

AM-90-426

Structural variation associated with compositional variation and order-disorder behavior in anorthite-rich feldspars

R. J. Angel, M. A. Carpenter, L. W. Finger

For deposit: Tables 2, 3, 4, and 5

American Mineralogist, 75, 1-2, 150-162.

(46)

Table 2: Positional and thermal parameters from $P\bar{1}$ refinement of Val Pasmaeda.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2652(2)	0.9861(1)	0.0869(1)	0.0033(2)	0.0030(1)	0.0016(1)	-.0002(1)	0.0009(1)	-.0008(1)	1.27
Mzoo	0.2683(2)	0.0313(1)	0.5430(1)	0.0030(2)	0.0016(1)	0.0012(1)	0.0006(1)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.86
Moio	0.7735(2)	0.5359(1)	0.5412(1)	0.0028(2)	0.0015(1)	0.0012(1)	0.0005(1)	0.0004(1)	-.0002(1)	0.85
Mzio	0.7637(2)	0.5051(1)	0.0751(1)	0.0023(2)	0.0031(1)	0.0023(1)	0.0007(1)	0.0003(1)	-.0015(1)	1.51
T1ooo	0.0090(2)	0.1589(1)	0.1039(1)	0.0020(3)	0.0008(1)	0.0008(1)	-.0003(1)	0.0005(1)	-.0000(1)	0.50
T1ooi	0.5066(2)	0.6560(1)	0.6045(1)	0.0029(3)	0.0009(1)	0.0009(1)	-.0002(1)	0.0007(1)	0.0000(1)	0.60
T1ozo	0.0069(3)	0.1609(1)	0.6111(1)	0.0026(3)	0.0009(1)	0.0009(1)	0.0002(2)	0.0008(2)	0.0002(1)	0.56
T1ozi	0.4988(3)	0.6660(1)	0.1129(1)	0.0034(3)	0.0009(1)	0.0006(1)	0.0001(1)	0.0008(2)	-.0000(1)	0.57
T1moo	0.9909(2)	0.8153(1)	0.1176(1)	0.0019(3)	0.0011(1)	0.0008(1)	0.0002(1)	0.0006(2)	0.0001(1)	0.56
T1moi	0.5083(3)	0.3146(1)	0.6214(1)	0.0025(3)	0.0008(1)	0.0007(1)	0.0004(2)	0.0004(2)	0.0000(1)	0.53
T1mzo	0.0058(2)	0.8153(1)	0.6132(1)	0.0026(3)	0.0011(1)	0.0005(1)	0.0001(1)	0.0003(1)	0.0000(1)	0.56
T1mzi	0.5050(2)	0.3203(1)	0.1103(1)	0.0030(3)	0.0009(1)	0.0009(1)	0.0004(1)	0.0008(1)	0.0000(1)	0.59
T2ooo	0.6843(2)	0.1132(1)	0.1512(1)	0.0023(3)	0.0009(1)	0.0008(1)	-.0000(1)	0.0004(2)	-.0001(1)	0.57
T2ooi	0.1910(3)	0.6111(1)	0.6677(1)	0.0022(3)	0.0008(1)	0.0009(1)	-.0002(1)	0.0005(2)	0.0001(1)	0.55
T2ozo	0.6817(2)	0.1034(1)	0.6647(1)	0.0020(3)	0.0007(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.0004(1)	-.0000(1)	0.53
T2ozi	0.1707(2)	0.6067(1)	0.1491(1)	0.0022(3)	0.0008(1)	0.0010(1)	-.0002(1)	0.0005(1)	0.0001(1)	0.56
T2moo	0.6739(2)	0.8829(1)	0.1877(1)	0.0027(3)	0.0009(1)	0.0008(1)	0.0001(1)	0.0007(1)	0.0000(1)	0.57
T2moi	0.1761(2)	0.3793(1)	0.6733(1)	0.0023(3)	0.0007(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.0006(1)	0.0000(1)	0.51
T2mzo	0.6814(3)	0.8716(1)	0.6724(1)	0.0024(3)	0.0007(1)	0.0009(1)	0.0003(1)	0.0005(2)	0.0001(1)	0.54
T2mzi	0.1855(3)	0.3776(1)	0.1816(1)	0.0020(3)	0.0007(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.0004(2)	0.0001(1)	0.51
Oa1oo	0.0263(6)	0.1246(3)	-.0043(3)	0.0044(8)	0.0012(3)	0.0009(2)	0.0005(4)	0.0013(4)	0.0002(2)	0.78
Oa1oi	0.4860(6)	0.6236(3)	0.4859(3)	0.0051(9)	0.0014(3)	0.0006(2)	0.0005(4)	0.0008(4)	0.0002(2)	0.81
Oa1zo	0.9811(6)	0.1256(3)	0.4836(3)	0.0044(8)	0.0012(3)	0.0009(2)	0.0005(4)	0.0013(4)	0.0002(2)	0.73
Oa1zi	0.5179(6)	0.6238(3)	0.9965(3)	0.0044(8)	0.0014(3)	0.0009(2)	0.0001(4)	0.0008(4)	0.0002(2)	0.84
Oa2oo	0.5757(6)	0.9906(3)	0.1434(3)	0.0020(8)	0.0006(2)	0.0015(3)	0.0007(3)	0.0002(4)	0.0004(2)	0.69
Oa2oi	0.0721(6)	0.4881(3)	0.6346(3)	0.0026(8)	0.0007(3)	0.0017(3)	-.0000(4)	0.0009(4)	0.0001(2)	0.70
Oa2zo	0.5723(6)	0.9892(3)	0.6370(3)	0.0025(9)	0.0007(3)	0.0015(3)	0.0004(4)	-.0000(4)	0.0002(2)	0.79
Oa2zi	0.0716(5)	0.4924(3)	0.1383(3)	0.0029(8)	0.0005(2)	0.0021(3)	-.0004(3)	0.0016(4)	0.0000(2)	0.71
Obooo	0.8133(5)	0.1016(3)	0.0798(3)	0.0036(7)	0.0013(2)	0.0011(2)	-.0004(3)	0.0007(4)	-.0001(2)	0.80
Obooi	0.3331(6)	0.5952(3)	0.6053(3)	0.0033(7)	0.0012(2)	0.0015(3)	-.0001(3)	0.0015(4)	-.0001(2)	0.78
Obozo	0.8117(6)	0.0967(3)	0.6057(3)	0.0034(8)	0.0014(2)	0.0010(2)	-.0012(3)	0.0008(4)	-.0002(2)	0.78
Obozi	0.2857(6)	0.6034(3)	0.0792(3)	0.0044(8)	0.0014(3)	0.0018(3)	-.0002(3)	0.0018(4)	-.0002(2)	0.95
Obmoo	0.8177(6)	0.8549(3)	0.1444(3)	0.0031(8)	0.0027(3)	0.0021(3)	0.0011(4)	0.0017(4)	0.0000(2)	1.18
Obmoi	0.2984(6)	0.3554(3)	0.6111(3)	0.0039(8)	0.0013(2)	0.0012(2)	0.0005(3)	0.0011(4)	0.0001(2)	0.80
Obmzo	0.8105(6)	0.8521(3)	0.6025(3)	0.0027(8)	0.0016(3)	0.0015(3)	0.0003(4)	0.0009(4)	0.0003(2)	0.87
Obmzi	0.3421(6)	0.3577(3)	0.1342(3)	0.0052(8)	0.0022(3)	0.0022(3)	0.0009(4)	0.0020(4)	-.0002(2)	1.25
Ocooo	0.0151(6)	0.2792(3)	0.1354(3)	0.0061(9)	0.0009(2)	0.0020(3)	-.0003(4)	0.0020(4)	0.0000(2)	1.02
Ocooi	0.5095(6)	0.7772(3)	0.6350(3)	0.0028(8)	0.0014(2)	0.0016(2)	-.0003(3)	0.0010(4)	-.0003(2)	0.87

Ocozo	0.0215(8)	0.2910(4)	0.6485(5)	0.005 (1)	0.0048(3)	0.0023(4)	-.0003(5)	0.0020(6)	-.0006(3)	0.79
Ocozi	0.5078(8)	0.7962(4)	0.1495(4)	0.002 (1)	0.0009(3)	0.0019(4)	-.0002(5)	0.0006(5)	-.0003(3)	0.84
Ocmoo	-.0000(8)	0.6801(4)	0.1034(5)	0.004 (1)	0.0006(3)	0.0017(4)	0.0007(5)	0.0009(6)	0.0001(3)	0.84
Ocmoi	0.5148(8)	0.1799(4)	0.6107(5)	0.003 (1)	0.0010(3)	0.0012(4)	-.0000(5)	0.0004(5)	0.0002(3)	0.77
Ocmzo	0.0093(8)	0.6885(4)	0.6006(4)	0.004 (1)	0.0008(3)	0.0010(3)	0.0001(5)	0.0011(5)	-.0003(3)	0.64
Ocmzi	0.5075(8)	0.1955(4)	0.0993(5)	0.003 (1)	0.0012(3)	0.0011(4)	0.0007(5)	-.0007(6)	-.0005(3)	0.91
Odooo	0.1833(8)	0.1053(5)	0.1910(4)	0.003 (1)	0.0019(4)	0.0003(3)	0.0007(5)	0.0000(5)	0.0000(3)	0.76
Odooi	0.7012(8)	0.6079(4)	0.6800(4)	0.002 (1)	0.0013(4)	0.0012(3)	0.0008(5)	-.0000(5)	0.0002(3)	0.76
Odozo	0.2136(8)	0.1025(5)	0.6840(4)	0.005 (1)	0.0018(4)	0.0005(3)	0.0003(5)	0.0010(5)	-.0002(3)	0.81
Odozi	0.6935(8)	0.6043(4)	0.2013(4)	0.005 (1)	0.0012(4)	0.0007(3)	0.0007(5)	0.0007(5)	0.0002(3)	0.81
Odmoo	0.2038(8)	0.8732(4)	0.2108(4)	0.002 (1)	0.0014(3)	0.0010(3)	0.0001(5)	-.0004(5)	-.0008(3)	0.83
Odmoi	0.6900(8)	0.3636(5)	0.7317(4)	0.005 (1)	0.0022(4)	0.0011(3)	0.0001(6)	-.0000(5)	-.0000(3)	1.24
Odmzo	0.1742(8)	0.8569(4)	0.7183(4)	0.003 (1)	0.0016(4)	0.0007(3)	-.0002(5)	-.0013(5)	-.0003(3)	1.03
Odmzi	0.6992(8)	0.3692(5)	0.1983(4)	0.003 (1)	0.0020(4)	0.0012(3)	0.0004(5)	-.0004(5)	-.0002(3)	1.09

