

Table 1D. ANISOTROPIC-DISPLACEMENT PARAMETERS* FOR THE SCAPOLITE-GROUP MINERALS IN $I4/m$

		S(1)	S(2)	S(3)	S(4)	S(5)	S(6)	S(16)	S(17)	S(18)
T(1)	U_{11}	86(2)	82(2)	82(2)	82(2)	73(3)	76(3)	75(2)	88(3)	80(3)
	U_{22}	97(2)	91(2)	93(2)	92(2)	80(3)	84(3)	86(2)	101(3)	96(3)
	U_{33}	106(2)	110(2)	108(2)	113(2)	124(3)	113(3)	121(3)	120(3)	126(3)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	-5(2)	-5(2)	-4(2)	-4(2)	-3(2)	-3(2)	-2(2)	-3(2)	-2(2)
T(2)	U_{11}	104(2)	102(2)	101(2)	102(2)	94(2)	103(2)	110(2)	120(2)	114(2)
	U_{22}	111(2)	106(2)	108(2)	108(2)	98(2)	103(2)	109(2)	118(2)	113(2)
	U_{33}	88(2)	89(2)	90(2)	92(2)	104(2)	96(2)	101(2)	94(2)	100(2)
	U_{23}	-9(1)	-9(1)	-9(1)	-9(1)	-8(1)	-9(1)	-7(1)	-7(1)	-7(1)
	U_{13}	-2(1)	-1(1)	-1(1)	0(1)	2(1)	3(1)	-1(1)	-0(1)	0(1)
	U_{12}	0(1)	-1(1)	-0(1)	-1(1)	-2(1)	-2(1)	-3(1)	-0(1)	-2(1)
M	U_{11}	329(5)	327(6)	328(6)	321(6)	284(6)	271(6)	162(3)	185(3)	172(3)
	U_{22}	352(6)	344(6)	338(6)	336(6)	288(6)	268(6)	202(3)	230(3)	219(3)
	U_{33}	622(8)	604(8)	597(8)	579(8)	546(8)	496(7)	380(3)	374(4)	377(3)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	152(4)	153(4)	154(4)	154(4)	132(4)	114(4)	42(2)	51(2)	45(2)
O(1)	U_{11}	109(6)	96(6)	100(6)	102(6)	90(7)	92(7)	125(6)	144(8)	140(7)
	U_{22}	179(6)	184(7)	183(7)	178(7)	160(7)	170(7)	186(7)	197(8)	183(7)
	U_{33}	235(7)	238(7)	241(7)	235(8)	238(8)	226(8)	226(8)	261(9)	268(8)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	22(5)	26(5)	25(5)	22(5)	25(5)	25(5)	10(5)	9(6)	6(5)
O(2)	U_{11}	220(7)	214(7)	216(7)	211(7)	216(8)	219(8)	216(7)	237(9)	231(8)
	U_{22}	176(6)	170(7)	172(6)	171(7)	154(7)	163(7)	142(6)	175(8)	151(7)
	U_{33}	141(6)	145(7)	136(6)	145(7)	155(7)	153(8)	134(7)	124(8)	134(7)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	32(5)	36(6)	34(5)	36(6)	47(6)	56(6)	44(5)	57(7)	56(6)
O(3)	U_{11}	182(5)	175(5)	181(5)	180(5)	176(6)	182(5)	182(5)	194(6)	190(5)
	U_{22}	230(5)	231(5)	226(5)	216(5)	208(6)	209(6)	203(5)	216(6)	196(5)
	U_{33}	219(5)	222(6)	221(5)	220(6)	223(6)	210(6)	191(5)	196(6)	189(5)
	U_{23}	-10(4)	-8(4)	-9(4)	-8(4)	-1(4)	5(5)	3(4)	-6(5)	-4(4)
	U_{13}	45(4)	43(4)	47(4)	46(4)	47(4)	50(6)	44(4)	41(5)	39(4)
	U_{12}	-23(4)	-24(4)	-19(4)	-20(4)	-17(5)	-16(4)	3(4)	0(5)	2(4)
O(4)	U_{11}	215(5)	213(5)	210(5)	205(5)	192(6)	187(5)	210(5)	220(6)	217(6)
	U_{22}	170(5)	160(5)	165(5)	160(5)	151(5)	149(5)	173(5)	179(6)	168(5)

