



STRUCTURAL SCIENCE
CRYSTAL ENGINEERING
MATERIALS

Volume 73 (2017)

Supporting information for article:

Low-temperature behaviour of $K_2Sc[Si_2O_6]F$: Determination of the lock-in phase and its relationships with fresnoite- and melilite-type compounds

C. Hejny and L. Bindi

Table D1: Atom coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2) ofK₂Sc[Si₂O₆]F at 25 K.

Atom	x	y	z	U _{eq}
Sc1	0.33277(2)	0.24312(8)	0.33409(2)	0.0494(2)
Sc2	0.33195(2)	0.24656(7)	-0.00607(2)	0.0494(2)
Sc3	0.5	0.25302(10)	0.5	0.0494(3)
Sc4	0.16716(2)	0.24551(8)	0.16565(2)	0.0491(2)
Sc5	-0.00319(2)	0.24678(8)	0.33597(2)	0.0494(2)
Sc6	0.83156(2)	0.25253(8)	0.16748(2)	0.0491(2)
Sc7	0.66247(2)	0.24847(8)	0.33259(2)	0.0495(2)
Sc8	0.49268(2)	0.24812(8)	0.16553(2)	0.0492(2)
Sc9	0.16771(2)	0.25112(8)	0.50029(2)	0.0492(2)
Sc10	0	0.24536(10)	0	0.0497(3)
K01	0.24784(3)	0.5	0.07343(3)	0.0490(3)
K02	0.12997(3)	0	0.26684(3)	0.0492(3)
K03	0.26044(3)	0	0.23264(4)	0.0494(3)
K04	0.54703(3)	0	0.37150(3)	0.0490(3)
K05	0.55811(3)	0.5	0.41034(3)	0.0492(3)
K06	0.41316(3)	0	0.43913(4)	0.0489(3)
K07	0.45525(3)	0	-0.06124(3)	0.0498(3)
K08	0.76536(3)	0	0.29795(3)	0.0490(3)
K09	0.43595(3)	0.5	0.27696(3)	0.0491(3)
K10	0.07838(3)	0	0.11029(3)	0.0490(3)
K11	0.76089(3)	0.5	0.24769(3)	0.0490(3)
K12	0.27075(3)	0	-0.11031(3)	0.0489(3)
K13	-0.06314(3)	0	0.22526(4)	0.0495(3)
K14	0.26498(3)	0.5	0.20258(3)	0.0493(3)
K15	0.06047(3)	0.5	0.45601(3)	0.0492(3)
K16	0.63640(3)	0.5	0.22013(3)	0.0490(3)
K17	0.72553(3)	0.5	0.10059(3)	0.0490(3)
K18	0.40964(3)	0	0.09912(4)	0.0494(3)
K19	0.26345(3)	0.5	0.53421(3)	0.0488(3)
K20	0.11950(3)	0	-0.05813(3)	0.0498(3)
K21	0.23755(3)	0	0.04342(3)	0.0492(3)
K22	0.91453(3)	0.5	0.08108(3)	0.0491(3)
K23	0.10699(3)	0.5	0.26959(3)	0.0491(3)
K24	0.36977(3)	0.5	0.11834(3)	0.0491(3)
K25	0.22816(3)	0	0.37828(3)	0.0490(3)
K26	0.08624(3)	0	0.43813(3)	0.0496(3)
K27	0.87693(3)	0.5	0.41730(3)	0.0491(3)
K28	0.93857(3)	0.5	0.21068(3)	0.0493(3)
K29	0.60636(3)	0	0.24198(3)	0.0492(3)
K30	0.38104(3)	0.5	0.44232(3)	0.0493(3)
K31	0.07201(3)	0.5	0.13531(3)	0.0492(3)
K32	0.74832(3)	0	0.42702(3)	0.0491(3)
K33	0.23216(3)	0.5	0.41083(3)	0.0494(3)
K34	0.91116(3)	0	0.37051(3)	0.0496(3)
K35	0.45718(3)	0	0.27166(3)	0.0495(3)
K36	0.55409(3)	0.5	0.08536(3)	0.0487(3)
Si1	0.45733(3)	0.30142(10)	0.03884(3)	0.0493(3)
Si2	0.12485(3)	0.30577(10)	0.04665(3)	0.0492(3)
Si3	0.20610(3)	0.30173(10)	-0.03991(3)	0.0494(3)

