

Table 43A-11-001. K₂Zn₂(SO₄)₃. Fractional atomic coordinates and temperature parameters U_{ij} [$\cdot 10^{-2} \text{ \AA}^2$] [96Mor]. The parameters U_{ij} are defined by Eq. (d) in Introduction. Parameter: T .(a) $T = 264 \text{ K}$

Atom	x	y	z	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Zn(1)	0.33454(8)	0.33454(8)	0.33454(8)	1.14(3)	1.14(3)	1.14(3)	-0.13(2)	-0.13(2)	-0.13(2)
Zn(2)	0.59348(9)	0.59348(9)	0.59348(9)	1.18(3)	1.18(3)	1.18(3)	-0.02(2)	-0.02(2)	-0.02(2)
K(1)	0.81468(19)	0.81468(19)	0.81468(19)	2.04(6)	2.04(6)	2.04(6)	-0.15(5)	-0.15(5)	-0.15(5)
K(2)	0.04927(21)	0.04927(21)	0.04927(21)	2.20(6)	2.20(6)	2.20(6)	0.02(6)	0.02(6)	0.02(6)
S	0.21836(6)	0.37586(5)	0.01777(5)	0.83(2)	0.82(2)	0.87(2)	0.13(1)	0.01(1)	0.07(1)
O(1)	0.30935(23)	0.27447(25)	0.96024(30)	1.96(9)	2.46(10)	3.84(14)	1.15(8)	-0.14(9)	-1.49(10)
O(2)	0.07825(21)	0.32922(23)	0.00347(25)	1.06(6)	2.56(10)	3.14(11)	-0.46(7)	0.02(7)	-0.16(8)
O(3)	0.24085(32)	0.50053(29)	0.94129(31)	3.24(12)	2.69(11)	4.26(16)	0.32(10)	0.60(12)	2.43(12)
O(4)	0.25100(27)	0.40568(30)	0.15880(22)	2.85(10)	3.83(13)	1.39(8)	0.64(10)	-1.01(8)	-0.70(9)

(b) $T = 134 \text{ K}$

Atom	x	y	z	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Zn(1)	0.33481(9)	0.33481(9)	0.33481(9)	0.82(3)	0.82(3)	0.82(3)	-0.14(2)	-0.14(2)	-0.14(2)
Zn(2)	0.59350(10)	0.59350(10)	0.59350(10)	0.86(3)	0.86(3)	0.86(3)	0.00(3)	0.00(3)	0.00(3)
K(1)	0.81450(19)	0.81450(19)	0.81450(19)	1.37(5)	1.37(5)	1.37(5)	-0.12(5)	-0.12(5)	-0.12(5)
K(2)	0.04949(20)	0.04949(20)	0.04949(20)	1.49(5)	1.49(5)	1.49(5)	0.01(6)	0.01(6)	0.01(6)
S	0.21856(6)	0.37590(6)	0.01790(6)	0.54(2)	0.61(2)	0.59(2)	0.11(2)	0.03(2)	0.04(2)
O(1)	0.30986(25)	0.27435(28)	0.96028(33)	1.56(9)	2.27(11)	3.30(14)	1.16(9)	-0.37(9)	-1.62(11)
O(2)	0.07838(23)	0.32975(26)	0.00136(29)	0.78(7)	2.07(10)	3.11(12)	-0.45(7)	0.11(8)	-1.10(10)
O(3)	0.24189(37)	0.50140(33)	0.94258(37)	2.86(13)	2.36(12)	4.30(18)	0.21(11)	0.44(14)	2.60(13)
O(4)	0.24968(32)	0.40510(35)	0.15959(26)	2.76(12)	3.67(15)	1.24(8)	0.75(12)	-1.05(9)	-0.87(10)

Table 43A-11-002. K₂Zn₂(SO₄)₃. Fractional atomic coordinates and temperature parameters U_{iso} [$\cdot 10^{-2} \text{ \AA}^2$] of the O atoms calculated from the 7-site O atom model [96Mor]. $U_{\text{iso}} = (U_{11} + U_{22} + U_{33})/3$, where U_{ij} are defined by Eq. (d) in Introduction.

O(1)				O(2)			
x	y	z	U_{iso}	x	y	z	U_{iso}
0.289(1)	0.252(2)	0.972(2)	0.3(2)	0.073(3)	0.342(7)	0.010(4)	0.5(7)
0.327(2)	0.290(2)	0.958(3)	0.5(4)	0.073(2)	0.344(5)	-0.006(8)	0.1(4)
0.316(4)	0.260(4)	0.977(4)	1.8(8)	0.089(2)	0.307(2)	0.048(2)	1.4(3)
0.312(2)	0.293(2)	0.933(2)	0.5(2)	0.079(7)	0.333(7)	-0.018(4)	0.9(6)
0.309(2)	0.273(3)	0.978(3)	0.0(3)	0.082(3)	0.317(3)	0.019(3)	0.4(4)
0.301(3)	0.272(4)	0.946(4)	0.6(6)	0.075(4)	0.322(5)	0.001(8)	0.2(5)
0.311(4)	0.276(4)	0.958(5)	-0.1(4)	0.086(4)	0.327(5)	-0.007(9)	0.4(5)
O(3)				O(4)			
x	y	z	U_{iso}	x	y	z	U_{iso}
0.230(2)	0.513(2)	0.957(4)	0.4(3)	0.252(2)	0.367(2)	0.159(2)	1.4(3)
0.262(2)	0.497(2)	0.938(3)	0.6(3)	0.234(2)	0.411(2)	0.158(2)	-0.3(2)
0.202(1)	0.484(1)	0.923(1)	1.0(2)	0.235(2)	0.387(3)	0.168(2)	0.4(2)
0.249(5)	0.514(3)	0.967(3)	0.9(5)	0.285(1)	0.420(2)	0.146(1)	1.2(3)
0.247(2)	0.478(2)	0.914(2)	1.3(3)	0.258(2)	0.397(2)	0.156(1)	-0.3(2)
0.237(2)	0.497(2)	0.933(2)	-0.3(2)	0.258(2)	0.428(1)	0.149(1)	0.1(2)
0.248(8)	0.511(4)	0.954(5)	0.8(6)	0.244(2)	0.413(2)	0.176(2)	0.5(3)