

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
0	1	0	23	8	2	-2	5	1	36	40	1	-7	12	1	126	131	3	-8	9	2	229	209	1	-5	7	3	650	694	6
0	2	0	34	41	1	0	5	1	11	20	3	-6	12	1	49	64	2	-7	9	2	33	32	1	-4	7	3	64	61	1
-2	3	0	104	111	2	1	5	1	47	54	1	-5	12	1	162	162	2	-6	9	2	949	939	7	-3	7	3	157	158	1
-1	3	0	105	110	1	2	5	1	893	983	7	-1	1	2	46	49	1	-5	9	2	32	35	1	-2	7	3	875	950	8
-3	4	0	27	31	2	3	5	1	27	28	1	0	1	2	52	59	1	-4	9	2	213	200	1	-1	7	3	59	54	1
-2	4	0	223	168	2	4	5	1	149	144	1	-3	2	2	308	307	2	-3	9	2	1330	1332	12	0	7	3	2	9	2
-1	4	0	17	31	2	5	5	1	655	656	5	-2	2	2	25	25	1	-2	9	2	250	242	2	1	7	3	619	635	4
0	4	0	21	40	1	-11	6	1	100	109	1	0	2	2	58	64	1	-1	9	2	36	37	1	2	7	3	147	145	1
-4	5	0	793	789	7	-10	6	1	17	11	5	1	2	2	82	86	1	0	9	2	938	914	7	3	7	3	23	24	1
-3	5	0	154	165	1	-9	6	1	118	102	1	2	2	2	633	635	5	1	9	2	70	70	1	4	7	3	377	377	3
-2	5	0	154	165	1	-8	6	1	76	72	1	-5	3	2	48	49	1	2	9	2	66	69	1	-11	8	3	27	34	2
-1	5	0	795	788	10	-7	6	1	149	157	1	-4	3	2	195	214	1	-10	10	2	24	24	1	-10	8	3	562	550	4
0	5	0	0	14	1	-6	6	1	92	76	1	-2	3	2	305	306	2	-9	10	2	139	131	2	-9	8	3	98	101	1
-5	6	0	19	19	1	-5	6	1	161	160	1	-1	3	2	81	86	1	-8	10	2	277	290	2	-8	8	3	42	36	1
-4	6	0	312	324	2	-4	6	1	165	154	1	1	3	2	96	78	1	-7	10	2	52	56	1	-7	8	3	610	623	4
-2	6	0	317	324	2	-3	6	1	720	748	6	2	3	2	136	145	1	-6	10	2	38	41	1	-6	8	3	42	42	1
-1	6	0	20	19	2	-2	6	1	217	229	1	-7	4	2	229	217	2	-5	10	2	353	357	2	-5	8	3	79	85	1
-6	7	0	30	28	1	-1	6	1	45	54	1	-6	4	2	138	151	2	-4	10	2	130	120	2	-4	8	3	789	818	6
-5	7	0	648	647	5	0	6	1	302	300	2	-5	4	2	583	558	4	-3	10	2	94	96	1	-3	8	3	15	31	5
-4	7	0	167	163	1	1	6	1	90	85	1	-4	4	2	29	16	1	-2	10	2	396	391	3	-2	8	3	112	121	2
-3	7	0	170	162	1	2	6	1	147	141	1	-3	4	2	199	215	2	-1	10	2	71	70	1	-1	8	3	618	636	5
-2	7	0	650	646	5	3	6	1	143	150	1	-2	4	2	640	634	8	0	10	2	18	25	3	0	8	3	6	3	6
-1	7	0	30	28	1	4	6	1	73	81	1	-1	4	2	95	78	1	-9	11	2	49	59	1	1	8	3	88	85	1
0	7	0	18	18	1	5	6	1	36	39	1	0	4	2	36	38	1	-8	11	2	41	47	2	2	8	3	440	438	3
-7	8	0	363	343	2	6	6	1	51	64	1	1	4	2	691	689	5	-7	11	2	240	251	1	3	8	3	19	27	1
