

data_hp693

_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 9.076(6)
_cell_length_b 17.944(5)
_cell_length_c 5.242(2)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume                853.7(7)
_cell_formula_units_Z      2
_cell_measurement_temperature 293(2)
_cell_measurement_reflns_used ?
_cell_measurement_theta_min ?
_cell_measurement_theta_max ?

_exptl_crystal_description ?
_exptl_crystal_colour      ?
_exptl_crystal_size_max    ?
_exptl_crystal_size_mid    ?
_exptl_crystal_size_min    ?
_exptl_crystal_density_meas ?
_exptl_crystal_density_diffn 3.781
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.632
_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        3349
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.1237
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0790
_diffrn_reflns_limit_h_min   -3
_diffrn_reflns_limit_h_max    3
_diffrn_reflns_limit_k_min   -23
_diffrn_reflns_limit_k_max    23
_diffrn_reflns_limit_l_min   -6
_diffrn_reflns_limit_l_max    6
_diffrn_reflns_theta_min     4.05
_diffrn_reflns_theta_max     28.58
_reflns_number_total         310
_reflns_number_gt            183
_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)+(0.1529P)^2+107.0370P] where P=(Fo^2+2Fc^2)/3'
_atom_sites_solution_primary    direct
_atom_sites_solution_secondary  difmap
_atom_sites_solution_hydrogens  geom
_refine_ls_hydrogen_treatment  mixed
_refine_ls_extinction_method     SHELXL
_refine_ls_extinction_coef       0.000(2)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/\sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns        310
_refine_ls_number_parameters     33
_refine_ls_number_restraints     0
_refine_ls_R_factor_all          0.1281
_refine_ls_R_factor_gt           0.0951
_refine_ls_wR_factor_ref         0.2686
_refine_ls_wR_factor_gt          0.2428
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   0.841
_refine_ls_restrained_S_all      0.841
_refine_ls_shift/su_max          0.990
_refine_ls_shift/su_mean         0.404

```

```
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 0.0855(3) 0.5000 0.0110(12) Uiso 0.82 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.0855(3) 0.5000 0.0110(12) Uiso 0.18 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.1772(3) 0.0000 0.0110(12) Uiso 0.71 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.1772(3) 0.0000 0.0110(12) Uiso 0.29 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0110(12) Uiso 0.78 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0110(12) Uiso 0.22 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.2607(2) 0.5000 0.0110(12) Uiso 0.71 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.2607(2) 0.5000 0.0110(12) Uiso 0.29 2 d SP . .
T1 Si 0.285(2) 0.0843(3) 0.1528(14) 0.0088(14) Uiso 1 1 d . . .
T2 Si 0.295(2) 0.1682(3) 0.6552(13) 0.0088(14) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.108(7) 0.0867(10) 0.163(4) 0.022(3) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.115(6) 0.1710(10) 0.664(4) 0.022(3) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.121(7) 0.0000 0.665(5) 0.022(3) Uiso 1 2 d S . .
O4 O 0.122(5) 0.2542(10) 0.180(3) 0.022(3) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.362(5) 0.1263(10) 0.402(3) 0.022(3) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.359(5) 0.1191(10) 0.899(3) 0.022(3) Uiso 1 1 d . . .
O7 O 0.355(7) 0.0000 0.168(5) 0.022(3) 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 2.02(3) . ?
Fe1 O1 2.02(3) 2_556 ?
Fe1 O2 2.04(3) . ?
Fe1 O2 2.04(3) 2_556 ?
Fe1 O3 2.08(4) 5_556 ?
Fe1 O3 2.08(4) . ?
Fe1 Mg3 3.037(3) 1_556 ?
Fe1 Mg1 3.070(9) 5_556 ?
Fe1 Mg2 3.095(4) 1_556 ?
Fe1 O5 3.40(5) . ?
Fe2 O4 2.01(3) . ?
Fe2 O4 2.01(3) 2 ?
Fe2 O2 2.05(3) 2_556 ?
Fe2 O2 2.05(3) 1_554 ?
Fe2 O1 2.08(3) 2 ?

```

Fe2 O1 2.08(3) . ?
 Fe2 Mn4 3.019(4) . ?
 Fe2 Mn4 3.019(4) 1_554 ?
 Fe2 Mg1 3.095(4) 1_554 ?
 Fe2 O6 3.46(5) 2_556 ?
 Fe3 O1 2.03(3) 5 ?
 Fe3 O1 2.03(3) . ?
 Fe3 O1 2.03(3) 6 ?
 Fe3 O1 2.03(3) 2 ?
 Fe3 O3 2.07(4) 5_556 ?
 Fe3 O3 2.07(4) 1_554 ?
 Fe3 Mg1 3.037(3) 5 ?
 Fe3 Mg1 3.037(3) 1_554 ?
 Fe3 Mg1 3.037(3) 5_556 ?
 Fe3 Mg2 3.180(5) 5 ?
 Mn4 O4 2.01(3) 2_556 ?
 Mn4 O4 2.01(3) . ?
 Mn4 O2 2.10(3) 2_556 ?
 Mn4 O2 2.10(3) . ?
 Mn4 O6 2.56(3) 3_554 ?
 Mn4 O6 2.56(3) 4_456 ?
 Mn4 T2 2.888(14) 4_456 ?
 Mn4 T2 2.888(14) 3_554 ?
 Mn4 Mg2 3.019(4) 1_556 ?
 Mn4 Fe2 3.019(4) 1_556 ?
 T1 O6 1.62(3) 1_554 ?
 T1 O1 1.61(5) . ?
 T1 O7 1.64(3) . ?
 T1 O5 1.66(3) . ?
 T1 O6 3.30(5) 2_656 ?
 T1 O6 3.94(2) 6_554 ?
 T1 O7 3.98(6) 5_655 ?
 T1 O6 4.021(19) . ?
 T1 O5 4.04(4) 2_656 ?
 T2 O4 1.59(3) 3 ?
 T2 O2 1.64(5) . ?
 T2 O5 1.64(3) . ?
 T2 O6 1.66(2) . ?
 T2 Fe4 2.888(14) 3 ?
 T2 Mn4 2.888(14) 3 ?
 T2 O5 3.21(5) 2_656 ?
 T2 Mg2 3.237(18) 1_556 ?
 T2 O7 3.992(19) . ?
 T2 O6 4.01(4) 2_657 ?
 T2 O5 4.030(19) 1_556 ?
 O1 O6 2.73(7) 1_554 ?
 O1 O5 2.72(7) . ?
 O1 O7 2.73(7) . ?
 O1 O6 4.29(7) 2_556 ?
 O1 O6 4.52(5) . ?
 O2 Mg2 2.05(3) 1_556 ?
 O2 Fe2 2.05(3) 1_556 ?
 O2 O6 2.70(6) . ?
 O2 O5 2.75(7) . ?

O2 O5 3.85(3) 3 ?
O2 O6 4.02(2) 3_554 ?
O2 O5 4.41(7) 2_556 ?
O3 Mg1 2.08(4) 5_556 ?
O3 Fe1 2.08(4) 5_556 ?
O3 Mg3 2.07(4) 1_556 ?
O3 Fe3 2.07(4) 1_556 ?
O3 O6 3.28(6) . ?
O3 O6 3.28(6) 6 ?
O3 O7 3.36(6) . ?
O3 O7 3.38(7) 1_556 ?
O3 O5 3.44(5) . ?
O3 O5 3.44(5) 6 ?
O4 T2 1.59(3) 3_554 ?
O4 O6 2.55(2) 3_554 ?
O4 O5 2.60(3) 3_554 ?
O4 O5 3.22(5) 4_455 ?
O4 O5 3.37(5) . ?
O4 O6 3.56(4) 1_554 ?
O4 O6 3.96(4) 4_456 ?
O4 O5 4.35(3) 3 ?
O5 O7 2.58(2) . ?
O5 O4 2.60(3) 3 ?
O5 O6 2.61(2) . ?
O5 O6 2.64(2) 1_554 ?
