

Supplementary Information for

Thermal structural changes in borax $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$

Wataru Nishiyasu and Atsushi Kyono*

Division of Earth Evolution Sciences, Graduate School of Life and Environmental
Sciences, University of Tsukuba, 1-1-1 Tennodai, Tsukuba, 305-8572, Japan

**Corresponding author: kyono@geol.tsukuba.ac.jp, ORCID: 0000-0001-5419-390X*

Supplementary Table S1. The fractional atomic coordinates, isotropic displacement parameters, and anisotropic displacement parameters for borax.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
113 K										
Na1	0	0	0	0.0147(4)	0.0130(4)	0.0115(4)	0.0003(2)	0.0046(3)	0.0003(3)	0.01289(19)
Na2	0	0.84849(7)	0.25	0.0152(4)	0.0147(4)	0.0125(4)	0	0.0062(3)	0	0.0137(2)
B1	0.08561(12)	0.34475(13)	0.21591(11)	0.0108(6)	0.0102(6)	0.0077(6)	0.0002(4)	0.0034(5)	0.0011(5)	0.0094(3)
B2	0.09864(12)	0.45619(13)	0.39295(12)	0.0131(7)	0.0094(6)	0.0086(6)	-0.0002(4)	0.0032(5)	0.0001(5)	0.0104(3)
O1	0	0.26631(11)	0.25	0.0117(6)	0.0089(6)	0.0084(6)	0	0.0034(4)	0	0.0096(3)
O2	0.15590(8)	0.41900(8)	0.31629(7)	0.0117(4)	0.0122(4)	0.0091(4)	-0.0017(3)	0.0045(3)	-0.0012(3)	0.0107(2)
O3	0.01966(8)	0.43639(8)	0.12484(7)	0.0109(4)	0.0128(4)	0.0099(4)	0.0032(3)	0.0047(3)	0.0013(3)	0.0108(2)
O4	0.16172(8)	0.26974(9)	0.16769(7)	0.0119(4)	0.0149(5)	0.0105(4)	-0.0024(3)	0.0038(3)	0.0022(3)	0.0123(2)
O5	0.16406(8)	0.51465(9)	0.49240(8)	0.0132(5)	0.0193(5)	0.0105(5)	-0.0051(3)	0.0051(4)	-0.0028(4)	0.0140(2)
O6	0.12360(8)	0.84590(9)	0.44854(8)	0.0137(5)	0.0162(5)	0.0129(4)	0.0011(3)	0.0040(4)	-0.0008(3)	0.0142(2)
O7	0.12315(8)	0.00133(9)	0.19525(8)	0.0141(5)	0.0125(5)	0.0159(5)	-0.0001(3)	0.0051(4)	0.0007(3)	0.0140(2)
O8	-0.11914(9)	0.16590(9)	0.03730(8)	0.0168(5)	0.0173(5)	0.0126(5)	-0.0036(3)	0.0035(4)	-0.0006(4)	0.0157(2)
O9	0.11738(9)	0.70714(9)	0.17224(8)	0.0189(5)	0.0147(5)	0.0151(5)	-0.0016(3)	0.0042(4)	-0.0003(4)	0.0164(2)
H4	0.2372(10)	0.2591(17)	0.2185(13)							0.024(4)
H5	0.1129(17)	0.534(2)	0.5355(17)							0.042(6)
H6A	0.1986(11)	0.8837(19)	0.4597(16)							0.041(6)
H6B	0.1317(18)	0.797(2)	0.5156(13)							0.056(7)
H7A	0.2008(11)	-0.0212(16)	0.198(2)							0.035(5)
H7B	0.1253(17)	0.0900(9)	0.2024(19)							0.047(6)
H8A	-0.0854(14)	0.191(2)	0.1140(10)							0.037(5)
