

# Supporting Information: Sulfide Perovskites for Solar Energy Conversion Applications: Computational Screening and Synthesis of the Selected Compound $\text{LaYS}_3$

Korina Kuhar<sup>\*,†</sup>, Andrea Crovetto<sup>\*,‡</sup>, Mohnish Pandey<sup>†</sup>, Kristian S. Thygesen<sup>†,¶</sup>,  
Brian Seger<sup>‡</sup>, Peter K. Vesborg<sup>‡</sup>, Ole Hansen<sup>§,‡</sup>, Ib Chorkendorff<sup>‡</sup> and Karsten  
W. Jacobsen<sup>\*,†</sup>

<sup>†</sup>*CAMD, Department of Physics, Technical University of Denmark, DK - 2800 Kongens  
Lyngby, Denmark*

<sup>‡</sup>*SurfCat, Department of Physics, Technical University of Denmark, DK - 2800 Kongens  
Lyngby, Denmark*

<sup>¶</sup>*Center for Nanostructured Graphene (CNG), Department of Physics, Technical  
University of Denmark, DK - 2800 Kongens Lyngby, Denmark*

<sup>§</sup>*Department of Micro- and Nanotechnology, Technical University of Denmark, DK - 2800  
Kongens Lyngby, Denmark*

E-mail: kwj@fysik.dtu.dk

# Lowest-energy prototype:

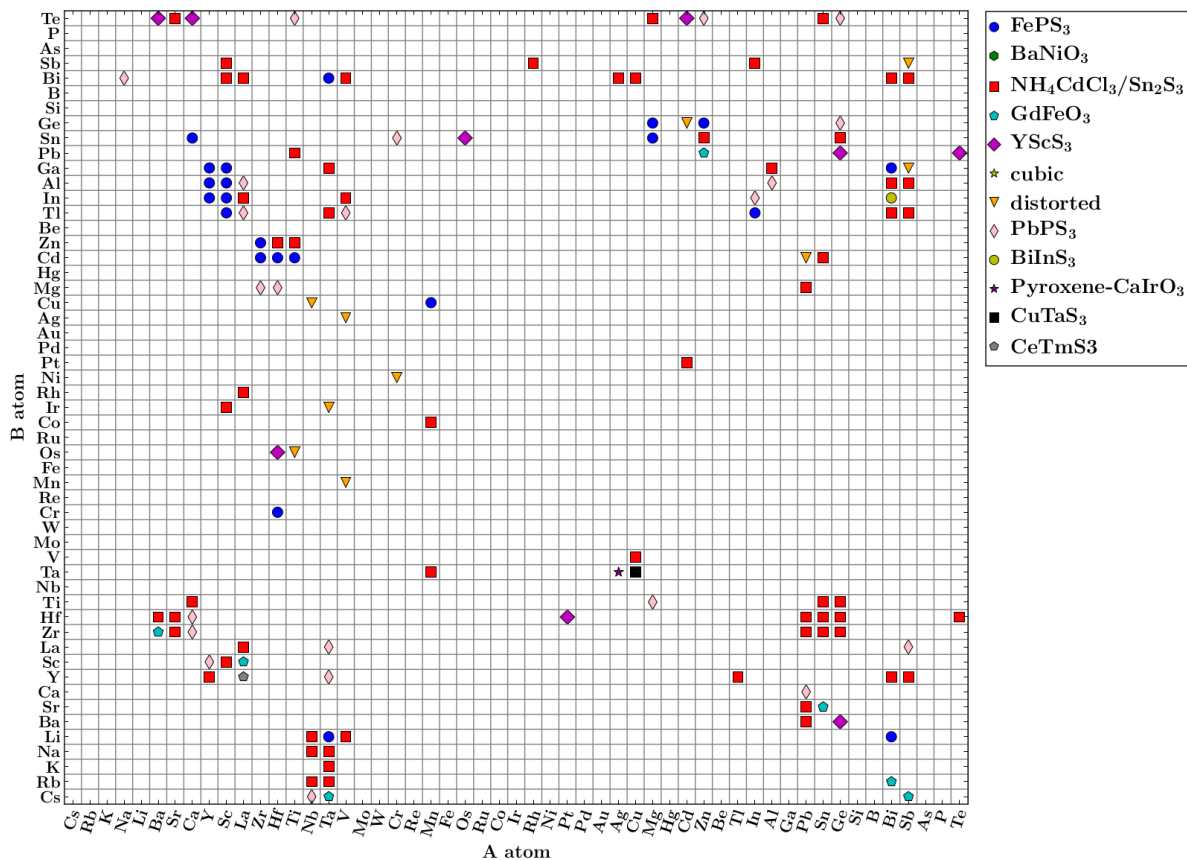


Figure S1: The most stable phase for the investigated  $AB_2S_3$  compounds, where the A and B cations are indicated on the x- and y-axes, respectively.

## Calculated carrier effective masses:

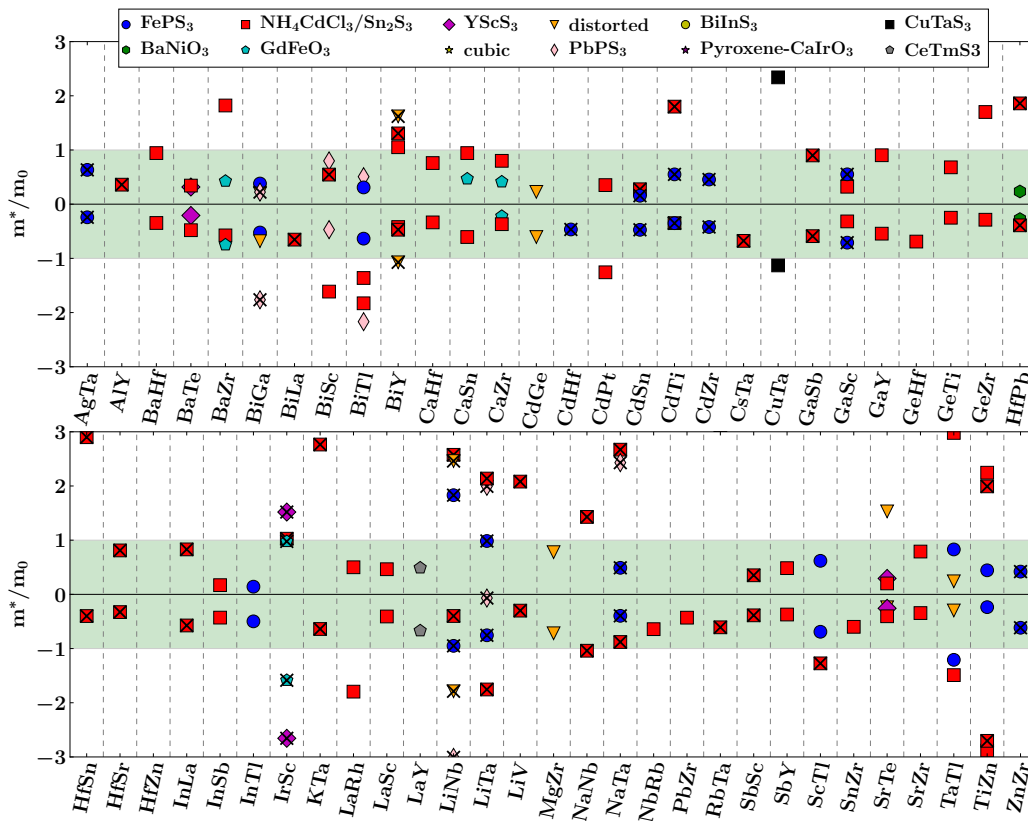


Figure S2: Calculated carrier effective masses for stable compounds with band gaps between 0.5 and 2.5 eV, where the negative sign represents hole effective masses and positive sign electron effective masses. Different markers represent different phases, as shown in the figure legend. Markers with crosses on top indicate that the chemical formula should be read in reverse, instead of AB (written on the x-label), it is BA.

Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4ClCl_3}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
Ag-Bi	1.14	1.31	0.00	0.00	1.25	1.41	1.29	1.44	0.75	0.75	0.28	0.28	0.23	0.23	0.00	0.00	-	-
BiAgS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ag-Ta	1.91	2.36	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.00	0.71	0.71	0.05	0.23	1.01	1.23	1.51	1.66	0.06	0.06
TaAgS3	0.84	0.93	0.00	0.00	0.90	0.97	1.54	1.59	0.87	0.87	0.00	0.00	0.00	0.31	0.90	0.90	-	-
Ag-V	0.60	0.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
VAgS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Al-Al	3.83	4.04	0.00	0.00	3.15	3.33	4.24	4.31	4.11	4.47	2.48	2.85	4.86	4.89	0.00	0.00	-	-
Al-Bi	2.93	3.17	0.00	0.00	1.24	1.47	0.00	0.00	2.77	3.06	0.00	0.00	2.60	2.60	2.29	2.48	-	-
BiAlS3	2.75	3.05	0.00	0.00	2.26	2.60	0.00	0.00	2.48	2.58	2.33	2.50	2.31	2.50	3.04	3.19	-	-
Al-Ga	4.89	4.97	0.00	0.00	2.83	2.97	0.00	0.00	4.01	4.02	1.52	1.73	3.09	3.22	0.00	0.00	-	-
GaAlS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Al-La	3.84	4.13	0.00	0.00	3.16	3.55	0.00	0.00	3.42	3.42	0.00	0.00	4.30	4.30	4.08	4.32	-	-
LaAlS3	1.60	2.09	0.00	0.00	3.74	4.14	2.27	2.37	1.67	1.67	4.02	4.16	4.00	4.16	4.75	5.26	-	-
Al-Sb	3.08	3.43	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.89	3.05	0.00	0.00	2.50	2.73	0.00	0.00	-	-
SbAlS3	2.98	3.37	0.00	0.00	2.08	2.61	0.00	0.00	2.69	2.76	2.36	2.46	2.39	2.48	0.00	0.00	-	-
Al-Sc	2.88	3.03	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.80	1.80	0.00	0.00	3.20	3.36	0.00	0.00	-	-
ScAlS3	3.69	3.69	0.00	0.00	3.07	3.08	0.00	0.00	0.00	0.00	3.21	3.36	3.20	3.36	3.51	3.51	-	-
Al-Y	3.52	3.68	0.00	0.00	3.56	3.65	0.00	0.00	3.97	3.97	2.92	3.19	4.09	4.35	0.00	0.00	-	-
YAlS3	4.36	4.42	0.00	0.00	3.82	3.86	1.24	1.51	1.97	2.01	0.00	0.00	4.08	4.34	3.74	3.74	-	-
Ba-Ge	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
GeBaS3	1.75	2.07	0.00	0.00	3.71	3.71	0.00	0.00	2.66	2.87	0.00	0.00	3.03	3.03	3.35	3.35	-	-
Ba-Hf	1.74	4.96	1.74	4.99	3.01	3.01	0.67	0.67	1.31	1.31	2.32	2.32	2.32	2.32	1.29	1.29	-	-
HfBaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ba-Pb	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PbBaS3	2.00	2.22	0.00	0.00	0.77	0.77	0.00	0.00	1.57	1.78	0.81	0.81	0.75	0.75	1.68	1.68	-	-
Ba-Te	0.41	0.41	1.18	1.33	2.69	2.80	1.00	1.52	0.95	1.21	0.28	0.32	1.40	1.40	0.00	0.00	-	-
TeBaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ba-Zr	1.60	1.86	1.60	1.86	3.00	3.00	0.40	0.40	1.79	1.79	2.25	2.25	2.25	2.25	2.70	2.83	-	-
ZrBaS3	1.69	1.96	0.00	0.00	3.52	3.58	0.00	0.00	1.23	1.41	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
Bi-Bi	2.15	2.17	0.00	0.00	1.62	2.27	0.00	0.00	2.49	2.49	0.39	0.39	0.76	0.82	1.84	1.97	-	-
Bi-Cu	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CuBiS3	1.12	1.32	0.00	0.00	0.91	0.91	0.00	0.00	0.00	0.00	0.52	0.82	0.45	0.71	1.12	1.46	-	-
Bi-Ga	2.45	2.76	0.00	0.00	2.05	2.47	0.00	0.00	2.53	2.56	0.00	0.00	1.16	1.41	2.55	2.61	-	-
GaBiS3	2.88	3.03	0.00	0.00	1.31	1.47	0.61	0.73	2.28	2.46	0.72	0.80	2.41	2.48	2.16	2.69	-	-
Bi-In	2.45	2.88	0.00	0.00	2.25	3.25	0.00	0.00	2.74	2.92	1.76	2.56	1.77	2.57	2.67	2.67	2.6	2.31
InBiS3	2.38	2.78	0.00	0.00	1.85	1.96	0.98	1.22	2.38	2.69	0.00	0.00	2.16	2.64	2.63	2.64	-	-
Bi-La	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4CdCl_3}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
LaBiS <sub>3</sub>	3.10	3.13	0.00	0.00	2.29	2.43	0.00	0.00	1.45	1.51	0.51	0.51	0.53	0.36	0.36	0.36	0.36	-
Bi-Li	2.05	2.25	0.00	0.00	1.13	1.43	0.00	0.00	1.30	1.30	1.25	1.87	0.00	1.39	2.58	1.31	1.34	-
LiBiS <sub>3</sub>	1.82	2.38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	0.35	1.31	1.34	1.34	-
Bi-Na	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NaBiS <sub>3</sub>	2.12	2.63	0.00	0.00	1.49	1.49	0.86	1.22	0.00	0.00	0.25	0.33	0.24	0.32	2.59	2.59	2.59	-
Bi-Rb	2.70	2.91	0.00	0.00	0.67	0.68	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	1.25	0.00	1.67	2.25	1.67	2.25	-
RbBiS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Bi-Sb	0.73	0.73	0.00	0.00	1.46	2.02	0.00	0.00	0.81	1.36	0.21	0.63	0.20	0.63	1.81	2.79	1.81	-
SbBiS <sub>3</sub>	0.98	1.76	0.00	0.00	1.48	2.02	0.00	0.00	1.65	1.91	0.00	0.00	0.80	0.80	2.42	2.49	0.80	-
Bi-Sc	2.42	3.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.23	2.35	2.50	2.65	2.48	2.62	2.45	2.72	2.45	-
ScBiS <sub>3</sub>	2.17	2.17	0.00	0.00	1.88	2.01	0.00	0.00	2.45	2.64	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-
Bi-Ta	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaBiS <sub>3</sub>	0.36	0.83	0.00	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-
Bi-Tl	1.29	2.12	0.00	0.00	1.36	1.98	0.00	0.00	1.86	2.06	0.54	0.54	0.00	1.95	2.19	1.95	2.19	-
TlBiS <sub>3</sub>	2.16	2.28	0.00	0.00	1.12	1.30	0.11	0.11	0.00	0.03	0.00	0.00	0.00	1.90	1.95	1.90	1.95	-
Bi-V	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VBiS <sub>3</sub>	0.57	0.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.02	0.15	0.00	0.00	0.00	-
Bi-Y	3.30	3.82	0.00	0.00	2.91	3.04	0.00	0.00	2.17	2.24	2.76	2.98	2.74	2.96	2.61	2.62	2.96	-
YBiS <sub>3</sub>	2.43	2.43	0.00	0.00	2.24	2.38	0.00	0.00	1.94	2.03	0.00	0.00	0.81	0.81	2.00	2.00	0.81	-
Ca-Hf	1.71	2.23	1.64	3.79	2.84	2.84	0.12	0.12	0.99	0.99	2.65	2.65	2.64	2.64	3.21	3.21	2.64	-
HfCaS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ca-Pb	1.83	2.38	0.00	0.00	1.69	1.80	0.00	0.00	0.00	0.00	0.60	0.78	0.60	0.78	2.37	2.55	0.60	-
PbCaS <sub>3</sub>	1.83	1.96	0.00	0.00	1.31	1.31	0.00	0.00	1.88	2.81	0.00	0.00	1.38	1.66	2.08	2.45	1.38	-
Ca-Sn	0.88	0.95	0.00	0.00	3.14	3.22	0.00	0.00	1.58	1.93	1.78	1.78	1.76	1.76	0.00	0.00	1.76	-
SnCaS <sub>3</sub>	1.40	1.56	0.00	0.00	3.03	3.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.45	2.45	2.62	2.72	2.45	-
Ca-Te	1.13	1.20	1.35	1.43	2.83	2.93	0.55	0.98	0.76	0.89	0.07	0.10	0.54	0.54	0.00	0.00	0.54	-
TeCaS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ca-Ti	1.05	1.60	0.00	0.00	2.06	2.06	0.00	0.00	0.21	0.21	0.94	0.94	1.00	1.00	2.73	2.73	1.00	-
TiCaS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ca-Zr	1.67	2.20	1.51	1.91	2.75	2.75	0.00	0.00	1.36	1.36	2.48	2.48	2.47	2.47	3.04	3.04	2.47	-
ZrCaS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cd-Ge	1.77	1.77	0.00	0.00	2.54	2.54	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.67	0.68	0.00	0.00	0.67	-
GeCdS <sub>3</sub>	2.76	2.79	0.00	0.00	1.08	1.08	0.00	0.00	0.00	0.00	1.62	1.73	0.62	0.64	0.00	0.00	0.62	-
Cd-Hf	2.17	2.25	0.00	0.00	2.12	2.12	0.00	0.00	2.20	2.35	0.00	0.00	2.40	2.45	1.66	1.66	2.40	-
HfCdS <sub>3</sub>	2.22	2.46	0.00	0.00	2.43	2.75	2.42	2.69	0.90	1.89	1.80	2.20	1.80	1.84	2.82	2.82	1.80	-
Cd-Pb	1.64	1.64	0.00	0.00	0.61	0.61	1.60	1.62	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.04	2.28	2.66	0.04	-
PbCdS <sub>3</sub>	1.74	1.74	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	1.29	0.00	0.00	0.06	0.06	2.28	2.32	0.06	-
Cd-Pt	0.29	0.48	0.00	0.00	0.00	0.00	1.98	2.22	1.64	1.94	0.00	0.00	0.13	0.15	1.54	1.64	0.13	-
PtCdS <sub>3</sub>																		

	Formula	$E_g^{dist}$	$E_g^{cubic}$	$E_g^{FePS_3}$	$E_g^{BaNiO_3}$	$E_g^{NH_4CdCl_3}$	$E_g^{GdFeO_3}$	$E_g^{YScS_3}$	$E_g^{PbPS_3}$	$E_g^{other}$
		(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
	PtCdS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
Cd-Sn	CdSnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	SnCdS3	1.95	2.07	0.00	1.58	1.78	1.71	0.91	0.00	0.00
Cd-Te	CdTeS3	2.46	2.50	0.00	1.81	2.02	0.00	0.00	1.03	1.12
	TeCdS3	0.43	0.60	0.00	1.70	1.80	2.61	2.75	0.00	0.00
Cd-Ti	CdTlS3	1.45	1.63	0.00	1.45	1.45	0.82	1.21	0.00	0.00
	TlCdS3	0.85	0.97	0.00	1.26	1.39	0.00	0.93	2.08	2.08
Cd-Zr	CdZrS3	2.24	2.54	0.00	1.91	1.91	0.00	2.15	0.00	0.00
	ZrCdS3	2.16	2.42	0.00	2.27	2.39	1.67	1.69	2.39	2.39
Co-Mn	CoMnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	MnCoS3	0.09	0.16	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Cr-Hf	CrHfS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	HfCrS3	0.57	0.91	0.00	0.00	0.00	0.00	0.03	0.00	0.00
Cr-Ni	CrNiS3	0.09	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	NiCrS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
Cr-Sn	CrSnS3	0.03	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	SnCrS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
Cs-Nb	CsNbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	NbCsS3	1.06	1.08	0.00	1.47	1.48	0.00	2.66	2.71	0.00
Cs-Sb	CsSbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	SbCsS3	0.91	1.31	0.00	1.94	2.04	2.51	2.58	2.96	3.03
Cs-Ta	CsTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	TaCsS3	1.15	1.18	0.00	2.19	2.27	0.00	0.00	0.00	0.00
Cu-Mn	CuMnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	MnCuS3	0.43	0.58	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Cu-Nb	CuNbS3	1.01	1.01	0.00	0.00	0.25	0.00	0.00	0.00	0.00
	NbCuS3	0.54	0.55	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.00	0.00
Cu-Ta	CuTaS3	0.88	0.98	0.00	0.00	0.04	0.00	0.22	0.00	0.00
	TaCuS3	0.69	0.73	0.00	0.24	0.30	0.00	0.10	0.42	0.82
Cu-V	CuVS3	0.95	1.25	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	VCuS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
Ga-Sb	GaSbS3	2.68	2.94	0.00	1.02	1.38	0.00	2.59	3.13	3.20
	SbGaS3	2.57	2.89	0.00	0.00	0.00	0.61	0.78	0.79	0.00
Ga-Sc	GaScS3	0.70	1.12	0.00	2.11	2.11	0.00	2.82	2.94	0.00
	ScGaS3	3.18	3.18	0.00	2.29	2.40	2.19	2.36	2.68	2.68
Ga-Ta	GaTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-
	TaGaS3	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.92	0.97
Ga-Y	GaYS3	0.15	0.29	0.00	2.48	2.55	1.75	3.30	0.00	0.00

Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4ClCl_3}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
YCaS <sub>3</sub>	3.39	3.40	0.00	0.00	2.86	2.98	0.00	0.00	1.24	1.46	0.00	0.00	2.37	2.37	2.95	2.97	-	-
Ge <sub>2</sub> Ge	1.10	1.69	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
Ge-Hf	1.46	2.14	0.96	2.15	0.97	1.30	0.00	0.00	1.70	1.73	1.44	1.44	0.00	0.00	2.18	2.39	-	-
HfGeS <sub>3</sub>	1.98	2.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.32	1.39	0.00	0.00	0.00	0.00	1.79	1.79	-	-
Ge-Mg	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
MgGeS <sub>3</sub>	2.79	2.83	0.00	0.00	2.76	2.98	1.00	1.30	0.56	1.00	0.91	1.02	1.92	2.02	0.00	0.00	-	-
Ge-Pb	1.48	1.79	0.00	0.00	0.65	1.01	0.94	0.94	0.00	0.00	2.45	2.48	0.00	0.00	2.03	2.23	-	-
PbGeS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ge-Sn	0.97	1.56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.46	1.61	0.00	0.00	0.00	0.00	1.57	1.70	-	-
SnGeS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ge-Te	1.35	1.49	1.35	1.42	0.00	0.00	0.00	0.00	1.38	1.39	0.00	0.00	0.74	0.89	2.51	2.58	-	-
TeGeS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ge-Ti	1.06	1.56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.54	0.61	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
TiGeS <sub>3</sub>	0.48	0.82	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.17	1.17	-	-
Ge-Zn	1.08	1.08	0.00	0.00	1.08	1.08	1.79	1.97	0.00	0.02	0.00	0.00	1.14	1.21	0.00	0.00	-	-
ZnGeS <sub>3</sub>	2.57	2.62	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.84	0.85	0.00	0.00	-	-
Ge-Zr	1.41	2.04	0.98	1.14	0.96	0.96	0.00	0.00	1.60	1.60	1.12	1.12	1.13	1.13	0.00	0.00	-	-
ZrGeS <sub>3</sub>	1.77	1.95	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.09	1.14	0.00	0.00	0.00	0.00	2.01	2.01	-	-
Hf-Mg	2.86	2.96	0.00	0.00	3.04	3.05	0.00	0.00	1.98	2.06	2.28	2.28	2.25	2.25	2.66	2.66	-	-
MgHfS <sub>3</sub>	2.30	2.41	0.00	0.00	2.69	2.72	1.95	2.17	2.31	2.82	0.00	0.00	2.58	2.58	3.51	3.65	-	-
Hf-Os	0.43	0.49	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.80	1.28	1.02	1.39	1.21	1.75	0.10	0.25	-	-
OsHfS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Hf-Pb	2.58	2.85	0.00	0.00	0.00	0.00	1.12	1.63	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.13	3.15	-	-
PbHfS <sub>3</sub>	1.92	2.60	1.55	2.57	1.88	1.88	0.40	0.40	2.11	2.24	1.86	2.09	0.00	0.00	2.52	2.69	-	-
Hf-Pt	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PtHfS <sub>3</sub>	0.26	0.38	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.47	0.47	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
Hf-Sn	1.74	2.11	0.00	0.00	1.12	1.20	0.00	0.00	0.86	1.10	0.00	0.00	1.31	1.31	2.48	2.48	-	-
SnHfS <sub>3</sub>	1.78	2.39	1.74	3.13	1.07	1.07	0.30	0.30	1.53	1.57	1.26	1.48	0.00	0.00	1.99	2.22	-	-
Hf-Sr	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SrHfS <sub>3</sub>	0.00	0.00	1.70	4.51	3.06	3.06	0.39	0.39	1.12	1.12	2.62	2.62	2.62	2.62	3.62	3.62	-	-
Hf-Te	0.26	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.18	1.31	1.12	1.41	-	-
TeHfS <sub>3</sub>	1.22	1.66	0.00	0.00	0.16	0.16	0.00	0.00	0.00	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	1.12	1.67	-	-
Hf-Zn	2.68	2.68	0.00	0.00	2.03	2.47	2.44	2.57	1.61	1.61	2.12	2.12	1.84	1.84	2.86	2.87	-	-
ZnHfS <sub>3</sub>	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
In-In	0.23	0.47	0.00	0.00	1.74	1.74	0.00	0.00	1.20	1.55	1.24	1.24	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
In-La	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
LaInS <sub>3</sub>	0.93	1.46	0.00	0.00	3.26	3.57	1.10	1.43	1.42	2.30	2.90	2.86	2.86	2.86	0.00	0.00	-	-
In-Sb	1.24	1.86	0.00	0.00	1.19	1.63	0.00	0.00	2.16	2.16	0.00	0.00	1.77	1.89	3.40	3.48	-	-

Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4ClCl_31}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)
In-Sc																		
SbInS3	2.20	2.73	0.00	0.00	1.75	1.94	0.00	0.00	2.33	2.42	1.30	1.45	1.31	1.46	0.00	0.00	-	-
InScS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ScInS3	3.04	3.08	0.00	0.00	2.51	2.61	0.00	0.00	2.20	2.73	2.84	2.93	2.78	2.89	1.62	1.69	-	-
In-Tl																		
InTlS3	2.36	2.38	0.00	0.00	0.87	0.87	0.00	0.00	0.71	1.55	0.62	1.21	0.34	1.68	2.87	3.05	-	-
TlInS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
In-V																		
InVS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VInS3	0.01	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
In-Y																		
InYS3	0.00	0.00	0.00	0.00	2.91	2.91	0.92	0.93	0.64	1.10	0.00	0.00	3.43	3.46	0.00	0.00	-	-
YInS3	2.87	2.99	0.00	0.00	3.03	3.13	0.00	0.00	1.90	2.13	3.03	3.03	3.03	3.03	0.00	0.00	-	-
Ir-Sc																		
IrScS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ScIrS3	0.13	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.33	1.44	1.28	1.35	1.39	1.51	1.30	1.52	-	-
Ir-Ta																		
IrTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaIrS3	0.04	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
K-Ta																		
KTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaKS3	0.74	0.78	0.00	0.00	2.57	2.57	0.00	0.00	1.12	1.88	0.34	0.34	0.43	0.43	2.37	2.42	-	-
La-La																		
La2S3	4.83	4.88	1.91	1.91	3.31	3.31	0.63	0.63	2.06	2.06	4.20	4.47	3.45	3.59	3.07	3.07	-	-
La-Rh																		
LaRhS3	0.10	0.15	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.83	0.93	0.29	0.32	0.18	0.23	0.00	0.00	-	-
RhLaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
La-Sb																		
LaSbS3	3.23	3.36	0.00	0.00	2.37	2.38	0.00	0.00	1.38	2.48	0.23	0.23	0.24	0.24	0.00	0.00	-	-
SbLaS3	1.30	1.65	0.00	0.00	2.52	2.81	0.00	0.00	1.23	1.23	0.00	0.00	2.80	3.22	2.17	2.57	-	-
La-Sc																		
LaScS3	2.42	2.70	2.20	3.80	3.70	3.70	0.99	0.99	0.78	0.78	3.38	3.38	3.37	3.37	2.71	2.71	-	-
ScLaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
La-Ta																		
LaTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaLaS3	0.39	0.39	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.52	0.60	-	-
La-Tl																		
LaTlS3	1.94	1.98	0.00	0.00	2.27	2.54	0.00	0.00	0.32	0.91	1.08	1.08	1.08	1.08	2.66	2.71	-	-
TlLaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
La-Y																		
LaYS3	4.82	4.96	2.59	2.59	4.19	4.19	1.24	1.24	1.87	1.87	4.30	4.51	4.25	4.48	2.91	2.91	1.79	1.79
YLaS3	3.56	3.56	1.22	1.22	4.07	4.07	0.00	0.00	1.79	1.79	0.00	0.00	4.06	4.28	3.23	3.23	-	-
Li-Nb																		
LiNbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NbLiS3	1.16	1.22	0.00	0.00	1.45	1.48	0.00	0.00	0.84	0.88	0.25	0.25	0.36	0.36	1.82	1.82	-	-
Li-Ta																		
LiTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaLiS3	1.20	1.28	0.00	0.00	1.98	2.00	0.00	0.00	0.76	0.76	0.42	0.42	0.52	0.52	2.26	2.33	-	-
Li-V																		
LiVS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VLiS3	1.61	1.81	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.57	0.65	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.39	-	-
Mg-Pb																		
MgPbS3	3.04	3.07	0.00	0.00	0.96	0.96	1.80	2.09	0.00	0.00	0.00	0.00	1.36	1.56	2.08	2.08	-	-
PbMgS3	0.71	0.71	0.00	0.00	0.64	0.64	0.00	0.00	0.00	1.09	0.08	0.19	1.32	1.46	2.02	2.67	-	-
Mg-Sn																		
MgSnS3	1.71	1.79	0.00	0.00	2.48	2.48	1.53	1.56	1.96	2.34	1.56	1.56	2.40	2.51	0.00	0.00	-	-



Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4ClCl_3}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)		(DIR)
Mg-Te																		
SnMgS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
MgTeS3	2.05	2.20	0.00	0.00	2.27	2.32	0.00	0.00	1.96	1.99	0.11	0.14	2.77	2.89	0.00	0.00	-	-
TeMgS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Mg-Ti																		
MgTiS3	1.86	2.13	0.00	0.00	1.43	1.43	0.31	0.31	0.87	0.87	0.82	0.82	0.83	0.83	1.34	1.34	-	-
TiMgS3	1.61	1.69	0.00	0.00	1.74	1.91	1.51	1.85	1.43	1.43	0.00	0.00	1.11	1.13	0.00	0.00	-	-
Mg-Zr																		
MgZrS3	2.21	2.32	0.00	0.00	2.42	2.42	1.73	1.93	2.07	2.23	0.00	0.00	2.38	2.38	0.00	0.00	-	-
ZrMgS3	2.76	2.86	0.00	0.00	2.84	2.86	0.00	0.00	1.73	1.78	2.13	2.13	2.12	2.12	3.40	3.42	-	-
Mn-Ta																		
MnTaS3	0.48	0.91	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
TaMnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Mn-V																		
MnVS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VMnS3	0.27	0.36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
Na-Nb																		
NaNbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NbNaS3	0.20	0.22	0.00	0.00	1.74	1.74	0.00	0.00	0.90	0.93	0.23	0.23	0.26	0.26	0.00	0.00	-	-
Na-Ta																		
NaTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaNaS3	0.20	0.22	0.00	0.00	2.37	2.39	0.00	0.00	0.90	0.93	0.38	0.38	0.42	0.42	1.84	1.84	-	-
Nb-Rb																		
NbRbS3	0.45	0.52	0.00	0.00	1.82	1.85	0.00	0.00	1.47	1.55	0.00	0.00	0.56	0.56	2.30	2.32	-	-
RbNbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Os-Sn																		
OsSnS3	0.25	0.59	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.75	0.77	0.00	0.00	-	-
SnOsS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Os-Ti																		
OsTiS3	0.00	0.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.67	0.71	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
TiOsS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Pb-Sr																		
PbSrS3	2.37	2.56	0.00	0.00	1.09	1.47	1.48	1.48	0.00	0.00	0.26	0.26	0.00	0.00	2.93	3.00	-	-
SrPbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Pb-Te																		
PbTeS3	0.06	0.06	1.33	1.33	1.92	2.26	0.00	0.00	0.77	1.79	0.32	0.65	0.65	0.65	0.00	0.00	-	-
TePbS3	0.88	1.12	0.00	0.00	1.56	2.46	0.00	0.00	1.09	1.32	0.00	0.00	1.44	1.44	1.93	1.93	-	-
Pb-Ti																		
PbTiS3	1.03	1.61	0.00	0.00	1.02	1.02	0.00	0.00	0.78	0.80	0.23	0.47	0.00	0.00	2.11	2.14	-	-
TiPbS3	1.57	1.96	0.00	0.00	1.39	1.60	1.13	1.34	1.14	1.16	0.00	0.00	0.00	0.00	1.33	1.36	-	-
Pb-Zn																		
PbZnS3	1.39	2.06	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.84	0.00	0.00	0.00	0.00	1.27	1.87	-	-
ZnPbS3	1.67	1.85	0.00	0.00	0.34	0.34	0.00	0.00	0.00	0.04	0.00	0.00	0.10	0.10	2.31	2.60	-	-
Pb-Zr																		
PbZrS3	1.90	2.58	1.51	2.38	1.85	1.85	0.13	0.13	2.08	2.08	1.72	1.91	1.68	1.89	2.56	2.62	-	-
ZrPbS3	2.37	2.58	0.00	0.00	1.89	2.18	1.26	1.55	0.95	1.07	0.25	0.25	1.40	1.40	0.00	0.00	-	-
Rb-Ta																		
RbTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TaRbS3	1.27	1.29	0.00	0.00	2.45	2.57	0.00	0.00	1.13	1.89	0.00	0.00	0.87	0.87	0.00	0.00	-	-
Rh-Sb																		
RhSbS3	0.42	1.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.12	1.26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
SbRhS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sb-Sb																		
Sb2S3	0.65	0.67	0.00	0.00	1.17	1.39	0.00	0.00	0.68	0.71	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
SbScS3	2.24	2.91	0.00	0.00	2.22	2.24	0.00	0.00	2.35	2.43	2.32	2.65	2.31	2.64	2.57	2.66	-	-

