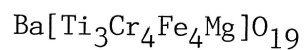


AM-87-340

Structure of a new upper-mantle, magnetoplumbite-type mineral,



Ian E. Grey, Ian C. Madsen, Stephen E. Haggerty

For deposit: Anisotropic thermal parameters and observed and calculated
structure factors

American Mineralogist, 72, 5-6, 633-636.

Table D1 Observed and calculated structure factors for PHASE 'N'

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-1	2	0	226	213	0	2	2	43	-41	0	0	4	14	-19	-1	7	5	24	23	0	6	7	14	-2
0	2	0	105	-107	-1	3	2	15	12	0	1	4	25	-21	0	7	5	14	-15	0	7	7	105	103
-1	3	0	7	2	0	3	2	60	-64	-1	2	4	255	264	-3	8	5	22	25	-3	7	7	16	17
0	3	0	167	165	-2	4	2	15	-11	0	2	4	5	16	0	0	6	177	-172	-2	7	7	84	-84
-2	4	0	486	490	-1	4	2	31	32	-1	3	4	18	-11	0	1	6	30	-29	-1	7	7	74	76
-1	4	0	11	8	0	4	2	21	-21	0	3	4	203	206	-1	2	6	50	46	0	7	7	82	-83
0	4	0	73	-70	-2	5	2	41	40	-2	4	4	14	-10	-1	2	6	162	163	-3	8	7	209	213
-2	5	0	15	17	-1	5	2	47	-50	-1	4	4	21	-19	0	0	8	18	-21	0	1	8	84	73
-1	5	0	128	126	0	5	2	12	2	0	4	4	23	25	-2	3	6	39	38	-1	2	8	41	46
0	5	0	6	-7	-3	6	2	43	-48	-2	5	4	19	-17	-1	4	6	98	-100	0	2	8	34	34
-3	6	0	119	119	-2	6	2	13	-10	-1	5	4	154	152	-1	4	6	18	-14	0	3	8	89	81
-2	6	0	54	-57	-1	6	2	17	13	0	5	4	9	-8	0	4	6	94	93	-1	3	8	36	38
-1	6	0	6	-6	0	6	2	14	-12	-3	6	4	143	139	-2	5	6	16	-16	-2	4	8	144	143
0	6	0	264	269	-3	7	2	13	5	-2	6	4	22	20	-1	5	6	23	21	-1	4	8	54	48
-3	7	0	12	-9	-2	7	2	36	-38	-1	6	4	14	-15	0	5	6	13	-11	0	4	8	17	18
-2	7	0	87	86	-1	7	2	24	24	0	6	4	16	-11	-3	6	6	16	14	-2	5	8	35	29
-1	7	0	7	9	0	7	2	31	30	-3	7	4	11	-10	-2	6	6	69	70	-1	5	8	28	28
0	7	0	13	14	-4	8	2	15	-12	-2	7	4	109	105	-1	6	6	11	-5	0	5	8	59	58
-4	8	0	224	225	-3	8	2	16	17	-1	7	4	14	-13	0	6	6	56	-56	-3	6	8	26	25
0	8	1	53	-59	0	1	3	5	-8	0	7	4	11	-12	-3	7	6	11	-5	-2	6	8	13	10
-1	3	1	33	-35	0	2	3	191	-203	-4	8	4	17	-13	-2	7	6	17	-13	-1	6	8	44	42
0	3	1	8	-7	-1	3	3	22	17	-3	8	4	15	-14	-1	7	6	16	-10	0	6	8	89	89
-1	4	1	32	36	0	3	3	26	26	0	1	5	25	-27	0	7	6	15	-11	-3	7	8	47	46
0	4	1	46	48	-1	4	3	12	-4	0	2	5	169	170	-4	8	6	48	-45	-2	7	8	23	18
-2	5	1	23	-27	0	4	3	140	142	-1	3	5	21	-22	-3	8	6	11	-4	-1	7	8	26	24
-1	5	1	11	2	-2	5	3	14	-6	0	3	5	17	15	0	1	7	227	226	-4	8	8	77	76
0	5	1	23	20	-1	5	3	15	-13	-1	4	5	26	30	0	2	7	25	35	0	1	9	29	-34
-2	6	1	40	-42	0	5	3	17	-18	0	4	5	95	-98	-1	3	7	196	194	0	2	9	120	119
-1	6	1	27	-26	-2	6	3	110	-110	-2	5	5	20	-22	0	3	7	23	24	-1	3	9	33	-32
0	6	1	7	3	-1	6	3	10	8	-1	5	5	19	-12	-1	4	7	154	-155	0	3	9	13	-11

