

Table 2: Atomic coordinates ($\times 10^5$) and displacement parameters (Ch1, Ch2: $\text{\AA}^2 \times 10^3$, all other positions: $\text{\AA}^2 \times 10^5$) for untreated samples. U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor. The exponent of the anisotropic displacement factor takes on the form: $-2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$

1997-1 SE-India												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33743(2)	0	25000	625(11)	522(14)	607(14)	745(15)	-8(9)	0	0	0.992(2)Mg	0.008(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25015(3)	553(8)	656(11)	502(11)	499(11)	0	0	136(7)	0.991(2)Al	0.009(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	448(5)	371(10)	561(11)	412(11)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19266(1)	7779(2)	0	405(4)	428(8)	351(8)	436(8)	0	0	28(6)	Si	
T ₂ 3	13516(1)	-23754(2)	0	414(4)	377(8)	421(8)	444(8)	0	0	-59(6)	Si	
T ₂ 6	5091(1)	30795(3)	0	440(4)	358(9)	488(9)	472(9)	0	0	51(7)	Al	
O ₁ 1	24743(3)	-10271(4)	35880(5)	722(7)	886(15)	655(14)	625(15)	-107(12)	279(13)	-73(11)	O	
O ₁ 6	6242(2)	-41629(4)	34900(5)	711(7)	573(14)	903(15)	657(15)	-312(12)	20(12)	-88(11)	O	
O ₁ 3	-17328(3)	-31056(4)	35852(5)	731(7)	789(14)	773(15)	630(15)	-221(13)	-202(12)	127(11)	O	
O ₂ 6	4309(4)	-24797(7)	0	1146(11)	437(21)	1486(27)	1515(28)	0	0	-198(18)	O	
O ₂ 1	12243(4)	18464(7)	0	1089(11)	839(22)	916(23)	1514(28)	0	0	508(18)	O	
O ₂ 3	16455(4)	-7972(6)	0	1064(10)	1244(25)	471(21)	1477(27)	0	0	-266(18)	O	
Ch1	0	0	25000	193(11)	362(29)	134(12)	84(8)	0	0	0	0.54(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	29(7)	17(8)	25(9)	46(13)	0	0	3(6)	0.044(5)Na	
126231 Tanzania												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33736(2)	0	25000	639(10)	543(13)	592(13)	782(14)	-16(9)	0	0	0.917(2)Mg	0.083(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25020(3)	585(9)	694(12)	534(12)	529(12)	0	0	145(8)	0.985(2)Al	0.015(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	492(10)	428(14)	596(14)	450(15)	0	0	0	0.992(3)Si	0.008(3)Fe
T ₂ 1	19258(1)	7786(2)	0	421(4)	451(8)	355(8)	457(9)	0	0	25(7)	Si	
T ₂ 3	13513(1)	-23727(2)	0	435(5)	395(9)	443(9)	467(9)	0	0	-55(7)	Si	
T ₂ 6	5091(2)	30800(3)	0	453(5)	388(10)	489(10)	481(10)	0	0	46(8)	Al	
O ₁ 1	24727(3)	-10284(5)	35879(5)	783(7)	980(17)	692(16)	676(17)	-96(14)	322(14)	-46(13)	O	
O ₁ 6	6223(3)	-41618(5)	34898(5)	748(7)	634(16)	913(17)	696(17)	-314(14)	27(13)	-72(13)	O	
O ₁ 3	-17310(3)	-31010(5)	35851(5)	800(8)	805(16)	859(17)	735(18)	-240(15)	-190(14)	131(13)	O	
O ₂ 6	4303(4)	-24727(8)	0	1158(12)	442(23)	1468(30)	1565(31)	0	0	-236(21)	O	
O ₂ 1	12227(4)	18445(8)	0	1156(12)	934(26)	969(26)	1564(31)	0	0	528(21)	O	
O ₂ 3	16444(4)	-7961(7)	0	1104(12)	1240(28)	450(23)	1620(31)	0	0	-292(21)	O	
Ch1	0	0	25000	161(14)							0.38(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	38(5)	38(7)	22(5)	53(9)	0	0	0(4)	0.084(7)Na	
Ch1c	0	0	25000	31(3)							0.192(12)C	
Ch1x	5953(102)	0	25000	82(6)							0.192(12)O	
Zimbabwe												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33745(2)	0	25000	657(11)	575(14)	559(14)	837(15)	-9(9)	0	0	0.876(3)Mg	0.124(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25012(4)	600(10)	738(13)	503(13)	560(14)	0	0	127(8)	0.982(3)Al	0.018(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	470(6)	434(12)	526(13)	448(13)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19236(2)	7792(3)	0	428(5)	476(9)	317(9)	492(10)	0	0	15(7)	Si	
T ₂ 3	13511(2)	-23720(3)	0	436(5)	416(9)	385(9)	506(10)	0	0	-64(7)	Si	
T ₂ 6	5075(2)	30775(3)	0	453(5)	416(11)	446(11)	496(11)	0	0	45(8)	Al	
O ₁ 1	24702(3)	-10287(5)	35867(6)	782(8)	1023(18)	631(17)	693(18)	-113(15)	305(16)	-84(14)	O	
O ₁ 6	6219(3)	-41604(5)	34894(6)	748(8)	687(17)	863(18)	695(19)	-318(15)	19(15)	-100(14)	O	
O ₁ 3	-17324(3)	-30991(5)	35840(6)	773(8)	830(17)	791(18)	700(19)	-236(16)	-196(15)	123(14)	O	
O ₂ 6	4317(4)	-24805(9)	0	1142(13)	459(25)	1426(32)	1542(34)	0	0	-204(23)	O	
O ₂ 1	12222(5)	18444(8)	0	1126(13)	924(28)	928(29)	1526(34)	0	0	504(23)	O	
O ₂ 3	16426(5)	-7955(8)	0	1093(13)	1268(30)	471(26)	1542(33)	0	0	-320(22)	O	
Ch1	0	0	25000	161(13)	298(34)	133(16)	52(8)	0	0	0	0.39(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	25(6)	21(8)	10(7)	44(12)	0	0	-3(5)	0.052(6)Na	

