

Table 8a. Crystallographic coordinates and equivalent isotropic and anisotropic temperature factors for Li-rich mica-1M crystals [layer symmetry $C12(1)$] from Pikes Peak batholith, central Colorado (available on request)

Atom	x/a	y/b	z/c	B _{eq}	B ₁₁	B ₂₂	B ₃₃	B ₁₂	B ₁₃	B ₂₃
Sample 114										
T1	0.0859(1)	0.1706(1)	0.22947(6)	0.66(2)	0.65(2)	0.57(2)	0.71(2)	-0.03(2)	0.06(2)	0.00(1)
T11	0.5760(1)	0.3340(2)	0.22972(6)	0.56(2)	0.57(2)	0.53(2)	0.60(2)	-0.02(1)	0.12(2)	0.05(1)
M1	0	1.01129(2)	0.5	0.69(2)	0.74(3)	0.45(3)	0.93(3)	0	0.25(2)	0
M2	0	0.3421(2)	0.5	0.58(3)	0.41(4)	0.44(4)	0.86(5)	0	0.06(3)	0
M3	0.5	0.1803(2)	0.5	0.69(2)	0.78(3)	0.63(3)	0.65(3)	0	0.10(2)	0
A	0	0.5016(2)	0	1.95(2)	2.04(2)	1.87(2)	1.92(2)	0	0.31(2)	0
O1	0.0404(3)	1.0032(3)	0.1715(1)	1.44(5)	2.22(6)	0.88(3)	1.11(4)	-0.18(6)	0.05(4)	0.08(5)
O2	0.3139(4)	0.2438(2)	0.1596(2)	1.33(5)	1.26(2)	1.66(6)	1.02(5)	-0.37(5)	0.11(5)	0.01(4)
O22	0.8205(4)	0.2622(3)	0.1728(2)	1.44(5)	1.32(6)	2.01(6)	1.01(6)	0.61(5)	0.22(5)	0.19(5)
O3	0.1621(3)	0.1757(3)	0.3925(2)	0.89(4)	0.79(4)	0.98(4)	0.91(4)	0.04(4)	0.15(4)	0.01(4)
O33	0.6158(3)	0.3283(3)	0.3935(2)	0.82(4)	1.06(5)	0.69(4)	0.71(4)	-0.09(4)	0.14(4)	0.08(4)
O4	0.1098(3)	0.5303(2)	0.3986(1)	0.60(3)	0.71(4)	0.49(4)	0.61(3)	0.07(3)	0.17(3)	-0.20(2)
Sample 55a										
T1	0.0757(2)	0.1687(2)	0.2289(1)	0.62(4)	0.59(4)	0.60(5)	0.65(5)	0.02(3)	0.11(3)	-0.04(3)
T11	0.5854(2)	0.3322(2)	0.2287(1)	0.68(4)	0.69(5)	0.61(5)	0.70(5)	0.03(3)	0.06(3)	-0.02(3)
M1	0	0.9920(3)	0.5	0.77(4)	0.77(5)	0.59(6)	0.98(5)	0	0.22(4)	0
M2	0	0.3227(3)	0.5	0.65(5)	0.66(6)	0.73(6)	0.54(6)	0	0.02(4)	0
M3	0.5	0.1612(4)	0.5	0.70(6)	0.48(8)	0.67(8)	0.90(9)	0	0.00(6)	0
A	0	0.5015(1)	0	2.01(3)	2.05(5)	1.97(4)	1.98(5)	0	0.29(3)	0
O1	0.0394(5)	0.9999(5)	0.1713(2)	1.60(9)	2.3(1)	1.20(8)	1.20(9)	0.1(1)	-0.03(7)	-0.2(1)
O2	0.3210(6)	0.2396(4)	0.1724(3)	1.5(1)	1.4(1)	2.2(1)	1.0(1)	-0.6(1)	0.18(9)	-0.18(9)
O22	0.8141(6)	0.2595(4)	0.1589(3)	1.4(1)	1.4(1)	1.8(1)	1.0(1)	0.49(9)	0.06(9)	0.04(8)
O3	0.1157(6)	0.1734(4)	0.3936(3)	1.00(9)	1.1(1)	1.0(1)	0.9(1)	0.07(8)	0.06(7)	-0.10(8)
O33	0.6616(5)	0.3264(5)	0.3923(3)	1.01(9)	0.93(9)	1.18(9)	0.9(1)	0.08(9)	0.17(7)	-0.02(9)
O4	0.1093(4)	0.4719(3)	0.3980(2)	0.56(7)	0.59(8)	0.55(9)	0.52(7)	-0.11(6)	0.10(6)	0.15(6)

