

AM-92-506

High-pressure crystal chemistry of cubanite, CuFe<sub>2</sub>S<sub>3</sub>

Catherine McCammon, Jinmin Zhang, Robert M. Hazen, Larry W. Finger

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 77, 9-10, 937-944., pp<sup>1</sup>

1-3, 1-2, 1-2, 1-2

Table 4A

Cubanite in Air										Items with $Sg<0$ are Rejected											
h	k	l	10Fo	10Fc	50S9	h	k	l	10Fo	10Fc	50S9	h	k	l	10Fo	10Fc	50S9	h	k		
2	0	0	1478	1344	-112	1	13	0	117	105	80	1	21	23	-525	1	14	1	212	216	
4	0	0	1390	1359	107	3	13	0	185	185	55	6	5	1	59	9	-266	2	14	1	
6	0	0	1764	1710	135	5	13	0	75	58	215	8	5	1	274	270	49	3	14	1	
8	0	0	539	505	55	0	14	0	174	171	55	1	6	1	318	316	34	1	15	1	
1	1	0	21	24	-235	2	14	0	82	86	230	2	6	1	330	336	35	2	15	1	
3	1	0	75	66	101	4	14	0	42	42	-415	3	6	1	34	31	-395	0	2	1389	
5	1	0	61	53	-265	1	15	0	556	561	55	4	6	1	254	255	38	1	0	2	
7	1	0	60	50	-333	1	0	1	473	450	37	5	6	1	252	245	40	2	0	2	
9	1	0	67	39	-291	2	0	1	424	430	36	6	6	1	84	85	138	3	0	2	
0	2	0	225	221	20	3	0	1	41	41	-169	7	6	1	164	158	70	4	0	2	
2	2	0	128	125	44	4	0	1	386	388	38	8	6	1	38	49	-450	5	0	2	
4	2	0	19	25	-479	5	0	1	292	289	38	1	7	1	79	79	74	6	0	2	
6	2	0	49	57	-345	6	0	1	178	65	141	2	7	1	805	785	65	7	0	2	
8	2	0	39	41	-499	7	0	1	172	177	65	3	7	1	39	2	-337	8	0	2	
1	3	0	1670	1530	-126	8	0	1	84	63	135	4	7	1	598	604	63	0	2	1381	
3	3	0	2264	2052	-170	9	0	1	46	40	-409	5	7	1	72	73	200	1	2	1420	
5	3	0	954	937	77	1	1	38	11	-199	6	7	1	49	27	-339	2	1	147		
7	3	0	925	877	77	2	1	1	1027	1004	79	7	7	1	45	74	-525	3	1	1427	
0	4	0	39	40	-165	3	1	1	32	4	-277	8	7	1	316	312	61	4	1	662	
2	4	0	16	8	-408	4	1	1	751	756	61	1	8	1	569	564	49	5	1	2	
4	4	0	52	64	-262	5	1	1	20	17	-508	2	8	1	68	73	126	6	1	2	
6	4	0	83	63	113	6	1	1	49	30	-320	3	8	1	41	14	-290	7	1	2	
8	4	0	48	5	-383	7	1	1	51	39	-438	4	8	1	68	41	160	8	1	2	
1	5	0	121	126	27	8	1	1	370	345	48	5	8	1	353	366	44	0	2	122	
3	5	0	207	210	33	9	1	1	48	4	-495	6	8	1	22	22	5	-643	1	2	117
5	5	0	98	98	79	1	2	1	1026	1005	78	7	8	1	241	238	51	2	2	122	
7	5	0	22	4	-562	2	2	1	54	59	97	1	9	1	234	225	35	3	2	1087	
9	6	0	2327	2379	175	3	2	1	40	24	-229	2	9	1	260	249	37	4	2	65	
2	6	0	1242	1239	96	4	2	1	41	25	-291	3	9	1	60	33	207	5	2	387	
4	6	0	1133	1153	89	5	2	1	609	605	53	4	9	1	197	195	44	6	2	212	
6	6	0	1491	1491	116	6	2	1	34	6	-375	5	6	1	96	98	125	7	2	279	
8	6	0	447	432	53	7	2	1	386	372	48	6	9	1	64	33	-306	8	2	1062	
1	7	0	98	78	60	8	2	1	23	24	-580	7	9	1	102	86	137	0	3	248	
2	8	0	131	133	67	5	3	1	222	211	41	5	10	1	418	432	48	5	2	497	
4	8	0	91	64	105	6	3	1	448	456	37	1	10	1	625	619	54	1	3	207	
5	7	0	41	21	-349	3	2	3	400	384	36	2	10	1	100	96	79	3	2	50	
6	8	0	99	92	143	3	3	1	28	45	-357	3	10	1	48	18	-288	3	2	274	
7	7	0	86	8	3	1	201	191	55	2	11	1	365	93	-248	4	2	45			
8	8	0	264	31	4	3	1	276	269	35	4	10	1	65	93	-248	3	2	208		
1	3	7	0	129	123	66	1	2	448	456	37	1	10	1	625	619	54	1	3	238	
3	9	0	1743	1725	134	1	4	1	1013	1002	78	3	11	1	38	3	-417	0	4	124	
5	9	0	634	651	58	2	4	1	65	48	215	6	10	1	41	3	-407	1	4	387	
6	10	0	650	649	62	3	4	1	44	24	-215	5	11	1	40	25	-408	2	4	723	
7	10	0	183	180	34	4	4	1	51	48	-246	6	11	1	24	13	-595	3	4	291	
1	9	0	1101	1100	86	8	3	1	201	191	55	2	11	1	189	191	41	4	4	1108	
2	10	0	67	71	161	5	4	1	634	624	55	1	12	1	172	171	72	8	4	1088	
3	9	0	116	109	86	6	4	1	21	5	-521	2	12	1	86	82	113	5	4	1117	
4	10	0	141	144	83	7	4	1	407	392	47	3	12	1	24	18	-611	6	4	105	
5	10	0	99	102	77	8	4	1	48	55	-390	4	12	1	84	83	155	7	4	108	
6	11	0	202	180	47	5	1	1	83	89	76	5	12	1	172	171	72	8	4	108	
5	11	0	71	84	172	2	5	1	765	758	61	1	13	1	97	105	102	0	5	1082	
6	12	0	1501	1520	116	3	5	1	37	4	-307	1	13	1	435	432	48	1	6	39	
7	12	0	717	708	62	4	6	1	665	659	50	3	13	1	47	2	-367	2	6	378	
4	12	0	680	702	62	6	6	1	21	28	-514	3	13	1	354	356	49	3	6	55	

