

**Abstract****Table 1**

## Experimental details

Crystal data	
Chemical formula	$\text{Ca}_{1.25}\text{H}_{0.25}\text{O}_{3.25}\text{P}_{0.75}$
$M_r$	125.58
Crystal system, space group	Hexagonal, $P6_3/m$
Temperature (K)	300
$a, c$ (Å)	9.3654 (4), 6.8786 (3)
$V$ (Å <sup>3</sup> )	522.50 (5)
$Z$	8
Radiation type	Mo $K\alpha$
$\mu$ (mm <sup>-1</sup> )	3.10
Crystal size (mm)	$0.06 \times 0.06 \times 0.05$
Data collection	
Diffractometer	Bruker D8 Venture Photon 100 CMOS
Absorption correction	Multi-scan ( <i>SADABS</i> ; Krause et al., 2015)
$T_{\min}, T_{\max}$	0.695, 0.746
No. of measured, independent and observed [ $I > 2\sigma(I)$ ] reflections	13717, 432, 382
$R_{\text{int}}$	0.066
$(\sin \theta/\lambda)_{\text{max}}$ (Å <sup>-1</sup> )	0.649
Refinement	
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$	0.025, 0.059, 1.16
No. of reflections	432
No. of parameters	42
No. of restraints	7
H-atom treatment	All H-atom parameters refined
$(\Delta/\sigma)_{\text{max}}$	2.800
$\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}}$ (e Å <sup>-3</sup> )	0.84, -0.56

Computer programs: *SHELXL2019/1* (Sheldrick, 2019).

**References**

NOT FOUND

## full crystallographic data

## Computing details

Program(s) used to refine structure: *SHELXL2019/1* (Sheldrick, 2019).

(linhuishi\_JD\_SNQPyuhe\_20230803\_S1)

## Crystal data

$\text{Ca}_{1.25}\text{H}_{0.25}\text{O}_{3.25}\text{P}_{0.75}$

$M_r = 125.58$

Hexagonal,  $P6_3/m$

$a = 9.3654$  (4) Å

$c = 6.8786$  (3) Å

$V = 522.50$  (5) Å<sup>3</sup>

$Z = 8$

$F(000) = 500$

$D_x = 3.193$  Mg m<sup>-3</sup>

Mo  $K\alpha$  radiation,  $\lambda = 0.71073$  Å

Cell parameters from 5553 reflections

$\theta = 2.5\text{--}27.4^\circ$

$\mu = 3.10$  mm<sup>-1</sup>

$T = 300$  K

Lump, colourless

$0.06 \times 0.06 \times 0.05$  mm

## Data collection

Bruker D8 Venture Photon 100 CMOS  
diffractometer

phi and  $\omega$  scans

Absorption correction: multi-scan

(*SADABS*; Krause et al., 2015)

$T_{\min} = 0.695$ ,  $T_{\max} = 0.746$

13717 measured reflections

432 independent reflections

382 reflections with  $I > 2\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.066$

