

8187 orig

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s						
-1	2	0	100	475	28	-5	31	0	108	67	69	-18	20	1	355	362	7	-13	31	1	0	32	1	-10	12	2	725	668	3
0	3	0	502	697	11	-2	31	0	349	317	17	-15	20	1	164	147	13	-10	31	1	121	16	43	-7	12	2	293	328	4
-2	4	0	1744	1934	16	-16	32	0	172	187	41	-12	20	1	84	93	28	-7	31	1	411	412	11	-4	12	2	589	526	2
-1	5	0	138	180	3	-13	32	0	222	241	20	-9	20	1	659	657	3	-4	31	1	98	71	97	-1	12	2	372	408	3
-3	6	0	374	469	3	-10	32	0	0	47	1	-6	20	1	419	410	5	-1	31	1	181	161	34	-12	13	2	155	148	8
0	6	0	724	581	3	-7	32	0	250	255	22	-3	20	1	391	415	6	-30	32	1	86	113	85	-9	13	2	131	137	9
-2	7	0	337	363	2	-4	32	0	0	20	1	-20	21	1	764	740	5	-27	32	1	282	265	21	-6	13	2	243	314	5
-4	8	0	305	321	4	-1	32	0	100	93	100	-17	21	1	0	20	1	-24	32	1	154	160	37	-3	13	2	222	201	5
-1	8	0	240	315	3	-15	33	0	124	28	48	-14	21	1	301	316	7	-21	32	1	385	383	13	0	13	2	25	16	24
-3	9	0	323	202	2	-12	33	0	359	338	14	-11	21	1	54	64	54	-18	32	1	435	420	11	-14	14	2	1141	1027	6
0	9	0	820	872	4	-9	33	0	30	48	30	-8	21	1	624	602	4	-15	32	1	532	517	9	-11	14	2	212	271	6
-5	10	0	240	206	6	-6	33	0	342	316	17	-5	21	1	458	435	5	-12	32	1	139	143	37	-8	14	2	688	636	2
-2	10	0	1203	1184	4	-3	33	0	0	46	1	-2	21	1	168	182	15	-9	32	1	437	420	11	-5	14	2	432	463	3
-4	11	0	40	38	40	0	33	0	370	391	47	-19	22	1	400	404	7	-6	32	1	89	76	89	-2	14	2	640	619	2
-1	11	0	66	57	19	-17	34	0	158	147	57	-16	22	1	186	160	13	-3	32	1	244	255	26	-13	15	2	99	106	16
-6	12	0	971	917	6	-14	34	0	39	61	38	-13	22	1	634	636	4	-32	33	1	273	315	35	-10	15	2	93	165	14
-3	12	0	446	460	3	-11	34	0	144	206	43	-10	22	1	55	106	54	-29	33	1	0	77	1	-7	15	2	42	56	41
0	12	0	1162	1134	7	-8	34	0	98	47	97	-7	22	1	1004	983	5	-26	33	1	94	81	93	-4	15	2	58	28	35
-5	13	0	152	184	7	-5	34	0	179	167	39	-4	22	1	316	333	8	-23	33	1	79	71	78	-1	15	2	130	149	12
-2	13	0	39	42	39	-2	34	0	0	60	1	-1	22	1	562	557	6	-20	33	1	0	54	1	-15	16	2	453	436	4
-7	14	0	743	739	4	-16	35	0	31	90	30	-21	23	1	179	168	18	-17	33	1	169	98	35	-12	16	2	565	549	3
-4	14	0	1309	1257	5	-13	35	0	95	82	95	-18	23	1	380	389	7	-14	33	1	42	56	42	-9	16	2	465	481	3
-1	14	0	441	512	3	-10	35	0	362	368	17	-15	23	1	128	115	21	-11	33	1	0	96	1	-6	16	2	923	913	4
-6	15	0	426	378	3	-7	35	0	76	26	75	-12	23	1	391	367	6	-8	33	1	77	17	76	-3	16	2	154	186	9
-3	15	0	132	141	11	-4	35	0	504	466	23	-9	23	1	410	372	6	-5	33	1	252	227	24	0	16	2	602	613	4
0	15	0	361	322	6	-18	36	0	51	41	50	-6	23	1	285	260	9	-2	33	1	0	15	1	-17	17	2	413	384	7
-8	16	0	1144	1106	5	-15	36	0	0	112	1	-3	23	1	254	224	11	-31	34	1	148	157	83	-14	17	2	81	103	23
-5	16	0	574	618	3	-12	36	0	0	23	1	-23	24	1	634	643	6	-28	34	1	72	107	72	-11	17	2	94	108	18
-2	16	0	707	678	3	-9	36	0	24	87	23	-20	24	1	343	365	9	-25	34	1	262	308	23	-8	17	2	217	211	7
-7	17	0	50	77	49	-6	36	0	187	216	77	-17	24	1	669	664	5	-22	34	1	210	217	26	-5	17	2	131	133	13
-4	17	0	529	483	3	-17	37	0	191	160	42	-14	24	1	0	27	1	-19	34	1	398	379	14	-2	17	2	300	304	6
-1	17	0	416	435	4	-14	37	0	315	292	23	-11	24	1	869	851	4	-16	34	1	203	183	28	-16	18	2	965	928	4
-9	18	0	227	255	11	-11	37	0	114	101	114	-8	24	1	489	478	6	-13	34	1	273	264	21	-13	18	2	182	226	10
-6	18	0	325	323	5	-19	38	0	0	46	1	-5	24	1	850	811	5	-10	34	1	71	79	71	-10	18	2	886	823	3
-3	18	0	466	471	4	-16	38	0	159	173	92	-2	24	1	257	256	13	-7	34	1	365	373	17	-7	18	2	126	147	14
0	18	0	652	579	5	-13	38	0	0	38	1	-22	25	1	483	462	8	-4	34	1	92	74	92	-4	18	2	450	433	4
-8	19	0	122	103	15	-2	3	1	199	170	2	-19	25	1	44	28	43	-1	34	1	66	146	66	-1	18	2	0	79	1
-5	19	0	29	83	28	-1	4	1	356	409	3	-16	25	1	305	308	10	-30	35	1	183	146	63	-18	19	2	527	531	4
-2	19	0	74	87	36	-3	5	1	121	159	4	-13	25	1	260	273	10	-27	35	1	92	108	92	-15	19	2	351	363	6
-10	20	0	114	134	28	-5	6	1	612	644	2	-10	25	1	492	511	6	-24	35	1	180	159	37	-12	19	2	261	271	7
-7	20	0	157	192	13	-2	6	1	367	277	2	-7	25	1	346	365	9	-21	35	1	0	10	1	-9	19	2	81	78	27
-4	20	0	528	499	4	-4	7	1	225	157	3	-4	25	1	216	207	16	-18	35	1	38	55	38	-6	19	2	130	83	15
-1	20	0	278	239	9	-1	7	1	421	432	3	-1	25	1	418	421	9	-15	35	1	62	38	62	-3	19	2	187	211	10
-9	21	0	68	55	49	-6	8	1	168	112	4	-24	26	1	87	43	87	-12	35	1	0	26	1	0	19	2	106	44	36
-6	21	0	348	333	6	-3	8	1	287	269	3	-21	26	1	454	426	8	-9	35	1	219	247	32	-20	20	2	272	236	14
-3	21	0	57	97	56	-8	9	1	736	675	2	-18	26	1	71	78	70	-6	35	1	0	33	1	-17	20	2	177	201	13
0	21	0	360	318	12	-5	9	1	634	577	3	-15	26	1	638	634	5	-3	35	1	0	22	1	-14	20	2	163	160	13
-11	22	0	163	123	21	-2	9	1	14	29	14	-12	26	1	277	259	11	-29	36	1	165	133	79	-11	20	2	156	188	13
-8	22	0	471	435	5	-7	10	1	113	131	8	-9	26	1	703	688	5	-26	36	1	106	106	105	-8	20	2	713	723	4
-5	22	0	147	174	17	-4	10	1	135	175	7	-6	26	1	329	317	11	-23	36	1	213	221	32	-5	20	2	481	475	5
-2	22	0	24	37	23	-1	10	1	457	513	2	-3	26	1	511	520	8	-20	36	1	257	268	27	-2	20	2	83	52	35
-10	23	0	247	184	10	-9	11	1	301	279	3	-26	27	1	268	266	16	-17	36	1	390	375	16	-19	21	2	511	492	6
-7	23	0	45	77	45	-6	11	1	95	100	11	-23	27	1	102	106	50	-14	36	1	130	170	65	-16	21	2	159	210	16
-4	23	0	357	340	8	-3	11	1	498	498	2	-20	27	1	285	315	13	-11	36	1	337	329	20	-13	21	2	0	22	1
-1	23	0	232	237	14	-11	12	1	630	702	2	-17	27	1	100	132	39	-8	36	1	231	208	40	-10	21	2	103	110	22
-12	24	0	67	71	66	-8	12	1	101	18	10	-14	27	1	194	177	16	-28	37	1	65	12	64	-7	21	2	0	15	1

-9	24	0	266	263	10	-5	12	1	438	476	3	-11	27	1	269	255	12	-25	37	1	66	102	66	-4	21	2	472	424	5
-6	24	0	603	597	6	-2	12	1	69	81	18	-8	27	1	185	200	20	-22	37	1	124	166	95	-1	21	2	89	98	35
-3	24	0	33	100	32	-10	13	1	466	451	3	-5	27	1	325	342	12	-19	37	1	122	85	87	-21	22	2	300	300	10
0	24	0	86	17	85	-7	13	1	363	361	3	-2	27	1	108	14	51	-16	37	1	0	35	1	-18	22	2	110	128	27
-11	25	0	134	121	23	-4	13	1	309	287	4	-25	28	1	373	364	12	-13	37	1	50	119	49	-15	22	2	147	145	18
-8	25	0	280	276	10	-1	13	1	750	751	3	-22	28	1	84	26	84	-10	37	1	81	39	80	-12	22	2	354	343	7
-5	25	0	65	43	64	-12	14	1	369	369	4	-19	28	1	531	527	7	-24	38	1	166	137	165	-9	22	2	550	567	5
-2	25	0	603	571	6	-9	14	1	607	625	5	-16	28	1	0	57	1	-21	38	1	398	386	32	-6	22	2	143	136	17
-13	26	0	371	429	12	-6	14	1	172	125	7	-13	28	1	427	423	8	-18	38	1	307	314	33	-3	22	2	141	147	19
-10	26	0	476	430	6	-3	14	1	650	585	3	-10	28	1	285	286	13	-15	38	1	294	303	35	0	22	2	460	490	9
-7	26	0	223	263	15	-14	15	1	1042	983	3	-7	28	1	470	478	9	-12	38	1	352	351	75	-23	23	2	268	236	19
-4	26	0	0	17	1	-11	15	1	65	23	25	-4	28	1	84	94	83	0	1	2	800	1007	6	-20	23	2	203	203	16
-1	26	0	275	258	14	-8	15	1	460	431	3	-1	28	1	234	232	20	-2	2	2	969	839	4	-17	23	2	124	126	23
-12	27	0	329	308	9	-5	15	1	723	699	2	-27	29	1	0	28	1	-1	3	2	216	277	2	-14	23	2	37	7	37
-9	27	0	0	18	1	-2	15	1	369	345	4	-24	29	1	154	127	33	-3	4	2	67	52	7	-11	23	2	141	116	18
-6	27	0	369	349	10	-13	16	1	969	927	3	-21	29	1	85	88	84	0	4	2	1076	1134	13	-8	23	2	401	380	6
-3	27	0	257	290	16	-10	16	1	0	18	1	-18	29	1	114	111	39	-5	5	2	107	148	9	-5	23	2	39	53	38
0	27	0	347	286	18	-7	16	1	868	872	3	-15	29	1	204	214	18	-2	5	2	740	748	5	-2	23	2	304	287	9
-14	28	0	0	43	1	-4	16	1	206	216	7	-12	29	1	132	155	32	-4	6	2	1614	1641	5	-22	24	2	316	277	11
-11	28	0	319	330	11	-1	16	1	617	618	3	-9	29	1	261	261	15	-1	6	2	669	710	2	-19	24	2	500	518	6
-8	28	0	45	39	45	-15	17	1	0	56	1	-6	29	1	75	68	74	-6	7	2	127	72	6	-16	24	2	239	201	12
-5	28	0	214	224	20	-12	17	1	76	67	23	-3	29	1	235	234	20	-3	7	2	191	249	3	-13	24	2	415	420	6
-2	28	0	229	199	19	-9	17	1	572	538	3	-29	30	1	289	300	20	0	7	2	162	132	7	-10	24	2	381	380	7
-13	29	0	0	38	1	-6	17	1	326	326	5	-26	30	1	138	134	42	-8	8	2	2431	2343	10	-7	24	2	503	520	6
-10	29	0	345	301	11	-3	17	1	780	758	3	-23	30	1	467	455	10	-5	8	2	77	132	10	-4	24	2	155	161	20
-7	29	0	172	169	25	-17	18	1	697	719	3	-20	30	1	220	230	20	-2	8	2	1751	1572	4	-1	24	2	239	265	14
-4	29	0	400	377	12	-14	18	1	222	213	8	-17	30	1	543	542	7	-7	9	2	281	246	4	-24	25	2	150	144	27
-1	29	0	189	194	27	-11	18	1	656	644	3	-14	30	1	231	211	17	-4	9	2	139	133	7	-21	25	2	294	286	12
-15	30	0	313	310	18	-8	18	1	156	148	10	-11	30	1	338	339	12	-1	9	2	601	663	4	-18	25	2	58	36	58
-12	30	0	84	89	83	-5	18	1	355	341	5	-8	30	1	77	70	77	-9	10	2	167	167	6	-15	25	2	104	82	31
-9	30	0	273	283	16	-2	18	1	137	159	14	-5	30	1	484	483	10	-6	10	2	809	931	5	-12	25	2	312	300	9
-6	30	0	107	135	55	-16	19	1	379	380	5	-2	30	1	84	87	83	-3	10	2	965	921	2	-9	25	2	71	45	71
-3	30	0	0	65	1	-13	19	1	154	160	12	-28	31	1	119	125	63	0	10	2	865	896	3	-6	25	2	250	227	13
0	30	0	265	286	35	-10	19	1	240	233	8	-25	31	1	171	162	32	-11	11	2	201	282	8	-3	25	2	72	94	72
-14	31	0	222	204	20	-7	19	1	513	535	4	-22	31	1	256	246	19	-8	11	2	448	520	2	0	25	2	469	454	12
-11	31	0	0	34	1	-4	19	1	77	107	30	-19	31	1	81	71	81	-5	11	2	297	232	3	-26	26	2	191	140	36
-8	31	0	331	327	14	-1	19	1	193	227	11	-16	31	1	19	73	19	-2	11	2	104	151	11	-23	26	2	170	211	25

