

Supplemental Table OM3. Anisotropic displacement parameters  $U^{ij}$  (in Å<sup>2</sup>) for bennesherite

Atom	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ba1, Ca1	0.0337(5)	0.0337(5)	0.0349(6)	-0.0018(6)	0.0018(6)	0.0052(5)
Fe1, Mg1	0.0286(17)	0.0286(17)	0.083(4)	0.000	0.000	0.000
Si1	0.035(2)	0.035(2)	0.034(3)	0.0018(19)	-0.0018(19)	0.010(2)
O1	0.055(10)	0.055(10)	0.026(11)	0.000	0.000	-0.025(14)
O2	0.073(10)	0.073(10)	0.038(9)	0.005(6)	-0.005(6)	0.029(12)
O3	0.039(7)	0.052(9)	0.064(9)	-0.016(7)	-0.003(7)	0.003(6)