Table 2: continued

1960728, Orijarvi, Finland												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33750(2)	0	25000	647(10)	534(13)	578(13)	830(14)	-6(10)	0	0	0.802(3)Mg	0.198(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25009(4)	589(10)	701(14)	551(14)	516(14)	0	0	129(9)	0.986(3)Al	0.014(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	483(6)	427(13)	568(14)	456(14)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19217(2)	7803(3)	0	431(5)	448(10)	364(10)	481(11)	0	0	34(8)	Si	
T ₂ 3	13511(2)	-23680(3)	0	436(5)	385(10)	446(10)	477(11)	0	0	-62(8)	Si	
T ₂ 6	5062(2)	30761(3)	0	460(6)	390(12)	473(12)	518(12)	0	0	48(9)	Al	
O ₁ 1	24680(3)	-10308(6)	35863(6)	768(9)	961(19)	668(19)	675(20)	-109(16)	306(17)	-57(15)	O	
O ₁ 6	6207(3)	-41588(6)	34889(6)	767(9)	641(18)	900(20)	759(21)	-326(17)	53(16)	-123(16)	O	
O ₁ 3	-17331(3)	-30949(6)	35834(6)	768(9)	797(19)	850(20)	659(21)	-213(18)	-186(16)	141(15)	O	
O ₂ 6	4329(5)	-24819(10)	0	1161(15)	400(27)	1531(36)	1552(37)	0	0	-219(25)	O	
O ₂ 1	12211(5)	18473(9)	0	1148(14)	873(30)	923(31)	1647(39)	0	0	520(25)	O	
O ₂ 3	16429(5)	-7925(9)	0	1124(14)	1282(34)	443(28)	1646(38)	0	0	-260(24)	O	
Ch1	0	0	25000	246(19)	599(55)	94(10)	45(6)	0	0	0	0.50(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	39(10)	27(13)	32(14)	58(21)	0	0	7(10)	0.046(7)Na	
85131, Mt Bity, Madagaskar												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33746(1)	0	25000	652(8)	541(10)	571(10)	843(11)	-3(6)	0	0	0.807(2)Mg	0.193(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25009(3)	610(8)	722(11)	557(11)	550(11)	0	0	132(6)	0.981(2)Al	0.019(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	498(9)	449(12)	574(13)	469(13)	0	0	0	0.992(3)Si	0.008(3)Fe
T ₂ 1	19213(1)	7807(2)	0	426(4)	444(7)	343(7)	491(8)	0	0	22(5)	Si	
T ₂ 3	13511(1)	-23686(2)	0	433(4)	378(7)	431(7)	491(8)	0	0	-60(5)	Si	
T ₂ 6	5064(1)	30764(2)	0	455(4)	384(8)	477(8)	503(9)	0	0	57(6)	Al	
O ₁ 1	24677(2)	-10308(4)	35865(5)	781(6)	994(14)	659(13)	690(14)	-100(11)	318(12)	-61(10)	O	
O ₁ 6	6208(2)	-41594(4)	34889(4)	768(6)	671(13)	907(14)	725(14)	-338(11)	34(11)	-127(10)	O	
O ₁ 3	-17326(2)	-30947(4)	35835(5)	776(6)	818(14)	812(13)	699(15)	-238(12)	-207(11)	133(10)	O	
O ₂ 6	4321(4)	-24788(7)	0	1167(10)	412(20)	1461(23)	1629(27)	0	0	-206(16)	O	
O ₂ 1	12197(4)	18448(6)	0	1145(10)	902(22)	926(21)	1608(27)	0	0	543(17)	O	
O ₂ 3	16417(4)	-7919(6)	0	1105(10)	1252(24)	480(19)	1581(26)	0	0	-288(16)	O	
Ch1	0	0	25000	195(11)	359(28)	154(12)	71(7)	0	0	0	0.55(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	37(6)	51(11)	16(6)	44(11)	0	0	-1(5)	0.056(6)Na	
NH1, Madagaskar												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33744(2)	0	25000	655(9)	548(12)	601(12)	816(13)	-14(8)	0	0	0.732(3)Mg	0.268(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25015(4)	567(10)	681(14)	526(14)	492(14)	0	0	115(9)	0.996(3)Al	0.004(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	492(12)	451(16)	577(17)	449(17)	0	0	0	0.994(4)Si	0.006(4)Fe
T ₂ 1	19203(2)	7828(3)	0	418(5)	443(10)	332(10)	478(11)	0	0	23(8)	Si	
T ₂ 3	13514(2)	-23655(3)	0	430(5)	383(10)	442(10)	467(11)	0	0	-68(8)	Si	
T ₂ 6	5050(2)	30745(3)	0	444(6)	377(11)	469(11)	487(12)	0	0	46(9)	Al	
O ₁ 1	24659(3)	-10327(6)	35854(6)	760(9)	955(19)	686(19)	638(19)	-98(16)	312(16)	-46(15)	O	
O ₁ 6	6196(3)	-41569(6)	34874(6)	760(9)	656(18)	938(20)	686(20)	-313(16)	25(15)	-104(15)	O	
O ₁ 3	-17329(3)	-30914(6)	35815(6)	762(9)	782(18)	828(20)	678(20)	-224(17)	-212(16)	156(15)	O	
O ₂ 6	4335(5)	-24820(9)	0	1136(14)	451(27)	1442(35)	1515(36)	0	0	-229(25)	O	
O ₂ 1	12204(5)	18486(9)	0	1142(14)	913(29)	902(30)	1611(37)	0	0	539(25)	O	
O ₂ 3	16429(5)	-7918(8)	0	1089(14)	1233(32)	465(27)	1569(36)	0	0	-259(24)	O	
Ch1	0	0	25000	73(26)							0.12(2)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	37(9)	46(15)	21(10)	43(15)	0	0	0(9)	0.050(7)Na	
Ch1c	0	0	25000	31(6)							0.165(12)C	
Ch1x	6330(112)	0	25000	69(7)							0.165(12)O	

