

**TABLE 5.** Structural parameters of ideal pyroxenes that have space groups other than *Pc* and repeat after twelve monolayers down a

Pyroxene no. Space group Sequence	11a <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			11b <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			12a <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			12b <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			13 <i>P2<sub>1</sub>cn</i>			14a <i>P2<sub>1</sub>/c</i>		
	ABABABABCBC TO			ABABABABCBC OT			ABABABABCBC TO			ABABABABCBC OT			ABABABACACAC			ABABABCABBC TO		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
TA	1/16	7/12	5/12	7/48	1/6	1/3	1/16	7/12	5/12	7/48	1/6	1/3	1/48	2/3	1/3	7/48	5/6	2/3
TB	5/48	1/12	7/12	3/16	5/6	2/3	5/48	1/12	7/12	3/16	5/6	2/3	1/16	1/3	0	3/16	1/6	1/3
TC	11/48	1/12	11/12	5/16	2/3	1/2	11/48	1/12	11/12	5/16	2/3	1/2	3/16	1/6	5/6	5/16	1/6	1/3
TD	13/48	5/12	7/12	17/48	1/3	1/6	13/48	5/12	7/12	17/48	1/3	1/6	11/48	2/3	0	17/48	5/6	0
TE	19/48	5/12	7/12	23/48	1/6	2/3	19/48	7/12	5/12	23/48	1/6	1/3	17/48	2/3	1/3	25/48	1/3	1/6
TF	7/16	1/12	1/4	1/48	1/6	2/3	7/16	1/12	1/4	1/48	1/6	2/3	19/48	1/3	0	1/48	5/6	1/3
M1A	0	1/12	1/4	1/12	2/3	1/2	0	1/12	1/4	1/12	2/3	1/2	1/8	2/3	2/3	1/12	1/6	0
M2A	0	1/4	3/4	1/12	1/2	0	0	1/4	3/4	1/12	1/2	0	1/8	0	2/3	1/12	0	1/2
M1B	1/6	5/12	1/4	1/4	1/3	1/2	1/6	5/12	1/4	1/4	1/3	1/2	7/24	1/3	2/3	1/4	2/3	5/6
M2B	1/6	1/4	3/4	1/4	1/2	0	1/6	1/4	3/4	1/4	1/2	0	7/24	0	2/3	1/4	1/2	1/3
M1C	1/3	1/12	7/12	5/12	5/6	2/3	1/3	1/12	7/12	5/12	2/3	5/6	11/24	2/3	2/3	5/12	1/6	0
M2C	1/3	1/4	1/12	5/12	1/2	2/3	1/3	1/4	1/12	5/12	1/2	1/3	11/24	0	2/3	5/12	0	1/2
M1D	1/2	5/12	1/4				1/2	5/12	1/4									
M2D	1/2	1/4	3/4				1/2	1/4	3/4									
O1A	1/8	7/12	5/12	5/24	1/6	1/3	1/8	7/12	5/12	5/24	1/6	1/3	1/12	2/3	1/3	5/24	5/6	2/3
O2A	1/24	3/4	7/12	1/8	0	1/6	1/24	3/4	7/12	1/8	0	1/6	0	1/2	1/2	1/8	0	5/6
O3A	1/24	5/12	7/12	1/8	1/6	2/3	1/24	5/12	7/12	1/8	1/6	2/3	0	5/6	1/2	1/8	5/6	1/3
O1B	1/24	1/12	7/12	1/8	5/6	2/3	1/24	1/12	7/12	1/8	5/6	2/3	0	1/3	0	1/8	1/6	1/3
O2B	1/8	1/4	5/12	5/24	0	5/6	1/8	1/4	5/12	5/24	0	5/6	1/12	0	1/3	5/24	0	1/6
O3B	1/8	1/12	11/12	5/24	5/6	1/3	1/8	1/12	11/12	5/24	5/6	1/3	1/12	1/3	1/3	5/24	1/6	2/3
O1C	7/24	1/12	11/12	3/8	2/3	1/2	7/24	1/12	11/12	3/8	2/3	1/2	1/4	1/6	5/6	3/8	1/6	1/3
O2C	5/24	1/4	1/12	7/24	1/2	2/3	5/24	1/4	1/12	7/24	1/2	2/3	1/6	0	0	7/24	0	1/2
O3C	5/24	1/12	7/12	7/24	5/6	2/3	5/24	1/12	7/12	7/24	5/6	2/3	1/6	1/3	0	7/24	1/6	0
O1D	5/24	5/12	7/12	7/24	1/3	1/6	5/24	5/12	7/12	7/24	1/3	1/6	1/6	2/3	0	7/24	5/6	0
O2D	7/24	1/4	5/12	3/8	1/2	0	7/24	1/4	5/12	3/8	1/2	0	1/4	0	1/3	3/8	0	5/6
O3D	7/24	7/12	5/12	3/8	1/6	0	7/24	7/12	5/12	3/8	1/6	0	1/4	2/3	1/3	3/8	5/6	1/3
O1E	11/24	5/12	7/12	13/24	1/6	2/3	11/24	7/12	5/12	13/24	1/6	1/3	5/12	2/3	1/3	11/24	1/3	1/6
O2E	3/8	1/4	3/4	11/24	0	5/6	3/8	1/4	3/4	11/24	0	1/6	1/3	0	0	13/24	0	5/6
O3E	3/8	7/12	3/4	11/24	1/6	1/3	3/8	7/12	3/4	11/24	1/6	2/3	1/3	2/3	0	13/24	1/6	1/3
O1F	3/8	1/12	1/4	23/24	1/6	2/3	3/8	1/12	1/4	23/24	1/6	2/3	1/3	1/3	0	23/24	5/6	1/3
O2F	11/24	1/4	1/12	1/24	0	5/6	11/24	1/4	5/12	1/24	0	5/6	5/12	0	1/3	1/24	0	1/6
O3F	11/24	1/12	7/12	1/24	1/6	1/3	11/24	1/12	5/12	1/24	1/6	1/3	5/12	1/3	1/3	1/24	5/6	2/3

