

Table 6: atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the high temperature refinements

dien2		T = 25 °C									
m.a.n.											
ATOM		x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A		0.86654	0.33948	0.17873	0.00462	0.00691	0.00576	0.00063	0.00148	-	0.00580
										0.00039	
		0.00015	0.00017	0.00028	0.00053	0.00056	0.00055	0.00051	0.00044	0.00048	0.00024
O1B		0.37433	0.83963	0.12772	0.00485	0.00782	0.00577	-	0.00173	0.00024	0.00613
								0.00011			
		0.00015	0.00017	0.00028	0.00054	0.00058	0.00056	0.00051	0.00045	0.00050	0.00024
O2A		0.12099	0.50111	0.32199	0.00807	0.00544	0.00744	0.00011	0.00256	-	0.00696
										0.00177	
		0.00016	0.00016	0.00031	0.00058	0.00058	0.00059	0.00048	0.00049	0.00047	0.00025
O2B		0.63185	0.98529	0.38213	0.01096	0.00879	0.01507	-	0.00770	-	0.01077
								0.00468		0.00394	
		0.00017	0.00017	0.00033	0.00064	0.00064	0.00074	0.00056	0.00058	0.00053	0.00029
O3A		0.10514	0.27488	0.60177	0.00587	0.01133	0.00964	0.00488	0.00245	0.00057	0.00895
		0.00016	0.00017	0.00032	0.00059	0.00066	0.00064	0.00053	0.00051	0.00049	0.00028
O3B		0.60463	0.70100	0.46426	0.00656	0.01388	0.00809	0.00498	0.00278	0.00099	0.00940
		0.00016	0.00018	0.00031	0.00059	0.00067	0.00062	0.00052	0.00050	0.00050	0.00028
SiA		0.04237	0.34128	0.28684	0.00442	0.00493	0.00526	-	0.00200	-	0.00476
								0.00029		0.00039	
		0.00006	0.00006	0.00011	0.00022	0.00022	0.00023	0.00019	0.00018	0.00019	0.00012
SiB		0.55077	0.83808	0.23258	0.00489	0.00454	0.00537	-	0.00216	-	0.00481
								0.00110		0.00092	
		0.00006	0.00006	0.00011	0.00023	0.00023	0.00022	0.00019	0.00017	0.00019	0.00012
M1		0.25087	0.65381	0.22287	0.00619	0.00638	0.00485	0.00081	0.00140	0.00042	0.00589
12		0.00008	0.00008	0.00014	0.00030	0.00030	0.00031	0.00025	0.00022	0.00026	0.00020
M2		0.25554	0.01760	0.22156	0.01036	0.01842	0.00807	0.00436	0.00217	0.00389	0.01245
13.35(7)		0.00008	0.00008	0.00015	0.00035	0.00039	0.00035	0.00026	0.00023	0.00027	0.00026

Continues table 6

dien2 m.a.n.		T = 500 °C									
ATOM		x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A		0.86787	0.33936	0.17583	0.01116	0.01636	0.01215	0.00092	0.00277	0.00051	0.01344
		0.00024	0.00024	0.00042	0.00105	0.00114	0.00098	0.00102	0.00083	0.00103	0.00047
O1B		0.37361	0.84055	0.12950	0.01158	0.01779	0.01337	-	0.00339	0.00056	0.01439
								0.00113			
		0.00024	0.00024	0.00041	0.00106	0.00118	0.00101	0.00106	0.00085	0.00105	0.00047
O2A		0.12166	0.49977	0.32593	0.01970	0.01221	0.01864	-	0.00678	-	0.01669
								0.00106		0.00565	
		0.00026	0.00024	0.00046	0.00115	0.00120	0.00113	0.00103	0.00096	0.00098	0.00052
O2B		0.63063	0.98561	0.37802	0.02271	0.01862	0.02613	-	0.01157	-	0.02159
								0.00709		0.00892	
		0.00025	0.00026	0.00047	0.00131	0.00133	0.00136	0.00114	0.00114	0.00108	0.00059
O3A		0.10420	0.27096	0.59479	0.01449	0.02546	0.01936	0.00943	0.00543	-	0.01976
										0.00050	