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-20	26	2	79	93	79	-17	35	2	189	170	34	-3	21	3	241	265	10	-10	32	3	345	346	15	-8	15	4	48	19	48
-17	26	2	404	390	8	-14	35	2	229	224	26	-20	22	3	108	93	31	-7	32	3	482	454	11	-5	15	4	428	467	4
-14	26	2	297	295	10	-11	35	2	61	68	60	-17	22	3	847	845	4	-4	32	3	14	99	14	-2	15	4	189	263	8
-11	26	2	322	367	9	-8	35	2	285	259	25	-14	22	3	305	294	8	-1	32	3	73	125	72	-16	16	4	610	558	5
-8	26	2	165	145	21	-5	35	2	33	22	32	-11	22	3	525	478	5	-30	33	3	108	57	108	-13	16	4	279	306	6
-5	26	2	239	281	16	-28	36	2	0	87	1	-8	22	3	113	135	23	-27	33	3	0	27	1	-10	16	4	824	759	3
-2	26	2	243	245	16	-25	36	2	37	36	36	-5	22	3	743	722	4	-24	33	3	142	137	46	-7	16	4	469	483	4
-25	27	2	292	263	15	-22	36	2	49	85	49	-2	22	3	0	33	1	-21	33	3	102	75	101	-4	16	4	472	400	4
-22	27	2	0	20	1	-19	36	2	49	157	49	-22	23	3	550	542	7	-18	33	3	141	146	41	-1	16	4	621	635	3
-19	27	2	387	346	9	-16	36	2	146	149	49	-19	23	3	136	165	23	-15	33	3	292	278	18	-15	17	4	235	246	8
-16	27	2	47	30	46	-13	36	2	321	321	21	-16	23	3	516	520	6	-12	33	3	71	28	71	-12	17	4	32	99	31
-13	27	2	109	87	34	-10	36	2	0	20	1	-13	23	3	95	78	32	-9	33	3	142	97	46	-9	17	4	214	234	8
-10	27	2	133	156	27	-7	36	2	115	83	114	-10	23	3	58	41	58	-6	33	3	0	33	1	-6	17	4	214	245	8
-7	27	2	39	28	39	-27	37	2	245	240	45	-7	23	3	436	397	6	-3	33	3	79	66	78	-3	17	4	277	300	6
-4	27	2	429	409	9	-24	37	2	0	34	1	-4	23	3	310	306	9	-32	34	3	135	8	135	0	17	4	344	333	9
-1	27	2	115	118	47	-21	37	2	233	223	33	-1	23	3	514	491	6	-29	34	3	213	192	32	-17	18	4	190	223	11
-27	28	2	0	56	1	-18	37	2	0	54	1	-21	24	3	312	304	12	-26	34	3	150	194	47	-14	18	4	438	434	5
-24	28	2	192	145	23	-15	37	2	242	224	31	-18	24	3	65	27	65	-23	34	3	387	395	15	-11	18	4	511	522	4
-21	28	2	309	336	13	-12	37	2	284	319	30	-15	24	3	725	738	4	-20	34	3	255	267	23	-8	18	4	553	512	3
-18	28	2	79	63	78	-9	37	2	190	22	77	-12	24	3	374	379	7	-17	34	3	388	385	14	-5	18	4	211	264	9
-15	28	2	301	324	11	-23	38	2	297	236	48	-9	24	3	582	576	5	-14	34	3	180	167	32	-2	18	4	489	470	5
-12	28	2	75	37	74	-20	38	2	121	25	121	-6	24	3	47	54	46	-11	34	3	386	397	15	-19	19	4	53	87	52
-9	28	2	67	82	67	-17	38	2	68	92	67	-3	24	3	239	244	13	-8	34	3	232	247	27	-16	19	4	546	556	4
-6	28	2	108	104	47	-14	38	2	144	168	83	-23	25	3	86	56	85	-5	34	3	103	118	103	-13	19	4	53	19	53
-3	28	2	224	221	19	-1	2	3	419	481	1	-20	25	3	181	196	19	-2	34	3	112	31	112	-10	19	4	129	138	16
0	28	2	120	151	98	-2	4	3	197	102	3	-17	25	3	27	73	27	-31	35	3	0	112	1	-7	19	4	33	72	33
-29	29	2	476	467	16	-4	5	3	272	321	2	-14	25	3	374	358	8	-28	35	3	0	30	1	-4	19	4	352	302	6
-26	29	2	169	157	31	-1	5	3	253	358	2	-11	25	3	0	56	1	-25	35	3	3	70	2	-1	19	4	256	309	9
-23	29	2	484	468	9	-3	6	3	260	255	2	-8	25	3	55	26	55	-22	35	3	0	73	1	-18	20	4	263	192	10
-20	29	2	72	49	72	-5	7	3	841	752	3	-5	25	3	361	366	9	-19	35	3	0	18	1	-15	20	4	474	527	5
-17	29	2	189	184	20	-2	7	3	52	19	18	-2	25	3	86	108	71	-16	35	3	106	99	89	-12	20	4	338	281	6
-14	29	2	405	381	9	-7	8	3	910	818	3	-25	26	3	414	417	11	-13	35	3	213	193	29	-9	20	4	325	359	6
-11	29	2	0	4	1	-4	8	3	241	147	3	-22	26	3	261	262	16	-10	35	3	0	44	1	-6	20	4	256	219	8
-8	29	2	154	98	29	-1	8	3	869	772	3	-19	26	3	320	298	11	-7	35	3	122	60	87	-3	20	4	187	195	12
-5	29	2	0	120	1	-6	9	3	726	666	2	-16	26	3	91	130	46	-4	35	3	0	2	1	0	20	4	233	214	15
-2	29	2	447	439	11	-3	9	3	853	818	3	-13	26	3	499	503	6	-27	36	3	315	289	32	-20	21	4	210	207	15
-28	30	2	186	180	30	-8	10	3	96	109	11	-10	26	3	130	162	25	-24	36	3	117	155	94	-17	21	4	167	130	15
-25	30	2	96	112	96	-5	10	3	679	699	6	-7	26	3	386	399	9	-21	36	3	276	259	26	-14	21	4	0	17	1
-22	30	2	24	35	23	-2	10	3	147	67	7	-4	26	3	61	79	61	-18	36	3	267	239	26	-11	21	4	52	63	52
-19	30	2	311	321	14	-10	11	3	658	626	2	-1	26	3	524	552	9	-15	36	3	170	200	40	-8	21	4	90	110	29
-16	30	2	0	15	1	-7	11	3	107	188	9	-24	27	3	485	463	10	-12	36	3	169	211	42	-5	21	4	104	124	27
-13	30	2	24	52	23	-4	11	3	769	806	2	-21	27	3	62	31	61	-9	36	3	309	312	26	-2	21	4	321	297	8
-10	30	2	0	32	1	-1	11	3	97	111	11	-18	27	3	255	270	13	-26	37	3	0	37	1	-22	22	4	340	325	14
-7	30	2	270	271	16	-9	12	3	539	515	3	-15	27	3	0	46	1	-23	37	3	95	87	95	-19	22	4	277	283	11
-4	30	2	105	104	66	-6	12	3	43	116	42	-12	27	3	0	29	1	-20	37	3	125	82	109	-16	22	4	313	276	8
-1	30	2	160	130	38	-3	12	3	904	897	3	-9	27	3	132	139	29	-17	37	3	0	63	1	-13	22	4	513	511	5
-30	31	2	195	187	31	-11	13	3	144	177	9	-6	27	3	0	62	1	-14	37	3	0	14	1	-10	22	4	328	321	7
-27	31	2	457	432	12	-8	13	3	693	682	4	-3	27	3	467	472	9	-11	37	3	0	11	1	-7	22	4	154	197	17
-24	31	2	0	64	1	-5	13	3	129	96	10	-26	28	3	80	14	80	-22	38	3	261	296	57	-4	22	4	196	175	14
-21	31	2	413	395	11	-2	13	3	257	214	5	-23	28	3	94	95	82	-19	38	3	323	301	37	-1	22	4	279	300	10
-18	31	2	284	282	16	-13	14	3	587	622	3	-20	28	3	92	87	66	-16	38	3	205	231	49	-21	23	4	267	235	13
-15	31	2	44	24	44	-10	14	3	175	143	7	-17	28	3	423	431	8	-1	1	4	301	292	3	-18	23	4	111	85	29
-12	31	2	192	188	25	-7	14	3	410	408	3	-14	28	3	0	53	1	0	2	4	870	861	2	-15	23	4	186	146	15
-9	31	2	71	66	71	-4	14	3	322	336	4	-11	28	3	552	526	7	-2	3	4	150	227	4	-12	23	4	201	188	13
-6	31	2	480	456	10	-1	14	3	437	406	3	-8	28	3	168	176	24	-4	4	4	557	415	3	-9	23	4	143	170	19
-3	31	2	251	223	22	-12	15	3	109	70	14	-5	28	3	365	354	11	-1	4	4	158	215	4	-6	23	4	228	194	12

0	31	2	403	390	22	-9	15	3	179	167	8	-2	28	3	121	13	46	-3	5	4	969	1008	2	-3	23	4	286	298	10
-32	32	2	179	204	65	-6	15	3	362	340	4	-28	29	3	330	337	16	0	5	4	85	191	14	0	23	4	208	184	22
-29	32	2	91	77	91	-3	15	3	279	281	5	-25	29	3	79	79	79	-5	6	4	813	956	3	-23	24	4	233	222	18
-26	32	2	86	94	86	-14	16	3	59	35	40	-22	29	3	314	294	14	-2	6	4	1110	1119	10	-20	24	4	199	225	18
-23	32	2	136	168	47	-11	16	3	539	530	3	-19	29	3	99	97	52	-7	7	4	408	483	4	-17	24	4	495	485	6
-20	32	2	149	99	36	-8	16	3	85	87	19	-16	29	3	220	236	17	-4	7	4	149	273	5	-14	24	4	298	256	10
-17	32	2	378	376	12	-5	16	3	850	825	2	-13	29	3	184	186	23	-1	7	4	466	490	3	-11	24	4	496	535	6
-14	32	2	43	23	42	-2	16	3	98	78	19	-10	29	3	53	50	52	-6	8	4	1218	1102	3	-8	24	4	349	340	8
-11	32	2	44	82	43	-16	17	3	711	658	3	-7	29	3	204	211	23	-3	8	4	239	346	3	-5	24	4	375	359	8
-8	32	2	75	91	75	-13	17	3	237	235	7	-4	29	3	116	120	50	0	8	4	1390	1400	7	-2	24	4	210	194	16
-5	32	2	184	182	33	-10	17	3	266	323	6	-1	29	3	296	292	18	-8	9	4	530	551	2	-25	25	4	406	417	16
-2	32	2	150	188	49	-7	17	3	301	325	5	-27	30	3	279	262	19	-5	9	4	452	432	2	-22	25	4	56	107	56
-31	33	2	456	439	15	-4	17	3	121	120	15	-24	30	3	140	116	39	-2	9	4	144	133	7	-19	25	4	405	377	8
-28	33	2	178	170	37	-1	17	3	832	817	3	-21	30	3	529	524	9	-10	10	4	930	814	5	-16	25	4	0	33	1
-25	33	2	434	415	14	-15	18	3	947	957	5	-18	30	3	291	280	14	-7	10	4	290	380	4	-13	25	4	66	16	66
-22	33	2	87	19	87	-12	18	3	295	267	6	-15	30	3	588	590	7	-4	10	4	804	797	3	-10	25	4	126	120	26
-19	33	2	201	198	26	-9	18	3	585	622	3	-12	30	3	258	260	17	-1	10	4	190	183	5	-7	25	4	73	44	72
-16	33	2	268	293	19	-6	18	3	194	200	9	-9	30	3	576	585	8	-9	11	4	115	61	11	-4	25	4	309	283	10
-13	33	2	18	68	18	-3	18	3	952	943	3	-6	30	3	144	116	38	-6	11	4	377	416	3	-1	25	4	251	265	15
-10	33	2	378	338	15	-17	19	3	149	145	15	-3	30	3	284	305	20	-3	11	4	113	206	10	-24	26	4	0	47	1
-7	33	2	0	76	1	-14	19	3	263	268	8	-29	31	3	0	46	1	0	11	4	416	496	4	-21	26	4	356	364	11
-4	33	2	429	419	15	-11	19	3	235	225	9	-26	31	3	139	156	43	-11	12	4	189	190	7	-18	26	4	110	89	34
-1	33	2	169	142	68	-8	19	3	250	248	7	-23	31	3	82	50	82	-8	12	4	1094	1080	2	-15	26	4	181	210	18
-30	34	2	0	54	1	-5	19	3	594	601	4	-20	31	3	98	131	82	-5	12	4	129	148	9	-12	26	4	200	207	17
-27	34	2	115	129	80	-2	19	3	328	318	7	-17	31	3	126	158	39	-2	12	4	917	851	2	-9	26	4	499	515	7
-24	34	2	88	102	87	-19	20	3	604	626	5	-14	31	3	227	218	20	-13	13	4	385	353	5	-6	26	4	168	141	21
-21	34	2	243	272	23	-16	20	3	25	43	25	-11	31	3	229	219	21	-10	13	4	247	268	5	-3	26	4	279	303	13
-18	34	2	0	13	1	-13	20	3	960	910	4	-8	31	3	66	78	65	-7	13	4	159	183	7	0	26	4	108	40	108
-15	34	2	119	136	57	-10	20	3	348	352	6	-5	31	3	121	104	53	-4	13	4	171	184	7	-26	27	4	150	146	34
-12	34	2	134	107	50	-7	20	3	711	706	4	-2	31	3	77	91	77	-1	13	4	244	279	5	-23	27	4	402	395	11
-9	34	2	333	333	18	-4	20	3	63	22	63	-31	32	3	214	219	30	-12	14	4	667	610	3	-20	27	4	146	154	28
-6	34	2	0	38	1	-1	20	3	462	462	5	-28	32	3	183	207	35	-9	14	4	481	495	3	-17	27	4	263	263	13
-3	34	2	126	153	125	-18	21	3	73	81	52	-25	32	3	410	393	14	-6	14	4	799	745	2	-14	27	4	38	26	37
-29	35	2	338	311	30	-15	21	3	134	103	18	-22	32	3	237	232	22	-3	14	4	85	134	18	-11	27	4	205	198	18
-26	35	2	98	91	97	-12	21	3	719	701	4	-19	32	3	515	510	10	0	14	4	907	838	3	-8	27	4	166	173	22
-23	35	2	319	311	19	-9	21	3	414	420	5	-16	32	3	246	222	19	-14	15	4	238	236	7	-5	27	4	71	93	70
-20	35	2	165	132	41	-6	21	3	344	334	6	-13	32	3	483	485	11	-11	15	4	0	5	1	-2	27	4	153	172	33

