

data_hp154

_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 9.320(4)
_cell_length_b 18.266(7)
_cell_length_c 5.322(2)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume               906.0(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 3.563
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000        948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.307
_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        2586
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0842
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0453
_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     3.99
_diffrn_reflns_theta_max     28.27
_reflns_number_total         278
_reflns_number_gt            186
_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)+(0.1037P)^2+19.8671P] 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(17)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/\sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        278
_refine_ls_number_parameters     33
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.0943
_refine_ls_R_factor_gt           0.0643
_refine_ls_wR_factor_ref         0.2104
_refine_ls_wR_factor_gt          0.1784
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.144
_refine_ls_restrained_S_all      1.144
_refine_ls_shift/su_max          1.148
_refine_ls_shift/su_mean         0.436

```

```
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 0.0873(2) 0.5000 0.0119(9) Uiso 0.83 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.0873(2) 0.5000 0.0119(9) Uiso 0.17 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1781(2) 0.0000 0.0119(9) Uiso 0.73 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1781(2) 0.0000 0.0119(9) Uiso 0.27 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0119(9) Uiso 0.80 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0119(9) Uiso 0.20 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.2604(2) 0.5000 0.0119(9) Uiso 0.72 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.2604(2) 0.5000 0.0119(9) Uiso 0.28 2 d SP . .
T1 Si 0.2891(12) 0.0835(2) 0.1599(11) 0.0081(10) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.2976(12) 0.1676(3) 0.6545(10) 0.0081(10) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.104(3) 0.0867(6) 0.166(3) 0.0119(15) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.123(3) 0.1720(7) 0.669(3) 0.0119(15) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.108(4) 0.0000 0.663(3) 0.0119(15) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.385(3) 0.2464(7) 0.688(2) 0.0119(15) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.354(3) 0.1261(7) 0.402(3) 0.0119(15) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.351(3) 0.1231(7) 0.904(3) 0.0119(15) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.339(4) 0.0000 0.165(3) 0.0119(15) 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 2.03(2) 2_556 ?
Fe1 O1 2.03(2) . ?
Fe1 O3 2.08(2) 5_556 ?
Fe1 O3 2.08(2) . ?
Fe1 O2 2.127(19) . ?
Fe1 O2 2.127(19) 2_556 ?
Fe1 Mg3 3.102(2) 1_556 ?
Fe1 Mg2 3.136(3) 1_556 ?
Fe1 Mn4 3.163(5) . ?
Fe1 Mg1 3.188(8) 5_556 ?
Fe2 O4 2.014(18) 3_554 ?
Fe2 O4 2.014(18) 4_455 ?
Fe2 O2 2.10(2) 1_554 ?
Fe2 O2 2.10(2) 2_556 ?
Fe2 O1 2.124(18) 2 ?

```

Fe2 O1 2.124(18) . ?
Fe2 Mn4 3.056(3) . ?
Fe2 Mn4 3.056(3) 1_554 ?
Fe2 Mg1 3.136(3) 1_554 ?
Fe2 O6 3.46(3) 2_556 ?
Fe3 O1 2.056(19) 5 ?
Fe3 O1 2.056(19) . ?
Fe3 O1 2.056(19) 6 ?
Fe3 O1 2.056(19) 2 ?
Fe3 O3 2.06(3) 5_556 ?
Fe3 O3 2.06(3) 1_554 ?
Fe3 Mg1 3.102(2) 5 ?
Fe3 Mg1 3.102(2) 1_554 ?
Fe3 Mg1 3.102(2) 5_556 ?
Fe3 Mg2 3.254(4) 5 ?
Mn4 O4 1.983(18) 4_456 ?
Mn4 O4 1.983(18) 3_554 ?
Mn4 O2 2.18(2) 2_556 ?
Mn4 O2 2.18(2) . ?
Mn4 O6 2.593(17) 3_554 ?
Mn4 O6 2.593(17) 4_456 ?
Mn4 T2 2.944(9) 4_456 ?
Mn4 T2 2.944(9) 3_554 ?
Mn4 Mg2 3.056(3) 1_556 ?
Mn4 Fe2 3.056(3) 1_556 ?
T1 O7 1.595(13) . ?
T1 O5 1.621(16) . ?
T1 O6 1.648(17) 1_554 ?
T1 O1 1.72(3) . ?
T1 O6 3.45(3) 2_656 ?
T1 Mn4 3.566(8) 3_554 ?
T1 O6 4.053(13) 6_554 ?
T1 O6 4.064(15) . ?
T1 O5 4.083(13) 6 ?
T1 O5 4.14(2) 2_656 ?
T2 O2 1.63(3) . ?
T2 O6 1.632(16) . ?
T2 O5 1.631(18) . ?
T2 O4 1.66(2) . ?
T2 Mn4 2.944(9) 3 ?
T2 O5 3.35(3) 2_656 ?
T2 O7 4.040(13) . ?
T2 O5 4.083(15) 1_556 ?
T2 O6 4.108(15) 1_554 ?
T2 O7 4.110(13) 1_556 ?
O1 O7 2.70(4) . ?
O1 O5 2.74(4) . ?
O1 O6 2.77(4) 1_554 ?
O1 O6 4.31(4) 2_556 ?
O2 Mg2 2.10(2) 1_556 ?
O2 Fe2 2.10(2) 1_556 ?
O2 O6 2.62(3) . ?
O2 O5 2.71(3) . ?
O2 O5 3.897(18) 3 ?

O2 O6 4.009(17) 3_554 ?
O2 Mn4 4.12(3) 3 ?
O3 Mg1 2.08(2) 5_556 ?
O3 Fe1 2.08(2) 5_556 ?
O3 Mg3 2.06(3) 1_556 ?
O3 Fe3 2.06(3) 1_556 ?
O3 O7 3.42(4) . ?
O3 O6 3.44(3) . ?
O3 O6 3.44(3) 6 ?
O3 O7 3.43(4) 1_556 ?
O3 O5 3.53(3) . ?
O3 O5 3.53(3) 6 ?
O4 Fe4 1.983(18) 3 ?
O4 Mn4 1.983(18) 3 ?
O4 Mg2 2.014(18) 3 ?
O4 Fe2 2.014(18) 3 ?
O4 O6 2.547(18) . ?
O4 O5 2.688(18) . ?
O4 O5 3.31(3) 2_656 ?
O4 O5 3.42(3) 3 ?
O4 O6 3.58(3) 3_554 ?
O4 Mn4 3.816(14) 3_554 ?
O5 O7 2.630(16) . ?
O5 O6 2.65(2) 1_554 ?
O5 O6 2.67(2) . ?
O5 O5 2.91(5) 2_656 ?
O5 O6 3.20(3) 2_656 ?
O5 Fe4 3.275(17) 3_554 ?
O5 Mn4 3.275(17) 3_554 ?
O5 O4 3.31(3) 2_656 ?
O5 T2 3.35(3) 2_656 ?
O5 O4 3.42(3) 3_554 ?
O5 Mg2 3.862(15) 3 ?
O5 Fe2 3.862(15) 3 ?
O6 T1 1.648(17) 1_556 ?
O6 Fe4 2.593(17) 3 ?
O6 Mn4 2.593(17) 3 ?
O6 O5 2.65(2) 1_556 ?
O6 O7 2.645(16) 1_556 ?
O6 O1 2.77(4) 1_556 ?
O6 O6 2.96(5) 2_657 ?
O6 O5 3.20(3) 2_656 ?
O6 Mg2 3.46(3) 1_556 ?
O6 Fe2 3.46(3) 1_556 ?
O6 T1 3.45(3) 2_656 ?
O6 O4 3.58(3) 3 ?
O6 O7 3.68(4) 5_656 ?
O7 T1 1.595(13) 6 ?
O7 O5 2.630(16) 6 ?
O7 O6 2.645(16) 1_554 ?
O7 O6 2.645(16) 6_554 ?
O7 O1 2.70(4) 6 ?
