

Supplementary Material

Table: Structural distortion modes for the average and the superstructure of of NaPrF₄ at ambient conditions.

Displacive Mode Amplitudes	As	Ap
GM1	5.154(18)	2.103(8)
GM2	0.682(13)	0.278(5)
A1	0.374(18)	0.153(7)
A2	0.162(14)	0.066(6)
H1H1	0.104(12)	0.043(5)
H2H2	0.104(12)	0.043(5)
H3H3	0.144(11)	0.059(4)
H4H4	0.454(20)	0.186(8)
H5H5	0.0000(4)	0.00000(18)
K1K1	0.030(7)	0.012(3)
K2K2	0.030(8)	0.012(3)
K3K3	0.16(2)	0.065(10)
K4K4	0.090(12)	0.037(5)
K6K6	0.0000(4)	0.00000(18)
Occupancy Mode Amplitudes	As	Ap
GM1	0.205(9)	0.084(4)
GM2	1.73205	0.70711
A1	0.00000	0.00000
A2	0.231(9)	0.094(4)
H6H6	0.510(7)	0.208(3)
K5K5	0.346(7)	0.141(3)

Detailed Analysis

Parent structure (174 P-6)

a=6.12980, b=6.12990, c=3.74950, alpha=90.00000, beta=90.00000, gamma=120.00050

atom	site	x	y	z	occ
Pr1	1a	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000
Na1	2h	0.33333	0.66667	-0.33000	0.50000
Pr2	1f	0.66667	0.33333	0.50000	0.50000
Na2	1f	0.66667	0.33333	0.50000	0.50000
F1	3j	-0.36660	0.04090	0.00000	1.00000
F2	3k	-0.26730	-0.24480	0.50000	1.00000

Subgroup details

143 P3, basis={(1,-1,0),(1,2,0),(0,0,2)}, origin=(1/3,2/3,0), s=6, i=12

Undistorted superstructure (143 P3)

a=10.61724, b=10.61724, c=7.49900, alpha=90.00000, beta=90.00000, gamma=120.00106

atom	site	x	y	z	occ	displ
Pr1a	3d	0.66667	0.00000	0.00000	1.00000	0.00000

Pr1b 3d	0.66667	0.00000	0.50000	1.00000	0.00000
Na1a 3d	0.66667	0.66667	0.16743	0.50000	0.00000
Na1b 3d	0.66667	0.66667	0.66743	0.50000	0.00000
Na1c 3d	0.00000	0.33333	0.83743	0.50000	0.00000
Na1d 3d	0.00000	0.33333	0.33743	0.50000	0.00000
Pr2e 1a	0.00000	0.00000	0.25912	0.50000	0.00000
Pr2f 1a	0.00000	0.00000	0.75912	0.50000	0.00000
Pr2c 1b	0.33333	0.66667	0.25912	0.50000	0.00000
Pr2d 1b	0.33333	0.66667	0.75912	0.50000	0.00000
Pr2a 1c	0.66667	0.33333	0.25912	0.50000	0.00000
Pr2b 1c	0.66667	0.33333	0.75912	0.50000	0.00000
Na2e 1a	0.00000	0.00000	0.25912	0.50000	0.00000
Na2f 1a	0.00000	0.00000	0.75912	0.50000	0.00000
Na2c 1b	0.33333	0.66667	0.25912	0.50000	0.00000
Na2d 1b	0.33333	0.66667	0.75912	0.50000	0.00000
Na2a 1c	0.66667	0.33333	0.25912	0.50000	0.00000
Na2b 1c	0.66667	0.33333	0.75912	0.50000	0.00000
F1a 3d	0.74197	0.55810	0.00000	1.00000	0.00000
F1b 3d	0.74197	0.55810	0.50000	1.00000	0.00000
F1e 3d	0.07530	0.22477	0.00000	1.00000	0.00000
F1f 3d	0.07530	0.22477	0.50000	1.00000	0.00000
F1c 3d	0.40863	0.89143	0.00000	1.00000	0.00000
F1d 3d	0.40863	0.89143	0.50000	1.00000	0.00000
F2a 3d	0.50403	0.40743	0.25000	1.00000	0.00000
F2b 3d	0.50403	0.40743	0.75000	1.00000	0.00000
F2e 3d	0.83737	0.07410	0.25000	1.00000	0.00000
F2f 3d	0.83737	0.07410	0.75000	1.00000	0.00000
F2c 3d	0.17070	0.74077	0.25000	1.00000	0.00000
F2d 3d	0.17070	0.74077	0.75000	1.00000	0.00000

Distorted superstructure (143 P3)

