Table S1. EMPA analyses of a representative sample of wollastonite-1*A* from Băița Bihor *

Sample	2585 a	2585 b	2585 c	2585 d	2585 e	2585 f	2585 g	2585 h	2585 i	2585 j	2585
SiO_2	51.73	51.45	51.72	51.51	51.76	51.81	51.81	51.76	51.60	51.61	51.68
TiO_2	0.08	0.08	0.10	0.08	0.07	0.08	0.09	0.03	0.04	0.05	0.07
Al_2O_3	0.24	0.16	0.19	0.20	0.18	0.15	0.17	0.20	0.16	0.19	0.18
$FeO^{(1)}$	0.04	0.04	0.01	0.06	0.03	0.03	0.04	0.05	0.04	0.04	0.04
MnO	0.03	0.04	0.04	0.08	0.03	0.04	0.02	0.05	0.03	0.01	0.04
MgO	0.05	0.06	0.06	0.08	0.07	0.06	0.05	0.06	0.06	0.05	0.06
CaO	48.66	48.42	48.39	47.91	48.75	48.62	48.71	48.78	48.94	48.47	48.57
Total	100.83	100.25	100.51	99.92	100.89	100.79	100.89	100.93	100.87	100.42	100.63
Number of cations on the basis of 3 (O)											
Si	0.993	0.994	0.995	0.997	0.993	0.995	0.994	0.993	0.992	0.995	0.994
Ti	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.000	0.001	0.001	0.001
Al	0.005	0.004	0.004	0.005	0.004	0.003	0.004	0.005	0.004	0.004	0.004
Fe^{2+}	0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
Mn	0.000	0.001	0.001	0.001	0.000	0.001	0.000	0.001	0.000	0.000	0.001
Mg	0.001	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.001	0.002	0.002	0.001	0.002
Ca	1.001	1.002	0.998	0.993	1.002	1.000	1.001	1.003	1.008	1.001	1.000

* results expressed in wt.%; (1) total iron as FeO.

Table S2. Torsion angles for a selected sample of Wollastonite-1*A* from Băița Bihor

A	B	C	D	Angle (°)
Ca1[1]	Ca3	O4	Ca1	88.11(13)
Ca1[1]	Ca3	O4	Ca2	-179.14(5)
Ca1[1]	Ca3	O4	Si2[2]	-46.2(2)
Ca1[3]	Si1	O1	Ca1	-89.44(18)
Ca1[4]	Si1	O1	Ca1	97.91(18)
Ca1[4]	Si1	O1	Ca2	-92.4(3)
Ca1[3]	Si1	O1	Ca2	80.2(3)
Ca1	Si1	O1	Ca2	169.7(4)
Ca1	Si1	O5	Ca1[4]	16.4(3)
Ca1[3]	Si1	O5	Ca1[4]	-171.54(9)
Ca1[3]	Si1	O5	Ca3[5]	-35.1(4)
Ca1[3]	Si1	O5	Ca3[4]	76.8(2)
Ca1	Si1	O5	Ca3[5]	152.81(14)
Ca1[4]	Si1	O5	Ca3[5]	136.5(4)
Ca1	Si1	O5	Ca3[4]	-95.30(15)
Ca1[4]	Si1	O5	Ca3[4]	-111.7(3)
Ca1	Si1	O7	Ca1[3]	24.5(3)
Ca1[4]	Si1	O7	Ca1[3]	178.15(9)
Ca1	Si1	O7	Si2[3]	-146.6(3)
Ca1[4]	Si1	O7	Si2[3]	7.1(5)
Ca1[3]	Si1	O7	Si2[3]	-171.1(5)
Ca1	Si1	O9	Ca3[4]	137.93(12)
Ca1[3]	Si1	O9	Ca3[4]	-124.57(10)
Ca1[4]	Si1	O9	Ca3[4]	49.84(12)
Ca1[3]	Si1	O9	Si3	144.5(6)
Ca1[4]	Si1	O9	Si3	-41.1(6)
Ca1	Si1	O9	Si3	47.0(5)
Ca1	Si2	O2	Ca2[6]	99.71(16)
Ca1	Si2	O2	Ca3[1]	-132.8(7)
Ca1	Si2	O8	Ca2[6]	-48.88(15)
Ca1	Si2	O8	Si3[7]	120.9(4)
Ca1	O3	Si3	Ca2[3]	89.64(17)
Ca1	O3	Si3	Ca2[6]	169.6(4)
Ca1	O3	Si3	Ca2[4]	-97.88(17)
Ca1	O3	Si3	Ca3[4]	-54.3(3)
Ca1	O3	Si3	Ca3[8]	-148.57(11)

Ca1	O3	Si3	O6	-112.1(2)
Ca1	O3	Si3	O8^{7}	119.5(2)
Ca1	O3	Si3	O9	6.7(3)
Ca1	Si3	O6	Ca2^{4}	-17.8(3)
Ca1	Si3	O6	Ca3^{8}	-153.12(14)
Ca1	Si3	O6	Ca3^{4}	94.29(15)
Ca1	Si3	O9	Ca3^{4}	-137.85(12)
Ca1	Si3	O9	Si1	-46.8(5)
Ca2^{9}	Ca3	O4	Ca1	178.01(5)
Ca2^{9}	Ca3	O4	Ca2	-89.23(13)
Ca2^{9}	Ca3	O4	Si2^{2}	43.7(2)
Ca2	Si1	O1	Ca1	-169.7(4)
Ca2	Si1	O5	Ca1^{4}	-53.7(2)
Ca2	Si1	O5	Ca3^{4}	-165.41(8)
Ca2	Si1	O5	Ca3^{5}	82.7(2)
Ca2	Si1	O7	Ca1^{3}	84.3(2)
Ca2	Si1	O7	Si2^{3}	-86.8(4)
Ca2	Si1	O9	Ca3^{4}	152.62(10)
Ca2	Si1	O9	Si3	61.7(6)
Ca2^{6}	Si2	O2	Ca1	-99.71(16)
Ca2^{6}	Si2	O2	Ca3^{1}	127.5(7)
Ca2^{6}	Si2	O8	Si3^{7}	169.8(5)
Ca2^{6}	O3	Si3	Ca1	-169.6(4)
Ca2^{6}	O3	Si3	Ca2^{3}	-79.9(3)
Ca2^{6}	O3	Si3	Ca2^{4}	92.5(3)
Ca2^{6}	O3	Si3	Ca3^{4}	136.2(2)
Ca2^{6}	O3	Si3	Ca3^{8}	41.9(4)
Ca2^{6}	O3	Si3	O6	78.3(3)
Ca2^{6}	O3	Si3	O8^{7}	-50.1(4)
Ca2^{6}	O3	Si3	O9	-162.9(3)
Ca2^{6}	Si3	O6	Ca2^{4}	53.4(2)
Ca2^{3}	Si3	O6	Ca2^{4}	170.48(9)
Ca2^{3}	Si3	O6	Ca3^{4}	-77.4(2)
Ca2^{3}	Si3	O6	Ca3^{8}	35.2(4)
Ca2^{4}	Si3	O6	Ca3^{8}	-135.3(4)
Ca2^{6}	Si3	O6	Ca3^{4}	165.54(8)
Ca2^{6}	Si3	O6	Ca3^{8}	-81.9(2)
Ca2^{4}	Si3	O6	Ca3^{4}	112.1(2)
Ca2^{4}	Si3	O9	Ca3^{4}	-50.47(12)
Ca2^{6}	Si3	O9	Ca3^{4}	-152.44(10)

Ca2^{4}	Si3	O9	Si1	40.5(6)
Ca2^{6}	Si3	O9	Si1	-61.4(6)
Ca2^{3}	Si3	O9	Si1	-144.0(6)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	Ca1^{3}	-165.38(7)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	Ca1^{4}	18.46(7)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	Ca2	105.74(7)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	Ca3^{4}	-47.39(9)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	Ca3^{5}	39.09(15)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	O1	100.7(2)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	O5	9.6(2)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	O7	-178.76(16)
Ca3^{1}	Ca1	Si1	O9	-86.28(16)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	Ca2^{6}	63.17(3)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	Ca3^{2}	-152.99(8)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	O2	8.96(16)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	O4^{2}	-87.6(2)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	O7^{3}	-165.98(17)
Ca3^{1}	Ca1	Si2	O8	100.88(15)
Ca3^{1}	Ca1	O1	Ca2	72.5(2)
Ca3^{1}	Ca1	O1	Si1	-114.9(2)
Ca3^{1}	Ca1	O2	Ca2^{6}	95.58(14)
Ca3^{1}	Ca1	O2	Si2	-167.0(2)
Ca3^{1}	Ca1	O3	Ca2^{6}	-34.48(12)
Ca3^{1}	Ca1	O3	Si3	153.0(2)
Ca3^{1}	Ca1	O4	Ca2	-144.02(9)
Ca3^{1}	Ca1	O4	Ca3	-48.13(10)
Ca3^{1}	Ca1	O4	Si2^{2}	74.0(2)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	Ca2^{6}	-33.88(4)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	Ca2^{4}	53.07(4)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	Ca2^{3}	-122.36(4)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	Ca3^{4}	119.10(5)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	Ca3^{8}	33.92(12)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	O3	-28.8(2)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	O6	62.90(18)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	O8^{7}	-110.53(18)
Ca3^{1}	Ca1	Si3	O9	157.92(15)
Ca3^{9}	Ca2	Si1	Ca1^{3}	170.50(7)
Ca3^{9}	Ca2	Si1	Ca1^{4}	-1.45(9)
Ca3^{9}	Ca2	Si1	Ca1	-95.24(8)
Ca3^{9}	Ca2	Si1	Ca3^{4}	-3.28(18)