Cubanite in Air										Items with Sg<0 are Rejected														
h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k					
2	12	2	289	289	44	8	4	3	28	29	-506	4	13	3	399	408	51	0	6	644	642	54		
3	12	2	232	230	47	4	5	3	227	230	29	1	14	3	241	230	49	1	6	4	40	56		
4	12	2	313	49	2	5	3	755	754	61	2	14	3	102	112	142	2	6	4	309	-227			
5	12	2	101	90	144	3	5	3	25	20	-369	0	0	4	861	894	67	3	6	4	105	302		
6	13	2	614	611	57	4	5	3	588	576	52	1	0	4	81	79	71	4	6	4	200	85		
7	13	2	41	45	-368	5	5	3	122	114	82	2	0	4	422	421	39	5	6	4	66	202		
8	13	2	299	286	46	6	5	3	77	77	31	210	3	0	4	139	141	45	6	4	277	241	245	
9	13	2	60	76	-319	7	5	3	76	90	248	4	0	4	287	278	37	7	6	4	26	36		
10	14	2	251	255	53	8	5	3	307	302	50	5	0	4	108	76	87	0	7	4	48	504		
11	14	2	181	199	66	5	6	3	530	533	46	6	0	4	370	382	44	1	7	4	33	270		
12	14	2	22	13	-546	1	6	3	1377	1412	106	7	0	4	42	19	198	6	7	4	35	241		
13	14	2	170	143	61	2	6	3	1377	1412	106	7	0	4	22	9	-560	2	2	4	27	241		
14	14	2	68	10	-268	3	6	3	66	39	-226	8	0	4	135	149	88	3	7	4	49	27		
15	14	2	260	253	52	4	6	3	1103	1113	87	0	1	4	48	41	-242	0	8	4	47	212		
16	15	2	181	199	66	5	6	3	390	408	44	1	1	4	33	31	-261	5	7	4	40	319		
17	15	2	256	246	52	6	6	3	126	110	75	2	1	4	36	41	-369	2	8	4	21	524		
18	15	2	686	681	54	7	6	3	268	269	48	3	1	4	69	39	116	7	7	4	35	436		
19	15	2	1699	1699	121	1	7	3	40	44	-289	4	1	4	48	41	-242	0	8	4	124	281		
20	15	2	31	49	-371	1	7	3	818	818	86	5	1	4	49	7	-220	1	8	4	18	129		
21	15	2	1327	1327	101	3	7	3	29	22	-402	6	1	4	38	37	-190	6	8	4	60	465		
22	15	2	487	480	46	4	7	3	653	642	57	7	1	4	36	41	-369	2	8	4	67	57		
23	15	2	127	128	72	5	7	3	21	9	-524	8	1	4	30	5	-581	4	8	4	33	38		
24	15	2	291	305	44	6	7	3	80	35	155	0	2	4	128	125	37	5	8	4	43	12		
25	15	2	763	780	67	7	7	3	65	8	197	1	2	4	38	37	-190	6	8	4	60	369		
26	15	2	187	187	25	1	8	3	570	563	50	2	2	4	67	55	94	0	9	4	94	90		
27	15	2	997	1013	77	2	3	167	178	48	3	2	4	54	59	163	1	9	4	210	209			
28	15	2	44	26	-252	3	8	3	47	48	-257	4	2	4	24	27	-408	2	9	4	38	52		
29	15	2	774	764	63	4	8	3	147	152	56	5	2	4	48	46	-319	3	9	4	360	362		
30	15	2	92	72	108	5	8	3	380	390	45	6	2	4	62	52	-317	4	9	4	37	19		
31	15	2	62	39	-271	6	8	3	41	21	-397	7	2	4	22	35	-550	5	9	4	162	157		
32	15	2	62	39	-309	4	9	3	327	335	44	3	3	4	88	87	86	2	10	4	20	52		
33	15	2	68	29	-338	7	8	3	256	258	51	8	2	4	47	47	-335	6	9	4	30	58		
34	15	2	389	387	49	1	9	3	1130	1158	89	0	3	4	166	163	29	0	10	4	124	109		
35	15	2	974	989	75	2	9	3	414	421	43	1	3	4	397	403	37	1	10	4	57	22		
36	15	2	193	198	78	3	9	3	62	65	-212	2	3	4	88	87	86	2	10	4	20	503		
37	15	2	395	399	46	4	9	3	327	335	44	3	3	4	851	855	55	3	10	4	61	33		
38	15	2	151	162	49	5	9	3	836	880	71	4	3	4	39	33	-329	4	10	4	67	211		
39	15	2	630	627	55	6	9	3	58	45	-308	5	3	4	246	247	41	5	10	4	48	459		
40	15	2	342	31	-334	1	10	3	666	667	67	6	3	4	59	78	198	0	11	4	64	63		
41	15	2	395	399	46	2	10	3	48	22	-256	7	3	4	851	855	55	3	10	4	61	33		
42	15	2	77	33	237	3	10	3	48	21	-335	0	4	4	37	10	-472	2	11	4	54	49		
43	15	2	1684	1677	120	4	10	3	35	38	-389	1	4	4	34	30	-238	3	11	4	72	79		
44	15	2	619	621	51	5	10	3	469	488	62	2	4	4	18	5	-442	4	11	4	24	28		
45	15	2	3	104	92	50	6	10	3	42	27	-400	3	4	55	66	194	0	12	4	101	100		
46	15	2	464	44	111	3	163	159	45	4	4	4	19	21	-472	1	12	4	64	281				
47	15	2	3	1177	1205	93	2	11	3	373	360	43	6	4	4	21	4	-531	2	12	4	64	389	
48	15	2	3	60	-342	3	11	3	53	11	-271	6	4	4	88	62	125	3	12	4	47	7		
49	15	2	3	753	782	65	4	11	3	292	289	46	7	4	4	63	54	-354	3	7	5	58	374	
50	15	2	3	298	308	48	5	11	3	95	96	131	0	5	4	63	33	211	4	12	4	101	121	
51	15	2	3	499	1011	77	1	12	3	328	328	42	1	5	4	61	66	161	0	13	4	64	273	
52	15	2	3	99	90	65	2	12	3	867	858	72	2	4	4	52	24	161	2	13	4	61	154	
53	15	2	3	38	29	-291	3	12	3	55	24	-310	3	5	4	110	103	68	2	0	5	54	1029	
54	15	2	3	91	81	125	4	12	3	669	693	82	4	5	4	110	103	68	2	0	5	54	1029	
55	15	2	3	669	661	58	1	13	3	41	41	-435	6	5	4	49	29	-374	3	0	5	33	375	
56	15	2	3	59	34	197	2	13	3	479	491	52	6	5	4	41	43	-428	4	0	5	33	374	
57	15	2	3	424	430	48	3	13	3	41	16	-388	7	6	4	6	138	123	65	0	6	5	33	374
58	15	2	3	7	4	48	4	13	3	41	16	-388	7	6	4	6	138	123	65	1	9	5	33	374

