

Site		K 1	K 2	K 3	K 5	K 6	K 7
M(1)	x	12008(3)	12025(3)	11689(3)	11823(3)	11852(3)	11926(4)
	y	13805(3)	13941(4)	13874(3)	13962(4)	13978(4)	14081(4)
M(2)	y	14640(4)	14645(5)	14926(5)	14776(5)	14823(5)	14725(5)
M(3)	x	21560(2)	21544(3)	21503(3)	21516(3)	21533(3)	21519(3)
M(4)	x	31360(2)	31336(3)	31223(3)	31266(3)	31257(3)	31278(3)
	y	14130(3)	14160(3)	14187(3)	14169(3)	14199(4)	14215(4)
M(5)	x	40759(2)	40799(3)	40897(3)	40878(3)	40858(3)	40881(3)
T(1)	x	40151(2)	40158(2)	40124(3)	40124(3)	40130(3)	40146(3)
	y	35251(3)	35261(3)	35299(3)	35262(3)	35291(4)	35290(3)
T(2)	x	17866(3)	17753(3)	17495(3)	17549(3)	17563(3)	17532(3)
	y	33266(3)	33314(3)	33299(3)	33322(3)	33365(4)	33380(3)
T(3)	y	34189(5)	34280(7)	34579(13)	34491(10)	34497(11)	34523(11)
O(1)	x	22548(6)	22531(6)	22591(7)	22551(7)	22511(8)	22482(7)
	y	4498(7)	4507(7)	4531(9)	4534(8)	4517(9)	4536(8)
O(2)	x	40267(5)	40277(6)	40201(7)	40243(6)	40259(8)	40288(7)
	y	4634(7)	4661(8)	4788(9)	4739(8)	4749(9)	4744(9)
O(3)	x	40103(6)	40110(6)	39797(8)	39939(7)	39953(8)	40047(7)
	y	23427(7)	23441(8)	23442(9)	23444(8)	23483(10)	23500(9)
O(4)	x	13910(4)	13887(5)	13938(5)	13877(5)	13870(6)	13837(5)
	y	9995(5)	9983(5)	9993(6)	9979(5)	9952(6)	9970(6)
	z	-5203(10)	-5146(11)	-5142(14)	-5116(12)	-5140(14)	-5090(13)
O(5)	x	23410(7)	23274(8)	22996(8)	23061(8)	23046(9)	23013(8)
	y	23484(7)	23534(8)	23450(9)	23534(8)	23530(10)	23616(9)
O(6)	x	31661(4)	31666(4)	31669(5)	31657(5)	31655(5)	31655(5)
	y	9617(5)	9607(5)	9665(6)	9654(5)	9601(6)	9612(6)
	z	-4604(11)	-4685(12)	-4677(14)	-4763(12)	-4712(15)	-4832(13)
O(7)	x	8245(7)	8116(7)	7780(8)	7858(7)	7858(8)	7880(8)
	y	28147(8)	28309(8)	28639(9)	28570(8)	28622(10)	28632(9)
O(8)	y	8849(6)	8846(7)	8816(8)	8846(7)	8809(9)	8857(8)
	z	-5396(15)	-5589(16)	-6150(19)	-6025(17)	-5980(20)	-5982(18)
O(9)	y	38435(10)	38492(11)	38163(14)	38329(12)	38392(14)	38523(13)
O(10)	y	8801(11)	8815(12)	9017(14)	8872(13)	8894(15)	8963(13)
H(1)	y	1652(13)	—	1858(16)	1719(15)	—	—
H(2)	y	53(3)	42(2)	47(3)	50(3)	42(2)	41(2)
	z	123(3)	138(4)	134(5)	127(4)	140(4)	142(4)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$) ; ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 8	K 9	K 10	K 11	K 12	K 13
M(1)	x	11979(3)	11864(3)	11860(3)	11643(3)	12178(5)	11948(4)
	y	13951(4)	14112(4)	13937(3)	13830(3)	13871(5)	14203(4)
M(2)	y	14717(5)	14785(5)	14774(5)	14992(4)	14564(7)	14721(5)
M(3)	x	21570(3)	21519(3)	21544(3)	21514(3)	21587(3)	21536(3)
M(4)	x	31307(3)	31248(3)	31282(3)	31182(3)	31391(4)	31259(3)
	y	14166(3)	14210(3)	14208(3)	14163(4)	14080(4)	14215(4)
M(5)	x	40783(3)	40916(3)	40859(3)	40903(3)	40706(3)	40917(3)
T(1)	x	40133(3)	40131(2)	40133(3)	40106(3)	40157(3)	40139(3)
	y	35258(3)	35289(3)	35288(3)	35288(3)	35219(4)	35280(3)
T(2)	x	17729(3)	17464(3)	17580(3)	17463(3)	17994(4)	17461(3)
	y	33373(4)	33384(3)	33358(3)	33277(3)	33250(4)	33411(3)
T(3)	y	34353(8)	34658(12)	34461(10)	34662(13)	34144(7)	34660(12)
O(1)	x	22490(8)	22492(6)	22535(7)	22644(7)	22523(8)	22456(7)
	y	4491(9)	4542(8)	4527(8)	4549(8)	4469(9)	4556(8)
O(2)	x	40317(7)	40273(6)	40265(7)	40125(7)	40271(8)	40303(7)
	y	4673(9)	4784(8)	4728(9)	4803(9)	4595(9)	4763(8)
O(3)	x	40084(7)	39972(7)	40003(7)	39693(7)	40170(8)	40026(7)
	y	23481(9)	23503(8)	23476(9)	23429(9)	23402(9)	23500(8)
O(4)	x	13880(5)	13849(5)	13907(5)	13924(5)	13851(6)	13798(5)
	y	9973(6)	9976(5)	9980(6)	9957(6)	9967(6)	9953(5)
	z	-5204(13)	-5067(12)	-5159(13)	-5166(13)	-5205(14)	-5022(12)
O(5)	x	23202(9)	22936(7)	23086(8)	22970(8)	23544(9)	22926(8)
	y	23489(10)	23594(8)	23555(9)	23456(9)	23449(10)	23631(8)
O(6)	x	31664(5)	31648(5)	31672(5)	31653(5)	31651(6)	31648(5)
	y	9548(6)	9603(5)	9599(6)	9703(6)	9581(6)	9606(5)
	z	-4643(14)	-4828(12)	-4746(13)	-4730(14)	-4525(15)	-4851(12)
O(7)	x	8032(8)	7766(7)	7910(8)	7734(8)	8375(9)	7778(7)
	y	28427(10)	28718(8)	28579(9)	28695(9)	27980(11)	28717(8)
O(8)	y	8823(8)	8840(7)	8818(8)	8794(8)	8856(9)	8866(8)
	z	-5755(19)	-6206(16)	-5948(19)	-6234(19)	-5202(21)	-6138(17)
O(9)	y	38481(13)	38446(12)	38421(13)	38037(13)	38502(14)	38557(13)
O(10)	y	8805(14)	8957(12)	8809(13)	8913(14)	8740(15)	8834(12)
H(1)	y	—	—	1671(15)	—	1608(17)	—
H(2)	y	40(2)	50(3)	51(3)	43(3)	52(3)	49(3)
	z	141(4)	127(4)	125(3)	137(4)	123(4)	127(4)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 14	K 15	K 16	K 17	K 18	K 19
M(1)	x	11749(3)	11897(4)	11655(3)	11828(3)	11871(4)	11711(3)
	y	13885(3)	14054(4)	13802(3)	14018(4)	14022(4)	13911(4)
M(2)	y	14843(4)	14770(5)	14944(4)	14802(5)	14764(5)	14892(5)
M(3)	x	21518(3)	21501(3)	21510(3)	21505(3)	21525(3)	21486(3)
M(4)	x	31249(3)	31268(3)	31223(3)	31257(3)	31270(3)	31232(3)
	y	14207(3)	14278(3)	14186(3)	14259(3)	14223(4)	14188(3)
M(5)	x	40877(3)	40884(3)	40916(3)	40892(3)	40883(3)	40913(3)
T(1)	x	40123(3)	40177(3)	40105(3)	40165(3)	40138(3)	40135(3)
	y	35285(3)	35346(3)	35290(3)	35340(3)	35294(3)	35299(3)
T(2)	x	17528(3)	17513(3)	17454(3)	17499(3)	17517(3)	17473(3)
	y	33331(3)	33442(3)	33289(3)	33413(4)	33392(4)	33290(3)
T(3)	y	34521(11)	34515(11)	34646(13)	34532(12)	34521(11)	34596(12)
O(1)	x	22567(7)	22438(8)	22648(7)	22458(8)	22502(8)	22586(7)
	y	4536(8)	4513(9)	4553(8)	4530(9)	4530(9)	4549(8)
O(2)	x	40250(7)	40347(7)	40184(7)	40315(7)	40295(7)	40215(7)
	y	4761(8)	4718(9)	4806(8)	4752(9)	4742(9)	4797(8)
O(3)	x	39906(7)	40118(8)	39775(7)	40029(8)	40015(8)	39833(7)
	y	23473(9)	23580(9)	23421(8)	23549(9)	23493(9)	23436(9)
O(4)	x	13936(5)	13875(5)	13980(5)	13904(6)	13899(5)	13917(5)
	y	9977(5)	9977(6)	9996(5)	9987(6)	9986(6)	9990(6)
	z	-5175(13)	-5107(13)	-5181(13)	-5115(14)	-5122(14)	-5078(13)
O(5)	x	23026(8)	22991(9)	22979(7)	22966(9)	23017(9)	22966(8)
	y	23513(9)	23673(9)	23483(8)	23613(10)	23592(9)	23494(8)
O(6)	x	31678(5)	31681(5)	31685(5)	31674(5)	31673(5)	31671(5)
	y	9629(6)	9535(6)	9685(5)	9563(6)	9593(6)	9686(5)
	z	-4724(13)	-4822(14)	-4720(13)	-4789(14)	-4795(14)	-4756(13)
O(7)	x	7840(8)	7878(8)	7741(7)	7832(8)	7836(8)	7764(7)
	y	28624(9)	28651(9)	28687(8)	28675(10)	28635(9)	28637(9)
O(8)	y	8813(8)	8823(8)	8812(8)	8824(8)	8841(8)	8840(8)
	z	-6028(18)	-5947(19)	-6224(18)	-6048(20)	-6045(19)	-6177(18)
O(9)	y	38296(13)	38612(14)	38144(12)	38521(14)	38502(14)	38219(13)
O(10)	y	8735(13)	9139(14)	8773(13)	9043(15)	8853(14)	9071(13)
H(1)	y	—	—	1599(15)	—	1711(16)	1902(15)
H(2)	y	39(2)	52(3)	46(3)	48(3)	51(3)	53(3)
