

Supplement

Table S1 Atomic fractional coordinates of Z1-Z4 samples.

	Z1				Z2			
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	OCC	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	OCC
Fe1	0	0	0	0.08333	0	0	0	0.08333
Fe2	0.33333	0.66667	0.03384	0.16667	0.33333	0.66667	0.03419	0.16667
Fe3/ Co1	0	0	0.0535	0.16667/0	0	0	0.05216	0.15833/0.00833
Fe4/ Co2	0.50845	0.01695	0.09077	0.475/0.025	0.51341	0.0269	0.09036	0.45/0.05
Fe5/ Zn1	0	0	0.12577	0.1/0.06667	0	0	0.12527	0.11667/0.05
Fe6	0.33333	0.66667	0.13691	0.16667	0.33333	0.66667	0.13596	0.16667
Fe7/ Zn2	0.66667	0.33333	0.15284	0.1/0.06667	0.66667	0.33333	0.1529	0.11667/0.05
Fe8	0.16149	-0.16149	0.18897	0.5	0.15548	-0.15548	0.18855	0.5
Fe9/ Co3	0.66667	0.33333	0.22368	0.15833/0.00833	0.66667	0.33333	0.2223	0.15833/0.00833
Fe10	0.33333	0.66667	0.25	0.08333	0.33333	0.66667	0.25	0.08333
Ba1	0	0	0.25	0.08333	0	0	0.25	0.08333
Ba2	0.66667	0.33333	0.02814	0.16667	0.66667	0.33333	0.02794	0.16667
O1	0.17234	-0.17234	0.02537	0.5	0.18134	-0.18134	0.02589	0.5
O2	-0.16452	0.16452	0.07036	0.5	-0.16539	0.16539	0.0689	0.5
O3	0.33333	0.66667	0.03384	0.16667	0.33333	0.66667	0.03419	0.16667
O4	0.18249	-0.18249	0.11553	0.5	0.18257	-0.18257	0.11671	0.5
O5	0.66667	0.33333	0.11817	0.16667	0.66667	0.33333	0.10506	0.16667
O6	0.47019	-0.05963	0.1558	0.5	0.43816	-0.12376	0.15266	0.5
O7	0	0	0.1753	0.16667	0	0	0.17516	0.16667
O8	-0.22225	0.22225	0.20288	0.5	-0.22893	0.22893	0.20028	0.5
O9	0.33333	0.66667	0.20499	0.16667	0.33333	0.66667	0.20417	0.16667
O10	0	0.5	0.25	0.25	0	0.5	0.25	0.25

	Z1				Z2			
	x	y	z	OCC	x	y	z	OCC
Fe1	0	0	0	0.08333	0	0	0	0.08333
Fe2	0.33333	0.66667	0.03443	0.16667	0.33333	0.66667	0.03443	0.16667
Fe3/ Co1	0	0	0.05457	0.14167/0.025	0	0	0.05317	0.13333/0.03333
Fe4/ Co2	0.50698	0.014	0.09057	0.43333/0.06667	0.51028	0.02061	0.09095	0.40833/0.09167
Fe5/ Zn1	0	0	0.12426	0.13333/0.03333	0	0	0.12531	0.15/0.01667
Fe6	0.33333	0.66667	0.13852	0.16667	0.33333	0.66667	0.13692	0.16667
Fe7/ Zn2	0.66667	0.33333	0.15231	0.13333/0.03333	0.66667	0.33333	0.15247	0.15/0.01667
Fe8	0.16846	-0.16846	0.18863	0.5	0.1676	-0.1676	0.18873	0.5
Fe9/ Co3	0.66667	0.33333	0.22541	0.15833/0.00833	0.66667	0.33333	0.22385	0.15833/0.00833
Fe10	0.33333	0.66667	0.25	0.08333	0.33333	0.66667	0.25	0.08333
Ba1	0	0	0.25	0.08333	0	0	0.25	0.08333
Ba2	0.66667	0.33333	0.02788	0.16667	0.66667	0.33333	0.02822	0.16667
O1	0.15891	-0.15891	0.02367	0.5	0.17414	-0.17414	0.025	0.5
O2	-0.15233	0.15233	0.06369	0.5	-0.1615	0.1615	0.06928	0.5
O3	0.33333	0.66667	0.03443	0.16667	0.33333	0.66667	0.03443	0.16667
O4	0.15762	-0.15762	0.11415	0.5	0.17149	-0.17149	0.11528	0.5
O5	0.66667	0.33333	0.1313	0.16667	0.66667	0.33333	0.11732	0.16667
O6	0.47209	-0.0558	0.15746	0.5	0.47091	-0.05818	0.15432	0.5
O7	0	0	0.16657	0.16667	0	0	0.17347	0.16667
O8	-0.11902	0.11902	0.2048	0.5	-0.21997	0.21997	0.20172	0.5
O9	0.33333	0.66667	0.202	0.16667	0.33333	0.66667	0.20392	0.16667
O10	0	0.5	0.25	0.25	0	0.5	0.25	0.25