

Table S2. Atom coordinates,  $U_{eq}$  ( $\text{\AA}^2$ ) values for stracherite

site	atom	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$sof$	$U^{eq}$
Ba1	Ba	0.3333	0.6667	0.1667	0.976(3)	0.02088(14)
Ca1	Ca	0.83757(10)	0.6751(2)	0.06260(15)	0.841(14)	0.0155(4)
Ca1A	Ca	0.8448(5)	0.6896(10)	0.0766(5)	0.159(14)	0.0155(4)
T1	Si	0.3333	0.6667	0.03341(4)	1	0.0089(2)
T2	P	0.6667	0.3333	0.15557(12)	0.604(9)	0.0103(6)
C1	C	0.689(2)	0.377(4)	0.1619(14)	0.132(3)	0.012
O1	O	0.3333	0.6667	0.96901(12)	1	0.0283(7)
O2	O	0.2037(6)	0.7963(6)	0.0455(3)	0.557(12)	0.0147(9)
O2A	O	0.2137(8)	0.7863(8)	0.0614(3)	0.443(12)	0.0147(9)
O3	O	0.55468(18)	0.1094(4)	0.13464(7)	0.870(12)	0.0283(5)
O4	O	0.0	0.0	0.11824(11)	1	0.0253(6)
F1	F	0.0	0.0	0.0	1	0.0270(8)