

Supplementary Materials

Crystal Chemistry of Stanfieldite, $\text{Ca}_7\text{M}_2\text{Mg}_9(\text{PO}_4)_{12}$ ($M = \text{Ca}, \text{Mg}, \text{Fe}^{2+}$), a Structural Base of $\text{Ca}_3\text{Mg}_3(\text{PO}_4)_4$ Phosphors

Sergey N. Britvin, Maria G. Krzhizhanovskaya, Vladimir N. Bocharov, Edit V. Obolonskaya

Supplementary Table S1

Fractional atomic coordinates and isotropic displacement parameters (\AA^2)
for stanfieldite from the Brahmin meteorite ¹

Site	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso}
Mg1	0	0.57300(12)	1/4	0.0191(4)
Mg2	0.23626(4)	0.13303(8)	0.13021(5)	0.0127(3)
Mg3	0.39344(4)	0.35179(9)	0.26411(6)	0.0184(3)
Mg4	0.23467(4)	0.38282(9)	0.22494(5)	0.0132(3)
Mg5	0.42054(4)	0.08982(8)	0.05197(5)	0.0140(3)
Ca1	0	0.10393(8)	1/4	0.01776(17)
Ca2	0.18662(3)	0.34808(5)	0.43354(3)	0.01479(12)
Ca3	0.34004(3)	0.45235(6)	0.06501(4)	0.02104(14)
Ca4	0.41109(2)	0.08351(5)	0.39216(3)	0.01564(12)
M5A	0.06647(3)	0.10405(7)	0.08884(4)	0.0201(2)
P1	0.31713(3)	0.38173(7)	0.39968(4)	0.01247(14)
P2	0.16254(3)	0.11546(7)	0.27430(4)	0.01192(14)
P3	0.36196(3)	0.08026(7)	0.21380(4)	0.01197(14)
P4	0.19441(3)	0.37868(6)	0.02437(4)	0.01166(14)
P5	-0.00018(3)	0.34978(7)	0.09477(4)	0.01506(15)
P6	0.47414(3)	0.36317(7)	0.11722(5)	0.01704(15)
O1	0.25662(8)	0.41581(18)	0.34472(11)	0.0141(4)
O2	0.30200(9)	0.3218(2)	0.47501(12)	0.0216(4)
O3	0.35685(8)	0.29166(18)	0.36017(11)	0.0157(4)
O4	0.34550(9)	0.52166(18)	0.41889(12)	0.0185(4)
O5	0.10086(9)	0.1213(2)	0.22285(12)	0.0211(4)
O6	0.16234(9)	0.16256(18)	0.35870(12)	0.0186(4)
O7	0.20793(8)	0.18996(18)	0.23398(11)	0.0144(4)
O8	0.18153(8)	-0.03575(18)	0.28187(12)	0.0164(4)
O9	0.37755(8)	0.00272(19)	0.14335(11)	0.0157(4)
O10	0.41954(8)	0.15311(17)	0.25751(11)	0.0135(4)
O11	0.34090(8)	-0.00955(18)	0.27660(11)	0.0157(4)
O12	0.31768(8)	0.19125(18)	0.18654(11)	0.0164(4)
O13	0.24422(8)	0.41763(18)	-0.02155(11)	0.0153(4)
O14	0.22342(9)	0.33110(18)	0.10740(11)	0.0170(4)
O15	0.15253(8)	0.27381(18)	-0.02026(11)	0.0157(4)
O16	0.15764(8)	0.50573(18)	0.03040(11)	0.0153(4)
O17	-0.05283(9)	0.3960(2)	0.03191(12)	0.0206(4)
O18	0.05688(9)	0.34793(19)	0.05739(12)	0.0203(4)
O19	-0.00900(9)	0.2093(2)	0.12596(13)	0.0254(5)
O20	0.01035(9)	0.4546(2)	0.16139(13)	0.0224(4)
O21	0.42903(10)	0.4060(2)	0.16942(14)	0.0292(5)
O22	0.45000(12)	0.4199(2)	0.03530(15)	0.0367(6)
O23	0.53411(9)	0.4268(2)	0.15211(16)	0.0343(6)
O24	0.48122(9)	0.21033(19)	0.11731(12)	0.0202(4)

¹ Site occupancies are discussed in the article

Supplementary Table S2Anisotropic displacement parameters (\AA^2) for stanfieldite from the Brahmin meteorite

