

[

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
2	0	0	17	-32	1	9	13	0	14	-18	-5	12	2	1	35	-33	3	11	9	1	43	-38	4	-4	18	1	9	-8	-4
4	0	0	28	32	1	11	13	0	25	17	-6	-13	3	1	44	-45	3	-12	10	1	26	24	4	-2	18	1	10	-15	-5
6	0	0	129	128	1	0	14	0	31	-39	2	-11	3	1	9	-5	-4	-10	10	1	14	-20	-5	0	18	1	22	15	3
8	0	0	119	130	1	2	14	0	33	23	1	-9	3	1	46	-43	1	-8	10	1	21	17	3	2	18	1	19	12	3
10	0	0	82	85	1	4	14	0	9	-4	-4	-7	3	1	52	-50	1	-6	10	1	48	-52	1	4	18	1	95	99	1
12	0	0	17	-2	-12	6	14	0	7	-9	-5	-5	3	1	51	-42	1	-4	10	1	67	61	1	6	18	1	80	-82	2
1	1	0	62	87	0	8	14	0	8	1	-5	-3	3	1	154	-136	1	-2	10	1	5	-9	-2	8	18	1	46	48	2
3	1	0	168	185	1	10	14	0	11	-6	-5	-1	3	1	32	51	0	0	10	1	35	-43	1	-9	19	1	8	-13	-8
5	1	0	89	-86	1	1	15	0	18	-4	2	1	3	1	181	-171	1	2	10	1	53	54	1	-7	19	1	34	31	2
7	1	0	89	90	1	3	15	0	8	5	-4	3	3	1	56	-51	1	4	10	1	42	-46	1	-5	19	1	11	-7	-4
9	1	0	39	36	1	5	15	0	56	60	1	5	3	1	28	-28	1	6	10	1	29	28	3	-3	19	1	7	2	-3
11	1	0	73	71	1	7	15	0	60	-60	2	7	3	1	51	-53	1	8	10	1	23	-21	-6	-1	19	1	42	-39	1
13	1	0	26	-26	-6	9	15	0	36	41	3	9	3	1	7	-8	-3	10	10	1	21	22	-5	1	19	1	38	38	2
0	2	0	26	-54	0	0	16	0	7	2	-5	11	3	1	56	-55	2	-11	11	1	18	-19	-7	3	19	1	10	-9	-5
2	2	0	12	-35	1	2	16	0	25	19	2	-12	4	1	33	-27	3	-9	11	1	8	-5	-5	5	19	1	10	5	-4
4	2	0	9	-25	-2	4	16	0	46	-50	1	-10	4	1	17	12	-5	-7	11	1	17	-15	-4	7	19	1	11	-4	-5
6	2	0	39	-45	1	6	16	0	50	47	1	-8	4	1	10	3	-5	-5	11	1	8	3	-4	-8	20	1	27	29	4
8	2	0	18	-22	2	8	16	0	8	4	-5	-6	4	1	5	-12	-3	-3	11	1	48	-38	1	-6	20	1	27	-24	3
10	2	0	15	-11	-4	10	16	0	37	-38	5	-4	4	1	4	-19	-2	-1	11	1	5	15	-3	-4	20	1	27	22	3
12	2	0	10	9	-5	1	17	0	23	-18	2	-2	4	1	5	-18	-3	1	11	1	34	-24	1	-2	20	1	21	9	3
1	3	0	28	-6	0	3	17	0	30	27	2	0	4	1	10	-13	1	3	11	1	16	-10	3	0	20	1	8	-5	-5
3	3	0	117	-105	3	5	17	0	7	-2	-4	2	4	1	4	-14	-2	5	11	1	17	-17	3	2	20	1	22	18	3
5	3	0	47	48	1	7	17	0	17	-20	-5	4	4	1	11	8	-3	7	11	1	19	9	-6	4	20	1	16	-14	-5
7	3	0	64	-67	1	9	17	0	25	18	4	6	4	1	7	1	-3	9	11	1	13	-14	-9	6	20	1	34	30	3
9	3	0	7	5	-4	0	18	0	8	-8	-6	8	4	1	7	-3	-3	11	11	1	9	-3	-5	-7	21	1	15	-6	-6
11	3	0	39	-36	2	2	18	0	10	-8	-5	10	4	1	24	-25	3	-10	12	1	8	-9	-5	-5	21	1	13	22	-5
13	3	0	13	6	-9	4	18	0	11	-15	-4	12	4	1	20	24	-8	-8	12	1	7	-5	-4	-3	21	1	29	-22	3
0	4	0	131	-152	1	6	18	0	8	5	-5	-13	5	1	72	66	2	-6	12	1	7	-5	-4	-1	21	1	59	63	2
2	4	0	100	84	1	8	18	0	21	-28	-4	-11	5	1	10	-4	-5	-4	12	1	5	-13	-3	1	21	1	50	-43	2
4	4	0	4	-13	-2	1	19	0	32	-27	2	-9	5	1	53	53	1	-2	12	1	16	2	2	3	21	1	21	23	4
6	4	0	5	-1	-3	3	19	0	62	-55	1	-7	5	1	150	161	1	0	12	1	10	-7	-3	5	21	1	17	12	-6
8	4	0	9	-5	-5	5	19	0	27	-26	3	-5	5	1	36	44	1	2	12	1	5	-14	-2	-6	22	1	9	-6	-6
10	4	0	23	-15	3	7	19	0	42	-43	2	-3	5	1	143	168	1	4	12	1	8	-1	-5	-4	22	1	29	28	4
12	4	0	11	11	-8	0	20	0	77	-78	2	-1	5	1	67	-43	0	6	12	1	7	-2	-5	-2	22	1	12	-9	-5
1	5	0	15	9	1	2	20	0	7	-4	-4	1	5	1	223	242	1	8	12	1	19	-17	-7	0	22	1	10	3	-6
3	5	0	80	-70	1	4	20	0	63	-65	1	3	5	1	105	109	1	10	12	1	9	1	-5	2	22	1	32	30	3
5	5	0	15	-7	2	6	20	0	34	-32	2	5	5	1	113	116	1	-11	13	1	22	-30	-6	4	22	1	31	-28	4
7	5	0	7	-3	-3	8	20	0	27	-22	4	7	5	1	37	34	1	-9	13	1	18	-12	-5	-5	23	1	15	-2	-15
9	5	0	7	-4	-3	1	21	0	17	15	-6	9	5	1	15	12	-5	-7	13	1	30	-31	2	-3	23	1	11	9	-6
11	5	0	33	-36	3	3	21	0	27	-21	3	11	5	1	104	101	1	-5	13	1	14	-9	-5	-1	23	1	20	11	-6
13	5	0	31	16	-7	5	21	0	12	13	-5	-12	6	1	14	-6	-6	-3	13	1	61	-56	1	1	23	1	11	-14	-6
0	6	0	9	-31	-3	7	21	0	17	-11	-8	-10	6	1	98	100	1	-1	13	1	7	5	-3	3	23	1	18	9	-9
2	6	0	6	-18	-3	0	22	0	69	64	2	-8	6	1	29	-29	2	1	13	1	72	-68	1	-2	24	1	11	-16	-6
4	6	0	17	-24	1	2	22	0	13	12	-6	-6	6	1	271	267	1	3	13	1	5	1	-3	0	24	1	13	-13	-7
6	6	0	6	-2	-3	4	22	0	54	46	2	-4	6	1	88	73	1	5	13	1	27	-29	2	2	24	1	17	-20	-7

