

Electronic Supplementary Information
**“Thermoelectricity in Transition Metal Compounds:
Role of Spin Disorder”**

Prashun Gorai,^{†,‡} Eric S. Toberer,^{†,‡} and Vladan Stevanović^{*,†,‡}

[†]*Colorado School of Mines, Golden, Colorado 80401, USA*

[‡]*National Renewable Energy Laboratory, Golden, Colorado 80401, USA*

E-mail: vladan.stevanovic@nrel.gov

Predicted Thermoelectric Performance of Transition-Metal Sulfides

Table S1: Material properties used to determine β_{SE} obtained from high-throughput DFT calculations. The parameters include: chemical formula, space group number (SG), Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) identification number, β_{SE} for valence band (p-type) and conduction band (n-type) transport, lattice thermal conductivity (κ_L) in $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, bulk modulus (B) in GPa, valence band (VB) density of states (DOS) effective mass $m_{DOS,VB}^*$ and conduction band (CB) DOS effective mass $m_{DOS,CB}^*$ in the units of m_e , and VB degeneracy $N_{b,VB}$ and CB degeneracy $N_{b,CB}$.

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
AgAlS ₂	122	604698	0.72	3.90	9.2	58	5.55	0.07	2.0	1.0
AgAlS ₂	122	028744	0.71	3.83	9.2	58	5.62	0.07	2.0	1.0
AgAlS ₂	122	604692	0.71	3.88	9.2	58	5.66	0.07	2.0	1.0
AgAlS ₂	156	025356	1.37	4.03	13.6	72	3.61	0.05	3.0	1.0
AgAlS ₂	122	604694	0.70	3.83	9.2	58	5.73	0.07	2.0	1.0
AgBa ₂ InS ₄	14	183654	4.73	5.32	2.8	34	3.65	0.12	4.0	1.0
AgCd ₂ GaS ₄	31	170108	2.41	8.26	6.1	53	1.24	0.03	2.0	1.0
AgCd ₂ GaS ₄	31	090459	2.40	8.03	6.1	53	1.24	0.03	2.0	1.0
AgCrS ₂	160	024797	0.55	1.34	12.0	68	1.41	0.83	1.0	1.5
AgCrS ₂	160	042395	0.56	1.33	12.0	68	1.39	0.84	1.0	1.5
AgCrS ₂	160	604981	0.55	1.32	12.0	68	1.40	0.85	1.0	1.5
AgCrS ₂	160	042396	0.59	1.34	12.0	68	1.25	0.83	1.0	1.5
AgCuS	63	030233	4.14	1.45	2.9	29	0.67	0.76	2.0	1.0
AgCuS	26	066582	4.14	2.53	1.2	17	1.17	0.53	2.0	1.0
AgCuS	26	066581	10.44	2.52	1.3	18	1.25	0.53	4.0	1.0
AgCuS	36	066580	4.17	1.45	2.8	29	0.66	0.76	2.0	1.0
AgFeS ₂	122	056263	16.48	1.84	7.6	54	1.54	7.01	10.0	4.0
AgFe ₂ S ₃	64	068347	1.91	3.01	2.0	25	8.24	7.52	3.0	4.0
AgFe ₂ S ₃	14	165661	0.17	1.11	3.7	39	5.39	3.14	0.5	1.5
AgGaS ₂	122	023698	0.87	5.52	8.0	56	0.94	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605184	0.88	5.53	7.9	56	0.93	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605175	0.86	5.37	8.0	56	0.97	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605182	0.86	5.37	8.0	56	0.97	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605187	0.86	5.49	8.0	56	0.96	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605177	0.86	5.46	7.9	56	0.97	0.04	1.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
AgGaS ₂	122	605179	0.86	5.37	8.0	56	0.97	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	600584	0.86	5.47	8.0	56	0.96	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	028747	0.88	5.38	8.0	56	0.94	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	9	092052	0.87	5.36	8.0	56	0.95	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605186	0.86	5.41	7.9	56	0.96	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	042125	0.86	5.51	8.0	56	0.96	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	156126	0.86	5.47	8.0	56	0.96	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	603823	0.85	5.38	7.9	56	0.99	0.05	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	605191	0.86	5.43	7.9	56	0.97	0.04	1.0	1.0
AgGaS ₂	122	156785	0.86	5.48	8.0	56	0.96	0.04	1.0	1.0
AgGeLa ₃ S ₇	173	605297	4.20	2.08	5.2	52	3.15	2.01	4.0	2.0
AgGeLa ₃ S ₇	173	080174	2.79	2.11	5.2	52	3.20	1.98	3.0	2.0
AgInS ₂	122	605407	0.95	6.53	6.5	48	0.89	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	33	605408	4.39	8.67	5.1	46	1.28	0.03	3.0	1.0
AgInS ₂	122	052577	0.95	6.60	6.5	48	0.89	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	122	156129	0.95	6.50	6.5	48	0.89	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	33	052578	4.49	8.66	5.1	47	1.24	0.03	3.0	1.0
AgInS ₂	122	605418	0.94	6.56	6.5	48	0.90	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	122	605415	0.95	6.50	6.5	48	0.88	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	122	656317	0.95	6.64	6.5	48	0.88	0.03	1.0	1.0
AgInS ₂	122	605413	0.95	6.61	6.5	48	0.88	0.03	1.0	1.0
AgInS ₂	122	051617	0.94	6.58	6.5	48	0.90	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	166	659385	0.96	8.17	9.4	60	3.48	0.25	2.0	3.0
AgInS ₂	33	605420	4.41	8.62	5.1	47	1.28	0.03	3.0	1.0
AgInS ₂	122	600585	0.96	6.61	6.5	48	0.86	0.03	1.0	1.0
AgInS ₂	166	032655	1.73	8.50	9.9	62	3.27	0.23	3.0	3.0
AgInS ₂	122	605417	0.94	6.47	6.5	48	0.90	0.04	1.0	1.0
AgInS ₂	122	028750	0.96	6.63	6.5	48	0.87	0.03	1.0	1.0
AgInS ₂	33	051618	4.42	8.57	5.1	47	1.27	0.03	3.0	1.0
AgK ₂ NbS ₄	70	084292	7.73	1.17	1.3	14	3.30	5.91	6.0	2.0