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-28	28	4	206	232	37	-16	37	4	195	176	44	-13	24	5	734	725	5	-18	34	5	192	217	33	-8	19	6	11	35	11
-25	28	4	241	244	20	-13	37	4	0	50	1	-10	24	5	0	33	1	-15	34	5	399	397	14	-5	19	6	265	286	8
-22	28	4	27	11	27	-10	37	4	91	141	91	-7	24	5	543	536	6	-12	34	5	99	172	99	-2	19	6	305	327	8
-19	28	4	52	76	52	-21	38	4	151	138	151	-4	24	5	109	98	34	-9	34	5	218	240	32	-19	20	6	58	66	58
-16	28	4	57	54	57	-18	38	4	78	30	78	-1	24	5	520	531	7	-6	34	5	80	43	80	-16	20	6	496	479	6
-13	28	4	469	466	8	-15	38	4	272	284	68	-24	25	5	400	400	11	-3	34	5	238	176	63	-13	20	6	381	385	7
-10	28	4	65	49	65	-1	3	5	88	59	8	-21	25	5	54	52	53	-29	35	5	0	58	1	-10	20	6	77	60	40
-7	28	4	291	311	14	-3	4	5	912	820	2	-18	25	5	271	249	12	-26	35	5	230	227	31	-7	20	6	422	456	6
-4	28	4	43	14	42	-2	5	5	227	158	4	-15	25	5	362	349	9	-23	35	5	100	112	100	-4	20	6	408	351	6
-1	28	4	79	118	79	-4	6	5	543	480	2	-12	25	5	240	242	13	-20	35	5	0	26	1	-1	20	6	16	89	16
-27	29	4	460	479	11	-1	6	5	193	187	4	-9	25	5	305	286	11	-17	35	5	97	84	97	-21	21	6	288	298	17
-24	29	4	164	171	31	-6	7	5	59	55	17	-6	25	5	54	23	53	-14	35	5	0	37	1	-18	21	6	12	58	12
-21	29	4	299	287	15	-3	7	5	232	233	4	-3	25	5	275	296	13	-11	35	5	144	155	52	-15	21	6	244	224	11
-18	29	4	70	102	70	-5	8	5	459	501	3	-23	26	5	483	478	9	-8	35	5	90	98	89	-12	21	6	292	281	9
-15	29	4	249	226	15	-2	8	5	80	61	13	-20	26	5	339	326	11	-5	35	5	256	130	118	-9	21	6	120	140	22
-12	29	4	130	152	35	-7	9	5	280	241	4	-17	26	5	659	635	6	-25	36	5	289	311	35	-6	21	6	184	170	14
-9	29	4	0	29	1	-4	9	5	281	342	3	-14	26	5	151	133	23	-22	36	5	164	172	50	-3	21	6	246	252	11
-6	29	4	521	501	9	-1	9	5	725	612	2	-11	26	5	525	513	7	-19	36	5	361	360	19	0	21	6	178	189	24
-3	29	4	134	145	44	-9	10	5	362	364	3	-8	26	5	91	50	52	-16	36	5	199	202	34	-20	22	6	0	67	1
0	29	4	378	375	24	-6	10	5	676	646	2	-5	26	5	450	451	8	-13	36	5	292	279	24	-17	22	6	300	298	9
-29	30	4	166	186	36	-3	10	5	885	845	3	-2	26	5	106	103	47	-10	36	5	118	68	117	-14	22	6	253	245	11
-26	30	4	0	101	1	-8	11	5	482	481	3	-25	27	5	0	10	1	-24	37	5	0	27	1	-11	22	6	154	148	18
-23	30	4	390	374	12	-5	11	5	278	269	4	-22	27	5	295	298	15	-21	37	5	109	13	109	-8	22	6	377	367	7
-20	30	4	0	15	1	-2	11	5	367	377	3	-19	27	5	59	28	58	-18	37	5	38	70	37	-5	22	6	387	397	8
-17	30	4	9	72	8	-10	12	5	201	217	6	-16	27	5	256	266	14	-15	37	5	119	72	118	-2	22	6	73	64	72
-14	30	4	86	119	86	-7	12	5	996	949	3	-13	27	5	218	211	16	-12	37	5	119	145	118	-22	23	6	290	297	12
-11	30	4	396	396	11	-4	12	5	0	67	1	-10	27	5	352	339	10	0	0	6	3200	2997	19	-19	23	6	86	78	54
-8	30	4	0	24	1	-1	12	5	526	555	2	-7	27	5	248	235	15	-1	2	6	649	648	2	-16	23	6	151	162	20
-5	30	4	150	154	39	-12	13	5	610	623	5	-4	27	5	17	9	16	-3	3	6	543	699	3	-13	23	6	143	126	21
-2	30	4	0	68	1	-9	13	5	229	282	6	-1	27	5	202	220	25	0	3	6	865	976	2	-10	23	6	105	80	32
-31	31	4	488	472	18	-6	13	5	517	506	3	-27	28	5	238	256	22	-2	4	6	955	984	1	-7	23	6	345	364	9
-28	31	4	98	51	98	-3	13	5	787	797	3	-24	28	5	0	23	1	-4	5	6	207	226	4	-4	23	6	300	289	10
-25	31	4	311	283	17	-11	14	5	527	493	3	-21	28	5	492	507	9	-1	5	6	275	281	3	-1	23	6	228	243	16
-22	31	4	130	130	44	-8	14	5	187	181	7	-18	28	5	303	299	12	-6	6	6	973	866	5	-24	24	6	131	77	58
-19	31	4	139	108	39	-5	14	5	933	874	3	-15	28	5	417	429	9	-3	6	6	212	286	4	-21	24	6	291	281	13
-16	31	4	147	162	32	-2	14	5	70	9	26	-12	28	5	171	190	23	0	6	6	866	812	3	-18	24	6	266	244	12
-13	31	4	156	144	32	-13	15	5	46	30	45	-9	28	5	462	471	9	-5	7	6	226	207	4	-15	24	6	253	245	12
-10	31	4	402	388	12	-10	15	5	803	769	2	-6	28	5	0	91	1	-2	7	6	577	640	4	-12	24	6	86	76	47
-7	31	4	197	189	28	-7	15	5	447	393	3	-3	28	5	443	430	12	-7	8	6	339	275	3	-9	24	6	346	328	9
-4	31	4	475	464	14	-4	15	5	84	59	20	-26	29	5	210	202	25	-4	8	6	931	872	3	-6	24	6	224	224	14
-1	31	4	144	189	55	-1	15	5	739	708	3	-23	29	5	151	84	34	-1	8	6	327	370	3	-3	24	6	257	271	13
-30	32	4	5	86	4	-15	16	5	295	297	6	-20	29	5	291	288	15	-9	9	6	329	408	5	0	24	6	111	26	74
-27	32	4	321	325	17	-12	16	5	81	92	25	-17	29	5	79	62	79	-6	9	6	77	106	16	-23	25	6	446	433	9
-24	32	4	0	35	1	-9	16	5	1115	1067	3	-14	29	5	355	361	11	-3	9	6	507	524	2	-20	25	6	0	19	1
-21	32	4	141	145	44	-6	16	5	58	16	47	-11	29	5	166	163	27	0	9	6	364	433	5	-17	25	6	156	149	22
-18	32	4	0	56	1	-3	16	5	326	324	5	-8	29	5	97	106	67	-8	10	6	788	759	2	-14	25	6	132	145	26
-15	32	4	329	328	14	-14	17	5	674	665	3	-5	29	5	73	45	72	-5	10	6	83	59	14	-11	25	6	0	26	1
-12	32	4	120	107	52	-11	17	5	320	328	6	-2	29	5	0	33	1	-2	10	6	789	734	2	-8	25	6	292	291	12
-9	32	4	149	177	41	-8	17	5	539	524	4	-28	30	5	0	9	1	-10	11	6	453	489	3	-5	25	6	76	87	76
-6	32	4	0	34	1	-5	17	5	253	286	7	-25	30	5	384	364	13	-7	11	6	398	391	3	-2	25	6	580	546	7
-3	32	4	145	138	55	-2	17	5	45	41	45	-22	30	5	63	105	63	-4	11	6	43	32	42	-25	26	6	314	314	15
0	32	4	0	88	1	-16	18	5	200	181	11	-19	30	5	389	388	12	-1	11	6	480	487	3	-22	26	6	41	96	40
-32	33	4	136	178	136	-13	18	5	404	393	5	-16	30	5	273	300	15	-12	12	6	680	571	4	-19	26	6	239	274	16
-29	33	4	374	350	17	-10	18	5	137	87	14	-13	30	5	607	604	8	-9	12	6	447	501	3	-16	26	6	256	243	14
-26	33	4	0	21	1	-7	18	5	448	484	4	-10	30	5	257	251	18	-6	12	6	660	629	2	-13	26	6	339	358	10
-23	33	4	237	244	25	-4	18	5	220	199	9	-7	30	5	342	342	15	-3	12	6	332	345	4	-10	26	6	180	184	20

-20	33	4	167	156	36	-1	18	5	640	632	4	-4	30	5	120	119	61	0	12	6	1173	1142	4	-7	26	6	357	364	10
-17	33	4	182	171	30	-18	19	5	400	383	6	-1	30	5	272	277	24	-11	13	6	376	401	4	-4	26	6	0	60	1
-14	33	4	233	225	23	-15	19	5	160	142	14	-30	31	5	240	238	25	-8	13	6	392	417	4	-1	26	6	208	224	21
-11	33	4	7	71	7	-12	19	5	473	509	5	-27	31	5	83	80	82	-5	13	6	431	444	3	-27	27	6	258	287	28
-8	33	4	377	392	15	-9	19	5	44	46	43	-24	31	5	324	299	16	-2	13	6	0	25	1	-24	27	6	307	286	15
-5	33	4	130	155	68	-6	19	5	46	29	45	-21	31	5	124	84	48	-13	14	6	543	584	3	-21	27	6	314	316	13
-2	33	4	458	463	19	-3	19	5	321	336	7	-18	31	5	0	29	1	-10	14	6	837	781	2	-18	27	6	129	111	32
-31	34	4	177	197	96	-17	20	5	198	197	13	-15	31	5	66	55	66	-7	14	6	556	559	3	-15	27	6	153	156	26
-28	34	4	110	115	109	-14	20	5	251	224	10	-12	31	5	89	83	88	-4	14	6	954	900	2	-12	27	6	234	220	16
-25	34	4	316	314	19	-11	20	5	976	952	3	-9	31	5	175	157	32	-1	14	6	423	396	4	-9	27	6	26	5	25
-22	34	4	78	50	77	-8	20	5	112	118	20	-6	31	5	185	158	34	-15	15	6	157	160	18	-6	27	6	267	253	14
-19	34	4	94	177	93	-5	20	5	236	232	10	-3	31	5	172	176	41	-12	15	6	306	350	6	-3	27	6	132	139	38
-16	34	4	80	106	80	-2	20	5	294	269	8	-29	32	5	291	281	21	-9	15	6	109	65	16	0	27	6	264	289	29
-13	34	4	214	212	27	-19	21	5	75	35	75	-26	32	5	0	88	1	-6	15	6	392	364	4	-26	28	6	0	79	1
-10	34	4	126	144	60	-16	21	5	507	500	5	-23	32	5	370	341	14	-3	15	6	354	355	5	-23	28	6	226	212	21
-7	34	4	73	114	72	-13	21	5	368	347	7	-20	32	5	176	150	33	0	15	6	58	83	57	-20	28	6	192	198	23
-4	34	4	115	74	114	-10	21	5	181	198	13	-17	32	5	471	465	11	-14	16	6	567	551	4	-17	28	6	310	303	13
-30	35	4	168	42	168	-7	21	5	143	143	17	-14	32	5	313	339	16	-11	16	6	665	652	3	-14	28	6	111	110	42
-27	35	4	274	278	24	-4	21	5	48	81	47	-11	32	5	348	339	15	-8	16	6	477	464	4	-11	28	6	370	374	11
-24	35	4	0	44	1	-1	21	5	736	741	4	-8	32	5	105	113	92	-5	16	6	477	483	4	-8	28	6	0	23	1
-21	35	4	239	213	27	-21	22	5	543	579	7	-5	32	5	208	218	33	-2	16	6	736	725	3	-5	28	6	333	322	14
-18	35	4	216	225	30	-18	22	5	312	299	9	-2	32	5	168	124	46	-16	17	6	219	222	10	-2	28	6	137	165	46
-15	35	4	0	53	1	-15	22	5	885	880	4	-31	33	5	104	62	104	-13	17	6	161	122	13	-28	29	6	117	132	60
-12	35	4	276	259	23	-12	22	5	66	22	65	-28	33	5	172	146	38	-10	17	6	120	160	17	-25	29	6	368	332	14
-9	35	4	55	13	54	-9	22	5	441	446	6	-25	33	5	0	6	1	-7	17	6	55	24	54	-22	29	6	169	155	28
-6	35	4	242	231	61	-6	22	5	245	228	11	-22	33	5	156	140	43	-4	17	6	253	201	8	-19	29	6	244	243	18
-29	36	4	150	49	150	-3	22	5	624	587	5	-19	33	5	152	145	40	-1	17	6	368	392	6	-16	29	6	83	119	83
-26	36	4	112	85	112	-20	23	5	321	315	11	-16	33	5	0	19	1	-18	18	6	563	509	8	-13	29	6	142	125	32
-23	36	4	243	275	29	-17	23	5	134	139	23	-13	33	5	101	66	100	-15	18	6	319	326	7	-10	29	6	329	331	13
-20	36	4	222	259	32	-14	23	5	115	112	27	-10	33	5	67	11	66	-12	18	6	191	168	12	-7	29	6	0	63	1
-17	36	4	159	128	44	-11	23	5	384	408	7	-7	33	5	200	166	35	-9	18	6	568	559	4	-4	29	6	259	266	20
-14	36	4	48	37	48	-8	23	5	86	78	42	-4	33	5	0	59	1	-6	18	6	373	347	5	-1	29	6	263	297	22
-11	36	4	99	64	98	-5	23	5	360	356	8	-1	33	5	241	231	54	-3	18	6	507	516	4	-30	30	6	214	151	41
-8	36	4	88	95	88	-2	23	5	267	298	11	-30	34	5	0	83	1	0	18	6	681	610	6	-27	30	6	227	200	24
-25	37	4	301	289	46	-22	24	5	82	93	81	-27	34	5	271	255	24	-17	19	6	0	54	1	-24	30	6	128	102	47
-22	37	4	229	240	46	-19	24	5	703	670	5	-24	34	5	0	49	1	-14	19	6	177	186	13	-21	30	6	257	256	18
-19	37	4	150	88	75	-16	24	5	440	431	7	-21	34	5	295	281	21	-11	19	6	464	461	5	-18	30	6	117	108	46

