

Table 4. Anisotropic displacement parameters for non-hydrogen atoms of Tutton's salts

	atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Mg	<i>M</i>	0.0154(3)	0.0168(3)	0.0157(3)	0.0002(2)	0.0037(2)	-0.0011(2)
Fe		0.0152(2)	0.0171(3)	0.0157(2)	0.00022(15)	0.00047(16)	-0.00117(14)
Co		0.01264(15)	0.01578(13)	0.01555(13)	0.00029(10)	0.00331(11)	-0.00105(11)
Ni		0.01271(12)	0.01479(13)	0.01434(13)	0.00014(10)	0.00391(9)	-0.00095(10)
Cu		0.01541(11)	0.01697(12)	0.01406(11)	0.00068(9)	0.00367(8)	-0.00243(9)
Zn		0.0164(2)	0.01722(18)	0.01629(17)	0.00033(16)	0.00369(14)	-0.00150(17)
Mg	<i>K</i>	0.03259(16)	0.03123(16)	0.02921(16)	-0.00037(12)	0.01124(12)	-0.00269(12)
Fe		0.0335(4)	0.0321(4)	0.0281(3)	-0.0002(2)	0.0088(3)	-0.0024(2)
Co		0.0301(2)	0.0304(2)	0.02903(19)	-0.00041(15)	0.01121(18)	-0.00223(16)
Ni		0.03046(19)	0.0295(2)	0.02847(19)	-0.00026(16)	0.01221(16)	-0.00189(16)
Cu		0.02998(19)	0.03057(19)	0.02703(17)	-0.00043(14)	0.01086(14)	-0.00119(14)
Zn		0.0311(4)	0.0299(3)	0.0281(3)	-0.0003(2)	0.0115(2)	-0.0025(3)
Mg	<i>S</i>	0.01540(12)	0.01931(13)	0.01754(13)	-0.00196(11)	0.00382(9)	-0.00266(10)
Fe		0.0166(3)	0.0206(3)	0.0174(3)	-0.00192(19)	0.0016(2)	-0.00235(18)
Co		0.01455(18)	0.01910(17)	0.01763(16)	-0.00191(13)	0.00404(15)	-0.00239(14)
Ni		0.01451(15)	0.01763(17)	0.01711(16)	-0.00185(14)	0.00410(13)	-0.00207(13)
Cu		0.01673(15)	0.01915(16)	0.01706(14)	-0.00135(12)	0.00465(11)	-0.00278(12)
Zn		0.0154(3)	0.0183(2)	0.0174(2)	-0.0014(2)	0.0042(2)	-0.0026(2)
Mg	<i>O1</i>	0.0511(7)	0.0242(5)	0.0240(5)	0.0023(4)	0.0083(5)	-0.0128(5)
Fe		0.0515(15)	0.0258(10)	0.0242(11)	0.0041(8)	0.0038(10)	-0.0121(10)
Co		0.0462(9)	0.0242(6)	0.0244(6)	0.0023(5)	0.0074(6)	-0.0119(6)
Ni		0.0466(8)	0.0221(6)	0.0236(6)	0.0021(5)	0.0103(6)	-0.0101(6)
Cu		0.0466(8)	0.0233(6)	0.0245(6)	0.0035(5)	0.0079(5)	-0.0109(5)
Zn		0.0506(14)	0.0238(10)	0.0228(9)	0.0030(7)	0.0076(9)	-0.0123(9)
Mg	<i>O2</i>	0.0185(5)	0.0552(8)	0.0456(7)	-0.0102(6)	0.0016(5)	0.0099(5)
Fe		0.0202(9)	0.0598(19)	0.0410(15)	-0.0133(13)	-0.0016(9)	0.0109(11)
Co		0.0176(7)	0.0523(10)	0.0427(8)	-0.0103(8)	0.0013(7)	0.0096(7)
Ni		0.0172(6)	0.0486(10)	0.0429(9)	-0.0096(8)	0.0017(6)	0.0090(6)
