**Supplementary material**

Table S1. Hydrogen coordinates (x104) and isotropic displacement parameters (Å2 x103)

for ferrostrunzite.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*x y z Uiso*

*\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_*

H(1) 9430(90) 3810(60) 3730(100) 63(7)

H(2) 430(90) 9330(40) 1200(100) 63(7)

H(1A) 3200(80) 3120(70) -640(80) 63(7)

H(1B) 2450(60) 2330(80) 630(90) 63(7)

H(2A) 6700(80) 4660(70) 5700(70) 63(7)

H(2B) 7540(60) 4940(60) 4410(90) 63(7)

H(3A) 4550(80) 5780(70) 1770(60) 63(7)

H(3B) 5440(70) 6200(50) 3370(70) 63(7)

H(4A) 5990(60) 1330(90) 1290(90) 63(7)

H(4B) 5290(100) 940(110) 2720(80) 63(7)

H(5A) 2320(90) 7480(80) 2260(40) 63(7)

H(5B) 2470(90) 7070(70) 3930(70) 63(7)

H(6A) -2150(90) 240(70) 2770(30) 63(7)

H(6B) -2500(90) -410(50) 1090(70) 63(7)

H(7A) 5820(140) 450(90) 5480(160) 63(7)

H(7B) 5280(160) -1030(90) 5170(170) 63(7)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Table S2. Anisotropic displacement parameters (Å2 x103) for ferrostrunzite. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*U11 U22 U33 U23 U13 U12*

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Fe 17(1) 18(1) 16(1) 3(1) 6(1) 9(1)

Fe(1) 16(1) 12(1) 8(1) 2(1) 2(1) 8(1)

Fe(2) 19(1) 12(1) 9(1) 2(1) 2(1) 9(1)

P(1) 17(1) 11(1) 9(1) 2(1) 3(1) 9(1)

P(2) 12(1) 10(1) 10(1) 3(1) 2(1) 5(1)

O(1) 21(2) 39(2) 17(2) 7(2) 9(2) 17(2)

O(2) 26(2) 15(2) 14(2) 0(1) -1(2) 15(2)

O(3) 15(2) 6(2) 13(2) -3(1) -6(2) 2(2)

O(4) 17(2) 13(2) 12(2) 2(1) 0(2) 3(2)

O(5) 19(2) 13(2) 10(2) 1(1) 0(2) 10(2)

O(6) 18(2) 12(2) 11(2) 3(1) 0(2) 7(2)

O(7) 14(2) 25(2) 20(2) 6(2) 5(2) 5(2)

O(8) 17(2) 16(2) 10(2) -2(1) -2(2) 10(2)

OH1 20(2) 12(2) 11(2) 2(1) 0(2) 9(2)

OH2 24(2) 14(2) 7(2) 1(1) 2(2) 10(2)

OW1 26(2) 26(2) 21(2) 2(2) 4(2) 16(2)

OW2 28(2) 30(2) 15(2) 6(2) 6(2) 13(2)

OW3 35(3) 22(2) 18(2) -1(2) -5(2) 16(2)

OW4A 35(7) 34(6) 51(9) 15(5) 29(5) 20(6)

OW4B 35(7) 34(6) 51(9) 15(5) 29(5) 20(6)

OW5 20(2) 35(2) 15(2) -2(2) -4(2) 19(2)

OW6 30(2) 17(2) 12(2) 3(2) 2(2) 10(2)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Table S3. Hydrogen coordinates (x104) and isotropic displacement parameters (Å2 x103)

for ferristrunzite..

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*x y z Uiso*

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

H(1) 9510(90) 3860(50) 3760(120) 50(8)

H(2) 420(90) 9290(40) 1170(120) 50(8)

H(1A) 3300(80) 3020(80) -770(80) 50(8)

H(1B) 2560(50) 2310(90) 540(100) 50(8)

H(2B) 7280(70) 4910(70) 4430(110) 50(8)

H(3A) 4200(80) 5290(100) 1620(70) 50(8)

H(4A) 6070(70) 1640(90) 1380(90) 50(8)

H(4B) 5470(90) 1010(90) 2830(70) 50(8)

H(5A) 2280(100) 7370(90) 2260(40) 50(8)

H(5B) 2430(90) 6880(70) 3900(80) 50(8)

H(6A) -2290(90) 230(80) 2770(40) 50(8)

H(6B) -2630(90) -370(50) 1080(80) 50(8)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Table S4. Anisotropic displacement parameters (Å2 x103) for ferristrunzite. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2U11 + ... + 2 h k a\* b\* U12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

M(1) 20(1) 22(1) 21(1) 3(1) 1(1) 9(1)

Fe(1) 18(1) 17(1) 14(1) 1(1) -1(1) 8(1)

Fe(2) 19(1) 16(1) 13(1) 0(1) -2(1) 7(1)

P(1) 15(1) 17(1) 14(1) 2(1) -1(1) 7(1)

P(2) 17(1) 16(1) 15(1) 2(1) -1(1) 7(1)

O(1) 18(2) 31(3) 24(3) 3(2) 2(2) 11(2)

O(2) 20(2) 22(2) 16(2) 0(2) -4(2) 10(2)

O(3) 22(2) 17(2) 16(2) -1(2) -5(2) 7(2)

O(4) 18(2) 21(2) 20(2) 5(2) 0(2) 4(2)

