data\_b6

\_audit\_creation\_method SHELXL-97

\_chemical\_name\_systematic

;

?

;

\_chemical\_name\_common ?

\_chemical\_melting\_point ?

\_chemical\_formula\_moiety ?

\_chemical\_formula\_sum

'Ca2 Fe6 Mg0.10 Mn3 O232 P8'

\_chemical\_formula\_weight 1342.25

loop\_

\_atom\_type\_symbol

\_atom\_type\_description

\_atom\_type\_scat\_dispersion\_real

\_atom\_type\_scat\_dispersion\_imag

\_atom\_type\_scat\_source

'O' 'O2-' 0.0080 0.0060

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'P' 'P' 0.1023 0.0942

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'Ca' 'Ca' 0.2262 0.3064

'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

'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'

\_symmetry\_cell\_setting ?

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M ?

loop\_

\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz

'x, y, z'

'-x, y+1/2, -z+1/2'

'-x, -y, -z'

'x, -y-1/2, z-1/2'

\_cell\_length\_a 8.790

\_cell\_length\_b 11.5380(10)

\_cell\_length\_c 6.165

\_cell\_angle\_alpha 90.00

\_cell\_angle\_beta 99.20

\_cell\_angle\_gamma 90.00

\_cell\_volume 617.21(5)

\_cell\_formula\_units\_Z 1

\_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\_diffrn 3.611

\_exptl\_crystal\_density\_method 'not measured'

\_exptl\_crystal\_F\_000 698

\_exptl\_absorpt\_coefficient\_mu 5.971

\_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\a

\_diffrn\_radiation\_source 'fine-focus sealed tube'

\_diffrn\_radiation\_monochromator graphite

\_diffrn\_measurement\_device\_type ?

\_diffrn\_measurement\_method ?

\_diffrn\_detector\_area\_resol\_mean ?

\_diffrn\_reflns\_number 1973

\_diffrn\_reflns\_av\_R\_equivalents 0.0471

\_diffrn\_reflns\_av\_sigmaI/netI 0.0524

\_diffrn\_reflns\_limit\_h\_min -12

\_diffrn\_reflns\_limit\_h\_max 12

\_diffrn\_reflns\_limit\_k\_min 0

\_diffrn\_reflns\_limit\_k\_max 16

\_diffrn\_reflns\_limit\_l\_min 0

\_diffrn\_reflns\_limit\_l\_max 8

\_diffrn\_reflns\_theta\_min 2.94

\_diffrn\_reflns\_theta\_max 30.15

\_reflns\_number\_total 1817

\_reflns\_number\_gt 1374

\_reflns\_threshold\_expression >2sigma(I)

\_computing\_data\_collection ?

\_computing\_cell\_refinement ?

\_computing\_data\_reduction ?

\_computing\_structure\_solution 'SHELXS-97 (Sheldrick, 2008)'

\_computing\_structure\_refinement 'SHELXL-97 (Sheldrick, 2008)'

\_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^ > 2sigma(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^)+(0.0540P)^2^+0.2067P] 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 none

\_refine\_ls\_extinction\_coef ?

\_refine\_ls\_number\_reflns 1817

\_refine\_ls\_number\_parameters 121

\_refine\_ls\_number\_restraints 0

\_refine\_ls\_R\_factor\_all 0.0609

\_refine\_ls\_R\_factor\_gt 0.0426

\_refine\_ls\_wR\_factor\_ref 0.1025

\_refine\_ls\_wR\_factor\_gt 0.0954

\_refine\_ls\_goodness\_of\_fit\_ref 0.987

\_refine\_ls\_restrained\_S\_all 0.987

\_refine\_ls\_shift/su\_max 9.675

\_refine\_ls\_shift/su\_mean 0.080

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

M1CA Ca 0.94752(10) 0.12120(7) 0.83417(15) 0.0170(3) Uani 0.509(17) 1 d P . .

M1MN Mn 0.94752(10) 0.12120(7) 0.83417(15) 0.0170(3) Uani 0.491(17) 1 d P . .

Fe Fe 0.71435(9) 0.07930(7) 0.32701(12) 0.0184(2) Uani 1.000(4) 1 d . . .

M3 Mn 0.36186(8) 0.19129(6) 0.12998(12) 0.0123(2) Uani 1.000(4) 1 d . . .

P1 P 0.09428(13) 0.13426(10) 0.39670(19) 0.0096(3) Uani 1 1 d . . .

P2 P 0.60199(13) 0.08893(10) 0.80684(18) 0.0086(3) Uani 1 1 d . . .

O1 O2- 0.0795(4) 0.0699(3) 0.1767(6) 0.0150(7) Uani 1 1 d . . .

O2 O2- 0.4734(4) 0.1752(3) 0.8301(5) 0.0130(7) Uani 1 1 d . . .

03 O2- 0.9415(4) 0.1929(3) 0.4243(6) 0.0205(8) Uani 1 1 d . . .

04 O2- 0.6893(4) 0.1272(3) 0.6232(5) 0.0127(7) Uani 1 1 d . . .

05 O2- 0.2155(4) 0.2299(3) 0.3831(6) 0.0177(7) Uani 1 1 d . . .

06 O2- 0.7259(4) 0.0897(3) 0.0147(5) 0.0129(7) Uani 1 1 d . . .

07 O2- 0.1413(4) 0.0593(3) 0.5993(6) 0.0174(7) Uani 1 1 d . . .

O8 O2- 0.5349(4) -0.0338(3) 0.7630(5) 0.0111(6) Uani 1 1 d . . .

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

M1CA 0.0177(4) 0.0106(4) 0.0214(5) -0.0037(3) -0.0009(3) 0.0012(3)

M1MN 0.0177(4) 0.0106(4) 0.0214(5) -0.0037(3) -0.0009(3) 0.0012(3)

Fe 0.0191(4) 0.0271(4) 0.0094(3) 0.0006(3) 0.0037(3) 0.0077(3)

M3 0.0143(4) 0.0097(3) 0.0134(4) -0.0001(3) 0.0033(3) 0.0021(3)

P1 0.0088(5) 0.0092(5) 0.0114(5) 0.0004(4) 0.0035(4) -0.0007(4)

P2 0.0088(5) 0.0085(5) 0.0091(5) -0.0003(4) 0.0035(4) -0.0001(4)

O1 0.0181(17) 0.0137(16) 0.0130(15) -0.0029(13) 0.0013(13) 0.0002(13)

O2 0.0144(15) 0.0111(15) 0.0149(16) 0.0017(12) 0.0066(13) 0.0057(12)

03 0.0142(17) 0.027(2) 0.0216(18) -0.0032(15) 0.0072(14) 0.0056(15)

04 0.0145(15) 0.0134(16) 0.0117(15) 0.0003(12) 0.0069(12) -0.0038(13)

05 0.0239(18) 0.0174(17) 0.0134(16) -0.0004(13) 0.0081(14) -0.0129(14)

06 0.0102(14) 0.0186(17) 0.0106(15) 0.0011(13) 0.0035(12) 0.0004(13)

07 0.0257(18) 0.0096(16) 0.0172(17) 0.0047(13) 0.0042(14) -0.0036(14)

O8 0.0119(15) 0.0071(14) 0.0145(15) 0.0008(12) 0.0031(12) 0.0008(11)

\_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

M1CA O1 2.218(3) 3\_656 ?

M1CA 03 2.219(4) 4\_566 ?

M1CA O1 2.318(4) 1\_656 ?

M1CA 06 2.420(3) 1\_556 ?

M1CA 04 2.430(4) . ?

M1CA 07 2.509(4) 1\_655 ?

M1CA 03 2.651(4) . ?

M1CA 05 2.892(4) 4\_666 ?

M1CA P2 3.0378(14) . ?

M1CA P1 3.1007(15) 4\_666 ?

M1CA P1 3.1739(15) 1\_655 ?

M1CA P1 3.2683(15) 3\_656 ?

M1MN O1 2.218(3) 3\_656 ?

M1MN 03 2.219(4) 4\_566 ?

M1MN O1 2.318(4) 1\_656 ?

M1MN 06 2.420(3) 1\_556 ?

M1MN 04 2.430(4) . ?

M1MN 07 2.509(4) 1\_655 ?

M1MN Fe 3.4873(11) . ?

M1MN M1CA 3.5001(18) 3\_757 ?

M1MN Fe 3.9569(12) 1\_556 ?

M1MN Fe 4.0143(12) 4\_566 ?

M1MN Fe 4.0146(11) 3\_756 ?

Fe 06 1.948(3) . ?

Fe 04 1.954(3) . ?

Fe 07 2.047(4) 3\_656 ?

Fe O8 2.235(3) 3\_656 ?

Fe 03 2.384(4) . ?

Fe P2 3.2030(13) 1\_554 ?

Fe P2 3.2669(13) . ?

Fe P1 3.2994(14) 3\_656 ?

Fe P1 3.3587(14) 1\_655 ?

Fe P2 3.3833(14) 3\_656 ?

Fe M3 3.3973(10) . ?

Fe O2 3.431(3) 3\_656 ?

Fe O1 3.482(4) 1\_655 ?

Fe O2 3.539(3) 4\_565 ?

Fe O8 3.574(3) . ?

Fe 04 3.606(3) 4\_565 ?

Fe O2 3.608(3) 1\_554 ?

Fe O1 3.719(4) 3\_656 ?

Fe O8 3.811(3) 1\_554 ?

Fe 07 3.865(4) 1\_655 ?

Fe P2 3.9504(14) 4\_565 ?

Fe M1MN 3.9569(12) 1\_554 ?

Fe M1CA 3.9569(12) 1\_554 ?

Fe 06 3.987(3) 4\_566 ?

Fe 05 3.994(4) 3\_656 ?

Fe M1CA 4.0144(12) 4\_565 ?

Fe M1MN 4.0144(12) 4\_565 ?

Fe M1MN 4.0146(11) 3\_756 ?

Fe M1CA 4.0146(11) 3\_756 ?

Fe O2 4.175(3) . ?

Fe M3 4.1868(11) 3\_655 ?

Fe O1 4.206(4) 3\_655 ?

Fe 06 4.226(3) 1\_556 ?

Fe 05 4.309(4) 2\_645 ?

Fe 03 4.319(4) 4\_565 ?

Fe 04 4.325(3) 3\_656 ?

Fe 04 4.345(3) 1\_554 ?

Fe 03 4.458(4) 3\_756 ?

M3 05 2.043(3) 4\_565 ?

M3 O8 2.090(3) 3\_656 ?

M3 O2 2.115(3) 4\_565 ?

M3 05 2.220(4) . ?

M3 O2 2.235(3) 1\_554 ?

M3 Fe 4.1869(11) 3\_655 ?

M3 Fe 4.5408(12) 2\_655 ?

M3 Fe 4.6847(10) 4\_565 ?

M3 Fe 4.7032(11) 3\_656 ?

M3 Fe 5.5512(10) 4\_566 ?

P1 07 1.521(4) . ?

P1 O1 1.533(4) . ?

P1 03 1.537(4) 1\_455 ?

P1 05 1.545(3) . ?

P1 M1CA 3.1007(15) 4\_465 ?

P1 M1CA 3.1739(15) 1\_455 ?

P1 M1CA 3.2683(15) 3\_656 ?

P1 Fe 3.2994(14) 3\_656 ?

P1 Fe 3.3586(14) 1\_455 ?

P1 M1CA 3.5047(15) 1\_454 ?

P1 Fe 5.5371(14) 4\_465 ?

P2 O2 1.530(3) . ?

P2 04 1.531(3) . ?