AgK ₂ S ₄ V	70	066840	8.45	2.76	1.4	15	2.68	6.72	6.0	4.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
AgLa ₃ S ₇ Si	173	409845	2.07	1.50	5.5	53	5.00	3.35	3.0	2.0
AgLa ₃ S ₇ Si	173	605505	2.06	1.49	5.5	53	5.04	3.36	3.0	2.0
AgLa ₃ S ₇ Sn	173	417316	4.30	1.82	4.7	49	3.24	2.69	4.0	2.0
AgNa ₃ S ₂	72	201800	1.02	3.32	3.4	28	4.69	0.13	2.0	1.0
AgNbRb ₂ S ₄	70	050463	10.66	1.25	1.1	13	4.32	6.07	8.0	2.0
AgRb ₂ S ₄ V	70	066841	11.78	2.71	1.2	14	3.46	7.94	8.0	4.0
Ag ₂ BaGeS ₄	121	010040	7.19	4.69	5.2	41	0.45	0.07	3.0	1.0
Ag ₂ BaS ₂	164	050183	3.12	4.69	6.6	47	1.50	0.06	3.0	1.0
Ag ₂ BaS ₄ Sn	23	041898	7.85	4.27	4.2	35	0.43	0.09	3.0	1.0
Ag ₂ CdGeS ₄	31	152753	2.01	7.09	6.9	58	1.60	0.04	2.0	1.0
Ag ₂ CdGeS ₄	33	423404	3.78	9.51	4.1	46	2.35	0.04	3.0	1.0
Ag ₂ FeS ₄ Sn	121	042534	0.96	13.13	6.8	49	0.86	0.03	1.0	1.5
Ag ₂ GeIn ₂ S ₆	9	159759	1.11	6.98	2.4	28	1.49	0.07	1.0	1.0
Ag ₂ GeK ₂ S ₄	15	170843	1.84	5.62	1.7	19	3.04	0.09	2.0	1.0
Ag ₂ GePbS ₄	40	180802	16.22	3.48	2.1	26	1.26	1.27	6.0	2.0
Ag ₂ GeS ₃	36	041711	1.93	5.99	5.3	45	1.77	0.05	2.0	1.0
Ag ₂ HfS ₃	64	079251	2.08	2.67	5.2	60	0.50	1.65	1.0	2.0
Ag ₂ HgS ₂	14	201713	1.44	9.03	3.8	41	0.87	0.04	1.0	1.0
Ag ₂ In ₂ S ₆ Si	9	159758	1.13	6.62	2.6	30	1.35	0.07	1.0	1.0
Ag ₂ S	19	262635	3.99	8.37	5.6	58	0.72	0.21	2.0	2.0
Ag ₂ S	4	098453	26.25	2.66	0.9	13	2.10	0.44	10.0	1.0
Ag ₂ S	4	098454	2.32	5.54	1.3	15	2.20	0.52	2.0	2.0
Ag ₂ S	19	262634	3.91	8.07	5.7	58	0.73	0.22	2.0	2.0
Ag ₂ S ₄ SiZn	7	183705	1.08	6.28	5.9	51	0.94	0.05	1.0	1.0
Ag ₃ AuS ₂	213	015732	7.17	12.96	2.5	44	0.66	0.05	2.0	1.0
Ag ₃ CuS ₂	141	067526	11.42	11.12	1.2	20	1.44	0.06	4.0	1.0
Ag ₃ CuS ₂	141	163982	11.86	11.67	0.9	17	1.44	0.06	4.0	1.0
Ag ₃ CuS ₂	88	163983	6.52	7.71	1.5	24	1.63	0.09	3.0	1.0
Ag ₃ K ₃ Nb ₂ S ₈	15	412478	13.62	4.54	0.9	12	3.70	7.72	8.0	5.0
Ag ₃ NaS ₂	227	073198	2.29	9.17	2.0	28	3.04	0.06	2.0	1.0
Ag ₃ RbS ₂	12	001034	1.12	7.61	2.0	24	1.50	0.06	1.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
Ag ₄ CdGe ₂ S ₇	9	095121	5.12	8.63	3.9	44	2.69	0.04	4.0	1.0
Ag ₄ Ge ₂ HgS ₇	9	095120	5.38	9.43	3.6	43	2.71	0.04	4.0	1.0
Ag ₄ K ₂ S ₃	12	000863	1.97	5.61	2.6	30	0.55	0.10	1.0	1.0
Ag ₄ Rb ₂ S ₃	12	409727	1.91	5.91	2.2	27	0.65	0.10	1.0	1.0
Ag ₅ Ba ₂ LaS ₆	12	067894	0.80	3.88	4.8	46	1.85	0.13	1.0	1.0
Ag ₆ K ₂ S ₄	227	073581	2.40	7.36	1.2	18	2.94	0.09	2.0	1.0
Ag ₇ NbS ₆	7	084317	4.07	11.51	1.8	26	6.46	0.04	4.0	1.0
Ag ₇ NbS ₆	7	084367	5.28	10.99	2.2	31	6.50	0.04	5.0	1.0
Ag ₇ RbS ₄	85	071645	3.19	9.34	1.6	27	2.48	0.08	2.0	1.0
AlCo ₇ Y ₃	173	606649	0.82	0.83	6.5	57	7.82	7.64	2.0	2.0
AlCuS ₂	122	042124	0.61	3.79	13.0	74	1.19	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	165738	0.61	3.88	13.0	74	1.21	0.05	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	607072	0.60	3.85	13.0	74	1.23	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	603538	0.61	3.82	13.0	74	1.20	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	607076	0.61	3.82	13.0	74	1.20	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	028733	0.60	3.85	13.0	74	1.21	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	607081	0.61	3.78	13.0	74	1.19	0.06	1.0	1.0
AlCuS ₂	122	607074	0.61	3.76	13.0	74	1.19	0.06	1.0	1.0
AlFe ₇ Y ₃	173	607623	1.34	0.40	6.4	56	3.41	5.18	2.0	1.0
AlLa ₃ MnS ₇	173	608303	1.51	1.95	5.4	51	8.22	10.47	3.0	4.0
AlMn ₇ Y ₃	173	608513	1.07	1.44	5.8	52	5.08	3.11	2.0	2.0
AlMo ₄ S ₈	216	608603	0.13	0.09	10.7	79	5.08	9.40	0.5	0.5
AlMo ₄ S ₈	216	036561	0.13	0.09	10.7	79	5.12	9.35	0.5	0.5
AlMo ₄ S ₈	216	036562	0.13	0.09	10.7	79	5.09	9.32	0.5	0.5
AlMo ₄ S ₈	160	036564	0.31	0.08	12.4	88	5.34	9.63	1.0	0.5
AlNi ₇ Y ₃	173	608836	1.49	1.22	6.7	59	7.31	10.13	3.0	3.0
Al ₂ FeS ₄	160	607619	1.51	3.93	0.6	6	3.65	1.92	2.0	3.0
Al ₂ MnS ₄	227	608509	1.43	3.37	13.4	80	8.02	0.99	4.0	3.0
AuCrS ₂	160	088852	1.02	0.30	9.2	62	0.67	1.01	1.0	0.5
BaCrS ₂	59	165626	0.83	0.72	7.4	50	0.97	1.23	1.0	1.0
BaCuLaS ₃	62	078174	1.16	1.54	5.9	58	1.01	0.63	1.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
BaCuLaS ₃	62	659175	1.19	1.56	5.9	58	0.98	0.62	1.0	1.0
BaCuS ₃ Sc	63	659165	2.82	1.49	7.5	57	0.78	0.45	2.0	1.0
BaCuS ₃ Y	63	659166	3.72	1.91	6.3	51	1.37	0.32	3.0	1.0
BaCu ₂ GeS ₄	144	010006	2.46	5.85	5.4	53	1.46	0.07	2.0	1.0
BaCu ₂ S ₂	139	203088	0.90	1.54	9.3	62	0.84	0.34	1.0	1.0
BaCu ₂ S ₂	139	615832	0.89	1.56	9.3	62	0.84	0.33	1.0	1.0
BaCu ₂ S ₂	139	615834	0.90	1.57	9.3	62	0.83	0.33	1.0	1.0
BaCu ₂ S ₂	139	615837	0.90	1.55	9.3	62	0.83	0.34	1.0	1.0
BaCu ₂ S ₂	62	089573	1.39	4.13	6.0	61	0.80	0.65	1.0	2.0
BaCu ₂ S ₂	62	066656	1.40	4.14	6.0	61	0.79	0.65	1.0	2.0
BaCu ₂ S ₂	139	089575	0.89	1.58	9.3	62	0.85	0.32	1.0	1.0
BaCu ₂ S ₄ Sn	144	052685	2.55	7.10	4.9	49	1.44	0.05	2.0	1.0
BaCu ₄ S ₃	63	015139	2.19	4.06	5.4	54	0.37	0.13	1.0	1.0
BaCu ₄ S ₃	62	015138	7.13	4.06	2.9	39	0.43	0.22	2.0	1.0
