

Table S1. Crystal data and structure refinement for $K_{1.25}Pb_{3.5}Bi_{7.25}Se_{15}$.

Empirical formula	$K_{1.25}Pb_{3.5}Bi_{7.25}Se_{15}$
Formula weight	3473.54
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71069 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /m
Unit cell dimensions	a = 17.4481(8) Å b = 4.1964(2) Å c = 21.6945(10) Å alpha = 90 deg. beta = 98.8500(10) deg. gamma = 90 deg.
Volume	1569.54(13) Å ³
Z	2
Density (calculated)	7.350 Mg/m ³
Absorption coefficient	76.731 mm ⁻¹
F(000)	2845
Theta range for data collection	1.63 to 28.30 deg.
Index ranges	-22 ≤ h ≤ 19, -5 ≤ k ≤ 5, -28 ≤ l ≤ 27
Reflections collected	12085
Independent reflections	4208 [R(int) = 0.0821]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	4208 / 0 / 166
Goodness-of-fit on F ²	0.921
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0537, wR2 = 0.1126
R indices (all data)	R1 = 0.0910, wR2 = 0.1211
Extinction coefficient	0.00043(3)
Largest diff. peak and hole	5.021 and -5.899 e.Å ⁻³

Table **S2** Crystal data and structure refinement for
KSn₄Bi₇Se₁₅

Identification code	a_0
Empirical formula	Bi _{7.45} K _{1.46} Se ₁₅ Sn _{3.09}
Formula weight	3165.14
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71073 Å
Crystal system	monoclinic
Space group	P 2(1)/M
Unit cell dimensions	a = 17.454(5) Å b = 4.2012(12) Å c = 21.750(6) Å alpha = 90 deg. beta = 98.550(5) deg. gamma = 90 deg.
Volume	1577.2(8) Å ³
Z	2
Density (calculated)	6.665 Mg/m ³
Absorption coefficient	61.297 mm ⁻¹
F(000)	2621
Crystal size	0.02 x 0.03 x 0.55 mm
Theta range for data collection	1.89 to 28.22 deg.
Index ranges	-19<=h<=22, -5<=k<=5, -28<=l<=28
Reflections collected / unique	12486 / 3948 [R(int) = 0.0592]
Completeness to theta = 28.22	89.2%
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3948 / 0 / 175
Goodness-of-fit on F ²	1.160
Final R indices [I>2sigma(I)]	R1 = 0.0625, wR2 = 0.1469
R indices (all data)	R1 = 0.0835, wR2 = 0.1562
Largest diff. peak and hole	3.721 and -4.093 e.Å ⁻³

Table S3. Crystal data and structure refinement for $\text{Rb}_{1.45}\text{Pb}_{3.1}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$.

Empirical formula	$\text{Rb}_{1.45}\text{Pb}_{3.1}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$
Formula weight	2857.66
Temperature	171(2) K
Wavelength	0.71069 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P21/m
Unit cell dimensions	a = 17.3160(7) Å b = 4.1406(2) Å c = 21.6401(8) Å alpha = 90 deg. beta = 99.1390(10) deg. gamma = 90 deg.
Volume	1531.87(11) Å ³
Z	2
Density (calculated)	6.195 Mg/m ³
Absorption coefficient	43.529 mm ⁻¹
F(000)	2396
Theta range for data collection	1.64 to 28.84 deg.
Index ranges	-22 ≤ h ≤ 18, -5 ≤ k ≤ 5, -27 ≤ l ≤ 25
Reflections collected	10198
Independent reflections	4089 [R(int) = 0.0427]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	4089 / 0 / 174
Goodness-of-fit on F ²	0.994
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0432, wR2 = 0.0931
R indices (all data)	R1 = 0.0603, wR2 = 0.0986
Extinction coefficient	0.00058(4)
Largest diff. peak and hole	5.776 and -1.918 e.Å ⁻³

Table S4. Crystal data and structure refinement for $K_{1.45}Pb_{3.10}Sb_{7.45}Se_{15}$.

Empirical formula	$K_{1.45} Pb_{3.10} Sb_{7.45} Se_{15}$
Formula weight	2790.42
Temperature	171(2) K
Wavelength	0.71069 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P21/m
Unit cell dimensions	a = 17.1204(6) Å b = 4.1568(2) Å c = 21.6362(8) Å alpha = 90 deg. beta = 98.7060(10) deg. gamma = 90 deg.
Volume	1522.02(11) Å ³
Z	2
Density (calculated)	6.089 Mg/m ³
Absorption coefficient	41.705 mm ⁻¹
F(000)	2343
Theta range for data collection	1.64 to 28.35 deg.
Index ranges	-22 ≤ h ≤ 22, -5 ≤ k ≤ 5, -26 ≤ l ≤ 28
Reflections collected	10547
Independent reflections	3992 [R(int) = 0.0546]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3992 / 0 / 166
Goodness-of-fit on F ²	1.029
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0533, wR2 = 0.1095
R indices (all data)	R1 = 0.0850, wR2 = 0.1212
Extinction coefficient	0.00042(5)
Largest diff. peak and hole	3.913 and -2.208 e.Å ⁻³

Table S5. Crystal data and structure refinement for $K_{2.15}Pb_{1.7}Sb_{8.15}Se_{15}$.

Empirical formula	$K_{2.15}Pb_{1.7}Sb_{8.15}Se_{15}$
Formula weight	2612.95
Temperature	293(2) K
Wavelength	0.71069 Å
Crystal system	Monoclinic
Space group	P2 ₁ /m
Unit cell dimensions	a = 17.167(4) Å b = 4.1494(9) Å c = 21.684(5) Å alpha = 90 deg. beta = 98.664(3) deg. gamma = 90 deg.
Volume	1527.0(6) Å ³
Z	2
Density (calculated)	5.683 Mg/m ³
Absorption coefficient	34.588 mm ⁻¹
F(000)	2212
Theta range for data collection	1.64 to 28.70 deg.
Index ranges	-22 ≤ h ≤ 22, -5 ≤ k ≤ 5, -27 ≤ l ≤ 26
Reflections collected	12322
Independent reflections	3992 [R(int) = 0.0433]
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²
Data / restraints / parameters	3992 / 0 / 165
Goodness-of-fit on F ²	1.043
Final R indices [I > 2sigma(I)]	R1 = 0.0502, wR2 = 0.1308
R indices (all data)	R1 = 0.0605, wR2 = 0.1364
Extinction coefficient	0.00007(4)
Largest diff. peak and hole	3.823 and -4.880 e.Å ⁻³

Table S6. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{1.25}\text{Pb}_{3.5}\text{Bi}_{7.25}\text{Se}_{15}$.

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Pb(1)	3300(1)	2500	7735(1)	20(1)	0.891(6)
K(11)	3300(1)	2500	7735(1)	20(1)	0.109(6)
Pb(2)	7769(1)	2500	6832(1)	19(1)	0.857(6)
K(22)	7769(1)	2500	6832(1)	19(1)	0.143(6)
Bi(1)	4546(1)	2500	1669(1)	11(1)	1
Bi(2)	7563(1)	2500	8799(1)	11(1)	1
Bi(3)	340(1)	2500	928(1)	14(1)	1
Bi(4)	1848(1)	2500	9413(1)	13(1)	1
Bi(5)	6063(1)	2500	266(1)	13(1)	1
Bi(6)	535(1)	2500	7146(1)	12(1)	1
Bi(7)	3253(1)	2500	4814(1)	10(1)	1
Bi(8)	681(1)	2500	4323(1)	11(1)	1
Bi(9)	8064(1)	2500	3938(1)	10(1)	1
Se(1)	4619(2)	2500	9036(1)	15(1)	1
Se(2)	3207(2)	2500	454(1)	10(1)	1
Se(3)	8937(2)	2500	9855(1)	11(1)	1
Se(4)	5705(2)	2500	2659(1)	11(1)	1
Se(5)	6255(2)	2500	7802(1)	11(1)	1
Se(6)	1761(2)	2500	1839(1)	14(1)	1
Se(7)	430(2)	2500	8476(1)	15(1)	1
Se(8)	7373(2)	2500	1190(1)	13(1)	1
Se(9)	3350(2)	2500	3565(1)	14(1)	1
Se(10)	684(2)	2500	3059(1)	10(1)	1
Se(11)	8231(2)	2500	2711(1)	11(1)	1
Se(12)	5711(2)	2500	4922(1)	10(1)	1
Se(13)	8149(2)	2500	5511(1)	11(1)	1
Se(14)	575(2)	2500	5788(1)	9(1)	1
Se(15)	3016(2)	2500	6274(1)	11(1)	1
K(1)	5069(4)	2500	6328(3)	18(2)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S7 Atomic coordinates ($\times 10^4$), equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$), and occupancies for $\text{KSn}_4\text{Bi}_7\text{Se}_{15}$

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Bi(1)	4540(1)	2500	1664(1)	22(1)	0.878(5)
Sn(1)	4540(1)	2500	1664(1)	22(1)	0.12
Bi(2)	7574(1)	2500	8813(1)	20(1)	0.832(5)
Sn(2)	7574(1)	2500	8813(1)	20(1)	0.17
Bi(3)	337(1)	2500	924(1)	23(1)	0.673(5)
Sn(3)	337(1)	2500	924(1)	23(1)	0.33
Bi(4)	1846(1)	2500	9429(1)	22(1)	0.739(6)
Sn(4)	1846(1)	2500	9429(1)	22(1)	0.26
Bi(5)	6070(1)	2500	267(1)	20(1)	0.710(6)
Sn(5)	6070(1)	2500	267(1)	20(1)	0.29
Bi(6)	524(1)	2500	7129(1)	21(1)	0.934(5)
Sn(6)	524(1)	2500	7129(1)	21(1)	0.07
Bi(7)	3255(1)	2500	4821(1)	20(1)	1
Bi(8)	697(1)	2500	4326(1)	19(1)	0.794(5)
Sn(8)	697(1)	2500	4326(1)	19(1)	0.21
Bi(9)	8075(1)	2500	3940(1)	19(1)	0.888(5)
Sn(9)	8075(1)	2500	3940(1)	19(1)	0.11
Sn(10)	3377(2)	2500	7667(2)	44(1)	0.694(9)
K(10)	3377(2)	2500	7667(2)	44(1)	0.31
Sn(11)	2320(2)	-2500	3228(2)	37(1)	0.846(9)
K(11)	2090(40)	-2500	2930(30)	37(1)	0.15
K(30)	5066(4)	2500	6331(3)	34(2)	1
Se(1)	4634(2)	2500	9081(2)	26(1)	1
Se(2)	3194(1)	2500	443(1)	17(1)	1
Se(3)	8956(1)	2500	9849(1)	19(1)	1
Se(4)	5665(2)	2500	2658(1)	25(1)	1
Se(5)	6275(2)	2500	7830(1)	21(1)	1
Se(6)	1738(2)	2500	1808(1)	21(1)	1
Se(7)	422(2)	2500	8480(1)	26(1)	1
Se(8)	7392(2)	2500	1163(1)	22(1)	1
Se(9)	3383(2)	2500	3575(2)	29(1)	1
Se(10)	684(2)	2500	3075(1)	20(1)	1
Se(11)	8272(2)	2500	2719(1)	21(1)	1
Se(12)	5721(1)	2500	4919(1)	21(1)	1
Se(13)	8151(2)	2500	15501(2)	23(1)	1
Se(14)	564(1)	2500	5800(1)	17(1)	1
Se(15)	3003(2)	2500	6264(1)	22(1)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S8. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{Rb}_{1.45}\text{Pb}_{3.1}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$.

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Pb(1)	3284(1)	2500	7800(1)	19(1)	1
Pb(2)	7864(1)	2500	6842(1)	21(1)	0.821(5)
Rb(22)	7864(1)	2500	6842(1)	21(1)	0.179(5)
Sb(1)	4551(1)	2500	1641(1)	18(1)	1
Sb(2)	7564(1)	2500	8809(1)	14(1)	1
Pb(33)	282(21)	2500	925(20)	17(2)	0.294(8)
Sb(3)	383(14)	2500	953(14)	17(2)	0.706(8)
Pb(44)	1735(22)	2500	9399(21)	16(2)	0.273(7)
Sb(4)	1829(13)	2500	9438(13)	16(2)	0.727(7)
Sb(5)	6117(1)	2500	299(1)	19(1)	1
Sb(6)	556(12)	2500	7160(9)	14(2)	0.801(7)
Pb(66)	579(29)	2500	7090(21)	14(2)	0.199(7)
Sb(7)	3196(1)	2500	4790(1)	13(1)	1
Sb(8)	653(1)	2500	4304(1)	17(1)	1
Sb(9)	8042(1)	2500	3900(1)	13(1)	1
Rb(1)	5052(1)	2500	6344(1)	15(1)	1
Se(1)	4595(1)	2500	9036(1)	19(1)	1
Se(2)	3187(1)	2500	408(1)	16(1)	1
Se(3)	8914(1)	2500	9876(1)	18(1)	1
Se(4)	5684(1)	2500	2590(1)	11(1)	1
Se(5)	6235(1)	2500	7845(1)	21(1)	1
Se(6)	1786(1)	2500	1817(1)	34(1)	1
Se(7)	348(2)	2500	8475(1)	51(1)	1
Se(8)	7352(1)	2500	1187(1)	16(1)	1
Se(9)	3297(1)	2500	3592(1)	13(1)	1
Se(10)	664(1)	2500	3095(1)	14(1)	1
Se(11)	8212(1)	2500	2724(1)	14(1)	1
Se(12)	5799(1)	2500	4946(1)	14(1)	1
Se(13)	8198(1)	2500	5535(1)	13(1)	1
Se(14)	580(1)	2500	5820(1)	13(1)	1
Se(15)	2996(1)	2500	6304(1)	14(1)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S9. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{1.45}\text{Pb}_{3.10}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$.

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Pb(1)	3277(1)	2500	7770(1)	21(1)	0.908(4)
K(11)	3277(1)	2500	7770(1)	21(1)	0.092(4)
Pb(2)	7795(1)	2500	6852(1)	26(1)	0.706(5)
K(22)	7795(1)	2500	6852(1)	26(1)	0.294(5)
Sb(1)	4547(1)	2500	1675(1)	22(1)	1
Sb(2)	7561(1)	2500	8821(1)	22(1)	1
Sb(3)	338(1)	2500	935(1)	15(1)	1
Sb(4)	1811(1)	2500	9427(1)	17(1)	1
Sb(5)	6101(1)	2500	312(1)	24(1)	1
Sb(6)	530(1)	2500	7138(1)	18(1)	1
Sb(7)	3220(1)	2500	4778(1)	24(1)	1
Sb(8)	669(1)	2500	4300(1)	22(1)	1
Sb(9)	8051(1)	2500	3900(1)	16(1)	1
Se(1)	4603(1)	2500	9004(1)	24(1)	1
Se(2)	3208(1)	2500	400(1)	19(1)	1
Se(3)	8904(1)	2500	9866(1)	20(1)	1
Se(4)	5674(1)	2500	2630(1)	14(1)	1
Se(5)	6255(1)	2500	7816(1)	25(1)	1
Se(6)	1766(1)	2500	1797(1)	35(1)	1
Se(7)	361(2)	2500	8483(1)	50(1)	1
Se(8)	7353(1)	2500	1188(1)	20(1)	1
Se(9)	3380(1)	2500	3597(1)	18(1)	1
Se(10)	696(1)	2500	3096(1)	17(1)	1
Se(11)	8232(1)	2500	2724(1)	18(1)	1
Se(12)	5754(1)	2500	4939(1)	31(1)	1
Se(13)	8159(1)	2500	5532(1)	23(1)	1
Se(14)	566(1)	2500	5820(1)	17(1)	1
Se(15)	3001(1)	2500	6294(1)	17(1)	1
K(1)	5039(3)	2500	6341(2)	20(1)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S10. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{2.15}\text{Pb}_{1.7}\text{Sb}_{8.15}\text{Se}_{15}$.

	x	y	z	U(eq)	Occ.
Pb(1)	3281(1)	2500	7767(1)	41(1)	1
Pb(2)	7758(1)	2500	6839(1)	50(1)	0.505(5)
K(22)	7758(1)	2500	6839(1)	50(1)	0.495(5)
Sb(1)	4545(1)	2500	1674(1)	27(1)	1
Sb(2)	7568(1)	2500	8826(1)	33(1)	1
Sb(3)	342(1)	2500	934(1)	26(1)	1
Sb(4)	1815(1)	2500	9430(1)	27(1)	1
Sb(5)	6108(1)	2500	314(1)	30(1)	1
Sb(6)	528(1)	2500	7127(1)	26(1)	1
Sb(7)	3219(1)	2500	4787(1)	28(1)	1
Sb(8)	676(1)	2500	4303(1)	28(1)	1
Sb(9)	8049(1)	2500	3898(1)	22(1)	1
Se(1)	4609(1)	2500	9011(1)	31(1)	1
Se(2)	3204(1)	2500	393(1)	25(1)	1
Se(3)	8902(1)	2500	9864(1)	26(1)	1
Se(4)	5663(1)	2500	2626(1)	20(1)	1
Se(5)	6259(1)	-7500	7822(1)	33(1)	1
Se(6)	1747(1)	2500	1778(1)	42(1)	1
Se(7)	355(2)	2500	8481(1)	62(1)	1
Se(8)	7351(1)	2500	1182(1)	25(1)	1
Se(9)	3388(1)	2500	3609(1)	25(1)	1
Se(10)	678(1)	2500	3101(1)	22(1)	1
Se(11)	8237(1)	2500	2731(1)	22(1)	1
Se(12)	5765(1)	2500	4935(1)	32(1)	1
Se(13)	8168(1)	2500	5530(1)	29(1)	1
Se(14)	574(1)	2500	5826(1)	22(1)	1
Se(15)	3002(1)	2500	6292(1)	22(1)	1
K(1)	5036(2)	2500	6338(2)	31(1)	1

U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

Table S11. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{1.25}\text{Pb}_{3.5}\text{Bi}_{7.25}\text{Se}_{15}$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(1)	21(1)	16(1)	24(1)	0	6(1)	0
K(11)	21(1)	16(1)	24(1)	0	6(1)	0
Pb(2)	25(1)	15(1)	18(1)	0	6(1)	0
K(22)	25(1)	15(1)	18(1)	0	6(1)	0
Bi(1)	10(1)	14(1)	11(1)	0	2(1)	0
Bi(2)	10(1)	13(1)	11(1)	0	4(1)	0
Bi(3)	13(1)	15(1)	15(1)	0	4(1)	0
Bi(4)	14(1)	14(1)	13(1)	0	3(1)	0
Bi(5)	13(1)	13(1)	14(1)	0	6(1)	0
Bi(6)	14(1)	13(1)	10(1)	0	4(1)	0
Bi(7)	9(1)	10(1)	12(1)	0	3(1)	0
Bi(8)	11(1)	13(1)	9(1)	0	4(1)	0
Bi(9)	10(1)	12(1)	9(1)	0	3(1)	0
Se(1)	14(2)	15(2)	19(2)	0	11(1)	0
Se(2)	11(2)	12(2)	7(1)	0	1(1)	0
Se(3)	11(2)	13(2)	11(2)	0	3(1)	0
Se(4)	8(2)	14(2)	12(2)	0	1(1)	0
Se(5)	12(2)	14(2)	6(1)	0	2(1)	0
Se(6)	13(2)	20(2)	9(2)	0	6(1)	0
Se(7)	19(2)	19(2)	7(1)	0	2(1)	0
Se(8)	14(2)	16(2)	8(1)	0	2(1)	0
Se(9)	19(2)	16(2)	9(2)	0	4(1)	0
Se(10)	11(2)	14(2)	8(1)	0	4(1)	0
Se(11)	14(2)	11(1)	8(1)	0	2(1)	0
Se(12)	6(2)	12(2)	12(2)	0	3(1)	0
Se(13)	9(2)	10(1)	12(2)	0	2(1)	0
Se(14)	7(2)	12(1)	9(1)	0	2(1)	0
Se(15)	10(2)	11(2)	12(2)	0	5(1)	0
K(1)	23(4)	17(3)	16(4)	0	6(3)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$$

Table S12 Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{KSn}_4\text{Bi}_7\text{Se}_{15}$

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Bi(1)	16(1)	20(1)	32(1)	0	4(1)	0
Sn(1)	16(1)	20(1)	32(1)	0	4(1)	0
Bi(2)	15(1)	19(1)	27(1)	0	5(1)	0
Sn(2)	15(1)	19(1)	27(1)	0	5(1)	0
Bi(3)	16(1)	21(1)	32(1)	0	4(1)	0
Sn(3)	16(1)	21(1)	32(1)	0	4(1)	0
Bi(4)	17(1)	20(1)	29(1)	0	4(1)	0
Sn(4)	17(1)	20(1)	29(1)	0	4(1)	0
Bi(5)	15(1)	16(1)	28(1)	0	6(1)	0
Sn(5)	15(1)	16(1)	28(1)	0	6(1)	0
Bi(6)	19(1)	21(1)	25(1)	0	6(1)	0
Sn(6)	19(1)	21(1)	25(1)	0	6(1)	0
Bi(7)	11(1)	16(1)	33(1)	0	4(1)	0
Bi(8)	14(1)	18(1)	25(1)	0	5(1)	0
Sn(8)	14(1)	18(1)	25(1)	0	5(1)	0
Bi(9)	14(1)	19(1)	24(1)	0	4(1)	0
Sn(9)	14(1)	19(1)	24(1)	0	4(1)	0
Sn(10)	46(2)	20(2)	64(3)	0	-4(2)	0
K(10)	46(2)	20(2)	64(3)	0	-4(2)	0
Sn(11)	46(2)	20(2)	46(2)	0	11(1)	0
K(11)	46(2)	20(2)	46(2)	0	11(1)	0
K(30)	37(4)	29(4)	35(4)	0	3(3)	0
Se(1)	25(2)	19(2)	40(2)	0	19(1)	0
Se(2)	15(1)	17(1)	19(1)	0	3(1)	0
Se(3)	12(1)	20(2)	23(2)	0	1(1)	0
Se(4)	17(1)	29(2)	30(2)	0	2(1)	0
Se(5)	18(1)	21(2)	25(2)	0	5(1)	0
Se(6)	18(1)	22(2)	22(2)	0	7(1)	0
Se(7)	29(2)	27(2)	22(2)	0	6(1)	0
Se(8)	20(1)	22(2)	25(2)	0	5(1)	0
Se(9)	28(2)	33(2)	29(2)	0	7(1)	0
Se(10)	16(1)	20(1)	26(2)	0	7(1)	0
Se(11)	20(1)	18(1)	25(2)	0	4(1)	0
Se(12)	13(1)	14(1)	36(2)	0	3(1)	0
Se(13)	14(1)	12(1)	43(2)	0	0(1)	0
Se(14)	13(1)	16(1)	23(2)	0	4(1)	0
Se(15)	12(1)	21(2)	34(2)	0	7(1)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:
 $-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

Table S13. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{Rb}_{1.45}\text{Pb}_{3.1}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(1)	19(1)	12(1)	25(1)	0	6(1)	0
Pb(2)	24(1)	12(1)	28(1)	0	8(1)	0
Rb(22)	24(1)	12(1)	28(1)	0	8(1)	0
Sb(1)	18(1)	18(1)	16(1)	0	-4(1)	0
Sb(2)	11(1)	9(1)	22(1)	0	5(1)	0
Pb(33)	12(6)	15(1)	24(2)	0	2(3)	0
Sb(3)	12(6)	15(1)	24(2)	0	2(3)	0
Pb(44)	12(5)	13(1)	23(3)	0	3(3)	0
Sb(4)	12(5)	13(1)	23(3)	0	3(3)	0
Sb(5)	16(1)	12(1)	26(1)	0	-2(1)	0
Sb(6)	15(1)	14(1)	14(4)	0	5(2)	0
Pb(66)	15(1)	14(1)	14(4)	0	5(2)	0
Sb(7)	11(1)	12(1)	16(1)	0	2(1)	0
Sb(8)	26(1)	15(1)	11(1)	0	4(1)	0
Sb(9)	14(1)	12(1)	12(1)	0	3(1)	0
Rb(1)	15(1)	15(1)	14(1)	0	4(1)	0
Se(1)	17(1)	22(1)	17(1)	0	3(1)	0
Se(2)	18(1)	17(1)	15(1)	0	1(1)	0
Se(3)	18(1)	18(1)	17(1)	0	2(1)	0
Se(4)	12(1)	10(1)	10(1)	0	2(1)	0
Se(5)	19(1)	28(1)	15(1)	0	1(1)	0
Se(6)	33(1)	53(1)	18(1)	0	10(1)	0
Se(7)	80(2)	54(2)	21(1)	0	9(1)	0
Se(8)	19(1)	17(1)	10(1)	0	0(1)	0
Se(9)	15(1)	13(1)	11(1)	0	2(1)	0
Se(10)	14(1)	15(1)	13(1)	0	4(1)	0
Se(11)	15(1)	16(1)	11(1)	0	2(1)	0
Se(12)	13(1)	13(1)	15(1)	0	1(1)	0
Se(13)	12(1)	13(1)	13(1)	0	2(1)	0
Se(14)	13(1)	14(1)	12(1)	0	3(1)	0
Se(15)	11(1)	14(1)	16(1)	0	3(1)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + \dots + 2 h k a^* b^* U12]$$

Table S14. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{1.45}\text{Pb}_{3.10}\text{Sb}_{7.45}\text{Se}_{15}$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(1)	20(1)	14(1)	30(1)	0	1(1)	0
K(11)	20(1)	14(1)	30(1)	0	1(1)	0
Pb(2)	32(1)	14(1)	32(1)	0	6(1)	0
K(22)	32(1)	14(1)	32(1)	0	6(1)	0
Sb(1)	18(1)	22(1)	22(1)	0	-6(1)	0
Sb(2)	17(1)	16(1)	33(1)	0	4(1)	0
Sb(3)	13(1)	10(1)	20(1)	0	0(1)	0
Sb(4)	15(1)	14(1)	23(1)	0	3(1)	0
Sb(5)	17(1)	16(1)	36(1)	0	-4(1)	0
Sb(6)	15(1)	16(1)	21(1)	0	2(1)	0
Sb(7)	12(1)	34(1)	24(1)	0	-2(1)	0
Sb(8)	28(1)	22(1)	16(1)	0	2(1)	0
Sb(9)	16(1)	16(1)	16(1)	0	1(1)	0
Se(1)	19(1)	28(1)	24(1)	0	0(1)	0
Se(2)	17(1)	19(1)	18(1)	0	-2(1)	0
Se(3)	19(1)	19(1)	21(1)	0	-1(1)	0
Se(4)	13(1)	12(1)	17(1)	0	-2(1)	0
Se(5)	25(1)	28(1)	21(1)	0	-2(1)	0
Se(6)	31(1)	53(2)	20(1)	0	5(1)	0
Se(7)	72(2)	53(2)	24(1)	0	7(1)	0
Se(8)	23(1)	18(1)	16(1)	0	-5(1)	0
Se(9)	18(1)	18(1)	18(1)	0	0(1)	0
Se(10)	18(1)	17(1)	16(1)	0	1(1)	0
Se(11)	18(1)	20(1)	14(1)	0	-1(1)	0
Se(12)	24(1)	44(2)	23(1)	0	0(1)	0
Se(13)	21(1)	26(1)	22(1)	0	3(1)	0
Se(14)	15(1)	20(1)	16(1)	0	1(1)	0
Se(15)	12(1)	19(1)	19(1)	0	-1(1)	0
K(1)	20(2)	19(2)	21(2)	0	3(2)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + \dots + 2 h k a^* b^* U12]$$

Table S15. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for $\text{K}_{2.15}\text{Pb}_{1.7}\text{Sb}_{8.15}\text{Se}_{15}$.

	U11	U22	U33	U23	U13	U12
Pb(1)	40(1)	30(1)	52(1)	0	3(1)	0
Pb(2)	66(1)	24(1)	65(1)	0	23(1)	0
K(22)	66(1)	24(1)	65(1)	0	23(1)	0
Sb(1)	22(1)	30(1)	26(1)	0	-5(1)	0
Sb(2)	26(1)	26(1)	46(1)	0	6(1)	0
Sb(3)	25(1)	22(1)	31(1)	0	0(1)	0
Sb(4)	26(1)	22(1)	33(1)	0	6(1)	0
Sb(5)	24(1)	25(1)	37(1)	0	-4(1)	0
Sb(6)	25(1)	26(1)	27(1)	0	2(1)	0
Sb(7)	18(1)	34(1)	30(1)	0	-1(1)	0
Sb(8)	32(1)	30(1)	19(1)	0	3(1)	0
Sb(9)	23(1)	24(1)	18(1)	0	1(1)	0
Se(1)	27(1)	34(1)	33(1)	0	5(1)	0
Se(2)	24(1)	27(1)	21(1)	0	-1(1)	0
Se(3)	25(1)	26(1)	24(1)	0	-2(1)	0
Se(4)	18(1)	21(1)	20(1)	0	-2(1)	0
Se(5)	34(1)	36(1)	27(1)	0	-4(1)	0
Se(6)	39(1)	65(2)	21(1)	0	4(1)	0
Se(7)	89(2)	70(2)	29(1)	0	11(1)	0
Se(8)	28(1)	26(1)	19(1)	0	-2(1)	0
Se(9)	26(1)	27(1)	22(1)	0	1(1)	0
Se(10)	22(1)	25(1)	19(1)	0	3(1)	0
Se(11)	23(1)	26(1)	17(1)	0	1(1)	0
Se(12)	25(1)	40(1)	29(1)	0	-2(1)	0
Se(13)	25(1)	29(1)	31(1)	0	0(1)	0
Se(14)	22(1)	24(1)	19(1)	0	4(1)	0
Se(15)	17(1)	24(1)	24(1)	0	2(1)	0
K(1)	30(2)	29(2)	34(2)	0	7(2)	0

The anisotropic displacement factor exponent takes the form:

$$-2 \pi^2 [h^2 a^{*2} U11 + \dots + 2 h k a^* b^* U12]$$

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5B17.25Se15. Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1148	1178	63	16	2	0	2979	3116	227	-13	0	1	279	236	279
3	0	0	1389	1445	105	17	2	0	3053	204	302	-12	0	1	2559	2594	70
4	0	0	1370	1257	57	18	2	0	1379	1353	72	-11	0	1	1379	1353	72
5	0	0	2412	2569	76	19	2	0	1813	1345	128	-10	0	1	298	219	298
6	0	0	351	317	144	20	2	0	0	625	1	-9	0	1	2112	2112	71
7	0	0	4828	4899	73	1	3	0	425	309	128	-8	0	1	1975	2037	52
8	0	0	8344	8463	114	2	3	0	200	379	200	-6	0	1	1111	1094	51
9	0	0	735	768	87	3	3	0	3878	781	46	-5	0	1	4080	4075	63
10	0	0	2236	2350	58	4	3	0	6945	7037	70	-4	0	1	354	349	112
11	0	0	1383	1488	65	5	3	0	935	922	75	-3	0	1	1447	1399	38
12	0	0	400	414	232	6	3	0	690	705	104	-1	0	1	1282	1283	41
13	0	0	753	710	111	7	3	0	756	8204	122	2	0	1	866	934	48
14	0	0	5523	5285	152	8	3	0	574	627	195	3	0	1	160	166	159
15	0	0	2058	2034	207	9	3	0	245	125	244	4	0	1	1762	1840	69
16	0	0	3817	3530	170	10	3	0	138	204	137	5	0	1	591	615	51
17	0	0	0	236	1	11	3	0	1880	2176	75	6	0	1	887	920	70
18	0	0	1742	1473	282	12	3	0	1698	1900	142	7	0	1	4577	5123	137
19	0	0	1589	1498	363	13	3	0	520	607	228	8	0	1	6495	7076	75
20	0	0	703	720	702	14	3	0	1262	1354	187	9	0	1	3041	3347	112
21	0	0	1589	1473	445	15	3	0	1559	1703	136	10	0	1	927	924	62
1	1	0	5187	5086	41	16	3	0	1387	1458	238	11	0	1	732	1412	106
2	1	0	676	651	35	17	3	0	1364	1578	232	12	0	1	513	454	310
3	1	0	5619	5600	61	18	3	0	563	657	331	13	0	1	0	71	1
4	1	0	10660	10339	196	19	3	0	557	625	556	14	0	1	7786	8211	113
5	1	0	1303	1309	36	0	4	0	13167	12535	261	15	0	1	2839	2626	183
6	1	0	898	900	37	1	4	0	744	713	169	16	0	1	2619	2591	181
7	1	0	11420	11635	122	2	4	0	462	656	462	17	0	1	288	186	288
8	1	0	803	826	43	3	4	0	841	730	174	18	0	1	1877	1795	288
9	1	0	175	165	175	4	4	0	757	651	181	19	0	1	1686	1464	375
10	1	0	339	254	134	5	4	0	1364	1326	108	20	0	1	909	926	905
11	1	0	3016	2895	200	6	4	0	53	120	53	21	0	1	989	372	989
12	1	0	2387	2484	97	7	4	0	2515	2607	99	22	0	1	2213	1723	351
13	1	0	696	756	143	8	4	0	4573	4620	76	23	0	1	1126	916	448
14	1	0	1788	1779	77	9	4	0	0	376	1	-20	1	1	1157	889	366
15	1	0	2106	2226	74	10	4	0	1208	1275	127	-19	1	1	584	580	584
16	1	0	1694	1836	82	11	4	0	708	886	245	-18	1	1	404	404	404
17	1	0	2015	2036	87	12	4	0	458	254	458	-17	1	1	2045	1795	183
18	1	0	656	600	655	13	4	0	0	343	1	-16	1	1	936	891	133
19	1	0	0	723	1	14	4	0	2963	3183	108	-15	1	1	1031	1035	108
20	1	0	1746	1554	292	15	4	0	552	1333	551	-14	1	1	293	146	293
21	1	0	2102	1983	251	1	5	0	783	150	676	-13	1	1	345	315	344
0	2	0	02061	120374	273	3	5	0	2328	2256	114	-12	1	1	4423	4477	129
1	2	0	1217	1132	39	4	5	0	4689	4233	149	-11	1	1	844	851	110
2	2	0	986	956	38	5	5	0	986	557	428	-10	1	1	215	389	214
3	2	0	1145	1139	35	6	5	0	546	508	546	-9	1	1	269	146	268
4	2	0	1091	1072	37	7	5	0	5009	4096	97	-8	1	1	2488	2466	37
5	2	0	2008	2078	36	8	5	0	340	408	340	-7	1	1	313	376	292
6	2	0	206	222	205	9	5	0	428	93	427	-6	1	1	357	320	115
7	2	0	3781	4008	60	-22	0	1	221	170	220	-5	1	1	869	859	33
8	2	0	6546	7033	125	-21	0	1	1445	1426	519	-4	1	1	5765	5727	118
9	2	0	402	619	147	-20	0	1	1711	1748	333	-3	1	1	786	760	30
10	2	0	1840	1974	54	-19	0	1	1512	1202	394	-2	1	1	386	306	59
11	2	0	1236	1270	94	-18	0	1	221	772	720	-1	1	1	221	144	220
12	2	0	543	357	408	-17	0	1	694	653	694	-0	1	1	677	783	37
13	2	0	505	585	220	-16	0	1	1740	1301	286	2	1	1	1065	107	47
14	2	0	4276	4590	269	-15	0	1	802	683	801	2	1	1	4252	4477	59
15	2	0	1855	1806	90	-14	0	1	1223	1409	314	3	1	1	1356	3725	80

