

DEPOSIT FOR GFELLER ET AL.: CRYSTAL CHEMISTRY AND HYDROGEN
BONDING OF RUSTUMITE**TABLE 4A.** Anisotropic displacement parameters U_{ij} for Rust1_LCI (deposited material)

Site	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ca1	0.01118(13)	0.02046(16)	0.00972(13)	-0.00253(10)	0.00221(10)	-0.00015(11)
Ca2	0.01266(14)	0.01100(14)	0.02074(15)	0.00259(11)	0.00645(11)	0.00091(11)
Ca3	0.01230(14)	0.01098(14)	0.01889(15)	0.00278(11)	0.00499(11)	0.00043(10)
Ca4	0.01006(13)	0.01582(15)	0.01157(13)	0.00035(11)	0.00167(10)	0.00160(11)
Ca5	0.01448(14)	0.01223(14)	0.01274(13)	-0.00173(10)	0.00599(11)	-0.00279(11)
Si1	0.00752(17)	0.00848(17)	0.00823(16)	-0.00007(13)	0.00244(13)	0.00028(13)
Si2	0.00719(17)	0.00870(16)	0.00785(16)	-0.00017(13)	0.00172(13)	0.00018(13)
Si3	0.0125(3)	0.0107(3)	0.0098(2)	0.000	0.0027(2)	0.000
O1	0.0085(5)	0.0220(6)	0.0215(5)	0.0060(5)	0.0060(4)	0.0024(4)
O2	0.0179(5)	0.0137(5)	0.0143(5)	-0.0039(4)	-0.0025(4)	-0.0001(4)
O3	0.0142(5)	0.0106(5)	0.0193(5)	-0.0035(4)	0.0044(4)	0.0021(4)
O4	0.0133(5)	0.0108(5)	0.0129(5)	0.0006(4)	0.0030(4)	0.0012(4)
O5	0.0134(5)	0.0351(7)	0.0171(5)	0.0143(5)	0.0039(4)	0.0008(5)
O6	0.0137(5)	0.0162(5)	0.0128(5)	0.0051(4)	0.0034(4)	0.0028(4)
O7	0.0168(5)	0.0130(5)	0.0112(5)	0.0015(4)	0.0060(4)	-0.0012(4)
O8	0.0165(5)	0.0151(5)	0.0124(5)	-0.0003(4)	0.0035(4)	-0.0030(4)
O9	0.0222(6)	0.0125(5)	0.0133(5)	0.0022(4)	0.0051(4)	0.0060(4)
Cl1	0.0111(4)	0.0133(4)	0.0122(3)	0.0004(2)	0.0036(2)	0.0004(2)
OH1	0.0111(4)	0.0133(4)	0.0122(3)	0.0004(2)	0.0036(2)	0.0004(2)
OH2	0.0254(6)	0.0163(6)	0.0238(6)	0.0008(5)	0.0080(5)	0.0013(5)

TABLE 4B. Anisotropic displacement parameters U_{ij} for Rust2_F (deposited material)

