

Table S1. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2) for $\text{Cs}_5[\text{Sc}_2(\text{IO}_3)_9](\text{IO}_3)_2$.

Atom	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{eq}}^1, \text{\AA}^2$
I1	0.05126(2)	0.19953(4)	0.17631(2)	0.01039(8)
I2	-0.25840(2)	0.52037(4)	0.00814(3)	0.01322(9)
I3	-0.45165(2)	0.26200(4)	-0.35185(3)	0.01352(9)
I4	-0.11550(2)	0.26107(4)	-0.00650(2)	0.01286(9)
I5	-0.29508(2)	0.27463(4)	-0.17225(3)	0.01582(9)
I6	-0.36355(2)	0.79144(4)	0.00693(2)	0.01309(9)
I7	0.15803(2)	0.47752(4)	0.16145(3)	0.01390(9)
I8	0.08250(2)	0.44504(4)	0.34586(2)	0.01182(9)
I9	-0.33246(2)	0.53679(4)	0.19024(3)	0.01494(9)
I10	-0.43912(2)	0.01205(4)	-0.17383(3)	0.01477(9)
I11	-0.28091(3)	0.11527(5)	0.05620(3)	0.03087(13)
Cs1	0.04634(2)	0.09965(5)	0.40967(3)	0.02713(11)
Cs2	0.19836(2)	0.11145(5)	0.08082(3)	0.02584(11)
Cs3	-0.45916(3)	0.37357(6)	-0.07989(3)	0.03748(13)
Cs4	-0.36793(2)	0.61728(5)	-0.25495(4)	0.03553(14)
Cs5	0.12455(3)	-0.15773(6)	0.25676(4)	0.04434(15)
Sc1	0.5000	0.5000	0.5000	0.0108(3)
Sc2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0102(3)
Sc3	0.21296(5)	0.2487(1)	0.32488(7)	0.0102(2)
O1	-0.29124(2)	0.8352(4)	0.0904(3)	0.0186(10)
O2	-0.2797(2)	0.6702(4)	0.2251(3)	0.0170(10)
O3	0.1509(2)	0.3352(5)	0.3782(3)	0.0204(11)
O4	-0.3761(2)	0.6392(4)	0.0372(3)	0.0217(11)
O5	0.1340(2)	0.1635(4)	0.2405(3)	0.0169(10)
O6	0.0115(2)	0.0886(5)	0.2204(3)	0.0209(11)
O7	0.2139(2)	0.3907(4)	0.2447(3)	0.0220(11)
O8	-0.5409(2)	0.2586(5)	-0.3811(3)	0.0264(12)
O9	-0.4208(2)	0.8758(5)	0.0436(3)	0.0250(12)
O10	0.0259(2)	0.3402(5)	0.2800(3)	0.0214(11)
O11	-0.4324(3)	0.1645(5)	-0.2099(3)	0.0304(13)
O12	-0.4021(2)	0.5993(5)	0.2129(3)	0.0282(12)
O13	-0.0789(2)	0.3799(5)	-0.0495(3)	0.0243(12)
O14	-0.2263(2)	0.5819(5)	0.1108(3)	0.0206(10)
O15	0.0551(2)	0.4202(5)	0.4326(3)	0.0255(12)
O16	0.0565(2)	0.1062(4)	0.0929(3)	0.0195(11)
O17	-0.0667(2)	0.2739(6)	0.0964(3)	0.0316(14)
O18	-0.3218(2)	0.3177(5)	-0.2756(3)	0.0297(13)
O19	-0.4417(2)	0.3638(5)	-0.4299(3)	0.0226(11)
O20	-0.1807(2)	0.4720(5)	0.0014(3)	0.0263(12)

O21	-0.2716(2)	0.6632(5)	-0.0468(3)	0.0259(12)
O22	-0.3038(3)	0.4242(5)	-0.1307(3)	0.0316(13)
O23	0.1120(2)	0.3520(5)	0.1041(3)	0.0271(12)
O24	-0.5163(2)	-0.0382(5)	-0.2412(3)	0.0265(12)
O25	-0.4336(2)	0.1193(5)	-0.3909(3)	0.0277(12)
O26	-0.2072(2)	0.2682(5)	-0.1544(3)	0.0282(13)
O27	-0.4688(3)	0.0594(5)	-0.0928(3)	0.0294(12)
O28	-0.0771(2)	0.1303(5)	-0.0384(3)	0.0306(13)
O29	0.1045(3)	0.5314(5)	0.2147(3)	0.0322(14)
O30	-0.2955(3)	0.4457(6)	0.2771(4)	0.054(2)
O31	-0.3160(3)	0.0357(7)	-0.0373(4)	0.056(2)
O32	-0.1952(3)	0.1022(7)	0.0673(5)	0.058(2)
O33	-0.2958(4)	0.2714(7)	0.0266(6)	0.097(4)