P2 O8 1.541(3) . ?

P2 06 1.543(3) 1\_556 ?

P2 Fe 3.2030(13) 1\_556 ?

P2 Fe 3.3834(14) 3\_656 ?

P2 Fe 3.9503(14) 4\_566 ?

O1 M1MN 2.218(3) 3\_656 ?

O1 M1CA 2.218(3) 3\_656 ?

O1 M1CA 2.318(3) 1\_454 ?

O1 M1MN 2.318(3) 1\_454 ?

O1 Fe 3.482(4) 1\_455 ?

O1 Fe 3.719(4) 3\_656 ?

O1 Fe 4.206(4) 3\_655 ?

O2 M3 2.115(3) 4\_566 ?

O2 M3 2.235(3) 1\_556 ?

O2 Fe 3.431(3) 3\_656 ?

O2 Fe 3.539(3) 4\_566 ?

O2 Fe 3.608(3) 1\_556 ?

03 P1 1.537(4) 1\_655 ?

03 M1MN 2.219(4) 4\_565 ?

03 M1CA 2.219(4) 4\_565 ?

03 Fe 4.319(4) 4\_566 ?

03 Fe 4.458(4) 3\_756 ?

03 Fe 4.702(4) 4\_565 ?

04 Fe 3.606(3) 4\_566 ?

04 Fe 4.325(3) 3\_656 ?

04 Fe 4.345(3) 1\_556 ?

05 M3 2.043(3) 4\_566 ?

05 M1CA 2.892(4) 4\_465 ?

05 Fe 3.994(4) 3\_656 ?

05 Fe 4.309(4) 2\_655 ?

05 Fe 4.696(3) 1\_455 ?

06 P2 1.543(3) 1\_554 ?

06 M1CA 2.420(3) 1\_554 ?

06 M1MN 2.420(3) 1\_554 ?

06 Fe 3.987(3) 4\_565 ?

06 Fe 4.226(3) 1\_554 ?

06 Fe 4.540(3) 3\_655 ?

07 Fe 2.047(4) 3\_656 ?

07 M1CA 2.509(4) 1\_455 ?

07 M1MN 2.509(4) 1\_455 ?

07 Fe 3.865(4) 1\_455 ?

O8 M3 2.090(3) 3\_656 ?

O8 Fe 2.235(3) 3\_656 ?

O8 Fe 3.811(3) 1\_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 M1CA 03 164.21(14) 3\_656 4\_566 ?

O1 M1CA O1 79.01(13) 3\_656 1\_656 ?

03 M1CA O1 92.71(13) 4\_566 1\_656 ?

O1 M1CA 06 76.96(12) 3\_656 1\_556 ?

03 M1CA 06 88.69(12) 4\_566 1\_556 ?

O1 M1CA 06 82.25(12) 1\_656 1\_556 ?

O1 M1CA 04 85.74(12) 3\_656 . ?

03 M1CA 04 92.80(12) 4\_566 . ?

O1 M1CA 04 141.59(12) 1\_656 . ?

06 M1CA 04 59.92(11) 1\_556 . ?

O1 M1CA 07 77.21(12) 3\_656 1\_655 ?

03 M1CA 07 117.73(12) 4\_566 1\_655 ?

O1 M1CA 07 99.56(12) 1\_656 1\_655 ?

06 M1CA 07 153.24(12) 1\_556 1\_655 ?

04 M1CA 07 111.18(12) . 1\_655 ?

O1 M1CA 03 107.18(13) 3\_656 . ?

03 M1CA 03 86.53(10) 4\_566 . ?

O1 M1CA 03 151.49(12) 1\_656 . ?

06 M1CA 03 126.18(11) 1\_556 . ?

04 M1CA 03 66.83(11) . . ?

07 M1CA 03 56.67(11) 1\_655 . ?

O1 M1CA 05 132.49(12) 3\_656 4\_666 ?

03 M1CA 05 56.70(11) 4\_566 4\_666 ?

O1 M1CA 05 77.05(11) 1\_656 4\_666 ?

06 M1CA 05 138.00(11) 1\_556 4\_666 ?

04 M1CA 05 135.59(11) . 4\_666 ?

07 M1CA 05 67.22(11) 1\_655 4\_666 ?

03 M1CA 05 78.80(11) . 4\_666 ?

O1 M1CA P2 77.00(10) 3\_656 . ?

03 M1CA P2 93.95(10) 4\_566 . ?

O1 M1CA P2 111.69(9) 1\_656 . ?

06 M1CA P2 30.24(8) 1\_556 . ?

04 M1CA P2 29.97(8) . . ?

07 M1CA P2 134.25(9) 1\_655 . ?

03 M1CA P2 96.78(8) . . ?

05 M1CA P2 150.34(8) 4\_666 . ?

O1 M1CA P1 161.62(10) 3\_656 4\_666 ?

03 M1CA P1 27.76(9) 4\_566 4\_666 ?

O1 M1CA P1 88.93(9) 1\_656 4\_666 ?

06 M1CA P1 115.40(9) 1\_556 4\_666 ?

04 M1CA P1 112.03(9) . 4\_666 ?

07 M1CA P1 91.36(8) 1\_655 4\_666 ?

03 M1CA P1 77.24(9) . 4\_666 ?

05 M1CA P1 29.63(7) 4\_666 4\_666 ?

P2 M1CA P1 120.72(4) . 4\_666 ?

O1 M1CA P1 94.45(10) 3\_656 1\_655 ?

03 M1CA P1 101.30(10) 4\_566 1\_655 ?

O1 M1CA P1 125.03(9) 1\_656 1\_655 ?

06 M1CA P1 149.79(9) 1\_556 1\_655 ?

04 M1CA P1 90.90(8) . 1\_655 ?

07 M1CA P1 28.06(8) 1\_655 1\_655 ?

03 M1CA P1 28.85(8) . 1\_655 ?

05 M1CA P1 68.00(7) 4\_666 1\_655 ?

P2 M1CA P1 119.82(4) . 1\_655 ?

P1 M1CA P1 81.08(4) 4\_666 1\_655 ?

O1 M1CA P1 23.94(9) 3\_656 3\_656 ?

03 M1CA P1 167.29(11) 4\_566 3\_656 ?

O1 M1CA P1 99.88(9) 1\_656 3\_656 ?

06 M1CA P1 91.27(9) 1\_556 3\_656 ?

04 M1CA P1 76.25(8) . 3\_656 ?

07 M1CA P1 62.04(8) 1\_655 3\_656 ?

03 M1CA P1 83.25(9) . 3\_656 ?

05 M1CA P1 127.89(7) 4\_666 3\_656 ?

P2 M1CA P1 79.83(4) . 3\_656 ?

P1 M1CA P1 152.92(3) 4\_666 3\_656 ?

P1 M1CA P1 72.87(4) 1\_655 3\_656 ?

O1 M1MN 03 164.21(14) 3\_656 4\_566 ?

O1 M1MN O1 79.01(13) 3\_656 1\_656 ?

03 M1MN O1 92.71(13) 4\_566 1\_656 ?

O1 M1MN 06 76.96(12) 3\_656 1\_556 ?

03 M1MN 06 88.69(12) 4\_566 1\_556 ?

O1 M1MN 06 82.25(12) 1\_656 1\_556 ?

O1 M1MN 04 85.74(12) 3\_656 . ?

03 M1MN 04 92.80(12) 4\_566 . ?

O1 M1MN 04 141.59(12) 1\_656 . ?

06 M1MN 04 59.92(11) 1\_556 . ?

O1 M1MN 07 77.21(12) 3\_656 1\_655 ?

03 M1MN 07 117.73(12) 4\_566 1\_655 ?

O1 M1MN 07 99.56(12) 1\_656 1\_655 ?

06 M1MN 07 153.24(12) 1\_556 1\_655 ?

04 M1MN 07 111.18(12) . 1\_655 ?

O1 M1MN Fe 77.89(9) 3\_656 . ?

03 M1MN Fe 108.93(10) 4\_566 . ?

O1 M1MN Fe 156.68(9) 1\_656 . ?

06 M1MN Fe 89.46(8) 1\_556 . ?

04 M1MN Fe 32.79(8) . . ?

07 M1MN Fe 78.39(9) 1\_655 . ?

O1 M1MN M1CA 40.55(9) 3\_656 3\_757 ?

03 M1MN M1CA 129.87(11) 4\_566 3\_757 ?

O1 M1MN M1CA 38.46(8) 1\_656 3\_757 ?

06 M1MN M1CA 76.57(9) 1\_556 3\_757 ?

04 M1MN M1CA 118.16(9) . 3\_757 ?

07 M1MN M1CA 88.26(8) 1\_655 3\_757 ?

Fe M1MN M1CA 118.37(4) . 3\_757 ?

O1 M1MN Fe 80.54(10) 3\_656 1\_556 ?

03 M1MN Fe 83.69(10) 4\_566 1\_556 ?

O1 M1MN Fe 60.96(9) 1\_656 1\_556 ?

06 M1MN Fe 22.31(8) 1\_556 1\_556 ?

04 M1MN Fe 81.97(8) . 1\_556 ?

07 M1MN Fe 153.00(8) 1\_655 1\_556 ?

Fe M1MN Fe 111.67(3) . 1\_556 ?

M1CA M1MN Fe 64.81(3) 3\_757 1\_556 ?

O1 M1MN Fe 143.47(10) 3\_656 4\_566 ?

03 M1MN Fe 30.45(9) 4\_566 4\_566 ?

O1 M1MN Fe 114.21(9) 1\_656 4\_566 ?

06 M1MN Fe 71.78(8) 1\_556 4\_566 ?

04 M1MN Fe 62.48(8) . 4\_566 ?

07 M1MN Fe 129.14(8) 1\_655 4\_566 ?

Fe M1MN Fe 83.32(3) . 4\_566 ?

M1CA M1MN Fe 141.33(4) 3\_757 4\_566 ?

Fe M1MN Fe 77.73(2) 1\_556 4\_566 ?

O1 M1MN Fe 59.97(9) 3\_656 3\_756 ?

03 M1MN Fe 131.85(10) 4\_566 3\_756 ?

O1 M1MN Fe 78.22(9) 1\_656 3\_756 ?

06 M1MN Fe 135.19(9) 1\_556 3\_756 ?

04 M1MN Fe 123.31(8) . 3\_756 ?

07 M1MN Fe 25.23(8) 1\_655 3\_756 ?

Fe M1MN Fe 92.89(3) . 3\_756 ?

M1CA M1MN Fe 63.11(3) 3\_757 3\_756 ?

Fe M1MN Fe 127.92(2) 1\_556 3\_756 ?

Fe M1MN Fe 152.90(3) 4\_566 3\_756 ?

06 Fe 04 159.69(15) . . ?

06 Fe 07 98.00(14) . 3\_656 ?

04 Fe 07 99.91(14) . 3\_656 ?

06 Fe O8 88.46(13) . 3\_656 ?

04 Fe O8 92.63(13) . 3\_656 ?

07 Fe O8 114.85(13) 3\_656 3\_656 ?

06 Fe 03 92.33(14) . . ?

04 Fe 03 79.90(13) . . ?

07 Fe 03 84.75(13) 3\_656 . ?

O8 Fe 03 160.09(13) 3\_656 . ?

06 Fe P2 20.73(10) . 1\_554 ?

04 Fe P2 149.66(11) . 1\_554 ?

07 Fe P2 109.30(11) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe P2 68.06(9) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe P2 110.16(10) . 1\_554 ?

