

Supplement of Eur. J. Mineral., 32, 89–98, 2020
<https://doi.org/10.5194/ejm-32-89-2020-supplement>
© Author(s) 2020. This work is distributed under
the Creative Commons Attribution 4.0 License.



European Journal of
Mineralogy



Open Access

Supplement of

Halilsarpite, a new arsenate analogue of walentaite, from the Oumlil mine, Bou Azzer district, Morocco

Tomas Husdal et al.

Correspondence to: Ian E. Grey (ian.grey@csiro.au)

The copyright of individual parts of the supplement might differ from the CC BY 4.0 License.

```
#=====
data_global
#=====
```

```
_audit_creation_method          'Jana2006 Version : 01/05/2018'
```

```
# 1. PROCESSING SUMMARY (IUCr Office Use Only)
```

```
_journal_date_recd_electronic    ?
_journal_date_to_coeditor        ?
_journal_date_from_coeditor      ?
_journal_date_accepted           ?
_journal_date_printers_first     ?
_journal_date_printers_final     ?
_journal_date_proofs_out         ?
_journal_date_proofs_in         ?
_journal_coeditor_name           ?
_journal_coeditor_code           ?
_journal_coeditor_notes
; ?
;
_journal_techeditor_code         ?
_journal_paper_category          ?
_journal_techeditor_notes
; ?
;
_journal_coden_ASTM             ?
_journal_name_full              'Acta Crystallographica Section C'
_journal_year                   ?
_journal_volume                 ?
_journal_issue                  ?
_journal_page_first            ?
_journal_page_last             ?
_journal_suppl_publ_number      ?
_journal_suppl_publ_pages      ?
```

```
#=====
```

```
# 2. SUBMISSION DETAILS
```

```
_publ_contact_author_name       ?
_publ_contact_author_address
; ?
;
_publ_contact_author_email      ?
_publ_contact_author_fax        ?
_publ_contact_author_phone      ?

_publ_requested_journal         'Acta Crystallographica Section C'
_publ_requested_category        ?

_publ_contact_letter
```

```
; ?  
;
```

```
#=====
```

```
# 3. TITLE AND AUTHOR LIST
```

```
_publ_section_title  
; ?  
;  
_publ_section_title_footnote  
; ?  
;  
loop_  
  _publ_author_name  
  _publ_author_footnote  
  _publ_author_address  
; ?      # name  
;  
; ?      # footnote  
;  
; ?      # address  
;
```

```
#=====
```

```
# 4. TEXT
```

```
_publ_section_synopsis  
; ?  
;  
_publ_section_abstract  
; ?  
;  
_publ_section_comment  
; ?  
;  
_publ_section_introduction  
; ?  
;  
_publ_section_experimental  
; ?  
;  
_publ_section_exptl_prep  
; ?  
;  
_publ_section_exptl_refinement  
; ?  
;  
_publ_section_exptl_solution  
; ?  
;  
_publ_section_discussion  
; ?
```

```

;
_publ_section_acknowledgements
; ?
;
_publ_section_references
;
Petricek, V., Dusek, M. & Palatinus L. (2014). Z. Kristallogr. 229(5), 345-352.

Palatinus L. & Chapuis G. (2007). J. Appl. Cryst. 40, 786-790.

# enable this reference if Diamond ver. 2 was used for visualization
#Brandenburg, K. (1999). DIAMOND. Version. 2.1c.
#Crystal Impact GbR, Bonn, Germany.

# enable this reference if Diamond ver. 3 was used for visualization
#Brandenburg, K. & Putz, H. (2005). DIAMOND Version 3.
#Crystal Impact GbR, Postfach 1251, D-53002 Bonn, Germany.

# enable this reference if SIR97 was used for solving of the structure
#Altomare, A., Burla, M. C., Camalli, M., Cascarano, G., Giacovazzo, C.,
#Guagliardi, A., Moliterni, A. G. G., Polidori, G., Spagna, R. (1997).
#SIR97. A Package for Crystal Structure Solution by Direct Methods
#and Refinement, Bari, Rome, Italy.

# use this reference if SIR2002 was used for solving of the structure
#Burla, M.C., Camalli, M., Carrozzini, B., Cascarano, G., Giacovazzo, C.,
#Polidori, G., Spagna, R.
#SIR2002: the program, J. Appl. Cryst, (2003). 36, 1103

# use this reference if SIR2011 was used for solving of the structure
#Burla, M.C., Caliandro, R., Camalli, M., Carrozzini, B., Cascarano,
#G.L., Giacovazzo, C., Mallamo. M., Mazzone, A., Polidori, G., Spagna, R.
#SIR2011: a new package for crystal structure determination and refinement,
#J.Appl.Cryst. (2012) 45, 357-361

# enable this reference if bond valences were calculated
#Brown, I. D. (1996). J. Appl. Cryst. 29, 479-480.

# enable this reference if Xshape wase used for crystal shape refinement
#Stoe & Cie (1998). X-SHAPE. Stoe & Cie, Darmstadt, Germany.

# enable this reference if Flack coefficient was refined
#Flack, H. D. (1983). Acta Cryst. A39, 876-881.
;
_publ_section_figure_captions
; ?
;
_publ_section_table_legends
; ?
;

#=====

```

data_I
#=====

5. CHEMICAL DATA

_chemical_name_systematic
; ?
;
_chemical_name_common ?
_chemical_formula_moiety ?
_chemical_formula_structural ?
_chemical_formula_analytical ?
_chemical_formula_iupac ?
_chemical_formula_sum
'As4.02 Ca0.69 Fe2.55 H12.1 K0.01 Mg0.62 Mo0.56 Na0.11 O21 P0.03'
_chemical_formula_weight 892.1
_chemical_melting_point ?
_chemical_compound_source ?
_chemical_absolute_configuration .

#=====

6. CRYSTAL DATA

_symmetry_cell_setting orthorhombic
_symmetry_space_group_name_H-M 'I m m a'
_symmetry_space_group_name_Hall '-I -2x;-2yb;-2zb'
_symmetry_Int_Tables_number 74

loop_

_space_group_symop_id
_space_group_symop_operation_xyz
1 x,y,z
2 -x,-y+1/2,z
3 -x,y+1/2,-z
4 x,-y,-z
5 -x,-y,-z
6 x,y+1/2,-z
7 x,-y+1/2,z
8 -x,y,z
9 x+1/2,y+1/2,z+1/2
10 -x+1/2,-y,z+1/2
11 -x+1/2,y,-z+1/2
12 x+1/2,-y+1/2,-z+1/2
13 -x+1/2,-y+1/2,-z+1/2
14 x+1/2,y,-z+1/2
15 x+1/2,-y,z+1/2
16 -x+1/2,y+1/2,z+1/2

_cell_length_a 26.4890(10)
_cell_length_b 7.4205(3)
_cell_length_c 10.4378(4)
_cell_angle_alpha 90
_cell_angle_beta 90

_cell_angle_gamma	90
_cell_volume	2051.67(14)
loop_	
_twin_individual_id	
_twin_individual_mass_fraction_refined	
_twin_individual_twin_matrix_11	
_twin_individual_twin_matrix_12	
_twin_individual_twin_matrix_13	
_twin_individual_twin_matrix_21	
_twin_individual_twin_matrix_22	
_twin_individual_twin_matrix_23	
_twin_individual_twin_matrix_31	
_twin_individual_twin_matrix_32	
_twin_individual_twin_matrix_33	
? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ?	
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_reflns_used	3520
_cell_measurement_theta_min	2
_cell_measurement_theta_max	30
_cell_measurement_temperature	293
_cell_special_details	
; ?	
;	
_exptl_crystal_density_diffn	2.888
_exptl_crystal_density_meas	?
_exptl_crystal_density_method	?
_exptl_crystal_F_000	1619
_exptl_absorpt_coefficient_mu	8.84
_exptl_crystal_description	platelet
_exptl_crystal_size_max	0.051
_exptl_crystal_size_mid	0.030
_exptl_crystal_size_min	0.017
_exptl_crystal_size_rad	?
_exptl_crystal_colour	colourless
_exptl_absorpt_correction_type	analytical
_exptl_absorpt_process_details	"face indexing"
_exptl_absorpt_correction_T_min	0.72
_exptl_absorpt_correction_T_max	0.86
loop_	
_exptl_crystal_face_index_h	
_exptl_crystal_face_index_k	
_exptl_crystal_face_index_l	
_exptl_crystal_face_perp_dist	
-5 -4 -2 0.021	
-1 0 0 0.0039	
5 1 0 0.018	
5 4 2 0.021	
1 0 0 0.012	
1 1 -1 0.024	

1 0 1 0.012
0 0 -1 0.016

#=====

7. EXPERIMENTAL DATA

_exptl_special_details	?
_diffrn_ambient_temperature	293
_diffrn_source	?
_diffrn_source_power	?
_diffrn_source_voltage	?
_diffrn_source_current	?
_diffrn_radiation_type	'Mo K\alpha'
_diffrn_radiation_source	'X-ray tube'
_diffrn_radiation_wavelength	0.7107
_diffrn_radiation_monochromator	?
_diffrn_measurement_device	diffractometer
_diffrn_measurement_device_type	"Rigaku Synergy_S"
_diffrn_detector	?
_diffrn_detector_area_resol_mean	?
_diffrn_measurement_method	?
_diffrn_measurement_specimen_support	?
_diffrn_reflns_number	8963
_diffrn_reflns_theta_min	2.1
_diffrn_reflns_theta_max	32.19
_diffrn_reflns_theta_full	29.09
_diffrn_measured_fraction_theta_max	0.84
_diffrn_measured_fraction_theta_full	0.98
_diffrn_reflns_av_R_equivalents	0.0498
_diffrn_reflns_av_unetI/netI	0.0417
_diffrn_reflns_limit_h_min	-38
_diffrn_reflns_limit_h_max	29
_diffrn_reflns_limit_k_min	-11
_diffrn_reflns_limit_k_max	9
_diffrn_reflns_limit_l_min	-9
_diffrn_reflns_limit_l_max	13
_diffrn_reflns_reduction_process	?
_diffrn_standards_number	?
_diffrn_standards_interval_count	?
_diffrn_standards_interval_time	?
_diffrn_standards_decay_%	?
loop_	
_diffrn_standard_refl_n_index_h	
_diffrn_standard_refl_n_index_k	
_diffrn_standard_refl_n_index_l	
? ? ?	
_diffrn_radiation_probe	X-ray

#=====

8. REFINEMENT DATA

```
_refine_special_details
; ?
;

_reflns_number_total          1402
_reflns_number_gt            1111
_reflns_threshold_expression  'I>3\s(I)'

_refine_ls_structure_factor_coef      F
_refine_ls_R_factor_gt                0.0410
_refine_ls_wR_factor_gt               0.0450
_refine_ls_R_factor_all               0.0551
_refine_ls_wR_factor_ref              0.0463
_refine_ls_goodness_of_fit_ref        2.01
_refine_ls_goodness_of_fit_gt        2.22
_refine_ls_restrained_S_gt            ?
_refine_ls_restrained_S_all           ?
_refine_ls_number_reflns              1402
_refine_ls_number_parameters          111
_refine_ls_number_restraints          0
_refine_ls_number_constraints         0
_refine_ls_weighting_scheme           sigma
_refine_ls_weighting_details          'w=1/(\s^2^(F)+0.0001F^2^)'
_refine_ls_hydrogen_treatment         'constr'
_refine_ls_shift/su_max                0.0140
_refine_ls_shift/su_mean              0.0032
_refine_diff_density_max               1.13
_refine_diff_density_min              -0.83
_refine_ls_extinction_method           'none'
_refine_ls_extinction_coef             ?
_refine_ls_extinction_expression       ?
_refine_ls_abs_structure_details       ?
_refine_ls_abs_structure_Flack         ?
_refine_ls_abs_structure_Rogers       ?

loop_
  _atom_type_symbol
  _atom_type_scatter_dispersion_real
  _atom_type_scatter_dispersion_imag
  _atom_type_scatter_source
As  0.0499  2.0058
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
Ca  0.2262  0.3064
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
Fe  0.3463  0.8444
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
H   0.0000  0.0000
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
K   0.2009  0.2494
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
Mg  0.0486  0.0363
```


'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
Mo -1.6832 0.6857
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
Na 0.0362 0.0249
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
O 0.0106 0.0060
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'
P 0.1023 0.0942
'International Tables Vol C tables 4.2.6.8 and 6.1.1.1'

_computing_data_collection ?
_computing_cell_refinement ?
_computing_data_reduction ?
_computing_structure_solution ?
_computing_structure_refinement ?
_computing_molecular_graphics ?
_computing_publication_material ?

loop_
_restr_distance_atom_site_label_1
_restr_distance_site_symmetry_1
_restr_distance_atom_site_label_2
_restr_distance_site_symmetry_2
_restr_distance_target
_restr_distance_target_weight_param
? ? ? ? ? ?

loop_
_restr_angle_atom_site_label_1
_restr_angle_site_symmetry_1
_restr_angle_atom_site_label_2
_restr_angle_site_symmetry_2
_restr_angle_atom_site_label_3
_restr_angle_site_symmetry_3
_restr_angle_target
_restr_angle_target_weight_param
? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_restr_torsion_atom_site_label_1
_restr_torsion_site_symmetry_1
_restr_torsion_atom_site_label_2
_restr_torsion_site_symmetry_2
_restr_torsion_atom_site_label_3
_restr_torsion_site_symmetry_3
_restr_torsion_atom_site_label_4
_restr_torsion_site_symmetry_4
_restr_torsion_angle_target
_restr_torsion_weight_param
? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_restr_equal_distance_atom_site_label_1
_restr_equal_distance_site_symmetry_1

_restr_equal_distance_atom_site_label_2
_restr_equal_distance_site_symmetry_2
_restr_equal_distance_class_class_id
_restr_equal_distance_class_target_weight_param
? ? ? ? ? ?

loop_
_restr_equal_angle_atom_site_label_1
_restr_equal_angle_site_symmetry_1
_restr_equal_angle_atom_site_label_2
_restr_equal_angle_site_symmetry_2
_restr_equal_angle_atom_site_label_3
_restr_equal_angle_site_symmetry_3
_restr_equal_angle_class_class_id
_restr_equal_angle_class_target_weight_param
? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_restr_equal_torsion_atom_site_label_1
_restr_equal_torsion_site_symmetry_1
_restr_equal_torsion_atom_site_label_2
_restr_equal_torsion_site_symmetry_2
_restr_equal_torsion_atom_site_label_3
_restr_equal_torsion_site_symmetry_3
_restr_equal_torsion_atom_site_label_4
_restr_equal_torsion_site_symmetry_4
_restr_equal_torsion_class_class_id
_restr_equal_torsion_class_target_weight_param
? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

#=====

9. ATOMIC COORDINATES AND DISPLACEMENT PARAMETERS

loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_adp_type
_atom_site_U_iso_or_equiv
_atom_site_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_occupancy
_atom_site_calc_flag
_atom_site_refinement_flags
_atom_site_disorder_assembly
_atom_site_disorder_group
Fe1 Fe 0.25 0.25 0.25 Uani 0.0159(3) 4 1 d . . .
Fe2 Fe 0.32427(16) 0.5 0.5 Uani 0.0169(6) 8 0.744(7) d . . .
Mo2 Mo 0.3092(2) 0.5244(7) 0.4923(6) Uani 0.0169(6) 16 0.128(3) d . . .
As1 As 0.374258(19) 0.25 0.27927(6) Uani 0.01980(19) 8 1 d . . .
O1 O 0.42555(16) 0.25 0.1878(5) Uani 0.0356(16) 8 1 d . . .

02 O 0.32184(15) 0.25 0.1890(4) Uani 0.0317(15) 8 1 d . . .
 03 O 0.37434(10) 0.4339(4) 0.3738(3) Uani 0.0270(10) 16 1 d . . .
 04a O 0.2684(3) 0.5457(9) 0.6298(7) Uiso 0.0179(9) 16 0.5 d . . .
 04b O 0.2618(2) 0.5736(10) 0.6072(7) Uiso 0.0179(9) 16 0.5 d . . .
 05 O 0.31916(14) 0.25 0.5719(4) Uani 0.0227(13) 8 1 d . . .
 As2 As 0.21445(7) 0.0300(4) 0.5153(4) Uani 0.0171(11) 16 0.242(2) d . . .
 As3 As 0.27130(6) 0.3064(2) 0.69453(17) Uani 0.0184(6) 16 0.234(2) d . . .
 06 O 0.2148(3) 0.25 0.6021(9) Uiso 0.036(3) 8 0.538(18) d . . .
 Fe3 Fe 0.5 0.75 0.3017(7) Uiso 0.0429(14) 4 0.16 d . . .
 Mg3 Mg 0.5 0.75 0.3017(7) Uiso 0.0429(14) 4 0.205(13) d . . .
 Ca1 Ca 0.5 0.75 0.1909(9) Uiso 0.0429(14) 4 0.2 d . . .
 Mg1 Mg 0.5 0.75 0.1909(9) Uiso 0.0429(14) 4 0.172(11) d . . .
 Mg2 Mg 0.1831(3) 0.010(3) 0.51 Uiso 0.0429(14) 16 0.032(5) d . . .
 Ca2 Ca 0.1831(3) 0.010(3) 0.51 Uiso 0.0429(14) 16 0.12 d . . .
 Ow1a O 0.5684(4) 0.75 0.3382(16) Uiso 0.061(2) 8 0.578(19) d . . .
 Ow1b O 0.5814(6) 0.75 0.2696(19) Uiso 0.061(2) 8 0.461(18) d . . .
 Ow2a O 0.5 0.4645(14) 0.2792(12) Uiso 0.061(2) 8 0.647(18) d . . .
 Ow2b O 0.5 0.524(3) 0.197(2) Uiso 0.061(2) 8 0.358(15) d . . .
 Ow3 O 0.529(2) 0.75 0.482(6) Uiso 0.061(2) 8 0.105(14) d . . .
 Ow4 O 0.5 0.75 0.094(5) Uiso 0.061(2) 4 0.20(2) d . . .
 Ow5 O 0.4475(7) 0.550(3) 0.033(2) Uiso 0.061(2) 16 0.200(10) d . . .
 Ow6 O 0.3975(11) 0.25 -0.042(3) Uiso 0.061(2) 8 0.202(13) d . . .

loop_

_atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_type_symbol
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_12
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_23

Fe1 Fe 0.0196(5) 0.0131(6) 0.0150(7) 0 -0.0001(4) 0
 Fe2 Fe 0.0258(16) 0.0100(7) 0.0149(6) 0 0 -0.0008(5)
 Mo2 Mo 0.0258(16) 0.0100(7) 0.0149(6) 0 0 -0.0008(5)
 As1 As 0.0194(3) 0.0217(3) 0.0183(3) 0 0.0027(2) 0
 O1 O 0.022(2) 0.050(3) 0.035(3) 0 0.0115(18) 0
 O2 O 0.022(2) 0.051(3) 0.021(3) 0 -0.0006(16) 0
 O3 O 0.0291(15) 0.0175(15) 0.034(2) -0.0052(12) 0.0066(12) -0.0022(13)
 O5 O 0.030(2) 0.013(2) 0.024(3) 0 -0.0015(16) 0
 As2 As 0.0209(11) 0.015(2) 0.016(2) 0.0001(6) -0.0004(7) -0.0004(11)
 As3 As 0.0275(11) 0.0131(10) 0.0148(11) 0.0024(5) 0.0034(6) 0.0022(6)

loop_

_jana_atom_site_ADP_C_label
 _jana_atom_site_ADP_C_type_symbol
 _jana_atom_site_ADP_C_111
 _jana_atom_site_ADP_C_112
 _jana_atom_site_ADP_C_113
 _jana_atom_site_ADP_C_122
 _jana_atom_site_ADP_C_123
 _jana_atom_site_ADP_C_133
 _jana_atom_site_ADP_C_222
 _jana_atom_site_ADP_C_223

_jana_atom_site_ADP_C_233
_jana_atom_site_ADP_C_333
? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_jana_atom_site_ADP_D_label
_jana_atom_site_ADP_D_type_symbol
_jana_atom_site_ADP_D_1111
_jana_atom_site_ADP_D_1112
_jana_atom_site_ADP_D_1113
_jana_atom_site_ADP_D_1122
_jana_atom_site_ADP_D_1123
_jana_atom_site_ADP_D_1133
_jana_atom_site_ADP_D_1222
_jana_atom_site_ADP_D_1223
_jana_atom_site_ADP_D_1233
_jana_atom_site_ADP_D_1333
_jana_atom_site_ADP_D_2222
_jana_atom_site_ADP_D_2223
_jana_atom_site_ADP_D_2233
_jana_atom_site_ADP_D_2333
_jana_atom_site_ADP_D_3333
? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_jana_atom_site_ADP_E_label
_jana_atom_site_ADP_E_type_symbol
_jana_atom_site_ADP_E_11111
_jana_atom_site_ADP_E_11112
_jana_atom_site_ADP_E_11113
_jana_atom_site_ADP_E_11122
_jana_atom_site_ADP_E_11123
_jana_atom_site_ADP_E_11133
_jana_atom_site_ADP_E_11222
_jana_atom_site_ADP_E_11223
_jana_atom_site_ADP_E_11233
_jana_atom_site_ADP_E_11333
_jana_atom_site_ADP_E_12222
_jana_atom_site_ADP_E_12223
_jana_atom_site_ADP_E_12233
_jana_atom_site_ADP_E_12333
_jana_atom_site_ADP_E_13333
_jana_atom_site_ADP_E_22222
_jana_atom_site_ADP_E_22223
_jana_atom_site_ADP_E_22233
_jana_atom_site_ADP_E_22333
_jana_atom_site_ADP_E_23333
_jana_atom_site_ADP_E_33333
? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_jana_atom_site_ADP_F_label
_jana_atom_site_ADP_F_type_symbol
_jana_atom_site_ADP_F_111111

_jana_atom_site_ADp_F_111112
_jana_atom_site_ADp_F_111113
_jana_atom_site_ADp_F_111122
_jana_atom_site_ADp_F_111123
_jana_atom_site_ADp_F_111133
_jana_atom_site_ADp_F_111222
_jana_atom_site_ADp_F_111223
_jana_atom_site_ADp_F_111233
_jana_atom_site_ADp_F_111333
_jana_atom_site_ADp_F_112222
_jana_atom_site_ADp_F_112223
_jana_atom_site_ADp_F_112233
_jana_atom_site_ADp_F_112333
_jana_atom_site_ADp_F_113333
_jana_atom_site_ADp_F_122222
_jana_atom_site_ADp_F_122223
_jana_atom_site_ADp_F_122233
_jana_atom_site_ADp_F_122333
_jana_atom_site_ADp_F_123333
_jana_atom_site_ADp_F_133333
_jana_atom_site_ADp_F_222222
_jana_atom_site_ADp_F_222223
_jana_atom_site_ADp_F_222233
_jana_atom_site_ADp_F_222333
_jana_atom_site_ADp_F_223333
_jana_atom_site_ADp_F_233333
_jana_atom_site_ADp_F_333333
? ?

#=====

10. MOLECULAR GEOMETRY

loop_
_geom_bond_atom_site_label_1
_geom_bond_atom_site_label_2
_geom_bond_site_symmetry_1
_geom_bond_site_symmetry_2
_geom_bond_distance
_geom_bond_publ_flag
Fe1 Fe2 . . 3.758(2) ?
Fe1 Fe2 . 10_564 3.758(2) ?
Fe1 Fe2 . 13_555 3.758(2) ?
Fe1 Fe2 . 6_546 3.758(2) ?
Fe1 Mo2 . . 3.606(6) ?
Fe1 Mo2 . 10_564 3.535(6) ?
Fe1 Mo2 . 11_555 3.606(6) ?
Fe1 Mo2 . 4_566 3.535(6) ?
Fe1 Mo2 . 13_555 3.606(6) ?
Fe1 Mo2 . 6_546 3.535(6) ?
Fe1 Mo2 . 7_555 3.606(6) ?
Fe1 Mo2 . 16_544 3.535(6) ?

Fe1 As1 . . 3.3056(6) ?
Fe1 As1 . 11_555 3.3056(6) ?
Fe1 O2 . . 2.007(4) ?
Fe1 O2 . 11_555 2.007(4) ?
Fe1 O4a . 10_564 2.027(7) ?
Fe1 O4a . 4_566 2.027(7) ?
Fe1 O4a . 6_546 2.027(7) ?
Fe1 O4a . 16_544 2.027(7) ?
Fe1 O4b . 10_564 2.008(7) ?
Fe1 O4b . 4_566 2.008(7) ?
Fe1 O4b . 6_546 2.008(7) ?
Fe1 O4b . 16_544 2.008(7) ?
Fe1 As2 . . 3.350(4) ?
Fe1 As2 . 10_554 3.347(3) ?
Fe1 As2 . 11_555 3.350(4) ?
Fe1 As2 . 4_556 3.347(3) ?
Fe1 As2 . 13_555 3.350(4) ?
Fe1 As2 . 6_556 3.347(3) ?
Fe1 As2 . 7_555 3.350(4) ?
Fe1 As2 . 16_554 3.347(3) ?
Fe1 As3 . 10_564 3.3897(16) ?
Fe1 As3 . 4_566 3.3897(16) ?
Fe1 As3 . 6_546 3.3897(16) ?
Fe1 As3 . 16_544 3.3897(16) ?
Fe1 Mg2 . . 3.699(10) ?
Fe1 Mg2 . 10_554 3.623(11) ?
Fe1 Mg2 . 11_555 3.699(10) ?
Fe1 Mg2 . 4_556 3.623(11) ?
Fe1 Mg2 . 13_555 3.699(10) ?
Fe1 Mg2 . 6_556 3.623(11) ?
Fe1 Mg2 . 7_555 3.699(10) ?
Fe1 Mg2 . 16_554 3.623(11) ?
Fe1 Ca2 . . 3.699(10) ?
Fe1 Ca2 . 10_554 3.623(11) ?
Fe1 Ca2 . 11_555 3.699(10) ?
Fe1 Ca2 . 4_556 3.623(11) ?
Fe1 Ca2 . 13_555 3.699(10) ?
Fe1 Ca2 . 6_556 3.623(11) ?
Fe1 Ca2 . 7_555 3.699(10) ?
Fe1 Ca2 . 16_554 3.623(11) ?
Fe2 Fe2 . 6_546 3.7102(3) ?
Fe2 Fe2 . 6_556 3.7102(3) ?
Fe2 Mo2 . . 0.446(6) ?
Fe2 Mo2 . 4_566 0.446(6) ?
Fe2 Mo2 . 6_546 3.552(5) ?
Fe2 Mo2 . 6_556 3.913(5) ?
Fe2 Mo2 . 7_555 3.913(5) ?
Fe2 Mo2 . 7_565 3.552(5) ?
Fe2 As1 . . 3.2408(18) ?
Fe2 As1 . 4_566 3.2408(18) ?
Fe2 O3 . . 1.933(4) ?
Fe2 O3 . 4_566 1.933(4) ?
Fe2 O4a . . 2.035(8) ?
Fe2 O4a . 4_566 2.035(8) ?

Fe2 04b . . 2.070(8) ?
Fe2 04b . 4_566 2.070(8) ?
Fe2 05 . . 2.0059(17) ?
Fe2 05 . 4_566 2.0059(17) ?
Fe2 As2 . 6_556 2.922(5) ?
Fe2 As2 . 7_555 2.922(5) ?
Fe2 As3 . . 2.856(3) ?
Fe2 As3 . 4_566 2.856(3) ?
Fe2 As3 . 6_556 3.356(2) ?
Fe2 As3 . 7_555 3.356(2) ?
Fe2 Mg2 . 6_556 3.741(9) ?
Fe2 Mg2 . 7_555 3.741(9) ?
Fe2 Ca2 . 6_556 3.741(9) ?
Fe2 Ca2 . 7_555 3.741(9) ?
Mo2 Mo2 . 4_566 0.397(7) ?
Mo2 Mo2 . 6_546 3.714(7) ?
Mo2 Mo2 . 6_556 3.714(7) ?
Mo2 Mo2 . 7_555 4.073(7) ?
Mo2 Mo2 . 7_565 3.348(7) ?
Mo2 As1 . . 3.473(6) ?
Mo2 As1 . 4_566 3.385(6) ?
Mo2 03 . . 2.227(6) ?
Mo2 03 . 4_566 2.243(6) ?
Mo2 04a . . 1.803(9) ?
Mo2 04a . 4_566 1.750(9) ?
Mo2 04b . . 1.774(9) ?
Mo2 04b . 4_566 1.784(9) ?
Mo2 05 . . 2.215(5) ?
Mo2 05 . 4_566 1.822(5) ?
Mo2 As2 . 6_556 2.511(6) ?
Mo2 As2 . 7_555 2.553(6) ?
Mo2 As3 . . 2.843(6) ?
Mo2 As3 . 4_566 2.527(6) ?
Mo2 As3 . 6_556 3.031(6) ?
Mo2 As3 . 7_555 3.390(6) ?
Mo2 Mg2 . 6_556 3.341(10) ?
Mo2 Mg2 . 7_555 3.353(10) ?
Mo2 Ca2 . 1_565 4.914(16) ?
Mo2 Ca2 . 4_566 4.806(16) ?
Mo2 Ca2 . 6_556 3.341(10) ?
Mo2 Ca2 . 7_555 3.353(10) ?
Mo2 Ca2 . 16_554 5.039(6) ?
As1 01 . . 1.661(5) ?
As1 02 . . 1.678(4) ?
As1 03 . . 1.684(3) ?
As1 03 . 7_555 1.684(3) ?
As1 Mg2 . 10_554 3.732(11) ?
As1 Mg2 . 11_555 3.822(10) ?
As1 Mg2 . 13_555 3.822(10) ?
As1 Mg2 . 16_554 3.732(11) ?
As1 Ca2 . 10_554 3.732(11) ?
As1 Ca2 . 11_555 3.822(10) ?
As1 Ca2 . 13_555 3.822(10) ?
As1 Ca2 . 16_554 3.732(11) ?

02 Mg2 . 10_554 2.688(15) ?
02 Mg2 . 11_555 2.741(13) ?
02 Mg2 . 13_555 2.741(13) ?
02 Mg2 . 16_554 2.688(15) ?
02 Ca2 . 10_554 2.688(15) ?
02 Ca2 . 11_555 2.741(13) ?
02 Ca2 . 13_555 2.741(13) ?
02 Ca2 . 16_554 2.688(15) ?
04a 04b . . 0.359(10) ?
04a As2 . 6_556 2.085(8) ?
04a As2 . 7_555 1.945(8) ?
04a As3 . . 1.901(7) ?
04a Mg2 . 6_556 2.702(10) ?
04a Mg2 . 7_555 2.614(10) ?
04a Ca2 . 6_556 2.702(10) ?
04a Ca2 . 7_555 2.614(10) ?
04b As2 . 6_556 1.820(8) ?
04b As2 . 7_555 1.756(7) ?
04b As3 . . 2.197(7) ?
04b Mg2 . 6_556 2.463(11) ?
04b Mg2 . 7_555 2.399(11) ?
04b Ca2 . 6_556 2.463(11) ?
04b Ca2 . 7_555 2.399(11) ?
05 As3 . . 1.849(4) ?
05 As3 . 7_555 1.849(4) ?
As2 As2 . 4_556 0.549(5) ?
As2 As2 . 7_555 3.265(4) ?
As2 As3 . . 3.158(4) ?
As2 As3 . 13_556 3.285(4) ?
As2 As3 . 6_546 3.134(4) ?
As2 As3 . 7_555 2.691(4) ?
As2 06 . . 1.867(6) ?
As2 06 . 4_556 2.413(6) ?
As2 Mg2 . . 0.845(9) ?
As2 Mg2 . 4_556 0.919(10) ?
As2 Mg2 . 6_546 3.96(2) ?
As2 Mg2 . 6_556 3.66(2) ?
As2 Mg2 . 7_545 4.09(2) ?
As2 Mg2 . 7_555 3.52(2) ?
As2 Ca2 . . 0.845(9) ?
As2 Ca2 . 4_556 0.919(10) ?
As2 Ca2 . 6_546 3.96(2) ?
As2 Ca2 . 6_556 3.66(2) ?
As2 Ca2 . 7_545 4.09(2) ?
As2 Ca2 . 7_555 3.52(2) ?
As3 As3 . 11_556 1.617(2) ?
As3 As3 . 13_556 1.821(2) ?
As3 As3 . 7_555 0.837(2) ?
As3 06 . . 1.830(9) ?
As3 06 . 11_556 2.195(10) ?
As3 Mg2 . . 3.743(13) ?
As3 Mg2 . 11_556 3.977(11) ?
As3 Mg2 . 4_556 3.939(13) ?
As3 Mg2 . 13_556 3.582(8) ?

As3 Mg2 . 6_556 3.505(10) ?
As3 Mg2 . 7_555 3.321(10) ?
As3 Mg2 . 16_555 3.818(8) ?
As3 Ca2 . . 3.743(13) ?
As3 Ca2 . 10_555 4.219(11) ?
As3 Ca2 . 11_556 3.977(11) ?
As3 Ca2 . 4_556 3.939(13) ?
As3 Ca2 . 13_556 3.582(8) ?
As3 Ca2 . 6_556 3.505(10) ?
As3 Ca2 . 7_555 3.321(10) ?
As3 Ca2 . 16_555 3.818(8) ?
O6 Mg2 . . 2.192(17) ?
O6 Mg2 . 4_556 2.405(17) ?
O6 Mg2 . 6_556 2.405(17) ?
O6 Mg2 . 7_555 2.192(17) ?
O6 Ca2 . . 2.192(17) ?
O6 Ca2 . 4_556 2.405(17) ?
O6 Ca2 . 6_556 2.405(17) ?
O6 Ca2 . 7_555 2.192(17) ?
Fe3 Mg3 . . 0 ?
Fe3 Ca1 . . 1.156(11) ?
Fe3 Mg1 . . 1.156(11) ?
Fe3 Ow1a . . 1.851(12) ?
Fe3 Ow1a . 2_665 1.851(12) ?
Fe3 Ow1b . . 2.181(16) ?
Fe3 Ow1b . 2_665 2.181(16) ?
Fe3 Ow2a . . 2.131(10) ?
Fe3 Ow2a . 2_665 2.131(10) ?
Fe3 Ow2b . . 2.00(2) ?
Fe3 Ow2b . 2_665 2.00(2) ?
Fe3 Ow3 . . 2.04(7) ?
Fe3 Ow3 . 2_665 2.04(7) ?
Fe3 Ow4 . . 2.16(6) ?
Mg3 Ca1 . . 1.156(11) ?
Mg3 Mg1 . . 1.156(11) ?
Mg3 Ow1a . . 1.851(12) ?
Mg3 Ow1a . 2_665 1.851(12) ?
Mg3 Ow1b . . 2.181(16) ?
Mg3 Ow1b . 2_665 2.181(16) ?
Mg3 Ow2a . . 2.131(10) ?
Mg3 Ow2a . 2_665 2.131(10) ?
Mg3 Ow2b . . 2.00(2) ?
Mg3 Ow2b . 2_665 2.00(2) ?
Mg3 Ow3 . . 2.04(7) ?
Mg3 Ow3 . 2_665 2.04(7) ?
Mg3 Ow4 . . 2.16(6) ?
Ca1 Ca1 . 3_645 5.445(9) ?
Ca1 Ca1 . 3_655 5.445(9) ?
Ca1 Mg1 . . 0 ?
Ca1 Ca2 . 9_554 5.502(10) ?
Ca1 Ca2 . 10_564 5.502(10) ?
Ca1 Ca2 . 11_565 5.625(10) ?
Ca1 Ca2 . 12_555 5.625(10) ?
Ca1 Ca2 . 13_555 5.625(10) ?

Ca1 Ca2 . 14_565 5.625(10) ?
Ca1 Ca2 . 15_564 5.502(10) ?
Ca1 Ca2 . 16_554 5.502(10) ?
Ca1 Ow1a . . 2.376(15) ?
Ca1 Ow1a . 2_665 2.376(15) ?
Ca1 Ow1b . . 2.307(16) ?
Ca1 Ow1b . 2_665 2.307(16) ?
Ca1 Ow2a . . 2.310(11) ?
Ca1 Ow2a . 2_665 2.310(11) ?
Ca1 Ow2b . . 1.675(19) ?
Ca1 Ow2b . 2_665 1.675(19) ?
Ca1 Ow3 . . 3.14(7) ?
Ca1 Ow3 . 2_665 3.14(7) ?
Ca1 Ow4 . . 1.01(6) ?
Ca1 Ow5 . . 2.62(2) ?
Ca1 Ow5 . 2_665 2.62(2) ?
Ca1 Ow5 . 7_565 2.62(2) ?
Ca1 Ow5 . 8_655 2.62(2) ?
Ca1 Ow6 . 3_655 3.13(3) ?
Ca1 Ow6 . 4_565 3.13(3) ?
Mg1 Ow1a . . 2.376(15) ?
Mg1 Ow1a . 2_665 2.376(15) ?
Mg1 Ow1b . . 2.307(16) ?
Mg1 Ow1b . 2_665 2.307(16) ?
Mg1 Ow2a . . 2.310(11) ?
Mg1 Ow2a . 2_665 2.310(11) ?
Mg1 Ow2b . . 1.675(19) ?
Mg1 Ow2b . 2_665 1.675(19) ?
Mg1 Ow4 . . 1.01(6) ?
Mg1 Ow5 . . 2.62(2) ?
Mg1 Ow5 . 2_665 2.62(2) ?
Mg1 Ow5 . 7_565 2.62(2) ?
Mg1 Ow5 . 8_655 2.62(2) ?
Mg2 Mg2 . 4_556 0.254(16) ?
Mg2 Mg2 . 6_546 3.72(3) ?
Mg2 Mg2 . 6_556 3.72(3) ?
Mg2 Mg2 . 7_545 3.85(3) ?
Mg2 Mg2 . 7_555 3.57(3) ?
Mg2 Ca2 . . 0 ?
Mg2 Ca2 . 4_556 0.254(16) ?
Mg2 Ca2 . 6_546 3.72(3) ?
Mg2 Ca2 . 6_556 3.72(3) ?
Mg2 Ca2 . 7_545 3.85(3) ?
Mg2 Ca2 . 7_555 3.57(3) ?
Mg2 Ow6 . 10_555 2.93(3) ?
Mg2 Ow6 . 11_555 2.80(3) ?
Ca2 Ca2 . 4_556 0.254(16) ?
Ca2 Ca2 . 6_546 3.72(3) ?
Ca2 Ca2 . 6_556 3.72(3) ?
Ca2 Ca2 . 7_545 3.85(3) ?
Ca2 Ca2 . 7_555 3.57(3) ?
Ca2 Ow5 . 16_545 3.48(2) ?
Ca2 Ow6 . 10_555 2.93(3) ?
Ca2 Ow6 . 11_555 2.80(3) ?

Ow1a Ow1b . . 0.79(2) ?
Ow1a Ow3 . . 1.82(7) ?
Ow2a Ow2b . . 0.96(2) ?
Ow2b Ow4 . . 1.99(4) ?
Ow2b Ow5 . . 2.21(3) ?
Ow2b Ow5 . 8_655 2.21(3) ?
Ow3 Ow3 . 2_665 1.56(8) ?
Ow4 Ow5 . . 2.13(3) ?
Ow4 Ow5 . 2_665 2.13(3) ?
Ow4 Ow5 . 7_565 2.13(3) ?
Ow4 Ow5 . 8_655 2.13(3) ?
Ow5 Ow5 . 4_565 1.02(3) ?
Ow5 Ow6 . 4_565 1.99(3) ?

loop_

_geom_angle_atom_site_label_1
_geom_angle_atom_site_label_2
_geom_angle_atom_site_label_3
_geom_angle_site_symmetry_1
_geom_angle_site_symmetry_2
_geom_angle_site_symmetry_3
_geom_angle
_geom_angle_publ_flag
Fe2 Fe1 Fe2 . . 10_564 120.83(3) ?
Fe2 Fe1 Fe2 . . 13_555 180.0(5) ?
Fe2 Fe1 Fe2 . . 6_546 59.17(3) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . . 6.53(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 10_564 121.79(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 11_555 115.84(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 4_566 6.08(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 13_555 173.47(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 6_546 58.21(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 7_555 64.16(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 . . 16_544 173.92(10) ?
Fe2 Fe1 As1 . . . 54.16(5) ?
Fe2 Fe1 As1 . . 11_555 125.84(5) ?
Fe2 Fe1 O2 . . . 73.96(12) ?
Fe2 Fe1 O2 . . 11_555 106.04(12) ?
Fe2 Fe1 O4a . . 10_564 100.7(2) ?
Fe2 Fe1 O4a . . 4_566 22.4(2) ?
Fe2 Fe1 O4a . . 6_546 79.3(2) ?
Fe2 Fe1 O4a . . 16_544 157.6(2) ?
Fe2 Fe1 O4b . . 10_564 106.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b . . 4_566 23.25(19) ?
Fe2 Fe1 O4b . . 6_546 74.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b . . 16_544 156.75(19) ?
Fe2 Fe1 As2 . . . 79.26(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 10_554 131.86(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 11_555 131.87(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 4_556 86.88(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 13_555 100.74(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 6_556 48.14(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 7_555 48.13(6) ?
Fe2 Fe1 As2 . . 16_554 93.12(6) ?

Fe2 Fe1 As3 . . 10_564 74.12(4) ?
Fe2 Fe1 As3 . . 4_566 46.75(3) ?
Fe2 Fe1 As3 . . 6_546 105.88(4) ?
Fe2 Fe1 As3 . . 16_544 133.25(3) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . . 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 10_554 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 11_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 4_556 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 13_555 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 6_556 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 7_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 . . 16_554 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . . 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 10_554 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 11_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 4_556 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 13_555 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 6_556 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 7_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 . . 16_554 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Fe2 10_564 . 13_555 59.17(3) ?
Fe2 Fe1 Fe2 10_564 . 6_546 180.0(5) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . . 115.84(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 10_564 6.08(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 11_555 6.53(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 4_566 121.79(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 13_555 64.16(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 6_546 173.92(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 7_555 173.47(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 10_564 . 16_544 58.21(9) ?
Fe2 Fe1 As1 10_564 . . 125.84(5) ?
Fe2 Fe1 As1 10_564 . 11_555 54.16(5) ?
Fe2 Fe1 O2 10_564 . . 106.04(12) ?
Fe2 Fe1 O2 10_564 . 11_555 73.96(12) ?
Fe2 Fe1 O4a 10_564 . 10_564 22.4(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 10_564 . 4_566 100.7(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 10_564 . 6_546 157.6(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 10_564 . 16_544 79.3(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 10_564 . 10_564 23.25(19) ?
Fe2 Fe1 O4b 10_564 . 4_566 106.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 10_564 . 6_546 156.75(19) ?
Fe2 Fe1 O4b 10_564 . 16_544 74.0(2) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . . 131.87(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 10_554 86.88(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 11_555 79.26(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 4_556 131.86(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 13_555 48.13(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 6_556 93.12(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 7_555 100.74(6) ?
Fe2 Fe1 As2 10_564 . 16_554 48.14(6) ?
Fe2 Fe1 As3 10_564 . 10_564 46.75(3) ?
Fe2 Fe1 As3 10_564 . 4_566 74.12(4) ?
Fe2 Fe1 As3 10_564 . 6_546 133.25(3) ?
Fe2 Fe1 As3 10_564 . 16_544 105.88(4) ?

Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . . 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 10_554 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 11_555 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 4_556 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 13_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 6_556 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 7_555 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 10_564 . 16_554 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . . 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 10_554 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 11_555 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 4_556 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 13_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 6_556 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 7_555 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 10_564 . 16_554 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Fe2 13_555 . 6_546 120.83(3) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . . 173.47(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 10_564 58.21(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 11_555 64.16(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 4_566 173.92(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 13_555 6.53(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 6_546 121.79(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 7_555 115.84(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 13_555 . 16_544 6.08(10) ?
Fe2 Fe1 As1 13_555 . . 125.84(5) ?
Fe2 Fe1 As1 13_555 . 11_555 54.16(5) ?
Fe2 Fe1 O2 13_555 . . 106.04(12) ?
Fe2 Fe1 O2 13_555 . 11_555 73.96(12) ?
Fe2 Fe1 O4a 13_555 . 10_564 79.3(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 13_555 . 4_566 157.6(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 13_555 . 6_546 100.7(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 13_555 . 16_544 22.4(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 13_555 . 10_564 74.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 13_555 . 4_566 156.75(19) ?
Fe2 Fe1 O4b 13_555 . 6_546 106.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 13_555 . 16_544 23.25(19) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . . 100.74(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 10_554 48.14(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 11_555 48.13(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 4_556 93.12(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 13_555 79.26(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 6_556 131.86(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 7_555 131.87(6) ?
Fe2 Fe1 As2 13_555 . 16_554 86.88(6) ?
Fe2 Fe1 As3 13_555 . 10_564 105.88(4) ?
Fe2 Fe1 As3 13_555 . 4_566 133.25(3) ?
Fe2 Fe1 As3 13_555 . 6_546 74.12(4) ?
Fe2 Fe1 As3 13_555 . 16_544 46.75(3) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . . 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 10_554 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 11_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 4_556 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 13_555 88.81(17) ?

Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 6_556 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 7_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 13_555 . 16_554 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . . 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 10_554 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 11_555 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 4_556 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 13_555 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 6_556 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 7_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 13_555 . 16_554 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . . 64.16(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 10_564 173.92(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 11_555 173.47(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 4_566 58.21(9) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 13_555 115.84(8) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 6_546 6.08(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 7_555 6.53(10) ?
Fe2 Fe1 Mo2 6_546 . 16_544 121.79(9) ?
Fe2 Fe1 As1 6_546 . . 54.16(5) ?
Fe2 Fe1 As1 6_546 . 11_555 125.84(5) ?
Fe2 Fe1 O2 6_546 . . 73.96(12) ?
Fe2 Fe1 O2 6_546 . 11_555 106.04(12) ?
Fe2 Fe1 O4a 6_546 . 10_564 157.6(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 6_546 . 4_566 79.3(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 6_546 . 6_546 22.4(2) ?
Fe2 Fe1 O4a 6_546 . 16_544 100.7(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 6_546 . 10_564 156.75(19) ?
Fe2 Fe1 O4b 6_546 . 4_566 74.0(2) ?
Fe2 Fe1 O4b 6_546 . 6_546 23.25(19) ?
Fe2 Fe1 O4b 6_546 . 16_544 106.0(2) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . . 48.13(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 10_554 93.12(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 11_555 100.74(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 4_556 48.14(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 13_555 131.87(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 6_556 86.88(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 7_555 79.26(6) ?
Fe2 Fe1 As2 6_546 . 16_554 131.86(6) ?
Fe2 Fe1 As3 6_546 . 10_564 133.25(3) ?
Fe2 Fe1 As3 6_546 . 4_566 105.88(4) ?
Fe2 Fe1 As3 6_546 . 6_546 46.75(3) ?
Fe2 Fe1 As3 6_546 . 16_544 74.12(4) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . . 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 10_554 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 11_555 91.19(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 4_556 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 13_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 6_556 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 7_555 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Mg2 6_546 . 16_554 119.13(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . . 60.21(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 10_554 87.80(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 11_555 91.19(17) ?

Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 4_556 60.87(15) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 13_555 119.79(16) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 6_556 92.20(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 7_555 88.81(17) ?
Fe2 Fe1 Ca2 6_546 . 16_554 119.13(15) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 10_564 117.33(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 11_555 111.22(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 4_566 6.27(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 13_555 180.0(5) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 6_546 62.67(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 7_555 68.78(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 . . 16_544 173.73(12) ?
Mo2 Fe1 As1 . . . 60.15(9) ?
Mo2 Fe1 As1 . . 11_555 119.85(9) ?
Mo2 Fe1 O2 . . . 79.05(14) ?
Mo2 Fe1 O2 . . 11_555 100.95(14) ?
Mo2 Fe1 O4a . . 10_564 96.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4a . . 4_566 16.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4a . . 6_546 83.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4a . . 16_544 163.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4b . . 10_564 102.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4b . . 4_566 17.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b . . 6_546 77.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4b . . 16_544 163.0(2) ?
Mo2 Fe1 As2 . . . 79.49(10) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 10_554 137.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 11_555 137.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 4_556 87.69(10) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 13_555 100.51(10) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 6_556 42.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 7_555 42.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 . . 16_554 92.31(10) ?
Mo2 Fe1 As3 . . 10_564 69.13(9) ?
Mo2 Fe1 As3 . . 4_566 42.21(9) ?
Mo2 Fe1 As3 . . 6_546 110.87(9) ?
Mo2 Fe1 As3 . . 16_544 137.79(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . . 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 10_554 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 11_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 4_556 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 13_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 6_556 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 7_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 . . 16_554 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . . 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 10_554 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 11_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 4_556 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 13_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 6_556 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 7_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 . . 16_554 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 11_555 6.27(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 4_566 123.47(12) ?

Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 13_555 62.67(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 6_546 180.0(5) ?
Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 7_555 173.73(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 10_564 . 16_544 56.53(12) ?
Mo2 Fe1 As1 10_564 . . 120.79(9) ?
Mo2 Fe1 As1 10_564 . 11_555 59.21(9) ?
Mo2 Fe1 O2 10_564 . . 100.33(14) ?
Mo2 Fe1 O2 10_564 . 11_555 79.67(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 10_564 . 10_564 21.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 10_564 . 4_566 102.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 10_564 . 6_546 158.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 10_564 . 16_544 77.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 10_564 . 10_564 19.5(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 10_564 . 4_566 109.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 10_564 . 6_546 160.5(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 10_564 . 16_544 71.0(2) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . . 137.33(9) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 10_554 82.06(10) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 11_555 74.11(10) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 4_556 136.56(9) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 13_555 42.67(9) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 6_556 97.94(10) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 7_555 105.89(10) ?
Mo2 Fe1 As2 10_564 . 16_554 43.44(9) ?
Mo2 Fe1 As3 10_564 . 10_564 48.42(9) ?
Mo2 Fe1 As3 10_564 . 4_566 75.17(9) ?
Mo2 Fe1 As3 10_564 . 6_546 131.58(9) ?
Mo2 Fe1 As3 10_564 . 16_544 104.83(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . . 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 10_554 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 11_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 4_556 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 13_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 6_556 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 7_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 10_564 . 16_554 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . . 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 10_554 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 11_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 4_556 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 13_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 6_556 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 7_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 10_564 . 16_554 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Mo2 11_555 . 4_566 117.33(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 11_555 . 13_555 68.78(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 11_555 . 6_546 173.73(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 11_555 . 7_555 180.0(5) ?
Mo2 Fe1 Mo2 11_555 . 16_544 62.67(12) ?
Mo2 Fe1 As1 11_555 . . 119.85(9) ?
Mo2 Fe1 As1 11_555 . 11_555 60.15(9) ?
Mo2 Fe1 O2 11_555 . . 100.95(14) ?
Mo2 Fe1 O2 11_555 . 11_555 79.05(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 11_555 . 10_564 16.1(2) ?

Mo2 Fe1 04a 11_555 . 4_566 96.7(2) ?
Mo2 Fe1 04a 11_555 . 6_546 163.9(2) ?
Mo2 Fe1 04a 11_555 . 16_544 83.3(2) ?
Mo2 Fe1 04b 11_555 . 10_564 17.0(2) ?
Mo2 Fe1 04b 11_555 . 4_566 102.7(2) ?
Mo2 Fe1 04b 11_555 . 6_546 163.0(2) ?
Mo2 Fe1 04b 11_555 . 16_544 77.3(2) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . . 137.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 10_554 87.69(10) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 11_555 79.49(10) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 4_556 137.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 13_555 42.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 6_556 92.31(10) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 7_555 100.51(10) ?
Mo2 Fe1 As2 11_555 . 16_554 42.13(9) ?
Mo2 Fe1 As3 11_555 . 10_564 42.21(9) ?
Mo2 Fe1 As3 11_555 . 4_566 69.13(9) ?
Mo2 Fe1 As3 11_555 . 6_546 137.79(9) ?
Mo2 Fe1 As3 11_555 . 16_544 110.87(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . . 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 10_554 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 11_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 4_556 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 13_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 6_556 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 7_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 11_555 . 16_554 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . . 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 10_554 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 11_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Mo2 4_566 . 13_555 173.73(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 4_566 . 6_546 56.53(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 4_566 . 7_555 62.67(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 4_566 . 16_544 180.0(5) ?
Mo2 Fe1 As1 4_566 . . 59.21(9) ?
Mo2 Fe1 As1 4_566 . 11_555 120.79(9) ?
Mo2 Fe1 O2 4_566 . . 79.67(14) ?
Mo2 Fe1 O2 4_566 . 11_555 100.33(14) ?
Mo2 Fe1 04a 4_566 . 10_564 102.9(2) ?
Mo2 Fe1 04a 4_566 . 4_566 21.3(2) ?
Mo2 Fe1 04a 4_566 . 6_546 77.1(2) ?
Mo2 Fe1 04a 4_566 . 16_544 158.7(2) ?
Mo2 Fe1 04b 4_566 . 10_564 109.0(2) ?
Mo2 Fe1 04b 4_566 . 4_566 19.5(2) ?
Mo2 Fe1 04b 4_566 . 6_546 71.0(2) ?
Mo2 Fe1 04b 4_566 . 16_544 160.5(2) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . . 74.11(10) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 10_554 136.56(9) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 11_555 137.33(9) ?

Mo2 Fe1 As2 4_566 . 4_556 82.06(10) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 13_555 105.89(10) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 6_556 43.44(9) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 7_555 42.67(9) ?
Mo2 Fe1 As2 4_566 . 16_554 97.94(10) ?
Mo2 Fe1 As3 4_566 . 10_564 75.17(9) ?
Mo2 Fe1 As3 4_566 . 4_566 48.42(9) ?
Mo2 Fe1 As3 4_566 . 6_546 104.83(9) ?
Mo2 Fe1 As3 4_566 . 16_544 131.58(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . . 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 10_554 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 11_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 4_556 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 13_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 6_556 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 7_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 4_566 . 16_554 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . . 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 10_554 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 11_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 4_556 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 13_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 6_556 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 7_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 4_566 . 16_554 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Mo2 13_555 . 6_546 117.33(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 13_555 . 7_555 111.22(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 13_555 . 16_544 6.27(12) ?
Mo2 Fe1 As1 13_555 . . 119.85(9) ?
Mo2 Fe1 As1 13_555 . 11_555 60.15(9) ?
Mo2 Fe1 O2 13_555 . . 100.95(14) ?
Mo2 Fe1 O2 13_555 . 11_555 79.05(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 13_555 . 10_564 83.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 13_555 . 4_566 163.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 13_555 . 6_546 96.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 13_555 . 16_544 16.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 13_555 . 10_564 77.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 13_555 . 4_566 163.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 13_555 . 6_546 102.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 13_555 . 16_544 17.0(2) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . . 100.51(10) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 10_554 42.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 11_555 42.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 4_556 92.31(10) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 13_555 79.49(10) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 6_556 137.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 7_555 137.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 13_555 . 16_554 87.69(10) ?
Mo2 Fe1 As3 13_555 . 10_564 110.87(9) ?
Mo2 Fe1 As3 13_555 . 4_566 137.79(9) ?
Mo2 Fe1 As3 13_555 . 6_546 69.13(9) ?
Mo2 Fe1 As3 13_555 . 16_544 42.21(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . . 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 10_554 55.05(18) ?

Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 11_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 4_556 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 13_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 6_556 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 7_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 13_555 . 16_554 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . . 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 10_554 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 11_555 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 4_556 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 13_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 6_556 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 7_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 13_555 . 16_554 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Mo2 6_546 . 7_555 6.27(12) ?
Mo2 Fe1 Mo2 6_546 . 16_544 123.47(12) ?
Mo2 Fe1 As1 6_546 . . 59.21(9) ?
Mo2 Fe1 As1 6_546 . 11_555 120.79(9) ?
Mo2 Fe1 O2 6_546 . . 79.67(14) ?
Mo2 Fe1 O2 6_546 . 11_555 100.33(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 6_546 . 10_564 158.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 6_546 . 4_566 77.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 6_546 . 6_546 21.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 6_546 . 16_544 102.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 6_546 . 10_564 160.5(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 6_546 . 4_566 71.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 6_546 . 6_546 19.5(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 6_546 . 16_544 109.0(2) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . . 42.67(9) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 10_554 97.94(10) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 11_555 105.89(10) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 4_556 43.44(9) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 13_555 137.33(9) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 6_556 82.06(10) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 7_555 74.11(10) ?
Mo2 Fe1 As2 6_546 . 16_554 136.56(9) ?
Mo2 Fe1 As3 6_546 . 10_564 131.58(9) ?
Mo2 Fe1 As3 6_546 . 4_566 104.83(9) ?
Mo2 Fe1 As3 6_546 . 6_546 48.42(9) ?
Mo2 Fe1 As3 6_546 . 16_544 75.17(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . . 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 10_554 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 11_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 4_556 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 13_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 6_556 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 7_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 6_546 . 16_554 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . . 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 10_554 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 11_555 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 4_556 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 13_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 6_556 86.70(19) ?

Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 7_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 6_546 . 16_554 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Mo2 7_555 . 16_544 117.33(12) ?
Mo2 Fe1 As1 7_555 . . 60.15(9) ?
Mo2 Fe1 As1 7_555 . 11_555 119.85(9) ?
Mo2 Fe1 O2 7_555 . . 79.05(14) ?
Mo2 Fe1 O2 7_555 . 11_555 100.95(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 7_555 . 10_564 163.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 7_555 . 4_566 83.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 7_555 . 6_546 16.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 7_555 . 16_544 96.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 7_555 . 10_564 163.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 7_555 . 4_566 77.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 7_555 . 6_546 17.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 7_555 . 16_544 102.7(2) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . . 42.87(9) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 10_554 92.31(10) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 11_555 100.51(10) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 4_556 42.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 13_555 137.13(9) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 6_556 87.69(10) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 7_555 79.49(10) ?
Mo2 Fe1 As2 7_555 . 16_554 137.87(9) ?
Mo2 Fe1 As3 7_555 . 10_564 137.79(9) ?
Mo2 Fe1 As3 7_555 . 4_566 110.87(9) ?
Mo2 Fe1 As3 7_555 . 6_546 42.21(9) ?
Mo2 Fe1 As3 7_555 . 16_544 69.13(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . . 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 10_554 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 11_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 4_556 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 13_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 6_556 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 7_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 7_555 . 16_554 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . . 54.64(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 10_554 88.4(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 11_555 92.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 4_556 55.05(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 13_555 125.36(18) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 6_556 91.6(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 7_555 88.0(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 7_555 . 16_554 124.95(18) ?
Mo2 Fe1 As1 16_544 . . 120.79(9) ?
Mo2 Fe1 As1 16_544 . 11_555 59.21(9) ?
Mo2 Fe1 O2 16_544 . . 100.33(14) ?
Mo2 Fe1 O2 16_544 . 11_555 79.67(14) ?
Mo2 Fe1 O4a 16_544 . 10_564 77.1(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 16_544 . 4_566 158.7(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 16_544 . 6_546 102.9(2) ?
Mo2 Fe1 O4a 16_544 . 16_544 21.3(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 16_544 . 10_564 71.0(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 16_544 . 4_566 160.5(2) ?
Mo2 Fe1 O4b 16_544 . 6_546 109.0(2) ?

Mo2 Fe1 O4b 16_544 . 16_544 19.5(2) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . . 105.89(10) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 10_554 43.44(9) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 11_555 42.67(9) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 4_556 97.94(10) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 13_555 74.11(10) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 6_556 136.56(9) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 7_555 137.33(9) ?
Mo2 Fe1 As2 16_544 . 16_554 82.06(10) ?
Mo2 Fe1 As3 16_544 . 10_564 104.83(9) ?
Mo2 Fe1 As3 16_544 . 4_566 131.58(9) ?
Mo2 Fe1 As3 16_544 . 6_546 75.17(9) ?
Mo2 Fe1 As3 16_544 . 16_544 48.42(9) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . . 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 10_554 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 11_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 4_556 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 13_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 6_556 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 7_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Mg2 16_544 . 16_554 86.70(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . . 96.8(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 10_554 55.86(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 11_555 54.95(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 4_556 93.30(19) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 13_555 83.2(2) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 6_556 124.14(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 7_555 125.05(16) ?
Mo2 Fe1 Ca2 16_544 . 16_554 86.70(19) ?
As1 Fe1 As1 . . 11_555 180.0(5) ?
As1 Fe1 O2 . . . 23.79(13) ?
As1 Fe1 O2 . . 11_555 156.21(13) ?
As1 Fe1 O4a . . 10_564 107.24(19) ?
As1 Fe1 O4a . . 4_566 72.76(19) ?
As1 Fe1 O4a . . 6_546 72.76(19) ?
As1 Fe1 O4a . . 16_544 107.24(19) ?
As1 Fe1 O4b . . 10_564 102.93(19) ?
As1 Fe1 O4b . . 4_566 77.07(19) ?
As1 Fe1 O4b . . 6_546 77.07(19) ?
As1 Fe1 O4b . . 16_544 102.93(19) ?
As1 Fe1 As2 . . . 101.74(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 10_554 77.73(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 11_555 78.26(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 4_556 102.27(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 13_555 78.26(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 6_556 102.27(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 7_555 101.74(4) ?
As1 Fe1 As2 . . 16_554 77.73(4) ?
As1 Fe1 As3 . . 10_564 100.46(3) ?
As1 Fe1 As3 . . 4_566 79.54(3) ?
As1 Fe1 As3 . . 6_546 79.54(3) ?
As1 Fe1 As3 . . 16_544 100.46(3) ?
As1 Fe1 Mg2 . . . 114.14(13) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 10_554 64.98(14) ?

As1 Fe1 Mg2 . . 11_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 4_556 115.02(14) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 13_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 6_556 115.02(14) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 7_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Mg2 . . 16_554 64.98(14) ?
As1 Fe1 Ca2 . . . 114.14(13) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 10_554 64.98(14) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 11_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 4_556 115.02(14) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 13_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 6_556 115.02(14) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 7_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Ca2 . . 16_554 64.98(14) ?
As1 Fe1 O2 11_555 . . 156.21(13) ?
As1 Fe1 O2 11_555 . 11_555 23.79(13) ?
As1 Fe1 O4a 11_555 . 10_564 72.76(19) ?
As1 Fe1 O4a 11_555 . 4_566 107.24(19) ?
As1 Fe1 O4a 11_555 . 6_546 107.24(19) ?
As1 Fe1 O4a 11_555 . 16_544 72.76(19) ?
As1 Fe1 O4b 11_555 . 10_564 77.07(19) ?
As1 Fe1 O4b 11_555 . 4_566 102.93(19) ?
As1 Fe1 O4b 11_555 . 6_546 102.93(19) ?
As1 Fe1 O4b 11_555 . 16_544 77.07(19) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . . 78.26(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 10_554 102.27(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 11_555 101.74(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 4_556 77.73(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 13_555 101.74(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 6_556 77.73(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 7_555 78.26(4) ?
As1 Fe1 As2 11_555 . 16_554 102.27(4) ?
As1 Fe1 As3 11_555 . 10_564 79.54(3) ?
As1 Fe1 As3 11_555 . 4_566 100.46(3) ?
As1 Fe1 As3 11_555 . 6_546 100.46(3) ?
As1 Fe1 As3 11_555 . 16_544 79.54(3) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . . 65.86(13) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 10_554 115.02(14) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 11_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 4_556 64.98(14) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 13_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 6_556 64.98(14) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 7_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Mg2 11_555 . 16_554 115.02(14) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . . 65.86(13) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 10_554 115.02(14) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 11_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 64.98(14) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 114.14(13) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 64.98(14) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 65.86(13) ?
As1 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 115.02(14) ?
O2 Fe1 O2 . . 11_555 180.0(5) ?
O2 Fe1 O4a . . 10_564 91.8(2) ?

02 Fe1 04a . . 4_566 88.2(2) ?
02 Fe1 04a . . 6_546 88.2(2) ?
02 Fe1 04a . . 16_544 91.8(2) ?
02 Fe1 04b . . 10_564 85.0(2) ?
02 Fe1 04b . . 4_566 95.0(2) ?
02 Fe1 04b . . 6_546 95.0(2) ?
02 Fe1 04b . . 16_544 85.0(2) ?
02 Fe1 As2 . . . 121.93(11) ?
02 Fe1 As2 . . 10_554 60.07(10) ?
02 Fe1 As2 . . 11_555 58.07(11) ?
02 Fe1 As2 . . 4_556 119.93(10) ?
02 Fe1 As2 . . 13_555 58.07(11) ?
02 Fe1 As2 . . 6_556 119.93(10) ?
02 Fe1 As2 . . 7_555 121.93(11) ?
02 Fe1 As2 . . 16_554 60.07(10) ?
02 Fe1 As3 . . 10_564 95.95(4) ?
02 Fe1 As3 . . 4_566 84.05(4) ?
02 Fe1 As3 . . 6_546 84.05(4) ?
02 Fe1 As3 . . 16_544 95.95(4) ?
02 Fe1 Mg2 . . . 133.4(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 10_554 46.9(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 11_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 4_556 133.1(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 13_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 6_556 133.1(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 7_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Mg2 . . 16_554 46.9(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . . 133.4(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 10_554 46.9(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 11_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 4_556 133.1(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 13_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 6_556 133.1(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 7_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Ca2 . . 16_554 46.9(2) ?
02 Fe1 04a 11_555 . 10_564 88.2(2) ?
02 Fe1 04a 11_555 . 4_566 91.8(2) ?
02 Fe1 04a 11_555 . 6_546 91.8(2) ?
02 Fe1 04a 11_555 . 16_544 88.2(2) ?
02 Fe1 04b 11_555 . 10_564 95.0(2) ?
02 Fe1 04b 11_555 . 4_566 85.0(2) ?
02 Fe1 04b 11_555 . 6_546 85.0(2) ?
02 Fe1 04b 11_555 . 16_544 95.0(2) ?
02 Fe1 As2 11_555 . . 58.07(11) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 10_554 119.93(10) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 11_555 121.93(11) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 4_556 60.07(10) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 13_555 121.93(11) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 6_556 60.07(10) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 7_555 58.07(11) ?
02 Fe1 As2 11_555 . 16_554 119.93(10) ?
02 Fe1 As3 11_555 . 10_564 84.05(4) ?
02 Fe1 As3 11_555 . 4_566 95.95(4) ?
02 Fe1 As3 11_555 . 6_546 95.95(4) ?

02 Fe1 As3 11_555 . 16_544 84.05(4) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . . 46.6(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 10_554 133.1(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 11_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 4_556 46.9(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 13_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 6_556 46.9(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 7_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Mg2 11_555 . 16_554 133.1(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . . 46.6(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 10_554 133.1(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 11_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 46.9(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 133.4(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 46.9(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 46.6(2) ?
02 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 133.1(2) ?
04a Fe1 04a 10_564 . 4_566 83.2(3) ?
04a Fe1 04a 10_564 . 6_546 180.0(5) ?
04a Fe1 04a 10_564 . 16_544 96.8(3) ?
04a Fe1 04b 10_564 . 10_564 10.2(3) ?
04a Fe1 04b 10_564 . 4_566 90.5(3) ?
04a Fe1 04b 10_564 . 6_546 169.8(3) ?
04a Fe1 04b 10_564 . 16_544 89.5(3) ?
04a Fe1 As2 10_564 . . 144.0(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 10_554 94.5(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 11_555 85.4(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 4_556 148.2(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 13_555 36.0(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 6_556 85.5(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 7_555 94.6(2) ?
04a Fe1 As2 10_564 . 16_554 31.8(2) ?
04a Fe1 As3 10_564 . 10_564 29.3(2) ?
04a Fe1 As3 10_564 . 4_566 54.5(2) ?
04a Fe1 As3 10_564 . 6_546 150.7(2) ?
04a Fe1 As3 10_564 . 16_544 125.5(2) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . . 134.4(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 10_554 95.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 11_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 4_556 135.1(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 13_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 6_556 85.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 7_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Mg2 10_564 . 16_554 44.9(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . . 134.4(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 10_554 95.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 11_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 4_556 135.1(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 13_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 6_556 85.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 7_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Ca2 10_564 . 16_554 44.9(3) ?
04a Fe1 04a 4_566 . 6_546 96.8(3) ?
04a Fe1 04a 4_566 . 16_544 180.0(5) ?

04a Fe1 04b 4_566 . 10_564 90.5(3) ?
04a Fe1 04b 4_566 . 4_566 10.2(3) ?
04a Fe1 04b 4_566 . 6_546 89.5(3) ?
04a Fe1 04b 4_566 . 16_544 169.8(3) ?
04a Fe1 As2 4_566 . . 85.4(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 10_554 148.2(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 11_555 144.0(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 4_556 94.5(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 13_555 94.6(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 6_556 31.8(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 7_555 36.0(2) ?
04a Fe1 As2 4_566 . 16_554 85.5(2) ?
04a Fe1 As3 4_566 . 10_564 54.5(2) ?
04a Fe1 As3 4_566 . 4_566 29.3(2) ?
04a Fe1 As3 4_566 . 6_546 125.5(2) ?
04a Fe1 As3 4_566 . 16_544 150.7(2) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . . 91.2(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 10_554 135.1(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 11_555 134.4(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 4_556 95.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 13_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 6_556 44.9(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 7_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Mg2 4_566 . 16_554 85.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . . 91.2(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 10_554 135.1(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 11_555 134.4(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 4_556 95.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 13_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 6_556 44.9(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 7_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Ca2 4_566 . 16_554 85.0(3) ?
04a Fe1 04a 6_546 . 16_544 83.2(3) ?
04a Fe1 04b 6_546 . 10_564 169.8(3) ?
04a Fe1 04b 6_546 . 4_566 89.5(3) ?
04a Fe1 04b 6_546 . 6_546 10.2(3) ?
04a Fe1 04b 6_546 . 16_544 90.5(3) ?
04a Fe1 As2 6_546 . . 36.0(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 10_554 85.5(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 11_555 94.6(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 4_556 31.8(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 13_555 144.0(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 6_556 94.5(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 7_555 85.4(2) ?
04a Fe1 As2 6_546 . 16_554 148.2(2) ?
04a Fe1 As3 6_546 . 10_564 150.7(2) ?
04a Fe1 As3 6_546 . 4_566 125.5(2) ?
04a Fe1 As3 6_546 . 6_546 29.3(2) ?
04a Fe1 As3 6_546 . 16_544 54.5(2) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . . 45.6(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 10_554 85.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 11_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 4_556 44.9(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 13_555 134.4(3) ?

04a Fe1 Mg2 6_546 . 6_556 95.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 7_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Mg2 6_546 . 16_554 135.1(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . . 45.6(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 10_554 85.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 11_555 88.8(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 4_556 44.9(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 13_555 134.4(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 6_556 95.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 7_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Ca2 6_546 . 16_554 135.1(3) ?
04a Fe1 04b 16_544 . 10_564 89.5(3) ?
04a Fe1 04b 16_544 . 4_566 169.8(3) ?
04a Fe1 04b 16_544 . 6_546 90.5(3) ?
04a Fe1 04b 16_544 . 16_544 10.2(3) ?
04a Fe1 As2 16_544 . . 94.6(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 10_554 31.8(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 11_555 36.0(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 4_556 85.5(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 13_555 85.4(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 6_556 148.2(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 7_555 144.0(2) ?
04a Fe1 As2 16_544 . 16_554 94.5(2) ?
04a Fe1 As3 16_544 . 10_564 125.5(2) ?
04a Fe1 As3 16_544 . 4_566 150.7(2) ?
04a Fe1 As3 16_544 . 6_546 54.5(2) ?
04a Fe1 As3 16_544 . 16_544 29.3(2) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . . 88.8(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 10_554 44.9(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 11_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 4_556 85.0(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 13_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 6_556 135.1(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 7_555 134.4(3) ?
04a Fe1 Mg2 16_544 . 16_554 95.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . . 88.8(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 10_554 44.9(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 11_555 45.6(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 4_556 85.0(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 13_555 91.2(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 6_556 135.1(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 7_555 134.4(3) ?
04a Fe1 Ca2 16_544 . 16_554 95.0(3) ?
04b Fe1 04b 10_564 . 4_566 98.7(3) ?
04b Fe1 04b 10_564 . 6_546 180.0(5) ?
04b Fe1 04b 10_564 . 16_544 81.3(3) ?
04b Fe1 As2 10_564 . . 152.55(19) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 10_554 84.6(2) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 11_555 75.4(2) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 4_556 154.68(19) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 13_555 27.45(19) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 6_556 95.4(2) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 7_555 104.6(2) ?
04b Fe1 As2 10_564 . 16_554 25.32(19) ?

04b Fe1 As3 10_564 . 10_564 38.2(2) ?
04b Fe1 As3 10_564 . 4_566 61.3(2) ?
04b Fe1 As3 10_564 . 6_546 141.8(2) ?
04b Fe1 As3 10_564 . 16_544 118.7(2) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . . 141.6(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 10_554 84.8(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 11_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 4_556 141.6(2) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 13_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 6_556 95.2(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 7_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 10_564 . 16_554 38.4(2) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . . 141.6(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 10_554 84.8(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 11_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 4_556 141.6(2) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 13_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 6_556 95.2(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 7_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 10_564 . 16_554 38.4(2) ?
04b Fe1 04b 4_566 . 6_546 81.3(3) ?
04b Fe1 04b 4_566 . 16_544 180.0(5) ?
04b Fe1 As2 4_566 . . 75.4(2) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 10_554 154.68(19) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 11_555 152.55(19) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 4_556 84.6(2) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 13_555 104.6(2) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 6_556 25.32(19) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 7_555 27.45(19) ?
04b Fe1 As2 4_566 . 16_554 95.4(2) ?
04b Fe1 As3 4_566 . 10_564 61.3(2) ?
04b Fe1 As3 4_566 . 4_566 38.2(2) ?
04b Fe1 As3 4_566 . 6_546 118.7(2) ?
04b Fe1 As3 4_566 . 16_544 141.8(2) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . . 81.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 10_554 141.6(2) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 11_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 4_556 84.8(3) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 13_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 6_556 38.4(2) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 7_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Mg2 4_566 . 16_554 95.2(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . . 81.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 10_554 141.6(2) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 11_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 4_556 84.8(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 13_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 6_556 38.4(2) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 7_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Ca2 4_566 . 16_554 95.2(3) ?
04b Fe1 04b 6_546 . 16_544 98.7(3) ?
04b Fe1 As2 6_546 . . 27.45(19) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 10_554 95.4(2) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 11_555 104.6(2) ?

04b Fe1 As2 6_546 . 4_556 25.32(19) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 13_555 152.55(19) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 6_556 84.6(2) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 7_555 75.4(2) ?
04b Fe1 As2 6_546 . 16_554 154.68(19) ?
04b Fe1 As3 6_546 . 10_564 141.8(2) ?
04b Fe1 As3 6_546 . 4_566 118.7(2) ?
04b Fe1 As3 6_546 . 6_546 38.2(2) ?
04b Fe1 As3 6_546 . 16_544 61.3(2) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . . 38.4(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 10_554 95.2(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 11_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 4_556 38.4(2) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 13_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 6_556 84.8(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 7_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 6_546 . 16_554 141.6(2) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . . 38.4(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 10_554 95.2(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 11_555 99.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 4_556 38.4(2) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 13_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 6_556 84.8(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 7_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 6_546 . 16_554 141.6(2) ?
04b Fe1 As2 16_544 . . 104.6(2) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 10_554 25.32(19) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 11_555 27.45(19) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 4_556 95.4(2) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 13_555 75.4(2) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 6_556 154.68(19) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 7_555 152.55(19) ?
04b Fe1 As2 16_544 . 16_554 84.6(2) ?
04b Fe1 As3 16_544 . 10_564 118.7(2) ?
04b Fe1 As3 16_544 . 4_566 141.8(2) ?
04b Fe1 As3 16_544 . 6_546 61.3(2) ?
04b Fe1 As3 16_544 . 16_544 38.2(2) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . . 99.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 10_554 38.4(2) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 11_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 4_556 95.2(3) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 13_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 6_556 141.6(2) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 7_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Mg2 16_544 . 16_554 84.8(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . . 99.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 10_554 38.4(2) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 11_555 38.4(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 4_556 95.2(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 13_555 81.0(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 6_556 141.6(2) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 7_555 141.6(3) ?
04b Fe1 Ca2 16_544 . 16_554 84.8(3) ?
As2 Fe1 As2 . . 10_554 112.43(8) ?

As2 Fe1 As2 . . 11_555 121.67(8) ?
As2 Fe1 As2 . . 4_556 9.40(8) ?
As2 Fe1 As2 . . 13_555 180.0(5) ?
As2 Fe1 As2 . . 6_556 67.57(8) ?
As2 Fe1 As2 . . 7_555 58.33(8) ?
As2 Fe1 As2 . . 16_554 170.60(8) ?
As2 Fe1 As3 . . 10_564 124.59(6) ?
As2 Fe1 As3 . . 4_566 112.26(6) ?
As2 Fe1 As3 . . 6_546 55.41(6) ?
As2 Fe1 As3 . . 16_544 67.74(6) ?
As2 Fe1 Mg2 . . . 12.55(12) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 10_554 116.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 11_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 4_556 14.47(12) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 13_555 167.45(12) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 6_556 63.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 7_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Mg2 . . 16_554 165.53(12) ?
As2 Fe1 Ca2 . . . 12.55(12) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 10_554 116.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 11_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 4_556 14.47(12) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 13_555 167.45(12) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 6_556 63.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 7_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Ca2 . . 16_554 165.53(12) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 11_555 9.40(8) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 4_556 103.26(8) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 13_555 67.57(8) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 6_556 180.0(5) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 7_555 170.60(8) ?
As2 Fe1 As2 10_554 . 16_554 76.74(8) ?
As2 Fe1 As3 10_554 . 10_564 121.65(7) ?
As2 Fe1 As3 10_554 . 4_566 132.92(6) ?
As2 Fe1 As3 10_554 . 6_546 58.35(7) ?
As2 Fe1 As3 10_554 . 16_544 47.08(6) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . . 111.9(3) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 10_554 13.17(18) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 11_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 4_556 108.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 13_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 6_556 166.83(18) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 7_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Mg2 10_554 . 16_554 71.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . . 111.9(3) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 10_554 13.17(18) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 11_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 4_556 108.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 13_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 6_556 166.83(18) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 7_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Ca2 10_554 . 16_554 71.7(3) ?
As2 Fe1 As2 11_555 . 4_556 112.43(8) ?
As2 Fe1 As2 11_555 . 13_555 58.33(8) ?

As2 Fe1 As2 11_555 . 6_556 170.60(8) ?
As2 Fe1 As2 11_555 . 7_555 180.0(5) ?
As2 Fe1 As2 11_555 . 16_554 67.57(8) ?
As2 Fe1 As3 11_555 . 10_564 112.26(6) ?
As2 Fe1 As3 11_555 . 4_566 124.59(6) ?
As2 Fe1 As3 11_555 . 6_546 67.74(6) ?
As2 Fe1 As3 11_555 . 16_544 55.41(6) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . . 120.4(3) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 10_554 14.47(12) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 11_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 4_556 116.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 13_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 6_556 165.53(12) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 7_555 167.45(12) ?
As2 Fe1 Mg2 11_555 . 16_554 63.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . . 120.4(3) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 10_554 14.47(12) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 11_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 116.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 165.53(12) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 167.45(12) ?
As2 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 63.3(3) ?
As2 Fe1 As2 4_556 . 13_555 170.60(8) ?
As2 Fe1 As2 4_556 . 6_556 76.74(8) ?
As2 Fe1 As2 4_556 . 7_555 67.57(8) ?
As2 Fe1 As2 4_556 . 16_554 180.0(5) ?
As2 Fe1 As3 4_556 . 10_564 132.92(6) ?
As2 Fe1 As3 4_556 . 4_566 121.65(7) ?
As2 Fe1 As3 4_556 . 6_546 47.08(6) ?
As2 Fe1 As3 4_556 . 16_544 58.35(7) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . . 13.9(2) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 10_554 108.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 11_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 4_556 13.17(18) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 13_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 6_556 71.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 7_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Mg2 4_556 . 16_554 166.83(18) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . . 13.9(2) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 10_554 108.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 11_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 4_556 13.17(18) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 13_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 6_556 71.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 7_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Ca2 4_556 . 16_554 166.83(18) ?
As2 Fe1 As2 13_555 . 6_556 112.43(8) ?
As2 Fe1 As2 13_555 . 7_555 121.67(8) ?
As2 Fe1 As2 13_555 . 16_554 9.40(8) ?
As2 Fe1 As3 13_555 . 10_564 55.41(6) ?
As2 Fe1 As3 13_555 . 4_566 67.74(6) ?
As2 Fe1 As3 13_555 . 6_546 124.59(6) ?
As2 Fe1 As3 13_555 . 16_544 112.26(6) ?

As2 Fe1 Mg2 13_555 . . 167.45(12) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 10_554 63.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 11_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 4_556 165.53(12) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 13_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 6_556 116.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 7_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Mg2 13_555 . 16_554 14.47(12) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . . 167.45(12) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 10_554 63.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 11_555 59.6(3) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 4_556 165.53(12) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 13_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 6_556 116.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 7_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Ca2 13_555 . 16_554 14.47(12) ?
As2 Fe1 As2 6_556 . 7_555 9.40(8) ?
As2 Fe1 As2 6_556 . 16_554 103.26(8) ?
As2 Fe1 As3 6_556 . 10_564 58.35(7) ?
As2 Fe1 As3 6_556 . 4_566 47.08(6) ?
As2 Fe1 As3 6_556 . 6_546 121.65(7) ?
As2 Fe1 As3 6_556 . 16_544 132.92(6) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . . 68.1(3) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 10_554 166.83(18) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 11_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 4_556 71.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 13_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 6_556 13.17(18) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 7_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Mg2 6_556 . 16_554 108.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . . 68.1(3) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 10_554 166.83(18) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 11_555 166.1(2) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 4_556 71.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 13_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 6_556 13.17(18) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 7_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Ca2 6_556 . 16_554 108.3(3) ?
As2 Fe1 As2 7_555 . 16_554 112.43(8) ?
As2 Fe1 As3 7_555 . 10_564 67.74(6) ?
As2 Fe1 As3 7_555 . 4_566 55.41(6) ?
As2 Fe1 As3 7_555 . 6_546 112.26(6) ?
As2 Fe1 As3 7_555 . 16_544 124.59(6) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . . 59.6(3) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 10_554 165.53(12) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 11_555 167.45(12) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 4_556 63.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 13_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 6_556 14.47(12) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 7_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Mg2 7_555 . 16_554 116.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . . 59.6(3) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 10_554 165.53(12) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 11_555 167.45(12) ?

As2 Fe1 Ca2 7_555 . 4_556 63.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 13_555 120.4(3) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 6_556 14.47(12) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 7_555 12.55(12) ?
As2 Fe1 Ca2 7_555 . 16_554 116.7(3) ?
As2 Fe1 As3 16_554 . 10_564 47.08(6) ?
As2 Fe1 As3 16_554 . 4_566 58.35(7) ?
As2 Fe1 As3 16_554 . 6_546 132.92(6) ?
As2 Fe1 As3 16_554 . 16_544 121.65(7) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . . 166.1(2) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 10_554 71.7(3) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 11_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 4_556 166.83(18) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 13_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 6_556 108.3(3) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 7_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Mg2 16_554 . 16_554 13.17(18) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . . 166.1(2) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 10_554 71.7(3) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 11_555 68.1(3) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 4_556 166.83(18) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 13_555 13.9(2) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 6_556 108.3(3) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 7_555 111.9(3) ?
As2 Fe1 Ca2 16_554 . 16_554 13.17(18) ?
As3 Fe1 As3 10_564 . 4_566 27.60(4) ?
As3 Fe1 As3 10_564 . 6_546 180.0(5) ?
As3 Fe1 As3 10_564 . 16_544 152.40(4) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . . 120.9(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 10_554 118.7(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 11_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 4_556 123.6(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 13_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 6_556 61.3(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 7_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 10_564 . 16_554 56.4(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . . 120.9(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 10_554 118.7(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 11_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 4_556 123.6(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 13_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 6_556 61.3(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 7_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 10_564 . 16_554 56.4(3) ?
As3 Fe1 As3 4_566 . 6_546 152.40(4) ?
As3 Fe1 As3 4_566 . 16_544 180.0(5) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . . 115.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 10_554 123.6(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 11_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 4_556 118.7(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 13_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 6_556 56.4(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 7_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Mg2 4_566 . 16_554 61.3(3) ?

As3 Fe1 Ca2 4_566 . . 115.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 10_554 123.6(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 11_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 4_556 118.7(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 13_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 6_556 56.4(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 7_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Ca2 4_566 . 16_554 61.3(3) ?
As3 Fe1 As3 6_546 . 16_544 27.60(4) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . . 59.1(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 10_554 61.3(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 11_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 4_556 56.4(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 13_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 6_556 118.7(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 7_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 6_546 . 16_554 123.6(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . . 59.1(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 10_554 61.3(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 11_555 65.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 4_556 56.4(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 13_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 6_556 118.7(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 7_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 6_546 . 16_554 123.6(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . . 65.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 10_554 56.4(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 11_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 4_556 61.3(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 13_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 6_556 123.6(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 7_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Mg2 16_544 . 16_554 118.7(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . . 65.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 10_554 56.4(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 11_555 59.1(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 4_556 61.3(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 13_555 115.0(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 6_556 123.6(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 7_555 120.9(3) ?
As3 Fe1 Ca2 16_544 . 16_554 118.7(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 10_554 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 11_555 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 4_556 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 13_555 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 6_556 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 7_555 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 . . 16_554 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . . 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 10_554 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 11_555 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 4_556 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 13_555 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 6_556 61.0(4) ?

Mg2 Fe1 Ca2 . . 7_555 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 . . 16_554 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 11_555 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 4_556 115.7(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 13_555 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 6_556 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 7_555 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 10_554 . 16_554 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . . 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 10_554 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 11_555 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 4_556 115.7(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 13_555 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 6_556 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 7_555 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 10_554 . 16_554 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 11_555 . 4_556 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 11_555 . 13_555 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 11_555 . 6_556 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 11_555 . 7_555 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Mg2 11_555 . 16_554 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . . 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 10_554 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 11_555 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 4_556 . 13_555 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 4_556 . 6_556 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 4_556 . 7_555 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 4_556 . 16_554 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . . 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 10_554 115.7(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 11_555 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 13_555 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 6_556 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 7_555 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 4_556 . 16_554 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Mg2 13_555 . 6_556 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 13_555 . 7_555 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 13_555 . 16_554 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . . 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 10_554 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 11_555 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 4_556 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 13_555 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 6_556 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 7_555 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 13_555 . 16_554 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 6_556 . 7_555 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Mg2 6_556 . 16_554 115.7(4) ?

Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . . 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 10_554 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 11_555 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 4_556 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 13_555 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 7_555 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 6_556 . 16_554 115.7(4) ?
Mg2 Fe1 Mg2 7_555 . 16_554 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . . 57.6(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 10_554 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 11_555 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 4_556 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 13_555 122.4(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 6_556 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 7_555 . 16_554 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . . 176.2(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 10_554 64.3(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 11_555 61.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 4_556 180.0(5) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 13_555 3.8(3) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 6_556 115.7(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 7_555 119.0(4) ?
Mg2 Fe1 Ca2 16_554 . 16_554 0.0(5) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 10_554 119.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 11_555 122.4(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 4_556 3.8(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 13_555 180.0(5) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 6_556 61.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 7_555 57.6(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 . . 16_554 176.2(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 11_555 3.8(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 4_556 115.7(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 13_555 61.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 6_556 180.0(5) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 7_555 176.2(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 10_554 . 16_554 64.3(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 11_555 . 4_556 119.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 11_555 . 13_555 57.6(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 11_555 . 6_556 176.2(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 11_555 . 7_555 180.0(5) ?
Ca2 Fe1 Ca2 11_555 . 16_554 61.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 4_556 . 13_555 176.2(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 4_556 . 6_556 64.3(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 4_556 . 7_555 61.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 4_556 . 16_554 180.0(5) ?
Ca2 Fe1 Ca2 13_555 . 6_556 119.0(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 13_555 . 7_555 122.4(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 13_555 . 16_554 3.8(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 6_556 . 7_555 3.8(3) ?
Ca2 Fe1 Ca2 6_556 . 16_554 115.7(4) ?
Ca2 Fe1 Ca2 7_555 . 16_554 119.0(4) ?
Fe1 Fe2 Fe1 . . 10_565 116.86(11) ?

Fe1 Fe2 Fe2 . . 6_546 60.42(4) ?
Fe1 Fe2 Fe2 . . 6_556 119.58(7) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . . 66.8(7) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . 4_566 57.0(8) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . 6_546 57.75(10) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . 6_556 116.86(10) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . 7_555 56.03(9) ?
Fe1 Fe2 Mo2 . . 7_565 114.57(11) ?
Fe1 Fe2 As1 . . . 55.782(16) ?
Fe1 Fe2 As1 . . 4_566 171.96(11) ?
Fe1 Fe2 O3 . . . 76.15(9) ?
Fe1 Fe2 O3 . . 4_566 163.31(13) ?
Fe1 Fe2 O4a . . . 99.4(2) ?
Fe1 Fe2 O4a . . 4_566 22.3(2) ?
Fe1 Fe2 O4b . . . 95.0(2) ?
Fe1 Fe2 O4b . . 4_566 22.5(2) ?
Fe1 Fe2 O5 . . . 76.59(13) ?
Fe1 Fe2 O5 . . 4_566 99.28(13) ?
Fe1 Fe2 As2 . . 6_556 58.56(9) ?
Fe1 Fe2 As2 . . 7_555 58.61(9) ?
Fe1 Fe2 As3 . . . 89.32(8) ?
Fe1 Fe2 As3 . . 4_566 59.83(5) ?
Fe1 Fe2 As3 . . 6_556 72.27(5) ?
Fe1 Fe2 As3 . . 7_555 82.35(6) ?
Fe1 Fe2 Mg2 . . 6_556 57.78(19) ?
Fe1 Fe2 Mg2 . . 7_555 59.11(18) ?
Fe1 Fe2 Ca2 . . 6_556 57.78(19) ?
Fe1 Fe2 Ca2 . . 7_555 59.11(18) ?
Fe1 Fe2 Fe2 10_565 . 6_546 119.58(7) ?
Fe1 Fe2 Fe2 10_565 . 6_556 60.42(4) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . . 57.0(8) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . 4_566 66.8(7) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . 6_546 114.57(11) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . 6_556 56.03(9) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . 7_555 116.86(10) ?
Fe1 Fe2 Mo2 10_565 . 7_565 57.75(10) ?
Fe1 Fe2 As1 10_565 . . 171.96(11) ?
Fe1 Fe2 As1 10_565 . 4_566 55.782(16) ?
Fe1 Fe2 O3 10_565 . . 163.31(13) ?
Fe1 Fe2 O3 10_565 . 4_566 76.15(9) ?
Fe1 Fe2 O4a 10_565 . . 22.3(2) ?
Fe1 Fe2 O4a 10_565 . 4_566 99.4(2) ?
Fe1 Fe2 O4b 10_565 . . 22.5(2) ?
Fe1 Fe2 O4b 10_565 . 4_566 95.0(2) ?
Fe1 Fe2 O5 10_565 . . 99.28(13) ?
Fe1 Fe2 O5 10_565 . 4_566 76.59(13) ?
Fe1 Fe2 As2 10_565 . 6_556 58.61(9) ?
Fe1 Fe2 As2 10_565 . 7_555 58.56(9) ?
Fe1 Fe2 As3 10_565 . . 59.83(5) ?
Fe1 Fe2 As3 10_565 . 4_566 89.32(8) ?
Fe1 Fe2 As3 10_565 . 6_556 72.27(5) ?
Fe1 Fe2 As3 10_565 . 7_555 82.35(6) ?
Fe1 Fe2 Mg2 10_565 . 6_556 57.78(19) ?
Fe1 Fe2 Mg2 10_565 . 7_555 59.11(18) ?

Fe1 Fe2 Ca2 10_565 . 6_556 59.11(18) ?
Fe1 Fe2 Ca2 10_565 . 7_555 57.78(19) ?
Fe2 Fe2 Fe2 6_546 . 6_556 180.0(5) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . . 114.0(7) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . 4_566 66.0(7) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . 6_546 6.59(11) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . 6_556 174.02(16) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . 7_555 5.98(10) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_546 . 7_565 173.41(17) ?
Fe2 Fe2 As1 6_546 . . 55.08(3) ?
Fe2 Fe2 As1 6_546 . 4_566 124.92(6) ?
Fe2 Fe2 O3 6_546 . . 75.30(10) ?
Fe2 Fe2 O3 6_546 . 4_566 104.70(12) ?
Fe2 Fe2 O4a 6_546 . . 99.6(2) ?
Fe2 Fe2 O4a 6_546 . 4_566 80.4(2) ?
Fe2 Fe2 O4b 6_546 . . 105.3(2) ?
Fe2 Fe2 O4b 6_546 . 4_566 74.7(2) ?
Fe2 Fe2 O5 6_546 . . 22.36(12) ?
Fe2 Fe2 O5 6_546 . 4_566 157.64(12) ?
Fe2 Fe2 As2 6_546 . 6_556 94.37(11) ?
Fe2 Fe2 As2 6_546 . 7_555 85.63(10) ?
Fe2 Fe2 As3 6_546 . . 59.79(5) ?
Fe2 Fe2 As3 6_546 . 4_566 120.21(8) ?
Fe2 Fe2 As3 6_546 . 6_556 132.65(8) ?
Fe2 Fe2 As3 6_546 . 7_555 47.35(5) ?
Fe2 Fe2 Mg2 6_546 . 6_556 91.1(3) ?
Fe2 Fe2 Mg2 6_546 . 7_555 88.9(3) ?
Fe2 Fe2 Ca2 6_546 . 6_556 91.1(3) ?
Fe2 Fe2 Ca2 6_546 . 7_555 88.9(3) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . . 66.0(7) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . 4_566 114.0(7) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . 6_546 173.41(17) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . 6_556 5.98(10) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . 7_555 174.02(16) ?
Fe2 Fe2 Mo2 6_556 . 7_565 6.59(11) ?
Fe2 Fe2 As1 6_556 . . 124.92(6) ?
Fe2 Fe2 As1 6_556 . 4_566 55.08(3) ?
Fe2 Fe2 O3 6_556 . . 104.70(12) ?
Fe2 Fe2 O3 6_556 . 4_566 75.30(10) ?
Fe2 Fe2 O4a 6_556 . . 80.4(2) ?
Fe2 Fe2 O4a 6_556 . 4_566 99.6(2) ?
Fe2 Fe2 O4b 6_556 . . 74.7(2) ?
Fe2 Fe2 O4b 6_556 . 4_566 105.3(2) ?
Fe2 Fe2 O5 6_556 . . 157.64(12) ?
Fe2 Fe2 O5 6_556 . 4_566 22.36(12) ?
Fe2 Fe2 As2 6_556 . 6_556 85.63(10) ?
Fe2 Fe2 As2 6_556 . 7_555 94.37(11) ?
Fe2 Fe2 As3 6_556 . . 120.21(8) ?
Fe2 Fe2 As3 6_556 . 4_566 59.79(5) ?
Fe2 Fe2 As3 6_556 . 6_556 47.35(5) ?
Fe2 Fe2 As3 6_556 . 7_555 132.65(8) ?
Fe2 Fe2 Mg2 6_556 . 6_556 88.9(3) ?
Fe2 Fe2 Mg2 6_556 . 7_555 91.1(3) ?
Fe2 Fe2 Ca2 6_556 . 6_556 88.9(3) ?

Fe2 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 91.1(3) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 . . 4_566 52.8(11) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 . . 6_546 107.9(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 . . 6_556 60.5(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 . . 7_555 108.0(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 . . 7_565 59.4(7) ?
 Mo2 Fe2 As1 . . . 118.1(8) ?
 Mo2 Fe2 As1 . . 4_566 105.2(7) ?
 Mo2 Fe2 O3 . . . 126.5(8) ?
 Mo2 Fe2 O3 . . 4_566 129.4(7) ?
 Mo2 Fe2 O4a . . . 53.2(8) ?
 Mo2 Fe2 O4a . . 4_566 45.3(8) ?
 Mo2 Fe2 O4b . . . 43.5(8) ?
 Mo2 Fe2 O4b . . 4_566 45.1(7) ?
 Mo2 Fe2 O5 . . . 112.5(8) ?
 Mo2 Fe2 O5 . . 4_566 59.7(7) ?
 Mo2 Fe2 As2 . . 6_556 21.2(7) ?
 Mo2 Fe2 As2 . . 7_555 31.7(7) ?
 Mo2 Fe2 As3 . . . 83.8(8) ?
 Mo2 Fe2 As3 . . 4_566 39.4(8) ?
 Mo2 Fe2 As3 . . 6_556 40.6(7) ?
 Mo2 Fe2 As3 . . 7_555 90.6(8) ?
 Mo2 Fe2 Mg2 . . 6_556 24.8(8) ?
 Mo2 Fe2 Mg2 . . 7_555 28.1(8) ?
 Mo2 Fe2 Ca2 . . 6_556 24.8(8) ?
 Mo2 Fe2 Ca2 . . 7_555 28.1(8) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 4_566 . 6_546 59.4(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 4_566 . 6_556 108.0(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 4_566 . 7_555 60.5(7) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 4_566 . 7_565 107.9(7) ?
 Mo2 Fe2 As1 4_566 . . 105.2(7) ?
 Mo2 Fe2 As1 4_566 . 4_566 118.1(8) ?
 Mo2 Fe2 O3 4_566 . . 129.4(7) ?
 Mo2 Fe2 O3 4_566 . 4_566 126.5(8) ?
 Mo2 Fe2 O4a 4_566 . . 45.3(8) ?
 Mo2 Fe2 O4a 4_566 . 4_566 53.2(8) ?
 Mo2 Fe2 O4b 4_566 . . 45.1(7) ?
 Mo2 Fe2 O4b 4_566 . 4_566 43.5(8) ?
 Mo2 Fe2 O5 4_566 . . 59.7(7) ?
 Mo2 Fe2 O5 4_566 . 4_566 112.5(8) ?
 Mo2 Fe2 As2 4_566 . 6_556 31.7(7) ?
 Mo2 Fe2 As2 4_566 . 7_555 21.2(7) ?
 Mo2 Fe2 As3 4_566 . . 39.4(8) ?
 Mo2 Fe2 As3 4_566 . 4_566 83.8(8) ?
 Mo2 Fe2 As3 4_566 . 6_556 90.6(8) ?
 Mo2 Fe2 As3 4_566 . 7_555 40.6(7) ?
 Mo2 Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 28.1(8) ?
 Mo2 Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 24.8(8) ?
 Mo2 Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 28.1(8) ?
 Mo2 Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 24.8(8) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 6_546 . 6_556 167.43(17) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 6_546 . 7_555 2.55(13) ?
 Mo2 Fe2 Mo2 6_546 . 7_565 167.08(18) ?
 Mo2 Fe2 As1 6_546 . . 59.56(9) ?

Mo2 Fe2 As1 6_546 . 4_566 126.76(10) ?
Mo2 Fe2 03 6_546 . . 80.83(13) ?
Mo2 Fe2 03 6_546 . 4_566 108.29(14) ?
Mo2 Fe2 04a 6_546 . . 93.9(2) ?
Mo2 Fe2 04a 6_546 . 4_566 76.6(2) ?
Mo2 Fe2 04b 6_546 . . 99.2(2) ?
Mo2 Fe2 04b 6_546 . 4_566 70.1(2) ?
Mo2 Fe2 05 6_546 . . 20.81(15) ?
Mo2 Fe2 05 6_546 . 4_566 156.87(17) ?
Mo2 Fe2 As2 6_546 . 6_556 87.99(13) ?
Mo2 Fe2 As2 6_546 . 7_555 79.11(12) ?
Mo2 Fe2 As3 6_546 . . 55.17(10) ?
Mo2 Fe2 As3 6_546 . 4_566 117.43(12) ?
Mo2 Fe2 As3 6_546 . 6_556 129.77(12) ?
Mo2 Fe2 As3 6_546 . 7_555 42.79(10) ?
Mo2 Fe2 Mg2 6_546 . 6_556 84.7(3) ?
Mo2 Fe2 Mg2 6_546 . 7_555 82.4(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 6_546 . 6_556 84.7(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 6_546 . 7_555 82.4(3) ?
Mo2 Fe2 Mo2 6_556 . 7_555 168.28(16) ?
Mo2 Fe2 Mo2 6_556 . 7_565 2.55(13) ?
Mo2 Fe2 As1 6_556 . . 128.73(10) ?
Mo2 Fe2 As1 6_556 . 4_566 57.17(9) ?
Mo2 Fe2 03 6_556 . . 109.66(14) ?
Mo2 Fe2 03 6_556 . 4_566 78.68(12) ?
Mo2 Fe2 04a 6_556 . . 75.3(2) ?
Mo2 Fe2 04a 6_556 . 4_566 96.0(2) ?
Mo2 Fe2 04b 6_556 . . 69.2(2) ?
Mo2 Fe2 04b 6_556 . 4_566 101.1(2) ?
Mo2 Fe2 05 6_556 . . 154.85(16) ?
Mo2 Fe2 05 6_556 . 4_566 23.22(15) ?
Mo2 Fe2 As2 6_556 . 6_556 79.84(11) ?
Mo2 Fe2 As2 6_556 . 7_555 88.45(12) ?
Mo2 Fe2 As3 6_556 . . 115.82(11) ?
Mo2 Fe2 As3 6_556 . 4_566 57.59(9) ?
Mo2 Fe2 As3 6_556 . 6_556 45.24(9) ?
Mo2 Fe2 As3 6_556 . 7_555 128.22(11) ?
Mo2 Fe2 Mg2 6_556 . 6_556 83.1(3) ?
Mo2 Fe2 Mg2 6_556 . 7_555 85.2(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 6_556 . 6_556 83.1(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 85.2(3) ?
Mo2 Fe2 Mo2 7_555 . 7_565 167.43(17) ?
Mo2 Fe2 As1 7_555 . . 57.17(9) ?
Mo2 Fe2 As1 7_555 . 4_566 128.73(10) ?
Mo2 Fe2 03 7_555 . . 78.68(12) ?
Mo2 Fe2 03 7_555 . 4_566 109.66(14) ?
Mo2 Fe2 04a 7_555 . . 96.0(2) ?
Mo2 Fe2 04a 7_555 . 4_566 75.3(2) ?
Mo2 Fe2 04b 7_555 . . 101.1(2) ?
Mo2 Fe2 04b 7_555 . 4_566 69.2(2) ?
Mo2 Fe2 05 7_555 . . 23.22(15) ?
Mo2 Fe2 05 7_555 . 4_566 154.85(16) ?
Mo2 Fe2 As2 7_555 . 6_556 88.45(12) ?
Mo2 Fe2 As2 7_555 . 7_555 79.84(11) ?

Mo2 Fe2 As3 7_555 . . 57.59(9) ?
Mo2 Fe2 As3 7_555 . 4_566 115.82(11) ?
Mo2 Fe2 As3 7_555 . 6_556 128.22(11) ?
Mo2 Fe2 As3 7_555 . 7_555 45.24(9) ?
Mo2 Fe2 Mg2 7_555 . 6_556 85.2(3) ?
Mo2 Fe2 Mg2 7_555 . 7_555 83.1(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 7_555 . 6_556 85.2(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 7_555 . 7_555 83.1(3) ?
Mo2 Fe2 As1 7_565 . . 126.76(10) ?
Mo2 Fe2 As1 7_565 . 4_566 59.56(9) ?
Mo2 Fe2 O3 7_565 . . 108.29(14) ?
Mo2 Fe2 O3 7_565 . 4_566 80.83(13) ?
Mo2 Fe2 O4a 7_565 . . 76.6(2) ?
Mo2 Fe2 O4a 7_565 . 4_566 93.9(2) ?
Mo2 Fe2 O4b 7_565 . . 70.1(2) ?
Mo2 Fe2 O4b 7_565 . 4_566 99.2(2) ?
Mo2 Fe2 O5 7_565 . . 156.87(17) ?
Mo2 Fe2 O5 7_565 . 4_566 20.81(15) ?
Mo2 Fe2 As2 7_565 . 6_556 79.11(12) ?
Mo2 Fe2 As2 7_565 . 7_555 87.99(13) ?
Mo2 Fe2 As3 7_565 . . 117.43(12) ?
Mo2 Fe2 As3 7_565 . 4_566 55.17(10) ?
Mo2 Fe2 As3 7_565 . 6_556 42.79(10) ?
Mo2 Fe2 As3 7_565 . 7_555 129.77(12) ?
Mo2 Fe2 Mg2 7_565 . 6_556 82.4(3) ?
Mo2 Fe2 Mg2 7_565 . 7_555 84.7(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 7_565 . 6_556 82.4(3) ?
Mo2 Fe2 Ca2 7_565 . 7_555 84.7(3) ?
As1 Fe2 As1 . . 4_566 131.77(13) ?
As1 Fe2 O3 . . . 24.46(9) ?
As1 Fe2 O3 . . 4_566 110.45(17) ?
As1 Fe2 O4a . . . 150.0(2) ?
As1 Fe2 O4a . . 4_566 74.3(2) ?
As1 Fe2 O4b . . . 149.5(2) ?
As1 Fe2 O4b . . 4_566 78.0(2) ?
As1 Fe2 O5 . . . 76.37(12) ?
As1 Fe2 O5 . . 4_566 106.91(13) ?
As1 Fe2 As2 . . 6_556 114.30(10) ?
As1 Fe2 As2 . . 7_555 113.71(10) ?
As1 Fe2 As3 . . . 114.72(3) ?
As1 Fe2 As3 . . 4_566 89.04(4) ?
As1 Fe2 As3 . . 6_556 97.38(3) ?
As1 Fe2 As3 . . 7_555 102.31(3) ?
As1 Fe2 Mg2 . . 6_556 113.5(2) ?
As1 Fe2 Mg2 . . 7_555 114.7(2) ?
As1 Fe2 Ca2 . . 6_556 113.5(2) ?
As1 Fe2 Ca2 . . 7_555 114.7(2) ?
As1 Fe2 O3 4_566 . . 110.45(17) ?
As1 Fe2 O3 4_566 . 4_566 24.46(9) ?
As1 Fe2 O4a 4_566 . . 74.3(2) ?
As1 Fe2 O4a 4_566 . 4_566 150.0(2) ?
As1 Fe2 O4b 4_566 . . 78.0(2) ?
As1 Fe2 O4b 4_566 . 4_566 149.5(2) ?
As1 Fe2 O5 4_566 . . 106.91(13) ?

As1 Fe2 O5 4_566 . 4_566 76.37(12) ?
As1 Fe2 As2 4_566 . 6_556 113.71(10) ?
As1 Fe2 As2 4_566 . 7_555 114.30(10) ?
As1 Fe2 As3 4_566 . . 89.04(4) ?
As1 Fe2 As3 4_566 . 4_566 114.72(3) ?
As1 Fe2 As3 4_566 . 6_556 102.31(3) ?
As1 Fe2 As3 4_566 . 7_555 97.38(3) ?
As1 Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 114.7(2) ?
As1 Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 113.5(2) ?
As1 Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 114.7(2) ?
As1 Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 113.5(2) ?
O3 Fe2 O3 . . 4_566 93.3(2) ?
O3 Fe2 O4a . . . 174.4(2) ?
O3 Fe2 O4a . . 4_566 90.2(2) ?
O3 Fe2 O4b . . . 169.6(3) ?
O3 Fe2 O4b . . 4_566 96.5(2) ?
O3 Fe2 O5 . . . 93.83(16) ?
O3 Fe2 O5 . . 4_566 91.48(16) ?
O3 Fe2 As2 . . 6_556 131.70(15) ?
O3 Fe2 As2 . . 7_555 134.52(15) ?
O3 Fe2 As3 . . . 133.96(10) ?
O3 Fe2 As3 . . 4_566 88.86(10) ?
O3 Fe2 As3 . . 6_556 92.66(10) ?
O3 Fe2 As3 . . 7_555 121.84(10) ?
O3 Fe2 Mg2 . . 6_556 132.20(16) ?
O3 Fe2 Mg2 . . 7_555 134.43(17) ?
O3 Fe2 Ca2 . . 6_556 132.20(16) ?
O3 Fe2 Ca2 . . 7_555 134.43(17) ?
O3 Fe2 O4a 4_566 . . 90.2(2) ?
O3 Fe2 O4a 4_566 . 4_566 174.4(2) ?
O3 Fe2 O4b 4_566 . . 96.5(2) ?
O3 Fe2 O4b 4_566 . 4_566 169.6(3) ?
O3 Fe2 O5 4_566 . . 91.48(16) ?
O3 Fe2 O5 4_566 . 4_566 93.83(16) ?
O3 Fe2 As2 4_566 . 6_556 134.52(15) ?
O3 Fe2 As2 4_566 . 7_555 131.70(15) ?
O3 Fe2 As3 4_566 . . 88.86(10) ?
O3 Fe2 As3 4_566 . 4_566 133.96(10) ?
O3 Fe2 As3 4_566 . 6_556 121.84(10) ?
O3 Fe2 As3 4_566 . 7_555 92.66(10) ?
O3 Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 134.43(17) ?
O3 Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 132.20(16) ?
O3 Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 134.43(17) ?
O3 Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 132.20(16) ?
O4a Fe2 O4a . . 4_566 86.7(3) ?
O4a Fe2 O4b . . . 10.0(3) ?
O4a Fe2 O4b . . 4_566 79.8(3) ?
O4a Fe2 O5 . . . 81.7(2) ?
O4a Fe2 O5 . . 4_566 92.6(2) ?
O4a Fe2 As2 . . 6_556 45.5(2) ?
O4a Fe2 As2 . . 7_555 41.6(2) ?
O4a Fe2 As3 . . . 41.7(2) ?
O4a Fe2 As3 . . 4_566 91.8(2) ?
O4a Fe2 As3 . . 6_556 89.2(2) ?

04a Fe2 As3 . . 7_555 53.6(2) ?
04a Fe2 Mg2 . . 6_556 44.6(2) ?
04a Fe2 Mg2 . . 7_555 42.1(2) ?
04a Fe2 Ca2 . . 6_556 44.6(2) ?
04a Fe2 Ca2 . . 7_555 42.1(2) ?
04a Fe2 04b 4_566 . . 79.8(3) ?
04a Fe2 04b 4_566 . 4_566 10.0(3) ?
04a Fe2 05 4_566 . . 92.6(2) ?
04a Fe2 05 4_566 . 4_566 81.7(2) ?
04a Fe2 As2 4_566 . 6_556 41.6(2) ?
04a Fe2 As2 4_566 . 7_555 45.5(2) ?
04a Fe2 As3 4_566 . . 91.8(2) ?
04a Fe2 As3 4_566 . 4_566 41.7(2) ?
04a Fe2 As3 4_566 . 6_556 53.6(2) ?
04a Fe2 As3 4_566 . 7_555 89.2(2) ?
04a Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 42.1(2) ?
04a Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 44.6(2) ?
04a Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 42.1(2) ?
04a Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 44.6(2) ?
04b Fe2 04b . . 4_566 73.9(3) ?
04b Fe2 05 . . . 89.3(2) ?
04b Fe2 05 . . 4_566 84.5(2) ?
04b Fe2 As2 . . 6_556 38.2(2) ?
04b Fe2 As2 . . 7_555 36.4(2) ?
04b Fe2 As3 . . . 49.9(2) ?
04b Fe2 As3 . . 4_566 81.9(2) ?
04b Fe2 As3 . . 6_556 79.3(2) ?
04b Fe2 As3 . . 7_555 61.2(2) ?
04b Fe2 Mg2 . . 6_556 38.0(2) ?
04b Fe2 Mg2 . . 7_555 36.0(3) ?
04b Fe2 Ca2 . . 6_556 38.0(2) ?
04b Fe2 Ca2 . . 7_555 36.0(3) ?
04b Fe2 05 4_566 . . 84.5(2) ?
04b Fe2 05 4_566 . 4_566 89.3(2) ?
04b Fe2 As2 4_566 . 6_556 36.4(2) ?
04b Fe2 As2 4_566 . 7_555 38.2(2) ?
04b Fe2 As3 4_566 . . 81.9(2) ?
04b Fe2 As3 4_566 . 4_566 49.9(2) ?
04b Fe2 As3 4_566 . 6_556 61.2(2) ?
04b Fe2 As3 4_566 . 7_555 79.3(2) ?
04b Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 36.0(3) ?
04b Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 38.0(2) ?
04b Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 36.0(3) ?
04b Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 38.0(2) ?
05 Fe2 05 . . 4_566 172.3(3) ?
05 Fe2 As2 . . 6_556 91.37(18) ?
05 Fe2 As2 . . 7_555 80.90(16) ?
05 Fe2 As3 . . . 40.13(12) ?
05 Fe2 As3 . . 4_566 134.29(18) ?
05 Fe2 As3 . . 6_556 145.58(19) ?
05 Fe2 As3 . . 7_555 28.20(12) ?
05 Fe2 Mg2 . . 6_556 87.8(3) ?
05 Fe2 Mg2 . . 7_555 84.5(3) ?
05 Fe2 Ca2 . . 6_556 87.8(3) ?

05 Fe2 Ca2 . . 7_555 84.5(3) ?
05 Fe2 As2 4_566 . 6_556 80.90(16) ?
05 Fe2 As2 4_566 . 7_555 91.37(18) ?
05 Fe2 As3 4_566 . . 134.29(18) ?
05 Fe2 As3 4_566 . 4_566 40.13(12) ?
05 Fe2 As3 4_566 . 6_556 28.20(12) ?
05 Fe2 As3 4_566 . 7_555 145.58(19) ?
05 Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 84.5(3) ?
05 Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 87.8(3) ?
05 Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 84.5(3) ?
05 Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 87.8(3) ?
As2 Fe2 As2 6_556 . 7_555 10.77(9) ?
As2 Fe2 As3 6_556 . . 65.68(11) ?
As2 Fe2 As3 6_556 . 4_566 55.50(10) ?
As2 Fe2 As3 6_556 . 6_556 59.93(9) ?
As2 Fe2 As3 6_556 . 7_555 70.64(10) ?
As2 Fe2 Mg2 6_556 . 6_556 3.6(3) ?
As2 Fe2 Mg2 6_556 . 7_555 7.2(2) ?
As2 Fe2 Ca2 6_556 . 6_556 3.6(3) ?
As2 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 7.2(2) ?
As2 Fe2 As3 7_555 . . 55.50(10) ?
As2 Fe2 As3 7_555 . 4_566 65.68(11) ?
As2 Fe2 As3 7_555 . 6_556 70.64(10) ?
As2 Fe2 As3 7_555 . 7_555 59.93(9) ?
As2 Fe2 Mg2 7_555 . 6_556 7.2(2) ?
As2 Fe2 Mg2 7_555 . 7_555 3.6(3) ?
As2 Fe2 Ca2 7_555 . 6_556 7.2(2) ?
As2 Fe2 Ca2 7_555 . 7_555 3.6(3) ?
As3 Fe2 As3 . . 4_566 121.15(15) ?
As3 Fe2 As3 . . 6_556 124.45(14) ?
As3 Fe2 As3 . . 7_555 12.44(4) ?
As3 Fe2 Mg2 . . 6_556 62.52(19) ?
As3 Fe2 Mg2 . . 7_555 58.63(19) ?
As3 Fe2 Ca2 . . 6_556 62.52(19) ?
As3 Fe2 Ca2 . . 7_555 58.63(19) ?
As3 Fe2 As3 4_566 . 6_556 12.44(4) ?
As3 Fe2 As3 4_566 . 7_555 124.45(14) ?
As3 Fe2 Mg2 4_566 . 6_556 58.63(19) ?
As3 Fe2 Mg2 4_566 . 7_555 62.52(19) ?
As3 Fe2 Ca2 4_566 . 6_556 58.63(19) ?
As3 Fe2 Ca2 4_566 . 7_555 62.52(19) ?
As3 Fe2 As3 6_556 . 7_555 130.57(14) ?
As3 Fe2 Mg2 6_556 . 6_556 63.4(2) ?
As3 Fe2 Mg2 6_556 . 7_555 67.2(2) ?
As3 Fe2 Ca2 6_556 . 6_556 63.4(2) ?
As3 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 67.2(2) ?
As3 Fe2 Mg2 7_555 . 6_556 67.2(2) ?
As3 Fe2 Mg2 7_555 . 7_555 63.4(2) ?
As3 Fe2 Ca2 7_555 . 6_556 67.2(2) ?
As3 Fe2 Ca2 7_555 . 7_555 63.4(2) ?
Mg2 Fe2 Mg2 6_556 . 7_555 3.9(2) ?
Mg2 Fe2 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 3.9(2) ?
Mg2 Fe2 Ca2 7_555 . 6_556 3.9(2) ?

