

AM-94-562

Composition and temperature dependence of Fe-Mg ordering in cummingtonite-grunerite as determined by X-ray diffraction

Marc Hirschmann, Bernard W. Evans, Hexiong Yang

For deposit: Tables 5 - 7

American Mineralogist, 79, 9-10, 862-877.

Table 5 Atomic positions and equivalent isotropic temperature parameters (\AA^2)

	DH7-482	DH7-484	27022	Lab 510	24159	1-K	45a		57d	
M1	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	-25023(17)		-24984(14)	
	y 0.08702(2)	0.08733(5)	0.08736(1)	0.08764(2)	0.08756(2)	0.08786(2)	0.33631(6)		0.33675(5)	
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.48603(28)		0.48810(21)	
	B 0.73	0.66	0.57	0.60	0.58	0.64	0.58		0.55	
M2	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	-25046(17)		-25002(15)	
	y 0.17714(3)	0.17782(6)	0.17812(2)	0.17831(2)	0.17853(3)	0.17941(2)	0.42678(7)		0.42703(5)	
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.98423(26)		0.98756(20)	
	B 0.73	0.70	0.55	0.57	0.60	0.60	0.51		0.64	
M3	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	-24930(25)		-24856(21)	
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.25000(0)		0.25000(0)	
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.98785(40)		0.98967(31)	
	B 0.72	0.90	0.53	0.51	0.59	0.59	0.55		0.55	
M4	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	-25169(13)		-25177(10)	
	y 0.25938(1)	0.25904(3)	0.25830(1)	0.25886(1)	0.25837(2)	0.25746(2)	0.50861(5)		0.50915(3)	
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.48161(20)		0.48457(14)	
	B 0.94	0.70	0.81	0.85	0.88	0.87	0.75		0.93	
							A set	B set	A set	B set
T1	x 0.28756(4)	0.28729(9)	0.28734(4)	0.28721(4)	0.28705(6)	0.28657(5)	0.03976(12)	0.53734(12)	0.03919(11)	0.53754(11)
	y 0.08412(2)	0.08405(4)	0.08391(1)	0.08411(2)	0.08389(2)	0.08359(2)	0.33464(6)	0.83389(6)	0.33459(5)	0.83377(5)
	z 0.27486(7)	0.27315(16)	0.27216(7)	0.27216(8)	0.27167(12)	0.27011(10)	0.25839(23)	0.28898(22)	0.26104(19)	0.28690(19)
	B 0.58	0.56	0.47	0.49	0.51	0.52	0.41	0.39	0.53	0.55
T2	x 0.29762(4)	0.29793(9)	0.29830(3)	0.29835(4)	0.29831(6)	0.29885(5)	0.04562(12)	0.54903(12)	0.04596(11)	0.54922(11)
	y 0.16886(2)	0.16851(4)	0.16804(1)	0.16815(2)	0.16777(3)	0.16677(2)	0.42048(6)	0.91859(6)	0.42021(6)	0.91834(5)
	z 0.78165(7)	0.78003(16)	0.77907(6)	0.77917(8)	0.77856(11)	0.77693(9)	0.76396(21)	0.79361(22)	0.76705(18)	0.79212(18)
	B 0.62	0.59	0.51	0.52	0.56	0.56	0.48	0.51	0.61	0.56
O1	x 0.11410(11)	0.11410(23)	0.11395(10)	0.11372(12)	0.11390(17)	0.11349(15)	-13364(33)	0.36307(34)	-13460(30)	0.36313(32)
	y 0.08702(5)	0.08739(11)	0.08761(4)	0.08821(6)	0.08786(7)	0.08834(6)	0.33660(16)	0.83678(16)	0.33662(14)	0.83682(14)