	z	143(4)	128(4)	132(4)	132(4)	126(4)	125(4)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 20	K 21	K 22	K 23	K 24	K 25
M(1)	x	11639(3)	11957(5)	12033(4)	11887(4)	11691(4)	11804(3)
	y	13835(3)	13697(5)	13834(4)	14034(4)	13856(4)	14049(3)
M(2)	y	14947(5)	14655(7)	14606(6)	14719(5)	14895(5)	14867(4)
M(3)	x	21498(3)	21566(4)	21551(3)	21505(3)	21487(3)	21503(3)
M(4)	x	31204(3)	31368(4)	31368(3)	31283(3)	31239(3)	31231(3)
	y	14171(4)	14143(5)	14128(4)	14169(3)	14186(4)	14250(3)
M(5)	x	40913(3)	40751(4)	40777(3)	40875(3)	40903(3)	40918(3)
T(1)	x	40110(3)	40152(4)	40154(3)	40136(2)	40141(3)	40149(3)
	y	35283(3)	35260(4)	35243(3)	35260(3)	35299(3)	35339(3)
T(2)	x	17460(3)	17900(4)	17855(3)	17568(3)	17498(3)	17440(3)
	y	33279(3)	33253(5)	33249(3)	33318(3)	33270(3)	33394(3)
T(3)	y	34619(14)	34163(9)	34166(7)	34447(9)	34521(13)	34643(12)
O(1)	x	22638(7)	22563(10)	22581(7)	22536(7)	22610(8)	22487(7)
	y	4566(9)	4496(11)	4527(8)	4543(8)	4567(9)	4529(8)
O(2)	x	40177(7)	40251(9)	40246(7)	40261(6)	40191(7)	40272(7)
	y	4809(9)	4621(11)	4646(8)	4738(8)	4792(9)	4776(9)
O(3)	x	39744(7)	40096(10)	40105(7)	39989(7)	39831(8)	39950(7)
	y	23412(9)	23422(12)	23404(8)	23437(8)	23425(9)	23529(9)
O(4)	x	13945(5)	13940(7)	13896(5)	13879(5)	13923(5)	13878(5)
	y	9987(6)	9980(8)	9975(5)	9991(5)	10000(6)	9966(6)
	z	-5158(14)	-5266(17)	-5167(12)	-5097(12)	-5099(14)	-5074(13)
O(5)	x	22969(8)	23487(12)	23437(9)	23069(8)	23012(9)	22916(8)
	y	23447(9)	23462(13)	23530(9)	23539(8)	23514(9)	23593(9)
O(6)	x	31673(5)	31672(7)	31671(5)	31665(4)	31671(5)	31653(5)
	y	9704(6)	9606(8)	9640(6)	9653(5)	9707(6)	9593(6)
	z	-4726(14)	-4579(18)	-4639(13)	-4754(12)	-4772(14)	-4824(13)
O(7)	x	7752(8)	8298(11)	8262(8)	7897(7)	7817(8)	7766(8)
	y	28661(9)	28079(13)	28122(9)	28536(8)	28599(10)	28749(9)
O(8)	y	8834(8)	8835(11)	8850(8)	8862(7)	8840(8)	8824(8)
	z	-6224(19)	-5361(25)	-5371(18)	-5937(17)	-6080(20)	-6191(18)
O(9)	y	38092(14)	38415(17)	38429(13)	38392(12)	38175(14)	38428(13)
O(10)	y	8853(14)	8779(19)	8768(13)	8788(12)	9130(14)	9142(13)
H(1)	y	1686(16)	1635(20)	—	—	—	2000(15)
H(2)	y	—	—	43(3)	37(2)	43(3)	48(3)
	z	—	—	137(4)	147(5)	142(5)	133(5)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 26	K 27	K 28	K 29	K 30	K 31
M(1)	x	11975(4)	11892(4)	11926(4)	11867(4)	12206(5)	12105(5)
	y	13923(4)	14033(4)	14098(4)	13910(4)	13721(5)	13815(5)
M(2)	y	14713(6)	14758(6)	14738(5)	14797(6)	14500(7)	14577(7)
M(3)	x	21557(4)	21532(3)	21533(3)	21553(4)	21595(4)	21587(4)
M(4)	x	31321(3)	31271(3)	31276(3)	31268(4)	31442(4)	31392(4)
	y	14175(4)	14213(4)	14199(3)	14137(4)	14052(4)	14073(4)
M(5)	x	40790(4)	40885(3)	40885(3)	40824(3)	40653(3)	40720(3)
T(1)	x	40163(3)	40135(3)	40137(3)	40121(3)	40173(3)	40153(3)
	y	35287(4)	35292(4)	35278(3)	35254(4)	35213(4)	35215(4)
T(2)	x	17765(4)	17532(4)	17526(3)	17661(4)	18155(4)	17979(4)
	y	33345(4)	33392(4)	33388(3)	33313(4)	33183(4)	33211(4)
T(3)	y	34287(10)	34507(12)	34546(11)	34400(10)	34032(6)	34107(7)
O(1)	x	22476(9)	22495(8)	22489(7)	22550(9)	22560(9)	22574(9)
	y	4486(10)	4523(9)	4525(8)	4505(10)	4479(10)	4485(10)
O(2)	x	40273(8)	40297(8)	40304(7)	40232(8)	40221(8)	40230(8)
	y	4669(11)	4741(9)	4742(8)	4723(10)	4571(10)	4620(10)
O(3)	x	40094(9)	40022(8)	40024(7)	39928(9)	40187(9)	40114(8)
	y	23492(11)	23501(10)	23505(9)	23430(11)	23367(10)	23364(10)
O(4)	x	13872(6)	13878(6)	13845(5)	13881(6)	13866(6)	13888(6)
	y	9953(7)	9979(6)	9972(6)	9961(7)	9962(7)	9978(7)
	z	-5189(16)	-5114(15)	-5101(12)	-5163(16)	-5236(15)	-5193(14)
O(5)	x	23268(11)	22998(9)	23014(8)	23149(10)	23765(10)	23554(10)
	y	23487(12)	23589(10)	23599(8)	23455(11)	23465(11)	23412(10)
O(6)	x	31662(6)	31667(6)	31658(5)	31653(6)	31636(6)	31664(6)
	y	9558(7)	9585(6)	9591(6)	9607(7)	9621(7)	9620(7)
	z	-4638(16)	-4793(15)	-4808(12)	-4633(16)	-4470(16)	-4464(15)
O(7)	x	8115(10)	7864(9)	7853(7)	7948(10)	8607(9)	8378(9)
	y	28336(12)	28634(10)	28644(9)	28482(11)	27739(11)	27954(11)
O(8)	y	8807(10)	8848(9)	8839(8)	8809(9)	8859(10)	8853(9)
	z	-5603(23)	-6049(21)	-6039(17)	-5899(22)	-4844(21)	-5214(21)
O(9)	y	38456(17)	38502(15)	38503(13)	38304(15)	38424(15)	38393(15)
O(10)	y	9028(17)	8852(15)	8909(13)	8845(16)	8761(16)	8728(16)
H(1)	y	—	1712(17)	—	—	—	1576(17)
H(2)	y	45(3)	51(3)	44(2)	44(3)	38(3)	—
	z	137(5)	125(4)	137(4)	136(5)	145(5)	—

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 32	K 33	K 34	K 35	K 36	K 38
M(1)	x	11907(3)	11832(3)	11728(4)	12229(4)	12282(3)	12163(3)
	y	14116(4)	13898(3)	13868(4)	13647(4)	13761(4)	13900(3)
M(2)	y	14734(5)	14849(4)	14864(5)	14475(5)	14480(5)	14565(5)
M(3)	x	21532(3)	21523(3)	21482(3)	21621(3)	21624(3)	21580(2)
M(4)	x	31263(3)	31271(3)	31256(3)	31450(3)	31437(3)	31378(2)
	y	14195(3)	14163(3)	14191(4)	14014(3)	14020(3)	14083(3)
M(5)	x	40902(3)	40844(3)	40898(3)	40590(3)	40578(3)	40703(2)
T(1)	x	40127(2)	40151(3)	40153(3)	40159(2)	40170(2)	40157(2)
	y	35270(3)	35290(3)	35303(3)	35188(3)	35200(3)	35223(3)
T(2)	x	17489(3)	17641(3)	17523(3)	18253(3)	18236(3)	17970(3)
	y	33386(3)	33286(3)	33279(3)	33173(3)	33228(3)	33280(3)
T(3)	y	34613(11)	34371(9)	34456(11)	34035(4)	34079(4)	34171(5)
O(1)	x	22493(6)	22544(7)	22582(7)	22572(7)	22498(6)	22499(6)
	y	4551(8)	4518(8)	4559(8)	4438(8)	4406(7)	4468(7)
O(2)	x	40281(6)	40219(7)	40201(7)	40214(6)	40261(6)	40275(5)
	y	4760(8)	4734(8)	4778(9)	4541(8)	4533(8)	4609(7)
O(3)	x	40001(7)	39908(7)	39883(8)	40188(6)	40209(6)	40162(6)
	y	23486(8)	23440(8)	23450(9)	23335(8)	23385(8)	23419(7)
O(4)	x	13842(5)	13897(5)	13908(5)	13887(5)	13844(5)	13850(4)
	y	9966(5)	9988(5)	9999(6)	9979(5)	9967(5)	9973(5)
	z	-5075(11)	-5128(12)	-5095(13)	-5276(11)	-5254(11)	-5198(10)
O(5)	x	22978(7)	23146(8)	23040(9)	23840(7)	23769(7)	23501(7)
	y	23622(8)	23449(9)	23546(9)	23350(8)	23319(9)	23425(7)
O(6)	x	31653(4)	31661(5)	31669(5)	31611(4)	31606(4)	31648(4)
	y	9622(5)	9622(6)	9693(6)	9594(5)	9528(5)	9561(5)
	z	-4821(12)	-4626(13)	-4779(13)	-4347(12)	-4320(12)	-4538(11)
O(7)	x	7815(7)	7957(8)	7874(8)	8656(7)	8592(7)	8336(6)
	y	28684(8)	28441(9)	28566(9)	27658(8)	27724(8)	28039(8)
O(8)	y	8860(7)	8820(7)	8840(8)	8858(7)	8845(7)	8836(6)
	z	-6070(16)	-5868(18)	-5995(19)	-4758(16)	-4850(16)	-5258(15)
O(9)	y	38490(12)	38253(13)	38262(14)	38356(11)	38470(11)	38499(10)
O(10)	y	8835(12)	9247(13)	9226(14)	8743(12)	8826(12)	8753(11)
H(1)	y	—	2095(15)	—	1613(14)	1704(15)	—
H(2)	y	43(2)	57(4)	52(3)	49(3)	50(3)	45(2)
	z	136(4)	123(4)	130(5)	128(4)	128(4)	134(3)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 39	K 40	K 41	K 42	K 43	K 45