Mg2 Fe2 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Ca2 Fe2 Ca2 6_556 . 7_555 3.9(2) ?
Fe1 Mo2 Fe1 . . 10_565 127.47(15) ?
Fe1 Mo2 Fe2 . . . 106.6(7) ?
Fe1 Mo2 Fe2 . . 6_546 59.81(9) ?
Fe1 Mo2 Fe2 . . 6_556 128.75(17) ?
Fe1 Mo2 Mo2 . . 4_566 76.6(12) ?
Fe1 Mo2 Mo2 . . 6_546 57.73(12) ?
Fe1 Mo2 Mo2 . . 6_556 126.49(18) ?
Fe1 Mo2 Mo2 . . 7_555 55.61(11) ?
Fe1 Mo2 Mo2 . . 7_565 124.39(19) ?
Fe1 Mo2 As1 . . . 55.64(9) ?
Fe1 Mo2 As1 . . 4_566 174.12(17) ?
Fe1 Mo2 O3 . . . 77.12(17) ?
Fe1 Mo2 O3 . . 4_566 148.2(2) ?
Fe1 Mo2 O4a . . . 110.3(3) ?
Fe1 Mo2 O4a . . 4_566 18.7(2) ?
Fe1 Mo2 O4b . . . 106.4(3) ?
Fe1 Mo2 O4b . . 4_566 19.2(2) ?
Fe1 Mo2 O5 . . . 78.22(18) ?
Fe1 Mo2 O5 . . 4_566 108.9(3) ?
Fe1 Mo2 As2 . . 6_556 63.42(14) ?
Fe1 Mo2 As2 . . 7_555 63.21(14) ?
Fe1 Mo2 As3 . . . 92.63(14) ?
Fe1 Mo2 As3 . . 4_566 64.32(13) ?
Fe1 Mo2 As3 . . 6_556 78.15(13) ?
Fe1 Mo2 As3 . . 7_555 84.21(12) ?
Fe1 Mo2 Mg2 . . 6_556 62.7(2) ?
Fe1 Mo2 Mg2 . . 7_555 64.1(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 . . 1_565 98.33(17) ?
Fe1 Mo2 Ca2 . . 4_566 95.78(17) ?
Fe1 Mo2 Ca2 . . 6_556 62.7(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 . . 7_555 64.1(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 . . 16_554 45.9(2) ?
Fe1 Mo2 Fe2 10_565 . . 116.9(8) ?
Fe1 Mo2 Fe2 10_565 . 6_546 120.04(15) ?
Fe1 Mo2 Fe2 10_565 . 6_556 64.04(10) ?
Fe1 Mo2 Mo2 10_565 . 4_566 97.1(12) ?
Fe1 Mo2 Mo2 10_565 . 6_546 116.11(18) ?
Fe1 Mo2 Mo2 10_565 . 6_556 59.60(12) ?
Fe1 Mo2 Mo2 10_565 . 7_555 118.26(17) ?
Fe1 Mo2 Mo2 10_565 . 7_565 61.74(13) ?
Fe1 Mo2 As1 10_565 . . 170.04(18) ?
Fe1 Mo2 As1 10_565 . 4_566 57.02(9) ?
Fe1 Mo2 O3 10_565 . . 155.4(2) ?
Fe1 Mo2 O3 10_565 . 4_566 78.56(18) ?
Fe1 Mo2 O4a 10_565 . . 24.1(2) ?
Fe1 Mo2 O4a 10_565 . 4_566 114.9(3) ?
Fe1 Mo2 O4b 10_565 . . 22.2(2) ?
Fe1 Mo2 O4b 10_565 . 4_566 108.9(3) ?
Fe1 Mo2 O5 10_565 . . 101.7(2) ?
Fe1 Mo2 O5 10_565 . 4_566 84.8(2) ?
Fe1 Mo2 As2 10_565 . 6_556 64.73(15) ?
Fe1 Mo2 As2 10_565 . 7_555 64.37(14) ?

Fe1 Mo2 As3 10_565 . . 63.12(12) ?
Fe1 Mo2 As3 10_565 . 4_566 100.13(16) ?
Fe1 Mo2 As3 10_565 . 6_556 90.91(13) ?
Fe1 Mo2 As3 10_565 . 7_555 74.80(12) ?
Fe1 Mo2 Mg2 10_565 . 6_556 65.0(2) ?
Fe1 Mo2 Mg2 10_565 . 7_555 63.4(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 10_565 . 1_565 47.40(6) ?
Fe1 Mo2 Ca2 10_565 . 4_566 49.84(6) ?
Fe1 Mo2 Ca2 10_565 . 6_556 65.0(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 10_565 . 7_555 63.4(2) ?
Fe1 Mo2 Ca2 10_565 . 16_554 142.0(2) ?
Fe2 Mo2 Fe2 . . 6_546 60.0(7) ?
Fe2 Mo2 Fe2 . . 6_556 107.4(7) ?
Fe2 Mo2 Mo2 . . 4_566 63.6(11) ?
Fe2 Mo2 Mo2 . . 6_546 65.5(7) ?
Fe2 Mo2 Mo2 . . 6_556 113.5(7) ?
Fe2 Mo2 Mo2 . . 7_555 66.0(7) ?
Fe2 Mo2 Mo2 . . 7_565 114.0(7) ?
Fe2 Mo2 As1 . . . 55.4(7) ?
Fe2 Mo2 As1 . . 4_566 67.5(7) ?
Fe2 Mo2 O3 . . . 44.2(7) ?
Fe2 Mo2 O3 . . 4_566 41.8(6) ?
Fe2 Mo2 O4a . . . 115.4(9) ?
Fe2 Mo2 O4a . . 4_566 124.3(9) ?
Fe2 Mo2 O4b . . . 126.5(9) ?
Fe2 Mo2 O4b . . 4_566 124.7(8) ?
Fe2 Mo2 O5 . . . 56.8(7) ?
Fe2 Mo2 O5 . . 4_566 108.0(8) ?
Fe2 Mo2 As2 . . 6_556 155.2(8) ?
Fe2 Mo2 As2 . . 7_555 143.0(8) ?
Fe2 Mo2 As3 . . . 87.2(8) ?
Fe2 Mo2 As3 . . 4_566 134.2(9) ?
Fe2 Mo2 As3 . . 6_556 133.9(8) ?
Fe2 Mo2 As3 . . 7_555 81.9(7) ?
Fe2 Mo2 Mg2 . . 6_556 152.0(8) ?
Fe2 Mo2 Mg2 . . 7_555 148.3(8) ?
Fe2 Mo2 Ca2 . . 1_565 154.1(8) ?
Fe2 Mo2 Ca2 . . 4_566 156.3(8) ?
Fe2 Mo2 Ca2 . . 6_556 152.0(8) ?
Fe2 Mo2 Ca2 . . 7_555 148.3(8) ?
Fe2 Mo2 Ca2 . . 16_554 97.8(8) ?
Fe2 Mo2 Fe2 6_546 . 6_556 167.43(19) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_546 . 4_566 23.4(11) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_546 . 6_546 6.00(10) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_546 . 6_556 173.09(19) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_546 . 7_555 5.98(10) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_546 . 7_565 174.0(2) ?
Fe2 Mo2 As1 6_546 . . 51.63(8) ?
Fe2 Mo2 As1 6_546 . 4_566 115.17(15) ?
Fe2 Mo2 O3 6_546 . . 68.43(15) ?
Fe2 Mo2 O3 6_546 . 4_566 92.61(18) ?
Fe2 Mo2 O4a 6_546 . . 97.6(3) ?
Fe2 Mo2 O4a 6_546 . 4_566 77.4(3) ?
Fe2 Mo2 O4b 6_546 . . 105.2(3) ?

Fe2 Mo2 04b 6_546 . 4_566 71.2(3) ?
Fe2 Mo2 05 6_546 . . 20.91(13) ?
Fe2 Mo2 05 6_546 . 4_566 155.0(3) ?
Fe2 Mo2 As2 6_546 . 6_556 96.84(17) ?
Fe2 Mo2 As2 6_546 . 7_555 86.62(16) ?
Fe2 Mo2 As3 6_546 . . 56.95(10) ?
Fe2 Mo2 As3 6_546 . 4_566 123.40(19) ?
Fe2 Mo2 As3 6_546 . 6_556 137.19(18) ?
Fe2 Mo2 As3 6_546 . 7_555 45.34(8) ?
Fe2 Mo2 Mg2 6_546 . 6_556 94.0(4) ?
Fe2 Mo2 Mg2 6_546 . 7_555 91.5(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_546 . 1_565 142.9(2) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_546 . 4_566 141.9(2) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_546 . 6_556 94.0(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_546 . 7_555 91.5(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_546 . 16_554 89.7(2) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_556 . 4_566 154.0(13) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_556 . 6_546 172.5(2) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_556 . 6_556 6.57(11) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_556 . 7_555 173.41(19) ?
Fe2 Mo2 Mo2 6_556 . 7_565 6.59(11) ?
Fe2 Mo2 As1 6_556 . . 122.76(17) ?
Fe2 Mo2 As1 6_556 . 4_566 55.64(9) ?
Fe2 Mo2 03 6_556 . . 103.0(2) ?
Fe2 Mo2 03 6_556 . 4_566 76.26(17) ?
Fe2 Mo2 04a 6_556 . . 87.9(3) ?
Fe2 Mo2 04a 6_556 . 4_566 112.4(3) ?
Fe2 Mo2 04b 6_556 . . 81.9(3) ?
Fe2 Mo2 04b 6_556 . 4_566 119.8(3) ?
Fe2 Mo2 05 6_556 . . 153.0(3) ?
Fe2 Mo2 05 6_556 . 4_566 23.02(16) ?
Fe2 Mo2 As2 6_556 . 6_556 95.55(18) ?
Fe2 Mo2 As2 6_556 . 7_555 105.41(18) ?
Fe2 Mo2 As3 6_556 . . 126.04(19) ?
Fe2 Mo2 As3 6_556 . 4_566 64.44(12) ?
Fe2 Mo2 As3 6_556 . 6_556 50.66(9) ?
Fe2 Mo2 As3 6_556 . 7_555 137.62(18) ?
Fe2 Mo2 Mg2 6_556 . 6_556 98.3(4) ?
Fe2 Mo2 Mg2 6_556 . 7_555 100.7(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_556 . 1_565 49.3(2) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_556 . 4_566 50.5(2) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_556 . 6_556 98.3(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 100.7(4) ?
Fe2 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 92.3(3) ?
Mo2 Mo2 Mo2 4_566 . 6_546 21.4(11) ?
Mo2 Mo2 Mo2 4_566 . 6_556 153.6(13) ?
Mo2 Mo2 Mo2 4_566 . 7_555 23.9(11) ?
Mo2 Mo2 Mo2 4_566 . 7_565 156.1(13) ?
Mo2 Mo2 As1 4_566 . . 74.0(11) ?
Mo2 Mo2 As1 4_566 . 4_566 99.6(12) ?
Mo2 Mo2 03 4_566 . . 87.1(11) ?
Mo2 Mo2 03 4_566 . 4_566 82.7(11) ?
Mo2 Mo2 04a 4_566 . . 75.9(12) ?
Mo2 Mo2 04a 4_566 . 4_566 91.4(12) ?

Mo2 Mo2 04b 4_566 . . 85.1(12) ?
Mo2 Mo2 04b 4_566 . 4_566 82.1(11) ?
Mo2 Mo2 05 4_566 . . 7.1(10) ?
Mo2 Mo2 05 4_566 . 4_566 171.4(12) ?
Mo2 Mo2 As2 4_566 . 6_556 91.6(11) ?
Mo2 Mo2 As2 4_566 . 7_555 79.5(11) ?
Mo2 Mo2 As3 4_566 . . 34.8(11) ?
Mo2 Mo2 As3 4_566 . 4_566 140.1(12) ?
Mo2 Mo2 As3 4_566 . 6_556 153.1(12) ?
Mo2 Mo2 As3 4_566 . 7_555 23.9(11) ?
Mo2 Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 88.5(11) ?
Mo2 Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 84.8(11) ?
Mo2 Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 130.9(11) ?
Mo2 Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 131.3(11) ?
Mo2 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 88.5(11) ?
Mo2 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 84.8(11) ?
Mo2 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 112.7(12) ?
Mo2 Mo2 Mo2 6_546 . 6_556 175.0(2) ?
Mo2 Mo2 Mo2 6_546 . 7_555 2.48(13) ?
Mo2 Mo2 Mo2 6_546 . 7_565 177.5(2) ?
Mo2 Mo2 As1 6_546 . . 56.08(12) ?
Mo2 Mo2 As1 6_546 . 4_566 117.61(18) ?
Mo2 Mo2 03 6_546 . . 73.90(18) ?
Mo2 Mo2 03 6_546 . 4_566 96.4(2) ?
Mo2 Mo2 04a 6_546 . . 93.0(3) ?
Mo2 Mo2 04a 6_546 . 4_566 74.6(3) ?
Mo2 Mo2 04b 6_546 . . 100.2(3) ?
Mo2 Mo2 04b 6_546 . 4_566 67.5(3) ?
Mo2 Mo2 05 6_546 . . 20.83(15) ?
Mo2 Mo2 05 6_546 . 4_566 159.0(3) ?
Mo2 Mo2 As2 6_546 . 6_556 91.02(18) ?
Mo2 Mo2 As2 6_546 . 7_555 80.66(17) ?
Mo2 Mo2 As3 6_546 . . 53.07(13) ?
Mo2 Mo2 As3 6_546 . 4_566 122.0(2) ?
Mo2 Mo2 As3 6_546 . 6_556 135.8(2) ?
Mo2 Mo2 As3 6_546 . 7_555 41.36(11) ?
Mo2 Mo2 Mg2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mo2 Mg2 6_546 . 7_555 85.5(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_546 . 1_565 136.9(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_546 . 4_566 136.0(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_546 . 7_555 85.5(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_546 . 16_554 91.2(3) ?
Mo2 Mo2 Mo2 6_556 . 7_555 177.5(2) ?
Mo2 Mo2 Mo2 6_556 . 7_565 2.48(14) ?
Mo2 Mo2 As1 6_556 . . 127.85(18) ?
Mo2 Mo2 As1 6_556 . 4_566 58.36(12) ?
Mo2 Mo2 03 6_556 . . 109.0(2) ?
Mo2 Mo2 03 6_556 . 4_566 80.52(18) ?
Mo2 Mo2 04a 6_556 . . 83.0(3) ?
Mo2 Mo2 04a 6_556 . 4_566 109.2(3) ?
Mo2 Mo2 04b 6_556 . . 76.4(3) ?
Mo2 Mo2 04b 6_556 . 4_566 115.6(3) ?
Mo2 Mo2 05 6_556 . . 154.4(3) ?

Mo2 Mo2 05 6_556 . 4_566 25.62(19) ?
Mo2 Mo2 As2 6_556 . 6_556 89.13(18) ?
Mo2 Mo2 As2 6_556 . 7_555 98.86(18) ?
Mo2 Mo2 As3 6_556 . . 122.4(2) ?
Mo2 Mo2 As3 6_556 . 4_566 62.42(14) ?
Mo2 Mo2 As3 6_556 . 6_556 48.57(12) ?
Mo2 Mo2 As3 6_556 . 7_555 134.2(2) ?
Mo2 Mo2 Mg2 6_556 . 6_556 91.9(4) ?
Mo2 Mo2 Mg2 6_556 . 7_555 94.2(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_556 . 1_565 42.8(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_556 . 4_566 44.1(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_556 . 6_556 91.9(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 94.2(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 93.7(3) ?
Mo2 Mo2 Mo2 7_555 . 7_565 180.0(5) ?
Mo2 Mo2 As1 7_555 . . 54.10(11) ?
Mo2 Mo2 As1 7_555 . 4_566 119.63(17) ?
Mo2 Mo2 03 7_555 . . 72.45(17) ?
Mo2 Mo2 03 7_555 . 4_566 97.92(19) ?
Mo2 Mo2 04a 7_555 . . 95.0(3) ?
Mo2 Mo2 04a 7_555 . 4_566 72.7(3) ?
Mo2 Mo2 04b 7_555 . . 101.9(3) ?
Mo2 Mo2 04b 7_555 . 4_566 65.9(3) ?
Mo2 Mo2 05 7_555 . . 23.19(15) ?
Mo2 Mo2 05 7_555 . 4_566 156.7(3) ?
Mo2 Mo2 As2 7_555 . 6_556 90.95(17) ?
Mo2 Mo2 As2 7_555 . 7_555 80.89(16) ?
Mo2 Mo2 As3 7_555 . . 55.30(12) ?
Mo2 Mo2 As3 7_555 . 4_566 119.8(2) ?
Mo2 Mo2 As3 7_555 . 6_556 133.65(19) ?
Mo2 Mo2 As3 7_555 . 7_555 43.59(11) ?
Mo2 Mo2 Mg2 7_555 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mo2 Mg2 7_555 . 7_555 85.7(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_555 . 1_565 137.1(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_555 . 4_566 136.0(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_555 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_555 . 7_555 85.7(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_555 . 16_554 88.8(3) ?
Mo2 Mo2 As1 7_565 . . 125.9(2) ?
Mo2 Mo2 As1 7_565 . 4_566 60.37(13) ?
Mo2 Mo2 03 7_565 . . 107.6(2) ?
Mo2 Mo2 03 7_565 . 4_566 82.08(19) ?
Mo2 Mo2 04a 7_565 . . 85.0(3) ?
Mo2 Mo2 04a 7_565 . 4_566 107.3(3) ?
Mo2 Mo2 04b 7_565 . . 78.1(3) ?
Mo2 Mo2 04b 7_565 . 4_566 114.1(3) ?
Mo2 Mo2 05 7_565 . . 156.8(3) ?
Mo2 Mo2 05 7_565 . 4_566 23.29(19) ?
Mo2 Mo2 As2 7_565 . 6_556 89.05(18) ?
Mo2 Mo2 As2 7_565 . 7_555 99.11(19) ?
Mo2 Mo2 As3 7_565 . . 124.7(2) ?
Mo2 Mo2 As3 7_565 . 4_566 60.21(15) ?
Mo2 Mo2 As3 7_565 . 6_556 46.35(13) ?
Mo2 Mo2 As3 7_565 . 7_555 136.4(2) ?

Mo2 Mo2 Mg2 7_565 . 6_556 91.9(4) ?
Mo2 Mo2 Mg2 7_565 . 7_555 94.3(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_565 . 1_565 42.9(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_565 . 4_566 44.0(2) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_565 . 6_556 91.9(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_565 . 7_555 94.3(4) ?
Mo2 Mo2 Ca2 7_565 . 16_554 91.2(3) ?
As1 Mo2 As1 . . 4_566 119.22(15) ?
As1 Mo2 O3 . . . 23.50(10) ?
As1 Mo2 O3 . . 4_566 95.62(18) ?
As1 Mo2 O4a . . . 149.1(3) ?
As1 Mo2 O4a . . 4_566 70.5(3) ?
As1 Mo2 O4b . . . 154.8(3) ?
As1 Mo2 O4b . . 4_566 74.8(3) ?
As1 Mo2 O5 . . . 69.02(17) ?
As1 Mo2 O5 . . 4_566 103.4(3) ?
As1 Mo2 As2 . . 6_556 119.0(2) ?
As1 Mo2 As2 . . 7_555 117.1(2) ?
As1 Mo2 As3 . . . 108.47(15) ?
As1 Mo2 As3 . . 4_566 89.68(17) ?
As1 Mo2 As3 . . 6_556 99.04(17) ?
As1 Mo2 As3 . . 7_555 96.95(13) ?
As1 Mo2 Mg2 . . 6_556 118.2(3) ?
As1 Mo2 Mg2 . . 7_555 119.0(3) ?
As1 Mo2 Ca2 . . 1_565 142.28(16) ?
As1 Mo2 Ca2 . . 4_566 139.76(16) ?
As1 Mo2 Ca2 . . 6_556 118.2(3) ?
As1 Mo2 Ca2 . . 7_555 119.0(3) ?
As1 Mo2 Ca2 . . 16_554 47.8(2) ?
As1 Mo2 O3 4_566 . . 98.38(19) ?
As1 Mo2 O3 4_566 . 4_566 25.95(10) ?
As1 Mo2 O4a 4_566 . . 72.6(3) ?
As1 Mo2 O4a 4_566 . 4_566 167.0(3) ?
As1 Mo2 O4b 4_566 . . 77.4(3) ?
As1 Mo2 O4b 4_566 . 4_566 165.9(3) ?
As1 Mo2 O5 4_566 . . 97.4(2) ?
As1 Mo2 O5 4_566 . 4_566 74.4(2) ?
As1 Mo2 As2 4_566 . 6_556 121.5(2) ?
As1 Mo2 As2 4_566 . 7_555 120.8(2) ?
As1 Mo2 As3 4_566 . . 86.45(16) ?
As1 Mo2 As3 4_566 . 4_566 120.01(18) ?
As1 Mo2 As3 4_566 . 6_556 106.29(15) ?
As1 Mo2 As3 4_566 . 7_555 94.02(15) ?
As1 Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 122.0(3) ?
As1 Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 120.4(2) ?
As1 Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 87.55(16) ?
As1 Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 90.09(17) ?
As1 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 122.0(3) ?
As1 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 120.4(2) ?
As1 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 133.9(2) ?
O3 Mo2 O3 . . 4_566 78.0(2) ?
O3 Mo2 O4a . . . 158.9(4) ?
O3 Mo2 O4a . . 4_566 89.1(3) ?
O3 Mo2 O4b . . . 170.3(4) ?

03 Mo2 04b . . 4_566 95.7(3) ?
03 Mo2 05 . . . 80.7(2) ?
03 Mo2 05 . . 4_566 87.7(3) ?
03 Mo2 As2 . . 6_556 139.6(3) ?
03 Mo2 As2 . . 7_555 140.0(3) ?
03 Mo2 As3 . . . 120.9(2) ?
03 Mo2 As3 . . 4_566 91.7(2) ?
03 Mo2 As3 . . 6_556 96.2(2) ?
03 Mo2 As3 . . 7_555 110.9(2) ?
03 Mo2 Mg2 . . 6_556 139.5(3) ?
03 Mo2 Mg2 . . 7_555 141.2(3) ?
03 Mo2 Ca2 . . 1_565 140.2(2) ?
03 Mo2 Ca2 . . 4_566 138.8(2) ?
03 Mo2 Ca2 . . 6_556 139.5(3) ?
03 Mo2 Ca2 . . 7_555 141.2(3) ?
03 Mo2 Ca2 . . 16_554 53.65(19) ?
03 Mo2 04a 4_566 . . 87.3(3) ?
03 Mo2 04a 4_566 . 4_566 166.0(4) ?
03 Mo2 04b 4_566 . . 95.4(4) ?
03 Mo2 04b 4_566 . 4_566 163.8(4) ?
03 Mo2 05 4_566 . . 78.5(2) ?
03 Mo2 05 4_566 . 4_566 89.5(3) ?
03 Mo2 As2 4_566 . 6_556 141.9(3) ?
03 Mo2 As2 4_566 . 7_555 136.0(3) ?
03 Mo2 As3 4_566 . . 83.5(2) ?
03 Mo2 As3 4_566 . 4_566 135.9(2) ?
03 Mo2 As3 4_566 . 6_556 124.1(2) ?
03 Mo2 As3 4_566 . 7_555 86.52(19) ?
03 Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 141.1(3) ?
03 Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 137.9(3) ?
03 Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 113.5(2) ?
03 Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 116.0(2) ?
03 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 141.1(3) ?
03 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 137.9(3) ?
03 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 126.5(2) ?
04a Mo2 04a . . 4_566 103.6(4) ?
04a Mo2 04b . . . 11.5(3) ?
04a Mo2 04b . . 4_566 94.4(4) ?
04a Mo2 05 . . . 81.6(3) ?
04a Mo2 05 . . 4_566 107.4(4) ?
04a Mo2 As2 . . 6_556 54.9(3) ?
04a Mo2 As2 . . 7_555 49.5(3) ?
04a Mo2 As3 . . . 41.2(3) ?
04a Mo2 As3 . . 4_566 109.4(3) ?
04a Mo2 As3 . . 6_556 104.7(3) ?
04a Mo2 As3 . . 7_555 52.4(3) ?
04a Mo2 Mg2 . . 6_556 53.8(3) ?
04a Mo2 Mg2 . . 7_555 50.7(3) ?
04a Mo2 Ca2 . . 1_565 59.9(3) ?
04a Mo2 Ca2 . . 4_566 61.6(3) ?
04a Mo2 Ca2 . . 6_556 53.8(3) ?
04a Mo2 Ca2 . . 7_555 50.7(3) ?
04a Mo2 Ca2 . . 16_554 145.2(3) ?
04a Mo2 04b 4_566 . . 96.7(4) ?

04a Mo2 04b 4_566 . 4_566 11.6(3) ?
04a Mo2 05 4_566 . . 94.2(3) ?
04a Mo2 05 4_566 . 4_566 95.4(4) ?
04a Mo2 As2 4_566 . 6_556 50.6(3) ?
04a Mo2 As2 4_566 . 7_555 54.2(3) ?
04a Mo2 As3 4_566 . . 98.8(3) ?
04a Mo2 As3 4_566 . 4_566 48.7(3) ?
04a Mo2 As3 4_566 . 6_556 62.1(3) ?
04a Mo2 As3 4_566 . 7_555 93.2(3) ?
04a Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 50.8(3) ?
04a Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 53.3(3) ?
04a Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 80.0(3) ?
04a Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 77.4(3) ?
04a Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 50.8(3) ?
04a Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 53.3(3) ?
04a Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 44.8(3) ?
04b Mo2 04b . . 4_566 88.9(4) ?
04b Mo2 05 . . . 91.1(3) ?
04b Mo2 05 . . 4_566 99.3(4) ?
04b Mo2 As2 . . 6_556 46.5(3) ?
04b Mo2 As2 . . 7_555 43.4(3) ?
04b Mo2 As3 . . . 50.6(3) ?
04b Mo2 As3 . . 4_566 98.0(3) ?
04b Mo2 As3 . . 6_556 93.4(3) ?
04b Mo2 As3 . . 7_555 61.2(3) ?
04b Mo2 Mg2 . . 6_556 45.9(3) ?
04b Mo2 Mg2 . . 7_555 43.4(3) ?
04b Mo2 Ca2 . . 1_565 48.9(3) ?
04b Mo2 Ca2 . . 4_566 50.5(3) ?
04b Mo2 Ca2 . . 6_556 45.9(3) ?
04b Mo2 Ca2 . . 7_555 43.4(3) ?
04b Mo2 Ca2 . . 16_554 135.1(3) ?
04b Mo2 05 4_566 . . 85.8(3) ?
04b Mo2 05 4_566 . 4_566 105.2(4) ?
04b Mo2 As2 4_566 . 6_556 44.4(3) ?
04b Mo2 As2 4_566 . 7_555 45.5(3) ?
04b Mo2 As3 4_566 . . 87.2(3) ?
04b Mo2 As3 4_566 . 4_566 58.3(3) ?
04b Mo2 As3 4_566 . 6_556 71.0(3) ?
04b Mo2 As3 4_566 . 7_555 81.9(3) ?
04b Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 43.9(3) ?
04b Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 45.7(3) ?
04b Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 81.0(3) ?
04b Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 78.6(3) ?
04b Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 43.9(3) ?
04b Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 45.7(3) ?
04b Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 55.8(3) ?
05 Mo2 05 . . 4_566 164.8(3) ?
05 Mo2 As2 . . 6_556 98.4(2) ?
05 Mo2 As2 . . 7_555 86.4(2) ?
05 Mo2 As3 . . . 40.56(14) ?
05 Mo2 As3 . . 4_566 142.5(3) ?
05 Mo2 As3 . . 6_556 156.3(3) ?
05 Mo2 As3 . . 7_555 30.22(13) ?

05 Mo2 Mg2 . . 6_556 95.3(4) ?
05 Mo2 Mg2 . . 7_555 91.6(4) ?
05 Mo2 Ca2 . . 1_565 137.8(3) ?
05 Mo2 Ca2 . . 4_566 138.2(3) ?
05 Mo2 Ca2 . . 6_556 95.3(4) ?
05 Mo2 Ca2 . . 7_555 91.6(4) ?
05 Mo2 Ca2 . . 16_554 110.5(3) ?
05 Mo2 As2 4_566 . 6_556 96.8(3) ?
05 Mo2 As2 4_566 . 7_555 108.8(3) ?
05 Mo2 As3 4_566 . . 147.9(3) ?
05 Mo2 As3 4_566 . 4_566 46.95(18) ?
05 Mo2 As3 4_566 . 6_556 34.65(17) ?
05 Mo2 As3 4_566 . 7_555 159.6(3) ?
05 Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 99.9(4) ?
05 Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 103.5(4) ?
05 Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 55.9(2) ?
05 Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 55.8(2) ?
05 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 99.9(4) ?
05 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 103.5(4) ?
05 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 69.3(3) ?
As2 Mo2 As2 6_556 . 7_555 12.40(11) ?
As2 Mo2 As3 6_556 . . 71.35(16) ?
As2 Mo2 As3 6_556 . 4_566 64.57(16) ?
As2 Mo2 As3 6_556 . 6_556 68.74(15) ?
As2 Mo2 As3 6_556 . 7_555 74.68(16) ?
As2 Mo2 Mg2 6_556 . 6_556 3.2(3) ?
As2 Mo2 Mg2 6_556 . 7_555 7.3(3) ?
As2 Mo2 Ca2 6_556 . 1_565 46.4(2) ?
As2 Mo2 Ca2 6_556 . 4_566 45.1(2) ?
As2 Mo2 Ca2 6_556 . 6_556 3.2(3) ?
As2 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 7.3(3) ?
As2 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 90.5(2) ?
As2 Mo2 As3 7_555 . . 59.54(15) ?
As2 Mo2 As3 7_555 . 4_566 76.18(18) ?
As2 Mo2 As3 7_555 . 6_556 81.05(17) ?
As2 Mo2 As3 7_555 . 7_555 62.34(14) ?
As2 Mo2 Mg2 7_555 . 6_556 9.3(3) ?
As2 Mo2 Mg2 7_555 . 7_555 5.3(3) ?
As2 Mo2 Ca2 7_555 . 1_565 56.3(2) ?
As2 Mo2 Ca2 7_555 . 4_566 55.4(2) ?
As2 Mo2 Ca2 7_555 . 6_556 9.3(3) ?
As2 Mo2 Ca2 7_555 . 7_555 5.3(3) ?
As2 Mo2 Ca2 7_555 . 16_554 97.5(2) ?
As3 Mo2 As3 . . 4_566 135.7(2) ?
As3 Mo2 As3 . . 6_556 138.9(2) ?
As3 Mo2 As3 . . 7_555 11.71(5) ?
As3 Mo2 Mg2 . . 6_556 68.5(2) ?
As3 Mo2 Mg2 . . 7_555 64.2(2) ?
As3 Mo2 Ca2 . . 1_565 98.59(18) ?
As3 Mo2 Ca2 . . 4_566 99.67(18) ?
As3 Mo2 Ca2 . . 6_556 68.5(2) ?
As3 Mo2 Ca2 . . 7_555 64.2(2) ?
As3 Mo2 Ca2 . . 16_554 138.0(3) ?
As3 Mo2 As3 4_566 . 6_556 13.86(6) ?

As3 Mo2 As3 4_566 . 7_555 136.3(2) ?
 As3 Mo2 Mg2 4_566 . 6_556 67.3(2) ?
 As3 Mo2 Mg2 4_566 . 7_555 71.6(2) ?
 As3 Mo2 Ca2 4_566 . 1_565 52.79(10) ?
 As3 Mo2 Ca2 4_566 . 4_566 50.43(10) ?
 As3 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 67.3(2) ?
 As3 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 71.6(2) ?
 As3 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 41.9(2) ?
 As3 Mo2 As3 6_556 . 7_555 143.38(19) ?
 As3 Mo2 Mg2 6_556 . 6_556 71.8(3) ?
 As3 Mo2 Mg2 6_556 . 7_555 76.0(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 6_556 . 1_565 45.05(10) ?
 As3 Mo2 Ca2 6_556 . 4_566 43.14(10) ?
 As3 Mo2 Ca2 6_556 . 6_556 71.8(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 76.0(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 52.1(2) ?
 As3 Mo2 Mg2 7_555 . 6_556 71.6(3) ?
 As3 Mo2 Mg2 7_555 . 7_555 67.4(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 7_555 . 1_565 107.83(19) ?
 As3 Mo2 Ca2 7_555 . 4_566 108.57(19) ?
 As3 Mo2 Ca2 7_555 . 6_556 71.6(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 7_555 . 7_555 67.4(3) ?
 As3 Mo2 Ca2 7_555 . 16_554 128.2(3) ?
 Mg2 Mo2 Mg2 6_556 . 7_555 4.3(3) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 6_556 . 1_565 49.1(4) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 6_556 . 4_566 47.9(4) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 4.3(3) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 91.86(16) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 7_555 . 1_565 51.5(4) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 7_555 . 4_566 50.4(4) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 7_555 . 6_556 4.3(3) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
 Mg2 Mo2 Ca2 7_555 . 16_554 95.37(16) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 1_565 . 4_566 2.71(10) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 1_565 . 6_556 49.1(4) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 1_565 . 7_555 51.5(4) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 1_565 . 16_554 94.6(2) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 4_566 . 6_556 47.9(4) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 4_566 . 7_555 50.4(4) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 4_566 . 16_554 92.2(2) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 6_556 . 7_555 4.3(3) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 6_556 . 16_554 91.86(16) ?
 Ca2 Mo2 Ca2 7_555 . 16_554 95.37(16) ?
 Fe1 As1 Fe2 . . . 70.05(7) ?
 Fe1 As1 Fe2 . . . 6_546 70.05(7) ?
 Fe1 As1 Mo2 . . . 64.21(9) ?
 Fe1 As1 Mo2 . . . 4_566 63.77(9) ?
 Fe1 As1 Mo2 . . . 6_546 63.77(9) ?
 Fe1 As1 Mo2 . . . 7_555 64.21(9) ?
 Fe1 As1 O1 . . . 139.59(16) ?
 Fe1 As1 O2 . . . 28.85(15) ?
 Fe1 As1 O3 . . . 93.18(9) ?
 Fe1 As1 O3 . . . 7_555 93.18(9) ?

Fe1 As1 Mg2 . . 10_554 61.62(15) ?
Fe1 As1 Mg2 . . 11_555 62.02(14) ?
Fe1 As1 Mg2 . . 13_555 62.02(14) ?
Fe1 As1 Mg2 . . 16_554 61.62(15) ?
Fe1 As1 Ca2 . . 10_554 61.62(15) ?
Fe1 As1 Ca2 . . 11_555 62.02(14) ?
Fe1 As1 Ca2 . . 13_555 62.02(14) ?
Fe1 As1 Ca2 . . 16_554 61.62(15) ?
Fe2 As1 Fe2 . . 6_546 69.84(3) ?
Fe2 As1 Mo2 . . . 6.51(11) ?
Fe2 As1 Mo2 . . 4_566 7.31(11) ?
Fe2 As1 Mo2 . . 6_546 64.80(9) ?
Fe2 As1 Mo2 . . 7_555 71.20(9) ?
Fe2 As1 O1 . . . 138.00(10) ?
Fe2 As1 O2 . . . 93.50(14) ?
Fe2 As1 O3 . . . 28.38(11) ?
Fe2 As1 O3 . . 7_555 92.76(11) ?
Fe2 As1 Mg2 . . 10_554 131.65(16) ?
Fe2 As1 Mg2 . . 11_555 131.77(17) ?
Fe2 As1 Mg2 . . 13_555 97.6(2) ?
Fe2 As1 Mg2 . . 16_554 94.2(2) ?
Fe2 As1 Ca2 . . 10_554 131.65(16) ?
Fe2 As1 Ca2 . . 11_555 131.77(17) ?
Fe2 As1 Ca2 . . 13_555 97.6(2) ?
Fe2 As1 Ca2 . . 16_554 94.2(2) ?
Fe2 As1 Mo2 6_546 . . 71.20(9) ?
Fe2 As1 Mo2 6_546 . 4_566 64.80(9) ?
Fe2 As1 Mo2 6_546 . 6_546 7.31(11) ?
Fe2 As1 Mo2 6_546 . 7_555 6.51(11) ?
Fe2 As1 O1 6_546 . . 138.00(10) ?
Fe2 As1 O2 6_546 . . 93.50(14) ?
Fe2 As1 O3 6_546 . . 92.76(11) ?
Fe2 As1 O3 6_546 . 7_555 28.38(11) ?
Fe2 As1 Mg2 6_546 . 10_554 94.2(2) ?
Fe2 As1 Mg2 6_546 . 11_555 97.6(2) ?
Fe2 As1 Mg2 6_546 . 13_555 131.77(17) ?
Fe2 As1 Mg2 6_546 . 16_554 131.65(16) ?
Fe2 As1 Ca2 6_546 . 10_554 94.2(2) ?
Fe2 As1 Ca2 6_546 . 11_555 97.6(2) ?
Fe2 As1 Ca2 6_546 . 13_555 131.77(17) ?
Fe2 As1 Ca2 6_546 . 16_554 131.65(16) ?
Mo2 As1 Mo2 . . 4_566 6.47(13) ?
Mo2 As1 Mo2 . . 6_546 65.56(12) ?
Mo2 As1 Mo2 . . 7_555 71.80(12) ?
Mo2 As1 O1 . . . 140.74(11) ?
Mo2 As1 O2 . . . 87.06(15) ?
Mo2 As1 O3 . . . 31.84(13) ?
Mo2 As1 O3 . . 7_555 95.79(14) ?
Mo2 As1 Mg2 . . 10_554 125.65(18) ?
Mo2 As1 Mg2 . . 11_555 125.58(19) ?
Mo2 As1 Mg2 . . 13_555 92.0(2) ?
Mo2 As1 Mg2 . . 16_554 88.7(2) ?
Mo2 As1 Ca2 . . 10_554 125.65(18) ?
Mo2 As1 Ca2 . . 11_555 125.58(19) ?

Mo2 As1 Ca2 . . 13_555 92.0(2) ?
Mo2 As1 Ca2 . . 16_554 88.7(2) ?
Mo2 As1 Mo2 4_566 . 6_546 59.27(13) ?
Mo2 As1 Mo2 4_566 . 7_555 65.56(12) ?
Mo2 As1 01 4_566 . . 145.26(12) ?
Mo2 As1 02 4_566 . . 88.51(16) ?
Mo2 As1 03 4_566 . . 35.64(13) ?
Mo2 As1 03 4_566 . 7_555 89.36(14) ?
Mo2 As1 Mg2 4_566 . 10_554 125.34(17) ?
Mo2 As1 Mg2 4_566 . 11_555 125.77(17) ?
Mo2 As1 Mg2 4_566 . 13_555 97.1(2) ?
Mo2 As1 Mg2 4_566 . 16_554 93.9(2) ?
Mo2 As1 Ca2 4_566 . 10_554 125.34(17) ?
Mo2 As1 Ca2 4_566 . 11_555 125.77(17) ?
Mo2 As1 Ca2 4_566 . 13_555 97.1(2) ?
Mo2 As1 Ca2 4_566 . 16_554 93.9(2) ?
Mo2 As1 Mo2 6_546 . 7_555 6.47(13) ?
Mo2 As1 01 6_546 . . 145.26(12) ?
Mo2 As1 02 6_546 . . 88.51(16) ?
Mo2 As1 03 6_546 . . 89.36(14) ?
Mo2 As1 03 6_546 . 7_555 35.64(13) ?
Mo2 As1 Mg2 6_546 . 10_554 93.9(2) ?
Mo2 As1 Mg2 6_546 . 11_555 97.1(2) ?
Mo2 As1 Mg2 6_546 . 13_555 125.77(17) ?
Mo2 As1 Mg2 6_546 . 16_554 125.34(17) ?
Mo2 As1 Ca2 6_546 . 10_554 93.9(2) ?
Mo2 As1 Ca2 6_546 . 11_555 97.1(2) ?
Mo2 As1 Ca2 6_546 . 13_555 125.77(17) ?
Mo2 As1 Ca2 6_546 . 16_554 125.34(17) ?
Mo2 As1 01 7_555 . . 140.74(11) ?
Mo2 As1 02 7_555 . . 87.06(15) ?
Mo2 As1 03 7_555 . . 95.79(14) ?
Mo2 As1 03 7_555 . 7_555 31.84(13) ?
Mo2 As1 Mg2 7_555 . 10_554 88.7(2) ?
Mo2 As1 Mg2 7_555 . 11_555 92.0(2) ?
Mo2 As1 Mg2 7_555 . 13_555 125.58(19) ?
Mo2 As1 Mg2 7_555 . 16_554 125.65(18) ?
Mo2 As1 Ca2 7_555 . 10_554 88.7(2) ?
Mo2 As1 Ca2 7_555 . 11_555 92.0(2) ?
Mo2 As1 Ca2 7_555 . 13_555 125.58(19) ?
Mo2 As1 Ca2 7_555 . 16_554 125.65(18) ?
01 As1 02 . . . 110.7(2) ?
01 As1 03 . . . 109.62(13) ?
01 As1 03 . . 7_555 109.62(13) ?
01 As1 Mg2 . . 10_554 84.27(18) ?
01 As1 Mg2 . . 11_555 82.59(18) ?
01 As1 Mg2 . . 13_555 82.59(18) ?
01 As1 Mg2 . . 16_554 84.27(18) ?
01 As1 Ca2 . . 10_554 84.27(18) ?
01 As1 Ca2 . . 11_555 82.59(18) ?
01 As1 Ca2 . . 13_555 82.59(18) ?
01 As1 Ca2 . . 16_554 84.27(18) ?
02 As1 03 . . . 109.27(12) ?
02 As1 03 . . 7_555 109.27(12) ?

02 As1 Mg2 . . 10_554 40.5(2) ?
02 As1 Mg2 . . 11_555 39.4(2) ?
02 As1 Mg2 . . 13_555 39.4(2) ?
02 As1 Mg2 . . 16_554 40.5(2) ?
02 As1 Ca2 . . 10_554 40.5(2) ?
02 As1 Ca2 . . 11_555 39.4(2) ?
02 As1 Ca2 . . 13_555 39.4(2) ?
02 As1 Ca2 . . 16_554 40.5(2) ?
03 As1 O3 . . 7_555 108.29(16) ?
03 As1 Mg2 . . 10_554 149.3(3) ?
03 As1 Mg2 . . 11_555 147.3(3) ?
03 As1 Mg2 . . 13_555 94.9(3) ?
03 As1 Mg2 . . 16_554 91.3(3) ?
03 As1 Ca2 . . 10_554 149.3(3) ?
03 As1 Ca2 . . 11_555 147.3(3) ?
03 As1 Ca2 . . 13_555 94.9(3) ?
03 As1 Ca2 . . 16_554 91.3(3) ?
03 As1 Mg2 7_555 . 10_554 91.3(3) ?
03 As1 Mg2 7_555 . 11_555 94.9(3) ?
03 As1 Mg2 7_555 . 13_555 147.3(3) ?
03 As1 Mg2 7_555 . 16_554 149.3(3) ?
03 As1 Ca2 7_555 . 10_554 91.3(3) ?
03 As1 Ca2 7_555 . 11_555 94.9(3) ?
03 As1 Ca2 7_555 . 13_555 147.3(3) ?
03 As1 Ca2 7_555 . 16_554 149.3(3) ?
Mg2 As1 Mg2 10_554 . 11_555 3.6(3) ?
Mg2 As1 Mg2 10_554 . 13_555 58.9(4) ?
Mg2 As1 Mg2 10_554 . 16_554 62.2(4) ?
Mg2 As1 Ca2 10_554 . 10_554 0.0(5) ?
Mg2 As1 Ca2 10_554 . 11_555 3.6(3) ?
Mg2 As1 Ca2 10_554 . 13_555 58.9(4) ?
Mg2 As1 Ca2 10_554 . 16_554 62.2(4) ?
Mg2 As1 Mg2 11_555 . 13_555 55.6(4) ?
Mg2 As1 Mg2 11_555 . 16_554 58.9(4) ?
Mg2 As1 Ca2 11_555 . 10_554 3.6(3) ?
Mg2 As1 Ca2 11_555 . 11_555 0.0(5) ?
Mg2 As1 Ca2 11_555 . 13_555 55.6(4) ?
Mg2 As1 Ca2 11_555 . 16_554 58.9(4) ?
Mg2 As1 Mg2 13_555 . 16_554 3.6(3) ?
Mg2 As1 Ca2 13_555 . 10_554 58.9(4) ?
Mg2 As1 Ca2 13_555 . 11_555 55.6(4) ?
Mg2 As1 Ca2 13_555 . 13_555 0.0(5) ?
Mg2 As1 Ca2 13_555 . 16_554 3.6(3) ?
Mg2 As1 Ca2 16_554 . 10_554 62.2(4) ?
Mg2 As1 Ca2 16_554 . 11_555 58.9(4) ?
Mg2 As1 Ca2 16_554 . 13_555 3.6(3) ?
Mg2 As1 Ca2 16_554 . 16_554 0.0(5) ?
Ca2 As1 Ca2 10_554 . 11_555 3.6(3) ?
Ca2 As1 Ca2 10_554 . 13_555 58.9(4) ?
Ca2 As1 Ca2 10_554 . 16_554 62.2(4) ?
Ca2 As1 Ca2 11_555 . 13_555 55.6(4) ?
Ca2 As1 Ca2 11_555 . 16_554 58.9(4) ?
Ca2 As1 Ca2 13_555 . 16_554 3.6(3) ?
Fe1 O2 As1 . . . 127.4(3) ?

Fe1 02 Mg2 . . 10_554 100.0(2) ?
 Fe1 02 Mg2 . . 11_555 101.2(2) ?
 Fe1 02 Mg2 . . 13_555 101.2(2) ?
 Fe1 02 Mg2 . . 16_554 100.0(2) ?
 Fe1 02 Ca2 . . 10_554 100.0(2) ?
 Fe1 02 Ca2 . . 11_555 101.2(2) ?
 Fe1 02 Ca2 . . 13_555 101.2(2) ?
 Fe1 02 Ca2 . . 16_554 100.0(2) ?
 As1 02 Mg2 . . 10_554 115.5(3) ?
 As1 02 Mg2 . . 11_555 117.7(3) ?
 As1 02 Mg2 . . 13_555 117.7(3) ?
 As1 02 Mg2 . . 16_554 115.5(3) ?
 As1 02 Ca2 . . 10_554 115.5(3) ?
 As1 02 Ca2 . . 11_555 117.7(3) ?
 As1 02 Ca2 . . 13_555 117.7(3) ?
 As1 02 Ca2 . . 16_554 115.5(3) ?
 Mg2 02 Mg2 10_554 . 11_555 5.2(4) ?
 Mg2 02 Mg2 10_554 . 13_555 86.4(4) ?
 Mg2 02 Mg2 10_554 . 16_554 91.6(4) ?
 Mg2 02 Ca2 10_554 . 10_554 0.0(5) ?
 Mg2 02 Ca2 10_554 . 11_555 5.2(4) ?
 Mg2 02 Ca2 10_554 . 13_555 86.4(4) ?
 Mg2 02 Ca2 10_554 . 16_554 91.6(4) ?
 Mg2 02 Mg2 11_555 . 13_555 81.2(5) ?
 Mg2 02 Mg2 11_555 . 16_554 86.4(4) ?
 Mg2 02 Ca2 11_555 . 10_554 5.2(4) ?
 Mg2 02 Ca2 11_555 . 11_555 0.0(5) ?
 Mg2 02 Ca2 11_555 . 13_555 81.2(5) ?
 Mg2 02 Ca2 11_555 . 16_554 86.4(4) ?
 Mg2 02 Mg2 13_555 . 16_554 5.2(4) ?
 Mg2 02 Ca2 13_555 . 10_554 86.4(4) ?
 Mg2 02 Ca2 13_555 . 11_555 81.2(5) ?
 Mg2 02 Ca2 13_555 . 13_555 0.0(5) ?
 Mg2 02 Ca2 13_555 . 16_554 5.2(4) ?
 Mg2 02 Ca2 16_554 . 10_554 91.6(4) ?
 Mg2 02 Ca2 16_554 . 11_555 86.4(4) ?
 Mg2 02 Ca2 16_554 . 13_555 5.2(4) ?
 Mg2 02 Ca2 16_554 . 16_554 0.0(5) ?
 Ca2 02 Ca2 10_554 . 11_555 5.2(4) ?
 Ca2 02 Ca2 10_554 . 13_555 86.4(4) ?
 Ca2 02 Ca2 10_554 . 16_554 91.6(4) ?
 Ca2 02 Ca2 11_555 . 13_555 81.2(5) ?
 Ca2 02 Ca2 11_555 . 16_554 86.4(4) ?
 Ca2 02 Ca2 13_555 . 16_554 5.2(4) ?
 Fe2 03 Mo2 . . . 9.27(17) ?
 Fe2 03 Mo2 . . 4_566 8.85(15) ?
 Fe2 03 As1 . . . 127.16(17) ?
 Mo2 03 Mo2 . . 4_566 10.18(19) ?
 Mo2 03 As1 . . . 124.7(2) ?
 Mo2 03 As1 4_566 . . 118.4(2) ?
 Fe1 04a Fe2 10_565 . . 135.3(4) ?
 Fe1 04a Mo2 10_565 . . 134.6(4) ?
 Fe1 04a Mo2 10_565 . 4_566 145.2(4) ?
 Fe1 04a 04b 10_565 . . 81.9(16) ?

Fe1 04a As2 10_565 . 6_556 109.1(3) ?
Fe1 04a As2 10_565 . 7_555 114.8(3) ?
Fe1 04a As3 10_565 . . 119.2(4) ?
Fe1 04a Mg2 10_565 . 6_556 102.0(4) ?
Fe1 04a Mg2 10_565 . 7_555 101.9(4) ?
Fe1 04a Ca2 10_565 . 6_556 102.0(4) ?
Fe1 04a Ca2 10_565 . 7_555 101.9(4) ?
Fe2 04a Mo2 . . . 11.43(19) ?
Fe2 04a Mo2 . . 4_566 10.44(19) ?
Fe2 04a 04b . . . 90.7(16) ?
Fe2 04a As2 . . 6_556 90.3(3) ?
Fe2 04a As2 . . 7_555 94.4(3) ?
Fe2 04a As3 . . . 93.0(3) ?
Fe2 04a Mg2 . . 6_556 103.4(3) ?
Fe2 04a Mg2 . . 7_555 106.5(3) ?
Fe2 04a Ca2 . . 6_556 103.4(3) ?
Fe2 04a Ca2 . . 7_555 106.5(3) ?
Mo2 04a Mo2 . . 4_566 12.7(2) ?
Mo2 04a 04b . . . 79.5(16) ?
Mo2 04a As2 . . 6_556 80.1(3) ?
Mo2 04a As2 . . 7_555 85.8(4) ?
Mo2 04a As3 . . . 100.2(4) ?
Mo2 04a Mg2 . . 6_556 93.6(4) ?
Mo2 04a Mg2 . . 7_555 97.1(4) ?
Mo2 04a Ca2 . . 6_556 93.6(4) ?
Mo2 04a Ca2 . . 7_555 97.1(4) ?
Mo2 04a 04b 4_566 . . 89.6(16) ?
Mo2 04a As2 4_566 . 6_556 83.0(4) ?
Mo2 04a As2 4_566 . 7_555 85.4(4) ?
Mo2 04a As3 4_566 . . 87.5(3) ?
Mo2 04a Mg2 4_566 . 6_556 95.4(4) ?
Mo2 04a Mg2 4_566 . 7_555 98.0(4) ?
Mo2 04a Ca2 4_566 . 6_556 95.4(4) ?
Mo2 04a Ca2 4_566 . 7_555 98.0(4) ?
04b 04a As2 . . 6_556 39.0(15) ?
04b 04a As2 . . 7_555 53.6(15) ?
04b 04a As3 . . . 142.4(17) ?
04b 04a Mg2 . . 6_556 45.3(15) ?
04b 04a Mg2 . . 7_555 50.0(15) ?
04b 04a Ca2 . . 6_556 45.3(15) ?
04b 04a Ca2 . . 7_555 50.0(15) ?
As2 04a As2 6_556 . 7_555 15.13(14) ?
As2 04a As3 6_556 . . 103.5(3) ?
As2 04a Mg2 6_556 . 6_556 13.98(15) ?
As2 04a Mg2 6_556 . 7_555 18.54(18) ?
As2 04a Ca2 6_556 . 6_556 13.98(15) ?
As2 04a Ca2 6_556 . 7_555 18.54(18) ?
As2 04a As3 7_555 . . 88.8(3) ?
As2 04a Mg2 7_555 . 6_556 13.1(4) ?
As2 04a Mg2 7_555 . 7_555 13.2(3) ?
As2 04a Ca2 7_555 . 6_556 13.1(4) ?
As2 04a Ca2 7_555 . 7_555 13.2(3) ?
As3 04a Mg2 . . 6_556 97.7(5) ?
As3 04a Mg2 . . 7_555 93.3(5) ?

As3 04a Ca2 . . 6_556 97.7(5) ?
As3 04a Ca2 . . 7_555 93.3(5) ?
Mg2 04a Mg2 6_556 . 7_555 5.1(4) ?
Mg2 04a Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 04a Ca2 6_556 . 7_555 5.1(4) ?
Mg2 04a Ca2 7_555 . 6_556 5.1(4) ?
Mg2 04a Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Ca2 04a Ca2 6_556 . 7_555 5.1(4) ?
Fe1 04b Fe2 10_565 . . 134.2(4) ?
Fe1 04b Mo2 10_565 . . 138.3(4) ?
Fe1 04b Mo2 10_565 . 4_566 143.9(4) ?
Fe1 04b 04a 10_565 . . 88.0(17) ?
Fe1 04b As2 10_565 . 6_556 122.0(4) ?
Fe1 04b As2 10_565 . 7_555 125.4(4) ?
Fe1 04b As3 10_565 . . 107.3(3) ?
Fe1 04b Mg2 10_565 . 6_556 111.2(4) ?
Fe1 04b Mg2 10_565 . 7_555 110.3(4) ?
Fe1 04b Ca2 10_565 . 6_556 111.2(4) ?
Fe1 04b Ca2 10_565 . 7_555 110.3(4) ?
Fe2 04b Mo2 . . . 10.0(2) ?
Fe2 04b Mo2 . . 4_566 10.21(18) ?
Fe2 04b 04a . . . 79.4(16) ?
Fe2 04b As2 . . 6_556 97.1(3) ?
Fe2 04b As2 . . 7_555 99.2(4) ?
Fe2 04b As3 . . . 84.0(3) ?
Fe2 04b Mg2 . . 6_556 110.9(4) ?
Fe2 04b Mg2 . . 7_555 113.4(4) ?
Fe2 04b Ca2 . . 6_556 110.9(4) ?
Fe2 04b Ca2 . . 7_555 113.4(4) ?
Mo2 04b Mo2 . . 4_566 12.8(2) ?
Mo2 04b 04a . . . 89.0(16) ?
Mo2 04b As2 . . 6_556 88.6(4) ?
Mo2 04b As2 . . 7_555 92.6(4) ?
Mo2 04b As3 . . . 90.8(3) ?
Mo2 04b Mg2 . . 6_556 102.9(4) ?
Mo2 04b Mg2 . . 7_555 106.0(4) ?
Mo2 04b Ca2 . . 6_556 102.9(4) ?
Mo2 04b Ca2 . . 7_555 106.0(4) ?
Mo2 04b 04a 4_566 . . 78.8(16) ?
Mo2 04b As2 4_566 . 6_556 90.2(4) ?
Mo2 04b As2 4_566 . 7_555 90.3(4) ?
Mo2 04b As3 4_566 . . 78.0(3) ?
Mo2 04b Mg2 4_566 . 6_556 103.2(4) ?
Mo2 04b Mg2 4_566 . 7_555 105.1(5) ?
Mo2 04b Ca2 4_566 . 6_556 103.2(4) ?
Mo2 04b Ca2 4_566 . 7_555 105.1(5) ?
04a 04b As2 . . 6_556 133.9(17) ?
04a 04b As2 . . 7_555 116.9(17) ?
04a 04b As3 . . . 31.9(15) ?
04a 04b Mg2 . . 6_556 128.7(17) ?
04a 04b Mg2 . . 7_555 123.4(17) ?
04a 04b Ca2 . . 6_556 128.7(17) ?
04a 04b Ca2 . . 7_555 123.4(17) ?
As2 04b As2 6_556 . 7_555 17.52(16) ?

As2 04b As3 6_556 . . 102.1(3) ?
As2 04b Mg2 6_556 . 6_556 14.90(16) ?
As2 04b Mg2 6_556 . 7_555 19.68(17) ?
As2 04b Ca2 6_556 . 6_556 14.90(16) ?
As2 04b Ca2 6_556 . 7_555 19.68(17) ?
As2 04b As3 7_555 . . 85.0(3) ?
As2 04b Mg2 7_555 . 6_556 16.3(4) ?
As2 04b Mg2 7_555 . 7_555 15.4(4) ?
As2 04b Ca2 7_555 . 6_556 16.3(4) ?
As2 04b Ca2 7_555 . 7_555 15.4(4) ?
As3 04b Mg2 . . 6_556 97.4(5) ?
As3 04b Mg2 . . 7_555 92.4(5) ?
As3 04b Ca2 . . 6_556 97.4(5) ?
As3 04b Ca2 . . 7_555 92.4(5) ?
Mg2 04b Mg2 6_556 . 7_555 5.8(4) ?
Mg2 04b Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 04b Ca2 6_556 . 7_555 5.8(4) ?
Mg2 04b Ca2 7_555 . 6_556 5.8(4) ?
Mg2 04b Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Ca2 04b Ca2 6_556 . 7_555 5.8(4) ?
Fe2 05 Fe2 . . 6_546 135.3(2) ?
Fe2 05 Mo2 . . . 10.72(18) ?
Fe2 05 Mo2 . . 4_566 12.2(2) ?
Fe2 05 Mo2 . . 6_546 136.2(3) ?
Fe2 05 Mo2 . . 7_555 135.9(3) ?
Fe2 05 As3 . . . 95.51(13) ?
Fe2 05 As3 . . 7_555 120.97(17) ?
Fe2 05 Mo2 6_546 . . 135.9(3) ?
Fe2 05 Mo2 6_546 . 4_566 136.2(3) ?
Fe2 05 Mo2 6_546 . 6_546 12.2(2) ?
Fe2 05 Mo2 6_546 . 7_555 10.72(18) ?
Fe2 05 As3 6_546 . . 120.97(17) ?
Fe2 05 As3 6_546 . 7_555 95.51(13) ?
Mo2 05 Mo2 . . 4_566 1.5(2) ?
Mo2 05 Mo2 . . 6_546 133.5(3) ?
Mo2 05 Mo2 . . 7_555 133.6(3) ?
Mo2 05 As3 . . . 88.28(17) ?
Mo2 05 As3 . . 7_555 112.7(2) ?
Mo2 05 Mo2 4_566 . 6_546 133.4(4) ?
Mo2 05 Mo2 4_566 . 7_555 133.5(3) ?
Mo2 05 As3 4_566 . . 87.0(2) ?
Mo2 05 As3 4_566 . 7_555 111.3(2) ?
Mo2 05 Mo2 6_546 . 7_555 1.5(2) ?
Mo2 05 As3 6_546 . . 111.3(2) ?
Mo2 05 As3 6_546 . 7_555 87.0(2) ?
Mo2 05 As3 7_555 . . 112.7(2) ?
Mo2 05 As3 7_555 . 7_555 88.28(17) ?
As3 05 As3 . . 7_555 26.15(9) ?
Fe1 As2 Fe1 . . 10_555 145.94(6) ?
Fe1 As2 Fe2 . . 6_546 73.26(6) ?
Fe1 As2 Mo2 . . 6_546 72.60(15) ?
Fe1 As2 Mo2 . . 7_555 73.92(15) ?
Fe1 As2 04a . . 6_546 34.9(2) ?
Fe1 As2 04a . . 7_555 116.2(2) ?

