
AM-94-547

Cation partitioning and substitution mechanisms in 1M phlogopite: A
chemical study

Giuseppe Cruciani, Pier Francesco Zanazzi

For deposit: Tables 3-5, 9

American Mineralogist, 79, 3-4, 289-301.

Table 3. Crystallographic coordinates, equivalent isotropic U (\AA^2) and anisotropic thermal parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^4$) for *IM* phlogopite samples. (to be deposited)

Atom	x/a	y/b	z/c	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₁₂	U ₁₃	U ₂₃
Sample 1										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.1 (1)	3.14 (6)	3.25 (7)	2.83 (8)	0.00 (0)	0.43 (5)	0.00 (0)
T	0.5758 (1)	0.1669 (1)	0.2273 (1)	0.9 (0)	0.83 (2)	0.89 (2)	1.12 (3)	0.00 (0)	0.23 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.0 (0)	0.82 (4)	0.79 (4)	1.33 (5)	0.00 (0)	0.37 (3)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8330 (1)	0.5000	1.0 (0)	0.73 (3)	1.00 (3)	1.26 (4)	0.00 (0)	0.20 (2)	0.00 (0)
O(1)	0.8290 (3)	0.2279 (2)	0.1703 (2)	1.9 (1)	1.78 (6)	2.44 (8)	1.66 (8)	-0.60 (5)	0.48 (6)	-0.24 (7)
O(2)	0.5120 (4)	0.0000	0.1709 (2)	2.0 (1)	2.62 (10)	1.44 (9)	1.75 (12)	0.00 (0)	0.05 (9)	0.00 (0)
O(3)	0.6314 (3)	0.1675 (1)	0.3919 (2)	1.4 (1)	1.39 (6)	1.45 (6)	1.28 (7)	0.02 (4)	0.29 (6)	0.03 (5)
O(4)	0.1304 (4)	0.0000	0.3985 (2)	1.5 (1)	1.42 (8)	1.74 (9)	1.32 (11)	0.00 (0)	0.16 (8)	0.00 (0)
Sample 2										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.0 (1)	3.26 (9)	3.24 (9)	2.35 (8)	0.00 (0)	0.39 (6)	0.00 (0)
T	0.5760 (1)	0.1668 (1)	0.2285 (1)	0.8 (0)	0.74 (3)	0.69 (3)	0.98 (3)	0.00 (0)	0.16 (3)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (1)	0.64 (8)	0.53 (8)	1.18 (9)	0.00 (0)	0.20 (6)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8323 (1)	0.5000	0.8 (1)	0.51 (5)	0.78 (6)	1.06 (6)	0.00 (0)	0.12 (4)	0.00 (0)
O(1)	0.8316 (4)	0.2254 (2)	0.1712 (2)	1.8 (1)	1.66 (9)	2.17 (11)	1.47 (9)	-0.51 (8)	0.35 (8)	-0.13 (9)
O(2)	0.5064 (6)	0.0000	0.1709 (3)	1.8 (1)	2.43 (15)	1.25 (13)	1.47 (14)	0.00 (0)	-0.06 (12)	0.00 (0)
O(3)	0.6305 (3)	0.1670 (2)	0.3919 (2)	1.0 (1)	0.93 (8)	0.85 (8)	1.13 (8)	-0.04 (7)	0.17 (6)	-0.05 (7)
O(4)	0.1329 (5)	0.0000	0.3998 (3)	1.1 (1)	1.20 (12)	1.11 (13)	0.87 (13)	0.00 (0)	0.10 (11)	0.00 (0)
Sample 3										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.6 (1)	2.65 (7)	2.83 (8)	2.44 (8)	0.00 (0)	0.42 (6)	0.00 (0)
T	0.5749 (1)	0.1667 (1)	0.2244 (1)	0.8 (0)	0.66 (3)	0.86 (3)	0.83 (3)	0.00 (0)	0.08 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (1)	0.70 (7)	0.73 (8)	1.13 (8)	0.00 (0)	0.25 (6)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8347 (1)	0.5000	0.9 (0)	0.58 (5)	1.22 (5)	1.06 (6)	0.00 (0)	0.17 (4)	0.00 (0)
O(1)	0.8199 (3)	0.2355 (2)	0.1658 (2)	1.8 (1)	1.70 (9)	1.90 (11)	1.42 (10)	-0.62 (8)	0.43 (8)	-0.14 (9)
O(2)	0.5256 (6)	0.0000	0.1659 (3)	1.8 (1)	2.42 (14)	1.47 (13)	1.36 (15)	0.00 (0)	-0.13 (12)	0.00 (0)
O(3)	0.6311 (3)	0.1672 (2)	0.3904 (2)	1.0 (1)	0.88 (7)	1.12 (8)	0.91 (8)	-0.01 (7)	0.12 (7)	-0.04 (8)
O(4)	0.1312 (5)	0.0000	0.4004 (4)	0.7 (1)	0.75 (12)	0.82 (11)	0.63 (14)	0.00 (0)	0.26 (11)	0.00 (0)
Sample 4										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.9 (1)	2.96 (11)	2.94 (11)	2.85 (12)	0.00 (0)	0.61 (8)	0.00 (0)