M(1)	x	12073(4)	12284(3)	12011(4)	11807(4)	11898(4)	11863(4)
	y	13955(4)	13721(4)	14295(4)	13993(4)	13985(4)	14048(4)
M(2)	y	14627(6)	14460(5)	14701(6)	14846(6)	14689(6)	14763(6)
M(3)	x	21555(3)	21632(3)	21546(3)	21525(3)	21520(3)	21516(3)
M(4)	x	31343(3)	31444(3)	31256(3)	31245(4)	31299(3)	31262(3)
	y	14139(4)	13984(3)	14239(4)	14178(4)	14146(4)	14198(4)
M(5)	x	40776(3)	40578(2)	40932(3)	40892(3)	40846(3)	40896(3)
T(1)	x	40152(3)	40157(2)	40143(3)	40126(3)	40137(3)	40132(3)
	y	35247(3)	35181(3)	35291(3)	35281(4)	35244(3)	35269(4)
T(2)	x	17794(3)	18268(2)	17419(3)	17513(4)	17638(3)	17517(3)
	y	33306(4)	33170(3)	33472(3)	33343(4)	33294(3)	33360(4)
T(3)	y	34246(8)	34032(4)	34757(14)	34604(14)	34381(9)	34550(12)
O(1)	x	22509(8)	22557(6)	22401(7)	22547(8)	22538(7)	22511(8)
	y	4492(9)	4421(7)	4566(8)	4546(10)	4529(8)	4563(9)
O(2)	x	40275(7)	40215(6)	40339(7)	40230(8)	40255(7)	40269(8)
	y	4665(9)	4540(7)	4783(9)	4786(10)	4723(8)	4761(10)
O(3)	x	40117(8)	40186(6)	40068(7)	39888(8)	39991(7)	39963(8)
	y	23451(9)	23339(7)	23547(9)	23456(10)	23418(8)	23465(10)
O(4)	x	13860(5)	13867(4)	13774(5)	13883(6)	13888(5)	13856(6)
	y	9975(6)	9974(5)	9931(6)	9972(7)	9997(6)	9973(6)
	z	-5143(14)	-5277(11)	-5012(13)	-5130(15)	-5128(12)	-5063(14)
O(5)	x	23305(9)	23839(7)	22879(8)	22994(9)	23147(8)	23001(9)
	y	23511(10)	23311(8)	23694(9)	23509(10)	23499(8)	23602(10)
O(6)	x	31656(5)	31610(4)	31637(5)	31649(6)	31665(5)	31661(5)
	y	9600(6)	9585(5)	9562(6)	9645(7)	9658(6)	9633(6)
	z	-4642(14)	-4294(11)	-4897(13)	-4764(15)	-4726(13)	-4785(14)
O(7)	x	8143(9)	8642(6)	7739(8)	7801(9)	7982(8)	7843(9)
	y	28272(10)	27647(7)	28797(8)	28653(10)	28441(9)	28649(10)
O(8)	y	8856(8)	8853(7)	8864(8)	8828(9)	8865(8)	8846(8)
	z	-5536(20)	-4790(15)	-6224(18)	-6112(21)	-5846(18)	-6067(20)
O(9)	y	38500(14)	38395(11)	38672(13)	38298(15)	38369(13)	38426(14)
O(10)	y	8784(14)	8680(11)	8862(13)	8950(16)	8764(13)	8956(14)
H(1)	y	—	1543(14)	—	—	—	—
H(2)	y	44(3)	45(3)	42(3)	47(3)	41(3)	45(3)
	z	135(5)	132(4)	140(5)	132(4)	139(4)	136(5)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site		K 46	K 47	K 49	K 50	K 52
M(1)	x	12085(4)	12078(4)	11992(4)	12069(4)	12055(4)
	y	13849(4)	13870(5)	14110(4)	13796(5)	14063(4)
M(2)	y	14572(5)	14584(6)	14704(5)	14583(6)	14636(6)
M(3)	x	21556(3)	21556(3)	21543(3)	21563(3)	21550(3)
M(4)	x	31387(3)	31371(3)	31290(3)	31383(3)	31325(3)
	y	14110(3)	14111(4)	14192(4)	14115(4)	14175(4)
M(5)	x	40743(3)	40749(3)	40865(3)	40747(3)	40836(3)
T(1)	x	40169(2)	40170(3)	40144(3)	40159(3)	40159(3)
	y	35236(3)	35239(3)	35274(3)	35242(3)	35266(3)
T(2)	x	17935(3)	17909(3)	17578(3)	17929(3)	17660(3)
	y	33242(3)	33257(4)	33387(3)	33237(4)	33352(3)
T(3)	y	34146(6)	34170(7)	34474(10)	34125(7)	34356(8)
O(1)	x	22532(7)	22525(7)	22458(7)	22565(8)	22468(7)
	y	4497(8)	4510(9)	4526(8)	4511(9)	4534(8)
O(2)	x	40243(6)	40259(7)	40302(7)	40232(7)	40302(7)
	y	4612(8)	4618(9)	4711(9)	4618(9)	4678(8)
O(3)	x	40159(7)	40137(7)	40050(7)	40128(8)	40116(7)
	y	23401(8)	23415(9)	23497(9)	23395(9)	23495(9)
O(4)	x	13855(5)	13841(5)	13816(5)	13885(6)	13820(5)
	y	9972(5)	9962(6)	9958(5)	9985(6)	9945(5)
	z	-5170(12)	-5184(13)	-5079(12)	-5190(13)	-5092(12)
O(5)	x	23509(8)	23468(9)	23054(8)	23515(9)	23147(9)
	y	23504(8)	23501(9)	23589(8)	23496(10)	23608(9)
O(6)	x	31648(5)	31648(5)	31646(5)	31660(5)	31656(5)
	y	9623(6)	9618(6)	9580(6)	9634(6)	9602(6)
	z	-4619(12)	-4638(14)	-4775(12)	-4592(14)	-4764(13)
O(7)	x	8373(8)	8339(8)	7910(8)	8357(8)	8043(8)
	y	28045(9)	28075(10)	28579(9)	28011(10)	28424(9)
O(8)	y	8853(7)	8853(8)	8847(7)	8848(8)	8861(8)
	z	-5235(17)	-5294(19)	-5943(17)	-5258(19)	-5707(18)
O(9)	y	38462(12)	38476(13)	38542(12)	38464(13)	38598(13)
O(10)	y	8798(12)	8765(14)	8918(12)	8773(14)	8784(13)
H(1)	y	—	—	—	—	—
H(2)	y	66(3)	49(3)	50(3)	38(2)	52(3)
	z	111(2)	127(4)	128(4)	145(5)	123(4)

* Refined atomic fractional coordinates ($\times 10^5$); ($\times 10^3$) for H(2) y,z

Site	U_{ij}	K 1	K 2	K 3	K 5	K 6	K 7	K 8	K 9
X	U_{11}	316(11)	392(14)	305(17)	311(13)	295(12)	364(13)	295(9)	323(11)
	U_{22}	86(8)	100(9)	85(13)	106(10)	95(10)	82(9)	83(7)	81(8)
	U_{33}	64(8)	64(10)	78(14)	75(11)	53(10)	53(9)	60(8)	69(8)
	U_{23}	-15(6)	-11(7)	-16(10)	-9(7)	-13(7)	-13(6)	-18(5)	-11(6)
	U_{eq}	155(6)	185(7)	156(9)	164(7)	148(6)	166(6)	146(5)	158(5)
M(1)	U_{11}	163(3)	143(3)	122(2)	122(3)	130(3)	122(3)	148(3)	114(3)
	U_{22}	126(2)	119(3)	115(2)	115(3)	115(3)	105(3)	127(3)	102(3)
	U_{33}	88(2)	94(3)	96(3)	93(3)	103(3)	94(3)	104(3)	92(3)
	U_{12}	49(2)	35(2)	33(2)	29(2)	33(2)	25(2)	40(2)	27(2)
	U_{eq}	126(2)	119(2)	111(2)	110(2)	116(2)	107(2)	126(2)	103(2)
M(2)	U_{11}	60(3)	60(4)	54(3)	53(4)	66(4)	57(4)	57(4)	53(4)
	U_{22}	69(3)	75(4)	76(3)	78(4)	76(4)	63(4)	74(4)	63(3)
	U_{33}	134(4)	140(4)	157(4)	147(4)	116(4)	141(5)	168(4)	140(4)
	U_{eq}	88(2)	92(2)	95(2)	93(2)	103(2)	87(3)	100(2)	85(2)
M(3)	U_{11}	76(2)	74(2)	74(2)	75(2)	73(2)	66(2)	74(2)	71(2)
	U_{22}	74(2)	70(2)	64(2)	73(2)	69(3)	62(2)	69(2)	64(2)
	U_{33}	41(2)	42(2)	43(2)	43(2)	40(3)	39(2)	43(3)	43(2)
	U_{23}	-6(1)	-8(1)	-5(2)	-6(2)	-6(2)	-7(2)	-4(2)	-8(2)
	U_{eq}	64(1)	62(1)	60(1)	64(1)	60(1)	56(1)	62(1)	60(1)
M(4)	U_{11}	58(2)	56(2)	51(3)	54(3)	61(3)	53(3)	55(3)	45(2)
	U_{22}	60(2)	59(2)	53(2)	62(3)	59(3)	53(3)	63(2)	51(2)
	U_{33}	86(2)	87(2)	89(3)	91(3)	91(3)	83(3)	92(3)	87(3)
	U_{12}	-4(1)	-3(1)	-0(2)	1(2)	-3(2)	-1(2)	-1(2)	1(2)
	U_{eq}	68(2)	68(2)	64(2)	69(2)	71(2)	63(2)	70(2)	61(2)
M(5)	U_{11}	65(2)	64(2)	55(2)	62(2)	63(2)	53(2)	63(2)	58(2)
	U_{22}	66(2)	65(2)	62(2)	71(2)	66(2)	61(2)	61(2)	63(2)
	U_{33}	48(2)	47(2)	47(2)	49(2)	46(3)	42(2)	44(3)	47(2)
	U_{23}	-6(1)	-9(2)	-8(2)	-8(2)	-5(2)	-9(2)	-7(2)	-9(2)
	U_{eq}	60(1)	59(1)	55(1)	61(1)	58(1)	52(1)	56(1)	56(1)
T(1)	U_{11}	50(2)	48(2)	50(2)	51(2)	56(2)	49(2)	50(2)	50(2)
	U_{22}	54(2)	57(2)	53(2)	62(2)	58(2)	53(2)	60(2)	52(2)
	U_{33}	51(2)	50(2)	51(2)	54(2)	48(2)	51(2)	52(2)	54(2)
	U_{12}	8(1)	7(1)	9(2)	8(1)	9(2)	9(2)	9(2)	10(1)
	U_{eq}	52(1)	52(1)	51(1)	56(1)	54(1)	51(1)	54(1)	52(1)
T(2)	U_{11}	139(2)	139(2)	98(2)	110(2)	121(3)	105(2)	143(3)	93(2)
	U_{22}	61(2)	58(2)	54(2)	61(2)	58(2)	56(2)	59(2)	55(2)
	U_{33}	50(2)	51(2)	48(2)	53(2)	49(2)	48(2)	54(2)	49(2)
	U_{12}	-9(1)	-12(2)	2(2)	-1(2)	-5(2)	-6(2)	-10(2)	-1(2)
	U_{eq}	83(1)	82(1)	67(1)	75(1)	76(1)	70(1)	86(1)	66(1)
T(3)	U_{11}	43(4)	46(4)	35(8)	53(7)	45(8)	42(7)	44(5)	39(8)