Fe1 As2 04b . . 6_546 30.6(2) ?
Fe1 As2 04b . . 7_555 117.6(2) ?
Fe1 As2 As2 . . 4_556 85.1(5) ?
Fe1 As2 As2 . . 7_555 60.84(9) ?
Fe1 As2 As3 . . . 92.25(8) ?
Fe1 As2 As3 . . 13_556 123.36(9) ?
Fe1 As2 As3 . . 6_546 62.94(7) ?
Fe1 As2 As3 . . 7_555 101.39(8) ?
Fe1 As2 06 . . . 88.5(3) ?
Fe1 As2 06 . . 4_556 89.9(2) ?
Fe1 As2 Mg2 . . . 108.0(7) ?
Fe1 As2 Mg2 . . 4_556 99.9(6) ?
Fe1 As2 Mg2 . . 6_546 118.62(10) ?
Fe1 As2 Mg2 . . 6_556 62.01(8) ?
Fe1 As2 Mg2 . . 7_545 121.53(10) ?
Fe1 As2 Mg2 . . 7_555 65.15(9) ?
Fe1 As2 Ca2 . . . 108.0(7) ?
Fe1 As2 Ca2 . . 4_556 99.9(6) ?
Fe1 As2 Ca2 . . 6_546 118.62(10) ?
Fe1 As2 Ca2 . . 6_556 62.01(8) ?
Fe1 As2 Ca2 . . 7_545 121.53(10) ?
Fe1 As2 Ca2 . . 7_555 65.15(9) ?
Fe1 As2 Fe2 10_555 . 6_546 73.30(6) ?
Fe1 As2 Mo2 10_555 . 6_546 74.44(15) ?
Fe1 As2 Mo2 10_555 . 7_555 72.19(14) ?
Fe1 As2 04a 10_555 . 6_546 111.9(2) ?
Fe1 As2 04a 10_555 . 7_555 33.4(2) ?
Fe1 As2 04b 10_555 . 6_546 115.5(2) ?
Fe1 As2 04b 10_555 . 7_555 29.3(2) ?
Fe1 As2 As2 10_555 . 4_556 85.6(5) ?
Fe1 As2 As2 10_555 . 7_555 128.37(13) ?
Fe1 As2 As3 10_555 . . 80.53(9) ?
Fe1 As2 As3 10_555 . 13_556 61.47(7) ?
Fe1 As2 As3 10_555 . 6_546 92.73(7) ?
Fe1 As2 As3 10_555 . 7_555 67.29(8) ?
Fe1 As2 06 10_555 . . 100.7(3) ?
Fe1 As2 06 10_555 . 4_556 80.6(2) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . . 102.3(9) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . 4_556 105.4(9) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . 6_546 60.15(9) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . 6_556 136.01(12) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . 7_545 57.26(8) ?
Fe1 As2 Mg2 10_555 . 7_555 132.93(12) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . . 102.3(9) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . 4_556 105.4(9) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . 6_546 60.15(9) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . 6_556 136.01(12) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . 7_545 57.26(8) ?
Fe1 As2 Ca2 10_555 . 7_555 132.93(12) ?
Fe2 As2 Mo2 6_546 . 6_546 3.68(12) ?
Fe2 As2 Mo2 6_546 . 7_555 5.27(12) ?
Fe2 As2 04a 6_546 . 6_546 44.1(2) ?
Fe2 As2 04a 6_546 . 7_555 44.0(2) ?
Fe2 As2 04b 6_546 . 6_546 44.7(2) ?

Fe2 As2 04b 6_546 . 7_555 44.4(2) ?
Fe2 As2 As2 6_546 . 4_556 84.6(3) ?
Fe2 As2 As2 6_546 . 7_555 94.37(7) ?
Fe2 As2 As3 6_546 . . 66.87(6) ?
Fe2 As2 As3 6_546 . 13_556 87.95(8) ?
Fe2 As2 As3 6_546 . 6_546 56.14(6) ?
Fe2 As2 As3 6_546 . 7_555 61.00(6) ?
Fe2 As2 06 6_546 . . 95.1(3) ?
Fe2 As2 06 6_546 . 4_556 84.4(2) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . . 163.8(12) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . 4_556 149.1(9) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . 6_546 97.50(15) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . 6_556 107.19(16) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . 7_545 97.27(15) ?
Fe2 As2 Mg2 6_546 . 7_555 107.95(17) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . . 163.8(12) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . 4_556 149.1(9) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . 6_546 97.50(15) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . 6_556 107.19(16) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . 7_545 97.27(15) ?
Fe2 As2 Ca2 6_546 . 7_555 107.95(17) ?
Mo2 As2 Mo2 6_546 . 7_555 8.94(17) ?
Mo2 As2 04a 6_546 . 6_546 45.0(2) ?
Mo2 As2 04a 6_546 . 7_555 44.0(3) ?
Mo2 As2 04b 6_546 . 6_546 44.9(3) ?
Mo2 As2 04b 6_546 . 7_555 45.3(3) ?
Mo2 As2 As2 6_546 . 4_556 88.2(3) ?
Mo2 As2 As2 6_546 . 7_555 90.95(14) ?
Mo2 As2 As3 6_546 . . 63.44(14) ?
Mo2 As2 As3 6_546 . 13_556 85.44(16) ?
Mo2 As2 As3 6_546 . 6_546 59.26(14) ?
Mo2 As2 As3 6_546 . 7_555 58.00(15) ?
Mo2 As2 06 6_546 . . 91.4(3) ?
Mo2 As2 06 6_546 . 4_556 88.1(2) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . . 167.4(12) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . 4_556 152.6(9) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . 6_546 101.02(19) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . 6_556 103.9(2) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . 7_545 100.72(19) ?
Mo2 As2 Mg2 6_546 . 7_555 104.6(2) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . . 167.4(12) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . 4_556 152.6(9) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . 6_546 101.02(19) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . 6_556 103.9(2) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . 7_545 100.72(19) ?
Mo2 As2 Ca2 6_546 . 7_555 104.6(2) ?
Mo2 As2 04a 7_555 . 6_546 42.9(2) ?
Mo2 As2 04a 7_555 . 7_555 44.8(3) ?
Mo2 As2 04b 7_555 . 6_546 44.3(3) ?
Mo2 As2 04b 7_555 . 7_555 43.9(3) ?
Mo2 As2 As2 7_555 . 4_556 79.4(3) ?
Mo2 As2 As2 7_555 . 7_555 99.11(14) ?
Mo2 As2 As3 7_555 . . 71.93(14) ?
Mo2 As2 As3 7_555 . 13_556 91.86(16) ?

Mo2 As2 As3 7_555 . 6_546 51.54(14) ?
Mo2 As2 As3 7_555 . 7_555 65.59(14) ?
Mo2 As2 06 7_555 . . 100.3(3) ?
Mo2 As2 06 7_555 . 4_556 79.2(2) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . . 158.5(12) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . 4_556 144.0(10) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . 6_546 92.59(19) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . 6_556 111.7(2) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . 7_545 92.47(19) ?
Mo2 As2 Mg2 7_555 . 7_555 112.6(2) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . . 158.5(12) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . 4_556 144.0(10) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . 6_546 92.59(19) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . 6_556 111.7(2) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . 7_545 92.47(19) ?
Mo2 As2 Ca2 7_555 . 7_555 112.6(2) ?
04a As2 04a 6_546 . 7_555 87.6(3) ?
04a As2 04b 6_546 . 6_546 7.1(3) ?
04a As2 04b 6_546 . 7_555 86.1(3) ?
04a As2 As2 6_546 . 4_556 67.8(5) ?
04a As2 As2 6_546 . 7_555 86.8(2) ?
04a As2 As3 6_546 . . 93.9(2) ?
04a As2 As3 6_546 . 13_556 124.8(2) ?
04a As2 As3 6_546 . 6_546 36.2(2) ?
04a As2 As3 6_546 . 7_555 95.5(2) ?
04a As2 06 6_546 . . 107.5(3) ?
04a As2 06 6_546 . 4_556 71.1(3) ?
04a As2 Mg2 6_546 . . 129.4(4) ?
04a As2 Mg2 6_546 . 4_556 115.3(4) ?
04a As2 Mg2 6_546 . 6_546 98.6(2) ?
04a As2 Mg2 6_546 . 6_556 92.8(2) ?
04a As2 Mg2 6_546 . 7_545 100.6(2) ?
04a As2 Mg2 6_546 . 7_555 95.5(2) ?
04a As2 Ca2 6_546 . . 129.4(4) ?
04a As2 Ca2 6_546 . 4_556 115.3(4) ?
04a As2 Ca2 6_546 . 6_546 98.6(2) ?
04a As2 Ca2 6_546 . 6_556 92.8(2) ?
04a As2 Ca2 6_546 . 7_545 100.6(2) ?
04a As2 Ca2 6_546 . 7_555 95.5(2) ?
04a As2 04b 7_555 . 6_546 88.7(3) ?
04a As2 04b 7_555 . 7_555 9.5(3) ?
04a As2 As2 7_555 . 4_556 97.1(5) ?
04a As2 As2 7_555 . 7_555 106.8(2) ?
04a As2 As3 7_555 . . 58.2(2) ?
04a As2 As3 7_555 . 13_556 57.0(2) ?
04a As2 As3 7_555 . 6_546 85.6(2) ?
04a As2 As3 7_555 . 7_555 44.9(2) ?
04a As2 06 7_555 . . 87.2(4) ?
04a As2 06 7_555 . 4_556 93.5(3) ?
04a As2 Mg2 7_555 . . 135.2(9) ?
04a As2 Mg2 7_555 . 4_556 138.3(10) ?
04a As2 Mg2 7_555 . 6_546 85.0(2) ?
04a As2 Mg2 7_555 . 6_556 119.4(3) ?
04a As2 Mg2 7_555 . 7_545 82.8(2) ?

04a As2 Mg2 7_555 . 7_555 117.6(3) ?
04a As2 Ca2 7_555 . . 135.2(9) ?
04a As2 Ca2 7_555 . 4_556 138.3(10) ?
04a As2 Ca2 7_555 . 6_546 85.0(2) ?
04a As2 Ca2 7_555 . 6_556 119.4(3) ?
04a As2 Ca2 7_555 . 7_545 82.8(2) ?
04a As2 Ca2 7_555 . 7_555 117.6(3) ?
04b As2 04b 6_546 . 7_555 88.2(3) ?
04b As2 As2 6_546 . 4_556 74.6(5) ?
04b As2 As2 6_546 . 7_555 79.8(3) ?
04b As2 As3 6_546 . . 88.4(2) ?
04b As2 As3 6_546 . 13_556 120.2(3) ?
04b As2 As3 6_546 . 6_546 43.3(2) ?
04b As2 As3 6_546 . 7_555 91.3(2) ?
04b As2 06 6_546 . . 100.5(4) ?
04b As2 06 6_546 . 4_556 78.1(3) ?
04b As2 Mg2 6_546 . . 131.5(4) ?
04b As2 Mg2 6_546 . 4_556 118.5(4) ?
04b As2 Mg2 6_546 . 6_546 105.7(3) ?
04b As2 Mg2 6_546 . 6_556 86.1(3) ?
04b As2 Mg2 6_546 . 7_545 107.7(3) ?
04b As2 Mg2 6_546 . 7_555 88.8(3) ?
04b As2 Ca2 6_546 . . 131.5(4) ?
04b As2 Ca2 6_546 . 4_556 118.5(4) ?
04b As2 Ca2 6_546 . 6_546 105.7(3) ?
04b As2 Ca2 6_546 . 6_556 86.1(3) ?
04b As2 Ca2 6_546 . 7_545 107.7(3) ?
04b As2 Ca2 6_546 . 7_555 88.8(3) ?
04b As2 As2 7_555 . 4_556 87.9(5) ?
04b As2 As2 7_555 . 7_555 116.0(3) ?
04b As2 As3 7_555 . . 67.7(3) ?
04b As2 As3 7_555 . 13_556 64.9(3) ?
04b As2 As3 7_555 . 6_546 78.8(3) ?
04b As2 As3 7_555 . 7_555 54.4(3) ?
04b As2 06 7_555 . . 96.6(4) ?
04b As2 06 7_555 . 4_556 84.1(3) ?
04b As2 Mg2 7_555 . . 131.2(11) ?
04b As2 Mg2 7_555 . 4_556 131.4(11) ?
04b As2 Mg2 7_555 . 6_546 76.1(3) ?
04b As2 Mg2 7_555 . 6_556 128.8(3) ?
04b As2 Mg2 7_555 . 7_545 74.0(3) ?
04b As2 Mg2 7_555 . 7_555 127.1(3) ?
04b As2 Ca2 7_555 . . 131.2(11) ?
04b As2 Ca2 7_555 . 4_556 131.4(11) ?
04b As2 Ca2 7_555 . 6_546 76.1(3) ?
04b As2 Ca2 7_555 . 6_556 128.8(3) ?
04b As2 Ca2 7_555 . 7_545 74.0(3) ?
04b As2 Ca2 7_555 . 7_555 127.1(3) ?
As2 As2 As2 4_556 . 7_555 144.3(6) ?
As2 As2 As3 4_556 . . 150.8(3) ?
As2 As2 As3 4_556 . 13_556 146.9(6) ?
As2 As2 As3 4_556 . 6_546 33.1(3) ?
As2 As2 As3 4_556 . 7_555 140.5(4) ?
As2 As2 06 4_556 . . 173.4(7) ?

As2 As2 O6 4_556 . 4_556 5.1(5) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . . 79.4(11) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . 4_556 64.6(10) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . 6_546 33.8(5) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . 6_556 138.3(6) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . 7_545 36.6(5) ?
As2 As2 Mg2 4_556 . 7_555 141.3(5) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . . 79.4(11) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . 4_556 64.6(10) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . 6_546 33.8(5) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . 6_556 138.3(6) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . 7_545 36.6(5) ?
As2 As2 Ca2 4_556 . 7_555 141.3(5) ?
As2 As2 As3 7_555 . . 49.50(8) ?
As2 As2 As3 7_555 . 13_556 68.31(10) ?
As2 As2 As3 7_555 . 6_546 121.98(12) ?
As2 As2 As3 7_555 . 7_555 63.18(9) ?
As2 As2 O6 7_555 . . 29.0(3) ?
As2 As2 O6 7_555 . 4_556 149.5(3) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . . 100.3(13) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . 4_556 108.7(12) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . 6_546 167.29(15) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . 6_556 13.74(15) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . 7_545 168.27(14) ?
As2 As2 Mg2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . . 100.3(13) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . 4_556 108.7(12) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . 6_546 167.29(15) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . 6_556 13.74(15) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . 7_545 168.27(14) ?
As2 As2 Ca2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As3 As2 As3 . . 13_556 32.76(6) ?
As3 As2 As3 . . 6_546 121.92(7) ?
As3 As2 As3 . . 7_555 13.68(5) ?
As3 As2 O6 . . . 31.0(3) ?
As3 As2 O6 . . 4_556 149.2(2) ?
As3 As2 Mg2 . . . 128.5(10) ?
As3 As2 Mg2 . . 4_556 144.0(9) ?
As3 As2 Mg2 . . 6_546 140.62(13) ?
As3 As2 Mg2 . . 6_556 61.31(12) ?
As3 As2 Mg2 . . 7_545 137.78(13) ?
As3 As2 Mg2 . . 7_555 59.40(13) ?
As3 As2 Ca2 . . . 128.5(10) ?
As3 As2 Ca2 . . 4_556 144.0(9) ?
As3 As2 Ca2 . . 6_546 140.62(13) ?
As3 As2 Ca2 . . 6_556 61.31(12) ?
As3 As2 Ca2 . . 7_545 137.78(13) ?
As3 As2 Ca2 . . 7_555 59.40(13) ?
As3 As2 As3 13_556 . 6_546 141.72(9) ?
As3 As2 As3 13_556 . 7_555 29.31(6) ?
As3 As2 O6 13_556 . . 39.5(3) ?
As3 As2 O6 13_556 . 4_556 141.9(2) ?
As3 As2 Mg2 13_556 . . 103.9(5) ?
As3 As2 Mg2 13_556 . 4_556 119.2(4) ?

As3 As2 Mg2 13_556 . 6_546 116.50(10) ?
As3 As2 Mg2 13_556 . 6_556 74.54(8) ?
As3 As2 Mg2 13_556 . 7_545 113.44(10) ?
As3 As2 Mg2 13_556 . 7_555 71.49(8) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . . 103.9(5) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . 4_556 119.2(4) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . 6_546 116.50(10) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . 6_556 74.54(8) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . 7_545 113.44(10) ?
As3 As2 Ca2 13_556 . 7_555 71.49(8) ?
As3 As2 As3 6_546 . 7_555 117.12(8) ?
As3 As2 O6 6_546 . . 143.1(3) ?
As3 As2 O6 6_546 . 4_556 35.6(2) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . . 109.3(9) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . 4_556 93.6(8) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . 6_546 62.45(10) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . 6_556 124.95(13) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . 7_545 64.50(10) ?
As3 As2 Mg2 6_546 . 7_555 128.09(13) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . . 109.3(9) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . 4_556 93.6(8) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . 6_546 62.45(10) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . 6_556 124.95(13) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . 7_545 64.50(10) ?
As3 As2 Ca2 6_546 . 7_555 128.09(13) ?
As3 As2 O6 7_555 . . 42.7(3) ?
As3 As2 O6 7_555 . 4_556 137.7(2) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . . 132.5(7) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . 4_556 148.2(5) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . 6_546 127.14(14) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . 6_556 74.85(13) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . 7_545 124.38(13) ?
As3 As2 Mg2 7_555 . 7_555 72.82(13) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . . 132.5(7) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . 4_556 148.2(5) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . 6_546 127.14(14) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . 6_556 74.85(13) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . 7_545 124.38(13) ?
As3 As2 Ca2 7_555 . 7_555 72.82(13) ?
O6 As2 O6 . . 4_556 178.4(4) ?
O6 As2 Mg2 . . . 101.1(12) ?
O6 As2 Mg2 . . 4_556 115.1(11) ?
O6 As2 Mg2 . . 6_546 152.4(3) ?
O6 As2 Mg2 . . 6_556 35.6(3) ?
O6 As2 Mg2 . . 7_545 149.7(3) ?
O6 As2 Mg2 . . 7_555 32.8(3) ?
O6 As2 Ca2 . . . 101.1(12) ?
O6 As2 Ca2 . . 4_556 115.1(11) ?
O6 As2 Ca2 . . 6_546 152.4(3) ?
O6 As2 Ca2 . . 6_556 35.6(3) ?
O6 As2 Ca2 . . 7_545 149.7(3) ?
O6 As2 Ca2 . . 7_555 32.8(3) ?
O6 As2 Mg2 4_556 . . 79.4(12) ?
O6 As2 Mg2 4_556 . 4_556 65.2(10) ?

06 As2 Mg2 4_556 . 6_546 29.1(2) ?
06 As2 Mg2 4_556 . 6_556 143.2(2) ?
06 As2 Mg2 4_556 . 7_545 31.8(2) ?
06 As2 Mg2 4_556 . 7_555 146.1(2) ?
06 As2 Ca2 4_556 . . 79.4(12) ?
06 As2 Ca2 4_556 . 4_556 65.2(10) ?
06 As2 Ca2 4_556 . 6_546 29.1(2) ?
06 As2 Ca2 4_556 . 6_556 143.2(2) ?
06 As2 Ca2 4_556 . 7_545 31.8(2) ?
06 As2 Ca2 4_556 . 7_555 146.1(2) ?
Mg2 As2 Mg2 . . 4_556 15.8(10) ?
Mg2 As2 Mg2 . . 6_546 67.4(13) ?
Mg2 As2 Mg2 . . 6_556 86.9(13) ?
Mg2 As2 Mg2 . . 7_545 68.0(13) ?
Mg2 As2 Mg2 . . 7_555 86.6(13) ?
Mg2 As2 Ca2 . . . 0.0(5) ?
Mg2 As2 Ca2 . . 4_556 15.8(10) ?
Mg2 As2 Ca2 . . 6_546 67.4(13) ?
Mg2 As2 Ca2 . . 6_556 86.9(13) ?
Mg2 As2 Ca2 . . 7_545 68.0(13) ?
Mg2 As2 Ca2 . . 7_555 86.6(13) ?
Mg2 As2 Mg2 4_556 . 6_546 58.6(12) ?
Mg2 As2 Mg2 4_556 . 6_556 95.0(12) ?
Mg2 As2 Mg2 4_556 . 7_545 59.9(12) ?
Mg2 As2 Mg2 4_556 . 7_555 95.4(12) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . . 15.8(10) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . 6_546 58.6(12) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . 6_556 95.0(12) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . 7_545 59.9(12) ?
Mg2 As2 Ca2 4_556 . 7_555 95.4(12) ?
Mg2 As2 Mg2 6_546 . 6_556 153.5(2) ?
Mg2 As2 Mg2 6_546 . 7_545 3.08(4) ?
Mg2 As2 Mg2 6_546 . 7_555 153.8(2) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . . 67.4(13) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . 4_556 58.6(12) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . 6_546 0.0(5) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . 6_556 153.5(2) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . 7_545 3.08(4) ?
Mg2 As2 Ca2 6_546 . 7_555 153.8(2) ?
Mg2 As2 Mg2 6_556 . 7_545 154.7(2) ?
Mg2 As2 Mg2 6_556 . 7_555 3.27(3) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . . 86.9(13) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . 4_556 95.0(12) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . 6_546 153.5(2) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . 7_545 154.7(2) ?
Mg2 As2 Ca2 6_556 . 7_555 3.27(3) ?
Mg2 As2 Mg2 7_545 . 7_555 154.6(2) ?
Mg2 As2 Ca2 7_545 . . 68.0(13) ?
Mg2 As2 Ca2 7_545 . 4_556 59.9(12) ?
Mg2 As2 Ca2 7_545 . 6_546 3.08(4) ?
Mg2 As2 Ca2 7_545 . 6_556 154.7(2) ?
Mg2 As2 Ca2 7_545 . 7_545 0.0(5) ?

Mg2 As2 Ca2 7_545 . 7_555 154.6(2) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . . 86.6(13) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . 4_556 95.4(12) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . 6_546 153.8(2) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . 6_556 3.27(3) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . 7_545 154.6(2) ?
Mg2 As2 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Ca2 As2 Ca2 . . 4_556 15.8(10) ?
Ca2 As2 Ca2 . . 6_546 67.4(13) ?
Ca2 As2 Ca2 . . 6_556 86.9(13) ?
Ca2 As2 Ca2 . . 7_545 68.0(13) ?
Ca2 As2 Ca2 . . 7_555 86.6(13) ?
Ca2 As2 Ca2 4_556 . 6_546 58.6(12) ?
Ca2 As2 Ca2 4_556 . 6_556 95.0(12) ?
Ca2 As2 Ca2 4_556 . 7_545 59.9(12) ?
Ca2 As2 Ca2 4_556 . 7_555 95.4(12) ?
Ca2 As2 Ca2 6_546 . 6_556 153.5(2) ?
Ca2 As2 Ca2 6_546 . 7_545 3.08(4) ?
Ca2 As2 Ca2 6_546 . 7_555 153.8(2) ?
Ca2 As2 Ca2 6_556 . 7_545 154.7(2) ?
Ca2 As2 Ca2 6_556 . 7_555 3.27(3) ?
Ca2 As2 Ca2 7_545 . 7_555 154.6(2) ?
Fe1 As3 Fe2 10_565 . . 73.42(4) ?
Fe1 As3 Fe2 10_565 . 6_546 146.20(6) ?
Fe1 As3 Mo2 10_565 . . 68.46(11) ?
Fe1 As3 Mo2 10_565 . 4_566 73.47(12) ?
Fe1 As3 Mo2 10_565 . 6_546 146.65(12) ?
Fe1 As3 Mo2 10_565 . 7_555 149.20(11) ?
Fe1 As3 04a 10_565 . . 31.5(2) ?
Fe1 As3 04b 10_565 . . 34.4(2) ?
Fe1 As3 05 10_565 . . 116.87(7) ?
Fe1 As3 As2 10_565 . . 130.73(7) ?
Fe1 As3 As2 10_565 . 13_556 60.18(6) ?
Fe1 As3 As2 10_565 . 6_556 61.65(7) ?
Fe1 As3 As2 10_565 . 7_555 65.63(8) ?
Fe1 As3 As3 10_565 . 11_556 76.20(8) ?
Fe1 As3 As3 10_565 . 13_556 103.56(8) ?
Fe1 As3 As3 10_565 . 7_555 166.20(19) ?
Fe1 As3 06 10_565 . . 100.13(10) ?
Fe1 As3 06 10_565 . 11_556 92.75(8) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . . 123.7(3) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 11_556 117.1(2) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 4_556 124.9(2) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 13_556 62.5(3) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 6_556 64.9(3) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 7_555 65.3(3) ?
Fe1 As3 Mg2 10_565 . 16_555 61.4(3) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . . 123.7(3) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 10_555 117.0(2) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 11_556 117.1(2) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 4_556 124.9(2) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 13_556 62.5(3) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 6_556 64.9(3) ?
Fe1 As3 Ca2 10_565 . 7_555 65.3(3) ?

Fe1 As3 Ca2 10_565 . 16_555 61.4(3) ?
Fe2 As3 Fe2 . . 6_546 72.86(5) ?
Fe2 As3 Mo2 . . . 8.98(13) ?
Fe2 As3 Mo2 . . 4_566 6.43(14) ?
Fe2 As3 Mo2 . . 6_546 74.17(11) ?
Fe2 As3 Mo2 . . 7_555 77.07(10) ?
Fe2 As3 O4a . . . 45.4(2) ?
Fe2 As3 O4b . . . 46.14(19) ?
Fe2 As3 O5 . . . 44.36(7) ?
Fe2 As3 As2 . . . 98.04(9) ?
Fe2 As3 As2 . . 13_556 114.40(8) ?
Fe2 As3 As2 . . 6_556 58.18(9) ?
Fe2 As3 As2 . . 7_555 63.50(10) ?
Fe2 As3 As3 . . 11_556 148.44(11) ?
Fe2 As3 As3 . . 13_556 171.11(13) ?
Fe2 As3 As3 . . 7_555 120.21(19) ?
Fe2 As3 O6 . . . 98.2(3) ?
Fe2 As3 O6 . . 11_556 134.5(2) ?
Fe2 As3 Mg2 . . . 103.69(14) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 11_556 132.91(15) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 4_556 101.86(14) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 13_556 104.8(2) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 6_556 71.20(18) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 7_555 74.12(19) ?
Fe2 As3 Mg2 . . 16_555 105.0(2) ?
Fe2 As3 Ca2 . . . 103.69(14) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 10_555 133.95(15) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 11_556 132.91(15) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 4_556 101.86(14) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 13_556 104.8(2) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 6_556 71.20(18) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 7_555 74.12(19) ?
Fe2 As3 Ca2 . . 16_555 105.0(2) ?
Fe2 As3 Mo2 6_546 . . 77.81(12) ?
Fe2 As3 Mo2 6_546 . 4_566 72.76(13) ?
Fe2 As3 Mo2 6_546 . 6_546 5.50(12) ?
Fe2 As3 Mo2 6_546 . 7_555 7.56(11) ?
Fe2 As3 O4a 6_546 . . 115.8(2) ?
Fe2 As3 O4b 6_546 . . 114.1(2) ?
Fe2 As3 O5 6_546 . . 30.84(7) ?
Fe2 As3 As2 6_546 . . 53.20(8) ?
Fe2 As3 As2 6_546 . 13_556 139.49(8) ?
Fe2 As3 As2 6_546 . 6_556 97.86(8) ?
Fe2 As3 As2 6_546 . 7_555 96.84(10) ?
Fe2 As3 As3 6_546 . 11_556 136.48(11) ?
Fe2 As3 As3 6_546 . 13_556 109.43(9) ?
Fe2 As3 As3 6_546 . 7_555 47.35(16) ?
Fe2 As3 O6 6_546 . . 82.4(2) ?
Fe2 As3 O6 6_546 . 11_556 112.69(14) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . . 63.32(19) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . 11_556 88.1(2) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . 4_556 61.08(18) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . 13_556 129.7(2) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . 6_556 101.6(2) ?

Fe2 As3 Mg2 6_546 . 7_555 102.8(2) ?
Fe2 As3 Mg2 6_546 . 16_555 131.1(2) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . . 63.32(19) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 10_555 88.63(19) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 11_556 88.1(2) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 4_556 61.08(18) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 13_556 129.7(2) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 6_556 101.6(2) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 7_555 102.8(2) ?
Fe2 As3 Ca2 6_546 . 16_555 131.1(2) ?
Mo2 As3 Mo2 . . 4_566 5.14(16) ?
Mo2 As3 Mo2 . . 6_546 78.37(16) ?
Mo2 As3 Mo2 . . 7_555 81.10(15) ?
Mo2 As3 O4a . . . 38.6(2) ?
Mo2 As3 O4b . . . 38.6(2) ?
Mo2 As3 O5 . . . 51.17(13) ?
Mo2 As3 As2 . . . 95.63(14) ?
Mo2 As3 As2 . . 13_556 115.71(13) ?
Mo2 As3 As2 . . 6_556 49.39(12) ?
Mo2 As3 As2 . . 7_555 54.87(12) ?
Mo2 As3 As3 . . 11_556 141.09(15) ?
Mo2 As3 As3 . . 13_556 162.30(15) ?
Mo2 As3 As3 . . 7_555 124.7(2) ?
Mo2 As3 O6 . . . 91.6(3) ?
Mo2 As3 O6 . . 11_556 140.1(2) ?
Mo2 As3 Mg2 . . . 99.96(19) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 11_556 141.62(18) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 4_556 98.38(19) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 13_556 107.7(3) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 6_556 62.5(2) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 7_555 65.4(2) ?
Mo2 As3 Mg2 . . 16_555 107.7(3) ?
Mo2 As3 Ca2 . . . 99.96(19) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 10_555 142.66(17) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 11_556 141.62(18) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 4_556 98.38(19) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 13_556 107.7(3) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 6_556 62.5(2) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 7_555 65.4(2) ?
Mo2 As3 Ca2 . . 16_555 107.7(3) ?
Mo2 As3 Mo2 4_566 . 6_546 73.44(16) ?
Mo2 As3 Mo2 4_566 . 7_555 76.21(16) ?
Mo2 As3 O4a 4_566 . . 43.8(2) ?
Mo2 As3 O4b 4_566 . . 43.7(2) ?
Mo2 As3 O5 4_566 . . 46.07(14) ?
Mo2 As3 As2 4_566 . . 93.15(15) ?
Mo2 As3 As2 4_566 . 13_556 118.84(14) ?
Mo2 As3 As2 4_566 . 6_556 52.29(13) ?
Mo2 As3 As2 4_566 . 7_555 57.43(14) ?
Mo2 As3 As3 4_566 . 11_556 146.08(16) ?
Mo2 As3 As3 4_566 . 13_556 164.86(16) ?
Mo2 As3 As3 4_566 . 7_555 119.8(2) ?
Mo2 As3 O6 4_566 . . 91.8(3) ?
Mo2 As3 O6 4_566 . 11_556 140.7(2) ?

Mo2 As3 Mg2 4_566 . . 98.21(19) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 11_556 138.85(18) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 4_556 96.49(19) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 13_556 110.0(3) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 6_556 65.2(2) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 7_555 68.1(2) ?
Mo2 As3 Mg2 4_566 . 16_555 110.1(3) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . . 98.21(19) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 10_555 139.90(18) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 11_556 138.85(18) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 4_556 96.49(19) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 13_556 110.0(3) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 6_556 65.2(2) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 7_555 68.1(2) ?
Mo2 As3 Ca2 4_566 . 16_555 110.1(3) ?
Mo2 As3 Mo2 6_546 . 7_555 3.04(13) ?
Mo2 As3 O4a 6_546 . . 115.4(3) ?
Mo2 As3 O4b 6_546 . . 113.2(2) ?
Mo2 As3 O5 6_546 . . 34.07(12) ?
Mo2 As3 As2 6_546 . . 47.82(11) ?
Mo2 As3 As2 6_546 . 13_556 144.13(13) ?
Mo2 As3 As2 6_546 . 6_556 94.30(13) ?
Mo2 As3 As2 6_546 . 7_555 92.84(14) ?
Mo2 As3 As3 6_546 . 11_556 133.77(14) ?
Mo2 As3 As3 6_546 . 13_556 107.29(13) ?
Mo2 As3 As3 6_546 . 7_555 46.35(19) ?
Mo2 As3 O6 6_546 . . 76.9(2) ?
Mo2 As3 O6 6_546 . 11_556 115.79(17) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . . 58.0(2) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 11_556 90.9(2) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 4_556 55.70(19) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 13_556 134.9(2) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 6_556 97.2(2) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 7_555 98.2(2) ?
Mo2 As3 Mg2 6_546 . 16_555 136.3(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . . 58.0(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 10_555 91.4(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 11_556 90.9(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 4_556 55.70(19) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 13_556 134.9(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 6_556 97.2(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 7_555 98.2(2) ?
Mo2 As3 Ca2 6_546 . 16_555 136.3(2) ?
Mo2 As3 O4a 7_555 . . 117.8(3) ?
Mo2 As3 O4b 7_555 . . 115.4(2) ?
Mo2 As3 O5 7_555 . . 37.09(11) ?
Mo2 As3 As2 7_555 . . 45.73(10) ?
Mo2 As3 As2 7_555 . 13_556 143.89(12) ?
Mo2 As3 As2 7_555 . 6_556 95.19(12) ?
Mo2 As3 As2 7_555 . 7_555 93.41(13) ?
Mo2 As3 As3 7_555 . 11_556 130.74(13) ?
Mo2 As3 As3 7_555 . 13_556 104.29(12) ?
Mo2 As3 As3 7_555 . 7_555 43.59(18) ?
Mo2 As3 O6 7_555 . . 75.4(2) ?

Mo2 As3 O6 7_555 . 11_556 114.49(15) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . . 55.8(2) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 11_556 89.6(2) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 4_556 53.61(19) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 13_556 135.4(3) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 6_556 97.4(2) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 7_555 98.3(3) ?
Mo2 As3 Mg2 7_555 . 16_555 136.9(2) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . . 55.8(2) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 10_555 89.9(2) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 11_556 89.6(2) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 4_556 53.61(19) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 13_556 135.4(3) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 6_556 97.4(2) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 7_555 98.3(3) ?
Mo2 As3 Ca2 7_555 . 16_555 136.9(2) ?
04a As3 O4b . . . 5.7(3) ?
04a As3 O5 . . . 89.6(2) ?
04a As3 As2 . . . 112.1(2) ?
04a As3 As2 . . 13_556 89.3(2) ?
04a As3 As2 . . 6_556 40.3(2) ?
04a As3 As2 . . 7_555 46.3(2) ?
04a As3 As3 . . 11_556 103.1(2) ?
04a As3 As3 . . 13_556 129.1(2) ?
04a As3 As3 . . 7_555 159.0(3) ?
04a As3 O6 . . . 89.6(2) ?
04a As3 O6 . . 11_556 121.9(2) ?
04a As3 Mg2 . . . 109.9(3) ?
04a As3 Mg2 . . 11_556 143.6(3) ?
04a As3 Mg2 . . 4_556 109.8(3) ?
04a As3 Mg2 . . 13_556 87.9(4) ?
04a As3 Mg2 . . 6_556 49.8(4) ?
04a As3 Mg2 . . 7_555 51.8(4) ?
04a As3 Mg2 . . 16_555 87.2(4) ?
04a As3 Ca2 . . . 109.9(3) ?
04a As3 Ca2 . . 10_555 143.9(3) ?
04a As3 Ca2 . . 11_556 143.6(3) ?
04a As3 Ca2 . . 4_556 109.8(3) ?
04a As3 Ca2 . . 13_556 87.9(4) ?
04a As3 Ca2 . . 6_556 49.8(4) ?
04a As3 Ca2 . . 7_555 51.8(4) ?
04a As3 Ca2 . . 16_555 87.2(4) ?
04b As3 O5 . . . 89.7(2) ?
04b As3 As2 . . . 106.6(2) ?
04b As3 As2 . . 13_556 93.6(2) ?
04b As3 As2 . . 6_556 34.61(19) ?
04b As3 As2 . . 7_555 40.56(19) ?
04b As3 As3 . . 11_556 102.6(2) ?
04b As3 As3 . . 13_556 127.4(2) ?
04b As3 As3 . . 7_555 154.5(3) ?
04b As3 O6 . . . 83.9(2) ?
04b As3 O6 . . 11_556 126.3(2) ?
04b As3 Mg2 . . . 104.2(3) ?
04b As3 Mg2 . . 11_556 148.9(3) ?

04b As3 Mg2 . . 4_556 104.2(3) ?
04b As3 Mg2 . . 13_556 93.0(4) ?
04b As3 Mg2 . . 6_556 44.2(3) ?
04b As3 Mg2 . . 7_555 46.2(4) ?
04b As3 Mg2 . . 16_555 92.1(3) ?
04b As3 Ca2 . . . 104.2(3) ?
04b As3 Ca2 . . 10_555 149.1(3) ?
04b As3 Ca2 . . 11_556 148.9(3) ?
04b As3 Ca2 . . 4_556 104.2(3) ?
04b As3 Ca2 . . 13_556 93.0(4) ?
04b As3 Ca2 . . 6_556 44.2(3) ?
04b As3 Ca2 . . 7_555 46.2(4) ?
04b As3 Ca2 . . 16_555 92.1(3) ?
05 As3 As2 . . . 76.71(12) ?
05 As3 As2 . . 13_556 130.01(14) ?
05 As3 As2 . . 6_556 88.03(14) ?
05 As3 As2 . . 7_555 90.27(15) ?
05 As3 As3 . . 11_556 166.92(12) ?
05 As3 As3 . . 13_556 139.56(11) ?
05 As3 As3 . . 7_555 76.92(17) ?
05 As3 O6 . . . 98.3(3) ?
05 As3 O6 . . 11_556 120.7(2) ?
05 As3 Mg2 . . . 86.48(16) ?
05 As3 Mg2 . . 11_556 101.73(18) ?
05 As3 Mg2 . . 4_556 84.07(15) ?
05 As3 Mg2 . . 13_556 116.81(19) ?
05 As3 Mg2 . . 6_556 97.63(17) ?
05 As3 Mg2 . . 7_555 100.01(17) ?
05 As3 Mg2 . . 16_555 118.00(18) ?
05 As3 Ca2 . . . 86.48(16) ?
05 As3 Ca2 . . 10_555 102.60(18) ?
05 As3 Ca2 . . 11_556 101.73(18) ?
05 As3 Ca2 . . 4_556 84.07(15) ?
05 As3 Ca2 . . 13_556 116.81(19) ?
05 As3 Ca2 . . 6_556 97.63(17) ?
05 As3 Ca2 . . 7_555 100.01(17) ?
05 As3 Ca2 . . 16_555 118.00(18) ?
As2 As3 As2 . . 13_556 147.24(10) ?
As2 As3 As2 . . 6_556 72.58(9) ?
As2 As3 As2 . . 7_555 67.31(9) ?
As2 As3 As3 . . 11_556 95.24(10) ?
As2 As3 As3 . . 13_556 77.45(10) ?
As2 As3 As3 . . 7_555 49.50(17) ?
As2 As3 O6 . . . 31.67(14) ?
As2 As3 O6 . . 11_556 121.95(13) ?
As2 As3 Mg2 . . . 10.17(16) ?
As2 As3 Mg2 . . 11_556 104.2(2) ?
As2 As3 Mg2 . . 4_556 7.88(16) ?
As2 As3 Mg2 . . 13_556 156.7(3) ?
As2 As3 Mg2 . . 6_556 66.5(3) ?
As2 As3 Mg2 . . 7_555 65.7(3) ?
As2 As3 Mg2 . . 16_555 156.7(2) ?
As2 As3 Ca2 . . . 10.17(16) ?
As2 As3 Ca2 . . 10_555 103.8(2) ?

As2 As3 Ca2 . . 11_556 104.2(2) ?
As2 As3 Ca2 . . 4_556 7.88(16) ?
As2 As3 Ca2 . . 13_556 156.7(3) ?
As2 As3 Ca2 . . 6_556 66.5(3) ?
As2 As3 Ca2 . . 7_555 65.7(3) ?
As2 As3 Ca2 . . 16_555 156.7(2) ?
As2 As3 As2 13_556 . 6_556 120.26(9) ?
As2 As3 As2 13_556 . 7_555 122.58(10) ?
As2 As3 As3 13_556 . 11_556 54.54(9) ?
As2 As3 As3 13_556 . 13_556 69.79(9) ?
As2 As3 As3 13_556 . 7_555 111.69(19) ?
As2 As3 06 13_556 . . 131.7(3) ?
As2 As3 06 13_556 . 11_556 32.79(8) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . . 139.78(10) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 11_556 57.0(2) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 4_556 142.00(11) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 13_556 13.24(13) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 6_556 118.6(2) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 7_555 117.6(2) ?
As2 As3 Mg2 13_556 . 16_555 12.14(12) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . . 139.78(10) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 10_555 56.8(2) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 11_556 57.0(2) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 4_556 142.00(11) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 13_556 13.24(13) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 6_556 118.6(2) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 7_555 117.6(2) ?
As2 As3 Ca2 13_556 . 16_555 12.14(12) ?
As2 As3 As2 6_556 . 7_555 6.39(7) ?
As2 As3 As3 6_556 . 11_556 99.51(11) ?
As2 As3 As3 6_556 . 13_556 112.96(10) ?
As2 As3 As3 6_556 . 7_555 121.98(19) ?
As2 As3 06 6_556 . . 50.16(16) ?
As2 As3 06 6_556 . 11_556 149.07(18) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . . 69.6(2) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 11_556 168.84(14) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 4_556 69.6(2) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 13_556 124.2(3) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 6_556 13.15(19) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 7_555 16.0(2) ?
As2 As3 Mg2 6_556 . 16_555 123.1(3) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . . 69.6(2) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 10_555 167.80(13) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 11_556 168.84(14) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 4_556 69.6(2) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 13_556 124.2(3) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 6_556 13.15(19) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 7_555 16.0(2) ?
As2 As3 Ca2 6_556 . 16_555 123.1(3) ?
As2 As3 As3 7_555 . 11_556 96.15(11) ?
As2 As3 As3 7_555 . 13_556 107.61(10) ?
As2 As3 As3 7_555 . 7_555 116.82(19) ?
As2 As3 06 7_555 . . 43.83(15) ?
As2 As3 06 7_555 . 11_556 148.5(2) ?

As2 As3 Mg2 7_555 . . 63.8(3) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 11_556 163.48(16) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 4_556 63.9(2) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 13_556 128.0(3) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 6_556 7.95(13) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 7_555 10.81(14) ?
As2 As3 Mg2 7_555 . 16_555 126.7(3) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . . 63.8(3) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 10_555 162.45(15) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 11_556 163.48(16) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 4_556 63.9(2) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 13_556 128.0(3) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 6_556 7.95(13) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 7_555 10.81(14) ?
As2 As3 Ca2 7_555 . 16_555 126.7(3) ?
As3 As3 As3 11_556 . 13_556 27.36(8) ?
As3 As3 As3 11_556 . 7_555 90.00(19) ?
As3 As3 O6 11_556 . . 78.8(3) ?
As3 As3 O6 11_556 . 11_556 54.9(2) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . . 86.16(12) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 11_556 69.91(14) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 4_556 88.53(12) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 13_556 67.58(15) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 6_556 88.35(13) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 7_555 85.67(13) ?
As3 As3 Mg2 11_556 . 16_555 66.61(15) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . . 86.16(12) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 10_555 68.94(14) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 11_556 69.91(14) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 4_556 88.53(12) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 13_556 67.58(15) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 6_556 88.35(13) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 7_555 85.67(13) ?
As3 As3 Ca2 11_556 . 16_555 66.61(15) ?
As3 As3 As3 13_556 . 7_555 62.64(17) ?
As3 As3 O6 13_556 . . 73.9(3) ?
As3 As3 O6 13_556 . 11_556 53.2(2) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . . 70.74(13) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 11_556 55.97(14) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 4_556 72.75(13) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 13_556 80.6(2) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 6_556 99.91(18) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 7_555 97.00(19) ?
As3 As3 Mg2 13_556 . 16_555 80.2(2) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . . 70.74(13) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 10_555 54.93(14) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 11_556 55.97(14) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 4_556 72.75(13) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 13_556 80.6(2) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 6_556 99.91(18) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 7_555 97.00(19) ?
As3 As3 Ca2 13_556 . 16_555 80.2(2) ?
As3 As3 O6 7_555 . . 76.78(18) ?
As3 As3 O6 7_555 . 11_556 79.01(18) ?

As3 As3 Mg2 7_555 . . 54.0(3) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 11_556 56.4(3) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 4_556 53.5(3) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 13_556 112.4(3) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 6_556 115.5(3) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 7_555 114.3(4) ?
As3 As3 Mg2 7_555 . 16_555 113.3(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . . 54.0(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 10_555 56.2(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 11_556 56.4(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 4_556 53.5(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 13_556 112.4(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 6_556 115.5(3) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 7_555 114.3(4) ?
As3 As3 Ca2 7_555 . 16_555 113.3(3) ?
06 As3 06 . . 11_556 127.1(3) ?
06 As3 Mg2 . . . 23.6(3) ?
06 As3 Mg2 . . 11_556 122.0(3) ?
06 As3 Mg2 . . 4_556 24.9(3) ?
06 As3 Mg2 . . 13_556 144.8(3) ?
06 As3 Mg2 . . 6_556 39.8(3) ?
06 As3 Mg2 . . 7_555 38.1(3) ?
06 As3 Mg2 . . 16_555 143.5(3) ?
06 As3 Ca2 . . . 23.6(3) ?
06 As3 Ca2 . . 10_555 121.2(3) ?
06 As3 Ca2 . . 11_556 122.0(3) ?
06 As3 Ca2 . . 4_556 24.9(3) ?
06 As3 Ca2 . . 13_556 144.8(3) ?
06 As3 Ca2 . . 6_556 39.8(3) ?
06 As3 Ca2 . . 7_555 38.1(3) ?
06 As3 Ca2 . . 16_555 143.5(3) ?
06 As3 Mg2 11_556 . . 119.4(2) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 11_556 25.0(2) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 4_556 120.7(2) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 13_556 35.2(3) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 6_556 141.5(2) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 7_555 139.2(2) ?
06 As3 Mg2 11_556 . 16_555 35.7(3) ?
06 As3 Ca2 11_556 . . 119.4(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 10_555 24.6(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 11_556 25.0(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 4_556 120.7(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 13_556 35.2(3) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 6_556 141.5(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 7_555 139.2(2) ?
06 As3 Ca2 11_556 . 16_555 35.7(3) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 11_556 105.2(3) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 4_556 2.41(15) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 13_556 151.3(2) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 6_556 61.6(4) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 7_555 60.3(4) ?
Mg2 As3 Mg2 . . 16_555 150.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 . . . 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 10_555 104.7(3) ?

Mg2 As3 Ca2 . . 11_556 105.2(3) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 4_556 2.41(15) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 13_556 151.3(2) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 6_556 61.6(4) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 7_555 60.3(4) ?
Mg2 As3 Ca2 . . 16_555 150.9(2) ?
Mg2 As3 Mg2 11_556 . 4_556 105.7(3) ?
Mg2 As3 Mg2 11_556 . 13_556 56.0(4) ?
Mg2 As3 Mg2 11_556 . 6_556 155.9(2) ?
Mg2 As3 Mg2 11_556 . 7_555 153.0(2) ?
Mg2 As3 Mg2 11_556 . 16_555 56.9(4) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . . 105.2(3) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 10_555 1.05(17) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 11_556 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 4_556 105.7(3) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 13_556 56.0(4) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 6_556 155.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 7_555 153.0(2) ?
Mg2 As3 Ca2 11_556 . 16_555 56.9(4) ?
Mg2 As3 Mg2 4_556 . 13_556 153.3(2) ?
Mg2 As3 Mg2 4_556 . 6_556 62.0(4) ?
Mg2 As3 Mg2 4_556 . 7_555 60.9(4) ?
Mg2 As3 Mg2 4_556 . 16_555 152.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . . 2.41(15) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 10_555 105.2(3) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 11_556 105.7(3) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 13_556 153.3(2) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 6_556 62.0(4) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 7_555 60.9(4) ?
Mg2 As3 Ca2 4_556 . 16_555 152.9(2) ?
Mg2 As3 Mg2 13_556 . 6_556 125.8(4) ?
Mg2 As3 Mg2 13_556 . 7_555 125.4(4) ?
Mg2 As3 Mg2 13_556 . 16_555 1.4(3) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . . 151.3(2) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 10_555 56.2(4) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 11_556 56.0(4) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 4_556 153.3(2) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 13_556 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 6_556 125.8(4) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 7_555 125.4(4) ?
Mg2 As3 Ca2 13_556 . 16_555 1.4(3) ?
Mg2 As3 Mg2 6_556 . 7_555 2.9(2) ?
Mg2 As3 Mg2 6_556 . 16_555 124.5(4) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . . 61.6(4) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 10_555 154.8(2) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 11_556 155.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 4_556 62.0(4) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 13_556 125.8(4) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 7_555 2.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 6_556 . 16_555 124.5(4) ?
Mg2 As3 Mg2 7_555 . 16_555 124.1(4) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . . 60.3(4) ?

Mg2 As3 Ca2 7_555 . 10_555 151.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 11_556 153.0(2) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 4_556 60.9(4) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 13_556 125.4(4) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 6_556 2.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Mg2 As3 Ca2 7_555 . 16_555 124.1(4) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . . 150.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 10_555 57.1(4) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 11_556 56.9(4) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 4_556 152.9(2) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 13_556 1.4(3) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 6_556 124.5(4) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 7_555 124.1(4) ?
Mg2 As3 Ca2 16_555 . 16_555 0.0(5) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 10_555 104.7(3) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 11_556 105.2(3) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 4_556 2.41(15) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 13_556 151.3(2) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 6_556 61.6(4) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 7_555 60.3(4) ?
Ca2 As3 Ca2 . . 16_555 150.9(2) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 11_556 1.05(17) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 4_556 105.2(3) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 13_556 56.2(4) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 6_556 154.8(2) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 7_555 151.9(2) ?
Ca2 As3 Ca2 10_555 . 16_555 57.1(4) ?
Ca2 As3 Ca2 11_556 . 4_556 105.7(3) ?
Ca2 As3 Ca2 11_556 . 13_556 56.0(4) ?
Ca2 As3 Ca2 11_556 . 6_556 155.9(2) ?
Ca2 As3 Ca2 11_556 . 7_555 153.0(2) ?
Ca2 As3 Ca2 11_556 . 16_555 56.9(4) ?
Ca2 As3 Ca2 4_556 . 13_556 153.3(2) ?
Ca2 As3 Ca2 4_556 . 6_556 62.0(4) ?
Ca2 As3 Ca2 4_556 . 7_555 60.9(4) ?
Ca2 As3 Ca2 4_556 . 16_555 152.9(2) ?
Ca2 As3 Ca2 13_556 . 6_556 125.8(4) ?
Ca2 As3 Ca2 13_556 . 7_555 125.4(4) ?
Ca2 As3 Ca2 13_556 . 16_555 1.4(3) ?
Ca2 As3 Ca2 6_556 . 7_555 2.9(2) ?
Ca2 As3 Ca2 6_556 . 16_555 124.5(4) ?
Ca2 As3 Ca2 7_555 . 16_555 124.1(4) ?
As2 O6 As2 . . 4_556 1.51(16) ?
As2 O6 As2 . . 6_556 120.4(5) ?
As2 O6 As2 . . 7_555 121.9(5) ?
As2 O6 As3 . . . 117.4(3) ?
As2 O6 As3 . . 11_556 129.6(3) ?
As2 O6 As3 . . 13_556 107.7(2) ?
As2 O6 As3 . . 7_555 93.4(2) ?
As2 O6 Mg2 . . . 22.2(3) ?
As2 O6 Mg2 . . 4_556 20.2(3) ?
As2 O6 Mg2 . . 6_556 117.6(5) ?
As2 O6 Mg2 . . 7_555 119.8(6) ?

As2 06 Ca2 . . . 22.2(3) ?
As2 06 Ca2 . . 4_556 20.2(3) ?
As2 06 Ca2 . . 6_556 117.6(5) ?
As2 06 Ca2 . . 7_555 119.8(6) ?
As2 06 As2 4_556 . 6_556 118.9(4) ?
As2 06 As2 4_556 . 7_555 120.4(5) ?
As2 06 As3 4_556 . . 117.9(3) ?
As2 06 As3 4_556 . 11_556 131.0(3) ?
As2 06 As3 4_556 . 13_556 109.14(18) ?
As2 06 As3 4_556 . 7_555 94.23(19) ?
As2 06 Mg2 4_556 . . 22.4(3) ?
As2 06 Mg2 4_556 . 4_556 20.2(2) ?
As2 06 Mg2 4_556 . 6_556 116.2(5) ?
As2 06 Mg2 4_556 . 7_555 118.4(5) ?
As2 06 Ca2 4_556 . . 22.4(3) ?
As2 06 Ca2 4_556 . 4_556 20.2(2) ?
As2 06 Ca2 4_556 . 6_556 116.2(5) ?
As2 06 Ca2 4_556 . 7_555 118.4(5) ?
As2 06 As2 6_556 . 7_555 1.51(16) ?
As2 06 As3 6_556 . . 94.23(19) ?
As2 06 As3 6_556 . 11_556 109.14(18) ?
As2 06 As3 6_556 . 13_556 131.0(3) ?
As2 06 As3 6_556 . 7_555 117.9(3) ?
As2 06 Mg2 6_556 . . 118.4(5) ?
As2 06 Mg2 6_556 . 4_556 116.2(5) ?
As2 06 Mg2 6_556 . 6_556 20.2(2) ?
As2 06 Mg2 6_556 . 7_555 22.4(3) ?
As2 06 Ca2 6_556 . . 118.4(5) ?
As2 06 Ca2 6_556 . 4_556 116.2(5) ?
As2 06 Ca2 6_556 . 6_556 20.2(2) ?
As2 06 Ca2 6_556 . 7_555 22.4(3) ?
As2 06 As3 7_555 . . 93.4(2) ?
As2 06 As3 7_555 . 11_556 107.7(2) ?
As2 06 As3 7_555 . 13_556 129.6(3) ?
As2 06 As3 7_555 . 7_555 117.4(3) ?
As2 06 Mg2 7_555 . . 119.8(6) ?
As2 06 Mg2 7_555 . 4_556 117.6(5) ?
As2 06 Mg2 7_555 . 6_556 20.2(3) ?
As2 06 Mg2 7_555 . 7_555 22.2(3) ?
As2 06 Ca2 7_555 . . 119.8(6) ?
As2 06 Ca2 7_555 . 4_556 117.6(5) ?
As2 06 Ca2 7_555 . 6_556 20.2(3) ?
As2 06 Ca2 7_555 . 7_555 22.2(3) ?
As3 06 As3 . . 11_556 46.3(2) ?
As3 06 As3 . . 13_556 52.9(3) ?
As3 06 As3 . . 7_555 26.44(14) ?
As3 06 Mg2 . . . 136.9(4) ?
As3 06 Mg2 . . 4_556 136.5(4) ?
As3 06 Mg2 . . 6_556 111.0(3) ?
As3 06 Mg2 . . 7_555 111.0(4) ?
As3 06 Ca2 . . . 136.9(4) ?
As3 06 Ca2 . . 4_556 136.5(4) ?
As3 06 Ca2 . . 6_556 111.0(3) ?
As3 06 Ca2 . . 7_555 111.0(4) ?

As3 06 As3 11_556 . 13_556 21.98(11) ?
As3 06 As3 11_556 . 7_555 52.9(3) ?
As3 06 Mg2 11_556 . . 130.1(4) ?
As3 06 Mg2 11_556 . 4_556 133.0(4) ?
As3 06 Mg2 11_556 . 6_556 112.1(3) ?
As3 06 Mg2 11_556 . 7_555 109.5(3) ?
As3 06 Ca2 11_556 . . 130.1(4) ?
As3 06 Ca2 11_556 . 4_556 133.0(4) ?
As3 06 Ca2 11_556 . 6_556 112.1(3) ?
As3 06 Ca2 11_556 . 7_555 109.5(3) ?
As3 06 As3 13_556 . 7_555 46.3(2) ?
As3 06 Mg2 13_556 . . 109.5(3) ?
As3 06 Mg2 13_556 . 4_556 112.1(3) ?
As3 06 Mg2 13_556 . 6_556 133.0(4) ?
As3 06 Mg2 13_556 . 7_555 130.1(4) ?
As3 06 Ca2 13_556 . . 109.5(3) ?
As3 06 Ca2 13_556 . 4_556 112.1(3) ?
As3 06 Ca2 13_556 . 6_556 133.0(4) ?
As3 06 Ca2 13_556 . 7_555 130.1(4) ?
As3 06 Mg2 7_555 . . 111.0(4) ?
As3 06 Mg2 7_555 . 4_556 111.0(3) ?
As3 06 Mg2 7_555 . 6_556 136.5(4) ?
As3 06 Mg2 7_555 . 7_555 136.9(4) ?
As3 06 Ca2 7_555 . . 111.0(4) ?
As3 06 Ca2 7_555 . 4_556 111.0(3) ?
As3 06 Ca2 7_555 . 6_556 136.5(4) ?
As3 06 Ca2 7_555 . 7_555 136.9(4) ?
Mg2 06 Mg2 . . 4_556 3.4(2) ?
Mg2 06 Mg2 . . 6_556 107.8(6) ?
Mg2 06 Mg2 . . 7_555 108.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 . . . 0.0(5) ?
Mg2 06 Ca2 . . 4_556 3.4(2) ?
Mg2 06 Ca2 . . 6_556 107.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 . . 7_555 108.8(6) ?
Mg2 06 Mg2 4_556 . 6_556 106.5(5) ?
Mg2 06 Mg2 4_556 . 7_555 107.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 4_556 . . 3.4(2) ?
Mg2 06 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
Mg2 06 Ca2 4_556 . 6_556 106.5(5) ?
Mg2 06 Ca2 4_556 . 7_555 107.8(6) ?
Mg2 06 Mg2 6_556 . 7_555 3.4(2) ?
Mg2 06 Ca2 6_556 . . 107.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 6_556 . 4_556 106.5(5) ?
Mg2 06 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
Mg2 06 Ca2 6_556 . 7_555 3.4(2) ?
Mg2 06 Ca2 7_555 . . 108.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 7_555 . 4_556 107.8(6) ?
Mg2 06 Ca2 7_555 . 6_556 3.4(2) ?
Mg2 06 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Ca2 06 Ca2 . . 4_556 3.4(2) ?
Ca2 06 Ca2 . . 6_556 107.8(6) ?
Ca2 06 Ca2 . . 7_555 108.8(6) ?
Ca2 06 Ca2 4_556 . 6_556 106.5(5) ?
Ca2 06 Ca2 4_556 . 7_555 107.8(6) ?

