Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 1

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

1 1 0 431 676 3 -5 13 0 222 224 2 -1 7 1 70 67 1 -2 12 1 70 67 1 -5 5 2 113 109 1

-1 2 0 430 676 3 -2 13 0 137 138 1 2 7 1 178 201 1 1 12 1 74 73 1 -2 5 2 84 84 1

2 2 0 416 384 3 1 13 0 202 195 2 5 7 1 29 25 1 4 12 1 84 84 1 1 5 2 316 306 1

0 3 0 2217 1837 11 4 13 0 226 197 2 -15 8 1 45 39 2 -16 13 1 23 28 5 4 5 2 64 58 1

3 3 0 2310 1906 20 -7 14 0 26 36 9 -12 8 1 77 74 1 -13 13 1 0 2 1 -10 6 2 56 53 1

-2 4 0 415 384 3 -4 14 0 31 37 2 -9 8 1 56 62 1 -10 13 1 101 103 1 -7 6 2 126 109 1

1 4 0 517 523 2 -1 14 0 199 195 2 -6 8 1 44 40 1 -7 13 1 136 149 1 -4 6 2 276 277 1

4 4 0 2261 2062 23 2 14 0 82 95 2 -3 8 1 136 141 1 -4 13 1 28 22 2 -1 6 2 313 306 1

-1 5 0 515 523 2 -6 15 0 226 203 6 0 8 1 155 163 1 -1 13 1 75 73 1 2 6 2 88 94 1

2 5 0 869 725 5 -3 15 0 556 532 5 3 8 1 8 15 8 2 13 1 71 73 2 5 6 2 87 92 1

5 5 0 79 91 3 0 15 0 337 335 2 6 8 1 37 36 2 -15 14 1 78 77 1 -12 7 2 47 49 1

-3 6 0 2313 1906 15 -8 16 0 871 886 19 -17 9 1 55 52 2 -12 14 1 69 68 2 -9 7 2 182 193 1

0 6 0 443 455 2 -5 16 0 234 232 3 -14 9 1 24 34 2 -9 14 1 25 34 2 -6 7 2 127 109 1

3 6 0 153 131 1 -2 16 0 82 95 2 -11 9 1 147 162 1 -6 14 1 39 36 2 -3 7 2 85 91 1

6 6 0 610 575 4 -7 17 0 177 183 11 -8 9 1 57 61 1 -3 14 1 73 69 1 0 7 2 103 100 1

-2 7 0 865 725 4 -4 17 0 223 197 4 -5 9 1 19 13 1 0 14 1 16 29 5 3 7 2 40 42 1

1 7 0 868 783 5 -9 18 0 70 60 7 -2 9 1 178 201 1 -14 15 1 78 77 2 6 7 2 69 74 1

4 7 0 566 525 2 -1 1 1 250 296 1 1 9 1 130 136 1 -11 15 1 43 42 2 -14 8 2 16 16 4

7 7 0 35 36 3 -3 2 1 171 177 1 4 9 1 18 22 3 -8 15 1 48 39 3 -11 8 2 46 36 1

-4 8 0 2266 2062 15 0 2 1 172 173 1 7 9 1 61 68 2 -5 15 1 81 91 2 -8 8 2 228 232 1

-1 8 0 869 783 5 -5 3 1 237 242 1 -16 10 1 23 27 3 -2 15 1 74 73 1 -5 8 2 97 97 1

2 8 0 217 187 1 -2 3 1 170 177 1 -13 10 1 102 103 1 1 15 1 50 46 2 -2 8 2 88 94 1

5 8 0 223 224 1 1 3 1 115 131 1 -10 10 1 46 39 1 -13 16 1 26 28 3 1 8 2 26 24 1

8 8 0 928 886 9 -7 4 1 117 129 1 -7 10 1 53 64 1 -10 16 1 21 27 5 4 8 2 74 77 1

-3 9 0 157 131 1 -4 4 1 346 356 1 -4 10 1 125 133 1 -7 16 1 51 68 5 7 8 2 24 21 3

0 9 0 1350 1218 6 -1 4 1 115 131 1 -1 10 1 129 136 1 -4 16 1 85 84 2 -16 9 2 33 29 3

3 9 0 590 565 3 2 4 1 135 134 1 2 10 1 72 67 1 -1 16 1 48 46 2 -13 9 2 23 22 3

6 9 0 238 203 2 -9 5 1 18 13 2 5 10 1 78 91 1 -12 17 1 50 44 2 -10 9 2 54 52 1

9 9 0 77 60 4 -6 5 1 317 311 1 8 10 1 30 23 3 -9 17 1 52 52 8 -7 9 2 183 192 1

-5 10 0 77 90 1 -3 5 1 237 242 1 -15 11 1 43 42 2 -6 17 1 51 58 3 -4 9 2 61 58 1

-2 10 0 220 187 1 0 5 1 134 127 1 -12 11 1 125 122 1 -8 18 1 6 23 5 -1 9 2 28 24 1

1 10 0 283 270 1 3 5 1 133 141 1 -9 11 1 150 162 1 0 1 2 106 108 1 2 9 2 97 92 1

4 10 0 35 37 4 -11 6 1 148 154 1 -6 11 1 150 154 1 -2 2 2 25 24 1 5 9 2 13 12 5

7 10 0 178 183 2 -8 6 1 45 40 1 -3 11 1 16 15 1 1 2 2 116 117 1 8 9 2 23 23 4

-4 11 0 570 525 2 -5 6 1 316 311 1 0 11 1 101 103 1 -4 3 2 72 77 1 -18 10 2 17 22 6

-1 11 0 285 270 1 -2 6 1 136 134 1 3 11 1 73 69 1 -1 3 2 115 118 1 -15 10 2 52 54 2

2 11 0 138 138 1 1 6 1 69 67 1 6 11 1 59 58 2 2 3 2 86 84 1 -12 10 2 82 82 1

5 11 0 233 232 2 4 6 1 123 133 1 -17 12 1 47 44 2 -6 4 2 276 277 1 -9 10 2 55 52 1

-6 12 0 614 575 3 -13 7 1 135 149 1 -14 12 1 62 68 1 -3 4 2 72 77 1 -6 10 2 56 53 1

-3 12 0 595 565 2 -10 7 1 53 64 1 -11 12 1 130 122 1 0 4 2 359 357 1 -3 10 2 41 42 1

0 12 0 1064 1009 7 -7 7 1 144 150 1 -8 12 1 79 74 1 3 4 2 88 91 1 0 10 2 104 95 1

3 12 0 554 532 3 -4 7 1 117 130 1 -5 12 1 31 25 1 -8 5 2 95 97 1 3 10 2 92 90 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 2

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

6 10 2 0 3 1 -8 17 2 0 23 1 0 9 3 207 195 1 2 14 3 17 9 6 -1 7 4 83 87 1

-17 11 2 37 46 2 -5 17 2 72 60 2 3 9 3 24 24 2 -15 15 3 102 99 1 2 7 4 116 106 1

-14 11 2 11 20 10 -10 18 2 22 22 21 6 9 3 86 101 1 -12 15 3 233 207 4 5 7 4 52 41 1

-11 11 2 141 136 1 2 2 3 54 66 1 9 9 3 67 56 2 -9 15 3 19 25 4 -15 8 4 66 51 2

-8 11 2 46 36 1 -3 3 3 29 25 1 -17 10 3 32 26 3 -6 15 3 86 101 2 -12 8 4 99 106 1

-5 11 2 88 92 1 0 3 3 242 307 1 -14 10 3 39 45 2 -3 15 3 152 133 1 -9 8 4 77 71 1

-2 11 2 95 92 1 3 3 3 247 261 1 -11 10 3 71 70 1 0 15 3 143 129 2 -6 8 4 65 61 1

1 11 2 101 105 1 -5 4 3 106 110 1 -8 10 3 45 43 1 -14 16 3 63 65 2 -3 8 4 66 66 1

4 11 2 31 35 2 -2 4 3 54 66 1 -5 10 3 36 29 1 -11 16 3 26 22 4 0 8 4 133 152 1

-16 12 2 101 101 1 1 4 3 72 97 1 -2 10 3 112 108 1 -8 16 3 117 98 4 3 8 4 25 26 1

-13 12 2 53 52 1 4 4 3 74 52 1 1 10 3 70 63 1 -5 16 3 79 70 2 6 8 4 29 30 2

-10 12 2 83 82 1 -7 5 3 46 56 1 4 10 3 54 54 2 -2 16 3 27 9 3 -17 9 4 49 44 2

-7 12 2 48 49 1 -4 5 3 106 110 1 7 10 3 19 8 5 -13 17 3 67 58 2 -14 9 4 47 60 1

-4 12 2 75 77 1 -1 5 3 72 97 1 -16 11 3 21 22 4 -10 17 3 28 26 5 -11 9 4 133 136 1

-1 12 2 104 105 1 2 5 3 40 51 1 -13 11 3 19 24 3 -7 17 3 16 8 16 -8 9 4 75 71 1

2 12 2 23 25 3 5 5 3 39 29 1 -10 11 3 73 70 1 -4 17 3 32 12 3 -5 9 4 63 65 1

5 12 2 75 60 2 -9 6 3 82 78 1 -7 11 3 51 37 1 -9 18 3 53 56 5 -2 9 4 114 106 1

-15 13 2 41 47 2 -6 6 3 67 53 1 -4 11 3 252 240 1 -1 1 4 170 204 1 1 9 4 147 151 1

-12 13 2 56 52 1 -3 6 3 245 261 1 -1 11 3 68 63 1 -3 2 4 172 169 1 4 9 4 37 30 2

-9 13 2 18 22 3 0 6 3 125 122 1 2 11 3 33 20 2 0 2 4 131 150 1 7 9 4 52 63 2

-6 13 2 69 74 1 3 6 3 101 119 1 5 11 3 79 70 1 -5 3 4 223 237 1 -16 10 4 13 21 8

-3 13 2 95 90 1 6 6 3 274 248 1 -15 12 3 232 207 2 -2 3 4 172 169 1 -13 10 4 85 81 1

