

Table_5 (Deposited). Bond distances (Å) and angles (°) of the datolite samples BC,CI,CT,FI,SP,VM at room-conditions

Sample name: BC

_cell_length_a	4.8332(2)Å
_cell_length_b	7.6082(2)Å
_cell_length_c	9.6342(2)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.147(2)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	354.267(19)Å^3
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

- Ca O1 2.2762(9)
- Ca O1 2.2803(8)
- Ca O4 2.4141(9)
- Ca O2 2.4447(8)
- Ca O5 2.5240(9)
- Ca O3 2.6104(9)
- Ca O3 2.6577(9)
- Ca O5 2.6705(9)
- Si O1 1.5741(9)
- Si O2 1.6474(9)
- Si O3 1.6543(8)
- Si O4 1.6573(9)
- B O4 1.4676(15)
- B O3 1.4761(14)
- B O2 1.4818(14)
- B O5 1.4976(15)
- O1 Ca 2.2762(9)
- O1 Ca 2.2803(8)
- O2 Si 1.6474(9)
- O3 Ca 2.6577(9)
- O4 B 1.4676(15)
- O4 Ca 2.4141(9)
- O5 Ca 2.5240(9)
- O5 Ca 2.6705(9)

- l
- O1 Ca O1 77.72(3)
- O1 Ca O4 133.39(3)
- O1 Ca O4 107.66(3)
- O1 Ca O2 81.12(3)
- O1 Ca O2 86.71(3)
- O4 Ca O2 144.10(3)
- O1 Ca O5 73.63(3)
- O1 Ca O5 142.87(3)
- O4 Ca O5 77.12(3)
- O2 Ca O5 111.25(3)

O1 Ca O3 114.57(3)
O1 Ca O3 135.85(3)
O4 Ca O3 93.78(3)
O2 Ca O3 56.35(3)
O5 Ca O3 78.59(3)
O1 Ca O3 81.77(3)
O1 Ca O3 78.86(3)
O4 Ca O3 55.51(3)
O2 Ca O3 159.60(3)
O5 Ca O3 74.14(3)
O3 Ca O3 142.512(13)
O1 Ca O5 146.94(3)
O1 Ca O5 76.49(3)
O4 Ca O5 74.79(3)
O2 Ca O5 77.09(3)
O5 Ca O5 137.775(19)
O3 Ca O5 72.56(3)
O3 Ca O5 112.81(3)
O1 Si O2 113.84(4)
O1 Si O3 115.25(5)
O2 Si O3 106.69(4)
O1 Si O4 108.72(5)
O2 Si O4 106.29(4)
O3 Si O4 105.39(4)
O4 B O3 107.36(9)
O4 B O2 109.00(8)
O3 B O2 107.89(9)
O4 B O5 111.87(9)
O3 B O5 109.53(8)
O2 B O5 111.04(9)
Si O1 Ca 129.80(5)
Si O1 Ca 126.61(5)
Ca O1 Ca 102.28(3)
B O2 Si 122.79(7)
B O2 Ca 100.95(6)
Si O2 Ca 123.02(4)
B O3 Si 122.42(7)
B O3 Ca 94.13(6)
Si O3 Ca 118.80(4)
B O3 Ca 93.02(6)
Si O3 Ca 119.04(4)
Ca O3 Ca 103.99(3)
B O4 Si 127.61(7)
B O4 Ca 103.67(6)
Si O4 Ca 121.13(4)
B O5 Ca 120.27(6)
B O5 Ca 118.07(6)
Ca O5 Ca 106.06(3)

Sample name: CI

_cell_length_a	4.83610(10)Å
_cell_length_b	7.6155(2)Å

_cell_length_c	9.6392(2)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.134(2)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	355.004(14)Å ³
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