$\theta_{\max} = 27.5^\circ$ ,  $\theta_{\min} = 2.5^\circ$

$h = -12 \rightarrow 12$

$k = -12 \rightarrow 12$

$l = -8 \rightarrow 8$

## Refinement

Refinement on  $F^2$

Least-squares matrix: full

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.025$

$wR(F^2) = 0.059$

$S = 1.16$

432 reflections

42 parameters

7 restraints

Hydrogen site location: difference Fourier map

All H-atom parameters refined

$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0229P)^2 + 1.2034P]$

where  $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$

$(\Delta/\sigma)_{\max} = 2.800$

$\Delta\rho_{\max} = 0.84$  e Å<sup>-3</sup>

$\Delta\rho_{\min} = -0.56$  e Å<sup>-3</sup>

## Special details

*Geometry.* All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes) are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken into account individually in the estimation of esds in distances, angles and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only used when they are defined by crystal symmetry. An approximate (isotropic) treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s. planes.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å<sup>2</sup>) for  
(linhuishi\_JD\_SNQPyuhe\_20230803\_S1)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$	Occ. (<1)
Ca1	0.666667	0.333333	0.00099 (14)	0.0096 (2)	
Ca2	−0.00735 (9)	0.24181 (9)	0.250000	0.0069 (2)	
P1	0.36890 (12)	0.39829 (11)	0.250000	0.0059 (2)	
O1	0.4848 (3)	0.3269 (3)	0.250000	0.0107 (6)	
O2	0.4666 (3)	0.5876 (3)	0.250000	0.0128 (6)	

O3	0.2571 (2)	0.3415 (3)	0.0705 (3)	0.0145 (5)	
O4	0.000000	0.000000	0.2709 (15)	0.0017 (10)	0.5
H1	0.000000	0.000000	0.154 (3)	0.00 (3)*	0.5

Atomic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for (linhuishi\_JD\_SNQPyuhe\_20230803\_S1)

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ca1	0.0118 (3)	0.0118 (3)	0.0052 (4)	0.00591 (16)	0.000	0.000
Ca2	0.0068 (4)	0.0085 (4)	0.0058 (4)	0.0040 (3)	0.000	0.000
P1	0.0062 (5)	0.0069 (5)	0.0055 (5)	0.0039 (4)	0.000	0.000
O1	0.0107 (14)	0.0139 (14)	0.0113 (14)	0.0090 (12)	0.000	0.000
O2	0.0111 (14)	0.0089 (14)	0.0181 (15)	0.0048 (12)	0.000	0.000
O3	0.0123 (10)	0.0233 (11)	0.0101 (10)	0.0105 (9)	−0.0035 (8)	−0.0065 (9)
O4	0.0019 (10)	0.0019 (10)	0.0014 (15)	0.0009 (5)	0.000	0.000

Geometric parameters ( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ ) for (linhuishi\_JD\_SNQPyuhe\_20230803\_S1)

Ca1—O1	2.3951 (19)	Ca2—O2 <sup>ix</sup>	2.371 (3)
Ca1—O1 <sup>i</sup>	2.3951 (19)	Ca2—O3 <sup>vi</sup>	2.494 (2)
Ca1—O1 <sup>ii</sup>	2.3951 (19)	Ca2—O3	2.494 (2)
Ca1—O2 <sup>iii</sup>	2.452 (2)	Ca2—O1 <sup>x</sup>	2.688 (3)
Ca1—O2 <sup>iv</sup>	2.452 (2)	Ca2—P1	3.0660 (12)
