

Eisen(III)-Oximat 3 mit der Struktur Na₂[Fe₄O₂L₁₀]

Empirical formula	C102 H152 Fe8 N20 Na4 O68
Formula weight	3285.20
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system, space group	Orthorhombic, P n a 21
Unit cell dimensions	a = 34.863(2) Å alpha = 90 deg. b = 16.3476(8) Å beta = 90 deg. c = 26.614(1) Å gamma = 90 deg.
Volume	15168.0(13) Å ³
Z, Calculated density	4, 1.439 Mg/m ³
Absorption coefficient	0.851 mm ⁻¹
F(000)	6800
Crystal size	? x ? x ? mm
Theta range for data collection	1.38 to 26.37 deg.
Limiting indices	0 ≤ h ≤ 43, 0 ≤ k ≤ 20, -33 ≤ l ≤ 33
Reflections collected / unique	29282 / 29282 [R(int) = 0.0000]
Completeness to theta = 26.37	98.1 %
Refinement method	Full-matrix-block least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	29282 / 9 / 1725
Goodness-of-fit on F ²	0.868
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0650, wR2 = 0.1397
R indices (all data)	R1 = 0.1796, wR2 = 0.1854
Absolute structure parameter	0.004(17)
Extinction coefficient	0.00016(2)
Largest diff. peak and hole	0.600 and -0.932 e.Å ⁻³

Atom	Wyck	Site	S.O.F.	Atomic parameters		
				x/a	y/b	z/c
Fe1	4a	1		0.48128(4)	0.34127(8)	0.66261(7)
Fe2	4a	1		0.48802(4)	0.35553(8)	0.55330(7)
Fe3	4a	1		0.40121(4)	0.40034(8)	0.60677(7)
Fe4	4a	1		0.56363(4)	0.42171(8)	0.61515(7)
Fe5	4a	1		0.33360(4)	-0.10129(9)	0.36886(7)
Fe6	4a	1		0.32540(4)	0.06888(9)	0.33575(7)
Fe7	4a	1		0.30329(4)	-0.06464(9)	0.24750(7)
Fe8	4a	1		0.29742(4)	0.01537(9)	0.45598(7)
Na1	4a	1		0.41645(11)	0.1960(2)	0.56197(15)
Na2	4a	1		0.39890(11)	-0.0987(2)	0.27524(15)
Na3	4a	1		0.38747(11)	0.0958(2)	0.43173(15)
Na4	4a	1		0.56167(11)	0.2033(2)	0.64527(15)
OXB1	4a	1		0.52098(17)	0.3573(3)	0.6116(3)
OXB2	4a	1		0.44729(17)	0.3482(3)	0.6049(2)
OX11	4a	1		0.58113(18)	0.4025(4)	0.5445(2)
OX12	4a	1		0.53001(19)	0.3585(4)	0.5011(2)
OX13	4a	1		0.6026(2)	0.3143(5)	0.3852(3)
OX23	4a	1		0.3783(2)	0.3892(4)	0.3772(3)
OX22	4a	1		0.44850(18)	0.3707(4)	0.4984(2)
OX21	4a	1		0.40639(19)	0.4557(4)	0.5373(3)
OX33	4a	1		0.4955(2)	0.7550(4)	0.5856(3)
OX32	4a	1		0.53918(18)	0.5271(4)	0.5970(2)
OX31	4a	1		0.48901(18)	0.4824(4)	0.5533(3)
OX43	4a	1		0.4350(2)	0.7283(4)	0.6994(4)
OX42	4a	1		0.41711(17)	0.5018(4)	0.6404(2)
OX41	4a	1		0.47265(17)	0.4652(4)	0.6772(2)
OX53	4a	1		0.5778(2)	0.3751(4)	0.8509(2)
OX52	4a	1		0.52096(19)	0.3543(4)	0.7178(3)
OX51	4a	1		0.55804(17)	0.4565(4)	0.6883(2)
OX63	4a	1		0.64123(19)	0.5502(4)	0.6144(3)
OX61	4a	1		0.59559(18)	0.3314(4)	0.6436(2)
OX62	4a	1		0.64351(19)	0.3064(4)	0.6987(3)
OX73	4a	1		0.4603(2)	-0.0101(4)	0.5428(3)
OX71	4a	1		0.48312(17)	0.2358(4)	0.5436(2)
OX72	4a	1		0.54430(17)	0.1994(4)	0.5569(2)
OX83	4a	1		0.3719(2)	0.1749(5)	0.8026(3)
OX81	4a	1		0.38440(17)	0.3446(3)	0.6715(2)
OX82	4a	1		0.43932(17)	0.3198(4)	0.7127(2)
OX93	4a	1		0.32068(19)	0.5231(4)	0.6078(3)
OX91	4a	1		0.37243(18)	0.3149(4)	0.5687(2)
OX92	4a	1		0.32591(19)	0.2899(4)	0.5136(3)
OXA3	4a	1		0.53155(19)	-0.0141(4)	0.6676(3)
OXA1	4a	1		0.49363(16)	0.2209(4)	0.6635(3)
OXA2	4a	1		0.43489(17)	0.1691(4)	0.6481(2)
OYB1	4a	1		0.32898(17)	-0.0387(4)	0.3058(2)
OYB2	4a	1		0.32713(17)	0.0039(4)	0.3991(2)
OY13	4a	1		0.14011(18)	0.0345(4)	0.2952(3)
OY11	4a	1		0.25173(19)	-0.0221(4)	0.2669(2)
OY12	4a	1		0.26776(18)	0.0680(4)	0.3274(3)
OY23	4a	1		0.1452(2)	-0.1034(5)	0.3873(3)
OY21	4a	1		0.25053(18)	-0.0357(4)	0.4287(3)
OY22	4a	1		0.27540(17)	-0.1261(4)	0.3740(3)
OY33	4a	1		0.23345(19)	0.0495(5)	0.5520(3)
OY31	4a	1		0.33923(18)	0.0699(4)	0.4948(2)
OY32	4a	1		0.35888(19)	0.1251(4)	0.5675(3)
OY43	4a	1		0.48620(19)	0.1841(5)	0.3758(3)
OY41	4a	1		0.38083(18)	0.0944(4)	0.3443(3)
OY42	4a	1		0.40580(19)	0.0415(4)	0.2738(3)
OY53	4a	1		0.5024(2)	-0.1241(4)	0.3266(3)

OY51	4a	1	0.39066(17)	-0.1025(4)	0.3622(2)
OY52	4a	1	0.40844(18)	-0.0357(4)	0.4328(2)
OY63	4a	1	0.3875(2)	0.2595(4)	0.1671(3)
OY61	4a	1	0.32821(19)	0.1311(4)	0.2721(2)
OY62	4a	1	0.31412(18)	0.0407(4)	0.2101(2)
OY73	4a	1	0.2475(2)	-0.1297(5)	0.1496(3)
OY71	4a	1	0.35099(18)	-0.1051(4)	0.2132(2)
OY72	4a	1	0.37830(18)	-0.1412(4)	0.1392(2)
OY83	4a	1	0.2604(3)	0.3882(5)	0.3950(3)
OY81	4a	1	0.27449(18)	0.1228(4)	0.4381(2)
OY82	4a	1	0.31345(18)	0.1696(4)	0.3777(3)
OY93	4a	1	0.2937(2)	-0.3107(5)	0.5630(3)
OY91	4a	1	0.33917(18)	-0.1672(4)	0.4327(2)
OY92	4a	1	0.30809(19)	-0.0912(4)	0.4907(2)
OYA3	4a	1	0.2619(2)	-0.4209(4)	0.2786(3)
OYA1	4a	1	0.33462(17)	-0.2042(4)	0.3264(2)
OYA2	4a	1	0.28995(18)	-0.1792(4)	0.2672(2)
OH23	4a	1	0.41831(18)	-0.2148(4)	0.2360(2)
OH24	4a	1	0.39332(18)	0.2159(4)	0.4741(2)
NX11	4a	1	0.5754(2)	0.3352(6)	0.4221(4)
NX21	4a	1	0.4005(3)	0.3728(5)	0.4198(3)
NX31	4a	1	0.5130(3)	0.6794(5)	0.5912(3)
NX41	4a	1	0.4273(3)	0.6520(5)	0.6776(4)
NX51	4a	1	0.5604(2)	0.3592(5)	0.8035(3)
NX61	4a	1	0.6239(2)	0.4750(5)	0.6243(3)
NX71	4a	1	0.4652(2)	0.0749(5)	0.5448(3)
NX81	4a	1	0.3943(2)	0.2356(5)	0.7799(3)
NX91	4a	1	0.3393(2)	0.4486(4)	0.5958(3)
NXA1	4a	1	0.5208(2)	0.0696(4)	0.6600(3)
NY11	4a	1	0.1784(2)	0.0099(5)	0.2830(3)
NY21	4a	1	0.1820(2)	-0.0783(5)	0.4029(3)
NY31	4a	1	0.2707(2)	0.0514(5)	0.5324(3)
NY41	4a	1	0.4490(2)	0.1520(5)	0.3691(3)
NY51	4a	1	0.4632(2)	-0.1148(5)	0.3356(3)
NY61	4a	1	0.3690(2)	0.2155(5)	0.2061(3)
NY71	4a	1	0.2835(2)	-0.1152(5)	0.1719(3)
NY81	4a	1	0.2798(3)	0.3156(5)	0.3854(4)
NY91	4a	1	0.2924(3)	-0.2376(5)	0.5347(4)
NYA1	4a	1	0.2673(2)	-0.3353(5)	0.2761(3)
CX11	4a	1	0.5663(3)	0.3683(6)	0.5066(4)
CX12	4a	1	0.6338(3)	0.3403(10)	0.4753(5)
HX1A	4a	1	0.64740	0.38130	0.45670
HX1B	4a	1	0.64300	0.28710	0.46600
HX1C	4a	1	0.63790	0.34880	0.51060
CX13	4a	1	0.5923(3)	0.3461(7)	0.4640(4)
CX14	4a	1	0.5817(4)	0.3018(8)	0.3372(4)
H1	4a	1	0.59990	0.29200	0.31070
H2	4a	1	0.56690	0.34970	0.32950
H3	4a	1	0.56490	0.25550	0.34020
CX24	4a	1	0.3791(4)	0.3170(6)	0.3438(4)
HX2A	4a	1	0.36370	0.32750	0.31460
HX2B	4a	1	0.36910	0.27040	0.36140
HX2C	4a	1	0.40500	0.30620	0.33360
CX23	4a	1	0.3982(3)	0.4335(7)	0.4515(4)
CX22	4a	1	0.3762(3)	0.5091(7)	0.4437(4)
HX2D	4a	1	0.38350	0.53330	0.41220
HX2E	4a	1	0.38150	0.54670	0.47050
HX2F	4a	1	0.34930	0.49660	0.44320
CX21	4a	1	0.4200(3)	0.4190(6)	0.4982(4)
CX34	4a	1	0.5194(4)	0.8139(6)	0.6115(7)
HX3A	4a	1	0.50820	0.86730	0.60860
HX3B	4a	1	0.54450	0.81420	0.59670