O7 O3 3.43(4) 1_554 ?
O7 O7 3.47(7) 5_655 ?

O7 O6 3.68(4) 2_556 ?
O7 O6 3.68(4) 5_556 ?
O7 Mg1 3.97(3) 5_556 ?
O7 Fe1 3.97(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 179.4(7) 2_556 . ?
O1 Fe1 O3 97.5(11) 2_556 5_556 ?
O1 Fe1 O3 82.0(11) . 5_556 ?
O1 Fe1 O3 82.0(11) 2_556 . ?
O1 Fe1 O3 97.5(11) . . ?
O3 Fe1 O3 79.7(14) 5_556 . ?
O1 Fe1 O2 83.7(9) 2_556 . ?
O1 Fe1 O2 96.7(10) . . ?
O3 Fe1 O2 176.1(9) 5_556 . ?
O3 Fe1 O2 96.8(10) . . ?
O1 Fe1 O2 96.7(10) 2_556 2_556 ?
O1 Fe1 O2 83.7(9) . 2_556 ?
O3 Fe1 O2 96.8(10) 5_556 2_556 ?
O3 Fe1 O2 176.1(9) . 2_556 ?
O2 Fe1 O2 86.7(11) . 2_556 ?
O1 Fe1 Mg3 40.9(6) 2_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mg3 138.6(6) . 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 88.0(5) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 41.1(8) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 90.6(4) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 137.5(6) 2_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mg2 42.1(6) 2_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mg2 138.4(6) . 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 139.6(8) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 92.9(4) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 41.9(6) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 88.6(4) 2_556 1_556 ?
Mg3 Fe1 Mg2 62.87(7) 1_556 1_556 ?
O1 Fe1 Mn4 90.3(3) 2_556 . ?
O1 Fe1 Mn4 90.3(3) . . ?
O3 Fe1 Mn4 140.1(7) 5_556 . ?
O3 Fe1 Mn4 140.1(7) . . ?
O2 Fe1 Mn4 43.3(6) . . ?
O2 Fe1 Mn4 43.3(6) 2_556 . ?
Mg3 Fe1 Mn4 120.92(6) 1_556 . ?
Mg2 Fe1 Mn4 58.05(9) 1_556 . ?
O1 Fe1 Mg1 89.7(3) 2_556 5_556 ?
O1 Fe1 Mg1 89.7(3) . 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 39.9(7) 5_556 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 39.9(7) . 5_556 ?
O2 Fe1 Mg1 136.7(6) . 5_556 ?

O2 Fe1 Mg1 136.7(6) 2_556 5_556 ?
 Mg3 Fe1 Mg1 59.08(6) 1_556 5_556 ?
 Mg2 Fe1 Mg1 121.95(9) 1_556 5_556 ?
 Mn4 Fe1 Mg1 180.0 . 5_556 ?
 O4 Fe2 O4 93.5(11) 3_554 4_455 ?
 O4 Fe2 O2 99.2(9) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 O2 85.0(8) 4_455 1_554 ?
 O4 Fe2 O2 85.0(8) 3_554 2_556 ?
 O4 Fe2 O2 99.2(9) 4_455 2_556 ?
 O2 Fe2 O2 173.9(7) 1_554 2_556 ?
 O4 Fe2 O1 171.4(7) 3_554 2 ?
 O4 Fe2 O1 95.1(9) 4_455 2 ?
 O2 Fe2 O1 82.0(10) 1_554 2 ?
 O2 Fe2 O1 93.2(9) 2_556 2 ?
 O4 Fe2 O1 95.1(9) 3_554 . ?
 O4 Fe2 O1 171.4(7) 4_455 . ?
 O2 Fe2 O1 93.2(9) 1_554 . ?
 O2 Fe2 O1 82.0(10) 2_556 . ?
 O1 Fe2 O1 76.3(12) 2 . ?
 O4 Fe2 Mn4 39.7(6) 3_554 . ?
 O4 Fe2 Mn4 95.4(4) 4_455 . ?
 O2 Fe2 Mn4 139.0(6) 1_554 . ?
 O2 Fe2 Mn4 45.4(5) 2_556 . ?
 O1 Fe2 Mn4 138.4(6) 2 . ?
 O1 Fe2 Mn4 91.5(4) . . ?
 O4 Fe2 Mn4 95.4(4) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 Mn4 39.7(6) 4_455 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 45.4(5) 1_554 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 139.0(6) 2_556 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 91.5(4) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 138.4(6) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mn4 121.07(19) . 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 141.6(6) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 86.7(4) 4_455 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 42.4(6) 1_554 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 132.9(5) 2_556 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 39.8(6) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 86.3(4) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 177.51(16) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 61.42(8) 1_554 1_554 ?
 O4 Fe2 O6 129.0(7) 3_554 2_556 ?
 O4 Fe2 O6 76.6(7) 4_455 2_556 ?
 O2 Fe2 O6 128.6(7) 1_554 2_556 ?
 O2 Fe2 O6 49.1(7) 2_556 2_556 ?
 O1 Fe2 O6 53.2(8) 2 2_556 ?
 O1 Fe2 O6 98.2(9) . 2_556 ?
 Mn4 Fe2 O6 90.8(2) . 2_556 ?
 Mn4 Fe2 O6 105.8(2) 1_554 2_556 ?
 Mg1 Fe2 O6 88.4(2) 1_554 2_556 ?
 O1 Fe3 O1 180.0(9) 5 . ?
 O1 Fe3 O1 79.3(12) 5 6 ?
 O1 Fe3 O1 100.7(12) . 6 ?
 O1 Fe3 O1 100.7(12) 5 2 ?
 O1 Fe3 O1 79.3(12) . 2 ?

O1 Fe3 O1 180.0(17) 6 2 ?
 O1 Fe3 O3 98.1(11) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 81.9(11) . 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 81.9(11) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 98.1(11) 2 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 81.9(11) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 98.1(11) . 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 98.1(11) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 81.9(11) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 O3 180(2) 5_556 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 40.2(6) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 139.8(6) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.4(4) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.6(4) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 138.4(7) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 41.6(7) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.6(4) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.4(4) . 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 139.8(6) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 40.2(6) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 138.4(7) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 41.6(7) 1_554 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 61.85(12) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.4(4) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.6(4) . 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 40.2(6) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 139.8(6) 2 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 41.6(7) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 138.4(7) 1_554 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 118.15(12) 5 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(12) 1_554 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.7(6) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.3(6) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.7(6) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.3(6) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.08(6) 5 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 120.92(6) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.08(6) 5_556 5 ?
 O4 Mn4 O4 172.8(8) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O2 90.9(8) 4_456 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 83.8(8) 3_554 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 83.8(8) 4_456 . ?
 O4 Mn4 O2 90.9(8) 3_554 . ?
 O2 Mn4 O2 84.2(11) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O6 120.5(6) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 66.1(6) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 144.1(5) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 114.1(8) . 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 66.1(6) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 O6 120.5(6) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 114.1(8) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 144.1(5) . 4_456 ?

O6 Mn4 O6 69.7(10) 3_554 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 32.6(5) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 154.0(5) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 104.6(7) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 114.2(5) . 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 95.8(4) 3_554 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 33.5(4) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 154.0(5) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 32.6(5) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 114.2(5) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 104.6(7) . 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 33.5(4) 3_554 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 95.8(4) 4_456 3_554 ?
 T2 Mn4 T2 127.0(3) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 Fe2 134.4(6) 4_456 . ?
 O4 Mn4 Fe2 40.5(6) 3_554 . ?
 O2 Mn4 Fe2 43.5(5) 2_556 . ?
 O2 Mn4 Fe2 89.7(4) . . ?
 O6 Mn4 Fe2 103.4(3) 3_554 . ?
 O6 Mn4 Fe2 125.2(4) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 139.76(18) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 71.08(13) 3_554 . ?
 O4 Mn4 Mg2 40.5(6) 4_456 1_556 ?