	z 0.20923(21)	0.20810(45)	0.20760(19)	0.20736(23)	0.20651(33)	0.20594(29)	0.19862(58)	0.22080(60)	0.20015(49)	0.21975(51)
	B 0.69	0.69	0.65	0.66	0.69	0.66	0.49	0.56	0.60	0.79
O2	x 0.12352(11)	0.12418(23)	0.12441(10)	0.12421(12)	0.12443(16)	0.12579(14)	-12878(32)	0.37379(32)	-12920(30)	0.37412(29)
	y 0.17231(5)	0.17284(12)	0.17303(5)	0.17336(6)	0.17339(8)	0.17378(7)	0.42256(17)	0.92373(17)	0.42239(15)	0.92286(15)
	z 0.71930(21)	0.71873(47)	0.71820(20)	0.71857(23)	0.71693(33)	0.71497(28)	0.69701(55)	0.73276(56)	0.70190(48)	0.73039(47)
	B 0.77	0.77	0.69	0.71	0.72	0.71	0.57	0.61	0.79	0.66
O3	x 0.11388(16)	0.11485(35)	0.11393(14)	0.11449(18)	0.11417(25)	0.11507(22)	-13551(48)	0.36187(48)	-13667(48)	0.36271(45)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.25000(0)	0.75000(0)	0.25000(0)	0.75000(0)
	z 0.70770(31)	0.70784(68)	0.70606(27)	0.70635(33)	0.70554(47)	0.70451(41)	0.69645(81)	0.72154(80)	0.69667(74)	0.71951(74)
	B 0.86	0.94	0.75	0.79	0.85	0.88	0.61	0.52	0.89	0.78
O4	x 0.38028(12)	0.38116(24)	0.38191(10)	0.38191(13)	0.38236(17)	0.38403(14)	0.12602(36)	0.63428(34)	0.12730(32)	0.63333(32)
	y 0.24558(5)	0.24473(12)	0.24418(5)	0.24433(6)	0.24348(8)	0.24191(7)	0.49850(17)	0.99352(18)	0.49789(14)	0.99371(15)
	z 0.76997(22)	0.76917(49)	0.76804(19)	0.76880(23)	0.76897(32)	0.76787(28)	0.78799(60)	0.75861(60)	0.78290(52)	0.75915(52)
	B 1.00	0.92	0.83	0.86	0.90	0.91	0.76	0.79	0.90	0.97
O5	x 0.35129(11)	0.35170(23)	0.35073(10)	0.35078(12)	0.35040(16)	0.34936(12)	0.09946(33)	0.60118(31)	0.10007(31)	0.60165(30)
	y 0.13124(6)	0.13016(13)	0.12998(5)	0.12976(6)	0.12957(9)	0.12849(7)	0.36956(19)	0.88839(17)	0.37223(17)	0.88713(15)
	z 0.06492(21)	0.06244(45)	0.06048(19)	0.05961(24)	0.05896(33)	0.05694(26)	0.01941(59)	0.09366(55)	0.02911(52)	0.08935(50)
	B 1.04	0.99	0.90	0.97	0.97	0.90	0.93	0.69	1.12	0.89
O6	x 0.34967(11)	0.34924(23)	0.34955(10)	0.34916(12)	0.34874(17)	0.34850(13)	0.10560(32)	0.59559(33)	0.10466(31)	0.59636(32)
	y 0.11873(6)	0.11912(14)	0.11848(5)	0.11879(7)	0.11824(9)	0.11757(8)	0.38261(19)	0.85987(18)	0.38013(16)	0.86101(16)
	z 0.55884(21)	0.55602(46)	0.55518(20)	0.55448(24)	0.55410(34)	0.55200(26)	0.51920(57)	0.58751(59)	0.52585(51)	0.58273(52)
	B 1.16	1.13	1.08	1.17	1.13	1.06	0.83	0.84	1.04	1.10
O7	x 0.34319(16)	0.34254(34)	0.34164(14)	0.34112(18)	0.34055(24)	0.33884(19)	0.09887(52)	0.59283(47)	0.09564(46)	0.59266(45)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.25000(0)	0.75000(0)	0.25000(0)	0.75000(0)
	z 0.27164(33)	0.27167(74)	0.27000(30)	0.27026(37)	0.27002(51)	0.26856(40)	0.30230(89)	0.25801(89)	0.29770(76)	0.25714(77)
	B 1.07	1.06	0.96	1.00	1.04	1.02	0.97	0.70	0.97	0.87