HX3C	4a	1	0.52130	0.79920	0.64630
CX33	4a	1	0.4921(3)	0.6227(6)	0.5690(4)
CX32	4a	1	0.4534(3)	0.6375(7)	0.5458(4)
HX3D	4a	1	0.45320	0.69000	0.52960
HX3E	4a	1	0.43410	0.63640	0.57160
HX3F	4a	1	0.44810	0.59560	0.52150
CX31	4a	1	0.5075(3)	0.5379(5)	0.5740(3)
CX44	4a	1	0.4064(5)	0.7850(8)	0.6852(10)
HX4A	4a	1	0.41400	0.83900	0.69530
HX4B	4a	1	0.38270	0.77090	0.70140
HX4C	4a	1	0.40310	0.78360	0.64940
CX43	4a	1	0.4539(3)	0.6000(6)	0.6884(4)
CX42	4a	1	0.4887(3)	0.6178(7)	0.7165(5)
HX4D	4a	1	0.49760	0.67170	0.70820
HX4E	4a	1	0.50810	0.57850	0.70810
HX4F	4a	1	0.48340	0.61500	0.75190
CX41	4a	1	0.4470(3)	0.5157(5)	0.6674(4)
CX54	4a	1	0.5748(4)	0.3023(6)	0.8792(4)
HX5A	4a	1	0.58260	0.31270	0.91320
HX5B	4a	1	0.59100	0.26120	0.86480
HX5C	4a	1	0.54870	0.28370	0.87890
CX53	4a	1	0.5619(3)	0.4243(6)	0.7751(4)
CX52	4a	1	0.5811(4)	0.5045(6)	0.7865(4)
HX5D	4a	1	0.58590	0.50840	0.82190
HX5E	4a	1	0.56480	0.54860	0.77610
HX5F	4a	1	0.60500	0.50760	0.76860
CX51	4a	1	0.5457(3)	0.4095(5)	0.7230(4)
CX64	4a	1	0.6204(3)	0.5951(6)	0.5755(4)
HX6A	4a	1	0.63470	0.64300	0.56630
HX6B	4a	1	0.59570	0.61100	0.58810
HX6C	4a	1	0.61710	0.56070	0.54660
CX62	4a	1	0.6859(3)	0.4506(7)	0.6684(4)
HX6D	4a	1	0.70160	0.46260	0.63980
HX6E	4a	1	0.69640	0.40480	0.68620
HX6F	4a	1	0.68510	0.49730	0.69020
CX63	4a	1	0.6458(3)	0.4302(6)	0.6511(4)
CX61	4a	1	0.6274(3)	0.3487(6)	0.6650(4)
CX74	4a	1	0.4197(3)	-0.0297(6)	0.5516(4)
HX7A	4a	1	0.41660	-0.08790	0.55350
HX7B	4a	1	0.40460	-0.00870	0.52430
HX7C	4a	1	0.41150	-0.00520	0.58250
CX72	4a	1	0.5004(3)	0.0921(6)	0.5402(4)
CX73	4a	1	0.5316(3)	0.0335(6)	0.5332(4)
HX7D	4a	1	0.52400	-0.00740	0.50930
HX7E	4a	1	0.53750	0.00780	0.56480
HX7F	4a	1	0.55400	0.06160	0.52100
CX71	4a	1	0.5111(3)	0.1827(6)	0.5477(4)
CX84	4a	1	0.3849(4)	0.1725(9)	0.8549(4)
HX8A	4a	1	0.37040	0.13240	0.87310
HX8B	4a	1	0.38130	0.22530	0.87000
HX8C	4a	1	0.41160	0.15820	0.85590
CX82	4a	1	0.3827(3)	0.2416(6)	0.7334(4)
CX83	4a	1	0.3508(3)	0.1970(7)	0.7077(4)
HX8D	4a	1	0.32890	0.19510	0.72940
HX8E	4a	1	0.35890	0.14230	0.70000
HX8F	4a	1	0.34420	0.22500	0.67720
CX81	4a	1	0.4043(3)	0.3066(5)	0.7039(4)
CX94	4a	1	0.3358(4)	0.5592(7)	0.6530(5)
HX9A	4a	1	0.32300	0.61020	0.65940
HX9B	4a	1	0.36280	0.56870	0.64910
HX9C	4a	1	0.33170	0.52280	0.68080
CX92	4a	1	0.3219(2)	0.4114(5)	0.5603(4)

CX93	4a	1	0.2864(3)	0.4400(7)	0.5353(4)
HX9D	4a	1	0.29080	0.49280	0.52060
HX9E	4a	1	0.26610	0.44390	0.55960
HX9F	4a	1	0.27920	0.40190	0.50950
CX91	4a	1	0.3407(3)	0.3313(6)	0.5463(4)
CXA4	4a	1	0.5723(3)	-0.0234(6)	0.6590(4)
HXA1	4a	1	0.57950	-0.07930	0.66460
HXA2	4a	1	0.58620	0.01130	0.68170
HXA3	4a	1	0.57820	-0.00840	0.62500
CXA2	4a	1	0.4850(3)	0.0774(5)	0.6666(3)
CXA3	4a	1	0.4579(3)	0.0072(6)	0.6791(4)
HXA4	4a	1	0.46550	-0.04080	0.66080
HXA5	4a	1	0.43220	0.02190	0.66970
HXA6	4a	1	0.45880	-0.00390	0.71450
CXA1	4a	1	0.4687(3)	0.1629(6)	0.6585(4)
CY14	4a	1	0.1147(3)	-0.0235(6)	0.2731(4)
HY1A	4a	1	0.08870	-0.00630	0.27830
HY1B	4a	1	0.11850	-0.07610	0.28840
HY1C	4a	1	0.11970	-0.02730	0.23770
CY12	4a	1	0.2018(3)	0.0548(6)	0.3088(4)
CY13	4a	1	0.1935(3)	0.1183(6)	0.3468(4)
HY1D	4a	1	0.16620	0.12610	0.34920
HY1E	4a	1	0.20540	0.16880	0.33710
HY1F	4a	1	0.20330	0.10120	0.37880
CY11	4a	1	0.2434(3)	0.0322(6)	0.2998(4)
CY24	4a	1	0.1169(3)	-0.0525(8)	0.4098(5)
HY2A	4a	1	0.09190	-0.07160	0.40070
HY2B	4a	1	0.12020	0.00270	0.39830
HY2C	4a	1	0.11970	-0.05410	0.44570
CY22	4a	1	0.2085(3)	-0.1175(6)	0.3796(4)
CY23	4a	1	0.2033(3)	-0.1817(7)	0.3394(4)
HY2D	4a	1	0.18130	-0.16830	0.31910
HY2E	4a	1	0.19940	-0.23410	0.35480
HY2F	4a	1	0.22570	-0.18360	0.31850
CY21	4a	1	0.2480(3)	-0.0927(6)	0.3953(4)
CY34	4a	1	0.2093(4)	-0.0089(10)	0.5239(6)
HY3A	4a	1	0.18720	-0.02270	0.54370
HY3B	4a	1	0.22390	-0.05760	0.51700
HY3C	4a	1	0.20130	0.01550	0.49290
CY32	4a	1	0.2930(3)	0.0941(6)	0.5594(4)
CY33	4a	1	0.2824(3)	0.1366(8)	0.6064(5)
HY3D	4a	1	0.25610	0.12500	0.61440
HY3E	4a	1	0.28570	0.19440	0.60220
HY3F	4a	1	0.29860	0.11780	0.63330
CY31	4a	1	0.3335(3)	0.0992(6)	0.5393(4)
CY44	4a	1	0.4879(3)	0.2195(7)	0.4259(4)
HY4A	4a	1	0.51340	0.23910	0.43230
HY4B	4a	1	0.48140	0.17860	0.45030
HY4C	4a	1	0.47010	0.26410	0.42820
CY42	4a	1	0.4453(3)	0.1232(6)	0.3230(4)
CY43	4a	1	0.4747(4)	0.1272(9)	0.2825(5)
HY4D	4a	1	0.48110	0.18330	0.27590
HY4E	4a	1	0.46470	0.10240	0.25260
HY4F	4a	1	0.49730	0.09840	0.29310
CY41	4a	1	0.4075(3)	0.0863(6)	0.3122(3)
CY54	4a	1	0.5064(3)	-0.1666(7)	0.2808(4)
HY5A	4a	1	0.53310	-0.17300	0.27320
HY5B	4a	1	0.49420	-0.13620	0.25440
HY5C	4a	1	0.49460	-0.21950	0.28370
CY52	4a	1	0.4571(3)	-0.0839(6)	0.3798(4)
CY53	4a	1	0.4876(3)	-0.0619(9)	0.4170(4)
HY5D	4a	1	0.51020	-0.09400	0.41060

HY5E	4a	1	0.47860	-0.07280	0.45040
HY5F	4a	1	0.49380	-0.00490	0.41390
CY51	4a	1	0.4166(3)	-0.0727(6)	0.3937(4)
CY64	4a	1	0.4105(4)	0.3215(7)	0.1904(5)
HY6A	4a	1	0.42940	0.34070	0.16690
HY6B	4a	1	0.42310	0.29910	0.21940
HY6C	4a	1	0.39440	0.36620	0.20040
CY62	4a	1	0.3470(3)	0.1620(6)	0.1867(4)
CY63	4a	1	0.3409(3)	0.1450(7)	0.1320(3)
HY6D	4a	1	0.33050	0.19270	0.11600
HY6E	4a	1	0.32340	0.10010	0.12820
HY6F	4a	1	0.36500	0.13130	0.11660
CY61	4a	1	0.3282(3)	0.1071(6)	0.2274(4)
CY74	4a	1	0.2184(3)	-0.1379(7)	0.1868(4)
HY7A	4a	1	0.19450	-0.15100	0.17090
HY7B	4a	1	0.21590	-0.08750	0.20500
HY7C	4a	1	0.22530	-0.18090	0.20970
CY72	4a	1	0.3116(3)	-0.1374(6)	0.1433(4)
CY73	4a	1	0.3060(4)	-0.1745(10)	0.0915(4)
HY7D	4a	1	0.27920	-0.18490	0.08600
HY7E	4a	1	0.32000	-0.22490	0.08920
HY7F	4a	1	0.31520	-0.13710	0.06640
CY71	4a	1	0.3495(3)	-0.1271(5)	0.1637(4)
CY84	4a	1	0.2754(5)	0.4487(7)	0.3601(5)
HY8A	4a	1	0.26770	0.50240	0.37080
HY8B	4a	1	0.26530	0.43830	0.32710
HY8C	4a	1	0.30280	0.44550	0.35930
CY82	4a	1	0.2678(3)	0.2590(6)	0.4163(4)
CY83	4a	1	0.2373(3)	0.2675(6)	0.4565(4)
HY8D	4a	1	0.22570	0.32060	0.45420
HY8E	4a	1	0.24880	0.26100	0.48900
HY8F	4a	1	0.21800	0.22620	0.45170
CY81	4a	1	0.2862(3)	0.1765(6)	0.4114(4)
CY94	4a	1	0.2570(4)	-0.3212(8)	0.5880(5)
HY9A	4a	1	0.25600	-0.37430	0.60340
HY9B	4a	1	0.23670	-0.31640	0.56390
HY9C	4a	1	0.25410	-0.27990	0.61330
CY92	4a	1	0.3243(3)	-0.2285(6)	0.5093(4)
CY93	4a	1	0.3569(4)	-0.2863(9)	0.5089(6)
H106	4a	1	0.36200	-0.30440	0.54250
H107	4a	1	0.37910	-0.25960	0.49550
H108	4a	1	0.35060	-0.33260	0.48830
CY91	4a	1	0.3236(3)	-0.1557(6)	0.4771(4)
CYA4	4a	1	0.2243(3)	-0.4379(7)	0.2568(5)
HYA1	4a	1	0.22110	-0.49600	0.25310
HYA2	4a	1	0.22230	-0.41210	0.22450
HYA3	4a	1	0.20460	-0.41700	0.27860
CYA2	4a	1	0.3007(3)	-0.3170(6)	0.2942(4)
CYA3	4a	1	0.3296(3)	-0.3734(6)	0.3156(5)
HYA4	4a	1	0.32620	-0.42700	0.30150
HYA5	4a	1	0.32660	-0.37610	0.35140
HYA6	4a	1	0.35490	-0.35380	0.30780
CYA1	4a	1	0.3084(3)	-0.2274(6)	0.2963(4)
CT12	4a	1	0.0228(3)	0.9279(9)	0.3426(6)
HT12	4a	1	0.02350	0.94830	0.31000
CT11	4a	1	0.0089(3)	0.9819(9)	0.3853(6)
CT13	4a	1	0.0111(3)	0.9357(9)	0.4296(6)
HT13	4a	1	0.00320	0.96230	0.45870
CT14	4a	1	0.0230(4)	0.8581(11)	0.4358(7)
HT14	4a	1	0.02300	0.83480	0.46770
CT15	4a	1	0.0354(4)	0.8125(13)	0.3946(8)
HT15	4a	1	0.04390	0.75870	0.39740

