

Supplementary Table 1. Anisotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for the LT-polymorph of alunogen. The anisotropic displacement factor exponent takes the form:  
 $-2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11}+...+2hka^*b^*U_{12}]$

	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
S1	11(1)	20(1)	10(1)	-1(1)	2(1)	-2(1)
S2	11(1)	14(1)	10(1)	0(1)	1(1)	-1(1)
S3	44(1)	17(1)	20(1)	1(1)	16(1)	7(1)
Al1	13(1)	14(1)	8(1)	0(1)	3(1)	-1(1)
Al2	11(1)	13(1)	10(1)	0(1)	3(1)	1(1)
O1	17(1)	26(2)	13(2)	1(1)	2(1)	-1(1)
O2	20(1)	30(2)	14(2)	8(1)	-3(1)	-9(1)
O3	17(1)	36(2)	14(2)	-6(1)	0(1)	4(1)
O4	21(1)	22(2)	20(2)	-8(1)	-6(1)	4(1)
O5	22(1)	16(2)	17(2)	6(1)	-7(1)	-3(1)
O6	13(1)	25(2)	13(2)	1(1)	4(1)	-3(1)
O7	17(1)	21(2)	17(2)	-6(1)	-3(1)	5(1)
O8	11(1)	20(2)	13(1)	-2(1)	3(1)	1(1)
O9	64(2)	46(2)	59(2)	11(2)	44(2)	20(2)
O10	52(2)	20(2)	28(2)	7(1)	-4(1)	-3(2)
O11	34(2)	23(2)	32(2)	-10(1)	9(1)	5(1)
O12	80(2)	11(2)	21(2)	-1(1)	17(2)	2(2)
O13	11(1)	27(2)	16(2)	-3(1)	7(1)	-4(1)
O14	19(1)	16(2)	15(2)	-6(1)	3(1)	5(1)
O15	26(2)	19(2)	20(2)	4(1)	10(1)	5(1)
O16	13(1)	14(1)	12(1)	-2(1)	-1(1)	3(1)
O17	13(1)	15(2)	15(2)	0(1)	0(1)	-1(1)
O18	15(1)	17(2)	18(2)	-6(1)	7(1)	-6(1)
O19	16(1)	14(2)	19(2)	-7(1)	5(1)	1(1)
O20	11(1)	18(2)	11(1)	1(1)	1(1)	-2(1)
O21	13(1)	27(2)	10(2)	-1(1)	2(1)	7(1)
O22	14(1)	15(1)	15(2)	-4(1)	2(1)	1(1)
O23	15(1)	22(2)	12(2)	3(1)	6(1)	4(1)
O24	15(1)	18(2)	12(1)	2(1)	-1(1)	-4(1)
Ow1	28(2)	24(2)	24(2)	-3(1)	0(1)	0(1)
Ow2	33(2)	25(2)	34(2)	-4(1)	10(1)	-3(1)

Ow3	39(2)	51(2)	61(3)	4(2)	5(2)	-21(2)
Ow4	33(2)	62(3)	58(2)	-36(2)	3(2)	12(2)
Ow5	42(4)	57(5)	55(4)	-4(4)	-6(3)	5(3)

---