8	6	0	34	-36	1	6	22	0	14	5	-6	-2	6	1	16	-21	1	7	13	1	33	-32	3	-12	0	2	118	120	2
10	6	0	12	13	-6	1	23	0	20	19	-4	0	6	1	156	143	0	9	13	1	17	-20	-7	-10	0	2	72	70	1
12	6	0	21	-20	-5	3	23	0	52	58	2	2	6	1	190	175	1	-10	14	1	68	-66	2	-8	0	2	25	-31	2
1	7	0	63	-44	1	5	23	0	46	-43	2	4	6	1	234	229	1	-8	14	1	25	-22	4	-6	0	2	240	222	2
3	7	0	23	30	1	0	24	0	106	102	2	6	6	1	81	-85	1	-6	14	1	65	-71	1	-4	0	2	160	130	1
5	7	0	16	-8	2	2	24	0	48	-47	2	8	6	1	122	127	1	-4	14	1	6	-13	-3	-2	0	2	325	303	1
7	7	0	60	-60	1	1	25	0	10	1	-7	10	6	1	25	22	3	-2	14	1	93	-103	1	0	0	2	82	-81	1
9	7	0	36	33	2	-12	0	1	9	-11	-6	12	6	1	64	64	2	0	14	1	73	-79	1	2	0	2	190	187	2
11	7	0	25	-28	4	-10	0	1	19	-22	-4	-13	7	1	40	31	6	2	14	1	15	7	3	4	0	2	131	133	1
0	8	0	19	-11	1	-8	0	1	6	-16	-4	-11	7	1	29	-28	3	4	14	1	105	-111	2	6	0	2	84	89	1
2	8	0	23	-32	1	-6	0	1	10	-22	-7	-9	7	1	8	3	-4	6	14	1	17	-10	-6	8	0	2	111	115	1
4	8	0	152	-163	2	-4	0	1	34	-48	1	-7	7	1	72	74	1	8	14	1	55	-55	2	10	0	2	42	-39	3
6	8	0	31	30	2	-2	0	1	8	-28	2	-5	7	1	31	-24	1	10	14	1	22	-18	-6	-13	1	2	72	69	2
8	8	0	21	-21	3	0	0	1	16	-34	1	-3	7	1	41	51	1	-9	15	1	13	-15	-5	-11	1	2	21	-17	3
10	8	0	85	-86	2	2	0	1	32	-41	1	-1	7	1	119	-106	1	-7	15	1	23	-18	3	-9	1	2	83	83	1
12	8	0	21	15	-7	4	0	1	21	-23	2	1	7	1	88	97	1	-5	15	1	23	-18	2	-7	1	2	44	-37	1
1	9	0	111	-95	1	6	0	1	17	-16	3	3	7	1	23	25	1	-3	15	1	55	-48	1	-5	1	2	93	103	1
3	9	0	42	-31	1	8	0	1	27	-22	2	5	7	1	44	41	1	-1	15	1	7	15	-4	-3	1	2	146	153	1
5	9	0	18	-14	1	10	0	1	8	0	-6	7	7	1	19	-18	-4	1	15	1	79	-72	1	-1	1	2	19	28	1
7	9	0	112	-116	2	12	0	1	20	-23	-13	9	7	1	16	-16	-5	3	15	1	7	-1	-4	1	1	2	17	26	1
9	9	0	19	15	-5	-13	1	1	10	-2	-6	11	7	1	68	62	2	5	15	1	7	-1	-4	3	1	2	15	-17	1
11	9	0	26	-24	4	-11	1	1	22	-21	4	-12	8	1	23	-19	-6	7	15	1	36	-41	3	5	1	2	192	189	1
0	10	0	91	73	1	-9	1	1	7	-4	-3	-10	8	1	11	-14	-5	9	15	1	9	0	-5	7	1	2	16	-20	3
2	10	0	26	13	1	-7	1	1	26	-20	1	-8	8	1	22	11	3	-10	16	1	42	43	2	9	1	2	35	33	2
4	10	0	49	44	1	-5	1	1	5	11	-2	-6	8	1	36	-44	1	-8	16	1	29	24	3	11	1	2	20	18	-9
6	10	0	6	3	-4	-3	1	1	79	-54	0	-4	8	1	5	-17	-3	-6	16	1	58	56	1	-12	2	2	19	-21	-6
8	10	0	20	18	3	-1	1	1	14	38	1	-2	8	1	3	-25	-2	-4	16	1	36	24	1	-10	2	2	22	-24	3
10	10	0	27	26	4	1	1	1	80	-62	0	0	8	1	14	-31	1	-2	16	1	50	36	1	-8	2	2	18	-29	2
12	10	0	16	20	-12	3	1	1	5	7	-3	2	8	1	7	-16	-3	0	16	1	59	54	1	-6	2	2	7	-17	-3
1	11	0	126	139	1	5	1	1	16	-15	2	4	8	1	32	-37	1	2	16	1	39	33	1	-4	2	2	13	-36	1
3	11	0	99	113	1	7	1	1	6	-8	-3	6	8	1	12	11	-4	4	16	1	62	61	1	-2	2	2	29	-48	1
5	11	0	31	-33	1	9	1	1	15	-15	-5	8	8	1	25	-22	3	6	16	1	24	15	-5	0	2	2	17	-28	1
7	11	0	152	156	2	11	1	1	8	-5	-4	10	8	1	20	-21	-7	8	16	1	42	38	3	2	2	2	24	-31	1
9	11	0	17	17	-6	-12	2	1	22	20	-5	12	8	1	9	6	-9	-9	17	1	22	26	4	4	2	2	42	-43	1
11	11	0	67	73	2	-10	2	1	46	-45	1	-11	9	1	26	25	3	-7	17	1	88	96	1	6	2	2	8	-3	-3
0	12	0	231	228	2	-8	2	1	14	8	-3	-9	9	1	7	-12	-4	-5	17	1	9	8	-4	8	2	2	8	-5	-4
2	12	0	25	-33	1	-6	2	1	65	-70	2	-7	9	1	20	-14	2	-3	17	1	88	97	1	10	2	2	11	-5	-5
4	12	0	78	72	1	-4	2	1	89	66	0	-5	9	1	19	30	2	-1	17	1	44	-43	1	-13	3	2	26	-27	5
6	12	0	7	-11	-5	-2	2	1	54	-72	0	-3	9	1	71	-59	1	1	17	1	132	137	1	-11	3	2	32	32	2
8	12	0	50	55	1	0	2	1	69	-88	1	-1	9	1	98	110	0	3	17	1	25	25	3	-9	3	2	89	-88	1
10	12	0	78	86	2	2	2	1	89	75	1	1	9	1	88	-79	0	5	17	1	59	62	1	-7	3	2	33	39	1
1	13	0	22	26	2	4	2	1	92	-94	1	3	9	1	5	11	-3	7	17	1	28	27	3	-5	3	2	36	-22	1
3	13	0	18	-12	2	6	2	1	21	19	2	5	9	1	15	12	3	9	17	1	9	-3	-6	-3	3	2	115	-93	1
5	13	0	63	-66	1	8	2	1	43	-43	1	7	9	1	8	-10	-5	-8	18	1	43	-43	3	-1	3	2	24	-8	1
7	13	0	54	56	1	10	2	1	8	9	-4	9	9	1	26	17	4	-6	18	1	88	91	2	1	3	2	8	4	-3

