

## Supporting Information

# Unraveling the Origin of Long-term Stability for Cs<sup>+</sup> and Sr<sup>2+</sup> Solidification inside Sodalite

Wenzhi Luo,<sup>1</sup> Xiaoqiang Yang,<sup>1</sup> Hailin Cao,<sup>2</sup> Luqian Weng,<sup>3</sup> Gang Feng<sup>4</sup>, Xian-Zhu Fu,<sup>1</sup> Jing-  
Li Luo<sup>1</sup>, Jianwen Liu <sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> College of Materials Science and Engineering, Shenzhen University, Shenzhen, 518055, China

<sup>2</sup> College of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Shenzhen,  
518000, Peoples R China

<sup>3</sup> Shenzhen Aerospace New Materials Technology Cooperation, Shenzhen, Peoples R China

<sup>4</sup> Institute of Applied Chemistry, College of Chemistry, Nanchang University, No. 999 Xuefu  
Road, Nanchang 330031, P. R. China

**Table S1.** Lattice parameters for crystalline H<sub>2</sub>O, HNO<sub>3</sub>, NaNO<sub>3</sub>, CsNO<sub>3</sub> and Sr(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>. The parameters for *a*, *b* and *c* are in angstrom (Å) and the *α*, *β* and *γ* are in degree (°).

Substances	Crystalline		
	Substances	Lattice Parameters	
H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O [1]	$a = b = 4.511, c = 7.351$	$\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$
HNO <sub>3</sub>	HNO <sub>3</sub> ·3H <sub>2</sub> O [2]	$a = 9.485, b = 14.684, c = 3.436$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$
NaNO <sub>3</sub>	NaNO <sub>3</sub> [3]	$a = b = 5.075, c = 17.070$	$\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$
CsNO <sub>3</sub>	CsNO <sub>3</sub> [4]	$a = b = 10.902, c = 7.740$	$\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$
Sr(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Sr(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> [5]	$a = b = c = 7.822$	$\alpha = \beta = \gamma = 90$

**Table S2.** The radii for different ions.

<b>Ions</b>	<b><i>Radius</i> [6] (Å)</b>
H <sup>+</sup>	0.55
Na <sup>+</sup>	1.02
Cs <sup>+</sup>	1.67
Sr <sup>2+</sup>	1.18

**Table S3.** Exchange energies (in eV) for two possible configurations of  $\text{CsH}_5[\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_8$  and  $\text{SrH}_4[\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_8$ , respectively.

$(\text{H}_2\text{O})_8$	$E(\text{Cs}^+)$	$E(\text{Sr}^{2+})$
Configuration1 <sup>a</sup>	-419.60	-418.84
Configuration2 <sup>b</sup>	-419.43	-418.79

<sup>a</sup> the configuration for three water molecules in the cage and five molecules out of the cage.

<sup>b</sup> the configuration for four water molecules in the cage and four molecules out of the cage.

**Table S4.** Exchange energies  $E_{EX}$  (eV) for  $\text{Cs}^+$  and  $\text{Sr}^{2+}$  ions with solvation water  $(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n=1-11$ ) in the cage of sodalite in acid environment.

$(\text{H}_2\text{O})_n$	$E_{EX}(\text{Cs}^+)$	$E_{EX}(\text{Sr}^{2+})$
$n = 0$	-0.47	0.24
$n = 1$	-0.49	0.21
$n = 2$	-1.25	-0.87
$n = 3$	-1.49	-1.15
$n = 4$	-1.74	-1.79
$n = 5$	-1.12	-1.36
$n = 6$	-0.6	-0.66
$n = 7$	-0.46	-0.17
$n = 8$	-1.05	-0.83
$n = 9$	-0.98	-1.41
$n = 10$	-0.43	-1.14
$n = 11$	0.06	-0.27

**Table S5.** Distances (in Å) for Cs<sup>+</sup> and Sr<sup>2+</sup> from the framework and H<sub>2</sub>O with minimal value structure in H-type.