  

Pyroxene no. Space group Sequence	14b <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			15a <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			15b <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			16* <i>Cc</i>			17a <i>P2<sub>1</sub>/c</i>			17b <i>P2<sub>1</sub>/c</i>		
	ABABABCABBC OT			ABABABCBBAC TO			ABABABCBBAC OT			ABABACABABAC			ABABACBCBCC TO			ABABACBCBCC OT		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
TA	1/16	7/12	1/12	1/48	5/6	1/3	1/16	7/12	1/12	1/48	5/12	17/48	1/16	1/12	7/12	1/48	2/3	1/3
TB	5/48	1/12	11/12	7/48	2/3	1/6	5/48	1/12	11/12	1/16	1/12	1/16	5/48	7/12	5/12	7/48	2/3	0
TC	11/48	1/12	1/4	3/16	1/6	1/3	11/48	1/12	1/4	3/16	1/12	25/48	11/48	7/12	1/12	3/16	1/3	1/3
TD	13/48	7/12	5/12	5/16	1/3	1/6	13/48	7/12	5/12	11/48	5/12	11/48	13/48	1/12	1/4	5/16	1/3	0
TE	19/48	7/12	5/12	17/48	5/6	0	19/48	7/12	1/12	17/48	7/12	25/48	19/48	1/12	7/12	17/48	2/3	1/3
TF	7/16	1/12	7/12	23/48	2/3	1/6	7/16	1/12	11/12	19/48	1/12	19/48	7/16	5/12	1/4	23/48	5/6	1/6
M1A	0	1/12	1/4	1/12	1/6	0	1/6	5/12	1/4	1/8	5/12	19/24	0	5/12	1/4	1/12	1/6	1/2
M2A	0	1/4	3/4	1/12	0	1/2	1/6	1/4	3/4	1/8	1/4	7/24	0	1/4	3/4	1/12	0	0
M1B	1/6	5/12	1/4	1/4	2/3	5/6	1/3	1/12	7/12	7/24	1/12	23/24	1/6	1/12	11/12	1/4	2/3	2/3
M2B	1/6	1/4	3/4	1/4	0	5/6	1/3	1/4	1/12	7/24	1/4	11/24	1/6	1/4	5/12	1/4	0	2/3
M1C	1/3	1/12	11/12	5/12	1/6	0	1/2	5/12	1/4	11/24	5/12	19/24	1/3	5/12	11/12	5/12	1/6	1/6
M2C	1/3	1/4	5/12	5/12	0	1/2	1/2	1/4	3/4	11/24	1/4	7/24	1/3	1/4	5/12	5/12	0	2/3
M1D	1/2	5/12	1/4				0	1/12	1/4				1/2	1/12	1/4			