O5 O5 2.71(9) 2_656 ?
O5 O6 2.99(6) 2_656 ?
O5 Fe4 3.18(3) 3_554 ?
O5 Mn4 3.18(3) 3_554 ?
O5 O4 3.22(5) 4 ?
O5 T2 3.21(5) 2_656 ?
O5 Mg2 3.78(2) 3 ?
O5 Fe2 3.78(2) 3 ?
O6 T1 1.62(3) 1_556 ?
O6 O4 2.55(2) 3 ?
O6 O7 2.56(2) 1_556 ?
O6 Fe4 2.56(3) 3 ?
O6 Mn4 2.56(3) 3 ?
O6 O5 2.64(2) 1_556 ?
O6 O1 2.73(7) 1_556 ?
O6 O6 2.76(9) 2_657 ?
O6 O5 2.99(6) 2_656 ?
O6 T1 3.30(5) 2_656 ?
O6 O7 3.38(6) 5_656 ?
O6 Mg2 3.46(5) 1_556 ?
O6 Fe2 3.46(5) 1_556 ?
O6 O4 3.56(4) 1_556 ?
O7 T1 1.64(3) 6 ?
O7 O6 2.56(2) 1_554 ?
O7 O6 2.56(2) 6_554 ?
O7 O5 2.58(2) 6 ?
O7 O1 2.73(7) 6 ?
O7 O7 3.17(11) 5_655 ?
O7 O3 3.38(7) 1_554 ?

O7 O6 3.38(6) 2_656 ?
O7 O6 3.38(6) 5_656 ?
O7 T1 3.98(6) 2_655 ?
O7 T1 3.98(6) 5_655 ?
O7 Fe1 3.97(5) 5_556 ?
O7 Mg1 3.97(5) 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 178.9(10) . 2_556 ?
O1 Fe1 O2 96.5(17) . . ?
O1 Fe1 O2 82.6(17) 2_556 . ?
O1 Fe1 O2 82.6(17) . 2_556 ?
O1 Fe1 O2 96.5(17) 2_556 2_556 ?
O2 Fe1 O2 83(2) . 2_556 ?
O1 Fe1 O3 84.2(17) . 5_556 ?
O1 Fe1 O3 96.7(18) 2_556 5_556 ?
O2 Fe1 O3 178.7(19) . 5_556 ?
O2 Fe1 O3 96.2(16) 2_556 5_556 ?
O1 Fe1 O3 96.7(18) . . ?
O1 Fe1 O3 84.2(17) 2_556 . ?
O2 Fe1 O3 96.2(16) . . ?
O2 Fe1 O3 178.7(19) 2_556 . ?
O3 Fe1 O3 85(2) 5_556 . ?
O1 Fe1 Mg3 139.4(10) . 1_556 ?
O1 Fe1 Mg3 41.4(10) 2_556 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 90.9(5) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg3 137.9(10) 2_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 89.2(7) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg3 42.8(12) . 1_556 ?
O1 Fe1 Mg1 90.6(5) . 5_556 ?
O1 Fe1 Mg1 90.6(5) 2_556 5_556 ?
O2 Fe1 Mg1 138.6(10) . 5_556 ?
O2 Fe1 Mg1 138.6(10) 2_556 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 42.4(11) 5_556 5_556 ?
O3 Fe1 Mg1 42.4(11) . 5_556 ?
Mg3 Fe1 Mg1 59.65(8) 1_556 5_556 ?
O1 Fe1 Mg2 137.3(10) . 1_556 ?
O1 Fe1 Mg2 41.7(10) 2_556 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 40.9(11) . 1_556 ?
O2 Fe1 Mg2 87.6(5) 2_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 138.3(12) 5_556 1_556 ?
O3 Fe1 Mg2 92.3(6) . 1_556 ?
Mg3 Fe1 Mg2 62.47(9) 1_556 1_556 ?
Mg1 Fe1 Mg2 122.12(11) 5_556 1_556 ?
O1 Fe1 O5 53.0(14) . . ?
O1 Fe1 O5 126.7(15) 2_556 . ?
O2 Fe1 O5 53.9(14) . . ?

O2 Fe1 O5 105.5(15) 2_556 . ?
O3 Fe1 O5 127.3(15) 5_556 . ?
O3 Fe1 O5 73.2(16) . . ?
Mg3 Fe1 O5 103.8(3) 1_556 . ?
Mg1 Fe1 O5 102.4(4) 5_556 . ?
Mg2 Fe1 O5 90.8(3) 1_556 . ?
O4 Fe2 O4 92.9(15) . 2 ?
O4 Fe2 O2 85.0(14) . 2_556 ?
O4 Fe2 O2 99.3(15) 2 2_556 ?
O4 Fe2 O2 99.3(15) . 1_554 ?
O4 Fe2 O2 85.0(14) 2 1_554 ?
O2 Fe2 O2 173.8(10) 2_556 1_554 ?
O4 Fe2 O1 172.2(13) . 2 ?
O4 Fe2 O1 94.9(13) 2 2 ?
O2 Fe2 O1 94.0(16) 2_556 2 ?
O2 Fe2 O1 81.1(17) 1_554 2 ?
O4 Fe2 O1 94.9(13) . . ?
O4 Fe2 O1 172.2(13) 2 . ?
O2 Fe2 O1 81.1(17) 2_556 . ?
O2 Fe2 O1 94.0(16) 1_554 . ?
O1 Fe2 O1 77(2) 2 . ?
O4 Fe2 Mn4 41.3(9) . . ?
O4 Fe2 Mn4 93.9(5) 2 . ?
O2 Fe2 Mn4 44.0(9) 2_556 . ?
O2 Fe2 Mn4 140.6(10) 1_554 . ?
O1 Fe2 Mn4 138.0(10) 2 . ?
O1 Fe2 Mn4 91.8(5) . . ?
O4 Fe2 Mn4 93.9(5) . 1_554 ?
O4 Fe2 Mn4 41.3(9) 2 1_554 ?
O2 Fe2 Mn4 140.6(10) 2_556 1_554 ?
O2 Fe2 Mn4 44.0(9) 1_554 1_554 ?
O1 Fe2 Mn4 91.8(5) 2 1_554 ?
O1 Fe2 Mn4 138.0(10) . 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mn4 120.5(2) . 1_554 ?
O4 Fe2 Mg1 139.9(9) . 1_554 ?
O4 Fe2 Mg1 88.1(5) 2 1_554 ?
O2 Fe2 Mg1 134.3(9) 2_556 1_554 ?
O2 Fe2 Mg1 40.8(10) 1_554 1_554 ?
O1 Fe2 Mg1 40.3(10) 2 1_554 ?
O1 Fe2 Mg1 86.1(5) . 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mg1 177.63(19) . 1_554 ?
Mn4 Fe2 Mg1 61.86(11) 1_554 1_554 ?
O4 Fe2 O6 130.9(10) . 2_556 ?
O4 Fe2 O6 76.1(12) 2 2_556 ?
O2 Fe2 O6 51.2(13) 2_556 2_556 ?
O2 Fe2 O6 126.4(13) 1_554 2_556 ?
O1 Fe2 O6 51.9(15) 2 2_556 ?
O1 Fe2 O6 98.4(15) . 2_556 ?
Mn4 Fe2 O6 91.0(3) . 2_556 ?
Mn4 Fe2 O6 106.4(3) 1_554 2_556 ?
Mg1 Fe2 O6 88.2(3) 1_554 2_556 ?
O1 Fe3 O1 180.0(12) 5 . ?
O1 Fe3 O1 80(2) 5 6 ?
O1 Fe3 O1 100(2) . 6 ?

O1 Fe3 O1 100(2) 5 2 ?
 O1 Fe3 O1 80(2) . 2 ?
 O1 Fe3 O1 180(3) 6 2 ?
 O1 Fe3 O3 95.7(17) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 84.3(17) . 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 84.3(17) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 95.7(17) 2 5_556 ?