0 13 2 47 43 2 -11 7 3 48 37 1 -12 12 3 129 105 1 1 3 4 37 37 1 -10 10 4 23 15 1

3 13 2 22 19 7 -8 7 3 89 106 1 -9 12 3 105 110 1 -7 4 4 54 48 1 -7 10 4 89 93 1

-14 14 2 19 3 4 -5 7 3 47 56 1 -6 12 3 274 248 1 -4 4 4 280 295 1 -4 10 4 115 111 1

-11 14 2 17 20 4 -2 7 3 40 51 1 -3 12 3 30 24 1 -1 4 4 37 37 1 -1 10 4 147 151 1

-8 14 2 9 16 9 1 7 3 33 42 2 0 12 3 134 137 4 2 4 4 47 45 1 2 10 4 23 29 2

-5 14 2 8 12 8 4 7 3 249 240 1 3 12 3 153 133 1 -9 5 4 59 65 1 5 10 4 72 77 1

-2 14 2 23 25 3 7 7 3 18 33 4 -17 13 3 65 58 2 -6 5 4 167 163 1 8 10 4 35 32 3

1 14 2 75 65 1 -13 8 3 98 91 1 -14 13 3 53 38 2 -3 5 4 222 237 1 -15 11 4 56 52 2

-16 15 2 35 32 3 -10 8 3 45 43 1 -11 13 3 23 24 3 0 5 4 195 192 1 -12 11 4 125 125 1

-13 15 2 42 47 2 -7 8 3 92 106 1 -8 13 3 98 91 2 3 5 4 66 67 1 -9 11 4 137 136 1

-10 15 2 54 54 2 -4 8 3 80 52 2 -5 13 3 105 84 1 -11 6 4 140 131 1 -6 11 4 143 131 1

-7 15 2 26 21 8 -1 8 3 27 42 1 -2 13 3 30 20 2 -8 6 4 66 61 1 -3 11 4 27 26 1

-4 15 2 29 35 2 2 8 3 112 108 1 1 13 3 19 14 4 -5 6 4 166 163 1 0 11 4 49 51 1

-1 15 2 73 65 2 5 8 3 105 84 1 4 13 3 33 12 3 -2 6 4 44 45 1 3 11 4 80 76 1

-15 16 2 36 32 3 8 8 3 133 98 2 -16 14 3 68 65 2 1 6 4 82 87 1 6 11 4 54 54 2

-12 16 2 101 101 2 -15 9 3 18 25 4 -13 14 3 55 38 2 4 6 4 114 111 1 -17 12 4 28 30 3

-9 16 2 30 28 5 -12 9 3 101 110 1 -10 14 3 45 45 3 -13 7 4 148 153 1 -14 12 4 61 56 1

-6 16 2 16 3 6 -9 9 3 127 111 1 -7 14 3 23 33 4 -10 7 4 87 93 1 -11 12 4 126 125 1

-3 16 2 26 19 3 -6 9 3 85 78 1 -4 14 3 53 54 1 -7 7 4 78 75 1 -8 12 4 100 106 1

-11 17 2 37 46 3 -3 9 3 102 119 1 -1 14 3 22 14 3 -4 7 4 54 48 1 -5 12 4 53 41 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 3

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-2 12 4 23 29 1 -2 5 5 55 56 1 -17 11 5 16 32 5 -5 17 5 87 73 2 0 9 6 77 61 1

1 12 4 51 49 2 1 5 5 274 274 1 -14 11 5 34 24 2 -10 18 5 48 46 5 3 9 6 16 28 3

4 12 4 72 75 1 4 5 5 39 41 1 -11 11 5 143 126 1 0 0 6 8 10 8 6 9 6 35 28 2

-16 13 4 33 21 2 -10 6 5 14 9 2 -8 11 5 42 41 1 2 2 6 93 81 1 9 9 6 15 6 7

-13 13 4 22 24 3 -7 6 5 98 94 1 -5 11 5 31 36 1 -3 3 6 45 53 1 -17 10 6 15 9 7

-10 13 4 85 81 1 -4 6 5 235 235 1 -2 11 5 88 72 1 0 3 6 245 248 1 -14 10 6 16 18 5

-7 13 4 148 153 1 -1 6 5 273 274 1 1 11 5 37 36 2 3 3 6 24 8 1 -11 10 6 43 43 1

-4 13 4 37 30 1 2 6 5 73 81 1 4 11 5 35 30 3 -5 4 6 115 116 1 -8 10 6 24 23 1

-1 13 4 54 49 1 5 6 5 30 36 1 -16 12 5 80 73 1 -2 4 6 93 81 1 -5 10 6 10 6 3

2 13 4 71 76 2 -12 7 5 61 57 1 -13 12 5 41 34 2 1 4 6 73 56 1 -2 10 6 49 42 1

-15 14 4 53 58 2 -9 7 5 145 142 1 -10 12 5 54 52 2 4 4 6 19 19 2 1 10 6 69 68 1

-12 14 4 63 56 1 -6 7 5 98 94 1 -7 12 5 60 57 1 -7 5 6 26 23 1 4 10 6 46 45 2

-9 14 4 45 60 2 -3 7 5 54 61 1 -4 12 5 0 12 1 -4 5 6 114 116 1 7 10 6 35 39 3

-6 14 4 33 30 3 0 7 5 132 123 1 -1 12 5 37 36 2 -1 5 6 71 56 1 -16 11 6 67 69 2

-3 14 4 83 76 1 3 7 5 46 49 1 2 12 5 26 23 3 2 5 6 29 30 1 -13 11 6 27 28 2

0 14 4 18 35 4 6 7 5 16 19 4 5 12 5 86 73 2 5 5 6 12 6 3 -10 11 6 43 43 1

-14 15 4 52 58 2 -14 8 5 25 20 2 -15 13 5 12 10 8 -9 6 6 62 57 1 -7 11 6 41 49 1

-11 15 4 53 52 3 -11 8 5 41 41 1 -12 13 5 44 34 2 -6 6 6 301 305 1 -4 11 6 88 83 1

-8 15 4 66 51 3 -8 8 5 151 139 1 -9 13 5 20 15 2 -3 6 6 18 8 1 -1 11 6 69 68 1

-5 15 4 76 77 2 -5 8 5 88 88 1 -6 13 5 30 19 1 0 6 6 146 122 1 2 11 6 24 16 3

-2 15 4 73 76 1 -2 8 5 72 81 1 -3 13 5 77 68 1 3 6 6 103 103 2 5 11 6 45 45 2

1 15 4 33 37 3 1 8 5 8 14 4 0 13 5 46 51 2 6 6 6 60 39 1 -15 12 6 43 23 3

-13 16 4 26 21 3 4 8 5 0 12 1 3 13 5 18 16 5 -11 7 6 38 49 1 -12 12 6 29 24 2

-10 16 4 11 21 11 7 8 5 18 25 5 -14 14 5 37 26 2 -8 7 6 32 28 1 -9 12 6 98 87 1

-7 16 4 54 62 4 -16 9 5 2 7 1 -11 14 5 34 24 2 -5 7 6 30 23 1 -6 12 6 60 39 1

-4 16 4 75 75 2 -13 9 5 18 15 4 -8 14 5 25 20 2 -2 7 6 29 31 1 -3 12 6 18 28 2

-1 16 4 35 37 3 -10 9 5 29 27 1 -5 14 5 8 8 7 1 7 6 44 46 1 0 12 6 55 40 1

-12 17 4 22 30 4 -7 9 5 146 142 1 -2 14 5 28 23 2 4 7 6 88 83 1 3 12 6 23 29 4

-9 17 4 39 44 7 -4 9 5 43 41 1 1 14 5 69 67 2 7 7 6 24 30 3 -17 13 6 22 24 4

-6 17 4 51 54 3 -1 9 5 12 14 2 -16 15 5 24 12 4 -13 8 6 83 85 1 -14 13 6 36 33 2

-8 18 4 32 32 11 2 9 5 88 72 1 -13 15 5 9 10 8 -10 8 6 21 23 1 -11 13 6 32 28 2

-2 2 5 30 12 1 5 9 5 0 8 1 -10 15 5 41 36 2 -7 8 6 30 28 1 -8 13 6 85 85 1

1 2 5 106 75 1 8 9 5 21 10 4 -7 15 5 21 25 19 -4 8 6 16 19 3 -5 13 6 65 70 1

-4 3 5 116 106 1 -18 10 5 49 46 2 -4 15 5 25 30 3 -1 8 6 43 46 1 -2 13 6 21 16 3

-1 3 5 105 75 1 -15 10 5 46 36 2 -1 15 5 65 67 2 2 8 6 45 42 1 1 13 6 33 39 3

2 3 5 56 56 1 -12 10 5 51 52 1 -15 16 5 27 12 3 5 8 6 66 70 1 4 13 6 19 7 5

-6 4 5 231 235 2 -9 10 5 27 27 1 -12 16 5 79 73 2 8 8 6 20 13 4 -16 14 6 50 55 2

-3 4 5 117 106 1 -6 10 5 13 9 1 -9 16 5 20 7 9 -15 9 6 21 8 3 -13 14 6 38 33 2

0 4 5 153 145 1 -3 10 5 46 49 1 -6 16 5 20 19 5 -12 9 6 96 88 1 -10 14 6 20 18 3

3 4 5 56 61 1 0 10 5 94 97 1 -3 16 5 16 16 7 -9 9 6 17 5 3 -7 14 6 27 30 3

-8 5 5 89 88 1 3 10 5 76 68 2 -11 17 5 26 32 3 -6 9 6 60 57 1 -4 14 6 49 45 2

-5 5 5 73 75 1 6 10 5 21 19 3 -8 17 5 17 10 17 -3 9 6 105 103 1 -1 14 6 36 39 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 4

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

2 14 6 20 22 4 -1 7 7 38 33 1 -2 12 7 46 46 1 -2 5 8 25 31 1 -17 11 8 25 13 4

-15 15 6 60 50 2 2 7 7 22 22 1 1 12 7 56 49 2 1 5 8 167 161 2 -14 11 8 22 16 3

-12 15 6 41 23 2 5 7 7 27 28 1 4 12 7 100 115 2 4 5 8 31 32 1 -11 11 8 214 202 2

-9 15 6 25 8 4 -15 8 7 88 95 1 -16 13 7 32 28 3 -10 6 8 11 12 3 -8 11 8 121 119 1

