

Table 5. Atom coordinates and displacement parameters (\AA^2) for fluorwavellite.

	x/a	y/b	z/c	U_{eq}	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Al1	0.22360(8)	0.25	0.12424(10)	0.0108(2)	0.0126(4)	0.0105(4)	0.0093(4)	0	-0.0004(3)	0
Al2	0.75614(5)	0.01608(3)	0.14135(7)	0.00850(18)	0.0090(3)	0.0102(3)	0.0064(3)	0.00031(17)	0.00018(19)	-0.00012(18)
P1	0.06047(4)	0.09249(2)	0.10416(6)	0.00804(18)	0.0083(3)	0.0083(3)	0.0076(3)	-0.00026(13)	-0.00008(15)	-0.00016(15)
O1	0.90414(12)	0.08341(7)	0.06432(18)	0.0110(3)	0.0091(6)	0.0140(6)	0.0099(6)	0.0015(5)	-0.0017(5)	-0.0012(4)
O2	0.08825(13)	0.17679(7)	0.15583(19)	0.0148(3)	0.0159(6)	0.0103(6)	0.0183(7)	-0.0041(5)	0.0045(5)	-0.0031(5)
O3	0.10072(12)	0.04175(7)	0.27410(18)	0.0129(3)	0.0115(6)	0.0173(6)	0.0099(6)	0.0036(5)	0.0011(5)	0.0032(5)
O4	0.35889(13)	0.07249(7)	0.42095(17)	0.0108(3)	0.0126(6)	0.0117(5)	0.0080(6)	0.0004(4)	-0.0016(5)	-0.0014(5)
F5	0.27950(19)	0.25	0.3695(2)	0.0197(6)	0.0246(10)	0.0243(10)	0.0101(9)	0	-0.0043(6)	0
O6	0.82046(14)	0.01765(7)	0.39498(16)	0.0106(5)	0.0067(7)	0.0176(7)	0.0075(7)	0.0000(4)	0.0008(4)	-0.0008(5)
H6	0.905(2)	0.0253(14)	0.398(3)	0.016						
O7	0.36874(15)	0.17072(9)	0.0972(2)	0.0228(3)	0.0213(7)	0.0241(7)	0.0230(8)	-0.0042(5)	-0.0021(6)	0.0052(6)
H71	0.372(3)	0.1362(13)	0.198(3)	0.027						
H72	0.379(3)	0.1436(14)	0.008(3)	0.027						
O8	0.65089(14)	0.11053(8)	0.1977(2)	0.0151(3)	0.0181(7)	0.0156(6)	0.0115(6)	0.0022(5)	0.0035(5)	0.0025(5)
H81	0.640(3)	0.1065(13)	0.309(3)	0.018						
H82	0.689(2)	0.1507(12)	0.173(3)	0.018						
O9	0.8088(8)	0.25	0.229(3)	0.053(4)	0.037(3)	0.036(3)	0.086(12)	0	0.015(4)	0
O10	0.7814(14)	0.25	0.107(3)	0.057(4)	0.077(6)	0.025(3)	0.069(10)	0	0.028(6)	0
Refined occupancies: F5/O5 = 0.90/0.10(5); O6/F6 = 1.00/0.00(3); O9/O10 = 0.49/0.51(3)										