

data_proto7

_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 9.4276(9)
_cell_length_b 18.356(3)
_cell_length_c 5.3503(6)
_cell_angle_alpha 90.00
_cell_angle_beta 90.00

```

_cell_angle_gamma          90.00
_cell_volume              925.89(19)
_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 3.487
_exptl_crystal_density_method 'not measured'
_exptl_crystal_F_000       948
_exptl_absorpt_coefficient_mu 5.193
_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        8152
_diffrn_reflns_av_R_equivalents 0.0275
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI 0.0266
_diffrn_reflns_limit_h_min    -11
_diffrn_reflns_limit_h_max     14
_diffrn_reflns_limit_k_min    -27
_diffrn_reflns_limit_k_max     28
_diffrn_reflns_limit_l_min    -8
_diffrn_reflns_limit_l_max     8
_diffrn_reflns_theta_min      3.97
_diffrn_reflns_theta_max      33.51
_reflns_number_total          1807
_reflns_number_gt             1362
_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)+(0.0847P)^2+0.6760P] 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        0.0002(8)
_refine_ls_extinction_expression
'Fc^*=kFc[1+0.001xFc^2\l^3/\sin(2\q)]^-1/4'
_refine_ls_number_reflns         1807
_refine_ls_number_parameters     106
_refine_ls_number_restraints     5
_refine_ls_R_factor_all          0.0763
_refine_ls_R_factor_gt           0.0541
_refine_ls_wR_factor_ref         0.1443
_refine_ls_wR_factor_gt          0.1312
_refine_ls_goodness_of_fit_ref   1.100
_refine_ls_restrained_S_all      1.098
_refine_ls_shift/su_max          1.067
_refine_ls_shift/su_mean         0.275

```

```
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 0.08795(3) 0.5000 0.0082(2) Uani 0.825(3) 2 d SP . .
Mg1 Mg 0.0000 0.08795(3) 0.5000 0.0082(2) Uani 0.175(3) 2 d SP . .
Fe2 Fe 0.0000 0.17963(4) 0.0000 0.0081(2) Uani 0.728(3) 2 d SP . .
Mg2 Mg 0.0000 0.17963(4) 0.0000 0.0081(2) Uani 0.272(3) 2 d SP . .
Fe3 Fe 0.0000 0.0000 0.0000 0.0074(2) Uani 0.797(4) 4 d SP . .
Mg3 Mg 0.0000 0.0000 0.0000 0.0074(2) Uani 0.203(4) 4 d SP . .
Mn4 Mn 0.0000 0.26056(4) 0.5000 0.01172(19) Uani 0.717(4) 2 d SP . .
Fe4 Fe 0.0000 0.26056(4) 0.5000 0.01172(19) Uani 0.283(4) 2 d SP . .
T1 Si 0.28441(9) 0.08379(4) 0.16400(15) 0.0068(2) Uani 1 1 d . . .
T2 Si 0.29578(9) 0.16761(4) 0.66101(14) 0.0072(2) Uani 1 1 d . . .
O1 O 0.1131(2) 0.08815(11) 0.1623(4) 0.0091(4) Uani 1 1 d . . .
O2 O 0.1241(2) 0.17428(11) 0.6661(4) 0.0098(4) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.1144(4) 0.0000 0.6616(6) 0.0110(6) Uani 1 2 d SD . .
O4 O 0.3812(2) 0.24281(12) 0.6852(4) 0.0124(4) Uani 1 1 d . . .
O5 O 0.3451(2) 0.12362(13) 0.4116(4) 0.0134(5) Uani 1 1 d . . .
O6 O 0.3474(2) 0.12386(14) 0.9163(4) 0.0148(5) Uani 1 1 d . . .
O7 O 0.3375(4) 0.0000 0.1629(6) 0.0129(6) Uani 1 2 d S . .
H H 0.032(5) 0.0000 0.750(13) 0.050 Uiso 1 2 d SD . .

```

loop_

```

_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_23
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_12
Fe1 0.0094(4) 0.0090(4) 0.0063(3) 0.000 0.0000(3) 0.000
Mg1 0.0094(4) 0.0090(4) 0.0063(3) 0.000 0.0000(3) 0.000
Fe2 0.0095(4) 0.0078(4) 0.0070(3) 0.000 -0.0001(3) 0.000
Mg2 0.0095(4) 0.0078(4) 0.0070(3) 0.000 -0.0001(3) 0.000
Fe3 0.0089(5) 0.0067(4) 0.0067(4) 0.000 -0.0003(4) 0.000
Mg3 0.0089(5) 0.0067(4) 0.0067(4) 0.000 -0.0003(4) 0.000
Mn4 0.0122(4) 0.0143(3) 0.0087(3) 0.000 0.0019(2) 0.000
Fe4 0.0122(4) 0.0143(3) 0.0087(3) 0.000 0.0019(2) 0.000
T1 0.0064(4) 0.0075(4) 0.0064(3) 0.0004(3) 0.0001(3) -0.0005(2)
T2 0.0068(4) 0.0084(4) 0.0065(3) 0.0001(3) -0.0003(3) -0.0018(3)
O1 0.0058(10) 0.0123(10) 0.0092(9) -0.0009(7) 0.0002(9) -0.0008(7)
O2 0.0080(11) 0.0116(10) 0.0097(9) 0.0014(8) -0.0001(8) 0.0010(7)
O3 0.0108(16) 0.0116(14) 0.0104(12) 0.000 0.0024(13) 0.000
O4 0.0134(11) 0.0117(10) 0.0119(9) -0.0019(8) 0.0000(9) -0.0042(8)
O5 0.0087(11) 0.0193(12) 0.0122(9) -0.0078(8) -0.0007(8) 0.0008(9)
O6 0.0091(12) 0.0227(12) 0.0125(9) 0.0091(9) 0.0004(9) 0.0019(9)
O7 0.0110(16) 0.0081(13) 0.0195(15) 0.000 -0.0017(13) 0.000

```

_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 2.098(2) . ?  
Fe1 O1 2.098(2) 2_556 ?  
Fe1 O3 2.125(2) 5_556 ?  
Fe1 O3 2.125(2) . ?  
Fe1 O2 2.161(2) . ?  
Fe1 O2 2.161(2) 2_556 ?  
Fe1 Mg3 3.1246(4) 1_556 ?  
Fe1 Mg2 3.1604(6) 1_556 ?  
Fe1 Mn4 3.1684(10) . ?  
Fe1 Mg1 3.2289(13) 5_556 ?  
Fe2 O4 2.065(2) 3_554 ?  
Fe2 O4 2.065(2) 4_455 ?  
Fe2 O2 2.137(2) 2_556 ?  
Fe2 O2 2.137(2) 1_554 ?  
Fe2 O1 2.170(2) 2 ?  
Fe2 O1 2.170(2) . ?  
Fe2 Mn4 3.0599(5) . ?  
Fe2 Mn4 3.0599(5) 1_554 ?  
Fe2 Mg1 3.1604(6) 1_554 ?  
Fe2 O6 3.460(2) 2_556 ?  
Fe3 O3 2.107(3) 5_556 ?  
Fe3 O3 2.107(3) 1_554 ?  
Fe3 O1 2.123(2) . ?  
Fe3 O1 2.123(2) 5 ?  
Fe3 O1 2.123(2) 6 ?  
Fe3 O1 2.123(2) 2 ?  
Fe3 Mg1 3.1246(4) 5 ?  
Fe3 Mg1 3.1246(4) 1_554 ?  
Fe3 Mg1 3.1246(4) 5_556 ?  
Fe3 Mg2 3.2973(8) 5 ?  
Mn4 O4 2.024(2) 4_456 ?  
Mn4 O4 2.024(2) 3_554 ?  
Mn4 O2 2.160(2) 2_556 ?  
Mn4 O2 2.160(2) . ?  
Mn4 O6 2.602(3) 3_554 ?  
Mn4 O6 2.602(3) 4_456 ?  
Mn4 T2 2.9555(9) 4_456 ?  
Mn4 T2 2.9555(9) 3_554 ?  
Mn4 Mg2 3.0599(5) 1_556 ?  
Mn4 Fe2 3.0599(5) 1_556 ?  
T1 O5 1.618(2) . ?  
T1 O1 1.617(2) . ?
```

T1 O7 1.6174(14) . ?
 T1 O6 1.628(2) 1_554 ?
 T1 O6 3.574(3) 2_656 ?
 T1 Mn4 3.6145(10) 3_554 ?
 T1 O5 4.072(3) 6 ?
 T1 O6 4.079(3) 6_554 ?
 T1 O5 4.131(2) 1_554 ?
 T1 O6 4.135(3) . ?
 T2 O4 1.603(2) . ?
 T2 O2 1.624(2) . ?
 T2 O5 1.627(2) . ?
 T2 O6 1.658(2) . ?
 T2 Mn4 2.9555(9) 3 ?
 T2 O5 3.502(2) 2_656 ?
 T2 O7 4.089(2) . ?
 T2 O6 4.093(2) 1_554 ?
 T2 O7 4.103(2) 1_556 ?
 T2 O5 4.123(2) 1_556 ?
 O1 O5 2.644(3) . ?
