

Supplementary Materials: Table Captions

Table S1 Crystal habitus.

Table S2 Fractional coordinates, equivalent atomic displacement parameters and anisotropic atomic

displacement parameters (\AA^2). U^{ij} are defined as $T = \exp\left\{-2\pi^2 \sum_i \sum_j U^{ij} h_i h_j a_i^* a_j^*\right\}$,

$$U_{eq} = \left(\frac{1}{3}\right) \sum_i \sum_j U^{ij} a_i^* a_j^* a_i a_j.$$

Table S3 Final atomic and contraction / dilatation deformation parameters of the multipolar model.

Supplementary Materials: Tables

Table S1

Face indexes	Distance from origin point (mm)
1 1 0	0.10
1 -1 0	0.06
-1 1 0	0.08
-1 -1 0	0.07
0 1 1	0.09
0 1 -1	0.09
0 -1 1	0.09
0 -1 -1	0.07
1 0 1	0.06
1 0 -1	0.07
-1 0 1	0.09
-1 0 -1	0.06

Table S2

Atom	x	y	z	U_{eq} (\AA^2)
P1	0.301122(5)	0.532947(5)	0.151339(5)	0.00286(1)
P2	0.794553(5)	0.808911(5)	0.136246(5)	0.00280(1)
Al1	0.613765(7)	0.537615(6)	0.127745(6)	0.00313(2)
Al2	0.393032(7)	0.229762(6)	0.184785(6)	0.00327(2)
O1	0.45676(2)	0.58656(2)	0.20305(2)	0.00426(3)
O2	0.19288(2)	0.62927(2)	0.19356(2)	0.00485(3)
O3	0.26278(2)	0.52050(2)	-0.01400(2)	0.00426(3)
O4	0.28927(2)	0.38662(2)	0.21529(2)	0.00429(3)
O5	0.95422(2)	0.76935(2)	0.16548(2)	0.00485(3)
O6	0.77919(2)	0.95029(2)	0.20925(2)	0.00437(3)
O7	0.70821(2)	0.69936(2)	0.19652(2)	0.00483(3)
O8	0.73961(2)	0.82479(2)	-0.02469(2)	0.00476(3)
O9	0.49666(2)	0.36443(2)	0.05453(2)	0.00439(3)
O10	0.50018(2)	0.06728(2)	0.14699(2)	0.00683(4)
O11	0.31887(2)	0.85681(2)	0.03809(2)	0.00893(4)
N	0.98742(2)	0.30853(2)	0.10266(2)	0.00779(4)
H1	0.5608(4)	0.2984(7)	0.0206(4)	0.0084(8)
H2	0.4449(5)	-0.0098(5)	0.0992(5)	0.013(1)
H3	0.5961(4)	0.0363(4)	0.1889(4)	0.013(1)
H4	0.2668(4)	0.8587(5)	0.1118(4)	0.015(1)
H5	0.2650(5)	0.9090(5)	-0.0409(4)	0.0145(9)
H6	0.9988(5)	0.2780(5)	0.0066(4)	0.013(1)
H7	0.8975(4)	0.3652(5)	0.0898(4)	0.0144(9)
H8	0.9910(5)	0.2261(5)	0.1671(4)	0.013(1)
H9	1.0756(4)	0.3634(5)	0.1466(4)	0.013 (1)