	U_{22}	81(4)	84(5)	83(9)	95(7)	78(8)	83(7)	67(6)	81(8)
	U_{33}	50(4)	46(5)	39(9)	41(7)	23(8)	29(7)	47(6)	46(8)
	U_{eq}	58(2)	59(3)	52(5)	63(4)	49(5)	52(5)	53(4)	55(5)
O(1)	U_{11}	84(4)	72(5)	64(5)	70(5)	79(6)	74(5)	86(6)	64(5)
	U_{22}	73(4)	71(4)	62(5)	74(5)	70(6)	65(5)	64(5)	71(5)
	U_{33}	39(4)	49(5)	42(5)	59(5)	48(6)	48(5)	51(6)	51(5)
	U_{12}	7(3)	6(4)	1(4)	5(4)	5(5)	7(4)	9(4)	7(4)
	U_{eq}	66(2)	64(2)	56(2)	68(2)	66(3)	62(2)	67(2)	62(2)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 1	K 2	K 3	K 5	K 6	K 7	K 8	K 9
O(2)	U_{11}	67(4)	70(5)	61(5)	67(5)	69(6)	70(5)	63(5)	64(5)
	U_{22}	66(4)	67(5)	55(5)	67(5)	73(6)	68(5)	65(5)	65(5)
	U_{33}	43(4)	54(5)	51(6)	48(5)	35(6)	43(5)	56(6)	48(5)
	U_{12}	-6(3)	-10(4)	-7(4)	-14(4)	-12(5)	-10(4)	-6(4)	-11(4)
	U_{eq}	59(2)	63(2)	56(2)	61(2)	59(3)	60(2)	61(2)	59(2)
O(3)	U_{11}	94(4)	91(5)	101(6)	110(6)	113(7)	104(6)	89(6)	109(5)
	U_{22}	64(4)	63(4)	61(5)	65(5)	67(6)	65(5)	68(5)	64(5)
	U_{33}	105(5)	109(5)	112(6)	116(6)	108(7)	109(6)	111(6)	116(5)
	U_{12}	10(3)	12(4)	9(4)	11(4)	11(5)	18(4)	5(4)	18(4)
	U_{eq}	88(2)	88(2)	91(3)	97(2)	96(3)	93(3)	89(3)	96(2)
O(4)	U_{11}	112(3)	101(3)	98(4)	105(4)	107(4)	96(4)	101(4)	105(3)
	U_{22}	93(3)	93(3)	88(4)	92(3)	95(4)	97(4)	102(4)	94(3)
	U_{33}	64(3)	64(3)	64(4)	74(4)	67(4)	62(4)	71(4)	60(4)
	U_{23}	4(2)	2(3)	8(3)	7(3)	0(4)	3(3)	4(3)	4(3)
	U_{13}	-13(3)	-11(3)	-16(3)	-17(3)	-17(4)	-12(3)	-15(3)	-14(3)
	U_{12}	34(2)	35(3)	31(3)	36(3)	38(3)	34(3)	40(3)	40(3)
	U_{eq}	90(1)	86(2)	83(2)	90(2)	90(2)	85(2)	91(2)	87(2)
O(5)	U_{11}	218(5)	210(6)	128(6)	158(6)	156(7)	155(6)	181(7)	121(5)
	U_{22}	124(5)	113(5)	92(6)	101(5)	107(6)	89(5)	125(6)	89(5)
	U_{33}	101(5)	109(5)	107(6)	98(5)	91(6)	95(6)	101(6)	101(5)
	U_{12}	12(4)	-1(5)	-1(5)	-1(4)	-8(5)	-4(5)	-24(5)	-2(4)
	U_{eq}	148(2)	144(2)	109(3)	119(2)	118(3)	113(3)	136(3)	104(2)
O(6)	U_{11}	74(3)	71(3)	66(4)	69(3)	70(4)	66(4)	70(4)	66(3)
	U_{22}	86(3)	84(3)	78(4)	89(3)	87(4)	83(4)	79(4)	81(3)
	U_{33}	82(3)	82(3)	74(4)	81(4)	73(4)	68(4)	87(4)	74(4)
	U_{23}	-4(2)	0(3)	-0(3)	3(3)	4(4)	12(3)	0(3)	5(3)
	U_{13}	-6(2)	-5(2)	-7(3)	1(3)	-0(3)	-15(3)	-6(3)	-3(3)
	U_{12}	6(2)	4(3)	6(3)	4(3)	7(3)	7(3)	6(3)	5(3)
	U_{eq}	80(1)	79(2)	73(2)	80(2)	77(2)	72(2)	78(2)	74(2)
O(7)	U_{11}	162(5)	151(5)	84(5)	116(5)	111(6)	117(5)	133(6)	89(5)
	U_{22}	152(5)	153(5)	102(6)	125(5)	113(6)	111(6)	151(6)	90(5)
	U_{33}	87(5)	82(5)	84(6)	86(5)	95(7)	92(6)	82(6)	80(5)
	U_{12}	-90(4)	-87(4)	-39(5)	-61(5)	-53(5)	-50(5)	-77(5)	-30(4)
	U_{eq}	134(2)	128(2)	90(2)	109(2)	106(3)	107(3)	122(3)	86(2)
O(8)	U_{11}	53(4)	50(4)	52(5)	47(4)	54(5)	54(5)	52(5)	64(4)
	U_{22}	60(4)	57(4)	50(5)	64(4)	67(5)	60(5)	61(5)	56(4)
	U_{33}	104(4)	106(5)	75(6)	96(5)	85(6)	84(6)	97(6)	68(5)
	U_{23}	7(3)	4(4)	7(4)	3(4)	14(5)	10(4)	9(5)	4(4)
	U_{eq}	73(2)	71(2)	59(2)	69(2)	69(3)	66(2)	70(2)	63(2)
O(9)	U_{11}	54(6)	46(6)	45(8)	61(7)	61(8)	50(7)	48(8)	60(7)
	U_{22}	114(6)	127(7)	124(8)	124(8)	124(9)	137(8)	105(8)	125(7)
	U_{33}	217(8)	230(9)	194(10)	216(9)	207(11)	220(10)	215(10)	207(9)
	U_{eq}	128(3)	128(3)	121(4)	134(4)	131(4)	136(4)	123(4)	131(3)
O(10)	U_{11}	107(6)	134(3)	93(9)	73(8)	110(10)	84(9)	102(8)	71(8)
	U_{22}	133(6)	89(7)	181(10)	150(9)	153(11)	145(9)	120(8)	145(8)
	U_{33}	185(7)	120(7)	201(12)	170(10)	180(12)	145(10)	165(10)	155(9)
	U_{eq}	142(3)	172(8)	159(6)	131(5)	148(7)	125(6)	129(4)	124(5)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 10	K 11	K 12	K 13	K 14	K 15	K 16	K 17
X	U_{11}	287(11)	339(18)	438(20)	487(18)	313(17)	310(11)	302(18)	282(12)
	U_{22}	77(8)	111(13)	91(14)	100(11)	85(13)	73(8)	70(13)	77(10)
	U_{33}	50(9)	87(14)	88(16)	69(11)	58(14)	70(9)	70(14)	63(10)
	U_{23}	-11(6)	-19(10)	-22(11)	-13(8)	-24(9)	-8(6)	-8(9)	-16(7)
	U_{eq}	138(6)	179(9)	206(10)	219(8)	152(9)	151(6)	147(9)	141(6)
M(1)	U_{11}	144(3)	107(2)	144(4)	109(3)	126(2)	133(3)	126(2)	134(3)
	U_{22}	124(2)	113(2)	110(3)	89(3)	115(2)	114(3)	120(2)	112(3)
	U_{33}	96(3)	101(2)	95(4)	88(3)	94(2)	104(3)	96(2)	99(3)
	U_{12}	38(2)	30(1)	41(3)	14(2)	31(2)	31(2)	39(1)	30(2)
	U_{eq}	121(2)	107(1)	116(2)	95(2)	112(2)	117(2)	114(1)	115(2)
M(2)	U_{11}	64(3)	51(3)	62(4)	56(4)	56(3)	64(4)	58(3)	59(4)
	U_{22}	78(3)	77(3)	59(5)	64(4)	72(3)	71(4)	76(3)	73(4)
	U_{33}	164(4)	160(3)	119(5)	135(4)	155(4)	155(4)	154(3)	152(4)
	U_{eq}	102(2)	96(2)	80(3)	85(3)	94(2)	97(2)	96(2)	95(2)
	U_{11}	77(2)	71(2)	75(3)	70(2)	72(2)	74(2)	73(2)	75(2)
M(3)	U_{22}	70(2)	68(2)	66(2)	62(2)	66(2)	67(2)	66(2)	67(2)
	U_{33}	44(3)	45(2)	43(3)	38(2)	41(2)	46(3)	41(2)	45(3)
	U_{23}	-7(2)	-6(2)	-9(2)	-6(2)	-7(2)	-7(2)	-8(2)	-6(2)
	U_{eq}	64(1)	62(1)	61(1)	57(1)	60(1)	62(1)	60(1)	62(1)
	U_{11}	62(3)	50(2)	49(3)	49(3)	56(2)	58(2)	55(2)	57(2)
M(4)	U_{22}	61(2)	51(2)	55(3)	52(3)	57(2)	63(2)	52(2)	58(2)
	U_{33}	88(3)	93(3)	87(3)	84(3)	89(3)	88(3)	93(3)	86(3)
	U_{12}	-3(2)	0(2)	-2(2)	0(2)	0(2)	-4(2)	-0(2)	-2(2)
	U_{eq}	71(2)	65(1)	64(2)	62(2)	67(2)	70(2)	67(2)	67(2)
	U_{11}	65(2)	53(2)	66(2)	56(2)	57(2)	60(2)	60(2)	61(2)
M(5)	U_{22}	65(2)	67(2)	60(2)	59(2)	64(2)	66(2)	62(2)	65(2)
	U_{33}	46(2)	48(2)	46(3)	43(2)	45(2)	51(3)	43(2)	45(3)
	U_{23}	-8(2)	-8(2)	-8(2)	-8(2)	-10(2)	-8(2)	-8(2)	-7(2)
	U_{eq}	59(1)	56(1)	58(1)	53(1)	55(1)	59(1)	55(1)	57(1)
	U_{11}	52(2)	50(2)	52(2)	49(2)	48(2)	56(2)	49(2)	53(2)
T(1)	U_{22}	57(2)	53(2)	45(2)	52(2)	57(2)	58(2)	51(2)	60(2)
	U_{33}	52(2)	54(2)	51(2)	48(2)	50(2)	59(2)	56(2)	55(2)
	U_{12}	8(2)	6(1)	5(2)	10(1)	7(1)	9(2)	8(1)	11(2)
	U_{eq}	54(1)	52(1)	49(1)	50(1)	52(1)	58(1)	52(1)	56(1)
	U_{11}	128(2)	90(2)	129(3)	90(2)	116(2)	123(2)	90(2)	118(2)
T(2)	U_{22}	61(2)	54(2)	54(2)	53(2)	54(2)	62(2)	51(2)	61(2)
	U_{33}	48(2)	49(2)	51(3)	46(2)	46(2)	54(2)	49(2)	52(2)
	U_{12}	-7(2)	3(2)	-12(2)	-4(2)	-1(2)	-12(2)	3(2)	-6(2)
	U_{eq}	79(1)	64(1)	78(1)	63(1)	72(1)	79(1)	64(1)	77(1)
	U_{11}	42(6)	42(9)	41(4)	31(8)	45(7)	50(7)	43(8)	42(8)
T(3)	U_{22}	83(7)	78(9)	60(5)	87(8)	87(7)	95(7)	77(8)	101(8)
	U_{33}	40(7)	49(9)	45(5)	47(8)	32(7)	43(7)	39(8)	48(8)
	U_{eq}	55(4)	56(6)	49(3)	55(5)	55(4)	63(5)	53(5)	64(5)
	U_{11}	75(5)	60(5)	76(6)	72(5)	73(5)	83(5)	64(5)	82(5)
O(1)	U_{22}	73(5)	64(5)	62(6)	67(5)	69(5)	70(5)	66(5)	71(5)
	U_{33}	47(5)	54(5)	53(6)	42(5)	43(5)	55(6)	46(5)	44(6)
	U_{12}	2(4)	1(4)	9(5)	12(4)	0(4)	3(4)	3(4)	2(4)
	U_{eq}	65(2)	59(2)	63(3)	60(2)	62(2)	69(2)	59(2)	66(2)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 10	K 11	K 12	K 13	K 14	K 15	K 16	K 17
O(2)	U_{11}	78(5)	64(5)	58(6)	64(5)	66(5)	71(5)	66(5)	68(5)