Table 5 (continued) Atomic positions and equivalent isotropic temperature parameters (\AA^2)

	11a	14a	14g	12a	15b	30a	1c				
M1	x -0.24988(14) y 0.33686(3) z 0.49295(16) B 0.70	0.00000(0) 0.08716(2) 0.50000(0) 0.65	0.00000(0) 0.08718(2) 0.50000(0) 0.58	0.00000(0) 0.08741(2) 0.50000(0) 0.69	0.00000(0) 0.08783(2) 0.50000(0) 0.58	-0.24991(8) 0.33683(3) 0.48772(13) 0.54	-0.24930(16) 0.33691(4) 0.49218(21) 0.60				
M2	x -0.25017(15) y 0.42730(4) z 0.99227(16) B 0.65	0.00000(0) 0.17777(3) 0.00000(0) 0.64	0.00000(0) 0.17781(3) 0.00000(0) 0.58	0.00000(0) 0.17842(3) 0.00000(0) 0.65	0.00000(0) 0.17928(2) 0.00000(0) 0.56	-0.25016(8) 0.42713(3) 0.98679(13) 0.54	-0.25010(17) 0.42735(4) 0.99134(20) 0.58				
M3	x -0.24975(23) y 0.25000(0) z 0.99396(24) B 0.58	0.00000(0) 0.00000(0) 0.00000(0) 0.58	0.00000(0) 0.00000(0) 0.00000(0) 0.54	0.00000(0) 0.00000(0) 0.00000(0) 0.58	0.00000(0) 0.00000(0) 0.00000(0) 0.53	-0.24885(12) 0.25000(0) 0.98960(18) 0.56	-0.24963(27) 0.25000(0) 0.99325(33) 0.45				
M4	x -0.25101(10) y 0.50884(2) z 0.49028(11) B 0.93	0.00000(0) 0.25882(2) 0.50000(0) 0.94	0.00000(0) 0.25874(2) 0.50000(0) 0.86	0.00000(0) 0.25801(2) 0.50000(0) 0.98	0.00000(0) 0.25739(2) 0.50000(0) 0.90	-0.25174(5) 0.50902(2) 0.48415(8) 0.87	-0.25161(11) 0.50886(3) 0.48965(15) 0.87				
	A set	B set				A set	B set	A set	B set		
T1	x 0.03824(14) y 0.33436(5) z 0.26522(16) B 0.52	0.53738(13) 0.83389(5) 0.28138(16) 0.52	0.28744(5) 0.08402(2) 0.27294(8) 0.57	0.28746(5) 0.08403(2) 0.27294(9) 0.48	0.28727(6) 0.08388(2) 0.27155(11) 0.58	0.28664(7) 0.08357(3) 0.27019(11) 0.48	0.03918(7) 0.33453(3) 0.26054(12) 0.48	0.53735(7) 0.83383(3) 0.28675(12) 0.50	0.03868(15) 0.33441(6) 0.26492(20) 0.56	0.53683(14) 0.83390(6) 0.28171(20) 0.43	
T2	x 0.04669(14) y 0.41939(5) z 0.77178(16) B 0.53	0.54867(14) 0.91819(5) 0.78754(16) 0.56	0.29779(5) 0.16842(2) 0.77949(8) 0.60	0.29795(5) 0.16843(2) 0.77957(9) 0.52	0.29834(6) 0.16755(3) 0.77798(10) 0.62	0.29886(6) 0.16672(3) 0.77689(11) 0.52	0.04601(7) 0.42028(3) 0.79230(12) 0.52	0.54913(7) 0.91826(3) 0.79230(12) 0.53	0.04608(14) 0.41940(6) 0.77097(19) 0.51	0.54913(14) 0.91825(7) 0.78809(20) 0.54	
O1	x -0.13530(31) y 0.33683(13) z 0.20250(41) B 0.57	0.36404(33) 0.83695(14) 0.21622(43) 0.69	0.11405(13) 0.08736(6) 0.20891(22) 0.70	0.11382(14) 0.08746(6) 0.20820(24) 0.63	0.11386(17) 0.08782(7) 0.20755(30) 0.72	0.11384(18) 0.08817(8) 0.20633(32) 0.66	-0.13451(18) 0.33671(9) 0.19953(32) 0.61	0.36314(19) 0.83673(9) 0.21972(32) 0.61	-0.13536(37) 0.33686(17) 0.20238(52) 0.67	0.36396(37) 0.83713(15) 0.21629(53) 0.59	