Table 3. (continued)

Sample 5										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.8 (1)	2.86 (7)	2.94 (8)	2.55 (7)	0.00 (0)	0.37 (5)	0.00 (0)
T	0.5754 (1)	0.1669 (1)	0.2265 (1)	0.7 (0)	0.74 (3)	0.68 (3)	0.71 (3)	0.00 (0)	0.06 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (1)	0.69 (6)	0.57 (6)	1.04 (6)	0.00 (0)	0.25 (4)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8351 (1)	0.5000	0.8 (0)	0.55 (4)	0.96 (4)	0.86 (5)	0.00 (0)	0.02 (3)	0.00 (0)
O(1)	0.8291 (3)	0.2265 (2)	0.1693 (2)	1.7 (1)	1.72 (8)	2.16 (9)	1.32 (8)	-0.60 (7)	0.37 (6)	-0.35 (7)
O(2)	0.5095 (5)	0.0000	0.1697 (2)	1.7 (1)	2.53 (12)	1.24 (11)	0.98 (11)	0.00 (0)	-0.26 (9)	0.00 (0)
O(3)	0.6304 (3)	0.1675 (2)	0.3916 (2)	0.9 (1)	1.04 (7)	0.94 (7)	0.78 (7)	0.02 (5)	0.06 (6)	0.04 (6)
O(4)	0.1323 (4)	0.0000	0.3992 (2)	1.0 (1)	0.92 (9)	1.22 (11)	0.79 (11)	0.00 (0)	0.14 (8)	0.00 (0)
Sample 6										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.4 (2)	3.15 (22)	3.25 (23)	3.94 (28)	0.00 (0)	0.63 (18)	0.00 (0)
T	0.5750 (3)	0.1668 (2)	0.2264 (2)	1.1 (1)	0.84 (8)	0.77 (8)	1.64 (10)	0.00 (0)	0.39 (7)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (2)	0.37 (20)	0.49 (21)	1.56 (27)	0.00 (0)	0.18 (17)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8354 (3)	0.5000	0.9 (1)	0.61 (13)	0.81 (14)	1.39 (16)	0.00 (0)	0.33 (11)	0.00 (0)
O(1)	0.8254 (9)	0.2287 (6)	0.1684 (5)	2.0 (3)	2.20 (27)	2.43 (30)	1.60 (25)	-0.57 (22)	0.60 (22)	0.26 (25)
O(2)	0.5126 (14)	0.0000	0.1677 (8)	2.1 (4)	2.26 (38)	1.18 (32)	2.84 (47)	0.00 (0)	0.48 (34)	0.00 (0)
O(3)	0.6306 (8)	0.1676 (5)	0.3915 (5)	1.2 (2)	0.90 (20)	1.09 (22)	1.51 (24)	0.07 (18)	0.29 (18)	-0.03 (21)
O(4)	0.1348 (16)	0.0000	0.4011 (8)	1.4 (4)	0.86 (33)	1.36 (36)	1.86 (50)	0.00 (0)	0.28 (32)	0.00 (0)
Sample 7										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.7 (1)	3.58 (16)	3.82 (16)	3.58 (15)	0.00 (0)	0.50 (11)	0.00 (0)
T	0.5761 (2)	0.1668 (1)	0.2279 (1)	1.0 (0)	0.78 (5)	0.70 (5)	1.45 (5)	0.00 (0)	0.14 (4)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.7 (1)	0.43 (12)	0.41 (11)	1.31 (14)	0.00 (0)	0.17 (11)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8339 (2)	0.5000	0.7 (1)	0.24 (8)	0.68 (8)	1.21 (9)	0.00 (0)	0.12 (7)	0.00 (0)
O(1)	0.8257 (6)	0.2298 (4)	0.1694 (3)	1.9 (2)	1.86 (17)	2.07 (17)	1.82 (15)	-0.46 (13)	0.35 (13)	-0.28 (15)
O(2)	0.5145 (10)	0.0000	0.1687 (5)	1.9 (2)	2.30 (24)	1.36 (20)	1.99 (25)	0.00 (0)	-0.01 (19)	0.00 (0)
O(3)	0.6310 (5)	0.1676 (3)	0.3920 (3)	1.1 (1)	0.81 (13)	0.79 (12)	1.70 (14)	0.00 (11)	0.26 (11)	-0.06 (12)
O(4)	0.1313 (8)	0.0000	0.3984 (5)	1.2 (2)	0.55 (20)	0.73 (18)	2.10 (27)	0.00 (0)	-0.15 (18)	0.00 (0)
Sample 8										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.2 (2)	3.10 (19)	2.96 (19)	3.34 (20)	0.00 (0)	0.36 (16)	0.00 (0)
T	0.5753 (3)	0.1668 (2)	0.2266 (2)	0.9 (1)	0.54 (8)	0.91 (8)	1.33 (7)	0.00 (0)	0.11 (6)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.9 (2)	0.31 (19)	0.65 (20)	1.64 (23)	0.00 (0)	0.12 (16)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8367 (3)	0.5000	1.0 (1)	0.40 (12)	1.19 (13)	1.34 (13)	0.00 (0)	0.18 (9)	0.00 (0)