Ca3[9]	Ca2	Si1	O1	-88.2(3)
Ca3[9]	Ca2	Si1	O5	24.69(18)
Ca3[9]	Ca2	Si1	O7	136.82(14)
Ca3[9]	Ca2	Si1	O9	-110.9(2)
Ca3[9]	Ca2	O1	Ca1	-71.7(2)
Ca3[9]	Ca2	O1	Si1	117.7(3)
Ca3[9]	Ca2	O4	Ca1	144.65(9)
Ca3[9]	Ca2	O4	Ca3	47.90(9)
Ca3[9]	Ca2	O4	Si2[2]	-73.0(2)
Ca3[4]	Si1	O1	Ca1	53.7(3)
Ca3[5]	Si1	O1	Ca1	148.82(12)
Ca3[4]	Si1	O1	Ca2	-136.6(2)
Ca3[5]	Si1	O1	Ca2	-41.5(4)
Ca3[4]	Si1	O5	Ca1[4]	111.7(3)
Ca3[5]	Si1	O5	Ca1[4]	-136.5(4)
Ca3[4]	Si1	O5	Ca3[5]	-111.9(3)
Ca3[5]	Si1	O5	Ca3[4]	111.9(3)
Ca3[5]	Si1	O7	Ca1[3]	-173.4(2)
Ca3[4]	Si1	O7	Ca1[3]	-111.36(19)
Ca3[5]	Si1	O7	Si2[3]	15.5(3)
Ca3[4]	Si1	O7	Si2[3]	77.6(4)
Ca3[5]	Si1	O9	Ca3[4]	-13.64(18)
Ca3[5]	Si1	O9	Si3	-104.6(5)
Ca3[4]	Si1	O9	Si3	-91.0(5)
Ca3[2]	Si2	O2	Ca1	128.2(5)
Ca3[2]	Si2	O2	Ca2[6]	-132.1(5)
Ca3[2]	Si2	O2	Ca3[1]	-4.6(12)
Ca3[2]	Si2	O8	Ca2[6]	172.38(12)
Ca3[2]	Si2	O8	Si3[7]	-17.8(4)
Ca3[4]	Si3	O6	Ca2[4]	-112.1(2)
Ca3[8]	Si3	O6	Ca2[4]	135.3(4)
Ca3[8]	Si3	O6	Ca3[4]	-112.6(3)
Ca3[4]	Si3	O6	Ca3[8]	112.6(3)
Ca3[8]	Si3	O9	Ca3[4]	13.20(18)
Ca3[4]	Si3	O9	Si1	91.0(5)
Ca3[8]	Si3	O9	Si1	104.2(5)
Si1[4]	Ca1	Si1	Ca1[3]	176.16(5)
Si1[3]	Ca1	Si1	Ca1[3]	0.0
Si1[4]	Ca1	Si1	Ca1[4]	0.0
Si1[3]	Ca1	Si1	Ca1[4]	-176.16(5)

Si1[3]	Ca1	Si1	Ca2	-88.87(3)
Si1[4]	Ca1	Si1	Ca3[4]	-65.84(4)
Si1[3]	Ca1	Si1	Ca3[4]	118.00(6)
Si1[4]	Ca1	Si1	Ca3[5]	20.64(8)
Si1[3]	Ca1	Si1	Ca3[5]	-155.52(11)
Si1[4]	Ca1	Si1	O1	82.2(2)
Si1[3]	Ca1	Si1	O1	-93.9(2)
Si1[3]	Ca1	Si1	O5	174.98(19)
Si1[4]	Ca1	Si1	O5	-8.86(17)
Si1[4]	Ca1	Si1	O7	162.78(18)
Si1[3]	Ca1	Si1	O7	-13.38(16)
Si1[4]	Ca1	Si1	O9	-104.73(15)
Si1[3]	Ca1	Si1	O9	79.11(14)
Si1	Ca1	Si2	Ca2[6]	-93.95(6)
Si1[4]	Ca1	Si2	Ca2[6]	52.79(6)
Si1[3]	Ca1	Si2	Ca2[6]	-128.17(5)
Si1[3]	Ca1	Si2	Ca3[2]	15.67(6)
Si1[4]	Ca1	Si2	Ca3[2]	-163.37(6)
Si1	Ca1	Si2	Ca3[2]	49.89(10)
Si1[4]	Ca1	Si2	O2	-1.41(18)
Si1[3]	Ca1	Si2	O2	177.63(17)
Si1	Ca1	Si2	O2	-148.16(17)
Si1[3]	Ca1	Si2	O4[2]	81.0(2)
Si1	Ca1	Si2	O4[2]	115.2(2)
Si1[4]	Ca1	Si2	O4[2]	-98.0(2)
Si1[3]	Ca1	Si2	O7[3]	2.68(17)
Si1	Ca1	Si2	O7[3]	36.90(18)
Si1[4]	Ca1	Si2	O7[3]	-176.36(17)
Si1[4]	Ca1	Si2	O8	90.51(15)
Si1[3]	Ca1	Si2	O8	-90.45(15)
Si1	Ca1	Si2	O8	-56.24(16)
Si1	Ca1	O1	Ca2	-172.7(3)
Si1[4]	Ca1	O1	Ca2	91.47(12)
Si1[3]	Ca1	O1	Ca2	-87.96(12)
Si1[3]	Ca1	O1	Si1	84.7(2)
Si1[4]	Ca1	O1	Si1	-95.9(2)
Si1[3]	Ca1	O2	Ca2[6]	-99.33(10)
Si1[4]	Ca1	O2	Ca2[6]	81.56(11)
Si1	Ca1	O2	Ca2[6]	-28.1(3)
Si1[3]	Ca1	O2	Ca3[1]	165.09(10)

Si1	Ca1	O2	Ca3[1]	-123.65(19)
Si1[3]	Ca1	O2	Si2	-1.95(14)
Si1[4]	Ca1	O2	Si2	178.95(13)
Si1	Ca1	O2	Si2	69.3(3)
Si1[3]	Ca1	O3	Ca2[6]	91.97(12)
Si1[4]	Ca1	O3	Ca2[6]	-95.64(12)
Si1	Ca1	O3	Ca2[6]	177.22(14)
Si1[3]	Ca1	O3	Si3	-80.6(2)
Si1[4]	Ca1	O3	Si3	91.8(2)
Si1	Ca1	O3	Si3	4.67(19)
Si1[3]	Ca1	O4	Ca2	89.13(9)
Si1[4]	Ca1	O4	Ca2	-83.00(9)
Si1	Ca1	O4	Ca2	4.47(11)
Si1	Ca1	O4	Ca3	100.37(10)
Si1[4]	Ca1	O4	Ca3	12.89(10)
Si1[3]	Ca1	O4	Ca3	-174.98(10)
Si1	Ca1	O4	Si2[2]	-137.5(2)
Si1[4]	Ca1	O4	Si2[2]	135.0(2)
Si1[3]	Ca1	O4	Si2[2]	-52.9(2)
Si1[4]	Ca1	Si3	Ca2[4]	-6.39(4)
Si1	Ca1	Si3	Ca2[4]	-92.62(4)
Si1[3]	Ca1	Si3	Ca2[4]	-178.37(4)
Si1	Ca1	Si3	Ca2[3]	91.95(4)
Si1[4]	Ca1	Si3	Ca2[3]	178.17(4)
Si1[3]	Ca1	Si3	Ca2[3]	6.20(4)
Si1	Ca1	Si3	Ca2[6]	-179.56(4)
Si1[3]	Ca1	Si3	Ca2[6]	94.68(3)
Si1[4]	Ca1	Si3	Ca2[6]	-93.34(3)
Si1	Ca1	Si3	Ca3[4]	-26.58(5)
Si1[3]	Ca1	Si3	Ca3[8]	162.48(10)
Si1[4]	Ca1	Si3	Ca3[8]	-25.55(11)
Si1	Ca1	Si3	Ca3[8]	-111.77(10)
Si1[4]	Ca1	Si3	Ca3[4]	59.64(5)
Si1[3]	Ca1	Si3	Ca3[4]	-112.34(5)
Si1[4]	Ca1	Si3	O3	-88.2(2)
Si1[3]	Ca1	Si3	O3	99.8(2)
Si1	Ca1	Si3	O3	-174.5(2)
Si1	Ca1	Si3	O6	-82.78(17)
Si1[4]	Ca1	Si3	O6	3.44(18)
Si1[3]	Ca1	Si3	O6	-168.54(17)