-6	8	0	143	146	1	-12	7	1	125	131	2	2	4	2	198	185	1	-6	11	2	84	83	1	-11	9	3	88	94	1
-5	8	0	16	9	1	-11	7	1	523	494	5	3	4	2	36	44	1	-5	11	2	36	35	2	-10	9	3	50	47	1
-4	8	0	415	412	3	-10	7	1	81	82	1	4	4	2	470	475	4	-4	11	2	374	362	3	-9	9	3	62	55	1
-3	8	0	16	9	2	-9	7	1	92	94	1	-9	5	2	40	35	1	-3	11	2	29	46	2	-8	9	3	95	101	1
-2	8	0	141	146	1	-8	7	1	714	730	5	-8	5	2	19	18	2	-2	11	2	66	69	1	-7	9	3	135	127	1
-1	8	0	363	343	2	-7	7	1	9	16	7	-7	5	2	535	521	4	-6	12	2	711	729	7	-6	9	3	78	74	1
0	8	0	39	44	1	-6	7	1	146	157	1	-6	5	2	100	112	1	-5	12	2	92	97	4	-5	9	3	107	96	2
-8	9	0	170	152	1	-5	7	1	693	755	5	-5	5	2	0	2	1	-1	1	3	15	7	2	-4	9	3	143	142	1
-7	9	0	111	103	1	-4	7	1	32	31	1	-4	5	2	585	558	4	0	1	3	36	16	1	-3	9	3	172	182	1
-6	9	0	1044	1053	8	-3	7	1	173	176	1	-3	5	2	50	49	1	-3	2	3	243	233	2	-2	9	3	146	145	3
-5	9	0	122	119	2	-2	7	1	892	984	9	-2	5	2	132	146	2	-2	2	3	61	59	1	-1	9	3	90	85	2
-4	9	0	128	119	1	-1	7	1	91	85	1	-1	5	2	686	689	6	0	2	3	8	18	2	0	9	3	115	117	1
-3	9	0	1058	1053	8	0	7	1	0	7	1	0	5	2	31	17	1	1	2	3	338	351	2	1	9	3	85	83	1
-2	9	0	109	103	2	1	7	1	709	729	5	1	5	2	120	114	1	-5	3	3	222	226	1	2	9	3	72	76	1
-1	9	0	169	152	1	2	7	1	85	83	1	2	5	2	531	517	4	-4	3	3	108	115	1	-10	10	3	12	18	6
0	9	0	1044	1024	8	3	7	1	18	21	2	3	5	2	101	108	1	-3	3	3	314	245	2	-9	10	3	55	47	1
-9	10	0	141	128	1	4	7	1	494	482	4	4	5	2	206	200	1	-2	3	3	240	232	2	-8	10	3	557	550	4
-8	10	0	306	314	2	5	7	1	156	162	4	5	5	2	353	357	3	-1	3	3	342	351	2	-7	10	3	54	60	1
-7	10	0	21	25	1	-11	8	1	29	31	1	-11	6	2	83	83	2	1	3	3	337	337	2	-6	10	3	44	48	1
-6	10	0	96	101	1	-10	8	1	481	479	4	-10	6	2	37	41	1	2	3	3	53	63	1	-5	10	3	459	460	3
-5	10	0	358	352	3	-9	8	1	129	131	1	-9	6	2	963	939	8	3	3	3	80	78	1	-4	10	3	158	155	2
-4	10	0	107	102	2	-8	8	1	12	4	2	-8	6	2	51	47	1	-7	4	3	68	61	1	-3	10	3	26	24	1
-3	10	0	19	25	1	-7	8	1	712	731	5	-7	6	2	176	170	3	-6	4	3	90	84	1	-2	10	3	442	438	3
-2	10	0	310	315	3	-6	8	1	79	72	1	-5	6	2	102	111	1	-4	4	3	41	44	1	-1	10	3	79	83	1

-1 10 0 145 128 1 -5 8 1 63 70 1 -4 6 2 141 151 1 -3 4 3 108 116 1 0 10 3 0 3 1
0 10 0 17 18 3 -4 8 1 571 628 4 -2 6 2 200 185 4 -1 4 3 339 337 2 -9 11 3 91 94 1