M2D	1/2	1/4	3/4				0	1/4	3/4				1/2	1/4	3/4			
O1A	1/8	7/12	1/12	23/24	5/6	1/3	1/8	7/12	1/12	1/12	5/12	5/12	1/8	1/12	7/12	23/24	2/3	1/3
O2A	1/24	1/4	5/12	1/24	0	1/6	1/24	1/4	5/12	0	3/4	0	1/24	1/4	5/12	1/24	0	2/3
O3A	1/24	7/12	5/12	1/24	5/6	2/3	1/24	7/12	5/12	0	5/12	0	1/24	1/12	11/12	1/24	2/3	2/3
O1B	1/24	1/12	11/12	5/24	2/3	1/6	1/24	1/12	11/12	0	1/12	0	1/24	7/12	5/12	5/24	2/3	0
O2B	1/8	1/4	1/12	1/8	0	5/6	1/8	1/4	1/12	1/12	1/4	11/12	1/8	1/4	1/12	1/8	0	1/3
O3B	1/8	1/12	7/12	1/8	5/6	1/3	1/8	1/12	7/12	1/12	1/12	5/12	1/8	7/12	1/12	1/8	2/3	1/3
O1C	7/24	1/12	1/4	1/8	1/6	1/3	7/24	1/12	1/4	1/4	1/12	7/12	7/24	7/12	1/12	1/8	1/3	1/3
O2C	5/24	1/4	5/12	5/24	0	1/6	5/24	1/4	5/12	1/6	1/4	2/3	5/24	3/4	1/4	5/24	0	0
O3C	5/24	1/12	11/12	5/24	1/3	1/6	5/24	1/12	11/12	1/6	1/12	1/6	5/24	5/12	1/4	5/24	1/3	0
O1D	5/24	7/12	5/12	3/8	1/3	1/6	5/24	7/12	5/12	1/6	5/12	1/6	5/24	1/12	1/4	3/8	1/3	0
O2D	7/24	3/4	1/4	7/24	0	1/2	7/24	1/4	3/4	1/4	3/4	7/12	7/24	1/4	1/12	7/24	0	1/3
O3D	7/24	5/12	1/4	7/24	1/6	0	7/24	5/12	1/4	1/4	5/12	7/12	7/24	1/12	7/12	7/24	1/3	1/3
O1E	11/24	7/12	5/12	7/24	5/6	0	11/24	7/12	1/12	5/12	7/12	7/12	11/24	1/12	7/12	7/24	2/3	1/3
O2E	3/8	1/4	1/12	3/8	0	1/6	3/8	1/4	5/12	1/3	3/4	1/3	3/8	1/4	3/4	3/8	0	0
O3E	3/8	7/12	1/12	3/8	2/3	1/6	3/8	7/12	5/12	1/3	5/12	1/3	3/8	1/12	1/4	3/8	2/3	0
O1F	3/8	1/12	7/12	13/24	2/3	1/6	3/8	1/12	11/12	1/3	1/12	1/3	3/8	5/12	1/4	13/24	5/6	1/6
O2F	11/24	1/4	5/12	11/24	0	5/6	11/24	1/4	1/12	5/12	1/4	7/12	11/24	1/4	1/12	11/24	0	1/3
O3F	11/24	1/12	11/12	11/24	5/6	1/3	11/24	1/12	7/12	5/12	1/12	1/12	11/24	7/12	1/12	11/24	2/3	1/3