Si1[4]	Ca1	Si3	O8[7]	-170.00(18)
Si1	Ca1	Si3	O8[7]	103.78(18)
Si1[3]	Ca1	Si3	O9	-73.52(15)
Si1	Ca1	Si3	O9	12.23(14)
Si1[4]	Ca1	Si3	O9	98.46(15)
Si1	Ca2	O1	Ca1	170.6(4)
Si1	Ca2	O4	Ca1	-4.09(10)
Si1	Ca2	O4	Ca3	-100.85(10)
Si1	Ca2	O4	Si2[2]	138.3(2)
Si1[4]	Ca3	O4	Ca1	-14.72(12)
Si1[4]	Ca3	O4	Ca2	78.04(10)
Si1[4]	Ca3	O4	Si2[2]	-149.00(15)
Si2	Ca1	Si1	Ca1[4]	156.32(6)
Si2	Ca1	Si1	Ca1[3]	-27.52(6)
Si2	Ca1	Si1	Ca2	-116.39(6)
Si2	Ca1	Si1	Ca3[5]	176.96(8)
Si2	Ca1	Si1	Ca3[4]	90.48(7)
Si2	Ca1	Si1	O1	-121.4(2)
Si2	Ca1	Si1	O5	147.46(17)
Si2	Ca1	Si1	O7	-40.89(19)
Si2	Ca1	Si1	O9	51.59(16)
Si2	Ca1	O1	Ca2	-86.64(18)
Si2	Ca1	O1	Si1	86.0(2)
Si2	Ca1	O2	Ca2[6]	-97.38(19)
Si2	Ca1	O2	Ca3[1]	167.0(2)
Si2	Ca1	O3	Ca2[6]	38.21(11)
Si2	Ca1	O3	Si3	-134.3(2)
Si2	Ca1	O4	Ca2	143.69(8)
Si2	Ca1	O4	Ca3	-120.41(10)
Si2	Ca1	O4	Si2[2]	1.7(2)
Si2	Ca1	Si3	Ca2[3]	-48.29(4)
Si2	Ca1	Si3	Ca2[4]	127.15(4)
Si2	Ca1	Si3	Ca2[6]	40.20(4)
Si2	Ca1	Si3	Ca3[4]	-166.82(5)
Si2	Ca1	Si3	Ca3[8]	107.99(10)
Si2	Ca1	Si3	O3	45.3(2)
Si2	Ca1	Si3	O6	136.98(17)
Si2	Ca1	Si3	O8[7]	-36.45(18)
Si2	Ca1	Si3	O9	-128.00(15)
Si2[10]	Ca2	Si1	Ca1	108.30(7)

Si2[10]	Ca2	Si1	Ca1[3]	14.04(7)
Si2[10]	Ca2	Si1	Ca3[4]	-159.74(11)
Si2[10]	Ca2	Si1	Ca3[5]	-99.22(7)
Si2[10]	Ca2	Si1	O1	115.3(3)
Si2[10]	Ca2	Si1	O5	-131.77(15)
Si2[10]	Ca2	Si1	O7	-19.64(16)
Si2[10]	Ca2	Si1	O9	92.6(2)
Si2[10]	Ca2	O1	Ca1	85.35(18)
Si2[10]	Ca2	O1	Si1	-85.3(3)
Si2[10]	Ca2	O4	Ca1	-143.18(8)
Si2[10]	Ca2	O4	Ca3	120.07(9)
Si2[10]	Ca2	O4	Si2[2]	-0.8(2)
Si2[2]	Ca3	O4	Ca1	134.3(2)
Si2[2]	Ca3	O4	Ca2	-133.0(2)
O1	Ca1	Si1	Ca1[3]	93.9(2)
O1	Ca1	Si1	Ca1[4]	-82.2(2)
O1	Ca1	Si1	Ca2	5.0(2)
O1	Ca1	Si1	Ca3[4]	-148.1(2)
O1	Ca1	Si1	Ca3[5]	-61.6(2)
O1	Ca1	Si1	O5	-91.1(3)
O1	Ca1	Si1	O7	80.5(3)
O1	Ca1	Si1	O9	173.0(3)
O1	Ca1	Si2	Ca2[6]	-129.78(16)
O1	Ca1	Si2	Ca3[2]	14.06(19)
O1	Ca1	Si2	O2	176.0(2)
O1	Ca1	Si2	O4[2]	79.4(3)
O1	Ca1	Si2	O7[3]	1.1(2)
O1	Ca1	Si2	O8	-92.1(2)
O1	Ca1	O2	Ca2[6]	-121.0(11)
O1	Ca1	O2	Ca3[1]	143.5(11)
O1	Ca1	O2	Si2	-23.6(13)
O1	Ca1	O3	Ca2[6]	-179.54(12)
O1	Ca1	O3	Si3	7.9(3)
O1	Ca1	O4	Ca2	0.88(11)
O1	Ca1	O4	Ca3	96.77(14)
O1	Ca1	O4	Si2[2]	-141.1(3)
O1	Ca1	Si3	Ca2[3]	94.15(10)
O1	Ca1	Si3	Ca2[6]	-177.37(10)
O1	Ca1	Si3	Ca2[4]	-90.42(10)
O1	Ca1	Si3	Ca3[4]	-24.39(10)

O1	Ca1	Si3	O3	-172.3(3)
O1	Ca1	Si3	O6	-80.6(2)
O1	Ca1	Si3	$O8^{7}$	106.0(2)
O1	Ca1	Si3	O9	14.43(17)
O1	Ca2	Si1	$Ca1^{4}$	86.8(3)
O1	Ca2	Si1	Ca1	-7.0(3)
O1	Ca2	Si1	$Ca1^{3}$	-101.3(3)
O1	Ca2	Si1	$Ca3^{4}$	85.0(3)
O1	Ca2	Si1	$Ca3^{5}$	145.5(3)
O1	Ca2	Si1	O5	112.9(3)
O1	Ca2	Si1	O7	-134.9(3)
O1	Ca2	Si1	O9	-22.7(4)
O1	Ca2	O4	Ca1	-0.90(11)
O1	Ca2	O4	Ca3	-97.65(13)
O1	Ca2	O4	$Si2^{2}$	141.5(3)
O1	Si1	O5	$Ca1^{4}$	-26.8(3)
O1	Si1	O5	$Ca3^{4}$	-138.43(18)
O1	Si1	O5	$Ca3^{5}$	109.7(3)
O1	Si1	O7	$Ca1^{3}$	64.7(3)
O1	Si1	O7	$Si2^{3}$	-106.3(4)
O1	Si1	O9	$Ca3^{4}$	142.38(17)
O1	Si1	O9	Si3	51.4(6)
O2	Ca1	Si1	$Ca1^{4}$	112.4(2)
O2	Ca1	Si1	$Ca1^{3}$	-71.4(2)
O2	Ca1	Si1	Ca2	-160.3(2)
O2	Ca1	Si1	$Ca3^{4}$	46.6(2)
O2	Ca1	Si1	$Ca3^{5}$	133.1(2)
O2	Ca1	Si1	O1	-165.3(3)
O2	Ca1	Si1	O5	103.6(3)
O2	Ca1	Si1	O7	-84.8(3)
O2	Ca1	Si1	O9	7.7(3)
O2	Ca1	Si2	$Ca2^{6}$	54.20(16)
O2	Ca1	Si2	$Ca3^{2}$	-161.95(19)
O2	Ca1	Si2	$O4^{2}$	-96.6(3)
O2	Ca1	Si2	$O7^{3}$	-174.9(2)
O2	Ca1	Si2	O8	91.9(2)
O2	Ca1	O1	Ca2	-66.4(12)
O2	Ca1	O1	Si1	106.3(12)
O2	Ca1	O3	$Ca2^{6}$	6.11(13)
O2	Ca1	O3	Si3	-166.4(2)

O2	Ca1	O4	Ca3	-88.74(13)
O2	Ca1	O4	Si2[2]	33.4(3)
O2	Ca1	Si3	Ca2[3]	-80.10(9)
O2	Ca1	Si3	Ca2[4]	95.33(9)
O2	Ca1	Si3	Ca2[6]	8.38(9)
O2	Ca1	Si3	Ca3[4]	161.36(9)
O2	Ca1	Si3	Ca3[8]	76.18(13)
O2	Ca1	Si3	O3	13.5(2)
O2	Ca1	Si3	O6	105.16(19)
O2	Ca1	Si3	O8[7]	-68.3(2)
O2	Ca1	Si3	O9	-159.82(17)
O2[10]	Ca2	Si1	Ca1	150.3(3)
O2[10]	Ca2	Si1	Ca1[3]	56.0(3)
O2[10]	Ca2	Si1	Ca1[4]	-115.9(3)
O2[10]	Ca2	Si1	Ca3[5]	-57.3(3)
O2[10]	Ca2	Si1	Ca3[4]	-117.8(3)
O2[10]	Ca2	Si1	O1	157.3(4)
O2[10]	Ca2	Si1	O5	-89.8(3)
O2[10]	Ca2	Si1	O7	22.3(3)
O2[10]	Ca2	Si1	O9	134.6(3)
O2[10]	Ca2	O1	Ca1	66.0(11)
O2[10]	Ca2	O1	Si1	-104.6(11)
O2[10]	Ca2	O4	Ca1	-174.69(10)
O2[10]	Ca2	O4	Ca3	88.55(13)
O2[10]	Ca2	O4	Si2[2]	-32.3(3)
O2[1]	Ca3	O4	Ca1	127.7(9)
O2[1]	Ca3	O4	Ca2	-139.5(9)
O2[1]	Ca3	O4	Si2[2]	-6.6(11)
O2	Si2	O8	Ca2[6]	4.8(2)
O2	Si2	O8	Si3[7]	174.6(4)
O3	Ca1	Si1	Ca1[3]	-93.63(9)
O3	Ca1	Si1	Ca1[4]	90.21(9)
O3	Ca1	Si1	Ca2	177.50(9)
O3	Ca1	Si1	Ca3[4]	24.37(10)
O3	Ca1	Si1	Ca3[5]	110.85(13)
O3	Ca1	Si1	O1	172.5(3)
O3	Ca1	Si1	O5	81.3(2)
O3	Ca1	Si1	O7	-107.00(19)
O3	Ca1	Si1	O9	-14.52(17)
O3	Ca1	Si2	Ca2[6]	-27.58(9)