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5B17.25Se15. Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
5	0	2	1685	1862	33	19	1	2	1802	1783	249	-6	3	2	189	504	188
6	0	2	357	361	86	20	1	2	531	736	530	-5	3	2	299	280	298
7	0	2	591	646	62	21	1	2	4186	4128	164	-4	3	2	780	780	78
8	0	2	1823	1932	38	-20	2	2	468	723	467	-3	3	2	2737	2709	43
9	0	2	1998	2133	102	-19	2	2	2832	3376	90	-2	3	2	1415	1379	56
10	0	2	1949	2203	42	-18	2	2	1237	1211	135	-1	3	2	1047	987	67
11	0	2	1030	1171	58	-17	2	2	235	291	234	0	3	2	443	480	151
12	0	2	268	354	267	-16	2	2	462	649	462	1	3	2	293	176	292
13	0	2	167	120	166	-15	2	2	391	652	390	2	3	2	1272	2391	41
14	0	2	3540	3669	85	-14	2	2	649	561	168	3	3	2	1012	1014	61
15	0	2	3398	3332	181	-13	2	2	843	929	130	4	3	2	1289	1271	55
16	0	2	2024	2182	219	-12	2	2	2055	2174	67	5	3	2	893	889	79
17	0	2	1768	1526	312	-11	2	2	993	1003	110	6	3	2	419	129	196
18	0	2	884	815	807	-10	2	2	2677	3809	61	7	3	2	2766	2869	50
19	0	2	1902	1804	326	-9	2	2	694	716	119	8	3	2	354	28	354
20	0	2	658	410	658	-8	2	2	852	950	101	9	3	2	767	786	97
21	0	2	0	557	1	-7	2	2	1730	1636	58	10	3	2	248	223	248
22	0	2	1559	1159	582	-6	2	2	0	40	1	11	3	2	1279	1369	75
-20	1	2	0	86	1	-5	2	2	2081	2033	36	12	3	2	2036	2234	84
-19	1	2	0	353	1	-4	2	2	2401	2253	35	13	3	2	590	670	175
-18	1	2	2420	2208	170	-3	2	2	85	49	84	14	3	2	640	824	265
-17	1	2	3004	2748	136	-2	2	2	0	68	1	15	3	2	842	812	181
-16	1	2	1994	2084	203	-1	2	2	418	463	92	16	3	2	1845	1913	102
-15	1	2	2710	2697	83	0	2	2	1226	1238	69	17	3	2	631	790	297
-14	1	2	1243	1251	92	1	2	2	284	218	187	18	3	2	654	697	254
-13	1	2	466	554	218	2	2	2	826	850	62	-15	4	2	425	451	425
-12	1	2	2818	2792	70	3	2	2	536	475	72	-14	4	2	449	469	448
-11	1	2	1126	1013	84	4	2	2	481	493	84	-13	4	2	613	632	297
-10	1	2	1010	881	87	5	2	2	1481	1538	52	-12	4	2	1453	1548	115
-9	1	2	485	423	67	6	2	2	363	329	138	-11	4	2	565	642	294
-8	1	2	1996	1860	50	7	2	2	426	572	118	-10	4	2	2529	2556	117
-7	1	2	1071	991	45	8	2	2	1577	1613	50	-9	4	2	643	526	292
-6	1	2	741	700	741	9	2	2	1709	1687	109	-8	4	2	984	1000	260
-5	1	2	443	332	80	10	2	2	1689	1867	109	-7	4	2	1072	1040	270
-4	1	2	1331	1354	53	11	2	2	952	1017	75	-6	4	2	397	60	397
-3	1	2	3697	3698	84	12	2	2	355	277	230	-5	4	2	1411	1369	114
-2	1	2	1936	1990	54	13	2	2	292	99	291	-4	4	2	1551	1454	108
-1	1	2	1409	1416	34	14	2	2	3033	3186	191	-3	4	2	0	55	
0	1	2	563	621	49	15	2	2	2694	2940	263	-2	4	2	219	100	219
1	1	2	318	318	17	16	2	2	1837	1932	323	-1	4	2	253	317	253
2	1	2	3160	3366	39	17	2	2	1242	1354	381	0	4	2	984	1000	260
3	1	2	1614	1616	30	18	2	2	504	709	503	1	4	2	429	217	429
4	1	2	1863	1855	47	19	2	2	1590	1624	350	2	4	2	533	568	177
5	1	2	1188	1213	36	20	2	2	785	347	785	3	4	2	395	395	366
6	1	2	164	231	163	-19	3	2	519	309	519	4	4	2	378	358	377
7	1	2	3716	3904	45	-18	3	2	1519	1777	148	5	4	2	1086	1046	96
8	1	2	0	109	1	-17	3	2	1984	2154	131	6	4	2	449	262	226
9	1	2	1009	1090	75	-16	3	2	1609	1694	280	7	4	2	260	222	260
10	1	2	359	309	150	-15	3	2	7040	2072	196	8	4	2	1055	1055	197
11	1	2	1590	1745	52	-14	3	2	711	936	245	9	4	2	1183	1254	92
12	1	2	2669	2883	136	-13	3	2	332	386	332	10	4	2	1145	1246	95
13	1	2	680	794	91	-12	3	2	2040	2142	79	11	4	2	580	706	290
14	1	2	1084	1085	111	-11	3	2	659	727	180	12	4	2	538	146	311
15	1	2	1103	1032	111	-10	3	2	690	710	174	13	4	2	14	34	14
16	1	2	2439	2439	111	-9	3	2	358	358	111	14	4	2	1960	2201	135
17	1	2	1041	1012	139	-8	3	2	1355	1335	131	15	4	2	1187	1122	307
18	1	2	539	548	539	-7	3	2	552	669	190	-9	5	2	584	106	584

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
7	3	3	2804	2927	50	4	5	3	680	226	465	-13	1	4	2914	2881	84
8	3	3	653	649	115	5	5	3	0	55	1	-12	1	4	2035	1825	137
9	3	3	193	59	192	6	5	3	764	250	267	-11	1	4	404	473	285
10	3	3	1056	1170	82	7	5	3	1829	1813	125	-10	1	4	381	423	381
11	3	3	3371	3694	76	8	5	3	93	355	92	-9	1	4	1139	1083	68
12	3	3	136	282	136	-22	0	4	0	213	1	-8	1	4	5638	5602	70
13	3	3	974	971	92	-21	0	4	461	1074	460	-7	1	4	1625	1473	44
14	3	3	156	411	156	-20	0	4	2838	2693	228	-6	1	4	78	110	78
15	3	3	2257	2271	92	-19	0	4	1535	1362	411	-5	1	4	1005	956	52
16	3	3	2630	2443	112	-18	0	4	882	581	560	-4	1	4	4417	4378	73
17	3	3	154	152	153	-17	0	4	1600	1420	297	-3	1	4	412344	11586	165
18	3	3	408	673	407	-16	0	4	298	348	298	-2	1	4	247	126	134
19	3	3	812	42	811	-14	0	4	371	126	371	-1	1	4	2555	2664	32
-14	4	3	775	902	207	-13	0	4	386	173	386	0	1	4	2580	2722	95
-13	4	3	789	778	361	-12	0	4	1679	1618	53	1	1	4	875	909	33
-12	4	3	1784	1664	202	-11	0	4	873	828	73	2	1	4	2094	2172	45
-11	4	3	2951	3127	183	-10	0	4	7697	7534	87	3	1	4	1129	1128	44
-10	4	3	4411	4589	209	-9	0	4	2293	2022	91	4	1	4	280	78	112
-9	4	3	476	381	475	-8	0	4	2740	2639	49	5	1	4	1215	1331	35
-8	4	3	0	243	1	-7	0	4	1141	1079	65	6	1	4	1452	1486	46
-7	4	3	812	42	811	-6	0	4	1699	1439	39	7	1	4	1785	1845	55
-6	4	3	473	430	398	-5	0	4	470	291	89	8	1	4	130	127	129
-5	4	3	2139	2023	101	-4	0	4	3154	2962	110	9	1	4	1447	1433	69
-4	4	3	2548	2402	91	-3	0	4	869	638	56	10	1	4	1416	1445	86
-3	4	3	503	544	233	-2	0	4	1061	925	62	11	1	4	4009	4451	223
-2	4	3	464	465	243	-1	0	4	3803	3617	151	12	1	4	521	586	119
-1	4	3	1421	1503	83	0	0	4	425	297	152	13	1	4	606	544	122
0	4	3	0	107	1	1	0	4	734	783	61	14	1	4	2612	2885	209
1	4	3	827	815	101	2	0	4	949	796	101	15	1	4	1627	1727	282
2	4	3	540	523	160	3	0	4	5774	5861	360	16	1	4	190	307	190
3	4	3	1446	1461	77	4	0	4	9987	10207	570	17	1	4	308	279	308
4	4	3	3924	3983	109	5	0	4	431	500	92	18	1	4	916	834	516
5	4	3	0	106	1	6	0	4	362	208	111	19	1	4	0	450	1
6	4	3	557	461	174	7	0	4	1899	2110	38	20	1	4	0	470	1
7	4	3	1975	2106	77	8	0	4	537	560	82	21	1	4	803	534	903
8	4	3	318	471	318	9	0	4	1043	1115	53	-20	2	4	2826	2407	188
9	4	3	2053	2158	97	10	0	4	3210	3434	49	-19	2	4	1245	1210	351
10	4	3	180	290	180	11	0	4	2091	2166	45	-18	2	4	523	545	348
11	4	3	1434	1574	85	12	0	4	2445	2566	78	-17	2	4	1272	1261	128
12	4	3	0	252	1	13	0	4	0	123	1	-16	2	4	461	340	460
13	4	3	876	1058	176	14	0	4	219	140	218	-15	2	4	3220	3169	111
14	4	3	554	891	347	15	0	4	2115	2102	223	-14	2	4	0	197	1
15	4	3	0	115	1	16	0	4	1003	1133	535	-13	2	4	0	149	1
-10	5	3	854	412	853	17	0	4	756	132	755	-12	2	4	1474	1424	88
-9	5	3	519	223	519	18	0	4	5137	5337	178	-11	2	4	756	725	159
-8	5	3	1634	1491	163	19	0	4	1744	1897	365	-10	2	4	6334	6333	79
-7	5	3	290	467	289	20	0	4	1630	1754	485	-9	2	4	1823	1817	63
-6	5	3	158	98	157	21	0	4	1427	890	672	-8	2	4	2222	2171	58
-5	5	3	642	459	385	-22	1	4	3492	3147	231	-7	2	4	987	930	58
-4	5	3	1274	1262	173	-21	1	4	0	380	1	-6	2	4	1399	1349	36
-3	5	3	3396	3190	94	-20	1	4	483	240	483	-5	2	4	215	216	215
-2	5	3	246	99	246	-19	1	4	0	41	1	-4	2	4	2418	2422	72
-1	5	3	1302	1308	234	-18	1	4	0	212	1	-3	2	4	539	507	67
0	5	3	1487	1349	234	-17	1	4	4147	3733	123	-2	2	4	827	747	50
1	5	3	767	219	766	-16	1	4	2590	2515	259	-1	2	4	2561	2820	55
2	5	3	1186	1192	172	-15	1	4	264	51	264	0	2	4	294	176	145
3	5	3	1602	1504	100	-14	1	4	1704	1624	83	1	2	4	542	632	78

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	2	4	607	645	74	-15	4	4	2244	2281	106	-13	0	5	484	260	362
3	2	4	4466	4763	57	-14	4	4	613	119	617	-12	0	5	1310	1167	65
4	2	4	7639	8000	67	-13	4	4	131	114	131	-11	0	5	4312	4245	105
5	2	4	380	431	106	-12	4	4	1065	1044	167	-10	0	5	4297	4132	57
6	2	4	242	232	242	-11	4	4	0	515	1	-9	0	5	1866	1764	48
7	2	4	1654	1748	44	-10	4	4	4133	4137	119	-8	0	5	800	716	70
8	2	4	439	478	126	-9	4	4	1109	1171	131	-7	0	5	889	837	64
9	2	4	934	963	79	-8	4	4	1337	1420	120	-6	0	5	1569	1491	42
10	2	4	2736	2930	48	-7	4	4	793	646	232	-5	0	5	1378	1248	51
11	2	4	1753	1896	107	-6	4	4	907	901	163	-4	0	5	824	713	62
12	2	4	1949	2196	110	-5	4	4	572	198	289	-3	0	5	1916	1701	77
13	2	4	227	93	227	-4	4	4	1618	1626	109	-2	0	5	1570	1299	58
14	2	4	334	98	333	-3	4	4	0	316	1	-1	0	5	4658	4592	58
15	2	4	1600	1828	92	-2	4	4	523	521	197	0	0	5	1522	1884	64
16	2	4	836	994	223	-1	4	4	1874	1803	92	1	0	5	532	514	99
17	2	4	0	144	1	0	4	4	288	42	288	2	0	5	1591	1536	69
18	2	4	4564	4754	221	1	4	4	393	389	322	3	0	5	786	804	63
19	2	4	1779	1705	126	2	4	4	466	430	292	4	0	5	1521	1515	572
20	2	4	1376	1570	765	3	4	4	3126	3131	91	5	0	5	557	555	79
-19	3	4	359	43	359	4	4	4	4807	4961	68	6	0	5	2232	2344	100
-18	3	4	297	187	296	5	4	4	0	288	1	7	0	5	181	89	181
-17	3	4	2757	2903	100	6	4	4	452	229	270	8	0	5	873	978	115
-16	3	4	1913	1966	96	7	4	4	1137	1162	97	9	0	5	390	353	144
-15	3	4	487	48	486	8	4	4	452	347	250	10	0	5	3448	3700	117
-14	3	4	1077	1247	127	9	4	4	642	667	150	11	0	5	1762	1790	49
-13	3	4	2158	2192	86	10	4	4	1917	1947	73	12	0	5	413	562	366
-12	3	4	1412	1422	101	11	4	4	1364	1378	90	13	0	5	1361	1422	95
-11	3	4	330	413	329	12	4	4	1410	1450	88	14	0	5	557	302	225
-10	3	4	196	324	195	13	4	4	364	42	363	15	0	5	896	749	537
-9	3	4	821	802	123	14	4	4	342	78	342	16	0	5	0	349	1
-8	3	4	4057	4100	67	-10	5	4	76	219	75	17	0	5	1728	1486	318
-7	3	4	914	1023	121	-9	5	4	449	491	449	18	0	5	1823	2179	292
-6	3	4	0	55	1	-8	5	4	2567	2602	111	19	0	5	807	691	807
-5	3	4	629	698	112	-7	5	4	457	588	457	20	0	5	428	264	428
-4	3	4	3241	3029	65	-6	5	4	0	12	1	21	0	5	1170	661	69
-3	3	4	8213	7731	81	-5	5	4	502	454	501	-22	1	5	1128	88	399
-2	3	4	369	108	211	-4	5	4	1931	1842	125	-21	1	5	860	821	659
-1	3	4	1926	1940	46	-3	5	4	4768	4642	96	-20	1	5	1655	1487	223
0	3	4	1964	1934	49	-2	5	4	170	90	169	-22	1	5	1655	1487	223
1	3	4	705	744	84	-1	5	4	1332	1234	290	-18	1	5	1872	1552	216
2	3	4	1439	1448	71	0	5	4	1223	1230	309	-17	1	5	1334	1362	225
3	3	4	857	841	74	-1	5	4	736	449	248	-16	1	5	912	902	296
4	3	4	0	28	1	2	5	4	1040	821	175	-15	1	5	3069	2892	129
5	3	4	939	900	70	3	5	4	565	568	285	-14	1	5	850	894	131
6	3	4	1023	1112	74	4	5	4	0	1	1	-13	1	5	2654	2543	102
7	3	4	1352	1425	66	5	5	4	934	997	436	-12	1	5	1717	1708	102
8	3	4	372	372	67	6	5	4	737	726	200	-11	1	5	389	182	388
9	3	4	1059	1075	81	7	5	4	456	499	280	-10	1	5	0	164	1
10	3	4	1103	1169	107	-22	0	5	1124	848	635	-9	1	5	1041	927	73
11	3	4	3078	3317	55	-21	0	5	1241	1058	479	-8	1	5	3239	3290	99
12	3	4	507	429	186	-20	0	5	1312	2901	214	-7	1	5	2612	2439	44
13	3	4	509	438	192	-19	0	5	3205	1144	328	-6	1	5	193	38	193
14	3	4	2217	2255	66	-18	0	5	2082	1487	285	-5	1	5	2111	2040	30
15	3	4	1330	1420	92	-17	0	5	1673	1582	351	-4	1	5	2532	2551	1
16	3	4	159	152	159	-16	0	5	184	185	308	-3	1	5	6866	6380	74
17	3	4	192	190	191	-15	0	5	3527	3263	145	-2	1	5	1485	1428	27
18	3	4	945	692	240	-14	0	5	193	301	193	-1	1	5	863	785	34

Table 1. Observed and calculated structure factors for $Kl_{25}Pb_{3.5}Bi_{1.7}Sb_{0.5}S_{15}$. Page 9

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-9	5	6	473	183	473	19	0	7	682	731	681	-10	2	7	2302	2254	65
-8	5	6	1298	1254	184	21	0	7	682	731	681	-9	2	7	6106	5941	80
-7	5	6	1444	1335	167	-22	1	7	750	607	749	-8	2	7	4322	4128	122
-6	5	6	0	269	1	-21	1	7	2441	2366	171	-7	2	7	2772	2632	94
-5	5	6	2653	2500	103	-20	1	7	2220	1862	156	-6	2	7	8116	8047	92
-4	5	6	2026	1867	124	-19	1	7	942	804	398	-5	2	7	162	246	162
-3	5	6	558	272	557	-18	1	7	1865	1671	189	-4	2	7	480	390	85
-2	5	6	602	468	602	-17	1	7	0	407	1	-3	2	7	2436	2461	40
0	5	6	0	224	1	-16	1	7	1542	1474	104	-2	2	7	2955	3056	70
1	5	6	408	166	408	-15	1	7	966	976	93	-1	2	7	7177	7266	99
2	5	6	1318	1188	171	-14	1	7	1431	1429	69	0	2	7	1114	1141	45
3	5	6	1708	1613	121	-13	1	7	7127810931	221		1	2	7	180	180	180
4	5	6	126	343	126	-12	1	7	14291	4265	61	2	2	7	2432	2496	44
5	5	6	583	532	269	-11	1	7	252	146	251	3	2	7	662	722	67
6	5	6	2311	2220	112	-10	1	7	1010	1059	89	4	2	7	1942	2012	36
7	5	6	0	108	1	-9	1	7	263	94	262	5	2	7	663	615	74
8	5	6	1175	1082	573	-8	1	7	579	567	79	6	2	7	3167	3260	47
9	5	6	2757	2538	217	-7	1	7	2233	2152	86	7	2	7	5144	5455	59
10	5	6	4703	4319	167	-6	1	7	2135	2082	39	8	2	7	3248	3402	44
11	5	6	1907	1904	226	-5	1	7	1907	1904	226	9	2	7	259	149	258
12	5	6	1569	1421	265	-4	1	7	3834	3749	36	10	2	7	1942	1988	67
13	5	6	7125	7775	164	-3	1	7	1192	1777	30	11	2	7	993	990	91
14	5	6	3569	3099	160	-2	1	7	838	784	45	12	2	7	1435	1438	70
15	5	6	546	142	546	-1	1	7	719	654	51	13	2	7	1965	1925	62
16	5	6	723	898	477	0	1	7	1780	1698	39	14	2	7	1711	1763	78
17	5	6	731	637	187	1	1	7	9908	9392	95	15	2	7	1411	1507	87
18	5	6	648	723	134	2	1	7	3588	3688	38	16	2	7	625	486	363
19	5	6	1096	1008	106	3	1	7	8041	8136	63	17	2	7	2337	2296	165
20	5	6	2791	2674	87	4	1	7	192	228	192	18	2	7	872	842	248
21	5	6	7354	7006	84	5	1	7	914	992	54	19	2	7	819	659	315
22	5	6	5216	4930	64	6	1	7	724	742	64	20	2	7	570	630	570
23	5	6	3347	3164	49	7	1	7	541	541	84	21	2	7	1303	1309	263
24	5	6	71034	9796	120	8	1	7	1013	1005	51	22	2	7	385	351	384
25	5	6	277	264	277	9	1	7	1722	1715	56	23	2	7	1082	1089	158
26	5	6	537	441	121	10	1	7	4550	4670	50	24	2	7	496	737	495
27	5	6	3239	3042	69	11	1	7	2600	2624	50	25	2	7	1167	1104	147
28	5	6	4042	3800	55	12	1	7	545	601	125	26	2	7	8680	8353	105
29	5	6	8988	9236	99	13	1	7	985	874	99	27	2	7	3299	3212	72
30	5	6	1254	1375	91	14	1	7	1608	1623	109	28	2	7	222	77	221
31	5	6	232	252	231	15	1	7	2867	2663	89	29	2	7	664	761	183
32	5	6	7233	3040	119	16	1	7	0	0	0	30	2	7	302	95	301
33	5	6	871	856	78	17	1	7	326	349	325	31	2	7	497	369	265
34	5	6	2489	2463	151	18	1	7	1737	1673	291	32	2	7	1941	1939	257
35	5	6	795	739	114	19	1	7	0	93	1	33	2	7	1601	1536	63
36	5	6	3769	3934	140	20	1	7	3090	2523	187	34	2	7	6342	6392	80
37	5	6	5950	6402	265	21	1	7	0	561	1	35	2	7	2662	2629	54
38	5	6	7765	7992	191	22	1	7	2310	2275	254	36	2	7	1176	1161	62
39	5	6	0	172	1	23	1	7	4225	3840	138	37	2	7	552	570	122
40	5	6	2278	2292	85	24	1	7	1727	1667	224	38	2	7	390	470	187
41	5	6	1158	1155	88	25	1	7	1216	1239	111	39	2	7	1108	1193	67
42	5	6	1730	1654	89	26	1	7	2581	2461	168	40	2	7	634	6541	71
43	5	6	2212	2179	84	27	1	7	2705	2741	87	41	2	7	2541	2597	43
44	5	6	1921	1991	89	28	1	7	0	131	1	42	2	7	5515	5845	53
45	5	6	1730	1706	101	29	1	7	167	175	197	43	2	7	196	180	196
46	5	6	869	840	617	30	1	7	535	548	534	44	2	7	720	694	109
47	5	6	3039	2573	214	31	1	7	667	611	178	45	2	7	511	478	153
48	5	6	845	927	845	32	1	7	943	836	113	46	2	7	434	380	223

Table 1. Observed and calculated structure factors for $Kl_{25}Pb_{3.5}Bi_{1.7}Sb_{0.5}S_{15}$. Page 11

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
8	2	8	5427	5667	54	-7	4	8	1021	934	171	0	0	9	1275	1361	50
9	2	8	1620	1642	54	-6	4	8	4209	3998	90	1	0	9	1351	1427	57
10	2	8	619	567	120	-5	4	8	1132	915	165	2	0	9	785	796	99
11	2	8	208	212	208	-4	4	8	372	379	372	3	0	9	4629	5144	86
12	2	8	1056	1054	103	-3	4	8	825	705	143	4	0	9	431	339	257
13	2	8	1094	1020	97	-2	4	8	2211	2090	70	5	0	9	435	350	186
14	2	8	2791	2840	62	-1	4	8	4309	4001	129	6	0	9	527	384	161
15	2	8	2324	2446	71	0	4	8	452	59	451	7	0	9	3076	3051	113
16	2	8	1319	1247	179	1	4	8	0	154	1	8	0	9	8150	8321	94
17	2	8	1330	1300	162	2	4	8	534	432	187	9	0	9	207	313	207
18	2	8	1822	1754	141	3	4	8	1740	1779	77	10	0	9	1871	1833	60
19	2	8	940	602	307	4	4	8	296	450	295	11	0	9	609	469	285
20	2	8	1743	1852	109	5	4	8	671	503	172	12	0	9	874	901	162
21	2	8	1102	1161	174	6	4	8	3905	3857	75	13	0	9	887	712	187
22	2	8	2093	2102	189	7	4	8	2282	2287	75	14	0	9	2052	1940	101
23	2	8	592	519	321	8	4	8	3842	3757	71	15	0	9	1101	1161	156
24	2	8	629	550	263	9	4	8	949	1063	134	16	0	9	2155	1630	260
25	2	8	1157	1251	137	10	4	8	220	409	220	17	0	9	142	543	141
26	2	8	2400	2430	96	11	4	8	153	88	153	18	0	9	500	514	499
27	2	8	1311	1319	106	12	4	8	731	738	201	19	0	9	0	274	1
28	2	8	711	781	175	13	4	8	613	414	612	20	0	9	1461	1206	644
29	2	8	1191	1214	111	-5	6	8	601	645	603	21	0	9	1408	1312	350
30	2	8	333	45	332	-5	5	8	2850	2791	131	22	1	9	550	450	549
31	2	8	846	947	137	-4	5	8	1690	1512	177	-20	1	9	769	23	769
32	2	8	217	103	217	-3	5	8	479	450	479	-19	1	9	397	242	396
33	2	8	1070	1059	87	-2	5	8	742	479	527	-18	1	9	3348	3168	133
34	2	8	4573	4461	97	-1	5	8	892	897	327	-17	1	9	1948	1854	134
35	2	8	2629	2554	55	0	5	8	1121	1026	216	-16	1	9	1638	1644	102
36	2	8	760	706	113	1	5	8	3532	3447	108	-15	1	9	1322	1321	82
37	2	8	752	758	83	2	5	8	2465	2319	187	-14	1	9	988	901	92
38	2	8	1563	1553	50	3	5	8	2848	2742	104	-13	1	9	1540	1544	67

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5B17.25Se15. Page 13

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-16	1	10	1270	1110	122	0	2	10	1567	1548	43	-9	4	10	849	761	326
-15	1	10	1290	1247	82	1	2	10	0	187	1	-8	4	10	0	201	1
-14	1	10	2046	2062	60	2	2	10	3373	3758	43	-7	4	10	1633	1601	180
-13	1	10	595	670	207	3	2	10	1440	1412	53	-6	4	10	335	541	334
-12	1	10	117	15	117	4	2	10	2263	2191	48	-5	4	10	2266	2173	86
-11	1	10	396	174	258	5	2	10	1726	1730	53	-4	4	10	375	224	375
-10	1	10	2387	2313	59	6	2	10	3335	3457	60	-3	4	10	479	432	285
-9	1	10	7644	7863	168	7	2	10	655	738	116	-2	4	10	3284	3150	64
-8	1	10	1692	1708	71	8	2	10	918	931	82	-1	4	10	2038	1931	71
-7	1	10	486	547	116	9	2	10	1242	1240	76	0	4	10	1007	1039	114
-6	1	10	2172	2316	84	10	2	10	732	658	145	1	4	10	458	100	457
-5	1	10	1740	1714	40	11	2	10	356	332	356	2	4	10	2548	2563	60
-4	1	10	3165	3169	81	12	2	10	1076	1021	108	3	4	10	1088	1025	108
-3	1	10	1232	1281	43	13	2	10	1623	1492	87	4	4	10	1597	1467	99
-2	1	10	2637	2705	36	14	2	10	766	566	177	5	4	10	1274	1187	118
-1	1	10	4737	4571	55	15	2	10	784	686	167	6	4	10	2367	2319	79
0	1	10	3749	3656	50	16	2	10	2748	2626	112	7	4	10	543	469	287
1	1	10	925	859	90	17	2	10	3167	2997	148	8	4	10	722	583	223
2	1	10	2834	2814	43	18	2	10	1080	1137	246	9	4	10	768	860	265
3	1	10	2645	2610	37	-18	3	10	0	220	1	10	4	10	625	510	278
4	1	10	1306	1278	49	-17	3	10	1848	1842	95	11	4	10	275	253	274
5	1	10	196	106	195	-16	3	10	1002	878	153	-6	5	10	1150	1072	173
6	1	10	1820	1841	43	-15	3	10	976	951	138	-5	5	10	966	653	206
7	1	10	594	382	104	-14	3	10	1594	1640	87	-4	5	10	1694	1661	135
8	1	10	2571	2454	70	-13	3	10	487	507	275	-3	5	10	512	582	512
9	1	10	3925	3806	55	-12	3	10	270	182	270	-2	5	10	1438	1325	224
10	1	10	1920	1850	65	-11	3	10	256	160	255	-1	5	10	2335	2052	115
11	1	10	456	73	214	-10	3	10	1689	1700	89	0	5	10	1684	1597	157
12	1	10	2023	1953	148	-9	3	10	593	5915	148	1	5	10	499	316	498
13	1	10	466	456	465	-8	3	10	1332	1298	81	2	5	10	1369	1254	205
14	1	10	2237	2078	178	-7	3	10	440	402	235	3	5	10	1098	1172	252
15	1	10	2146	2133	147	-6	3	10	1729	1717	55	5	5	10	761	67	509
16	1	10	126	349	126	-5	3	10	1420	1187	74	-22	0	11	1295	1192	473
17	1	10	0	980	1	-4	3	10	2450	2430	50	-21	0	11	3146	2729	202
18	1	10	1002	631	255	-3	3	10	953	917	98	-19	0	11	816	228	815
19	1	10	0	322	1	-2	3	10	2015	1996	49	-18	0	11	2465	1850	223
-21	2	10	1436	1215	352	-1	3	10	3360	3320	48	-17	0	11	1953	1913	205
-20	2	10	624	468	624	0	3	10	2610	2636	46	-16	0	11	3957	3757	133
-19	2	10	1039	830	370	1	3	10	504	578	144	-15	0	11	2290	1975	152
-18	2	10	0	472	1	2	3	10	2009	2031	47	-14	0	11	355	143	354
-17	2	10	2841	2889	66	3	3	10	1944	1915	49	-13	0	11	1517	1418	128
-16	2	10	4158	4187	67	4	3	10	921	946	98	-12	0	11	1294	1134	132
-15	2	10	1002	631	255	5	3	10	0	87	1	-11	0	11	816	228	815
-14	2	10	963	865	108	6	3	10	1351	1374	81	-10	0	11	1720	1563	77
-13	2	10	3003	2968	77	7	3	10	427	283	305	-9	0	11	760	592	149
-12	2	10	1213	1175	84	8	3	10	1979	1839	74	-8	0	11	1596	1489	70
-11	2	10	1957	1936	63	9	3	10	2964	2908	68	-7	0	11	1992	1858	63
-10	2	10	1908	1885	60	10	3	10	1581	1474	91	-6	0	11	872	818	111
-9	2	10	1273	1185	65	11	3	10	370	360	369	-5	0	11	3008	2851	58
-8	2	10	422	305	173	12	3	10	1557	1543	95	-4	0	11	1533	1595	61
-7	2	10	2472	2432	44	13	3	10	443	366	44	-3	0	11	410	416	413
-6	2	10	776	703	182	14	3	10	1619	1643	99	-2	0	11	5313	5243	141
-5	2	10	3282	3250	36	15	3	10	1540	1657	109	-1	0	11	1121	1081	194
-4	2	10	428	342	120	-13	4	10	2199	2111	189	0	0	11	610	749	116
-3	2	10	624	659	80	-12	4	10	791	786	271	1	0	11	946	974	80
-2	2	10	4725	4733	46	-11	4	10	1342	1444	168	2	0	11	3149	3410	57
-1	2	10	2878	2913	37	-10	4	10	1375	1343	251	3	0	11	1448	1508	73

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5B17.25Se15. Page 14

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
4	0	11	562	507	232	-15	2	11	1680	1727	76	5	3	11	5117	4902	64
5	0	11	1078	1009	95	-14	2	11	111	146	110	6	3	11	3411	3270	80
6	0	11	731	853	128	-13	2	11	1208	1279	89	7	3	11	531	420	254
7	0	11	2467	2458	114	-12	2	11	950	1005	104	8	3	11	273	525	273
8	0	11	429	190	281	-11	2	11	530	576	188	9	3	11	931	948	143
9	0	11	2592	2438	127	-10	2	11	1374	1360	73	10	3	11	2787	2685	73
10	0	11	3554	3315	103	-9	2	11	569	493	128	11	3	11	1063	1003	141
11	0	11	2349	2129	100	-8	2	11	1312	1288	60	12	3	11	246	79	246
12	0	11	2274	1568	55	-7	2	11	1541	1568	55	13	3	11	3165	3062	109
13	0	11	3370	2987	240	-6	2	11	626	630	106	14	3	11	438	174	438
14	0	11	1683	1430	183	-5	2	11	2393	2420	47	15	3	11	1262	1271	194
15	0	11	1377	1316	164	-4	2	11	1666	1673	40	-13	4	11	1137	993	167
-21	1	11	940	1047	364	-3	2	11	3365	3366	80	-12	4	11	854	738	222
-20	1	11	621	1003	621	-2	2	11	4308	4338	65	-11	4	11	225	326	225
-19	1	11	1283	1306	222	-1	2	11	985	933	72	-10	4	11	1093	969	163
-18	1	11	565	606	564	0	2	11	588	659	119	-9	4	11	226	327	226
-17	1	11	994	793	257	1	2	11	840	833	88	-8	4	11	878	889	197
-16	1	11	466	569	466	2	2	11	2919	2901	44	-7	4	11	1026	1025	164
-15	1	11	1449	1414	105	3	2	11	1386	1352	54	-6	4	11	268	313	267
-14	1	11	3459	3522	60	4	2	11	407	448	213	-5	4	11	1658	1666	120
-13	1	11	687	840	131	5	2	11	807	892	101	-4	4	11	1250	1122	114
-12	1	11	1102	1153	81	6	2	11	747	739	114	-3	4	11	2367	2262	76
-11	1	11	1836	1785	55	7	2	11	2122	2120	73	-2	4	11	3001	2796	66
-10	1	11	3241	3252	46	8	2	11	0	145	1	-1	4	11	675	495	168
-9	1	11	4635	4553	83	9	2	11	2328	2129	56	0	4	11	511	477	220
-8	1	11	1680	1807	54	10	2	11	3097	2919	80	1	4	11	752	558	140
-7	1	11	1109	1159	61	11	2	11	1921	1872	71	2	4	11	2090	2016	68
-6	1	11	1395	1397	50	12	2	11	1833	1748	82	3	4	11	1067	1039	113
-5	1	11	789	826	92	13	2	11	2782	2656	92	4	4	11	365	320	364
-4	1	11	395	353	136	14	2	11	1388	125	135	5	4	11	563	525	248
-3	1	11	2	0	13	15	2	11	1229	119	205	6	4	11	640	628	640
-2	1	11	2319	2195	37	16	2	11	74	713	74	7	4	11	1471	1453	068
-1	1	11	1144	1199	73	17	2	11	612	163	611	8	4	11	0	47	1
0	1	11	453	456	200	18	2	11	1068	835	264	9	4	11	1507	1524	113
1	1	11	891	830	79	-18	3	11	94	463	94	10	4	11	2131	2114	95
2	1	11	2572	2567	54	-17	3	11	741	766	209	11	4	11	1247	1331	446
3	1	11	461	410	319	-16	3	11	368	442	368	-6	5	11	522	768	522
4	1	11	2541	2572	44	-15	3	11	1219	1124	123	-5	5	11	749	447	589
5	1	11	6571	6539	62	-14	3	11	2799	2745	90	-4	5	11	523	304	524
6	1	11	4366	4277	77	-13	3	11	526	428	236	-3	5	11	188	181	188
7	1	11	561	529	116	-12	3	11	862	920	131	-2	5	11	1093	1083	146
8	1	11	627	674	129	-11	3	11	1403	1364	90	-1	5	11	756	625	327
9	1	11	1227	1177	79	-10	3	11	2639	2504	75	1	5	11	458	220	457
10	1	11	3517	3380	61	-9	3	11	3560	3350	70	2	5	11	1407	1203	222
11	1	11	1386	1293	83	-8	3	11	1422	1353	110	-22	0	12	1010	1145	612
12	1	11	218	106	197	-7	3	11	881	880	109	-20	0	12	1264	1242	378
13	1	11	4198	3862	291	-6	3	11	1252	1103	90	-20	0	12	3296	2857	179
14	1	11	1590	1490	100	-5	3	11	549	498	174	-19	0	12	1789	1581	181
15	1	11	1682	1583	223	-4	3	11	489	332	305	-18	0	12	1739	1560	264
16	1	11	537	254	336	-3	3	11	0	149	1	-17	0	12	1847	1320	296
17	1	11	2804	2476	286	-2	3	11	1719	1633	57	-16	0	12	3769	3035	173
18	1	11	0	115	1	-1	3	11	940	915	80	-15	0	12	1662	1307	254
-20	2	11	0	119	1	0	3	11	326	338	326	-14	0	12	1112	1076	211
-19	2	11	849	229	586	1	3	11	627	523	123	-13	0	12	1288	1200	189
-18	2	11	1581	1653	122	2	3	11	1940	1910	56	-12	0	12	2389	2066	199
-17	2	11	1661	1661	437	3	3	11	546	526	265	-11	0	12	1596	1328	265
-16	2	11	3217	3292	127	4	3	11	1923	1930	71	-10	0	12	2244	2148	69

