

TABLE 6. Anisotropic displacement parameters (in Å², × 10⁴) for khmaralite ($U_{eq} = 1/3 \sum \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$)

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
M1	62(1)	47(1)	51(1)	-2(1)	7(1)	2(1)
M2	59(1)	50(1)	52(1)	5(1)	9(1)	2(1)
M3	60(1)	38(1)	64(1)	-2(1)	13(1)	0(1)
M4	66(1)	33(1)	76(1)	5(1)	23(1)	1(1)
M5	78(1)	40(1)	49(1)	-3(1)	5(1)	3(1)
M6	61(1)	58(1)	53(1)	-5(1)	4(1)	3(1)
M7	79(1)	39(1)	46(1)	-1(1)	6(1)	1(1)
M8	68(1)	50(1)	44(1)	-5(1)	5(1)	-6(1)
M9	56(1)	55(1)	54(1)	-11(1)	13(1)	-5(1)
M10	57(1)	49(1)	59(1)	10(1)	13(1)	1(1)
M11	56(1)	39(1)	73(1)	0(1)	18(1)	0(1)
M12	66(1)	32(1)	75(1)	3(1)	25(1)	-2(1)
M13	81(1)	50(1)	51(1)	-12(1)	3(1)	19(1)
M14	75(1)	44(1)	60(1)	8(1)	-8(1)	-4(1)
M15	77(1)	42(1)	43(1)	0(1)	8(1)	-1(1)
M16	68(1)	48(1)	45(1)	-1(1)	4(1)	-5(1)
T1	59(1)	32(1)	45(1)	1(1)	5(1)	2(1)
T2	62(2)	29(2)	46(2)	-1(1)	7(2)	1(1)
T3	62(1)	33(1)	41(1)	-3(1)	1(1)	1(1)
T4	61(1)	33(1)	45(1)	4(1)	2(1)	-10(1)
T5	48(1)	61(1)	31(1)	0(1)	6(1)	3(1)
T6	52(1)	50(1)	37(1)	-1(1)	6(1)	-6(1)
T7	63(1)	31(1)	47(1)	5(1)	-3(1)	-3(1)
T8	59(1)	33(1)	40(1)	-2(1)	3(1)	3(1)
T9	61(2)	34(2)	51(3)	0(2)	7(2)	1(2)
T10	61(1)	32(1)	44(1)	0(1)	4(1)	-2(1)
T11	54(1)	45(1)	39(1)	3(1)	5(1)	2(1)
T12	50(1)	56(1)	35(1)	-1(1)	6(1)	-3(1)
O1	75(3)	57(3)	66(3)	-5(2)	10(2)	-5(2)
O2	67(3)	67(3)	67(3)	1(2)	3(2)	-5(2)
O3	71(3)	51(3)	38(3)	5(2)	-5(2)	2(2)
O4	88(3)	73(3)	65(3)	10(2)	6(2)	-9(2)
O5	67(3)	107(3)	58(3)	2(2)	9(2)	3(2)
O6	69(3)	39(2)	43(3)	-3(2)	4(2)	1(2)
O7	72(3)	96(3)	47(3)	-2(2)	6(2)	3(2)
O8	83(3)	49(3)	49(3)	-4(2)	-4(2)	-5(2)
O9	71(3)	56(3)	76(3)	9(2)	-4(2)	-2(2)
O10	67(3)	74(3)	62(3)	-1(2)	4(2)	7(2)
O11	87(3)	58(3)	73(3)	-4(2)	17(2)	10(2)
O12	102(3)	59(3)	63(3)	-2(2)	12(2)	10(2)
O13	62(3)	67(3)	66(3)	-4(2)	9(2)	2(2)
O14	61(3)	43(2)	36(3)	2(2)	7(2)	3(2)
O15	78(3)	38(3)	67(3)	3(2)	6(2)	0(2)
O16	82(3)	46(3)	44(3)	4(2)	7(2)	-1(2)
O17	116(3)	64(3)	86(3)	-16(2)	-9(2)	8(2)
O18	83(3)	49(3)	72(3)	-5(2)	5(2)	-18(2)
O19	83(3)	49(3)	74(3)	-3(2)	11(2)	8(2)
O20	81(3)	35(3)	46(3)	-7(2)	9(2)	-3(2)
O21	64(3)	48(3)	44(3)	-2(2)	-1(2)	-1(2)
O22	69(3)	53(3)	58(3)	-7(2)	0(2)	0(2)
O23	77(3)	64(3)	61(3)	-2(2)	-6(2)	1(2)
O24	86(3)	97(3)	62(3)	9(2)	0(2)	-18(2)
O25	77(3)	100(3)	68(3)	1(2)	4(2)	4(2)
O26	65(3)	41(2)	41(3)	-2(2)	6(2)	-1(2)
O27	79(3)	64(3)	59(3)	-12(2)	4(2)	6(2)
O28	94(3)	67(3)	69(3)	-2(2)	13(2)	1(2)
O29	60(3)	47(3)	44(3)	4(2)	9(2)	4(2)
O30	70(3)	51(3)	56(3)	5(2)	6(2)	7(2)
O31	85(3)	45(2)	58(3)	3(2)	14(2)	13(2)
O32	94(3)	79(3)	73(3)	8(2)	20(2)	19(2)
O33	108(3)	107(3)	62(3)	-3(2)	5(2)	-28(2)
O34	71(3)	50(2)	39(3)	6(2)	5(2)	3(2)
O35	63(3)	33(2)	65(3)	3(2)	5(2)	2(2)
O36	120(3)	52(3)	50(3)	6(2)	0(2)	-16(2)
O37	86(3)	53(3)	66(3)	-7(2)	12(2)	-8(2)
O38	85(3)	54(3)	57(3)	-6(2)	10(2)	-14(2)
O39	78(3)	50(3)	71(3)	-4(2)	9(2)	10(2)
O40	91(3)	46(3)	55(3)	-5(2)	6(2)	6(2)