Ca1—O2 <sup>v</sup>	2.452 (2)	Ca2—P1 <sup>x</sup>	3.2491 (12)
Ca1—O3 <sup>iv</sup>	2.802 (2)	Ca2—P1 <sup>ix</sup>	3.4866 (12)
Ca1—O3 <sup>iii</sup>	2.802 (2)	Ca2—H1	2.393 (6)
Ca1—O3 <sup>v</sup>	2.802 (2)	Ca2—H1 <sup>vi</sup>	2.393 (6)
Ca1—P1 <sup>iii</sup>	3.2009 (9)	P1—O3	1.532 (2)
Ca1—P1 <sup>iv</sup>	3.2009 (9)	P1—O3 <sup>vi</sup>	1.532 (2)
Ca1—P1 <sup>v</sup>	3.2009 (9)	P1—O1	1.533 (3)
Ca2—O4	2.3043 (10)	P1—O2	1.535 (3)
Ca2—O4 <sup>vi</sup>	2.3043 (10)	O4—O4 <sup>vi</sup>	0.29 (2)
Ca2—O3 <sup>vii</sup>	2.346 (2)	O4—H1	0.80 (2)
Ca2—O3 <sup>viii</sup>	2.346 (2)	O4—H1 <sup>vi</sup>	0.52 (3)
O1—Ca1—O1 <sup>i</sup>	74.50 (7)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	78.97 (5)
O1—Ca1—O1 <sup>ii</sup>	74.51 (7)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	78.97 (5)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O1 <sup>ii</sup>	74.51 (7)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	21.14 (7)
O1—Ca1—O2 <sup>iii</sup>	124.10 (8)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	92.76 (5)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>iii</sup>	92.76 (7)	O3—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	92.76 (5)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>iii</sup>	154.43 (9)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	79.58 (6)
O1—Ca1—O2 <sup>iv</sup>	154.43 (9)	P1—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	90.64 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	124.10 (8)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	107.51 (4)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	92.76 (7)	O4—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	130.27 (14)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O2 <sup>iv</sup>	75.88 (8)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	126.32 (16)
O1—Ca1—O2 <sup>v</sup>	92.76 (7)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	44.33 (6)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	154.43 (9)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	95.71 (6)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	124.10 (8)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	75.63 (6)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	75.88 (8)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	149.78 (6)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O2 <sup>v</sup>	75.88 (8)	O3—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	115.77 (5)
O1—Ca1—O3 <sup>iv</sup>	142.28 (7)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	36.40 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	68.98 (7)	P1—Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	136.42 (2)