Si4	0.62630(3)	0.19518(10)	0.12658(3)	0.0491(3)
Si5	0.29110(3)	0.19238(10)	0.12438(3)	0.0492(3)
Si6	0.03529(3)	0.20016(10)	0.12629(3)	0.0496(3)
Si7	0.12667(3)	0.30509(10)	0.37291(3)	0.0493(3)
Si8	0.79109(3)	0.30216(11)	0.37663(3)	0.0496(3)
Si9	0.46050(3)	0.30165(10)	0.37546(3)	0.0495(3)
Si10	0.54105(3)	0.31192(11)	0.28694(3)	0.0492(3)
Si11	-0.12380(3)	0.30857(11)	0.29440(3)	0.0495(3)
Si12	0.21105(3)	0.30556(10)	0.29240(3)	0.0493(3)
Si13	0.04308(3)	0.19058(10)	0.53546(3)	0.0490(3)
Si14	0.29237(3)	0.19287(10)	0.45635(3)	0.0495(3)
Si15	0.62668(3)	0.20008(10)	0.45424(3)	0.0494(3)
Si16	0.04270(3)	0.19457(10)	0.21354(3)	0.0489(3)
Si17	0.37252(3)	0.19003(10)	0.20662(3)	0.0491(3)
Si18	0.70985(3)	0.19208(10)	0.21020(3)	0.0496(3)
F1	0.65231(9)	0	0.32762(8)	0.0499(7)
F2	0.17298(8)	0	0.17175(8)	0.0480(8)
F3	0.16662(7)	0.5	0.17349(8)	0.0495(8)
F4	0.5	0	0.5	0.0483(10)
F5	0.01324(9)	0.5	0.33703(8)	0.0487(7)
F6	0.33392(8)	0.5	0.00559(8)	0.0487(8)
F7	0.66795(7)	0.5	0.33527(7)	0.0488(8)
F8	0.32965(8)	0	-0.00966(9)	0.0494(7)
F9	0	0	0	0.0482(10)
F10	0.48984(9)	0	0.16502(8)	0.0494(8)
F11	0.50155(8)	0.5	0.16967(8)	0.0485(8)
F12	0.17114(8)	0.5	0.49141(8)	0.0484(8)
F13	0.33472(7)	0	0.33745(8)	0.0493(8)
F14	0.83861(8)	0	0.17159(8)	0.0489(8)
F15	0.5	0.5	0.5	0.0492(11)
F16	0.00407(8)	0	0.33612(8)	0.0495(8)
F17	0.83366(7)	0.5	0.16365(8)	0.0490(8)
F18	0	0.5	0	0.0486(11)
F19	0.33840(8)	0.5	0.33371(7)	0.0482(8)
F20	0.17246(8)	0	0.50214(8)	0.0479(7)
O1	0.37186(10)	0	0.20479(11)	0.0482(9)
O2	0.12577(10)	0.5	0.30089(11)	0.0506(9)
O3	0.66064(7)	0.2627(3)	0.17228(7)	0.0492(7)
O4	0.57021(8)	0.2412(2)	0.14451(8)	0.0495(7)
O5	0.28584(10)	0	0.13343(11)	0.0494(9)
O6	0.03166(8)	0.2591(2)	0.40774(8)	0.0488(7)
O7	0.5	0.2290(3)	0	0.0507(10)
O8	0.63407(10)	0	0.12475(11)	0.0495(9)
O9	0.47174(8)	0.2397(2)	0.42812(8)	0.0494(7)
O10	0.83303(7)	0.2350(3)	0.33765(7)	0.0508(8)
O11	0.13636(10)	0.5	0.37922(10)	0.0476(9)
O12	0.33145(7)	0.2682(3)	0.50593(8)	0.0503(7)
O13	0.00719(8)	0.2441(2)	0.16552(7)	0.0501(7)
O14	0.80179(10)	0.5	0.04381(11)	0.0501(9)
O15	0.81993(8)	0.2391(2)	0.09037(8)	0.0483(7)
O16	0.21412(10)	0.5	0.63302(10)	0.0484(9)
O17	0.50986(8)	0.2400(2)	0.33789(7)	0.0489(7)
O18	0.10056(8)	0.2410(2)	0.20108(8)	0.0492(7)
O19	0.03973(10)	0	0.21233(10)	0.0481(9)
O20	0.46371(10)	0.5	0.37052(10)	0.0490(9)
O21	-0.07684(8)	0.2291(2)	0.30974(8)	0.0486(7)