Site	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
Mg1	0.0160(7)	0.0197(7)	0.0236(8)	0.000	0.0085(5)	0.000
Mg2	0.0125(5)	0.0147(5)	0.0106(5)	0.0002(3)	0.0014(3)	-0.0009(3)
Mg3	0.0153(6)	0.0202(6)	0.0207(6)	0.0048(4)	0.0063(4)	0.0058(4)
Mg4	0.0136(5)	0.0155(5)	0.0099(5)	-0.0010(3)	0.0008(3)	-0.0009(3)
Mg5	0.0136(5)	0.0156(5)	0.0124(5)	-0.0012(3)	0.0009(3)	-0.0015(3)
Ca1	0.0154(4)	0.0205(4)	0.0181(4)	0.000	0.0050(3)	0.000
Ca2	0.0191(3)	0.0138(3)	0.0113(3)	0.0008(2)	0.0021(2)	0.00033(19)
Ca3	0.0216(3)	0.0221(3)	0.0169(3)	0.0044(2)	-0.0039(2)	-0.0050(2)
Ca4	0.0168(3)	0.0186(3)	0.0113(3)	0.0027(2)	0.0019(2)	0.00172(19)
M5A	0.0190(4)	0.0278(4)	0.0139(4)	0.0079(3)	0.0044(3)	0.0017(3)
P1	0.0127(3)	0.0145(3)	0.0099(3)	0.0009(2)	0.0013(2)	0.0003(2)
P2	0.0114(3)	0.0132(3)	0.0111(3)	-0.0013(2)	0.0018(2)	-0.0006(2)
P3	0.0109(3)	0.0147(3)	0.0098(3)	-0.0011(2)	0.0002(2)	0.0000(2)
P4	0.0111(3)	0.0142(3)	0.0092(3)	0.0012(2)	0.0005(2)	0.0008(2)
P5	0.0172(4)	0.0149(3)	0.0120(4)	-0.0014(2)	-0.0007(3)	0.0014(2)
P6	0.0112(3)	0.0150(3)	0.0243(4)	-0.0007(2)	0.0016(3)	-0.0023(3)
O1	0.0124(9)	0.0184(10)	0.0109(10)	0.0006(7)	0.0006(7)	-0.0008(7)
O2	0.0261(12)	0.0258(11)	0.0144(11)	0.0075(8)	0.0080(8)	0.0073(8)
O3	0.0162(10)	0.0171(9)	0.0141(10)	0.0037(7)	0.0028(8)	0.0003(7)
O4	0.0164(10)	0.0176(10)	0.0207(11)	-0.0015(7)	0.0008(8)	-0.0039(7)
O5	0.0122(10)	0.0309(12)	0.0192(11)	-0.0016(8)	-0.0001(8)	0.0011(8)
O6	0.0245(11)	0.0196(10)	0.0127(10)	-0.0030(8)	0.0065(8)	-0.0021(7)
O7	0.0156(10)	0.0171(9)	0.0114(10)	-0.0037(7)	0.0048(7)	-0.0015(7)
O8	0.0158(10)	0.0142(9)	0.0198(11)	-0.0001(7)	0.0046(8)	-0.0003(7)
O9	0.0163(10)	0.0186(9)	0.0125(10)	-0.0012(7)	0.0031(7)	-0.0025(7)
O10	0.0121(9)	0.0163(9)	0.0116(10)	-0.0017(7)	0.0011(7)	0.0001(7)
O11	0.0168(10)	0.0190(9)	0.0109(10)	-0.0038(7)	0.0011(7)	0.0009(7)
O12	0.0135(10)	0.0184(9)	0.0166(10)	0.0021(7)	0.0006(8)	0.0008(7)
O13	0.0149(9)	0.0209(10)	0.0106(10)	-0.0020(7)	0.0038(7)	-0.0004(7)
O14	0.0228(11)	0.0177(10)	0.0088(10)	0.0054(8)	-0.0020(8)	0.0007(7)
O15	0.0148(10)	0.0149(9)	0.0161(10)	0.0003(7)	-0.0006(7)	-0.0005(7)
O16	0.0164(10)	0.0159(9)	0.0137(10)	0.0027(7)	0.0030(7)	-0.0005(7)
O17	0.0230(11)	0.0228(10)	0.0140(11)	0.0069(8)	-0.0026(8)	0.0000(8)
O18	0.0222(11)	0.0264(11)	0.0132(11)	-0.0006(8)	0.0053(8)	0.0005(8)
O19	0.0262(12)	0.0198(10)	0.0260(12)	-0.0063(8)	-0.0069(9)	0.0093(8)
O20	0.0212(11)	0.0263(11)	0.0199(11)	-0.0050(8)	0.0041(8)	-0.0060(8)
O21	0.0295(13)	0.0246(11)	0.0387(14)	0.0095(9)	0.0208(11)	0.0070(9)
O22	0.0563(17)	0.0238(12)	0.0291(14)	0.0075(11)	0.0046(12)	0.0048(10)
O23	0.0162(11)	0.0187(11)	0.0633(18)	-0.0017(8)	-0.0059(11)	-0.0104(11)
O24	0.0157(10)	0.0169(10)	0.0257(12)	-0.0005(7)	-0.0034(8)	-0.0028(8)