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-3	7	1	22	-17	0	6	3	6	-2	0	5	5	15	13	0	4	7	15	-18	-1	4	9	28	32
-2	7	1	13	-2	-3	7	3	15	10	-2	6	5	68	68	-2	5	7	126	124	0	4	9	81	-82
-1	7	1	20	21	-2	7	3	17	16	-1	6	5	23	-24	-1	5	7	14	-13	-2	5	9	21	-25
0	7	1	13	-15	-1	7	3	13	5	0	6	5	13	3	0	5	7	128	-128	-1	5	9	14	5
-3	8	1	21	22	0	7	3	14	-7	-3	7	5	15	-13	-2	6	7	15	14	0	5	9	24	24
-1	2	2	75	-80	-3	8	3	6	2	-2	7	5	20	15	-1	6	7	108	111	-2	6	9	63	63
-1	6	9	26	-26	-3	7	11	38	33	-1	7	13	18	10	0	2	16	37	-27	-2	5	18	80	80
0	6	9	12	3	-2	7	11	15	-6	0	0	14	270	-265	-1	3	16	14	2	-1	5	18	106	-106
-3	7	9	22	-21	-1	7	11	41	-41	0	1	14	40	38	0	3	16	100	101	0	5	18	44	40
-2	7	9	16	-7	0	0	12	94	90	-1	2	14	60	-56	-2	4	16	56	55	-3	6	18	94	-98
-1	7	9	20	23	0	1	12	35	27	0	2	14	184	181	-1	4	16	11	3	-2	6	18	12	-4
0	0	10	45	-32	-1	2	12	99	102	-1	3	14	28	27	0	4	16	25	-15	-1	6	18	48	47
0	1	10	40	41	0	2	12	72	71	0	3	14	50	-48	-2	5	16	14	8	0	1	19	12	14
-1	2	10	79	-81	-1	3	12	40	39	-2	4	14	195	-192	-1	5	16	83	85	0	2	19	35	-35
0	2	10	88	-89	0	3	12	84	84	-1	4	14	30	30	0	5	16	12	-5	-1	3	19	16	13
-1	3	10	40	42	-2	4	12	61	60	0	4	14	129	130	-3	6	16	79	83	0	3	19	16	8
0	3	10	62	-65	-1	4	12	22	17	-2	5	14	30	28	-2	6	16	21	-13	-1	4	19	14	-13
-2	4	10	22	12	0	4	12	48	49	-1	5	14	40	-39	-1	6	16	12	-7	0	4	19	26	27
-1	4	10	34	32	-2	5	12	13	6	0	5	14	16	17	0	6	16	33	32	-2	5	19	16	10
0	4	10	60	-65	-1	5	12	65	65	-3	6	14	38	-37	-3	7	16	15	-8	-1	6	19	14	-5
-2	5	10	23	19	0	5	12	31	32	-2	6	14	105	106	0	1	17	38	38	0	5	19	14	-7
-1	5	10	53	-56	-3	6	12	60	61	-1	6	14	23	21	0	2	17	114	112	-2	6	19	24	-20
0	5	10	28	31	-2	6	12	38	36	0	6	14	126	-128	-1	3	17	28	27	-1	6	19	17	8
-3	6	10	56	-57	-1	6	12	20	19	-3	7	14	20	17	0	3	17	15	-12	0	0	20	225	231
-2	6	10	49	-51	0	6	12	39	38	-2	7	14	30	-27	-1	4	17	28	-26	0	1	20	43	44
-1	6	10	29	30	-3	7	12	25	24	0	1	15	59	59	0	4	17	86	-87	0	2	20	23	18
0	6	10	23	26	-2	7	12	50	48	0	2	15	16	-16	-2	5	17	28	29	0	2	20	12	-4
-3	7	10	25	28	-1	7	12	16	6	-1	3	15	51	52	-1	5	17	10	7	-1	3	20	34	34
-2	7	10	36	-35	0	1	13	34	-30	0	3	15	10	-7	0	5	17	19	-19	0	3	20	16	14