Table 2: continued

Great Bear Lake, Canada												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33749(2)	0	25000	636(9)	539(12)	575(12)	795(13)	-11(8)	0	0	0.724(3)Mg	0.276(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25008(4)	584(11)	713(14)	540(15)	498(15)	0	0	124(9)	0.988(3)Al	0.012(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	493(12)	474(17)	585(17)	420(17)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19194(2)	7819(3)	0	421(5)	457(10)	341(10)	465(11)	0	0	30(8)	Si	
T ₂ 3	13505(2)	-23659(3)	0	424(5)	387(10)	428(10)	457(11)	0	0	-58(7)	Si	
T ₂ 6	5050(2)	30742(3)	0	452(6)	397(11)	484(11)	474(12)	0	0	55(9)	Al	
O ₁ 1	24649(3)	-10316(6)	35856(6)	774(9)	981(19)	705(19)	637(19)	-66(16)	323(16)	-86(15)	O	
O ₁ 6	6196(3)	-41578(6)	34894(6)	776(9)	704(18)	918(20)	707(20)	-340(16)	34(16)	-140(15)	O	
O ₁ 3	-17328(3)	-30911(6)	35830(6)	782(9)	824(18)	858(20)	663(20)	-236(17)	-204(16)	152(15)	O	
O ₂ 6	4332(5)	-24794(9)	0	1131(14)	445(27)	1475(35)	1471(36)	0	0	-197(24)	O	
O ₂ 1	12183(5)	18459(9)	0	1149(14)	905(29)	950(31)	1591(37)	0	0	527(37)	O	
O ₂ 3	16406(5)	-7919(8)	0	1101(14)	1263(32)	458(27)	1582(36)	0	0	-299(24)	O	
Ch1	0	0	25000	239(24)	565(70)	104(14)	49(8)	0	0	0	0.40(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	38(9)	28(11)	25(11)	59(19)	0	0	0	0.053(8)Na	
94755, Tincup mining district, Wyoming												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33741(2)	0	25000	665(11)	532(15)	599(15)	864(16)	-4(12)	0	0	0.711(3)Mg	0.289(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25005(5)	592(13)	696(18)	570(18)	510(18)	0	0	130(12)	0.994(3)Al	0.006(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	536(15)	486(22)	649(23)	472(22)	0	0	0	0.991(4)Si	0.009(4)Fe
T ₂ 1	19176(2)	7829(4)	0	441(7)	466(14)	367(14)	492(15)	0	0	35(11)	Si	
T ₂ 3	13508(2)	-23651(4)	0	451(7)	389(13)	482(14)	481(14)	0	0	-76(11)	Si	
T ₂ 6	5046(2)	30765(5)	0	471(8)	385(16)	523(16)	503(17)	0	0	52(13)	Al	
O ₁ 1	24628(4)	-10336(7)	35846(8)	788(12)	1025(27)	667(26)	673(26)	-102(22)	296(24)	-50(21)	O	
O ₁ 6	6185(4)	-41574(8)	34894(8)	812(12)	733(25)	954(28)	749(28)	-356(23)	58(22)	-155(22)	O	
O ₁ 3	-17325(4)	-30893(8)	35817(8)	784(12)	841(26)	830(28)	680(28)	-224(24)	-207(22)	147(21)	O	
O ₂ 6	4320(6)	-24811(13)	0	1181(20)	532(37)	1524(49)	1487(49)	0	0	-198(36)	O	
O ₂ 1	12171(7)	18462(12)	0	1193(19)	959(41)	1027(44)	1594(51)	0	0	464(35)	O	
O ₂ 3	16392(7)	-7899(12)	0	1140(19)	1298(45)	546(39)	1578(49)	0	0	-267(35)	O	
Ch1	0	0	25000	147(13)	320(36)	84(11)	37(7)	0	0	0	0.39(2)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	24(6)	21(8)	12(7)	39(11)	0	0	0(6)	0.069(7)Na	
111249, Cerro del Hoyazo, Spain												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33745(3)	0	25000	640(14)	499(19)	581(20)	840(21)	-25(18)	0	0	0.507(5)Mg	0.493(5)Fe
T ₁ 1	25000	25000	24994(9)	615(20)	672(30)	581(30)	593(30)	0	0	139(20)	0.988(5)Al	0.012(5)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	527(24)	486(36)	641(37)	454(37)	0	0	0	0.990(7)Si	0.010(7)Fe
T ₂ 1	19130(4)	7843(7)	0	440(11)	423(23)	400(23)	499(25)	0	0	27(19)	Si	
T ₂ 3	13493(4)	-23598(7)	0	408(11)	346(22)	416(23)	463(24)	0	0	-51(19)	Si	
T ₂ 6	5013(4)	30716(8)	0	430(12)	335(27)	510(26)	446(28)	0	0	75(22)	Al	
O ₁ 1	24564(7)	-10376(12)	35849(13)	806(20)	998(48)	742(44)	678(45)	-109(38)	401(41)	-60(37)	O	
O ₁ 6	6152(7)	-41520(13)	34878(14)	816(20)	702(44)	983(47)	763(48)	-344(40)	71(38)	-87(37)	O	
O ₁ 3	-17331(7)	-30786(13)	35812(14)	813(21)	830(47)	913(47)	696(48)	-227(41)	-226(36)	190(36)	O	
O ₂ 6	4364(11)	-24894(21)	0	1156(32)	489(63)	1387(80)	1590(82)	0	0	-184(60)	O	
O ₂ 1	12127(11)	18450(20)	0	1120(32)	829(69)	876(70)	1656(86)	0	0	557(59)	O	
O ₂ 3	16358(12)	-7888(19)	0	1110(31)	1232(75)	561(65)	1536(81)	0	0	-294(59)	O	
Ch2	0	0	0	48(34)	15(29)	10(26)	120(91)	0	0	-6(25)	0.032(12)Na	