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s						
-15	30	6	369	349	12	-14	15	7	721	691	3	-7	28	7	363	356	12	0	10	8	803	787	4	-6	25	8	205	214	19
-12	30	6	50	11	50	-11	15	7	207	205	9	-4	28	7	188	169	26	-11	11	8	78	16	44	-3	25	8	145	164	29
-9	30	6	363	354	13	-8	15	7	131	142	14	-1	28	7	227	200	23	-8	11	8	470	510	3	0	25	8	249	248	26
-6	30	6	109	127	75	-5	15	7	466	445	4	-27	29	7	0	9	1	-5	11	8	188	145	8	-26	26	8	41	67	40
-3	30	6	124	165	61	-2	15	7	307	306	6	-24	29	7	251	233	20	-2	11	8	124	82	12	-23	26	8	138	161	36
0	30	6	178	186	63	-13	16	7	759	769	3	-21	29	7	84	104	84	-10	12	8	715	705	3	-20	26	8	116	114	44
-29	31	6	150	130	44	-10	16	7	197	203	10	-18	29	7	154	165	30	-7	12	8	468	488	4	-17	26	8	332	343	12
-26	31	6	94	22	93	-7	16	7	523	506	4	-15	29	7	92	90	74	-4	12	8	567	494	3	-14	26	8	189	200	20
-23	31	6	365	356	14	-4	16	7	64	49	45	-12	29	7	127	106	39	-1	12	8	433	456	4	-11	26	8	351	346	11
-20	31	6	126	38	47	-1	16	7	420	418	5	-9	29	7	192	194	25	-12	13	8	99	103	21	-8	26	8	109	118	46
-17	31	6	111	107	51	-15	17	7	78	10	39	-6	29	7	88	133	87	-9	13	8	89	61	24	-5	26	8	264	284	16
-14	31	6	200	211	25	-12	17	7	59	73	58	-3	29	7	195	225	31	-6	13	8	425	445	4	-2	26	8	120	92	44
-11	31	6	0	19	1	-9	17	7	625	600	4	-29	30	7	228	246	26	-3	13	8	304	312	6	-25	27	8	326	295	15
-8	31	6	183	204	35	-6	17	7	180	174	11	-26	30	7	207	199	27	0	13	8	406	394	7	-22	27	8	64	80	63
-5	31	6	144	159	51	-3	17	7	466	451	5	-23	30	7	436	436	12	-14	14	8	498	461	6	-19	27	8	344	361	12
-2	31	6	418	408	16	-17	18	7	650	627	5	-20	30	7	127	98	46	-11	14	8	163	176	12	-16	27	8	54	76	54
-31	32	6	221	114	55	-14	18	7	25	17	24	-17	30	7	469	474	10	-8	14	8	501	472	4	-13	27	8	0	32	1
-28	32	6	111	41	82	-11	18	7	384	374	6	-14	30	7	135	119	38	-5	14	8	335	349	5	-10	27	8	45	43	45
-25	32	6	292	316	19	-8	18	7	155	170	14	-11	30	7	299	296	15	-2	14	8	482	442	4	-7	27	8	112	97	49
-22	32	6	92	66	92	-5	18	7	584	573	4	-8	30	7	88	52	87	-13	15	8	0	21	1	-4	27	8	436	420	11
-19	32	6	287	315	18	-2	18	7	227	216	11	-5	30	7	361	365	16	-10	15	8	82	83	29	-1	27	8	41	116	40
-16	32	6	78	117	77	-16	19	7	322	307	8	-2	30	7	26	62	25	-7	15	8	121	125	17	-27	28	8	134	123	48
-13	32	6	287	298	19	-13	19	7	206	204	12	-28	31	7	135	144	52	-4	15	8	47	71	46	-24	28	8	82	74	81
-10	32	6	0	74	1	-10	19	7	300	304	8	-25	31	7	0	29	1	-1	15	8	385	406	5	-21	28	8	299	287	15
-7	32	6	198	235	34	-7	19	7	459	468	5	-22	31	7	147	153	40	-15	16	8	322	317	7	-18	28	8	0	62	1
-4	32	6	68	55	67	-4	19	7	121	110	22	-19	31	7	126	154	47	-12	16	8	333	319	6	-15	28	8	186	189	23
-1	32	6	167	205	66	-1	19	7	239	221	11	-16	31	7	162	152	32	-9	16	8	335	299	6	-12	28	8	108	96	49
-30	33	6	0	85	1	-18	20	7	227	228	13	-13	31	7	152	139	34	-6	16	8	619	627	4	-9	28	8	74	98	73
-27	33	6	335	322	18	-15	20	7	219	220	12	-10	31	7	0	49	1	-3	16	8	297	274	7	-6	28	8	135	116	40
-24	33	6	60	15	60	-12	20	7	0	66	1	-7	31	7	324	307	19	0	16	8	510	502	7	-3	28	8	237	249	22
-21	33	6	212	212	30	-9	20	7	558	540	5	-4	31	7	0	16	1	-17	17	8	357	349	11	0	28	8	103	3	103
-18	33	6	0	58	1	-6	20	7	368	377	7	-1	31	7	171	176	46	-14	17	8	103	111	26	-29	29	8	348	383	24
-15	33	6	113	91	64	-3	20	7	541	538	5	-30	32	7	18	39	18	-11	17	8	99	134	26	-26	29	8	177	172	32
-12	33	6	359	349	15	-20	21	7	616	628	6	-27	32	7	332	310	18	-8	17	8	370	383	6	-23	29	8	250	231	20
-9	33	6	0	14	1	-17	21	7	55	41	55	-24	32	7	213	244	28	-5	17	8	238	255	9	-20	29	8	76	80	75
-6	33	6	221	214	33	-14	21	7	400	395	7	-21	32	7	372	368	15	-2	17	8	396	372	6	-17	29	8	96	86	72
-3	33	6	0	141	1	-11	21	7	351	366	7	-18	32	7	294	290	18	-16	18	8	401	394	7	-14	29	8	234	219	19
-29	34	6	228	213	64	-8	21	7	400	390	7	-15	32	7	390	398	13	-13	18	8	333	353	7	-11	29	8	126	72	47
-26	34	6	185	91	39	-5	21	7	433	428	6	-12	32	7	70	83	70	-10	18	8	663	641	4	-8	29	8	187	185	28
-23	34	6	181	186	39	-2	21	7	109	92	30	-9	32	7	288	301	22	-7	18	8	220	224	10	-5	29	8	51	71	51
-20	34	6	81	29	80	-19	22	7	614	604	6	-6	32	7	77	34	76	-4	18	8	488	454	5	-2	29	8	321	325	18
-17	34	6	214	224	27	-16	22	7	217	209	14	-3	32	7	195	218	39	-1	18	8	180	208	16	-28	30	8	197	229	31
-14	34	6	41	31	41	-13	22	7	357	366	8	-29	33	7	143	56	109	-18	19	8	480	539	6	-25	30	8	0	100	1
-11	34	6	223	228	31	-10	22	7	275	281	10	-26	33	7	88	30	88	-15	19	8	224	189	12	-22	30	8	47	81	47
-8	34	6	75	88	75	-7	22	7	1012	991	4	-23	33	7	138	54	52	-12	19	8	328	312	8	-19	30	8	305	292	16
-5	34	6	194	169	70	-4	22	7	0	12	1	-20	33	7	87	57	86	-9	19	8	0	19	1	-16	30	8	33	41	32
-25	35	6	384	379	20	-1	22	7	358	368	9	-17	33	7	147	129	42	-6	19	8	88	69	33	-13	30	8	101	50	68
-22	35	6	69	8	69	-21	23	7	0	16	1	-14	33	7	140	120	49	-3	19	8	196	196	14	-10	30	8	27	50	26
-19	35	6	139	153	56	-18	23	7	339	330	10	-11	33	7	128	137	57	0	19	8	108	83	50	-7	30	8	270	312	21
-16	35	6	0	37	1	-15	23	7	137	107	23	-8	33	7	124	106	84	-20	20	8	135	114	37	-4	30	8	0	34	1
-13	35	6	101	45	101	-12	23	7	200	211	15	-5	33	7	278	254	26	-17	20	8	192	193	15	-1	30	8	121	123	85
-10	35	6	226	264	35	-9	23	7	356	353	8	-2	33	7	141	6	140	-14	20	8	139	112	20	-30	31	8	137	132	102
-7	35	6	118	17	117	-6	23	7	116	149	30	-28	34	7	0	132	1	-11	20	8	354	351	7	-27	31	8	271	276	22
-24	36	6	67	62	67	-3	23	7	375	394	9	-25	34	7	331	323	19	-8	20	8	737	726	4	-24	31	8	0	43	1
-21	36	6	192	131	58	-23	24	7	564	556	8	-22	34	7	224	218	30	-5	20	8	341	371	8	-21	31	8	206	192	27
-18	36	6	155	147	53	-20	24	7	285	305	13	-19	34	7	393	376	16	-2	20	8	248	197	12	-18	31	8	261	251	20