Cu		0.0193(6)	0.0482(9)	0.0381(7)	-0.0076(6)	0.0033(5)	0.0076(6)
Zn		0.0187(11)	0.0518(14)	0.0430(12)	-0.0104(11)	0.0023(10)	0.0100(10)
Mg	<i>O3</i>	0.0214(4)	0.0240(4)	0.0257(5)	-0.0059(4)	0.0064(4)	-0.0080(3)
Fe		0.0230(9)	0.0261(10)	0.0263(10)	-0.0056(8)	0.0051(7)	-0.0083(7)
Co		0.0189(6)	0.0246(6)	0.0265(6)	-0.0051(5)	0.0068(5)	-0.0076(5)
Ni		0.0192(5)	0.0238(6)	0.0248(6)	-0.0049(3)	0.0073(5)	-0.0080(5)
Cu		0.0201(5)	0.0258(6)	0.0236(5)	-0.0052(4)	0.0062(4)	-0.0076(4)
Zn		0.0189(10)	0.0260(9)	0.0255(9)	-0.0068(7)	0.0070(8)	-0.0078(8)
Mg	<i>O4</i>	0.0377(6)	0.0261(5)	0.0193(4)	-0.0048(4)	0.0103(4)	-0.0045(4)
Fe		0.0377(12)	0.0280(10)	0.0199(9)	-0.0040(8)	0.0081(8)	-0.0031(9)
Co		0.0355(8)	0.0250(6)	0.0189(5)	-0.0034(5)	0.0096(6)	-0.0039(5)
Ni		0.0355(7)	0.0257(6)	0.0177(5)	-0.0035(5)	0.0100(5)	-0.0035(5)
Cu		0.0357(7)	0.0295(6)	0.0188(5)	-0.0044(4)	0.0100(5)	-0.0031(5)
Zn		0.0339(12)	0.0257(9)	0.0190(8)	-0.0046(7)	0.0103(8)	-0.0033(8)
Mg	<i>OW1</i>	0.0219(4)	0.0284(5)	0.0208(5)	-0.0005(4)	0.0029(4)	-0.0074(4)
Fe		0.0228(9)	0.0309(11)	0.0214(9)	0.0004(8)	-0.0013(7)	-0.0072(7)
Co		0.0201(7)	0.0277(6)	0.0207(6)	-0.0004(5)	0.0028(6)	-0.0068(5)
Ni		0.0200(5)	0.0245(6)	0.0191(6)	-0.0013(5)	0.0043(5)	-0.0061(5)
Cu		0.0238(6)	0.0346(7)	0.0192(5)	0.0026(5)	0.0043(4)	-0.0058(5)
Zn		0.0209(11)	0.0271(10)	0.0210(9)	-0.0004(8)	0.0042(9)	-0.0065(8)
Mg	<i>OW2</i>	0.0192(4)	0.0208(4)	0.0272(5)	0.0010(4)	0.0058(4)	0.0013(3)
Fe		0.0210(8)	0.0237(9)	0.0284(10)	0.0011(8)	0.0043(7)	0.0028(7)
Co		0.0177(6)	0.0214(6)	0.0274(6)	0.0004(5)	0.0058(6)	0.0011(5)
Ni		0.0177(5)	0.0191(6)	0.0246(6)	-0.0005(5)	0.0061(5)	0.0007(4)

Cu		0.0235(6)	0.0282(6)	0.0282(6)	0.0031(5)	0.0045(5)	-0.0021(5)
Zn		0.0199(11)	0.0219(9)	0.0248(9)	0.0001(7)	0.0056(8)	0.0005(8)
Mg	OW3	0.0280(5)	0.0219(4)	0.0225(4)	0.0037(4)	0.0114(4)	0.0028(4)
Fe		0.0307(10)	0.0253(9)	0.0214(9)	0.0037(7)	0.0084(8)	0.0032(8)
Co		0.0270(7)	0.0217(6)	0.0215(5)	0.0036(5)	0.0107(5)	0.0034(5)
Ni		0.0252(6)	0.0197(6)	0.0195(5)	0.0028(4)	0.0100(5)	0.0013(5)
Cu		0.0222(5)	0.0220(5)	0.0188(5)	0.0033(4)	0.0081(4)	0.0014(4)
Zn		0.0272(13)	0.0220(9)	0.0206(8)	0.0019(7)	0.0104(8)	0.0025(8)