 O1 O6 2.654(3) 1_554 ?
 O1 O7 2.664(3) . ?
 O1 O6 4.410(3) 2_556 ?
 O2 Mg2 2.137(2) 1_556 ?
 O2 Fe2 2.137(2) 1_556 ?
 O2 O5 2.657(3) . ?
 O2 O6 2.661(3) . ?
 O2 O5 3.946(3) 3 ?
 O2 O6 3.948(3) 3_554 ?
 O2 Mn4 4.145(2) 3 ?
 O3 Mg3 2.107(3) 1_556 ?
 O3 Fe3 2.107(3) 1_556 ?
 O3 Mg1 2.125(2) 5_556 ?
 O3 Fe1 2.125(2) 5_556 ?
 O3 O7 3.398(5) . ?
 O3 O7 3.409(5) 1_556 ?
 O3 O5 3.416(3) 6 ?
 O3 O5 3.416(3) . ?
 O3 O6 3.443(4) . ?
 O3 O6 3.443(4) 6 ?
 O3 H 0.91(2) . ?
 O4 Fe4 2.024(2) 3 ?
 O4 Mn4 2.024(2) 3 ?
 O4 Mg2 2.065(2) 3 ?
 O4 Fe2 2.065(2) 3 ?
 O4 O6 2.529(3) . ?
 O4 O5 2.654(3) . ?
 O4 O5 3.423(3) 2_656 ?
 O4 O5 3.468(3) 3 ?
 O4 O6 3.564(3) 3_554 ?
 O4 Mn4 3.834(2) 3_554 ?
 O5 O7 2.632(3) . ?
 O5 O6 2.650(3) 1_554 ?
 O5 O6 2.700(3) . ?
 O5 O5 3.069(5) 2_656 ?

O5 O6 3.389(3) 2_656 ?
 O5 Fe4 3.392(2) 3_554 ?
 O5 Mn4 3.392(2) 3_554 ?
 O5 O4 3.423(3) 2_656 ?
 O5 O4 3.468(3) 3_554 ?
 O5 T2 3.502(2) 2_656 ?
 O5 Mg2 3.924(2) 3 ?
 O5 Fe2 3.924(2) 3 ?
 O6 T1 1.628(2) 1_556 ?
 O6 Fe4 2.602(3) 3 ?
 O6 Mn4 2.602(3) 3 ?
 O6 O7 2.630(3) 1_556 ?
 O6 O5 2.650(3) 1_556 ?
 O6 O1 2.654(3) 1_556 ?
 O6 O6 3.014(5) 2_657 ?
 O6 O5 3.389(3) 2_656 ?
 O6 Mg2 3.460(2) 1_556 ?
 O6 Fe2 3.460(2) 1_556 ?
 O6 O4 3.564(3) 3 ?
 O6 T1 3.574(3) 2_656 ?
 O6 O7 3.765(4) 5_656 ?
 O6 O2 3.948(3) 3 ?
 O6 O4 3.983(3) 2_657 ?
 O7 T1 1.6174(14) 6 ?
 O7 O5 2.632(3) 6 ?
 O7 O6 2.630(3) 1_554 ?
 O7 O6 2.630(3) 6_554 ?
 O7 O1 2.664(3) 6 ?
 O7 O3 3.409(5) 1_554 ?
 O7 O7 3.525(7) 5_655 ?
 O7 O6 3.765(4) 2_656 ?
 O7 O6 3.765(4) 5_656 ?
 O7 Mg1 3.998(3) 5_556 ?
 O7 Fe1 3.998(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 179.80(12) . 2_556 ?
 O1 Fe1 O3 84.76(10) . 5_556 ?
 O1 Fe1 O3 95.39(10) 2_556 5_556 ?
 O1 Fe1 O3 95.39(10) . . ?
 O1 Fe1 O3 84.76(10) 2_556 . ?
 O3 Fe1 O3 81.14(13) 5_556 . ?
 O1 Fe1 O2 94.48(8) . . ?
 O1 Fe1 O2 85.38(8) 2_556 . ?
 O3 Fe1 O2 177.53(9) 5_556 . ?
 O3 Fe1 O2 96.60(9) . . ?
 O1 Fe1 O2 85.38(8) . 2_556 ?

O1 Fe1 O2 94.48(8) 2_556 2_556 ?
 O3 Fe1 O2 96.60(9) 5_556 2_556 ?
 O3 Fe1 O2 177.53(9) . 2_556 ?
 O2 Fe1 O2 85.67(11) . 2_556 ?
 O1 Fe1 Mg3 137.59(6) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg3 42.56(6) 2_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg3 87.47(7) 5_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg3 42.20(8) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg3 91.53(5) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg3 136.98(6) 2_556 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg2 136.73(6) . 1_556 ?
 O1 Fe1 Mg2 43.12(6) 2_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg2 138.49(8) 5_556 1_556 ?
 O3 Fe1 Mg2 93.44(7) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg2 42.38(6) . 1_556 ?
 O2 Fe1 Mg2 87.58(6) 2_556 1_556 ?
 Mg3 Fe1 Mg2 63.283(14) 1_556 1_556 ?
 O1 Fe1 Mn4 89.90(6) . . ?
 O1 Fe1 Mn4 89.90(6) 2_556 . ?
 O3 Fe1 Mn4 139.43(7) 5_556 . ?
 O3 Fe1 Mn4 139.43(7) . . ?
 O2 Fe1 Mn4 42.84(6) . . ?
 O2 Fe1 Mn4 42.84(6) 2_556 . ?
 Mg3 Fe1 Mn4 121.111(11) 1_556 . ?
 Mg2 Fe1 Mn4 57.828(14) 1_556 . ?
 O1 Fe1 Mg1 90.10(6) . 5_556 ?
 O1 Fe1 Mg1 90.10(6) 2_556 5_556 ?
 O3 Fe1 Mg1 40.57(7) 5_556 5_556 ?
 O3 Fe1 Mg1 40.57(7) . 5_556 ?
 O2 Fe1 Mg1 137.16(6) . 5_556 ?
 O2 Fe1 Mg1 137.16(6) 2_556 5_556 ?
 Mg3 Fe1 Mg1 58.889(11) 1_556 5_556 ?
 Mg2 Fe1 Mg1 122.172(14) 1_556 5_556 ?
 Mn4 Fe1 Mg1 180.0 . 5_556 ?
 O4 Fe2 O4 92.83(13) 3_554 4_455 ?
 O4 Fe2 O2 85.85(8) 3_554 2_556 ?
 O4 Fe2 O2 97.81(9) 4_455 2_556 ?
 O4 Fe2 O2 97.81(9) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 O2 85.85(8) 4_455 1_554 ?
 O2 Fe2 O2 174.73(12) 2_556 1_554 ?
 O4 Fe2 O1 172.72(8) 3_554 2 ?
 O4 Fe2 O1 94.30(8) 4_455 2 ?
 O2 Fe2 O1 91.72(8) 2_556 2 ?
 O2 Fe2 O1 84.20(8) 1_554 2 ?
 O4 Fe2 O1 94.30(8) 3_554 . ?
 O4 Fe2 O1 172.72(8) 4_455 . ?
 O2 Fe2 O1 84.20(8) 2_556 . ?
 O2 Fe2 O1 91.72(8) 1_554 . ?
 O1 Fe2 O1 78.61(11) 2 . ?
 O4 Fe2 Mn4 41.04(6) 3_554 . ?
 O4 Fe2 Mn4 94.87(6) 4_455 . ?
 O2 Fe2 Mn4 44.90(6) 2_556 . ?
 O2 Fe2 Mn4 138.84(6) 1_554 . ?
 O1 Fe2 Mn4 136.50(6) 2 . ?

O1 Fe2 Mn4 91.48(6) . . ?
 O4 Fe2 Mn4 94.87(6) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 Mn4 41.04(6) 4_455 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 138.84(6) 2_556 1_554 ?
 O2 Fe2 Mn4 44.90(6) 1_554 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 91.48(6) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mn4 136.50(6) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mn4 121.91(3) . 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 140.65(6) 3_554 1_554 ?
 O4 Fe2 Mg1 87.76(6) 4_455 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 133.07(6) 2_556 1_554 ?
 O2 Fe2 Mg1 42.96(6) 1_554 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 41.35(6) 2 1_554 ?
 O1 Fe2 Mg1 85.79(6) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 176.87(3) . 1_554 ?
 Mn4 Fe2 Mg1 61.216(17) 1_554 1_554 ?
 O4 Fe2 O6 130.95(7) 3_554 2_556 ?
 O4 Fe2 O6 75.67(8) 4_455 2_556 ?
 O2 Fe2 O6 50.23(7) 2_556 2_556 ?
 O2 Fe2 O6 127.77(7) 1_554 2_556 ?
 O1 Fe2 O6 50.06(7) 2 2_556 ?
 O1 Fe2 O6 100.61(7) . 2_556 ?
 Mn4 Fe2 O6 91.75(4) . 2_556 ?
 Mn4 Fe2 O6 104.87(4) 1_554 2_556 ?
 Mg1 Fe2 O6 87.25(4) 1_554 2_556 ?
 O3 Fe3 O3 180.00(15) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 O1 84.58(8) 5_556 . ?
