

TABLE 6. ANISOTROPIC DISPLACEMENT PARAMETERS (\AA^2) FOR NON-HYDROGEN ATOMS IN WERNERBAURITE AND SCHINDLERITE.[†]

(For Deposit)

wernerbaurite

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
V1	0.0192(2)	0.0179(2)	0.0201(2)	0.00144(17)	-0.00144(19)	-0.00831(19)
V2	0.0266(3)	0.0171(2)	0.0250(3)	-0.00075(18)	-0.0038(2)	-0.00607(19)
V3	0.0234(3)	0.0228(2)	0.0197(2)	0.00043(18)	-0.0034(2)	-0.0089(2)
V4	0.0214(3)	0.0249(2)	0.0277(3)	0.00370(19)	-0.0049(2)	-0.0065(2)
V5	0.0273(3)	0.0216(2)	0.0278(3)	0.00767(19)	-0.0045(2)	-0.0102(2)
Ca	0.0265(3)	0.0278(3)	0.0294(3)	0.0016(2)	-0.0036(3)	-0.0105(2)
O1	0.0221(10)	0.0200(9)	0.0194(10)	0.0014(7)	-0.0030(8)	-0.0088(8)
O2	0.0228(10)	0.0196(9)	0.0233(10)	-0.0003(7)	-0.0024(8)	-0.0100(8)
O3	0.0198(10)	0.0223(9)	0.0204(10)	0.0007(7)	-0.0010(8)	-0.0079(8)
O4	0.0252(11)	0.0234(10)	0.0265(10)	0.0042(8)	-0.0024(8)	-0.0123(8)
O5	0.0244(10)	0.0298(10)	0.0228(10)	0.0014(8)	-0.0055(8)	-0.0107(8)
O6	0.0207(10)	0.0277(10)	0.0264(10)	0.0024(8)	-0.0016(8)	-0.0097(8)
O7	0.0277(11)	0.0269(10)	0.0207(10)	0.0050(8)	-0.0024(8)	-0.0107(8)
O8	0.0281(11)	0.0240(10)	0.0298(11)	0.0066(8)	-0.0065(9)	-0.0068(8)
O9	0.0226(10)	0.0234(10)	0.0283(10)	-0.0004(8)	-0.0011(8)	-0.0045(8)
O10	0.0313(11)	0.0190(9)	0.0306(11)	0.0035(8)	-0.0044(9)	-0.0107(8)
O11	0.0324(12)	0.0331(11)	0.0264(11)	-0.0046(9)	-0.0033(9)	-0.0111(9)
O12	0.0403(13)	0.0280(11)	0.0353(12)	-0.0066(9)	-0.0051(10)	-0.0090(10)
O13	0.0259(12)	0.0409(12)	0.0377(12)	0.0015(10)	-0.0060(10)	-0.0063(10)
O14	0.0439(14)	0.0334(11)	0.0418(13)	0.0172(10)	-0.0124(11)	-0.0190(10)
OW1	0.0326(12)	0.0342(11)	0.0254(11)	0.0020(9)	-0.0011(9)	-0.0159(10)
OW2	0.0371(13)	0.0383(12)	0.0367(13)	-0.0082(10)	0.0059(10)	-0.0202(11)
OW3	0.0285(13)	0.0644(17)	0.0388(14)	0.0179(12)	0.0032(11)	-0.0045(12)
OW4	0.098(3)	0.084(2)	0.0487(18)	0.0154(15)	-0.0301(17)	-0.054(2)
OW5	0.0427(14)	0.0267(11)	0.0438(14)	0.0030(10)	0.0108(11)	-0.0101(10)
OW6	0.0349(13)	0.0290(12)	0.0769(18)	0.0132(12)	-0.0198(13)	-0.0117(10)
OW7	0.0453(16)	0.084(2)	0.0341(13)	0.0096(13)	-0.0089(12)	-0.0363(15)
OW8	0.112(3)	0.0461(15)	0.0370(15)	-0.0069(12)	-0.0033(16)	-0.0376(16)
OW9	0.0514(17)	0.0380(14)	0.0708(19)	0.0027(13)	-0.0111(14)	-0.0166(12)

schindlerite

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
V1	0.0244(3)	0.0151(3)	0.0210(3)	-0.0079(2)	0.0017(2)	-0.0047(2)
V2	0.0173(3)	0.0165(3)	0.0188(3)	-0.0070(2)	0.0019(2)	-0.0053(2)