Supplementary Table S3

Selected interatomic bond lengths (Å) for stanfieldite from the Brahmin meteorite

Bond	Length	Bond	Length	Bond	Length
Ca1—O5	2.429(2)	Mg1—O10	2.0253(19)	P1—O1	1.5652(19)
Ca1—O19	2.339(2)	Mg1—O20	1.965(2)	P1—O2	1.510(2)
Ca1—O21	2.764(2)	Mg1—O24	2.617(2)	P1—O3	1.5143(19)
Ca1—O23	2.640(2)			P1—O4	1.5505(19)
		Mg2—O1	2.211(2)		
Ca2—O1	2.4765(19)	Mg2—O4	2.207(2)	P2—O5	1.525(2)
Ca2—O2	2.616(2)	Mg2—O7	2.065(2)	P2—O6	1.515(2)
Ca2—O2	2.288(2)	Mg2—O12	2.022(2)	P2—O7	1.5305(19)
Ca2—O6	2.2629(19)	Mg2—O13	2.042(2)	P2—O8	1.5695(19)
Ca2—O9	2.3620(19)	Mg2—O14	2.0268(19)		
Ca2—O13	2.7266(19)			P3—O10	1.5715(19)
Ca2—O16	2.3816(19)	Mg3—O3	2.052(2)	P3—O11	1.5359(19)
		Mg3—O5	2.701(2)	P3—O12	1.5168(19)
Ca3—O2	2.780(2)	Mg3—O8	2.082(2)	P3—O9	1.522(2)
Ca3—O4	2.529(2)	Mg3—O10	2.079(2)		
Ca3—O6	2.475(2)	Mg3—O12	2.552(2)	P4—O13	1.5366(19)
Ca3—O8	2.742(2)	Mg3—O21	2.003(2)	P4—O14	1.5310(19)
Ca3—O13	2.4405(19)	Mg3—O23	2.125(3)	P4—O15	1.5283(19)
Ca3—O15	2.3986(19)			P4—O16	1.5336(19)
Ca3—O21	2.500(2)	Mg4—O1	2.044(2)		
Ca3—O22	2.662(3)	Mg4—O7	2.033(2)	P5—O17	1.536(2)
		Mg4—O8	2.098(2)	P5—O18	1.544(2)
Ca4—O3	2.4314(19)	Mg4—O11	2.027(2)	P5—O19	1.525(2)
Ca4—O10	2.438(2)	Mg4—O14	2.042(2)	P5—O20	1.532(2)
Ca4—O11	2.4932(19)				
Ca4—O16	2.3488(19)	Mg5—O9	2.162(2)	P6—O21	1.533(2)
Ca4—O17	2.392(2)	Mg5—O15	2.147(2)	P6—O22	1.520(2)
Ca4—O18	2.567(2)	Mg5—O16	2.279(2)	P6—O23	1.531(2)
Ca4—O20	2.503(2)	Mg5—O17	2.074(2)	P6—O24	1.534(2)
Ca4—O24	2.792(2)	Mg5—O18	2.112(2)		
		Mg5—O24	2.017(2)		
M5A—O4	2.194(2)				
M5A—O5	2.291(2)				
M5A—O18	2.494(2)				
M5A—O19	2.200(2)				
M5A—O22	2.099(3)				
M5A—O23	2.262(3)				