

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

	Occ.	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{eq}}/U_{\text{iso}}$	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
V1	1	0.33174(3)	0.07076(2)	0.07076(2)	0.0151(2)	0.0189(5)	0.0132(3)	0.0132(3)	0.0019(3)	0.0010(2)	0.0010(2)
V2	1	0.33163(3)	0.17757(2)	0.07243(2)	0.0145(2)	0.0168(4)	0.0134(3)	0.0134(3)	0.0001(3)	0.0009(2)	-0.0009(2)
P/As	0.880/0.120(4)	0.37518(2)	0.12482(2)	0	0.0133(3)	0.0142(4)	0.0142(4)	0.0114(5)	0.0018(3)	0.0018(3)	0.0000(5)
O1	1	0.37541(9)	0.16469(7)	0.02906(7)	0.0179(5)	0.0200(12)	0.0175(12)	0.0162(11)	0.0006(9)	0.0023(11)	-0.0018(12)
O2	1	0.37495(9)	0.08414(7)	0.02705(8)	0.0196(5)	0.0198(12)	0.0195(12)	0.0196(12)	0.0028(9)	0.0048(12)	0.0013(12)
O3	1	0.31158(7)	0.12438(8)	0.06488(7)	0.0164(5)	0.0178(11)	0.0143(11)	0.0170(12)	0.0006(10)	0.0009(9)	-0.0009(10)
O4	1	0.29787(13)	0.04376(8)	0.04376(8)	0.0259(9)	0.031(2)	0.0232(13)	0.0232(13)	-0.0031(17)	-0.0002(12)	-0.0002(12)
O5	1	0.29835(12)	0.20441(8)	0.04559(8)	0.0214(8)	0.025(2)	0.0194(12)	0.0194(12)	0.0026(15)	-0.0014(11)	0.0014(11)
Na	1.08(2)	0.25	0.25	0	0.0238(17)	0.0238(17)	0.0238(17)	0.0238(17)	-0.0037(12)	-0.0037(12)	-0.0037(12)
N1/K1	0.748/0.252(10)	0.24853(8)	0.12237(12)	0.00147(8)	0.0453(15)	0.0341(15)	0.068(3)	0.0341(15)	0.0090(13)	-0.0065(13)	-0.0090(13)
N2/K2	0.753/0.247(13)	0.23666(15)	0.125	0.125	0.0382(18)	0.041(3)	0.037(2)	0.037(2)	-0.004(2)	0	0
Cl1	0.977(11)	0.19256(5)	0.19256(5)	0.05744(5)	0.0327(10)	0.0327(10)	0.0327(10)	0.0327(10)	-0.0020(7)	-0.0020(7)	0.0020(7)
Cl2	0.989(11)	0.18890(5)	0.06110(5)	0.06110(5)	0.0331(9)	0.0331(9)	0.0331(9)	0.0331(9)	0.0051(7)	-0.0051(7)	-0.0051(7)
Cl3	0.765(12)	0.39002(13)	0.125	0.125	0.0419(13)	0.050(3)	0.0376(12)	0.0376(12)	0.0048(14)	0	0
X1	1.23(3)	0.4587(3)	0.1927(2)	0.0573(2)	0.126(5)	0.071(6)	0.154(7)	0.154(7)	-0.046(7)	-0.019(5)	0.019(5)
X2	0.42(4)	0.3752(6)	-0.0552(5)	-0.0552(5)	0.066(9)	0.055(12)	0.071(11)	0.071(11)	0.042(10)	0.024(8)	0.024(8)
X3	1.30(8)	0.4569(11)	0.0486(16)	0.0486(16)	0.79(6)	0.22(3)	1.07(9)	1.07(9)	0.88(9)	0.24(4)	0.24(4)
X4	0.55(4)	0.4194(7)	0.0225(4)	0.0225(4)	0.085(10)	0.119(17)	0.067(9)	0.067(9)	0.034(9)	0.050(9)	0.050(9)
X5	0.91(5)	0.3741(8)	-0.0134(6)	-0.0134(6)	0.248(19)	0.25(3)	0.25(2)	0.25(2)	0.00(2)	0.052(16)	0.052(16)
X6	0.32(3)	0.4210(8)	0.125	0.125	0.039(10)	0.014(16)	0.052(12)	0.052(12)	0.010(14)	0	0
X7	0.30(3)	0.4413(6)	0.1006(6)	0.1006(6)	0.063(11)	0.014(11)	0.088(15)	0.088(15)	-0.005(15)	0.004(7)	0.004(7)
X8	0.83(6)	0.381(6)	-0.0535(11)	-0.099(6)	0.66(14)	1.0(4)	0.43(4)	0.53(12)	0.18(6)	-0.26(15)	0.13(6)
X9	0.42(4)	0.2630(10)	-0.0130(10)	-0.0130(10)	0.11(2)	0.11(2)	0.11(2)	0.11(2)	0.10(2)	-0.10(2)	-0.10(2)
X10	0.29(6)	0.4142(9)	-0.0858(9)	-0.0858(9)	0.07(2)	0.07(2)	0.07(2)	0.07(2)	0.003(16)	0.003(16)	0.003(16)
X11	0.10(3)	0.375	-0.104(2)	-0.125	0.04(3)	0.04(3)	0.03(4)	0.04(3)	0	0.00(3)	0
X12	0.09(3)	0.4364(17)	0.0692(12)	0.0692(12)	0.018(19)						