

Table S5,2

U values for the colorless II form of NHP

atom	U11	U22	U33	U12	U13	U23
O (1)	0.036 (1)	0.067 (1)	0.025 (2)	-0.007 (1)	0.0057 (2)	0.075 (1)
O (2)	0.033 (1)	0.057 (2)	0.0039 (1)	0.013 (9)	0.025 (2)	-0.01000 (9)
O (3)	0.0355 (8)	0.063 (3)	0.029 (1)	-0.0037 (8)	-0.0103 (2)	0.0035 (8)
N (1)	0.030 (1)	0.050 (2)	0.025 (2)	-0.0012 (3)	0.0125 (3)	-0.005 (9)
C (1)	0.026 (1)	0.051 (3)	0.040 (1)	-0.009 (5)	0.008 (9)	0.005 (2)
C (2)	0.023 (1)	0.046 (1)	0.042 (3)	-0.003 (7)	0.017 (3)	0.001 (3)
C (3)	0.024 (1)	0.037 (1)	0.045 (1)	-0.0037 (9)	0.0147 (1)	-0.001 (2)
C (4)	0.047 (1)	0.034 (2)	0.041 (2)	-0.002 (9)	0.016 (9)	-0.001 (9)
C (5)	0.062 (1)	0.050 (1)	0.056 (3)	-0.003 (1)	0.031 (1)	-0.009 (3)
C (6)	0.051 (1)	0.054 (2)	0.080 (2)	0.002 (2)	0.035 (9)	-0.006 (1)
C (7)	0.035 (1)	0.047 (1)	0.071 (2)	0.002 (1)	0.018 (1)	0.002 (2)
C (8)	0.030 (2)	0.040 (3)	0.050 (3)	-0.0040 (8)	0.014 (9)	0.003 (1)
H (1)	0.10 (1)					
H (2)	0.04 (7)					
H (3)	0.008 (8)					
H (4)	0.054 (7)					
H (5)	0.049 (7)					