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 17

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
-18	0	14	2235	1990	212	2	1	14	4542	4561	51	-12	3	14	475	333	474	
-17	0	14	2063	2098	181	3	1	14	1414	1406	68	-11	3	14	1601	1492	104	
-16	0	14	464	78	463	4	1	14	2994	2883	64	-10	3	14	774	852	153	
-15	0	14	418	550	418	5	1	14	3787	3727	49	-9	3	14	803	716	170	
-14	0	14	2104	1973	127	6	1	14	1256	1191	84	-8	3	14	1436	1352	102	
-13	0	14	3732	3558	98	7	1	14	481	465	226	-7	3	14	864	869	134	
-12	0	14	5045	4783	96	8	1	14	998	1015	118	-6	3	14	6015	5690	122	
-11	0	14	849	789	171	9	1	14	3711	3625	65	-5	3	14	470	461	295	
-10	0	14	5152	4710	75	10	1	14	1835	1750	80	-4	3	14	243	114	242	
-9	0	14	2805	2643	70	11	1	14	0	159	1	-3	3	14	727	615	159	
-8	0	14	1039	935	128	12	1	14	3171	3058	66	-2	3	14	382	289	362	
-7	0	14	151	174	151	13	1	14	531	492	398	-1	3	14	1221	1181	87	
-6	0	14	1530	1323	92	14	1	14	2946	2624	142	0	3	14	619	582	162	
-5	0	14	520	71	519	15	1	14	0	514	1	1	3	14	4111	4020	119	
-4	0	14	4990	4914	109	16	1	14	467	153	466	2	3	14	3553	3479	83	
-3	0	14	5704	5565	96	17	1	14	1429	1234	259	3	3	14	1147	1075	106	
-2	0	14	7438	7226	114	18	1	14	1448	1544	192	4	3	14	2262	2164	69	
-1	0	14	2244	2058	103	19	1	14	1870	1797	145	5	3	14	2959	2852	89	
0	14	160	183	160	1	20	1	14	1919	1868	141	6	3	14	850	898	144	
1	0	14	2352	2211	91	21	1	14	211	61	211	7	3	14	613	343	203	
2	0	14	1136	1174	152	22	1	14	305	486	304	8	3	14	708	812	210	
3	0	14	458	381	458	23	1	14	1743	1745	90	9	3	14	2995	2869	111	
4	0	14	1283	1381	96	24	1	14	3080	3122	81	10	3	14	1511	1438	110	
5	0	14	5097	5193	91	25	1	14	1240	1197	69	11	3	14	364	98	363	
6	0	14	1404	1413	113	26	1	14	764	665	160	12	3	14	2661	2428	106	
7	0	14	2398	2526	88	27	1	14	4246	4117	60	13	3	14	367	375	367	
8	0	14	2374	2411	109	28	1	14	2341	2303	60	14	3	14	2248	2102	140	
9	0	14	1236	1405	108	29	1	14	805	812	126	15	3	14	3260	2977	213	
10	0	14	769	626	277	30	1	14	390	146	310	16	3	14	335	404	335	
11	0	14	1359	1327	231	31	1	14	1090	1128	88	17	3	14	2952	2916	99	
12	0	14	2651	2657	121	32	1	14	297	60	297	18	3	14	1631	1622	131	
13	0	14	1528	1371	187	33	1	14	4163	4212	66	19	3	14	340	569	340	
14	0	14	1849	1763	181	34	1	14	4670	4747	58	20	3	14	0	116	1	
15	0	14	240	101	239	35	1	14	6031	6184	88	21	3	14	884	759	217	
16	0	14	2820	2844	136	36	1	14	1701	1759	65	22	3	14	138	33	137	
17	0	14	3219	3085	125	37	1	14	79	170	78	23	3	14	3020	2872	72	
18	0	14	2326	2240	127	38	1	14	1953	1929	57	24	3	14	3314	3191	72	
19	0	14	984	955	171	39	1	14	1043	1026	86	25	3	14	4409	4228	148	
20	0	14	1752	1758	58	40	1	14	63	306	62	26	3	14	1210	1175	137	
21	0	14	1403	1307	118	41	1	14	1217	1208	82	27	3	14	0	141	1	
22	0	14	2668	2733	80	42	1	14	4399	4486	110	28	3	14	1398	1389	124	
23	0	14	1982	2013	63	43	1	14	2315	2208	63	29	3	14	702	728	199	
24	0	14	490	444	196	44	1	14	1090	1128	88	30	3	14	0	166	1	
25	0	14	1898	1917	58	45	1	14	1390	1248	121	31	3	14	1025	873	166	
26	0	14	1186	1152	75	46	1	14	605	559	205	32	3	14	3362	3107	80	
27	0	14	966	950	97	47	1	14	1168	1172	123	33	3	14	757	888	207	
28	0	14	1752	1758	58	48	1	14	2439	2343	85	34	3	14	1786	1568	121	
29	0	14	930	871	269	49	1	14	1352	1242	145	35	3	14	871	923	719	
30	0	14	7210	7467	118	50	1	14	1549	1572	139	36	3	14	0	153	997.836	
31	0	14	477	597	172	51	1	14	343	343	342	37	3	14	0	15	408	240
32	0	14	62	201	62	52	1	14	2326	1807	166	38	3	14	0	15	658	146.658
33	0	14	700	758	141	53	1	14	627	745	627	39	3	14	0	15	3160	3116
34	0	14	608	411	178	54	1	14	352	362	381	40	3	14	0	15	1743	1517
35	0	14	1501	1530	120	55	1	14	1082	1030	172	41	3	14	0	15	2915	2899
36	0	14	835	826	134	56	1	14	2178	2109	97	42	3	14	0	15	626	784.625
37	0	14	505	5348	89	57	1	14	1599	1558	105	43	3	14	0	15	0	76

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 18

h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						h k l 10Fo 10Fc 10s						
-13	0	15	2267	1993	130	8	1	15	2189	2162	75	-3	3	15	858	745	145	
-12	0	15	4965	4689	113	9	1	15	1659	1651	85	-2	3	15	1118	1125	120	
-11	0	15	4369	4048	72	10	1	15	739	709	151	-1	3	15	649	684	156	
-10	0	15	2326	2175	79	11	1	15	500	499	320	0	3	15	811	777	124	
-9	0	15	516	279	516	12	1	15	1534	1496	119	1	3	15	3147	3039	56	
-8	0	15	871	781	162	13	1	15	1758	1705	118	2	3	15	2888	2819	73	
-7	0	15	1618	1481	168	14	1	15	949	944	333	3	3	15	1594	1505	96	
-6	0	15	794	626	308	15	1	15	1584	1244	141	4	3	15	710	690	182	
-5	0	15	796	675	276	16	1	15	193	364	193	5	3	15	1071	1014	127	
-4	0	15	745	766	211	17	1	15	0	120	1	6	3	15	265	422	264	
-3	0	15	4478	4134	92	18	1	15	2787	2789	159	7	3	15	2268	2161	74	
-2	0	15	5617	5352	98	19	1	15	1457	1434	163	8	3	15	1688	1683	109	
-1	0	15	142	63	141	20	1	15	2449	2571	81	9	3	15	1465	1286	122	
0	15	4027	3654	88	21	1	15	539	701	271	10	3	15	617	559	325		
1	0	15	2039	1907	96	22	1	15	417	87	416	11	3	15	528	381	527	
2	0	15	3697	3391	124	23	1	15	1762	1752	92	12	3	15	1218	1201	158	
3	0	15	2767	2829	136	24	1	15	4077	4106	68	13	3	15	1502	1385	216	
4	0	15	0	296	1	25	1	15	3543	3525	66	14	3	15	1418	1341	172	
5	0	15	5164	5167	93	26	1	15	1895	1903	71	15	3	15	0	222	1	
6	0	15	2850	2983	130	27	1	15	183	260	182	16	3	15	643	443	262	
7	0	15	459	272	459	28	1	15	616	669	173	17	3	15	1089	1002	193	
8	0	15	1134	1207	129	29	1	15	1134	1314	85	18	3	15	453	286	453	
9	0	15	850	904	170	30	1	15	401	507	328	19	3	15	536	449	536	
10	0	15	0	196	1	31	1	15	517	601	225	20	3	15	473	472	421	
11	0	15	1558	1491	179	32	1	15	4475	4586	59	21	3	15	2428	2397	83	
12	0	15	3280	3012	130	33	1	15	369	60	368	22	3	15	3212	3122	110	
13	0	15	355	142	355	34	1	15	3085	3113	57	23	3	15	380	61	380	
14	0	15	1402	1563	248	35	1	15	1631	1622	68	24	3	15	2259	2049	82	
15	0	15	0	132	1	36	1	15	2922	2931	52	25	3	15	1743	1683	130	
16	0	15	3121	3261	113	37	1	15	2470	2445	57	26	3	15	1556	163	556	
17	0	15	0	423	119	38	1	15	122	251	311	27	3	15	3523	3144	84	
18	0	15	0	132	1	39	1	15	4589	4495	99	28	3	15	1954	1857	112	
19	0	15	1965	2125	117	40	1	15	2670	2615	60	29	3	15	489	237	488	
20	0	15	1249	1253	105	41	1	15	368	244	367	30	3	15	0	722	1	
21	0	15	398	398	788	42	1	15	1007	1051	123	31	3	15	738	757	738	
22	0	15	1553	1557	83	43	1	15	983	826	145	32	0	16	0	527	1	
23	0	15	1280	2851	116	44	1	15	1957	1912	94	33	0	16	0	643	1	
24	0	15	1280	1283	89	45	1	15	630	630	123	34	0	16	0	1600	2044	224
25	0	15	2413	2241	51	46	1	15	1498	1319	136	35	0	16	0	1594	1594	244
26	0	15	654	738	146	47	1	15	2836	2694	97	36	0	16	0	166	1	
27	0	15	4401	4441	52	48	1	15	0	125	1	37	0	16	0	2344	2458	113
28	0	15	0	95	1	49	1	15	1564	1382	247	38	0	16	0	287	438	
29	0	15	5087	5283	90	50	1	15	327	127	326	39	0	16	0	3770	3784	158
30	0	15	2927	3058	67	51	1	15	1674	1684	118	40	0	16	0	2283	2191	99
31	0	15	804	982	132	52	1	15	1008	1044	158	41	0	16	0	1225	1144	217
32	0	15	1450	1518	109	53	1	15	351	75	350	42	0	16	0	1135	1102	214
33	0	15	792	911	142	54	1	15	1142	1252	140	43	0	16	0	1385	1194	188
34	0	15	730	917	168	55	1	15	2211	2207	91	44	0	16	0	2307	2142	120
35	0	15	3884	4110	72	56	1	15	722	875	207	45	0	16	0	1829	1704	148
36	1	15	1648	3642	59	57	1	15	1710	1743	93	46	0	16	0	256	205	363
37	1	15	2038	2029	68	58	1	15	530	576	328	47	0	16	0	2527	2471	99
38	1	15	945	937	110	59	1	15	3472	3370	105	48	0	16	0	3919	3819	105
39	1	15	1384	1303	83	60	1	15	280	95	279	49	0	16	0	2334	2217	103
40	1	15	492	424	227	61	1	15	1148	1397	90	50	0	16	0	740	682	275
41	1	15	2798	2801	60	62	1	15	2292	2276	114	51	0	16	0	596	529	305

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 21

#	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-13	2	18	661	784	237		-3	4	18	2034	1921	111	2	1	19	1024	863	144
-12	2	18	1386	1363	108		-2	4	18	1294	1241	155	3	1	19	829	1044	166
-11	2	18	2518	2617	75		-1	4	18	909	838	245	4	1	19	507	498	299
-10	2	18	1132	1381	123		0	4	18	1760	1618	138	5	1	19	946	849	139
-9	2	18	1128	1303	129		1	4	18	872	816	271	6	1	19	62	399	61
-8	2	18	1446	1515	127		2	4	18	328	582	328	7	1	19	2284	2385	90
-7	2	18	1716	1879	120		3	4	18	1264	1373	203	8	1	19	1197	1239	150
-6	2	18	1400	1706	105		4	4	18	2409	2207	211	9	1	19	1481	1428	115
-5	2	18	922	974	155		-15	0	19	1460	1710	367	10	1	19	993	1014	166
-4	2	18	1502	1627	97		-14	0	19	2755	2805	199	11	1	19	2264	2270	119
-3	2	18	2350	2593	75		-13	0	19	394	651	393	12	1	19	0	239	1
-2	2	18	1689	1771	88		-12	0	19	1785	1883	235	13	1	19	1689	1669	153
-1	2	18	1075	1189	132		-11	0	19	1028	762	448	-17	2	19	0	293	1
0	2	18	2119	2284	78		-10	0	19	2019	1976	144	-16	2	19	557	410	556
1	2	18	986	1019	149		-9	0	19	3170	3271	108	-15	2	19	1508	1531	147
2	2	18	781	878	179		-8	0	19	3247	3267	99	-14	2	19	2327	2476	113
3	2	18	1940	1996	81		-7	0	19	2525	2457	111	-13	2	19	461	608	460
4	2	18	2989	3076	68		-6	0	19	853	857	265	-12	2	19	1519	1648	137
5	2	18	1180	1152	148		-5	0	19	572	404	572	-11	2	19	701	700	321
6	2	18	2697	2670	82		-4	0	19	827	550	312	-10	2	19	1532	1723	203
7	2	18	1480	1400	120		-3	0	19	1026	1024	213	-9	2	19	2593	2884	222
8	2	18	2485	2190	88		-2	0	19	123	234	123	-8	2	19	2627	2886	182
9	2	18	132	122	131		-1	0	19	1206	933	176	-7	2	19	1963	2133	157
10	2	18	272	439	271		0	0	19	1144	964	176	-6	2	19	707	740	208
11	2	18	2421	2361	113		1	0	19	140	167	139	-5	2	19	526	365	525
12	2	18	1470	1420	163		2	0	19	646	509	331	-4	2	19	215	493	215
13	2	18	1047	1178	342		3	0	19	0	109	1	-3	2	19	773	881	155
-15	3	18	0	363	1		4	0	19	1585	1479	127	-2	2	19	289	238	288
-14	3	18	595	720	595		5	0	19	2895	2872	99	-1	2	19	451	793	451
-13	3	18	549	756	549		6	0	19	1676	1657	136	0	2	19	620	829	262
-12	3	18	652	646	277		7	0	19	1991	1985	123	1	2	19	452	178	451
-11	3	18	668	588	282		8	0	19	1367	1257	221	2	2	19	463	445	364
-10	3	18	1608	1544	112		9	0	19	608	410	608	3	2	19	349	88	348
-9	3	18	0	319	1		10	0	19	0	330	1	4	2	19	1196	1271	137
-8	3	18	1699	1721	112		11	0	19	283	324	283	5	2	19	2505	2545	90
-7	3	18	532	345	326		12	0	19	1535	1376	221	6	2	19	1492	1489	115
-6	3	18	913	1116	167		13	0	19	1409	1521	234	7	2	19	1956	1759	104
-5	3	18	821	742	203		14	0	19	1050	933	443	8	2	19	1257	1127	153
-4	3	18	782	1045	199		-17	1	19	1010	1104	492	9	2	19	450	383	450
-3	3	18	2625	2750	82		-16	1	19	2069	2120	212	10	2	19	486	305	485
-2	3	18	419	20	418		-15	1	19	3566	3829	168	11	2	19	750	260	392
-1	3	18	444	512	444		-14	1	19	2280	2411	212	12	2	19	1268	1260	248
0	3	18	2151	2079	83		-13	1	19	0	101	1	-14	3	19	1811	1917	281
1	3	18	1752	1699	96		-12	1	19	726	642	248	-13	3	19	0	103	1
2	3	18	1618	1673	118		-11	1	19	0	466	1	-12	3	19	519	511	519
3	3	18	518	269	517		-10	1	19	685	663	305	-11	3	19	427	353	426
4	3	18	383	88	383		-9	1	19	1859	1809	182	-10	3	19	533	558	532
5	3	18	756	932	275		-8	1	19	1702	1688	119	-9	3	19	1421	1492	155
6	3	18	309	273	308		-7	1	19	136	291	135	-8	3	19	1230	1348	160
7	3	18	407	276	407		-6	1	19	859	876	181	-7	3	19	651	274	287
8	3	18	1217	1057	204		-5	1	19	317	222	317	-6	3	19	665	638	249
9	3	18	687	168	458		-4	1	19	603	624	284	-5	3	19	479	155	479
10	3	18	1026	838	346		-3	1	19	2380	2364	82	-4	3	19	583	482	351
-7	4	18	1730	1463	253		-2	1	19	2066	2127	83	-3	3	19	1614	1770	113
-6	4	18	1073	1209	222		-1	1	19	3373	3585	65	-2	3	19	1484	1659	114
-5	4	18	874	693	242		0	1	19	971	1028	134	-1	3	19	2680	2831	90
-4	4	18	1025	1124	186		1	1	19	251	530	251	0	3	19	762	770	224

Table 1. Observed and calculated structure factors for K1.25Pb3.5Bi7.25Se15. Page 22

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	3	19	458	451	458	-7	1	20	4378	4281	155	-4	3	20	503	793	503
2	3	19	578	658	439	-6	1	20	2128	2130	94	-3	3	20	615	352	353
3	3	19	870	797	233	-5	1	20	2525	2503	83	-2	3	20	1822	1967	118
4	3	19	427	484	427	-4	1	20	927	967	176	-1	3	20	1533	1528	141
5	3	19	601	741	392	-3	1	20	449	452	448	0	3	20	2255	2325	93
6	3	19	363	271	362	-2	1	20	2384	2485	88	1	3	20	989	798	220
7	3	19	1928	1863	119	-1	1	20	2024	2032	83	2	3	20	1285	1375	166
8	3	19	1164	1026	235	0	1	20	2983	2953	71	3	3	20	0	62	1
-6	4	19	0	497	1	1	1	20	971	1005	149	4	3	20	827	669	229
-5	4	19	593	277	593	2	1	20	1776	1707	93	5	3	20	485	351	484
-4	4	19	121	379	121	3	1	20	245	130	245	6	3	20	798	400	298
-3	4	19	679	576	335	4	1	20	905	787	153	7	3	20	658	730	334
-2	4	19	319	242	319	5	1	20	542	444	326	-5	4	20	2204	1738	277
-1	4	19	0	505	1	6	1	20	672	512	234	-4	4	20	1099	652	272
0	4	19	422	548	422	7	1	20	748	874	226	-3	4	20	503	837	502
1	4	19	690	201	690	8	1	20	1471	1465	130	-14	0	21	525	210	524
2	4	19	54	312	53	9	1	20	1772	1973	109	-12	0	21	2506	2710	186
3	4	19	0	49	1	10	1	20	1523	1572	126	-11	0	21	3372	3520	149

Table 2. Observed and calculated structure factors for $Kl.41Sn2.96H7.63Se15$. Page 1

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
2	0	0	41	37	2	14	2	0	371	377	2	-12	0	1	268	255	2
3	0	0	117	101	2	15	2	0	79	87	5	-11	0	1	57	53	7
4	0	0	123	99	2	16	2	0	253	264	3	-10	0	1	30	3	15
5	0	0	240	220	2	17	2	0	44	43	10	-9	0	1	164	170	10
6	0	0	13	16	13	18	2	0	50	56	9	-8	0	1	190	196	8
7	0	0	433	402	5	19	2	0	123	130	10	-7	0	1	15	21	15
8	0	0	773	726	16	20	2	0	55	11	25	-6	0	1	205	188	2
9	0	0	141	145	10	21	2	0	31	22	13	-5	0	1	356	299	2
10	0	0	287	259	3	22	2	0	84	55	8	-4	0	1	81	19	12
11	0	0	33	25	13	33	0	0	294	306	7	-3	0	1	158	141	3
12	0	0	55	52	6	43	0	0	536	554	5	-2	0	1	33	19	6
13	0	0	73	66	5	53	0	0	104	114	4	2	0	1	165	162	1
14	0	0	522	449	4	63	0	0	47	28	9	3	0	1	81	66	2
15	0	0	128	99	10	73	0	0	628	640	2	4	0	1	132	115	1
16	0	0	358	313	5	83	0	0	61	60	7	5	0	1	155	146	4
17	0	0	88	51	14	93	0	0	17	5	17	6	0	1	49	46	6
18	0	0	69	66	18	103	0	0	42	17	13	7	0	1	455	422	7
19	0	0	162	150	9	113	0	0	146	135	13	8	0	1	671	678	7
20	0	0	46	12	46	123	0	0	186	156	9	9	0	1	235	240	13
21	0	0	112	107	12	133	0	0	90	98	5	10	0	1	74	83	4
22	0	0	40	26	40	143	0	0	91	92	5	11	0	1	186	169	2
1	1	0	45	39	3	153	0	0	66	71	7	12	0	1	77	70	5
2	1	0	86	85	2	163	0	0	90	96	6	13	0	1	37	32	12
3	1	0	480	502	3	173	0	0	123	125	7	14	0	1	718	639	4
4	1	0	929	896	6	183	0	0	57	51	12	15	0	1	254	219	6
5	1	0	173	169	3	0	4	0	876	967	14	16	0	1	321	268	6
6	1	0	40	30	4	14	4	0	78	61	5	17	0	1	57	45	28
7	1	0	1075	986	5	24	4	0	32	20	20	18	0	1	139	130	9
8	1	0	76	82	5	34	4	0	54	41	8	19	0	1	131	120	10
9	1	0	32	7	7	44	4	0	39	34	12	20	0	1	111	85	12
10	1	0	29	23	16	54	4	0	110	101	8	21	0	1	42	30	42
11	1	0	208	195	2	64	4	0	38	3	13	22	0	1	86	81	16
12	1	0	252	228	2	74	4	0	182	176	6	-22	1	1	33	10	32
13	1	0	141	135	3	84	4	0	330	334	10	-21	1	1	50	31	16
14	1	0	142	134	3	94	4	0	72	71	5	-20	1	1	19	12	18
15	1	0	100	99	4	104	4	0	106	113	4	-19	1	1	53	55	13
16	1	0	117	122	3	114	4	0	13	16	12	-18	1	1	32	6	32
17	1	0	187	181	7	124	4	0	33	27	22	-17	1	1	235	225	3
18	1	0	76	80	10	134	4	0	40	22	13	-16	1	1	72	75	6
19	1	0	57	50	12	144	4	0	235	237	15	-15	1	1	138	131	3
20	1	0	144	141	6	154	4	0	153	150	8	-14	1	1	0	4	1
21	1	0	155	158	9	164	4	0	309	280	11	-13	1	1	33	21	16
22	1	0	53	22	20	174	4	0	59	60	12	-12	1	1	371	352	2
0	2	0	1597	1791	4	184	4	0	27	23	27	-11	1	1	40	40	10
1	2	0	92	110	3	194	4	0	332	327	10	-10	1	1	71	68	4
2	2	0	19	30	19	204	4	0	53	36	13	-9	1	1	95	96	4
3	2	0	69	75	3	214	4	0	0	4	1	-8	1	1	312	328	11
4	2	0	59	71	2	224	4	0	32	1	2	-7	1	1	329	318	9
5	2	0	144	172	9	234	4	0	141	140	9	-6	1	1	55	40	4
6	2	0	17	17	17	244	4	0	157	130	9	-5	1	1	70	71	3
7	2	0	291	312	4	254	4	0	72	57	17	-4	1	1	566	552	4
8	2	0	566	578	5	264	4	0	193	80	12	-3	1	1	86	51	3
9	2	0	114	118	3	274	4	0	19	21	27	-2	1	1	95	111	4
10	2	0	215	205	2	284	4	0	79	74	15	-1	1	1	16	6	16
11	2	0	23	21	22	294	4	0	129	114	9	0	1	1	33	32	6
12	2	0	48	43	7	304	4	0	134	121	9	1	1	1	133	149	2
13	2	0	49	50	7	314	4	0	137	128	8	2	1	1	293	321	11

Table 2. Observed and calculated structure factors for $Kl.41Sn2.96H7.63Se15$. Page 3

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
13	0	2	35	36	16	-17	2	2	98	106	4	2	3	2	143	151	3
14	0	2	394	356	5	-16	2	2	71	70	6	3	3	2	65	58	4
15	0	2	354	323	5	-15	2	2	33	8	15	4	3	2	144	159	4
16	0	2	224	187	7	-14	2	2	61	55	6	5	3	2	141	142	3
17	0	2	140	110	10	-13	2	2	88	87	4	6	3	2	29	32	19
18	0	2	32	40	32	-12	2	2	197	193	2	7	3	2	290	308	3
19	0	2	126	111	9	-11	2	2	52	40	8	8	3	2	36	25	12
20	0	2	88	37	16	-10	2	2	424	412	5	9	3	2	74	81	5
21	0	2	60	15	28	-9	2	2	114	104	3	10	3	2	19	13	19
22	0	2	101	67	16	-8	2	2	30	16	27	11	3	2	144	139	7
-22	1	2	67	66	13	-7	2	2	135	142	2	12	3	2	164	175	3
-21	1	2	46	36	26	-6	2	2	45	44	7	13	3	2	78	82	6
-20	1	2	52	49	13	-5	2	2	127	142	6	14	3	2	7	19	7
-19	1	2	55	45	12	-4	2	2	185	211	9	15	3	2	75	79	6
-18	1	2	205	188	3	-3	2	2	0	11	1	16	3	2	73	65	6
-17	1	2	262	243	4	-2	2	2	63	68	3	17	3	2	37	55	14
-16	1	2	199	190	4	-1	2	2	46	66	7	18	3	2	12	38	11
-15	1	2	167	161	3	0	2	2	164	188	4	-14	4	2	24	40	24
-14	1	2	155	148	2	1	2	2	77	94	3	-13	4	2	54	52	9
-13	1	2	40	35	11	2	2	2	127	145	2	-12	4	2	120	120	4
-12	1	2	209	184	2	3	2	2	65	87	4	-11	4	2	47	15	13
-11	1	2	51	49	7	4	2	2	13	18	12	-10	4	2	254	246	11
-10	1	2	139	130	2	5	2	2	134	139	2	-9	4	2	72	68	6
-9	1	2	47	48	6	6	2	2	40	35	7	-8	4	2	41	9	41
-8	1	2	183	169	2	7	2	2	112	127	4	-7	4	2	74	80	5
-7	1	2	86	78	3	8	2	2	161	173	4	-6	4	2	24	24	23
-6	1	2	33	32	8	9	2	2	47	46	7	-5	4	2	99	91	7
-5	1	2	62	48	4	10	2	2	167	173	4	-4	4	2	124	117	5
-4	1	2	49	46	5	11	2	2	144	148	3	-3	4	2	22	9	22
-3	1	2	360	382	6	12	2	2	34	28	12	-2	4	2	48	41	12
-2	1	2	243	256	4	13	2	2	278	296	7	-1	4	2	52	30	12
-1	1	2	162	165	4	14	2	2	278	296	7	0	4	2	125	127	4
0	1	2	54	68	3	15	2	2	261	271	2	1	4	2	66	62	6
1	1	2	30	31	6	16	2	2	158	161	3	2	4	2	79	76	8
2	1	2	233	227	6	17	2	2	92	93	5	3	4	2	65	56	6
3	1	2	104	99	3	18	2	2	0	31	1	4	4	2	131	24	10
4	1	2	249	242	3	19	2	2	86	95	6	5	4	2	77	76	5
5	1	2	217	221	11	-18	3	2	131	138	5	6	4	2	16	22	15
6	1	2	51	51	3	-17	3	2	186	174	19	7	4	2	88	73	5
7	1	2	476	460	10	-16	3	2	124	141	5	8	4	2	100	105	6
8	1	2	28	19	10	-15	3	2	104	112	4	9	4	2	78	37	22
9	1	2	136	127	1	-14	3	2	90	102	5	10	4	2	91	98	4
10	1	2	28	19	11	-13	3	2	32	31	17	11	4	2	89	86	5
11	1	2	206	200	4	-12	3	2	132	127	9	12	4	2	16	27	16
12	1	2	254	242	5	-11	3	2	0	29	1	13	4	2	14	16	24
13	1	2	115	115	3	-10	3	2	88	90	4	14	4	2	233	181	6
14	1	2	36	33	13	-9	3	2	35	35	12	15	4	2	68	16	16
15	1	2	113	114	4	-8	3	2	114	112	5	-7	5	2	35	11	35
16	1	2	91	89	4	-7	3	2	46	42	21	-6	5	2	0	18	1
17	1	2	82	79	9	-6	3	2	21	25	21	-5	5	2	50	29	21
18	1	2	68	49	11	-5	3	2	33	42	15	-4	5	2	109	25	35
19	1	2	182	176	16	-4	3	2	39	15	21	-3	5	2	148	134	14
20	1	2	85	81	10	-3	3	2	236	249	8	2	5	2	134	86	9
21	1	2	331	300	7	-2	3	2	155	152	3	3	5	2	75	31	31
-20	2	2	122	108	7	-1	3	2	97	101	5	4	5	2	147	8	30
-19	2	2	194	210	6	0	3	2	37	42	11	5	5	2	84	71	6
-18	2	2	84	83	5	1	3	2	29	18	28	6	5	2	19	15	18

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.41Sn2.96Bi7.63Se15. Page 5

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-12	4	3	108	103	4	-4	0	4	269	272	7	9	1	4	112	101	3
-11	4	3	183	202	3	-3	0	4	74	57	2	10	1	4	145	132	2
-10	4	3	324	318	9	-2	0	4	134	137	1	11	1	4	368	353	3
-9	4	3	57	49	8	-1	0	4	389	395	5	12	1	4	124	115	3
-8	4	3	9	16	9	0	0	4	50	65	10	13	1	4	75	66	5
-7	4	3	6	20	6	1	0	4	16	25	15	14	1	4	184	178	2
-6	4	3	0	13	1	2	0	4	96	92	3	15	1	4	210	169	12
-5	4	3	132	124	4	3	0	4	513	478	3	16	1	4	30	26	21
-4	4	3	148	143	5	4	0	4	1034	923	16	17	1	4	23	14	23
-3	4	3	58	59	16	5	0	4	48	42	6	18	1	4	10	32	10
-2	4	3	5	6	4	6	0	4	33	19	10	19	1	4	53	28	31
-1	4	3	115	105	6	7	0	4	274	241	3	20	1	4	63	38	26
0	4	3	28	21	20	8	0	4	111	99	3	21	1	4	49	21	48
1	4	3	76	69	5	9	0	4	113	106	3	-21	2	4	90	84	11
2	4	3	52	51	12	10	0	4	255	246	6	-20	2	4	163	166	5
3	4	3	121	74	19	11	0	4	160	154	2	-19	2	4	61	64	12
4	4	3	301	280	13	12	0	4	163	150	3	-18	2	4	77	76	5
5	4	3	53	44	8	13	0	4	0	1	1	-17	2	4	54	64	8
6	4	3	33	39	18	14	0	4	46	41	5	-16	2	4	66	66	7
7	4	3	121	123	7	15	0	4	188	164	7	-15	2	4	207	214	4
8	4	3	57	50	9	16	0	4	111	98	12	-14	2	4	24	16	24
9	4	3	170	186	5	17	0	4	85	80	17	-13	2	4	25	12	25
10	4	3	52	22	9	18	0	4	427	375	6	-12	2	4	130	124	3
11	4	3	110	113	4	19	0	4	248	215	7	-11	2	4	44	34	9
12	4	3	36	17	21	20	0	4	127	106	10	-10	2	4	497	477	4
13	4	3	59	56	8	21	0	4	66	19	26	-9	2	4	147	141	3
-8	5	3	122	66	21	-22	1	4	224	243	5	-8	2	4	119	114	3
-7	5	3	45	31	31	-21	1	4	51	7	14	-7	2	4	115	111	3
-6	5	3	8	26	8	-20	1	4	24	6	23	-6	2	4	86	84	4
-5	5	3	51	33	22	-19	1	4	53	43	12	-5	2	4	30	30	7
-4	5	3	98	84	7	-18	1	4	24	6	23	-4	2	4	188	210	5
-3	5	3	226	228	17	-17	1	4	313	306	3	-3	2	4	39	41	7
-2	5	3	149	95	10	-16	1	4	207	198	3	-2	2	4	77	100	2
-1	5	3	101	90	15	-15	1	4	28	7	18	-1	2	4	256	300	7
0	5	3	55	4	9	-14	1	4	223	225	3	0	2	4	27	40	12
1	5	3	24	13	23	-13	1	4	226	221	3	1	2	4	25	20	13
2	5	3	17	17	17	-12	1	4	93	82	4	2	2	4	58	69	4
3	5	3	124	101	7	-11	1	4	20	20	3	3	2	4	348	370	3
4	5	3	0	24	1	-10	1	4	17	8	16	4	2	4	664	695	5
-22	0	4	43	16	43	-9	1	4	116	105	2	5	2	4	19	36	18
-21	0	4	95	99	11	-8	1	4	540	502	3	6	2	4	35	25	9
-20	0	4	184	186	7	-7	1	4	145	122	4	7	2	4	180	191	4
-19	0	4	75	77	15	-6	1	4	78	66	8	8	2	4	78	81	5
-18	0	4	88	91	12	-5	1	4	134	131	2	9	2	4	81	89	4
-17	0	4	82	75	13	-4	1	4	324	322	5	10	2	4	187	199	10
-16	0	4	99	73	11	-3	1	4	974	1005	5	11	2	4	129	129	7
-15	0	4	259	249	5	-2	1	4	64	66	4	12	2	4	124	125	5
-14	0	4	0	22	1	-1	1	4	175	187	2	13	2	4	23	1	22
-13	0	4	18	19	17	0	1	4	233	250	3	14	2	4	33	29	16
-12	0	4	144	146	6	1	1	4	132	85	3	15	2	4	133	133	3
-11	0	4	39	37	9	2	1	4	174	185	6	16	2	4	83	84	5
-10	0	4	628	586	3	3	1	4	148	165	7	17	2	4	79	70	6
-9	0	4	160	178	8	4	1	4	27	8	9	18	2	4	299	323	8
-8	0	4	133	148	10	5	1	4	28	37	9	19	2	4	181	182	4
-7	0	4	130	133	6	6	1	4	123	132	5	-18	3	4	36	7	22
-6	0	4	106	105	9	7	1	4	99	92	2	-17	3	4	205	218	8
-5	0	4	66	46	8	8	1	4	34	41	8	-16	3	4	128	141	4