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-1	7	10	21	14	0	2	13	124	-115	-1	4	15	50	-50	-2	6	17	72	71	-2	4	20	172	172
0	1	11	87	81	-1	3	13	40	-42	0	4	15	15	4	-1	6	17	21	20	-1	4	20	32	32
0	2	11	297	-300	0	3	13	19	-19	-2	5	15	42	40	0	6	17	11	20	0	4	20	12	-2
-1	3	11	72	66	-1	4	13	26	26	-1	5	15	11	7	-3	7	17	18	20	-2	5	20	33	35
0	3	11	10	-3	0	4	13	81	79	0	5	15	32	-33	0	0	18	22	16	-1	5	20	18	16
-1	4	11	67	-65	-2	5	13	20	-14	-2	6	15	13	5	0	1	18	101	99	0	5	20	25	22
0	4	11	206	208	-1	5	13	17	11	-1	6	15	39	37	-1	2	18	153	-152	-3	6	20	19	19
-2	5	11	56	55	0	5	13	32	36	0	6	15	8	-3	0	2	18	11	-9	-2	6	20	13	-2
-1	5	11	13	4	-2	6	13	63	-63	-3	7	15	30	28	-1	3	18	70	68	-1	6	20	23	19
0	5	11	43	-40	-1	6	13	27	-25	-2	7	15	15	-9	0	3	18	134	-132	0	1	21	93	-93
-2	6	11	160	-160	0	6	13	12	1	0	0	16	80	81	-2	4	18	13	9	0	2	21	14	-6
-1	6	11	46	45	-3	7	13	29	-28	0	1	16	12	11	-1	4	18	77	75	-1	3	21	84	-82
0	6	11	12	-3	-2	7	13	18	-15	-1	2	16	118	119	0	4	18	14	-6	0	3	21	10	3
-1	4	21	79	79	0	5	22	16	14	-2	4	24	94	-93	0	2	26	56	57	0	3	28	23	20
0	4	21	14	11	-3	6	22	24	-18	-1	4	24	14	12	-1	3	26	23	23	-2	4	28	113	110
-2	5	21	69	-70	0	1	23	29	30	0	4	24	50	52	0	3	26	16	-11	-1	4	28	20	14
-1	5	21	15	-4	0	2	23	60	-56	-2	5	24	18	7	-2	4	26	10	-10	0	1	29	48	5
0	5	21	60	58	-1	3	23	36	38	-1	5	24	35	33	-1	4	26	22	19	0	2	29	53	-55
-2	6	21	18	-15	0	3	23	14	14	0	1	25	51	-54	0	4	26	43	44	-1	3	29	13	-12
0	0	22	129	-130	-1	4	23	26	-26	0	2	25	169	171	0	1	27	44	47	0	0	30	37	-36
0	1	22	26	33	0	4	23	51	49	-1	3	25	49	-49	0	2	27	24	25	0	0	30	37	-36
-1	2	22	33	-30	-2	5	23	23	15	0	3	25	16	7	-1	3	27	48	45	0	1	30	35	-34
0	2	22	57	55	-1	5	23	14	-10	-1	4	25	47	48	0	3	27	15	5	-1	2	30	28	-29
-1	3	22	22	24	0	5	23	31	-37	0	4	25	141	-141	-1	4	27	42	-42	0	2	30	12	5
0	3	22	27	-25	0	0	24	112	-110	-2	5	25	43	-43	0	0	28	128	128	-1	3	30	32	36
-2	4	22	103	-101	0	1	24	16	15	-1	5	25	13	-7	0	1	28	14	15	0	1	31	28	-30
-1	4	22	26	26	-1	2	24	43	47	0	0	26	8	-20	-1	2	28	22	23	0	2	31	78	-82
0	4	22	44	44	0	2	24	54	59	0	1	26	13	22	0	2	28	27	-25	0	0	32	45	42
-2	5	22	27	25	-1	3	24	22	20	-1	2	26	17	-15	-1	3	28	24	24	0	1	32	27	-32
-1	5	22	21	-19	0	3	24	41	41															

Table D2 . Anisotropic thermal parameters for PHASE 'N'

ATOM	U11	U22	U33	U23	U13	U12
A	0.0101(5)	0.0101(5)	0.0074(7)	0.0	0.0	0.0051(3)
M1	0.008(1)	0.008(1)	0.003(2)	0.0	0.0	0.0037(6)
M2	0.008(1)	0.008(1)	0.014(3)	0.0	0.0	0.0042(6)
M3	0.007(1)	0.007(1)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0037(5)
M4	0.0034(9)	0.0034(9)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0017(4)
M5	0.0050(6)	0.0045(8)	0.0063(6)	0.0013(6)	0.0007(3)	0.0022(4)
O1	0.002(3)	0.002(3)	0.016(6)	0.0	0.0	0.001(2)
O2	0.005(4)	0.005(4)	0.008(6)	0.0	0.0	0.002(2)
O3	0.012(4)	0.036(9)	0.015(5)	0.0	0.0	0.018(4)
O4	0.009(3)	-0.005(3)	0.001(2)	0.000(2)	0.000(1)	-0.002(1)
O5	0.008(2)	0.009(4)	0.007(3)	-0.007(3)	-0.003(2)	0.004(2)

Table D1 Observed and calculated structure factors for PHASE 'N'