-6 15 6 33 28 3 -12 8 7 180 185 1 -13 13 7 31 13 2 -7 6 8 41 53 1 -5 11 8 22 25 1

-3 15 6 26 29 3 -9 8 7 51 63 1 -10 13 7 24 17 2 -4 6 8 68 81 1 -2 11 8 26 25 1

0 15 6 46 29 2 -6 8 7 65 68 1 -7 13 7 104 98 1 -1 6 8 165 161 1 1 11 8 88 84 1

-14 16 6 50 55 2 -3 8 7 108 113 1 -4 13 7 56 60 2 2 6 8 40 30 1 4 11 8 56 55 2

-11 16 6 69 69 2 0 8 7 201 225 1 -1 13 7 53 49 1 5 6 8 16 25 2 -16 12 8 81 80 2

-8 16 6 23 13 9 3 8 7 86 87 1 2 13 7 34 30 2 -12 7 8 35 43 1 -13 12 8 85 73 2

-5 16 6 49 45 3 6 8 7 34 28 2 -15 14 7 19 26 4 -9 7 8 104 99 1 -10 12 8 27 25 2

-2 16 6 31 22 3 -17 9 7 50 39 2 -12 14 7 26 11 2 -6 7 8 44 53 1 -7 12 8 40 43 1

-13 17 6 26 24 4 -14 9 7 56 64 1 -9 14 7 59 64 1 -3 7 8 178 158 1 -4 12 8 179 170 1

-10 17 6 16 9 11 -11 9 7 58 59 1 -6 14 7 36 29 3 0 7 8 217 199 1 -1 12 8 92 84 1

-7 17 6 28 39 8 -8 9 7 54 63 1 -3 14 7 63 56 1 3 7 8 38 44 1 2 12 8 49 42 2

-4 17 6 12 7 11 -5 9 7 86 84 1 0 14 7 24 25 3 6 7 8 70 52 1 5 12 8 80 66 1

-9 18 6 0 6 1 -2 9 7 22 22 1 -14 15 7 16 26 5 -14 8 8 17 7 4 -15 13 8 25 9 3

-1 1 7 55 28 1 1 9 7 127 121 1 -11 15 7 53 58 2 -11 8 8 119 119 1 -12 13 8 85 73 1

-3 2 7 126 125 1 4 9 7 55 60 1 -8 15 7 92 95 4 -8 8 8 161 156 1 -9 13 8 43 41 1

0 2 7 11 13 2 7 9 7 44 42 2 -5 15 7 27 36 3 -5 8 8 146 128 1 -6 13 8 71 52 1

-5 3 7 74 92 1 -16 10 7 41 27 2 -2 15 7 34 30 2 -2 8 8 42 30 1 -3 13 8 37 25 1

-2 3 7 126 124 1 -13 10 7 18 17 4 1 15 7 48 45 2 1 8 8 66 69 1 0 13 8 26 38 3

1 3 7 224 226 1 -10 10 7 12 10 2 -13 16 7 29 28 3 4 8 8 176 170 1 3 13 8 52 68 2

-7 4 7 148 152 1 -7 10 7 63 67 1 -10 16 7 48 27 2 7 8 8 111 113 1 -14 14 8 41 39 2

-4 4 7 431 414 2 -4 10 7 33 32 1 -7 16 7 40 42 6 -16 9 8 89 83 2 -11 14 8 26 16 2

-1 4 7 224 226 1 -1 10 7 129 121 1 -4 16 7 100 115 2 -13 9 8 42 41 2 -8 14 8 21 7 3

2 4 7 13 28 4 2 10 7 46 46 1 -1 16 7 52 45 2 -10 9 8 64 60 1 -5 14 8 32 30 2

-9 5 7 84 85 1 5 10 7 31 37 2 -12 17 7 38 28 3 -7 9 8 107 99 1 -2 14 8 49 42 1

-6 5 7 35 24 1 8 10 7 9 8 8 -9 17 7 34 39 6 -4 9 8 33 32 1 1 14 8 49 43 2

-3 5 7 72 92 1 -15 11 7 58 58 2 -6 17 7 27 36 4 -1 9 8 66 69 1 -16 15 8 74 79 2

0 5 7 135 164 1 -12 11 7 70 70 1 -8 18 7 0 8 1 2 9 8 27 25 1 -13 15 8 22 9 3

3 5 7 109 112 1 -9 11 7 62 58 1 -2 2 8 47 36 1 5 9 8 32 30 2 -10 15 8 40 34 2

-11 6 7 73 58 1 -6 11 7 78 58 1 1 2 8 117 92 1 8 9 8 29 27 3 -7 15 8 106 113 3

-8 6 7 63 68 1 -3 11 7 84 87 1 -4 3 8 244 219 1 -18 10 8 52 52 2 -4 15 8 59 55 2

-5 6 7 35 24 1 0 11 7 146 138 1 -1 3 8 117 92 1 -15 10 8 39 34 2 -1 15 8 46 43 2

-2 6 7 16 28 1 3 11 7 60 56 1 2 3 8 27 31 1 -12 10 8 23 25 2 -15 16 8 71 79 2

1 6 7 41 33 1 6 11 7 26 36 3 -6 4 8 67 81 1 -9 10 8 63 59 1 -12 16 8 81 80 4

4 6 7 31 32 1 -17 12 7 32 28 3 -3 4 8 245 219 1 -6 10 8 14 12 2 -9 16 8 89 83 2

-13 7 7 102 98 1 -14 12 7 26 11 3 0 4 8 224 179 1 -3 10 8 38 44 1 -6 16 8 13 10 13

-10 7 7 63 67 1 -11 12 7 76 70 1 3 4 8 179 158 1 0 10 8 54 45 1 -3 16 8 51 68 2

-7 7 7 151 146 1 -8 12 7 184 185 1 -8 5 8 145 128 1 3 10 8 38 25 2 -11 17 8 23 13 4

-4 7 7 146 152 1 -5 12 7 29 28 1 -5 5 8 226 212 1 6 10 8 13 9 7 -8 17 8 22 27 10

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 5

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

-5 17 8 79 66 4 -6 9 9 80 73 1 -4 14 9 46 41 2 -7 7 10 326 329 2 -8 12 10 224 231 1

-10 18 8 43 52 6 -3 9 9 97 94 1 -1 14 9 28 17 2 -4 7 10 116 125 1 -5 12 10 65 64 1

0 0 9 17 18 1 0 9 9 14 12 2 2 14 9 32 23 3 -1 7 10 48 57 1 -2 12 10 51 50 1

1 1 9 8 21 1 3 9 9 54 48 1 -15 15 9 62 47 2 2 7 10 24 16 1 1 12 10 79 83 1

-1 2 9 9 21 1 6 9 9 61 55 1 -12 15 9 37 34 2 5 7 10 66 64 1 4 12 10 119 136 2

2 2 9 19 6 1 9 9 9 18 23 5 -9 15 9 50 39 2 -15 8 10 85 92 1 -16 13 10 12 9 11

-3 3 9 159 155 1 -17 10 9 31 25 3 -6 15 9 56 55 2 -12 8 10 223 231 1 -13 13 10 87 87 1

0 3 9 169 173 1 -14 10 9 18 20 4 -3 15 9 37 42 2 -9 8 10 43 41 1 -10 13 10 13 8 5

3 3 9 21 25 1 -11 10 9 50 39 1 0 15 9 41 28 2 -6 8 10 91 96 1 -7 13 10 60 52 1

-5 4 9 83 89 1 -8 10 9 12 12 2 -14 16 9 38 38 2 -3 8 10 164 175 1 -4 13 10 61 65 1

-2 4 9 12 6 1 -5 10 9 10 2 2 -11 16 9 75 75 2 0 8 10 217 246 1 -1 13 10 78 83 2

1 4 9 95 98 1 -2 10 9 39 38 1 -8 16 9 30 20 6 3 8 10 57 55 1 2 13 10 13 8 8

4 4 9 16 13 2 1 10 9 58 53 1 -5 16 9 47 47 4 6 8 10 52 51 1 -15 14 10 31 25 3

-7 5 9 48 49 1 4 10 9 46 41 2 -2 16 9 24 23 3 -17 9 10 11 12 10 -12 14 10 50 41 2

-4 5 9 83 89 1 7 10 9 41 39 2 -13 17 9 15 17 8 -14 9 10 78 81 1 -9 14 10 81 81 1

-1 5 9 94 98 1 -16 11 9 73 75 1 -10 17 9 31 25 4 -11 9 10 38 40 1 -6 14 10 58 51 1

2 5 9 49 45 1 -13 11 9 45 48 2 -7 17 9 39 39 8 -8 9 10 42 41 1 -3 14 10 58 47 2

5 5 9 6 2 5 -10 11 9 48 39 1 -4 17 9 0 9 1 -5 9 10 95 100 1 0 14 10 49 48 2

-9 6 9 81 73 1 -7 11 9 29 31 1 -9 18 9 13 23 13 -2 9 10 24 16 1 -14 15 10 33 25 2

-6 6 9 208 212 1 -4 11 9 58 60 1 -1 1 10 110 117 1 1 9 10 40 39 1 -11 15 10 92 100 1

-3 6 9 22 25 1 -1 11 9 56 53 1 -3 2 10 120 108 1 4 9 10 63 65 1 -8 15 10 83 92 2

0 6 9 214 210 1 2 11 9 23 23 3 0 2 10 25 28 1 7 9 10 59 63 2 -5 15 10 11 13 11

3 6 9 100 94 1 5 11 9 52 47 2 -5 3 10 23 20 1 -16 10 10 40 39 2 -2 15 10 18 8 4

6 6 9 14 24 2 -15 12 9 36 34 2 -2 3 10 119 108 1 -13 10 10 10 8 10 1 15 10 63 69 2

-11 7 9 25 31 1 -12 12 9 66 53 1 1 3 10 312 328 1 -10 10 10 37 27 1 -13 16 10 16 9 6

-8 7 9 62 66 1 -9 12 9 90 90 1 -7 4 10 117 125 1 -7 10 10 40 29 1 -10 16 10 42 38 3

-5 7 9 47 49 1 -6 12 9 21 24 1 -4 4 10 504 512 2 -4 10 10 26 27 1 -7 16 10 61 63 4