	U_{22}	65(5)	56(5)	47(6)	60(5)	59(5)	63(5)	54(5)	58(5)
	U_{33}	45(6)	54(5)	48(6)	36(5)	50(5)	48(6)	42(5)	52(6)
	U_{12}	-6(4)	-3(4)	-8(5)	-9(4)	-5(4)	-15(4)	-2(4)	-5(4)
	U_{eq}	63(2)	58(2)	51(3)	53(2)	58(2)	61(2)	54(2)	59(2)
O(3)	U_{11}	104(6)	101(6)	73(6)	108(5)	100(6)	103(6)	95(5)	104(6)
	U_{22}	68(5)	60(5)	62(6)	51(5)	63(5)	74(5)	57(5)	70(5)
	U_{33}	112(6)	122(6)	112(7)	112(6)	113(6)	111(6)	113(6)	117(6)
	U_{12}	10(4)	5(4)	6(5)	17(4)	8(4)	12(4)	5(4)	16(5)
	U_{eq}	95(3)	94(3)	82(3)	91(2)	92(2)	96(3)	88(2)	97(3)
O(4)	U_{11}	111(4)	100(4)	100(4)	101(4)	96(3)	110(4)	104(3)	110(4)
	U_{22}	94(4)	87(4)	82(4)	95(4)	88(4)	99(4)	87(3)	96(4)
	U_{33}	69(4)	73(4)	65(5)	56(4)	64(4)	68(4)	64(4)	64(4)
	U_{23}	2(3)	2(3)	3(4)	0(3)	-0(3)	5(3)	1(3)	5(3)
	U_{13}	-16(3)	-20(3)	-24(4)	-10(3)	-12(3)	-21(3)	-19(3)	-18(3)
	U_{12}	36(3)	34(3)	35(3)	39(3)	36(3)	40(3)	32(3)	36(3)
	U_{eq}	91(2)	87(2)	82(2)	84(2)	83(2)	92(2)	85(2)	90(2)
O(5)	U_{11}	161(6)	121(6)	194(8)	129(6)	145(6)	188(7)	115(5)	161(7)
	U_{22}	110(6)	81(5)	122(7)	90(5)	94(5)	102(6)	84(5)	104(6)
	U_{33}	111(6)	102(6)	92(7)	99(5)	103(6)	101(6)	100(5)	108(6)
	U_{12}	-12(5)	13(4)	21(6)	-4(4)	-8(5)	-8(5)	4(4)	-9(5)
	U_{eq}	127(3)	101(2)	136(3)	106(2)	114(2)	130(3)	100(2)	124(3)
O(6)	U_{11}	75(4)	64(4)	75(4)	61(3)	61(3)	74(4)	70(3)	75(4)
	U_{22}	89(4)	78(4)	79(4)	81(3)	82(3)	79(4)	76(3)	83(4)
	U_{33}	78(4)	71(4)	86(5)	70(4)	76(4)	81(4)	68(4)	74(4)
	U_{23}	2(3)	-3(3)	-2(4)	11(3)	-1(3)	3(3)	2(3)	5(3)
	U_{13}	-4(3)	2(3)	-1(4)	-3(3)	-4(3)	-6(3)	-5(3)	-3(3)
	U_{12}	6(3)	8(3)	-2(3)	3(3)	5(3)	4(3)	6(3)	8(3)
	U_{eq}	80(2)	71(2)	80(2)	71(2)	73(2)	78(2)	71(2)	77(2)
O(7)	U_{11}	115(6)	82(5)	140(7)	87(5)	99(5)	126(6)	83(5)	100(6)
	U_{22}	141(6)	93(5)	134(7)	89(5)	119(6)	130(6)	89(5)	120(6)
	U_{33}	87(6)	92(6)	93(7)	83(5)	88(6)	81(6)	89(5)	93(6)
	U_{12}	-60(5)	-31(4)	-71(6)	-31(4)	-52(4)	-64(5)	-34(4)	-46(5)
	U_{eq}	114(3)	89(2)	122(3)	87(2)	102(2)	112(3)	87(2)	105(3)
O(8)	U_{11}	51(5)	49(5)	52(5)	53(4)	46(4)	59(5)	55(4)	56(5)
	U_{22}	70(5)	60(5)	55(5)	62(4)	60(4)	56(5)	59(4)	55(5)
	U_{33}	99(6)	84(5)	94(7)	74(5)	86(5)	100(6)	72(5)	92(6)
	U_{23}	9(4)	9(4)	-0(5)	7(4)	3(4)	7(4)	9(4)	8(4)
	U_{eq}	73(2)	64(2)	67(3)	63(2)	64(2)	72(2)	62(2)	68(2)
O(9)	U_{11}	72(8)	48(8)	46(8)	47(7)	64(7)	57(8)	49(7)	55(8)
	U_{22}	133(8)	119(8)	93(9)	134(8)	116(8)	123(8)	110(8)	144(9)
	U_{33}	229(10)	188(9)	238(12)	234(9)	218(10)	216(10)	203(9)	202(10)
	U_{eq}	145(4)	118(4)	126(4)	138(4)	133(4)	132(4)	121(3)	134(4)
O(10)	U_{11}	104(9)	101(9)	90(9)	77(8)	100(9)	110(9)	100(9)	98(9)
	U_{22}	138(9)	184(10)	105(9)	144(9)	137(9)	194(10)	167(10)	177(10)
	U_{33}	159(11)	226(11)	181(11)	138(9)	178(10)	176(11)	236(11)	179(11)
	U_{eq}	134(6)	170(6)	125(4)	120(5)	138(6)	160(6)	168(6)	151(6)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 18	K 19	K 20	K 21	K 22	K 23	K 24	K 25
X	U_{11}	292(12)	308(18)	313(23)	299(17)	454(20)	486(26)	293(20)	305(11)
	U_{22}	84(10)	110(15)	114(18)	101(13)	109(13)	112(16)	71(15)	74(9)
	U_{33}	63(10)	77(15)	68(19)	66(13)	66(13)	88(17)	63(16)	63(9)
	U_{23}	-17(7)	-5(10)	-12(13)	-25(10)	-16(10)	-17(11)	-21(11)	-13(6)
	U_{eq}	146(7)	165(9)	165(12)	156(9)	210(10)	229(12)	142(10)	147(6)
M(1)	U_{11}	134(3)	117(3)	119(3)	183(4)	144(3)	122(3)	121(3)	128(3)
	U_{22}	113(3)	109(3)	111(3)	146(4)	121(3)	94(3)	121(3)	112(2)
	U_{33}	98(3)	97(3)	94(3)	102(3)	96(3)	89(3)	97(3)	100(3)
	U_{12}	36(2)	29(2)	30(2)	72(3)	40(2)	17(2)	31(2)	31(2)
	U_{eq}	115(2)	107(2)	108(2)	144(2)	120(2)	102(2)	113(2)	113(2)
M(2)	U_{11}	63(4)	55(3)	60(3)	59(5)	58(4)	62(4)	55(4)	57(3)
	U_{22}	67(4)	75(3)	77(3)	70(5)	75(4)	65(4)	80(4)	73(3)
	U_{33}	150(5)	148(4)	152(4)	145(6)	130(5)	141(4)	148(4)	147(4)
	U_{eq}	93(3)	93(2)	96(2)	91(3)	88(3)	90(3)	94(2)	92(2)
M(3)	U_{11}	72(2)	71(2)	74(2)	78(3)	75(2)	70(2)	68(2)	75(2)
	U_{22}	65(2)	63(2)	65(2)	72(3)	72(2)	63(2)	66(2)	66(2)
	U_{33}	40(3)	41(2)	39(2)	45(3)	40(2)	39(2)	39(2)	42(2)
	U_{23}	-5(2)	-6(2)	-7(2)	-5(2)	-6(2)	-5(2)	-5(2)	-8(2)
	U_{eq}	59(1)	58(1)	59(1)	65(2)	62(1)	57(1)	58(1)	61(1)
M(4)	U_{11}	56(3)	53(3)	62(3)	59(3)	56(3)	58(2)	56(2)	54(2)
	U_{22}	57(3)	54(2)	55(3)	61(3)	62(3)	56(2)	57(2)	56(2)
	U_{33}	84(3)	93(3)	87(3)	93(3)	93(3)	90(2)	96(3)	87(3)
	U_{12}	0(2)	2(2)	-2(2)	-2(2)	-1(2)	-2(2)	-1(2)	1(1)
	U_{eq}	66(2)	67(2)	68(2)	71(2)	70(2)	68(1)	70(1)	66(2)
M(5)	U_{11}	59(2)	54(2)	58(2)	67(3)	63(2)	61(2)	55(2)	60(2)
	U_{22}	60(2)	61(2)	61(2)	65(3)	67(2)	60(2)	61(2)	64(2)
	U_{33}	42(2)	44(2)	40(2)	50(3)	47(2)	46(2)	43(2)	43(2)
	U_{23}	-9(2)	-8(2)	-7(2)	-9(2)	-9(2)	-9(2)	-6(2)	-8(2)
	U_{eq}	54(1)	53(1)	53(1)	61(2)	59(1)	56(1)	53(1)	56(1)
T(1)	U_{11}	46(2)	46(2)	52(2)	52(3)	47(2)	48(2)	47(2)	53(2)
	U_{22}	57(2)	51(2)	52(2)	55(3)	55(2)	47(2)	50(2)	58(2)
	U_{33}	51(2)	55(2)	50(2)	52(3)	53(2)	50(2)	54(2)	54(2)
	U_{12}	7(2)	8(1)	7(2)	6(2)	7(1)	8(1)	6(2)	10(1)
	U_{eq}	52(1)	51(1)	51(1)	53(1)	52(1)	48(1)	50(1)	55(1)
T(2)	U_{11}	112(2)	91(2)	86(2)	142(3)	130(2)	111(2)	97(2)	99(2)
	U_{22}	58(2)	52(2)	53(2)	63(3)	62(2)	53(2)	53(2)	58(2)
	U_{33}	45(2)	47(2)	43(2)	51(3)	55(2)	47(2)	49(2)	48(2)
	U_{12}	-6(2)	-1(2)	2(2)	-10(2)	-10(2)	-7(1)	-1(2)	-4(2)
	U_{eq}	72(1)	63(1)	61(1)	85(2)	82(1)	70(1)	67(1)	68(1)
T(3)	U_{11}	46(7)	34(8)	37(9)	50(6)	38(4)	41(6)	32(8)	45(8)
	U_{22}	75(8)	74(8)	66(9)	75(6)	74(5)	79(6)	80(8)	77(8)
	U_{33}	28(8)	28(8)	26(9)	48(6)	49(5)	41(6)	45(8)	41(8)
	U_{eq}	50(5)	45(5)	43(6)	58(4)	54(3)	54(4)	53(5)	54(5)
O(1)	U_{11}	75(5)	67(5)	68(5)	78(7)	81(5)	66(5)	63(5)	77(5)
	U_{22}	64(5)	66(5)	69(5)	72(7)	73(5)	68(5)	61(5)	71(5)
	U_{33}	44(6)	47(5)	49(5)	46(7)	48(5)	47(5)	53(5)	47(5)
	U_{12}	1(4)	-0(4)	-1(4)	6(6)	-4(4)	1(4)	-3(4)	2(4)
	U_{eq}	61(2)	60(2)	62(2)	65(3)	67(2)	61(2)	59(2)	65(2)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 18	K 19	K 20	K 21	K 22	K 23	K 24	K 25
O(2)	U_{11}	60(5)	57(5)	59(5)	67(7)	69(5)	66(5)	61(5)	66(5)
	U_{22}	68(5)	58(5)	54(5)	62(7)	69(5)	59(5)	60(5)	63(5)
	U_{33}	52(6)	46(5)	45(6)	48(7)	47(5)	44(5)	52(6)	49(5)
	U_{12}	-7(4)	-3(4)	3(4)	-9(5)	-6(4)	-9(4)	-2(4)	-10(4)
	U_{eq}	60(2)	54(2)	52(2)	59(3)	62(2)	57(2)	58(2)	59(2)
O(3)	U_{11}	111(6)	98(5)	95(6)	81(7)	88(5)	96(5)	98(6)	119(6)
	U_{22}	58(5)	60(5)	48(5)	70(7)	63(5)	56(5)	61(5)	66(5)
	U_{33}	120(6)	117(6)	117(6)	113(8)	113(6)	114(5)	115(6)	113(6)
	U_{12}	15(4)	9(4)	8(4)	5(6)	8(4)	11(4)	13(4)	13(4)
	U_{eq}	97(3)	92(2)	86(3)	88(3)	88(2)	89(2)	91(3)	100(2)