 O4 Mn4 Mg2 134.4(6) 3_554 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 89.7(4) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 43.5(5) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 125.2(4) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 103.4(3) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 71.08(13) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 139.76(18) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Mg2 121.07(19) . 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 40.5(6) 4_456 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 134.4(6) 3_554 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 89.7(4) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 43.5(5) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 125.2(4) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 103.4(3) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 71.08(13) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 139.76(18) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Fe2 121.07(19) . 1_556 ?
 Mg2 Mn4 Fe2 0.00(14) 1_556 1_556 ?
 O7 T1 O5 109.7(12) . . ?
 O7 T1 O6 109.3(12) . 1_554 ?
 O5 T1 O6 108.4(9) . 1_554 ?
 O7 T1 O1 109.0(14) . . ?
 O5 T1 O1 110.0(11) . . ?
 O6 T1 O1 110.4(11) 1_554 . ?
 O7 T1 O6 85.2(14) . 2_656 ?
 O5 T1 O6 67.3(9) . 2_656 ?
 O6 T1 O6 59.2(10) 1_554 2_656 ?
 O1 T1 O6 165.2(5) . 2_656 ?
 O7 T1 Mn4 127.3(13) . 3_554 ?
 O5 T1 Mn4 66.4(6) . 3_554 ?
 O6 T1 Mn4 42.2(5) 1_554 3_554 ?

O1 T1 Mn4 121.8(5) . 3_554 ?
 O6 T1 Mn4 43.3(2) 2_656 3_554 ?
 O7 T1 O6 22.1(8) . 6_554 ?
 O5 T1 O6 131.4(8) . 6_554 ?
 O6 T1 O6 94.6(7) 1_554 6_554 ?
 O1 T1 O6 100.3(6) . 6_554 ?
 O6 T1 O6 91.4(4) 2_656 6_554 ?
 Mn4 T1 O6 125.9(4) 3_554 6_554 ?
 O7 T1 O6 96.5(7) . . ?
 O5 T1 O6 24.3(7) . . ?
 O6 T1 O6 132.7(8) 1_554 . ?
 O1 T1 O6 96.8(7) . . ?
 O6 T1 O6 85.4(5) 2_656 . ?
 Mn4 T1 O6 90.7(3) 3_554 . ?
 O6 T1 O6 118.3(3) 6_554 . ?
 O7 T1 O5 19.2(8) . 6 ?
 O5 T1 O5 98.3(7) . 6 ?
 O6 T1 O5 128.4(7) 1_554 6 ?
 O1 T1 O5 100.0(6) . 6 ?
 O6 T1 O5 94.8(5) 2_656 6 ?
 Mn4 T1 O5 138.0(5) 3_554 6 ?
 O6 T1 O5 38.1(3) 6_554 6 ?
 O6 T1 O5 80.7(3) . 6 ?
 O7 T1 O5 86.3(12) . 2_656 ?
 O5 T1 O5 33.1(11) . 2_656 ?
 O6 T1 O5 96.0(9) 1_554 2_656 ?
 O1 T1 O5 141.9(7) . 2_656 ?
 O6 T1 O5 40.0(4) 2_656 2_656 ?
 Mn4 T1 O5 62.7(2) 3_554 2_656 ?
 O6 T1 O5 104.5(4) 6_554 2_656 ?
 O6 T1 O5 45.9(5) . 2_656 ?
 O5 T1 O5 83.1(4) 6 2_656 ?
 O2 T2 O6 106.7(11) . . ?
 O2 T2 O5 112.6(11) . . ?
 O6 T2 O5 109.8(10) . . ?
 O2 T2 O4 116.1(10) . . ?
 O6 T2 O4 101.3(9) . . ?
 O5 T2 O4 109.4(12) . . ?
 O2 T2 Mn4 126.0(6) . 3 ?
 O6 T2 Mn4 61.4(7) . 3 ?
 O5 T2 Mn4 121.1(11) . 3 ?
 O4 T2 Mn4 40.0(6) . 3 ?
 O2 T2 Mn4 33.1(5) . . ?
 O6 T2 Mn4 134.6(9) . . ?
 O5 T2 Mn4 107.5(8) . . ?
 O4 T2 Mn4 89.6(9) . . ?
 Mn4 T2 Mn4 117.23(17) 3 . ?
 O2 T2 O5 169.4(6) . 2_656 ?
 O6 T2 O5 70.4(10) . 2_656 ?
 O5 T2 O5 60.5(11) . 2_656 ?
 O4 T2 O5 74.4(10) . 2_656 ?
 Mn4 T2 O5 62.3(3) 3 2_656 ?
 Mn4 T2 O5 153.5(3) . 2_656 ?
 O2 T2 O7 99.4(8) . . ?

O6 T2 O7 96.7(6) . . ?
O5 T2 O7 23.7(7) . . ?
O4 T2 O7 132.7(10) . . ?
Mn4 T2 O7 132.8(6) 3 . ?
Mn4 T2 O7 107.7(5) . . ?
O5 T2 O7 71.2(6) 2_656 . ?
O2 T2 O5 95.2(7) . 1_556 ?
O6 T2 O5 22.7(6) . 1_556 ?
O5 T2 O5 132.4(9) . 1_556 ?
O4 T2 O5 89.7(5) . 1_556 ?
Mn4 T2 O5 52.6(3) 3 1_556 ?
Mn4 T2 O5 116.1(4) . 1_556 ?
O5 T2 O5 85.4(5) 2_656 1_556 ?
O7 T2 O5 118.4(3) . 1_556 ?
O2 T2 O6 100.2(7) . 1_554 ?
O6 T2 O6 130.9(8) . 1_554 ?
O5 T2 O6 21.1(6) . 1_554 ?
O4 T2 O6 102.5(6) . 1_554 ?
Mn4 T2 O6 128.2(4) 3 1_554 ?
Mn4 T2 O6 87.8(4) . 1_554 ?
O5 T2 O6 75.6(5) 2_656 1_554 ?
O7 T2 O6 37.9(3) . 1_554 ?
O5 T2 O6 153.5(4) 1_556 1_554 ?
O2 T2 O7 95.6(8) . 1_556 ?
O6 T2 O7 20.6(6) . 1_556 ?
O5 T2 O7 99.6(6) . 1_556 ?
O4 T2 O7 121.9(8) . 1_556 ?
Mn4 T2 O7 81.9(4) 3 1_556 ?
Mn4 T2 O7 128.1(6) . 1_556 ?
O5 T2 O7 78.4(6) 2_656 1_556 ?
O7 T2 O7 81.52(13) . 1_556 ?
O5 T2 O7 37.4(3) 1_556 1_556 ?
O6 T2 O7 118.9(3) 1_554 1_556 ?
T1 O1 Fe1 119.7(11) . . ?
T1 O1 Fe3 116.0(10) . . ?
Fe1 O1 Fe3 98.8(11) . . ?
T1 O1 Fe2 118.5(11) . . ?
Fe1 O1 Fe2 98.1(10) . . ?
Fe3 O1 Fe2 102.2(11) . . ?
T1 O1 O7 33.9(6) . . ?
Fe1 O1 O7 113.2(8) . . ?
Fe3 O1 O7 86.1(8) . . ?
Fe2 O1 O7 146.2(12) . . ?
T1 O1 O5 33.8(6) . . ?
Fe1 O1 O5 90.2(8) . . ?
Fe3 O1 O5 143.1(10) . . ?
Fe2 O1 O5 111.9(8) . . ?
O7 O1 O5 57.8(8) . . ?
T1 O1 O6 33.9(6) . 1_554 ?
Fe1 O1 O6 147.0(11) . 1_554 ?
Fe3 O1 O6 111.2(8) . 1_554 ?
Fe2 O1 O6 89.0(7) . 1_554 ?
O7 O1 O6 57.8(8) . 1_554 ?
O5 O1 O6 57.6(8) . 1_554 ?

T1 O1 Mn4 107.2(7) . . ?