Table 2: Positional and thermal parameters from $P\bar{1}$ refinement of Monte Somma.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2659(2)	0.9867(1)	0.0864(1)	0.0026(3)	0.0031(1)	0.0015(1)	-0.0002(1)	0.0007(2)	-0.0008(1)	1.24
Mzoo	0.2683(2)	0.0310(1)	0.5432(1)	0.0027(3)	0.0019(1)	0.0013(1)	0.0008(1)	0.0006(2)	-0.0002(1)	0.93
Moio	0.7736(2)	0.5353(1)	0.5421(1)	0.0019(3)	0.0014(1)	0.0012(1)	0.0005(1)	0.0002(1)	-0.0003(1)	0.79
Mzio	0.7639(2)	0.5073(1)	0.0726(1)	0.0016(3)	0.0041(1)	0.0028(1)	0.0009(2)	-0.0002(2)	-0.0027(1)	1.90
Tlooo	0.0094(3)	0.1592(2)	0.1043(2)	0.0024(4)	0.0007(1)	0.0010(1)	0.0002(2)	0.0011(2)	0.0001(1)	0.47
Tlooi	0.5064(3)	0.6561(2)	0.6040(2)	0.0021(4)	0.0007(1)	0.0004(1)	-0.0003(2)	0.0002(2)	0.0000(1)	0.43
Tlozo	0.0069(4)	0.1614(2)	0.6116(2)	0.0020(5)	0.0005(1)	0.0011(1)	-0.0001(2)	0.0013(2)	-0.0001(1)	0.41
Tlozi	0.4987(4)	0.6658(2)	0.1124(2)	0.0016(5)	0.0010(2)	0.0002(1)	-0.0001(2)	-0.0002(2)	0.0000(1)	0.45
Tlmoo	0.9918(4)	0.8151(2)	0.1177(2)	0.0019(5)	0.0010(2)	0.0005(1)	-0.0000(2)	0.0006(2)	-0.0000(1)	0.46
Tlmoi	0.5073(4)	0.3145(2)	0.6211(2)	0.0019(5)	0.0005(2)	0.0006(2)	0.0004(2)	0.0004(2)	-0.0000(1)	0.38
Tlmzo	0.0056(3)	0.8156(2)	0.6132(2)	0.0024(5)	0.0009(1)	0.0005(1)	0.0004(2)	0.0005(2)	0.0001(1)	0.47
Tlmzi	0.5048(3)	0.3200(2)	0.1101(2)	0.0020(4)	0.0006(1)	0.0007(1)	0.0006(2)	0.0005(2)	-0.0000(1)	0.41
T2ooo	0.6855(4)	0.1133(2)	0.1521(2)	0.0025(5)	0.0007(1)	0.0008(1)	-0.0000(2)	0.0005(2)	-0.0000(1)	0.51
T2ooi	0.1909(3)	0.6113(2)	0.6667(2)	0.0013(5)	0.0007(1)	0.0008(1)	0.0003(2)	0.0004(2)	0.0000(1)	0.40
T2ozo	0.6817(3)	0.1038(2)	0.6645(2)	0.0018(4)	0.0006(1)	0.0008(1)	-0.0001(2)	0.0002(2)	0.0000(1)	0.48
T2ozi	0.1710(3)	0.6066(2)	0.1499(2)	0.0010(4)	0.0007(1)	0.0007(1)	-0.0001(2)	0.0003(2)	-0.0001(1)	0.39
T2moo	0.6739(3)	0.8831(2)	0.1875(2)	0.0014(4)	0.0006(1)	0.0008(1)	0.0003(2)	0.0007(2)	0.0000(1)	0.39
T2moi	0.1768(3)	0.3795(2)	0.6738(2)	0.0015(4)	0.0005(1)	0.0007(1)	0.0003(2)	0.0007(2)	0.0001(1)	0.36
T2mzo	0.6813(4)	0.8724(2)	0.6734(2)	0.0022(5)	0.0008(1)	0.0007(1)	0.0003(2)	-0.0000(2)	0.0002(1)	0.55
T2mzi	0.1864(4)	0.3773(2)	0.1811(2)	0.0015(4)	0.0007(1)	0.0008(1)	0.0001(2)	0.0007(2)	0.0001(1)	0.40
Oa1oo	0.0242(9)	0.1242(5)	-0.0051(5)	0.005 (1)	0.0013(4)	0.0011(4)	0.0002(5)	0.0015(6)	0.0002(3)	0.84
Oa1oi	0.4912(8)	0.6251(4)	0.4870(4)	0.002 (1)	0.0015(4)	0.0004(3)	0.0003(5)	0.0003(5)	-0.0001(3)	0.60
Oa1zo	0.9797(8)	0.1252(4)	0.4832(5)	0.005 (1)	0.0007(4)	0.0011(3)	0.0009(5)	0.0012(5)	0.0003(3)	0.68
Oa1zi	0.5176(8)	0.6249(4)	0.9968(4)	0.003 (1)	0.0015(4)	0.0002(3)	-0.0008(5)	0.0005(5)	-0.0003(3)	0.62
Oa2oo	0.5760(8)	0.9902(4)	0.1426(5)	0.002 (1)	0.0002(3)	0.0012(4)	0.0005(5)	0.0003(6)	0.0004(3)	0.44
Oa2oi	0.0730(9)	0.4881(5)	0.6345(5)	0.001 (1)	0.0012(4)	0.0014(4)	-0.0006(5)	-0.0003(6)	-0.0002(3)	0.80
Oa2zo	0.5728(8)	0.9893(5)	0.6373(5)	0.002 (1)	0.0003(4)	0.0014(4)	0.0012(5)	0.0004(6)	0.0005(3)	npd
Oa2zi	0.0726(9)	0.4924(5)	0.1391(5)	0.002 (1)	0.0012(4)	0.0018(4)	0.0007(6)	0.0010(6)	0.0000(3)	0.79
Obooo	0.8143(8)	0.1011(4)	0.0803(4)	0.004 (1)	0.0011(3)	0.0013(3)	-0.0003(5)	0.0011(5)	-0.0005(3)	0.75
Obooi	0.3305(8)	0.5964(4)	0.6034(4)	0.005 (1)	0.0009(3)	0.0018(4)	0.0000(5)	0.0026(6)	-0.0002(3)	0.76
Obozo	0.8120(7)	0.0975(4)	0.6058(4)	0.002 (1)	0.0010(3)	0.0012(3)	-0.0004(4)	0.0010(5)	-0.0005(3)	0.75
Obozi	0.2871(7)	0.6039(4)	0.0811(4)	0.0026(9)	0.0016(4)	0.0016(4)	-0.0008(5)	0.0015(5)	-0.0001(3)	0.84
Obmoo	0.8171(8)	0.8548(4)	0.1424(5)	0.004 (1)	0.0019(4)	0.0028(4)	-0.0001(5)	0.0034(6)	-0.0003(3)	npd
Obmoi	0.2984(8)	0.3563(4)	0.6116(4)	0.005 (1)	0.0015(4)	0.0013(3)	0.0004(5)	0.0018(6)	-0.0004(3)	0.93
Obmzo	0.8111(8)	0.8523(4)	0.6041(4)	0.002 (1)	0.0017(4)	0.0012(3)	0.0013(5)	0.0014(5)	0.0006(3)	0.67
Obmzi	0.3414(8)	0.3582(5)	0.1323(5)	0.005 (1)	0.0023(4)	0.0029(4)	0.0011(5)	0.0027(6)	-0.0002(3)	1.41
Ocooo	0.0164(8)	0.2801(4)	0.1368(4)	0.005 (1)	0.0007(3)	0.0016(3)	-0.0001(5)	0.0016(6)	0.0002(3)	0.79
Ocooi	0.5084(8)	0.7768(4)	0.6344(4)	0.002 (1)	0.0005(3)	0.0013(3)	-0.0012(4)	0.0002(5)	-0.0008(3)	npd

Ocozo	0.0201(6)	0.2899(3)	0.6477(3)	0.0058(9)	0.0011(2)	0.0019(3)	-0.0002(4)	0.0019(4)	-0.0001(2)	1.03
Ocozi	0.5087(6)	0.7965(3)	0.1499(3)	0.0040(8)	0.0009(2)	0.0016(2)	-0.0003(3)	0.0010(4)	-0.0001(2)	0.85
Ocmoo	0.0000(6)	0.6800(3)	0.1038(3)	0.0020(8)	0.0014(2)	0.0014(3)	0.0003(3)	0.0003(4)	-0.0002(2)	0.82
Ocmoi	0.5168(6)	0.1793(3)	0.6104(3)	0.0043(8)	0.0003(2)	0.0014(3)	-0.0001(3)	0.0004(4)	-0.0001(2)	0.77
Ocmzo	0.0084(6)	0.6885(3)	0.6006(3)	0.0034(8)	0.0011(2)	0.0009(2)	0.0005(3)	0.0005(4)	0.0003(2)	0.72
Ocmzi	0.5071(6)	0.1959(3)	0.0976(3)	0.0046(9)	0.0007(2)	0.0019(3)	0.0003(3)	0.0007(4)	-0.0001(2)	0.99
Odooo	0.1832(6)	0.1062(3)	0.1922(3)	0.0039(8)	0.0017(3)	0.0008(2)	0.0008(3)	0.0004(4)	-0.0000(2)	0.87
Odooi	0.7006(6)	0.6075(3)	0.6783(3)	0.0024(8)	0.0021(3)	0.0011(2)	0.0003(4)	0.0001(4)	0.0000(2)	0.96
Odozo	0.2135(6)	0.1033(3)	0.6835(3)	0.0031(8)	0.0012(2)	0.0009(2)	0.0002(3)	0.0002(4)	-0.0001(2)	0.75
Odozi	0.6894(6)	0.6035(3)	0.2005(3)	0.0036(8)	0.0015(3)	0.0008(2)	0.0006(4)	-0.0000(4)	0.0003(2)	0.86
Odmo0	0.2037(6)	0.8734(3)	0.2098(3)	0.0021(7)	0.0018(3)	0.0006(2)	0.0000(3)	-0.0003(3)	-0.0001(2)	0.79
Odmoi	0.6890(6)	0.3636(3)	0.7327(3)	0.0047(8)	0.0017(3)	0.0012(2)	0.0003(4)	-0.0004(4)	0.0001(2)	1.16
Odmzo	0.1727(6)	0.8564(3)	0.7192(3)	0.0049(9)	0.0019(3)	0.0007(2)	-0.0004(4)	-0.0004(4)	-0.0003(2)	1.11
Odmzi	0.7001(6)	0.3705(3)	0.1968(3)	0.0045(8)	0.0016(3)	0.0007(2)	0.0001(4)	0.0002(4)	-0.0001(2)	0.93

Table 2: Positional and thermal parameters from $P\bar{1}$ refinement of 115082a.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2655(3)	0.9871(2)	0.0856(2)	0.0042(3)	0.0049(2)	0.0023(1)	-.0002(2)	0.0013(2)	-.0013(1)	1.93
Mzoo	0.2681(2)	0.0301(1)	0.5445(1)	0.0036(3)	0.0026(1)	0.0017(1)	0.0008(1)	0.0007(2)	-.0002(1)	1.25
Moio	0.7733(3)	0.5344(2)	0.5431(1)	0.0033(3)	0.0025(1)	0.0018(1)	0.0008(2)	0.0005(2)	-.0007(1)	1.27
Mzio	0.7654(3)	0.5135(2)	0.0660(2)	0.0018(3)	0.0062(2)	0.0062(2)	0.0012(2)	-.0002(2)	-.0054(2)	3.36
Tlooo	0.0089(3)	0.1590(2)	0.1042(2)	0.0025(4)	0.0010(1)	0.0007(1)	-.0003(2)	0.0008(2)	0.0001(1)	0.51
Tlooi	0.5068(3)	0.6569(2)	0.6044(2)	0.0022(4)	0.0007(1)	0.0007(1)	0.0001(2)	0.0007(2)	0.0001(1)	0.44
Tlozo	0.0053(3)	0.1626(2)	0.6113(2)	0.0027(5)	0.0009(1)	0.0007(1)	-.0004(2)	0.0011(2)	-.0001(1)	0.48
Tlozi	0.4996(3)	0.6658(2)	0.1124(2)	0.0019(4)	0.0007(1)	0.0006(1)	0.0002(2)	0.0004(2)	0.0000(1)	0.42
Tlmoo	0.9938(3)	0.8154(2)	0.1185(2)	0.0026(4)	0.0010(2)	0.0007(1)	0.0008(2)	0.0011(2)	0.0002(1)	0.47
Tlmoi	0.5061(3)	0.3147(2)	0.6202(2)	0.0025(5)	0.0008(2)	0.0007(1)	0.0004(2)	0.0006(2)	0.0000(1)	0.49
Tlmzo	0.0057(3)	0.8162(2)	0.6135(2)	0.0025(4)	0.0008(1)	0.0006(1)	0.0006(2)	0.0006(2)	0.0003(1)	0.48
Tlmzi	0.5051(3)	0.3147(2)	0.6202(2)	0.0025(4)	0.0008(1)	0.0006(1)	0.0002(2)	0.0007(2)	-.0001(1)	0.48
T2ooo	0.6855(3)	0.1130(2)	0.1530(2)	0.0024(4)	0.0006(1)	0.0008(1)	0.0002(2)	0.0005(2)	0.0000(1)	0.49
T2ooi	0.1906(3)	0.6112(2)	0.6647(2)	0.0014(4)	0.0007(1)	0.0011(1)	-.0000(2)	0.0006(2)	0.0002(1)	0.49
T2ozo	0.6797(3)	0.1046(2)	0.6631(2)	0.0019(4)	0.0008(1)	0.0010(1)	0.0001(2)	0.0006(2)	-.0001(1)	0.51
T2ozi	0.1733(3)	0.6062(2)	0.1523(2)	0.0020(4)	0.0007(1)	0.0012(1)	-.0000(2)	0.0007(2)	-.0001(1)	0.54
T2moo	0.6752(3)	0.8829(2)	0.1864(2)	0.0020(4)	0.0005(1)	0.0007(1)	0.0003(2)	0.0005(2)	0.0000(1)	0.41
T2moi	0.1766(3)	0.3800(2)	0.6759(2)	0.0021(4)	0.0009(1)	0.0012(1)	0.0002(2)	0.0006(2)	0.0002(1)	0.61
T2mzo	0.6814(3)	0.8735(2)	0.6738(2)	0.0024(4)	0.0005(1)	0.0006(1)	0.0003(2)	0.0008(2)	0.0002(1)	0.38
T2mzi	0.1849(4)	0.3761(2)	0.1798(2)	0.0025(5)	0.0010(1)	0.0012(1)	0.0003(2)	0.0011(2)	0.0002(1)	0.62
Oa1oo	0.0222(8)	0.1252(5)	-.0047(4)	0.006 (1)	0.0017(4)	0.0009(3)	0.0003(5)	0.0017(5)	0.0002(3)	0.90
Oa1oi	0.4939(8)	0.6243(5)	0.4881(4)	0.006 (1)	0.0015(4)	0.0007(3)	0.0014(5)	0.0011(5)	0.0004(3)	0.91
Oa1zo	0.9822(8)	0.1255(4)	0.4838(4)	0.005 (1)	0.0015(4)	0.0009(3)	0.0008(5)	0.0018(5)	0.0003(3)	0.74
Oa1zi	0.5115(8)	0.6241(5)	0.9944(4)	0.007 (1)	0.0013(4)	0.0008(3)	-.0004(5)	0.0016(5)	0.0001(3)	0.95
Oa2oo	0.5774(8)	0.9910(5)	0.1434(5)	0.003 (1)	0.0012(4)	0.0014(4)	-.0000(5)	0.0014(6)	0.0001(3)	0.71
Oa2oi	0.0738(8)	0.4890(4)	0.6358(5)	0.004 (1)	0.0002(3)	0.0019(4)	0.0009(5)	0.0008(6)	0.0004(3)	npd
Oa2zo	0.5721(8)	0.9898(4)	0.6373(4)	0.001 (1)	0.0010(4)	0.0012(4)	-.0001(5)	0.0009(5)	0.0001(3)	0.53
Oa2zi	0.0719(8)	0.4933(4)	0.1375(5)	0.002 (1)	0.0005(4)	0.0018(4)	0.0007(5)	-.0000(5)	0.0004(3)	0.73
Obooo	0.8156(8)	0.1011(5)	0.0822(5)	0.003 (1)	0.0017(4)	0.0024(4)	0.0002(5)	0.0024(5)	0.0003(3)	1.00
Obooi	0.3281(8)	0.5973(4)	0.6000(5)	0.004 (1)	0.0010(3)	0.0019(4)	-.0012(5)	0.0020(5)	-.0005(3)	0.86
Obozo	0.8098(8)	0.0987(4)	0.6037(5)	0.004 (1)	0.0014(4)	0.0023(4)	-.0002(5)	0.0029(6)	-.0004(3)	0.93
Obozi	0.2882(8)	0.6029(5)	0.0827(5)	0.004 (1)	0.0013(4)	0.0030(4)	-.0008(5)	0.0025(6)	-.0007(3)	1.12
Obmoo	0.8167(8)	0.8553(5)	0.1414(5)	0.005 (1)	0.0021(4)	0.0027(4)	0.0010(5)	0.0019(6)	-.0005(3)	1.35
Obmoi	0.3003(8)	0.3544(5)	0.6152(5)	0.004 (1)	0.0017(4)	0.0030(4)	0.0002(5)	0.0026(6)	-.0003(3)	1.19
Obmzo	0.8132(8)	0.8543(5)	0.6058(5)	0.004 (1)	0.0021(4)	0.0018(4)	0.0011(5)	0.0020(5)	0.0012(3)	1.03
Obmzi	0.3342(9)	0.3550(5)	0.1276(6)	0.007 (1)	0.0025(4)	0.0053(5)	0.0012(6)	0.0053(7)	-.0002(4)	1.88
Ocooo	0.0117(8)	0.2798(4)	0.1360(5)	0.005 (1)	0.0009(3)	0.0017(4)	-.0004(5)	0.0008(6)	0.0002(3)	1.00
Ocooi	0.5122(8)	0.7777(4)	0.6347(5)	0.004 (1)	0.0005(3)	0.0023(4)	-.0004(5)	0.0022(5)	-.0008(3)	0.79