Sample 55b

T1	0.0758(2)	0.1678(2)	0.22923(9)	0.59(4)	0.63(4)	0.54(4)	0.59(4)	0.01(3)	0.11(3)	-0.04(3)
T11	0.5859(2)	0.3311(2)	0.22905(9)	0.52(4)	0.57(4)	0.44(4)	0.54(4)	-0.02(3)	0.03(3)	0.00(3)
M1	0	0.9926(3)	0.5	0.65(4)	0.74(5)	0.40(5)	0.82(5)	0	0.20(4)	0
M2	0	0.32175(3)	0.5	0.58(4)	0.67(5)	0.57(5)	0.47(4)	0	0.05(4)	0
M3	0.5	0.1612(3)	0.5	0.61(5)	0.57(7)	0.43(7)	0.81(7)	0	0.06(6)	0
A	0	0.5017(3)	0	1.84(3)	2.00(5)	1.78(4)	1.70(4)	0	0.27(3)	0
O1	0.0396(5)	0.9990(5)	0.1712(2)	1.4(1)	2.2(1)	0.88(8)	1.09(8)	0.1(1)	0.12(8)	-0.1(1)
O2	0.3204(6)	0.2385(5)	0.1724(3)	1.4(1)	1.3(1)	2.1(1)	0.8(1)	-0.5(1)	0.15(8)	-0.08(9)
O22	0.8145(7)	0.2572(4)	0.1588(3)	1.4(1)	1.4(1)	1.6(1)	1.2(1)	0.4(1)	0.14(8)	-0.08(8)
O3	0.1150(6)	0.1731(4)	0.3927(2)	0.68(8)	0.8(1)	0.7(1)	0.59(8)	0.11(8)	0.15(7)	-0.05(7)
O33	0.6637(5)	0.3253(5)	0.3922(2)	0.59(8)	0.55(9)	0.69(9)	0.49(8)	-0.05(9)	-0.02(7)	-0.02(7)
O4	0.1086(5)	0.4704(4)	0.3981(2)	0.62(7)	0.73(8)	0.57(8)	0.56(7)	-0.05(7)	0.14(6)	0.12(5)

Sample 130(1)

T1	0.0747(2)	0.1683(2)	0.22799(9)	0.61(3)	0.65(3)	0.64(3)	0.55(3)	0.02(2)	0.12(2)	-0.01(2)
T11	0.5844(2)	0.3316(2)	0.22810(8)	0.69(3)	0.78(3)	0.65(3)	0.62(3)	0(2)	0.09(2)	0.01(2)
M1	0	0.9917(2)	0.5	0.91(3)	0.98(3)	0.75(3)	1.05(3)	0	0.28(3)	0
M2	0	0.3224(2)	0.5	0.70(3)	0.82(4)	0.73(3)	0.54(4)	0	0.10(3)	0
M3	0.5	0.1608(2)	0.5	0.86(3)	0.67(4)	0.83(4)	1.04(5)	0	0.06(3)	0
A	0	0.5012(2)	0	2.17(3)	2.28(3)	2.15(3)	2.04(3)	0	0.33(3)	0
O1	0.0329(4)	0.9990(4)	0.1719(2)	1.62(7)	2.40(8)	1.22(6)	1.11(6)	0.10(8)	-0.03(6)	0.01(8)
O2	0.3230(5)	0.2364(3)	0.1725(2)	1.62(8)	1.62(8)	2.12(9)	1.1(1)	-0.66(8)	0.30(7)	-0.15(7)
O22	0.8166(5)	0.2614(3)	0.1595(2)	1.48(8)	1.56(8)	1.95(9)	0.90(9)	0.46(7)	0.15(7)	0.09(6)
O3	0.1155(4)	0.1741(3)	0.3940(2)	0.96(7)	0.94(7)	1.06(8)	0.85(7)	0.07(6)	0.06(6)	-0.17(6)
O33	0.6622(4)	0.3264(4)	0.3928(2)	0.95(6)	0.92(7)	1.15(7)	0.76(7)	-0.05(6)	0.14(6)	-0.05(6)
O4	0.1103(3)	0.4727(2)	0.3993(2)	0.61(5)	0.81(6)	0.50(7)	0.52(5)	-0.06(4)	0.12(5)	0.21(4)