Fe1 O1 Mn4 57.1(4) . . ?
Fe3 O1 Mn4 136.8(13) . . ?
Fe2 O1 Mn4 54.2(3) . . ?
O7 O1 Mn4 134.7(9) . . ?
O5 O1 Mn4 77.4(5) . . ?
O6 O1 Mn4 104.5(5) 1_554 . ?
T1 O1 O6 170.9(7) . 2_556 ?
Fe1 O1 O6 66.6(9) . 2_556 ?
Fe3 O1 O6 67.5(8) . 2_556 ?
Fe2 O1 O6 52.6(7) . 2_556 ?
O7 O1 O6 152.6(8) . 2_556 ?
O5 O1 O6 146.6(7) . 2_556 ?
O6 O1 O6 137.4(6) 1_554 2_556 ?
Mn4 O1 O6 69.9(5) . 2_556 ?
T2 O2 Mg2 126.0(11) . 1_556 ?
T2 O2 Fe2 126.0(11) . 1_556 ?
Mg2 O2 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
T2 O2 Fe1 118.8(9) . . ?
Mg2 O2 Fe1 95.7(10) 1_556 . ?
Fe2 O2 Fe1 95.7(10) 1_556 . ?
T2 O2 Mn4 122.8(10) . . ?
Mg2 O2 Mn4 91.1(10) 1_556 . ?
Fe2 O2 Mn4 91.1(10) 1_556 . ?
Fe1 O2 Mn4 94.6(10) . . ?
T2 O2 O6 36.7(6) . . ?
Mg2 O2 O6 93.6(7) 1_556 . ?
Fe2 O2 O6 93.6(7) 1_556 . ?
Fe1 O2 O6 113.0(7) . . ?
Mn4 O2 O6 151.3(10) . . ?
T2 O2 O5 33.7(6) . . ?
Mg2 O2 O5 152.6(10) 1_556 . ?
Fe2 O2 O5 152.6(10) 1_556 . ?
Fe1 O2 O5 88.9(6) . . ?
Mn4 O2 O5 115.5(7) . . ?
O6 O2 O5 60.1(8) . . ?
T2 O2 O5 90.4(8) . 3 ?
Mg2 O2 O5 73.4(4) 1_556 3 ?
Fe2 O2 O5 73.4(4) 1_556 3 ?
Fe1 O2 O5 148.5(12) . 3 ?
Mn4 O2 O5 57.2(4) . 3 ?
O6 O2 O5 97.3(7) . 3 ?
O5 O2 O5 114.6(8) . 3 ?
T2 O2 O6 88.1(8) . 3_554 ?
Mg2 O2 O6 106.2(6) 1_556 3_554 ?
Fe2 O2 O6 106.2(6) 1_556 3_554 ?
Fe1 O2 O6 124.2(8) . 3_554 ?
Mn4 O2 O6 36.2(5) . 3_554 ?
O6 O2 O6 115.9(8) . 3_554 ?
O5 O2 O6 93.2(7) . 3_554 ?
O5 O2 O6 39.2(3) 3 3_554 ?
T2 O2 Mn4 35.4(5) . 3 ?
Mg2 O2 Mn4 95.3(6) 1_556 3 ?
Fe2 O2 Mn4 95.3(6) 1_556 3 ?

Fe1 O2 Mn4 149.3(9) . 3 ?
 Mn4 O2 Mn4 113.8(6) . 3 ?
 O6 O2 Mn4 37.6(5) . 3 ?
 O5 O2 Mn4 68.9(7) . 3 ?
 O5 O2 Mn4 62.2(5) 3 3 ?
 O6 O2 Mn4 79.6(5) 3_554 3 ?
 Mg1 O3 Fe1 0.00(14) 5_556 5_556 ?
 Mg1 O3 Fe1 100.3(14) 5_556 . ?
 Fe1 O3 Fe1 100.3(14) 5_556 . ?
 Mg1 O3 Mg3 97.3(13) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Mg3 97.3(13) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Mg3 97.3(13) . 1_556 ?
 Mg1 O3 Fe3 97.3(13) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 97.3(13) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 Fe3 97.3(13) . 1_556 ?
 Mg3 O3 Fe3 0.0 1_556 1_556 ?
 Mg1 O3 O7 88.9(8) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O7 88.9(8) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O7 88.9(8) . . ?
 Mg3 O3 O7 170.3(17) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O7 170.3(17) 1_556 . ?
 Mg1 O3 O6 167.9(16) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 167.9(16) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 88.4(5) . . ?
 Mg3 O3 O6 89.9(7) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O6 89.9(7) 1_556 . ?
 O7 O3 O6 82.8(10) . . ?
 Mg1 O3 O6 88.4(5) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 88.4(5) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 167.9(16) . 6 ?
 Mg3 O3 O6 89.9(7) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O6 89.9(7) 1_556 6 ?
 O7 O3 O6 82.8(10) . 6 ?
 O6 O3 O6 81.8(10) . 6 ?
 Mg1 O3 O7 129.1(5) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 O7 129.1(5) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 O7 129.1(5) . 1_556 ?
 Mg3 O3 O7 68.3(8) 1_556 1_556 ?
 Fe3 O3 O7 68.3(8) 1_556 1_556 ?
 O7 O3 O7 102.0(15) . 1_556 ?
 O6 O3 O7 45.3(5) . 1_556 ?
 O6 O3 O7 45.3(5) 6 1_556 ?
 Mg1 O3 O5 130.6(9) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 130.6(9) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 69.5(7) . . ?
 Mg3 O3 O5 131.4(6) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O5 131.4(6) 1_556 . ?
 O7 O3 O5 44.4(5) . . ?
 O6 O3 O5 45.0(5) . . ?
 O6 O3 O5 98.4(12) 6 . ?
 O7 O3 O5 84.2(10) 1_556 . ?
 Mg1 O3 O5 69.5(7) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 69.5(7) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 130.6(9) . 6 ?

Mg3 O3 O5 131.4(6) 1_556 6 ?
Fe3 O3 O5 131.4(6) 1_556 6 ?
O7 O3 O5 44.4(5) . 6 ?
O6 O3 O5 98.4(12) . 6 ?
O6 O3 O5 45.0(5) 6 6 ?
O7 O3 O5 84.2(10) 1_556 6 ?
O5 O3 O5 81.3(10) . 6 ?
T2 O4 Fe4 107.5(7) . 3 ?
T2 O4 Mn4 107.5(7) . 3 ?
Fe4 O4 Mn4 0.0(2) 3 3 ?
T2 O4 Mg2 143.2(8) . 3 ?
Fe4 O4 Mg2 99.8(10) 3 3 ?
Mn4 O4 Mg2 99.8(10) 3 3 ?
T2 O4 Fe2 143.2(8) . 3 ?
Fe4 O4 Fe2 99.8(10) 3 3 ?
Mn4 O4 Fe2 99.8(10) 3 3 ?
Mg2 O4 Fe2 0.00(18) 3 3 ?
T2 O4 O6 38.9(6) . . ?
Fe4 O4 O6 68.5(6) 3 . ?
Mn4 O4 O6 68.5(6) 3 . ?
Mg2 O4 O6 153.6(13) 3 . ?
Fe2 O4 O6 153.6(13) 3 . ?
T2 O4 O5 34.9(6) . . ?
Fe4 O4 O5 118.8(8) 3 . ?
Mn4 O4 O5 118.8(8) 3 . ?
Mg2 O4 O5 109.6(7) 3 . ?
Fe2 O4 O5 109.6(7) 3 . ?
O6 O4 O5 61.3(5) . . ?
T2 O4 O5 76.7(7) . 2_656 ?
Fe4 O4 O5 71.4(8) 3 2_656 ?
Mn4 O4 O5 71.4(8) 3 2_656 ?
Mg2 O4 O5 89.5(10) 3 2_656 ?
Fe2 O4 O5 89.5(10) 3 2_656 ?