Ions	CsH <sub>5</sub> [Al <sub>6</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>24</sub> ]	SrH <sub>4</sub> [Al <sub>6</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>24</sub> ]	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.05		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.46	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.60		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.87	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.15		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.38	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.59		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.71	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.16		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.44	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.56		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.22	
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>1</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>1</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.95	Cs-O <sub>water</sub> : 3.10	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.48	Sr-O <sub>water</sub> : 3.33
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.44		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.98	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.60		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.43	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.33		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.85	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.10		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.47	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.08		Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.06	
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.01	Cs-O <sub>water</sub> : 2.99	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.53	Sr-O <sub>water</sub> : 3.27
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.43	Cs-O <sub>water</sub> : 3.05	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.80	Sr-O <sub>water</sub> : 3.27
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.00		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.45	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.57		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.93	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.65		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.55	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.20		Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.48	
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub></b>	

Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.49	Cs-O <sub>water</sub> :3.10	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.46	Sr-O <sub>water</sub> :3.24
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.04	Cs-O <sub>water</sub> :3.05	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.01	Sr-O <sub>water</sub> :3.61
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.55	Cs-O <sub>water</sub> :3.07	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.50	Sr-O <sub>water</sub> :3.63
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.09		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.99	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.54		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.51	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.95		Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.08	

---

**CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>**

**SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>**

Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.06	Cs-O <sub>water</sub> :3.10	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.55	Sr-O <sub>water</sub> :3.10
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.61	Cs-O <sub>water</sub> :2.80	Sr-O <sub>Framework</sub> :3.27	Sr-O <sub>water</sub> :3.57
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.09	Cs-O <sub>water</sub> :3.16	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.68	Sr-O <sub>water</sub> :2.64
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.55	Cs-O <sub>water</sub> :5.13	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.38	Sr-O <sub>water</sub> :5.25
Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.99		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.54	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.49		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.89	

---

**CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>**

**SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>**

Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.04	Cs-O <sub>water</sub> :3.12	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.68	Sr-O <sub>water</sub> :2.62
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.67	Cs-O <sub>water</sub> :2.83	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.32	Sr-O <sub>water</sub> :3.10
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.07	Cs-O <sub>water</sub> :3.16	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.53	Sr-O <sub>water</sub> :3.59
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.50	Cs-O <sub>water</sub> :5.17	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.84	Sr-O <sub>water</sub> :6.04
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.09	Cs-O <sub>water</sub> :5.16	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.55	Sr-O <sub>water</sub> :5.23
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.44		Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.38	

---

**CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>**

**SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>**

Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.72	Cs-O <sub>water</sub> :3.13	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.50	Sr-O <sub>water</sub> :2.61
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.10	Cs-O <sub>water</sub> :2.84	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.25	Sr-O <sub>water</sub> :3.13
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.47	Cs-O <sub>water</sub> :3.15	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.64	Sr-O <sub>water</sub> :3.54
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.04	Cs-O <sub>water</sub> :5.33	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.52	Sr-O <sub>water</sub> :7.45
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.43	Cs-O <sub>water</sub> :5.29	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.52	Sr-O <sub>water</sub> :7.90
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.02	Cs-O <sub>water</sub> :8.28	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.02	Sr-O <sub>water</sub> :4.74