-10 11 0 344 344 3 -3 8 1 26 28 1 -1 6 2 118 114 1 0 4 3 11 32 3 -8 11 3 24 34 1
-9 11 0 42 39 1 -2 8 1 146 141 1 1 6 2 29 30 1 1 4 3 767 889 7 -7 11 3 414 409 3
-8 11 0 48 58 1 -1 8 1 703 729 5 2 6 2 139 139 1 2 4 3 173 184 1 -6 11 3 83 90 1
-7 11 0 354 345 2 0 8 1 0 2 1 3 6 2 1325 1332 10 3 4 3 154 159 2 -5 11 3 10 6 4
-6 11 0 68 58 1 1 8 1 140 139 1 4 6 2 123 120 2 4 4 3 792 818 6 -4 11 3 382 377 3
-5 11 0 71 58 1 2 8 1 389 400 2 5 6 2 37 35 1 -9 5 3 107 95 1 -3 11 3 24 26 2
-4 11 0 365 345 3 3 8 1 33 33 1 6 6 2 700 729 8 -8 5 3 79 85 2 -2 11 3 71 76 1
-3 11 0 59 58 1 -11 9 1 41 41 1 -12 7 2 111 110 2 -7 5 3 643 694 5 -1 1 4 23 22 1
-2 11 0 41 38 1 -10 9 1 147 134 2 -11 7 2 251 252 3 -6 5 3 202 203 2 0 1 4 26 14 1
-1 11 0 317 344 4 -9 9 1 159 161 1 -10 7 2 53 56 1 -5 5 3 30 22 1 -3 2 4 129 140 1
-7 12 0 110 112 3 -8 9 1 129 131 1 -9 7 2 30 32 1 -3 5 3 216 225 1 -2 2 4 93 98 1
-6 12 0 877 865 7 -7 9 1 92 94 1 -8 7 2 483 473 4 -2 5 3 55 63 1 -1 2 4 580 547 13
-5 12 0 112 112 1 -6 9 1 115 102 1 -7 7 2 40 37 1 -1 5 3 760 889 9 0 2 4 67 66 1
-1 1 1 25 24 1 -5 9 1 121 111 2 -6 7 2 175 171 1 0 5 3 9 24 6 1 2 4 113 125 1
0 1 1 30 20 1 -4 9 1 156 144 1 -5 7 2 540 521 4 1 5 3 63 60 1 -5 3 4 57 53 1
-3 2 1 214 204 1 -3 9 1 151 150 2 -4 7 2 221 218 2 2 5 3 883 950 6 -4 3 4 159 170 1
-2 2 1 9 18 3 -2 9 1 82 83 2 -3 7 2 38 43 1 3 5 3 13 31 2 -2 3 4 128 140 1
0 2 1 19 20 1 -1 9 1 138 139 1 -2 7 2 533 517 6 4 5 3 141 142 1 -1 3 4 116 124 1
1 2 1 369 393 3 0 9 1 337 315 2 -1 7 2 30 30 2 5 5 3 465 460 4 1 3 4 156 163 2
-5 3 1 240 247 1 1 9 1 188 170 2 0 7 2 6 5 6 -11 6 3 86 89 1 2 3 4 61 64 1
-4 3 1 137 139 2 2 9 1 35 29 1 1 7 2 345 339 2 -10 6 3 44 48 1 -7 4 4 33 29 1
-3 3 1 290 254 2 -10 10 1 13 7 3 2 7 2 256 242 2 -9 6 3 78 74 1 -6 4 4 52 52 2
-2 3 1 221 204 1 -9 10 1 150 134 1 3 7 2 97 96 1 -8 6 3 44 42 1 -5 4 4 421 403 5
-1 3 1 365 393 2 -8 10 1 478 479 3 4 7 2 361 362 2 -7 6 3 134 136 2 -4 4 4 76 71 1
1 3 1 291 292 2 -7 10 1 83 82 1 -11 8 2 42 47 1 -6 6 3 677 684 5 -3 4 4 160 170 1
2 3 1 36 40 1 -6 10 1 13 11 1 -10 8 2 277 290 2 -5 6 3 199 203 1 -1 4 4 160 164 2
3 3 1 716 748 5 -5 10 1 655 655 5 -9 8 2 228 209 3 -4 6 3 91 84 1 0 4 4 54 41 1
-7 4 1 31 31 1 -4 10 1 74 81 2 -8 8 2 25 22 2 -3 6 3 85 78 1 1 4 4 500 475 4
-6 4 1 167 154 1 -3 10 1 16 21 3 -7 8 2 482 473 3 -2 6 3 171 185 1 2 4 4 31 23 1
-4 4 1 7 8 6 -2 10 1 390 399 3 -6 8 2 51 47 1 -1 6 3 64 60 1 3 4 4 51 53 1
-3 4 1 137 139 1 -1 10 1 180 170 3 -5 8 2 5 18 5 0 6 3 200 221 2 4 4 4 491 473 4
-1 4 1 293 292 3 0 10 1 22 16 2 -4 8 2 471 475 3 1 6 3 63 54 1 -9 5 4 103 104 2
0 4 1 11 10 2 1 10 1 388 382 8 -3 8 2 108 108 1 2 6 3 116 121 1 -8 5 4 67 68 1
2 4 1 211 229 1 -10 11 1 364 356 7 -2 8 2 139 139 1 3 6 3 174 182 1 -7 5 4 406 403 3
3 4 1 170 176 1 -9 11 1 40 41 1 -1 8 2 344 338 2 4 6 3 157 156 2 -6 5 4 255 241 2
4 4 1 571 628 4 -8 11 1 27 31 1 0 8 2 26 23 1 5 6 3 13 6 2 -5 5 4 14 4 4
-9 5 1 125 111 1 -7 11 1 506 494 4 1 8 2 41 37 1 -11 7 3 433 409 6 -4 5 4 421 402 3
-8 5 1 64 70 1 -6 11 1 121 109 2 2 8 2 397 391 2 -10 7 3 63 60 1 -3 5 4 54 53 1
-7 5 1 685 755 8 -5 11 1 39 39 1 3 8 2 27 46 2 -9 7 3 129 127 1 -2 5 4 61 64 1
-6 5 1 154 160 2 -4 11 1 512 482 4 -11 9 2 51 59 1 -8 7 3 615 623 5 -1 5 4 496 476 4
-5 5 1 9 4 2 -3 11 1 27 33 1 -10 9 2 141 131 3 -7 7 3 7 12 4 0 5 4 53 25 2
-3 5 1 242 247 2 -2 11 1 35 29 1 -9 9 2 1073 1025 8 -6 7 3 130 136 1 1 5 4 187 187 1

Observed and calculated structure factors for cualstibite

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

2 5 4 361 359 2 -7 4 5 117 105 1 -7 11 5 332 345 4 -3 9 6 854 817 7 -7 9 7 67 61 1
3 5 4 109 117 1 -6 4 5 77 75 1 -6 11 5 18 15 2 -2 9 6 43 46 1 -6 9 7 140 142 1
4 5 4 147 138 2 -5 4 5 704 783 7 -5 11 5 40 35 2 -1 9 6 91 97 1 -5 9 7 123 127 2
5 5 4 362 340 3 -4 4 5 20 17 1 -4 11 5 303 313 3 0 9 6 711 691 6 -4 9 7 48 47 1
-11 6 4 78 77 2 -3 4 5 140 150 1 1 1 6 537 514 5 -8 10 6 275 295 2 -3 9 7 81 73 1

-10	6	4	34	33	1	-1	4	5	27	25	1	-3	2	6	107	93	2	-7	10	6	118	118	1	-2	9	7	93	97	2
-9	6	4	1115	1074	9	0	4	5	24	21	1	-2	2	6	121	112	1	-6	10	6	76	78	1	-1	9	7	51	52	1
-8	6	4	42	34	1	1	4	5	748	819	5	-1	2	6	525	514	6	-5	10	6	301	304	4	-7	10	7	5	12	5