Sample 130(2)

T1	0.0755(2)	0.1687(2)	0.22887(9)	0.72(3)	0.84(3)	0.52(3)	0.79(3)	0.05(2)	0.15(2)	-0.01(2)
T11	0.5850(2)	0.3322(2)	0.22855(8)	0.76(3)	0.90(3)	0.47(3)	0.89(3)	0.02(2)	0.10(2)	0.01(2)
M1	0	0.99201(2)	0.5	0.96(2)	1.14(3)	0.60(3)	1.18(3)	0	0.27(3)	0
M2	0	0.3225(2)	0.5	0.66(3)	0.86(4)	0.46(3)	0.63(4)	0	0.05(3)	0
M3	0.5	0.1606(2)	0.5	0.93(3)	0.82(4)	0.63(4)	1.17(4)	0	0.05(3)	0
A	0	0.5014(2)	0	2.17(2)	2.37(4)	1.93(3)	2.19(3)	0	0.36(3)	0
O1	0.0379(4)	0.9998(3)	0.1718(2)	1.59(7)	2.39(8)	0.90(5)	1.32(5)	0.20(8)	-0.05(5)	-0.12(7)
O2	0.3209(5)	0.2391(3)	0.1729(2)	1.63(8)	1.63(9)	2.12(9)	1.10(8)	-0.65(7)	0.12(6)	-0.11(6)
O22	0.8142(5)	0.2593(3)	0.1584(2)	1.45(7)	1.50(9)	1.75(9)	1.06(7)	0.51(6)	0.12(6)	0.03(5)
O3	0.1158(5)	0.1746(3)	0.3935(2)	0.98(6)	1.28(8)	0.72(6)	0.88(6)	0.05(5)	0.02(5)	-0.03(5)
O33	0.6610(4)	0.3270(4)	0.3926(2)	0.99(6)	1.01(7)	0.94(6)	1.00(7)	-0.05(6)	0.14(5)	-0.02(6)
O4	0.1109(4)	0.4725(3)	0.3987(2)	0.95(5)	1.13(6)	0.75(5)	0.98(5)	-0.08(4)	0.23(4)	0.15(3)

Sample 137

T1	0.0750(2)	0.1688(2)	0.2282(2)	0.47(4)	0.24(5)	0.51(6)	0.70(6)	-0.02(3)	0.21(4)	-0.07(3)
T11	0.5856(2)	0.3323(2)	0.2280(2)	0.62(5)	0.34(5)	0.53(6)	1.03(7)	-0.02(3)	0.23(4)	-0.06(4)
M1	0	0.9911(3)	0.5	0.75(4)	0.65(4)	0.46(5)	1.26(5)	0	0.44(3)	0
M2	0	0.3218(4)	0.5	0.77(2)	0.67(5)	0.81(5)	0.86(7)	0	0.19(5)	0
M3	0.5	0.1605(3)	0.5	0.62(6)	0.23(6)	0.34(7)	1.30(9)	0	0.17(5)	0
A	0	0.5015(3)	0	1.90(5)	1.77(4)	1.80(4)	2.14(5)	0	0.40(4)	0
O1	0.0373(5)	1.0000(5)	0.1712(2)	1.5(1)	2.07(9)	0.99(7)	1.42(8)	0.0(1)	0.08(7)	0.0(1)
O2	0.3189(7)	0.2397(5)	0.1708(4)	1.6(1)	1.0(1)	2.1(1)	1.7(2)	-0.5(1)	0.5(1)	-0.5(1)
O22	0.8173(7)	0.2608(5)	0.1602(5)	1.4(1)	1.1(1)	2.0(1)	1.2(1)	0.4(1)	0.2(1)	-0.1(1)
O3	0.1147(6)	0.1751(5)	0.3931(4)	0.9(1)	0.65(9)	0.9(1)	1.4(1)	0.20(8)	0.28(8)	0.06(9)
O33	0.6627(6)	0.3276(5)	0.3927(4)	0.83(9)	0.49(9)	1.2(1)	0.8(1)	-0.05(8)	0.06(8)	0.05(9)
O4	0.1092(4)	0.4721(3)	0.3984(2)	0.52(7)	0.64(7)	0.26(9)	0.76(8)	-0.26(5)	0.35(6)	0.14(5)