O2	x -0.12788(31) y 0.42228(16) z 0.70882(42) B 0.75	0.37422(30) 0.92290(15) 0.72614(42) 0.67	0.12369(12) 0.17289(6) 0.71774(23) 0.78	0.12388(13) 0.17295(7) 0.71762(24) 0.73	0.12477(16) 0.17355(8) 0.71645(29) 0.75	0.12577(18) 0.17375(8) 0.71527(30) 0.67	-0.12846(18) 0.42250(9) 0.70199(30) 0.61	0.37410(18) 0.92312(9) 0.73073(31) 0.66	-0.12755(34) 0.42281(17) 0.70738(50) 0.61	0.37405(37) 0.92294(17) 0.72672(51) 0.71	
O3	x -0.13503(47) y 0.25000(0) z 0.70047(61) B 0.75	0.36189(51) 0.75000(0) 0.71401(63) 0.85	0.11413(19) 0.00000(0) 0.70771(32) 0.87	0.11435(21) 0.00000(0) 0.70783(35) 0.80	0.11468(26) 0.00000(0) 0.70606(43) 0.92	0.11530(27) 0.00000(0) 0.70537(44) 0.78	-0.13563(28) 0.25000(0) 0.69736(45) 0.70	0.36217(27) 0.75000(0) 0.71917(46) 0.69	-0.13626(53) 0.25000(0) 0.70065(76) 0.73	0.36337(58) 0.75000(0) 0.71586(76) 0.90	
O4	x 0.12930(34) y 0.49679(14) z 0.77553(45) B 0.93	0.63240(33) 0.99379(16) 0.76340(45) 0.94	0.38110(14) 0.24467(7) 0.76921(23) 0.97	0.38103(15) 0.24463(7) 0.76911(24) 0.91	0.38263(18) 0.24318(8) 0.76818(29) 0.97	0.38397(19) 0.24177(9) 0.76791(30) 0.88	0.12719(19) 0.49807(9) 0.78401(32) 0.78	0.63322(19) 0.99326(9) 0.75931(32) 0.87	0.12841(38) 0.49721(17) 0.77731(55) 0.91	0.63262(36) 0.99369(17) 0.76216(54) 0.81	
O5	x 0.10008(32) y 0.37555(16) z 0.04217(44) B 1.06	0.60179(32) 0.88473(15) 0.07938(44) 0.91	0.35063(13) 0.13028(7) 0.06158(22) 1.00	0.35045(14) 0.13024(7) 0.06103(25) 0.93	0.35017(17) 0.12947(8) 0.05958(28) 1.00	0.34971(17) 0.12850(9) 0.05736(31) 0.91	0.10040(19) 0.37168(10) 0.02651(32) 0.95	0.60120(19) 0.88704(9) 0.09021(31) 0.82	0.10098(35) 0.37497(19) 0.04018(56) 1.00	0.60047(36) 0.88503(18) 0.08022(54) 0.85	
O6	x 0.10208(33) y 0.37566(17) z 0.53704(44) B 1.22	0.59798(31) 0.86349(16) 0.57315(43) 0.97	0.34940(13) 0.11892(7) 0.55588(23) 1.18	0.34944(14) 0.11893(8) 0.55575(26) 1.13	0.34897(18) 0.11813(9) 0.55424(29) 1.22	0.34852(18) 0.11748(9) 0.55194(31) 1.07	0.10443(19) 0.38063(10) 0.52386(32) 0.95	0.59632(19) 0.86108(10) 0.58332(32) 0.97	0.10356(36) 0.37566(19) 0.53591(54) 1.05	0.59663(36) 0.86325(19) 0.57471(56) 1.02	
O7	x 0.09461(50) y 0.25000(0) z 0.28526(74) B 1.16	0.59273(47) 0.75000(0) 0.26114(73) 0.85	0.34249(20) 0.00000(0) 0.27086(37) 1.06	0.34207(21) 0.00000(0) 0.27168(40) 0.98	0.34094(25) 0.00000(0) 0.26921(47) 1.07	0.33869(27) 0.00000(0) 0.26847(50) 1.00	0.09588(28) 0.25000(0) 0.29782(51) 1.01	0.59303(27) 0.75000(0) 0.25691(48) 0.78	0.09549(48) 0.25000(0) 0.28682(86) 0.82	0.59141(56) 0.75000(0) 0.25897(87) 1.09	