U_{33}	221(5)	232(5)	226(5)	229(5)	245(6)	229(6)	286(6)	276(7)	287(6)
U_{23}	45(4)	47(4)	47(4)	40(4)	43(4)	41(4)	30(4)	29(5)	26(5)
U_{13}	115(4)	119(4)	120(4)	114(4)	118(5)	115(5)	136(5)	124(5)	125(5)
U_{12}	28(4)	32(4)	29(4)	32(4)	27(4)	32(4)	42(4)	33(5)	32(4)

Table 1D. Continued

		S(1)	S(2)	S(3)	S(4)	S(5)	S(6)	S(16)	S(17)	S(18)
A	U_{11}	474(5)	471(5)	474(5)	469(6)	469(6)	481(7)	123(20)	1732(2193)	1303(955)
	U_{22}	474(5)	471(5)	474(5)	469(6)	469(6)	481(7)	123(20)	1732(2193)	1303(955)
	U_{33}	618(10)	587(10)	591(10)	582(10)	566(11)	545(12)	196(50)	964(723)	348(612)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C**	U_{11}	-	-	-	-	-	-	1622(303)	193(373)	0(120)
	U_{22}	-	-	-	-	-	-	0(208)	781(582)	759(357)
	U_{33}	-	-	-	-	-	-	223(155)	188(107)	187(126)
	U_{23}	-	-	-	-	-	-	0	0	0
	U_{13}	-	-	-	-	-	-	0	0	0
	U_{12}	-	-	-	-	-	-	111(359)	18(393)	-7(276)
O(7)	U_{11}	-	-	-	-	-	475(478)	456(117)	108(78)	130(54)
	U_{22}	-	-	-	-	-	0(279)	360(86)	184(91)	6(76)
	U_{33}	-	-	-	-	-	66(286)	0(63)	533(81)	454(57)
	U_{23}	-	-	-	-	-	0	0	0	0
	U_{13}	-	-	-	-	-	0	0	0	0
	U_{12}	-	-	-	-	-	-203(305)	-47(68)	-29(98)	-34(103)
O(8)	U_{11}	-	-	-	-	-	121(337)	1126(278)	599(183)	391(140)
	U_{22}	-	-	-	-	-	424(333)	2360(598)	588(233)	746(399)
	U_{33}	-	-	-	-	-	303(756)	437(124)	410(78)	487(71)
	U_{23}	-	-	-	-	-	0	0	0	0
	U_{13}	-	-	-	-	-	0	0	0	0
	U_{12}	-	-	-	-	-	-3(279)	1689(335)	480(154)	355(112)
O(9)	U_{11}	-	-	-	-	-	-	833(300)	602(229)	411(108)
	U_{22}	-	-	-	-	-	-	271(138)	242(172)	402(322)
	U_{33}	-	-	-	-	-	-	6529(1105)	563(95)	591(75)
	U_{23}	-	-	-	-	-	-	0	0	0
	U_{13}	-	-	-	-	-	-	0	0	0
	U_{12}	-	-	-	-	-	-	-335(185)	-208(120)	-204(153)
O(10)	U_{11}	-	-	-	-	-	83(400)	248(55)	-	-
	U_{22}	-	-	-	-	-	4(326)	213(56)	-	-
	U_{33}	-	-	-	-	-	183(639)	614(86)	-	-
	U_{23}	-	-	-	-	-	284(357)	206(58)	-	-
	U_{13}	-	-	-	-	-	-165(379)	-19(51)	-	-