CT16	4a	1	0.0341(4)	0.8521(10)	0.3514(6)
HT16	4a	1	0.04210	0.82270	0.32340
CT17	4a	1	-0.0031(4)	1.0582(11)	0.3804(8)
HT1A	4a	1	0.00120	1.07620	0.34650
HT1B	4a	1	0.01090	1.09280	0.40310
HT1C	4a	1	-0.02990	1.06120	0.38800
CT21	4a	1	0.2138(6)	0.3672(7)	0.1730(7)
CT22	4a	1	0.2021(8)	0.3276(10)	0.2165(8)
HT22	4a	1	0.17660	0.32310	0.22660
CT23	4a	1	0.2362(9)	0.2921(11)	0.2461(10)
HT23	4a	1	0.23050	0.26460	0.27580
CT24	4a	1	0.2736(7)	0.2969(9)	0.2332(8)
HT24	4a	1	0.29400	0.27550	0.25150
CT25	4a	1	0.2768(6)	0.3425(9)	0.1849(8)
HT25	4a	1	0.30190	0.34750	0.17370
CT26	4a	1	0.2521(8)	0.3769(11)	0.1546(10)
HT26	4a	1	0.25850	0.40410	0.12510
CT27	4a	1	0.1821(4)	0.4093(8)	0.1363(3)
HT2A	4a	1	0.15740	0.40770	0.15220
HT2B	4a	1	0.18100	0.37990	0.10510
HT2C	4a	1	0.18920	0.46510	0.12990
OTH5	4a	1	0.1513(3)	0.7007(5)	0.4854(3)
CTH1	4a	1	0.1887(3)	0.7261(5)	0.4711(4)
HTH1	4a	1	0.18730	0.76100	0.44160
HTH2	4a	1	0.20060	0.75670	0.49810
CTH	4a	1	0.2105(3)	0.6550(5)	0.4602(4)
HTH3	4a	1	0.23270	0.65220	0.48220
HTH4	4a	1	0.21950	0.65650	0.42570
CTH3	4a	1	0.1867(3)	0.5857(5)	0.4679(3)
HTH5	4a	1	0.18440	0.55470	0.43690
HTH6	4a	1	0.19770	0.55040	0.49340
CTH4	4a	1	0.1501(3)	0.6140(5)	0.4834(3)
HTH7	4a	1	0.14380	0.59200	0.51630
HTH8	4a	1	0.13060	0.59630	0.45980
OTH1	4a	1	0.0852(3)	0.4261(6)	0.3863(4)
C001	4a	1	0.0951(3)	0.4475(6)	0.3363(4)
H001	4a	1	0.09040	0.50520	0.33060
H002	4a	1	0.07970	0.41640	0.31270
C002	4a	1	0.1346(3)	0.4295(6)	0.3292(3)
H003	4a	1	0.13770	0.39010	0.30230
H004	4a	1	0.14850	0.47890	0.32030
C003	4a	1	0.1491(3)	0.3971(6)	0.3749(4)
H005	4a	1	0.15900	0.34240	0.36950
H006	4a	1	0.16980	0.43120	0.38740
C004	4a	1	0.1186(3)	0.3949(6)	0.4102(4)
H007	4a	1	0.12490	0.42800	0.43930
H008	4a	1	0.11410	0.33920	0.42130

Anisotropic displacement parameters, in Å²

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Fe1	0.0313(7)	0.0433(8)	0.0512(8)	-0.0008(6)	-0.0014(6)	-0.0014(7)
Fe2	0.0319(7)	0.0443(8)	0.0504(9)	-0.0013(7)	-0.0003(6)	-0.0032(7)
Fe3	0.0319(7)	0.0457(8)	0.0529(8)	0.0039(6)	-0.0009(7)	-0.0014(8)
Fe4	0.0326(7)	0.0455(8)	0.0533(9)	-0.0025(6)	-0.0016(6)	0.0006(8)
Fe5	0.0348(8)	0.0449(8)	0.0528(9)	0.0005(7)	-0.0003(6)	-0.0009(7)
Fe6	0.0361(8)	0.0446(8)	0.0513(8)	-0.0029(7)	0.0011(6)	-0.0024(7)
Fe7	0.0347(8)	0.0450(8)	0.0517(9)	0.0002(7)	-0.0010(6)	-0.0028(7)
Fe8	0.0339(8)	0.0503(9)	0.0524(9)	-0.0020(7)	0.0013(7)	-0.0035(8)
Na1	0.039(2)	0.054(2)	0.054(2)	-0.0024(19)	-0.0012(18)	0.002(2)

Na2	0.040(2)	0.050(2)	0.058(2)	0.0011(19)	0.0034(18)	-0.004(2)
Na3	0.048(2)	0.055(2)	0.054(2)	-0.006(2)	0.0024(18)	-0.011(2)
Na4	0.039(2)	0.050(2)	0.057(2)	0.0002(18)	-0.0022(18)	0.0004(19)
OXB1	0.037(4)	0.045(4)	0.044(3)	-0.004(3)	-0.007(3)	0.002(3)
OXB2	0.040(4)	0.041(3)	0.045(4)	0.001(3)	-0.003(3)	0.005(3)
OX11	0.043(4)	0.046(4)	0.052(4)	-0.008(3)	-0.004(3)	-0.002(4)
OX12	0.044(4)	0.042(4)	0.048(4)	-0.006(3)	-0.002(3)	0.007(3)
OX13	0.048(5)	0.126(7)	0.055(5)	-0.002(5)	0.015(4)	-0.017(5)
OX23	0.061(5)	0.046(4)	0.057(4)	-0.006(3)	-0.010(4)	-0.002(4)
OX22	0.037(4)	0.040(4)	0.058(4)	0.003(3)	0.002(3)	-0.001(3)
OX21	0.047(4)	0.045(4)	0.064(5)	0.001(3)	-0.004(4)	0.001(4)
OX33	0.082(6)	0.036(4)	0.119(7)	0.002(4)	-0.018(5)	-0.009(4)
OX32	0.045(4)	0.049(4)	0.060(5)	-0.001(3)	0.001(3)	0.001(3)
OX31	0.039(4)	0.050(4)	0.053(4)	-0.002(3)	0.000(3)	-0.002(4)
OX43	0.089(7)	0.044(5)	0.130(8)	0.013(4)	-0.023(6)	-0.032(5)
OX42	0.033(4)	0.050(4)	0.058(4)	0.007(3)	0.002(3)	0.003(3)
OX41	0.030(4)	0.052(4)	0.059(4)	-0.004(3)	-0.008(3)	-0.006(3)
OX53	0.057(5)	0.052(4)	0.047(4)	-0.005(4)	-0.012(3)	0.001(3)
OX52	0.045(4)	0.037(4)	0.063(5)	-0.002(3)	-0.009(3)	0.002(3)
OX51	0.037(4)	0.048(4)	0.049(4)	-0.006(3)	0.003(3)	0.001(3)
OX63	0.046(4)	0.059(4)	0.067(5)	-0.016(3)	0.001(4)	0.003(4)
OX61	0.044(4)	0.048(4)	0.058(4)	-0.011(3)	-0.006(3)	0.001(3)
OX62	0.042(4)	0.054(4)	0.072(5)	-0.002(3)	-0.012(4)	0.004(4)
OX73	0.059(5)	0.050(5)	0.067(5)	-0.007(4)	-0.009(4)	0.002(4)
OX71	0.025(3)	0.053(4)	0.060(4)	0.008(3)	0.002(3)	-0.008(4)
OX72	0.033(4)	0.056(4)	0.052(4)	0.007(3)	-0.005(3)	0.001(4)
OX83	0.063(5)	0.074(5)	0.053(4)	-0.012(4)	0.005(4)	0.019(4)
OX81	0.035(4)	0.041(4)	0.054(4)	0.006(3)	0.004(3)	-0.003(3)
OX82	0.030(4)	0.057(4)	0.049(4)	-0.002(3)	-0.005(3)	-0.006(3)
OX93	0.048(4)	0.064(5)	0.083(5)	0.009(4)	-0.007(4)	-0.009(5)
OX91	0.038(4)	0.047(4)	0.061(4)	0.001(3)	0.001(3)	0.000(3)
OX92	0.045(4)	0.057(4)	0.059(4)	-0.003(3)	-0.007(3)	-0.009(4)
OXA3	0.057(5)	0.040(4)	0.067(5)	0.004(3)	-0.011(4)	0.002(4)
OXA1	0.026(3)	0.050(4)	0.061(4)	-0.006(3)	-0.003(3)	-0.005(4)
OXA2	0.029(3)	0.049(4)	0.058(4)	0.002(3)	-0.003(3)	-0.006(3)
OYB1	0.032(4)	0.053(4)	0.050(4)	-0.005(3)	-0.001(3)	0.000(3)
OYB2	0.035(4)	0.049(4)	0.053(4)	0.003(3)	-0.004(3)	0.006(3)
OY13	0.028(4)	0.085(5)	0.072(5)	0.007(4)	0.000(3)	-0.021(4)
OY11	0.044(4)	0.037(4)	0.058(4)	0.007(3)	0.001(3)	0.000(3)
OY12	0.045(4)	0.044(4)	0.059(4)	0.001(3)	0.006(3)	-0.003(3)
OY23	0.038(4)	0.086(5)	0.067(5)	-0.007(4)	-0.004(3)	-0.005(4)
OY21	0.034(4)	0.063(5)	0.066(5)	-0.010(3)	-0.002(3)	-0.009(4)
OY22	0.036(4)	0.048(4)	0.062(4)	0.003(3)	-0.003(3)	0.000(4)
OY33	0.035(4)	0.125(7)	0.057(5)	-0.014(4)	0.011(3)	-0.020(5)
OY31	0.043(4)	0.065(4)	0.039(4)	-0.004(3)	0.002(3)	-0.010(3)
OY32	0.038(4)	0.066(5)	0.064(5)	-0.013(3)	-0.002(3)	-0.005(4)
OY43	0.036(4)	0.092(5)	0.063(5)	-0.017(4)	0.008(3)	-0.034(4)
OY41	0.034(4)	0.047(4)	0.068(5)	-0.001(3)	0.008(3)	-0.004(4)
OY42	0.049(4)	0.051(4)	0.058(4)	-0.012(3)	0.001(3)	-0.006(3)
OY53	0.038(4)	0.085(5)	0.069(5)	0.007(4)	0.003(4)	-0.020(4)
OY51	0.034(4)	0.057(4)	0.043(4)	-0.005(3)	0.000(3)	-0.001(3)
OY52	0.041(4)	0.062(5)	0.048(4)	0.013(3)	0.004(3)	-0.007(4)
OY63	0.066(5)	0.066(5)	0.065(5)	-0.031(4)	0.000(4)	0.014(4)
OY61	0.052(5)	0.044(4)	0.049(4)	0.001(3)	0.010(3)	0.001(3)
OY62	0.036(4)	0.050(4)	0.057(4)	-0.003(3)	-0.004(3)	-0.004(3)
OY73	0.039(4)	0.106(6)	0.053(4)	-0.004(4)	-0.002(3)	-0.004(4)
OY71	0.042(4)	0.046(4)	0.052(4)	0.001(3)	0.007(3)	-0.010(3)
OY72	0.039(4)	0.063(5)	0.059(4)	0.004(3)	0.000(3)	-0.002(4)
OY83	0.105(8)	0.054(5)	0.106(7)	0.020(5)	0.015(6)	0.015(5)
OY81	0.038(4)	0.052(4)	0.055(4)	-0.014(3)	0.003(3)	0.008(3)
OY82	0.040(4)	0.044(4)	0.072(5)	-0.014(3)	0.001(3)	-0.007(4)
OY93	0.079(6)	0.079(6)	0.108(7)	0.023(5)	0.028(5)	0.032(5)