BaFe ₂ S ₃	63	016307	0.94	1.29	3.0	29	7.15	10.75	2.0	3.0
BaFe ₂ S ₄	87	023081	2.48	0.91	2.6	23	6.04	1.27	4.0	1.0
BaKNbS ₄	62	415335	3.06	1.66	1.8	20	1.30	3.62	2.0	2.0
BaK ₄ S ₈ V ₂	72	240378	2.97	1.23	1.7	18	6.40	5.51	4.0	2.0
BaLa ₂ MnS ₅	140	091227	3.69	1.38	6.1	54	3.15	0.64	4.0	1.0
BaLa ₂ MnS ₅	82	090640	5.01	1.38	6.1	54	3.19	0.64	5.0	1.0
BaLa ₂ MnS ₅	140	090639	5.05	1.37	6.1	54	3.15	0.64	5.0	1.0
BaMnS ₂	62	031453	2.12	1.45	4.9	43	1.55	0.58	2.0	1.0
BaMnS ₂	62	615969	2.14	1.45	4.7	41	1.55	0.59	2.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	148	062157	2.17	0.41	5.8	54	0.33	5.28	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	2	065775	2.23	0.43	5.8	54	0.32	4.96	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	2	085490	2.23	0.43	5.8	54	0.32	4.90	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	148	065776	2.18	0.41	5.8	54	0.33	5.30	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	2	615979	2.19	0.41	5.8	54	0.33	5.27	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	148	615980	2.23	0.40	5.8	54	0.32	5.51	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	148	085489	2.18	0.41	5.8	54	0.33	5.30	1.0	1.0
BaMo ₆ S ₈	148	615975	2.18	0.41	5.8	54	0.33	5.29	1.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
BaPdS ₂	63	202009	0.98	1.75	4.5	37	5.17	0.39	2.0	1.0
BaPdS ₂	63	063588	0.98	1.75	4.5	37	5.17	0.39	2.0	1.0
BaPd ₂ S ₄	11	079930	3.20	1.35	4.5	43	4.61	0.77	4.0	1.0
BaPt ₂ S ₃	92	201146	1.30	3.18	5.4	62	1.09	3.20	1.0	3.0
BaS ₃ V	194	008194	4.21	0.98	6.0	46	3.45	12.01	5.0	3.0
BaS ₃ V	36	616099	4.58	1.05	5.3	42	3.18	11.26	5.0	3.0
BaS ₃ V	8	154184	2.43	0.17	2.4	26	3.10	6.32	2.5	0.5
BaS ₃ V	194	008193	4.19	0.97	6.0	46	3.48	12.09	5.0	3.0
BaS ₃ V	8	154183	1.70	2.64	4.3	42	2.72	11.15	2.0	5.0
BaS ₃ V	194	015537	4.17	0.98	6.0	46	3.52	11.96	5.0	3.0
BaS ₃ V	194	616098	4.17	0.98	6.0	46	3.51	12.02	5.0	3.0
BaS ₃ V	36	052692	4.41	1.03	5.3	42	3.40	11.65	5.0	3.0
BaS ₃ V	194	023194	4.19	0.98	6.0	46	3.49	11.96	5.0	3.0
BaS ₃ V	36	063229	4.40	1.03	5.4	43	3.37	11.61	5.0	3.0
BaS ₃ V	194	062711	4.17	0.98	6.0	46	3.51	12.02	5.0	3.0
BaS ₃ V	36	154182	2.42	0.41	1.1	13	0.41	1.58	1.0	0.5
Ba ₂ CoS ₃	62	160294	0.64	1.36	4.3	43	2.91	4.15	1.0	2.0
Ba ₂ Cu ₃ S ₆ V	15	083969	10.17	1.18	2.7	31	3.49	6.79	7.0	2.0
Ba ₂ MnS ₃	62	026231	1.19	2.33	4.1	41	5.14	0.33	2.0	1.0
Ba ₃ FeS ₅	62	000280	2.35	2.40	3.3	38	5.37	5.15	3.0	3.0
Ba ₆ Fe ₈ S ₁₅	87	016309	0.41	1.06	3.3	37	7.31	7.48	1.0	2.0
CaMo ₆ S ₈	2	619422	2.81	1.23	2.4	28	0.32	3.26	1.0	1.5
CaMo ₆ S ₈	148	062388	2.54	1.13	3.3	36	0.33	3.26	1.0	1.5
CaMo ₆ S ₈	148	619421	2.30	1.08	4.3	43	0.35	3.16	1.0	1.5
CdCr ₂ S ₄	227	657592	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619688	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619693	0.77	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619692	0.77	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619689	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	042021	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619695	0.76	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
CdCr ₂ S ₄	227	619686	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	039415	0.77	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	657591	0.77	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	657590	0.77	0.28	10.9	77	3.04	1.27	1.5	0.5
CdCr ₂ S ₄	227	619697	0.76	0.28	10.9	77	3.05	1.27	1.5	0.5
CdCu ₂ GeS ₄	31	026150	2.62	7.46	7.5	63	1.02	0.04	2.0	1.0
CdCu ₂ S ₄ Si	31	016924	0.83	5.54	8.2	66	1.27	0.05	1.0	1.0
CdCu ₂ S ₄ Si	31	002780	0.83	5.65	8.2	66	1.27	0.05	1.0	1.0
CdCu ₂ S ₄ Sn	121	619774	2.73	7.02	8.6	60	1.81	0.03	3.0	1.0
CdCu ₂ S ₄ Sn	121	619773	2.73	7.11	8.6	60	1.80	0.03	3.0	1.0
CdMo ₆ S ₈	148	620169	3.02	1.45	5.1	50	1.05	0.71	2.0	1.0
CoCr ₂ S ₄	227	043039	1.53	0.10	11.4	79	0.93	6.95	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	622503	1.53	0.10	11.3	78	0.94	6.86	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	622504	1.53	0.10	11.3	78	0.93	7.05	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	169878	1.53	0.10	11.3	78	0.93	7.00	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	603918	1.52	0.10	11.3	78	0.94	6.96	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	622497	1.52	0.10	11.3	78	0.94	6.88	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	622501	1.53	0.10	11.3	78	0.93	6.91	1.5	0.5
CoCr ₂ S ₄	227	052942	1.52	0.10	11.3	78	0.94	6.89	1.5	0.5
CoCu ₂ GeS ₄	121	099293	2.27	0.32	10.8	70	0.85	0.86	2.0	0.5
CoCu ₂ S ₄ Si	121	622576	3.33	0.11	12.0	74	1.05	4.42	3.0	0.5
CoCu ₂ S ₄ Si	121	099292	3.30	0.11	12.0	74	1.06	4.51	3.0	0.5
CoCu ₂ S ₄ Sn	121	099294	1.53	1.41	9.5	64	0.89	1.03	1.5	1.5
CoCu ₂ S ₄ Sn	121	622578	1.52	1.42	9.6	65	0.90	1.02	1.5	1.5
CoGa ₂ S ₄	82	052961	1.09	0.08	6.2	42	1.61	9.17	1.5	0.5
CoK ₂ S ₂	72	623958	2.05	0.77	3.4	25	6.32	16.47	4.0	3.0
CoK ₆ S ₄	186	068603	2.14	1.41	2.6	22	12.87	0.60	5.0	1.0
CoMo ₂ S ₄	9	002018	0.95	1.34	7.1	74	1.58	4.51	1.0	2.0
CoMo ₂ S ₄	9	624227	0.57	0.62	15.8	127	2.42	2.07	1.0	1.0
CoMo ₂ S ₄	9	094752	1.13	1.53	7.4	77	1.17	3.54	1.0	2.0
CoNa ₂ S ₂	72	067386	7.65	0.79	4.5	33	3.44	15.38	8.0	3.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
CoNa ₆ S ₄	186	037012	1.57	0.27	3.7	31	11.91	9.11	4.0	1.0
CoRb ₂ S ₂	72	067388	1.62	0.59	2.5	22	12.41	13.40	4.0	2.0
CoRh ₂ S ₄	227	174043	0.36	4.11	504.5	1164	3.19	1.88	2.0	9.0
Co ₂ Ge ₃ S ₃	146	404663	5.00	2.77	11.8	112	0.08	5.75	1.0	4.0
Co ₂ Ge ₃ S ₃	146	655009	5.04	2.77	11.8	112	0.08	5.75	1.0	4.0
Co ₂ Na ₅ S ₅	107	201439	2.15	0.15	17.5	87	5.02	1.89	5.0	0.5
Co ₃ Rb ₂ S ₄	72	624797	6.12	1.31	2.7	28	2.97	4.58	5.0	2.0
Co ₃ S ₄	227	056125	1.14	1.89	12.8	94	8.49	3.66	3.0	3.0
Co ₃ S ₄	227	624840	1.13	1.88	12.8	94	8.58	3.70	3.0	3.0
Co ₈ NiS ₈	225	624466	3.87	2.83	2.5	29	2.33	1.53	3.0	2.0
Co ₉ S ₈	225	657415	2.39	0.19	4.2	42	2.72	4.34	2.5	0.5
Co ₉ S ₈	225	660368	2.38	0.20	4.2	42	2.75	4.03	2.5	0.5
Co ₉ S ₈	225	600664	2.39	0.19	4.2	42	2.72	4.17	2.5	0.5
Co ₉ S ₈	225	624834	3.00	0.20	4.2	42	2.86	4.01	3.0	0.5
Co ₉ S ₈	225	031753	1.15	0.21	4.2	42	2.82	3.80	1.5	0.5
Co ₉ S ₈	225	023929	2.96	0.20	4.2	42	2.91	3.97	3.0	0.5
Co ₉ S ₈	225	040046	3.03	0.20	4.2	42	2.81	4.07	3.0	0.5
CrKS ₂	166	042406	0.35	1.10	10.7	53	2.36	0.91	1.0	1.5
CrKS ₂	166	042407	0.36	1.11	10.8	53	2.22	0.89	1.0	1.5
CrKS ₂	166	025723	0.36	1.10	10.7	53	2.27	0.90	1.0	1.5
CrLaS ₃	62	051123	1.93	10.53	9.6	79	0.33	0.83	1.0	5.0
CrMo ₂ S ₄	9	094748	3.81	1.84	10.9	103	5.62	0.44	5.0	1.0
CrMo ₂ S ₄	9	626322	1.18	1.45	6.6	68	1.09	0.78	1.0	1.0
CrNaS ₂	166	042390	0.34	1.12	11.2	56	2.58	0.91	1.0	1.5
CrNaS ₂	166	660322	0.34	1.12	11.1	56	2.64	0.91	1.0	1.5
CrNaS ₂	166	025722	0.34	1.14	11.2	56	2.58	0.88	1.0	1.5
CrNaS ₂	166	015558	0.35	1.30	11.2	56	2.45	0.71	1.0	1.5
CrNaS ₂	166	626368	0.34	1.11	11.1	56	2.61	0.93	1.0	1.5
CrNaS ₂	166	042389	0.34	1.09	11.1	56	2.62	0.95	1.0	1.5
CrS	194	626593	3.47	3.18	7.9	48	1.87	3.66	4.0	5.0
CrS	194	049666	2.47	3.28	7.9	48	1.69	3.49	3.0	5.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
CrS	194	626613	3.92	3.43	7.8	48	1.55	3.26	4.0	5.0
CrS	194	626595	3.34	3.28	7.9	48	1.46	3.45	3.5	5.0
CrS	15	016723	3.13	3.04	8.0	48	2.18	3.85	4.0	5.0
Cr ₂ FeS ₄	227	625937	0.25	0.32	11.5	89	9.27	5.87	1.0	1.0
Cr ₂ FeS ₄	227	043268	0.25	0.33	11.5	89	9.24	5.78	1.0	1.0
Cr ₂ FeS ₄	227	625938	0.59	0.91	14.8	105	1.87	11.69	1.0	3.0
Cr ₂ FeS ₄	227	658964	2.66	0.41	11.9	80	2.54	0.61	3.5	0.5
Cr ₂ FeS ₄	227	095399	0.24	0.32	11.5	89	9.28	5.94	1.0	1.0
Cr ₂ FeS ₄	227	603366	0.59	1.37	14.7	105	1.85	11.60	1.0	4.0
Cr ₂ FeS ₄	227	625944	0.33	0.51	13.9	100	5.10	12.15	1.0	2.0
Cr ₂ FeS ₄	227	625936	0.33	0.51	13.8	100	5.13	12.17	1.0	2.0
Cr ₂ HgS ₄	227	626165	0.98	76.32	9.4	75	2.44	0.02	1.5	4.5
Cr ₂ HgS ₄	227	626162	0.98	76.37	9.4	75	2.44	0.02	1.5	4.5
Cr ₂ HgS ₄	227	053129	0.98	76.16	9.4	75	2.44	0.02	1.5	4.5
Cr ₂ MnS ₄	12	626279	4.93	0.53	10.3	63	0.77	1.70	3.5	1.0
Cr ₂ NiS ₄	12	016884	0.47	0.24	12.6	76	0.41	1.25	0.5	0.5
Cr ₂ S ₃	148	626604	1.65	0.37	9.3	63	0.79	0.72	1.5	0.5
Cr ₂ S ₃	148	016721	3.45	1.37	8.9	61	1.20	1.10	3.0	1.5
Cr ₂ S ₄ Zn	74	164167	0.70	47.87	12.4	83	3.24	0.07	1.5	6.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626674	0.70	47.60	12.4	83	3.25	0.07	1.5	6.0
Cr ₂ S ₄ Zn	141	164168	0.71	11.24	12.3	83	3.22	0.06	1.5	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	164169	2.24	0.52	15.9	103	4.38	9.85	4.0	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	166481	2.27	0.52	16.1	104	4.23	9.90	4.0	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	042019	0.70	47.56	12.4	83	3.24	0.07	1.5	6.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626675	2.25	0.53	15.2	100	4.44	9.89	4.0	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	601922	1.66	2.41	15.8	103	18.63	33.06	6.0	10.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	085198	2.19	0.51	16.8	107	4.42	9.90	4.0	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626671	1.66	2.41	15.8	103	18.64	33.05	6.0	10.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626672	2.26	0.52	15.7	103	4.32	9.86	4.0	2.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626670	1.66	2.43	15.7	102	18.69	32.67	6.0	10.0
Cr ₂ S ₄ Zn	227	053209	1.70	2.45	15.3	102	18.71	33.45	6.0	10.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
Cr ₂ S ₄ Zn	227	626666	1.66	2.41	15.9	103	18.60	32.84	6.0	10.0
Cr ₃ RbS ₅	12	073143	1.56	2.29	5.4	47	4.39	3.53	2.5	3.0
Cr ₃ S ₄	12	081886	4.71	5.11	7.2	49	1.01	0.88	3.5	3.5
Cr ₄ CuFeS ₈	216	053108	1.84	0.81	14.5	94	0.61	2.40	1.5	1.5
Cr ₅ KS ₈	12	002568	1.02	0.56	6.4	50	2.23	2.37	1.5	1.0
Cr ₅ RbS ₈	12	002567	0.57	0.54	6.5	51	2.36	2.51	1.0	1.0
CuFeS ₂	122	002518	8.52	2.56	11.1	70	1.17	5.67	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	261882	8.73	2.57	11.0	70	1.12	5.63	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	627340	8.51	2.55	11.0	70	1.17	5.70	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	030289	8.78	2.57	11.1	70	1.11	5.63	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	080095	8.77	2.57	11.1	70	1.11	5.63	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	261883	8.67	2.54	11.0	70	1.14	5.76	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	094554	8.50	2.56	11.0	70	1.18	5.67	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	080094	8.67	2.54	11.0	70	1.14	5.76	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	060166	8.58	2.55	11.1	70	1.16	5.72	6.0	5.0
CuFeS ₂	122	627337	8.53	2.56	11.1	70	1.17	5.69	6.0	5.0
CuFe ₂ S ₃	62	067531	0.60	0.68	6.3	58	2.74	5.74	1.0	1.5
CuFe ₂ S ₃	62	067530	6.47	1.23	6.3	58	2.23	4.18	5.0	2.0
CuFe ₂ S ₃	62	014255	6.53	1.24	6.3	58	2.19	4.10	5.0	2.0
CuFe ₂ S ₃	62	161169	0.60	0.68	6.3	58	2.72	5.73	1.0	1.5
CuFe ₂ S ₃	62	067529	0.60	0.68	6.3	58	2.71	5.70	1.0	1.5
CuFe ₂ S ₃	62	653995	3.20	1.25	6.3	58	2.19	4.08	3.0	2.0
CuFe ₂ S ₃	62	016909	0.60	0.68	6.3	58	2.70	5.62	1.0	1.5
CuFe ₂ S ₃	62	042104	6.51	1.25	6.3	58	2.20	4.07	5.0	2.0
CuFe ₂ S ₃	62	029095	6.52	1.25	6.3	58	2.20	4.08	5.0	2.0
CuFe ₂ S ₃	62	159383	6.53	1.25	6.3	58	2.19	4.08	5.0	2.0
CuGaS ₂	122	028736	0.89	5.29	11.0	71	0.78	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627486	0.88	5.29	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	066864	0.88	5.35	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	600510	0.89	5.37	11.0	71	0.79	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627483	0.89	5.29	11.0	71	0.78	0.04	1.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
CuGaS ₂	122	042126	0.89	5.36	11.0	71	0.79	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	156786	0.87	5.25	11.0	71	0.82	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	657346	0.88	5.31	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	600238	0.89	5.29	11.0	71	0.78	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	600604	0.88	5.27	11.0	71	0.81	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627481	0.89	5.27	11.0	71	0.78	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627475	0.88	5.29	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627484	0.88	5.23	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	180351	0.88	5.21	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGaS ₂	122	627478	0.88	5.29	11.0	71	0.80	0.04	1.0	1.0
CuGeLa ₃ S ₇	173	627711	2.78	2.21	6.0	57	2.94	1.68	3.0	2.0
CuGeLa ₃ S ₇	173	095025	2.77	2.24	6.0	57	2.95	1.64	3.0	2.0
CuGeS ₇ Y ₃	173	154626	3.06	2.94	6.0	56	2.42	1.00	3.0	2.0
CuHfKS ₃	63	409293	1.21	1.31	3.4	34	0.97	0.85	1.0	1.0
CuInS ₂	122	656271	2.62	7.40	9.1	62	1.87	0.03	3.0	1.0
CuInS ₂	122	028739	2.54	7.52	9.1	62	1.96	0.02	3.0	1.0
CuInS ₂	122	600239	2.70	7.32	9.1	62	1.78	0.03	3.0	1.0
CuInS ₂	122	628059	2.67	7.33	9.1	62	1.81	0.03	3.0	1.0
CuInS ₂	122	628063	2.66	7.51	9.1	62	1.82	0.02	3.0	1.0
CuInS ₂	122	628051	2.70	7.52	9.1	62	1.78	0.02	3.0	1.0
CuInS ₂	122	066865	2.64	7.28	9.1	62	1.84	0.03	3.0	1.0
CuInS ₂	122	042127	2.59	7.42	9.1	62	1.89	0.03	3.0	1.0
CuKS	33	049008	3.29	1.81	1.9	17	9.67	0.40	6.0	1.0
CuKS ₃ Zr	63	080624	1.10	2.17	3.8	33	0.92	1.49	1.0	2.0
CuKS ₄ Y ₂	63	097557	0.95	3.45	6.3	50	1.00	0.59	1.0	2.0
CuK ₂ NbS ₄	70	402422	12.96	1.37	1.5	16	6.37	4.11	12.0	2.0
CuLa ₂ S ₄	14	412900	0.71	1.61	5.3	56	2.63	8.67	1.0	3.0
CuLa ₃ S ₇ Si	173	628244	2.16	1.60	6.5	59	4.23	2.73	3.0	2.0
CuLa ₃ S ₇ Sn	173	628248	3.17	1.97	4.7	48	2.70	2.31	3.0	2.0
CuNa ₃ Ti	62	073886	2.41	2.67	4.4	42	1.48	3.23	2.0	3.0
CuNa ₃ Zr	63	073887	1.03	3.05	4.8	40	0.97	0.80	1.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
CuNbRb ₂ S ₄	70	084304	14.89	2.64	1.3	14	7.10	4.14	13.0	3.0
CuRb ₂ S ₄ V	70	084302	8.32	3.35	1.5	16	5.68	5.12	8.0	4.0
CuS ₂ Sc	156	015298	2.66	1.68	15.7	75	1.97	2.17	4.0	3.0
CuS ₂ Y	62	092458	2.43	5.06	8.4	65	1.02	1.51	2.0	4.0
CuS ₂ Y	19	152553	2.84	5.82	5.1	46	1.00	1.53	2.0	4.0
CuS ₂ Y	19	628960	2.81	5.89	5.0	45	1.03	1.52	2.0	4.0
CuS ₂ Y	19	628966	2.84	5.94	4.8	44	1.03	1.52	2.0	4.0
CuS ₇ SiY ₃	173	152792	2.44	2.65	7.5	65	3.09	1.04	3.0	2.0
CuS ₇ SiY ₃	173	628864	2.42	2.63	7.6	65	3.13	1.05	3.0	2.0
CuS ₇ SnY ₃	173	152554	3.23	2.74	5.8	55	2.26	1.15	3.0	2.0
CuS ₇ SnY ₃	173	628890	3.24	2.73	5.8	55	2.26	1.16	3.0	2.0
Cu ₂ FeGeS ₄	121	627306	1.55	0.36	10.6	68	0.81	0.72	1.5	0.5
Cu ₂ FeS ₄ Sn	81	181166	1.43	3.59	9.5	63	0.98	0.08	1.5	1.0
Cu ₂ FeS ₄ Sn	121	627358	1.50	9.19	9.2	62	0.92	0.04	1.5	1.5
Cu ₂ GeHgS ₄	121	094988	3.18	7.65	8.6	64	1.55	0.03	3.0	1.0
Cu ₂ GeHgS ₄	121	627691	3.09	7.72	8.6	63	1.62	0.03	3.0	1.0
Cu ₂ GeHgS ₄	31	152762	2.57	9.84	6.7	62	1.23	0.03	2.0	1.0
Cu ₂ GeMnS ₄	31	042490	2.25	3.31	8.1	64	1.20	0.13	2.0	1.0