 O3 Fe3 O1 95.42(8) 1_554 . ?
 O3 Fe3 O1 95.42(8) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 O1 84.58(8) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 O1 180.00(16) . 5 ?
 O3 Fe3 O1 84.58(8) 5_556 6 ?
 O3 Fe3 O1 95.42(8) 1_554 6 ?
 O1 Fe3 O1 99.30(12) . 6 ?
 O1 Fe3 O1 80.70(12) 5 6 ?
 O3 Fe3 O1 95.42(8) 5_556 2 ?
 O3 Fe3 O1 84.58(8) 1_554 2 ?
 O1 Fe3 O1 80.70(12) . 2 ?
 O1 Fe3 O1 99.30(12) 5 2 ?
 O1 Fe3 O1 180.00(13) 6 2 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.35(6) 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.65(6) 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.06(6) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.94(6) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.50(6) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.50(6) 2 5 ?
 O3 Fe3 Mg1 137.35(6) 5_556 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.65(6) 1_554 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.50(6) . 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.50(6) 5 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.06(6) 6 1_554 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.94(6) 2 1_554 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 62.22(2) 5 1_554 ?
 O3 Fe3 Mg1 42.65(6) 5_556 5_556 ?

O3 Fe3 Mg1 137.35(6) 1_554 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 92.50(6) . 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 87.50(6) 5 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 41.94(6) 6 5_556 ?
 O1 Fe3 Mg1 138.06(6) 2 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 117.78(2) 5 5_556 ?
 Mg1 Fe3 Mg1 180.00(2) 1_554 5_556 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.0 5_556 5 ?
 O3 Fe3 Mg2 90.0 1_554 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 139.65(6) . 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 40.35(6) 5 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 40.35(6) 6 5 ?
 O1 Fe3 Mg2 139.65(6) 2 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 58.889(11) 5 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 121.111(11) 1_554 5 ?
 Mg1 Fe3 Mg2 58.889(11) 5_556 5 ?
 O4 Mn4 O4 176.50(13) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O2 91.16(9) 4_456 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 86.27(8) 3_554 2_556 ?
 O4 Mn4 O2 86.27(8) 4_456 . ?
 O4 Mn4 O2 91.16(9) 3_554 . ?
 O2 Mn4 O2 85.70(12) 2_556 . ?
 O4 Mn4 O6 118.30(8) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 64.89(8) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 145.73(7) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 O6 111.66(8) . 3_554 ?
 O4 Mn4 O6 64.89(8) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 O6 118.30(8) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 111.66(8) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 O6 145.73(7) . 4_456 ?
 O6 Mn4 O6 70.76(10) 3_554 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 30.94(6) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 152.25(7) 3_554 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 103.11(6) 2_556 4_456 ?
 O2 Mn4 T2 115.30(6) . 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 95.85(6) 3_554 4_456 ?
 O6 Mn4 T2 33.96(5) 4_456 4_456 ?
 O4 Mn4 T2 152.25(7) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 T2 30.94(6) 3_554 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 115.30(6) 2_556 3_554 ?
 O2 Mn4 T2 103.11(6) . 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 33.96(5) 3_554 3_554 ?
 O6 Mn4 T2 95.85(6) 4_456 3_554 ?
 T2 Mn4 T2 127.01(4) 4_456 3_554 ?
 O4 Mn4 Fe2 135.46(7) 4_456 . ?
 O4 Mn4 Fe2 42.07(6) 3_554 . ?
 O2 Mn4 Fe2 44.30(6) 2_556 . ?
 O2 Mn4 Fe2 90.22(6) . . ?
 O6 Mn4 Fe2 104.21(5) 3_554 . ?
 O6 Mn4 Fe2 123.11(5) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 138.859(16) 4_456 . ?
 T2 Mn4 Fe2 71.343(19) 3_554 . ?
 O4 Mn4 Mg2 42.07(6) 4_456 1_556 ?
 O4 Mn4 Mg2 135.46(7) 3_554 1_556 ?

O2 Mn4 Mg2 90.22(6) 2_556 1_556 ?
O2 Mn4 Mg2 44.30(6) . 1_556 ?
O6 Mn4 Mg2 123.11(5) 3_554 1_556 ?
O6 Mn4 Mg2 104.21(5) 4_456 1_556 ?
T2 Mn4 Mg2 71.343(19) 4_456 1_556 ?
T2 Mn4 Mg2 138.859(16) 3_554 1_556 ?
Fe2 Mn4 Mg2 121.91(3) . 1_556 ?
O4 Mn4 Fe2 42.07(6) 4_456 1_556 ?
O4 Mn4 Fe2 135.46(7) 3_554 1_556 ?
O2 Mn4 Fe2 90.22(6) 2_556 1_556 ?
O2 Mn4 Fe2 44.30(6) . 1_556 ?
O6 Mn4 Fe2 123.11(5) 3_554 1_556 ?
O6 Mn4 Fe2 104.21(5) 4_456 1_556 ?
T2 Mn4 Fe2 71.343(19) 4_456 1_556 ?
T2 Mn4 Fe2 138.859(16) 3_554 1_556 ?
Fe2 Mn4 Fe2 121.91(3) . 1_556 ?
Mg2 Mn4 Fe2 0.00(2) 1_556 1_556 ?
O5 T1 O1 109.61(12) . . ?
O5 T1 O7 108.85(15) . . ?
O1 T1 O7 110.87(14) . . ?
O5 T1 O6 109.47(13) . 1_554 ?
O1 T1 O6 109.72(12) . 1_554 ?
O7 T1 O6 108.29(15) . 1_554 ?
O5 T1 O6 70.24(9) . 2_656 ?
O1 T1 O6 163.56(9) . 2_656 ?
O7 T1 O6 83.95(13) . 2_656 ?
O6 T1 O6 56.96(11) 1_554 2_656 ?
O5 T1 Mn4 69.06(9) . 3_554 ?
O1 T1 Mn4 121.41(8) . 3_554 ?
O7 T1 Mn4 125.22(13) . 3_554 ?
O6 T1 Mn4 40.54(9) 1_554 3_554 ?
O6 T1 Mn4 42.44(4) 2_656 3_554 ?
O5 T1 O5 96.10(12) . 6 ?
O1 T1 O5 100.87(9) . 6 ?
O7 T1 O5 21.33(12) . 6 ?
O6 T1 O5 129.51(10) 1_554 6 ?
O6 T1 O5 95.45(6) 2_656 6 ?
Mn4 T1 O5 137.65(4) 3_554 6 ?
O5 T1 O6 129.55(10) . 6_554 ?
O1 T1 O6 100.94(8) . 6_554 ?
O7 T1 O6 20.80(12) . 6_554 ?
O6 T1 O6 96.01(12) 1_554 6_554 ?
O6 T1 O6 90.68(5) 2_656 6_554 ?
Mn4 T1 O6 125.31(4) 3_554 6_554 ?
O5 T1 O6 37.95(5) 6 6_554 ?
O5 T1 O5 131.99(12) . 1_554 ?
O1 T1 O5 97.13(9) . 1_554 ?
O7 T1 O5 97.00(12) . 1_554 ?
O6 T1 O5 22.52(10) 1_554 1_554 ?
O6 T1 O5 73.25(5) 2_656 1_554 ?
Mn4 T1 O5 62.98(3) 3_554 1_554 ?
O5 T1 O5 117.59(5) 6 1_554 ?
O6 T1 O5 80.14(5) 6_554 1_554 ?
O5 T1 O6 21.81(10) . . ?

O1 T1 O6 98.06(9) . . ?
 O7 T1 O6 97.36(12) . . ?
 O6 T1 O6 131.28(12) 1_554 . ?
 O6 T1 O6 86.62(5) 2_656 . ?
 Mn4 T1 O6 90.86(4) 3_554 . ?
 O5 T1 O6 80.17(5) 6 . ?
 O6 T1 O6 117.49(5) 6_554 . ?
 O5 T1 O6 153.79(5) 1_554 . ?
 O4 T2 O2 115.74(12) . . ?
 O4 T2 O5 110.48(12) . . ?
 O2 T2 O5 109.65(12) . . ?
 O4 T2 O6 101.72(12) . . ?
 O2 T2 O6 108.38(12) . . ?
 O5 T2 O6 110.57(13) . . ?
 O4 T2 Mn4 40.46(8) . 3 ?
 O2 T2 Mn4 127.26(8) . 3 ?
 O5 T2 Mn4 122.56(9) . 3 ?
 O6 T2 Mn4 61.26(9) . 3 ?
 O4 T2 Mn4 90.01(9) . . ?
 O2 T2 Mn4 31.12(8) . . ?
 O5 T2 Mn4 106.10(9) . . ?
 O6 T2 Mn4 134.16(9) . . ?
 Mn4 T2 Mn4 117.94(3) 3 . ?
 O4 T2 O5 73.87(10) . 2_656 ?
 O2 T2 O5 169.45(10) . 2_656 ?
 O5 T2 O5 61.20(11) . 2_656 ?
 O6 T2 O5 72.30(9) . 2_656 ?
 Mn4 T2 O5 62.69(4) 3 2_656 ?
 Mn4 T2 O5 152.31(4) . 2_656 ?
