

**THORTVEITITE Sample No. 1**

**Table of observed and calculated structure factors.**

Values of  $F_o$ ,  $F_c$  and  $sF_o = \sigma(F_o)$  are multiplied by 10

Reflections flagged with \* were considered unobserved.

\*\*\*

THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
2	0	0	752	762	9	1	9	0	105	82	18	4	2	1	1897	1863	14
4	0	0	3051	3090	12	3	9	0	109	120	37	4	2	-1	2222	2229	12
6	0	0	938	896	12	5	9	0	346	362	9	6	2	1	913	900	12
8	0	0	1493	1501	16	7	9	0	272	273	14	6	2	-1	929	914	12
10	0	0	965	959	11	9	9	0*	47	79	301	8	2	1	681	669	9
1	1	0	905	887	8	0	10	0	1407	1409	15	8	2	-1	1247	1256	16
3	1	0	883	868	10	2	10	0	947	958	12	10	2	1	905	900	11
5	1	0	547	534	7	4	10	0	885	894	11	10	2	-1	548	556	10
7	1	0	971	964	13	6	10	0	762	770	10	1	3	1	2627	2551	10
9	1	0*	59	56	115	8	10	0	692	682	9	1	3	-1	736	817	9
11	1	0	432	437	13	1	11	0	655	658	8	3	3	1	1928	1891	13
0	2	0	418	414	5	3	11	0	663	666	8	3	3	-1	1943	1958	12
2	2	0	2037	2089	9	5	11	0	137	207	25	5	3	1	729	725	10
4	2	0	1305	1279	13	7	11	0	649	646	10	5	3	-1	678	657	8
6	2	0	1289	1251	14	0	12	0	198	176	16	7	3	1	1081	1078	14
8	2	0	636	636	8	2	12	0	915	919	12	7	3	-1	1696	1681	18
10	2	0	401	401	11	4	12	0	199	187	18	9	3	1	541	546	9
1	3	0	2008	2034	9	6	12	0	605	608	10	9	3	-1	326	329	11
3	3	0	1969	1937	12	1	13	0	776	783	10	11	3	1	689	705	11
5	3	0	2093	2071	15	3	13	0	606	606	9	11	3	-1	714	739	10
7	3	0	720	717	9	5	13	0	988	994	12	0	4	1	809	769	9
9	3	0	957	973	13	0	14	0	357	363	13	2	4	1	575	548	7
11	3	0	474	474	12	2	14	0	413	396	12	2	4	-1	1489	1479	12
0	4	0	1368	1325	10	4	14	0*	55	75	82	4	4	1	205	218	9
2	4	0	468	427	6	1	15	0	584	589	11	4	4	-1	318	314	6
4	4	0	337	319	6	3	15	0	563	583	12	6	4	1	478	447	7
6	4	0	189	169	11	0	0	1	1654	1589	7	6	4	-1	419	408	7
8	4	0	325	312	10	2	0	1	1735	1796	11	8	4	1	251	251	14
10	4	0	365	360	13	2	0	-1	3665	3900	8	8	4	-1	112	151	23
1	5	0	2034	2007	12	4	0	1	1804	1728	14	10	4	1	132	116	70
3	5	0	1879	1842	14	4	0	-1	1088	1061	12	10	4	-1	187	196	22
5	5	0	675	642	8	6	0	1	1260	1246	14	1	5	1	2369	2364	12
7	5	0	1529	1507	17	6	0	-1	1837	1807	15	1	5	-1	1864	1830	12
9	5	0	591	595	9	8	0	1	1353	1343	18	3	5	1	848	799	10
11	5	0	790	791	10	8	0	-1	556	562	7	3	5	-1	2171	2184	14
0	6	0	2670	2696	13	10	0	1	368	368	13	5	5	1	2122	2109	17
2	6	0	290	279	6	10	0	-1	982	984	12	5	5	-1	1570	1556	16
4	6	0	1329	1350	14	1	1	1	2239	2155	8	7	5	1	787	777	10
6	6	0	133	126	17	1	1	-1	439	418	6	7	5	-1	750	740	9
8	6	0	711	730	9	3	1	1	645	605	8	9	5	1	1066	1058	14
10	6	0	428	430	12	3	1	-1	2078	2014	10	9	5	-1	1122	1136	15
1	7	0	1098	1069	12	5	1	1	1718	1682	15	11	5	-1	550	552	12
3	7	0	722	698	9	5	1	-1	629	633	8	0	6	1	189	197	8
5	7	0	1520	1493	16	7	1	1	80	79	67	2	6	1	712	690	9
7	7	0	204	191	15	7	1	-1	127	137	16	2	6	-1	1709	1690	14
9	7	0	773	760	10	9	1	1	638	644	9	4	6	1	593	586	8
0	8	0	456	443	6	9	1	-1	656	647	8	4	6	-1	76	105	26
2	8	0	1779	1778	16	11	1	1*	0	48	990	6	6	1	475	480	8
4	8	0	873	872	11	11	1	-1	152	180	29	6	6	-1	843	862	11
6	8	0	1149	1155	14	0	2	1	3269	3488	8	8	6	1	672	678	9
8	8	0	610	612	9	2	2	1	1868	1812	11	8	6	-1*	0	74	990
10	8	0	452	457	13	2	2	-1	599	596	7	10	6	1*	63	54	67

THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
10	6	-1	505	488	11	4	12	-1	673	682	10	1	3	-2	1493	1435	12
1	7	1	339	308	6	6	12	1	333	340	14	3	3	2	304	289	6
1	7	-1	1534	1533	15	6	12	-1	236	226	18	3	3	-2	2203	2186	12
3	7	1	1839	1852	16	1	13	1	460	447	10	5	3	2	1864	1841	17
3	7	-1	359	324	7	1	13	-1	1039	1051	14	5	3	-2	1050	1047	13
5	7	1	127	97	18	3	13	1	1205	1207	16	7	3	2	604	595	8
5	7	-1	893	871	11	3	13	-1	448	443	11	7	3	-2	929	949	11
7	7	1	924	924	11	5	13	1	267	253	17	9	3	2	1043	1054	13
7	7	-1	868	846	11	5	13	-1	757	755	9	9	3	-2	1154	1164	14
9	7	1	243	242	18	0	14	1	305	295	15	11	3	-2	419	450	13
9	7	-1	349	330	13	2	14	1	112	80	37	0	4	2	1075	1006	12
0	8	1	1907	1870	16	2	14	-1	115	236	40	2	4	2	96	53	14
2	8	1	1143	1143	14	4	14	1	72	97	63	2	4	-2	808	785	10
2	8	-1	524	536	6	4	14	-1	277	277	17	4	4	2	633	618	8
4	8	1	1244	1235	14	1	15	1	527	547	12	4	4	-2	1589	1595	15
4	8	-1	1586	1570	18	1	15	-1	595	606	11	6	4	2	477	455	8
6	8	1	835	841	11	3	15	-1	503	527	13	6	4	-2	309	307	8
6	8	-1	721	717	9	0	0	2	1528	1522	9	8	4	2	190	170	19
8	8	1	568	564	10	2	0	2	2917	2925	13	8	4	-2	652	645	8
8	8	-1	1025	1042	13	2	0	-2	2524	2522	10	10	4	2	363	336	15
10	8	-1	477	480	12	4	0	2	1526	1491	16	10	4	-2	177	165	22
1	9	1*	0	24	990	4	0	-2	2400	2381	12	1	5	2	841	784	10
1	9	-1	267	259	9	6	0	2	1840	1826	19	1	5	-2	1933	1919	14
3	9	1	256	259	10	6	0	-2	1438	1431	16	3	5	2	2231	2219	15
3	9	-1	89	49	24	8	0	2	524	499	9	3	5	-2	1224	1216	13
5	9	1	366	350	10	8	0	-2	1263	1299	16	5	5	2	854	843	11
5	9	-1	343	340	9	10	0	2	993	1012	13	5	5	-2	1565	1563	17
7	9	1	73	59	49	10	0	-2	652	664	9	7	5	2	1097	1098	13
7	9	-1	393	397	11	12	0	-2	731	724	11	7	5	-2	1088	1094	15
9	9	1*	0	127	990	1	1	2	367	334	4	9	5	2	541	531	10
9	9	-1	312	298	15	1	1	-2	616	627	7	9	5	-2	530	531	9
0	10	1	586	574	7	3	1	2	1368	1321	15	11	5	-2	723	721	10
2	10	1	1229	1233	16	3	1	-2	203	207	6	0	6	2	467	428	6
2	10	-1	1586	1609	18	5	1	2	145	148	15	2	6	2	1114	1106	13
4	10	1	653	661	8	5	1	-2	855	816	11	2	6	-2	642	650	8
4	10	-1	636	645	8	7	1	2	444	435	8	4	6	2	469	477	7
6	10	1	971	966	11	7	1	-2	408	393	7	4	6	-2	1081	1071	13
6	10	-1	899	916	12	9	1	2*	45	78	274	6	6	2	886	909	11
8	10	1	664	670	10	9	1	-2*	0	51	990	6	6	-2	454	466	7
8	10	-1	494	500	11	11	1	-2	321	310	14	8	6	2*	72	60	154
1	11	1	698	700	9	0	2	2	1273	1228	11	8	6	-2	573	581	8
1	11	-1	615	628	8	2	2	2	1669	1605	12	10	6	-2*	70	186	189
3	11	1	241	225	13	2	2	-2	2646	2652	11	1	7	2	1516	1476	16
3	11	-1	623	633	9	4	2	2	956	888	13	1	7	-2	864	847	11
5	11	1	825	830	10	4	2	-2	148	127	9	3	7	2	404	373	7
5	11	-1	635	651	8	6	2	2	658	627	8	3	7	-2	1155	1135	13
7	11	1	285	292	16	6	2	-2	1514	1512	16	5	7	2	860	858	10
7	11	-1	136	164	65	8	2	2	1102	1096	14	5	7	-2	538	537	7
0	12	1	770	769	10	8	2	-2	382	371	8	7	7	2	571	557	9
2	12	1	429	427	10	10	2	2	299	323	17	7	7	-2	628	619	8
2	12	-1	92	74	34	10	2	-2	882	897	11	9	7	2	574	566	11
4	12	1	455	465	10	1	3	2	3246	3256	12	9	7	-2	725	707	9

THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
0	8	2	1140	1137	14	1	15	-2	636	636	11	8	4	-3	160	133	18
2	8	2	1137	1127	14	0	0	3	1702	1604	12	10	4	-3	335	330	13
2	8	-2	1640	1624	18	2	0	3	1988	1949	14	1	5	3	2348	2292	16
4	8	2	928	941	12	2	0	-3	1985	1954	12	1	5	-3	951	939	11
4	8	-2	497	500	7	4	0	3	1419	1413	15	3	5	3	1022	1010	14
6	8	2	619	623	9	4	0	-3	787	750	10	3	5	-3	1713	1725	16
6	8	-2	1173	1160	15	6	0	3	684	667	8	5	5	3	1156	1189	16
8	8	2	967	967	12	6	0	-3	1787	1803	16	5	5	-3	951	944	12
8	8	-2	508	521	10	8	0	3	1056	1034	13	7	5	3	755	751	10
10	8	-2	771	778	10	8	0	-3	664	688	9	7	5	-3	1267	1279	16
1	9	2	648	644	8	10	0	3	576	589	12	9	5	3	706	710	10
1	9	-2	340	330	9	10	0	-3	914	932	12	9	5	-3	879	872	11
3	9	2	705	694	9	1	1	3	1610	1528	12	11	5	-3	482	486	12
3	9	-2	231	228	12	1	1	-3	306	273	5	0	6	3	586	574	7
5	9	2	325	328	11	3	1	3	340	340	7	2	6	3	769	764	9
5	9	-2	229	216	13	3	1	-3	752	745	9	2	6	-3	794	774	10
7	9	2	193	227	22	5	1	3	548	535	7	4	6	3	610	620	8
7	9	-2*	28	87	363	5	1	-3	365	367	6	4	6	-3	175	71	14
9	9	-2	219	209	20	7	1	3	232	222	16	6	6	3*	0	110	990
0	10	2	1324	1343	17	7	1	-3	656	660	8	6	6	-3	929	930	12
2	10	2	722	736	10	9	1	3	353	307	14	8	6	3	489	507	11
2	10	-2	369	360	9	9	1	-3	463	475	9	8	6	-3	195	181	17
4	10	2	1029	1055	13	11	1	-3	98	95	43	10	6	-3	461	469	12
4	10	-2	1616	1590	17	0	2	3	1187	1146	13	1	7	3	339	343	8
6	10	2	813	819	10	2	2	3	1583	1520	15	1	7	-3	1110	1112	14
6	10	-2	396	403	10	2	2	-3	1678	1653	13	3	7	3	882	873	11
8	10	-2	938	922	11	4	2	3	640	632	8	3	7	-3	775	770	9
1	11	2	101	125	31	4	2	-3	1873	1856	14	5	7	3	603	608	8
1	11	-2	796	784	10	6	2	3	1554	1541	18	5	7	-3	767	768	10
3	11	2	1020	1012	13	6	2	-3	512	517	7	7	7	3	603	612	10
3	11	-2	387	384	10	8	2	3	317	328	14	7	7	-3	489	479	9
5	11	2	164	240	26	8	2	-3	1077	1095	14	9	7	-3	327	327	14
5	11	-2	651	642	8	10	2	-3	399	400	11	0	8	3	1021	1009	12
7	11	2	528	524	11	1	3	3	182	168	9	2	8	3	1060	1063	14
7	11	-2	486	478	11	1	3	-3	2767	2757	13	2	8	-3	1067	1074	14
0	12	2	561	562	9	3	3	3	1898	1856	16	4	8	3	697	698	8
2	12	2	304	314	13	3	3	-3	495	471	6	4	8	-3	1385	1376	16
2	12	-2	563	582	9	5	3	3	726	702	9	6	8	3	1149	1159	13
4	12	2	455	458	11	5	3	-3	1855	1853	16	6	8	-3	500	510	9
4	12	-2	153	198	23	7	3	3	991	1021	12	8	8	3	369	408	15
6	12	2*	61	141	163	7	3	-3	363	364	8	8	8	-3	884	879	11
6	12	-2	425	431	12	9	3	3	568	554	11	10	8	-3	412	406	14
1	13	2	939	945	11	9	3	-3	754	769	10	1	9	3	789	796	10
1	13	-2	682	690	9	11	3	-3	581	587	11	1	9	-3	658	643	8
3	13	2	482	482	11	0	4	3	664	671	9	3	9	3	368	355	10
3	13	-2	801	797	9	2	4	3	106	88	16	3	9	-3	479	480	8
5	13	2	629	630	10	2	4	-3*	45	37	103	5	9	3	145	200	54
5	13	-2	492	511	11	4	4	3	749	732	9	5	9	-3	399	381	9
0	14	2	157	147	57	4	4	-3	286	268	7	7	9	3	126	146	31
2	14	2*	46	24	317	6	4	3	542	530	8	7	9	-3	361	354	12
2	14	-2	212	206	21	6	4	-3	655	649	8	9	9	-3*	44	21	103
4	14	-2*	73	104	189	8	4	3	526	517	10	0	10	3	1171	1166	13

THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
2	10	3	652	661	8	4	2	4	1562	1554	17	7	7	4	341	356	14
2	10	-3	790	796	10	4	2	-4	1155	1135	13	7	7	-4	873	867	10
4	10	3	1115	1133	14	6	2	4	281	262	14	9	7	-4	275	263	16
4	10	-3	593	600	8	6	2	-4	1082	1061	13	0	8	4	1096	1081	14
6	10	3	201	216	21	8	2	4	692	694	10	2	8	4	621	621	8
6	10	-3	1012	1005	13	8	2	-4	419	419	9	2	8	-4	711	721	9
8	10	-3	439	455	12	10	2	-4	600	600	10	4	8	4	1219	1251	16
1	11	3	994	1007	13	1	3	4	1362	1308	16	4	8	-4	888	888	11
1	11	-3*	76	144	154	1	3	-4	782	780	10	6	8	4	350	356	13
3	11	3	276	284	14	3	3	4	1360	1338	16	6	8	-4	1010	1003	12
3	11	-3	758	749	10	3	3	-4	1617	1593	16	8	8	-4	438	421	11
5	11	3	484	490	11	5	3	4	784	786	10	1	9	4*	0	69	990
5	11	-3	238	228	17	5	3	-4	866	870	11	1	9	-4	369	366	10
7	11	-3	604	599	10	7	3	4	870	873	11	3	9	4	114	117	65
0	12	3	405	415	11	7	3	-4	1210	1224	15	3	9	-4	259	229	13
2	12	3	332	348	13	9	3	-4	488	487	10	5	9	4	75	78	53
2	12	-3	360	368	12	11	3	-4	564	550	11	5	9	-4	124	151	27
4	12	3	277	289	16	0	4	4	103	103	42	7	9	-4	222	202	19
4	12	-3	641	645	9	2	4	4	795	766	10	9	9	-4	114	164	40
6	12	-3	114	110	38	2	4	-4	885	864	11	0	10	4	555	561	9
1	13	3	493	502	11	4	4	4	458	449	8	2	10	4	1089	1094	13
1	13	-3	804	779	10	4	4	-4*	31	29	191	2	10	-4	1203	1178	15
3	13	3	656	660	10	6	4	4	605	608	9	4	10	4	278	279	16
3	13	-3	728	712	9	6	4	-4*	46	84	177	4	10	-4	549	563	9
5	13	-3	602	599	11	8	4	4*	38	32	115	6	10	-4	630	625	9
0	14	3	92	82	50	8	4	-4	360	353	11	8	10	-4	650	628	10
2	14	3*	0	21	990	10	4	-4*	0	96	990	1	11	4	356	348	13
2	14	-3*	0	43	990	1	5	4	804	814	11	1	11	-4	809	801	9
0	0	4	1796	1746	14	1	5	-4	1950	1973	17	3	11	4	377	376	13
2	0	4	1659	1606	16	3	5	4	1120	1122	13	3	11	-4	229	237	18
2	0	-4	1601	1569	14	3	5	-4	645	653	8	5	11	-4	557	547	10
4	0	4	657	672	8	5	5	4	787	817	11	7	11	-4	156	177	29
4	0	-4	1766	1733	15	5	5	-4	1325	1337	16	0	12	4	335	350	14
6	0	4	1389	1381	17	7	5	4	765	768	9	2	12	4	263	290	18
6	0	-4	592	606	7	7	5	-4	527	529	8	2	12	-4	310	341	15
8	0	4	653	665	10	9	5	-4	916	907	12	4	12	-4	262	275	17
8	0	-4	1398	1430	18	0	6	4	676	664	9	6	12	-4	546	546	11
10	0	-4	528	528	10	2	6	4	712	706	10	1	13	4	904	890	11
1	1	4	198	200	9	2	6	-4	621	615	8	1	13	-4	214	223	22
1	1	-4	1522	1502	14	4	6	4*	27	79	103	3	13	-4	897	891	12
3	1	4	594	572	8	4	6	-4	760	751	10	0	0	5	1870	1844	17
3	1	-4	319	327	6	6	6	4	709	710	9	2	0	5	201	217	13
5	1	4	127	120	24	6	6	-4*	57	63	187	2	0	-5	643	621	8
5	1	-4	768	755	10	8	6	4	241	238	21	4	0	5	1667	1668	18
7	1	4	357	346	13	8	6	-4	769	757	9	4	0	-5	1658	1650	17
7	1	-4	86	136	28	10	6	-4	164	134	27	6	0	5	506	512	12
9	1	4	385	381	16	1	7	4	1238	1239	16	6	0	-5	758	770	10
9	1	-4	476	471	10	1	7	-4	90	95	27	8	0	-5	634	632	9
11	1	-4	158	182	28	3	7	4	443	455	9	10	0	-5	710	716	10
0	2	4	1466	1394	15	3	7	-4	1264	1287	15	1	1	5	460	442	7
2	2	4	532	510	6	5	7	4	768	790	9	1	1	-5	58	47	33
2	2	-4	588	561	8	5	7	-4	328	341	10	3	1	5	398	395	9

THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
3	1	-5	1191	1178	14	3	7	5	526	554	9	2	2	6	265	265	13
5	1	5	246	293	18	3	7	-5*	37	82	74	2	2	-6	526	515	7
5	1	-5	93	94	24	5	7	5	475	489	11	4	2	6	696	705	10
7	1	5	523	534	12	5	7	-5	928	943	12	4	2	-6	903	921	12
7	1	-5	695	689	9	7	7	-5	134	172	30	6	2	6	473	492	14
9	1	-5*	9	87	399	9	7	-5	686	681	10	6	2	-6	355	356	10
0	2	5	718	717	9	0	8	5	583	574	9	8	2	-6	519	525	10
2	2	5	1416	1402	15	2	8	5	1230	1220	15	1	3	6	882	884	11
2	2	-5	1191	1166	14	2	8	-5	1047	1040	12	1	3	-6	753	741	9
4	2	5	364	378	11	4	8	5	340	348	13	3	3	6	614	624	9
4	2	-5	607	606	8	4	8	-5	519	520	9	3	3	-6	1250	1237	15
6	2	5	702	708	10	6	8	-5	762	743	10	5	3	6	514	521	12
6	2	-5	802	816	10	8	8	-5	722	713	10	5	3	-6	304	298	11
8	2	-5	835	850	10	1	9	5	153	122	25	7	3	-6	923	915	12
10	2	-5	401	390	13	1	9	-5*	38	43	84	9	3	-6	315	343	15
1	3	5	1179	1165	15	3	9	5	129	119	31	0	4	6	221	211	14
1	3	-5	1107	1081	15	3	9	-5	237	251	16	2	4	6	550	568	9
3	3	5	715	719	9	5	9	5*	44	29	289	2	4	-6	337	349	10
3	3	-5	627	614	7	5	9	-5*	42	67	260	4	4	6*	72	46	113
5	3	5	777	800	10	7	9	-5*	0	80	990	4	4	-6*	0	21	990
5	3	-5	962	978	12	0	10	5	691	710	10	6	4	-6	336	351	12
7	3	5	361	345	15	2	10	5	493	496	11	8	4	-6	109	157	79
7	3	-5	616	625	8	2	10	-5	689	702	9	1	5	6	990	1012	13
9	3	-5	751	745	10	4	10	5	710	726	10	1	5	-6	705	718	9
0	4	5	284	297	10	4	10	-5	756	755	9	3	5	6	645	653	9
2	4	5	216	211	13	6	10	-5	618	612	10	3	5	-6	673	673	9
2	4	-5	73	87	31	1	11	5	372	361	14	5	5	6	890	919	11
4	4	5	444	437	10	1	11	-5	320	290	15	5	5	-6	1018	1048	13
4	4	-5	379	370	8	3	11	5	407	393	14	7	5	-6	505	516	11
6	4	5*	86	120	107	3	11	-5	687	661	10	9	5	-6	679	681	10
6	4	-5	138	146	21	5	11	-5	262	245	18	0	6	6	95	96	35
8	4	-5*	72	94	104	0	12	5*	0	115	990	2	6	6	812	806	10
10	4	-5	225	209	20	2	12	-5	513	521	12	2	6	-6	766	748	10
1	5	5	990	1014	12	4	12	-5*	74	103	193	4	6	6	247	239	18
1	5	-5	768	768	10	0	0	6	416	420	8	4	6	-6*	40	60	253
3	5	5	961	959	11	2	0	6	1461	1452	17	6	6	-6	733	719	9
3	5	-5	1572	1586	18	2	0	-6	1413	1450	16	8	6	-6*	59	165	256
5	5	5	775	793	10	4	0	6	683	706	9	1	7	6	140	214	70
5	5	-5	599	616	8	4	0	-6	502	512	8	1	7	-6	784	816	9
7	5	5	873	885	11	6	0	6	639	690	11	3	7	6	670	688	10
7	5	-5	1042	1049	13	6	0	-6	1315	1314	16	3	7	-6	520	538	10
9	5	-5	374	394	13	8	0	-6	545	553	10	5	7	-6	327	326	13
0	6	5	958	959	11	10	0	-6	564	571	12	7	7	-6	485	491	11
2	6	5	289	280	13	1	1	6	633	618	8	0	8	6	1017	1004	12
2	6	-5*	44	74	180	1	1	-6	83	55	66	2	8	6	330	346	16
4	6	5	954	951	12	3	1	6	88	69	38	2	8	-6	509	511	10
4	6	-5	865	858	11	3	1	-6	208	201	13	4	8	-6	855	846	10
6	6	5	123	109	75	5	1	6	595	602	11	6	8	-6	356	356	14
6	6	-5	237	248	15	5	1	-6	538	534	8	1	9	6	64	17	62
8	6	-5	211	199	19	7	1	-6*	42	98	282	1	9	-6*	60	60	243
1	7	5	548	563	9	9	1	-6	338	330	14	3	9	-6	288	240	15
1	7	-5	971	987	12	0	2	6	1175	1174	14	5	9	-6	268	317	19

## THORTVEITITE - Sample No. 1

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
0	10	6	389	384	14	0	0	8	553	575	11
2	10	-6	646	661	10	2	0	-8	866	889	11
4	10	-6	527	508	12	4	0	-8	492	484	11
0	0	7	945	944	12	6	0	-8	619	631	11
2	0	7	833	841	10	1	1	8	317	296	15
2	0	-7	671	667	9	1	1	-8	155	166	27
4	0	7	455	444	12	3	1	-8	372	350	13
4	0	-7	796	775	9	5	1	-8	90	142	50
6	0	-7	547	540	10	0	2	8	535	539	11
8	0	-7	740	726	10	2	2	-8	192	214	22
1	1	7	67	134	54	4	2	-8	676	667	9
1	1	-7	562	550	8	1	3	-8	852	849	10
3	1	7	472	479	11	3	3	-8	92	159	48
3	1	-7	85	92	38	5	3	-8	741	744	10
5	1	-7	162	185	48	2	4	-8	351	374	15
7	1	-7	364	354	13	4	4	-8	112	97	40
0	2	7	199	184	17	3	5	-8	741	749	10
2	2	7	718	730	9						
2	2	-7	1023	1026	13						
4	2	7	482	511	12						
4	2	-7	341	347	12						
6	2	-7	823	826	11						
8	2	-7	217	212	21						
1	3	7	744	739	9						
1	3	-7	496	492	9						
3	3	7	354	339	14						
3	3	-7	698	700	9						
5	3	-7	819	814	11						
7	3	-7	285	268	16						
0	4	7	605	626	9						
2	4	7	73	97	53						
2	4	-7	334	326	12						
4	4	-7	404	417	12						
6	4	-7	225	211	19						
1	5	7	552	565	10						
1	5	-7	935	947	12						
3	5	7	830	858	11						
3	5	-7	555	559	10						
5	5	-7	548	559	10						
7	5	-7	716	716	10						
0	6	7	474	461	11						
2	6	7	400	389	14						
2	6	-7	189	216	47						
4	6	-7	327	328	14						
6	6	-7	182	166	25						
1	7	7	501	510	12						
1	7	-7	182	218	25						
3	7	-7	565	589	10						
5	7	-7	391	422	14						
0	8	7	316	318	17						
2	8	-7	790	789	10						
4	8	-7	436	433	13						

**THORTVEITITE - Sample No. 2**

**Table of observed and calculated structure factors.**

Values of  $F_o$ ,  $F_c$  and  $sF_o = \sigma(F_o)$  are multiplied by 10

Reflections flagged with \* were considered unobserved.

\*\*\*



THORTVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
2	0	0	402	419	6	5	9	0	557	562	11	6	2	-1	888	862	11
4	0	0	3674	3699	11	7	9	0	232	221	25	8	2	1	633	645	11
6	0	0	781	721	10	9	9	0	68	146	101	8	2	-1	1405	1423	16
8	0	0	1665	1672	19	0	10	0	1578	1555	18	10	2	1	934	932	12
10	0	0	983	990	13	2	10	0	964	944	12	10	2	-1	552	541	13
1	1	0	1076	1029	7	4	10	0	897	904	11	1	3	1	3044	2994	10
3	1	0	1051	1048	11	6	10	0	740	745	11	1	3	-1	595	662	7
5	1	0	872	861	11	8	10	0	683	687	14	3	3	1	2230	2165	12
7	1	0	1152	1160	15	1	11	0	804	804	10	3	3	-1	2211	2216	11
9	1	0	108	136	42	3	11	0	787	808	10	5	3	1	672	671	8
11	1	0	556	542	15	5	11	0	188	223	29	5	3	-1	548	506	7
0	2	0	106	133	14	7	11	0	761	764	13	7	3	1	1144	1157	15
2	2	0	2316	2299	9	0	12	0	472	458	13	7	3	-1	1955	1961	17
4	2	0	1341	1305	12	2	12	0	987	986	12	9	3	1	485	510	14
6	2	0	1396	1374	16	4	12	0	60	51	88	9	3	-1	231	252	21
8	2	0	612	605	10	6	12	0	649	641	14	11	3	1	761	764	14
10	2	0	322	350	19	1	13	0	818	843	11	11	3	-1	823	819	13
1	3	0	2245	2280	9	3	13	0	626	625	13	0	4	1	1273	1263	10
3	3	0	2250	2218	11	5	13	0	1127	1141	14	2	4	1	633	568	8
5	3	0	2393	2392	14	0	14	0	327	346	21	2	4	-1	1874	1805	11
7	3	0	736	738	9	2	14	0	579	558	15	4	4	1	437	481	8
9	3	0	1016	1029	12	4	14	0*	0	28	990	4	4	-1	527	560	7
11	3	0	468	463	18	1	15	0	565	582	16	6	4	1	512	494	9
0	4	0	1673	1643	10	0	0	1	1535	1535	7	6	4	-1	465	430	9
2	4	0	406	379	6	2	0	1	1749	1804	9	8	4	1	232	226	22
4	4	0	329	301	8	2	0	-1	4420	4700	35	8	4	-1	296	303	16
6	4	0	41	64	75	4	0	1	1879	1848	13	10	4	1	108	158	60
8	4	0	329	309	15	4	0	-1	949	915	10	10	4	-1	63	169	147
10	4	0	389	382	18	6	0	1	1248	1241	13	1	5	1	2741	2740	12
1	5	0	2272	2189	11	6	0	-1	2040	2067	15	1	5	-1	1931	1905	11
3	5	0	2071	2015	13	8	0	1	1479	1506	17	3	5	1	633	589	8
5	5	0	510	464	8	8	0	-1	363	381	13	3	5	-1	2552	2548	13
7	5	0	1655	1650	19	10	0	1	259	287	23	5	5	1	2406	2416	16
9	5	0	515	543	14	10	0	-1	1078	1081	13	5	5	-1	1692	1659	15
0	6	0	3498	3552	12	1	1	1	2770	2766	8	7	5	1	721	717	10
2	6	0	504	486	7	1	1	-1	401	356	5	7	5	-1	688	700	10
4	6	0	1694	1737	15	3	1	1	1030	988	12	9	5	1	1147	1164	15
6	6	0*	0	78	990	3	1	-1	2682	2633	10	9	5	-1	1178	1192	16
8	6	0	875	899	10	5	1	1	2077	2078	14	11	5	-1	547	541	16
10	6	0	479	485	17	5	1	-1	739	703	9	0	6	1	159	162	14
1	7	0	1112	1063	13	7	1	1*	0	48	990	2	6	1	801	784	10
3	7	0	622	583	8	7	1	-1	212	106	16	2	6	-1	2182	2149	13
5	7	0	1717	1701	17	9	1	1	766	769	11	4	6	1	682	682	8
7	7	0*	0	78	990	9	1	-1	710	711	11	4	6	-1*	0	79	990
9	7	0	850	817	12	11	1	1	55	40	121	6	6	1	511	534	11
0	8	0	322	317	10	11	1	-1	172	173	39	6	6	-1	1091	1087	13
2	8	0	2021	2024	15	0	2	1	3976	4264	33	8	6	1	848	842	11
4	8	0	921	903	11	2	2	1	2023	1961	10	8	6	-1	67	88	154
6	8	0	1289	1297	17	2	2	-1	292	329	6	10	6	1	112	74	60
8	8	0	632	634	13	4	2	1	2181	2153	13	10	6	-1	613	596	15
1	9	0	38	23	194	4	2	-1	2579	2579	12	1	7	1	136	103	18
3	9	0	46	19	188	6	2	1	903	862	11	1	7	-1	1686	1676	14

THORTVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
3	7	1	2123	2118	15	1	13	1	417	430	16	7	3	2	477	496	12
3	7	-1	135	109	20	1	13	-1	1165	1186	15	7	3	-2	973	989	13
5	7	1	263	296	15	3	13	1	1364	1386	17	9	3	2	1213	1194	14
5	7	-1	876	866	11	3	13	-1	371	408	18	9	3	-2	1286	1303	17
7	7	1	983	966	12	5	13	1	199	216	33	11	3	-2	427	445	18
7	7	-1	856	850	11	5	13	-1	808	833	13	0	4	2	1181	1136	12
9	7	1	43	141	338	0	14	1	500	466	16	2	4	2	51	72	106
9	7	-1	188	287	33	2	14	1	205	192	32	2	4	-2	1227	1208	12
0	8	1	2217	2201	15	2	14	-1	205	215	32	4	4	2	668	655	8
2	8	1	1227	1229	13	4	14	1	254	211	28	4	4	-2	1965	1983	14
2	8	-1	429	426	9	4	14	-1	423	426	19	6	4	2	538	509	10
4	8	1	1395	1400	15	1	15	1	490	502	17	6	4	-2	532	519	9
4	8	-1	1781	1812	17	1	15	-1	609	615	15	8	4	2	314	287	18
6	8	1	862	882	12	0	0	2	1402	1475	10	8	4	-2	817	793	10
6	8	-1	713	708	10	2	0	2	3367	3391	11	10	4	2	384	341	20
8	8	1	552	569	14	2	0	-2	2799	2881	10	10	4	-2	297	311	22
8	8	-1	1211	1201	15	4	0	2	1567	1544	14	1	5	2	662	589	8
10	8	-1	483	485	18	4	0	-2	2691	2673	12	1	5	-2	2123	2092	12
1	9	1	104	166	31	6	0	2	2068	2045	17	3	5	2	2527	2507	15
1	9	-1	204	221	16	6	0	-2	1577	1568	15	3	5	-2	1180	1140	14
3	9	1	420	449	11	8	0	2	420	410	14	5	5	2	799	794	10
3	9	-1	163	180	21	8	0	-2	1365	1402	16	5	5	-2	1726	1728	16
5	9	1	337	327	15	10	0	2	1034	1051	13	7	5	2	1149	1161	14
5	9	-1	383	363	13	10	0	-2	655	637	12	7	5	-2	1126	1125	14
7	9	1*	0	140	990	1	1	2	653	616	8	9	5	2	486	490	17
7	9	-1	597	606	13	1	1	-2	650	675	8	9	5	-2	478	486	14
9	9	1	90	102	79	3	1	2	1631	1599	13	11	5	-2	714	720	14
9	9	-1	303	303	24	3	1	-2	98	71	18	0	6	2	489	450	7
0	10	1	442	436	11	5	1	2	107	115	27	2	6	2	1386	1371	15
2	10	1	1293	1312	16	5	1	-2	1043	1010	12	2	6	-2	770	787	10
2	10	-1	1784	1798	18	7	1	2	470	488	12	4	6	2	539	539	9
4	10	1	568	567	11	7	1	-2	412	398	10	4	6	-2	1308	1292	16
4	10	-1	578	580	11	9	1	2	47	58	113	6	6	2	1108	1113	13
6	10	1	1028	1036	13	9	1	-2	47	82	249	6	6	-2	582	581	9
6	10	-1	943	948	12	11	1	-2	231	302	53	8	6	2*	0	82	990
8	10	1	645	659	15	0	2	2	1235	1203	10	8	6	-2	683	688	11
8	10	-1	425	450	18	2	2	2	1765	1740	12	10	6	-2	188	198	35
1	11	1	880	888	11	2	2	-2	3139	3161	10	1	7	2	1642	1635	15
1	11	-1	722	724	10	4	2	2	888	839	11	1	7	-2	774	787	10
3	11	1	164	216	48	4	2	-2	341	365	8	3	7	2	229	220	15
3	11	-1	822	817	10	6	2	2	532	539	9	3	7	-2	1252	1234	13
5	11	1	1027	1031	12	6	2	-2	1687	1699	16	5	7	2	858	843	11
5	11	-1	763	772	11	8	2	2	1176	1185	15	5	7	-2	399	402	11
7	11	1	316	330	23	8	2	-2	204	208	21	7	7	2	526	519	13
7	11	-1	208	199	30	10	2	2	275	291	26	7	7	-2	598	607	11
0	12	1	762	767	11	10	2	-2	1012	1015	13	9	7	2	558	550	16
2	12	1	366	362	16	1	3	2	3938	4042	11	9	7	-2	707	702	12
2	12	-1	167	161	31	1	3	-2	1528	1484	11	0	8	2	1209	1203	14
4	12	1	401	404	16	3	3	2	148	148	15	2	8	2	1244	1237	14
4	12	-1	662	678	12	3	3	-2	2635	2642	12	2	8	-2	1902	1892	16
6	12	1	232	288	55	5	3	2	2131	2146	16	4	8	2	950	975	12
6	12	-1	41	114	158	5	3	-2	1003	1034	13	4	8	-2	386	396	11

THORTVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo
6	8	2	622	622	12
6	8	-2	1309	1303	16
8	8	2	1049	1051	12
8	8	-2	449	475	15
10	8	-2	890	884	13
1	9	2	1010	995	13
1	9	-2	328	325	12
3	9	2	791	803	10
3	9	-2	467	457	10
5	9	2	523	528	12
5	9	-2	211	204	21
7	9	2	267	240	23
7	9	-2	77	26	108
9	9	-2	347	324	21
0	10	2	1427	1427	15
2	10	2	712	703	10
2	10	-2	209	211	20
4	10	2	1098	1097	15
4	10	-2	1778	1794	20
6	10	2	855	858	12
6	10	-2	284	306	20
8	10	-2	1033	1020	14
1	11	2	135	121	34
1	11	-2	956	950	12
3	11	2	1217	1233	15
3	11	-2	411	432	14
5	11	2	289	285	21
5	11	-2	791	792	11
7	11	2	611	628	15
7	11	-2	577	574	15
0	12	2	535	541	13
2	12	2	164	193	52
2	12	-2	505	524	13
4	12	2	414	413	17
4	12	-2	50	100	255
6	12	2	32	44	487
6	12	-2	295	352	25
1	13	2	1055	1053	13
1	13	-2	735	738	12
3	13	2	494	491	16
3	13	-2	892	889	11
5	13	2	645	653	15
5	13	-2	477	503	17
0	14	2	277	256	26
2	14	2	157	132	42
2	14	-2	390	365	19
4	14	-2	83	69	78
1	15	-2	628	645	15
0	0	3	1682	1656	12
2	0	3	2152	2148	13
2	0	-3	2109	2120	12
4	0	3	1499	1477	16

h	k	l	Fo	Fc	sFo
4	0	-3	562	548	8
6	0	3	594	603	10
6	0	-3	1974	1986	16
8	0	3	1030	1047	14
8	0	-3	620	636	10
10	0	-3	986	998	13
1	1	3	1926	1924	13
1	1	-3	216	215	10
3	1	3	322	324	10
3	1	-3	849	889	11
5	1	3	616	610	9
5	1	-3	319	327	10
7	1	3	173	189	27
7	1	-3	788	796	10
9	1	3	324	313	21
9	1	-3	563	550	12
11	1	-3	54	88	273
0	2	3	1090	1084	13
2	2	3	1729	1697	14
2	2	-3	1888	1892	12
4	2	3	486	486	9
4	2	-3	2083	2118	14
6	2	3	1732	1744	20
6	2	-3	438	441	9
8	2	3	217	249	27
8	2	-3	1172	1191	15
10	2	-3	328	325	19
1	3	3	484	486	7
1	3	-3	3245	3309	12
3	3	3	2108	2090	15
3	3	-3	276	252	10
5	3	3	677	673	9
5	3	-3	2239	2239	15
7	3	3	1069	1100	13
7	3	-3	171	182	22
9	3	3	579	581	15
9	3	-3	857	848	11
11	3	-3	555	557	16
0	4	3	759	781	9
2	4	3	287	278	10
2	4	-3	181	178	13
4	4	3	884	868	11
4	4	-3	482	483	8
6	4	3	769	767	10
6	4	-3	699	707	9
8	4	3	583	569	13
8	4	-3	261	251	19
10	4	-3	404	384	17
1	5	3	2612	2617	14
1	5	-3	869	855	11
3	5	3	991	996	12
3	5	-3	1899	1900	15

h	k	l	Fo	Fc	sFo	Page
5	5	3	1243	1237	16	3
5	5	-3	862	876	11	
7	5	3	726	726	12	
7	5	-3	1417	1410	16	
9	5	3	705	695	14	
9	5	-3	927	914	12	
11	5	-3	476	478	18	
0	6	3	674	659	8	
2	6	3	911	916	11	
2	6	-3	919	912	11	
4	6	3	702	717	9	
4	6	-3	54	106	134	
6	6	3	112	112	43	
6	6	-3	1113	1110	14	
8	6	3	527	550	16	
8	6	-3	125	188	42	
10	6	-3	571	558	16	
1	7	3	157	140	19	
1	7	-3	1176	1178	13	
3	7	3	869	880	11	
3	7	-3	668	699	8	
5	7	3	531	538	12	
5	7	-3	758	781	9	
7	7	3	610	619	13	
7	7	-3	397	397	14	
9	7	-3	233	246	26	
0	8	3	1038	1031	13	
2	8	3	1178	1177	15	
2	8	-3	1221	1203	14	
4	8	3	676	672	11	
4	8	-3	1559	1554	18	
6	8	3	1309	1308	17	
6	8	-3	500	505	12	
8	8	3	398	396	20	
8	8	-3	954	953	13	
1	9	3	913	921	11	
1	9	-3	956	948	13	
3	9	3	537	533	12	
3	9	-3	543	543	11	
5	9	3	142	165	70	
5	9	-3	644	638	11	
7	9	3	260	248	26	
7	9	-3	437	423	15	
9	9	-3	159	116	42	
0	10	3	1261	1260	16	
2	10	3	567	586	12	
2	10	-3	730	737	10	
4	10	3	1222	1234	14	
4	10	-3	515	536	13	
6	10	3	113	117	57	
6	10	-3	1042	1056	12	
8	10	-3	388	412	20	

THORVVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
1	11	3	1218	1215	16	3	3	4	1485	1503	18	8	8	-4	417	429	18
1	11	-3	143	164	33	3	3	-4	1787	1771	15	1	9	4	195	150	24
3	11	3	377	355	16	5	3	4	765	768	10	1	9	-4	329	341	15
3	11	-3	912	899	11	5	3	-4	883	887	11	3	9	4	293	266	19
5	11	3	562	565	16	7	3	4	956	956	12	3	9	-4	379	360	14
5	11	-3	230	244	25	7	3	-4	1398	1417	16	5	9	4	89	41	68
7	11	-3	759	732	13	9	3	-4	454	446	14	5	9	-4*	0	95	990
0	12	3	337	347	18	11	3	-4	608	587	16	7	9	-4	394	350	17
2	12	3	219	249	28	0	4	4	269	254	12	0	10	4	472	495	13
2	12	-3	234	286	26	2	4	4	876	874	11	2	10	4	1134	1149	15
4	12	3	158	220	74	2	4	-4	1049	1059	13	2	10	-4	1308	1288	16
4	12	-3	632	657	13	4	4	4	640	647	10	4	10	4	138	194	45
6	12	-3*	0	44	990	4	4	-4	146	128	21	4	10	-4	478	490	14
1	13	3	497	486	16	6	4	4	646	644	12	6	10	-4	630	625	13
1	13	-3	855	856	12	6	4	-4	63	54	59	8	10	-4	586	595	16
3	13	3	691	710	15	8	4	4	32	18	477	1	11	4	426	394	16
3	13	-3	750	765	14	8	4	-4	319	328	17	1	11	-4	992	981	13
5	13	-3	658	648	15	10	4	-4	69	98	211	3	11	4	437	441	17
0	14	3	170	160	40	1	5	4	687	713	9	3	11	-4	258	256	22
2	14	-3	198	156	35	1	5	-4	2218	2232	16	5	11	-4	679	665	14
0	0	4	1816	1833	14	3	5	4	1121	1143	15	7	11	-4	128	162	54
2	0	4	1778	1782	16	3	5	-4	490	503	9	0	12	4	246	281	27
2	0	-4	1711	1748	14	5	5	4	760	780	11	2	12	4*	0	200	990
4	0	4	489	523	10	5	5	-4	1416	1458	15	2	12	-4	190	247	34
4	0	-4	1844	1899	15	7	5	4	749	760	13	4	12	-4*	0	193	990
6	0	4	1498	1492	17	7	5	-4	330	380	16	6	12	-4	539	553	16
6	0	-4	455	481	10	9	5	-4	966	977	13	1	13	4	998	979	13
8	0	4	597	620	15	0	6	4	772	745	9	1	13	-4*	0	168	990
8	0	-4	1627	1595	20	2	6	4	889	870	11	3	13	-4	1011	990	13
10	0	-4	464	474	15	2	6	-4	798	773	10	0	0	5	2083	2073	17
1	1	4	348	364	10	4	6	4	38	68	261	2	0	5	98	168	40
1	1	-4	1847	1859	14	4	6	-4	900	890	11	2	0	-5	409	402	9
3	1	4	646	629	8	6	6	4	849	832	11	4	0	5	1828	1831	21
3	1	-4	517	559	8	6	6	-4	86	82	76	4	0	-5	1866	1899	17
5	1	4	104	77	68	8	6	-4	950	912	11	6	0	5	425	441	16
5	1	-4	907	907	11	10	6	-4*	0	123	990	6	0	-5	618	662	10
7	1	4	342	362	18	1	7	4	1321	1333	16	8	0	-5	652	617	12
7	1	-4	321	319	15	1	7	-4	302	304	13	10	0	-5	651	683	14
9	1	-4	567	552	13	3	7	4	372	374	14	1	1	5	426	421	10
11	1	-4	151	171	72	3	7	-4	1412	1421	15	1	1	-5*	0	70	990
0	2	4	1546	1530	15	5	7	4	818	808	11	3	1	5	442	455	12
2	2	4	342	353	10	5	7	-4	169	211	26	3	1	-5	1384	1414	15
2	2	-4	352	343	9	7	7	4	273	303	26	5	1	5	275	263	20
4	2	4	1739	1740	19	7	7	-4	990	966	12	5	1	-5	129	172	30
4	2	-4	1217	1228	13	9	7	-4	173	181	38	7	1	5	607	617	15
6	2	4	186	171	26	0	8	4	1206	1207	16	7	1	-5	839	845	11
6	2	-4	1072	1084	13	2	8	4	543	569	12	9	1	-5	137	198	76
8	2	4	683	706	14	2	8	-4	631	657	10	0	2	5	647	662	9
8	2	-4	393	387	14	4	8	4	1426	1415	18	2	2	5	1546	1542	19
10	2	-4	587	578	14	4	8	-4	977	977	12	2	2	-5	1256	1276	14
1	3	4	1382	1375	16	6	8	4	331	319	21	4	2	5	294	301	17
1	3	-4	757	758	10	6	8	-4	1046	1080	13	4	2	-5	494	499	10

THORTVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
6	2	5	689	694	13	6	8	-5	821	799	11	7	3	-6	1031	993	13
6	2	-5	837	858	10	8	8	-5	785	763	14	9	3	-6	298	287	23
8	2	-5	889	896	11	1	9	5	291	238	20	0	4	6	364	356	15
10	2	-5	394	396	19	1	9	-5	163	127	32	2	4	6	620	635	12
1	3	5	1243	1252	15	3	9	5	105	69	58	2	4	-6	362	383	15
1	3	-5	1127	1131	15	3	9	-5	250	226	21	4	4	6	61	17	215
3	3	5	718	710	10	5	9	-5	177	125	32	4	4	-6	70	101	66
3	3	-5	559	550	9	7	9	-5	71	28	85	6	4	-6	407	414	15
5	3	5	793	819	12	0	10	5	674	694	13	8	4	-6	54	142	261
5	3	-5	989	994	12	2	10	5	395	432	19	1	5	6	1083	1074	13
7	3	5	337	304	21	2	10	-5	643	667	13	1	5	-6	587	613	12
7	3	-5	589	615	12	4	10	5	709	719	14	3	5	6	565	583	14
9	3	-5	798	791	12	4	10	-5	759	782	12	3	5	-6	640	646	11
0	4	5	261	286	15	6	10	-5	582	591	15	5	5	6	968	965	13
2	4	5	399	366	13	1	11	5	445	411	17	5	5	-6	1041	1061	13
2	4	-5*	0	34	990	1	11	-5	345	326	21	7	5	-6	469	493	16
4	4	5	451	450	14	3	11	-5	833	793	13	9	5	-6	701	690	15
4	4	-5	381	416	13	5	11	-5	306	282	23	0	6	6	72	133	68
6	4	5	87	93	115	0	12	5	57	48	186	2	6	6	936	904	11
6	4	-5*	0	80	990	2	12	-5	522	534	17	2	6	-6	910	869	11
8	4	-5	192	173	28	4	12	-5	45	73	311	4	6	6	311	290	23
10	4	-5	159	167	44	0	0	6	293	310	16	4	6	-6	63	70	77
1	5	5	992	988	12	2	0	6	1506	1523	18	6	6	-6	921	896	12
1	5	-5	713	717	10	2	0	-6	1536	1559	19	8	6	-6	95	143	69
3	5	5	983	980	12	4	0	6	720	713	12	1	7	6*	0	99	990
3	5	-5	1753	1752	18	4	0	-6	366	373	14	1	7	-6	861	869	11
5	5	5	770	765	12	6	0	6	655	648	15	3	7	6	698	693	14
5	5	-5	553	554	11	6	0	-6	1460	1496	18	3	7	-6	460	482	14
7	5	5	926	924	13	8	0	-6	501	482	14	5	7	-6	297	284	21
7	5	-5	1168	1146	14	10	0	-6	678	617	14	7	7	-6	417	444	19
9	5	-5	302	298	22	1	1	6	721	726	10	0	8	6	1091	1082	14
0	6	5	1180	1173	15	1	1	-6*	0	102	990	2	8	6	317	310	22
2	6	5	427	424	13	3	1	6	44	40	110	2	8	-6	498	493	14
2	6	-5	111	99	35	3	1	-6	194	202	22	4	8	-6	953	925	11
4	6	5	1108	1121	15	5	1	6	709	685	13	6	8	-6	290	292	24
4	6	-5	1097	1092	14	5	1	-6	546	554	12	1	9	6	188	78	33
6	6	5	154	99	43	7	1	-6	79	91	67	1	9	-6*	0	11	990
6	6	-5	177	214	29	9	1	-6	375	356	20	3	9	-6	423	368	18
8	6	-5	237	231	26	0	2	6	1255	1267	16	5	9	-6	292	326	24
1	7	5	510	556	12	2	2	6	101	155	82	0	10	6	287	295	25
1	7	-5	972	993	13	2	2	-6	436	421	12	2	10	-6	686	666	14
3	7	5	443	470	15	4	2	6	693	691	12	4	10	-6	434	444	18
3	7	-5	182	191	42	4	2	-6	970	994	12	0	0	7	930	936	12
5	7	5	457	482	17	6	2	6	443	458	18	2	0	7	840	852	12
5	7	-5	354	983	13	6	2	-6	220	229	24	2	0	-7	654	633	11
7	7	-5*	0	63	990	8	2	-6	525	509	14	4	0	7	370	373	20
9	7	-5	752	754	14	1	3	6	895	890	11	4	0	-7	728	735	11
0	8	5	579	563	12	1	3	-6	796	765	10	6	0	-7	479	472	15
2	8	5	1345	1346	16	3	3	6	604	623	12	8	0	-7	751	737	14
2	8	-5	1171	1148	15	3	3	-6	1363	1367	17	1	1	7*	0	106	990
4	8	5	372	325	20	5	3	6	522	486	16	1	1	-7	661	640	12
4	8	-5	474	470	13	5	3	-6	206	213	23	3	1	7	520	519	16

THORVEITITE - Sample No. 2

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
3	1	-7*	0	44	990	3	3	-8*	0	80	990
5	1	-7	194	195	29	5	3	-8	849	819	13
7	1	-7	353	356	20	2	4	-8	318	364	24
0	2	7	92	99	83	4	4	-8	119	124	90
2	2	7	713	713	12	3	5	-8	765	769	14
2	2	-7	1081	1092	14						
4	2	7	505	495	16						
4	2	-7	266	268	21						
6	2	-7	925	920	12						
8	2	-7	106	119	62						
1	3	7	789	792	12						
1	3	-7	412	386	15						
3	3	7	262	251	26						
3	3	-7	759	753	11						
5	3	-7	828	828	12						
7	3	-7	247	223	27						
0	4	7	636	670	13						
2	4	7	88	137	107						
2	4	-7	462	449	15						
4	4	-7	434	447	15						
6	4	-7	386	355	19						
1	5	7	502	506	16						
1	5	-7	1032	1004	13						
3	5	7	882	873	13						
3	5	-7	509	479	14						
5	5	-7	564	540	15						
7	5	-7	712	699	14						
0	6	7	516	498	16						
2	6	7	473	445	17						
2	6	-7	257	241	26						
4	6	-7	383	336	18						
6	6	-7	77	156	221						
1	7	7	446	470	18						
1	7	-7	82	121	180						
3	7	-7	570	589	15						
5	7	-7	347	375	21						
0	8	7	300	270	24						
2	8	-7	883	840	13						
4	8	-7	427	407	19						
0	0	8	546	533	16						
2	0	-8	916	910	12						
4	0	-8	486	440	16						
6	0	-8	658	621	14						
1	1	8	304	313	24						
1	1	-8	146	131	44						
3	1	-8	410	402	18						
5	1	-8	77	106	192						
0	2	8	499	482	16						
2	2	-8	125	155	51						
4	2	-8	644	643	14						
6	2	-8	209	218	34						
1	3	-8	936	901	13						

**THORTVEITITE - Sample NO. 3**

**Table of observed and calculated structure factors.**

Values of  $F_o, F_c$  and  $sF_o = \sigma(F_o)$  are multiplied by 10

Reflections flagged with \* were considered unobserved.

\*\*\*

THORVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
2	0	0	331	350	6	5	9	0	474	483	11	6	2	-1	747	726	9
4	0	0	2694	3091	11	7	9	0	202	176	24	8	2	1	567	562	11
6	0	0	629	587	8	9	9	0	77	121	123	8	2	-1	1263	1217	16
8	0	0	1462	1438	16	0	10	0	1353	1353	15	10	2	1	818	806	12
10	0	0	861	852	12	2	10	0	829	824	10	10	2	-1	497	470	13
1	1	0	898	858	8	4	10	0	779	797	10	1	3	1	2504	2480	10
3	1	0	864	874	10	6	10	0	652	657	11	1	3	-1	494	554	6
5	1	0	710	703	9	8	10	0	611	621	14	3	3	1	1868	1811	12
7	1	0	986	981	12	1	11	0	682	692	10	3	3	-1	1866	1850	11
9	1	0	113	98	38	3	11	0	691	701	10	5	3	1	586	574	8
11	1	0	504	494	15	5	11	0	194	187	25	5	3	-1	442	430	8
0	2	0	101	87	16	7	11	0	664	677	13	7	3	1	971	985	12
2	2	0	1906	1908	9	0	12	0	397	398	14	7	3	-1	1664	1675	18
4	2	0	1014	1094	12	2	12	0	866	861	10	9	3	1	448	446	14
6	2	0	1199	1182	13	4	12	0	96	37	48	9	3	-1	195	236	23
8	2	0	541	523	10	6	12	0	567	576	14	11	3	-1	743	737	13
10	2	0	301	322	19	1	13	0	720	751	11	0	4	1	1080	1058	11
1	3	0	1911	1898	9	3	13	0	548	562	13	2	4	1	503	467	6
3	3	0	1896	1866	11	5	13	0	1020	1029	13	2	4	-1	1534	1493	11
5	3	0	2044	1999	14	0	14	0	305	313	19	4	4	1	370	416	8
7	3	0	653	649	8	2	14	0	490	496	16	4	4	-1	435	460	7
9	3	0	894	874	11	4	14	0*	0	18	990	6	4	1	441	431	10
11	3	0	425	413	17	1	15	0	515	531	15	6	4	-1	389	373	10
0	4	0	1409	1382	10	0	0	1	1319	1280	7	8	4	1	226	192	19
2	4	0	355	335	6	2	0	1	1471	1502	10	8	4	-1	245	255	17
4	4	0	267	261	9	2	0	-1	3901	3900	8	10	4	1	124	122	47
6	4	0	58	49	119	4	0	1	1388	1543	13	10	4	-1	153	154	32
8	4	0	286	268	15	4	0	-1	693	784	9	1	5	1	2332	2312	12
10	4	0	331	331	18	6	0	1	1057	1064	14	1	5	-1	1648	1610	12
1	5	0	1883	1824	11	6	0	-1	1751	1775	15	3	5	1	549	512	7
3	5	0	1741	1688	13	8	0	1	1310	1302	16	3	5	-1	2185	2163	13
5	5	0	431	391	9	8	0	-1	343	325	12	5	5	1	2052	2049	16
7	5	0	1423	1410	16	10	0	1	179	262	31	5	5	-1	1388	1409	16
9	5	0	472	484	13	10	0	-1	964	972	12	7	5	1	634	633	10
0	6	0	2972	2987	12	1	1	1	2349	2296	8	7	5	-1	626	617	10
2	6	0	400	387	7	1	1	-1	306	286	6	9	5	1	1040	1025	13
4	6	0	1411	1479	16	3	1	1	859	813	10	9	5	-1	1040	1028	13
6	6	0	44	52	69	3	1	-1	2300	2199	10	11	5	-1	488	490	17
8	6	0	794	789	10	5	1	1	1756	1735	14	0	6	1	131	118	22
10	6	0	427	424	7	5	1	-1	537	569	7	2	6	1	676	647	8
1	7	0	937	912	12	7	1	1	43	30	69	2	6	-1	1806	1794	13
3	7	0	559	514	7	7	1	-1	99	100	29	4	6	1	545	563	8
5	7	0	1492	1459	18	9	1	1	692	667	11	4	6	-1	23	52	104
7	7	0	26	60	153	9	1	-1	592	582	11	6	6	1	467	457	11
9	7	0	754	721	12	11	1	1*	0	34	990	6	6	-1	928	938	11
0	8	0	281	251	10	11	1	-1	155	154	37	8	6	1	734	733	11
2	8	0	1716	1713	16	0	2	1	3521	3546	8	8	6	-1*	0	74	990
4	8	0	743	760	9	2	2	1	1704	1642	10	10	6	1	92	52	60
6	8	0	1130	1131	15	2	2	-1	271	291	7	10	6	-1	555	540	14
8	8	0	545	549	13	4	2	1	1709	1824	13	1	7	1	85	71	46
1	9	0*	0	23	990	4	2	-1	1947	2144	12	1	7	-1	1432	1415	14
3	9	0	17	4	182	6	2	1	765	720	9	3	7	1	1819	1792	16



THORTVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
3	7	-1	102	73	45	1	13	-1	1040	1052	13	7	3	-2	864	847	11
5	7	1	208	243	17	3	13	1	1225	1234	16	9	3	2	1084	1061	13
5	7	-1	753	752	9	3	13	-1	335	358	18	9	3	-2	1130	1121	14
7	7	1	848	835	11	5	13	1	135	192	75	11	3	-2	405	398	17
7	7	-1	731	722	10	5	13	-1	728	752	13	0	4	2	1000	965	11
9	7	1	104	120	56	0	14	1	430	419	16	2	4	2	93	45	20
9	7	-1	264	276	21	2	14	1	157	169	39	2	4	-2	1012	997	13
0	8	1	1911	1884	15	2	14	-1	169	188	35	4	4	2	585	570	8
2	8	1	1051	1057	14	4	14	1	147	199	41	4	4	-2	1577	1670	14
2	8	-1	382	379	9	4	14	-1	401	380	18	6	4	2	464	439	10
4	8	1	1168	1222	15	1	15	1	432	465	18	6	4	-2	443	441	9
4	8	-1	1512	1553	16	1	15	-1	532	559	16	8	4	2	251	240	19
6	8	1	762	762	10	0	0	2	1183	1244	10	8	4	-2	720	693	10
6	8	-1	619	622	10	2	0	2	2878	2838	11	10	4	2	311	291	22
8	8	1	496	512	14	2	0	-2	2468	2431	10	10	4	-2	289	285	20
8	8	-1	1083	1063	13	4	0	2	1340	1324	14	1	5	2	535	490	7
10	8	-1	447	441	17	4	0	-2	1775	2208	12	1	5	-2	1774	1763	13
1	9	1	92	127	52	6	0	2	1775	1740	17	3	5	2	2150	2115	15
1	9	-1	198	193	16	6	0	-2	1361	1354	16	3	5	-2	968	946	12
3	9	1	359	381	11	8	0	2	367	362	14	5	5	2	692	684	8
3	9	-1	153	140	20	8	0	-2	1194	1188	16	5	5	-2	1479	1488	16
5	9	1	296	290	15	10	0	2	929	916	13	7	5	2	997	1009	12
5	9	-1	301	318	15	10	0	-2	601	563	12	7	5	-2	965	966	12
7	9	1	141	117	56	1	1	2	544	514	7	9	5	2	419	427	17
7	9	-1	524	520	13	1	1	-2	538	565	7	9	5	-2	435	456	14
9	9	1	53	99	120	3	1	2	1362	1335	13	11	5	-2	638	641	14
9	9	-1	286	263	22	3	1	-2	40	47	40	0	6	2	424	392	8
0	10	1	383	369	11	5	1	2	62	101	42	2	6	2	1187	1166	14
2	10	1	1132	1131	14	5	1	-2	881	870	10	2	6	-2	662	686	8
2	10	-1	1567	1549	19	7	1	2	409	423	12	4	6	2	464	479	9
4	10	1	485	486	11	7	1	-2	344	342	10	4	6	-2	1067	1086	12
4	10	-1	474	504	12	9	1	2	62	42	76	6	6	2	961	960	12
6	10	1	901	916	11	9	1	-2	72	36	89	6	6	-2	516	521	9
6	10	-1	839	836	11	11	1	-2	274	264	22	8	6	2	63	55	74
8	10	1	565	588	15	0	2	2	1040	1009	11	8	6	-2	608	594	11
8	10	-1	401	400	17	2	2	2	1493	1455	12	10	6	-2	201	182	30
1	11	1	775	779	10	2	2	-2	2670	2641	10	1	7	2	1432	1409	16
1	11	-1	625	633	10	4	2	2	752	703	10	1	7	-2	692	686	8
3	11	1	189	191	22	4	2	-2	254	269	9	3	7	2	213	197	14
3	11	-1	731	722	10	6	2	2	476	463	9	3	7	-2	1086	1076	13
5	11	1	902	908	11	6	2	-2	1459	1452	16	5	7	2	736	736	10
5	11	-1	675	685	11	8	2	2	1023	1027	13	5	7	-2	349	352	11
7	11	1	297	306	21	8	2	-2	153	185	25	7	7	2	460	459	13
7	11	-1	140	182	71	10	2	2	279	274	23	7	7	-2	557	543	11
0	12	1	684	683	11	10	2	-2	913	913	12	9	7	2	486	505	16
2	12	1	319	326	16	1	3	2	3409	3397	11	9	7	-2	616	610	12
2	12	-1	104	132	41	1	3	-2	1283	1255	11	0	8	2	1027	1025	13
4	12	1	342	368	17	3	3	2	77	95	27	2	8	2	1074	1054	14
4	12	-1	599	611	12	3	3	-2	2267	2239	12	2	8	-2	1636	1610	17
6	12	1	215	262	48	5	3	2	1825	1823	16	4	8	2	813	836	11
6	12	-1	93	99	133	5	3	-2	878	876	10	4	8	-2	325	345	12
1	13	1	377	381	16	7	3	2	425	426	12	6	8	2	525	538	12

THORTVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
6	8	-2	1152	1126	14	6	0	3	534	518	10	5	5	-3	758	760	10
8	8	2	935	935	12	6	0	-3	1644	1690	16	7	5	3	635	632	12
8	8	-2	392	421	15	8	0	3	503	911	11	7	5	-3	1243	1231	15
10	8	-2	817	799	13	8	0	-3	567	587	10	9	5	3	617	635	15
1	9	2	857	863	11	10	0	-3	905	897	12	9	5	-3	828	808	11
1	9	-2	272	272	13	1	1	3	1655	1631	13	11	5	-3	467	447	16
3	9	2	697	687	9	1	1	-3	208	203	10	0	6	3	563	559	8
3	9	-2	407	405	11	3	1	3	281	288	10	2	6	3	780	774	10
5	9	2	476	462	12	3	1	-3	755	756	9	2	6	-3	786	767	10
5	9	-2	191	172	21	5	1	3	546	531	9	4	6	3	598	613	10
7	9	2	158	212	34	5	1	-3	255	278	11	4	6	-3*	0	73	990
7	9	-2	95	21	47	7	1	3	99	156	44	6	6	3	28	87	383
9	9	-2	321	286	20	7	1	-3	681	669	8	6	6	-3	950	941	12
0	10	2	1239	1247	16	9	1	3	299	286	21	8	6	3	437	480	17
2	10	2	633	623	10	9	1	-3	475	474	13	8	6	-3	101	180	47
2	10	-2	191	186	20	11	1	-3	45	76	276	10	6	-3	517	499	15
4	10	2	967	974	12	0	2	3	938	928	11	1	7	3	99	111	30
4	10	-2	1529	1575	17	2	2	3	1478	1450	14	1	7	-3	1007	1004	12
6	10	2	770	769	11	2	2	-3	1634	1615	13	3	7	3	761	757	10
6	10	-2	261	275	19	4	2	3	432	430	9	3	7	-3	594	603	8
8	10	-2	943	932	12	4	2	-3	1796	1790	14	5	7	3	484	467	11
1	11	2	107	92	38	6	2	3	1539	1511	18	5	7	-3	669	677	9
1	11	-2	830	831	11	6	2	-3	395	400	10	7	7	3	559	557	13
3	11	2	1063	1079	14	8	2	3	183	231	29	7	7	-3	356	364	14
3	11	-2	354	363	14	8	2	-3	1050	1025	13	9	7	-3	207	220	27
5	11	2	233	254	23	10	2	-3	314	282	17	0	8	3	902	902	11
5	11	-2	721	708	11	1	3	3	397	395	7	2	8	3	1032	1032	13
7	11	2	582	564	15	1	3	-3	2767	2787	13	2	8	-3	1068	1053	14
7	11	-2	493	505	16	3	3	3	1789	1763	15	4	8	3	601	595	11
0	12	2	484	476	12	3	3	-3	250	193	10	4	8	-3	1341	1359	16
2	12	2	105	175	46	5	3	3	579	580	9	6	8	3	1173	1166	14
2	12	-2	435	462	14	5	3	-3	1930	1946	16	6	8	-3	444	461	12
4	12	2	350	360	17	7	3	3	948	966	12	8	8	3	358	367	19
4	12	-2	85	92	54	7	3	-3	144	144	24	8	8	-3	873	856	12
6	12	2	72	35	184	9	3	3	524	514	15	1	9	3	806	804	10
6	12	-2	314	311	20	9	3	-3	791	784	11	1	9	-3	808	812	11
1	13	2	955	950	12	11	3	-3	483	490	16	3	9	3	466	451	12
1	13	-2	646	662	12	0	4	3	651	659	8	3	9	-3	483	489	11
3	13	2	449	442	16	2	4	3	268	238	10	5	9	3	119	146	39
3	13	-2	802	808	12	2	4	-3	135	161	17	5	9	-3	568	568	11
5	13	2	599	597	14	4	4	3	747	732	9	7	9	3	224	222	27
5	13	-2	465	457	16	4	4	-3	407	391	8	7	9	-3	384	389	15
0	14	2	263	227	24	6	4	3	658	663	10	9	9	-3	137	115	43
2	14	2*	0	115	990	6	4	-3	577	588	9	0	10	3	1107	1107	13
2	14	-2	342	325	20	8	4	3	497	489	14	2	10	3	520	517	11
4	14	-2	73	58	196	8	4	-3	199	202	22	2	10	-3	631	642	10
1	15	-2	575	591	16	10	4	-3	360	352	17	4	10	3	1079	1089	13
0	0	3	1453	1402	12	1	5	3	2276	2245	15	4	10	-3	469	483	12
2	0	3	1827	1812	13	1	5	-3	767	753	9	6	10	3	69	94	151
2	0	-3	1815	1794	12	3	5	3	884	868	11	6	10	-3	915	930	11
4	0	3	1268	1258	13	3	5	-3	1664	1640	15	8	10	-3	358	381	19
4	0	-3	469	491	7	5	5	3	1089	1085	14	1	11	3	1083	1082	14

THORVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
1	11	-3	177	148	25	3	3	-4	1544	1520	16	1	9	4	177	138	23
3	11	3	331	320	16	5	3	4	686	692	10	1	9	-4	272	290	16
3	11	-3	814	807	10	5	3	-4	791	778	10	3	9	4	268	238	19
5	11	3	512	516	15	7	3	4	842	843	11	3	9	-4	347	318	14
5	11	-3	224	217	23	7	3	-4	1265	1244	15	5	9	4	66	24	83
7	11	-3	690	671	13	9	3	-4	408	400	15	5	9	-4	34	85	131
0	12	3	295	312	18	11	3	-4	573	542	15	7	9	-4	349	320	17
2	12	3	258	231	20	0	4	4	221	208	13	0	10	4	445	449	13
2	12	-3	236	268	23	2	4	4	763	761	9	2	10	4	1034	1034	13
4	12	3	168	203	60	2	4	-4	910	930	11	2	10	-4	1159	1164	14
4	12	-3	563	588	13	4	4	4	552	550	10	4	10	4	190	177	29
6	12	-3*	0	31	990	4	4	-4	117	114	24	4	10	-4	427	441	15
1	13	3	417	436	17	6	4	4	571	568	12	6	10	-4	580	596	13
1	13	-3	781	774	12	6	4	-4	35	80	248	8	10	-4	540	532	15
3	13	3	646	647	13	8	4	4*	0	7	990	1	11	4	351	353	17
3	13	-3	676	693	14	8	4	-4	298	255	17	1	11	-4	904	871	11
5	13	-3	597	593	15	10	4	-4	43	103	129	3	11	4	422	397	16
0	14	3	145	144	41	1	5	4	616	623	8	3	11	-4	236	237	22
2	14	-3	143	140	40	1	5	-4	1907	1912	16	5	11	-4	608	599	13
0	0	4	1562	1579	15	3	5	4	996	989	13	7	11	-4	56	153	113
2	0	4	1584	1547	16	3	5	-4	452	449	9	0	12	4	246	260	22
2	0	-4	1523	1511	14	5	5	4	654	679	11	2	12	4	200	179	28
4	0	4	458	459	10	5	5	-4	1290	1276	15	2	12	-4	214	224	25
4	0	-4	1632	1655	15	7	5	4	678	685	12	4	12	-4	136	173	42
6	0	4	1322	1313	15	7	5	-4	337	346	14	6	12	-4	489	509	16
6	0	-4	442	422	10	9	5	-4	888	880	11	1	13	4	898	901	13
8	0	4	538	566	15	0	6	4	663	650	8	1	13	-4	129	155	74
8	0	-4	1398	1401	17	2	6	4	784	769	9	3	13	-4	907	915	13
10	0	-4	383	413	17	2	6	-4	708	681	9	0	0	5	1787	1804	17
1	1	4	291	308	10	4	6	4	106	46	61	2	0	5*	0	1171	1457
1	1	-4	1568	1569	14	4	6	-4	803	791	9	2	0	-5	358	338	10
3	1	4	557	529	8	6	6	4	758	744	11	4	0	5	1606	1604	17
3	1	-4	441	465	8	6	6	-4	47	56	207	4	0	-5	1671	1678	17
5	1	4	71	57	91	8	6	-4	832	814	11	6	0	5	383	408	15
5	1	-4	804	795	10	10	6	-4	79	104	125	6	0	-5	601	586	10
7	1	4	318	323	18	1	7	4	1174	1173	15	8	0	-5	589	595	12
7	1	-4	286	265	15	1	7	-4	232	236	15	10	0	-5	594	625	14
9	1	-4	525	498	12	3	7	4	326	347	14	1	1	5	383	375	10
11	1	-4	55	167	254	3	7	-4	1256	1252	15	1	1	-5	103	40	28
0	2	4	1330	1315	15	5	7	4	736	727	11	3	1	5	404	411	12
2	2	4	292	303	11	5	7	-4	188	187	21	3	1	-5	1198	1224	14
2	2	-4	313	285	9	7	7	4	249	278	25	5	1	5	234	246	21
4	2	4	1529	1502	19	7	7	-4	871	874	12	5	1	-5	105	137	61
4	2	-4	1090	1075	13	9	7	-4	134	172	39	7	1	5	555	561	15
6	2	4	107	151	41	0	8	4	1074	1061	14	7	1	-5	765	761	10
6	2	-4	943	926	12	2	8	4	506	501	11	9	1	-5	137	181	68
8	2	4	590	622	15	2	8	-4	561	569	10	0	2	5	578	595	9
8	2	-4	363	385	14	4	8	4	1266	1252	15	2	2	5	1363	1363	15
10	2	-4	539	523	13	4	8	-4	868	868	11	2	2	-5	1126	1137	14
1	3	4	1199	1196	13	6	8	4	302	291	21	4	2	5	282	276	16
1	3	-4	673	681	8	6	8	-4	933	951	12	4	2	-5	466	452	10
3	3	4	1305	1309	14	8	8	-4	410	408	16	6	2	5	602	627	13

THORVVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
6	2	-5	779	770	9	8	8	-5	708	692	14	9	3	-6	267	269	23
8	2	-5	799	788	11	1	9	5	222	209	24	0	4	6	296	300	16
10	2	-5	404	379	17	1	9	-5	109	103	80	2	4	6	573	575	12
1	3	5	1107	1095	13	3	9	5	47	63	109	2	4	-6	334	351	14
1	3	-5	968	979	13	3	9	-5	178	190	27	4	4	6	124	9	70
3	3	5	632	627	10	5	9	-5	58	92	90	4	4	-6	124	80	34
3	3	-5	498	514	9	7	9	-5	29	18	203	6	4	-6	362	364	15
5	3	5	708	721	11	0	10	5	611	634	12	8	4	-6	93	143	60
5	3	-5	874	855	11	2	10	5	391	392	17	1	5	6	956	974	12
7	3	5	302	275	21	2	10	-5	588	607	12	1	5	-6	546	556	11
7	3	-5	561	578	11	4	10	5	642	668	14	3	5	6	513	535	14
9	3	-5	732	704	12	4	10	-5	706	712	12	3	5	-6	602	598	11
0	4	5	245	244	14	6	10	-5	516	555	16	5	5	6	868	886	13
2	4	5	335	325	14	1	11	5	389	380	18	5	5	-6	937	951	13
2	4	-5*	0	35	990	1	11	-5	349	306	18	7	5	-6	453	470	14
4	4	5	360	397	15	3	11	-5	755	726	13	9	5	-6	669	654	14
4	4	-5	361	357	12	5	11	-5	276	271	24	0	6	6	51	97	128
6	4	5	54	83	140	0	12	5	41	32	226	2	6	6	853	823	11
6	4	-5*	0	76	990	2	12	-5	496	503	16	2	6	-6	806	797	11
8	4	-5	151	136	57	4	12	-5*	0	55	990	4	6	6	262	277	24
10	4	-5	67	147	204	0	0	6	302	300	14	4	6	-6	84	55	55
1	5	5	880	883	11	2	0	6	1358	1371	18	6	6	-6	847	834	11
1	5	-5	651	653	9	2	0	-6	1388	1410	16	8	6	-6	70	121	136
3	5	5	872	885	11	4	0	6	643	663	12	1	7	6	64	94	77
3	5	-5	1534	1545	17	4	0	-6	363	335	13	1	7	-6	789	805	11
5	5	5	693	699	12	6	0	6	593	603	15	3	7	6	624	639	14
5	5	-5	494	512	11	6	0	-6	1343	1371	18	3	7	-6	432	436	14
7	5	5	824	852	13	8	0	-6	435	429	15	5	7	-6	281	299	20
7	5	-5	1047	1045	13	10	0	-6	651	616	14	7	7	-6	404	405	17
9	5	-5	294	281	21	1	1	6	635	646	11	0	8	6	984	986	13
0	6	5	1027	1029	13	1	1	-6	88	91	42	2	8	6	283	288	22
2	6	5	360	368	14	3	1	6	74	27	58	2	8	-6	447	457	14
2	6	-5*	0	88	990	3	1	-6	195	197	21	4	8	-6	856	855	11
4	6	5	1002	990	12	5	1	6	618	615	14	6	8	-6	268	284	24
4	6	-5	982	971	12	5	1	-6	468	468	12	1	9	6	116	69	48
6	6	5	78	94	160	7	1	-6	51	104	97	1	9	-6*	0	13	990
6	6	-5	153	185	53	9	1	-6	338	329	20	3	9	-6	376	337	18
8	6	-5	225	232	25	0	2	6	1098	1122	14	5	9	-6	255	287	25
1	7	5	485	499	12	2	2	6	84	138	51	0	10	6	283	288	22
1	7	-5	849	877	11	2	2	-6	379	382	13	2	10	-6	626	630	14
3	7	5	436	420	13	4	2	6	641	623	12	4	10	-6	397	427	19
3	7	-5	189	150	22	4	2	-6	894	895	11	0	0	7	839	852	11
5	7	5	416	432	17	6	2	6	414	422	18	2	0	7	781	788	11
5	7	-5	865	883	11	6	2	-6	169	228	30	2	0	-7	600	607	12
7	7	-5	66	45	165	8	2	-6	493	473	14	4	0	7	351	354	19
9	7	-5	704	708	14	1	3	6	799	806	11	4	0	-7	669	673	12
0	8	5	523	514	12	1	3	-6	698	698	10	6	0	-7	464	467	14
2	8	5	1241	1216	15	3	3	6	570	579	12	8	0	-7	694	680	14
2	8	-5	1053	1048	14	3	3	-6	1234	1235	16	1	1	7	160	105	29
4	8	5	284	302	22	5	3	6	454	448	16	1	1	-7	595	596	12
4	8	-5	426	430	14	5	3	-6	194	212	24	3	1	7	476	484	16
6	8	-5	747	744	12	7	3	-6	947	916	11	3	1	-7	80	42	57