-15	36	6	116	126	115	-17	24	7	612	592	6	-16	34	7	187	167	33	-19	21	8	384	365	9	-15	31	8	88	70	88
-12	36	6	90	119	90	-14	24	7	144	144	23	-13	34	7	242	229	26	-16	21	8	224	227	13	-12	31	8	157	136	36
-9	36	6	39	127	39	-11	24	7	805	810	5	-10	34	7	203	157	39	-13	21	8	35	86	34	-9	31	8	0	24	1
-23	37	6	206	184	205	-8	24	7	372	380	9	-7	34	7	332	341	32	-10	21	8	118	89	26	-6	31	8	538	521	12
-20	37	6	45	113	44	-5	24	7	517	532	7	-27	35	7	199	52	198	-7	21	8	54	83	54	-3	31	8	210	210	35
-17	37	6	119	149	118	-2	24	7	139	115	29	-24	35	7	0	76	1	-4	21	8	342	325	9	0	31	8	208	247	207
-14	37	6	210	218	68	-22	25	7	434	438	10	-21	35	7	0	51	1	-1	21	8	237	251	14	-29	32	8	0	35	1
-2	3	7	162	89	6	-19	25	7	55	116	55	-18	35	7	140	150	54	-21	22	8	175	173	23	-26	32	8	0	43	1
-1	4	7	161	143	6	-16	25	7	317	305	10	-15	35	7	116	13	86	-18	22	8	211	194	16	-23	32	8	158	180	42
-3	5	7	0	44	1	-13	25	7	188	179	18	-12	35	7	0	13	1	-15	22	8	169	154	18	-20	32	8	0	72	1
-5	6	7	38	79	37	-10	25	7	169	176	22	-9	35	7	260	178	126	-12	22	8	283	262	11	-17	32	8	287	298	19
-2	6	7	451	445	3	-7	25	7	333	344	10	-23	36	7	256	240	71	-9	22	8	591	560	6	-14	32	8	0	34	1
-4	7	7	272	250	4	-4	25	7	0	23	1	-20	36	7	312	318	30	-6	22	8	148	140	21	-11	32	8	118	173	70
-1	7	7	597	536	2	-1	25	7	288	305	15	-17	36	7	367	357	22	-3	22	8	95	125	43	-8	32	8	123	108	76
-6	8	7	85	84	15	-24	26	7	65	77	64	-14	36	7	250	244	48	0	22	8	289	282	17	-5	32	8	203	150	39
-3	8	7	362	343	3	-21	26	7	556	551	8	-19	37	7	148	5	147	-23	23	8	219	228	27	-2	32	8	84	160	83
-8	9	7	487	469	3	-18	26	7	0	27	1	0	1	8	257	271	6	-20	23	8	211	210	17	-28	33	8	139	191	139
-5	9	7	76	56	20	-15	26	7	557	540	7	-2	2	8	1008	930	4	-17	23	8	135	129	27	-25	33	8	274	290	24
-2	9	7	53	34	33	-12	26	7	419	416	8	-1	3	8	274	283	4	-14	23	8	44	36	44	-22	33	8	0	36	1
-7	10	7	251	246	5	-9	26	7	675	670	6	-3	4	8	139	146	8	-11	23	8	187	171	17	-19	33	8	266	253	23
-4	10	7	400	374	3	-6	26	7	42	100	41	0	4	8	1251	1289	3	-8	23	8	215	208	16	-16	33	8	183	174	31
-1	10	7	665	634	3	-3	26	7	333	327	13	-5	5	8	595	671	4	-5	23	8	117	124	34	-13	33	8	0	23	1
-9	11	7	172	212	8	-26	27	7	295	268	17	-2	5	8	378	397	3	-2	23	8	297	274	12	-10	33	8	328	278	21
-6	11	7	253	216	5	-23	27	7	83	96	82	-4	6	8	1319	1270	3	-22	24	8	285	266	14	-7	33	8	48	78	48
-3	11	7	440	455	3	-20	27	7	376	378	11	-1	6	8	331	310	4	-19	24	8	336	334	11	-4	33	8	455	407	32
-11	12	7	1114	1069	3	-17	27	7	28	83	27	-6	7	8	420	423	3	-16	24	8	191	184	17	-27	34	8	161	88	143
-8	12	7	121	99	13	-14	27	7	137	156	30	-3	7	8	147	140	9	-13	24	8	415	423	8	-24	34	8	67	78	66
-5	12	7	670	658	3	-11	27	7	80	89	80	0	7	8	74	128	30	-10	24	8	250	225	13	-21	34	8	272	277	24
-2	12	7	365	344	4	-8	27	7	224	212	17	-8	8	8	1501	1449	6	-7	24	8	377	382	10	-18	34	8	0	18	1
-10	13	7	407	410	4	-5	27	7	271	258	16	-5	8	8	703	718	2	-4	24	8	0	60	1	-15	34	8	191	196	37
-7	13	7	140	133	11	-2	27	7	79	46	79	-2	8	8	1055	1004	2	-1	24	8	252	262	16	-12	34	8	80	88	79
-4	13	7	136	177	11	-25	28	7	339	352	15	-7	9	8	408	437	3	-24	25	8	97	138	68	-9	34	8	263	273	32
-1	13	7	359	386	4	-22	28	7	97	116	71	-4	9	8	138	173	10	-21	25	8	261	246	15	-6	34	8	0	27	1
-12	14	7	45	8	45	-19	28	7	530	521	8	-1	9	8	127	172	11	-18	25	8	66	160	65	-26	35	8	127	158	126
-9	14	7	566	574	3	-16	28	7	0	34	1	-9	10	8	411	410	4	-15	25	8	151	161	25	-23	35	8	259	293	48
-6	14	7	166	154	9	-13	28	7	545	538	8	-6	10	8	896	872	3	-12	25	8	265	230	13	-20	35	8	104	66	104
-3	14	7	603	592	3	-10	28	7	203	209	21	-3	10	8	842	805	3	-9	25	8	46	8	45	-17	35	8	286	264	27



Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-14	35	8	172	137	48	-12	24	9	219	194	16	-13	35	9	139	127	138	-21	23	10	293	302	14	-17	33	10	86	130	85
-11	35	8	0	53	1	-9	24	9	376	379	10	-1	1	10	83	47	27	-18	23	10	152	112	26	-14	33	10	217	259	30
-22	36	8	0	90	1	-6	24	9	33	21	32	0	2	10	969	945	3	-15	23	10	0	75	1	-11	33	10	101	113	101
-19	36	8	168	211	80	-3	24	9	377	384	11	-2	3	10	227	209	6	-12	23	10	55	90	54	-8	33	10	324	318	44
-16	36	8	70	78	69	-23	25	9	104	57	53	-4	4	10	1034	1008	3	-9	23	10	0	50	1	-22	34	10	163	18	163
-1	2	9	256	242	5	-20	25	9	119	128	38	-1	4	10	262	239	5	-6	23	10	310	277	13	-19	34	10	101	181	100
-2	4	9	270	243	4	-17	25	9	182	181	21	-3	5	10	432	416	3	-3	23	10	250	254	17	-16	34	10	0	45	1
-4	5	9	282	303	4	-14	25	9	255	272	14	0	5	10	168	180	12	0	23	10	282	293	20	-13	34	10	163	141	74
-1	5	9	0	52	1	-11	25	9	221	220	17	-5	6	10	465	501	4	-23	24	10	233	234	19	-10	34	10	230	27	133
-3	6	9	451	423	3	-8	25	9	61	76	60	-2	6	10	1054	1037	2	-20	24	10	133	157	33	-18	35	10	131	108	131
-5	7	9	502	448	3	-5	25	9	335	327	13	-7	7	10	144	109	17	-17	24	10	277	277	14	-1	3	11	113	114	14
-2	7	9	148	160	9	-2	25	9	108	56	55	-4	7	10	82	115	22	-14	24	10	157	160	24	-3	4	11	713	673	3
-7	8	9	265	229	6	-25	26	9	372	362	14	-1	7	10	618	641	3	-11	24	10	268	279	14	-2	5	11	56	37	55
-4	8	9	301	269	5	-22	26	9	130	128	40	-6	8	10	1086	1065	4	-8	24	10	188	172	21	-4	6	11	268	215	6
-1	8	9	585	563	3	-19	26	9	311	309	13	-3	8	10	242	242	6	-5	24	10	121	134	41	-1	6	11	83	113	24
-6	9	9	350	333	4	-16	26	9	70	119	70	0	8	10	725	711	4	-2	24	10	250	243	18	-6	7	11	190	201	9
-3	9	9	539	527	3	-13	26	9	400	417	9	-8	9	10	571	541	4	-25	25	10	307	317	22	-3	7	11	300	289	6
-8	10	9	151	177	11	-10	26	9	25	104	25	-5	9	10	438	428	4	-22	25	10	81	69	80	-5	8	11	495	470	4
-5	10	9	482	505	3	-7	26	9	477	469	9	-2	9	10	91	98	21	-19	25	10	357	358	11	-2	8	11	0	42	1
-2	10	9	176	176	9	-4	26	9	94	83	93	-10	10	10	546	530	6	-16	25	10	102	41	49	-7	9	11	0	26	1
-10	11	9	331	333	6	-1	26	9	446	437	11	-7	10	10	92	132	23	-13	25	10	28	31	27	-4	9	11	204	196	9
-7	11	9	235	233	7	-24	27	9	352	342	14	-4	10	10	798	786	3	-10	25	10	159	102	27	-1	9	11	403	370	5
-4	11	9	464	454	4	-21	27	9	0	40	1	-1	10	10	154	170	12	-7	25	10	67	97	66	-9	10	11	271	275	8
-1	11	9	240	226	7	-18	27	9	275	259	16	-9	11	10	432	425	5	-4	25	10	297	307	15	-6	10	11	257	245	8
-9	12	9	172	153	11	-15	27	9	169	159	24	-6	11	10	175	140	10	-1	25	10	141	133	40	-3	10	11	457	467	5
-6	12	9	429	429	4	-12	27	9	93	34	87	-3	11	10	225	226	8	-24	26	10	127	101	43	-8	11	11	254	240	9
-3	12	9	748	749	3	-9	27	9	140	142	34	0	11	10	772	750	5	-21	26	10	357	367	12	-5	11	11	257	268	8
-11	13	9	140	149	15	-6	27	9	155	160	33	-11	12	10	296	294	7	-18	26	10	48	105	47	-2	11	11	358	360	6
-8	13	9	507	505	4	-3	27	9	323	344	16	-8	12	10	852	851	3	-15	26	10	121	103	37	-10	12	11	27	69	26
-5	13	9	80	76	26	-26	28	9	65	42	65	-5	12	10	120	101	17	-12	26	10	179	166	25	-7	12	11	566	575	4
-2	13	9	135	125	14	-23	28	9	211	207	24	-2	12	10	740	707	3	-9	26	10	270	298	16	-4	12	11	79	25	35
-13	14	9	401	394	5	-20	28	9	167	166	31	-13	13	10	218	168	16	-6	26	10	124	120	44	-1	12	11	275	269	8
-10	14	9	132	161	16	-17	28	9	376	363	12	-10	13	10	284	284	7	-3	26	10	202	219	25	-12	13	11	526	527	5
-7	14	9	343	349	6	-14	28	9	63	40	62	-7	13	10	77	57	34	0	26	10	0	80	1	-9	13	11	418	390	6
-4	14	9	40	17	40	-11	28	9	417	407	11	-4	13	10	0	14	1	-26	27	10	105	163	85	-6	13	11	561	553	4
-1	14	9	212	192	10	-8	28	9	76	125	76	-1	13	10	98	66	25	-23	27	10	272	275	18	-3	13	11	714	696	4
-12	15	9	168	201	13	-5	28	9	373	355	14	-12	14	10	436	418	5	-20	27	10	105	84	58	-11	14	11	541	526	5
-9	15	9	198	198	10	-2	28	9	71	75	71	-9	14	10	495	454	5	-17	27	10	200	177	23	-8	14	11	116	125	21
-6	15	9	209	209	10	-28	29	9	310	332	19	-6	14	10	681	670	4	-14	27	10	110	135	49	-5	14	11	649	614	5
-3	15	9	286	284	8	-25	29	9	134	104	48	-3	14	10	114	108	21	-11	27	10	337	363	13	-2	14	11	92	77	33
-14	16	9	117	74	22	-22	29	9	233	255	23	0	14	10	378	365	10	-8	27	10	128	113	43	-13	15	11	64	80	63
-11	16	9	476	477	5	-19	29	9	66	82	65	-14	15	10	48	38	48	-5	27	10	41	96	40	-10	15	11	493	484	5
-8	16	9	0	34	1	-16	29	9	322	309	14	-11	15	10	108	73	23	-2	27	10	155	133	39	-7	15	11	298	264	8
-5	16	9	608	587	4	-13	29	9	159	179	32	-8	15	10	322	342	7	-28	28	10	0	86	1	-4	15	11	238	235	11
-2	16	9	105	111	25	-10	29	9	92	28	92	-5	15	10	408	381	6	-25	28	10	165	187	37	-1	15	11	499	480	6
-16	17	9	599	607	5	-7	29	9	0	86	1	-2	15	10	147	134	17	-22	28	10	107	108	72	-15	16	11	339	332	8
-13	17	9	248	229	11	-4	29	9	94	92	93	-16	16	10	508	512	9	-19	28	10	125	110	46	-12	16	11	0	18	1
-10	17	9	273	265	9	-1	29	9	243	244	27	-13	16	10	224	231	11	-16	28	10	57	99	56	-9	16	11	699	708	4
-7	17	9	204	168	12	-27	30	9	357	356	17	-10	16	10	701	688	4	-13	28	10	446	460	10	-6	16	11	22	68	22
-4	17	9	62	63	62	-24	30	9	117	142	63	-7	16	10	387	378	6	-10	28	10	143	143	38	-3	16	11	338	325	8
-1	17	9	716	703	5	-21	30	9	483	485	11	-4	16	10	395	378	7	-7	28	10	156	147	35	-14	17	11	425	420	7
-15	18	9	642	633	5	-18	30	9	272	239	18	-1	16	10	319	309	9	-4	28	10	19	60	19	-11	17	11	80	54	46
-12	18	9	299	291	8	-15	30	9	429	424	12	-15	17	10	271	271	10	-1	28	10	68	83	68	-8	17	11	402	408	7
-9	18	9	665	657	4	-12	30	9	171	175	33	-12	17	10	33	36	33	-27	29	10	473	456	13	-5	17	11	577	568	6
-6	18	9	0	78	1	-9	30	9	442	445	12	-9	17	10	68	77	67	-24	29	10	161	156	36	-2	17	11	107	84	33
-3	18	9	711	705	4	-6	30	9	0	23	1	-6	17	10	157	134	18	-21	29	10	233	224	23	-16	18	11	152	133	22

