

## Supporting information

**Table S1** Principal IR-bands observed in KS1-KS5 and their composition.

Kidney stone	Region	Observed IR-bands ( $\text{cm}^{-1}$ ) with peak assignment	Stone Composition
KS1	C	3489 ( $\nu_s$ OH), 3063 ( $\nu_{as}$ OH), 1612 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 663 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
	M	3479 ( $\nu_s$ OH), 3063 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 658 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
	O	3487 ( $\nu_s$ OH), 3061 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 663 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
KS2	C	3485 ( $\nu_s$ OH), 3063 ( $\nu_{as}$ OH), 1612 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 658 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
	M	3489 ( $\nu_s$ OH), 3061 ( $\nu_{as}$ OH), 1616 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1038 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 663 ( $\omega$ OH), 602 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+HAP
	O	3487 ( $\nu_s$ OH), 3065 ( $\nu_{as}$ OH), 1616 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1036 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 658 ( $\omega$ OH), 606 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+COD+HAP
KS3	C	3487 ( $\nu_s$ OH), 3061 ( $\nu_{as}$ OH), 1616 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 660 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
	M	3487 ( $\nu_s$ OH), 3061 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1420 ( $\nu$ $\text{CO}_3$ ), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1038 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 667 ( $\omega$ OH), 606 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 567 ( $\delta$ O-POH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP
	O	3481 ( $\nu_s$ OH), 3067 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1420 ( $\nu$ $\text{CO}_3$ ), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1034 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 604 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 565 ( $\delta$ O-POH), 519 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP
KS4	C	3487 ( $\nu_s$ OH), 3063 ( $\nu_{as}$ OH), 1616 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1040 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 660 ( $\omega$ OH), 606 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 565 ( $\delta$ O-POH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP
	M	3483 ( $\nu_s$ OH), 3065 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1420 ( $\nu$ $\text{CO}_3$ ), 1317 ( $\nu_s$ CO), 1038 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 660 ( $\omega$ OH), 606 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 567 ( $\delta$ O-POH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP
	O	3483 ( $\nu_s$ OH), 3065 ( $\nu_{as}$ OH), 1620 ( $\nu_{as}$ CO), 1420 ( $\nu$ $\text{CO}_3$ ), 1317 ( $\nu_s$ CO), 1038 ( $\nu$ $\text{PO}_4$ ), 781 ( $\delta$ CH), 656 ( $\omega$ OH), 606 ( $\delta$ $\text{PO}_4$ ), 567 ( $\delta$ O-POH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP

KS5	C	3489 ( $\nu_s$ OH), 3061 ( $\nu_{as}$ OH), 1616 ( $\nu_{as}$ CO), 1315 ( $\nu_s$ CO), 781 ( $\delta$ CH), 660 ( $\omega$ OH), 517 ( $\delta$ OCO)	COM
	M	3015 ( $\nu$ OH), 2822 ( $\nu$ NH), 1670 ( $\nu$ CO), 1435 ( $\omega$ NH), 1389 ( $\omega$ NH), 1348 ( $\omega$ NH), 1312 ( $\delta$ CH <sub>2</sub> ), 1122 ( $\nu$ C-C), 1026 ( $\nu$ NH), 991( $\nu$ C-C), 878 ( $\delta$ NH), 783 ( $\nu$ CH <sub>2</sub> ), 744 ( $\nu$ CN, $\delta$ NH, $\nu$ C-C), 573 ( $\delta$ PO), 521( $\delta$ OCO)	COM+UAA+AAU+BRS
	O	3483 ( $\nu_s$ OH), 3065 ( $\nu_{as}$ OH), 1618 ( $\nu_{as}$ CO), 1420 ( $\nu$ CO <sub>3</sub> ), 1315 ( $\nu_s$ CO), 1034 ( $\nu$ PO <sub>4</sub> ), 781 ( $\delta$ CH), 604 ( $\delta$ PO <sub>4</sub> ), 565 ( $\delta$ O-POH), 519 ( $\delta$ OCO)	COM+CAP

C (core), M (middle) and O (core)

**Table S2** Final atomic coordinates, occupancy factors (Occ.) and B<sub>eq</sub> (Å<sup>2</sup>) values for COM in KS3C.