Table 3. (continued)

Sample 9										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.9 (1)	2.99 (6)	3.03 (6)	2.55 (6)	0.00 (0)	0.46 (4)	0.00 (0)
T	0.5754 (1)	0.1668 (1)	0.2268 (1)	0.7 (0)	0.68 (3)	0.67 (3)	0.78 (3)	0.00 (0)	0.14 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.9 (0)	0.74 (5)	0.71 (5)	1.21 (6)	0.00 (0)	0.31 (4)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8346 (1)	0.5000	1.0 (0)	0.67 (4)	1.16 (4)	1.08 (4)	0.00 (0)	0.18 (3)	0.00 (0)
O(1)	0.8299 (3)	0.2260 (2)	0.1690 (1)	1.7 (1)	1.62 (6)	2.15 (8)	1.29 (7)	-0.51 (5)	0.39 (5)	-0.31 (5)
O(2)	0.5081 (4)	0.0000	0.1693 (2)	1.7 (1)	2.11 (9)	1.28 (9)	1.47 (10)	0.00 (0)	-0.04 (8)	0.00 (0)
O(3)	0.6306 (3)	0.1675 (1)	0.3917 (1)	0.9 (1)	0.91 (5)	0.91 (6)	0.98 (6)	-0.02 (4)	0.21 (5)	0.08 (4)
O(4)	0.1321 (4)	0.0000	0.3994 (2)	1.0 (1)	1.10 (8)	1.06 (8)	0.94 (8)	0.00 (0)	0.05 (7)	0.00 (0)
Sample 10										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.1 (1)	2.89 (7)	2.84 (7)	3.59 (8)	0.00 (0)	0.58 (5)	0.00 (0)
T	0.5751 (1)	0.1669 (1)	0.2258 (1)	1.2 (0)	0.88 (3)	0.91 (3)	1.84 (4)	0.00 (0)	0.22 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.2 (1)	0.88 (6)	0.75 (6)	2.07 (7)	0.00 (0)	0.42 (5)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8358 (1)	0.5000	1.3 (0)	0.68 (4)	1.20 (4)	1.96 (5)	0.00 (0)	0.19 (3)	0.00 (0)
O(1)	0.8305 (3)	0.2259 (2)	0.1687 (2)	2.1 (1)	1.85 (9)	2.24 (10)	2.35 (10)	-0.60 (7)	0.53 (7)	-0.33 (8)
O(2)	0.5082 (5)	0.0000	0.1693 (3)	2.2 (1)	2.47 (13)	1.53 (12)	2.36 (15)	0.00 (0)	-0.07 (11)	0.00 (0)
O(3)	0.6300 (3)	0.1679 (2)	0.3913 (2)	1.4 (1)	1.18 (7)	1.16 (7)	1.91 (9)	-0.01 (6)	0.25 (6)	-0.07 (7)
O(4)	0.1331 (5)	0.0000	0.3999 (3)	1.5 (1)	1.14 (10)	1.48 (11)	1.81 (13)	0.00 (0)	0.27 (10)	0.00 (0)
Sample 11										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.9 (1)	3.15 (7)	2.95 (7)	2.49 (7)	0.00 (0)	0.43 (5)	0.00 (0)
T	0.5756 (1)	0.1668 (1)	0.2271 (1)	0.8 (0)	0.78 (2)	0.69 (3)	0.79 (3)	0.00 (0)	0.11 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.9 (0)	0.82 (5)	0.71 (5)	1.13 (6)	0.00 (0)	0.28 (4)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8345 (1)	0.5000	0.9 (0)	0.73 (4)	1.01 (4)	1.02 (4)	0.00 (0)	0.12 (3)	0.00 (0)
O(1)	0.8307 (3)	0.2254 (2)	0.1698 (2)	1.7 (1)	1.81 (7)	2.15 (8)	1.35 (7)	-0.55 (6)	0.52 (6)	-0.31 (7)
O(2)	0.5069 (4)	0.0000	0.1701 (2)	1.8 (1)	2.45 (11)	1.28 (10)	1.47 (11)	0.00 (0)	-0.07 (9)	0.00 (0)
O(3)	0.6310 (3)	0.1676 (1)	0.3921 (2)	1.0 (1)	1.04 (6)	0.99 (6)	1.02 (7)	-0.02 (5)	0.23 (5)	-0.03 (5)
O(4)	0.1318 (4)	0.0000	0.3994 (2)	1.1 (1)	1.05 (8)	1.30 (9)	0.86 (9)	0.00 (0)	0.16 (8)	0.00 (0)
Sample 12										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.0 (1)	2.89 (12)	2.81 (12)	3.27 (14)	0.00 (0)	0.48 (9)	0.00 (0)
T	0.5746 (2)	0.1670 (1)	0.2251 (1)	0.9 (0)	0.80 (5)	0.76 (5)	1.12 (5)	0.00 (0)	0.20 (4)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.7 (1)	0.62 (9)	0.44 (10)	1.18 (11)	0.00 (0)	0.38 (7)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8373 (2)	0.5000	0.8 (1)	0.46 (6)	1.04 (7)	1.02 (7)	0.00 (0)	0.13 (5)	0.00 (0)

Table 3. (continued)