Page 2										Page 3														
h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	
1	2	2	232	230	47	2	2	5	755	754	61	2	14	3	102	112	142	2	6	4	309	302	36	
2	2	2	313	319	49	2	2	5	25	20	-369	0	0	4	861	894	67	3	6	4	105	85	85	
3	2	2	101	90	144	3	2	5	3	307	302	50	5	0	4	108	76	87	0	7	4	120	139	87
4	2	2	611	614	57	4	5	3	588	576														

Table 4A (cont.)

Cubanite in Air		10Fo		10Fc		5oSg		h		h		Page 3		Items with Sg<0 are Rejected	
h	k	h	k	h	k	h	k	h	k	h	k	h	k	h	k
2	9	5	119	110	78	6	105	108	69	4	6	141	142	70	6
3	9	5	56	49	-294	3	2	6	787	784	68	5	6	129	117
4	9	5	91	80	209	4	2	6	98	83	104	0	7	838	840
5	9	5	826	823	72	5	2	6	282	278	45	1	7	118	103
1	10	5	182	185	51	6	2	6	144	137	83	2	7	389	384
2	10	5	137	147	67	0	3	6	472	469	45	3	7	185	188
3	10	5	58	4	-296	1	3	6	160	155	48	4	7	363	370
4	10	5	119	122	105	2	3	6	205	196	39	5	7	41	82
1	11	5	64	56	-243	3	3	6	261	264	40	0	8	142	143
2	11	5	141	112	70	4	3	6	250	250	42	1	8	304	295
3	11	5	59	9	-281	5	3	6	85	89	150	2	8	56	316
1	12	5	49	75	-378	6	3	6	315	331	48	3	8	620	512
2	12	5	822	804	71	0	4	6	233	234	38	4	8	57	56
0	0	8	296	299	37	1	4	6	487	483	46	0	9	380	366
1	0	6	256	257	36	2	4	6	97	113	87	1	9	6	125
2	0	6	118	122	65	3	4	6	823	823	68	2	9	6	159
3	0	6	441	440	45	4	4	6	98	89	195	3	9	207	203
4	0	6	170	162	50	5	4	6	308	295	46	4	9	203	198
5	0	6	132	130	72	6	4	6	147	148	72	0	10	167	179
6	0	6	192	195	59	0	5	6	751	762	63	1	10	6	355
0	1	6	967	974	78	1	5	6	105	90	79	2	10	80	87
1	1	6	126	116	52	2	5	6	344	345	41	3	10	6	646
2	1	6	445	444	44	3	5	6	180	163	52	0	11	6	422
3	1	6	208	40	4	5	6	325	327	44	1	11	6	23	
4	1	6	408	410	44	5	6	74	71	191	1	0	7	163	
5	1	6	71	89	180	0	6	268	267	39	2	0	7	51	
6	1	6	673	674	56	1	6	225	226	39	3	0	7	332	
0	2	6	220	220	36	2	6	6	126	109	57	4	0	7	68
1	2	6	460	462	44	3	6	406	389	45	5	0	7	132	
2	0	6	462	462	44	3	6	406	389	45	5	0	7	234	