06 Fe P2 164.59(10) . . ?

04 Fe P2 17.91(10) . . ?

07 Fe P2 95.28(10) 3\_656 . ?

O8 Fe P2 78.85(9) 3\_656 . ?

03 Fe P2 96.66(9) . . ?

P2 Fe P2 144.68(5) 1\_554 . ?

06 Fe P1 116.96(11) . 3\_656 ?

04 Fe P1 81.56(10) . 3\_656 ?

07 Fe P1 19.11(10) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe P1 110.57(9) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe P1 86.74(10) . 3\_656 ?

P2 Fe P1 126.37(4) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe P1 76.17(3) . 3\_656 ?

06 Fe P1 84.65(10) . 1\_655 ?

04 Fe P1 94.91(10) . 1\_655 ?

07 Fe P1 63.28(10) 3\_656 1\_655 ?

O8 Fe P1 172.45(9) 3\_656 1\_655 ?

03 Fe P1 24.23(9) . 1\_655 ?

P2 Fe P1 105.23(3) 1\_554 1\_655 ?

P2 Fe P1 108.43(3) . 1\_655 ?

P1 Fe P1 70.16(4) 3\_656 1\_655 ?

06 Fe P2 88.00(10) . 3\_656 ?

04 Fe P2 100.31(10) . 3\_656 ?

07 Fe P2 93.58(10) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe P2 21.54(8) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe P2 178.33(10) . 3\_656 ?

P2 Fe P2 70.48(4) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe P2 83.38(3) . 3\_656 ?

P1 Fe P2 91.65(3) 3\_656 3\_656 ?

P1 Fe P2 154.31(4) 1\_655 3\_656 ?

06 Fe M3 79.16(10) . . ?

04 Fe M3 89.64(10) . . ?

07 Fe M3 150.96(10) 3\_656 . ?

O8 Fe M3 36.75(8) 3\_656 . ?

03 Fe M3 124.08(10) . . ?

P2 Fe M3 60.74(3) 1\_554 . ?

P2 Fe M3 85.43(3) . . ?

P1 Fe M3 146.01(3) 3\_656 . ?

P1 Fe M3 143.63(4) 1\_655 . ?

P2 Fe M3 57.59(3) 3\_656 . ?

06 Fe O2 82.68(12) . 3\_656 ?

04 Fe O2 112.64(11) . 3\_656 ?

07 Fe O2 69.36(11) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe O2 47.21(10) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe O2 152.53(11) . 3\_656 ?

P2 Fe O2 71.92(6) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe O2 94.78(6) . 3\_656 ?

P1 Fe O2 71.89(6) 3\_656 3\_656 ?

P1 Fe O2 128.41(6) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe O2 25.93(6) 3\_656 3\_656 ?

M3 Fe O2 81.63(6) . 3\_656 ?

06 Fe O1 62.80(11) . 1\_655 ?

04 Fe O1 120.27(12) . 1\_655 ?

07 Fe O1 57.96(11) 3\_656 1\_655 ?

O8 Fe O1 146.66(10) 3\_656 1\_655 ?

03 Fe O1 46.62(10) . 1\_655 ?

P2 Fe O1 83.37(6) 1\_554 1\_655 ?

P2 Fe O1 131.84(6) . 1\_655 ?

P1 Fe O1 72.46(6) 3\_656 1\_655 ?

P1 Fe O1 25.82(6) 1\_655 1\_655 ?

P2 Fe O1 132.37(6) 3\_656 1\_655 ?

M3 Fe O1 138.03(6) . 1\_655 ?

O2 Fe O1 108.70(8) 3\_656 1\_655 ?

06 Fe M1CA 139.60(10) . . ?

04 Fe M1CA 42.34(10) . . ?

07 Fe M1CA 69.78(10) 3\_656 . ?

O8 Fe M1CA 131.87(9) 3\_656 . ?

03 Fe M1CA 49.43(9) . . ?

P2 Fe M1CA 159.36(4) 1\_554 . ?

P2 Fe M1CA 53.33(3) . . ?

P1 Fe M1CA 57.50(3) 3\_656 . ?

P1 Fe M1CA 55.20(3) 1\_655 . ?

P2 Fe M1CA 129.83(3) 3\_656 . ?

M3 Fe M1CA 129.76(3) . . ?

O2 Fe M1CA 123.99(6) 3\_656 . ?

O1 Fe M1CA 78.94(6) 1\_655 . ?

06 Fe M1MN 139.60(10) . . ?

04 Fe M1MN 42.34(10) . . ?

07 Fe M1MN 69.78(10) 3\_656 . ?

O8 Fe M1MN 131.87(9) 3\_656 . ?

03 Fe M1MN 49.43(9) . . ?

P2 Fe M1MN 159.36(4) 1\_554 . ?

P2 Fe M1MN 53.33(3) . . ?

P1 Fe M1MN 57.50(3) 3\_656 . ?

P1 Fe M1MN 55.20(3) 1\_655 . ?

P2 Fe M1MN 129.83(3) 3\_656 . ?

M3 Fe M1MN 129.76(3) . . ?

O2 Fe M1MN 123.99(6) 3\_656 . ?

O1 Fe M1MN 78.94(6) 1\_655 . ?

M1CA Fe M1MN 0.0 . . ?

06 Fe O2 94.69(12) . 4\_565 ?

04 Fe O2 67.13(11) . 4\_565 ?

07 Fe O2 167.03(12) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe O2 68.02(10) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe O2 92.10(11) . 4\_565 ?

P2 Fe O2 83.60(6) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe O2 72.55(6) . 4\_565 ?

P1 Fe O2 148.34(6) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe O2 115.58(6) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe O2 89.50(6) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe O2 35.42(5) . 4\_565 ?

O2 Fe O2 115.17(2) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe O2 127.18(8) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe O2 98.66(6) . 4\_565 ?

M1MN Fe O2 98.66(6) . 4\_565 ?

06 Fe O8 149.89(12) . . ?

04 Fe O8 43.19(11) . . ?

07 Fe O8 83.13(11) 3\_656 . ?

O8 Fe O8 64.41(12) 3\_656 . ?

03 Fe O8 117.66(10) . . ?

P2 Fe O8 131.55(6) 1\_554 . ?

P2 Fe O8 25.53(6) . . ?

P1 Fe O8 65.72(6) 3\_656 . ?

P1 Fe O8 121.47(6) 1\_655 . ?

P2 Fe O8 61.95(6) 3\_656 . ?

M3 Fe O8 85.46(5) . . ?

O2 Fe O8 69.50(8) 3\_656 . ?

O1 Fe O8 136.49(8) 1\_655 . ?

M1CA Fe O8 69.08(6) . . ?

M1MN Fe O8 69.08(6) . . ?

O2 Fe O8 87.24(7) 4\_565 . ?

06 Fe 04 66.90(11) . 4\_565 ?

04 Fe 04 92.88(8) . 4\_565 ?

07 Fe 04 144.29(12) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe 04 97.54(10) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe 04 64.76(11) . 4\_565 ?

P2 Fe 04 68.08(6) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe 04 105.84(6) . 4\_565 ?

P1 Fe 04 151.50(6) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe 04 82.61(6) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe 04 116.85(6) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe 04 61.11(6) . 4\_565 ?

O2 Fe 04 134.85(8) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe 04 86.80(8) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe 04 100.17(6) . 4\_565 ?

M1MN Fe 04 100.17(6) . 4\_565 ?

O2 Fe 04 41.14(7) 4\_565 4\_565 ?

O8 Fe 04 126.52(7) . 4\_565 ?

06 Fe O2 42.12(11) . 1\_554 ?

04 Fe O2 124.62(12) . 1\_554 ?

07 Fe O2 133.39(12) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe O2 56.09(10) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe O2 113.55(11) . 1\_554 ?

P2 Fe O2 25.06(5) 1\_554 1\_554 ?

P2 Fe O2 122.48(6) . 1\_554 ?

P1 Fe O2 148.09(6) 3\_656 1\_554 ?

P1 Fe O2 119.17(6) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe O2 67.72(6) 3\_656 1\_554 ?

M3 Fe O2 37.05(5) . 1\_554 ?

O2 Fe O2 80.33(8) 3\_656 1\_554 ?

O1 Fe O2 102.98(8) 1\_655 1\_554 ?

M1CA Fe O2 154.13(6) . 1\_554 ?

M1MN Fe O2 154.13(6) . 1\_554 ?

O2 Fe O2 59.25(6) 4\_565 1\_554 ?

O8 Fe O2 118.74(7) . 1\_554 ?

04 Fe O2 54.65(8) 4\_565 1\_554 ?

06 Fe O1 138.25(12) . 3\_656 ?

04 Fe O1 58.34(11) . 3\_656 ?

07 Fe O1 41.63(11) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe O1 115.14(10) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe O1 76.65(11) . 3\_656 ?

P2 Fe O1 150.61(6) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe O1 56.56(6) . 3\_656 ?

P1 Fe O1 24.30(6) 3\_656 3\_656 ?

P1 Fe O1 68.81(6) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe O1 102.03(6) 3\_656 3\_656 ?

M3 Fe O1 140.05(6) . 3\_656 ?

O2 Fe O1 89.15(8) 3\_656 3\_656 ?

O1 Fe O1 81.72(9) 1\_655 3\_656 ?

M1CA Fe O1 35.66(5) . 3\_656 ?

M1MN Fe O1 35.66(5) . 3\_656 ?

O2 Fe O1 125.40(8) 4\_565 3\_656 ?

O8 Fe O1 55.10(7) . 3\_656 ?

04 Fe O1 135.71(8) 4\_565 3\_656 ?

O2 Fe O1 169.38(8) 1\_554 3\_656 ?

06 Fe O8 36.75(11) . 1\_554 ?

04 Fe O8 149.03(11) . 1\_554 ?

07 Fe O8 94.97(11) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe O8 56.41(12) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe O8 128.72(10) . 1\_554 ?

P2 Fe O8 23.38(5) 1\_554 1\_554 ?

P2 Fe O8 134.17(6) . 1\_554 ?

P1 Fe O8 108.53(5) 3\_656 1\_554 ?

P1 Fe O8 116.06(5) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe O8 51.47(5) 3\_656 1\_554 ?

M3 Fe O8 65.37(5) . 1\_554 ?

O2 Fe O8 48.64(7) 3\_656 1\_554 ?

O1 Fe O8 90.64(7) 1\_655 1\_554 ?

M1CA Fe O8 164.49(5) . 1\_554 ?

M1MN Fe O8 164.49(5) . 1\_554 ?

O2 Fe O8 96.79(7) 4\_565 1\_554 ?

O8 Fe O8 113.16(9) . 1\_554 ?

04 Fe O8 90.59(7) 4\_565 1\_554 ?

O2 Fe O8 39.58(7) 1\_554 1\_554 ?

O1 Fe O8 131.92(7) 3\_656 1\_554 ?

06 Fe 07 103.44(11) . 1\_655 ?

04 Fe 07 81.83(12) . 1\_655 ?

07 Fe 07 48.10(14) 3\_656 1\_655 ?

O8 Fe 07 159.88(10) 3\_656 1\_655 ?

03 Fe 07 37.57(10) . 1\_655 ?

P2 Fe 07 124.02(6) 1\_554 1\_655 ?

P2 Fe 07 91.26(6) . 1\_655 ?

P1 Fe 07 49.58(5) 3\_656 1\_655 ?

P1 Fe 07 22.97(5) 1\_655 1\_655 ?

P2 Fe 07 140.77(6) 3\_656 1\_655 ?

M3 Fe 07 160.85(6) . 1\_655 ?