O22	0	0.2449(3)	0.5	0.0476(9)
O23	0.70026(8)	0.2484(2)	0.26136(8)	0.0493(7)
O24	0.85228(7)	0.2709(2)	0.24248(8)	0.0484(7)
O25	0.35089(7)	0.2380(2)	0.26008(8)	0.0480(7)
O26	0.16174(7)	0.2338(3)	0.32887(7)	0.0491(7)
O27	0.17024(8)	0.2209(2)	0.00881(8)	0.0494(7)
O28	0.53187(10)	0.5	0.28821(10)	0.0492(9)
O29	0.45623(10)	0.5	0.03017(10)	0.0490(9)
O30	-0.03646(10)	0	0.13174(11)	0.0495(9)
O31	0.26210(8)	0.2324(2)	-0.03057(8)	0.0483(6)
O32	0.41109(8)	0.2392(2)	0.34808(8)	0.0485(7)
O33	0.04625(10)	0	0.53473(11)	0.0497(9)
O34	0.75859(8)	0.2491(2)	0.18035(8)	0.0495(7)
O35	0.09643(8)	0.2662(2)	0.51897(8)	0.0484(7)
O36	0.30798(8)	0.2371(2)	0.06986(8)	0.0484(7)
O37	0.40521(8)	0.2231(2)	0.01959(8)	0.0494(7)
O38	0.14449(8)	0.2212(2)	0.42305(8)	0.0486(7)
O39	0.63532(8)	0.2451(2)	0.40117(8)	0.0489(7)
O40	0.13601(8)	0.2390(2)	0.10016(8)	0.0483(7)
O41	0.23941(8)	0.2758(2)	0.14041(8)	0.0482(7)
O42	0.20335(8)	0.2380(2)	0.24022(8)	0.0480(7)
O43	0.30375(10)	0	0.45845(11)	0.0490(9)
O44	0.20965(10)	0.5	0.29678(11)	0.0511(9)
O45	0.59752(8)	0.2439(2)	0.29934(8)	0.0480(7)
O46	0.25956(7)	0.2162(2)	0.32197(7)	0.0483(6)
O47	0.73784(8)	0.2321(2)	0.36230(8)	0.0487(7)
O48	0.47252(8)	0.2570(2)	0.09381(8)	0.0479(6)
O49	0.07472(8)	0.2340(2)	0.02120(8)	0.0485(7)
O50	0.33177(7)	0.2642(3)	0.16368(7)	0.0500(8)
O51	0.70538(10)	0	0.20692(11)	0.0505(9)
O52	-0.08929(8)	0.2760(2)	0.15069(8)	0.0497(7)
O53	0.24347(8)	0.2311(2)	0.47166(8)	0.0488(6)
O54	0.57162(8)	0.2670(2)	0.47696(8)	0.0486(7)
O55	0.12563(10)	0.5	0.03705(11)	0.0503(9)
O57	0.32082(8)	0.2679(2)	0.41002(8)	0.0499(7)
O58	0.06944(8)	0.2688(2)	0.36182(7)	0.0484(6)
O59	0.02163(8)	0.2705(2)	0.26304(8)	0.0486(7)
O60	0.64106(7)	0.2738(2)	0.07647(8)	0.0480(7)
O61	0.52007(8)	0.2266(2)	0.24012(8)	0.0490(7)
O62	-0.02387(8)	0.2669(2)	0.07269(8)	0.0494(7)
O63	0.80695(7)	0.2688(2)	0.43153(8)	0.0487(7)
O64	0.62484(10)	0	0.46184(11)	0.0475(9)
O65	0.42549(8)	0.2738(2)	0.19169(8)	0.0484(7)

Table D2: Anisotropic displacement parameters (\AA^2) of $\text{K}_2\text{Sc}[\text{Si}_2\text{O}_6]\text{F}$ at 25 K.