TABLE 4b

## Cubanite at 0 GPa in Cell

	$h$	$k$	$l$	10Fo	10Fc	5oSg	$h$	$k$	$l$	10Fo	10Fc	5oSg	$h$	$k$	$l$	10Fo	10Fc	5oSg	$h$	$k$	$l$	10Fo	10Fc	5oSg	$h$	$k$	$l$	10Fo	10Fc	5oSg	
0	2	0	242	222	36	1	2	2	2	108	77	-68	1	5	3	220	224	163	1	6	4	43	95-1083	1	8	5	218	156	260		
0	1	3	0	1282	1336	100	2	2	2	108	77	362	2	5	3	729	692	82	2	6	4	275	300	171	2	8	5	91	19	-788	
0	0	4	0	50	-484	0	3	2	512	491	59	3	5	3	39	1	-964	3	6	4	175	154	260	3	8	5	47	16-1176			
0	1	5	0	98	134	-371	1	3	2	698	678	67	1	6	3	498	495	97	0	7	4	42	26-1057	1	9	5	857	884	108		
0	0	6	0	1841	1785	144	2	3	2	195	173	115	2	6	3	1263	1241	109	1	7	4	43	50-1083	2	9	5	144	91	-524		
0	2	6	0	1005	1065	87	0	4	2	161	186	212	3	6	3	176	223	2	2	7	4	45	6-1132	3	9	5	47	109-1166			
1	1	7	0	61	84	-588	1	4	2	711	681	75	1	7	3	91	43	-600	3	7	4	185	66	274	1	10	5	126	173	-706	
0	8	0	246	264	163	2	4	2	121	90	-578	2	7	3	791	751	92	0	8	4	154	138	-682	2	10	5	100	173	-802		
2	8	0	146	121	254	0	5	2	1067	955	94	3	7	3	42	13-1043	1	8	4	70	49	-849	3	10	5	48	9-1202				
1	1	9	0	942	1000	93	1	5	2	111	43	422	1	8	3	533	502	97	2	8	4	107	81	-658	1	11	5	50	37-1260		
0	10	0	123	180	-650	2	5	2	481	471	75	2	8	3	173	289	3	8	4	156	76	319	2	11	5	86	83	-864			
2	10	0	82	65	-728	0	8	2	979	940	89	3	8	3	201	33	-180	0	9	4	70	132	-979	3	11	5	49	1-1219			
1	1	0	54	103	-903	1	6	2	218	224	165	1	9	3	1024	990	104	1	9	4	143	184	503	1	12	5	115	64	-675		
0	12	0	1188	1277	112	2	6	2	437	381	87	3	8	3	387	390	136	2	9	4	78	59	-809	2	12	5	638	665	127		
2	12	0	597	569	107	0	7	2	1045	1022	95	3	9	3	44	125-1098	3	9	4	324	335	174	0	6	6	258	279				
1	13	0	87	100	-1228	1	7	2	95	77	-542	1	10	3	603	689	119	0	10	4	104	98	-762	1	0	6	233	239	228		
0	14	0	166	154	397	2	7	2	634	492	90	2	10	3	47	19-1189	1	10	4	94	9	-933	2	1	0	6	46	83-1133			
2	14	0	44	69	-1343	0	8	2	103	53	-526	3	10	3	173	46	289	2	10	4	142	24	412	3	0	6	369	385	141		
1	15	0	425	472	161	1	8	2	342	347	125	1	11	3	137	139	-595	3	10	4	51	10-1019	0	1	0	6	839	849			
1	1	0	371	404	38	2	8	2	159	33	428	2	11	3	364	312	160	0	11	4	47	77-1179	1	1	0	129	-603				
1	1	1	18	14	-462	3	8	2	566	565	460	3	11	3	102	6	-487	1	11	4	66	49-1112	2	1	0	403	374	148			
1	1	2	1	857	896	70	0	9	2	278	297	172	1	12	3	301	274	190	2	11	4	131	28-575	3	1	0	196	204	248		
1	1	3	1	404	455	51	1	9	2	422	420	115	2	12	3	728	731	118	3	11	4	48	95-1190	0	2	0	211	223	234		
1	1	4	1	883	911	76	2	9	2	145	107	401	3	12	3	111	41	-680	0	12	4	171	254	377	1	2	0	405	417	135	