U_{12} - - - - - - -238(296) -40(45) - -

* $\times 10^4$

** C shifted from the A site

Table 2D. ANISOTROPIC-DISPLACEMENT PARAMETERS* FOR THE SCAPOLITE-GROUP MINERALS IN $P4_2/n$

		S(7)	S(8)	S(9)	S(10)	S(11)	S(12)	S(13)	S(14)	S(15)
T(1)	U_{11}	64(3)	69(2)	70(2)	70(2)	73(2)	68(2)	66(2)	73(2)	75(2)
	U_{22}	68(3)	78(2)	75(2)	78(2)	83(2)	84(2)	81(2)	88(2)	89(2)
	U_{33}	111(3)	107(2)	98(3)	99(2)	104(2)	104(2)	106(2)	114(2)	123(2)
	U_{23}	1(2)	-0(1)	-1(2)	-1(2)	-1(1)	-0(2)	1(3)	-2(2)	4(4)
	U_{13}	-3(2)	-3(1)	-1(2)	-3(2)	-1(1)	-2(2)	1(3)	-1(2)	-1(5)
	U_{12}	-3(2)	-4(1)	-5(2)	-4(1)	-1(1)	-2(1)	0(2)	0(1)	2(1)
T(2)	U_{11}	85(3)	94(2)	93(3)	95(3)	101(3)	102(3)	92(4)	99(2)	106(5)
	U_{22}	90(3)	98(2)	97(3)	102(3)	112(3)	111(3)	105(4)	108(2)	120(5)
	U_{33}	95(3)	88(2)	80(3)	87(2)	86(2)	89(2)	87(3)	97(2)	106(4)
	U_{23}	7(2)	5(2)	5(2)	5(2)	5(2)	8(2)	8(3)	7(2)	8(4)
	U_{13}	3(2)	4(2)	3(2)	5(2)	5(2)	4(2)	5(3)	3(2)	3(4)
	U_{12}	4(2)	1(2)	2(2)	1(2)	0(2)	0(2)	-2(3)	-0(2)	-5(4)
T(3)	U_{11}	83(3)	92(2)	91(3)	89(2)	97(2)	95(2)	90(3)	98(2)	97(5)
	U_{22}	84(3)	92(2)	97(3)	91(2)	97(2)	95(2)	96(3)	98(2)	113(5)
	U_{33}	92(3)	88(2)	77(2)	75(2)	78(2)	77(2)	79(3)	91(2)	93(4)
	U_{23}	1(2)	1(1)	2(2)	3(2)	2(1)	2(2)	-3(2)	-0(2)	-3(4)
	U_{13}	-6(2)	-6(1)	-5(2)	-2(2)	-1(1)	-1(2)	-2(2)	-2(2)	-6(3)
	U_{12}	-1(2)	-3(2)	-3(2)	-6(2)	-5(2)	-5(2)	-8(3)	-4(2)	-3(4)
M	U_{11}	301(5)	298(4)	283(4)	255(4)	236(3)	215(3)	188(3)	176(2)	167(2)
	U_{22}	278(5)	274(4)	252(4)	235(4)	228(3)	226(3)	217(3)	218(2)	200(2)
	U_{33}	409(6)	362(4)	362(5)	322(4)	319(4)	340(3)	345(3)	344(3)	386(3)
	U_{23}	10(3)	10(2)	1(3)	-6(2)	-7(2)	-10(2)	-12(3)	-13(2)	-19(5)
	U_{13}	22(4)	23(2)	10(3)	6(2)	3(2)	1(2)	-5(3)	-1(2)	-6(5)
	U_{12}	142(3)	140(3)	121(3)	104(2)	92(2)	79(2)	68(2)	58(2)	44(2)
O(1)	U_{11}	76(6)	89(5)	83(6)	87(5)	93(5)	102(5)	113(6)	112(5)	129(6)
	U_{22}	150(6)	157(6)	163(6)	162(6)	173(6)	167(6)	150(7)	176(5)	163(6)
	U_{33}	203(7)	195(6)	178(6)	183(6)	194(6)	200(6)	211(7)	223(6)	227(6)
	U_{23}	-4(6)	-3(4)	-6(5)	-1(5)	-4(4)	-2(5)	1(8)	-1(5)	0(13)
	U_{13}	4(6)	0(4)	6(5)	5(5)	4(4)	-0(5)	9(8)	4(5)	-0(13)
	U_{12}	17(5)	18(4)	16(5)	14(5)	14(4)	10(4)	14(5)	3(4)	11(4)
O(2)	U_{11}	219(7)	230(6)	218(7)	223(6)	237(7)	215(6)	199(7)	214(5)	210(6)
	U_{22}	150(7)	151(6)	155(6)	144(6)	157(6)	159(6)	145(7)	143(5)	150(6)
	U_{33}	108(7)	92(5)	88(6)	75(5)	78(5)	88(5)	104(6)	110(5)	137(6)
	U_{23}	-3(6)	-6(4)	-7(4)	0(4)	1(4)	-4(5)	1(7)	3(4)	-14(12)
	U_{13}	8(6)	8(4)	5(5)	8(5)	8(4)	7(5)	12(8)	7(5)	-14(13)
	U_{12}	61(6)	56(5)	62(5)	53(5)	62(5)	62(5)	53(5)	58(4)	51(4)

