

**Table S2.** Fractional atomic coordinates and displacement parameters (in Å<sup>2</sup>) for waipouaite.

	x	y	z	$U^{eq}$	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ca1	0.67174(8)	0.44948(4)	0.24945(9)	0.0232(2)	0.0230(4)	0.0255(5)	0.0212(4)	-0.0006(3)	0.0098(3)	-0.0002(3)
Ca2	0.83031(8)	0.56604(4)	0.78965(9)	0.0232(2)	0.0231(4)	0.0267(5)	0.0200(4)	-0.0001(3)	0.0094(3)	-0.0003(3)
Ca3	0.31524(9)	0.31744(4)	-0.06878(9)	0.0263(2)	0.0278(5)	0.0281(5)	0.0222(4)	0.0008(3)	0.0100(4)	-0.0003(4)
V1	0.42633(8)	0.65609(4)	0.31830(8)	0.0285(2)	0.0290(4)	0.0310(5)	0.0259(4)	-0.0006(3)	0.0121(3)	-0.0006(3)
V2	0.64652(7)	0.65066(3)	0.54534(7)	0.02243(19)	0.0247(4)	0.0238(4)	0.0201(4)	0.0004(3)	0.0108(3)	-0.0003(3)
V3	0.34363(8)	0.64094(4)	0.51792(9)	0.0305(2)	0.0300(4)	0.0351(5)	0.0251(4)	-0.0001(3)	0.0106(3)	-0.0044(4)
V4	0.25204(7)	0.57004(4)	0.20182(8)	0.0246(2)	0.0250(4)	0.0284(4)	0.0215(4)	-0.0004(3)	0.0111(3)	0.0002(3)
V5	0.54811(7)	0.57731(3)	0.22661(8)	0.02302(19)	0.0224(4)	0.0251(4)	0.0209(4)	0.0002(3)	0.0087(3)	-0.0011(3)
Si1	0.36425(11)	0.47677(6)	0.08026(12)	0.0216(3)	0.0215(6)	0.0248(6)	0.0186(6)	-0.0001(4)	0.0089(5)	-0.0007(5)
Si2	0.42432(11)	0.36842(6)	0.22359(12)	0.0223(3)	0.0227(6)	0.0253(6)	0.0187(6)	0.0001(4)	0.0088(5)	-0.0006(5)
Si3	0.79910(11)	0.56451(6)	0.46534(12)	0.0219(3)	0.0224(6)	0.0247(6)	0.0182(6)	-0.0001(4)	0.0084(5)	-0.0004(5)
Si4	0.85323(11)	0.45367(6)	0.59554(12)	0.0220(3)	0.0218(6)	0.0255(6)	0.0181(6)	0.0003(4)	0.0080(5)	0.0005(5)
Si5	0.08046(11)	0.37799(6)	-0.31585(12)	0.0233(3)	0.0230(6)	0.0268(6)	0.0214(6)	0.0025(5)	0.0106(5)	0.0020(5)
O1	0.4926(3)	0.50213(14)	0.1541(3)	0.0231(6)	0.0220(15)	0.0258(16)	0.0218(15)	-0.0007(12)	0.0098(12)	-0.0017(12)
O2	0.2806(3)	0.49665(15)	0.1448(3)	0.0243(7)	0.0240(15)	0.0279(17)	0.0222(16)	-0.0022(12)	0.0110(13)	-0.0008(13)
OH3	0.3052(3)	0.48977(15)	-0.0748(3)	0.0246(7)	0.0260(16)	0.0263(16)	0.0211(15)	0.0013(12)	0.0099(13)	0.0007(13)
O4	0.3723(3)	0.40673(14)	0.0920(3)	0.0232(6)	0.0255(15)	0.0252(16)	0.0192(15)	0.0004(12)	0.0101(12)	-0.0012(13)
O5	0.3375(3)	0.37555(15)	0.2888(3)	0.0246(7)	0.0249(15)	0.0316(17)	0.0187(15)	0.0020(12)	0.0108(12)	0.0004(13)
O6	0.5558(3)	0.38719(16)	0.3110(3)	0.0283(7)	0.0246(16)	0.0377(19)	0.0206(16)	0.0028(13)	0.0077(13)	-0.0052(14)
OH7	0.4182(4)	0.30400(16)	0.1655(4)	0.0338(8)	0.045(2)	0.0293(18)	0.0235(17)	-0.0029(14)	0.0107(15)	0.0034(16)