Table 6: atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the high temperature refinements

O3B		0.00025 0.00027 0.00048 0.00113 0.00135 0.00119 0.00112 0.00096 0.00102 0.00055
		0.60331 0.70554 0.47150 0.01617 0.02381 0.01785 0.00876 0.00678 0.00308 0.01895
		0.00023 0.00026 0.00045 0.00120 0.00128 0.00119 0.00097 0.00099 0.00093 0.00056
TA		0.04254 0.34090 0.28445 0.01050 0.01105 0.01145 - 0.00454 - 0.01075
		0.00106 0.00124
		0.00009 0.00011 0.00016 0.00050 0.00047 0.00042 0.00038 0.00035 0.00039 0.00024
TB		0.54985 0.83826 0.23615 0.01050 0.01029 0.01172 - 0.00429 - 0.01066
		0.00072 0.00119
		0.00009 0.00010 0.00017 0.00048 0.00046 0.00041 0.00038 0.00034 0.00039 0.00024
M1 12		0.25060 0.65285 0.22641 0.01596 0.01404 0.01463 0.00053 0.00480 0.00035 0.01490
		0.00014 0.00011 0.00023 0.00055 0.00055 0.00062 0.00053 0.00040 0.00060 0.00040
		0.00014 0.00012 0.00023 0.00062 0.00065 0.00063 0.00054 0.00044 0.00059 0.00042
M2 13.22(8)		0.25495 0.01784 0.22514 0.02404 0.02834 0.01646 0.00404 0.00394 0.00507 0.02354
		0.00014 0.00012 0.00023 0.00062 0.00065 0.00063 0.00054 0.00044 0.00059 0.00042

Continues table 6

dien2 m.a.n.		T = 650° C									
ATOM		x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A		0.86807	0.33954	0.17543	0.01259	0.02205	0.01565	-	0.00282	-	0.01717
								0.00038		0.00213	
		0.00040	0.00041	0.00071	0.00179	0.00203	0.00172	0.00180	0.00142	0.00179	0.00082
O1B		0.37321	0.84096	0.13015	0.01344	0.01662	0.01427	-	0.00386	0.00024	0.01491
								0.00023			
		0.00039	0.00038	0.00065	0.00173	0.00179	0.00167	0.00176	0.00139	0.00169	0.00074
O2A		0.12149	0.49930	0.32662	0.02458	0.01618	0.02138	-	0.00883	-	0.02036
								0.00333		0.00751	
		0.00043	0.00041	0.00075	0.00197	0.00211	0.00188	0.00173	0.00162	0.00171	0.00087
O2B		0.63021	0.98629	0.37674	0.02393	0.01912	0.02850	-	0.01085	-	0.02326
								0.00684		0.00742	
		0.00040	0.00042	0.00072	0.00210	0.00216	0.00226	0.00194	0.00188	0.00181	0.00095
O3A		0.10371	0.27021	0.59168	0.01794	0.02438	0.02033	0.00996	0.00521	-	0.02110
										0.00114	
		0.00040	0.00042	0.00077	0.00189	0.00218	0.00192	0.00181	0.00160	0.00170	0.00090
O3B		0.60314	0.70639	0.47337	0.01803	0.02328	0.01792	0.00860	0.00582	0.00399	0.01973
		0.00038	0.00042	0.00070	0.00198	0.00206	0.00195	0.00156	0.00165	0.00154	0.00090
TA		0.04250	0.34052	0.28366	0.01182	0.01240	0.01091	-	0.00359	-	0.01172
								0.00098		0.00126	
		0.00014	0.00018	0.00025	0.00077	0.00079	0.00069	0.00061	0.00057	0.00061	0.00040
TB		0.54963	0.83857	0.23700	0.01181	0.01040	0.01178	-	0.00377	-	0.01133
								0.00118		0.00170	
		0.00015	0.00017	0.00028	0.00076	0.00075	0.00065	0.00060	0.00054	0.00062	0.00038
M1	12	0.25025	0.65276	0.22705	0.01807	0.01629	0.01330	0.00100	0.00501	0.00098	0.01589
		0.00022	0.00019	0.00035	0.00090	0.00091	0.00098	0.00086	0.00066	0.00097	0.00065
M2	13.28(13)	0.25478	0.01793	0.22547	0.02634	0.03240	0.01676	0.00277	0.00326	0.00475	0.02602
		0.00023	0.00021	0.00036	0.00102	0.00110	0.00102	0.00087	0.00073	0.00098	0.00070