---

<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>7</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>7</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.81	Cs-O <sub>water</sub> :3.11	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> :2.56
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.13	Cs-O <sub>water</sub> :2.85	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.38	Sr-O <sub>water</sub> :3.57
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.47	Cs-O <sub>water</sub> :3.17	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> :3.58
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.10	Cs-O <sub>water</sub> :7.58	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.96	Sr-O <sub>water</sub> :5.13
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.49	Cs-O <sub>water</sub> :5.60	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.47	Sr-O <sub>water</sub> :6.40
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.08	Cs-O <sub>water</sub> :5.16	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.07	Sr-O <sub>water</sub> :7.52
	Cs-O <sub>water</sub> :4.71		Sr-O <sub>water</sub> :4.23
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.03	Cs-O <sub>water</sub> :2.85	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.61	Sr-O <sub>water</sub> :2.55
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.77	Cs-O <sub>water</sub> :3.14	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.56	Sr-O <sub>water</sub> :3.39
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.14	Cs-O <sub>water</sub> :3.16	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.68	Sr-O <sub>water</sub> :6.31
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.40	Cs-O <sub>water</sub> :5.08	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.12	Sr-O <sub>water</sub> :6.82
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.11	Cs-O <sub>water</sub> :6.15	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> :3.22
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.53	Cs-O <sub>water</sub> :6.57	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.15	Sr-O <sub>water</sub> :5.13
	Cs-O <sub>water</sub> :4.50		Sr-O <sub>water</sub> :5.51
	Cs-O <sub>water</sub> :5.58		Sr-O <sub>water</sub> :4.19
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.99	Cs-O <sub>water</sub> :2.90	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.43	Sr-O <sub>water</sub> :3.49
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.56	Cs-O <sub>water</sub> :3.31	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.46	Sr-O <sub>water</sub> :3.86
Cs-O <sub>Framework</sub> :2.94	Cs-O <sub>water</sub> :3.90	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.46	Sr-O <sub>water</sub> :3.86
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.39	Cs-O <sub>water</sub> :3.14	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.81	Sr-O <sub>water</sub> :4.83
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.14	Cs-O <sub>water</sub> :6.44	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.98	Sr-O <sub>water</sub> :7.11
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.84	Cs-O <sub>water</sub> :6.59	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.02	Sr-O <sub>water</sub> :5.45
	Cs-O <sub>water</sub> :4.85		Sr-O <sub>water</sub> :2.88
	Cs-O <sub>water</sub> :7.13		Sr-O <sub>water</sub> :7.11
	Cs-O <sub>water</sub> :4.26		Sr-O <sub>water</sub> :5.45



<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>10</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>10</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.25	Cs-O <sub>water</sub> :4.29	Sr-O <sub>Framework</sub> :4.83	Sr-O <sub>water</sub> :2.49
Cs-O <sub>Framework</sub> :4.84	Cs-O <sub>water</sub> :2.82	Sr-O <sub>Framework</sub> : 5.17	Sr-O <sub>water</sub> :2.57
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.31	Cs-O <sub>water</sub> :3.86	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.58	Sr-O <sub>water</sub> :3.97
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.00	Cs-O <sub>water</sub> :5.43	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> :4.59
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.20	Cs-O <sub>water</sub> :7.63	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.36	Sr-O <sub>water</sub> :5.68
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.65	Cs-O <sub>water</sub> :2.95	Sr-O <sub>Framework</sub> : 5.27	Sr-O <sub>water</sub> :7.84
	Cs-O <sub>water</sub> :3.00		Sr-O <sub>water</sub> :2.57
	Cs-O <sub>water</sub> :6.89		Sr-O <sub>water</sub> :6.21
	Cs-O <sub>water</sub> :6.06		Sr-O <sub>water</sub> :5.52
	Cs-O <sub>water</sub> :5.05		Sr-O <sub>water</sub> :6.55
<b>CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub></b>		<b>SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub></b>	
Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.97	Cs-O <sub>water</sub> :2.97	Sr-O <sub>Framework</sub> :4.73	Sr-O <sub>water</sub> :2.62
Cs-O <sub>Framework</sub> :3.36	Cs-O <sub>water</sub> :2.98	Sr-O <sub>Framework</sub> : 4.67	Sr-O <sub>water</sub> :2.52
Cs-O <sub>Framework</sub> :5.07	Cs-O <sub>water</sub> :4.44	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.15	Sr-O <sub>water</sub> :3.98
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.41	Cs-O <sub>water</sub> :2.88	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> :2.53
Cs-O <sub>Framework</sub> : 4.87	Cs-O <sub>water</sub> :3.93	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.42	Sr-O <sub>water</sub> :4.52
Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.30	Cs-O <sub>water</sub> :5.48	Sr-O <sub>Framework</sub> : 5.46	Sr-O <sub>water</sub> :3.36
	Cs-O <sub>water</sub> :7.84		Sr-O <sub>water</sub> :7.74
	Cs-O <sub>water</sub> :2.95		Sr-O <sub>water</sub> :5.83
	Cs-O <sub>water</sub> :6.69		Sr-O <sub>water</sub> :6.40
	Cs-O <sub>water</sub> :6.06		Sr-O <sub>water</sub> :5.15
	Cs-O <sub>water</sub> :5.11		Sr-O <sub>water</sub> :6.50