Notes: If *r* is the ideal anion radius, then  $a = 24 \sqrt{6} r/3$ ,  $b = 6r$ ,  $c = 2 \sqrt{3}r$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90$ .

\* Pyroxenes have  $a = 6 \sqrt{11} r$  and  $\cos \beta = -c/a$  or  $\beta = 100.025$ .

TABLE 5—continued

Pyroxene no. Space group Sequence	18 P <sub>2,1</sub> cn			19a P <sub>2,1</sub> c			19b P <sub>2,1</sub> c			20a P <sub>2,1</sub> c			20b P <sub>2,1</sub> c			21a P <sub>2,1</sub> cn		
	ABABACBABABC			ABABCACBCBAC TO			ABABCACBCBAC OT			ABABCACBACBC TO			ABABCACBACBC OT			ABABCACBCBAC TO		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
TA	1/16	1/6	1/3	1/48	1/3	1/3	1/16	1/12	1/4	1/16	1/12	11/12	1/48	2/3	1/6	1/48	2/3	0
TB	1/48	2/3	1/6	7/48	1/3	1/3	5/48	5/12	11/12	5/48	7/12	1/12	7/48	5/6	0	1/16	1/6	1/6
TC	3/16	1/3	1/6	3/16	2/3	0	11/48	5/12	1/4	11/48	7/12	1/12	3/16	1/3	1/6	3/16	1/3	0
TD	11/48	5/6	1/3	5/16	2/3	1/3	13/48	1/12	7/12	13/48	1/12	1/4	5/16	1/6	0	11/48	5/6	1/6
TE	17/48	5/6	0	17/48	1/3	0	19/48	1/12	11/12	7/16	5/12	1/4	17/48	5/6	1/3	17/48	5/6	1/6
TF	19/48	1/6	1/3	23/48	1/3	1/3	7/16	7/12	1/12	19/48	1/12	11/12	23/48	5/6	1/3	19/48	1/3	1/3
M1A	1/8	2/3	1/2	1/12	2/3	1/3	0	5/12	1/4	0	5/12	1/4	1/12	1/6	0	1/8	2/3	1/3
M2A	1/8	0	1/2	1/12	1/2	5/6	0	1/4	3/4	0	1/4	3/4	1/12	0	1/2	1/8	0	1/3
M1B	7/24	1/6	0	1/4	1/6	1/6	1/6	1/12	11/12	1/6	1/12	7/12	1/4	2/3	1/6	7/24	1/6	1/6
M2B	7/24	0	1/2	1/4	0	2/3	1/6	1/4	5/12	1/6	1/4	1/12	1/4	0	1/6	7/24	0	2/3
M1C	11/24	2/3	5/6	5/12	2/3	0	1/3	5/12	11/12	1/3	5/12	11/12	5/12	1/6	1/3	11/24	2/3	0