Sample 14										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.5 (2)	3.35 (20)	4.16 (23)	3.04 (22)	0.00 (0)	0.49 (15)	0.00 (0)
T	0.5750 (3)	0.1666 (2)	0.2263 (2)	1.4 (1)	1.13 (7)	1.85 (8)	1.12 (7)	0.00 (0)	0.25 (6)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.4 (2)	1.03 (17)	1.87 (20)	1.39 (19)	0.00 (0)	0.47 (13)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8362 (3)	0.5000	1.7 (1)	1.27 (12)	2.39 (14)	1.44 (13)	0.00 (0)	0.30 (8)	0.00 (0)
O(1)	0.8234 (8)	0.2311 (6)	0.1687 (4)	2.4 (2)	2.01 (22)	3.66 (29)	1.71 (21)	-0.51 (20)	0.58 (18)	0.08 (23)
O(2)	0.5194 (15)	0.0000	0.1693 (7)	2.9 (3)	4.14 (41)	2.56 (33)	1.87 (36)	0.00 (0)	0.05 (32)	0.00 (0)
O(3)	0.6314 (7)	0.1679 (5)	0.3915 (4)	1.5 (2)	1.18 (18)	1.63 (19)	1.63 (19)	0.10 (16)	0.26 (15)	0.18 (17)
O(4)	0.1302 (14)	0.0000	0.4000 (7)	1.6 (3)	1.06 (27)	2.84 (35)	1.11 (36)	0.00 (0)	0.50 (23)	0.00 (0)
Sample 15										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.1 (2)	3.09 (22)	3.16 (25)	2.83 (24)	0.00 (0)	0.18 (18)	0.00 (0)
T	0.5757 (3)	0.1673 (2)	0.2265 (2)	0.9 (1)	0.89 (8)	0.93 (9)	0.99 (9)	0.00 (0)	0.28 (7)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.9 (2)	0.97 (19)	0.68 (20)	1.21 (23)	0.00 (0)	0.43 (16)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8351 (3)	0.5000	1.4 (1)	1.19 (12)	1.55 (13)	1.50 (14)	0.00 (0)	0.35 (10)	0.00 (0)
O(1)	0.8254 (8)	0.2313 (5)	0.1701 (4)	1.9 (2)	1.59 (21)	2.57 (27)	1.56 (23)	-0.67 (22)	0.37 (18)	-0.26 (24)
O(2)	0.5171 (14)	0.0000	0.1701 (7)	2.4 (4)	3.77 (43)	1.68 (36)	1.49 (38)	0.00 (0)	0.08 (32)	0.00 (0)
O(3)	0.6336 (7)	0.1682 (5)	0.3924 (4)	1.2 (2)	1.43 (22)	1.01 (23)	1.17 (25)	-0.05 (24)	0.35 (19)	0.01 (27)
O(4)	0.1301 (13)	0.0000	0.3974 (9)	1.4 (4)	1.54 (39)	1.69 (42)	0.76 (47)	0.00 (0)	-0.02 (37)	0.00 (0)
Sample 16										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.5 (1)	3.33 (15)	4.09 (17)	2.97 (15)	0.00 (0)	0.61 (11)	0.00 (0)
T	0.5748 (3)	0.1669 (1)	0.2257 (1)	1.6 (1)	1.45 (6)	2.28 (7)	0.99 (6)	0.00 (0)	0.21 (5)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.5 (1)	1.34 (14)	2.12 (16)	1.23 (14)	0.00 (0)	0.43 (10)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8395 (2)	0.5000	1.8 (1)	1.32 (9)	2.80 (11)	1.22 (9)	0.00 (0)	0.14 (6)	0.00 (0)
O(1)	0.8304 (7)	0.2254 (5)	0.1688 (3)	2.5 (2)	2.36 (18)	3.76 (23)	1.61 (17)	-0.37 (17)	0.64 (15)	-0.27 (17)
O(2)	0.5061 (10)	0.0000	0.1697 (5)	2.4 (2)	2.61 (25)	2.83 (27)	1.69 (24)	0.00 (0)	-0.10 (20)	0.00 (0)
O(3)	0.6304 (6)	0.1685 (4)	0.3919 (3)	1.7 (1)	1.72 (16)	2.22 (17)	1.10 (14)	0.05 (13)	0.23 (12)	-0.04 (13)
O(4)	0.1343 (11)	0.0000	0.4012 (5)	1.9 (2)	2.21 (24)	2.71 (28)	0.79 (23)	0.00 (0)	0.23 (21)	0.00 (0)
Sample 17										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.6 (1)	3.60 (9)	3.71 (9)	3.43 (10)	0.00 (0)	0.48 (7)	0.00 (0)
T	0.5756 (1)	0.1669 (1)	0.2269 (1)	1.3 (0)	1.08 (3)	1.02 (3)	1.65 (4)	0.00 (0)	0.19 (3)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.2 (1)	1.04 (8)	0.95 (8)	1.69 (10)	0.00 (0)	0.28 (6)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8349 (1)	0.5000	1.3 (0)	0.80 (5)	1.41 (6)	1.62 (7)	0.00 (0)	0.11 (4)	0.00 (0)