**Table S6.** Distances (in Å) for Cs<sup>+</sup> and Sr<sup>2+</sup> from the framework and H<sub>2</sub>O in H-type and Na-type sodalite.

Ions	H-type		Na-type	
Cs <sup>+</sup>	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.04	Cs-O <sub>water</sub> : 2.85	Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.79	Cs-O <sub>water</sub> : 2.82
	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.11	Cs-O <sub>water</sub> : 3.14	Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.88	Cs-O <sub>water</sub> : 2.83
	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.14	Cs-O <sub>water</sub> : 3.15	Cs-O <sub>Framework</sub> : 2.93	Cs-O <sub>water</sub> : 2.86
	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.40		Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.23	
	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.53		Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.23	
	Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.77		Cs-O <sub>Framework</sub> : 3.45	
Sr <sup>2+</sup>	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.57	Sr-O <sub>water</sub> : 2.55	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.40	Sr-O <sub>water</sub> : 2.74
	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.61	Sr-O <sub>water</sub> : 3.22	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.42	Sr-O <sub>water</sub> : 2.85
	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.18	Sr-O <sub>water</sub> : 3.39	Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.46	Sr-O <sub>water</sub> : 2.88
	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.12		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.94	
	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.15		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.97	
	Sr-O <sub>Framework</sub> : 3.56		Sr-O <sub>Framework</sub> : 2.98	

**Table S7.** Distances (in Å) for Na atoms from the framework and H<sub>2</sub>O for the immobilization of Cs<sup>+</sup> and Sr<sup>2+</sup> in Na-type sodalite.

Ions	Distance (Na-O)		Distance(Na-O)		
	(Å)		(Å)		
Cs <sup>+</sup>	Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.29	Na1-O <sub>water</sub> :2.49	Na2-O <sub>Framework</sub> : 2.29	Na2-O <sub>water</sub> :2.33	
	Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.35	Na1-O <sub>water</sub> :2.59	Na2-O <sub>Framework</sub> : 2.51	Na2-O <sub>water</sub> :2.46	
	Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.45	Na1-O <sub>water</sub> :2.60	Na2-O <sub>Framework</sub> : 2.73	Na2-O <sub>water</sub> :2.46	
	Na1-O <sub>Framework</sub> : 3.09	Na1-O <sub>water</sub> :4.75	Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.03	Na2-O <sub>water</sub> :4.55	
	Na1-O <sub>Framework</sub> : 3.19		Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.51		
	Na1-O <sub>Framework</sub> : 3.19		Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.47		
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 2.32	Na3-O <sub>water</sub> :2.54			
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 2.33	Na3-O <sub>water</sub> :2.57			
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 2.36	Na3-O <sub>water</sub> :2.65			
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 3.03	Na3-O <sub>water</sub> :4.74			
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 3.12				
	Na3-O <sub>Framework</sub> : 3.34				
	Sr <sup>2+</sup>	Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.34	Na1-O <sub>water</sub> :2.39	Na2-O <sub>Framework</sub> :2.41	Na2-O <sub>water</sub> :2.41
		Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.41	Na1-O <sub>water</sub> :2.41	Na2-O <sub>Framework</sub> : 2.53	Na2-O <sub>water</sub> :2.43
		Na1-O <sub>Framework</sub> : 2.63	Na1-O <sub>water</sub> :2.55	Na2-O <sub>Framework</sub> : 2.59	Na2-O <sub>water</sub> :2.48
Na1-O <sub>Framework</sub> : 3.03		Na1-O <sub>water</sub> :3.90	Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.32	Na2-O <sub>water</sub> :4.22	
Na1-O <sub>Framework</sub> :3.29			Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.35		
Na1-O <sub>Framework</sub> : 3.49			Na2-O <sub>Framework</sub> : 3.40		

**Table S8.** Gibbs free energies  $G_T$  (eV) for  $\text{Cs}^+$  and  $\text{Sr}^{2+}$  ions adsorbed in the cage of  $\text{H}_6[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 0-11$ ) in 0 K, 300 K, 600 K, 900 K, 1200 K, respectively.