M2C	11/24	0	5/6	5/12	0	0	1/3	1/4	5/12	1/3	1/4	5/12	5/12	0	5/6	11/24	0	0
M1D								1/2	1/12	1/4	1/2	1/12	1/4					
M2D								1/2	1/4	3/4	1/2	1/4	3/4					
O1A	0	1/6	1/3	23/24	1/3	1/3	1/8	1/12	1/4	1/8	1/12	11/12	23/24	2/3	1/6	1/12	2/3	0
O2A	1/12	0	1/6	1/24	0	2/3	1/24	1/4	5/12	1/24	1/4	1/12	1/24	0	5/6	0	0	2/3
O3A	1/12	1/3	1/6	1/24	1/3	2/3	1/24	1/12	11/12	1/24	1/12	7/12	1/24	5/6	1/3	0	2/3	2/3
O1B	1/12	2/3	1/6	5/24	1/3	1/3	1/24	7/12	5/12	1/24	7/12	1/12	5/24	5/6	0	0	1/6	1/6
O2B	0	0	5/6	1/8	0	0	1/8	3/4	1/4	1/8	1/4	5/12	1/8	0	1/6	1/12	0	0
O3B	0	2/3	5/6	1/8	1/6	1/2	1/8	7/12	3/4	1/8	7/12	5/12	1/8	2/3	1/6	1/12	1/3	0
O1C	1/4	1/3	1/6	1/8	2/3	0	7/24	5/12	1/4	7/24	7/12	1/12	1/8	1/3	1/6	1/4	1/3	0
O2C	1/6	1/2	1/3	5/24	0	1/3	5/24	1/4	1/12	5/24	3/4	1/4	5/24	1/2	0	1/6	0	2/3
O3C	1/6	1/6	1/3	5/24	2/3	1/3	5/24	7/12	1/12	5/24	5/12	1/4	5/24	1/6	0	1/6	1/3	2/3
O1D	1/6	5/6	1/3	3/8	2/3	1/3	5/24	1/12	7/12	5/24	1/12	1/4	3/8	1/6	0	1/6	5/6	1/6
O2D	1/4	0	1/6	7/24	0	0	7/24	1/4	3/4	7/24	1/4	1/12	7/24	0	5/6	1/4	0	0
O3D	1/4	2/3	1/6	7/24	2/3	0	7/24	1/12	1/4	7/24	1/12	7/12	7/24	1/6	1/3	1/4	2/3	0
O1E	5/12	5/6	0	7/24	1/3	0	11/24	1/12	11/12	5/8	5/12	1/4	7/24	5/6	1/3	5/12	5/6	1/6
O2E	1/3	0	5/6	3/8	0	1/3	3/8	1/4	1/12	13/24	1/4	1/12	3/8	1/2	0	1/3	0	1/3
O3E	1/3	2/3	5/6	3/8	1/3	1/3	3/8	1/12	7/12	13/24	7/12	1/12	3/8	5/6	0	1/3	2/3	1/3
O1F	1/3	1/6	1/3	13/24	1/3	1/3	3/8	7/12	1/12	13/24	1/12	7/12	13/24	5/6	1/3	1/3	1/3	1/3
O2F	5/12	0	1/2	11/24	0	2/3	11/24	1/4	5/12	5/8	1/4	3/4	11/24	0	1/6	5/12	0	2/3
O3F	5/12	1/6	0	11/24	1/3	2/3	11/24	7/12	5/12	5/8	1/12	1/4	11/24	2/3	1/6	5/12	1/6	1/6