Table 2: continued

Greb370, Pena Negra Complex, Spain												
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.	
M	33731(2)	0	25000	736(9)	616(12)	669(12)	924(13)	10(10)	0	0	0.358(10)Mg fixed: 0.02Li	0.618(6)Fe
T ₁₁	25000	25000	25014(6)	658(15)	800(20)	654(21)	519(20)	0	0	104(13)	0.991(4)Al	0.009(4)Fe
T ₁₆	0	50000	25000	598(17)	612(24)	678(24)	502(24)	0	0	0	0.989(5)Si	0.011(5)Fe
T ₂₁	19091(2)	7858(4)	0	470(7)	510(15)	399(15)	500(15)	0	0	22(12)	Si	
T ₂₃	13491(2)	-23527(4)	0	481(7)	452(14)	491(15)	501(15)	0	0	-81(12)	Si	
T ₂₆	5005(3)	30727(5)	0	510(8)	469(17)	552(17)	508(17)	0	0	56(13)	Al	
O ₁₁	24525(5)	-10393(8)	35839(9)	859(13)	1141(30)	760(29)	678(28)	-113(24)	314(25)	-77(23)	O	
O ₁₆	6130(5)	-41506(8)	34874(9)	873(13)	815(27)	1033(31)	770(30)	-383(25)	52(24)	-133(23)	O	
O ₁₃	-17308(5)	-30706(9)	35788(9)	861(13)	901(28)	985(31)	697(30)	-198(26)	-216(23)	184(23)	O	
O ₂₆	4335(7)	-24721(14)	0	1238(21)	551(41)	1512(53)	1652(54)	0	0	-233(37)	O	
O ₂₁	12067(7)	18419(13)	0	1261(21)	1103(46)	989(47)	1691(56)	0	0	610(38)	O	
O ₂₃	16311(8)	-7808(12)	0	1209(20)	1413(48)	556(42)	1657(53)	0	0	-317(38)	O	
Ch1	0	0	25000	113(9)	198(22)	90(10)	51(7)	0	0	0	0.48(3)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	24(5)	39(9)	5(5)	29(8)	0	0	2(5)	0.091(8)Na	
1997-2, Dolní Bory, Czech Republic												
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.	
M	33699(1)	0	25000	740(5)	603(7)	617(7)	999(7)	-6(4)	0	0	0.101(10)Mg fixed: 0.035Li	0.866(5)Fe
T ₁₁	25000	25000	25006(3)	673(10)	785(13)	624(14)	608(13)	0	0	100(8)	0.988(3)Al	0.012(3)Fe
T ₁₆	0	50000	25000	574(6)	540(12)	635(12)	547(12)	0	0	0	Si	
T ₂₁	19008(1)	7903(3)	0	484(5)	506(9)	365(9)	581(9)	0	0	13(7)	Si	
T ₂₃	13472(1)	-23451(3)	0	495(5)	441(9)	460(9)	584(9)	0	0	-72(7)	Si	
T ₂₆	4980(2)	30746(3)	0	508(5)	404(10)	532(10)	587(11)	0	0	80(8)	Al	
O ₁₁	24428(3)	-10448(5)	35810(6)	880(8)	1108(18)	733(17)	799(17)	-105(14)	291(14)	-93(13)	O	
O ₁₆	6099(3)	-41473(5)	34882(6)	876(8)	762(16)	1018(18)	849(18)	-349(14)	20(14)	-134(14)	O	
O ₁₃	-17306(3)	-30582(5)	35765(6)	878(8)	924(17)	915(17)	795(18)	-207(14)	-213(14)	210(14)	O	
O ₂₆	4327(4)	-24672(9)	0	1331(13)	564(25)	1636(32)	1793(34)	0	0	-211(22)	O	
O ₂₁	11979(5)	18378(8)	0	1318(13)	1113(27)	1060(28)	1782(34)	0	0	650(23)	O	
O ₂₃	16227(5)	-7716(7)	0	1273(13)	1444(30)	494(24)	1880(34)	0	0	-368(21)	O	
Ch1	0	0	25000	85(4)	138(10)	64(5)	53(5)	0	0	0	0.47(2)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	27(2)	30(3)	14(2)	38(4)	0	0	0	0.161(6)Na	
g13994, Dolní Bory, Czech Republic												
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.	
M	33698(1)	0	25000	741(6)	592(8)	639(8)	991(8)	-12(6)	0	0	0.077(10)Mg fixed: 0.035Li	0.888(5)Fe
T ₁₁	25000	25000	25007(4)	688(12)	783(16)	652(16)	628(16)	0	0	109(9)	0.984(3)Al	0.016(3)Fe
T ₁₆	0	50000	25000	582(13)	516(18)	662(19)	569(19)	0	0	0	0.995(4)Si	0.005(4)Fe
T ₂₁	19001(2)	7904(3)	0	482(6)	496(11)	369(11)	579(12)	0	0	20(8)	Si	
T ₂₃	13473(2)	-23442(3)	0	499(6)	413(11)	495(11)	588(12)	0	0	-57(8)	Si	
T ₂₆	4982(2)	30742(4)	0	521(7)	422(12)	550(13)	592(13)	0	0	74(10)	Al	
O ₁₁	24419(4)	-10452(6)	35794(7)	863(10)	1087(22)	734(21)	767(22)	-97(18)	259(18)	-70(17)	O	
O ₁₆	6097(3)	-41472(6)	34885(7)	876(10)	756(20)	1013(23)	860(23)	-378(18)	66(17)	-108(17)	O	
O ₁₃	-17306(4)	-30569(6)	35772(7)	890(10)	898(21)	967(23)	805(24)	-195(18)	-210(17)	173(17)	O	
O ₂₆	4325(5)	-24690(11)	0	1325(17)	514(31)	1685(42)	1778(43)	0	0	-246(27)	O	
O ₂₁	11960(6)	18377(10)	0	1295(16)	1000(34)	1069(35)	1817(43)	0	0	668(28)	O	
O ₂₃	16227(6)	-7697(9)	0	1283(16)	1451(37)	531(31)	1868(43)	0	0	-327(28)	O	
Ch1	0	0	25000	78(5)	129(11)	57(6)	47(5)	0	0	0	0.43(2)O(H ₂ O)	
Ch2	0	0	0	26(2)	27(3)	11(3)	40(4)	0	0	-1(2)	0.162(7)Na	

Table 3: Atomic coordinates ($\times 10^5$) and displacement parameters (Ch2: $\text{\AA}^2 \times 10^3$, all other positions: $\text{\AA}^2 \times 10^5$) for heat treated samples. U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor. The exponent of the anisotropic displacement factor takes on the form: $-2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11} + \dots + 2hka^*b^*U_{12}]$