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
Sc1	0.0499(4)	0.0471(4)	0.0512(4)	-0.0001(2)	-0.0003(3)	-0.0004(2)
Sc2	0.0496(4)	0.0468(4)	0.0518(4)	0.0003(2)	-0.0001(3)	0.0004(2)
Sc3	0.0497(5)	0.0464(5)	0.0519(5)	0	0.0002(4)	0
Sc4	0.0497(4)	0.0468(4)	0.0510(4)	-0.0002(2)	0.0004(3)	0.0002(2)
Sc5	0.0502(4)	0.0469(4)	0.0511(4)	-0.0001(2)	0.0001(3)	0.0002(2)
Sc6	0.0495(4)	0.0468(4)	0.0510(4)	0.0003(2)	0.0003(3)	0.0000(2)
Sc7	0.0495(4)	0.0475(4)	0.0514(4)	0.0003(2)	-0.0002(3)	0.0003(2)
Sc8	0.0496(4)	0.0476(4)	0.0504(4)	0.0001(2)	-0.0005(3)	-0.0002(2)
Sc9	0.0494(4)	0.0473(4)	0.0510(4)	-0.0003(2)	0.0004(3)	-0.0005(2)
Sc10	0.0502(5)	0.0478(5)	0.0511(5)	0	-0.0004(4)	0
K01	0.0480(5)	0.0474(4)	0.0515(5)	0	-0.0010(4)	0
K02	0.0495(5)	0.0470(4)	0.0511(5)	0	0.0010(4)	0
K03	0.0492(5)	0.0466(5)	0.0523(5)	0	-0.0006(4)	0
K04	0.0503(5)	0.0470(4)	0.0496(5)	0	0.0001(4)	0
K05	0.0497(5)	0.0485(4)	0.0493(5)	0	0.0005(4)	0
K06	0.0500(5)	0.0463(5)	0.0504(5)	0	0.0011(4)	0
K07	0.0503(5)	0.0471(4)	0.0520(5)	0	0.0008(4)	0
K08	0.0495(5)	0.0485(4)	0.0489(5)	0	0.0021(4)	0
K09	0.0497(5)	0.0472(4)	0.0504(5)	0	0.0001(4)	0
K10	0.0493(5)	0.0467(5)	0.0510(5)	0	-0.0004(4)	0
K11	0.0495(5)	0.0465(4)	0.0510(5)	0	-0.0011(4)	0
K12	0.0489(5)	0.0473(4)	0.0504(5)	0	0.0012(4)	0
K13	0.0506(5)	0.0466(4)	0.0514(5)	0	0.0012(4)	0
K14	0.0486(5)	0.0487(4)	0.0506(5)	0	-0.0006(4)	0
K15	0.0498(5)	0.0469(4)	0.0511(5)	0	0.0004(4)	0
K16	0.0496(5)	0.0464(4)	0.0508(5)	0	0.0005(4)	0
K17	0.0495(5)	0.0468(4)	0.0507(5)	0	-0.0006(4)	0
K18	0.0489(5)	0.0479(5)	0.0515(5)	0	0.0007(4)	0
K19	0.0489(5)	0.0478(4)	0.0498(5)	0	0.0002(4)	0
K20	0.0503(5)	0.0470(4)	0.0520(5)	0	-0.0015(4)	0
K21	0.0495(5)	0.0466(4)	0.0515(5)	0	0.0019(4)	0
K22	0.0494(5)	0.0470(4)	0.0508(5)	0	-0.0009(4)	0
K23	0.0494(5)	0.0475(4)	0.0503(5)	0	0.0001(4)	0
K24	0.0499(5)	0.0478(4)	0.0495(5)	0	0.0013(4)	0
K25	0.0503(5)	0.0466(4)	0.0502(5)	0	0.0015(4)	0
K26	0.0498(5)	0.0478(4)	0.0513(5)	0	-0.0005(4)	0
K27	0.0500(5)	0.0470(4)	0.0505(5)	0	-0.0005(4)	0
K28	0.0493(5)	0.0468(4)	0.0519(5)	0	0.0000(4)	0
K29	0.0498(5)	0.0478(4)	0.0502(5)	0	-0.0009(4)	0
K30	0.0506(5)	0.0474(4)	0.0499(5)	0	-0.0016(4)	0
K31	0.0498(5)	0.0482(4)	0.0496(5)	0	-0.0006(4)	0
K32	0.0490(5)	0.0480(4)	0.0502(5)	0	-0.0002(4)	0
K33	0.0501(5)	0.0473(4)	0.0507(5)	0	-0.0001(4)	0
K34	0.0504(5)	0.0472(4)	0.0512(5)	0	-0.0011(4)	0
K35	0.0508(5)	0.0466(4)	0.0511(5)	0	-0.0002(4)	0
K36	0.0496(5)	0.0469(4)	0.0497(5)	0	0.0007(4)	0
Si1	0.0500(5)	0.0477(5)	0.0501(5)	0.0003(4)	-0.0005(4)	0.0003(4)
Si2	0.0502(5)	0.0467(5)	0.0508(5)	0.0001(4)	0.0007(4)	0.0003(4)
Si3	0.0497(5)	0.0459(5)	0.0525(5)	0.0000(4)	0.0005(4)	-0.0002(4)
Si4	0.0493(5)	0.0467(5)	0.0514(5)	0.0001(4)	0.0004(4)	-0.0004(4)
Si5	0.0494(5)	0.0464(5)	0.0517(5)	-0.0006(4)	-0.0002(4)	0.0001(4)
Si6	0.0497(5)	0.0463(5)	0.0528(5)	-0.0001(3)	0.0007(4)	0.0002(4)
Si7	0.0498(5)	0.0473(5)	0.0508(5)	0.0000(4)	0.0004(4)	0.0002(4)