Atoms	Occ.	x	y	z	B <sub>eq</sub>
Ca1	1.0	0.9686(6)	0.1236(8)	0.0569(4)	1.57(2)
Ca2	1.0	0.9942(6)	0.1239(8)	0.4356(5)	1.55(1)
C1	1.0	0.9827(18)	0.3202(10)	0.2485(8)	1.70(3)
C2	1.0	0.0002(10)	0.4228(11)	0.2485(8)	1.70(3)
C3	1.0	0.5206(10)	0.1212(12)	0.1827(16)	1.67(4)
C4	1.0	0.4542(12)	0.1219(14)	0.3147(17)	1.67(4)
O1	1.0	0.9780(18)	0.2830(9)	0.1326(17)	1.66(2)
O2	1.0	0.0066(12)	0.4660(9)	0.1391(16)	1.72(3)
O3	1.0	0.9830(10)	0.2819(9)	0.3557(16)	1.67(1)
O4	1.0	0.0089(15)	0.4658(9)	0.3616(14)	1.72(3)
O5	1.0	0.3614(13)	0.1450(11)	0.0709(12)	1.86(3)
O6	1.0	0.7250(13)	0.1252(18)	0.2005(12)	1.65(3)
O7	1.0	0.2431(13)	0.1264(14)	0.2973(12)	1.74(2)
O8	1.0	0.6062(13)	0.1084(12)	0.4296(12)	1.87(2)
OW1	0.858(10)	0.405(2)	0.343(1)	0.101(1)	1.69(3)
OW2	0.863(8)	0.593(1)	0.359(2)	0.401(1)	1.70(1)
OW10	0.150(10)	0.371(9)	0.409(5)	0.100(8)	1.70(2)
OW20	0.144(9)	0.571(10)	0.407(7)	0.399(9)	1.73(4)

**Figure S1** Images of kidney stones samples (a) KS1, (b) KS2, (c) KS3, (d) KS4 and (e) KS5.



(a)



(b)



(c)