Ca2 O6 Ca2 6_556 . 7_555 3.4(2) ?
 Mg3 Fe3 Ca1 . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Mg1 . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow1a . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow1a . . 2_665 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow1b . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow1b . . 2_665 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow2a . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow2a . . 2_665 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow2b . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow2b . . 2_665 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow3 . . . 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow3 . . 2_665 0 ?
 Mg3 Fe3 Ow4 . . . 0 ?
 Ca1 Fe3 Mg1 . . . 0.0(5) ?
 Ca1 Fe3 Ow1a . . . 101.9(5) ?
 Ca1 Fe3 Ow1a . . 2_665 101.9(5) ?
 Ca1 Fe3 Ow1b . . . 81.2(5) ?
 Ca1 Fe3 Ow1b . . 2_665 81.2(5) ?
 Ca1 Fe3 Ow2a . . . 83.7(4) ?
 Ca1 Fe3 Ow2a . . 2_665 83.7(4) ?
 Ca1 Fe3 Ow2b . . . 56.9(6) ?
 Ca1 Fe3 Ow2b . . 2_665 56.9(6) ?
 Ca1 Fe3 Ow3 . . . 157.6(17) ?
 Ca1 Fe3 Ow3 . . 2_665 157.6(17) ?
 Ca1 Fe3 Ow4 . . . 0.0(5) ?
 Mg1 Fe3 Ow1a . . . 101.9(5) ?
 Mg1 Fe3 Ow1a . . 2_665 101.9(5) ?
 Mg1 Fe3 Ow1b . . . 81.2(5) ?
 Mg1 Fe3 Ow1b . . 2_665 81.2(5) ?
 Mg1 Fe3 Ow2a . . . 83.7(4) ?
 Mg1 Fe3 Ow2a . . 2_665 83.7(4) ?
 Mg1 Fe3 Ow2b . . . 56.9(6) ?
 Mg1 Fe3 Ow2b . . 2_665 56.9(6) ?
 Mg1 Fe3 Ow3 . . . 157.6(17) ?
 Mg1 Fe3 Ow3 . . 2_665 157.6(17) ?
 Mg1 Fe3 Ow4 . . . 0.0(5) ?
 Ow1a Fe3 Ow1a . . 2_665 156.2(8) ?
 Ow1a Fe3 Ow1b . . . 20.7(7) ?
 Ow1a Fe3 Ow1b . . 2_665 176.9(8) ?
 Ow1a Fe3 Ow2a . . . 91.30(9) ?
 Ow1a Fe3 Ow2a . . 2_665 91.30(9) ?
 Ow1a Fe3 Ow2b . . . 96.5(3) ?
 Ow1a Fe3 Ow2b . . 2_665 96.5(3) ?
 Ow1a Fe3 Ow3 . . . 55.7(17) ?
 Ow1a Fe3 Ow3 . . 2_665 100.6(18) ?
 Ow1a Fe3 Ow4 . . . 101.9(5) ?
 Ow1a Fe3 Ow1b 2_665 . . 176.9(8) ?
 Ow1a Fe3 Ow1b 2_665 . 2_665 20.7(7) ?
 Ow1a Fe3 Ow2a 2_665 . . 91.30(9) ?
 Ow1a Fe3 Ow2a 2_665 . 2_665 91.30(9) ?
 Ow1a Fe3 Ow2b 2_665 . . 96.5(3) ?
 Ow1a Fe3 Ow2b 2_665 . 2_665 96.5(3) ?
 Ow1a Fe3 Ow3 2_665 . . 100.6(18) ?

Ow1a Fe3 Ow3 2_665 . 2_665 55.7(17) ?
Ow1a Fe3 Ow4 2_665 . . 101.9(5) ?
Ow1b Fe3 Ow1b . . 2_665 162.3(8) ?
Ow1b Fe3 Ow2a . . . 89.03(9) ?
Ow1b Fe3 Ow2a . . 2_665 89.03(9) ?
Ow1b Fe3 Ow2b . . . 85.2(3) ?
Ow1b Fe3 Ow2b . . 2_665 85.2(3) ?
Ow1b Fe3 Ow3 . . . 76.4(17) ?
Ow1b Fe3 Ow3 . . 2_665 121.3(18) ?
Ow1b Fe3 Ow4 . . . 81.2(5) ?
Ow1b Fe3 Ow2a 2_665 . . 89.03(9) ?
Ow1b Fe3 Ow2a 2_665 . 2_665 89.03(9) ?
Ow1b Fe3 Ow2b 2_665 . . 85.2(3) ?
Ow1b Fe3 Ow2b 2_665 . 2_665 85.2(3) ?
Ow1b Fe3 Ow3 2_665 . . 121.3(18) ?
Ow1b Fe3 Ow3 2_665 . 2_665 76.4(17) ?
Ow1b Fe3 Ow4 2_665 . . 81.2(5) ?
Ow2a Fe3 Ow2a . . 2_665 167.4(6) ?
Ow2a Fe3 Ow2b . . . 26.7(7) ?
Ow2a Fe3 Ow2b . . 2_665 140.6(8) ?
Ow2a Fe3 Ow3 . . . 95.8(4) ?
Ow2a Fe3 Ow3 . . 2_665 95.8(4) ?
Ow2a Fe3 Ow4 . . . 83.7(4) ?
Ow2a Fe3 Ow2b 2_665 . . 140.6(8) ?
Ow2a Fe3 Ow2b 2_665 . 2_665 26.7(7) ?
Ow2a Fe3 Ow3 2_665 . . 95.8(4) ?
Ow2a Fe3 Ow3 2_665 . 2_665 95.8(4) ?
Ow2a Fe3 Ow4 2_665 . . 83.7(4) ?
Ow2b Fe3 Ow2b . . 2_665 113.9(9) ?
Ow2b Fe3 Ow3 . . . 120.3(7) ?
Ow2b Fe3 Ow3 . . 2_665 120.3(7) ?
Ow2b Fe3 Ow4 . . . 56.9(6) ?
Ow2b Fe3 Ow3 2_665 . . 120.3(7) ?
Ow2b Fe3 Ow3 2_665 . 2_665 120.3(7) ?
Ow2b Fe3 Ow4 2_665 . . 56.9(6) ?
Ow3 Fe3 Ow3 . . 2_665 45(2) ?
Ow3 Fe3 Ow4 . . . 157.6(17) ?
Ow3 Fe3 Ow4 2_665 . . 157.6(17) ?
Fe3 Mg3 Ca1 . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Mg1 . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow1a . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow1a . . 2_665 0 ?
Fe3 Mg3 Ow1b . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow1b . . 2_665 0 ?
Fe3 Mg3 Ow2a . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow2a . . 2_665 0 ?
Fe3 Mg3 Ow2b . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow2b . . 2_665 0 ?
Fe3 Mg3 Ow3 . . . 0 ?
Fe3 Mg3 Ow3 . . 2_665 0 ?
Fe3 Mg3 Ow4 . . . 0 ?
Ca1 Mg3 Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Mg3 Ow1a . . . 101.9(5) ?
Ca1 Mg3 Ow1a . . 2_665 101.9(5) ?

Ca1 Mg3 Ow1b . . . 81.2(5) ?
 Ca1 Mg3 Ow1b . . 2_665 81.2(5) ?
 Ca1 Mg3 Ow2a . . . 83.7(4) ?
 Ca1 Mg3 Ow2a . . 2_665 83.7(4) ?
 Ca1 Mg3 Ow2b . . . 56.9(6) ?
 Ca1 Mg3 Ow2b . . 2_665 56.9(6) ?
 Ca1 Mg3 Ow3 . . . 157.6(17) ?
 Ca1 Mg3 Ow3 . . 2_665 157.6(17) ?
 Ca1 Mg3 Ow4 . . . 0.0(5) ?
 Mg1 Mg3 Ow1a . . . 101.9(5) ?
 Mg1 Mg3 Ow1a . . 2_665 101.9(5) ?
 Mg1 Mg3 Ow1b . . . 81.2(5) ?
 Mg1 Mg3 Ow1b . . 2_665 81.2(5) ?
 Mg1 Mg3 Ow2a . . . 83.7(4) ?
 Mg1 Mg3 Ow2a . . 2_665 83.7(4) ?
 Mg1 Mg3 Ow2b . . . 56.9(6) ?
 Mg1 Mg3 Ow2b . . 2_665 56.9(6) ?
 Mg1 Mg3 Ow3 . . . 157.6(17) ?
 Mg1 Mg3 Ow3 . . 2_665 157.6(17) ?
 Mg1 Mg3 Ow4 . . . 0.0(5) ?
 Ow1a Mg3 Ow1a . . 2_665 156.2(8) ?
 Ow1a Mg3 Ow1b . . . 20.7(7) ?
 Ow1a Mg3 Ow1b . . 2_665 176.9(8) ?
 Ow1a Mg3 Ow2a . . . 91.30(9) ?
 Ow1a Mg3 Ow2a . . 2_665 91.30(9) ?
 Ow1a Mg3 Ow2b . . . 96.5(3) ?
 Ow1a Mg3 Ow2b . . 2_665 96.5(3) ?
 Ow1a Mg3 Ow3 . . . 55.7(17) ?
 Ow1a Mg3 Ow3 . . 2_665 100.6(18) ?
 Ow1a Mg3 Ow4 . . . 101.9(5) ?
 Ow1a Mg3 Ow1b 2_665 . . 176.9(8) ?
 Ow1a Mg3 Ow1b 2_665 . 2_665 20.7(7) ?
 Ow1a Mg3 Ow2a 2_665 . . 91.30(9) ?
 Ow1a Mg3 Ow2a 2_665 . 2_665 91.30(9) ?
 Ow1a Mg3 Ow2b 2_665 . . 96.5(3) ?
 Ow1a Mg3 Ow2b 2_665 . 2_665 96.5(3) ?
 Ow1a Mg3 Ow3 2_665 . . 100.6(18) ?
 Ow1a Mg3 Ow3 2_665 . 2_665 55.7(17) ?
 Ow1a Mg3 Ow4 2_665 . . 101.9(5) ?
 Ow1b Mg3 Ow1b . . 2_665 162.3(8) ?
 Ow1b Mg3 Ow2a . . . 89.03(9) ?
 Ow1b Mg3 Ow2a . . 2_665 89.03(9) ?
 Ow1b Mg3 Ow2b . . . 85.2(3) ?
 Ow1b Mg3 Ow2b . . 2_665 85.2(3) ?
 Ow1b Mg3 Ow3 . . . 76.4(17) ?
 Ow1b Mg3 Ow3 . . 2_665 121.3(18) ?
 Ow1b Mg3 Ow4 . . . 81.2(5) ?
 Ow1b Mg3 Ow2a 2_665 . . 89.03(9) ?
 Ow1b Mg3 Ow2a 2_665 . 2_665 89.03(9) ?
 Ow1b Mg3 Ow2b 2_665 . . 85.2(3) ?
 Ow1b Mg3 Ow2b 2_665 . 2_665 85.2(3) ?
 Ow1b Mg3 Ow3 2_665 . . 121.3(18) ?
 Ow1b Mg3 Ow3 2_665 . 2_665 76.4(17) ?
 Ow1b Mg3 Ow4 2_665 . . 81.2(5) ?

Ow2a Mg3 Ow2a . . 2_665 167.4(6) ?
Ow2a Mg3 Ow2b . . . 26.7(7) ?
Ow2a Mg3 Ow2b . . 2_665 140.6(8) ?
Ow2a Mg3 Ow3 . . . 95.8(4) ?
Ow2a Mg3 Ow3 . . 2_665 95.8(4) ?
Ow2a Mg3 Ow4 . . . 83.7(4) ?
Ow2a Mg3 Ow2b 2_665 . . 140.6(8) ?
Ow2a Mg3 Ow2b 2_665 . 2_665 26.7(7) ?
Ow2a Mg3 Ow3 2_665 . . 95.8(4) ?
Ow2a Mg3 Ow3 2_665 . 2_665 95.8(4) ?
Ow2a Mg3 Ow4 2_665 . . 83.7(4) ?
Ow2b Mg3 Ow2b . . 2_665 113.9(9) ?
Ow2b Mg3 Ow3 . . . 120.3(7) ?
Ow2b Mg3 Ow3 . . 2_665 120.3(7) ?
Ow2b Mg3 Ow4 . . . 56.9(6) ?
Ow2b Mg3 Ow3 2_665 . . 120.3(7) ?
Ow2b Mg3 Ow3 2_665 . 2_665 120.3(7) ?
Ow2b Mg3 Ow4 2_665 . . 56.9(6) ?
Ow3 Mg3 Ow3 . . 2_665 45(2) ?
Ow3 Mg3 Ow4 . . . 157.6(17) ?
Ow3 Mg3 Ow4 2_665 . . 157.6(17) ?
Fe3 Ca1 Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ca1 Ca1 . . 3_645 137.04(9) ?
Fe3 Ca1 Ca1 . . 3_655 137.04(9) ?
Fe3 Ca1 Mg1 . . . 0 ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 9_554 110.07(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 10_564 110.07(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 11_565 111.88(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 12_555 111.88(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 13_555 111.88(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 14_565 111.88(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 15_564 110.07(9) ?
Fe3 Ca1 Ca2 . . 16_554 110.07(9) ?
Fe3 Ca1 Ow1a . . . 49.7(4) ?
Fe3 Ca1 Ow1a . . 2_665 49.7(4) ?
Fe3 Ca1 Ow1b . . . 69.1(5) ?
Fe3 Ca1 Ow1b . . 2_665 69.1(5) ?
Fe3 Ca1 Ow2a . . . 66.5(4) ?
Fe3 Ca1 Ow2a . . 2_665 66.5(4) ?
Fe3 Ca1 Ow2b . . . 87.7(8) ?
Fe3 Ca1 Ow2b . . 2_665 87.7(8) ?
Fe3 Ca1 Ow3 . . . 14.4(11) ?
Fe3 Ca1 Ow3 . . 2_665 14.4(11) ?
Fe3 Ca1 Ow4 . . . 180.0(5) ?
Fe3 Ca1 Ow5 . . . 128.9(5) ?
Fe3 Ca1 Ow5 . . 2_665 128.9(5) ?
Fe3 Ca1 Ow5 . . 7_565 128.9(5) ?
Fe3 Ca1 Ow5 . . 8_655 128.9(5) ?
Fe3 Ca1 Ow6 . . 3_655 119.8(6) ?
Fe3 Ca1 Ow6 . . 4_565 119.8(6) ?
Mg3 Ca1 Ca1 . . 3_645 137.04(9) ?
Mg3 Ca1 Ca1 . . 3_655 137.04(9) ?
Mg3 Ca1 Mg1 . . . 0 ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 9_554 110.07(9) ?

Mg3 Ca1 Ca2 . . 10_564 110.07(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 11_565 111.88(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 12_555 111.88(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 13_555 111.88(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 14_565 111.88(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 15_564 110.07(9) ?
Mg3 Ca1 Ca2 . . 16_554 110.07(9) ?
Mg3 Ca1 Ow1a . . . 49.7(4) ?
Mg3 Ca1 Ow1a . . 2_665 49.7(4) ?
Mg3 Ca1 Ow1b . . . 69.1(5) ?
Mg3 Ca1 Ow1b . . 2_665 69.1(5) ?
Mg3 Ca1 Ow2a . . . 66.5(4) ?
Mg3 Ca1 Ow2a . . 2_665 66.5(4) ?
Mg3 Ca1 Ow2b . . . 87.7(8) ?
Mg3 Ca1 Ow2b . . 2_665 87.7(8) ?
Mg3 Ca1 Ow3 . . . 14.4(11) ?
Mg3 Ca1 Ow3 . . 2_665 14.4(11) ?
Mg3 Ca1 Ow4 . . . 180.0(5) ?
Mg3 Ca1 Ow5 . . . 128.9(5) ?
Mg3 Ca1 Ow5 . . 2_665 128.9(5) ?
Mg3 Ca1 Ow5 . . 7_565 128.9(5) ?
Mg3 Ca1 Ow5 . . 8_655 128.9(5) ?
Mg3 Ca1 Ow6 . . 3_655 119.8(6) ?
Mg3 Ca1 Ow6 . . 4_565 119.8(6) ?
Ca1 Ca1 Ca1 3_645 . 3_655 85.91(16) ?
Ca1 Ca1 Mg1 3_645 . . 0 ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 9_554 61.84(14) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 10_564 88.27(17) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 11_565 87.75(17) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 12_555 59.59(14) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 13_555 59.59(14) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 14_565 87.75(17) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 15_564 88.27(17) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_645 . 16_554 61.84(14) ?
Ca1 Ca1 Ow1a 3_645 . . 118.3(2) ?
Ca1 Ca1 Ow1a 3_645 . 2_665 118.3(2) ?
Ca1 Ca1 Ow1b 3_645 . . 105.1(4) ?
Ca1 Ca1 Ow1b 3_645 . 2_665 105.1(4) ?
Ca1 Ca1 Ow2a 3_645 . . 70.6(3) ?
Ca1 Ca1 Ow2a 3_645 . 2_665 156.5(4) ?
Ca1 Ca1 Ow2b 3_645 . . 49.3(8) ?
Ca1 Ca1 Ow2b 3_645 . 2_665 135.2(8) ?
Ca1 Ca1 Ow3 3_645 . . 135.2(3) ?
Ca1 Ca1 Ow3 3_645 . 2_665 135.2(3) ?
Ca1 Ca1 Ow4 3_645 . . 42.96(9) ?
Ca1 Ca1 Ow5 3_645 . . 32.1(5) ?
Ca1 Ca1 Ow5 3_645 . 2_665 85.8(6) ?
Ca1 Ca1 Ow5 3_645 . 7_565 85.8(6) ?
Ca1 Ca1 Ow5 3_645 . 8_655 32.1(5) ?
Ca1 Ca1 Ow6 3_645 . 3_655 68.7(4) ?
Ca1 Ca1 Ow6 3_645 . 4_565 68.7(4) ?
Ca1 Ca1 Mg1 3_655 . . 0 ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 9_554 88.27(17) ?
Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 10_564 61.84(14) ?

Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 11_565 59.59(14) ?
 Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 12_555 87.75(17) ?
 Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 13_555 87.75(17) ?
 Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 14_565 59.59(14) ?
 Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 15_564 61.84(14) ?
 Ca1 Ca1 Ca2 3_655 . 16_554 88.27(17) ?
 Ca1 Ca1 Ow1a 3_655 . . 118.3(2) ?
 Ca1 Ca1 Ow1a 3_655 . 2_665 118.3(2) ?
 Ca1 Ca1 Ow1b 3_655 . . 105.1(4) ?
 Ca1 Ca1 Ow1b 3_655 . 2_665 105.1(4) ?
 Ca1 Ca1 Ow2a 3_655 . . 156.5(4) ?
 Ca1 Ca1 Ow2a 3_655 . 2_665 70.6(3) ?
 Ca1 Ca1 Ow2b 3_655 . . 135.2(8) ?
 Ca1 Ca1 Ow2b 3_655 . 2_665 49.3(8) ?
 Ca1 Ca1 Ow3 3_655 . . 135.2(3) ?
 Ca1 Ca1 Ow3 3_655 . 2_665 135.2(3) ?
 Ca1 Ca1 Ow4 3_655 . . 42.96(9) ?
 Ca1 Ca1 Ow5 3_655 . . 85.8(6) ?
 Ca1 Ca1 Ow5 3_655 . 2_665 32.1(5) ?
 Ca1 Ca1 Ow5 3_655 . 7_565 32.1(5) ?
 Ca1 Ca1 Ow5 3_655 . 8_655 85.8(6) ?
 Ca1 Ca1 Ow6 3_655 . 3_655 68.7(4) ?
 Ca1 Ca1 Ow6 3_655 . 4_565 68.7(4) ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 9_554 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 10_564 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 11_565 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 12_555 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 13_555 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 14_565 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 15_564 0 ?
 Mg1 Ca1 Ca2 . . 16_554 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow1a . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow1a . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow1b . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow1b . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow2a . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow2a . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow2b . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow2b . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow3 . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow3 . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow4 . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow5 . . . 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow5 . . 2_665 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow5 . . 7_565 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow5 . . 8_655 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow6 . . 3_655 0 ?
 Mg1 Ca1 Ow6 . . 4_565 0 ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 10_564 139.87(18) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 11_565 138.02(18) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 12_555 2.28(15) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 13_555 121.4(2) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 14_565 39.0(3) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 15_564 37.8(3) ?

Ca2 Ca1 Ca2 9_554 . 16_554 123.7(2) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 9_554 . . 63.3(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 9_554 . 2_665 153.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 9_554 . . 45.4(4) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 9_554 . 2_665 161.1(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 9_554 . . 80.8(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 9_554 . 2_665 115.73(19) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 9_554 . . 71.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 9_554 . 2_665 109.7(3) ?
Ca2 Ca1 Ow3 9_554 . . 96.5(10) ?
Ca2 Ca1 Ow3 9_554 . 2_665 123.4(10) ?
Ca2 Ca1 Ow4 9_554 . . 69.93(9) ?
Ca2 Ca1 Ow5 9_554 . . 94.0(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 9_554 . 2_665 60.0(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 9_554 . 7_565 115.9(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 9_554 . 8_655 29.7(5) ?
Ca2 Ca1 Ow6 9_554 . 3_655 20.7(3) ?
Ca2 Ca1 Ow6 9_554 . 4_565 126.5(6) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 11_565 2.28(15) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 12_555 138.02(18) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 13_555 39.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 14_565 121.4(2) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 15_564 123.7(2) ?
Ca2 Ca1 Ca2 10_564 . 16_554 37.8(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 10_564 . . 153.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 10_564 . 2_665 63.3(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 10_564 . . 161.1(2) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 10_564 . 2_665 45.4(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 10_564 . . 115.73(19) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 10_564 . 2_665 80.8(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 10_564 . . 109.7(3) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 10_564 . 2_665 71.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow3 10_564 . . 123.4(10) ?
Ca2 Ca1 Ow3 10_564 . 2_665 96.5(10) ?
Ca2 Ca1 Ow4 10_564 . . 69.93(9) ?
Ca2 Ca1 Ow5 10_564 . . 60.0(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 10_564 . 2_665 94.0(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 10_564 . 7_565 29.7(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 10_564 . 8_655 115.9(5) ?
Ca2 Ca1 Ow6 10_564 . 3_655 126.5(6) ?
Ca2 Ca1 Ow6 10_564 . 4_565 20.7(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 11_565 . 12_555 136.23(18) ?
Ca2 Ca1 Ca2 11_565 . 13_555 40.1(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 11_565 . 14_565 119.2(2) ?
Ca2 Ca1 Ca2 11_565 . 15_564 121.4(2) ?
Ca2 Ca1 Ca2 11_565 . 16_554 39.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 11_565 . . 154.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 11_565 . 2_665 65.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 11_565 . . 159.8(2) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 11_565 . 2_665 47.7(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 11_565 . . 117.57(19) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 11_565 . 2_665 80.5(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 11_565 . . 110.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 11_565 . 2_665 70.9(4) ?

Ca2 Ca1 Ow3 11_565 . . 125.1(10) ?
Ca2 Ca1 Ow3 11_565 . 2_665 98.5(10) ?
Ca2 Ca1 Ow4 11_565 . . 68.12(9) ?
Ca2 Ca1 Ow5 11_565 . . 60.1(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 11_565 . 2_665 91.7(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 11_565 . 7_565 27.5(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 11_565 . 8_655 114.8(5) ?
Ca2 Ca1 Ow6 11_565 . 3_655 124.3(6) ?
Ca2 Ca1 Ow6 11_565 . 4_565 21.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 12_555 . 13_555 119.2(2) ?
Ca2 Ca1 Ca2 12_555 . 14_565 40.1(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 12_555 . 15_564 39.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 12_555 . 16_554 121.4(2) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 12_555 . . 65.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 12_555 . 2_665 154.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 12_555 . . 47.7(4) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 12_555 . 2_665 159.8(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 12_555 . . 80.5(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 12_555 . 2_665 117.57(19) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 12_555 . . 70.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 12_555 . 2_665 110.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow3 12_555 . . 98.5(10) ?
Ca2 Ca1 Ow3 12_555 . 2_665 125.1(10) ?
Ca2 Ca1 Ow4 12_555 . . 68.12(9) ?
Ca2 Ca1 Ow5 12_555 . . 91.7(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 12_555 . 2_665 60.1(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 12_555 . 7_565 114.8(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 12_555 . 8_655 27.5(5) ?
Ca2 Ca1 Ow6 12_555 . 3_655 21.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ow6 12_555 . 4_565 124.3(6) ?
Ca2 Ca1 Ca2 13_555 . 14_565 136.23(18) ?
Ca2 Ca1 Ca2 13_555 . 15_564 138.02(18) ?
Ca2 Ca1 Ca2 13_555 . 16_554 2.28(15) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 13_555 . . 154.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 13_555 . 2_665 65.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 13_555 . . 159.8(2) ?
Ca2 Ca1 Ow1b 13_555 . 2_665 47.7(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 13_555 . . 80.5(2) ?
Ca2 Ca1 Ow2a 13_555 . 2_665 117.57(19) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 13_555 . . 70.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow2b 13_555 . 2_665 110.9(4) ?
Ca2 Ca1 Ow3 13_555 . . 125.1(10) ?
Ca2 Ca1 Ow3 13_555 . 2_665 98.5(10) ?
Ca2 Ca1 Ow4 13_555 . . 68.12(9) ?
Ca2 Ca1 Ow5 13_555 . . 27.5(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 13_555 . 2_665 114.8(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 13_555 . 7_565 60.1(5) ?
Ca2 Ca1 Ow5 13_555 . 8_655 91.7(5) ?
Ca2 Ca1 Ow6 13_555 . 3_655 124.3(6) ?
Ca2 Ca1 Ow6 13_555 . 4_565 21.0(3) ?
Ca2 Ca1 Ca2 14_565 . 15_564 2.28(15) ?
Ca2 Ca1 Ca2 14_565 . 16_554 138.02(18) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 14_565 . . 65.4(3) ?
Ca2 Ca1 Ow1a 14_565 . 2_665 154.0(3) ?

Ca2 Ca1 Ow1b 14_565 . . 47.7(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow1b 14_565 . 2_665 159.8(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 14_565 . . 117.57(19) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 14_565 . 2_665 80.5(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 14_565 . . 110.9(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 14_565 . 2_665 70.9(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 14_565 . . 98.5(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 14_565 . 2_665 125.1(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow4 14_565 . . 68.12(9) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 14_565 . . 114.8(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 14_565 . 2_665 27.5(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 14_565 . 7_565 91.7(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 14_565 . 8_655 60.1(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 14_565 . 3_655 21.0(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 14_565 . 4_565 124.3(6) ?
 Ca2 Ca1 Ca2 15_564 . 16_554 139.87(18) ?
 Ca2 Ca1 Ow1a 15_564 . . 63.3(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow1a 15_564 . 2_665 153.4(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow1b 15_564 . . 45.4(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow1b 15_564 . 2_665 161.1(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 15_564 . . 115.73(19) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 15_564 . 2_665 80.8(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 15_564 . . 109.7(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 15_564 . 2_665 71.9(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 15_564 . . 96.5(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 15_564 . 2_665 123.4(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow4 15_564 . . 69.93(9) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 15_564 . . 115.9(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 15_564 . 2_665 29.7(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 15_564 . 7_565 94.0(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 15_564 . 8_655 60.0(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 15_564 . 3_655 20.7(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 15_564 . 4_565 126.5(6) ?
 Ca2 Ca1 Ow1a 16_554 . . 153.4(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow1a 16_554 . 2_665 63.3(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow1b 16_554 . . 161.1(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow1b 16_554 . 2_665 45.4(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 16_554 . . 80.8(2) ?
 Ca2 Ca1 Ow2a 16_554 . 2_665 115.73(19) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 16_554 . . 71.9(4) ?
 Ca2 Ca1 Ow2b 16_554 . 2_665 109.7(3) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 16_554 . . 123.4(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow3 16_554 . 2_665 96.5(10) ?
 Ca2 Ca1 Ow4 16_554 . . 69.93(9) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 16_554 . . 29.7(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 16_554 . 2_665 115.9(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 16_554 . 7_565 60.0(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow5 16_554 . 8_655 94.0(5) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 16_554 . 3_655 126.5(6) ?
 Ca2 Ca1 Ow6 16_554 . 4_565 20.7(3) ?
 Ow1a Ca1 Ow1a . . 2_665 99.3(6) ?
 Ow1a Ca1 Ow1b . . . 19.5(6) ?
 Ow1a Ca1 Ow1b . . 2_665 118.8(7) ?
 Ow1a Ca1 Ow2a . . . 75.0(3) ?

Ow1a Ca1 Ow2a . . 2_665 75.0(3) ?
Ow1a Ca1 Ow2b . . . 88.5(5) ?
Ow1a Ca1 Ow2b . . 2_665 88.5(5) ?
Ow1a Ca1 Ow3 . . . 35.3(11) ?
Ow1a Ca1 Ow3 . . 2_665 64.0(11) ?
Ow1a Ca1 Ow4 . . . 130.3(4) ?
Ow1a Ca1 Ow5 . . . 144.3(5) ?
Ow1a Ca1 Ow5 . . 2_665 90.1(6) ?
Ow1a Ca1 Ow5 . . 7_565 144.3(5) ?
Ow1a Ca1 Ow5 . . 8_655 90.1(6) ?
Ow1a Ca1 Ow6 . . 3_655 70.1(7) ?
Ow1a Ca1 Ow6 . . 4_565 169.5(8) ?
Ow1a Ca1 Ow1b 2_665 . . 118.8(7) ?
Ow1a Ca1 Ow1b 2_665 . 2_665 19.5(6) ?
Ow1a Ca1 Ow2a 2_665 . . 75.0(3) ?
Ow1a Ca1 Ow2a 2_665 . 2_665 75.0(3) ?
Ow1a Ca1 Ow2b 2_665 . . 88.5(5) ?
Ow1a Ca1 Ow2b 2_665 . 2_665 88.5(5) ?
Ow1a Ca1 Ow3 2_665 . . 64.0(11) ?
Ow1a Ca1 Ow3 2_665 . 2_665 35.3(11) ?
Ow1a Ca1 Ow4 2_665 . . 130.3(4) ?
Ow1a Ca1 Ow5 2_665 . . 90.1(6) ?
Ow1a Ca1 Ow5 2_665 . 2_665 144.3(5) ?
Ow1a Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 90.1(6) ?
Ow1a Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 144.3(5) ?
Ow1a Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 169.5(8) ?
Ow1a Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 70.1(7) ?
Ow1b Ca1 Ow1b . . 2_665 138.3(8) ?
Ow1b Ca1 Ow2a . . . 81.8(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2a . . 2_665 81.8(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2b . . . 89.2(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2b . . 2_665 89.2(3) ?
Ow1b Ca1 Ow3 . . . 54.8(12) ?
Ow1b Ca1 Ow3 . . 2_665 83.5(12) ?
Ow1b Ca1 Ow4 . . . 110.9(5) ?
Ow1b Ca1 Ow5 . . . 136.1(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 . . 2_665 74.2(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 . . 7_565 136.1(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 . . 8_655 74.2(6) ?
Ow1b Ca1 Ow6 . . 3_655 50.7(8) ?
Ow1b Ca1 Ow6 . . 4_565 171.1(9) ?
Ow1b Ca1 Ow2a 2_665 . . 81.8(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2a 2_665 . 2_665 81.8(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2b 2_665 . . 89.2(3) ?
Ow1b Ca1 Ow2b 2_665 . 2_665 89.2(3) ?
Ow1b Ca1 Ow3 2_665 . . 83.5(12) ?
Ow1b Ca1 Ow3 2_665 . 2_665 54.8(12) ?
Ow1b Ca1 Ow4 2_665 . . 110.9(5) ?
Ow1b Ca1 Ow5 2_665 . . 74.2(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 2_665 . 2_665 136.1(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 74.2(6) ?
Ow1b Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 136.1(6) ?
Ow1b Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 171.1(9) ?
Ow1b Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 50.7(8) ?

Ow2a Ca1 Ow2a . . 2_665 133.0(6) ?
 Ow2a Ca1 Ow2b . . . 21.2(8) ?
 Ow2a Ca1 Ow2b . . 2_665 154.2(10) ?
 Ow2a Ca1 Ow3 . . . 67.3(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow3 . . 2_665 67.3(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow4 . . . 113.5(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 . . . 74.3(6) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 . . 2_665 140.5(5) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 . . 7_565 140.5(5) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 . . 8_655 74.3(6) ?
 Ow2a Ca1 Ow6 . . 3_655 101.4(3) ?
 Ow2a Ca1 Ow6 . . 4_565 101.4(3) ?
 Ow2a Ca1 Ow2b 2_665 . . 154.2(10) ?
 Ow2a Ca1 Ow2b 2_665 . 2_665 21.2(8) ?
 Ow2a Ca1 Ow3 2_665 . . 67.3(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow3 2_665 . 2_665 67.3(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow4 2_665 . . 113.5(4) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 2_665 . . 140.5(5) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 2_665 . 2_665 74.3(6) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 74.3(6) ?
 Ow2a Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 140.5(5) ?
 Ow2a Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 101.4(3) ?
 Ow2a Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 101.4(3) ?
 Ow2b Ca1 Ow2b . . 2_665 175.4(12) ?
 Ow2b Ca1 Ow3 . . . 87.8(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow3 . . 2_665 87.8(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow4 . . . 92.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 . . . 57.2(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 . . 2_665 126.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 . . 7_565 126.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 . . 8_655 57.2(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow6 . . 3_655 91.1(4) ?
 Ow2b Ca1 Ow6 . . 4_565 91.1(4) ?
 Ow2b Ca1 Ow3 2_665 . . 87.8(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow3 2_665 . 2_665 87.8(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow4 2_665 . . 92.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 2_665 . . 126.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 2_665 . 2_665 57.2(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 57.2(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 126.3(8) ?
 Ow2b Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 91.1(4) ?
 Ow2b Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 91.1(4) ?
 Ow3 Ca1 Ow3 . . 2_665 28.7(15) ?
 Ow3 Ca1 Ow4 . . . 165.6(11) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 . . . 137.8(8) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 . . 2_665 118.5(10) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 . . 7_565 137.8(8) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 . . 8_655 118.5(10) ?
 Ow3 Ca1 Ow6 . . 3_655 105.4(12) ?
 Ow3 Ca1 Ow6 . . 4_565 134.2(12) ?
 Ow3 Ca1 Ow4 2_665 . . 165.6(11) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 2_665 . . 118.5(10) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 2_665 . 2_665 137.8(8) ?
 Ow3 Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 118.5(10) ?

Ow3 Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 137.8(8) ?
Ow3 Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 134.2(12) ?
Ow3 Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 105.4(12) ?
Ow4 Ca1 Ow5 . . . 51.1(5) ?
Ow4 Ca1 Ow5 . . 2_665 51.1(5) ?
Ow4 Ca1 Ow5 . . 7_565 51.1(5) ?
Ow4 Ca1 Ow5 . . 8_655 51.1(5) ?
Ow4 Ca1 Ow6 . . 3_655 60.2(6) ?
Ow4 Ca1 Ow6 . . 4_565 60.2(6) ?
Ow5 Ca1 Ow5 . . 2_665 102.1(8) ?
Ow5 Ca1 Ow5 . . 7_565 69.2(7) ?
Ow5 Ca1 Ow5 . . 8_655 64.2(7) ?
Ow5 Ca1 Ow6 . . 3_655 98.6(7) ?
Ow5 Ca1 Ow6 . . 4_565 39.3(6) ?
Ow5 Ca1 Ow5 2_665 . 7_565 64.2(7) ?
Ow5 Ca1 Ow5 2_665 . 8_655 69.2(7) ?
Ow5 Ca1 Ow6 2_665 . 3_655 39.3(6) ?
Ow5 Ca1 Ow6 2_665 . 4_565 98.6(7) ?
Ow5 Ca1 Ow5 7_565 . 8_655 102.1(8) ?
Ow5 Ca1 Ow6 7_565 . 3_655 98.6(7) ?
Ow5 Ca1 Ow6 7_565 . 4_565 39.3(6) ?
Ow5 Ca1 Ow6 8_655 . 3_655 39.3(6) ?
Ow5 Ca1 Ow6 8_655 . 4_565 98.6(7) ?
Ow6 Ca1 Ow6 3_655 . 4_565 120.4(9) ?
Fe3 Mg1 Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Mg1 Ca1 . . . 0 ?
Fe3 Mg1 Ow1a . . . 49.7(4) ?
Fe3 Mg1 Ow1a . . 2_665 49.7(4) ?
Fe3 Mg1 Ow1b . . . 69.1(5) ?
Fe3 Mg1 Ow1b . . 2_665 69.1(5) ?
Fe3 Mg1 Ow2a . . . 66.5(4) ?
Fe3 Mg1 Ow2a . . 2_665 66.5(4) ?
Fe3 Mg1 Ow2b . . . 87.7(8) ?
Fe3 Mg1 Ow2b . . 2_665 87.7(8) ?
Fe3 Mg1 Ow4 . . . 180.0(5) ?
Fe3 Mg1 Ow5 . . . 128.9(5) ?
Fe3 Mg1 Ow5 . . 2_665 128.9(5) ?
Fe3 Mg1 Ow5 . . 7_565 128.9(5) ?
Fe3 Mg1 Ow5 . . 8_655 128.9(5) ?
Mg3 Mg1 Ca1 . . . 0 ?
Mg3 Mg1 Ow1a . . . 49.7(4) ?
Mg3 Mg1 Ow1a . . 2_665 49.7(4) ?
Mg3 Mg1 Ow1b . . . 69.1(5) ?
Mg3 Mg1 Ow1b . . 2_665 69.1(5) ?
Mg3 Mg1 Ow2a . . . 66.5(4) ?
Mg3 Mg1 Ow2a . . 2_665 66.5(4) ?
Mg3 Mg1 Ow2b . . . 87.7(8) ?
Mg3 Mg1 Ow2b . . 2_665 87.7(8) ?
Mg3 Mg1 Ow4 . . . 180.0(5) ?
Mg3 Mg1 Ow5 . . . 128.9(5) ?
Mg3 Mg1 Ow5 . . 2_665 128.9(5) ?
Mg3 Mg1 Ow5 . . 7_565 128.9(5) ?
Mg3 Mg1 Ow5 . . 8_655 128.9(5) ?
Ca1 Mg1 Ow1a . . . 0 ?

Ca1 Mg1 Ow1a . . 2_665 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow1b . . . 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow1b . . 2_665 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow2a . . . 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow2a . . 2_665 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow2b . . . 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow2b . . 2_665 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow4 . . . 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow5 . . . 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow5 . . 2_665 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow5 . . 7_565 0 ?
 Ca1 Mg1 Ow5 . . 8_655 0 ?
 Ow1a Mg1 Ow1a . . 2_665 99.3(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow1b . . . 19.5(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow1b . . 2_665 118.8(7) ?
 Ow1a Mg1 Ow2a . . . 75.0(3) ?
 Ow1a Mg1 Ow2a . . 2_665 75.0(3) ?
 Ow1a Mg1 Ow2b . . . 88.5(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow2b . . 2_665 88.5(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow4 . . . 130.3(4) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 . . . 144.3(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 . . 2_665 90.1(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 . . 7_565 144.3(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 . . 8_655 90.1(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow1b 2_665 . . 118.8(7) ?
 Ow1a Mg1 Ow1b 2_665 . 2_665 19.5(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow2a 2_665 . . 75.0(3) ?
 Ow1a Mg1 Ow2a 2_665 . 2_665 75.0(3) ?
 Ow1a Mg1 Ow2b 2_665 . . 88.5(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow2b 2_665 . 2_665 88.5(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow4 2_665 . . 130.3(4) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 2_665 . . 90.1(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 2_665 . 2_665 144.3(5) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 2_665 . 7_565 90.1(6) ?
 Ow1a Mg1 Ow5 2_665 . 8_655 144.3(5) ?
 Ow1b Mg1 Ow1b . . 2_665 138.3(8) ?
 Ow1b Mg1 Ow2a . . . 81.8(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2a . . 2_665 81.8(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2b . . . 89.2(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2b . . 2_665 89.2(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow4 . . . 110.9(5) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 . . . 136.1(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 . . 2_665 74.2(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 . . 7_565 136.1(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 . . 8_655 74.2(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow2a 2_665 . . 81.8(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2a 2_665 . 2_665 81.8(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2b 2_665 . . 89.2(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow2b 2_665 . 2_665 89.2(3) ?
 Ow1b Mg1 Ow4 2_665 . . 110.9(5) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 2_665 . . 74.2(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 2_665 . 2_665 136.1(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 2_665 . 7_565 74.2(6) ?
 Ow1b Mg1 Ow5 2_665 . 8_655 136.1(6) ?

Ow2a Mg1 Ow2a . . 2_665 133.0(6) ?
Ow2a Mg1 Ow2b . . . 21.2(8) ?
Ow2a Mg1 Ow2b . . 2_665 154.2(10) ?
Ow2a Mg1 Ow4 . . . 113.5(4) ?
Ow2a Mg1 Ow5 . . . 74.3(6) ?
Ow2a Mg1 Ow5 . . 2_665 140.5(5) ?
Ow2a Mg1 Ow5 . . 7_565 140.5(5) ?
Ow2a Mg1 Ow5 . . 8_655 74.3(6) ?
Ow2a Mg1 Ow2b 2_665 . . 154.2(10) ?
Ow2a Mg1 Ow2b 2_665 . 2_665 21.2(8) ?
Ow2a Mg1 Ow4 2_665 . . 113.5(4) ?
Ow2a Mg1 Ow5 2_665 . . 140.5(5) ?
Ow2a Mg1 Ow5 2_665 . 2_665 74.3(6) ?
Ow2a Mg1 Ow5 2_665 . 7_565 74.3(6) ?
Ow2a Mg1 Ow5 2_665 . 8_655 140.5(5) ?
Ow2b Mg1 Ow2b . . 2_665 175.4(12) ?
Ow2b Mg1 Ow4 . . . 92.3(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 . . . 57.2(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 . . 2_665 126.3(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 . . 7_565 126.3(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 . . 8_655 57.2(8) ?
Ow2b Mg1 Ow4 2_665 . . 92.3(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 2_665 . . 126.3(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 2_665 . 2_665 57.2(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 2_665 . 7_565 57.2(8) ?
Ow2b Mg1 Ow5 2_665 . 8_655 126.3(8) ?
Ow4 Mg1 Ow5 . . . 51.1(5) ?
Ow4 Mg1 Ow5 . . 2_665 51.1(5) ?
Ow4 Mg1 Ow5 . . 7_565 51.1(5) ?
Ow4 Mg1 Ow5 . . 8_655 51.1(5) ?
Ow5 Mg1 Ow5 . . 2_665 102.1(8) ?
Ow5 Mg1 Ow5 . . 7_565 69.2(7) ?
Ow5 Mg1 Ow5 . . 8_655 64.2(7) ?
Ow5 Mg1 Ow5 2_665 . 7_565 64.2(7) ?
Ow5 Mg1 Ow5 2_665 . 8_655 69.2(7) ?
Ow5 Mg1 Ow5 7_565 . 8_655 102.1(8) ?
Fe1 Mg2 Fe1 . . 10_555 122.0(2) ?
Fe1 Mg2 Fe2 . . 6_546 60.67(14) ?
Fe1 Mg2 Mo2 . . 6_546 60.03(18) ?
Fe1 Mg2 Mo2 . . 7_555 61.26(18) ?
Fe1 Mg2 As1 . . 10_555 175.3(3) ?
Fe1 Mg2 As1 . . 11_555 52.12(14) ?
Fe1 Mg2 O2 . . 10_555 151.6(4) ?
Fe1 Mg2 O2 . . 11_555 32.15(13) ?
Fe1 Mg2 O4a . . 6_546 32.4(2) ?
Fe1 Mg2 O4a . . 7_555 90.7(3) ?
Fe1 Mg2 O4b . . 6_546 30.4(2) ?
Fe1 Mg2 O4b . . 7_555 91.1(3) ?
Fe1 Mg2 As2 . . . 59.5(6) ?
Fe1 Mg2 As2 . . 4_556 60.8(7) ?
Fe1 Mg2 As2 . . 6_546 107.9(2) ?
Fe1 Mg2 As2 . . 6_556 51.7(2) ?
Fe1 Mg2 As2 . . 7_545 112.6(3) ?
Fe1 Mg2 As2 . . 7_555 55.3(2) ?

Fe1 Mg2 As3 . . . 78.2(3) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 11_556 99.0(4) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 4_556 66.76(10) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 13_556 106.7(4) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 6_546 56.06(9) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 7_555 83.7(3) ?
Fe1 Mg2 As3 . . 16_544 53.58(6) ?
Fe1 Mg2 O6 . . . 75.3(5) ?
Fe1 Mg2 O6 . . 4_556 82.1(2) ?
Fe1 Mg2 Mg2 . . 4_556 71(5) ?
Fe1 Mg2 Mg2 . . 6_546 116.1(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 . . 6_556 58.5(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 . . 7_545 118.8(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 . . 7_555 61.2(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . . 0 ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . 4_556 71(5) ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . 6_546 116.1(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . 6_556 58.5(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . 7_545 118.8(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 . . 7_555 61.2(3) ?
Fe1 Mg2 Ow6 . . 10_555 122.1(7) ?
Fe1 Mg2 Ow6 . . 11_555 98.4(7) ?
Fe1 Mg2 Fe2 10_555 . 6_546 61.35(15) ?
Fe1 Mg2 Mo2 10_555 . 6_546 62.21(19) ?
Fe1 Mg2 Mo2 10_555 . 7_555 60.7(2) ?
Fe1 Mg2 As1 10_555 . 10_555 53.39(16) ?
Fe1 Mg2 As1 10_555 . 11_555 171.4(3) ?
Fe1 Mg2 O2 10_555 . 10_555 33.05(15) ?
Fe1 Mg2 O2 10_555 . 11_555 153.3(3) ?
Fe1 Mg2 O4a 10_555 . 6_546 91.0(3) ?
Fe1 Mg2 O4a 10_555 . 7_555 33.2(2) ?
Fe1 Mg2 O4b 10_555 . 6_546 91.8(3) ?
Fe1 Mg2 O4b 10_555 . 7_555 31.3(2) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . . 64.5(8) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . 4_556 65.6(6) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . 6_546 54.7(3) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . 6_556 117.6(3) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . 7_545 51.0(2) ?
Fe1 Mg2 As2 10_555 . 7_555 113.0(3) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . . 69.64(11) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 11_556 67.04(7) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 4_556 76.6(3) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 13_556 56.13(7) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 6_546 82.3(3) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 7_555 58.25(11) ?
Fe1 Mg2 As3 10_555 . 16_544 103.4(4) ?
Fe1 Mg2 O6 10_555 . . 86.7(2) ?
Fe1 Mg2 O6 10_555 . 4_556 74.9(4) ?
Fe1 Mg2 Mg2 10_555 . 4_556 106(5) ?
Fe1 Mg2 Mg2 10_555 . 6_546 60.5(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 10_555 . 6_556 124.7(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 10_555 . 7_545 57.9(3) ?
Fe1 Mg2 Mg2 10_555 . 7_555 122.1(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . . 0 ?

Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . 4_556 106(5) ?
Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . 6_546 60.5(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . 6_556 124.7(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . 7_545 57.9(3) ?
Fe1 Mg2 Ca2 10_555 . 7_555 122.1(3) ?
Fe1 Mg2 Ow6 10_555 . 10_555 97.7(7) ?
Fe1 Mg2 Ow6 10_555 . 11_555 129.0(7) ?
Fe2 Mg2 Mo2 6_546 . 6_546 3.21(10) ?
Fe2 Mg2 Mo2 6_546 . 7_555 3.59(9) ?
Fe2 Mg2 As1 6_546 . 10_555 114.7(3) ?
Fe2 Mg2 As1 6_546 . 11_555 112.6(2) ?
Fe2 Mg2 O2 6_546 . 10_555 93.1(3) ?
Fe2 Mg2 O2 6_546 . 11_555 92.3(3) ?
Fe2 Mg2 O4a 6_546 . 6_546 31.95(18) ?
Fe2 Mg2 O4a 6_546 . 7_555 31.44(19) ?
Fe2 Mg2 O4b 6_546 . 6_546 31.1(2) ?
Fe2 Mg2 O4b 6_546 . 7_555 30.5(2) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . . 12.6(9) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . 4_556 23.6(7) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . 6_546 75.7(3) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . 6_556 78.9(3) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . 7_545 77.2(3) ?
Fe2 Mg2 As2 6_546 . 7_555 77.5(3) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . . 53.28(14) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 11_556 74.27(18) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 4_556 51.74(14) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 13_556 72.22(15) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 6_546 46.28(11) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 7_555 47.25(12) ?
Fe2 Mg2 As3 6_546 . 16_544 69.66(15) ?
Fe2 Mg2 O6 6_546 . . 69.3(3) ?
Fe2 Mg2 O6 6_546 . 4_556 67.8(3) ?
Fe2 Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 88(3) ?
Fe2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 88.8(4) ?
Fe2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 91.0(4) ?
Fe2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 88.9(3) ?
Fe2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 91.1(4) ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 88(3) ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 88.8(4) ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 91.0(4) ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 88.9(3) ?
Fe2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 91.1(4) ?
Fe2 Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 135.4(7) ?
Fe2 Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 141.0(7) ?
Mo2 Mg2 Mo2 6_546 . 7_555 6.79(13) ?
Mo2 Mg2 As1 6_546 . 10_555 115.4(3) ?
Mo2 Mg2 As1 6_546 . 11_555 112.1(3) ?
Mo2 Mg2 O2 6_546 . 10_555 94.4(3) ?
Mo2 Mg2 O2 6_546 . 11_555 91.2(3) ?
Mo2 Mg2 O4a 6_546 . 6_546 32.6(2) ?
Mo2 Mg2 O4a 6_546 . 7_555 31.2(2) ?
Mo2 Mg2 O4b 6_546 . 6_546 31.2(2) ?
Mo2 Mg2 O4b 6_546 . 7_555 31.0(2) ?

Mo2 Mg2 As2 6_546 . . 9.4(9) ?
Mo2 Mg2 As2 6_546 . 4_556 26.7(7) ?
Mo2 Mg2 As2 6_546 . 6_546 78.8(3) ?
Mo2 Mg2 As2 6_546 . 6_556 76.0(3) ?
Mo2 Mg2 As2 6_546 . 7_545 80.2(3) ?
Mo2 Mg2 As2 6_546 . 7_555 74.5(3) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . . 50.27(18) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 11_556 71.6(2) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 4_556 54.76(19) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 13_556 69.94(19) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 6_546 48.99(16) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 7_555 44.58(16) ?
Mo2 Mg2 As3 6_546 . 16_544 71.99(19) ?
Mo2 Mg2 O6 6_546 . . 66.1(3) ?
Mo2 Mg2 O6 6_546 . 4_556 71.0(3) ?
Mo2 Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 91(3) ?
Mo2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 91.9(4) ?
Mo2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 91.9(4) ?
Mo2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 88.1(4) ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 91(3) ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 91.9(4) ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 91.9(4) ?
Mo2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 88.1(4) ?
Mo2 Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 138.6(7) ?
Mo2 Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 137.9(8) ?
Mo2 Mg2 As1 7_555 . 10_555 114.1(3) ?
Mo2 Mg2 As1 7_555 . 11_555 112.8(2) ?
Mo2 Mg2 O2 7_555 . 10_555 91.9(4) ?
Mo2 Mg2 O2 7_555 . 11_555 93.2(3) ?
Mo2 Mg2 O4a 7_555 . 6_546 31.3(2) ?
Mo2 Mg2 O4a 7_555 . 7_555 32.3(2) ?
Mo2 Mg2 O4b 7_555 . 6_546 31.2(2) ?
Mo2 Mg2 O4b 7_555 . 7_555 30.6(2) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . . 16.2(9) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . 4_556 20.2(6) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . 6_546 72.4(3) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . 6_556 82.0(3) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . 7_545 74.0(3) ?
Mo2 Mg2 As2 7_555 . 7_555 80.8(3) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . . 56.74(19) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 11_556 77.4(2) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 4_556 48.30(18) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 13_556 74.98(19) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 6_546 43.16(15) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 7_555 50.42(16) ?
Mo2 Mg2 As3 7_555 . 16_544 66.91(18) ?
Mo2 Mg2 O6 7_555 . . 72.8(3) ?
Mo2 Mg2 O6 7_555 . 4_556 64.3(3) ?
Mo2 Mg2 Mg2 7_555 . 4_556 85(3) ?
Mo2 Mg2 Mg2 7_555 . 6_546 85.5(4) ?
Mo2 Mg2 Mg2 7_555 . 6_556 94.1(4) ?

Mo2 Mg2 Mg2 7_555 . 7_545 85.7(4) ?
 Mo2 Mg2 Mg2 7_555 . 7_555 94.3(4) ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 85(3) ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 85.5(4) ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 94.1(4) ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 85.7(4) ?
 Mo2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 94.3(4) ?
 Mo2 Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 131.8(7) ?
 Mo2 Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 144.4(8) ?
 As1 Mg2 As1 10_555 . 11_555 132.4(2) ?
 As1 Mg2 O2 10_555 . 10_555 23.94(11) ?
 As1 Mg2 O2 10_555 . 11_555 152.5(3) ?
 As1 Mg2 O4a 10_555 . 6_546 143.0(5) ?
 As1 Mg2 O4a 10_555 . 7_555 84.9(3) ?
 As1 Mg2 O4b 10_555 . 6_546 144.9(5) ?
 As1 Mg2 O4b 10_555 . 7_555 84.4(3) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . . 116.3(7) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . 4_556 114.8(11) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . 6_546 69.2(3) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . 6_556 129.8(3) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . 7_545 64.3(3) ?
 As1 Mg2 As2 10_555 . 7_555 125.9(3) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . . 99.81(5) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 11_556 79.95(3) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 4_556 110.0(5) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 13_556 71.67(5) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 6_546 120.5(5) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 7_555 93.55(7) ?
 As1 Mg2 As3 10_555 . 16_544 125.1(5) ?
 As1 Mg2 O6 10_555 . . 104.2(2) ?
 As1 Mg2 O6 10_555 . 4_556 95.4(6) ?
 As1 Mg2 Mg2 10_555 . 4_556 109(5) ?
 As1 Mg2 Mg2 10_555 . 6_546 61.8(3) ?
 As1 Mg2 Mg2 10_555 . 6_556 123.9(3) ?
 As1 Mg2 Mg2 10_555 . 7_545 58.9(3) ?
 As1 Mg2 Mg2 10_555 . 7_555 121.1(3) ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . . 0 ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . 4_556 109(5) ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . 6_546 61.8(3) ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . 6_556 123.9(3) ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . 7_545 58.9(3) ?
 As1 Mg2 Ca2 10_555 . 7_555 121.1(3) ?
 As1 Mg2 Ow6 10_555 . 10_555 60.1(7) ?
 As1 Mg2 Ow6 10_555 . 11_555 85.9(6) ?
 As1 Mg2 O2 11_555 . 10_555 149.8(4) ?
 As1 Mg2 O2 11_555 . 11_555 22.87(10) ?
 As1 Mg2 O4a 11_555 . 6_546 81.9(3) ?
 As1 Mg2 O4a 11_555 . 7_555 142.6(4) ?
 As1 Mg2 O4b 11_555 . 6_546 81.6(3) ?
 As1 Mg2 O4b 11_555 . 7_555 143.1(4) ?
 As1 Mg2 As2 11_555 . . 111.0(9) ?
 As1 Mg2 As2 11_555 . 4_556 106.3(5) ?
 As1 Mg2 As2 11_555 . 6_546 119.1(3) ?

As1 Mg2 As2 11_555 . 6_556 64.9(3) ?
As1 Mg2 As2 11_555 . 7_545 123.2(3) ?
As1 Mg2 As2 11_555 . 7_555 69.7(3) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . . 112.4(5) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 11_556 118.4(5) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 4_556 94.90(6) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 13_556 129.5(6) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 6_546 89.12(5) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 7_555 123.1(5) ?
As1 Mg2 As3 11_555 . 16_544 68.21(3) ?
As1 Mg2 06 11_555 . . 96.8(6) ?
As1 Mg2 06 11_555 . 4_556 97.4(2) ?
As1 Mg2 Mg2 11_555 . 4_556 67(5) ?
As1 Mg2 Mg2 11_555 . 6_546 114.9(3) ?
As1 Mg2 Mg2 11_555 . 6_556 59.3(3) ?
As1 Mg2 Mg2 11_555 . 7_545 117.8(3) ?
As1 Mg2 Mg2 11_555 . 7_555 62.2(3) ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . . 0 ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . 4_556 67(5) ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . 6_546 114.9(3) ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . 6_556 59.3(3) ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . 7_545 117.8(3) ?
As1 Mg2 Ca2 11_555 . 7_555 62.2(3) ?
As1 Mg2 Ow6 11_555 . 10_555 82.6(6) ?
As1 Mg2 Ow6 11_555 . 11_555 59.6(7) ?
02 Mg2 02 10_555 . 11_555 172.4(5) ?
02 Mg2 04a 10_555 . 6_546 119.2(5) ?
02 Mg2 04a 10_555 . 7_555 66.2(3) ?
02 Mg2 04b 10_555 . 6_546 121.7(5) ?
02 Mg2 04b 10_555 . 7_555 64.1(4) ?
02 Mg2 As2 10_555 . . 97.5(10) ?
02 Mg2 As2 10_555 . 4_556 90.8(11) ?
02 Mg2 As2 10_555 . 6_546 50.6(3) ?
02 Mg2 As2 10_555 . 6_556 139.1(3) ?
02 Mg2 As2 10_555 . 7_545 45.4(3) ?
02 Mg2 As2 10_555 . 7_555 134.2(3) ?
02 Mg2 As3 10_555 . . 95.43(14) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 11_556 82.68(10) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 4_556 88.8(5) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 13_556 72.01(9) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 6_546 98.5(5) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 7_555 85.75(15) ?
02 Mg2 As3 10_555 . 16_544 109.4(6) ?
02 Mg2 06 10_555 . . 107.3(2) ?
02 Mg2 06 10_555 . 4_556 77.3(6) ?
02 Mg2 Mg2 10_555 . 4_556 100(5) ?
02 Mg2 Mg2 10_555 . 6_546 47.4(3) ?
02 Mg2 Mg2 10_555 . 6_556 139.0(3) ?
02 Mg2 Mg2 10_555 . 7_545 44.2(3) ?
02 Mg2 Mg2 10_555 . 7_555 135.8(3) ?
02 Mg2 Ca2 10_555 . . 0 ?
02 Mg2 Ca2 10_555 . 4_556 100(5) ?
02 Mg2 Ca2 10_555 . 6_546 47.4(3) ?
02 Mg2 Ca2 10_555 . 6_556 139.0(3) ?