Ca O1 2.2783(8)
 Ca O1 2.2830(8)
 Ca O4 2.4159(8)
 Ca O2 2.4482(7)
 Ca O5 2.5270(8)
 Ca O3 2.6135(7)
 Ca O3 2.6616(8)
 Ca O5 2.6742(8)
 Si O1 1.5732(8)
 Si O2 1.6463(7)
 Si O3 1.6527(7)
 Si O4 1.6591(7)
 B O4 1.4690(13)
 B O3 1.4793(12)
 B O2 1.4821(12)
 B O5 1.4974(13)
 O1 Ca 2.2783(7)
 O1 Ca 2.2830(8)
 O2 Si 1.6463(7)
 O3 Ca 2.6616(8)
 O4 B 1.4690(13)
 O4 Ca 2.4159(8)
 O5 Ca 2.5270(8)
 O5 Ca 2.6742(8)

O1 Ca O1 77.82(3)
 O1 Ca O4 133.33(3)
 O1 Ca O4 107.68(3)
 O1 Ca O2 81.16(3)
 O1 Ca O2 86.69(3)
 O4 Ca O2 144.09(2)
 O1 Ca O5 73.60(3)
 O1 Ca O5 142.96(3)
 O4 Ca O5 77.07(3)
 O2 Ca O5 111.24(3)
 O1 Ca O3 114.55(3)
 O1 Ca O3 135.83(3)
 O4 Ca O3 93.76(2)
 O2 Ca O3 56.37(2)
 O5 Ca O3 78.51(2)
 O1 Ca O3 81.72(3)
 O1 Ca O3 78.86(2)
 O4 Ca O3 55.55(2)
 O2 Ca O3 159.57(2)
 O5 Ca O3 74.19(2)

O3 Ca O3 142.522(11)
 O1 Ca O5 146.97(3)
 O1 Ca O5 76.40(2)
 O4 Ca O5 74.83(2)
 O2 Ca O5 77.08(2)
 O5 Ca O5 137.773(17)
 O3 Ca O5 72.61(2)
 O3 Ca O5 112.81(2)
 O1 Si O2 113.87(4)
 O1 Si O3 115.28(4)
 O2 Si O3 106.73(4)
 O1 Si O4 108.66(4)
 O2 Si O4 106.19(4)
 O3 Si O4 105.43(4)
 O4 B O3 107.39(8)
 O4 B O2 109.02(8)
 O3 B O2 107.96(8)
 O4 B O5 111.89(8)
 O3 B O5 109.42(8)
 O2 B O5 111.02(8)
 Si O1 Ca 129.86(4)
 Si O1 Ca 126.67(4)
 Ca O1 Ca 102.18(3)
 B O2 Si 122.87(6)
 B O2 Ca 100.92(5)
 Si O2 Ca 122.97(4)
 B O3 Si 122.54(6)
 B O3 Ca 94.06(5)
 Si O3 Ca 118.86(4)
 B O3 Ca 92.93(5)
 Si O3 Ca 119.04(4)
 Ca O3 Ca 103.93(2)
 B O4 Si 127.57(6)
 B O4 Ca 103.69(5)
 Si O4 Ca 121.08(4)
 B O5 Ca 120.30(6)
 B O5 Ca 118.05(6)
 Ca O5 Ca 106.01(3)

Sample name: CT

_cell_length_a	4.83550(10)Å
_cell_length_b	7.61020(10)Å
_cell_length_c	9.63170(10)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.1500(10)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	354.437(9)Å ³
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

Ca O1 2.2782(8)
 Ca O1 2.2795(8)

Ca O4 2.4152(8)
Ca O2 2.4480(7)
Ca O5 2.5238(8)
Ca O3 2.6107(7)
Ca O3 2.6603(8)
Ca O5 2.6716(8)
Si O1 1.5741(8)
Si O2 1.6463(7)
Si O3 1.6529(7)
Si O4 1.6559(7)
B O4 1.4702(12)
B O3 1.4773(13)
B O2 1.4800(12)
B O5 1.4969(13)
O1 Ca 2.2782(8)
O1 Ca 2.2795(8)
O2 Si 1.6463(7)
O3 Ca 2.6603(8)
O4 B 1.4702(12)
O4 Ca 2.4152(8)
O5 Ca 2.5238(8)
O5 Ca 2.6715(8)