OY91	0.041(4)	0.056(4)	0.056(4)	0.000(3)	0.004(3)	0.003(4)
OY92	0.053(4)	0.053(4)	0.054(4)	0.000(3)	0.003(3)	0.007(4)
OYA3	0.056(5)	0.058(5)	0.080(5)	-0.006(4)	-0.015(4)	0.013(4)
OYA1	0.032(4)	0.049(4)	0.055(4)	0.007(3)	-0.004(3)	0.000(3)
OYA2	0.037(4)	0.048(4)	0.055(4)	0.007(3)	-0.009(3)	-0.002(3)
OH23	0.047(4)	0.044(4)	0.050(4)	0.003(3)	0.004(3)	-0.005(3)
OH24	0.047(4)	0.047(4)	0.055(4)	-0.005(3)	-0.003(3)	-0.013(3)
NX11	0.038(5)	0.077(7)	0.065(6)	-0.015(5)	0.008(4)	-0.015(5)
NX21	0.058(6)	0.045(5)	0.054(5)	-0.008(4)	-0.015(4)	0.005(5)
NX31	0.070(7)	0.036(5)	0.077(7)	0.002(5)	-0.007(5)	0.005(4)
NX41	0.052(6)	0.047(6)	0.109(8)	0.010(5)	-0.003(5)	-0.023(5)
NX51	0.047(5)	0.059(6)	0.043(5)	-0.009(4)	0.000(4)	-0.004(4)
NX61	0.047(5)	0.038(5)	0.064(6)	0.000(4)	0.002(4)	0.013(4)
NX71	0.046(5)	0.046(5)	0.049(5)	0.000(4)	0.002(4)	-0.006(4)
NX81	0.045(6)	0.059(6)	0.067(6)	0.002(5)	0.000(4)	0.004(5)
NX91	0.035(5)	0.042(5)	0.057(5)	0.003(4)	0.001(4)	-0.004(4)
NXA1	0.053(5)	0.036(5)	0.058(5)	0.003(4)	-0.005(4)	0.006(4)
NY11	0.030(5)	0.065(6)	0.065(6)	0.003(4)	0.007(4)	-0.001(5)
NY21	0.030(5)	0.058(6)	0.063(5)	0.001(4)	-0.002(4)	0.011(4)
NY31	0.031(5)	0.068(6)	0.063(6)	-0.010(4)	0.004(4)	0.008(5)
NY41	0.044(5)	0.058(6)	0.072(6)	-0.013(4)	-0.003(5)	-0.015(5)
NY51	0.029(5)	0.059(5)	0.064(6)	-0.001(4)	0.002(4)	-0.003(5)
NY61	0.056(6)	0.053(5)	0.051(5)	-0.005(4)	0.010(4)	0.007(4)
NY71	0.024(4)	0.061(5)	0.061(5)	0.001(4)	0.000(4)	0.000(5)
NY81	0.067(7)	0.048(6)	0.090(8)	0.008(5)	-0.003(5)	-0.009(5)
NY91	0.086(8)	0.043(5)	0.076(7)	0.012(5)	0.028(5)	0.009(5)
NYA1	0.052(6)	0.040(5)	0.065(6)	-0.007(4)	-0.005(4)	0.013(4)
CX11	0.025(5)	0.058(7)	0.062(7)	-0.008(5)	0.006(5)	0.005(6)
CX12	0.036(7)	0.172(14)	0.087(10)	0.006(8)	0.007(6)	0.00(1)
CX13	0.027(6)	0.088(9)	0.068(8)	-0.008(6)	0.016(5)	-0.005(7)
CX14	0.093(11)	0.117(11)	0.055(7)	-0.025(8)	-0.007(7)	-0.008(8)
CX24	0.097(10)	0.046(7)	0.079(9)	-0.008(6)	-0.025(7)	-0.011(7)
CX23	0.041(6)	0.051(7)	0.057(7)	0.002(5)	-0.009(5)	0.007(6)
CX22	0.085(9)	0.075(8)	0.054(7)	0.026(7)	-0.021(6)	-0.002(6)
CX21	0.031(5)	0.045(6)	0.061(7)	-0.003(5)	-0.002(5)	-0.005(6)
CX34	0.126(13)	0.044(7)	0.168(14)	-0.011(8)	-0.038(12)	-0.031(10)
CX33	0.033(6)	0.046(6)	0.071(7)	-0.004(5)	0.005(5)	-0.002(5)
CX32	0.051(7)	0.070(7)	0.063(7)	0.018(6)	-0.013(5)	0.005(6)
CX31	0.040(6)	0.041(6)	0.046(6)	0.000(5)	-0.003(4)	0.009(5)
CX44	0.137(17)	0.063(10)	0.39(3)	0.056(10)	-0.103(19)	-0.038(14)
CX43	0.037(6)	0.054(7)	0.062(7)	-0.009(5)	0.007(5)	-0.007(5)
CX42	0.066(9)	0.058(7)	0.098(10)	0.004(6)	-0.011(7)	-0.021(7)
CX41	0.030(5)	0.039(6)	0.067(7)	0.001(4)	0.004(5)	0.011(5)
CX54	0.093(9)	0.044(7)	0.058(7)	-0.002(6)	-0.026(6)	0.012(6)
CX53	0.031(5)	0.048(6)	0.065(6)	0.004(5)	-0.010(5)	-0.021(5)
CX52	0.081(9)	0.051(7)	0.059(7)	-0.020(6)	-0.004(6)	-0.006(6)
CX51	0.036(5)	0.039(6)	0.064(7)	-0.002(4)	-0.014(5)	-0.010(5)
CX64	0.071(8)	0.063(7)	0.059(7)	-0.006(6)	0.008(6)	0.008(6)
CX62	0.035(6)	0.087(8)	0.077(8)	-0.014(6)	-0.014(5)	0.030(7)
CX63	0.039(6)	0.046(6)	0.057(6)	-0.017(5)	-0.008(5)	0.005(5)
CX61	0.035(5)	0.051(6)	0.061(6)	0.000(5)	0.002(5)	-0.004(5)
CX74	0.054(7)	0.060(7)	0.077(8)	0.002(6)	-0.014(6)	-0.002(6)
CX72	0.050(6)	0.043(6)	0.055(6)	0.012(5)	0.007(5)	-0.006(5)
CX73	0.054(7)	0.059(7)	0.070(8)	0.011(6)	-0.010(6)	-0.009(6)
CX71	0.042(6)	0.053(6)	0.051(6)	-0.002(5)	0.001(5)	-0.003(5)
CX84	0.08(1)	0.125(11)	0.060(8)	0.007(8)	-0.001(7)	0.029(8)
CX82	0.029(5)	0.048(6)	0.069(7)	0.000(5)	0.002(5)	-0.007(5)
CX83	0.074(9)	0.062(7)	0.071(8)	-0.013(6)	-0.008(6)	0.013(6)
CX81	0.040(6)	0.038(6)	0.055(6)	0.006(5)	0.010(5)	-0.005(5)
CX94	0.079(9)	0.084(9)	0.093(10)	0.026(7)	-0.037(8)	-0.040(8)
CX92	0.024(5)	0.047(6)	0.060(6)	0.009(4)	0.000(4)	0.000(5)
CX93	0.048(7)	0.079(8)	0.057(7)	0.001(6)	-0.011(5)	-0.007(6)

CX91	0.042(6)	0.054(7)	0.068(7)	-0.010(5)	0.009(5)	-0.010(6)
CXA4	0.055(7)	0.047(6)	0.066(7)	0.011(5)	-0.001(6)	-0.003(6)
CXA2	0.047(6)	0.036(5)	0.043(5)	-0.007(5)	-0.007(4)	0.001(5)
CXA3	0.044(7)	0.065(7)	0.087(9)	-0.005(6)	0.008(6)	0.016(6)
CXA1	0.044(6)	0.048(6)	0.043(5)	0.000(5)	0.002(5)	-0.001(5)
CY14	0.038(6)	0.065(7)	0.065(7)	0.000(5)	-0.002(5)	-0.003(6)
CY12	0.035(5)	0.052(6)	0.054(6)	0.000(5)	-0.005(4)	-0.018(5)
CY13	0.034(6)	0.066(7)	0.075(8)	0.003(5)	0.002(5)	-0.020(6)
CY11	0.027(5)	0.045(6)	0.064(7)	-0.002(4)	-0.008(4)	0.004(5)
CY24	0.045(7)	0.131(11)	0.079(9)	0.021(7)	0.022(6)	-0.022(8)
CY22	0.029(5)	0.048(6)	0.059(6)	-0.001(4)	0.002(4)	-0.001(5)
CY23	0.046(7)	0.069(7)	0.083(8)	-0.023(6)	0.010(6)	-0.014(7)
CY21	0.034(5)	0.044(6)	0.055(6)	-0.005(5)	-0.002(4)	0.010(5)
CY34	0.057(9)	0.214(17)	0.111(12)	-0.075(10)	-0.002(8)	-0.065(12)
CY32	0.035(6)	0.063(7)	0.069(7)	-0.020(5)	0.007(5)	-0.003(6)
CY33	0.056(8)	0.119(10)	0.080(8)	-0.002(7)	0.027(7)	-0.012(9)
CY31	0.039(6)	0.054(6)	0.061(7)	-0.009(5)	-0.001(5)	0.001(5)
CY44	0.054(8)	0.099(9)	0.062(7)	-0.008(7)	-0.004(6)	-0.036(7)
CY42	0.042(6)	0.058(7)	0.058(7)	-0.009(5)	0.005(5)	-0.011(5)
CY43	0.064(9)	0.152(13)	0.076(9)	-0.038(9)	0.029(7)	-0.034(9)
CY41	0.052(6)	0.054(7)	0.044(6)	-0.012(5)	-0.003(5)	-0.004(5)
CY54	0.051(7)	0.090(9)	0.069(8)	0.022(6)	0.008(6)	0.003(7)
CY52	0.039(6)	0.055(7)	0.073(7)	-0.002(5)	-0.007(5)	-0.010(6)
CY53	0.032(6)	0.189(14)	0.069(8)	0.010(8)	-0.013(5)	-0.050(9)
CY51	0.032(5)	0.055(7)	0.059(6)	0.010(5)	0.003(4)	0.001(5)
CY64	0.136(13)	0.065(8)	0.074(8)	-0.047(8)	-0.006(8)	0.014(7)
CY62	0.041(6)	0.043(6)	0.049(6)	0.000(5)	0.009(4)	-0.001(5)
CY63	0.074(8)	0.070(7)	0.037(6)	-0.012(6)	0.001(5)	0.009(5)
CY61	0.039(6)	0.045(6)	0.067(7)	-0.002(5)	0.007(5)	0.003(5)
CY74	0.031(6)	0.103(9)	0.076(8)	-0.009(6)	0.009(5)	-0.013(7)
CY72	0.051(6)	0.052(6)	0.051(6)	0.013(5)	-0.009(5)	-0.014(5)
CY73	0.050(8)	0.179(15)	0.073(9)	0.013(9)	-0.004(6)	-0.041(10)
CY71	0.038(6)	0.042(6)	0.060(6)	0.001(4)	0.001(5)	-0.004(5)
CY84	0.147(15)	0.065(9)	0.122(13)	-0.010(9)	-0.021(11)	0.054(9)
CY82	0.045(6)	0.044(6)	0.054(6)	0.001(5)	-0.002(5)	-0.004(5)
CY83	0.061(7)	0.052(7)	0.066(7)	0.009(5)	0.023(6)	0.004(6)
CY81	0.029(5)	0.042(6)	0.068(7)	0.007(4)	-0.009(5)	-0.015(5)
CY94	0.066(9)	0.109(10)	0.097(10)	-0.004(8)	0.032(7)	0.031(8)
CY92	0.058(8)	0.058(7)	0.066(7)	0.012(6)	0.006(6)	0.006(6)
CY93	0.081(10)	0.141(13)	0.138(13)	0.059(9)	0.039(9)	0.100(11)
CY91	0.044(6)	0.053(7)	0.063(7)	-0.005(5)	-0.011(5)	0.009(6)
CYA4	0.059(8)	0.063(7)	0.102(10)	-0.008(6)	-0.023(7)	0.004(7)
CYA2	0.049(6)	0.036(6)	0.061(7)	-0.003(5)	-0.001(5)	0.008(5)
CYA3	0.058(8)	0.047(7)	0.11(1)	0.003(6)	-0.040(7)	-0.001(6)
CYA1	0.034(6)	0.049(6)	0.052(6)	0.003(5)	0.008(4)	-0.005(5)

Selected geometric informations			
Atoms 1,2	d 1,2 [Å]	Atoms 1,2	d 1,2 [Å]
Fe1—OXB2	1.944(7)	CX34—HX3C	0.9600
Fe1—OXB1	1.956(7)	CX33—CX31	1.493(14)
Fe1—OX82	2.009(7)	CX33—CX32	1.505(14)
Fe1—OXA1	2.015(6)	CX32—HX3D	0.9600
Fe1—OX52	2.028(7)	CX32—HX3E	0.9600
Fe1—OX41	2.084(7)	CX32—HX3F	0.9600
Fe1—Fe2	2.928(2)	CX44—HX4A	0.9600
Fe2—OXB1	1.932(7)	CX44—HX4B	0.9600
Fe2—OXB2	1.978(7)	CX44—HX4C	0.9600
Fe2—OX71	1.982(7)	CX43—CX42	1.455(15)
Fe2—OX12	2.018(7)	CX43—CX41	1.506(13)
Fe2—OX22	2.024(7)	CX42—HX4D	0.9600

