe1 O2 96.0(9) . . ?  
O1 Fe1 O2 84.9(8) . 2\_556 ?  
O1 Fe1 O2 95.7(8) 2\_556 2\_556 ?  
O3 Fe1 O2 96.0(9) 5\_556 2\_556 ?  
O3 Fe1 O2 176.2(8) . 2\_556 ?  
O2 Fe1 O2 87.4(10) . 2\_556 ?  
O1 Fe1 Mg3 138.3(5) . 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg3 41.1(5) 2\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg3 87.8(4) 5\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg3 42.0(7) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg3 90.9(3) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg3 136.6(5) 2\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg2 138.1(5) . 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mg2 42.5(5) 2\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg2 138.8(7) 5\_556 1\_556 ?  
O3 Fe1 Mg2 93.2(4) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg2 42.7(5) . 1\_556 ?  
O2 Fe1 Mg2 88.2(3) 2\_556 1\_556 ?  
Mg3 Fe1 Mg2 62.88(6) 1\_556 1\_556 ?  
O1 Fe1 Mn4 90.4(3) . . ?  
O1 Fe1 Mn4 90.4(3) 2\_556 . ?  
O3 Fe1 Mn4 139.7(6) 5\_556 . ?  
O3 Fe1 Mn4 139.7(6) . . ?  
O2 Fe1 Mn4 43.7(5) . . ?  
O2 Fe1 Mn4 43.7(5) 2\_556 . ?  
Mg3 Fe1 Mn4 120.87(5) 1\_556 . ?  
Mg2 Fe1 Mn4 57.99(7) 1\_556 . ?  
O1 Fe1 Mg1 89.6(3) . 5\_556 ?  
O1 Fe1 Mg1 89.6(3) 2\_556 5\_556 ?  
O3 Fe1 Mg1 40.3(6) 5\_556 5\_556 ?  
O3 Fe1 Mg1 40.3(6) . 5\_556 ?  
O2 Fe1 Mg1 136.3(5) . 5\_556 ?

O2 Fe1 Mg1 136.3(5) 2\_556 5\_556 ?  
 Mg3 Fe1 Mg1 59.13(5) 1\_556 5\_556 ?  
 Mg2 Fe1 Mg1 122.01(7) 1\_556 5\_556 ?  
 Mn4 Fe1 Mg1 180.0 . 5\_556 ?  
 O4 Fe2 O4 94.5(9) 3\_554 4\_455 ?  
 O4 Fe2 O1 170.9(6) 3\_554 2 ?  
 O4 Fe2 O1 94.6(8) 4\_455 2 ?  
 O4 Fe2 O1 94.6(8) 3\_554 . ?  
 O4 Fe2 O1 170.9(6) 4\_455 . ?  
 O1 Fe2 O1 76.3(11) 2 . ?  
 O4 Fe2 O2 97.9(8) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O2 86.5(7) 4\_455 1\_554 ?  
 O1 Fe2 O2 83.2(8) 2 1\_554 ?  
 O1 Fe2 O2 91.7(8) . 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O2 86.5(7) 3\_554 2\_556 ?  
 O4 Fe2 O2 97.9(8) 4\_455 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O2 91.7(8) 2 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O2 83.2(8) . 2\_556 ?  
 O2 Fe2 O2 173.5(6) 1\_554 2\_556 ?  
 O4 Fe2 Mn4 40.8(5) 3\_554 . ?  
 O4 Fe2 Mn4 95.1(3) 4\_455 . ?  
 O1 Fe2 Mn4 137.4(5) 2 . ?  
 O1 Fe2 Mn4 92.2(3) . . ?  
 O2 Fe2 Mn4 138.7(5) 1\_554 . ?  
 O2 Fe2 Mn4 45.9(4) 2\_556 . ?  
 O4 Fe2 Mn4 95.1(3) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mn4 40.8(5) 4\_455 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mn4 92.2(3) 2 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mn4 137.4(5) . 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mn4 45.9(4) 1\_554 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mn4 138.7(5) 2\_556 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mn4 121.05(16) . 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mg1 140.5(5) 3\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 Mg1 87.0(3) 4\_455 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mg1 40.8(5) 2 1\_554 ?  
 O1 Fe2 Mg1 85.6(3) . 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mg1 42.7(5) 1\_554 1\_554 ?  
 O2 Fe2 Mg1 132.5(4) 2\_556 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mg1 177.46(13) . 1\_554 ?  
 Mn4 Fe2 Mg1 61.49(7) 1\_554 1\_554 ?  
 O4 Fe2 O6 130.6(6) 3\_554 2\_556 ?  
 O4 Fe2 O6 75.2(7) 4\_455 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O6 51.8(7) 2 2\_556 ?  
 O1 Fe2 O6 99.2(8) . 2\_556 ?  
 O2 Fe2 O6 128.5(6) 1\_554 2\_556 ?  
 O2 Fe2 O6 49.0(6) 2\_556 2\_556 ?  
 Mn4 Fe2 O6 91.21(19) . 2\_556 ?  
 Mn4 Fe2 O6 105.4(2) 1\_554 2\_556 ?  
 Mg1 Fe2 O6 88.0(2) 1\_554 2\_556 ?  
 O1 Fe3 O1 180.0(4) 5 . ?  
 O1 Fe3 O1 79.9(11) 5 6 ?  
 O1 Fe3 O1 100.1(11) . 6 ?  
 O1 Fe3 O1 100.1(11) 5 2 ?  
 O1 Fe3 O1 79.9(11) . 2 ?



O1 Fe3 O1 180.0(15) 6 2 ?  
 O1 Fe3 O3 96.7(9) 5 5\_556 ?  
 O1 Fe3 O3 83.3(9) . 5\_556 ?  
 O1 Fe3 O3 83.3(9) 6 5\_556 ?  
 O1 Fe3 O3 96.7(9) 2 5\_556 ?  
 O1 Fe3 O3 83.3(9) 5 1\_554 ?  
 O1 Fe3 O3 96.7(9) . 1\_554 ?  
 O1 Fe3 O3 96.7(9) 6 1\_554 ?  
 O1 Fe3 O3 83.3(9) 2 1\_554 ?  
 O3 Fe3 O3 180.0(18) 5\_556 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 41.3(6) 5 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 138.7(6) . 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) 6 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) 2 5 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.0(6) 5\_556 5 ?  
 O3 Fe3 Mg1 42.0(6) 1\_554 5 ?  
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) 5 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) . 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 138.7(6) 6 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 41.3(6) 2 1\_554 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.0(6) 5\_556 1\_554 ?  
 O3 Fe3 Mg1 42.0(6) 1\_554 1\_554 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 61.73(11) 5 1\_554 ?  
 O1 Fe3 Mg1 87.9(4) 5 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 92.1(4) . 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 41.3(6) 6 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg1 138.7(6) 2 5\_556 ?  
 O3 Fe3 Mg1 42.0(6) 5\_556 5\_556 ?  
 O3 Fe3 Mg1 138.0(6) 1\_554 5\_556 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 118.27(11) 5 5\_556 ?  
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(10) 1\_554 5\_556 ?  
 O1 Fe3 Mg2 39.9(5) 5 5 ?  
 O1 Fe3 Mg2 140.1(5) . 5 ?  
 O1 Fe3 Mg2 39.9(5) 6 5 ?  
 O1 Fe3 Mg2 140.1(5) 2 5 ?  
 O3 Fe3 Mg2 90.0 5\_556 5 ?  
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 1\_554 5 ?  
 Mg1 Fe3 Mg2 59.13(5) 5 5 ?  
 Mg1 Fe3 Mg2 120.87(5) 1\_554 5 ?  
 Mg1 Fe3 Mg2 59.13(5) 5\_556 5 ?  
 O4 Mn4 O4 172.7(7) 3\_554 4\_456 ?  
 O4 Mn4 O2 85.1(7) 3\_554 2\_556 ?  
 O4 Mn4 O2 89.5(7) 4\_456 2\_556 ?  
 O4 Mn4 O2 89.5(7) 3\_554 . ?  
 O4 Mn4 O2 85.1(7) 4\_456 . ?  
 O2 Mn4 O2 84.5(9) 2\_556 . ?  
 O4 Mn4 O6 66.4(5) 3\_554 3\_554 ?  
 O4 Mn4 O6 120.3(5) 4\_456 3\_554 ?  
 O2 Mn4 O6 145.3(4) 2\_556 3\_554 ?  
 O2 Mn4 O6 113.2(7) . 3\_554 ?  
 O4 Mn4 O6 120.3(5) 3\_554 4\_456 ?  
 O4 Mn4 O6 66.4(5) 4\_456 4\_456 ?  
 O2 Mn4 O6 113.2(7) 2\_556 4\_456 ?  
 O2 Mn4 O6 145.3(4) . 4\_456 ?