Table S2 continued

Atom	U ₁₁	U ₂₂	U ₃₃	U ₂₃	U ₁₃	U ₁₂
P1	0.00269(2)	0.00301(2)	0.00288(2)	0.00016(2)	0.00065(2)	-0.00020(2)
P2	0.00267(2)	0.00285(2)	0.00263(2)	0.00001(2)	0.00011(2)	-0.00014(2)
Al1	0.00293(3)	0.00345(3)	0.00288(3)	-0.00014(2)	0.00044(2)	-0.00011(2)
Al2	0.00298(3)	0.00359(3)	0.00296(3)	-0.00008(2)	0.00015(2)	-0.00019(2)
O1	0.00301(6)	0.00517(6)	0.00459(6)	-0.00055(5)	0.00085(5)	-0.00106(5)
O2	0.00466(6)	0.00528(6)	0.00497(6)	0.00185(5)	0.00184(5)	-0.00086(5)
O3	0.00417(6)	0.00584(6)	0.00276(5)	0.00070(5)	0.00078(5)	-0.00048(4)
O4	0.00487(6)	0.00320(5)	0.00516(6)	0.00029(5)	0.00190(5)	0.00068(5)
O5	0.00297(6)	0.00675(6)	0.00437(6)	0.00136(5)	-0.00006(5)	-0.00015(5)
O6	0.00481(6)	0.00359(6)	0.00418(6)	0.00027(4)	-0.00003(5)	-0.00141(4)
O7	0.00580(6)	0.00403(6)	0.00469(6)	-0.00189(5)	0.00129(5)	-0.00013(5)
O8	0.00518(6)	0.00585(6)	0.00250(5)	-0.00055(5)	-0.00058(5)	0.00006(5)
O9	0.00413(6)	0.00453(6)	0.00448(6)	0.00059(5)	0.00098(5)	-0.00044(5)
O10	0.00491(7)	0.00631(6)	0.00889(6)	0.00096(5)	0.00084(5)	-0.00198(5)
O11	0.01051(7)	0.00863(7)	0.00823(7)	-0.00036(5)	0.00336(6)	0.00091(5)
N	0.00693(8)	0.00947(7)	0.00683(7)	0.00044(6)	0.00134(6)	0.00152(6)

Table S3

Multipole parameters.												
	P1	P2	A11	A12	O1	O2	O3	O4	O5	O6	O7	O8
Pv	4.36(5)	4.33(5)	1.47(7)	1.69(5)	6.62(1)	6.63(1)	6.62(1)	6.60(1)	6.64(1)	6.64(1)	6.61(1)	6.62(1)
P ₁₁₊	0.006(8)	-0.010(9)	-0.10(2)	-0.00(2)	-0.02(1)	-0.03(1)	-0.00(1)	-0.02(1)	-0.01(1)	-0.02(1)	-0.01(2)	0.01(1)
P ₁₁₋	0.015(9)	-0.010(9)	0.01(2)	-0.04(1)	0.016(8)	0.011(7)	0.033(8)	0.017(8)	0.029(8)	0.011(7)	0.016(8)	0.043(8)
P ₁₀	-0.008(9)	-0.005(8)	0.02(2)	-0.07(2)	-0.032(7)	0.019(8)	0.001(7)	-0.008(7)	-0.024(8)	-0.007(8)	0.010(7)	-0.005(8)
P ₂₀	0.002(7)	0.006(7)	0.03(2)	-0.06(2)	-0.016(7)	-0.015(8)	-0.026(7)	-0.020(7)	-0.025(8)	-0.012(8)	-0.006(7)	-0.011(8)
P ₂₁₊	0.037(8)	0.011(8)	-0.02(1)	0.01(1)	0.002(8)	-0.008(8)	-0.011(7)	0.008(7)	0.009(8)	-0.006(8)	0.004(8)	0.008(7)
P ₂₁₋	0.015(8)	-0.004(8)	-0.04(1)	-0.02(1)	-0.003(7)	0.009(6)	-0.007(7)	-0.015(6)	-0.001(6)	0.013(6)	-0.011(7)	0.000(7)
P ₂₂₊	-0.017(7)	0.004(7)	-0.02(1)	0.02(1)	-0.017(9)	0.030(8)	-0.022(8)	-0.017(9)	-0.007(8)	-0.002(8)	-0.001(9)	0.026(8)
P ₂₂₋	0.002(8)	-0.017(8)	0.05(1)	0.01(1)	-0.008(8)	-0.030(8)	-0.039(8)	-0.008(8)	-0.024(8)	-0.032(8)	-0.051(8)	-0.027(8)
P ₃₀	0.002(8)	0.008(7)	0.04(1)	-0.05(1)	-0.019(7)	0.000(8)	0.006(8)	-0.004(7)	0.013(8)	-0.016(8)	-0.010(7)	-0.001(8)
P ₃₁₊	0.003(8)	-0.007(8)	0.08(1)	-0.02(1)	-0.009(7)	0.010(8)	-0.001(7)	-0.016(7)	0.001(7)	-0.021(8)	-0.010(7)	0.007(7)
P ₃₁₋	0.003(8)	0.023(8)	-0.02(1)	0.01(1)	-0.012(7)	-0.016(6)	-0.014(7)	-0.049(7)	-0.016(6)	-0.031(6)	-0.005(6)	-0.017(7)
P ₃₂₊	-0.001(8)	-0.010(8)	0.000(9)	-0.017(9)	-0.012(7)	-0.013(8)	-0.010(7)	-0.010(7)	0.001(7)	-0.004(7)	0.000(8)	0.015(7)
P ₃₂₋	0.43(1)	0.44(1)	-0.01(1)	0.02(1)	-0.020(7)	-0.008(7)	0.014(7)	-0.004(7)	0.004(7)	0.007(7)	-0.004(7)	0.003(7)
P ₃₃₊	-0.006(7)	0.000(7)	0.02(1)	-0.04(1)	0.095(8)	0.017(8)	0.073(8)	0.056(8)	0.069(8)	0.080(8)	0.045(8)	0.029(8)
P ₃₃₋	-0.008(8)	0.006(7)	-0.00(1)	0.02(1)	0.011(8)	-0.031(8)	-0.009(8)	-0.013(8)	-0.025(8)	-0.026(8)	0.001(8)	-0.028(8)
P ₄₀	-0.109(8)	-0.122(8)	0.15(1)	0.11(1)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₁₊	-0.004(5)	0.017(5)	-0.030(8)	-0.035(8)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₁₋	0.001(6)	0.003(6)	-0.002(8)	0.020(8)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₂₊	-0.013(7)	-0.007(7)	0.00(1)	0.02(1)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₂₋	-0.011(8)	0.006(8)	-0.01(1)	-0.01(1)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₃₊	-0.001(8)	0.000(8)	-0.045(9)	-0.005(9)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₃₋	0.016(8)	-0.010(8)	-0.002(9)	0.032(9)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₄₊	-0.105(7)	-0.073(7)	-0.10(1)	-0.11(1)	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₄₄₋	0.003(7)	-0.013(7)	-0.00(1)	0.03(1)	/	/	/	/	/	/	/	/