O(4)	U_{11}	102(4)	98(4)	98(4)	105(5)	106(4)	97(3)	96(4)	105(4)
	U_{22}	91(4)	89(4)	85(4)	92(5)	91(4)	85(3)	86(4)	92(4)
	U_{33}	64(4)	61(4)	65(4)	65(5)	58(4)	59(3)	64(4)	64(4)
	U_{23}	5(3)	7(3)	7(3)	3(4)	7(3)	5(3)	4(3)	6(3)
	U_{13}	-10(3)	-16(3)	-15(3)	-10(4)	-12(3)	-12(3)	-15(3)	-9(3)
	U_{12}	36(3)	32(3)	30(3)	35(4)	37(3)	35(3)	32(3)	35(3)
	U_{eq}	86(2)	83(2)	83(2)	87(2)	85(2)	80(2)	82(2)	87(2)
O(5)	U_{11}	153(7)	130(6)	120(6)	223(9)	226(7)	164(6)	144(6)	134(6)
	U_{22}	103(6)	82(5)	78(6)	131(8)	116(6)	92(5)	83(6)	98(5)
	U_{33}	100(6)	107(5)	101(6)	104(8)	101(6)	104(5)	99(6)	107(6)
	U_{12}	-13(5)	4(4)	7(5)	21(7)	19(5)	0(4)	11(5)	-7(4)
	U_{eq}	118(3)	106(2)	100(3)	153(4)	148(3)	120(2)	109(3)	113(2)
O(6)	U_{11}	70(4)	67(3)	68(4)	72(5)	74(3)	66(3)	65(4)	70(3)
	U_{22}	80(4)	77(3)	76(4)	89(5)	84(3)	79(3)	75(4)	86(4)
	U_{33}	76(4)	70(4)	60(4)	79(5)	77(4)	72(4)	76(4)	70(4)
	U_{23}	3(3)	12(3)	2(3)	-7(4)	4(3)	3(3)	6(3)	7(3)
	U_{13}	-3(3)	-4(3)	4(3)	-3(4)	-6(3)	-4(3)	-1(3)	-7(3)
	U_{12}	5(3)	4(3)	8(3)	6(4)	9(3)	4(3)	6(3)	6(3)
	U_{eq}	75(2)	71(2)	68(2)	80(2)	78(2)	72(2)	72(2)	75(2)
O(7)	U_{11}	106(6)	90(5)	78(5)	155(8)	158(6)	114(5)	95(5)	90(5)
	U_{22}	111(6)	94(5)	94(6)	152(8)	144(6)	116(5)	112(6)	109(5)
	U_{33}	84(6)	88(5)	82(6)	91(8)	87(6)	74(5)	87(6)	81(6)
	U_{12}	-49(5)	-35(4)	-30(5)	-89(7)	-86(5)	-57(4)	-44(5)	-33(4)
	U_{eq}	100(3)	91(2)	85(2)	133(4)	129(3)	101(2)	98(3)	93(2)
O(8)	U_{11}	59(5)	47(4)	57(5)	53(6)	52(5)	56(4)	52(5)	55(5)
	U_{22}	60(5)	58(4)	58(5)	61(6)	67(5)	50(4)	56(5)	62(4)
	U_{33}	73(6)	74(5)	78(6)	99(7)	105(5)	92(5)	89(6)	77(5)
	U_{23}	8(4)	16(4)	2(4)	7(6)	5(4)	6(4)	8(4)	12(4)
	U_{eq}	64(2)	60(2)	64(2)	71(3)	75(2)	66(2)	66(2)	65(2)
O(9)	U_{11}	69(8)	53(7)	51(8)	57(10)	44(7)	55(7)	61(8)	57(7)
	U_{22}	123(9)	130(8)	119(8)	108(11)	121(8)	117(7)	122(9)	151(8)
	U_{33}	198(10)	206(9)	186(10)	214(13)	230(10)	223(9)	194(10)	211(10)
	U_{eq}	130(4)	129(4)	119(4)	126(5)	132(4)	132(3)	126(4)	140(4)
O(10)	U_{11}	98(9)	103(9)	101(9)	116(12)	84(8)	83(8)	95(9)	98(9)
	U_{22}	143(10)	178(9)	184(11)	155(13)	122(8)	139(8)	185(10)	202(10)
	U_{33}	165(11)	205(10)	238(12)	232(15)	178(9)	152(9)	205(11)	185(10)
	U_{eq}	135(6)	162(6)	174(6)	168(8)	128(4)	124(5)	162(6)	162(6)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 26	K 27	K 28	K 29	K 30	K 31	K 32	K 33
X	U_{11}	306(12)	293(12)	328(11)	295(13)	584(35)	538(29)	376(12)	285(12)
	U_{22}	78(9)	74(10)	83(8)	89(10)	110(20)	109(17)	76(9)	76(10)
	U_{33}	53(10)	74(11)	63(8)	74(11)	100(21)	85(18)	47(9)	59(10)
	U_{23}	-5(7)	-9(7)	-4(6)	-16(7)	-10(15)	3(12)	-12(6)	-5(7)
	U_{eq}	146(6)	147(7)	158(6)	153(7)	265(15)	244(13)	166(6)	140(6)
M(1)	U_{11}	154(3)	133(3)	122(3)	144(3)	152(4)	164(4)	115(3)	140(3)
	U_{22}	133(3)	109(3)	108(3)	118(3)	109(4)	130(4)	98(3)	118(3)
	U_{33}	94(3)	102(3)	95(3)	101(3)	90(4)	70(4)	91(3)	100(3)
	U_{12}	41(2)	32(2)	30(2)	36(2)	59(3)	41(3)	25(2)	37(2)
	U_{eq}	127(2)	115(2)	108(2)	121(2)	117(3)	121(2)	101(2)	119(2)
M(2)	U_{11}	67(4)	59(4)	55(4)	65(4)	55(5)	67(5)	56(4)	59(3)
	U_{22}	88(4)	61(4)	66(4)	76(4)	59(5)	74(5)	62(4)	75(3)
	U_{33}	149(5)	145(5)	139(4)	167(5)	82(5)	104(5)	137(4)	161(4)
	U_{eq}	102(3)	88(3)	87(2)	103(3)	65(3)	82(3)	85(2)	99(2)
M(3)	U_{11}	81(3)	73(2)	70(2)	82(3)	78(3)	89(3)	74(2)	76(2)
	U_{22}	73(3)	65(3)	61(2)	69(3)	61(3)	81(3)	61(2)	67(2)
	U_{33}	33(3)	42(3)	41(2)	42(3)	39(3)	15(3)	36(2)	39(2)
	U_{23}	-4(2)	-6(2)	-5(2)	-4(2)	-6(2)	-6(2)	-7(1)	-4(2)
	U_{eq}	62(1)	60(1)	57(1)	64(1)	59(1)	62(1)	57(1)	61(1)
M(4)	U_{11}	62(3)	56(3)	54(3)	67(3)	50(3)	66(3)	58(3)	56(2)
	U_{22}	64(3)	53(3)	57(2)	59(3)	53(3)	74(3)	54(2)	56(2)
	U_{33}	80(3)	84(3)	85(3)	98(3)	89(3)	73(3)	84(3)	87(3)
	U_{12}	-1(2)	-4(2)	-1(2)	-3(2)	3(2)	-0(2)	-2(2)	-2(1)
	U_{eq}	69(2)	64(2)	65(2)	75(2)	64(1)	71(2)	65(2)	66(2)
M(5)	U_{11}	65(3)	59(2)	58(2)	69(3)	68(3)	73(3)	59(2)	58(2)
	U_{22}	70(3)	59(2)	59(2)	67(3)	62(3)	77(3)	57(2)	63(2)
	U_{33}	40(3)	46(3)	46(2)	46(3)	42(3)	26(3)	40(2)	44(2)
	U_{23}	-9(2)	-9(2)	-6(2)	-8(2)	-10(2)	-10(2)	-6(2)	-8(2)
	U_{eq}	58(1)	54(1)	54(1)	61(1)	57(1)	59(1)	52(1)	55(1)
T(1)	U_{11}	50(2)	52(2)	49(2)	57(2)	46(2)	60(2)	49(2)	48(2)
	U_{22}	69(3)	55(2)	50(2)	51(2)	44(2)	65(2)	47(2)	53(2)
	U_{33}	44(3)	54(3)	54(2)	58(3)	47(3)	25(2)	45(2)	51(2)
	U_{12}	11(2)	7(2)	10(1)	10(2)	7(2)	6(2)	10(1)	7(1)
	U_{eq}	54(1)	53(1)	51(1)	55(1)	46(1)	50(1)	47(1)	50(1)
T(2)	U_{11}	139(3)	120(3)	107(2)	134(3)	87(3)	137(3)	96(2)	126(2)
	U_{22}	74(3)	53(2)	56(2)	59(2)	54(2)	71(2)	52(2)	55(2)
	U_{33}	43(3)	49(2)	50(2)	50(3)	48(3)	30(2)	42(2)	46(2)
	U_{12}	-9(2)	-5(2)	-8(2)	-4(2)	-1(2)	-2(2)	-5(1)	-6(2)
	U_{eq}	86(1)	74(1)	71(1)	81(1)	63(1)	79(1)	63(1)	76(1)
T(3)	U_{11}	39(6)	36(8)	45(7)	57(7)	44(4)	52(5)	34(7)	45(6)
	U_{22}	77(7)	68(8)	81(7)	71(7)	63(4)	76(5)	78(7)	82(6)
	U_{33}	44(7)	20(8)	40(7)	45(7)	43(4)	26(5)	36(7)	42(6)
	U_{eq}	53(4)	41(5)	56(4)	58(5)	50(3)	51(3)	50(5)	56(4)
O(1)	U_{11}	75(6)	75(6)	77(5)	79(6)	74(6)	86(6)	77(5)	70(5)
	U_{22}	72(6)	58(6)	64(5)	73(6)	63(6)	86(6)	65(4)	68(5)
	U_{33}	43(7)	46(6)	47(5)	48(6)	40(6)	24(6)	41(5)	46(5)
	U_{12}	4(5)	-3(5)	-1(4)	6(5)	6(5)	-3(5)	7(4)	4(4)
	U_{eq}	63(3)	60(3)	62(2)	67(3)	59(3)	65(3)	61(2)	61(2)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 26	K 27	K 28	K 29	K 30	K 31	K 32	K 33
O(2)	U_{11}	75(6)	69(6)	67(5)	76(6)	65(6)	75(6)	71(5)	59(5)
	U_{22}	74(7)	54(6)	61(5)	63(6)	56(6)	82(6)	58(5)	60(5)
	U_{33}	48(7)	58(6)	48(5)	47(6)	45(6)	21(6)	41(5)	49(5)
	U_{12}	-8(5)	-13(5)	-6(4)	1(5)	-4(5)	-8(5)	-14(3)	-0(4)
	U_{eq}	66(3)	60(3)	59(2)	62(3)	55(3)	59(3)	57(2)	56(2)
O(3)	U_{11}	99(7)	111(7)	105(6)	111(7)	79(6)	88(6)	109(5)	110(5)
	U_{22}	85(7)	60(6)	62(5)	70(6)	61(6)	69(6)	56(5)	58(5)
	U_{33}	111(7)	113(7)	104(6)	116(7)	99(7)	79(6)	100(5)	107(6)
	U_{12}	11(5)	17(5)	16(4)	7(5)	4(5)	3(5)	20(4)	6(4)
	U_{eq}	98(3)	95(3)	90(2)	99(3)	80(3)	78(3)	88(2)	91(2)
O(4)	U_{11}	113(4)	105(4)	101(4)	110(4)	104(4)	112(4)	109(3)	100(3)
	U_{22}	101(5)	91(4)	90(4)	95(4)	83(4)	103(4)	92(3)	88(3)
	U_{33}	54(5)	72(5)	64(4)	72(5)	53(5)	33(4)	60(3)	61(4)
	U_{23}	1(4)	4(4)	6(3)	1(4)	2(4)	3(3)	4(3)	7(3)
	U_{13}	-13(4)	-9(4)	-15(3)	-17(4)	-9(4)	-14(4)	-15(3)	-12(3)
	U_{12}	36(4)	41(3)	42(3)	37(3)	33(4)	43(4)	41(3)	33(3)
	U_{eq}	89(2)	89(2)	85(2)	92(2)	80(2)	83(2)	87(2)	83(2)
O(5)	U_{11}	211(8)	144(7)	159(6)	175(7)	159(7)	200(7)	146(5)	179(6)
	U_{22}	121(7)	97(6)	91(5)	111(7)	147(7)	130(7)	89(5)	103(5)