Coordinates of Na2f were set to x=y=0 for the analysis.

a=10.61703, b=10.61703, c=7.49900, alpha=90.00000, beta=90.00000,
gamma=120.00106

atom site	x	y	z	occ	displ
Pr1a 3d	0.66873(6)	0.00030(11)	0.00000	1.00000	0.0205(8)
Pr1b 3d	0.66477(7)	-0.00023(11)	0.50000	1.00000	0.0190(9)
Na1a 3d	0.6612(7)	0.6621(7)	0.1682(11)	1.00000	0.054(5)
Na1b 3d	0.6742(6)	0.6695(6)	0.6683(11)	1.00000	0.070(6)
Na1c 3d	0.0000(7)	0.3333(7)	0.8366(11)	0.00000	0.006(6)
Na1d 3d	0.0000(6)	0.3333(6)	0.3366(11)	0.00000	0.006(5)
Pr2e 1a	0.00000	0.00000	0.25912(4)	0.50000	0.0000(3)
Pr2f 1a	0.00000	0.00000	0.75912	0.50000	0.00000
Pr2c 1b	0.33333	0.66667	0.25912(4)	0.50000	0.0000(3)
Pr2d 1b	0.33333	0.66667	0.75912	0.50000	0.00000
Pr2a 1c	0.66667	0.33333	0.25912(4)	0.50000	0.0000(3)
Pr2b 1c	0.66667	0.33333	0.75912(4)	0.50000	0.0000(3)
Na2e 1a	0.00000	0.00000	0.25912	0.50000	0.00000
Na2f 1a	0.00000	0.00000	0.75912	0.50000	0.00000
Na2c 1b	0.33333	0.66667	0.25912(4)	0.50000	0.0000(3)
Na2d 1b	0.33333	0.66667	0.75912	0.50000	0.00000
Na2a 1c	0.66667	0.33333	0.25912(4)	0.50000	0.0000(3)
Na2b 1c	0.66667	0.33333	0.75912	0.50000	0.00000
F1a 3d	0.7463(7)	0.5251(7)	0.0078(9)	1.00000	0.380(9)
F1b 3d	0.7400(6)	0.5144(6)	0.5295(10)	1.00000	0.505(7)
F1e 3d	0.0767(6)	0.1886(6)	0.0294(9)	1.00000	0.449(7)
F1f 3d	0.0722(7)	0.1776(6)	0.5177(7)	1.00000	0.503(7)
F1c 3d	0.4157(7)	0.8587(7)	0.0073(9)	1.00000	0.395(9)
F1d 3d	0.4033(6)	0.8461(6)	0.5273(10)	1.00000	0.500(7)
F2a 3d	0.5028(8)	0.4286(8)	0.2562(14)	1.00000	0.237(10)
F2b 3d	0.5068(8)	0.4326(8)	0.7588(15)	1.00000	0.262(9)
F2e 3d	0.8383(8)	0.1001(8)	0.2637(14)	1.00000	0.290(10)
F2f 3d	0.8335(7)	0.0891(7)	0.7550(13)	1.00000	0.187(9)

F2c	3d	0.1687(8)	0.7605(8)	0.2580(14)	1.00000	0.229(10)
F2d	3d	0.1732(8)	0.7652(8)	0.7571(14)	1.00000	0.253(9)

For displacive and occupational mode definitions

Displacive mode definitions

atom	x	y	z	dx	dy	dz
P-6[0,0,0]GM1(a)[Na1:h]A(a) normfactor = 0.03850						
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	0.0000	0.0000	-1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	0.0000	0.0000	-1.0000
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	0.0000	0.0000	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[0,0,0]GM1(a)[F1:j]A'_1(a) normfactor = 0.02220						
F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000

P-6[0,0,0]GM1(a)[F1:j]A'_2(a) normfactor = 0.02563						
F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000

P-6[0,0,0]GM1(a)[F2:k]A'_1(a) normfactor = 0.02220						
F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000

P-6[0,0,0]GM1(a)[F2:k]A'_2(a) normfactor = 0.02563						
F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[Pr1:a]A''(a) normfactor = 0.05444						
Pr1a	0.66667	0.00000	0.00000	0.0000	0.0000	1.0000
Pr1b	0.66667	0.00000	0.50000	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[Na1:h]A(a) normfactor = 0.03850						
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	0.0000	0.0000	1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	0.0000	0.0000	1.0000
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	0.0000	0.0000	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[Pr2:f]A''(a) normfactor = 0.05444						
Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[Na2:f]A''(a) normfactor = 0.05444
Na2e 0.00000 0.00000 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2f 0.00000 0.00000 0.75912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2c 0.33333 0.66667 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2d 0.33333 0.66667 0.75912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2a 0.66667 0.33333 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2b 0.66667 0.33333 0.75912 0.0000 0.0000 1.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[F1:j]A''(a) normfactor = 0.03143
F1a 0.74197 0.55810 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1b 0.74197 0.55810 0.50000 0.0000 0.0000 1.0000
F1e 0.07530 0.22477 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1f 0.07530 0.22477 0.50000 0.0000 0.0000 1.0000
F1c 0.40863 0.89143 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1d 0.40863 0.89143 0.50000 0.0000 0.0000 1.0000

