



JOURNAL OF
APPLIED
CRYSTALLOGRAPHY

Volume 53 (2020)

Supporting information for article:

Localization and steric effect of the lone electron pair of tellurium Te⁴⁺ cation and other cations of the *p*-block elements. A systematic study

D. Hamani, O. Masson and P. Thomas

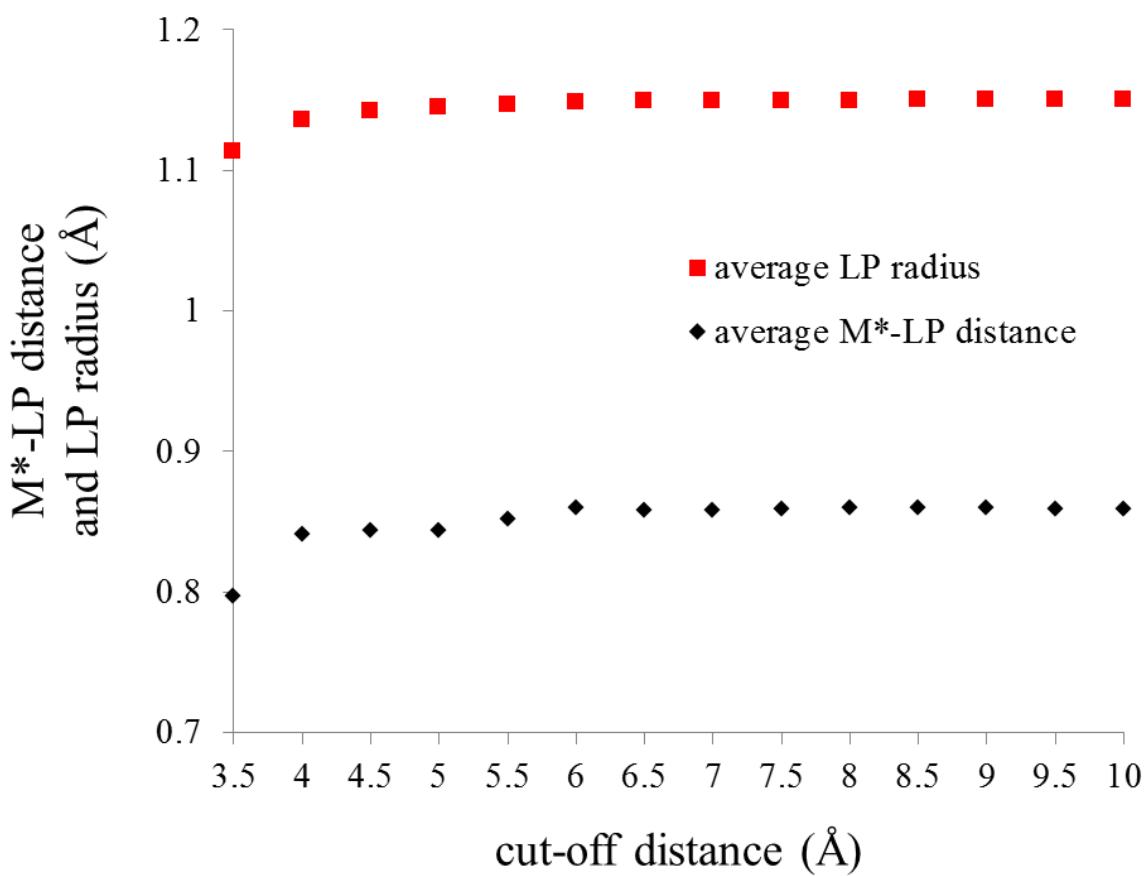


Figure S1 Average M*-LP distance and LP radius as functions of the cut-off distance from 2439 non-equivalent M* positions in 1185 crystal structures.

1) Structure selection criteria.

All the structures used in this work were extracted from the Inorganic Chemistry Structure Database (ICSD) according to the following criteria:

- Selection among experimental inorganic structures up to May 2019;
- Data of high quality according to the ICSD: temperature factors given, standard deviation given for cell parameters, an R-value must be specified, no unusual difference between calculated and measured density;
- No hydrogen element;
- Only one LP cation type and one anion type per structure;
- Only integer oxidation numbers;
- Only one ion type per site;

- Only site occupation factor equal to 1;
- Crystal structure determined at temperature included between 278K and 308K and at ambient pressure;

In a second time, the preselected structures were chosen after the following checks:

- No distance too short between two ions (cation-anion, cation-cation and anion-anion distances were checked) with a tolerance of 30%, *i.e.* if an experimental distance is strictly inferior to 70% of the sum of the ionic radii (in our case using the Shannon effective ionic radii), the structure is rejected.
- All the ions (cations and anions) satisfy the bond valence sum rule (Brown, 2016*b*) using the equation of Brown & Altermatt (1985) to within 0.5 valence units. The bond valence parameters used were extracted from databases established by Adams (2004) and Brown (2016*a*) except for Ge²⁺-O²⁻, (Cempírek & Groat, 2013), Te⁴⁺-F⁻, Te⁴⁺-S²⁻ and Te⁴⁺-Se²⁻ (Hamani, 2019). At the best of our knowledge, bond valence parameters for In⁺-O²⁻ are not yet available; we assumed that the ions in the single preselected structure satisfied this bond valence criterion.

2) Results of M*-LP distances, LP radii and LP relative coordinates from 2380 non-equivalent M* positions in 1138 oxide crystal structures obtained with the present method.

The symbol \bullet indicates a mixed-valence structure, i.e. containing cations of M* element with different charge numbers.

M* type	ICSD #	Structure	Non-equivalent M* position #	M*-LP distance (Å)	r _{LP} (Å)	LP relative coordinates		
						x	y	z
As ³⁺	4287	CuAs ₂ O ₄	1	1.10	1.13	0.114	0.068	0.000
	10400	Zn ₃ As ₂ O ₆	1	1.80	1.39	1.208	0.874	0.500
			2	0.96	1.00	0.106	0.945	0.000
	10436	As ₂ O ₄ \bullet	1	1.23	1.22	0.176	0.250	0.671
	31879	Pa ₂ O ₄	1	1.40	1.25	0.167	0.250	0.632
	32581	SAs ₂ O ₆	1	1.21	1.16	0.425	0.181	0.377
	32586	S ₃ As ₂ O ₁₂	1	1.17	1.19	0.381	-0.029	0.143
			2	1.03	1.09	0.150	0.372	0.334
	63530	S ₂ As ₂ O ₉	1	1.15	1.14	0.389	0.276	-0.022
			2	1.19	1.10	0.167	0.025	0.266
	65416	Cu ₃ K ₂ As ₄ O ₁₂ \bullet	1	1.41	1.35	0.643	0.000	-0.089
	74290	Be ₂ Ca ₃ Si ₂ TiAs ₆ O ₂₀	1	1.32	1.21	0.073	0.310	0.021
	154363	Al ₂ Cs ₂ As ₂ O ₇	1	1.03	1.04	0.000	0.395	0.341
	238290	ThAs ₈ O ₁₈ \bullet	1	1.40	1.21	0.157	0.698	0.924
			2	1.22	1.12	0.653	0.835	0.118
	238612	As ₄ O ₆ (As ₂ O ₃ (cF80))	1	1.27	1.25	0.206	0.206	0.206
	238641	α -As ₂ O ₃	1	0.98	1.04	0.719	0.323	0.049
			2	0.97	1.04	0.446	0.082	0.393
	243844	Fe ₄ As ₅ O ₁₃	1	1.24	1.18	0.558	0.220	0.354
			2	1.18	1.18	0.420	0.711	1.157
			3	1.18	1.18	0.711	0.556	0.643
			4	1.26	1.18	0.477	0.136	0.587
			5	1.25	1.18	0.641	0.497	0.908
	291399	CeAsO ₃	1	1.20	1.12	0.168	0.643	0.108
			2	1.32	1.10	0.420	0.633	0.363
	291400	CeAsO ₃ (HP)	1	1.15	0.97	0.114	0.250	-0.033
	413148	NaAsO ₂	1	1.49	1.37	0.275	0.111	0.270
	413149	KAsO ₂	1	1.11	1.14	-0.012	0.868	0.250
	413150	RbAsO ₂	1	1.10	1.10	-0.003	0.847	0.250
	413151	Cs ₃ As ₅ O ₉	1	1.06	1.04	0.857	0.000	0.564
			2	1.42	1.36	0.333	0.667	0.236
	415666	Sm ₂ As ₄ O ₉	1	1.00	1.07	0.101	0.617	0.189
			2	1.06	1.07	0.146	0.044	0.179
			3	1.05	1.07	0.933	0.235	0.022
			4	1.32	1.07	0.260	0.251	1.060
	417004	Zn ₃ As ₂ O ₆ (porous)	1	1.28	1.25	0.120	0.646	0.613
			2	1.35	1.25	0.895	0.129	0.532
	419758	Co ₂ As ₂ O ₅	1	1.13	1.12	0.239	0.643	0.380

			2	1.47	1.12	0.299	0.940	-0.059
			3	1.22	1.12	0.350	0.026	0.128
			4	1.12	1.12	0.418	0.195	0.870
423416	LaAsO ₃		1	1.01	0.94	0.123	0.250	-0.004
424067	V ₃ As ₂ O ₉		1	1.09	1.10	0.821	0.679	0.936
Bi ³⁺	2650	Mo ₃ Bi ₂ O ₁₂	1	0.34	1.02	0.279	0.362	0.288
			2	0.37	1.04	0.895	0.119	0.051
10481	ReBiO ₄		1	1.34	1.36	0.000	0.402	0.250
27199	α -AsBiO ₄		1	0.20	1.06	0.271	0.156	0.097
29408	Cr ₄ RbBiO ₁₄		1	0.02	0.91	0.287	0.877	0.998
30995	SiBi ₂ O ₅ (HT)		1	0.67	1.16	0.130	0.284	0.215
39227	Ge ₃ Bi ₄ O ₁₂		1	0.54	1.13	0.058	0.058	0.058
39611	GeBi ₁₂ O ₂₀		1	0.73	1.16	0.114	0.338	-0.016
39739	LiMo ₄ RbBi ₂ O ₁₆		1	0.16	1.03	0.496	0.358	0.029
40245	Li ₃ BiO ₃		1	0.91	1.28	0.086	0.896	0.129
			2	0.93	1.28	0.837	0.779	0.766
			3	0.93	1.28	0.260	0.181	0.926
			4	1.05	1.28	0.133	0.883	0.848
50601	Ta ₂ Bi ₄ O ₁₁		1	1.06	1.24	0.665	0.517	0.065
			2	0.67	1.14	0.531	0.036	0.118
			3	0.19	0.99	0.225	0.123	0.514
			4	0.27	1.01	0.274	0.628	0.522
50610	Na ₅ P ₄ BiO ₁₄		1	0.43	1.06	0.083	0.218	0.126
50939	Ca ₂ VBiO ₆		1	0.57	1.13	0.500	0.137	0.250
51091	Cu ₂ VBiO ₆		1	1.28	1.30	0.314	-0.046	0.010
			2	0.71	1.19	0.675	1.016	0.297
			3	0.86	1.27	0.343	0.000	0.359
51716	Cr ₂ Bi ₆ O ₁₅		1	0.78	1.20	0.134	0.079	0.346
			2	0.69	1.20	0.142	0.226	0.825
			3	0.59	1.15	0.364	0.079	0.841
51779	SbBi ₃ O ₇		1	0.69	1.18	0.829	0.499	0.620
			2	0.54	1.10	0.261	0.418	0.900
			3	0.43	1.02	0.425	0.030	0.236
54021	Li ₈ Mo ₇ Bi ₂ O ₂₈		1	0.22	1.04	0.131	1.000	0.000
59350	As ₅ Na ₅ Bi ₂ O ₁₈		1	0.30	0.98	0.404	0.402	0.222
			2	0.10	0.92	0.240	0.061	0.687
59673	Mn ₂ PBiO ₆		1	1.07	1.35	0.179	0.250	-0.029
59720	MnVBiO ₅		1	0.71	1.15	0.154	0.479	0.957
59721	AsMnBiO ₅		1	0.66	1.14	0.158	0.480	0.959
59887	As ₃ K ₃ Bi ₂ O ₁₂		1	0.26	0.98	0.251	0.367	0.335
61061	Ba ₃ P ₄ Bi ₂ O ₁₆		1	0.75	1.14	0.046	0.457	0.200
65133	P ₄ Bi ₂ O ₁₃		1	0.38	1.06	0.327	-0.004	0.465
67073	BaBiO ₃ [•]		1	0.00	0.87	0.000	0.000	0.000
67426	CuSr ₂ Bi ₂ O ₆		1	0.91	1.26	0.000	0.167	0.038
67569	CuW ₂ BiO ₈		1	0.22	0.93	0.705	0.075	0.603
69864	BaBiO _{2.5}		1	1.12	1.29	0.495	0.151	0.400

71055	Ag ₂₅ Bi ₃ O ₁₈ •	1	0.28	0.99	0.333	0.667	0.194
71313	CuBi ₂ O ₄	1	0.80	1.20	0.648	0.352	0.250
71362	α-Na ₃ P ₂ BiO ₈	1	0.43	1.05	0.603	0.200	0.059
		2	0.43	1.06	0.104	0.202	0.046
73122	Ag ₃ BiO ₃	1	1.08	1.26	0.149	0.282	-0.041
		2	1.15	1.21	0.774	0.352	1.050
73123	Ag ₅ BiO ₄	1	1.21	1.19	0.232	0.083	0.133
73184	CaVBiO ₅	1	0.99	1.27	0.091	0.002	0.723
73780	Ca ₆ Bi ₆ O ₁₅	1	0.78	1.21	0.064	0.851	-0.014
		2	0.83	1.21	0.399	1.016	0.377
		3	0.83	1.21	0.870	0.892	0.694
		4	0.76	1.21	0.348	0.508	0.497
		5	1.05	1.21	0.635	0.741	0.451
		6	0.99	1.21	0.724	0.826	0.814
73895	AsMg ₂ BiO ₆	1	0.97	1.44	0.500	0.173	0.250
74338	α-NbBiO ₄	1	0.51	1.11	0.250	0.500	0.679
74440	Sr ₂ V ₃ BiO ₁₁	1	0.23	0.98	0.916	0.373	0.173
75079	MnBi ₁₂ O ₂₀	1	0.72	1.16	0.115	0.332	-0.007
75222	Cu ₃ V ₂ Bi ₄ O ₁₄	1	0.53	1.18	0.134	0.723	0.709
		2	0.48	1.14	0.369	0.212	0.651
75387	Cu ₂ PBiO ₆	1	1.05	1.24	0.182	0.250	-0.051
78088	CaBi ₂ O ₄	1	0.88	1.23	0.907	0.214	0.618
		2	0.82	1.23	0.910	0.407	0.314
		3	0.95	1.23	0.580	0.232	0.172
		4	0.95	1.23	0.576	0.038	0.430
78156	Ba ₂ V ₃ BiO ₁₁	1	0.55	1.03	0.503	1.001	0.315
79500	Bi ₂ O ₄ •	1	0.68	1.22	0.000	0.135	0.250
79768	α-Ti ₄ Bi ₂ O ₁₁	1	0.76	1.23	0.369	0.256	0.170
79857	NiPBiO ₅	1	0.76	1.11	0.285	0.134	0.126
79859	NaSb ₃ Bi ₂ O ₁₁	1	0.51	1.19	0.407	0.407	0.407
80821	SbBiO ₄	1	0.63	1.14	0.000	0.383	0.250
81090	V ₃ Bi ₆ O ₁₆	1	0.75	1.12	0.338	0.250	0.319
		2	1.02	1.27	0.166	0.250	0.611
		3	0.83	1.17	0.296	0.388	0.878
		4	0.73	1.23	0.232	0.445	0.127
82093	Au ₂ Bi ₄ O ₉	1	0.81	1.14	0.792	0.640	0.085
		2	0.35	1.08	0.751	0.417	0.232
		3	0.67	1.14	0.238	0.642	0.532
		4	0.27	1.03	0.282	0.392	0.146
82280	Nb ₂ SrBi ₂ O ₉	1	0.73	1.26	0.484	0.775	0.174
84519	Si ₃ Bi ₄ O ₁₂	1	0.47	1.10	0.058	0.058	0.058
85173	SrBiO ₃ •	1	0.00	0.87	0.000	0.000	0.000
86416	Sr ₂ Bi ₂ O ₅ (I)	1	0.95	1.23	0.230	0.250	0.027
		2	1.20	1.23	0.263	0.250	0.711
87722	SrTa ₂ Bi ₂ O ₉	1	0.82	1.28	0.497	0.718	0.171
88428	W ₂ Bi ₂ O ₉	1	0.50	1.11	0.160	0.498	0.270

		2	0.69	1.14	0.205	1.053	0.418
88455	NaV ₂ Bi ₃ O ₁₀	1	0.42	1.11	0.623	0.610	0.256
		2	0.48	1.12	0.912	0.338	0.642
		3	1.17	1.30	1.157	1.013	0.902
88825	CoPBiO ₅	1	0.76	1.11	0.282	0.134	0.126
89453	CdBi ₂ O ₄	1	1.03	1.30	0.000	0.159	0.140
		2	0.93	1.30	0.112	0.138	0.875
90842	Ba ₃ TeBi ₂ O ₉	1	0.28	0.94	0.333	0.667	0.850
90907	Mg ₂ VBiO ₆	1	1.07	1.40	0.750	1.018	0.822
91234	PZn ₂ BiO ₆	1	0.94	1.32	0.176	0.250	-0.017
91474	CdVBiO ₅	1	0.57	1.14	0.261	0.067	0.441
		2	0.56	1.11	0.723	0.883	0.262
91475	AsCa ₂ BiO ₆	1	0.61	1.13	0.500	0.139	0.246
91476	Mg ₂ PBiO ₆	1	0.90	1.35	0.750	-0.008	0.827
92056	CaTa ₂ Bi ₂ O ₉	1	0.66	1.17	0.508	0.717	0.176
92326	γ (H)-MoBi ₂ O ₆	1	0.45	1.09	0.244	0.184	0.504
		2	0.56	1.14	0.425	0.183	1.018
		3	0.50	1.12	0.597	0.180	0.516
		4	0.46	1.08	0.413	0.049	0.513
		5	0.50	1.10	0.247	0.049	0.007
		6	0.51	1.09	0.066	0.185	0.015
		7	0.43	1.07	0.764	0.185	0.994
		8	0.29	1.05	0.927	0.060	1.009
92916	AsNiBiO ₅	1	0.63	1.13	0.152	0.971	0.449
94229	α -Bi ₂ O ₃	1	0.67	1.10	0.482	0.260	0.365
		2	0.70	1.10	0.124	0.104	0.776
94334	GeBi ₂ O ₅	1	0.56	1.13	0.140	0.272	0.215
95086	MnPBiO ₅	1	0.44	1.10	0.226	0.125	0.125
95895	K ₉ Bi ₅ O ₁₅ •	1	1.41	1.44	0.583	0.113	-0.008
		2	1.25	1.41	0.714	0.394	0.189
		3	1.15	1.37	0.074	0.598	0.393
		4	1.25	1.34	-0.055	0.305	0.435
96263	KP ₄ BiO ₁₂ (IV)	1	0.05	0.93	0.997	0.279	0.818
96409	ErGeBiO ₅	1	0.74	1.18	1.023	0.264	0.107
96510	CsNb ₂ BiO ₇	1	0.37	1.12	0.267	0.222	0.000
97423	TaBiO ₄	1	0.58	1.08	0.250	0.000	0.838
97768	NiBiO ₃ •	1	0.19	0.94	0.013	0.081	0.242
100733	VBiO ₄ (tI24)	1	0.00	1.01	0.000	0.750	0.125
150399	MgVBiO ₅	1	1.14	1.14	0.312	0.144	0.128
150447	Sr _{0.5} V ₂ Bi ₃ O ₁₀	1	0.64	1.17	0.720	0.350	0.517
		2	0.35	1.05	0.432	0.266	0.100
		3	0.83	1.08	0.117	0.116	0.596
152400	β -B ₃ BiO ₆	1	0.47	1.14	0.902	0.299	0.178
152401	γ -B ₃ BiO ₆	1	0.55	1.10	0.378	0.347	0.609
152961	NaP ₄ BiO ₁₂	1	0.04	1.00	0.983	0.783	0.025
153855	MnNiBi ₂ O ₆	1	0.59	1.11	0.096	1.064	0.373

		2	0.51	1.01	0.361	-0.053	0.103
154149	Ba ₂ TaBiO ₆	1	0.00	0.94	0.000	0.000	0.000
155234	Si ₃ Bi ₂ O ₉	1	0.70	1.21	0.333	0.667	0.100
156821	As ₃ Mo ₂ Bi ₇ O ₂₄	1	0.24	1.02	0.250	0.000	0.811
		2	0.54	1.14	0.296	0.168	0.306
		3	0.34	1.08	0.242	0.153	0.562
		4	0.40	1.03	0.243	0.348	0.446
162454	Ba ₂ SbBiO ₆	1	0.00	0.90	0.000	0.000	0.000
162458	As ₆ K ₃ Bi ₅ O ₂₄	1	0.28	1.09	0.414	0.180	0.518
		2	0.36	1.06	0.000	0.139	0.250
		3	0.39	1.04	0.166	0.099	0.707
163387	Ru ₂ Bi ₂ O ₇	1	0.00	0.82	0.500	0.500	0.500
164184	Mn ₇ BiO ₁₂	1	0.28	1.22	-0.005	0.000	0.000
165521	B ₂ ZnBi ₂ O ₇	1	0.45	1.09	0.162	-0.003	0.615
		2	0.58	1.15	0.525	0.154	0.609
166828	B ₄ SrBi ₂ O ₁₀	1	0.36	1.04	0.428	0.100	0.778
		2	0.68	1.14	0.938	0.821	0.834
167355	TiBi ₁₂ O ₂₀	1	0.69	1.10	0.109	0.330	-0.010
171384	ScBiO ₃	1	0.82	1.23	0.120	1.090	0.382
		2	0.48	1.06	0.364	0.001	0.123
171708	AlBiO ₃	1	0.37	1.14	0.000	0.000	-0.028
171709	GaBiO ₃	1	0.51	1.07	0.250	0.000	0.661
172004	CrBi ₈ O ₁₅	1	0.62	1.11	0.630	0.250	0.690
		2	0.47	1.05	0.990	0.250	0.611
		3	0.73	1.13	-0.042	0.250	0.116
		4	0.83	1.20	0.396	0.250	-0.012
		5	0.62	1.15	0.336	0.080	0.726
		6	0.63	1.15	0.608	0.075	0.449
		7	0.62	1.12	0.065	0.389	0.394
		8	0.94	1.20	0.593	0.378	0.977
		9	0.74	1.15	0.409	0.413	0.285
		10	0.37	1.10	1.016	0.091	0.876
172529	ϵ -Bi ₂ O ₃	1	0.98	1.30	-0.140	0.255	0.350
173624	NaBiO ₂	1	0.79	1.18	0.000	0.226	0.250
173837	Mo ₃ Bi ₁₀ O ₂₄	1	0.68	1.14	0.248	0.040	0.889
		2	0.51	1.15	0.311	0.007	0.436
		3	0.35	1.04	0.143	-0.009	0.218
		4	0.45	1.08	0.075	0.044	0.641
		5	0.58	1.07	0.470	0.052	0.738
174074	ReBi ₉ O ₁₇	1	0.32	1.04	0.097	0.257	0.437
		2	1.24	1.32	0.615	0.221	0.629
		3	0.66	1.15	0.178	0.043	0.489
		4	1.00	1.19	0.089	0.459	0.495
		5	1.19	1.23	0.618	0.501	0.734
		6	0.79	1.06	0.118	0.617	0.451
		7	0.80	1.07	0.196	0.858	0.459

