

Table 7 (deposited) Anisotropic displacement parameters of non-H atoms at 1.0 GPa, 2.0 GPa, 3.0 GPa, 4.0 GPa (1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup>, 3<sup>rd</sup>, 4<sup>th</sup> lines downwards)

	U <sub>11</sub>	U <sub>22</sub>	U <sub>33</sub>	U <sub>23</sub>	U <sub>13</sub>	U <sub>12</sub>
O1	0.051(6)	0.0438(14)	0.050(2)	-0.0182(13)	-0.011(4)	0.0029(16)
	0.035(5)	0.0370(12)	0.0412(17)	-0.0150(11)	-0.006(3)	0.0024(13)
	0.034(5)	0.0349(11)	0.0380(16)	-0.0149(10)	-0.004(3)	0.0041(13)
	0.034(6)	0.0294(13)	0.0327(18)	-0.0113(10)	-0.004(3)	0.0023(16)
C1	0.026(8)	0.0294(16)	0.031(3)	0.0013(15)	0.006(4)	0.001(2)
	0.019(6)	0.0262(15)	0.022(2)	0.0006(13)	0.007(4)	-0.0019(18)
	0.034(6)	0.0214(14)	0.024(2)	0.0022(13)	-0.003(3)	0.0003(16)
	0.023(7)	0.0187(14)	0.019(2)	0.0026(13)	0.006(4)	-0.0009(19)
C2	0.032(8)	0.0347(16)	0.044(3)	-0.0017(15)	-0.006(5)	0.0117(19)
	0.016(6)	0.0283(14)	0.032(2)	-0.0003(13)	0.006(4)	0.0082(16)
	0.017(6)	0.0267(13)	0.031(2)	-0.0012(12)	0.006(4)	0.0053(15)
	0.010(7)	0.0219(13)	0.025(2)	0.0021(13)	0.012(4)	0.0068(16)
C3	0.026(8)	0.0375(17)	0.030(3)	-0.0029(17)	-0.001(4)	0.008(2)
	0.042(7)	0.0280(15)	0.032(2)	0.0021(14)	-0.015(4)	0.0064(18)
	0.035(6)	0.0262(14)	0.029(2)	0.0026(13)	-0.010(3)	0.0065(17)
	0.032(7)	0.0216(14)	0.023(2)	0.0050(14)	-0.007(4)	0.000(2)
C4	0.018(8)	0.0265(15)	0.026(3)	0.0056(15)	0.006(5)	-0.002(2)
	0.013(6)	0.0206(13)	0.016(2)	0.0034(12)	0.011(4)	-0.0026(18)
	0.019(6)	0.0189(12)	0.015(2)	0.0058(11)	0.006(3)	-0.0049(16)
	0.016(7)	0.0180(13)	0.016(2)	0.0016(13)	0.006(4)	0.0010(19)
C5	0.012(8)	0.0331(17)	0.032(3)	0.0048(14)	0.010(5)	0.0076(17)
	0.027(6)	0.0258(14)	0.028(2)	0.0047(13)	-0.002(4)	0.0025(16)
	0.025(6)	0.0229(14)	0.025(2)	0.0058(12)	0.001(4)	0.0009(14)
	0.018(7)	0.0222(13)	0.018(2)	0.0030(12)	0.008(4)	0.0012(17)
C6	0.024(8)	0.0372(19)	0.033(3)	0.0022(16)	-0.004(5)	0.000(2)
	0.003(6)	0.0299(16)	0.024(2)	0.0005(14)	0.003(4)	0.0022(17)
	0.007(6)	0.0264(13)	0.024(2)	0.0056(13)	0.004(3)	-0.0011(16)
	0.021(7)	0.0213(14)	0.021(2)	0.0030(13)	0.000(4)	0.0012(18)
N1	0.028(8)	0.0338(17)	0.032(3)	-0.0014(13)	-0.003(5)	0.002(2)
	0.009(6)	0.0298(14)	0.022(2)	0.0016(12)	0.004(3)	-0.0010(17)
	0.012(5)	0.0281(13)	0.0219(19)	0.0000(11)	0.003(3)	0.0014(16)
	0.023(6)	0.0242(13)	0.022(2)	0.0015(11)	-0.005(4)	0.0002(17)
C7	0.011(11)	0.031(2)	0.034(4)	0.0048(18)	0.015(6)	0.005(3)
	0.029(8)	0.0215(17)	0.039(3)	0.0003(16)	0.000(4)	0.005(2)
	0.031(7)	0.0214(15)	0.033(3)	0.0046(14)	-0.002(4)	0.002(2)
	0.035(8)	0.0175(15)	0.027(3)	0.0072(14)	-0.002(5)	0.002(2)
O2	0.028(8)	0.0685(17)	0.045(3)	-0.0022(13)	0.006(4)	0.005(2)
	0.016(6)	0.0530(14)	0.043(2)	-0.0003(11)	0.007(3)	0.0040(15)
	0.013(5)	0.0493(12)	0.0351(17)	0.0010(10)	0.011(3)	0.0036(13)
	0.024(6)	0.0369(12)	0.0311(18)	0.0018(10)	0.003(3)	0.0037(14)
C8	0.082(9)	0.0418(17)	0.043(3)	-0.0113(16)	-0.002(5)	0.004(2)
	0.057(7)	0.0314(13)	0.033(2)	-0.0047(13)	0.004(4)	0.0009(19)
	0.071(6)	0.0264(12)	0.034(2)	-0.0036(12)	-0.005(4)	0.0038(18)
	0.054(8)	0.0231(14)	0.027(2)	-0.0027(12)	-0.001(4)	0.0017(18)