 O1 Fe3 O3 84.3(17) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 95.7(17) . 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 95.7(17) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 O3 84.3(17) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 O3 180(3) 5_556 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.3(11) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.7(11) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.6(6) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.4(6) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.0(11) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.0(11) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.4(6) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.6(6) . 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.7(11) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.3(11) 2 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.0(10) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.0(10) 1_554 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 60.71(16) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 88.6(6) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 91.4(6) . 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.3(11) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.7(11) 2 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 43.0(10) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.0(10) 1_554 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 119.29(16) 5 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(15) 1_554 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.9(11) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.1(11) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 39.9(11) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 140.1(11) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.000(1) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.65(8) 5 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 120.35(8) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 59.65(8) 5_556 5 ?
 O4 Mn4 O4 173.4(10) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O2 91.4(14) 2_556 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 83.5(14) . 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 83.5(14) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O2 91.4(14) . . ?
 O2 Mn4 O2 80.1(19) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O6 119.6(8) 2_556 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 66.6(8) . 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 143.9(7) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 118.8(17) . 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 66.6(8) 2_556 4_456 ?
 O4 Mn4 O6 119.6(8) . 4_456 ?

O2 Mn4 O6 118.8(17) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 143.9(7) . 4_456 ?
 O6 Mn4 O6 65.3(18) 3_554 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 31.9(6) 2_556 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 154.2(7) . 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 106.0(12) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 113.6(9) . 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 94.5(8) 3_554 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 34.8(6) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 154.2(7) 2_556 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 31.9(6) . 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 113.6(9) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 106.0(12) . 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 34.8(6) 3_554 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 94.5(8) 4_456 3_554 ?
 T2 Mn4 T2 127.6(4) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 Fe2 134.0(8) 2_556 . ?
 O4 Mn4 Fe2 41.2(9) . . ?
 O2 Mn4 Fe2 42.6(10) 2_556 . ?
 O2 Mn4 Fe2 88.6(5) . . ?
 O6 Mn4 Fe2 103.8(4) 3_554 . ?
 O6 Mn4 Fe2 126.6(6) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 139.7(3) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 71.08(16) 3_554 . ?
 O4 Mn4 Mg2 41.2(9) 2_556 1_556 ?
 O4 Mn4 Mg2 134.0(8) . 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 88.6(5) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Mg2 42.6(10) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 126.6(6) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Mg2 103.8(4) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 71.08(16) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Mg2 139.7(3) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Mg2 120.5(2) . 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 41.2(9) 2_556 1_556 ?
 O4 Mn4 Fe2 134.0(8) . 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 88.6(5) 2_556 1_556 ?
 O2 Mn4 Fe2 42.6(10) . 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 126.6(6) 3_554 1_556 ?
 O6 Mn4 Fe2 103.8(4) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 71.08(16) 4_456 1_556 ?
 T2 Mn4 Fe2 139.7(3) 3_554 1_556 ?
 Fe2 Mn4 Fe2 120.5(2) . 1_556 ?
 Mg2 Mn4 Fe2 0.00(17) 1_556 1_556 ?
 O6 T1 O1 116(2) 1_554 . ?
 O6 T1 O7 103.5(19) 1_554 . ?
 O1 T1 O7 114(2) . . ?
 O6 T1 O5 107.0(18) 1_554 . ?
 O1 T1 O5 112.6(18) . . ?
 O7 T1 O5 102.6(18) . . ?
 O6 T1 O6 56.6(19) 1_554 2_656 ?
 O1 T1 O6 167.2(8) . 2_656 ?
 O7 T1 O6 78(2) . 2_656 ?
 O5 T1 O6 64.3(17) . 2_656 ?
 O6 T1 O6 90.6(11) 1_554 6_554 ?

O1 T1 O6 102.0(11) . 6_554 ?
 O7 T1 O6 25.4(13) . 6_554 ?
 O5 T1 O6 127.8(13) . 6_554 ?
 O6 T1 O6 88.8(8) 2_656 6_554 ?
 O6 T1 O7 57.0(15) 1_554 5_655 ?
 O1 T1 O7 147.8(10) . 5_655 ?
 O7 T1 O7 49.6(19) . 5_655 ?
 O5 T1 O7 99.0(19) . 5_655 ?
 O6 T1 O7 39.8(7) 2_656 5_655 ?
 O6 T1 O7 50.6(8) 6_554 5_655 ?
 O6 T1 O6 132.0(19) 1_554 . ?
 O1 T1 O6 97.6(11) . . ?
 O7 T1 O6 91.8(11) . . ?
 O5 T1 O6 25.1(12) . . ?
 O6 T1 O6 83.5(9) 2_656 . ?
 O6 T1 O6 116.3(5) 6_554 . ?
 O7 T1 O6 109.4(10) 5_655 . ?
 O6 T1 O5 94.0(18) 1_554 2_656 ?
 O1 T1 O5 140.3(10) . 2_656 ?
 O7 T1 O5 80.6(18) . 2_656 ?
 O5 T1 O5 29(2) . 2_656 ?
 O6 T1 O5 40.1(6) 2_656 2_656 ?
 O6 T1 O5 103.4(9) 6_554 2_656 ?
 O7 T1 O5 70.2(9) 5_655 2_656 ?
 O6 T1 O5 43.5(8) . 2_656 ?
 O4 T2 O2 116.4(17) 3 . ?
 O4 T2 O5 107.1(19) 3 . ?
 O2 T2 O5 114(2) . . ?
 O4 T2 O6 103.7(16) 3 . ?
 O2 T2 O6 110.0(19) . . ?
 O5 T2 O6 104.6(15) . . ?
 O4 T2 Fe4 42.0(9) 3 3 ?
 O2 T2 Fe4 127.6(8) . 3 ?
 O5 T2 Fe4 118(2) . 3 ?
 O6 T2 Fe4 61.8(12) . 3 ?
 O4 T2 Mn4 42.0(9) 3 3 ?
 O2 T2 Mn4 127.6(8) . 3 ?
 O5 T2 Mn4 118(2) . 3 ?
 O6 T2 Mn4 61.8(12) . 3 ?
 Fe4 T2 Mn4 0.00(16) 3 3 ?
 O4 T2 O5 75.8(16) 3 2_656 ?
 O2 T2 O5 167.6(9) . 2_656 ?
 O5 T2 O5 57(2) . 2_656 ?
 O6 T2 O5 67.0(17) . 2_656 ?
 Fe4 T2 O5 62.6(5) 3 2_656 ?
 Mn4 T2 O5 62.6(5) 3 2_656 ?
 O4 T2 Mg2 107.6(13) 3 1_556 ?
 O2 T2 Mg2 32.3(7) . 1_556 ?
 O5 T2 Mg2 141.2(18) . 1_556 ?
 O6 T2 Mg2 83.4(16) . 1_556 ?
 Fe4 T2 Mg2 99.3(2) 3 1_556 ?
 Mn4 T2 Mg2 99.3(2) 3 1_556 ?
 O5 T2 Mg2 149.9(4) 2_656 1_556 ?
 O4 T2 O7 130.7(15) 3 . ?

O2 T2 O7 100.2(12) . . ?
O5 T2 O7 23.9(12) . . ?
O6 T2 O7 92.6(9) . . ?
Fe4 T2 O7 130.4(11) 3 . ?
Mn4 T2 O7 130.4(11) 3 . ?
O5 T2 O7 68.5(10) 2_656 . ?
Mg2 T2 O7 120.5(9) 1_556 . ?
O4 T2 O6 76.9(14) 3 2_657 ?
O2 T2 O6 140.5(9) . 2_657 ?
O5 T2 O6 94.8(18) . 2_657 ?
O6 T2 O6 33(2) . 2_657 ?
Fe4 T2 O6 39.6(4) 3 2_657 ?
Mn4 T2 O6 39.6(4) 3 2_657 ?
O5 T2 O6 41.0(6) 2_656 2_657 ?
Mg2 T2 O6 109.5(5) 1_556 2_657 ?
O7 T2 O6 95.8(9) . 2_657 ?
O4 T2 O5 90.7(9) 3 1_556 ?