		8	0.82	1.23	0.599	0.877	0.172
		9	0.90	1.24	0.591	0.635	0.119
174290	Ba ₂ IrBiO ₆	1	0.00	0.89	0.000	0.000	0.000
183442	CeW ₂ BiO ₉	1	0.36	1.09	0.076	0.433	0.625
183443	ErW ₂ BiO ₉	1	1.28	1.40	0.933	0.250	0.760
183444	EuW ₂ BiO ₉	1	1.30	1.42	0.933	0.750	0.236
183445	SmW ₂ BiO ₉	1	1.31	1.42	0.933	0.250	0.263
185903	ReBi ₃ O ₈	1	0.49	1.07	0.105	0.350	0.378
		2	0.56	1.10	0.111	0.108	0.649
186440	Fe ₄ Bi ₂ O ₉	1	0.83	1.24	0.413	0.124	0.000
189995	β-Bi ₂ O ₃	1	0.96	1.17	-0.011	0.187	0.102
192511	FeBiO ₃	1	0.25	1.06	0.000	0.000	-0.018
192533	BPBi ₄ O ₁₀	1	0.85	1.24	0.014	0.768	0.297
		2	0.20	1.08	0.536	0.513	0.314
		3	0.62	1.09	-0.032	0.533	0.447
		4	0.61	1.14	0.490	0.758	0.430
193189	MnBiO ₃	1	0.75	1.13	0.109	0.658	0.133
193538	VZn ₂ BiO ₆	1	0.51	1.16	-0.033	0.739	0.648
200145	PdBi ₂ O ₄	1	0.86	1.20	0.850	0.150	0.250
201685	γ(L)-MoBi ₂ O ₆	1	0.54	1.15	0.479	0.397	1.025
		2	0.51	1.14	0.495	0.105	1.036
201742	Mo ₂ Bi ₂ O ₉	1	0.42	1.12	0.933	0.129	0.748
		2	0.39	1.08	0.573	0.117	0.747
		3	0.00	0.98	0.256	0.123	0.759
		4	0.40	1.03	0.257	0.122	0.445
202428	K ₃ V ₃ Bi ₂ O ₁₂	1	0.34	1.01	0.251	0.129	0.157
202930	LiPd ₂ BiO ₄	1	1.03	1.47	0.250	0.250	0.733
236561	Al ₄ Bi ₂ O ₉	1	0.74	1.17	0.410	0.117	0.000
237194	Ti ₃ Bi ₄ O ₁₂	1	0.21	1.09	0.032	1.008	0.062
		2	0.50	1.17	0.002	-0.010	0.197
238176	CoSBi ₂ O ₇	1	0.66	1.23	0.224	0.835	0.346
		2	0.62	1.14	0.258	0.127	0.483
238177	CoS ₂ Bi ₆ O ₁₆	1	0.81	1.21	0.801	0.347	0.370
		2	0.47	1.08	1.019	0.884	0.337
		3	0.69	1.24	0.634	0.833	0.980
239965	α-Sn ₂ Bi ₂ O ₇	1	0.16	0.95	0.245	0.280	0.012
		2	0.74	1.04	0.229	0.294	0.478
		3	0.18	0.93	0.987	0.967	0.971
		4	0.81	1.01	-0.020	-0.042	0.757
239966	β-Sn ₂ Bi ₂ O ₇	1	0.16	0.95	0.715	0.122	0.112
		2	0.13	0.96	0.288	0.370	0.361
		3	0.53	0.94	-0.008	0.253	0.024
		4	0.66	0.95	0.000	0.000	0.276
		5	0.04	0.92	0.000	0.000	0.772
239992	α-S ₂ Bi ₂ O ₉	1	0.63	1.16	0.351	0.259	0.130
		2	0.58	1.12	0.849	0.499	0.138

		3	0.50	1.03	0.769	0.899	0.152
		4	0.72	1.20	0.733	0.628	0.432
		5	0.43	1.11	0.326	0.746	0.615
		6	0.24	1.01	0.133	0.004	0.372
241864	MnTeBiO ₆	1	0.27	0.94	0.719	0.288	0.496
244341	Bi ₁₅ K ₇ SrBi ₂ O ₃₀	1	0.04	0.93	0.000	0.000	0.271
245016	B ₂ CaBi ₂ O ₇	1	0.63	1.18	0.160	0.495	0.297
		2	0.72	1.20	0.151	0.502	0.706
245017	B ₂ SrBi ₂ O ₇	1	0.53	1.21	0.337	0.335	0.802
		2	0.48	1.21	0.334	0.321	0.198
245707	Nb ₃ Bi ₅ O ₁₅	1	0.30	1.05	0.000	0.500	-0.055
		2	0.76	1.26	0.209	0.032	0.449
		3	0.87	1.27	0.404	0.512	0.409
245897	α -B ₃ BiO ₆	1	0.51	1.07	0.000	0.102	0.000
247466	CoBiO ₃	1	0.59	1.25	0.000	0.000	0.125
248027	B ₃ Cd ₄ BiO ₁₀	1	0.10	0.91	0.054	0.500	0.500
248244	Ga ₄ Bi ₂ O ₉	1	0.78	1.21	0.410	0.121	0.000
249162	K ₂ PWBiO ₈	1	0.00	0.95	0.250	0.581	0.000
250425	B ₂ Bi ₄ O ₉	1	0.36	1.03	0.976	0.477	0.318
		2	0.34	1.06	0.828	0.015	0.484
		3	0.49	1.06	0.517	0.479	0.185
		4	0.49	1.12	0.307	0.481	0.484
251951	Ta ₇ BiO ₁₉	1	0.00	1.02	0.333	0.667	0.000
260559	Cs ₂ PWBiO ₈	1	0.00	0.98	0.250	0.587	0.000
262690	MgP ₂ Bi ₄ O ₁₂	1	0.49	1.12	0.167	0.680	0.323
		2	0.65	1.23	0.168	0.163	0.167
		3	0.53	1.15	-0.004	0.636	0.177
		4	0.73	1.09	1.000	0.167	0.037
262691	P ₂ ZnBi ₄ O ₁₂	1	0.40	1.09	0.012	0.887	0.184
		2	0.84	1.12	0.188	0.873	0.168
		3	0.74	1.26	0.076	0.624	0.333
		4	0.54	1.18	0.159	0.877	0.322
		5	0.55	1.10	0.039	0.341	0.047
		6	0.57	1.08	0.208	0.590	0.452
		7	0.48	1.13	0.235	0.629	0.320
		8	0.57	1.18	0.073	0.139	0.327
		9	0.31	1.08	0.236	0.136	0.312
		10	0.37	1.06	0.151	0.364	0.306
		11	0.92	1.23	0.207	0.138	0.462
		12	0.40	1.09	0.319	0.886	0.323
		13	0.78	1.20	0.961	0.093	0.955
		14	0.83	1.24	-0.006	0.386	0.164
		15	0.49	1.13	0.089	0.118	0.179
		16	0.58	1.17	0.092	0.620	0.176
263468	WBi ₂ O ₆	1	0.53	1.15	0.478	0.396	1.016
		2	0.65	1.17	0.508	0.109	1.040

265512	Cs ₃ P ₄ SrBiO ₁₄	1	0.28	0.99	0.759	0.140	0.253
265514	CaCs ₃ P ₄ BiO ₁₄	1	0.27	0.99	0.757	0.144	0.244
280092	Ta ₃ Bi ₇ O ₁₈	1	0.24	1.02	-0.020	0.965	0.849
		2	0.47	1.00	0.526	0.244	0.883
		3	0.49	1.02	0.493	0.703	0.797
		4	1.02	1.18	0.458	0.152	0.210
		5	0.52	1.02	0.874	0.429	0.272
		6	0.87	1.15	0.441	0.670	0.216
		7	0.16	1.00	0.020	0.461	0.834
		8	0.98	1.32	0.887	0.595	0.584
		9	0.47	1.02	0.303	0.813	0.031
		10	0.61	1.16	0.629	0.031	0.467
		11	0.42	1.05	0.130	0.323	0.054
		12	0.89	1.31	0.488	0.542	0.490
		13	0.37	0.98	0.846	0.897	0.199
		14	0.68	1.16	0.739	0.107	0.611
281391	CaP ₄ Bi ₆ O ₂₀	1	0.50	1.11	0.702	0.332	0.507
		2	0.29	1.06	0.424	0.256	0.099
		3	0.76	1.09	0.124	0.129	0.593
281392	P ₄ SrBi ₆ O ₂₀	1	0.58	1.13	0.716	0.335	0.510
		2	0.29	1.06	0.432	0.259	0.102
		3	0.75	1.08	0.129	0.126	0.595
281725	GeYbBiO ₅	1	0.81	1.21	1.024	0.269	0.097
391261	LiNb ₃ Bi ₄ O ₁₄	1	0.33	0.99	0.116	0.144	0.954
		2	0.46	1.13	0.143	0.647	0.007
406563	Cs ₃ BiO ₃	1	1.26	1.44	0.335	0.335	0.335
406564	CsBiO ₂	1	1.42	1.50	0.000	0.243	0.250
407208	RbBiO ₂	1	1.38	1.47	0.000	0.263	0.250
407209	KBiO ₂	1	1.17	1.36	0.000	0.252	0.250
407293	K ₃ BiO ₃	1	1.07	1.34	0.910	0.910	0.910
407294	Rb ₃ BiO ₃	1	1.19	1.43	0.596	0.596	0.596
408000	K ₄ Bi ₅ O ₅	1	1.55	1.42	0.820	0.203	0.016
		2	1.20	1.44	0.219	0.517	0.126
409582	K ₃ P ₃ Bi ₂ O ₁₂	1	0.25	0.99	0.249	0.366	0.336
412831	B ₅ Bi ₃ O ₁₂	1	0.65	1.18	0.556	0.250	0.824
		2	0.63	1.14	0.982	0.452	0.117
413621	BBiO ₃	1	0.50	1.04	0.699	0.317	0.115
415115	P ₄ Bi ₁₄ O ₃₁	1	0.49	1.10	0.808	0.038	0.153
		2	0.48	1.08	0.817	0.406	0.161
		3	0.64	1.18	0.815	0.777	0.154
		4	0.71	1.20	0.626	0.594	0.155
		5	0.69	1.20	0.620	0.226	0.157
		6	0.81	1.17	0.504	0.104	0.164
		7	0.66	1.19	0.502	0.689	0.160
		8	0.61	1.14	0.929	0.920	0.280
		9	1.03	1.15	0.942	0.318	0.276

		10	0.70	1.15	0.047	0.415	0.272
		11	0.73	1.14	0.030	0.780	0.279
		12	0.52	1.14	0.747	0.266	0.776
		13	0.76	1.14	0.225	0.599	0.271
		14	0.70	1.14	0.247	0.995	0.284
		15	0.45	1.04	0.388	0.076	0.097
		16	0.59	1.16	0.405	0.462	0.101
		17	0.57	1.16	0.384	0.724	0.097
		18	0.74	1.28	0.592	0.261	0.100
		19	0.41	1.12	0.571	0.899	0.100
		20	0.50	1.08	0.711	0.788	0.096
		21	0.81	1.28	0.692	0.401	0.088
		22	0.51	1.17	0.276	0.091	0.023
		23	0.73	1.27	0.261	0.725	0.028
		24	0.85	1.27	0.656	0.097	0.039
		25	0.58	1.12	0.639	0.696	0.029
		26	0.50	1.12	0.946	0.032	0.028
		27	0.33	1.09	0.963	0.417	0.033
		28	0.87	1.26	0.957	0.785	0.028
415959	Ag ₂ BiO ₃ •	1	0.02	0.93	0.000	0.500	0.609
416023	BaMo ₄ Bi ₂ O ₁₆	1	0.20	1.04	0.998	0.143	0.029
416362	α-B ₈ Bi ₂ O ₁₅	1	0.79	1.23	0.941	0.621	0.728
		2	0.72	1.20	0.494	0.806	0.840
416427	K ₂ MoPBiO ₈	1	0.00	0.94	0.250	0.581	0.000
416822	δ-B ₃ BiO ₆	1	0.35	1.10	0.852	0.190	0.658
417181	B ₄ BaBi ₂ O ₁₀	1	0.56	1.13	0.469	0.254	0.100
		2	0.74	1.10	0.722	0.078	0.418
417568	P ₂ ZnBi ₆ O ₁₅	1	0.52	1.08	0.661	0.659	0.433
		2	0.52	1.14	0.953	0.666	0.700
		3	0.74	1.15	0.645	0.202	0.532
		4	0.64	1.15	0.025	0.145	0.584
		5	0.46	1.13	0.397	0.703	0.329
		6	0.53	1.07	0.726	0.193	0.304
419114	KW ₂ BiO ₈	1	0.00	0.95	0.500	0.227	0.250
422389	SiBi ₁₂ O ₂₀	1	0.70	1.16	0.883	0.666	1.018
422618	K ₃ N ₉ Bi ₂ O ₂₇	1	0.08	1.20	0.303	0.303	0.303
423963	BCo ₂ P ₂ BiO ₁₀	1	0.73	1.25	0.773	0.250	-0.047
424596	BBaBiO ₄	1	1.30	1.41	0.590	0.250	0.339
426231	PBiO ₄ (II)	1	0.13	1.04	0.279	0.152	0.101
426246	PBiO ₄ (III)	1	0.43	1.04	0.072	0.250	0.215
426593	MoPRb ₂ BiO ₈	1	0.00	0.96	0.750	0.667	0.500
426594	PRb ₂ WBiO ₈	1	0.00	0.96	0.750	0.666	0.500
428061	Cs ₂ Mo ₃ NaBiO ₁₂	1	0.25	0.97	0.000	0.000	-0.006
		2	0.31	1.00	0.000	0.000	0.335
428633	AsCoBiO ₅	1	0.65	1.13	0.203	0.177	0.149
430534	BaCoP ₂ Bi ₂ O ₁₀	1	0.64	1.19	0.950	0.206	0.362

			2	0.44	1.06	0.280	0.230	0.373
	431283	BTeBi ₃ O ₉	1	0.24	1.01	0.365	0.286	0.284
Br ⁵⁺	1302	NaBrO ₃	1	1.02	0.86	0.319	0.319	0.319
	24405	HgK ₂ N ₂ Br ₂ O ₁₂	1	1.20	1.02	0.453	0.826	0.000
	31925	Hg ₂ Br ₂ O ₆	1	1.22	0.93	0.219	0.627	0.415
	40287	BaBr ₂ O ₆ (II)	1	1.36	1.15	1.008	0.373	-0.076
	61158	SrBr ₂ O ₆	1	1.27	1.11	-0.070	0.752	-0.017
			2	1.17	0.99	-0.038	0.011	1.042
	66035	BaBr ₂ O ₆ (I)	1	1.48	1.17	0.148	0.362	0.035
	74767	KBrO ₃	1	0.97	0.83	0.602	0.602	0.602
	74768	RbBrO ₃	1	1.05	0.89	0.601	0.601	0.601
	74769	CsBrO ₃	1	1.19	1.00	0.613	0.613	0.613
Cl ⁵⁺	1301	NaClO ₃ (I)	1	0.62	0.41	0.364	0.364	0.364
	10283	RbClO ₃	1	0.71	0.47	0.000	0.000	0.554
	21014	NaClO ₃ (III)	1	0.63	0.41	0.060	0.212	0.113
	31120	KClO ₃	1	0.64	0.42	-0.007	0.250	0.107
	40285	BaCl ₂ O ₆	1	0.62	0.41	0.995	0.329	-0.004
	61157	SrCl ₂ O ₆	1	0.63	0.42	0.998	0.333	0.000
	62063	Cl ₂ O ₆ •	1	0.47	0.24	0.266	0.425	0.169
Ga ⁺	165330	P ₃ Zr ₂ GaO ₁₂	1	0.00	1.40	0.000	0.000	0.000
Ge ²⁺	240922	NaP ₃ Ge ₄ O ₁₂	1	1.16	1.35	0.000	0.000	0.026
			2	1.28	1.35	0.275	0.473	0.100
I ⁵⁺	1391	CaI ₂ O ₆	1	0.91	0.94	0.260	0.060	0.593
			2	1.00	1.06	0.802	0.222	0.544
	1397	CdI ₂ O ₆	1	0.94	0.91	0.290	0.250	0.182
			2	0.95	0.98	0.715	0.086	0.176
	2232	γ-CuI ₂ O ₆	1	1.10	0.97	0.048	0.250	0.107
			2	1.08	1.09	0.670	0.250	0.891
	2642	β-LiIO ₃	1	1.26	1.10	0.087	0.642	0.147
	2826	GeK ₂ I ₆ O ₁₈	1	0.59	0.83	0.691	0.997	0.102
	4327	α-CuI ₂ O ₆	1	0.81	0.90	0.256	-0.157	0.065
			2	0.99	0.99	0.770	0.804	0.628
	14100	AgI ₃ O ₃	1	0.89	0.94	0.142	0.430	0.543
			2	1.06	1.06	0.630	0.467	0.373
	15405	ZrI ₄ O ₁₂	1	0.95	1.03	1.075	0.891	0.269
	16665	CeI ₄ O ₁₂	1	1.22	1.14	0.310	-0.117	0.455
	24341	CrKIO ₆	1	1.15	1.01	0.505	-0.028	0.364
	40361	α-LiIO ₃	1	0.99	1.03	0.333	0.667	0.192
	59645	KMoIO ₆	1	0.92	0.99	0.428	0.745	0.019
	62367	CuNaI ₃ O ₉	1	0.78	0.91	0.797	0.349	0.737
			2	1.07	1.09	0.583	0.880	0.382
			3	1.34	0.99	0.875	0.475	0.221
	78903	I ₄ O ₁₂ •	1	1.13	0.95	0.438	0.406	0.232
	92833	UI ₂ O ₈	1	0.90	0.99	0.645	0.830	0.929
	152757	NdI ₃ O ₉	1	1.09	1.12	0.632	0.736	0.243
			2	0.81	0.93	0.633	0.266	0.025

		3	0.89	0.94	0.316	0.275	0.169
152758	AlI ₃ O ₉	1	0.83	0.95	0.048	0.329	0.574
154674	FeI ₃ O ₉	1	0.81	0.93	0.292	0.958	0.157
156006	LiMoIO ₆	1	1.08	1.06	0.385	0.209	0.277
168504	LaV ₂ IO ₉	1	0.96	0.91	0.752	0.118	0.250
168505	LaVI ₅ O ₁₆	1	1.06	1.02	0.532	0.589	0.000
		2	0.79	0.90	0.502	0.888	0.490
		3	0.93	1.00	0.707	0.696	0.389
		4	1.03	0.96	0.837	0.305	0.390
		5	1.18	1.11	0.297	0.496	0.371
170119	K ₂ MoI ₄ O ₁₄	1	0.95	0.97	0.543	-0.040	0.622
		2	1.14	1.07	0.761	0.134	0.291
170120	Ba ₂ VI ₅ O ₁₇	1	0.94	0.98	0.521	0.054	0.561
		2	1.03	1.07	-0.043	0.211	0.865
		3	0.95	1.00	0.998	0.120	0.508
		4	0.86	0.93	0.680	0.210	0.221
		5	0.83	0.94	0.489	0.122	1.013
170121	LaTiI ₅ O ₁₆	1	1.02	0.99	0.022	0.410	0.503
		2	0.88	0.94	0.162	0.186	0.607
		3	0.76	0.88	0.500	0.385	0.492
		4	1.67	1.19	0.177	0.530	0.094
		5	0.92	0.98	0.300	0.805	0.611
170860	α -AmI ₃ O ₉	1	0.96	0.99	0.322	0.309	0.851
		2	1.06	1.10	0.179	-0.042	0.083
		3	1.06	1.09	0.860	-0.068	0.366
171008	GaI ₃ O ₉	1	0.83	0.95	0.715	0.669	0.905
171248	β -Cs ₂ I ₄ O ₁₁	1	1.10	0.94	0.505	0.091	0.266
		2	1.14	0.96	0.165	0.069	0.237
		3	1.12	0.95	0.822	1.076	0.234
		4	0.89	0.96	0.274	0.303	1.020
171250	LaI ₃ O ₉	1	1.22	1.05	0.391	0.758	0.681
		2	1.06	1.06	0.538	0.731	0.593
		3	0.96	1.01	0.256	0.215	0.728
		4	1.24	1.12	0.341	0.484	0.812
		5	0.88	0.90	0.069	0.733	0.706
		6	1.08	0.99	0.156	0.883	0.823
		7	1.00	1.05	0.791	0.002	0.956
		8	0.93	1.02	0.929	0.416	0.457
		9	0.96	1.00	0.148	0.703	0.585
171330	CfI ₃ O ₉	1	0.81	0.93	0.868	0.233	0.973
		2	1.06	1.11	0.631	0.268	0.742
		3	0.95	0.96	0.178	0.219	0.827
174518	PdI ₂ O ₆	1	0.95	0.99	0.442	0.513	0.819
174520	BaPdI ₄ O ₁₂	1	0.94	0.93	0.466	0.432	0.864
		2	1.23	1.05	0.322	0.261	0.380
		3	0.92	0.94	0.771	0.047	0.587

		4	1.27	1.06	0.828	0.227	0.075
190875	LiZnI ₆ O ₄	1	0.49	0.68	0.250	0.234	0.110
192438	K ₂ ZrI ₆ O ₁₈	1	1.01	1.00	0.313	0.289	0.711
194399	α -AgI ₃ O ₈	1	0.97	0.91	0.762	0.303	0.735
		2	1.02	0.96	0.000	0.500	0.457
		3	0.99	0.93	0.316	0.259	0.232
		4	0.84	0.88	0.500	0.500	0.496
194400	β -AgI ₃ O ₈	1	0.95	0.91	0.199	0.759	0.751
		2	1.01	0.96	0.000	0.000	0.887
		3	1.01	0.93	0.241	0.316	1.002
		4	0.83	0.88	0.000	0.500	0.869
200380	α -GdI ₃ O ₉	1	1.05	1.09	0.414	0.461	0.317
		2	1.09	1.11	0.362	-0.064	0.362
		3	0.95	0.98	0.149	0.697	0.174
200669	Li ₂ RbI ₃ O ₉	1	1.03	1.00	0.196	0.132	0.137
		2	1.05	1.00	0.407	0.062	0.413
		3	0.93	0.99	0.838	0.072	0.426
202679	NaIO ₃	1	1.09	1.00	0.089	-0.142	0.250
244005	CeNaI ₄ O ₁₂	1	1.16	1.00	0.825	0.814	0.244
		2	1.12	1.01	0.768	0.162	0.043
		3	1.15	1.12	0.753	0.625	0.842
		4	0.93	0.93	0.911	0.809	0.703
		5	1.19	0.98	0.127	0.177	0.699
		6	1.16	1.04	0.183	0.865	0.901
		7	1.30	1.11	0.192	0.414	0.096
		8	0.81	0.90	0.992	0.764	0.068
244006	NaSmI ₄ O ₁₂	1	1.12	0.98	0.826	0.810	0.239
		2	1.04	0.99	0.770	0.165	0.045
		3	1.10	1.07	0.753	0.631	0.842
		4	0.89	0.91	0.912	0.812	0.703
		5	1.15	0.96	0.128	0.186	0.696
		6	1.11	1.01	0.182	0.858	0.902
		7	1.26	1.09	0.192	0.408	0.096
		8	0.78	0.87	0.994	0.765	0.068
244007	EuNaI ₄ O ₁₂	1	1.14	0.98	0.826	0.812	0.239
		2	1.04	0.98	0.770	0.169	0.039
		3	1.11	1.09	0.754	0.630	0.841
		4	0.84	0.89	0.913	0.802	0.701
		5	1.15	0.94	0.126	0.181	0.701
		6	1.07	0.98	0.181	0.855	0.900
		7	1.30	1.08	0.192	0.415	0.093
		8	0.79	0.88	0.992	0.772	0.069
244018	AuBaI ₃ O ₁₅	1	0.87	0.95	0.717	0.892	-0.025
		2	1.01	1.04	0.594	0.051	0.255
		3	0.82	0.94	0.523	0.551	0.345
		4	1.11	1.04	0.715	0.526	0.073

		5	0.93	0.93	0.433	0.328	0.282
244440	LaNi ₂ O ₉	1	1.04	1.01	0.291	0.230	0.069
		2	0.91	1.01	0.721	0.347	0.165
		3	0.92	0.97	0.908	0.610	0.068
249137	LiV ₂ O ₈	1	0.91	0.95	0.599	0.139	0.667
		2	0.82	0.92	0.090	0.173	0.662
250786	α -AuNaI ₄ O ₁₂	1	0.88	0.92	0.469	0.445	0.001
		2	1.01	1.03	0.020	0.677	0.804
		3	0.78	0.90	0.110	0.792	0.277
		4	1.19	1.05	0.479	0.592	0.488
250787	β -AuNaI ₄ O ₁₂	1	0.98	1.04	0.338	1.175	0.170
		2	1.30	1.14	0.140	0.794	0.347
250788	AuRbI ₄ O ₁₂	1	0.90	1.00	0.147	0.625	0.806
		2	1.05	0.99	0.769	0.510	0.655
250789	α -AuCsI ₄ O ₁₂	1	0.99	1.01	0.853	0.368	0.192
		2	1.07	1.01	0.229	0.500	0.340
250790	β -AuCsI ₄ O ₁₂	1	0.93	0.93	0.639	0.766	0.536
		2	1.26	1.09	0.275	0.510	0.133
		3	1.00	1.01	0.823	0.219	0.599
		4	0.86	0.95	0.345	0.387	0.741
250861	VZn ₂ IO ₇	1	1.06	1.00	0.215	0.844	0.376
255777	GeRb ₂ I ₆ O ₁₈	1	0.84	0.96	0.627	0.984	0.048
255778	Cs ₂ GeI ₆ O ₁₈	1	0.92	0.97	0.706	1.029	0.117
280739	Ag ₄ U ₄ I ₄ O ₂₄	1	1.32	1.16	0.121	0.263	0.035
		2	1.28	1.15	0.936	0.255	0.428
		3	0.92	0.99	0.366	1.057	0.088
		4	0.80	0.92	0.350	0.482	0.085
405696	S ₂ I ₂ O ₁₁	1	1.00	1.01	0.036	0.116	0.422
		2	0.97	0.99	0.042	0.331	0.031
413033	β -HgI ₂ O ₆	1	0.84	0.86	0.289	0.329	0.491
		2	0.84	0.90	0.560	0.282	0.185
413873	KU ₃ I ₃ O ₁₁	1	1.22	1.11	0.072	0.622	0.572
		2	1.39	1.19	0.642	0.027	0.692
		3	1.11	1.08	0.386	-0.062	0.720
415011	CdI ₂ O ₆	1	0.84	0.89	0.389	0.826	0.332
		2	0.96	0.93	0.438	0.307	0.659
		3	0.92	0.91	0.731	0.817	0.325
		4	0.77	0.88	0.778	0.333	0.642
415819	Co ₂ I ₄ O ₁₂	1	0.77	0.84	0.144	0.468	0.104
		2	1.07	0.86	0.326	-0.106	0.398
		3	0.94	0.95	0.823	-0.076	0.419
		4	0.92	0.91	0.691	0.435	0.072
415820	Mg ₂ I ₄ O ₁₂	1	0.85	0.92	0.155	0.337	0.081
		2	0.98	0.93	0.342	-0.177	0.390
		3	1.05	0.95	0.833	-0.189	0.411
		4	1.02	1.00	0.664	0.312	0.061

