

[$\text{\AA}^2 \times 10^3$] for 2c. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	U(eq)
Si(11)	805(1)	5024(1)	4967(1)	49(1)
Si(12)	703(1)	3840(1)	3743(1)	74(1)
Si(21)	749(1)	914(1)	6706(1)	67(1)
Si(22)	832(1)	-85(1)	5510(1)	51(1)
O(11)	421(1)	6172(2)	4948(1)	61(1)
O(12)	522(1)	3716(2)	5046(1)	60(1)
O(21)	481(1)	1080(2)	5203(1)	61(1)
O(22)	476(1)	-1319(2)	5392(1)	68(1)
N(1)	974(1)	4847(2)	4327(1)	51(1)
N(2)	1068(1)	257(1)	6237(1)	50(1)
C(11)	1350(1)	5693(2)	4250(1)	53(1)
C(12)	1243(1)	6915(2)	4021(1)	59(1)
C(12A)	740(1)	7396(3)	3817(2)	83(1)
C(13)	1612(1)	7722(3)	3971(1)	74(1)
C(14)	2074(1)	7345(3)	4128(1)	85(1)
C(14A)	2465(2)	8238(5)	4062(2)	137(2)
C(15)	2168(1)	6128(4)	4335(1)	90(1)
C(16)	1822(1)	5282(3)	4405(1)	69(1)
C(16A)	1965(1)	3943(3)	4633(2)	102(1)
C(111)	1311(1)	5312(2)	5601(1)	70(1)
C(121)	890(1)	2137(3)	3892(2)	113(1)
C(122)	892(2)	4347(5)	3081(2)	144(2)
C(123)	46(1)	3921(4)	3609(2)	99(1)
C(21)	1558(1)	-65(2)	6506(1)	51(1)
C(22)	1673(1)	-1236(2)	6788(1)	62(1)
C(22A)	1299(1)	-2223(2)	6801(2)	91(1)
C(23)	2145(1)	-1487(3)	7067(1)	81(1)
C(24)	2502(1)	-633(3)	7067(1)	82(1)
C(24A)	3018(1)	-959(5)	7370(2)	131(1)
C(25)	2379(1)	502(3)	6779(1)	76(1)
C(26)	1915(1)	818(2)	6493(1)	59(1)
C(26A)	1811(1)	2089(3)	6181(1)	82(1)
C(211)	1304(1)	-436(3)	5147(1)	75(1)
C(221)	647(1)	2657(2)	6586(2)	98(1)
C(222)	171(1)	91(3)	6572(2)	104(1)
C(223)	1089(2)	701(4)	7482(1)	117(1)