O(5) 21(2) 22(2) 19(2) 2(2) -1(2) 11(2)

O(6) 27(2) 15(2) 13(2) 2(2) -2(2) 9(2)

O(7) 17(2) 24(2) 29(3) 2(2) 4(2) 7(2)

O(8) 21(2) 22(2) 18(2) -1(2) 2(2) 9(2)

OH1 31(3) 21(2) 15(2) 6(2) 1(2) 14(2)

OH2 31(3) 18(2) 15(2) 3(2) -2(2) 11(2)

OW1 28(3) 29(3) 30(3) 3(2) 3(2) 15(2)

OW2 19(3) 26(3) 22(3) 5(2) 0(2) 6(2)

OW3 31(3) 31(3) 20(3) 3(2) -2(2) 18(2)

OW4 38(3) 35(3) 44(3) 12(2) 16(2) 21(3)

OW5 26(3) 32(3) 21(3) 1(2) -1(2) 16(2)

OW6 26(3) 22(2) 23(3) 3(2) 2(2) 5(2)

OW7 55(8) 55(14) 49(14) 21(10) 17(9) 20(9)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Table S5. Anisotropic displacement parameters (Å2 x103) for strunzite from Hagendorf Süd. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2*U*11 + ... + 2 h k a\* b\* *U*12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*U11 U22 U33 U23 U13 U12*

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Mn 26(2) 26(2) 24(2) 1(1) 8(1) 12(1)

Fe(1) 22(2) 15(2) 10(1) 1(1) 4(1) 9(1)

Fe(2) 23(2) 16(2) 8(1) 0(1) 3(1) 10(1)

P(1) 20(3) 18(3) 9(2) 2(2) 5(2) 10(2)

P(2) 20(3) 12(2) 11(2) 3(2) 5(2) 7(2)

O(1) 27(7) 40(8) 24(7) 5(6) 10(6) 16(6)

O(2) 34(7) 22(7) 14(6) 1(5) -7(5) 15(6)

O(3) 27(6) 17(6) 14(6) 5(5) 4(5) 12(5)

O(4) 27(6) 13(6) 14(6) -2(5) 1(5) 5(5)

O(5) 31(7) 26(7) 13(6) 8(5) 5(5) 15(6)

O(6) 27(7) 13(6) 12(6) 4(5) 2(5) 10(5)

O(7) 16(6) 29(7) 27(7) 9(6) 6(5) 9(6)

O(8) 28(7) 25(7) 13(6) -3(5) 4(5) 11(6)

OH1 26(6) 18(6) 15(6) 3(5) 1(5) 13(5)

OH2 33(7) 22(7) 7(6) 6(5) 3(5) 11(5)

OW1 29(7) 21(7) 31(7) -5(6) 6(6) 12(6)

OW2 30(7) 31(7) 23(7) -2(6) -3(6) 14(6)

OW3 54(8) 22(7) 37(7) -9(6) -2(6) 17(7)

OW5 30(7) 33(8) 24(7) 0(5) 2(5) 19(6)

OW6 29(7) 19(7) 23(7) 1(5) 5(5) 11(5)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Table S6. Anisotropic displacement parameters (Å2 x103) for strunzite from Lord Hill. The anisotropic

displacement factor exponent takes the form: -22[ h2a\*2*U*11 + ... + 2 h k a\* b\* *U*12 ]

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

*U11 U22 U33 U23 U13 U12*

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Mn 17(2) 21(2) 20(2) 0(2) 8(1) 7(2)

Fe(1) 15(2) 13(2) 9(2) 0(1) 4(1) 4(2)

Fe(2) 18(2) 14(2) 11(2) 1(1) 4(1) 6(2)

P(1) 12(3) 14(3) 12(3) 2(3) 7(2) 4(3)

P(2) 18(3) 12(3) 11(3) 0(2) 0(2) 6(3)

O(1) 19(8) 55(11) 17(8) 18(8) 11(7) 19(8)

O(2) 22(8) 12(9) 12(7) -8(6) -4(6) 0(7)

O(3) 25(8) 10(8) 20(8) 10(7) 12(7) 9(7)

O(4) 29(8) 13(9) 16(8) -2(7) 1(7) 5(7)

O(5) 25(8) 23(9) 11(7) 4(6) 6(6) 14(7)

O(6) 16(7) 13(8) 17(8) 0(7) 3(6) 5(7)

O(7) 10(7) 23(9) 25(8) 13(7) 15(6) 6(7)

O(8) 26(8) 17(9) 14(8) -4(7) 5(6) 10(7)

OH1 20(7) 20(9) 10(7) -3(6) 2(6) 13(7)

OH2 24(8) 11(8) 12(7) 1(6) 10(6) 1(7)

OW1 20(8) 23(9) 34(9) 0(7) 8(7) 8(7)

OW2 32(9) 22(9) 21(8) 1(7) 3(7) 5(7)

OW3 41(9) 20(9) 31(9) -1(8) 0(7) 12(8)

OW4 65(13) 54(14) 96(17) -9(12) 7(12) 45(12)

OW5 31(8) 39(10) 20(8) 4(7) 8(7) 26(8)

OW6 25(8) 29(9) 23(8) 9(7) 11(7) 15(7)

OW7 10(40) 170(60) 150(50) 50(40) -10(30) 30(30)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_