415821	Zn ₂ I ₄ O ₁₂	1	0.93	0.94	0.181	0.873	0.064
		2	0.99	0.99	0.319	0.387	0.431
		3	0.81	0.87	0.857	0.366	0.410
		4	0.83	0.96	0.645	0.866	0.099
415822	Mn ₂ I ₄ O ₁₂	1	1.11	1.00	0.181	0.952	0.080
		2	1.00	1.00	0.321	0.426	0.433
		3	0.86	0.98	0.845	0.410	0.400
		4	0.85	0.93	0.664	0.909	0.098
416690	YbI ₃ O ₉	1	0.85	0.92	0.868	0.223	0.967
		2	1.05	1.09	0.631	0.266	0.741
		3	0.99	0.96	0.178	0.223	0.822
416691	LuI ₃ O ₉	1	0.86	0.92	0.870	0.223	0.966
		2	1.03	1.09	0.631	0.272	0.742
		3	0.98	0.96	0.178	0.221	0.823
417267	α -AuKI ₄ O ₁₂	1	0.89	0.97	0.950	0.413	0.731
		2	1.16	1.03	0.965	0.573	0.221
		3	0.92	0.93	0.628	0.774	-0.009
		4	1.11	1.03	0.494	0.628	0.510
417355	α -InI ₃ O ₉	1	0.90	0.97	0.291	0.329	0.931
417356	β -InI ₃ O ₉	1	1.02	0.99	0.450	0.363	0.699
417477	α -YI ₃ O ₉	1	1.04	1.07	0.315	0.462	0.913
		2	0.91	0.96	0.834	0.199	0.855
		3	1.11	1.11	0.637	0.436	0.643
417478	α -DyI ₃ O ₉	1	1.04	1.07	0.318	0.462	0.914
		2	0.94	0.96	0.829	0.197	0.852
		3	1.08	1.09	0.637	0.436	0.639
417479	β -YI ₃ O ₉	1	0.84	0.91	0.134	0.224	0.531
		2	0.99	0.96	0.823	0.221	0.677
		3	1.05	1.09	0.869	0.232	0.258
417480	β -CeI ₃ O ₉	1	0.83	0.93	0.132	0.232	0.523
		2	0.87	0.94	0.816	0.223	0.667
		3	1.13	1.13	0.868	0.239	0.256
417481	PrI ₃ O ₉	1	0.84	0.94	0.132	0.230	0.524
		2	0.89	0.94	0.817	0.221	0.669
		3	1.11	1.12	0.868	0.237	0.256
417482	β -EuI ₃ O ₉	1	0.81	0.93	0.132	0.231	0.527
		2	0.92	0.94	0.818	0.223	0.672
		3	1.06	1.09	0.868	0.232	0.258
417483	β -GdI ₃ O ₉	1	0.79	0.91	0.131	0.234	0.527
		2	0.94	0.94	0.821	0.220	0.673
		3	1.08	1.09	0.869	0.237	0.258
417484	β -TbI ₃ O ₉	1	0.82	0.92	0.133	0.229	0.529
		2	0.93	0.95	0.819	0.219	0.672
		3	1.06	1.10	0.869	0.233	0.258
417485	β -DyI ₃ O ₉	1	0.83	0.92	0.133	0.227	0.529
		2	0.99	0.96	0.825	0.217	0.676

		3	1.05	1.09	0.868	0.232	0.258
417486	β -HoI ₃ O ₉	1	0.86	0.92	0.128	0.225	0.532
		2	0.98	0.96	0.823	0.221	0.676
		3	1.05	1.09	0.869	0.233	0.259
417487	β -ErI ₃ O ₉	1	0.84	0.91	0.135	0.223	0.532
		2	0.99	0.96	0.823	0.221	0.677
		3	1.04	1.09	0.869	0.233	0.259
418336	NaI ₃ O ₈	1	1.05	0.94	0.260	0.177	1.016
		2	1.03	0.98	0.500	0.000	0.421
420852	Ag ₂ TiI ₆ O ₁₈	1	0.80	0.93	0.308	-0.023	0.885
420853	Ag ₂ MoI ₄ O ₁₄	1	1.01	0.96	0.560	0.532	0.125
		2	1.02	1.01	0.237	0.602	0.198
420854	Ag ₂ VI ₃ O ₁₁	1	1.12	1.03	0.141	0.377	0.196
		2	0.90	0.98	0.165	0.604	0.761
		3	0.82	0.92	-0.016	0.515	0.747
420855	Ag ₂ V ₂ I ₄ O ₁₆	1	1.31	1.20	0.250	0.596	0.126
		2	0.85	0.95	0.529	1.038	0.126
		3	0.91	1.00	0.243	0.496	0.375
		4	0.80	0.92	0.511	1.033	0.624
422056	InLiI ₄ O ₁₂	1	0.94	0.99	0.329	0.787	0.146
		2	0.92	0.89	-0.027	0.313	0.138
422057	InNaI ₄ O ₁₂	1	0.94	0.97	0.322	1.094	0.145
		2	0.98	0.95	0.848	0.896	0.195
422058	InRb ₃ I ₆ O ₁₈	1	0.97	0.95	0.840	0.491	0.167
		2	1.01	0.94	0.444	1.100	0.163
		3	0.84	0.90	0.691	0.461	0.592
424632	TiI ₂ O ₇	1	0.87	0.91	0.307	0.274	0.717
424864	KIO ₃	1	0.60	0.78	1.042	1.042	1.042
		2	0.62	0.79	0.544	0.544	0.544
427148	NaYI ₄ O ₁₂	1	1.02	0.98	0.417	0.651	0.742
		2	1.23	1.07	0.405	0.095	0.553
		3	1.14	0.96	0.470	0.684	0.449
		4	0.77	0.86	0.603	0.731	0.576
		5	0.83	0.87	0.685	0.306	0.446
		6	1.00	0.94	0.827	0.332	0.606
		7	1.12	1.06	0.843	0.875	0.803
		8	1.17	0.96	0.772	0.321	0.908
427149	AgYI ₄ O ₁₂	1	1.03	0.97	0.415	0.653	0.734
		2	1.20	1.06	0.402	0.101	0.544
		3	1.15	0.96	0.469	0.680	0.438
		4	0.74	0.85	0.604	0.725	0.571
		5	0.81	0.87	0.684	0.296	0.438
		6	1.01	0.95	0.826	0.337	0.593
		7	1.11	1.06	0.841	0.876	0.795
		8	1.13	0.96	0.771	0.315	0.900
427150	AgLaI ₄ O ₁₂	1	0.83	0.91	0.109	0.731	0.899

			2	1.30	1.13	0.909	0.086	0.872
			3	1.19	1.05	0.918	0.637	0.067
			4	1.18	1.00	0.277	0.685	0.724
			5	1.13	1.01	0.334	0.343	0.925
			6	0.87	0.93	0.189	0.299	0.764
			7	1.17	1.12	0.348	0.880	0.125
			8	1.23	1.01	-0.027	0.330	0.272
427151	AgGdI ₄ O ₁₂		1	0.78	0.88	0.278	0.214	0.293
			2	0.74	0.85	0.200	0.229	0.928
			3	1.16	0.97	0.065	0.178	0.794
			4	1.07	0.98	0.010	0.148	0.093
			5	1.17	0.97	0.368	0.817	0.253
			6	1.04	0.96	0.423	0.837	0.951
			7	1.11	1.07	0.437	0.373	0.151
			8	1.22	1.07	0.998	0.599	0.900
430304	AuK ₂ I ₅ O ₁₅		1	0.97	1.00	0.000	0.490	0.145
			2	0.95	0.99	0.500	0.183	0.358
			3	0.67	0.86	0.500	0.732	0.342
			4	0.82	0.90	0.224	0.463	0.354
430305	β-AuKI ₄ O ₁₂		1	1.04	0.98	0.270	1.012	0.659
			2	0.86	0.96	0.349	-0.099	0.196
432515	AuCuI ₅ O ₉		1	0.80	0.90	0.288	0.357	0.247
			2	1.00	1.07	0.897	0.116	0.134
			3	1.41	1.04	0.393	0.466	0.738
In ⁺	412855	P ₂ In ₂ O ₇ •	1	0.06	1.45	0.318	0.189	0.442
P ³⁺	24407	P ₄ O ₆	1	1.33	1.10	0.847	0.250	0.346
			2	1.29	1.10	0.145	0.250	0.602
			3	1.50	1.27	0.817	0.588	1.000
300205	P ₄ O ₉ •		1	0.94	0.89	0.463	0.463	0.463
406625	P ₄ O ₈ •		1	1.30	1.16	0.067	0.387	-0.096
Pb ²⁺	856	K ₂ P ₄ PbO ₁₂	1	0.33	1.22	0.122	0.089	0.111
	2104	Ti ₃ PbO ₇	1	0.53	1.26	0.199	0.250	0.042
2266	K ₂ PbO ₂		1	1.18	1.50	0.259	0.307	0.533
			2	1.13	1.50	0.476	0.354	0.097
2641	B ₁₀ Pb ₆ O ₂₁		1	0.61	1.28	0.394	0.055	0.291
			2	0.54	1.30	0.834	0.805	0.454
			3	0.70	1.28	0.456	0.653	0.016
2901	V ₂ Pb ₂ O ₇		1	0.19	1.17	0.854	0.421	0.041
			2	0.23	1.23	0.155	0.201	0.367
6109	V ₂ PbO ₆ (I)		1	0.04	1.19	0.128	0.250	0.119
14246	SPb ₂ O ₅		1	0.47	1.28	0.183	0.000	0.118
			2	0.51	1.32	0.032	0.500	0.348
15371	Si ₂ Pb ₃ O ₇		1	0.90	1.47	0.177	0.164	0.040
			2	0.00	1.20	0.000	0.000	0.159
			3	0.00	1.09	0.000	0.000	0.250
18098	Ca ₂ Si ₃ PbO ₉		1	0.76	1.30	0.032	0.142	0.361

23275	P ₂ Pb ₃ O ₈ (II)	1	0.01	1.12	0.333	0.667	0.007
		2	0.87	1.43	0.153	0.181	0.250
26840	SiZnPbO ₄	1	0.59	1.33	-0.029	0.283	0.250
		2	0.77	1.32	0.235	0.051	0.231
32536	Si ₃ Pb ₁₁ O ₁₇	1	0.71	1.32	0.009	-0.025	0.175
		2	0.55	1.32	0.020	0.236	-0.057
		3	0.65	1.32	0.979	0.512	0.305
		4	0.62	1.32	0.010	0.727	0.429
		5	0.65	1.31	0.164	0.399	0.360
		6	0.77	1.31	0.160	0.622	0.059
		7	0.58	1.31	0.275	-0.021	0.114
		8	0.72	1.31	0.267	0.276	0.501
		9	0.70	1.31	0.266	0.528	0.220
		10	0.78	1.31	0.265	0.751	0.288
		11	0.83	1.29	0.475	0.177	0.008
		12	0.59	1.29	0.437	0.386	0.281
		13	0.68	1.29	0.434	0.656	-0.064
		14	0.51	1.29	0.576	0.136	0.308
		15	0.78	1.29	0.532	0.317	0.440
		16	0.63	1.29	0.563	0.872	0.551
		17	0.82	1.31	0.757	0.228	0.070
		18	0.60	1.31	0.721	0.508	0.403
		19	0.59	1.31	0.717	0.761	0.138
		20	0.70	1.31	0.734	0.961	0.264
		21	0.64	1.31	0.839	0.103	0.164
		22	0.80	1.31	0.836	0.867	0.446
35415	Rb ₂ Pb ₄ O ₇ •	1	0.85	1.35	-0.049	0.325	0.236
		2	0.81	1.35	0.064	0.051	0.766
37178	Ga ₁₀ GePb ₃ O ₂₀	1	0.00	1.14	0.000	0.000	0.000
		2	0.91	1.32	0.282	0.000	1.130
38410	B ₂ SPb ₆ O ₁₂	1	0.73	1.37	0.225	0.070	0.073
		2	0.71	1.37	0.617	0.563	0.069
		3	0.52	1.23	0.325	0.250	0.706
		4	0.40	1.26	0.181	0.250	0.309
39399	P ₂ ZnPbO ₇	1	0.23	1.12	0.769	0.160	0.792
39417	MgV ₂ PbO ₇	1	0.16	1.15	0.655	0.112	0.053
		2	0.20	1.18	0.889	0.007	0.759
40180	PbO (HT)	1	0.95	1.50	0.364	1.081	0.250
40920	CrPbO ₄	1	0.10	1.20	0.231	0.156	0.396
40921	SePbO ₄	1	0.08	1.22	0.225	0.155	0.408
48205	Re ₂ PbO ₆	1	0.00	1.30	0.000	0.000	0.000
		2	0.55	1.32	0.000	0.000	0.380
50607	Cu ₃ P ₄ Pb ₃ O ₁₆	1	0.50	1.20	0.250	-0.061	0.750
		2	0.18	1.17	0.094	0.020	0.857
50945	P ₂ SnPbO ₈	1	0.47	1.29	0.263	0.095	0.141
51750	Mo ₃ P ₅ Pb ₃ O ₂₃	1	0.63	1.35	0.136	0.095	0.014

		2	0.66	1.38	0.156	0.750	0.054
55331	V ₂ Pb ₄ O ₉	1	0.72	1.31	0.325	0.250	0.756
		2	0.92	1.25	0.514	0.250	0.625
		3	0.75	1.24	0.687	0.250	0.451
		4	0.70	1.29	0.717	0.046	0.184
		5	0.55	1.29	0.401	0.010	0.960
		6	0.36	1.25	0.483	0.250	0.286
59316	MoPb ₅ O ₈	1	0.51	1.22	0.166	0.272	0.108
		2	0.59	1.22	0.447	0.262	0.150
		3	0.52	1.22	0.691	0.282	0.131
		4	0.49	1.22	0.956	0.285	0.105
		5	0.68	1.22	0.212	0.530	0.117
		6	0.88	1.22	0.687	0.504	0.125
		7	0.47	1.22	0.198	0.916	0.150
		8	0.51	1.22	0.437	0.908	0.145
		9	0.52	1.22	0.688	0.907	0.153
		10	1.42	1.22	0.881	0.908	0.208
60503	Cs ₃ P ₇ Pb ₂ O ₂₁	1	0.16	1.17	0.433	0.185	0.379
		2	0.07	1.12	0.601	0.837	0.115
61339	As ₂ CuPbO ₇	1	0.26	1.19	0.719	0.333	0.706
61344	UPbO ₄	1	0.22	1.24	0.456	0.202	0.250
61677	AsCuPbO ₄	1	0.49	1.27	0.895	0.687	0.739
62101	KNa ₇ Pb ₂ O ₇ •	1	1.36	1.50	0.004	0.242	0.962
62593	P ₄ Pb ₃ O ₁₃	1	0.30	1.22	0.459	0.229	0.246
		2	0.29	1.23	0.288	0.274	0.861
		3	0.14	1.15	0.279	0.798	0.396
62698	N ₂ PbO ₆	1	0.00	1.34	0.000	0.000	0.000
62832	Mo ₂ P ₂ PbO ₁₂	1	0.10	1.20	0.013	0.375	0.240
65245	Rb ₄ PbO ₃	1	1.07	1.42	0.121	0.113	0.199
65442	LiPPbO ₄	1	0.39	1.23	0.781	0.445	-0.030
		2	0.39	1.25	1.018	0.223	0.977
65501	K ₂ Pb ₂ O ₄ •	1	0.83	1.39	-0.040	0.214	0.471
		2	0.88	1.38	0.464	0.207	-0.043
65998	Ag ₂ PbO ₂	1	1.28	1.37	0.000	-0.018	0.250
66088	Ba ₂ Cu ₃ YPb ₂ O ₈	1	0.84	1.37	0.294	0.077	0.606
66379	P ₂ Pb ₃ O ₈ (I)	1	0.00	1.13	0.000	0.288	0.250
		2	0.51	1.26	0.291	0.248	0.345
67482	P ₂ V ₂ PbO ₁₀	1	0.10	1.16	0.055	0.196	0.187
67820	Al ₃ LuPb ₂ O ₈	1	0.51	1.33	0.417	0.417	0.417
69799	β-V ₂ Pb ₃ O ₈	1	0.00	1.19	0.000	0.000	0.000
		2	0.84	1.27	0.421	0.469	0.344
74073	Cu ₃ Sr ₂ YPb ₂ O ₈	1	0.58	1.27	0.211	0.540	0.419
		2	0.63	1.27	0.814	0.040	0.418
74873	K ₆ Pb ₂ O ₅	1	1.17	1.52	0.377	0.373	0.012
		2	1.31	1.62	0.099	0.322	0.041
74874	K ₄ PbO ₃	1	1.02	1.40	0.126	0.112	0.203

75388	P ₃ RbPbO ₉	1	0.22	1.22	0.385	0.061	0.070
		2	0.41	1.23	0.891	0.061	0.027
77438	CuGe ₅ Pb ₃ O ₁₄	1	0.00	1.10	0.250	0.398	0.000
		2	0.59	1.33	0.027	0.737	0.019
78032	P ₄ V ₃ Pb ₂ O ₁₇	1	0.00	1.12	0.113	0.125	0.019
		2	0.63	1.43	0.230	0.469	0.535
78326	Li ₁₀ Si ₂ PbO ₁₀	1	1.08	1.45	0.048	0.000	0.600
79369	As ₆ Cu ₇ Pb ₂ O ₂₄	1	0.12	1.14	0.494	0.543	0.321
79370	As ₆ Cu ₈ Pb ₂ O ₂₄	1	0.15	1.18	0.502	0.551	0.319
79786	MgWPb ₂ O ₆ (II)	1	0.30	1.36	-0.005	0.750	0.121
79993	BaP ₂ PbO ₇	1	0.27	1.26	0.750	0.892	0.412
79994	CoP ₂ PbO ₇	1	0.17	1.17	0.218	0.657	0.211
79995	MnP ₂ PbO ₇	1	0.22	1.20	0.217	0.655	0.216
79996	CuP ₂ PbO ₇	1	0.16	1.16	0.222	0.657	0.210
80321	Co ₃ P ₄ PbO ₁₄	1	0.00	1.18	0.000	0.000	0.500
80322	Fe ₃ P ₄ PbO ₁₄	1	0.00	1.19	0.000	0.000	0.500
80816	KVPbO ₄ •	1	0.51	1.27	-0.040	0.250	0.684
83648	Fe ₂ P ₄ PbO ₁₄	1	0.00	1.08	0.000	0.000	0.000
87820	α-P ₄ V ₃ PbO ₁₇	1	0.09	1.25	0.494	0.440	0.327
89034	MoPbO ₄	1	0.00	1.21	0.500	0.250	0.375
90909	α-PVPbO ₆	1	0.22	1.18	0.823	0.684	0.084
90910	β-PVPbO ₆	1	0.10	1.19	0.100	0.110	0.621
		2	0.34	1.29	0.483	0.250	0.485
91714	CPb ₂ O ₄	1	1.14	1.60	0.016	0.681	0.601
		2	0.65	1.40	1.010	0.245	0.281
92179	Na ₂ P ₂ PbO ₇	1	0.48	1.32	0.133	0.132	0.425
92582	P ₂ Pb ₃ O ₈ (III)	1	0.23	1.18	0.500	0.250	0.060
		2	0.57	1.29	0.907	0.605	0.940
93967	Ag ₂ P ₂ PbO ₇	1	0.46	1.30	0.100	0.627	0.411
94438	V ₅ Pb ₂ O ₁₂	1	0.31	1.22	0.268	0.389	0.687
95653	Mn ₅ V ₂ Pb ₃ O ₁₆	1	0.00	1.08	0.333	0.667	0.235
		2	0.00	1.29	0.000	0.000	0.000
96454	Mo ₂ P ₄ Pb ₂ O ₁₆	1	0.30	1.20	0.357	0.130	0.035
97663	BCrPbO ₄	1	0.68	1.29	0.012	0.250	0.437
97664	BMnPbO ₄	1	0.39	1.19	0.005	0.250	0.391
97665	BFePbO ₄	1	0.63	1.29	0.012	0.250	0.422
98572	α-AlBPbO ₄	1	0.68	1.31	0.012	0.250	0.435
98573	β-AlBPbO ₄	1	0.73	1.36	0.988	0.617	0.078
98701	P ₂ Pb ₄ O ₉	1	0.51	1.34	0.945	0.856	0.125
		2	0.80	1.39	0.396	0.756	0.379
		3	1.20	1.39	0.326	1.064	0.010
		4	0.73	1.39	0.319	0.431	0.096
98702	P ₂ Pb ₈ O ₁₃	1	0.68	1.38	0.993	0.000	0.305
		2	0.79	1.39	0.386	0.000	0.933
		3	0.66	1.38	0.266	0.500	0.534
		4	0.73	1.38	0.398	0.000	0.332

		5	0.80	1.39	0.112	0.273	0.960
		6	0.71	1.38	0.206	0.198	0.320
99432	As ₂ Pb ₈ O ₁₃	1	0.70	1.40	0.992	0.000	0.304
		2	0.81	1.42	0.384	0.000	0.930
		3	0.72	1.40	0.262	0.500	0.533
		4	0.75	1.40	0.396	0.000	0.329
		5	0.82	1.42	0.110	0.274	0.957
		6	0.73	1.40	0.207	0.201	0.317
99433	CrPb ₅ O ₈	1	0.67	1.33	0.160	0.283	0.121
		2	0.66	1.29	0.459	0.285	0.141
		3	0.64	1.29	0.679	0.288	0.129
		4	0.66	1.33	0.971	0.298	0.114
		5	0.84	1.33	0.210	0.511	0.143
		6	0.92	1.29	0.653	0.506	0.138
		7	0.60	1.29	0.196	0.914	0.164
		8	0.63	1.29	0.438	0.910	0.160
		9	0.67	1.33	0.691	0.907	0.167
		10	0.66	1.33	0.932	0.946	0.176
99614	MnSb ₂ Pb ₅ O ₁₁	1	0.75	1.35	0.000	1.065	0.250
		2	0.66	1.35	0.349	0.224	0.750
		3	0.62	1.35	0.000	0.205	0.468
100269	Ge ₃ PbO ₇	1	0.37	1.24	0.176	0.132	0.187
100275	GePb ₃ O ₅	1	0.60	1.27	0.903	0.043	0.017
		2	0.58	1.27	0.547	0.206	0.954
		3	0.52	1.27	0.449	0.513	0.447
100296	SSi ₃ Zn ₂ Pb ₄ O ₁₅	1	0.23	1.19	0.140	0.015	0.199
		2	0.29	1.21	0.174	-0.030	0.879
		3	0.28	1.21	0.558	0.038	0.873
		4	0.97	1.57	0.740	0.573	0.439
100681	α -SPb ₃ O ₆	1	0.59	1.35	0.128	0.250	0.322
		2	0.71	1.35	0.517	0.250	0.440
		3	0.72	1.41	0.192	0.250	0.923
150381	UV ₂ PbO ₉	1	0.37	1.28	0.222	0.177	0.009
152084	N ₂ Pb ₃ O ₈	1	0.65	1.36	-0.005	0.750	0.191
		2	0.90	1.39	0.252	0.750	0.950
		3	0.56	1.39	0.388	0.250	0.081
152277	VPbO ₃	1	0.50	1.33	0.000	0.000	0.108
152567	Li ₂ Ti ₆ PbO ₁₄	1	0.06	1.22	0.000	0.346	0.124
153273	Fe ₁₂ PbO ₁₉	1	0.00	1.35	0.667	0.333	0.250
155324	MoP ₃ Pb ₂ O ₁₁	1	0.20	1.19	0.134	0.127	0.426
		2	0.23	1.17	0.098	0.536	0.782
155452	Cu ₂ P ₂ PbO ₈	1	0.16	1.14	0.009	0.878	0.924
157608	P ₃ Ti ₂ Pb _{0.5} O ₁₂	1	0.00	1.17	0.000	0.000	0.000
159977	Al ₂ Si ₂ Pb ₂ O ₉	1	0.49	1.25	0.490	0.325	0.584
161704	HfPbO ₃	1	0.38	1.31	0.781	0.131	0.000
		2	0.32	1.30	0.766	0.116	0.500