-2 7 9 48 45 1 -3 12 9 53 48 1 -1 4 10 312 327 1 -1 10 10 41 39 1 -4 16 10 115 136 2

1 7 9 51 52 1 0 12 9 60 51 1 2 4 10 25 20 1 2 10 10 50 50 1 -1 16 10 62 69 2

4 7 9 57 60 1 3 12 9 35 42 2 -9 5 10 92 100 1 5 10 10 18 13 4 -12 17 10 56 49 2

7 7 9 17 21 4 -17 13 9 12 17 12 -6 5 10 91 93 1 8 10 10 18 3 5 -9 17 10 16 12 16

-13 8 9 54 50 1 -14 13 9 42 37 2 -3 5 10 24 20 1 -15 11 10 90 100 1 -6 17 10 46 38 3

-10 8 9 13 12 2 -11 13 9 47 48 1 0 5 10 84 60 1 -12 11 10 60 63 1 -8 18 10 0 3 1

-7 8 9 65 66 1 -8 13 9 57 50 1 3 5 10 164 175 1 -9 11 10 41 40 1 1 2 11 1364 1055 7

-4 8 9 10 13 2 -5 13 9 61 61 1 -11 6 10 88 81 1 -6 11 10 90 81 1 -4 3 11 800 702 4

-1 8 9 52 51 1 -2 13 9 21 23 3 -8 6 10 91 96 1 -3 11 10 59 55 1 -1 3 11 1370 1055 7

2 8 9 37 38 1 1 13 9 24 17 3 -5 6 10 89 93 1 0 11 10 149 155 1 2 3 11 444 422 2

5 8 9 65 61 1 4 13 9 14 9 9 -2 6 10 23 20 1 3 11 10 58 47 2 -6 4 11 172 163 1

8 8 9 21 20 4 -16 14 9 43 38 2 1 6 10 48 57 1 6 11 10 46 38 2 -3 4 11 801 702 4

-15 9 9 51 39 2 -13 14 9 43 37 2 4 6 10 26 27 1 -17 12 10 55 49 2 0 4 11 2089 1916 11

-12 9 9 89 90 1 -10 14 9 21 20 3 -13 7 10 58 52 1 -14 12 10 50 41 2 3 4 11 561 509 3

-9 9 9 26 13 1 -7 14 9 18 21 4 -10 7 10 37 29 1 -11 12 10 62 63 1 -8 5 11 503 469 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 6

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

-5 5 11 262 220 1 6 10 11 31 19 2 -8 17 11 59 86 5 -9 9 12 5 1 5 -7 14 12 11 5 9

-2 5 11 440 422 2 -17 11 11 150 169 2 -5 17 11 145 130 7 -6 9 12 62 57 1 -4 14 12 63 64 2

1 5 11 356 339 2 -14 11 11 154 136 1 -10 18 11 54 60 5 -3 9 12 66 58 1 -1 14 12 35 38 2

4 5 11 254 243 1 -11 11 11 268 230 1 0 0 12 29 16 1 0 9 12 96 84 1 2 14 12 15 21 10

-10 6 11 96 78 1 -8 11 11 77 67 1 1 1 12 29 19 1 3 9 12 58 49 1 -15 15 12 42 25 2

-7 6 11 118 118 1 -5 11 11 421 377 1 -1 2 12 28 19 1 6 9 12 77 68 1 -12 15 12 49 49 2

-4 6 11 173 163 1 -2 11 11 191 196 1 2 2 12 99 91 1 9 9 12 28 29 3 -9 15 12 60 54 2

-1 6 11 358 339 2 1 11 11 207 197 1 -3 3 12 268 274 1 -17 10 12 32 32 3 -6 15 12 77 68 2

2 6 11 513 440 3 4 11 11 172 184 1 0 3 12 141 160 1 -14 10 12 34 36 2 -3 15 12 47 46 2

5 6 11 422 377 2 -16 12 11 482 471 3 3 3 12 50 58 1 -11 10 12 19 18 2 0 15 12 22 9 4

-12 7 11 385 369 2 -13 12 11 205 220 1 -5 4 12 79 81 1 -8 10 12 47 48 1 -14 16 12 40 35 2

-9 7 11 380 363 2 -10 12 11 33 33 1 -2 4 12 99 91 1 -5 10 12 15 1 2 -11 16 12 72 70 2

-6 7 11 117 118 1 -7 12 11 383 369 2 1 4 12 101 93 1 -2 10 12 75 77 1 -8 16 12 27 37 7

-3 7 11 555 509 2 -4 12 11 741 672 3 4 4 12 53 52 1 1 10 12 39 40 1 -5 16 12 48 46 3

0 7 11 712 620 4 -1 12 11 204 197 1 -7 5 12 80 84 1 4 10 12 64 64 1 -2 16 12 22 21 4

3 7 11 64 46 1 2 12 11 213 194 2 -4 5 12 77 81 1 7 10 12 38 34 2 -13 17 12 17 10 6

6 7 11 120 113 1 5 12 11 153 130 2 -1 5 12 100 93 1 -16 11 12 70 70 2 -10 17 12 35 32 3

-14 8 11 24 53 3 -15 13 11 82 71 1 2 5 12 68 69 1 -13 11 12 54 59 2 -7 17 12 34 34 8

-11 8 11 75 67 1 -12 13 11 207 220 1 5 5 12 9 1 4 -10 11 12 21 19 1 -4 17 12 23 20 5

-8 8 11 1080 1022 6 -9 13 11 280 269 2 -9 6 12 63 57 1 -7 11 12 33 30 1 -9 18 12 35 28 6

-5 8 11 502 469 2 -6 13 11 122 113 1 -6 6 12 102 94 1 -4 11 12 32 35 1 -1 1 13 165 194 1

-2 8 11 511 440 2 -3 13 11 44 36 2 -3 6 12 50 58 1 -1 11 12 40 40 1 -3 2 13 288 274 1

1 8 11 307 292 1 0 13 11 369 358 2 0 6 12 268 260 1 2 11 12 41 37 2 0 2 13 29 3 1

4 8 11 739 672 3 3 13 11 204 198 2 3 6 12 67 58 1 5 11 12 47 46 2 -5 3 13 29 30 1

7 8 11 183 169 1 -14 14 11 181 211 2 6 6 12 7 16 7 -15 12 12 49 49 2 -2 3 13 289 274 1

-16 9 11 243 251 2 -11 14 11 155 136 2 -11 7 12 33 30 1 -12 12 12 75 59 1 1 3 13 300 309 1

-13 9 11 281 269 2 -8 14 11 29 53 2 -8 7 12 49 51 1 -9 12 12 104 102 1 -7 4 13 117 123 1

-10 9 11 77 69 1 -5 14 11 186 195 3 -5 7 12 79 84 1 -6 12 12 13 16 2 -4 4 13 428 416 2

-7 9 11 384 364 2 -2 14 11 213 194 2 -2 7 12 68 69 1 -3 12 12 59 48 1 -1 4 13 300 309 1

-4 9 11 255 243 1 1 14 11 98 105 2 1 7 12 67 72 1 0 12 12 17 15 3 2 4 13 12 15 1

-1 9 11 310 292 1 -16 15 11 186 176 2 4 7 12 25 35 1 3 12 12 49 46 2 -9 5 13 84 99 1

2 9 11 189 196 1 -13 15 11 79 71 2 7 7 12 10 5 9 -17 13 12 15 10 7 -6 5 13 20 18 1

5 9 11 189 195 1 -10 15 11 188 182 1 -13 8 12 27 23 3 -14 13 12 32 29 2 -3 5 13 30 30 1

8 9 11 73 86 2 -7 15 11 181 169 8 -10 8 12 45 48 1 -11 13 12 57 59 1 0 5 13 157 136 1

-18 10 11 67 60 2 -4 15 11 169 184 3 -7 8 12 50 51 1 -8 13 12 30 23 2 3 5 13 148 159 1

-15 10 11 191 182 2 -1 15 11 99 105 1 -4 8 12 53 52 1 -5 13 12 27 13 1 -11 6 13 90 89 1

-12 10 11 30 33 2 -15 16 11 178 176 2 -1 8 12 68 72 1 -2 13 12 41 37 2 -8 6 13 129 128 1

-9 10 11 76 69 1 -12 16 11 481 471 3 2 8 12 73 77 1 1 13 12 39 38 2 -5 6 13 17 18 1

-6 10 11 97 78 1 -9 16 11 237 251 3 5 8 12 21 13 3 4 13 12 22 20 4 -2 6 13 15 15 1

-3 10 11 60 46 4 -6 16 11 33 19 3 8 8 12 38 37 2 -16 14 12 41 35 2 1 6 13 37 28 1

0 10 11 14 8 2 -3 16 11 198 198 2 -15 9 12 61 54 1 -13 14 12 27 29 3 4 6 13 58 50 1

3 10 11 42 36 2 -11 17 11 157 169 3 -12 9 12 105 102 1 -10 14 12 37 36 2 -13 7 13 33 37 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 7

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

-10 7 13 43 47 1 -11 12 13 50 58 1 3 4 14 584 510 3 0 10 14 28 29 1 -3 16 14 143 130 2

-7 7 13 359 352 2 -8 12 13 256 259 1 -8 5 14 289 278 2 3 10 14 112 119 1 -11 17 14 142 131 2

-4 7 13 119 123 1 -5 12 13 79 75 1 -5 5 14 175 175 1 6 10 14 173 168 1 -8 17 14 133 141 4

-1 7 13 37 28 1 -2 12 13 31 36 1 -2 5 14 100 114 1 -17 11 14 139 131 2 -5 17 14 146 131 5

2 7 13 40 42 1 1 12 13 87 85 1 1 5 14 357 336 2 -14 11 14 26 21 3 -10 18 14 28 27 8

5 7 13 78 75 1 4 12 13 144 154 1 4 5 14 68 71 1 -11 11 14 256 212 1 0 0 15 114 105 1

-15 8 13 68 77 2 -16 13 13 23 29 4 -10 6 14 36 39 1 -8 11 14 91 86 1 1 1 15 81 81 1

-12 8 13 258 259 1 -13 13 13 65 63 1 -7 6 14 602 560 3 -5 11 14 52 54 1 -1 2 15 81 81 1