Sample 104

T1	0.0754(1)	0.1680(1)	0.22841(8)	0.61(2)	0.77(3)	0.33(3)	0.71(3)	0.02(2)	0.09(2)	-0.01(2)
T11	0.5849(1)	0.3310(1)	0.22840(7)	0.77(3)	1.01(3)	0.37(3)	0.94(3)	0.01(2)	0.20(2)	0.02(2)
M1	0	0.9912(1)	0.5	0.83(3)	1.07(3)	0.38(3)	1.07(3)	0	0.32(2)	0
M2	0	0.3218(2)	0.5	0.79(3)	1.12(4)	0.51(3)	0.76(4)	0	0.21(3)	0
M3	0.5	0.1606(2)	0.5	0.92(3)	0.98(4)	0.60(4)	1.15(5)	0	0.09(3)	0
A	0	0.5010(2)	0	2.25(2)	2.58(3)	1.84(3)	2.29(3)	0	0.36(3)	0
O1	0.0356(4)	0.9991(3)	0.1717(2)	1.75(6)	2.69(7)	1.01(5)	1.47(6)	0.20(7)	0.17(5)	-0.11(6)
O2	0.3223(5)	0.2371(3)	0.1729(2)	1.78(7)	2.06(7)	1.87(7)	1.46(9)	-0.62(7)	0.44(6)	-0.13(6)
O22	0.8163(4)	0.2601(3)	0.1598(2)	1.63(7)	1.81(7)	1.70(8)	1.38(8)	0.58(6)	0.32(6)	0.14(5)
O3	0.1181(4)	0.1739(3)	0.3942(2)	1.10(6)	1.56(6)	0.77(7)	0.93(6)	0.03(5)	0.15(5)	-0.01(5)
O33	0.6622(4)	0.3254(3)	0.3926(2)	1.15(6)	1.56(6)	0.86(6)	1.07(7)	0.01(5)	0.39(5)	0.11(5)
O4	0.1097(3)	0.4716(2)	0.3985(2)	0.80(5)	0.96(5)	0.44(5)	0.98(5)	-0.07(3)	0.15(4)	0.23(4)

Sample 54b

T1	0.0753(2)	0.1690(2)	0.22801(9)	0.43(3)	0.48(3)	0.58(4)	0.23(3)	-0.01(2)	0.01(2)	-0.05(2)
T11	0.5851(2)	0.3320(2)	0.22782(9)	0.46(3)	0.50(3)	0.52(4)	0.32(4)	-0.02(2)	-0.01(2)	-0.04(2)
M1	0	0.9911(3)	0.5	0.51(3)	0.63(4)	0.44(4)	0.49(4)	0	0.23(3)	0
M2	0	0.3224(3)	0.5	0.35(4)	0.40(5)	0.51(5)	0.11(5)	0	-0.04(3)	0
M3	0.5	0.1602(2)	0.5	0.54(3)	0.41(5)	0.64(5)	0.50(4)	0	-0.09(3)	0
A	0	0.5015(2)	0	1.88(3)	1.99(4)	1.93(4)	1.67(4)	0	0.21(3)	0
O1	0.0407(4)	1.0004(4)	0.1711(2)	1.38(7)	2.23(8)	1.06(7)	0.73(7)	0.19(9)	-0.03(6)	0.01(8)
O2	0.3201(6)	0.2402(4)	0.1719(3)	1.45(9)	1.34(9)	2.2(1)	0.80(9)	-0.49(9)	0.14(7)	0.01(8)
O22	0.8124(5)	0.2580(3)	0.1585(3)	1.24(8)	1.28(9)	1.63(9)	0.80(9)	0.42(8)	0.17(7)	0.07(7)
O3	0.1148(5)	0.1751(3)	0.3933(2)	0.91(7)	0.96(8)	1.2(1)	0.48(7)	0.14(7)	-0.05(6)	-0.30(6)
O33	0.6640(4)	0.3264(4)	0.3925(2)	0.84(7)	0.82(7)	1.13(8)	0.55(7)	0.05(7)	0.07(6)	-0.30(7)
O4	0.1086(4)	0.4715(3)	0.3978(2)	0.57(6)	0.77(6)	0.63(7)	0.34(6)	-0.05(5)	0.15(5)	0.16(5)