O6 Mn4 O6 69.5(9) 3\_554 4\_456 ?  
O4 Mn4 T2 32.2(4) 3\_554 3\_554 ?  
O4 Mn4 T2 154.5(4) 4\_456 3\_554 ?  
O2 Mn4 T2 114.8(4) 2\_556 3\_554 ?  
O2 Mn4 T2 104.0(6) . 3\_554 ?  
O6 Mn4 T2 34.2(3) 3\_554 3\_554 ?  
O6 Mn4 T2 95.4(4) 4\_456 3\_554 ?  
O4 Mn4 T2 154.5(4) 3\_554 4\_456 ?  
O4 Mn4 T2 32.2(4) 4\_456 4\_456 ?  
O2 Mn4 T2 104.0(6) 2\_556 4\_456 ?  
O2 Mn4 T2 114.8(4) . 4\_456 ?  
O6 Mn4 T2 95.4(4) 3\_554 4\_456 ?  
O6 Mn4 T2 34.2(3) 4\_456 4\_456 ?  
T2 Mn4 T2 127.0(2) 3\_554 4\_456 ?  
O4 Mn4 Fe2 41.0(5) 3\_554 . ?  
O4 Mn4 Fe2 133.8(5) 4\_456 . ?  
O2 Mn4 Fe2 44.3(5) 2\_556 . ?  
O2 Mn4 Fe2 89.2(3) . . ?  
O6 Mn4 Fe2 104.0(3) 3\_554 . ?  
O6 Mn4 Fe2 124.5(3) 4\_456 . ?  
T2 Mn4 Fe2 70.87(12) 3\_554 . ?  
T2 Mn4 Fe2 140.07(17) 4\_456 . ?  
O4 Mn4 Mg2 133.8(5) 3\_554 1\_556 ?  
O4 Mn4 Mg2 41.0(5) 4\_456 1\_556 ?  
O2 Mn4 Mg2 89.2(3) 2\_556 1\_556 ?  
O2 Mn4 Mg2 44.3(5) . 1\_556 ?  
O6 Mn4 Mg2 124.5(3) 3\_554 1\_556 ?  
O6 Mn4 Mg2 104.0(3) 4\_456 1\_556 ?  
T2 Mn4 Mg2 140.07(17) 3\_554 1\_556 ?  
T2 Mn4 Mg2 70.87(12) 4\_456 1\_556 ?  
Fe2 Mn4 Mg2 121.05(16) . 1\_556 ?  
O4 Mn4 Fe2 133.8(5) 3\_554 1\_556 ?  
O4 Mn4 Fe2 41.0(5) 4\_456 1\_556 ?  
O2 Mn4 Fe2 89.2(3) 2\_556 1\_556 ?  
O2 Mn4 Fe2 44.3(5) . 1\_556 ?  
O6 Mn4 Fe2 124.5(3) 3\_554 1\_556 ?  
O6 Mn4 Fe2 104.0(3) 4\_456 1\_556 ?  
T2 Mn4 Fe2 140.07(17) 3\_554 1\_556 ?  
T2 Mn4 Fe2 70.87(12) 4\_456 1\_556 ?  
Fe2 Mn4 Fe2 121.05(16) . 1\_556 ?  
Mg2 Mn4 Fe2 0.00(12) 1\_556 1\_556 ?  
O5 T1 O7 108.9(10) . . ?  
O5 T1 O6 107.6(9) . 1\_554 ?  
O7 T1 O6 108.2(11) . 1\_554 ?  
O5 T1 O1 111.2(10) . . ?  
O7 T1 O1 110.6(12) . . ?  
O6 T1 O1 110.2(10) 1\_554 . ?  
O5 T1 O6 67.4(8) . 2\_656 ?  
O7 T1 O6 83.0(12) . 2\_656 ?  
O6 T1 O6 58.5(9) 1\_554 2\_656 ?  
O1 T1 O6 165.3(5) . 2\_656 ?  
O5 T1 Mn4 66.0(5) . 3\_554 ?  
O7 T1 Mn4 125.2(12) . 3\_554 ?  
O6 T1 Mn4 41.8(5) 1\_554 3\_554 ?

O1 T1 Mn4 122.2(4) . 3\_554 ?  
 O6 T1 Mn4 43.3(2) 2\_656 3\_554 ?  
 O5 T1 O6 131.2(7) . 6\_554 ?  
 O7 T1 O6 22.4(7) . 6\_554 ?  
 O6 T1 O6 95.3(6) 1\_554 6\_554 ?  
 O1 T1 O6 99.6(6) . 6\_554 ?  
 O6 T1 O6 91.3(4) 2\_656 6\_554 ?  
 Mn4 T1 O6 126.1(4) 3\_554 6\_554 ?  
 O5 T1 O6 24.9(6) . . ?  
 O7 T1 O6 96.2(6) . . ?  
 O6 T1 O6 132.5(8) 1\_554 . ?  
 O1 T1 O6 97.5(6) . . ?  
 O6 T1 O6 86.0(4) 2\_656 . ?  
 Mn4 T1 O6 90.9(3) 3\_554 . ?  
 O6 T1 O6 117.7(3) 6\_554 . ?  
 O5 T1 O5 98.8(6) . 6 ?  
 O7 T1 O5 20.1(8) . 6 ?  
 O6 T1 O5 128.3(7) 1\_554 6 ?  
 O1 T1 O5 99.8(5) . 6 ?  
 O6 T1 O5 94.8(4) 2\_656 6 ?  
 Mn4 T1 O5 138.0(4) 3\_554 6 ?  
 O6 T1 O5 37.3(2) 6\_554 6 ?  
 O6 T1 O5 80.9(2) . 6 ?  
 O5 T1 O7 101.5(9) . 5\_655 ?  
 O7 T1 O7 51.7(12) . 5\_655 ?  
 O6 T1 O7 61.9(8) 1\_554 5\_655 ?  
 O1 T1 O7 147.0(6) . 5\_655 ?  
 O6 T1 O7 39.5(4) 2\_656 5\_655 ?  
 Mn4 T1 O7 75.0(3) 3\_554 5\_655 ?  
 O6 T1 O7 52.9(5) 6\_554 5\_655 ?  
 O6 T1 O7 111.0(4) . 5\_655 ?  
 O5 T1 O7 69.9(3) 6 5\_655 ?  
 O2 T2 O5 110.9(10) . . ?  
 O2 T2 O4 114.9(9) . . ?  
 O5 T2 O4 110.5(10) . . ?  
 O2 T2 O6 105.8(10) . . ?  
 O5 T2 O6 111.4(9) . . ?  
 O4 T2 O6 103.2(8) . . ?  
 O2 T2 Mn4 126.5(5) . 3 ?  
 O5 T2 Mn4 122.3(10) . 3 ?  
 O4 T2 Mn4 41.5(6) . 3 ?  
 O6 T2 Mn4 61.7(6) . 3 ?  
 O2 T2 O5 168.6(5) . 2\_656 ?  
 O5 T2 O5 61.8(9) . 2\_656 ?  
 O4 T2 O5 76.4(9) . 2\_656 ?  
 O6 T2 O5 71.3(9) . 2\_656 ?  
 Mn4 T2 O5 62.4(3) 3 2\_656 ?  
 O2 T2 Mn4 33.0(4) . . ?  
 O5 T2 Mn4 106.5(7) . . ?  
 O4 T2 Mn4 87.9(8) . . ?  
 O6 T2 Mn4 133.3(9) . . ?  
 Mn4 T2 Mn4 117.28(15) 3 . ?  
 O5 T2 Mn4 154.0(3) 2\_656 . ?  
 O2 T2 O7 99.2(7) . . ?