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.41Sn2.96Bi7.63Se15. Page 6

	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-15	3	4	47	5	11		9	4	4	71	59	8	19	0	5	106	66	15
-14	3	4	138	152	3		10	4	4	110	116	6	20	0	5	56	23	10
-13	3	4	146	154	3		11	4	4	78	81	5	-22	1	5	32	47	31
-12	3	4	56	53	8		12	4	4	73	77	6	-21	1	5	100	93	6
-11	3	4	0	20	1		13	4	4	0	1	1	-20	1	5	165	155	4
-10	3	4	0	8	1		-8	5	4	186	185	7	-19	1	5	52	39	13
-9	3	4	80	77	6		-7	5	4	55	31	28	-18	1	5	137	146	5
-8	3	4	325	340	3		-5	5	4	67	56	14	-17	1	5	205	192	3
-7	3	4	80	73	7		-5	5	4	115	113	5	-16	1	5	136	131	4
-6	3	4	31	40	23		-3	5	4	307	301	22	-15	1	5	230	219	2
-5	3	4	92	92	4		2	5	4	101	48	7	-14	1	5	155	144	2
-4	3	4	213	209	2		3	5	4	100	62	7	-13	1	5	271	258	2
-3	3	4	572	614	8		4	5	4	50	8	10	-12	1	5	162	154	2
-2	3	4	50	42	6		5	5	4	13	9	12	-11	1	5	45	29	8
-1	3	4	126	122	3		6	5	4	88	42	22	-10	1	5	65	52	5
0	3	4	157	160	3		7	5	4	57	45	11	-9	1	5	99	94	3
1	3	4	58	59	5		-22	0	5	46	25	25	-8	1	5	198	174	3
2	3	4	102	109	3		-21	0	5	166	154	7	-7	1	5	329	301	7
3	3	4	100	111	3		-20	0	5	233	234	6	-6	1	5	85	74	4
4	3	4	33	4	11		-19	0	5	90	78	11	-5	1	5	285	271	2
5	3	4	0	21	1		-18	0	5	171	159	7	-4	1	5	252	252	2
6	3	4	73	85	12		-17	0	5	174	174	6	-3	1	5	588	597	4
7	3	4	74	68	6		-16	0	5	103	92	9	-2	1	5	89	93	3
8	3	4	28	27	19		-15	0	5	235	222	5	-1	1	5	25	23	14
9	3	4	71	73	6		-14	0	5	73	76	15	0	1	5	48	47	4
10	3	4	94	105	4		-13	0	5	39	33	39	1	1	5	22	32	21
11	3	4	237	248	8		-12	0	5	215	209	3	2	1	5	34	45	10
12	3	4	78	80	5		-11	0	5	457	442	10	3	1	5	28	20	16
13	3	4	52	48	11		-10	0	5	492	471	7	4	1	5	127	126	2
14	3	4	119	129	4		-9	0	5	236	247	12	5	1	5	48	54	5
15	3	4	123	122	4		-8	0	5	41	49	9	6	1	5	486	512	15
16	3	4	39	22	14		-7	0	5	97	92	4	7	1	5	182	176	2
17	3	4	30	12	30		-6	0	5	112	106	2	8	1	5	72	61	3
18	3	4	125	143	7		-5	0	5	159	154	3	9	1	5	47	39	6
19	3	4	34	7	20		-4	0	5	148	134	2	10	1	5	94	85	3
20	3	4	0	6	1		-3	0	5	291	273	1	11	1	5	714	695	7
21	3	4	83	82	6		-2	0	5	101	91	2	12	1	5	109	109	3
22	3	4	75	72	12		-1	0	5	328	324	10	13	1	5	161	150	3
23	3	4	310	284	7		0	0	5	128	174	5	14	1	5	246	230	3
24	3	4	90	83	5		1	0	5	129	142	19	15	1	5	17	29	17
25	3	4	58	65	11		2	0	5	142	151	14	16	1	5	107	107	5
26	3	4	66	70	8		3	0	5	111	107	2	17	1	5	0	16	0
27	3	4	35	50	17		4	0	5	990	888	11	18	1	5	115	110	10
28	3	4	6	19	5		5	0	5	139	134	2	19	1	5	0	48	1
29	3	4	132	120	8		6	0	5	193	168	2	20	1	5	0	22	1
30	3	4	31	19	30		7	0	5	56	48	5	21	1	5	73	73	21
31	3	4	51	51	16		8	0	5	38	33	10	-21	2	5	146	135	9
32	3	4	173	177	10		9	0	5	31	25	16	-20	2	5	192	200	5
33	3	4	31	10	14		10	0	5	316	298	6	-19	2	5	63	64	11
34	3	4	12	12	14		11	0	5	178	169	3	-18	2	5	142	134	11
35	3	4	54	36	11		12	0	5	79	76	5	-17	2	5	147	148	3
36	3	4	224	213	5		13	0	5	100	88	4	-16	2	5	76	77	5
37	3	4	418	388	10		14	0	5	105	99	5	-15	2	5	187	189	3
38	3	4	43	23	12		15	0	5	43	14	42	-14	2	5	60	62	7
39	3	4	27	28	27		16	0	5	54	37	30	-13	2	5	36	30	14
40	3	4	109	110	4		17	0	5	116	100	12	-12	2	5	182	172	3

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.418n2.96B17.63Se15. Page 9

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
11	0	7	128	121	3	-14	2	7	78	71	5	4	3	7	57	49	6
12	0	7	155	145	3	-13	2	7	78	71	5	5	3	7	70	76	4
13	0	7	145	143	3	-12	2	7	100	112	13	6	3	7	45	34	11
14	0	7	100	99	4	-11	2	7	128	119	4	7	3	7	32	37	14
15	0	7	185	170	8	-10	2	7	268	256	3	8	3	7	35	49	12
16	0	7	0	29	1	-9	2	7	493	465	6	9	3	7	98	105	4
17	0	7	127	115	11	-8	2	7	358	358	2	10	3	7	201	214	4
18	0	7	112	92	13	-7	2	7	235	227	3	11	3	7	189	203	7
19	0	7	158	160	5	-6	2	7	679	663	6	12	3	7	53	56	8
20	0	7	140	156	4	-5	2	7	55	60	4	13	3	7	16	12	16
21	0	7	80	69	7	-4	2	7	27	26	11	14	3	7	50	59	10
22	0	7	177	177	3	-3	2	7	138	143	2	15	3	7	114	125	4
23	0	7	40	15	16	-2	2	7	253	262	3	16	3	7	21	16	20
24	0	7	42	40	14	-1	2	7	573	627	4	17	3	7	48	3	29
25	0	7	78	73	5	0	2	7	107	124	4	18	3	7	0	13	1
26	0	7	22	16	22	1	2	7	47	44	4	19	3	7	30	17	29
27	0	7	936	915	4	2	2	7	198	209	3	20	3	7	30	13	29
28	0	7	346	328	2	3	2	7	56	67	6	21	3	7	85	67	16
29	0	7	11	14	10	4	2	7	115	118	4	22	3	7	172	147	6
30	0	7	52	50	7	5	2	7	34	41	12	23	3	7	302	276	13
31	0	7	69	57	6	6	2	7	180	190	4	24	3	7	216	207	6
32	0	7	59	32	13	7	2	7	403	439	6	25	3	7	136	132	8
33	0	7	131	113	3	8	2	7	167	181	3	26	3	7	370	375	3
34	0	7	259	237	4	9	2	7	0	15	1	27	3	7	41	40	17
35	0	7	786	756	4	10	2	7	103	98	4	28	3	7	29	20	28
36	0	7	342	344	6	11	2	7	97	100	4	29	3	7	91	83	7
37	0	7	154	145	4	12	2	7	120	120	4	30	3	7	152	148	7
38	0	7	68	67	3	13	2	7	114	121	4	31	3	7	356	344	13
39	0	7	118	119	4	14	2	7	87	84	5	32	3	7	66	73	7
40	0	7	168	166	3	15	2	7	137	145	3	33	3	7	21	28	20
41	0	7	691	734	4	16	2	7	20	26	20	34	3	7	118	112	4
42	0	7	283	284	3	17	2	7	51	100	5	35	3	7	64	58	6
43	0	7	676	669	3	18	2	7	84	79	6	36	3	7	74	58	6
44	0	7	61	75	10	19	2	7	31	35	30	5	4	7	47	28	9
45	0	7	109	111	4	20	2	7	121	131	5	37	3	7	106	105	5
46	0	7	60	68	4	21	2	7	81	50	5	38	3	7	250	272	2
47	0	7	56	59	6	22	2	7	40	16	18	39	3	7	102	116	5
48	0	7	79	74	4	23	2	7	0	30	1	40	3	7	24	13	24
49	0	7	169	151	4	24	2	7	37	49	19	41	3	7	41	60	12
50	0	7	326	312	5	25	2	7	55	14	10	42	3	7	44	62	10
51	0	7	295	275	3	26	2	7	610	645	9	43	3	7	63	73	7
52	0	7	87	89	5	27	2	7	222	223	4	44	3	7	50	83	8
53	0	7	27	13	27	28	2	7	15	8	15	45	3	7	268	251	17
54	0	7	78	78	6	29	2	7	99	28	32	46	3	7	122	114	7
55	0	7	172	165	3	30	2	7	40	44	12	47	3	7	40	41	26
56	0	7	25	23	25	31	2	7	42	19	14	48	3	7	0	18	1
57	0	7	55	40	10	32	2	7	83	79	7	49	3	7	124	90	11
58	0	7	131	126	11	33	2	7	167	160	3	50	3	7	252	234	15
59	0	7	48	48	4	34	2	7	494	490	3	51	3	7	50	23	16
60	0	7	141	141	10	35	2	7	223	222	3	52	3	7	90	83	11
61	0	7	15	17	14	36	2	7	86	89	4	53	3	7	46	8	45
62	0	7	267	274	4	37	2	7	55	40	7	54	3	7	125	133	6
63	0	7	84	79	8	38	2	7	76	83	5	55	3	7	302	335	5
64	0	7	135	137	5	39	2	7	113	114	6	56	3	7	18	31	18
65	0	7	173	173	3	40	2	7	447	473	7	57	3	7	46	42	20
66	0	7	209	209	3	41	2	7	189	180	14	58	3	7	144	155	6
67	0	7	41	13	13	42	2	7	414	442	6	59	3	7	35	35	34

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.418n2.96B17.63Se15. Page 11

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
10	4	8	49	44	10	-12	1	9	67	62	5	5	2	9	21	5	21
11	4	8	30	33	29	-11	1	9	132	128	3	6	2	9	119	131	4
-6	5	8	73	42	12	-10	1	9	37	37	12	7	2	9	224	238	2
-5	5	8	229	215	4	-9	1	9	291	277	2	8	2	9	584	651	6
-4	5	8	114	108	6	-8	1	9	57	59	5	9	2	9	19	3	18
-3	5	8	45	53	17	-7	1	9	53	60	6	10	2	9	144	152	3
-2	5	8	47	46	34	-6	1	9	18	6	17	11	2	9	16	12	16
-1	5	8	211	200	14	-5	1	9	155	165	5	12	2	9	90	84	5
0	5	8	82	29	14	-4	1	9	127	127	2	13	2	9	46	56	10
1	5	8	48	43	29	-3	1	9	45	39	7	14	2	9	171	171	3
2	5	8	46	49	25	-2	1	9	94	104	6	15	2	9	57	58	8
-21	0	9	84	93	9	-1	1	9	50	59	4	16	2	9	80	77	6
-20	0	9	0	7	1	0	1	9	78	69	5	17	2	9	29	24	28
-19	0	9	37	45	27	1	1	9	682	668	4	18	2	9	32	4	22
-18	0	9	150	155	5	2	1	9	0	13	1	19	3	9	76	33	13
-17	0	9	41	17	22	3	1	9	275	282	2	20	3	9	151	168	8
-16	0	9	114	125	7	4	1	9	198	192	12	21	3	9	119	122	8
-15	0	9	147	156	6	5	1	9	36	39	9	22	3	9	54	50	13
-14	0	9	48	51	17	6	1	9	49	59	9	23	3	9	99	112	6
-13	0	9	241	256	4	7	1	9	41	44	10	24	3	9	44	5	15
-12	0	9	135	135	7	8	1	9	39	24	11	25	3	9	159	137	4
-11	0	9	164	157	2	9	1	9	75	71	4	26	3	9	57	43	12
-10	0	9	20	10	20	10	1	9	29	20	18	27	3	9	105	95	6
-9	0	9	45	46	7	11	1	9	116	105	3	28	3	9	41	17	17
-8	0	9	306	299	1	12	1	9	99	93	4	29	3	9	191	179	4
-7	0	9	28	29	13	13	1	9	32	28	20	30	3	9	43	45	15
-6	0	9	603	574	6	14	1	9	141	142	3	31	3	9	38	45	27
-5	0	9	313	303	1	15	1	9	389	399	2	32	3	9	0	4	1
-4	0	9	136	125	2	16	1	9	65	68	7	33	3	9	97	104	9
-3	0	9	47	38	8	17	1	9	35	19	23	34	3	9	88	88	10
-2	0	9	100	86	4	18	1	9	118	120	13	35	3	9	0	26	1
-1	0	9	87	95	11	19	1	9	130	132	12	36	3	9	75	67	5
0	9	196	227	4	-20	2	9	41	7	26	37	38	3	9	48	37	12
1	0	9	80	98	7	21	2	9	44	40	20	39	3	9	56	51	8
2	0	9	49	62	15	22	2	9	138	135	5	40	3	9	423	441	5
3	0	9	350	425	3	-17	2	9	48	10	12	2	3	9	45	10	44
4	0	9	25	9	25	-16	2	9	112	106	5	3	3	9	199	189	7
5	0	9	4	6	4	-15	2	9	139	135	4	4	3	9	103	119	4
6	0	9	173	162	4	-14	2	9	38	41	15	5	3	9	16	24	16
7	0	9	329	286	4	-13	2	9	218	4	6	3	3	9	47	45	9
8	0	9	872	799	9	-12	2	9	114	112	5	14	3	9	25	10	20
9	0	9	0	4	1	-11	2	9	139	131	4	8	3	9	62	20	24
10	0	9	202	182	6	-10	2	9	24	10	23	9	3	9	25	51	9
11	0	9	33	17	22	-9	2	9	42	34	12	10	3	9	41	12	11
12	0	9	117	102	4	-8	2	9	253	240	2	11	3	9	70	77	6
13	0	9	68	66	7	-7	2	9	18	21	17	12	3	9	58	64	7
14	0	9	207	203	3	-6	2	9	469	460	5	13	3	9	26	19	26
15	0	9	61	68	15	-5	2	9	232	225	5	14	3	9	99	97	6
-21	1	9	45	47	13	-4	2	9	100	101	15	3	3	9	257	291	3
-20	1	9	28	4	27	-3	2	9	24	23	24	4	3	9	141	126	6
-19	1	9	64	44	9	-2	2	9	69	61	5	5	3	9	81	70	9
-18	1	9	207	223	3	-1	2	9	76	79	5	6	3	9	92	84	7
-17	1	9	161	167	14	0	2	9	165	179	2	7	3	9	56	19	15
-16	1	9	69	72	7	1	2	9	82	78	4	8	3	9	12	14	15
-15	1	9	149	155	3	2	2	9	49	48	8	9	3	9	144	147	6
-14	1	9	20	9	19	3	2	9	326	336	9	7	3	9	21	10	20
-13	1	9	201	187	2	4	2	9	0	6	1	6	3	9	287	269	4

Table 2. Observed and calculated structure factors for K1.41Sn2.96Bi7.63Sb15. Page 13

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-13	4	10	132	121	6	7	0	11	173	164	3	-10	2	11	126	119	4
-12	4	10	67	47	13	8	0	11	51	35	10	-9	2	11	57	45	9
-11	4	10	128	125	6	9	0	11	160	141	4	-8	2	11	144	137	3
-10	4	10	93	95	8	10	0	11	288	277	5	-7	2	11	132	120	5
-9	4	10	83	73	10	11	0	11	154	132	4	-6	2	11	55	56	9
-8	4	10	36	4	35	12	0	11	142	130	5	-5	2	11	223	229	2
-7	4	10	89	81	9	13	0	11	208	201	5	-4	2	11	178	182	2
-6	4	10	84	21	12	14	0	11	100	95	6	-3	2	11	252	255	4
-5	4	10	136	129	6	15	0	11	117	107	6	-2	2	11	250	244	9
-4	4	10	46	51	17	-20	1	11	70	62	8	-1	2	11	47	38	9
-3	4	10	25	7	24	-19	1	11	99	117	5	0	2	11	0	7	1
-2	4	10	214	213	11	-18	1	11	39	46	16	1	2	11	44	51	10
-1	4	10	124	134	9	-17	1	11	76	85	7	2	2	11	218	217	4
0	4	10	72	68	7	-16	1	11	16	28	15	3	2	11	82	81	6
1	4	10	13	6	12	-15	1	11	167	171	4	4	2	11	47	50	13
2	4	10	137	142	5	-14	1	11	266	268	2	5	2	11	91	96	6
3	4	10	80	77	7	-13	1	11	147	142	3	6	2	11	91	96	5
4	4	10	59	60	11	-12	1	11	106	99	4	7	2	11	127	131	4
5	4	10	86	84	5	-11	1	11	163	151	3	8	2	11	25	33	24
6	4	10	122	126	4	-10	1	11	251	240	2	9	2	11	113	120	5
7	4	10	46	30	10	-9	1	11	352	334	5	10	2	11	208	231	5
8	4	10	57	54	14	-8	1	11	139	139	5	11	2	11	106	114	5
9	4	10	37	40	17	-7	1	11	45	53	9	12	2	11	107	113	4
10	4	10	50	19	20	-6	1	11	187	189	11	13	2	11	158	171	6
-4	5	10	109	105	11	-5	1	11	15	5	14	14	2	11	74	80	7
-3	5	10	0	14	1	-4	1	11	56	54	4	15	2	11	84	90	7
-2	5	10	51	61	13	-3	1	11	29	19	10	16	2	11	35	4	23
-1	5	10	125	115	9	-2	1	11	139	148	9	17	2	11	0	5	1
5	5	10	45	5	44	-1	1	11	96	109	7	18	2	11	68	98	21
-21	0	11	190	222	4	0	1	11	46	52	12	-18	3	11	53	26	13
-20	0	11	31	10	30	1	1	11	31	10	31	-17	3	11	78	66	7
-19	0	11	32	41	32	2	1	11	301	299	5	-16	3	11	46	21	14
-18	0	11	91	89	7	3	1	11	76	63	8	-15	3	11	131	121	5
-17	0	11	72	83	9	4	1	11	152	153	4	-14	3	11	193	197	3
-16	0	11	325	343	9	5	1	11	423	448	8	-13	3	11	109	96	6
-15	0	11	144	144	5	6	1	11	310	309	8	-12	3	11	73	72	10
-14	0	11	27	13	26	7	1	11	31	25	17	-11	3	11	130	108	6
-13	0	11	166	163	6	8	1	11	41	33	12	-10	3	11	193	169	5
-12	0	11	82	84	7	9	1	11	119	122	5	-9	3	11	247	228	4
-11	0	11	0	24	1	10	1	11	246	246	5	-8	3	11	110	100	9
-10	0	11	140	141	3	11	1	11	53	50	7	-7	3	11	28	43	27
-9	0	11	55	56	7	12	1	11	64	46	6	-6	3	11	149	136	5
-8	0	11	175	166	2	13	1	11	235	232	7	-5	3	11	0	9	1
-7	0	11	154	147	2	14	1	11	57	48	9	-4	3	11	39	41	23
-6	0	11	80	73	5	15	1	11	137	140	7	-3	3	11	0	16	1
-5	0	11	286	284	5	16	1	11	23	14	22	-2	3	11	98	96	4
-4	0	11	226	223	2	17	1	11	144	157	5	-1	3	11	76	75	6
-3	0	11	315	302	8	18	1	11	40	3	40	0	3	11	44	40	21
-2	0	11	366	308	9	-19	2	11	57	35	13	1	3	11	28	43	27
-1	0	11	32	40	31	-20	2	11	187	179	8	2	3	11	187	202	9
0	0	11	0	16	1	-17	2	11	76	71	6	3	3	11	63	51	6
1	0	11	31	58	30	-16	2	11	109	289	2	4	3	11	109	114	4
2	0	11	237	273	4	-15	2	11	127	121	4	5	3	11	297	316	8
3	0	11	74	92	15	-14	2	11	37	10	6	6	3	11	198	212	9
4	0	11	45	59	11	-13	2	11	147	141	3	7	3	11	30	21	25
5	0	11	111	117	7	-12	2	11	79	73	7	8	3	11	27	22	26
6	0	11	118	117	4	-11	2	11	21	20	20	9	3	11	81	88	5

Table 2. Observed and calculated structure factors for K1.41Sn2.96Bi7.63Sb15. Page 14

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
10	3	11	170	181	5	6	0	12	164	174	3	-11	2	12	85	82	6
11	3	11	29	33	29	7	0	12	75	68	7	-10	2	12	195	186	3
12	3	11	43	33	11	8	0	12	57	58	18	-9	2	12	97	95	5
13	3	11	155	171	3	9	0	12	263	250	9	-8	2	12	142	141	3
14	3	11	32	35	25	10	0	12	77	52	10	-7	2	12	263	260	5
-12	4	11	64	49	26	11	0	12	41	32	29	-6	2	12	151	141	5
-11	4	11	35	12	34	12	0	12	327	308	4	-5	2	12	24	19	23
-10	4	11	85	78	10	13	0	12	55	30	20	-4	2	12	63	63	7
-9	4	11	24	24	6	14	0	12	128	119	7	-3	2	12	127	121	5
-8	4	11	78	63	10	15	0	12	23	22	22	-2	2	12	589	598	2
-7	4	11	74	72	13	-20	1	12	51	55	11	-1	2	12	64	57	7
-6	4	11	21	28	20	-19	1	12	73	75	7	0	2	12	54	47	8
-5	4	11	133	136	6	-18	1	12	28	36	29	1	2	12	110	116	4
-4	4	11	105	113	6	-17	1	12	73	70	7	2	2	12	33	28	22
-3	4	11	165	162	10	-16	1	12	226	231	3	3	2	12	13	19	12
-2	4	11	147	139	5	-15	1	12	42	32	15	4	2	12	65	75	10
-1	4	11	30	31	29	-14	1	12	76	72	5	5	2	12	35	42	30
0	4	11	0	4	1	-13	1	12	84	78	4	6	2	12	128	141	5
1	4	11	40	35	14	-12	1	12	34	12	13	7	2	12	52	55	8
2	4	11	129	124	3	-11	1	12	47	52	9	8	2	12	48	49	8
3	4	11	56	58	9	-10	1	12	42	41	11	9	2	12	194	209	7
4	4	11	48	32	14	-9	1	12	529	513	6	10	2	12	40	43	12
5	4	11	66	64	7	-8	1	12	95	95	5	11	2	12	18	29	18
6	4	11	62	60	7	-7	1	12	5	8	4	12	2	12	227	261	8
7	4	11	77	72	6	-6	1	12	84	87	6	13	2	12	33	32	19
8	4	11	45	27	11	-5	1	12	40	49	7	14	2	12	92	101	7
9	4	11	88	80	8	-4	1	12	35	38	9	15	2	12	30	19	30
10	4	11	141	144	6	-3	1	12	25	18	15	16	2	12	34	45	26
-3	5	11	0	10	1	-2	1	12	107	113	4	17	2	12	105	134	8
-2	5	11	22	50	22	-1	1	12	78	85	7	-18	3	12	0	31	1
-1	5	11	32	43	32	0	1	12	156	153	4	-17	3	12	78	55	8
0	5	11	129	123	5	1	1	12	144	152	5	-16	3	12	172	170	5
1	5	11	142	146	5	2	1	12	60	34	13	-15	3	12	42	28	23
-18	0	12	164	179	9	3	1	12	100	101	6	-14	3	12	71	51	10
-17	0	12	79	81	8	4	1	12	215	209	3	-13	3	12	61	49	13
-16	0	12	315	315	4	5	1	12	317	332	8	-12	3	12	0	11	1
-15	0	12	0	2	1	6	1	12	36	40	16	-11	3	12	47	38	23
-14	0	12	71	7	9	7	1	12	26	18	26	-10	3	12	41	36	27
-13	0	12	27	44	27	8	1	12	12	12	17	-9	3	12	128	139	6
-12	0	12	217	211	3	9	1	12	96	17	18	-8	3	12	86	76	10
-11	0	12	103	101	4	10	1	12	169	165	6	-7	3	12	0	7	1
-10	0	12	223	221	3	11	1	12	60	59	6	-6	3	12	75	66	9
-9	0	12	117	117	2	12	1	12	33	36	15	-5	3	12	26	33	26
-8	0	12	170	174	2	13	1	12	92	86	5	-4	3	12	37	26	27
-7	0	12	346	324	2	14	1	12	45	53	12	-3	3	12	0	6	1
-6	0	12	183	175	2	15	1	12	129	127	6	-2	3	12	91	81	5
-5	0	12	34	26	25	16	1	12	47	40	14	-1	3	12	83	73	11
-4	0	12	77	72	11	17	1	12	22	11	22	0	3	12	92	95	5
-3	0	12	146	151	5	18	1	12	109	103	10	1	3	12	100	108	4
-2	0	12	668	736	3	-19	2	12	127	123	7	2	3	12	41	28	10
-1	0	12	71	77	12	-18	2	12	154	152	5	3	3	12	58	65	8
0	0	12	55	59	14	-17	2	12	85	74	6	4	3	12	143	143	4
1	0	12	153	144	10	-16	2	12	283	269	5	5	3	12	229	229	4
2	0	12	15	33	15	-15	2	12	0	3	1	6	3	12	36	35	15
3	0	12	0	72	1	-14	2	12	67	58	7	7	3	12	11	35	3
4	0	12	64	85	14	-13	2	12	32	32	8	8	3	12	18	9	17
5	0	12	38	42	14	-12	2	12	200	181	3	9	3	12	4	8	4

Table 2. Observed and calculated structure factors for K1.415n2.96B17.635e15. Page 17

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
3	4	14	32	11	32	-4	1	15	142	149	13	-16	3	15	0	4	1
4	4	14	68	59	10	-3	1	15	132	139	15	-15	3	15	89	92	9
5	4	14	158	164	9	-2	1	15	84	101	20	-14	3	15	62	71	13
6	4	14	76	57	7	-1	1	15	43	60	43	-13	3	15	44	42	25
7	4	14	132	125	6	0	1	15	24	42	24	-12	3	15	157	146	6
8	4	14	100	85	8	1	1	15	305	392	18	-11	3	15	161	156	6
-20	0	15	64	50	20	2	1	15	280	326	18	-10	3	15	40	31	39
-19	0	15	41	25	19	3	1	15	120	118	6	-9	3	15	141	131	12
-18	0	15	191	210	8	4	1	15	85	71	7	-8	3	15	32	39	31
-17	0	15	72	84	9	5	1	15	124	108	5	-7	3	15	294	277	5
-16	0	15	234	253	8	6	1	15	56	56	9	-6	3	15	70	70	13
-15	0	15	32	38	32	7	1	15	185	188	13	-5	3	15	274	259	7
-14	0	15	50	35	13	8	1	15	130	140	8	-4	3	15	110	105	7
-13	0	15	109	118	6	9	1	15	123	132	6	-3	3	15	89	91	7
-12	0	15	385	382	6	10	1	15	80	70	8	-2	3	15	66	65	11
-11	0	15	286	286	10	11	1	15	33	40	33	-1	3	15	42	37	12
-10	0	15	238	227	3	12	1	15	130	122	7	0	3	15	47	39	10
-9	0	15	24	19	24	13	1	15	109	108	7	1	3	15	256	259	4
-8	0	15	29	24	29	14	1	15	100	95	8	2	3	15	229	233	3
-7	0	15	123	121	5	15	1	15	24	20	23	3	3	15	85	80	6
-6	0	15	30	14	30	16	1	15	57	39	18	4	3	15	59	53	10
-5	0	15	99	101	9	-19	2	15	36	23	35	5	3	15	93	74	13
-4	0	15	45	57	15	-18	2	15	169	181	7	6	3	15	55	39	8
-3	0	15	337	371	4	-17	2	15	70	72	10	7	3	15	120	133	6
-2	0	15	438	456	9	-16	2	15	200	213	5	8	3	15	92	100	7
-1	0	15	45	59	22	-15	2	15	31	32	31	9	3	15	76	69	14
0	0	15	287	280	9	-14	2	15	46	30	16	10	3	15	62	53	15
1	0	15	57	55	22	-13	2	15	94	101	7	11	3	15	68	29	22
2	0	15	246	234	9	-12	2	15	328	320	4	12	3	15	19	91	19
3	0	15	168	164	8	-11	2	15	244	239	3	-9	4	15	29	10	28
4	0	15	0	22	1	-10	2	15	200	189	4	-8	4	15	15	9	15
5	0	15	386	422	4	-9	2	15	0	16	1	-7	4	15	65	65	14
6	0	15	172	213	8	-8	2	15	0	19	1	-6	4	15	28	13	28
7	0	15	0	17	1	-7	2	15	99	100	8	-5	4	15	69	57	12
8	0	15	111	144	8	-6	2	15	21	14	21	-4	4	15	58	36	13
9	0	15	114	112	8	-5	2	15	95	86	7	-3	4	15	184	180	4
10	0	15	97	98	9	-4	2	15	63	50	9	-2	4	15	224	223	4
11	0	15	46	35	21	-3	2	15	304	304	8	-1	4	15	39	27	38
12	0	15	153	127	6	-2	2	15	350	374	6	0	4	15	135	142	7
13	0	15	191	185	7	-1	2	15	56	47	10	1	4	15	38	37	20
14	0	15	45	31	0	0	2	15	231	231	3	2	4	15	121	126	15
15	0	15	110	117	7	1	2	15	56	49	11	3	4	15	83	80	8
-19	1	15	264	283	3	2	1	15	198	197	7	4	4	15	43	12	21
-18	1	15	52	44	10	3	2	15	135	134	5	5	4	15	212	206	4
-17	1	15	23	24	23	4	2	15	28	18	27	6	4	15	123	119	5
-16	1	15	25	6	25	5	2	15	342	347	9	7	4	15	29	18	29
-15	1	15	107	128	5	6	2	15	180	182	5	-19	0	16	105	111	6
-14	1	15	89	90	5	7	2	15	39	16	11	-18	0	16	129	170	5
-13	1	15	59	56	6	8	2	15	128	122	9	-17	0	16	110	128	7
-12	1	15	208	205	4	9	2	15	68	62	12	-16	0	16	45	39	12
-11	1	15	216	223	2	10	2	15	68	82	12	-15	0	16	63	54	11
-10	1	15	45	47	9	11	2	15	27	30	26	-14	0	16	140	138	5
-9	1	15	194	189	2	12	2	15	90	106	14	-13	0	16	84	57	10
-8	1	15	68	65	6	13	2	15	136	158	11	-12	0	16	393	380	3
-7	1	15	383	398	6	14	2	15	3	3	3	-11	0	16	176	166	5
-6	1	15	94	105	4	15	2	15	59	94	20	-10	0	16	47	49	13
-5	1	15	356	366	5	16	2	15	7	45	6	-9	0	16	130	113	5

Table 2. Observed and calculated structure factors for K1.415n2.96B17.635e15. Page 18

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-8	0	16	215	114	6	13	1	16	94	90	8	5	3	16	45	40	16
-7	0	16	212	208	3	14	1	16	56	45	19	6	3	16	57	51	31
-6	0	16	48	52	27	15	1	16	34	3	33	7	3	16	90	84	5
-5	0	16	38	49	23	-18	2	16	106	146	9	8	3	16	49	35	10
-4	0	16	149	158	4	-17	2	16	108	111	12	9	3	16	268	305	18
-3	0	16	185	193	5	-16	2	16	46	35	20	10	3	16	122	135	14
-2	0	16	115	119	8	-15	2	16	58	46	12	11	3	16	0	33	1
-1	0	16	94	103	9	-14	2	16	123	117	5	-8	4	16	58	55	17
0	0	16	65	65	17	-13	2	16	55	51	13	-7	4	16	110	99	9
1	0	16	240	226	5	-12	2	16	333	323	7	-6	4	16	10	24	10
2	0	16	435	399	6	-11	2	16	140	137	5	-5	4	16	20	25	20
3	0	16	186	157	7	-10	2	16	33	39	33	-4	4	16	68	73	11
4	0	16	0	10	1	-9	2	16	103	95	7	-3	4	16	96	92	7
5	0	16	134	138	8	-8	2	16	87	94	9	-2	4	16	71	57	12
6	0	16	123	147	8	-7	2	16	172	170	5	-1	4	16	35	46	28
7	0	16	116	136	13	-6	2	16	52	42	15	0	4	16	30	32	29
8	0	16	52	100	19	-5	2	16	60	40	13	1	4	16	109	117	6
9	0	16	40	35	42	-4	2	16	120	128	4	2	4	16	185	201	15
10	0	16	64	74	15	-3	2	16	156	156	3	3	4	16	75	82	10
11	0	16	34	28	33	-2	2	16	103	97	6	4	4	16	49	5	20
12	0	16	164	151	7	-1	2	16	88	83	9	5	4	16	93	70	9
13	0	16	101	109	9	0	2	16	65	54	9	6	4	16	84	77	11
14	0	16	161	159	6	1	2	16	188	189	4	-19	0	17	103	127	8
15	0	16	60	67	15	2	2	16	319	333	3	-18	0	17	79	84	10
16	0	16	223	237	7	3	2	16	133	131	5	-17	0	17	145	147	6
17	0	16	190	196	6	4	2	16	29	29	29	-16	0	17	130	126	7
18	0	16	198	214	3	5	2	16	124	115	5	-15	0	17	51	43	16
19	0	16	50	42	11	6	2	16	125	124	3	-14	0	17	256	267	7
-16	1	16	14	7	14	7	2	16	116	111	4	-13	0	17	0	22	1
-15	1	16	99	98	5	8	2	16	75	85	5	-12	0	17	139	137	6
-14	1	16	37	9	17	9	2	16	13	28	13	-11	0	17	86	90	9
-13	1	16	122	118	3	10	2	16	61	61	10	-10	0	17	251	243	4
-12	1	16	67	74	6	11	2	16	16	25	16	-9	0	17	74	74	9
-11	1	16	79	75	5	12	2	16	116	125	10	-8	0	17	108	112	6
-10	1	16	379	381	2	13	2	16	83	93	19	-7	0	17	10	30	9
-9	1	16	104	106	4	14	2	16	95	137	11	-6	0	17	201	213	6
-8	1	16	13	7	13	-16	3	16	0	13	1	-5	0	17	122	125	5
-7	1	16	19	44	18	-15	3	16	68	69	14	-4	0	17	186	197	8
-6	1	16	92	97	7	-14	3	16	17	7	17	-3	0	17	17	28	27
-5	1	16	56	65	10	-13	3	16	48	48	11	-2	0	17	147	150	7
-4	1	16	145	161	8	-12	3	16	45	91	27	-1	0	17	164	168	6
-3	1	16	133	145	11	-11	3	16	45	58	24	0	0	17	30	11	29
-2	1	16	40	53	40	-10	3	16	291	270	7	1	0	17	121	112	9
-1	1	16	38	65	38	-9	3	16	75	71	12	2	0	17	491	418	19
0	1	16	13	57	32	-8	3	16	0	4	1	3	0	17	0	30	1
1	1	16	119	142	21	-7	3	16	30	29	29	4	0	17	47	36	47
2	1	16	42	20	27	-6	3	16	71	72	12	5	0	17	11	72	27
3	1	16	180	180	10	-5	3	16	413	403	10	6	0	17	36	55	35
4	1	16	55	56	12	-4	3	16	110	109	6	7	0	17	118	126	9
5	1	16	66	59	8	-3	3	16	103	101	7	8	0	17	22	69	21
6	1	16	53	43	8	-2	3	16	22	39	22	9	0	17	136	156	8
7	1	16	106	111	6	-1	3	16	35	48	18	10	0	17	44	77	28
8	1	16	44	39	12	0	3	16	45	41	12	11	0	17	105	117	9
9	1	16	396	420	15	1	3	16	115	102	5	12	0	17	109	103	9
10	1	16	180	180	10	2	3	16	116	115	13	13	0	17	33	43	15
11	1	16	43	43	25	3	3	16	66	52	9	14	0	17	71	67	13
12	1	16	78	62	8	4	3	16	41	38	19	15	0	17	77	62	11