Table 2D. Continued

Atoms U_{ij}	S(7)	S(8)	S(9)	S(10)	S(11)	S(12)	S(13)	S(14)	S(15)	
O(3)	U_{11}	213(8)	225(7)	213(7)	209(7)	206(7)	201(7)	194(9)	198(6)	204(13)
	U_{22}	131(7)	128(6)	129(7)	117(6)	132(6)	142(7)	158(9)	151(6)	193(13)
	U_{33}	207(8)	199(6)	183(6)	173(6)	174(6)	174(6)	180(8)	182(6)	190(11)
	U_{23}	-49(6)	-39(5)	-32(5)	-27(5)	-20(4)	-28(5)	-34(7)	-31(4)	-51(10)
	U_{13}	-1(6)	-1(5)	4(5)	3(5)	6(5)	4(5)	3(7)	1(5)	6(10)
	U_{12}	35(6)	35(5)	31(6)	37(5)	31(5)	22(5)	17(7)	12(5)	-8(10)
O(4)	U_{11}	125(7)	120(6)	114(7)	105(6)	109(6)	122(6)	116(9)	129(6)	186(13)
	U_{22}	213(8)	228(7)	218(7)	213(7)	206(6)	203(7)	200(9)	198(6)	194(12)
	U_{33}	211(8)	204(6)	185(6)	179(6)	175(6)	173(6)	189(8)	176(6)	198(12)
	U_{23}	2(6)	4(5)	2(5)	4(5)	-4(5)	1(5)	3(7)	2(5)	14(9)
	U_{13}	-27(6)	-22(5)	-22(5)	-16(5)	-13(4)	-14(5)	-19(6)	-22(4)	-37(9)
	U_{12}	-32(6)	-33(5)	-30(6)	-35(5)	-31(5)	-30(5)	-16(7)	-17(5)	1(10)
O(5)	U_{11}	131(7)	137(6)	133(7)	136(7)	147(6)	157(7)	155(9)	166(6)	181(13)
	U_{22}	177(8)	184(6)	178(7)	180(7)	183(7)	186(7)	171(10)	180(6)	195(14)
	U_{33}	229(8)	224(6)	211(6)	225(6)	223(6)	230(6)	228(8)	238(7)	283(14)
	U_{23}	-111(6)	-116(5)	-112(5)	-117(5)	-108(5)	-113(5)	-101(7)	-103(5)	-125(10)
	U_{13}	45(6)	39(5)	38(5)	32(5)	27(5)	19(5)	12(7)	14(5)	16(10)
	U_{12}	-16(6)	-26(5)	-23(5)	-33(5)	-24(5)	-34(5)	-26(7)	-32(5)	-27(11)
O(6)	U_{11}	154(7)	159(6)	160(7)	150(7)	160(6)	168(7)	162(9)	173(6)	205(14)
	U_{22}	126(7)	135(6)	128(6)	136(6)	147(6)	163(7)	163(9)	166(6)	177(13)
	U_{33}	220(8)	215(6)	201(6)	202(6)	202(6)	207(6)	221(8)	217(6)	280(14)
	U_{23}	35(6)	36(5)	37(5)	31(5)	25(5)	23(5)	29(7)	21(5)	45(10)
	U_{13}	93(6)	95(5)	90(5)	89(5)	87(5)	92(5)	106(7)	91(5)	135(10)
	U_{12}	19(6)	26(5)	22(5)	29(5)	30(5)	40(5)	47(7)	42(5)	63(11)
A	U_{11}	570(8)	550(12)	461(10)	405(11)	407(16)	302(11)	1777(213)	319(68)	154(28)
	U_{22}	570(8)	550(12)	461(10)	405(11)	407(16)	302(11)	1777(213)	319(68)	154(28)
	U_{33}	510(12)	540(22)	491(23)	367(45)	436(41)	318(35)	29(163)	361(203)	245(102)
	U_{23}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{13}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	U_{12}	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C**	U_{11}	-	2771(2290)	8197(3354)	1856(1034)	4116(1159)	2758(1135)	0(166)	22(105)	581(242)
	U_{22}	-	843(652)	725(822)	1346(803)	532(296)	1542(672)	395(148)	1874(253)	255(164)
	U_{33}	-	607(695)	471(576)	409(356)	300(193)	0(196)	7(169)	288(121)	184(191)
	U_{23}	-	1001(529)	1037(621)	733(559)	-350(258)	41(695)	-102(221)	-72(250)	483(78)
	U_{13}	-	-989(1163)	-1555(1508)	482(603)	523(588)	380(776)	-108(152)	-42(153)	-154(270)
	U_{12}	-	174(1021)	-1241(1731)	252(791)	-758(452)	314(1243)	7(205)	77(129)	-225(143)