O5 T2 O7 23.2(6) . . ?  
O4 T2 O7 133.0(9) . . ?  
O6 T2 O7 97.0(5) . . ?  
Mn4 T2 O7 132.5(6) 3 . ?  
O5 T2 O7 70.7(6) 2\_656 . ?  
Mn4 T2 O7 108.1(5) . . ?  
O2 T2 O5 95.4(6) . 1\_556 ?  
O5 T2 O5 133.2(8) . 1\_556 ?  
O4 T2 O5 90.7(5) . 1\_556 ?  
O6 T2 O5 22.0(5) . 1\_556 ?  
Mn4 T2 O5 52.6(3) 3 1\_556 ?  
O5 T2 O5 85.3(4) 2\_656 1\_556 ?  
Mn4 T2 O5 115.9(4) . 1\_556 ?  
O7 T2 O5 118.2(3) . 1\_556 ?  
O2 T2 O6 141.5(6) . 2\_657 ?  
O5 T2 O6 97.8(8) . 2\_657 ?  
O4 T2 O6 75.8(8) . 2\_657 ?  
O6 T2 O6 37.5(10) . 2\_657 ?  
Mn4 T2 O6 39.13(19) 3 2\_657 ?  
O5 T2 O6 39.5(3) 2\_656 2\_657 ?  
Mn4 T2 O6 154.4(2) . 2\_657 ?  
O7 T2 O6 97.4(5) . 2\_657 ?  
O5 T2 O6 46.3(4) 1\_556 2\_657 ?  
O2 T2 O6 99.2(6) . 1\_554 ?  
O5 T2 O6 20.4(6) . 1\_554 ?  
O4 T2 O6 102.7(5) . 1\_554 ?  
O6 T2 O6 131.7(7) . 1\_554 ?  
Mn4 T2 O6 128.9(4) 3 1\_554 ?  
O5 T2 O6 76.2(4) 2\_656 1\_554 ?  
Mn4 T2 O6 87.6(3) . 1\_554 ?  
O7 T2 O6 37.6(2) . 1\_554 ?  
O5 T2 O6 153.6(4) 1\_556 1\_554 ?  
O6 T2 O6 114.9(3) 2\_657 1\_554 ?  
T1 O1 Fe3 117.9(9) . . ?  
T1 O1 Fe1 119.3(10) . . ?  
Fe3 O1 Fe1 97.6(10) . . ?  
T1 O1 Fe2 119.3(10) . . ?  
Fe3 O1 Fe2 101.9(10) . . ?  
Fe1 O1 Fe2 96.7(9) . . ?  
T1 O1 O5 33.5(6) . . ?  
Fe3 O1 O5 144.4(9) . . ?  
Fe1 O1 O5 90.1(6) . . ?  
Fe2 O1 O5 111.7(7) . . ?  
T1 O1 O7 34.0(5) . . ?  
Fe3 O1 O7 87.5(7) . . ?  
Fe1 O1 O7 113.3(7) . . ?  
Fe2 O1 O7 147.2(10) . . ?  
O5 O1 O7 57.8(7) . . ?  
T1 O1 O6 34.1(6) . 1\_554 ?  
Fe3 O1 O6 113.1(7) . 1\_554 ?  
Fe1 O1 O6 146.7(10) . 1\_554 ?  
Fe2 O1 O6 89.8(6) . 1\_554 ?  
O5 O1 O6 57.4(7) . 1\_554 ?  
O7 O1 O6 57.9(8) . 1\_554 ?

T1 O1 Mn4 106.7(7) . . ?  
Fe3 O1 Mn4 135.4(12) . . ?  
Fe1 O1 Mn4 56.6(3) . . ?  
Fe2 O1 Mn4 53.6(3) . . ?  
O5 O1 Mn4 77.0(4) . . ?  
O7 O1 Mn4 134.4(8) . . ?  
O6 O1 Mn4 104.3(5) 1\_554 . ?  
T1 O1 O6 170.9(6) . 2\_556 ?  
Fe3 O1 O6 66.6(8) . 2\_556 ?  
Fe1 O1 O6 66.1(8) . 2\_556 ?  
Fe2 O1 O6 51.7(6) . 2\_556 ?  
O5 O1 O6 145.9(6) . 2\_556 ?  
O7 O1 O6 153.2(7) . 2\_556 ?  
O6 O1 O6 137.5(6) 1\_554 2\_556 ?  
Mn4 O1 O6 69.5(4) . 2\_556 ?  
T2 O2 Fe1 120.5(8) . . ?  
T2 O2 Mg2 125.8(9) . 1\_556 ?  
Fe1 O2 Mg2 94.6(9) . 1\_556 ?  
T2 O2 Fe2 125.8(9) . 1\_556 ?  
Fe1 O2 Fe2 94.6(9) . 1\_556 ?  
Mg2 O2 Fe2 0.0 1\_556 1\_556 ?  
T2 O2 Mn4 123.4(8) . . ?  
Fe1 O2 Mn4 94.1(9) . . ?  
Mg2 O2 Mn4 89.8(8) 1\_556 . ?  
Fe2 O2 Mn4 89.8(8) 1\_556 . ?  
T2 O2 O6 37.7(6) . . ?  
Fe1 O2 O6 113.7(6) . . ?  
Mg2 O2 O6 92.7(6) 1\_556 . ?  
Fe2 O2 O6 92.7(6) 1\_556 . ?  
Mn4 O2 O6 151.8(8) . . ?  
T2 O2 O5 35.0(5) . . ?  
Fe1 O2 O5 89.5(5) . . ?  
Mg2 O2 O5 153.6(8) 1\_556 . ?  
Fe2 O2 O5 153.6(8) 1\_556 . ?  
Mn4 O2 O5 115.9(6) . . ?  
O6 O2 O5 62.0(7) . . ?  
T2 O2 O5 90.2(7) . 3 ?  
Fe1 O2 O5 147.3(10) . 3 ?  
Mg2 O2 O5 73.1(4) 1\_556 3 ?  
Fe2 O2 O5 73.1(4) 1\_556 3 ?  
Mn4 O2 O5 56.7(4) . 3 ?  
O6 O2 O5 97.4(6) . 3 ?  
O5 O2 O5 115.1(7) . 3 ?  
T2 O2 O6 88.3(7) . 3\_554 ?  
Fe1 O2 O6 124.5(7) . 3\_554 ?  
Mg2 O2 O6 105.2(5) 1\_556 3\_554 ?  
Fe2 O2 O6 105.2(5) 1\_556 3\_554 ?  
Mn4 O2 O6 36.5(4) . 3\_554 ?  
O6 O2 O6 116.5(7) . 3\_554 ?  
O5 O2 O6 93.7(6) . 3\_554 ?  
O5 O2 O6 38.4(3) 3 3\_554 ?  
T2 O2 Mn4 35.1(4) . 3 ?  
Fe1 O2 Mn4 150.2(7) . 3 ?  
Mg2 O2 Mn4 95.2(5) 1\_556 3 ?

