

Table 6 (continued). Anisotropic thermal parameters ($\times 10^5$)

		<i>C2/m</i> structures							
		2b	19a	5c	5b	16a	22f	8a	9a
M1	β_{11}	196(3)	188(5)	238(5)	210(5)	203(3)	208(4)	236(6)	192(5)
	β_{22}	47(0)	52(1)	38(1)	52(1)	46(0)	40(0)	52(1)	53(1)
	β_{33}	542(11)	515(15)	532(16)	634(17)	523(10)	463(12)	727(18)	473(16)
	β_{13}	91(4)	86(6)	96(6)	123(7)	102(4)	97(5)	103(8)	81(7)
M2	β_{11}	185(4)	191(5)	208(5)	208(5)	201(3)	206(4)	227(6)	182(5)
	β_{22}	44(1)	43(1)	34(1)	45(1)	41(0)	35(0)	48(1)	46(1)
	β_{33}	565(12)	562(16)	581(17)	691(18)	574(10)	527(12)	772(20)	518(17)
	β_{13}	91(5)	80(7)	69(7)	123(7)	95(4)	83(5)	97(8)	64(7)
M3	β_{11}	187(5)	185(7)	229(6)	210(7)	209(5)	205(5)	239(9)	184(7)
	β_{22}	36(1)	40(1)	33(1)	43(1)	35(1)	32(1)	45(2)	41(1)
	β_{33}	498(16)	475(22)	565(22)	577(24)	519(14)	456(17)	651(26)	430(23)
	β_{13}	66(6)	60(9)	63(9)	102(10)	69(6)	59(7)	78(11)	33(9)
M4	β_{11}	252(3)	243(4)	285(4)	265(4)	253(3)	257(4)	289(4)	249(4)
	β_{22}	75(0)	95(1)	69(1)	78(1)	88(0)	74(1)	82(1)	89(1)
	β_{33}	758(8)	798(12)	749(12)	862(14)	784(9)	685(11)	1013(12)	723(13)
	β_{13}	160(3)	159(5)	157(5)	195(6)	165(4)	155(5)	227(5)	143(6)
T1	β_{11}	148(3)	140(4)	173(4)	156(4)	153(3)	156(4)	175(4)	144(5)
	β_{22}	38(0)	42(1)	32(1)	40(1)	37(0)	31(1)	38(0)	46(1)
	β_{33}	535(9)	561(14)	510(14)	608(16)	552(10)	425(14)	706(12)	479(16)
	β_{12}	-3(1)	-2(1)	-5(1)	-4(1)	-3(1)	-3(1)	-3(1)	-1(2)
	β_{13}	67(4)	53(6)	49(6)	85(7)	62(5)	53(6)	59(5)	39(7)
	β_{23}	-2(2)	-3(3)	-3(2)	3(3)	-4(2)	-4(3)	-9(2)	-7(3)
T2	β_{11}	149(3)	171(4)	180(4)	173(4)	171(3)	178(4)	186(3)	166(4)
	β_{22}	46(0)	48(1)	37(1)	46(1)	44(0)	37(1)	46(0)	53(1)
	β_{33}	493(9)	544(14)	493(13)	580(15)	547(10)	417(12)	693(11)	492(14)
	β_{12}	-10(1)	-13(1)	-11(1)	-13(1)	-13(1)	-12(1)	-13(1)	-14(2)
	β_{13}	71(4)	53(6)	53(6)	97(6)	70(4)	59(6)	93(5)	56(6)
	β_{23}	1(2)	6(3)	7(3)	4(3)	4(2)	6(3)	-6(2)	1(3)
O1	β_{11}	151(8)	149(12)	187(11)	158(12)	150(9)	153(11)	175(10)	150(13)
	β_{22}	62(2)	53(3)	53(3)	55(3)	52(2)	52(2)	53(2)	63(3)
	β_{33}	711(27)	746(41)	631(40)	770(45)	795(29)	616(37)	824(32)	717(44)
	β_{12}	3(3)	-2(4)	0(4)	2(4)	-2(3)	-3(4)	-8(4)	-4(5)
	β_{13}	86(12)	38(18)	57(17)	92(20)	73(13)	59(17)	72(15)	52(20)
	β_{23}	19(5)	-3(8)	10(8)	21(9)	5(6)	3(8)	0(7)	5(9)
O2	β_{11}	156(8)	162(12)	199(11)	171(12)	181(9)	179(11)	184(10)	167(13)
	β_{22}	60(2)	67(3)	55(3)	66(3)	58(2)	56(3)	61(2)	65(3)