Sample 177

T1	0.0749(2)	0.1681(2)	0.2280(1)	0.49(3)	0.42(3)	0.56(3)	0.50(3)	0.03(2)	0.11(2)	-0.02(2)
T11	0.5850(2)	0.3318(2)	0.2277(1)	0.62(3)	0.56(3)	0.59(3)	0.69(4)	0.05(2)	0.08(2)	-0.01(2)
M1	0	0.9910(2)	0.5	0.72(2)	0.78(3)	0.53(3)	0.90(3)	0	0.29(2)	0
M2	0	0.3215(2)	0.5	0.62(3)	0.65(4)	0.66(4)	0.53(5)	0	0.09(3)	0
M3	0.5	0.1602(2)	0.5	0.76(3)	0.56(4)	0.72(4)	0.95(5)	0	0.04(3)	0
A	0	0.5010(2)	0	2.07(2)	2.09(3)	2.03(3)	2.06(3)	0(6)	0.33(2)	0(6)
O1	0.0362(4)	0.9990(4)	0.1716(2)	1.53(7)	2.20(7)	1.02(5)	1.21(6)	0.29(8)	-0.08(5)	0.07(9)
O2	0.3219(5)	0.2379(4)	0.1724(3)	1.54(8)	1.43(8)	2.04(9)	1.2(1)	-0.47(7)	0.33(7)	-0.18(8)
O22	0.8155(5)	0.2600(3)	0.1595(3)	1.37(8)	1.21(7)	1.93(9)	0.93(9)	0.55(6)	0.15(7)	0.04(7)
O3	0.1150(4)	0.1738(3)	0.3928(3)	0.81(6)	0.89(6)	0.77(7)	0.71(7)	0.14(5)	-0.04(5)	-0.01(5)
O33	0.6627(4)	0.3266(4)	0.3934(3)	0.90(6)	0.71(6)	1.18(7)	0.78(7)	0.03(6)	0.08(5)	0.17(6)
O4	0.1098(3)	0.4720(2)	0.3985(2)	0.61(5)	0.65(5)	0.61(6)	0.61(5)	-0.04(4)	0.19(4)	0.17(4)

Sample 140(1)

T1	0.0753(1)	0.1682(2)	0.22833(8)	0.62(2)	0.61(3)	0.63(3)	0.61(3)	0.00(2)	0.12(2)	-0.01(2)
T11	0.5851(1)	0.3315(2)	0.22829(7)	0.60(2)	0.60(3)	0.58(3)	0.62(3)	-0.01(2)	0.08(2)	0.00(2)
M1	0	0.9913(2)	0.5	0.94(2)	1.01(3)	0.80(3)	1.07(3)	0	0.36(3)	0
M2	0	0.3220(2)	0.5	0.63(3)	0.69(3)	0.68(3)	0.51(4)	0	0.11(3)	0
M3	0.5	0.1601(2)	0.5	0.75(3)	0.58(3)	0.76(4)	0.90(4)	0	0.10(3)	0
A	0	0.5008(2)	0	1.90(2)	1.95(3)	1.89(3)	1.83(3)	0	0.30(2)	0
O1	0.0386(3)	0.9989(3)	0.1715(2)	1.55(6)	2.25(7)	1.16(6)	1.11(6)	0.12(7)	0.01(5)	-0.12(7)
O2	0.3204(4)	0.2390(3)	0.1725(2)	1.69(8)	1.59(8)	2.41(9)	1.08(9)	-0.56(7)	0.25(6)	-0.08(7)
O22	0.8141(4)	0.2590(3)	0.1587(2)	1.47(7)	1.57(8)	1.89(8)	0.92(8)	0.43(6)	0.19(6)	0.05(6)
O3	0.1159(4)	0.1743(3)	0.3932(2)	0.77(6)	0.87(7)	0.86(8)	0.57(7)	0.09(5)	0.13(5)	-0.08(5)
O33	0.6622(4)	0.3260(3)	0.3922(2)	0.84(6)	0.87(6)	0.96(6)	0.71(7)	0.03(5)	0.17(5)	0.00(5)
O4	0.1096(3)	0.4720(2)	0.3980(2)	0.77(5)	0.84(5)	0.77(6)	0.72(6)	-0.03(4)	0.24(4)	0.16(4)

Sample 140(2)