O2 Fe 07 117.47(8) 3\_656 1\_655 ?

O1 Fe 07 40.66(8) 1\_655 1\_655 ?

M1CA Fe 07 39.49(6) . 1\_655 ?

M1MN Fe 07 39.49(6) . 1\_655 ?

O2 Fe 07 125.86(8) 4\_565 1\_655 ?

O8 Fe 07 99.56(7) . 1\_655 ?

04 Fe 07 102.04(8) 4\_565 1\_655 ?

O2 Fe 07 141.67(8) 1\_554 1\_655 ?

O1 Fe 07 45.86(7) 3\_656 1\_655 ?

O8 Fe 07 127.38(7) 1\_554 1\_655 ?

06 Fe P2 87.79(11) . 4\_565 ?

04 Fe P2 71.95(10) . 4\_565 ?

07 Fe P2 155.09(10) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe P2 89.40(9) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe P2 70.76(9) . 4\_565 ?

P2 Fe P2 84.22(3) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe P2 83.41(3) . 4\_565 ?

P1 Fe P2 147.59(3) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe P2 93.41(3) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe P2 110.89(2) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe P2 53.92(2) . 4\_565 ?

O2 Fe P2 135.54(6) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe P2 104.97(6) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe P2 90.12(3) . 4\_565 ?

M1MN Fe P2 90.12(3) . 4\_565 ?

O2 Fe P2 22.72(5) 4\_565 4\_565 ?

O8 Fe P2 103.84(5) . 4\_565 ?

04 Fe P2 22.79(5) 4\_565 4\_565 ?

O2 Fe P2 64.30(6) 1\_554 4\_565 ?

O1 Fe P2 124.11(6) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe P2 103.77(5) 1\_554 4\_565 ?

07 Fe P2 106.99(6) 1\_655 4\_565 ?

06 Fe M1MN 28.14(10) . 1\_554 ?

04 Fe M1MN 146.39(10) . 1\_554 ?

07 Fe M1MN 83.51(10) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe M1MN 116.46(9) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe M1MN 67.04(9) . 1\_554 ?

P2 Fe M1MN 48.82(3) 1\_554 1\_554 ?

P2 Fe M1MN 163.70(3) . 1\_554 ?

P1 Fe M1MN 101.76(3) 3\_656 1\_554 ?

P1 Fe M1MN 56.54(3) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe M1MN 112.91(3) 3\_656 1\_554 ?

M3 Fe M1MN 103.52(2) . 1\_554 ?

O2 Fe M1MN 99.94(6) 3\_656 1\_554 ?

O1 Fe M1MN 35.59(6) 1\_655 1\_554 ?

M1CA Fe M1MN 111.67(3) . 1\_554 ?

M1MN Fe M1MN 111.67(3) . 1\_554 ?

O2 Fe M1MN 106.87(6) 4\_565 1\_554 ?

O8 Fe M1MN 165.29(6) . 1\_554 ?

04 Fe M1MN 68.17(5) 4\_565 1\_554 ?

O2 Fe M1MN 67.44(5) 1\_554 1\_554 ?

O1 Fe M1MN 116.37(6) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe M1MN 62.02(5) 1\_554 1\_554 ?

07 Fe M1MN 75.80(6) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe M1MN 90.86(3) 4\_565 1\_554 ?

06 Fe M1CA 28.14(10) . 1\_554 ?

04 Fe M1CA 146.39(10) . 1\_554 ?

07 Fe M1CA 83.51(10) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe M1CA 116.46(9) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe M1CA 67.04(9) . 1\_554 ?

P2 Fe M1CA 48.82(3) 1\_554 1\_554 ?

P2 Fe M1CA 163.70(3) . 1\_554 ?

P1 Fe M1CA 101.76(3) 3\_656 1\_554 ?

P1 Fe M1CA 56.54(3) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe M1CA 112.91(3) 3\_656 1\_554 ?

M3 Fe M1CA 103.52(2) . 1\_554 ?

O2 Fe M1CA 99.94(6) 3\_656 1\_554 ?

O1 Fe M1CA 35.59(6) 1\_655 1\_554 ?

M1CA Fe M1CA 111.67(3) . 1\_554 ?

M1MN Fe M1CA 111.67(3) . 1\_554 ?

O2 Fe M1CA 106.87(6) 4\_565 1\_554 ?

O8 Fe M1CA 165.29(6) . 1\_554 ?

04 Fe M1CA 68.17(5) 4\_565 1\_554 ?

O2 Fe M1CA 67.44(5) 1\_554 1\_554 ?

O1 Fe M1CA 116.37(6) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe M1CA 62.02(5) 1\_554 1\_554 ?

07 Fe M1CA 75.80(6) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe M1CA 90.86(3) 4\_565 1\_554 ?

M1MN Fe M1CA 0.00(2) 1\_554 1\_554 ?

06 Fe 06 102.99(10) . 4\_566 ?

04 Fe 06 57.27(11) . 4\_566 ?

07 Fe 06 134.23(11) 3\_656 4\_566 ?

O8 Fe 06 106.00(10) 3\_656 4\_566 ?

03 Fe 06 54.48(10) . 4\_566 ?

P2 Fe 06 104.29(5) 1\_554 4\_566 ?

P2 Fe 06 72.67(5) . 4\_566 ?

P1 Fe 06 125.33(6) 3\_656 4\_566 ?

P1 Fe 06 78.65(5) 1\_655 4\_566 ?

P2 Fe 06 127.03(5) 3\_656 4\_566 ?

M3 Fe 06 73.68(5) . 4\_566 ?

O2 Fe 06 152.93(8) 3\_656 4\_566 ?

O1 Fe 06 97.19(7) 1\_655 4\_566 ?

M1CA Fe 06 67.85(5) . 4\_566 ?

M1MN Fe 06 67.85(5) . 4\_566 ?

O2 Fe 06 38.67(7) 4\_565 4\_566 ?

O8 Fe 06 97.20(7) . 4\_566 ?

04 Fe 06 36.77(7) 4\_565 4\_566 ?

O2 Fe 06 86.39(7) 1\_554 4\_566 ?

O1 Fe 06 102.60(7) 3\_656 4\_566 ?

O8 Fe 06 125.47(7) 1\_554 4\_566 ?

07 Fe 06 87.33(7) 1\_655 4\_566 ?

P2 Fe 06 22.42(5) 4\_565 4\_566 ?

M1MN Fe 06 96.51(5) 1\_554 4\_566 ?

M1CA Fe 06 96.51(5) 1\_554 4\_566 ?

06 Fe 05 117.95(12) . 3\_656 ?

04 Fe 05 82.35(11) . 3\_656 ?

07 Fe 05 32.54(11) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe 05 88.65(10) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe 05 108.38(11) . 3\_656 ?

P2 Fe 05 118.68(6) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe 05 70.89(6) . 3\_656 ?

P1 Fe 05 21.93(5) 3\_656 3\_656 ?

P1 Fe 05 91.85(6) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe 05 70.05(6) 3\_656 3\_656 ?

M3 Fe 05 124.51(6) . 3\_656 ?

O2 Fe 05 52.76(7) 3\_656 3\_656 ?

O1 Fe 05 90.48(8) 1\_655 3\_656 ?

M1CA Fe 05 72.30(5) . 3\_656 ?

M1MN Fe 05 72.30(5) . 3\_656 ?

O2 Fe 05 139.68(8) 4\_565 3\_656 ?

O8 Fe 05 52.58(7) . 3\_656 ?

04 Fe 05 172.38(8) 4\_565 3\_656 ?

O2 Fe 05 132.96(8) 1\_554 3\_656 ?

O1 Fe 05 36.71(7) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe 05 96.56(7) 1\_554 3\_656 ?

07 Fe 05 71.49(7) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe 05 154.11(6) 4\_565 3\_656 ?

M1MN Fe 05 113.01(6) 1\_554 3\_656 ?

M1CA Fe 05 113.01(6) 1\_554 3\_656 ?

06 Fe 05 136.96(7) 4\_566 3\_656 ?

06 Fe M1CA 81.40(10) . 4\_565 ?

04 Fe M1CA 83.10(10) . 4\_565 ?

07 Fe M1CA 111.87(10) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe M1CA 133.11(9) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe M1CA 28.15(9) . 4\_565 ?

P2 Fe M1CA 93.23(3) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe M1CA 100.86(3) . 4\_565 ?

P1 Fe M1CA 114.83(3) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe M1CA 48.75(3) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe M1CA 153.48(3) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe M1CA 96.39(3) . 4\_565 ?

O2 Fe M1CA 164.04(6) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe M1CA 62.55(6) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe M1CA 69.20(2) . 4\_565 ?

M1MN Fe M1CA 69.20(2) . 4\_565 ?

O2 Fe M1CA 67.40(5) 4\_565 4\_565 ?

O8 Fe M1CA 126.29(6) . 4\_565 ?

04 Fe M1CA 36.70(6) 4\_565 4\_565 ?

O2 Fe M1CA 88.56(6) 1\_554 4\_565 ?

O1 Fe M1CA 102.04(6) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe M1CA 116.15(5) 1\_554 4\_565 ?

07 Fe M1CA 65.68(5) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe M1CA 44.83(2) 4\_565 4\_565 ?

M1MN Fe M1CA 64.98(2) 1\_554 4\_565 ?

M1CA Fe M1CA 64.98(2) 1\_554 4\_565 ?

06 Fe M1CA 35.21(5) 4\_566 4\_565 ?

05 Fe M1CA 136.22(5) 3\_656 4\_565 ?

06 Fe M1MN 81.40(10) . 4\_565 ?

04 Fe M1MN 83.10(10) . 4\_565 ?

07 Fe M1MN 111.87(10) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe M1MN 133.11(9) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe M1MN 28.15(9) . 4\_565 ?

P2 Fe M1MN 93.23(3) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe M1MN 100.86(3) . 4\_565 ?

P1 Fe M1MN 114.83(3) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe M1MN 48.75(3) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe M1MN 153.48(3) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe M1MN 96.39(3) . 4\_565 ?

O2 Fe M1MN 164.04(6) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe M1MN 62.55(6) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe M1MN 69.20(2) . 4\_565 ?

M1MN Fe M1MN 69.20(2) . 4\_565 ?

O2 Fe M1MN 67.40(5) 4\_565 4\_565 ?

O8 Fe M1MN 126.29(6) . 4\_565 ?

04 Fe M1MN 36.70(6) 4\_565 4\_565 ?

O2 Fe M1MN 88.56(6) 1\_554 4\_565 ?

O1 Fe M1MN 102.04(6) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe M1MN 116.15(5) 1\_554 4\_565 ?

07 Fe M1MN 65.68(5) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe M1MN 44.83(2) 4\_565 4\_565 ?

M1MN Fe M1MN 64.98(2) 1\_554 4\_565 ?

M1CA Fe M1MN 64.98(2) 1\_554 4\_565 ?

06 Fe M1MN 35.21(5) 4\_566 4\_565 ?

05 Fe M1MN 136.22(5) 3\_656 4\_565 ?

M1CA Fe M1MN 0.00(3) 4\_565 4\_565 ?

06 Fe M1MN 68.48(10) . 3\_756 ?

04 Fe M1MN 126.37(10) . 3\_756 ?

07 Fe M1MN 31.51(10) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe M1MN 122.57(9) 3\_656 3\_756 ?

03 Fe M1MN 75.84(9) . 3\_756 ?

P2 Fe M1MN 83.92(3) 1\_554 3\_756 ?

P2 Fe M1MN 125.92(3) . 3\_756 ?