H8B	-0.1935(10)	0.1323(18)	0.0333(15)							0.035(5)
H9A	0.097(2)	0.6207(10)	0.1630(17)							0.056(7)
H9B	0.115(2)	0.7360(17)	0.0983(11)							0.048(6)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
143 K										
Na1	0	0	0	0.0169(3)	0.0156(3)	0.0132(3)	0.0003(2)	0.0053(3)	0.0003(2)	0.01502(17)
Na2	0	0.84836(6)	0.25	0.0179(3)	0.0174(3)	0.0142(3)	0	0.0071(3)	0	0.01602(17)
B1	0.08565(10)	0.34483(11)	0.21573(9)	0.0123(5)	0.0111(5)	0.0093(5)	0.0000(4)	0.0042(4)	0.0008(4)	0.0106(2)
B2	0.09863(10)	0.45624(11)	0.39287(10)	0.0138(6)	0.0112(5)	0.0097(5)	-0.0004(4)	0.0041(4)	-0.0006(4)	0.0114(2)
O1	0	0.26623(9)	0.25	0.0137(5)	0.0097(5)	0.0097(5)	0	0.0041(4)	0	0.0109(2)
O2	0.15582(7)	0.41910(7)	0.31605(6)	0.0122(4)	0.0148(4)	0.0102(4)	-0.0024(3)	0.0045(3)	-0.0018(3)	0.01209(18)
O3	0.01970(7)	0.43612(7)	0.12472(6)	0.0127(4)	0.0152(4)	0.0110(4)	0.0040(3)	0.0049(3)	0.0020(3)	0.01267(18)
O4	0.16170(7)	0.26990(7)	0.16775(6)	0.0134(4)	0.0179(4)	0.0122(4)	-0.0032(3)	0.0045(3)	0.0031(3)	0.01434(19)
O5	0.16393(7)	0.51485(8)	0.49203(7)	0.0145(4)	0.0224(4)	0.0127(4)	-0.0067(3)	0.0056(3)	-0.0037(3)	0.0161(2)
O6	0.12360(7)	0.84604(8)	0.44854(7)	0.0153(4)	0.0187(4)	0.0154(4)	0.0017(3)	0.0042(3)	-0.0012(3)	0.01651(19)
O7	0.12311(7)	0.00129(7)	0.19538(7)	0.0159(4)	0.0143(4)	0.0188(4)	0.0002(3)	0.0060(3)	0.0006(3)	0.0161(2)
O8	-0.11908(7)	0.16572(8)	0.03731(7)	0.0188(4)	0.0201(4)	0.0156(4)	-0.0044(3)	0.0041(3)	-0.0006(3)	0.0183(2)
O9	0.11743(7)	0.70697(8)	0.17213(7)	0.0212(4)	0.0172(4)	0.0180(4)	-0.0021(3)	0.0044(3)	-0.0004(3)	0.0191(2)
H4	0.2370(9)	0.2618(15)	0.2181(12)							0.027(4)
H5	0.1132(14)	0.5349(17)	0.5354(14)							0.036(5)
H6A	0.1970(11)	0.8861(15)	0.4586(14)							0.038(5)
H6B	0.1349(16)	0.7955(16)	0.5147(12)							0.052(5)
H7A	0.2003(10)	-0.0218(14)	0.1963(18)							0.037(5)
H7B	0.1258(15)	0.0892(9)	0.2023(17)							0.048(5)
H8A	-0.0858(13)	0.1938(18)	0.1130(9)							0.043(5)
H8B	-0.1936(9)	0.1340(16)	0.0336(14)							0.037(5)
H9A	0.0958(18)	0.6218(10)	0.1636(15)							0.052(6)
H9B	0.1136(19)	0.7367(15)	0.0981(10)							0.058(6)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
173 K										
Na1	0	0	0	0.0170(3)	0.0185(3)	0.0150(3)	0.0003(2)	0.0046(3)	0.0003(2)	0.01685(17)
Na2	0	0.84812(6)	0.25	0.0183(3)	0.0207(3)	0.0166(3)	0	0.0071(3)	0	0.01814(17)