T1	0.07481(9)	0.16864(9)	0.22783(5)	0.59(2)	0.51(2)	0.67(2)	0.57(2)	0.00(1)	0.09(1)	-0.02(1)
T11	0.58434(9)	0.33204(9)	0.22770(5)	0.62(2)	0.61(2)	0.62(2)	0.64(2)	0.00(1)	0.11(1)	-0.01(1)
M1	0	0.9923(1)	0.5	0.72(2)	0.73(2)	0.65(2)	0.82(2)	0	0.27(2)	0
M2	0	0.3230(1)	0.5	0.57(2)	0.55(3)	0.66(3)	0.50(3)	0	0.08(2)	0
M3	0.5	0.1611(1)	0.5	0.72(2)	0.57(3)	0.75(3)	0.81(3)	0	0.05(2)	0
A	0	0.5015(1)	0	2.08(2)	2.09(2)	2.07(2)	2.04(2)	0	0.32(2)	0
O1	0.0363(3)	0.9996(2)	0.1716(1)	1.56(4)	2.28(5)	1.17(4)	1.15(4)	0.14(5)	0.08(4)	0.00(4)
O2	0.3206(3)	0.2386(2)	0.1720(1)	1.57(5)	1.47(5)	2.26(6)	0.96(5)	-0.55(5)	0.21(4)	-0.10(4)
O22	0.8153(3)	0.2602(2)	0.1592(1)	1.48(5)	1.35(5)	2.01(6)	1.08(5)	0.61(4)	0.26(4)	0.16(4)
O3	0.1160(3)	0.1745(2)	0.3935(1)	0.97(4)	1.00(4)	1.12(5)	0.75(4)	0.04(4)	0.08(3)	-0.14(3)
O33	0.6620(3)	0.3266(2)	0.3925(1)	0.96(4)	0.96(4)	1.14(5)	0.78(4)	0.01(4)	0.18(3)	0.03(3)
O4	0.1100(2)	0.4729(2)	0.3983(1)	0.73(3)	0.74(3)	0.83(4)	0.61(4)	-0.03(3)	0.12(3)	0.14(3)

Sample 24

T1	0.0748(2)	0.1679(2)	0.22739(8)	0.49(3)	0.64(3)	0.73(3)	0.09(3)	0.01(2)	0.04(2)	-0.03(2)
T11	0.5847(2)	0.3313(2)	0.22725(8)	0.49(3)	0.65(3)	0.68(3)	0.10(3)	0.00(2)	-0.05(2)	-0.01(2)
M1	0	0.99099(2)	0.5	0.64(2)	0.93(3)	0.73(3)	0.30(3)	0	0.22(2)	0
M2	0	0.3213(2)	0.5	0.48(3)	0.65(4)	0.75(4)	0.03(4)	0	0.00(3)	0
M3	0.5	0.1605(2)	0.5	0.63(3)	0.70(4)	0.85(5)	0.28(4)	0	-0.04(3)	0
A	0	0.5009(2)	0	1.94(3)	2.14(4)	2.20(4)	1.43(3)	0	0.20(3)	0
O1	0.0345(4)	0.9994(4)	0.1714(2)	1.43(7)	2.37(8)	1.31(7)	0.51(6)	0.08(9)	-0.03(6)	-0.03(7)
O2	0.3222(5)	0.2370(4)	0.1730(2)	1.44(8)	1.38(8)	2.4(1)	0.51(8)	-0.53(8)	0.06(6)	-0.10(7)
O22	0.8161(5)	0.2607(3)	0.1588(2)	1.33(8)	1.44(8)	2.1(1)	0.36(8)	0.63(7)	0.06(6)	0.09(6)
O3	0.1146(5)	0.1738(3)	0.3942(2)	0.87(7)	1.07(7)	1.24(9)	0.29(7)	0.10(6)	0.07(5)	-0.11(6)
O33	0.6636(4)	0.3263(4)	0.3932(2)	0.88(7)	1.00(7)	1.23(7)	0.35(7)	0.07(6)	0.01(6)	0.01(6)
O4	0.1080(4)	0.4712(3)	0.3979(2)	0.60(5)	0.89(6)	0.79(7)	0.10(6)	-0.03(4)	0.06(5)	0.22(5)

