

DEPOSITED MATERIAL (Part 1)

Fractional atomic co-ordinates and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$ for hydrogen atoms and $\text{\AA}^2 \times 10^4$ for all other atoms) for the studied $M^I M^{III}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ alums (U_{eq} is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor; upper rows - room temperature, lower rows - low temperature data). Note that H21 and H22 in the room temperature structure of T1Al were not refined.

KAl	x/a	y/b	z/c	U_{eq}
K	0.5	0.5	0.5	492(3)
	0.5	0.5	0.5	271(3)
Al	0	0	0	208(3)
	0	0	0	130(3)
S	0.30764(3)	0.30764(3)	0.30764(3)	265(3)
	0.30610(2)	0.30610(2)	0.30610(2)	150(2)
O1	0.15176(8)	0.01980(9)	-0.01855(10)	308(3)
	0.15173(7)	0.02080(7)	-0.01985(8)	191(3)
O2	0.04633(12)	0.13357(10)	0.30258(9)	417(4)
	0.04692(9)	0.13071(8)	0.30399(7)	232(3)
O3	0.23898(16)	0.23898(16)	0.23898(16)	633(12)
	0.23606(11)	0.23606(11)	0.23606(11)	294(6)
O4	0.2648(3)	0.42078(16)	0.30973(15)	479(8)
	0.26302(10)	0.41979(9)	0.30624(9)	240(4)
O3A	0.3749(4)	0.3749(4)	0.3749(4)	820(30)
	0.3746(3)	0.3746(3)	0.3746(3)	226(16)
O4A	0.2853(4)	0.2042(4)	0.3643(5)	501(18)
	0.2808(3)	0.2000(3)	0.3614(3)	185(13)
H11	0.1752(17)	0.0350(18)	-0.0683(19)	44(6)
	0.1750(15)	0.0365(16)	-0.0726(17)	34(5)
H12	0.198(2)	0.025(2)	0.038(2)	61(6)
	0.1982(17)	0.0262(18)	0.034(2)	48(5)
H21	0.104(3)	0.160(2)	0.299(2)	77(9)
	0.104(2)	0.155(2)	0.3000(16)	44(5)
H22	0.008(2)	0.184(2)	0.290(2)	60(7)
	0.0009(18)	0.1821(16)	0.2914(17)	42(5)

Part 1 (continued)

KCr	x/a	y/b	z/c	U_{eq}
K	0.5	0.5	0.5	767(10)
	0.5	0.5	0.5	562(8)
Cr	0	0	0	194(5)
	0	0	0	111(5)
S	0.31011(5)	0.31011(5)	0.31011(5)	267(5)
	0.30918(5)	0.30918(5)	0.30918(5)	150(5)
O1	0.15869(17)	0.01364(17)	-0.0145(2)	310(6)
	0.15926(16)	0.01347(15)	-0.0155(2)	189(5)
O2	0.0470(2)	0.13945(18)	0.30272(16)	430(7)
	0.0473(2)	0.13690(18)	0.30445(16)	255(6)
O3	0.2420(3)	0.2420(3)	0.2420(3)	660(30)
	0.2403(2)	0.2403(2)	0.2403(2)	400(14)
O4	0.2682(5)	0.4227(3)	0.3128(2)	484(15)
	0.2660(2)	0.42175(18)	0.31071(17)	303(9)
O3A	0.3751(10)	0.3751(10)	0.3751(10)	1360(150)
	0.3782(13)	0.3782(13)	0.3782(13)	320(100)
O4A	0.2921(13)	0.2100(15)	0.3690(19)	720(80)
	0.2856(15)	0.2030(13)	0.3612(15)	140(70)
H11	0.178(3)	0.030(2)	-0.056(3)	20(9)
	0.181(3)	0.026(2)	-0.062(3)	12(8)
H12	0.200(3)	0.022(3)	0.040(3)	38(9)
	0.200(3)	0.017(2)	0.042(3)	16(7)
H21	0.105(6)	0.164(5)	0.301(5)	91(18)
	0.087(3)	0.160(3)	0.292(3)	16(10)
H22	0.014(7)	0.193(7)	0.312(6)	120(30)
	0.006(4)	0.178(4)	0.287(4)	46(13)

Part 1 (continued)