B1	0.08555(10)	0.34492(11)	0.21573(9)	0.0113(5)	0.0136(5)	0.0101(5)	-0.0002(4)	0.0032(4)	0.0007(4)	0.0116(2)
B2	0.09852(10)	0.45641(11)	0.39289(10)	0.0133(6)	0.0126(5)	0.0120(5)	-0.0008(4)	0.0040(4)	-0.0012(4)	0.0126(2)
O1	0	0.26648(9)	0.25	0.0129(5)	0.0118(5)	0.0110(5)	0	0.0034(4)	0	0.0119(2)
O2	0.15553(6)	0.41924(7)	0.31592(6)	0.0114(4)	0.0175(4)	0.0116(4)	-0.0027(3)	0.0041(3)	-0.0022(3)	0.01331(18)
O3	0.01964(7)	0.43586(7)	0.12460(6)	0.0118(4)	0.0179(4)	0.0126(4)	0.0047(3)	0.0046(3)	0.0023(3)	0.01384(18)
O4	0.16168(7)	0.27024(8)	0.16783(6)	0.0138(4)	0.0208(4)	0.0134(4)	-0.0037(3)	0.0037(3)	0.0040(3)	0.01602(19)
O5	0.16364(7)	0.51511(8)	0.49157(7)	0.0145(4)	0.0268(4)	0.0145(4)	-0.0081(3)	0.0056(3)	-0.0045(3)	0.0183(2)
O6	0.12365(7)	0.84606(8)	0.44865(7)	0.0156(4)	0.0217(4)	0.0180(4)	0.0021(3)	0.0039(3)	-0.0009(3)	0.01862(19)
O7	0.12302(7)	0.00124(8)	0.19542(7)	0.0159(4)	0.0170(4)	0.0215(4)	-0.0001(3)	0.0054(3)	0.0001(3)	0.0181(2)
O8	-0.11908(8)	0.16566(8)	0.03738(7)	0.0194(4)	0.0237(4)	0.0178(4)	-0.0055(3)	0.0036(3)	-0.0010(3)	0.0207(2)
O9	0.11743(8)	0.70668(8)	0.17218(7)	0.0222(4)	0.0197(4)	0.0211(4)	-0.0028(3)	0.0044(3)	-0.0005(3)	0.0214(2)
H4	0.2363(9)	0.2604(15)	0.2194(12)							0.031(4)
H5	0.1141(13)	0.5366(16)	0.5352(13)							0.035(4)
H6A	0.1975(10)	0.8857(16)	0.4602(14)							0.043(5)
H6B	0.1332(16)	0.7950(16)	0.5143(12)							0.057(6)
H7A	0.2011(10)	-0.0199(14)	0.1980(18)							0.045(5)
H7B	0.1250(15)	0.0893(9)	0.2026(16)							0.047(5)
H8A	-0.0859(13)	0.1950(18)	0.1121(10)							0.049(5)
H8B	-0.1932(9)	0.1328(16)	0.0340(14)							0.041(5)
H9A	0.0985(18)	0.6206(9)	0.1632(15)							0.058(6)
H9B	0.1168(18)	0.7355(15)	0.0987(10)							0.055(6)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
203 K										
Na1	0	0	0	0.0196(3)	0.0205(3)	0.0179(3)	0.0005(2)	0.0054(3)	0.0004(2)	0.01936(17)
Na2	0	0.84786(6)	0.25	0.0206(3)	0.0233(3)	0.0197(3)	0	0.0081(3)	0	0.02076(17)
B1	0.08540(10)	0.34498(11)	0.21554(9)	0.0124(5)	0.0144(5)	0.0123(5)	-0.0003(4)	0.0039(4)	0.0013(4)	0.0130(2)
B2	0.09835(10)	0.45654(11)	0.39268(10)	0.0137(5)	0.0151(5)	0.0131(5)	-0.0003(4)	0.0040(4)	-0.0006(4)	0.0139(2)
O1	0	0.26663(9)	0.25	0.0144(5)	0.0121(5)	0.0125(5)	0	0.0030(4)	0	0.0132(2)
O2	0.15531(6)	0.41943(7)	0.31565(6)	0.0128(4)	0.0190(4)	0.0140(4)	-0.0030(3)	0.0050(3)	-0.0022(3)	0.01503(18)