Table S3: continued

Multipole parameters.													
	O9	O10	O11	N	H1	H2	H3	H4	H5	H6	H7	H8	H9
P _v	6.52(2)	6.48(4)	6.41(3)	5.44(2)	0.78(2)	0.67(2)	0.71(2)	0.70(2)	0.71(2)	0.68(1)	0.72(1)	0.68(1)	0.71(1)
P ₁₁₊	-0.21(2)	-0.00(1)	-0.03(1)	-0.02(1)	0.192(7)	0.12(1)	0.156(9)	0.14(1)	0.126(9)	0.088(9)	0.133(9)	0.120(9)	0.110(8)
P ₁₁₋	0.04(2)	-0.04(1)	0.02(1)	-0.00(1)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₁₀	-0.08(2)	0.021(7)	-0.001(7)	0.01(1)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₂₀	0.11(2)	0.024(8)	0.056(8)	-0.012(6)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₂₁₊	0.01(1)	0.011(6)	0.001(7)	-0.04(1)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₂₁₋	-0.06(1)	-0.009(7)	0.027(6)	-0.020(9)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₂₂₊	-0.11(2)	0.006(9)	0.01(1)	0.003(7)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₂₂₋	-0.01(1)	0.054(7)	0.031(7)	-0.007(9)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₀	-0.06(2)	-0.008(6)	-0.061(7)	-0.013(7)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₁₊	-0.16(2)	-0.018(7)	-0.027(7)	0.028(7)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₁₋	-0.13(2)	-0.024(6)	-0.033(6)	-0.046(6)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₂₊	-0.06(2)	0.015(6)	0.001(6)	-0.053(6)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₂₋	0.03(1)	0.021(6)	-0.001(6)	0.272(8)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₃₊	0.17(2)	0.151(8)	0.115(7)	0.024(7)	/	/	/	/	/	/	/	/	/
P ₃₃₋	0.02(1)	0.013(6)	0.024(6)	-0.023(7)	/	/	/	/	/	/	/	/	/

Table S3: end

Contraction / dilatation deformation parameters of the multipolar model.							
Atom type	K	ζ, K' (bohr ⁻¹)			Atom type	K	ζ, K' (bohr ⁻¹)
P	1.000(4)	5.07(5)			N	0.980(5)	3.08(7)
Al	0.99(1)	2.75(8)			H _{OH}	1.00(4)	2.4(2)
O _{P-O-Al}	0.966(1)	3.02(8)			H _{H₂O}	1.00(1)	2.4(2)
O _{OH}	0.968(3)	2.00(5)			H _{NH₄}	1.00(1)	2.4(2)
O _{H₂O}	0.971(3)	3.29(8)					