Fe2 O2 Mn4 95.2(5) 1\_556 3 ?  
 Mn4 O2 Mn4 114.0(5) . 3 ?  
 O6 O2 Mn4 37.8(4) . 3 ?  
 O5 O2 Mn4 69.9(6) . 3 ?  
 O5 O2 Mn4 62.4(4) 3 3 ?  
 O6 O2 Mn4 79.5(5) 3\_554 3 ?  
 Mg1 O3 Fe1 0.00(12) 5\_556 5\_556 ?  
 Mg1 O3 Fe1 99.4(13) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 Fe1 99.4(13) 5\_556 . ?  
 Mg1 O3 Mg3 96.1(12) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 Mg3 96.1(12) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 Mg3 96.1(12) . 1\_556 ?  
 Mg1 O3 Fe3 96.1(12) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 Fe3 96.1(12) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 Fe3 96.1(12) . 1\_556 ?  
 Mg3 O3 Fe3 0.0 1\_556 1\_556 ?  
 Mg1 O3 O7 90.0(7) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O7 90.0(7) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O7 90.0(7) . . ?  
 Mg3 O3 O7 170.6(15) 1\_556 . ?  
 Fe3 O3 O7 170.6(15) 1\_556 . ?  
 Mg1 O3 O6 169.5(14) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O6 169.5(14) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O6 88.9(4) . . ?  
 Mg3 O3 O6 89.4(6) 1\_556 . ?  
 Fe3 O3 O6 89.4(6) 1\_556 . ?  
 O7 O3 O6 83.5(9) . . ?  
 Mg1 O3 O6 88.9(4) 5\_556 6 ?  
 Fe1 O3 O6 88.9(4) 5\_556 6 ?  
 Fe1 O3 O6 169.5(14) . 6 ?  
 Mg3 O3 O6 89.4(6) 1\_556 6 ?  
 Fe3 O3 O6 89.4(6) 1\_556 6 ?  
 O7 O3 O6 83.5(9) . 6 ?  
 O6 O3 O6 82.2(9) . 6 ?  
 Mg1 O3 O7 129.3(5) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 O7 129.3(5) 5\_556 1\_556 ?  
 Fe1 O3 O7 129.3(5) . 1\_556 ?  
 Mg3 O3 O7 69.2(7) 1\_556 1\_556 ?  
 Fe3 O3 O7 69.2(7) 1\_556 1\_556 ?  
 O7 O3 O7 101.4(13) . 1\_556 ?  
 O6 O3 O7 44.9(5) . 1\_556 ?  
 O6 O3 O7 44.9(5) 6 1\_556 ?  
 Mg1 O3 O5 131.1(7) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O5 131.1(7) 5\_556 . ?  
 Fe1 O3 O5 69.8(6) . . ?  
 Mg3 O3 O5 131.7(5) 1\_556 . ?  
 Fe3 O3 O5 131.7(5) 1\_556 . ?  
 O7 O3 O5 44.4(4) . . ?  
 O6 O3 O5 46.2(5) . . ?  
 O6 O3 O5 99.9(11) 6 . ?  
 O7 O3 O5 84.5(9) 1\_556 . ?  
 Mg1 O3 O5 69.8(6) 5\_556 6 ?  
 Fe1 O3 O5 69.8(6) 5\_556 6 ?  
 Fe1 O3 O5 131.1(7) . 6 ?

Mg3 O3 O5 131.7(5) 1\_556 6 ?  
Fe3 O3 O5 131.7(5) 1\_556 6 ?  
O7 O3 O5 44.4(4) . 6 ?  
O6 O3 O5 99.9(11) . 6 ?  
O6 O3 O5 46.2(5) 6 6 ?  
O7 O3 O5 84.5(9) 1\_556 6 ?  
O5 O3 O5 82.1(9) . 6 ?  
T2 O4 Fe4 106.2(6) . 3 ?  
T2 O4 Mn4 106.2(6) . 3 ?  
Fe4 O4 Mn4 0.00(18) 3 3 ?  
T2 O4 Mg2 143.6(7) . 3 ?  
Fe4 O4 Mg2 98.2(9) 3 3 ?  
Mn4 O4 Mg2 98.2(9) 3 3 ?  
T2 O4 Fe2 143.6(7) . 3 ?  
Fe4 O4 Fe2 98.2(9) 3 3 ?  
Mn4 O4 Fe2 98.2(9) 3 3 ?  
Mg2 O4 Fe2 0.00(15) 3 3 ?  
T2 O4 O6 38.8(5) . . ?  
Fe4 O4 O6 67.5(5) 3 . ?  
Mn4 O4 O6 67.5(5) 3 . ?  
Mg2 O4 O6 151.9(12) 3 . ?  
Fe2 O4 O6 151.9(12) 3 . ?  
T2 O4 O5 35.0(6) . . ?  
Fe4 O4 O5 118.1(7) 3 . ?  
Mn4 O4 O5 118.1(7) 3 . ?  
Mg2 O4 O5 109.2(6) 3 . ?  
Fe2 O4 O5 109.2(6) 3 . ?  
O6 O4 O5 62.4(4) . . ?  
T2 O4 O5 110.1(12) . 3 ?  
Fe4 O4 O5 97.0(5) 3 3 ?  
Mn4 O4 O5 97.0(5) 3 3 ?  
Mg2 O4 O5 92.9(5) 3 3 ?  
Fe2 O4 O5 92.9(5) 3 3 ?  
O6 O4 O5 112.2(8) . 3 ?  
O5 O4 O5 134.0(8) . 3 ?  
T2 O4 O5 75.3(7) . 2\_656 ?  
Fe4 O4 O5 70.0(7) 3 2\_656 ?  
Mn4 O4 O5 70.0(7) 3 2\_656 ?  
Mg2 O4 O5 88.6(9) 3 2\_656 ?  
Fe2 O4 O5 88.6(9) 3 2\_656 ?  
O6 O4 O5 64.1(6) . 2\_656 ?  
O5 O4 O5 56.9(7) . 2\_656 ?  
O5 O4 O5 166.9(6) 3 2\_656 ?  
T2 O4 O6 106.0(11) . 3\_554 ?  
Fe4 O4 O6 136.5(5) 3 3\_554 ?  
Mn4 O4 O6 136.5(5) 3 3\_554 ?  
Mg2 O4 O6 71.0(5) 3 3\_554 ?  
Fe2 O4 O6 71.0(5) 3 3\_554 ?  
O6 O4 O6 136.2(9) . 3\_554 ?  
O5 O4 O6 105.1(6) . 3\_554 ?  
O5 O4 O6 44.2(4) 3 3\_554 ?  
O5 O4 O6 147.2(5) 2\_656 3\_554 ?  
T2 O4 Mn4 65.9(8) . . ?  
Fe4 O4 Mn4 139.2(8) 3 . ?

Mn4 O4 Mn4 139.2(8) 3 . ?  
Mg2 O4 Mn4 110.7(6) 3 . ?  
Fe2 O4 Mn4 110.7(6) 3 . ?  
O6 O4 Mn4 94.6(8) . . ?  
O5 O4 Mn4 79.5(6) . . ?  
O5 O4 Mn4 54.7(5) 3 . ?  
O5 O4 Mn4 136.3(5) 2\_656 . ?  
O6 O4 Mn4 42.1(4) 3\_554 . ?  
T2 O4 Mn4 90.6(4) . 3\_554 ?  
Fe4 O4 Mn4 129.1(9) 3 3\_554 ?  
Mn4 O4 Mn4 129.1(9) 3 3\_554 ?  
Mg2 O4 Mn4 53.0(3) 3 3\_554 ?  
Fe2 O4 Mn4 53.0(3) 3 3\_554 ?  
O6 O4 Mn4 116.5(5) . 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 57.0(3) . 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 122.2(4) 3 3\_554 ?  
O5 O4 Mn4 68.6(4) 2\_656 3\_554 ?  
O6 O4 Mn4 78.6(3) 3\_554 3\_554 ?  
Mn4 O4 Mn4 91.6(3) . 3\_554 ?  
T1 O5 T2 139.9(16) . . ?  
T1 O5 O6 36.4(5) . 1\_554 ?  
T2 O5 O6 146.9(9) . 1\_554 ?  
T1 O5 O2 105.8(12) . . ?  
T2 O5 O2 34.2(7) . . ?  
O6 O5 O2 122.0(9) 1\_554 . ?  
T1 O5 O7 35.8(6) . . ?  
T2 O5 O7 142.6(9) . . ?  
O6 O5 O7 60.3(5) 1\_554 . ?  
O2 O5 O7 120.2(11) . . ?  
T1 O5 O1 35.3(7) . . ?  
T2 O5 O1 104.6(12) . . ?  
O6 O5 O1 61.2(7) 1\_554 . ?  
O2 O5 O1 70.5(8) . . ?  
O7 O5 O1 61.2(8) . . ?  
T1 O5 O4 151.5(9) . . ?  
T2 O5 O4 34.5(6) . . ?  
O6 O5 O4 126.0(6) 1\_554 . ?  
O2 O5 O4 61.1(7) . . ?  
O7 O5 O4 172.6(9) . . ?  
O1 O5 O4 124.1(8) . . ?  
T1 O5 O6 140.7(9) . . ?  
T2 O5 O6 34.4(5) . . ?  
O6 O5 O6 177.0(9) 1\_554 . ?  
O2 O5 O6 57.5(6) . . ?  
O7 O5 O6 117.1(5) . . ?  
O1 O5 O6 116.6(9) . . ?  
O4 O5 O6 56.6(4) . . ?  
T1 O5 O5 130.1(12) . 2\_656 ?  
T2 O5 O5 88.6(7) . 2\_656 ?  
O6 O5 O5 112.6(11) 1\_554 2\_656 ?  
O2 O5 O5 122.2(7) . 2\_656 ?  
O7 O5 O5 101.7(9) . 2\_656 ?  
O1 O5 O5 162.9(6) . 2\_656 ?  
O4 O5 O5 72.8(6) . 2\_656 ?