Sample 47

T1	0.0748(2)	0.1697(3)	0.22575(8)	0.47(3)	0.58(4)	0.53(3)	0.32(3)	0.07(3)	0.14(2)	0.06(2)
T11	0.5791(2)	0.3344(3)	0.2252(1)	1.03(4)	0.94(4)	1.11(4)	1.04(4)	0.09(3)	0.16(3)	0.09(2)
M1	0	0.9997(3)	0.5	0.74(1)	0.80(1)	0.76(1)	0.72(1)	0	0.26(1)	0
M2	0	0.3317(3)	0.5	0.69(3)	0.66(4)	0.90(4)	0.50(3)	0	0.07(3)	0
M3	0.5	0.1674(3)	0.5	0.80(3)	0.63(3)	1.02(3)	0.71(3)	0	0.05(2)	0
A	0	0.5013(2)	0	2.51(2)	2.42(3)	2.43(2)	2.64(3)	0	0.35(2)	0
O1	0.0389(3)	1.0014(5)	0.1699(1)	1.70(7)	2.49(6)	1.31(4)	1.22(4)	0.1(1)	0.12(4)	-0.15(9)
O2	0.3180(7)	0.2417(5)	0.1689(3)	1.83(9)	1.7(1)	2.3(1)	1.57(9)	-0.4(1)	0.54(8)	-0.20(8)
O22	0.8099(6)	0.2585(4)	0.1641(2)	1.56(8)	1.29(9)	2.3(1)	1.04(7)	0.71(9)	0.02(7)	-0.16(7)
O3	0.1289(6)	0.1749(4)	0.3933(2)	1.08(7)	1.69(9)	0.98(7)	0.50(5)	-0.49(7)	0.05(6)	-0.19(5)
O33	0.6392(8)	0.3331(4)	0.3885(3)	1.60(9)	2.1(1)	1.7(1)	1.09(8)	-0.54(8)	0.44(8)	-0.31(6)
O4	0.1158(3)	0.4953(6)	0.3961(1)	1.83(8)	1.32(5)	3.46(9)	0.69(3)	0.4(1)	0.11(3)	0.1(1)

Sample 103

T1	0.0749(2)	0.1684(3)	0.2272(1)	0.83(4)	0.62(4)	0.89(5)	1.01(5)	0.03(3)	0.20(3)	0.03(3)
T11	0.5832(2)	0.3325(3)	0.2272(1)	0.82(4)	0.65(4)	0.76(5)	1.07(6)	-0.01(3)	0.20(3)	0.02(3)
M1	0	0.9933(3)	0.5	0.86(3)	0.74(3)	0.81(4)	1.07(4)	0	0.31(3)	0
M2	0	0.3247(3)	0.5	0.49(4)	0.26(4)	0.63(5)	0.57(5)	0	0.06(4)	0
M3	0.5	0.1625(3)	0.5	1.26(4)	0.94(4)	1.35(5)	1.45(6)	0	0.14(4)	0
A	0	0.5015(2)	0	2.11(3)	1.95(4)	1.95(4)	2.41(5)	0	0.37(4)	0
O1	0.0406(5)	1.0001(6)	0.1705(2)	1.8(1)	2.1(1)	1.34(4)	1.67(9)	0.2(1)	0.03(8)	-0.2(1)
O2	0.3199(7)	0.2405(5)	0.1715(3)	1.9(1)	1.7(1)	2.7(1)	1.3(1)	-0.5(1)	0.30(9)	-0.1(1)
O22	0.8125(7)	0.2575(5)	0.1589(4)	1.4(1)	1.0(1)	1.7(1)	1.4(1)	0.57(9)	0.24(9)	0.14(9)
O3	0.1167(6)	0.1736(4)	0.3918(4)	1.0(1)	0.8(1)	1.4(1)	0.8(1)	0.04(8)	0.13(7)	-0.01(8)
O33	0.6580(6)	0.3277(5)	0.3918(3)	0.9(1)	0.7(1)	1.0(1)	1.0(1)	-0.05(8)	0.13(8)	0.03(9)
O4	0.1112(4)	0.4753(4)	0.3975(2)	1.04(8)	0.98(8)	1.1(1)	1.01(8)	0.09(6)	0.20(6)	0.04(6)

Notes: The form of the anisotropic thermal parameter is $\exp[-1/4 (B_{11}h^2a^{*2} + B_{22}k^2b^{*2} + B_{33}l^2c^{*2} + 2B_{12}hka^*b^* + 2B_{13}hla^*c^* + 2B_{23}klb^*c^*)]$; Labels (1), (2), a and b as in Table 2.