162048	TiPbO ₃	1	0.37	1.36	0.000	0.000	0.031
162102	Cu ₃ Sn ₄ PbO ₁₂	1	0.00	1.34	0.000	0.000	0.000
162757	CrP ₂ Pb ₅ O ₁₃	1	0.17	1.11	0.186	0.250	0.277
		2	0.62	1.28	0.412	0.250	0.501
		3	0.29	1.14	0.819	0.040	0.427
		4	0.68	1.10	0.575	0.250	0.212
165644	Cr ₂ P ₄ Pb ₃ O ₁₆ (mP50)	1	0.56	1.39	0.293	0.194	0.465
		2	0.00	1.13	0.000	0.500	0.500
165645	Cr ₂ P ₄ Pb ₃ O ₁₆ (tP100)	1	0.63	1.43	0.057	0.322	0.229
		2	0.00	1.14	0.134	0.134	0.000
166089	CPbO ₃	1	0.03	1.21	0.250	0.417	0.759
168928	P ₂ VZnPbO ₉	1	0.26	1.23	0.153	0.001	0.407
169195	CoTePb ₂ O ₆	1	0.06	1.28	0.000	0.000	0.255
170716	CrHg ₃ Pb ₂ O ₈	1	0.47	1.26	0.139	0.320	0.926
		2	0.59	1.29	0.970	0.958	0.677
171056	P ₂ UPb ₂ O ₁₀	1	0.28	1.23	0.300	0.551	0.231
		2	0.73	1.40	0.035	0.840	0.779
171139	B ₂ Zn ₂ PbO ₆	1	1.17	1.56	0.750	0.750	0.675
172521	GePbO ₃	1	0.91	1.42	0.753	-0.013	0.100
174072	MnS ₂ PbO ₈	1	0.12	1.21	0.264	0.264	0.000
174110	HfPbO ₃	1	0.51	1.36	0.795	0.122	0.000
		2	0.34	1.36	0.768	0.117	0.500
182557	CdUPb ₂ O ₆	1	0.55	1.18	1.042	-0.030	0.270
182928	TiPbO ₃ (PX)	1	0.84	1.41	0.601	0.629	0.000
183637	B ₂ Pb ₄ O ₇	1	1.15	1.35	0.387	0.150	0.190
		2	0.87	1.35	0.403	0.632	0.185
		3	0.64	1.35	0.165	0.874	0.354
		4	0.75	1.35	0.397	0.886	0.597
185673	B ₄ PbO ₇	1	0.36	1.29	0.000	0.273	0.079
186380	BaCoFePbO ₅	1	0.61	1.28	-0.007	0.250	0.540
188677	Mn ₃ P ₃ PbO ₁₂	1	0.12	1.27	0.000	0.250	0.904
188731	Mn ₃ P ₂ TePb ₃ O ₁₄	1	0.46	1.34	0.544	0.000	0.000
192532	BPPb ₄ O ₈	1	0.36	1.24	0.908	0.234	0.081
		2	0.58	1.25	0.429	0.271	0.083
		3	0.46	1.25	0.752	0.933	0.307
		4	0.46	1.25	0.807	0.520	0.294
192806	B ₆ Ba ₂ PbO ₁₂	1	0.00	1.15	0.333	0.667	0.167
193588	B ₆ Cd ₂ PbO ₁₂	1	0.44	1.21	0.928	0.466	0.120
194795	CsPPbO ₄	1	0.45	1.25	0.657	0.750	0.359
195305	P ₂ PdPbO ₇	1	0.02	1.09	0.240	0.250	0.258
201430	Re ₂ PbO ₈	1	0.16	1.18	0.000	0.000	0.036
		2	0.00	1.01	0.333	0.667	0.471
201748	P ₂ Pb ₂ O ₇	1	0.25	1.17	0.237	0.239	0.654
		2	0.24	1.17	0.696	0.221	0.848
		3	0.34	1.28	0.089	0.840	0.833
		4	0.13	1.14	0.642	0.626	0.641

202214	PtPb ₂ O ₄	1	0.64	1.21	0.375	0.051	0.000
		2	0.58	1.21	0.875	0.577	0.500
238002	SbYPb ₂ O ₆	1	0.59	1.29	0.118	0.686	0.133
238676	β -B ₁₄ Ba ₄ Zn ₄ Pb ₂ O ₃₁	1	0.86	1.38	0.813	0.234	0.045
		2	0.69	1.38	0.183	0.170	0.072
238677	α -B ₁₄ Ba ₄ Zn ₄ Pb ₂ O ₃₁	1	0.85	1.34	0.660	1.042	0.934
		2	0.72	1.34	0.532	0.439	0.984
238678	γ -B ₁₄ Ba ₄ Zn ₄ Pb ₂ O ₃₁	1	0.95	1.41	0.816	0.798	0.169
		2	0.81	1.41	0.397	0.491	0.191
238732	Al ₂ Si ₂ PbO ₈	1	0.31	1.21	0.255	1.002	0.049
239067	Mn ₂ Ni ₆ Te ₃ PbO ₁₈	1	0.00	1.22	0.000	0.000	0.000
239068	Cd ₂ Ni ₆ Te ₃ PbO ₁₈	1	0.00	1.22	0.000	0.000	0.000
239435	MnWPb ₂ O ₆	1	0.33	1.35	0.630	0.135	0.759
		2	0.44	1.33	0.618	0.626	0.766
239629	B ₃ Cs ₂ Li ₃ P ₆ Pb ₂ O ₂₄	1	0.31	1.19	0.420	0.080	0.920
		2	0.48	1.39	0.414	0.586	0.086
239790	B ₆ Pb ₆ O ₁₅ (I)	1	0.72	1.26	0.714	0.846	0.065
		2	1.09	1.35	0.142	0.801	0.927
		3	0.79	1.35	0.403	0.533	0.123
		4	0.52	1.26	0.878	0.571	0.299
		5	0.52	1.26	0.750	-0.012	0.447
		6	0.59	1.35	0.349	0.428	0.746
244458	SePb ₂ O ₅	1	0.47	1.32	0.178	0.000	0.117
		2	0.58	1.26	0.526	0.000	0.349
246351	MnPbO ₃	1	0.00	1.33	0.000	0.998	0.250
		2	0.08	1.28	0.992	0.336	0.092
248064	Ge ₉ Pb ₁₅ O ₃₃	1	0.18	1.18	0.333	0.667	0.318
		2	0.40	1.30	0.333	0.667	0.696
		3	0.53	1.40	0.667	0.333	0.374
		4	0.22	1.20	0.667	0.333	0.651
		5	0.24	1.29	0.333	0.667	0.974
		6	0.01	1.05	0.667	0.333	0.996
		7	1.03	1.44	0.227	0.178	0.120
		8	1.10	1.44	0.180	0.143	0.853
		9	1.01	1.44	0.141	0.959	0.495
248670	Be ₂ P ₂ PbO ₈	1	0.08	1.20	0.755	0.584	0.109
248842	P ₃ VPb ₄ O ₁₄	1	0.59	1.23	0.366	-0.021	0.152
		2	0.38	1.21	0.496	0.184	0.370
		3	0.45	1.26	0.174	-0.002	0.327
		4	0.24	1.20	0.622	0.955	0.156
		5	0.16	1.13	0.871	0.966	0.343
		6	0.11	1.20	0.248	0.741	0.484
		7	0.36	1.22	-0.004	0.688	0.285
		8	0.09	1.19	0.770	0.752	0.989
249142	P ₂ VPb ₂ O ₉	1	0.75	1.35	0.428	0.134	0.322
		2	0.26	1.20	0.871	0.131	0.714

250220	SiPbO ₃	1	0.72	1.41	0.525	0.092	0.612
		2	0.93	1.42	0.342	0.379	0.873
		3	0.79	1.31	0.227	0.308	0.054
250533	B ₁₀ Zn ₂ Pb ₄ O ₂₁	1	0.74	1.41	0.876	0.938	0.404
		2	0.76	1.46	0.887	0.693	0.380
		3	0.49	1.35	0.094	0.814	0.610
		4	1.05	1.59	0.126	0.550	0.621
250750	B ₃ NPb ₃ O ₁₀	1	0.68	1.40	0.599	0.451	0.700
		2	0.72	1.40	0.333	0.750	0.500
251155	BLiP ₂ Pb ₄ O ₁₁	1	0.73	1.23	0.339	0.749	1.016
		2	0.31	1.19	0.490	0.719	0.834
		3	0.16	1.15	0.341	0.282	0.275
		4	0.51	1.22	1.003	0.307	0.076
251950	Ta ₄ PbO ₁₁	1	0.22	1.21	0.000	0.000	0.326
		2	0.20	1.18	0.000	0.000	0.174
252311	P ₂ TeZn ₃ Pb ₃ O ₁₄	1	0.40	1.32	0.455	0.455	0.000
252312	Mg ₃ P ₂ TePb ₃ O ₁₄	1	0.40	1.30	0.548	0.000	0.000
252313	P ₂ WZn ₃ Pb ₃ O ₁₄	1	0.36	1.28	0.000	0.449	0.000
252314	TeV ₂ Zn ₃ Pb ₃ O ₁₄	1	0.48	1.35	0.451	0.451	0.000
252389	Mn ₇ PbO ₁₂	1	0.00	1.24	0.000	0.000	0.000
252804	WPbO ₄ (tI24)	1	0.00	1.20	0.500	0.750	0.125
253684	Li ₂ P ₁₂ Pb ₉ O ₄₀	1	0.00	1.09	0.000	0.000	0.000
		2	0.07	1.18	0.231	0.643	0.498
		3	0.60	1.26	0.524	0.704	0.996
		4	0.14	1.25	0.393	0.672	0.748
		5	0.00	1.30	0.834	0.001	0.752
253685	Ba ₇ Li ₂ P ₁₂ Pb ₂ O ₄₀	1	0.73	1.28	0.511	0.734	0.990
253686	Ba ₂ Li ₂ P ₁₂ Pb ₇ O ₄₀	1	0.00	1.09	0.000	0.000	0.000
		2	0.68	1.28	0.485	0.279	0.008
		3	0.08	1.23	0.243	0.644	0.497
		4	0.40	1.32	0.596	0.366	0.263
253687	Ba ₆ Li ₂ P ₁₂ Pb ₃ O ₄₀	1	0.00	1.13	0.000	0.000	0.000
		2	0.71	1.27	0.514	0.728	0.992
254371	Ta ₂ V ₂ PbO ₁₁	1	0.00	1.37	0.000	0.000	0.000
254645	MgP ₂ Pb ₂ O ₈	1	0.46	1.22	0.204	0.747	0.284
		2	0.55	1.33	0.654	0.494	0.334
254646	P ₈ Zn ₈ Pb ₄ O ₃₂	1	0.52	1.31	0.263	0.745	0.127
		2	0.56	1.30	0.513	1.001	0.127
		3	0.50	1.31	0.507	0.492	0.127
		4	0.59	1.35	0.252	0.234	0.129
255742	B ₂ SPb ₄ O ₁₀	1	0.43	1.20	0.451	0.336	0.900
		2	0.58	1.32	0.132	0.321	0.150
		3	0.49	1.26	0.163	0.569	0.349
		4	0.66	1.26	0.323	0.548	0.633
255766	B ₁₅ K ₇ Y ₂ PbO ₃₀	1	0.00	1.13	0.667	0.333	0.833
255769	B ₁₅ Gd ₂ K ₇ PbO ₃₀	1	0.00	1.17	0.333	0.667	0.667

261031	SbTmPb ₂ O ₆	1	0.51	1.28	0.121	0.696	0.132
261472	B ₅ NaPbO ₉	1	0.53	1.27	0.100	0.311	0.611
261534	B ₂ WPb ₆ O ₁₂	1	0.37	1.19	0.708	0.745	0.750
		2	0.72	1.38	0.925	0.810	0.567
261812	FeP ₂ PbO ₇	1	0.22	1.18	0.289	0.218	0.151
262264	Al ₈ Ca ₂ PbO ₁₅	1	0.73	1.43	0.542	0.250	0.000
262284	MgWPb ₂ O ₆ (I)	1	0.00	1.42	0.250	0.250	0.250
263127	Co ₉ Te ₅ Pb ₆ O ₃₀	1	1.03	1.48	0.168	0.168	0.000
		2	0.62	1.43	0.329	0.000	0.000
279600	BGaPbO ₄	1	0.66	1.31	0.014	0.250	0.428
280778	CrHgPb ₂ O ₆	1	0.47	1.20	0.765	0.237	0.074
		2	0.98	1.35	0.228	0.869	0.332
290268	NiP ₂ Pb ₂ O ₈	1	0.48	1.29	0.337	0.495	0.839
		2	0.48	1.22	0.800	0.751	0.286
290292	BVPb ₄ O ₈	1	0.35	1.22	0.895	0.235	0.580
		2	0.64	1.26	0.428	0.269	0.585
		3	0.72	1.27	0.836	0.497	0.798
		4	0.50	1.26	0.736	0.927	0.806
380500	TeUPb ₂ O ₈	1	0.46	1.30	-0.028	0.188	0.264
400657	Cu ₂ PbO ₂	1	1.10	1.50	0.000	0.505	0.250
403000	Ge ₃ Pb ₁₁ O ₁₇	1	0.71	1.31	0.992	0.097	0.330
		2	0.68	1.34	0.989	0.273	0.683
		3	0.66	1.34	0.979	0.430	0.025
		4	0.60	1.34	0.983	0.596	0.349
		5	0.76	1.34	0.991	0.767	0.672
		6	0.57	1.31	0.989	0.928	0.023
		7	0.60	1.32	0.161	0.156	0.735
		8	0.71	1.32	0.162	0.315	0.109
		9	0.63	1.32	0.165	0.489	0.420
		10	0.72	1.36	0.166	0.643	0.750
		11	0.76	1.36	0.172	0.805	0.073
		12	0.73	1.32	0.164	0.976	0.421
		13	0.69	1.32	0.249	0.055	0.649
		14	0.82	1.32	0.284	0.048	0.312
		15	0.69	1.32	0.260	0.226	-0.051
		16	0.65	1.32	0.273	0.191	0.558
		17	0.70	1.32	0.258	0.391	0.280
		18	0.73	1.32	0.297	0.363	0.925
		19	0.68	1.32	0.260	0.553	0.626
		20	0.72	1.32	0.276	0.526	0.256
		21	0.70	1.36	0.277	0.703	0.649
		22	0.79	1.36	0.282	0.724	0.026
		23	0.80	1.36	0.260	0.899	0.331
		24	0.65	1.36	0.274	0.864	0.948
		25	0.71	1.34	0.432	0.089	0.005
		26	0.51	1.31	0.433	0.274	0.366

		27	0.70	1.31	0.468	0.296	0.859
		28	0.63	1.31	0.442	0.442	0.593
		29	0.70	1.31	0.436	0.619	1.038
		30	0.57	1.31	0.452	0.633	0.479
		31	0.61	1.31	0.444	0.783	0.464
		32	0.72	1.34	0.439	0.964	0.789
		33	0.79	1.34	0.469	0.939	0.172
404328	AsBPbO ₅	1	0.21	1.16	0.669	0.760	0.200
404478	Al ₃ EuPb ₂ O ₈	1	0.57	1.33	0.418	0.418	0.418
404479	Al ₃ GdPb ₂ O ₈	1	0.55	1.33	0.417	0.417	0.417
406531	Al ₁₂ Nd ₄ Pb ₈ O ₃₂	1	0.58	1.35	0.418	0.418	0.418
406532	Al ₁₂ Sm ₄ Pb ₈ O ₃₂	1	0.58	1.34	0.418	0.418	0.418
407263	In ₂ Si ₂ Pb ₂ O ₉	1	0.50	1.30	0.425	0.591	0.226
		2	0.94	1.47	0.062	0.626	0.207
408315	Ni ₉ Te ₅ Pb ₆ O ₃₀	1	0.96	1.45	0.829	0.000	0.500
		2	0.62	1.41	0.000	0.327	0.500
409091	P ₄ Pb ₂ O ₁₂	1	0.21	1.17	0.980	0.596	0.107
		2	0.23	1.20	0.482	0.677	0.174
410650	SiTeZn ₄ PbO ₁₀	1	0.61	1.26	0.440	0.750	0.514
417802	Mo ₃ P ₂ PbO ₁₄	1	0.05	1.17	0.481	0.750	0.258
417963	Ba ₃ V ₄ PbO ₁₄	1	0.23	1.18	0.398	0.348	0.354
420535	P ₄ PdSiPbO ₁₄	1	0.26	1.31	0.945	0.250	0.122
420557	B ₂ CrPb ₆ O ₁₂	1	0.70	1.36	0.258	0.071	0.074
		2	0.71	1.36	0.649	0.566	0.073
		3	0.45	1.19	0.286	0.250	0.706
		4	0.27	1.20	0.217	0.250	0.298
420558	B ₂ MoPb ₆ O ₁₂	1	0.35	1.18	0.793	0.248	0.750
		2	0.73	1.37	0.575	0.313	0.567
421981	P ₂ TiPbO ₈	1	0.08	1.27	0.750	0.689	0.000
421987	As ₂ TiPb ₂ O ₉	1	0.15	1.17	0.246	0.372	0.026
		2	0.34	1.27	0.760	0.458	0.486
422862	B ₄ Cd ₃ Pb ₃ O ₁₂	1	0.88	1.38	0.888	0.813	0.250
423338	Fe ₃ P ₃ PbO ₁₃	1	0.01	1.13	0.834	0.250	0.299
425090	TePb ₂ O ₅	1	0.71	1.21	0.819	0.578	0.542
425091	TePb ₅ O ₈	1	0.61	1.30	0.580	0.153	0.384
		2	0.82	1.30	0.794	0.166	0.072
		3	0.71	1.30	0.122	0.127	0.444
		4	0.74	1.30	0.443	0.193	0.086
		5	0.65	1.30	0.826	0.826	0.278
425092	CdTePb ₆ O ₁₀	1	0.71	1.28	0.361	0.234	0.263
		2	0.67	1.28	0.000	0.065	0.750
		3	0.63	1.28	0.505	0.709	-0.039
		4	0.25	1.18	0.729	0.000	0.000
427843	GeSrPbO ₄	1	0.92	1.44	0.658	0.369	0.321
429369	BaGePbO ₄	1	1.10	1.51	0.654	0.372	0.341
431518	B ₆ Pb ₆ O ₁₅ (II)	1	0.62	1.32	0.137	0.783	0.931

			2	0.83	1.32	0.614	0.962	0.928
			3	0.51	1.32	0.541	0.340	0.855
			4	0.54	1.31	0.701	0.633	0.631
			5	0.63	1.31	0.118	0.182	0.552
			6	0.66	1.31	0.652	0.024	0.593
432759	B ₇ TbPbO ₁₃		1	0.56	1.29	0.142	0.543	0.331
			2	0.75	1.38	0.376	0.759	0.670
432760	B ₇ EuPbO ₁₃		1	0.72	1.34	0.377	0.766	0.677
			2	0.63	1.33	0.140	0.983	0.338
433334	B ₁₈ Cs ₂ Na ₂ PbO ₃₀		1	0.00	1.21	0.000	0.500	0.500
433335	B ₁₈ Na ₂ Rb ₂ PbO ₃₀		1	0.00	1.22	0.000	0.500	0.500
433569	WPb ₂ O ₅ (LT)		1	0.30	1.21	0.118	0.277	0.524
			2	0.45	1.28	0.102	0.707	0.344
433570	WPb ₂ O ₅ (HT)		1	0.63	1.26	0.023	0.000	0.347
			2	0.55	1.34	0.822	0.500	0.868
710043	CrPb ₂ O ₅		1	0.49	1.28	0.024	0.000	0.338
			2	0.47	1.29	0.322	0.000	0.879
S ⁴⁺	14190 FeSO ₃		1	1.07	0.82	0.090	-0.021	0.385
	15554 α-MnSO ₃		1	0.99	0.73	0.239	0.024	0.112
	26556 β-MnSO ₃		1	0.90	0.69	0.856	0.052	0.094
			2	0.90	0.69	0.926	0.114	0.457
60762	K ₂ SO ₃		1	0.79	0.57	0.333	0.667	0.070
62640	CdSO ₃ (I)		1	0.90	0.68	0.396	0.126	0.369
62641	CdSO ₃ (II)		1	0.90	0.69	0.904	0.448	0.352
			2	0.90	0.69	0.447	0.614	0.576
62642	CdSO ₃ (III)		1	0.88	0.66	0.122	0.111	0.132
Sb ³⁺	618 S ₃ Sb ₂ O ₁₂		1	0.53	1.06	0.329	0.358	0.253
			2	0.45	1.01	0.099	0.119	0.426
1948	S ₂ Sb ₂ O ₉		1	1.15	1.25	0.438	0.716	0.153
4122	MgSb ₂ O ₄		1	0.88	1.14	0.398	0.409	0.000
20344	NbSbO ₄		1	0.80	1.13	0.478	-0.104	0.266
23316	AsSbO ₄		1	1.21	1.18	0.385	0.250	0.526
27800	VSb ₂ O ₅		1	1.08	1.26	0.149	0.914	0.239
28493	KSb ₃ O ₅		1	1.18	1.24	-0.018	0.552	0.189
			2	1.11	1.24	0.574	0.960	0.409
			3	0.98	1.24	0.419	0.611	0.274
31996	ZnSb ₂ O ₄		1	0.89	1.16	0.392	0.414	0.000
59292	MoSb ₂ O ₆		1	0.86	1.15	0.071	-0.052	0.145
			2	0.76	1.14	0.583	-0.039	0.147
			3	0.82	1.16	0.083	0.456	0.146
			4	0.87	1.14	0.562	0.447	0.144
			5	0.84	1.16	0.073	-0.048	0.646
			6	0.92	1.14	0.563	-0.058	0.643
			7	0.83	1.15	0.072	0.452	0.645
			8	0.83	1.15	0.586	0.456	0.646
			9	0.82	1.15	0.322	0.290	0.147

		10	0.89	1.14	0.812	0.309	0.143
		11	0.80	1.13	0.346	0.796	0.149
		12	0.88	1.17	0.818	0.796	0.145
		13	0.89	1.13	0.318	0.309	0.643
		14	0.79	1.13	0.822	0.289	0.648
		15	0.92	1.16	0.308	0.799	0.643
		16	0.93	1.14	0.815	0.812	0.642
59329	CsSbO ₂	1	1.40	1.37	0.000	0.224	0.250
62977	PSbO ₄	1	1.04	1.13	0.050	0.250	0.365
80553	KMo ₂ SbO ₈	1	0.80	1.11	0.007	0.358	0.178
80595	Li ₂ Mo ₂ SbO ₈	1	0.87	1.15	0.000	0.132	0.250
91332	PSb ₅ O ₁₀	1	1.07	1.24	0.582	0.657	0.846
		2	0.74	1.15	0.911	0.903	0.673
		3	0.97	1.15	0.112	1.021	0.885
		4	0.83	1.15	0.710	0.282	0.861
		5	1.12	1.15	0.406	0.345	0.037
95735	Ge ₃ Sb ₂ O ₉	1	0.99	1.26	0.667	0.333	0.118
153154	α -Sb ₂ O ₄ •	1	0.79	1.09	0.942	-0.115	0.020
153156	β -Sb ₂ O ₄ •	1	0.64	0.90	0.000	0.158	0.250
153459	KMoSbO ₅	1	1.29	1.31	0.431	0.415	0.127
154360	Al ₂ Rb ₂ Sb ₂ O ₇	1	1.51	1.64	0.333	0.667	-0.029
154361	Al ₂ Cs ₂ Sb ₂ O ₇	1	1.54	1.66	0.333	0.667	-0.028
154362	Al ₂ BaSb ₂ O ₇	1	1.57	1.60	0.000	0.000	0.345
165619	Re ₂ Sb ₄ O ₁₃	1	0.99	1.23	0.065	0.818	0.133
		2	0.72	1.13	0.462	0.239	0.531
		3	1.00	1.24	0.055	0.384	0.521
		4	1.06	1.28	0.712	0.903	0.125
182798	FeSb ₂ O ₄	1	0.90	1.17	0.107	0.088	0.000
240206	α -Sb ₂ O ₃	1	1.03	1.26	0.294	0.456	-0.044
240207	β -Sb ₂ O ₃	1	1.12	1.30	-0.156	0.151	0.271
243464	MnSb ₂ O ₄	1	0.94	1.19	0.393	0.588	0.500
250669	S ₂ Sb ₆ O ₁₅	1	0.69	1.10	0.132	0.429	0.524
		2	0.93	1.16	0.371	0.415	1.029
		3	0.89	1.24	0.354	0.261	0.503
262075	LiSbO ₂	1	1.38	1.39	0.274	0.540	0.415
		2	1.26	1.39	0.197	0.461	0.869
262626	CoSb ₂ O ₄	1	0.88	1.15	0.106	0.088	0.000
279579	K ₃ SbO ₃	1	1.24	1.34	0.601	0.601	0.601
279580	Cs ₃ SbO ₃	1	1.29	1.37	0.585	0.585	0.585
280310	Al ₂ K ₂ Sb ₂ O ₇	1	1.50	1.64	0.333	0.667	-0.031
401295	CuMo ₂ SbO ₈	1	0.84	1.14	0.750	0.364	0.000
411212	Cs ₂ SbO _{2.5}	1	1.21	1.30	0.244	0.000	0.358
		2	1.20	1.29	0.740	0.000	0.599
411216	RbSbO ₂	1	1.46	1.42	0.000	0.254	0.250
411346	NaP ₂ Sb ₃ O ₁₀	1	1.21	1.35	0.402	0.546	0.260
		2	1.45	1.36	0.271	0.348	0.566