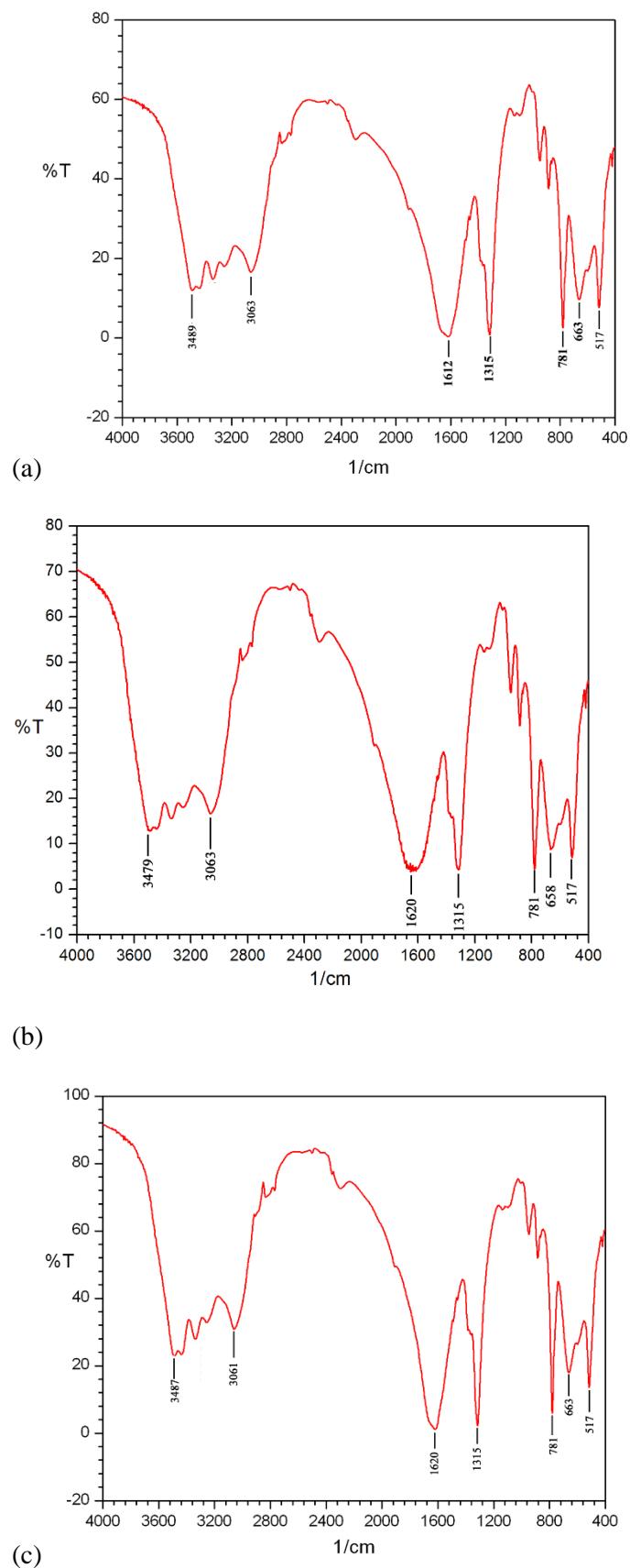


(d)

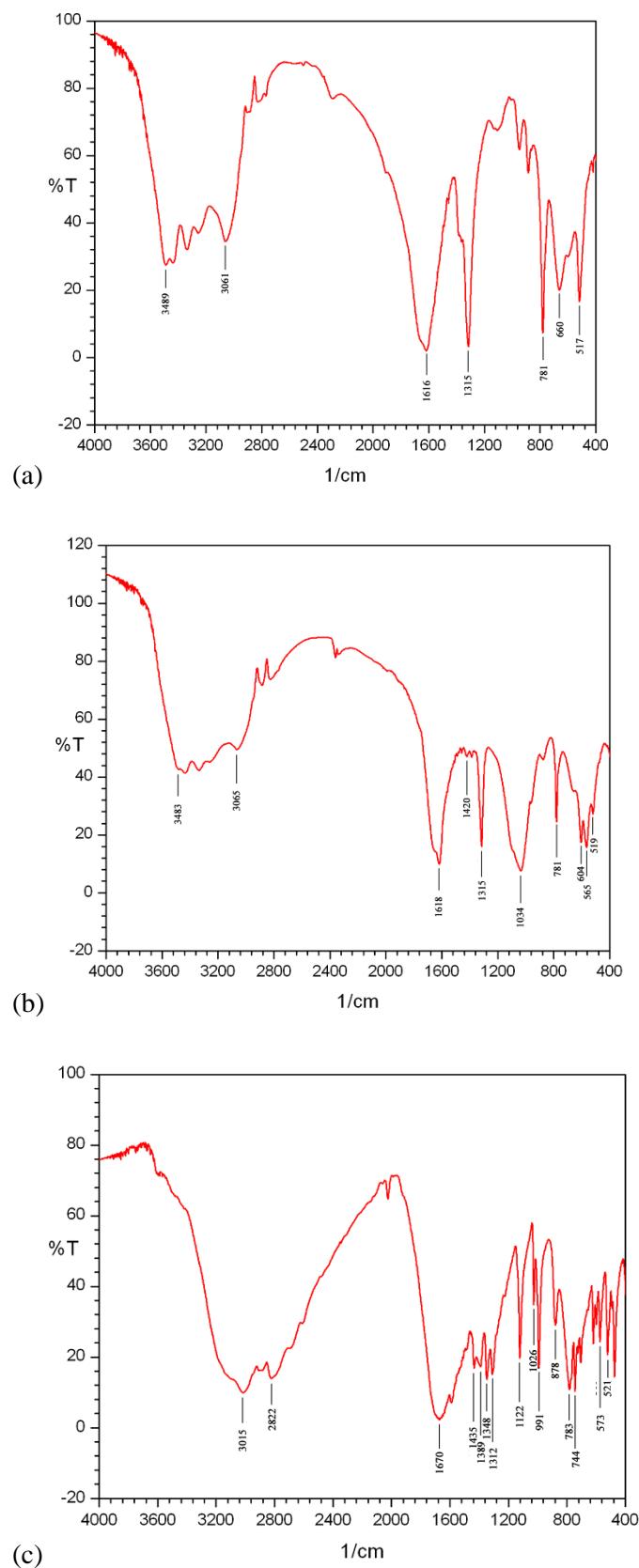


(e)

**Figure S2** IR spectra of different regions of KS1 (a) KS1C, (b) KS1M and (c) KS1O.



**Figure S3** IR spectra of kidney stone KS5 (a) KS5C, (b) KS5M and (c) KS5O.



**Figure S4** SEM micrograph of multilayered deposition of COM in the core (C) region of KS3.