1997-1 SE-India, T=900°C, t=24h, in air												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33748(2)	0	25000	620(10)	553(13)	583(13)	723(14)	-5(9)	0	0	0.988(2)Mg	0.012(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25011(3)	525(8)	645(10)	477(10)	454(11)	0	0	143(7)	0.988(2)Al	0.012(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	438(9)	389(12)	539(13)	386(13)	0	0	0	0.994(3)Si	0.006(3)Fe
T ₂ 1	19262(1)	7779(2)	0	376(4)	420(7)	319(7)	389(8)	0	0	15(6)	Si	
T ₂ 3	13516(1)	-23764(2)	0	385(4)	380(7)	386(8)	389(8)	0	0	-56(6)	Si	
T ₂ 6	5083(1)	30787(2)	0	403(4)	346(8)	450(8)	412(9)	0	0	45(6)	Al	
O ₁ 1	24734(2)	-10261(4)	35881(5)	700(6)	862(14)	636(13)	601(14)	-101(12)	274(12)	-64(11)	O	
O ₁ 6	6241(2)	-41623(4)	34899(4)	679(6)	579(13)	850(14)	610(15)	-307(12)	14(11)	-76(11)	O	
O ₁ 3	-17334(2)	-31051(4)	35846(5)	703(6)	782(14)	728(14)	600(15)	-222(12)	-183(12)	132(11)	O	
O ₂ 6	4329(4)	-24896(7)	0	1068(10)	446(20)	1368(25)	1391(26)	0	0	-173(18)	O	
O ₂ 1	12251(4)	18478(7)	0	1048(10)	807(21)	902(22)	1434(27)	0	0	508(18)	O	
O ₂ 3	16447(4)	-7972(6)	0	1032(10)	1155(24)	438(20)	1502(27)	0	0	-290(17)	O	
Ch2	0	0	0	124(24)	61(17)	47(14)	263(66)	0	0	-7(12)	0.067(9)Na	
126231 Tanzania, T=900°C, t=24h												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33750(1)	0	25000	648(7)	540(9)	611(9)	793(10)	-6(5)	0	0	0.908(2)Mg	0.092(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25014(2)	580(7)	670(8)	535(8)	535(9)	0	0	131(5)	0.988(2)Al	0.012(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	468(4)	400(7)	567(8)	437(8)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19241(1)	7782(2)	0	419(3)	441(6)	368(5)	449(6)	0	0	23(4)	Si	
T ₂ 3	13509(1)	-23748(2)	0	427(3)	377(6)	443(6)	460(6)	0	0	-61(4)	Si	
T ₂ 6	5078(1)	30787(2)	0	452(3)	375(6)	500(6)	479(7)	0	0	57(5)	Al	
O ₁ 1	24706(2)	-10275(3)	35876(4)	777(5)	958(11)	707(11)	666(11)	-77(9)	302(9)	-55(8)	O	
O ₁ 6	6229(2)	-41607(3)	34893(3)	745(5)	620(10)	912(11)	703(11)	-316(9)	24(8)	-95(8)	O	
O ₁ 3	-17325(2)	-31013(3)	35842(4)	779(5)	792(10)	847(11)	698(11)	-236(9)	-208(9)	127(8)	O	
O ₂ 6	4320(3)	-24863(5)	0	1139(8)	439(15)	1494(19)	1484(20)	0	0	-221(13)	O	
O ₂ 1	12219(3)	18450(5)	0	1137(8)	940(16)	971(17)	1499(20)	0	0	563(13)	O	
O ₂ 3	16419(3)	-7953(5)	0	1107(8)	1253(18)	486(15)	1582(20)	0	0	-307(12)	O	
Ch2	0	0	0	66(7)	51(7)	19(4)	128(17)	0	0	0(4)	0.086(6)Na	
Zimbabwe, T=900°C, t=24h												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33748(1)	0	25000	678(8)	577(11)	613(11)	845(11)	-5(7)	0	0	0.875(2)Mg	0.125(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25010(3)	599(8)	705(10)	535(10)	557(11)	0	0	109(6)	0.992(2)Al	0.008(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	505(5)	445(9)	583(10)	485(10)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19230(1)	7793(2)	0	452(4)	485(7)	374(7)	496(8)	0	0	13(5)	Si	
T ₂ 3	13508(1)	-23728(2)	0	458(4)	412(7)	452(7)	511(8)	0	0	-66(5)	Si	
T ₂ 6	5070(1)	30776(2)	0	480(4)	415(8)	506(8)	520(8)	0	0	55(6)	Al	
O ₁ 1	24692(2)	-10287(4)	35864(4)	804(6)	1004(14)	697(13)	712(14)	-89(11)	295(11)	-56(10)	O	
O ₁ 6	6223(2)	-41597(4)	34892(4)	770(6)	654(13)	914(14)	742(14)	-321(11)	20(11)	-100(11)	O	
O ₁ 3	-17333(2)	-30993(4)	35840(4)	806(6)	815(13)	864(14)	738(15)	-233(12)	-198(11)	122(10)	O	
O ₂ 6	4327(3)	-24890(7)	0	1181(10)	482(20)	1511(24)	1550(26)	0	0	-210(17)	O	
O ₂ 1	12214(4)	18465(6)	0	1157(10)	947(21)	961(22)	1564(26)	0	0	524(17)	O	
O ₂ 3	16414(4)	-7939(6)	0	1133(10)	1299(23)	505(19)	1596(25)	0	0	-297(17)	O	
Ch2	0	0	0	83(12)	58(12)	19(6)	171(32)	0	0	2(6)	0.074(8)Na	
85131, Mt. Bity, Madagascar, T=900°C, t=24h												
	x	y	z	U_{eq}	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	Occ.	
M	33754(1)	0	25000	665(9)	529(11)	583(11)	883(12)	-7(8)	0	0	0.810(2)Mg	0.190(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25009(3)	603(9)	679(12)	547(12)	583(13)	0	0	110(7)	0.988(2)Al	0.012(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	498(6)	446(11)	556(11)	491(12)	0	0	0	Si	
T ₂ 1	19202(1)	7808(2)	0	445(5)	460(8)	341(8)	536(9)	0	0	23(6)	Si	
T ₂ 3	13512(1)	-23696(2)	0	453(5)	379(8)	429(9)	550(9)	0	0	-69(6)	Si	
T ₂ 6	5050(2)	30757(3)	0	468(5)	388(10)	466(10)	549(10)	0	0	55(7)	Al	
O ₁ 1	24663(3)	-10299(5)	35858(5)	788(7)	981(16)	661(15)	722(17)	-70(14)	297(14)	-81(13)	O	
O ₁ 6	6211(3)	-41584(5)	34883(5)	781(7)	660(16)	914(17)	769(17)	-335(14)	7(13)	-90(13)	O	
O ₁ 3	-17333(3)	-30942(5)	35828(5)	805(8)	814(16)	844(17)	757(18)	-216(14)	-212(14)	142(13)	O	
O ₂ 6	4344(4)	-24918(8)	0	1148(12)	440(23)	1414(29)	1591(31)	0	0	-190(20)	O	
O ₂ 1	12205(4)	18480(8)	0	1152(12)	932(25)	952(26)	1572(32)	0	0	541(21)	O	
O ₂ 3	16401(4)	-7922(7)	0	1139(12)	1268(28)	504(23)	1644(31)	0	0	-301(20)	O	
Ch2	0	0	0	83(20)	39(14)	16(9)	193(55)	0	0	8(9)	0.052(8)Na	

