

**Table 21A-1-001.** TIS.  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $U_{\text{eq}}$  in phase III [93Nak].  $T = \text{RT}$ .  $U_{\text{eq}}$  for Tl:  $U_{\text{eq}} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i a_j$ .  $U_{\text{eq}}$  for S: isotropic thermal parameter.  $U_{ij}$  is defined by Eq. (d) in Introduction. The superscripts on the atomic names represent the valences.

Atom	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{eq}} [\text{\AA}]$
Tl(1) <sup>3</sup> -1	0.396(3)	0.809(4)	0.0235(7)	0.09(2)
Tl(1) <sup>3</sup> -2	0.405(2)	0.807(2)	0.2737(3)	0.015(9)
Tl(1) <sup>3</sup> -3	0.404(2)	0.803(4)	0.5255(19)	0.05(1)
Tl(1) <sup>3</sup> -4	0.396(2)	0.809(2)	0.7743(3)	0.016(6)
Tl(2) <sup>3</sup> -1	0.146(2)	0.055(2)	0.0258(4)	0.019(7)
Tl(2) <sup>3</sup> -2	0.156(2)	0.063(3)	0.2748(5)	0.04(1)
Tl(2) <sup>3</sup> -3	0.141(2)	0.056(2)	0.5242(2)	0.016(6)
Tl(2) <sup>3</sup> -4	0.156(2)	0.068(3)	0.7745(5)	0.05(1)
Tl(3) <sup>3</sup> -1	0.777(4)	0.949(6)	0.0309(7)	0.16(3)
Tl(3) <sup>1</sup> -2	0.785(2)	0.940(3)	0.2819(3)	0.04(1)
Tl(3) <sup>1</sup> -3	0.786(2)	0.915(3)	0.5320(5)	0.06(1)
Tl(3) <sup>1</sup> -4	0.791(2)	0.947(3)	0.7817(4)	0.038(9)
Tl(4) <sup>1</sup> -1	0.561(2)	0.208(2)	0.0332(4)	0.032(8)
Tl(4) <sup>1</sup> -2	0.533(3)	0.183(4)	0.2828(5)	0.09(1)
Tl(4) <sup>1</sup> -3	0.517(2)	0.160(2)	0.5344(4)	0.032(8)
Tl(4) <sup>1</sup> -4	0.556(3)	0.207(5)	0.7835(5)	0.14(3)
Tl(5) <sup>1</sup> -1	0.494(3)	0.824(5)	0.0926(5)	0.10(2)
Tl(5) <sup>1</sup> -2	0.468(2)	0.823(2)	0.3410(3)	0.026(7)
Tl(5) <sup>1</sup> -3	0.455(2)	0.791(2)	0.5921(3)	0.021(7)
Tl(5) <sup>1</sup> -4	0.479(2)	0.811(2)	0.8416(3)	0.031(8)
Tl(6) <sup>1</sup> -1	0.251(1)	0.079(3)	0.0922(3)	0.032(7)
Tl(6) <sup>1</sup> -2	0.207(2)	0.052(2)	0.3428(4)	0.024(7)
Tl(6) <sup>1</sup> -3	0.193(2)	0.038(3)	0.5913(3)	0.037(9)
Tl(6) <sup>1</sup> -4	0.228(1)	0.069(2)	0.8429(3)	0.019(6)
Tl(7) <sup>3</sup> -1	0.863(2)	0.933(4)	0.1014(5)	0.05(1)
Tl(7) <sup>3</sup> -2	0.432(2)	0.924(2)	0.3491(3)	0.018(6)
Tl(7) <sup>3</sup> -3	0.864(2)	0.939(3)	0.6009(4)	0.025(8)
Tl(7) <sup>3</sup> -4	0.840(2)	0.931(2)	0.8509(3)	0.012(5)
Tl(8) <sup>3</sup> -1	0.602(2)	0.182(2)	0.1008(5)	0.04(1)
Tl(8) <sup>3</sup> -2	0.604(2)	0.185(3)	0.3508(3)	0.022(8)
Tl(8) <sup>3</sup> -3	0.596(2)	0.183(3)	0.6016(5)	0.04(1)
Tl(8) <sup>3</sup> -4	0.600(2)	0.182(3)	0.8478(3)	0.021(8)

(continued)

Table 21A-1-001 (continued)

Atom	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{eq}} [\text{\AA}]$
S (1)-1	0.0	0.91(1)	0.0	0.01(3)
S (1)-2	0.0	0.91(2)	0.5	0.03(4)
S (1)-3	0.000(7)	0.93(1)	0.250(1)	0.01(2)
S (2)-1	0.0	0.44(2)	0.0	0.04(4)
S (2)-2	0.0	0.44(1)	0.5	0.01(2)
S (2)-3	0.004(7)	0.463(8)	0.248(1)	0.01(2)
S (3)-1	0.273(8)	0.189(8)	0.004(1)	0.01(2)
S (3)-2	0.276(10)	0.20(1)	0.251(2)	0.04(3)
S (3)-3	0.242(6)	0.154(7)	0.491(1)	0.02(1)
S (3)-4	0.262(11)	0.16(1)	0.756(2)	0.05(3)
S (4)-1	0.511(7)	0.649(7)	0.050(1)	0.01(1)
S (4)-2	0.545(9)	0.681(9)	0.300(1)	0.02(2)
S (4)-3	0.591(8)	0.704(8)	0.553(1)	0.02(2)
S (4)-4	0.556(6)	0.692(6)	0.802(1)	0.01(1)
S (5)-1	0.276(7)	0.904(7)	0.052(1)	0.01(1)
S (5)-2	0.331(6)	0.951(7)	0.300(1)	0.01(1)
S (5)-3	0.329(8)	0.986(8)	0.550(1)	0.02(2)
S (5)-4	0.349(9)	0.973(9)	0.801(2)	0.04(2)
S (6)-1	0.710(8)	0.049(8)	0.078(2)	0.02(2)
S (6)-2	0.715(9)	0.077(9)	0.324(2)	0.02(2)
S (6)-3	0.741(9)	0.103(9)	0.578(2)	0.03(2)
S (6)-4	0.695(7)	0.050(7)	0.823(1)	0.01(1)
S (7)-1	0.410(7)	0.266(7)	0.078(1)	0.01(1)
S (7)-2	0.434(7)	0.286(7)	0.327(1)	0.01(1)
S (7)-3	0.475(7)	0.328(7)	0.577(1)	0.01(1)
S (7)-4	0.470(7)	0.342(7)	0.821(1)	0.01(1)
S (8)-1	0.261(9)	0.817(9)	0.124(2)	0.01(2)
S (8)-2	0.264(10)	0.812(10)	0.371(2)	0.03(2)
S (8)-3	0.256(7)	0.799(7)	0.630(1)	0.01(2)
S (8)-4	0.259(7)	0.803(7)	0.872(1)	0.01(1)
S (9)-1	0.460(9)	0.566(9)	0.124(2)	0.04(2)
S (9)-2	0.502(6)	0.573(7)	0.371(1)	0.01(1)
S(10)-1	0.516(11)	0.041(9)	0.125(2)	0.03(2)
S(11)-2	0.525(7)	0.046(7)	0.379(1)	0.01(1)