O2 T2 O5 97.3(11) . 1_556 ?
O5 T2 O5 130.2(16) . 1_556 ?
O6 T2 O5 25.7(10) . 1_556 ?
Fe4 T2 O5 51.6(6) 3 1_556 ?
Mn4 T2 O5 51.6(6) 3 1_556 ?
O5 T2 O5 84.3(9) 2_656 1_556 ?
Mg2 T2 O5 65.9(7) 1_556 1_556 ?
O7 T2 O5 117.4(5) . 1_556 ?
O6 T2 O5 43.6(8) 2_657 1_556 ?
T1 O1 Fe1 120.8(18) . . ?
T1 O1 Fe3 116.7(17) . . ?
Fe1 O1 Fe3 97.2(19) . . ?
T1 O1 Fe2 118.6(17) . . ?
Fe1 O1 Fe2 97.9(19) . . ?
Fe3 O1 Fe2 101(2) . . ?
T1 O1 O6 32.3(11) . 1_554 ?
Fe1 O1 O6 148(2) . 1_554 ?
Fe3 O1 O6 110.8(13) . 1_554 ?
Fe2 O1 O6 91.1(11) . 1_554 ?
T1 O1 O5 34.4(11) . . ?
Fe1 O1 O5 90.6(12) . . ?
Fe3 O1 O5 143.6(19) . . ?
Fe2 O1 O5 112.6(12) . . ?
O6 O1 O5 57.9(15) 1_554 . ?
T1 O1 O7 33.3(11) . . ?
Fe1 O1 O7 112.6(13) . . ?
Fe3 O1 O7 87.9(12) . . ?
Fe2 O1 O7 147(2) . . ?
O6 O1 O7 56.0(15) 1_554 . ?
O5 O1 O7 56.5(15) . . ?
T1 O1 O6 171.2(10) . 2_556 ?
Fe1 O1 O6 65.7(15) . 2_556 ?
Fe3 O1 O6 66.1(15) . 2_556 ?
Fe2 O1 O6 53.0(14) . 2_556 ?
O6 O1 O6 139.3(11) 1_554 2_556 ?
O5 O1 O6 146.8(11) . 2_556 ?
O7 O1 O6 152.8(13) . 2_556 ?

T1 O1 O6 61.8(12) . . ?
Fe1 O1 O6 59.9(10) . . ?
Fe3 O1 O6 134.6(8) . . ?
Fe2 O1 O6 119.1(7) . . ?
O6 O1 O6 89.0(17) 1_554 . ?
O5 O1 O6 31.2(9) . . ?
O7 O1 O6 69.6(12) . . ?
O6 O1 O6 123.0(10) 2_556 . ?
T2 O2 Mg2 122.4(17) . 1_556 ?
T2 O2 Fe2 122.4(17) . 1_556 ?
Mg2 O2 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
T2 O2 Fe1 118.3(17) . . ?
Mg2 O2 Fe1 98.2(19) 1_556 . ?
Fe2 O2 Fe1 98.2(19) 1_556 . ?
T2 O2 Mn4 120.5(16) . . ?
Mg2 O2 Mn4 93.3(18) 1_556 . ?
Fe2 O2 Mn4 93.3(18) 1_556 . ?
Fe1 O2 Mn4 98.5(19) . . ?
T2 O2 O6 35.2(11) . . ?
Mg2 O2 O6 92.6(11) 1_556 . ?
Fe2 O2 O6 92.6(11) 1_556 . ?
Fe1 O2 O6 110.6(11) . . ?
Mn4 O2 O6 149.0(19) . . ?
T2 O2 O5 33.1(11) . . ?
Mg2 O2 O5 149.4(18) 1_556 . ?
Fe2 O2 O5 149.4(18) 1_556 . ?
Fe1 O2 O5 89.2(10) . . ?
Mn4 O2 O5 115.0(12) . . ?
O6 O2 O5 57.2(14) . . ?
T2 O2 O5 89.1(12) . 3 ?
Mg2 O2 O5 72.5(7) 1_556 3 ?
Fe2 O2 O5 72.5(7) 1_556 3 ?
Fe1 O2 O5 151(2) . 3 ?
Mn4 O2 O5 55.7(7) . 3 ?
O6 O2 O5 97.7(12) . 3 ?
O5 O2 O5 113.1(13) . 3 ?
T2 O2 O6 87.7(12) . 3_554 ?
Mg2 O2 O6 106.0(9) 1_556 3_554 ?
Fe2 O2 O6 106.0(9) 1_556 3_554 ?
Fe1 O2 O6 125.9(12) . 3_554 ?
Mn4 O2 O6 33.9(9) . 3_554 ?
O6 O2 O6 115.6(14) . 3_554 ?
O5 O2 O6 93.0(11) . 3_554 ?
O5 O2 O6 39.1(4) 3 3_554 ?
T2 O2 O5 166.3(9) . 2_556 ?
Mg2 O2 O5 65.0(14) 1_556 2_556 ?
Fe2 O2 O5 65.0(14) 1_556 2_556 ?
Fe1 O2 O5 48.0(13) . 2_556 ?
Mn4 O2 O5 67.7(14) . 2_556 ?
O6 O2 O5 141.0(11) . 2_556 ?
O5 O2 O5 135.0(11) . 2_556 ?
O5 O2 O5 104.5(12) 3 2_556 ?
O6 O2 O5 101.6(11) 3_554 2_556 ?
Mg1 O3 Fe1 0.00(18) 5_556 5_556 ?

Mg1 O3 Fe1 95(2) 5_556 . ?
Fe1 O3 Fe1 95(2) 5_556 . ?
Mg1 O3 Mg3 94(2) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 Mg3 94(2) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 Mg3 94(2) . 1_556 ?
Mg1 O3 Fe3 94(2) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 Fe3 94(2) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 Fe3 94(2) . 1_556 ?
Mg3 O3 Fe3 0.0 1_556 1_556 ?
Mg1 O3 O6 171(2) 5_556 . ?
Fe1 O3 O6 171(2) 5_556 . ?
Fe1 O3 O6 91.3(8) . . ?
Mg3 O3 O6 91.9(10) 1_556 . ?
Fe3 O3 O6 91.9(10) 1_556 . ?
Mg1 O3 O6 91.3(8) 5_556 6 ?
Fe1 O3 O6 91.3(8) 5_556 6 ?
Fe1 O3 O6 171(2) . 6 ?
Mg3 O3 O6 91.9(10) 1_556 6 ?
Fe3 O3 O6 91.9(10) 1_556 6 ?
O6 O3 O6 81.4(17) . 6 ?
Mg1 O3 O7 90.6(11) 5_556 . ?
Fe1 O3 O7 90.6(11) 5_556 . ?
Fe1 O3 O7 90.6(11) . . ?
Mg3 O3 O7 173(3) 1_556 . ?
Fe3 O3 O7 173(3) 1_556 . ?
O6 O3 O7 82.8(16) . . ?
O6 O3 O7 82.8(16) 6 . ?
Mg1 O3 O7 131.1(8) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 O7 131.1(8) 5_556 1_556 ?
Fe1 O3 O7 131.1(8) . 1_556 ?
Mg3 O3 O7 70.9(13) 1_556 1_556 ?
Fe3 O3 O7 70.9(13) 1_556 1_556 ?
O6 O3 O7 45.2(8) . 1_556 ?
O6 O3 O7 45.2(8) 6 1_556 ?
O7 O3 O7 102(2) . 1_556 ?
Mg1 O3 O5 131.0(12) 5_556 . ?
Fe1 O3 O5 131.0(12) 5_556 . ?
Fe1 O3 O5 71.4(10) . . ?
Mg3 O3 O5 132.7(8) 1_556 . ?
Fe3 O3 O5 132.7(8) 1_556 . ?
O6 O3 O5 45.7(8) . . ?
O6 O3 O5 99.3(19) 6 . ?
O7 O3 O5 44.5(8) . . ?
O7 O3 O5 85.1(15) 1_556 . ?
Mg1 O3 O5 71.4(10) 5_556 6 ?