O3	0.01958(6)	0.43564(7)	0.12450(6)	0.0131(4)	0.0199(4)	0.0146(4)	0.0056(3)	0.0051(3)	0.0031(3)	0.01562(18)
O4	0.16162(7)	0.27028(7)	0.16786(6)	0.0153(4)	0.0233(4)	0.0161(4)	-0.0044(3)	0.0042(3)	0.0050(3)	0.01832(19)
O5	0.16344(7)	0.51543(8)	0.49110(7)	0.0157(4)	0.0299(4)	0.0174(4)	-0.0094(3)	0.0064(3)	-0.0058(3)	0.0207(2)
O6	0.12359(7)	0.84616(8)	0.44864(7)	0.0171(4)	0.0248(4)	0.0211(4)	0.0023(3)	0.0044(3)	-0.0008(3)	0.02125(19)
O7	0.12308(7)	0.00110(7)	0.19553(7)	0.0181(4)	0.0192(4)	0.0246(4)	-0.0001(3)	0.0060(3)	0.0003(3)	0.0207(2)
O8	-0.11913(7)	0.16550(8)	0.03758(7)	0.0218(4)	0.0262(4)	0.0210(4)	-0.0062(3)	0.0043(3)	-0.0011(3)	0.0234(2)
O9	0.11741(8)	0.70633(8)	0.17207(7)	0.0257(5)	0.0226(4)	0.0253(4)	-0.0039(3)	0.0047(3)	-0.0001(3)	0.0251(2)
H4	0.2366(9)	0.2584(15)	0.2200(11)							0.037(4)
H5	0.1139(13)	0.5337(16)	0.5355(13)							0.040(4)
H6A	0.1972(10)	0.8856(15)	0.4600(14)							0.047(5)
H6B	0.1327(16)	0.7949(16)	0.5137(12)							0.060(6)
H7A	0.2016(10)	-0.0187(14)	0.1977(18)							0.048(5)
H7B	0.1243(15)	0.0896(9)	0.2020(16)							0.056(5)
H8A	-0.0870(12)	0.1949(17)	0.1125(9)							0.045(5)
H8B	-0.1933(9)	0.1317(15)	0.0342(13)							0.041(5)
H9A	0.0983(19)	0.6203(10)	0.1638(16)							0.070(6)
H9B	0.1143(18)	0.7340(15)	0.0976(10)							0.063(6)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
233 K										
Na1	0	0	0	0.0238(4)	0.0223(4)	0.0206(4)	0.0005(3)	0.0068(3)	0.0008(3)	0.0221(2)
Na2	0	0.84760(7)	0.25	0.0257(4)	0.0255(4)	0.0233(4)	0	0.0110(3)	0	0.0240(2)
B1	0.08531(11)	0.34497(13)	0.21552(11)	0.0162(6)	0.0153(6)	0.0131(6)	0.0002(5)	0.0055(5)	0.0015(5)	0.0146(3)
B2	0.09829(12)	0.45641(13)	0.39256(12)	0.0167(6)	0.0151(6)	0.0149(6)	-0.0013(5)	0.0053(5)	-0.0011(5)	0.0154(3)
O1	0	0.26688(11)	0.25	0.0177(6)	0.0129(6)	0.0142(6)	0	0.0050(4)	0	0.0148(3)
O2	0.15507(7)	0.41948(8)	0.31543(7)	0.0161(4)	0.0203(4)	0.0158(4)	-0.0039(3)	0.0069(3)	-0.0025(3)	0.0169(2)
O3	0.01956(7)	0.43532(8)	0.12439(7)	0.0163(4)	0.0215(5)	0.0169(4)	0.0065(3)	0.0075(3)	0.0030(3)	0.0177(2)
O4	0.16164(8)	0.27053(9)	0.16789(7)	0.0190(4)	0.0255(5)	0.0180(5)	-0.0051(3)	0.0058(3)	0.0056(4)	0.0208(2)
O5	0.16307(8)	0.51570(10)	0.49049(8)	0.0194(5)	0.0326(5)	0.0196(5)	-0.0106(4)	0.0080(4)	-0.0067(4)	0.0234(2)