THORTVEITITE - Sample No. 3

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
5	1	-7	215	208	25	2	4	-8	320	335	21
7	1	-7	343	310	19	4	4	-8	84	101	74
0	2	7	41	101	260	3	5	-8	742	733	14
2	2	7	652	665	13						
2	2	-7	990	1004	12						
4	2	7	452	477	17						
4	2	-7	281	257	19						
6	2	-7	877	867	12						
8	2	-7	47	126	130						
1	3	7	719	735	12						
1	3	-7	359	358	16						
3	3	7	257	238	23						
3	3	-7	706	693	11						
5	3	-7	759	769	12						
7	3	-7	236	223	26						
0	4	7	572	603	13						
2	4	7	175	121	32						
2	4	-7	421	405	14						
4	4	-7	401	421	15						
6	4	-7	383	336	17						
1	5	7	483	482	15						
1	5	-7	938	947	12						
3	5	7	808	823	13						
3	5	-7	451	459	14						
5	5	-7	532	537	15						
7	5	-7	651	649	14						
0	6	7	472	454	15						
2	6	7	438	414	17						
2	6	-7	249	239	22						
4	6	-7	348	307	19						
6	6	-7	150	161	40						
1	7	7	440	445	16						
1	7	-7	58	114	90						
3	7	-7	537	554	15						
5	7	-7	326	342	21						
0	8	7	282	272	23						
2	8	-7	799	791	13						
4	8	-7	403	399	18						
0	0	8	530	524	15						
2	0	-8	869	859	12						
4	0	-8	457	451	16						
6	0	-8	628	602	14						
1	1	8	279	294	23						
1	1	-8	76	123	76						
3	1	-8	370	371	18						
5	1	-8	149	114	38						
0	2	8	448	458	17						
2	2	-8	107	165	55						
4	2	-8	600	609	14						
1	3	-8	862	873	13						
3	3	-8*	0	65	990						
5	3	-8	818	804	13						

**THORTVEITITE Sample No. 4**

**Table of observed and calculated structure factors.**

Values of  $F_o$ ,  $F_c$  and  $sF_o = \sigma(F_o)$  are multiplied by 10

Reflections flagged with \* were considered unobserved.

\*\*\*

THORTVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
2	0	0	242	136	8	9	7	0	1380	1388	17	5	17	0	288	306	28
4	0	0	5359	5488	48	11	7	0	182	158	37	0	18	0	169	130	43
6	0	0	592	548	8	0	8	0	149	160	19	2	18	0	1168	1149	16
8	0	0	2668	2683	18	2	8	0	2905	2908	15	0	0	1	1756	1769	7
10	0	0	1466	1459	19	4	8	0	1169	1163	15	2	0	1	2049	2181	9
12	0	0	982	971	13	6	8	0	1985	2026	19	2	0	-1	6238	6651	35
1	1	0	1535	1460	7	8	8	0	907	915	11	4	0	1	2434	2399	12
3	1	0	1502	1501	10	10	8	0	681	698	14	4	0	-1	970	957	10
5	1	0	1535	1512	14	12	8	0	996	1013	14	6	0	1	1629	1584	16
7	1	0	1795	1812	17	1	9	0	251	265	14	6	0	-1	3104	3102	15
9	1	0	390	380	14	3	9	0	243	222	15	8	0	1	2430	2383	19
11	1	0	1093	1104	14	5	9	0	1141	1138	14	8	0	-1	210	177	19
13	1	0	374	362	22	7	9	0	160	136	32	10	0	1	148	221	40
0	2	0	573	559	7	9	9	0	358	369	20	10	0	-1	1816	1847	22
2	2	0	2964	2979	9	11	9	0	110	51	60	12	0	1	1370	1375	19
4	2	0	1663	1602	12	0	10	0	2306	2301	17	12	0	-1	776	810	14
6	2	0	2012	1971	15	2	10	0	1245	1236	15	1	1	1	4070	4160	34
8	2	0	785	767	10	4	10	0	1266	1268	17	1	1	-1	365	337	6
10	2	0	414	424	16	6	10	0	1021	1031	13	3	1	1	1817	1712	11
12	2	0	955	967	13	8	10	0	1026	1044	14	3	1	-1	4246	4097	10
1	3	0	3007	3103	9	10	10	0	1193	1192	15	5	1	1	3238	3230	14
3	3	0	3192	3137	11	1	11	0	1297	1297	16	5	1	-1	942	929	12
5	3	0	3511	3482	14	3	11	0	1323	1336	17	7	1	1	169	152	22
7	3	0	1098	1111	13	5	11	0	275	302	20	7	1	-1	227	186	15
9	3	0	1534	1555	18	7	11	0	1346	1352	17	9	1	1	1426	1419	18
11	3	0	768	770	13	9	11	0	517	549	17	9	1	-1	1064	1047	13
13	3	0	1080	1076	13	0	12	0	1207	1181	15	11	1	1	150	139	43
0	4	0	2450	2411	10	2	12	0	1429	1420	18	11	1	-1	297	294	23
2	4	0	450	407	6	4	12	0	368	347	16	13	1	1	450	465	20
4	4	0	376	354	8	6	12	0	999	1010	12	13	1	-1	866	868	14
6	4	0	78	82	40	8	12	0	230	205	30	0	2	1	5511	6132	33
8	4	0	411	413	13	10	12	0	194	172	37	2	2	1	2674	2574	10
10	4	0	669	646	13	1	13	0	1278	1296	16	2	2	-1	170	96	11
12	4	0	142	155	50	3	13	0	952	942	12	4	2	1	3215	3172	13
1	5	0	2919	2858	11	5	13	0	1950	1984	24	4	2	-1	3685	3658	12
3	5	0	2764	2689	13	7	13	0	371	376	20	6	2	1	1075	1038	13
5	5	0	495	289	9	9	13	0	1273	1274	17	6	2	-1	996	1000	13
7	5	0	2440	2428	18	0	14	0	501	475	15	8	2	1	934	928	12
9	5	0	645	652	12	2	14	0	1128	1133	14	8	2	-1	2254	2257	18
11	5	0	1555	1546	19	4	14	0	109	150	60	10	2	1	1435	1435	18
13	5	0	262	266	29	6	14	0	843	841	13	10	2	-1	810	795	11
0	6	0	5419	5655	12	8	14	0	145	140	48	12	2	1	682	670	15
2	6	0	845	806	10	1	15	0	812	813	13	12	2	-1	629	640	15
4	6	0	2856	2905	15	3	15	0	761	781	14	1	3	1	4289	4191	10
6	6	0	204	189	18	5	15	0	168	206	41	1	3	-1	409	596	6
8	6	0	1644	1678	17	7	15	0	796	812	14	3	3	1	3071	2986	12
10	6	0	800	811	13	0	16	0	1226	1192	14	3	3	-1	3062	3049	11
12	6	0	504	499	17	2	16	0	924	919	13	5	3	1	842	835	10
1	7	0	1362	1313	14	4	16	0	694	690	15	5	3	-1	432	383	8
3	7	0	647	609	8	6	16	0	745	750	15	7	3	1	1641	1619	18
5	7	0	2565	2561	17	1	17	0	191	86	36	7	3	-1	3071	3073	17
7	7	0	208	226	22	3	17	0	37	24	178	9	3	1	680	672	11

THORTVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
9	3	-1	168	183	29	9	7	1	179	114	34	2	12	-1	560	556	12
11	3	1	1301	1314	17	9	7	-1	370	392	17	4	12	1	474	482	14
11	3	-1	1505	1516	18	11	7	1	958	964	13	4	12	-1	989	972	13
13	3	1	636	634	16	11	7	-1	570	583	16	6	12	1	339	336	20
13	3	-1	85	87	83	0	8	1	3347	3347	15	6	12	-1	102	97	60
0	4	1	2326	2295	10	2	8	1	1715	1744	16	8	12	1	156	161	43
2	4	1	703	637	8	2	8	-1	398	435	9	8	12	-1	907	905	13
2	4	-1	2651	2558	11	4	8	1	2203	2204	17	10	12	-1	112	71	61
4	4	1	1091	1101	12	4	8	-1	2758	2786	17	1	13	1	529	533	13
4	4	-1	1092	1123	12	6	8	1	1299	1295	17	1	13	-1	1874	1887	22
6	4	1	737	728	10	6	8	-1	966	975	13	3	13	1	2299	2317	23
6	4	-1	643	608	8	8	8	1	885	899	11	3	13	-1	473	470	14
8	4	1	241	184	19	8	8	-1	2047	2089	22	5	13	1	157	183	40
8	4	-1	717	722	10	10	8	1	1481	1483	18	5	13	-1	1399	1375	17
10	4	1	268	271	24	10	8	-1	779	800	14	7	13	1	1378	1390	18
10	4	-1	212	172	25	12	8	-1	785	787	14	7	13	-1	1112	1113	13
12	4	1	92	40	73	1	9	1	429	425	10	9	13	1	350	378	23
12	4	-1	309	289	24	1	9	-1	244	210	14	9	13	-1	799	803	14
1	5	1	3920	3930	12	3	9	1	880	883	11	0	14	1	1062	1041	13
1	5	-1	2450	2451	11	3	9	-1	417	423	10	2	14	1	521	507	15
3	5	1	571	461	8	5	9	1	413	389	13	2	14	-1	245	229	26
3	5	-1	3736	3752	13	5	9	-1	560	541	11	4	14	1	613	601	15
5	5	1	3575	3614	16	7	9	1	301	317	19	4	14	-1	962	950	13
5	5	-1	2296	2286	15	7	9	-1	1243	1236	16	6	14	1	430	397	18
7	5	1	923	910	11	9	9	1	178	125	36	6	14	-1	50	118	136
7	5	-1	942	961	12	9	9	-1	525	511	16	8	14	1	97	65	68
9	5	1	1941	1985	23	11	9	1	438	438	20	8	14	-1	905	884	13
9	5	-1	1797	1818	22	11	9	-1	567	551	16	1	15	1	664	668	14
11	5	1	484	487	18	0	10	1	288	284	14	1	15	-1	898	906	13
11	5	-1	857	861	13	2	10	1	1824	1820	18	3	15	1	380	363	20
13	5	-1	1312	1305	16	2	10	-1	2635	2641	18	3	15	-1	680	694	15
0	6	1	187	116	13	4	10	1	538	542	11	5	15	1	919	934	13
2	6	1	1136	1099	13	4	10	-1	609	607	11	5	15	-1	972	981	13
2	6	-1	3279	3290	13	6	10	1	1581	1601	18	7	15	1	523	530	18
4	6	1	965	968	12	6	10	-1	1376	1403	18	7	15	-1	82	65	82
4	6	-1	119	140	24	8	10	1	923	921	12	0	16	1	423	418	19
6	6	1	764	768	9	8	10	-1	515	528	15	2	16	1	1115	1100	14
6	6	-1	1776	1836	18	10	10	1	609	610	15	2	16	-1	1496	1492	18
8	6	1	1498	1510	18	10	10	-1	814	821	13	4	16	1	482	468	18
8	6	-1	326	317	16	1	11	1	1573	1562	18	4	16	-1	576	596	16
10	6	1	170	198	40	1	11	-1	1143	1171	14	6	16	1	1074	1080	14
10	6	-1	1147	1163	15	3	11	1	302	308	16	6	16	-1	884	862	14
12	6	1	876	875	13	3	11	-1	1509	1487	16	1	17	1*	0	21	990
12	6	-1	414	405	20	5	11	1	1836	1853	22	1	17	-1	116	104	61
1	7	1	365	401	9	5	11	-1	1335	1349	17	3	17	1	299	319	25
1	7	-1	2230	2223	14	7	11	1	588	604	15	3	17	-1	79	34	88
3	7	1	3040	3049	15	7	11	-1	345	390	20	5	17	-1	218	214	36
3	7	-1	381	431	9	9	11	1	1168	1179	15	0	18	1	1050	1034	13
5	7	1	820	841	10	9	11	-1	1131	1141	16	2	18	-1	324	298	24
5	7	-1	1106	1123	15	11	11	-1	502	470	17	0	0	2	1613	1750	10
7	7	1	1410	1431	18	0	12	1	1069	1059	13	2	0	2	4817	4836	11
7	7	-1	1090	1068	13	2	12	1	372	376	16	2	0	-2	4075	4042	10



THORTVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
4	0	2	2067	2057	14	2	4	-2	2095	2051	12	4	8	2	1305	1328	16
4	0	-2	3638	3656	12	4	4	2	981	968	12	4	8	-2	326	343	12
6	0	2	3117	3123	17	4	4	-2	3030	3034	13	6	8	2	840	851	11
6	0	-2	2260	2318	15	6	4	2	775	749	10	6	8	-2	2054	2028	19
8	0	2	422	446	14	6	4	-2	1025	1040	13	8	8	2	1690	1721	19
8	0	-2	2073	2075	18	8	4	2	543	544	13	8	8	-2	528	564	13
10	0	2	1740	1740	20	8	4	-2	1463	1444	16	10	8	2	631	647	15
10	0	-2	979	979	13	10	4	2	543	531	16	10	8	-2	1616	1622	20
12	0	2	660	663	16	10	4	-2	809	803	11	12	8	-2	476	512	19
12	0	-2	1179	1193	16	12	4	2	123	166	61	1	9	2	1939	1942	17
14	0	-2	1056	1028	14	12	4	-2	654	626	15	1	9	-2	370	347	11
1	1	2	1245	1139	11	1	5	2	449	398	7	3	9	2	1185	1189	15
1	1	-2	814	886	9	1	5	-2	2794	2809	12	3	9	-2	1096	1077	13
3	1	2	2395	2324	13	3	5	2	3595	3546	14	5	9	2	1137	1156	14
3	1	-2	219	191	10	3	5	-2	1266	1230	14	5	9	-2	227	212	20
5	1	2	98	104	30	5	5	2	991	960	12	7	9	2	413	396	17
5	1	-2	1621	1589	14	5	5	-2	2520	2515	15	7	9	-2	162	142	32
7	1	2	753	735	10	7	5	2	1700	1727	20	9	9	2	911	907	13
7	1	-2	546	519	9	7	5	-2	1544	1535	19	9	9	-2	747	744	13
9	1	2	96	37	54	9	5	2	619	622	14	11	9	2	158	76	43
9	1	-2	91	88	52	9	5	-2	667	691	12	11	9	-2	48	59	131
11	1	2	188	198	35	11	5	2	850	862	13	0	10	2	2075	2062	18
11	1	-2	426	419	17	11	5	-2	1103	1116	14	2	10	2	915	899	11
13	1	-2	90	62	80	13	5	-2	504	508	18	2	10	-2	161	98	23
0	2	2	1443	1398	10	0	6	2	727	674	9	4	10	2	1678	1663	19
2	2	2	2374	2321	12	2	6	2	2208	2198	15	4	10	-2	2789	2831	19
2	2	-2	4468	4509	10	2	6	-2	1244	1285	14	6	10	2	1296	1323	16
4	2	2	998	915	13	4	6	2	864	859	10	6	10	-2	234	251	22
4	2	-2	940	939	11	4	6	-2	2027	2013	15	8	10	2	441	438	18
6	2	2	576	584	9	6	6	2	1927	1938	19	8	10	-2	1830	1841	19
6	2	-2	2508	2516	15	6	6	-2	1040	1054	13	10	10	2	966	981	14
8	2	2	1796	1779	21	8	6	2	156	122	35	10	10	-2	74	93	87
8	2	-2	78	113	52	8	6	-2	1172	1184	15	1	11	2	227	110	21
10	2	2	382	399	19	10	6	2	1110	1100	13	1	11	-2	1585	1587	18
10	2	-2	1785	1793	20	10	6	-2	387	399	19	3	11	2	2080	2096	21
12	2	2	892	887	13	12	6	2	259	258	29	3	11	-2	614	620	11
12	2	-2	220	239	33	12	6	-2	648	672	15	5	11	2	473	478	15
1	3	2	5779	6104	47	1	7	2	2388	2351	15	5	11	-2	1425	1430	17
1	3	-2	1958	1920	11	1	7	-2	933	933	11	7	11	2	1148	1182	15
3	3	2	435	417	8	3	7	2	130	81	24	7	11	-2	998	998	12
3	3	-2	3989	4030	12	3	7	-2	1768	1779	16	9	11	2	261	270	28
5	3	2	3313	3330	16	5	7	2	1137	1125	14	9	11	-2	356	370	21
5	3	-2	1270	1287	15	5	7	-2	366	338	11	11	11	-2	771	775	15
7	3	2	489	472	11	7	7	2	707	711	11	0	12	2	660	660	11
7	3	-2	1458	1459	14	7	7	-2	835	863	11	2	12	2	146	35	34
9	3	2	2156	2180	23	9	7	2	824	834	13	2	12	-2	571	585	12
9	3	-2	2097	2101	21	9	7	-2	1037	1020	13	4	12	2	464	470	15
11	3	2	586	614	16	11	7	2	667	672	15	4	12	-2	94	95	54
11	3	-2	681	701	14	11	7	-2	559	563	16	6	12	2	282	272	24
13	3	-2	1333	1297	16	0	8	2	1605	1618	16	6	12	-2	343	332	21
0	4	2	1643	1567	12	2	8	2	1799	1765	17	8	12	2	830	845	13
2	4	2	271	259	10	2	8	-2	2842	2826	16	8	12	-2	142	116	46