-17	19	9	76	59	76	-3	30	9	194	166	33	-3	17	10	113	117	27	-18	29	10	0	25	1	-13	18	11	510	512	6
-14	19	9	539	551	5	-29	31	9	107	24	107	0	17	10	255	256	17	-15	29	10	133	147	43	-10	18	11	229	244	12
-11	19	9	55	68	54	-26	31	9	190	173	33	-17	18	10	102	59	37	-12	29	10	249	239	20	-7	18	11	409	422	7
-8	19	9	213	180	13	-23	31	9	0	8	1	-14	18	10	584	580	5	-9	29	10	94	30	94	-4	18	11	125	68	28
-5	19	9	585	579	5	-20	31	9	163	184	37	-11	18	10	657	674	5	-6	29	10	353	357	15	-1	18	11	510	511	7
-2	19	9	221	258	14	-17	31	9	0	20	1	-8	18	10	642	653	5	-3	29	10	0	34	1	-18	19	11	400	394	8
-19	20	9	550	535	6	-14	31	9	190	191	29	-5	18	10	234	238	12	0	29	10	277	255	64	-15	19	11	141	109	23
-16	20	9	93	109	39	-11	31	9	107	128	83	-2	18	10	324	323	9	-29	30	10	184	97	66	-12	19	11	497	472	6
-13	20	9	1033	1003	5	-8	31	9	0	94	1	-19	19	10	284	288	16	-26	30	10	113	9	80	-9	19	11	6	47	6
-10	20	9	206	227	14	-5	31	9	193	191	38	-16	19	10	285	311	11	-23	30	10	132	153	52	-6	19	11	63	55	62
-7	20	9	516	490	6	-2	31	9	0	129	1	-13	19	10	152	130	19	-20	30	10	0	30	1	-3	19	11	251	267	14
-4	20	9	270	267	11	-28	32	9	187	196	74	-10	19	10	129	178	24	-17	30	10	151	159	41	-17	20	11	261	270	13
-1	20	9	470	490	7	-25	32	9	389	359	16	-7	19	10	155	157	19	-14	30	10	52	75	51	-14	20	11	77	42	76
-18	21	9	342	332	10	-22	32	9	159	174	41	-4	19	10	414	417	8	-11	30	10	356	350	16	-11	20	11	775	740	5
-15	21	9	0	20	1	-19	32	9	489	471	12	-1	19	10	220	223	15	-8	30	10	88	79	88	-8	20	11	188	205	17
-12	21	9	477	484	6	-16	32	9	126	142	54	-18	20	10	279	280	12	-5	30	10	73	138	73	-5	20	11	449	438	8
-9	21	9	254	254	11	-13	32	9	490	484	12	-15	20	10	363	351	8	-2	30	10	0	25	1	-2	20	11	121	138	34
-6	21	9	364	371	9	-10	32	9	411	431	15	-12	20	10	404	412	7	-28	31	10	141	62	141	-19	21	11	49	48	48
-3	21	9	347	342	9	-7	32	9	289	291	24	-9	20	10	331	324	9	-25	31	10	261	223	25	-16	21	11	461	464	8
-20	22	9	102	111	44	-4	32	9	155	20	154	-6	20	10	226	202	15	-22	31	10	67	55	66	-13	21	11	248	266	13
-17	22	9	616	624	6	-27	33	9	0	70	1	-3	20	10	263	255	13	-19	31	10	0	54	1	-10	21	11	44	53	43
-14	22	9	109	116	33	-24	33	9	196	162	35	0	20	10	439	435	12	-16	31	10	238	239	25	-7	21	11	0	51	1
-11	22	9	591	566	6	-21	33	9	0	8	1	-20	21	10	188	169	19	-13	31	10	73	106	73	-4	21	11	88	71	65
-8	22	9	136	137	26	-18	33	9	68	97	68	-17	21	10	250	246	13	-10	31	10	401	358	15	-1	21	11	462	457	9
-5	22	9	659	676	6	-15	33	9	137	171	51	-14	21	10	6	49	6	-7	31	10	254	276	26	-21	22	11	421	420	10
-2	22	9	0	82	1	-12	33	9	76	14	76	-11	21	10	0	14	1	-4	31	10	376	350	28	-18	22	11	185	199	21
-22	23	9	398	393	10	-9	33	9	82	59	82	-8	21	10	0	26	1	-27	32	10	225	245	83	-15	22	11	604	606	7
-19	23	9	171	177	22	-6	33	9	0	15	1	-5	21	10	109	89	37	-24	32	10	0	32	1	-12	22	11	68	27	68
-16	23	9	463	469	8	-26	34	9	123	164	122	-2	21	10	410	401	9	-21	32	10	0	54	1	-9	22	11	304	303	11
-13	23	9	127	117	30	-23	34	9	386	359	32	-22	22	10	148	91	44	-18	32	10	50	31	49	-6	22	11	153	163	26
-10	23	9	72	91	72	-20	34	9	261	262	27	-19	22	10	260	267	14	-15	32	10	291	307	20	-3	22	11	583	563	7
-7	23	9	366	359	10	-17	34	9	420	406	16	-16	22	10	290	260	12	-12	32	10	34	20	34	-20	23	11	231	229	18
-4	23	9	300	321	12	-14	34	9	188	211	41	-13	22	10	191	193	17	-9	32	10	90	140	90	-17	23	11	69	54	69
-1	23	9	382	370	10	-11	34	9	410	435	20	-10	22	10	311	302	11	-6	32	10	138	33	137	-14	23	11	249	244	16
-21	24	9	308	293	13	-22	35	9	75	69	75	-7	22	10	105	60	39	-26	33	10	151	20	151	-11	23	11	314	327	12
-18	24	9	0	33	1	-19	35	9	0	36	1	-4	22	10	151	151	26	-23	33	10	232	223	47	-8	23	11	109	102	43
-15	24	9	619	640	6	-16	35	9	0	68	1	-1	22	10	321	311	11	-20	33	10	96	130	96	-5	23	11	290	275	14

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s						
-2	23	11	136	119	34	0	6	12	972	907	5	-18	24	12	117	137	45	-11	12	13	711	676	4	-17	27	13	35	48	35
-22	24	11	101	61	61	-5	7	12	90	107	24	-15	24	12	257	251	17	-8	12	13	312	326	8	-14	27	13	121	37	57
-19	24	11	507	508	8	-2	7	12	221	221	9	-12	24	12	159	168	27	-5	12	13	576	562	5	-11	27	13	0	66	1
-16	24	11	163	142	26	-7	8	12	151	173	14	-9	24	12	156	191	31	-2	12	13	0	16	1	-8	27	13	134	152	51
-13	24	11	551	553	7	-4	8	12	768	762	3	-6	24	12	162	141	30	-10	13	13	301	301	9	-5	27	13	213	201	29
-10	24	11	0	75	1	-1	8	12	192	192	11	-3	24	12	173	194	30	-7	13	13	0	40	1	-2	27	13	0	47	1
-7	24	11	419	430	10	-9	9	12	171	188	19	0	24	12	0	67	1	-4	13	13	0	38	1	-25	28	13	371	373	23
-4	24	11	99	86	65	-6	9	12	57	36	56	-23	25	12	253	269	20	-1	13	13	422	423	7	-22	28	13	134	174	57
-1	24	11	372	388	13	-3	9	12	61	38	60	-20	25	12	41	28	40	-12	14	13	106	58	30	-19	28	13	366	378	15
-24	25	11	141	138	37	0	9	12	623	621	6	-17	25	12	130	148	41	-9	14	13	326	332	8	-16	28	13	141	202	47
-21	25	11	107	67	59	-8	10	12	494	479	5	-14	25	12	0	25	1	-6	14	13	112	111	29	-13	28	13	551	527	11
-18	25	11	187	180	24	-5	10	12	215	219	10	-11	25	12	0	10	1	-3	14	13	689	659	5	-10	28	13	61	102	60
-15	25	11	298	295	14	-2	10	12	724	715	4	-8	25	12	259	267	18	-14	15	13	500	504	6	-7	28	13	364	371	17
-12	25	11	218	215	19	-10	11	12	229	221	10	-5	25	12	107	115	67	-11	15	13	357	346	9	-4	28	13	199	218	46
-9	25	11	197	195	23	-7	11	12	281	285	8	-2	25	12	421	384	13	-8	15	13	0	65	1	-1	28	13	181	156	181
-6	25	11	53	80	52	-4	11	12	241	244	10	-25	26	12	140	134	43	-5	15	13	348	344	9	-24	29	13	207	216	58
-3	25	11	292	292	17	-1	11	12	165	148	15	-22	26	12	0	27	1	-2	15	13	48	51	48	-21	29	13	17	51	17
-23	26	11	286	297	17	-12	12	12	817	802	6	-19	26	12	257	267	19	-13	16	13	671	672	6	-18	29	13	190	190	32
-20	26	11	290	281	16	-9	12	12	354	361	7	-16	26	12	125	160	46	-10	16	13	28	57	27	-15	29	13	0	47	1
-17	26	11	552	527	8	-6	12	12	727	692	4	-13	26	12	221	248	21	-7	16	13	298	294	10	-12	29	13	123	97	60
-14	26	11	96	80	63	-3	12	12	340	359	7	-10	26	12	82	81	81	-4	16	13	82	103	75	-9	29	13	70	107	70
-11	26	11	446	458	10	0	12	12	783	761	6	-7	26	12	187	186	28	-1	16	13	331	329	11	-6	29	13	135	68	80
-8	26	11	141	122	37	-11	13	12	149	146	17	-4	26	12	0	35	1	-15	17	13	132	109	27	-3	29	13	185	212	184
-5	26	11	436	446	11	-8	13	12	60	28	59	-1	26	12	55	119	55	-12	17	13	177	159	19	-23	30	13	323	331	44
-2	26	11	173	195	35	-5	13	12	235	246	10	-27	27	12	351	339	25	-9	17	13	405	383	8	-20	30	13	0	57	1
-25	27	11	80	19	80	-2	13	12	135	101	20	-24	27	12	178	195	31	-6	17	13	119	96	31	-17	30	13	296	292	21
-22	27	11	251	244	20	-13	14	12	260	279	10	-21	27	12	353	353	15	-3	17	13	273	287	14	-14	30	13	184	171	36
-19	27	11	90	84	89	-10	14	12	924	906	4	-18	27	12	0	12	1	-17	18	13	382	364	9	-11	30	13	347	350	19
-16	27	11	202	230	24	-7	14	12	418	413	6	-15	27	12	0	60	1	-14	18	13	69	98	69	-8	30	13	139	54	88
-13	27	11	186	187	26	-4	14	12	600	609	5	-12	27	12	163	199	33	-11	18	13	530	523	7	-22	31	13	94	111	94
-10	27	11	260	244	19	-1	14	12	255	257	12	-9	27	12	0	53	1	-8	18	13	77	96	77	-19	31	13	147	93	146
-7	27	11	222	225	23	-15	15	12	87	53	87	-6	27	12	197	214	28	-5	18	13	434	431	9	-16	31	13	126	80	125
-4	27	11	0	10	1	-12	15	12	222	229	12	-3	27	12	0	27	1	-2	18	13	45	26	44	-13	31	13	167	208	75
-1	27	11	265	263	25	-9	15	12	280	296	10	0	27	12	319	296	31	-16	19	13	200	206	18	-10	31	13	0	107	1
-27	28	11	147	188	47	-6	15	12	227	239	13	-26	28	12	0	49	1	-13	19	13	73	89	72	-18	32	13	158	188	158
-24	28	11	81	15	80	-3	15	12	201	176	15	-23	28	12	86	58	85	-10	19	13	308	299	11	-15	32	13	284	274	98
-21	28	11	525	513	11	0	15	12	205	242	23	-20	28	12	148	172	40	-7	19	13	251	239	15	0	1	14	154	133	23
-18	28	11	148	165	38	-14	16	12	534	527	6	-17	28	12	326	317	16	-4	19	13	174	177	24	-2	2	14	421	417	8
-15	28	11	397	401	12	-11	16	12	337	331	8	-14	28	12	211	172	25	-1	19	13	309	322	14	-1	3	14	225	209	11
-12	28	11	225	217	22	-8	16	12	304	294	9	-11	28	12	251	281	21	-18	20	13	68	58	68	-3	4	14	219	202	11
-9	28	11	421	416	12	-5	16	12	182	181	17	-8	28	12	102	112	101	-15	20	13	393	413	10	0	4	14	886	888	5
-6	28	11	225	230	24	-2	16	12	516	515	7	-5	28	12	198	199	31	-12	20	13	98	69	48	-5	5	14	493	463	8
-3	28	11	433	452	14	-16	17	12	228	256	14	-2	28	12	0	111	1	-9	20	13	394	407	9	-2	5	14	217	191	11
-26	29	11	258	270	24	-13	17	12	0	36	1	-28	29	12	185	133	83	-6	20	13	0	30	1	-4	6	14	828	824	4
-23	29	11	146	124	45	-10	17	12	0	33	1	-25	29	12	363	365	17	-3	20	13	504	494	9	-1	6	14	293	271	9
-20	29	11	272	290	20	-7	17	12	164	142	19	-22	29	12	107	120	107	-20	21	13	347	338	12	-6	7	14	354	330	7
-17	29	11	85	101	85	-4	17	12	204	189	16	-19	29	12	304	311	19	-17	21	13	186	195	22	-3	7	14	341	310	7
-14	29	11	312	302	16	-1	17	12	116	126	34	-16	29	12	0	29	1	-14	21	13	382	401	10	0	7	14	109	106	40
-11	29	11	195	160	28	-18	18	12	247	265	20	-13	29	12	117	106	65	-11	21	13	292	287	13	-8	8	14	575	594	7
-8	29	11	77	74	76	-15	18	12	124	100	28	-10	29	12	301	311	19	-8	21	13	320	303	13	-5	8	14	202	189	13
-5	29	11	0	51	1	-12	18	12	440	435	7	-7	29	12	0	21	1	-5	21	13	244	235	18	-2	8	14	674	689	4
-2	29	11	0	64	1	-9	18	12	182	195	17	-4	29	12	286	265	30	-2	21	13	100	25	64	-7	9	14	366	330	7
-28	30	11	0	90	1	-6	18	12	368	342	9	-1	29	12	320	271	44	-19	22	13	370	365	11	-4	9	14	327	318	8
-25	30	11	258	255	25	-3	18	12	463	470	8	-27	30	12	146	197	146	-16	22	13	92	100	74	-1	9	14	96	86	35
-22	30	11	139	153	50	0	18	12	501	503	11	-24	30	12	105	103	104	-13	22	13	453	443	9	-9	10	14	340	312	8
-19	30	11	350	348	16	-17	19	12	183	174	19	-21	30	12	235	256													