Ocozo	0.0161(8)	0.2926(4)	0.6480(4)	0.005 (1)	0.0008(3)	0.0015(3)	0.0005(5)	0.0012(5)	-.0002(3)	0.88
Ocozi	0.5132(8)	0.7959(4)	0.1494(5)	0.003 (1)	0.0012(3)	0.0021(4)	-.0009(5)	0.0012(5)	-.0002(3)	0.98
Ocmoo	0.0022(8)	0.6816(4)	0.1054(5)	0.004 (1)	0.0011(4)	0.0021(4)	0.0013(5)	0.0009(6)	-.0002(3)	1.04
Ocmoi	0.5132(8)	0.1780(4)	0.6090(4)	0.003 (1)	0.0008(3)	0.0007(3)	0.0004(5)	0.0004(5)	0.0004(3)	0.55
Ocmzo	0.0083(8)	0.6908(4)	0.6005(5)	0.006 (1)	0.0004(3)	0.0017(4)	0.0007(5)	0.0014(6)	-.0001(3)	0.85
Ocmzi	0.5077(8)	0.1932(5)	0.0983(5)	0.005 (1)	0.0016(4)	0.0010(4)	0.0006(5)	0.0005(6)	0.0001(3)	1.02
Odooo	0.1852(8)	0.1057(4)	0.1913(4)	0.003 (1)	0.0012(4)	0.0013(4)	0.0004(5)	-.0001(5)	0.0004(3)	0.87
Odooi	0.6977(8)	0.6073(5)	0.6829(5)	0.005 (1)	0.0018(4)	0.0011(4)	0.0010(5)	0.0002(6)	0.0002(3)	1.09
Odozo	0.2106(8)	0.1029(5)	0.6843(5)	0.003 (1)	0.0019(4)	0.0014(4)	-.0000(5)	0.0007(5)	0.0002(3)	0.95
Odozi	0.6946(8)	0.6038(4)	0.1986(4)	0.006 (1)	0.0013(3)	0.0009(3)	0.0005(5)	0.0003(5)	-.0000(3)	1.00
Odmoo	0.2023(7)	0.8723(4)	0.2108(4)	0.002 (1)	0.0012(3)	0.0011(3)	-.0009(5)	-.0006(5)	-.0005(3)	npd
Odmoi	0.6915(8)	0.3638(5)	0.7292(5)	0.004 (1)	0.0022(4)	0.0018(4)	0.0010(5)	-.0008(5)	0.0000(3)	1.47
Odmzo	0.1762(9)	0.8590(5)	0.7181(5)	0.007 (1)	0.0017(4)	0.0016(4)	-.0001(5)	0.0003(6)	-.0002(3)	1.38
Odmzi	0.6956(9)	0.3664(5)	0.2026(5)	0.006 (1)	0.0024(4)	0.0022(4)	0.0018(6)	-.0007(6)	-.0006(3)	1.79

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{\text{I}}$ refinement of Val Pasmada.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2654(2)	0.9859(2)	0.0872(2)	0.0027(3)	0.0028(1)	0.0014(1)	-.0002(1)	0.0008(2)	-.0007(1)	1.14
Mz _{oo}	0.2682(3)	0.0303(5)	0.5446(6)	0.0027(3)	0.0017(2)	0.0015(2)	0.0006(1)	0.0004(2)	-.0003(2)	0.97
Mo _{io}	0.7735(2)	0.5357(1)	0.5415(1)	0.0029(3)	0.0017(1)	0.0012(1)	0.0005(1)	0.0003(1)	-.0002(1)	0.92
Mz _{io}	0.7633(4)	0.5027(7)	0.0775(8)	0.0026(4)	0.0023(3)	0.0014(3)	0.0006(2)	0.0007(2)	-.0004(2)	1.03
Tl _{oo}	0.0079(2)	0.1575(1)	0.1041(1)	0.0025(2)	0.0009(1)	0.0009(1)	-.0003(1)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.58
Tl _{oz}	0.0028(2)	0.1634(1)	0.6120(1)	0.0035(2)	0.0010(1)	0.0008(1)	-.0001(1)	0.0008(1)	0.0002(1)	0.66
Tl _{mo}	0.9995(2)	0.8149(1)	0.1195(1)	0.0039(2)	0.0010(1)	0.0009(1)	0.0003(1)	0.0009(1)	0.0001(1)	0.67
Tl _{mz}	0.0054(2)	0.8178(1)	0.6117(1)	0.0029(2)	0.0012(1)	0.0008(1)	0.0002(1)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.64
T2 _{oo}	0.6877(2)	0.1121(1)	0.1595(1)	0.0027(2)	0.0009(1)	0.0009(1)	-.0002(1)	0.0011(1)	-.0002(1)	0.93
T2 _{oz}	0.6762(2)	0.1051(1)	0.6569(1)	0.0027(2)	0.0008(1)	0.0023(1)	-.0002(1)	0.0013(1)	-.0002(1)	0.86
T2 _{mo}	0.6750(2)	0.8811(1)	0.1805(1)	0.0026(2)	0.0009(1)	0.0020(1)	0.0001(1)	0.0005(1)	0.0003(1)	0.89
T2 _{mz}	0.6834(2)	0.8746(1)	0.6770(1)	0.0024(2)	0.0009(1)	0.0013(1)	0.0004(1)	0.0006(1)	0.0004(1)	0.67
Oa _{1o}	0.0061(5)	0.1241(2)	-.0093(2)	0.0145(8)	0.0014(2)	0.0012(2)	0.0006(3)	0.0034(3)	0.0002(1)	1.46
Oa _{1z}	0.9993(5)	0.1248(2)	0.4901(2)	0.0117(8)	0.0013(2)	0.0018(2)	-.0001(3)	0.0035(3)	-.0000(1)	1.34
Oa _{2o}	0.5739(4)	0.9894(2)	0.1389(2)	0.0023(5)	0.0007(2)	0.0020(2)	0.0004(2)	0.0007(3)	0.0004(1)	0.80
Oa _{2z}	0.5718(4)	0.9908(2)	0.6376(2)	0.0029(5)	0.0007(2)	0.0018(2)	-.0001(2)	0.0008(3)	0.0001(1)	0.78
Ob _{oo}	0.8232(4)	0.0985(2)	0.0926(3)	0.0057(6)	0.0015(2)	0.0051(3)	-.0013(3)	0.0041(3)	-.0012(2)	1.70
Ob _{oz}	0.7990(5)	0.0999(2)	0.5927(3)	0.0076(7)	0.0016(2)	0.0054(3)	-.0017(3)	0.0051(4)	-.0011(2)	1.82
Ob _{mo}	0.8074(5)	0.8552(3)	0.1269(3)	0.0055(6)	0.0019(2)	0.0086(4)	0.0007(3)	0.0054(4)	0.0001(2)	2.48
Ob _{mz}	0.8254(5)	0.8550(3)	0.6175(3)	0.0094(8)	0.0020(2)	0.0077(3)	0.0016(3)	0.0071(4)	0.0011(2)	2.33
Oc _{oo}	0.0123(4)	0.2782(2)	0.1352(2)	0.0045(6)	0.0013(2)	0.0018(2)	-.0001(2)	0.0014(3)	-.0001(1)	0.98
Oc _{oz}	0.0142(4)	0.2932(2)	0.6486(2)	0.0055(6)	0.0012(2)	0.0018(2)	-.0007(2)	0.0013(3)	0.0000(1)	1.08
Oc _{mo}	0.0081(4)	0.6796(2)	0.1071(2)	0.0045(6)	0.0009(2)	0.0017(2)	0.0002(2)	0.0009(3)	-.0001(1)	0.93
Oc _{mz}	0.0077(4)	0.6922(2)	0.5992(2)	0.0041(5)	0.0012(2)	0.0016(2)	0.0002(2)	0.0007(3)	-.0000(1)	0.95
Od _{oo}	0.1920(4)	0.1069(2)	0.1854(3)	0.0050(6)	0.0019(2)	0.0021(2)	0.0008(3)	-.0012(3)	-.0002(2)	1.57
Od _{oz}	0.2019(5)	0.1032(2)	0.6919(3)	0.0067(7)	0.0013(2)	0.0026(2)	0.0004(3)	-.0023(3)	0.0002(2)	1.89
Od _{mo}	0.1970(5)	0.8685(3)	0.2208(3)	0.0045(6)	0.0023(2)	0.0042(3)	0.0009(3)	-.0026(3)	-.0015(2)	2.40
Od _{mz}	0.1868(5)	0.8637(3)	0.7077(3)	0.0096(8)	0.0028(2)	0.0040(3)	0.0027(3)	-.0041(4)	-.0023(2)	3.15