 O4 T2 O7 130.71(9) . . ?
 O2 T2 O7 99.42(9) . . ?
 O5 T2 O7 20.76(10) . . ?
 O6 T2 O7 98.30(10) . . ?
 Mn4 T2 O7 132.29(5) 3 . ?
 Mn4 T2 O7 107.04(5) . . ?
 O5 T2 O7 70.19(6) 2_656 . ?
 O4 T2 O6 100.83(9) . 1_554 ?
 O2 T2 O6 98.61(8) . 1_554 ?
 O5 T2 O6 21.68(10) . 1_554 ?
 O6 T2 O6 132.24(12) . 1_554 ?
 Mn4 T2 O6 127.40(4) 3 1_554 ?
 Mn4 T2 O6 87.08(4) . 1_554 ?
 O5 T2 O6 74.44(5) 2_656 1_554 ?
 O7 T2 O6 37.50(5) . 1_554 ?
 O4 T2 O7 123.00(9) . 1_556 ?
 O2 T2 O7 98.11(9) . 1_556 ?
 O5 T2 O7 97.88(10) . 1_556 ?
 O6 T2 O7 21.43(10) . 1_556 ?
 Mn4 T2 O7 82.55(4) 3 1_556 ?
 Mn4 T2 O7 128.64(5) . 1_556 ?
 O5 T2 O7 78.87(6) 2_656 1_556 ?
 O7 T2 O7 81.555(19) . 1_556 ?
 O6 T2 O7 118.59(5) 1_554 1_556 ?
 O4 T2 O5 91.90(9) . 1_556 ?

O2 T2 O5 96.36(8) . 1_556 ?
O5 T2 O5 132.00(12) . 1_556 ?
O6 T2 O5 21.44(9) . 1_556 ?
Mn4 T2 O5 54.27(4) 3 1_556 ?
Mn4 T2 O5 116.11(4) . 1_556 ?
O5 T2 O5 87.36(5) 2_656 1_556 ?
O7 T2 O5 118.46(5) . 1_556 ?
O6 T2 O5 153.68(5) 1_554 1_556 ?
O7 T2 O5 37.32(5) 1_556 1_556 ?
T1 O1 Fe1 120.16(12) . . ?
T1 O1 Fe3 117.77(12) . . ?
Fe1 O1 Fe3 95.50(9) . . ?
T1 O1 Fe2 122.08(12) . . ?
Fe1 O1 Fe2 95.53(9) . . ?
Fe3 O1 Fe2 100.34(9) . . ?
T1 O1 O5 35.20(7) . . ?
Fe1 O1 O5 89.21(9) . . ?
Fe3 O1 O5 144.04(11) . . ?
Fe2 O1 O5 114.69(10) . . ?
T1 O1 O6 35.27(7) . 1_554 ?
Fe1 O1 O6 148.26(11) . 1_554 ?
Fe3 O1 O6 113.79(10) . 1_554 ?
Fe2 O1 O6 91.11(9) . 1_554 ?
O5 O1 O6 60.03(8) . 1_554 ?
T1 O1 O7 34.56(7) . . ?
Fe1 O1 O7 113.67(11) . . ?
Fe3 O1 O7 86.36(9) . . ?
Fe2 O1 O7 149.39(12) . . ?
O5 O1 O7 59.44(9) . . ?
O6 O1 O7 59.29(9) 1_554 . ?
T1 O1 Mn4 108.60(9) . . ?
Fe1 O1 Mn4 56.56(5) . . ?
Fe3 O1 Mn4 133.54(9) . . ?
Fe2 O1 Mn4 53.67(5) . . ?
O5 O1 Mn4 77.70(7) . . ?
O6 O1 Mn4 105.29(8) 1_554 . ?
O7 O1 Mn4 136.77(9) . . ?
T1 O1 O6 172.29(11) . 2_556 ?
Fe1 O1 O6 65.31(6) . 2_556 ?
Fe3 O1 O6 65.18(6) . 2_556 ?
Fe2 O1 O6 50.46(6) . 2_556 ?
O5 O1 O6 145.69(9) . 2_556 ?
O6 O1 O6 137.34(9) 1_554 2_556 ?
O7 O1 O6 150.73(9) . 2_556 ?
Mn4 O1 O6 69.22(5) . 2_556 ?
T2 O2 Mg2 124.28(12) . 1_556 ?
T2 O2 Fe2 124.28(12) . 1_556 ?
Mg2 O2 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
T2 O2 Mn4 126.03(12) . . ?
Mg2 O2 Mn4 90.79(8) 1_556 . ?
Fe2 O2 Mn4 90.79(8) 1_556 . ?
T2 O2 Fe1 118.52(12) . . ?
Mg2 O2 Fe1 94.66(9) 1_556 . ?
Fe2 O2 Fe1 94.66(9) 1_556 . ?

Mn4 O2 Fe1 94.31(9) . . ?
T2 O2 O5 35.22(7) . . ?
Mg2 O2 O5 150.86(11) 1_556 . ?
Fe2 O2 O5 150.86(11) 1_556 . ?
Mn4 O2 O5 118.06(10) . . ?
Fe1 O2 O5 87.54(9) . . ?
T2 O2 O6 36.24(7) . . ?
Mg2 O2 O6 91.64(9) 1_556 . ?
Fe2 O2 O6 91.64(9) 1_556 . ?
Mn4 O2 O6 152.92(12) . . ?
Fe1 O2 O6 112.35(10) . . ?
O5 O2 O6 61.03(8) . . ?
T2 O2 O5 90.18(9) . 3 ?
Mg2 O2 O5 73.67(7) 1_556 3 ?
Fe2 O2 O5 73.67(7) 1_556 3 ?
Mn4 O2 O5 59.18(6) . 3 ?
Fe1 O2 O5 150.01(9) . 3 ?
O5 O2 O5 116.22(8) . 3 ?
O6 O2 O5 95.81(9) . 3 ?
T2 O2 O6 89.84(9) . 3_554 ?
Mg2 O2 O6 106.08(8) 1_556 3_554 ?
Fe2 O2 O6 106.08(8) 1_556 3_554 ?
Mn4 O2 O6 37.77(5) . 3_554 ?
Fe1 O2 O6 125.86(8) . 3_554 ?
O5 O2 O6 95.83(8) . 3_554 ?
O6 O2 O6 116.28(8) . 3_554 ?
O5 O2 O6 39.23(5) 3 3_554 ?
T2 O2 Mn4 34.58(6) . 3 ?
Mg2 O2 Mn4 95.42(7) 1_556 3 ?
Fe2 O2 Mn4 95.42(7) 1_556 3 ?
Mn4 O2 Mn4 115.39(7) . 3 ?
Fe1 O2 Mn4 148.40(8) . 3 ?
O5 O2 Mn4 69.59(7) . 3 ?
O6 O2 Mn4 37.55(6) . 3 ?
O5 O2 Mn4 61.47(5) 3 3 ?
O6 O2 Mn4 79.44(5) 3_554 3 ?
Mg3 O3 Fe3 0.0 1_556 1_556 ?
Mg3 O3 Mg1 95.16(11) 1_556 5_556 ?
Fe3 O3 Mg1 95.16(11) 1_556 5_556 ?
Mg3 O3 Fe1 95.16(11) 1_556 5_556 ?
Fe3 O3 Fe1 95.16(11) 1_556 5_556 ?
Mg1 O3 Fe1 0.00(2) 5_556 5_556 ?
Mg3 O3 Fe1 95.16(11) 1_556 . ?
Fe3 O3 Fe1 95.16(11) 1_556 . ?
Mg1 O3 Fe1 98.86(13) 5_556 . ?
Fe1 O3 Fe1 98.86(13) 5_556 . ?
Mg3 O3 O7 172.53(15) 1_556 . ?
Fe3 O3 O7 172.53(15) 1_556 . ?
Mg1 O3 O7 89.69(9) 5_556 . ?
Fe1 O3 O7 89.69(9) 5_556 . ?
Fe1 O3 O7 89.69(9) . . ?
Mg3 O3 O7 68.89(10) 1_556 1_556 ?
Fe3 O3 O7 68.89(10) 1_556 1_556 ?
Mg1 O3 O7 129.29(7) 5_556 1_556 ?

Fe1 O3 O7 129.29(7) 5_556 1_556 ?
 Fe1 O3 O7 129.29(7) . 1_556 ?
 O7 O3 O7 103.64(13) . 1_556 ?
 Mg3 O3 O5 131.47(8) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O5 131.47(8) 1_556 6 ?
 Mg1 O3 O5 70.08(6) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 70.08(6) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O5 131.94(13) . 6 ?
 O7 O3 O5 45.44(6) . 6 ?
 O7 O3 O5 85.13(9) 1_556 6 ?
 Mg3 O3 O5 131.47(8) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O5 131.47(8) 1_556 . ?
 Mg1 O3 O5 131.94(13) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 131.94(13) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O5 70.08(6) . . ?
 O7 O3 O5 45.44(6) . . ?
 O7 O3 O5 85.13(9) 1_556 . ?
 O5 O3 O5 83.25(11) 6 . ?
 Mg3 O3 O6 89.22(9) 1_556 . ?