Fe1 O3 O5 71.4(10) 5_556 6 ?
Fe1 O3 O5 131.0(12) . 6 ?
Mg3 O3 O5 132.7(8) 1_556 6 ?
Fe3 O3 O5 132.7(8) 1_556 6 ?
O6 O3 O5 99.3(19) . 6 ?
O6 O3 O5 45.7(8) 6 6 ?
O7 O3 O5 44.5(8) . 6 ?
O7 O3 O5 85.1(15) 1_556 6 ?
O5 O3 O5 82.5(16) . 6 ?

T2 O4 Fe2 145.7(12) 3_554 . ?
T2 O4 Mn4 106.2(10) 3_554 . ?
Fe2 O4 Mn4 97.4(16) . . ?
T2 O4 O6 39.2(10) 3_554 3_554 ?
Fe2 O4 O6 150(2) . 3_554 ?
Mn4 O4 O6 67.1(10) . 3_554 ?
T2 O4 O5 37.2(11) 3_554 3_554 ?
Fe2 O4 O5 109.6(12) . 3_554 ?
Mn4 O4 O5 116.9(13) . 3_554 ?
O6 O4 O5 60.9(7) 3_554 3_554 ?
T2 O4 O5 75.6(13) 3_554 4_455 ?
Fe2 O4 O5 89.6(15) . 4_455 ?
Mn4 O4 O5 70.7(11) . 4_455 ?
O6 O4 O5 61.0(12) 3_554 4_455 ?
O5 O4 O5 54.3(16) 3_554 4_455 ?
T2 O4 O5 109(2) 3_554 . ?
Fe2 O4 O5 92.8(8) . . ?
Mn4 O4 O5 96.2(8) . . ?
O6 O4 O5 114.1(15) 3_554 . ?
O5 O4 O5 135.9(16) 3_554 . ?
O5 O4 O5 166.9(10) 4_455 . ?
T2 O4 O6 106.0(18) 3_554 1_554 ?
Fe2 O4 O6 70.7(10) . 1_554 ?
Mn4 O4 O6 135.8(8) . 1_554 ?
O6 O4 O6 138.7(16) 3_554 1_554 ?
O5 O4 O6 107.1(12) 3_554 1_554 ?
O5 O4 O6 147.4(8) 4_455 1_554 ?
O5 O4 O6 44.6(6) . 1_554 ?
T2 O4 O6 80.1(12) 3_554 4_456 ?
Fe2 O4 O6 109.0(16) . 4_456 ?
Mn4 O4 O6 34.2(6) . 4_456 ?
O6 O4 O6 43.9(17) 3_554 4_456 ?
O5 O4 O6 82.7(10) 3_554 4_456 ?
O5 O4 O6 41.5(6) 4_455 4_456 ?
O5 O4 O6 126.0(7) . 4_456 ?
O6 O4 O6 169.8(5) 1_554 4_456 ?
T2 O4 O5 67.9(8) 3_554 3 ?
Fe2 O4 O5 140.2(14) . 3 ?
Mn4 O4 O5 42.7(7) . 3 ?
O6 O4 O5 33.6(5) 3_554 3 ?
O5 O4 O5 94.6(7) 3_554 3 ?
O5 O4 O5 79.2(9) 4_455 3 ?
O5 O4 O5 90.8(8) . 3 ?
O6 O4 O5 132.4(12) 1_554 3 ?
O6 O4 O5 41.8(8) 4_456 3 ?
T2 O5 T1 133(3) . . ?
T2 O5 O7 141(2) . . ?
T1 O5 O7 38.4(11) . . ?
T2 O5 O4 35.7(10) . 3 ?
T1 O5 O4 147(2) . 3 ?
O7 O5 O4 173.9(13) . 3 ?
T2 O5 O6 37.9(9) . . ?
T1 O5 O6 139(2) . . ?
O7 O5 O6 115.6(10) . . ?

O4 O5 O6 58.7(7) 3 . ?
 T2 O5 O6 146(2) . 1_554 ?
 T1 O5 O6 35.9(10) . 1_554 ?
 O7 O5 O6 58.8(7) . 1_554 ?
 O4 O5 O6 127.0(10) 3 1_554 ?
 O6 O5 O6 174.3(13) . 1_554 ?
 T2 O5 O5 91.8(14) . 2_656 ?
 T1 O5 O5 134(2) . 2_656 ?
 O7 O5 O5 101.8(19) . 2_656 ?
 O4 O5 O5 74.5(12) 3 2_656 ?
 O6 O5 O5 68.2(13) . 2_656 ?
 O6 O5 O5 113(2) 1_554 2_656 ?
 T2 O5 O1 100(3) . . ?
 T1 O5 O1 33.0(11) . . ?
 O7 O5 O1 61.9(16) . . ?
 O4 O5 O1 122(2) 3 . ?
 O6 O5 O1 116(2) . . ?
 O6 O5 O1 61.2(15) 1_554 . ?
 O5 O5 O1 163.6(11) 2_656 . ?
 T2 O5 O2 33.0(13) . . ?
 T1 O5 O2 100(3) . . ?
 O7 O5 O2 118(2) . . ?
 O4 O5 O2 61.6(13) 3 . ?
 O6 O5 O2 60.5(14) . . ?
 O6 O5 O2 120(2) 1_554 . ?
 O5 O5 O2 124.3(11) 2_656 . ?
 O1 O5 O2 67.4(18) . . ?
 T2 O5 O6 139(2) . 2_656 ?
 T1 O5 O6 85.6(15) . 2_656 ?
 O7 O5 O6 74.5(16) . 2_656 ?
 O4 O5 O6 106.5(17) 3 2_656 ?
 O6 O5 O6 122.3(18) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 58.5(18) 1_554 2_656 ?
 O5 O5 O6 54.3(15) 2_656 2_656 ?
 O1 O5 O6 117.6(11) . 2_656 ?
 O2 O5 O6 165.5(10) . 2_656 ?
 T2 O5 Fe4 112.9(9) . 3_554 ?
 T1 O5 Fe4 86.3(8) . 3_554 ?
 O7 O5 Fe4 104.8(10) . 3_554 ?
 O4 O5 Fe4 79.8(8) 3 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 134.1(13) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 51.2(8) 1_554 3_554 ?
 O5 O5 Fe4 83.5(15) 2_656 3_554 ?
 O1 O5 Fe4 101.3(8) . 3_554 ?
 O2 O5 Fe4 117.8(9) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 49.0(7) 2_656 3_554 ?
 T2 O5 Mn4 112.9(9) . 3_554 ?
 T1 O5 Mn4 86.3(8) . 3_554 ?
 O7 O5 Mn4 104.8(10) . 3_554 ?
 O4 O5 Mn4 79.8(8) 3 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 134.1(13) . 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 51.2(8) 1_554 3_554 ?
 O5 O5 Mn4 83.5(15) 2_656 3_554 ?
 O1 O5 Mn4 101.3(8) . 3_554 ?

O2 O5 Mn4 117.8(9) . 3_554 ?
O6 O5 Mn4 49.0(7) 2_656 3_554 ?
Fe4 O5 Mn4 0.00(12) 3_554 3_554 ?
T2 O5 O4 94.1(14) . 4 ?
T1 O5 O4 120.5(14) . 4 ?
O7 O5 O4 122.8(19) . 4 ?
O4 O5 O4 58.9(13) 3 4 ?
O6 O5 O4 100.0(14) . 4 ?
O6 O5 O4 84.6(13) 1_554 4 ?
O5 O5 O4 51.1(11) 2_656 4 ?
O1 O5 O4 137.3(9) . 4 ?
O2 O5 O4 118.0(9) . 4 ?
O6 O5 O4 48.4(9) 2_656 4 ?
Fe4 O5 O4 36.6(5) 3_554 4 ?
Mn4 O5 O4 36.6(5) 3_554 4 ?
T2 O5 T2 108.9(18) . 2_656 ?
T1 O5 T2 116.2(18) . 2_656 ?
O7 O5 T2 100.7(18) . 2_656 ?