		3	1.17	1.25	0.089	0.671	0.105
		4	1.42	1.35	0.470	0.834	0.364
		5	0.90	1.14	0.319	0.185	0.332
		6	1.05	1.25	0.154	0.964	0.177
412329	Rb ₂ Sb ₈ O ₁₃	1	1.15	1.24	0.474	0.103	0.641
		2	1.14	1.24	0.157	0.501	0.548
		3	1.04	1.24	0.234	0.010	0.373
		4	0.94	1.20	-0.035	0.149	0.152
		5	0.97	1.20	0.531	0.100	0.128
		6	1.01	1.20	0.279	0.019	0.910
		7	0.97	1.20	0.332	0.510	0.132
		8	0.99	1.24	0.027	0.098	0.656
413147	MoNaSbO ₅	1	1.34	1.35	-0.071	0.079	0.144
413764	Ba ₃ Sb ₂ O ₆	1	1.64	1.34	0.878	0.194	-0.013
		2	1.31	1.34	0.221	0.538	-0.027
		3	1.15	1.28	0.270	0.449	0.425
414463	γ-Sb ₂ O ₃	1	1.21	1.12	0.267	0.619	0.450
		2	1.28	1.12	0.559	0.238	0.134
		3	1.03	1.12	-0.075	0.217	0.189
		4	0.98	1.12	0.293	0.102	-0.015
417670	Mo ₄ Y ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.32	1.35	0.354	0.093	0.531
417671	La ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.42	1.40	0.356	0.089	0.536
417672	Mo ₄ Nd ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.38	1.38	0.354	0.091	0.532
417673	Mo ₄ Sm ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.36	1.37	0.352	0.092	0.530
417674	Dy ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.31	1.35	0.350	0.093	0.526
421470	Ge ₃ Sb ₄ O ₁₂	1	0.83	1.18	0.552	0.448	0.948
422101	Ce ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.41	1.40	0.354	0.091	0.533
422102	Mo ₄ Pr ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.39	1.39	0.354	0.091	0.534
422103	Eu ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.35	1.37	0.352	0.092	0.530
422104	Gd ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.36	1.37	0.354	0.093	0.533
422105	Mo ₄ Tb ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.33	1.36	0.350	0.094	0.526
422106	Ho ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.31	1.35	0.349	0.093	0.524
422107	Er ₂ Mo ₄ Sb ₂ O ₁₈	1	1.30	1.34	0.352	0.093	0.528
422108	Mo ₄ Tm ₂ Sb ₂ O ₁₈	1	1.29	1.34	0.352	0.093	0.529
425765	Sr ₅ Sb ₂₂ O ₃₈	1	0.98	1.23	0.697	0.796	0.183
		2	1.07	1.23	0.745	0.173	0.177
		3	1.65	1.23	0.569	0.747	0.363
		4	0.98	1.23	0.427	0.152	0.499
		5	1.15	1.29	0.860	1.044	0.385
		6	1.02	1.23	0.153	0.317	-0.057
		7	0.97	1.23	0.345	0.556	0.535
		8	0.91	1.23	0.521	0.009	0.373
		9	0.95	1.23	0.539	0.331	0.354
		10	1.12	1.29	0.385	0.499	0.133
		11	1.14	1.29	0.542	0.391	0.990
428356	CuS ₂ Sb ₆ O ₁₆	1	0.71	1.13	0.284	0.508	0.149

			2	0.88	1.20	0.184	0.142	0.498
			3	0.74	1.13	0.628	0.115	0.116
430241	CsS ₂ SbO ₈		1	0.68	1.08	0.226	0.525	0.481
430367	KPS ₂ Sb ₂ O ₁₂		1	0.87	1.15	0.202	0.368	0.501
			2	0.76	1.09	0.798	0.603	0.855
430368	PRbS ₂ Sb ₂ O ₁₂		1	0.89	1.15	0.203	0.869	-0.001
			2	0.77	1.09	0.797	0.099	0.349
431504	CoMo ₂ Sb ₂ O ₁₀		1	1.16	1.25	0.201	0.142	0.356
<hr/>								
Se ⁴⁺	494	MgSeO ₃	1	0.90	0.84	-0.120	0.250	0.923
	2355	ZnSe ₂ O ₅	1	0.98	0.94	0.449	0.152	0.397
	10471	Se ₂ O ₅ •	1	0.97	0.90	0.190	0.208	0.105
	15495	Au ₂ Se ₄ O ₁₁	1	1.36	1.12	0.168	0.522	0.159
			2	1.31	1.02	0.071	0.513	0.304
	27209	CaSe ₂ O ₅	1	1.11	1.04	0.027	0.131	0.074
			2	1.00	0.93	-0.041	0.229	0.349
	29506	CuSeO ₃ (II)	1	1.04	0.98	0.025	0.180	0.355
	29507	CuSeO ₃ (III)	1	1.23	1.12	0.930	0.541	0.110
			2	1.27	1.12	0.276	0.480	0.107
	29508	CuSeO ₃ (IV)	1	1.17	1.02	0.561	0.264	0.379
			2	1.42	1.07	0.296	0.354	0.982
			3	1.43	1.07	0.994	0.434	0.109
	50541	Cu ₃ K ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.25	1.08	0.737	0.935	0.446
			2	1.34	1.08	0.595	0.991	0.184
	54155	Ca ₂ Se ₃ O ₈	1	1.07	0.99	0.167	0.680	0.778
			2	1.14	0.99	0.073	0.525	0.259
			3	1.09	0.99	0.167	0.385	0.491
	54156	BaSeO ₃	1	1.26	1.06	0.139	0.750	-0.002
	54157	BaSe ₂ O ₅	1	1.28	1.02	0.608	-0.008	0.094
			2	0.97	0.93	0.663	0.141	0.807
	60513	USe ₂ O ₇	1	1.12	1.02	0.160	0.404	0.984
			2	1.58	1.21	0.639	0.422	0.666
			3	1.08	0.99	0.151	0.054	-0.068
			4	1.09	1.00	0.397	0.054	0.579
	60652	Cu ₂ SeO ₄ (I)	1	1.13	1.02	0.285	0.285	0.285
			2	1.04	0.97	0.526	0.526	0.526
	60653	Cu ₂ SeO ₄ (II)	1	1.24	1.00	0.318	0.602	0.160
	60654	Cu ₄ Se ₃ O ₁₀	1	1.07	0.91	0.098	0.083	0.725
			2	1.33	1.06	0.057	0.554	0.233
			3	1.20	1.09	0.049	0.626	0.568
			4	1.18	1.06	0.058	0.753	0.063
			5	1.18	1.06	0.064	0.355	0.815
			6	1.22	1.09	0.046	0.277	0.326
			7	1.22	1.09	0.049	0.122	0.290
			8	1.21	1.09	0.068	0.881	0.567
			9	1.16	1.06	0.058	0.526	0.791
			10	1.20	1.09	0.079	0.053	0.499

		11	1.31	1.07	0.100	0.602	-0.019
		12	1.68	1.32	0.028	-0.011	0.070
60933	SrSe ₂ O ₅	1	1.21	1.08	0.739	0.045	0.879
		2	1.33	1.08	0.941	0.085	0.322
		3	1.20	1.08	0.966	0.829	0.478
		4	1.18	1.08	0.375	0.753	0.477
62966	CuSr ₂ Se ₃ O ₉	1	1.20	1.05	0.589	1.023	0.123
		2	1.41	1.05	0.825	0.022	0.024
		3	1.30	1.08	0.876	0.297	0.322
63508	K ₂ Se ₂ O ₅	1	1.24	1.10	0.155	0.004	0.597
		2	1.31	1.04	0.159	0.234	0.390
		3	1.43	1.25	0.295	0.135	0.361
		4	1.22	1.10	0.289	0.115	0.642
67916	FeKSe ₂ O ₆	1	1.25	1.11	0.657	0.250	0.267
		2	1.42	1.12	0.357	0.250	0.659
68333	VSeO ₄	1	1.06	0.89	0.396	0.229	0.131
68466	NaYSe ₂ O ₆	1	1.22	1.07	0.776	0.872	0.135
		2	1.22	1.07	0.178	0.773	0.175
		3	1.05	0.96	0.644	0.025	0.614
68467	LaNaSe ₂ O ₆	1	1.05	0.96	0.746	0.089	0.491
		2	1.05	0.96	0.989	0.553	0.191
69801	MnSe ₂ O ₆	1	0.98	0.88	0.000	0.000	0.684
71536	CoK ₂ Se ₂ O ₆	1	0.99	0.94	-0.102	0.156	0.548
71537	CoSe ₂ O ₅	1	1.01	0.90	0.000	0.000	0.682
72366	SeO ₂	1	1.28	1.15	0.238	0.099	0.000
72643	KMn ₅ Se ₆ O ₁₈	1	1.09	0.97	0.159	0.205	0.583
		2	1.00	0.92	-0.022	0.653	0.912
		3	1.09	0.97	0.328	0.362	0.091
73936	MnSe ₂ O ₅	1	1.00	0.93	0.413	0.122	0.570
74299	FeLiSe ₄ O ₁₀	1	0.97	0.92	0.852	0.045	0.502
		2	1.01	0.90	0.354	0.459	0.688
74685	Cu ₃ Li ₂ Se ₄ O ₁₄ •	1	1.25	1.12	0.465	0.282	0.263
75230	CdSe ₂ O ₅	1	1.02	0.94	0.078	0.122	0.429
75273	CdSeO ₃ (oP20)	1	1.06	0.93	-0.130	0.250	0.587
75274	CdSeO ₃ (mP40)	1	1.34	1.20	0.411	0.073	0.907
		2	1.58	1.20	-0.013	0.061	0.890
75473	Cs ₂ Mo ₃ SeO ₁₂	1	1.24	1.13	0.000	0.000	0.570
75509	Mn ₃ Se ₃ O ₁₀	1	1.37	1.12	0.449	0.000	0.369
		2	1.26	1.00	0.928	0.000	0.470
		3	1.61	1.37	0.990	0.000	0.815
75554	FeLiSe ₂ O ₆	1	1.34	1.20	0.432	0.399	0.421
78388	Ag ₂ SeO ₃	1	1.21	1.09	0.865	0.414	0.987
78910	Ca ₃ Fe ₂ Se ₆ O ₁₈	1	1.36	1.10	0.250	0.231	0.164
78911	Fe ₂ Sr ₃ Se ₆ O ₁₈	1	1.24	1.08	0.255	0.229	0.165
79204	CoSr ₂ Se ₃ O ₉	1	1.08	1.01	0.610	1.018	0.134
		2	1.41	1.01	0.832	0.028	0.038

		3	1.13	1.01	0.844	0.286	0.334
79694	α -HgSeO ₃	1	1.25	1.00	-0.129	0.250	0.595
80178	KV ₂ SeO ₇	1	1.48	1.28	0.225	0.250	0.116
80392	Cs ₂ W ₃ SeO ₁₂	1	1.27	1.14	0.000	0.000	0.568
80401	CoSeO ₃ (II)	1	1.26	1.18	0.460	0.113	0.145
		2	1.18	0.97	0.032	0.199	0.319
		3	1.32	1.01	0.423	0.323	0.283
		4	1.54	1.18	0.022	0.431	0.088
80822	Cu ₃ Fe ₂ Se ₆ O ₁₈ (I)	1	1.07	0.99	0.138	0.079	0.382
		2	1.06	0.99	0.982	0.279	0.965
		3	0.95	0.94	0.640	0.251	0.274
80823	Fe ₂ Zn ₃ Se ₆ O ₁₈	1	1.11	0.99	0.138	0.076	0.376
		2	1.05	0.99	0.982	0.276	0.966
		3	1.02	0.98	0.643	0.251	0.277
81231	KV ₃ Se ₂ O ₁₂	1	1.47	1.28	0.333	0.667	0.640
		2	1.03	0.95	0.000	0.000	-0.030
81451	CsVSeO ₅	1	1.23	1.09	0.303	-0.113	0.504
		2	1.18	1.06	0.039	0.181	0.869
81559	FeNaSe ₂ O ₆	1	1.10	1.00	0.655	0.250	0.269
		2	1.45	1.12	0.354	0.250	0.661
81560	BaCoSe ₂ O ₆	1	1.15	1.03	0.435	0.250	0.493
		2	1.23	1.03	0.311	0.250	0.610
82025	Fe ₂ Se ₆ O ₁₅	1	1.16	1.09	0.152	0.449	0.495
		2	1.63	1.30	0.477	0.755	0.532
		3	1.23	0.95	0.458	0.549	0.297
		4	1.30	1.09	0.474	0.248	0.036
		5	1.19	1.10	0.738	0.472	0.079
		6	1.18	1.09	0.095	0.493	0.307
82026	Cr ₂ Se ₆ O ₁₅	1	1.28	1.18	0.323	0.640	0.248
		2	1.30	1.18	0.027	0.355	0.241
		3	1.42	1.26	0.778	0.013	0.190
		4	1.28	1.18	0.741	0.325	-0.052
		5	1.41	1.18	0.333	0.249	1.097
		6	1.61	1.30	0.007	0.250	0.796
82164	Ca ₃ CoSe ₄ O ₁₂	1	1.56	1.19	0.346	0.220	0.209
82255	BaMoSeO ₆	1	0.80	0.79	0.838	0.902	0.820
82256	BaMoSe ₂ O ₁₁	1	1.31	1.20	0.749	-0.017	0.410
82887	Fe ₂ ZnSe ₄ O ₁₂	1	1.05	0.97	0.272	0.049	1.045
		2	1.15	0.99	0.783	0.528	0.447
		3	1.05	1.00	0.750	-0.022	0.007
		4	0.92	0.86	0.454	0.219	0.301
83344	Fe ₂ Se ₂ O ₇	1	1.07	0.95	0.011	0.513	0.276
		2	1.03	0.95	0.056	0.084	0.101
83436	Cu ₃ Fe ₂ Se ₆ O ₁₈ (II)	1	1.23	1.07	0.792	0.154	0.196
		2	1.22	1.07	0.447	0.179	1.057
		3	1.04	0.99	0.443	0.171	0.496

83803	RbV ₂ SeO ₇	1	1.51	1.30	0.273	0.250	0.109
84954	CuLa ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.53	1.16	0.096	-0.006	0.462
		2	1.30	1.17	0.189	0.741	0.284
88704	CuVSe ₂ O ₇ (A)	1	1.01	0.94	0.004	0.238	0.273
		2	1.00	0.94	0.801	0.337	0.298
89466	α -V ₂ Se ₂ O ₉	1	1.15	0.94	0.067	0.117	0.473
		2	1.00	0.95	0.539	0.288	0.466
89649	Co ₃ Li ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.01	0.94	0.716	0.347	0.142
		2	1.03	0.94	0.512	0.175	0.398
89657	Cu ₃ Tl ₂ Se ₆ O ₁₈	1	1.03	0.96	0.810	0.248	0.374
		2	1.10	1.04	0.453	0.124	0.146
		3	1.06	0.96	0.054	0.044	0.563
90413	BaFe ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.45	1.19	0.837	0.474	0.336
		2	1.19	1.06	0.089	0.036	0.807
90414	AgFeSe ₂ O ₆	1	1.44	1.07	0.377	0.322	-0.054
		2	1.31	0.94	0.367	0.255	0.423
90415	FeRbSe ₂ O ₇ •	1	1.41	1.27	0.000	0.000	0.263
95791	Tb ₂ Se ₂ O ₇	1	0.96	0.88	0.191	0.191	0.567
95945	In ₂ Se ₆ O ₁₅	1	1.08	1.01	0.584	0.663	0.493
		2	1.26	1.13	0.362	0.732	0.209
		3	0.99	0.89	0.335	0.800	0.658
		4	0.97	0.94	0.609	0.827	0.012
		5	1.09	1.05	0.862	0.052	0.235
		6	1.29	1.08	0.116	0.279	0.873
		7	1.30	1.19	0.827	0.518	0.178
		8	1.08	1.00	0.594	0.910	0.402
		9	1.06	0.89	0.183	0.725	0.748
		10	1.16	1.05	0.004	0.994	0.147
		11	1.26	0.95	0.100	0.550	0.049
		12	1.07	0.98	0.572	0.596	0.877
97747	CuSeO ₃ (I)	1	1.08	0.90	-0.116	0.250	-0.098
98624	Sc ₂ Se ₃ O ₉	1	1.20	1.06	0.130	-0.036	0.250
154716	α -SnSe ₂ O ₆	1	1.42	1.30	0.233	0.233	0.233
154717	β -SnSe ₂ O ₆	1	1.11	1.00	0.083	0.098	0.447
155489	CoSeO ₃ (I)	1	0.90	0.84	-0.120	0.250	0.923
159880	CaSeO ₃	1	1.14	1.00	0.092	0.235	0.625
163221	ZnSeO ₃ (HP)	1	0.82	0.81	-0.095	0.250	0.906
163600	RbV ₃ Se ₂ O ₁₂	1	1.62	1.41	0.333	0.667	0.842
		2	1.04	0.95	0.000	0.000	0.522
167530	Mo ₃ Rb ₂ SeO ₁₂	1	1.17	1.05	0.000	0.000	0.098
170707	Tl ₂ Se ₃ O ₉	1	1.31	1.09	0.395	0.407	0.474
		2	1.35	1.15	0.604	0.714	0.130
		3	1.43	1.06	0.513	0.907	0.511
170739	CsV ₃ Se ₂ O ₁₂	1	1.47	1.28	0.667	0.333	0.143
		2	1.08	0.98	0.000	0.000	0.483
171244	Gd ₂ MoSe ₃ O ₁₂	1	1.12	1.03	0.249	0.993	0.609

		2	0.89	0.83	0.718	0.381	-0.075
		3	1.09	0.98	0.875	0.167	0.692
171246	MoNd ₂ Se ₂ O ₁₀	1	1.09	1.04	0.778	0.457	0.289
		2	0.88	0.84	0.547	0.001	0.138
172383	B ₂ Se ₂ O ₇	1	1.27	1.01	0.292	0.381	0.274
		2	1.07	1.01	0.295	0.783	0.606
190004	NiSeO ₃ (I)	1	0.85	0.81	-0.116	0.250	0.923
190005	MnSeO ₃ (I)	1	0.96	0.88	-0.123	0.250	0.925
194086	VYSe ₂ O ₈	1	1.07	0.99	0.197	0.750	0.565
		2	1.27	1.05	0.190	0.250	0.580
194704	CsTa ₃ Se ₂ O ₁₂	1	1.52	1.35	0.667	0.333	0.109
200203	TiSe ₂ O ₆	1	1.05	0.99	0.100	0.096	0.462
202386	BaCuSe ₂ O ₆ (I)	1	1.07	0.94	0.425	0.000	0.125
		2	1.03	0.94	0.926	0.000	0.776
		3	1.02	0.94	0.562	0.071	0.935
202387	BaCuSe ₂ O ₆ (II)	1	1.33	1.08	0.782	0.019	0.143
		2	1.43	1.08	0.365	0.044	0.063
202388	BaCuSe ₂ O ₆ (III)	1	1.53	1.24	0.254	0.011	0.013
202389	CuSrSe ₂ O ₆	1	1.45	1.19	0.248	0.021	0.016
237540	Na ₆ W ₆ Se ₂ O ₂₅	1	1.04	0.97	0.105	0.620	0.639
		2	1.36	1.09	0.169	0.402	0.796
238044	KYS ₂ O ₆	1	1.51	1.23	0.368	0.750	0.356
		2	1.27	1.13	0.163	0.750	0.762
238045	RbYS ₂ O ₆	1	1.52	1.26	0.370	0.750	0.353
		2	1.39	1.22	0.162	0.750	0.759
238046	CsYSe ₂ O ₆	1	1.11	1.00	0.310	0.310	0.310
238180	Sc ₂ Se ₃ O ₁₀ •	1	1.34	1.19	0.319	0.506	0.252
		2	1.31	1.19	0.621	0.102	0.851
238497	NaScSe ₂ O ₆	1	1.39	1.11	0.356	0.750	0.356
		2	1.14	1.02	0.157	0.750	0.764
238498	RbScSe ₂ O ₆	1	1.23	1.06	0.333	0.667	0.138
		2	1.57	1.39	0.000	0.000	0.302
238499	CsScSe ₂ O ₆	1	1.23	1.08	0.223	0.250	0.249
		2	1.00	0.92	0.444	0.250	-0.019
239095	Na ₂ Nb ₄ Se ₄ O ₁₉	1	1.66	1.32	0.917	0.308	0.509
		2	1.36	1.15	0.947	0.382	-0.013
239096	NaNbSe ₂ O ₁₄	1	1.15	0.98	0.307	0.239	0.112
239795	Li ₃ Sc _{2.67} Se _{5.33} O ₁₅	1	1.39	1.26	0.333	0.667	0.109
		2	1.14	0.96	0.464	-0.006	0.084
		3	1.23	1.09	0.000	0.000	0.053
		4	1.12	1.03	0.862	0.635	0.043
		5	1.27	1.16	0.000	0.000	0.128
		6	1.36	1.21	0.167	0.835	0.153
		7	1.31	1.18	0.803	0.685	0.098
		8	1.14	1.04	0.667	0.333	0.032
242275	Na ₂ Zn ₃ Se ₄ O ₁₂	1	1.07	0.98	0.769	0.109	0.219

		2	1.30	1.15	0.714	0.228	0.611
242276	Rb ₂ Zn ₃ Se ₄ O ₁₂	1	1.11	0.98	0.823	0.230	0.890
		2	1.11	0.98	0.254	0.827	0.229
		3	1.12	0.98	0.761	1.125	0.011
		4	1.09	0.98	0.329	0.698	0.052
242277	Cs ₂ Zn ₃ Se ₄ O ₁₂	1	1.29	1.07	-0.137	0.030	0.738
		2	1.09	0.98	0.557	0.747	0.656
		3	1.39	1.07	0.776	0.978	0.876
		4	1.16	0.98	0.502	0.583	0.759
244687	CdK ₂ Se ₂ O ₆	1	1.08	0.95	0.667	0.333	1.014
244688	CdRb ₂ Se ₂ O ₆	1	1.03	0.92	0.667	0.333	1.013
244689	CdCs ₂ Se ₂ O ₆	1	0.98	0.89	0.667	0.333	1.011
244690	Cd ₃ Li ₂ Se ₄ O ₁₀	1	0.93	0.87	0.241	0.311	0.274
		2	1.53	1.38	0.715	0.617	0.261
		3	1.27	1.09	0.586	0.608	0.958
		4	0.94	0.87	0.621	0.741	0.622
245059	α -CuSe ₂ O ₅	1	1.20	0.97	0.205	-0.120	0.900
249582	Mo ₂ Ni ₃ SeO ₁₁	1	1.57	1.33	1.073	0.497	0.683
249713	VZnSe ₂ O ₇	1	1.46	1.31	0.308	0.502	0.556
		2	1.21	0.96	0.689	0.209	0.234
249714	Cd ₆ V ₂ Se ₅ O ₂₁	1	0.91	0.90	0.289	0.839	0.741
		2	1.07	0.99	0.105	0.239	0.697
		3	1.47	1.23	0.815	0.247	0.598
		4	1.36	1.23	0.660	0.248	0.632
		5	1.46	1.23	0.286	0.396	0.447
249928	Cu ₃ In ₂ Se ₆ O ₁₈	1	1.16	1.06	1.082	0.817	0.554
		2	1.07	1.00	0.556	0.832	-0.006
		3	1.23	1.06	0.909	0.853	0.699
249957	Cu ₂ MoSeO ₇	1	1.25	1.06	0.169	0.625	0.173
250480	MoY ₂ Se ₃ O ₁₂	1	1.07	0.97	0.626	0.334	0.807
		2	1.12	1.01	0.251	0.503	0.891
		3	0.92	0.83	0.216	0.877	0.421
250676	Li ₆ Mo ₆ Se ₆ O ₃₃	1	1.43	1.21	0.000	0.349	0.904
		2	1.53	1.26	0.000	0.853	0.150
		3	1.37	1.17	0.500	0.348	0.940
		4	1.61	1.36	0.000	-0.015	0.881
		5	1.38	1.22	0.500	0.855	0.186
		6	1.47	1.27	0.000	0.500	0.638
		7	1.10	0.99	0.500	-0.018	0.883
		8	1.38	1.18	0.000	0.127	0.143
		9	1.34	1.16	0.000	0.541	0.122
		10	1.11	0.98	0.500	0.637	0.896
		11	1.69	1.38	0.500	0.363	0.395
		12	1.51	1.28	0.500	0.167	0.158
250783	α -ScVSe ₂ O ₈	1	1.45	1.08	0.363	0.480	0.790
		2	1.13	1.03	0.688	0.797	0.822