-7	6	4	186	176	1	2	4	5	89	86	1	0	2	6	63	57	1	-4	10	6	46	53	1	-6	10	7	56	67	2
-5	6	4	255	241	1	3	4	5	44	52	1	1	2	6	169	169	2	-3	10	6	15	16	4	-5	10	7	364	351	5
-4	6	4	54	52	1	4	4	5	755	748	6	2	2	6	607	598	5	-2	10	6	214	236	2	-4	10	7	15	15	3
-2	6	4	32	23	1	-9	5	5	109	107	2	-5	3	6	114	100	1	-3	2	7	270	249	3	-3	10	7	38	48	2
-1	6	4	184	186	1	-8	5	5	49	40	2	-4	3	6	125	116	2	-2	2	7	46	41	1	-3	2	8	70	62	2
0	6	4	1127	1154	11	-7	5	5	739	752	6	-2	3	6	102	93	1	0	2	7	37	37	1	1	2	8	94	79	3
1	6	4	168	155	1	-6	5	5	126	130	1	-1	3	6	165	169	1	1	2	7	82	87	1	2	2	8	273	261	2
2	6	4	81	72	1	-5	5	5	38	36	1	1	3	6	228	211	2	2	2	7	656	699	6	-5	3	8	72	64	2
3	6	4	1250	1223	9	-4	5	5	714	784	5	2	3	6	78	69	3	-5	3	7	59	59	1	-4	3	8	109	85	1
4	6	4	79	83	1	-3	5	5	43	45	1	3	3	6	1153	1139	15	-4	3	7	130	139	1	-2	3	8	68	62	1
5	6	4	33	34	1	-2	5	5	87	94	1	-7	4	6	95	83	1	-3	3	7	619	628	4	-1	3	8	97	78	1
-11	7	4	217	234	3	-1	5	5	756	819	7	-6	4	6	97	81	1	-2	3	7	268	249	3	0	3	8	901	895	8
-10	7	4	72	74	2	0	5	5	12	19	2	-5	4	6	463	445	3	-1	3	7	86	87	1	1	3	8	45	31	2
-9	7	4	90	92	1	1	5	5	134	124	2	-4	4	6	68	68	1	0	3	7	37	28	1	2	3	8	92	83	1
-8	7	4	484	471	4	2	5	5	656	688	4	-3	4	6	130	116	2	1	3	7	79	75	1	3	3	8	1052	1005	8
-7	7	4	44	47	1	3	5	5	99	105	1	-2	4	6	615	599	5	2	3	7	79	93	1	-7	4	8	60	57	1
-6	7	4	186	176	1	4	5	5	93	99	2	-1	4	6	232	211	2	3	3	7	105	99	1	-6	4	8	136	130	2
-5	7	4	405	402	3	5	5	5	350	336	3	0	4	6	75	79	1	-7	4	7	127	114	1	-5	4	8	467	449	3
-4	7	4	32	29	1	-11	6	5	24	15	4	1	4	6	432	416	3	-6	4	7	78	77	1	-4	4	8	44	48	1
-3	7	4	50	53	1	-10	6	5	81	90	2	2	4	6	56	50	1	-5	4	7	628	639	5	-3	4	8	109	85	2
-2	7	4	360	359	4	-9	6	5	90	99	1	3	4	6	79	86	1	-4	4	7	12	12	2	-2	4	8	273	261	3
-1	7	4	162	155	2	-8	6	5	79	74	1	4	4	6	345	342	3	-3	4	7	122	139	2	-1	4	8	43	31	1
0	7	4	21	18	2	-7	6	5	84	78	2	-9	5	6	182	174	2	-2	4	7	660	699	5	0	4	8	88	82	1
1	7	4	431	422	3	-6	6	5	462	461	3	-8	5	6	65	71	1	-1	4	7	79	76	1	1	4	8	387	370	3
2	7	4	183	181	1	-5	6	5	126	130	1	-7	5	6	380	364	3	0	4	7	85	93	1	2	4	8	139	140	2
3	7	4	78	86	1	-4	6	5	72	76	1	-6	5	6	185	167	2	1	4	7	776	773	5	3	4	8	93	85	1
4	7	4	260	271	2	-3	6	5	147	135	1	-5	5	6	56	57	1	2	4	7	42	40	1	4	4	8	233	241	3