O4 O5 T2 78.7(14) 3 2_656 ?
O6 O5 T2 96.5(17) . 2_656 ?
O6 O5 T2 85.9(16) 1_554 2_656 ?
O5 O5 T2 30.7(10) 2_656 2_656 ?
O1 O5 T2 147.0(11) . 2_656 ?
O2 O5 T2 140.1(11) . 2_656 ?
O6 O5 T2 30.8(7) 2_656 2_656 ?
Fe4 O5 T2 53.7(7) 3_554 2_656 ?
Mn4 O5 T2 53.7(7) 3_554 2_656 ?
O4 O5 T2 28.6(7) 4 2_656 ?
T2 O5 O4 74.3(14) . . ?
T1 O5 O4 76.5(14) . . ?
O7 O5 O4 114.7(16) . . ?
O4 O5 O4 70.6(11) 3 . ?
O6 O5 O4 111.8(15) . . ?
O6 O5 O4 71.5(11) 1_554 . ?
O5 O5 O4 136.8(9) 2_656 . ?
O1 O5 O4 58.1(10) . . ?
O2 O5 O4 56.4(10) . . ?
O6 O5 O4 113.3(10) 2_656 . ?
Fe4 O5 O4 66.0(7) 3_554 . ?
Mn4 O5 O4 66.0(7) 3_554 . ?
O4 O5 O4 88.5(4) 4 . ?
T2 O5 O4 115.7(9) 2_656 . ?
T2 O5 O3 75.1(15) . . ?
T1 O5 O3 75.4(14) . . ?
O7 O5 O3 66.2(13) . . ?
O4 O5 O3 110.7(13) 3 . ?
O6 O5 O3 63.9(13) . . ?
O6 O5 O3 111.3(14) 1_554 . ?
O5 O5 O3 115.8(10) 2_656 . ?
O1 O5 O3 58.3(12) . . ?
O2 O5 O3 58.2(11) . . ?
O6 O5 O3 136.3(10) 2_656 . ?
Fe4 O5 O3 159.5(14) 3_554 . ?
Mn4 O5 O3 159.5(14) 3_554 . ?

O4 O5 O3 163.6(10) 4 . ?
 T2 O5 O3 143.8(12) 2_656 . ?
 O4 O5 O3 100.1(16) . . ?
 T2 O5 Fe1 67.7(18) . . ?
 T1 O5 Fe1 67.3(17) . . ?
 O7 O5 Fe1 81.9(17) . . ?
 O4 O5 Fe1 98.5(15) 3 . ?
 O6 O5 Fe1 80.2(16) . . ?
 O6 O5 Fe1 97.6(17) 1_554 . ?
 O5 O5 Fe1 146.6(11) 2_656 . ?
 O1 O5 Fe1 36.4(10) . . ?
 O2 O5 Fe1 36.9(10) . . ?
 O6 O5 Fe1 152.7(9) 2_656 . ?
 Fe4 O5 Fe1 128.1(11) 3_554 . ?
 Mn4 O5 Fe1 128.1(11) 3_554 . ?
 O4 O5 Fe1 150.6(11) 4 . ?
 T2 O5 Fe1 176.5(6) 2_656 . ?
 O4 O5 Fe1 64.8(10) . . ?
 O3 O5 Fe1 35.3(9) . . ?
 T2 O5 Mg2 65.4(9) . 3 ?
 T1 O5 Mg2 132.1(8) . 3 ?
 O7 O5 Mg2 153.4(16) . 3 ?
 O4 O5 Mg2 30.0(7) 3 3 ?
 O6 O5 Mg2 85.0(8) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 100.7(9) 1_554 3 ?
 O5 O5 Mg2 69.0(7) 2_656 3 ?
 O1 O5 Mg2 126.1(10) . 3 ?
 O2 O5 Mg2 86.0(7) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 80.3(9) 2_656 3 ?
 Fe4 O5 Mg2 50.5(4) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Mg2 50.5(4) 3_554 3 ?
 O4 O5 Mg2 32.1(6) 4 3 ?
 T2 O5 Mg2 58.2(6) 2_656 3 ?
 O4 O5 Mg2 68.0(6) . 3 ?
 O3 O5 Mg2 140.5(9) . 3 ?
 Fe1 O5 Mg2 120.0(9) . 3 ?
 T2 O5 Fe2 65.4(9) . 3 ?
 T1 O5 Fe2 132.1(8) . 3 ?
 O7 O5 Fe2 153.4(16) . 3 ?
 O4 O5 Fe2 30.0(7) 3 3 ?
 O6 O5 Fe2 85.0(8) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 100.7(9) 1_554 3 ?
 O5 O5 Fe2 69.0(7) 2_656 3 ?
 O1 O5 Fe2 126.1(10) . 3 ?
 O2 O5 Fe2 86.0(7) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 80.3(9) 2_656 3 ?
 Fe4 O5 Fe2 50.5(4) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Fe2 50.5(4) 3_554 3 ?
 O4 O5 Fe2 32.1(6) 4 3 ?
 T2 O5 Fe2 58.2(6) 2_656 3 ?
 O4 O5 Fe2 68.0(6) . 3 ?
 O3 O5 Fe2 140.5(9) . 3 ?
 Fe1 O5 Fe2 120.0(9) . 3 ?
 Mg2 O5 Fe2 0.00(6) 3 3 ?

T1 O6 T2 134(3) 1_556 . ?
 T1 O6 O4 138.0(18) 1_556 3 ?
 T2 O6 O4 37.2(9) . 3 ?
 T1 O6 O7 38.6(11) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O7 150(2) . 1_556 ?
 O4 O6 O7 172.9(14) 3 1_556 ?
 T1 O6 Fe4 111.4(9) 1_556 3 ?
 T2 O6 Fe4 83.4(10) . 3 ?
 O4 O6 Fe4 46.3(8) 3 3 ?
 O7 O6 Fe4 126.7(15) 1_556 3 ?
 T1 O6 Mn4 111.4(9) 1_556 3 ?
 T2 O6 Mn4 83.4(10) . 3 ?
 O4 O6 Mn4 46.3(8) 3 3 ?
 O7 O6 Mn4 126.7(15) 1_556 3 ?
 Fe4 O6 Mn4 0.00(11) 3 3 ?
 T1 O6 O5 148(2) 1_556 . ?
 T2 O6 O5 37.5(9) . . ?
 O4 O6 O5 60.4(7) 3 . ?
 O7 O6 O5 126.2(10) 1_556 . ?
 Fe4 O6 O5 99.2(12) 3 . ?
 Mn4 O6 O5 99.2(12) 3 . ?
 T1 O6 O5 37.1(10) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O5 138.4(17) . 1_556 ?
 O4 O6 O5 113.9(9) 3 1_556 ?
 O7 O6 O5 59.5(7) 1_556 1_556 ?
 Fe4 O6 O5 75.4(9) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O5 75.4(9) 3 1_556 ?
 O5 O6 O5 174.3(14) . 1_556 ?
 T1 O6 O2 99(3) 1_556 . ?
 T2 O6 O2 34.7(12) . . ?
 O4 O6 O2 62.8(14) 3 . ?
 O7 O6 O2 122(2) 1_556 . ?
 Fe4 O6 O2 102.3(9) 3 . ?
 Mn4 O6 O2 102.3(9) 3 . ?
 O5 O6 O2 62.3(14) . . ?
 O5 O6 O2 117(2) 1_556 . ?
 T1 O6 O1 32.0(13) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O1 102(3) . 1_556 ?
 O4 O6 O1 118.3(19) 3 1_556 ?
 O7 O6 O1 62.0(15) 1_556 1_556 ?
 Fe4 O6 O1 119.5(10) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O1 119.5(10) 3 1_556 ?
 O5 O6 O1 122(2) . 1_556 ?
 O5 O6 O1 60.9(14) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 O1 67.6(18) . 1_556 ?
 T1 O6 O6 94.2(14) 1_556 2_657 ?
 T2 O6 O6 128(2) . 2_657 ?