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-1	2	0	226	213	0	2	2	43	-41	0	0	4	14	-19	-1	7	5	24	23	0	6	7	14	-2
0	2	0	105	-107	-1	3	2	15	12	0	1	4	25	-21	0	7	5	14	-15	-3	7	7	105	103
-1	3	0	7	2	0	3	2	60	-64	-1	2	4	255	264	-3	8	5	22	25	-2	7	7	16	17
0	3	0	167	165	-2	4	2	15	-11	0	2	4	5	16	0	0	6	177	-172	-1	7	7	84	-84
-2	4	0	486	490	-1	4	2	31	32	-1	3	4	18	-11	0	1	6	30	-29	0	7	7	74	76
-1	4	0	11	8	0	4	2	21	-21	0	3	4	203	206	-1	2	6	50	46	-3	8	7	82	-83
0	4	0	73	-70	-2	5	2	41	40	-2	4	4	14	-10	0	2	6	162	163	0	0	8	209	213
-2	5	0	15	17	-1	5	2	47	-50	-1	4	4	21	-19	-1	3	6	18	-21	0	1	8	84	73
-1	5	0	128	126	0	5	2	12	2	0	4	4	23	25	0	3	6	39	38	-1	2	8	41	46
0	5	0	6	-7	-3	6	2	43	-48	-2	5	4	19	-17	-2	4	6	98	-100	0	2	8	34	34
-3	6	0	119	119	-2	6	2	13	-10	-1	5	4	154	152	-1	4	6	18	-14	-1	3	8	89	81
-2	6	0	54	-57	-1	6	2	17	13	0	5	4	9	-8	0	4	6	94	93	0	3	8	36	38
-1	6	0	6	-6	0	6	2	14	-12	-3	6	4	143	139	-2	5	6	16	-16	-2	4	8	144	143
0	6	0	264	269	-3	7	2	13	5	-2	6	4	22	20	-1	5	6	23	21	-1	4	8	54	48
-3	7	0	12	-9	-2	7	2	36	-38	-1	6	4	14	-15	0	5	6	13	-11	0	4	8	17	18
-2	7	0	87	86	-1	7	2	24	24	0	6	4	16	-11	-3	6	6	16	14	-2	5	8	35	29
-1	7	0	7	9	0	7	2	31	30	-3	7	4	11	-10	-2	6	6	69	70	-1	5	8	28	28
0	7	0	13	14	-4	8	2	15	-12	-2	7	4	109	105	-1	6	6	11	-5	0	5	8	59	58
-4	8	0	224	225	-3	8	2	16	17	-1	7	4	14	-13	0	6	6	56	-56	-3	6	8	26	25
0	8	1	53	-59	0	1	3	5	-8	0	7	4	11	-12	-3	7	6	11	-5	-2	6	8	13	10
-1	3	1	33	-35	0	2	3	191	-203	-4	8	4	17	-13	-2	7	6	17	20	-1	6	8	44	42
0	3	1	8	-7	-1	3	3	22	17	-3	8	4	15	-14	-1	7	6	16	-10	0	6	8	89	89
-1	4	1	32	36	0	3	3	26	26	0	1	5	25	-27	0	7	6	15	-11	-3	7	7	47	46
0	4	1	46	48	-1	4	3	12	-4	0	2	5	169	170	-4	8	6	48	-45	-2	7	8	23	18
-2	5	1	23	-27	0	4	3	140	142	-1	3	5	21	-22	-3	8	6	11	-4	-1	7	8	26	24
-1	5	1	11	2	-2	5	3	14	-6	0	3	5	17	15	0	1	7	227	226	-4	8	8	77	76
0	5	1	23	20	-1	5	3	15	-13	-1	4	5	26	30	0	2	7	25	35	0	1	9	29	-34
-2	6	1	40	-42	0	5	3	17	-18	0	4	5	95	-98	-1	3	7	196	194	0	2	9	120	119
-1	6	1	27	-26	-2	6	3	110	-110	-2	5	5	20	-22	0	3	7	23	24	-1	3	9	33	-32
0	6	1	7	3	-1	6	3	10	8	-1	5	5	19	-12	-1	4	7	154	-155	0	3	9	13	-11

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-3	7	1	22	-17	0	6	3	6	-2	0	5	5	15	13	0	4	7	15	-18	-1	4	9	28	32
-2	7	1	13	-2	-3	7	3	15	10	-2	6	5	68	68	-2	5	7	126	124	0	4	9	81	-82
-1	7	1	20	21	-2	7	3	17	16	-1	6	5	23	-24	-1	5	7	14	-13	-2	5	9	21	-25
0	7	1	13	-15	-1	7	3	13	5	0	6	5	13	3	0	5	7	128	-128	-1	5	9	14	24
-3	8	1	21	22	0	7	3	14	-7	-3	7	5	15	-13	-2	6	7	15	14	0	5	9	24	24
-1	2	2	75	-80	-3	8	3	6	2	-2	7	5	20	15	-1	6	7	108	111	-2	6	9	63	63
-1	6	9	26	-26	-3	7	11	38	33	-1	7	13	18	10	0	2	16	37	-27	-2	5	18	80	80
0	6	9	12	3	-2	7	11	15	-6	0	0	14	270	-265	-1	3	16	14	2	-1	5	18	106	-106
-3	7	9	22	-21	-1	7	11	41	-41	0	1	14	40	38	0	3	16	100	101	0	5	18	44	40
-2	7	9	16	-7	0	0	12	94	90	-1	2	14	60	-56	-2	4	16	56	55	-3	6	18	94	-98
-1	7	9	20	23	0	1	12	35	27	0	2	14	184	181	-1	4	16	11	3	-2	6	18	12	-4
0	0	10	45	-32	-1	2	12	99	102	-1	3	14	28	27	0	4	16	25	-15	-1	6	18	48	47
0	1	10	40	41	0	2	12	72	71	0	3	14	50	-48	-2	5	16	14	8	0	1	19	12	14
-1	2	10	79	-81	-1	3	12	40	39	-2	4	14	195	-192	-1	5	16	83	85	0	2	19	35	-35
0	2	10	88	-89	0	3	12	84	84	-1	4	14	30	30	0	3	19	12	-5	-1	3	19	16	13
-1	3	10	40	42	-2	4	12	61	60	0	4	14	129	130	-3	6	16	79	83	0	3	19	16	8
0	3	10	62	-65	-1	4	12	22	17	-2	5	14	30	28	-2	6	16	21	-13	-1	4	19	14	-13
-2	4	10	22	12	0	4	12	48	49	-1	5	14	40	-39	-1	6	16	12	-7	0	4	19	26	27
-1	4	10	34	32	-2	5	12	13	6	0	5	14	16	17	0	6	16	33	32	-2	5	19	16	10
0	4	10	60	-65	-1	5	12	65	65	-3	6	14	38	-37	-3	7	16	15	-8	-1	5	19	14	-5
-2	5	10	23	19	0	5	12	31	32	-2	6	14	105	106	0	1	17	38	38	0	5	19	14	-7
-1	5	10	53	-56	-3	6	12	60	61	-1	6	14	23	21	0	2	17	114	112	-2	6	19	24	-20
0	5	10	28	31	-2	6	12	38	36	0	6	14	126	-128	-1	3	17	28	27	-1	6	19	17	8
-3	6	10	56	-57	-1	6	12	20	19	-3	7	14	20	17	0	3	17	15	-12	0	0	20	225	231
-2	6	10	49	-51	0	6	12	39	38	-2	7	14	30	-27	-1	4	17	28	-26	0	1	20	43	44
-1	6	10	29	30	-3	7	12	25	24	0	1	15	59	59	0	4	17	86	-87	-1	2	20	23	18
0	6	10	23	26	-2	7	12	50	48	0	2	15	16	-16	-2	5	17	28	29	0	2	20	12	-4
-3	7	10	25	28	-1	7	12	16	6	-1	3	15	51	52	-1	5	17	10	7	-1	3	20	34	34
-2	7	10	36	-35	0	1	13	34	-30	0	3	15	10	-7	0	5	17	19	-19	0	3	20	16	14