${}^1U(eq)$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S2. Selected interatomic distances for $Cs_5[Sc_2(IO_3)_9](IO_3)_2$

Bond		Distance, Å	Bond		Distance, Å	Bond		Distance, Å
I1	O6	1.787(5)	I2	O20	1.784(4)	I3	O25	1.786(5)
I1	O16	1.815(4)	I2	O21	1.803(5)	I3	O8	1.817(4)
I1	O5	1.818(4)	I2	O14	1.842(5)	I3	O19	1.826(5)
Av. I1 – O		1.807	Av. I2 – O		1.810	Av. I3 – O		1.810
I4	O17	1.787(5)	I5	O18	1.786(5)	I6	O4	1.783(5)
I4	O13	1.796(5)	I5	O26	1.808(4)	I6	O9	1.804(4)
I4	O28	1.817(5)	I5	O22	1.815(5)	I6	O1	1.828(4)
Av. I4 – O		1.800	Av. I5 – O		1.803	Av. I6 – O		1.805
I7	O29	1.790(5)	I8	O10	1.795(5)	I9	O30	1.783(6)
I7	O23	1.795(5)	I8	O15	1.817(5)	I9	O12	1.794(5)
I7	O7	1.832(4)	I8	O3	1.836(4)	I9	O2	1.822(4)
Av. I7 – O		1.806	Av. I8 – O		1.816	Av. I9 – O		1.800
I10	O24	1.788(5)	I11	O33	1.773(7)			
I10	O11	1.796(5)	I11	O32	1.789(6)			
I10	O27	1.808(5)	I11	O31	1.799(7)			
Av. I10 – O		1.797	Av. I11 – O		1.787			
Sc1	O27(x2)	2.050(5)	Sc2	O16(x2)	2.053(4)	Sc3	O3	2.075(4)
Sc1	O19(x2)	2.074(5)	Sc2	O15(x2)	2.104(5)	Sc3	O2	2.080(4)
Sc1	O9(x2)	2.113(5)	Sc2	O28(x2)	2.117(5)	Sc3	O5	2.082(4)
						Sc3	O1	2.083(4)
						Sc3	O7	2.095(5)
						Sc3	O14	2.107(5)
Av. Sc1 – O		2.079	Av. Sc2 – O		2.091	Av. Sc3 – O		2.087
Cs1	O13	2.992(4)	Cs2	O21	3.066(5)	Cs3	O12	3.163(5)
Cs1	O20	3.132(5)	Cs2	O16	3.110(4)	Cs3	O24	3.169(5)
Cs1	O6	3.173(5)	Cs2	O30	3.245(6)	Cs3	O25	3.193(5)
Cs1	O23	3.302(5)	Cs2	O31	3.269(6)	Cs3	O11	3.395(6)

Cs1	O13	3.339(5)	Cs2	O23	3.301(6)	Cs3	O27	3.424(6)
Cs1	O29	3.362(5)	Cs2	O15	3.359(5)	Cs3	O25	3.453(5)
Cs1	O10	3.404(5)	Cs2	O2	3.365(5)			
Cs1	O15	3.505(6)	Cs2	O3	3.431(5)			
			Cs2	O32	3.473(8)			
Av. Cs1 – O		3.276	Av. Cs2 – O		3.291	Av. Cs3 – O		3.300
Cs4	O24	2.982(5)	Cs5	O10	3.078(4)			
Cs4	O22	3.028(5)	Cs5	O26	3.132(5)			
Cs4	O2	3.073(5)	Cs5	O17	3.279(5)			
Cs4	O12	3.174(5)	Cs5	O29	3.456(6)			
Cs4	O7	3.245(5)	Cs5	O5	3.514(5)			
Cs4	O9	3.361(5)	Cs5	O6	3.529(5)			
Cs4	O18	3.454(6)						
Av. Cs4 – O		3.188	Av. Cs5 – O		3.331			