O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	86.80 (8)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	58.573 (19)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	67.81 (8)	P1 <sup>ix</sup> —Ca2—Ca1 <sup>xi</sup>	57.046 (17)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	55.92 (7)	O4—Ca2—H1	19.6 (5)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iv</sup>	124.57 (7)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—H1	12.4 (7)
O1—Ca1—O3 <sup>iii</sup>	68.98 (7)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—H1	87.4 (5)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	86.80 (8)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—H1	118.2 (5)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	142.28 (7)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—H1	148.5 (3)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	55.92 (7)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—H1	89.9 (3)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	124.57 (7)	O3—Ca2—H1	74.0 (2)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	67.81 (8)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—H1	106.14 (7)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>iii</sup>	116.99 (3)	P1—Ca2—H1	83.24 (3)
O1—Ca1—O3 <sup>v</sup>	86.80 (8)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—H1	79.31 (4)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	142.28 (7)	P1 <sup>ix</sup> —Ca2—H1	162.8 (5)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	68.98 (7)	Ca1 <sup>xi</sup> —Ca2—H1	118.5 (4)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	124.57 (7)	O4—Ca2—H1 <sup>vi</sup>	12.4 (7)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	67.81 (8)	O4 <sup>vi</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	19.6 (5)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	55.92 (7)	O3 <sup>vii</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	118.2 (5)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	116.99 (3)	O3 <sup>viii</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	87.4 (5)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—O3 <sup>v</sup>	116.99 (3)	O2 <sup>ix</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	148.5 (3)
O1—Ca1—P1 <sup>iii</sup>	97.53 (6)	O3 <sup>vi</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	74.0 (2)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	93.06 (6)	O3—Ca2—H1 <sup>vi</sup>	89.9 (3)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	166.56 (6)	O1 <sup>x</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	106.14 (7)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	27.68 (6)	P1—Ca2—H1 <sup>vi</sup>	83.24 (3)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	98.58 (6)	P1 <sup>x</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	79.31 (4)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	66.23 (7)	P1 <sup>ix</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	162.8 (5)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	93.57 (5)	Ca1 <sup>xi</sup> —Ca2—H1 <sup>vi</sup>	135.73 (19)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	28.59 (4)	H1—Ca2—H1 <sup>vi</sup>	32.0 (10)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iii</sup>	122.13 (5)	O3—P1—O3 <sup>vi</sup>	107.43 (16)
O1—Ca1—P1 <sup>iv</sup>	166.56 (6)	O3—P1—O1	111.01 (10)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	97.53 (6)	O3 <sup>vi</sup> —P1—O1	111.01 (10)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	93.06 (6)	O3—P1—O2	108.05 (11)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	66.23 (6)	O3 <sup>vi</sup> —P1—O2	108.05 (11)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	27.68 (6)	O1—P1—O2	111.13 (16)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	98.58 (6)	O3—P1—Ca2	53.95 (8)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	28.59 (4)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2	53.95 (8)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	122.13 (5)	O1—P1—Ca2	133.36 (12)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	93.57 (5)	O2—P1—Ca2	115.51 (12)
P1 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>iv</sup>	93.65 (2)	O3—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	112.70 (9)
O1—Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.06 (5)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca1 <sup>xii</sup>	61.08 (8)
O1 <sup>i</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	166.56 (6)	O1—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	135.78 (8)
O1 <sup>ii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	97.53 (6)	O2—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	47.87 (8)
O2 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	98.58 (6)	Ca2—P1—Ca1 <sup>xii</sup>	80.18 (2)
O2 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	66.23 (6)	O3—P1—Ca1 <sup>v</sup>	61.08 (8)
O2 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	27.68 (6)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca1 <sup>v</sup>	112.70 (9)
O3 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	122.13 (5)	O1—P1—Ca1 <sup>v</sup>	135.78 (8)
O3 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.57 (5)	O2—P1—Ca1 <sup>v</sup>	47.87 (8)
O3 <sup>v</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	28.59 (4)	Ca2—P1—Ca1 <sup>v</sup>	80.18 (2)
P1 <sup>iii</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.65 (2)	Ca1 <sup>xii</sup> —P1—Ca1 <sup>v</sup>	65.28 (3)
P1 <sup>iv</sup> —Ca1—P1 <sup>v</sup>	93.65 (2)	O3—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	79.51 (9)
O4—Ca2—O4 <sup>vi</sup>	7.1 (5)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	79.51 (9)
O4—Ca2—O3 <sup>vii</sup>	106.3 (3)	O1—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	55.21 (11)