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	
-1	7	10	21	14	0	2	13	124	-115	-1	4	15	50	-50	-2	6	17	72	71	-2	4	20	172	172	-1	4	20	172	172	
0	1	11	87	81	-1	3	13	40	-42	0	4	15	15	4	-1	6	17	21	20	-1	4	20	32	32	-1	4	20	32	32	
0	2	11	297	-300	0	3	13	19	-19	-2	5	15	42	40	0	6	17	11	20	0	4	20	12	-2	5	20	33	35	-2	
-1	3	11	72	66	-1	4	13	26	26	-1	5	15	11	7	-3	7	17	18	20	-2	5	20	33	35	-1	5	20	33	35	
0	3	11	10	-3	0	4	13	81	79	0	5	15	32	-33	0	18	22	16	16	-1	5	20	18	16	0	5	20	18	16	
-1	4	11	67	-65	-2	5	13	20	-14	-2	6	15	13	5	0	18	101	99	99	0	5	20	25	22	-3	6	20	25	22	
0	4	11	206	208	-1	5	13	17	11	-1	6	15	39	37	-1	18	153	-152	-9	-3	6	20	19	19	-2	6	20	19	19	
-2	5	11	56	55	0	5	13	32	36	0	6	15	8	-3	0	18	11	-9	-9	-2	6	20	13	19	-1	6	20	13	19	
-1	5	11	13	4	-2	6	13	63	-63	-3	7	15	30	28	-1	3	18	70	68	-1	6	20	23	19	-2	6	20	23	19	
0	5	11	43	-40	-1	6	13	27	-25	-2	7	15	15	-9	0	18	134	-132	9	0	1	21	93	-93	0	1	21	93	-93	
-2	6	11	160	-160	0	6	13	12	1	0	0	16	80	81	-2	4	18	13	75	-1	2	21	14	-6	-1	2	21	14	-6	
-1	6	11	46	45	-3	7	13	29	-28	0	1	16	12	11	-1	4	18	77	75	0	3	21	84	-82	0	3	21	84	-82	
0	6	11	12	-3	-2	7	13	18	-15	-1	2	16	118	119	0	4	18	14	-6	-1	3	21	10	3	0	3	21	10	3	
-1	4	21	79	79	0	5	22	16	14	-2	4	24	94	-93	0	2	26	56	57	0	3	28	23	20	0	3	28	23	20	
0	4	21	14	11	-3	6	22	24	-18	-1	4	24	14	12	-1	3	26	23	23	-2	4	28	113	110	-2	4	28	113	110	
-2	5	21	69	-70	0	1	23	29	30	0	4	24	50	52	0	3	26	16	-11	-1	4	28	20	14	0	4	28	20	14	
-1	5	21	15	-4	0	2	23	60	-56	-2	5	24	18	7	-2	4	26	10	-10	0	1	29	48	-57	0	1	29	48	-57	
0	5	21	60	58	-1	3	23	36	38	-1	5	24	35	33	-1	4	26	22	19	0	2	29	12	5	0	2	29	12	5	
-2	6	21	18	-15	0	3	23	14	14	0	1	25	51	-54	0	4	26	43	44	-1	3	29	53	-55	0	3	29	53	-55	
0	0	22	129	-130	-1	4	23	26	-26	0	2	25	169	171	0	1	27	44	47	0	3	29	13	-12	0	3	29	13	-12	
0	1	22	26	33	0	4	23	51	49	-1	3	25	49	-49	0	2	27	24	25	0	0	30	37	-36	0	0	30	37	-36	
-1	2	22	33	-30	-2	5	23	23	15	0	3	25	16	7	-1	3	27	48	45	0	1	30	35	34	0	1	30	35	34	
0	2	22	57	55	-1	5	23	14	-10	-1	4	25	47	48	0	3	27	15	5	-1	2	30	28	-29	0	2	30	28	-29	
-1	3	22	22	24	0	5	23	31	-37	0	4	25	141	-141	-1	4	27	42	-42	0	2	30	12	5	0	2	30	12	5	
0	3	22	27	-25	0	0	24	112	-110	-2	5	25	43	-43	0	0	28	128	128	-42	-1	3	30	32	36	0	3	30	32	36
-2	4	22	103	-101	0	1	24	16	15	-1	5	25	13	-7	0	1	28	14	15	-1	1	31	28	-30	0	1	31	28	-30	
-1	4	22	26	26	-1	2	24	43	47	0	0	26	8	-20	-1	2	28	22	23	0	2	31	78	-82	0	2	31	78	-82	
0	4	22	44	44	0	2	24	54	59	0	1	26	13	22	0	2	28	27	-25	0	0	32	45	42	0	0	32	45	42	
-2	5	22	27	25	-1	3	24	22	20	0	2	26	17	-15	-1	2	28	24	24	0	0	32	27	-32	0	0	32	27	-32	
-1	5	22	21	-19	0	3	24	41	41	-1	2	26	17	-15	-1	3	28	24	24	0	1	32	27	-32	0	1	32	27	-32	