Table 2D. continued

Atoms U_{ij}	S(7)	S(8)	S(9)	S(10)	S(11)	S(12)	S(13)	S(14)	S(15)
O(7) U_{11}	605(208)	11940(8755)	19(138)	402(135)	307(113)	199(67)	184(66)	351(66)	20(78)
U_{22}	469(298)	2794(1833)	34(143)	132(137)	0(71)	21(60)	0(66)	5(65)	133(65)
U_{33}	0(266)	622(972)	68(287)	15(74)	241(97)	119(79)	425(70)	475(53)	1243(316)
U_{23}	145(286)	-473(1178)	-107(197)	-11(89)	-112(73)	161(68)	-27(99)	-6(87)	-65(218)
U_{13}	-89(176)	-497(2670)	-14(170)	-74(93)	-43(74)	18(60)	5(78)	-0(44)	83(193)
U_{12}	-128(188)	5507(3918)	51(143)	191(111)	282(66)	-207(52)	6(73)	315(49)	-81(62)
O(8) U_{11}	-	282(301)	121(356)	226(144)	397(148)	1328(291)	588(148)	0(58)	830(198)
U_{22}	-	142(266)	1216(892)	534(257)	97(98)	743(224)	458(256)	215(64)	1050(331)
U_{33}	-	117(278)	403(384)	1437(418)	1135(233)	1796(209)	687(112)	541(53)	74(103)
U_{23}	-	158(241)	89(440)	-591(269)	-248(111)	-1037(174)	-27(169)	6(83)	208(137)
U_{13}	-	151(266)	-105(303)	-616(181)	-506(118)	-1206(195)	20(170)	-21(81)	469(136)
U_{12}	-	22(219)	224(408)	187(136)	40(96)	747(206)	282(143)	44(44)	655(213)
O(9) U_{11}	-	1510(1203)	1682(629)	760(327)	401(210)	393(151)	275(98)	633(112)	752(171)
U_{22}	-	687(829)	134(238)	1282(558)	3469(940)	279(99)	532(124)	1975(360)	127(124)
U_{33}	-	518(559)	397(398)	971(336)	668(230)	466(132)	716(92)	617(77)	610(219)
U_{23}	-	-145(533)	-85(200)	212(324)	204(245)	259(88)	-106(106)	9(151)	-94(137)
U_{13}	-	-93(929)	-128(421)	-447(328)	14(160)	-496(113)	28(147)	77(145)	460(184)
U_{12}	-	-266(957)	227(294)	-633(339)	-1432(455)	-19(94)	22(101)	-891(176)	-175(120)
O(10) U_{11}	0(324)	454(262)	162(193)	-	-	-	-	-	185(119)
U_{22}	0(194)	9(151)	91(180)	-	-	-	-	-	193(112)
U_{33}	0(269)	388(342)	841(320)	-	-	-	-	-	858(197)
U_{23}	27(209)	-72(214)	-184(280)	-	-	-	-	-	-7(137)
U_{13}	-24(200)	-81(229)	-30(193)	-	-	-	-	-	147(119)
U_{12}	17(185)	118(165)	141(133)	-	-	-	-	-	-32(79)
O(11) U_{11}	62(194)	201(162)	88(124)	292(85)	173(98)	222(79)	-	-	0(85)
U_{22}	170(225)	232(171)	206(157)	276(87)	236(125)	589(126)	-	-	614(168)
U_{33}	0(223)	345(198)	89(113)	731(146)	585(161)	543(117)	-	-	316(111)
U_{23}	32(190)	422(169)	152(135)	29(109)	-78(136)	74(117)	-	-	190(104)
U_{13}	-24(161)	-100(162)	-148(108)	137(96)	-47(109)	36(83)	-	-	114(63)
U_{12}	91(161)	30(123)	78(102)	50(67)	39(82)	-46(71)	-	-	-123(88)

* $\times 10^4$

**C shifted from the A site