-9 8 13 69 80 1 -10 13 13 14 7 5 -4 6 14 293 258 1 -2 11 14 231 221 1 2 2 15 203 211 1

-6 8 13 130 128 1 -7 13 13 39 37 1 -1 6 14 361 336 2 1 11 14 200 210 1 -3 3 15 243 266 1

-3 8 13 148 159 1 -4 13 13 43 48 1 2 6 14 200 151 1 4 11 14 163 162 1 0 3 15 14 13 1

0 8 13 308 320 1 -1 13 13 86 85 1 5 6 14 52 54 1 -16 12 14 420 401 3 3 3 15 174 168 1

3 8 13 39 39 1 2 13 13 46 50 2 -12 7 14 355 324 1 -13 12 14 174 185 1 -5 4 15 60 47 1

6 8 13 39 28 2 -15 14 13 16 23 4 -9 7 14 200 194 1 -10 12 14 125 140 1 -2 4 15 203 211 1

-17 9 13 8 22 8 -12 14 13 42 38 2 -6 7 14 605 560 3 -7 12 14 355 324 1 1 4 15 27 26 1

-14 9 13 114 111 1 -9 14 13 113 111 1 -3 7 14 581 510 3 -4 12 14 807 745 3 4 4 15 135 163 1

-11 9 13 57 51 1 -6 14 13 37 28 2 0 7 14 262 213 1 -1 12 14 201 210 1 -7 5 15 33 43 1

-8 9 13 69 81 1 -3 14 13 43 37 2 3 7 14 467 449 2 2 12 14 88 82 1 -4 5 15 60 47 1

-5 9 13 89 99 1 0 14 13 54 52 2 6 7 14 167 163 1 5 12 14 145 131 2 -1 5 15 30 25 1

-2 9 13 41 42 1 -14 15 13 25 23 3 -14 8 14 67 94 1 -15 13 14 80 83 2 2 5 15 58 57 1

1 9 13 41 38 1 -11 15 13 92 100 1 -11 8 14 90 86 1 -12 13 14 175 185 2 5 5 15 16 22 2

4 9 13 47 48 1 -8 15 13 71 77 2 -8 8 14 1317 1194 7 -9 13 14 115 113 1 -9 6 15 57 60 1

7 9 13 75 77 1 -5 15 13 17 7 6 -5 8 14 293 278 1 -6 13 14 166 163 1 -6 6 15 101 115 1

-16 10 13 0 8 1 -2 15 13 45 50 2 -2 8 14 195 151 1 -3 13 14 107 119 1 -3 6 15 173 168 1

-13 10 13 3 7 3 1 15 13 62 61 2 1 8 14 528 493 2 0 13 14 110 85 2 0 6 15 272 288 1

-10 10 13 41 31 1 -13 16 13 30 29 3 4 8 14 802 745 4 3 13 14 144 130 2 3 6 15 12 21 3

-7 10 13 47 47 1 -10 16 13 14 8 6 7 8 14 199 181 2 -14 14 14 56 54 2 6 6 15 40 38 1

-4 10 13 56 50 1 -7 16 13 75 77 7 -16 9 14 177 185 2 -11 14 14 23 21 3 -11 7 15 33 44 1

-1 10 13 39 38 1 -4 16 13 139 154 3 -13 9 14 116 113 1 -8 14 14 71 94 1 -8 7 15 42 39 1

2 10 13 30 36 2 -1 16 13 60 61 2 -10 9 14 121 118 1 -5 14 14 177 161 4 -5 7 15 33 43 1

5 10 13 16 7 4 -12 17 13 69 52 2 -7 9 14 201 193 1 -2 14 14 87 82 1 -2 7 15 58 57 1

8 10 13 16 10 6 -9 17 13 23 23 10 -4 9 14 69 71 1 1 14 14 69 69 2 1 7 15 58 65 1

-15 11 13 92 100 1 -6 17 13 86 84 5 -1 9 14 530 493 2 -16 15 14 76 77 2 4 7 15 46 41 1

-12 11 13 55 58 1 -8 18 13 0 11 1 2 9 14 230 220 1 -13 15 14 78 83 1 7 7 15 16 22 4

-9 11 13 57 51 1 0 1 14 558 707 3 5 9 14 180 161 1 -10 15 14 102 87 1 -13 8 15 35 35 2

-6 11 13 92 89 1 1 2 14 1197 977 6 8 9 14 152 141 2 -7 15 14 196 181 4 -10 8 15 88 103 1

-3 11 13 39 39 1 -4 3 14 445 366 2 -18 10 14 38 27 3 -4 15 14 163 162 3 -7 8 15 43 39 2

0 11 13 117 109 1 -1 3 14 1198 977 6 -15 10 14 106 87 1 -1 15 14 75 69 2 -4 8 15 136 163 1

3 11 13 41 37 2 2 3 14 101 114 1 -12 10 14 128 140 2 -15 16 14 79 78 2 -1 8 15 58 65 1

6 11 13 91 84 2 -6 4 14 293 258 1 -9 10 14 124 118 1 -12 16 14 422 401 3 2 8 15 104 111 1

-17 12 13 66 52 2 -3 4 14 443 366 2 -6 10 14 39 39 1 -9 16 14 176 185 3 5 8 15 49 43 1

-14 12 13 44 38 2 0 4 14 1053 1004 5 -3 10 14 466 449 2 -6 16 14 175 168 7 8 8 15 26 31 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 8

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

-15 9 15 44 39 2 -13 14 15 32 35 2 4 6 16 79 66 1 -14 12 16 19 22 4 0 4 17 437 465 2

-12 9 15 69 65 1 -10 14 15 46 46 2 -13 7 16 54 57 1 -11 12 16 54 63 1 3 4 17 279 275 1

-9 9 15 96 85 1 -7 14 15 13 22 5 -10 7 16 138 148 1 -8 12 16 317 314 1 -8 5 17 121 113 1

-6 9 15 60 60 1 -4 14 15 48 57 2 -7 7 16 264 252 1 -5 12 16 113 107 1 -5 5 17 121 131 1

-3 9 15 13 22 2 -1 14 15 40 33 2 -4 7 16 189 173 1 -2 12 16 52 45 1 -2 5 17 95 77 1

0 9 15 173 165 1 2 14 15 39 50 3 -1 7 16 163 179 1 1 12 16 82 72 1 1 5 17 296 285 1

3 9 15 55 45 1 -15 15 15 8 10 8 2 7 16 89 98 1 4 12 16 190 188 2 4 5 17 139 134 1

6 9 15 64 55 1 -12 15 15 82 80 2 5 7 16 112 107 1 -16 13 16 54 65 2 -10 6 17 53 46 1

9 9 15 54 48 2 -9 15 15 41 39 2 -15 8 16 62 74 2 -13 13 16 16 13 5 -7 6 17 260 250 1

-17 10 15 18 21 5 -6 15 15 62 55 3 -12 8 16 319 314 1 -10 13 16 25 29 2 -4 6 17 281 263 1

-14 10 15 45 46 2 -3 15 15 59 53 2 -9 8 16 139 150 1 -7 13 16 55 57 1 -1 6 17 295 285 1

-11 10 15 22 21 2 0 15 15 20 11 4 -6 8 16 133 131 1 -4 13 16 36 30 1 2 6 17 170 160 1

-8 10 15 90 103 1 -14 16 15 33 21 3 -3 8 16 123 110 1 -1 13 16 74 72 1 5 6 17 52 47 1

-5 10 15 14 22 2 -11 16 15 35 35 2 0 8 16 485 474 2 2 13 16 64 74 2 -12 7 17 180 169 1

-2 10 15 102 111 1 -8 16 15 26 31 6 3 8 16 43 44 1 -15 14 16 29 20 3 -9 7 17 197 194 1

1 10 15 60 71 1 -5 16 15 26 33 4 6 8 16 19 11 3 -12 14 16 16 22 5 -6 7 17 260 250 1

4 10 15 49 57 2 -2 16 15 40 50 2 -17 9 16 41 40 4 -9 14 16 149 144 1 -3 7 17 279 275 1

7 10 15 23 22 3 -13 17 15 25 13 4 -14 9 16 151 144 2 -6 14 16 16 11 3 0 7 17 227 219 1

-16 11 15 36 35 2 -10 17 15 19 21 5 -11 9 16 33 42 1 -3 14 16 20 3 3 3 7 17 187 172 1

-13 11 15 45 47 2 -7 17 15 13 22 12 -8 9 16 143 150 1 0 14 16 65 57 3 6 7 17 89 95 1

-10 11 15 18 21 2 -4 17 15 27 24 4 -5 9 16 14 12 2 -14 15 16 24 20 3 -14 8 17 20 23 4

-7 11 15 37 44 1 -9 18 15 47 48 5 -2 9 16 89 98 1 -11 15 16 102 106 1 -11 8 17 42 52 1

-4 11 15 48 41 1 -1 1 16 217 242 1 1 9 16 80 86 1 -8 15 16 67 74 2 -8 8 17 798 768 4

-1 11 15 62 71 1 -3 2 16 458 446 2 4 9 16 32 30 2 -5 15 16 26 25 3 -5 8 17 122 113 1

2 11 15 53 49 1 0 2 16 15 16 1 7 9 16 101 97 1 -2 15 16 60 74 2 -2 8 17 169 160 1

5 11 15 27 33 3 -5 3 16 32 19 1 -16 10 16 43 40 2 1 15 16 62 61 2 1 8 17 249 242 1

-15 12 15 82 81 1 -2 3 16 458 446 2 -13 10 16 21 29 3 -13 16 16 55 65 2 4 8 17 378 377 2

-12 12 15 78 65 2 1 3 16 254 242 1 -10 10 16 14 8 2 -10 16 16 46 40 2 7 8 17 92 92 2

-9 12 15 72 64 1 -7 4 16 186 173 1 -7 10 16 141 148 1 -7 16 16 98 97 3 -16 9 17 127 121 1

-6 12 15 42 38 1 -4 4 16 374 350 1 -4 10 16 78 66 1 -4 16 16 184 188 3 -13 9 17 48 43 2

-3 12 15 55 45 1 -1 4 16 253 242 1 -1 10 16 79 86 1 -1 16 16 63 61 2 -10 9 17 96 103 1