250784	β -ScVSe ₂ O ₈	1	1.04	0.97	0.910	0.206	0.829
		2	1.64	1.30	0.314	0.474	0.200
251711	ThSe ₄ O ₁₀	1	1.43	1.05	0.536	0.321	0.982
		2	1.27	0.99	0.796	0.496	-0.039
		3	1.16	1.06	0.476	0.025	0.166
		4	1.35	1.06	0.521	0.592	0.785
251713	β -ThSe ₂ O ₆	1	0.88	0.86	0.151	0.279	0.022
		2	1.14	1.03	0.125	1.016	-0.033
251714	α -ThSe ₂ O ₆	1	1.15	1.04	0.760	0.029	0.591
		2	1.20	1.11	0.708	0.790	0.439
252000	Mo ₂ Na ₂ Se ₂ O ₁₁	1	1.11	0.99	0.438	0.589	0.360
252001	K ₂ Mo ₂ Se ₂ O ₁₁	1	1.23	1.02	0.648	0.322	1.104
252002	Mo ₃ Rb ₂ Se ₃ O ₁₆	1	1.27	1.14	0.394	0.018	0.909
		2	1.31	1.17	0.099	0.618	0.001
		3	1.41	1.16	0.086	0.091	0.164
254207	Li ₃ MnSe ₈ O ₂₄	1	1.20	1.09	0.545	0.766	0.006
		2	1.22	1.09	0.000	0.000	0.280
254209	Li ₁₃ ScSe ₈ O ₂₄	1	1.24	1.11	0.535	0.761	0.010
		2	1.25	1.11	0.000	0.000	0.278
254210	FeLi ₁₃ Se ₈ O ₂₄	1	1.21	1.09	0.545	0.779	0.006
		2	1.22	1.09	0.667	0.333	0.054
254211	CrLi ₁₃ Se ₈ O ₂₄	1	1.19	1.08	0.547	0.769	0.006
		2	1.23	1.08	0.667	0.333	0.052
255981	CeSe ₂ O ₆	1	1.18	1.09	0.716	0.707	-0.052
		2	1.10	0.99	0.754	0.466	1.080
259022	β -ZnSeO ₃	1	1.16	1.07	0.682	0.485	0.861
261178	Sr ₂ V ₃ Se ₅ O ₁₈	1	1.08	1.01	-0.011	0.013	0.730
		2	1.05	1.01	0.375	0.005	0.840
		3	1.58	1.20	0.026	0.250	-0.056
261181	Ba ₃ V ₂ Se ₄ O ₁₆	1	1.02	0.96	0.642	0.092	0.203
		2	1.16	1.03	0.622	0.517	0.162
		3	1.10	0.96	0.393	0.924	-0.036
		4	1.03	0.96	0.835	0.159	0.137
261699	MoZn ₂ SeO ₇	1	0.98	0.96	0.474	0.296	0.263
262207	Sr ₂ V ₂ Se ₃ O ₁₃	1	1.19	1.08	0.792	0.575	0.065
		2	1.53	1.16	0.416	0.380	0.456
		3	1.16	1.08	0.223	0.348	0.201
262208	BaV ₂ SeO ₈	1	1.22	0.93	0.136	0.250	0.655
262209	Sr ₄ V ₂ Se ₆ O ₂₁	1	1.31	1.07	0.259	0.164	0.655
		2	1.49	1.14	0.257	0.383	0.827
		3	1.23	0.86	0.315	0.879	0.871
262816	Co ₂ V ₂ Se ₂ O ₁₁	1	0.92	0.86	0.412	0.250	0.367
		2	1.58	1.21	-0.128	0.250	0.964
264693	CoLi ₆ Se ₄ O ₁₂	1	1.19	1.08	0.540	0.776	0.007
		2	1.21	1.08	0.667	0.333	0.053
264694	Li ₆ NiSe ₄ O ₁₂	1	1.17	1.07	0.542	0.766	0.007

		2	1.22	1.07	0.667	0.333	0.052
264696	CdLi ₆ Se ₄ O ₁₂	1	1.08	0.98	0.457	1.048	0.788
		2	1.25	0.98	0.473	0.397	0.084
280801	SrZnSe ₂ O ₆	1	1.17	1.08	0.619	0.645	0.472
		2	1.25	1.08	0.133	1.027	0.104
280834	Ag ₂ USe ₂ O ₈	1	1.55	1.18	0.823	0.429	0.010
		2	1.36	1.09	0.407	-0.053	0.744
280910	MnSrSe ₂ O ₆	1	1.22	1.05	0.623	0.637	0.453
		2	1.35	1.05	0.159	0.024	0.087
280914	Hg ₃ Se ₃ O ₁₀ •	1	1.22	1.09	0.392	0.287	0.944
		2	1.19	1.12	0.400	0.236	0.495
280941	Na ₂ SeO ₃	1	1.23	1.08	0.625	0.914	0.042
280951	Cd ₃ Se ₃ O ₁₀ •	1	1.26	1.08	0.392	0.302	0.943
		2	1.25	1.14	0.415	0.221	0.497
291298	NpSe ₂ O ₆	1	1.12	1.00	0.256	0.533	1.081
		2	1.20	1.10	0.283	0.794	0.553
291299	NpSeO ₅	1	1.41	1.28	0.007	0.750	0.568
402917	MgSe ₂ O ₅	1	1.00	0.94	0.050	0.153	-0.105
410952	La ₂ Se ₃ O ₉	1	0.94	0.88	0.045	0.687	0.225
		2	0.93	0.88	0.894	0.750	0.482
411749	Er ₂ Se ₃ O ₉	1	0.91	0.87	0.059	0.322	0.655
		2	1.34	0.98	1.035	0.114	-0.022
		3	1.13	0.98	0.709	0.212	0.847
412182	NaSmSe ₂ O ₇ •	1	1.25	1.11	0.221	0.207	0.606
412302	α-Hg ₂ SeO ₃	1	1.42	1.04	0.092	0.636	1.004
412303	β-Hg ₂ SeO ₃	1	1.19	1.03	0.408	0.073	-0.019
412304	γ-Hg ₂ SeO ₃	1	1.79	1.41	-0.086	0.092	0.000
412547	β-HgSeO ₃	1	1.57	1.20	0.602	-0.018	0.169
412548	γ-HgSeO ₃	1	1.22	1.11	0.402	0.615	0.441
412945	CuGd ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.36	1.16	0.902	0.015	0.533
		2	1.27	1.16	0.807	0.730	0.731
412946	CuSm ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.60	1.23	0.889	-0.022	0.518
		2	1.28	1.16	0.808	0.733	0.729
412998	MoNa ₂ SeO ₆	1	1.41	1.30	0.730	0.230	0.270
412999	K ₂ MoSeO ₆	1	1.30	1.14	-0.019	0.358	0.476
413000	MoRb ₂ SeO ₆	1	1.20	1.07	1.055	0.250	0.026
413090	Ag ₂ HgSe ₂ O ₆	1	1.19	1.03	0.042	0.160	0.402
		2	1.24	1.09	0.485	0.395	0.022
414051	Ba ₂ Mn ₃ Se ₆ O ₁₈	1	1.08	1.00	0.489	0.137	0.374
		2	1.09	1.00	0.495	0.246	-0.010
		3	1.09	0.97	-0.090	0.889	0.013
414649	MnSeO ₃ (II)	1	1.18	0.99	0.242	0.399	1.008
		2	1.05	0.99	1.062	1.031	0.378
414650	MnSeO ₃ (III)	1	1.46	1.15	0.411	-0.023	0.867
		2	1.26	1.15	0.302	0.075	0.117
416077	Pr ₂ Se ₃ O ₉	1	1.05	0.96	0.367	0.568	0.108

		2	1.06	0.96	0.220	-0.005	0.977
		3	1.06	0.96	0.248	0.266	0.434
		4	1.02	0.96	0.402	0.237	0.584
		5	0.98	0.92	0.083	0.199	0.267
		6	1.06	0.96	0.312	0.265	0.630
		7	1.04	0.96	0.160	0.276	0.480
		8	1.01	0.92	0.482	0.346	0.784
		9	1.02	0.96	0.071	0.487	0.827
416078	Ce ₂ Se ₃ O ₉	1	0.93	0.88	0.390	0.250	0.515
		2	0.94	0.88	0.043	0.188	0.724
416156	Sm ₂ Se ₃ O ₉	1	1.52	1.14	0.066	0.088	0.127
		2	1.22	1.09	0.460	0.111	0.292
		3	1.26	1.09	0.400	0.334	0.403
416232	BaZnSe ₂ O ₆	1	1.11	1.02	0.118	0.428	0.092
		2	1.35	1.02	0.829	0.979	0.513
416251	NiSeO ₃ (II)	1	1.08	1.04	0.450	0.119	0.140
		2	1.13	0.94	0.034	0.192	0.317
		3	1.42	1.04	0.432	0.316	0.284
		4	1.15	1.04	0.028	0.428	0.127
417773	AgVSeO ₅	1	1.33	1.23	0.993	0.832	0.250
419386	SrSeO ₃	1	1.33	1.00	-0.017	0.250	0.624
419618	NiSr ₂ Se ₃ O ₉	1	1.16	1.02	0.297	0.093	0.554
		2	1.39	1.02	0.057	1.043	0.625
		3	1.14	1.02	0.349	0.283	0.835
420433	Ga ₂ MoSe ₂ O ₁₀	1	1.45	1.15	0.605	0.250	0.487
		2	1.21	1.13	0.858	0.250	0.880
421941	EuVSe ₂ O ₈	1	1.14	1.02	0.201	0.250	0.375
		2	0.98	0.93	0.603	0.250	0.208
		3	1.09	1.01	0.935	0.250	0.552
		4	0.99	0.95	0.124	0.250	0.766
421942	GdVSe ₂ O ₈	1	1.13	1.01	0.799	0.750	0.625
		2	0.96	0.92	0.603	0.250	0.206
		3	1.11	1.00	0.935	0.250	0.548
		4	0.98	0.95	0.127	0.250	0.766
421944	TbVSe ₂ O ₈	1	1.11	1.00	0.798	0.750	0.628
		2	0.95	0.91	0.600	0.250	0.206
		3	1.10	0.99	0.935	0.250	0.548
		4	0.95	0.93	0.123	0.250	0.769
422203	KNb ₃ Se ₂ O ₁₂	1	1.64	1.29	0.808	0.674	0.087
422883	α -GeSe ₂ O ₆	1	1.21	1.14	0.007	0.452	0.817
422884	β -GeSe ₂ O ₆	1	1.28	1.19	0.264	0.236	0.764
422885	In ₂ Se ₂ O ₇	1	0.94	0.89	0.414	0.555	0.386
		2	0.93	0.89	0.513	0.987	0.226
422886	Ga ₂ Se ₂ O ₇	1	1.07	0.99	0.539	0.422	0.096
		2	1.12	0.99	0.497	-0.022	0.264
423088	Sm ₂ Se ₂ O ₇	1	0.98	0.88	0.191	0.191	0.569

423089	Eu ₂ Se ₂ O ₇	1	0.97	0.89	0.191	0.191	0.566
423090	Gd ₂ Se ₂ O ₇	1	0.97	0.88	0.191	0.191	0.566
423091	Dy ₂ Se ₂ O ₇	1	0.95	0.87	0.191	0.191	0.567
423092	Ho ₂ Se ₂ O ₇	1	0.95	0.87	0.191	0.191	0.567
423093	Er ₂ Se ₂ O ₇	1	0.94	0.87	0.190	0.190	0.564
423094	Tm ₂ Se ₂ O ₇	1	0.95	0.86	0.191	0.191	0.564
423571	BaPdSe ₂ O ₆	1	1.45	1.22	0.238	0.026	0.023
424076	B ₂ K ₂ Se ₃ O ₁₀	1	1.12	0.89	0.340	0.306	0.332
		2	0.98	0.89	0.721	0.250	0.601
424077	B ₃ NaSe ₃ O ₇	1	1.09	0.99	0.129	0.474	0.591
424078	B ₃ KSe ₃ O ₇	1	1.45	1.11	0.225	0.476	0.523
424079	B ₈ Li ₂ SeO ₁₅	1	1.65	1.37	0.730	0.205	0.359
428421	Hg ₂ MoSeO ₆	1	1.66	1.32	0.776	0.240	0.250
429332	Hg ₂ Se ₂ O ₈ •	1	1.23	1.10	0.461	0.959	0.336
429439	CdCuSe ₂ O ₆	1	1.02	0.97	0.081	0.680	0.395
		2	1.20	1.07	0.701	0.215	0.257
429441	CuHgSe ₂ O ₆	1	1.25	1.01	0.123	0.705	0.386
		2	1.18	1.01	0.681	0.205	0.282
429803	K ₂ Zn ₃ Se ₄ O ₁₂	1	1.01	0.93	0.287	0.223	0.235
		2	1.04	0.93	0.577	0.166	0.188
430539	β-V ₂ Se ₂ O ₉	1	1.18	1.02	0.395	0.923	0.060
		2	1.13	1.02	0.883	0.129	0.185
430691	Sc ₂ SeO ₅	1	1.49	1.14	0.399	-0.170	0.817
431114	β-CuSe ₂ O ₅	1	1.26	1.16	0.196	0.630	0.188
		2	1.34	1.20	0.625	0.878	0.219
431399	AgNbSe ₂ O ₇	1	1.10	0.96	0.690	0.253	0.250
431400	AgTaSe ₂ O ₇	1	1.12	0.97	0.687	0.252	0.250
432357	Sc ₂ SrSe ₄ O ₁₂	1	1.07	1.00	0.191	0.084	0.385
		2	1.20	1.00	0.224	0.146	0.594
		3	1.24	1.00	0.537	-0.070	0.322
		4	1.25	1.13	0.555	0.279	0.695
432358	BaSc ₂ Se ₄ O ₁₂	1	1.26	1.10	0.072	0.382	0.216
		2	1.50	1.24	0.459	0.331	0.023
Sn ²⁺	966 P ₂ Sn ₃ O ₈	1	1.02	1.45	0.713	0.195	0.288
		2	1.10	1.45	0.472	0.265	0.201
		3	1.57	1.50	0.210	0.218	0.393
2147	α-WSnO ₄	1	0.55	1.18	0.250	0.000	0.329
2840	β-WSnO ₄	1	0.69	1.31	0.896	0.896	0.896
15511	K ₂ Sn ₂ O ₃	1	1.03	1.31	0.000	0.000	0.312
16481	SnO	1	0.89	1.39	0.250	0.250	0.422
24392	Cs ₂ Sn ₂ O ₃	1	1.31	1.53	0.045	0.250	0.727
		2	1.20	1.53	0.374	0.250	-0.002
24805	Rb ₂ SnO ₂	1	1.23	1.43	0.098	0.096	0.344
24816	Rb ₂ Sn ₂ O ₃	1	1.11	1.37	0.000	0.000	0.308
35101	SSn ₂ O ₅	1	0.93	1.39	0.950	0.229	0.170
		2	0.99	1.39	0.372	-0.024	0.240

49624	Na ₄ SnO ₃	1	1.22	1.41	-0.064	0.799	0.831	
79101	K ₄ SnO ₃	1	1.15	1.36	0.376	0.375	0.299	
156236	SiSn ₆ O ₈	1	0.98	1.34	0.879	0.121	0.652	
		2	0.86	1.34	0.546	0.454	0.808	
163230	TiSn ₂ O ₄	1	0.68	1.17	0.100	0.097	0.000	
170846	P ₂ Sn ₂ O ₇	1	0.72	1.27	0.166	0.491	0.091	
		2	0.96	1.38	0.354	0.893	1.015	
		3	0.92	1.33	0.848	1.010	0.401	
		4	0.66	1.20	0.337	0.411	0.491	
186951	SSnO ₄	1	0.67	1.37	0.145	0.160	0.250	
249206	β-B ₄ SnO ₇	1	0.56	1.28	0.000	0.780	1.021	
249534	WSn ₃ O ₆	1	0.91	1.32	0.851	0.922	0.168	
		2	0.79	1.32	0.835	0.380	0.171	
		3	1.09	1.32	0.035	0.108	0.170	
249546	WSn ₂ O ₅	1	0.85	1.35	0.704	0.066	0.313	
		2	0.84	1.35	0.606	0.441	0.772	
		3	0.74	1.24	0.721	0.095	0.961	
		4	0.99	1.35	0.564	0.418	0.088	
413552	NaP ₃ Sn ₄ O ₁₂	1	0.93	1.38	0.667	0.333	0.182	
		2	0.96	1.38	0.487	0.854	0.107	
413553	KP ₃ Sn ₄ O ₁₂	1	0.95	1.40	0.333	0.667	0.821	
		2	1.36	1.40	0.544	0.144	0.880	
415445	PVSnO ₅	1	0.48	1.18	0.575	0.853	0.553	
418458	P ₂ Sn ₅ O ₁₀	1	0.80	1.34	0.553	0.404	0.394	
		2	0.93	1.38	0.912	0.328	0.071	
		3	0.86	1.34	0.300	0.220	0.394	
		4	0.92	1.38	0.867	0.704	0.146	
		5	1.19	1.38	0.516	0.656	0.214	
418459	P ₂ Sn ₄ O ₉	1	0.80	1.33	0.222	0.239	0.061	
		2	0.85	1.33	0.558	0.822	0.134	
		3	0.96	1.33	-0.081	0.813	0.133	
		4	0.85	1.33	0.702	0.565	0.065	
419264	K ₂ P ₂ SnO ₇	1	1.57	1.50	0.318	0.337	0.589	
424729	SnO (red)	1	0.80	1.30	0.000	-0.090	-0.055	
		2	0.89	1.34	0.000	0.496	0.295	
Te ⁴⁺	500	CoTeO ₃	1	0.79	0.94	0.873	0.250	0.918
	1728	K ₂ Te ₄ O ₁₂ •	1	0.75	0.97	0.797	0.000	0.282
	1885	Te ₄ O ₉ •	1	1.04	0.99	0.774	0.025	0.352
	2542	CuTe ₂ O ₅	1	1.26	1.26	0.092	0.110	0.194
		2	1.16	1.18	0.715	0.367	0.208	
	4320	BaTeO ₃ (I)	1	1.38	1.14	0.629	0.250	0.543
	8282	Fe ₂ TeO ₅	1	1.41	1.29	0.392	0.216	0.413
	9255	V ₂ Te ₂ O ₉ (I)	1	1.18	1.12	0.028	0.294	-0.101
	10034	Nb ₂ Te ₃ O ₁₁	1	1.14	1.17	0.418	0.278	0.681
		2	0.79	0.83	0.500	0.500	0.344	
	14168	CuTeO ₃ (I)	1	1.15	1.26	0.250	0.142	0.204

		2	1.53	1.26	0.750	0.362	0.143
21012	LiVTeO ₅	1	1.34	1.18	0.081	-0.040	0.394
26451	α -Li ₂ Te ₂ O ₅	1	1.42	1.16	0.792	0.106	0.213
		2	1.27	1.11	0.483	0.120	0.084
26452	β -Li ₂ Te ₂ O ₅	1	1.30	1.12	0.293	0.695	0.207
		2	1.29	1.16	0.337	0.332	0.952
26533	NiTe ₂ O ₅	1	0.86	0.93	0.884	0.547	0.118
		2	0.89	0.99	0.196	0.250	0.149
		3	0.82	0.99	0.388	0.250	0.602
26844	β -TeO ₂	1	0.89	0.99	0.162	-0.106	0.367
29338	CuTeO ₃ (I) (HP)	1	0.95	1.02	0.250	1.092	-0.127
36394	In ₂ Te ₃ O ₉	1	1.31	1.14	0.563	0.032	0.250
		2	0.67	0.95	0.266	0.413	0.157
37069	Ba ₃ Te ₄ O ₁₁	1	1.10	1.13	0.116	0.551	0.317
		2	1.35	1.13	0.127	0.649	0.990
		3	1.38	1.39	0.396	0.961	0.650
		4	1.13	1.13	0.050	0.366	0.863
50702	Co ₂ Te ₃ O ₈	1	1.66	1.37	0.500	0.973	0.250
		2	1.24	1.23	0.447	0.209	0.494
50703	Ni ₂ Te ₃ O ₈	1	1.63	1.35	0.500	0.991	0.250
		2	1.14	1.17	0.443	0.223	0.486
50704	Cu ₂ Te ₃ O ₈	1	1.53	1.29	0.500	0.922	0.250
		2	1.14	1.17	0.456	0.235	0.491
50705	Zn ₂ Te ₃ O ₈	1	1.64	1.34	0.500	0.954	0.250
		2	1.24	1.23	0.447	0.206	0.498
59164	Cs ₂ TeO ₃	1	1.24	1.25	0.667	0.333	0.009
59166	Cs ₂ Te ₂ O ₅	1	1.41	1.16	0.313	-0.087	0.953
		2	1.39	1.16	0.570	0.211	-0.083
59167	Cs ₂ Te ₄ O ₉	1	1.35	1.11	0.058	0.087	0.114
		2	1.04	0.98	0.385	0.299	0.084
59328	MnV ₂ TeO ₇	1	1.16	1.19	1.140	0.449	0.851
60067	α -CdTeO ₃	1	0.95	1.11	0.513	0.174	0.093
		2	1.12	1.11	0.714	0.037	0.272
61673	HgTeO ₃	1	0.95	1.10	0.596	0.268	0.359
		2	0.98	1.10	0.309	0.366	0.267
62898	α -TeO ₂	1	1.04	1.06	-0.126	-0.126	0.000
63031	AgNTeO ₅	1	0.81	1.02	0.500	0.119	0.750
65640	K ₂ TeO ₃	1	1.14	1.14	0.333	0.667	-0.017
73991	α -MnTe ₂ O ₅	1	1.23	1.23	0.148	0.650	0.384
82490	Mn ₂ Te ₃ O ₈	1	1.78	1.44	0.500	0.030	0.250
		2	1.33	1.30	0.049	0.285	0.004
85922	GaN ₂ Te ₂ O ₆	1	1.03	1.03	0.629	0.307	0.368
		2	1.08	1.07	0.074	-0.036	0.694
86226	CuMnTe ₄ O ₁₀	1	1.23	1.21	0.150	0.653	0.383
86663	Cs ₂ Mo ₅ TeO ₁₂	1	1.03	1.14	0.000	0.000	0.073
88009	Na ₂ WTe ₄ O ₁₂	1	0.85	1.03	0.410	0.374	0.464

		2	1.01	1.03	0.383	0.297	0.057
88010	MoNa ₂ Te ₄ O ₁₂	1	0.87	1.04	0.409	0.369	0.467
		2	1.19	1.04	0.386	0.330	0.060
90109	Mo ₂ P ₂ Rb ₂ TeO ₁₄	1	1.47	1.27	0.000	-0.034	0.250
90111	Cs ₂ Mo ₂ P ₂ TeO ₁₄	1	1.45	1.27	0.000	-0.035	0.250
90371	Nb ₂ Te ₄ O ₁₃	1	1.23	1.05	0.563	0.692	0.281
		2	0.94	1.04	0.139	1.034	0.795
		3	0.78	0.95	0.639	0.435	0.230
		4	0.86	0.98	0.390	0.051	0.278
		5	0.79	0.97	0.888	0.482	0.701
		6	0.84	1.04	1.014	0.202	0.763
		7	0.74	0.98	0.250	0.017	0.459
		8	1.39	1.11	0.838	0.539	-0.065
90383	PuTe ₂ O ₆	1	1.10	1.16	0.265	0.191	0.520
		2	0.98	1.04	0.234	0.963	0.413
90733	γ -TeO ₂	1	1.26	1.06	1.174	0.065	0.294
90837	STe ₂ O ₇	1	0.87	0.99	0.254	0.751	0.372
92444	Pr ₂ Te ₂ O ₇	1	0.00	0.68	0.000	0.000	0.000
94349	Ga ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.77	0.91	0.294	0.240	0.640
		2	1.07	1.15	0.527	0.570	0.923
		3	1.36	1.34	1.084	-0.050	0.510
		4	0.99	1.11	0.279	0.316	0.142
94462	CeTe ₂ O ₆	1	1.02	1.16	0.265	0.205	0.531
		2	0.92	1.02	0.255	0.457	1.080
97532	V ₂ Te ₂ O ₉ (II)	1	0.89	1.03	0.235	-0.021	0.757
		2	0.91	1.06	0.494	0.257	0.483
98614	P ₂ Te ₃ O ₁₁	1	0.70	0.90	0.243	0.205	0.485
		2	1.04	0.99	0.083	0.671	0.585
		3	1.12	1.16	0.419	0.691	0.448
98902	TiTe ₃ O ₈	1	0.94	1.07	0.295	0.000	0.250
100151	P ₄ Te ₈ O ₂₆	1	0.85	0.99	0.181	0.690	0.147
		2	1.03	1.06	0.465	0.174	0.066
		3	0.88	1.01	0.674	0.346	0.142
		4	1.01	1.05	0.967	0.875	0.077
100661	CaTe ₃ O ₈ [•]	1	1.04	1.00	0.753	0.457	0.819
159460	β -BaMo ₂ TeO ₉	1	1.09	1.16	0.803	0.465	0.418
160677	UTeO ₅	1	1.26	1.13	0.254	0.597	0.272
163978	MnMoTeO ₆ (I)	1	0.84	1.02	0.000	0.500	0.156
170699	Lu ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.90	1.04	0.079	0.324	0.322
		2	1.07	1.04	0.155	0.568	0.245
170714	BaV ₂ TeO ₈	1	0.82	0.98	0.650	0.175	0.351
170917	NaNb ₃ Te ₄ O ₁₆	1	0.84	0.96	0.463	0.250	0.257
		2	1.02	1.07	0.395	0.250	0.780
		3	0.95	1.07	0.533	0.250	0.938
		4	0.84	0.93	-0.011	0.750	0.546
171017	MgTe ₂ O ₅	1	0.90	0.97	0.046	0.169	-0.093