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{1}\bar{1}$ refinement of Monte Somma.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2659(3)	0.9861(2)	0.0869(2)	0.0020(4)	0.0029(2)	0.0015(2)	-0.0002(2)	0.0007(2)	-0.0009(1)	1.15
Mz _{oo}	0.2681(4)	0.0304(6)	0.5450(8)	0.0020(3)	0.0017(2)	0.0013(3)	0.0008(2)	0.0001(2)	-0.0003(2)	0.88
Mo _{io}	0.7735(3)	0.5353(2)	0.5422(2)	0.0023(4)	0.0015(1)	0.0013(1)	0.0006(2)	0.0004(2)	-0.0002(1)	0.83
Mz _{io}	0.7637(5)	0.503 (1)	0.077 (1)	0.0026(5)	0.0023(4)	0.0011(4)	0.0006(3)	0.0002(3)	-0.0007(3)	1.03
Tl _{oo}	0.0080(2)	0.1577(1)	0.1042(1)	0.0025(3)	0.0009(1)	0.0007(1)	-0.0000(8)	0.0007(1)	0.0000(1)	0.51
Tl _{oz}	0.0028(2)	0.1635(1)	0.6119(1)	0.0024(2)	0.0009(1)	0.0008(1)	-0.0002(1)	0.0007(1)	-0.0000(1)	0.55
Tl _{mo}	-0.0004(2)	0.8148(1)	0.1194(1)	0.0034(2)	0.0008(1)	0.0007(1)	0.0002(1)	0.0008(1)	-0.0000(1)	0.55
Tl _{mz}	0.0052(2)	0.8178(1)	0.6116(1)	0.0024(3)	0.0009(1)	0.0007(1)	0.0005(1)	0.0005(1)	0.0000(1)	0.52
T2 _{oo}	0.6882(2)	0.1123(1)	0.1595(1)	0.0022(3)	0.0008(1)	0.0019(1)	0.0001(1)	0.0009(1)	-0.0001(1)	0.76
T2 _{oz}	0.6764(2)	0.1052(1)	0.6572(1)	0.0022(3)	0.0007(1)	0.0020(1)	-0.0003(1)	0.0012(1)	-0.0003(1)	0.74
T2 _{mo}	0.6754(2)	0.8813(1)	0.1806(1)	0.0013(2)	0.0007(1)	0.0018(1)	0.0003(1)	0.0005(1)	0.0003(1)	0.74
T2 _{mz}	0.6838(2)	0.8749(1)	0.6772(1)	0.0021(2)	0.0009(1)	0.0011(1)	0.0004(1)	0.0005(1)	0.0003(1)	0.60
Oa _{1o}	0.0071(56)	0.1244(3)	-0.0094(3)	0.0101(9)	0.0015(2)	0.0010(2)	-0.0002(3)	0.0023(3)	-0.0001(2)	1.18
Oa _{1z}	-0.0011(6)	0.1253(3)	0.4902(3)	0.0114(9)	0.0012(2)	0.0018(2)	0.0001(3)	0.0036(4)	-0.0000(2)	1.27
Oa _{2o}	0.5743(5)	0.9893(2)	0.1391(3)	0.0016(7)	0.0009(2)	0.0016(2)	0.0001(3)	0.0003(3)	0.0003(2)	0.72
Oa _{2z}	0.5728(5)	-0.0094(2)	0.6382(3)	0.0020(7)	0.0008(2)	0.0016(2)	0.0008(3)	0.0007(3)	0.0002(1)	0.70
Ob _{oo}	0.8226(6)	0.0988(3)	0.0922(3)	0.0053(7)	0.0010(2)	0.0047(3)	-0.0007(3)	0.0039(4)	-0.0010(2)	1.47
Ob _{oz}	0.7994(6)	0.1005(3)	0.5934(3)	0.0059(8)	0.0016(2)	0.0047(3)	-0.0015(3)	0.0044(4)	-0.0012(2)	1.56
Ob _{mo}	0.8072(6)	0.8555(3)	0.1266(4)	0.0071(9)	0.0018(2)	0.0083(4)	0.0000(4)	0.0065(5)	-0.0009(3)	2.40
Ob _{mz}	0.8247(5)	0.8553(3)	0.6170(3)	0.0081(9)	0.0022(2)	0.0060(4)	0.0022(4)	0.0062(5)	0.0012(2)	1.95
Oc _{oo}	0.0124(5)	0.2783(2)	0.1356(3)	0.0035(7)	0.0008(2)	0.0015(2)	-0.0003(3)	0.0009(3)	-0.0003(1)	0.78
Oc _{oz}	0.0141(5)	0.2935(3)	0.6485(3)	0.0050(7)	0.0008(2)	0.0021(2)	-0.0008(3)	0.0015(3)	-0.0004(2)	1.01
Oc _{mo}	0.0076(5)	0.6800(2)	0.1072(3)	0.0049(7)	0.0008(2)	0.0018(2)	0.0004(2)	0.0012(3)	0.0001(1)	0.93
Oc _{mz}	0.0083(5)	0.6921(2)	0.6001(3)	0.0038(7)	0.0013(2)	0.0012(2)	0.0004(2)	0.0004(3)	-0.0004(1)	0.89
Od _{oo}	0.1919(5)	0.1066(2)	0.1855(3)	0.0038(6)	0.0017(2)	0.0017(2)	0.0012(3)	-0.0013(3)	-0.0000(2)	1.32
Od _{oz}	0.2042(6)	0.1034(3)	0.6926(3)	0.0073(9)	0.0014(2)	0.0023(2)	0.0003(3)	-0.0013(4)	0.0003(2)	1.76
Od _{mo}	0.1973(6)	0.8684(3)	0.2207(3)	0.0040(6)	0.0024(2)	0.0038(3)	0.0007(3)	-0.0019(3)	-0.0016(2)	2.20
Od _{mz}	0.1864(6)	0.8629(3)	0.7083(3)	0.0070(9)	0.0029(3)	0.0035(3)	0.0022(4)	-0.0042(4)	-0.0020(2)	2.81

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{I}\bar{I}$ refinement of 115082a.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2658(2)	0.9859(2)	0.0865(2)	0.0036(3)	0.0038(2)	0.0019(1)	-.0002(2)	0.0013(2)	-.0011(1)	1.50
Mzoo	0.2681(3)	0.0301(4)	0.5459(5)	0.0033(2)	0.0020(1)	0.0016(2)	0.0007(1)	0.0007(1)	-.0003(1)	1.08
Moio	0.7737(2)	0.5350(2)	0.5429(2)	0.0034(3)	0.0020(1)	0.0015(1)	0.0009(1)	0.0007(2)	-.0003(1)	1.06
Mzio	0.7636(5)	0.502 (1)	0.077 (1)	0.0029(5)	0.0025(4)	0.0017(4)	0.0006(3)	0.0010(3)	-.0006(3)	1.13
T1oo	0.0078(1)	0.1580(1)	0.1042(1)	0.0027(2)	0.0010(1)	0.0008(1)	-.0001(1)	0.0008(1)	0.0001(1)	0.58
T1oz	0.0025(2)	0.1642(1)	0.6119(1)	0.0028(2)	0.0010(1)	0.0008(1)	-.0002(1)	0.0008(1)	-.0000(1)	0.57
T1mo	-.0001(2)	0.8151(1)	0.1194(1)	0.0038(2)	0.0010(1)	0.0008(1)	0.0005(1)	0.0011(1)	0.0001(1)	0.62
T1mz	0.0054(1)	0.8176(1)	0.6120(1)	0.0029(2)	0.0010(1)	0.0008(1)	0.0005(1)	0.0007(1)	0.0001(1)	0.58
T2oo	0.6879(2)	0.1120(1)	0.1588(1)	0.0025(2)	0.0008(1)	0.0019(1)	0.0001(1)	0.0010(1)	0.0000(1)	0.76
T2oz	0.6765(1)	0.1054(1)	0.6577(1)	0.0026(2)	0.0009(1)	0.0018(1)	-.0000(1)	0.0012(1)	-.0002(1)	0.76
T2mo	0.6760(1)	0.8815(1)	0.1813(1)	0.0025(2)	0.0009(1)	0.0017(1)	0.0003(1)	0.0006(1)	0.0003(1)	0.76
T2mz	0.6831(2)	0.8748(1)	0.6766(1)	0.0029(2)	0.0009(1)	0.0012(1)	0.0004(1)	0.0011(1)	0.0003(1)	0.64
Oa1o	0.0076(4)	0.1247(2)	-.0087(2)	0.0110(7)	0.0018(2)	0.0011(2)	0.0009(3)	0.0027(3)	0.0002(1)	1.31
Oa1z	-.0035(4)	0.1248(2)	0.4893(2)	0.0115(7)	0.0015(2)	0.0016(2)	0.0002(3)	0.0036(3)	0.0001(1)	1.31
Oa2o	0.5756(4)	0.9901(2)	0.1396(2)	0.0035(5)	0.0010(1)	0.0018(2)	0.0004(2)	0.0012(2)	0.0003(1)	0.85
Oa2z	0.5717(3)	0.9910(2)	0.6376(2)	0.0019(4)	0.0009(1)	0.0016(2)	0.0002(2)	0.0007(2)	0.0002(1)	0.70
Oboo	0.8216(4)	0.0994(2)	0.0910(3)	0.0052(5)	0.0015(2)	0.0043(2)	-.0009(2)	0.0038(3)	-.0007(2)	1.47
Oboz	0.7994(4)	0.1006(2)	0.5936(3)	0.0071(6)	0.0015(2)	0.0051(2)	-.0008(2)	0.0053(3)	-.0009(2)	1.65
Obmo	0.8088(4)	0.8549(2)	0.1282(3)	0.0061(6)	0.0021(2)	0.0074(3)	0.0005(3)	0.0052(4)	-.0005(2)	2.29
Obmz	0.8224(4)	0.8550(2)	0.6153(3)	0.0083(6)	0.0024(2)	0.0062(3)	0.0013(3)	0.0062(4)	0.0007(2)	2.06
Ocoo	0.0120(4)	0.2787(2)	0.1353(2)	0.0051(5)	0.0009(1)	0.0021(2)	-.0004(2)	0.0018(3)	-.0004(1)	0.99
Ocoz	0.0144(4)	0.2941(2)	0.6484(2)	0.0045(5)	0.0013(2)	0.0019(2)	-.0004(2)	0.0014(2)	-.0001(1)	1.02
Ocmo	0.0076(4)	0.6799(2)	0.1073(2)	0.0047(5)	0.0010(1)	0.0016(2)	0.0008(2)	0.0011(2)	0.0002(1)	0.92
Ocmz	0.0078(4)	0.6920(2)	0.5995(2)	0.0059(5)	0.0012(2)	0.0015(2)	0.0005(2)	0.0010(3)	-.0000(1)	1.04
Odo	0.1910(4)	0.1065(2)	0.1869(2)	0.0046(5)	0.0017(2)	0.0019(2)	0.0007(2)	-.0004(3)	0.0002(1)	1.34
Odoz	0.2029(4)	0.1035(2)	0.6915(2)	0.0063(6)	0.0016(2)	0.0024(2)	0.0005(2)	-.0010(3)	0.0003(1)	1.66
Odmo	0.1976(4)	0.8685(2)	0.2193(3)	0.0040(5)	0.0022(2)	0.0033(2)	0.0007(3)	-.0018(3)	-.0010(2)	2.01
Odmoz	0.1854(5)	0.8625(3)	0.7105(3)	0.0088(7)	0.0027(2)	0.0036(2)	0.0018(3)	-.0020(3)	-.0013(2)	2.64

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{\text{I}}$ refinement of 87975a.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2667(3)	0.9850(3)	0.0869(2)	0.0031(5)	0.0048(2)	0.0027(1)	-0.0013(2)	0.0011(2)	-0.0019(2)	1.97
Mzoo	0.2674(3)	0.0298(5)	0.5465(6)	0.0028(3)	0.0019(2)	0.0017(2)	0.0005(1)	0.0004(2)	-0.0003(2)	1.07
Moio	0.7743(4)	0.5345(3)	0.5446(3)	0.0046(6)	0.0020(2)	0.0020(2)	0.0007(2)	0.0007(3)	-0.0007(2)	1.29
Mzio	0.765 (1)	0.500 (2)	0.078 (2)	0.004 (1)	0.0034(8)	0.0016(7)	0.0003(6)	0.0010(6)	-0.0008(7)	1.49
Tloo	0.0075(2)	0.1582(1)	0.1041(1)	0.0027(3)	0.0010(1)	0.0008(1)	-0.0004(1)	0.0005(1)	0.0000(1)	0.62
Tloz	0.0022(2)	0.1645(1)	0.6112(1)	0.0036(3)	0.0010(1)	0.0009(1)	-0.0001(1)	0.0008(1)	0.0001(1)	0.66
Tlmo	-0.0004(2)	0.8155(1)	0.1190(1)	0.0034(3)	0.0010(1)	0.0010(1)	0.0000(1)	0.0008(1)	-0.0000(1)	0.69
Tlmz	0.0054(2)	0.8174(1)	0.6121(1)	0.0034(3)	0.0011(1)	0.0009(1)	0.0003(1)	0.0006(1)	0.0001(1)	0.69
T2oo	0.6875(2)	0.1117(1)	0.1576(1)	0.0032(3)	0.0009(1)	0.0015(1)	0.0001(1)	0.0005(1)	0.0001(1)	0.82
T2oz	0.6777(2)	0.1057(1)	0.6588(1)	0.0027(3)	0.0007(1)	0.0017(1)	-0.0002(1)	0.0008(1)	-0.0001(1)	0.76
T2mo	0.6770(2)	0.8815(1)	0.1820(1)	0.0026(3)	0.0006(1)	0.0015(1)	0.0000(1)	0.0004(1)	0.0002(1)	0.70
T2mz	0.6830(2)	0.8750(1)	0.6758(1)	0.0032(3)	0.0009(1)	0.0014(1)	0.0002(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.74
Oa1o	0.0108(5)	0.1251(3)	-0.0079(3)	0.0083(8)	0.0019(2)	0.0011(2)	-0.0002(3)	0.0017(3)	-0.0000(2)	1.22
Oa1z	0.9929(5)	0.1263(3)	0.4884(3)	0.0093(9)	0.0016(2)	0.0017(2)	0.0008(3)	0.0027(4)	0.0002(2)	1.26
Oa2o	0.5774(4)	0.9901(2)	0.1402(3)	0.0037(7)	0.0011(2)	0.0018(2)	0.0003(3)	0.0005(3)	0.0002(2)	0.97
Oa2z	0.5728(5)	0.9908(2)	0.6372(3)	0.0028(7)	0.0005(2)	0.0021(2)	-0.0002(3)	0.0007(3)	0.0002(2)	0.84
Oboo	0.8193(5)	0.1006(3)	0.0899(3)	0.0044(8)	0.0015(2)	0.0034(3)	-0.0013(3)	0.0028(4)	-0.0007(2)	1.29
Oboz	0.8016(5)	0.1011(3)	0.5962(3)	0.0056(8)	0.0013(2)	0.0042(3)	-0.0001(3)	0.0039(4)	-0.0005(2)	1.40
Obmo	0.8104(6)	0.8552(3)	0.1294(4)	0.0076(9)	0.0022(2)	0.0062(3)	-0.0001(3)	0.0053(5)	-0.0005(2)	2.13
Obmz	0.8204(5)	0.8556(3)	0.6133(3)	0.0065(8)	0.0019(2)	0.0046(3)	0.0009(3)	0.0039(4)	0.0003(2)	1.70
Ocoo	0.0124(5)	0.2791(3)	0.1356(3)	0.0044(7)	0.0011(2)	0.0023(2)	-0.0006(3)	0.0011(3)	-0.0002(2)	1.11
Ocoz	0.0145(5)	0.2944(3)	0.6480(3)	0.0051(7)	0.0011(2)	0.0023(2)	-0.0008(2)	0.0018(3)	-0.0004(2)	1.09
Ocmo	0.0091(5)	0.6805(3)	0.1080(3)	0.0052(7)	0.0010(2)	0.0019(2)	0.0004(3)	0.0010(3)	0.0003(2)	1.06
Ocmz	0.0086(5)	0.6914(3)	0.5996(3)	0.0067(8)	0.0010(2)	0.0016(2)	0.0002(3)	0.0008(3)	-0.0001(2)	1.15
Odoo	0.1893(5)	0.1061(3)	0.1878(3)	0.0042(7)	0.0020(2)	0.0014(2)	-0.0000(3)	-0.0007(3)	-0.0000(2)	1.29
Odoz	0.2038(6)	0.1038(3)	0.6902(3)	0.0074(8)	0.0013(3)	0.0025(2)	0.0003(3)	-0.0001(4)	0.0003(2)	1.63
Odmo	0.2002(5)	0.8687(3)	0.2181(3)	0.0050(8)	0.0018(2)	0.0030(3)	-0.0002(3)	-0.0014(4)	-0.0010(2)	1.86
Odmz	0.1820(6)	0.8620(3)	0.7125(3)	0.0082(9)	0.0024(3)	0.0027(3)	-0.0000(4)	-0.0017(4)	-0.0010(2)	2.23

