

## SUPPLEMENTAL TABLE

Index	Site	$x$	$y$	$z$	
1	Fe (3)	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0.9595	
2	Fe (3)	0.8333	0.1667	0.9595	
3	Fe (3)	0.8333	$\frac{2}{3}$	0.9595	
4	Fe (3)	$\frac{1}{3}$	0.1667	0.9595	
5	Fe (2)	0.1667	0.8333	0.85	
6	Fe (2)	$\frac{2}{3}$	0.8333	0.85	
7	Fe (2)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0.85	
8	Fe (2)	0.1667	$\frac{1}{3}$	0.85	
9	O (16)	0.8333	0.1667	0.75	
10	O (15)	$\frac{1}{3}$	0.1667	0.75	
11	O (14)	0.8333	$\frac{2}{3}$	0.75	
12	O (13)	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0.75	
13	Fe (1)	$\frac{2}{3}$	0.8333	0.65	
14	Fe (1)	0.1667	$\frac{1}{3}$	0.65	
15	Fe (1)	0.1667	0.8333	0.65	
16	Fe (1)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0.65	
17	O (12)	0	0	0.5	
18	O (11)	0.5	0	0.5	
19	O (10)	0	0.5	0.5	
20	O (9)	0.5	0.5	0.5	
21	Fe (3)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0.4595	
22	Fe (3)	0.1667	$\frac{1}{3}$	0.4595	
23	Fe (3)	0.1667	0.8333	0.4595	
24	Fe (3)	$\frac{2}{3}$	0.8333	0.4594	
25	Fe (2)	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0.35	
26	Fe (2)	0.8333	0.1667	0.35	
27	Fe (2)	$\frac{1}{3}$	0.1667	0.35	
28	Fe (2)	0.8333	$\frac{2}{3}$	0.35	
29	O (8)	0.1667	0.8333	0.25	
30	O (7)	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	0.25	
31	O (6)	$\frac{2}{3}$	0.8333	0.25	
32	O (5)	0.1667	$\frac{1}{3}$	0.25	
33	Fe (1)	0.8333	$\frac{2}{3}$	0.15	
34	Fe (1)	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0.15	
35	Fe (1)	0.8333	0.1667	0.15	
36	Fe (1)	$\frac{1}{3}$	0.1667	0.15	
37	O (4)	0.5	0.5	0	
38	O (3)	0	0	0	
39	O (2)	0	0.5	0	
40	O (1)	0.5	0	0	

**Table S1.** Atomic coordinates of *hybrid* model in a P1 symmetry unit cell.  $a = b = 5.92 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.3 \text{ \AA}$ .  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ .