

Table 22A-3-001. TlGaSe₂. x, y, z, β_{ij} [78Mul]. $T = \text{RT}$. $\beta_{ij} [\text{\AA}^2]$ is defined by Eq. (c) in Introduction.

	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Tl1	0.4866	0.1897(8)	0.2289	4.1(3)	3.8(3)	3.7(3)	-2.4(3)	0.7(2)	-0.5(3)
Tl2	0.2416(11)	0.0631(7)	0.7382(7)	3.2(3)	3.8(3)	3.5(3)	1.5(2)	-0.3(2)	-0.9(2)
Tl3	0.0602(4)	0.3127(8)	0.0134(3)	4.9(3)	5.4(3)	0.4(1)	-2.6(3)	0.1(2)	-0.1(2)
Tl4	0.3090(11)	0.4405(8)	0.5067(7)	5.1(3)	4.8(3)	0.6(1)	2.5(3)	0.9(2)	0.8(2)
Ga1	0.4249(13)	0.1907(13)	0.9584(10)	0.9(4)	0.2(3)	4.1(6)	-0.1(4)	1.0(4)	0.4(4)
Ga2	0.1729(13)	0.0639(13)	0.4607(11)	0.7(5)	1.5(5)	4.3(7)	-0.9(4)	0.4(4)	-0.8(4)
Ga3	0.3807(13)	0.4362(11)	0.7826(7)	1.9(5)	1.4(4)	0.5(3)	1.8(4)	0.1(3)	0.9(3)
Ga4	0.1288(14)	0.3148(14)	0.2828(7)	2.0(5)	2.5(5)	0.7(3)	-0.4(4)	-0.5(3)	-0.2(3)
Se1	0.2355(14)	0.4346(13)	0.1916(9)	1.4(4)	1.4(4)	1.3(5)	-1.2(3)	-0.3(3)	-0.4(4)
Se2	0.2872(14)	0.1876(15)	0.3782(8)	0.9(4)	1.4(5)	0.7(3)	0.9(4)	0.0(3)	0.5(4)
Se3	0.0272(19)	0.0705(9)	0.8772(11)	1.6(3)	1.3(3)	0.7(3)	-0.3(5)	0.0(2)	-1.2(4)
Se4	0.0278(20)	0.4468(9)	0.3776(11)	1.8(3)	1.4(3)	0.7(3)	0.7(5)	0.4(2)	0.3(4)
Se5	0.4813(12)	0.3111(11)	0.6962(9)	0.7(3)	0.5(3)	4.4(6)	1.5(3)	0.7(3)	-0.1(4)
Se6	0.2697(14)	0.3112(17)	0.8767(8)	1.1(4)	1.7(5)	0.8(3)	-0.8(5)	0.1(3)	0.1(4)
Se7	0.0731(17)	0.1864(18)	0.5592(8)	5.4(7)	5.5(7)	0.6(3)	3.0(6)	0.2(3)	0.3(4)
Se8	0.3261(18)	0.0607(18)	0.0526(10)	3.8(7)	4.3(8)	2.6(5)	-2.5(6)	0.9(5)	0.6(5)