

Table 2 atomic coordinates for the raw, data

Composition, x		0.7					0.8					0.9				
Site	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	
Ga1	0.1515 (2)	0	0.1766 (3)	0.4	1	0.15163 (11)	0	0.17651 (16)	0.4	1	0.1524 (3)	0	0.1768 (4)	0.6	1	
Ga2	0.16069 (17)	0.31001 (18)	0.8084 (3)	0.4	0.5	0.15984 (9)	0.30985 (9)	0.80714 (14)	0.4	0.6	0.1603 (2)	0.3103 (3)	0.8113 (4)	0.6	0.8	
Ga2/Fe	0.16069 (17)	0.31001 (18)	0.8084 (3)	0.4	0.5	0.15984 (9)	0.30985 (9)	0.80714 (14)	0.4	0.4	0.1603 (2)	0.3103 (3)	0.8113 (4)	0.6	0.2	
Fe1	0.1540 (3)	0.58588 (18)	0.1907 (4)	0.4	1	0.15191 (15)	0.58299 (10)	0.1918 (2)	0.4	1	0.1521 (4)	0.5853 (3)	0.1895 (6)	0.6	1	
Fe1/Ga																
Fe2	0.03332 (17)	0.7947 (3)	0.6767 (3)	0.4	1	0.03347 (9)	0.79459 (13)	0.67659 (17)	0.4	1	0.0337 (2)	0.7955 (4)	0.6770 (5)	0.6	1	
Fe2/Ga																
O1	0.3302 (9)	0.4286 (8)	0.9796 (15)	0.4	1	0.3275 (5)	0.4355 (4)	0.9837 (9)	0.4	1	0.3252 (13)	0.4297 (12)	0.975 (2)	0.6	1	
O2	0.5120 (10)	0.4270 (8)	0.4940 (14)	0.4	1	0.4982 (5)	0.4342 (5)	0.5140 (8)	0.4	1	0.4969 (14)	0.4326 (13)	0.509 (2)	0.6	1	
O3	0.9946 (8)	0.1947 (9)	0.6638 (13)	0.4	1	0.9841 (5)	0.2054 (4)	0.6516 (7)	0.4	1	0.9924 (13)	0.2052 (13)	0.660 (2)	0.6	1	
O4	0.1621 (10)	0.1866 (7)	0.1390 (14)	0.4	1	0.1511 (5)	0.1894 (4)	0.1554 (7)	0.4	1	0.1543 (14)	0.1953 (11)	0.157 (2)	0.6	1	
O5	0.1784 (9)	0.6607 (8)	0.8387 (15)	0.4	1	0.1756 (5)	0.6766 (4)	0.8491 (8)	0.4	1	0.1703 (14)	0.6763 (12)	0.850 (2)	0.6	1	
O6	0.1690 (9)	0.9367 (8)	0.5090 (16)	0.4	1	0.1708 (5)	0.9326 (4)	0.5111 (9)	0.4	1	0.1687 (14)	0.9387 (13)	0.524 (2)	0.6	1	

