Table 1b. The fractional coordinates of the oxygen atoms ($\times 10^3$) and isotropic temperature factors (those from D11 down to U66 are equivalent temperature factors)

Site	Occupancy	x	y	z	B(Å^2)	Site	Occupancy	x	y	z	B(Å^2)
1A	0.5	990(3)	0	245(5)	4.2(8)	U95	0.32	212	0	681	1.3(3)
1B	0.5	988(3)	0	245(5)	4.2(8)	U96	0.32	141	189	627	1.3(3)
2A	0.5	038(3)	0	119(4)	3.8(11)	G91	0.045	140	050	584	1.3(3)
2B	0.5	052(3)	0	124(5)	3.8(11)	G92	0.045	133	−123	712	1.3(3)
3A	0.5	030(2)	0	599(3)	2.8(9)	G93	0.045	204	−123	655	1.3(3)
3B	0.5	038(2)	0	610(4)	2.8(9)	G94	0.045	175	197	706	1.3(3)
4A	0.5	−004(2)	0	753(3)	1.0(3)	D101	0.59	255	0	335	11(4)
4B	0.5	−005(2)	0	754(3)	1.0(3)	D102	0.59	268	0	480	2.7(8)
5A	0.5	372(2)	0	−077(3)	2.8(9)	D103	0.59	206	189	415	2.0(5)
5B	0.5	373(2)	0	−047(4)	2.8(9)	U104	0.41	212	0	487	6(3)
6A	0.5	329(3)	0	075(4)	4.1(8)	U105	0.41	283	0	430	2(1)
6B	0.5	331(3)	0	077(5)	4.1(8)	U106	0.41	221	189	365	3(1)
7A	0.5	289(2)	0	211(4)	2.7(7)	D111	0.57	444	0	175	5(2)
7B	0.5	289(2)	0	223(4)	2.7(7)	D112	0.57	372	0	233	3(1)
8A	0.5	362(1)	0	441(2)	0.8(3)	D113	0.57	435	189	298	3(1)
8B	0.5	362(1)	0	442(2)	0.8(3)	U114	0.43	399	0	327	5(2)
9A	0.5	325(1)	0	583(2)	0.1(4)	U115	0.43	382	0	193	5(2)
9B	0.5	334(1)	0	595(2)	0.1(4)	U116	0.43	450	189	257	2.3(8)
10A	0.5	282(1)	0	724(3)	1.4(5)	U124	0.43	478	0	080	6(1)
10B	0.5	293(2)	0	732(3)	1.4(5)	U125	0.43	550	0	022	6(1)
11A	0.5	666(1)	0	−093(2)	0.5(4)	U126	0.43	487	189	−043	6(1)
11B	0.5	675(1)	0	−081(2)	0.5(4)	G121	0.285	478	050	−075	6(1)
12A	0.5	627(2)	0	049(3)	1.5(6)	G122	0.285	466	−123	040	6(1)
12B	0.5	634(2)	0	067(3)	1.5(6)	G123	0.285	542	−123	−004	6(1)
13A	0.5	706(2)	0	285(4)	2.6(6)	G124	0.285	513	197	047	6(1)
13B	0.5	704(2)	0	290(4)	2.6(6)	D131	0.37	520	0	425	3.4(6)
14A	0.5	648(2)	0	421(3)	2.1(7)	D132	0.37	448	0	483	3.4(6)
14B	0.5	655(2)	0	414(3)	2.1(7)	D133	0.37	511	189	547	3.4(6)
15A	0.5	608(1)	0	564(3)	1.5(6)	G131	0.315	520	050	580	3.4(6)
15B	0.5	622(2)	0	567(3)	1.5(6)	G132	0.315	526	−128	451	3.4(6)
16A	0.5	705(1)	0	763(3)	1.4(5)	G133	0.315	456	−123	508	3.4(6)
16B	0.5	709(2)	0	771(3)	1.4(5)	G134	0.315	481	197	463	3.4(6)
[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]	[redacted]
17A	0.5	949(2)	0	376(3)	1.5(6)	D141	0.37	591	0	169	16(9)
17B	0.5	957(2)	0	401(3)	1.5(6)	D142	0.37	602	0	212	12(7)
		-0-								-0-	
		057(2)								312	