Table 5 (continued) Atomic positions and equivalent isotropic temperature parameters (\AA^2)

	21a	6b	4b	4a	17c	3b	18a	2b	19a	5c
M1	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.08695(3)	0.08716(1)	0.08719(4)	0.08724(2)	0.08729(3)	0.08736(1)	0.08736(2)	0.08735(1)	0.08738(2)	0.08740(2)
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)
	B 0.68	0.59	0.65	0.63	0.64	0.56	0.59	0.63	0.64	0.63
M2	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.17738(4)	0.17776(2)	0.17775(4)	0.17776(3)	0.17797(3)	0.17812(1)	0.17826(2)	0.17820(2)	0.17838(2)	0.17845(2)
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	B 0.66	0.57	0.64	0.63	0.63	0.57	0.60	0.61	0.62	0.61
M3	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	B 0.56	0.56	0.57	0.58	0.56	0.56	0.54	0.56	0.57	0.63
M4	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.25897(3)	0.25908(1)	0.25878(3)	0.25869(2)	0.25863(2)	0.25822(1)	0.25840(1)	0.25829(1)	0.25823(2)	0.25813(2)
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)
	B 0.98	0.91	1.01	0.90	0.94	0.86	0.90	0.88	0.98	0.89
T1	x 0.28764(6)	0.28718(3)	0.28751(8)	0.28740(5)	0.28732(6)	0.28744(3)	0.28704(4)	0.28750(4)	0.28690(5)	0.28734(5)
	y 0.08414(3)	0.08403(1)	0.08404(3)	0.08400(2)	0.08398(3)	0.08389(1)	0.08384(2)	0.08394(1)	0.08383(2)	0.08385(2)
	z 0.27371(11)	0.27358(6)	0.27282(13)	0.27263(9)	0.27265(11)	0.27235(5)	0.27273(7)	0.27166(6)	0.27255(10)	0.27161(10)
	B 0.58	0.48	0.60	0.52	0.53	0.47	0.5	0.53	0.56	0.53
T2	x 0.29761(6)	0.29754(3)	0.29760(8)	0.29789(5)	0.29788(6)	0.29831(3)	0.29806(4)	0.29844(3)	0.29805(6)	0.29844(5)
	y 0.16879(3)	0.16853(1)	0.16831(3)	0.16846(2)	0.16818(3)	0.16800(1)	0.16792(2)	0.16796(1)	0.16768(2)	0.16767(2)
	z 0.78000(11)	0.78024(5)	0.77913(13)	0.77938(9)	0.77913(11)	0.77883(5)	0.77940(7)	0.77836(6)	0.77917(9)	0.77824(9)
	B 0.64	0.53	0.62	0.56	0.61	0.52	0.54	0.55	0.62	0.56
O1	x 0.11392(17)	0.11407(10)	0.11399(20)	0.11412(14)	0.11379(16)	0.11387(9)	0.11397(11)	0.11412(10)	0.11384(15)	0.11406(15)
	y 0.08696(8)	0.08724(4)	0.08721(10)	0.08725(6)	0.08743(8)	0.08749(4)	0.08758(5)	0.08747(4)	0.08776(7)	0.08755(6)
	z 0.20904(29)	0.20893(17)	0.20894(36)	0.20863(25)	0.20808(28)	0.20781(14)	0.20819(21)	0.20787(19)	0.20786(28)	0.20780(28)
	B 0.71	0.63	0.73	0.67	0.67	0.67	0.64	0.71	0.69	0.69