1	2	4	1	119	78	229	3	9	2	717	654	176	1	13	3	88	38	-806	1	12	4	133	44	-601	2	2	0	163	88	-682	
1	1	5	1	127	114	212	0	10	2	190	128	669	2	13	3	446	424	160	2	12	4	102	138	-824	3	12	0	669	678	101	
1	2	5	1	660	726	79	1	10	2	362	408	140	3	13	3	159	11	345	3	12	4	169	77	346	0	3	6	444	416	123	
1	1	6	1	272	276	115	2	10	2	121	81	-681	1	14	3	198	186	340	4	13	4	83	5	-876	1	2	0	166	141	487	
1	2	6	1	271	319	115	3	10	2	663	671	493	2	14	3	72	95	-878	1	13	4	119	62	-756	2	1	0	210	159	262	
1	2	7	1	36	79	-891	0	11	2	400	412	148	0	4	4	897	808	84	2	13	4	102	4	-837	3	1	0	213	326		
2	7	1	707	742	80	1	11	2	77	8	-650	1	0	4	138	132	220	0	5	4	102	138	-828	0	4	6	242	237	232		
1	8	1	527	522	87	2	11	2	265	191	208	2	0	4	430	417	92	2	0	4	88	5	1229	1328	109	1	4	6	424	431	138
2	8	1	41	83	-978	3	11	2	41	23-1032	3	0	4	180	209	210	3	0	4	63	43	7-1087	2	4	6	136	95	-685			
1	1	9	1	230	228	0	12	2	661	664	116	0	1	4	106	67	-431	1	1	5	91	111	-530	3	4	6	717	702	108		
2	9	1	222	211	198	1	12	2	48	119	-1190	1	1	4	38	8	-943	2	1	5	317	285	152	0	5	6	897	682	98		
1	10	1	551	567	101	0	12	2	282	211	191	2	1	4	88	21	-628	3	1	5	43	19-1069	1	5	6	142	95	426			
2	10	1	93	108	-685	0	13	2	608	562	134	3	1	4	107	36	386	1	2	5	294	293	158	2	6	6	86	71	-796		
1	11	1	46	90	-1162	1	13	2	48	49-1197	0	2	4	129	117	104	2	4	5	72	64	-786	3	6	6	98	150				
2	11	1	321	309	181	2	13	2	278	260	211	1	2	4	121	48	295	3	2	5	116	19	-540	0	6	6	193	221	288		
1	12	1	180	151	371	0	14	2	159	7	-558	2	2	4	100	84	-636	1	3	5	126	169	-615	1	7	6	99	108	-769		
2	12	1	45	82	-1127	1	14	2	153	111	505	3	2	4	86	71	-572	2	3	5	124	161	-445	2	6	6	86	71	311		
1	13	1	46	87	-1205	2	14	2	50	9-1136	0	3	4	207	242	173	3	3	5	44	160-1088	3	6	6	346	329	187				
2	13	1	393	384	158	0	15	2	168	159	543	1	3	4	407	367	104	1	4	5	298	293	149	0	7	6	723	710	109		
1	14	1	186	183	320	54	1	2	168	204	426	2	3	4	69	105	-690	2	4	5	122	169	-615	1	7	6	99	108	-769		
1	0	2	304	306	54	1	2	3	911	877	82	3	4	4	624	607	83	3	4	5	126	136	-557	2	6	6	105	50	-675		
2	0	2	498	519	55	2	2	208	140	1374	116	1	4	4	84	94	-562	2	6	5	1105	1120	109	3	8	6	394	428	171		
1	1	2	1201	1152	95	1	3	3	1414	1374	116	1	5	4	116	66	-648	2	6	5	80	80	5	6	178	129	360				
2	1	2	86	88	206	3	3	588	609	72	2	4	4	107	33	-598	1	5	4	48	170-1191	1	9	8	113	101	-682				
2	1	2	581	659	-559	1	4	3	871	903	82	3	5	4	42	110-1049	2	7	6	233	216	232	2	9	6	236	23	3			
0	2	2	144	150	128	2	4	3	121	95	399	0	6																		

TABLE 4B (cont.).