TIAI	x/a	y/b	z/c	U_{eq}
TI	0.5	0.5	0.5	519(3)
	0.5	0.5	0.5	314(2)
AI	0	0	0	196(5)
	0	0	0	101(5)
S	0.31138(5)	0.31138(5)	0.31138(5)	259(3)
	0.31104(6)	0.31104(6)	0.31104(6)	135(3)
O1	0.1521(2)	0.01508(19)	-0.0144(2)	284(5)
	0.1526(2)	0.01481(19)	-0.0146(2)	159(5)
O2	0.04606(18)	0.13994(17)	0.29729(16)	405(6)
	0.0469(2)	0.13812(19)	0.29852(19)	220(5)
O3	0.2434(3)	0.2434(3)	0.2434(3)	650(30)
	0.2420(2)	0.2420(2)	0.2420(2)	328(15)
O4	0.2676(4)	0.4232(3)	0.3157(2)	465(13)
	0.2666(2)	0.42301(19)	0.31399(19)	261(8)
O3A	0.3779(14)	0.3779(14)	0.3779(14)	1300(200)
	0.377(3)	0.377(3)	0.377(3)	500(300)
O4A	0.2918(18)	0.2065(19)	0.368(2)	640(100)
	0.282(3)	0.201(2)	0.368(2)	100(100)
H11	0.176(3)	0.028(3)	-0.066(3)	37(11)
	0.174(4)	0.034(4)	-0.068(4)	33(12)
H12	0.192(4)	0.018(3)	0.038(4)	40(11)
	0.194(4)	0.024(3)	0.042(4)	37(12)
H21	0.1140	0.1732	0.293	104(18)
	0.115(4)	0.159(3)	0.296(4)	45(13)
H22	0.004	0.1919	0.2958	120(30)
	0.005(3)	0.183(4)	0.293(4)	41(14)

Part 1 (continued)

TlGa	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	<i>U_{eq}</i>
Tl	0.5	0.5	0.5	513(3)
Ga	0	0	0	199(3)
S	0.31303(5)	0.31303(5)	0.31303(5)	268(3)
O1	0.1579(2)	0.0104(2)	-0.0124(2)	311(6)
O2	0.0468(3)	0.1433(2)	0.2987(2)	422(6)
O3	0.2453(2)	0.2453(2)	0.2453(2)	700(40)
O4	0.2700(5)	0.4249(3)	0.3178(3)	478(15)
O3A	0.3772(15)	0.3772(15)	0.3772(15)	1900(300)
O4A	0.295(2)	0.212(2)	0.372(3)	790(130)
H11	0.177(3)	0.026(3)	-0.056(3)	35(13)
H12	0.193(3)	0.022(3)	0.033(3)	40(12)
H21	0.123(6)	0.168(4)	0.301(5)	109(17)
H22	0.014(3)	0.180(3)	0.289(3)	32(12)

RbGa	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>	<i>U_{eq}</i>
Rb	0.5	0.5	0.5	514(4)
Ga	0	0	0	253(4)
S	0.31299(6)	0.31299(6)	0.31299(6)	305(4)
O1	0.1577(2)	0.0107(2)	-0.0125(2)	349(6)
O2	0.0479(3)	0.1425(2)	0.2988(2)	451(7)
O3	0.2453(2)	0.2453(2)	0.2453(2)	660(30)
O4	0.2701(5)	0.4245(3)	0.3178(3)	507(14)
O3A	0.380(3)	0.380(3)	0.380(3)	1800(500)
O4A	0.292(3)	0.211(3)	0.369(5)	680(180)
H11	0.181(4)	0.029(4)	-0.061(4)	62(15)
H12	0.203(4)	0.025(3)	0.048(4)	59(12)
H21	0.102(6)	0.165(5)	0.299(5)	90(20)
H22	0.013(4)	0.191(5)	0.285(5)	72(17)

DEPOSITED MATERIAL (part 2)

Anisotropic displacement parameters for non-equivalent atoms in $M^I M^{III}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ (for O3A and O4A in $\text{Å}^2 \times 10^3$, for all other atoms in $\text{Å}^2 \times 10^4$). The anisotropic displacement factor takes the form: $\exp[-2\pi^2(h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12} + \dots)]$; upper rows - room temperature, lower rows - low temperature data.

KAl	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
K	492(3)	492(3)	492(3)	104(2)	104(2)	104(2)
	271(3)	271(3)	271(3)	82(2)	82(2)	82(2)
Al	208(3)	208(3)	208(3)	-4(2)	-4(2)	-4(2)
	130(3)	130(3)	130(3)	1(2)	1(2)	1(2)
S	265(3)	265(3)	265(3)	37(1)	34(1)	37(1)
	150(2)	150(2)	150(2)	18(1)	18(1)	18(1)
O1	237(5)	385(6)	303(6)	13(4)	13(4)	-46(4)
	150(4)	231(5)	190(5)	14(3)	7(4)	-21(3)
O2	443(8)	396(7)	413(7)	-52(5)	-50(5)	8(6)
	233(5)	227(5)	235(5)	-11(3)	-22(4)	7(4)
O3	633(12)	633(12)	633(12)	-121(9)	-121(9)	-121(9)
	294(6)	294(6)	294(6)	-38(5)	-38(5)	-38(5)
O4	620(15)	378(11)	440(10)	115(7)	212(9)	213(10)
	299(7)	194(7)	226(6)	44(4)	74(4)	88(5)
O3A	82(3)	82(3)	82(3)	-28(2)	-28(2)	-28(2)
	23(2)	23(2)	23(2)	-7(1)	-7(1)	-7(1)
O4A	48(2)	37(3)	66(4)	27(3)	23(2)	12(2)
	19(2)	16(2)	20(2)	9(2)	4(2)	2(1)

