Table 5. Final atomic fractional coordinates and equivalent isotropic ($Å^2$) and anisotropic ($Å^2 \times 10^4$) thermal factors.

Atom	x/a	y/b	z/c	B_{eq}	β_{11}*	β_{22}*	β_{33}*	β_{12}*	β_{13}*	β_{23}*
	Sample 1: Tas27-2Ba									
O1	0.0138(6)	0.0	0.1703(3)	2.33(7)	260(10)	62(4)	52(3)	0	28(5)	0
O2	0.3285(4)	0.2286(2)	0.1703(2)	2.37(5)	222(8)	86(3)	44(2)	-20(4)	30(3)	-6(2)
O3	0.1302(3)	0.1668(2)	0.3908(2)	1.58(4)	135(6)	43(2)	45(2)	0(3)	25(2)	-1(2)
O4	0.1322(5)	0.5	0.3978(3)	1.60(6)	137(9)	50(3)	42(2)	0	25(4)	0
T	0.0761(1)	0.16662(8)	0.22825(7)	1.41(2)	124(2)	41(1)	38(1)	-1(1)	25(1)	-1(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.87(4)	157(6)	52(2)	54(2)	0	31(3)	0
M2	0.0	0.3323(1)	0.5	1.54(3)	133(4)	42(1)	44(1)	0	25(2)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.27(4)	330(7)	108(2)	63(2)	0	34(2)	0
	Sample 2: Tas27-2Bb									
O1	0.0134(4)	0.0	0.1704(2)	1.45(4)	189(7)	35(2)	24(1)	0	6(2)	0
O2	0.3281(2)	0.2284(2)	0.1703(1)	1.44(3)	132(4)	56(2)	24(1)	-24(2)	15(2)	-5(1)
O3	0.1300(2)	0.1667(1)	0.3910(1)	0.72(2)	69(3)	20(1)	18(1)	1(2)	9(1)	-1(1)
O4	0.1326(3)	0.5	0.3976(2)	0.78(3)	69(4)	24(2)	18(1)	0	4(2)	0
T	0.07606(7)	0.16669(4)	0.22828(4)	0.55(1)	48(1)	16(1)	14(1)	0(1)	6(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	0.82(2)	68(3)	22(1)	24(1)	0	11(1)	0
M2	0.0	0.33224(8)	0.5	0.71(1)	55(2)	19(1)	21(1)	0	7(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	2.57(2)	269(4)	87(1)	42(1)	0	15(1)	0
	Sample 3: Tag15-4									
O1	0.0134(7)	0.0	0.1705(4)	2.21(9)	240(10)	63(5)	42(4)	0	6(6)	0
O2	0.3285(4)	0.2281(3)	0.1700(2)	2.16(6)	190(9)	81(4)	39(2)	-23(5)	13(4)	-5(3)
O3	0.1304(4)	0.1670(3)	0.3914(2)	1.49(5)	124(7)	48(3)	36(2)	-2(5)	12(3)	-1(3)
O4	0.1314(6)	0.5	0.3973(3)	1.40(8)	130(10)	43(4)	32(3)	0	11(5)	0
T	0.0755 (1)	0.1666(1)	0.22683(8)	1.22(2)	107(3)	38(1)	29(1)	2(2)	10(1)	-1(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.38(4)	106(6)	42(2)	38(2)	0	13(3)	0
M2	0.0	0.3334(2)	0.5	1.38(3)	105(4)	45(1)	35(1)	0	9(2)	0
K	0.0	0.5	0.0	2.70(4)	256(7)	91(2)	53(2)	0	20(3)	0
	Sample 4: Tag15-3									
O1	0.015(1)	0.0	0.1699(5)	2.7(1)	310(30)	65(6)	59(6)	0	10(10)	0
O2	0.3283(7)	0.2278(4)	0.1698(4)	2.6(1)	240(20)	86(5)	64(4)	-35(8)	60(10)	-4(4)
O3	0.1295(6)	0.1674(3)	0.3908(3)	1.95(8)	190(10)	59(3)	43(3)	7(8)	19(8)	1(4)
O4	0.1308(9)	0.5	0.3966(5)	1.8(1)	160(20)	64(6)	42(5)	0	30(10)	0
T	0.0760(2)	0.1666(1)	0.2271(1)	1.84(3)	166(5)	52(1)	50(1)	2(4)	32(3)	0(2)
M1	0.0	0.0	0.5	1.70(7)	150(10)	46(3)	50(3)	0	37(7)	0
M2	0.0	0.3335(2)	0.5	1.67(4)	142(7)	48(2)	48(2)	0	37(4)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.01(7)	280(10)	99(3)	69(3)	0	56(7)	0