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{1}$ refinement of 21704a.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2673(3)	0.9853(3)	0.0865(2)	0.0045(4)	0.0050(2)	0.0025(2)	-0.0009(2)	0.0016(2)	-0.0019(2)	2.03
Mz _{oo}	0.2674(3)	0.0294(3)	0.5468(5)	0.0036(3)	0.0022(2)	0.0015(2)	0.0009(1)	0.0004(1)	-0.0004(1)	1.16
Mo _{io}	0.7747(4)	0.5345(3)	0.5450(3)	0.0035(5)	0.0025(2)	0.0019(2)	0.0007(2)	0.0007(2)	-0.0005(2)	1.29
Mz _{io}	0.764 (1)	0.498 (2)	0.079 (2)	0.006 (1)	0.0059(9)	0.0019(6)	0.0003(6)	0.0012(5)	-0.0008(7)	2.20
Tl _{oo}	0.0074(2)	0.1586(1)	0.1043(1)	0.0037(2)	0.0012(1)	0.0009(1)	-0.0004(1)	0.0009(1)	0.0000(1)	0.70
Tl _{oz}	0.0028(2)	0.1648(1)	0.6112(1)	0.0029(2)	0.0011(1)	0.0009(1)	-0.0002(1)	0.0007(1)	-0.0001(1)	0.64
Tl _{mo}	-0.0005(2)	0.8156(1)	0.1189(1)	0.0039(3)	0.0012(1)	0.0009(1)	0.0004(1)	0.0009(1)	0.0000(1)	0.73
Tl _{mz}	0.0054(2)	0.8174(1)	0.6123(1)	0.0033(2)	0.0012(1)	0.0007(1)	0.0004(1)	0.0007(1)	-0.0000(1)	0.66
T2 _{oo}	0.6878(2)	0.1118(1)	0.1573(1)	0.0036(3)	0.0009(1)	0.0014(1)	-0.0001(1)	0.0008(1)	0.0000(1)	0.78
T2 _{oz}	0.6780(2)	0.1060(1)	0.6589(1)	0.0031(2)	0.0010(1)	0.0015(1)	-0.0001(1)	0.0009(1)	-0.0001(1)	0.78
T2 _{mo}	0.6774(2)	0.8817(1)	0.1820(1)	0.0033(2)	0.0009(1)	0.0015(1)	0.0001(1)	0.0006(1)	0.0002(1)	0.79
T2 _{mz}	0.6832(2)	0.8751(1)	0.6756(1)	0.0047(3)	0.0015(1)	0.0018(1)	0.0001(1)	0.0013(1)	0.0002(1)	1.07
Oa _{lo}	0.0113(5)	0.1263(3)	-0.0075(3)	0.0091(8)	0.0020(2)	0.0012(2)	-0.0005(3)	0.0020(3)	0.0001(2)	1.31
Oa _{lz}	-0.0077(5)	0.1265(3)	0.4878(3)	0.0105(8)	0.0022(2)	0.0013(2)	0.0007(3)	0.0026(3)	0.0004(2)	1.41
Oa _{2o}	0.5772(4)	0.9899(2)	0.1402(2)	0.0042(6)	0.0010(2)	0.0018(2)	0.0005(3)	0.0010(3)	0.0003(2)	0.94
Oa _{2z}	0.5735(4)	0.9918(2)	0.6373(2)	0.0023(6)	0.0012(2)	0.0018(2)	-0.0002(3)	0.0006(3)	0.0002(2)	0.87
Ob _{oo}	0.8193(5)	0.1009(3)	0.0903(3)	0.0054(7)	0.0020(2)	0.0031(2)	-0.0010(3)	0.0027(3)	-0.0006(2)	1.39
Ob _{oz}	0.8022(5)	0.1021(2)	0.5960(3)	0.0051(7)	0.0015(2)	0.0039(3)	-0.0007(3)	0.0032(4)	-0.0005(2)	1.41
Ob _{mo}	0.8118(5)	0.8551(3)	0.1304(3)	0.0073(7)	0.0022(2)	0.0060(3)	0.0002(3)	0.0050(4)	-0.0006(2)	2.06
Ob _{mz}	0.8202(5)	0.8549(3)	0.6128(3)	0.0054(7)	0.0025(2)	0.0045(3)	0.0009(3)	0.0038(4)	-0.0000(2)	1.72
Oc _{oo}	0.0115(5)	0.2800(2)	0.1352(3)	0.0059(7)	0.0014(2)	0.0021(2)	-0.0010(3)	0.0017(3)	-0.0005(2)	1.19
Oc _{oz}	0.0155(5)	0.2950(2)	0.6479(3)	0.0053(6)	0.0013(2)	0.0023(2)	-0.0006(3)	0.0015(3)	-0.0002(2)	1.18
Oc _{mo}	0.0091(4)	0.6807(3)	0.1082(3)	0.0046(6)	0.0020(2)	0.0014(2)	0.0001(3)	0.0005(3)	-0.0003(2)	1.16
Oc _{mz}	0.0094(5)	0.6914(3)	0.6005(3)	0.0072(7)	0.0014(2)	0.0020(2)	0.0012(3)	0.0014(3)	0.0000(2)	1.30
Od _{oo}	0.1900(5)	0.1068(3)	0.1882(3)	0.0058(7)	0.0020(2)	0.0014(2)	0.0005(3)	-0.0001(3)	0.0002(2)	1.36
Od _{oz}	0.2046(5)	0.1047(3)	0.6905(3)	0.0066(7)	0.0016(2)	0.0017(2)	0.0003(3)	-0.0005(3)	0.0001(2)	1.48
Od _{mo}	0.1993(5)	0.8691(3)	0.2178(3)	0.0060(7)	0.0021(2)	0.0025(2)	0.0002(3)	-0.0012(3)	-0.0007(2)	1.86
Od _{mz}	0.1836(5)	0.8615(3)	0.7129(3)	0.0078(8)	0.0022(2)	0.0026(2)	0.0004(3)	-0.0014(3)	-0.0008(2)	2.08

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{1}$ refinement of 101377a.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2677(2)	0.9836(2)	0.0862(2)	0.0051(3)	0.0069(2)	0.0033(1)	-0.0017(2)	0.0021(2)	-0.0027(1)	2.68
Mz _{oo}	0.2683(3)	0.0297(2)	0.5469(4)	0.0037(2)	0.0025(1)	0.0015(1)	0.0008(1)	0.0005(1)	-0.0005(1)	1.24
Mo _{io}	0.7753(2)	0.5339(2)	0.5460(2)	0.0042(3)	0.0026(1)	0.0022(1)	0.0010(1)	0.0008(1)	-0.0005(1)	1.45
Mz _{io}	0.7640(6)	0.498 (2)	0.077 (1)	0.0040(5)	0.0085(8)	0.0029(4)	-0.0003(4)	0.0012(3)	-0.0027(6)	2.92
Tl _{oo}	0.0077(1)	0.1596(1)	0.1045(1)	0.0036(1)	0.0014(1)	0.0010(1)	-0.0004(1)	0.0008(1)	0.0000(1)	0.78
Tl _{oz}	0.0034(1)	0.1650(1)	0.6109(1)	0.0036(2)	0.0012(1)	0.0010(1)	-0.0002(1)	0.0009(1)	0.0001(1)	0.74
Tl _{mo}	0.0001(1)	0.8155(1)	0.1186(1)	0.0038(2)	0.0014(1)	0.0009(1)	0.0006(1)	0.0008(1)	0.0001(1)	0.76
Tl _{mz}	0.0052(1)	0.8173(1)	0.6128(1)	0.0040(1)	0.0015(1)	0.0010(1)	0.0006(1)	0.0009(1)	0.0000(1)	0.82
T2 _{oo}	0.6880(1)	0.1116(1)	0.1579(1)	0.0029(2)	0.0011(1)	0.0014(1)	0.0000(1)	0.0006(1)	0.0001(1)	0.80
T2 _{oz}	0.6789(1)	0.1063(1)	0.6587(1)	0.0034(1)	0.0010(1)	0.0016(1)	0.0000(1)	0.0008(1)	-0.0001(1)	0.85
T2 _{mo}	0.6777(1)	0.8815(1)	0.1812(1)	0.0035(1)	0.0010(1)	0.0015(1)	0.0003(1)	0.0007(1)	0.0002(1)	0.84
T2 _{mz}	0.6834(1)	0.8757(1)	0.6766(1)	0.0034(2)	0.0010(1)	0.0014(1)	0.0002(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.78
Oa _{lo}	0.0092(3)	0.1277(2)	-0.0083(2)	0.0101(5)	0.0023(1)	0.0015(1)	0.0004(2)	0.0025(2)	0.0001(1)	1.47
Oa _{lz}	0.9956(3)	0.1269(2)	0.4885(2)	0.0105(5)	0.0025(1)	0.0016(1)	0.0009(2)	0.0026(2)	0.0003(1)	1.54
Oa _{2o}	0.5788(3)	0.9908(2)	0.1399(2)	0.0040(4)	0.0014(1)	0.0021(1)	0.0004(2)	0.0011(2)	0.0004(1)	1.08
Oa _{2z}	0.5750(3)	0.9914(2)	0.6377(2)	0.0035(4)	0.0012(1)	0.0020(1)	-0.0003(2)	0.0007(2)	0.0001(1)	1.04
Ob _{oo}	0.8194(3)	0.1019(2)	0.0915(2)	0.0060(4)	0.0018(1)	0.0031(1)	-0.0008(2)	0.0027(2)	-0.0003(1)	1.42
Ob _{oz}	0.8031(3)	0.1025(2)	0.5955(2)	0.0058(4)	0.0019(1)	0.0036(2)	-0.0007(2)	0.0032(2)	-0.0004(1)	1.50
Ob _{mo}	0.8108(3)	0.8542(2)	0.1282(2)	0.0076(5)	0.0025(1)	0.0052(2)	0.0004(2)	0.0045(3)	-0.0006(1)	2.03
Ob _{mz}	0.8199(3)	0.8544(2)	0.6153(2)	0.0066(5)	0.0029(1)	0.0044(2)	0.0009(2)	0.0038(2)	-0.0000(1)	1.91
Oc _{oo}	0.0129(3)	0.2817(2)	0.1362(2)	0.0065(4)	0.0018(1)	0.0026(1)	-0.0004(2)	0.0020(2)	-0.0001(1)	1.39
Oc _{oz}	0.0144(3)	0.2944(2)	0.6468(2)	0.0054(4)	0.0017(1)	0.0026(1)	-0.0006(2)	0.0015(2)	-0.0000(1)	1.36
Oc _{mo}	0.0100(3)	0.6816(2)	0.1084(2)	0.0054(4)	0.0019(1)	0.0019(1)	0.0009(2)	0.0007(2)	-0.0000(1)	1.32
Oc _{mz}	0.0100(3)	0.6914(2)	0.6014(2)	0.0078(4)	0.0018(1)	0.0019(1)	0.0013(2)	0.0010(2)	-0.0001(1)	1.45
Od _{oo}	0.1910(3)	0.1072(2)	0.1885(2)	0.0056(4)	0.0022(1)	0.0016(1)	0.0005(2)	-0.0001(2)	0.0002(1)	1.42
Od _{oz}	0.2030(3)	0.1045(2)	0.6914(2)	0.0059(4)	0.0020(1)	0.0018(1)	0.0003(2)	-0.0002(2)	0.0001(1)	1.47
Od _{mo}	0.1967(3)	0.8680(2)	0.2180(2)	0.0060(4)	0.0024(1)	0.0024(1)	0.0003(2)	-0.0009(2)	-0.0007(1)	1.85
Od _{mz}	0.1844(3)	0.8624(2)	0.7129(2)	0.0073(5)	0.0029(2)	0.0027(2)	0.0006(2)	-0.0010(2)	-0.0007(1)	2.16