O6 O5 O5 68.9(6) . 2\_656 ?  
 T1 O5 O6 85.0(7) . 2\_656 ?  
 T2 O5 O6 134.1(11) . 2\_656 ?  
 O6 O5 O6 60.1(8) 1\_554 2\_656 ?  
 O2 O5 O6 162.8(6) . 2\_656 ?  
 O7 O5 O6 76.4(9) . 2\_656 ?  
 O1 O5 O6 118.9(6) . 2\_656 ?  
 O4 O5 O6 103.2(7) . 2\_656 ?  
 O6 O5 O6 121.4(7) . 2\_656 ?  
 O5 O5 O6 52.6(7) 2\_656 2\_656 ?  
 T1 O5 Fe4 87.2(5) . 3\_554 ?  
 T2 O5 Fe4 112.0(5) . 3\_554 ?  
 O6 O5 Fe4 51.0(4) 1\_554 3\_554 ?  
 O2 O5 Fe4 118.7(5) . 3\_554 ?  
 O7 O5 Fe4 105.1(6) . 3\_554 ?  
 O1 O5 Fe4 102.8(5) . 3\_554 ?  
 O4 O5 Fe4 79.2(4) . 3\_554 ?  
 O6 O5 Fe4 132.0(6) . 3\_554 ?  
 O5 O5 Fe4 81.7(7) 2\_656 3\_554 ?  
 O6 O5 Fe4 47.3(3) 2\_656 3\_554 ?  
 T1 O5 Mn4 87.2(5) . 3\_554 ?  
 T2 O5 Mn4 112.0(5) . 3\_554 ?  
 O6 O5 Mn4 51.0(4) 1\_554 3\_554 ?  
 O2 O5 Mn4 118.7(5) . 3\_554 ?  
 O7 O5 Mn4 105.1(6) . 3\_554 ?  
 O1 O5 Mn4 102.8(5) . 3\_554 ?  
 O4 O5 Mn4 79.2(4) . 3\_554 ?  
 O6 O5 Mn4 132.0(6) . 3\_554 ?  
 O5 O5 Mn4 81.7(7) 2\_656 3\_554 ?  
 O6 O5 Mn4 47.3(3) 2\_656 3\_554 ?  
 Fe4 O5 Mn4 0.00(9) 3\_554 3\_554 ?  
 T1 O5 T2 114.3(9) . 2\_656 ?  
 T2 O5 T2 105.1(9) . 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 86.3(7) 1\_554 2\_656 ?  
 O2 O5 T2 137.6(6) . 2\_656 ?  
 O7 O5 T2 100.9(9) . 2\_656 ?  
 O1 O5 T2 147.2(6) . 2\_656 ?  
 O4 O5 T2 76.8(6) . 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 95.8(7) . 2\_656 ?  
 O5 O5 T2 29.7(5) 2\_656 2\_656 ?  
 O6 O5 T2 29.3(4) 2\_656 2\_656 ?  
 Fe4 O5 T2 52.8(3) 3\_554 2\_656 ?  
 Mn4 O5 T2 52.8(3) 3\_554 2\_656 ?  
 T1 O5 O4 79.9(7) . 3\_554 ?  
 T2 O5 O4 76.3(7) . 3\_554 ?  
 O6 O5 O4 70.8(5) 1\_554 3\_554 ?  
 O2 O5 O4 57.3(6) . 3\_554 ?  
 O7 O5 O4 115.3(9) . 3\_554 ?  
 O1 O5 O4 59.1(6) . 3\_554 ?  
 O4 O5 O4 71.8(5) . 3\_554 ?  
 O6 O5 O4 110.0(7) . 3\_554 ?  
 O5 O5 O4 136.3(5) 2\_656 3\_554 ?  
 O6 O5 O4 113.3(5) 2\_656 3\_554 ?  
 Fe4 O5 O4 67.3(4) 3\_554 3\_554 ?

Mn4 O5 O4 67.3(4) 3\_554 3\_554 ?  
T2 O5 O4 116.1(5) 2\_656 3\_554 ?  
T1 O5 O4 119.6(8) . 2\_656 ?  
T2 O5 O4 91.8(6) . 2\_656 ?  
O6 O5 O4 83.9(6) 1\_554 2\_656 ?  
O2 O5 O4 116.8(5) . 2\_656 ?  
O7 O5 O4 122.5(10) . 2\_656 ?  
O1 O5 O4 137.9(5) . 2\_656 ?  
O4 O5 O4 58.0(7) . 2\_656 ?  
O6 O5 O4 98.9(6) . 2\_656 ?  
O5 O5 O4 50.3(6) 2\_656 2\_656 ?  
O6 O5 O4 46.2(5) 2\_656 2\_656 ?  
Fe4 O5 O4 35.6(3) 3\_554 2\_656 ?  
Mn4 O5 O4 35.6(3) 3\_554 2\_656 ?  
T2 O5 O4 28.2(4) 2\_656 2\_656 ?  
O4 O5 O4 88.9(3) 3\_554 2\_656 ?  
T1 O5 Fe1 70.1(8) . . ?  
T2 O5 Fe1 70.7(8) . . ?  
O6 O5 Fe1 98.1(7) 1\_554 . ?  
O2 O5 Fe1 38.7(5) . . ?  
O7 O5 Fe1 82.2(9) . . ?  
O1 O5 Fe1 37.2(5) . . ?  
O4 O5 Fe1 99.7(7) . . ?  
O6 O5 Fe1 79.8(6) . . ?  
O5 O5 Fe1 146.7(6) 2\_656 . ?  
O6 O5 Fe1 155.1(5) 2\_656 . ?  
Fe4 O5 Fe1 129.8(5) 3\_554 . ?  
Mn4 O5 Fe1 129.8(5) 3\_554 . ?  
T2 O5 Fe1 175.5(4) 2\_656 . ?  
O4 O5 Fe1 64.9(6) 3\_554 . ?  
O4 O5 Fe1 151.0(6) 2\_656 . ?  
T1 O5 O3 75.8(7) . . ?  
T2 O5 O3 77.1(7) . . ?  
O6 O5 O3 112.0(6) 1\_554 . ?  
O2 O5 O3 59.0(6) . . ?  
O7 O5 O3 66.1(7) . . ?  
O1 O5 O3 57.8(6) . . ?  
O4 O5 O3 111.6(6) . . ?  
O6 O5 O3 65.1(6) . . ?  
O5 O5 O3 116.5(6) 2\_656 . ?  
O6 O5 O3 137.9(6) 2\_656 . ?  
Fe4 O5 O3 160.6(7) 3\_554 . ?  
Mn4 O5 O3 160.6(7) 3\_554 . ?  
T2 O5 O3 143.6(7) 2\_656 . ?  
O4 O5 O3 99.9(9) 3\_554 . ?  
O4 O5 O3 163.6(6) 2\_656 . ?  
Fe1 O5 O3 35.0(5) . . ?  
T1 O5 Mg2 133.8(5) . 3 ?  
T2 O5 Mg2 64.0(5) . 3 ?  
O6 O5 Mg2 99.6(5) 1\_554 3 ?  
O2 O5 Mg2 85.2(4) . 3 ?  
O7 O5 Mg2 153.0(9) . 3 ?  
O1 O5 Mg2 127.8(5) . 3 ?  
O4 O5 Mg2 29.7(4) . 3 ?