Table 5. Continued

Atom	x/a	y/b	z/c	B_{eq}	β_{11}*	β_{22}*	β_{33}*	β_{12}*	β_{13}*	β_{23}*
	Sample 5: Tpg63-2B									
O1	0.0160(5)	0.0	0.1704(3)	2.41(7)	240(10)	68(4)	54(3)	0	12(4)	0
O2	0.3271(3)	0.2293(2)	0.1695(2)	2.34(5)	194(6)	89(3)	46(2)	-22(4)	20(3)	-4(2)
O3	0.1311(3)	0.1671(2)	0.3910(2)	1.61(4)	124(5)	51(2)	43(2)	-2(3)	16(2)	0(2)
O4	0.1309(4)	0.5	0.3972(3)	1.60(6)	117(8)	55(3)	40(3)	0	10(4)	0
T	0.0756(1)	0.16669(8)	0.22652(7)	1.50(1)	113(2)	48(1)	40(1)	-1(1)	14(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.52(3)	113(4)	45(1)	44(1)	0	19(2)	0
M2	0.0	0.3335(1)	0.5	1.53(2)	107(2)	49(1)	43(1)	0	13(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.13(4)	280(5)	102(2)	68(2)	0	21(2)	0
	Sample 6: Tae23-1a									
O1	0.0108(6)	0.0	0.1704(3)	1.98(7)	230(10)	56(3)	34(2)	0	3(4)	0
O2	0.3296(4)	0.2276(2)	0.1704(2)	2.03(5)	196(7)	78(3)	32(2)	-21(4)	22(3)	-6(2)
O3	0.1302(3)	0.1666(2)	0.3912(2)	1.35(4)	117(6)	46(2)	30(1)	3(3)	12(2)	-1(2)
O4	0.1320(5)	0.5	0.3977(2)	1.41(6)	115(9)	47(3)	34(2)	0	16(4)	0
T	0.0760(1)	0.16675(8)	0.22819(6)	1.16(1)	103(2)	41(1)	25(1)	-2(1)	14(1)	-1(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.36(4)	113(5)	45(2)	33(1)	0	15(2)	0
M2	0.0	0.3320(1)	0.5	1.32(2)	113(3)	44(1)	30(1)	0	13(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	2.79(4)	285(6)	101(2)	44(1)	0	17(2)	0
	Sample 7: Tae23-1b									
O1	0.0112(4)	0.0	0.1706(2)	2.30(5)	226(8)	52(2)	61(2)	0	5(4)	0
O2	0.3296(3)	0.2274(2)	0.1707(2)	2.30(4)	176(5)	72(2)	62(2)	-23(3)	18(2)	-6(2)
O3	0.1300(2)	0.1668(2)	0.3910(1)	1.53(3)	104(4)	36(1)	54(1)	0(2)	13(2)	0(1)
O4	0.1323(4)	0.5	0.3976(2)	1.62(5)	105(6)	39(2)	59(2)	0	15(3)	0
T	0.07591(9)	0.16666(6)	0.22784(6)	1.41(1)	88(2)	32(1)	53(1)	1(1)	11(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.45(3)	89(3)	32(1)	56(1)	0	14(2)	0
M2	0.0	0.33253(9)	0.5	1.47(2)	86(2)	34(1)	56(1)	0	10(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.09(3)	272(4)	94(2)	74(1)	0	19(2)	0
	Sample 8: Tae23-1c									
O1	0.0105(7)	0.0	0.1714(3)	2.98(8)	370(20)	77(4)	52(3)	0	16(5)	0
O2	0.3286(4)	0.2275(2)	0.1708(2)	2.86(5)	275(8)	94(3)	58(2)	-18(4)	23(3)	0(2)
O3	0.1318(4)	0.1670(2)	0.3920(2)	2.25(5)	232(7)	68(2)	44(2)	0(4)	7(3)	-2(2)
O4	0.1329(5)	0.5	0.3975(3)	2.73(7)	270(10)	84(4)	57(3)	0	8(5)	0
T	0.0760(1)	0.16654(9)	0.22763(7)	1.92(2)	198(3)	49(1)	46(1)	-1(1)	12(1)	-1(1)
M1	0.0	0.0	0.5	2.06(4)	202(6)	54(2)	53(2)	0	20(3)	0
M2	0.0	0.3320(1)	0.5	2.02(3)	192(4)	52(1)	52(1)	0	12(2)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.51(4)	376(7)	107(2)	67(2)	0	23(3)	0