	β_{33}	778(27)	708(39)	704(39)	799(43)	811(28)	717(37)	968(32)	731(42)
	β_{12}	4(3)	-4(4)	0(4)	4(4)	2(3)	5(4)	4(4)	-7(5)
	β_{13}	78(12)	75(17)	100(17)	104(19)	97(13)	85(17)	109(15)	79(19)
	β_{23}	8(5)	19(8)	24(8)	12(9)	28(6)	10(8)	32(7)	10(9)
O3	β_{11}	209(12)	257(19)	256(16)	234(19)	306(14)	321(19)	233(15)	216(20)
	β_{22}	72(3)	63(4)	59(4)	66(5)	60(3)	54(4)	64(3)	67(5)
	β_{33}	855(39)	726(56)	738(56)	789(62)	821(42)	622(54)	939(48)	732(61)
	β_{13}	95(17)	82(26)	74(25)	112(29)	152(20)	103(27)	88(22)	94(29)
O4	β_{11}	256(9)	289(13)	326(12)	305(14)	298(10)	297(13)	291(11)	286(15)
	β_{22}	57(2)	61(3)	49(3)	56(3)	58(2)	56(3)	67(2)	69(3)
	β_{33}	904(26)	886(39)	822(39)	877(44)	955(29)	823(39)	1086(34)	823(43)
	β_{12}	-37(3)	-40(5)	-49(4)	-42(5)	-50(4)	-47(5)	-53(4)	-46(6)
	β_{13}	97(12)	59(19)	102(18)	122(21)	84(14)	98(19)	65(17)	83(21)
	β_{23}	32(6)	24(9)	18(8)	18(10)	22(7)	3(8)	44(8)	19(10)
O5	β_{11}	194(9)	204(13)	232(11)	212(13)	207(9)	211(12)	225(12)	200(14)
	β_{22}	100(2)	91(3)	87(3)	91(3)	90(2)	81(3)	152(3)	102(4)
	β_{33}	880(27)	894(40)	825(39)	944(43)	861(29)	782(39)	1891(46)	828(44)
	β_{12}	0(3)	-3(5)	-6(5)	-10(5)	-4(4)	-17(5)	2(5)	-1(6)
	β_{13}	94(12)	69(18)	79(17)	125(20)	86(13)	72(18)	135(19)	55(20)
	β_{23}	126(6)	112(10)	129(9)	129(11)	112(7)	105(9)	355(11)	123(11)
O6	β_{11}	212(9)	222(13)	254(11)	236(13)	235(10)	237(13)	247(13)	222(15)
	β_{22}	140(3)	130(4)	120(4)	133(4)	127(3)	116(3)	219(4)	141(4)
	β_{33}	898(28)	804(40)	756(39)	888(44)	760(29)	712(40)	1709(46)	725(44)
	β_{12}	25(4)	17(5)	25(5)	24(6)	22(4)	26(5)	64(6)	24(6)
	β_{13}	18(12)	13(18)	20(18)	60(20)	39(14)	31(19)	-95(19)	-35(20)
	β_{23}	-186(7)	-150(10)	-153(10)	-170(12)	-142(7)	-130(9)	-441(12)	-147(11)
O7	β_{11}	260(13)	269(19)	280(17)	252(19)	278(14)	260(19)	275(17)	243(21)
	β_{22}	34(2)	35(4)	30(4)	37(4)	32(3)	24(4)	39(3)	45(4)
	β_{33}	1570(46)	1657(71)	1601(67)	1617(76)	1551(51)	1462(67)	1909(64)	1598(79)
	β_{13}	136(19)	100(30)	133(28)	113(32)	155(22)	117(29)	168(27)	93(34)

Table 6 (continued). Anisotropic thermal parameters ($\times 10^5$)

		<i>P2₁/m</i> structures									
		45a		57d		11a		30a		1c	
M1,M2	β_{11}	170(13)	159(13)	196(11)	178(12)	232(8)	222(9)	174(7)	169(7)	183(9)	183(9)
	β_{22}	52(3)	46(3)	46(2)	47(2)	49(2)	41(2)	40(1)	39(1)	45(2)	41(2)
	β_{33}	448(46)	352(43)	640(37)	646(38)	597(25)	591(28)	473(23)	471(23)	517(29)	525(31)
	β_{12}	-9(7)	-6(7)	2(5)	0(6)	10(6)	-1(6)	5(3)	0(3)	-15(7)	11(7)