0 12 15 36 37 2 2 4 16 107 89 1 2 10 16 51 45 1 -12 17 16 61 55 2 -7 9 17 197 194 1

3 12 15 66 53 2 -9 5 16 13 12 3 5 10 16 23 24 3 -9 17 16 38 40 4 -4 9 17 138 134 1

-17 13 15 18 13 5 -6 5 16 116 131 1 -15 11 16 107 106 1 -6 17 16 123 116 7 -1 9 17 248 241 1

-14 13 15 34 35 2 -3 5 16 32 19 1 -12 11 16 52 63 1 0 1 17 294 299 1 2 9 17 97 92 1

-11 13 15 44 47 1 0 5 16 80 96 1 -9 11 16 36 42 1 -2 2 17 41 42 1 5 9 17 177 165 1

-8 13 15 37 35 2 3 5 16 124 110 1 -6 11 16 48 44 1 1 2 17 717 669 3 8 9 17 86 69 2

-5 13 15 45 43 1 -11 6 16 47 44 1 -3 11 16 42 44 1 -4 3 17 177 184 1 -15 10 17 56 51 2

-2 13 15 54 49 2 -8 6 16 129 131 1 0 11 16 107 91 1 -1 3 17 718 669 3 -12 10 17 95 90 1

1 13 15 39 34 2 -5 6 16 117 131 1 3 11 16 0 3 1 2 3 17 95 77 1 -9 10 17 97 103 1

4 13 15 35 24 3 -2 6 16 107 89 1 6 11 16 124 116 2 -6 4 17 280 263 1 -6 10 17 54 46 1

-16 14 15 29 21 3 1 6 16 165 179 1 -17 12 16 59 55 2 -3 4 17 177 184 1 -3 10 17 188 172 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 9

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

0 10 17 48 52 1 -3 16 17 74 78 2 -12 9 18 80 75 1 -7 14 18 38 30 1 -7 7 19 226 210 2

3 10 17 62 61 1 -11 17 17 135 119 2 -9 9 18 113 102 1 -4 14 18 36 37 2 -4 7 19 229 225 1

6 10 17 82 80 1 -8 17 17 75 69 4 -6 9 18 114 110 1 -1 14 18 44 50 2 -1 7 19 267 261 1

-17 11 17 131 119 2 -5 17 17 61 55 2 -3 9 18 118 110 1 2 14 18 39 35 3 2 7 19 208 214 1

-14 11 17 108 104 1 0 0 18 155 139 2 0 9 18 127 123 1 -15 15 18 31 17 2 5 7 19 159 154 1

-11 11 17 149 145 3 1 1 18 218 195 1 3 9 18 79 69 1 -12 15 18 58 49 2 -15 8 19 77 86 2

-8 11 17 44 52 1 -1 2 18 219 195 1 6 9 18 35 32 2 -9 15 18 39 34 2 -12 8 19 388 385 2

-5 11 17 53 47 1 2 2 18 210 226 1 -17 10 18 54 57 2 -6 15 18 30 32 4 -9 8 19 199 181 1

-2 11 17 95 92 1 -3 3 18 148 140 1 -14 10 18 35 42 2 -3 15 18 69 50 2 -6 8 19 228 210 1

1 11 17 86 93 1 0 3 18 158 141 1 -11 10 18 108 110 1 0 15 18 18 13 7 -3 8 19 64 60 1

4 11 17 162 154 1 3 3 18 207 217 1 -8 10 18 108 116 1 -14 16 18 33 29 3 0 8 19 755 732 3

-16 12 17 272 253 2 -5 4 18 38 44 1 -5 10 18 89 90 1 -11 16 18 17 22 5 3 8 19 51 50 1

-13 12 17 57 43 1 -2 4 18 210 226 1 -2 10 18 97 101 1 -8 16 18 50 51 2 6 8 19 59 71 1

-10 12 17 94 90 1 1 4 18 22 17 1 1 10 18 84 89 1 -5 16 18 14 17 13 -17 9 19 42 37 2

-7 12 17 183 169 1 4 4 18 223 229 1 4 10 18 36 37 2 -2 16 18 39 35 2 -14 9 19 236 220 2

-4 12 17 378 377 1 -7 5 18 56 52 1 7 10 18 58 59 2 -13 17 18 35 33 3 -11 9 19 136 141 1

-1 12 17 81 93 1 -4 5 18 37 44 1 -16 11 18 20 22 4 -10 17 18 53 58 2 -8 9 19 201 181 1

2 12 17 79 68 1 -1 5 18 22 17 1 -13 11 18 49 37 2 -7 17 18 53 59 3 -5 9 19 112 110 1

5 12 17 59 55 2 2 5 18 48 40 1 -10 11 18 109 110 1 -4 17 18 29 28 4 -2 9 19 207 214 1

-15 13 17 62 75 2 5 5 18 89 91 1 -7 11 18 14 15 2 -1 1 19 396 392 2 1 9 19 129 127 1

-12 13 17 59 43 1 -9 6 18 113 110 1 -4 11 18 38 32 1 -3 2 19 685 651 3 4 9 19 57 56 1

-9 13 17 48 43 1 -6 6 18 254 248 1 -1 11 18 86 89 1 0 2 19 9 20 2 7 9 19 115 117 2

-6 13 17 88 95 1 -3 6 18 206 217 1 2 11 18 51 51 1 -5 3 19 38 43 1 -16 10 19 112 110 2

-3 13 17 61 61 2 0 6 18 246 261 1 5 11 18 14 17 8 -2 3 19 691 651 3 -13 10 19 83 93 1

0 13 17 79 69 1 3 6 18 117 110 1 -15 12 18 62 49 2 1 3 19 262 225 1 -10 10 19 18 11 2

3 13 17 77 77 2 6 6 18 61 57 1 -12 12 18 115 116 2 -7 4 19 228 225 1 -7 10 19 240 244 1

-14 14 17 59 53 1 -11 7 18 16 15 2 -9 12 18 78 75 1 -4 4 19 481 495 2 -4 10 19 53 42 1

-11 14 17 110 104 2 -8 7 18 19 20 2 -6 12 18 62 57 1 -1 4 19 265 225 1 -1 10 19 128 127 1

-8 14 17 17 23 3 -5 7 18 57 52 1 -3 12 18 77 69 1 2 4 19 240 225 1 2 10 19 101 98 2

-5 14 17 181 165 1 -2 7 18 49 40 1 0 12 18 103 93 1 -9 5 19 110 110 1 5 10 19 54 62 2

-2 14 17 80 68 1 1 7 18 21 21 1 3 12 18 68 50 3 -6 5 19 353 332 2 -15 11 19 121 116 1

1 14 17 26 20 3 4 7 18 35 32 1 -17 13 18 33 33 3 -3 5 19 39 43 1 -12 11 19 58 57 1

-16 15 17 66 73 3 7 7 18 32 30 2 -14 13 18 55 53 2 0 5 19 151 168 1 -9 11 19 136 141 1

-13 15 17 61 75 2 -13 8 18 55 49 1 -11 13 18 49 37 1 3 5 19 61 60 1 -6 11 19 51 52 1

-10 15 17 55 51 2 -10 8 18 106 116 1 -8 13 18 55 49 1 -11 6 19 48 52 1 -3 11 19 51 50 1

-7 15 17 93 92 4 -7 8 18 18 20 3 -5 13 18 63 59 1 -8 6 19 227 210 1 0 11 19 91 76 1

-4 15 17 162 154 2 -4 8 18 221 229 1 -2 13 18 54 51 2 -5 6 19 356 332 2 3 11 19 41 39 2

-1 15 17 25 20 3 -1 8 18 19 21 1 1 13 18 49 50 2 -2 6 19 242 225 1 6 11 19 173 169 2

-15 16 17 62 73 2 2 8 18 99 101 1 4 13 18 22 28 5 1 6 19 269 261 1 -17 12 19 34 28 3

-12 16 17 270 253 3 5 8 18 60 59 1 -16 14 18 36 29 2 4 6 19 50 42 1 -14 12 19 16 19 5

-9 16 17 130 121 2 8 8 18 50 51 2 -13 14 18 51 53 2 -13 7 19 121 125 1 -11 12 19 54 57 1

-6 16 17 83 80 2 -15 9 18 41 34 2 -10 14 18 35 42 2 -10 7 19 242 244 1 -8 12 19 389 385 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 10

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

-5 12 19 159 154 1 -5 5 20 19 30 1 -17 11 20 104 88 2 -5 17 20 46 51 3 -3 9 21 150 142 1

-2 12 19 101 98 1 -2 5 20 47 40 1 -14 11 20 33 32 2 0 0 21 204 226 1 0 9 21 26 20 1

1 12 19 61 57 1 1 5 20 207 215 1 -11 11 20 94 76 1 1 1 21 97 118 1 3 9 21 86 85 1

4 12 19 252 251 2 4 5 20 31 24 1 -8 11 20 40 43 1 -1 2 21 98 118 1 6 9 21 91 85 1

-16 13 19 63 68 2 -10 6 20 15 14 2 -5 11 20 45 41 1 2 2 21 155 179 1 -17 10 21 40 41 3

-13 13 19 94 99 1 -7 6 20 152 156 1 -2 11 20 35 32 1 -3 3 21 46 63 1 -14 10 21 66 67 1

-10 13 19 85 93 1 -4 6 20 134 128 1 1 11 20 34 38 2 0 3 21 266 293 1 -11 10 21 43 46 1

-7 13 19 124 125 1 -1 6 20 209 215 1 4 11 20 90 79 1 3 3 21 111 104 1 -8 10 21 156 153 1

-4 13 19 58 56 2 2 6 20 147 145 1 -16 12 20 170 176 1 -5 4 21 31 41 1 -5 10 21 56 53 1

-1 13 19 63 57 2 5 6 20 42 41 1 -13 12 20 30 29 2 -2 4 21 155 179 1 -2 10 21 118 113 1

2 13 19 96 101 2 -12 7 20 99 102 1 -10 12 20 65 58 1 1 4 21 41 33 1 1 10 21 55 56 1

-15 14 19 57 52 2 -9 7 20 131 146 1 -7 12 20 101 102 1 4 4 21 215 228 1 4 10 21 69 77 1