P1 Fe M1MN 50.28(3) 3\_656 3\_756 ?

P1 Fe M1MN 51.69(3) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe M1MN 102.78(3) 3\_656 3\_756 ?

M3 Fe M1MN 143.09(3) . 3\_756 ?

O2 Fe M1MN 77.22(6) 3\_656 3\_756 ?

O1 Fe M1MN 33.46(6) 1\_655 3\_756 ?

M1CA Fe M1MN 87.11(3) . 3\_756 ?

M1MN Fe M1MN 87.11(3) . 3\_756 ?

O2 Fe M1MN 158.43(6) 4\_565 3\_756 ?

O8 Fe M1MN 114.14(5) . 3\_756 ?

04 Fe M1MN 117.47(6) 4\_565 3\_756 ?

O2 Fe M1MN 108.89(6) 1\_554 3\_756 ?

O1 Fe M1MN 69.78(6) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe M1MN 77.97(5) 1\_554 3\_756 ?

07 Fe M1MN 50.74(6) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe M1MN 137.89(3) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe M1MN 52.08(2) 1\_554 3\_756 ?

M1CA Fe M1MN 52.08(2) 1\_554 3\_756 ?

06 Fe M1MN 129.66(5) 4\_566 3\_756 ?

05 Fe M1MN 61.87(5) 3\_656 3\_756 ?

M1CA Fe M1MN 95.847(18) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe M1MN 95.847(18) 4\_565 3\_756 ?

06 Fe M1CA 68.48(10) . 3\_756 ?

04 Fe M1CA 126.37(10) . 3\_756 ?

07 Fe M1CA 31.51(10) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe M1CA 122.57(9) 3\_656 3\_756 ?

03 Fe M1CA 75.84(9) . 3\_756 ?

P2 Fe M1CA 83.92(3) 1\_554 3\_756 ?

P2 Fe M1CA 125.92(3) . 3\_756 ?

P1 Fe M1CA 50.28(3) 3\_656 3\_756 ?

P1 Fe M1CA 51.69(3) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe M1CA 102.78(3) 3\_656 3\_756 ?

M3 Fe M1CA 143.09(3) . 3\_756 ?

O2 Fe M1CA 77.22(6) 3\_656 3\_756 ?

O1 Fe M1CA 33.46(6) 1\_655 3\_756 ?

M1CA Fe M1CA 87.11(3) . 3\_756 ?

M1MN Fe M1CA 87.11(3) . 3\_756 ?

O2 Fe M1CA 158.43(6) 4\_565 3\_756 ?

O8 Fe M1CA 114.14(5) . 3\_756 ?

04 Fe M1CA 117.47(6) 4\_565 3\_756 ?

O2 Fe M1CA 108.89(6) 1\_554 3\_756 ?

O1 Fe M1CA 69.78(6) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe M1CA 77.97(5) 1\_554 3\_756 ?

07 Fe M1CA 50.74(6) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe M1CA 137.89(3) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe M1CA 52.08(2) 1\_554 3\_756 ?

M1CA Fe M1CA 52.08(2) 1\_554 3\_756 ?

06 Fe M1CA 129.66(5) 4\_566 3\_756 ?

05 Fe M1CA 61.87(5) 3\_656 3\_756 ?

M1CA Fe M1CA 95.847(18) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe M1CA 95.847(18) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe M1CA 0.00(3) 3\_756 3\_756 ?

06 Fe O2 146.19(11) . . ?

04 Fe O2 23.68(11) . . ?

07 Fe O2 114.34(11) 3\_656 . ?

O8 Fe O2 69.70(10) 3\_656 . ?

03 Fe O2 99.88(10) . . ?

P2 Fe O2 128.52(5) 1\_554 . ?

P2 Fe O2 19.19(5) . . ?

P1 Fe O2 95.26(5) 3\_656 . ?

P1 Fe O2 117.85(5) 1\_655 . ?

P2 Fe O2 80.70(5) 3\_656 . ?

M3 Fe O2 67.84(5) . . ?

O2 Fe O2 99.10(7) 3\_656 . ?

O1 Fe O2 143.58(7) 1\_655 . ?

M1CA Fe O2 65.95(5) . . ?

M1MN Fe O2 65.95(5) . . ?

O2 Fe O2 53.76(6) 4\_565 . ?

O8 Fe O2 36.93(7) . . ?

04 Fe O2 90.00(7) 4\_565 . ?

O2 Fe O2 104.53(8) 1\_554 . ?

O1 Fe O2 75.51(7) 3\_656 . ?

O8 Fe O2 125.69(7) 1\_554 . ?

07 Fe O2 105.42(7) 1\_655 . ?

P2 Fe O2 67.21(5) 4\_565 . ?

M1MN Fe O2 157.62(5) 1\_554 . ?

M1CA Fe O2 157.62(5) 1\_554 . ?

06 Fe O2 61.52(7) 4\_566 . ?

05 Fe O2 87.97(7) 3\_656 . ?

M1CA Fe O2 94.73(5) 4\_565 . ?

M1MN Fe O2 94.73(5) 4\_565 . ?

M1MN Fe O2 145.10(5) 3\_756 . ?

M1CA Fe O2 145.10(5) 3\_756 . ?

06 Fe M3 53.77(10) . 3\_655 ?

04 Fe M3 144.10(10) . 3\_655 ?

07 Fe M3 66.04(10) 3\_656 3\_655 ?

O8 Fe M3 67.21(9) 3\_656 3\_655 ?

03 Fe M3 128.07(9) . 3\_655 ?

P2 Fe M3 50.33(2) 1\_554 3\_655 ?

P2 Fe M3 126.56(3) . 3\_655 ?

P1 Fe M3 78.70(3) 3\_656 3\_655 ?

P1 Fe M3 106.00(3) 1\_655 3\_655 ?

P2 Fe M3 51.04(2) 3\_656 3\_655 ?

M3 Fe M3 90.25(2) . 3\_655 ?

O2 Fe M3 32.21(6) 3\_656 3\_655 ?

O1 Fe M3 81.54(6) 1\_655 3\_655 ?

M1CA Fe M3 135.61(3) . 3\_655 ?

M1MN Fe M3 135.61(3) . 3\_655 ?

O2 Fe M3 124.68(6) 4\_565 3\_655 ?

O8 Fe M3 101.04(6) . 3\_655 ?

04 Fe M3 118.13(6) 4\_565 3\_655 ?

O2 Fe M3 69.40(6) 1\_554 3\_655 ?

O1 Fe M3 102.29(6) 3\_656 3\_655 ?

O8 Fe M3 29.83(5) 1\_554 3\_655 ?

07 Fe M3 106.70(6) 1\_655 3\_655 ?

P2 Fe M3 133.56(3) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe M3 67.74(2) 1\_554 3\_655 ?

M1CA Fe M3 67.74(2) 1\_554 3\_655 ?

06 Fe M3 154.61(5) 4\_566 3\_655 ?

05 Fe M3 68.39(5) 3\_656 3\_655 ?

M1CA Fe M3 132.51(3) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe M3 132.51(3) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe M3 56.557(19) 3\_756 3\_655 ?

M1CA Fe M3 56.557(19) 3\_756 3\_655 ?

O2 Fe M3 130.68(5) . 3\_655 ?

06 Fe O1 36.74(11) . 3\_655 ?

04 Fe O1 158.79(11) . 3\_655 ?

07 Fe O1 61.26(11) 3\_656 3\_655 ?

O8 Fe O1 103.97(10) 3\_656 3\_655 ?

03 Fe O1 88.18(10) . 3\_655 ?

P2 Fe O1 51.33(5) 1\_554 3\_655 ?

P2 Fe O1 155.62(6) . 3\_655 ?

P1 Fe O1 80.29(5) 3\_656 3\_655 ?

P1 Fe O1 68.58(5) 1\_655 3\_655 ?

P2 Fe O1 91.11(5) 3\_656 3\_655 ?

M3 Fe O1 111.57(5) . 3\_655 ?

O2 Fe O1 71.69(7) 3\_656 3\_655 ?

O1 Fe O1 42.82(9) 1\_655 3\_655 ?

M1CA Fe O1 117.26(5) . 3\_655 ?

M1MN Fe O1 117.26(5) . 3\_655 ?

O2 Fe O1 131.33(7) 4\_565 3\_655 ?

O8 Fe O1 134.43(7) . 3\_655 ?

04 Fe O1 97.85(7) 4\_565 3\_655 ?

O2 Fe O1 76.25(7) 1\_554 3\_655 ?

O1 Fe O1 101.96(8) 3\_656 3\_655 ?

O8 Fe O1 49.50(7) 1\_554 3\_655 ?

07 Fe O1 78.07(7) 1\_655 3\_655 ?

P2 Fe O1 120.56(5) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe O1 31.34(5) 1\_554 3\_655 ?

M1CA Fe O1 31.34(5) 1\_554 3\_655 ?

06 Fe O1 127.75(7) 4\_566 3\_655 ?

05 Fe O1 84.89(7) 3\_656 3\_655 ?

M1CA Fe O1 94.65(5) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe O1 94.65(5) 4\_565 3\_655 ?

M1MN Fe O1 32.65(5) 3\_756 3\_655 ?

M1CA Fe O1 32.65(5) 3\_756 3\_655 ?

O2 Fe O1 170.60(7) . 3\_655 ?

M3 Fe O1 40.48(5) 3\_655 3\_655 ?

06 Fe 06 173.26(15) . 1\_556 ?

04 Fe 06 16.79(11) . 1\_556 ?

07 Fe 06 83.38(11) 3\_656 1\_556 ?

O8 Fe 06 96.96(10) 3\_656 1\_556 ?

03 Fe 06 81.21(10) . 1\_556 ?

P2 Fe 06 163.24(5) 1\_554 1\_556 ?

P2 Fe 06 18.73(5) . 1\_556 ?

P1 Fe 06 64.84(5) 3\_656 1\_556 ?

P1 Fe 06 90.13(5) 1\_655 1\_556 ?

P2 Fe 06 98.51(5) 3\_656 1\_556 ?

M3 Fe 06 102.84(5) . 1\_556 ?

O2 Fe 06 103.94(7) 3\_656 1\_556 ?

O1 Fe 06 113.11(7) 1\_655 1\_556 ?

M1CA Fe 06 34.93(5) . 1\_556 ?

M1MN Fe 06 34.93(5) . 1\_556 ?

O2 Fe 06 83.70(7) 4\_565 1\_556 ?

O8 Fe 06 36.73(7) . 1\_556 ?

04 Fe 06 108.25(7) 4\_565 1\_556 ?

O2 Fe 06 139.44(7) 1\_554 1\_556 ?

O1 Fe 06 42.06(7) 3\_656 1\_556 ?

O8 Fe 06 149.88(7) 1\_554 1\_556 ?

07 Fe 06 72.55(7) 1\_655 1\_556 ?

P2 Fe 06 88.27(5) 4\_565 1\_556 ?

M1MN Fe 06 146.56(5) 1\_554 1\_556 ?

M1CA Fe 06 146.56(5) 1\_554 1\_556 ?

06 Fe 06 71.72(8) 4\_566 1\_556 ?

05 Fe 06 66.37(7) 3\_656 1\_556 ?

M1CA Fe 06 91.95(5) 4\_565 1\_556 ?

M1MN Fe 06 91.95(5) 4\_565 1\_556 ?

M1MN Fe 06 111.39(5) 3\_756 1\_556 ?

M1CA Fe 06 111.39(5) 3\_756 1\_556 ?

O2 Fe 06 35.01(6) . 1\_556 ?