O1 Ca O1 77.78(3)
O1 Ca O4 133.41(3)
O1 Ca O4 107.59(3)
O1 Ca O2 81.14(3)
O1 Ca O2 86.76(3)
O4 Ca O2 144.06(2)
O1 Ca O5 73.59(3)
O1 Ca O5 142.89(3)
O4 Ca O5 77.18(3)
O2 Ca O5 111.21(3)
O1 Ca O3 114.53(3)
O1 Ca O3 135.85(3)
O4 Ca O3 93.81(2)
O2 Ca O3 56.31(2)
O5 Ca O3 78.57(2)
O1 Ca O3 81.76(3)
O1 Ca O3 78.84(2)
O4 Ca O3 55.54(2)
O2 Ca O3 159.62(2)
O5 Ca O3 74.16(2)
O3 Ca O3 142.526(11)
O1 Ca O5 146.97(3)
O1 Ca O5 76.46(2)
O4 Ca O5 74.73(2)
O2 Ca O5 77.11(2)
O5 Ca O5 137.781(17)
O3 Ca O5 72.59(2)
O3 Ca O5 112.80(2)
O1 Si O2 113.83(4)
O1 Si O3 115.31(4)

O2 Si O3 106.76(4)
O1 Si O4 108.67(4)
O2 Si O4 106.20(4)
O3 Si O4 105.38(4)
O4 B O3 107.34(8)
O4 B O2 108.98(8)
O3 B O2 107.91(7)
O4 B O5 111.84(7)
O3 B O5 109.50(8)
O2 B O5 111.11(8)
Si O1 Ca 129.77(5)
Si O1 Ca 126.71(4)
Ca O1 Ca 102.22(3)
B O2 Si 122.88(6)
B O2 Ca 100.94(5)
Si O2 Ca 122.90(4)
B O3 Si 122.42(6)
B O3 Ca 94.17(5)
Si O3 Ca 118.84(4)
B O3 Ca 93.01(5)
Si O3 Ca 119.03(4)
Ca O3 Ca 103.94(2)
B O4 Si 127.58(6)
B O4 Ca 103.67(5)
Si O4 Ca 121.18(4)
B O5 Ca 120.35(6)
B O5 Ca 118.04(5)
Ca O5 Ca 106.07(3)

Sample name: FI

_cell_length_a	4.83560(10)Å
_cell_length_b	7.61140(10)Å
_cell_length_c	9.6341(2)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.158(2)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	354.588(11)Å
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

Ca O1 2.2797(6)
Ca O1 2.2812(6)
Ca O4 2.4152(6)
Ca O2 2.4487(6)
Ca O5 2.5241(6)
Ca O3 2.6115(6)
Ca O3 2.6608(6)
Ca O5 2.6722(6)
Si O1 1.5720(6)
Si O2 1.6457(6)
Si O3 1.6528(6)

Si O4 1.6582(6)
B O4 1.4680(10)
B O3 1.4789(9)
B O2 1.4832(10)
B O5 1.4954(10)
O1 Ca 2.2797(6)
O1 Ca 2.2812(6)
O2 Si 1.6457(6)
O3 Ca 2.6608(6)
O4 B 1.4680(10)
O4 Ca 2.4152(6)
O5 Ca 2.5241(6)
O5 Ca 2.6722(6)

O1 Ca O1 77.83(2)
O1 Ca O4 133.39(2)
O1 Ca O4 107.59(2)
O1 Ca O2 81.08(2)
O1 Ca O2 86.71(2)
O4 Ca O2 144.14(2)
O1 Ca O5 73.59(2)
O1 Ca O5 142.91(2)
O4 Ca O5 77.14(2)
O2 Ca O5 111.24(2)
O1 Ca O3 114.48(2)
O1 Ca O3 135.84(2)
O4 Ca O3 93.837(18)
O2 Ca O3 56.355(17)
O5 Ca O3 78.556(19)
O1 Ca O3 81.79(2)
O1 Ca O3 78.823(19)
O4 Ca O3 55.512(18)
O2 Ca O3 159.556(18)
O5 Ca O3 74.179(19)
O3 Ca O3 142.551(9)
O1 Ca O5 146.95(2)
O1 Ca O5 76.423(19)
O4 Ca O5 74.793(19)
O2 Ca O5 77.105(19)
O5 Ca O5 137.794(13)
O3 Ca O5 72.609(18)
O3 Ca O5 112.797(18)
O1 Si O2 113.86(3)
O1 Si O3 115.30(3)
O2 Si O3 106.70(3)
O1 Si O4 108.75(3)
O2 Si O4 106.17(3)
O3 Si O4 105.36(3)
O4 B O3 107.33(6)
O4 B O2 108.93(6)
O3 B O2 107.83(6)
O4 B O5 112.01(6)
O3 B O5 109.49(6)
O2 B O5 111.10(6)