O6 O5 Mg2 83.3(4) . 3 ?  
O5 O5 Mg2 67.7(3) 2\_656 3 ?  
O6 O5 Mg2 77.7(4) 2\_656 3 ?  
Fe4 O5 Mg2 50.01(18) 3\_554 3 ?  
Mn4 O5 Mg2 50.01(18) 3\_554 3 ?  
T2 O5 Mg2 57.2(3) 2\_656 3 ?  
O4 O5 Mg2 68.8(3) 3\_554 3 ?  
O4 O5 Mg2 31.6(3) 2\_656 3 ?  
Fe1 O5 Mg2 120.8(5) . 3 ?  
O3 O5 Mg2 141.0(5) . 3 ?  
T1 O5 Fe2 133.8(5) . 3 ?  
T2 O5 Fe2 64.0(5) . 3 ?  
O6 O5 Fe2 99.6(5) 1\_554 3 ?  
O2 O5 Fe2 85.2(4) . 3 ?  
O7 O5 Fe2 153.0(9) . 3 ?  
O1 O5 Fe2 127.8(5) . 3 ?  
O4 O5 Fe2 29.7(4) . 3 ?  
O6 O5 Fe2 83.3(4) . 3 ?  
O5 O5 Fe2 67.7(3) 2\_656 3 ?  
O6 O5 Fe2 77.7(4) 2\_656 3 ?  
Fe4 O5 Fe2 50.01(18) 3\_554 3 ?  
Mn4 O5 Fe2 50.01(18) 3\_554 3 ?  
T2 O5 Fe2 57.2(3) 2\_656 3 ?  
O4 O5 Fe2 68.8(3) 3\_554 3 ?  
O4 O5 Fe2 31.6(3) 2\_656 3 ?  
Fe1 O5 Fe2 120.8(5) . 3 ?  
O3 O5 Fe2 141.0(5) . 3 ?  
Mg2 O5 Fe2 0.00(4) 3 3 ?  
T1 O6 T2 142.7(17) 1\_556 . ?  
T1 O6 O4 144.2(8) 1\_556 . ?  
T2 O6 O4 38.0(5) . . ?  
T1 O6 Fe4 113.6(6) 1\_556 3 ?  
T2 O6 Fe4 84.1(5) . 3 ?  
O4 O6 Fe4 46.1(4) . 3 ?  
T1 O6 Mn4 113.6(6) 1\_556 3 ?  
T2 O6 Mn4 84.1(5) . 3 ?  
O4 O6 Mn4 46.1(4) . 3 ?  
Fe4 O6 Mn4 0.00(8) 3 3 ?  
T1 O6 O2 106.2(12) 1\_556 . ?  
T2 O6 O2 36.6(7) . . ?  
O4 O6 O2 63.7(7) . . ?  
Fe4 O6 O2 104.1(5) 3 . ?  
Mn4 O6 O2 104.1(5) 3 . ?  
T1 O6 O5 36.0(5) 1\_556 1\_556 ?  
T2 O6 O5 144.3(9) . 1\_556 ?  
O4 O6 O5 116.3(5) . 1\_556 ?  
Fe4 O6 O5 77.7(5) 3 1\_556 ?  
Mn4 O6 O5 77.7(5) 3 1\_556 ?  
O2 O6 O5 120.0(9) . 1\_556 ?  
T1 O6 O7 36.0(6) 1\_556 1\_556 ?  
T2 O6 O7 147.6(9) . 1\_556 ?  
O4 O6 O7 173.8(11) . 1\_556 ?  
Fe4 O6 O7 128.0(7) 3 1\_556 ?  
Mn4 O6 O7 128.0(7) 3 1\_556 ?

O2 O6 O7 122.4(10) . 1\_556 ?  
O5 O6 O7 60.3(5) 1\_556 1\_556 ?  
T1 O6 O5 146.9(9) 1\_556 . ?  
T2 O6 O5 34.3(5) . . ?  
O4 O6 O5 61.0(4) . . ?  
Fe4 O6 O5 99.3(6) 3 . ?  
Mn4 O6 O5 99.3(6) 3 . ?  
O2 O6 O5 60.4(6) . . ?  
O5 O6 O5 177.0(9) 1\_556 . ?  
O7 O6 O5 122.3(5) 1\_556 . ?  
T1 O6 O1 35.7(7) 1\_556 1\_556 ?  
T2 O6 O1 107.1(12) . 1\_556 ?  
O4 O6 O1 122.6(9) . 1\_556 ?  
Fe4 O6 O1 124.1(6) 3 1\_556 ?  
Mn4 O6 O1 124.1(6) 3 1\_556 ?  
O2 O6 O1 70.5(8) . 1\_556 ?  
O5 O6 O1 61.4(7) 1\_556 1\_556 ?  
O7 O6 O1 61.3(8) 1\_556 1\_556 ?  
O5 O6 O1 120.7(9) . 1\_556 ?  
T1 O6 O6 93.6(8) 1\_556 2\_657 ?  
T2 O6 O6 122.5(12) . 2\_657 ?  
O4 O6 O6 92.9(8) . 2\_657 ?  
Fe4 O6 O6 55.3(4) 3 2\_657 ?  
Mn4 O6 O6 55.3(4) 3 2\_657 ?  
O2 O6 O6 156.5(7) . 2\_657 ?  
O5 O6 O6 70.1(6) 1\_556 2\_657 ?  
O7 O6 O6 81.1(8) 1\_556 2\_657 ?  
O5 O6 O6 108.4(10) . 2\_657 ?  
O1 O6 O6 128.6(7) 1\_556 2\_657 ?  
T1 O6 O5 137.0(11) 1\_556 2\_656 ?  
T2 O6 O5 79.4(7) . 2\_656 ?  
O4 O6 O5 69.7(7) . 2\_656 ?  
Fe4 O6 O5 67.5(6) 3 2\_656 ?  
Mn4 O6 O5 67.5(6) 3 2\_656 ?  
O2 O6 O5 115.3(6) . 2\_656 ?  
O5 O6 O5 119.9(8) 1\_556 2\_656 ?  
O7 O6 O5 106.9(8) 1\_556 2\_656 ?  
O5 O6 O5 58.6(7) . 2\_656 ?  
O1 O6 O5 166.6(6) 1\_556 2\_656 ?  
O6 O6 O5 49.8(7) 2\_657 2\_656 ?  
T1 O6 O3 78.4(7) 1\_556 . ?  
T2 O6 O3 80.0(7) . . ?  
O4 O6 O3 117.9(7) . . ?  
Fe4 O6 O3 163.9(6) 3 . ?  
Mn4 O6 O3 163.9(6) 3 . ?  
O2 O6 O3 61.0(7) . . ?  
O5 O6 O3 114.2(7) 1\_556 . ?  
O7 O6 O3 68.1(7) 1\_556 . ?  
O5 O6 O3 68.7(6) . . ?  
O1 O6 O3 59.2(7) 1\_556 . ?  
O6 O6 O3 137.6(6) 2\_657 . ?  
O5 O6 O3 111.8(6) 2\_656 . ?  
T1 O6 T1 109.8(9) 1\_556 2\_656 ?  
T2 O6 T1 107.0(9) . 2\_656 ?