O6	0.12365(8)	0.84613(9)	0.44869(8)	0.0208(5)	0.0274(5)	0.0244(5)	0.0021(4)	0.0062(4)	-0.0013(4)	0.0243(2)
O7	0.12303(9)	0.00105(9)	0.19571(9)	0.0217(5)	0.0206(5)	0.0287(5)	0.0004(4)	0.0080(4)	0.0003(4)	0.0235(2)
O8	-0.11920(9)	0.16544(9)	0.03770(8)	0.0260(5)	0.0293(6)	0.0243(5)	-0.0076(4)	0.0061(4)	-0.0017(4)	0.0268(2)
O9	0.11724(9)	0.70609(10)	0.17205(9)	0.0300(5)	0.0250(5)	0.0294(6)	-0.0047(4)	0.0066(4)	-0.0003(4)	0.0286(3)
H4	0.2362(10)	0.2594(16)	0.2195(13)							0.036(5)
H5	0.1133(17)	0.535(2)	0.5353(17)							0.058(6)
H6A	0.1981(11)	0.8831(17)	0.4599(16)							0.046(5)
H6B	0.1307(19)	0.796(2)	0.5143(14)							0.077(8)
H7A	0.2001(11)	-0.0198(17)	0.194(2)							0.056(6)
H7B	0.1260(18)	0.0897(9)	0.204(2)							0.064(7)
H8A	-0.0865(14)	0.1937(19)	0.1137(10)							0.050(6)
H8B	-0.1933(10)	0.1320(18)	0.0347(16)							0.052(6)
H9A	0.096(2)	0.6205(11)	0.1634(18)							0.077(8)
H9B	0.115(2)	0.7334(19)	0.0973(11)							0.075(8)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
263 K										
Na1	0	0	0	0.0251(4)	0.0271(4)	0.0228(4)	0.0006(3)	0.0075(3)	0.0009(3)	0.02484(18)
Na2	0	0.84721(7)	0.25	0.0274(4)	0.0304(4)	0.0259(4)	0	0.0117(3)	0	0.02706(19)
B1	0.08523(10)	0.34500(11)	0.21542(10)	0.0156(5)	0.0182(5)	0.0143(5)	0.0001(4)	0.0052(4)	0.0016(4)	0.0158(2)
B2	0.09808(11)	0.45649(12)	0.39217(11)	0.0167(6)	0.0190(5)	0.0158(5)	-0.0018(4)	0.0054(4)	-0.0019(4)	0.0170(2)
O1	0	0.26697(10)	0.25	0.0183(5)	0.0161(5)	0.0157(5)	0	0.0048(4)	0	0.0167(2)
O2	0.15465(7)	0.41967(8)	0.31509(6)	0.0155(4)	0.0250(4)	0.0173(4)	-0.0042(3)	0.0067(3)	-0.0027(3)	0.01886(19)
O3	0.01944(7)	0.43504(7)	0.12427(7)	0.0158(4)	0.0258(4)	0.0185(4)	0.0070(3)	0.0072(3)	0.0037(3)	0.01959(19)
O4	0.16152(7)	0.27083(8)	0.16785(7)	0.0192(4)	0.0304(4)	0.0200(4)	-0.0062(3)	0.0054(3)	0.0068(3)	0.0232(2)
O5	0.16276(7)	0.51606(9)	0.48996(7)	0.0202(4)	0.0391(5)	0.0217(4)	-0.0125(4)	0.0083(4)	-0.0083(4)	0.0265(2)
O6	0.12358(8)	0.84621(9)	0.44870(8)	0.0219(4)	0.0323(5)	0.0267(5)	0.0033(4)	0.0062(3)	-0.0007(4)	0.0271(2)
O7	0.12306(8)	0.00089(8)	0.19574(8)	0.0235(5)	0.0248(5)	0.0314(5)	-0.0003(3)	0.0083(4)	0.0001(3)	0.0265(2)
O8	-0.11919(8)	0.16519(9)	0.03775(8)	0.0278(5)	0.0350(5)	0.0269(5)	-0.0084(4)	0.0063(4)	-0.0014(4)	0.0302(2)
O9	0.11733(8)	0.70573(9)	0.17209(8)	0.0320(5)	0.0296(5)	0.0328(5)	-0.0052(4)	0.0061(4)	-0.0003(4)	0.0321(2)