Si(11)-O(12)	1.6336(18)	Si(11)-O(11)	1.6379(18)
Si(11)-N(1)	1.7140(18)	Si(11)-C(111)	1.837(2)
Si(12)-N(1)	1.7510(18)	Si(12)-C(122)	1.862(3)
Si(12)-C(121)	1.867(3)	Si(12)-C(123)	1.870(3)
Si(21)-N(2)	1.7586(18)	Si(21)-C(222)	1.852(3)
Si(21)-C(221)	1.854(3)	Si(21)-C(223)	1.855(3)
Si(22)-O(22)	1.636(2)	Si(22)-O(21)	1.6373(18)
Si(22)-N(2)	1.7125(18)	Si(22)-C(211)	1.840(2)
N(1)-C(11)	1.459(3)	N(2)-C(21)	1.451(3)
C(11)-C(12)	1.390(3)	C(11)-C(16)	1.402(3)
C(12)-C(13)	1.400(3)	C(12)-C(12A)	1.513(3)
C(13)-C(14)	1.364(4)	C(14)-C(15)	1.363(4)
C(14)-C(14A)	1.516(4)	C(15)-C(16)	1.387(4)
C(16)-C(16A)	1.517(4)	C(21)-C(22)	1.391(3)
C(21)-C(26)	1.400(3)	C(22)-C(23)	1.393(3)
C(22)-C(22A)	1.511(3)	C(23)-C(24)	1.373(4)
C(24)-C(25)	1.366(4)	C(24)-C(24A)	1.534(4)
C(25)-C(26)	1.393(3)	C(26)-C(26A)	1.509(3)
O(12)-Si(11)-O(11)	104.42(10)	O(12)-Si(11)-N(1)	106.32(9)
O(11)-Si(11)-N(1)	114.07(9)	O(12)-Si(11)-C(111)	111.79(12)
O(11)-Si(11)-C(111)	107.90(12)	N(1)-Si(11)-C(111)	112.13(11)
N(1)-Si(12)-C(122)	108.37(13)	N(1)-Si(12)-C(121)	111.84(13)
C(122)-Si(12)-C(121)	107.0(2)	N(1)-Si(12)-C(123)	110.10(12)
C(122)-Si(12)-C(123)	111.3(2)	C(121)-Si(12)-C(123)	108.22(18)
N(2)-Si(21)-C(222)	108.80(12)	N(2)-Si(21)-C(221)	112.23(12)
C(222)-Si(21)-C(221)	108.92(17)	N(2)-Si(21)-C(223)	109.59(14)
C(222)-Si(21)-C(223)	110.2(2)	C(221)-Si(21)-C(223)	107.05(19)
O(22)-Si(22)-O(21)	102.01(11)	O(22)-Si(22)-N(2)	114.06(10)
O(21)-Si(22)-N(2)	109.39(9)	O(22)-Si(22)-C(211)	106.77(13)
O(21)-Si(22)-C(211)	113.91(12)	N(2)-Si(22)-C(211)	110.52(11)
C(11)-N(1)-Si(11)	116.30(13)	C(11)-N(1)-Si(12)	118.01(14)
Si(11)-N(1)-Si(12)	125.48(10)	C(21)-N(2)-Si(22)	119.02(13)
C(21)-N(2)-Si(21)	116.28(14)	Si(22)-N(2)-Si(21)	124.64(10)
C(12)-C(11)-C(16)	119.4(2)	C(12)-C(11)-N(1)	120.1(2)
C(16)-C(11)-N(1)	120.5(2)	C(11)-C(12)-C(13)	118.9(2)
C(11)-C(12)-C(12A)	122.1(2)	C(13)-C(12)-C(12A)	119.0(2)
C(14)-C(13)-C(12)	122.5(3)	C(15)-C(14)-C(13)	117.5(3)
C(15)-C(14)-C(14A)	121.3(4)	C(13)-C(14)-C(14A)	121.2(4)
C(14)-C(15)-C(16)	123.3(3)	C(15)-C(16)-C(11)	118.5(3)
C(15)-C(16)-C(16A)	119.0(3)	C(11)-C(16)-C(16A)	122.5(3)
C(22)-C(21)-C(26)	119.9(2)	C(22)-C(21)-N(2)	120.2(2)
C(26)-C(21)-N(2)	119.9(2)	C(21)-C(22)-C(23)	118.7(2)
C(21)-C(22)-C(22A)	121.4(2)	C(23)-C(22)-C(22A)	119.9(2)
C(24)-C(23)-C(22)	122.7(3)	C(25)-C(24)-C(23)	117.4(3)
C(25)-C(24)-C(24A)	121.6(4)	C(23)-C(24)-C(24A)	121.0(3)
C(24)-C(25)-C(26)	122.9(3)	C(25)-C(26)-C(21)	118.4(2)
C(25)-C(26)-C(26A)	119.5(3)	C(21)-C(26)-C(26A)	122.1(2)