O8	0.7636(3)	0.59366(15)	0.5695(3)	0.0246(7)	0.0267(16)	0.0277(16)	0.0191(15)	0.0002(12)	0.0096(12)	0.0015(13)
O9	0.6908(3)	0.53990(15)	0.3403(3)	0.0241(6)	0.0245(15)	0.0262(16)	0.0199(15)	-0.0009(12)	0.0079(12)	0.0000(13)
O10	0.1238(3)	0.39123(15)	-0.4269(3)	0.0269(7)	0.0282(16)	0.0302(17)	0.0228(16)	-0.0004(13)	0.0113(13)	-0.0039(14)
O11	0.8850(3)	0.51101(15)	0.5370(3)	0.0245(7)	0.0225(15)	0.0296(17)	0.0207(15)	0.0004(12)	0.0089(12)	-0.0011(13)
O12	0.9709(3)	0.41785(16)	0.6625(4)	0.0295(7)	0.0234(16)	0.0346(19)	0.0299(18)	0.0030(14)	0.0109(14)	0.0056(14)
O13	0.7541(3)	0.42035(14)	0.4773(3)	0.0240(6)	0.0267(16)	0.0244(16)	0.0206(15)	-0.0015(12)	0.0100(13)	-0.0038(13)
O14	0.8113(3)	0.47382(15)	0.7024(3)	0.0263(7)	0.0289(16)	0.0279(17)	0.0244(16)	-0.0021(13)	0.0137(14)	-0.0010(14)
OH15	0.1799(3)	0.38745(17)	-0.1731(3)	0.0301(7)	0.0292(17)	0.040(2)	0.0213(16)	0.0050(14)	0.0108(14)	0.0066(15)
OH16	0.0374(4)	0.31208(17)	-0.3414(4)	0.0397(9)	0.052(2)	0.0264(18)	0.050(2)	-0.0007(16)	0.031(2)	-0.0035(18)
O17	0.4031(4)	0.71680(17)	0.2465(4)	0.0350(8)	0.038(2)	0.034(2)	0.0311(19)	0.0018(15)	0.0128(16)	0.0042(16)
O18	0.3922(3)	0.59774(16)	0.1978(3)	0.0275(7)	0.0253(16)	0.0321(18)	0.0262(16)	-0.0045(14)	0.0121(13)	-0.0017(14)
O19	0.4819(3)	0.66630(15)	0.4976(3)	0.0260(7)	0.0235(15)	0.0305(17)	0.0244(16)	-0.0026(13)	0.0108(13)	-0.0048(13)
O20	0.2926(3)	0.63027(15)	0.3325(3)	0.0259(7)	0.0259(16)	0.0312(17)	0.0210(15)	-0.0036(13)	0.0106(13)	-0.0034(14)
O21	0.5814(3)	0.63586(15)	0.3611(3)	0.0247(7)	0.0247(15)	0.0299(17)	0.0196(15)	-0.0016(12)	0.0094(12)	-0.0008(13)
O22	0.7061(3)	0.71283(15)	0.5677(3)	0.0273(7)	0.0319(17)	0.0256(16)	0.0256(16)	0.0005(13)	0.0135(14)	-0.0005(14)
O23	0.2845(3)	0.69842(17)	0.5326(4)	0.0331(8)	0.0376(19)	0.0340(19)	0.0317(19)	-0.0024(15)	0.0186(16)	-0.0043(16)
O24	0.1453(3)	0.59830(16)	0.0796(3)	0.0279(7)	0.0261(16)	0.0315(18)	0.0247(16)	0.0022(13)	0.0098(13)	0.0021(14)
O25	0.5716(3)	0.61169(15)	0.1204(3)	0.0259(7)	0.0286(16)	0.0243(16)	0.0263(17)	0.0003(13)	0.0133(14)	0.0000(13)
OW26	0.6743(4)	0.3713(2)	0.1219(5)	0.0493(12)	0.036(2)	0.049(3)	0.065(3)	-0.030(2)	0.023(2)	-0.007(2)
OW27	0.8766(3)	0.4451(2)	0.3066(4)	0.0404(10)	0.0270(18)	0.068(3)	0.0259(19)	-0.0070(18)	0.0114(15)	-0.0065(18)
OW28	0.9285(4)	0.6576(2)	0.8171(5)	0.0480(11)	0.046(2)	0.041(2)	0.054(3)	-0.003(2)	0.018(2)	-0.013(2)
OW29	0.9132(3)	0.57881(18)	1.0232(4)	0.0327(8)	0.0265(17)	0.048(2)	0.0257(18)	-0.0075(15)	0.0134(14)	-0.0032(16)

OW30	1.0304(3)	0.53264(17)	0.8667(4)	0.0314(8)	0.0264(17)	0.039(2)	0.0278(18)	-0.0046(15)	0.0105(14)	0.0004(15)
OW31	0.2948(4)	0.28721(17)	-0.2762(4)	0.0340(8)	0.039(2)	0.035(2)	0.0290(18)	0.0013(15)	0.0160(16)	0.0026(16)
OW32	0.1645(4)	0.29215(19)	0.0054(5)	0.0440(10)	0.056(3)	0.039(2)	0.049(3)	0.0013(19)	0.034(2)	0.002(2)
OW33	0.5146(4)	0.28375(18)	-0.0270(4)	0.0399(9)	0.0336(19)	0.0295(19)	0.056(3)	0.0068(18)	0.0182(19)	0.0023(16)
OW34	0.8354(5)	0.3086(3)	0.0653(6)	0.0657(15)	0.065(3)	0.062(3)	0.073(4)	0.004(3)	0.032(3)	0.001(3)
OW35	-0.0973(7)	0.2893(3)	-0.2187(8)	0.088(2)	0.103(5)	0.077(4)	0.120(6)	0.034(4)	0.080(5)	0.019(4)
OW36a	-0.1081(8)	0.1831(4)	-0.1129(9)	0.045(3)	0.048(5)	0.037(5)	0.047(6)	-0.001(4)	0.017(4)	-0.005(4)
OW36b	0.0432(9)	0.1985(5)	-0.1139(10)	0.042(4)	0.037(6)	0.054(7)	0.036(6)	0.013(5)	0.016(5)	-0.003(5)

---