H4	0.2356(10)	0.2580(16)	0.2193(12)							0.040(4)
H5	0.1133(15)	0.5366(18)	0.5342(15)							0.055(5)
H6A	0.1980(11)	0.8847(17)	0.4609(15)							0.057(6)
H6B	0.1319(17)	0.7960(17)	0.5145(12)							0.069(6)
H7A	0.2009(11)	-0.0201(16)	0.197(2)							0.061(6)
H7B	0.1244(16)	0.0882(9)	0.2045(17)							0.058(6)
H8A	-0.0861(14)	0.1911(19)	0.1140(9)							0.056(6)
H8B	-0.1938(10)	0.1338(18)	0.0328(15)							0.060(6)
H9A	0.096(2)	0.6201(10)	0.1638(17)							0.083(8)
H9B	0.114(2)	0.7322(17)	0.0968(10)							0.073(7)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
293 K										
Na1	0	0	0	0.0305(4)	0.0288(4)	0.0269(4)	0.0008(3)	0.0092(3)	0.0007(3)	0.0285(2)
Na2	0	0.84694(7)	0.25	0.0335(4)	0.0325(4)	0.0311(4)	0	0.0146(3)	0	0.0313(2)
B1	0.08507(11)	0.34516(12)	0.21537(10)	0.0197(6)	0.0190(6)	0.0178(6)	0.0001(4)	0.0069(5)	0.0023(4)	0.0185(3)
B2	0.09785(11)	0.45655(12)	0.39188(11)	0.0208(6)	0.0191(5)	0.0193(6)	-0.0017(4)	0.0068(5)	-0.0011(5)	0.0195(3)
O1	0	0.26731(10)	0.25	0.0233(6)	0.0161(5)	0.0192(5)	0	0.0066(4)	0	0.0194(3)
O2	0.15445(7)	0.41984(8)	0.31476(7)	0.0196(4)	0.0263(4)	0.0210(4)	-0.0046(3)	0.0086(3)	-0.0033(3)	0.0217(2)
O3	0.01932(7)	0.43463(8)	0.12405(7)	0.0199(4)	0.0275(4)	0.0217(4)	0.0081(3)	0.0091(3)	0.0043(3)	0.0224(2)
O4	0.16157(8)	0.27097(8)	0.16794(7)	0.0244(5)	0.0321(5)	0.0239(4)	-0.0066(3)	0.0075(3)	0.0078(4)	0.0267(2)
O5	0.16257(8)	0.51632(9)	0.48929(8)	0.0237(5)	0.0429(5)	0.0254(5)	-0.0145(4)	0.0099(4)	-0.0092(4)	0.0301(2)
O6	0.12366(8)	0.84629(9)	0.44872(8)	0.0275(5)	0.0337(5)	0.0324(5)	0.0036(4)	0.0080(4)	-0.0008(4)	0.0313(2)
O7	0.12309(9)	0.00082(8)	0.19576(8)	0.0282(5)	0.0260(5)	0.0362(5)	0.0003(4)	0.0102(4)	0.0000(4)	0.0300(2)
O8	-0.11949(9)	0.16486(9)	0.03802(8)	0.0337(6)	0.0372(5)	0.0317(5)	-0.0098(4)	0.0081(4)	-0.0023(4)	0.0345(2)
O9	0.11718(9)	0.70535(10)	0.17193(9)	0.0396(6)	0.0314(5)	0.0391(6)	-0.0058(4)	0.0078(4)	-0.0003(4)	0.0374(3)
H4	0.2359(10)	0.2587(16)	0.2193(13)							0.048(5)
H5	0.1115(14)	0.5364(17)	0.5322(15)							0.050(5)
H6A	0.1976(11)	0.8854(18)	0.4594(16)							0.065(6)
H6B	0.1337(18)	0.7946(18)	0.5135(13)							0.081(7)
H7A	0.2005(10)	-0.0191(15)	0.1943(18)							0.051(5)
H7B	0.1246(17)	0.0884(9)	0.2050(18)							0.069(6)