Site	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ca1	0.0129(4)	0.0088(2)	0.0092(2)	-0.0010(2)	0.0027(5)	-0.0006(2)
Ca2	0.0101(3)	0.0092(2)	0.0137(2)	0.0025(2)	0.0045(3)	0.0010(3)
Ca3	0.0094(3)	0.0092(2)	0.0138(2)	0.0028(2)	0.0029(4)	0.0005(3)
Ca4	0.0087(3)	0.0126(3)	0.0090(2)	0.0009(2)	0.0016(4)	0.0008(3)
Ca5	0.0130(4)	0.0099(3)	0.0094(2)	-0.00079(19)	0.0043(4)	-0.0008(3)
Si1	0.0128(6)	0.0070(3)	0.0076(4)	0.0001(3)	0.0028(3)	0.0000(3)
Si2	0.0119(6)	0.0074(4)	0.0071(4)	-0.0001(3)	0.0012(3)	-0.0003(3)
Si3	0.0088(5)	0.0077(4)	0.0077(4)	0.000	0.0011(6)	0.000
O1	0.0122(11)	0.0218(11)	0.0215(11)	0.0063(8)	0.0054(14)	0.0030(12)
O2	0.0187(17)	0.0113(9)	0.0127(10)	-0.0042(8)	-0.0019(11)	-0.0003(11)
O3	0.0166(18)	0.0097(9)	0.0184(11)	-0.0027(8)	0.0051(11)	0.0032(10)
O4	0.0104(12)	0.0081(9)	0.0114(9)	-0.0003(7)	0.0031(12)	0.0002(12)
O5	0.0110(14)	0.0275(12)	0.0149(10)	0.0117(9)	0.0036(13)	-0.0001(14)
O6	0.0133(14)	0.0141(9)	0.0108(9)	0.0043(7)	0.0019(13)	0.0022(12)
O7	0.0224(18)	0.0094(9)	0.0099(9)	0.0007(7)	0.0053(11)	-0.0005(11)
O8	0.0145(10)	0.0099(9)	0.0098(9)	-0.0013(10)	0.0033(10)	-0.0026(8)
O9	0.029(2)	0.0094(9)	0.0120(11)	0.0019(8)	0.0058(12)	0.0055(11)
Cl1	0.0120(4)	0.0114(2)	0.0115(3)	0.0008(3)	0.0019(5)	0.0002(3)
OH2/F	0.0152(12)	0.0104(8)	0.0274(11)	0.0045(7)	0.0091(14)	0.0028(13)

TABLE 4C. Anisotropic displacement parameters U_{ij} for low-Cl rustumite (deposited material)

Site	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Ca1	0.0113(2)	0.0257(3)	0.0100(2)	-0.00274(18)	0.00221(17)	0.00139(19)
Ca2	0.0134(3)	0.0094(4)	0.0192(5)	0.0018(3)	0.0060(3)	0.0007(2)
Ca3	0.0137(2)	0.0100(2)	0.0216(3)	0.00354(18)	0.00538(19)	0.00085(18)
Ca4	0.0110(2)	0.0145(3)	0.0132(2)	0.00132(17)	0.00343(17)	0.00122(18)
Ca5	0.0139(2)	0.0119(2)	0.0124(2)	-0.00133(17)	0.00523(18)	-0.00198(18)
Si1	0.0082(3)	0.0086(3)	0.0086(3)	-0.0001(2)	0.0023(2)	0.0002(2)
Si2	0.0080(3)	0.0087(3)	0.0090(3)	-0.0005(2)	0.0021(2)	0.0002(2)
Si3	0.0121(5)	0.0108(6)	0.0097(5)	0.000	0.0019(4)	0.000
O1	0.0088(8)	0.0237(10)	0.0219(9)	0.0038(7)	0.0060(6)	0.0015(7)
O2	0.0164(8)	0.0142(9)	0.0142(8)	-0.0036(6)	-0.0006(6)	-0.0005(7)
O3	0.0144(8)	0.0106(8)	0.0187(8)	-0.0030(6)	0.0048(7)	0.0015(6)
O4	0.0206(9)	0.0169(11)	0.0175(11)	0.0010(7)	0.0057(9)	-0.0002(8)
O5	0.0146(9)	0.0337(11)	0.0196(9)	0.0135(8)	0.0047(7)	0.0024(8)
O6	0.0158(8)	0.0198(9)	0.0155(8)	0.0075(7)	0.0036(7)	0.0027(7)
O7	0.0172(8)	0.0113(8)	0.0123(8)	0.0009(6)	0.0066(6)	-0.0004(6)
O8	0.0119(10)	0.0138(10)	0.0109(9)	-0.0001(7)	0.0024(7)	-0.0004(8)
O9	0.0225(9)	0.0125(9)	0.0154(8)	0.0027(6)	0.0060(7)	0.0063(7)
OH1	0.0123(11)	0.0123(12)	0.0158(6)	0.0006(6)	0.0041(7)	0.0021(7)
Cl1	0.0123(11)	0.0123(12)	0.0158(6)	0.0006(6)	0.0041(7)	0.0021(7)
OH2	0.0236(10)	0.0158(10)	0.0260(10)	0.0004(7)	0.0080(7)	0.0010(7)
F	0.0236(10)	0.0158(10)	0.0260(10)	0.0004(7)	0.0080(7)	0.0010(7)