O3	Ca1	Si2	O2	-81.79(19)
O3	Ca1	Si2	$O4^{2}$	-178.4(2)
O3	Ca1	Si2	$O7^{3}$	103.26(19)
O3	Ca1	Si2	O8	10.13(17)
O3	Ca1	O1	Ca2	179.63(12)
O3	Ca1	O1	Si1	-7.7(3)
O3	Ca1	O2	$Ca2^{6}$	-5.59(12)
O3	Ca1	O2	$Ca3^{1}$	-101.16(14)
O3	Ca1	O2	Si2	91.80(17)
O3	Ca1	O4	Ca2	175.6(10)
O3	Ca1	O4	Ca3	-88.5(10)
O3	Ca1	O4	$Si2^{2}$	33.6(11)
O3	Ca1	Si3	$Ca2^{4}$	81.9(2)
O3	Ca1	Si3	$Ca2^{6}$	-5.1(2)
O3	Ca1	Si3	$Ca2^{3}$	-93.6(2)
O3	Ca1	Si3	$Ca3^{8}$	62.7(2)
O3	Ca1	Si3	$Ca3^{4}$	147.9(2)
O3	Ca1	Si3	O6	91.7(3)
O3	Ca1	Si3	$O8^{7}$	-81.7(3)
O3	Ca1	Si3	O9	-173.3(3)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	Ca1	-178.36(10)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	$Ca1^{3}$	87.37(10)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	$Ca1^{4}$	-84.58(10)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	$Ca3^{5}$	-25.89(10)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	$Ca3^{4}$	-86.41(15)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	O1	-171.4(3)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	O5	-58.43(18)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	O7	53.70(16)
$O3^{10}$	Ca2	Si1	O9	165.9(2)
$O3^{10}$	Ca2	O1	Ca1	179.54(12)
$O3^{10}$	Ca2	O1	Si1	8.9(4)
$O3^{10}$	Ca2	O4	Ca1	-168.7(10)
$O3^{10}$	Ca2	O4	Ca3	94.5(10)
$O3^{10}$	Ca2	O4	$Si2^{2}$	-26.3(12)
O3	Si3	O6	$Ca2^{4}$	26.2(3)
O3	Si3	O6	$Ca3^{4}$	138.30(18)
O3	Si3	O6	$Ca3^{8}$	-109.1(3)
O3	Si3	O9	$Ca3^{4}$	-142.19(17)
O3	Si3	O9	Si1	-51.2(6)
O4	Ca1	Si1	$Ca1^{4}$	-90.85(9)

O4	Ca1	Si1	Ca2	-3.56(8)
O4	Ca1	Si1	$Ca3^{5}$	-70.21(13)
O4	Ca1	Si1	$Ca3^{4}$	-156.69(9)
O4	Ca1	Si1	O1	-8.6(2)
O4	Ca1	Si1	O5	-99.71(19)
O4	Ca1	Si1	O7	71.94(19)
O4	Ca1	Si1	O9	164.42(17)
O4	Ca1	Si2	$Ca2^{6}$	148.79(9)
O4	Ca1	Si2	$Ca3^{2}$	-67.37(11)
O4	Ca1	Si2	O2	94.59(19)
O4	Ca1	Si2	$O4^{2}$	-2.0(3)
O4	Ca1	Si2	$O7^{3}$	-80.36(19)
O4	Ca1	Si2	O8	-173.49(17)
O4	Ca1	O1	Ca2	-1.02(13)
O4	Ca1	O1	Si1	171.6(2)
O4	Ca1	O2	$Ca2^{6}$	174.39(11)
O4	Ca1	O2	$Ca3^{1}$	78.81(13)
O4	Ca1	O2	Si2	-88.23(17)
O4	Ca1	O3	$Ca2^{6}$	5.9(11)
O4	Ca1	O3	Si3	-166.7(9)
O4	Ca1	Si3	$Ca2^{3}$	81.3(3)
O4	Ca1	Si3	$Ca2^{6}$	169.8(3)
O4	Ca1	Si3	$Ca2^{4}$	-103.2(3)
O4	Ca1	Si3	$Ca3^{4}$	-37.2(3)
O4	Ca1	Si3	$Ca3^{8}$	-122.4(3)
O4	Ca1	Si3	O3	174.9(3)
O4	Ca1	Si3	O6	-93.4(3)
O4	Ca1	Si3	$O8^{7}$	93.2(3)
O4	Ca1	Si3	O9	1.6(3)
O4	Ca2	Si1	$Ca1^{4}$	97.20(8)
O4	Ca2	Si1	$Ca1^{3}$	-90.86(8)
O4	Ca2	Si1	Ca1	3.41(8)
O4	Ca2	Si1	$Ca3^{4}$	95.37(15)
O4	Ca2	Si1	$Ca3^{5}$	155.89(8)
O4	Ca2	Si1	O1	10.4(3)
O4	Ca2	Si1	O5	123.34(17)
O4	Ca2	Si1	O7	-124.53(16)
O4	Ca2	Si1	O9	-12.3(2)
O4	Ca2	O1	Ca1	1.00(13)
O4	Ca2	O1	Si1	-169.6(3)

O4[2]	Si2	O2	Ca2[6]	-131.16(18)
O4[2]	Si2	O2	Ca3[1]	-3.7(8)
O4[2]	Si2	O8	Ca2[6]	137.21(17)
O4[2]	Si2	O8	Si3[7]	-53.0(4)
Si3	Ca1	Si1	Ca1[3]	-91.32(4)
Si3	Ca1	Si1	Ca1[4]	92.52(4)
Si3	Ca1	Si1	Ca2	179.81(4)
Si3	Ca1	Si1	Ca3[4]	26.68(5)
Si3	Ca1	Si1	Ca3[5]	113.16(10)
Si3	Ca1	Si1	O1	174.8(2)
Si3	Ca1	Si1	O5	83.66(18)
Si3	Ca1	Si1	O7	-104.70(17)
Si3	Ca1	Si1	O9	-12.21(14)
Si3	Ca1	Si2	Ca2[6]	-44.90(4)
Si3	Ca1	Si2	Ca3[2]	98.94(7)
Si3	Ca1	Si2	O2	-99.11(17)
Si3	Ca1	Si2	O4[2]	164.3(2)
Si3	Ca1	Si2	O7[3]	85.95(17)
Si3	Ca1	Si2	O8	-7.18(15)
Si3	Ca1	O1	Ca2	-177.08(14)
Si3	Ca1	O1	Si1	-4.42(19)
Si3	Ca1	O2	Ca2[6]	-11.24(12)
Si3	Ca1	O2	Ca3[1]	-106.82(10)
Si3	Ca1	O2	Si2	86.14(15)
Si3	Ca1	O3	Ca2[6]	172.6(3)
Si3	Ca1	O4	Ca2	13.7(3)
Si3	Ca1	O4	Ca3	109.6(3)
Si3	Ca1	O4	Si2[2]	-128.3(3)
Si3[10]	Ca2	Si1	Ca1[3]	85.29(4)
Si3[4]	Ca2	Si1	Ca1[3]	177.99(4)
Si3[4]	Ca2	Si1	Ca1	-87.75(4)
Si3[3]	Ca2	Si1	Ca1	88.41(4)
Si3[10]	Ca2	Si1	Ca1[4]	-86.66(4)
Si3[4]	Ca2	Si1	Ca1[4]	6.04(4)
Si3[3]	Ca2	Si1	Ca1[4]	-177.80(4)
Si3[10]	Ca2	Si1	Ca1	179.56(4)
Si3[3]	Ca2	Si1	Ca1[3]	-5.86(4)
Si3[4]	Ca2	Si1	Ca3[5]	64.73(4)
Si3[3]	Ca2	Si1	Ca3[4]	-179.64(12)
Si3[10]	Ca2	Si1	Ca3[4]	-88.49(13)