 O4 O6 O6 96.3(18) 3 2_657 ?
 O7 O6 O6 78.8(15) 1_556 2_657 ?
 Fe4 O6 O6 57.3(9) 3 2_657 ?
 Mn4 O6 O6 57.3(9) 3 2_657 ?
 O5 O6 O6 112(2) . 2_657 ?
 O5 O6 O6 67.1(13) 1_556 2_657 ?
 O2 O6 O6 158.8(11) . 2_657 ?

O1 O6 O6 125.4(12) 1_556 2_657 ?
 T1 O6 O5 144(2) 1_556 2_656 ?
 T2 O6 O5 82.3(15) . 2_656 ?
 O4 O6 O5 70.5(13) 3 2_656 ?
 O7 O6 O5 109.9(18) 1_556 2_656 ?
 Fe4 O6 O5 69.5(11) 3 2_656 ?
 Mn4 O6 O5 69.5(11) 3 2_656 ?
 O5 O6 O5 57.5(18) . 2_656 ?
 O5 O6 O5 121.2(18) 1_556 2_656 ?
 O2 O6 O5 116.1(11) . 2_656 ?
 O1 O6 O5 170.1(10) 1_556 2_656 ?
 O6 O6 O5 54.4(15) 2_657 2_656 ?
 T1 O6 O3 77.2(16) 1_556 . ?
 T2 O6 O3 80.0(15) . . ?
 O4 O6 O3 117.2(14) 3 . ?
 O7 O6 O3 69.5(13) 1_556 . ?
 Fe4 O6 O3 162.7(13) 3 . ?
 Mn4 O6 O3 162.7(13) 3 . ?
 O5 O6 O3 70.4(12) . . ?
 O5 O6 O3 114.3(16) 1_556 . ?
 O2 O6 O3 60.8(12) . . ?
 O1 O6 O3 59.9(13) 1_556 . ?
 O6 O6 O3 138.8(10) 2_657 . ?
 O5 O6 O3 112.9(11) 2_656 . ?
 T1 O6 T1 113.8(18) 1_556 2_656 ?
 T2 O6 T1 112.2(19) . 2_656 ?
 O4 O6 T1 93.7(16) 3 2_656 ?
 O7 O6 T1 84.4(17) 1_556 2_656 ?
 Fe4 O6 T1 71.9(11) 3 2_656 ?
 Mn4 O6 T1 71.9(11) 3 2_656 ?
 O5 O6 T1 85.3(16) . 2_656 ?
 O5 O6 T1 94.8(16) 1_556 2_656 ?
 O2 O6 T1 146.1(12) . 2_656 ?
 O1 O6 T1 145.0(11) 1_556 2_656 ?
 O6 O6 T1 29.2(9) 2_657 2_656 ?
 O5 O6 T1 30.1(7) 2_656 2_656 ?
 O3 O6 T1 119.4(11) . 2_656 ?
 T1 O6 O7 99.3(14) 1_556 5_656 ?
 T2 O6 O7 121.6(16) . 5_656 ?
 O4 O6 O7 117.7(19) 3 5_656 ?
 O7 O6 O7 62.7(18) 1_556 5_656 ?
 Fe4 O6 O7 99.8(17) 3 5_656 ?
 Mn4 O6 O7 99.8(17) 3 5_656 ?
 O5 O6 O7 85.4(14) . 5_656 ?
 O5 O6 O7 97.3(14) 1_556 5_656 ?
 O2 O6 O7 143.2(10) . 5_656 ?
 O1 O6 O7 124.0(10) 1_556 5_656 ?
 O6 O6 O7 47.9(12) 2_657 5_656 ?
 O5 O6 O7 47.3(10) 2_656 5_656 ?
 O3 O6 O7 93.2(11) . 5_656 ?
 T1 O6 O7 28.4(8) 2_656 5_656 ?
 T1 O6 Mg2 66.3(18) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 Mg2 68.2(16) . 1_556 ?
 O4 O6 Mg2 82.2(14) 3 1_556 ?

O7 O6 Mg2 98.8(18) 1_556 1_556 ?
 Fe4 O6 Mg2 100.6(9) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Mg2 100.6(9) 3 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 98.4(16) . 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 80.9(15) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 Mg2 36.2(10) . 1_556 ?
 O1 O6 Mg2 36.9(10) 1_556 1_556 ?
 O6 O6 Mg2 144.3(10) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 149.9(8) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Mg2 68.4(13) . 1_556 ?
 T1 O6 Mg2 172.2(7) 2_656 1_556 ?
 O7 O6 Mg2 158.3(12) 5_656 1_556 ?
 T1 O6 Fe2 66.3(18) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 Fe2 68.2(16) . 1_556 ?
 O4 O6 Fe2 82.2(14) 3 1_556 ?
 O7 O6 Fe2 98.8(18) 1_556 1_556 ?
 Fe4 O6 Fe2 100.6(9) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Fe2 100.6(9) 3 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 98.4(16) . 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 80.9(15) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 Fe2 36.2(10) . 1_556 ?
 O1 O6 Fe2 36.9(10) 1_556 1_556 ?
 O6 O6 Fe2 144.3(10) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 149.9(8) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Fe2 68.4(13) . 1_556 ?
 T1 O6 Fe2 172.2(7) 2_656 1_556 ?
 O7 O6 Fe2 158.3(12) 5_656 1_556 ?
 Mg2 O6 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
 T1 O6 O4 70.8(13) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O4 75.3(13) . 1_556 ?
 O4 O6 O4 67.7(11) 3 1_556 ?
 O7 O6 O4 109.4(14) 1_556 1_556 ?
 Fe4 O6 O4 69.1(8) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O4 69.1(8) 3 1_556 ?
 O5 O6 O4 112.6(13) . 1_556 ?
 O5 O6 O4 63.9(11) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 O4 57.1(10) . 1_556 ?
 O1 O6 O4 55.3(9) 1_556 1_556 ?
 O6 O6 O4 113.7(8) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 O4 134.6(10) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 O4 101.5(17) . 1_556 ?
 T1 O6 O4 139.0(11) 2_656 1_556 ?
 O7 O6 O4 159.7(11) 5_656 1_556 ?
 Mg2 O6 O4 33.1(7) 1_556 1_556 ?
 Fe2 O6 O4 33.1(7) 1_556 1_556 ?
 T1 O6 Fe1 92(2) 1_556 . ?
 T2 O6 Fe1 51.6(14) . . ?
 O4 O6 Fe1 87.3(13) 3 . ?
 O7 O6 Fe1 98.7(16) 1_556 . ?
 Fe4 O6 Fe1 130.8(9) 3 . ?
 Mn4 O6 Fe1 130.8(9) 3 . ?
 O5 O6 Fe1 58.8(13) . . ?
 O5 O6 Fe1 123.3(19) 1_556 . ?
 O2 O6 Fe1 29.2(6) . . ?

O1 O6 Fe1 62.8(12) 1_556 . ?
 O6 O6 Fe1 166.5(12) 2_657 . ?
 O5 O6 Fe1 115.4(7) 2_656 . ?
 O3 O6 Fe1 32.0(7) . . ?
 T1 O6 Fe1 137.7(6) 2_656 . ?
 O7 O6 Fe1 119.1(8) 5_656 . ?
 Mg2 O6 Fe1 49.1(6) 1_556 . ?
 Fe2 O6 Fe1 49.1(6) 1_556 . ?
 O4 O6 Fe1 79.8(10) 1_556 . ?
 T1 O7 T1 134(4) 6 . ?
 T1 O7 O6 139(2) 6 1_554 ?
 T1 O7 O6 37.9(11) . 1_554 ?
 T1 O7 O6 37.9(11) 6 6_554 ?
 T1 O7 O6 139(2) . 6_554 ?
 O6 O7 O6 113.3(13) 1_554 6_554 ?
 T1 O7 O5 147(2) 6 . ?
 T1 O7 O5 39.0(10) . . ?
 O6 O7 O5 61.7(5) 1_554 . ?
 O6 O7 O5 174.6(17) 6_554 . ?