 Fe3 O3 O6 89.22(9) 1_556 . ?
 Mg1 O3 O6 170.57(12) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 170.57(12) 5_556 . ?
 Fe1 O3 O6 89.04(5) . . ?
 O7 O3 O6 85.17(9) . . ?
 O7 O3 O6 45.15(6) 1_556 . ?
 O5 O3 O6 100.80(10) 6 . ?
 O5 O3 O6 46.37(6) . . ?
 Mg3 O3 O6 89.22(9) 1_556 6 ?
 Fe3 O3 O6 89.22(9) 1_556 6 ?
 Mg1 O3 O6 89.04(5) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 89.04(5) 5_556 6 ?
 Fe1 O3 O6 170.57(12) . 6 ?
 O7 O3 O6 85.17(9) . 6 ?
 O7 O3 O6 45.15(6) 1_556 6 ?
 O5 O3 O6 46.37(6) 6 6 ?
 O5 O3 O6 100.80(10) . 6 ?
 O6 O3 O6 82.66(11) . 6 ?
 Mg3 O3 H 28(5) 1_556 . ?
 Fe3 O3 H 28(5) 1_556 . ?
 Mg1 O3 H 77(3) 5_556 . ?
 Fe1 O3 H 77(3) 5_556 . ?
 Fe1 O3 H 77(3) . . ?
 O7 O3 H 160(5) . . ?
 O7 O3 H 97(5) 1_556 . ?
 O5 O3 H 138.37(6) 6 . ?
 O5 O3 H 138.37(7) . . ?
 O6 O3 H 110(4) . . ?
 O6 O3 H 110(4) 6 . ?
 T2 O4 Fe4 108.60(12) . 3 ?
 T2 O4 Mn4 108.60(12) . 3 ?
 Fe4 O4 Mn4 0.00(4) 3 3 ?
 T2 O4 Mg2 145.82(12) . 3 ?
 Fe4 O4 Mg2 96.89(9) 3 3 ?
 Mn4 O4 Mg2 96.89(9) 3 3 ?

T2 O4 Fe2 145.82(12) . 3 ?
Fe4 O4 Fe2 96.89(9) 3 3 ?
Mn4 O4 Fe2 96.89(9) 3 3 ?
Mg2 O4 Fe2 0.00(3) 3 3 ?
T2 O4 O6 39.92(8) . . ?
Fe4 O4 O6 68.68(9) 3 . ?
Mn4 O4 O6 68.68(9) 3 . ?
Mg2 O4 O6 153.90(13) 3 . ?
Fe2 O4 O6 153.90(13) 3 . ?
T2 O4 O5 35.06(7) . . ?
Fe4 O4 O5 120.31(11) 3 . ?
Mn4 O4 O5 120.31(11) 3 . ?
Mg2 O4 O5 111.90(10) 3 . ?
Fe2 O4 O5 111.90(10) 3 . ?
O6 O4 O5 62.74(9) . . ?
T2 O4 O5 79.39(10) . 2_656 ?
Fe4 O4 O5 71.89(8) 3 2_656 ?
Mn4 O4 O5 71.89(8) 3 2_656 ?
Mg2 O4 O5 87.65(8) 3 2_656 ?
Fe2 O4 O5 87.65(8) 3 2_656 ?
O6 O4 O5 67.49(8) . 2_656 ?
O5 O4 O5 59.07(10) . 2_656 ?
T2 O4 O5 109.15(11) . 3 ?
Fe4 O4 O5 94.10(8) 3 3 ?
Mn4 O4 O5 94.10(8) 3 3 ?
Mg2 O4 O5 90.80(8) 3 3 ?
Fe2 O4 O5 90.80(8) 3 3 ?
O6 O4 O5 111.23(10) . 3 ?
O5 O4 O5 134.16(9) . 3 ?
O5 O4 O5 165.58(8) 2_656 3 ?
T2 O4 O6 104.78(11) . 3_554 ?
Fe4 O4 O6 133.76(10) 3 3_554 ?
Mn4 O4 O6 133.76(10) 3 3_554 ?
Mg2 O4 O6 70.17(7) 3 3_554 ?
Fe2 O4 O6 70.17(7) 3 3_554 ?
O6 O4 O6 135.57(9) . 3_554 ?
O5 O4 O6 105.43(9) . 3_554 ?
O5 O4 O6 146.47(8) 2_656 3_554 ?
O5 O4 O6 44.25(6) 3 3_554 ?
T2 O4 Mn4 64.62(8) . . ?
Fe4 O4 Mn4 139.01(9) 3 . ?
Mn4 O4 Mn4 139.01(9) 3 . ?
Mg2 O4 Mn4 109.50(8) 3 . ?
Fe2 O4 Mn4 109.50(8) 3 . ?
O6 O4 Mn4 94.81(8) . . ?
O5 O4 Mn4 78.63(7) . . ?
O5 O4 Mn4 137.70(8) 2_656 . ?
O5 O4 Mn4 55.96(5) 3 . ?
O6 O4 Mn4 41.64(5) 3_554 . ?
T2 O4 Mn4 93.18(8) . 3_554 ?
Fe4 O4 Mn4 129.31(9) 3 3_554 ?
Mn4 O4 Mn4 129.31(9) 3 3_554 ?
Mg2 O4 Mn4 52.67(5) 3 3_554 ?
Fe2 O4 Mn4 52.67(5) 3 3_554 ?

O6 O4 Mn4 119.36(9) . 3_554 ?
O5 O4 Mn4 59.79(7) . 3_554 ?
O5 O4 Mn4 67.95(5) 2_656 3_554 ?
O5 O4 Mn4 121.67(7) 3 3_554 ?
O6 O4 Mn4 78.57(6) 3_554 3_554 ?
Mn4 O4 Mn4 91.65(5) . 3_554 ?
T1 O5 T2 142.60(16) . . ?
T1 O5 O7 35.57(9) . . ?
T2 O5 O7 146.58(15) . . ?
T1 O5 O1 35.19(8) . . ?
T2 O5 O1 107.42(12) . . ?
O7 O5 O1 60.66(10) . . ?
T1 O5 O6 35.38(8) . 1_554 ?
T2 O5 O6 145.21(15) . 1_554 ?
O7 O5 O6 59.73(10) . 1_554 ?
O1 O5 O6 60.16(8) . 1_554 ?
T1 O5 O4 150.39(15) . . ?
T2 O5 O4 34.46(7) . . ?
O7 O5 O4 173.29(13) . . ?
O1 O5 O4 125.96(11) . . ?
O6 O5 O4 123.30(13) 1_554 . ?
T1 O5 O2 107.48(12) . . ?
T2 O5 O2 35.13(7) . . ?
O7 O5 O2 122.65(12) . . ?
O1 O5 O2 72.29(9) . . ?
O6 O5 O2 121.21(11) 1_554 . ?
O4 O5 O2 61.92(8) . . ?
T1 O5 O6 145.33(15) . . ?
T2 O5 O6 35.08(8) . . ?
O7 O5 O6 120.48(13) . . ?
O1 O5 O6 120.77(11) . . ?
O6 O5 O6 179.07(15) 1_554 . ?
O4 O5 O6 56.37(8) . . ?
O2 O5 O6 59.55(8) . . ?
T1 O5 O5 126.07(13) . 2_656 ?
T2 O5 O5 91.12(11) . 2_656 ?
O7 O5 O5 100.47(10) . 2_656 ?
O1 O5 O5 160.51(10) . 2_656 ?
O6 O5 O5 107.48(12) 1_554 2_656 ?
O4 O5 O5 73.05(8) . 2_656 ?
O2 O5 O5 126.03(12) . 2_656 ?
O6 O5 O5 71.61(10) . 2_656 ?
T1 O5 Fe1 71.57(8) . . ?
T2 O5 Fe1 72.77(9) . . ?
O7 O5 Fe1 82.90(10) . . ?
O1 O5 Fe1 38.73(6) . . ?
O6 O5 Fe1 98.58(8) 1_554 . ?
O4 O5 Fe1 101.97(8) . . ?
O2 O5 Fe1 40.09(6) . . ?
O6 O5 Fe1 82.36(8) . . ?
O5 O5 Fe1 151.64(11) 2_656 . ?
T1 O5 O6 83.06(10) . 2_656 ?
T2 O5 O6 131.95(12) . 2_656 ?
O7 O5 O6 76.26(10) . 2_656 ?

O1 O5 O6 116.54(9) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 58.35(9) 1_554 2_656 ?
 O4 O5 O6 100.08(10) . 2_656 ?
 O2 O5 O6 159.35(11) . 2_656 ?
 O6 O5 O6 120.74(9) . 2_656 ?
 O5 O5 O6 49.13(8) 2_656 2_656 ?
 Fe1 O5 O6 154.63(8) . 2_656 ?
 T1 O5 Fe4 84.48(9) . 3_554 ?
 T2 O5 Fe4 110.15(11) . 3_554 ?
 O7 O5 Fe4 102.94(10) . 3_554 ?
 O1 O5 Fe4 100.54(8) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 49.17(7) 1_554 3_554 ?
 O4 O5 Fe4 77.66(8) . 3_554 ?
 O2 O5 Fe4 116.81(9) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 130.16(10) . 3_554 ?