Si3[4]	Ca2	Si1	Ca3[4]	4.21(13)
Si3[10]	Ca2	Si1	Ca3[5]	-27.97(4)
Si3[4]	Ca2	Si1	O1	-80.7(3)
Si3[3]	Ca2	Si1	O1	95.4(3)
Si3[10]	Ca2	Si1	O1	-173.4(3)
Si3[4]	Ca2	Si1	O5	32.18(15)
Si3[3]	Ca2	Si1	O5	-151.66(15)
Si3[10]	Ca2	Si1	O5	-60.51(15)
Si3[3]	Ca2	Si1	O7	-39.53(14)
Si3[10]	Ca2	Si1	O7	51.62(14)
Si3[4]	Ca2	Si1	O7	144.31(14)
Si3[3]	Ca2	Si1	O9	72.7(2)
Si3[10]	Ca2	Si1	O9	163.9(2)
Si3[4]	Ca2	Si1	O9	-103.5(2)
Si3[10]	Ca2	O1	Ca1	176.77(12)
Si3[4]	Ca2	O1	Ca1	-91.32(12)
Si3[3]	Ca2	O1	Ca1	87.08(12)
Si3[10]	Ca2	O1	Si1	6.2(3)
Si3[3]	Ca2	O1	Si1	-83.5(3)
Si3[4]	Ca2	O1	Si1	98.1(3)
Si3[4]	Ca2	O4	Ca1	83.66(9)
Si3[3]	Ca2	O4	Ca1	-88.99(9)
Si3[10]	Ca2	O4	Ca1	-22.3(5)
Si3[4]	Ca2	O4	Ca3	-13.09(10)
Si3[10]	Ca2	O4	Ca3	-119.1(4)
Si3[3]	Ca2	O4	Ca3	174.26(10)
Si3[4]	Ca2	O4	Si2[2]	-134.0(2)
Si3[3]	Ca2	O4	Si2[2]	53.4(2)
Si3[10]	Ca2	O4	Si2[2]	120.0(4)
Si3[4]	Ca3	O4	Ca1	-77.81(10)
Si3[4]	Ca3	O4	Ca2	14.95(11)
Si3[4]	Ca3	O4	Si2[2]	147.91(15)
O5[4]	Ca1	Si1	Ca1[4]	-5.31(10)
O5[4]	Ca1	Si1	Ca1[3]	170.85(10)
O5[4]	Ca1	Si1	Ca2	81.98(10)
O5[4]	Ca1	Si1	Ca3[4]	-71.15(11)
O5[4]	Ca1	Si1	Ca3[5]	15.33(15)
O5[4]	Ca1	Si1	O1	76.9(2)
O5[4]	Ca1	Si1	O5	-14.2(3)
O5[4]	Ca1	Si1	O7	157.47(19)

O5[4]	Ca1	Si2	Ca2[6]	66.98(11)
O5[4]	Ca1	Si2	Ca3[2]	-149.18(11)
O5[4]	Ca1	Si2	O2	12.8(2)
O5[4]	Ca1	Si2	O4[2]	-83.8(2)
O5[4]	Ca1	Si2	O7[3]	-162.2(2)
O5[4]	Ca1	Si2	O8	104.70(18)
O5[4]	Ca1	O1	Ca2	77.75(16)
O5[4]	Ca1	O1	Si1	-109.6(2)
O5[4]	Ca1	O2	Ca2[6]	94.35(14)
O5[4]	Ca1	O2	Ca3[1]	-1.22(12)
O5[4]	Ca1	O2	Si2	-168.26(19)
O5[4]	Ca1	O3	Ca2[6]	-74.93(16)
O5[4]	Ca1	O3	Si3	112.5(2)
O5[4]	Ca1	O4	Ca2	-102.59(13)
O5[4]	Ca1	O4	Ca3	-6.70(12)
O5[4]	Ca1	O4	Si2[2]	115.4(3)
O5[4]	Ca1	Si3	Ca2[4]	9.29(10)
O5[4]	Ca1	Si3	Ca2[3]	-166.14(10)
O5[4]	Ca1	Si3	Ca2[6]	-77.66(10)
O5[4]	Ca1	Si3	Ca3[4]	75.32(11)
O5[4]	Ca1	Si3	Ca3[8]	-9.86(15)
O5[4]	Ca1	Si3	O3	-72.6(2)
O5[4]	Ca1	Si3	O6	19.1(2)
O5[4]	Ca1	Si3	O8[7]	-154.31(19)
O5[4]	Ca1	Si3	O9	114.14(18)
O5[11]	Ca3	O4	Ca1	85.28(13)
O5[4]	Ca3	O4	Ca1	6.41(12)
O5[4]	Ca3	O4	Ca2	99.17(13)
O5[11]	Ca3	O4	Ca2	178.04(12)
O5[4]	Ca3	O4	Si2[2]	-127.9(2)
O5[11]	Ca3	O4	Si2[2]	-49.0(2)
O5	Si1	O1	Ca1	112.2(2)
O5	Si1	O1	Ca2	-78.2(3)
O5	Si1	O7	Ca1[3]	-162.8(2)
O5	Si1	O7	Si2[3]	26.2(4)
O5	Si1	O9	Ca3[4]	15.53(19)
O5	Si1	O9	Si3	-75.4(6)
O6[4]	Ca2	Si1	Ca1	-79.40(10)
O6[4]	Ca2	Si1	Ca1[4]	14.39(10)
O6[4]	Ca2	Si1	Ca1[3]	-173.67(10)

O6[4]	Ca2	Si1	Ca3[5]	73.07(10)
O6[4]	Ca2	Si1	O1	-72.4(3)
O6[4]	Ca2	Si1	O5	40.53(19)
O6[4]	Ca2	Si1	O7	152.66(17)
O6[4]	Ca2	Si1	O9	-95.1(2)
O6[4]	Ca2	O1	Ca1	-77.06(16)
O6[4]	Ca2	O1	Si1	112.3(3)
O6[4]	Ca2	O4	Ca1	103.58(12)
O6[4]	Ca2	O4	Ca3	6.83(11)
O6[4]	Ca2	O4	Si2[2]	-114.0(3)
O6[4]	Ca3	O4	Ca1	-99.32(13)
O6[12]	Ca3	O4	Ca1	-177.88(12)
O6[12]	Ca3	O4	Ca2	-85.12(13)
O6[4]	Ca3	O4	Ca2	-6.56(11)
O6[4]	Ca3	O4	Si2[2]	126.4(2)
O6[12]	Ca3	O4	Si2[2]	47.8(2)
O6	Si3	O9	Ca3[4]	-15.47(18)
O6	Si3	O9	Si1	75.6(6)
O7[3]	Ca1	Si1	Ca1[4]	176.12(10)
O7[3]	Ca1	Si1	Ca1[3]	-7.72(9)
O7[3]	Ca1	Si1	Ca2	-96.59(9)
O7[3]	Ca1	Si1	Ca3[4]	110.28(10)
O7[3]	Ca1	Si1	Ca3[5]	-163.24(12)
O7[3]	Ca1	Si1	O1	-101.6(2)
O7[3]	Ca1	Si1	O5	167.26(19)
O7[3]	Ca1	Si1	O7	-21.1(3)
O7[3]	Ca1	Si1	O9	71.39(17)
O7[3]	Ca1	Si2	Ca2[6]	-130.85(17)
O7[3]	Ca1	Si2	Ca3[2]	12.99(17)
O7[3]	Ca1	Si2	O2	174.9(2)
O7[3]	Ca1	Si2	O4[2]	78.3(3)
O7[3]	Ca1	Si2	O8	-93.1(2)
O7[3]	Ca1	O1	Ca2	-86.03(16)
O7[3]	Ca1	O1	Si1	86.6(2)
O7[3]	Ca1	O2	Ca2[6]	-100.41(15)
O7[3]	Ca1	O2	Ca3[1]	164.01(17)
O7[3]	Ca1	O2	Si2	-3.03(15)
O7[3]	Ca1	O3	Ca2[6]	69.93(15)
O7[3]	Ca1	O3	Si3	-102.6(2)
O7[3]	Ca1	O4	Ca2	111.51(12)