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Si(11)	49(1)	42(1)	60(1)	-3(1)	21(1)	-6(1)
Si(12)	81(1)	78(1)	68(1)	-19(1)	28(1)	-24(1)
Si(21)	62(1)	72(1)	68(1)	-16(1)	20(1)	2(1)
Si(22)	47(1)	45(1)	56(1)	-8(1)	2(1)	2(1)
O(11)	65(1)	39(1)	87(1)	-7(1)	35(1)	-5(1)
O(12)	57(1)	46(1)	82(1)	-1(1)	29(1)	-7(1)
O(21)	58(1)	42(1)	75(1)	0(1)	1(1)	-5(1)
O(22)	61(1)	47(1)	83(1)	-9(1)	-3(1)	-1(1)
N(1)	47(1)	52(1)	59(1)	-5(1)	22(1)	-10(1)
N(2)	41(1)	53(1)	52(1)	-6(1)	5(1)	3(1)
C(11)	48(2)	63(2)	52(2)	-5(1)	20(1)	-3(1)
C(12)	62(2)	66(2)	53(2)	-2(1)	22(1)	-10(1)
C(12A)	79(2)	81(2)	91(2)	27(2)	24(2)	7(2)
C(13)	95(3)	75(2)	61(2)	-6(1)	36(2)	-27(2)
C(14)	73(2)	115(3)	76(2)	-30(2)	35(2)	-48(2)
C(14A)	121(3)	182(5)	125(4)	-42(3)	63(3)	-97(3)
C(15)	50(2)	140(3)	85(2)	-20(2)	30(2)	-14(2)
C(16)	53(2)	90(2)	70(2)	-7(1)	27(2)	-3(2)
C(16A)	71(2)	112(2)	125(3)	8(2)	33(2)	31(2)
C(111)	69(2)	75(2)	66(2)	-8(1)	18(2)	-13(2)
C(121)	116(4)	81(2)	147(3)	-50(2)	45(3)	-14(2)
C(122)	199(5)	167(5)	81(3)	-49(3)	64(3)	-95(4)
C(123)	72(2)	109(3)	98(3)	-17(2)	-10(2)	-21(2)
C(21)	52(2)	58(1)	43(1)	-5(1)	9(1)	1(1)
C(22)	65(2)	64(2)	56(2)	7(1)	15(2)	9(1)
C(22A)	112(2)	62(2)	95(3)	12(2)	20(3)	-4(2)
C(23)	86(2)	88(2)	68(2)	24(2)	16(2)	32(2)
C(24)	60(2)	125(3)	59(2)	8(2)	9(2)	17(2)
C(24A)	66(2)	216(5)	95(3)	25(3)	-6(2)	38(2)
C(25)	57(2)	109(2)	57(2)	-6(2)	8(2)	-15(2)
C(26)	52(2)	74(2)	47(2)	-4(1)	6(1)	-2(1)
C(26A)	82(2)	71(2)	88(3)	9(2)	16(2)	-13(2)
C(211)	68(2)	88(2)	66(2)	-19(2)	12(2)	6(2)
C(221)	102(3)	76(2)	124(3)	-31(2)	46(3)	6(2)
C(222)	80(2)	94(3)	154(4)	-25(2)	58(3)	-4(2)
C(223)	130(4)	152(4)	70(2)	-17(2)	27(2)	32(3)

10³) for 2c.

	x	y	z	U(eq)
H(11)	462(9)	6723(16)	5073(10)	58(10)
H(21)	573(8)	1637(14)	5227(10)	42(9)
H(22)	251(5)	-1220(30)	5339(14)	82(13)
H(12A)	584	7282	4125	149(14)
H(12B)	574	6922	3476	157(16)
H(12C)	741	8288	3719	142(12)
H(13A)	1540	8546	3825	77(8)
H(14A)	2350	9104	4024	170(20)
H(14B)	2564	8005	3719	230(20)
H(14C)	2727	8170	4403	210(20)
H(15A)	2481	5852	4435	88(9)
H(16A)	2260	3980	4927	260(30)
H(16B)	1998	3408	4314	184(18)
H(16C)	1727	3593	4801	120(12)
H(11A)	1207	5297	5955	97(10)
H(11B)	1447	6133	5560	100(9)
H(11C)	1544	4656	5618	110(11)
H(12D)	1228	2087	3996	162(17)
H(12E)	763	1632	3547	151(13)
H(12F)	774	1817	4211	156(17)
H(12G)	768	5183	2960	157(19)
H(12H)	776	3747	2768	134(12)
H(12I)	1231	4372	3173	190(20)
H(12J)	-51	4800	3603	168(17)
H(12K)	-47	3476	3918	210(20)
H(12L)	-101	3527	3239	158(14)
H(22A)	1089	-2303	6416	126(13)
H(22B)	1125	-1960	7074	167(17)
H(22C)	1447	-3035	6921	111(10)
H(23A)	2222	-2265	7260	79(8)
H(24A)	3214	-722	7118	200(20)
H(24B)	3046	-1862	7447	180(20)
H(24C)	3115	-496	7733	182(19)
H(25A)	2616	1090	6774	75(8)
H(26A)	2101	2545	6214	160(14)
H(26B)	1607	2584	6357	141(14)
H(26C)	1658	1946	5774	156(15)
H(21A)	1168	-567	4734	143(13)
H(21B)	1470	-1195	5315	127(12)
H(21C)	1520	272	5202	112(11)
H(22D)	451	2801	6196	166(18)
H(22E)	944	3085	6631	106(11)
H(22F)	492	2987	6868	117(11)
H(22G)	221	-814	6626	112(11)
H(22H)	-10	257	6177	136(16)
H(22I)	3	404	6843	117(11)
H(22J)	1101	-193	7581	146(16)
H(22K)	937	1163	7734	174(16)
H(22L)	1404	1021	7532	190(20)

H(12)

306(6)

3800(20)

5064(12)

62(11)