Formula	$E_g^{dist}$		$E_g^{cubic}$		$E_g^{FePS_3}$		$E_g^{BaNiO_3}$		$E_g^{NH_4ClCl_3}$		$E_g^{GdFeO_3}$		$E_g^{YScS_3}$		$E_g^{PbPS_3}$		$E_g^{other}$	
	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
ScSbS3	2.29	2.30	0.00	0.00	1.84	2.07	0.00	0.00	2.42	2.57	0.00	0.00	0.69	0.73	0.00	0.00	-	-
SbTiS3	1.13	1.61	0.00	0.00	0.63	1.15	0.00	0.00	1.17	1.36	0.00	0.00	0.00	0.00	1.68	1.68	-	-
TiSbS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sb-Y	3.36	3.89	0.00	0.00	2.77	2.84	0.00	0.00	2.03	2.09	2.82	3.15	2.82	3.15	0.00	0.00	-	-
YSbS3	2.63	2.82	0.00	0.00	2.19	2.40	0.00	0.00	1.84	1.86	0.00	0.00	0.03	0.03	0.00	0.00	-	-
Sc-Sc	3.19	3.67	0.00	0.00	3.07	3.07	0.07	0.07	2.22	2.22	2.64	2.93	2.65	2.93	0.00	0.00	-	-
Sc-Tl	1.77	1.93	0.00	0.00	1.48	1.65	0.00	0.00	1.41	1.53	0.00	0.00	1.01	1.01	3.10	3.18	-	-
TlScS3	0.69	0.81	0.00	0.00	1.98	2.34	0.00	0.00	0.76	1.41	0.78	1.12	1.60	1.76	2.59	2.72	-	-
Sc-Y	2.89	3.25	0.57	0.71	2.95	2.95	0.00	0.00	2.09	2.09	0.00	0.00	3.23	3.34	0.00	0.00	-	-
YSceS3	3.97	4.28	1.99	2.21	3.58	3.58	0.56	0.56	1.12	1.12	3.30	3.44	3.27	3.43	2.84	2.84	-	-
Sn-Sr	1.85	1.87	0.00	0.00	2.82	2.87	1.01	1.01	1.25	1.35	0.00	0.00	3.45	3.45	2.77	2.84	-	-
SrSnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sn-Te	0.30	0.30	1.47	1.47	0.00	0.00	0.00	0.00	1.02	1.11	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
TeSnS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sn-Ti	1.06	1.73	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.29	0.31	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
TlSnS3	0.86	0.89	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.56	0.58	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
Sn-Zn	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ZnSnS3	2.31	2.52	0.00	0.00	2.48	2.48	0.00	0.00	2.63	2.67	0.10	0.10	1.20	1.20	0.00	0.00	-	-
Sn-Zr	1.65	2.14	1.60	2.08	1.01	1.01	0.03	0.03	1.43	1.45	1.04	1.04	0.95	0.95	1.76	1.98	-	-
ZrSnS3	1.61	1.98	0.00	0.00	1.03	1.04	0.00	0.00	1.53	1.55	0.00	0.00	1.23	1.23	0.00	0.00	-	-
Sr-Te	0.73	0.73	1.30	1.39	2.86	3.03	0.80	1.23	0.82	1.01	0.16	0.27	0.79	0.79	0.99	1.02	-	-
TeSrS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sr-Zr	1.57	1.92	1.56	1.92	2.95	2.95	0.06	0.06	1.46	1.46	2.49	2.49	2.50	2.50	3.45	3.45	-	-
ZrSrS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ta-Tl	1.15	1.15	0.00	0.00	1.47	1.79	0.00	0.00	0.76	0.76	0.00	0.16	0.37	0.40	2.05	2.14	-	-
TlTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ta-Y	0.43	0.52	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-	-
YTaS3	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Te-Ti	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
TlTeS3	0.76	0.96	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.49	1.57	1.65	-	-
Te-Zn	2.36	2.52	0.00	0.00	1.54	1.68	0.00	0.00	1.09	1.29	2.45	2.50	2.46	2.50	0.00	0.00	-	-
ZnTeS3	2.42	2.65	0.00	0.00	1.38	1.62	0.00	0.00	1.67	1.69	0.00	0.00	2.45	2.55	2.90	2.90	-	-
Tl-Zn	1.95	1.95	0.00	0.00	0.95	1.03	0.00	0.00	0.78	0.81	0.00	0.00	0.67	0.67	1.36	1.37	-	-
ZnTlS3	2.22	2.28	0.00	0.00	0.99	0.99	0.00	0.00	0.84	0.85	0.00	0.00	0.28	0.28	0.00	0.00	-	-
Tl-V	0.00	0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
VTlS3	1.35	1.67	0.00	0.00	0.04	0.10	0.00	0.00	0.36	0.51	0.37	0.37	0.11	0.22	0.72	0.87	-	-
Tl-Y	0.00	0.00	0.00	0.00	0.94	0.94	0.00	0.00	1.68	1.68	0.00	0.00	1.79	1.79	1.06	1.23	-	-

Formula	$E_g^{direct}$	$E_g^{cubic}$	$E_g^{FePS_3}$	$E_g^{BaNiO_3}$	$E_g^{NH_4ClCl_3}$	$E_g^{GdFeO_3}$	$E_g^{YScS_3}$	$E_g^{PbPS_3}$	$E_g^{other}$
	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)	(DIR)
YTiS <sub>3</sub>	1.58	0.00	1.90	0.00	0.41	1.21	1.69	2.94	-
YS <sub>3</sub>	4.71	2.47	4.09	0.78	1.83	3.93	4.21	0.00	-
ZnZrS <sub>3</sub>	0.56	0.00	1.29	0.00	2.65	1.33	1.57	0.00	-
ZrZnS <sub>3</sub>	2.74	0.00	1.91	0.00	1.27	1.93	1.69	2.32	-

Table 1: Calculated band gap values (direct and indirect) for all the investigated ABS<sub>3</sub> compounds in 8 different phases. All the calculations were performed using the GLLB-SC functional.

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
Ag-Bi	AgBiS3	0.08 ± 0.02	0.80 ± 0.07	0.06 ± 0.02	0.17 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.03	0.10 ± 0.03	0.12 ± 0.01	-	0.18 ± 0.06
	BiAgS3	0.18 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.18 ± 0.06
Ag-Ta	AgTaS3	0.22 ± 0.07	0.44 ± 0.07	0.20 ± 0.08	0.33 ± 0.05	0.15 ± 0.06	0.18 ± 0.06	0.17 ± 0.06	0.15 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.08
	TaAgS3	0.08 ± 0.06	2.06 ± 0.09	0.00 ± 0.06	0.61 ± 0.05	0.07 ± 0.06	0.22 ± 0.03	0.21 ± 0.03	0.14 ± 0.04	-	0.03 ± 0.08
Ag-V	AgVS3	0.07 ± 0.04	0.50 ± 0.06	0.09 ± 0.05	0.19 ± 0.04	0.10 ± 0.05	0.19 ± 0.07	0.18 ± 0.06	0.05 ± 0.02	-	0.11 ± 0.11
	VAgS3	0.00 ± 0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.11 ± 0.11
Al-Al	Al2S3	0.11 ± 0.04	1.35 ± 0.13	0.06 ± 0.03	0.23 ± 0.07	0.11 ± 0.04	0.23 ± 0.06	0.12 ± 0.06	0.00 ± 0.00	-	0.11 ± 0.11
Al-Bi	AlBiS3	0.10 ± 0.04	1.42 ± 0.07	0.20 ± 0.04	0.94 ± 0.07	0.06 ± 0.03	0.19 ± 0.06	0.10 ± 0.04	0.03 ± 0.05	-	0.07 ± 0.03
	BiAlS3	0.03 ± 0.05	0.61 ± 0.08	0.02 ± 0.07	0.53 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.10 ± 0.03	0.10 ± 0.03	0.09 ± 0.04	-	0.07 ± 0.03
Al-Ca	AlCaS3	0.09 ± 0.04	1.45 ± 0.12	0.07 ± 0.04	0.91 ± 0.08	0.00 ± 0.00	0.34 ± 0.06	0.20 ± 0.06	0.46 ± 0.04	-	0.01 ± 0.03
	CaAlS3	0.78 ± 0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	0.01 ± 0.03
Al-La	AlLaS3	0.11 ± 0.04	1.72 ± 0.11	0.30 ± 0.03	0.94 ± 0.07	0.13 ± 0.05	0.17 ± 0.06	0.08 ± 0.05	0.04 ± 0.02	-	0.05 ± 0.02
	LaAlS3	0.13 ± 0.04	0.35 ± 0.09	0.06 ± 0.06	0.26 ± 0.08	0.04 ± 0.07	0.03 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.05 ± 0.02
Al-Sb	AlSbS3	0.08 ± 0.04	1.27 ± 0.06	0.26 ± 0.03	1.03 ± 0.06	0.06 ± 0.03	0.25 ± 0.05	0.12 ± 0.02	0.07 ± 0.05	-	0.08 ± 0.03
	SbAlS3	0.04 ± 0.05	0.71 ± 0.07	0.07 ± 0.06	0.67 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.15 ± 0.03	0.15 ± 0.03	0.20 ± 0.02	-	0.08 ± 0.03
Al-Sc	AlScS3	0.09 ± 0.06	1.33 ± 0.11	0.21 ± 0.05	0.83 ± 0.08	0.11 ± 0.08	0.16 ± 0.03	0.08 ± 0.07	0.10 ± 0.05	-	0.22 ± 0.05
	ScAlS3	0.01 ± 0.03	0.88 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.82 ± 0.13	0.13 ± 0.06	0.08 ± 0.07	0.08 ± 0.07	0.04 ± 0.05	-	0.22 ± 0.05
Al-Y	AlYS3	0.09 ± 0.03	1.49 ± 0.10	0.28 ± 0.06	1.01 ± 0.07	0.05 ± 0.01	0.15 ± 0.03	0.03 ± 0.07	0.08 ± 0.06	-	0.32 ± 0.08
	YAlS3	0.01 ± 0.03	0.55 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.51 ± 0.12	0.08 ± 0.09	0.03 ± 0.07	0.03 ± 0.07	0.05 ± 0.04	-	0.32 ± 0.08
Ba-Ge	BaGeS3	0.25 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.06 ± 0.04
	GeBaS3	0.27 ± 0.06	2.19 ± 0.12	1.27 ± 0.08	1.04 ± 0.12	0.16 ± 0.04	0.64 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.05 ± 0.04	-	0.06 ± 0.04
Ba-Ha	BaHS3	0.07 ± 0.04	0.09 ± 0.04	0.22 ± 0.10	0.10 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.03	0.04 ± 0.03	0.04 ± 0.03	-	0.08 ± 0.05
	HfBaS3	1.05 ± 0.10	-	-	-	-	-	-	-	-	0.08 ± 0.05
Ba-Pb	BaPbS3	0.18 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.09 ± 0.02
	PbBaS3	0.22 ± 0.03	1.38 ± 0.07	0.30 ± 0.02	0.51 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.03	0.14 ± 0.02	0.17 ± 0.03	-	0.09 ± 0.02
Ba-Te	BaTeS3	0.04 ± 0.02	0.21 ± 0.07	0.08 ± 0.04	0.18 ± 0.04	0.02 ± 0.05	0.09 ± 0.02	0.00 ± 0.00	0.29 ± 0.05	-	0.02 ± 0.05
	TeBaS3	0.45 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.02 ± 0.05
Ba-Zr	BaZrS3	0.03 ± 0.02	0.07 ± 0.03	0.19 ± 0.09	0.09 ± 0.03	0.02 ± 0.01	0.00 ± 0.00	0.00 ± 0.00	0.11 ± 0.07	-	0.37 ± 0.07
	ZrBaS3	0.04 ± 0.02	2.67 ± 0.10	0.15 ± 0.03	1.43 ± 0.10	0.41 ± 0.05	0.18 ± 0.04	0.04 ± 0.08	0.06 ± 0.07	-	0.37 ± 0.07
Bi-Bi	Bi2S3	0.04 ± 0.02	0.85 ± 0.06	0.13 ± 0.02	0.70 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.06 ± 0.03	0.06 ± 0.03	0.09 ± 0.05	-	0.37 ± 0.07
Bi-Cu	BiCuS3	0.19 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.18 ± 0.03
	CuBiS3	0.06 ± 0.04	1.06 ± 0.14	0.02 ± 0.04	0.40 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.06 ± 0.04	0.07 ± 0.05	0.05 ± 0.04	-	0.18 ± 0.03
Bi-Ga	BiGaS3	0.01 ± 0.03	0.74 ± 0.12	0.00 ± 0.00	0.60 ± 0.12	0.02 ± 0.06	0.13 ± 0.07	0.14 ± 0.07	0.04 ± 0.05	-	0.04 ± 0.04
	GaBiS3	0.13 ± 0.04	1.01 ± 0.07	0.23 ± 0.03	0.56 ± 0.07	0.09 ± 0.06	0.16 ± 0.03	0.04 ± 0.03	0.01 ± 0.04	-	0.04 ± 0.04
Bi-In	BiInS3	0.10 ± 0.04	0.84 ± 0.09	0.07 ± 0.05	0.77 ± 0.09	0.07 ± 0.03	0.13 ± 0.05	0.13 ± 0.05	0.16 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.26 ± 0.06
	InBiS3	0.11 ± 0.04	0.91 ± 0.08	0.20 ± 0.03	0.53 ± 0.07	0.04 ± 0.02	0.14 ± 0.03	0.10 ± 0.04	0.17 ± 0.05	-	0.26 ± 0.06
Bi-La	BiLaS3	0.50 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.01 ± 0.01
	LaBiS3	0.12 ± 0.09	0.70 ± 0.06	0.15 ± 0.09	0.61 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.05 ± 0.05	0.05 ± 0.05	0.29 ± 0.06	-	0.01 ± 0.01
Bi-Li	BiLiS3	0.20 ± 0.04	0.92 ± 0.14	0.00 ± 0.00	0.57 ± 0.11	0.10 ± 0.04	0.11 ± 0.06	0.25 ± 0.03	0.13 ± 0.04	-	0.09 ± 0.06