-12 14 19 29 19 2 -6 7 20 152 156 1 -4 12 20 266 263 1 -7 5 21 38 37 1 7 10 21 15 8 6

-9 14 19 233 220 2 -3 7 20 115 113 1 -1 12 20 37 38 2 -4 5 21 31 41 1 -16 11 21 83 81 1

-6 14 19 60 71 1 0 7 20 155 149 1 2 12 20 28 21 4 -1 5 21 41 33 1 -13 11 21 44 39 2

-3 14 19 39 39 2 3 7 20 175 170 1 5 12 20 50 51 2 2 5 21 109 117 1 -10 11 21 44 46 1

0 14 19 96 91 1 6 7 20 84 75 1 -15 13 20 73 75 2 5 5 21 54 53 1 -7 11 21 50 41 1

-14 15 19 56 52 2 -14 8 20 26 20 2 -12 13 20 35 29 2 -9 6 21 134 133 1 -4 11 21 96 86 1

-11 15 19 122 116 1 -11 8 20 39 43 1 -9 13 20 36 33 2 -6 6 21 280 287 1 -1 11 21 56 56 1

-8 15 19 77 86 3 -8 8 20 512 498 2 -6 13 20 82 75 1 -3 6 21 112 104 1 2 11 21 16 14 4

-5 15 19 53 62 2 -5 8 20 118 114 1 -3 13 20 62 68 1 0 6 21 205 212 1 5 11 21 42 38 2

-2 15 19 90 101 1 -2 8 20 145 145 1 0 13 20 32 25 2 3 6 21 150 142 1 -15 12 21 52 59 2

1 15 19 48 58 3 1 8 20 131 133 1 3 13 20 40 45 3 6 6 21 89 92 1 -12 12 21 142 147 1

-13 16 19 55 68 2 4 8 20 266 263 1 -14 14 20 57 33 2 -11 7 21 49 42 1 -9 12 21 127 130 1

-10 16 19 112 110 1 7 8 20 43 45 2 -11 14 20 34 32 2 -8 7 21 61 55 1 -6 12 21 90 92 1

-7 16 19 114 117 3 -16 9 20 67 65 2 -8 14 20 21 19 4 -5 7 21 39 37 1 -3 12 21 84 85 1

-4 16 19 257 251 3 -13 9 20 35 33 2 -5 14 20 154 145 1 -2 7 21 109 117 1 0 12 21 158 154 2

-1 16 19 46 58 2 -10 9 20 100 104 1 -2 14 20 22 21 3 1 7 21 49 48 1 3 12 21 28 21 3

-12 17 19 33 28 3 -7 9 20 132 146 1 1 14 20 29 30 3 4 7 21 97 86 1 -17 13 21 19 8 5

-9 17 19 42 37 2 -4 9 20 32 23 1 -16 15 20 44 51 2 7 7 21 47 57 2 -14 13 21 47 43 2

-6 17 19 171 169 5 -1 9 20 132 133 1 -13 15 20 69 75 2 -13 8 21 58 57 1 -11 13 21 46 39 1

0 1 20 273 239 1 2 9 20 33 32 1 -10 15 20 36 41 2 -10 8 21 154 153 1 -8 13 21 58 57 1

-2 2 20 6 6 4 5 9 20 153 145 1 -7 15 20 44 45 1 -7 8 21 59 55 2 -5 13 21 55 47 1

1 2 20 431 436 2 8 9 20 49 46 2 -4 15 20 86 79 2 -4 8 21 216 228 1 -2 13 21 15 14 4

-4 3 20 199 192 1 -15 10 20 39 41 2 -1 15 20 28 30 3 -1 8 21 44 48 1 1 13 21 24 24 3

-1 3 20 432 436 2 -12 10 20 65 58 1 -15 16 20 42 51 2 2 8 21 118 113 1 4 13 21 42 40 2

2 3 20 45 40 1 -9 10 20 100 104 1 -12 16 20 170 176 2 5 8 21 52 47 1 -16 14 21 60 55 3

-6 4 20 132 128 1 -6 10 20 14 14 2 -9 16 20 69 65 2 8 8 21 50 58 2 -13 14 21 43 43 2

-3 4 20 198 192 1 -3 10 20 175 170 1 -6 16 20 63 65 2 -15 9 21 32 35 2 -10 14 21 65 67 1

0 4 20 262 259 1 0 10 20 20 10 1 -3 16 20 42 45 2 -12 9 21 127 130 1 -7 14 21 52 56 1

3 4 20 114 113 1 3 10 20 62 68 1 -11 17 20 104 88 2 -9 9 21 58 59 1 -4 14 21 67 77 1

-8 5 20 117 114 1 6 10 20 64 65 1 -8 17 20 40 46 6 -6 9 21 134 133 1 -1 14 21 21 24 5

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 11

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

2 14 21 66 60 2 2 7 22 274 248 1 4 12 22 271 245 2 -1 6 23 133 136 1 4 11 23 87 91 1

-15 15 21 56 44 2 5 7 22 71 73 1 -16 13 22 102 102 2 2 6 23 110 111 1 -16 12 23 135 143 1

-12 15 21 58 59 2 -15 8 22 39 39 2 -10 13 22 122 119 1 5 6 23 30 29 1 -13 12 23 32 29 2

-9 15 21 35 35 3 -12 8 22 485 430 3 -7 13 22 193 183 1 -12 7 23 84 97 1 -10 12 23 38 27 1

-6 15 21 91 85 2 -9 8 22 221 209 1 -4 13 22 36 40 1 -9 7 23 115 116 1 -7 12 23 84 97 1

-3 15 21 16 21 6 -6 8 22 267 234 2 -1 13 22 69 65 1 -6 7 23 63 57 1 -4 12 23 225 232 1

0 15 21 70 67 2 -3 8 22 117 96 1 2 13 22 162 157 2 -3 7 23 30 32 1 -1 12 23 54 54 1

-14 16 21 61 55 2 0 8 22 830 724 4 -15 14 22 150 163 1 0 7 23 144 147 1 2 12 23 24 22 3

-11 16 21 82 81 1 3 8 22 134 110 1 -12 14 22 34 40 2 3 7 23 89 89 1 5 12 23 53 45 2

-8 16 21 51 58 2 6 8 22 146 151 1 -9 14 22 273 250 2 6 7 23 62 53 1 -15 13 23 50 51 2

-5 16 21 38 38 3 -17 9 22 25 16 3 -6 14 22 145 151 2 -14 8 23 64 60 1 -12 13 23 31 29 2

-2 16 21 64 60 2 -14 9 22 273 250 2 -3 14 22 124 134 2 -11 8 23 71 86 1 -9 13 23 25 14 2

-13 17 21 11 8 11 -11 9 22 298 304 1 0 14 22 149 129 2 -8 8 23 382 398 2 -6 13 23 58 53 1

-10 17 21 43 41 3 -8 9 22 221 209 1 -14 15 22 153 163 1 -5 8 23 207 216 1 -3 13 23 59 67 1

-7 17 21 17 8 9 -5 9 22 191 180 1 -8 15 22 45 39 7 -2 8 23 109 111 1 0 13 23 42 46 2

-4 17 21 43 40 3 -2 9 22 274 248 1 -5 15 22 139 142 2 1 8 23 80 86 1 3 13 23 26 23 4

-1 1 22 582 389 3 1 9 22 234 214 1 -2 15 22 155 157 3 4 8 23 228 232 1 -14 14 23 32 17 3

-3 2 22 856 765 4 4 9 22 33 40 2 -13 16 22 100 102 2 7 8 23 39 44 2 -11 14 23 21 27 3

0 2 22 65 49 1 7 9 22 116 114 1 -10 16 22 163 144 1 -16 9 23 53 45 3 -8 14 23 68 60 1

-5 3 22 286 280 1 -16 10 22 162 144 2 -7 16 22 117 114 2 -13 9 23 14 14 5 -5 14 23 92 89 1

-2 3 22 863 765 4 -13 10 22 127 119 2 -4 16 22 272 245 3 -10 9 23 102 98 1 -2 14 23 24 22 4

1 3 22 312 299 1 -10 10 22 33 12 1 -12 17 22 34 29 3 -7 9 23 118 116 1 1 14 23 11 2 11

-7 4 22 324 299 1 -7 10 22 487 444 2 -9 17 22 30 16 3 -4 9 23 78 85 1 -13 15 23 48 51 2

-4 4 22 621 637 3 -4 10 22 40 30 1 -6 17 22 209 181 5 -1 9 23 79 86 1 -10 15 23 23 20 3

-1 4 22 314 299 1 -1 10 22 234 214 1 0 1 23 294 297 1 2 9 23 60 52 1 -7 15 23 37 44 2

2 4 22 140 159 1 2 10 22 251 250 1 -2 2 23 89 110 1 5 9 23 95 89 1 -4 15 23 86 91 2

-9 5 22 191 180 1 5 10 22 142 142 1 1 2 23 239 249 1 8 9 23 50 58 2 -1 15 23 9 2 9

-6 5 22 437 387 2 -15 11 22 37 34 7 -4 3 23 185 218 1 -15 10 23 17 20 4 -12 16 23 136 143 2

-3 5 22 287 280 1 -12 11 22 31 35 2 -1 3 23 237 249 1 -12 10 23 38 27 2 -9 16 23 51 45 2

0 5 22 178 179 1 -9 11 22 297 304 1 2 3 23 61 51 1 -9 10 23 102 98 1 -6 16 23 43 39 2

3 5 22 118 96 1 -6 11 22 237 230 1 -6 4 23 39 48 1 -6 10 23 29 28 1 -3 16 23 17 23 6

-11 6 22 237 230 1 -3 11 22 135 110 1 -3 4 23 185 218 1 -3 10 23 88 89 1 -11 17 23 52 48 2

-8 6 22 264 234 2 0 11 22 53 39 1 0 4 23 229 228 1 0 10 23 48 42 1 -8 17 23 53 58 4

-5 6 22 442 387 3 3 11 22 131 134 2 3 4 23 28 32 1 3 10 23 59 67 1 -5 17 23 49 45 2

-2 6 22 142 159 1 6 11 22 204 181 2 -8 5 23 208 216 1 6 10 23 49 39 2 0 0 24 176 185 1