[

Observed and calculated structure factors for oxygenian potassian titano-kornite in C2/m

Page 2

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---	---	---	---	----	----	---

3	3	2	5	2	-3	-11	11	2	12	13	-6	-6	20	2	86	-87	1	-5	5	3	116	127	1	-5	13	3	63	-57	1
5	3	2	118	-120	2	-9	11	2	70	73	1	-4	20	2	8	2	-5	-3	5	3	22	29	1	-3	13	3	6	2	-4
7	3	2	53	52	1	-7	11	2	10	-3	-4	-2	20	2	41	-44	2	-1	5	3	210	210	1	-1	13	3	44	-43	1
9	3	2	21	-19	3	-5	11	2	159	172	1	0	20	2	32	-32	3	1	5	3	44	44	1	1	13	3	10	-13	-6

```

11 3 2 36 -34 3 -3 11 2 88 97 0 2 20 2 73 -73 2 3 5 3 51 48 1 3 13 3 30 -31 2
-12 4 2 48 -49 2 -1 11 2 20 27 1 4 20 2 9 -4 -5 5 5 3 74 69 1 5 13 3 24 -27 3
-10 4 2 23 19 3 1 11 2 145 148 1 6 20 2 16 -16 -16 7 5 3 31 27 2 7 13 3 10 -15 -6
-8 4 2 73 66 1 3 11 2 9 -12 -4 -7 21 2 16 15 -16 9 5 3 100 94 1 -10 14 3 17 -12 -6
-6 4 2 120 -127 1 5 11 2 148 152 1 -5 21 2 9 8 -5 -12 6 3 109 109 1 -8 14 3 61 -64 1
-4 4 2 54 44 1 7 11 2 28 23 3 -3 21 2 10 -7 -6 -10 6 3 12 11 -5 -6 14 3 11 -23 -4
-2 4 2 76 55 1 9 11 2 56 56 2 -1 21 2 16 2 -6 -8 6 3 150 147 1 -4 14 3 59 -63 1
0 4 2 4 -3 -2 -10 12 2 42 43 2 1 21 2 9 -2 -5 -6 6 3 18 3 2 -2 14 3 78 -80 1
2 4 2 97 -93 0 -8 12 2 8 -10 -5 3 21 2 11 8 -6 -4 6 3 45 35 1 0 14 3 10 8 -6
4 4 2 67 72 1 -6 12 2 72 63 1 5 21 2 24 -21 -6 -2 6 3 221 215 1 2 14 3 92 -91 1
6 4 2 8 -2 -4 -4 12 2 10 0 -3 -6 22 2 57 52 4 0 6 3 75 71 1 4 14 3 20 -15 3
8 4 2 63 -64 1 -2 12 2 236 234 1 -4 22 2 16 11 -9 2 6 3 132 136 1 6 14 3 57 -56 2
10 4 2 50 47 2 0 12 2 119 -128 0 -2 22 2 68 59 2 4 6 3 71 -73 1 8 14 3 14 -11 -7
-13 5 2 13 -16 -7 2 12 2 44 39 1 0 22 2 17 3 -7 6 6 3 153 155 1 -9 15 3 24 -17 4
-11 5 2 23 22 4 4 12 2 110 112 1 2 22 2 43 38 2 8 6 3 40 39 2 -7 15 3 9 -4 -5
-9 5 2 50 -51 1 6 12 2 34 34 2 4 22 2 25 22 -6 10 6 3 35 30 3 -5 15 3 58 -55 1
-7 5 2 23 -16 2 8 12 2 25 29 3 -3 23 2 32 37 4 -13 7 3 15 -10 -7 -3 15 3 10 12 -5
-5 5 2 19 27 1 10 12 2 30 -21 5 -1 23 2 9 -4 -5 -11 7 3 11 15 -5 -1 15 3 42 -40 2
-3 5 2 88 -71 0 -11 13 2 9 -5 -5 1 23 2 39 41 3 -9 7 3 59 61 1 1 15 3 16 -12 -4
-1 5 2 51 -36 0 -9 13 2 12 -7 -5 3 23 2 37 -29 6 -7 7 3 66 -63 1 3 15 3 12 -8 -5
1 5 2 36 38 1 -7 13 2 44 -47 1 -2 24 2 64 58 3 -5 7 3 31 34 1 5 15 3 36 -33 2
3 5 2 27 -24 1 -5 13 2 51 60 1 0 24 2 54 -56 4 -3 7 3 31 -29 1 7 15 3 9 4 -5
5 5 2 53 -56 1 -3 13 2 10 -3 -4 -12 0 3 10 -11 -7 -1 7 3 103 104 1 -10 16 3 26 19 -7