 O5 O5 Fe4 77.90(7) 2_656 3_554 ?
 Fe1 O5 Fe4 129.18(7) . 3_554 ?
 O6 O5 Fe4 45.14(6) 2_656 3_554 ?
 T1 O5 Mn4 84.48(9) . 3_554 ?
 T2 O5 Mn4 110.15(11) . 3_554 ?
 O7 O5 Mn4 102.94(10) . 3_554 ?
 O1 O5 Mn4 100.54(8) . 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 49.17(7) 1_554 3_554 ?
 O4 O5 Mn4 77.66(8) . 3_554 ?
 O2 O5 Mn4 116.81(9) . 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 130.16(10) . 3_554 ?
 O5 O5 Mn4 77.90(7) 2_656 3_554 ?
 Fe1 O5 Mn4 129.18(7) . 3_554 ?
 O6 O5 Mn4 45.14(6) 2_656 3_554 ?
 Fe4 O5 Mn4 0.000(18) 3_554 3_554 ?
 T1 O5 O3 78.18(10) . . ?
 T2 O5 O3 80.01(10) . . ?
 O7 O5 O3 66.91(10) . . ?
 O1 O5 O3 60.47(8) . . ?
 O6 O5 O3 113.44(10) 1_554 . ?
 O4 O5 O3 114.40(10) . . ?
 O2 O5 O3 62.13(8) . . ?
 O6 O5 O3 67.33(9) . . ?
 O5 O5 O3 119.03(9) 2_656 . ?
 Fe1 O5 O3 36.59(5) . . ?
 O6 O5 O3 138.45(10) 2_656 . ?
 Fe4 O5 O3 160.87(9) 3_554 . ?
 Mn4 O5 O3 160.87(9) 3_554 . ?
 T1 O5 O4 115.57(11) . 2_656 ?
 T2 O5 O4 91.29(10) . 2_656 ?
 O7 O5 O4 119.68(11) . 2_656 ?
 O1 O5 O4 134.82(10) . 2_656 ?
 O6 O5 O4 80.88(9) 1_554 2_656 ?
 O4 O5 O4 57.32(9) . 2_656 ?
 O2 O5 O4 116.43(9) . 2_656 ?
 O6 O5 O4 98.30(9) . 2_656 ?
 O5 O5 O4 47.88(6) 2_656 2_656 ?
 Fe1 O5 O4 151.40(9) . 2_656 ?
 O6 O5 O4 43.59(6) 2_656 2_656 ?

Fe4 O5 O4 34.55(4) 3_554 2_656 ?
 Mn4 O5 O4 34.55(4) 3_554 2_656 ?
 O3 O5 O4 164.58(10) . 2_656 ?
 T1 O5 O4 79.39(10) . 3_554 ?
 T2 O5 O4 76.10(9) . 3_554 ?
 O7 O5 O4 114.59(11) . 3_554 ?
 O1 O5 O4 59.26(8) . 3_554 ?
 O6 O5 O4 69.79(9) 1_554 3_554 ?
 O4 O5 O4 71.86(7) . 3_554 ?
 O2 O5 O4 56.58(7) . 3_554 ?
 O6 O5 O4 110.67(9) . 3_554 ?
 O5 O5 O4 133.85(6) 2_656 3_554 ?
 Fe1 O5 O4 65.82(6) . 3_554 ?
 O6 O5 O4 110.14(9) 2_656 3_554 ?
 Fe4 O5 O4 66.10(6) 3_554 3_554 ?
 Mn4 O5 O4 66.10(6) 3_554 3_554 ?
 O3 O5 O4 102.40(9) . 3_554 ?
 O4 O5 O4 87.65(6) 2_656 3_554 ?
 T1 O5 T2 110.81(10) . 2_656 ?
 T2 O5 T2 104.65(10) . 2_656 ?
 O7 O5 T2 99.73(10) . 2_656 ?
 O1 O5 T2 143.20(9) . 2_656 ?
 O6 O5 T2 83.16(8) 1_554 2_656 ?
 O4 O5 T2 75.37(7) . 2_656 ?
 O2 O5 T2 137.25(9) . 2_656 ?
 O6 O5 T2 95.91(8) . 2_656 ?
 O5 O5 T2 27.69(5) 2_656 2_656 ?
 Fe1 O5 T2 177.34(7) . 2_656 ?
 O6 O5 T2 27.78(4) 2_656 2_656 ?
 Fe4 O5 T2 50.74(4) 3_554 2_656 ?
 Mn4 O5 T2 50.74(4) 3_554 2_656 ?
 O3 O5 T2 144.31(9) . 2_656 ?
 O4 O5 T2 26.74(4) 2_656 2_656 ?
 O4 O5 T2 113.13(8) 3_554 2_656 ?
 T1 O5 Mg2 130.25(12) . 3 ?
 T2 O5 Mg2 63.32(8) . 3 ?
 O7 O5 Mg2 149.84(11) . 3 ?
 O1 O5 Mg2 126.53(9) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 96.66(9) 1_554 3 ?
 O4 O5 Mg2 29.23(5) . 3 ?
 O2 O5 Mg2 84.72(7) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 82.82(8) . 3 ?
 O5 O5 Mg2 66.98(3) 2_656 3 ?
 Fe1 O5 Mg2 121.59(6) . 3 ?
 O6 O5 Mg2 75.10(7) 2_656 3 ?
 Fe4 O5 Mg2 48.78(3) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Mg2 48.78(3) 3_554 3 ?
 O3 O5 Mg2 143.24(8) . 3 ?
 O4 O5 Mg2 31.72(4) 2_656 3 ?
 O4 O5 Mg2 67.69(6) 3_554 3 ?
 T2 O5 Mg2 56.05(4) 2_656 3 ?
 T1 O5 Fe2 130.25(12) . 3 ?
 T2 O5 Fe2 63.32(8) . 3 ?
 O7 O5 Fe2 149.84(11) . 3 ?

O1 O5 Fe2 126.53(9) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 96.66(9) 1_554 3 ?
 O4 O5 Fe2 29.23(5) . 3 ?
 O2 O5 Fe2 84.72(7) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 82.82(8) . 3 ?
 O5 O5 Fe2 66.98(3) 2_656 3 ?
 Fe1 O5 Fe2 121.59(6) . 3 ?
 O6 O5 Fe2 75.10(7) 2_656 3 ?
 Fe4 O5 Fe2 48.78(3) 3_554 3 ?
 Mn4 O5 Fe2 48.78(3) 3_554 3 ?
 O3 O5 Fe2 143.24(8) . 3 ?
 O4 O5 Fe2 31.72(4) 2_656 3 ?
 O4 O5 Fe2 67.69(6) 3_554 3 ?
 T2 O5 Fe2 56.05(4) 2_656 3 ?
 Mg2 O5 Fe2 0.000(8) 3 3 ?
 T1 O6 T2 141.51(16) 1_556 . ?
 T1 O6 O4 146.51(15) 1_556 . ?
 T2 O6 O4 38.36(8) . . ?
 T1 O6 Fe4 115.48(12) 1_556 3 ?
 T2 O6 Fe4 84.78(10) . 3 ?
 O4 O6 Fe4 46.42(7) . 3 ?
 T1 O6 Mn4 115.48(12) 1_556 3 ?
 T2 O6 Mn4 84.78(10) . 3 ?
 O4 O6 Mn4 46.42(7) . 3 ?
 Fe4 O6 Mn4 0.000(17) 3 3 ?
 T1 O6 O7 35.72(9) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O7 145.26(16) . 1_556 ?
 O4 O6 O7 174.76(14) . 1_556 ?
 Fe4 O6 O7 129.65(11) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O7 129.65(11) 3 1_556 ?
 T1 O6 O5 35.14(8) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O5 145.34(15) . 1_556 ?
 O4 O6 O5 119.43(13) . 1_556 ?
 Fe4 O6 O5 80.43(9) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O5 80.43(9) 3 1_556 ?
 O7 O6 O5 59.78(10) 1_556 1_556 ?
 T1 O6 O1 35.02(8) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 O1 106.49(12) . 1_556 ?
 O4 O6 O1 124.08(11) . 1_556 ?
 Fe4 O6 O1 125.20(11) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 O1 125.20(11) 3 1_556 ?
 O7 O6 O1 60.55(10) 1_556 1_556 ?
 O5 O6 O1 59.81(8) 1_556 1_556 ?
 T1 O6 O2 106.15(12) 1_556 . ?
 T2 O6 O2 35.38(7) . . ?
 O4 O6 O2 63.47(9) . . ?
 Fe4 O6 O2 103.91(9) 3 . ?
 Mn4 O6 O2 103.91(9) 3 . ?
 O7 O6 O2 121.67(12) 1_556 . ?
 O5 O6 O2 119.82(11) 1_556 . ?
 O1 O6 O2 71.14(9) 1_556 . ?
 T1 O6 O5 144.14(15) 1_556 . ?
 T2 O6 O5 34.35(8) . . ?
 O4 O6 O5 60.89(9) . . ?

Fe4 O6 O5 100.24(10) 3 . ?
 Mn4 O6 O5 100.24(10) 3 . ?
 O7 O6 O5 119.99(13) 1_556 . ?