O7[3]	Ca1	O4	Si2[2]	-30.5(3)
O7[3]	Ca1	Si3	Ca2[6]	72.89(9)
O7[3]	Ca1	Si3	Ca2[3]	-15.60(9)
O7[3]	Ca1	Si3	Ca2[4]	159.83(9)
O7[3]	Ca1	Si3	Ca3[4]	-134.13(9)
O7[3]	Ca1	Si3	Ca3[8]	140.68(12)
O7[3]	Ca1	Si3	O3	78.0(2)
O7[3]	Ca1	Si3	O6	169.66(19)
O7[3]	Ca1	Si3	O8[7]	-3.8(2)
O7[3]	Ca1	Si3	O9	-95.32(17)
O7	Si1	O1	Ca1	-119.9(2)
O7	Si1	O1	Ca2	49.8(4)
O7	Si1	O5	Ca1[4]	-156.5(2)
O7	Si1	O5	Ca3[5]	-20.0(3)
O7	Si1	O5	Ca3[4]	91.85(19)
O7	Si1	O9	Ca3[4]	-98.22(17)
O7	Si1	O9	Si3	170.8(5)
O7[3]	Si2	O2	Ca1	4.05(19)
O7[3]	Si2	O2	Ca2[6]	103.76(17)
O7[3]	Si2	O2	Ca3[1]	-128.7(7)
O7[3]	Si2	O8	Ca2[6]	-102.59(18)
O7[3]	Si2	O8	Si3[7]	67.2(4)
O8[10]	Ca2	Si1	Ca1[4]	-173.40(10)
O8[10]	Ca2	Si1	Ca1[3]	-1.45(10)
O8[10]	Ca2	Si1	Ca1	92.82(10)
O8[10]	Ca2	Si1	Ca3[5]	-114.71(10)
O8[10]	Ca2	Si1	Ca3[4]	-175.23(15)
O8[10]	Ca2	Si1	O1	99.8(3)
O8[10]	Ca2	Si1	O5	-147.26(17)
O8[10]	Ca2	Si1	O7	-35.12(17)
O8[10]	Ca2	Si1	O9	77.1(2)
O8[10]	Ca2	O1	Ca1	84.44(16)
O8[10]	Ca2	O1	Si1	-86.2(3)
O8[10]	Ca2	O4	Ca1	-111.33(12)
O8[10]	Ca2	O4	Ca3	151.91(13)
O8[10]	Ca2	O4	Si2[2]	31.0(2)
O8	Si2	O2	Ca1	-104.46(18)
O8	Si2	O2	Ca2[6]	-4.7(2)
O8	Si2	O2	Ca3[1]	122.8(7)
O8[7]	Si3	O6	Ca2[4]	156.5(2)

O8[7]	Si3	O6	Ca3[4]	-91.32(19)
O8[7]	Si3	O9	Ca3[4]	98.01(17)
O8[7]	Si3	O9	Si1	-171.0(5)
O9[4]	Ca3	O4	Ca1	-46.06(15)
O9[4]	Ca3	O4	Ca2	46.69(14)
O9[4]	Ca3	O4	Si2[2]	179.66(16)
O9	Si1	O1	Ca1	-7.0(3)
O9	Si1	O1	Ca2	162.7(3)
O9	Si1	O5	Ca1[4]	94.3(3)
O9	Si1	O5	Ca3[5]	-129.2(2)
O9	Si1	O5	Ca3[4]	-17.3(2)
O9	Si1	O7	Ca1[3]	-51.9(3)
O9	Si1	O7	Si2[3]	137.1(4)
O9	Si3	O6	Ca2[4]	-94.8(2)
O9	Si3	O6	Ca3[8]	130.0(2)
O9	Si3	O6	Ca3[4]	17.4(2)

[1] -X,-Y,1-Z; [2] -X,-Y,-Z; [3] 1-X,-Y,-Z; [4] 1-X,-Y,1-Z; [5] 1+X,+Y,+Z; [6] +X,1+Y,+Z; [7] 1-X,1-Y,-Z; [8] 1+X,1+Y,+Z; [9] -X,-1-Y,1-Z; [10] +X,-1+Y,+Z; [11] -1+X,+Y,+Z; [12] -1+X,-1+Y,+Z

Table S3. Bond lengths for wollastonite-1*A* from Băița Bihor.

Atom	Atom	Length (Å)	Atom	Atom	Length (Å)
Ca1	Ca3[1]	3.5220(13)	Si1	Ca1[3]	3.4890(16)
Ca1	Si1[2]	3.5936(16)	Si1	Ca3[9]	3.5673(18)
Ca1	Si1[3]	3.4890(16)	Si1	Ca3[3]	3.1337(16)
Ca1	Si1	3.3643(17)	Si1	O1	1.584(4)
Ca1	Si2	3.0630(17)	Si1	O5	1.607(4)
Ca1	O1	2.311(4)	Si1	O7	1.647(4)
Ca1	O2	2.419(4)	Si1	O9	1.653(4)
Ca1	O3	2.351(4)	Si2	Ca2[10]	3.0751(16)
Ca1	O4	2.496(4)	Si2	Ca3[6]	3.3371(17)
Ca1	Si3	3.3861(17)	Si2	O2	1.616(4)
Ca1	O5[3]	2.316(4)	Si2	O4[6]	1.605(4)
Ca1	O7[2]	2.408(4)	Si2	O7[2]	1.663(4)
Ca2	Ca3[4]	3.5238(13)	Si2	O8	1.661(4)
Ca2	Si1	3.5821(16)	O2	Ca2[10]	2.447(4)
Ca2	Si2[5]	3.0751(16)	O2	Ca3[1]	2.344(4)
Ca2	O1	2.264(3)	O3	Ca2[10]	2.296(4)
Ca2	O2[5]	2.447(4)	O3	Si3	1.578(4)
Ca2	O3[5]	2.296(4)	O4	Si2[6]	1.605(4)
Ca2	O4	2.539(4)	Si3	Ca2[3]	3.4770(16)
Ca2	Si3[3]	3.4770(16)	Si3	Ca2[10]	3.6057(17)
Ca2	Si3[2]	3.6046(16)	Si3	Ca2[2]	3.6046(16)
Ca2	Si3[5]	3.6057(17)	Si3	Ca3[11]	3.5612(16)
Ca2	O6[3]	2.318(4)	Si3	Ca3[3]	3.1305(17)
Ca2	O8[5]	2.415(4)	Si3	O6	1.612(4)
Ca3	Ca1[1]	3.5220(13)	Si3	O8[12]	1.649(4)
Ca3	Ca2[4]	3.5238(13)	Si3	O9	1.657(4)
Ca3	Si1[3]	3.1337(16)	O5	Ca1[3]	2.316(4)
Ca3	Si2[6]	3.3371(17)	O5	Ca3[9]	2.361(4)
Ca3	O2[1]	2.344(4)	O5	Ca3[3]	2.421(4)
Ca3	O4	2.419(4)	O6	Ca2[3]	2.318(4)
Ca3	Si3[3]	3.1305(17)	O6	Ca3[3]	2.406(4)
Ca3	O5[7]	2.361(4)	O6	Ca3[11]	2.348(3)
Ca3	O5[3]	2.421(4)	O7	Ca1[2]	2.407(4)
Ca3	O6[8]	2.348(3)	O7	Si2[2]	1.663(4)
Ca3	O6[3]	2.406(4)	O8	Ca2[10]	2.415(4)
Ca3	O9[3]	2.652(4)	O8	Si3[12]	1.649(4)
Si1	Ca1[2]	3.5936(16)	O9	Ca3[3]	2.652(4)

[1] -X, -Y, 1-Z; [2] 1-X, -Y, -Z; [3] 1-X ,-Y, 1-Z; [4] -X, -1-Y, 1-Z; [5] +X, -1+Y, +Z; [6] -X, -Y, -Z; [7] -1+X, +Y, +Z; [8] -1+X, -1+Y, +Z; [9] 1+X, +Y ,+Z; [10] +X, 1+Y, +Z; [11] 1+X, 1+Y, +Z; [12] 1-X, 1-Y, -Z.

Table S4. Bond angles for wollastonite-1*A* from Băița Bihor

Atom	Atom	Atom	Angle (°)
Ca3[1]	Ca1	Si1[2]	126.51(4)
Si1[3]	Ca1	Ca3[1]	61.17(3)
Si1	Ca1	Ca3[1]	146.43(4)
Si1[3]	Ca1	Si1[2]	171.95(5)
Si1	Ca1	Si1[3]	87.14(4)
Si1	Ca1	Si1[2]	85.78(4)
Si1	Ca1	Si3	56.59(4)
Si2	Ca1	Ca3[1]	72.57(4)
Si2	Ca1	Si1	135.02(5)
Si2	Ca1	Si1[2]	55.03(4)
Si2	Ca1	Si1[3]	132.99(5)
Si2	Ca1	Si3	97.41(4)
O1	Ca1	Ca3[1]	143.20(10)
O1	Ca1	Si1[2]	87.78(10)
O1	Ca1	Si1	24.51(9)
O1	Ca1	Si1[3]	84.18(10)
O1	Ca1	Si2	142.80(10)
O1	Ca1	O2	173.97(12)
O1	Ca1	O3	105.16(13)
O1	Ca1	O4	81.58(12)
O1	Ca1	Si3	81.01(9)
O1	Ca1	O5[3]	101.78(13)
O1	Ca1	O7[2]	110.12(13)
O2	Ca1	Ca3[1]	41.51(9)
O2	Ca1	Si1[2]	86.60(9)
O2	Ca1	Si1	156.51(10)
O2	Ca1	Si1[3]	101.40(9)
O2	Ca1	Si2	31.60(9)
O2	Ca1	O4	95.87(12)
O2	Ca1	Si3	101.08(9)
O3	Ca1	Ca3[1]	87.78(9)
O3	Ca1	Si1[2]	92.90(9)
O3	Ca1	Si1	80.87(9)
O3	Ca1	Si1[3]	89.75(9)
O3	Ca1	Si2	80.19(9)
O3	Ca1	O2	77.36(12)
O3	Ca1	O4	173.23(13)
O3	Ca1	Si3	24.38(9)
O3	Ca1	O7[2]	88.78(13)
O4	Ca1	Ca3[1]	87.06(9)
O4	Ca1	Si1[2]	86.66(8)
O4	Ca1	Si1	105.83(9)