7 5 2 39 36 1 -1 13 2 51 -47 1 -10 0 3 12 -24 -7 1 7 3 17 -17 2 -8 16 3 36 28 2
9 5 2 21 -25 4 1 13 2 38 38 1 -8 0 3 6 -16 -4 3 7 3 6 -6 -3 -6 16 3 31 25 2
11 5 2 12 -8 -6 3 13 2 46 -52 1 -6 0 3 24 -35 2 5 7 3 26 23 2 -4 16 3 44 36 2
-12 6 2 12 8 -6 5 13 2 43 44 1 -4 0 3 5 -23 -3 7 7 3 9 3 -4 -2 16 3 56 51 1
-10 6 2 36 -40 2 7 13 2 9 -2 -5 -2 0 3 21 -30 1 9 7 3 55 54 2 0 16 3 27 24 2
-8 6 2 13 4 -4 9 13 2 9 8 -6 0 0 3 31 -30 1 -12 8 3 13 -5 -5 2 16 3 53 55 1
-6 6 2 9 -26 -3 -10 14 2 12 -4 -6 2 0 3 22 -18 2 -10 8 3 12 0 -5 4 16 3 12 2 -5
-4 6 2 6 -23 -3 -8 14 2 17 9 -5 4 0 3 7 -6 -5 -8 8 3 31 -38 2 6 16 3 40 35 2
-2 6 2 4 -17 -2 -6 14 2 6 -12 -4 6 0 3 29 -24 3 -6 8 3 13 -3 -4 -9 17 3 73 78 2
0 6 2 12 -19 1 -4 14 2 24 12 2 8 0 3 9 2 -7 -4 8 3 7 -21 -3 -7 17 3 41 -33 2
2 6 2 24 -24 1 -2 14 2 15 -21 -3 10 0 3 21 -20 -7 -2 8 3 25 -33 1 -5 17 3 91 94 1
4 6 2 5 3 -3 0 14 2 31 21 1 -13 1 3 25 -29 -7 0 8 3 5 -3 -3 -3 17 3 16 -8 -6
6 6 2 34 -33 1 2 14 2 6 -13 -3 -11 1 3 10 7 -4 2 8 3 25 -23 1 -1 17 3 108 114 1
8 6 2 9 9 -4 4 14 2 14 -9 -3 -9 1 3 25 -17 2 4 8 3 6 2 -3 1 17 3 25 18 3
10 6 2 13 -15 -6 6 14 2 10 7 -6 -7 1 3 9 2 -3 6 8 3 28 -25 2 3 17 3 30 29 2
-13 7 2 29 -32 -6 8 14 2 10 -8 -5 -5 1 3 53 -37 1 8 8 3 18 -10 -5 5 17 3 43 39 4
-11 7 2 10 8 -5 -11 15 2 26 31 -7 -3 1 3 12 18 -2 10 8 3 11 15 -8 -8 18 3 77 71 2
-9 7 2 22 -16 3 -9 15 2 21 -21 4 -1 1 3 52 -46 0 -11 9 3 9 -3 -5 -6 18 3 31 -32 3
-7 7 2 15 -8 3 -7 15 2 41 46 2 1 1 3 12 11 2 -9 9 3 30 -18 2 -4 18 3 22 -24 4
-5 7 2 48 -34 1 -5 15 2 41 -35 1 3 1 3 13 -12 -3 -7 9 3 30 38 1 -2 18 3 87 84 1
-3 7 2 5 8 -3 -3 15 2 9 9 -5 5 1 3 13 -15 -4 -5 9 3 44 -38 1 0 18 3 7 -6 -4
-1 7 2 10 16 1 -1 15 2 41 45 1 7 1 3 7 -6 -3 -3 9 3 49 58 1 2 18 3 36 40 2
1 7 2 72 -64 1 1 15 2 33 -32 1 9 1 3 13 -11 -5 -1 9 3 86 -80 1 4 18 3 64 -60 2
3 7 2 9 5 -4 3 15 2 41 46 1 -12 2 3 47 -51 2 1 9 3 38 39 1 6 18 3 80 78 3
5 7 2 11 -14 -4 5 15 2 39 -40 1 -10 2 3 8 7 -4 3 9 3 30 25 1 -7 19 3 39 -33 3
7 7 2 10 1 -4 7 15 2 32 33 3 -8 2 3 23 -25 2 5 9 3 40 -44 1 -5 19 3 17 18 -8
9 7 2 39 -43 2 9 15 2 26 -11 -8 -6 2 3 36 23 1 7 9 3 20 20 4 -3 19 3 24 -18 4
11 7 2 25 11 -5 -10 16 2 11 4 -7 -4 2 3 52 -59 1 9 9 3 24 -28 4 -1 19 3 23 23 4
-12 8 2 28 -26 4 -8 16 2 16 10 -5 -2 2 3 48 -51 1 -12 10 3 37 -38 4 1 19 3 9 -2 -5
-10 8 2 25 -26 3 -6 16 2 22 -28 3 0 2 3 70 66 1 -10 10 3 12 6 -5 3 19 3 8 -4 -5
-8 8 2 27 -32 2 -4 16 2 39 34 2 2 2 3 97 -95 1 -8 10 3 8 -3 -4 5 19 3 15 -6 -15