Si8	0.0497(5)	0.0479(5)	0.0511(5)	-0.0003(4)	-0.0004(4)	0.0003(4)
Si9	0.0497(5)	0.0455(5)	0.0535(5)	0.0001(3)	-0.0003(4)	0.0003(4)
Si10	0.0503(5)	0.0472(5)	0.0502(5)	0.0002(4)	-0.0003(4)	0.0004(4)
Si11	0.0493(5)	0.0470(5)	0.0522(5)	-0.0001(4)	-0.0004(4)	-0.0002(4)
Si12	0.0499(5)	0.0468(5)	0.0514(5)	-0.0001(4)	-0.0002(4)	-0.0001(4)
Si13	0.0500(5)	0.0456(5)	0.0512(5)	-0.0001(3)	-0.0003(4)	0.0000(4)
Si14	0.0498(5)	0.0474(5)	0.0513(5)	-0.0002(4)	0.0000(4)	0.0003(4)
Si15	0.0495(5)	0.0469(5)	0.0519(5)	-0.0003(3)	0.0003(4)	0.0005(4)
Si16	0.0487(5)	0.0475(5)	0.0505(5)	0.0005(4)	0.0002(4)	-0.0002(4)
Si17	0.0489(5)	0.0467(5)	0.0518(5)	-0.0001(4)	0.0006(4)	0.0001(4)
Si18	0.0498(5)	0.0466(5)	0.0524(5)	0.0000(3)	0.0005(4)	-0.0002(4)
F1	0.0513(12)	0.0482(12)	0.0501(13)	0	-0.0010(10)	0
F2	0.0474(13)	0.0482(13)	0.0484(13)	0	-0.0013(10)	0
F3	0.0479(14)	0.0476(13)	0.0531(14)	0	0.0020(11)	0
F4	0.0471(18)	0.0461(17)	0.0517(19)	0	-0.0013(14)	0
F5	0.0497(12)	0.0455(12)	0.0509(14)	0	0.0011(10)	0
F6	0.0485(13)	0.0471(13)	0.0506(13)	0	0.0014(10)	0
F7	0.0495(14)	0.0488(14)	0.0480(15)	0	-0.0002(11)	0
F8	0.0502(13)	0.0477(13)	0.0503(13)	0	-0.0001(10)	0
F9	0.0496(18)	0.0472(17)	0.0479(18)	0	-0.0033(14)	0
F10	0.0481(12)	0.0502(13)	0.0497(14)	0	-0.0012(10)	0
F11	0.0482(14)	0.0473(13)	0.0501(14)	0	0.0032(10)	0
F12	0.0479(13)	0.0480(13)	0.0495(13)	0	0.0008(10)	0
F13	0.0505(14)	0.0456(14)	0.0519(15)	0	-0.0006(11)	0
F14	0.0506(14)	0.0479(14)	0.0481(14)	0	0.0017(11)	0
F15	0.0484(19)	0.0483(17)	0.0509(19)	0	0.0056(15)	0
F16	0.0503(14)	0.0468(13)	0.0513(14)	0	-0.0005(11)	0
F17	0.0506(15)	0.0458(14)	0.0508(15)	0	0.0017(12)	0
F18	0.0495(19)	0.0509(18)	0.0452(18)	0	0.0001(15)	0
F19	0.0481(14)	0.0497(14)	0.0469(14)	0	0.0016(11)	0
F20	0.0473(12)	0.0497(13)	0.0468(13)	0	-0.0017(10)	0
O1	0.0487(15)	0.0443(15)	0.0517(16)	0	0.0029(13)	0
O2	0.0543(17)	0.0456(15)	0.0519(17)	0	0.0005(13)	0
O3	0.0493(12)	0.0439(11)	0.0544(13)	0.0005(8)	-0.0023(10)	-0.0001(8)
O4	0.0489(12)	0.0482(11)	0.0513(12)	-0.0005(8)	0.0007(9)	0.0000(9)
O5	0.0502(16)	0.0452(15)	0.0530(17)	0	-0.0023(13)	0
O6	0.0498(12)	0.0457(10)	0.0510(12)	0.0000(8)	0.0009(9)	0.0005(9)
O7	0.0525(18)	0.0503(16)	0.0495(17)	0	-0.0007(14)	0
O8	0.0481(16)	0.0441(14)	0.0564(17)	0	-0.0025(13)	0
O9	0.0510(12)	0.0433(10)	0.0539(13)	0.0012(8)	0.0011(10)	-0.0002(9)
O10	0.0536(14)	0.0476(12)	0.0512(13)	-0.0009(7)	-0.0009(11)	-0.0006(8)
O11	0.0476(15)	0.0472(15)	0.0478(16)	0	-0.0005(12)	0
O12	0.0491(12)	0.0464(11)	0.0553(13)	0.0001(8)	0.0028(10)	0.0005(9)
O13	0.0505(12)	0.0456(11)	0.0543(13)	-0.0017(8)	0.0027(10)	0.0003(9)
O14	0.0508(16)	0.0468(15)	0.0528(17)	0	0.0008(13)	0
O15	0.0516(12)	0.0453(10)	0.0479(12)	0.0018(8)	0.0014(9)	0.0007(8)
O16	0.0493(16)	0.0446(15)	0.0513(16)	0	-0.0042(13)	0
O17	0.0515(12)	0.0450(11)	0.0503(12)	0.0013(8)	-0.0037(9)	-0.0011(8)
O18	0.0500(12)	0.0469(10)	0.0509(12)	0.0000(8)	0.0018(9)	0.0022(9)
O19	0.0486(15)	0.0438(14)	0.0517(17)	0	-0.0014(12)	0
O20	0.0497(16)	0.0493(16)	0.0481(16)	0	0.0026(13)	0
O21	0.0487(12)	0.0475(11)	0.0495(12)	-0.0004(8)	-0.0014(9)	-0.0004(9)
O22	0.0514(17)	0.0459(15)	0.0453(17)	0	0.0009(13)	0
O23	0.0485(12)	0.0446(10)	0.0547(13)	0.0016(8)	0.0006(10)	-0.0004(9)
O24	0.0492(12)	0.0444(10)	0.0516(12)	-0.0004(8)	0.0004(9)	-0.0002(9)
O25	0.0500(12)	0.0444(10)	0.0496(12)	0.0003(8)	0.0012(9)	-0.0010(8)