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{H}$ refinement of Crystal Bay.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2691(9)	0.981 (1)	0.0877(8)	0.004 (1)	0.0064(7)	0.0037(5)	-0.0020(6)	0.0024(6)	-0.0026(6)	2.50
Mzoo	0.268 (1)	0.030 (1)	0.546 (2)	0.002 (1)	0.0025(6)	0.0007(5)	0.0015(4)	-0.0010(5)	-0.0001(3)	npd
Moio	0.775 (1)	0.5331(8)	0.5472(8)	0.008 (1)	0.0032(6)	0.0037(6)	-0.0001(6)	0.0023(7)	-0.0013(4)	2.16
Mzio	0.765 (2)	0.502 (6)	0.073 (4)	0.009 (2)	0.010 (3)	0.004 (2)	0.002 (1)	0.000 (1)	-0.003 (2)	4.03
Tloo	0.0074(5)	0.1593(2)	0.1043(3)	0.0047(6)	0.0014(2)	0.0013(2)	-0.0003(2)	0.0012(3)	-0.0007(1)	0.94
Tloz	0.0036(5)	0.1662(2)	0.6109(3)	0.0037(6)	0.0015(2)	0.0006(2)	-0.0003(3)	0.0007(3)	0.0006(1)	0.71
Tlmo	0.0001(5)	0.8163(2)	0.1181(3)	0.0042(7)	0.0012(2)	0.0007(2)	0.0006(3)	0.0009(3)	0.0003(1)	0.68
Tlmz	0.0059(5)	0.8167(2)	0.6130(3)	0.0040(7)	0.0021(2)	0.0015(2)	0.0004(3)	0.00009(3)	-0.0003(2)	1.10
T2oo	0.6889(5)	0.1113(2)	0.1590(3)	0.0030(7)	0.0008(2)	0.0019(2)	0.0006(3)	0.0012(3)	0.0004(2)	0.77
T2oz	0.6792(5)	0.1062(2)	0.6580(2)	0.0037(6)	0.0018(2)	0.0014(2)	-0.0007(3)	0.0004(3)	-0.0006(2)	1.06
T2mo	0.6791(5)	0.8810(3)	0.1811(3)	0.0027(6)	0.0016(2)	0.0022(2)	-0.0002(3)	0.0013(3)	0.0001(2)	0.99
T2mz	0.6828(5)	0.8763(2)	0.6768(3)	0.0052(7)	0.0010(2)	0.0008(2)	0.0007(3)	0.0006(3)	0.0003(1)	0.80
Oa1o	0.007 (1)	0.1279(6)	-0.0085(6)	0.012 (2)	0.0017(5)	0.0008(5)	0.0004(7)	0.0015(6)	0.0001(4)	1.50
Oa1z	-0.002 (1)	0.1283(7)	0.4885(7)	0.009 (2)	0.0044(7)	0.0026(6)	0.0011(9)	0.0035(9)	0.0003(5)	2.00
Oa2o	0.580 (1)	-0.0094(5)	0.1399(6)	0.002 (2)	0.0012(4)	0.0020(5)	0.0011(6)	-0.0001(7)	0.0003(4)	1.00
Oa2z	0.577 (1)	-0.0079(6)	0.6379(6)	0.007 (2)	0.0020(5)	0.0022(6)	-0.0013(7)	0.0024(9)	0.0001(4)	1.37
Oboo	0.820 (1)	0.1029(6)	0.0916(7)	0.008 (2)	0.0020(5)	0.0041(6)	-0.0010(7)	0.0045(9)	-0.0006(4)	1.65
Oboz	0.803 (1)	0.1029(6)	0.5966(7)	0.005 (1)	0.0018(4)	0.0031(5)	-0.0006(6)	0.0024(8)	-0.0001(4)	1.38
Obmo	0.815 (1)	0.8528(6)	0.1291(8)	0.010 (2)	0.0022(5)	0.0065(8)	-0.0019(8)	0.005 (1)	-0.0019(5)	2.53
Obmz	0.816 (1)	0.8545(6)	0.6166(7)	0.007 (2)	0.0034(5)	0.0036(5)	0.0023(8)	0.0033(8)	0.0010(4)	1.83
Ocoo	0.014 (1)	0.2842(6)	0.1367(7)	0.007 (2)	0.0028(5)	0.0027(5)	0.0001(7)	0.0029(9)	-0.0001(4)	1.61
Ocoz	0.014 (1)	0.2938(6)	0.6457(6)	0.006 (2)	0.0021(5)	0.0024(5)	-0.0010(7)	0.0012(8)	0.0006(4)	1.49
Ocmo	0.012 (1)	0.6810(6)	0.1091(7)	0.006 (2)	0.0017(4)	0.0023(5)	0.0004(6)	0.0006(7)	0.0001(4)	1.43
Ocmz	0.013 (1)	0.6930(6)	0.6023(6)	0.007 (2)	0.0022(4)	0.0013(4)	0.0018(6)	0.0011(7)	0.0001(3)	1.30
Odo	0.192 (1)	0.1078(6)	0.1892(6)	0.006 (2)	0.0027(5)	0.0009(5)	-0.0004(7)	-0.0008(8)	0.0001(4)	1.50
Odoz	0.204 (1)	0.1054(6)	0.6916(7)	0.007 (2)	0.0020(5)	0.0029(6)	0.0001(7)	0.0011(9)	-0.0003(4)	1.69
Odmo	0.193 (1)	0.8688(6)	0.2174(7)	0.008 (2)	0.0035(6)	0.0023(6)	0.0005(9)	-0.0005(9)	0.0003(5)	2.16
Odmz	0.188 (1)	0.8636(6)	0.7134(7)	0.006 (2)	0.0020(5)	0.0027(6)	-0.0001(7)	-0.0016(9)	-0.0013(4)	1.97

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{I}\bar{I}$ refinement of Lake County.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2675(5)	0.9834(7)	0.0849(5)	0.0046(7)	0.0083(6)	0.0037(4)	-0.0026(4)	0.0021(4)	-0.0036(4)	3.08
Mzoo	0.2691(4)	0.0291(5)	0.5487(5)	0.0038(4)	0.0031(2)	0.0021(2)	0.0011(2)	0.0003(2)	-0.0007(2)	1.56
Moio	0.7747(5)	0.5329(4)	0.5463(4)	0.0057(6)	0.0033(3)	0.0027(2)	0.0016(3)	0.0012(3)	-0.0007(2)	1.83
Mzio	0.7649(9)	0.489 (2)	0.081 (1)	0.007 (1)	0.009 (1)	0.0036(6)	0.0003(7)	0.0024(6)	-0.0017(8)	3.33
Tloo	0.0076(2)	0.1607(1)	0.1053(1)	0.0037(3)	0.0014(1)	0.0013(1)	-0.0004(1)	0.0010(1)	-0.0000(1)	0.84
Tloz	0.0043(2)	0.1649(1)	0.6098(1)	0.0041(3)	0.0016(1)	0.0010(1)	-0.0002(1)	0.0008(1)	0.0001(1)	0.87
Tlmo	0.0011(2)	0.8156(1)	0.1180(1)	0.0047(3)	0.0016(1)	0.0011(1)	0.0008(1)	0.0012(2)	0.0001(1)	0.91
Tlmz	0.0046(2)	0.8170(1)	0.6133(1)	0.0035(3)	0.0017(1)	0.0011(1)	0.0008(1)	0.0007(1)	0.0001(1)	0.88
T2oo	0.6878(2)	0.1109(1)	0.1585(1)	0.0039(3)	0.0012(1)	0.0016(1)	0.0001(1)	0.0009(1)	0.0001(1)	0.92
T2oz	0.6811(2)	0.1068(1)	0.6587(1)	0.0036(3)	0.0013(1)	0.0015(1)	0.00019(1)	0.0009(1)	-0.0000(1)	0.91
T2mo	0.6787(2)	0.8808(1)	0.1802(1)	0.0033(3)	0.0013(1)	0.0014(1)	0.0001(1)	0.0007(1)	0.0002(1)	0.87
T2mz	0.6829(2)	0.8764(1)	0.6774(1)	0.0039(3)	0.0012(1)	0.0015(1)	0.0004(1)	0.0012(2)	0.0003(1)	0.86
Oa1o	0.0072(6)	0.1287(3)	-0.0089(3)	0.0091(9)	0.0028(3)	0.0013(2)	0.0007(4)	0.0017(4)	0.0002(2)	1.53
Oa1z	0.9982(6)	0.1279(3)	0.4889(3)	0.011 (1)	0.0032(3)	0.0019(3)	0.0010(4)	0.0028(5)	0.0006(2)	1.78
Oa2o	0.5802(5)	0.9912(3)	0.1397(3)	0.0049(8)	0.0014(2)	0.0021(3)	0.0008(3)	0.0013(4)	0.0005(2)	1.10
Oa2z	0.5776(5)	0.9914(3)	0.6387(3)	0.0043(8)	0.0015(2)	0.0025(3)	-0.0006(3)	0.0011(4)	0.0002(2)	1.23
Oboo	0.8190(6)	0.1028(3)	0.0930(3)	0.0066(8)	0.0020(2)	0.0033(3)	-0.0007(3)	0.0027(4)	-0.0001(2)	1.57
Oboz	0.8056(6)	0.1034(3)	0.5952(3)	0.0076(8)	0.0019(2)	0.0042(3)	-0.0005(3)	0.0038(4)	-0.0003(2)	1.72
Obmo	0.8108(6)	0.8536(3)	0.1256(4)	0.0090(9)	0.0024(3)	0.0056(4)	0.0003(4)	0.0046(5)	-0.0006(2)	2.22
Obmz	0.8195(6)	0.8537(3)	0.6179(4)	0.0067(8)	0.0038(3)	0.0051(3)	0.0011(4)	0.0038(5)	0.0000(3)	2.29
Ocoo	0.0133(6)	0.2837(3)	0.1371(3)	0.0085(9)	0.0021(2)	0.0029(3)	-0.0006(4)	0.0029(4)	-0.0000(2)	1.62
Ocoz	0.0156(6)	0.2945(3)	0.6454(3)	0.0056(8)	0.0022(2)	0.0028(3)	-0.0006(3)	0.0014(4)	0.0001(2)	1.53
Ocmo	0.0112(6)	0.6825(3)	0.1083(3)	0.0050(8)	0.0027(3)	0.0024(3)	0.0011(3)	0.0010(4)	0.0002(2)	1.55
Ocmz	0.0121(6)	0.6905(3)	0.6028(3)	0.0086(9)	0.0020(2)	0.0021(3)	0.0011(4)	0.0012(4)	-0.0004(2)	1.62
Odoo	0.1937(6)	0.1086(3)	0.1892(3)	0.0063(9)	0.0026(3)	0.0018(2)	0.0000(4)	0.0008(4)	0.0001(2)	1.51
Odoz	0.2008(6)	0.1049(3)	0.6924(3)	0.0080(9)	0.0020(2)	0.0020(2)	0.0008(4)	0.0003(4)	0.0002(2)	1.62
Odmo	0.1934(6)	0.8676(3)	0.2177(3)	0.0075(9)	0.0027(3)	0.0030(3)	0.0008(4)	-0.0000(4)	-0.0001(2)	2.07
Odmoz	0.1869(6)	0.8640(3)	0.7133(3)	0.0069(9)	0.0035(3)	0.0019(3)	0.0005(4)	-0.0008(4)	-0.0007(2)	2.03