Cubanite at 0 GPa in Cell										Page 2										Items with Sg<0 are Rejected										
	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg
0 10 6	208	168	307	2	1	7	234	218	228	3	4	7	123	4	-554	1	8	7	144	96	190	2	2	8	47	24-1177				
1 10 6	289	297	216	3	1	7	135	16	-482	1	5	7	79	112	-866	2	8	7	49	80-1214	3	2	8	184	201	678				
2 10 6	98	68	-813	1	2	7	166	200	521	2	5	7	189	137	329	1	9	7	160	42	-428	1	3	8	407	427	158			
3 10 6	409	500	166	2	2	7	104	111	-867	3	5	7	101	14	-751	1	0	8	258	230	234	2	3	8	143	179	421			
0 11 6	372	339	185	3	2	7	124	9	-730	1	6	7	111	177	-644	2	0	8	365	356	171	3	3	8	708	703	116			
1 11 6	84	45	-847	1	3	7	120	44	-561	2	6	7	122	67	-608	3	0	8	398	387	163	1	4	8	116	138	-889			
1 1 7	184	212	292	2	3	7	117	207	-615	3	6	7	84	21	-832	1	1	8	108	10	-773	2	4	8	63	2	-989			
2 0 7	61	70	-919	3	3	7	80	54	-841	1	7	7	99	83	-910	2	1	8	142	97	-677	1	5	8	90	31-1193				
3 0 7	149	26	374	1	4	7	209	238	280	2	7	7	217	210	283	3	1	8	118	13	-677	2	5	8	75	71	-892			
1 1 7	118	125	-585	2	4	7	139	95	476	3	7	7	50	12-1247	1	2	8	48	124-1181	1	6	8	166	193	-732					

TABLE 4C

Cubanite at 1.7 GPa										Items with Sg<0 are Rejected										
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	
0	2	0	229	226	36	1	2	2	766	689	67	2	3	3	253	169	127	1	5	
1	3	0	1186	1379	-93	2	2	2	84	95	-488	3	3	3	838	818	79	4	4	
0	4	0	57	45	-407	0	3	2	523	514	57	1	4	4	148	148	148	5	4	
1	5	0	75	147	-451	1	3	2	624	622	62	2	4	4	148	148	148	5	4	
0	6	0	1880	1844	146	2	3	2	166	172	156	3	4	3	35	59	-880	3	5	
2	6	0	919	1073	-81	0	4	2	148	188	214	1	5	3	183	230	176	1	6	
1	7	0	221	67	425	1	4	2	718	695	70	2	5	3	681	613	78	2	6	
0	8	0	222	273	172	2	4	2	36	106	-904	3	5	3	37	24	-933	3	6	
2	8	0	160	111	227	0	5	2	1061	988	93	1	6	3	461	457	92	0	7	
1	9	0	911	977	91	1	5	2	145	31	-547	2	6	3	1269	1278	109	1	7	
0	10	0	98	154	-635	2	5	2	482	482	487	3	6	3	121	63	290	2	7	
2	10	0	174	65	248	0	6	2	885	874	82	1	7	3	39	34	-985	0	8	
1	11	0	153	113	510	1	6	2	201	231	148	3	7	3	660	658	86	1	8	
0	12	0	1137	1227	108	2	6	2	438	361	81	3	7	3	41	7	-1021	2	8	
2	12	0	546	542	113	0	7	2	1009	1026	91	1	8	3	441	434	107	3	8	
1	13	0	145	78	485	1	7	2	107	87	-563	2	8	3	116	194	-863	0	9	
0	14	0	130	163	425	2	7	2	621	471	86	3	8	3	46	28	-892	1	9	
2	14	0	190	65	661	3	7	2	109	127	332	1	9	3	999	1011	99	2	9	
1	15	0	391	429	156	0	8	2	80	38	-693	2	9	3	339	344	147	3	9	
1	16	0	363	407	36	1	8	2	373	357	120	3	9	3	100	107	-563	0	10	
1	17	0	55	22	-199	2	8	2	186	37	298	1	10	3	541	499	118	1	10	
1	18	0	863	918	70	3	8	2	574	569	84	2	10	3	121	14	-611	2	10	
1	19	0	377	404	48	0	9	2	276	295	158	3	10	3	122	39	-634	3	10	
1	20	0	904	916	77	1	9	2	356	371	125	1	11	3	152	162	439	0	11	
1	21	0	22	74	-1018	2	9	2	36	101	-832	2	11	3	211	261	430	1	11	
1	22	0	130	88	225	3	9	2	594	589	89	3	11	3	48	20	-956	2	11	
1	23	0	589	730	-73	0	10	2	140	114	-708	1	12	3	181	234	334	3	11	
1	24	0	305	270	102	1	10	2	363	393	135	2	12	3	706	718	109	0	12	
1	25	0	1	306	293	110	2	10	2	44	65	-1092	3	12	3	73	32	-789	1	12
1	26	0	260	293	109	2	10	2	44	65	-1092	3	12	3	116	35	-709	2	12	
1	27	0	34	57	-858	3	10	2	630	636	88	1	13	3	366	346	165	3	12	
1	28	0	1	717	731	83	0	11	2	377	417	135	2	13	3	308	2	103	0	13
1	29	0	1	501	616	84	1	11	2	139	7	495	3	13	3	115	161	-725	1	13
1	30	0	1	38	42	-961	2	11	2	176	186	374	1	14	3	74	112	-830	2	13
1	31	0	1	169	186	357	3	11	2	41	4	-1029	1	14	3	74	112	-830	1	14
1	32	0	2	236	207	171	0	12	2	484	491	118	0	4	834	785	80	1	4	
1	33	0	1	520	541	100	1	12	2	153	115	454	1	0	4	46	122	-733	2	0
1	34	0	1	112	95	-661	2	12	2	241	195	209	2	0	4	371	367	106	3	0
1	35	0	1	111	43	53-1084	3	12	2	43	183	-1067	3	0	4	62	183	-596	1	1
1	36	0	1	281	298	166	0	13	2	492	511	126	0	1	4	61	135	-634	2	2
1	37	0	1	141	137	333	1	13	2	48	36	-1174	1	1	4	81	12	-501	3	1
1	38	0	1	43	63	-1083	2	13	2	227	223	227	2	4	108	67	483	1	2	
1	39	0	1	102	68	-747	3	13	2	94	70	-851	3	1	4	63	19	-825	2	2
1	40	0	1	112	102	-576	1	15	2	203	173	268	0	3	4	200	217	170	1	4
1	41	0	2	257	352	216	0	14	2	151	14	-677	0	2	4	87	81	-529	3	2
1	42	0	1	141	137	333	1	13	2	131	114	-616	1	2	4	73	71	-576	1	3
1	43	0	1	105	18	-815	2	14	2	48	5	-1138	2	2	4	108	67	-729	2	3
1	44	0	1	115	47	38-1175	0	15	2	81	145	-927	3	2	4	106	114	326	3	3
1	45	0	1	112	102	-576	1	15	2	203	173	268	0	3	4	200	217	170	1	4
1	46	0	2	1194	1115	94	1	0	3	644	610	72	1	3	4	363	362	106	2	4
1	47	0	2	322	323	54	2	0	3	1493	1529	119	2	3	4	38	87	-954	3	4
1	48	0	2	485	500	55	1	0	3	179	169	3	3	4	582	664	83	1	5	
1	49	0	2	1342	1209	104	2	1	3	826	844	77	0	4	82	28	-610	2	5	
1	50	0	2	1	25	78	-627	1	2	3	801	801	76	1	4	76	56	-581	3	5
1	51	0	2	688	656	-58	2	3	216	217	118	2	4	4	79	32	-682	1	6	
1	52	0	2	132	150	126	1	3	3	1468	1454	118	3	4	4	106	91	-523	2	6
1	53	0	2	2	2	226	0	10	3	226	226	118	0	10	3	1001	1041	-103	3	8