171245	La ₂ MoTe ₃ O ₁₂	1	1.27	1.16	0.177	0.350	0.141
		2	0.81	1.02	0.133	0.750	0.092
171247	MoNd ₂ Te ₃ O ₁₂	1	0.93	1.06	0.715	0.080	0.632
		2	0.82	1.00	0.591	0.250	0.339
171254	Rb ₄ Te ₈ O ₂₃ •	1	1.44	1.15	0.194	0.062	0.867
		2	0.86	0.97	0.375	0.427	0.366
		3	0.48	0.84	0.108	0.366	0.885
171758	Mo ₃ Na ₂ Te ₃ O ₁₆	1	0.98	0.97	0.000	1.076	0.000
		2	1.09	1.08	0.160	0.797	0.699
182023	ε-SrTeO ₃	1	1.16	1.13	0.537	0.246	0.125
183605	α-BaMo ₂ TeO ₉	1	1.08	1.28	0.770	-0.023	0.448
		2	1.02	1.24	0.486	0.487	0.516
184714	MgMoTeO ₆	1	0.91	1.03	0.000	0.000	0.345
188038	CdMoTeO ₆	1	0.80	1.03	0.000	0.500	0.154
188657	MgTe ₆ O ₁₃	1	0.77	1.03	0.247	0.017	0.080
		2	1.24	1.07	0.452	0.457	0.123
194085	VYTe ₂ O ₈	1	1.20	1.14	0.224	0.000	0.156
		2	0.98	1.04	0.713	0.000	0.156
		3	0.97	1.04	0.714	0.500	0.345
		4	1.18	1.13	0.727	0.000	0.344
194348	CuS ₂ Y ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.11	1.18	0.418	0.330	0.449
194349	CuNd ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.10	1.17	0.423	0.323	0.451
194350	CuS ₂ Sm ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.10	1.17	0.422	0.325	0.450
194351	CuEu ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.13	1.18	0.420	0.331	0.448
194353	CuS ₂ Tb ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.08	1.17	0.427	0.322	0.451
194355	CuHo ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.08	1.17	0.426	0.324	0.450
194356	CuEr ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.09	1.17	0.421	0.326	0.449
194357	CuS ₂ Tm ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.07	1.17	0.426	0.323	0.450
194359	CuLu ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.14	1.27	0.921	0.198	0.979
200625	α-MoTe ₂ O ₇	1	1.02	1.09	0.605	0.832	0.946
		2	0.79	0.98	0.946	0.608	0.708
202318	Ta ₂ Te ₂ O ₉	1	1.17	1.26	0.541	0.755	0.842
		2	1.14	1.22	1.091	-0.036	0.851
202451	CuTeO ₃ (II)	1	1.38	1.27	0.535	0.122	0.609
203064	Hg ₂ TeO ₃	1	1.46	1.44	0.213	0.250	0.378
238182	Sc ₂ Te ₃ O ₉	1	1.04	1.14	0.539	0.080	0.422
		2	1.32	1.13	0.716	0.161	1.094
		3	0.86	1.00	0.225	0.214	0.211
238201	InNbTe ₂ O ₈	1	0.99	1.06	0.685	0.232	0.202
		2	1.00	1.10	0.196	0.198	0.218
238571	ThWTeO ₇	1	0.81	1.04	0.036	0.437	0.443
238572	MoTh ₂ Te ₃ O ₁₃	1	1.37	1.17	0.681	0.877	0.994
		2	0.98	1.16	0.890	0.582	0.262
		3	1.14	1.17	0.528	0.203	0.972
238573	MoThTe ₂ O ₉	1	1.04	1.08	0.566	0.753	0.264
		2	0.92	1.03	0.796	0.660	0.381

238574	ThWTe ₂ O ₉	1	0.97	1.04	0.925	0.719	0.246
		2	1.02	1.13	0.732	0.653	0.510
238923	CoS ₂ Y ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.24	1.23	-0.090	0.849	0.447
238924	CoNd ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.33	1.27	0.408	0.353	0.452
238925	CoS ₂ Sm ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.33	1.27	0.403	0.357	0.450
238926	CoEu ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.28	1.25	0.405	0.352	0.447
238927	CoGd ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.27	1.25	0.408	0.351	0.448
238928	CoS ₂ Tb ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.25	1.24	0.409	0.348	0.448
238929	CoDy ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.27	1.25	0.406	0.351	0.448
238930	CoHo ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.24	1.24	0.411	0.347	0.448
238931	CoEr ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.24	1.24	0.410	0.348	0.448
238932	CoS ₂ Yb ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.16	1.27	0.920	0.192	0.976
238933	CoLu ₂ S ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.16	1.27	0.922	0.195	0.979
238934	S ₂ Sm ₂ Te ₂ O ₁₄	1	1.27	1.23	0.408	0.350	0.447
238935	Gd ₂ S ₂ ZnTe ₂ O ₁₄	1	1.19	1.20	0.414	0.342	0.446
238936	Dy ₂ S ₂ ZnTe ₂ O ₁₄	1	1.18	1.19	0.417	0.342	0.445
238937	Ho ₂ S ₂ ZnTe ₂ O ₁₄	1	1.18	1.20	0.415	0.340	0.446
238938	Er ₂ S ₂ ZnTe ₂ O ₁₄	1	1.25	1.24	0.411	0.351	0.446
238939	S ₂ Yb ₂ ZnTe ₂ O ₁₄	1	1.18	1.28	0.418	0.188	0.476
239153	AlVTe ₂ O ₈	1	0.98	1.00	0.874	0.285	0.322
		2	1.16	1.20	0.879	0.106	0.051
239154	GaVTe ₂ O ₈	1	0.95	1.00	0.872	0.289	0.320
		2	1.35	1.24	0.866	0.068	0.057
240868	SrTe ₃ O ₈ •	1	1.00	1.02	0.495	0.351	0.000
240939	FeNaTe ₂ O ₆	1	1.06	1.04	0.632	0.308	0.365
		2	1.02	1.05	0.085	-0.039	0.700
240967	α-SrTeO ₃	1	1.20	1.22	0.958	0.470	0.197
		2	1.29	1.22	0.517	0.367	0.747
		3	1.14	1.22	0.079	0.914	0.296
		4	1.17	1.22	0.355	0.954	0.146
		5	1.21	1.22	0.103	0.865	-0.071
		6	1.41	1.35	0.243	0.463	0.487
241977	K ₂ U ₃ Te ₄ O ₁₈	1	1.05	1.02	0.233	0.134	-0.017
		2	0.95	1.10	0.657	0.362	0.208
242165	Cd ₃ MoTe ₂ O ₁₀	1	1.02	1.16	0.886	0.645	0.954
		2	1.15	1.18	0.915	0.571	0.497
243559	Th ₂ Te ₃ O ₁₁ •	1	1.18	1.13	0.028	0.645	0.705
		2	1.13	1.04	0.495	0.843	0.290
243560	SThTeO ₇	1	1.14	1.19	0.132	0.459	0.601
243761	Ba ₂ V ₄ Te ₃ O ₁₈	1	1.49	1.18	0.095	0.403	0.530
		2	0.92	1.01	0.000	0.461	0.250
243763	Cd ₂ V ₂ Te ₂ O ₁₁	1	0.91	1.03	0.444	0.814	0.638
244231	Hg ₂ V ₂ Te ₂ O ₁₁	1	0.82	1.01	0.441	0.796	0.644
247052	CoMoTeO ₆	1	0.87	1.01	0.000	0.500	0.155
248226	P ₂ Te ₂ O ₉	1	0.84	0.94	0.424	0.247	0.119
		2	1.25	1.15	0.034	0.475	0.194

249539	MoNd ₂ Te ₄ O ₁₄	1	1.01	1.14	0.013	0.888	0.026
		2	0.93	1.09	0.259	0.622	0.373
		3	1.51	1.20	0.369	0.119	0.491
		4	1.41	1.20	1.025	0.037	0.379
249540	Nd ₂ W ₂ Te ₂ O ₁₃	1	1.08	1.09	0.768	0.344	-0.040
		2	0.82	1.02	0.115	0.091	0.477
249543	MoPr ₂ Te ₄ O ₁₄	1	1.01	1.14	0.012	0.888	0.026
		2	0.93	1.10	0.253	0.621	0.373
		3	1.47	1.21	0.371	0.124	0.492
		4	1.42	1.21	1.025	0.036	0.379
249583	Mo ₂ Ni ₃ TeO ₁₁	1	1.33	1.37	0.380	0.000	0.304
249958	MoNi ₃ Te ₂ O ₁₀	1	1.46	1.38	0.881	0.221	0.396
		2	1.39	1.27	0.312	1.089	0.451
250481	MoY ₂ Te ₃ O ₁₂	1	0.84	1.01	0.093	0.250	0.839
		2	0.93	1.03	0.784	0.918	0.860
250506	MnTe ₆ O ₁₃	1	0.82	1.05	0.231	0.245	0.421
		2	1.31	1.11	0.335	0.125	0.044
250507	CoTe ₆ O ₁₃	1	0.78	1.03	0.231	0.246	0.420
		2	1.25	1.08	0.329	0.119	0.043
250508	NiTe ₆ O ₁₃	1	0.77	1.03	0.231	0.247	0.420
		2	1.20	1.06	0.325	0.116	0.044
250523	MoZnTeO ₆	1	0.91	1.00	0.000	0.000	0.847
250677	Li ₂ MoTeO ₆	1	1.20	1.26	0.778	0.145	0.560
250678	Li ₂ WTeO ₆	1	1.15	1.24	0.775	0.147	0.557
250785	ScVTe ₂ O ₈	1	0.94	1.06	0.130	0.312	0.679
		2	1.32	1.29	0.872	0.907	0.056
251051	InNaTe ₂ O ₆	1	1.23	1.16	0.467	0.049	0.307
		2	1.18	1.13	0.696	0.117	0.647
251546	InKTe ₂ O ₆	1	1.48	1.26	0.349	0.750	0.326
		2	1.15	1.21	0.161	0.750	0.782
251547	InRbTe ₃ O ₈	1	1.18	1.14	0.426	-0.106	0.443
		2	1.03	1.15	0.028	0.431	0.199
		3	0.90	1.04	0.570	0.347	0.362
251548	CsInTe ₃ O ₈	1	1.21	1.15	0.421	-0.117	0.442
		2	1.06	1.18	0.030	0.434	0.204
		3	0.92	1.05	0.565	0.348	0.360
252505	BaTe ₄ O ₉	1	0.90	0.97	0.294	-0.162	0.031
		2	1.23	1.19	0.436	0.295	0.205
		3	1.38	1.27	0.531	0.804	0.362
		4	0.83	1.03	0.589	0.188	0.528
253016	BaTe ₂ O ₆ [•]	1	1.30	1.24	0.000	0.484	0.250
260041	ϵ -CaTe ₂ O ₅	1	1.10	1.23	0.389	0.277	0.778
		2	1.39	1.23	0.379	0.883	0.512
260226	α -CaTeO ₃	1	1.38	1.32	0.543	0.362	-0.015
		2	1.16	1.24	0.091	0.077	0.547
		3	1.04	1.04	0.937	0.324	0.289

		4	1.27	1.24	0.024	0.068	0.948
		5	1.35	1.32	0.471	0.441	0.586
260228	β -CaTeO ₃	1	1.21	1.15	0.216	0.215	0.651
		2	1.27	1.28	0.569	0.196	0.678
		3	1.13	1.15	0.921	0.161	0.703
		4	1.16	1.15	0.087	0.811	0.302
		5	1.49	1.31	0.414	0.862	0.349
		6	1.10	1.15	0.782	0.790	0.334
		7	1.10	1.15	0.075	0.712	0.530
		8	1.31	1.31	0.386	0.819	0.529
		9	1.07	1.15	0.737	0.712	0.496
		10	1.06	1.15	0.280	0.248	0.502
		11	1.36	1.36	0.592	0.239	0.465
		12	1.11	1.15	0.923	0.281	0.465
		13	1.00	1.15	0.204	0.270	0.230
		14	1.48	1.36	0.535	0.314	0.214
		15	1.06	1.15	0.878	0.195	0.278
		16	1.14	1.15	0.114	0.811	0.717
		17	1.29	1.31	0.481	0.680	0.777
		18	1.01	1.15	0.799	0.716	0.760
260257	NiV ₂ Te ₂ O ₁₀	1	0.99	1.07	0.079	0.907	0.216
260278	GeTe ₂ O ₆	1	1.06	1.21	0.514	0.050	0.819
261175	Ga ₂ Te ₃ O ₉	1	1.51	1.49	0.975	0.301	0.250
261179	SrV ₂ TeO ₈	1	0.89	1.05	0.310	-0.001	0.741
		2	0.75	0.97	0.162	0.414	0.636
		3	0.96	1.09	0.298	-0.002	0.246
		4	1.13	1.08	0.124	0.437	0.198
261183	Ba ₂ V ₂ Te ₂ O ₁₁	1	1.12	1.07	0.066	0.032	0.779
261700	MoZn ₂ TeO ₇	1	0.78	1.00	0.460	0.293	0.262
261941	Cs ₂ Te ₄ O ₁₂ •	1	0.00	0.71	0.000	0.000	0.500
264390	Ag ₂ CeSTe ₄ O ₁₄	1	1.18	1.17	0.425	1.013	0.650
		2	1.06	1.18	0.367	0.498	0.577
280793	GaKTe ₆ O ₁₄	1	0.91	0.96	0.196	0.538	0.248
280885	KVTeO ₅	1	1.02	1.07	0.730	0.626	0.467
280886	NaVTeO ₅	1	0.97	1.02	0.710	0.624	0.478
280967	β -MnTe ₂ O ₅	1	0.93	1.01	0.043	0.331	0.591
281268	Na ₂ W ₂ TeO ₉	1	1.05	1.09	0.373	0.985	0.816
		2	1.03	1.07	0.027	0.029	0.529
		3	1.09	1.09	0.306	0.552	0.380
		4	0.98	1.02	0.141	-0.015	0.587
281502	BaW ₂ TeO ₉	1	1.00	1.11	0.798	0.815	0.916
281698	BaNbPTeO ₈	1	0.88	0.98	0.327	0.381	0.085
291294	NaYTe ₄ O ₁₀	1	1.26	1.29	0.856	0.143	0.109
291295	KYTe ₂ O ₆	1	1.46	1.28	0.357	0.750	0.348
		2	1.13	1.20	0.163	0.750	0.771
291296	RbYTe ₂ O ₆	1	1.49	1.30	0.359	0.750	0.346

		2	1.21	1.25	0.165	0.750	0.772
291297	CsYTe ₃ O ₈	1	1.23	1.09	0.612	0.027	0.027
291413	MnMoTeO ₆ (II)	1	0.86	1.03	0.000	0.500	0.655
404297	BaCuTe ₂ O ₇ •	1	1.41	1.19	0.750	-0.013	0.167
405107	Ba ₂ Nb ₆ Te ₂ O ₂₁	1	1.12	1.27	0.285	0.000	0.134
405108	Ba ₂ Ta ₆ Te ₂ O ₂₁	1	1.09	1.24	0.286	0.000	0.135
407752	CuSrTe ₂ O ₆	1	1.02	1.17	0.398	0.963	0.025
409713	ZrTe ₃ O ₈	1	0.98	1.14	0.000	0.250	-0.043
411111	CsV ₃ Te ₂ O ₁₂	1	1.47	1.46	0.333	0.667	0.705
		2	0.87	1.02	0.000	0.000	0.027
412797	β-Hg ₂ Te ₂ O ₇ •	1	0.88	1.04	0.243	0.130	0.075
		2	0.90	1.03	0.262	0.380	0.166
412800	α-Hg ₂ Te ₂ O ₇ •	1	0.84	1.02	0.246	0.502	0.293
413007	LaNbTeO ₆	1	1.37	1.30	0.164	0.769	0.902
		2	0.65	0.88	0.755	0.386	0.434
413057	Cd ₂ Te ₂ O ₇ •	1	1.10	1.16	0.091	0.052	0.585
		2	0.93	1.08	0.568	0.161	0.568
413058	Cd ₂ Te ₃ O ₉ •	1	0.76	0.98	0.207	0.632	0.095
		2	0.97	1.07	0.112	0.119	0.015
413059	Ca ₄ Te ₅ O ₁₄	1	0.96	1.08	0.090	0.215	0.078
		2	1.19	1.08	0.103	0.148	0.473
		3	1.28	1.08	0.412	0.355	0.490
		4	1.16	1.08	0.383	0.018	0.030
		5	0.97	1.08	0.439	0.311	0.059
413651	La ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.97	1.08	0.081	0.323	0.317
		2	1.01	1.08	0.161	0.601	0.245
413652	Ce ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.96	1.08	0.081	0.324	0.318
		2	1.06	1.08	0.158	0.587	0.246
413653	Sm ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.94	1.06	0.081	0.325	0.319
		2	1.06	1.06	0.157	0.576	0.244
413654	Nd ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.95	1.07	0.081	0.324	0.319
		2	1.06	1.07	0.157	0.579	0.245
413655	Pr ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.95	1.05	0.081	0.324	0.318
		2	1.05	1.05	0.157	0.580	0.245
413656	Eu ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.93	1.06	0.081	0.325	0.320
		2	1.07	1.06	0.156	0.571	0.244
413657	Gd ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.92	1.05	0.081	0.324	0.321
		2	1.07	1.05	0.156	0.571	0.244
413658	Tb ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.91	1.05	0.081	0.325	0.321
		2	1.07	1.05	0.155	0.570	0.244
413659	Dy ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.92	1.05	0.081	0.325	0.320
		2	1.08	1.05	0.155	0.564	0.244
413660	Ho ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.90	1.04	0.081	0.323	0.321
		2	1.07	1.04	0.155	0.566	0.244
413661	Er ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.91	1.04	0.080	0.325	0.321
		2	1.08	1.04	0.154	0.562	0.243

413662	Tm ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.90	1.04	0.081	0.323	0.322
		2	1.09	1.04	0.154	0.561	0.244
413663	Yb ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.90	1.04	0.080	0.321	0.322
		2	1.09	1.04	0.154	0.558	0.244
413664	Dy ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.32	1.11	0.336	1.039	0.358
		2	1.01	1.07	0.212	0.264	0.056
		3	0.86	1.02	0.278	0.425	0.409
		4	1.09	1.11	0.816	0.213	0.466
		5	1.21	1.08	0.739	0.011	0.100
413665	Ho ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.30	1.10	0.341	1.039	0.356
		2	0.98	1.06	0.210	0.265	0.059
		3	0.84	1.01	0.277	0.425	0.410
		4	1.09	1.11	0.815	0.213	0.465
		5	1.22	1.08	0.737	0.011	0.102
413666	Er ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.31	1.10	0.336	1.037	0.358
		2	0.95	1.06	0.208	0.267	0.059
		3	0.84	1.01	0.276	0.428	0.410
		4	1.06	1.10	0.817	0.211	0.463
		5	1.20	1.07	0.736	0.012	0.100
413667	Tm ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.29	1.09	0.344	1.038	0.355
		2	0.96	1.06	0.210	0.267	0.058
		3	0.84	1.01	0.274	0.427	0.410
		4	1.06	1.10	0.817	0.213	0.463
		5	1.21	1.07	0.734	0.013	0.102
413668	Yb ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.29	1.09	0.341	1.038	0.355
		2	0.91	1.05	0.205	0.269	0.061
		3	0.84	1.01	0.274	0.428	0.410
		4	1.06	1.10	0.816	0.213	0.463
		5	1.20	1.07	0.733	0.014	0.103
413669	Lu ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.26	1.07	0.322	1.026	0.356
		2	0.93	1.05	0.209	0.268	0.059
		3	0.83	1.01	0.272	0.427	0.410
		4	1.06	1.10	0.816	0.211	0.463
		5	1.22	1.07	0.724	0.015	0.105
415472	Ag ₂ Te ₂ O ₆ (II)•	1	1.08	1.05	0.485	0.250	0.523
416032	Ba ₂ P ₂ TeO ₉	1	1.50	1.21	0.141	0.866	1.012
417616	BaLa ₂ Te ₅ O ₁₄	1	1.30	1.16	0.499	0.160	0.549
		2	1.17	1.07	0.500	0.485	0.250
		3	1.01	1.07	0.089	0.235	0.300
417712	Sc ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.32	1.09	0.519	1.041	0.313
		2	0.86	1.00	0.193	0.276	0.060
		3	0.83	0.98	0.283	0.431	0.408
		4	1.01	1.06	0.811	0.211	0.457
		5	1.16	1.06	0.713	0.031	0.110
417774	AgVTeO ₅	1	0.94	1.01	0.290	0.877	0.031
418184	Cd ₄ V ₂ Te ₃ O ₁₅	1	1.01	1.14	0.578	0.199	1.015

		2	1.27	1.25	-0.010	0.789	0.836
		3	1.03	1.11	0.588	0.703	0.848
418558	V ₂ Zn ₅ TeO ₁₀	1	1.04	1.05	0.403	0.639	0.755
418854	Y ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.90	1.04	0.081	0.324	0.321
		2	1.06	1.04	0.155	0.567	0.243
418855	Y ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.31	1.10	0.341	1.039	0.357
		2	1.00	1.07	0.213	0.265	0.056
		3	0.85	1.01	0.276	0.425	0.410
		4	1.10	1.11	0.815	0.212	0.466
		5	1.20	1.08	0.738	0.012	0.100
420079	Dy ₂ Te ₃ O ₉	1	0.86	1.05	0.267	0.347	0.019
		2	0.95	1.01	0.934	0.293	0.233
		3	1.00	1.05	0.760	0.380	0.081
		4	0.93	1.05	0.123	0.366	0.409
		5	1.07	1.16	0.936	0.140	0.503
		6	0.88	1.00	0.496	0.369	0.186
420405	Ag ₂ Mo ₃ Te ₃ O ₁₆	1	0.98	0.99	0.500	0.495	0.000
		2	1.19	1.13	0.355	0.206	0.306
420406	Ag ₂ MoTe ₄ O ₁₂	1	1.10	1.05	0.118	0.317	0.445
		2	0.88	1.05	0.088	0.621	0.535
420407	Ag ₆ W ₃ Te ₄ O ₂₀	1	1.15	1.08	0.100	0.016	0.593
		2	0.99	1.11	0.214	0.241	0.193
420434	Ga ₂ MoTe ₂ O ₁₀	1	1.24	1.18	0.602	0.250	0.486
		2	0.97	1.12	0.872	0.250	0.869
420436	In ₂ MoTe ₂ O ₁₀	1	0.64	0.95	0.753	0.726	0.502
		2	0.75	0.98	0.377	0.219	0.818
422199	KNb ₃ Te ₂ O ₁₂	1	1.44	1.31	0.788	0.670	0.086
422200	KTa ₃ Te ₂ O ₁₂	1	1.44	1.30	0.785	0.671	0.085
422201	Nb ₃ RbTe ₂ O ₁₂	1	1.44	1.31	0.795	0.671	0.085
422202	RbTa ₃ Te ₂ O ₁₂	1	1.47	1.31	0.795	0.673	0.085
422204	Cs ₃ Nb ₉ Te ₄ O ₃₂	1	0.64	0.90	0.264	0.269	0.250
		2	1.04	0.90	0.211	0.500	0.000
424305	Mg ₂ Te ₃ O ₈	1	1.64	1.34	0.000	0.471	0.750
		2	1.21	1.22	0.945	0.716	0.992
424607	Ca ₆ N ₂ Te ₅ O ₂₁	1	1.11	1.21	0.611	0.270	0.128
		2	1.24	1.21	0.629	0.407	-0.043
		3	1.12	1.21	0.368	0.263	0.091
		4	1.27	1.21	0.355	0.281	0.219
		5	1.08	1.21	0.736	0.386	0.236
424872	Lu ₂ Te ₃ O ₉	1	0.81	0.98	0.320	0.188	0.400
		2	1.11	1.12	0.393	0.862	0.224
		3	1.41	1.19	0.044	-0.037	0.829
		4	1.08	1.08	0.313	0.419	0.253
		5	0.92	1.08	0.212	0.632	0.358
		6	1.40	1.19	0.968	0.085	-0.001
		7	1.25	1.19	0.305	0.004	0.127