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{\text{I}}$ refinement of Val Paseda/3.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2672(5)	0.9855(5)	0.0872(4)	0.0030(7)	0.0047(3)	0.0021(3)	-0.0008(3)	0.0013(3)	-0.0016(3)	1.72
Mz _{oo}	0.2689(5)	0.0308(9)	0.546 (1)	0.0025(5)	0.0018(3)	0.0018(4)	0.0003(2)	0.0004(3)	-0.0004(3)	1.05
Mo _{io}	0.7740(4)	0.5354(3)	0.5431(3)	0.0031(5)	0.0023(2)	0.0014(2)	0.0012(2)	0.0004(2)	-0.0003(2)	1.10
Mz _{io}	0.7633(9)	0.502 (2)	0.077 (2)	0.0026(9)	0.0034(8)	0.0019(7)	0.0006(5)	0.0004(5)	-0.0008(7)	1.45
Tl _{oo}	0.0080(3)	0.1576(2)	0.1043(2)	0.0029(4)	0.0011(1)	0.0008(1)	-0.0001(2)	0.0006(2)	-0.0000(1)	0.63
Tl _{oz}	0.0028(3)	0.1637(2)	0.6121(2)	0.0025(4)	0.0012(1)	0.0009(1)	-0.0001(2)	0.0007(2)	0.0000(1)	0.64
Tl _{mo}	0.9998(3)	0.8148(2)	0.1196(2)	0.0038(4)	0.0011(1)	0.0011(1)	0.0006(2)	0.0012(2)	0.0002(1)	0.72
Tl _{mz}	0.0043(3)	0.8175(1)	0.6118(2)	0.0027(4)	0.0010(1)	0.0007(1)	0.0005(2)	0.0003(2)	-0.0000(1)	0.61
T2 _{oo}	0.6877(3)	0.1127(2)	0.1594(2)	0.0028(4)	0.0009(1)	0.0017(1)	0.0001(2)	0.0007(2)	-0.0000(1)	0.82
T2 _{oz}	0.6764(3)	0.1052(2)	0.6573(2)	0.0025(4)	0.0008(1)	0.0018(1)	-0.0000(2)	0.0010(2)	-0.0002(1)	0.77
T2 _{mo}	0.6755(3)	0.8814(2)	0.1809(2)	0.0019(4)	0.0009(1)	0.0016(1)	0.0004(2)	0.0002(2)	0.0002(1)	0.75
T2 _{mz}	0.6832(3)	0.8749(2)	0.6774(2)	0.0031(4)	0.0010(1)	0.0014(1)	0.0004(2)	0.0009(2)	0.0004(1)	0.74
Oa _{1o}	0.0062(8)	0.1246(4)	-0.0091(4)	0.012 (1)	0.0018(3)	0.0016(3)	0.0010(5)	0.0035(6)	-0.0001(3)	1.41
Oa _{1z}	0.9998(8)	0.1259(4)	0.4903(4)	0.012 (1)	0.0019(3)	0.0010(3)	0.0007(5)	0.0026(6)	0.0004(3)	1.38
Oa _{2o}	0.5745(7)	0.9895(4)	0.1400(4)	0.0022(9)	0.0010(3)	0.0020(3)	-0.0002(4)	0.0008(5)	0.0000(2)	0.84
Oa _{2z}	0.5733(7)	0.9916(4)	0.6379(4)	0.0026(9)	0.0007(3)	0.0021(3)	0.0003(4)	0.0004(5)	0.0002(2)	0.89
Ob _{oo}	0.8211(8)	0.0990(4)	0.0919(5)	0.005 (1)	0.0015(3)	0.0044(4)	-0.0004(4)	0.0033(6)	-0.0006(3)	1.50
Ob _{oz}	0.7992(8)	0.1005(4)	0.5925(5)	0.005 (1)	0.0010(3)	0.0049(4)	-0.0010(4)	0.0041(6)	-0.0009(3)	1.50
Ob _{mo}	0.8079(9)	0.8563(4)	0.1259(5)	0.007 (1)	0.0019(3)	0.0071(6)	0.0003(5)	0.0051(7)	-0.0005(3)	2.26
Ob _{mz}	0.8235(8)	0.8556(4)	0.6171(5)	0.008 (1)	0.0023(3)	0.0056(5)	0.0018(5)	0.0055(7)	0.0005(3)	1.91
Oc _{oo}	0.0129(8)	0.2791(4)	0.1368(4)	0.0043(9)	0.0018(3)	0.0020(3)	0.0001(4)	0.0016(5)	-0.0001(3)	1.11
Oc _{oz}	0.0150(7)	0.2928(4)	0.6491(4)	0.0048(9)	0.0009(3)	0.0022(3)	-0.0004(4)	0.0015(5)	-0.0004(2)	1.03
Oc _{mo}	0.0071(8)	0.6799(4)	0.1066(4)	0.004 (1)	0.0017(3)	0.0015(3)	0.0012(4)	0.0000(5)	0.0003(3)	1.13
Oc _{mz}	0.0053(8)	0.6911(4)	0.5995(4)	0.0035(9)	0.0013(3)	0.0017(3)	0.0004(4)	0.0007(5)	-0.0003(2)	0.97
Od _{oo}	0.1916(8)	0.1060(4)	0.1858(4)	0.004 (1)	0.0014(3)	0.0020(3)	0.0004(4)	-0.0007(5)	0.0003(3)	1.28
Od _{oz}	0.2019(8)	0.1027(4)	0.6925(4)	0.005 (1)	0.0022(3)	0.0018(3)	0.0007(5)	-0.0015(5)	-0.0004(3)	1.66
Od _{mo}	0.1964(9)	0.8680(4)	0.2209(5)	0.004 (1)	0.0023(3)	0.0038(4)	0.0010(5)	-0.0027(6)	-0.0016(3)	2.32
Od _{mz}	0.1863(9)	0.8627(4)	0.7084(5)	0.010 (1)	0.0020(3)	0.0040(4)	0.0017(6)	-0.0021(6)	-0.0011(3)	2.71

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{1}\bar{1}$ refinement of Val Pasmada/6.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2662(7)	0.9852(7)	0.0859(5)	0.0030(9)	0.0070(6)	0.0019(3)	-.0012(5)	0.0005(4)	-.0021(4)	2.32
Mzoo	0.271 (1)	0.0307(8)	0.547 (1)	0.0009(8)	0.0021(4)	0.0020(4)	0.0003(3)	0.0001(3)	-.0005(3)	1.07
Moio	0.7742(5)	0.5361(3)	0.5438(3)	0.0051(6)	0.0021(2)	0.0013(2)	0.0010(3)	0.0007(3)	-.0003(2)	1.19
Mzio	0.763 (1)	0.501 (4)	0.075 (4)	0.006 (1)	0.007 (2)	0.005 (1)	-.0007(9)	0.0029(9)	-.004 (1)	2.92
T1oo	0.0072(3)	0.1582(2)	0.1045(2)	0.0026(4)	0.0013(1)	0.0007(1)	-.0003(2)	0.0004(2)	0.0000(1)	0.65
T1oz	0.0027(4)	0.1638(2)	0.6118(2)	0.0044(5)	0.0012(1)	0.0009(2)	-.0004(2)	0.0012(2)	-.0001(1)	0.75
T1mo	0.0004(4)	0.8152(2)	0.1195(2)	0.0036(5)	0.0014(1)	0.0006(1)	0.0002(2)	0.0005(2)	-.0001(1)	0.71
T1mz	0.0033(4)	0.8170(2)	0.6121(2)	0.0034(5)	0.0012(1)	0.0010(1)	0.0006(2)	0.0006(2)	0.0001(1)	0.74
T2oo	0.6882(4)	0.1124(2)	0.1601(2)	0.0019(5)	0.0011(1)	0.0016(2)	0.0001(2)	0.0002(2)	0.0001(1)	0.82
T2oz	0.6767(4)	0.1061(2)	0.6571(2)	0.0038(4)	0.0008(1)	0.0017(1)	-.0001(2)	0.0011(2)	-.0002(1)	0.85
T2mo	0.6766(3)	0.8812(2)	0.1810(2)	0.0026(4)	0.0008(1)	0.0015(1)	0.0003(2)	0.0007(2)	0.0002(1)	0.72
T2mz	0.6825(4)	0.8755(2)	0.6778(2)	0.0033(5)	0.0012(1)	0.0012(1)	0.0003(2)	0.0008(2)	0.0002(1)	0.77
Oa1o	0.0068(9)	0.1248(5)	-.0098(4)	0.008 (1)	0.0024(4)	0.0005(3)	0.0015(6)	0.0013(6)	0.0003(3)	1.17
Oa1z	0.0002(9)	0.1269(5)	0.4904(5)	0.012 (2)	0.0018(3)	0.0021(4)	-.0001(6)	0.0035(7)	0.0001(3)	1.52
Oa2o	0.5738(9)	0.9885(4)	0.1396(5)	0.006 (1)	0.0007(3)	0.0016(4)	-.0002(5)	0.0009(6)	0.0001(3)	0.96
Oa2z	0.5735(8)	0.9919(4)	0.6379(5)	0.001 (1)	0.0011(3)	0.0018(4)	0.0006(5)	0.0001(6)	0.0002(3)	0.81
Oboo	0.8203(9)	0.0989(4)	0.0923(5)	0.004 (1)	0.0013(3)	0.0036(4)	-.0015(5)	0.0025(6)	-.0003(3)	1.31
Oboz	0.7992(9)	0.1007(5)	0.5917(5)	0.007 (1)	0.0017(4)	0.0043(5)	-.0009(5)	0.0039(7)	-.0007(3)	1.63
Obmo	0.8078(9)	0.8568(5)	0.1252(6)	0.008 (1)	0.0023(4)	0.0055(6)	0.0004(6)	0.0046(8)	-.0002(4)	2.10
Obmz	0.8206(9)	0.8553(5)	0.6165(6)	0.007 (1)	0.0021(4)	0.0055(5)	0.0009(6)	0.0048(7)	-.0000(4)	1.92
Ocoo	0.0132(9)	0.2801(5)	0.1369(5)	0.006 (1)	0.0018(3)	0.0022(4)	-.0008(5)	0.0017(6)	0.0001(3)	1.29
Ocoz	0.0161(9)	0.2924(5)	0.6497(5)	0.005 (1)	0.0015(3)	0.0019(4)	-.0002(5)	0.0013(5)	-.0004(3)	1.13
Ocmo	0.0070(9)	0.6808(5)	0.1069(5)	0.005 (1)	0.0018(4)	0.0020(4)	0.0010(5)	0.0007(6)	-.0004(3)	1.24
Ocmz	0.0065(9)	0.6901(5)	0.6012(5)	0.005 (1)	0.0019(4)	0.0015(4)	0.0007(5)	0.0004(6)	-.0003(3)	1.21
Odoz	0.1915(9)	0.1063(5)	0.1858(5)	0.007 (1)	0.0023(4)	0.0023(4)	0.0010(6)	0.0010(6)	0.0001(3)	1.61
Odoz	0.2006(9)	0.1026(5)	0.6919(5)	0.003 (1)	0.0018(4)	0.0012(3)	-.0002(5)	-.0016(5)	0.0001(3)	1.23
Odmo	0.1965(9)	0.8674(5)	0.2203(5)	0.005 (1)	0.0023(4)	0.0036(5)	0.0003(6)	-.0018(6)	-.0006(4)	2.20
Odmoz	0.1860(9)	0.8631(5)	0.7101(5)	0.007 (2)	0.0028(4)	0.0028(4)	0.0019(6)	-.0023(6)	-.0013(3)	2.35

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{1}\bar{1}$ refinement of Val Pasmeda/7.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2663(4)	0.9851(4)	0.0863(3)	0.0029(5)	0.0060(3)	0.0023(2)	-.0013(3)	0.0012(3)	-.0024(2)	2.12
Mzoo	0.2688(3)	0.0294(5)	0.5480(7)	0.0025(3)	0.0025(2)	0.0021(3)	0.0007(2)	0.0003(2)	-.0009(2)	1.30
Moio	0.7741(3)	0.5357(2)	0.5435(2)	0.0043(4)	0.0022(1)	0.0015(1)	0.0007(2)	0.0006(2)	-.0001(1)	1.19
Mzio	0.7631(8)	0.498 (1)	0.080 (1)	0.0044(9)	0.0046(7)	0.0013(5)	-.0007(5)	0.0011(4)	-.0008(5)	1.65
T1oo	0.0071(2)	0.1582(1)	0.1034(1)	0.0028(3)	0.0013(1)	0.0009(1)	-.0004(1)	0.0006(1)	0.0000(1)	0.70
T1oz	0.0030(2)	0.1635(1)	0.6118(1)	0.0033(3)	0.0012(1)	0.0010(1)	-.0004(1)	0.0009(1)	0.0000(1)	0.69
T1mo	0.9996(2)	0.8147(1)	0.1191(1)	0.0038(3)	0.0011(1)	0.0009(1)	0.0004(1)	0.0009(1)	0.0001(1)	0.71
T1mz	0.0041(2)	0.8173(1)	0.6122(1)	0.0034(3)	0.0012(1)	0.0008(1)	0.0004(1)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.71
T2oo	0.6876(2)	0.1124(1)	0.1598(1)	0.0028(3)	0.0009(1)	0.0016(1)	-.0000(1)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.80
T2oz	0.6766(2)	0.1058(1)	0.6574(1)	0.0028(3)	0.0010(1)	0.0018(1)	-.0001(1)	0.0010(1)	-.0001(1)	0.83
T2mo	0.6762(2)	0.8814(1)	0.1809(1)	0.0029(3)	0.0010(1)	0.0016(1)	0.0002(1)	0.0005(1)	0.0003(1)	0.83
T2mz	0.6831(2)	0.8755(1)	0.6778(1)	0.0026(3)	0.0011(1)	0.0014(1)	0.0002(1)	0.0008(1)	0.0002(1)	0.72
Oa1o	0.0069(6)	0.1252(3)	-.0097(3)	0.0106(9)	0.0020(2)	0.0011(2)	0.0005(4)	0.0022(4)	0.0001(2)	1.39
Oa1z	0.0002(5)	0.1257(3)	0.4901(3)	0.0096(9)	0.0015(2)	0.0017(2)	0.0003(3)	0.0025(4)	0.0003(2)	1.30
Oa2o	0.5750(5)	0.9897(3)	0.1395(3)	0.0024(6)	0.0009(2)	0.0016(2)	0.0000(3)	0.0002(3)	0.0003(2)	0.81
Oa2z	0.5727(5)	0.9905(3)	0.6378(3)	0.0037(7)	0.0010(2)	0.0023(3)	0.0003(3)	0.0013(4)	0.0003(2)	0.98
Oboo	0.8218(5)	0.0990(3)	0.0924(3)	0.0060(7)	0.0016(2)	0.0034(3)	-.0012(3)	0.0032(4)	-.0006(2)	1.39
Oboz	0.7987(5)	0.1011(3)	0.5922(3)	0.0047(7)	0.0015(2)	0.0042(3)	-.0010(3)	0.0033(4)	-.0004(2)	1.46
Obmo	0.8068(6)	0.8564(3)	0.1253(4)	0.0060(8)	0.0021(2)	0.0067(4)	0.0000(4)	0.0052(5)	-.0005(2)	2.13
Obmz	0.8220(6)	0.8555(3)	0.6166(4)	0.0076(8)	0.0023(2)	0.0054(3)	0.0009(4)	0.0050(5)	-.0000(2)	1.94
Ocoo	0.0124(5)	0.2788(3)	0.1368(3)	0.0056(7)	0.0012(2)	0.0023(2)	-.0004(3)	0.0020(4)	-.0000(2)	1.14
Ocoz	0.0166(5)	0.2930(3)	0.6490(3)	0.0043(7)	0.0013(2)	0.0021(2)	-.0006(3)	0.0010(3)	-.0000(2)	1.10
Ocmo	0.0065(5)	0.6801(3)	0.1074(3)	0.0059(8)	0.0014(2)	0.0015(2)	0.0001(3)	0.0008(3)	-.0001(2)	1.14
Ocmz	0.0067(5)	0.6910(3)	0.6005(3)	0.0034(7)	0.0016(2)	0.0018(2)	0.0007(3)	0.0007(3)	-.0001(2)	1.05
Odoo	0.1931(5)	0.1060(3)	0.1862(3)	0.0047(8)	0.0017(2)	0.0022(2)	0.0010(3)	0.0001(4)	0.0003(2)	1.37
Odoz	0.2004(6)	0.1023(3)	0.6921(3)	0.0073(8)	0.0017(2)	0.0017(2)	0.0003(4)	-.0007(4)	0.0001(2)	1.58
Odmo	0.1954(6)	0.8671(3)	0.2204(3)	0.0046(8)	0.0024(3)	0.0032(3)	0.0004(4)	-.0018(4)	-.0008(2)	2.07
Odmz	0.1866(6)	0.8622(3)	0.7091(4)	0.0080(9)	0.0028(3)	0.0034(3)	0.0010(4)	-.0015(4)	-.0011(2)	2.45