P-6[0,0,0]GM2(a)[F2:k]A''(a) normfactor = 0.03143
F2a 0.50403 0.40743 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2b 0.50403 0.40743 0.75000 0.0000 0.0000 1.0000
F2e 0.83737 0.07410 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2f 0.83737 0.07410 0.75000 0.0000 0.0000 1.0000
F2c 0.17070 0.74077 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2d 0.17070 0.74077 0.75000 0.0000 0.0000 1.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[Na1:h]A(a) normfactor = 0.03850
Na1a 0.66667 0.66667 0.16743 0.0000 0.0000 -1.0000
Na1b 0.66667 0.66667 0.66743 0.0000 0.0000 1.0000
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 0.0000 0.0000 1.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[Pr2:f]A''(a) normfactor = 0.05444
Pr2e 0.00000 0.00000 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Pr2f 0.00000 0.00000 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000
Pr2c 0.33333 0.66667 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Pr2d 0.33333 0.66667 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000
Pr2a 0.66667 0.33333 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Pr2b 0.66667 0.33333 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[Na2:f]A''(a) normfactor = 0.05444
Na2e 0.00000 0.00000 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2f 0.00000 0.00000 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000
Na2c 0.33333 0.66667 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2d 0.33333 0.66667 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000
Na2a 0.66667 0.33333 0.25912 0.0000 0.0000 1.0000
Na2b 0.66667 0.33333 0.75912 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[F1:j]A'_1(a) normfactor = 0.02220
F1a 0.74197 0.55810 0.00000 1.0000 1.0000 0.0000
F1b 0.74197 0.55810 0.50000 -1.0000 -1.0000 0.0000
F1e 0.07530 0.22477 0.00000 1.0000 1.0000 0.0000
F1f 0.07530 0.22477 0.50000 -1.0000 -1.0000 0.0000
F1c 0.40863 0.89143 0.00000 1.0000 1.0000 0.0000
F1d 0.40863 0.89143 0.50000 -1.0000 -1.0000 0.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[F1:j]A'_2(a) normfactor = 0.02563
F1a 0.74197 0.55810 0.00000 1.0000 0.5000 0.0000
F1b 0.74197 0.55810 0.50000 -1.0000 -0.5000 0.0000
F1e 0.07530 0.22477 0.00000 1.0000 0.5000 0.0000
F1f 0.07530 0.22477 0.50000 -1.0000 -0.5000 0.0000
F1c 0.40863 0.89143 0.00000 1.0000 0.5000 0.0000
F1d 0.40863 0.89143 0.50000 -1.0000 -0.5000 0.0000