M3 Fe 06 132.21(5) 3\_655 1\_556 ?

O1 Fe 06 143.92(7) 3\_655 1\_556 ?

06 Fe 05 74.22(11) . 2\_645 ?

04 Fe 05 126.06(11) . 2\_645 ?

07 Fe 05 38.97(11) 3\_656 2\_645 ?

O8 Fe 05 83.53(10) 3\_656 2\_645 ?

03 Fe 05 115.82(10) . 2\_645 ?

P2 Fe 05 76.56(5) 1\_554 2\_645 ?

P2 Fe 05 112.49(5) . 2\_645 ?

P1 Fe 05 51.01(5) 3\_656 2\_645 ?

P1 Fe 05 91.60(6) 1\_655 2\_645 ?

P2 Fe 05 62.71(5) 3\_656 2\_645 ?

M3 Fe 05 114.49(5) . 2\_645 ?

O2 Fe 05 36.87(7) 3\_656 2\_645 ?

O1 Fe 05 73.06(7) 1\_655 2\_645 ?

M1CA Fe 05 107.90(5) . 2\_645 ?

M1MN Fe 05 107.90(5) . 2\_645 ?

O2 Fe 05 149.90(7) 4\_565 2\_645 ?

O8 Fe 05 89.20(7) . 2\_645 ?

04 Fe 05 141.03(7) 4\_565 2\_645 ?

O2 Fe 05 97.14(7) 1\_554 2\_645 ?

O1 Fe 05 74.93(7) 3\_656 2\_645 ?

O8 Fe 05 57.57(7) 1\_554 2\_645 ?

07 Fe 05 84.20(7) 1\_655 2\_645 ?

P2 Fe 05 160.78(5) 4\_565 2\_645 ?

M1MN Fe 05 76.52(5) 1\_554 2\_645 ?

M1CA Fe 05 76.52(5) 1\_554 2\_645 ?

06 Fe 05 170.13(7) 4\_566 2\_645 ?

05 Fe 05 43.901(13) 3\_656 2\_645 ?

M1CA Fe 05 135.35(5) 4\_565 2\_645 ?

M1MN Fe 05 135.35(5) 4\_565 2\_645 ?

M1MN Fe 05 40.47(5) 3\_756 2\_645 ?

M1CA Fe 05 40.47(5) 3\_756 2\_645 ?

O2 Fe 05 125.82(7) . 2\_645 ?

M3 Fe 05 27.78(5) 3\_655 2\_645 ?

O1 Fe 05 45.24(7) 3\_655 2\_645 ?

06 Fe 05 110.27(7) 1\_556 2\_645 ?

06 Fe 03 44.94(11) . 4\_565 ?

04 Fe 03 119.79(11) . 4\_565 ?

07 Fe 03 106.01(11) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe 03 121.69(10) 3\_656 4\_565 ?

03 Fe 03 50.52(6) . 4\_565 ?

P2 Fe 03 60.01(5) 1\_554 4\_565 ?

P2 Fe 03 137.26(6) . 4\_565 ?

P1 Fe 03 120.46(6) 3\_656 4\_565 ?

P1 Fe 03 54.33(5) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe 03 130.28(6) 3\_656 4\_565 ?

M3 Fe 03 92.41(5) . 4\_565 ?

O2 Fe 03 127.19(8) 3\_656 4\_565 ?

O1 Fe 03 48.34(8) 1\_655 4\_565 ?

M1CA Fe 03 99.88(5) . 4\_565 ?

M1MN Fe 03 99.88(5) . 4\_565 ?

O2 Fe 03 81.25(7) 4\_565 4\_565 ?

O8 Fe 03 162.74(8) . 4\_565 ?

04 Fe 03 40.20(7) 4\_565 4\_565 ?

O2 Fe 03 65.66(7) 1\_554 4\_565 ?

O1 Fe 03 123.06(7) 3\_656 4\_565 ?

O8 Fe 03 81.13(7) 1\_554 4\_565 ?

07 Fe 03 77.29(7) 1\_655 4\_565 ?

P2 Fe 03 61.85(6) 4\_565 4\_565 ?

M1MN Fe 03 30.71(5) 1\_554 4\_565 ?

M1CA Fe 03 30.71(5) 1\_554 4\_565 ?

06 Fe 03 65.86(7) 4\_566 4\_565 ?

05 Fe 03 138.47(7) 3\_656 4\_565 ?

M1CA Fe 03 36.88(5) 4\_565 4\_565 ?

M1MN Fe 03 36.88(5) 4\_565 4\_565 ?

M1MN Fe 03 77.28(5) 3\_756 4\_565 ?

M1CA Fe 03 77.28(5) 3\_756 4\_565 ?

O2 Fe 03 127.02(7) . 4\_565 ?

M3 Fe 03 96.08(5) 3\_655 4\_565 ?

O1 Fe 03 62.05(7) 3\_655 4\_565 ?

06 Fe 03 128.34(7) 1\_556 4\_565 ?

05 Fe 03 107.17(7) 2\_645 4\_565 ?

06 Fe 04 106.09(11) . 3\_656 ?

04 Fe 04 82.71(11) . 3\_656 ?

07 Fe 04 92.32(11) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe 04 26.56(9) 3\_656 3\_656 ?

03 Fe 04 161.58(10) . 3\_656 ?

P2 Fe 04 88.00(5) 1\_554 3\_656 ?

P2 Fe 04 65.44(5) . 3\_656 ?

P1 Fe 04 84.73(5) 3\_656 3\_656 ?

P1 Fe 04 154.83(5) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe 04 18.15(5) 3\_656 3\_656 ?

M3 Fe 04 61.53(5) . 3\_656 ?

O2 Fe 04 35.47(7) 3\_656 3\_656 ?

O1 Fe 04 143.44(7) 1\_655 3\_656 ?

M1CA Fe 04 112.58(5) . 3\_656 ?

M1MN Fe 04 112.58(5) . 3\_656 ?

O2 Fe 04 86.69(7) 4\_565 3\_656 ?

O8 Fe 04 43.93(7) . 3\_656 ?

04 Fe 04 122.47(5) 4\_565 3\_656 ?

O2 Fe 04 81.51(7) 1\_554 3\_656 ?

O1 Fe 04 89.08(7) 3\_656 3\_656 ?

O8 Fe 04 69.62(7) 1\_554 3\_656 ?

07 Fe 04 133.37(7) 1\_655 3\_656 ?

P2 Fe 04 109.41(5) 4\_565 3\_656 ?

M1MN Fe 04 130.79(5) 1\_554 3\_656 ?

M1CA Fe 04 130.79(5) 1\_554 3\_656 ?

06 Fe 04 119.36(7) 4\_566 3\_656 ?

05 Fe 04 62.99(7) 3\_656 3\_656 ?

M1CA Fe 04 153.71(5) 4\_565 3\_656 ?

M1MN Fe 04 153.71(5) 4\_565 3\_656 ?

M1MN Fe 04 110.38(5) 3\_756 3\_656 ?

M1CA Fe 04 110.38(5) 3\_756 3\_656 ?

O2 Fe 04 64.78(6) . 3\_656 ?

M3 Fe 04 65.93(5) 3\_655 3\_656 ?

O1 Fe 04 106.38(7) 3\_655 3\_656 ?

06 Fe 04 80.38(6) 1\_556 3\_656 ?

05 Fe 04 70.39(7) 2\_645 3\_656 ?

03 Fe 04 146.73(7) 4\_565 3\_656 ?

06 Fe 04 6.95(11) . 1\_554 ?

04 Fe 04 154.43(14) . 1\_554 ?

07 Fe 04 104.59(11) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe 04 83.72(10) 3\_656 1\_554 ?

03 Fe 04 95.05(10) . 1\_554 ?

P2 Fe 04 15.71(5) 1\_554 1\_554 ?

P2 Fe 04 157.75(5) . 1\_554 ?

P1 Fe 04 123.43(5) 3\_656 1\_554 ?

P1 Fe 04 89.68(5) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe 04 85.46(5) 3\_656 1\_554 ?

M3 Fe 04 72.35(5) . 1\_554 ?

O2 Fe 04 83.20(7) 3\_656 1\_554 ?

O1 Fe 04 68.90(7) 1\_655 1\_554 ?

M1CA Fe 04 143.76(5) . 1\_554 ?

M1MN Fe 04 143.76(5) . 1\_554 ?

O2 Fe 04 88.20(7) 4\_565 1\_554 ?

O8 Fe 04 147.10(7) . 1\_554 ?

04 Fe 04 62.74(7) 4\_565 1\_554 ?

O2 Fe 04 35.30(7) 1\_554 1\_554 ?

O1 Fe 04 145.15(7) 3\_656 1\_554 ?

O8 Fe 04 35.40(6) 1\_554 1\_554 ?

07 Fe 04 109.39(7) 1\_655 1\_554 ?

P2 Fe 04 82.69(5) 4\_565 1\_554 ?

M1MN Fe 04 33.63(5) 1\_554 1\_554 ?

M1CA Fe 04 33.63(5) 1\_554 1\_554 ?

06 Fe 04 99.37(7) 4\_566 1\_554 ?

05 Fe 04 122.70(7) 3\_656 1\_554 ?

M1CA Fe 04 81.13(5) 4\_565 1\_554 ?

M1MN Fe 04 81.13(5) 4\_565 1\_554 ?

M1MN Fe 04 75.38(5) 3\_756 1\_554 ?

M1CA Fe 04 75.38(5) 3\_756 1\_554 ?

O2 Fe 04 139.24(6) . 1\_554 ?

M3 Fe 04 56.34(5) 3\_655 1\_554 ?

O1 Fe 04 43.43(7) 3\_655 1\_554 ?

06 Fe 04 170.93(7) 1\_556 1\_554 ?

05 Fe 04 78.80(6) 2\_645 1\_554 ?

03 Fe 04 45.78(7) 4\_565 1\_554 ?

04 Fe 04 103.28(5) 3\_656 1\_554 ?

06 Fe 03 104.10(11) . 3\_756 ?

04 Fe 03 92.84(11) . 3\_756 ?

07 Fe 03 8.48(11) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe 03 120.28(10) 3\_656 3\_756 ?

03 Fe 03 78.79(12) . 3\_756 ?

P2 Fe 03 116.90(6) 1\_554 3\_756 ?

P2 Fe 03 89.96(5) . 3\_756 ?

P1 Fe 03 15.12(5) 3\_656 3\_756 ?

P1 Fe 03 58.87(5) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe 03 99.54(6) 3\_656 3\_756 ?

M3 Fe 03 157.02(6) . 3\_756 ?

O2 Fe 03 76.33(7) 3\_656 3\_756 ?

O1 Fe 03 57.73(7) 1\_655 3\_756 ?

M1CA Fe 03 61.32(5) . 3\_756 ?

M1MN Fe 03 61.32(5) . 3\_756 ?

O2 Fe 03 159.33(7) 4\_565 3\_756 ?

O8 Fe 03 80.84(7) . 3\_756 ?

04 Fe 03 141.40(8) 4\_565 3\_756 ?

O2 Fe 03 141.42(7) 1\_554 3\_756 ?

O1 Fe 03 34.58(7) 3\_656 3\_756 ?

O8 Fe 03 103.40(7) 1\_554 3\_756 ?

07 Fe 03 41.44(7) 1\_655 3\_756 ?

P2 Fe 03 147.76(6) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe 03 86.79(5) 1\_554 3\_756 ?

M1CA Fe 03 86.79(5) 1\_554 3\_756 ?