Composition, x		1.0					1.1					1.3				
Site	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	
Ga1	0.15237 (8)	0	0.17654 (12)	0.6	1	0.15178 (14)	0	0.1773 (2)	0.6	1	0.1515 (3)	0	0.1802 (6)	0.4	1	
Ga2	0.16029 (6)	0.31028 (7)	0.81124 (10)	0.6	1	0.16129 (11)	0.31125 (13)	0.81389 (18)	0.6	1	0.1621 (2)	0.3089 (2)	0.8108 (3)	0.4	1	
Ga2/Fe																
Fe1	0.15164 (11)	0.58538 (8)	0.18928 (16)	0.6	1	0.15142 (19)	0.58743 (14)	0.1899 (3)	0.6	0.9	0.1517 (4)	0.5861 (2)	0.1822 (6)	0.4	0.8	
Fe1/Ga						0.15142 (19)	0.58743 (14)	0.1899 (3)	0.6	0.1	0.1517 (4)	0.5861 (2)	0.1822 (6)	0.4	0.3	
Fe2	0.03406 (7)	0.79506 (10)	0.67689 (13)	0.6	1	0.03251 (12)	0.79643 (18)	0.6767 (2)	0.6	0.9	0.0329 (2)	0.7960 (4)	0.6784 (4)	0.4	0.8	
Fe2/Ga						0.03251 (12)	0.79643 (18)	0.6767 (2)	0.6	0.1	0.0329 (2)	0.7960 (4)	0.6784 (4)	0.4	0.3	
O1	0.3269 (4)	0.4365 (3)	0.9741 (7)	0.6	1	0.3265 (7)	0.4362 (6)	0.9896 (12)	0.6	1	0.3289 (12)	0.4250 (10)	0.983 (2)	0.4	1	
O2	0.5015 (4)	0.4344 (3)	0.5078 (6)	0.6	1	0.5005 (8)	0.4331 (6)	0.5121 (11)	0.6	1	0.4951 (12)	0.4383 (11)	0.496 (2)	0.4	1	
O3	0.9910 (4)	0.2051 (4)	0.6539 (6)	0.6	1	0.9873 (7)	0.2108 (7)	0.6550 (11)	0.6	1	0.9954 (11)	0.2007 (11)	0.682 (2)	0.4	1	
O4	0.1555 (4)	0.1895 (3)	0.1537 (6)	0.6	1	0.1593 (7)	0.1971 (6)	0.1513 (10)	0.6	1	0.1635 (12)	0.1953 (8)	0.180 (2)	0.4	1	
O5	0.1743 (4)	0.6761 (3)	0.8510 (6)	0.6	1	0.1721 (7)	0.6737 (7)	0.8534 (11)	0.6	1	0.1948 (11)	0.6667 (11)	0.9115 (19)	0.4	1	
O6	0.1659 (4)	0.9391 (4)	0.5116 (7)	0.6	1	0.1696 (7)	0.9326 (6)	0.5136 (13)	0.6	1	0.1567 (13)	0.9405 (11)	0.516 (2)	0.4	1	

Atomic coordinates for the corrected data

Composition, x		0.7					0.8					0.9				
Site	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	
Ga1	0.1529 (2)	0	0.1758 (3)	0.4	1	0.15151 (13)	0	0.1770 (2)	0.8	1	0.15259 (14)	0	0.1774 (2)	0.8	1	
Ga2	0.16016 (19)	0.30999 (19)	0.8089 (3)	0.4	0.5	0.16033 (11)	0.30907 (12)	0.80791 (17)	0.8	0.6	0.16067 (11)	0.31039 (12)	0.81163 (18)	0.8	0.8	
Ga2/Fe	0.16016 (19)	0.30999 (19)	0.8089 (3)	0.4	0.5	0.16033 (11)	0.30907 (12)	0.80791 (17)	0.8	0.4	0.16067 (11)	0.31039 (12)	0.81163 (18)	0.8	0.2	
Fe1	0.1523 (3)	0.5858 (2)	0.1908 (4)	0.4	1	0.15271 (18)	0.58281 (12)	0.1908 (3)	0.8	1	0.15111 (19)	0.58512 (13)	0.1898 (3)	0.8	1	
Fe1/Ga																
Fe2	0.03220 (18)	0.7952 (3)	0.6766 (3)	0.4	1	0.03249 (11)	0.79415 (16)	0.6768 (2)	0.8	1	0.03322 (12)	0.79574 (17)	0.6765 (2)	0.8	1	
Fe2/Ga																
O1	0.3120 (9)	0.4214 (9)	0.9838 (18)	0.4	1	0.3249 (6)	0.4254 (5)	0.9834 (11)	0.8	1	0.3197 (6)	0.4239 (5)	0.9720 (12)	0.8	1	
O2	0.5206 (10)	0.4299 (10)	0.4820 (16)	0.4	1	0.4979 (6)	0.4256 (6)	0.5082 (10)	0.8	1	0.4906 (7)	0.4322 (6)	0.5069 (11)	0.8	1	
O3	0.9981 (10)	0.1956 (10)	0.6634 (15)	0.4	1	0.9853 (6)	0.2065 (5)	0.6526 (9)	0.8	1	0.9959 (6)	0.2067 (6)	0.6623 (10)	0.8	1	
O4	0.1613 (11)	0.1888 (8)	0.1390 (15)	0.4	1	0.1536 (6)	0.1930 (5)	0.1489 (9)	0.8	1	0.1588 (7)	0.1967 (5)	0.1623 (10)	0.8	1	
O5	0.1768 (10)	0.6572 (9)	0.8396 (17)	0.4	1	0.1754 (6)	0.6642 (5)	0.8527 (9)	0.8	1	0.1633 (7)	0.6725 (6)	0.8507 (10)	0.8	1	
O6	0.1648 (10)	0.9355 (9)	0.4967 (18)	0.4	1	0.1715 (6)	0.9325 (5)	0.5148 (11)	0.8	1	0.1722 (6)	0.9388 (6)	0.5266 (12)	0.8	1	