P-6[0,0,1/2]A1(a)[F2:k]A''(a) normfactor = 0.03143
F2a 0.50403 0.40743 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2b 0.50403 0.40743 0.75000 0.0000 0.0000 -1.0000
F2e 0.83737 0.07410 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2f 0.83737 0.07410 0.75000 0.0000 0.0000 -1.0000
F2c 0.17070 0.74077 0.25000 0.0000 0.0000 1.0000
F2d 0.17070 0.74077 0.75000 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[Pr1:a]A''(a) normfactor = 0.05444
Pr1a 0.66667 0.00000 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
Pr1b 0.66667 0.00000 0.50000 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[Na1:h]A(a) normfactor = 0.03850
Na1a 0.66667 0.66667 0.16743 0.0000 0.0000 1.0000
Na1b 0.66667 0.66667 0.66743 0.0000 0.0000 -1.0000
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 0.0000 0.0000 1.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[F1:j]A''(a) normfactor = 0.03143
F1a 0.74197 0.55810 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1b 0.74197 0.55810 0.50000 0.0000 0.0000 -1.0000
F1e 0.07530 0.22477 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1f 0.07530 0.22477 0.50000 0.0000 0.0000 -1.0000
F1c 0.40863 0.89143 0.00000 0.0000 0.0000 1.0000
F1d 0.40863 0.89143 0.50000 0.0000 0.0000 -1.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[F2:k]A'_1(a) normfactor = 0.02220
F2a 0.50403 0.40743 0.25000 -1.0000 0.0000 0.0000
F2b 0.50403 0.40743 0.75000 1.0000 0.0000 0.0000
F2e 0.83737 0.07410 0.25000 -1.0000 0.0000 0.0000
F2f 0.83737 0.07410 0.75000 1.0000 0.0000 0.0000
F2c 0.17070 0.74077 0.25000 -1.0000 0.0000 0.0000
F2d 0.17070 0.74077 0.75000 1.0000 0.0000 0.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[F2:k]A'_2(a) normfactor = 0.02563
F2a 0.50403 0.40743 0.25000 -0.5000 0.5000 0.0000
F2b 0.50403 0.40743 0.75000 0.5000 -0.5000 0.0000
F2e 0.83737 0.07410 0.25000 -0.5000 0.5000 0.0000
F2f 0.83737 0.07410 0.75000 0.5000 -0.5000 0.0000
F2c 0.17070 0.74077 0.25000 -0.5000 0.5000 0.0000
F2d 0.17070 0.74077 0.75000 0.5000 -0.5000 0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H1H1(a,b)[Na1:h]E*(a) normfactor = 0.03140
Na1a 0.66667 0.66667 0.16743 -0.5000 0.5000 0.0000
Na1b 0.66667 0.66667 0.66743 0.5000 -0.5000 0.0000
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 1.0000 0.5000 0.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 -1.0000 -0.5000 0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H1H1(a,b)[Na1:h]E*(b) normfactor = 0.02719
Na1a 0.66667 0.66667 0.16743 -1.0000 -1.0000 0.0000
Na1b 0.66667 0.66667 0.66743 1.0000 1.0000 0.0000
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 0.0000 1.0000 0.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 0.0000 -1.0000 0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H2H2(a,b)[Na1:h]E*(a) normfactor = 0.03140
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 1.0000 0.5000 0.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 -1.0000 -0.5000 0.0000
Na1a 0.66667 0.66667 0.16743 0.5000 -0.5000 0.0000
Na1b 0.66667 0.66667 0.66743 -0.5000 0.5000 0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H2H2(a,b)[Na1:h]E*(b) normfactor = 0.02719
Na1c 0.00000 0.33333 0.83743 0.0000 1.0000 0.0000
Na1d 0.00000 0.33333 0.33743 0.0000 -1.0000 0.0000

Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	1.0000	1.0000	0.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	-1.0000	-1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[Pr1:a]E'*(a) normfactor = 0.04440

Pr1a	0.66667	0.00000	0.00000	-0.5000	-1.0000	0.0000
Pr1b	0.66667	0.00000	0.50000	0.5000	1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[Pr1:a]E'*(b) normfactor = 0.03845

Pr1a	0.66667	0.00000	0.00000	-1.0000	0.0000	0.0000
Pr1b	0.66667	0.00000	0.50000	1.0000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F1:j]A'_1(a) normfactor = 0.03140

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	-1.0000	-1.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	-0.5000	-0.5000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.5000	0.5000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-0.5000	-0.5000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.5000	0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F1:j]A'_1(b) normfactor = 0.02719

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	-1.0000	-1.0000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-1.0000	-1.0000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F1:j]A'_2(a) normfactor = 0.03625

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	-1.0000	-0.5000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	-0.5000	-0.2500	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.5000	0.2500	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-0.5000	-0.2500	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.5000	0.2500	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F1:j]A'_2(b) normfactor = 0.03140

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	-1.0000	-0.5000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-1.0000	-0.5000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F2:k]A''(a) normfactor = 0.04445

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	1.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	-1.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.0000	0.0000	-0.5000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.0000	0.0000	0.5000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.0000	0.0000	-0.5000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.0000	0.0000	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H3H3(a,b)[F2:k]A''(b) normfactor = 0.03850

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.0000	0.0000	1.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.0000	0.0000	-1.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.0000	0.0000	-1.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F1:j]A''(a) normfactor = 0.04445

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	1.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	-1.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	0.0000	0.0000	-0.5000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.0000	0.0000	0.5000

F1c	0.40863	0.89143	0.00000	0.0000	0.0000	-0.5000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.0000	0.0000	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F1:j]A''(b) normfactor = 0.03850

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	0.0000	0.0000	1.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.0000	0.0000	-1.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	0.0000	0.0000	-1.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F2:k]A'_1(a) normfactor = 0.03140

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	1.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.5000	0.0000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-0.5000	0.0000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.5000	0.0000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-0.5000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F2:k]A'_1(b) normfactor = 0.02719