02 Mg2 Ca2 10_555 . 7_545 44.2(3) ?
02 Mg2 Ca2 10_555 . 7_555 135.8(3) ?
02 Mg2 Ow6 10_555 . 10_555 67.7(7) ?
02 Mg2 Ow6 10_555 . 11_555 109.6(6) ?
02 Mg2 04a 11_555 . 6_546 64.3(3) ?
02 Mg2 04a 11_555 . 7_555 120.4(5) ?
02 Mg2 04b 11_555 . 6_546 62.5(3) ?
02 Mg2 04b 11_555 . 7_555 122.0(5) ?
02 Mg2 As2 11_555 . . 88.9(10) ?
02 Mg2 As2 11_555 . 4_556 92.0(7) ?
02 Mg2 As2 11_555 . 6_546 126.0(3) ?
02 Mg2 As2 11_555 . 6_556 47.5(3) ?
02 Mg2 As2 11_555 . 7_545 131.1(3) ?
02 Mg2 As2 11_555 . 7_555 52.5(3) ?
02 Mg2 As3 11_555 . . 92.1(5) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 11_556 104.0(5) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 4_556 90.29(14) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 13_556 114.9(6) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 6_546 81.40(13) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 7_555 101.9(5) ?
02 Mg2 As3 11_555 . 16_544 67.58(9) ?
02 Mg2 06 11_555 . . 79.7(6) ?
02 Mg2 06 11_555 . 4_556 99.7(2) ?
02 Mg2 Mg2 11_555 . 4_556 75(5) ?
02 Mg2 Mg2 11_555 . 6_546 127.4(3) ?
02 Mg2 Mg2 11_555 . 6_556 46.2(3) ?
02 Mg2 Mg2 11_555 . 7_545 130.6(3) ?
02 Mg2 Mg2 11_555 . 7_555 49.4(3) ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . . 0 ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . 4_556 75(5) ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . 6_546 127.4(3) ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . 6_556 46.2(3) ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . 7_545 130.6(3) ?
02 Mg2 Ca2 11_555 . 7_555 49.4(3) ?
02 Mg2 Ow6 11_555 . 10_555 104.6(6) ?
02 Mg2 Ow6 11_555 . 11_555 68.9(7) ?
04a Mg2 04a 6_546 . 7_555 63.4(3) ?
04a Mg2 04b 6_546 . 6_546 6.0(2) ?
04a Mg2 04b 6_546 . 7_555 61.8(3) ?
04a Mg2 As2 6_546 . . 36.6(3) ?
04a Mg2 As2 6_546 . 4_556 28.6(7) ?
04a Mg2 As2 6_546 . 6_546 82.4(4) ?
04a Mg2 As2 6_546 . 6_556 72.1(4) ?
04a Mg2 As2 6_546 . 7_545 86.2(4) ?
04a Mg2 As2 6_546 . 7_555 73.5(4) ?
04a Mg2 As3 6_546 . . 72.4(3) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 11_556 96.3(4) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 4_556 43.2(2) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 13_556 98.4(3) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 6_546 32.5(2) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 7_555 71.6(3) ?
04a Mg2 As3 6_546 . 16_544 46.3(2) ?
04a Mg2 06 6_546 . . 80.6(5) ?
04a Mg2 06 6_546 . 4_556 61.7(3) ?

04a Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 67(3) ?
04a Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 93.9(5) ?
04a Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 82.6(5) ?
04a Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 95.7(5) ?
04a Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 84.3(5) ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 67(3) ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 93.9(5) ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 82.6(5) ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 95.7(5) ?
04a Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 84.3(5) ?
04a Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 125.1(8) ?
04a Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 129.7(8) ?
04a Mg2 O4b 7_555 . 6_546 62.4(3) ?
04a Mg2 O4b 7_555 . 7_555 6.6(2) ?
04a Mg2 As2 7_555 . . 31.6(6) ?
04a Mg2 As2 7_555 . 4_556 46.2(4) ?
04a Mg2 As2 7_555 . 6_546 71.7(4) ?
04a Mg2 As2 7_555 . 6_556 90.2(4) ?
04a Mg2 As2 7_555 . 7_545 70.4(4) ?
04a Mg2 As2 7_555 . 7_555 86.6(4) ?
04a Mg2 As3 7_555 . . 46.2(3) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 11_556 56.9(2) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 4_556 69.7(3) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 13_556 50.0(2) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 6_546 69.4(3) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 7_555 34.9(2) ?
04a Mg2 As3 7_555 . 16_544 94.4(3) ?
04a Mg2 O6 7_555 . . 65.7(3) ?
04a Mg2 O6 7_555 . 4_556 78.8(5) ?
04a Mg2 Mg2 7_555 . 4_556 108(3) ?
04a Mg2 Mg2 7_555 . 6_546 82.5(5) ?
04a Mg2 Mg2 7_555 . 6_556 100.6(5) ?
04a Mg2 Mg2 7_555 . 7_545 81.0(5) ?
04a Mg2 Mg2 7_555 . 7_555 99.0(5) ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 108(3) ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 82.5(5) ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 100.6(5) ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 81.0(5) ?
04a Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 99.0(5) ?
04a Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 128.0(8) ?
04a Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 134.6(8) ?
04b Mg2 O4b 6_546 . 7_555 61.6(3) ?
04b Mg2 As2 6_546 . . 33.6(4) ?
04b Mg2 As2 6_546 . 4_556 32.3(7) ?
04b Mg2 As2 6_546 . 6_546 87.7(4) ?
04b Mg2 As2 6_546 . 6_556 66.5(4) ?
04b Mg2 As2 6_546 . 7_545 91.4(5) ?
04b Mg2 As2 6_546 . 7_555 67.7(4) ?
04b Mg2 As3 6_546 . . 67.3(3) ?
04b Mg2 As3 6_546 . 11_556 91.2(4) ?
04b Mg2 As3 6_546 . 4_556 49.0(3) ?
04b Mg2 As3 6_546 . 13_556 94.0(4) ?

04b Mg2 As3 6_546 . 6_546 38.4(2) ?
04b Mg2 As3 6_546 . 7_555 67.3(3) ?
04b Mg2 As3 6_546 . 16_544 51.7(2) ?
04b Mg2 O6 6_546 . . 74.8(5) ?
04b Mg2 O6 6_546 . 4_556 67.5(3) ?
04b Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 73(3) ?
04b Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 99.5(5) ?
04b Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 77.3(5) ?
04b Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 101.1(5) ?
04b Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 78.9(5) ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 73(3) ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 99.5(5) ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 77.3(5) ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 101.1(5) ?
04b Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 78.9(5) ?
04b Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 130.7(8) ?
04b Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 125.6(9) ?
04b Mg2 As2 7_555 . . 33.4(7) ?
04b Mg2 As2 7_555 . 4_556 41.8(4) ?
04b Mg2 As2 7_555 . 6_546 65.4(4) ?
04b Mg2 As2 7_555 . 6_556 95.6(5) ?
04b Mg2 As2 7_555 . 7_545 64.3(4) ?
04b Mg2 As2 7_555 . 7_555 92.2(5) ?
04b Mg2 As3 7_555 . . 52.5(3) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 11_556 63.3(3) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 4_556 63.9(3) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 13_556 56.0(2) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 6_546 64.4(3) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 7_555 41.4(2) ?
04b Mg2 As3 7_555 . 16_544 89.3(4) ?
04b Mg2 O6 7_555 . . 72.1(4) ?
04b Mg2 O6 7_555 . 4_556 72.3(5) ?
04b Mg2 Mg2 7_555 . 4_556 102(4) ?
04b Mg2 Mg2 7_555 . 6_546 76.5(5) ?
04b Mg2 Mg2 7_555 . 6_556 106.3(5) ?
04b Mg2 Mg2 7_555 . 7_545 75.1(5) ?
04b Mg2 Mg2 7_555 . 7_555 104.9(5) ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 102(4) ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 76.5(5) ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 106.3(5) ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 75.1(5) ?
04b Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 104.9(5) ?
04b Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 122.9(9) ?
04b Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 140.9(8) ?
As2 Mg2 As2 . . 4_556 35.9(5) ?
As2 Mg2 As2 . . 6_546 87.5(13) ?
As2 Mg2 As2 . . 6_556 67.9(13) ?
As2 Mg2 As2 . . 7_545 88.6(13) ?
As2 Mg2 As2 . . 7_555 66.0(13) ?
As2 Mg2 As3 . . . 41.3(8) ?
As2 Mg2 As3 . . 11_556 63.4(7) ?
As2 Mg2 As3 . . 4_556 63.9(9) ?

As2 Mg2 As3 . . 13_556 62.9(5) ?
As2 Mg2 As3 . . 6_546 57.5(7) ?
As2 Mg2 As3 . . 7_555 36.7(6) ?
As2 Mg2 As3 . . 16_544 79.5(6) ?
As2 Mg2 O6 . . . 56.7(10) ?
As2 Mg2 O6 . . 4_556 80.4(11) ?
As2 Mg2 Mg2 . . 4_556 99(3) ?
As2 Mg2 Mg2 . . 6_546 100.5(14) ?
As2 Mg2 Mg2 . . 6_556 79.9(13) ?
As2 Mg2 Mg2 . . 7_545 100.3(14) ?
As2 Mg2 Mg2 . . 7_555 79.7(13) ?
As2 Mg2 Ca2 . . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 . . 4_556 99(3) ?
As2 Mg2 Ca2 . . 6_546 100.5(14) ?
As2 Mg2 Ca2 . . 6_556 79.9(13) ?
As2 Mg2 Ca2 . . 7_545 100.3(14) ?
As2 Mg2 Ca2 . . 7_555 79.7(13) ?
As2 Mg2 Ow6 . . 10_555 147.8(16) ?
As2 Mg2 Ow6 . . 11_555 128.8(17) ?
As2 Mg2 As2 4_556 . 6_546 57.6(11) ?
As2 Mg2 As2 4_556 . 6_556 96.0(12) ?
As2 Mg2 As2 4_556 . 7_545 60.5(11) ?
As2 Mg2 As2 4_556 . 7_555 95.9(11) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . . 76.9(8) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 11_556 97.3(7) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 4_556 28.1(7) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 13_556 93.8(5) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 6_546 23.9(4) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 7_555 70.4(6) ?
As2 Mg2 As3 4_556 . 16_544 48.7(4) ?
As2 Mg2 O6 4_556 . . 92.4(10) ?
As2 Mg2 O6 4_556 . 4_556 44.7(9) ?
As2 Mg2 Mg2 4_556 . 4_556 65(3) ?
As2 Mg2 Mg2 4_556 . 6_546 70.3(12) ?
As2 Mg2 Mg2 4_556 . 6_556 107.7(12) ?
As2 Mg2 Mg2 4_556 . 7_545 71.3(12) ?
As2 Mg2 Mg2 4_556 . 7_555 108.7(12) ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . 4_556 65(3) ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_546 70.3(12) ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_556 107.7(12) ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_545 71.3(12) ?
As2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_555 108.7(12) ?
As2 Mg2 Ow6 4_556 . 10_555 113.2(14) ?
As2 Mg2 Ow6 4_556 . 11_555 157.8(15) ?
As2 Mg2 As2 6_546 . 6_556 153.5(2) ?
As2 Mg2 As2 6_546 . 7_545 5.11(9) ?
As2 Mg2 As2 6_546 . 7_555 153.1(3) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . . 117.9(3) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . 11_556 121.7(3) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . 4_556 41.26(18) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . 13_556 110.9(3) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . 6_546 52.2(2) ?
As2 Mg2 As3 6_546 . 7_555 106.4(3) ?

As2 Mg2 As3 6_546 . 16_544 58.8(2) ?
As2 Mg2 06 6_546 . . 137.3(4) ?
As2 Mg2 06 6_546 . 4_556 26.8(3) ?
As2 Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 52(5) ?
As2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 13.12(15) ?
As2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 165.0(3) ?
As2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 13.74(14) ?
As2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 166.3(3) ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 52(5) ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 13.12(15) ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 165.0(3) ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 13.74(14) ?
As2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 166.3(3) ?
As2 Mg2 0w6 6_546 . 10_555 60.8(5) ?
As2 Mg2 0w6 6_546 . 11_555 143.0(6) ?
As2 Mg2 As2 6_556 . 7_545 156.0(2) ?
As2 Mg2 As2 6_556 . 7_555 4.97(9) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . . 47.9(2) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 11_556 56.5(2) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 4_556 114.9(2) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 13_556 67.4(3) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 6_546 103.9(3) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 7_555 59.4(3) ?
As2 Mg2 As3 6_556 . 16_544 105.2(2) ?
As2 Mg2 06 6_556 . . 32.4(3) ?
As2 Mg2 06 6_556 . 4_556 132.5(3) ?
As2 Mg2 Mg2 6_556 . 4_556 120(5) ?
As2 Mg2 Mg2 6_556 . 6_546 166.0(3) ?
As2 Mg2 Mg2 6_556 . 6_556 12.12(15) ?
As2 Mg2 Mg2 6_556 . 7_545 167.3(3) ?
As2 Mg2 Mg2 6_556 . 7_555 12.71(15) ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . 4_556 120(5) ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . 6_546 166.0(3) ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . 6_556 12.12(15) ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_545 167.3(3) ?
As2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_555 12.71(15) ?
As2 Mg2 0w6 6_556 . 10_555 141.5(6) ?
As2 Mg2 0w6 6_556 . 11_555 63.1(5) ?
As2 Mg2 As2 7_545 . 7_555 154.6(3) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . . 116.3(3) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 11_556 118.0(2) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 4_556 45.9(2) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 13_556 107.0(3) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 6_546 56.8(3) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 7_555 104.6(3) ?
As2 Mg2 As3 7_545 . 16_544 63.9(3) ?
As2 Mg2 06 7_545 . . 135.5(4) ?
As2 Mg2 06 7_545 . 4_556 32.0(3) ?
As2 Mg2 Mg2 7_545 . 4_556 57(5) ?
As2 Mg2 Mg2 7_545 . 6_546 12.36(14) ?
As2 Mg2 Mg2 7_545 . 6_556 168.1(3) ?
As2 Mg2 Mg2 7_545 . 7_545 11.73(14) ?

As2 Mg2 Mg2 7_545 . 7_555 168.3(3) ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . 4_556 57(5) ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . 6_546 12.36(14) ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . 6_556 168.1(3) ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . 7_545 11.73(14) ?
As2 Mg2 Ca2 7_545 . 7_555 168.3(3) ?
As2 Mg2 Ow6 7_545 . 10_555 60.4(5) ?
As2 Mg2 Ow6 7_545 . 11_555 140.9(6) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . . 43.4(2) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 11_556 51.6(2) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 4_556 116.6(2) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 13_556 62.4(3) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 6_546 105.7(3) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 7_555 54.9(3) ?
As2 Mg2 As3 7_555 . 16_544 108.8(3) ?
As2 Mg2 O6 7_555 . . 27.5(3) ?
As2 Mg2 O6 7_555 . 4_556 134.7(4) ?
As2 Mg2 Mg2 7_555 . 4_556 124(5) ?
As2 Mg2 Mg2 7_555 . 6_546 166.2(3) ?
As2 Mg2 Mg2 7_555 . 6_556 14.26(15) ?
As2 Mg2 Mg2 7_555 . 7_545 166.3(3) ?
As2 Mg2 Mg2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 124(5) ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 166.2(3) ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 14.26(15) ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 166.3(3) ?
As2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As2 Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 144.6(6) ?
As2 Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 63.9(6) ?
As3 Mg2 As3 . . 11_556 23.94(8) ?
As3 Mg2 As3 . . 4_556 105.0(2) ?
As3 Mg2 As3 . . 13_556 28.68(10) ?
As3 Mg2 As3 . . 6_546 98.7(2) ?
As3 Mg2 As3 . . 7_555 11.76(8) ?
As3 Mg2 As3 . . 16_544 118.6(2) ?
As3 Mg2 O6 . . . 19.5(2) ?
As3 Mg2 O6 . . 4_556 120.3(4) ?
As3 Mg2 Mg2 . . 4_556 139(3) ?
As3 Mg2 Mg2 . . 6_546 128.0(3) ?
As3 Mg2 Mg2 . . 6_556 56.1(3) ?
As3 Mg2 Mg2 . . 7_545 126.0(3) ?
As3 Mg2 Mg2 . . 7_555 54.0(3) ?
As3 Mg2 Ca2 . . . 0 ?
As3 Mg2 Ca2 . . 4_556 139(3) ?
As3 Mg2 Ca2 . . 6_546 128.0(3) ?
As3 Mg2 Ca2 . . 6_556 56.1(3) ?
As3 Mg2 Ca2 . . 7_545 126.0(3) ?
As3 Mg2 Ca2 . . 7_555 54.0(3) ?
As3 Mg2 Ow6 . . 10_555 159.7(7) ?
As3 Mg2 Ow6 . . 11_555 92.3(7) ?
As3 Mg2 As3 11_556 . 4_556 124.8(2) ?
As3 Mg2 As3 11_556 . 13_556 11.22(7) ?

As3 Mg2 As3 11_556 . 6_546 120.6(2) ?
As3 Mg2 As3 11_556 . 7_555 27.03(10) ?
As3 Mg2 As3 11_556 . 16_544 142.3(3) ?
As3 Mg2 06 11_556 . . 25.0(2) ?
As3 Mg2 06 11_556 . 4_556 135.7(4) ?
As3 Mg2 Mg2 11_556 . 4_556 162(3) ?
As3 Mg2 Mg2 11_556 . 6_546 126.6(3) ?
As3 Mg2 Mg2 11_556 . 6_556 59.4(3) ?
As3 Mg2 Mg2 11_556 . 7_545 123.6(3) ?
As3 Mg2 Mg2 11_556 . 7_555 56.4(2) ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . . 0 ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . 4_556 162(3) ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . 6_546 126.6(3) ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . 6_556 59.4(3) ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . 7_545 123.6(3) ?
As3 Mg2 Ca2 11_556 . 7_555 56.4(2) ?
As3 Mg2 Ow6 11_556 . 10_555 136.8(7) ?
As3 Mg2 Ow6 11_556 . 11_555 77.7(7) ?
As3 Mg2 As3 4_556 . 13_556 119.6(2) ?
As3 Mg2 As3 4_556 . 6_546 11.06(7) ?
As3 Mg2 As3 4_556 . 7_555 98.2(2) ?
As3 Mg2 As3 4_556 . 16_544 27.09(9) ?
As3 Mg2 06 4_556 . . 119.7(4) ?
As3 Mg2 06 4_556 . 4_556 18.67(19) ?
As3 Mg2 Mg2 4_556 . 4_556 38(3) ?
As3 Mg2 Mg2 4_556 . 6_546 51.3(2) ?
As3 Mg2 Mg2 4_556 . 6_556 124.3(3) ?
As3 Mg2 Mg2 4_556 . 7_545 53.5(3) ?
As3 Mg2 Mg2 4_556 . 7_555 126.5(3) ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . . 0 ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . 4_556 38(3) ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . 6_546 51.3(2) ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . 6_556 124.3(3) ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . 7_545 53.5(3) ?
As3 Mg2 Ca2 4_556 . 7_555 126.5(3) ?
As3 Mg2 Ow6 4_556 . 10_555 86.6(7) ?
As3 Mg2 Ow6 4_556 . 11_555 153.5(7) ?
As3 Mg2 As3 13_556 . 6_546 117.6(2) ?
As3 Mg2 As3 13_556 . 7_555 26.75(8) ?
As3 Mg2 As3 13_556 . 16_544 141.9(2) ?
As3 Mg2 06 13_556 . . 35.3(2) ?
As3 Mg2 06 13_556 . 4_556 127.4(4) ?
As3 Mg2 Mg2 13_556 . 4_556 158(4) ?
As3 Mg2 Mg2 13_556 . 6_546 115.4(3) ?
As3 Mg2 Mg2 13_556 . 6_556 70.6(3) ?
As3 Mg2 Mg2 13_556 . 7_545 112.4(3) ?
As3 Mg2 Mg2 13_556 . 7_555 67.6(3) ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . . 0 ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . 4_556 158(4) ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . 6_546 115.4(3) ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . 6_556 70.6(3) ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . 7_545 112.4(3) ?
As3 Mg2 Ca2 13_556 . 7_555 67.6(3) ?
As3 Mg2 Ow6 13_556 . 10_555 131.0(7) ?

As3 Mg2 Ow6 13_556 . 11_555 85.0(7) ?
 As3 Mg2 As3 6_546 . 7_555 93.5(2) ?
 As3 Mg2 As3 6_546 . 16_544 25.05(7) ?
 As3 Mg2 O6 6_546 . . 111.3(4) ?
 As3 Mg2 O6 6_546 . 4_556 29.16(19) ?
 As3 Mg2 Mg2 6_546 . 4_556 42(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 6_546 . 6_546 62.4(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 113.3(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 64.5(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 115.5(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 42(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 62.4(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 113.3(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 64.5(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 115.5(3) ?
 As3 Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 95.2(7) ?
 As3 Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 148.7(7) ?
 As3 Mg2 As3 7_555 . 16_544 116.1(2) ?
 As3 Mg2 O6 7_555 . . 31.0(2) ?
 As3 Mg2 O6 7_555 . 4_556 111.5(4) ?
 As3 Mg2 Mg2 7_555 . 4_556 135(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 7_555 . 6_546 116.3(4) ?
 As3 Mg2 Mg2 7_555 . 6_556 67.8(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 7_555 . 7_545 114.3(4) ?
 As3 Mg2 Mg2 7_555 . 7_555 65.7(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 135(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 116.3(4) ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 67.8(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 114.3(4) ?
 As3 Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 65.7(3) ?
 As3 Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 153.0(7) ?
 As3 Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 101.9(7) ?
 As3 Mg2 O6 16_544 . . 125.4(4) ?
 As3 Mg2 O6 16_544 . 4_556 32.2(2) ?
 As3 Mg2 Mg2 16_544 . 4_556 21(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 16_544 . 6_546 63.7(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 16_544 . 6_556 110.2(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 16_544 . 7_545 66.7(3) ?
 As3 Mg2 Mg2 16_544 . 7_555 113.3(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . . 0 ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . 4_556 21(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . 6_546 63.7(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . 6_556 110.2(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . 7_545 66.7(3) ?
 As3 Mg2 Ca2 16_544 . 7_555 113.3(3) ?
 As3 Mg2 Ow6 16_544 . 10_555 79.1(7) ?
 As3 Mg2 Ow6 16_544 . 11_555 126.5(7) ?
 O6 Mg2 O6 . . 4_556 137.0(5) ?
 O6 Mg2 Mg2 . . 4_556 145(4) ?
 O6 Mg2 Mg2 . . 6_546 146.8(4) ?
 O6 Mg2 Mg2 . . 6_556 38.1(4) ?
 O6 Mg2 Mg2 . . 7_545 144.4(4) ?

06 Mg2 Mg2 . . 7_555 35.6(4) ?
 06 Mg2 Ca2 . . . 0 ?
 06 Mg2 Ca2 . . 4_556 145(4) ?
 06 Mg2 Ca2 . . 6_546 146.8(4) ?
 06 Mg2 Ca2 . . 6_556 38.1(4) ?
 06 Mg2 Ca2 . . 7_545 144.4(4) ?
 06 Mg2 Ca2 . . 7_555 35.6(4) ?
 06 Mg2 Ow6 . . 10_555 153.6(7) ?
 06 Mg2 Ow6 . . 11_555 73.8(7) ?
 06 Mg2 Mg2 4_556 . 4_556 31(4) ?
 06 Mg2 Mg2 4_556 . 6_546 34.2(3) ?
 06 Mg2 Mg2 4_556 . 6_556 140.6(4) ?
 06 Mg2 Mg2 4_556 . 7_545 36.8(3) ?
 06 Mg2 Mg2 4_556 . 7_555 143.2(4) ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . . 0 ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . 4_556 31(4) ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . 6_546 34.2(3) ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . 6_556 140.6(4) ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . 7_545 36.8(3) ?
 06 Mg2 Ca2 4_556 . 7_555 143.2(4) ?
 06 Mg2 Ow6 4_556 . 10_555 68.7(7) ?
 06 Mg2 Ow6 4_556 . 11_555 146.4(7) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 4_556 . 6_546 52(5) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 4_556 . 6_556 121(5) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 4_556 . 7_545 55(5) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 4_556 . 7_555 125(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . . 0 ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_546 52(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_556 121(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_545 55(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_555 125(5) ?
 Mg2 Mg2 Ow6 4_556 . 10_555 58(4) ?
 Mg2 Mg2 Ow6 4_556 . 11_555 117(4) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . . 0 ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . 4_556 52(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_546 0.0(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
 Mg2 Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 48.1(5) ?
 Mg2 Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 129.9(6) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
 Mg2 Mg2 Mg2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . . 0 ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . 4_556 121(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . 6_546 173.56(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
 Mg2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
 Mg2 Mg2 Ow6 6_556 . 10_555 130.3(6) ?

Mg2 Mg2 Ow6 6_556 . 11_555 51.1(5) ?
Mg2 Mg2 Mg2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . . 0 ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . 4_556 55(5) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . 6_546 3.22(2) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . 6_556 176.78(2) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . 7_545 0.0(5) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
Mg2 Mg2 Ow6 7_545 . 10_555 48.8(5) ?
Mg2 Mg2 Ow6 7_545 . 11_555 129.5(6) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . . 0 ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . 4_556 125(5) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_546 176.78(2) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . 6_556 3.22(2) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_545 180.0(5) ?
Mg2 Mg2 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Mg2 Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 131.2(6) ?
Mg2 Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 50.5(5) ?
Ca2 Mg2 Ca2 . . 4_556 0 ?
Ca2 Mg2 Ca2 . . 6_546 0 ?
Ca2 Mg2 Ca2 . . 6_556 0 ?
Ca2 Mg2 Ca2 . . 7_545 0 ?
Ca2 Mg2 Ca2 . . 7_555 0 ?
Ca2 Mg2 Ow6 . . 10_555 0 ?
Ca2 Mg2 Ow6 . . 11_555 0 ?
Ca2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_546 52(5) ?
Ca2 Mg2 Ca2 4_556 . 6_556 121(5) ?
Ca2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_545 55(5) ?
Ca2 Mg2 Ca2 4_556 . 7_555 125(5) ?
Ca2 Mg2 Ow6 4_556 . 10_555 58(4) ?
Ca2 Mg2 Ow6 4_556 . 11_555 117(4) ?
Ca2 Mg2 Ca2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
Ca2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
Ca2 Mg2 Ca2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
Ca2 Mg2 Ow6 6_546 . 10_555 48.1(5) ?
Ca2 Mg2 Ow6 6_546 . 11_555 129.9(6) ?
Ca2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
Ca2 Mg2 Ca2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
Ca2 Mg2 Ow6 6_556 . 10_555 130.3(6) ?
Ca2 Mg2 Ow6 6_556 . 11_555 51.1(5) ?
Ca2 Mg2 Ca2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
Ca2 Mg2 Ow6 7_545 . 10_555 48.8(5) ?
Ca2 Mg2 Ow6 7_545 . 11_555 129.5(6) ?
Ca2 Mg2 Ow6 7_555 . 10_555 131.2(6) ?
Ca2 Mg2 Ow6 7_555 . 11_555 50.5(5) ?
Ow6 Mg2 Ow6 10_555 . 11_555 83.4(6) ?
Fe1 Ca2 Fe1 . . 10_555 122.0(2) ?
Fe1 Ca2 Fe2 . . 6_546 60.67(14) ?
Fe1 Ca2 Mo2 . . 1_545 90.02(19) ?
Fe1 Ca2 Mo2 . . 4_566 46.92(19) ?
Fe1 Ca2 Mo2 . . 6_546 60.03(18) ?
Fe1 Ca2 Mo2 . . 7_555 61.26(18) ?
Fe1 Ca2 Mo2 . . 16_545 134.7(3) ?
Fe1 Ca2 As1 . . 10_555 175.3(3) ?

Fe1 Ca2 As1 . . 11_555 52.12(14) ?
Fe1 Ca2 O2 . . 10_555 151.6(4) ?
Fe1 Ca2 O2 . . 11_555 32.15(13) ?
Fe1 Ca2 O4a . . 6_546 32.4(2) ?
Fe1 Ca2 O4a . . 7_555 90.7(3) ?
Fe1 Ca2 O4b . . 6_546 30.4(2) ?
Fe1 Ca2 O4b . . 7_555 91.1(3) ?
Fe1 Ca2 As2 . . . 59.5(6) ?
Fe1 Ca2 As2 . . 4_556 60.8(7) ?
Fe1 Ca2 As2 . . 6_546 107.9(2) ?
Fe1 Ca2 As2 . . 6_556 51.7(2) ?
Fe1 Ca2 As2 . . 7_545 112.6(3) ?
Fe1 Ca2 As2 . . 7_555 55.3(2) ?
Fe1 Ca2 As3 . . . 78.2(3) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 10_554 63.79(7) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 11_556 99.0(4) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 4_556 66.76(10) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 13_556 106.7(4) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 6_546 56.06(9) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 7_555 83.7(3) ?
Fe1 Ca2 As3 . . 16_544 53.58(6) ?
Fe1 Ca2 O6 . . . 75.3(5) ?
Fe1 Ca2 O6 . . 4_556 82.1(2) ?
Fe1 Ca2 Ca1 . . 9_445 121.2(4) ?
Fe1 Ca2 Ca1 . . 11_545 107.74(11) ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . . 0 ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . 4_556 71(5) ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . 6_546 116.1(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . 6_556 58.5(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . 7_545 118.8(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 . . 7_555 61.2(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 . . 4_556 71(5) ?
Fe1 Ca2 Ca2 . . 6_546 116.1(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 . . 6_556 58.5(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 . . 7_545 118.8(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 . . 7_555 61.2(3) ?
Fe1 Ca2 Ow5 . . 16_545 119.1(5) ?
Fe1 Ca2 Ow6 . . 10_555 122.1(7) ?
Fe1 Ca2 Ow6 . . 11_555 98.4(7) ?
Fe1 Ca2 Fe2 10_555 . 6_546 61.35(15) ?
Fe1 Ca2 Mo2 10_555 . 1_545 45.90(19) ?
Fe1 Ca2 Mo2 10_555 . 4_566 92.66(19) ?
Fe1 Ca2 Mo2 10_555 . 6_546 62.21(19) ?
Fe1 Ca2 Mo2 10_555 . 7_555 60.7(2) ?
Fe1 Ca2 Mo2 10_555 . 16_545 45.66(6) ?
Fe1 Ca2 As1 10_555 . 10_555 53.39(16) ?
Fe1 Ca2 As1 10_555 . 11_555 171.4(3) ?
Fe1 Ca2 O2 10_555 . 10_555 33.05(15) ?
Fe1 Ca2 O2 10_555 . 11_555 153.3(3) ?
Fe1 Ca2 O4a 10_555 . 6_546 91.0(3) ?
Fe1 Ca2 O4a 10_555 . 7_555 33.2(2) ?
Fe1 Ca2 O4b 10_555 . 6_546 91.8(3) ?
Fe1 Ca2 O4b 10_555 . 7_555 31.3(2) ?
Fe1 Ca2 As2 10_555 . . 64.5(8) ?

Fe1 Ca2 As2 10_555 . 4_556 65.6(6) ?
Fe1 Ca2 As2 10_555 . 6_546 54.7(3) ?
Fe1 Ca2 As2 10_555 . 6_556 117.6(3) ?
Fe1 Ca2 As2 10_555 . 7_545 51.0(2) ?
Fe1 Ca2 As2 10_555 . 7_555 113.0(3) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . . 69.64(11) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 10_554 96.0(4) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 11_556 67.04(7) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 4_556 76.6(3) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 13_556 56.13(7) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 6_546 82.3(3) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 7_555 58.25(11) ?
Fe1 Ca2 As3 10_555 . 16_544 103.4(4) ?
Fe1 Ca2 O6 10_555 . . 86.7(2) ?
Fe1 Ca2 O6 10_555 . 4_556 74.9(4) ?
Fe1 Ca2 Ca1 10_555 . 9_445 111.48(13) ?
Fe1 Ca2 Ca1 10_555 . 11_545 119.8(4) ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . . 0 ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . 4_556 106(5) ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . 6_546 60.5(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . 6_556 124.7(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . 7_545 57.9(3) ?
Fe1 Ca2 Mg2 10_555 . 7_555 122.1(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 10_555 . 4_556 106(5) ?
Fe1 Ca2 Ca2 10_555 . 6_546 60.5(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 10_555 . 6_556 124.7(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 10_555 . 7_545 57.9(3) ?
Fe1 Ca2 Ca2 10_555 . 7_555 122.1(3) ?
Fe1 Ca2 Ow5 10_555 . 16_545 118.9(5) ?
Fe1 Ca2 Ow6 10_555 . 10_555 97.7(7) ?
Fe1 Ca2 Ow6 10_555 . 11_555 129.0(7) ?
Fe2 Ca2 Mo2 6_546 . 1_545 46.04(17) ?
Fe2 Ca2 Mo2 6_546 . 4_566 47.11(17) ?
Fe2 Ca2 Mo2 6_546 . 6_546 3.21(10) ?
Fe2 Ca2 Mo2 6_546 . 7_555 3.59(9) ?
Fe2 Ca2 Mo2 6_546 . 16_545 89.31(12) ?
Fe2 Ca2 As1 6_546 . 10_555 114.7(3) ?
Fe2 Ca2 As1 6_546 . 11_555 112.6(2) ?
Fe2 Ca2 O2 6_546 . 10_555 93.1(3) ?
Fe2 Ca2 O2 6_546 . 11_555 92.3(3) ?
Fe2 Ca2 O4a 6_546 . 6_546 31.95(18) ?
Fe2 Ca2 O4a 6_546 . 7_555 31.44(19) ?
Fe2 Ca2 O4b 6_546 . 6_546 31.1(2) ?
Fe2 Ca2 O4b 6_546 . 7_555 30.5(2) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . . 12.6(9) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . 4_556 23.6(7) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . 6_546 75.7(3) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . 6_556 78.9(3) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . 7_545 77.2(3) ?
Fe2 Ca2 As2 6_546 . 7_555 77.5(3) ?
Fe2 Ca2 As3 6_546 . . 53.28(14) ?
Fe2 Ca2 As3 6_546 . 10_554 71.44(17) ?
Fe2 Ca2 As3 6_546 . 11_556 74.27(18) ?
Fe2 Ca2 As3 6_546 . 4_556 51.74(14) ?

Fe2 Ca2 As3 6_546 . 13_556 72.22(15) ?
 Fe2 Ca2 As3 6_546 . 6_546 46.28(11) ?
 Fe2 Ca2 As3 6_546 . 7_555 47.25(12) ?
 Fe2 Ca2 As3 6_546 . 16_544 69.66(15) ?
 Fe2 Ca2 O6 6_546 . . 69.3(3) ?
 Fe2 Ca2 O6 6_546 . 4_556 67.8(3) ?
 Fe2 Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 153.8(3) ?
 Fe2 Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 147.7(3) ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 88(3) ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 88.8(4) ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 91.0(4) ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 88.9(3) ?
 Fe2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 91.1(4) ?
 Fe2 Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 88(3) ?
 Fe2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 88.8(4) ?
 Fe2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 91.0(4) ?
 Fe2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 88.9(3) ?
 Fe2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 91.1(4) ?
 Fe2 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 175.5(7) ?
 Fe2 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 135.4(7) ?
 Fe2 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 141.0(7) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 1_545 . 4_566 93.15(17) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 1_545 . 6_546 49.1(2) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 1_545 . 7_555 42.8(2) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 1_545 . 16_545 91.5(2) ?
 Mo2 Ca2 As1 1_545 . 10_555 85.8(3) ?
 Mo2 Ca2 As1 1_545 . 11_555 125.62(19) ?
 Mo2 Ca2 O2 1_545 . 10_555 62.2(3) ?
 Mo2 Ca2 O2 1_545 . 11_555 118.7(2) ?
 Mo2 Ca2 O4a 1_545 . 6_546 58.9(3) ?
 Mo2 Ca2 O4a 1_545 . 7_555 46.8(3) ?
 Mo2 Ca2 O4b 1_545 . 6_546 63.1(4) ?
 Mo2 Ca2 O4b 1_545 . 7_555 40.3(3) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . . 57.7(12) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . 4_556 30.8(10) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . 6_546 29.74(12) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . 6_556 124.7(2) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . 7_545 31.27(13) ?
 Mo2 Ca2 As2 1_545 . 7_555 123.5(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . . 91.51(19) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 10_554 50.87(18) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 11_556 103.22(18) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 4_556 30.73(14) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 13_556 94.7(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 6_546 37.72(18) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 7_555 81.1(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 1_545 . 16_544 57.5(2) ?
 Mo2 Ca2 O6 1_545 . . 110.7(3) ?
 Mo2 Ca2 O6 1_545 . 4_556 32.6(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca1 1_545 . 9_445 148.1(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca1 1_545 . 11_545 108.7(3) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . . 0 ?
 Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . 4_556 63(4) ?

Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . 6_546 42.8(2) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . 6_556 136.8(3) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . 7_545 42.9(2) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 1_545 . 7_555 137.1(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 1_545 . 4_556 63(4) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 1_545 . 6_546 42.8(2) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 1_545 . 6_556 136.8(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 1_545 . 7_545 42.9(2) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 1_545 . 7_555 137.1(3) ?
 Mo2 Ca2 Ow5 1_545 . 16_545 137.8(6) ?
 Mo2 Ca2 Ow6 1_545 . 10_555 90.4(6) ?
 Mo2 Ca2 Ow6 1_545 . 11_555 171.3(7) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 4_566 . 6_546 44.1(2) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 4_566 . 7_555 50.4(2) ?
 Mo2 Ca2 Mo2 4_566 . 16_545 87.8(2) ?
 Mo2 Ca2 As1 4_566 . 10_555 131.17(18) ?
 Mo2 Ca2 As1 4_566 . 11_555 86.4(3) ?
 Mo2 Ca2 O2 4_566 . 10_555 123.6(2) ?
 Mo2 Ca2 O2 4_566 . 11_555 64.0(3) ?
 Mo2 Ca2 O4a 4_566 . 6_546 49.1(3) ?
 Mo2 Ca2 O4a 4_566 . 7_555 61.0(3) ?
 Mo2 Ca2 O4b 4_566 . 6_546 43.2(3) ?
 Mo2 Ca2 O4b 4_566 . 7_555 65.4(4) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . . 35.9(12) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . 4_556 66.6(10) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . 6_546 122.8(2) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . 6_556 32.05(13) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . 7_545 124.3(2) ?
 Mo2 Ca2 As2 4_566 . 7_555 30.38(13) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . . 31.36(15) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 10_554 101.38(16) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 11_556 52.8(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 4_556 90.78(18) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 13_556 59.7(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 6_546 81.0(2) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 7_555 38.62(19) ?
 Mo2 Ca2 As3 4_566 . 16_544 93.46(19) ?
 Mo2 Ca2 O6 4_566 . . 32.0(3) ?
 Mo2 Ca2 O6 4_566 . 4_556 109.4(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca1 4_566 . 9_445 112.4(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca1 4_566 . 11_545 147.5(3) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . . 0 ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . 4_556 114(4) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . 6_546 135.9(3) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . 6_556 44.1(2) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . 7_545 136.0(3) ?
 Mo2 Ca2 Mg2 4_566 . 7_555 44.0(2) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 4_566 . 4_556 114(4) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 4_566 . 6_546 135.9(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 4_566 . 6_556 44.1(2) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 4_566 . 7_545 136.0(3) ?
 Mo2 Ca2 Ca2 4_566 . 7_555 44.0(2) ?
 Mo2 Ca2 Ow5 4_566 . 16_545 129.0(6) ?
 Mo2 Ca2 Ow6 4_566 . 10_555 168.4(7) ?

Mo2 Ca2 Ow6 4_566 . 11_555 94.2(6) ?
Mo2 Ca2 Mo2 6_546 . 7_555 6.79(13) ?
Mo2 Ca2 Mo2 6_546 . 16_545 88.06(15) ?
Mo2 Ca2 As1 6_546 . 10_555 115.4(3) ?
Mo2 Ca2 As1 6_546 . 11_555 112.1(3) ?
Mo2 Ca2 O2 6_546 . 10_555 94.4(3) ?
Mo2 Ca2 O2 6_546 . 11_555 91.2(3) ?
Mo2 Ca2 O4a 6_546 . 6_546 32.6(2) ?
Mo2 Ca2 O4a 6_546 . 7_555 31.2(2) ?
Mo2 Ca2 O4b 6_546 . 6_546 31.2(2) ?
Mo2 Ca2 O4b 6_546 . 7_555 31.0(2) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . . 9.4(9) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . 4_556 26.7(7) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . 6_546 78.8(3) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . 6_556 76.0(3) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . 7_545 80.2(3) ?
Mo2 Ca2 As2 6_546 . 7_555 74.5(3) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . . 50.27(18) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 10_554 74.1(2) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 11_556 71.6(2) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 4_556 54.76(19) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 13_556 69.94(19) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 6_546 48.99(16) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 7_555 44.58(16) ?
Mo2 Ca2 As3 6_546 . 16_544 71.99(19) ?
Mo2 Ca2 O6 6_546 . . 66.1(3) ?
Mo2 Ca2 O6 6_546 . 4_556 71.0(3) ?
Mo2 Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 150.8(4) ?
Mo2 Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 150.5(3) ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 91(3) ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 91.9(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 91.9(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 88.1(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 91(3) ?
Mo2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 91.9(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 88.1(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 91.9(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 88.1(4) ?
Mo2 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 172.3(7) ?
Mo2 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 138.6(7) ?
Mo2 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 137.9(8) ?
Mo2 Ca2 Mo2 7_555 . 16_545 90.94(16) ?
Mo2 Ca2 As1 7_555 . 10_555 114.1(3) ?
Mo2 Ca2 As1 7_555 . 11_555 112.8(2) ?
Mo2 Ca2 O2 7_555 . 10_555 91.9(4) ?
Mo2 Ca2 O2 7_555 . 11_555 93.2(3) ?
Mo2 Ca2 O4a 7_555 . 6_546 31.3(2) ?
Mo2 Ca2 O4a 7_555 . 7_555 32.3(2) ?
Mo2 Ca2 O4b 7_555 . 6_546 31.2(2) ?
Mo2 Ca2 O4b 7_555 . 7_555 30.6(2) ?
Mo2 Ca2 As2 7_555 . . 16.2(9) ?
Mo2 Ca2 As2 7_555 . 4_556 20.2(6) ?

Mo2 Ca2 As2 7_555 . 6_546 72.4(3) ?
Mo2 Ca2 As2 7_555 . 6_556 82.0(3) ?
Mo2 Ca2 As2 7_555 . 7_545 74.0(3) ?
Mo2 Ca2 As2 7_555 . 7_555 80.8(3) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . . 56.74(19) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 10_554 68.3(2) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 11_556 77.4(2) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 4_556 48.30(18) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 13_556 74.98(19) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 6_546 43.16(15) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 7_555 50.42(16) ?
Mo2 Ca2 As3 7_555 . 16_544 66.91(18) ?
Mo2 Ca2 O6 7_555 . . 72.8(3) ?
Mo2 Ca2 O6 7_555 . 4_556 64.3(3) ?
Mo2 Ca2 Ca1 7_555 . 9_445 157.1(4) ?
Mo2 Ca2 Ca1 7_555 . 11_545 144.3(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . . 0 ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . 4_556 85(3) ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . 6_546 85.5(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . 6_556 94.1(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . 7_545 85.7(4) ?
Mo2 Ca2 Mg2 7_555 . 7_555 94.3(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 85(3) ?
Mo2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 85.5(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 94.1(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 85.7(4) ?
Mo2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 94.3(4) ?
Mo2 Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 179.0(5) ?
Mo2 Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 131.8(7) ?
Mo2 Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 144.4(8) ?
Mo2 Ca2 As1 16_545 . 10_555 43.55(6) ?
Mo2 Ca2 As1 16_545 . 11_555 142.7(4) ?
Mo2 Ca2 O2 16_545 . 10_555 47.39(11) ?
Mo2 Ca2 O2 16_545 . 11_555 138.2(5) ?
Mo2 Ca2 O4a 16_545 . 6_546 120.2(3) ?
Mo2 Ca2 O4a 16_545 . 7_555 59.38(17) ?
Mo2 Ca2 O4b 16_545 . 6_546 117.2(3) ?
Mo2 Ca2 O4b 16_545 . 7_555 63.13(19) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . . 83.7(3) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . 4_556 104.9(4) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . 6_546 94.8(3) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . 6_556 92.1(3) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . 7_545 90.0(2) ?
Mo2 Ca2 As2 16_545 . 7_555 87.3(2) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . . 56.50(8) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 10_554 141.3(4) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 11_556 36.97(6) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 4_556 122.0(3) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 13_556 28.12(8) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 6_546 126.2(3) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 7_555 51.92(7) ?
Mo2 Ca2 As3 16_545 . 16_544 149.0(4) ?
Mo2 Ca2 O6 16_545 . . 61.9(2) ?
Mo2 Ca2 O6 16_545 . 4_556 119.3(5) ?

Mo2 Ca2 Ca1 16_545 . 9_445 71.69(13) ?
Mo2 Ca2 Ca1 16_545 . 11_545 114.50(19) ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . . 0 ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . 4_556 147(5) ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . 6_546 94.5(2) ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . 6_556 92.0(2) ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . 7_545 91.2(2) ?
Mo2 Ca2 Mg2 16_545 . 7_555 88.8(2) ?
Mo2 Ca2 Ca2 16_545 . 4_556 147(5) ?
Mo2 Ca2 Ca2 16_545 . 6_546 94.5(2) ?
Mo2 Ca2 Ca2 16_545 . 6_556 92.0(2) ?
Mo2 Ca2 Ca2 16_545 . 7_545 91.2(2) ?
Mo2 Ca2 Ca2 16_545 . 7_555 88.8(2) ?
Mo2 Ca2 Ow5 16_545 . 16_545 88.2(4) ?
Mo2 Ca2 Ow6 16_545 . 10_555 103.2(7) ?
Mo2 Ca2 Ow6 16_545 . 11_555 84.2(7) ?
As1 Ca2 As1 10_555 . 11_555 132.4(2) ?
As1 Ca2 O2 10_555 . 10_555 23.94(11) ?
As1 Ca2 O2 10_555 . 11_555 152.5(3) ?
As1 Ca2 O4a 10_555 . 6_546 143.0(5) ?
As1 Ca2 O4a 10_555 . 7_555 84.9(3) ?
As1 Ca2 O4b 10_555 . 6_546 144.9(5) ?
As1 Ca2 O4b 10_555 . 7_555 84.4(3) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . . 116.3(7) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . 4_556 114.8(11) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . 6_546 69.2(3) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . 6_556 129.8(3) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . 7_545 64.3(3) ?
As1 Ca2 As2 10_555 . 7_555 125.9(3) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . . 99.81(5) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 10_554 114.7(5) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 11_556 79.95(3) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 4_556 110.0(5) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 13_556 71.67(5) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 6_546 120.5(5) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 7_555 93.55(7) ?
As1 Ca2 As3 10_555 . 16_544 125.1(5) ?
As1 Ca2 O6 10_555 . . 104.2(2) ?
As1 Ca2 O6 10_555 . 4_556 95.4(6) ?
As1 Ca2 Ca1 10_555 . 9_445 63.24(13) ?
As1 Ca2 Ca1 10_555 . 11_545 75.7(2) ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . . 0 ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . 4_556 109(5) ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . 6_546 61.8(3) ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . 6_556 123.9(3) ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . 7_545 58.9(3) ?
As1 Ca2 Mg2 10_555 . 7_555 121.1(3) ?
As1 Ca2 Ca2 10_555 . 4_556 109(5) ?
As1 Ca2 Ca2 10_555 . 6_546 61.8(3) ?
As1 Ca2 Ca2 10_555 . 6_556 123.9(3) ?
As1 Ca2 Ca2 10_555 . 7_545 58.9(3) ?
As1 Ca2 Ca2 10_555 . 7_555 121.1(3) ?
As1 Ca2 Ow5 10_555 . 16_545 65.6(4) ?
As1 Ca2 Ow6 10_555 . 10_555 60.1(7) ?

As1 Ca2 Ow6 10_555 . 11_555 85.9(6) ?
As1 Ca2 O2 11_555 . 10_555 149.8(4) ?
As1 Ca2 O2 11_555 . 11_555 22.87(10) ?
As1 Ca2 O4a 11_555 . 6_546 81.9(3) ?
As1 Ca2 O4a 11_555 . 7_555 142.6(4) ?
As1 Ca2 O4b 11_555 . 6_546 81.6(3) ?
As1 Ca2 O4b 11_555 . 7_555 143.1(4) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . . 111.0(9) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . 4_556 106.3(5) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . 6_546 119.1(3) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . 6_556 64.9(3) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . 7_545 123.2(3) ?
As1 Ca2 As2 11_555 . 7_555 69.7(3) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . . 112.4(5) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 10_554 75.91(5) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 11_556 118.4(5) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 4_556 94.90(6) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 13_556 129.5(6) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 6_546 89.12(5) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 7_555 123.1(5) ?
As1 Ca2 As3 11_555 . 16_544 68.21(3) ?
As1 Ca2 O6 11_555 . . 96.8(6) ?
As1 Ca2 O6 11_555 . 4_556 97.4(2) ?
As1 Ca2 Ca1 11_555 . 9_445 76.7(2) ?
As1 Ca2 Ca1 11_555 . 11_545 61.47(12) ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . . 0 ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . 4_556 67(5) ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . 6_546 114.9(3) ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . 6_556 59.3(3) ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . 7_545 117.8(3) ?
As1 Ca2 Mg2 11_555 . 7_555 62.2(3) ?
As1 Ca2 Ca2 11_555 . 4_556 67(5) ?
As1 Ca2 Ca2 11_555 . 6_546 114.9(3) ?
As1 Ca2 Ca2 11_555 . 6_556 59.3(3) ?
As1 Ca2 Ca2 11_555 . 7_545 117.8(3) ?
As1 Ca2 Ca2 11_555 . 7_555 62.2(3) ?
As1 Ca2 Ow5 11_555 . 16_545 67.7(4) ?
As1 Ca2 Ow6 11_555 . 10_555 82.6(6) ?
As1 Ca2 Ow6 11_555 . 11_555 59.6(7) ?
O2 Ca2 O2 10_555 . 11_555 172.4(5) ?
O2 Ca2 O4a 10_555 . 6_546 119.2(5) ?
O2 Ca2 O4a 10_555 . 7_555 66.2(3) ?
O2 Ca2 O4b 10_555 . 6_546 121.7(5) ?
O2 Ca2 O4b 10_555 . 7_555 64.1(4) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . . 97.5(10) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . 4_556 90.8(11) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . 6_546 50.6(3) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . 6_556 139.1(3) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . 7_545 45.4(3) ?
O2 Ca2 As2 10_555 . 7_555 134.2(3) ?
O2 Ca2 As3 10_555 . . 95.43(14) ?
O2 Ca2 As3 10_555 . 10_554 99.1(5) ?
O2 Ca2 As3 10_555 . 11_556 82.68(10) ?
O2 Ca2 As3 10_555 . 4_556 88.8(5) ?

02 Ca2 As3 10_555 . 13_556 72.01(9) ?
02 Ca2 As3 10_555 . 6_546 98.5(5) ?
02 Ca2 As3 10_555 . 7_555 85.75(15) ?
02 Ca2 As3 10_555 . 16_544 109.4(6) ?
02 Ca2 06 10_555 . . 107.3(2) ?
02 Ca2 06 10_555 . 4_556 77.3(6) ?
02 Ca2 Ca1 10_555 . 9_445 87.17(19) ?
02 Ca2 Ca1 10_555 . 11_545 88.4(3) ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . . 0 ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . 4_556 100(5) ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . 6_546 47.4(3) ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . 6_556 139.0(3) ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . 7_545 44.2(3) ?
02 Ca2 Mg2 10_555 . 7_555 135.8(3) ?
02 Ca2 Ca2 10_555 . 4_556 100(5) ?
02 Ca2 Ca2 10_555 . 6_546 47.4(3) ?
02 Ca2 Ca2 10_555 . 6_556 139.0(3) ?
02 Ca2 Ca2 10_555 . 7_545 44.2(3) ?
02 Ca2 Ca2 10_555 . 7_555 135.8(3) ?
02 Ca2 0w5 10_555 . 16_545 87.9(5) ?
02 Ca2 0w6 10_555 . 10_555 67.7(7) ?
02 Ca2 0w6 10_555 . 11_555 109.6(6) ?
02 Ca2 04a 11_555 . 6_546 64.3(3) ?
02 Ca2 04a 11_555 . 7_555 120.4(5) ?
02 Ca2 04b 11_555 . 6_546 62.5(3) ?
02 Ca2 04b 11_555 . 7_555 122.0(5) ?
02 Ca2 As2 11_555 . . 88.9(10) ?
02 Ca2 As2 11_555 . 4_556 92.0(7) ?
02 Ca2 As2 11_555 . 6_546 126.0(3) ?
02 Ca2 As2 11_555 . 6_556 47.5(3) ?
02 Ca2 As2 11_555 . 7_545 131.1(3) ?
02 Ca2 As2 11_555 . 7_555 52.5(3) ?
02 Ca2 As3 11_555 . . 92.1(5) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 10_554 77.52(12) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 11_556 104.0(5) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 4_556 90.29(14) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 13_556 114.9(6) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 6_546 81.40(13) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 7_555 101.9(5) ?
02 Ca2 As3 11_555 . 16_544 67.58(9) ?
02 Ca2 06 11_555 . . 79.7(6) ?
02 Ca2 06 11_555 . 4_556 99.7(2) ?
02 Ca2 Ca1 11_555 . 9_445 90.4(3) ?
02 Ca2 Ca1 11_555 . 11_545 84.20(18) ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . . 0 ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . 4_556 75(5) ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . 6_546 127.4(3) ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . 6_556 46.2(3) ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . 7_545 130.6(3) ?
02 Ca2 Mg2 11_555 . 7_555 49.4(3) ?
02 Ca2 Ca2 11_555 . 4_556 75(5) ?
02 Ca2 Ca2 11_555 . 6_546 127.4(3) ?
02 Ca2 Ca2 11_555 . 6_556 46.2(3) ?
02 Ca2 Ca2 11_555 . 7_545 130.6(3) ?

02 Ca2 Ca2 11_555 . 7_555 49.4(3) ?
02 Ca2 Ow5 11_555 . 16_545 87.1(5) ?
02 Ca2 Ow6 11_555 . 10_555 104.6(6) ?
02 Ca2 Ow6 11_555 . 11_555 68.9(7) ?
04a Ca2 04a 6_546 . 7_555 63.4(3) ?
04a Ca2 04b 6_546 . 6_546 6.0(2) ?
04a Ca2 04b 6_546 . 7_555 61.8(3) ?
04a Ca2 As2 6_546 . . 36.6(3) ?
04a Ca2 As2 6_546 . 4_556 28.6(7) ?
04a Ca2 As2 6_546 . 6_546 82.4(4) ?
04a Ca2 As2 6_546 . 6_556 72.1(4) ?
04a Ca2 As2 6_546 . 7_545 86.2(4) ?
04a Ca2 As2 6_546 . 7_555 73.5(4) ?
04a Ca2 As3 6_546 . . 72.4(3) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 10_554 52.7(2) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 11_556 96.3(4) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 4_556 43.2(2) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 13_556 98.4(3) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 6_546 32.5(2) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 7_555 71.6(3) ?
04a Ca2 As3 6_546 . 16_544 46.3(2) ?
04a Ca2 06 6_546 . . 80.6(5) ?
04a Ca2 06 6_546 . 4_556 61.7(3) ?
04a Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 152.9(6) ?
04a Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 123.6(2) ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 67(3) ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 93.9(5) ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 82.6(5) ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 95.7(5) ?
04a Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 84.3(5) ?
04a Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 67(3) ?
04a Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 93.9(5) ?
04a Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 82.6(5) ?
04a Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 95.7(5) ?
04a Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 84.3(5) ?
04a Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 149.3(5) ?
04a Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 125.1(8) ?
04a Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 129.7(8) ?
04a Ca2 04b 7_555 . 6_546 62.4(3) ?
04a Ca2 04b 7_555 . 7_555 6.6(2) ?
04a Ca2 As2 7_555 . . 31.6(6) ?
04a Ca2 As2 7_555 . 4_556 46.2(4) ?
04a Ca2 As2 7_555 . 6_546 71.7(4) ?
04a Ca2 As2 7_555 . 6_556 90.2(4) ?
04a Ca2 As2 7_555 . 7_545 70.4(4) ?
04a Ca2 As2 7_555 . 7_555 86.6(4) ?
04a Ca2 As3 7_555 . . 46.2(3) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 10_554 92.2(4) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 11_556 56.9(2) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 4_556 69.7(3) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 13_556 50.0(2) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 6_546 69.4(3) ?
04a Ca2 As3 7_555 . 7_555 34.9(2) ?