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	LiBiS3	0.03 ± 0.02	0.77 ± 0.21	0.27 ± 0.04	0.15 ± 0.05	0.19 ± 0.07	0.07 ± 0.03	0.08 ± 0.04	0.07 ± 0.04	-	0.09 ± 0.06
Bi-Na	BiNaS3	0.39 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.09 ± 0.03
	NaBiS3	0.05 ± 0.03	0.57 ± 0.17	0.23 ± 0.06	0.13 ± 0.05	0.03 ± 0.01	0.02 ± 0.03	0.02 ± 0.03	0.00 ± 0.00	-	0.09 ± 0.03
Bi-Rb	BiRbS3	0.14 ± 0.13	2.01 ± 0.12	0.24 ± 0.05	0.45 ± 0.06	0.19 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.07	0.04 ± 0.06	-	0.09 ± 0.06
	RbBiS3	0.27 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.09 ± 0.06
Bi-Sb	BiSbS3	0.07 ± 0.06	0.66 ± 0.05	0.09 ± 0.05	0.53 ± 0.06	0.12 ± 0.03	0.08 ± 0.03	0.08 ± 0.03	0.07 ± 0.05	-	0.04 ± 0.01
	SbBiS3	0.05 ± 0.04	1.00 ± 0.05	0.13 ± 0.05	0.30 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.04	0.04 ± 0.04	0.04 ± 0.06	-	0.04 ± 0.01
Bi-Sc	BiScS3	0.14 ± 0.05	0.66 ± 0.07	0.16 ± 0.06	0.69 ± 0.09	0.03 ± 0.03	0.06 ± 0.04	0.06 ± 0.04	0.02 ± 0.02	-	0.27 ± 0.04
	ScBiS3	0.06 ± 0.03	1.31 ± 0.09	0.16 ± 0.04	1.20 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.03	0.10 ± 0.04	0.15 ± 0.06	-	0.27 ± 0.04
Bi-Ta	BiTaS3	0.08 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.23 ± 0.04
	TaBiS3	0.24 ± 0.04	2.12 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.51 ± 0.05	0.13 ± 0.04	0.19 ± 0.03	0.06 ± 0.04	0.19 ± 0.04	-	0.23 ± 0.04
Bi-Tl	BiTlS3	0.07 ± 0.05	0.89 ± 0.08	0.03 ± 0.05	0.44 ± 0.08	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.04	0.04 ± 0.01	0.03 ± 0.04	-	0.05 ± 0.06
	TlBiS3	0.08 ± 0.05	0.53 ± 0.07	0.19 ± 0.03	0.16 ± 0.07	0.07 ± 0.05	0.08 ± 0.01	0.04 ± 0.01	0.07 ± 0.05	-	0.05 ± 0.06
Bi-V	BiVS3	0.18 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.15 ± 0.03
	VBiS3	0.20 ± 0.04	1.74 ± 0.07	0.11 ± 0.03	1.46 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.14 ± 0.04	0.26 ± 0.04	0.13 ± 0.04	-	0.15 ± 0.03
Bi-Y	BiYS3	0.09 ± 0.04	0.91 ± 0.07	0.16 ± 0.05	0.52 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.02	0.03 ± 0.02	0.12 ± 0.04	-	0.34 ± 0.08
	YBiS3	0.01 ± 0.02	1.01 ± 0.10	0.11 ± 0.02	0.90 ± 0.09	0.04 ± 0.07	0.09 ± 0.02	0.09 ± 0.02	0.14 ± 0.07	-	0.34 ± 0.08
Ca-Hf	CaHfS3	0.21 ± 0.05	0.33 ± 0.07	0.19 ± 0.06	0.34 ± 0.06	0.00 ± 0.04	0.02 ± 0.04	0.02 ± 0.04	0.00 ± 0.00	-	0.13 ± 0.02
	HfCaS3	1.00 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	0.13 ± 0.02
Ca-Pb	CaPbS3	0.03 ± 0.06	0.62 ± 0.07	0.06 ± 0.05	0.49 ± 0.05	0.01 ± 0.02	0.10 ± 0.04	0.11 ± 0.04	0.07 ± 0.03	-	0.12 ± 0.02
	PbCaS3	0.11 ± 0.02	0.88 ± 0.07	0.17 ± 0.04	0.34 ± 0.04	0.02 ± 0.04	0.14 ± 0.05	0.09 ± 0.04	0.00 ± 0.00	-	0.12 ± 0.02
Ca-Sn	CaSnS3	0.10 ± 0.03	0.54 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.35 ± 0.08	0.02 ± 0.07	0.04 ± 0.05	0.04 ± 0.06	0.34 ± 0.06	-	0.06 ± 0.06
	SnCaS3	0.38 ± 0.06	1.22 ± 0.11	0.08 ± 0.04	0.57 ± 0.06	0.38 ± 0.09	0.12 ± 0.03	0.04 ± 0.03	0.08 ± 0.05	-	0.06 ± 0.06
Ca-Te	CaTeS3	0.03 ± 0.05	0.43 ± 0.07	0.01 ± 0.04	0.36 ± 0.07	0.01 ± 0.06	0.04 ± 0.01	0.00 ± 0.00	0.15 ± 0.04	-	0.07 ± 0.06
	TeCaS3	0.37 ± 0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.07 ± 0.06
Ca-Ti	CaTiS3	0.19 ± 0.06	0.31 ± 0.05	0.10 ± 0.09	0.26 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.06 ± 0.04	0.06 ± 0.04	0.01 ± 0.07	-	0.11 ± 0.04
	TiCaS3	0.78 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.11 ± 0.04
Ca-Zr	CaZrS3	0.21 ± 0.05	0.35 ± 0.07	0.20 ± 0.06	0.37 ± 0.07	0.01 ± 0.04	0.04 ± 0.05	0.04 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.33 ± 0.07
	ZrCaS3	0.75 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	0.33 ± 0.07
Cd-Ge	CdGeS3	0.00 ± 0.00	0.83 ± 0.10	0.01 ± 0.01	0.50 ± 0.06	0.29 ± 0.07	0.25 ± 0.06	0.21 ± 0.05	0.14 ± 0.05	-	0.04 ± 0.04
	GeCdS3	0.21 ± 0.04	1.22 ± 0.12	0.10 ± 0.02	0.32 ± 0.06	0.22 ± 0.03	0.10 ± 0.01	0.21 ± 0.05	0.12 ± 0.03	-	0.04 ± 0.04
Cd-Hf	CdHfS3	0.13 ± 0.04	0.65 ± 0.07	0.22 ± 0.02	0.08 ± 0.02	0.10 ± 0.03	0.11 ± 0.05	0.10 ± 0.05	0.27 ± 0.04	-	0.00 ± 0.05
	HfCdS3	0.10 ± 0.03	1.86 ± 0.15	0.00 ± 0.00	0.60 ± 0.10	0.29 ± 0.09	0.17 ± 0.03	0.16 ± 0.03	0.18 ± 0.05	-	0.00 ± 0.05
Cd-Pb	CdPbS3	0.06 ± 0.04	0.93 ± 0.05	0.12 ± 0.03	0.11 ± 0.07	0.24 ± 0.02	0.19 ± 0.02	0.16 ± 0.02	0.04 ± 0.03	-	0.19 ± 0.04
	PbCdS3	0.00 ± 0.00	0.66 ± 0.09	0.10 ± 0.03	0.34 ± 0.04	0.13 ± 0.03	0.22 ± 0.03	0.16 ± 0.02	0.06 ± 0.05	-	0.19 ± 0.04
Cd-Pt	CdPtS3	0.30 ± 0.04	0.98 ± 0.09	0.50 ± 0.06	0.10 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.27 ± 0.05	0.24 ± 0.05	0.23 ± 0.04	-	0.01 ± 0.04
	PtCdS3	0.59 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.01 ± 0.04
Cd-Sn	CdSnS3	0.32 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.01 ± 0.04

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 \cdot 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	SnCdS3	0.24 ± 0.05	0.96 ± 0.12	0.00 ± 0.02	0.25 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.08 ± 0.02	0.12 ± 0.06	0.24 ± 0.05	-	0.01 ± 0.04
Cd-Te	CdTeS3	0.02 ± 0.06	0.72 ± 0.05	0.07 ± 0.05	0.52 ± 0.06	0.06 ± 0.03	0.14 ± 0.03	0.00 ± 0.00	0.15 ± 0.07	-	0.25 ± 0.07
	TeCdS3	0.19 ± 0.06	1.07 ± 0.11	0.04 ± 0.04	0.13 ± 0.05	0.09 ± 0.03	0.03 ± 0.04	0.04 ± 0.04	0.09 ± 0.03	-	0.25 ± 0.07
Cd-Ti	CdTiS3	0.14 ± 0.03	0.62 ± 0.08	0.11 ± 0.02	0.53 ± 0.07	0.11 ± 0.06	0.12 ± 0.06	0.12 ± 0.06	0.09 ± 0.04	-	0.04 ± 0.05
	TiCdS3	0.30 ± 0.04	1.73 ± 0.15	0.00 ± 0.00	1.36 ± 0.10	0.01 ± 0.03	0.19 ± 0.03	0.18 ± 0.03	0.05 ± 0.05	-	0.04 ± 0.05
Cd-Zr	CdZrS3	0.18 ± 0.06	0.66 ± 0.07	0.22 ± 0.01	0.51 ± 0.05	0.08 ± 0.04	0.11 ± 0.05	0.11 ± 0.05	0.31 ± 0.05	-	0.18 ± 0.08
	ZrCdS3	0.09 ± 0.03	1.62 ± 0.14	0.00 ± 0.00	0.53 ± 0.10	0.37 ± 0.09	0.15 ± 0.03	0.14 ± 0.03	0.08 ± 0.04	-	0.18 ± 0.08
Co-Mn	CoMnS3	0.42 ± 0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.10 ± 0.04
	MnCoS3	0.06 ± 0.13	1.48 ± 0.16	0.13 ± 0.06	1.22 ± 0.19	0.00 ± 0.00	0.10 ± 0.04	0.08 ± 0.04	0.18 ± 0.11	-	0.10 ± 0.04
Cr-Hf	CrHfS3	0.34 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.05 ± 0.08
	HfCrS3	0.30 ± 0.10	1.29 ± 0.20	0.00 ± 0.00	0.30 ± 0.11	0.24 ± 0.13	0.20 ± 0.11	0.19 ± 0.10	0.14 ± 0.09	-	0.05 ± 0.08
Cr-Ni	CrNiS3	0.00 ± 0.00	1.42 ± 0.12	0.04 ± 0.08	1.12 ± 0.11	0.09 ± 0.07	0.19 ± 0.08	0.19 ± 0.08	0.26 ± 0.04	-	0.10 ± 0.06
	NiCrS3	0.43 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.10 ± 0.06
Cr-Sn	CrSnS3	0.14 ± 0.09	1.39 ± 0.14	0.09 ± 0.06	0.66 ± 0.11	0.05 ± 0.04	0.12 ± 0.05	0.24 ± 0.07	0.00 ± 0.00	-	0.15 ± 0.09
	SnCrS3	0.09 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.15 ± 0.09
Cs-Nb	CsNbS3	0.17 ± 0.10	-	-	-	-	-	-	-	-	0.16 ± 0.06
	NbCsS3	0.86 ± 0.04	3.28 ± 0.10	0.08 ± 0.05	1.26 ± 0.09	0.41 ± 0.10	0.26 ± 0.07	0.04 ± 0.06	0.00 ± 0.00	-	0.16 ± 0.06
Cs-Sb	CsSbS3	0.29 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.10 ± 0.03
	SbCsS3	0.36 ± 0.07	2.24 ± 0.13	0.14 ± 0.04	0.61 ± 0.08	0.28 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.06 ± 0.04	0.15 ± 0.04	-	0.10 ± 0.03
Cs-Ta	CsTaS3	0.20 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.27 ± 0.08
	TaCsS3	0.98 ± 0.06	3.82 ± 0.16	0.10 ± 0.05	1.47 ± 0.12	0.03 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.06 ± 0.04	0.04 ± 0.05	-	0.27 ± 0.08
Cu-Mn	CuMnS3	0.15 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.12 ± 0.05
	MnCuS3	0.51 ± 0.08	1.52 ± 0.09	0.00 ± 0.00	1.03 ± 0.07	0.09 ± 0.03	0.14 ± 0.03	0.14 ± 0.02	0.21 ± 0.04	-	0.12 ± 0.05
Cu-Nb	CuNbS3	0.19 ± 0.04	0.74 ± 0.08	0.25 ± 0.05	0.47 ± 0.03	0.01 ± 0.05	0.20 ± 0.06	0.20 ± 0.06	0.34 ± 0.08	-	0.07 ± 0.05
	NbCuS3	0.00 ± 0.00	1.46 ± 0.13	0.02 ± 0.04	0.99 ± 0.12	0.03 ± 0.03	0.21 ± 0.05	0.18 ± 0.05	0.08 ± 0.02	-	0.07 ± 0.05
Cu-Ta	CuTaS3	0.35 ± 0.06	0.84 ± 0.10	0.38 ± 0.05	0.63 ± 0.05	0.17 ± 0.04	0.31 ± 0.06	0.30 ± 0.06	0.39 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.05 ± 0.05
	TaCuS3	0.10 ± 0.03	1.78 ± 0.15	0.11 ± 0.04	0.52 ± 0.09	0.14 ± 0.01	0.35 ± 0.05	0.32 ± 0.05	0.19 ± 0.02	-	0.05 ± 0.05
Cu-V	CuVS3	0.02 ± 0.06	0.74 ± 0.09	0.10 ± 0.05	0.30 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.10 ± 0.05	0.10 ± 0.06	0.11 ± 0.02	-	0.21 ± 0.06
	VCuS3	0.08 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.21 ± 0.06
Ga-Sb	GaSbS3	0.04 ± 0.01	0.86 ± 0.05	0.21 ± 0.03	0.58 ± 0.04	0.08 ± 0.04	0.21 ± 0.05	0.04 ± 0.02	0.03 ± 0.03	-	0.03 ± 0.03
	SbGaS3	0.00 ± 0.00	0.80 ± 0.09	0.04 ± 0.03	0.71 ± 0.09	0.02 ± 0.05	0.17 ± 0.06	0.17 ± 0.06	0.28 ± 0.03	-	0.03 ± 0.03
Ga-Sc	GaScS3	0.69 ± 0.07	0.91 ± 0.09	0.26 ± 0.03	0.69 ± 0.07	0.02 ± 0.01	0.14 ± 0.03	0.14 ± 0.04	0.16 ± 0.05	-	0.26 ± 0.04
	ScGaS3	0.01 ± 0.03	1.02 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.45 ± 0.07	0.17 ± 0.04	0.16 ± 0.06	0.16 ± 0.06	0.07 ± 0.04	-	0.26 ± 0.04
Ga-Ta	GaTaS3	0.23 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.15 ± 0.03
	TaGaS3	0.08 ± 0.05	1.58 ± 0.10	0.06 ± 0.04	0.99 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.04	0.17 ± 0.04	0.07 ± 0.05	-	0.15 ± 0.03
Ga-Y	GaYS3	0.76 ± 0.07	1.05 ± 0.10	0.30 ± 0.05	0.73 ± 0.07	0.03 ± 0.04	0.14 ± 0.03	0.10 ± 0.06	0.08 ± 0.06	-	0.35 ± 0.08
	YGaS3	0.01 ± 0.02	0.71 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.63 ± 0.12	0.15 ± 0.10	0.09 ± 0.06	0.10 ± 0.06	0.06 ± 0.06	-	0.35 ± 0.08
Ge-Ge	Ge2S3	0.03 ± 0.04	0.85 ± 0.10	0.06 ± 0.04	0.59 ± 0.08	0.07 ± 0.05	0.25 ± 0.07	0.25 ± 0.07	0.00 ± 0.00	-	0.35 ± 0.08
	GeHfS3	0.17 ± 0.03	0.69 ± 0.06	0.27 ± 0.05	0.69 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.16 ± 0.04	0.13 ± 0.04	0.19 ± 0.02	-	0.02 ± 0.02

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	HfGeS3	0.13 ± 0.04	1.41 ± 0.12	0.19 ± 0.04	0.57 ± 0.07	0.05 ± 0.01	0.27 ± 0.03	0.18 ± 0.02	0.13 ± 0.05	-	0.02 ± 0.02
Ge-Mg	GeMgS3	0.50 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.07 ± 0.05
	MgGeS3	0.04 ± 0.02	0.93 ± 0.12	0.00 ± 0.00	0.26 ± 0.05	0.22 ± 0.07	0.22 ± 0.05	0.17 ± 0.04	0.21 ± 0.04	-	0.07 ± 0.05
Ge-Pb	GePbS3	0.17 ± 0.02	1.26 ± 0.07	0.29 ± 0.03	0.38 ± 0.06	0.23 ± 0.03	0.08 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.10 ± 0.02	-	0.07 ± 0.01
	PbGeS3	0.16 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.07 ± 0.01
Ge-Sn	GeSnS3	0.17 ± 0.05	0.87 ± 0.06	0.25 ± 0.03	0.68 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.20 ± 0.04	0.20 ± 0.04	0.04 ± 0.02	-	0.05 ± 0.03
	SnGeS3	0.17 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.05 ± 0.03
Ge-Te	GeTeS3	0.22 ± 0.05	1.00 ± 0.09	0.36 ± 0.07	0.80 ± 0.09	0.16 ± 0.05	0.32 ± 0.08	0.29 ± 0.08	0.00 ± 0.00	-	0.09 ± 0.03
	TeGeS3	0.31 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.09 ± 0.03
Ge-Ti	GeTiS3	0.18 ± 0.05	0.69 ± 0.08	0.19 ± 0.05	0.17 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.16 ± 0.04	0.12 ± 0.03	0.17 ± 0.03	-	0.03 ± 0.04
	TiGeS3	0.11 ± 0.05	1.31 ± 0.11	0.10 ± 0.03	0.63 ± 0.07	0.05 ± 0.01	0.27 ± 0.04	0.23 ± 0.04	0.09 ± 0.06	-	0.03 ± 0.04
Ge-Zn	GeZnS3	0.18 ± 0.04	1.07 ± 0.14	0.06 ± 0.04	0.33 ± 0.06	0.22 ± 0.06	0.14 ± 0.03	0.22 ± 0.06	0.26 ± 0.04	-	0.15 ± 0.07
	ZnGeS3	0.25 ± 0.05	1.06 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.31 ± 0.06	0.21 ± 0.04	0.24 ± 0.06	0.23 ± 0.06	0.21 ± 0.05	-	0.15 ± 0.07
Ge-Zr	GeZrS3	0.17 ± 0.05	0.72 ± 0.06	0.27 ± 0.05	0.71 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.16 ± 0.05	0.16 ± 0.05	0.18 ± 0.02	-	0.06 ± 0.02
	ZrGeS3	0.12 ± 0.04	1.26 ± 0.11	0.16 ± 0.04	1.06 ± 0.10	0.05 ± 0.01	0.24 ± 0.04	0.20 ± 0.03	0.14 ± 0.05	-	0.06 ± 0.02
Hf-Mg	HfMgS3	0.05 ± 0.04	1.55 ± 0.13	0.02 ± 0.05	1.18 ± 0.12	0.39 ± 0.07	0.11 ± 0.03	0.11 ± 0.03	0.00 ± 0.00	-	0.03 ± 0.01
	MgHfS3	0.05 ± 0.02	0.79 ± 0.14	0.24 ± 0.04	0.14 ± 0.05	0.10 ± 0.03	0.10 ± 0.04	0.10 ± 0.04	0.21 ± 0.06	-	0.03 ± 0.01
Hf-Os	HfOsS3	0.09 ± 0.02	1.36 ± 0.09	0.23 ± 0.03	1.09 ± 0.09	0.07 ± 0.03	0.01 ± 0.01	0.00 ± 0.00	0.46 ± 0.05	-	0.32 ± 0.06
	OsHfS3	0.98 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.32 ± 0.06
Hf-Pb	HfPbS3	0.19 ± 0.06	2.05 ± 0.10	0.07 ± 0.05	0.04 ± 0.04	0.32 ± 0.06	0.26 ± 0.05	0.20 ± 0.05	0.15 ± 0.07	-	0.00 ± 0.02
	PbHfS3	0.16 ± 0.03	0.34 ± 0.05	0.19 ± 0.09	0.32 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.07 ± 0.02	0.04 ± 0.01	0.04 ± 0.04	-	0.00 ± 0.02
Hf-Pt	HfPtS3	0.04 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.27 ± 0.02
	PtHfS3	0.49 ± 0.04	1.21 ± 0.12	0.05 ± 0.06	0.51 ± 0.06	0.20 ± 0.03	0.04 ± 0.01	0.00 ± 0.00	0.12 ± 0.02	-	0.27 ± 0.02
Hf-Sn	HfSnS3	0.13 ± 0.04	1.70 ± 0.10	0.17 ± 0.03	1.54 ± 0.12	0.31 ± 0.07	0.28 ± 0.03	0.24 ± 0.05	0.16 ± 0.06	-	0.03 ± 0.04
	SnHfS3	0.16 ± 0.03	0.43 ± 0.05	0.23 ± 0.07	0.43 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.12 ± 0.03	0.10 ± 0.02	0.07 ± 0.03	-	0.03 ± 0.04
Hf-Sr	HfSrS3	1.04 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.27 ± 0.04
	SrHfS3	0.18 ± 0.05	0.21 ± 0.04	0.21 ± 0.10	0.21 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.03	0.04 ± 0.03	0.07 ± 0.04	-	0.27 ± 0.04
Hf-Te	HfTeS3	0.02 ± 0.04	1.64 ± 0.08	0.07 ± 0.04	0.21 ± 0.08	0.19 ± 0.07	0.05 ± 0.03	0.05 ± 0.03	0.04 ± 0.04	-	0.29 ± 0.04
	TeHfS3	0.03 ± 0.04	0.55 ± 0.06	0.05 ± 0.08	0.02 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.17 ± 0.04	0.16 ± 0.04	0.03 ± 0.03	-	0.29 ± 0.04
Hf-Zn	HfZnS3	0.11 ± 0.02	1.53 ± 0.15	0.04 ± 0.03	0.51 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.22 ± 0.05	0.20 ± 0.04	0.12 ± 0.01	-	0.24 ± 0.06
	ZnHfS3	0.43 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.19 ± 0.05
In-In	In2S3	0.39 ± 0.05	0.95 ± 0.12	0.00 ± 0.04	0.46 ± 0.06	0.10 ± 0.05	0.12 ± 0.06	0.03 ± 0.06	0.00 ± 0.00	-	0.19 ± 0.05
In-La	InLaS3	0.40 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.22 ± 0.09
	LaInS3	0.18 ± 0.07	0.51 ± 0.06	0.06 ± 0.11	0.46 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.42 ± 0.10	-	0.22 ± 0.09
In-Sb	InSbS3	0.07 ± 0.03	0.70 ± 0.07	0.14 ± 0.03	0.47 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.14 ± 0.01	0.08 ± 0.03	0.09 ± 0.08	-	0.16 ± 0.11
	SbInS3	0.07 ± 0.05	0.95 ± 0.09	0.07 ± 0.05	0.29 ± 0.06	0.03 ± 0.03	0.11 ± 0.04	0.11 ± 0.04	0.32 ± 0.03	-	0.16 ± 0.11
In-Sc	InScS3	0.52 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	0.47 ± 0.06
	ScInS3	0.03 ± 0.03	1.16 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.35 ± 0.04	0.05 ± 0.03	0.11 ± 0.04	0.11 ± 0.04	0.43 ± 0.07	-	0.47 ± 0.06
In-Tl	InTlS3	0.09 ± 0.06	0.98 ± 0.09	0.00 ± 0.00	0.37 ± 0.06	0.04 ± 0.03	0.17 ± 0.03	0.09 ± 0.03	0.01 ± 0.05	-	0.47 ± 0.06