-11	8	4	4	4	4	-2	6	5	87	86	1	-4	5	6	459	445	3	3	4	7	32	33	3	-9	5	8	121	121	4
-10	8	4	308	309	3	-1	6	5	135	124	1	-3	5	6	112	100	2	4	4	7	478	468	4	-8	5	8	46	47	1
-9	8	4	100	103	1	0	6	5	478	471	3	-2	5	6	73	69	1	-9	5	7	120	127	2	-7	5	8	324	319	3
-8	8	4	27	30	1	1	6	5	109	107	1	-1	5	6	436	416	3	-8	5	7	48	50	1	-6	5	8	43	51	1
-7	8	4	476	470	3	2	6	5	51	51	1	0	5	6	69	64	1	-7	5	7	663	647	5	-5	5	8	89	105	1
-6	8	4	38	34	1	3	6	5	173	171	1	1	5	6	124	123	1	-6	5	7	77	85	1	-4	5	8	461	449	3
-5	8	4	64	68	1	4	6	5	94	98	1	2	5	6	355	338	2	-5	5	7	68	69	1	-3	5	8	73	64	2
-4	8	4	493	473	4	5	6	5	36	35	1	3	5	6	37	38	2	-4	5	7	628	639	4	-2	5	8	90	83	1
-3	8	4	110	118	2	-11	7	5	327	345	4	4	5	6	68	72	2	-3	5	7	61	60	1	-1	5	8	383	370	3
-2	8	4	80	73	2	-10	7	5	13	6	2	5	5	6	304	304	3	-2	5	7	89	93	1	0	5	8	60	72	1
-1	8	4	435	421	3	-9	7	5	109	100	1	-10	6	6	75	77	2	-1	5	7	760	773	6	1	5	8	108	112	2
0	8	4	30	34	1	-8	7	5	506	504	4	-9	6	6	1077	1012	10	0	5	7	18	30	1	2	5	8	376	361	3
1	8	4	39	46	1	-7	7	5	11	14	4	-8	6	6	97	97	1	1	5	7	110	116	1	3	5	8	28	16	2
2	8	4	364	370	2	-6	7	5	83	78	1	-7	6	6	78	81	2	2	5	7	492	490	4	4	5	8	53	61	1
3	8	4	40	42	1	-5	7	5	733	752	5	-6	6	6	1124	1103	8	3	5	7	88	88	2	-9	6	8	690	699	11
-10	9	4	62	71	2	-4	7	5	112	105	1	-5	6	6	185	167	1	4	5	7	55	47	2	-8	6	8	117	127	2
-9	9	4	866	822	6	-3	7	5	48	52	1	-4	6	6	95	80	1	5	5	7	362	351	3	-7	6	8	73	77	1
-8	9	4	104	103	1	-2	7	5	657	687	5	-3	6	6	1160	1139	11	-10	6	7	53	67	1	-6	6	8	933	881	7
-7	9	4	89	92	1	-1	7	5	110	107	2	-2	6	6	53	50	1	-9	6	7	144	142	3	-5	6	8	32	51	1
-6	9	4	1105	1074	7	0	7	5	14	9	3	-1	6	6	122	123	1	-8	6	7	103	89	2	-4	6	8	124	130	2
-5	9	4	101	104	1	1	7	5	533	532	3	0	6	6	1308	1304	10	-7	6	7	67	72	1	-3	6	8	1040	1005	10
-4	9	4	147	138	3	2	7	5	183	175	1	1	6	6	181	172	2	-6	6	7	86	82	1	-2	6	8	133	140	2
-3	9	4	1249	1223	10	3	7	5	46	49	1	2	6	6	56	54	1	-5	6	7	79	85	1	-1	6	8	110	112	2
-2	9	4	188	181	2	4	7	5	305	313	2	3	6	6	855	817	6	-4	6	7	77	77	1	0	6	8	1189	1139	9

```

-1 9 4 45 46 2 -10 8 5 455 441 5 4 6 6 48 53 1 -3 6 7 109 99 2 1 6 8 99 93 2
0 9 4 872 825 7 -9 8 5 98 93 2 -10 7 6 125 118 1 -2 6 7 39 40 1 2 6 8 49 57 1