Ions	$(\text{H}_2\text{O})_n$	$G_T$	$G_T$	$G_T$	$G_T$	$G_T$
		0 K	300K	600K	900K	1200K
$\text{Cs}^+$	$n = 0$	-0.37	-0.36	-0.45	-0.62	-0.86
	$n = 1$	-0.60	-0.59	-0.54	-0.51	-0.48
	$n = 2$	-1.32	-1.41	-1.50	-1.61	-1.74
	$n = 3$	-1.57	-1.54	-1.50	-1.47	-1.48
	$n = 4$	-1.72	-1.64	-1.51	-1.38	-1.27
	$n = 5$	-0.97	-0.76	-0.42	-0.07	0.25
	$n = 6$	-0.55	-0.49	-0.37	-0.25	-0.15
	$n = 7$	-0.31	-0.06	0.33	0.72	1.10
	$n = 8$	-1.04	-1.03	-1.02	-1.04	-1.09
	$n = 9$	-0.95	-0.86	-0.71	-0.59	-0.52
	$n = 10$	-0.48	-0.37	-0.19	-0.02	0.13
$n = 11$	0.16	0.33	0.44	0.49	0.48	
$\text{Sr}^{2+}$	$n = 0$	0.27	0.22	0.04	-0.25	-0.60
	$n = 1$	0.27	0.32	0.35	0.33	0.27
	$n = 2$	-0.91	-0.95	-1.09	-1.29	-1.53
	$n = 3$	-1.17	-1.16	-1.20	-1.29	-1.41

$n = 4$	-1.68	-1.71	-1.78	-1.91	-2.08
$n = 5$	-1.23	-1.09	-0.90	-0.72	-0.56
$n = 6$	-0.54	-0.50	-0.43	-0.38	-0.35
$n = 7$	0.07	0.24	0.42	0.56	0.67
$n = 8$	-0.67	-0.56	-0.45	-0.38	-0.34
$n = 9$	-1.24	-1.20	-1.21	-1.29	-1.41
$n = 10$	-1.04	-0.95	-0.87	-0.83	-0.83
$n = 11$	-0.01	0.03	-0.02	-0.16	-0.36

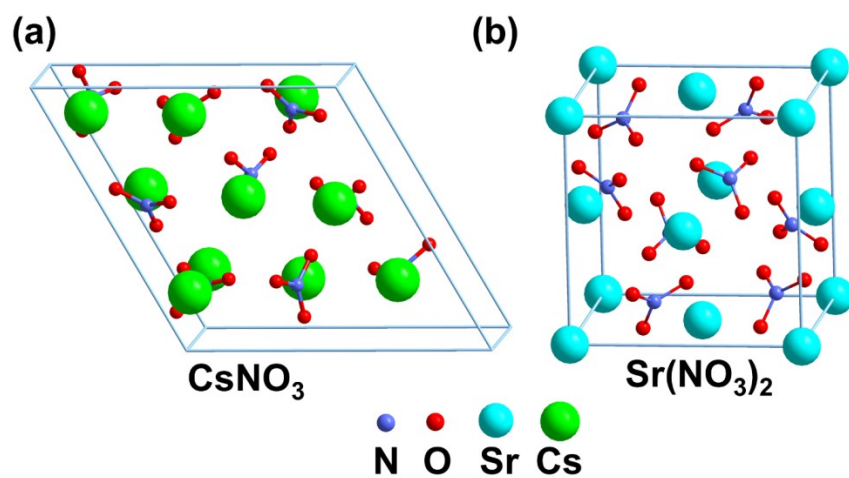
---

**Table S9.** The diffusion energy barrier for  $\text{CsH}_5[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  and  $\text{SrH}_4[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 0-4$ ) along the reaction coordinate, respectively.