O26	0.0509(13)	0.0467(12)	0.0497(13)	-0.0010(8)	-0.0022(10)	0.0010(8)
O27	0.0545(13)	0.0451(11)	0.0486(12)	-0.0010(8)	-0.0009(9)	0.0002(9)
O28	0.0496(16)	0.0459(15)	0.0521(17)	0	0.0019(13)	0
O29	0.0503(16)	0.0451(15)	0.0518(16)	0	-0.0010(13)	0
O30	0.0495(16)	0.0440(15)	0.0550(17)	0	-0.0007(13)	0
O31	0.0496(12)	0.0461(10)	0.0491(12)	-0.0005(8)	0.0001(9)	0.0000(9)
O32	0.0482(12)	0.0453(10)	0.0518(13)	-0.0008(8)	0.0000(9)	0.0008(9)
O33	0.0493(16)	0.0477(15)	0.0519(16)	0	-0.0027(13)	0
O34	0.0510(12)	0.0474(10)	0.0502(13)	0.0001(8)	0.0015(9)	-0.0001(9)
O35	0.0485(12)	0.0444(10)	0.0522(13)	-0.0007(8)	0.0003(9)	-0.0003(9)
O36	0.0516(12)	0.0469(11)	0.0465(12)	-0.0003(8)	0.0003(9)	0.0006(9)
O37	0.0484(12)	0.0482(11)	0.0516(12)	0.0005(8)	-0.0018(9)	-0.0001(9)
O38	0.0502(12)	0.0463(10)	0.0492(12)	0.0008(8)	-0.0001(9)	0.0005(9)
O39	0.0496(12)	0.0456(10)	0.0515(12)	-0.0013(8)	0.0020(10)	-0.0009(9)
O40	0.0498(12)	0.0429(10)	0.0521(12)	0.0007(8)	-0.0002(10)	-0.0001(9)
O41	0.0479(12)	0.0478(10)	0.0488(12)	-0.0008(8)	-0.0010(9)	0.0002(9)
O42	0.0508(12)	0.0435(10)	0.0498(12)	-0.0005(8)	-0.0001(9)	-0.0003(8)
O43	0.0505(16)	0.0418(14)	0.0546(17)	0	-0.0002(13)	0
O44	0.0496(16)	0.0477(15)	0.0561(18)	0	-0.0009(13)	0
O45	0.0486(12)	0.0457(10)	0.0499(12)	0.0011(8)	-0.0007(9)	-0.0001(9)
O46	0.0494(12)	0.0459(10)	0.0497(12)	-0.0005(8)	-0.0006(9)	0.0000(9)
O47	0.0494(12)	0.0466(10)	0.0502(12)	-0.0003(8)	-0.0011(9)	0.0002(9)
O48	0.0497(12)	0.0458(10)	0.0481(12)	0.0008(8)	-0.0022(9)	0.0001(9)
O49	0.0485(12)	0.0450(10)	0.0521(12)	-0.0006(8)	0.0002(9)	0.0004(9)
O50	0.0528(14)	0.0465(12)	0.0507(14)	0.0007(7)	0.0006(11)	0.0002(8)
O51	0.0547(17)	0.0463(15)	0.0506(17)	0	-0.0029(13)	0
O52	0.0500(12)	0.0475(10)	0.0514(12)	-0.0002(8)	0.0000(9)	-0.0004(9)
O53	0.0480(12)	0.0476(10)	0.0508(12)	-0.0006(8)	0.0001(9)	-0.0015(9)
O54	0.0486(12)	0.0488(10)	0.0484(12)	-0.0016(8)	0.0015(9)	-0.0009(9)
O55	0.0502(16)	0.0475(15)	0.0531(17)	0	0.0025(13)	0
O57	0.0500(12)	0.0454(10)	0.0542(12)	0.0005(8)	0.0010(9)	0.0000(9)
O58	0.0502(12)	0.0454(10)	0.0497(12)	-0.0012(8)	0.0003(9)	-0.0002(8)
O59	0.0509(12)	0.0445(10)	0.0503(12)	0.0014(8)	0.0001(9)	0.0012(8)
O60	0.0475(12)	0.0427(10)	0.0538(12)	-0.0010(8)	0.0005(9)	-0.0003(9)
O61	0.0482(12)	0.0453(10)	0.0535(12)	-0.0010(8)	-0.0012(9)	-0.0010(9)
O62	0.0497(12)	0.0463(10)	0.0522(12)	-0.0008(8)	0.0005(9)	0.0009(9)
O63	0.0501(12)	0.0435(10)	0.0524(12)	0.0008(8)	-0.0016(9)	0.0009(9)
O64	0.0492(16)	0.0431(15)	0.0501(16)	0	0.0035(12)	0
O65	0.0485(12)	0.0470(11)	0.0498(12)	-0.0007(8)	-0.0006(9)	-0.0003(9)