Table 2: Positional and thermal parameters from $\bar{I}\bar{1}$ refinement of Val Pasma/8.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mo _{oo}	0.2664(3)	0.9857(3)	0.0864(2)	0.0028(4)	0.0049(3)	0.0021(2)	-0.0010(2)	0.0010(2)	-0.0018(2)	1.81
Mz _{oo}	0.2691(5)	0.0306(5)	0.5459(8)	0.0022(3)	0.0020(2)	0.0015(2)	0.0005(2)	0.0005(2)	-0.0004(2)	0.99
Mo _{io}	0.7740(2)	0.5358(2)	0.5433(2)	0.0035(3)	0.0018(1)	0.0014(1)	0.0007(1)	0.0004(1)	-0.0003(1)	1.07
Mz _{io}	0.7635(6)	0.503 (2)	0.076 (2)	0.0028(5)	0.0051(7)	0.0028(6)	0.0002(4)	0.0009(3)	-0.0020(6)	2.06
Tl _{oo}	0.0073(2)	0.1579(1)	0.1043(1)	0.0026(2)	0.0011(1)	0.0008(1)	-0.0004(1)	0.0007(1)	-0.0000(1)	0.61
Tl _{oz}	0.0030(1)	0.1637(1)	0.6118(1)	0.0030(3)	0.0010(8)	0.0008(8)	-0.0003(1)	0.0006(1)	0.0000(1)	0.63
Tl _{mo}	0.9996(2)	0.8148(1)	0.1193(1)	0.0035(3)	0.0010(1)	0.0007(1)	0.0002(1)	0.0007(1)	0.0000(1)	0.63
Tl _{mz}	0.0042(2)	0.8174(1)	0.6119(1)	0.0026(2)	0.0012(1)	0.0008(1)	0.0005(1)	0.0006(1)	-0.0000(1)	0.64
T2 _{oo}	0.6878(2)	0.1123(1)	0.1597(1)	0.0023(2)	0.0011(1)	0.0016(1)	-0.0001(1)	0.0007(1)	-0.0001(1)	0.78
T2 _{oz}	0.6764(2)	0.1056(1)	0.6572(1)	0.0027(2)	0.0009(1)	0.0019(1)	-0.0001(1)	0.0009(1)	-0.0002(1)	0.81
T2 _{mo}	0.6756(2)	0.8815(1)	0.1806(1)	0.0027(2)	0.0009(1)	0.0016(1)	0.0001(1)	0.0006(1)	0.0002(1)	0.76
T2 _{mz}	0.6830(2)	0.8753(1)	0.6776(1)	0.0020(2)	0.0009(1)	0.0014(1)	0.0002(1)	0.0006(1)	0.0003(1)	0.65
Oa _{1o}	0.0068(5)	0.1251(2)	-0.0090(3)	0.0084(7)	0.0017(2)	0.0013(2)	0.0002(3)	0.0017(3)	0.0000(2)	1.23
Oa _{1z}	0.9988(5)	0.1258(2)	0.4896(3)	0.0112(8)	0.0016(2)	0.0013(2)	0.0004(3)	0.0030(4)	0.0001(2)	1.27
Oa _{2o}	0.5735(4)	0.9895(2)	0.1390(2)	0.0026(6)	0.0011(2)	0.0017(2)	-0.0001(2)	0.0008(3)	0.0002(1)	0.80
Oa _{2z}	0.5725(4)	0.9905(2)	0.6383(2)	0.0022(6)	0.0009(2)	0.0020(2)	0.0002(2)	0.0006(3)	0.0002(1)	0.83
Ob _{oo}	0.8208(5)	0.0988(2)	0.0917(3)	0.0046(6)	0.0014(2)	0.0034(2)	-0.0011(3)	0.0027(3)	-0.0007(2)	1.30
Ob _{oz}	0.7988(5)	0.1007(3)	0.5925(3)	0.0050(7)	0.0017(2)	0.0046(3)	-0.0011(3)	0.0039(4)	-0.0006(2)	1.57
Ob _{mo}	0.8066(5)	0.8562(3)	0.1253(3)	0.0050(7)	0.0019(2)	0.0065(3)	0.0000(3)	0.0040(4)	-0.0008(2)	2.07
Ob _{mz}	0.8228(5)	0.8558(3)	0.6173(3)	0.0068(7)	0.0025(2)	0.0058(3)	0.0013(3)	0.0048(4)	0.0003(2)	2.06
Oc _{oo}	0.0128(5)	0.2790(2)	0.1369(3)	0.0045(6)	0.0015(2)	0.0020(2)	-0.0004(3)	0.0016(3)	0.0001(2)	1.04
Oc _{oz}	0.0159(5)	0.2930(2)	0.6496(3)	0.0038(6)	0.0012(2)	0.0024(2)	-0.0006(3)	0.0012(3)	-0.0002(2)	1.09
Oc _{mo}	0.0074(4)	0.6799(2)	0.1076(3)	0.0032(6)	0.0012(2)	0.0019(2)	0.0006(3)	0.0005(3)	0.0002(2)	0.99
Oc _{mz}	0.0067(5)	0.6910(3)	0.5997(3)	0.0047(6)	0.0013(2)	0.0016(2)	0.0007(3)	0.0005(3)	-0.0001(2)	1.07
Od _{oo}	0.1917(5)	0.1064(3)	0.1855(3)	0.0040(6)	0.0018(2)	0.0016(2)	0.0005(3)	-0.0006(3)	0.0002(2)	1.26
Od _{oz}	0.2024(5)	0.1025(3)	0.6920(3)	0.0055(7)	0.0019(2)	0.0018(2)	0.0004(3)	-0.0010(3)	0.0003(2)	1.51
Od _{mo}	0.1957(5)	0.8677(3)	0.2208(3)	0.0056(7)	0.0022(2)	0.0034(3)	0.0001(3)	-0.0016(4)	-0.0013(2)	2.15
Od _{mz}	0.1871(6)	0.8620(3)	0.7093(3)	0.0079(8)	0.0029(3)	0.0029(3)	0.0015(3)	-0.0024(4)	-0.0009(2)	2.47

Table 2: Positional and thermal parameters from $\text{I}\bar{\text{I}}$ refinement of Monte Somma/1.

Site	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
Mooo	0.2659(3)	0.9860(2)	0.0862(2)	0.0024(3)	0.0040(2)	0.0019(1)	-.0007(2)	0.0010(2)	-.0014(1)	1.52
Mzoo	0.2681(3)	0.0292(4)	0.5471(5)	0.0026(2)	0.0022(2)	0.0018(2)	0.0007(1)	0.0005(1)	-.0007(1)	1.15
Moio	0.7740(2)	0.5353(1)	0.5430(1)	0.0027(3)	0.0017(1)	0.0015(1)	0.0006(1)	0.0006(1)	-.0003(1)	0.95
Mzio	0.7639(5)	0.501 (1)	0.079 (1)	0.0025(5)	0.0030(4)	0.0011(3)	0.0000(3)	0.0009(3)	-.0005(3)	1.10
T1oo	0.0076(1)	0.1580(1)	0.1043(1)	0.0023(2)	0.0011(1)	0.0008(5)	-.0004(8)	0.0006(1)	-.0000(1)	0.58
T1oz	0.0027(2)	0.1636(1)	0.6119(1)	0.0032(2)	0.0009(1)	0.0009(1)	-.0004(1)	0.0008(1)	0.0000(1)	0.62
T1mo	0.0000(2)	0.8150(1)	0.1195(1)	0.0037(2)	0.0009(1)	0.0009(1)	0.0002(1)	0.0010(1)	0.0000(1)	0.63
T1mz	0.0046(1)	0.8174(1)	0.6118(1)	0.0024(2)	0.0011(5)	0.0008(1)	0.0004(1)	0.0006(1)	0.0000(1)	0.58
T2oo	0.6877(2)	0.1124(1)	0.1597(1)	0.0025(2)	0.0008(1)	0.0018(1)	-.0002(1)	0.0009(1)	-.0001(1)	0.76
T2oz	0.6767(1)	0.1056(1)	0.6574(1)	0.0024(2)	0.0007(1)	0.0019(1)	-.0002(1)	0.0011(1)	-.0002(1)	0.76
T2mo	0.6760(1)	0.8816(1)	0.1808(1)	0.0021(2)	0.0008(1)	0.0016(1)	0.0000(1)	0.0004(1)	0.0002(1)	0.72
T2mz	0.6831(2)	0.8751(1)	0.6773(1)	0.0026(2)	0.0008(1)	0.0013(1)	0.0003(1)	0.0009(1)	0.0003(1)	0.64
Oa1o	0.0073(4)	0.1251(2)	-.0090(2)	0.0099(6)	0.0017(2)	0.0013(2)	0.0001(2)	0.0023(3)	-.0001(1)	1.28
Oa1z	0.9984(4)	0.1254(2)	0.4899(2)	0.0114(7)	0.0015(2)	0.0016(2)	0.0004(2)	0.0033(3)	0.0004(1)	1.30
Oa2o	0.5743(3)	0.9896(2)	0.1391(2)	0.0021(5)	0.0008(1)	0.0019(2)	-.0002(2)	0.0007(2)	0.0002(1)	0.78
Oa2z	0.5727(3)	0.9906(2)	0.6381(2)	0.0021(5)	0.0010(1)	0.0017(2)	0.0000(2)	0.0005(2)	0.0002(1)	0.79
Oboo	0.8217(4)	0.0993(2)	0.0919(2)	0.0048(5)	0.0013(2)	0.0039(2)	-.0014(2)	0.0031(3)	-.0007(1)	1.38
Oboz	0.7984(4)	0.1007(2)	0.5924(2)	0.0058(5)	0.0014(2)	0.0050(2)	-.0014(2)	0.0045(3)	-.0009(2)	1.59
Obmo	0.8079(4)	0.8562(2)	0.1261(3)	0.0065(6)	0.0018(2)	0.0071(3)	0.0001(3)	0.0053(4)	-.0006(2)	2.19
Obmz	0.8231(4)	0.8558(2)	0.6166(3)	0.0082(6)	0.0020(2)	0.0058(3)	0.0012(3)	0.0058(3)	0.0005(2)	1.95
Ocoo	0.0129(4)	0.2789(2)	0.1360(2)	0.0044(5)	0.0014(2)	0.0019(2)	-.0007(2)	0.0014(2)	-.0003(1)	1.05
Ocoz	0.0152(4)	0.2933(2)	0.6490(2)	0.0051(5)	0.0012(1)	0.0020(2)	-.0004(2)	0.0014(2)	-.0002(1)	1.09
Ocmo	0.0078(4)	0.6797(2)	0.1073(2)	0.0048(5)	0.0010(1)	0.0018(2)	0.0006(2)	0.0011(2)	-.0000(1)	0.98
Ocmz	0.0058(4)	0.6912(2)	0.5997(2)	0.0035(5)	0.0012(1)	0.0015(2)	0.0004(2)	0.0002(2)	-.0003(1)	0.95
Odo	0.1920(4)	0.1062(2)	0.1863(2)	0.0043(5)	0.0018(2)	0.0017(2)	0.0005(2)	-.0004(2)	-.0000(1)	1.30
Odoz	0.2020(4)	0.1032(2)	0.6921(2)	0.0060(6)	0.0013(2)	0.0023(2)	0.0003(2)	-.0010(3)	0.0002(1)	1.57
Odmo	0.1970(4)	0.8679(2)	0.2207(2)	0.0047(6)	0.0023(2)	0.0037(2)	0.0007(3)	-.0012(3)	-.0012(2)	2.09
Odmz	0.1860(4)	0.8623(2)	0.7088(2)	0.0074(6)	0.0025(2)	0.0031(2)	0.0013(3)	-.0027(3)	-.0014(2)	2.44