Si O1 Ca 129.79(3)
Si O1 Ca 126.72(3)
Ca O1 Ca 102.17(2)
B O2 Si 122.77(5)
B O2 Ca 100.93(4)
Si O2 Ca 122.97(3)
B O3 Si 122.43(5)
B O3 Ca 94.21(4)
Si O3 Ca 118.86(3)
B O3 Ca 92.97(4)
Si O3 Ca 119.02(3)
Ca O3 Ca 103.911(18)
B O4 Si 127.52(5)
B O4 Ca 103.76(4)
Si O4 Ca 121.09(3)
B O5 Ca 120.31(4)
B O5 Ca 118.09(4)
Ca O5 Ca 106.05(2)

Sample name: SP

_cell_length_a	4.83360(10)Å
_cell_length_b	7.6076(2)Å
_cell_length_c	9.6298(2)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.165(2)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	354.106(14)Å
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

Ca O1 2.2769(11)
Ca O1 2.2783(12)
Ca O4 2.4164(11)
Ca O2 2.4488(11)
Ca O5 2.5218(12)
Ca O3 2.6102(11)
Ca O3 2.6575(11)
Ca O5 2.6725(12)
Si O1 1.5730(11)
Si O2 1.6433(11)
Si O3 1.6538(11)
Si O4 1.6558(11)
B O4 1.4665(19)
B O3 1.4767(19)
B O2 1.4814(19)
B O5 1.4992(19)
O1 Ca 2.2769(11)
O1 Ca 2.2783(12)
O2 Si 1.6433(11)
O3 Ca 2.6575(11)
O4 B 1.4665(19)
O4 Ca 2.4164(11)

O5 Ca 2.5218(12)
O5 Ca 2.6725(12)

O1 Ca O1 77.75(4)
O1 Ca O4 133.32(4)
O1 Ca O4 107.67(4)
O1 Ca O2 81.14(4)
O1 Ca O2 86.65(4)
O4 Ca O2 144.15(4)
O1 Ca O5 73.65(4)
O1 Ca O5 142.98(4)
O4 Ca O5 77.11(4)
O2 Ca O5 111.20(4)
O1 Ca O3 114.61(4)
O1 Ca O3 135.78(4)
O4 Ca O3 93.80(4)
O2 Ca O3 56.37(3)
O5 Ca O3 78.53(4)
O1 Ca O3 81.70(4)
O1 Ca O3 78.92(4)
O4 Ca O3 55.51(3)
O2 Ca O3 159.56(3)
O5 Ca O3 74.17(3)
O3 Ca O3 142.514(17)
O1 Ca O5 146.97(4)
O1 Ca O5 76.47(4)
O4 Ca O5 74.82(4)
O2 Ca O5 77.09(4)
O5 Ca O5 137.72(3)
O3 Ca O5 72.52(3)
O3 Ca O5 112.87(3)
O1 Si O2 113.94(6)
O1 Si O3 115.32(6)
O2 Si O3 106.68(6)
O1 Si O4 108.67(6)
O2 Si O4 106.13(6)
O3 Si O4 105.40(6)
O4 B O3 107.44(11)
O4 B O2 109.05(12)
O3 B O2 108.03(11)
O4 B O5 111.67(11)
O3 B O5 109.59(11)
O2 B O5 110.94(11)
Si O1 Ca 129.83(7)
Si O1 Ca 126.67(6)
Ca O1 Ca 102.25(4)
B O2 Si 122.99(9)
B O2 Ca 100.78(8)
Si O2 Ca 122.98(6)
B O3 Si 122.40(9)
B O3 Ca 94.13(8)
Si O3 Ca 118.82(6)
B O3 Ca 93.01(8)
Si O3 Ca 119.05(6)