	U_{33}	99(7)	97(7)	94(5)	111(7)	94(7)	87(6)	90(5)	103(5)
	U_{12}	-1(6)	-8(5)	-16(5)	-12(6)	48(6)	40(6)	-7(4)	6(5)
	U_{eq}	144(3)	113(3)	114(2)	132(3)	133(3)	139(3)	108(2)	128(2)
O(6)	U_{11}	77(4)	67(4)	63(3)	76(4)	80(4)	87(4)	67(3)	70(3)
	U_{22}	83(4)	79(4)	81(4)	84(4)	78(4)	97(4)	77(3)	83(3)
	U_{33}	78(5)	80(5)	76(4)	83(5)	78(5)	54(4)	70(3)	82(4)
	U_{23}	3(4)	6(4)	13(3)	1(4)	-8(4)	-3(4)	13(3)	-4(3)
	U_{13}	-9(4)	-5(4)	-3(3)	-2(4)	-5(4)	-6(3)	-2(3)	-4(3)
	U_{12}	6(4)	10(3)	7(3)	9(3)	7(4)	7(3)	6(3)	4(3)
	U_{eq}	79(2)	75(2)	73(2)	81(2)	79(2)	80(2)	71(2)	78(2)
O(7)	U_{11}	159(7)	111(6)	104(5)	131(7)	119(7)	158(7)	95(5)	127(5)
	U_{22}	154(8)	106(6)	114(6)	126(7)	95(6)	148(7)	97(5)	126(5)
	U_{33}	76(7)	83(7)	83(6)	111(7)	86(7)	57(6)	78(5)	89(5)
	U_{12}	-89(6)	-53(5)	-51(5)	-65(6)	-37(5)	-76(6)	-45(4)	-71(5)
	U_{eq}	130(3)	100(3)	101(2)	123(3)	100(3)	121(3)	90(2)	114(2)
O(8)	U_{11}	64(6)	48(5)	51(5)	64(6)	62(6)	54(5)	55(4)	54(4)
	U_{22}	69(6)	62(5)	60(5)	59(5)	56(5)	78(5)	57(4)	50(4)
	U_{33}	93(7)	82(6)	83(5)	95(6)	77(6)	77(6)	76(5)	100(5)
	U_{23}	10(5)	7(5)	18(4)	5(5)	-5(5)	2(5)	8(4)	6(4)
	U_{eq}	75(3)	64(3)	65(2)	72(3)	65(3)	69(3)	63(2)	68(2)
O(9)	U_{11}	55(9)	64(9)	63(7)	62(9)	46(9)	64(8)	59(7)	52(7)
	U_{22}	149(11)	116(9)	126(8)	114(9)	93(9)	116(9)	123(7)	129(8)
	U_{33}	209(12)	209(11)	226(10)	215(11)	223(12)	202(11)	206(8)	201(9)
	U_{eq}	138(5)	129(4)	138(4)	130(4)	120(4)	127(4)	129(3)	127(3)
O(10)	U_{11}	108(11)	108(11)	79(8)	96(10)	94(9)	101(9)	74(7)	106(8)
	U_{22}	185(12)	131(11)	145(9)	162(11)	114(10)	126(9)	121(7)	222(10)
	U_{33}	160(13)	157(12)	153(10)	166(12)	192(11)	181(10)	125(7)	212(10)
	U_{eq}	151(7)	132(7)	126(5)	142(7)	134(4)	136(4)	107(3)	180(6)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 34	K 35	K 36	K 38	K 39	K 40	K 41	K 42
X	U_{11}	289(18)	321(12)	347(10)	408(12)	381(16)	546(21)	427(15)	298(13)
	U_{22}	79(14)	87(8)	74(7)	87(8)	97(12)	101(12)	91(10)	70(11)
	U_{33}	63(14)	78(9)	69(7)	69(8)	77(12)	89(13)	70(10)	52(11)
	U_{23}	-4(10)	-14(6)	-11(5)	-12(6)	-13(9)	-21(9)	-23(7)	-10(8)
	U_{eq}	144(9)	162(6)	163(5)	188(6)	185(8)	245(9)	196(7)	140(7)
M(1)	U_{11}	124(3)	166(3)	147(3)	144(3)	144(3)	151(3)	96(3)	124(3)
	U_{22}	114(3)	131(3)	117(3)	114(2)	107(3)	105(3)	87(3)	113(3)
	U_{33}	93(3)	98(3)	90(3)	90(2)	95(3)	93(3)	102(3)	101(3)
	U_{12}	31(2)	83(2)	70(2)	40(2)	31(2)	64(2)	16(2)	32(2)
	U_{eq}	110(2)	132(2)	118(2)	116(2)	115(2)	116(2)	95(2)	113(2)
M(2)	U_{11}	61(4)	52(4)	52(4)	64(3)	59(4)	57(3)	43(4)	62(4)
	U_{22}	73(4)	64(4)	66(4)	70(3)	63(4)	61(3)	61(4)	74(4)
	U_{33}	144(4)	83(4)	81(4)	128(4)	144(5)	82(4)	135(5)	155(5)
	U_{eq}	93(2)	67(2)	66(2)	87(2)	89(3)	67(2)	80(3)	97(3)
M(3)	U_{11}	75(2)	69(2)	69(2)	80(2)	74(2)	72(2)	64(2)	72(3)
	U_{22}	62(2)	71(2)	68(2)	72(2)	65(2)	64(2)	60(2)	66(3)
	U_{33}	38(2)	45(2)	39(2)	36(2)	44(2)	40(2)	44(2)	40(3)
	U_{23}	-6(2)	-6(2)	-5(2)	-6(1)	-5(2)	-7(1)	-7(2)	-7(2)
	U_{eq}	58(1)	62(1)	58(1)	63(1)	61(1)	59(1)	56(1)	59(1)
M(4)	U_{11}	58(2)	43(2)	42(2)	57(2)	54(3)	45(2)	46(3)	61(3)
	U_{22}	55(2)	56(2)	59(2)	64(2)	53(3)	54(2)	55(3)	55(3)
	U_{33}	91(3)	97(3)	88(2)	85(2)	87(3)	91(2)	90(3)	86(3)
	U_{12}	-1(2)	6(1)	7(1)	-1(1)	-4(2)	5(1)	2(2)	2(2)
	U_{eq}	68(1)	65(2)	63(2)	69(1)	65(2)	63(2)	64(2)	67(2)
M(5)	U_{11}	57(2)	61(2)	58(2)	68(2)	65(2)	64(2)	50(2)	54(3)
	U_{22}	61(2)	67(2)	65(2)	65(2)	61(2)	61(2)	59(2)	59(3)
	U_{33}	39(2)	45(2)	42(2)	44(2)	52(2)	41(2)	46(3)	46(3)
	U_{23}	-8(2)	-7(2)	-7(2)	-6(1)	-8(2)	-7(1)	-9(2)	-5(2)
	U_{eq}	52(1)	58(1)	55(1)	59(1)	59(1)	56(1)	52(1)	53(1)
T(1)	U_{11}	51(2)	41(2)	42(2)	49(2)	48(2)	45(2)	43(2)	44(2)
	U_{22}	48(2)	50(2)	51(2)	55(2)	50(2)	44(2)	50(2)	55(2)
	U_{33}	51(2)	50(2)	46(2)	48(2)	53(2)	45(2)	54(2)	52(3)
	U_{12}	9(1)	8(1)	9(1)	8(1)	7(2)	6(1)	8(1)	11(2)
	U_{eq}	50(1)	47(1)	46(1)	51(1)	50(1)	45(1)	49(1)	50(1)
T(2)	U_{11}	103(2)	61(2)	67(2)	134(2)	140(2)	64(2)	75(2)	97(3)
	U_{22}	52(2)	62(2)	61(2)	64(2)	56(2)	56(2)	54(2)	57(2)
	U_{33}	43(2)	55(2)	53(2)	48(2)	51(2)	50(2)	51(2)	46(3)
	U_{12}	-7(2)	9(1)	5(1)	-9(1)	-15(2)	9(1)	-4(2)	1(2)
	U_{eq}	66(1)	59(1)	60(1)	82(1)	82(1)	57(1)	60(1)	67(1)
T(3)	U_{11}	39(7)	45(3)	43(3)	42(3)	43(5)	47(3)	38(9)	32(9)
	U_{22}	73(7)	55(3)	57(3)	76(3)	71(5)	55(3)	80(9)	80(10)
	U_{33}	45(8)	54(3)	46(3)	48(3)	49(5)	48(3)	38(9)	37(10)
	U_{eq}	52(5)	51(2)	49(2)	55(2)	54(3)	50(2)	52(6)	50(6)
O(1)	U_{11}	70(5)	58(4)	63(4)	78(4)	78(5)	60(4)	67(5)	54(6)
	U_{22}	61(5)	76(5)	71(4)	77(4)	65(5)	73(4)	66(5)	74(6)
	U_{33}	41(5)	50(5)	45(5)	48(4)	48(6)	45(4)	50(5)	55(7)
	U_{12}	2(4)	2(4)	9(4)	4(3)	-1(4)	6(3)	10(4)	-5(5)
	U_{eq}	57(2)	61(2)	60(2)	68(2)	64(2)	59(2)	61(2)	61(3)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 34	K 35	K 36	K 38	K 39	K 40	K 41	K 42
O(2)	U_{11}	66(5)	62(5)	70(4)	68(4)	70(5)	67(4)	57(5)	70(6)
	U_{22}	67(5)	66(5)	59(5)	70(4)	58(5)	55(4)	64(5)	54(6)
	U_{33}	36(5)	52(5)	41(5)	46(4)	48(5)	40(4)	50(5)	36(6)
	U_{12}	-1(4)	-2(4)	-6(4)	-9(3)	-8(4)	-2(3)	-16(4)	-7(5)
	U_{eq}	56(2)	60(2)	59(2)	61(2)	58(2)	54(2)	57(2)	53(3)
O(3)	U_{11}	108(6)	71(5)	71(5)	82(4)	94(6)	75(4)	105(6)	118(7)
	U_{22}	61(5)	62(5)	61(5)	70(4)	58(5)	50(4)	56(5)	53(6)
	U_{33}	99(6)	105(5)	109(5)	106(5)	111(6)	104(5)	115(6)	110(7)
	U_{12}	10(4)	12(4)	11(4)	8(3)	10(4)	11(3)	24(4)	24(5)
	U_{eq}	89(3)	79(2)	81(2)	86(2)	88(3)	76(2)	92(3)	94(3)
O(4)	U_{11}	98(4)	98(3)	101(3)	105(3)	106(4)	98(3)	96(4)	104(4)
	U_{22}	89(4)	91(3)	91(3)	97(3)	88(4)	82(3)	93(4)	84(4)
	U_{33}	60(4)	68(4)	61(3)	63(3)	64(4)	60(3)	68(4)	65(5)
	U_{23}	8(3)	2(3)	3(3)	4(2)	3(3)	-0(3)	4(3)	2(4)
	U_{13}	-9(3)	-17(3)	-16(3)	-9(3)	-17(3)	-16(3)	-11(3)	-18(4)
	U_{12}	31(3)	34(3)	40(3)	35(2)	38(3)	36(2)	44(3)	41(4)
	U_{eq}	82(2)	86(2)	84(2)	88(1)	86(2)	80(2)	86(2)	84(2)
O(5)	U_{11}	168(6)	115(5)	119(5)	209(5)	207(7)	117(5)	112(6)	127(7)
	U_{22}	89(6)	162(6)	173(6)	133(5)	110(6)	154(5)	91(5)	92(7)
	U_{33}	97(6)	111(5)	109(5)	100(5)	102(6)	103(5)	100(6)	96(7)
	U_{12}	14(5)	69(5)	60(5)	11(4)	-0(5)	60(4)	-10(4)	-5(6)
	U_{eq}	118(3)	129(2)	134(2)	147(2)	140(3)	125(2)	101(3)	105(3)
O(6)	U_{11}	66(4)	68(3)	62(3)	74(3)	71(4)	68(3)	55(4)	67(4)
	U_{22}	77(4)	96(3)	95(3)	88(3)	81(4)	87(3)	82(4)	84(4)
	U_{33}	68(4)	88(4)	82(4)	82(3)	82(4)	85(3)	74(4)	73(5)
	U_{23}	4(3)	-13(3)	-11(3)	-4(3)	2(3)	-18(3)	13(3)	3(4)
	U_{13}	-3(3)	-9(3)	-8(3)	-6(2)	-6(3)	-3(3)	-3(3)	-2(4)
	U_{12}	6(3)	8(3)	12(3)	9(2)	4(3)	9(2)	5(3)	10(4)
	U_{eq}	70(2)	84(2)	80(2)	81(1)	78(2)	80(2)	70(2)	75(2)