Table 3: continued

1960728 Orijarvi, Finland, T=900°C, t=24h											
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.
M	33754(1)	0	25000	663(8)	556(10)	583(10)	851(11)	-10(7)	0	0	0.791(2)Mg 0.209(2)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25007(3)	593(8)	688(11)	542(11)	548(11)	0	0	128(7)	0.987(2)Al 0.013(2)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	523(9)	490(13)	585(14)	493(14)	0	0	0	0.991(3)Si 0.009(3)Fe
T ₂ 1	19202(1)	7809(2)	0	431(4)	439(8)	352(8)	503(8)	0	0	19(6)	Si
T ₂ 3	13506(1)	-23699(2)	0	444(4)	396(8)	431(8)	505(9)	0	0	-65(6)	Si
T ₂ 6	5054(1)	30758(3)	0	462(5)	387(9)	491(9)	507(10)	0	0	72(7)	Al
O ₁ 1	24663(3)	-10297(5)	35844(5)	778(7)	960(15)	669(15)	705(16)	-101(13)	285(13)	-72(12)	O
O ₁ 6	6210(2)	-41591(4)	34889(5)	770(7)	663(14)	902(16)	745(16)	-324(13)	22(12)	-124(12)	O
O ₁ 3	-17335(3)	-30947(5)	35823(5)	771(7)	786(15)	809(16)	720(16)	-224(13)	-202(13)	128(12)	O
O ₂ 6	4345(4)	-24929(7)	0	1136(11)	438(21)	1457(28)	1513(28)	0	0	-166(19)	O
O ₂ 1	12212(4)	18498(7)	0	1142(11)	891(23)	956(25)	1579(29)	0	0	495(20)	O
O ₂ 3	16405(4)	-7917(7)	0	1092(11)	1250(25)	473(22)	1554(28)	0	0	-299(19)	O
Ch2	0	0	0	182(71)	77(39)	27(21)	444(208)	0	0	-5(21)	0.038(9)Na
Great Bear Lake, T=900°C, t=24h											
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.
M	33757(2)	0	25000	649(9)	515(12)	551(12)	881(13)	-6(9)	0	0	0.725(3)Mg 0.275(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25004(4)	593(10)	693(14)	521(14)	566(15)	0	0	117(9)	0.988(3)Al 0.012(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	510(12)	474(17)	554(17)	501(18)	0	0	0	0.993(4)Si 0.007(3)Fe
T ₂ 1	19183(2)	7819(3)	0	423(5)	443(10)	322(10)	504(11)	0	0	31(8)	Si
T ₂ 3	13504(2)	-23677(3)	0	446(5)	403(10)	415(10)	521(11)	0	0	-69(8)	Si
T ₂ 6	5045(2)	30737(3)	0	460(6)	392(12)	449(12)	540(13)	0	0	48(9)	Al
O ₁ 1	24639(3)	-10313(6)	35861(6)	783(9)	972(19)	645(19)	731(20)	-93(16)	326(17)	-39(16)	O
O ₁ 6	6192(3)	-41565(6)	34876(6)	779(9)	646(18)	872(20)	818(21)	-348(17)	60(16)	-131(16)	O
O ₁ 3	-17331(3)	-30913(6)	35824(6)	780(9)	758(19)	855(21)	725(21)	-238(18)	-208(16)	154(16)	O
O ₂ 6	4336(5)	-24898(10)	0	1162(15)	402(27)	1466(36)	1619(38)	0	0	-202(25)	O
O ₂ 1	12195(5)	18469(9)	0	1120(14)	861(30)	958(31)	1542(38)	0	0	524(26)	O
O ₂ 3	16388(5)	-7901(9)	0	1115(14)	1249(33)	477(28)	1618(37)	0	0	-287(25)	O
Ch2	0	0	0	11(10)							0.021(5)Na
94755, Tincup mining district, Wyoming, T=900°C, t=24h											
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.
M	33744(2)	0	25000	715(9)	625(12)	679(12)	841(13)	-9(9)	0	0	0.711(3)Mg 0.289(3)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25005(4)	635(11)	786(15)	628(15)	490(15)	0	0	114(9)	0.995(3)Al 0.005(3)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	564(7)	577(15)	657(15)	457(15)	0	0	0	Si
T ₂ 1	19161(2)	7831(3)	0	500(5)	566(11)	460(11)	475(11)	0	0	19(9)	Si
T ₂ 3	13501(2)	-23658(3)	0	502(5)	486(11)	543(11)	478(11)	0	0	-56(8)	Si
T ₂ 6	5037(2)	30762(4)	0	522(6)	482(12)	606(12)	480(13)	0	0	71(10)	Al
O ₁ 1	24616(4)	-10329(6)	35854(7)	859(9)	1134(22)	811(21)	633(21)	-83(17)	313(18)	-59(17)	O
O ₁ 6	6194(3)	-41571(6)	34891(7)	862(9)	815(20)	1047(22)	725(21)	-322(17)	79(17)	-150(17)	O
O ₁ 3	-17335(4)	-30888(6)	35817(7)	872(9)	940(21)	972(22)	702(22)	-231(18)	-228(17)	136(17)	O
O ₂ 6	4342(5)	-24893(10)	0	1254(15)	600(31)	1612(38)	1551(39)	0	0	-234(27)	O
O ₂ 1	12162(6)	18469(10)	0	1254(15)	1122(34)	1063(33)	1578(40)	0	0	557(27)	O
O ₂ 3	16365(6)	-7891(9)	0	1218(15)	1390(36)	634(30)	1630(39)	0	0	-294(27)	O
Ch2	0	0	0	90(19)	41(14)	16(9)	212(54)	0	0	7(9)	0.066(9)Na
111249, Cerro del Hoyazo, Spain, T=900°C, t=24h											
	x	y	z	U _{eq}	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂	Occ.
M	33741(2)	0	25000	707(13)	608(18)	663(18)	851(19)	6(16)	0	0	0.494(4)Mg 0.506(4)Fe
T ₁ 1	25000	25000	25008(8)	612(18)	773(27)	588(26)	475(27)	0	0	122(18)	0.991(4)Al 0.009(4)Fe
T ₁ 6	0	50000	25000	525(13)	537(27)	642(28)	397(29)	0	0	0	Si
T ₂ 1	19126(3)	7847(6)	0	474(10)	598(21)	378(21)	447(22)	0	0	17(17)	Si
T ₂ 3	13492(3)	-23598(6)	0	466(10)	480(21)	474(21)	445(22)	0	0	-79(17)	Si
T ₂ 6	5011(4)	30707(7)	0	461(11)	390(24)	583(24)	411(25)	0	0	69(19)	Al
O ₁ 1	24562(7)	-10360(11)	35846(12)	835(18)	1087(40)	784(40)	635(41)	-139(34)	291(36)	-43(33)	O
O ₁ 6	6161(6)	-41513(11)	34874(13)	846(18)	806(38)	975(42)	757(44)	-298(35)	-17(34)	-124(33)	O
O ₁ 3	-17332(6)	-30819(11)	35802(13)	826(19)	919(40)	940(42)	619(43)	-218(36)	-217(33)	139(32)	O
O ₂ 6	4360(9)	-24862(19)	0	1233(30)	587(57)	1590(74)	1521(76)	0	0	-263(54)	O
O ₂ 1	12127(10)	18444(18)	0	1236(30)	1118(64)	1014(65)	1577(79)	0	0	532(54)	O
O ₂ 3	16337(11)	-7837(17)	0	1219(29)	1552(69)	576(58)	1530(75)	0	0	-341(54)	O
Ch2	0	0	0	55(32)							0.037(14)Na