Note: m.a.n. mean atomic number

Continues table 6

dien2 m.a.n.	T = 800
--------------	---------

Table 6: atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the high temperature refinements

°C										
ATOM	x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A	0.86828	0.33961	0.17249	0.01595	0.02406	0.01797	0.00149	0.00505	0.00094	0.01942
	0.00029	0.00029	0.00050	0.00137	0.00152	0.00123	0.00132	0.00106	0.00133	0.00061
O1B	0.37346	0.84123	0.13248	0.01476	0.02284	0.01853	-	0.00368	0.00146	0.01912
							0.00057			
O2A	0.00029	0.00028	0.00049	0.00134	0.00146	0.00122	0.00131	0.00103	0.00129	0.00059
	0.12164	0.49858	0.32875	0.02631	0.01887	0.02612	-	0.00961	-	0.02349
O2B							0.00341		0.00863	
	0.00031	0.00029	0.00055	0.00151	0.00159	0.00141	0.00132	0.00122	0.00130	0.00067
O3A	0.62975	0.98637	0.37552	0.03137	0.02224	0.02992	-	0.01431	-	0.02678
							0.00841		0.00943	
O3B	0.00030	0.00030	0.00055	0.00170	0.00163	0.00161	0.00137	0.00142	0.00134	0.00073
	0.10313	0.26764	0.58800	0.02048	0.03486	0.02415	0.01199	0.00716	-	0.02651
TA									0.00056	
	0.00030	0.00032	0.00055	0.00145	0.00174	0.00148	0.00142	0.00121	0.00130	0.00070
TB	0.60222	0.70925	0.47905	0.02226	0.03067	0.02337	0.01248	0.00998	0.00350	0.02480
	0.00028	0.00032	0.00052	0.00153	0.00158	0.00146	0.00125	0.00127	0.00120	0.00069
M1	0.04294	0.34079	0.28246	0.01284	0.01520	0.01384	-	0.00518	-	0.01375
							0.00056		0.00107	
M2	0.00011	0.00013	0.00019	0.00062	0.00058	0.00049	0.00046	0.00042	0.00047	0.00029
	0.54865	0.83882	0.23917	0.01469	0.01415	0.01394	-	0.00632	-	0.01385
12							0.00078		0.00138	
	0.00012	0.00013	0.00021	0.00062	0.00057	0.00048	0.00046	0.00042	0.00048	0.00028
13.35(9)	0.25051	0.65217	0.22924	0.02213	0.02058	0.01778	0.00025	0.00625	0.00014	0.02020
	0.00017	0.00014	0.00027	0.00067	0.00067	0.00071	0.00068	0.00049	0.00077	0.00048
	0.25431	0.01745	0.22774	0.03421	0.03803	0.02157	0.00261	0.00470	0.00622	0.03230
	0.00018	0.00015	0.00028	0.00077	0.00083	0.00074	0.00068	0.00054	0.00080	0.00052

Note: m.a.n. mean atomic number

Continues table 6

dien2 m.a.n.