 T1 O7 O5 39.0(10) 6 6 ?
 T1 O7 O5 147(2) . 6 ?
 O6 O7 O5 174.6(17) 1_554 6 ?
 O6 O7 O5 61.7(5) 6_554 6 ?
 O5 O7 O5 123.1(13) . 6 ?
 T1 O7 O1 32.5(13) 6 6 ?
 T1 O7 O1 102(3) . 6 ?
 O6 O7 O1 119(2) 1_554 6 ?
 O6 O7 O1 62.1(14) 6_554 6 ?
 O5 O7 O1 122(2) . 6 ?
 O5 O7 O1 61.6(14) 6 6 ?
 T1 O7 O1 102(3) 6 . ?
 T1 O7 O1 32.5(13) . . ?
 O6 O7 O1 62.1(15) 1_554 . ?
 O6 O7 O1 119(2) 6_554 . ?
 O5 O7 O1 61.6(14) . . ?
 O5 O7 O1 122(2) 6 . ?
 O1 O7 O1 70(2) 6 . ?
 T1 O7 O7 107.2(15) 6 5_655 ?
 T1 O7 O7 107.2(15) . 5_655 ?
 O6 O7 O7 71.5(13) 1_554 5_655 ?
 O6 O7 O7 71.5(13) 6_554 5_655 ?
 O5 O7 O7 104(2) . 5_655 ?
 O5 O7 O7 104(2) 6 5_655 ?
 O1 O7 O7 132.7(11) 6 5_655 ?
 O1 O7 O7 132.7(11) . 5_655 ?
 T1 O7 O3 78.0(17) 6 . ?
 T1 O7 O3 78.0(17) . . ?
 O6 O7 O3 115.9(15) 1_554 . ?
 O6 O7 O3 115.9(15) 6_554 . ?
 O5 O7 O3 69.3(12) . . ?
 O5 O7 O3 69.3(12) 6 . ?
 O1 O7 O3 59.3(13) 6 . ?
 O1 O7 O3 59.3(13) . . ?
 O7 O7 O3 163(3) 5_655 . ?

T1 O7 Fe3 67(2) 6 . ?
T1 O7 Fe3 67(2) . . ?
O6 O7 Fe3 82.6(16) 1_554 . ?
O6 O7 Fe3 82.6(16) 6_554 . ?
O5 O7 Fe3 98.6(18) . . ?
O5 O7 Fe3 98.6(18) 6 . ?
O1 O7 Fe3 37.4(11) 6 . ?
O1 O7 Fe3 37.4(11) . . ?
O7 O7 Fe3 131.1(16) 5_655 . ?
O3 O7 Fe3 66.2(14) . . ?
T1 O7 O3 73.8(16) 6 1_554 ?
T1 O7 O3 73.8(16) . 1_554 ?
O6 O7 O3 65.3(12) 1_554 1_554 ?
O6 O7 O3 65.3(12) 6_554 1_554 ?
O5 O7 O3 112.7(15) . 1_554 ?
O5 O7 O3 112.7(15) 6 1_554 ?
O1 O7 O3 58.5(13) 6 1_554 ?
O1 O7 O3 58.5(13) . 1_554 ?
O7 O7 O3 95.2(15) 5_655 1_554 ?
O3 O7 O3 102(2) . 1_554 ?
Fe3 O7 O3 35.9(11) . 1_554 ?
T1 O7 O6 151(3) 6 2_656 ?
T1 O7 O6 73.1(15) . 2_656 ?
O6 O7 O6 53.3(17) 1_554 2_656 ?
O6 O7 O6 117.3(18) 6_554 2_656 ?
O5 O7 O6 58.3(13) . 2_656 ?
O5 O7 O6 126(2) 6 2_656 ?
O1 O7 O6 172.0(15) 6 2_656 ?
O1 O7 O6 105.6(9) . 2_656 ?
O7 O7 O6 45.8(11) 5_655 2_656 ?
O3 O7 O6 124.4(10) . 2_656 ?
Fe3 O7 O6 135.5(9) . 2_656 ?
O3 O7 O6 113.6(10) 1_554 2_656 ?
T1 O7 O6 73.1(15) 6 5_656 ?
T1 O7 O6 151(3) . 5_656 ?
O6 O7 O6 117.3(18) 1_554 5_656 ?
O6 O7 O6 53.3(17) 6_554 5_656 ?
O5 O7 O6 126(2) . 5_656 ?
O5 O7 O6 58.3(13) 6 5_656 ?
O1 O7 O6 105.6(9) 6 5_656 ?
O1 O7 O6 172.0(14) . 5_656 ?
O7 O7 O6 45.8(11) 5_655 5_656 ?
O3 O7 O6 124.4(9) . 5_656 ?
Fe3 O7 O6 135.5(9) . 5_656 ?
O3 O7 O6 113.6(10) 1_554 5_656 ?
O6 O7 O6 78.4(18) 2_656 5_656 ?
T1 O7 T1 130.4(19) 6 2_655 ?
T1 O7 T1 87.0(16) . 2_655 ?
O6 O7 T1 55.7(14) 1_554 2_655 ?
O6 O7 T1 94.1(16) 6_554 2_655 ?
O5 O7 T1 81.1(14) . 2_655 ?
O5 O7 T1 121(2) 6 2_655 ?
O1 O7 T1 152.7(10) 6 2_655 ?
O1 O7 T1 117.1(9) . 2_655 ?

O7 O7 T1 23.2(5) 5_655 2_655 ?
 O3 O7 T1 147.9(11) . 2_655 ?
 Fe3 O7 T1 133.1(8) . 2_655 ?
 O3 O7 T1 100.8(11) 1_554 2_655 ?
 O6 O7 T1 23.6(5) 2_656 2_655 ?
 O6 O7 T1 64.2(12) 5_656 2_655 ?
 T1 O7 T1 87.0(16) 6 5_655 ?
 T1 O7 T1 130.4(19) . 5_655 ?
 O6 O7 T1 94.1(16) 1_554 5_655 ?
 O6 O7 T1 55.7(14) 6_554 5_655 ?
 O5 O7 T1 121(2) . 5_655 ?
 O5 O7 T1 81.1(14) 6 5_655 ?
 O1 O7 T1 117.1(9) 6 5_655 ?
 O1 O7 T1 152.7(10) . 5_655 ?
 O7 O7 T1 23.2(5) 5_655 5_655 ?
 O3 O7 T1 147.9(11) . 5_655 ?
 Fe3 O7 T1 133.1(8) . 5_655 ?
 O3 O7 T1 100.8(11) 1_554 5_655 ?
 O6 O7 T1 64.2(12) 2_656 5_655 ?
 O6 O7 T1 23.6(5) 5_656 5_655 ?
 T1 O7 T1 44.7(7) 2_655 5_655 ?
 T1 O7 Fe1 49.5(15) 6 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 94(2) . 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 125(2) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 86.1(14) 6_554 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 98.7(16) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 58.1(14) 6 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 28.1(7) 6 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 63.8(14) . 5_556 ?
 O7 O7 Fe1 156.7(3) 5_655 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 31.6(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Fe1 48.2(8) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 80.4(15) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 155.9(8) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 115.1(6) 5_656 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 178.8(12) 2_655 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 134.89(14) 5_655 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 49.5(15) 6 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 94(2) . 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 125(2) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 86.1(14) 6_554 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 98.7(16) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 58.1(14) 6 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 28.1(7) 6 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 63.8(14) . 5_556 ?
 O7 O7 Mg1 156.7(3) 5_655 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 31.6(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Mg1 48.2(8) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 80.4(15) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 155.9(8) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 115.1(6) 5_656 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 178.8(12) 2_655 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 134.89(14) 5_655 5_556 ?
 Fe1 O7 Mg1 0.00(13) 5_556 5_556 ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.275
_diffn_reflns_theta_full 28.58
_diffn_measured_fraction_theta_full 0.275
_refine_diff_density_max 1.400
_refine_diff_density_min -1.037
_refine_diff_density_rms 0.309