

Appendix TABLE S2. Atomic coordinates, equivalent isotropic and anisotropic atomic displacement parameters (\AA^2) for magnesio-ferri-hornblende

Site	Atom	Wyck.	Occ.	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	<i>U</i> _{eq}	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	
<i>A</i>	<i>A</i> (m)	Na1	4 <i>i</i>	0.210	0.5348(13)	0.0	0.0766(19)	0.049(4)	0.080(10)	0.022(3)	0.076(8)	0	0.077(8)	0
	<i>A</i> (2)	K1	4 <i>g</i>	0.037	0.5	0.0275(19)	0.0	0.048(7)						
<i>B</i>	<i>M</i> (4)	Ca4	4 <i>h</i>	0.910	0.5	0.77931(11)	-0.5	0.0099(2)	0.0123(2)	0.0073(5)	0.0125(2)	0	0.00786(17)	0
	<i>M</i> (4')	Na4	4 <i>h</i>	0.151	0.5	0.7596(13)	-0.5	0.009(2)						
<i>C</i>	<i>M</i> (1)	Fe1	4 <i>h</i>	0.388	0.0	0.91160(3)	0.5	0.00872(14)	0.0096(2)	0.0103(2)	0.0068(2)	0	0.00309(16)	0
		Mg1	4 <i>h</i>	0.612	0.0	0.91160(3)	0.5	0.00872(14)	0.0096(2)	0.0103(2)	0.0068(2)	0	0.00309(16)	0
	<i>M</i> (2)	Fe2	4 <i>g</i>	0.363	0.5	0.67783(3)	0.0	0.00631(14)	0.0070(2)	0.0055(2)	0.0068(2)	0	0.00240(16)	0
		Mg2	4 <i>g</i>	0.637	0.5	0.67783(3)	0.0	0.00631(14)	0.0070(2)	0.0055(2)	0.0068(2)	0	0.00240(16)	0
	<i>M</i> (3)	Fe3	2 <i>a</i>	0.435	0.0	0.0	0.0	0.00680(19)	0.0091(3)	0.0043(3)	0.0068(3)	0	0.0016(2)	0
		Mg3	2 <i>a</i>	0.565	0.0	0.0	0.0	0.00680(19)	0.0091(3)	0.0043(3)	0.0068(3)	0	0.0016(2)	0
<i>T</i>	<i>T</i> (1)	Si1	8 <i>j</i>	0.735	0.28038(5)	0.91506(2)	0.29845(9)	0.00627(9)	0.00652(17)	0.00578(17)	0.00656(18)	0.00004(13)	0.00177(14)	0.00064(13)
		Al1	8 <i>j</i>	0.265	0.28038(5)	0.91506(2)	0.29845(9)	0.00627(9)	0.00652(17)	0.00578(17)	0.00656(18)	0.00004(13)	0.00177(14)	0.00064(13)
	<i>T</i> (2)	Si2	8 <i>j</i>	1.000	0.29030(4)	0.82826(2)	-0.19228(9)	0.00670(8)	0.00678(17)	0.00676(16)	0.00668(17)	-0.00045(13)	0.00192(13)	0.00061(13)
<i>O</i> 1		O1	8 <i>j</i>	1.000	0.10865(12)	0.91163(7)	0.2160(2)	0.00982(19)	0.0086(4)	0.0116(5)	0.0091(5)	0.0006(4)	0.0020(4)	0.0014(4)
<i>O</i> 2		O2	8 <i>j</i>	1.000	0.11976(12)	0.82677(6)	-0.2716(2)	0.00919(19)	0.0068(4)	0.0107(5)	0.0097(5)	-0.0009(4)	0.0014(4)	-0.0003(3)
<i>W</i>	<i>W</i>	O3	4 <i>i</i>	1.000	0.1099(2)	0.0	0.7131(4)	0.0119(3)	0.0102(7)	0.0127(7)	0.0125(7)	0	0.0022(6)	0
	<i>W'</i>	Cl	4 <i>i</i>	0.054	0.176(3)	0.0	0.747(5)	0.049(7)						
<i>O</i> 4		O4	8 <i>j</i>	1.000	0.36695(13)	0.75126(7)	-0.2089(2)	0.0114(2)	0.0133(5)	0.0091(5)	0.0121(5)	0.0006(4)	0.0037(4)	0.0028(4)
<i>O</i> 5		O5	8 <i>j</i>	1.000	0.34813(12)	0.86349(7)	0.1022(2)	0.0127(2)	0.0096(5)	0.0175(5)	0.0104(5)	-0.0055(4)	0.0018(4)	-0.0012(4)
<i>O</i> 6		O6	8 <i>j</i>	1.000	0.34383(12)	0.88133(7)	0.5963(2)	0.0120(2)	0.0099(5)	0.0135(5)	0.0127(5)	0.0035(4)	0.0030(4)	-0.0012(4)
<i>O</i> 7		O7	4 <i>i</i>	1.000	0.33627(18)	0.0	0.2874(4)	0.0141(3)	0.0120(7)	0.0097(7)	0.0203(8)	0	0.0039(6)	0