Table D2 . Anisotropic thermal parameters for PHASE 'N'

ATOM	U11	U22	U33	U23	U13	U12
A	0.0101(5)	0.0101(5)	0.0074(7)	0.0	0.0	0.0051(3)
M1	0.008(1)	0.008(1)	0.003(2)	0.0	0.0	0.0037(6)
M2	0.008(1)	0.008(1)	0.014(3)	0.0	0.0	0.0042(6)
M3	0.007(1)	0.007(1)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0037(5)
M4	0.0034(9)	0.0034(9)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0017(4)
M5	0.0050(6)	0.0045(8)	0.0063(6)	0.0013(6)	0.0007(3)	0.0022(4)
O1	0.002(3)	0.002(3)	0.016(6)	0.0	0.0	0.001(2)
O2	0.005(4)	0.005(4)	0.008(6)	0.0	0.0	0.002(2)
O3	0.012(4)	0.036(9)	0.015(5)	0.0	0.0	0.018(4)
O4	0.009(3)	-0.005(3)	0.001(2)	0.000(2)	0.000(1)	-0.002(1)
O5	0.008(2)	0.009(4)	0.007(3)	-0.007(3)	-0.003(2)	0.004(2)

Table D1 Observed and calculated structure factors for PHASE 'N'

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-1	2	0	226	213	0	2	2	43	-41	0	0	4	14	-19	-1	7	5	24	23	0	6	7	14	-2
0	2	0	105	-107	-1	3	2	15	12	0	1	4	25	-21	0	7	5	14	-15	-3	7	7	105	103
-1	3	0	7	2	0	3	2	60	-64	-1	2	4	255	264	-3	8	5	22	25	-2	7	7	16	17
0	3	0	167	165	-2	4	2	15	-11	0	2	4	5	16	0	0	6	177	-172	-1	7	7	84	-84
-2	4	0	486	490	-1	4	2	31	32	-1	3	4	18	-11	0	1	6	30	-29	0	7	7	74	-76
-1	4	0	11	8	0	4	2	21	-21	0	3	4	203	206	-1	2	6	50	46	-3	8	7	82	-83
0	4	0	73	-70	-2	5	2	41	40	-2	4	4	14	-10	0	2	6	162	163	0	0	8	209	213
-2	5	0	15	17	-1	5	2	47	-50	-1	4	4	21	-19	-1	3	6	18	-21	0	1	8	84	73
-1	5	0	128	126	0	5	2	12	2	0	4	4	23	25	0	3	6	39	38	-1	2	8	41	46
0	5	0	6	-7	-3	6	2	43	-48	-2	5	4	19	-17	-2	4	6	98	-100	-1	2	8	34	34
-3	6	0	119	119	-2	6	2	13	-10	-1	5	4	154	152	-1	4	6	18	-14	0	3	8	89	81
-2	6	0	54	-57	-1	6	2	17	13	0	5	4	9	-8	0	4	6	94	93	-2	3	8	36	38
-1	6	0	6	-6	0	6	2	14	-12	-3	6	4	143	139	-2	5	6	16	-16	-2	4	8	144	143
0	6	0	264	269	-3	7	2	13	5	-2	6	4	22	20	-1	5	6	23	21	-1	4	8	54	48
-3	7	0	12	-9	-2	7	2	36	-38	-1	6	4	14	-15	0	5	6	13	-11	0	4	8	17	18
-2	7	0	87	86	-1	7	2	24	24	0	6	4	16	-11	-3	6	6	16	14	-2	5	8	35	29
-1	7	0	7	9	0	7	2	31	30	-3	7	4	11	-10	-2	6	6	69	70	-1	5	8	28	28
0	7	0	13	14	-4	8	2	15	-12	-2	7	4	109	105	-1	6	6	11	-5	0	5	8	59	58
-4	8	0	224	225	-3	8	2	16	17	-1	7	4	14	-13	0	6	6	56	-56	-3	6	8	26	25
0	8	1	53	-59	0	8	2	5	-8	0	7	4	11	-12	-3	7	6	11	-5	-2	6	8	13	10
-1	8	1	33	-35	0	8	3	191	-203	-4	8	4	17	-13	-2	7	6	17	20	-1	7	8	44	42
0	8	1	8	-7	-1	8	3	22	17	-3	8	4	15	-14	-1	7	6	16	-10	0	6	8	89	89
-1	8	1	32	36	0	8	3	26	26	0	1	5	25	-27	0	7	6	15	-11	-3	7	8	47	46
0	8	1	46	48	-1	4	3	12	-4	0	2	5	169	170	-4	8	6	48	-45	-2	7	8	23	18
-2	5	1	23	-27	0	4	3	140	142	-1	3	5	21	-22	-3	8	6	11	-4	-1	8	8	26	24
-1	5	1	11	2	-2	5	3	14	-6	0	3	5	17	15	0	1	7	227	226	-4	8	8	77	76
0	5	1	23	20	-1	5	3	15	-13	-1	4	5	26	30	0	2	7	25	35	0	1	9	29	-34
-2	6	1	40	-42	0	5	3	17	-18	0	4	5	95	-98	-1	3	7	196	194	0	2	9	120	119
-1	6	1	27	-26	-2	6	3	110	-110	-2	5	5	20	-22	0	3	7	23	24	-1	3	9	33	-32
0	6	1	7	3	-1	6	3	10	8	-1	5	5	19	-12	-1	4	7	154	-155	0	3	9	13	-11