-16 30 11	202	226	30	-14 19 12	192	180	17	-18 30 12	151	148	47	-7 22 13	492	484	9	-3 10 14	441	412	6
-13 30 11	539	554	11	-11 19 12	322	336	10	-15 30 12	168	165	39	-4 22 13	23	11	23	0 10 14	588	608	8
-10 30 11	232	229	25	-8 19 12	51	9	51	-12 30 12	61	17	60	-1 22 13	267	283	19	-11 11 14	93	106	73
-7 30 11	270	250	22	-5 19 12	113	117	36	-9 30 12	290	291	21	-21 23 13	87	95	86	-8 11 14	270	275	10
-4 30 11	112	79	112	-2 19 12	104	103	46	-6 30 12	0	8	1	-18 23 13	275	306	17	-5 11 14	70	55	69
-1 30 11	246	217	52	-19 20 12	128	133	32	-3 30 12	164	193	140	-15 23 13	0	30	1	-2 11 14	0	24	1
-27 31 11	100	77	100	-16 20 12	423	425	8	-23 31 12	362	365	28	-12 23 13	198	202	21	-10 12 14	546	574	6
-24 31 11	317	312	25	-13 20 12	269	271	13	-20 31 12	111	106	93	-9 23 13	112	114	50	-7 12 14	308	281	9
-21 31 11	0	61	1	-10 20 12	202	205	17	-17 31 12	128	97	64	-6 23 13	77	89	77	-4 12 14	593	602	5
-18 31 11	34	29	33	-7 20 12	259	253	14	-14 31 12	223	236	31	-3 23 13	384	385	12	-1 12 14	560	539	6
-15 31 11	0	34	1	-4 20 12	385	379	10	-11 31 12	0	8	1	-23 24 13	363	364	14	-12 13 14	239	210	13
-12 31 11	52	133	52	-1 20 12	166	193	26	-8 31 12	229	218	38	-20 24 13	0	46	1	-9 13 14	125	94	26
-9 31 11	0	59	1	-21 21 12	285	282	20	-22 32 12	0	69	1	-17 24 13	348	349	14	-6 13 14	238	235	13
-6 31 11	171	132	58	-18 21 12	187	182	21	-19 32 12	287	266	36	-14 24 13	77	59	77	-3 13 14	265	238	13
-26 32 11	0	26	1	-15 21 12	103	94	40	-16 32 12	78	66	78	-11 24 13	586	590	8	0 13 14	339	364	16
-23 32 11	293	295	32	-12 21 12	107	94	39	-13 32 12	188	199	51	-8 24 13	189	231	26	-14 14 14	276	288	16
-20 32 11	204	196	35	-9 21 12	26	7	25	-10 32 12	32	24	32	-5 24 13	315	334	16	-11 14 14	279	245	11
-17 32 11	226	233	29	-6 21 12	164	182	24	-18 33 12	0	58	1	-2 24 13	0	44	1	-8 14 14	407	410	8
-14 32 11	247	227	26	-3 21 12	114	41	44	-15 33 12	0	77	1	-22 25 13	320	308	16	-5 14 14	156	147	22
-11 32 11	398	359	19	0 21 12	177	173	40	-2 3 13	317	293	7	-19 25 13	104	44	71	-2 14 14	490	496	7
-8 32 11	82	43	82	-20 22 12	140	128	32	-1 4 13	61	72	60	-16 25 13	192	206	26	-13 15 14	56	3	56
-22 33 11	0	100	1	-17 22 12	219	238	18	-3 5 13	99	96	23	-13 25 13	242	246	20	-10 15 14	68	45	67
-19 33 11	131	117	131	-14 22 12	229	232	17	-5 6 13	447	426	5	-10 25 13	0	45	1	-7 15 14	101	56	41
-16 33 11	45	21	45	-11 22 12	143	163	27	-2 6 13	62	38	61	-7 25 13	204	201	26	-4 15 14	116	100	34
-13 33 11	102	111	102	-8 22 12	280	292	15	-4 7 13	581	584	4	-4 25 13	161	54	37	-1 15 14	334	325	11
-10 33 11	109	43	109	-5 22 12	351	345	12	-1 7 13	81	79	36	-1 25 13	133	171	59	-15 16 14	184	156	20
-18 34 11	248	243	59	-2 22 12	175	173	26	-6 8 13	38	137	38	-24 26 13	0	48	1	-12 16 14	337	351	10
-15 34 11	392	365	42	-22 23 12	161	171	30	-3 8 13	207	212	11	-21 26 13	498	515	11	-9 16 14	12	57	11
0 0 12	1467	1393	6	-19 23 12	71	51	70	-8 9 13	394	393	6	-18 26 13	87	75	86	-6 16 14	351	383	11
-1 2 12	503	509	4	-16 23 12	89	32	88	-5 9 13	115	121	21	-15 26 13	426	411	12	-3 16 14	312	298	12
-3 3 12	228	231	11	-13 23 12	142	121	29	-2 9 13	128	116	20	-12 26 13	358	380	14	0 16 14	152	164	44
0 3 12	281	284	10	-10 23 12	146	149	29	-7 10 13	223	234	11	-9 26 13	523	485	10	-17 17 14	226	253	24
-2 4 12	903	893	3	-7 23 12	243	226	17	-4 10 13	190	201	13	-6 26 13	85	23	84	-14 17 14	57	36	57
-4 5 12	76	43	29	-4 23 12	243	232	18	-1 10 13	682	681	4	-3 26 13	245	251	25	-11 17 14	231	206	15
-1 5 12	413	384	5	-1 23 12	0	89	1	-9 11 13	31	46	31	-26 27 13	259	260	27	-8 17 14	207	221	17
-6 6 12	272	261	10	-24 24 12	59	94	58	-6 11 13	140	142	18	-23 27 13	143	139	47	-5 17 14	194	192	20
-3 6 12	272	273	7	-21 24 12	110	120	51	-3 11 13	403	389	7	-20 27 13	356	362	15	-2 17 14	143	165	31

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s						
-16	18	14	174	157	23	-10	30	14	0	45	1	-23	25	15	0	9	1	-2	18	16	112	138	57	-13	15	17	0	16	1
-13	18	14	203	207	18	-1	2	15	0	68	1	-20	25	15	262	263	22	-19	19	16	72	87	72	-10	15	17	393	420	12
-10	18	14	332	342	11	-2	4	15	88	71	39	-17	25	15	163	167	38	-16	19	16	0	33	1	-7	15	17	90	101	90
-7	18	14	143	156	30	-4	5	15	42	43	41	-14	25	15	178	209	36	-13	19	16	132	108	39	-4	15	17	60	66	60
-4	18	14	385	395	11	-1	5	15	455	460	6	-11	25	15	93	82	92	-10	19	16	120	88	47	-1	15	17	255	259	19
-1	18	14	106	137	54	-3	6	15	325	293	9	-8	25	15	0	24	1	-7	19	16	190	160	26	-15	16	17	337	346	15
-18	19	14	254	250	16	-5	7	15	379	361	8	-5	25	15	368	362	17	-4	19	16	174	206	30	-12	16	17	150	108	34
-15	19	14	74	31	73	-2	7	15	0	70	1	-2	25	15	77	95	77	-1	19	16	301	291	18	-9	16	17	468	466	10
-12	19	14	72	50	72	-7	8	15	54	113	53	-25	26	15	193	222	122	-18	20	16	219	235	24	-6	16	17	71	10	70
-9	19	14	101	80	46	-4	8	15	398	397	8	-22	26	15	145	91	67	-15	20	16	360	356	14	-3	16	17	292	302	17
-6	19	14	45	34	45	-1	8	15	261	252	12	-19	26	15	299	294	20	-12	20	16	194	220	25	-14	17	17	361	368	14
-3	19	14	0	37	1	-6	9	15	163	148	20	-16	26	15	71	131	70	-9	20	16	304	292	17	-11	17	17	65	32	64
0	19	14	104	106	103	-3	9	15	264	273	11	-13	26	15	389	410	16	-6	20	16	223	210	22	-8	17	17	232	237	22
-20	20	14	140	98	50	-8	10	15	188	191	19	-10	26	15	157	147	43	-3	20	16	269	291	20	-5	17	17	272	271	18
-17	20	14	206	190	20	-5	10	15	348	327	8	-7	26	15	317	362	20	0	20	16	282	316	29	-2	17	17	0	22	1
-14	20	14	208	232	20	-2	10	15	48	70	47	-4	26	15	51	53	50	-20	21	16	104	40	80	-16	18	17	109	121	70
-11	20	14	381	366	10	-10	11	15	250	251	13	-21	27	15	0	8	1	-17	21	16	113	108	60	-13	18	17	450	450	12
-8	20	14	474	499	10	-7	11	15	127	126	26	-18	27	15	138	154	55	-14	21	16	0	9	1	-10	18	17	187	193	28
-5	20	14	402	371	11	-4	11	15	320	304	10	-15	27	15	103	92	103	-11	21	16	99	4	98	-7	18	17	356	349	14
-2	20	14	122	161	47	-1	11	15	100	71	41	-12	27	15	85	118	85	-8	21	16	0	33	1	-4	18	17	81	36	81
-19	21	14	223	230	20	-9	12	15	360	358	9	-9	27	15	192	189	37	-5	21	16	190	169	30	-1	18	17	387	392	14
-16	21	14	140	118	34	-6	12	15	132	103	27	-6	27	15	122	132	122	-2	21	16	285	289	20	-18	19	17	276	297	19
-13	21	14	73	17	73	-3	12	15	394	387	9	-20	28	15	84	105	84	-22	22	16	64	75	63	-15	19	17	117	138	61
-10	21	14	126	131	36	-11	13	15	191	184	17	-17	28	15	433	418	24	-19	22	16	316	315	17	-12	19	17	295	302	18
-7	21	14	0	29	1	-8	13	15	350	366	10	-14	28	15	169	210	74	-16	22	16	183	202	29	-9	19	17	75	75	75
-4	21	14	139	140	37	-5	13	15	71	84	70	-11	28	15	264	295	40	-13	22	16	169	138	33	-6	19	17	75	61	74
-1	21	14	171	168	31	-2	13	15	244	242	15	-8	28	15	0	127	1	-10	22	16	211	207	26	-3	19	17	269	261	20
-21	22	14	156	134	33	-13	14	15	246	265	15	-19	29	15	160	136	121	-7	22	16	158	156	36	-17	20	17	293	299	20
-18	22	14	192	223	24	-10	14	15	0	8	1	-16	29	15	188	248	97	-4	22	16	139	201	47	-14	20	17	0	54	1
-15	22	14	168	184	29	-7	14	15	311	305	11	-13	29	15	0	95	1	-1	22	16	266	261	23	-11	20	17	404	401	13
-12	22	14	189	213	23	-4	14	15	70	65	69	-10	29	15	99	49	98	-21	23	16	79	137	79	-8	20	17	199	187	28
-9	22	14	549	542	9	-1	14	15	272	289	15	-1	1	16	0	71	1	-18	23	16	17	66	17	-5	20	17	364	354	15
-6	22	14	219	264	22	-12	15	15	159	144	23	0	2	16	634	653	7	-15	23	16	0	67	1	-2	20	17	0	17	1
-3	22	14	226	248	23	-9	15	15	109	124	39	-2	3	16	267	248	11	-12	23	16	0	22	1	-19	21	17	0	65	1
0	22	14	182	230	47	-6	15	15	249	269	15	-4	4	16	810	790	7	-9	23	16	0	29	1	-16	21	17	269	294	21
-23	23	14	180	191	46	-3	15	15	343	324	12	-1	4	16	378	343	9	-6	23	16	0	75	1	-13	21	17	199	208	33
-20	23	14	140	122	40	-14	16	15	25	39	25	-3	5	16	212	205	15	-3	23	16	244	240	25	-10	21	17	180	134	33
-17	23	14	150	157	35	-11	16	15	418	422	9	0	5	16	0	59	1	0	23	16	288	165	106	-7	21	17	121	96	57
-14	23	14	28	14	28	-8	16	15	71	67	71	-5	6	16	392	381	8	-23	24	16	218	150	55	-4	21	17	0	69	1
-11	23	14	0	71	1	-5	16	15	545	540	8	-2	6	16	620	626	6	-20	24	16	139	85	52	-1	21	17	337	346	18
-8	23	14	100	126	73	-2	16	15	66	94	66	-7	7	16	0	43	1	-17	24	16	209	224	28	-21	22	17	285	280	27
-5	23	14	71	40	70	-16	17	15	392	375	11	-4	7	16	162	147	21	-14	24	16	80	74	80	-18	22	17	0	52	1
-2	23	14	173	181	33	-13	17	15	282	277	14	-1	7	16	458	405	8	-11	24	16	214	225	28	-15	22	17	337	341	17
-22	24	14	146	164	41	-10	17	15	109	109	44	-6	8	16	732	736	5	-8	24	16	120	125	62	-12	22	17	0	19	1
-19	24	14	187	213	29	-7	17	15	197	178	20	-3	8	16	321	290	10	-5	24	16	208	173	31	-9	22	17	236	266	25
-16	24	14	0	67	1	-4	17	15	70	91	70	0	8	16	315	332	16	-2	24	16	175	171	68	-6	22	17	49	40	49
-13	24	14	358	361	13	-1	17	15	363	368	13	-8	9	16	248	255	14	-22	25	16	0	37	1	-3	22	17	406	402	15
-10	24	14	170	175	31	-15	18	15	477	474	9	-5	9	16	411	381	8	-19	25	16	125	213	72	-20	23	17	207	205	48
-7	24	14	248	255	22	-12	18	15	285	288	14	-2	9	16	100	120	46	-16	25	16	96	89	96	-17	23	17	108	48	107
-4	24	14	164	198	38	-9	18	15	549	538	8	-10	10	16	380	366	14	-13	25	16	98	11	98	-14	23	17	145	143	52
-1	24	14	237	235	26	-6	18	15	58	109	57	-7	10	16	268	273	13	-10	25	16	67	28	66	-11	23	17	266	271	23
-24	25	14	136	85	50	-3	18	15	465	475	10	-4	10	16	580	590	7	-7	25	16	121	56	76	-8	23	17	148	132	45
-21	25	14	126	159	52	-17	19	15	56	92	55	-1	10	16	193	184	19	-4	25	16	151	171	151	-5	23	17	211	234	38
-18	25	14	158	139	36	-14	19	15	271	262	16	-9	11	16	30	39	30	-21	26	16	218	215	61	-2	23	17	0	21	1
-15	25	14	261	266	20	-11	19	15	102	139	52	-6	11	16	73	108	72	-18	26	16	0	109	1	-19	24	17	360	366	26
-12	25	14	110	145	68	-8	19	15	117	128	45	-3	11	16	253	233	14	-15	26										