H8A	-0.0874(14)	0.1928(19)	0.1137(10)							0.060(6)
H8B	-0.1941(10)	0.1328(18)	0.0346(15)							0.059(6)
H9A	0.094(2)	0.6207(11)	0.1617(18)							0.096(9)
H9B	0.114(2)	0.7340(18)	0.0974(11)							0.083(7)

Supplementary Table S1. Continued.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₂₃	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> _{eq}
323 K										
Na1	0	0	0	0.0302(5)	0.0340(4)	0.0287(4)	0.0011(3)	0.0088(3)	0.0011(3)	0.0309(2)
Na2	0	0.84664(8)	0.25	0.0336(5)	0.0387(4)	0.0335(4)	0	0.0151(4)	0	0.0341(2)
B1	0.08481(12)	0.34526(13)	0.21500(11)	0.0172(7)	0.0237(6)	0.0177(6)	-0.0004(5)	0.0062(5)	0.0024(5)	0.0193(3)
B2	0.09762(13)	0.45656(13)	0.39168(11)	0.0195(7)	0.0237(6)	0.0198(6)	-0.0021(5)	0.0070(5)	-0.0020(5)	0.0207(3)
O1	0	0.26746(11)	0.25	0.0213(6)	0.0201(5)	0.0196(5)	0	0.0062(5)	0	0.0203(3)
O2	0.15402(8)	0.41998(8)	0.31448(7)	0.0180(5)	0.0313(5)	0.0213(4)	-0.0052(3)	0.0081(3)	-0.0033(3)	0.0230(2)
O3	0.01930(8)	0.43418(8)	0.12389(7)	0.0179(5)	0.0334(5)	0.0228(4)	0.0089(3)	0.0086(4)	0.0052(4)	0.0241(2)
O4	0.16152(8)	0.27113(9)	0.16794(7)	0.0230(5)	0.0389(5)	0.0252(4)	-0.0071(4)	0.0066(4)	0.0091(4)	0.0291(2)
O5	0.16212(9)	0.51676(10)	0.48856(8)	0.0233(5)	0.0507(6)	0.0268(5)	-0.0162(4)	0.0100(4)	-0.0099(4)	0.0330(3)
O6	0.12359(9)	0.84634(10)	0.44859(9)	0.0260(6)	0.0399(6)	0.0342(5)	0.0040(4)	0.0070(4)	-0.0006(4)	0.0336(2)
O7	0.12296(9)	0.00068(9)	0.19581(9)	0.0274(6)	0.0313(5)	0.0393(6)	0.0001(4)	0.0094(4)	-0.0003(4)	0.0327(2)
O8	-0.11954(10)	0.16456(10)	0.03828(9)	0.0337(6)	0.0438(6)	0.0346(5)	-0.0110(5)	0.0077(5)	-0.0018(5)	0.0378(3)
O9	0.11723(10)	0.70490(11)	0.17199(9)	0.0396(7)	0.0374(6)	0.0421(6)	-0.0070(5)	0.0071(5)	-0.0012(5)	0.0406(3)
H4	0.2356(10)	0.2600(17)	0.2203(12)							0.046(5)
H5	0.1132(15)	0.5360(17)	0.5339(15)							0.050(5)
H6A	0.1986(11)	0.8828(19)	0.4595(17)							0.072(7)
H6B	0.1316(18)	0.7962(18)	0.5137(13)							0.075(7)
H7A	0.2013(11)	-0.0197(17)	0.198(2)							0.068(7)
H7B	0.1248(17)	0.0876(9)	0.2069(18)							0.071(7)
H8A	-0.0867(15)	0.1931(19)	0.1135(10)							0.064(6)
H8B	-0.1933(10)	0.1315(18)	0.0346(15)							0.062(6)
H9A	0.094(2)	0.6203(11)	0.1651(17)							0.089(8)
H9B	0.112(2)	0.7298(19)	0.0958(11)							0.091(8)

Supplementary Table S2. Selected bond lengths (Å) for borax at different temperatures.