Table 3. (continued)

Sample 18										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.3 (1)	3.43 (9)	3.24 (9)	3.41 (10)	0.00 (0)	0.69 (7)	0.00 (0)
T	0.5754 (1)	0.1668 (1)	0.2264 (1)	1.0 (0)	0.81 (3)	0.73 (3)	1.34 (4)	0.00 (0)	0.24 (3)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.1 (1)	0.94 (8)	0.72 (7)	1.71 (9)	0.00 (0)	0.37 (6)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8344 (1)	0.5000	1.2 (0)	0.85 (5)	1.18 (5)	1.50 (6)	0.00 (0)	0.31 (4)	0.00 (0)
O(1)	0.8273 (4)	0.2284 (2)	0.1683 (2)	1.9 (1)	1.76 (9)	2.17 (11)	1.82 (11)	-0.58 (8)	0.48 (8)	-0.21 (9)
O(2)	0.5113 (6)	0.0000	0.1686 (3)	1.9 (1)	2.52 (14)	1.20 (12)	1.89 (16)	0.00 (0)	0.17 (12)	0.00 (0)
O(3)	0.6308 (3)	0.1671 (2)	0.3913 (2)	1.1 (1)	1.19 (8)	0.89 (8)	1.39 (9)	0.01 (6)	0.30 (7)	0.00 (7)
O(4)	0.1318 (7)	0.0000	0.3986 (4)	1.1 (1)	0.92 (12)	0.84 (11)	1.47 (17)	0.00 (0)	0.14 (11)	0.00 (0)
Sample 19										
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.8 (2)	3.93 (19)	3.47 (18)	3.96 (23)	0.00 (0)	0.86 (14)	0.00 (0)
T	0.5761 (3)	0.1666 (1)	0.2270 (2)	1.3 (1)	1.09 (6)	1.08 (7)	1.82 (8)	0.00 (0)	0.18 (5)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.5 (2)	1.33 (16)	0.86 (15)	2.31 (20)	0.00 (0)	0.67 (12)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8345 (2)	0.5000	1.6 (1)	1.22 (11)	1.46 (11)	1.94 (13)	0.00 (0)	0.13 (8)	0.00 (0)
O(1)	0.8267 (8)	0.2300 (5)	0.1688 (5)	2.6 (2)	2.38 (22)	2.91 (26)	2.67 (24)	-0.71 (16)	0.83 (20)	-0.28 (20)
O(2)	0.5164 (13)	0.0000	0.1687 (6)	2.6 (3)	3.71 (34)	2.08 (29)	1.83 (34)	0.00 (0)	0.21 (27)	0.00 (0)