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	1.0000	0.0000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	1.0000	0.0000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F2:k]A'_2(a) normfactor = 0.03625

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.5000	-0.5000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.2500	-0.2500	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-0.2500	0.2500	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.2500	-0.2500	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-0.2500	0.2500	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H4H4(a,b)[F2:k]A'_2(b) normfactor = 0.03140

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.5000	-0.5000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.5000	-0.5000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H5H5(a,b)[Pr2:f]A''(a) normfactor = 0.07699

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	0.5000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H5H5(a,b)[Pr2:f]A''(b) normfactor = 0.06668

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	0.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	0.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H5H5(a,b)[Na2:f]A''(a) normfactor = 0.07699

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	0.5000

Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H5H5(a,b)[Na2:f]A'(b) normfactor = 0.06668

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	0.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	0.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-1.0000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K1K1(a,b)[Na1:h]E*(a) normfactor = 0.03140

Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	-0.5000	0.5000	0.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	-0.5000	0.5000	0.0000
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000	0.5000	0.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	1.0000	0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K1K1(a,b)[Na1:h]E*(b) normfactor = 0.02719

Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	-1.0000	-1.0000	0.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	-1.0000	-1.0000	0.0000
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	0.0000	1.0000	0.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	0.0000	1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K2K2(a,b)[Na1:h]E*(a) normfactor = 0.03140

Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000	0.5000	0.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	1.0000	0.5000	0.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	0.5000	-0.5000	0.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	0.5000	-0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K2K2(a,b)[Na1:h]E*(b) normfactor = 0.02719

Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	0.0000	1.0000	0.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	0.0000	1.0000	0.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	1.0000	1.0000	0.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	1.0000	1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[Pr1:a]E*(a) normfactor = 0.04440

Pr1a	0.66667	0.00000	0.00000	-0.5000	-1.0000	0.0000
Pr1b	0.66667	0.00000	0.50000	-0.5000	-1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[Pr1:a]E*(b) normfactor = 0.03845

Pr1a	0.66667	0.00000	0.00000	-1.0000	0.0000	0.0000
Pr1b	0.66667	0.00000	0.50000	-1.0000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F1:j]A'_1(a) normfactor = 0.03140

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	-0.5000	-0.5000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	-0.5000	-0.5000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-0.5000	-0.5000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	-0.5000	-0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F1:j]A'_1(b) normfactor = 0.02719

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	1.0000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	1.0000	1.0000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-1.0000	-1.0000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	-1.0000	-1.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F1:j]A'_2(a) normfactor = 0.03625

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000

F1e	0.07530	0.22477	0.00000	-0.5000	-0.2500	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	-0.5000	-0.2500	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-0.5000	-0.2500	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	-0.5000	-0.2500	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F1:j]A'_2(b) normfactor = 0.03140

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	1.0000	0.5000	0.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	1.0000	0.5000	0.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	-1.0000	-0.5000	0.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	-1.0000	-0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F2:k]A'_1(a) normfactor = 0.03140

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.5000	0.0000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.5000	0.0000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.5000	0.0000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.5000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F2:k]A'_1(b) normfactor = 0.02719

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-1.0000	0.0000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	1.0000	0.0000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	1.0000	0.0000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F2:k]A'_2(a) normfactor = 0.03625

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.2500	-0.2500	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.2500	-0.2500	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.2500	-0.2500	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.2500	-0.2500	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K3K3(a,b)[F2:k]A'_2(b) normfactor = 0.03140

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	-0.5000	0.5000	0.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.5000	-0.5000	0.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.5000	-0.5000	0.0000

P-6[1/3,1/3,0]K4K4(a,b)[F1:j]A''(a) normfactor = 0.04445

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	1.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	1.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	0.0000	0.0000	-0.5000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.0000	0.0000	-0.5000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	0.0000	0.0000	-0.5000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.0000	0.0000	-0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K4K4(a,b)[F1:j]A''(b) normfactor = 0.03850

F1a	0.74197	0.55810	0.00000	0.0000	0.0000	0.0000
F1b	0.74197	0.55810	0.50000	0.0000	0.0000	0.0000
F1e	0.07530	0.22477	0.00000	0.0000	0.0000	1.0000
F1f	0.07530	0.22477	0.50000	0.0000	0.0000	1.0000
F1c	0.40863	0.89143	0.00000	0.0000	0.0000	-1.0000
F1d	0.40863	0.89143	0.50000	0.0000	0.0000	-1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K4K4(a,b)[F2:k]A''(a) normfactor = 0.04445

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	1.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	1.0000