T = 1000 °C

ATOM	x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A	0.86862	0.33890	0.17197	0.01655	0.02735	0.01874	0.00100	0.00625	0.00345	0.02075
	0.00036	0.00036	0.00065	0.00174	0.00191	0.00160	0.00177	0.00134	0.00181	0.00076
O1B	0.37311	0.84175	0.13310	0.01986	0.02434	0.02009	0.00018	0.00674	0.00202	0.02136
	0.00038	0.00036	0.00064	0.00179	0.00184	0.00166	0.00177	0.00136	0.00179	0.00076
O2A	0.12226	0.49844	0.33087	0.02956	0.01942	0.03102	-	0.01199	-	0.02613
							0.00410		0.00833	
	0.00040	0.00036	0.00073	0.00202	0.00200	0.00200	0.00173	0.00163	0.00172	0.00088
O2B	0.62858	0.98692	0.37344	0.03185	0.02848	0.03628	-	0.01675	-	0.03082
							0.00999		0.01373	
	0.00040	0.00038	0.00074	0.00225	0.00223	0.00228	0.00192	0.00184	0.00184	0.00100
O3A	0.10324	0.26674	0.58704	0.02092	0.03935	0.02482	0.01704	0.00715	0.00030	0.02842
	0.00037	0.00041	0.00072	0.00188	0.00224	0.00195	0.00187	0.00155	0.00167	0.00091
O3B	0.60230	0.71138	0.48337	0.02675	0.03591	0.02514	0.01352	0.01085	0.00777	0.02867
	0.00036	0.00041	0.00069	0.00210	0.00215	0.00206	0.00157	0.00169	0.00156	0.00094
TA	0.04317	0.34038	0.28182	0.01501	0.01670	0.01515	-	0.00645	-	0.01524

Table 6: atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the high temperature refinements

						0.00167	0.00186			
TB		0.00013	0.00017	0.00024	0.00078	0.00076	0.00067	0.00061	0.00056	0.00062
		0.54817	0.83878	0.24048	0.01547	0.01633	0.01619	-	0.00609	-
								0.00152	0.00176	0.01576
M1	12	0.00014	0.00017	0.00027	0.00078	0.00076	0.00064	0.00064	0.00053	0.00064
		0.25048	0.65186	0.23090	0.02398	0.02230	0.01975	0.00060	0.00728	-
M2	13.24(11)	0.00023	0.00016	0.00037	0.00086	0.00084	0.00096	0.00094	0.00063	0.00107
		0.25426	0.01793	0.22864	0.03785	0.04023	0.02357	0.00239	0.00606	0.00768
		0.00024	0.00019	0.00037	0.00102	0.00103	0.00101	0.00093	0.00071	0.00109

Note: m.a.n. mean atomic number

Continues table 6

dien1		m.a.n.		T = 25 °C						
ATOM		x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12
O1A		0.86657	0.33948	0.17890	0.00494	0.00690	0.00789	0.00066	0.00181	0.00005
		0.00010	0.00011	0.00020	0.00037	0.00039	0.00040	0.00034	0.00032	0.00033
O1B		0.37428	0.83968	0.12721	0.00494	0.00843	0.00658	0.00046	0.00169	0.00005
		0.00010	0.00011	0.00019	0.00038	0.00041	0.00040	0.00034	0.00032	0.00034
O2A		0.12121	0.50101	0.32229	0.00980	0.00567	0.00908	-	0.00377	-
								0.00030	0.00218	0.00800
		0.00011	0.00011	0.00021	0.00041	0.00040	0.00041	0.00034	0.00035	0.00033
O2B		0.63154	0.98539	0.38134	0.01156	0.00931	0.01722	-	0.00822	-
								0.00598	0.00530	0.01184
		0.00011	0.00011	0.00022	0.00045	0.00045	0.00052	0.00039	0.00041	0.00036
O3A		0.10505	0.27466	0.60141	0.00700	0.01225	0.01143	0.00524	0.00314	0.00084
		0.00011	0.00011	0.00021	0.00041	0.00047	0.00045	0.00037	0.00036	0.00035
O3B		0.60473	0.70086	0.46442	0.00686	0.01411	0.00909	0.00505	0.00255	0.00095
		0.00011	0.00011	0.00020	0.00042	0.00047	0.00044	0.00036	0.00036	0.00034
TA		0.04243	0.34128	0.28683	0.00529	0.00501	0.00701	-	0.00286	-
								0.00051	0.00049	0.00555
		0.00004	0.00004	0.00007	0.00016	0.00016	0.00016	0.00013	0.00013	0.00013
TB		0.55079	0.83814	0.23243	0.00533	0.00528	0.00662	-	0.00245	-
								0.00065	0.00079	0.00561
		0.00004	0.00004	0.00008	0.00016	0.00016	0.00016	0.00013	0.00012	0.00013
M1	12	0.25088	0.65386	0.22278	0.00693	0.00705	0.00690	0.00070	0.00227	-
		0.00005	0.00005	0.00010	0.00024	0.00024	0.00025	0.00017	0.00016	0.00018
M2	13.28(5)	0.25548	0.01774	0.22147	0.01046	0.01878	0.00911	0.00467	0.00257	0.00380
		0.00005	0.00006	0.00010	0.00024	0.00027	0.00024	0.00018	0.00017	0.00018