			8	0.98	1.08	0.969	0.453	0.149
			9	0.95	1.08	0.420	0.537	0.151
425499	As ₂ Te ₃ O ₁₁		1	1.09	1.01	0.338	0.045	0.450
			2	0.92	0.95	0.216	0.074	0.709
			3	0.99	1.01	0.217	0.942	0.927
428420	Hg ₂ Mo ₂ TeO ₉		1	1.12	1.17	0.450	0.282	0.112
428422	α -Hg ₂ MoTeO ₆		1	1.51	1.37	0.759	0.236	0.250
428423	β -Hg ₂ MoTeO ₆		1	1.00	1.07	-0.018	0.188	0.503
428628	NbYTe ₂ O ₈		1	1.20	1.15	0.228	0.000	0.154
			2	1.03	1.06	0.708	0.000	0.154
			3	1.03	1.06	0.708	0.500	0.347
			4	1.19	1.15	0.729	0.000	0.347
429330	Hg ₃ SeTe ₂ O ₁₀		1	1.06	1.11	0.587	0.970	0.000
			2	0.95	1.12	0.382	0.392	0.442
429440	Cu ₃ Hg ₂ Te ₆ O ₁₆		1	1.01	1.18	0.370	0.367	0.247
			2	1.09	1.05	0.086	0.086	0.000
429738	Cs ₂ W ₃ TeO ₁₂		1	1.02	1.13	0.000	0.000	0.599
431133	Ca ₄ Te ₅ O ₁₄ (HP)		1	1.14	1.13	0.671	0.213	0.278
			2	0.98	1.00	0.911	0.920	0.143
			3	1.10	1.00	0.830	0.286	0.454
			4	0.85	1.00	0.128	0.876	0.496
			5	0.92	1.08	0.562	0.445	0.099
431222	Ca ₂ UTe ₂ O ₉		1	1.07	1.17	0.606	0.386	0.493
			2	0.80	0.98	0.610	0.867	0.403
431223	K ₂ UTe ₂ O ₉		1	0.91	1.06	0.728	0.524	0.283
431435	BaTe ₃ O ₇		1	0.95	1.06	0.425	0.806	0.255
			2	1.02	1.06	0.243	0.333	0.154
			3	1.03	1.06	0.004	0.609	0.082
432105	β -CdTeO ₃		1	1.02	1.14	0.746	0.250	0.682
			2	1.14	1.08	0.672	0.750	0.849
			3	1.19	1.14	0.374	0.848	0.457
Tl ⁺								
343	Mo ₇ Tl ₂ O ₂₂		1	0.33	1.53	0.259	0.067	0.171
2082	B ₂ NbTlO ₆		1	0.39	1.65	0.038	0.232	0.229
2139	P ₄ Tl ₄ O ₁₂		1	0.62	1.55	0.000	0.500	0.718
			2	0.00	1.49	0.000	0.000	0.833
4230	Si ₂ Tl ₆ O ₇		1	0.76	1.57	0.271	0.242	0.132
			2	0.66	1.57	0.292	0.241	0.611
4239	CTl ₂ O ₃		1	0.25	1.47	0.069	0.000	0.316
			2	0.37	1.47	0.387	0.000	0.282
6105	TiTl ₂ O ₃		1	0.57	1.48	0.066	0.086	0.250
			2	0.57	1.48	0.385	0.285	0.750
6108	VTlO ₃		1	0.06	1.52	0.067	0.403	0.250
8084	BTl ₃ O ₃		1	1.24	1.61	0.150	0.324	0.250
8212	WTl ₂ O ₄		1	0.00	1.29	0.000	0.000	0.000
			2	0.00	1.55	0.000	0.000	0.500
			3	0.62	1.68	0.667	0.333	0.095

8265	Ge ₅ Tl ₈ O ₁₄	1	0.53	1.52	0.260	0.439	0.411
		2	0.56	1.52	0.290	0.250	0.118
		3	0.56	1.52	0.356	-0.037	0.413
		4	0.79	1.52	0.442	0.359	0.066
23478	Tl ₄ O ₃ •	1	0.62	1.53	0.104	0.250	0.140
		2	0.61	1.53	0.110	0.250	0.741
		3	0.53	1.53	0.683	0.250	0.976
26526	C ₂ CuTl ₂ O ₆	1	0.76	1.47	0.208	0.597	0.906
		2	0.35	1.47	0.101	0.179	0.484
30508	Mo ₈ Tl ₄ O ₂₆	1	0.12	1.49	0.284	0.291	0.069
		2	0.22	1.47	0.112	0.015	0.077
36535	Cu ₂ TlO ₂	1	0.68	1.54	0.000	0.250	0.033
36653	BaVTlO ₄	1	0.50	1.63	0.250	0.124	0.389
36654	SrVTlO ₄	1	0.41	1.54	1.007	0.135	0.091
48138	Mo ₁₀ Tl ₈ O ₃₄	1	0.31	1.48	0.120	0.796	0.490
		2	0.24	1.47	0.157	0.436	0.932
		3	0.30	1.46	0.316	0.735	0.758
		4	0.34	1.61	0.242	0.908	0.160
50456	AsCuTl ₂ O ₄	1	0.41	1.51	0.262	0.225	0.627
		2	0.48	1.51	-0.007	0.227	0.424
50457	CuPTlO ₄	1	0.56	1.61	0.586	0.328	0.937
50458	AsCuTlO ₄	1	0.62	1.64	0.590	0.331	0.938
50927	B ₅ TlO ₈	1	0.00	1.50	0.066	0.208	0.122
59944	β-STl ₂ O ₄	1	0.23	1.64	0.647	0.250	0.401
		2	0.12	1.50	0.989	0.250	0.715
60780	PTl ₃ O ₄	1	0.67	1.62	0.270	0.189	0.024
61345	C ₃ UTl ₄ O ₁₁	1	0.00	1.41	0.683	0.344	0.352
		2	0.08	1.51	0.604	0.829	0.548
65659	BrTlO ₄	1	0.07	1.57	0.178	0.250	0.176
65773	V ₃ TlO ₈	1	0.10	1.44	0.069	0.250	0.955
72593	NbPTl ₂ O ₆	1	0.50	1.61	0.697	0.738	0.023
		2	0.30	1.52	0.664	0.706	0.145
72810	V ₂ Tl ₄ O ₇	1	0.64	1.55	0.333	0.667	0.502
		2	0.14	1.55	0.333	0.667	0.100
73083	β-ReTlO ₄	1	0.00	1.48	0.006	0.914	0.124
		2	0.12	1.48	0.969	0.255	0.131
		3	0.03	1.46	0.027	0.580	0.131
74811	PZnTlO ₄	1	0.21	1.52	0.009	-0.017	0.210
		2	0.06	1.47	0.503	0.015	0.324
75253	NTlO ₃ (III)	1	0.04	1.57	0.124	0.503	0.221
75599	NbP ₂ TlO ₈	1	0.30	1.51	0.346	0.389	0.013
80667	β-VTl ₃ O ₄	1	0.43	1.51	0.236	0.603	0.000
		2	0.42	1.51	0.000	-0.032	0.000
81436	PTiTlO ₅	1	0.31	1.43	0.106	0.692	0.047
		2	0.28	1.38	0.380	0.779	0.309
83659	Cd ₂ S ₃ Tl ₂ O ₁₂	1	0.16	1.71	0.192	0.308	0.692

		2	0.00	1.55	0.448	0.948	0.552
84291	Li ₂ Mo ₂ Tl ₃ O ₈	1	0.27	1.57	0.000	0.000	-0.017
		2	0.40	1.57	0.000	0.000	0.285
		3	0.00	1.61	0.333	0.667	0.100
84855	B ₃ TlO ₅	1	0.32	1.55	0.001	0.275	0.100
89615	Cu ₂ P ₂ TlO ₇	1	0.33	1.57	0.193	0.978	0.316
91276	P ₃ ZnTlO ₉	1	0.73	1.60	0.195	0.178	0.250
92324	Cu ₄ P ₆ Tl ₄ O ₂₁	1	0.08	1.46	0.500	0.395	0.250
		2	0.41	1.74	0.750	0.000	0.222
		3	0.37	1.63	0.896	0.229	0.307
93745	β-B ₄ Tl ₂ O ₇	1	0.73	1.45	0.050	0.538	0.919
		2	0.37	1.47	0.390	0.722	0.626
		3	0.37	1.45	0.657	0.951	0.094
		4	0.35	1.45	0.601	0.674	0.090
		5	0.41	1.63	0.282	0.979	0.569
		6	0.41	1.47	0.119	0.551	0.441
98626	Ni ₇ P ₆ Tl ₄ O ₂₄	1	0.22	1.41	0.628	0.901	0.538
		2	0.26	1.39	0.393	0.500	0.468
		3	0.22	1.36	0.825	0.500	0.515
98627	Ni ₄ P ₄ Tl ₂ O ₁₅	1	0.34	1.44	0.623	0.230	0.685
		2	0.26	1.46	0.457	0.095	0.538
99050	B ₁₀ Na ₂ Tl ₂ O ₁₇	1	0.44	1.64	0.055	0.145	0.595
99382	SeTl ₂ O ₄	1	0.06	1.46	0.250	0.722	0.999
		2	0.42	1.66	0.250	0.093	0.120
152173	α-Mo ₂ PrTlO ₈	1	0.00	1.35	0.500	0.267	0.250
152174	β-EuMo ₂ TlO ₈	1	0.00	1.64	0.250	0.250	0.250
152175	γ-Mo ₂ SmTlO ₈	1	0.00	1.61	0.250	0.250	0.250
154022	Mo ₃ U ₂ Tl ₂ O ₁₆	1	0.10	1.56	0.645	0.802	0.948
		2	0.28	1.61	0.618	0.535	0.397
154165	V ₈ Tl ₂ O ₂₁	1	0.03	1.46	0.520	0.000	0.316
154270	Cr ₂ UTl ₂ O ₁₀	1	0.21	1.44	0.272	0.565	0.579
		2	0.01	1.35	0.756	0.915	0.764
		3	0.14	1.45	0.468	0.945	0.038
		4	0.08	1.41	0.501	0.572	0.320
154271	Mo ₂ UTl ₂ O ₁₀	1	0.17	1.49	0.729	0.439	0.415
		2	0.07	1.48	0.248	0.090	0.246
		3	0.22	1.48	0.547	0.049	0.974
		4	0.19	1.43	0.493	0.433	0.671
157104	P ₆ Tl ₆ O ₁₈	1	0.31	1.58	0.411	0.077	0.686
		2	0.30	1.58	0.220	0.025	0.430
		3	0.12	1.53	0.092	0.045	0.154
161960	Mo ₂ NdTlO ₈	1	0.00	1.62	0.250	0.250	0.750
187561	CuTeTl ₄ O ₆	1	0.52	1.47	0.061	0.909	0.246
		2	0.73	1.47	0.154	0.817	0.609
		3	0.69	1.47	0.747	0.687	0.531
		4	0.54	1.47	0.482	0.048	0.302

190108	MnP ₃ TlO ₉	1	0.18	1.64	0.613	0.250	0.413
195302	P ₄ Pd ₃ Tl ₂ O ₁₄	1	0.23	1.69	0.000	0.323	0.539
195357	AlSiTlO ₄	1	0.38	1.67	0.999	0.728	0.229
201934	AgV ₂ TlO ₆	1	0.18	1.46	0.000	0.686	0.250
202028	Na ₃ TlO ₂	1	0.97	1.57	0.089	0.250	0.415
247477	CrTl ₂ O ₄ (II)	1	0.33	1.55	0.908	0.500	0.389
		2	0.02	1.32	0.579	0.500	0.388
		3	0.23	1.42	0.187	0.000	0.131
		4	0.32	1.58	0.512	0.000	0.111
248229	V ₅ Tl ₃ O ₁₄	1	0.33	1.50	0.366	0.000	0.815
250339	β -AlMo ₂ TlO ₈	1	0.00	1.63	0.000	0.000	0.500
250340	β -Mo ₂ ScTlO ₈	1	0.00	1.57	0.000	0.000	0.500
250390	HfMo ₆ Tl ₈ O ₂₄	1	0.40	1.52	0.175	0.000	0.649
		2	0.24	1.47	0.671	0.179	0.107
		3	0.01	1.45	0.500	0.167	0.500
250400	Mg ₂ Mo ₃ Tl ₂ O ₁₂	1	0.08	1.69	0.179	0.179	0.179
		2	0.44	1.86	0.975	0.975	0.975
250712	Si ₅ Tl ₄ O ₁₂	1	0.81	1.56	0.368	0.514	0.668
		2	0.55	1.56	0.137	0.214	0.666
280212	Al ₂ P ₃ Tl ₃ O ₁₂	1	0.06	1.62	0.239	0.354	0.121
		2	0.39	1.52	0.278	0.199	0.734
		3	0.46	1.58	0.248	0.203	0.508
280608	MoTl ₂ O ₄	1	0.20	1.43	0.000	-0.031	0.000
		2	0.29	1.53	0.000	0.095	0.500
		3	0.49	1.63	0.329	0.035	0.121
401129	CrP ₂ TlO ₇	1	0.01	1.38	0.316	0.311	0.454
407561	AsTl ₃ O ₄	1	0.70	1.65	0.269	0.191	0.030
411704	MoPTlO ₆	1	0.42	1.50	0.291	0.125	0.125
413950	Cr ₂ Tl ₂ O ₇	1	0.00	1.42	0.118	0.013	0.254
		2	0.00	1.33	0.692	0.417	0.250
415929	As ₂ InTlO ₇	1	0.18	1.52	0.672	0.452	0.693
		2	0.16	1.42	0.312	0.069	0.198
421051	γ -Mo ₂ PrTlO ₈	1	0.00	1.62	0.250	0.250	0.750
421466	Cu ₄ NaTe ₂ Tl ₃ O ₁₂	1	0.57	1.46	0.000	0.314	0.500
		2	0.00	1.35	0.500	0.000	0.000
421926	AgCr ₄ Tl ₃ O ₁₄	1	0.15	1.42	0.570	0.170	0.499
		2	0.15	1.50	0.500	0.512	0.250
427689	B ₃ TlO ₅ (HP)	1	0.31	1.41	0.055	0.368	0.426
Xe ⁶⁺							
26627	α -XeO ₃	1	1.00	0.92	0.842	0.223	0.316
253443	K ₄ Xe ₃ O ₁₂ [•]	1	0.61	0.73	0.000	0.000	0.598
253589	γ -XeO ₃	1	0.85	0.86	0.333	0.667	0.341
		2	0.85	0.85	0.175	0.376	0.548

3) Results of Te-LP distances, Te⁴⁺ LP radii and LP relative coordinates from 59 non-equivalent Te⁴⁺ positions in 47 non-oxide (X) crystal structures obtained with the present method.

X type	ICSD #	Structure	Non-equivalent Te ⁴⁺ position #	Te-LP (Å)	r _{LP} (Å)	LP relative coordinates		
						x	y	z
Br ⁻	22078	K ₂ TeBr ₆	1	0.00	0.72	0.000	0.000	0.000
	39531	FeTeBr ₇	1	0.65	0.85	0.943	0.546	0.875
			2	0.57	0.82	0.244	0.113	0.475
	49522	Rb ₂ TeBr ₆	1	0.00	0.72	0.000	0.000	0.000
	65057	Cs ₂ TeBr ₆	1	0.00	0.74	0.000	0.000	0.000
	69976	Zr ₂ TeBr ₁₂	1	0.54	0.82	0.693	0.069	0.832
	410948	WTeBr ₉	1	0.40	0.73	0.254	0.250	0.503
Cl ⁻	26043	AlTeCl ₇	1	0.74	0.90	0.159	0.272	0.154
	39530	FeTeCl ₇	1	0.64	0.87	0.938	0.555	0.863
			2	0.65	0.86	0.255	0.132	0.477
	39785	ZrTe ₂ Cl ₁₂	1	0.44	0.80	0.325	0.330	0.289
	39786	HfTe ₂ Cl ₁₂	1	0.51	0.80	0.320	0.335	0.291
	61350	AuTeCl ₇	1	0.78	0.95	0.278	0.173	0.300
	68656	α -ReTe ₂ Cl ₁₂	1	0.61	0.86	0.234	0.723	0.810
	74682	OsTe ₂ Cl ₁₂	1	0.64	0.88	0.230	0.723	0.813
	404223	β -ReTe ₂ Cl ₁₂	1	0.52	0.80	0.002	0.648	0.086
	404224	MoTe ₂ Cl ₁₂	1	0.52	0.80	0.002	0.648	0.086
	410945	WTeCl ₉	1	0.69	0.88	0.136	0.382	0.324
	410946	α -NbTeCl ₉	1	0.65	0.85	0.137	0.376	0.330
	410947	α -TaTeCl ₉	1	0.66	0.86	0.142	0.379	0.331
	410950	β -NbTeCl ₉	1	0.63	0.81	0.065	0.243	0.177
	410951	β -TaTeCl ₉	1	0.68	0.84	0.064	0.245	0.178
F ⁻	16108	Sb ₂ TeF ₁₄	1	0.81	1.06	0.839	0.207	0.414
	26051	KTeF ₅	1	1.40	1.28	-0.091	-0.054	0.250
	81862	BaTe ₂ F ₁₀	1	0.96	1.00	0.204	0.547	0.057
	84364	KTe ₂ F ₉	1	0.89	0.97	0.244	0.518	0.870
			2	1.46	1.28	0.142	0.099	0.920
	85452	TeF ₄	1	0.97	1.01	0.488	-0.038	0.064
	88416	BaTeF ₆	1	1.12	1.05	0.065	0.109	0.645
	200252	CsTeF ₅	1	1.08	1.05	-0.031	0.250	0.103
	202879	NaTeF ₅	1	1.74	1.38	0.194	0.250	0.876
	203140	RbTeF ₅	1	0.90	0.98	0.324	0.250	0.547
			2	1.35	1.27	0.170	0.250	0.247
I ⁻	79	δ -TeI ₄	1	0.39	0.77	0.132	0.250	0.573
			2	0.32	0.76	0.133	0.128	0.326
			3	0.36	0.77	0.138	0.250	0.083
	23649	K ₂ TeI ₆	1	0.00	0.72	0.000	0.000	0.000
	36009	Rb ₂ TeI ₆	1	0.00	0.72	0.000	0.000	0.000
	63536	β -TeI ₄	1	0.46	0.75	0.242	0.422	0.000

			2	0.30	0.76	0.256	0.661	0.125
			3	0.36	0.77	0.266	0.909	0.000
63537	γ -TeI ₄		1	0.30	0.76	0.026	0.864	0.195
			2	0.52	0.78	0.147	0.872	0.378
			3	0.34	0.77	0.778	0.870	0.320
			4	0.36	0.77	0.659	0.864	0.137
63538	ε -TeI ₄		1	0.40	0.79	0.121	0.750	0.500
401395	AlTeI ₇		1	0.77	0.88	-0.076	0.604	-0.041
S ²⁻	8 BaTeS ₃		1	0.76	0.95	0.621	0.250	0.243
85135	Ag ₂ TeS ₃		1	0.83	0.91	0.270	0.431	0.706
165378	Cs ₂ MnTe ₂ S ₆		1	1.03	1.13	0.667	0.333	-0.026
415120	Li ₂ TeS ₃		1	0.70	0.89	0.785	0.083	0.111
424890	Cs ₂ TeS ₃		1	1.82	1.57	0.501	0.507	0.389
			2	1.25	1.20	0.275	0.072	0.221
430311	Na ₂ TeS ₃		1	0.94	1.05	0.806	0.090	0.097
Se ²⁻	63011 Na ₂ TeSe ₃ (mC48)		1	0.91	1.03	0.921	-0.039	0.561
63012	K ₂ TeSe ₃		1	1.34	1.17	0.159	0.375	0.273
415121	Li ₂ TeSe ₃		1	0.69	0.86	0.768	0.080	0.118
430313	Na ₂ TeSe ₃ (mP24)		1	0.85	1.00	0.783	0.092	0.112

4) Results of Te-LP distances from 66 non-equivalent Te^{4+} positions in 33 oxide crystal structures obtained with the present method and using the ELF function.

The symbol \bullet indicates a mixed-valence structure, i.e. containing cations of M^* element with different charge numbers.

ICSD #	Structure	Non-equivalent Te^{4+} position #	Te-LP distance (\AA)		
			Present method with r_{LP} allowed to vary	Present method with r_{LP} fixed at 1.05 \AA	ELF function
500	CoTeO_3	1	0.79	0.73	0.81
1885	$\text{Te}_4\text{O}_9 \bullet$	1	1.04	1.04	0.91
2542	CuTe_2O_5	1	1.26	0.83	0.98
		2	1.16	0.90	0.98
8282	Fe_2TeO_5	1	1.41	0.96	0.97
26844	$\beta\text{-TeO}_2$	1	0.89	0.88	0.93
50702	$\text{Co}_2\text{Te}_3\text{O}_8$	1	1.66	1.15	1.08
		2	1.24	0.87	0.98
59166	$\text{Cs}_2\text{Te}_2\text{O}_5$	1	1.41	1.14	1.06
		2	1.39	1.08	1.11
59167	$\text{Cs}_2\text{Te}_4\text{O}_9$	1	1.35	1.23	1.03
		2	1.04	0.99	0.94
60067	$\alpha\text{-CdTeO}_3$	1	0.95	0.87	1.00
		2	1.12	0.95	0.97
61673	HgTeO_3	1	0.95	0.85	1.05
		2	0.98	0.86	0.94
62898	$\alpha\text{-TeO}_2$	1	1.04	1.02	0.91
65640	K_2TeO_3	1	1.14	1.02	1.15
73991	$\alpha\text{-MnTe}_2\text{O}_5$	1	1.23	0.89	1.10
90371	$\text{Nb}_2\text{Te}_4\text{O}_{13}$	1	1.23	1.23	0.89
		2	0.94	0.92	0.96
		3	0.78	0.76	0.84
		4	0.86	0.84	0.89
		5	0.79	0.77	0.85
		6	0.84	0.85	0.98
		7	0.74	0.87	0.98
		8	1.39	1.16	0.90
90733	$\gamma\text{-TeO}_2$	1	1.26	1.19	0.91
94349	$\text{Ga}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$	1	0.77	0.75	0.81
		2	1.07	0.89	1.02
		3	1.36	0.87	1.06
		4	0.99	0.90	0.97
97532	$\text{V}_2\text{Te}_2\text{O}_9$ (II)	1	0.89	0.89	0.93
		2	0.91	0.88	0.97
100661	$\text{CaTe}_3\text{O}_8 \bullet$	1	1.04	0.98	0.89
171017	MgTe_2O_5	1	0.90	0.84	0.91
171254	$\text{Rb}_4\text{Te}_8\text{O}_{23} \bullet$	1	1.44	1.11	0.91
		2	0.86	1.21	0.85

		3	0.48	0.42	0.69
200625	α -MoTe ₂ O ₇	1	1.02	0.96	0.92
		2	0.79	0.81	0.87
202318	Ta ₂ Te ₂ O ₉	1	1.17	0.90	1.06
		2	1.14	0.90	1.01
202451	CuTeO ₃ (II)	1	1.38	1.00	0.90
203064	Hg ₂ TeO ₃	1	1.46	0.82	0.99
280967	β -MnTe ₂ O ₅	1	0.93	0.92	0.92
412797	β -Hg ₂ Te ₂ O ₇ •	1	0.88	0.86	0.89
		2	0.90	0.90	0.90
412800	α -Hg ₂ Te ₂ O ₇ •	1	0.84	0.82	0.87
413057	Cd ₂ Te ₂ O ₇ •	1	1.10	0.86	1.01
		2	0.93	0.86	0.85
413058	Cd ₂ Te ₃ O ₉ •	1	0.76	0.78	0.83
		2	0.97	0.92	0.95
413654	Nd ₂ Te ₄ O ₁₁	1	0.95	0.92	0.97
		2	1.06	0.99	0.93
413666	Er ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.31	1.21	0.94
		2	0.95	0.92	0.90
		3	0.84	0.84	0.96
		4	1.06	0.95	0.99
		5	1.20	1.14	0.93
415472	Ag ₂ Te ₂ O ₆ (II)•	1	1.08	0.99	0.86
417712	Sc ₂ Te ₅ O ₁₃	1	1.32	1.24	0.92
		2	0.86	0.82	0.81
		3	0.83	0.80	0.95
		4	1.01	0.98	0.98
		5	1.16	1.13	0.95