O(3)	0.6303 (7)	0.1662 (3)	0.3913 (4)	1.5 (2)	1.20 (16)	1.19 (17)	2.08 (21)	-0.03 (13)	0.24 (14)	-0.05 (16)
O(4)	0.1328 (13)	0.0000	0.3989 (6)	1.4 (2)	1.22 (23)	2.03 (25)	0.91 (32)	0.00 (0)	0.03 (23)	0.00 (0)
Sample 21										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.6 (0)	2.50 (4)	2.47 (4)	2.89 (4)	0.00 (0)	0.52 (3)	0.00 (0)
T	0.5738 (1)	0.1671 (1)	0.2222 (1)	0.9 (0)	0.95 (2)	0.89 (2)	0.99 (3)	0.00 (0)	0.21 (2)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.0 (0)	0.88 (4)	0.80 (4)	1.24 (5)	0.00 (0)	0.35 (3)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8423 (1)	0.5000	1.2 (0)	0.78 (3)	1.72 (3)	1.11 (3)	0.00 (0)	0.16 (2)	0.00 (0)
O(1)	0.8179 (3)	0.2356 (2)	0.1628 (1)	2.0 (1)	1.87 (7)	2.63 (8)	1.65 (7)	-0.70 (6)	0.33 (6)	-0.23 (6)
O(2)	0.5255 (4)	0.0000	0.1648 (2)	2.0 (1)	2.82 (10)	1.41 (9)	1.65 (10)	0.00 (0)	0.16 (9)	0.00 (0)
O(3)	0.6314 (3)	0.1699 (1)	0.3900 (1)	1.3 (1)	1.29 (6)	1.18 (6)	1.39 (7)	0.10 (5)	0.32 (5)	-0.04 (5)
O(4)	0.1288 (4)	0.0000	0.3994 (2)	1.3 (1)	1.14 (8)	1.81 (9)	0.94 (9)	0.00 (0)	0.26 (7)	0.00 (0)
Sample 22										
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.4 (1)	2.30 (10)	2.24 (10)	2.61 (12)	0.00 (0)	0.44 (8)	0.00 (0)
T	0.5735 (2)	0.1669 (2)	0.2214 (1)	0.8 (1)	0.65 (6)	0.75 (6)	0.87 (7)	0.00 (0)	0.09 (5)	0.00 (0)
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (1)	0.76 (12)	0.80 (13)	0.93 (14)	0.00 (0)	0.30 (9)	0.00 (0)
M2	0.0000	0.8427 (2)	0.5000	1.0 (1)	0.57 (7)	1.48 (9)	1.00 (9)	0.00 (0)	-0.02 (6)	0.00 (0)

