

Supplemental Table OM2. Fractional atom coordinates, U_{eq} (Å²) values for benneshierite

Atom	melilite site	x/a	y/b	z/c	U_{eq}	sof
Ba1	<i>X</i>	0.16823(11)	0.33177(11)	0.4920(4)	0.0341(2)	0.85(2)
Ca1	<i>X</i>					0.15(2)
Fe1	<i>T1</i>	0	0	0	0.0467(18)	0.81(4)
Mg1	<i>T1</i>					0.19(4)
Si1	<i>T2</i>	0.3663(5)	0.1337(5)	0.0281(13)	0.0344(17)	1
O1		0	0.5	0.873(4)	0.045(6)	1
O2		0.3649(18)	0.1351(18)	0.729(3)	0.061(6)	1
O3		0.1972(16)	0.0756(16)	0.170(3)	0.052(4)	1