Table 6: Tetrahedral and octahedral bond lengths (Å) of untreated samples

	1997-1	126231	Zimb	1960728	85131	NH1	GBL	94755	111249	GREB370	1997-2	G13994
M												
O ₁ (×2)	2.0944(5)	2.0975(5)	2.1017(6)	2.1073(6)	2.1074(4)	2.1100(7)	2.1125(6)	2.1151(8)	2.1290(13)	2.1337(8)	2.1476(5)	2.1486(6)
O ₁₆ (×2)	2.1062(5)	2.1112(5)	2.1117(6)	2.1148(6)	2.1150(4)	2.1176(7)	2.1185(6)	2.1214(8)	2.1311(13)	2.1372(8)	2.1521(5)	2.1532(6)
O ₁₃ (×2)	2.1094(4)	2.1153(5)	2.1163(5)	2.1207(6)	2.1213(4)	2.1228(7)	2.1251(6)	2.1270(7)	2.1378(12)	2.1461(8)	2.1618(5)	2.1630(6)
$\langle M-O \rangle$	2.1033	2.1080	2.1099	2.1143	2.1146	2.1168	2.1187	2.1212	2.1327	2.1390	2.1539	2.1550
T ₁												
O ₁₃ (×2)	1.7563(5)	1.7577(5)	1.7553(6)	1.7540(6)	1.7545(4)	1.7518(7)	1.7538(6)	1.7533(8)	1.7509(13)	1.7503(8)	1.7483(5)	1.7485(7)
O ₁ (×2)	1.7569(4)	1.7580(5)	1.7561(5)	1.7547(6)	1.7551(4)	1.7532(7)	1.7547(6)	1.7533(8)	1.7517(13)	1.7524(9)	1.7512(5)	1.7500(7)
$\langle T_{11}-O \rangle$	1.7566	1.7579	1.7557	1.7544	1.7548	1.7525	1.7543	1.7533	1.7513	1.7514	1.7498	1.7492
T ₁₆												
O ₁₆	1.6282(4)	1.6277(5)	1.6276(5)	1.6278(5)	1.6276(4)	1.6267(6)	1.6280(5)	1.6274(7)	1.6274(12)	1.6262(8)	1.6277(5)	1.6278(6)
T ₂												
O ₂	1.5851(6)	1.5859(7)	1.5842(8)	1.5857(9)	1.5852(6)	1.5845(9)	1.5860(8)	1.5854(12)	1.5872(19)	1.5885(12)	1.5885(8)	1.5906(9)
O ₂₃	1.6037(7)	1.6054(7)	1.6057(8)	1.6037(9)	1.6044(6)	1.6052(9)	1.6063(8)	1.6062(12)	1.6086(19)	1.6057(13)	1.6077(8)	1.6057(9)
O ₁ (×2)	1.6350(4)	1.6351(5)	1.6344(5)	1.6353(6)	1.6350(4)	1.6345(7)	1.6347(6)	1.6355(8)	1.6337(13)	1.6343(8)	1.6358(5)	1.6365(6)
$\langle T_{21}-O \rangle$	1.6147	1.6154	1.6147	1.6150	1.6149	1.6147	1.6154	1.6157	1.6158	1.6157	1.6170	1.6173
T ₂₃												
O ₂₆	1.5737(7)	1.5747(7)	1.5740(8)	1.5740(9)	1.5749(6)	1.5743(9)	1.5738(9)	1.5768(11)	1.5726(19)	1.5768(12)	1.5789(8)	1.5804(10)
O ₂₃	1.6131(7)	1.6132(7)	1.6128(8)	1.6130(9)	1.6139(6)	1.6116(9)	1.6124(8)	1.6136(12)	1.6114(20)	1.6126(13)	1.6172(8)	1.6182(10)
O ₁₃ (×2)	1.6355(4)	1.6347(5)	1.6348(5)	1.6360(6)	1.6352(4)	1.6361(7)	1.6357(6)	1.6361(8)	1.6351(13)	1.6353(8)	1.6372(5)	1.6361(7)
$\langle T_{23}-O \rangle$	1.6145	1.6143	1.6141	1.6148	1.6148	1.6145	1.6144	1.6157	1.6136	1.6150	1.6176	1.6177
T ₂₆												
O ₂₆	1.7060(7)	1.7085(7)	1.7060(8)	1.7068(9)	1.7071(6)	1.7059(9)	1.7073(8)	1.7052(11)	1.7075(19)	1.7081(12)	1.7096(8)	1.7089(9)
O ₂	1.7098(7)	1.7109(7)	1.7118(8)	1.7105(9)	1.7106(6)	1.7096(9)	1.7099(9)	1.7109(12)	1.7111(19)	1.7093(12)	1.7113(8)	1.7097(10)
O ₁₆ (×2)	1.7717(4)	1.7718(5)	1.7713(6)	1.7719(6)	1.7720(4)	1.7723(7)	1.7721(6)	1.7708(8)	1.7707(13)	1.7703(8)	1.7681(5)	1.7675(6)
$\langle T_{26}-O \rangle$	1.7398	1.7408	1.7401	1.7403	1.7404	1.7400	1.7404	1.7394	1.7400	1.7395	1.7393	1.7384