Atom	Atom	Atom	Angle (°)
O5[7]	Ca3	O9[3]	126.57(12)
O6[3]	Ca3	Ca1[1]	146.30(9)
O6[8]	Ca3	Ca1[1]	91.84(9)
O6[3]	Ca3	Ca2[4]	90.58(9)
O6[8]	Ca3	Ca2[4]	40.65(8)
O6[8]	Ca3	Si1[3]	158.21(10)
O6[3]	Ca3	Si1[3]	86.67(9)
O6[8]	Ca3	Si2[6]	74.00(9)
O6[3]	Ca3	Si2[6]	97.27(9)
O6[8]	Ca3	O4	91.71(12)
O6[3]	Ca3	O4	81.13(12)
O6[8]	Ca3	Si3[3]	99.42(10)
O6[3]	Ca3	Si3[3]	30.42(8)
O6[3]	Ca3	O5[3]	103.79(13)
O6[8]	Ca3	O5[7]	96.79(13)
O6[8]	Ca3	O5[3]	171.02(11)
O6[8]	Ca3	O6[3]	78.97(14)
O6[3]	Ca3	O9[3]	61.33(12)
O6[8]	Ca3	O9[3]	126.77(12)
O9[3]	Ca3	Ca1[1]	101.97(9)
O9[3]	Ca3	Ca2[4]	102.62(9)
O9[3]	Ca3	Si1[3]	31.82(8)
O9[3]	Ca3	Si2[6]	140.40(9)
O9[3]	Ca3	Si3[3]	31.95(8)
Ca1	Si1	Ca1[3]	92.86(4)
Ca1	Si1	Ca1[2]	94.22(4)
Ca1[3]	Si1	Ca1[2]	171.95(5)
Ca1[3]	Si1	Ca2	88.90(4)
Ca1	Si1	Ca2	62.81(3)
Ca1[3]	Si1	Ca3[9]	59.87(3)
Ca1	Si1	Ca3[9]	150.63(5)
Ca2	Si1	Ca1[2]	90.93(4)
Ca3[3]	Si1	Ca1[2]	113.03(4)
Ca3[9]	Si1	Ca1[2]	112.40(4)
Ca3[3]	Si1	Ca1[3]	67.01(3)
Ca3[3]	Si1	Ca1	115.44(5)
Ca3[9]	Si1	Ca2	103.02(4)
Ca3[3]	Si1	Ca2	155.89(5)
Ca3[3]	Si1	Ca3[9]	66.33(4)
O1	Si1	Ca1[2]	95.72(14)
O1	Si1	Ca1	37.23(13)
O1	Si1	Ca1[3]	87.61(14)

O4	Ca1	Si1[3]	91.60(8)	O1	Si1	Ca2	25.85(13)
O4	Ca1	Si2	94.07(9)	O1	Si1	Ca3[3]	143.69(14)
O4	Ca1	Si3	162.15(9)	O1	Si1	Ca3[9]	123.56(14)
Si3	Ca1	Ca3[1]	109.40(4)	O1	Si1	O5	117.7(2)
Si3	Ca1	Si1[3]	90.52(4)	O1	Si1	O7	112.61(19)
Si3	Ca1	Si1[2]	88.78(4)	O1	Si1	O9	108.7(2)
O5[3]	Ca1	Ca3[1]	41.63(9)	O5	Si1	Ca1	124.93(14)
O5[3]	Ca1	Si1[2]	162.91(10)	O5	Si1	Ca1[2]	140.56(15)
O5[3]	Ca1	Si1[3]	22.27(9)	O5	Si1	Ca1[3]	33.11(13)
O5[3]	Ca1	Si1	108.78(10)	O5	Si1	Ca2	109.86(14)
O5[3]	Ca1	Si2	114.04(10)	O5	Si1	Ca3[3]	49.50(14)
O5[3]	Ca1	O2	83.12(12)	O5	Si1	Ca3[9]	31.90(13)
O5[3]	Ca1	O3	98.11(13)	O5	Si1	O7	108.9(2)
O5[3]	Ca1	O4	80.87(12)	O5	Si1	O9	105.0(2)
O5[3]	Ca1	Si3	106.56(10)	O7	Si1	Ca1[3]	138.16(14)
O5[3]	Ca1	O7[2]	144.33(13)	O7	Si1	Ca1[2]	33.86(13)
O7[2]	Ca1	Ca3[1]	104.35(10)	O7	Si1	Ca1	125.75(14)
O7[2]	Ca1	Si1[2]	22.41(9)	O7	Si1	Ca2	94.94(14)
O7[2]	Ca1	Si1[3]	165.49(10)	O7	Si1	Ca3[3]	103.50(14)
O7[2]	Ca1	Si1	106.86(10)	O7	Si1	Ca3[9]	78.76(14)
O7[2]	Ca1	Si2	32.68(9)	O7	Si1	O9	102.51(19)
O7[2]	Ca1	O2	64.21(12)	O9	Si1	Ca1[2]	81.03(14)
O7[2]	Ca1	O4	88.26(12)	O9	Si1	Ca1[3]	104.88(14)
O7[2]	Ca1	Si3	94.06(10)	O9	Si1	Ca1	71.73(15)
Ca3[4]	Ca2	Si1	148.40(4)	O9	Si1	Ca2	133.07(16)
Ca3[4]	Ca2	Si3[5]	104.52(4)	O9	Si1	Ca3[9]	122.87(15)
Ca3[4]	Ca2	Si3[2]	125.89(4)	O9	Si1	Ca3[3]	57.80(14)
Si1	Ca2	Si3[5]	69.96(4)	Ca1	Si2	Ca2[10]	74.05(4)
Si1	Ca2	Si3[2]	85.64(4)	Ca1	Si2	Ca3[6]	136.75(5)
Si2[5]	Ca2	Ca3[4]	72.41(3)	Ca2[10]	Si2	Ca3[6]	137.06(5)
Si2[5]	Ca2	Si1	137.42(4)	O2	Si2	Ca1	51.65(13)
Si2[5]	Ca2	Si3[2]	54.66(4)	O2	Si2	Ca2[10]	52.30(13)
Si2[5]	Ca2	Si3[5]	92.76(4)	O2	Si2	Ca3[6]	164.33(15)
Si2[5]	Ca2	Si3[3]	132.94(4)	O2	Si2	O7[2]	102.94(19)
O1	Ca2	Ca3[4]	143.73(10)	O2	Si2	O8	103.44(19)
O1	Ca2	Si1	17.76(9)	O4[6]	Si2	Ca1	138.28(14)
O1	Ca2	Si2[5]	142.14(10)	O4[6]	Si2	Ca2[10]	139.79(14)
O1	Ca2	O2[5]	173.18(13)	O4[6]	Si2	Ca3[6]	42.79(13)
O1	Ca2	O3[5]	104.99(14)	O4[6]	Si2	O2	121.54(19)
O1	Ca2	O4	81.55(12)	O4[6]	Si2	O7[2]	111.11(19)
O1	Ca2	Si3[2]	87.49(10)	O4[6]	Si2	O8	111.74(19)
O1	Ca2	Si3[5]	87.61(10)	O7[2]	Si2	Ca1	51.43(13)
O1	Ca2	Si3[3]	84.85(10)	O7[2]	Si2	Ca2[10]	108.69(14)
O1	Ca2	O6[3]	102.66(13)	O7[2]	Si2	Ca3[6]	86.11(13)
O1	Ca2	O8[5]	109.66(13)	O8	Si2	Ca1	109.55(15)