O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>vii</sup>	99.4 (3)	O2—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	166.34 (12)
O4—Ca2—O3 <sup>viii</sup>	99.4 (3)	Ca2—P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	78.15 (3)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>viii</sup>	106.3 (3)	Ca1 <sup>xii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	140.54 (2)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3 <sup>viii</sup>	139.97 (11)	Ca1 <sup>v</sup> —P1—Ca2 <sup>xiii</sup>	140.54 (2)
O4—Ca2—O2 <sup>ix</sup>	152.25 (8)	O3—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	122.56 (9)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	152.25 (8)	O3 <sup>vi</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	122.56 (9)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	85.63 (6)	O1—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	77.28 (11)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O2 <sup>ix</sup>	85.63 (6)	O2—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	33.85 (11)
O4—Ca2—O3 <sup>vi</sup>	79.92 (14)	Ca2—P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	149.36 (4)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	83.50 (14)	Ca1 <sup>xii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	74.13 (2)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	136.10 (8)	Ca1 <sup>v</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	74.13 (2)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	77.88 (4)	Ca2 <sup>xiii</sup> —P1—Ca2 <sup>xiv</sup>	132.49 (4)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O3 <sup>vi</sup>	74.45 (8)	P1—O1—Ca1 <sup>vi</sup>	129.70 (8)
O4—Ca2—O3	83.50 (14)	P1—O1—Ca1	129.70 (8)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O3	79.92 (14)	Ca1 <sup>vi</sup> —O1—Ca1	91.31 (9)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O3	77.88 (4)	P1—O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	96.86 (13)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O3	136.10 (8)	Ca1 <sup>vi</sup> —O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	101.86 (8)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O3	74.45 (8)	Ca1—O1—Ca2 <sup>xiii</sup>	101.86 (8)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—O3	59.36 (10)	P1—O2—Ca2 <sup>xiv</sup>	125.01 (16)
O4—Ca2—O1 <sup>x</sup>	106.78 (6)	P1—O2—Ca1 <sup>v</sup>	104.45 (11)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	106.78 (6)	Ca2 <sup>xiv</sup> —O2—Ca1 <sup>v</sup>	113.66 (8)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	71.72 (5)	P1—O2—Ca1 <sup>xii</sup>	104.45 (11)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	71.72 (5)	Ca2 <sup>xiv</sup> —O2—Ca1 <sup>xii</sup>	113.66 (8)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	100.72 (9)	Ca1 <sup>v</sup> —O2—Ca1 <sup>xii</sup>	89.53 (10)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—O1 <sup>x</sup>	149.53 (5)	P1—O3—Ca2 <sup>iii</sup>	142.24 (11)
O3—Ca2—O1 <sup>x</sup>	149.53 (5)	P1—O3—Ca2	96.27 (10)
O4—Ca2—P1	82.98 (3)	Ca2 <sup>iii</sup> —O3—Ca2	117.45 (8)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1	82.98 (3)	P1—O3—Ca1 <sup>v</sup>	90.33 (10)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1	106.61 (5)	Ca2 <sup>iii</sup> —O3—Ca1 <sup>v</sup>	99.86 (8)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1	106.61 (5)	Ca2—O3—Ca1 <sup>v</sup>	99.18 (7)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1	69.50 (7)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2	86.4 (3)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1	29.78 (5)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2 <sup>x</sup>	86.4 (3)
O3—Ca2—P1	29.78 (5)	Ca2—O4—Ca2 <sup>x</sup>	119.62 (6)
O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1	170.22 (7)	O4 <sup>vi</sup> —O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	86.4 (3)
O4—Ca2—P1 <sup>x</sup>	78.90 (3)	Ca2—O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	119.61 (6)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	78.90 (3)	Ca2 <sup>x</sup> —O4—Ca2 <sup>xiii</sup>	119.61 (6)
O3 <sup>vii</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	77.70 (5)	O4 <sup>vi</sup> —O4—H1	0.000 (5)
O3 <sup>viii</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	77.70 (5)	Ca2—O4—H1	86.4 (3)
O2 <sup>ix</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	128.66 (7)	Ca2 <sup>x</sup> —O4—H1	86.4 (3)
O3 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	144.37 (5)	Ca2 <sup>xiii</sup> —O4—H1	86.4 (3)
O3—Ca2—P1 <sup>x</sup>	144.37 (5)	O4 <sup>vi</sup> —O4—H1 <sup>vi</sup>	180.000 (15)
O1 <sup>x</sup> —Ca2—P1 <sup>x</sup>	27.93 (6)	Ca2—O4—H1 <sup>vi</sup>	93.6 (3)
P1—Ca2—P1 <sup>x</sup>	161.85 (3)	Ca2 <sup>x</sup> —O4—H1 <sup>vi</sup>	93.6 (3)
O4—Ca2—P1 <sup>ix</sup>	172.68 (13)	Ca2 <sup>xiii</sup> —O4—H1 <sup>vi</sup>	93.6 (3)
O4 <sup>vi</sup> —Ca2—P1 <sup>ix</sup>	172.68 (13)	H1—O4—H1 <sup>vi</sup>	180.0

Symmetry codes: (i)  $-y+1, x-y, z$ ; (ii)  $-x+y+1, -x+1, z$ ; (iii)  $y, -x+y, -z$ ; (iv)  $x-y+1, x, -z$ ; (v)  $-x+1, -y+1, -z$ ; (vi)  $x, y, -z+1/2$ ; (vii)  $x-y, x, -z$ ; (viii)  $x-y, x, z+1/2$ ; (ix)  $-x+y, -x+1, z$ ; (x)  $-y, x-y, z$ ; (xi)  $x-1, y, z$ ; (xii)  $-x+1, -y+1, z+1/2$ ; (xiii)  $-x+y, -x, z$ ; (xiv)  $-y+1, x-y+1, z$ .