 O5 O6 O5 179.07(15) 1_556 . ?
 O1 O6 O5 119.26(11) 1_556 . ?
 O2 O6 O5 59.42(8) . . ?
 T1 O6 O6 96.12(12) 1_556 2_657 ?
 T2 O6 O6 121.67(13) . 2_657 ?
 O4 O6 O6 91.43(9) . 2_657 ?
 Fe4 O6 O6 54.62(5) 3 2_657 ?
 Mn4 O6 O6 54.62(5) 3 2_657 ?
 O7 O6 O6 83.38(10) 1_556 2_657 ?
 O5 O6 O6 73.18(10) 1_556 2_657 ?
 O1 O6 O6 130.37(12) 1_556 2_657 ?
 O2 O6 O6 154.81(10) . 2_657 ?
 O5 O6 O6 107.73(12) . 2_657 ?
 T1 O6 O5 137.14(12) 1_556 2_656 ?
 T2 O6 O5 79.92(10) . 2_656 ?
 O4 O6 O5 68.92(9) . 2_656 ?
 Fe4 O6 O5 67.49(7) 3 2_656 ?
 Mn4 O6 O5 67.49(7) 3 2_656 ?
 O7 O6 O5 106.79(11) 1_556 2_656 ?
 O5 O6 O5 121.65(9) 1_556 2_656 ?
 O1 O6 O5 165.62(12) 1_556 2_656 ?
 O2 O6 O5 114.63(9) . 2_656 ?
 O5 O6 O5 59.26(9) . 2_656 ?
 O6 O6 O5 48.47(8) 2_657 2_656 ?
 T1 O6 O3 77.94(10) 1_556 . ?
 T2 O6 O3 78.84(10) . . ?
 O4 O6 O3 117.19(10) . . ?
 Fe4 O6 O3 163.60(9) 3 . ?
 Mn4 O6 O3 163.60(9) 3 . ?
 O7 O6 O3 66.74(9) 1_556 . ?
 O5 O6 O3 112.93(10) 1_556 . ?
 O1 O6 O3 60.13(8) 1_556 . ?
 O2 O6 O3 61.69(8) . . ?
 O5 O6 O3 66.30(9) . . ?
 O6 O6 O3 136.62(6) 2_657 . ?
 O5 O6 O3 109.87(10) 2_656 . ?
 T1 O6 Mg2 71.53(9) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 Mg2 71.67(8) . 1_556 ?
 O4 O6 Mg2 85.81(8) . 1_556 ?
 Fe4 O6 Mg2 105.06(8) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Mg2 105.06(8) 3 1_556 ?
 O7 O6 Mg2 99.05(10) 1_556 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 82.16(8) 1_556 1_556 ?
 O1 O6 Mg2 38.83(6) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 Mg2 38.13(5) . 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 97.03(8) . 1_556 ?
 O6 O6 Mg2 149.92(10) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Mg2 151.28(8) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Mg2 69.06(6) . 1_556 ?
 T1 O6 Fe2 71.53(9) 1_556 1_556 ?
 T2 O6 Fe2 71.67(8) . 1_556 ?

O4 O6 Fe2 85.81(8) . 1_556 ?
 Fe4 O6 Fe2 105.06(8) 3 1_556 ?
 Mn4 O6 Fe2 105.06(8) 3 1_556 ?
 O7 O6 Fe2 99.05(10) 1_556 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 82.16(8) 1_556 1_556 ?
 O1 O6 Fe2 38.83(6) 1_556 1_556 ?
 O2 O6 Fe2 38.13(5) . 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 97.03(8) . 1_556 ?
 O6 O6 Fe2 149.92(10) 2_657 1_556 ?
 O5 O6 Fe2 151.28(8) 2_656 1_556 ?
 O3 O6 Fe2 69.06(6) . 1_556 ?
 Mg2 O6 Fe2 0.0 1_556 1_556 ?
 T1 O6 O4 76.18(9) 1_556 3 ?
 T2 O6 O4 79.78(10) . 3 ?
 O4 O6 O4 71.37(8) . 3 ?
 Fe4 O6 O4 72.84(7) 3 3 ?
 Mn4 O6 O4 72.84(7) 3 3 ?
 O7 O6 O4 111.70(10) 1_556 3 ?
 O5 O6 O4 65.96(8) 1_556 3 ?
 O1 O6 O4 57.74(7) 1_556 3 ?
 O2 O6 O4 59.06(7) . 3 ?
 O5 O6 O4 113.58(10) . 3 ?
 O6 O6 O4 117.22(8) 2_657 3 ?
 O5 O6 O4 136.64(10) 2_656 3 ?
 O3 O6 O4 103.15(9) . 3 ?
 Mg2 O6 O4 34.15(4) 1_556 3 ?
 Fe2 O6 O4 34.15(4) 1_556 3 ?
 T1 O6 T1 111.05(10) 1_556 2_656 ?
 T2 O6 T1 106.60(10) . 2_656 ?
 O4 O6 T1 89.81(8) . 2_656 ?
 Fe4 O6 T1 69.61(5) 3 2_656 ?
 Mn4 O6 T1 69.61(5) 3 2_656 ?
 O7 O6 T1 85.23(9) 1_556 2_656 ?
 O5 O6 T1 97.34(8) 1_556 2_656 ?
 O1 O6 T1 144.82(9) 1_556 2_656 ?
 O2 O6 T1 141.21(9) . 2_656 ?
 O5 O6 T1 83.52(8) . 2_656 ?
 O6 O6 T1 26.92(5) 2_657 2_656 ?
 O5 O6 T1 26.70(4) 2_656 2_656 ?
 O3 O6 T1 115.86(8) . 2_656 ?
 Mg2 O6 T1 174.62(8) 1_556 2_656 ?
 Fe2 O6 T1 174.62(8) 1_556 2_656 ?
 O4 O6 T1 140.99(9) 3 2_656 ?
 T1 O6 O7 96.12(11) 1_556 5_656 ?
 T2 O6 O7 115.55(11) . 5_656 ?
 O4 O6 O7 111.53(10) . 5_656 ?
 Fe4 O6 O7 94.33(7) 3 5_656 ?
 Mn4 O6 O7 94.33(7) 3 5_656 ?
 O7 O6 O7 64.05(12) 1_556 5_656 ?
 O5 O6 O7 96.78(10) 1_556 5_656 ?
 O1 O6 O7 124.30(10) 1_556 5_656 ?
 O2 O6 O7 141.04(11) . 5_656 ?
 O5 O6 O7 83.83(9) . 5_656 ?
 O6 O6 O7 43.95(6) 2_657 5_656 ?

O5 O6 O7 42.77(6) 2_656 5_656 ?
O3 O6 O7 93.44(8) . 5_656 ?
Mg2 O6 O7 160.06(8) 1_556 5_656 ?
Fe2 O6 O7 160.06(8) 1_556 5_656 ?
O4 O6 O7 159.59(9) 3 5_656 ?
T1 O6 O7 25.29(4) 2_656 5_656 ?
T1 O6 O2 99.99(11) 1_556 3 ?
T2 O6 O2 81.04(10) . 3 ?
O4 O6 O2 49.21(7) . 3 ?
Fe4 O6 O2 30.57(4) 3 3 ?
Mn4 O6 O2 30.57(4) 3 3 ?
O7 O6 O2 130.08(10) 1_556 3 ?
O5 O6 O2 70.34(9) 1_556 3 ?
O1 O6 O2 96.93(9) 1_556 3 ?
O2 O6 O2 84.13(8) . 3 ?
O5 O6 O2 109.91(10) . 3 ?
O6 O6 O2 80.47(5) 2_657 3 ?
O5 O6 O2 96.79(8) 2_656 3 ?
O3 O6 O2 142.87(9) . 3 ?
Mg2 O6 O2 75.11(6) 1_556 3 ?
Fe2 O6 O2 75.11(6) 1_556 3 ?
O4 O6 O2 42.27(6) 3 3 ?
T1 O6 O2 99.65(7) 2_656 3 ?
O7 O6 O2 123.45(8) 5_656 3 ?
T1 O6 O4 92.66(10) 1_556 2_657 ?
T2 O6 O4 111.36(11) . 2_657 ?
O4 O6 O4 72.99(9) . 2_657 ?
Fe4 O6 O4 26.58(4) 3 2_657 ?
Mn4 O6 O4 26.58(4) 3 2_657 ?
O7 O6 O4 103.19(10) 1_556 2_657 ?
O5 O6 O4 58.05(8) 1_556 2_657 ?
O1 O6 O4 113.89(9) 1_556 2_657 ?
O2 O6 O4 125.94(10) . 2_657 ?
O5 O6 O4 122.77(10) . 2_657 ?
O6 O6 O4 39.41(5) 2_657 2_657 ?
O5 O6 O4 74.23(7) 2_656 2_657 ?
O3 O6 O4 169.73(8) . 2_657 ?
Mg2 O6 O4 112.13(7) 1_556 2_657 ?
Fe2 O6 O4 112.13(7) 1_556 2_657 ?
O4 O6 O4 78.23(5) 3 2_657 ?
T1 O6 O4 63.46(5) 2_656 2_657 ?