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc
-3	7	1	22	-17	0	6	3	6	-2	0	5	5	15	13	0	4	7	15	-18	-1	4	9	28	32
-2	7	1	13	-2	-3	7	3	15	10	-2	6	5	68	68	-2	5	7	126	124	0	4	9	81	-82
-1	7	1	20	21	-2	7	3	17	16	-1	6	5	23	-24	-1	5	7	14	-13	-2	5	9	21	-25
0	7	1	13	-15	-1	7	3	13	5	0	6	5	13	3	0	5	7	128	-128	-1	5	9	14	5
-3	8	1	21	22	0	7	3	14	-7	-3	7	5	15	-13	-2	6	7	15	14	0	5	9	24	24
-1	2	2	75	-80	-3	8	3	6	2	-2	7	5	20	15	-1	6	7	108	111	-2	6	9	63	63
-1	6	9	26	-26	-3	7	11	38	33	-1	7	13	18	10	0	2	16	37	-27	-2	5	18	80	80
0	6	9	12	3	-2	7	11	15	-6	0	0	14	270	-265	-1	3	16	14	2	-1	5	18	106	-106
-3	7	9	22	-21	-1	7	11	41	-41	0	1	14	40	38	0	3	16	100	101	0	5	18	44	40
-2	7	9	16	-7	0	0	12	94	90	-1	2	14	60	-56	-2	4	16	56	55	-3	6	18	94	-98
-1	7	9	20	23	0	1	12	35	27	0	2	14	184	181	-1	4	16	11	3	-2	6	18	12	-4
0	0	10	45	-32	-1	2	12	99	102	-1	3	14	28	27	0	4	16	25	-15	-1	6	18	48	47
0	1	10	40	41	0	2	12	72	71	0	3	14	50	-48	-2	5	16	14	8	0	1	19	12	14
-1	2	10	79	-81	-1	3	12	40	39	-2	4	14	195	-192	-1	5	16	83	85	0	2	19	35	-35
0	3	10	88	-89	0	3	12	84	84	-1	4	14	30	30	0	3	19	12	-5	-1	3	19	16	13
-1	3	10	40	42	-2	4	12	61	60	0	4	14	129	130	-3	6	16	79	83	0	4	19	16	8
0	3	10	62	-65	-1	4	12	22	17	-2	5	14	30	28	-2	6	16	21	-13	-1	4	19	14	-13
-2	4	10	22	12	0	4	12	48	49	-1	5	14	40	-39	-1	6	16	12	-7	0	4	19	26	27
-1	4	10	34	32	-2	5	12	13	6	0	5	14	16	17	0	6	16	33	32	-2	5	19	16	10
0	4	10	60	-65	-1	5	12	65	65	-3	6	14	38	-37	-3	7	16	15	-8	-1	5	19	14	-5
-2	5	10	23	19	0	5	12	31	32	-2	6	14	105	106	0	1	17	38	38	0	5	19	14	-7
-1	5	10	53	-56	-3	6	12	60	61	-1	6	14	23	21	0	2	17	114	112	-2	6	19	24	-20
0	5	10	28	31	-2	6	12	38	36	0	6	14	126	-128	-1	3	17	28	27	-1	6	19	17	8
-3	6	10	56	-57	-1	6	12	20	19	-3	7	14	20	17	0	4	17	15	-12	0	0	20	225	231
-2	6	10	49	-51	0	6	12	39	38	-2	7	14	30	-27	-1	4	17	28	-26	0	1	20	43	44
-1	6	10	29	30	-3	7	12	25	24	0	1	15	59	59	0	4	17	86	-87	-1	2	20	23	18
0	6	10	23	26	-2	7	12	50	48	0	2	15	16	-16	-2	5	17	28	29	0	2	20	12	-4
-3	7	10	25	28	-1	7	12	16	6	-1	3	15	51	52	-1	5	17	10	7	-1	3	20	34	34
-2	7	10	36	-35	0	1	13	34	-30	0	3	15	10	-7	0	5	17	19	-19	0	3	20	16	14

Table D1 (continued).