Table 5. Continued

Atom	x/a	y/b	z/c	B_{eq}	β_{11}*	β_{22}*	β_{33}*	β_{12}*	β_{13}*	β_{23}*
	Sample 9: Tpq16-4A									
O1	0.0106(5)	0.0	0.1711(2)	2.43(6)	280(10)	72(3)	39(2)	0	3(4)	0
O2	0.3301(3)	0.2268(2)	0.1708(2)	2.42(4)	241(6)	88(2)	39(1)	-24(3)	21(2)	-6(2)
O3	0.1300(2)	0.1670(2)	0.3910(1)	1.36(3)	122(4)	41(2)	32(1)	0(2)	11(2)	0(1)
O4	0.1327(4)	0.5	0.3980(2)	1.35(4)	117(6)	40(2)	33(2)	0	12(3)	0
T	0.07582(9)	0.16666(5)	0.22749(5)	1.40(1)	129(2)	42(1)	33(1)	1(1)	13(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.37(3)	123(4)	39(1)	34(1)	0	12(2)	0
M2	0.0	0.3325(1)	0.5	1.34(2)	118(2)	38(1)	35(1)	0	13(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.11(3)	318(5)	105(2)	53(1)	0	20(2)	0
	Sample 10: Tpt17-1									
O1	0.0112(4)	0.0	0.1701(2)	1.50(5)	186(8)	37(2)	26(2)	0	-5(3)	0
O2	0.3291(3)	0.2278(2)	0.1700(2)	1.49(3)	133(4)	56(2)	28(1)	-31(2)	18(2)	-6(1)
O3	0.1304(2)	0.1668(2)	0.3912(1)	0.78(2)	68(3)	24(1)	19(1)	-2(2)	6(1)	0(1)
O4	0.1324(3)	0.5	0.3980(2)	0.93(4)	75(5)	29(2)	24(1)	0	6(2)	0
T	0.07607(9)	0.16667(5)	0.22803(5)	0.64(1)	51(1)	19(1)	17(1)	1(1)	6(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	0.84(2)	61(3)	23(1)	26(1)	0	10(1)	0
M2	0.0	0.3326(1)	0.5	0.77(1)	53(2)	23(1)	23(1)	0	5(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	2.42(3)	237(4)	82(1)	43(1)	0	12(1)	0
	Sample 11: Tas22-1a									
O1	0.000(1)	0.0	0.1717(5)	3.8(2)	420(30)	117(8)	58(5)	0	-30(10)	0
O2	0.3317(7)	0.2220(4)	0.1715(3)	3.7(1)	360(20)	122(6)	73(4)	-15(9)	36(7)	-4(4)
O3	0.1281(5)	0.1677(3)	0.3909(3)	1.46(6)	76(9)	52(3)	40(2)	-1(6)	-3(5)	1(3)
O4	0.1338(8)	0.5	0.3982(4)	1.7(1)	120(20)	57(5)	41(4)	0	-10(8)	0
T	0.0759(2)	0.1667(1)	0.22680(9)	1.61(2)	109(4)	56(1)	39(1)	3(2)	5(2)	-1(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.49(7)	100(10)	54(3)	35(3)	0	-2(5)	0
M2	0.0	0.3325(2)	0.5	1.56(4)	104(7)	58(2)	35(2)	0	2(3)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.70(8)	340(10)	126(4)	73(3)	0	33(5)	0
	Sample 12: Tas22-1b									
O1	0.0012(8)	0.0	0.1701(4)	3.3(1))	350(20)	89(5)	68(4)	0	20(6)	0
O2	0.3342(5)	0.2221(3)	0.1700(2)	3.18(7)	310(10)	104(4)	62(2)	-22(5)	38(4)	-10(2)
O3	0.1309(3)	0.1670(2)	0.3918(2)	1.44(4)	124(6)	34(2)	45(2)	-2(3)	26(2)	0(2)
O4	0.1330(5)	0.5	0.3977(3)	1.75(6)	163(9)	50(3)	45(3)	0	30(4)	0
T	0.0755(1)	0.16666(7)	0.22672(6)	1.48(1)	123(2)	44(1)	39(1)	-1(1)	22(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.70(4)	140(5)	47(2)	48(2)	0	26(2)	0
M2	0.0	0.3328(1)	0.5	1.47(3)	121(4)	41(1)	42(1)	0	25(2)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.15(4)	287(6)	100(2)	69(2)	0	31(3)	0

Table 5. Continued

Atom	x/a	y/b	z/c	B_{eq}	β_{11}*	β_{22}*	β_{33}*	β_{12}*	β_{13}*	β_{23}*
	Sample 13: Tpq16-6B									
O1	0.0046(6)	0.0	0.1695(3)	3.14(8)	340(10)	83(4)	64(3)	0	5(5)	0
O2	0.3320(4)	0.2238(2)	0.1699(2)	3.16(6)	339(9)	91(3)	64(2)	-20(4)	36(3)	-9(2)
O3	0.1302(3)	0.1671(2)	0.3909(2)	1.57(3)	152(5)	30(2)	49(1)	0(2)	22(2)	1(1)
O4	0.1327(4)	0.5	0.3978(2)	1.56(5)	156(8)	30(2)	47(2)	0	22(3)	0
T	0.0756(1)	0.16665(6)	0.22661(5)	1.56(1)	155(2)	34(1)	45(1)	0(1)	20(1)	0(1)
M1	0.0	0.0	0.5	1.60(3)	157(4)	32(1)	49(1)	0	23(2)	0
M2	0.0	0.3329(1)	0.5	1.42(2)	139(3)	26(1)	45(1)	0	21(1)	0
K	0.0	0.5	0.0	3.07(4)	314(6)	84(2)	68(1)	0	24(2)	0

* $exp[-(h^2\beta_{11} + ... + 2hk\beta_{12} + ...)]$

Labels a, b, c as in Table 4. Standard deviations are given in parentheses.