Composition, x		1.0					1.1					1.3				
Site	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	x	y	z	B_{iso}	Occ	
Ga1	0.15236 (8)	0	0.17592 (13)	0.7	1	0.15137 (15)	0	0.1773 (2)	0.8	1	0.1497 (3)	0	0.1848 (5)	0.4	1	
Ga2	0.16079 (7)	0.31021 (7)	0.81148 (11)	0.7	1	0.16161 (12)	0.31103 (14)	0.8144 (2)	0.8	1	0.1624 (2)	0.3086 (2)	0.8093 (4)	0.4	1	
Ga2/Fe					1						0.1525 (4)	0.5859 (2)	0.1755 (5)	0.4	0.8	
Fe1	0.15115 (12)	0.58518 (8)	0.18930 (18)	0.7		0.1515 (2)	0.58744 (15)	0.1890 (3)	0.8	0.9	0.1525 (4)	0.5859 (2)	0.1755 (5)	0.4	0.3	
Fe1/Ga						0.1515 (2)	0.58744 (15)	0.1890 (3)	0.8	0.1						
Fe2	0.03341 (8)	0.79503 (10)	0.67661 (14)	0.7	1	0.03157 (13)	0.79646 (19)	0.6767 (2)	0.8	0.9	0.0320 (2)	0.7972 (4)	0.6777 (4)	0.4	0.8	
Fe2/Ga						0.03157 (13)	0.79646 (19)	0.6767 (2)	0.8	0.1	0.0320 (2)	0.7972 (4)	0.6777 (4)	0.4	0.3	
O1	0.3221 (4)	0.4272 (4)	0.9756 (8)	0.7	1	0.3227 (7)	0.4289 (6)	0.9863 (14)	0.8	1	0.3259 (11)	0.4209 (10)	0.977 (2)	0.4	1	
O2	0.4976 (5)	0.4328 (4)	0.5044 (7)	0.7	1	0.4962 (8)	0.4300 (7)	0.5070 (12)	0.8	1	0.4917 (11)	0.4363 (11)	0.492 (2)	0.4	1	
O3	0.9943 (4)	0.2064 (4)	0.6571 (6)	0.7	1	0.9902 (7)	0.2116 (7)	0.6591 (12)	0.8	1	1.0103 (12)	0.2010 (11)	0.700 (2)	0.4	1	
O4	0.1593 (5)	0.1927 (3)	0.1524 (7)	0.7	1	0.1621 (8)	0.2010 (6)	0.1507 (12)	0.8	1	0.1695 (12)	0.2001 (9)	0.172 (2)	0.4	1	
O5	0.1715 (4)	0.6701 (4)	0.8548 (7)	0.7	1	0.1691 (8)	0.6670 (7)	0.8580 (12)	0.8	1	0.1998 (11)	0.6406 (11)	0.966 (2)	0.4	1	
O6	0.1673 (5)	0.9390 (4)	0.5069 (8)	0.7	1	0.1703 (8)	0.9313 (7)	0.5098 (14)	0.8	1	0.1561 (13)	0.9421 (11)	0.513 (2)	0.4	1	