  

Pyroxene no. Space group Sequence	21b P <sub>2,1</sub> cn			22a P <sub>2,1</sub> c			22b P <sub>2,1</sub> c			23 P <sub>2,1</sub> cn			24* C <sub>2,1</sub> c		
	ABABCACBCBAC OT			ABABCACBCBAC TO			ABABCACBCBAC OT			ABABCACBCBAC			ABABCACBCBAC		
	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z	x	y	z
TA	5/48	1/6	1/6	1/16	1/12	1/4	1/48	5/6	1/6	1/48	2/3	0	1/16	1/12	13/16
TB	7/48	2/3	0	5/48	7/12	1/12	7/48	5/6	1/6	1/16	1/6	1/6	5/48	5/12	25/48
TC	13/48	2/3	1/3	11/48	7/12	1/12	3/16	1/3	0	3/16	1/3	1/3	11/48	5/12	5/16
TD	5/16	1/3	0	13/48	1/12	11/12	5/16	1/3	0	11/48	5/6	1/6			
TE	7/16	1/3	1/3	19/48	1/12	7/12	17/48	2/3	1/3	17/48	5/6	1/6			
TF	23/48	5/6	1/6	7/16	5/12	1/4	23/48	2/3	2/3	19/48	1/3	0			
M1A	1/24	2/3	1/3	0	5/12	1/4	1/12	1/6	1/6	1/8	2/3	1/3	0	5/12	3/4
M2A	1/24	1/2	5/6	0	1/4	3/4	1/12	0	2/3	1/8	0	1/3	0	1/4	1/4
M1B	5/24	1/6	5/6	1/6	1/12	7/12	1/4	2/3	0	7/24	1/6	1/6	1/6	1/12	1/4
M2B	5/24	0	1/3	1/6	1/4	1/12	1/4	0	0	7/24	0	2/3	1/6	1/4	3/4
M1C	3/8	2/3	0	1/3	5/12	11/12	5/12	1/6	1/6	11/24	2/3	0			
M2C	3/8	0	0	1/3	1/4	5/12	5/12	0	2/3	11/24	0	0			
M1D					1/2	1/12	1/4								
M2D					1/2	1/4	3/4								
O1A	1/6	1/6	1/6	1/8	1/12	1/4	23/24	5/6	1/6	1/12	2/3	0	1/8	1/12	7/8
O2A	1/12	0	0	1/24	1/4	1/12	1/24	0	1/3	0	0	2/3	1/24	1/4	23/24
O3A	1/12	1/3	0	1/24	1/12	7/12	1/24	2/3	1/3	0	2/3	2/3	1/24	1/12	11/24
O1B	1/12	2/3	0	1/24	7/12	1/12	5/24	5/6	1/6	0	1/6	1/6	1/24	5/12	11/24
O2B	1/6	0	2/3	1/8	3/4	1/4	1/8	0	0	1/12	0	0	1/8	1/4	3/8
O3B	1/6	2/3	2/3	1/8	5/12	1/4	1/8	2/3	0	1/12	1/3	0	1/8	7/12	3/8
O1C	1/3	2/3	1/3	7/24	7/12	1/12	1/8	1/3	0	1/4	1/3	1/3	7/24	5/12	3/8
O2C	1/4	0	0	5/24	1/4	5/12	5/24	0	2/3	1/6	0	2/3	5/24	3/4	5/8
O3C	1/4	2/3	0	5/24	7/12	5/12	5/24	1/6	1/6	1/6	1/3	2/3	5/24	5/12	5/8
O1D	1/4	1/3	0	5/24	1/12	11/12	3/8	1/3	0	1/6	5/6	1/6			
O2D	1/3	0	1/3	7/24	1/4	1/12	7/24	0	1/3	1/4	0	1/3			
O3D	1/3	1/3	1/3	7/24	1/12	7/12	7/24	1/3	1/3	1/4	2/3	1/3			
O1E	1/2	1/3	1/3	11/24	1/12	7/12	7/24	2/3	1/3	5/12	5/6	1/6			
O2E	5/12	0	2/3	3/8	1/4	3/4	3/8	0	0	1/3	0	0			
O3E	5/12	1/3	2/3	3/8	1/12	1/4	3/8	2/3	0	1/3	2/3	0			
O1F	5/12	5/6	1/6	3/8	5/12	1/4	13/24	2/3	2/3	1/3	1/3	0			
O2F	1/2	0	1/3	11/24	1/4	1/12	11/24	0	1/3	5/12	0	2/3			
O3F	1/2	2/3	1/3	11/24	7/12	1/12	11/24	2/3	1/3	5/12	1/6	1/6			

Note: If r is the ideal anion radius, then a = 24 □ 6 r/3, b = 6r, c = 2 □ 3r, α = β = γ = 90.  
 \* Pyroxenes have a = 6 □ 11 r and cosβ = -c/a or β = 100.025.