Fe2—OX31	2.074(7)	CX42—HX4E	0.9600
Fe3—OXB2	1.820(6)	CX42—HX4F	0.9600
Fe3—OX42	1.964(7)	CX54—HX5A	0.9600
Fe3—OX91	1.996(7)	CX54—HX5B	0.9600
Fe3—OX81	2.035(7)	CX54—HX5C	0.9600
Fe3—OX21	2.065(7)	CX53—CX52	1.502(13)
Fe3—NX91	2.318(8)	CX53—CX51	1.517(13)
Fe3—Na1	3.586(4)	CX52—HX5D	0.9600
Fe4—OXB1	1.825(6)	CX52—HX5E	0.9600
Fe4—OX32	1.982(7)	CX52—HX5F	0.9600
Fe4—OX61	1.999(7)	CX64—HX6A	0.9600
Fe4—OX11	2.001(7)	CX64—HX6B	0.9600
Fe4—OX51	2.037(7)	CX64—HX6C	0.9600
Fe4—NX61	2.287(9)	CX62—CX63	1.508(13)
Fe5—OYB2	1.912(7)	CX62—HX6D	0.9600
Fe5—OYB1	1.973(7)	CX62—HX6E	0.9600
Fe5—OY51	1.997(6)	CX62—HX6F	0.9600
Fe5—OY91	2.021(7)	CX63—CX61	1.524(13)
Fe5—OYA1	2.028(7)	CX74—HX7A	0.9600
Fe5—OY22	2.074(7)	CX74—HX7B	0.9600
Fe5—Fe6	2.932(2)	CX74—HX7C	0.9600
Fe6—OYB1	1.936(7)	CX72—CX73	1.463(13)
Fe6—OY61	1.978(7)	CX72—CX71	1.540(14)
Fe6—OYB2	1.993(7)	CX73—HX7D	0.9600
Fe6—OY41	1.990(7)	CX73—HX7E	0.9600
Fe6—OY12	2.022(7)	CX73—HX7F	0.9600
Fe6—OY82	2.032(7)	CX84—HX8A	0.9600
Fe7—OYB1	1.840(6)	CX84—HX8B	0.9600
Fe7—OY11	1.996(7)	CX84—HX8C	0.9600
Fe7—OYA2	1.999(7)	CX82—CX83	1.493(14)
Fe7—OY71	2.009(7)	CX82—CX81	1.520(14)
Fe7—OY62	2.025(7)	CX83—HX8D	0.9600
Fe7—NY71	2.281(9)	CX83—HX8E	0.9600
Fe8—OYB2	1.844(7)	CX83—HX8F	0.9600
Fe8—OY21	1.974(7)	CX94—HX9A	0.9600
Fe8—OY81	1.987(7)	CX94—HX9B	0.9600
Fe8—OY31	1.996(7)	CX94—HX9C	0.9600
Fe8—OY92	2.007(7)	CX92—CX93	1.481(13)
Fe8—NY31	2.313(9)	CX92—CX91	1.510(13)
Na1—OY32	2.322(8)	CX93—HX9D	0.9600
Na1—OXA2	2.421(8)	CX93—HX9E	0.9600
Na1—OX71	2.463(7)	CX93—HX9F	0.9600
Na1—OX91	2.483(8)	CXA4—HXA1	0.9600
Na1—OH24	2.494(8)	CXA4—HXA2	0.9600
Na1—NX71	2.648(9)	CXA4—HXA3	0.9600
Na1—OXB2	2.941(7)	CXA2—CXA3	1.523(13)
Na1—Na3	3.964(6)	CXA2—CXA1	1.524(13)
Na2—OH23	2.268(7)	CXA3—HXA4	0.9600
Na2—OY42	2.305(8)	CXA3—HXA5	0.9600
Na2—OY51	2.333(8)	CXA3—HXA6	0.9600
Na2—OY71	2.351(8)	CY14—HY1A	0.9600
Na2—OYB1	2.750(8)	CY14—HY1B	0.9600
Na2—NY51	2.771(9)	CY14—HY1C	0.9600
Na2—Na4 ⁱ	4.096(6)	CY12—CY13	1.479(13)
Na3—OY52	2.271(8)	CY12—CY11	1.514(13)
Na3—OH24	2.273(8)	CY13—HY1D	0.9600
Na3—OY41	2.339(8)	CY13—HY1E	0.9600
Na3—OY31	2.413(8)	CY13—HY1F	0.9600
Na3—OYB2	2.727(8)	CY24—HY2A	0.9600
Na3—NY41	2.868(10)	CY24—HY2B	0.9600
Na3—CY51	3.105(10)	CY24—HY2C	0.9600
Na4—OY72 ⁱⁱ	2.332(8)	CY22—CY21	1.496(13)

Na4—OX61	2.404(8)	CY22—CY23	1.511(14)
Na4—OX72	2.430(8)	CY23—HY2D	0.9600
Na4—OXA1	2.438(7)	CY23—HY2E	0.9600
Na4—OH23 ⁱⁱ	2.521(8)	CY23—HY2F	0.9600
Na4—NXA1	2.639(9)	CY34—HY3A	0.9600
OX11—CX11	1.264(12)	CY34—HY3B	0.9600
OX12—CX11	1.283(11)	CY34—HY3C	0.9600
OX13—NX11	1.406(11)	CY32—CY33	1.477(16)
OX13—CX14	1.484(14)	CY32—CY31	1.513(14)
OX23—NX21	1.397(10)	CY33—HY3D	0.9600
OX23—CX24	1.477(12)	CY33—HY3E	0.9600
OX22—CX21	1.269(11)	CY33—HY3F	0.9600
OX21—CX21	1.292(12)	CY44—HY4A	0.9600
OX33—NX31	1.386(11)	CY44—HY4B	0.9600
OX33—CX34	1.448(12)	CY44—HY4C	0.9600
OX32—CX31	1.273(10)	CY42—CY41	1.478(14)
OX31—CX31	1.244(10)	CY42—CY43	1.488(15)
OX43—NX41	1.401(11)	CY43—HY4D	0.9600
OX43—CX44	1.413(14)	CY43—HY4E	0.9600
OX42—CX41	1.288(10)	CY43—HY4F	0.9600
OX41—CX41	1.244(9)	CY54—HY5A	0.9600
OX53—CX54	1.413(9)	CY54—HY5B	0.9600
OX53—NX51	1.424(10)	CY54—HY5C	0.9600
OX52—CX51	1.257(9)	CY52—CY51	1.470(14)
OX51—CX51	1.277(10)	CY52—CY53	1.499(14)
OX63—NX61	1.396(10)	CY53—HY5D	0.9600
OX63—CX64	1.461(11)	CY53—HY5E	0.9600
OX61—CX61	1.28(1)	CY53—HY5F	0.9600
OX62—CX61	1.265(11)	CY64—HY6A	0.9600
OX73—NX71	1.402(10)	CY64—HY6B	0.9600
OX73—CX74	1.468(11)	CY64—HY6C	0.9600
OX71—CX71	1.31(1)	CY62—CY63	1.499(13)
OX72—CX71	1.215(10)	CY62—CY61	1.551(13)
OX83—NX81	1.400(11)	CY63—HY6D	0.9600
OX83—CX84	1.465(11)	CY63—HY6E	0.9600
OX81—CX81	1.269(10)	CY63—HY6F	0.9600
OX82—CX81	1.262(10)	CY74—HY7A	0.9600
OX93—NX91	1.416(10)	CY74—HY7B	0.9600
OX93—CX94	1.440(11)	CY74—HY7C	0.9600
OX91—CX91	1.286(11)	CY72—CY71	1.437(14)
OX92—CX91	1.216(11)	CY72—CY73	1.520(15)
OXA3—NXA1	1.432(10)	CY73—HY7D	0.9600
OXA3—CXA4	1.447(10)	CY73—HY7E	0.9600
OXA1—CXA1	1.293(10)	CY73—HY7F	0.9600
OXA2—CXA1	1.215(10)	CY84—HY8A	0.9600
OY13—CY14	1.425(10)	CY84—HY8B	0.9600
OY13—NY11	1.43(1)	CY84—HY8C	0.9600
OY11—CY11	1.281(10)	CY82—CY81	1.499(13)
OY12—CY11	1.266(9)	CY82—CY83	1.515(14)
OY23—NY21	1.408(10)	CY83—HY8D	0.9600
OY23—CY24	1.422(11)	CY83—HY8E	0.9600
OY21—CY21	1.291(10)	CY83—HY8F	0.9600
OY22—CY21	1.24(1)	CY94—HY9A	0.9600
OY33—NY31	1.399(10)	CY94—HY9B	0.9600
OY33—CY34	1.475(12)	CY94—HY9C	0.9600
OY31—CY31	1.292(11)	CY92—CY91	1.467(14)
OY32—CY31	1.235(10)	CY92—CY93	1.477(16)
OY43—NY41	1.41(1)	CY93—H106	0.9600
OY43—CY44	1.455(10)	CY93—H107	0.9600
OY41—CY41	1.269(10)	CY93—H108	0.9600
OY42—CY41	1.26(1)	CYA4—HYA1	0.9600
OY53—NY51	1.393(10)	CYA4—HYA2	0.9600

OY53—CY54	1.410(11)	CYA4—HYA3	0.9600
OY51—CY51	1.326(11)	CYA2—CYA3	1.481(14)
OY52—CY51	1.236(10)	CYA2—CYA1	1.491(14)
OY63—NY61	1.418(10)	CYA3—HYA4	0.9600
OY63—CY64	1.433(12)	CYA3—HYA5	0.9600
OY61—CY61	1.254(11)	CYA3—HYA6	0.9600
OY62—CY61	1.277(10)	CT12—CT16	1.320(18)
OY73—NY71	1.41(1)	CT12—CT11	1.519(19)
OY73—CY74	1.424(11)	CT12—HT12	0.9300
OY71—CY71	1.367(11)	CT11—CT17	1.322(19)
OY72—CY71	1.219(10)	CT11—CT13	1.403(18)
OY72—Na4 ⁱ	2.332(8)	CT13—CT14	1.344(19)
OY83—NY81	1.388(11)	CT13—HT13	0.9300
OY83—CY84	1.454(12)	CT14—CT15	1.39(2)
OY81—CY81	1.203(11)	CT14—HT14	0.9300
OY82—CY81	1.31(1)	CT15—CT16	1.32(2)
OY93—NY91	1.414(11)	CT15—HT15	0.9300
OY93—CY94	1.452(12)	CT16—HT16	0.9300
OY91—CY91	1.315(11)	CT17—HT1A	0.9600
OY92—CY91	1.240(11)	CT17—HT1B	0.9600
OYA3—NYA1	1.414(10)	CT17—HT1C	0.9600
OYA3—CYA4	1.462(11)	CT21—CT22	1.3900
OYA1—CYA1	1.274(10)	CT21—CT26	1.43(3)
OYA2—CYA1	1.278(10)	CT21—CT27	1.63(2)
OH23—Na4 ⁱ	2.521(8)	CT22—CT23	1.54(4)
NX11—CX13	1.276(14)	CT22—HT22	0.9300
NX21—CX23	1.304(13)	CT23—CT24	1.35(3)
NX31—CX33	1.318(10)	CT23—HT23	0.9300
NX41—CX43	1.292(11)	CT24—CT25	1.49(2)
NX51—CX53	1.306(11)	CT24—HT24	0.9300
NX61—CX63	1.275(10)	CT25—CT26	1.31(3)
NX71—CX72	1.265(10)	CT25—HT25	0.9300
NX81—CX82	1.308(11)	CT26—HT26	0.9300
NX91—CX92	1.278(10)	CT27—HT2A	0.9601
NXA1—CXA2	1.269(10)	CT27—HT2B	0.9601
NY11—CY12	1.295(10)	CT27—HT2C	0.9601
NY21—CY22	1.284(10)	OTH5—CTH4	1.4200(11)
NY31—CY32	1.27(1)	OTH5—CTH1	1.4200
NY41—CY42	1.32(1)	CTH1—CTH	1.4200
NY51—CY52	1.301(11)	CTH1—HTH1	0.9700
NY61—CY62	1.272(10)	CTH1—HTH2	0.9700
NY71—CY72	1.293(10)	CTH—CTH3	1.4200
NY81—CY82	1.307(10)	CTH—HTH3	0.9700
NY91—CY92	1.310(12)	CTH—HTH4	0.9700
NYA1—CYA2	1.294(11)	CTH3—CTH4	1.4200
CX11—CX13	1.496(14)	CTH3—HTH5	0.9700
CX12—CX13	1.479(15)	CTH3—HTH6	0.9700
CX12—HX1A	0.9600	CTH4—HTH7	0.9700
CX12—HX1B	0.9600	CTH4—HTH8	0.9700
CX12—HX1C	0.9600	OTH1—C001	1.4200
CX14—H1	0.9600	OTH1—C004	1.4200
CX14—H2	0.9600	C001—C002	1.4200
CX14—H3	0.9600	C001—H001	0.9700
CX24—HX2A	0.9600	C001—H002	0.9700
CX24—HX2B	0.9600	C002—C003	1.4200
CX24—HX2C	0.9600	C002—H003	0.9700
CX23—CX22	1.469(15)	C002—H004	0.9700
CX23—CX21	1.477(14)	C003—C004	1.420(1)
CX22—HX2D	0.9600	C003—H005	0.9700
CX22—HX2E	0.9600	C003—H006	0.9700
CX22—HX2F	0.9600	C004—H007	0.9700
CX34—HX3A	0.9600	C004—H008	0.9700