KCr	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
K	767(10)	767(10)	767(10)	88(6)	88(6)	88(6)
	562(8)	562(8)	562(8)	97(6)	97(6)	97(6)
Cr	194(5)	194(5)	194(5)	-7(2)	-7(2)	-7(2)
	111(5)	111(5)	111(5)	-5(2)	-5(2)	-5(2)
S	267(5)	267(5)	267(5)	35(2)	35(2)	35(2)
	150(5)	150(5)	150(5)	26(2)	26(2)	26(2)
O1	223(10)	415(12)	293(12)	19(8)	17(8)	-49(7)
	135(9)	256(10)	177(11)	19(7)	18(8)	-36(7)
O2	456(14)	402(12)	433(12)	-64(8)	-60(9)	19(9)
	247(13)	248(11)	270(11)	-31(7)	-38(9)	1(10)
O3	660(30)	660(30)	660(30)	-151(15)	-151(15)	-151(15)
	400(14)	400(14)	400(14)	-60(10)	-60(10)	-60(10)
O4	670(30)	356(18)	422(17)	106(11)	214(15)	213(19)
	398(16)	238(14)	271(12)	76(8)	118(9)	150(11)
O3A	136(15)	136(15)	136(15)	-57(9)	-57(9)	-57(9)
	32(10)	32(10)	32(10)	-22(7)	-22(7)	-22(7)
O4A	71(8)	49(9)	96(16)	54(10)	48(9)	30(7)
	15(9)	3(9)	23(12)	23(8)	24(8)	10(6)

Part 2 (continued)

TlAl	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Tl	519(3)	519(3)	519(3)	83(1)	83(1)	83(1)
	314(2)	314(2)	314(2)	87(1)	87(1)	87(1)
Al	196(5)	196(5)	196(5)	-2(3)	-2(3)	-2(3)
	101(5)	101(5)	101(5)	-1(4)	-1(4)	-1(4)
S	259(3)	259(3)	259(3)	37(3)	37(3)	37(3)
	135(3)	135(3)	135(3)	25(3)	25(3)	25(3)
O1	226(11)	355(12)	271(12)	21(8)	7(9)	-34(8)
	121(11)	213(12)	142(11)	18(8)	9(9)	-27(9)
O2	457(12)	351(11)	408(12)	-60(9)	-76(10)	25(10)
	235(13)	201(11)	225(11)	-12(9)	-39(9)	33(10)
O3	650(30)	650(30)	650(30)	-166(15)	-166(15)	-166(15)
	328(15)	328(15)	328(15)	-61(11)	-61(11)	-61(11)
O4	640(30)	342(18)	417(15)	103(12)	205(15)	240(18)
	372(16)	198(14)	213(12)	57(10)	112(11)	164(13)
O3A	130(20)	130(20)	130(20)	-52(13)	-52(13)	-52(13)
	50(30)	50(30)	50(30)	-30(20)	-30(20)	-30(20)
O4A	67(13)	44(12)	82(18)	40(13)	52(12)	26(10)
	19(17)	0(16)	10(16)	16(13)	10(13)	8(12)

TlGa	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Tl	513(3)	513(3)	513(3)	57(1)	57(1)	57(1)
Ga	199(3)	199(3)	199(3)	-4(1)	-4(1)	-4(1)
S	268(3)	268(3)	268(3)	37(3)	37(3)	37(3)
O1	235(12)	425(15)	274(14)	17(10)	-1(10)	-55(9)
O2	459(15)	360(12)	448(13)	-47(11)	-89(11)	49(12)
O3	700(40)	700(40)	700(40)	-208(17)	-208(17)	-208(17)
O4	640(30)	355(19)	433(17)	111(14)	229(17)	240(20)
O3A	190(30)	190(30)	190(30)	-86(19)	-86(19)	-86(19)
O4A	80(15)	57(15)	100(20)	62(16)	64(15)	38(12)

RbGa	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Rb	514(4)	514(4)	514(4)	108(2)	108(2)	108(2)
Ga	253(4)	253(4)	253(4)	-4(2)	-4(2)	-4(2)
S	305(4)	305(4)	305(4)	37(3)	37(3)	37(3)
O1	286(12)	445(15)	317(13)	30(10)	8(10)	-35(09)
O2	486(16)	402(14)	465(14)	-41(11)	-53(12)	25(13)
O3	660(30)	660(30)	660(30)	-149(16)	-149(16)	-149(16)
O4	640(30)	422(19)	458(17)	88(14)	185(17)	213(19)
O3A	180(50)	180(50)	180(50)	-70(30)	-70(30)	-70(30)
O4A	57(18)	38(18)	110(40)	40(20)	60(20)	14(14)