Table D3: Interatomic K-O distances [\AA] and bond valence sum (b.v.s.) of $\text{K}_2\text{Sc}[\text{Si}_2\text{O}_6]\text{F}$ at 25 K for distances up to 3.1 \AA .

K01-F6	2.946(3)
K01-O36 (2 \times)	2.706(3)
K01-O41 (2 \times)	2.599(3)
b.v.s	0.9784(9)
K02-F2	2.782(3)
K02-O18 (2 \times)	2.766(3)
K02-O19	2.808(4)
K02-O26 (2 \times)	2.683(3)
K02-O42 (2 \times)	2.862(3)
b.v.s	1.2231(8)
K03-F2	2.832(3)
K03-O1	3.091(4)
K03-O5	2.757(4)
K03-O42 (2 \times)	2.494(3)
K03-O46 (2 \times)	2.972(3)
b.v.s	1.1768(10)
K04-F1	3.050(3)
K04-O17 (2 \times)	2.379(3)
K04-O45 (2 \times)	3.099(3)
b.v.s	0.8936(12)
K05-F15	2.8654(14)
K05-O20	2.740(4)
K05-O39 (2 \times)	2.956(3)
K05-O54 (2 \times)	2.649(3)
b.v.s	0.9080(7)
K06-F4	2.8420(14)
K06-O9 (2 \times)	2.548(3)
K06-O43	2.979(4)
K06-O64	2.829(4)
b.v.s	0.9060(8)
K07-O4 (2 \times)	3.078(3)
K07-O7 (2 \times)	2.769(3)
K07-O8	2.951(4)
K07-O48 (2 \times)	3.002(3)
b.v.s	0.7650(5)
K08-O10 (2 \times)	2.860(3)
K08-O23 (2 \times)	2.869(3)
K08-O47 (2 \times)	2.672(3)
K08-O51	2.924(4)
b.v.s	1.0380(7)

K09-F19 3.013(3)
K09-O20 2.638(4)
K09-O28 2.607(4)
K09-O32 (2×) 2.941(3)
K09-O65 (2×) 2.962(3)
b.v.s 0.9604(6)

K10-F2 3.041(3)
K10-O19 2.922(4)
K10-O40 (2×) 2.515(3)
K10-O49 (2×) 3.082(3)
b.v.s 0.9376(9)

K11-F17 2.965(3)
K11-O23 (2×) 2.653(3)
K11-O24 (2×) 3.093(3)
K11-O34 (2×) 2.740(3)
b.v.s 0.9848(8)

K12-O8 2.577(4)
K12-O31 (2×) 2.874(3)
K12-O34 (2×) 2.900(3)
K12-O51 2.679(4)
b.v.s 0.9575(7)