O4 O6 T1 91.6(8) . 2\_656 ?  
 Fe4 O6 T1 70.5(6) 3 2\_656 ?  
 Mn4 O6 T1 70.5(6) 3 2\_656 ?  
 O2 O6 T1 142.6(6) . 2\_656 ?  
 O5 O6 T1 95.6(7) 1\_556 2\_656 ?  
 O7 O6 T1 83.7(8) 1\_556 2\_656 ?  
 O5 O6 T1 83.5(7) . 2\_656 ?  
 O1 O6 T1 144.1(6) 1\_556 2\_656 ?  
 O6 O6 T1 27.9(4) 2\_657 2\_656 ?  
 O5 O6 T1 27.6(3) 2\_656 2\_656 ?  
 O3 O6 T1 116.9(6) . 2\_656 ?  
 T1 O6 Mg2 71.3(9) 1\_556 1\_556 ?  
 T2 O6 Mg2 72.6(8) . 1\_556 ?  
 O4 O6 Mg2 84.9(7) . 1\_556 ?  
 Fe4 O6 Mg2 104.1(5) 3 1\_556 ?  
 Mn4 O6 Mg2 104.1(5) 3 1\_556 ?  
 O2 O6 Mg2 38.3(5) . 1\_556 ?  
 O5 O6 Mg2 82.3(7) 1\_556 1\_556 ?  
 O7 O6 Mg2 99.4(8) 1\_556 1\_556 ?  
 O5 O6 Mg2 98.4(7) . 1\_556 ?  
 O1 O6 Mg2 38.3(5) 1\_556 1\_556 ?  
 O6 O6 Mg2 148.0(5) 2\_657 1\_556 ?  
 O5 O6 Mg2 151.6(5) 2\_656 1\_556 ?  
 O3 O6 Mg2 68.5(7) . 1\_556 ?  
 T1 O6 Mg2 174.6(4) 2\_656 1\_556 ?  
 T1 O6 Fe2 71.3(9) 1\_556 1\_556 ?  
 T2 O6 Fe2 72.6(8) . 1\_556 ?  
 O4 O6 Fe2 84.9(7) . 1\_556 ?  
 Fe4 O6 Fe2 104.1(5) 3 1\_556 ?  
 Mn4 O6 Fe2 104.1(5) 3 1\_556 ?  
 O2 O6 Fe2 38.3(5) . 1\_556 ?  
 O5 O6 Fe2 82.3(7) 1\_556 1\_556 ?  
 O7 O6 Fe2 99.4(8) 1\_556 1\_556 ?  
 O5 O6 Fe2 98.4(7) . 1\_556 ?  
 O1 O6 Fe2 38.3(5) 1\_556 1\_556 ?  
 O6 O6 Fe2 148.0(5) 2\_657 1\_556 ?  
 O5 O6 Fe2 151.6(5) 2\_656 1\_556 ?  
 O3 O6 Fe2 68.5(7) . 1\_556 ?  
 T1 O6 Fe2 174.6(4) 2\_656 1\_556 ?  
 Mg2 O6 Fe2 0.0 1\_556 1\_556 ?  
 T1 O6 O4 75.0(7) 1\_556 3 ?  
 T2 O6 O4 80.4(7) . 3 ?  
 O4 O6 O4 70.5(6) . 3 ?  
 Fe4 O6 O4 72.2(4) 3 3 ?  
 Mn4 O6 O4 72.2(4) 3 3 ?  
 O2 O6 O4 59.4(6) . 3 ?  
 O5 O6 O4 64.9(6) 1\_556 3 ?  
 O7 O6 O4 110.8(7) 1\_556 3 ?  
 O5 O6 O4 114.2(6) . 3 ?  
 O1 O6 O4 57.0(5) 1\_556 3 ?  
 O6 O6 O4 116.0(5) 2\_657 3 ?  
 O5 O6 O4 136.3(6) 2\_656 3 ?  
 O3 O6 O4 102.2(9) . 3 ?  
 T1 O6 O4 140.9(6) 2\_656 3 ?

Mg2 O6 O4 33.8(4) 1\_556 3 ?  
Fe2 O6 O4 33.8(4) 1\_556 3 ?  
T1 O6 O7 95.0(7) 1\_556 5\_656 ?  
T2 O6 O7 116.2(9) . 5\_656 ?  
O4 O6 O7 114.3(9) . 5\_656 ?  
Fe4 O6 O7 96.3(9) 3 5\_656 ?  
Mn4 O6 O7 96.3(9) 3 5\_656 ?  
O2 O6 O7 141.2(6) . 5\_656 ?  
O5 O6 O7 96.3(7) 1\_556 5\_656 ?  
O7 O6 O7 62.3(9) 1\_556 5\_656 ?  
O5 O6 O7 84.1(6) . 5\_656 ?  
O1 O6 O7 123.1(5) 1\_556 5\_656 ?  
O6 O6 O7 45.6(6) 2\_657 5\_656 ?  
O5 O6 O7 44.7(5) 2\_656 5\_656 ?  
O3 O6 O7 93.2(6) . 5\_656 ?  
T1 O6 O7 26.3(4) 2\_656 5\_656 ?  
Mg2 O6 O7 158.7(6) 1\_556 5\_656 ?  
Fe2 O6 O7 158.7(6) 1\_556 5\_656 ?  
O4 O6 O7 159.4(7) 3 5\_656 ?  
T1 O6 Fe1 95.1(9) 1\_556 . ?  
T2 O6 Fe1 53.2(7) . . ?  
O4 O6 Fe1 88.8(6) . . ?  
Fe4 O6 Fe1 132.9(5) 3 . ?  
Mn4 O6 Fe1 132.9(5) 3 . ?  
O2 O6 Fe1 29.5(3) . . ?  
O5 O6 Fe1 124.2(8) 1\_556 . ?  
O7 O6 Fe1 97.4(7) 1\_556 . ?  
O5 O6 Fe1 57.7(5) . . ?  
O1 O6 Fe1 63.1(5) 1\_556 . ?  
O6 O6 Fe1 162.6(7) 2\_657 . ?  
O5 O6 Fe1 115.4(4) 2\_656 . ?  
O3 O6 Fe1 31.7(4) . . ?  
T1 O6 Fe1 134.8(3) 2\_656 . ?  
Mg2 O6 Fe1 49.4(3) 1\_556 . ?  
Fe2 O6 Fe1 49.4(3) 1\_556 . ?  
O4 O6 Fe1 80.9(6) 3 . ?  
O7 O6 Fe1 118.5(4) 5\_656 . ?  
T1 O7 T1 142(2) . 6 ?  
T1 O7 O5 35.3(5) . . ?  
T1 O7 O5 147.7(13) 6 . ?  
T1 O7 O5 147.7(13) . 6 ?  
T1 O7 O5 35.3(5) 6 6 ?  
O5 O7 O5 123.1(8) . 6 ?  
T1 O7 O6 143.9(12) . 6\_554 ?  
T1 O7 O6 35.8(6) 6 6\_554 ?  
O5 O7 O6 176.4(11) . 6\_554 ?  
O5 O7 O6 59.4(4) 6 6\_554 ?  
T1 O7 O6 35.8(6) . 1\_554 ?  
T1 O7 O6 143.9(12) 6 1\_554 ?  
O5 O7 O6 59.4(4) . 1\_554 ?  
O5 O7 O6 176.4(11) 6 1\_554 ?  
O6 O7 O6 118.0(7) 6\_554 1\_554 ?  
T1 O7 O1 106.2(17) . 6 ?  
T1 O7 O1 35.4(9) 6 6 ?

