

Table 5 (to be deposited) Atomic coordinates and displacement factors**Sample 1 - J9698 - IGG codes ifr 1073**

ATOM	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
O(1)	0.10789	0.08660	0.21813	0.0017	0.0007	0.0060	-0.0003	0.0006	-0.0004	0.71
O(2)	0.11909	0.17190	0.73121	0.0013	0.0005	0.0074	0.0000	0.0000	0.0001	0.67
O(3)	0.10565	0.00000	0.71408	0.0024	0.0006	0.0091	0.0000	0.0009	0.0000	0.88
O(4)	0.36574	0.25033	0.79079	0.0026	0.0006	0.0094	-0.0002	0.0020	-0.0001	0.86
O(5)	0.34988	0.13859	0.10929	0.0019	0.0010	0.0079	0.0001	0.0002	0.0010	0.94
O(6)	0.34506	0.11758	0.60568	0.0017	0.0008	0.0102	0.0000	0.0008	-0.0008	0.91
O(7)	0.34247	0.00000	0.28354	0.0023	0.0007	0.0136	0.0000	0.0005	0.0000	1.07
T(1)	0.28097	0.08495	0.30239	0.0010	0.0004	0.0050	0.0000	0.0001	0.0000	0.47
T(2)	0.29018	0.17274	0.81150	0.0011	0.0004	0.0050	0.0000	0.0005	0.0001	0.50
M(1)	0.00000	0.08902	0.50000	0.0017	0.0004	0.0055	0.0000	0.0006	0.0000	0.59
M(2)	0.00000	0.17586	0.00000	0.0014	0.0004	0.0059	0.0000	0.0005	0.0000	0.56
M(3)	0.00000	0.00000	0.00000	0.0017	0.0004	0.0057	0.0000	0.0002	0.0000	0.61
M(4)	0.00000	0.27913	0.50000	0.0023	0.0005	0.0086	0.0000	0.0020	0.0000	0.77
A	0.00000	0.50000	0.00000	0.0025	0.0010	0.0143	0.0000	0.0046	0.0000	1.13
A(m)	0.04390	0.50000	0.09781	0.0056	0.0029	0.0242	0.0000	0.0032	0.0000	2.77
A(2)	0.00000	0.47334	0.00000	0.0090	0.0010	0.0513	0.0000	0.0198	0.0000	2.78

Sample 2 - C2552 - IGG codes iff 1069

ATOM	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
O(1)	0.10962	0.08564	0.21880	0.0016	0.0006	0.0050	-0.0001	0.0008	-0.0002	0.62
O(2)	0.11978	0.17135	0.72712	0.0013	0.0006	0.0058	0.0000	0.0006	0.0000	0.61
O(3)	0.10625	0.00000	0.71453	0.0025	0.0007	0.0080	0.0000	0.0015	0.0000	0.86
O(4)	0.36481	0.24920	0.78973	0.0026	0.0005	0.0078	-0.0003	0.0018	-0.0001	0.79
O(5)	0.34894	0.13711	0.10513	0.0019	0.0010	0.0076	0.0000	0.0007	0.0010	0.93
O(6)	0.34560	0.11700	0.60216	0.0018	0.0008	0.0090	0.0000	0.0011	-0.0008	0.86
O(7)	0.34273	0.00000	0.28313	0.0024	0.0007	0.0124	0.0000	0.0013	0.0000	1.02
T(1)	0.28091	0.08455	0.30040	0.0012	0.0003	0.0042	0.0000	0.0006	0.0000	0.44
T(2)	0.28960	0.17200	0.80821	0.0012	0.0004	0.0040	0.0000	0.0007	0.0000	0.45
M(1)	0.00000	0.08864	0.50000	0.0018	0.0004	0.0042	0.0000	0.0011	0.0000	0.53
M(2)	0.00000	0.17620	0.00000	0.0015	0.0004	0.0046	0.0000	0.0010	0.0000	0.49
M(3)	0.00000	0.00000	0.00000	0.0017	0.0004	0.0049	0.0000	0.0007	0.0000	0.54
M(4)	0.00000	0.27848	0.50000	0.0027	0.0005	0.0088	0.0000	0.0029	0.0000	0.79
A	0.00000	0.50000	0.00000	0.0067	0.0020	0.0210	0.0000	0.0079	0.0000	2.24
A(m)	0.04635	0.50000	0.10415	0.0046	0.0025	0.0148	0.0000	0.0038	0.0000	2.10
A(2)	0.00000	0.47156	0.00000	0.0099	0.0008	0.0505	0.0000	0.0207	0.0000	2.77
H	0.19118	0.00000	0.75125	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.00
M(4')	0.00000	0.25755	0.50000	0.9352	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.94

Sample 3 - GE408 - IGG codes ifg 1070

ATOM	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}	B_{eq}
O(1)	0.10980	0.08556	0.21899	0.0014	0.0004	0.0048	-0.0001	0.0007	-0.0001	0.52
O(2)	0.11931	0.17125	0.72617	0.0011	0.0005	0.0052	0.0000	0.0007	0.0000	0.53
O(3)	0.10653	0.00000	0.71504	0.0022	0.0006	0.0078	0.0000	0.0014	0.0000	0.77
O(4)	0.36476	0.24882	0.79029	0.0022	0.0005	0.0078	-0.0003	0.0017	-0.0002	0.73
O(5)	0.34799	0.13643	0.10432	0.0017	0.0009	0.0066	0.0000	0.0005	0.0008	0.82
O(6)	0.34494	0.11723	0.59980	0.0016	0.0007	0.0079	0.0000	0.0011	-0.0007	0.77
O(7)	0.34091	0.00000	0.28617	0.0022	0.0005	0.0128	0.0000	0.0008	0.0000	0.95
T(1)	0.28028	0.08445	0.29996	0.0010	0.0003	0.0039	0.0000	0.0005	0.0000	0.39
T(2)	0.28905	0.17190	0.80750	0.0011	0.0003	0.0039	-0.0001	0.0007	0.0000	0.40
M(1)	0.00000	0.08840	0.50000	0.0016	0.0004	0.0042	0.0000	0.0010	0.0000	0.48
M(2)	0.00000	0.17610	0.00000	0.0013	0.0003	0.0043	0.0000	0.0009	0.0000	0.43
M(3)	0.00000	0.00000	0.00000	0.0015	0.0003	0.0046	0.0000	0.0007	0.0000	0.48
M(4)	0.00000	0.27840	0.50000	0.0026	0.0005	0.0083	0.0000	0.0029	0.0000	0.73
A	0.00000	0.50000	0.00000	0.0047	0.0012	0.0232	0.0000	0.0069	0.0000	1.73
A(m)	0.04458	0.50000	0.09785	0.0047	0.0019	0.0222	0.0000	0.0060	0.0000	2.04
A(2)	0.00000	0.47231	0.00000	0.0103	0.0005	0.0549	0.0000	0.0206	0.0000	2.87
H	0.19406	0.00000	0.77619	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.00
M(4')	0.00000	0.25650	0.50000	0.3981	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.40