```

-6	8	2	71	-81	1	-2	16	2	38	-44	2	4	2	3	26	26	1	-6	10	3	36	30	1	-6	20	3	24	19	-5
-4	8	2	43	26	1	0	16	2	44	40	1	6	2	3	45	-42	1	-4	10	3	26	-35	1	-4	20	3	11	3	-7
-2	8	2	125	-137	0	2	16	2	8	-7	-4	8	2	3	8	-6	-4	-2	10	3	19	-21	1	-2	20	3	15	-6	-7
0	8	2	13	4	1	4	16	2	12	-4	-4	10	2	3	22	-21	-5	0	10	3	57	59	1	0	20	3	20	22	-7
2	8	2	61	-62	1	6	16	2	11	0	-4	-13	3	3	10	-7	-6	2	10	3	60	-60	1	2	20	3	11	-14	-7
4	8	2	55	-55	1	8	16	2	11	-1	-7	-11	3	3	34	-34	2	4	10	3	39	41	1	4	20	3	27	26	5
6	8	2	28	-24	2	-9	17	2	12	7	-6	-9	3	3	59	-53	1	6	10	3	22	-18	3	-5	21	3	33	-27	4
8	8	2	43	-40	1	-7	17	2	11	-4	-5	-7	3	3	19	-10	2	8	10	3	10	0	-5	-3	21	3	38	40	3
10	8	2	16	-1	-7	-5	17	2	12	-12	-5	-5	3	3	102	-91	1	-11	11	3	15	5	-6	-1	21	3	38	-31	3
-11	9	2	9	-15	-5	-3	17	2	8	3	-5	-3	3	3	6	1	-3	-9	11	3	24	-21	3	1	21	3	20	25	-6
-9	9	2	55	-55	1	-1	17	2	10	12	-5	-1	3	3	134	-128	1	-7	11	3	8	-4	-4	3	21	3	26	17	-10
-7	9	2	8	-4	-4	1	17	2	12	-11	-5	1	3	3	14	-12	2	-5	11	3	21	-15	2	-4	22	3	9	-1	-9
-5	9	2	109	-102	1	3	17	2	7	3	-3	3	3	3	10	-13	-3	-3	11	3	5	0	-3	-2	22	3	11	-16	-7
-3	9	2	51	-42	1	5	17	2	14	3	-4	5	3	3	75	-76	1	-1	11	3	39	-39	1	0	22	3	33	29	4
-1	9	2	25	-14	1	7	17	2	10	0	-5	7	3	3	13	-2	-4	1	11	3	15	12	2	2	22	3	16	-8	-16
1	9	2	122	-117	1	-8	18	2	9	0	-7	9	3	3	42	-40	2	3	11	3	6	-4	-3	-12	0	4	72	62	3
3	9	2	7	-10	-3	-6	18	2	9	-11	-7	-12	4	3	20	16	-6	5	11	3	7	-9	-4	-10	0	4	35	30	3
5	9	2	59	-61	1	-4	18	2	13	-6	-5	-10	4	3	13	-1	-5	7	11	3	12	-7	-5	-8	0	4	162	152	1
7	9	2	10	-9	-5	-2	18	2	9	-15	-5	-8	4	3	13	-24	-3	9	11	3	12	2	-6	-6	0	4	38	28	2
9	9	2	34	-30	3	0	18	2	9	-4	-5	-6	4	3	5	-13	-3	-10	12	3	8	-8	-5	-4	0	4	219	210	2
-12	10	2	25	13	-6	2	18	2	9	-12	-5	-4	4	3	12	-7	2	-8	12	3	7	-2	-4	-2	0	4	77	-77	1
-10	10	2	9	10	-5	4	18	2	8	-6	-4	-2	4	3	11	-3	2	-6	12	3	10	-17	-4	0	0	4	149	152	1
-8	10	2	10	-1	-4	6	18	2	21	-22	-5	0	4	3	8	-9	-3	-4	12	3	14	1	-3	2	0	4	184	189	1
-6	10	2	62	55	1	-7	19	2	24	-22	4	2	4	3	5	8	-3	-2	12	3	6	-7	-3	4	0	4	6	-5	-4
-4	10	2	27	14	1	-5	19	2	26	-24	3	4	4	3	16	-12	2	0	12	3	5	-12	-3	6	0	4	57	57	2
-2	10	2	60	45	1	-3	19	2	48	-47	2	6	4	3	7	1	-3	2	12	3	11	-6	-4	8	0	4	13	19	-7
0	10	2	14	9	1	-1	19	2	38	-33	2	8	4	3	9	-7	-5	4	12	3	6	1	-3	-13	1	4	16	-16	-11
2	10	2	41	40	1	1	19	2	44	-40	3	10	4	3	27	25	5	6	12	3	20	-17	-5	-11	1	4	25	29	4
4	10	2	13	7	-3	3	19	2	21	-23	-5	-13	5	3	18	21	-7	8	12	3	12	1	-7	-9	1	4	15	21	-4
6	10	2	29	32	2	5	19	2	51	-55	2	-11	5	3	53	55	2	-11	13	3	15	-9	-6	-7	1	4	103	108	1
8	10	2	31	31	3	7	19	2	11	1	-8	-9	5	3	113	121	1	-9	13	3	26	-27	3	-5	1	4	12	13	-3
10	10	2	10	-1	-6	-8	20	2	21	-9	-9	-7	5	3	31	-20	1	-7	13	3	12	-2	-6	-3	1	4	43	-40	1

[

Observed and calculated structure factors for oxygenian potassian titano-kornite in C2/m

Page 3

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-1	1	4	150	146	1	3	9	4	68	-68	1	0	0	5	11	-9	-8	-6	10	5	13	-14	-6	2	4	6	9	-2	-4
1	1	4	6	-11	-3	5	9	4	14	22	-5	2	0	5	7	-7	-5	-4	10	5	18	-20	3	4	4	6	48	-51	1
3	1	4	98	97	1	7	9	4	33	-29	3	4	0	5	23	-24	3	-2	10	5	43	47	1	-9	5	6	16	10	-5
5	1	4	13	-4	-5	-10	10	4	21	16	-5	6	0	5	8	5	-5	0	10	5	41	-41	1	-7	5	6	36	-39	2
7	1	4	39	35	4	-8	10	4	44	38	1	-11	1	5	29	-19	3	2	10	5	21	20	2	-5	5	6	7	-7	-4
9	1	4	16	16	-6	-6	10	4	11	-4	-5	-9	1	5	8	1	-4	4	10	5	26	-22	2	-3	5	6	7	-5	-4
-12	2	4	11	-14	-6	-4	10	4	39	35	1	-7	1	5	35	-30	2	-9	11	5	9	-5	-5	-1	5	6	7	-12	-4
-10	2	4	9	-11	-4	-2	10	4	11	6	-3	-5	1	5	6	5	-3	-7	11	5	23	-25	3	1	5	6	23	-24	3
-8	2	4	8	-18	-4	0	10	4	33	29	1	-3	1	5	24	-23	2	-5	11	5	7	-2	-4	3	5	6	23	22	3
-6	2	4	17	-28	2	2	10	4	19	21	2	-1	1	5	8	2	-4	-3	11	5	7	-13	-4	-10	6	6	14	-19	-9
-4	2	4	21	-28	2	4	10	4	20	22	3	1	1	5	13	-14	-3	-1	11	5	9	1	-4	-8	6	6	13	-19	-5
-2	2	4	16	-22	2	6	10	4	15	18	-5	3	1	5	16	-16	-3	1	11	5	15	-10	-5	-6	6	6	8	-8	-4
0	2	4	21	-23	1	8	10	4	21	-1	-8	5	1	5	7	-2	-4	3	11	5	10	-4	-5	-4	6	6	12	-14	-4
2	2	4	27	-21	1	-11	11	4	73	80	2	7	1	5	9	-14	-5	5	11	5	10	-6	-5	-2	6	6	15	-19	-4
4	2	4	8	5	-4	-9	11	4	23	29	3	-12	2	5	14	15	-14	-8	12	5	10	-12	-6	0	6	6	8	-4	-4
6	2	4	15	-11	-5	-7	11	4	79	90	1	-10	2	5	9	-13	-5	-6	12	5	8	-2	-5	2	6	6	15	-14	-6
8	2	4	16	-9	-5	-5	11	4	71	76	1	-8	2	5	9	-11	-5	-4	12	5	8	-13	-5	4	6	6	9	0	-4