Table 7: Tetrahedral and octahedral bond lengths (Å) of heat treated samples

	1997-1	126231	Zimb	1960728	85131	GBL	94755	111249	1997-2
M									
O ₁ (×2)	2.0969(5)	2.1028(7)	2.1045(6)	2.1097(6)	2.1102(5)	2.1157(7)	2.1182(7)	2.1281(12)	2.1521(5)
O ₁₆ (×2)	2.1069(5)	2.1107(7)	2.1123(6)	2.1151(6)	2.1146(5)	2.1189(7)	2.1215(7)	2.1306(11)	2.1528(6)
O ₁₃ (×2)	2.1100(5)	2.1151(9)	2.1165(5)	2.1203(6)	2.1210(5)	2.1245(8)	2.1273(7)	2.1343(11)	2.1592(6)
$\langle M-O \rangle$	2.1046	2.1095	2.1111	2.1151	2.1153	2.1197	2.1223	2.1310	2.1547
T ₁									
O ₁₃ (×2)	1.7561(5)	1.7571(7)	1.7554(5)	1.7538(6)	1.7539(5)	1.7542(6)	1.7528(8)	1.7515(12)	1.7493(5)
O ₁ (×2)	1.7579(5)	1.7583(8)	1.7561(5)	1.7544(6)	1.7552(5)	1.7548(7)	1.7542(8)	1.7526(12)	1.7496(5)
$\langle T_1-O \rangle$	1.7570	1.7577	1.7558	1.7541	1.7545	1.7545	1.7535	1.7521	1.7495
T ₁₆									
O ₁₆	1.6291(4)	1.6296(6)	1.6292(5)	1.6286(5)	1.6285(5)	1.6279(6)	1.6290(6)	1.6285(11)	1.6300(5)
T ₂									
O ₂	1.5853(7)	1.5865(6)	1.5864(7)	1.5858(7)	1.5854(7)	1.5843(9)	1.5859(10)	1.5861(17)	1.5903(7)
O ₂₃	1.6042(7)	1.6050(8)	1.6045(7)	1.6041(7)	1.6048(7)	1.6049(10)	1.6062(10)	1.6048(17)	1.6071(7)
O ₁ (×2)	1.6348(4)	1.6355(9)	1.6355(6)	1.6366(6)	1.6353(5)	1.6350(6)	1.6353(7)	1.6338(12)	1.6385(6)
$\langle T_2-O \rangle$	1.6148	1.6156	1.6154	1.6158	1.6152	1.6148	1.6157	1.6146	1.6186
T ₂₃									
O ₂₆	1.5721(7)	1.5741(7)	1.5738(8)	1.5729(8)	1.5734(7)	1.5752(9)	1.5743(10)	1.5731(17)	1.5775(8)
O ₂₃	1.6141(7)	1.6152(8)	1.6144(7)	1.6146(8)	1.6134(7)	1.6146(10)	1.6140(10)	1.6148(17)	1.6184(7)
O ₁₃ (×2)	1.6361(5)	1.6361(9)	1.6361(5)	1.6366(6)	1.6354(5)	1.6359(6)	1.6368(7)	1.6373(12)	1.6387(6)
$\langle T_23-O \rangle$	1.6146	1.6154	1.6151	1.6152	1.6144	1.6154	1.6155	1.6156	1.6183
T ₂₆									
O ₂₆	1.7057(7)	1.7063(7)	1.7056(8)	1.7061(8)	1.7053(7)	1.7049(9)	1.7061(10)	1.7074(17)	1.7099(7)
O ₂	1.7111(7)	1.7117(10)	1.7106(7)	1.7106(8)	1.7111(7)	1.7115(9)	1.7111(10)	1.7110(17)	1.7102(8)
O ₁₆ (×2)	1.7721(5)	1.7725(10)	1.7718(6)	1.7722(6)	1.7723(5)	1.7727(7)	1.7711(7)	1.7714(12)	1.7684(6)
$\langle T_26-O \rangle$	1.7403	1.7408	1.7400	1.7403	1.7403	1.7405	1.7399	1.7403	1.7392