<b>Ions</b>	<b>(H<sub>2</sub>O)<sub>0</sub></b>	<b>(H<sub>2</sub>O)<sub>1</sub></b>	<b>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub></b>	<b>(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub></b>	<b>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub></b>
<b>Cs<sup>+</sup></b>	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	0.26	0.27	0.41	0.36	0.40
	1.23	1.26	1.74	1.58	1.71
	2.78	2.84	3.59	3.40	3.65
	4.16	4.20	4.79	4.90	5.17
	4.27	4.41	4.84	5.17	5.26
	4.08	4.22	4.60	4.93	5.05
	3.67	3.81	4.14	4.46	4.64
	3.12	3.26	3.54	3.82	4.08
	2.49	2.62	2.84	3.10	3.46
	1.23	1.35	1.46	1.64	1.78
	0.35	0.43	0.47	0.58	1.08
	0.01	0.05	0.06	0.13	0.94
	0.00	0.04	0.03	0.09	0.98
<b>Sr<sup>2+</sup></b>	0	0	0	0	0
	0.07	0.06	0.07	0.08	0.04

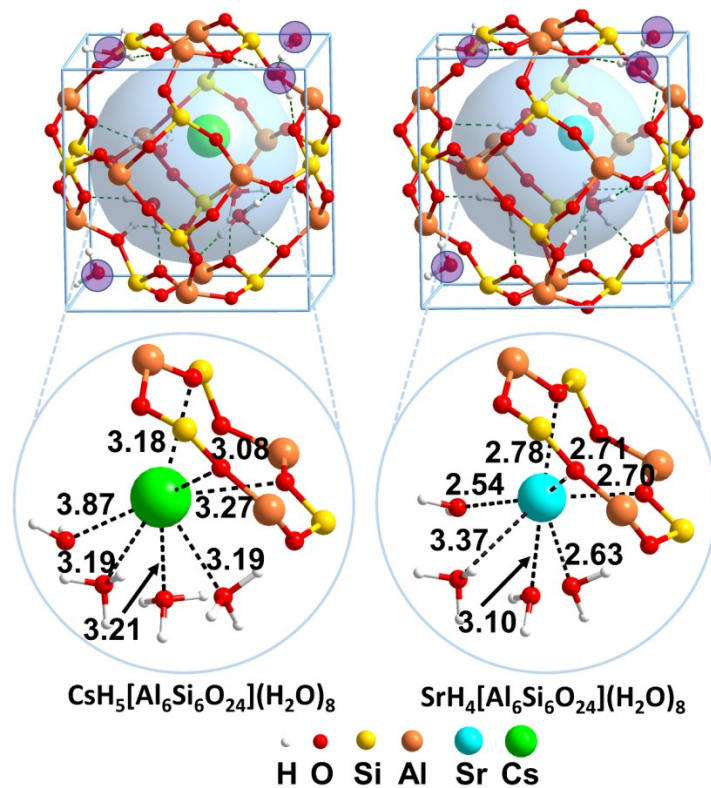
0.25	0.24	0.27	0.29	0.20
0.50	0.50	0.57	0.63	0.24
0.76	0.80	0.94	1.04	0.61
0.99	1.09	1.31	1.43	1.05
1.16	1.33	1.63	1.75	1.48
1.23	1.48	1.83	1.94	1.84
1.24	1.54	1.91	1.98	2.73
1.15	1.52	1.87	1.90	2.70
1.03	1.41	1.74	1.74	2.46
0.89	1.26	1.53	1.54	2.44
0.78	1.12	1.32	1.35	2.16
0.75	1.05	1.16	1.22	1.94