K13-F14 3.001(3)
K13-O19 2.794(4)
K13-O21 (2×) 2.984(3)
K13-O30 2.590(5)
b.v.s 0.6646(5)

K14-F3 2.739(3)
K14-O41 (2×) 2.576(3)
K14-O42 (2×) 2.907(3)
K14-O44 2.917(5)
K14-O50 (2×) 2.844(3)
b.v.s 1.2558(8)

K15-O11 2.893(4)
K15-O22 (2×) 2.898(4)
K15-O35 (2×) 2.735(3)
b.v.s 0.7009(6)

K16-O3 (2×) 2.430(4)
K16-O23 (2×) 2.906(3)
b.v.s 0.9953(11)

K17-O14 2.535(4)
K17-O31 (2×) 2.911(3)
K17-O60 (2×) 3.003(3)
b.v.s 0.6888(5)

K18-F10 2.778(4)
K18-O1 2.991(4)
K18-O37 (2×) 2.821(3)
K18-O48 (2×) 2.704(3)
b.v.s 0.8620(7)

K19-F12 2.730(3)
K19-O12 (2×) 2.752(3)
K19-O16 2.946(4)
K19-O53 (2×) 2.839(3)
K19-O63 (2×) 2.841(3)
b.v.s 1.1257(7)

K20-O15 (2×) 2.693(3)
K20-O27 (2×) 2.905(3)
K20-O30 2.989(4)
b.v.s 0.7262(6)

K21-F8 2.855(4)
K21-O5 2.720(4)
K21-O27 (2×) 2.713(3)
K21-O31 (2×) 2.841(3)
K21-O36 (2×) 2.805(3)
b.v.s 1.2044(7)

K22-O52 (2×) 2.627(3)
K22-O62 (2×) 2.537(3)
b.v.s 1.0920(10)

K23-F3 3.045(3)
K23-O11 3.055(4)
K23-O18 (2×) 2.827(3)
K23-O26 (2×) 3.082(3)
K23-O44 2.840(4)
K23-O59 (2×) 2.975(3)
b.v.s 0.9074(6)

K24-O36 (2×) 3.026(3)
K24-O50 (2×) 2.518(4)
K24-O65 (2×) 3.095(3)
b.v.s 0.9441(9)

K25-F13 3.052(3)
K25-O26 (2×) 2.930(3)
K25-O43 2.963(4)
K25-O46 (2×) 2.482(3)
b.v.s 1.0412(8)

K26-F20 2.879(3)
K26-O33 2.825(4)
K26-O35 (2×) 3.100(3)
K26-O38 (2×) 2.430(3)
K26-O58 (2×) 3.042(3)
b.v.s 1.2955(10)

K27-F12 2.777(4)
K27-O16 2.785(4)
K27-O35 (2×) 2.673(3)
K27-O63 (2×) 2.697(3)
b.v.s 1.0693(8)

K28-F17 3.074(3)
K28-O2 2.967(4)
K28-O13 (2×) 3.049(3)
K28-O52 (2×) 2.548(3)
b.v.s 0.8619(7)

K29-F1 2.608(3)
K29-O45 (2×) 2.537(3)
K29-O51 2.811(4)
K29-O61 (2×) 2.973(3)
b.v.s 1.0822(9)

K30-O12 (2×) 2.886(3)
K30-O20 2.918(4)
K30-O57 (2×) 2.644(3)
b.v.s 0.7940(6)

K31-F3 2.752(3)
K31-O13 (2×) 2.848(3)
K31-O18 (2×) 2.878(3)
K31-O40 (2×) 2.917(3)
K31-O55 2.980(4)
b.v.s 0.9600(6)

K32-F20 2.846(3)
K32-O47 (2×) 2.604(3)
K32-O63 (2×) 2.718(3)
b.v.s 0.9625(9)

K33-F12 2.699(4)
K33-O11 2.697(4)
K33-O53 (2×) 2.762(3)
K33-O57 (2×) 3.040(3)
b.v.s 0.8082(6)

K34-F16 2.660(3)
K34-O6 (2×) 2.820(3)
K34-O10 (2×) 2.971(3)
K34-O21 (2×) 2.507(3)
K34-O33 2.778(4)
b.v.s 1.4012(10)

K35-F10 2.986(4)
K35-O1 2.899(4)
K35-O17 (2×) 3.008(3)
K35-O32 (2×) 3.095(3)
K35-O61 (2×) 2.646(3)
b.v.s 0.7963(6)

K36-F11 2.656(4)
K36-O4 (2×) 2.698(3)
K36-O29 3.010(4)
K36-O48 (2×) 2.976(3)
K36-O60 (2×) 2.982(3)
b.v.s 1.0055(7)