

**TABLE 6.** Anisotropic components of the displacement factors ( $\text{\AA}^2$ ) (to be deposited)

Site	11	22	33	12	13	23
O 1	0.0014(1)	0.0004(1)	0.0041(4)	-0.0001(1)	0.0006(2)	-0.0001(1)
O 2	0.0012(1)	0.0005(1)	0.0052(4)	-0.0001(1)	0.0008(2)	-0.0002(1)
O 3	0.0022(2)	0.0005(1)	0.0064(6)	0	0.0013(2)	0
O 4	0.0025(1)	0.0005(1)	0.0067(5)	-0.0004(1)	0.0011(2)	-0.0002(1)
O 5	0.0020(1)	0.0009(1)	0.0077(5)	0.0000(1)	0.0009(2)	0.0009(1)
O 6	0.0018(1)	0.0007(1)	0.0078(5)	0.0000(1)	0.0010(2)	-0.0008(1)
O 7	0.0021(2)	0.0005(1)	0.0118(8)	0	0.0005(3)	0
T 1	0.0011(1)	0.0003(1)	0.0039(2)	-0.0001(1)	0.0002(1)	-0.0001(1)
T 2	0.0011(1)	0.0003(1)	0.0033(2)	-0.0001(1)	0.0004(1)	0.0000(4)
M 1	0.0014(1)	0.0005(1)	0.0035(4)	0	0.0007(1)	0
M 2	0.0013(1)	0.0004(1)	0.0045(3)	0	0.0007(1)	0
M 3	0.0017(1)	0.0003(1)	0.0038(5)	0	0.0002(2)	0
M 4	0.0028(1)	0.0006(1)	0.0094(2)	0	0.0033(1)	0
A	0.0033(8)	0.0024(3)	0.0026(23)	0	0.0029(11)	0
Am	0.0058(5)	0.0027(1)	0.0171(19)	0	0.0057(8)	0