-13	3	4	15	18	-15	-3	11	4	7	5	-4	-6	2	5	24	-27	2	-2	12	5	6	-7	-4	-9	7	6	10	-9	-6
-11	3	4	36	-33	5	-1	11	4	111	114	1	-4	2	5	34	-31	1	0	12	5	7	-5	-4	-7	7	6	14	-12	-5
-9	3	4	9	10	-4	1	11	4	22	17	2	-2	2	5	43	44	1	2	12	5	15	-5	-6	-5	7	6	8	2	-4
-7	3	4	70	-60	1	3	11	4	138	138	1	0	2	5	84	-79	1	4	12	5	10	-20	-5	-3	7	6	37	-43	2
-5	3	4	9	-2	-4	5	11	4	22	-23	3	2	2	5	16	16	3	-9	13	5	15	-12	-5	-1	7	6	13	9	-4
-3	3	4	35	35	1	7	11	4	44	42	2	4	2	5	37	-35	1	-7	13	5	35	-32	3	1	7	6	10	-16	-5
-1	3	4	103	-105	1	-10	12	4	24	-28	4	6	2	5	9	-7	-5	-5	13	5	7	-1	-4	3	7	6	13	-13	-4
1	3	4	23	21	1	-8	12	4	127	128	1	-11	3	5	38	-34	2	-3	13	5	40	-41	1	-8	8	6	26	22	4
3	3	4	37	-38	1	-6	12	4	9	-14	-3	-9	3	5	8	-2	-4	-1	13	5	11	-11	-6	-6	8	6	81	-81	1
5	3	4	18	12	-5	-4	12	4	73	69	1	-7	3	5	80	-74	1	1	13	5	20	-22	3	-4	8	6	13	-11	-6
7	3	4	31	-30	3	-2	12	4	45	-49	1	-5	3	5	7	0	-4	3	13	5	33	-35	3	-2	8	6	18	-16	3
9	3	4	25	-15	-7	0	12	4	106	107	1	-3	3	5	63	-65	1	-8	14	5	33	-38	3	0	8	6	46	-47	1
-12	4	4	10	-4	-6	2	12	4	58	59	1	-1	3	5	13	-11	-3	-6	14	5	45	-49	3	2	8	6	10	-7	-5
-10	4	4	8	-6	-4	4	12	4	21	-16	3	1	3	5	20	-20	2	-4	14	5	40	-42	3	-9	9	6	47	-41	4
-8	4	4	30	-36	2	6	12	4	65	64	1	3	3	5	64	-66	1	-2	14	5	7	6	-4	-7	9	6	20	-21	-5
-6	4	4	75	68	1	-9	13	4	21	-11	-6	5	3	5	12	15	-6	0	14	5	97	-95	2	-5	9	6	10	-5	-5
-4	4	4	61	-67	1	-7	13	4	7	12	-4	7	3	5	33	-31	3	2	14	5	8	0	-5	-3	9	6	73	-75	1
-2	4	4	33	34	1	-5	13	4	8	11	-5	-10	4	5	13	-14	-5	4	14	5	40	-34	4	-1	9	6	16	12	-5
0	4	4	15	-9	2	-3	13	4	37	-36	1	-8	4	5	19	5	4	-7	15	5	36	-29	4	1	9	6	27	-23	3
2	4	4	33	-29	1	-1	13	4	16	15	3	-6	4	5	7	-9	-3	-5	15	5	26	4	-8	3	9	6	28	-22	3
4	4	4	12	12	-4	1	13	4	10	-14	-4	-4	4	5	7	0	-3	-3	15	5	36	-37	2	-8	10	6	8	-3	-6
6	4	4	11	-11	-6	3	13	4	58	57	1	-2	4	5	8	-6	-4	-1	15	5	8	-2	-5	-6	10	6	27	22	4
8	4	4	11	9	-7	5	13	4	44	-41	2	0	4	5	7	2	-3	1	15	5	13	-5	-6	-4	10	6	17	12	-5
-11	5	4	11	-10	-6	7	13	4	9	6	-7	2	4	5	12	-9	-5	3	15	5	38	-41	3	-2	10	6	21	23	3
-9	5	4	23	-19	2	-10	14	4	22	6	-8	4	4	5	14	10	-4	-6	16	5	27	28	4	0	10	6	19	12	-6
-7	5	4	32	-27	1	-8	14	4	10	-10	-8	6	4	5	9	1	-4	-4	16	5	43	42	4	2	10	6	9	12	-5
-5	5	4	7	-4	-3	-6	14	4	20	16	3	-11	5	5	58	67	2	-2	16	5	9	8	-5	-7	11	6	28	30	4
-3	5	4	9	8	-4	-4	14	4	12	-20	-5	-9	5	5	36	-30	2	0	16	5	40	39	2	-5	11	6	9	11	-5
-1	5	4	52	-55	1	-2	14	4	23	16	2	-7	5	5	119	129	1	2	16	5	19	7	-7	-3	11	6	126	127	1
1	5	4	5	3	-3	0	14	4	15	-10	-4	-5	5	5	30	30	1	-5	17	5	13	8	-7	-1	11	6	9	-12	-5
3	5	4	6	-3	-3	2	14	4	16	-11	-4	-3	5	5	98	96	1	-3	17	5	72	73	2	1	11	6	67	69	2
5	5	4	9	-4	-4	4	14	4	16	17	-6	-1	5	5	24	20	2	-1	17	5	9	3	-5	-6	12	6	70	74	1
7	5	4	26	-26	4	6	14	4	19	-8	-5	1	5	5	42	40	1	1	17	5	21	19	-6	-4	12	6	22	-19	4
9	5	4	23	19	-10	-9	15	4	22	30	-8	3	5	5	85	83	1	-4	18	5	60	64	3	-2	12	6	59	65	1
-12	6	4	24	-35	-5	-7	15	4	10	-5	-8	5	5	5	21	16	3	-2	18	5	38	-41	4	0	12	6	57	61	2
-10	6	4	18	-1	-5	-5	15	4	16	-6	-5	7	5	5	74	67	3	0	18	5	32	44	-7	-5	13	6	22	-22	4
-8	6	4	7	-19	-4	-3	15	4	38	38	2	-10	6	5	79	76	1	-10	0	6	145	143	2	-3	13	6	59	58	2
-6	6	4	6	-17	-3	-1	15	4	24	-24	3	-8	6	5	25	21	2	-8	0	6	18	-17	-7	-1	13	6	30	-28	3
-4	6	4	11	-17	-3	1	15	4	24	25	3	-6	6	5	51	50	1	-6	0	6	77	78	1	-4	14	6	14	5	-7
-2	6	4	7	-11	-3	3	15	4	39	-37	2	-4	6	5	164	165	1	-4	0	6	41	41	2	-2	14	6	9	-7	-5
0	6	4	18	-17	2	5	15	4	47	48	2	-2	6	5	31	-28	1	-2	0	6	121	127	3	-6	0	7	13	-18	-6
2	6	4	6	-7	-3	-8	16	4	53	-58	3	0	6	5	89	90	1	0	0	6	49	48	1	-4	0	7	9	-11	-6
4	6	4	23	-22	2	-6	16	4	43	40	2	2	6	5	6	-3	-3	2	0	6	24	-21	3	-2	0	7	10	-14	-7
6	6	4	9	9	-5	-4	16	4	15	5	-5	4	6	5	130	134	1	4	0	6	112	114	1	0	0	7	17	-9	-8
8	6	4	9	-15	-5	-2	16	4	9	-4	-5	6	6	5	17	7	-6	-9	1	6	13	16	-6	-7	1	7	10	1	-5
-11	7	4	40	-42	3	0	16	4	28	-26	3	-11	7	5	14	24	-6	-7	1	6	37	36	2	-5	1	7	17	-19	-5
-9	7	4	12	0	-4	2	16	4	25	27	3	-9	7	5	53	-53	1	-5	1	6	8	-2	-4	-3	1	7	8	-5	-4
-7	7	4	13	16	-3	4	16	4	12	6	-6	-7	7	5	63	62	1	-3	1	6	86	83	1	-1	1	7	8	-12	-4
-5	7	4	48	-42	1	-7	17	4	12	15	-8	-5	7	5	12	-9	-4	-1	1	6	8	-5	-4	1	1	7	10	-19	-10
-3	7	4	12	-4	-3	-5	17	4	15	-18	-7	-3	7	5	41	39	1	1	1	6	74	74	1	-6	2	7	23	-15	4
-1	7	4	5	-6	-3	-3	17	4	8	2	-5	-1	7	5	16	-16	3	3	1	6	27	-26	2	-4	2	7	17	18	-4
1	7	4	6	-9	-3	-1	17	4	22	12	-5	1	7	5	13	3	-4	5	1	6	41	40	6	-2	2	7	65	-66	1
3	7	4	42	-44	1	1	17	4	9	-11	-6	3	7	5	42	42	1	-10	2	6	12	-16	-6	0	2	7	21	14	4
5	7	4	29	24	2	3	17	4	19	-14	-6	5	7	5	8	0	-4	-8	2	6	9	-16	-4	-7	3	7	11	3	-6