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	TlInS3	0.34 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	0.47 ± 0.06
In-V	InVS3	0.36 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	0.09 ± 0.09
	VInS3	0.13 ± 0.04	1.59 ± 0.10	0.05 ± 0.03	0.90 ± 0.09	0.00 ± 0.00	0.24 ± 0.04	0.23 ± 0.04	0.10 ± 0.04	-	0.09 ± 0.09
In-Y	InYS3	0.62 ± 0.06	0.92 ± 0.10	0.20 ± 0.02	0.51 ± 0.06	0.19 ± 0.07	0.10 ± 0.04	0.05 ± 0.05	0.13 ± 0.06	-	0.58 ± 0.13
	YInS3	0.02 ± 0.02	0.82 ± 0.13	0.00 ± 0.00	0.75 ± 0.12	0.16 ± 0.10	0.05 ± 0.06	0.05 ± 0.06	0.34 ± 0.06	-	0.58 ± 0.13
Ir-Sc	IrScS3	0.79 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	0.11 ± 0.03
	ScIrS3	0.39 ± 0.05	1.04 ± 0.08	0.39 ± 0.07	0.77 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.20 ± 0.05	-	0.11 ± 0.03
Ir-Ta	IrTaS3	0.30 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.26 ± 0.04
	TaIrS3	0.00 ± 0.00	1.57 ± 0.11	0.03 ± 0.01	1.28 ± 0.11	0.16 ± 0.04	0.09 ± 0.02	0.09 ± 0.02	0.14 ± 0.01	-	0.26 ± 0.04
K-Ta	KTaS3	0.12 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	0.32 ± 0.08
	TaKS3	0.95 ± 0.07	3.41 ± 0.13	0.07 ± 0.05	1.68 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.29 ± 0.06	0.28 ± 0.05	0.06 ± 0.06	-	0.32 ± 0.08
La-La	La2S3	0.16 ± 0.10	1.04 ± 0.06	0.27 ± 0.09	0.93 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.07	0.13 ± 0.07	0.09 ± 0.08	-	0.32 ± 0.08
La-Rh	LaRhS3	0.34 ± 0.06	0.55 ± 0.08	0.33 ± 0.07	0.32 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.14 ± 0.04	0.14 ± 0.04	0.49 ± 0.07	-	0.16 ± 0.10
	RhLaS3	0.83 ± 0.12	-	-	-	-	-	-	-	-	0.16 ± 0.10
La-Sb	LaSbS3	0.06 ± 0.06	0.51 ± 0.06	0.08 ± 0.06	0.50 ± 0.06	0.06 ± 0.06	0.03 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.29 ± 0.05	-	0.05 ± 0.03
	SbLaS3	0.48 ± 0.04	1.27 ± 0.08	0.20 ± 0.06	0.63 ± 0.06	0.03 ± 0.03	0.04 ± 0.07	0.05 ± 0.07	0.00 ± 0.00	-	0.05 ± 0.03
La-Sc	LaScS3	0.22 ± 0.03	0.36 ± 0.06	0.21 ± 0.08	0.39 ± 0.06	0.01 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.00 ± 0.00	0.11 ± 0.04	-	0.29 ± 0.03
	ScLaS3	0.93 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.29 ± 0.03
La-Te	LaTaS3	0.07 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.23 ± 0.05
	TaLaS3	0.50 ± 0.06	2.37 ± 0.11	0.06 ± 0.06	1.40 ± 0.15	0.15 ± 0.06	0.26 ± 0.06	0.18 ± 0.08	0.00 ± 0.00	-	0.23 ± 0.05
La-Tl	LaTlS3	0.04 ± 0.04	0.58 ± 0.09	0.02 ± 0.04	0.53 ± 0.07	0.00 ± 0.07	0.03 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.10 ± 0.05
	TlLaS3	0.19 ± 0.01	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.10 ± 0.05
La-Y	LaYS3	0.15 ± 0.10	0.62 ± 0.04	0.27 ± 0.10	0.63 ± 0.07	0.03 ± 0.01	0.06 ± 0.05	0.06 ± 0.05	0.11 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.42 ± 0.07
	YLaS3	0.13 ± 0.07	1.47 ± 0.10	0.26 ± 0.08	0.53 ± 0.09	0.12 ± 0.02	0.22 ± 0.06	0.23 ± 0.06	0.21 ± 0.05	-	0.42 ± 0.07
Li-Nb	LiNbS3	0.29 ± 0.17	-	-	-	-	-	-	-	-	0.04 ± 0.10
	NbLiS3	0.03 ± 0.05	1.61 ± 0.15	0.01 ± 0.06	0.70 ± 0.08	0.00 ± 0.00	0.12 ± 0.06	0.12 ± 0.06	0.02 ± 0.07	-	0.04 ± 0.10
Li-Ta	LiTaS3	0.32 ± 0.19	-	-	-	-	-	-	-	-	0.11 ± 0.08
	TaLiS3	0.06 ± 0.04	1.86 ± 0.16	0.00 ± 0.00	0.76 ± 0.07	0.02 ± 0.05	0.16 ± 0.04	0.16 ± 0.05	0.05 ± 0.05	-	0.11 ± 0.08
Li-V	LiVS3	0.09 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.06 ± 0.09
	VLiS3	0.13 ± 0.06	1.69 ± 0.15	0.07 ± 0.03	0.74 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.20 ± 0.05	0.19 ± 0.06	0.02 ± 0.04	-	0.06 ± 0.09
Mg-Pb	MgPbS3	0.04 ± 0.07	1.01 ± 0.12	0.06 ± 0.04	0.25 ± 0.08	0.18 ± 0.02	0.19 ± 0.02	0.09 ± 0.01	0.03 ± 0.06	-	0.26 ± 0.04
	PbMgS3	0.09 ± 0.06	0.54 ± 0.07	0.10 ± 0.05	0.29 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.14 ± 0.01	0.09 ± 0.01	0.05 ± 0.05	-	0.26 ± 0.04
Mg-Sn	MgSnS3	0.04 ± 0.03	0.89 ± 0.12	0.00 ± 0.00	0.09 ± 0.03	0.01 ± 0.04	0.09 ± 0.04	0.02 ± 0.03	0.30 ± 0.06	-	0.10 ± 0.05
	SnMgS3	0.55 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.10 ± 0.05
Mg-Te	MgTeS3	0.04 ± 0.03	0.84 ± 0.13	0.07 ± 0.04	0.73 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.17 ± 0.04	0.03 ± 0.04	0.27 ± 0.03	-	0.19 ± 0.05
	TeMgS3	0.48 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.19 ± 0.05
Mg-Ti	MgTiS3	0.13 ± 0.05	0.74 ± 0.11	0.11 ± 0.05	0.14 ± 0.05	0.12 ± 0.03	0.10 ± 0.05	0.10 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.06 ± 0.02
	TiMgS3	0.06 ± 0.03	1.51 ± 0.13	0.04 ± 0.06	0.39 ± 0.05	0.12 ± 0.04	0.15 ± 0.04	0.14 ± 0.04	0.11 ± 0.02	-	0.06 ± 0.02
Mg-Zr	MgZrS3	0.02 ± 0.04	0.74 ± 0.13	0.21 ± 0.03	0.13 ± 0.04	0.06 ± 0.04	0.10 ± 0.06	0.10 ± 0.07	0.18 ± 0.04	-	0.14 ± 0.07



	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 \cdot 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	ZrMgS3	0.02 ± 0.03	1.35 ± 0.11	0.00 ± 0.04	1.02 ± 0.11	0.31 ± 0.08	0.07 ± 0.05	0.07 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.14 ± 0.07
Mn-Ta	MnTaS3	0.25 ± 0.03	1.44 ± 0.10	0.43 ± 0.04	0.93 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.31 ± 0.04	0.28 ± 0.04	0.40 ± 0.06	-	0.05 ± 0.04
	TaMnS3	0.12 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	0.05 ± 0.04
Mn-V	MnVS3	0.53 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.09 ± 0.05
	VMnS3	0.00 ± 0.00	1.27 ± 0.11	0.09 ± 0.02	0.01 ± 0.05	0.03 ± 0.04	0.06 ± 0.05	0.03 ± 0.05	0.06 ± 0.03	-	0.09 ± 0.05
NA-Nb	NaNbS3	0.19 ± 0.13	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.04 ± 0.07
	NbNaS3	0.44 ± 0.07	2.31 ± 0.13	0.05 ± 0.04	0.84 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.18 ± 0.05	0.17 ± 0.05	0.06 ± 0.06	-	0.04 ± 0.07
Na-Ta	NaTaS3	0.21 ± 0.12	-	-	-	-	-	-	-	-	0.20 ± 0.08
	TaNaS3	0.56 ± 0.07	2.60 ± 0.16	0.04 ± 0.04	0.90 ± 0.08	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.05	0.21 ± 0.05	0.05 ± 0.05	-	0.20 ± 0.08
Nb-Rb	NbRbS3	0.87 ± 0.06	3.38 ± 0.11	0.07 ± 0.04	1.28 ± 0.09	0.00 ± 0.00	0.01 ± 0.03	0.10 ± 0.05	0.02 ± 0.06	-	0.17 ± 0.07
	RbNbS3	0.12 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	0.17 ± 0.07
Os-Sn	OsSnS3	0.11 ± 0.06	2.12 ± 0.11	0.03 ± 0.03	0.51 ± 0.07	0.18 ± 0.03	0.38 ± 0.03	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.05	-	0.22 ± 0.06
	SnOsS3	0.23 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.22 ± 0.06
Os-Ti	OsTiS3	0.27 ± 0.07	1.76 ± 0.13	0.16 ± 0.05	0.74 ± 0.05	0.05 ± 0.02	0.29 ± 0.04	0.25 ± 0.03	0.21 ± 0.03	-	0.27 ± 0.04
	TiOsS3	0.00 ± 0.00	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.27 ± 0.04
Pb-Sr	PbSrS3	0.15 ± 0.03	1.16 ± 0.08	0.21 ± 0.03	0.11 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.18 ± 0.04	0.05 ± 0.04	0.01 ± 0.02	-	0.00 ± 0.04
	SrPbS3	0.11 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	0.00 ± 0.04
Pb-Te	PbTeS3	0.04 ± 0.04	0.41 ± 0.07	0.05 ± 0.03	0.32 ± 0.07	0.04 ± 0.06	0.08 ± 0.04	0.03 ± 0.03	0.20 ± 0.04	-	0.21 ± 0.09
	TePbS3	0.14 ± 0.04	1.12 ± 0.08	0.08 ± 0.02	0.35 ± 0.07	0.11 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.00 ± 0.00	0.11 ± 0.05	-	0.21 ± 0.09
Pb-Tl	PbTlS3	0.10 ± 0.03	0.29 ± 0.07	0.06 ± 0.08	0.21 ± 0.05	0.02 ± 0.03	0.08 ± 0.04	0.03 ± 0.02	0.05 ± 0.06	-	0.06 ± 0.03
	TlPbS3	0.12 ± 0.06	1.74 ± 0.10	0.11 ± 0.04	0.07 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.11 ± 0.06	0.21 ± 0.05	0.01 ± 0.05	-	0.06 ± 0.03
Pb-Zn	PbZnS3	0.09 ± 0.03	0.68 ± 0.13	0.23 ± 0.03	0.48 ± 0.08	0.15 ± 0.06	0.38 ± 0.07	0.05 ± 0.04	0.15 ± 0.06	-	0.14 ± 0.08
	ZnPbS3	0.14 ± 0.04	1.33 ± 0.07	0.31 ± 0.03	0.63 ± 0.09	0.41 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.34 ± 0.05	0.12 ± 0.04	-	0.14 ± 0.08
Pb-Zr	PbZrS3	0.17 ± 0.04	0.33 ± 0.04	0.19 ± 0.09	0.34 ± 0.04	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.01	0.08 ± 0.03	0.04 ± 0.04	-	0.18 ± 0.06
	ZrPbS3	0.14 ± 0.05	1.82 ± 0.07	0.13 ± 0.05	0.05 ± 0.04	0.28 ± 0.06	0.27 ± 0.05	0.21 ± 0.05	0.13 ± 0.07	-	0.18 ± 0.06
Rb-Ta	RbTaS3	0.13 ± 0.02	-	-	-	-	-	-	-	-	0.30 ± 0.07
	TaRbS3	0.96 ± 0.07	3.70 ± 0.14	0.07 ± 0.05	0.62 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.02 ± 0.03	0.10 ± 0.05	0.04 ± 0.06	-	0.30 ± 0.07
Rh-Sb	RhSbS3	0.53 ± 0.05	1.63 ± 0.10	0.16 ± 0.04	1.30 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.38 ± 0.05	0.15 ± 0.04	0.29 ± 0.04	-	0.13 ± 0.08
	SbRhS3	0.27 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.06 ± 0.05
Sb-Sb	Sb2S3	0.00 ± 0.00	0.76 ± 0.09	0.05 ± 0.03	0.59 ± 0.09	0.13 ± 0.08	0.06 ± 0.07	0.06 ± 0.07	0.06 ± 0.03	-	0.06 ± 0.05
Sb-Sc	SbScS3	0.10 ± 0.04	0.80 ± 0.07	0.19 ± 0.05	0.33 ± 0.05	0.03 ± 0.03	0.09 ± 0.04	0.09 ± 0.04	0.06 ± 0.02	-	0.28 ± 0.04
	ScSbS3	0.08 ± 0.03	1.13 ± 0.09	0.14 ± 0.03	1.07 ± 0.10	0.00 ± 0.00	0.23 ± 0.03	0.20 ± 0.03	0.14 ± 0.05	-	0.28 ± 0.04
Sb-Tl	SbTlS3	0.07 ± 0.04	1.06 ± 0.08	0.07 ± 0.04	0.39 ± 0.08	0.00 ± 0.00	0.09 ± 0.03	0.09 ± 0.03	0.14 ± 0.02	-	0.16 ± 0.03
	TlSbS3	0.26 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.16 ± 0.03
Sb-Y	SbYS3	0.03 ± 0.04	0.96 ± 0.06	0.18 ± 0.04	0.62 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.02 ± 0.03	0.02 ± 0.03	0.08 ± 0.04	-	0.33 ± 0.07
	YSbS3	0.02 ± 0.01	0.84 ± 0.10	0.06 ± 0.02	0.79 ± 0.09	0.11 ± 0.05	0.09 ± 0.03	0.09 ± 0.03	0.37 ± 0.03	-	0.31 ± 0.07
Sc-Sc	Sc2S3	0.00 ± 0.04	0.90 ± 0.09	0.09 ± 0.04	0.90 ± 0.09	0.00 ± 0.00	0.01 ± 0.02	0.01 ± 0.02	0.18 ± 0.07	-	0.31 ± 0.07
	ScTiS3	0.05 ± 0.03	1.28 ± 0.11	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.06	0.09 ± 0.02	0.16 ± 0.03	0.13 ± 0.03	0.04 ± 0.04	-	0.20 ± 0.05

	Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 \cdot 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
	TlSeS3	0.31 ± 0.04	0.43 ± 0.08	0.11 ± 0.03	0.15 ± 0.03	0.01 ± 0.03	0.09 ± 0.05	0.09 ± 0.04	0.06 ± 0.04	-	0.20 ± 0.05
Sc-Y	ScYS3	0.04 ± 0.02	1.29 ± 0.09	0.24 ± 0.04	0.38 ± 0.04	0.04 ± 0.04	0.17 ± 0.03	0.17 ± 0.03	0.08 ± 0.02	-	0.66 ± 0.06
	YSceS3	0.07 ± 0.05	0.69 ± 0.07	0.17 ± 0.05	0.68 ± 0.08	0.07 ± 0.05	0.03 ± 0.04	0.03 ± 0.04	0.00 ± 0.00	-	0.66 ± 0.06
Sn-Sr	SnSrS3	0.38 ± 0.06	1.47 ± 0.11	0.10 ± 0.06	0.34 ± 0.08	0.21 ± 0.02	0.00 ± 0.00	0.03 ± 0.05	0.06 ± 0.03	-	0.11 ± 0.03
	SrSnS3	0.19 ± 0.03	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.11 ± 0.03
Sn-Te	SnTeS3	0.05 ± 0.06	0.48 ± 0.03	0.11 ± 0.03	0.42 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.03	0.13 ± 0.03	0.12 ± 0.04	-	0.23 ± 0.05
	TeSnS3	0.15 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.23 ± 0.05
Sn-Ti	SnTiS3	0.14 ± 0.04	0.40 ± 0.06	0.13 ± 0.07	0.34 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.04	0.09 ± 0.02	0.07 ± 0.05	-	0.00 ± 0.05
	TiSnS3	0.11 ± 0.05	1.46 ± 0.10	0.17 ± 0.03	0.43 ± 0.07	0.03 ± 0.00	0.31 ± 0.04	0.21 ± 0.04	0.08 ± 0.06	-	0.00 ± 0.05
Sn-Zn	SnZnS3	0.41 ± 0.06	-	-	-	-	-	-	-	-	0.23 ± 0.06
	ZnSnS3	0.33 ± 0.07	1.13 ± 0.08	0.13 ± 0.04	0.22 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.05	0.20 ± 0.05	0.30 ± 0.05	-	0.23 ± 0.06
Sn-Zr	SnZrS3	0.17 ± 0.04	0.45 ± 0.05	0.23 ± 0.07	0.44 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.13 ± 0.04	0.14 ± 0.04	0.05 ± 0.03	-	0.12 ± 0.04
	ZrSnS3	0.12 ± 0.04	1.49 ± 0.09	0.17 ± 0.03	0.40 ± 0.04	0.04 ± 0.01	0.28 ± 0.04	0.21 ± 0.05	0.14 ± 0.06	-	0.12 ± 0.04
Sr-Te	SrTeS3	0.06 ± 0.07	0.33 ± 0.04	0.06 ± 0.08	0.26 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.07 ± 0.04	0.01 ± 0.06	0.18 ± 0.08	-	0.01 ± 0.11
	TeSrS3	0.43 ± 0.08	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.01 ± 0.11
Sr-Zr	SrZrS3	0.20 ± 0.05	0.21 ± 0.04	0.21 ± 0.10	0.24 ± 0.05	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.04	0.04 ± 0.04	0.06 ± 0.04	-	0.47 ± 0.07
	ZrSrS3	0.98 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	0.47 ± 0.07
Ta-Tl	TaTlS3	0.06 ± 0.06	2.41 ± 0.11	0.01 ± 0.03	1.38 ± 0.11	0.00 ± 0.00	0.20 ± 0.05	0.18 ± 0.06	0.03 ± 0.01	-	0.02 ± 0.05
	TlTaS3	0.12 ± 0.07	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.02 ± 0.05
Ta-Y	TaYS3	0.36 ± 0.03	1.99 ± 0.09	0.19 ± 0.05	0.10 ± 0.03	0.15 ± 0.04	0.24 ± 0.04	0.12 ± 0.03	0.00 ± 0.00	-	0.11 ± 0.07
	YTas3	0.20 ± 0.04	-	-	-	-	-	-	-	-	0.11 ± 0.07
Te-Tl	TeTlS3	0.11 ± 0.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.18 ± 0.05
	TlTeS3	0.22 ± 0.03	1.47 ± 0.10	0.15 ± 0.05	1.41 ± 0.11	0.11 ± 0.06	0.20 ± 0.07	0.20 ± 0.07	0.00 ± 0.00	-	0.18 ± 0.05
Te-Zn	TeZnS3	0.02 ± 0.03	0.90 ± 0.13	0.05 ± 0.04	0.19 ± 0.03	0.01 ± 0.03	0.12 ± 0.06	0.12 ± 0.06	0.12 ± 0.02	-	0.17 ± 0.08
	ZnTeS3	0.06 ± 0.02	0.99 ± 0.05	0.15 ± 0.03	0.76 ± 0.05	0.07 ± 0.03	0.19 ± 0.05	0.11 ± 0.05	0.00 ± 0.00	-	0.17 ± 0.08
Ti-Zn	TiZnS3	0.04 ± 0.03	1.48 ± 0.15	0.01 ± 0.04	1.11 ± 0.12	0.00 ± 0.00	0.21 ± 0.05	0.19 ± 0.05	0.09 ± 0.01	-	0.19 ± 0.07
	ZnTiS3	0.06 ± 0.03	0.86 ± 0.09	0.21 ± 0.04	0.53 ± 0.06	0.02 ± 0.03	0.16 ± 0.06	0.16 ± 0.06	0.29 ± 0.04	-	0.19 ± 0.07
Tl-V	TlVS3	0.28 ± 0.09	-	-	-	-	-	-	-	-	-0.08 ± 0.06
	VTiS3	0.08 ± 0.02	1.95 ± 0.08	0.11 ± 0.05	0.75 ± 0.09	0.05 ± 0.06	0.02 ± 0.03	0.30 ± 0.08	0.00 ± 0.00	-	0.08 ± 0.06
Tl-Y	TlYS3	0.34 ± 0.06	0.56 ± 0.10	0.26 ± 0.04	0.37 ± 0.06	0.00 ± 0.00	0.09 ± 0.04	0.08 ± 0.04	0.15 ± 0.02	-	0.21 ± 0.03
	YTiS3	0.04 ± 0.04	0.96 ± 0.10	0.01 ± 0.04	0.15 ± 0.06	0.22 ± 0.08	0.10 ± 0.05	0.10 ± 0.05	0.09 ± 0.04	-	0.21 ± 0.05
Y-Y	Y2S3	0.06 ± 0.09	0.91 ± 0.06	0.16 ± 0.09	0.89 ± 0.07	0.00 ± 0.00	0.04 ± 0.05	0.04 ± 0.05	0.08 ± 0.05	-	0.21 ± 0.05
Zn-Zr	ZnZrS3	0.42 ± 0.07	0.88 ± 0.08	0.31 ± 0.04	0.67 ± 0.07	0.07 ± 0.03	0.15 ± 0.03	0.15 ± 0.03	0.13 ± 0.05	-	0.22 ± 0.08
	ZrZnS3	0.06 ± 0.03	1.31 ± 0.16	0.00 ± 0.00	0.95 ± 0.14	0.33 ± 0.10	0.17 ± 0.06	0.14 ± 0.04	0.05 ± 0.05	-	0.22 ± 0.08

Formula	$E^{dist}$	$E^{cubic}$	$E^{FePS_3}$	$E^{BaNiO_3}$	$E^{NH_4CdCl_3 \cdot 2}$	$E^{GdFeO_3}$	$E^{YScS_3}$	$E^{PbPS_3}$	$E^{other}$	$E^{Hull}$
---------	------------	-------------	--------------	---------------	--------------------------	---------------	--------------	--------------	-------------	------------

**Table 2: Energies with respect to the lowest-energy  $AB_2S_3$  phase for all the investigated compounds. The energy of the convex hull is reported as well. The column 'other' contains energies for the structures found in the ICSD: the prototype for  $AgTaS_3$  is Pyroxene-CaIrO<sub>3</sub>, for  $BiInS_3$  is  $BiInS_3$ , for  $CuTaS_3$  is  $CuTaS_3$  and for  $LaYS_3$  is  $CeTmS_3$**

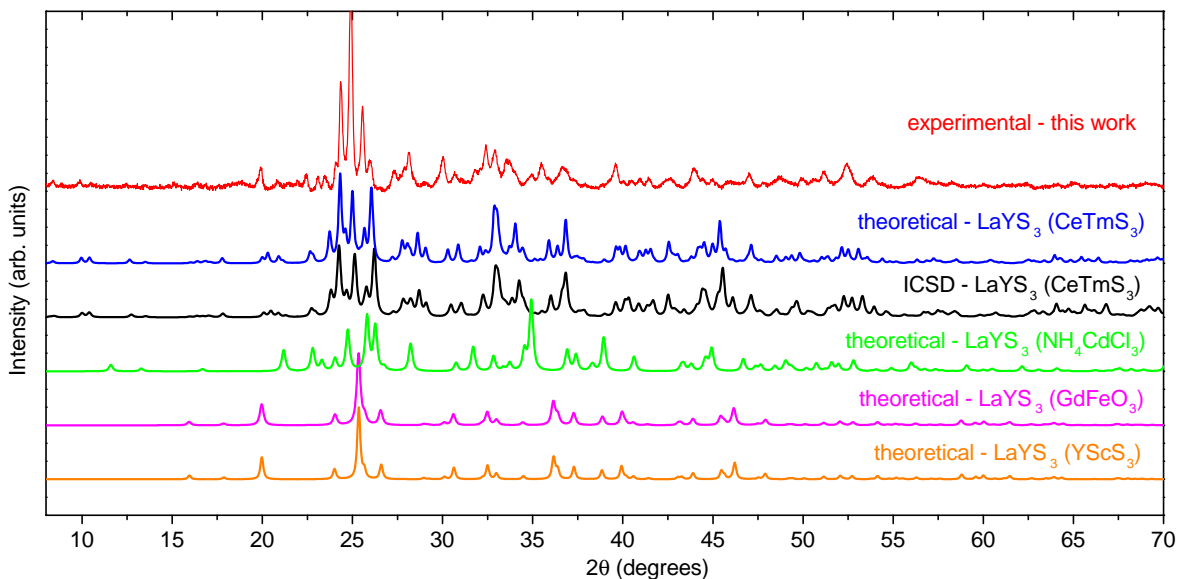


Figure S3: Experimental XRD pattern obtained in this work (red plot at the top) compared to reference XRD patterns of the four lowest-energy LaYS<sub>3</sub> structural prototypes according to our calculations (Fig. 3 in the main article). An ICSD-deposited XRD pattern for a powder LaYS<sub>3</sub> sample with the CeTmS<sub>3</sub> structure is also included (black plot; ICSD 641874). The ICSD reference and our calculated XRD for the CeTmS<sub>3</sub> structure (blue plot) are in very good agreement.