CX34—HX3B 0.9600

Atoms 1,2,3	Angle 1,2,3 [°]	Atoms 1,2,3	Angle 1,2,3 [°]
AXB2—Fe1—AXB1	82.8(3)	OX33—CX34—HX3C	109.500
AXB2—Fe1—OX82	95.2(3)	HX3A—CX34—HX3C	109.500
AXB1—Fe1—OX82	176.8(3)	HX3B—CX34—HX3C	109.500
AXB2—Fe1—OXA1	101.3(3)	NX31—CX33—CX31	114.5(8)
AXB1—Fe1—OXA1	89.3(3)	NX31—CX33—CX32	124.5(9)
OX82—Fe1—OXA1	88.7(3)	CX31—CX33—CX32	120.6(9)
AXB2—Fe1—OX52	169.1(3)	CX33—CX32—HX3D	109.500
AXB1—Fe1—OX52	90.3(3)	CX33—CX32—HX3E	109.500
OX82—Fe1—OX52	92.0(3)	HX3D—CX32—HX3E	109.500
OXA1—Fe1—OX52	87.0(3)	CX33—CX32—HX3F	109.500
AXB2—Fe1—OX41	90.2(3)	HX3D—CX32—HX3F	109.500
AXB1—Fe1—OX41	95.8(3)	HX3E—CX32—HX3F	109.500
OX82—Fe1—OX41	86.6(3)	OX31—CX31—OX32	124.2(8)
OXA1—Fe1—OX41	168.0(3)	OX31—CX31—CX33	116.8(8)
OX52—Fe1—OX41	82.1(3)	OX32—CX31—CX33	118.9(8)
AXB2—Fe1—Fe2	42.2(2)	OX43—CX44—HX4A	109.500
AXB1—Fe1—Fe2	40.83(19)	OX43—CX44—HX4B	109.500
OX82—Fe1—Fe2	136.96(19)	HX4A—CX44—HX4B	109.500
OXA1—Fe1—Fe2	94.2(2)	OX43—CX44—HX4C	109.500
OX52—Fe1—Fe2	131.0(2)	HX4A—CX44—HX4C	109.500
OX41—Fe1—Fe2	96.84(19)	HX4B—CX44—HX4C	109.500
AXB1—Fe2—AXB2	82.6(3)	NX41—CX43—CX42	125.6(9)
AXB1—Fe2—OX71	99.8(3)	NX41—CX43—CX41	113.9(8)
AXB2—Fe2—OX71	88.2(3)	CX42—CX43—CX41	120.5(9)
AXB1—Fe2—OX12	97.0(3)	CX43—CX42—HX4D	109.500
AXB2—Fe2—OX12	177.9(3)	CX43—CX42—HX4E	109.500
OX71—Fe2—OX12	89.8(3)	HX4D—CX42—HX4E	109.500
AXB1—Fe2—OX22	169.6(3)	CX43—CX42—HX4F	109.500
AXB2—Fe2—OX22	91.1(3)	HX4D—CX42—HX4F	109.500
OX71—Fe2—OX22	88.2(3)	HX4E—CX42—HX4F	109.500
OX12—Fe2—OX22	89.6(3)	OX41—CX41—OX42	125.5(8)
AXB1—Fe2—OX31	88.6(3)	OX41—CX41—CX43	114.5(8)
AXB2—Fe2—OX31	94.2(3)	OX42—CX41—CX43	119.9(8)
OX71—Fe2—OX31	171.5(3)	OX53—CX54—HX5A	109.500
OX12—Fe2—OX31	87.9(3)	OX53—CX54—HX5B	109.500
OX22—Fe2—OX31	83.6(3)	HX5A—CX54—HX5B	109.500
AXB1—Fe2—Fe1	41.4(2)	OX53—CX54—HX5C	109.500
AXB2—Fe2—Fe1	41.27(19)	HX5A—CX54—HX5C	109.500
OX71—Fe2—Fe1	92.5(2)	HX5B—CX54—HX5C	109.500
OX12—Fe2—Fe1	138.0(2)	NX51—CX53—CX52	127.9(8)
OX22—Fe2—Fe1	132.3(2)	NX51—CX53—CX51	112.5(7)
OX31—Fe2—Fe1	94.7(2)	CX52—CX53—CX51	119.3(9)
AXB2—Fe3—OX42	99.2(3)	CX53—CX52—HX5D	109.500
AXB2—Fe3—OX91	95.8(3)	CX53—CX52—HX5E	109.500
OX42—Fe3—OX91	164.6(3)	HX5D—CX52—HX5E	109.500
AXB2—Fe3—OX81	93.9(3)	CX53—CX52—HX5F	109.500
OX42—Fe3—OX81	94.2(3)	HX5D—CX52—HX5F	109.500
OX91—Fe3—OX81	88.4(3)	HX5E—CX52—HX5F	109.500
AXB2—Fe3—OX21	95.9(3)	OX52—CX51—OX51	125.7(8)
OX42—Fe3—OX21	90.7(3)	OX52—CX51—CX53	118.2(9)
OX91—Fe3—OX21	84.0(3)	OX51—CX51—CX53	116.1(8)
OX81—Fe3—OX21	168.2(3)	OX63—CX64—HX6A	109.500
AXB2—Fe3—NX91	168.2(3)	OX63—CX64—HX6B	109.500
OX42—Fe3—NX91	91.9(3)	HX6A—CX64—HX6B	109.500
OX91—Fe3—NX91	72.9(3)	OX63—CX64—HX6C	109.500
OX81—Fe3—NX91	89.5(3)	HX6A—CX64—HX6C	109.500
OX21—Fe3—NX91	79.6(3)	HX6B—CX64—HX6C	109.500
AXB2—Fe3—Na1	54.8(2)	CX63—CX62—HX6D	109.500

OX42—Fe3—Na1	153.6(2)	CX63—CX62—HX6E	109.500
OX91—Fe3—Na1	41.8(2)	HX6D—CX62—HX6E	109.500
OX81—Fe3—Na1	84.69(19)	CX63—CX62—HX6F	109.500
OX21—Fe3—Na1	95.6(2)	HX6D—CX62—HX6F	109.500
NX91—Fe3—Na1	114.4(2)	HX6E—CX62—HX6F	109.500
AXB1—Fe4—OX32	98.0(3)	NX61—CX63—CX62	126.8(8)
AXB1—Fe4—OX61	92.7(3)	NX61—CX63—CX61	112.7(8)
OX32—Fe4—OX61	167.0(3)	CX62—CX63—CX61	120.5(9)
AXB1—Fe4—OX11	96.3(3)	OX62—CX61—OX61	125.4(8)
OX32—Fe4—OX11	92.2(3)	OX62—CX61—CX63	117.7(8)
OX61—Fe4—OX11	94.0(3)	OX61—CX61—CX63	116.8(8)
AXB1—Fe4—OX51	97.6(3)	OX73—CX74—HX7A	109.500
OX32—Fe4—OX51	87.1(3)	OX73—CX74—HX7B	109.500
OX61—Fe4—OX51	84.2(3)	HX7A—CX74—HX7B	109.500
OX11—Fe4—OX51	166.0(3)	OX73—CX74—HX7C	109.500
AXB1—Fe4—NX61	166.8(3)	HX7A—CX74—HX7C	109.500
OX32—Fe4—NX61	95.2(3)	HX7B—CX74—HX7C	109.500
OX61—Fe4—NX61	74.3(3)	NX71—CX72—CX73	126.1(9)
OX11—Fe4—NX61	83.1(3)	NX71—CX72—CX71	115.8(8)
OX51—Fe4—NX61	83.1(3)	CX73—CX72—CX71	117.8(9)
OYB2—Fe5—OYB1	83.2(3)	CX72—CX73—HX7D	109.500
OYB2—Fe5—OY51	99.4(3)	CX72—CX73—HX7E	109.500
OYB1—Fe5—OY51	90.6(3)	HX7D—CX73—HX7E	109.500
OYB2—Fe5—OY91	97.9(3)	CX72—CX73—HX7F	109.500
OYB1—Fe5—OY91	178.7(3)	HX7D—CX73—HX7F	109.500
OY51—Fe5—OY91	88.5(3)	HX7E—CX73—HX7F	109.500
OYB2—Fe5—OYA1	169.5(3)	OX72—CX71—OX71	125.3(8)
OYB1—Fe5—OYA1	87.5(3)	OX72—CX71—CX72	118.2(8)
OY51—Fe5—OYA1	85.7(3)	OX71—CX71—CX72	116.5(8)
OY91—Fe5—OYA1	91.4(3)	OX83—CX84—HX8A	109.500
OYB2—Fe5—OY22	91.9(3)	OX83—CX84—HX8B	109.500
OYB1—Fe5—OY22	94.5(3)	HX8A—CX84—HX8B	109.500
OY51—Fe5—OY22	168.1(3)	OX83—CX84—HX8C	109.500
OY91—Fe5—OY22	86.2(3)	HX8A—CX84—HX8C	109.500
OYA1—Fe5—OY22	83.8(3)	HX8B—CX84—HX8C	109.500
OYB2—Fe5—Fe6	42.4(2)	NX81—CX82—CX83	128.9(9)
OYB1—Fe5—Fe6	40.92(19)	NX81—CX82—CX81	112.8(8)
OY51—Fe5—Fe6	94.6(2)	CX83—CX82—CX81	118.2(9)
OY91—Fe5—Fe6	140.2(2)	CX82—CX83—HX8D	109.500
OYA1—Fe5—Fe6	128.4(2)	CX82—CX83—HX8E	109.500
OY22—Fe5—Fe6	96.33(18)	HX8D—CX83—HX8E	109.500
OYB1—Fe6—OY61	96.4(3)	CX82—CX83—HX8F	109.500
OYB1—Fe6—OYB2	82.1(3)	HX8D—CX83—HX8F	109.500
OY61—Fe6—OYB2	175.3(3)	HX8E—CX83—HX8F	109.500
OYB1—Fe6—OY41	100.1(3)	OX82—CX81—OX81	124.7(8)
OY61—Fe6—OY41	86.7(3)	OX82—CX81—CX82	120.3(8)
OYB2—Fe6—OY41	89.2(3)	OX81—CX81—CX82	115.0(8)
OYB1—Fe6—OY12	90.7(3)	OX93—CX94—HX9A	109.500
OY61—Fe6—OY12	87.7(3)	OX93—CX94—HX9B	109.500
OYB2—Fe6—OY12	96.8(3)	HX9A—CX94—HX9B	109.500
OY41—Fe6—OY12	168.3(3)	OX93—CX94—HX9C	109.500
OYB1—Fe6—OY82	167.4(3)	HX9A—CX94—HX9C	109.500
OY61—Fe6—OY82	93.6(3)	HX9B—CX94—HX9C	109.500
OYB2—Fe6—OY82	88.5(3)	NX91—CX92—CX93	125.3(8)
OY41—Fe6—OY82	88.1(3)	NX91—CX92—CX91	112.9(8)
OY12—Fe6—OY82	82.1(3)	CX93—CX92—CX91	121.7(9)
OYB1—Fe6—Fe5	41.9(2)	CX92—CX93—HX9D	109.500
OY61—Fe6—Fe5	137.8(2)	CX92—CX93—HX9E	109.500
OYB2—Fe6—Fe5	40.3(2)	HX9D—CX93—HX9E	109.500
OY41—Fe6—Fe5	94.0(2)	CX92—CX93—HX9F	109.500
OY12—Fe6—Fe5	97.0(2)	HX9D—CX93—HX9F	109.500
OY82—Fe6—Fe5	128.6(2)	HX9E—CX93—HX9F	109.500