Cu ₂ GeMnS ₄	31	415453	3.05	2.41	7.4	62	3.98	3.01	4.0	3.0
Cu ₂ GeS ₃	9	085138	0.78	5.23	8.9	67	1.27	0.05	1.0	1.0
Cu ₂ GeS ₄ Sr	145	010005	2.65	12.63	5.7	54	1.22	0.23	2.0	3.0
Cu ₂ GeS ₄ Zn	121	627794	1.86	4.92	10.7	69	1.18	0.05	2.0	1.0
Cu ₂ GeS ₄ Zn	121	627804	1.84	5.01	10.8	70	1.19	0.04	2.0	1.0
Cu ₂ GeS ₄ Zn	121	152752	1.83	4.91	10.7	70	1.21	0.05	2.0	1.0
Cu ₂ GeS ₄ Zn	121	061693	1.85	4.97	10.7	69	1.19	0.05	2.0	1.0
Cu ₂ HgS ₄ Sn	121	627930	3.01	9.60	7.8	59	1.76	0.02	3.0	1.0
Cu ₂ HgS ₄ Sn	121	627929	3.02	9.56	7.8	59	1.75	0.02	3.0	1.0
Cu ₂ In ₂ S ₆ Si	9	157375	2.39	6.38	3.6	38	1.73	0.07	2.0	1.0
Cu ₂ KS ₄ V	40	402424	6.74	1.48	1.7	18	2.64	9.98	5.0	3.0
Cu ₂ KS ₄ V	40	402924	6.81	1.48	1.7	18	2.59	10.03	5.0	3.0
Cu ₂ La ₆ S ₁₄ Si ₂	173	023519	2.18	1.60	6.5	59	4.17	2.72	3.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
Cu ₂ MnS ₄ Si	31	415452	0.69	0.39	8.9	67	1.54	4.08	1.0	1.0
Cu ₂ MnS ₄ Sn	121	628379	1.62	3.27	9.2	61	0.79	0.10	1.5	1.0
Cu ₂ NaNbS ₄	40	084301	4.88	5.08	0.1	2	4.87	2.71	5.0	4.0
Cu ₂ Na ₂ S ₄ Zr	12	079536	0.82	1.43	6.2	47	1.17	0.46	1.0	1.0
Cu ₂ PbS ₄ Si	154	152763	1.75	4.73	4.4	48	0.62	3.01	1.0	4.0
Cu ₂ Pt ₄ S ₈	13	074894	9.63	6.06	5.3	67	0.61	0.10	3.0	1.0
Cu ₂ RbS ₄ V	40	280516	10.27	1.58	1.6	18	3.10	9.68	7.0	3.0
Cu ₂ Rb ₂ S ₄ Ti	132	280644	4.07	1.20	2.8	28	5.78	1.04	5.0	1.0
Cu ₂ Rb ₂ S ₆ Sn ₂	15	074021	4.16	5.52	3.0	37	4.45	0.11	4.0	1.0
Cu ₂ S	194	020560	12.35	8.24	2.4	27	1.61	0.24	6.0	2.0
Cu ₂ S	96	016550	2.61	7.25	9.5	82	5.39	0.04	4.0	1.0
Cu ₂ S	194	166578	9.51	3.11	2.5	27	1.62	0.24	5.0	1.0
Cu ₂ S ₃ Si	36	070057	2.20	2.65	10.1	71	1.02	1.92	2.0	3.0
Cu ₂ S ₃ Si	143	024132	3.07	4.28	7.5	57	3.38	0.08	4.0	1.0
Cu ₂ S ₃ Si	9	088235	0.44	3.35	9.8	69	3.02	0.10	1.0	1.0
Cu ₂ S ₃ Sn	9	091762	3.63	7.81	7.5	59	1.41	0.03	3.0	1.0
Cu ₂ S ₄ SiZn	31	261367	0.88	4.90	9.4	71	1.07	0.06	1.0	1.0
Cu ₂ S ₄ SnSr	154	043131	2.53	7.01	5.1	50	1.39	0.05	2.0	1.0
Cu ₂ S ₄ SnZn	82	262388	3.49	5.85	9.5	64	1.14	0.04	3.0	1.0
Cu ₂ S ₄ SnZn	121	184478	1.82	6.08	9.6	65	1.30	0.03	2.0	1.0
Cu ₃ KS ₂	12	100001	0.81	5.75	4.2	40	1.76	0.07	1.0	1.0
Cu ₃ NbS ₄	215	108392	9.90	2.58	3.9	33	2.03	2.65	7.0	3.0
Cu ₃ NbS ₄	215	170784	18.43	2.59	3.9	32	2.07	2.62	11.0	3.0
Cu ₃ NbS ₄	215	183994	10.11	2.59	3.9	32	1.97	2.64	7.0	3.0
Cu ₃ NbS ₄	215	628466	9.93	2.59	3.9	32	2.03	2.64	7.0	3.0
Cu ₃ NbS ₄	215	628472	9.95	2.59	3.9	33	2.01	2.62	7.0	3.0
Cu ₃ RbS ₂	12	409646	1.87	5.96	4.2	41	2.31	0.07	2.0	1.0
Cu ₃ S ₄ V	215	628947	10.03	0.94	4.6	36	1.83	5.09	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	001414	10.09	0.93	4.5	36	1.83	5.25	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	015490	10.27	0.95	4.4	35	1.80	5.09	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	628945	10.21	0.93	4.6	36	1.78	5.24	7.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
Cu ₃ S ₄ V	215	628955	10.06	0.94	4.6	36	1.82	5.12	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	036169	10.21	0.93	4.6	36	1.78	5.23	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	183993	10.25	0.93	4.5	36	1.78	5.21	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	628957	10.09	0.94	4.6	36	1.81	5.11	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	036298	10.04	0.94	4.6	36	1.84	5.09	7.0	2.0
Cu ₃ S ₄ V	215	402891	10.22	0.92	4.6	36	1.78	5.25	7.0	2.0
Cu ₄ Na ₂ S ₃	12	100829	1.73	5.69	4.5	46	0.56	0.08	1.0	1.0
Cu ₄ S ₄ Sn	62	604567	4.21	12.46	4.9	57	0.81	0.03	2.0	1.0
Cu ₄ S ₄ Sn	62	628881	4.24	12.58	4.8	57	0.80	0.03	2.0	1.0
Cu ₄ S ₄ Sn	62	000833	4.22	12.30	4.9	57	0.81	0.03	2.0	1.0
Cu ₄ S ₄ Ti	121	082558	7.68	1.12	8.6	63	4.50	3.33	9.0	2.0
Cu ₆ GeS ₈ W	186	156238	6.48	4.73	4.6	53	3.19	0.13	5.0	1.0
Cu ₈ GeS ₆	31	089452	2.09	9.92	2.1	30	0.74	0.05	1.0	1.0
Cu ₈ GeS ₆	31	280133	2.09	9.91	2.1	31	0.73	0.05	1.0	1.0
Cu ₈ S ₆ Si	31	024374	1.27	8.41	5.9	66	1.10	0.05	1.0	1.0
Cu ₈ S ₆ Si	31	628854	1.33	8.70	4.9	57	1.11	0.05	1.0	1.0
FeGa ₂ S ₄	164	602041	2.53	5.81	0.3	3	11.26	0.11	4.0	1.0
FeGa ₂ S ₄	164	100706	1.73	3.48	0.2	3	3.97	0.05	2.0	0.5
FeKS ₂	15	068383	3.21	0.30	1.9	16	1.85	7.48	3.0	1.0
FeLa ₃ MnS ₇	173	035581	1.54	1.07	5.0	50	8.39	5.98	3.0	2.0
FeMo ₂ S ₄	9	002019	1.08	0.18	5.8	63	3.44	5.47	1.5	0.5
FeMo ₃ S ₄	2	014069	3.99	0.79	4.4	47	3.76	2.21	4.0	1.0
FeNa ₆ S ₄	186	072303	0.79	2.71	3.7	31	7.39	0.19	2.0	1.0
FeRbS ₂	15	633208	3.66	0.32	1.6	15	1.75	7.98	3.0	1.0
FeS	186	053528	1.01	7.64	15.3	80	2.28	2.62	2.0	9.0
FeS	62	035008	3.00	1.54	12.8	82	1.34	1.59	3.0	2.0
FeS	62	087499	6.90	1.93	12.8	82	0.66	2.82	4.0	3.0
FeS	194	053526	1.01	7.57	15.3	80	2.27	2.66	2.0	9.0
FeS	62	633259	3.21	1.91	12.8	82	0.47	2.85	2.0	3.0
FeS ₂	205	043716	2.32	2.82	9.2	66	0.19	1.80	1.0	3.0
FeS ₂	1	010422	2.29	1.69	9.2	66	0.20	1.63	1.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
FeS ₂	205	053529	2.21	2.15	9.2	66	0.21	1.10	1.0	2.0
FeS ₂	29	041401	1.89	2.95	9.2	66	0.27	1.67	1.0	3.0