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.41Sn2.96Bi7.63Se15. Page 21

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
9	3	15	104	108	11	8	1	20	63	12	28	-12	0	21	204	214	8
-18	0	20	86	86	16	9	1	20	134	126	18	-11	0	21	239	237	8
-17	0	20	115	114	10	10	1	20	84	89	24	-9	0	21	87	86	16
-16	0	20	75	71	13	11	1	20	38	53	24	-8	0	21	248	284	9
-15	0	20	47	30	26	12	1	20	103	80	11	-7	0	21	152	163	6
-14	0	20	49	22	23	13	1	20	88	99	18	-6	0	21	54	9	19
-13	0	20	330	336	4	-15	2	20	21	29	20	-5	0	21	137	136	7
-12	0	20	91	102	10	-14	2	20	25	22	25	-4	0	21	196	208	5
-11	0	20	108	102	8	-13	2	20	287	289	4	-3	0	21	274	254	19
-10	0	20	41	38	30	-12	2	20	88	85	9	-2	0	21	9	19	9
-9	0	20	125	139	7	-11	2	20	80	89	11	-1	0	21	196	164	6
-8	0	20	225	262	9	-10	2	20	13	33	13	0	0	21	25	22	24
-7	0	20	98	99	10	-9	2	20	110	118	7	1	0	21	330	254	5
-6	0	20	149	148	7	-8	2	20	210	218	5	2	0	21	204	161	7
-5	0	20	154	161	9	-7	2	20	78	84	11	3	0	21	36	45	36
-4	0	20	58	66	23	-6	2	20	136	124	8	4	0	21	152	128	8
-3	0	20	47	18	22	-5	2	20	125	139	7	5	0	21	102	98	11
-2	0	20	51	14	26	-4	2	20	56	58	55	6	0	21	248	227	17
-1	0	20	138	118	8	-3	2	20	22	12	21	7	0	21	0	11	1
0	0	20	153	130	8	-2	2	20	41	13	19	8	0	21	120	109	16
1	0	20	109	82	13	-1	2	20	78	98	9	9	0	21	54	50	26
2	0	20	90	76	15	0	2	20	90	111	9	10	0	21	0	23	1
3	0	20	135	112	9	1	2	20	58	70	14	11	0	21	68	74	15
4	0	20	122	112	10	2	2	20	68	64	9	12	0	21	0	67	1
5	0	20	0	19	1	3	2	20	98	97	6	-16	1	21	122	125	16
6	0	20	136	129	8	4	2	20	99	99	6	-15	1	21	273	296	5
7	0	20	64	79	19	5	2	20	47	18	13	-14	1	21	197	187	12
8	0	20	0	13	1	6	2	20	118	111	4	-13	1	21	30	36	29
9	0	20	46	58	44	7	2	20	84	70	6	-12	1	21	95	98	11
10	0	20	56	68	21	8	2	20	33	8	22	-11	1	21	41	30	27
11	0	20	0	11	1	9	2	20	70	50	11	-10	1	21	24	5	23
12	0	20	0	50	1	10	2	20	103	58	19	-9	1	21	68	80	14
13	0	20	54	72	21	-11	3	20	30	4	30	-8	1	21	159	151	9
-16	1	20	74	61	19	-10	3	20	156	147	7	-7	1	21	114	124	14
-15	1	20	99	101	11	-9	3	20	119	101	13	-6	1	21	258	241	5
-14	1	20	51	33	29	-8	3	20	41	36	40	-5	1	21	202	193	5
-13	1	20	86	78	13	-7	3	20	180	176	9	-4	1	21	68	75	15
-12	1	20	49	58	16	-6	3	20	111	112	9	-3	1	21	0	5	1
-11	1	20	21	8	20	-5	3	20	88	89	10	-2	1	21	47	51	17
-10	1	20	207	212	4	-4	3	20	55	45	17	-1	1	21	330	337	7
-9	1	20	128	136	6	-3	3	20	19	7	19	0	1	21	53	31	15
-8	1	20	43	51	27	-2	3	20	134	129	8	1	1	21	192	190	4
-7	1	20	228	238	7	-1	3	20	111	114	9	2	1	21	0	6	1
-6	1	20	160	158	5	0	3	20	124	126	7	3	1	21	137	111	9
-5	1	20	117	128	8	1	3	20	55	32	15	4	1	21	169	151	11
-4	1	20	26	57	26	2	3	20	72	62	11	5	1	21	10	16	10
-3	1	20	0	8	1	3	3	20	55	7	16	6	1	21	134	117	20
-2	1	20	163	178	5	4	3	20	41	14	21	7	1	21	28	29	28
-1	1	20	158	164	5	5	3	20	35	17	34	8	1	21	53	57	16
0	1	20	160	167	5	6	3	20	38	19	31	9	1	21	0	37	1
1	1	20	43	51	21	7	3	20	43	36	9	10	1	21	0	4	1
2	1	20	83	84	8	8	3	20	82	58	12	11	1	21	65	62	39
3	1	20	0	3	1	-17	0	21	22	55	22	12	1	21	61	46	32
4	1	20	0	24	1	-16	0	21	55	28	29	-15	2	21	76	58	18
5	1	20	13	23	12	-15	0	21	69	68	15	-14	2	21	65	64	14
6	1	20	56	23	24	-14	0	21	73	73	14	-13	2	21	59	58	16
7	1	20	65	44	19	-13	0	21	68	67	15	-12	2	21	175	181	8

Table 2. Observed and calculated structure factors for Kl.41Sn2.96Bi7.63Se15. Page 22

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-11	2	21	187	201	5	5	0	22	110	90	13	-5	3	22	81	15	21
-10	2	21	0	6	1	6	0	22	234	202	7	-4	3	22	59	45	20
-9	2	21	71	69	12	7	0	22	236	206	9	-3	3	22	70	71	17
-8	2	21	253	242	6	8	0	22	50	47	36	-2	3	22	0	8	1
-7	2	21	157	138	7	9	0	22	44	55	43	-1	3	22	78	77	20
-6	2	21	25	11	24	10	0	22	41	28	40	0	3	22	243	248	16
-5	2	21	111	118	9	-15	1	22	95	79	17	1	3	22	45	13	38
-4	2	21	171	176	7	-14	1	22	69	70	18	2	3	22	73	68	10
-3	2	21	190	216	34	-13	1	22	57	20	3	3	3	22	69	46	15
-2	2	21	0	15	1	-12	1	22	0	6	1	4	3	22	54	8	26
-1	2	21	110	139	23	-11	1	22	127	122	6	-9	0	23	87	110	14
0	2	21	12	17	11	-10	1	22	32	21	31	-8	0	23	75	48	15
1	2	21	172	212	20	-9	1	22	60	49	26	-7	0	23	62	53	15
2	2	21	97	136	12	-8	1	22	259	249	7	-6	0	23	152	167	6
3	2	21	52	40	12	-7	1	22	143	138	12	-5	0	23	82	77	12
4	2	21	97	111	11	-6	1	22	56	54	25	-4	0	23	238	213	5
5	2	21	108	85	12	-5	1	22	19	26	18	-3	0	23	88	69	12
6	2	21	187	192	11	-4	1	22	58	56	15	-2	0	23	39	10	39
7	2	21	36	7	35	-3	1	22	96	101	8	-1	0	23	53	31	28
8	2	21	96	95	12	-2	1	22	0	13	1	0	0	23	103	76	15
9	2	21	66	42	24	-1	1	22	112	113	6	1	0	23	27	19	26
10	2	21	0	21	1	0	1	22	367	345	6	2	0	23	21	4	21
-10	3	21	0	8	1	1	1	22	29	19	28	3	0	23	67	57	20
-9	3	21	53	63	53	2	1	22	94	92	8	4	0	23	259	230	8
-8	3	21	111	111	9	3	1	22	77	65	10	5	0	23	37	10	37
-7	3	21	79	90	12	4	1	22	0	10	1	6	0	23	0	18	1
-6	3	21	182	178	6	5	1	22	45	24	22	7	0	23	15	17	14
-5	3	21	139	136	13	6	1	22	0	11	1	8	0	23	210	159	7
-4	3	21	75	58	12	7	1	22	22	21	21	9	0	23	22	56	21
-3	3	21	0	3	1	8	1	22	282	257	11	-15	1	23	107	118	18
-2	3	21	48	34	26	9	1	22	68	79	15	-14	1	23	55	55	30
-1	3	21	245	245	6	10	1	22	38	34	38	-13	1	23	173	199	7
0	3	21	36	24	36	-14	2	22	27	19	26	-12	1	23	186	186	8
1	3	21	134	141	7	-13	2	22	0	20	1	-11	1	23	105	96	9
2	3	21	55	4	17	-12	2	22	66	83	43	-10	1	23	136	134	12
3	3	21	82	82	9	-11	2	22	125	128	8	-9	1	23	0	23	1
4	3	21	107	112	6	-10	2	22	63	57	20	-8	1	23	30	7	25
5	3	21	33	8	32	-9	2	22	39	21	38	-7	1	23	35	5	35
6	3	21	123	88	16	-8	2	22	11	15	11	-6	1	23	115	117	10
7	3	21	96	72	11	-7	2	22	31	27	31	-5	1	23	121	125	9
-16	0	22	93	68	11	-6	2	22	114	114	12	-4	2	23	28	20	27
-15	0	22	45	18	44	-5	2	22	42	37	42	-3	1	23	43	45	21
-14	0	22	41	22	41	-4	2	22	138	136	10	-2	1	23	8	23	8
-9	0	22	0	15	1	-3	2	22	88	83	19	-1	1	23	38	32	28
-8	0	22	4	26	4	-2	2	22	0	3	1	0	1	23	96	72	7
-7	0	22	94	136	10	-1	2	22	57	113	57	1	1	23	123	133	6
-6	0	22	114	132	8	0	2	22	47	69	44	-2	1	23	117	127	80
-5	0	22	30	36	1	1	2	22	97	81	36	3	2	23	160	133	3
-4	0	22	183	165	16	2	2	22	60	13	37	4	1	23	113	97	11
-3	0	22	121	99	9	3	2	22	0	7	1	5	1	23	28	34	28
-2	0	22	49	4	28	4	2	22	111	113	22	6	1	23	55	49	18
-1	0	22	154	136	12	5	2	22	75	77	13	7	1	23	44	45	22
0	0	22	118	78	12	6	2	22	168	170	22	8	1	23	97	93	15
1	0	22	114	92	12	7	2	22	196	177	24	-14	2	23	69	59	23
2	0	22	20	27	19	8	2	22	27	27	20	-12	2	23	73	68	5
3	0	22	9	11	9	9	2	22	32	46	32	-12	2	23	29	41	28
4	0	22	160	133	7	-6	3	22	69	41	18	-11	2	23	116	126	11

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1159	1148	33	14	2	0	2664	2707	41	-16	0	1	759	803	69
3	0	0	962	1002	21	15	2	0	973	927	37	-15	0	1	1553	1512	21
4	0	0	1151	1099	24	16	2	0	2540	2486	41	-14	0	1	1921	1991	59
5	0	0	1373	1319	26	17	2	0	424	336	70	-13	0	1	217	150	216
6	0	0	1548	1611	29	18	2	0	1391	1344	50	-12	0	1	1742	1751	34
7	0	0	3510	3435	55	19	2	0	324	196	172	-11	0	1	2866	2957	47
8	0	0	6719	6780	101	20	2	0	970	916	76	-10	0	1	1347	1372	29
9	0	0	937	916	27	1	3	0	118	196	117	-9	0	1	1794	1833	33
10	0	0	583	513	32	2	3	0	161	221	90	-8	0	1	1561	1604	61
11	0	0	1455	1449	31	3	3	0	2357	2318	25	-7	0	1	224	188	24
12	0	0	300	301	55	4	3	0	5973	5901	54	-6	0	1	841	891	24
13	0	0	536	575	76	5	3	0	456	428	38	-5	0	1	1932	1939	33
14	0	0	3262	3246	80	6	3	0	1014	1005	28	-4	0	1	1408	1458	34
15	0	0	1035	1037	57	7	3	0	5788	5815	72	-3	0	1	612	569	31
16	0	0	2714	2887	72	8	3	0	137	131	137	-2	0	1	1060	1043	22
17	0	0	299	355	196	9	3	0	77	142	76	1	0	1	431	324	28
18	0	0	1448	1536	62	10	3	0	543	511	41	2	0	1	427	394	22
19	0	0	293	211	292	11	3	0	1867	1881	33	3	0	1	650	570	21
20	0	0	1094	1063	71	12	3	0	2117	2102	36	4	0	1	1399	1463	37
21	0	0	285	217	285	13	3	0	300	290	83	5	0	1	379	317	32
22	0	0	471	321	149	14	3	0	277	326	95	6	0	1	1407	1370	48
1	1	0	381	473	25	15	3	0	1694	1627	59	7	0	1	3779	3729	58
2	1	0	140	109	48	16	3	0	875	856	42	8	0	1	5303	5037	80
3	1	0	3658	3633	56	17	3	0	856	898	46	9	0	1	1193	1088	42
4	1	0	9129	9038	74	18	3	0	876	857	55	10	0	1	1289	1250	29
5	1	0	927	922	22	19	3	0	449	379	143	11	0	1	695	859	37
6	1	0	1381	1342	21	0	4	0	9606	9547	126	12	0	1	109	128	109
7	1	0	9264	8755	98	1	4	0	311	204	70	13	0	1	801	794	57
8	1	0	176	112	71	2	4	0	788	755	36	14	0	1	4791	4958	108
9	1	0	172	193	80	3	4	0	546	494	44	15	0	1	1917	1873	59
10	1	0	701	715	26	4	4	0	527	513	57	16	0	1	1386	1410	56
11	1	0	2534	2581	43	5	4	0	634	534	42	17	0	1	544	499	94
12	1	0	2808	2807	40	6	4	0	685	688	39	18	0	1	269	159	268
13	1	0	379	379	51	7	4	0	791	1748	33	20	0	1	309	364	226
14	1	0	399	399	50	8	4	0	3329	3414	58	21	0	1	0	259	1
15	1	0	2179	2179	35	9	4	0	282	271	137	22	0	1	871	873	88
16	1	0	1051	1096	44	10	4	0	0	209	1	-22	1	1	497	577	166
17	1	0	1286	1185	68	11	4	0	997	1000	50	-21	1	1	1411	1428	52
18	1	0	1217	1206	62	12	4	0	415	292	91	-20	1	1	453	162	159
19	1	0	391	407	102	13	4	0	309	308	119	-19	1	1	247	249	227
20	1	0	1003	1034	53	14	4	0	1759	1716	38	-18	1	1	1081	1100	48
21	1	0	1106	1143	74	15	4	0	533	688	105	-17	1	1	175	193	174
22	1	0	535	648	141	16	4	0	1637	1678	68	-16	1	1	570	540	61
1	2	0	017084	1647	210	1	5	0	125	37	125	-15	1	1	557	528	41
2	2	0	536	495	26	2	5	0	376	246	106	-14	1	1	170	202	170
3	2	0	1029	981	18	3	5	0	1265	1314	38	-13	1	1	1562	1552	30
4	2	0	783	778	18	4	5	0	3661	3474	49	-12	1	1	2467	2463	38
5	2	0	907	835	16	5	5	0	242	100	242	-11	1	1	1213	1189	55
6	2	0	1202	1219	16	6	5	0	1082	948	56	-10	1	1	742	770	37
7	2	0	213	276	71	7	5	0	3413	3229	59	-9	1	1	168	175	91
8	2	0	5321	5490	58	8	5	0	0	78	21	-8	1	1	1583	1579	35
9	2	0	656	650	29	-22	0	1	818	668	93	-7	1	1	2049	2005	26
10	2	0	414	400	41	-21	0	1	363	209	194	-6	1	1	1341	1433	21
11	2	0	1331	1298	26	-20	0	1	265	314	264	-5	1	1	1160	1164	19
12	2	0	364	308	50	-19	0	1	1180	1248	65	-4	1	1	4650	4661	38
13	2	0	472	481	40	-18	0	1	240	157	239	-3	1	1	754	781	13
						-17	0	1	606	688	77	-2	1	1	143	127	44

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 3

	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-1	0	2	179	134	45	12	1	2	1831	1817	31	-15	3	2	1140	1181	45	
0	0	2	183	227	88	13	1	2	1068	1047	29	-14	3	2	113	188	112	
1	0	2	910	862	32	14	1	2	2117	2125	41	-13	3	2	99	238	98	
2	0	2	648	499	27	15	1	2	815	837	34	-12	3	2	1802	1780	41	
3	0	2	272	216	36	16	1	2	1202	1210	43	-11	3	2	2009	1003	32	
4	0	2	832	797	36	17	1	2	350	387	106	-10	3	2	513	477	44	
5	0	2	1718	1728	30	18	1	2	286	95	126	-9	3	2	808	759	29	
6	0	2	407	400	32	19	1	2	413	387	101	-8	3	2	509	549	35	
7	0	2	1524	1496	66	20	1	2	901	894	58	-7	3	2	375	376	46	
8	0	2	736	699	36	21	1	2	2120	2037	53	-6	3	2	541	538	30	
9	0	2	1732	1664	57	22	1	2	605	528	149	-5	3	2	320	284	44	
10	0	2	1265	1237	29	-21	2	2	344	415	344	-4	3	2	2118	2094	21	
11	0	2	693	705	30	-20	2	2	619	559	88	-3	3	2	1299	1248	18	
12	0	2	215	209	89	-19	2	2	1964	2000	51	-2	3	2	356	531	25	
13	0	2	707	765	58	-18	2	2	477	519	91	-1	3	2	356	363	35	
14	0	2	2655	2773	68	-17	2	2	1036	1021	38	0	3	2	191	215	85	
15	0	2	593	653	75	-16	2	2	1128	1043	37	1	3	2	145	3	145	
16	0	2	1632	1670	58	-15	2	2	1446	1382	34	2	3	2	1604	1549	28	
17	0	2	235	273	234	-14	2	2	616	631	42	3	3	2	1385	1350	23	
18	0	2	1321	1355	60	-13	2	2	726	703	33	4	3	2	415	390	34	
19	0	2	1792	1897	66	-12	2	2	847	844	30	5	3	2	72	168	72	
20	0	2	495	585	118	-11	2	2	795	778	29	6	3	2	163	173	163	
21	0	2	1054	980	79	-10	2	2	1858	1872	32	7	3	2	1414	1423	29	
-22	1	2	1493	1516	77	-9	2	2	339	257	44	8	3	2	461	474	43	
-21	1	2	408	428	115	-8	2	2	1680	1743	25	9	3	2	1294	1296	30	
-20	1	2	385	361	125	-7	2	2	1180	1178	23	10	3	2	529	523	43	
-19	1	2	449	387	87	-6	2	2	295	213	31	11	3	2	281	236	94	
-18	1	2	1366	1397	61	-5	2	2	1151	1066	16	12	3	2	1423	1391	32	
-17	1	2	1583	1535	45	-4	2	2	1013	1028	16	13	3	2	735	755	71	
-16	1	2	717	714	82	-3	2	2	183	97	48	14	3	2	1695	1642	35	
-15	1	2	1523	1540	31	-2	2	2	509	466	18	15	3	2	643	626	48	
-14	1	2	357	333	68	-1	2	2	225	146	43	16	3	2	1048	1050	39	
-13	1	2	282	324	60	0	2	2	242	204	81	17	3	2	346	241	119	
-12	1	2	2189	2158	34	1	2	2	744	771	24	18	3	2	69	51	68	
-11	1	2	1241	1259	28	2	2	2	393	338	37	19	3	2	269	328	268	
-10	1	2	688	668	59	3	2	2	234	252	47	-14	4	2	511	500	61	
-9	1	2	1141	1139	23	4	2	2	812	744	17	-13	4	2	512	455	57	
-8	1	2	813	783	23	5	2	2	1419	1393	17	-12	4	2	616	535	49	
-7	1	2	422	409	29	6	2	2	351	291	31	-11	4	2	581	607	52	
-6	1	2	649	656	22	7	2	2	1337	1267	14	-10	4	2	1250	1464	10	
-5	1	2	444	389	25	8	2	2	603	690	34	-9	4	2	201	198	193	
-4	1	2	2872	2937	29	9	2	2	1495	1542	55	-8	4	2	1177	1168	33	
-3	1	2	1707	1676	20	10	2	2	984	978	30	-7	4	2	714	713	40	
-2	1	2	887	841	13	11	2	2	603	550	40	-6	4	2	263	100	208	
-1	1	2	722	663	16	12	2	2	180	175	156	-5	4	2	933	951	34	
0	1	2	328	305	33	13	2	2	729	662	33	-4	4	2	556	504	34	
1	1	2	210	204	52	14	2	2	2471	2409	34	-3	4	2	142	70	142	
2	1	2	1961	1961	22	15	2	2	489	489	10	-2	4	2	362	363	109	
3	1	2	2202	2267	22	16	2	2	1534	1469	40	-1	4	2	0	132	10	
4	1	2	704	694	17	17	2	2	247	227	247	0	4	2	164	166	163	
5	1	2	321	297	28	18	2	2	1256	1195	65	1	4	2	533	583	43	
6	1	2	378	303	19	19	2	2	1690	1682	67	2	4	2	200	201	199	
7	1	2	2091	2003	35	20	2	2	519	499	127	3	4	2	295	253	103	
8	1	2	574	556	20	-19	3	2	372	345	215	4	4	2	654	622	48	
9	1	2	1807	1807	35	-18	3	2	1061	1061	50	5	4	2	967	911	47	
10	1	2	807	738	25	-17	3	2	1250	1227	67	6	4	2	187	139	187	
11	1	2	247	236	63	-16	3	2	569	563	52	7	4	2	808	811	36	

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	3	3	3955	3844	33	-5	5	3	636	547	60	-19	1	4	539	499	75
-2	3	3	121	77	87	-4	5	3	963	932	42	-18	1	4	755	762	55
-1	3	3	1199	1149	27	-3	5	3	2158	2083	39	-17	1	4	2125	2171	63
0	3	3	1025	1177	27	-2	5	3	355	153	105	-16	1	4	1128	1158	44
1	3	3	438	363	44	-1	5	3	687	672	75	-15	1	4	217	88	110
2	3	3	238	168	108	0	5	3	798	720	68	-14	1	4	341	407	64
3	3	3	3097	3107	54	1	5	3	224	178	223	-13	1	4	1497	1454	30
4	3	3	658	648	25	2	5	3	1936	1807	48	-12	1	4	2414	2425	54
5	3	3	75	104	78	3	5	3	288	334	114	-11	1	4	349	284	54
6	3	3	117	98	117	4	5	3	194	27	194	-10	1	4	799	807	37
7	3	3	2133	2207	40	5	5	3	256	112	164	-9	1	4	721	641	40
8	3	3	1352	1328	51	6	5	3	1326	1213	50	-8	1	4	3299	3387	44
9	3	3	602	601	37	7	5	3	732	745	92	-7	1	4	1004	940	18
10	3	3	891	847	40	-22	0	4	362	151	295	-6	1	4	680	660	20
11	3	3	3521	3586	48	-21	0	4	1237	1252	75	-5	1	4	317	284	26
12	3	3	961	930	34	-20	0	4	1589	1627	69	-4	1	4	3654	3606	31
13	3	3	185	73	184	-19	0	4	1207	1207	70	-3	1	4	40690	9799	87
14	3	3	478	470	75	-18	0	4	518	629	103	-2	1	4	238	229	30
15	3	3	1827	1782	36	-17	0	4	507	782	95	-1	1	4	1153	1107	15
16	3	3	1852	1857	37	-15	0	4	2459	2442	69	0	1	4	924	896	22
17	3	3	949	882	57	-13	0	4	47	72	47	1	1	4	243	205	52
18	3	3	1004	1001	74	-12	0	4	554	555	43	2	1	4	1362	1363	19
19	3	3	805	776	87	-11	0	4	183	87	157	3	1	4	401	284	23
-14	4	3	830	812	44	-10	0	4	6301	6132	96	4	1	4	283	156	31
-13	4	3	961	993	40	-9	0	4	1231	1213	31	5	1	4	1435	1522	32
-12	4	3	1350	1298	43	-8	0	4	3391	3255	99	6	1	4	1027	1032	17
-11	4	3	2032	1889	35	-7	0	4	283	221	71	7	1	4	729	728	19
-10	4	3	3247	3296	43	-6	0	4	1055	984	21	8	1	4	579	552	25
-9	4	3	405	409	63	-5	0	4	1394	1261	22	9	1	4	951	935	19
-8	4	3	200	256	169	-4	0	4	2135	2072	41	10	1	4	238	137	63
-7	4	3	251	252	107	-3	0	4	490	352	28	11	1	4	2592	2582	32
-6	4	3	147	132	147	-2	0	4	320	364	37	12	1	4	292	271	58
-5	4	3	541	575	47	-1	0	4	1850	1913	82	13	1	4	711	667	34
-4	4	3	1740	1691	61	0	0	4	545	550	45	14	1	4	2551	2569	38
-3	4	3	1234	1234	134	1	0	4	782	831	37	15	1	4	569	560	51
-2	4	3	661	618	41	2	0	4	125	92	124	16	1	4	1287	1260	43
-1	4	3	1436	1377	28	3	0	4	3475	3637	47	17	1	4	302	261	120
0	4	3	533	573	43	4	0	4	9797	9060	119	18	1	4	735	715	59
1	4	3	367	455	85	5	0	4	355	274	43	19	1	4	47	311	47
2	4	3	170	66	170	6	0	4	752	637	36	20	1	4	848	765	97
3	4	3	1418	1352	57	7	0	4	1303	1281	28	21	1	4	936	1117	88
4	4	3	2172	2130	56	8	0	4	215	239	64	-21	2	4	1037	1064	93
5	4	3	1060	1076	47	9	0	4	501	473	37	-20	2	4	1435	1446	53
6	4	3	128	224	128	10	0	4	3326	3449	134	-19	2	4	1061	1072	56
7	4	3	2470	2509	61	11	0	4	1304	1329	79	-18	2	4	534	519	88
8	4	3	112	71	112	12	0	4	2194	2243	39	-17	2	4	410	436	69
9	4	3	911	917	43	13	0	4	517	549	70	-16	2	4	1508	1460	44
10	4	3	290	205	98	14	0	4	707	614	66	-15	2	4	2154	2087	37
11	4	3	1109	1107	36	15	0	4	2047	2210	60	-14	2	4	1221	1194	33
12	4	3	301	368	93	17	0	4	411	399	117	-13	2	4	202	75	201
13	4	3	1215	1186	37	18	0	4	3096	3137	80	-12	2	4	521	477	40
14	4	3	1060	1076	47	19	0	4	1386	1513	63	-11	2	4	690	794	101
15	4	3	536	451	116	20	0	4	1852	1933	67	-10	2	4	4888	4994	54
-9	5	3	311	399	311	21	0	4	333	353	333	-9	2	4	970	957	30
-8	5	3	1398	1326	67	-22	1	4	760	877	99	-8	2	4	2719	2767	33
-7	5	3	249	344	170	-21	1	4	731	703	71	-7	2	4	163	238	80
-6	5	3	377	406	87	-20	1	4	1077	1142	55	-6	2	4	860	852	15

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 7

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	1	5	1952	1990	35	13	2	5	678	630	39	-3	4	5	228	214	121
-1	1	5	2504	2524	25	14	2	5	740	711	38	-2	4	5	389	316	74
0	1	5	416	353	24	15	2	5	183	79	183	-1	4	5	1866	1810	29
1	1	5	1046	1065	23	16	2	5	866	845	63	0	4	5	654	647	34
2	1	5	368	365	28	17	2	5	1260	1216	41	1	4	5	1454	108	64
3	1	5	1680	1700	19	18	2	5	1242	1206	67	2	4	5	523	499	47
4	1	5	241	241	36	19	2	5	240	272	239	3	4	5	839	821	34
5	1	5	185	74	50	-19	3	5	263	270	144	4	4	5	3106	3168	50
6	1	5	2812	2791	29	-18	3	5	691	699	45	5	4	5	622	665	42
7	1	5	281	229	35	-17	3	5	686	686	42	6	4	5	1634	1678	38
8	1	5	487	453	25	-16	3	5	300	191	87	7	4	5	253	180	175
9	1	5	1126	1079	19	-15	3	5	2071	2079	28	8	4	5	397	373	58
10	1	5	2740	2788	33	-14	3	5	1317	1284	35	9	4	5	247	205	99
11	1	5	5001	4923	58	-13	3	5	422	427	47	10	4	5	1080	1082	35
12	1	5	447	458	43	-12	3	5	82	80	82	11	4	5	252	192	114
13	1	5	1340	1315	37	-11	3	5	110	120	109	12	4	5	147	86	147
14	1	5	1265	1228	37	-10	3	5	156	142	156	13	4	5	462	423	72
15	1	5	338	348	74	-9	3	5	628	628	28	14	4	5	465	454	117
16	1	5	246	148	144	-8	3	5	1841	1765	26	-9	5	5	344	309	210
17	1	5	888	791	80	-7	3	5	623	543	35	-8	5	5	1334	1210	49
18	1	5	436	459	83	-6	3	5	357	334	56	-7	5	5	507	402	71
19	1	5	692	640	63	-5	3	5	375	328	53	-6	5	5	435	263	81
20	1	5	583	552	79	-4	3	5	1528	1503	24	-5	5	5	367	801	107
-21	2	5	716	607	138	-3	3	5	3096	2980	29	-4	5	5	899	801	46
-20	2	5	1177	1155	58	-2	3	5	1344	1318	24	-3	5	5	1605	1554	38
-19	2	5	1688	1617	51	-1	3	5	1831	1772	26	-2	5	5	728	775	77
-18	2	5	397	362	113	0	3	5	197	212	111	-1	5	5	1210	1125	80
-17	2	5	338	348	85	1	3	5	704	627	36	2	5	5	445	428	93
-16	2	5	671	639	44	2	3	5	880	478	42	3	5	5	839	814	57
-15	2	5	1111	1116	35	3	3	5	1258	1266	29	4	5	5	182	120	181
-14	2	5	230	65	113	4	3	5	209	179	69	5	5	5	152	40	151
-13	2	5	155	235	154	5	3	5	90	125	90	6	5	5	1199	1234	51
-12	2	5	222	227	97	6	3	5	1953	1991	26	-22	0	6	496	158	143</

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 9

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	5	6	791	845	64	-16	1	7	1808	1776	69	-1	2	7	6740	6829	67
-3	5	6	134	121	134	-15	1	7	422	457	44	0	2	7	180	183	67
-2	5	6	668	621	123	-14	1	7	517	448	37	1	2	7	566	511	34
-1	5	6	1010	956	52	-13	1	7	7593	7435	76	2	2	7	1382	1431	27
0	5	6	1175	1161	50	-12	1	7	2788	2822	32	3	2	7	897	897	25
1	5	6	240	187	244	-11	1	7	510	521	32	4	2	7	1767	1794	25
2	5	6	733	737	91	-10	1	7	1013	964	41	5	2	7	444	427	33
3	5	6	1659	1777	67	-9	1	7	1055	1061	39	6	2	7	2346	2414	25
4	5	6	493	514	159	-8	1	7	610	676	26	7	2	7	1651	1699	41
5	5	6	919	923	93	-7	1	7	2188	2203	24	8	2	7	2151	2110	31
6	5	6	2974	3091	83	-6	1	7	2279	2237	25	9	2	7	872	850	29
7	5	6	1069	1011	74	-5	1	7	7827	7540	70	10	2	7	1719	1767	31
8	5	6	392	366	143	-4	1	7	1755	1707	25	11	2	7	1287	1260	36
9	5	6	2183	2274	69	-3	1	7	1591	1588	18	12	2	7	1498	1471	40
10	5	6	2004	2079	67	-2	1	7	162	37	68	13	2	7	1393	1402	31
11	5	6	0	92	1	-1	1	7	390	340	24	14	2	7	1508	1458	33
12	5	6	406	403	114	0	1	7	581	512	25	15	2	7	1110	1077	35
13	5	6	812	807	72	1	1	7	684	684	65	16	2	7	384	429	35
14	5	6	1404	1312	26	2	1	7	2309	2474	26	17	2	7	1541	1519	43
15	5	6	1047	1081	26	3	1	7	6137	6321	55	18	2	7	926	881	77
16	5	6	2291	2247	59	4	1	7	416	360	59	19	3	7	160	53	159
17	5	6	5671	5451	64	5	1	7	591	564	22	20	3	7	240	136	197
18	5	6	3193	3103	43	6	1	7	1539	1604	33	21	3	7	288	163	113
19	5	6	2315	2238	31	7	1	7	1252	1505	34	22	3	7	1369	1370	31
20	5	6	6627	6634	77	8	1	7	1090	1046	19	23	3	7	329	382	69
21	5	6	1064	1107	24	9	1	7	928	927	20	24	3	7	342	294	60
22	5	6	253	157	64	10	1	7	3010	3027	36	25	3	7	5235	5514	61
23	5	6	2657	2831	83	11	1	7	1711	1762	26	26	3	7	1976	2074	33
24	5	6	2720	2813	115	12	1	7	693	699	33	27	3	7	480	469	45
25	5	6	8127	8970	172	13	1	7	275	182	72	28	3	7	735	712	33
26	5	6	152	161	151	14	1	7	1709	1694	32	29	3	7	685	681	33
27	5	6	652	699	48	15	1	7	1838	1899	48	30	3	7	387	327	55
28	5	6	1717	1822	31	16	1	7	571	538	63	31	3	7	1645	1640	30
29	5	6	1082	1042	21	17	1	7	888	919	51	32	3	7	1569	1516	30
30	5	6	2344	2358	32	18	1	7	740	717	75	33	3	7	5256	5220	61
31	5	6	590	540	31	19	1	7	388	450	181	34	3	7	1069	1049	27
32	5	6	2754	2861	56	20	1	7	1447	1454	70	35	3	7	841	809	26
33	5	6	4483	4483	146	21	2	7	758	789	130	36	3	7	164	25	163
34	5	6	2411	2469	109	22	2	7	2800	2738	59	37	3	7	425	358	39
35	5	6	1006	1044	29	23	2	7	919	890	62	38	3	7	303	233	53
36	5	6	1999	2019	94	24	2	7	271	256	114	39	3	7	4545	4670	54
37	5	6	1476	1469	33	25	2	7	2003	1980	30	40	3	7	1799	1780	31
38	5	6	1728	1728	42	26	2	7	1866	1853	29	41	3	7	4430	4432	53
39	5	6	1389	1527	51	27	2	7	1456	1386	145	42	3	7	1325	1258	48
40	5	6	1610	1637	55	28	2	7	396	363	49	43	3	7	288	271	59
41	5	6	1355	1308	55	29	2	7	693	703	40	44	3	7	948	955	26
42	5	6	741	495	119	30	2	7	1220	1156	26	45	3	7	1162	1131	28
43	5	6	1692	1722	62	31	2	7	993	986	31	46	3	7	833	848	33
44	5	6	939	953	73	32	2	7	1781	1766	23	47	3	7	606	615	40
45	5	6	235	144	234	33	2	7	4422	4532	42	48	3	7	2297	2290	46
46	5	6	444	502	154	34	2	7	2493	2507	27	49	3	7	1283	1345	56
47	5	6	169	1	1	35	2	7	1796	1867	23	50	3	7	532	487	173
48	5	6	1401	1449	53	36	2	7	5351	5342	45	51	3	7	204	198	173
49	5	6	771	807	65	37	2	7	976	939	19	52	3	7	1275	1316	36
50	5	6	117	97	116	38	2	7	115	73	115	53	3	7	1468	1435	36
51	5	6	117	246	117	39	2	7	2301	2300	24	54	3	7	460	386	69
52	5	6	139	170	138	40	2	7	2133	2113	23	55	3	7	673	673	84

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 11

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-10	3	8	673	680	36	-4	5	8	658	677	80	-13	1	9	925	897	28
-9	3	8	591	641	40	-3	5	8	176	313	176	-12	1	9	215	256	128
-8	3	8	617	686	40	-2	5	8	253	111	253	-11	1	9	95	99	94
-7	3	8	515	496	43	-1	5	8	811	938	97	-10	1	9	1664	1651	26
-6	3	8	1159	1124	42	2	5	8	1446	1394	50	-9	1	9	2915	3029	58
-5	3	8	2492	2472	35	3	5	8	1765	1646	70	-8	1	9	1159	1179	43
-4	3	8	1403	1330	25	4	5	8	341	89	235	-7	1	9	850	842	23
-3	3	8	348	351	49	5	5	8	772	663	97	-6	1	9	255	128	78
-2	3	8	170	125	170	6	5	8	431	269	179	-5	1	9	1928	1929	23
-1	3	8	1715	1686	26	-20	0	9	0	173	1	-4	1	9	2167	2156	28
0	3	8	1599	1591	25	-19	0	9	246	188	245	-3	1	9	532	549	32
1	3	8	4109	4133	44	-18	0	9	503	478	135	-2	1	9	489	473	29
2	3	8	2520	2527	36	-16	0	9	969	944	73	-1	1	9	1042	1074	34
3	3	8	2884	2959	39	-15	0	9	942	880	72	0	1	9	1654	1701	27
4	3	8	144	142	143	-14	0	9	1200	1083	65	1	1	9	4496	4703	52
5	3	8	1054	1059	25	-13	0	9	2614	2534	73	2	1	9	2843	3001	73
6	3	8	519	561	35	-12	0	9	949	531	68	3	1	9	2192	2250	32
7	3	8	126	61	125	-11	0	9	2367	2228	40	4	1	9	753	762	21
8	3	8	760	775	35	-10	0	9	363	370	53	5	1	9	444	426	25
9	3	8	868	881	33	-9	0	9	2122	2048	31	6	1	9	268	234	41
10	3	8	2039	2100	51	-8	0	9	1007	977	32	7	1	9	755	729	28
11	3	8	2840	2920	42	-7	0	9	371	391	48	8	1	9	1393	1413	23
12	3	8	419	473	61	-6	0	9	4520	4422	53	9	1	9	633	659	25
13	3	8	765	789	41	-5	0	9	2176	2144	34	10	1	9	1401	1325	29
14	3	8	341	371	78	-4	0	9	1807	1882	35	11	1	9	1002	1019	26
15	3	8	1433	1498	36	-3	0	9	1514	1581	41	12	1	9	217	194	85
16	3	8	1113	1104	39	-2	0	9	1999	2134	76	13	1	9	1045	1091	31
17	3	8	187	156	187	-1	0	9	426	432	75	14	1	9	1741	1737	39
18	3	8	0	168	1	-0	0	9	341	280	90	15	1	9	3014	2919	52
19	3	8	575	565	58	-1	0	9	1003	1128	46	16	1	9	1009	1030	63
20	3	8	988	904	42	2	0	9	355	302	63	17	1	9	761	764	78
21	3	8	1205	1147	38	3	0	9	3414	3247	54	18	1	9	592	601	31
22	3	8	903	870	48	4	0	9	1250	1254	24	19	1	9	1343	1304	68
23	3	8	918	921	40	5	0	9	163	55	106	20	1	9	303	148	303
24	3	8	128	80	127	6	0	9	1469	1486	32	21	1	9	459	437	84
25	3	8	1259	1247	41	7	0	9	2415	2473	42	22	1	9	1216	1179	31
26	3	8	2944	2888	103	8	0	9	4986	5078	116	23	1	9	938	863	32
27	3	8	1434	1352	34	9	0	9	834	802	33	24	1	9	830	809	34
28	3	8	455	455	103	10	0	9	1813	1810	30	25	1	9	965	981	29
29	3	8	154	241	155	11	0	9	315	315	1	26	1	9	2139	2139	21
30	3	8	1359	1294	44	12	0	9	935	991	34	27	1	9	423	397	48
31	3	8	2617	2587	39	13	0	9	868	882	56	28	1	9	1977	1965	28
32	3	8	235	186	235	14	0	9	419	470	96	29	1	9	489	366	40
33	3	8	912	920	39	15	0	9	1545	1611	57	30	1	9	1725	1736	24
34	3	8	659	657	57	16	0	9	942	958	65	31	2	9	828	820	24
35	3	8	1053	1033	37	17	0	9	712	757	77	32	2	9	265	266	57
36	3	8	220	260	118	18	0	9	491	544	89	33	2	9	3512	3474	31
37	3	8	544	561	47	19	0	9	272	252	271	34	2	9	2701	2744	35
38	3	8	2207	2239	37	20	0	9	940	972	79	35	2	9	1609	1602	21
39	3	8	1566	1575	59	21	1	9	537	619	94	36	2	9	1286	1293	23
40	3	8	2567	2557	66	22	1	9	193	85	193	37	2	9	1644	1680	27
41	3	8	791	784	41	23	1	9	1551	1513	72	38	2	9	343	257	38
42	3	8	317	344	121	24	1	9	1856	1810	50	39	2	9	189	171	70
43	3	8	90	90	121	25	1	9	1516	1516	1	40	2	9	913	918	23
44	3	8	543	648	172	26	1	9	1093	1040	64	41	2	9	290	374	45
45	3	8	702	631	77	27	1	9	178	153	178	42	2	9	2580	2662	35
46	3	8	1471	1464	54	28	1	9	804	822	30	43	2	9	995	1003	24

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 13

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-17	2	10	1045	1085	33	3	3	10	1603	1659	32	-11	0	11	1461	1418	42
-16	2	10	2504	2580	33	4	3	10	1150	1149	28	-10	0	11	1373	1320	29
-15	2	10	1141	1181	32	5	3	10	270	309	63	-9	0	11	698	643	30
-14	2	10	768	812	35	6	3	10	842	897	27	-8	0	11	350	281	60
-13	2	10	2185	2247	30	7	3	10	866	876	34	-7	0	11	867	879	30
-12	2	10	1086	1081	28	8	3	10	1722	1721	40	-6	0	11	1504	1477	28
-11	2	10	743	783	32	9	3	10	2122	2111	44	-5	0	11	1741	1760	36
-10	2	10	1400	1440	26	10	3	10	198	104	159	-4	0	11	1301	1303	35
-9	2	10	909	900	29	11	3	10	382	260	70	-3	0	11	2471	2594	57
-8	2	10	211	190	75	12	3	10	764	778	41	-2	0	11	2686	3059	69
-7	2	10	2119	2126	23	13	3	10	221	228	156	-1	0	11	217	98	216
-6	2	10	197	9	81	14	3	10	1074	1102	38	0	0	11	435	497	87
-5	2	10	2064	2071	30	15	3	10	174	119	173	1	0	11	650	570	83
-4	2	10	935	972	24	16	3	10	288	77	287	2	0	11	1672	1756	64
-3	2	10	387	361	38	17	3	10	554	532	140	3	0	11	987	1001	30
-2	2	10	2318	2315	36	18	3	10	1478	1541	37	4	0	11	482	475	34
-1	2	10	2428	2454	33	19	3	10	811	684	54	5	0	11	423	365	41
0	2	10	1200	1197	26	20	3	10	603	689	54	6	0	11	1312	1267	33
1	2	10	363	303	54	21	3	10	1040	1022	48	7	0	11	2094	2062	39
2	2	10	2670	2683	37	22	3	10	601	573	54	8	0	11	312	288	67
3	2	10	941	919	30	23	3	10	0	121	1	9	0	11	1334	1308	34
4	2	10	1936	2017	27	24	3	10	1341	1345	53	10	0	11	1885	1895	66
5	2	10	1084	1081	22	25	3	10	0	32	1	11	0	11	1351	1362	40
6	2	10	1355	1362	37	26	3	10	1324	1378	38	12	0	11	699	708	42
7	2	10	319	311	52	27	3	10	726	700	82	13	0	11	1741	1794	57
8	2	10	348	321	53	28	3	10	429	233	102	14	0	11	1778	1871	59
9	2	10	1416	1464	30	29	3	10	2252	2248	46	15	0	11	1655	1600	59
10	2	10	339	399	57	30	3	10	1659	1688	48	16	0	11	1144	1222	66
11	2	10	902	917	33	31	3	10	772	794	47	17	0	11	0	62	1
12	2	10	1293	1356	32	32	3	10	270	220	117	18	0	11	586	485	116
13	2	10	1196	1194	33	33	3	10	1766	1770	54	19	0	11	1449	1389	69
14	2	10	154	94	154	34	3	10	704	785	54	20	1	11	129	386	129
15	2	10	226	274	225	35	4	10	1507	1553	29	21	0	11	932	986	61
16	2	10	1205	1221	43	36	4	10	746	745	40	22	0	11	1454	1526	51
17	2	10	1149	1199	62	37	4	10	2051	2121	51	23	1	11	437	326	105
18	2	10	688	723	101	38	4	10	235	249	133	24	1	11	219	170	218
19	2	10	324	160	105	39	4	10	289	175	127	25	1	11	329	323	121
20	2	10	1061	1036	42	40	4	10	947	1038	46	26	1	11	606	589	53
21	2	10	508	517	62	41	4	10	356	300	78	27	1	11	1707	1710	28
22	2	10	232	206	165	42	4	10	694	684	59	28	1	11	537	596	41
23	2	10	1376	1415	36	43	4	10	1057	1026	63	29	1	11	462	470	26
24	2	10	181	111	180	44	4	10	864	850	68	30	1	11	1474	1548	41
25	2	10	986	1016	32	45	4	10	1087	1125	61	31	1	11	1381	1346	26
26	2	10	631	600	44	46	4	10	1068	1041	80	32	1	11	3097	3110	64
27	2	10	3844	3939	48	47	4	10	1187	1180	76	33	1	11	912	893	37
28	2	10	300	194	77	48	4	10	1082	1102	79	34	1	11	1525	1595	68
29	2	10	447	421	52	49	4	10	908	975	87	35	1	11	688	634	28
30	2	10	1393	1380	31	50	4	10	682	660	121	36	1	11	453	489	35
31	2	10	1946	1954	42	51	4	10	589	589	135	37	1	11	890	1017	85
32	2	10	1021	1009	27	52	4	10	1009	1075	83	38	1	11	1372	1324	121
33	2	10	1033	1055	56	53	4	10	979	920	84	39	1	11	556	618	45
34	2	10	1774	1725	32	54	4	10	1752	1733	69	40	1	11	376	326	52
35	2	10	1763	1744	32	55	4	10	1958	1997	67	41	1	11	218	274	92
36	2	10	1970	2001	34	56	4	10	350	418	154	42	1	11	1253	1359	28
37	2	10	668	716	42	57	4	10	337	149	168	43	1	11	2384	2528	63
38	2	10	1844	1882	33	58	4	10	334	323	117	44	1	11	296	278	52
												45	1	11	1370	1413	22

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 14

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s		
5	1	11	3673	3830	48	-13	3	11	604	569	59	0	5	11	355	170	355		
6	1	11	2575	2653	63	-12	3	11	637	567	71	2	5	11	1004	985	90		
7	1	11	662	619	26	-11	3	11	1044	1065	31	3	5	11	0	264	2		
8	1	11	71	44	71	-10	3	11	908	911	36	4	5	11	567	637	95		
9	1	11	352	342	47	-9	3	11	2274	2301	35	-21	0	12	1233	1199	81		
10	1	11	2331	2360	44	-8	3	11	608	631	38	-20	0	12	1492	1579	75		
11	1	11	1845	1834	36	-7	3	11	1231	1222	40	-19	0	12	269	260	268		
12	0	0	75	1	1	-6	3	11	455	431	50	-18	0	12	0	254	1		
13	1	11	2349	2353	44	-5	3	11	484	469	69	-16	0	12	2562	2550	75		
14	1	11	132	151	131	-4	3	11	550	541	46	-15	0	12	1267	1159	71		
15	1	11	1167	1147	39	-3	3	11	213	62	137	-13	0	12	2144	2114	69		
16	1	11	494	446	99	-2	3	11	496	477	52	-12	0	12	397	412	97		
17	1	11	1376	1393	66	-1	3	11	513	513	325	-11	0	12	137	91	137		
18	1	11	856	884	78	0	3	11	223	240	222	-10	0	12	660	652	38		
19	1	11	653	540	86	1	3	11	801	797	38	-9	0	12	1306	1254	30		
-2	1	11	1809	1794	62	2	3	11	1809	1789	33	-8	0	12	408	363	41		
-19	2	11	883	803	63	3	3	11	313	295	81	-7	0	12	3368	3364	42		
-17	2	11	1492	1480	31	4	3	11	1009	1009	29	-6	0	12	990	1029	29		
-16	2	11	1571	1613	33	5	3	11	2794	2849	39	-5	0	12	305	306	66		
-15	2	11	1729	1740	41	6	3	11	1968	1959	32	-4	0	12	775	838	30		
-14	2	11	441	414	52	7	3	11	491	536	44	-2	0	12	4982	5733	110		
-13	2	11	115	134	115	8	3	11	76	34	75	0	0	12	1475	1592	54		
-12	2	11	414	322	51	9	3	11	231	237	103	1	0	12	199	95	198		
-10	2	11	1141	1120	32	10	3	11	1868	1916	48	2	0	12	1731	1767	94		
-9	2	11	1125	1079	27	11	3	11	1481	1495	34	3	0	12	1410	1370	33		
-8	2	11	575	579	37	12	3	11	26	45	26	4	0	12	462	407	49		
-7	2	11	233	266	103	13	3	11	1813	1800	43	5	0	12	1971	2000	65		
-6	2	11	706	721	32	14	3	11	268	141	144	6	0	12	2362	2327	53		
-5	2	11	1082	1099	26	15	3	11	914	946	54	7	0	12	452	479	49		
-4	2	11	1468	1469	30	-13	4	0	0	102	1	8	0	12	1196	1118	56		
-3	2	11	1036	1002	25	-12	4	0	11	316	281	9	0	12	1495	1469	34		
-2	2	11	2070	2050	33	-11	3	11	550	595	74	10	0	12	1525	1518	69		
-1	2	11	2593	2605	36	-10	3	11	586	651	114	11	0	12	1810	1812	47		
0	2	11	57	78	97	-9	4	0	11	448	450	92	12	0	12	2682	2755	47	
1	2	11	490	490	47	-8	4	0	11	386	234	179	13	0	12	2302	2318	64	
2	1	11	499	487	48	-7	4	0	11	460	451	192	14	0	12	1981	1992	61	
3	2	11	1487	1524	39	-6	4	0	11	569	497	70	15	0	12	250	114	250	
4	2	11	639	694	40	-5	4	0	11	954	952	54	16	0	12	752	724	76	
5	2	11	466	459	38	-4	4	0	11	513	528	79	17	0	12	6	124	6	
6	2	11	343	341	47	-3	4	0	11	1236	1237	118	18	0	12	693	693	118	
7	2	11	1086	1086	25	-2	4	0	11	1712	1761	60	-21	2	12	299	124	292	
8	2	11	1737	1775	27	-1	4	0	11	118	45	118	-20	1	12	1713	1167	59	
9	2	11	216	157	101	0	4	0	11	570	437	97	-19	1	12	399	455	259	
10	2	11	1109	1107	31	1	4	0	11	338	322	97	-18	1	12	357	264	133	
11	2	11	1583	1622	31	2	4	0	11	1079	1104	48	-17	1	12	1027	980	82	
12	2	11	1187	1174	40	3	4	0	11	497	220	192	-16	1	12	1579	1549	120	
13	2	11	673	635	40	4	4	0	11	445	395	95	-15	1	12	829	833	45	
14	2	11	1520	1569	37	5	4	0	11	249	257	118	-14	1	12	1097	1107	98	
15	2	11	1594	1601	35	6	4	0	11	747	739	42	-13	1	12	593	557	39	
16	2	11	1410	1416	41	7	4	0	11	1117	1209	57	-12	1	12	300	274	66	
17	2	11	1000	1076	45	8	4	0	11	135	78	134	-11	1	12	899	876	30	
18	2	11	326	64	213	9	4	0	11	731	782	46	-10	1	12	2135	2170	29	
-18	3	11	210	197	209	10	4	0	11	1008	1110	46	-9	1	12	3082	3129	94	
-17	3	11	254	145	201	-4	5	4	0	11	474	179	211	-8	1	12	1112	1156	61
-16	3	11	272	231	142	-3	5	4	0	11	164	163	207	-7	1	12	140	134	140
-15	3	11	446	429	67	-2	5	4	0	11	356	477	118	-6	1	12	405	377	118
-14	3	11	1205	1274	37	-1	5	4	0	11	407	88	263	-5	1	12	408	400	401

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 17

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-4	1	14	946	964	32	15	2	14	220	46	219	-14	0	15	778	631	95
-3	1	14	537	551	48	16	2	14	1147	1153	63	-13	0	15	939	905	72
-2	1	14	966	973	34	-17	3	14	905	914	59	-12	0	15	2977	2711	164
-1	1	14	869	905	35	-16	3	14	982	901	48	-11	0	15	3363	3130	84
0	1	14	1367	1326	93	-15	3	14	363	550	93	-10	0	15	352	375	143
1	14	3633	3775	61	-14	3	14	983	1029	42	-9	0	15	761	752	37	
2	1	14	2013	2127	43	-13	3	14	1177	1163	46	-8	0	15	1399	1422	32
3	14	664	653	35	-12	3	14	405	240	112	-7	0	15	372	350	62	
4	14	1559	1577	55	-11	3	14	957	1072	60	-6	0	15	1703	1776	31	
5	14	2218	2128	107	-10	3	14	1728	1784	42	-5	0	15	381	334	82	
6	14	674	612	39	-9	3	14	369	258	100	-4	0	15	938	996	62	
7	14	365	280	66	-8	3	14	1056	1162	46	-3	0	15	1773	1860	63	
8	14	281	67	82	-7	3	14	1283	1269	56	-2	0	15	3126	3564	78	
9	14	1966	1917	37	-6	3	14	2724	2754	62	-1	0	15	195	177	194	
10	14	1207	1166	31	-5	3	14	254	337	177	0	0	15	3502	3167	91	
11	14	229	372	141	-4	3	14	568	532	52	1	0	15	1981	1937	66	
12	14	1699	1629	41	-3	3	14	403	446	67	2	0	15	1818	1488	71	
13	14	159	49	159	-2	3	14	765	743	42	3	0	15	1984	1790	66	
14	14	1295	1318	44	-1	3	14	706	726	47	4	0	15	216	132	136	
15	14	360	23	165	0	3	14	922	987	39	5	0	15	2485	2322	46	
16	14	672	690	100	1	3	14	2870	2977	41	6	0	15	1985	1903	41	
17	14	0	237	1	2	3	14	1542	1562	35	7	0	15	1550	1471	38	
-20	2	14	267	200	267	3	14	487	502	61	8	0	15	416	398	64	
-19	2	14	1086	1054	80	4	3	14	1068	1078	32	9	0	15	362	267	78
-18	2	14	1540	1493	54	5	3	14	1457	1521	32	10	0	15	927	895	42
-17	2	14	809	774	54	6	3	14	428	495	56	11	0	15	161	84	160
-16	2	14	270	283	105	7	14	193	179	192	12	0	15	1026	1000	42	
-15	2	14	389	313	98	8	14	0	77	1	13	0	15	1317	1218	60	
-14	2	14	542	511	58	9	3	14	1499	1552	35	-20	1	15	0	58	1
-13	2	14	1014	1043	38	10	3	14	942	967	44	-19	1	15	1410	1371	55
-12	2	14	3154	3151	43	11	3	14	348	249	83	-18	1	15	539	482	111
-11	2	14	1408	1358	34	12	3	14	1155	1258	58	-17	1	15	164	64	163
-10	2	14	2284	2294	36	13	3	14	1475	1547	59	-16	1	15	173	295	173
-9	2	14	1392	1414	39	14	3	14	867	943	60	-15	1	15	2260	2212	41
-8	2	14	149	55	148	-8	4	14	0	29	1	-14	1	15	397	386	82
-7	2	14	29	74	29	-7	4	14	314	194	231	-13	1	15	92	19	92
-6	2	14	1642	1710	37	-6	4	14	1337	1293	52	-12	1	15	366	374	64
-5	2	14	825	801	49	-5	4	14	465	550	98	-11	1	15	773	771	35
-4	2	14	2886	2984	40	-4	4	14	2020	1998	48	-10	1	15	1325	1283	29
-3	2	14	3339	3363	43	-3	4	14	2072	2130	48	-9	1	15	838	902	42
-2	2	14	3770	3953	47	-2	4	14	2549	2552	63	-8	1	15	301	258	63
-1	2	14	1037	1126	63	-1	4	14	705	688	54	-7	1	15	2969	2942	32
0	2	14	404	390	63	0	4	14	335	242	136	-6	1	15	0	77	1
1	2	14	170	141	169	1	4	14	290	120	125	-5	1	15	3510	3550	40
2	2	14	728	726	64	2	4	14	545	572	71	-4	1	15	2578	2585	39
3	2	14	362	339	73	3	4	14	251	142	185	-3	1	15	472	539	57
4	2	14	571	556	43	4	4	14	353	375	70	-2	1	15	1166	1270	34
5	2	14	2924	3049	42	5	4	14	2043	2109	39	-1	1	15	1073	1118	39
6	2	14	280	350	67	6	4	14	50	200	49	0	1	15	856	864	37
7	2	14	1221	1258	27	7	4	14	801	880	44	1	15	2146	2184	46	
8	2	14	1464	1155	32	8	4	14	899	932	62	2	1	15	2016	2113	44
9	2	14	745	762	51	-20	0	15	579	613	120	3	15	2191	2330	45	
10	2	14	431	480	68	-19	0	15	567	420	125	4	1	15	709	713	60
11	2	14	592	552	65	-18	0	15	1416	1454	72	5	1	15	473	430	52
12	2	14	506	496	81	-17	0	15	881	941	87	6	1	15	1072	983	73
13	2	14	163	90	162	-16	0	15	624	630	97	7	1	15	1944	1832	80
14	2	14	847	938	48	-15	0	15	532	531	113	8	1	15	1242	1183	33

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 18

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
9	1	15	660	586	42	0	3	15	783	420	108	7	0	16	1599	1505	40
10	1	15	525	465	48	1	3	15	1445	1471	35	8	0	16	785	789	43
11	1	15	454	417	71	2	3	15	1459	1561	35	9	0	16	923	893	67
12	1	15	363	260	112	3	3	15	1695	1707	36	10	0	16	1772	1698	68
13	1	15	1235	1309	42	4	3	15	590	526	43	11	0	16	213	246	233
14	1	15	468	516	76	5	3	15	329	321	73	12	0	16	1111	1007	65
15	1	15	1270	1158	69	6	3	15	737	718	41	13	0	16	1461	1548	78
-18	2	15	1319	1251	88	7	3	15	1318	1361	34	-19	1	16	1194	1196	58
-2	2	15	805	847	83	8	3	15	891	859	39	-18	1	16	2118	2056	86
-16	2	15	516	523	91	9	3	15	256	393	141	-17	1	16	370	320	145
-2	2	15	539	487	89	10	3	15	285	321	120	-16	1	16	1476	1375	50
-14	2	15	490	526	56	11	3	15	310	370	121	-15	1	16	593	562	57
-13	2	15	735	732	45	-10	4	15	295	141	182	-14	1	16	235	167	170
-12	2	15	2349	2383	37	-9	4	15	220	390	219	-13	1	16	278	273	126
-11	2	15	2709	2712	40	-8	4	15	844	915	61	-12	1	16	250	296	95
-10	2	15	287	284	152	-7	4	15	72	160	72	-11	1	16	335	337	75
-9	2	15	625	632	50	-6	4	15	905	918	59	-10	1	16	384	3725	43
-8	2	15	1206	1265	40	-5	4	15	202	232	202	-9	1	16	267	205	73
-7	2	15	236	195	131	-4	4	15	448	441	106	-8	1	16	1121	1120	27
-6	2	15	1419	1472	34	-3	4	15	1064	1051	90	-7	1	16	1348	1315	27
-5	2	15	322	306	82	-2	4	15	1663	1744	49	-6	1	16	683	671	39
-4	2	15	862	841	39	-1	4	15	231	235	235	-5	1	16	3633	3659	41
-3	2	15	1581	1568	38	0	4	15	1646	1659	40	-4	1	16	1686	1696	46
-2	2	15	2833	2905	40	1	4	15	1041	1070	46	-3	1	16	1500	1553	65
-1	2	15	223	155	159	2	4	15	998	953	76	-2	1	16	589	604	50
0	2	15	2613	2637	38	3	4	15	1075	1105	42	-1	1	16	1766	1777	34
1	2	15	1594	1631	33	4	4	15	0	34	1	0	1	16	524	592	50
2	2	15	1323	1308	34	5	4	15	1294	1331	33	1	1	16	1272	1367	80
3	2	15	1502	1561	33	6	4	15	1055	1063	45	2	1	16	1029	1025	42
4	2	15	133	78	133	7	4	15	617	634	105	3	1	16	1073	1099	46
5	2	15	2012	2013	35	8	4	15	81	85	61	4	1	16	259	173	232
6	2	15	1599	1611	28	-20	0	16	878	817	93	5	1	16	1317	1235	34
7	2	15	1178	1178	33	-19	0	16	243	234	242	6	1	16	594	529	69
8	2	15	265	254	115	-18	0	16	426	425	170	7	1	16	2121	1992	85
9	2	15	335	325	95	-16	0	16	514	408	134	8	1	16	1333	1259	49
10	2	15	740	766	71	-15	0	16	360	302	210	9	1	16	2208	2167	37
11	2	15	204	86	204	-14	0	16	2301	2260	71	10	1	16	1719	2668	50
12	2	15	934	917	78	-13	0	16	757	615	75	11	1	16	685	655	74
13	2	15	1132	1094	104	-12	0	16	1958	1877	80	12	1	16	226	273	225
14	2	15	396	396	50	-11	0	16	1764	1606	46	13	1	16	1001	975	46
15	2	15	415	569	132	-10	0	16	767	715	59	14	1	16	1529	1463	44
16	2	15	247	91	247	-9	0	16	307	145	83	15	1	16	0	395	1
-16	3	15	319	205	113	-8	0	16	918	899	36	-17	2	16	748	579	84
-15	3	15	1643	1739	52	-7	0	16	1709	1713	32	-16	2	16	282	390	281
-14	3	15	355	407	95	-6	0	16	1522	1554	36	-15	2	16	270	270	270
-13	3	15	325	34	325	-5	0	16	995	959	75	-14	2	16	177	198	43
-12	3	15	286	256	28	-4	0	16	1200	1289	73	-13	2	16	1400	1417	36
-11	3	15	510	551	73	-3	0	16	2760	3153	74	-12	2	16	1514	1563	36
-10	3	15	1017	998	61	-2	0	16	1131	1309	65	-11	2	16	1357	1356	36
-9	3	15	477	574	84	-1	0	16	0	93	1	-10	2	16	51	575	58
-8	3	15	0	200	1	0	0	16	267	203	267	-9	2	16	257	124	155
-6	3	15	0	98	1	1	0	16	1856	1762	68	-8	2	16	784	834	50
-5	3	15	2652	2707	36	2	0	16	3203	3048	84	-7	2	16	1393	1409	49
-4	3	15	1913	1956	48	3	0	16	3559	3933	84	-6	2	16	1326	1333	36
-3	3	15	414	465	88	4	0	16	841	814	81	-5	2	16	785	820	50
-2	3	15	1014	957	39	5	0	16	474	473	61	-4	2	16	1050	1128	42
-1	3	15	874	886	41	6	0	16	1752	1701	40	-3	2	16	2159	2632	30

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 21

#	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
-10	0	19	1003	961	55		-15	2	19	356	464	153	-15	0	20	0	258	1	
-9	0	19	2119	2074	48		-14	2	19	1462	1562	38	-14	0	20	342	300	195	
-8	0	19	1859	1748	62		-13	2	19	359	313	129	-13	0	20	2620	2461	77	
-7	0	19	2686	2586	76		-12	2	19	562	654	59	-12	0	20	1315	1251	51	
-6	0	19	0	85	1		-11	2	19	539	548	132	-11	0	20	1874	1816	48	
-5	0	19	0	190	1		-10	2	19	849	799	54	-10	0	20	352	263	116	
-3	0	19	1629	1825	66		-9	2	19	1750	1791	55	-9	0	20	878	966	52	
-2	0	19	470	448	224		-8	2	19	1559	1562	43	-8	0	20	1970	1964	48	
-1	0	19	1519	1517	76		-7	2	19	2212	2289	124	-7	0	20	701	640	106	
0	0	19	2749	2567	82		-6	2	19	342	88	103	-6	0	20	726	850	49	
1	0	19	240	296	239		-5	2	19	153	154	153	-5	0	20	1538	2115	70	
2	0	19	288	280	287		-4	2	19	107	72	106	-4	0	20	1134	1153	80	
3	0	19	406	395	182		-3	2	19	1442	1457	48	-3	0	20	344	248	228	
4	0	19	1691	1602	43		-2	2	19	344	300	93	-2	0	20	1480	1469	77	
5	0	19	2540	2449	75		-1	2	19	1349	1336	38	-1	0	20	662	513	109	
6	0	19	1270	1267	71		0	2	19	2182	2209	38	0	0	20	1494	1300	93	
7	0	19	1105	1115	71		1	2	19	270	278	270	1	0	20	290	236	290	
8	0	19	338	244	239		2	2	19	130	194	130	2	0	20	1455	1341	80	
9	0	19	211	134	211		3	2	19	368	364	113	3	0	20	1583	1538	72	
10	0	19	310	191	249		4	2	19	1348	1378	78	4	0	20	1562	1315	72	
11	0	19	902	865	78		5	2	19	2090	2119	49	5	0	20	247	98	247	
12	0	19	0	295	1		6	2	19	1203	1152	77	6	0	20	719	495	98	
-19	1	19	397	603	194		7	2	19	1001	1018	65	7	0	20	2237	2097	71	
-18	1	19	1478	1399	76		8	2	19	227	246	227	8	0	20	1315	1232	68	
-17	1	19	355	137	146		9	2	19	318	139	209	9	0	20	293	203	292	
-16	1	19	830	806	63		10	2	19	246	185	209	10	0	20	258	176	257	
-15	1	19	2018	2040	63		11	2	19	746	728	59	11	0	20	397	322	160	
-14	1	19	1434	1392	50		12	2	19	191	222	191	12	0	20	375	112	192	
-13	1	19	1083	1043	43		13	2	19	794	866	76	13	0	20	504	497	150	
-12	1	19	297	403	109		14	2	19	88	375	109	14	0	20	1115	1095	55	
-11	1	19	1678	1612	41		15	2	19	1225	1251	49	15	0	20	610	469	121	
-10	1	19	359	371	86		16	2	19	516	453	109	16	0	20	648	636	114	
-9	1	19	213	144	212		17	2	19	236	112	236	17	0	20	267	74	267	
-8	1	19	692	771	50		18	2	19	503	561	91	18	0	20	191	90	191	
-7	1	19	1421	1411	37		19	2	19	1097	1087	53	19	0	20	562	507	79	
-6	1	19	0	146	1		20	2	19	493	474	91	20	0	20	186	80	187	
-5	1	19	390	468	75		21	2	19	290	66	290	21	0	20	1548	1477	36	
-4	1	19	0	93	1		22	2	19	1709	1774	61	22	0	20	1921	1840	38	
-3	1	19	2327	2413	73		23	2	19	941	933	58	23	0	20	412	421	83	
-2	1	19	1218	1250	52		24	2	19	1307	1380	39	24	0	20	2340	2230	40	
-1	1	19	1630	1722	48		25	2	19	728	704	77	25	0	20	2100	1988	52	
0	1	19	764	807	64		26	2	19	851	902	49	26	0	20	1573	1485	37	
1	1	19	1078	1148	75		27	2	19	401	52	143	27	0	20	1065	1028	41	
2	1	19	235	92	242		28	2	19	794	846	66	28	0	20	479	369	103	
3	1	19	1158	1078	125		29	2	19	1142	1132	56	29	0	20	1072	1083	56	
4	1	19	1768	1651	51		30	2	19	74	26	74	30	0	20	472	419	90	
5	1	19	236	166	236		31	2	19	647	623	66	31	0	20	2478	2474	54	
6	1	19	931	800	73		32	2	19	1385	1411	47	32	0	20	491	528	111	
7	1	19	1959	1861	46		33	2	19	635	789	139	33	0	20	1735	1732	48	
8	1	19	395	227	105		34	2	19	266	56	266	34	0	20	510	483	87	
9	1	19	1525	1478	40		35	2	19	1023	930	105	35	0	20	640	600	79	
10	1	19	365	194	95		36	2	19	1395	1477	58	36	0	20	123	119	123	
11	1	19	1063	1092	47		37	2	19	178	219	177	37	0	20	295	228	120	
12	1	19	723	684	63		38	2	19	0	109	4	38	0	20	332	265	105	
13	1	19	935	823	55		39	2	19	0	954	1007	39	39	0	20	286	170	124
14	1	19	643	665	72		40	2	19	0	426	240	173	40	0	20	1669	1587	39
15	1	19	425	255	123		41	2	19	0	534	399	115	41	0	20	2247	2223	49

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 22

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-15	1	22	519	389	146	-1	3	22	450	470	91	-11	2	23	733	791	82
-14	1	22	260	104	259	0	3	22	1549	1603	67	-10	2	23	109	200	109
-13	1	22	540	486	90	1	3	22	110	351	109	-9	2	23	1056	1034	94
-12	1	22	41	117	40	2	3	22	1247	1328	89	-8	2	23	770	741	63
-11	1	22	0	256	1	3	3	22	240	164	239	-7	2	23	463	512	95
-10	1	22	299	256	156	16	0	23	524	598	147	-6	2	23	1737	1693	87
-9	1	22	305	244	136	15	0	23	1374	1328	74	-5	2	23	294	80	222
-8	1	22	1254	1243	41	14	0	23	1617	1454	69	-4	2	23	315	261	140
-7	1	22	339	326	110	13	0	23	470	400	95	-3	2	23	727	748	61
-6	1	22	1102	974	42	12	0	23	913	912	60	-2	2	23	230	68	230
-5	1	22	738	732	75	-9	0	23	1212	1130	77	-1	2	23	144	111	144
-4	1	22	749	729	73	-8	0	23	983	802	87	0	2	23	758	829	76
-3	1	22	847	824	66	-7	0	23	482	583	170	1	2	23	838	832	71
-2	1	22	477	486	104	-6	0	23	1931	1936	73	2	2	23	1129	1165	61
-1	1	22	572	733	90	-5	0	23	168	90	168	3	2	23	628	608	97
0	1	22	2084	2164	53	-4	0	23	421	255	242	4	2	23	1331	1279	85
1	1	22	481	456	103	-3	0	23	881	787	105	5	2	23	263	121	171
2	1	22	1755	1724	117	-2	0	23	310	77	310	6	2	23	526	442	86
3	1	22	323	267	178	-1	0	23	0	123	1	7	2	23	295	62	295
4	1	22	781	686	120	0	0	23	1029	931	104	8	2	23	908	913	108
5	1	22	302	69	149	1	0	23	1298	1013	92	9	2	23	749	925	111
6	1	22	578	604	65	2	0	23	1490	1396	79	10	2	23	916	893	135
7	1	22	490	447	74	3	0	23	838	677	106	-1	2	23	505	427	118
8	1	22	1681	1587	41	4	0	23	1474	1488	76	0	2	23	654	762	98
9	1	22	1062	912	46	5	0	23	228	115	228	1	3	23	1071	984	105
10	1	22	308	357	307	6	0	23	489	514	154	2	3	23	208	344	207
11	1	22	325	96	325	7	0	23	131	58	130	3	3	23	1006	1020	108
-14	2	22	490	341	197	8	0	23	1451	1335	88	-16	0	24	469	548	157
-13	2	22	125	104	124	9	0	23	1498	1295	81	-15	0	24	217	409	216
-12	2	22	1132	1139	51	10	0	23	451	333	227	-14	0	24	685	683	100
-11	2	22	277	328	228	11	0	23	654	576	122	-13	0	24	503	543	131
-10	2	22	1880	1867	46	-15	1	23	82	86	139	-12	0	24	701	696	95
-9	2	22	276	263	173	-14	0	23	584	58	1	-10	0	24	1920	1790	80
-8	2	22	477	424	127	-13	0	23	1750	1686	55	-9	0	24	0	233	1
-7	2	22	1406	1414	46	-12	1	23	1691	1628	78	-8	0	24	2968	2856	85
-6	2	22	572	722	71	-11	1	23	0	337	1	-7	0	24	405	231	238
-5	2	22	410	499	86	-9	1	23	625	550	61	-6	0	24	827	515	148
-4	2	22	340	252	123	-8	1	23	835	734	52	-5	0	24	0	40	1
-3	2	22	1819	163	188	-7	1	23	528	300	257	-4	0	24	2312	2160	93
-2	2	22	959	959	959	-6	1	23	613	628	133	-3	0	24	2554	2273	122
-1	2	22	812	839	95	-5	1	23	261	60	97	-2	0	24	1854	1602	93
0	2	22	655	577	37	-4	1	23	1099	1118	61	-1	0	24	1469	1313	90
1	2	22	398	435	130	-3	1	23	1234	1203	58	0	0	24	925	726	120
2	2	22	697	625	78	-2	1	23	1025	1031	59	1	0	24	641	467	160
3	2	22	191	207	190	-1	1	23	591	604	94	2	0	24	455	364	194
4	2	22	332	322	179	0	1	23	917	934	63	3	0	24	571	483	163
5	2	22	651	586	12	-1	1	23	1184	1124	110	4	0	24	1184	1109	114
6	2	22	1831	1762	90	2	1	23	399	440	135	5	0	24	1499	1374	95
7	2	22	995	1017	57	3	1	23	1374	1224	97	6	0	24	1928	1920	77
8	2	22	564	506	107	4	1	23	843	893	83	7	0	24	2085	1889	80
9	2	22	845	920	79	5	1	23	396	334	106	8	0	24	721	674	154
-7	3	22	295	215	229	6	1	23	727	735	58	9	0	24	606	503	184
-6	3	22	712	743	77	7	1	23	595	371	68	-14	0	24	1313	1233	56
-5	3	22	461	400	100	8	1	23	677	678	100	-13	0	24	599	616	100
-4	3	22	693	566	73	9	1	23	704	523	85	-12	1	24	810	338	227

Table 3. Observed and calculated structure factors for Rb1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 24

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-9	1	24	830	801	79	2	0	25	856	832	114	-4	0	26	1623	1349	106
-8	1	24	474	529	131	3	0	25	199	303	198	-3	0	26	1036	1039	122
-7	1	24	1165	1141	80	4	0	25	2281	2094	84	-2	0	26	1731	1517	95
-6	1	24	590	636	95	6	0	25	411	153	249	-1	0	26	1868	1658	91
-5	1	24	256	333	255	7	0	25	504	329	182	0	0	26	687	463	160
-4	1	24	2101	2123	56	-14	1	25	266	251	266	1	0	26	634	512	170
-3	1	24	432	521	118	-13	1	25	405	507	338	2	0	26	422	500	258
-2	1	24	258	9	257	-12	1	25	413	218	240	3	0	26	1223	1128	92
-1	1	24	1658	1719	79	-11	1	25	987	709	107	4	0	26	625	646	146
0	1	24	715	560	148	-10	1	25	1429	1467	87	5	0	26	119	342	118
1	1	24	1543	1522	57	-9	1	25	2174	2061	102	-10	1	26	199	159	198
2	1	24	1075	1114	125	-8	1	25	906	986	78	-9	1	26	561	396	116
3	1	24	900	748	140	-7	1	25	1404	1438	58	-8	1	26	1047	1054	74
4	1	24	788	751	62	-6	1	25	744	691	113	-7	1	26	532	394	116
5	1	24	762	687	62	-5	1	25	685	620	91	-6	1	26	1123	1181	67
6	1	24	463	51	225	-4	1	25	262	36	262	-5	1	26	765	823	91
7	1	24	360	284	166	-3	1	25	920	816	70	-4	1	26	383	464	161
8	1	24	1254	1032	99	-2	1	25	1580	1558	58	-3	1	26	0	202	1
9	1	24	1194	1015	100	-1	1	25	379	212	173	-2	1	26	213	260	212
-12	2	24	563	633	121	0	1	25	1957	1845	78	-1	1	26	1456	1369	65
-11	2	24	152	154	151	1	1	25	1320	1274	124	0	1	26	1014	998	75
-10	2	24	1550	1591	47	2	1	25	1161	1000	100	1	1	26	1170	1038	128
-9	2	24	331	183	330	3	1	25	1658	1489	92	2	1	26	222	52	221
-8	2	24	2592	2476	64	4	1	25	1359	1136	67	3	1	26	1796	1523	187
-7	2	24	286	226	286	5	1	25	218	141	217	4	1	26	730	599	152
-6	2	24	563	492	78	6	1	25	1248	975	100	-6	2	26	1352	1560	105
-5	2	24	268	60	268	7	1	25	765	903	117	-5	2	26	1093	1229	106
-4	2	24	1925	1906	210	8	1	25	757	602	135	-4	2	26	1029	1139	123
-3	2	24	1860	1935	56	-11	2	25	588	680	98	-3	2	26	585	863	169
-2	2	24	1309	1397	93	-10	2	25	278	61	278	-2	2	26	1162	1358	107
-1	2	24	1128	1178	63	-9	2	25	1051	952	72	-11	0	27	919	619	175
0	2	24	474	623	121	-8	2	25	844	714	62	-10	0	27	472	392	369
1	2	24	298	319	298	-7	2	25	567	434	89	-9	0	27	478	277	254
2	2	24	500	359	110	-6	2	25	188	147	187	-7	0	27	706	586	163
3	2	24	471	619	124	-5	2	25	1468	1523	73	-6	0	27	725	554	160
4	2	24	1129	983	93	-4	2	25	0	103	1	-5	0	27	1256	920	124
5	2	24	1307	1211	68	-3	2	25	0	122	1	-4	0	27	753	604	181
6	2	24	1999	1655	104	-2	2	25	850	955	77	-3	0	27	1466	1299	104
-3	3	24	478	434	205	-1	2	25	389	8	161	-2	0	27	555	552	196
-2	3	24	27	40	27	0	2	25	247	303	247	-1	0	27	1250	1174	108
-15	0	25	0	216	1	1	2	25	0	246	1	0	0	27	615	352	161
-11	0	25	813	748	122	2	2	25	781	748	115	1	0	27	1209	1053	111
-9	0	25	1123	1130	87	3	2	25	154	252	154	-8	1	27	703	383	167
-8	0	25	1005	830	125	4	2	25	1985	1863	90	-7	1	27	346	93	346
-7	0	25	594	468	174	5	2	25	359	193	359	-6	1	27	250	260	249
-6	0	25	308	190	307	-11	0	26	364	495	364	-5	1	27	1183	1187	65
-5	0	25	1823	1744	84	-10	0	26	1559	1337	97	-4	1	27	524	137	211
-4	0	25	360	100	360	-9	0	26	533	238	262	-3	1	27	1048	1025	70
-2	0	25	1133	1051	98	-8	0	26	727	671	155	-2	1	27	617	498	121
-1	0	25	661	20	171	-7	0	26	545	220	189	-1	1	27	1517	1345	104
0	0	25	0	313	1	-6	0	26	1968	1781	88	0	1	27	179	238	179
1	0	25	266	290	266	-5	0	26	1642	1420	94	-6	2	27	439	510	438

NOTE: Fo is set to zero if Fo² is negative, and negative sigma(Fo) flags reflections suppressed for refinement purposes.

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	0	0	1306	1313	38	16	2	0	1944	1935	51
3	0	0	1408	1364	25	17	2	0	396	147	171
4	0	0	979	699	28	18	2	0	1179	1151	49
5	0	0	1430	1341	28	19	2	0	476	337	107
6	0	0	1154	1072	29	20	2	0	815	849	78
7	0	0	3062	2992	57	21	2	0	0	504	1
8	0	0	6475	6203	168	1	3	0	366	111	68
9	0	0	415	301	59	2	3	0	206	249	164
10	0	0	1542	1314	53	3	3	0	2313	2270	28
11	0	0	980	975	63	4	3	0	580	515	50
12	0	0	405	356	125	5	3	0	1563	1617	65
13	0	0	528	478	94	6	3	0	640	697	54
14	0	0	3502	3319	78	7	3	0	5341	5417	60
15	0	0	920	792	87	8	3	0	297	298	88
16	0	0	2415	2327	68	9	3	0	279	171	278
17	0	0	0	132	1	10	3	0	364	427	86
18	0	0	1437	1321	81	11	3	0	1312	1443	46
19	0	0	291	258	191	12	3	0	1489	1605	38
20	0	0	862	1024	98	13	3	0	306	276	161
21	0	0	511	572	178	14	3	0	502	670	79
1	1	0	889	353	43	15	3	0	1090	1000	47
2	1	0	81	187	80	16	3	0	840	836	55
3	1	0	3610	3602	31	17	3	0	799	853	69
4	1	0	8791	8228	81	18	3	0	410	520	161
5	1	0	663	612	19	0	4	0	8618	8287	113
6	1	0	990	1036	21	1	4	0	258	298	119
7	1	0	8660	8411	92	2	4	0	742	728	36
8	1	0	422	486	47	3	4	0	684	648	45
9	1	0	213	207	147	4	4	0	393	357	77
10	1	0	583	578	42	5	4	0	564	530	54
11	1	0	2055	2036	32	6	4	0	475	377	71
12	1	0	2353	2366	35	7	4	0	1414	1476	44
13	1	0	462	395	76	8	4	0	2651	2728	47
14	1	0	838	848	42	9	4	0	335	146	335
15	1	0	1410	1451	36	10	4	0	472	631	194
16	1	0	1159	1190	40	11	4	0	718	620	110
17	1	0	1285	1256	42	12	4	0	293	150	293
18	1	0	837	767	131	13	4	0	0	241	1
19	1	0	0	76	1	14	4	0	1524	1684	51
20	1	0	749	769	85	15	4	0	115	470	114
21	1	0	1042	1062	69	8	5	0	537	87	144
0	0	1	0616315297	296		9	5	0	396	109	226
1	2	0	519	479	49	-22	0	1	348	379	347
2	2	0	1073	1075	30	-21	0	1	616	664	134
3	2	0	1060	1052	32	-20	0	1	833	797	116
4	2	0	594	539	32	-19	0	1	910	836	100
5	2	0	1044	986	21	-18	0	1	677	707	102
6	2	0	812	766	21	-17	0	1	705	757	104
7	2	0	2340	2390	28	-16	0	1	196	255	195
8	2	0	4699	4852	53	-15	0	1	1558	1555	58
9	2	0	213	212	163	-14	0	1	193	142	192
10	2	0	1020	1066	34	-13	0	1	1589	1507	58
11	2	0	812	842	42	-12	0	1	1624	1572	38
12	2	0	312	276	142	-11	0	1	937	948	38
13	2	0	395	387	82	-10	0	1	1583	1669	33
14	2	0	2748	2744	40	-9	0	1	1396	1375	31
15	2	0	700	693	52	-8	0	1	471	419	44

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 3

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
20	0	2	553	454	148	-9	2	2	357	307	64
21	0	2	667	690	140	-8	2	2	1487	1564	32
22	0	2	1158	1226	98	-7	2	2	1254	1228	21
23	0	2	266	122	265	-6	2	2	308	359	42
24	0	2	289	150	288	-5	2	2	853	806	21
25	0	2	137	167	217	-4	2	2	1191	1221	19
26	0	2	1098	1102	59	-3	2	2	116	133	115
27	0	2	1196	1197	40	-2	2	2	488	494	30
28	0	2	502	456	65	-1	2	2	208	153	106
29	0	2	1622	1614	40	0	2	2	322	204	48
30	0	2	932	927	39	1	2	2	696	613	28
31	0	2	550	574	52	2	2	2	467	405	36
32	0	2	1791	1771	32	3	2	2	256	157	155
33	0	2	915	847	44	4	2	2	432	354	43
34	0	2	358	361	46	5	2	2	993	1060	18
35	0	2	1109	1126	22	6	2	2	204	133	203
36	0	2	788	733	26	7	2	2	342	281	65
37	0	2	510	496	34	8	2	2	818	818	36
38	0	2	938	863	20	9	2	2	1120	1049	33
39	0	2	216	134	51	10	2	2	1158	1150	34
40	0	2	2243	2170	22	11	2	2	764	744	41
41	0	2	2057	1951	24	12	2	2	333	336	88
42	0	2	584	560	20	13	2	2	289	219	288
43	0	2	1126	1126	22	14	2	2	1943	1952	49
44	0	2	142	202	110	15	2	2	1282	1278	40
45	0	2	102	178	72	16	2	2	1542	1500	41
46	0	2	1308	1146	21	17	2	2	423	506	169
47	0	2	1641	1670	24	18	2	2	568	511	74
48	0	2	988	915	24	19	2	2	1350	1301	48
49	0	2	335	291	48	20	2	2	529	432	237
50	0	2	245	119	71	21	2	2	905	765	70
51	0	2	2393	2298	256	22	2	2	901	990	67
52	0	2	448	315	70	23	2	2	0	285	1
53	0	2	1309	1288	28	24	2	2	1083	1266	56
54	0	2	407	423	58	25	2	2	741	659	65
55	0	2	996	958	35	26	2	2	512	457	79
56	0	2	1959	1924	44	27	2	2	1441	1526	40
57	0	2	258	315	121	28	2	2	778	697	46
58	0	2	1371	1375	35	29	2	2	198	210	197
59	0	2	247	818	43	30	2	2	746	696	43
60	0	2	1285	1259	51	31	2	2	395	394	64
61	0	2	405	452	126	32	2	2	307	315	92
62	0	2	384	253	384	33	2	2	707	716	65
63	0	2	779	774	73	34	2	2	311	218	79
64	0	2	603	626	98	35	2	2	1762	1737	26
65	0	2	1899	1862	99	36	2	2	1424	1347	22
66	0	2	257	208	256	37	2	2	311	351	70
67	0	2	1609	1639	65	38	2	2	213	189	121
68	0	2	862	894	57	39	2	2	0	75	1
69	0	2	708	590	79	40	2	2	291	20	136
70	0	2	845	809	88	41	2	2	1052	1011	30
71	0	2	813	796	51	42	2	2	784	802	35
72	0	2	379	368	83	43	2	2	369	368	61
73	0	2	918	888	42	44	2	2	338	174	99
74	0	2	625	573	66	45	2	2	35	42	34
75	0	2	1465	1501	42	46	2	2	1465	1501	42
76	0	2	2123	2056	34	47	2	2	412	385	66

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 2

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
10	1	1	493	416	54	-15	3	1	0	112	1
11	1	1	3684	3678	44	-14	3	1	0	74	1
12	1	1	3437	3337	43	-13	3	1	1083	1024	43
13	1	1	388	419	69	-12	3	1	1376	1404	38
14	1	1	303	330	97	-11	3	1	895	1033	42
15	1	1	726	728	47	-10	3	1	486	700	62
16	1	1	426	353	92	-9	3	1	193	132	193
17	1	1	241	258	241	-8	3	1	891	845	39
18	1	1	565	499	97	-7	3	1	1514	1490	32
19	1	1	1563	1641	74	-6	3	1	761	654	40
20	1	1	898	941	74	-5	3	1	696	684	37
21	1	1	2374	2371	57	-4	3	1	2460	2479	43
22	1	1	421	538	420	-3	3	1	499	517	33
23	1	1	211	155	210	-2	3	1	395	396	44
24	1	1	807	727	63	-1	3	1	160	43	160
25	1	1	762	695	61	0	3	1	680	632	41
26	1	1	720	647	61	1	3	1	227	145	

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 5

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-1	4	3	1093	1126	37	2	0	4	233	250	52	17	1	4	419	557	116
0	4	3	598	570	54	3	0	4	3020	3257	36	18	1	4	965	957	66
1	4	3	306	390	93	4	0	4	9008	8521	100	19	1	4	387	101	288
2	4	3	272	169	272	5	0	4	6307	567	25	20	1	4	714	364	120
3	4	3	913	874	48	6	0	4	0	55	1	-20	2	4	1341	1379	58
4	4	3	2019	2079	35	7	0	4	1580	1581	90	-19	2	4	1218	1133	57
5	4	3	0	250	1	8	0	4	279	287	164	-18	2	4	247	279	246
6	4	3	0	47	1	9	0	4	2954	2834	68	-17	2	4	792	949	54
7	4	3	1953	2022	60	10	0	4	1193	1187	63	-16	2	4	923	1055	48
8	4	3	201	104	200	12	0	4	2469	2379	65	-15	2	4	1535	1629	53
9	4	3	577	645	58	13	0	4	0	229	1	-14	2	4	720	704	66
10	4	3	571	475	71	14	0	4	193	113	192	-13	2	4	242	111	241
11	4	3	819	848	60	15	0	4	2085	2094	64	-12	2	4	436	309	69
12	4	3	419	239	224	16	0	4	505	687	133	-11	2	4	833	746	43
13	4	3	880	927	92	17	0	4	328	215	328	-10	2	4	4409	4499	112
14	4	3	465	777	120	18	0	4	2945	2865	79	-9	2	4	1206	1252	30
15	4	3	77	154	77	19	0	4	1153	1197	84	-8	2	4	2175	2266	27
-9	5	101	247	101	20	20	0	4	1808	1733	79	-7	2	4	36	202	46
-8	5	3	804	690	68	-22	1	4	1309	1508	92	-6	2	4	968	998	23
-7	5	3	552	538	98	-21	1	4	831	781	82	-5	2	4	623	597	25
-6	5	3	433	395	117	-20	1	4	668	732	68	-4	2	4	1081	1083	20
-5	5	3	217	248	217	-19	1	4	208	204	174	-3	2	4	532	493	30
-4	5	3	805	949	65	-18	1	4	535	634	144	-2	2	4	186	210	115
-3	5	3	1832	1899	47	-17	1	4	2144	2114	38	-1	2	4	1580	1493	19
-2	5	3	129	138	129	-16	1	4	1317	1366	39	0	2	4	109	136	109
-1	5	3	340	493	157	-15	1	4	658	633	49	1	2	4	870	858	135
0	5	3	697	723	73	-14	1	4	883	860	41	2	2	4	163	235	182
1	5	3	0	198	1	-13	1	4	2003	1951	34	3	2	4	2538	2513	32
2	5	3	244	141	244	-12	1	4	2016	2033	28	4	2	4	6433	6376	69
3	5	3	1414	1364	75	-11	1	4	487	420	39	5	2	4	481	415	42
4	5	3	129	498	129	-10	1	4	532	582	33	6	2	4	218	4	151
5	5	3	141	145	108	-9	1	4	512	581	29	7	2	4	1164	1136	32
6	5	3	388	303	173	-8	1	4	2654	2609	26	8	2	4	199	189	175
-21	0	4	540	493	206	-7	1	4	661	635	23	9	2	4	222	255	135
-20	0	4	759	865	121	-6	1	4	667	659	20	10	2	4	2293	2330	35
-19	0	4	1711	1628	78	-5	1	4	674	574	19	11	2	4	995	942	39
-18	0	4	1365	1314	81	-4	1	4	3496	3627	29	12	2	4	2003	1961	36
-17	0	4	268	274	267	-3	1	4	9376	9047	80	13	2	4	152	169	152
-16	0	4	1007	996	75	-2	1	4	303	246	31	14	2	4	373	58	95
-15	0	4	1310	1271	71	-1	1	4	944	957	14	15	2	4	1717	1715	39
-14	0	4	2024	1949	66	0	1	4	697	681	15	16	2	4	327	547	327
-13	0	4	796	831	54	1	1	4	211	179	39	17	2	4	391	162	99
-12	0	4	445	428	53	2	1	4	1372	1241	16	18	2	4	1858	2486	56
-11	0	4	835	910	32	3	1	4	795	808	19	19	2	4	1035	990	74
-10	0	4	5784	5587	77	4	1	4	214	63	54	-18	3	4	285	455	284
-9	0	4	1733	1636	50	5	1	4	1297	1209	20	-17	3	4	1474	1600	51
-8	0	4	2797	2771	35	6	1	4	396	362	35	-16	3	4	438	490	158
-7	0	4	377	321	39	7	1	4	365	598	28	-15	3	4	588	558	75
-6	0	4	1157	1179	22	8	1	4	1265	1228	30	-14	3	4	1191	1365	48
-5	0	4	1076	1042	22	9	1	4	1076	919	37	-13	3	4	1487	1484	18
-4	0	4	1365	1431	21	10	1	4	2416	2293	35	-12	3	4	1357	147	63
-3	0	4	640	589	22	11	1	4	587	507	51	-11	3	4	323	428	107
-2	0	4	175	202	175	12	1	4	698	674	60	-10	3	4	403	399	96
-1	0	4	2159	2347	54	13	1	4	2076	2009	46	-9	3	4	1650	1588	41
0	0	4	175	212	84	14	1	4	417	480	102	-8	3	4	326	438	132
1	0	4	1000	977	22	15	1	4	1402	1366	50	-7	3	4	520	479	48

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 6

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	3	4	329	204	68	-2	5	4	376	158	140	-18	1	5	762	775	57
-4	3	4	2312	2298	26	-1	5	4	487	574	77	-17	1	5	743	777	52
-3	3	4	5585	5552	49	0	5	4	229	126	229	-16	1	5	519	448	75
-2	3	4	168	184	169	1	5	4	244	99	244	-15	1	5	2224	2168	37
-1	3	4	815	780	25	2	5	4	32	431	31	-14	1	5	569	516	110
0	3	4	347	329	46	3	5	4	416	128	184	-13	1	5	1153	1105	33
1	3	4	223	131	73	4	5	4	360	198	140	-12	1	5	490	513	41
2	3	4	846	767	71	5	5	4	472	473	113	-11	1	5	260	220	61
3	3	4	372	426	97	6	5	4	605	538	86	-10	1	5	399	365	38
4	3	4	308	167	74	7	5	4	443	300	168	-9	1	5	481	494	30
5	3	4	813	795	51	8	5	4	451	362	201	-8	1	5	1822	1716	25
6	3	4	807	848	44	-22	0	5	416	526	416	-7	1	5	1179	1126	20
7	3	4	388	330	120	-20	0	5	1536	1556	79	-6	1	5	404	415	30
8	3	4	408	501	73	-19	0	5	1233	1163	80	-5	1	5	985	1006	24
9	3	4	738	818	47	-18	0	5	354	279	250	-4	1	5	1912	1937	22
10	3	4	522	530	65	-17	0	5	1011	906	85	-3	1	5	4438	4471	45
11	3	4	1593	1625	37	-16	0	5	964	951	84	-2	1	5	1922	1913	24
12	3	4	209	230	208	-15	0	5	1616	1573	44	-1	1	5	217	222	25
13	3	4	394	492	98	-14	0	5	242	207	168	0	1	5	916	106	97
14	3	4	1483	1557	42	-13	0	5	356	366	132	1	1	5	1237	1283	22
15	3	4	463	333	111	-12	0	5	551	489	43	2	1	5	389	437	25
16	3	4	1040	956	50	-11	0	5	2928	2956	87	3	1	5	1302	1231	19
17	3	4	303	420	166	-10	0	5	2485	2371	33	4	1	5	170	129	86
18	3	4	602	679	216	-9	0	5	587	623	46	5	1	5	511	525	25
-14	4	4	521	437	97	-8	0	5	748	760	27	6	1	5	3291	3179	56
-13	4	4	388	175	377	-7	0	5	1182	186	23	7	1	5	304	292	51
-12	4	4	332	129	160	-6	0	5	1876	1874	26	8	1	5	284	267	53
-11	4	4	542	430	82	-5	0	5	1279	1351	41	9	1	5	676	618	39
-10	4	4	2552	2648	49	-4	0	5	248	173	50	10	1	5	2072	2088	33
-9	4	4	646	686	90	-3	0	5	578	557	24	11	1	5	1113	1071	72
-8	4	4	1469	1458	45	-2	0	5	491	511	34	12	1	5	417	399	92
-7	4	4	596	673	73	-1	0	5	2443	2417	93	13	1	5	1738	1686	48
-6	4	4	555	621	74	0	0	5	840	844	25	14	1	5	1290	1226	46
-5	4	4	391	351	72	1	0	5	384	442	37	15	1	5	454	524	95
-4	4	4	284	207	133	2	0	5	1464	1328	23	16	1	5	371	318	135
-3	4	4	641	584	145	3	0	5	1205	1238	24	17	1	5	631	593	76
0	4	4	603	94	95	4	0	5	7251	6827	81	18	1	5	351	123	166
1	4	4	460	651	49	5	0	5	904	851	27	19	1	5	1015	960	70
2	4	4	361	195	85	6	0	5	2825	2874	49	20	1	5	0	40	1
3	4	4	1531	1565	68	7	0	5	342	197	41	21	1	5	1285	1261	13
4	4	4	3658	3565	85	8	0	5	832	896	53	-19	2	5	1095	985	59
5	4	4	316	211	139	9	0	5	137	105	137	-17	2	5	159	218	158
6	4	4	0	20	1	10	0	5	1883	2002	113	-18	2	5	791	733	66
7	4	4	469	506	94	11	0	5	322	444	88	-16	2	5	740	790	101
8	4	4	0	192	1	12	0	5	523	312	164	-15	2	5	1335	1412	46
9	4	4	167	189	167	13	0	5	740	613	81	-14	2	5	128	165	127
10	4	4	1387	1463	42	14	0	5	460	416	128	-13	2	5	417	325	73
11	4	4	575	538	70	15	0	5	500	456	140	-12	2	5	336	314	141
12	4	4	1202	1185	615	-20	1	5	1682	1528	128	-11	2	5	2281	2261	84
13	4	4	551	50	114	17	0	5	1299	1291	74	-10	2	5	1803	1873	37
14	4	4	310	38	242	18	0	5	1419	1462	75	-9	2	5	322	406	68
-8	5	4	875	799	67	19	0	5	468	454	182	-8	2	5	584	569	31
-7	5	4	219	274	218	20	0	5	550	137	157	-7	2	5	943	933	24
-6	5	4	388	303	274	-22	1	5	147	569	146	-6	2	5	1325	1387	21
-5	5	4	0	0	0	-21	1	5	379	379	171	-5	2	5	1107	1140	22
-4	5	4	1231	1200	44	-20	1	5	1682	1528	93	-4	2	5	277	282	9
-3	5	4	2906	2886	53	-19	1	5	692	569	60	-3	2	5	0	366	37

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 9

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
15	0	7	1133	1139	73	-11	2	7	317	59	247	9	3	7	598	613	48
16	0	7	2777	2751	276	-10	2	7	1167	1193	48	10	3	7	2028	2035	33
17	0	7	1477	1466	72	-9	2	7	3832	3923	47	11	3	7	981	992	49
18	0	7	862	775	106	-8	2	7	2413	2460	27	12	3	7	507	473	61
19	0	7	648	325	130	-7	2	7	1828	1908	24	13	3	7	337	83	198
20	0	7	452	398	241	-6	2	7	4948	4982	40	14	3	7	1006	954	41
-22	1	7	339	389	338	-5	2	7	632	662	24	15	3	7	1347	1321	49
-21	1	7	1106	1066	62	-4	2	7	388	402	29	16	3	7	434	307	216
-20	1	7	691	787	81	-3	2	7	2294	2230	23	17	3	7	488	263	324
-19	1	7	323	286	151	-2	2	7	2015	2026	20	-14	4	7	221	304	221
-18	1	7	672	624	61	-1	2	7	6242	6291	49	-13	4	7	0	234	1
-17	1	7	345	454	106	0	2	7	404	383	32	-12	4	7	420	558	117
-16	1	7	1157	1163	45	1	2	7	232	165	62	-11	4	7	331	47	164
-15	1	7	434	365	74	2	2	7	1583	1520	19	-10	4	7	632	581	71
-14	1	7	894	820	40	3	2	7	1079	1106	19	-9	4	7	2172	2308	47
-13	1	7	6598	6509	57	4	2	7	1706	1679	23	-8	4	7	1448	1473	65
-12	1	7	2428	2425	27	5	2	7	288	190	76	-7	4	7	1036	1031	52
-11	1	7	445	428	39	6	2	7	1785	1758	25	-6	4	7	2909	3020	51
-10	1	7	841	815	33	7	2	7	3561	3477	38	-5	4	7	656	495	82
-9	1	7	572	561	30	8	2	7	2204	2114	30	-4	4	7	361	214	97
-8	1	7	1234	1284	21	9	2	7	401	375	53	-3	4	7	1374	1362	37
-7	1	7	1685	1682	21	10	2	7	1379	1394	30	-2	4	7	1144	1091	158
-6	1	7	1721	1838	19	11	2	7	1090	1076	32	-1	4	7	3410	3339	47
-5	1	7	6391	6597	50	12	2	7	950	976	35	0	4	7	358	192	104
-4	1	7	2025	2030	24	13	2	7	884	838	38	1	4	7	111	69	111
-3	1	7	1192	1207	23	14	2	7	940	1044	74	2	4	7	877	891	47
-2	1	7	251	219	76	15	2	7	72	880	107	3	4	7	720	709	60
-1	1	7	246	146	58	16	2	7	299	279	299	4	4	7	877	890	50
0	1	7	1010	1066	18	17	2	7	1307	1262	67	5	4	7	240	68	240
1	1	7	6382	6422	55	18	2	7	593	693	99	6	4	7	1189	1199	47
2	1	7	2386	2431	26	19	2	7	459	245	251	7	4	7	1918	1871	43
3	1	7	5972	5959	54	-17	3	7	187	326	187	8	4	7	1259	1365	46
4	1	7	409	409	34	-16	3	7	789	827	75	9	4	7	374	280	217
5	1	7	567	545	25	-15	3	7	54	326	53	10	4	7	1002	942	65
6	1	7	1713	1775	22	-14	3	7	621	549	74	11	4	7	688	679	72
7	1	7	1173	1168	24	-13	3	7	4542	4633	67	12	4	7	679	581	73
8	1	7	646	660	33	-12	3	7	1676	1748	44	13	4	7	655	721	105
9	1	7	975	972	33	-11	3	7	425	358	92	-7	5	7	799	665	78
10	1	7	2746	2765	56	-10	3	7	567	671	142	-6	5	7	670	596	82
11	1	7	1393	1408	34	-9	3	7	458	394	82	-5	5	7	2116	2252	50
12	1	7	675	607	40	-8	3	7	733	688	40	-4	5	7	662	704	123
13	1	7	240	96	239	-7	3	7	1175	1163	34	-3	5	7	277	97	276
14	1	7	1372	1362	51	-6	3	7	1372	1198	34	-2	5	7	221	23	93
15	1	7	1808	1781	49	-5	3	7	4258	4278	51	-1	5	7	261	228	61
16	1	7	264	382	264	-4	3	7	1337	1311	28	0	5	7	326	58	326
17	1	7	481	418	110	-3	3	7	529	521	51	1	5	7	2364	2292	59
18	1	7	660	574	85	-2	3	7	232	152	137	2	5	7	939	967	73
19	1	7	375	284	166	-1	3	7	191	220	190	3	5	7	2069	2005	44
-20	2	7	1998	1939	53	0	3	7	486	465	59	4	5	7	327	239	241
-19	2	7	1022	1086	58	1	3	7	4363	4196	54	5	5	7	434	41	152
-18	2	7	861	868	78	2	3	7	4607	4679	56	-6	5	7	420	410	141
-17	2	7	1288	1364	51	3	3	7	4066	3861	67	-7	5	7	639	512	174
-16	2	7	1479	1526	47	4	3	7	303	320	78	-22	0	8	863	757	116
-15	2	7	449	300	95	5	3	7	92	196	91	-21	0	8	0	395	1
-14	2	7	233	334	233	6	3	7	1099	1055	29	-20	0	8	1997	2053	72
-13	2	7	439	250	81	7	3	7	899	867	32	-19	0	8	551	434	153
-12	2	7	892	874	47	8	3	7	490	512	68	-18	0	8	440	378	183

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 11

	h	k	l	10Fo	10Fc	10s		h	k	l	10Fo	10Fc	10s		h	k	l	10Fo	10Fc	10s
	8	4	8	2319	2237	103		18	0	9	317	402	316		-7	2	9	522	499	38
	9	4	8	900	901	59		19	0	9	368	424	307		-6	2	9	2774	2718	30
10	4	8	195	214	195		-22	1	9	240	363	239		-5	2	9	3153	3099	36	
11	4	8	317	262	184		-21	1	9	500	634	500		-4	2	9	1319	1350	27	
12	4	8	607	605	115		-20	1	9	249	39	249		-3	2	9	1272	1256	26	
-7	5	8	249	46	249		-19	1	9	825	639	68		-2	2	9	1365	1430	26	
-6	5	8	623	428	115		-18	1	9	2042	1941	49		-1	2	9	490	444	39	
-5	5	8	1104	1065	94		-17	1	9	908	888	58		0	2	9	286	213	48	
-4	5	8	602	705	88		-16	1	9	1191	1194	37		1	2	9	898	935	20	
-3	5	8	358	301	178		-15	1	9	392	340	75		2	2	9	409	411	34	
-2	5	8	0	60	1		-14	1	9	583	614	46		3	2	9	2594	2492	25	
-1	5	8	821	889	58		-13	1	9	531	492	39		4	2	9	677	729	29	
0	5	8	861	868	78		-12	1	9	142	154	141		5	2	9	221	23	93	
1	5	8	2018	1969	77		-11	1	9	258	324	68		6	2	9	505	471	38	
2	5	8	1438	1458	62		-10	1	9	1468	1520	30		7	2	9	2077	1969	27	
3	5	8	1148	1187	51		-9	1	9	2734	2789	28		8	2	9	4149	4014	39	
4	5	8	287	170	287		-8	1	9	332	303	45		9	2	9	527	538	43	
5	5	8	520	548	134		-7	1	9	1134	1132	21		10	2	9	1409	1358	33	
-22	0	9	884	736	128		-6	1	9	261	369	48		11	2	9	387	51	170	
-20	0	9	388	146	225		-5	1	9	1679	1769	47		12	2	9	572	522	51	
-19	0	9	242	57	242		-4	1	9	1354	1269	26		13	2	9	208	206	207	
-18	0	9	361	152	269		-3	1	9	820	768	29		14	2	9	934	890	62	
-17	0	9	999	1037	40		-2	1	9	461	393	39		15	2	9	1278	1265	52	
-16	0	9	731	738	46		-1	1	9	1247	1186	24		16	2	9	631	725	87	
-15	0	9	551	541	53		0	1	9	1311	1351	20		17	2	9	342	332	149	
-14	0	9	1451	1417	33		1	1	9	490	4389	42		18	2	9	173	326	172	
-13	0	9	2019	2026	33		2	1	9	2384	2455	39		-17	3	9	567	580	96	
-12	0	9	386	356	80		3	1	9	2135	2223	50		-16	3	9	903	931	64	
-11	0	9	1814	1816	30		4	1	9	618	650	27		-15	3	9	232	196	231	
-10	0	9	312	196	78		5	1	9	386	364	40		-14	3	9	594	462	78	
-9	0	9	1690	1729	32		6	1	9	384	160	47		-13	3	9	240	264	240	
-8	0	9	1409	1428	30		7	1	9	664	634	30		-12	3	9	306	48	144	
-7	0	9	668	670	30		8	1	9	647	696	41		-11	3	9	155	22		
-6	0	9	3427	3490	58		9	1	9	208	47	113		-10	3	9	1071	1051	50	
-5	0	9	3787	3919	43		10	1	9	814	756	34		-9	3	9	1770	1825	43	
-4	0	9	1628	1708	32		11	1	9	1322	1370	30		-8	3	9	416	237	72	
-3	0	9	1504	1493	32		12	1	9	186	173	186		-7	3	9	957	992	38	
-2	0	9	1727	1903	33		13	1	9	660	541	59		-6	3	9	114	174	114	
-1	0	9	607	551	34		14	1	9	1235	1218	43		-5	3	9	1415	1395	30	
0	9	0	405	405	100		15	1	9	2500	2419	51		-4	3	9	1003	889	49	
1	0	9	1131	1162	21		16	1	9	926	925	66		-3	3	9	612	589	48	
2	0	9	463	431	44		17	1	9	279	372	278		-2	3	9	319	269	88	
3	0	9	3114	3119	39		18	1	9	903	820	75		-1	3	9	773	786	45	
4	0	9	946	969	28		19	1	9	1064	1150	71		0	3	9	904	961	42	
5	0	9	230	12	127		-20	2	9	379	173	150		1	3	9	2766	2713	45	
6	0	9	566	586	33		-19	2	9	237	46	237		2	3	9	1637	1614	36	
7	0	9	2337	2435	33		-18	2	9	346	116	216		3	3	9	1345	1394	37	
8	0	9	4875	5000	18		-17	2	9	939	895	54		4	3	9	1821	1800	40	
9	0	9	671	610	49		-16	2	9	601	701	77		5	3	9	181	240	181	
10	0	9	1649	1669	39		-15	2	9	434	489	127		6	3	9	277	162	129	
11	0	9	0	34	1		-14	2	9	1151	1237	70		7	3	9	556	567	52	
12	0	9	604	605	99		-13	2	9	1633	1665	42		8	3	9	465	461	61	
13	0	9	319	204	269		-12	2	9	419	398	69		9	3	9	247	64	137	
14	0	9	1034	1069	75		-11	2	9	1581	1590	33		10	3	9	622	538	60	
15	0	9	1526	1560	30		-10	2	9	1445	1458	64		11	3	9	916	898	49	
16	0	9	911	872	91		-9	2	9	1445	1457	25		12	3	9	127	132	125	
17	0	9	501	304	158		-8	2	9	1171	1170	26		13	3	9	425	465	75	