H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	H	K	L	Fo	Fc	
-1	7	10	21	14	0	2	13	124	-115	-1	4	15	50	-50	-2	6	17	72	71	-2	4	20	172	172	
0	1	11	87	81	-1	3	13	40	-42	0	4	15	15	4	-1	6	17	21	20	-1	4	20	32	32	
0	2	11	297	-300	0	3	13	19	-19	-2	5	15	42	40	0	6	17	11	20	0	4	20	12	-2	
-1	3	11	72	66	-1	4	13	26	26	-1	5	15	11	7	-3	7	17	18	20	-2	5	20	33	35	
0	3	11	10	-3	0	4	13	81	79	0	5	15	32	-33	0	7	17	22	16	-1	5	20	18	16	
-1	4	11	67	-65	-2	5	13	20	-14	-2	6	15	13	5	0	1	18	101	99	0	5	20	25	22	
0	4	11	206	208	-1	5	13	17	11	-1	6	15	39	37	-1	2	18	153	-152	-3	6	20	19	19	
-2	5	11	56	55	0	5	13	32	36	0	6	15	8	-3	0	2	18	11	-9	-2	6	20	13	-2	
-1	5	11	13	4	-2	6	13	63	-63	-3	7	15	30	28	-1	3	18	70	68	-1	6	20	23	19	
0	5	11	43	-40	-1	6	13	27	-25	-2	7	15	15	-9	0	3	18	134	-132	0	1	21	93	-93	
-2	6	11	160	-160	0	6	13	12	1	0	0	16	80	81	-2	4	18	13	9	0	2	21	14	-6	
-1	6	11	46	45	-3	7	13	29	-28	0	1	16	12	11	-1	4	18	77	75	-1	3	21	84	-82	
0	6	11	12	-3	-2	7	13	18	-15	-1	2	16	118	119	0	4	18	14	-6	0	3	21	10	3	
-1	4	21	79	79	0	5	22	16	14	-2	4	24	94	-93	0	2	26	56	57	0	3	28	23	20	
0	4	21	14	11	-3	6	22	24	-18	-1	4	24	14	12	-1	3	26	23	23	-2	4	28	113	110	
-2	5	21	69	-70	0	1	23	29	30	0	4	24	50	52	0	3	26	16	-11	-1	4	28	20	14	
-1	5	21	15	-4	0	2	23	60	-56	-2	5	24	18	7	-2	4	26	10	-10	0	1	29	48	-57	
0	5	21	60	58	-1	3	23	36	38	-1	5	24	35	33	-1	4	26	22	19	0	2	29	12	5	
-2	6	21	18	-15	0	3	23	14	14	0	1	25	51	-54	0	4	26	43	44	-1	3	29	53	-55	
0	0	22	129	-130	-1	4	23	26	-26	0	2	25	169	171	0	1	27	44	47	0	0	3	29	13	-12
0	1	22	26	33	0	4	23	51	49	-1	3	25	49	-49	0	2	27	24	25	0	0	30	37	-36	
-1	2	22	33	-30	-2	5	23	23	15	0	3	25	16	7	-1	3	27	48	45	0	1	30	35	34	
0	2	22	57	55	-1	5	23	14	-10	-1	4	25	47	48	0	3	27	15	5	-1	2	30	28	-29	
-1	3	22	22	24	0	5	23	31	-37	0	4	25	141	-141	-1	4	27	42	-42	0	2	30	12	5	
0	3	22	27	-25	0	0	24	112	-110	-2	5	25	43	-43	0	0	28	128	128	-1	3	30	32	36	
-2	4	22	103	-101	0	1	24	16	15	-1	5	25	13	-7	0	1	28	14	15	0	1	31	28	-30	
-1	4	22	26	26	-1	2	24	43	47	0	0	26	8	-20	-1	2	28	22	23	0	2	31	78	-82	
0	4	22	44	44	0	2	24	54	59	0	1	26	13	22	0	2	28	27	-25	0	0	32	45	42	
-2	5	22	27	25	-1	3	24	22	20	0	2	26	17	-15	-1	3	28	24	24	0	1	32	27	-32	
-1	5	22	21	-19	0	3	24	41	41	-1	2	26	17	-15	-1	3	28	24	24	0	1	32	27	-32	

Table D2 . Anisotropic thermal parameters for PHASE 'N'

ATOM	U11	U22	U33	U23	U13	U12
A	0.0101(5)	0.0101(5)	0.0074(7)	0.0	0.0	0.0051(3)
M1	0.008(1)	0.008(1)	0.003(2)	0.0	0.0	0.0037(6)
M2	0.008(1)	0.008(1)	0.014(3)	0.0	0.0	0.0042(6)
M3	0.007(1)	0.007(1)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0037(5)
M4	0.0034(9)	0.0034(9)	0.006(1)	0.0	0.0	0.0017(4)
M5	0.0050(6)	0.0045(8)	0.0063(6)	0.0013(6)	0.0007(3)	0.0022(4)
O1	0.002(3)	0.002(3)	0.016(6)	0.0	0.0	0.001(2)
O2	0.005(4)	0.005(4)	0.008(6)	0.0	0.0	0.002(2)
O3	0.012(4)	0.036(9)	0.015(5)	0.0	0.0	0.018(4)
O4	0.009(3)	-0.005(3)	0.001(2)	0.000(2)	0.000(1)	-0.002(1)
O5	0.008(2)	0.009(4)	0.007(3)	-0.007(3)	-0.003(2)	0.004(2)