FeS ₂	205	041995	2.33	1.50	9.2	66	0.19	1.02	1.0	1.5
FeS ₂	205	052372	2.27	1.32	9.2	66	0.20	1.27	1.0	1.5
FeS ₂	205	053935	0.92	0.95	9.2	66	0.18	0.85	0.5	1.0
FeS ₂	205	000316	1.91	4.31	9.2	66	0.26	1.74	1.0	4.0
FeS ₂	205	015012	2.29	1.39	9.2	66	0.20	1.16	1.0	1.5
FeS ₂	205	633270	0.68	0.12	9.6	68	0.29	5.24	0.5	0.5
FeS ₂	205	109377	0.68	0.13	9.6	68	0.29	4.71	0.5	0.5
FeS ₂	205	633287	1.88	2.96	9.2	66	0.27	1.66	1.0	3.0
FeS ₂	205	633254	0.68	0.12	9.6	68	0.29	4.95	0.5	0.5
FeS ₂	205	633289	1.91	2.88	9.2	66	0.26	1.74	1.0	3.0
FeS ₄ Sc ₂	227	100527	1.12	1.72	11.5	71	4.18	1.22	2.5	2.0
Fe ₂ Ga ₂ S ₅	166	032551	0.97	6.82	0.5	6	2.16	0.08	1.0	1.0
Fe ₂ GeS ₄	62	023526	9.69	1.77	9.6	87	4.45	2.26	9.0	2.0
Fe ₂ KS ₃	63	099507	5.17	0.43	1.3	13	3.83	5.55	5.0	1.0
Fe ₂ Na ₃ S ₄	62	100357	1.41	1.67	2.0	22	4.64	8.97	2.0	3.0
Fe ₂ RbS ₃	63	099505	6.72	0.46	1.1	12	4.36	5.82	6.0	1.0
Fe ₂ RbS ₃	63	099506	6.69	0.46	1.1	12	4.39	5.81	6.0	1.0
Fe ₂ Rb ₃ S ₄	62	079225	1.86	1.42	1.7	20	8.78	5.32	3.0	2.0
Fe ₂ S ₄ Si	62	000332	0.58	0.42	7.0	61	0.54	0.91	0.5	0.5
Fe ₂ S ₄ Si	62	088517	0.59	0.42	7.0	61	0.51	0.91	0.5	0.5
GaMo ₄ S ₈	216	041935	0.57	0.09	10.1	78	5.73	9.48	1.5	0.5
GaMo ₄ S ₈	216	158198	0.57	0.09	10.1	78	5.73	9.52	1.5	0.5
GaMo ₄ S ₈	160	033995	0.30	0.09	11.5	85	5.95	9.30	1.0	0.5
GaMo ₄ S ₈	216	049566	0.57	0.09	10.1	78	5.71	9.64	1.5	0.5
GaMo ₄ S ₈	216	033994	0.86	0.09	9.8	76	5.72	9.55	2.0	0.5
GaMo ₄ S ₈	216	634707	0.86	0.09	10.1	78	5.71	9.63	2.0	0.5
GaMo ₄ S ₈	160	158201	0.30	0.09	11.5	85	5.96	9.54	1.0	0.5
GaMo ₄ S ₈	160	106732	0.30	0.09	11.5	85	5.97	9.49	1.0	0.5
GaMo ₄ S ₈ Si	216	053580	2.34	2.71	2.4	26	1.86	1.46	2.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
GaNb ₄ S ₈	216	170657	3.46	1.77	9.5	70	2.63	2.68	4.0	2.5
Ga ₂ MnS ₄	82	152909	1.08	1.41	5.6	38	1.64	0.40	1.5	1.0
Ga ₂ NiS ₄	164	059230	1.41	29.80	0.4	5	5.77	0.38	2.0	5.5
GePtS	29	637646	34.19	8.04	15.1	129	0.49	0.16	9.0	2.0
IrS ₂	62	080568	4.55	11.17	12.4	125	2.80	3.15	4.0	8.0
IrS ₂	62	640950	4.57	11.25	12.4	125	2.77	3.12	4.0	8.0
KMo ₃ S ₃	176	030752	3.02	1.32	1.8	21	1.43	1.13	2.0	1.0
KMo ₃ S ₃	176	603631	3.02	1.32	1.8	21	1.43	1.13	2.0	1.0
KMo ₃ S ₃	176	641249	3.02	1.32	1.8	21	1.43	1.14	2.0	1.0
KNbS ₂	194	026286	1.50	4.64	12.1	72	0.29	2.88	1.0	6.0
K ₂ MnS ₂	72	065453	3.55	2.54	3.5	25	8.79	0.16	7.0	1.0
K ₂ MoS ₄	62	409563	3.59	1.36	1.1	12	2.61	1.01	3.0	1.0
K ₂ MoS ₄	62	641254	3.69	1.34	1.1	12	2.49	1.03	3.0	1.0
K ₂ Ni ₃ S ₄	70	081731	13.62	1.51	1.7	19	4.50	4.13	10.0	2.0
K ₂ Ni ₃ S ₄	70	641275	13.62	1.52	1.7	19	4.50	4.08	10.0	2.0
K ₂ PdS ₂	71	641296	4.43	3.03	4.8	31	7.18	2.69	8.0	4.0
K ₂ Pd ₃ S ₄	70	041885	8.29	1.77	1.8	21	6.80	3.50	8.0	2.0
K ₂ PtS ₂	71	026258	3.52	3.79	4.3	33	6.77	2.32	6.0	4.0
K ₂ Pt ₄ S ₆	166	040062	1.31	8.10	2.3	27	5.97	0.74	2.0	3.0
K ₃ NbS ₄	62	073326	0.74	0.72	1.4	15	2.56	2.67	1.0	1.0
K ₃ S ₄ V	62	081413	0.74	1.58	1.6	17	2.33	3.34	1.0	2.0
K ₃ S ₄ V	62	641342	0.73	1.58	1.6	17	2.41	3.36	1.0	2.0
K ₃ S ₄ V	62	074678	0.74	1.58	1.6	17	2.33	3.35	1.0	2.0
K ₆ MnS ₄	186	065448	2.63	2.73	2.6	22	8.91	0.20	5.0	1.0
LaMo ₆ S ₈	148	641457	1.42	6.00	8.4	73	1.53	0.27	1.5	2.0
MnNa ₆ S ₄	186	642996	1.22	4.04	3.6	30	9.14	0.10	3.0	1.0
MnNa ₆ S ₄	186	095067	1.21	3.97	3.6	30	9.26	0.10	3.0	1.0
MnNa ₆ S ₄	186	095065	1.22	4.03	3.6	30	9.15	0.10	3.0	1.0
MnNa ₆ S ₄	186	065447	1.22	4.02	3.6	30	9.12	0.10	3.0	1.0
MnNa ₆ S ₄	186	095066	1.22	3.99	3.6	30	9.15	0.10	3.0	1.0
MnNb ₃ S ₆	182	643019	3.76	2.06	11.0	92	1.43	1.52	3.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
MnRb ₂ S ₂	72	065454	3.72	3.20	2.6	22	10.84	0.15	7.0	1.0
MnS	225	643438	0.31	1.30	22.0	83	1.87	0.45	1.0	1.5
MnS	225	076204	0.32	1.30	21.9	83	1.84	0.45	1.0	1.5
MnS	225	643445	0.30	1.28	22.0	83	1.96	0.46	1.0	1.5
MnS	225	041331	0.30	1.28	22.0	83	1.96	0.46	1.0	1.5
MnS	186	643455	0.81	1.82	11.9	56	2.77	6.09	2.0	5.0
MnS	225	643436	0.31	1.31	21.9	83	1.89	0.44	1.0	1.5
MnS	225	603118	0.30	1.29	22.0	83	1.99	0.46	1.0	1.5
MnS	225	643444	0.30	1.29	22.0	83	2.00	0.46	1.0	1.5
MnS	225	158648	0.31	1.28	22.0	83	1.94	0.46	1.0	1.5
MnS	216	643454	0.75	0.66	15.8	58	1.06	2.60	1.5	2.0
MnS	225	158647	0.31	1.30	21.9	83	1.89	0.44	1.0	1.5
MnS	225	643451	0.30	1.28	22.0	83	1.99	0.46	1.0	1.5
MnS	216	076205	0.76	0.66	15.8	58	1.04	2.60	1.5	2.0
MnS	225	643443	0.30	1.29	22.0	83	2.01	0.46	1.0	1.5
MnS	225	643437	0.30	1.28	22.0	83	1.97	0.46	1.0	1.5
MnS	225	158650	0.29	1.29	22.0	83	2.09	0.45	1.0	1.5
MnS ₂	58	643441	1.34	6.09	10.3	58	0.32	0.65	1.0	4.0
MnS ₂	205	015991	1.75	2.98	8.7	60	0.29	3.02	1.0	4.0
MnS ₄ Sc ₂	227	643459	2.04	1.21	11.4	69	2.32	0.43	3.0	1.0
MnS ₄ Sc ₂	227	100832	2.05	1.20	11.4	69	2.32	0.43	3.0	1.0
MnS ₄ Sc ₂	227	074406	2.04	1.21	11.4	69	2.33	0.43	3.0	1.0
MnS ₄ Sc ₂	227	037424	2.05	1.20	11.4	69	2.32	0.43	3.0	1.0
MnS ₄ Sc ₂	227	094992	2.05	1.20	11.4	69	2.32	0.43	3.0	1.0
Mn ₂ Na ₂ S ₃	15	036209	0.47	3.24	3.7	34	4.22	0.17	1.0	1.0