TABLE 4.C (cont.)

Cubanite at 1.7 GPa										Items with Sg<0 are Rejected									
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k
0	9	6	182	281	352	3	0	7	45	37-1124	2	4	7	46	59-1146	3	7	7	97
1	9	6	121	151	-494	3	1	7	135	95-502	3	4	7	72	10-894	1	8	7	117
2	9	6	131	113	-623	2	1	7	282	191-180	1	5	7	102	85-639	2	8	7	47
3	9	6	247	243	227	3	1	7	109	29-686	2	5	7	122	125-654	1	9	7	63
0	10	6	130	138	-546	1	2	7	185	172-441	3	5	7	46	24-1149	1	0	8	81
1	10	6	216	257	265	2	2	7	139	76-458	1	6	7	85	177-705	2	0	8	367
2	10	6	47	50-1163	3	2	7	46	6-1139	2	6	7	74	28-1095	3	0	8	275	
0	11	6	312	285	215	1	3	7	73	28-782	3	6	7	103	30-682	1	1	8	96
1	11	6	91	60	-857	2	3	7	188	213-275	1	7	7	141	65-400	2	1	8	75
1	0	7	247	215	184	3	3	7	87	31-769	2	7	7	180	175-447	3	1	8	81
2	0	7	44	28-1111	1	4	7	222	198	1	4	7	231	5-857	2	5	8	73	