OYB1—Fe7—OY11	98.1(3)	OX92—CX91—OX91	125.4(9)
OYB1—Fe7—OYA2	96.2(3)	OX92—CX91—CX92	118.4(9)
OY11—Fe7—OYA2	92.8(3)	OX91—CX91—CX92	116.1(8)
OYB1—Fe7—OY71	93.2(3)	OXA3—CXA4—HXA1	109.500
OY11—Fe7—OY71	168.0(3)	OXA3—CXA4—HXA2	109.500
OYA2—Fe7—OY71	90.2(3)	HXA1—CXA4—HXA2	109.500
OYB1—Fe7—OY62	97.4(3)	OXA3—CXA4—HXA3	109.500
OY11—Fe7—OY62	89.9(3)	HXA1—CXA4—HXA3	109.500
OYA2—Fe7—OY62	165.6(3)	HXA2—CXA4—HXA3	109.500
OY71—Fe7—OY62	84.4(3)	NXA1—CXA2—CXA3	124.5(8)
OYB1—Fe7—NY71	166.8(3)	NXA1—CXA2—CXA1	116.1(7)
OY11—Fe7—NY71	94.7(3)	CXA3—CXA2—CXA1	119.4(9)
OYA2—Fe7—NY71	79.7(3)	CXA2—CXA3—HXA4	109.500
OY71—Fe7—NY71	74.4(3)	CXA2—CXA3—HXA5	109.500
OY62—Fe7—NY71	86.0(3)	HXA4—CXA3—HXA5	109.500
OYB2—Fe8—OY21	96.9(3)	CXA2—CXA3—HXA6	109.500
OYB2—Fe8—OY81	96.9(3)	HXA4—CXA3—HXA6	109.500
OY21—Fe8—OY81	87.3(3)	HXA5—CXA3—HXA6	109.500
OYB2—Fe8—OY31	93.5(3)	OXA2—CXA1—OXA1	127.9(8)
OY21—Fe8—OY31	169.6(3)	OXA2—CXA1—CXA2	118.0(8)
OY81—Fe8—OY31	91.3(3)	OXA1—CXA1—CXA2	114.0(8)
OYB2—Fe8—OY92	100.7(3)	OY13—CY14—HY1A	109.500
OY21—Fe8—OY92	87.5(3)	OY13—CY14—HY1B	109.500
OY81—Fe8—OY92	162.1(3)	HY1A—CY14—HY1B	109.500
OY31—Fe8—OY92	90.8(3)	OY13—CY14—HY1C	109.500
OYB2—Fe8—NY31	166.9(3)	HY1A—CY14—HY1C	109.500
OY21—Fe8—NY31	95.5(3)	HY1B—CY14—HY1C	109.500
OY81—Fe8—NY31	79.8(3)	NY11—CY12—CY13	129.5(9)
OY31—Fe8—NY31	74.1(3)	NY11—CY12—CY11	112.5(8)
OY92—Fe8—NY31	83.7(3)	CY13—CY12—CY11	117.9(9)
OY32—Na1—OXA2	94.5(3)	CY12—CY13—HY1D	109.500
OY32—Na1—OX71	163.7(3)	CY12—CY13—HY1E	109.500
OXA2—Na1—OX71	89.2(3)	HY1D—CY13—HY1E	109.500
OY32—Na1—OX91	81.5(3)	CY12—CY13—HY1F	109.500
OXA2—Na1—OX91	103.8(3)	HY1D—CY13—HY1F	109.500
OX71—Na1—OX91	113.0(3)	HY1E—CY13—HY1F	109.500
OY32—Na1—OH24	81.1(3)	OY12—CY11—OY11	124.3(8)
OXA2—Na1—OH24	175.5(3)	OY12—CY11—CY12	116.0(8)
OX71—Na1—OH24	94.9(3)	OY11—CY11—CY12	119.6(8)
OX91—Na1—OH24	76.4(2)	OY23—CY24—HY2A	109.500
OY32—Na1—NX71	101.1(3)	OY23—CY24—HY2B	109.500
OXA2—Na1—NX71	81.8(3)	HY2A—CY24—HY2B	109.500
OX71—Na1—NX71	63.7(3)	OY23—CY24—HY2C	109.500
OX91—Na1—NX71	173.7(3)	HY2A—CY24—HY2C	109.500
OH24—Na1—NX71	98.2(3)	HY2B—CY24—HY2C	109.500
OY32—Na1—OXB2	135.5(3)	NY21—CY22—CY21	113.1(8)
OXA2—Na1—OXB2	71.9(2)	NY21—CY22—CY23	127.1(8)
OX71—Na1—OXB2	60.6(2)	CY21—CY22—CY23	119.8(9)
OX91—Na1—OXB2	62.3(2)	CY22—CY23—HY2D	109.500
OH24—Na1—OXB2	111.8(2)	CY22—CY23—HY2E	109.500
NX71—Na1—OXB2	117.7(3)	HY2D—CY23—HY2E	109.500
OY32—Na1—Fe3	108.4(2)	CY22—CY23—HY2F	109.500
OXA2—Na1—Fe3	83.92(18)	HY2D—CY23—HY2F	109.500
OX71—Na1—Fe3	87.72(18)	HY2E—CY23—HY2F	109.500
OX91—Na1—Fe3	32.37(17)	OY22—CY21—OY21	125.5(8)
OH24—Na1—Fe3	98.20(19)	OY22—CY21—CY22	117.6(8)
NX71—Na1—Fe3	148.0(2)	OY21—CY21—CY22	116.9(8)
OXB2—Na1—Fe3	30.37(13)	OY33—CY34—HY3A	109.500
OY32—Na1—Na3	68.2(2)	OY33—CY34—HY3B	109.500
OXA2—Na1—Na3	145.1(2)	HY3A—CY34—HY3B	109.500
OX71—Na1—Na3	100.1(2)	OY33—CY34—HY3C	109.500
OX91—Na1—Na3	103.2(2)	HY3A—CY34—HY3C	109.500

OH24—Na1—Na3	32.00(17)	HY3B—CY34—HY3C	109.500
NX71—Na1—Na3	72.8(2)	NY31—CY32—CY33	125.9(9)
OXB2—Na1—Na3	141.45(19)	NY31—CY32—CY31	113.7(9)
Fe3—Na1—Na3	129.63(13)	CY33—CY32—CY31	120.5(9)
OH23—Na2—OY42	142.5(3)	CY32—CY33—HY3D	109.500
OH23—Na2—OY51	118.1(3)	CY32—CY33—HY3E	109.500
OY42—Na2—OY51	93.2(3)	HY3D—CY33—HY3E	109.500
OH23—Na2—OY71	81.5(3)	CY32—CY33—HY3F	109.500
OY42—Na2—OY71	96.1(3)	HY3D—CY33—HY3F	109.500
OY51—Na2—OY71	127.5(3)	HY3E—CY33—HY3F	109.500
OH23—Na2—OYB1	134.3(3)	OY32—CY31—OY31	125.0(8)
OY42—Na2—OYB1	75.1(3)	OY32—CY31—CY32	118.1(9)
OY51—Na2—OYB1	66.9(2)	OY31—CY31—CY32	116.6(8)
OY71—Na2—OYB1	66.0(2)	OY43—CY44—HY4A	109.500
OH23—Na2—NY51	86.9(3)	OY43—CY44—HY4B	109.500
OY42—Na2—NY51	91.1(3)	HY4A—CY44—HY4B	109.500
OY51—Na2—NY51	61.5(3)	OY43—CY44—HY4C	109.500
OY71—Na2—NY51	167.9(3)	HY4A—CY44—HY4C	109.500
OYB1—Na2—NY51	125.5(3)	HY4B—CY44—HY4C	109.500
OH23—Na2—Na4 ⁱ	33.10(18)	NY41—CY42—CY41	114.4(8)
OY42—Na2—Na4 ⁱ	111.5(2)	NY41—CY42—CY43	126.1(9)
OY51—Na2—Na4 ⁱ	150.2(2)	CY41—CY42—CY43	119.5(10)
OY71—Na2—Na4 ⁱ	68.09(19)	CY42—CY43—HY4D	109.500
OYB1—Na2—Na4 ⁱ	134.1(2)	CY42—CY43—HY4E	109.500
NY51—Na2—Na4 ⁱ	100.2(2)	HY4D—CY43—HY4E	109.500
OY52—Na3—OH24	141.5(3)	CY42—CY43—HY4F	109.500
OY52—Na3—OY41	92.0(3)	HY4D—CY43—HY4F	109.500
OH24—Na3—OY41	120.8(3)	HY4E—CY43—HY4F	109.500
OY52—Na3—OY31	92.8(3)	OY42—CY41—OY41	124.9(8)
OH24—Na3—OY31	82.5(3)	OY42—CY41—CY42	115.9(9)
OY41—Na3—OY31	128.4(3)	OY41—CY41—CY42	118.8(8)
OY52—Na3—OYB2	74.4(3)	OY53—CY54—HY5A	109.500
OH24—Na3—OYB2	134.7(3)	OY53—CY54—HY5B	109.500
OY41—Na3—OYB2	66.5(2)	HY5A—CY54—HY5B	109.500
OY31—Na3—OYB2	65.6(2)	OY53—CY54—HY5C	109.500
OY52—Na3—NY41	94.0(3)	HY5A—CY54—HY5C	109.500
OH24—Na3—NY41	86.9(3)	HY5B—CY54—HY5C	109.500
OY41—Na3—NY41	59.9(3)	NY51—CY52—CY51	115.8(9)
OY31—Na3—NY41	169.0(3)	NY51—CY52—CY53	125.0(9)
OYB2—Na3—NY41	124.6(3)	CY51—CY52—CY53	119.1(10)
OY52—Na3—CY51	19.79(19)	CY52—CY53—HY5D	109.500
OH24—Na3—CY51	153.9(3)	CY52—CY53—HY5E	109.500
OY41—Na3—CY51	72.50(19)	HY5D—CY53—HY5E	109.500
OY31—Na3—CY51	107.4(2)	CY52—CY53—HY5F	109.500
OYB2—Na3—CY51	70.10(19)	HY5D—CY53—HY5F	109.500
NY41—Na3—CY51	81.4(2)	HY5E—CY53—HY5F	109.500
OY52—Na3—Na1	107.3(2)	OY52—CY51—OY51	123.8(8)
OH24—Na3—Na1	35.54(19)	OY52—CY51—CY52	119.5(9)
OY41—Na3—Na1	154.1(2)	OY51—CY51—CY52	116.7(8)
OY31—Na3—Na1	69.03(19)	OY52—CY51—Na3	38.5(3)
OYB2—Na3—Na1	134.7(2)	OY51—CY51—Na3	108.0(5)
NY41—Na3—Na1	100.7(2)	CY52—CY51—Na3	120.4(7)
CY51—Na3—Na1	124.61(19)	OY63—CY64—HY6A	109.500
OY72 ⁱⁱ —Na4—OX61	86.3(3)	OY63—CY64—HY6B	109.500
OY72 ⁱⁱ —Na4—OX72	98.3(3)	HY6A—CY64—HY6B	109.500
OX61—Na4—OX72	97.3(3)	OY63—CY64—HY6C	109.500
OY72 ⁱⁱ —Na4—OXA1	159.8(3)	HY6A—CY64—HY6C	109.500
OX61—Na4—OXA1	112.3(3)	HY6B—CY64—HY6C	109.500
OX72—Na4—OXA1	87.3(3)	NY61—CY62—CY63	127.3(8)
OY72 ⁱⁱ —Na4—OH23 ⁱⁱ	81.4(3)	NY61—CY62—CY61	111.7(8)
OX61—Na4—OH23 ⁱⁱ	79.5(2)	CY63—CY62—CY61	120.7(9)
OX72—Na4—OH23 ⁱⁱ	176.8(3)	CY62—CY63—HY6D	109.500

OXA1—Na4—OH23 ⁱⁱ	94.0(3)	CY62—CY63—HY6E	109.500
OY72 ⁱⁱ —Na4—NXA1	97.7(3)	HY6D—CY63—HY6E	109.500
OX61—Na4—NXA1	171.7(3)	CY62—CY63—HY6F	109.500
OX72—Na4—NXA1	89.3(3)	HY6D—CY63—HY6F	109.500
OXA1—Na4—NXA1	62.8(2)	HY6E—CY63—HY6F	109.500
OH23 ⁱⁱ —Na4—NXA1	93.9(3)	OY61—CY61—OY62	127.5(8)
Fe4—OXB1—Fe2	122.3(4)	OY61—CY61—CY62	118.7(8)
Fe4—OXB1—Fe1	128.2(4)	OY62—CY61—CY62	113.8(8)
Fe2—OXB1—Fe1	97.7(3)	OY73—CY74—HY7A	109.500
Fe3—OXB2—Fe1	122.9(4)	OY73—CY74—HY7B	109.500
Fe3—OXB2—Fe2	128.7(4)	HY7A—CY74—HY7B	109.500
Fe1—OXB2—Fe2	96.6(3)	OY73—CY74—HY7C	109.500
Fe3—OXB2—Na1	94.8(3)	HY7A—CY74—HY7C	109.500
Fe1—OXB2—Na1	118.7(3)	HY7B—CY74—HY7C	109.500
Fe2—OXB2—Na1	92.6(2)	NY71—CY72—CY71	116.2(8)
CX11—OX11—Fe4	134.0(7)	NY71—CY72—CY73	123.2(9)
CX11—OX12—Fe2	129.8(7)	CY71—CY72—CY73	120.5(10)
NX11—OX13—CX14	107.8(9)	CY72—CY73—HY7D	109.500
NX21—OX23—CX24	109.0(8)	CY72—CY73—HY7E	109.500
CX21—OX22—Fe2	127.7(7)	HY7D—CY73—HY7E	109.500
CX21—OX21—Fe3	123.4(6)	CY72—CY73—HY7F	109.500
NX31—OX33—CX34	106.8(7)	HY7D—CY73—HY7F	109.500
CX31—OX32—Fe4	127.6(4)	HY7E—CY73—HY7F	109.500
CX31—OX31—Fe2	137.6(5)	OY72—CY71—OY71	122.3(8)
NX41—OX43—CX44	109.7(7)	OY72—CY71—CY72	122.2(9)
CX41—OX42—Fe3	129.2(4)	OY71—CY71—CY72	115.4(8)
CX41—OX41—Fe1	135.2(5)	OY83—CY84—HY8A	109.500
CX54—OX53—NX51	106.7(6)	OY83—CY84—HY8B	109.500
CX51—OX52—Fe1	128.6(5)	HY8A—CY84—HY8B	109.500
CX51—OX51—Fe4	123.7(4)	OY83—CY84—HY8C	109.500
NX61—OX63—CX64	111.2(6)	HY8A—CY84—HY8C	109.500
CX61—OX61—Fe4	119.2(5)	HY8B—CY84—HY8C	109.500
CX61—OX61—Na4	127.7(5)	NY81—CY82—CY81	116.4(9)
Fe4—OX61—Na4	112.1(3)	NY81—CY82—CY83	127.1(9)
NX71—OX73—CX74	109.1(6)	CY81—CY82—CY83	116.5(9)
CX71—OX71—Fe2	125.4(5)	CY82—CY83—HY8D	109.500
CX71—OX71—Na1	120.8(4)	CY82—CY83—HY8E	109.500
Fe2—OX71—Na1	108.4(3)	HY8D—CY83—HY8E	109.500
CX71—OX72—Na4	116.0(5)	CY82—CY83—HY8F	109.500
NX81—OX83—CX84	104.8(6)	HY8D—CY83—HY8F	109.500
CX81—OX81—Fe3	129.6(4)	HY8E—CY83—HY8F	109.500
CX81—OX82—Fe1	127.8(5)	OY81—CY81—OY82	126.1(8)
NX91—OX93—CX94	111.9(6)	OY81—CY81—CY82	117.3(8)
CX91—OX91—Fe3	121.5(5)	OY82—CY81—CY82	116.6(9)
CX91—OX91—Na1	131.5(5)	OY93—CY94—HY9A	109.500
Fe3—OX91—Na1	105.9(3)	OY93—CY94—HY9B	109.500
NXA1—OXA3—CXA4	109.5(6)	HY9A—CY94—HY9B	109.500
CXA1—OXA1—Fe1	124.8(4)	OY93—CY94—HY9C	109.500
CXA1—OXA1—Na4	123.2(4)	HY9A—CY94—HY9C	109.500
Fe1—OXA1—Na4	108.7(3)	HY9B—CY94—HY9C	109.500
CXA1—OXA2—Na1	119.3(5)	NY91—CY92—CY91	112.3(9)
Fe7—OYB1—Fe6	121.7(4)	NY91—CY92—CY93	125.7(10)
Fe7—OYB1—Fe5	129.6(3)	CY91—CY92—CY93	121.9(10)
Fe6—OYB1—Fe5	97.2(3)	CY92—CY93—H106	109.500
Fe7—OYB1—Na2	95.8(3)	CY92—CY93—H107	109.500
Fe6—OYB1—Na2	120.2(3)	H106—CY93—H107	109.500
Fe5—OYB1—Na2	89.7(2)	CY92—CY93—H108	109.500
Fe8—OYB2—Fe5	120.2(4)	H106—CY93—H108	109.500
Fe8—OYB2—Fe6	128.6(4)	H107—CY93—H108	109.500
Fe5—OYB2—Fe6	97.3(3)	OY92—CY91—OY91	124.4(9)
Fe8—OYB2—Na3	96.6(3)	OY92—CY91—CY92	121.8(10)
Fe5—OYB2—Na3	122.6(3)	OY91—CY91—CY92	113.7(8)