04a Ca2 As3 7_555 . 16_544 94.4(3) ?
04a Ca2 O6 7_555 . . 65.7(3) ?
04a Ca2 O6 7_555 . 4_556 78.8(5) ?
04a Ca2 Ca1 7_555 . 9_445 130.4(2) ?
04a Ca2 Ca1 7_555 . 11_545 150.4(6) ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . . 0 ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . 4_556 108(3) ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . 6_546 82.5(5) ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . 6_556 100.6(5) ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . 7_545 81.0(5) ?
04a Ca2 Mg2 7_555 . 7_555 99.0(5) ?
04a Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 108(3) ?
04a Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 82.5(5) ?
04a Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 100.6(5) ?
04a Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 81.0(5) ?
04a Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 99.0(5) ?
04a Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 147.0(4) ?
04a Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 128.0(8) ?
04a Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 134.6(8) ?
04b Ca2 O4b 6_546 . 7_555 61.6(3) ?
04b Ca2 As2 6_546 . . 33.6(4) ?
04b Ca2 As2 6_546 . 4_556 32.3(7) ?
04b Ca2 As2 6_546 . 6_546 87.7(4) ?
04b Ca2 As2 6_546 . 6_556 66.5(4) ?
04b Ca2 As2 6_546 . 7_545 91.4(5) ?
04b Ca2 As2 6_546 . 7_555 67.7(4) ?
04b Ca2 As3 6_546 . . 67.3(3) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 10_554 58.5(3) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 11_556 91.2(4) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 4_556 49.0(3) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 13_556 94.0(4) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 6_546 38.4(2) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 7_555 67.3(3) ?
04b Ca2 As3 6_546 . 16_544 51.7(2) ?
04b Ca2 O6 6_546 . . 74.8(5) ?
04b Ca2 O6 6_546 . 4_556 67.5(3) ?
04b Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 148.7(6) ?
04b Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 127.6(2) ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 73(3) ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 99.5(5) ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 77.3(5) ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 101.1(5) ?
04b Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 78.9(5) ?
04b Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 73(3) ?
04b Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 99.5(5) ?
04b Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 77.3(5) ?
04b Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 101.1(5) ?
04b Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 78.9(5) ?
04b Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 149.3(6) ?
04b Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 130.7(8) ?
04b Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 125.6(9) ?
04b Ca2 As2 7_555 . . 33.4(7) ?
04b Ca2 As2 7_555 . 4_556 41.8(4) ?

04b Ca2 As2 7_555 . 6_546 65.4(4) ?
 04b Ca2 As2 7_555 . 6_556 95.6(5) ?
 04b Ca2 As2 7_555 . 7_545 64.3(4) ?
 04b Ca2 As2 7_555 . 7_555 92.2(5) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . . 52.5(3) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 10_554 86.5(4) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 11_556 63.3(3) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 4_556 63.9(3) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 13_556 56.0(2) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 6_546 64.4(3) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 7_555 41.4(2) ?
 04b Ca2 As3 7_555 . 16_544 89.3(4) ?
 04b Ca2 O6 7_555 . . 72.1(4) ?
 04b Ca2 O6 7_555 . 4_556 72.3(5) ?
 04b Ca2 Ca1 7_555 . 9_445 134.8(2) ?
 04b Ca2 Ca1 7_555 . 11_545 144.9(7) ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . . 0 ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . 4_556 102(4) ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . 6_546 76.5(5) ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . 6_556 106.3(5) ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . 7_545 75.1(5) ?
 04b Ca2 Mg2 7_555 . 7_555 104.9(5) ?
 04b Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 102(4) ?
 04b Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 76.5(5) ?
 04b Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 106.3(5) ?
 04b Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 75.1(5) ?
 04b Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 104.9(5) ?
 04b Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 148.9(5) ?
 04b Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 122.9(9) ?
 04b Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 140.9(8) ?
 As2 Ca2 As2 . . 4_556 35.9(5) ?
 As2 Ca2 As2 . . 6_546 87.5(13) ?
 As2 Ca2 As2 . . 6_556 67.9(13) ?
 As2 Ca2 As2 . . 7_545 88.6(13) ?
 As2 Ca2 As2 . . 7_555 66.0(13) ?
 As2 Ca2 As3 . . . 41.3(8) ?
 As2 Ca2 As3 . . 10_554 82.5(8) ?
 As2 Ca2 As3 . . 11_556 63.4(7) ?
 As2 Ca2 As3 . . 4_556 63.9(9) ?
 As2 Ca2 As3 . . 13_556 62.9(5) ?
 As2 Ca2 As3 . . 6_546 57.5(7) ?
 As2 Ca2 As3 . . 7_555 36.7(6) ?
 As2 Ca2 As3 . . 16_544 79.5(6) ?
 As2 Ca2 O6 . . . 56.7(10) ?
 As2 Ca2 O6 . . 4_556 80.4(11) ?
 As2 Ca2 Ca1 . . 9_445 141.7(12) ?
 As2 Ca2 Ca1 . . 11_545 158.8(8) ?
 As2 Ca2 Mg2 . . . 0 ?
 As2 Ca2 Mg2 . . 4_556 99(3) ?
 As2 Ca2 Mg2 . . 6_546 100.5(14) ?
 As2 Ca2 Mg2 . . 6_556 79.9(13) ?
 As2 Ca2 Mg2 . . 7_545 100.3(14) ?
 As2 Ca2 Mg2 . . 7_555 79.7(13) ?
 As2 Ca2 Ca2 . . 4_556 99(3) ?

As2 Ca2 Ca2 . . 6_546 100.5(14) ?
As2 Ca2 Ca2 . . 6_556 79.9(13) ?
As2 Ca2 Ca2 . . 7_545 100.3(14) ?
As2 Ca2 Ca2 . . 7_555 79.7(13) ?
As2 Ca2 Ow5 . . 16_545 162.9(15) ?
As2 Ca2 Ow6 . . 10_555 147.8(16) ?
As2 Ca2 Ow6 . . 11_555 128.8(17) ?
As2 Ca2 As2 4_556 . 6_546 57.6(11) ?
As2 Ca2 As2 4_556 . 6_556 96.0(12) ?
As2 Ca2 As2 4_556 . 7_545 60.5(11) ?
As2 Ca2 As2 4_556 . 7_555 95.9(11) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . . 76.9(8) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 10_554 48.6(6) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 11_556 97.3(7) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 4_556 28.1(7) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 13_556 93.8(5) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 6_546 23.9(4) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 7_555 70.4(6) ?
As2 Ca2 As3 4_556 . 16_544 48.7(4) ?
As2 Ca2 O6 4_556 . . 92.4(10) ?
As2 Ca2 O6 4_556 . 4_556 44.7(9) ?
As2 Ca2 Ca1 4_556 . 9_445 176.6(3) ?
As2 Ca2 Ca1 4_556 . 11_545 124.1(9) ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . . 0 ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . 4_556 65(3) ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . 6_546 70.3(12) ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . 6_556 107.7(12) ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . 7_545 71.3(12) ?
As2 Ca2 Mg2 4_556 . 7_555 108.7(12) ?
As2 Ca2 Ca2 4_556 . 4_556 65(3) ?
As2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_546 70.3(12) ?
As2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_556 107.7(12) ?
As2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_545 71.3(12) ?
As2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_555 108.7(12) ?
As2 Ca2 Ow5 4_556 . 16_545 160.8(12) ?
As2 Ca2 Ow6 4_556 . 10_555 113.2(14) ?
As2 Ca2 Ow6 4_556 . 11_555 157.8(15) ?
As2 Ca2 As2 6_546 . 6_556 153.5(2) ?
As2 Ca2 As2 6_546 . 7_545 5.11(9) ?
As2 Ca2 As2 6_546 . 7_555 153.1(3) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . . 117.9(3) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 10_554 48.62(19) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 11_556 121.7(3) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 4_556 41.26(18) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 13_556 110.9(3) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 6_546 52.2(2) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 7_555 106.4(3) ?
As2 Ca2 As3 6_546 . 16_544 58.8(2) ?
As2 Ca2 O6 6_546 . . 137.3(4) ?
As2 Ca2 O6 6_546 . 4_556 26.8(3) ?
As2 Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 122.6(3) ?
As2 Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 80.5(3) ?
As2 Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
As2 Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 52(5) ?

As2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 13.12(15) ?
As2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 165.0(3) ?
As2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 13.74(14) ?
As2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 166.3(3) ?
As2 Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 52(5) ?
As2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 13.12(15) ?
As2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 165.0(3) ?
As2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 13.74(14) ?
As2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 166.3(3) ?
As2 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 108.2(6) ?
As2 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 60.8(5) ?
As2 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 143.0(6) ?
As2 Ca2 As2 6_556 . 7_545 156.0(2) ?
As2 Ca2 As2 6_556 . 7_555 4.97(9) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . . 47.9(2) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 10_554 115.5(2) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 11_556 56.5(2) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 4_556 114.9(2) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 13_556 67.4(3) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 6_546 103.9(3) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 7_555 59.4(3) ?
As2 Ca2 As3 6_556 . 16_544 105.2(2) ?
As2 Ca2 O6 6_556 . . 32.4(3) ?
As2 Ca2 O6 6_556 . 4_556 132.5(3) ?
As2 Ca2 Ca1 6_556 . 9_445 83.8(3) ?
As2 Ca2 Ca1 6_556 . 11_545 119.3(3) ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . . 0 ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . 4_556 120(5) ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . 6_546 166.0(3) ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . 6_556 12.12(15) ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . 7_545 167.3(3) ?
As2 Ca2 Mg2 6_556 . 7_555 12.71(15) ?
As2 Ca2 Ca2 6_556 . 4_556 120(5) ?
As2 Ca2 Ca2 6_556 . 6_546 166.0(3) ?
As2 Ca2 Ca2 6_556 . 6_556 12.12(15) ?
As2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_545 167.3(3) ?
As2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_555 12.71(15) ?
As2 Ca2 Ow5 6_556 . 16_545 97.5(6) ?
As2 Ca2 Ow6 6_556 . 10_555 141.5(6) ?
As2 Ca2 Ow6 6_556 . 11_555 63.1(5) ?
As2 Ca2 As2 7_545 . 7_555 154.6(3) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . . 116.3(3) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 10_554 53.7(2) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 11_556 118.0(2) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 4_556 45.9(2) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 13_556 107.0(3) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 6_546 56.8(3) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 7_555 104.6(3) ?
As2 Ca2 As3 7_545 . 16_544 63.9(3) ?
As2 Ca2 O6 7_545 . . 135.5(4) ?
As2 Ca2 O6 7_545 . 4_556 32.0(3) ?
As2 Ca2 Ca1 7_545 . 9_445 119.4(3) ?
As2 Ca2 Ca1 7_545 . 11_545 81.1(3) ?
As2 Ca2 Mg2 7_545 . . 0 ?

As2 Ca2 Mg2 7_545 . 4_556 57(5) ?
As2 Ca2 Mg2 7_545 . 6_546 12.36(14) ?
As2 Ca2 Mg2 7_545 . 6_556 168.1(3) ?
As2 Ca2 Mg2 7_545 . 7_545 11.73(14) ?
As2 Ca2 Mg2 7_545 . 7_555 168.3(3) ?
As2 Ca2 Ca2 7_545 . 4_556 57(5) ?
As2 Ca2 Ca2 7_545 . 6_546 12.36(14) ?
As2 Ca2 Ca2 7_545 . 6_556 168.1(3) ?
As2 Ca2 Ca2 7_545 . 7_545 11.73(14) ?
As2 Ca2 Ca2 7_545 . 7_555 168.3(3) ?
As2 Ca2 Ow5 7_545 . 16_545 106.5(6) ?
As2 Ca2 Ow6 7_545 . 10_555 60.4(5) ?
As2 Ca2 Ow6 7_545 . 11_555 140.9(6) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . . 43.4(2) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 10_554 119.0(2) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 11_556 51.6(2) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 4_556 116.6(2) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 13_556 62.4(3) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 6_546 105.7(3) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 7_555 54.9(3) ?
As2 Ca2 As3 7_555 . 16_544 108.8(3) ?
As2 Ca2 O6 7_555 . . 27.5(3) ?
As2 Ca2 O6 7_555 . 4_556 134.7(4) ?
As2 Ca2 Ca1 7_555 . 9_445 83.6(3) ?
As2 Ca2 Ca1 7_555 . 11_545 122.8(3) ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . . 0 ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . 4_556 124(5) ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . 6_546 166.2(3) ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . 6_556 14.26(15) ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . 7_545 166.3(3) ?
As2 Ca2 Mg2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As2 Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 124(5) ?
As2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 166.2(3) ?
As2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 14.26(15) ?
As2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 166.3(3) ?
As2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 13.68(16) ?
As2 Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 98.7(6) ?
As2 Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 144.6(6) ?
As2 Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 63.9(6) ?
As3 Ca2 As3 . . 10_554 123.4(2) ?
As3 Ca2 As3 . . 11_556 23.94(8) ?
As3 Ca2 As3 . . 4_556 105.0(2) ?
As3 Ca2 As3 . . 13_556 28.68(10) ?
As3 Ca2 As3 . . 6_546 98.7(2) ?
As3 Ca2 As3 . . 7_555 11.76(8) ?
As3 Ca2 As3 . . 16_544 118.6(2) ?
As3 Ca2 O6 . . . 19.5(2) ?
As3 Ca2 O6 . . 4_556 120.3(4) ?
As3 Ca2 Ca1 . . 9_445 100.5(3) ?
As3 Ca2 Ca1 . . 11_545 158.6(4) ?
As3 Ca2 Mg2 . . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 . . 4_556 139(3) ?
As3 Ca2 Mg2 . . 6_546 128.0(3) ?
As3 Ca2 Mg2 . . 6_556 56.1(3) ?

As3 Ca2 Mg2 . . 7_545 126.0(3) ?
As3 Ca2 Mg2 . . 7_555 54.0(3) ?
As3 Ca2 Ca2 . . 4_556 139(3) ?
As3 Ca2 Ca2 . . 6_546 128.0(3) ?
As3 Ca2 Ca2 . . 6_556 56.1(3) ?
As3 Ca2 Ca2 . . 7_545 126.0(3) ?
As3 Ca2 Ca2 . . 7_555 54.0(3) ?
As3 Ca2 Ow5 . . 16_545 122.3(6) ?
As3 Ca2 Ow6 . . 10_555 159.7(7) ?
As3 Ca2 Ow6 . . 11_555 92.3(7) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 11_556 145.7(2) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 4_556 22.53(7) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 13_556 141.9(3) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 6_546 25.16(9) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 7_555 118.7(2) ?
As3 Ca2 As3 10_554 . 16_544 10.50(6) ?
As3 Ca2 O6 10_554 . . 133.2(4) ?
As3 Ca2 O6 10_554 . 4_556 22.4(2) ?
As3 Ca2 Ca1 10_554 . 9_445 134.4(2) ?
As3 Ca2 Ca1 10_554 . 11_545 76.43(18) ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . 4_556 17(3) ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . 6_546 53.2(2) ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . 6_556 120.7(2) ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . 7_545 56.2(2) ?
As3 Ca2 Mg2 10_554 . 7_555 123.8(2) ?
As3 Ca2 Ca2 10_554 . 4_556 17(3) ?
As3 Ca2 Ca2 10_554 . 6_546 53.2(2) ?
As3 Ca2 Ca2 10_554 . 6_556 120.7(2) ?
As3 Ca2 Ca2 10_554 . 7_545 56.2(2) ?
As3 Ca2 Ca2 10_554 . 7_555 123.8(2) ?
As3 Ca2 Ow5 10_554 . 16_545 112.7(5) ?
As3 Ca2 Ow6 10_554 . 10_555 72.4(7) ?
As3 Ca2 Ow6 10_554 . 11_555 131.6(7) ?
As3 Ca2 As3 11_556 . 4_556 124.8(2) ?
As3 Ca2 As3 11_556 . 13_556 11.22(7) ?
As3 Ca2 As3 11_556 . 6_546 120.6(2) ?
As3 Ca2 As3 11_556 . 7_555 27.03(10) ?
As3 Ca2 As3 11_556 . 16_544 142.3(3) ?
As3 Ca2 O6 11_556 . . 25.0(2) ?
As3 Ca2 O6 11_556 . 4_556 135.7(4) ?
As3 Ca2 Ca1 11_556 . 9_445 79.8(2) ?
As3 Ca2 Ca1 11_556 . 11_545 137.8(2) ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . 4_556 162(3) ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . 6_546 126.6(3) ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . 6_556 59.4(3) ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . 7_545 123.6(3) ?
As3 Ca2 Mg2 11_556 . 7_555 56.4(2) ?
As3 Ca2 Ca2 11_556 . 4_556 162(3) ?
As3 Ca2 Ca2 11_556 . 6_546 126.6(3) ?
As3 Ca2 Ca2 11_556 . 6_556 59.4(3) ?
As3 Ca2 Ca2 11_556 . 7_545 123.6(3) ?
As3 Ca2 Ca2 11_556 . 7_555 56.4(2) ?

As3 Ca2 Ow5 11_556 . 16_545 101.5(5) ?
As3 Ca2 Ow6 11_556 . 10_555 136.8(7) ?
As3 Ca2 Ow6 11_556 . 11_555 77.7(7) ?
As3 Ca2 As3 4_556 . 13_556 119.6(2) ?
As3 Ca2 As3 4_556 . 6_546 11.06(7) ?
As3 Ca2 As3 4_556 . 7_555 98.2(2) ?
As3 Ca2 As3 4_556 . 16_544 27.09(9) ?
As3 Ca2 O6 4_556 . . 119.7(4) ?
As3 Ca2 O6 4_556 . 4_556 18.67(19) ?
As3 Ca2 Ca1 4_556 . 9_445 154.4(3) ?
As3 Ca2 Ca1 4_556 . 11_545 96.0(3) ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . 4_556 38(3) ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . 6_546 51.3(2) ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . 6_556 124.3(3) ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . 7_545 53.5(3) ?
As3 Ca2 Mg2 4_556 . 7_555 126.5(3) ?
As3 Ca2 Ca2 4_556 . 4_556 38(3) ?
As3 Ca2 Ca2 4_556 . 6_546 51.3(2) ?
As3 Ca2 Ca2 4_556 . 6_556 124.3(3) ?
As3 Ca2 Ca2 4_556 . 7_545 53.5(3) ?
As3 Ca2 Ca2 4_556 . 7_555 126.5(3) ?
As3 Ca2 Ow5 4_556 . 16_545 132.7(5) ?
As3 Ca2 Ow6 4_556 . 10_555 86.6(7) ?
As3 Ca2 Ow6 4_556 . 11_555 153.5(7) ?
As3 Ca2 As3 13_556 . 6_546 117.6(2) ?
As3 Ca2 As3 13_556 . 7_555 26.75(8) ?
As3 Ca2 As3 13_556 . 16_544 141.9(2) ?
As3 Ca2 O6 13_556 . . 35.3(2) ?
As3 Ca2 O6 13_556 . 4_556 127.4(4) ?
As3 Ca2 Ca1 13_556 . 9_445 83.0(2) ?
As3 Ca2 Ca1 13_556 . 11_545 137.90(18) ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . 4_556 158(4) ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . 6_546 115.4(3) ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . 6_556 70.6(3) ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . 7_545 112.4(3) ?
As3 Ca2 Mg2 13_556 . 7_555 67.6(3) ?
As3 Ca2 Ca2 13_556 . 4_556 158(4) ?
As3 Ca2 Ca2 13_556 . 6_546 115.4(3) ?
As3 Ca2 Ca2 13_556 . 6_556 70.6(3) ?
As3 Ca2 Ca2 13_556 . 7_545 112.4(3) ?
As3 Ca2 Ca2 13_556 . 7_555 67.6(3) ?
As3 Ca2 Ow5 13_556 . 16_545 104.0(5) ?
As3 Ca2 Ow6 13_556 . 10_555 131.0(7) ?
As3 Ca2 Ow6 13_556 . 11_555 85.0(7) ?
As3 Ca2 As3 6_546 . 7_555 93.5(2) ?
As3 Ca2 As3 6_546 . 16_544 25.05(7) ?
As3 Ca2 O6 6_546 . . 111.3(4) ?
As3 Ca2 O6 6_546 . 4_556 29.16(19) ?
As3 Ca2 Ca1 6_546 . 9_445 159.4(2) ?
As3 Ca2 Ca1 6_546 . 11_545 101.5(3) ?
As3 Ca2 Mg2 6_546 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 6_546 . 4_556 42(3) ?

As3 Ca2 Mg2 6_546 . 6_546 62.4(3) ?
As3 Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 113.3(3) ?
As3 Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 64.5(3) ?
As3 Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 115.5(3) ?
As3 Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 42(3) ?
As3 Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 62.4(3) ?
As3 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 113.3(3) ?
As3 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 64.5(3) ?
As3 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 115.5(3) ?
As3 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 137.9(5) ?
As3 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 95.2(7) ?
As3 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 148.7(7) ?
As3 Ca2 As3 7_555 . 16_544 116.1(2) ?
As3 Ca2 O6 7_555 . . 31.0(2) ?
As3 Ca2 O6 7_555 . 4_556 111.5(4) ?
As3 Ca2 Ca1 7_555 . 9_445 106.7(3) ?
As3 Ca2 Ca1 7_555 . 11_545 164.5(2) ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . 4_556 135(3) ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . 6_546 116.3(4) ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . 6_556 67.8(3) ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . 7_545 114.3(4) ?
As3 Ca2 Mg2 7_555 . 7_555 65.7(3) ?
As3 Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 135(3) ?
As3 Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 116.3(4) ?
As3 Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 67.8(3) ?
As3 Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 114.3(4) ?
As3 Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 65.7(3) ?
As3 Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 128.6(5) ?
As3 Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 153.0(7) ?
As3 Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 101.9(7) ?
As3 Ca2 O6 16_544 . . 125.4(4) ?
As3 Ca2 O6 16_544 . 4_556 32.2(2) ?
As3 Ca2 Ca1 16_544 . 9_445 134.64(18) ?
As3 Ca2 Ca1 16_544 . 11_545 79.38(18) ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . . 0 ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . 4_556 21(3) ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . 6_546 63.7(3) ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . 6_556 110.2(3) ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . 7_545 66.7(3) ?
As3 Ca2 Mg2 16_544 . 7_555 113.3(3) ?
As3 Ca2 Ca2 16_544 . 4_556 21(3) ?
As3 Ca2 Ca2 16_544 . 6_546 63.7(3) ?
As3 Ca2 Ca2 16_544 . 6_556 110.2(3) ?
As3 Ca2 Ca2 16_544 . 7_545 66.7(3) ?
As3 Ca2 Ca2 16_544 . 7_555 113.3(3) ?
As3 Ca2 Ow5 16_544 . 16_545 114.1(4) ?
As3 Ca2 Ow6 16_544 . 10_555 79.1(7) ?
As3 Ca2 Ow6 16_544 . 11_555 126.5(7) ?
O6 Ca2 O6 . . 4_556 137.0(5) ?
O6 Ca2 Ca1 . . 9_445 85.6(4) ?
O6 Ca2 Ca1 . . 11_545 140.5(5) ?
O6 Ca2 Mg2 . . . 0 ?
O6 Ca2 Mg2 . . 4_556 145(4) ?

06 Ca2 Mg2 . . 6_546 146.8(4) ?
06 Ca2 Mg2 . . 6_556 38.1(4) ?
06 Ca2 Mg2 . . 7_545 144.4(4) ?
06 Ca2 Mg2 . . 7_555 35.6(4) ?
06 Ca2 Ca2 . . 4_556 145(4) ?
06 Ca2 Ca2 . . 6_546 146.8(4) ?
06 Ca2 Ca2 . . 6_556 38.1(4) ?
06 Ca2 Ca2 . . 7_545 144.4(4) ?
06 Ca2 Ca2 . . 7_555 35.6(4) ?
06 Ca2 Ow5 . . 16_545 106.2(7) ?
06 Ca2 Ow6 . . 10_555 153.6(7) ?
06 Ca2 Ow6 . . 11_555 73.8(7) ?
06 Ca2 Ca1 4_556 . 9_445 137.2(5) ?
06 Ca2 Ca1 4_556 . 11_545 81.1(4) ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . . 0 ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . 4_556 31(4) ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . 6_546 34.2(3) ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . 6_556 140.6(4) ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . 7_545 36.8(3) ?
06 Ca2 Mg2 4_556 . 7_555 143.2(4) ?
06 Ca2 Ca2 4_556 . 4_556 31(4) ?
06 Ca2 Ca2 4_556 . 6_546 34.2(3) ?
06 Ca2 Ca2 4_556 . 6_556 140.6(4) ?
06 Ca2 Ca2 4_556 . 7_545 36.8(3) ?
06 Ca2 Ca2 4_556 . 7_555 143.2(4) ?
06 Ca2 Ow5 4_556 . 16_545 116.7(6) ?
06 Ca2 Ow6 4_556 . 10_555 68.7(7) ?
06 Ca2 Ow6 4_556 . 11_555 146.4(7) ?
Ca1 Ca2 Ca1 9_445 . 11_545 58.58(12) ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . . 0 ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . 4_556 118(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . 6_546 110.0(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . 6_556 72.3(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . 7_545 108.9(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 9_445 . 7_555 71.1(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 9_445 . 4_556 118(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 9_445 . 6_546 110.0(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 9_445 . 6_556 72.3(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 9_445 . 7_545 108.9(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 9_445 . 7_555 71.1(3) ?
Ca1 Ca2 Ow5 9_445 . 16_545 21.9(4) ?
Ca1 Ca2 Ow6 9_445 . 10_555 68.5(5) ?
Ca1 Ca2 Ow6 9_445 . 11_555 23.2(5) ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . . 0 ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . 4_556 60(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . 6_546 68.7(2) ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . 6_556 108.7(3) ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . 7_545 70.0(2) ?
Ca1 Ca2 Mg2 11_545 . 7_555 110.0(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 11_545 . 4_556 60(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 11_545 . 6_546 68.7(2) ?
Ca1 Ca2 Ca2 11_545 . 6_556 108.7(3) ?
Ca1 Ca2 Ca2 11_545 . 7_545 70.0(2) ?
Ca1 Ca2 Ca2 11_545 . 7_555 110.0(3) ?

Ca1 Ca2 Ow5 11_545 . 16_545 36.7(4) ?
 Ca1 Ca2 Ow6 11_545 . 10_555 22.5(5) ?
 Ca1 Ca2 Ow6 11_545 . 11_555 66.7(5) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 . . 4_556 0 ?
 Mg2 Ca2 Mg2 . . 6_546 0 ?
 Mg2 Ca2 Mg2 . . 6_556 0 ?
 Mg2 Ca2 Mg2 . . 7_545 0 ?
 Mg2 Ca2 Mg2 . . 7_555 0 ?
 Mg2 Ca2 Ca2 . . 4_556 0 ?
 Mg2 Ca2 Ca2 . . 6_546 0 ?
 Mg2 Ca2 Ca2 . . 6_556 0 ?
 Mg2 Ca2 Ca2 . . 7_545 0 ?
 Mg2 Ca2 Ca2 . . 7_555 0 ?
 Mg2 Ca2 Ow5 . . 16_545 0 ?
 Mg2 Ca2 Ow6 . . 10_555 0 ?
 Mg2 Ca2 Ow6 . . 11_555 0 ?
 Mg2 Ca2 Mg2 4_556 . 6_546 52(5) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 4_556 . 6_556 121(5) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 4_556 . 7_545 55(5) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 4_556 . 7_555 125(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 4_556 . 4_556 0.0(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_546 52(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_556 121(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_545 55(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_555 125(5) ?
 Mg2 Ca2 Ow5 4_556 . 16_545 96(3) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 4_556 . 10_555 58(4) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 4_556 . 11_555 117(4) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_546 . 4_556 52(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_546 0.0(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
 Mg2 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 95.1(5) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 48.1(5) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 129.9(6) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_556 . 4_556 121(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_556 . 6_546 173.56(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_556 . 6_556 0.0(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
 Mg2 Ca2 Ow5 6_556 . 16_545 85.3(5) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 6_556 . 10_555 130.3(6) ?
 Mg2 Ca2 Ow6 6_556 . 11_555 51.1(5) ?
 Mg2 Ca2 Mg2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 7_545 . 4_556 55(5) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 7_545 . 6_546 3.22(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 7_545 . 6_556 176.78(2) ?
 Mg2 Ca2 Ca2 7_545 . 7_545 0.0(5) ?

Mg2 Ca2 Ca2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
Mg2 Ca2 Ow5 7_545 . 16_545 94.9(5) ?
Mg2 Ca2 Ow6 7_545 . 10_555 48.8(5) ?
Mg2 Ca2 Ow6 7_545 . 11_555 129.5(6) ?
Mg2 Ca2 Ca2 7_555 . 4_556 125(5) ?
Mg2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_546 176.78(2) ?
Mg2 Ca2 Ca2 7_555 . 6_556 3.22(2) ?
Mg2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_545 180.0(5) ?
Mg2 Ca2 Ca2 7_555 . 7_555 0.0(5) ?
Mg2 Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 85.1(5) ?
Mg2 Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 131.2(6) ?
Mg2 Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 50.5(5) ?
Ca2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_546 52(5) ?
Ca2 Ca2 Ca2 4_556 . 6_556 121(5) ?
Ca2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_545 55(5) ?
Ca2 Ca2 Ca2 4_556 . 7_555 125(5) ?
Ca2 Ca2 Ow5 4_556 . 16_545 96(3) ?
Ca2 Ca2 Ow6 4_556 . 10_555 58(4) ?
Ca2 Ca2 Ow6 4_556 . 11_555 117(4) ?
Ca2 Ca2 Ca2 6_546 . 6_556 173.56(2) ?
Ca2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_545 3.22(2) ?
Ca2 Ca2 Ca2 6_546 . 7_555 176.78(2) ?
Ca2 Ca2 Ow5 6_546 . 16_545 95.1(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 6_546 . 10_555 48.1(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 6_546 . 11_555 129.9(6) ?
Ca2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_545 176.78(2) ?
Ca2 Ca2 Ca2 6_556 . 7_555 3.22(2) ?
Ca2 Ca2 Ow5 6_556 . 16_545 85.3(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 6_556 . 10_555 130.3(6) ?
Ca2 Ca2 Ow6 6_556 . 11_555 51.1(5) ?
Ca2 Ca2 Ca2 7_545 . 7_555 180.0(5) ?
Ca2 Ca2 Ow5 7_545 . 16_545 94.9(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 7_545 . 10_555 48.8(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 7_545 . 11_555 129.5(6) ?
Ca2 Ca2 Ow5 7_555 . 16_545 85.1(5) ?
Ca2 Ca2 Ow6 7_555 . 10_555 131.2(6) ?
Ca2 Ca2 Ow6 7_555 . 11_555 50.5(5) ?
Ow5 Ca2 Ow6 16_545 . 10_555 49.0(6) ?
Ow5 Ca2 Ow6 16_545 . 11_555 34.9(6) ?
Ow6 Ca2 Ow6 10_555 . 11_555 83.4(6) ?
Fe3 Ow1a Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow1a Ca1 . . . 28.4(3) ?
Fe3 Ow1a Mg1 . . . 28.4(3) ?
Fe3 Ow1a Ow1b . . . 103.8(17) ?
Fe3 Ow1a Ow3 . . . 67(2) ?
Mg3 Ow1a Ca1 . . . 28.4(3) ?
Mg3 Ow1a Mg1 . . . 28.4(3) ?
Mg3 Ow1a Ow1b . . . 103.8(17) ?
Mg3 Ow1a Ow3 . . . 67(2) ?
Ca1 Ow1a Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow1a Ow1b . . . 75.3(16) ?
Ca1 Ow1a Ow3 . . . 96(2) ?
Mg1 Ow1a Ow1b . . . 75.3(16) ?
Mg1 Ow1a Ow3 . . . 96(2) ?

Ow1b Ow1a Ow3 . . . 171(3) ?
Fe3 Ow1b Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow1b Ca1 . . . 29.7(3) ?
Fe3 Ow1b Mg1 . . . 29.7(3) ?
Fe3 Ow1b Ow1a . . . 55.5(13) ?
Mg3 Ow1b Ca1 . . . 29.7(3) ?
Mg3 Ow1b Mg1 . . . 29.7(3) ?
Mg3 Ow1b Ow1a . . . 55.5(13) ?
Ca1 Ow1b Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow1b Ow1a . . . 85.2(15) ?
Mg1 Ow1b Ow1a . . . 85.2(15) ?
Fe3 Ow2a Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow2a Ca1 . . . 29.8(3) ?
Fe3 Ow2a Mg1 . . . 29.8(3) ?
Fe3 Ow2a Ow2b . . . 68.8(13) ?
Mg3 Ow2a Ca1 . . . 29.8(3) ?
Mg3 Ow2a Mg1 . . . 29.8(3) ?
Mg3 Ow2a Ow2b . . . 68.8(13) ?
Ca1 Ow2a Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow2a Ow2b . . . 39.0(13) ?
Mg1 Ow2a Ow2b . . . 39.0(13) ?
Fe3 Ow2b Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow2b Ca1 . . . 35.4(5) ?
Fe3 Ow2b Mg1 . . . 35.4(5) ?
Fe3 Ow2b Ow2a . . . 84.4(15) ?
Fe3 Ow2b Ow4 . . . 65.8(15) ?
Fe3 Ow2b Ow5 . . . 110.5(9) ?
Fe3 Ow2b Ow5 . . 8_655 110.5(9) ?
Mg3 Ow2b Ca1 . . . 35.4(5) ?
Mg3 Ow2b Mg1 . . . 35.4(5) ?
Mg3 Ow2b Ow2a . . . 84.4(15) ?
Mg3 Ow2b Ow4 . . . 65.8(15) ?
Mg3 Ow2b Ow5 . . . 110.5(9) ?
Mg3 Ow2b Ow5 . . 8_655 110.5(9) ?
Ca1 Ow2b Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow2b Ow2a . . . 119.8(19) ?
Ca1 Ow2b Ow4 . . . 30.4(15) ?
Ca1 Ow2b Ow5 . . . 83.4(10) ?
Ca1 Ow2b Ow5 . . 8_655 83.4(10) ?
Mg1 Ow2b Ow2a . . . 119.8(19) ?
Mg1 Ow2b Ow4 . . . 30.4(15) ?
Mg1 Ow2b Ow5 . . . 83.4(10) ?
Mg1 Ow2b Ow5 . . 8_655 83.4(10) ?
Ow2a Ow2b Ow4 . . . 150(2) ?
Ow2a Ow2b Ow5 . . . 136.5(9) ?
Ow2a Ow2b Ow5 . . 8_655 136.5(9) ?
Ow4 Ow2b Ow5 . . . 60.7(13) ?
Ow4 Ow2b Ow5 . . 8_655 60.7(13) ?
Ow5 Ow2b Ow5 . . 8_655 77.9(11) ?
Fe3 Ow3 Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow3 Ca1 . . . 8.1(6) ?
Fe3 Ow3 Ow1a . . . 57(2) ?
Fe3 Ow3 Ow3 . . 2_665 68(3) ?
Mg3 Ow3 Ca1 . . . 8.1(6) ?

Mg3 Ow3 Ow1a . . . 57(2) ?
Mg3 Ow3 Ow3 . . 2_665 68(3) ?
Ca1 Ow3 Ow1a . . . 48.9(16) ?
Ca1 Ow3 Ow3 . . 2_665 76(3) ?
Ow1a Ow3 Ow3 . . 2_665 125(5) ?
Fe3 Ow4 Mg3 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow4 Ca1 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow4 Mg1 . . . 0.0(5) ?
Fe3 Ow4 Ow2b . . . 57.3(15) ?
Fe3 Ow4 Ow2b . . 2_665 57.3(15) ?
Fe3 Ow4 Ow5 . . . 107.4(16) ?
Fe3 Ow4 Ow5 . . 2_665 107.4(16) ?
Fe3 Ow4 Ow5 . . 7_565 107.4(16) ?
Fe3 Ow4 Ow5 . . 8_655 107.4(16) ?
Mg3 Ow4 Ca1 . . . 0.0(5) ?
Mg3 Ow4 Mg1 . . . 0.0(5) ?
Mg3 Ow4 Ow2b . . . 57.3(15) ?
Mg3 Ow4 Ow2b . . 2_665 57.3(15) ?
Mg3 Ow4 Ow5 . . . 107.4(16) ?
Mg3 Ow4 Ow5 . . 2_665 107.4(16) ?
Mg3 Ow4 Ow5 . . 7_565 107.4(16) ?
Mg3 Ow4 Ow5 . . 8_655 107.4(16) ?
Ca1 Ow4 Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow4 Ow2b . . . 57.3(15) ?
Ca1 Ow4 Ow2b . . 2_665 57.3(15) ?
Ca1 Ow4 Ow5 . . . 107.4(16) ?
Ca1 Ow4 Ow5 . . 2_665 107.4(16) ?
Ca1 Ow4 Ow5 . . 7_565 107.4(16) ?
Ca1 Ow4 Ow5 . . 8_655 107.4(16) ?
Mg1 Ow4 Ow2b . . . 57.3(15) ?
Mg1 Ow4 Ow2b . . 2_665 57.3(15) ?
Mg1 Ow4 Ow5 . . . 107.4(16) ?
Mg1 Ow4 Ow5 . . 2_665 107.4(16) ?
Mg1 Ow4 Ow5 . . 7_565 107.4(16) ?
Mg1 Ow4 Ow5 . . 8_655 107.4(16) ?
Ow2b Ow4 Ow2b . . 2_665 115(3) ?
Ow2b Ow4 Ow5 . . . 64.8(8) ?
Ow2b Ow4 Ow5 . . 2_665 138.4(12) ?
Ow2b Ow4 Ow5 . . 7_565 138.4(12) ?
Ow2b Ow4 Ow5 . . 8_655 64.8(8) ?
Ow2b Ow4 Ow5 2_665 . . 138.4(12) ?
Ow2b Ow4 Ow5 2_665 . 2_665 64.8(8) ?
Ow2b Ow4 Ow5 2_665 . 7_565 64.8(8) ?
Ow2b Ow4 Ow5 2_665 . 8_655 138.4(12) ?
Ow5 Ow4 Ow5 . . 2_665 145(3) ?
Ow5 Ow4 Ow5 . . 7_565 88.3(12) ?
Ow5 Ow4 Ow5 . . 8_655 81.4(11) ?
Ow5 Ow4 Ow5 2_665 . 7_565 81.4(11) ?
Ow5 Ow4 Ow5 2_665 . 8_655 88.3(12) ?
Ow5 Ow4 Ow5 7_565 . 8_655 145(3) ?
Ca1 Ow5 Mg1 . . . 0.0(5) ?
Ca1 Ow5 Ca2 . . 16_554 128.4(8) ?
Ca1 Ow5 Ow2b . . . 39.5(6) ?
Ca1 Ow5 Ow4 . . . 21.6(15) ?

Ca1 Ow5 Ow5 . . 4_565 147.6(19) ?
Ca1 Ow5 Ow6 . . 4_565 84.3(11) ?
Mg1 Ow5 Ca2 . . 16_554 128.4(8) ?
Mg1 Ow5 Ow2b . . . 39.5(6) ?
Mg1 Ow5 Ow4 . . . 21.6(15) ?
Mg1 Ow5 Ow5 . . 4_565 147.6(19) ?
Mg1 Ow5 Ow6 . . 4_565 84.3(11) ?
Ca2 Ow5 Ow2b 16_554 . . 132.2(10) ?
Ca2 Ow5 Ow4 16_554 . . 136.8(10) ?
Ca2 Ow5 Ow5 16_554 . 4_565 83.7(16) ?
Ca2 Ow5 Ow6 16_554 . 4_565 53.6(9) ?
Ow2b Ow5 Ow4 . . . 54.4(13) ?
Ow2b Ow5 Ow5 . . 4_565 118(2) ?
Ow2b Ow5 Ow6 . . 4_565 116.5(15) ?
Ow4 Ow5 Ow5 . . 4_565 135(2) ?
Ow4 Ow5 Ow6 . . 4_565 84.3(11) ?
Ow5 Ow5 Ow6 4_565 . 4_565 125(2) ?
Ca1 Ow6 Mg2 3_645 . 10_554 136.5(6) ?
Ca1 Ow6 Mg2 3_645 . 11_555 136.1(7) ?
Ca1 Ow6 Mg2 3_645 . 13_555 136.1(7) ?
Ca1 Ow6 Mg2 3_645 . 16_554 136.5(6) ?
Ca1 Ow6 Ca2 3_645 . 10_554 136.5(6) ?
Ca1 Ow6 Ca2 3_645 . 11_555 136.1(7) ?
Ca1 Ow6 Ca2 3_645 . 13_555 136.1(7) ?
Ca1 Ow6 Ca2 3_645 . 16_554 136.5(6) ?
Ca1 Ow6 Ow5 3_645 . 4_565 56.3(10) ?
Ca1 Ow6 Ow5 3_645 . 6_545 56.3(10) ?
Mg2 Ow6 Mg2 10_554 . 11_555 4.41(19) ?
Mg2 Ow6 Mg2 10_554 . 13_555 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Mg2 10_554 . 16_554 82.3(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 10_554 . 10_554 0.0(5) ?
Mg2 Ow6 Ca2 10_554 . 11_555 4.41(19) ?
Mg2 Ow6 Ca2 10_554 . 13_555 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 10_554 . 16_554 82.3(9) ?
Mg2 Ow6 Ow5 10_554 . 4_565 165.4(17) ?
Mg2 Ow6 Ow5 10_554 . 6_545 89.2(8) ?
Mg2 Ow6 Mg2 11_555 . 13_555 79.0(9) ?
Mg2 Ow6 Mg2 11_555 . 16_554 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 11_555 . 10_554 4.41(19) ?
Mg2 Ow6 Ca2 11_555 . 11_555 0.0(5) ?
Mg2 Ow6 Ca2 11_555 . 13_555 79.0(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 11_555 . 16_554 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Ow5 11_555 . 4_565 167.4(16) ?
Mg2 Ow6 Ow5 11_555 . 6_545 91.5(8) ?
Mg2 Ow6 Mg2 13_555 . 16_554 4.41(19) ?
Mg2 Ow6 Ca2 13_555 . 10_554 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 13_555 . 11_555 79.0(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 13_555 . 13_555 0.0(5) ?
Mg2 Ow6 Ca2 13_555 . 16_554 4.41(19) ?
Mg2 Ow6 Ow5 13_555 . 4_565 91.5(8) ?
Mg2 Ow6 Ow5 13_555 . 6_545 167.4(16) ?
Mg2 Ow6 Ca2 16_554 . 10_554 82.3(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 16_554 . 11_555 80.8(9) ?
Mg2 Ow6 Ca2 16_554 . 13_555 4.41(19) ?

Mg2 Ow6 Ca2 16_554 . 16_554 0.0(5) ?
Mg2 Ow6 Ow5 16_554 . 4_565 89.2(8) ?
Mg2 Ow6 Ow5 16_554 . 6_545 165.4(17) ?
Ca2 Ow6 Ca2 10_554 . 11_555 4.41(19) ?
Ca2 Ow6 Ca2 10_554 . 13_555 80.8(9) ?
Ca2 Ow6 Ca2 10_554 . 16_554 82.3(9) ?
Ca2 Ow6 Ow5 10_554 . 4_565 165.4(17) ?
Ca2 Ow6 Ow5 10_554 . 6_545 89.2(8) ?
Ca2 Ow6 Ca2 11_555 . 13_555 79.0(9) ?
Ca2 Ow6 Ca2 11_555 . 16_554 80.8(9) ?
Ca2 Ow6 Ow5 11_555 . 4_565 167.4(16) ?
Ca2 Ow6 Ow5 11_555 . 6_545 91.5(8) ?
Ca2 Ow6 Ca2 13_555 . 16_554 4.41(19) ?
Ca2 Ow6 Ow5 13_555 . 4_565 91.5(8) ?
Ca2 Ow6 Ow5 13_555 . 6_545 167.4(16) ?
Ca2 Ow6 Ow5 16_554 . 4_565 89.2(8) ?
Ca2 Ow6 Ow5 16_554 . 6_545 165.4(17) ?
Ow5 Ow6 Ow5 4_565 . 6_545 96.5(16) ?

loop_
_geom_torsion_atom_site_label_1
_geom_torsion_atom_site_label_2
_geom_torsion_atom_site_label_3
_geom_torsion_atom_site_label_4
_geom_torsion_site_symmetry_1
_geom_torsion_site_symmetry_2
_geom_torsion_site_symmetry_3
_geom_torsion_site_symmetry_4
_geom_torsion
_geom_torsion_publ_flag
? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

loop_
_geom_hbond_atom_site_label_D
_geom_hbond_atom_site_label_H
_geom_hbond_atom_site_label_A
_geom_hbond_site_symmetry_D
_geom_hbond_site_symmetry_H
_geom_hbond_site_symmetry_A
_geom_hbond_distance_DH
_geom_hbond_distance_HA
_geom_hbond_distance_DA
_geom_hbond_angle_DHA
_geom_hbond_publ_flag
? ? ? ? ? ? ? ? ? ?

#=====

11. STRUCTURE-FACTOR LIST

loop_
_refln_index_h
_refln_index_k

_refln_index_l						
_refln_F_squared_calc						
_refln_F_squared_meas						
_refln_F_squared_sigma						
_refln_observed_status						
4	0	0	2371.29	2700.65	150.63	o
6	0	0	8.95	166.77	102.22	<
8	0	0	40235.00	45873.30	2049.69	o
10	0	0	4909.01	5062.36	290.51	o
12	0	0	1158.92	1231.97	166.77	o
14	0	0	1759.90	2759.82	225.95	o
16	0	0	119670.00	108612.00	4831.03	o
18	0	0	4099.16	4782.62	225.95	o
20	0	0	80318.30	76059.20	3421.53	o
22	0	0	16220.30	14541.50	747.79	o
24	0	0	17696.10	18146.00	914.56	o
26	0	0	1238.10	1231.97	279.75	o
28	0	0	51.52	-419.62	295.89	<
30	0	0	801.89	1194.31	193.67	o
32	0	0	9353.58	11195.30	693.99	o
34	0	0	18.42	-161.39	376.58	<
0	2	0	20164.60	19786.80	634.81	o
2	2	0	12710.30	11760.20	317.41	o
4	2	0	16389.00	19291.90	392.72	o
6	2	0	55435.00	61453.10	1032.92	o
8	2	0	79276.60	67607.60	1140.51	o
12	2	0	129.49	204.43	48.42	o
14	2	0	761.26	667.09	53.80	o
16	2	0	24351.70	28313.70	575.64	o
18	2	0	5001.36	4072.49	145.25	o
20	2	0	4281.38	4018.69	134.49	o
22	2	0	1521.65	1237.35	215.19	o
24	2	0	9388.18	8279.47	478.80	o
26	2	0	726.14	780.07	247.47	o
28	2	0	5152.45	5869.33	317.41	o
30	2	0	374.13	500.32	225.95	<
32	2	0	4043.02	3937.99	312.03	o
34	2	0	1043.37	591.78	274.37	<
0	4	0	439797.00	452482.00	14116.50	o
2	4	0	46323.70	45012.50	1156.65	o
4	4	0	1859.05	1490.20	96.84	o
6	4	0	7808.42	8349.41	231.33	o
8	4	0	756.65	936.08	91.46	o
10	4	0	3911.01	3755.08	129.12	o
12	4	0	111.28	64.56	64.56	<
14	4	0	3780.86	3114.89	107.60	o
16	4	0	51189.00	51247.70	1038.30	o
18	4	0	9.95	53.80	91.46	<
20	4	0	22408.20	20690.60	500.32	o
22	4	0	2728.02	2878.18	139.87	o
24	4	0	13472.30	14111.10	355.07	o
26	4	0	3943.98	3529.13	193.67	o
28	4	0	1015.72	1312.66	166.77	o
30	4	0	1657.77	1775.32	263.61	o

32	4	0	5907.24	8327.89	419.62	o
0	6	0	16500.20	17425.10	511.08	o
2	6	0	3337.64	3819.64	156.01	o
4	6	0	10231.50	8344.03	242.09	o
6	6	0	11543.70	10883.30	247.47	o
8	6	0	58825.10	55831.30	989.88	o
10	6	0	5226.86	4777.24	172.15	o
12	6	0	4538.89	3674.38	161.39	o
14	6	0	43.65	263.61	112.97	<
16	6	0	24908.60	23934.60	457.28	o
18	6	0	4919.68	4944.01	172.15	o
20	6	0	359.66	521.84	123.74	o
22	6	0	2911.30	2808.24	145.25	o
24	6	0	13072.80	12846.90	451.90	o
0	8	0	19769.00	18113.70	995.26	o
2	8	0	503.48	290.51	338.93	<
4	8	0	7063.65	5901.61	532.60	o
6	8	0	6807.67	6068.38	365.82	o
8	8	0	358.15	161.39	247.47	<
10	8	0	218.42	494.94	258.23	<
12	8	0	603.10	914.56	268.99	o
14	8	0	5790.23	5820.91	371.20	o
16	8	0	15105.20	15552.90	478.80	o
18	8	0	1170.79	1178.17	285.13	o
20	8	0	1057.11	1075.95	290.51	o
1	0	1	18632.10	16860.20	435.76	o
3	0	1	64760.30	51543.60	1312.66	o
7	0	1	17786.50	19022.90	376.58	o
9	0	1	4599.61	3652.86	96.84	o
11	0	1	3719.98	3104.13	112.97	o
13	0	1	5445.24	6052.24	193.67	o
15	0	1	3815.88	3174.07	258.23	o
17	0	1	46179.00	45270.80	1188.93	o
19	0	1	44338.60	47971.40	1264.25	o
21	0	1	4921.59	4664.26	199.05	o
23	0	1	276.09	145.25	134.49	<
25	0	1	1190.46	806.97	134.49	o
27	0	1	941.34	1188.93	150.63	o
29	0	1	275.86	102.22	150.63	<
31	0	1	1124.09	1382.60	182.91	o
33	0	1	244.89	462.66	258.23	<
35	0	1	906.85	1425.64	295.89	o
0	1	1	68055.90	60796.80	1904.44	o
2	1	1	4870.91	6256.67	172.15	o
4	1	1	81706.90	80314.60	1436.40	o
6	1	1	2160.84	1979.76	43.04	o
8	1	1	56960.50	51882.50	763.93	o
10	1	1	14020.90	14676.00	204.43	o
12	1	1	12826.50	11555.70	156.01	o
14	1	1	13250.20	12341.20	161.39	o
16	1	1	65044.90	61819.00	715.51	o
18	1	1	15776.20	15633.60	312.03	o
20	1	1	6892.64	6595.60	150.63	o
22	1	1	6320.42	5761.74	139.87	o

24	1	1	29297.00	30438.70	537.98	o
26	1	1	5754.83	5880.09	182.91	o
28	1	1	1271.19	1447.16	107.60	o
30	1	1	997.73	957.60	139.87	o
32	1	1	6645.14	8042.76	247.47	o
34	1	1	1138.58	1237.35	204.43	o
3	2	1	10472.50	9027.26	182.91	o
5	2	1	713.82	828.48	43.04	o
7	2	1	4553.25	4185.46	64.56	o
9	2	1	12013.60	10894.00	139.87	o
11	2	1	19928.10	19076.70	236.71	o
15	2	1	2665.00	2668.37	59.18	o
17	2	1	7843.17	8144.97	129.12	o
19	2	1	8271.24	8559.22	134.49	o
21	2	1	3332.14	2878.18	64.56	o
23	2	1	826.63	758.55	129.12	o
25	2	1	170.41	64.56	161.39	<
27	2	1	61.19	5.38	156.01	<
29	2	1	455.29	796.21	156.01	o
31	2	1	22.01	166.77	166.77	<
33	2	1	686.75	462.66	188.29	<
0	3	1	8357.44	7338.01	295.89	o
2	3	1	1105.03	1022.16	69.94	o
4	3	1	33395.30	34715.70	591.78	o
6	3	1	667.55	548.74	48.42	o
8	3	1	9193.58	8672.19	118.36	o
10	3	1	5745.80	5643.38	86.08	o
12	3	1	6738.04	6649.40	96.84	o
14	3	1	6248.12	6681.68	96.84	o
16	3	1	24830.20	22767.20	306.65	o
18	3	1	8776.04	8817.45	129.12	o
20	3	1	2923.50	2964.25	75.32	o
22	3	1	4552.56	4524.39	91.46	o
24	3	1	16199.00	15273.20	242.09	o
26	3	1	4794.90	4427.55	123.74	o
28	3	1	184.74	96.84	161.39	<
30	3	1	1491.26	1479.44	215.19	o
32	3	1	5119.27	5600.34	322.79	o
1	4	1	3164.00	3577.55	129.12	o
3	4	1	12490.70	12373.50	231.33	o
5	4	1	1479.51	1441.78	69.94	o
7	4	1	5565.86	6009.20	112.97	o
9	4	1	15023.60	15413.00	225.95	o
11	4	1	12149.00	13207.30	182.91	o
13	4	1	5133.82	5008.57	96.84	o
15	4	1	695.31	742.41	64.56	o
17	4	1	11215.60	11867.80	182.91	o
19	4	1	10439.20	10307.60	182.91	o
21	4	1	1138.20	984.50	86.08	o
23	4	1	38.19	21.52	80.70	<
25	4	1	11.83	-64.56	80.70	<
27	4	1	86.12	118.36	107.60	<
29	4	1	12.97	96.84	134.49	<
31	4	1	132.83	-64.56	252.85	<

0	5	1	59953.20	55357.80	1038.30	o
2	5	1	10817.20	11168.40	204.43	o
4	5	1	9579.73	10695.00	236.71	o
6	5	1	7419.28	8032.00	139.87	o
8	5	1	45997.60	45394.50	597.16	o
10	5	1	8130.05	7897.50	129.12	o
12	5	1	6729.44	6778.51	118.36	o
14	5	1	2419.29	2700.65	75.32	o
16	5	1	23370.30	22444.40	328.17	o
18	5	1	2273.98	2125.01	86.08	o
20	5	1	9384.07	8688.33	193.67	o
22	5	1	151.65	16.14	86.08	<
24	5	1	8384.68	8666.81	215.19	o
26	5	1	476.33	624.05	139.87	o
28	5	1	3192.74	3529.13	295.89	o
30	5	1	2.79	451.90	252.85	<
1	6	1	0.00	10.76	80.70	<
3	6	1	831.06	850.00	107.60	o
5	6	1	3886.42	4029.45	112.97	o
7	6	1	127.50	91.46	91.46	<
9	6	1	8062.59	7757.63	172.15	o
11	6	1	8593.44	8349.41	166.77	o
13	6	1	0.35	-53.80	86.08	<
15	6	1	1910.98	1958.24	86.08	o
17	6	1	518.36	468.04	86.08	o
19	6	1	112.94	199.05	86.08	<
21	6	1	292.25	231.33	112.97	<
23	6	1	8.41	247.47	139.87	<
25	6	1	816.95	930.70	161.39	o
0	7	1	23484.80	20168.80	591.78	o
2	7	1	7001.12	7278.83	236.71	o
4	7	1	1372.46	1667.73	145.25	o
6	7	1	4465.08	4481.35	161.39	o
8	7	1	13785.80	12647.80	295.89	o
10	7	1	2656.04	2706.02	123.74	o
12	7	1	3143.21	3545.27	150.63	o
14	7	1	617.74	828.48	96.84	o
16	7	1	6019.63	5056.99	139.87	o
18	7	1	461.27	564.88	134.49	o
20	7	1	3874.17	4110.15	209.81	o
22	7	1	99.32	220.57	247.47	<
24	7	1	3042.09	2619.95	290.51	o
1	8	1	544.26	570.26	129.12	o
3	8	1	2420.24	2168.05	166.77	o
5	8	1	1003.63	968.36	134.49	o
7	8	1	536.57	618.67	134.49	o
9	8	1	5440.88	5250.66	215.19	o
11	8	1	5562.15	5401.29	215.19	o
13	8	1	1822.25	2012.03	166.77	o
15	8	1	22.90	75.32	188.29	<
17	8	1	704.28	726.27	199.05	o
19	8	1	203.76	43.04	279.75	<
0	9	1	10456.80	8537.70	468.04	o
2	9	1	3268.44	3265.52	344.30	o

4	9	1	35.18	-86.08	215.19	<
6	9	1	2676.35	2227.23	236.71	o
8	9	1	7811.52	8274.09	333.55	o
10	9	1	1755.54	1942.10	193.67	o
12	9	1	594.92	1016.78	188.29	o
14	9	1	162.69	559.50	220.57	<
2	0	2	40741.20	27614.40	1237.35	o
4	0	2	2874.20	3211.72	107.60	o
6	0	2	70656.70	81907.00	1619.31	o
8	0	2	288110.00	287549.00	5153.82	o
10	0	2	26229.60	23902.30	478.80	o
12	0	2	58.52	145.25	48.42	o
14	0	2	8756.92	8284.85	182.91	o
16	0	2	36479.80	35194.50	683.23	o
18	0	2	3067.76	3211.72	91.46	o
20	0	2	2221.70	2383.24	123.74	o
22	0	2	860.42	408.86	107.60	o
24	0	2	13187.00	14030.40	328.17	o
26	0	2	3084.55	3324.70	161.39	o
28	0	2	12755.30	13406.40	419.62	o
30	0	2	2745.20	3018.05	236.71	o
32	0	2	3562.23	4610.46	468.04	o
34	0	2	833.17	919.94	408.86	<
1	1	2	77.31	451.90	59.18	o
3	1	2	503.18	753.17	64.56	o
5	1	2	8975.69	10544.40	247.47	o
7	1	2	21148.90	21960.20	376.58	o
9	1	2	20388.70	22299.20	355.07	o
11	1	2	12913.40	13476.30	182.91	o
13	1	2	7551.11	7526.30	107.60	o
15	1	2	4928.34	5035.47	75.32	o
17	1	2	4.05	-16.14	37.66	<
19	1	2	197.19	290.51	43.04	o
21	1	2	980.48	1097.47	75.32	o
23	1	2	919.89	801.59	75.32	o
25	1	2	2181.16	2431.66	118.36	o
27	1	2	3421.03	3324.70	134.49	o
29	1	2	196.45	317.41	166.77	<
31	1	2	322.94	193.67	182.91	<
33	1	2	961.48	1361.08	285.13	o
0	2	2	502452.00	532006.00	16564.30	o
2	2	2	111270.00	114379.00	3577.55	o
4	2	2	3590.43	3464.57	112.97	o
6	2	2	400.27	220.57	48.42	o
10	2	2	8.20	5.38	37.66	<
12	2	2	3237.12	2937.36	59.18	o
14	2	2	4039.20	3948.75	69.94	o
16	2	2	42770.70	35641.00	468.04	o
18	2	2	20.54	107.60	43.04	<
20	2	2	30761.00	29836.20	338.93	o
22	2	2	1587.67	1301.90	48.42	o
24	2	2	13542.50	13530.10	263.61	o
26	2	2	3777.41	3733.56	204.43	o
28	2	2	45.35	32.28	274.37	<