7 7 4 30 -33 3 -6 18 4 12 -12 -6 -10 8 5 23 -26 -6 -6 2 6 12 -16 -4 -5 3 7 33 -33 2
-12 8 4 13 -10 -7 -4 18 4 9 -5 -5 -8 8 5 9 -1 -5 -4 2 6 8 -11 -4 -3 3 7 20 -19 -4
-10 8 4 10 2 -5 -2 18 4 8 -8 -5 -6 8 5 7 -11 -4 -2 2 6 8 -11 -4 -1 3 7 17 -17 -5
-8 8 4 101 -111 1 0 18 4 21 -17 -7 -4 8 5 22 -21 2 0 2 6 19 -10 -4 -6 4 7 9 -2 -4
-6 8 4 38 29 1 2 18 4 15 -4 -6 -2 8 5 6 2 -3 2 2 6 7 2 -4 -4 4 7 15 -6 -4
-4 8 4 36 -39 1 4 18 4 16 -19 -16 0 8 5 21 -20 2 4 2 6 15 -11 -4 -2 4 7 8 7 -4
-2 8 4 50 -53 1 -5 19 4 34 -33 3 2 8 5 8 -4 -3 -9 3 6 11 -2 -6 0 4 7 9 -4 -5
0 8 4 79 -76 1 -3 19 4 27 -20 5 4 8 5 17 -13 -4 -7 3 6 35 -33 2 -5 5 7 46 49 2
2 8 4 6 9 -3 -1 19 4 55 -55 2 6 8 5 9 0 -5 -5 3 6 7 8 -3 -3 5 7 32 27 2
4 8 4 21 -20 2 1 19 4 10 -11 -6 -9 9 5 32 38 2 -3 3 6 41 -46 2 -1 5 7 39 34 2
6 8 4 81 -78 1 3 19 4 29 -35 5 -7 9 5 54 -50 1 -1 3 6 14 13 -4 -6 6 7 83 86 1
8 8 4 27 24 4 -4 20 4 72 -71 4 -5 9 5 28 33 2 1 3 6 38 -40 1 -4 6 7 41 -38 3
-11 9 4 70 -70 2 -2 20 4 20 -19 -7 -3 9 5 28 -27 1 3 3 6 17 20 -4 -2 6 7 95 99 1
-9 9 4 9 -5 -5 0 20 4 34 -32 3 -1 9 5 24 22 2 -10 4 6 46 -52 2 -5 7 7 26 12 -6
-7 9 4 40 -33 2 -10 0 5 8 -18 -6 1 9 5 12 3 -4 -8 4 6 56 53 2 -3 7 7 13 2 -6
-5 9 4 69 -66 1 -8 0 5 15 -30 -8 3 9 5 41 -42 1 -6 4 6 14 -15 -4 -1 7 7 13 13 -7
-3 9 4 25 -21 1 -6 0 5 7 -9 -5 5 9 5 29 28 2 -4 4 6 29 -26 2 -4 8 7 9 4 -7
-1 9 4 52 -50 1 -4 0 5 17 -26 -4 -10 10 5 15 -5 -6 -2 4 6 20 -17 3 -2 8 7 10 -17 -7
1 9 4 18 -19 2 -2 0 5 22 -21 3 -8 10 5 10 0 -4 0 4 6 24 24 2