O(7)	U_{11}	115(5)	88(5)	87(5)	147(5)	149(6)	95(5)	70(5)	93(6)
	U_{22}	114(6)	78(5)	80(5)	133(5)	148(6)	62(4)	83(5)	102(7)
	U_{33}	84(6)	96(5)	95(5)	89(5)	83(6)	99(5)	85(6)	82(7)
	U_{12}	-57(5)	-20(4)	-24(4)	-72(4)	-75(5)	-14(3)	-22(4)	-42(6)
	U_{eq}	105(3)	87(2)	87(2)	123(2)	126(3)	85(2)	80(2)	92(3)
O(8)	U_{11}	52(5)	61(4)	56(4)	60(4)	57(5)	63(4)	47(5)	55(6)
	U_{22}	59(5)	63(4)	64(4)	63(4)	58(5)	58(4)	61(5)	56(6)
	U_{33}	94(6)	70(5)	71(5)	94(4)	99(6)	68(4)	76(5)	74(7)
	U_{23}	5(4)	5(4)	2(4)	3(3)	6(5)	-2(4)	10(4)	2(5)
	U_{eq}	68(2)	64(2)	64(2)	72(2)	71(2)	63(2)	61(2)	62(3)
O(9)	U_{11}	55(7)	53(7)	48(6)	57(6)	54(8)	53(6)	45(7)	42(9)
	U_{22}	127(8)	101(7)	104(7)	113(6)	114(9)	92(7)	137(8)	140(10)
	U_{33}	188(10)	210(9)	217(9)	229(8)	232(11)	228(8)	233(10)	216(12)
	U_{eq}	124(4)	121(3)	123(3)	133(3)	133(4)	124(3)	138(4)	132(5)
O(10)	U_{11}	100(9)	105(7)	84(8)	100(6)	81(8)	95(7)	68(8)	95(11)
	U_{22}	207(10)	112(7)	151(9)	122(6)	125(9)	115(7)	127(9)	188(12)
	U_{33}	195(11)	196(9)	160(9)	156(7)	171(10)	180(8)	137(9)	153(13)
	U_{eq}	167(6)	138(3)	132(5)	126(3)	125(4)	130(3)	111(5)	145(7)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 43	K 45	K 46	K 47	K 49	K 50	K 52
X	U_{11}	469(29)	325(14)	537(27)	562(30)	357(11)	464(22)	627(26)
	U_{22}	117(19)	77(10)	117(16)	124(18)	83(8)	88(13)	123(14)
	U_{33}	77(19)	65(11)	110(17)	89(19)	66(8)	90(15)	99(15)
	U_{23}	-25(13)	-9(7)	-18(12)	-23(14)	-10(5)	-20(10)	-15(10)
	U_{eq}	221(14)	156(7)	255(12)	258(13)	169(6)	214(10)	283(12)
M(1)	U_{11}	125(3)	120(3)	137(3)	129(3)	124(3)	150(3)	125(3)
	U_{22}	99(3)	110(3)	113(3)	116(3)	103(3)	120(3)	102(3)
	U_{33}	89(3)	94(3)	94(3)	95(3)	99(3)	96(3)	91(3)
	U_{12}	21(2)	28(2)	33(2)	34(2)	23(2)	45(2)	20(2)
	U_{eq}	104(2)	108(2)	115(2)	113(2)	109(2)	122(2)	106(2)
M(2)	U_{11}	59(4)	58(4)	62(4)	55(4)	63(4)	65(4)	59(4)
	U_{22}	63(4)	76(4)	68(4)	69(4)	67(4)	69(4)	69(4)
	U_{33}	140(5)	141(5)	128(4)	126(5)	154(4)	128(5)	145(5)
	U_{eq}	87(3)	92(3)	86(3)	83(3)	94(3)	88(3)	91(3)
M(3)	U_{11}	76(2)	67(3)	75(2)	74(2)	75(2)	77(2)	76(2)
	U_{22}	64(2)	67(3)	67(2)	69(2)	64(2)	67(2)	67(2)
	U_{33}	42(2)	41(3)	44(2)	42(2)	41(2)	43(3)	40(2)
	U_{23}	-5(2)	-4(2)	-5(2)	-7(2)	-5(2)	-8(2)	-6(2)
	U_{eq}	60(1)	58(1)	62(1)	61(1)	60(1)	63(1)	61(1)
M(4)	U_{11}	58(3)	53(3)	60(2)	55(2)	60(3)	58(3)	59(3)
	U_{22}	53(3)	57(3)	60(2)	62(2)	61(3)	61(3)	63(3)
	U_{33}	88(3)	89(3)	97(2)	92(3)	90(3)	93(3)	91(3)
	U_{12}	-2(2)	-3(2)	-1(2)	2(2)	-3(2)	-2(2)	-2(2)
	U_{eq}	66(2)	66(2)	72(1)	69(1)	70(2)	71(2)	71(2)
M(5)	U_{11}	62(2)	52(3)	68(2)	63(2)	63(2)	68(2)	66(2)
	U_{22}	60(2)	66(3)	59(2)	63(2)	63(2)	58(2)	64(2)
	U_{33}	45(2)	46(3)	45(2)	44(3)	47(2)	52(3)	47(2)
	U_{23}	-5(2)	-7(2)	-6(2)	-7(2)	-6(2)	-9(2)	-7(2)
	U_{eq}	56(1)	55(1)	58(1)	57(1)	58(1)	59(1)	59(1)
T(1)	U_{11}	46(2)	50(2)	49(2)	47(2)	51(2)	49(2)	54(2)
	U_{22}	48(2)	52(2)	50(2)	52(2)	51(2)	50(2)	52(2)
	U_{33}	51(2)	51(2)	49(2)	50(2)	55(2)	50(2)	47(2)
	U_{12}	8(1)	7(2)	7(1)	5(2)	10(1)	8(2)	8(1)
	U_{eq}	49(1)	51(1)	49(1)	50(1)	52(1)	50(1)	51(1)
T(2)	U_{11}	114(3)	100(3)	126(2)	128(2)	119(2)	129(3)	131(2)
	U_{22}	50(3)	61(2)	59(2)	58(2)	56(2)	59(2)	57(2)
	U_{33}	44(3)	45(2)	53(2)	53(2)	53(2)	53(2)	45(2)
	U_{12}	-3(2)	-3(2)	-9(2)	-8(2)	-8(2)	-10(2)	-10(2)
	U_{eq}	69(1)	69(1)	79(1)	80(1)	76(1)	81(1)	78(1)
T(3)	U_{11}	43(6)	45(8)	48(4)	37(4)	37(6)	46(4)	45(5)
	U_{22}	68(6)	82(8)	75(4)	68(5)	85(6)	69(5)	83(6)
	U_{33}	36(6)	49(8)	54(4)	47(5)	45(6)	45(5)	36(6)
	U_{eq}	49(4)	59(5)	59(3)	50(3)	56(4)	53(3)	55(4)
O(1)	U_{11}	65(5)	61(5)	74(5)	70(5)	78(5)	87(5)	77(5)
	U_{22}	59(5)	74(5)	73(5)	71(5)	65(5)	67(5)	72(5)
	U_{33}	47(5)	40(5)	48(5)	46(5)	51(5)	46(5)	43(5)
	U_{12}	1(4)	4(4)	1(4)	8(4)	5(4)	1(5)	9(4)
	U_{eq}	57(2)	58(2)	65(2)	62(2)	65(2)	67(2)	64(2)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)

Site	U_{ij}	K 43	K 45	K 46	K 47	K 49	K 50	K 52
O(2)	U_{11}	61(5)	64(6)	60(5)	63(5)	63(5)	63(5)	69(5)
	U_{22}	56(5)	63(6)	64(5)	67(5)	69(5)	59(5)	70(5)
	U_{33}	55(5)	45(6)	51(5)	52(6)	52(5)	56(6)	46(5)
	U_{12}	-9(4)	-3(4)	-4(4)	-12(4)	-15(4)	-8(4)	-9(4)
	U_{eq}	57(2)	58(3)	59(2)	60(2)	62(2)	59(2)	62(2)
O(3)	U_{11}	92(5)	95(6)	89(5)	76(6)	109(6)	84(6)	104(5)
	U_{22}	55(5)	66(6)	56(5)	64(5)	66(5)	64(6)	69(5)
	U_{33}	109(6)	110(6)	104(5)	103(6)	113(6)	105(6)	100(6)
	U_{12}	15(4)	16(4)	8(4)	11(4)	18(4)	3(4)	16(4)
	U_{eq}	85(2)	90(3)	83(2)	81(3)	96(2)	84(3)	91(2)
O(4)	U_{11}	91(4)	101(4)	101(3)	100(4)	111(4)	103(4)	103(4)
	U_{22}	90(4)	96(4)	89(3)	91(4)	93(4)	88(4)	96(3)
	U_{33}	58(4)	65(4)	61(3)	62(4)	66(4)	68(4)	65(4)
	U_{23}	4(3)	3(3)	3(3)	2(3)	0(3)	1(3)	4(3)
	U_{13}	-8(3)	-15(3)	-9(3)	-8(3)	-11(3)	-14(3)	-10(3)
	U_{12}	36(3)	39(3)	31(3)	34(3)	41(3)	31(3)	36(3)
	U_{eq}	80(2)	88(2)	84(2)	84(2)	90(2)	86(2)	88(2)
O(5)	U_{11}	181(6)	142(7)	216(6)	219(7)	163(6)	218(7)	208(6)
	U_{22}	87(5)	96(6)	121(5)	123(6)	106(5)	125(6)	105(5)
	U_{33}	94(5)	104(6)	104(5)	103(6)	101(5)	95(6)	94(6)
	U_{12}	1(5)	-3(5)	28(5)	16(6)	-15(5)	16(6)	-7(5)
	U_{eq}	121(3)	114(3)	147(3)	148(3)	123(2)	146(3)	136(3)
O(6)	U_{11}	66(3)	64(4)	70(3)	69(4)	65(4)	68(4)	70(3)
	U_{22}	80(4)	82(4)	88(3)	86(4)	81(4)	82(4)	86(4)
	U_{33}	73(4)	76(4)	82(4)	82(4)	78(4)	85(4)	80(4)
	U_{23}	4(3)	3(3)	1(3)	-6(3)	9(3)	-2(3)	4(3)
	U_{13}	-3(3)	-4(3)	-2(3)	-4(3)	-1(3)	-5(3)	-6(3)
	U_{12}	8(3)	1(3)	6(3)	3(3)	5(3)	5(3)	3(3)
	U_{eq}	73(2)	74(2)	80(2)	79(2)	75(2)	78(2)	79(2)
O(7)	U_{11}	132(6)	95(6)	160(6)	159(7)	120(5)	160(7)	137(6)
	U_{22}	122(6)	111(6)	144(6)	144(6)	123(5)	139(6)	146(6)
	U_{33}	81(6)	88(6)	88(5)	90(6)	80(5)	83(6)	81(6)
	U_{12}	-68(5)	-37(5)	-85(4)	-86(5)	-58(5)	-79(5)	-78(5)
	U_{eq}	111(3)	98(3)	130(3)	131(3)	108(2)	127(3)	122(3)
O(8)	U_{11}	48(5)	58(5)	55(4)	48(5)	53(5)	56(5)	61(5)
	U_{22}	59(4)	57(5)	56(4)	59(5)	61(4)	55(5)	64(4)
	U_{33}	88(5)	83(6)	108(5)	107(6)	96(5)	100(6)	104(5)
	U_{23}	5(4)	9(4)	5(4)	0(5)	11(4)	5(5)	3(4)
	U_{eq}	65(2)	66(2)	73(2)	71(2)	70(2)	70(2)	76(2)
O(9)	U_{11}	46(7)	48(8)	53(7)	46(8)	56(7)	59(8)	66(7)
	U_{22}	129(8)	137(9)	109(7)	111(8)	118(8)	111(9)	124(8)
	U_{33}	222(9)	205(10)	222(9)	227(10)	238(9)	232(11)	232(9)
	U_{eq}	132(4)	130(4)	128(3)	128(4)	137(4)	134(4)	140(4)
O(10)	U_{11}	88(8)	84(9)	87(7)	83(8)	86(8)	95(9)	82(7)
	U_{22}	118(8)	148(10)	131(7)	120(8)	139(9)	126(9)	124(8)
	U_{33}	153(9)	164(11)	152(8)	164(10)	140(9)	187(10)	148(8)
	U_{eq}	119(4)	132(6)	123(3)	122(4)	122(5)	136(4)	118(3)

Refined anisotropic displacement parameters ($\times 10^4$)