O7 O6 O4 83.36(7) 5_656 2_657 ?
O2 O6 O4 42.31(5) 3 2_657 ?
T1 O7 T1 143.9(2) 6 . ?
T1 O7 O5 145.75(19) 6 . ?
T1 O7 O5 35.58(8) . . ?
T1 O7 O5 35.58(8) 6 6 ?
T1 O7 O5 145.75(19) . 6 ?
O5 O7 O5 119.15(16) . 6 ?
T1 O7 O6 146.58(19) 6 1_554 ?
T1 O7 O6 35.98(8) . 1_554 ?
O5 O7 O6 60.48(7) . 1_554 ?
O5 O7 O6 176.40(16) 6 1_554 ?
T1 O7 O6 35.98(8) 6 6_554 ?

T1 O7 O6 146.58(19) . 6_554 ?
O5 O7 O6 176.40(16) . 6_554 ?
O5 O7 O6 60.48(7) 6 6_554 ?
O6 O7 O6 119.63(17) 1_554 6_554 ?
T1 O7 O1 34.57(9) 6 6 ?
T1 O7 O1 109.37(17) . 6 ?
O5 O7 O1 123.10(14) . 6 ?
O5 O7 O1 59.91(8) 6 6 ?
O6 O7 O1 123.54(13) 1_554 6 ?
O6 O7 O1 60.16(8) 6_554 6 ?
T1 O7 O1 109.37(17) 6 . ?
T1 O7 O1 34.57(9) . . ?
O5 O7 O1 59.91(8) . . ?
O5 O7 O1 123.10(14) 6 . ?
O6 O7 O1 60.16(8) 1_554 . ?
O6 O7 O1 123.54(13) 6_554 . ?
O1 O7 O1 74.80(12) 6 . ?
T1 O7 Fe3 72.68(12) 6 . ?
T1 O7 Fe3 72.68(12) . . ?
O5 O7 Fe3 99.20(10) . . ?
O5 O7 Fe3 99.20(10) 6 . ?
O6 O7 Fe3 84.35(9) 1_554 . ?
O6 O7 Fe3 84.35(9) 6_554 . ?
O1 O7 Fe3 39.96(6) 6 . ?
O1 O7 Fe3 39.96(6) . . ?
T1 O7 O3 78.79(12) 6 . ?
T1 O7 O3 78.79(12) . . ?
O5 O7 O3 67.65(9) . . ?
O5 O7 O3 67.65(9) 6 . ?
O6 O7 O3 114.57(9) 1_554 . ?
O6 O7 O3 114.57(9) 6_554 . ?
O1 O7 O3 60.61(9) 6 . ?
O1 O7 O3 60.61(9) . . ?
Fe3 O7 O3 67.07(8) . . ?
T1 O7 O3 79.15(12) 6 1_554 ?
T1 O7 O3 79.15(12) . 1_554 ?
O5 O7 O3 114.50(9) . 1_554 ?
O5 O7 O3 114.50(9) 6 1_554 ?
O6 O7 O3 68.11(9) 1_554 1_554 ?
O6 O7 O3 68.11(9) 6_554 1_554 ?
O1 O7 O3 60.57(8) 6 1_554 ?
O1 O7 O3 60.57(8) . 1_554 ?
Fe3 O7 O3 36.57(6) . 1_554 ?
O3 O7 O3 103.64(13) . 1_554 ?
T1 O7 O7 105.71(12) 6 5_655 ?
T1 O7 O7 105.71(12) . 5_655 ?
O5 O7 O7 103.09(11) . 5_655 ?
O5 O7 O7 103.09(11) 6 5_655 ?
O6 O7 O7 73.81(10) 1_554 5_655 ?
O6 O7 O7 73.81(9) 6_554 5_655 ?
O1 O7 O7 133.61(11) 6 5_655 ?
O1 O7 O7 133.61(11) . 5_655 ?
Fe3 O7 O7 135.04(15) . 5_655 ?
O3 O7 O7 157.89(17) . 5_655 ?

O3 O7 O7 98.46(14) 1_554 5_655 ?
 T1 O7 O6 144.98(16) 6 2_656 ?
 T1 O7 O6 70.76(10) . 2_656 ?
 O5 O7 O6 60.97(8) . 2_656 ?
 O5 O7 O6 123.79(12) 6 2_656 ?
 O6 O7 O6 52.67(9) 1_554 2_656 ?
 O6 O7 O6 115.95(12) 6_554 2_656 ?
 O1 O7 O6 173.46(13) 6 2_656 ?
 O1 O7 O6 105.06(6) . 2_656 ?
 Fe3 O7 O6 136.99(7) . 2_656 ?
 O3 O7 O6 125.24(8) . 2_656 ?
 O3 O7 O6 113.47(9) 1_554 2_656 ?
 O7 O7 O6 42.14(6) 5_655 2_656 ?
 T1 O7 O6 70.76(10) 6 5_656 ?
 T1 O7 O6 144.98(16) . 5_656 ?
 O5 O7 O6 123.79(12) . 5_656 ?
 O5 O7 O6 60.97(8) 6 5_656 ?
 O6 O7 O6 115.95(12) 1_554 5_656 ?
 O6 O7 O6 52.67(9) 6_554 5_656 ?
 O1 O7 O6 105.06(6) 6 5_656 ?
 O1 O7 O6 173.46(13) . 5_656 ?
 Fe3 O7 O6 136.99(7) . 5_656 ?
 O3 O7 O6 125.24(8) . 5_656 ?
 O3 O7 O6 113.47(9) 1_554 5_656 ?
 O7 O7 O6 42.14(6) 5_655 5_656 ?
 O6 O7 O6 74.30(10) 2_656 5_656 ?
 T1 O7 Mg1 50.80(10) 6 5_556 ?
 T1 O7 Mg1 97.81(14) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 98.15(11) . 5_556 ?
 O5 O7 Mg1 56.31(7) 6 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 127.12(11) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 84.57(7) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 28.72(6) 6 5_556 ?
 O1 O7 Mg1 67.27(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Mg1 49.58(4) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 32.11(4) . 5_556 ?
 O3 O7 Mg1 82.17(8) 1_554 5_556 ?
 O7 O7 Mg1 156.18(2) 5_655 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 157.32(9) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Mg1 115.78(5) 5_656 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 50.80(10) 6 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 97.81(14) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 98.15(11) . 5_556 ?
 O5 O7 Fe1 56.31(7) 6 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 127.12(11) 1_554 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 84.57(7) 6_554 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 28.72(6) 6 5_556 ?
 O1 O7 Fe1 67.27(8) . 5_556 ?
 Fe3 O7 Fe1 49.58(4) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 32.11(4) . 5_556 ?
 O3 O7 Fe1 82.17(8) 1_554 5_556 ?
 O7 O7 Fe1 156.18(2) 5_655 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 157.32(9) 2_656 5_556 ?
 O6 O7 Fe1 115.78(5) 5_656 5_556 ?

Mg1 O7 Fe1 0.000(17) 5_556 5_556 ?
 T1 O7 Fe1 97.81(14) 6 . ?
 T1 O7 Fe1 50.80(10) . . ?
 O5 O7 Fe1 56.31(7) . . ?
 O5 O7 Fe1 98.15(11) 6 . ?
 O6 O7 Fe1 84.57(7) 1_554 . ?
 O6 O7 Fe1 127.12(11) 6_554 . ?
 O1 O7 Fe1 67.27(8) 6 . ?
 O1 O7 Fe1 28.72(6) . . ?
 Fe3 O7 Fe1 49.58(4) . . ?
 O3 O7 Fe1 32.11(4) . . ?
 O3 O7 Fe1 82.17(8) 1_554 . ?
 O7 O7 Fe1 156.18(2) 5_655 . ?
 O6 O7 Fe1 115.78(5) 2_656 . ?
 O6 O7 Fe1 157.32(9) 5_656 . ?
 Mg1 O7 Fe1 47.63(4) 5_556 . ?
 Fe1 O7 Fe1 47.63(4) 5_556 . ?
 T1 O7 T2 133.10(16) 6 . ?
 T1 O7 T2 41.63(8) . . ?
 O5 O7 T2 12.66(6) . . ?
 O5 O7 T2 108.77(11) 6 . ?
 O6 O7 T2 71.33(6) 1_554 . ?
 O6 O7 T2 168.70(11) 6_554 . ?
 O1 O7 T2 112.42(11) 6 . ?
 O1 O7 T2 57.82(6) . . ?
 Fe3 O7 T2 94.55(6) . . ?
 O3 O7 T2 55.16(5) . . ?
 O3 O7 T2 116.96(7) 1_554 . ?
 O7 O7 T2 113.95(8) 5_655 . ?
 O6 O7 T2 72.24(5) 2_656 . ?
 O6 O7 T2 127.14(9) 5_656 . ?
 Mg1 O7 T2 86.17(6) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 86.17(6) 5_556 . ?
 Fe1 O7 T2 47.59(3) . . ?

_diffn_measured_fraction_theta_max 0.966
 _diffn_reflns_theta_full 33.51
 _diffn_measured_fraction_theta_full 0.966
 _refine_diff_density_max 3.548
 _refine_diff_density_min -0.820
 _refine_diff_density_rms 0.250