30	2	2	1759.44	1893.68	225.95	o
32	2	2	6371.88	6826.93	301.27	o
34	2	2	443.58	720.89	279.75	<
1	3	2	6803.42	8010.48	177.53	o
3	3	2	3488.07	4777.24	123.74	o
5	3	2	2971.98	3061.09	86.08	o
7	3	2	7013.39	6466.48	107.60	o
9	3	2	9.84	-5.38	48.42	<
11	3	2	108.35	118.36	48.42	<
13	3	2	5714.40	6030.72	102.22	o
15	3	2	2682.89	2350.96	69.94	o
17	3	2	4586.29	4427.55	91.46	o
19	3	2	3409.95	2948.11	80.70	o
21	3	2	821.21	844.62	59.18	o
23	3	2	381.35	392.72	53.80	o
25	3	2	27.73	75.32	59.18	<
27	3	2	294.13	430.38	91.46	o
29	3	2	250.44	107.60	225.95	<
31	3	2	264.42	349.68	312.03	<
33	3	2	51.38	225.95	236.71	<
0	4	2	3758.37	4185.46	139.87	o
2	4	2	16601.00	15402.30	371.20	o
4	4	2	4556.05	4965.53	123.74	o
6	4	2	30229.30	32515.30	446.52	o
8	4	2	121929.00	123713.00	1640.83	o
10	4	2	14115.90	13072.80	177.53	o
12	4	2	1573.20	1538.61	64.56	o
14	4	2	2276.63	2307.92	69.94	o
16	4	2	22786.20	22455.20	322.79	o
18	4	2	4377.92	4158.56	107.60	o
20	4	2	61.14	59.18	75.32	<
22	4	2	2926.28	2598.43	91.46	o
24	4	2	12458.70	12927.60	225.95	o
26	4	2	376.84	489.56	96.84	o
28	4	2	5879.20	5745.60	242.09	o
30	4	2	624.11	774.69	258.23	<
32	4	2	3380.19	3152.55	381.96	o
1	5	2	2438.71	1888.30	91.46	o
3	5	2	3199.35	3674.38	129.12	o
5	5	2	731.84	758.55	86.08	o
7	5	2	1431.11	1387.98	69.94	o
9	5	2	18746.70	18205.10	247.47	o
11	5	2	16265.30	15967.20	215.19	o
13	5	2	30.91	-10.76	59.18	<
15	5	2	342.40	446.52	75.32	o
17	5	2	1946.04	1651.59	86.08	o
19	5	2	667.82	489.56	86.08	o
21	5	2	330.96	242.09	80.70	<
23	5	2	752.05	936.08	86.08	o
25	5	2	1194.16	1366.46	118.36	o
27	5	2	1552.79	1662.35	188.29	o
29	5	2	406.31	365.82	247.47	<
0	6	2	73864.40	76408.90	1565.51	o
2	6	2	8371.23	7908.26	182.91	o

4	6	2	7627.98	7020.60	188.29	o
6	6	2	2735.87	2921.22	107.60	o
8	6	2	1576.60	1635.45	86.08	o
10	6	2	7.34	156.01	75.32	<
12	6	2	198.59	231.33	75.32	o
14	6	2	4454.98	4524.39	112.97	o
16	6	2	24498.20	25580.80	414.24	o
18	6	2	1042.20	1221.21	107.60	o
20	6	2	5178.28	5320.59	161.39	o
22	6	2	6.22	91.46	118.36	<
24	6	2	10287.50	9974.10	247.47	o
26	6	2	3614.36	3889.57	225.95	o
1	7	2	17.52	-37.66	112.97	<
3	7	2	184.77	59.18	107.60	<
5	7	2	460.70	96.84	102.22	<
7	7	2	301.74	236.71	96.84	<
9	7	2	1757.89	1963.62	118.36	o
11	7	2	1760.22	1678.49	118.36	o
13	7	2	107.97	-134.49	161.39	<
15	7	2	15.02	-91.46	161.39	<
17	7	2	164.54	376.58	156.01	<
19	7	2	83.91	242.09	161.39	<
21	7	2	52.04	139.87	247.47	<
23	7	2	19.75	188.29	252.85	<
0	8	2	100.60	215.19	188.29	<
2	8	2	2871.82	2991.15	182.91	o
4	8	2	2244.13	2286.40	177.53	o
6	8	2	4817.71	4987.05	166.77	o
8	8	2	19926.30	20701.40	408.86	o
10	8	2	1583.56	1490.20	139.87	o
12	8	2	2929.26	3157.93	161.39	o
14	8	2	576.82	898.42	193.67	o
16	8	2	5478.12	5288.32	252.85	o
18	8	2	2950.39	2867.42	312.03	o
20	8	2	647.67	946.84	295.89	o
1	9	2	40.45	-86.08	242.09	<
3	9	2	121.85	564.88	225.95	<
5	9	2	57.82	86.08	161.39	<
7	9	2	124.22	48.42	182.91	<
9	9	2	1964.39	2211.09	204.43	o
11	9	2	1927.61	1866.78	236.71	o
13	9	2	331.98	172.15	317.41	<
1	0	3	7205.66	6509.52	199.05	o
7	0	3	2554.68	2888.94	80.70	o
9	0	3	163678.00	171911.00	3098.75	o
11	0	3	174521.00	186737.00	3356.98	o
13	0	3	6612.47	7919.02	204.43	o
15	0	3	2430.80	2377.86	96.84	o
17	0	3	545.52	398.10	69.94	o
19	0	3	139.92	537.98	75.32	o
21	0	3	4275.09	3798.12	96.84	o
23	0	3	2198.39	2044.31	123.74	o
25	0	3	2116.36	2420.90	172.15	o
27	0	3	2228.13	2173.43	177.53	o

29	0	3	3436.92	3636.73	215.19	o
31	0	3	3423.92	3787.36	451.90	o
33	0	3	778.89	774.69	403.48	<
0	1	3	70964.10	91875.70	2878.18	o
4	1	3	19440.70	21922.60	451.90	o
6	1	3	121.91	193.67	37.66	o
8	1	3	11403.00	9549.09	166.77	o
10	1	3	1783.98	1882.92	53.80	o
12	1	3	5652.62	5869.33	107.60	o
14	1	3	6330.00	6853.83	123.74	o
16	1	3	35677.20	36953.70	435.76	o
18	1	3	5443.74	4685.78	75.32	o
20	1	3	2951.13	2657.61	64.56	o
22	1	3	2081.06	2173.43	59.18	o
24	1	3	15340.60	14961.10	317.41	o
26	1	3	5558.92	5810.15	215.19	o
28	1	3	22.41	112.97	145.25	<
30	1	3	1462.94	1447.16	193.67	o
32	1	3	6269.26	7311.11	312.03	o
34	1	3	1057.36	769.31	290.51	<
1	2	3	2903.68	2636.09	156.01	o
5	2	3	701.04	425.00	64.56	o
7	2	3	11902.60	12884.60	220.57	o
9	2	3	2474.43	2759.82	69.94	o
11	2	3	2805.57	3093.37	69.94	o
13	2	3	6067.32	6869.97	118.36	o
15	2	3	195.36	236.71	43.04	o
17	2	3	16008.00	17113.10	220.57	o
19	2	3	11832.50	12647.80	161.39	o
21	2	3	837.04	715.51	48.42	o
23	2	3	44.35	26.90	48.42	<
25	2	3	563.83	398.10	53.80	o
27	2	3	792.13	1221.21	172.15	o
29	2	3	1184.63	1495.58	188.29	o
31	2	3	2503.00	3055.71	268.99	o
33	2	3	274.24	672.47	215.19	o
0	3	3	104650.00	107445.00	2759.82	o
2	3	3	21816.50	23638.70	634.81	o
4	3	3	15086.80	15977.90	387.34	o
6	3	3	4925.32	5815.53	129.12	o
8	3	3	45216.90	43253.40	688.61	o
10	3	3	8205.21	8860.48	177.53	o
12	3	3	5874.21	5976.93	118.36	o
14	3	3	8527.57	7601.62	134.49	o
16	3	3	39555.70	41935.30	640.19	o
18	3	3	4454.29	4115.52	96.84	o
20	3	3	8077.09	7569.34	129.12	o
22	3	3	626.78	650.95	64.56	o
24	3	3	11300.80	11125.40	161.39	o
26	3	3	1863.23	2092.73	80.70	o
28	3	3	1509.12	1506.34	102.22	o
30	3	3	192.13	37.66	199.05	<
32	3	3	4159.66	5003.19	322.79	o
1	4	3	34.94	107.60	64.56	<

3	4	3	1651.05	2092.73	102.22	o
5	4	3	10965.30	11055.40	220.57	o
7	4	3	14.26	123.74	64.56	<
9	4	3	35954.20	35915.40	494.94	o
11	4	3	39019.70	40472.00	554.12	o
13	4	3	285.36	430.38	64.56	o
15	4	3	4667.27	4831.03	107.60	o
17	4	3	1447.69	1425.64	75.32	o
19	4	3	1560.11	1420.26	75.32	o
21	4	3	2534.22	2835.14	91.46	o
23	4	3	571.14	398.10	75.32	o
25	4	3	1153.88	1075.95	102.22	o
27	4	3	1098.59	1226.59	139.87	o
29	4	3	1215.53	1624.69	215.19	o
31	4	3	1234.20	973.74	220.57	o
0	5	3	33534.10	33193.20	693.99	o
2	5	3	5709.68	5336.73	145.25	o
4	5	3	2157.82	1807.60	102.22	o
6	5	3	187.25	182.91	69.94	<
8	5	3	5672.48	5562.68	118.36	o
10	5	3	382.56	403.48	69.94	o
12	5	3	3054.31	3012.67	91.46	o
14	5	3	1004.59	806.97	75.32	o
16	5	3	10657.90	10490.60	166.77	o
18	5	3	940.33	989.88	80.70	o
20	5	3	1938.68	2038.93	96.84	o
22	5	3	319.83	403.48	91.46	o
24	5	3	5766.48	6036.10	156.01	o
26	5	3	2238.79	2512.35	177.53	o
28	5	3	38.66	59.18	150.63	<
1	6	3	5503.44	5433.57	139.87	o
3	6	3	8886.46	8591.50	215.19	o
5	6	3	1263.97	1576.27	96.84	o
7	6	3	9116.05	9430.74	177.53	o
9	6	3	977.77	1221.21	86.08	o
11	6	3	940.32	1231.97	96.84	o
13	6	3	7426.94	7085.16	150.63	o
15	6	3	963.73	973.74	96.84	o
17	6	3	5996.04	5987.69	139.87	o
19	6	3	4265.05	4206.98	134.49	o
21	6	3	163.31	172.15	107.60	<
23	6	3	1013.89	866.14	118.36	o
25	6	3	546.90	823.10	188.29	o
27	6	3	1708.79	2022.79	215.19	o
0	7	3	20443.10	19146.60	586.40	o
2	7	3	4820.66	5191.48	177.53	o
4	7	3	1354.55	1570.89	139.87	o
6	7	3	2009.56	2076.59	139.87	o
8	7	3	11985.60	11179.20	258.23	o
10	7	3	2777.92	3335.46	129.12	o
12	7	3	850.80	968.36	112.97	o
14	7	3	1496.26	1178.17	166.77	o
16	7	3	7770.29	7913.64	274.37	o
18	7	3	585.85	559.50	166.77	o

20	7	3	3098.81	3695.90	209.81	o
22	7	3	12.85	-59.18	156.01	<
24	7	3	1914.51	2264.88	279.75	o
1	8	3	352.39	441.14	161.39	<
3	8	3	3187.67	3044.95	150.63	o
5	8	3	7339.96	7338.01	204.43	o
7	8	3	2206.08	2146.53	134.49	o
9	8	3	638.26	521.84	139.87	o
11	8	3	757.51	919.94	172.15	o
13	8	3	1266.90	1522.48	215.19	o
15	8	3	4299.95	4077.87	247.47	o
17	8	3	2576.39	2437.04	317.41	o
19	8	3	1024.43	1022.16	295.89	o
0	9	3	17426.70	17150.70	683.23	o
2	9	3	4818.96	4422.17	333.55	o
4	9	3	55.81	-285.13	231.33	<
6	9	3	1035.82	1242.73	242.09	o
8	9	3	5040.10	5121.54	306.65	o
10	9	3	434.95	656.33	231.33	<
12	9	3	943.45	925.32	236.71	o
0	0	4	157861.00	168919.00	5277.56	o
2	0	4	29109.80	26581.50	1221.21	o
4	0	4	180.31	511.08	112.97	o
6	0	4	17405.40	20921.90	435.76	o
8	0	4	3619.10	3765.84	102.22	o
10	0	4	5534.71	5508.89	129.12	o
12	0	4	148.70	209.81	59.18	o
14	0	4	5967.86	6525.66	177.53	o
16	0	4	18885.40	16548.20	392.72	o
18	0	4	185.05	150.63	80.70	<
20	0	4	4137.26	3970.27	129.12	o
22	0	4	244.39	398.10	86.08	o
24	0	4	10258.50	9075.67	166.77	o
26	0	4	7854.09	7520.92	285.13	o
28	0	4	2745.18	2716.78	204.43	o
30	0	4	3848.05	4163.94	242.09	o
32	0	4	6229.94	7327.25	408.86	o
34	0	4	1018.62	1893.68	451.90	o
1	1	4	238.72	166.77	75.32	<
3	1	4	3210.75	2878.18	96.84	o
5	1	4	11344.40	10436.80	209.81	o
7	1	4	49766.60	49133.50	731.65	o
9	1	4	454.54	355.07	48.42	o
11	1	4	262.28	403.48	48.42	o
13	1	4	31368.80	31374.80	451.90	o
15	1	4	12281.10	12249.70	199.05	o
17	1	4	259.17	166.77	48.42	o
19	1	4	622.61	726.27	48.42	o
21	1	4	1430.71	1226.59	59.18	o
23	1	4	2580.04	2786.72	80.70	o
25	1	4	1744.18	1543.99	69.94	o
27	1	4	3884.34	4147.80	199.05	o
29	1	4	686.70	710.13	161.39	o
31	1	4	572.72	559.50	177.53	o

33	1	4	2027.92	2732.92	322.79	o
0	2	4	453.00	494.94	118.36	o
2	2	4	3482.31	3055.71	166.77	o
4	2	4	9741.66	9371.56	242.09	o
6	2	4	61319.40	66391.80	1479.44	o
8	2	4	184289.00	195662.00	3523.75	o
10	2	4	36543.00	35522.60	537.98	o
12	2	4	5157.45	5261.42	96.84	o
14	2	4	89.19	166.77	48.42	o
16	2	4	17965.50	18845.30	268.99	o
18	2	4	7836.36	8053.52	112.97	o
20	2	4	253.60	295.89	48.42	o
22	2	4	2713.76	2781.34	69.94	o
24	2	4	8083.96	8021.24	123.74	o
26	2	4	459.27	392.72	69.94	o
28	2	4	11649.30	12373.50	268.99	o
30	2	4	1421.98	1484.82	204.43	o
32	2	4	2282.75	2523.11	231.33	o
1	3	4	675.66	801.59	112.97	o
3	3	4	6882.46	9748.15	312.03	o
5	3	4	4751.47	5508.89	177.53	o
7	3	4	12543.60	12470.30	258.23	o
9	3	4	2671.09	2652.23	96.84	o
11	3	4	5239.68	5186.10	107.60	o
13	3	4	14054.80	13293.40	199.05	o
15	3	4	3799.73	3400.02	75.32	o
17	3	4	863.36	796.21	59.18	o
19	3	4	773.46	602.53	64.56	o
21	3	4	1751.24	1581.65	75.32	o
23	3	4	2199.67	2237.98	86.08	o
25	3	4	942.58	1032.92	80.70	o
27	3	4	2867.79	2819.00	107.60	o
29	3	4	651.56	839.24	145.25	o
31	3	4	251.88	371.20	188.29	<
0	4	4	128636.00	126941.00	2835.14	o
2	4	4	27374.10	28496.70	672.47	o
4	4	4	2312.78	3018.05	145.25	o
6	4	4	2942.34	2878.18	107.60	o
8	4	4	2233.30	2625.33	91.46	o
10	4	4	169.62	177.53	69.94	<
12	4	4	514.91	500.32	69.94	o
14	4	4	7360.82	7321.87	150.63	o
16	4	4	23239.20	22519.70	328.17	o
18	4	4	531.91	435.76	64.56	o
20	4	4	5829.85	5750.98	118.36	o
22	4	4	115.46	263.61	69.94	o
24	4	4	8775.91	8946.56	166.77	o
26	4	4	4194.53	3927.23	118.36	o
28	4	4	311.41	279.75	172.15	<
30	4	4	1399.69	1307.28	193.67	o
1	5	4	1761.71	1823.74	80.70	o
3	5	4	3517.62	3459.19	107.60	o
5	5	4	1620.51	1726.91	96.84	o
7	5	4	9304.51	9118.71	166.77	o

9	5	4	3027.86	3405.40	102.22	o
11	5	4	1963.23	1909.82	91.46	o
13	5	4	3922.40	4465.21	107.60	o
15	5	4	1451.58	1366.46	86.08	o
17	5	4	3216.18	3647.49	107.60	o
19	5	4	2989.65	2695.27	102.22	o
21	5	4	49.55	64.56	91.46	<
23	5	4	904.51	909.18	112.97	o
25	5	4	712.49	715.51	96.84	o
27	5	4	789.57	683.23	129.12	o
0	6	4	2590.75	2915.84	145.25	o
2	6	4	4717.79	4562.05	118.36	o
4	6	4	1000.98	1226.59	91.46	o
6	6	4	9281.53	9920.30	188.29	o
8	6	4	26698.30	29405.80	446.52	o
10	6	4	4736.03	4798.76	123.74	o
12	6	4	1436.66	1377.22	96.84	o
14	6	4	333.26	123.74	102.22	<
16	6	4	2658.72	2480.07	107.60	o
18	6	4	3170.23	3631.35	134.49	o
20	6	4	1219.51	1231.97	172.15	o
22	6	4	2800.08	3077.23	193.67	o
24	6	4	3596.18	4196.22	215.19	o
26	6	4	31.06	43.04	145.25	<
1	7	4	1311.06	1275.01	139.87	o
3	7	4	4913.06	5363.63	215.19	o
5	7	4	1.54	48.42	150.63	<
7	7	4	17.88	69.94	112.97	<
9	7	4	5862.42	6251.29	204.43	o
11	7	4	6818.43	7106.68	220.57	o
13	7	4	158.69	145.25	134.49	<
15	7	4	9.83	64.56	166.77	<
17	7	4	1681.30	1716.15	188.29	o
19	7	4	922.67	774.69	182.91	o
21	7	4	732.53	677.85	182.91	o
23	7	4	1360.44	1140.51	182.91	o
0	8	4	28637.90	29642.50	839.24	o
2	8	4	5456.31	5810.15	182.91	o
4	8	4	2237.52	2394.00	139.87	o
6	8	4	311.93	435.76	172.15	<
8	8	4	3130.54	3362.36	204.43	o
10	8	4	664.75	817.72	172.15	o
12	8	4	7.78	150.63	172.15	<
14	8	4	4604.84	5132.30	236.71	o
16	8	4	10906.00	12169.00	376.58	o
18	8	4	439.46	355.07	199.05	<
1	9	4	874.69	575.64	204.43	<
3	9	4	1727.77	2361.72	247.47	o
5	9	4	10.35	-102.22	204.43	<
7	9	4	207.50	290.51	209.81	<
9	9	4	1759.68	1829.12	220.57	o
11	9	4	1616.66	1619.31	263.61	o
1	0	5	7553.35	6800.03	193.67	o
3	0	5	14597.60	13476.30	468.04	o

5	0	5	73.72	172.15	123.74	<
7	0	5	13176.40	15117.20	365.82	o
9	0	5	632.80	521.84	75.32	o
11	0	5	94.23	242.09	75.32	o
13	0	5	5433.52	6240.53	182.91	o
15	0	5	146.02	102.22	107.60	<
17	0	5	15009.00	16602.00	468.04	o
19	0	5	11811.70	12411.10	365.82	o
21	0	5	7.16	48.42	91.46	<
23	0	5	1977.73	1769.94	112.97	o
25	0	5	702.11	699.37	86.08	o
27	0	5	938.31	973.74	118.36	o
29	0	5	3076.04	3071.85	220.57	o
31	0	5	5194.10	5643.38	371.20	o
33	0	5	338.45	882.28	295.89	<
0	1	5	10650.40	8015.86	306.65	o
2	1	5	1783.53	2103.49	123.74	o
4	1	5	25.41	80.70	69.94	<
6	1	5	5565.05	5750.98	129.12	o
8	1	5	34407.20	36270.40	586.40	o
10	1	5	6967.78	6907.63	145.25	o
12	1	5	1251.56	1140.51	69.94	o
14	1	5	337.59	139.87	64.56	<
16	1	5	12221.00	11943.10	231.33	o
18	1	5	1592.55	1802.22	86.08	o
20	1	5	40.97	102.22	80.70	<
22	1	5	1261.46	968.36	75.32	o
24	1	5	5714.46	5627.24	118.36	o
26	1	5	887.78	790.83	80.70	o
28	1	5	652.15	543.36	91.46	o
30	1	5	1.40	-48.42	177.53	<
32	1	5	2752.21	3157.93	231.33	o
1	2	5	3980.81	4115.52	145.25	o
3	2	5	921.85	1006.02	86.08	o
5	2	5	10688.70	11007.00	285.13	o
7	2	5	102.82	182.91	75.32	<
9	2	5	116461.00	122594.00	2055.07	o
11	2	5	117609.00	119307.00	1872.16	o
13	2	5	1930.58	2307.92	75.32	o
15	2	5	3864.97	4126.28	86.08	o
17	2	5	133.32	145.25	64.56	<
19	2	5	11.03	-16.14	59.18	<
21	2	5	5747.11	6084.52	112.97	o
23	2	5	3059.97	2775.96	80.70	o
25	2	5	3483.57	3588.31	102.22	o
27	2	5	3066.29	3109.51	123.74	o
29	2	5	3476.18	3862.68	215.19	o
31	2	5	3339.47	3287.04	209.81	o
0	3	5	43901.70	47885.30	979.12	o
2	3	5	9259.84	9425.36	263.61	o
4	3	5	270.99	328.17	107.60	o
6	3	5	8317.52	7908.26	166.77	o
8	3	5	37568.60	39713.50	645.57	o
10	3	5	5782.25	5745.60	123.74	o

12	3	5	7258.45	7155.10	123.74	o
14	3	5	38.39	96.84	53.80	<
16	3	5	12739.50	11372.80	166.77	o
18	3	5	889.12	946.84	59.18	o
20	3	5	1182.41	1151.27	69.94	o
22	3	5	556.92	645.57	69.94	o
24	3	5	6573.51	6175.98	123.74	o
26	3	5	1020.82	898.42	102.22	o
28	3	5	1197.99	1118.99	182.91	o
30	3	5	11.96	64.56	166.77	<
1	4	5	9376.59	8026.62	172.15	o
3	4	5	15273.10	14154.20	365.82	o
5	4	5	1474.15	1178.17	102.22	o
7	4	5	12521.80	12771.60	258.23	o
9	4	5	229.61	215.19	80.70	<
11	4	5	79.84	102.22	75.32	<
13	4	5	8058.61	7542.44	145.25	o
15	4	5	978.72	1059.82	75.32	o
17	4	5	11418.80	11491.20	188.29	o
19	4	5	9098.82	9506.06	150.63	o
21	4	5	149.13	231.33	69.94	o
23	4	5	1569.23	1791.46	86.08	o
25	4	5	1585.95	1769.94	102.22	o
27	4	5	2467.24	2840.52	150.63	o
29	4	5	711.14	839.24	193.67	o
0	5	5	637.63	882.28	112.97	o
2	5	5	102.82	225.95	80.70	<
4	5	5	480.01	381.96	86.08	o
6	5	5	1118.12	1086.71	96.84	o
8	5	5	13010.10	13492.50	242.09	o
10	5	5	3164.96	2985.77	107.60	o
12	5	5	11.00	107.60	86.08	<
14	5	5	859.56	726.27	96.84	o
16	5	5	6734.69	7052.88	134.49	o
18	5	5	1606.30	1172.79	86.08	o
20	5	5	194.42	182.91	80.70	<
22	5	5	1310.84	1129.75	96.84	o
24	5	5	3472.07	3706.66	129.12	o
26	5	5	587.88	667.09	145.25	o
1	6	5	33.01	-16.14	96.84	<
3	6	5	1828.00	1850.64	139.87	o
5	6	5	11343.70	11039.30	252.85	o
7	6	5	3478.40	3728.18	129.12	o
9	6	5	8606.63	8075.04	193.67	o
11	6	5	8797.66	9048.78	215.19	o
13	6	5	1287.59	1280.39	112.97	o
15	6	5	8569.46	9048.78	236.71	o
17	6	5	2748.82	2636.09	134.49	o
19	6	5	1359.56	1387.98	139.87	o
21	6	5	2339.80	2797.48	177.53	o
23	6	5	606.86	828.48	156.01	o
25	6	5	1320.40	1404.12	156.01	o
0	7	5	11333.00	12039.90	505.70	o
2	7	5	3079.66	2700.65	161.39	o

4	7	5	6.94	123.74	107.60	<
6	7	5	1558.04	1167.41	123.74	o
8	7	5	6518.33	7144.34	204.43	o
10	7	5	684.37	677.85	112.97	o
12	7	5	1748.03	1856.02	139.87	o
14	7	5	0.48	-134.49	156.01	<
16	7	5	2876.06	3179.44	172.15	o
18	7	5	495.29	887.66	172.15	o
20	7	5	94.42	32.28	166.77	<
1	8	5	3360.77	3028.81	182.91	o
3	8	5	5405.89	5826.29	285.13	o
5	8	5	920.40	919.94	156.01	o
7	8	5	4884.71	4599.70	204.43	o
9	8	5	77.61	96.84	161.39	<
11	8	5	82.06	-43.04	150.63	<
13	8	5	4703.67	4319.96	188.29	o
15	8	5	1329.97	1328.80	204.43	o
0	9	5	629.75	833.86	306.65	<
2	9	5	43.33	-64.56	225.95	<
4	9	5	672.21	763.93	215.19	o
6	9	5	501.92	419.62	215.19	<
8	9	5	5247.59	5169.96	279.75	o
0	0	6	19154.60	18893.80	645.57	o
2	0	6	7335.40	8101.94	322.79	o
4	0	6	1860.90	2173.43	172.15	o
6	0	6	19135.10	20938.10	500.32	o
8	0	6	70216.10	73315.50	1468.68	o
10	0	6	16569.80	18441.90	398.10	o
12	0	6	615.69	683.23	91.46	o
14	0	6	894.20	979.12	123.74	o
16	0	6	6456.33	7241.17	215.19	o
18	0	6	8802.24	8623.77	285.13	o
20	0	6	5107.36	5325.97	215.19	o
22	0	6	6236.50	6364.27	209.81	o
24	0	6	5799.57	5847.81	231.33	o
26	0	6	274.56	279.75	188.29	<
28	0	6	2198.48	1925.96	193.67	o
30	0	6	9.19	328.17	274.37	<
32	0	6	1714.61	2114.25	322.79	o
1	1	6	2081.32	2490.83	123.74	o
3	1	6	865.16	1151.27	91.46	o
5	1	6	21163.10	24230.50	430.38	o
7	1	6	25879.50	26506.10	414.24	o
9	1	6	1840.62	1925.96	75.32	o
11	1	6	2347.33	2480.07	80.70	o
13	1	6	17812.30	17392.80	268.99	o
15	1	6	14424.90	14450.10	231.33	o
17	1	6	22.45	53.80	69.94	<
19	1	6	93.34	96.84	69.94	<
21	1	6	3769.49	3577.55	112.97	o
23	1	6	3002.53	2856.66	112.97	o
25	1	6	2204.58	2055.07	123.74	o
27	1	6	4137.98	4631.98	225.95	o
29	1	6	653.09	537.98	204.43	<

31	1	6	794.62	624.05	204.43	o
0	2	6	83255.70	86926.40	1947.48	o
2	2	6	45118.80	45421.40	925.32	o
4	2	6	952.41	1113.61	86.08	o
6	2	6	7132.44	7676.93	156.01	o
8	2	6	1107.22	1140.51	69.94	o
10	2	6	886.78	645.57	69.94	o
12	2	6	1177.64	1178.17	69.94	o
14	2	6	9290.51	9468.40	156.01	o
16	2	6	11357.90	11432.00	182.91	o
18	2	6	1101.72	876.90	69.94	o
20	2	6	1930.35	1683.87	75.32	o
22	2	6	49.22	21.52	64.56	<
24	2	6	5434.18	5288.32	102.22	o
26	2	6	8226.38	7542.44	161.39	o
28	2	6	1801.62	1899.06	193.67	o
30	2	6	3092.33	3071.85	215.19	o
1	3	6	5304.38	6046.86	172.15	o
3	3	6	9441.26	8155.73	209.81	o
5	3	6	23013.00	22535.90	441.14	o
7	3	6	20619.60	20878.90	355.07	o
9	3	6	9117.91	9409.22	156.01	o
11	3	6	12439.30	12798.50	204.43	o
13	3	6	11103.60	11453.50	172.15	o
15	3	6	5938.96	6003.82	112.97	o
17	3	6	5312.33	5417.43	107.60	o
19	3	6	7938.03	8015.86	129.12	o
21	3	6	1035.55	1022.16	69.94	o
23	3	6	916.34	962.98	80.70	o
25	3	6	5177.05	4960.15	129.12	o
27	3	6	5731.52	6310.47	199.05	o
29	3	6	1491.17	1135.13	193.67	o
0	4	6	4872.26	5481.99	204.43	o
2	4	6	2086.99	2259.50	129.12	o
4	4	6	499.28	344.30	123.74	<
6	4	6	12168.90	12572.50	258.23	o
8	4	6	35964.30	36808.40	656.33	o
10	4	6	8091.49	8451.62	182.91	o
12	4	6	1286.31	1350.32	91.46	o
14	4	6	5.90	59.18	69.94	<
16	4	6	2422.77	2636.09	91.46	o
18	4	6	3798.59	3916.47	102.22	o
20	4	6	1756.75	1818.36	80.70	o
22	4	6	2576.30	2533.87	96.84	o
24	4	6	2774.99	3147.17	118.36	o
26	4	6	102.12	172.15	134.49	<
28	4	6	1450.50	1457.92	193.67	o
1	5	6	1995.21	1856.02	107.60	o
3	5	6	1336.95	1705.39	134.49	o
5	5	6	2093.30	2114.25	102.22	o
7	5	6	2474.64	2743.68	118.36	o
9	5	6	5307.17	4997.81	145.25	o
11	5	6	4640.86	4820.27	145.25	o
13	5	6	1830.41	1640.83	112.97	o

15	5	6	3142.08	3023.43	107.60	o
17	5	6	122.04	37.66	91.46	<
19	5	6	57.27	-5.38	86.08	<
21	5	6	2915.08	2819.00	123.74	o
23	5	6	2912.58	3265.52	129.12	o
25	5	6	216.32	322.79	129.12	<
0	6	6	38629.90	37254.90	995.26	o
2	6	6	19672.30	20141.90	430.38	o
4	6	6	39.80	-172.15	134.49	<
6	6	6	513.09	564.88	134.49	o
8	6	6	74.69	150.63	150.63	<
10	6	6	106.14	166.77	129.12	<
12	6	6	176.46	102.22	145.25	<
14	6	6	5962.04	6353.51	220.57	o
16	6	6	5648.65	5971.55	177.53	o
18	6	6	145.01	511.08	123.74	o
20	6	6	1903.15	1969.00	139.87	o
22	6	6	332.21	392.72	134.49	<
1	7	6	1647.07	1839.88	112.97	o
3	7	6	3103.15	3044.95	150.63	o
5	7	6	2423.36	2469.32	139.87	o
7	7	6	1850.66	2324.06	139.87	o
9	7	6	3822.36	3991.79	166.77	o
11	7	6	5481.71	5627.24	209.81	o
13	7	6	517.19	683.23	161.39	o
15	7	6	180.31	295.89	145.25	<
17	7	6	3523.77	3744.32	209.81	o
19	7	6	4509.65	4508.25	220.57	o
0	8	6	213.43	43.04	268.99	<
2	8	6	215.20	478.80	204.43	<
4	8	6	331.90	403.48	215.19	<
6	8	6	5444.17	5750.98	268.99	o
8	8	6	9275.79	9850.36	290.51	o
10	8	6	1422.96	1554.75	177.53	o
12	8	6	1139.16	1065.19	215.19	o
14	8	6	318.82	570.26	204.43	<
1	0	7	2626.54	2022.79	102.22	o
3	0	7	695.21	785.45	129.12	o
5	0	7	5287.19	5153.82	182.91	o
7	0	7	575.31	505.70	96.84	o
9	0	7	44202.50	43802.10	898.42	o
11	0	7	34683.30	36308.10	753.17	o
13	0	7	2.27	-139.87	123.74	<
15	0	7	5377.77	5180.72	209.81	o
17	0	7	14.67	172.15	129.12	<
19	0	7	46.87	139.87	134.49	<
21	0	7	5398.52	5067.74	215.19	o
23	0	7	5097.52	5083.88	247.47	o
25	0	7	1111.39	936.08	150.63	o
27	0	7	827.31	618.67	204.43	o
29	0	7	2584.68	3324.70	328.17	o
0	1	7	24266.20	26350.10	624.05	o
2	1	7	9320.14	9904.16	242.09	o
4	1	7	6740.25	6595.60	182.91	o

6	1	7	6917.98	7192.75	156.01	o
8	1	7	28018.60	28539.70	425.00	o
10	1	7	4200.88	4094.01	102.22	o
12	1	7	22.13	48.42	69.94	<
14	1	7	405.53	457.28	75.32	o
16	1	7	3746.96	3163.31	91.46	o
18	1	7	43.34	59.18	75.32	<
20	1	7	25.41	-48.42	91.46	<
22	1	7	23.02	145.25	91.46	<
24	1	7	716.64	693.99	91.46	o
26	1	7	44.51	64.56	107.60	<
28	1	7	547.33	371.20	139.87	<
30	1	7	58.07	349.68	193.67	<
1	2	7	19363.10	19033.60	333.55	o
3	2	7	43664.10	43920.50	823.10	o
5	2	7	862.42	962.98	91.46	o
7	2	7	13339.10	13271.90	231.33	o
9	2	7	795.51	683.23	75.32	o
11	2	7	520.79	688.61	75.32	o
13	2	7	10296.30	10721.90	193.67	o
15	2	7	469.09	543.36	69.94	o
17	2	7	26411.60	26366.30	398.10	o
19	2	7	26435.60	26941.90	387.34	o
21	2	7	27.45	-10.76	75.32	<
23	2	7	3635.85	3523.75	96.84	o
25	2	7	1390.03	1619.31	107.60	o
27	2	7	2182.35	2324.06	150.63	o
29	2	7	2104.45	2087.35	215.19	o
0	3	7	43.82	5.38	112.97	<
2	3	7	19.52	172.15	102.22	<
4	3	7	642.29	667.09	123.74	o
6	3	7	833.11	1075.95	91.46	o
8	3	7	9024.26	8360.16	177.53	o
10	3	7	2864.95	3028.81	102.22	o
12	3	7	839.76	806.97	75.32	o
14	3	7	981.18	844.62	75.32	o
16	3	7	2183.35	2356.34	86.08	o
18	3	7	809.04	925.32	75.32	o
20	3	7	969.90	989.88	86.08	o
22	3	7	144.93	166.77	86.08	<
24	3	7	548.96	640.19	96.84	o
26	3	7	268.53	102.22	134.49	<
28	3	7	26.55	268.99	188.29	<
1	4	7	2598.17	2770.58	118.36	o
3	4	7	675.18	1102.85	150.63	o
5	4	7	9769.59	10539.00	236.71	o
7	4	7	3304.38	3421.53	129.12	o
9	4	7	21856.60	20965.00	355.07	o
11	4	7	19184.10	18646.30	285.13	o
13	4	7	1137.92	1118.99	86.08	o
15	4	7	7182.22	6633.26	139.87	o
17	4	7	8.22	26.90	80.70	<
19	4	7	95.53	107.60	80.70	<
21	4	7	3507.07	3464.57	112.97	o

23	4	7	2741.46	2867.42	118.36	o
25	4	7	1805.32	1764.56	145.25	o
27	4	7	1439.95	1371.84	150.63	o
0	5	7	14453.10	15493.70	591.78	o
2	5	7	3919.57	3991.79	215.19	o
4	5	7	1259.87	1070.57	172.15	o
6	5	7	1360.23	1070.57	177.53	o
8	5	7	8227.90	9387.70	441.14	o
10	5	7	616.48	650.95	123.74	o
12	5	7	299.97	381.96	123.74	o
14	5	7	160.81	-5.38	112.97	<
16	5	7	3359.82	3136.41	145.25	o
18	5	7	430.58	532.60	112.97	o
20	5	7	211.35	215.19	112.97	<
22	5	7	278.52	435.76	112.97	o
24	5	7	2101.42	2125.01	123.74	o
1	6	7	5157.17	4809.52	161.39	o
3	6	7	10215.40	8914.28	242.09	o
5	6	7	252.65	403.48	112.97	o
7	6	7	6225.09	6520.28	220.57	o
9	6	7	788.62	645.57	199.05	o
11	6	7	1360.10	1732.29	225.95	o
13	6	7	6852.80	6923.77	209.81	o
15	6	7	988.32	850.00	139.87	o
17	6	7	5021.63	4997.81	177.53	o
19	6	7	4564.36	4605.08	161.39	o
21	6	7	369.41	387.34	129.12	<
0	7	7	565.70	462.66	242.09	<
2	7	7	1008.06	365.82	150.63	<
4	7	7	555.86	355.07	156.01	<
6	7	7	45.68	134.49	134.49	<
8	7	7	3259.70	3184.82	166.77	o
10	7	7	1750.15	1764.56	145.25	o
12	7	7	834.03	806.97	156.01	o
14	7	7	1759.12	1743.05	252.85	o
16	7	7	3300.25	3039.57	209.81	o
1	8	7	686.95	1113.61	209.81	o
3	8	7	23.70	-53.80	225.95	<
5	8	7	6546.86	6746.23	290.51	o
7	8	7	3377.22	3276.28	242.09	o
9	8	7	3131.75	2802.86	242.09	o
11	8	7	3380.77	3200.96	247.47	o
0	0	8	29285.70	28270.70	774.69	o
2	0	8	23593.90	23353.60	650.95	o
4	0	8	141.99	-26.90	139.87	<
6	0	8	614.14	1006.02	102.22	o
8	0	8	29.35	220.57	107.60	<
10	0	8	87.17	177.53	107.60	<
12	0	8	428.27	295.89	139.87	<
14	0	8	6678.30	6708.57	252.85	o
16	0	8	5403.11	6348.13	247.47	o
18	0	8	2678.00	2662.99	182.91	o
20	0	8	5.09	263.61	172.15	<
22	0	8	750.68	505.70	172.15	<

24	0	8	4009.25	3781.98	231.33	o
26	0	8	6118.03	5777.87	317.41	o
28	0	8	940.63	1361.08	392.72	o
1	1	8	7041.12	6869.97	145.25	o
3	1	8	5479.24	5433.57	156.01	o
5	1	8	10435.40	10253.80	236.71	o
7	1	8	10406.40	10781.10	209.81	o
9	1	8	4475.31	4287.68	118.36	o
11	1	8	5611.86	5535.78	134.49	o
13	1	8	6395.34	6504.14	156.01	o
15	1	8	7519.66	7806.05	161.39	o
17	1	8	2632.15	2851.28	96.84	o
19	1	8	3972.97	4206.98	129.12	o
21	1	8	2490.79	2329.44	118.36	o
23	1	8	2094.31	2194.95	123.74	o
25	1	8	2911.71	2706.02	123.74	o
27	1	8	3164.74	2754.44	204.43	o
0	2	8	56772.10	58241.40	1328.80	o
2	2	8	15881.10	16682.70	381.96	o
4	2	8	79.57	-59.18	102.22	<
6	2	8	10459.80	10280.70	193.67	o
8	2	8	16699.60	18678.60	312.03	o
10	2	8	8748.10	8639.91	172.15	o
12	2	8	11.88	64.56	86.08	<
14	2	8	37.02	86.08	86.08	<
16	2	8	39.26	139.87	80.70	<
18	2	8	6771.48	6202.88	134.49	o
20	2	8	13760.40	13519.40	242.09	o
22	2	8	9152.72	8306.37	161.39	o
24	2	8	2429.78	2270.26	129.12	o
26	2	8	730.43	957.60	145.25	o
28	2	8	97.15	258.23	268.99	<
1	3	8	5918.80	6310.47	166.77	o
3	3	8	6887.87	7117.44	236.71	o
5	3	8	5967.50	6181.36	166.77	o
7	3	8	3664.38	4691.16	129.12	o
9	3	8	5956.68	6202.88	145.25	o
11	3	8	9350.29	9220.93	182.91	o
13	3	8	4192.78	4260.78	123.74	o
15	3	8	6620.55	6375.03	129.12	o
17	3	8	615.86	527.22	86.08	o
19	3	8	1014.87	919.94	86.08	o
21	3	8	5580.38	5374.39	145.25	o
23	3	8	4897.21	4895.59	145.25	o
25	3	8	627.82	785.45	145.25	o
27	3	8	1855.77	2125.01	177.53	o
0	4	8	14354.00	15789.60	489.56	o
2	4	8	15223.10	15332.30	414.24	o
4	4	8	662.99	376.58	225.95	<
6	4	8	217.03	371.20	156.01	<
8	4	8	559.70	333.55	134.49	<
10	4	8	103.04	252.85	123.74	<
12	4	8	130.60	247.47	107.60	<
14	4	8	3472.22	3771.22	145.25	o

16	4	8	1031.47	1328.80	134.49	o
18	4	8	566.88	613.29	129.12	o
20	4	8	9.38	145.25	112.97	<
22	4	8	20.90	-69.94	118.36	<
24	4	8	720.13	839.24	123.74	o
1	5	8	3501.38	3351.60	156.01	o
3	5	8	2526.24	2447.80	177.53	o
5	5	8	4786.23	4798.76	177.53	o
7	5	8	5723.03	5966.17	247.47	o
9	5	8	2244.80	2237.98	188.29	o
11	5	8	2295.42	2291.78	172.15	o
13	5	8	2411.96	2738.30	145.25	o
15	5	8	2331.83	2727.54	145.25	o
17	5	8	3199.60	3356.98	156.01	o
19	5	8	4207.07	3948.75	166.77	o
21	5	8	259.10	365.82	123.74	<
23	5	8	403.81	532.60	123.74	o
0	6	8	720.73	914.56	182.91	o
2	6	8	13.84	-177.53	129.12	<
4	6	8	1457.36	1441.78	139.87	o
6	6	8	13293.00	13331.10	338.93	o
8	6	8	18006.20	18877.60	500.32	o
10	6	8	4792.84	4352.24	236.71	o
12	6	8	653.87	543.36	150.63	o
14	6	8	466.14	624.05	139.87	o
16	6	8	3.60	193.67	139.87	<
18	6	8	870.69	688.61	145.25	o
1	7	8	2182.90	1829.12	215.19	o
3	7	8	3363.29	3077.23	252.85	o
5	7	8	661.85	704.75	199.05	o
7	7	8	104.05	199.05	172.15	<
9	7	8	5737.85	5406.67	263.61	o
11	7	8	6924.88	7203.51	349.68	o
13	7	8	171.10	199.05	252.85	<
0	8	8	4437.59	4362.99	376.58	o
2	8	8	5031.53	4987.05	312.03	o
4	8	8	1262.73	1054.44	225.95	o
1	0	9	18148.30	18049.10	376.58	o
3	0	9	21297.10	21927.90	624.05	o
5	0	9	2624.59	2840.52	134.49	o
7	0	9	13239.40	12314.30	279.75	o
9	0	9	500.01	381.96	134.49	<
11	0	9	39.44	129.12	134.49	<
13	0	9	7527.52	7300.35	279.75	o
15	0	9	1768.31	2329.44	225.95	o
17	0	9	17523.00	16940.90	624.05	o
19	0	9	17642.40	16790.30	618.67	o
21	0	9	139.22	220.57	199.05	<
23	0	9	2443.38	2324.06	225.95	o
25	0	9	2748.60	2334.82	312.03	o
27	0	9	2530.87	2679.13	274.37	o
0	1	9	6563.43	6068.38	215.19	o
2	1	9	7331.13	7241.17	193.67	o
4	1	9	11286.40	10087.10	263.61	o

6	1	9	2688.24	3297.80	118.36	o
8	1	9	8193.58	7300.35	161.39	o
10	1	9	1920.19	2184.19	102.22	o
12	1	9	1551.27	1339.56	102.22	o
14	1	9	259.16	177.53	96.84	<
16	1	9	196.00	225.95	91.46	<
18	1	9	0.40	-150.63	139.87	<
20	1	9	295.45	204.43	139.87	<
22	1	9	405.30	236.71	139.87	<
24	1	9	29.52	268.99	139.87	<
26	1	9	2.62	-32.28	166.77	<
1	2	9	1491.99	1721.53	107.60	o
3	2	9	52.53	177.53	112.97	<
5	2	9	14606.80	13282.70	242.09	o
7	2	9	2821.79	2921.22	118.36	o
9	2	9	15837.60	15778.90	295.89	o
11	2	9	16858.80	16558.90	290.51	o
13	2	9	657.83	435.76	96.84	o
15	2	9	7755.87	7816.81	182.91	o
17	2	9	599.78	516.46	102.22	o
19	2	9	15.95	150.63	102.22	<
21	2	9	5226.12	4664.26	182.91	o
23	2	9	3011.73	3001.91	177.53	o
25	2	9	1373.04	984.50	177.53	o
0	3	9	3813.94	4002.55	274.37	o
2	3	9	6238.81	7181.99	285.13	o
4	3	9	11428.80	11189.90	381.96	o
6	3	9	918.02	1081.33	112.97	o
8	3	9	666.96	441.14	112.97	o
10	3	9	166.20	209.81	112.97	<
12	3	9	999.05	962.98	118.36	o
14	3	9	83.32	96.84	102.22	<
16	3	9	2.59	21.52	96.84	<
18	3	9	43.36	-5.38	118.36	<
20	3	9	1844.13	1425.64	139.87	o
22	3	9	16.94	80.70	145.25	<
24	3	9	44.93	-32.28	139.87	<
1	4	9	8272.94	7526.30	204.43	o
3	4	9	11212.80	10727.30	333.55	o
5	4	9	1155.34	1043.68	156.01	o
7	4	9	7451.31	6999.08	274.37	o
9	4	9	19.15	-129.12	150.63	<
11	4	9	166.12	139.87	156.01	<
13	4	9	5440.58	5369.01	193.67	o
15	4	9	1502.79	2038.93	156.01	o
17	4	9	6865.31	6364.27	209.81	o
19	4	9	7381.56	7058.26	220.57	o
21	4	9	411.89	419.62	145.25	<
23	4	9	2466.61	2587.67	150.63	o
0	5	9	8.51	80.70	199.05	<
2	5	9	4.95	16.14	161.39	<
4	5	9	428.20	451.90	204.43	<
6	5	9	192.34	231.33	188.29	<
8	5	9	3880.35	3093.37	215.19	o

10	5	9	1956.92	2237.98	182.91	o
12	5	9	2176.93	2028.17	182.91	o
14	5	9	1412.96	1205.07	177.53	o
16	5	9	1868.32	1769.94	166.77	o
18	5	9	901.67	866.14	161.39	o
20	5	9	953.74	661.71	145.25	o
1	6	9	1171.22	1081.33	161.39	o
3	6	9	33.48	-91.46	182.91	<
5	6	9	7845.18	6950.66	258.23	o
7	6	9	1968.11	1942.10	172.15	o
9	6	9	9386.04	9156.37	290.51	o
11	6	9	10096.00	9995.62	312.03	o
13	6	9	254.22	242.09	161.39	<
15	6	9	3126.91	3206.34	193.67	o
0	7	9	502.33	312.03	290.51	<
2	7	9	550.16	150.63	236.71	<
4	7	9	626.54	688.61	193.67	o
6	7	9	91.36	21.52	199.05	<
8	7	9	108.57	392.72	193.67	<
10	7	9	100.38	193.67	199.05	<
0	0	10	37553.70	33440.70	1608.55	o
2	0	10	9225.36	10313.00	629.43	o
4	0	10	24.56	-188.29	301.27	<
6	0	10	5813.53	5019.33	306.65	o
8	0	10	3866.98	4712.68	301.27	o
10	0	10	6197.73	5815.53	322.79	o
12	0	10	726.85	1022.16	225.95	o
14	0	10	94.92	86.08	215.19	<
16	0	10	50.25	-10.76	220.57	<
18	0	10	5537.20	4266.16	290.51	o
20	0	10	10513.40	10689.60	457.28	o
22	0	10	5272.74	4766.48	312.03	o
24	0	10	559.11	301.27	225.95	<
1	1	10	8312.33	7666.17	263.61	o
3	1	10	11026.60	11733.30	489.56	o
5	1	10	1941.39	2453.18	177.53	o
7	1	10	1717.60	1560.13	161.39	o
9	1	10	5047.21	4519.01	209.81	o
11	1	10	5689.68	5019.33	220.57	o
13	1	10	1572.32	1581.65	172.15	o
15	1	10	1995.57	1974.38	177.53	o
17	1	10	5124.38	4685.78	215.19	o
19	1	10	5699.79	6299.71	242.09	o
21	1	10	1735.35	1431.02	172.15	o
23	1	10	2790.37	2523.11	188.29	o
0	2	10	4711.06	5519.65	322.79	o
2	2	10	7374.32	7262.69	365.82	o
4	2	10	917.81	1032.92	231.33	o
6	2	10	1566.83	2135.77	177.53	o
8	2	10	5462.94	5976.93	242.09	o
10	2	10	3.66	123.74	161.39	<
12	2	10	3774.07	3518.37	204.43	o
14	2	10	6338.45	6606.36	252.85	o
16	2	10	1254.20	1554.75	156.01	o

18	2	10	1602.14	1398.74	177.53	o
20	2	10	1213.58	1576.27	177.53	o
22	2	10	337.81	419.62	156.01	<
1	3	10	2826.75	2975.01	193.67	o
3	3	10	3825.71	3701.28	295.89	o
5	3	10	2812.51	2948.11	204.43	o
7	3	10	3338.04	3459.19	209.81	o
9	3	10	58.04	112.97	166.77	<
11	3	10	194.27	-59.18	150.63	<
13	3	10	3026.68	3330.08	188.29	o
15	3	10	1875.76	1452.54	166.77	o
17	3	10	2111.45	1931.34	150.63	o
19	3	10	4055.82	4519.01	220.57	o
21	3	10	368.79	468.04	172.15	<
0	4	10	9991.67	10291.50	468.04	o
2	4	10	793.54	850.00	252.85	o
4	4	10	1740.20	2178.81	247.47	o
6	4	10	8446.31	8500.04	252.85	o
8	4	10	5099.36	5734.84	236.71	o
10	4	10	4654.49	4470.59	225.95	o
12	4	10	554.05	817.72	182.91	o
14	4	10	0.44	-26.90	177.53	<
16	4	10	248.69	349.68	177.53	<
18	4	10	1947.03	1732.29	193.67	o
20	4	10	4714.30	4578.19	225.95	o
1	5	10	5030.93	5358.25	274.37	o
3	5	10	6575.34	7138.96	338.93	o
5	5	10	697.91	753.17	182.91	o
7	5	10	579.17	780.07	215.19	o
9	5	10	5037.56	4653.50	263.61	o
11	5	10	5130.74	5282.94	242.09	o
13	5	10	676.64	1000.64	193.67	o
15	5	10	1608.07	1108.23	193.67	o
17	5	10	1936.73	1915.20	188.29	o
0	6	10	5268.72	5245.28	312.03	o
2	6	10	6168.10	5369.01	317.41	o
4	6	10	1466.11	1624.69	263.61	o
6	6	10	132.11	86.08	193.67	<
8	6	10	1274.08	1366.46	204.43	o
10	6	10	112.08	-48.42	199.05	<
12	6	10	1969.20	1931.34	215.19	o
1	0	11	2817.30	2560.77	268.99	o
3	0	11	108.57	-328.17	333.55	<
5	0	11	9986.18	8290.23	403.48	o
7	0	11	3612.31	4395.27	312.03	o
9	0	11	8995.93	9005.74	425.00	o
11	0	11	8779.25	8516.18	414.24	o
13	0	11	656.59	737.03	247.47	<
15	0	11	8495.83	7343.39	387.34	o
17	0	11	78.72	279.75	247.47	<
19	0	11	62.99	-10.76	247.47	<
21	0	11	4002.69	3738.94	312.03	o
0	1	11	208.51	306.65	225.95	<
2	1	11	3089.55	3055.71	279.75	o

4	1	11	12193.10	10845.60	484.18	o
6	1	11	2255.04	2539.25	193.67	o
8	1	11	328.82	263.61	172.15	<
10	1	11	489.53	586.40	172.15	o
12	1	11	2170.66	2646.85	204.43	o
14	1	11	17.28	-10.76	172.15	<
16	1	11	1237.62	1549.37	188.29	o
18	1	11	8.97	-279.75	177.53	<
20	1	11	2005.88	1759.19	199.05	o
1	2	11	5733.21	4954.77	236.71	o
3	2	11	8826.20	7988.96	414.24	o
5	2	11	753.08	785.45	182.91	o
7	2	11	4827.75	5498.13	247.47	o
9	2	11	1907.88	1522.48	193.67	o
11	2	11	2025.74	1656.97	193.67	o
13	2	11	6758.83	6568.70	263.61	o
15	2	11	2218.52	2926.60	209.81	o
17	2	11	3268.64	2862.04	215.19	o
19	2	11	4602.27	4126.28	231.33	o
0	3	11	32.93	-107.60	263.61	<
2	3	11	652.95	570.26	252.85	<
4	3	11	5653.77	5745.60	371.20	o
6	3	11	2598.69	3410.78	225.95	o
8	3	11	2603.58	2576.91	215.19	o
10	3	11	2334.27	2926.60	220.57	o
12	3	11	3889.48	4260.78	242.09	o
14	3	11	571.99	532.60	193.67	<
16	3	11	2.31	-156.01	193.67	<
18	3	11	285.87	338.93	215.19	<
1	4	11	1086.56	1253.49	204.43	o
3	4	11	13.19	96.84	279.75	<
5	4	11	4880.51	4545.91	231.33	o
7	4	11	968.82	1258.87	182.91	o
9	4	11	6638.53	6165.22	301.27	o
11	4	11	7135.79	6563.32	306.65	o
13	4	11	34.31	220.57	193.67	<
15	4	11	3184.18	2716.78	220.57	o
0	5	11	5.79	-236.71	322.79	<
2	5	11	985.88	570.26	328.17	<
4	5	11	4381.12	3674.38	387.34	o
6	5	11	179.37	285.13	236.71	<
8	5	11	296.71	581.02	231.33	<
10	5	11	14.00	10.76	204.43	<
12	5	11	582.65	581.02	209.81	<
1	6	11	3812.58	3426.91	285.13	o
3	6	11	6879.49	6245.91	451.90	o
0	0	12	513.98	312.03	355.07	<
2	0	12	4134.92	3518.37	446.52	o
4	0	12	2700.08	3362.36	451.90	o
6	0	12	1812.34	2706.02	295.89	o
8	0	12	12144.30	10555.10	489.56	o
10	0	12	66.40	204.43	268.99	<
12	0	12	7415.70	8494.66	435.76	o
14	0	12	4288.18	3943.37	333.55	o

16	0	12	35.40	-112.97	274.37	<
18	0	12	1078.25	1043.68	285.13	o
1	1	12	2439.85	2657.61	215.19	o
3	1	12	2782.01	2291.78	290.51	o
5	1	12	939.59	1215.83	199.05	o
7	1	12	661.26	441.14	193.67	<
9	1	12	2196.75	2264.88	209.81	o
11	1	12	3140.51	2657.61	220.57	o
13	1	12	80.93	166.77	193.67	<
15	1	12	364.29	629.43	199.05	o
17	1	12	2339.20	2044.31	215.19	o
0	2	12	7154.95	6756.99	403.48	o
2	2	12	776.72	704.75	279.75	<
4	2	12	3310.13	3674.38	338.93	o
6	2	12	5048.04	5180.72	258.23	o
8	2	12	1828.36	2840.52	231.33	o
10	2	12	2822.25	2636.09	220.57	o
12	2	12	2075.30	2038.93	215.19	o
14	2	12	3.29	-333.55	204.43	<
16	2	12	297.67	516.46	204.43	<
1	3	12	1939.71	1786.08	225.95	o
3	3	12	2479.77	2727.54	333.55	o
5	3	12	408.66	801.59	215.19	o
7	3	12	62.50	182.91	209.81	<
9	3	12	3259.94	3238.62	242.09	o
11	3	12	4039.73	4718.06	263.61	o
13	3	12	8.29	96.84	209.81	<
0	4	12	2692.02	3044.95	344.30	o
2	4	12	4874.27	4524.39	371.20	o
4	4	12	2322.65	2732.92	279.75	o
6	4	12	465.39	747.79	193.67	o
8	4	12	4401.79	4960.15	242.09	o
10	4	12	5.15	172.15	247.47	<
1	5	12	933.79	866.14	258.23	o
1	0	13	3148.23	2254.12	317.41	o
3	0	13	4350.35	2905.08	457.28	o
5	0	13	89.56	419.62	295.89	<
7	0	13	3312.63	3238.62	338.93	o
9	0	13	4129.84	4142.42	365.82	o
11	0	13	4903.26	3577.55	349.68	o
13	0	13	5630.93	5385.15	392.72	o
0	1	13	599.79	204.43	295.89	<
2	1	13	518.74	161.39	306.65	<
4	1	13	5045.09	5164.58	312.03	o
6	1	13	565.54	634.81	215.19	<
8	1	13	488.08	581.02	215.19	<
10	1	13	657.84	613.29	220.57	<
12	1	13	5674.23	5358.25	279.75	o
1	2	13	421.66	543.36	252.85	<
3	2	13	4.37	-521.84	317.41	<
5	2	13	4515.41	3652.86	258.23	o
7	2	13	1126.36	1140.51	225.95	o
9	2	13	1478.15	1334.18	231.33	o
0	3	13	286.75	505.70	322.79	<

2	3	13	1872.46	2189.57	355.07	o
4	3	13	4421.40	4147.80	274.37	o
6	3	13	305.83	333.55	236.71	<

loop_
_twin_refl_datum_id
_twin_refl_individual_id
_twin_refl_index_h
_twin_refl_index_k
_twin_refl_index_l
_twin_refl_F_squared_calc
_twin_refl_F_squared_meas
_twin_refl_F_squared_sigma
_twin_refl_include_status
? ? ? ? ? ? ? ? ?