F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.0000	0.0000	-0.5000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.0000	0.0000	-0.5000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.0000	0.0000	-0.5000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.0000	0.0000	-0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K4K4(a,b)[F2:k]A''(b) normfactor = 0.03850

F2a	0.50403	0.40743	0.25000	0.0000	0.0000	0.0000
F2b	0.50403	0.40743	0.75000	0.0000	0.0000	0.0000
F2e	0.83737	0.07410	0.25000	0.0000	0.0000	1.0000
F2f	0.83737	0.07410	0.75000	0.0000	0.0000	1.0000
F2c	0.17070	0.74077	0.25000	0.0000	0.0000	-1.0000
F2d	0.17070	0.74077	0.75000	0.0000	0.0000	-1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K6K6(a,b)[Pr2:f]A''(a) normfactor = 0.07699

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	-0.5000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	-0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K6K6(a,b)[Pr2:f]A''(b) normfactor = 0.06668

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	0.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	0.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K6K6(a,b)[Na2:f]A''(a) normfactor = 0.07699

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	-0.5000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-0.5000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	-0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K6K6(a,b)[Na2:f]A''(b) normfactor = 0.06668

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000	0.0000	0.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000	0.0000	0.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.0000	0.0000	1.0000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	0.0000	0.0000	-1.0000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.0000	0.0000	-1.0000

Displacive mode amplitudes

mode	As	Ap	dmax
GM1[Na1:h]A(a)	-0.021(14)	-0.009(6)	0.006(4)
GM1[F1:j]A'_1(a)	-3.592(18)	-1.466(7)	0.847(4)
GM1[F1:j]A'_2(a)	3.126(17)	1.276(7)	0.737(4)
GM1[F2:k]A'_1(a)	-0.98(3)	-0.400(12)	0.231(7)
GM1[F2:k]A'_2(a)	1.71(2)	0.698(8)	0.403(5)
GM1 all	5.154(18)	2.103(8)	
GM2[Pr1:a]A''(a)	0.00000	0.00000	0.00000
GM2[Na1:h]A(a)	0.000(14)	0.000(6)	0.00000
GM2[Pr2:f]A''(a)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
GM2[Na2:f]A''(a)	0.00000(17)	0.00000(7)	0.00000
GM2[F1:j]A''(a)	0.631(12)	0.258(5)	0.149(3)
GM2[F2:k]A''(a)	0.259(18)	0.106(7)	0.061(4)
GM2 all	0.682(13)	0.278(5)	

