

PS5062 Table S1. Atom coordinates for the *F*-centred cell of the current study.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>sof</i>
Al6	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	1
Al7	0.2508	0.9170	0.4999	1
Cu1	0.0814	0.7581	0.4018	1
Cu2	0.0826	0.0920	0.4005	1
Cu3	0.0816	0.4256	0.3994	1
Sb4	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	0.715
Sb5	0.2506	0.1660	$\frac{1}{4}$	0.151
S5	0.1654	0.0020	0.2614	0.5
O1	0.3436	0.4232	0.4887	1
O2	0.4796	0.4195	0.3989	1
O3	0.0214	0.2471	0.1030	1
O4	0.1928	0.9284	0.4124	1
O6	0.4774	0.0867	0.3963	1
O7	0.1923	0.2632	0.4123	1
O8	0.1909	0.5958	0.4132	1
O9	0.1908	0.6665	0.1886	1
O10A	0.1860	0.0435	0.1935	0.5
O10B	0.2075	0.0015	0.1920	0.5
O11	0.3001	0.6493	0.3136	1
O12	0.0951	0.1210	0.2868	1
O13A	0.1100	0.8500	0.2680	0.5
O13B	0.0885	0.7925	0.2870	0.5
O14	0.3914	0.5381	0.2125	1
O15	0.1561	0.9100	0.0121	1
O16	0.3436	0.7554	0.4884	1