-9 25 14	95	17	94	-5 19 15	348	337	13	0 11 16	322	296	17	-12 26 16	112	102	111	-13 24 17	388	401	19
-6 25 14	151	135	41	-2 19 15	40	46	40	-11 12 16	339	315	11	-9 26 16	330	339	26	-10 24 17	0	22	1
-3 25 14	210	168	30	-19 20 15	517	503	9	-8 12 16	543	573	7	-6 26 16	151	65	150	-7 24 17	264	301	34
0 25 14	308	317	32	-16 20 15	75	83	74	-5 12 16	266	231	13	-17 27 16	0	106	1	-4 24 17	61	87	61
-26 26 14	101	92	100	-13 20 15	604	605	7	-2 12 16	580	583	7	-14 27 16	0	53	1	-18 25 17	125	159	124
-23 26 14	162	137	41	-10 20 15	49	72	48	-13 13 16	114	96	60	-11 27 16	218	220	71	-15 25 17	106	163	106
-20 26 14	127	123	54	-7 20 15	474	466	10	-10 13 16	158	154	24	-8 27 16	275	193	116	-12 25 17	227	204	56
-17 26 14	223	229	25	-4 20 15	98	117	76	-7 13 16	221	217	17	-1 3 17	66	47	65	-9 25 17	89	186	88
-14 26 14	89	99	89	-1 20 15	261	268	20	-4 13 16	119	120	37	-3 4 17	190	180	18	-6 25 17	202	69	202
-11 26 14	224	219	25	-18 21 15	480	487	10	-1 13 16	142	123	33	-2 5 17	78	28	77	-14 26 17	0	26	1
-8 26 14	113	111	73	-15 21 15	22	71	22	-12 14 16	207	218	20	-4 6 17	137	123	27	-11 26 17	387	409	37
-5 26 14	219	211	29	-12 21 15	166	182	28	-9 14 16	414	403	10	-1 6 17	104	113	47	0 0 18	652	684	18
-2 26 14	92	34	91	-9 21 15	140	149	39	-6 14 16	468	481	9	-6 7 17	33	46	32	-1 2 18	324	311	12
-25 27 14	243	286	51	-6 21 15	82	64	81	-3 14 16	88	99	80	-3 7 17	152	159	26	-3 3 18	158	138	36
-22 27 14	165	144	41	-3 21 15	307	300	17	0 14 16	234	257	28	-5 8 17	245	240	15	0 3 18	307	287	19
-19 27 14	369	370	16	-20 22 15	104	156	75	-14 15 16	143	131	32	-2 8 17	94	85	56	-2 4 18	670	665	6
-16 27 14	0	33	1	-17 22 15	407	413	12	-11 15 16	0	51	1	-7 9 17	52	80	52	-4 5 18	180	187	22
-13 27 14	0	19	1	-14 22 15	87	120	87	-8 15 16	21	38	21	-4 9 17	0	22	1	-1 5 18	224	219	19
-10 27 14	0	73	1	-11 22 15	461	425	11	-5 15 16	286	268	14	-1 9 17	256	250	17	-6 6 18	381	388	15
-7 27 14	176	164	37	-8 22 15	70	17	70	-2 15 16	63	11	62	-9 10 17	151	121	29	-3 6 18	228	237	18
-4 27 14	324	325	23	-5 22 15	358	346	14	-16 16 16	231	235	28	-6 10 17	175	183	23	0 6 18	684	685	10
-24 28 14	103	43	103	-2 22 15	92	65	92	-13 16 16	230	228	19	-3 10 17	294	292	14	-5 7 18	176	157	24
-21 28 14	202	201	38	-22 23 15	375	361	15	-10 16 16	271	270	16	-8 11 17	167	170	25	-2 7 18	152	179	30
-18 28 14	78	10	78	-19 23 15	80	91	80	-7 16 16	244	252	17	-5 11 17	170	175	25	-7 8 18	114	72	45
-15 28 14	70	147	70	-16 23 15	285	279	18	-4 16 16	302	323	14	-2 11 17	0	72	1	-4 8 18	554	561	8
-12 28 14	98	66	97	-13 23 15	155	151	33	-1 16 16	235	221	20	-10 12 17	91	49	72	-1 8 18	210	204	21
-9 28 14	112	103	89	-10 23 15	104	68	73	-15 17 16	40	37	40	-7 12 17	422	409	11	-9 9 18	0	69	1
-6 28 14	167	168	64	-7 23 15	258	266	20	-12 17 16	121	104	43	-4 12 17	72	68	72	-6 9 18	219	212	19
-23 29 14	0	82	1	-4 23 15	0	79	1	-9 17 16	0	78	1	-1 12 17	200	213	22	-3 9 18	0	33	1
-20 29 14	0	43	1	-1 23 15	227	266	27	-6 17 16	0	27	1	-12 13 17	318	330	14	0 9 18	167	126	42
-17 29 14	126	157	70	-21 24 15	260	261	22	-3 17 16	180	150	27	-9 13 17	121	116	43	-8 10 18	372	375	11
-14 29 14	55	142	54	-18 24 15	0	43	1	0 17 16	284	275	25	-6 13 17	234	240	18	-5 10 18	192	198	23
-11 29 14	10	40	10	-15 24 15	380	388	15	-17 18 16	207	172	23	-3 13 17	385	365	11	-2 10 18	367	366	12
-8 29 14	125	173	125	-12 24 15	67	87	67	-14 18 16	320	313	14	-11 14 17	374	353	13	-10 11 18	157	150	30
-19 30 14	242	246	62	-9 24 15	220	216	26	-11 18 16	326	320	13	-8 14 17	0	24	1	-7 11 18	190	157	25
-16 30 14	0	8	1	-6 24 15	33	79	32	-8 18 16	267	302	17	-5 14 17	368	369	12	-4 11 18	109	142	53
-13 30 14	0	84	1	-3 24 15	324	328	18	-5 18 16	248	231	19	-2 14 17	85	120	85	-1 11 18	112	80	59

Table 3. Observed and calculated structure factors for thornasite

h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s	h	k	l	Fo	Fc	s
-12	12	18	598	579	12	-18	21	18	201	144	45	-13	16	19	418	431	14	0	10	20	308	336	28	-3	9	21	197	158	32
-9	12	18	277	277	17	-15	21	18	128	44	65	-10	16	19	74	30	74	-11	11	20	0	62	1	-8	10	21	0	43	1
-6	12	18	381	382	12	-12	21	18	59	92	58	-7	16	19	237	251	26	-8	11	20	0	74	1	-5	10	21	251	266	26
-3	12	18	367	332	13	-9	21	18	0	50	1	-4	16	19	135	151	56	-5	11	20	120	64	66	-2	10	21	68	63	67
0	12	18	345	359	22	-6	21	18	163	185	41	-1	16	19	238	242	28	-2	11	20	0	13	1	-10	11	21	218	223	33
-11	13	18	204	211	25	-3	21	18	97	29	97	-15	17	19	91	44	91	-10	12	20	449	422	13	-7	11	21	31	87	30
-8	13	18	0	40	1	-17	22	18	158	196	73	-12	17	19	193	198	36	-7	12	20	144	176	49	-4	11	21	175	204	40
-5	13	18	150	124	35	-14	22	18	115	129	115	-9	17	19	239	233	26	-4	12	20	496	488	12	-1	11	21	165	170	47
-2	13	18	0	4	1	-11	22	18	166	160	49	-6	17	19	86	91	86	-1	12	20	323	338	19	-9	12	21	318	318	23
-13	14	18	84	133	83	-8	22	18	131	137	131	-3	17	19	231	205	29	-12	13	20	138	180	57	-6	12	21	0	37	1
-10	14	18	533	543	10	-5	22	18	221	242	43	-17	18	19	248	240	37	-9	13	20	130	146	57	-3	12	21	207	237	42
-7	14	18	312	306	16	-16	23	18	0	13	1	-14	18	19	118	150	86	-6	13	20	80	116	79	-11	13	21	0	84	1
-4	14	18	303	312	18	-13	23	18	0	36	1	-11	18	19	365	344	17	-3	13	20	101	74	101	-8	13	21	208	228	46
-1	14	18	314	283	17	-10	23	18	150	54	94	-8	18	19	97	44	96	0	13	20	276	260	34	-5	13	21	65	80	65
-15	15	18	0	10	1	-7	23	18	171	173	82	-5	18	19	458	466	14	-14	14	20	110	182	109	-2	13	21	221	189	57
-12	15	18	115	104	63	-12	24	18	95	125	94	-2	18	19	83	65	83	-11	14	20	146	175	53	-13	14	21	195	151	195
-9	15	18	80	72	79	-9	24	18	127	106	127	-16	19	19	157	152	64	-8	14	20	424	400	15	-10	14	21	0	20	1
-6	15	18	55	67	54	-2	3	19	172	182	27	-13	19	19	66	28	65	-5	14	20	99	140	98	-7	14	21	195	209	56
-3	15	18	200	181	28	-1	4	19	78	79	77	-10	19	19	181	188	36	-2	14	20	322	342	21	-4	14	21	0	82	1
0	15	18	0	53	1	-3	5	19	64	14	64	-7	19	19	181	207	40	-13	15	20	0	36	1	-1	14	21	273	263	89
-14	16	18	281	304	20	-5	6	19	262	251	18	-4	19	19	111	133	110	-10	15	20	0	53	1	-12	15	21	218	128	74
-11	16	18	292	269	19	-2	6	19	131	131	40	-1	19	19	286	295	52	-7	15	20	106	115	105	-9	15	21	0	28	1
-8	16	18	213	205	25	-4	7	19	300	316	16	-15	20	19	335	308	35	-4	15	20	50	100	49	-6	15	21	176	167	175
-5	16	18	169	162	34	-1	7	19	30	46	30	-12	20	19	148	20	99	-1	15	20	177	155	50	-3	15	21	261	278	116
-2	16	18	391	410	14	-6	8	19	177	175	30	-9	20	19	342	375	32	-15	16	20	91	108	90	-1	1	22	97	62	97
-16	17	18	176	167	36	-3	8	19	174	184	28	-6	20	19	0	79	1	-12	16	20	258	271	32	0	2	22	281	268	34
-13	17	18	0	19	1	-8	9	19	248	263	20	-3	20	19	386	366	31	-9	16	20	52	41	51	-2	3	22	94	118	93
-10	17	18	77	83	77	-5	9	19	82	106	81	-14	21	19	244	260	51	-6	16	20	309	316	24	-4	4	22	558	536	20
-7	17	18	65	63	65	-2	9	19	0	36	1	-11	21	19	51	163	51	-3	16	20	158	222	89	-1	4	22	206	221	38
-4	17	18	48	40	48	-7	10	19	217	235	24	-8	21	19	186	232	83	0	16	20	0	51	1	-3	5	22	57	107	56
-1	17	18	96	131	96	-4	10	19	55	79	55	-5	21	19	346	282	64	-14	17	20	164	77	100	0	5	22	103	87	103
-18	18	18	168	200	66	-1	10	19	340	350	14	0	1	20	91	141	90	-11	17	20	142	160	77	-5	6	22	192	263	57
-15	18	18	181	181	37	-9	11	19	66	101	66	-2	2	20	457	433	16	-8	17	20	82	154	82	-2	6	22	459	456	17
-12	18	18	284	288	19	-6	11	19	78	67	77	-1	3	20	0	68	1	-5	17	20	0	64	1	-7	7	22	0	35	1
-9	18	18	285	246	20	-3	11	19	206	215	26	-3	4	20	163	192	35	-2	17	20	0	127	1	-4	7	22	74	93	74
-6	18	18	279	259	21	-11	12	19	470	468	11	0	4	20	530	528	14	-13	18	20	144	128	144	-1	7	22	212	239	36
-3	18	18	273	272	21	-8	12	19	143	50	42	-5	5	20	193	181	41	-10	18	20	248	262	43	-6	8	22	551	527	17
0	18	18	306	345	28	-5	12	19	276	286	19	-2	5	20	179	206	31	-7	18	20	83	92	82	-3	8	22	98	110	97
-17	19	18	146	184	50	-2	12	19	89	61	88	-4	6	20	527	520	11	-4	18	20	0	251	1	0	8	22	221	248	56
-14	19	18	0	110	1	-10	13	19	332	340	17	-1	6	20	201	199	26	-12	19	20	0	10	1	-8	9	22	0	104	1
-11	19	18	201	188	29	-7	13	19	101	66	101	-6	7	20	151	150	42	-9	19	20	237	61	113	-5	9	22	184	269	62
-8	19	18	68	35	68	-4	13	19	0	22	1	-3	7	20	143	149	40	-1	2	21	110	148	80	-2	9	22	0	21	1
-5	19	18	72	155	72	-1	13	19	170	157	37	0	7	20	0	42	1	-2	4	21	108	112	108	-10	10	22	186	167	185
-2	19	18	50	24	50	-12	14	19	58	35	58	-8	8	20	369	364	21	-4	5	21	0	46	1	-7	10	22	152	131	151
-19	20	18	283	252	30	-9	14	19	198	189	29	-5	8	20	146	143	41	-1	5	21	361	337	17	-4	10	22	471	458	22
-16	20	18	189	197	34	-6	14	19	151	111	43	-2	8	20	356	351	14	-3	6	21	163	184	41	-1	10	22	0	115	1
-13	20	18	284	244	22	-3	14	19	386	381	16	-7	9	20	215	199	25	-5	7	21	250	249	25	-6	11	22	0	132	1
-10	20	18	200	235	32	-14	15	19	391	396	15	-4	9	20	171	171	33	-2	7	21	107	75	82	-3	11	22	182	208	129
-7	20	18	186	165	35	-11	15	19	185	169	33	-1	9	20	110	49	65	-7	8	21	162	146	42						
-4	20	18	214	241	29	-8	15	19	0	46	1	-9	10	20	149	161	41	-4	8	21	169	181	38						
-1	20	18	208	193	47	-5	15	19	150	173	45	-6	10	20	512	506	11	-1	8	21	114	150	69						
-21	21	18	244	217	124	-2	15	19	80	55	79	-3	10	20	261	288	21	-6	9	21	121	126	72						