Fe6—OYB2—Na3	90.0(3)	OYA3—CYA4—HYA1	109.500
CY14—OY13—NY11	107.4(6)	OYA3—CYA4—HYA2	109.500
CY11—OY11—Fe7	128.6(5)	HYA1—CYA4—HYA2	109.500
CY11—OY12—Fe6	137.2(5)	OYA3—CYA4—HYA3	109.500
NY21—OY23—CY24	109.6(6)	HYA1—CYA4—HYA3	109.500
CY21—OY21—Fe8	128.0(5)	HYA2—CYA4—HYA3	109.500
CY21—OY22—Fe5	134.3(5)	NYA1—CYA2—CYA3	127.7(9)
NY31—OY33—CY34	110.7(6)	NYA1—CYA2—CYA1	113.7(8)
CY31—OY31—Fe8	121.8(4)	CYA3—CYA2—CYA1	118.4(9)
CY31—OY31—Na3	132.8(4)	CYA2—CYA3—HYA4	109.500
Fe8—OY31—Na3	103.1(3)	CYA2—CYA3—HYA5	109.500
CY31—OY32—Na1	138.7(5)	HYA4—CYA3—HYA5	109.500
NY41—OY43—CY44	107.6(6)	CYA2—CYA3—HYA6	109.500
CY41—OY41—Fe6	127.8(5)	HYA4—CYA3—HYA6	109.500
CY41—OY41—Na3	126.7(5)	HYA5—CYA3—HYA6	109.500
Fe6—OY41—Na3	102.2(3)	OYA1—CYA1—OYA2	124.0(8)
CY41—OY42—Na2	124.8(5)	OYA1—CYA1—CYA2	116.3(8)
NY51—OY53—CY54	107.4(6)	OYA2—CYA1—CYA2	119.6(8)
CY51—OY51—Fe5	128.2(4)	CT16—CT12—CT11	120.6(16)
CY51—OY51—Na2	122.3(4)	CT16—CT12—HT12	119.000
Fe5—OY51—Na2	102.1(3)	CT11—CT12—HT12	120.500
CY51—OY52—Na3	121.7(5)	CT17—CT11—CT12	125.2(17)
NY61—OY63—CY64	107.2(6)	CT17—CT11—CT13	127.5(17)
CY61—OY61—Fe6	130.7(5)	CT12—CT11—CT13	107.3(13)
CY61—OY62—Fe7	128.1(5)	CT14—CT13—CT11	128.9(17)
NY71—OY73—CY74	110.9(6)	CT14—CT13—HT13	115.800
CY71—OY71—Fe7	119.6(4)	CT11—CT13—HT13	115.300
CY71—OY71—Na2	135.7(4)	CT15—CT14—CT13	120.(2)
Fe7—OY71—Na2	104.7(3)	CT15—CT14—HT14	120.200
CY71—OY72—Na4 ⁱ	141.6(5)	CT13—CT14—HT14	119.500
NY81—OY83—CY84	106.9(8)	CT14—CT15—CT16	114.(2)
CY81—OY81—Fe8	130.5(5)	CT14—CT15—HT15	121.900
CY81—OY82—Fe6	126.4(4)	CT16—CT15—HT15	123.800
NY91—OY93—CY94	108.5(7)	CT15—CT16—CT12	128.7(19)
CY91—OY91—Fe5	129.8(5)	CT15—CT16—HT16	114.700
CY91—OY92—Fe8	133.2(5)	CT12—CT16—HT16	116.600
NYA1—OYA3—CYA4	106.8(6)	CT11—CT17—HT1A	110.100
CYA1—OYA1—Fe5	125.8(4)	CT11—CT17—HT1B	109.100
CYA1—OYA2—Fe7	128.3(5)	HT1A—CT17—HT1B	109.500
Na2—OH23—Na4 ⁱ	117.5(3)	CT11—CT17—HT1C	109.200
Na3—OH24—Na1	112.5(3)	HT1A—CT17—HT1C	109.500
CX13—NX11—OX13	109.5(9)	HT1B—CT17—HT1C	109.500
CX23—NX21—OX23	110.3(8)	CT22—CT21—CT26	128.(3)
CX33—NX31—OX33	109.6(8)	CT22—CT21—CT27	120.(2)
CX43—NX41—OX43	110.8(8)	CT26—CT21—CT27	112.(2)
CX53—NX51—OX53	110.2(7)	CT23—CT22—CT21	112.(3)
CX63—NX61—OX63	110.6(7)	CT23—CT22—HT22	124.100
CX63—NX61—Fe4	113.1(5)	CT21—CT22—HT22	123.800
OX63—NX61—Fe4	135.5(6)	CT22—CT23—CT24	126.(3)
CX72—NX71—OX73	109.5(6)	CT22—CT23—HT23	117.000
CX72—NX71—Na1	118.3(5)	CT24—CT23—HT23	116.600
OX73—NX71—Na1	132.0(6)	CT23—CT24—CT25	109.(2)
CX82—NX81—OX83	106.7(7)	CT23—CT24—HT24	125.700
CX92—NX91—OX93	111.1(7)	CT25—CT24—HT24	125.500
CX92—NX91—Fe3	111.9(5)	CT24—CT25—CT26	134.(3)
OX93—NX91—Fe3	133.7(6)	CT24—CT25—HT25	112.900
CXA2—NXA1—OXA3	109.5(6)	CT26—CT25—HT25	112.800
CXA2—NXA1—Na4	118.0(5)	CT25—CT26—CT21	111.(3)
OXA3—NXA1—Na4	132.2(6)	CT25—CT26—HT26	124.800
CY12—NY11—OY13	108.1(7)	CT21—CT26—HT26	124.300
CY22—NY21—OY23	111.5(7)	CT21—CT27—HT2A	109.500
CY32—NY31—OY33	111.6(7)	CT21—CT27—HT2B	109.500

CY32—NY31—Fe8	113.0(5)	HT2A—CT27—HT2B	109.500
OY33—NY31—Fe8	134.2(6)	CT21—CT27—HT2C	109.400
CY42—NY41—OY43	109.9(7)	HT2A—CT27—HT2C	109.500
CY42—NY41—Na3	110.7(5)	HT2B—CT27—HT2C	109.500
OY43—NY41—Na3	137.2(6)	CTH4—OTH5—CTH1	108.000
CY52—NY51—OY53	111.1(7)	CTH—CTH1—OTH5	108.00(7)
CY52—NY51—Na2	110.7(5)	CTH—CTH1—HTH1	110.100
OY53—NY51—Na2	134.8(6)	OTH5—CTH1—HTH1	110.100
CY62—NY61—OY63	109.0(7)	CTH—CTH1—HTH2	110.100
CY72—NY71—OY73	112.3(7)	OTH5—CTH1—HTH2	110.100
CY72—NY71—Fe7	113.1(5)	HTH1—CTH1—HTH2	108.400
OY73—NY71—Fe7	134.6(6)	CTH1—CTH—CTH3	108.00(9)
CY82—NY81—OY83	109.5(8)	CTH1—CTH—HTH3	110.100
CY92—NY91—OY93	110.1(7)	CTH3—CTH—HTH3	110.100
CYA2—NYA1—OYA3	109.3(7)	CTH1—CTH—HTH4	110.100
OX11—CX11—OX12	123.3(10)	CTH3—CTH—HTH4	110.100
OX11—CX11—CX13	117.6(9)	HTH3—CTH—HTH4	108.400
OX12—CX11—CX13	118.9(10)	CTH4—CTH3—CTH	108.00(7)
CX13—CX12—HX1A	109.500	CTH4—CTH3—HTH5	110.100
CX13—CX12—HX1B	109.500	CTH—CTH3—HTH5	110.100
HX1A—CX12—HX1B	109.500	CTH4—CTH3—HTH6	110.100
CX13—CX12—HX1C	109.500	CTH—CTH3—HTH6	110.100
HX1A—CX12—HX1C	109.500	HTH5—CTH3—HTH6	108.400
HX1B—CX12—HX1C	109.500	CTH3—CTH4—OTH5	108.000
NX11—CX13—CX12	128.4(11)	CTH3—CTH4—HTH7	110.100
NX11—CX13—CX11	114.5(10)	OTH5—CTH4—HTH7	110.100
CX12—CX13—CX11	117.1(11)	CTH3—CTH4—HTH8	110.100
OX13—CX14—H1	109.500	OTH5—CTH4—HTH8	110.100
OX13—CX14—H2	109.500	HTH7—CTH4—HTH8	108.400
H1—CX14—H2	109.500	C001—OTH1—C004	108.000
OX13—CX14—H3	109.500	OTH1—C001—C002	108.000
H1—CX14—H3	109.500	OTH1—C001—H001	110.100
H2—CX14—H3	109.500	C002—C001—H001	110.100
OX23—CX24—HX2A	109.500	OTH1—C001—H002	110.100
OX23—CX24—HX2B	109.500	C002—C001—H002	110.100
HX2A—CX24—HX2B	109.500	H001—C001—H002	108.400
OX23—CX24—HX2C	109.500	C003—C002—C001	108.000
HX2A—CX24—HX2C	109.500	C003—C002—H003	110.100
HX2B—CX24—HX2C	109.500	C001—C002—H003	110.100
NX21—CX23—CX22	125.4(10)	C003—C002—H004	110.100
NX21—CX23—CX21	113.1(9)	C001—C002—H004	110.100
CX22—CX23—CX21	121.5(10)	H003—C002—H004	108.400
CX23—CX22—HX2D	109.500	C004—C003—C002	108.000
CX23—CX22—HX2E	109.500	C004—C003—H005	110.100
HX2D—CX22—HX2E	109.500	C002—C003—H005	110.100
CX23—CX22—HX2F	109.500	C004—C003—H006	110.100
HX2D—CX22—HX2F	109.500	C002—C003—H006	110.100
HX2E—CX22—HX2F	109.500	H005—C003—H006	108.400
OX22—CX21—OX21	125.(1)	C003—C004—OTH1	108.000
OX22—CX21—CX23	120.4(10)	C003—C004—H007	110.100
OX21—CX21—CX23	114.5(10)	OTH1—C004—H007	110.100
OX33—CX34—HX3A	109.500	C003—C004—H008	110.100
OX33—CX34—HX3B	109.500	OTH1—C004—H008	110.100
HX3A—CX34—HX3B	109.500	H007—C004—H008	108.400

(i) 1-x, -y, -0.5+z; (ii) 1-x, -y, 0.5+z.