O6 O4 O5 64.5(7) . 2_656 ?
O5 O4 O5 57.0(8) . 2_656 ?
T2 O4 O5 107.9(13) . 3 ?
Fe4 O4 O5 96.7(6) 3 3 ?
Mn4 O4 O5 96.7(6) 3 3 ?
Mg2 O4 O5 92.6(6) 3 3 ?
Fe2 O4 O5 92.6(6) 3 3 ?
O6 O4 O5 111.8(9) . 3 ?
O5 O4 O5 132.6(9) . 3 ?
O5 O4 O5 168.1(7) 2_656 3 ?
T2 O4 O6 103.4(11) . 3_554 ?
Fe4 O4 O6 136.8(6) 3 3_554 ?
Mn4 O4 O6 136.8(6) 3 3_554 ?
Mg2 O4 O6 70.2(6) 3 3_554 ?
Fe2 O4 O6 70.2(6) 3 3_554 ?
O6 O4 O6 134.7(10) . 3_554 ?
O5 O4 O6 103.9(7) . 3_554 ?
O5 O4 O6 146.3(5) 2_656 3_554 ?
O5 O4 O6 44.5(5) 3 3_554 ?
T2 O4 Mn4 64.0(9) . . ?
Fe4 O4 Mn4 138.5(9) 3 . ?

Mn4 O4 Mn4 138.5(9) 3 . ?
Mg2 O4 Mn4 109.4(7) 3 . ?
Fe2 O4 Mn4 109.4(7) 3 . ?
O6 O4 Mn4 93.6(9) . . ?
O5 O4 Mn4 78.6(7) . . ?
O5 O4 Mn4 135.5(6) 2_656 . ?
O5 O4 Mn4 54.3(6) 3 . ?
O6 O4 Mn4 41.5(5) 3_554 . ?
T2 O4 Mn4 90.4(5) . 3_554 ?
Fe4 O4 Mn4 130.5(11) 3 3_554 ?
Mn4 O4 Mn4 130.5(11) 3 3_554 ?
Mg2 O4 Mn4 52.9(3) 3 3_554 ?
Fe2 O4 Mn4 52.9(3) 3 3_554 ?
O6 O4 Mn4 116.0(5) . 3_554 ?
O5 O4 Mn4 57.4(4) . 3_554 ?
O5 O4 Mn4 68.5(4) 2_656 3_554 ?
O5 O4 Mn4 121.7(5) 3 3_554 ?
O6 O4 Mn4 77.8(4) 3_554 3_554 ?
Mn4 O4 Mn4 90.9(4) . 3_554 ?
T1 O5 T2 139.2(18) . . ?
T1 O5 O7 34.8(7) . . ?
T2 O5 O7 141.9(11) . . ?
T1 O5 O6 36.1(5) . 1_554 ?
T2 O5 O6 146.1(11) . 1_554 ?
O7 O5 O6 60.1(6) . 1_554 ?
T1 O5 O6 141.3(11) . . ?
T2 O5 O6 35.1(6) . . ?
O7 O5 O6 117.5(6) . . ?
O6 O5 O6 177.3(10) 1_554 . ?
T1 O5 O4 151.8(10) . . ?
T2 O5 O4 35.6(7) . . ?
O7 O5 O4 173.3(9) . . ?
O6 O5 O4 125.7(7) 1_554 . ?
O6 O5 O4 56.8(5) . . ?
T1 O5 O2 105.6(13) . . ?
T2 O5 O2 33.7(8) . . ?
O7 O5 O2 118.8(12) . . ?
O6 O5 O2 121.5(11) 1_554 . ?
O6 O5 O2 58.2(7) . . ?
O4 O5 O2 62.3(8) . . ?
T1 O5 O1 36.2(8) . . ?
T2 O5 O1 103.1(13) . . ?
O7 O5 O1 60.4(9) . . ?
O6 O5 O1 61.7(8) 1_554 . ?
O6 O5 O1 116.3(10) . . ?
O4 O5 O1 124.4(9) . . ?
O2 O5 O1 69.4(9) . . ?
T1 O5 O5 129.3(13) . 2_656 ?
T2 O5 O5 90.3(9) . 2_656 ?
O7 O5 O5 102.8(10) . 2_656 ?
O6 O5 O5 111.7(12) 1_554 2_656 ?
O6 O5 O5 69.6(7) . 2_656 ?
O4 O5 O5 72.4(7) . 2_656 ?
O2 O5 O5 123.5(8) . 2_656 ?

O1 O5 O5 163.1(6) . 2_656 ?
 T1 O5 O6 84.8(9) . 2_656 ?
 T2 O5 O6 134.8(12) . 2_656 ?
 O7 O5 O6 77.6(9) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 60.1(9) 1_554 2_656 ?
 O6 O5 O6 121.2(9) . 2_656 ?
 O4 O5 O6 102.1(8) . 2_656 ?
 O2 O5 O6 162.7(7) . 2_656 ?
 O1 O5 O6 119.5(7) . 2_656 ?
 O5 O5 O6 51.6(8) 2_656 2_656 ?
 T1 O5 Fe4 86.6(6) . 3_554 ?
 T2 O5 Fe4 112.2(6) . 3_554 ?
 O7 O5 Fe4 105.2(7) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 50.6(5) 1_554 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 132.1(7) . 3_554 ?
 O4 O5 Fe4 78.9(5) . 3_554 ?
 O2 O5 Fe4 118.5(6) . 3_554 ?
 O1 O5 Fe4 102.7(6) . 3_554 ?
 O5 O5 Fe4 81.2(8) 2_656 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 47.2(4) 2_656 3_554 ?
 T1 O5 Mn4 86.6(6) . 3_554 ?
 T2 O5 Mn4 112.2(6) . 3_554 ?
 O7 O5 Mn4 105.2(7) . 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 50.6(5) 1_554 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 132.1(7) . 3_554 ?
 O4 O5 Mn4 78.9(5) . 3_554 ?
 O2 O5 Mn4 118.5(6) . 3_554 ?
 O1 O5 Mn4 102.7(6) . 3_554 ?
 O5 O5 Mn4 81.2(8) 2_656 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 47.2(4) 2_656 3_554 ?
 Fe4 O5 Mn4 0.00(10) 3_554 3_554 ?
 T1 O5 O4 118.6(9) . 2_656 ?
 T2 O5 O4 92.7(7) . 2_656 ?
 O7 O5 O4 123.4(11) . 2_656 ?
 O6 O5 O4 83.0(7) 1_554 2_656 ?
 O6 O5 O4 99.5(7) . 2_656 ?
 O4 O5 O4 57.4(8) . 2_656 ?
 O2 O5 O4 116.9(6) . 2_656 ?
 O1 O5 O4 137.0(6) . 2_656 ?
 O5 O5 O4 50.6(7) 2_656 2_656 ?
 O6 O5 O4 46.0(5) 2_656 2_656 ?
 Fe4 O5 O4 35.0(3) 3_554 2_656 ?
 Mn4 O5 O4 35.0(3) 3_554 2_656 ?
 T1 O5 T2 113.6(10) . 2_656 ?
 T2 O5 T2 106.3(10) . 2_656 ?
 O7 O5 T2 101.9(10) . 2_656 ?
 O6 O5 T2 85.8(8) 1_554 2_656 ?
 O6 O5 T2 96.0(8) . 2_656 ?
 O4 O5 T2 76.2(7) . 2_656 ?
 O2 O5 T2 138.2(7) . 2_656 ?
 O1 O5 T2 147.3(7) . 2_656 ?
 O5 O5 T2 29.2(5) 2_656 2_656 ?
 O6 O5 T2 28.8(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 ?
O4 O5 T2 28.9(5) 2_656 2_656 ?
T1 O5 Fe1 70.2(9) . . ?
T2 O5 Fe1 70.1(9) . . ?
O7 O5 Fe1 80.9(9) . . ?
O6 O5 Fe1 97.9(8) 1_554 . ?