THORTVEITITE - Sample No. 4

												Page 4					
h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
10	12	-2	461	459	19	3	1	-3	1366	1390	13	5	5	3	1820	1836	19
1	13	2	1736	1745	19	5	1	3	1021	977	12	5	5	-3	1066	1074	14
1	13	-2	1147	1148	14	5	1	-3	327	354	11	7	5	3	1010	1018	13
3	13	2	730	737	13	7	1	3	256	225	19	7	5	-3	2206	2225	19
3	13	-2	1496	1490	19	7	1	-3	1276	1296	15	9	5	3	1091	1115	13
5	13	2	1054	1052	14	9	1	3	524	540	16	9	5	-3	1439	1455	18
5	13	-2	742	756	13	9	1	-3	952	938	12	11	5	3	1273	1263	16
7	13	2	996	993	13	11	1	3	761	760	14	11	5	-3	838	830	13
7	13	-2	1003	1009	13	11	1	-3	190	142	33	13	5	-3	955	949	14
9	13	-2	1019	1012	14	13	1	-3	621	586	16	0	6	3	978	965	13
0	14	2	593	583	14	0	2	3	1310	1307	13	2	6	3	1440	1430	17
2	14	2	399	406	18	2	2	3	2501	2443	14	2	6	-3	1404	1364	16
2	14	-2	865	850	12	2	2	-3	2750	2758	12	4	6	3	1073	1074	14
4	14	2	383	390	19	4	2	3	457	456	9	4	6	-3	240	227	14
4	14	-2	94	41	63	4	2	-3	2996	3056	13	6	6	3	173	175	28
6	14	2	151	119	45	6	2	3	2749	2774	19	6	6	-3	1809	1779	18
6	14	-2	600	581	16	6	2	-3	547	550	9	8	6	3	794	824	13
8	14	-2	184	138	38	8	2	3	248	256	23	8	6	-3	243	269	21
1	15	2*	0	61	990	8	2	-3	1828	1859	20	10	6	3	550	539	16
1	15	-2	965	966	12	10	2	3	1265	1281	17	10	6	-3	1073	1062	14
3	15	2	1345	1353	16	10	2	-3	328	341	19	12	6	-3	69	49	103
3	15	-2	352	370	22	12	2	3	173	148	42	1	7	3	265	233	13
5	15	2	253	249	28	12	2	-3	1537	1497	20	1	7	-3	1592	1579	16
5	15	-2	910	926	13	1	3	3	1146	1098	14	3	7	3	1141	1119	14
7	15	-2	608	620	16	1	3	-3	4771	4890	13	3	7	-3	706	733	8
0	16	2	1257	1223	16	3	3	3	3075	3031	15	5	7	3	604	602	11
2	16	2	601	577	15	3	3	-3	107	145	24	5	7	-3	1053	1068	14
2	16	-2	199	167	34	5	3	3	796	793	10	7	7	3	913	917	12
4	16	2	1122	1101	15	5	3	-3	3529	3595	15	7	7	-3	414	417	13
4	16	-2	1668	1638	20	7	3	3	1722	1756	21	9	7	3	419	447	20
6	16	-2	265	262	30	7	3	-3	209	216	20	9	7	-3	177	188	31
1	17	2	526	551	17	9	3	3	891	901	12	11	7	3	138	123	51
1	17	-2	216	204	34	9	3	-3	1494	1520	18	11	7	-3	855	832	13
3	17	2	610	580	16	11	3	3	344	372	22	0	8	3	1451	1463	18
3	17	-2	156	227	49	11	3	-3	728	718	13	2	8	3	1833	1814	18
0	0	3	2182	2119	12	13	3	-3	879	840	13	2	8	-3	1859	1861	17
2	0	3	3038	3006	13	0	4	3	1075	1077	12	4	8	3	943	936	11
2	0	-3	2906	2884	12	2	4	3	709	694	9	4	8	-3	2406	2447	18
4	0	3	2040	1959	16	2	4	-3	556	596	7	6	8	3	2194	2221	22
4	0	-3	544	442	7	4	4	3	1343	1310	14	6	8	-3	757	766	10
6	0	3	767	781	10	4	4	-3	922	915	11	8	8	3	610	638	15
6	0	-3	2944	2900	16	6	4	3	1502	1516	17	8	8	-3	1626	1640	19
8	0	3	1462	1449	19	6	4	-3	922	928	12	10	8	3	1107	1133	13
8	0	-3	824	823	10	8	4	3	927	928	12	10	8	-3	558	592	16
10	0	3	973	1002	13	8	4	-3	581	565	11	12	8	-3	1357	1326	18
10	0	-3	1685	1686	19	10	4	3	490	470	17	1	9	3	1451	1447	16
12	0	3	951	989	14	10	4	-3	696	701	12	1	9	-3	1771	1757	18
12	0	-3	334	380	24	12	4	-3	698	697	14	3	9	3	1044	1034	13
14	0	-3	744	758	15	1	5	3	3861	3864	14	3	9	-3	867	871	10
1	1	3	3024	2983	12	1	5	-3	1044	1039	12	5	9	3	194	216	27
1	1	-3	249	247	10	3	5	3	1357	1351	17	5	9	-3	1381	1370	17
3	1	3	461	479	8	3	5	-3	2749	2777	14	7	9	3	601	610	14

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
7	9	-3	795	797	11	1	15	3	1484	1467	18	12	2	-4	195	203	37
9	9	3	54	59	121	1	15	-3	92	61	73	1	3	4	1995	1947	16
9	9	-3	411	428	19	3	15	3	230	240	31	1	3	-4	1063	1074	13
11	9	-3	56	27	119	3	15	-3	1095	1096	13	3	3	4	2382	2364	17
0	10	3	1844	1854	19	5	15	3	765	773	15	3	3	-4	2613	2624	15
2	10	3	680	659	10	5	15	-3	116	79	59	5	3	4	1101	1100	13
2	10	-3	856	868	11	7	15	-3	1047	1037	13	5	3	-4	1261	1281	14
4	10	3	1914	1941	22	0	16	3	1227	1191	14	7	3	4	1665	1669	19
4	10	-3	624	649	11	2	16	3	541	532	17	7	3	-4	2348	2371	19
6	10	3	214	211	30	2	16	-3	614	600	16	9	3	4	170	173	39
6	10	-3	1539	1567	18	4	16	3	1227	1225	15	9	3	-4	669	648	12
8	10	3	1433	1472	18	4	16	-3	564	557	16	11	3	4	1380	1383	17
8	10	-3	537	541	15	6	16	-3	995	979	13	11	3	-4	1089	1116	14
10	10	-3	1221	1227	16	1	17	3	596	558	17	13	3	-4	753	742	15
1	11	3	2082	2125	21	1	17	-3	448	472	20	0	4	4	556	534	8
1	11	-3	313	296	17	3	17	-3	352	294	23	2	4	4	1397	1355	17
3	11	3	668	668	12	0	0	4	2541	2562	14	2	4	-4	1693	1703	15
3	11	-3	1580	1601	18	2	0	4	2671	2648	15	4	4	4	1181	1179	15
5	11	3	1041	1052	14	2	0	-4	2641	2611	14	4	4	-4	363	374	11
5	11	-3	411	403	15	4	0	4	568	573	9	6	4	4	1027	1013	14
7	11	3	585	585	16	4	0	-4	2692	2790	15	6	4	-4	152	110	26
7	11	-3	1415	1436	18	6	0	4	2341	2340	20	8	4	4	101	66	61
9	11	3	655	647	15	6	0	-4	529	536	10	8	4	-4	350	363	17
9	11	-3	776	770	14	8	0	4	916	935	12	10	4	4	417	420	19
11	11	-3	522	540	18	8	0	-4	2631	2628	20	10	4	-4	186	203	34
0	12	3	346	367	17	10	0	4	1466	1462	19	12	4	-4	482	453	18
2	12	3	203	180	26	10	0	-4	555	587	14	1	5	4	838	809	10
2	12	-3	293	277	19	12	0	-4	1878	1850	22	1	5	-4	3291	3286	16
4	12	3	187	207	33	1	1	4	697	707	9	3	5	4	1598	1591	19
4	12	-3	964	972	12	1	1	-4	2852	2853	14	3	5	-4	453	452	9
6	12	3	685	692	14	3	1	4	955	923	11	5	5	4	981	997	13
6	12	-3	235	200	28	3	1	-4	1014	1051	13	5	5	-4	2176	2217	18
8	12	3	110	133	65	5	1	4	102	91	41	7	5	4	1165	1165	14
8	12	-3	519	524	17	5	1	-4	1472	1505	16	7	5	-4	237	206	21
10	12	-3	149	77	48	7	1	4	617	602	13	9	5	4	1265	1316	17
1	13	3	664	663	13	7	1	-4	776	770	10	9	5	-4	1628	1645	19
1	13	-3	1405	1400	17	9	1	4	689	678	14	11	5	-4	805	796	14
3	13	3	1130	1146	14	9	1	-4	1024	1008	13	13	5	-4	661	659	16
3	13	-3	1191	1198	15	11	1	4	109	31	66	0	6	4	1232	1188	14
5	13	3	989	985	13	11	1	-4	246	228	28	2	6	4	1498	1494	17
5	13	-3	1086	1095	13	13	1	-4	158	156	47	2	6	-4	1408	1387	17
7	13	3	1007	1020	13	0	2	4	2183	2171	15	4	6	4	115	75	38
7	13	-3	857	875	13	2	2	4	216	210	15	4	6	-4	1477	1492	18
9	13	-3	474	489	19	2	2	-4	142	118	20	6	6	4	1481	1468	19
0	14	3	437	427	18	4	2	4	2644	2638	18	6	6	-4	123	101	34
2	14	3	396	375	19	4	2	-4	1769	1795	16	8	6	4	452	443	18
2	14	-3	487	471	17	6	2	4	100	92	48	8	6	-4	1685	1698	18
4	14	3	335	277	22	6	2	-4	1469	1460	16	10	6	4	929	929	14
4	14	-3	949	915	13	8	2	4	1100	1097	13	10	6	-4	134	138	48
6	14	3	808	794	14	8	2	-4	608	603	11	12	6	-4	1292	1263	16
6	14	-3	78	55	86	10	2	4	247	289	31	1	7	4	2001	1997	18
8	14	-3	587	529	17	10	2	-4	878	871	11	1	7	-4	752	742	9

THORVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
3	7	4	427	403	12	2	12	-4	124	155	48	9	1	-5	524	514	14
3	7	-4	2157	2198	18	4	12	4	788	820	13	11	1	-5	1123	1100	14
5	7	4	1296	1304	16	4	12	-4	109	102	55	13	1	-5	190	148	40
5	7	-4	74	68	57	6	12	4	188	124	36	0	2	5	873	894	11
7	7	4	346	341	19	6	12	-4	836	852	13	2	2	5	2420	2395	18
7	7	-4	1670	1684	18	8	12	-4	308	269	25	2	2	-5	1978	1987	17
9	7	4	312	308	23	10	12	-4	518	511	17	4	2	5	396	397	14
9	7	-4	68	129	84	1	13	4	1709	1708	20	4	2	-5	562	581	10
11	7	-4	544	543	17	1	13	-4	98	147	65	6	2	5	1042	1051	14
0	8	4	1906	1870	19	3	13	4	689	697	14	6	2	-5	1307	1370	16
2	8	4	690	703	10	3	13	-4	1768	1765	20	8	2	5	699	699	14
2	8	-4	744	774	10	5	13	4	1315	1329	16	8	2	-5	1445	1422	18
4	8	4	2285	2324	21	5	13	-4	542	558	16	10	2	5	811	815	15
4	8	-4	1517	1544	16	7	13	-4	1471	1445	19	10	2	-5	730	725	14
6	8	4	435	416	16	9	13	-4	450	447	20	12	2	-5	913	885	14
6	8	-4	1647	1664	17	0	14	4	573	541	15	1	3	5	1880	1874	18
8	8	4	1164	1177	15	2	14	4	127	125	53	1	3	-5	1607	1606	17
8	8	-4	720	717	13	2	14	-4	198	164	33	3	3	5	1009	1005	13
10	8	-4	1058	1070	13	4	14	4	974	974	13	3	3	-5	724	725	9
12	8	-4	331	332	24	4	14	-4	449	407	18	5	3	5	1216	1235	15
1	9	4	394	397	14	6	14	-4	761	738	14	5	3	-5	1394	1427	16
1	9	-4	341	361	15	8	14	-4	99	50	67	7	3	5	416	408	18
3	9	4	707	694	11	1	15	4	516	522	17	7	3	-5	888	925	13
3	9	-4	788	786	10	1	15	-4	989	996	13	9	3	5	1212	1242	15
5	9	4	124	54	46	3	15	4	340	355	22	9	3	-5	1327	1314	17
5	9	-4	45	12	106	3	15	-4	335	351	23	11	3	-5	634	620	15
7	9	4	534	517	16	5	15	-4	680	686	15	13	3	-5	451	438	20
7	9	-4	873	865	11	0	16	4	462	468	18	0	4	5	333	319	12
9	9	4	451	446	19	2	16	4	1126	1098	14	2	4	5	803	771	10
9	9	-4	162	188	41	2	16	-4	1357	1280	16	2	4	-5	296	275	14
11	9	-4	275	242	26	4	16	-4	394	402	22	4	4	5	595	592	12
0	10	4	621	620	11	0	0	5	3159	3167	16	4	4	-5	590	604	10
2	10	4	1791	1809	22	2	0	5	552	531	10	6	4	5	130	112	43
2	10	-4	2074	2071	21	2	0	-5	193	206	18	6	4	-5	84	21	49
4	10	4	152	128	37	4	0	5	2940	2906	20	8	4	5	118	71	56
4	10	-4	604	614	12	4	0	-5	3010	3061	17	8	4	-5	422	388	15
6	10	4	1413	1434	18	6	0	5	490	501	14	10	4	-5	161	172	42
6	10	-4	1009	1029	12	6	0	-5	728	749	10	12	4	-5	170	147	42
8	10	4	640	645	15	8	0	5	1537	1556	19	1	5	5	1432	1419	16
8	10	-4	884	875	13	8	0	-5	1100	1055	14	1	5	-5	981	1007	13
10	10	-4	875	868	13	10	0	5	343	329	24	3	5	5	1493	1490	17
1	11	4	660	665	12	10	0	-5	1009	1025	12	3	5	-5	2720	2748	18
1	11	-4	1714	1731	18	12	0	-5	672	619	15	5	5	5	1193	1185	14
3	11	4	773	783	12	1	1	5	591	602	9	5	5	-5	745	765	10
3	11	-4	428	422	15	1	1	-5	105	62	31	7	5	5	1596	1607	20
5	11	4	731	738	14	3	1	5	761	758	10	7	5	-5	1962	1996	21
5	11	-4	1244	1229	16	3	1	-5	2231	2272	17	9	5	5	389	355	19
7	11	4	658	651	15	5	1	5	419	412	15	9	5	-5	299	327	23
7	11	-4	215	224	31	5	1	-5	303	299	14	11	5	-5	1453	1425	19
9	11	-4	1065	1063	14	7	1	5	1153	1153	14	0	6	5	1979	1992	19
0	12	4	232	262	28	7	1	-5	1582	1573	17	2	6	5	833	838	10
2	12	4	136	99	45	9	1	5	256	269	29	2	6	-5	305	304	15

THORVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
4	6	5	1972	1968	22	5	11	5	798	781	13	0	2	6	1927	1955	20
4	6	-5	1948	1965	20	5	11	-5	569	552	15	2	2	6	41	82	114
6	6	5*	0	85	990	7	11	5	944	958	14	2	2	-6	496	468	11
6	6	-5	194	221	26	7	11	-5	1120	1067	14	4	2	6	1031	1029	12
8	6	5	1001	1010	13	9	11	-5	221	231	32	4	2	-6	1597	1601	16
8	6	-5	519	505	14	0	12	5	305	283	23	6	2	6	645	667	15
10	6	-5	541	550	16	2	12	5	1203	1211	15	6	2	-6	173	163	29
12	6	-5	316	282	26	2	12	-5	878	879	12	8	2	6	840	840	14
1	7	5	734	759	10	4	12	5	472	477	18	8	2	-6	791	823	12
1	7	-5	1336	1372	17	4	12	-5	403	372	19	10	2	-6	797	793	14
3	7	5	539	555	13	6	12	5	543	547	17	12	2	-6	463	426	19
3	7	-5	523	526	12	6	12	-5	529	545	16	1	3	6	1407	1425	17
5	7	5	661	692	14	8	12	-5	326	334	24	1	3	-6	1231	1229	15
5	7	-5	1464	1484	17	1	13	5	962	970	13	3	3	6	964	968	11
7	7	5	117	124	59	1	13	-5	1374	1376	17	3	3	-6	2228	2262	20
7	7	-5	322	280	18	3	13	5	861	851	13	5	3	6	834	825	12
9	7	5	972	987	14	3	13	-5	191	211	35	5	3	-6	246	275	22
9	7	-5	1397	1410	17	5	13	5	834	831	14	7	3	6	1294	1302	16
11	7	-5	258	235	29	5	13	-5	1407	1406	18	7	3	-6	1731	1789	18
0	8	5	855	857	11	7	13	-5	253	267	30	9	3	-6	352	380	21
2	8	5	2239	2259	21	0	14	5	119	48	57	11	3	-6	1561	1509	19
2	8	-5	1917	1939	21	2	14	5	1062	1032	13	0	4	6	711	703	10
4	8	5	507	508	15	2	14	-5	831	780	13	2	4	6	1036	1059	13
4	8	-5	662	655	11	4	14	5	100	148	70	2	4	-5	658	652	11
6	8	5	1156	1173	14	4	14	-5	79	97	88	4	4	6	56	70	97
6	8	-5	1394	1422	18	6	14	-5	573	527	17	4	4	-6	340	326	16
8	8	5	719	710	14	1	15	5	270	303	29	6	4	6	258	272	27
8	8	-5	1303	1322	18	1	15	-5	474	503	18	6	4	-6	733	760	11
10	8	-5	808	810	14	3	15	-5	783	799	14	8	4	6	207	178	34
1	9	5	572	557	13	5	15	-5	429	465	20	8	4	-6	233	208	26
1	9	-5	318	312	18	0	0	6	362	376	14	10	4	-6	148	105	46
3	9	5	62	21	94	2	0	6	2422	2419	20	12	4	-6	277	278	29
3	9	-5	266	261	21	2	0	-6	2454	2501	19	1	5	6	1696	1711	19
5	9	5	248	256	29	4	0	6	1203	1190	15	1	5	-6	739	747	10
5	9	-5	293	276	20	4	0	-6	391	391	14	3	5	6	777	795	11
7	9	5	262	293	28	6	0	6	1056	1044	13	3	5	-6	946	962	11
7	9	-5	50	44	120	6	0	-6	2581	2649	20	5	5	6	1643	1654	20
9	9	-5	425	421	19	8	0	6	924	891	13	5	5	-6	1606	1610	17
11	9	-5	34	16	201	8	0	-6	664	654	13	7	5	6	111	140	62
0	10	5	989	1006	12	10	0	-6	1356	1321	17	7	5	-6	757	769	12
2	10	5	543	544	14	12	0	-6	565	577	17	9	5	-6	1244	1233	15
2	10	-5	897	924	11	1	1	6	1211	1215	15	11	5	-6	218	208	34
4	10	5	1082	1098	13	1	1	-6	324	334	15	0	6	6	146	166	35
4	10	-5	1214	1228	15	3	1	6	127	135	40	2	6	6	1612	1596	19
6	10	5	910	914	13	3	1	-6	336	336	15	2	6	-6	1584	1571	17
6	10	-5	880	907	12	5	1	6	1232	1227	15	4	6	6	612	606	14
8	10	-5	404	439	20	5	1	-6	776	777	10	4	6	-6	149	128	33
10	10	-5	758	762	14	7	1	6	583	566	15	6	6	6	563	555	16
1	11	5	777	775	13	7	1	-6	190	163	28	6	6	-6	1754	1787	18
1	11	-5	642	613	13	9	1	6	625	627	16	8	6	6	454	451	19
3	11	5	849	851	13	9	1	-6	653	638	14	8	6	-6	220	196	30
3	11	-5	1565	1516	19	11	1	-6	311	313	26	10	6	-6	819	792	14

THORTVEITITE - Sample No. 4

h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
1	7	6	144	83	35	3	13	6	1144	1142	15	6	4	-7	902	885	12
1	7	-6	1453	1455	18	3	13	-6	772	747	14	8	4	-7	788	804	13
3	7	6	1126	1148	14	5	13	-6	768	750	14	10	4	-7	310	288	25
3	7	-6	637	644	12	7	13	-6	704	691	15	1	5	7	786	785	12
5	7	6	257	238	26	0	14	6	759	720	14	1	5	-7	1762	1766	19
5	7	-6	448	478	15	2	14	-6	146	146	51	3	5	7	1556	1533	19
7	7	6	1235	1262	16	4	14	-6	693	660	16	3	5	-7	696	700	12
7	7	-6	625	649	14	0	0	7	1412	1421	18	5	5	7	220	223	32
9	7	-6	315	304	23	2	0	7	1425	1437	17	5	5	-7	975	984	12
11	7	-6	884	869	14	2	0	-7	994	1000	15	7	5	-7	1152	1174	15
0	8	6	1761	1801	19	4	0	7	475	483	17	9	5	-7	843	838	13
2	8	6	443	446	16	4	0	-7	1100	1117	13	11	5	-7	1015	989	13
2	8	-6	749	747	11	6	0	7	1055	1091	15	0	6	7	845	840	12
4	8	6	1027	1016	14	6	0	-7	716	714	12	2	6	7	882	873	12
4	8	-6	1598	1605	19	8	0	-7	1192	1262	15	2	6	-7	497	470	15
6	8	6	868	871	13	10	0	-7	808	773	15	4	6	7	73	93	89
6	8	-6	381	388	19	12	0	-7	587	572	18	4	6	-7	591	574	14
8	8	-6	993	1016	13	1	1	7	174	179	31	6	6	7	639	653	16
10	8	-6	792	795	14	1	1	-7	1166	1177	15	6	6	-7	284	269	24
1	9	6	304	290	23	3	1	7	949	939	13	8	6	-7	781	788	14
1	9	-6	238	181	25	3	1	-7	64	35	78	10	6	-7	442	408	19
3	9	6	107	34	61	5	1	7	258	274	27	1	7	7	694	697	13
3	9	-6	884	835	12	5	1	-7	416	426	16	1	7	-7	63	47	97
5	9	6	100	20	66	7	1	7	534	547	18	3	7	7	164	142	38
5	9	-6	424	465	18	7	1	-7	588	584	15	3	7	-7	912	945	12
7	9	-6	656	623	14	9	1	-7	461	438	18	5	7	7	897	906	13
9	9	-6	246	256	30	11	1	-7	571	546	17	5	7	-7	496	512	16
0	10	6	355	354	20	0	2	7	53	77	99	7	7	-7	369	392	20
2	10	6	1448	1464	17	2	2	7	1167	1174	15	9	7	-7	249	279	31
2	10	-6	1099	1133	14	2	2	-7	1833	1847	20	0	8	7	454	441	17
4	10	6	611	629	16	4	2	7	805	827	13	2	8	7	1052	1049	14
4	10	-6	603	624	14	4	2	-7	356	345	17	2	8	-7	1546	1531	19
6	10	6	806	813	14	6	2	7	850	844	14	4	8	7	981	969	13
6	10	-6	1151	1143	14	6	2	-7	1738	1739	19	4	8	-7	683	701	14
8	10	-6	822	838	14	8	2	-7	69	89	94	6	8	-7	1459	1462	19
1	11	6	954	937	13	10	2	-7	962	945	13	8	8	-7	344	353	23
1	11	-6	576	580	15	1	3	7	1365	1355	17	10	8	-7	873	863	14
3	11	6	618	633	16	1	3	-7	471	459	14	1	9	7	394	352	19
3	11	-6	474	465	17	3	3	7	284	280	23	1	9	-7	153	233	45
5	11	6	993	980	13	3	3	-7	1331	1302	16	3	9	7	256	294	28
5	11	-6	1155	1126	13	5	3	7	1686	1686	21	3	9	-7	351	347	22
7	11	-6	448	435	18	5	3	-7	1315	1334	17	5	9	7	748	755	15
9	11	-6	859	839	14	7	3	7	236	244	32	5	9	-7	447	433	18
0	12	6	816	850	14	7	3	-7	351	363	22	7	9	-7	168	241	44
2	12	6	359	320	21	9	3	-7	1057	1085	13	9	9	-7	352	343	23
2	12	-6	232	170	28	11	3	-7	90	88	78	0	10	7	1498	1549	18
4	12	6	277	285	27	0	4	7	1068	1075	13	2	10	7	326	365	23
4	12	-6	757	775	14	2	4	7	367	324	18	2	10	-7	92	71	69
6	12	-6	484	428	18	2	4	-7	927	916	11	4	10	7	732	744	15
8	12	-6	449	465	19	4	4	7	88	119	74	4	10	-7	1257	1276	16
1	13	6	333	320	23	4	4	-7	731	756	12	6	10	-7	117	77	59
1	13	-6	1412	1401	19	6	4	7	238	155	28	8	10	-7	1204	1211	15

THORTVEITITE - Sample No. 4

THORTVEITITE - Sample No. 4												Page 9					
h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo	h	k	l	Fo	Fc	sFo
1	11	7	458	436	18	1	5	8	1132	1140	14	2	2	-9	533	528	17
1	11	-7	1158	1118	15	1	5	-8	655	639	14	4	2	-9	515	510	17
3	11	7	1030	1021	13	3	5	8	272	266	26	6	2	-9	583	602	17
3	11	-7	434	392	19	3	5	-8	1370	1383	17	8	2	-9	484	471	20
5	11	-7	578	537	16	5	5	8	944	946	14	1	3	9	1013	1018	13
7	11	-7	793	768	15	5	5	-8	559	563	16	1	3	-9	569	558	16
0	12	7	102	55	68	7	5	-8	628	633	15	3	3	9	486	487	18
2	12	-7	348	343	22	9	5	-8	697	725	15	3	3	-9	1031	1011	13
4	12	-7	195	240	36	0	6	8	496	478	17	5	3	-9	182	123	39
6	12	-7	390	414	22	2	6	8	402	362	20	7	3	-9	957	941	13
1	13	-7	378	404	22	2	6	-8	1041	1032	13	0	4	9	529	517	17
3	13	-7	999	1007	14	4	6	8	450	446	19	2	4	9	430	436	20
0	0	8	934	926	12	4	6	-8	359	353	21	2	4	-9	267	255	27
2	0	8	829	814	13	6	6	-8	713	684	15	4	4	-9	109	73	58
2	0	-8	1632	1616	20	8	6	-8	222	165	32	6	4	-9	144	139	50
4	0	8	848	833	13	1	7	8	364	391	22	8	4	-9*	0	26	990
4	0	-8	779	783	13	1	7	-8	505	506	17	1	5	9	286	277	27
6	0	-8	1185	1181	14	3	7	8	766	793	15	1	5	-9	1024	1013	13
8	0	-8	514	523	17	3	7	-8	202	259	35	3	5	-9	457	459	19
10	0	-8	1100	1041	14	5	7	-8	498	514	17	5	5	-9	1278	1254	15
1	1	8	529	541	16	7	7	-8	709	735	15	7	5	-9	479	469	19
1	1	-8	198	169	32	0	8	8	893	880	13	0	6	9	346	339	24
3	1	8	211	215	33	2	8	8	995	973	12	2	6	-9	128	145	53
3	1	-8	748	743	13	2	8	-8	381	379	21	4	6	-9	938	955	13
5	1	8	491	493	18	4	8	-8	1082	1078	13	6	6	-9	144	49	51
5	1	-8	176	130	38	6	8	-8	496	494	17	1	7	-9	53	52	135
7	1	-8	125	40	54	8	8	-8	1107	1098	13	3	7	-9	690	730	16
9	1	-8	390	386	22	1	9	8	365	391	22	5	7	-9	201	154	37
0	2	8	736	727	13	1	9	-8	733	701	14	2	8	-9	716	690	15
2	2	8	1030	1031	13	3	9	-8	556	586	16	4	8	-9	515	490	18
2	2	-8	230	213	27	5	9	-8	742	696	14	2	0	-10	283	198	26
4	2	8	413	434	21	7	9	-8*	0	15	990	4	0	-10	840	802	14
4	2	-8	1057	1058	14	0	10	8	700	710	15	3	1	-10	520	518	18
6	2	-8	302	288	24	2	10	-8	978	975	13	2	2	-10	813	810	14
8	2	-8	1175	1164	14	4	10	-8	405	414	21	4	2	-10	492	473	19
10	2	-8*	0	59	990	6	10	-8	873	861	14						
1	3	8	159	155	43	1	11	-8	351	317	23						
1	3	-8	1715	1710	20	3	11	-8	1031	1002	13						
3	3	8	1771	1763	21	0	0	9	748	705	14						
3	3	-8	148	126	43	2	0	9	797	772	14						
5	3	8	188	189	40	2	0	-9	478	475	18						
5	3	-8	1684	1654	20	4	0	-9	1416	1412	17						
7	3	-8	594	584	16	6	0	-9	356	306	21						
9	3	-8	980	957	13	8	0	-9	1153	1127	14						
0	4	8	187	165	35	1	1	9	242	289	31						
2	4	8	321	315	24	1	1	-9	676	680	15						
2	4	-8	559	577	16	3	1	9	728	720	15						
4	4	8	313	342	25	3	1	-9	25	79	265						
4	4	-8	229	208	29	5	1	-9	914	909	13						
6	4	-8	470	478	18	7	1	-9	78	62	90						
8	4	-8	507	492	17	0	2	9	1128	1146	14						
10	4	-8	611	637	17	2	2	9	227	240	32						