

S3b: Fractional atomic coordinates and mean-square atomic displacement parameters for the hydrogen atoms.

Atom	Fractional atomic coordinates			Mean-square atomic displacement parameters [\AA^2]					
	x/a	y/b	z/c	$U11$	$U22$	$U33$	$U12$	$U13$	$U23$
H(2a)	0.229000	0.335210	0.287310	0.067080	0.164801	0.034814	-0.003406	0.009672	0.021281
H(2b)	0.163710	0.278590	0.168450	0.047008	0.081276	0.079196	-0.016445	0.010400	0.003484
H(2c)	0.171690	0.452050	0.194260	0.055653	0.081146	0.087919	0.021593	0.022022	-0.000689
H(3a)	0.450260	0.461780	0.306060	0.094991	0.081263	0.031538	-0.016757	-0.015509	0.007878
H(3b)	0.411360	0.594320	0.220820	0.096174	0.044382	0.054717	-0.000286	-0.001248	-0.011193
H(3c)	0.536830	0.498040	0.202810	0.044499	0.086294	0.065182	-0.020605	-0.005018	0.001261
H(4a)	0.442330	0.182190	0.254950	0.099086	0.069472	0.050050	0.012987	-0.013806	0.023413
H(4b)	0.520350	0.197010	0.141910	0.045786	0.070382	0.088751	0.020397	0.000429	0.008541
H(4c)	0.388230	0.111860	0.135300	0.082173	0.035113	0.085800	0.000611	-0.016757	0.001105
H(5a)	0.239740	0.230740	-0.272890	0.116987	0.079859	0.050388	-0.007358	-0.007397	-0.027638
H(5b)	0.311180	0.383330	-0.258120	0.106028	0.134680	0.057291	-0.066417	-0.019838	0.035802
H(5c)	0.170370	0.370720	-0.226310	0.083603	0.146861	0.055549	0.055107	-0.017472	-0.000637
H(6a)	0.173660	0.063050	-0.099050	0.073671	0.050557	0.077285	-0.022880	0.006214	-0.026130
H(6b)	0.106420	0.196770	-0.036710	0.036673	0.054730	0.118404	0.001027	0.019331	0.002782
H(6c)	0.210030	0.099030	0.034400	0.074074	0.062699	0.066157	-0.017563	-0.000026	0.016354
H(7a)	0.402480	0.062230	-0.150680	0.057889	0.054730	0.122005	-0.000741	0.003042	-0.051857
H(7b)	0.475150	0.117940	-0.034470	0.066599	0.079599	0.070369	0.035776	-0.007059	0.001885
H(7c)	0.494710	0.199020	-0.154600	0.050544	0.063453	0.088972	0.002964	0.027404	-0.011037
H(12)	0.114500	0.433840	-0.068030	0.031213	0.032019	0.090012	-0.005473	-0.010699	-0.004979
H(13)	0.001910	0.644630	-0.080100	0.024466	0.051389	0.091546	0.004589	-0.011609	0.003991
H(14)	0.097350	0.865670	-0.026700	0.042510	0.033111	0.073983	0.015418	0.003081	0.003926
H(15)	0.304520	0.859320	0.031140	0.041054	0.028977	0.069667	-0.003393	-0.006409	-0.008476