Table 3. (continued)

Sample 23											
K	0.0000	0.0000	0.0000	2.8 (1)	2.68 (7)	2.73 (7)	2.95 (8)	0.00 (0)	0.57 (6)	0.00 (0)	
T	0.5738 (1)	0.1670 (1)	0.2222 (1)	1.0 (0)	0.87 (4)	0.93 (4)	1.08 (4)	0.00 (0)	0.20 (3)	0.00 (0)	
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.0 (1)	0.84 (7)	0.81 (7)	1.48 (8)	0.00 (0)	0.39 (6)	0.00 (0)	
M2	0.0000	0.8419 (1)	0.5000	1.3 (0)	0.85 (5)	1.74 (6)	1.33 (5)	0.00 (0)	0.25 (4)	0.00 (0)	
O(1)	0.8169 (4)	0.2367 (3)	0.1628 (2)	2.1 (1)	1.88 (11)	2.72 (14)	1.67 (11)	-0.59 (10)	0.46 (9)	-0.18 (12)	
O(2)	0.5272 (7)	0.0000	0.1646 (3)	2.0 (1)	2.99 (18)	1.39 (15)	1.58 (18)	0.00 (0)	0.22 (14)	0.00 (0)	
O(3)	0.6313 (4)	0.1697 (2)	0.3903 (2)	1.3 (1)	1.34 (9)	1.29 (10)	1.22 (10)	-0.06 (9)	0.28 (8)	-0.15 (10)	
O(4)	0.1278 (7)	0.0000	0.3975 (3)	1.3 (1)	1.31 (14)	1.91 (17)	0.86 (17)	0.00 (0)	0.32 (14)	0.00 (0)	
Sample 24											
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.4 (2)	3.93 (17)	3.67 (17)	2.43 (16)	0.00 (0)	0.33 (12)	0.00 (0)	
T	0.5758 (2)	0.1666 (1)	0.2278 (1)	1.0 (0)	0.87 (5)	0.81 (5)	1.31 (6)	0.00 (0)	0.23 (4)	0.00 (0)	
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.3 (1)	1.04 (14)	0.86 (14)	1.85 (17)	0.00 (0)	0.23 (12)	0.00 (0)	
M2	0.0000	0.8323 (2)	0.5000	1.2 (1)	1.07 (9)	0.95 (9)	1.60 (11)	0.00 (0)	0.29 (8)	0.00 (0)	
O(1)	0.8295 (6)	0.2269 (4)	0.1699 (3)	2.7 (2)	2.70 (19)	3.33 (21)	2.04 (18)	-0.56 (17)	0.49 (15)	-0.06 (18)	
O(2)	0.5110 (10)	0.0000	0.1701 (5)	2.7 (2)	3.54 (29)	2.28 (25)	2.18 (28)	0.00 (0)	0.27 (23)	0.00 (0)	
O(3)	0.6313 (5)	0.1669 (3)	0.3915 (3)	1.2 (1)	0.96 (13)	1.08 (13)	1.49 (16)	0.07 (13)	0.25 (11)	0.08 (14)	