	β_{13}	79(18)	42(17)	105(15)	75(15)	83(11)	68(11)	93(9)	59(9)	72(12)	72(12)
β_{23}	-23(10)	-16(11)	-4(8)	0(9)	-21(7)	12(7)	9(4)	2(5)	-7(9)	-15(10)	
M3,M4	β_{11}	157(18)	229(10)	149(16)	255(7)	221(12)	293(5)	188(11)	268(5)	164(13)	253(6)
	β_{22}	47(4)	83(2)	42(4)	84(1)	33(2)	78(1)	40(2)	76(1)	30(3)	79(1)
	β_{33}	445(64)	446(33)	553(53)	837(24)	469(37)	757(17)	443(32)	741(15)	333(41)	705(20)
	β_{12}	0(0)	-23(5)	0(0)	-16(4)	0(0)	-5(3)	0(0)	-15(2)	0(0)	-14(4)
	β_{13}	42(25)	181(13)	69(20)	193(10)	49(15)	176(7)	69(13)	204(6)	42(17)	171(8)
β_{23}	0(0)	0(8)	0(0)	0(6)	0(0)	-1(4)	0(0)	-3(3)	0(0)	13(6)	
T1A,T1B	β_{11}	116(12)	103(11)	137(12)	142(12)	185(13)	153(13)	148(6)	148(6)	187(15)	103(13)
	β_{22}	35(3)	40(3)	36(2)	44(2)	29(3)	36(3)	31(1)	36(1)	39(3)	31(3)
	β_{33}	318(34)	272(33)	567(30)	537(29)	483(25)	508(24)	473(18)	471(17)	494(32)	481(30)
	β_{12}	-4(4)	-4(4)	-7(4)	-6(4)	7(4)	-13(4)	0(2)	-2(2)	-8(5)	0(5)
	β_{13}	25(14)	26(14)	41(13)	62(14)	48(13)	36(13)	44(8)	47(8)	64(15)	27(14)
β_{23}	-9(7)	12(7)	-11(6)	-5(6)	-20(6)	2(6)	-4(3)	5(4)	-10(7)	4(7)	
T2A,T2B	β_{11}	119(12)	138(12)	174(12)	136(11)	162(13)	202(14)	152(6)	147(6)	192(16)	131(15)
	β_{22}	47(3)	48(3)	45(2)	43(2)	40(3)	36(3)	39(1)	39(1)	31(3)	48(3)
	β_{33}	378(32)	404(31)	617(29)	600(28)	473(24)	430(24)	508(17)	532(17)	418(29)	491(29)
	β_{12}	-12(4)	-8(4)	-16(4)	-12(4)	-6(4)	-23(4)	-14(2)	-12(2)	-11(5)	-20(5)
	β_{13}	51(14)	54(14)	85(13)	51(13)	52(12)	33(13)	63(8)	61(8)	38(14)	38(14)
β_{23}	-23(8)	13(8)	-21(7)	8(7)	-6(6)	0(6)	-4(4)	10(4)	-19(7)	28(7)	
O1A,O1B	β_{11}	99(30)	158(32)	90(29)	222(33)	149(36)	201(38)	142(17)	152(17)	132(38)	186(39)
	β_{22}	53(8)	41(8)	49(7)	60(7)	40(8)	45(8)	53(4)	44(4)	71(10)	31(9)
	β_{33}	448(91)	517(93)	785(83)	786(84)	573(70)	693(71)	624(48)	673(49)	566(86)	720(87)
	β_{12}	-22(12)	22(12)	-25(11)	9(12)	-8(12)	1(13)	-8(6)	-2(6)	1(16)	-17(15)
	β_{13}	104(40)	-6(41)	55(37)	104(40)	4(35)	38(38)	82(22)	47(22)	22(41)	126(43)
β_{23}	-5(20)	10(20)	16(19)	-5(19)	10(16)	-25(17)	22(11)	3(11)	-37(21)	46(20)	
O2A,O2B	β_{11}	109(29)	100(29)	168(30)	137(29)	210(38)	175(37)	124(16)	166(17)	79(36)	246(41)
	β_{22}	57(8)	69(8)	67(7)	58(7)	58(8)	49(7)	57(4)	55(4)	64(10)	41(9)
	β_{33}	497(86)	579(87)	850(80)	719(75)	738(67)	678(65)	629(46)	675(46)	723(79)	631(79)
	β_{12}	-33(13)	26(13)	2(12)	-10(12)	0(13)	-2(12)	-1(6)	2(6)	5(14)	-13(15)
	β_{13}	-12(38)	76(38)	75(36)	84(34)	127(35)	63(34)	75(20)	99(21)	111(38)	8(40)