O2	x 0.12339(16)	0.12374(9)	0.12381(20)	0.12381(14)	0.12428(16)	0.12436(8)	0.12426(11)	0.12429(10)	0.12465(15)	0.12460(14)
	y 0.17274(8)	0.17288(4)	0.17279(10)	0.17305(7)	0.17288(8)	0.17302(4)	0.17305(5)	0.17324(5)	0.17329(7)	0.17312(6)
	z 0.71753(29)	0.71779(17)	0.71767(35)	0.71777(25)	0.71738(28)	0.71694(13)	0.71719(22)	0.71672(18)	0.71705(27)	0.71639(27)
	B 0.77	0.71	0.75	0.72	0.80	0.71	0.72	0.73	0.74	0.73
O3	x 0.11423(25)	0.11395(14)	0.11426(31)	0.11400(21)	0.11491(25)	0.11401(13)	0.11427(17)	0.11443(15)	0.11456(23)	0.11388(21)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.70858(43)	0.70708(24)	0.70772(52)	0.70738(36)	0.70828(42)	0.70713(20)	0.70663(31)	0.70711(27)	0.70690(38)	0.70612(40)
	B 0.86	0.80	0.86	0.83	0.82	0.79	0.85	0.87	0.85	0.83
O4	x 0.38053(18)	0.38063(10)	0.38087(22)	0.38105(15)	0.38141(17)	0.38209(9)	0.38181(11)	0.38228(11)	0.38207(16)	0.38256(15)
	y 0.24509(9)	0.24483(5)	0.24485(11)	0.24467(7)	0.24422(9)	0.24401(4)	0.24384(5)	0.24381(5)	0.24337(8)	0.24338(7)
	z 0.76992(29)	0.77028(17)	0.76931(36)	0.76934(25)	0.76869(29)	0.76839(13)	0.76859(22)	0.76798(18)	0.76859(27)	0.76864(28)
	B 1.01	0.92	1.00	0.9	0.99	0.88	0.92	0.88	0.95	0.90
O5	x 0.35039(17)	0.35065(9)	0.35069(21)	0.35063(14)	0.35036(16)	0.35050(9)	0.35044(10)	0.35046(10)	0.35017(15)	0.35066(13)
	y 0.13047(10)	0.13030(5)	0.13021(11)	0.13015(7)	0.13000(9)	0.13001(4)	0.12984(6)	0.12973(5)	0.12970(8)	0.12957(7)
	z 0.06152(34)	0.06240(16)	0.06063(37)	0.06086(25)	0.06038(31)	0.06037(14)	0.06121(21)	0.05902(18)	0.06139(26)	0.05973(26)
	B 1.26	0.94	1.01	0.98	1.02	0.98	0.935	0.99	0.98	0.96
O6	x 0.34986(18)	0.34941(10)	0.34935(21)	0.34969(15)	0.34934(17)	0.34948(9)	0.34919(11)	0.34948(10)	0.34879(15)	0.34921(14)
	y 0.11918(10)	0.11897(5)	0.11911(12)	0.11908(8)	0.11871(9)	0.11833(5)	0.11826(6)	0.11861(6)	0.11786(8)	0.11825(8)
	z 0.55622(34)	0.55674(16)	0.55483(39)	0.55508(25)	0.55544(32)	0.55514(14)	0.55596(21)	0.55406(18)	0.55585(27)	0.55436(26)
	B 1.43	1.13	1.23	1.15	1.21	1.19	1.12	1.22	1.16	1.13
O7	x 0.34330(26)	0.34237(14)	0.34265(29)	0.34260(21)	0.34160(26)	0.34173(13)	0.34135(16)	0.34162(15)	0.34070(23)	0.34125(21)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.27220(49)	0.27161(27)	0.27097(59)	0.27128(39)	0.27157(48)	0.26917(23)	0.27005(33)	0.26980(29)	0.27009(43)	0.26981(43)
	B 1.07	0.98	1.05	0.98	1.16	1.03	1.02	1.03	1.08	1.05