TABLE 4D

Cubanite at 3.6 GPa										Page 1										
	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg	h	k	l	10Fo	10Fc	5oSg		
0	0	226	226	47	2	2	176	186	131	3	3	40	64-1005	3	4	154	138	387		
1	3	0	1635	1944	-127	1	2	2	855	797	80	1	3	2004	1915	159	0	5	4	
0	4	0	98	42	231	2	2	2	233	228	351	2	3	565	578	90	1	5	4	
1	5	0	96	173	-575	0	3	2	571	571	68	3	3	143	167	-524	2	5	4	
0	6	0	2715	2693	209	1	3	2	620	580	75	1	4	3	773	747	90	3	5	4
2	6	0	1143	1178	102	2	3	2	168	101	222	2	4	3	121	108	-447	0	6	4
1	7	0	79	43	-718	0	4	2	134	226	-816	3	4	66	72-1011	1	6	4	195	
0	8	0	202	259	298	1	4	2	759	784	83	1	5	205	208	207	2	6	4	
2	8	0	96	56	-757	2	4	2	76	231	-722	2	5	3	578	554	106	3	6	4
1	9	0	1035	1076	109	0	5	2	1223	1178	111	3	5	3	44	106-1135	0	7	4	
0	10	0	148	168	413	1	5	2	113	7	-676	1	6	3	427	436	137	1	7	4
2	10	0	136	111	461	2	5	2	483	486	100	2	6	3	1661	1540	134	2	7	4
1	11	0	52	122-	1319	0	6	2	884	868	92	3	6	3	80	108	-903	3	7	4
0	12	0	1361	1390	133	1	6	2	278	277	172	1	7	3	111	10-1023	0	8	4	
2	12	0	602	579	149	2	6	2	398	355	130	2	7	3	592	595	117	1	8	4
1	13	0	101	77	631	0	7	2	1237	1168	113	3	7	3	48	82-1246	1	2	8	
0	14	0	164	148	515	1	7	2	48	48-	1208	1	8	3	413	388	165	3	8	4
2	14	0	115	35	-786	2	7	2	531	471	119	2	8	3	93	206	-963	0	9	4
1	15	0	400	471	496	0	8	2	148	78	519	2	8	3	105	30	-798	1	9	4
1	0	1	387	392	44	1	8	2	421	406	145	1	9	3	1207	1177	125	2	9	4
1	1	1	22	87	-559	2	8	2	82	124	-874	2	9	3	338	345	215	3	9	4
1	2	1	1035	1093	85	3	8	2	662	644	110	3	9	3	119	98	-748	0	10	4
1	3	1	321	350	72	0	9	2	351	310	177	1	10	3	483	444	168	1	10	4
1	4	1	1043	1048	91	1	9	2	370	339	166	2	10	3	138	25	-652	2	10	4
2	4	1	146	113	217	2	9	2	575	59-	1066	3	10	3	132	4	-812	3	10	4
1	5	1	38	121	-956	3	9	2	566	549	119	1	11	3	169	135	572	0	11	4
2	5	1	710	792	270	0	10	2	63	164-	2731	2	11	3	201	239	-725	1	11	4
1	6	1	270	250	145	1	10	2	406	434	176	3	11	3	52	67	-803	2	11	4
2	6	1	249	322	332	2	10	2	54	153-	1348	1	12	3	238	226	337	3	11	4
1	7	1	116	22	350	3	10	2	636	691	131	2	12	3	756	818	141	0	12	4
2	7	1	753	782	97	0	11	2	436	489	173	3	12	3	117	56	-883	1	12	4
1	8	1	621	654	104	1	11	2	191	9	-898	1	13	3	80	76-	1497	2	12	4
2	8	1	96	13-	1371	2	11	2	227	209	388	2	13	3	310	319	295	3	12	4
1	9	1	134	157	-571	3	11	2	62	56-	1308	2	14	3	61	144-	1508	0	13	4
2	9	1	171	216	348	0	12	2	459	483	177	2	14	3	105	113-	1523	1	13	4
1	10	1	550	563	134	1	12	2	65	135-	1374	0	4	4	767	816	86	2	13	4
2	10	1	50	80	-1239	2	12	2	218	208	362	1	0	4	88	134	-687	1	0	5
3	10	1	170	52	361	3	12	2	207	184	361	2	0	4	298	291	184	2	1	4
1	11	1	54	83-	1355	0	13	2	575	564	163	3	0	4	167	196	334	3	0	5
2	11	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	0	5
1	12	1	184	126	496	3	13	2	226	228	561	1	1	4	42	63-1051	1	1	5	6
2	12	1	102	82	-901	0	14	2	127	22	-847	3	1	4	298	291	184	2	1	4
1	13	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
2	13	1	375	379	226	2	14	2	82	52-	1051	1	2	4	87	90	-713	1	3	4
1	14	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
2	14	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
1	15	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	4
2	15	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
1	16	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	2	4
2	16	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
1	17	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
2	17	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	4
1	18	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
2	18	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	2	4
1	19	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
2	19	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
1	20	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	4
2	20	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
1	21	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	2	4
2	21	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
1	22	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
2	22	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	4
1	23	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
2	23	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	2	4
1	24	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
2	24	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
1	25	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	4
2	25	1	56	7-	1401	1	14	2	184	148	-660	0	2	4	70	84	-708	4	2	4
1	26	1	313	331	214	0	12	2	103	39	-968	0	1	4	150	196	282	4	2	4
2	26	1	236	200	357	3	14	2	338	247	240	2	2	4	46	195-	1136	2	2	5
1	27	1	57	21-	1414	1	0	3	623	598	79	3	2	4	93	157	-768	3	2	5
2	27	1	58	32-	1447	2	0	3	2057	1991	182	0	3	4	185	232	270	4	3	

TABLE 4D (cont)