1 9 4 55 62 1 -8 8 5 40 37 1 -9 7 6 144 147 2 -1 6 7 98 116 3 3 6 8 555 539 4
-10 10 4 16 30 3 -7 8 5 524 504 4 -8 7 6 333 338 4 0 6 7 214 210 1 -9 7 8 80 95 2
-9 10 4 68 71 1 -6 8 5 75 74 1 -7 7 6 40 43 1 1 6 7 138 142 2 -8 7 8 215 217 2
-8 10 4 304 309 2 -5 8 5 46 40 1 -6 7 6 78 81 1 2 6 7 28 19 1 -7 7 8 27 30 2
-7 10 4 74 74 1 -4 8 5 755 748 6 -5 7 6 383 364 2 3 6 7 79 73 1 -6 7 8 66 77 2
-6 10 4 36 33 1 -3 8 5 100 105 1 -4 7 6 94 83 1 4 6 7 16 15 3 -5 7 8 314 319 3
-5 10 4 356 340 3 -2 8 5 50 51 1 -3 7 6 84 87 2 -10 7 7 10 12 5 -4 7 8 55 57 1
-4 10 4 79 83 1 -1 8 5 524 532 4 -2 7 6 352 338 3 -9 7 7 66 61 1 -3 7 8 91 86 2
-3 10 4 79 86 1 0 8 5 0 12 1 -1 7 6 183 172 2 -8 7 7 447 427 4 -2 7 8 370 361 3
-2 10 4 366 369 4 1 8 5 52 43 1 0 7 6 60 63 1 -7 7 7 32 36 1 -1 7 8 90 93 1
-1 10 4 52 62 1 2 8 5 468 449 3 1 7 6 430 406 3 -6 7 7 69 72 1 0 7 8 64 77 1
0 10 4 16 10 2 -10 9 5 27 36 3 2 7 6 42 46 1 -5 7 7 660 647 5 1 7 8 271 270 2
-8 11 4 14 4 1 -9 9 5 20 13 2 3 7 6 11 16 6 -4 7 7 122 114 1 2 7 8 23 23 3
-7 11 4 214 233 4 -8 9 5 96 93 1 -10 8 6 274 295 3 -3 7 7 30 33 1 -8 8 8 27 24 2
-6 11 4 73 77 2 -7 9 5 106 100 1 -9 8 6 21 21 1 -2 7 7 495 490 4 -7 8 8 209 217 1
-5 11 4 35 34 2 -6 9 5 96 99 1 -8 8 6 35 38 2 -1 7 7 149 142 3 -6 8 8 134 127 4
-4 11 4 248 271 3 -5 9 5 99 107 2 -7 8 6 336 338 2 0 7 7 36 45 1 -5 8 8 45 47 1
-3 11 4 36 42 2 -4 9 5 86 99 3 -6 8 6 96 98 1 1 7 7 442 424 3 -4 8 8 230 240 4
0 1 5 60 33 1 -3 9 5 173 171 4 -5 8 6 61 71 1 2 7 7 83 97 2 -3 8 8 28 16 2
-3 2 5 211 209 1 -2 9 5 184 175 1 -4 8 6 349 341 3 3 7 7 43 48 2 -2 8 8 54 57 1
-2 2 5 73 70 1 -1 9 5 51 43 2 -3 8 6 37 38 1 -9 8 7 69 73 1 -1 8 8 255 270 3
0 2 5 17 11 1 0 9 5 86 87 1 -2 8 6 56 54 1 -8 8 7 24 19 2 0 8 8 35 39 1
1 2 5 49 49 1 1 9 5 26 28 1 -1 8 6 420 406 3 -7 8 7 450 427 3 -7 9 8 70 94 1
-5 3 5 46 45 1 -9 10 5 32 36 1 0 8 6 45 57 1 -6 8 7 87 89 1 -6 9 8 724 699 11
-4 3 5 142 150 1 -8 10 5 455 440 3 1 8 6 92 97 1 -5 8 7 47 50 1 -5 9 8 101 120 3
-3 3 5 441 449 3 -7 10 5 0 6 1 2 8 6 215 236 4 -4 8 7 481 468 4 -4 9 8 59 61 2