Note: m.a.n. mean atomic number

Continues table 6

dien1		m.a.n.		T = 1038 °C						
-------	--	--------	--	-------------	--	--	--	--	--	--

Table 6: atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the high temperature refinements

ATOM	x	y	z	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
O1A	0.86851	0.33792	0.17346	0.02270	0.02279	0.02392	-	0.00185	0.00603	0.02453
							0.00022			
	0.00079	0.00079	0.00123	0.00385	0.00390	0.00329	0.00365	0.00280	0.00380	0.00164
O1B	0.37326	0.84298	0.13288	0.01854	0.03292	0.02364	0.00263	0.00944	0.00073	0.02440
	0.00077	0.00080	0.00125	0.00370	0.00435	0.00329	0.00403	0.00281	0.00391	0.00171
O2A	0.12306	0.49709	0.33023	0.03611	0.02643	0.03503	-	0.01199	-	0.03242
							0.01426		0.01207	
	0.00085	0.00078	0.00139	0.00468	0.00473	0.00386	0.00402	0.00345	0.00410	0.00201
O2B	0.62729	0.98937	0.37205	0.03885	0.03969	0.04646	-	0.01940	-	0.04033
							0.00072		0.01300	
	0.00090	0.00089	0.00156	0.00525	0.00568	0.00499	0.00487	0.00418	0.00478	0.00231
O3A	0.10337	0.26371	0.58561	0.01962	0.03966	0.03383	0.01987	0.00765	-	0.03129
									0.00139	
	0.00073	0.00078	0.00146	0.00378	0.00462	0.00410	0.00377	0.00314	0.00350	0.00195
O3B	0.60188	0.71307	0.48527	0.02920	0.03944	0.02786	0.01246	0.01272	0.00495	0.03133
	0.00073	0.00084	0.00133	0.00446	0.00446	0.00400	0.00329	0.00347	0.00330	0.00199
TA	0.04316	0.33983	0.27886	0.01836	0.01747	0.02239	0.00228	0.00700	-	0.01932
									0.00196	
	0.00029	0.00038	0.00049	0.00169	0.00165	0.00143	0.00130	0.00118	0.00137	0.00083
TB	0.54744	0.84026	0.24409	0.01627	0.02454	0.02556	-	0.00695	-	0.02209
							0.00196		0.00322	
	0.00030	0.00040	0.00055	0.00170	0.00187	0.00145	0.00146	0.00118	0.00145	0.00087
M1	12	0.24987	0.65144	0.23118	0.02716	0.02629	0.02310	0.00247	0.00695	-
										0.02581
									0.00454	
		0.00049	0.00037	0.00069	0.00173	0.00184	0.00188	0.00199	0.00129	0.00228
M2	13.3(2)	0.25375	0.01747	0.23273	0.03847	0.04574	0.03479	0.00580	0.00362	0.00308
		0.00050	0.00040	0.00075	0.00211	0.00227	0.00207	0.00213	0.00153	0.00245
										0.00140

Note: m.a.n. mean atomic number