Table 5 (continued) Atomic positions and equivalent isotropic temperature parameters (\AA^2)

	5b	16a	22f	8a	9a
M1	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.08742(2)	0.08759(1)	0.08783(2)	0.08691(3)	0.08745(2)
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)
	B 0.70	0.63	0.59	0.76	0.63
M2	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.17849(2)	0.17878(1)	0.17930(2)	0.17735(3)	0.17854(3)
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	B 0.68	0.62	0.59	0.75	0.61
M3	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	B 0.64	0.59	0.55	0.71	0.56
M4	x 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	y 0.25804(2)	0.25812(1)	0.25733(2)	0.25880(2)	0.25800(2)
	z 0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)	0.50000(0)
	B 0.94	0.96	0.87	1.03	0.94
T1	x 0.28723(6)	0.28685(4)	0.28664(5)	0.28786(5)	0.28723(6)
	y 0.08380(2)	0.08371(1)	0.08353(2)	0.08408(2)	0.08382(2)
	z 0.27160(11)	0.27184(7)	0.27029(9)	0.27316(8)	0.27155(10)
	B 0.58	0.55	0.48	0.63	0.55
T2	x 0.29838(6)	0.29828(4)	0.29882(5)	0.29773(4)	0.29842(6)
	y 0.16759(3)	0.16744(2)	0.16675(2)	0.16881(2)	0.16754(3)
	z 0.77812(10)	0.77854(7)	0.77684(8)	0.77934(8)	0.77810(10)
	B 0.61	0.59	0.53	0.66	0.61
O1	x 0.11402(16)	0.11383(11)	0.11367(13)	0.11422(13)	0.11381(16)
	y 0.08763(7)	0.08788(5)	0.08824(6)	0.08693(6)	0.08759(7)
	z 0.20745(31)	0.20725(20)	0.20604(24)	0.20890(22)	0.20721(29)
	B 0.70	0.70	0.64	0.74	0.72
O2	x 0.12497(15)	0.12520(11)	0.12596(13)	0.12338(12)	0.12471(15)
	y 0.17343(7)	0.17338(5)	0.17365(6)	0.17273(6)	0.17338(8)
	z 0.71661(30)	0.71646(19)	0.71560(23)	0.71689(23)	0.71681(28)
	B 0.78	0.76	0.72	0.83	0.75
O3	x 0.11408(23)	0.11498(17)	0.11557(21)	0.11383(19)	0.11423(24)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.70664(43)	0.70678(29)	0.70575(34)	0.70805(32)	0.70673(41)
	B 0.85	0.91	0.84	0.89	0.81
O4	x 0.38252(16)	0.38266(11)	0.38413(14)	0.38088(14)	0.38276(17)
	y 0.24328(8)	0.24290(5)	0.24176(7)	0.24509(6)	0.24322(8)
	z 0.76847(30)	0.76865(19)	0.76788(24)	0.77012(23)	0.76829(28)
	B 0.92	0.97	0.90	1.04	0.95
O5	x 0.35020(15)	0.34979(11)	0.34947(13)	0.35094(14)	0.35001(16)
	y 0.12946(8)	0.12925(5)	0.12853(7)	0.13025(8)	0.12943(8)
	z 0.05935(30)	0.05921(20)	0.05689(25)	0.06120(28)	0.05877(30)
	B 0.99	0.96	0.90	1.61	1.00
O6	x 0.34867(16)	0.34864(11)	0.34806(14)	0.35004(14)	0.34891(17)
	y 0.11827(9)	0.11806(6)	0.11760(7)	0.11950(9)	0.11816(9)
	z 0.55361(31)	0.55396(20)	0.55231(25)	0.55556(28)	0.55381(31)
	B 1.20	1.13	1.08	1.93	1.19
O7	x 0.34125(23)	0.34012(16)	0.33887(21)	0.34367(19)	0.34065(24)
	y 0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)	0.00000(0)
	z 0.26907(47)	0.27008(31)	0.26827(38)	0.27369(37)	0.26939(46)
	B 1.05	1.03	0.95	1.18	1.08