06 Fe 03 126.19(7) 4\_566 3\_756 ?

05 Fe 03 33.82(7) 3\_656 3\_756 ?

M1CA Fe 03 106.58(5) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe 03 106.58(5) 4\_565 3\_756 ?

M1MN Fe 03 35.99(5) 3\_756 3\_756 ?

M1CA Fe 03 35.99(5) 3\_756 3\_756 ?

O2 Fe 03 109.14(7) . 3\_756 ?

M3 Fe 03 74.51(5) 3\_655 3\_756 ?

O1 Fe 03 67.48(7) 3\_655 3\_756 ?

06 Fe 03 76.63(7) 1\_556 3\_756 ?

05 Fe 03 47.36(7) 2\_645 3\_756 ?

03 Fe 03 106.01(4) 4\_565 3\_756 ?

04 Fe 03 96.12(7) 3\_656 3\_756 ?

04 Fe 03 110.88(7) 1\_554 3\_756 ?

05 M3 O8 144.30(14) 4\_565 3\_656 ?

05 M3 O2 106.76(14) 4\_565 4\_565 ?

O8 M3 O2 108.19(14) 3\_656 4\_565 ?

05 M3 05 93.88(13) 4\_565 . ?

O8 M3 05 102.92(13) 3\_656 . ?

O2 M3 05 73.17(12) 4\_565 . ?

05 M3 O2 74.22(13) 4\_565 1\_554 ?

O8 M3 O2 87.88(12) 3\_656 1\_554 ?

O2 M3 O2 108.64(13) 4\_565 1\_554 ?

05 M3 O2 168.03(13) . 1\_554 ?

05 M3 Fe 149.94(10) 4\_565 . ?

O8 M3 Fe 39.78(9) 3\_656 . ?

O2 M3 Fe 75.95(10) 4\_565 . ?

05 M3 Fe 115.01(10) . . ?

O2 M3 Fe 76.61(9) 1\_554 . ?

05 M3 Fe 79.44(10) 4\_565 3\_655 ?

O8 M3 Fe 65.08(9) 3\_656 3\_655 ?

O2 M3 Fe 160.98(9) 4\_565 3\_655 ?

05 M3 Fe 125.04(9) . 3\_655 ?

O2 M3 Fe 54.93(9) 1\_554 3\_655 ?

Fe M3 Fe 89.75(2) . 3\_655 ?

05 M3 Fe 61.53(10) 4\_565 2\_655 ?

O8 M3 Fe 154.08(9) 3\_656 2\_655 ?

O2 M3 Fe 46.08(10) 4\_565 2\_655 ?

05 M3 Fe 69.74(9) . 2\_655 ?

O2 M3 Fe 102.64(9) 1\_554 2\_655 ?

Fe M3 Fe 119.26(2) . 2\_655 ?

Fe M3 Fe 139.93(3) 3\_655 2\_655 ?

05 M3 Fe 80.17(11) 4\_565 4\_565 ?

O8 M3 Fe 109.62(9) 3\_656 4\_565 ?

O2 M3 Fe 63.02(9) 4\_565 4\_565 ?

05 M3 Fe 131.40(9) . 4\_565 ?

O2 M3 Fe 46.49(9) 1\_554 4\_565 ?

Fe M3 Fe 74.57(2) . 4\_565 ?

Fe M3 Fe 101.415(16) 3\_655 4\_565 ?

Fe M3 Fe 65.125(19) 2\_655 4\_565 ?

05 M3 Fe 132.96(11) 4\_565 3\_656 ?

O8 M3 Fe 45.76(9) 3\_656 3\_656 ?

O2 M3 Fe 100.02(9) 4\_565 3\_656 ?

05 M3 Fe 57.89(10) . 3\_656 ?

O2 M3 Fe 131.67(9) 1\_554 3\_656 ?

Fe M3 Fe 73.66(2) . 3\_656 ?

Fe M3 Fe 87.61(2) 3\_655 3\_656 ?

Fe M3 Fe 125.01(2) 2\_655 3\_656 ?

Fe M3 Fe 146.869(18) 4\_565 3\_656 ?

05 M3 Fe 124.86(11) 4\_565 4\_566 ?

O8 M3 Fe 90.57(9) 3\_656 4\_566 ?

O2 M3 Fe 18.47(9) 4\_565 4\_566 ?

05 M3 Fe 71.02(9) . 4\_566 ?

O2 M3 Fe 114.56(9) 1\_554 4\_566 ?

Fe M3 Fe 62.63(2) . 4\_566 ?

Fe M3 Fe 152.36(2) 3\_655 4\_566 ?

Fe M3 Fe 63.511(18) 2\_655 4\_566 ?

Fe M3 Fe 73.520(14) 4\_565 4\_566 ?

Fe M3 Fe 83.738(13) 3\_656 4\_566 ?

07 P1 O1 115.1(2) . . ?

07 P1 03 106.7(2) . 1\_455 ?

O1 P1 03 111.0(2) . 1\_455 ?

07 P1 05 110.6(2) . . ?

O1 P1 05 105.0(2) . . ?

03 P1 05 108.3(2) 1\_455 . ?

07 P1 M1CA 132.27(15) . 4\_465 ?

O1 P1 M1CA 110.86(14) . 4\_465 ?

03 P1 M1CA 42.26(15) 1\_455 4\_465 ?

05 P1 M1CA 67.69(15) . 4\_465 ?

07 P1 M1CA 50.89(15) . 1\_455 ?

O1 P1 M1CA 137.75(15) . 1\_455 ?

03 P1 M1CA 56.35(15) 1\_455 1\_455 ?

05 P1 M1CA 117.23(14) . 1\_455 ?

M1CA P1 M1CA 86.06(4) 4\_465 1\_455 ?

07 P1 M1CA 80.87(14) . 3\_656 ?

O1 P1 M1CA 35.94(14) . 3\_656 ?

03 P1 M1CA 113.93(15) 1\_455 3\_656 ?

05 P1 M1CA 130.60(15) . 3\_656 ?

M1CA P1 M1CA 138.67(4) 4\_465 3\_656 ?

M1CA P1 M1CA 107.13(4) 1\_455 3\_656 ?

07 P1 Fe 26.14(14) . 3\_656 ?

O1 P1 Fe 93.38(14) . 3\_656 ?

03 P1 Fe 130.83(16) 1\_455 3\_656 ?

05 P1 Fe 105.20(15) . 3\_656 ?

M1CA P1 Fe 155.70(5) 4\_465 3\_656 ?

M1CA P1 Fe 76.63(3) 1\_455 3\_656 ?

M1CA P1 Fe 64.14(3) 3\_656 3\_656 ?

07 P1 Fe 97.55(15) . 1\_455 ?

O1 P1 Fe 81.59(14) . 1\_455 ?

03 P1 Fe 39.54(15) 1\_455 1\_455 ?

05 P1 Fe 143.89(16) . 1\_455 ?

M1CA P1 Fe 76.73(3) 4\_465 1\_455 ?

M1CA P1 Fe 64.46(3) 1\_455 1\_455 ?

M1CA P1 Fe 74.56(3) 3\_656 1\_455 ?

Fe P1 Fe 109.84(4) 3\_656 1\_455 ?

07 P1 M1CA 142.80(15) . 1\_454 ?

O1 P1 M1CA 30.49(13) . 1\_454 ?

03 P1 M1CA 86.47(15) 1\_455 1\_454 ?

05 P1 M1CA 97.17(14) . 1\_454 ?

M1CA P1 M1CA 80.57(4) 4\_465 1\_454 ?

M1CA P1 M1CA 134.71(5) 1\_455 1\_454 ?

M1CA P1 M1CA 62.12(3) 3\_656 1\_454 ?

Fe P1 M1CA 123.73(4) 3\_656 1\_454 ?

Fe P1 M1CA 70.38(3) 1\_455 1\_454 ?

07 P1 Fe 156.53(15) . 4\_465 ?

O1 P1 Fe 76.76(13) . 4\_465 ?

03 P1 Fe 50.10(15) 1\_455 4\_465 ?

05 P1 Fe 83.72(15) . 4\_465 ?

M1CA P1 Fe 35.04(2) 4\_465 4\_465 ?

M1CA P1 Fe 106.35(3) 1\_455 4\_465 ?

M1CA P1 Fe 104.34(3) 3\_656 4\_465 ?

Fe P1 Fe 168.29(4) 3\_656 4\_465 ?

Fe P1 Fe 62.94(3) 1\_455 4\_465 ?

M1CA P1 Fe 46.27(2) 1\_454 4\_465 ?

07 P1 Fe 81.84(15) . . ?

O1 P1 Fe 79.75(13) . . ?

03 P1 Fe 160.28(16) 1\_455 . ?

05 P1 Fe 52.09(15) . . ?

M1CA P1 Fe 119.12(3) 4\_465 . ?

M1CA P1 Fe 126.56(3) 1\_455 . ?

M1CA P1 Fe 84.66(3) 3\_656 . ?

Fe P1 Fe 62.00(3) 3\_656 . ?

Fe P1 Fe 159.00(4) 1\_455 . ?

M1CA P1 Fe 97.39(3) 1\_454 . ?

Fe P1 Fe 121.15(2) 4\_465 . ?

O2 P2 04 110.30(19) . . ?

O2 P2 O8 110.27(19) . . ?

04 P2 O8 111.00(19) . . ?

O2 P2 06 110.64(19) . 1\_556 ?

04 P2 06 103.98(18) . 1\_556 ?

O8 P2 06 110.51(19) . 1\_556 ?

O2 P2 M1CA 131.48(14) . . ?

04 P2 M1CA 52.47(13) . . ?

O8 P2 M1CA 118.25(13) . . ?

06 P2 M1CA 52.15(13) 1\_556 . ?

O2 P2 Fe 92.46(13) . 1\_556 ?

04 P2 Fe 129.78(14) . 1\_556 ?

O8 P2 Fe 101.05(13) . 1\_556 ?

06 P2 Fe 26.54(12) 1\_556 1\_556 ?

M1CA P2 Fe 78.65(3) . 1\_556 ?

O2 P2 Fe 116.23(13) . . ?

04 P2 Fe 23.11(13) . . ?

O8 P2 Fe 88.43(13) . . ?

06 P2 Fe 118.45(13) 1\_556 . ?

M1CA P2 Fe 67.05(3) . . ?

Fe P2 Fe 144.68(5) 1\_556 . ?

O2 P2 Fe 78.77(14) . 3\_656 ?

04 P2 Fe 118.34(14) . 3\_656 ?

O8 P2 Fe 32.18(12) . 3\_656 ?

06 P2 Fe 130.49(14) 1\_556 3\_656 ?

M1CA P2 Fe 149.24(4) . 3\_656 ?

Fe P2 Fe 109.52(4) 1\_556 3\_656 ?

Fe P2 Fe 96.62(3) . 3\_656 ?

O2 P2 Fe 63.36(13) . 4\_566 ?

04 P2 Fe 65.88(13) . 4\_566 ?

O8 P2 Fe 169.32(13) . 4\_566 ?

06 P2 Fe 80.12(13) 1\_556 4\_566 ?

M1CA P2 Fe 68.70(3) . 4\_566 ?

Fe P2 Fe 88.08(3) 1\_556 4\_566 ?

Fe P2 Fe 87.20(3) . 4\_566 ?

Fe P2 Fe 139.04(4) 3\_656 4\_566 ?

P1 O1 M1MN 120.1(2) . 3\_656 ?

P1 O1 M1CA 120.1(2) . 3\_656 ?

M1MN O1 M1CA 0.00(5) 3\_656 3\_656 ?

P1 O1 M1CA 129.9(2) . 1\_454 ?