A1[Na1:h]A(a)	0.001(14)	0.000(6)	0.000(4)
A1[Pr2:f]A''(a)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
A1[Na2:f]A''(a)	0.00000(17)	0.00000(7)	0.00000
A1[F1:j]A'_1(a)	0.342(18)	0.140(7)	0.081(4)
A1[F1:j]A'_2(a)	-0.146(17)	-0.060(7)	0.034(4)
A1[F2:k]A''(a)	0.037(18)	0.015(7)	0.009(4)
A1 all	0.374(18)	0.153(7)	
A2[Pr1:a]A''(a)	0.00000	0.00000	0.00000
A2[Na1:h]A(a)	-0.001(14)	0.000(6)	0.000(3)
A2[F1:j]A''(a)	-0.159(12)	-0.065(5)	0.037(3)
A2[F2:k]A'_1(a)	0.01(3)	0.004(12)	0.002(7)
A2[F2:k]A'_2(a)	0.03(2)	0.012(8)	0.007(5)
A2 all	0.162(14)	0.066(6)	
H1H1[Na1:h]E*(a)	0.045(7)	0.018(3)	0.013(2)
H1H1[Na1:h]E*(b)	0.094(13)	0.038(5)	0.027(4)
H1H1 all	0.104(12)	0.043(5)	
H2H2[Na1:h]E*(a)	-0.045(7)	-0.018(3)	0.013(2)
H2H2[Na1:h]E*(b)	-0.094(13)	-0.038(5)	0.027(4)
H2H2 all	0.104(12)	0.043(5)	
H3H3[Pr1:a]E''*(a)	-0.0060(18)	-0.0024(7)	0.0024(7)
H3H3[Pr1:a]E''*(b)	-0.0480(13)	-0.0196(5)	0.0196(5)
H3H3[F1:j]A'_1(a)	0.00(2)	0.000(8)	0.00000
H3H3[F1:j]A'_1(b)	0.044(12)	0.018(5)	0.013(3)
H3H3[F1:j]A'_2(a)	-0.02(2)	-0.008(8)	0.007(7)
H3H3[F1:j]A'_2(b)	-0.1019(16)	-0.0416(7)	0.0294(5)
H3H3[F2:k]A''(a)	-0.055(19)	-0.022(8)	0.018(6)
H3H3[F2:k]A''(b)	0.051(18)	0.021(7)	0.015(5)
H3H3 all	0.144(11)	0.059(4)	
H4H4[F1:j]A''(a)	-0.132(12)	-0.054(5)	0.044(4)
H4H4[F1:j]A''(b)	0.206(11)	0.084(4)	0.059(3)
H4H4[F2:k]A'_1(a)	0.12(3)	0.049(12)	0.040(10)
H4H4[F2:k]A'_1(b)	-0.23(2)	-0.094(8)	0.066(6)
H4H4[F2:k]A'_2(a)	-0.13(3)	-0.053(12)	0.043(10)
H4H4[F2:k]A'_2(b)	0.25(2)	0.102(8)	0.072(6)
H4H4 all	0.454(20)	0.186(8)	
H5H5[Pr2:f]A''(a)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
H5H5[Pr2:f]A''(b)	0.0000(3)	0.00000(12)	0.00000
H5H5[Na2:f]A''(a)	0.00000(12)	0.00000(5)	0.00000
H5H5[Na2:f]A''(b)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
H5H5 all	0.0000(4)	0.00000(18)	
K1K1[Na1:h]E*(a)	-0.030(7)	-0.012(3)	0.009(2)
K1K1[Na1:h]E*(b)	-0.002(13)	-0.001(5)	0.001(3)
K1K1 all	0.030(7)	0.012(3)	
K2K2[Na1:h]E*(a)	0.030(7)	0.012(3)	0.009(2)
K2K2[Na1:h]E*(b)	0.001(13)	0.000(5)	0.000(4)
K2K2 all	0.030(8)	0.012(3)	
K3K3[Pr1:a]E''*(a)	-0.0008(18)	-0.0003(7)	0.00033(8)
K3K3[Pr1:a]E''*(b)	-0.0017(13)	-0.0007(5)	0.0007(5)
K3K3[F1:j]A'_1(a)	0.06(2)	0.024(8)	0.020(7)
K3K3[F1:j]A'_1(b)	-0.063(12)	-0.026(5)	0.018(3)
K3K3[F1:j]A'_2(a)	-0.03(2)	-0.012(8)	0.010(7)
K3K3[F1:j]A'_2(b)	0.0276(16)	0.0113(7)	0.0080(5)
K3K3[F2:k]A'_1(a)	-0.07(3)	-0.029(12)	0.023(10)
K3K3[F2:k]A'_1(b)	0.06(2)	0.024(8)	0.017(6)
K3K3[F2:k]A'_2(a)	0.07(3)	0.029(12)	0.023(10)

K3K3[F2:k]A'_2(b)	-0.05(2)	-0.020(8)	0.014(6)
K3K3 all	0.16(2)	0.065(10)	
K4K4[F1:j]A''(a)	-0.027(12)	-0.011(5)	0.009(4)
K4K4[F1:j]A''(b)	0.081(11)	0.033(4)	0.023(3)
K4K4[F2:k]A''(a)	-0.014(19)	-0.006(8)	0.005(3)
K4K4[F2:k]A''(b)	0.023(18)	0.009(7)	0.007(5)
K4K4 all	0.090(12)	0.037(5)	
K6K6[Pr2:f]A''(a)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
K6K6[Pr2:f]A''(b)	0.0000(3)	0.00000(12)	0.00000
K6K6[Na2:f]A''(a)	0.00000(12)	0.00000(5)	0.00000
K6K6[Na2:f]A''(b)	0.0000(2)	0.00000(8)	0.00000
K6K6 all	0.0000(4)	0.00000(18)	

Occupancy mode definitions

atom	x	y	z	occ
P-6[0,0,0]GM1(a)[Na1:h]order(a) normfactor = 0.28868				
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	1.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	1.0000
P-6[0,0,0]GM2(a)[Na1:h]order(a) normfactor = 0.28868				
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	1.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	-1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	-1.0000
P-6[0,0,1/2]A1(a)[Na1:h]order(a) normfactor = 0.28868				
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	-1.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	-1.0000
P-6[0,0,1/2]A2(a)[Na1:h]order(a) normfactor = 0.28868				
Na1c	0.00000	0.33333	0.83743	1.0000
Na1d	0.00000	0.33333	0.33743	-1.0000
Na1a	0.66667	0.66667	0.16743	-1.0000
Na1b	0.66667	0.66667	0.66743	1.0000
P-6[0,0,0]GM1(a)[Pr2:f]order(a) normfactor = 0.40825				
Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	1.0000
P-6[0,0,0]GM1(a)[Na2:f]order(a) normfactor = 0.40825				
Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	1.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	1.0000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	1.0000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	1.0000
P-6[0,0,1/2]A2(a)[Pr2:f]order(a) normfactor = 0.40825				
Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	-1.0000

Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	-1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	-1.0000

P-6[0,0,1/2]A2(a)[Na2:f]order(a) normfactor = 0.40825

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	-1.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	-1.0000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	1.0000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	-1.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H6H6(a,b)[Pr2:f]order(a) normfactor = 0.57735

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	-1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	-0.5000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.5000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	-0.5000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H6H6(a,b)[Pr2:f]order(b) normfactor = 0.50000

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	-1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	-1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	1.0000

P-6[1/3,1/3,1/2]H6H6(a,b)[Na2:f]order(a) normfactor = 0.57735

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	-1.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	-0.5000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	0.5000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	-0.5000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	0.5000

P-6[1/3,1/3,1/2]H6H6(a,b)[Na2:f]order(b) normfactor = 0.50000

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000
Na2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Na2d	0.33333	0.66667	0.75912	-1.0000
Na2a	0.66667	0.33333	0.25912	-1.0000
Na2b	0.66667	0.33333	0.75912	1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K5K5(a,b)[Pr2:f]order(a) normfactor = 0.57735

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	1.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	-0.5000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	-0.5000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	-0.5000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	-0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K5K5(a,b)[Pr2:f]order(b) normfactor = 0.50000

Pr2e	0.00000	0.00000	0.25912	0.0000
Pr2f	0.00000	0.00000	0.75912	0.0000
Pr2c	0.33333	0.66667	0.25912	1.0000
Pr2d	0.33333	0.66667	0.75912	1.0000
Pr2a	0.66667	0.33333	0.25912	-1.0000
Pr2b	0.66667	0.33333	0.75912	-1.0000

P-6[1/3,1/3,0]K5K5(a,b)[Na2:f]order(a) normfactor = 0.57735

Na2e	0.00000	0.00000	0.25912	1.0000
Na2f	0.00000	0.00000	0.75912	1.0000

Na2c 0.33333 0.66667 0.25912 -0.5000
Na2d 0.33333 0.66667 0.75912 -0.5000
Na2a 0.66667 0.33333 0.25912 -0.5000
Na2b 0.66667 0.33333 0.75912 -0.5000

P-6[1/3,1/3,0]K5K5(a,b)[Na2:f]order(b) normfactor = 0.50000

Na2e 0.00000 0.00000 0.25912 0.0000
Na2f 0.00000 0.00000 0.75912 0.0000
Na2c 0.33333 0.66667 0.25912 1.0000
Na2d 0.33333 0.66667 0.75912 1.0000
Na2a 0.66667 0.33333 0.25912 -1.0000
Na2b 0.66667 0.33333 0.75912 -1.0000

Occupancy mode amplitudes

mode	As	Ap	omax
GM1[Na1:h]order(a)	0.00000	0.00000	0.00000
GM1[Pr2:f]order(a)	0.010(9)	0.004(4)	0.004(4)
GM1[Na2:f]order(a)	-0.205(9)	-0.084(4)	0.084(4)
GM1 all	0.205(9)	0.084(4)	
GM2[Na1:h]order(a)	-1.73205	-0.70711	0.50000
GM2 all	1.73205	0.70711	
A1[Na1:h]order(a)	0.00000	0.00000	0.00000
A1 all	0.00000	0.00000	
A2[Pr2:f]order(a)	-0.033(9)	-0.013(4)	0.013(4)
A2[Na2:f]order(a)	0.229(9)	0.093(4)	0.093(4)
A2[Na1:h]order(a)	0.00000	0.00000	0.00000
A2 all	0.231(9)	0.094(4)	
H6H6[Pr2:f]order(a)	0.471(7)	0.192(3)	0.272(4)
H6H6[Pr2:f]order(b)	-0.014(11)	-0.006(4)	0.007(5)
H6H6[Na2:f]order(a)	-0.195(7)	-0.080(3)	0.113(4)
H6H6[Na2:f]order(b)	0.014(11)	0.006(4)	0.007(5)
H6H6 all	0.510(7)	0.208(3)	
K5K5[Pr2:f]order(a)	0.064(7)	0.026(3)	0.037(4)
K5K5[Pr2:f]order(b)	-0.002(11)	-0.001(4)	0.001(5)
K5K5[Na2:f]order(a)	-0.340(7)	-0.139(3)	0.196(4)
K5K5[Na2:f]order(b)	0.001(11)	0.000(4)	0.001(5)
K5K5 all	0.346(7)	0.141(3)	