O6 O5 Fe1 80.3(8) . . ?
O4 O5 Fe1 100.7(8) . . ?
O2 O5 Fe1 38.5(5) . . ?
O1 O5 Fe1 36.4(5) . . ?
O5 O5 Fe1 147.9(7) 2_656 . ?
O6 O5 Fe1 155.0(5) 2_656 . ?
Fe4 O5 Fe1 129.2(6) 3_554 . ?
Mn4 O5 Fe1 129.2(6) 3_554 . ?
O4 O5 Fe1 150.4(7) 2_656 . ?
T2 O5 Fe1 176.2(5) 2_656 . ?
T1 O5 O4 79.6(8) . 3_554 ?
T2 O5 O4 75.4(8) . 3_554 ?
O7 O5 O4 113.8(10) . 3_554 ?
O6 O5 O4 70.9(6) 1_554 3_554 ?
O6 O5 O4 109.9(8) . 3_554 ?
O4 O5 O4 72.6(6) . 3_554 ?
O2 O5 O4 56.5(6) . 3_554 ?
O1 O5 O4 58.2(7) . 3_554 ?
O5 O5 O4 136.7(5) 2_656 3_554 ?
O6 O5 O4 113.7(6) 2_656 3_554 ?
Fe4 O5 O4 67.7(4) 3_554 3_554 ?
Mn4 O5 O4 67.7(4) 3_554 3_554 ?
O4 O5 O4 88.8(3) 2_656 3_554 ?
T2 O5 O4 116.5(6) 2_656 3_554 ?
Fe1 O5 O4 64.1(7) . 3_554 ?
T1 O5 O3 76.0(8) . . ?
T2 O5 O3 76.7(8) . . ?
O7 O5 O3 65.5(8) . . ?
O6 O5 O3 111.9(7) 1_554 . ?
O6 O5 O3 65.5(7) . . ?
O4 O5 O3 112.3(7) . . ?
O2 O5 O3 58.7(7) . . ?
O1 O5 O3 57.3(7) . . ?
O5 O5 O3 117.7(7) 2_656 . ?
O6 O5 O3 138.4(7) 2_656 . ?
Fe4 O5 O3 159.9(8) 3_554 . ?
Mn4 O5 O3 159.9(8) 3_554 . ?
O4 O5 O3 164.8(6) 2_656 . ?
T2 O5 O3 144.3(8) 2_656 . ?
Fe1 O5 O3 34.7(6) . . ?
O4 O5 O3 98.8(10) 3_554 . ?
T1 O5 Mg2 133.1(6) . 3 ?
T2 O5 Mg2 64.6(5) . 3 ?
O7 O5 Mg2 153.4(9) . 3 ?
O6 O5 Mg2 99.1(5) 1_554 3 ?
O6 O5 Mg2 83.5(5) . 3 ?
O4 O5 Mg2 29.4(4) . 3 ?
O2 O5 Mg2 85.5(5) . 3 ?

O1 O5 Mg2 127.2(6) . 3 ?
O5 O5 Mg2 67.8(4) 2_656 3 ?
O6 O5 Mg2 77.4(5) 2_656 3 ?
Fe4 O5 Mg2 49.9(2) 3_554 3 ?
Mn4 O5 Mg2 49.9(2) 3_554 3 ?
O4 O5 Mg2 31.4(3) 2_656 3 ?
T2 O5 Mg2 57.3(3) 2_656 3 ?
Fe1 O5 Mg2 120.8(5) . 3 ?
O4 O5 Mg2 69.1(4) 3_554 3 ?
O3 O5 Mg2 141.1(6) . 3 ?
T1 O5 Fe2 133.1(6) . 3 ?
T2 O5 Fe2 64.6(5) . 3 ?
O7 O5 Fe2 153.4(9) . 3 ?
O6 O5 Fe2 99.1(5) 1_554 3 ?
O6 O5 Fe2 83.5(5) . 3 ?
O4 O5 Fe2 29.4(4) . 3 ?
O2 O5 Fe2 85.5(5) . 3 ?
O1 O5 Fe2 127.2(6) . 3 ?
O5 O5 Fe2 67.8(4) 2_656 3 ?
O6 O5 Fe2 77.4(5) 2_656 3 ?
Fe4 O5 Fe2 49.9(2) 3_554 3 ?
Mn4 O5 Fe2 49.9(2) 3_554 3 ?
O4 O5 Fe2 31.4(3) 2_656 3 ?
T2 O5 Fe2 57.3(3) 2_656 3 ?
Fe1 O5 Fe2 120.8(5) . 3 ?
O4 O5 Fe2 69.1(4) 3_554 3 ?
O3 O5 Fe2 141.1(6) . 3 ?
Mg2 O5 Fe2 0.00(5) 3 3 ?
T2 O6 T1 141.7(18) . 1_556 ?
T2 O6 O4 39.7(6) . . ?
T1 O6 O4 143.6(9) 1_556 . ?
T2 O6 O2 36.6(8) . . ?
T1 O6 O2 105.1(13) 1_556 . ?
O4 O6 O2 65.5(9) . . ?
T2 O6 Fe4 85.1(6) . 3 ?
T1 O6 Fe4 112.6(7) 1_556 3 ?
O4 O6 Fe4 45.4(5) . 3 ?
O2 O6 Fe4 104.4(6) . 3 ?
T2 O6 Mn4 85.1(6) . 3 ?
T1 O6 Mn4 112.6(7) 1_556 3 ?
O4 O6 Mn4 45.4(5) . 3 ?
O2 O6 Mn4 104.4(6) . 3 ?
Fe4 O6 Mn4 0.00(10) 3 3 ?
T2 O6 O5 143.6(10) . 1_556 ?
T1 O6 O5 35.4(6) 1_556 1_556 ?
O4 O6 O5 115.6(6) . 1_556 ?
O2 O6 O5 118.6(10) . 1_556 ?
Fe4 O6 O5 77.3(5) 3 1_556 ?
Mn4 O6 O5 77.3(5) 3 1_556 ?
T2 O6 O7 146.9(11) . 1_556 ?
T1 O6 O7 34.7(7) 1_556 1_556 ?
O4 O6 O7 173.3(11) . 1_556 ?
O2 O6 O7 120.5(11) . 1_556 ?
Fe4 O6 O7 128.0(8) 3 1_556 ?

Mn4 O6 O7 128.0(8) 3 1_556 ?
O5 O6 O7 59.5(5) 1_556 1_556 ?
T2 O6 O5 35.1(6) . . ?
T1 O6 O5 147.2(10) 1_556 . ?
O4 O6 O5 62.0(5) . . ?
O2 O6 O5 61.7(7) . . ?
Fe4 O6 O5 100.1(7) 3 . ?
Mn4 O6 O5 100.1(7) 3 . ?
O5 O6 O5 177.3(10) 1_556 . ?
O7 O6 O5 122.9(6) 1_556 . ?
T2 O6 O1 106.1(13) . 1_556 ?
T1 O6 O1 35.7(8) 1_556 1_556 ?
O4 O6 O1 122.9(10) . 1_556 ?
O2 O6 O1 69.5(9) . 1_556 ?
Fe4 O6 O1 122.9(6) 3 1_556 ?
Mn4 O6 O1 122.9(6) 3 1_556 ?
O5 O6 O1 60.7(8) 1_556 1_556 ?
O7 O6 O1 59.8(8) 1_556 1_556 ?
O5 O6 O1 121.2(10) . 1_556 ?
T2 O6 O6 124.5(13) . 2_657 ?
T1 O6 O6 92.3(8) 1_556 2_657 ?
O4 O6 O6 92.3(9) . 2_657 ?
O2 O6 O6 157.7(7) . 2_657 ?
Fe4 O6 O6 55.1(5) 3 2_657 ?
Mn4 O6 O6 55.1(5) 3 2_657 ?
O5 O6 O6 69.1(7) 1_556 2_657 ?
O7 O6 O6 81.7(9) 1_556 2_657 ?