---

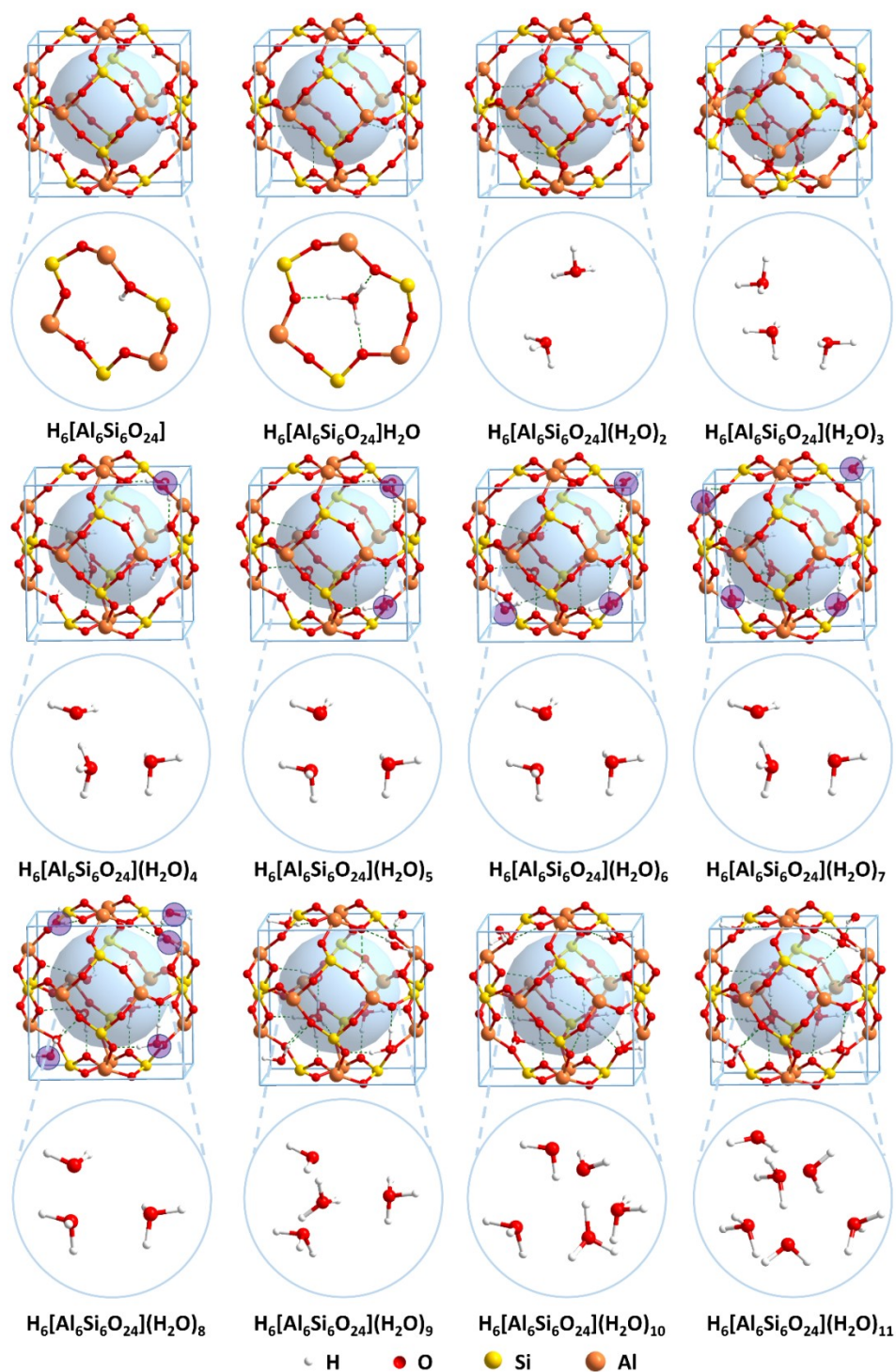


**Figure S1.** The crystalline structures of  $\text{CsNO}_3$  and  $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ .

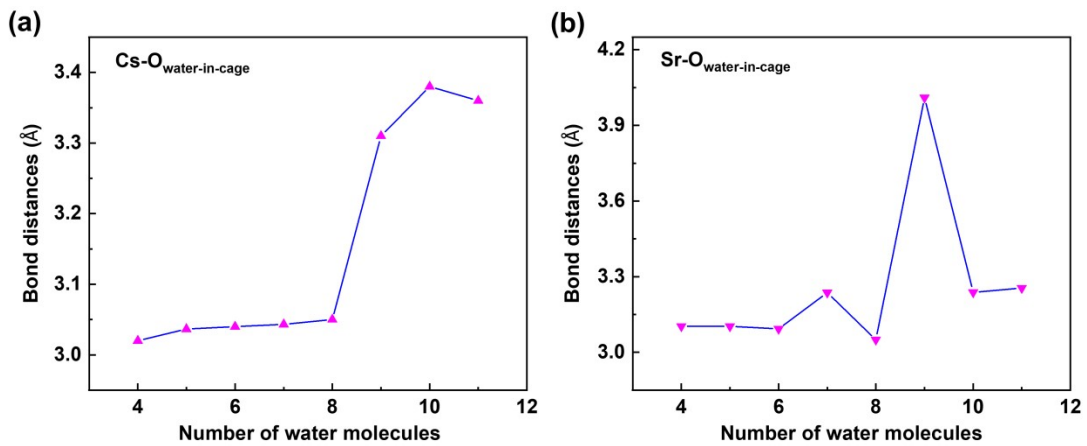




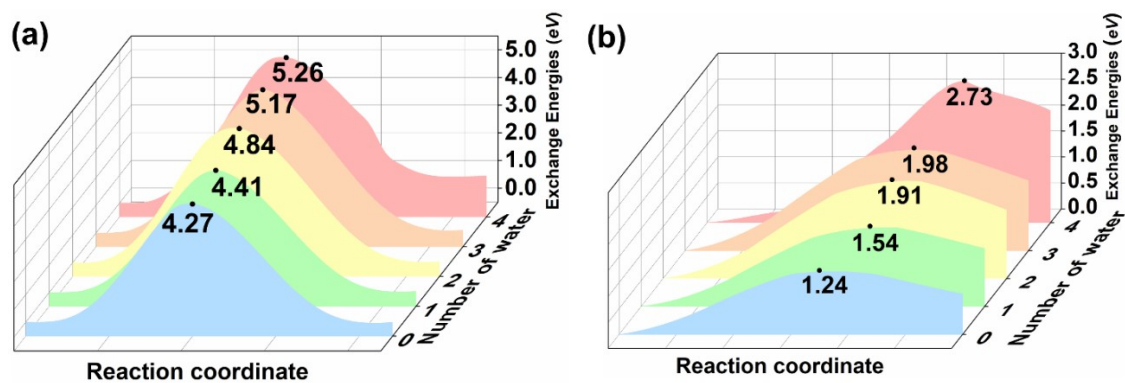
**Figure S2.** The structural details of  $\text{CsH}_5[\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_8$  and  $\text{SrH}_4[\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_8$  with four water molecules in the cage and four molecules out of the cage. Due the visualization, some hydrogen bonds are showed as chemical bonds.



**Figure S3.** Structures for  $\text{H}_6[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n=0-11$ ). The pale blue balls indicate the cage of the sodalite. The  $\text{H}_2\text{O}$  molecules adsorbed outside the cage of sodalite was highlighted in pale purple. Distances are given in Å.



**Figure S4.** Average bond distances of M-O<sub>water-in-cage</sub> vs number of water molecules for (a) CsH<sub>5</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>] and (b) SrH<sub>4</sub>[Al<sub>6</sub>Si<sub>6</sub>O<sub>24</sub>].



**Figure S5** The diffusion Gibbs free energy barrier for  $\text{CsH}_5[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  and (2)  $\text{SrH}_4[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{H}_2\text{O})_n$  ( $n = 0-4$ ). The associated data are listed in **Table S9** in the Supporting Information.