Mn ₂ S ₄ Si	62	065710	0.62	0.83	9.2	81	12.18	7.54	2.0	2.0
Mn ₂ S ₄ Si	62	024141	1.24	0.48	9.4	82	9.88	3.76	3.0	1.0
Mn ₂ S ₄ Sn	65	023265	2.22	2.02	7.6	52	0.94	0.22	2.0	1.0
Mn ₂ S ₄ Sn	65	078760	3.93	1.97	7.6	52	0.93	0.23	3.0	1.0
Mn ₃ Rb ₂ S ₄	72	643392	2.14	2.39	2.4	24	4.99	1.62	3.0	2.0
MoRb ₂ S ₄	62	280054	3.38	1.36	0.9	11	3.41	1.20	3.0	1.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
MoRb ₂ S ₄	62	644177	3.40	1.36	0.9	11	3.38	1.20	3.0	1.0
Mo ₂ S ₃	11	076371	7.27	3.19	4.2	39	2.89	2.26	6.0	3.0
Mo ₂ S ₃	11	062486	7.28	3.16	4.2	39	2.89	2.31	6.0	3.0
Mo ₂ S ₃	11	073453	7.29	3.21	4.2	39	2.88	2.24	6.0	3.0
Mo ₂ S ₃	11	602115	7.27	3.17	4.2	39	2.90	2.29	6.0	3.0
Mo ₂ S ₃	11	644252	7.26	3.20	4.2	39	2.90	2.25	6.0	3.0
Mo ₂ S ₄ V	9	644314	1.54	0.53	6.7	69	8.97	4.08	3.0	1.0
Mo ₂ S ₄ V	12	201787	0.32	1.08	7.7	56	5.37	0.69	1.0	1.0
Mo ₃ RbS ₃	176	603622	3.12	1.31	1.6	20	1.43	1.21	2.0	1.0
Mo ₃ RbS ₃	176	644175	3.13	1.32	1.7	20	1.42	1.19	2.0	1.0
Mo ₃ RbS ₃	176	030753	3.12	1.31	1.7	20	1.42	1.20	2.0	1.0
Mo ₆ S ₈ Sr	148	644293	1.82	1.84	6.4	59	2.16	5.45	2.0	3.0
Mo ₆ S ₈ Sr	148	062156	1.86	1.78	6.4	59	2.09	5.75	2.0	3.0
Mo ₆ S ₈ Sr	2	065941	2.28	0.33	6.1	56	0.30	7.62	1.0	1.0
Mo ₆ S ₈ Sr	148	644292	2.28	0.33	6.1	56	0.30	7.61	1.0	1.0
Mo ₆ S ₈ Sr	148	644296	1.84	1.82	6.4	59	2.12	5.54	2.0	3.0
Mo ₆ S ₈ Sr	148	065940	1.83	1.82	6.4	59	2.14	5.58	2.0	3.0
Mo ₆ S ₈ Y	148	644317	3.07	1.07	9.0	76	1.34	0.18	2.5	0.5
NaNbS ₂	194	026285	1.06	1.23	11.9	73	0.55	2.18	1.0	2.0
NaS ₂ V	166	076541	0.31	0.38	11.0	54	7.45	5.44	1.5	1.5
NaS ₂ V	160	644994	0.46	0.20	11.4	55	7.60	1.18	2.0	0.5
NaS ₂ V	164	644993	0.67	0.15	11.2	55	6.87	2.01	2.5	0.5
Na ₂ PdS ₂	36	076533	4.33	5.14	4.6	37	2.06	1.55	4.0	4.0
Na ₂ PtS ₂	36	087219	9.05	6.80	4.0	38	2.92	1.27	7.0	4.0
NbRb ₃ S ₄	62	051114	1.63	0.86	1.1	14	4.33	2.50	2.0	1.0
NbRb ₃ S ₄	62	059382	1.63	0.86	1.1	14	4.32	2.50	2.0	1.0
NbS ₃	2	645323	5.85	2.81	0.2	2	2.63	1.77	4.0	2.0
NbS ₃	2	002380	4.40	2.87	0.2	3	7.72	1.86	5.0	2.0
Nb ₃ S ₆ Ti	182	645331	5.18	2.17	10.1	83	0.06	0.68	1.0	1.5
NiS	186	042493	1.83	10.66	17.8	97	0.91	3.17	2.0	12.0
NiS	194	042492	1.83	10.67	17.8	97	0.91	3.16	2.0	12.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
NiS ₈ V ₄	12	035141	2.70	0.12	20.3	116	1.32	3.66	3.0	0.5
PdS	84	061063	4.59	2.79	12.9	107	3.35	0.18	5.0	1.0
PdS	84	648749	4.56	2.75	12.9	107	3.39	0.18	5.0	1.0
PdS	84	026766	4.56	2.77	12.9	107	3.39	0.18	5.0	1.0
Pd ₃ Rb ₂ S ₄	12	041886	7.82	2.05	1.5	17	4.90	2.45	7.0	2.0
Pd ₃ Rb ₂ S ₄	70	648723	12.88	1.87	1.3	17	6.48	3.78	10.0	2.0
PtRb ₂ S ₂	71	026259	4.09	3.81	3.8	31	3.91	2.61	5.0	4.0
PtS	131	031131	5.28	0.92	18.9	118	2.52	0.72	6.0	1.0
PtS	131	649541	5.29	0.91	18.9	118	2.52	0.72	6.0	1.0
PtS	131	649537	5.29	0.91	19.0	118	2.51	0.72	6.0	1.0
PtS	131	654379	5.29	0.92	18.9	118	2.52	0.71	6.0	1.0
Pt ₃ Rb ₂ S ₄	69	026267	23.44	2.62	1.2	16	1.07	2.21	7.0	2.0
RbS ₈ V ₅	12	602319	0.57	0.74	5.8	47	2.42	7.78	1.0	2.0
Rb ₂ S ₄ W	62	281586	3.59	1.51	0.8	11	3.63	1.18	3.0	1.0
Rb ₂ S ₄ W	62	650041	5.57	1.44	0.8	11	3.41	1.28	4.0	1.0
Rb ₃ S ₄ V	62	409565	1.41	1.91	1.3	15	5.24	3.14	2.0	2.0
Rh ₂ S ₃	60	015344	1.58	2.95	17.6	140	0.43	1.98	1.0	3.0
RuS ₂	205	657507	6.96	2.41	24.0	155	8.49	0.15	12.0	1.0
RuS ₂	205	041996	6.94	2.37	24.0	155	8.54	0.16	12.0	1.0
RuS ₂	205	024186	7.00	2.36	24.0	155	8.42	0.16	12.0	1.0
RuS ₂	205	650579	6.95	2.35	24.0	155	8.52	0.16	12.0	1.0
RuS ₂	205	604472	7.04	2.35	24.0	155	8.34	0.16	12.0	1.0
RuS ₂	205	068472	6.95	2.37	24.0	155	8.52	0.16	12.0	1.0
RuS ₂	205	650581	6.96	2.41	24.0	155	8.49	0.15	12.0	1.0
RuS ₂	205	650577	6.92	2.37	24.0	155	8.58	0.15	12.0	1.0
RuS ₂	205	600680	6.96	2.41	24.0	155	8.49	0.15	12.0	1.0
RuS ₂	205	056019	7.03	2.41	24.0	155	8.36	0.15	12.0	1.0
RuS ₂	205	052374	7.01	2.40	24.0	155	8.40	0.15	12.0	1.0
SV	62	651366	5.58	0.95	14.2	85	2.14	0.62	6.0	1.0
SV	194	083867	0.92	1.50	18.6	87	5.72	0.99	3.0	2.0
SV	194	033613	0.92	1.50	18.6	87	5.72	0.99	3.0	2.0

Compound	SG	ICSD	$\beta_{SE}(p)$	$\beta_{SE}(n)$	κ_L	B	$m_{DOS,VB}^*$	$m_{DOS,CB}^*$	$N_{b,VB}$	$N_{b,CB}$
SV	194	601915	0.92	1.50	18.6	87	5.72	0.99	3.0	2.0
SV	62	052212	5.62	0.96	14.2	85	2.11	0.61	6.0	1.0
SV	62	651373	5.59	0.95	14.2	85	2.14	0.63	6.0	1.0
SV	62	024564	5.63	0.96	14.2	85	2.11	0.61	6.0	1.0
SV	62	041778	3.16	0.95	14.2	85	2.15	0.62	4.0	1.0
SV	194	651358	0.92	1.50	18.6	87	5.72	0.99	3.0	2.0
SV	62	602567	5.57	0.95	14.2	85	2.15	0.62	6.0	1.0
SV	194	052211	0.92	1.50	18.6	87	5.72	0.99	3.0	2.0
SV ₃	121	026515	0.30	0.87	8.7	75	7.99	6.82	1.0	2.0
SV ₃	121	651364	0.79	0.87	8.7	75	7.96	6.80	2.0	2.0
S ₄ V ₃	176	072921	0.95	1.14	6.8	51	4.68	3.47	2.0	2.0
S ₄ V ₅	87	024563	0.63	0.17	7.5	54	1.66	2.97	1.0	0.5
S ₄ V ₅	87	041777	0.64	0.17	7.5	54	1.65	2.98	1.0	0.5
S ₈ V ₅	12	651379	2.48	1.13	7.7	57	1.54	0.13	2.5	0.5
S ₈ V ₅	12	073002	1.94	0.93	7.7	57	2.33	0.19	2.5	0.5