Table 4. Observed and calculated structure factors for Kl.45Pb3.15b7.45Se15. Page 13

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	3	10	1181	1114	38	-13	0	11	209	160	209	4	1	11	1456	1533	23
-1	3	10	1950	1942	36	-12	0	11	321	912	49	5	1	11	3273	3265	32
0	3	10	2170	2130	38	-11	0	11	1338	1357	35	6	1	11	2270	2311	26
1	3	10	573	515	56	-10	0	11	1323	1366	29	7	1	11	829	844	32
2	3	10	1406	1322	38	-9	0	11	271	170	76	8	1	11	371	259	61
3	3	10	1520	1842	38	-8	0	11	444	529	44	9	1	11	572	544	42
4	3	10	816	747	48	-7	0	11	1023	1009	27	10	1	11	1829	1890	40
5	3	10	206	72	205	-6	0	11	1236	1348	25	11	1	11	1531	1473	37
6	3	10	992	930	45	-5	0	11	1273	1276	30	12	1	11	456	330	77
7	3	10	821	727	52	-4	0	11	1531	1528	35	13	1	11	2306	2233	44
8	3	10	1595	1583	39	-3	0	11	2610	2713	92	14	1	11	172	200	172
9	3	10	2057	1997	35	-2	0	11	2338	2388	39	15	1	11	1468	1444	52
10	3	10	451	264	80	-1	0	11	328	194	59	16	1	11	302	123	279
11	3	10	189	45	189	0	0	11	463	574	47	17	1	11	1803	1803	91
12	3	10	883	831	47	1	0	11	537	489	56	18	1	11	183	374	183
13	3	10	330	154	150	2	0	11	1459	1468	30	-20	2	11	841	733	107
14	3	10	1169	1024	54	3	0	11	959	1044	52	-19	2	11	352	258	149
15	3	10	301	291	254	4	0	11	160	234	160	-18	2	11	959	853	65
-13	4	10	858	978	71	5	0	11	433	417	55	-17	2	11	1166	1124	110
-12	4	10	600	672	84	6	0	11	1151	1159	32	-16	2	11	1303	1509	48
-11	4	10	468	551	120	7	0	11	2184	2240	42	-15	2	11	1206	1262	70
-10	4	10	780	853	68	8	0	11	311	237	134	-14	2	11	382	310	84
-9	4	10	591	602	83	9	0	11	939	966	43	-13	2	11	218	193	217
-8	4	10	418	233	111	10	0	11	2155	2212	43	-12	2	11	691	773	46
-7	4	10	1248	1152	83	11	0	11	1865	1856	63	-11	2	11	1082	1045	36
-6	4	10	0	149	1	12	0	11	855	849	83	-10	2	11	1045	1060	29
-5	4	10	912	945	45	13	0	11	1940	2014	67	-9	2	11	209	168	131
-4	4	10	0	159	1	14	0	11	1355	1450	70	-8	2	11	494	414	45
-3	4	10	270	99	270	15	0	11	1239	1314	80	-7	2	11	870	843	30
-2	4	10	1930	1916	40	16	0	11	480	544	167	-6	2	11	934	960	28
-1	4	10	1583	1515	40	17	0	11	281	284	280	-5	2	11	963	983	33
0	4	10	748	654	54	18	0	11	482	226	186	-4	2	11	1166	1109	29
1	4	10	0	282	1	-21	1	11	232	36	231	-3	2	11	2065	2067	30
2	4	10	1401	1341	59	-20	1	11	558	613	94	-2	2	11	2111	2063	36
3	4	10	471	395	82	-19	1	11	1171	1136	170	-1	2	11	276	181	72
4	4	10	1467	1460	57	-18	1	11	470	512	80	0	2	11	459	513	47
5	4	10	734	716	63	-17	1	11	210	48	210	1	2	11	459	413	46
6	4	10	1736	1673	54	-16	1	11	404	451	85	2	2	11	1291	1273	28
7	4	10	0	45	1	-15	1	11	230	160	230	3	2	11	833	768	41
8	4	10	165	321	164	-14	1	11	1800	1753	30	4	2	11	0	85	1
9	4	10	766	775	71	-13	1	11	129	144	128	5	2	11	334	320	68
10	4	10	301	81	233	-12	1	11	654	663	38	6	2	11	980	893	35
11	4	10	658	534	102	-11	1	11	1345	1331	28	7	2	11	2048	1941	31
-4	5	10	523	602	144	-10	1	11	1466	1484	27	8	2	11	306	154	121
-5	5	10	627	691	70	-9	1	11	1236	1200	66	9	2	11	850	791	39
-6	5	10	736	679	67	-8	1	11	1027	1043	28	10	2	11	1868	1841	33
-7	5	10	911	1045	91	-7	1	11	1332	1376	26	11	2	11	1597	1541	34
0	5	10	1117	1111	69	-6	1	11	904	873	41	12	2	11	786	780	46
1	5	10	213	335	213	-5	1	11	448	404	48	13	2	11	1661	1740	55
2	5	10	669	660	94	-4	1	11	790	841	32	14	2	11	1215	1192	49
3	5	10	1035	1093	95	-3	1	11	333	375	60	15	2	11	1115	1193	52
4	5	10	326	440	326	-2	1	11	236	236	91	16	2	11	511	495	95
-18	0	11	1335	1344	74	-1	1	11	235	138	82	17	2	11	242	204	258
-17	0	11	1711	1723	44	0	1	11	142	102	141	-17	3	11	68	87	68
-16	0	11	1444	1464	43	1	1	11	843	882	23	-16	3	11	222	312	222
-15	0	11	387	283	104	2	1	11	2576	2623	39	-14	3	11	1054	1254	54
						3	1	11	251	177	63	-13	3	11	256	195	256

Table 4. Observed and calculated structure factors for Kl.45Pb3.15b7.45Se15. Page 14

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-12	3	11	129	476	129	-17	0	12	715	717	90	2	1	12	236	284	71
-11	3	11	889	926	54	-16	0	12	1441	1404	61	3	1	12	1323	1301	27
-10	3	11	997	1016	52	-15	0	12	1370	1257	76	4	1	12	1861	1921	24
-9	3	11	2312	2414	46	-14	0	12	465	488	81	5	1	12	3367	3464	39
-8	3	11	676	672	48	-13	0	12	1457	1533	42	6	1	12	2181	2266	26
-7	3	11	1014	975	34	-12	0	12	955	953	36	7	1	12	893	907	31
-6	3	11	434	462	55	-11	0	12	338	140	106	8	1	12	226	200	123
-5	3	11	314	264	95	-10	0	12	680	694	39	9	1	12	1409	1413	30
-4	3	11	405	432	61	-9	0	12	535	497	42	10	1	12	2683	2646	42
-3	3	11	356	211	67	-8	0	12	531	496	42	11	1	12	470	402	102
-2	3	11	214	257	149	-7	0	12	2952	2998	37	12	1	12	914	896	63
-1	3	11	202	165	173	-6	0	12	461	547	41	13	1	12	350	225	153
0	3	11	272	165	160	-5	0	12	672	719	40	14	1	12	0	61	1
1	3	11	509	498	66	-4	0	12	804	817	44	15	1	12	1079	1134	60
2	3	11	1732	1683	38	-3	0	12	1465	1581	33	16	1	12	192	186	191
3	3	11	190	106	190	-2	0	12	1167	539	84	17	1	12	710	663	88
4	3	11	996	956	45	-1	0	12	1562	1578	61	18	1	12	1529	1546	62
5	3	11	2617	2429	77	0	0	12	1255	1356	30	-20	2	12	1091	1131	94
6	3	11	1817	1687	93	1	0	12	214	125	121	-19	2	12	217	307	217
7	3	11	819	671	54	2	0	12	1680	1743	32	-18	2	12	431	432	131
8	3	11	180	111	180	3	0	12	1205	1275	37	-17	2	12	570	591	90
9	3	11	330	414	135	4	0	12	394	322	60	-16	2	12	1150	1150	80
10	3	11	1407	1424	44	5	0	12	1338	1490	32	-15	2	12	1137	1105	40
11	3	11	1285	1288	48	6	0	12	1981	2015	37	-14	2	12	353	408	113
12	3	11	143	144	143	7	0	12	841	813	38	-13	2	12	1376	1345	37
13	3	11	1747	1647	46	8	0	12	626	693	57	-12	2	12	727	721	45
14	3	11	334	165	298	9	0	12	1371	1307	43	-11	2	12	278	125	86
-12	4	11	545	498	100	10	0	12	1599	1586	42	-10	2	12	453	530	54
-11	4	11	684	512	259	11	0	12	684	512	259	-9	2	12	489	495	47
-10	4	11	534	535	102	12	0	12	2642	2582	71	-8	2	12	343	421	53
-9	4	11	162	167	162	13	0	12	1611	1640	68	-7	2	12	2459	2436	29
-8	4	11	422	498	421	14	0	12	1990	221	71	-6	2	12	607	514	58
-7	4	11	651	541	71	15	0	12	433	232	158	-5	2	12	705	688	39
-6	4	11	501	371	84	16	0	12	530	735	151	-4	2	12	775	758	40
-5	4	11	425	516	88	18	0	12	394	458	269	-3	2	12	1321	1301	30
-4	4	11	587	486	66	-20	1	12	1114	1155	94	-2	2	12	4222	4254	45
-3	4	11	1144	1073	66	-19	1	12	0	88	1	-1	2	12	1302	1266	30
-2	4	11	1561	1491	42	-18	1	12	328	409	104	0	2	12	1161	1180	30
-1	4	11	328	65	152	-17	1	12	413	474	119	-1	2	12	112	89	19
0	4	11	332	183	157	-16	1	12	2296	2216	38	0	2	12	1445	1510	29
1	4	11	437	271	88	-15	1	12	170	205	170	3	2	12	1009	998	39
2	4	11	933	929	53	-14	1	12	688	696	40	4	2	12	356	342	86
3	4	11	379	332	108	-13	1	12	308	277	72	5	2	12	1292	1279	37
4	4	11	227	137	227	-12	1	12	68	89	67	6	2	12	1642	1595	36
5	4	11	19	137	18	-11	1	12	748	784	34	7	2	12	726	714	47
6	4	11	170	452	191	-10	1	12	1325	1371	28	8	2	12	1463	1464	58
7	4	11	307	323	82	-9	1	12	2296	2216	38	9	2	12	1091	1081	40
8	4	11	199	85	199	-8	1	12	663	852	30	10	2	12	1347	1346	34
9	4	11	476	511	104	-7	1	12	127	109	127	11	2	12	627	614	52
10	4	11	1250	1533	55	-6	1	12	568	541	60	12	2	12	1266	2197	35
-3	5	11	419	83	419	-5	1	12	198	157	198	13	2	12	1504	1413	45
-2	5	11	70	264	69	-4	1	12	837	878	33	14	2	12	1928	1828	45
-1	5	11	0	133	10	-3	1	12	792	851	33	15	2	12	393	375	206
0	5	11	105	169	10	-2	1	12	1515	1313	72	16	2	12	706	706	19
1	5	11	933	933	104	-1	1	12	210	244	65	-16	3	12	1077	1088	180
2	5	11	694	195	128	0	1	12	2137	2190	26	-15	3	12	161	135	161
-19	0	12	518	538	117	1	1	12	534	571	31	-14	3	12	548	515	87

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 17

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	3	14	1590	1599	41	9	0	15	336	160	140	-8	2	15	962	930	32
3	14	814	709	53		10	0	15	1192	1227	76	-7	2	15	57	118	57
4	3	14	1218	1167	43	11	0	15	684	364	120	-6	2	15	1007	985	41
5	3	14	1353	1380	45	12	0	15	932	927	96	-5	2	15	284	176	99
6	3	14	696	799	63	13	0	15	1409	1306	80	-4	2	15	327	364	85
7	3	14	738	618	62	14	0	15	240	251	239	-3	2	15	1685	1713	32
8	3	14	248	190	248	15	0	15	983	869	109	-2	2	15	2096	2131	32
9	3	14	1397	1395	46	16	0	15	397	49	397	-1	2	15	290	104	108
10	3	14	785	625	67	-20	1	15	364	193	364	0	2	15	2541	2543	44
11	3	14	1202	1055	102	-19	1	15	1415	1236	76	1	2	15	1251	1238	35
12	3	14	1185	1148	54	-18	1	15	566	291	135	2	2	15	883	882	45
13	3	14	158	67	158	-17	1	15	366	202	141	3	2	15	1620	1623	35
14	3	14	1215	1181	59	-16	1	15	395	218	139	4	2	15	251	81	151
-9	4	14	598	643	88	-15	1	15	1702	1616	39	5	2	15	2036	2051	49
-8	4	14	339	37	338	-14	1	15	313	230	203	6	2	15	1101	1150	41
-7	4	14	432	65	125	-13	1	15	168	288	168	7	2	15	1197	1211	41
-6	4	14	1044	1063	55	-12	1	15	771	781	48	8	2	15	389	375	92
-5	4	14	355	91	123	-11	1	15	963	969	35	9	2	15	163	146	165
-4	4	14	1726	1744	83	-10	1	15	747	730	37	10	2	15	1018	1072	48
-3	4	14	1757	1865	44	-9	1	15	901	893	34	11	2	15	382	270	108
-2	4	14	2097	2041	44	-8	1	15	383	285	80	12	2	15	757	867	106
-1	4	14	883	923	55	-7	1	15	2995	2943	35	13	2	15	1149	1149	65
0	4	14	0	153	1	-6	1	15	289	358	103	14	2	15	483	252	138
1	4	14	342	139	341	-5	1	15	2869	2720	41	15	2	15	920	761	124
2	4	14	600	537	82	-4	1	15	2191	2237	32	-15	3	15	1254	1267	56
3	4	14	309	135	309	-3	1	15	200	172	199	-14	3	15	0	238	1
4	4	14	511	268	115	-2	1	15	1094	1184	34	-13	3	15	1	222	1
5	4	14	1692	1754	47	-1	1	15	976	1011	46	-12	3	15	497	510	76
6	4	14	248	210	248	0	1	15	685	761	43	-11	3	15	745	696	57
7	4	14	556	624	137	1	1	15	2290	2357	32	-10	3	15	518	620	82
-18	0	15	1007	932	78	2	1	15	1779	1776	30	-9	3	15	516	500	63
-17	0	15	851	744	86	3	1	15	2071	2080	31	-8	3	15	302	120	147
-16	0	15	1042	1046	72	4	1	15	496	511	53	-7	3	15	2103	2047	31
-15	0	15	366	382	170	5	1	15	396	350	68	-6	3	15	376	251	101
-14	0	15	166	291	165	6	1	15	929	984	33	-5	3	15	2118	2047	35
-13	0	15	1093	1074	70	7	1	15	2059	2151	31	-4	3	15	1699	1677	35
-12	0	15	2462	2401	72	8	1	15	1151	1200	33	-3	3	15	44	156	44
-11	0	15	2674	2610	74	9	1	15	809	761	51	-2	3	15	947	889	48
-10	0	15	422	370	139	10	1	15	275	310	135	-1	3	15	896	871	48
-9	0	15	0	100	1	11	1	15	492	514	98	0	3	15	555	469	70
-8	0	15	987	1028	71	12	1	15	471	358	185	1	3	15	1601	1552	42
-7	0	15	0	149	1	13	1	15	838	905	73	2	3	15	1203	1149	44
-6	0	15	1129	1192	38	14	1	15	152	167	152	3	3	15	1556	1558	74
-5	0	15	311	304	15	15	1	15	341	358	193	4	3	15	226	345	248
-4	0	15	354	354	78	16	1	15	828	935	80	5	3	15	122	186	122
-3	0	15	2081	2036	40	17	1	15	193	516	192	6	3	15	756	714	67
-2	0	15	2673	2731	45	-19	2	15	298	267	298	7	3	15	1605	1595	44
-1	0	15	344	124	192	-18	2	15	737	790	150	8	3	15	1014	911	53
0	0	15	3164	3147	67	-17	2	15	705	697	62	9	3	15	518	497	88
1	0	15	1474	1533	39	-16	2	15	849	862	68	10	3	15	0	84	1
2	0	15	1055	1010	38	-15	2	15	429	349	92	11	3	15	612	643	109
3	0	15	1769	1811	35	-14	2	15	126	261	126	12	3	15	268	177	267
4	0	15	0	23	1	-13	2	15	931	902	45	-11	3	15	249	16	248
5	0	15	2604	2449	38	-12	2	15	2117	2131	33	-10	3	15	732	694	73
6	0	15	1322	1459	36	-11	2	15	2231	2255	33	-9	3	15	165	218	164
7	0	15	1422	1466	44	-10	2	15	255	264	134	-8	3	15	699	614	115
8	0	15	606	596	65	-9	2	15	162	70	161	-7	3	15	585	53	123

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.18b7.45Se15. Page 19

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-5	0	17	1812	1868	68	-16	2	17	1116	1004	55	-8	4	17	654	790	107
-4	0	17	1153	1121	72	-15	2	17	317	431	246	-7	4	17	172	282	172
-3	0	17	512	420	128	-14	2	17	1677	1694	54	-6	4	17	696	738	51
-2	0	17	444	350	138	-13	2	17	470	534	76	-5	4	17	956	1026	101
-1	0	17	1657	1772	67	-12	2	17	408	418	73	-4	4	17	544	548	92
0	0	17	147	263	146	-11	2	17	531	471	58	-3	4	17	0	241	1
1	0	17	1505	1558	101	-10	2	17	1028	1016	57	-2	4	17	248	186	248
2	0	17	2515	2532	46	-9	2	17	763	752	43	-1	4	17	1167	992	55
3	0	17	449	96	112	-8	2	17	1158	1184	31	0	4	17	265	141	265
4	0	17	487	429	66	-7	2	17	510	501	69	1	4	17	940	884	62
5	0	17	1406	1440	38	-6	2	17	1192	1227	37	2	4	17	1188	1155	55
6	0	17	470	523	113	-5	2	17	1559	1578	34	3	4	17	236	109	236
7	0	17	1029	1064	51	-4	2	17	978	920	40	4	4	17	490	152	220
8	0	17	1600	1629	48	-3	2	17	268	378	130	-19	0	18	703	664	112
9	0	17	885	817	79	-2	2	17	289	306	109	-18	0	18	341	165	340
10	0	17	1359	1294	74	-1	2	17	1500	1503	34	-17	0	18	485	508	148
11	0	17	828	914	99	0	2	17	311	322	172	-16	0	18	480	42	161
12	0	17	1535	1527	74	1	2	17	1335	1319	40	-15	0	18	0	141	1
13	0	17	377	555	292	2	2	17	2036	2037	39	-14	0	18	766	613	104
14	0	17	622	503	158	3	2	17	204	106	203	-13	0	18	354	362	239
15	0	17	878	910	119	4	2	17	330	320	111	-12	0	18	1655	1572	75
16	0	17	141	174	410	5	2	17	1233	1200	42	-11	0	18	2132	2121	72
-19	1	17	737	801	118	6	2	17	500	486	70	-10	0	18	422	392	167
-18	1	17	263	99	263	7	2	17	916	859	50	-9	0	18	166	49	165
-16	1	17	665	665	70	8	2	17	1402	1417	52	-8	0	18	426	479	160
-15	1	17	2147	2095	51	9	2	17	751	721	63	-7	0	18	0	116	1
-14	1	17	757	725	118	10	2	17	1206	1133	49	-6	0	18	893	808	86
-13	1	17	414	330	108	11	2	17	783	789	83	-5	0	18	903	866	91
-12	1	17	908	911	46	12	2	17	1223	1323	68	-4	0	18	1840	1990	72
-11	1	17	243	285	115	13	2	17	236	477	236	-3	0	18	1636	1569	72
-10	1	17	852	875	36	14	2	17	436	464	436	-2	0	18	1439	1607	67
-9	1	17	1641	1662	69	15	2	17	1027	1051	37	-1	0	18	509	489	509
-8	1	17	592	565	37	16	3	17	277	323	277	0	0	18	1343	1400	72
-7	1	17	2455	2456	32	-12	3	17	883	739	55	1	0	18	272	215	272
-6	1	17	1032	975	39	-11	3	17	0	157	1	2	0	18	626	711	111
-5	1	17	834	822	41	-10	3	17	699	664	57	3	0	18	2098	2145	63
-4	1	17	1125	1173	35	-9	3	17	1213	1184	39	4	0	18	2309	2279	40
-3	1	17	816	835	55	-8	3	17	457	351	66	5	0	18	1593	1620	38
-2	1	17	92	93	38	-7	3	17	1774	1725	34	6	0	18	2121	2041	44
-1	1	17	2022	2023	38	-6	3	17	778	721	89	7	0	18	849	819	89
0	1	17	579	625	53	-5	3	17	302	445	130	8	0	18	1065	1089	46
1	1	17	1733	1713	33	-4	3	17	776	749	71	9	0	18	364	280	230
2	1	17	437	461	64	-3	3	17	624	600	64	10	0	18	0	150	1
3	1	17	2425	2481	36	-2	3	17	633	626	67	11	0	18	1519	1465	73
4	1	17	3042	3076	56	-1	3	17	1411	1403	59	12	0	18	852	928	99
5	1	17	1745	1738	30	0	3	17	232	319	231	13	0	18	1097	1043	96
6	1	17	931	903	48	1	3	17	1351	1315	47	14	0	18	764	755	76
7	1	17	931	903	48	2	3	17	190	313	189	15	0	18	532	233	235
8	1	17	1203	1199	42	3	3	17	1947	1811	44	-19	1	18	514	480	177
9	1	17	2129	2169	93	4	3	17	2268	2182	45	-18	1	18	91	182	91
10	1	17	1531	1563	52	5	3	17	1320	1304	47	-17	1	18	1246	1243	83
11	1	17	351	490	157	6	3	17	660	685	70	-16	1	18	1382	1284	58
12	1	17	1441	1359	84	7	3	17	571	636	116	-15	1	18	0	31	1
13	1	17	71	71	884	8	3	17	884	884	61	-14	1	18	515	464	22
14	1	17	35	35	154	9	3	17	1629	1546	49	-13	1	18	515	464	97
-18	2	17	711	784	151	10	3	17	1145	1156	56	-12	1	18	302	365	302
-17	2	17	138	281	137	11	3	17	0	323	1	-11	1	18	342	421	342

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 21

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	2	19	1633	1650	65	-3	0	20	629	536	111	2	2	20	798	883	58
1	2	19	610	519	68	-2	0	20	1293	1053	76	3	2	20	1079	1090	49
2	2	19	169	112	169	-1	0	20	919	913	82	4	2	20	899	946	82
3	2	19	440	410	89	0	0	20	1511	1565	71	5	2	20	435	428	101
4	2	19	1204	1175	47	1	0	20	319	229	318	6	2	20	490	464	94
5	2	19	1621	1619	43	2	0	20	1103	1143	82	7	2	20	1297	1349	49
6	2	19	630	516	86	3	0	20	1287	1305	80	8	2	20	1171	1207	51
7	2	19	1046	1121	51	4	0	20	1083	1141	80	9	2	20	237	300	237
8	2	19	0	211	1	5	0	20	263	491	263	10	2	20	0	195	1
9	2	19	284	20	284	6	0	20	596	555	146	11	2	20	0	55	1
10	2	19	210	174	210	7	0	20	1577	1604	79	-12	3	20	105	278	109
11	2	19	774	685	92	-17	1	20	498	466	169	-10	3	20	669	660	84
12	2	19	450	581	389	-16	1	20	161	77	161	-9	3	20	1248	1124	35
-13	3	19	286	332	286	-15	1	20	0	333	1	-8	3	20	420	539	81
-12	3	19	130	418	130	-14	1	20	336	248	181	-7	3	20	1569	1420	35
-11	3	19	906	758	54	-13	1	20	320	247	169	-6	3	20	887	928	52
-10	3	19	580	565	70	-12	1	20	361	382	130	-5	3	20	896	947	53
-9	3	19	302	207	126	-11	1	20	234	60	233	-4	3	20	677	620	101
-8	3	19	501	511	66	-10	1	20	868	903	89	-3	3	20	464	503	101
-7	3	19	602	636	59	-9	1	20	1763	1614	52	-2	3	20	528	616	94
-6	3	19	338	450	120	-8	1	20	566	632	86	-1	3	20	421	315	147
-5	3	19	635	527	66	-7	1	20	1961	1893	168	0	3	20	1332	1354	50
-4	3	19	354	183	124	-6	1	20	1247	1252	60	1	3	20	529	523	103
-3	3	19	1842	1799	45	-5	1	20	1288	1322	54	2	3	20	1113	1097	54
-2	3	19	539	488	86	-4	1	20	825	801	62	3	3	20	287	64	287
-1	3	19	946	916	57	-3	1	20	417	222	96	4	3	20	637	645	90
0	1	19	643	617	72	-2	1	20	926	834	42	5	3	20	0	182	1
1	1	19	741	681	68	-1	1	20	376	316	82	6	3	20	248	148	247
2	1	19	516	299	152	0	1	20	1940	1896	36	7	3	20	177	171	176
3	1	19	929	993	64	1	1	20	766	768	47	-17	0	21	151	126	150
4	1	19	1058	1033	55	2	1	20	1409	1413	41	-16	0	21	344	67	344
5	1	19	448	147	206	3	1	20	246	84	245	-15	0	21	391	197	240
6	1	19	456	524	205	4	1	20	728	700	73	-14	0	21	747	503	120
7	1	19	1230	1283	53	5	1	20	386	207	180	-13	0	21	341	83	340
8	1	19	242	398	242	6	1	20	211	221	211	-12	0	21	1421	1505	79
9	1	19	1233	1061	112	7	1	20	171	305	170	-11	0	21	982	1034	89
-5	4	19	509	299	375	8	1	20	393	465	393	-10	0	21	323	154	322
-6	4	19	326	110	325	9	1	20	1323	1382	57	-9	0	21	1032	1117	80
-4	4	19	733	182	154	10	1	20	1809	1817	55	-8	0	21	1049	1003	88
-3	4	19	607	665	190	11	1	20	1286	1369	89	-7	0	21	830	852	94
-2	4	19	737	123	147	12	1	20	958	702	102	-6	0	21	374	111	201
-1	4	19	609	773	189	-15	2	20	129	110	129	-5	0	21	1027	1010	81
0	4	19	1023	1069	118	-13	2	20	1568	1577	56	-4	0	21	1669	1655	73
-18	0	20	740	727	109	-12	2	20	989	978	43	-3	0	21	1172	1181	82
-17	0	20	388	374	249	-11	2	20	1021	941	53	-2	0	21	854	498	98
-16	0	20	747	525	106	-10	2	20	344	241	98	-1	0	21	1573	1577	72
-15	0	20	0	98	1	-9	2	20	594	505	56	0	21	931	766	94	
-13	0	20	1955	1862	77	-8	2	20	1112	1121	37	1	0	21	1758	1781	73
-12	0	20	1173	1123	85	-7	2	20	880	801	45	2	0	21	1274	1275	83
-11	0	20	1130	1050	81	-6	2	20	717	709	53	3	0	21	473	378	177
-10	0	20	413	285	178	-5	2	20	1282	1295	40	4	0	21	1204	1167	81
-9	0	20	522	643	126	-4	2	20	393	362	119	5	0	21	346	222	345
-8	0	20	1238	1289	78	-3	2	20	512	522	73	6	0	21	1561	1570	76
-7	0	20	935	952	89	-2	2	20	929	928	54	-16	1	21	753	789	83
-6	0	20	776	757	97	-1	2	20	812	812	51	-15	1	21	1274	1226	75
-5	0	20	1568	1550	74	0	2	20	1386	1340	46	-14	1	21	1279	1289	59
-4	0	20	629	402	124	1	2	20	414	185	224	-13	1	21	376	286	182

Table 4. Observed and calculated structure factors for K1.45Pb3.15b7.45Se15. Page 23

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
3	0	23	376	297	375	1	3	23	630	692	157	3	2	24	586	659	99
4	0	23	1241	1256	94	-14	0	24	584	581	177	4	2	24	699	614	81
5	0	23	0	66	1	-13	0	24	597	347	172	5	2	24	1155	1132	69
-15	1	23	803	721	132	-12	0	24	981	922	106	6	2	24	1152	1113	68
-14	1	23	646	635	94	-11	0	24	0	97	1	-6	3	24	490	516	211
-13	1	23	1454	1560	57	-10	0	24	1079	1099	83	-4	3	24	1426	1415	83
-12	1	23	878	923	69	-9	0	24	138	69	138	-3	3	24	619	294	156
-11	1	23	0	183	1	-8	0	24	2034	1963	78	-2	3	24	461	80	189
-10	1	23	1267	1329	60	-7	0	24	0	260	1	-1	3	24	905	861	110
-9	1	23	492	561	118	-6	0	24	515	475	162	0	3	24	341	452	340
-8	1	23	644	513	91	-5	0	24	457	209	215	-12	0	25	1636	1617	86
-7	1	23	203	96	202	-4	0	24	1784	1755	76	-10	0	25	435	391	233
-6	1	23	627	528	90	-3	0	24	1995	1962	77	-9	0	25	299	64	299
-5	1	23	728	530	142	-2	0	24	1124	1164	86	-8	0	25	893	805	110
-4	1	23	670	653	83	-1	0	24	577	585	131	-8	0	25	680	742	121
-3	1	23	489	521	113	0	0	24	917	966	107	-7	0	25	459	162	204
-2	1	23	1042	941	64	1	0	24	368	343	242	-5	0	25	1143	1151	91
-1	1	23	455	524	105	2	0	24	526	349	153	-4	0	25	547	467	131
0	1	23	817	823	62	3	0	24	526	787	256	-3	0	25	522	404	157
1	1	23	919	951	60	4	0	24	563	692	158	-2	0	25	1086	1063	94
2	1	23	137	230	136	5	0	24	1331	1283	99	-1	0	25	237	159	237
3	1	23	696	669	103	-14	1	24	0	251	1	1	0	25	216	311	215
4	1	23	787	764	91	-13	1	24	819	725	106	2	0	25	649	688	134
5	1	23	686	785	156	-12	1	24	563	294	193	3	0	25	518	311	176
6	1	23	660	663	165	-11	1	24	1299	1162	67	4	0	25	1664	1755	79
7	1	23	654	546	208	-10	1	24	221	296	221	-11	1	25	532	555	114
-13	2	23	774	275	128	-9	1	24	509	457	121	-10	1	25	1362	1392	63
-12	2	23	469	298	212	-8	1	24	990	971	73	-9	1	25	1521	1464	72
-11	2	23	800	901	79	-7	1	24	626	608	94	-8	1	25	1186	1159	66
-10	2	23	0	114	1	-6	1	24	634	534	86	-7	1	25	1089	999	68
-9	2	23	1058	996	67	-5	1	24	371	54	151	-6	1	25	519	562	110
-8	2	23	503	427	176	-4	1	24	190	188	67	-5	1	25	682	666	92
-7	2	23	843	901	74	-3	1	24	354	375	174	-4	1	25	490	474	100
-6	2	23	1409	1477	74	-2	1	24	367	52	166	-3	1	25	568	494	99
-5	2	23	445	257	272	-1	1	24	1247	1276	62	-2	1	25	1237	1286	60
-4	2	23	349	235	175	0	1	24	504	620	114	0	1	25	1133	1175	68
-3	2	23	306	292	153	1	1	24	1420	1360	49	1	1	25	1286	1270	66
-2	2	23	146	255	146	2	1	24	894	996	82	2	1	25	622	683	119
-1	2	23	216	214	214	3	1	24	506	466	150	3	1	25	1225	1180	72
0	2	23	891	841	63	4	1	24	542	616	151	4	1	25	1113	1151	64
1	2	23	678	624	79	5	1	24	566	747	355	5	1	25	775	278	214
2	2	23	936	848	61	6	1	24	0	100	1	6	1	25	752	438	167
3	2	23	519	246	100	8	1	24	954	862	133	7	1	25	0	480	1
4	2	23	998	1057	61	-12	2	24	914	821	108	-9	2	25	623	649	153
5	2	23	0	81	1	-10	2	24	1080	969	82	-8	2	25	706	649	96
6	2	23	675	527	84	-9	2	24	519	61	121	-7	2	25	240	129	239
7	2	23	376	376	97	-8	2	24	172	166	166	-6	2	25	642	135	149
8	2	23	1062	1104	98	-7	2	24	514	196	159	-5	2	25	930	966	106
-9	3	23	490	411	90	-6	2	24	411	398	285	-4	2	25	562	410	181
-8	3	23	344	83	270	-5	2	24	240	178	339	-3	2	25	298	311	298
-6	3	23	222	325	222	-4	2	24	1649	1538	70	-2	2	25	888	953	94
-5	3	23	151	312	150	-3	2	24	1599	1689	65	-1	2	25	237	133	237
-4	3	23	622	536	99	-2	2	24	1106	1015	81	0	2	25	261	62	261
-3	3	23	627	401	107	-1	2	24	574	532	135	1	2	25	162	293	162
-2	3	23	957	767	107	0	2	24	830	820	130	1	2	25	678	558	212
-1	3	23	0	449	0	1	2	24	50	219	1	-10	3	25	1096	1111	99
0	3	23	607	656	146	2	2	24	556	310	145	-9	0	26	311	15	311