O5 O6 O6 109.6(12) . 2_657 ?
O1 O6 O6 127.2(8) 1_556 2_657 ?
T2 O6 O5 80.8(8) . 2_656 ?
T1 O6 O5 136.8(12) 1_556 2_656 ?
O4 O6 O5 69.4(7) . 2_656 ?
O2 O6 O5 116.7(7) . 2_656 ?
Fe4 O6 O5 68.0(6) 3 2_656 ?
Mn4 O6 O5 68.0(6) 3 2_656 ?
O5 O6 O5 119.9(9) 1_556 2_656 ?
O7 O6 O5 108.4(9) 1_556 2_656 ?
O5 O6 O5 58.8(9) . 2_656 ?
O1 O6 O5 167.0(6) 1_556 2_656 ?
O6 O6 O5 50.8(8) 2_657 2_656 ?
T2 O6 O3 79.9(8) . . ?
T1 O6 O3 77.9(8) 1_556 . ?
O4 O6 O3 119.5(8) . . ?
O2 O6 O3 60.8(7) . . ?
Fe4 O6 O3 164.5(7) 3 . ?
Mn4 O6 O3 164.5(7) 3 . ?
O5 O6 O3 113.1(8) 1_556 . ?
O7 O6 O3 67.2(7) 1_556 . ?
O5 O6 O3 69.4(7) . . ?
O1 O6 O3 58.9(7) 1_556 . ?
O6 O6 O3 138.3(6) 2_657 . ?
O5 O6 O3 112.8(7) 2_656 . ?
T2 O6 Mg2 71.9(9) . 1_556 ?
T1 O6 Mg2 71.0(9) 1_556 1_556 ?

O4 O6 Mg2 85.8(8) . 1_556 ?
 O2 O6 Mg2 37.4(5) . 1_556 ?
 Fe4 O6 Mg2 103.8(5) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Mg2 103.8(5) 3 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 81.8(8) 1_556 1_556 ?
 O7 O6 Mg2 97.5(9) 1_556 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 98.8(8) . 1_556 ?
 O1 O6 Mg2 37.9(5) 1_556 1_556 ?
 O6 O6 Mg2 146.7(7) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 152.2(5) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Mg2 67.9(7) . 1_556 ?
 T2 O6 Fe2 71.9(9) . 1_556 ?
 T1 O6 Fe2 71.0(9) 1_556 1_556 ?
 O4 O6 Fe2 85.8(8) . 1_556 ?
 O2 O6 Fe2 37.4(5) . 1_556 ?
 Fe4 O6 Fe2 103.8(5) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Fe2 103.8(5) 3 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 81.8(8) 1_556 1_556 ?
 O7 O6 Fe2 97.5(9) 1_556 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 98.8(8) . 1_556 ?
 O1 O6 Fe2 37.9(5) 1_556 1_556 ?
 O6 O6 Fe2 146.7(7) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 152.2(5) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Fe2 67.9(7) . 1_556 ?
 Mg2 O6 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
 T2 O6 T1 108.7(10) . 2_656 ?
 T1 O6 T1 109.2(10) 1_556 2_656 ?
 O4 O6 T1 91.2(9) . 2_656 ?
 O2 O6 T1 144.4(7) . 2_656 ?
 Fe4 O6 T1 70.7(6) 3 2_656 ?
 Mn4 O6 T1 70.7(6) 3 2_656 ?
 O5 O6 T1 95.2(8) 1_556 2_656 ?
 O7 O6 T1 85.0(8) 1_556 2_656 ?
 O5 O6 T1 84.0(8) . 2_656 ?
 O1 O6 T1 143.7(6) 1_556 2_656 ?
 O6 O6 T1 28.5(5) 2_657 2_656 ?
 O5 O6 T1 27.9(4) 2_656 2_656 ?
 O3 O6 T1 117.8(7) . 2_656 ?
 Mg2 O6 T1 174.3(5) 1_556 2_656 ?
 Fe2 O6 T1 174.3(5) 1_556 2_656 ?
 T2 O6 O4 79.9(8) . 3 ?
 T1 O6 O4 74.3(7) 1_556 3 ?
 O4 O6 O4 71.2(7) . 3 ?
 O2 O6 O4 58.4(6) . 3 ?
 Fe4 O6 O4 72.4(5) 3 3 ?
 Mn4 O6 O4 72.4(5) 3 3 ?
 O5 O6 O4 64.6(6) 1_556 3 ?
 O7 O6 O4 108.7(8) 1_556 3 ?
 O5 O6 O4 114.6(7) . 3 ?
 O1 O6 O4 55.8(6) 1_556 3 ?
 O6 O6 O4 115.4(6) 2_657 3 ?
 O5 O6 O4 137.1(6) 2_656 3 ?
 O3 O6 O4 100.9(10) . 3 ?
 Mg2 O6 O4 33.2(4) 1_556 3 ?

Fe2 O6 O4 33.2(4) 1_556 3 ?
 T1 O6 O4 141.1(7) 2_656 3 ?
 T2 O6 O7 117.6(10) . 5_656 ?
 T1 O6 O7 95.0(8) 1_556 5_656 ?
 O4 O6 O7 113.5(10) . 5_656 ?
 O2 O6 O7 142.9(7) . 5_656 ?
 Fe4 O6 O7 95.7(9) 3 5_656 ?
 Mn4 O6 O7 95.7(9) 3 5_656 ?
 O5 O6 O7 95.9(8) 1_556 5_656 ?
 O7 O6 O7 64.2(10) 1_556 5_656 ?
 O5 O6 O7 84.5(7) . 5_656 ?
 O1 O6 O7 123.7(6) 1_556 5_656 ?
 O6 O6 O7 45.4(6) 2_657 5_656 ?
 O5 O6 O7 44.3(6) 2_656 5_656 ?
 O3 O6 O7 94.6(7) . 5_656 ?
 Mg2 O6 O7 159.2(7) 1_556 5_656 ?
 Fe2 O6 O7 159.2(7) 1_556 5_656 ?
 T1 O6 O7 25.6(5) 2_656 5_656 ?
 O4 O6 O7 158.6(7) 3 5_656 ?
 T2 O6 Fe1 52.6(7) . . ?
 T1 O6 Fe1 95.1(10) 1_556 . ?
 O4 O6 Fe1 90.2(7) . . ?
 O2 O6 Fe1 29.6(4) . . ?
 Fe4 O6 Fe1 133.2(5) 3 . ?
 Mn4 O6 Fe1 133.2(5) 3 . ?
 O5 O6 Fe1 123.7(9) 1_556 . ?
 O7 O6 Fe1 96.3(8) 1_556 . ?
 O5 O6 Fe1 58.1(6) . . ?
 O1 O6 Fe1 63.2(6) 1_556 . ?
 O6 O6 Fe1 163.9(7) 2_657 . ?
 O5 O6 Fe1 115.9(4) 2_656 . ?
 O3 O6 Fe1 31.6(4) . . ?
 Mg2 O6 Fe1 49.4(3) 1_556 . ?
 Fe2 O6 Fe1 49.4(3) 1_556 . ?
 T1 O6 Fe1 135.6(4) 2_656 . ?
 O4 O6 Fe1 80.4(6) 3 . ?
 O7 O6 Fe1 119.5(5) 5_656 . ?
 T1 O7 T1 146(3) 6 . ?
 T1 O7 O5 149.3(13) 6 . ?
 T1 O7 O5 35.5(6) . . ?
 T1 O7 O5 35.5(6) 6 6 ?
 T1 O7 O5 149.3(13) . 6 ?
 O5 O7 O5 122.2(9) . 6 ?
 T1 O7 O6 144.7(13) 6 1_554 ?
 T1 O7 O6 36.0(6) . 1_554 ?
 O5 O7 O6 60.4(4) . 1_554 ?
 O5 O7 O6 173.9(15) 6 1_554 ?
 T1 O7 O6 36.0(6) 6 6_554 ?