O2^{5}	Ca2	Ca3^{4}	41.53(8)	O8	Si2	Ca2^{10}	51.33(13)
O2^{5}	Ca2	Si1	162.70(9)	O8	Si2	Ca3^{6}	86.31(13)
O2^{5}	Ca2	Si2^{5}	31.50(9)	O8	Si2	O7^{2}	104.4(2)
O2^{5}	Ca2	O4	95.53(12)	Ca2	O1	Ca1	104.77(15)
O2^{5}	Ca2	Si3^{5}	94.79(9)	Si1	O1	Ca1	118.26(18)
O2^{5}	Ca2	Si3^{2}	86.14(9)	Si1	O1	Ca2	136.4(2)
O2^{5}	Ca2	Si3^{3}	101.44(9)	Ca1	O2	Ca2^{10}	98.85(13)
O3^{5}	Ca2	Ca3^{4}	88.60(9)	Ca3^{1}	O2	Ca1	95.35(13)
O3^{5}	Ca2	Si1	87.43(9)	Ca3^{1}	O2	Ca2^{10}	94.66(12)
O3^{5}	Ca2	Si2^{5}	80.75(9)	Si2	O2	Ca1	96.75(17)
O3^{5}	Ca2	O2^{5}	77.82(12)	Si2	O2	Ca2^{10}	96.20(17)
O3^{5}	Ca2	O4	173.31(12)	Si2	O2	Ca3^{1}	162.3(2)
O3^{5}	Ca2	Si3^{5}	17.59(9)	Ca2^{10}	O3	Ca1	105.39(14)
O3^{5}	Ca2	Si3^{3}	90.51(10)	Si3	O3	Ca1	117.68(19)
O3^{5}	Ca2	Si3^{2}	93.02(10)	Si3	O3	Ca2^{10}	136.3(2)
O3^{5}	Ca2	O6^{3}	99.31(13)	Ca1	O4	Ca2	92.09(13)
O3^{5}	Ca2	O8^{5}	89.65(13)	Ca3	O4	Ca1	96.51(12)
O4	Ca2	Ca3^{4}	86.80(9)	Ca3	O4	Ca2	95.61(12)
O4	Ca2	Si1	99.02(9)	Si2^{6}	O4	Ca1	127.62(19)
O4	Ca2	Si2^{5}	93.23(8)	Si2^{6}	O4	Ca2	126.97(18)
O4	Ca2	Si3^{5}	168.37(9)	Si2^{6}	O4	Ca3	110.43(19)
O4	Ca2	Si3^{2}	85.76(8)	Ca1	Si3	Ca2^{10}	63.74(3)
O4	Ca2	Si3^{3}	91.53(8)	Ca1	Si3	Ca2^{3}	92.36(4)
Si3^{3}	Ca2	Ca3^{4}	61.15(3)	Ca1	Si3	Ca2^{2}	94.00(4)
Si3^{3}	Ca2	Si1	87.54(4)	Ca1	Si3	Ca3^{11}	150.62(5)
Si3^{2}	Ca2	Si3^{5}	89.58(4)	Ca2^{3}	Si3	Ca2^{2}	172.17(5)
Si3^{3}	Ca2	Si3^{2}	172.17(5)	Ca2^{3}	Si3	Ca2^{10}	88.31(4)
Si3^{3}	Ca2	Si3^{5}	91.69(4)	Ca2^{2}	Si3	Ca2^{10}	90.42(4)
O6^{3}	Ca2	Ca3^{4}	41.29(9)	Ca2^{3}	Si3	Ca3^{11}	60.07(3)
O6^{3}	Ca2	Si1	108.78(9)	Ca3^{3}	Si3	Ca1	114.91(5)
O6^{3}	Ca2	Si2^{5}	113.44(9)	Ca3^{11}	Si3	Ca2^{2}	112.78(4)
O6^{3}	Ca2	O2^{5}	82.82(12)	Ca3^{3}	Si3	Ca2^{2}	113.75(5)
O6^{3}	Ca2	O4	80.36(12)	Ca3^{3}	Si3	Ca2^{10}	155.64(5)
O6^{3}	Ca2	Si3^{2}	161.30(10)	Ca3^{3}	Si3	Ca2^{3}	67.33(4)
O6^{3}	Ca2	Si3^{3}	22.76(9)	Ca3^{11}	Si3	Ca2^{10}	102.67(4)
O6^{3}	Ca2	Si3^{5}	106.30(10)	Ca3^{3}	Si3	Ca3^{11}	66.15(4)
O6^{3}	Ca2	O8^{5}	142.90(13)	O3	Si3	Ca1	37.94(13)
O8^{5}	Ca2	Ca3^{4}	103.78(9)	O3	Si3	Ca2^{3}	86.87(14)
O8^{5}	Ca2	Si1	107.53(9)	O3	Si3	Ca2^{2}	95.35(14)
O8^{5}	Ca2	Si2^{5}	32.48(9)	O3	Si3	Ca2^{10}	26.08(13)
O8^{5}	Ca2	O2^{5}	63.89(12)	O3	Si3	Ca3^{3}	143.56(15)
O8^{5}	Ca2	O4	86.73(12)	O3	Si3	Ca3^{11}	123.29(14)
O8^{5}	Ca2	Si3^{3}	164.92(10)	O3	Si3	O6	117.8(2)
O8^{5}	Ca2	Si3^{2}	22.32(9)	O3	Si3	O8^{12}	113.1(2)
O8^{5}	Ca2	Si3^{5}	93.00(10)	O3	Si3	O9	108.7(2)

Ca1[1]	Ca3	Ca2[4]	63.28(3)	O6	Si3	Ca1	124.92(14)
Si1[3]	Ca3	Ca1[1]	91.13(4)	O6	Si3	Ca2[3]	33.82(13)
Si1[3]	Ca3	Ca2[4]	124.32(4)	O6	Si3	Ca2[10]	109.88(14)
Si1[3]	Ca3	Si2[6]	124.52(4)	O6	Si3	Ca2[2]	140.77(14)
Si2[6]	Ca3	Ca1[1]	111.36(4)	O6	Si3	Ca3[11]	31.72(13)
Si2[6]	Ca3	Ca2[4]	111.00(4)	O6	Si3	Ca3[3]	49.10(13)
O2[1]	Ca3	Ca1[1]	43.14(9)	O6	Si3	O8[12]	108.84(19)
O2[1]	Ca3	Ca2[4]	43.81(9)	O6	Si3	O9	104.7(2)
O2[1]	Ca3	Si1[3]	83.03(9)	O8[12]	Si3	Ca1	125.98(14)
O2[1]	Ca3	Si2[6]	146.64(10)	O8[12]	Si3	Ca2[10]	95.31(15)
O2[1]	Ca3	O4	173.39(12)	O8[12]	Si3	Ca2[2]	33.79(13)
O2[1]	Ca3	Si3[3]	83.20(10)	O8[12]	Si3	Ca2[3]	138.72(14)
O2[1]	Ca3	O5[3]	102.99(12)	O8[12]	Si3	Ca3[11]	79.10(13)
O2[1]	Ca3	O5[7]	83.79(12)	O8[12]	Si3	Ca3[3]	103.17(15)
O2[1]	Ca3	O6[8]	84.45(12)	O8[12]	Si3	O9	102.22(19)
O2[1]	Ca3	O6[3]	103.33(12)	O9	Si3	Ca1	71.03(15)
O2[1]	Ca3	O9[3]	72.96(12)	O9	Si3	Ca2[2]	81.62(14)
O4	Ca3	Ca1[1]	131.92(9)	O9	Si3	Ca2[10]	133.34(15)
O4	Ca3	Ca2[4]	132.20(9)	O9	Si3	Ca2[3]	104.80(14)
O4	Ca3	Si1[3]	102.24(9)	O9	Si3	Ca3[11]	122.87(15)
O4	Ca3	Si2[6]	26.78(9)	O9	Si3	Ca3[3]	57.90(14)
O4	Ca3	Si3[3]	102.78(9)	Ca1[3]	O5	Ca3[3]	101.45(13)
O4	Ca3	O5[3]	80.39(12)	Ca1[3]	O5	Ca3[9]	97.70(13)
O4	Ca3	O9[3]	113.62(12)	Ca3[9]	O5	Ca3[3]	100.74(14)
Si3[3]	Ca3	Ca1[1]	123.78(4)	Si1	O5	Ca1[3]	124.6(2)
Si3[3]	Ca3	Ca2[4]	91.62(4)	Si1	O5	Ca3[3]	100.19(17)
Si3[3]	Ca3	Si1[3]	61.43(4)	Si1	O5	Ca3[9]	127.03(19)
Si3[3]	Ca3	Si2[6]	124.74(4)	Ca2[3]	O6	Ca3[3]	102.07(13)
O5[7]	Ca3	Ca1[1]	40.66(9)	Ca2[3]	O6	Ca3[11]	98.07(13)
O5[3]	Ca3	Ca1[1]	90.32(9)	Ca3[11]	O6	Ca3[3]	101.03(14)
O5[3]	Ca3	Ca2[4]	146.59(9)	Si3	O6	Ca2[3]	123.4(2)
O5[7]	Ca3	Ca2[4]	91.12(9)	Si3	O6	Ca3[11]	127.13(19)
O5[7]	Ca3	Si1[3]	99.48(9)	Si3	O6	Ca3[3]	100.48(17)
O5[3]	Ca3	Si1[3]	30.31(9)	Si1	O7	Ca1[2]	123.7(2)
O5[3]	Ca3	Si2[6]	97.10(9)	Si1	O7	Si2[2]	140.0(2)
O5[7]	Ca3	Si2[6]	74.06(9)	Si2[2]	O7	Ca1[2]	95.88(16)
O5[7]	Ca3	O4	91.34(12)	Si2	O8	Ca2[10]	96.18(16)
O5[3]	Ca3	Si3[3]	86.57(9)	Si3[12]	O8	Ca2[10]	123.89(19)
O5[7]	Ca3	Si3[3]	158.07(9)	Si3[12]	O8	Si2	139.2(2)
O5[7]	Ca3	O5[3]	79.26(14)	Si1	O9	Ca3[3]	90.37(17)
O5[7]	Ca3	O6[3]	171.19(11)	Si1	O9	Si3	150.4(3)
O5[3]	Ca3	O9[3]	61.10(12)	Si3	O9	Ca3[3]	90.15(16)

[1] -X,-Y,1-Z; [2] 1-X,-Y,-Z; [3] 1-X,-Y,1-Z; [4] -X,-1-Y,1-Z; [5] +X,-1+Y,+Z; [6] -X,-Y,-Z; [7] -1+X,+Y,+Z; [8] -1+X,-1+Y,+Z; [9] 1+X,+Y,+Z; [10] +X,1+Y,+Z; [11] 1+X,1+Y,+Z; [12] 1-X,1-Y,-Z