O5 O7 O1 122.3(12) . 6 ?  
O5 O7 O1 61.0(7) 6 6 ?  
O6 O7 O1 60.8(7) 6\_554 6 ?  
O6 O7 O1 120.4(11) 1\_554 6 ?  
T1 O7 O1 35.4(9) . . ?  
T1 O7 O1 106.2(17) 6 . ?  
O5 O7 O1 61.0(7) . . ?  
O5 O7 O1 122.3(12) 6 . ?  
O6 O7 O1 120.4(11) 6\_554 . ?  
O6 O7 O1 60.8(7) 1\_554 . ?  
O1 O7 O1 70.8(12) 6 . ?  
T1 O7 Fe3 71.3(12) . . ?  
T1 O7 Fe3 71.3(12) 6 . ?  
O5 O7 Fe3 98.7(9) . . ?  
O5 O7 Fe3 98.7(9) 6 . ?  
O6 O7 Fe3 83.1(7) 6\_554 . ?  
O6 O7 Fe3 83.1(7) 1\_554 . ?  
O1 O7 Fe3 38.0(6) 6 . ?  
O1 O7 Fe3 38.0(6) . . ?  
T1 O7 O7 105.9(10) . 5\_655 ?  
T1 O7 O7 105.9(10) 6 5\_655 ?  
O5 O7 O7 102.9(10) . 5\_655 ?  
O5 O7 O7 102.9(10) 6 5\_655 ?  
O6 O7 O7 73.8(6) 6\_554 5\_655 ?  
O6 O7 O7 73.8(6) 1\_554 5\_655 ?  
O1 O7 O7 134.0(6) 6 5\_655 ?  
O1 O7 O7 134.0(6) . 5\_655 ?  
Fe3 O7 O7 133.7(8) . 5\_655 ?  
T1 O7 O3 78.5(10) . . ?  
T1 O7 O3 78.5(10) 6 . ?  
O5 O7 O3 69.5(6) . . ?  
O5 O7 O3 69.5(6) 6 . ?  
O6 O7 O3 114.0(7) 6\_554 . ?  
O6 O7 O3 114.0(7) 1\_554 . ?  
O1 O7 O3 59.1(8) 6 . ?  
O1 O7 O3 59.1(8) . . ?  
Fe3 O7 O3 65.7(8) . . ?  
O7 O7 O3 160.7(14) 5\_655 . ?  
T1 O7 O3 77.5(10) . 1\_554 ?  
T1 O7 O3 77.5(10) 6 1\_554 ?  
O5 O7 O3 112.7(8) . 1\_554 ?  
O5 O7 O3 112.7(8) 6 1\_554 ?  
O6 O7 O3 67.0(6) 6\_554 1\_554 ?  
O6 O7 O3 67.0(6) 1\_554 1\_554 ?  
O1 O7 O3 58.8(7) 6 1\_554 ?  
O1 O7 O3 58.8(7) . 1\_554 ?  
Fe3 O7 O3 35.7(6) . 1\_554 ?  
O7 O7 O3 97.9(8) 5\_655 1\_554 ?  
O3 O7 O3 101.4(13) . 1\_554 ?  
T1 O7 O6 70.7(9) . 2\_656 ?  
T1 O7 O6 147.1(16) 6 2\_656 ?  
O5 O7 O6 58.9(6) . 2\_656 ?  
O5 O7 O6 125.0(12) 6 2\_656 ?  
O6 O7 O6 117.7(9) 6\_554 2\_656 ?

O6 O7 O6 53.4(7) 1\_554 2\_656 ?  
 O1 O7 O6 172.9(7) 6 2\_656 ?  
 O1 O7 O6 105.9(5) . 2\_656 ?  
 Fe3 O7 O6 136.3(5) . 2\_656 ?  
 O7 O7 O6 44.0(6) 5\_655 2\_656 ?  
 O3 O7 O6 125.1(5) . 2\_656 ?  
 O3 O7 O6 114.1(6) 1\_554 2\_656 ?  
 T1 O7 O6 147.1(16) . 5\_656 ?  
 T1 O7 O6 70.7(9) 6 5\_656 ?  
 O5 O7 O6 125.0(12) . 5\_656 ?  
 O5 O7 O6 58.9(6) 6 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 53.4(7) 6\_554 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 117.7(9) 1\_554 5\_656 ?  
 O1 O7 O6 105.9(5) 6 5\_656 ?  
 O1 O7 O6 172.9(7) . 5\_656 ?  
 Fe3 O7 O6 136.3(5) . 5\_656 ?  
 O7 O7 O6 44.0(6) 5\_655 5\_656 ?  
 O3 O7 O6 125.1(5) . 5\_656 ?  
 O3 O7 O6 114.1(6) 1\_554 5\_656 ?  
 O6 O7 O6 76.6(10) 2\_656 5\_656 ?  
 T1 O7 Mg1 96.7(13) . 5\_556 ?  
 T1 O7 Mg1 50.8(9) 6 5\_556 ?  
 O5 O7 Mg1 99.1(8) . 5\_556 ?  
 O5 O7 Mg1 57.4(7) 6 5\_556 ?  
 O6 O7 Mg1 84.4(6) 6\_554 5\_556 ?  
 O6 O7 Mg1 125.5(10) 1\_554 5\_556 ?  
 O1 O7 Mg1 28.2(4) 6 5\_556 ?  
 O1 O7 Mg1 65.0(8) . 5\_556 ?  
 Fe3 O7 Mg1 48.8(4) . 5\_556 ?  
 O7 O7 Mg1 156.56(14) 5\_655 5\_556 ?  
 O3 O7 Mg1 31.3(4) . 5\_556 ?  
 O3 O7 Mg1 80.8(8) 1\_554 5\_556 ?  
 O6 O7 Mg1 156.4(4) 2\_656 5\_556 ?  
 O6 O7 Mg1 115.2(3) 5\_656 5\_556 ?  
 T1 O7 Fe1 96.7(13) . 5\_556 ?  
 T1 O7 Fe1 50.8(9) 6 5\_556 ?  
 O5 O7 Fe1 99.1(8) . 5\_556 ?  
 O5 O7 Fe1 57.4(7) 6 5\_556 ?  
 O6 O7 Fe1 84.4(6) 6\_554 5\_556 ?  
 O6 O7 Fe1 125.5(10) 1\_554 5\_556 ?  
 O1 O7 Fe1 28.2(4) 6 5\_556 ?  
 O1 O7 Fe1 65.0(8) . 5\_556 ?  
 Fe3 O7 Fe1 48.8(4) . 5\_556 ?  
 O7 O7 Fe1 156.56(14) 5\_655 5\_556 ?  
 O3 O7 Fe1 31.3(4) . 5\_556 ?  
 O3 O7 Fe1 80.8(8) 1\_554 5\_556 ?  
 O6 O7 Fe1 156.4(4) 2\_656 5\_556 ?  
 O6 O7 Fe1 115.2(3) 5\_656 5\_556 ?  
 Mg1 O7 Fe1 0.00(9) 5\_556 5\_556 ?  
 T1 O7 Fe1 50.8(9) . . ?  
 T1 O7 Fe1 96.7(13) 6 . ?  
 O5 O7 Fe1 57.4(7) . . ?  
 O5 O7 Fe1 99.1(8) 6 . ?  
 O6 O7 Fe1 125.5(10) 6\_554 . ?



O6 O7 Fe1 84.4(6) 1\_554 . ?  
 O1 O7 Fe1 65.0(8) 6 . ?  
 O1 O7 Fe1 28.2(4) . . ?  
 Fe3 O7 Fe1 48.8(4) . . ?  
 O7 O7 Fe1 156.56(14) 5\_655 . ?  
 O3 O7 Fe1 31.3(4) . . ?  
 O3 O7 Fe1 80.8(8) 1\_554 . ?  
 O6 O7 Fe1 115.2(3) 2\_656 . ?  
 O6 O7 Fe1 156.4(4) 5\_656 . ?  
 Mg1 O7 Fe1 46.7(4) 5\_556 . ?  
 Fe1 O7 Fe1 46.7(4) 5\_556 . ?  
 T1 O7 T2 42.1(4) . . ?  
 T1 O7 T2 133.4(10) 6 . ?  
 O5 O7 T2 14.3(4) . . ?  
 O5 O7 T2 111.2(5) 6 . ?  
 O6 O7 T2 169.2(7) 6\_554 . ?  
 O6 O7 T2 71.6(3) 1\_554 . ?  
 O1 O7 T2 110.8(9) 6 . ?  
 O1 O7 T2 58.5(4) . . ?  
 Fe3 O7 T2 93.7(6) . . ?  
 O7 O7 T2 115.2(8) 5\_655 . ?  
 O3 O7 T2 55.6(3) . . ?  
 O3 O7 T2 115.6(7) 1\_554 . ?  
 O6 O7 T2 71.5(3) 2\_656 . ?  
 O6 O7 T2 128.3(9) 5\_656 . ?  
 Mg1 O7 T2 85.8(5) 5\_556 . ?  
 Fe1 O7 T2 85.8(5) 5\_556 . ?  
 Fe1 O7 T2 47.7(3) . . ?

\_diffn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.269  
 \_diffn\_reflns\_theta\_full 28.57  
 \_diffn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.269  
 \_refine\_diff\_density\_max 1.304  
 \_refine\_diff\_density\_min -0.976  
 \_refine\_diff\_density\_rms 0.259