O(4)	0.1313 (9)	0.0000	0.3989 (4)	1.3 (2)	1.42 (21)	1.30 (22)	1.19 (24)	0.00 (0)	0.27 (21)	0.00 (0)	
Sample 25											
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.3 (2)	3.52 (16)	4.10 (18)	2.29 (14)	0.00 (0)	0.46 (11)	0.00 (0)	
T	0.5758 (2)	0.1668 (1)	0.2279 (1)	1.0 (0)	0.73 (5)	0.91 (5)	1.25 (5)	0.00 (0)	0.21 (4)	0.00 (0)	
M1	0.0000	0.5000	0.5000	1.2 (1)	0.95 (14)	1.00 (15)	1.59 (16)	0.00 (0)	0.21 (11)	0.00 (0)	
M2	0.0000	0.8323 (2)	0.5000	1.1 (1)	0.79 (9)	0.91 (9)	1.47 (10)	0.00 (0)	0.24 (7)	0.00 (0)	
O(1)	0.8295 (6)	0.2265 (4)	0.1701 (3)	2.4 (2)	2.16 (17)	3.18 (21)	1.96 (16)	-0.60 (16)	0.28 (13)	0.06 (16)	
O(2)	0.5112 (9)	0.0000	0.1701 (5)	2.4 (2)	2.85 (26)	2.35 (25)	1.90 (25)	0.00 (0)	0.09 (20)	0.00 (0)	
O(3)	0.6305 (5)	0.1668 (3)	0.3913 (3)	1.2 (1)	1.00 (13)	1.14 (13)	1.44 (14)	0.03 (13)	0.25 (10)	0.06 (13)	
O(4)	0.1331 (9)	0.0000	0.3992 (4)	1.3 (2)	1.40 (20)	1.34 (22)	1.20 (23)	0.00 (0)	0.09 (19)	0.00 (0)	
Sample 26											
K	0.0000	0.0000	0.0000	3.0 (1)	3.02 (9)	3.12 (9)	2.75 (9)	0.00 (0)	0.36 (6)	0.00 (0)	
T	0.5752 (1)	0.1669 (1)	0.2266 (1)	0.8 (0)	0.74 (3)	0.90 (3)	0.86 (4)	0.00 (0)	0.11 (3)	0.00 (0)	
M1	0.0000	0.5000	0.5000	0.8 (1)	0.73 (6)	0.68 (6)	1.14 (8)	0.00 (0)	0.31 (5)	0.00 (0)	
M2	0.0000	0.8369 (1)	0.5000	1.1 (1)	0.63 (5)	1.53 (5)	1.01 (6)	0.00 (0)	0.13 (3)	0.00 (0)	
O(1)	0.8276 (4)	0.2281 (2)	0.1692 (2)	1.8 (1)	1.71 (9)	2.35 (10)	1.27 (9)	-0.55 (8)	0.46 (7)	-0.32 (8)	
O(2)	0.5118 (6)	0.0000	0.1699 (3)	1.8 (1)	2.49 (14)	1.55 (13)	1.07 (13)	0.00 (0)	-0.10 (11)	0.00 (0)	