V3	0.0206(3)	0.0193(3)	0.0237(3)	-0.0047(2)	-0.0024(2)	-0.0041(2)
V4	0.0241(3)	0.0186(3)	0.0178(3)	-0.0083(2)	0.0017(2)	-0.0061(2)
V5	0.0240(3)	0.0193(3)	0.0213(3)	-0.0045(2)	0.0018(2)	-0.0082(2)
Na	0.0378(9)	0.0298(8)	0.0357(8)	-0.0121(7)	0.0035(6)	-0.0130(7)
O1	0.0191(12)	0.0136(11)	0.0203(11)	-0.0058(9)	0.0013(8)	-0.0039(9)
O2	0.0224(12)	0.0189(11)	0.0195(11)	-0.0087(9)	0.0014(8)	-0.0070(9)
O3	0.0215(12)	0.0178(11)	0.0208(11)	-0.0098(9)	0.0029(8)	-0.0041(9)
O4	0.0263(12)	0.0149(11)	0.0246(12)	-0.0050(9)	0.0008(9)	-0.0080(9)
O5	0.0216(12)	0.0214(12)	0.0230(11)	-0.0076(10)	0.0040(9)	-0.0083(10)
O6	0.0245(12)	0.0193(12)	0.0250(12)	-0.0094(10)	0.0003(9)	-0.0028(10)
O7	0.0250(12)	0.0198(12)	0.0232(11)	-0.0051(10)	-0.0018(9)	-0.0054(10)
O8	0.0248(12)	0.0223(12)	0.0203(11)	-0.0081(10)	0.0037(9)	-0.0077(10)
O9	0.0201(12)	0.0214(12)	0.0229(11)	-0.0074(10)	0.0019(9)	-0.0056(9)
O10	0.0207(12)	0.0243(12)	0.0212(11)	-0.0077(10)	-0.0011(8)	-0.0059(10)
O11	0.0343(14)	0.0299(14)	0.0301(13)	-0.0049(11)	0.0068(10)	-0.0163(12)
O12	0.0349(14)	0.0216(12)	0.0319(13)	-0.0147(11)	0.0036(10)	-0.0077(11)
O13	0.0268(13)	0.0273(13)	0.0356(14)	-0.0083(11)	-0.0053(10)	-0.0042(11)
O14	0.0360(14)	0.0279(13)	0.0252(12)	-0.0151(11)	0.0045(10)	-0.0111(11)
OW1	0.0436(18)	0.062(2)	0.079(2)	-0.0540(19)	0.0326(16)	-0.0304(16)
OW2	0.053(2)	0.0347(16)	0.0575(19)	-0.0149(15)	0.0295(15)	-0.0146(15)
OW3	0.0319(15)	0.0457(17)	0.0288(14)	-0.0150(13)	0.0062(11)	-0.0105(13)
OW4	0.0452(18)	0.0245(14)	0.068(2)	-0.0082(14)	-0.0173(14)	-0.0102(13)
OW5	0.0575(19)	0.0338(16)	0.0296(14)	-0.0104(13)	-0.0032(13)	-0.0061(14)
OW6	0.0205(13)	0.0158(11)	0.0276(12)	-0.0115(10)	-0.0003(9)	-0.0055(10)
OW7	0.063(2)	0.052(2)	0.0476(18)	-0.0215(16)	-0.0034(15)	-0.0032(17)

†The anisotropic atomic displacement factor exponent takes the form:

$$-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}].$$