-2 3 5 217 210 1 -6 10 5 80 90 1 -9 9 6 632 606 4 -3 8 7 81 88 1 -3 9 8 561 539 9
-1 3 5 49 49 1 -5 10 5 350 336 2 -8 9 6 25 21 3 -2 8 7 31 19 2 -2 9 8 22 23 3
0 3 5 306 312 2 -4 10 5 95 98 1 -7 9 6 143 147 2 -1 8 7 440 424 5 2 2 9 512 504 8
1 3 5 29 25 1 -3 10 5 49 49 1 -6 9 6 1069 1013 8 0 8 7 13 17 2 -5 3 9 65 64 1
2 3 5 86 94 1 -2 10 5 467 450 5 -5 9 6 185 174 2 1 8 7 62 52 2 -4 3 9 37 35 1
3 3 5 151 135 1 -1 10 5 25 28 1 -4 9 6 68 72 1 -8 9 7 77 73 1 -3 3 9 189 177 7

```

Observed and calculated structure factors for cualstibite

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
0	3	9	0	15	1	-5	5	9	70	74	1	2	6	9	46	42	1	2	3	10	96	93	5	-7	6	10	50	72	4
1	3	9	59	59	1	-4	5	9	548	530	8	-8	7	9	338	355	6	3	3	10	830	819	9	-6	6	10	621	635	15
2	3	9	55	47	1	-3	5	9	62	64	1	-7	7	9	22	22	3	-7	4	10	113	112	1	-5	6	10	16	24	3
3	3	9	258	242	3	-2	5	9	56	47	2	-6	7	9	49	62	1	-6	4	10	104	111	2	-4	6	10	108	110	2
-7	4	9	20	19	1	-1	5	9	567	559	4	-5	7	9	409	395	8	-5	4	10	284	297	4	-3	6	10	872	819	13
-6	4	9	65	66	1	0	5	9	23	31	1	-4	7	9	11	19	3	-4	4	10	25	25	1	-2	6	10	95	113	1
-5	4	9	551	530	5	1	5	9	54	59	1	-3	7	9	34	37	1	1	4	10	277	287	5	-1	6	10	101	85	4
-4	4	9	18	8	1	2	5	9	405	382	4	-2	7	9	403	382	5	2	4	10	105	113	1	0	6	10	651	633	7
-3	4	9	48	35	3	3	5	9	13	9	5	-1	7	9	72	79	1	3	4	10	74	84	2	1	6	10	19	26	4
-2	4	9	512	504	10	-8	6	9	66	68	1	0	7	9	49	50	2	-7	5	10	203	247	2	-6	7	10	67	72	3
-1	4	9	54	59	2	-7	6	9	50	62	1	1	7	9	334	327	5	-6	5	10	24	24	2	-5	7	10	229	247	2
0	4	9	79	81	2	-6	6	9	136	146	4	-7	8	9	355	355	9	-5	5	10	70	80	2	-4	7	10	121	112	1
1	4	9	575	559	5	-5	6	9	49	60	1	-6	8	9	65	68	3	-4	5	10	299	297	4	-3	7	10	72	84	2
2	4	9	81	80	3	-4	6	9	65	67	1	-5	8	9	36	41	2	-3	5	10	42	42	2	-2	7	10	247	276	2
3	4	9	27	37	1	-3	6	9	247	242	2	-4	8	9	286	293	4	-2	5	10	94	93	1	-1	7	10	7	26	7

4 4 9 288 293 4 -2 6 9 67 80 1 -3 8 9 0 9 1 -1 5 10 285 287 6 -5 6 11 0 40 1
-8 5 9 30 41 1 -1 6 9 57 59 1 -2 8 9 47 41 2 0 5 10 24 29 2 -4 6 11 34 41 2
-7 5 9 403 395 3 0 6 9 29 24 1 -1 8 9 332 327 9 1 5 10 98 85 4 -1 6 11 31 27 3
-6 5 9 52 60 1 1 6 9 72 79 1 -5 3 10 39 42 1 2 5 10 245 276 6

E