M1MN O1 M1CA 100.99(13) 3\_656 1\_454 ?

M1CA O1 M1CA 100.99(13) 3\_656 1\_454 ?

P1 O1 M1MN 129.9(2) . 1\_454 ?

M1MN O1 M1MN 100.99(13) 3\_656 1\_454 ?

M1CA O1 M1MN 100.99(13) 3\_656 1\_454 ?

M1CA O1 M1MN 0.00(6) 1\_454 1\_454 ?

P1 O1 Fe 72.59(13) . 1\_455 ?

M1MN O1 Fe 86.57(11) 3\_656 1\_455 ?

M1CA O1 Fe 86.57(11) 3\_656 1\_455 ?

M1CA O1 Fe 83.45(10) 1\_454 1\_455 ?

M1MN O1 Fe 83.45(10) 1\_454 1\_455 ?

P1 O1 Fe 62.32(12) . 3\_656 ?

M1MN O1 Fe 66.45(9) 3\_656 3\_656 ?

M1CA O1 Fe 66.45(9) 3\_656 3\_656 ?

M1CA O1 Fe 167.07(13) 1\_454 3\_656 ?

M1MN O1 Fe 167.07(13) 1\_454 3\_656 ?

Fe O1 Fe 98.28(9) 1\_455 3\_656 ?

P1 O1 Fe 149.97(17) . 3\_655 ?

M1MN O1 Fe 68.12(9) 3\_656 3\_655 ?

M1CA O1 Fe 68.12(9) 3\_656 3\_655 ?

M1CA O1 Fe 69.13(8) 1\_454 3\_655 ?

M1MN O1 Fe 69.13(8) 1\_454 3\_655 ?

Fe O1 Fe 137.18(9) 1\_455 3\_655 ?

Fe O1 Fe 101.96(8) 3\_656 3\_655 ?

P2 O2 M3 134.4(2) . 4\_566 ?

P2 O2 M3 124.08(19) . 1\_556 ?

M3 O2 M3 101.43(13) 4\_566 1\_556 ?

P2 O2 Fe 75.30(13) . 3\_656 ?

M3 O2 Fe 107.56(13) 4\_566 3\_656 ?

M3 O2 Fe 92.86(11) 1\_556 3\_656 ?

P2 O2 Fe 93.92(15) . 4\_566 ?

M3 O2 Fe 68.63(9) 4\_566 4\_566 ?

M3 O2 Fe 106.26(12) 1\_556 4\_566 ?

Fe O2 Fe 160.87(11) 3\_656 4\_566 ?

P2 O2 Fe 62.48(12) . 1\_556 ?

M3 O2 Fe 150.84(14) 4\_566 1\_556 ?

M3 O2 Fe 66.34(8) 1\_556 1\_556 ?

Fe O2 Fe 99.67(8) 3\_656 1\_556 ?

Fe O2 Fe 88.82(8) 4\_566 1\_556 ?

P2 O2 Fe 44.59(10) . . ?

M3 O2 Fe 90.15(10) 4\_566 . ?

M3 O2 Fe 168.10(13) 1\_556 . ?

Fe O2 Fe 80.90(7) 3\_656 . ?

Fe O2 Fe 80.38(7) 4\_566 . ?

Fe O2 Fe 104.53(8) 1\_556 . ?

P1 03 M1MN 110.0(2) 1\_655 4\_565 ?

P1 03 M1CA 110.0(2) 1\_655 4\_565 ?

M1MN 03 M1CA 0.00(7) 4\_565 4\_565 ?

P1 03 Fe 116.2(2) 1\_655 . ?

M1MN 03 Fe 121.40(16) 4\_565 . ?

M1CA 03 Fe 121.40(16) 4\_565 . ?

P1 03 M1CA 94.80(18) 1\_655 . ?

M1MN 03 M1CA 122.85(16) 4\_565 . ?

M1CA 03 M1CA 122.85(16) 4\_565 . ?

Fe 03 M1CA 87.50(12) . . ?

P1 03 Fe 145.48(19) 1\_655 4\_566 ?

M1MN 03 Fe 65.60(9) 4\_565 4\_566 ?

M1CA 03 Fe 65.60(9) 4\_565 4\_566 ?

Fe 03 Fe 91.91(10) . 4\_566 ?

M1CA 03 Fe 65.31(7) . 4\_566 ?

P1 03 Fe 34.05(12) 1\_655 3\_756 ?

M1MN 03 Fe 136.49(13) 4\_565 3\_756 ?

M1CA 03 Fe 136.49(13) 4\_565 3\_756 ?

Fe 03 Fe 101.21(12) . 3\_756 ?

M1CA 03 Fe 62.85(8) . 3\_756 ?

Fe 03 Fe 125.57(9) 4\_566 3\_756 ?

P1 03 Fe 115.38(17) 1\_655 4\_565 ?

M1MN 03 Fe 44.56(8) 4\_565 4\_565 ?

M1CA 03 Fe 44.56(8) 4\_565 4\_565 ?

Fe 03 Fe 82.91(10) . 4\_565 ?

M1CA 03 Fe 149.54(11) . 4\_565 ?

Fe 03 Fe 86.12(7) 4\_566 4\_565 ?

Fe 03 Fe 147.46(9) 3\_756 4\_565 ?

P2 04 Fe 139.0(2) . . ?

P2 04 M1CA 97.56(16) . . ?

Fe 04 M1CA 104.87(14) . . ?

P2 04 M1MN 97.56(16) . . ?

Fe 04 M1MN 104.87(14) . . ?

M1CA 04 M1MN 0.00(4) . . ?

P2 04 Fe 91.33(14) . 4\_566 ?

Fe 04 Fe 125.56(13) . 4\_566 ?

M1CA 04 Fe 80.82(9) . 4\_566 ?

M1MN 04 Fe 80.82(9) . 4\_566 ?

P2 04 Fe 43.51(10) . 3\_656 ?

Fe 04 Fe 97.29(11) . 3\_656 ?

M1CA 04 Fe 130.76(11) . 3\_656 ?

M1MN 04 Fe 130.76(11) . 3\_656 ?

Fe 04 Fe 119.85(8) 4\_566 3\_656 ?

P2 04 Fe 34.51(10) . 1\_556 ?

Fe 04 Fe 154.43(14) . 1\_556 ?

M1CA 04 Fe 64.40(7) . 1\_556 ?

M1MN 04 Fe 64.40(7) . 1\_556 ?

Fe 04 Fe 77.35(6) 4\_566 1\_556 ?

Fe 04 Fe 76.72(5) 3\_656 1\_556 ?

P1 05 M3 129.4(2) . 4\_566 ?

P1 05 M3 112.15(19) . . ?

M3 05 M3 104.26(15) 4\_566 . ?

P1 05 M1CA 82.69(16) . 4\_465 ?

M3 05 M1CA 102.63(14) 4\_566 4\_465 ?

M3 05 M1CA 126.84(15) . 4\_465 ?

P1 05 Fe 52.87(12) . 3\_656 ?

M3 05 Fe 91.75(12) 4\_566 3\_656 ?

M3 05 Fe 94.01(12) . 3\_656 ?

M1CA 05 Fe 129.96(10) 4\_465 3\_656 ?

P1 05 Fe 144.82(19) . 2\_655 ?

M3 05 Fe 72.78(10) 4\_566 2\_655 ?

M3 05 Fe 81.35(9) . 2\_655 ?

M1CA 05 Fe 64.29(7) 4\_465 2\_655 ?

Fe 05 Fe 162.00(10) 3\_656 2\_655 ?

P1 05 Fe 24.93(11) . 1\_455 ?

M3 05 Fe 133.72(13) 4\_566 1\_455 ?

M3 05 Fe 121.07(12) . 1\_455 ?

M1CA 05 Fe 58.22(6) 4\_465 1\_455 ?

Fe 05 Fe 77.19(6) 3\_656 1\_455 ?

Fe 05 Fe 120.11(9) 2\_655 1\_455 ?

P1 05 Fe 113.13(17) . . ?

M3 05 Fe 74.93(11) 4\_566 . ?

M3 05 Fe 40.09(7) . . ?

M1CA 05 Fe 161.74(11) 4\_465 . ?

Fe 05 Fe 68.28(6) 3\_656 . ?

Fe 05 Fe 98.12(6) 2\_655 . ?

Fe 05 Fe 136.11(8) 1\_455 . ?

P2 06 Fe 132.7(2) 1\_554 . ?

P2 06 M1CA 97.61(16) 1\_554 1\_554 ?

Fe 06 M1CA 129.55(16) . 1\_554 ?

P2 06 M1MN 97.61(16) 1\_554 1\_554 ?

Fe 06 M1MN 129.55(16) . 1\_554 ?

M1CA 06 M1MN 0.00(6) 1\_554 1\_554 ?

P2 06 Fe 77.46(13) 1\_554 4\_565 ?

Fe 06 Fe 110.06(13) . 4\_565 ?

M1CA 06 Fe 73.01(8) 1\_554 4\_565 ?

M1MN 06 Fe 73.01(8) 1\_554 4\_565 ?

P2 06 Fe 42.82(10) 1\_554 1\_554 ?

Fe 06 Fe 173.26(15) . 1\_554 ?

M1CA 06 Fe 55.60(7) 1\_554 1\_554 ?

M1MN 06 Fe 55.60(7) 1\_554 1\_554 ?

Fe 06 Fe 74.97(6) 4\_565 1\_554 ?

P2 06 Fe 34.52(10) 1\_554 3\_655 ?

Fe 06 Fe 104.88(12) . 3\_655 ?

M1CA 06 Fe 122.70(11) 1\_554 3\_655 ?

M1MN 06 Fe 122.70(11) 1\_554 3\_655 ?

Fe 06 Fe 107.25(7) 4\_565 3\_655 ?

Fe 06 Fe 68.92(5) 1\_554 3\_655 ?

P1 07 Fe 134.7(2) . 3\_656 ?

P1 07 M1CA 101.04(18) . 1\_455 ?

Fe 07 M1CA 123.25(15) 3\_656 1\_455 ?

P1 07 M1MN 101.04(18) . 1\_455 ?

Fe 07 M1MN 123.25(15) 3\_656 1\_455 ?

M1CA 07 M1MN 0.00(3) 1\_455 1\_455 ?

P1 07 Fe 59.48(13) . 1\_455 ?

Fe 07 Fe 131.90(13) 3\_656 1\_455 ?

M1CA 07 Fe 62.11(8) 1\_455 1\_455 ?

M1MN 07 Fe 62.11(8) 1\_455 1\_455 ?

P2 O8 M3 127.52(19) . 3\_656 ?

P2 O8 Fe 126.28(18) . 3\_656 ?

M3 O8 Fe 103.46(14) 3\_656 3\_656 ?

P2 O8 Fe 66.04(12) . . ?

M3 O8 Fe 109.47(12) 3\_656 . ?

Fe O8 Fe 115.59(12) 3\_656 . ?

P2 O8 Fe 55.57(11) . 1\_556 ?

M3 O8 Fe 85.09(10) 3\_656 1\_556 ?

Fe O8 Fe 123.59(12) 3\_656 1\_556 ?

Fe O8 Fe 113.16(9) . 1\_556 ?

\_diffrn\_measured\_fraction\_theta\_max 0.992

\_diffrn\_reflns\_theta\_full 30.15

\_diffrn\_measured\_fraction\_theta\_full 0.992

\_refine\_diff\_density\_max 2.308

\_refine\_diff\_density\_min -0.884

\_refine\_diff\_density\_rms 0.202