Ca O3 Ca 103.99(3)
B O4 Si 127.77(9)
B O4 Ca 103.59(8)
Si O4 Ca 121.07(6)
B O5 Ca 120.34(9)
B O5 Ca 117.90(8)
Ca O5 Ca 106.05(4)

Sample name: VM

_cell_length_a	4.83540(10)Å
_cell_length_b	7.60820(10)Å
_cell_length_c	9.63350(10)Å
_cell_angle_alpha	90.00°
_cell_angle_beta	90.1580(10)°
_cell_angle_gamma	90.00°
_cell_volume	354.402(9)Å
_cell_formula_units_Z	4
_cell_measurement_temperature	293(2) K

Ca O1 2.2776(6)
Ca O1 2.2802(6)
Ca O4 2.4156(6)
Ca O2 2.4475(6)
Ca O5 2.5238(6)
Ca O3 2.6121(6)
Ca O3 2.6583(6)
Ca O5 2.6705(6)
Si O1 1.5728(6)
Si O2 1.6468(6)
Si O3 1.6538(6)
Si O4 1.6574(6)
B O4 1.4677(10)
B O3 1.4771(10)
B O2 1.4795(10)
B O5 1.4989(11)
O1 Ca 2.2776(6)
O1 Ca 2.2802(6)
O2 Si 1.6468(6)
O3 Ca 2.6583(6)
O4 B 1.4677(10)
O4 Ca 2.4156(6)
O5 Ca 2.5238(6)
O5 Ca 2.6705(6)

O1 Ca O1 77.78(2)
O1 Ca O4 133.40(2)
O1 Ca O4 107.60(2)
O1 Ca O2 81.08(2)
O1 Ca O2 86.77(2)
O4 Ca O2 144.12(2)
O1 Ca O5 73.64(2)

O1 Ca O5 142.90(2)
O4 Ca O5 77.11(2)
O2 Ca O5 111.21(2)
O1 Ca O3 114.51(2)
O1 Ca O3 135.84(2)
O4 Ca O3 93.828(19)
O2 Ca O3 56.311(19)
O5 Ca O3 78.573(19)
O1 Ca O3 81.83(2)
O1 Ca O3 78.82(2)
O4 Ca O3 55.481(18)
O2 Ca O3 159.62(2)
O5 Ca O3 74.169(19)
O3 Ca O3 142.535(9)
O1 Ca O5 146.92(2)
O1 Ca O5 76.46(2)
O4 Ca O5 74.81(2)
O2 Ca O5 77.106(19)
O5 Ca O5 137.766(14)
O3 Ca O5 72.572(19)
O3 Ca O5 112.789(19)
O1 Si O2 113.82(3)
O1 Si O3 115.26(3)
O2 Si O3 106.73(3)
O1 Si O4 108.77(3)
O2 Si O4 106.19(3)
O3 Si O4 105.39(3)
O4 B O3 107.28(6)
O4 B O2 109.05(6)
O3 B O2 108.00(6)
O4 B O5 111.84(6)
O3 B O5 109.49(6)
O2 B O5 111.04(6)
Si O1 Ca 129.79(3)
Si O1 Ca 126.67(3)
Ca O1 Ca 102.22(2)
B O2 Si 122.88(5)
B O2 Ca 100.94(4)
Si O2 Ca 122.97(3)
B O3 Si 122.46(5)
B O3 Ca 94.08(4)
Si O3 Ca 118.80(3)
B O3 Ca 93.07(4)
Si O3 Ca 119.06(3)
Ca O3 Ca 103.924(19)
B O4 Si 127.64(5)
B O4 Ca 103.71(5)
Si O4 Ca 121.09(3)
B O5 Ca 120.29(5)
B O5 Ca 118.02(5)
Ca O5 Ca 106.06(2)