β_{23}	46(21)	-20(23)	27(20)	47(20)	4(18)	20(17)	-3(11)	24(12)	21(22)	22(22)	
O3A,O3B	β_{11}	119(45)	193(47)	264(47)	160(44)	168(51)	273(56)	191(26)	185(26)	122(53)	331(64)
	β_{22}	66(13)	40(11)	53(11)	39(10)	64(12)	51(12)	59(6)	51(6)	58(15)	63(16)
	β_{33}	560(131)	375(123)	984(127)	1114(127)	763(104)	794(105)	609(68)	724(70)	930(130)	665(125)
	β_{12}	106(58)	85(57)	81(57)	14(55)	73(51)	6(54)	50(32)	101(32)	58(59)	105(64)
	β_{13}	106(58)	85(57)	81(57)	14(55)	73(51)	6(54)	50(32)	101(32)	58(59)	105(64)
O4A,O4B	β_{11}	282(34)	231(33)	217(33)	277(34)	327(40)	278(37)	243(18)	286(19)	294(41)	248(39)
	β_{22}	59(9)	63(8)	59(8)	59(8)	40(8)	75(9)	51(4)	57(4)	70(11)	43(10)
	β_{33}	452(88)	711(98)	1015(88)	1130(91)	911(73)	797(70)	804(49)	807(51)	671(86)	922(89)
	β_{12}	-30(13)	-46(13)	-35(11)	-58(12)	-36(12)	-68(12)	-41(7)	-40(7)	-60(15)	-28(14)
	β_{13}	13(42)	81(43)	8(39)	143(42)	-52(39)	106(37)	95(23)	88(24)	-2(42)	79(43)
β_{23}	-26(21)	23(23)	6(20)	22(21)	-26(17)	49(18)	3(12)	30(12)	-1(21)	48(21)	
O5A,O5B	β_{11}	170(31)	125(29)	202(31)	218(31)	229(31)	200(32)	222(18)	225(18)	175(35)	209(36)
	β_{22}	102(9)	81(8)	112(8)	79(7)	95(7)	93(7)	101(5)	74(4)	96(9)	83(8)
	β_{33}	860(101)	528(88)	1137(92)	822(82)	981(76)	733(67)	759(51)	666(49)	1045(94)	699(82)
	β_{12}	8(14)	-18(12)	-2(13)	-30(12)	4(13)	-18(12)	3(7)	-9(7)	-9(14)	3(13)
	β_{13}	122(43)	29(40)	120(39)	73(39)	23(36)	57(34)	142(23)	79(23)	87(41)	103(40)
β_{23}	166(25)	93(22)	177(23)	48(20)	160(20)	86(18)	149(13)	59(12)	172(24)	40(21)	
O6A,O6B	β_{11}	137(29)	206(31)	178(29)	266(32)	258(31)	253(30)	180(18)	246(18)	163(33)	219(35)
	β_{22}	103(9)	85(9)	108(8)	107(8)	133(8)	102(7)	110(5)	103(5)	129(9)	114(9)
	β_{33}	636(94)	586(93)	977(88)	865(87)	856(74)	544(64)	736(51)	626(50)	802(90)	756(83)
	β_{12}	-6(13)	16(13)	9(12)	13(13)	18(13)	21(12)	14(7)	18(8)	23(14)	33(14)
	β_{13}	55(40)	-8(42)	43(38)	16(41)	0(36)	-38(33)	72(23)	38(24)	35(40)	87(41)
β_{23}	-120(24)	-104(23)	-165(22)	-97(22)	-154(21)	-117(18)	-133(13)	-66(12)	-163(24)	-84(22)	
O7A,O7B	β_{11}	318(55)	129(46)	261(50)	236(48)	272(57)	193(51)	230(29)	258(28)	69(53)	314(67)
	β_{22}	57(12)	33(11)	49(11)	32(10)	53(12)	7(10)	48(6)	20(5)	17(13)	62(16)
	β_{33}	871(147)	1114(150)	1226(135)	1241(134)	1661(132)	1602(120)	1372(87)	1104(78)	1847(154)	1190(144)
	β_{13}	-64(68)	68(62)	76(60)	53(58)	97(60)	54(55)	-32(37)	108(35)	111(64)	32(67)