	Na1-O8 ×2	Na1-O6 ×2	Na1-O7 ×2	Na2-O7 ×2	Na2-O9 ×2	Na2-O6 ×2	
113K	2.3713(12)	2.3879(11)	2.3996(13)	2.3932(12)	2.4099(12)	2.4342(13)	
143K	2.3728(11)	2.3900(10)	2.4035(12)	2.3959(11)	2.4143(11)	2.4368(12)	
173K	2.3740(11)	2.3907(11)	2.4056(12)	2.3971(11)	2.4148(11)	2.4401(12)	
203K	2.3752(11)	2.3904(10)	2.4075(12)	2.3987(11)	2.4166(11)	2.4403(12)	
233K	2.3794(12)	2.3941(12)	2.4106(13)	2.4022(12)	2.4180(13)	2.4427(13)	
263K	2.3802(11)	2.3951(11)	2.4158(13)	2.4061(12)	2.4203(12)	2.4472(12)	
293K	2.3831(12)	2.3968(11)	2.4177(13)	2.4094(12)	2.4223(12)	2.4494(13)	
323K	2.3829(13)	2.3967(13)	2.4167(15)	2.4094(13)	2.4229(14)	2.4469(14)	
	B1-O4	B1-O1	B1-O2	B1-O3	B2-O2	B2-O3	B2-O5
113K	1.4449(16)	1.4585(15)	1.4852(16)	1.5057(16)	1.3602(16)	1.3701(18)	1.3782(17)
143K	1.4439(13)	1.4624(13)	1.4865(13)	1.5052(13)	1.3622(14)	1.3726(15)	1.3776(14)
173K	1.4427(14)	1.4608(13)	1.4864(14)	1.5050(14)	1.3621(14)	1.3720(15)	1.3745(14)
203K	1.4421(13)	1.4602(13)	1.4870(13)	1.5031(13)	1.3617(14)	1.3703(15)	1.3737(14)
233K	1.4428(15)	1.4597(15)	1.4868(16)	1.5035(16)	1.3616(16)	1.3711(17)	1.3716(17)
263K	1.4414(14)	1.4602(14)	1.4874(14)	1.5045(14)	1.3597(14)	1.3702(15)	1.3740(15)
293K	1.4430(14)	1.4586(14)	1.4865(15)	1.5034(15)	1.3600(15)	1.3680(16)	1.3732(15)
323K	1.4415(15)	1.4579(16)	1.4869(16)	1.4976(16)	1.3576(16)	1.3664(18)	1.3698(17)

Supplementary Table S2. Continued.

	O4-H4	O5-H5	O6-H6A	O6-H6B	O7-H7A	O7-H7B	O8-H8A	O8-H8B	O9-H9A	O9-H9B
113K	0.934(9)	0.931(10)	0.946(9)	0.945(9)	0.942(9)	0.938(9)	0.940(9)	0.938(9)	0.940(9)	0.941(9)
143K	0.929(9)	0.933(9)	0.943(9)	0.943(9)	0.944(9)	0.932(9)	0.940(9)	0.934(9)	0.932(9)	0.943(9)
173K	0.931(9)	0.927(9)	0.943(9)	0.944(9)	0.944(9)	0.935(9)	0.934(9)	0.935(9)	0.936(9)	0.943(9)
203K	0.940(9)	0.925(9)	0.941(9)	0.941(9)	0.946(9)	0.939(9)	0.934(9)	0.938(8)	0.937(9)	0.943(9)
233K	0.934(9)	0.936(10)	0.940(9)	0.941(9)	0.947(9)	0.945(9)	0.944(9)	0.938(9)	0.939(9)	0.949(9)
263K	0.932(9)	0.930(9)	0.946(9)	0.945(9)	0.946(9)	0.933(9)	0.942(9)	0.932(9)	0.941(9)	0.949(9)
293K	0.934(9)	0.931(9)	0.946(9)	0.942(9)	0.948(9)	0.938(9)	0.941(9)	0.939(9)	0.942(9)	0.949(9)
323K	0.935(9)	0.931(9)	0.945(9)	0.939(9)	0.949(9)	0.935(9)	0.939(9)	0.933(9)	0.940(9)	0.951(9)