 T1 O7 O6 144.7(13) . 6_554 ?
 O5 O7 O6 173.9(15) . 6_554 ?
 O5 O7 O6 60.4(4) 6 6_554 ?
 O6 O7 O6 116.4(8) 1_554 6_554 ?
 T1 O7 O1 37.1(10) 6 6 ?
 T1 O7 O1 108.8(19) . 6 ?

O5 O7 O1 123.7(13) . 6 ?
O5 O7 O1 61.9(7) 6 6 ?
O6 O7 O1 122.1(13) 1_554 6 ?
O6 O7 O1 62.3(7) 6_554 6 ?
T1 O7 O1 108.8(19) 6 . ?
T1 O7 O1 37.1(10) . . ?
O5 O7 O1 61.9(7) . . ?
O5 O7 O1 123.7(13) 6 . ?
O6 O7 O1 62.3(7) 1_554 . ?
O6 O7 O1 122.1(13) 6_554 . ?
O1 O7 O1 71.7(13) 6 . ?
T1 O7 Fe3 73.3(13) 6 . ?
T1 O7 Fe3 73.3(13) . . ?
O5 O7 Fe3 100.3(10) . . ?
O5 O7 Fe3 100.3(10) 6 . ?
O6 O7 Fe3 84.2(8) 1_554 . ?
O6 O7 Fe3 84.2(8) 6_554 . ?
O1 O7 Fe3 38.7(7) 6 . ?
O1 O7 Fe3 38.7(7) . . ?
T1 O7 O3 80.1(11) 6 . ?
T1 O7 O3 80.1(11) . . ?
O5 O7 O3 70.1(7) . . ?
O5 O7 O3 70.1(7) 6 . ?
O6 O7 O3 115.7(8) 1_554 . ?
O6 O7 O3 115.7(8) 6_554 . ?
O1 O7 O3 59.2(8) 6 . ?
O1 O7 O3 59.2(8) . . ?
Fe3 O7 O3 66.4(9) . . ?
T1 O7 O3 78.7(11) 6 1_554 ?
T1 O7 O3 78.7(11) . 1_554 ?
O5 O7 O3 114.0(8) . 1_554 ?
O5 O7 O3 114.0(8) 6 1_554 ?
O6 O7 O3 67.5(6) 1_554 1_554 ?
O6 O7 O3 67.5(6) 6_554 1_554 ?
O1 O7 O3 59.5(8) 6 1_554 ?
O1 O7 O3 59.5(8) . 1_554 ?
Fe3 O7 O3 35.6(7) . 1_554 ?
O3 O7 O3 102.0(15) . 1_554 ?
T1 O7 O7 104.2(11) 6 5_655 ?
T1 O7 O7 104.2(11) . 5_655 ?
O5 O7 O7 101.4(11) . 5_655 ?
O5 O7 O7 101.4(11) 6 5_655 ?
O6 O7 O7 72.5(7) 1_554 5_655 ?
O6 O7 O7 72.5(7) 6_554 5_655 ?
O1 O7 O7 134.5(7) 6 5_655 ?
O1 O7 O7 134.5(7) . 5_655 ?
Fe3 O7 O7 134.2(9) . 5_655 ?
O3 O7 O7 159.4(15) . 5_655 ?
O3 O7 O7 98.6(10) 1_554 5_655 ?
T1 O7 O6 144.4(17) 6 2_656 ?
T1 O7 O6 69.2(10) . 2_656 ?
O5 O7 O6 58.1(7) . 2_656 ?
O5 O7 O6 122.8(13) 6 2_656 ?
O6 O7 O6 52.9(8) 1_554 2_656 ?

O6 O7 O6 115.8(10) 6_554 2_656 ?
 O1 O7 O6 174.1(8) 6 2_656 ?
 O1 O7 O6 106.2(6) . 2_656 ?
 Fe3 O7 O6 136.9(5) . 2_656 ?
 O3 O7 O6 124.8(6) . 2_656 ?
 O3 O7 O6 114.6(7) 1_554 2_656 ?
 O7 O7 O6 43.3(7) 5_655 2_656 ?
 T1 O7 O6 69.2(10) 6 5_656 ?
 T1 O7 O6 144.4(17) . 5_656 ?
 O5 O7 O6 122.8(13) . 5_656 ?
 O5 O7 O6 58.1(7) 6 5_656 ?
 O6 O7 O6 115.8(10) 1_554 5_656 ?
 O6 O7 O6 52.9(8) 6_554 5_656 ?
 O1 O7 O6 106.2(6) 6 5_656 ?
 O1 O7 O6 174.1(8) . 5_656 ?
 Fe3 O7 O6 136.9(5) . 5_656 ?
 O3 O7 O6 124.8(6) . 5_656 ?
 O3 O7 O6 114.6(7) 1_554 5_656 ?
 O7 O7 O6 43.3(7) 5_655 5_656 ?
 O6 O7 O6 75.4(10) 2_656 5_656 ?
 T1 O7 Mg1 52.3(10) 6 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 99.1(15) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 100.2(9) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 58.2(7) 6 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 127.6(11) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 85.8(7) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 28.0(4) 6 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 65.7(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Mg1 49.6(5) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 31.6(5) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 81.3(9) 1_554 5_556 ?
 O7 O7 Mg1 156.28(19) 5_655 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 156.4(5) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 115.1(3) 5_656 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 52.3(10) 6 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 99.1(15) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 100.2(9) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 58.2(7) 6 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 127.6(11) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 85.8(7) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 28.0(4) 6 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 65.7(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Fe1 49.6(5) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 31.6(5) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 81.3(9) 1_554 5_556 ?
 O7 O7 Fe1 156.28(19) 5_655 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 156.4(5) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 115.1(3) 5_656 5_556 ?
 Mg1 O7 Fe1 0.00(10) 5_556 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 99.1(15) 6 . ?
 T1 O7 Fe1 52.3(10) . . ?
 O5 O7 Fe1 58.2(7) . . ?
 O5 O7 Fe1 100.2(9) 6 . ?
 O6 O7 Fe1 85.8(7) 1_554 . ?

O6 O7 Fe1 127.6(11) 6_554 . ?
 O1 O7 Fe1 65.7(8) 6 . ?
 O1 O7 Fe1 28.0(4) . . ?
 Fe3 O7 Fe1 49.6(5) . . ?
 O3 O7 Fe1 31.6(5) . . ?
 O3 O7 Fe1 81.3(9) 1_554 . ?
 O7 O7 Fe1 156.28(19) 5_655 . ?
 O6 O7 Fe1 115.1(3) 2_656 . ?
 O6 O7 Fe1 156.4(5) 5_656 . ?
 Mg1 O7 Fe1 47.4(4) 5_556 . ?
 Fe1 O7 Fe1 47.4(4) 5_556 . ?
 T1 O7 T2 134.9(11) 6 . ?
 T1 O7 T2 42.0(5) . . ?
 O5 O7 T2 14.4(5) . . ?
 O5 O7 T2 111.0(6) 6 . ?
 O6 O7 T2 72.5(3) 1_554 . ?
 O6 O7 T2 170.7(7) 6_554 . ?
 O1 O7 T2 111.4(10) 6 . ?
 O1 O7 T2 58.4(5) . . ?
 Fe3 O7 T2 94.6(7) . . ?
 O3 O7 T2 55.8(4) . . ?
 O3 O7 T2 116.2(8) 1_554 . ?
 O7 O7 T2 114.1(9) 5_655 . ?
 O6 O7 T2 71.1(4) 2_656 . ?
 O6 O7 T2 127.0(9) 5_656 . ?
 Mg1 O7 T2 86.4(5) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 86.4(5) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 47.8(3) . . ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.238
 _diffn_reflns_theta_full 28.27
 _diffn_measured_fraction_theta_full 0.238
 _refine_diff_density_max 0.907
 _refine_diff_density_min -0.846
 _refine_diff_density_rms 0.232