1 6 22 600 530 3 -17 12 22 31 28 3 -5 5 23 12 12 2 -17 11 23 55 48 2 1 1 24 82 96 1

4 6 22 41 30 1 -14 12 22 35 40 2 -2 5 23 62 51 1 -14 11 23 25 27 3 -1 2 24 82 96 1

-13 7 22 189 183 1 -11 12 22 30 36 2 1 5 23 134 136 1 -11 11 23 96 95 1 2 2 24 107 112 1

-10 7 22 489 444 2 -8 12 22 483 430 3 4 5 23 79 85 1 -8 11 23 74 86 1 -3 3 24 93 112 1

-7 7 22 62 47 1 -5 12 22 71 73 1 -10 6 23 29 27 1 -5 11 23 34 29 1 0 3 24 334 345 1

-4 7 22 325 299 1 -2 12 22 253 250 1 -7 6 23 64 57 1 -2 11 23 60 52 1 3 3 24 14 16 2

-1 7 22 595 530 3 1 12 22 70 65 1 -4 6 23 38 48 1 1 11 23 54 54 1 -5 4 24 46 35 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 12

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-2 4 24 109 112 1 -2 10 24 61 57 1 -8 16 24 56 53 2 6 8 25 56 41 1 -12 14 25 62 55 1

1 4 24 9 10 2 1 10 24 46 45 1 -5 16 24 47 49 2 -17 9 25 203 231 2 -9 14 25 53 56 1

4 4 24 144 152 1 4 10 24 58 58 1 -2 16 24 69 54 3 -14 9 25 50 57 2 -6 14 25 55 41 1

-7 5 24 76 83 1 7 10 24 24 19 4 -13 17 24 22 17 5 -11 9 25 57 72 1 -3 14 25 33 23 2

-4 5 24 45 35 1 -16 11 24 83 83 1 -10 17 24 48 51 2 -8 9 25 640 580 3 0 14 25 52 57 2

-1 5 24 10 10 2 -13 11 24 27 30 3 -7 17 24 31 19 4 -5 9 25 671 619 3 -14 15 25 24 28 3

2 5 24 164 165 1 -10 11 24 49 50 1 -4 17 24 34 28 3 -2 9 25 401 386 1 -11 15 25 269 265 2

5 5 24 55 48 1 -7 11 24 82 77 1 -1 1 25 1727 1473 9 1 9 25 200 179 1 -8 15 25 290 275 2

-9 6 24 65 63 1 -4 11 24 76 73 1 -3 2 25 451 362 2 4 9 25 155 149 1 -5 15 25 151 166 3

-6 6 24 229 221 1 -1 11 24 46 44 1 0 2 25 355 351 1 7 9 25 161 163 2 -2 15 25 103 90 2

-3 6 24 16 16 1 2 11 24 42 46 2 -5 3 25 351 298 2 -16 10 25 179 187 2 -13 16 25 138 128 2

0 6 24 67 65 1 5 11 24 48 49 2 -2 3 25 452 362 2 -13 10 25 264 242 2 -10 16 25 180 187 2

3 6 24 141 130 1 -15 12 24 48 60 2 1 3 25 527 494 2 -10 10 25 247 226 1 -7 16 25 158 163 4

6 6 24 93 97 1 -12 12 24 91 95 1 -7 4 25 361 349 2 -7 10 25 344 333 1 -4 16 25 492 469 5

-11 7 24 80 77 1 -9 12 24 135 121 1 -4 4 25 1485 1448 8 -4 10 25 225 214 1 -12 17 25 220 204 2

-8 7 24 63 58 1 -6 12 24 93 97 1 -1 4 25 525 494 2 -1 10 25 200 179 1 -9 17 25 199 231 4

-5 7 24 75 83 1 -3 12 24 45 39 1 2 4 25 267 273 1 2 10 25 47 56 2 -6 17 25 77 68 3

-2 7 24 164 166 1 0 12 24 125 111 1 -9 5 25 671 619 3 5 10 25 151 166 1 0 1 26 309 306 1

1 7 24 89 88 1 3 12 24 65 63 2 -6 5 25 354 306 2 -15 11 25 268 265 2 -2 2 26 142 165 1

4 7 24 76 74 1 -17 13 24 20 17 4 -3 5 25 352 298 1 -12 11 25 388 370 2 1 2 26 19 17 1

7 7 24 40 39 2 -14 13 24 57 53 2 0 5 25 576 509 3 -9 11 25 57 72 2 -4 3 26 184 209 1

-13 8 24 34 28 2 -11 13 24 34 30 2 3 5 25 825 739 4 -6 11 25 58 57 1 -1 3 26 18 17 1

-10 8 24 144 144 1 -8 13 24 32 28 2 -11 6 25 63 57 1 -3 11 25 466 429 2 2 3 26 17 15 1

-7 8 24 64 58 1 -5 13 24 69 63 1 -8 6 25 16 22 3 0 11 25 315 295 1 -6 4 26 43 41 1

-4 8 24 145 152 1 -2 13 24 44 46 1 -5 6 25 349 306 2 3 11 25 32 23 2 -3 4 26 184 209 1

-1 8 24 89 88 1 1 13 24 18 10 4 -2 6 25 267 274 1 6 11 25 78 68 2 0 4 26 240 246 1

2 8 24 61 57 1 4 13 24 33 28 3 1 6 25 351 308 2 -17 12 25 222 204 2 3 4 26 45 49 1

5 8 24 69 63 1 -16 14 24 38 36 2 4 6 25 226 215 1 -14 12 25 61 55 1 -8 5 26 232 241 1

8 8 24 53 53 2 -13 14 24 57 53 1 -13 7 25 215 211 1 -11 12 25 390 370 2 -5 5 26 93 97 1

-15 9 24 43 40 2 -10 14 24 75 73 1 -10 7 25 343 333 1 -8 12 25 932 836 5 -2 5 26 16 15 1

-12 9 24 132 121 1 -7 14 24 35 39 2 -7 7 25 290 241 2 -5 12 25 487 472 2 1 5 26 61 60 1

-9 9 24 13 2 2 -4 14 24 58 58 1 -4 7 25 360 349 2 -2 12 25 51 56 1 4 5 26 129 142 1

-6 9 24 66 63 1 -1 14 24 14 10 8 -1 7 25 350 308 2 1 12 25 185 175 1 -10 6 26 22 26 1

-3 9 24 143 130 1 2 14 24 69 54 2 2 7 25 402 386 1 4 12 25 482 469 3 -7 6 26 13 10 2

0 9 24 45 46 1 -15 15 24 72 51 2 5 7 25 489 472 2 -16 13 25 137 128 1 -4 6 26 43 41 1

3 9 24 42 39 1 -12 15 24 52 60 2 -15 8 25 283 275 2 -13 13 25 120 135 1 -1 6 26 60 60 1

6 9 24 113 99 1 -9 15 24 38 40 2 -12 8 25 925 836 5 -10 13 25 265 242 2 2 6 26 43 42 1

-17 10 24 47 51 2 -6 15 24 110 99 1 -9 8 25 642 580 3 -7 13 25 217 211 1 5 6 26 48 47 1

-14 10 24 72 73 1 -3 15 24 59 63 2 -6 8 25 8 22 7 -4 13 25 155 149 1 -12 7 26 79 78 1

-11 10 24 48 50 1 0 15 24 46 45 2 -3 8 25 820 739 4 -1 13 25 183 175 1 -9 7 26 21 19 1

-8 10 24 147 144 1 -14 16 24 40 36 2 0 8 25 1687 1541 7 2 13 25 104 90 2 -6 7 26 10 10 3

-5 10 24 55 48 1 -11 16 24 86 83 2 3 8 25 466 429 2 -15 14 25 8 28 8 -3 7 26 48 49 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 13

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

0 7 26 122 127 1 2 12 26 30 22 2 5 5 27 12 11 2 -7 11 27 77 81 1 -2 3 28 119 115 1

3 7 26 34 31 1 5 12 26 44 40 2 -9 6 27 95 90 1 -4 11 27 29 27 1 1 3 28 200 204 1

6 7 26 57 57 1 -15 13 26 19 17 4 -6 6 27 116 118 1 -1 11 27 28 25 1 -7 4 28 69 69 1

-14 8 26 85 77 1 -12 13 26 31 29 2 -3 6 27 24 9 1 2 11 27 28 32 3 -4 4 28 51 56 1

-11 8 26 113 121 1 -9 13 26 34 38 1 0 6 27 88 100 1 5 11 27 45 48 2 -1 4 28 200 204 1

-8 8 26 259 276 1 -6 13 26 56 57 1 3 6 27 132 127 1 -15 12 27 34 32 2 2 4 28 150 156 1

-5 8 26 233 241 1 -3 13 26 40 40 2 6 6 27 32 31 1 -12 12 27 13 12 6 -9 5 28 43 43 1

-2 8 26 45 42 1 0 13 26 68 72 1 -11 7 27 78 81 1 -9 12 27 105 93 1 -6 5 28 15 21 2

1 8 26 78 80 1 3 13 26 18 10 6 -8 7 27 57 62 1 -6 12 27 32 31 1 -3 5 28 375 363 1

4 8 26 223 225 1 -14 14 26 10 14 9 -5 7 27 108 111 1 -3 12 27 88 85 1 0 5 28 130 123 1

7 8 26 56 64 2 -11 14 26 22 26 3 -2 7 27 140 133 1 0 12 27 68 59 1 3 5 28 85 76 1

-16 9 26 48 46 3 -8 14 26 87 77 1 1 7 27 74 72 1 3 12 27 53 56 2 -11 6 28 32 30 1

-13 9 26 30 37 2 -5 14 26 52 52 1 4 7 27 26 27 1 -14 13 27 40 43 2 -8 6 28 5 9 4

-10 9 26 107 103 1 -2 14 26 24 22 3 7 7 27 16 15 4 -11 13 27 17 17 3 -5 6 28 14 20 2

-7 9 26 25 19 1 1 14 26 39 31 2 -13 8 27 60 59 1 -8 13 27 60 59 1 -2 6 28 151 156 1

-4 9 26 128 142 1 -13 15 26 24 17 3 -10 8 27 84 85 1 -5 13 27 78 74 1 1 6 28 40 33 1

-1 9 26 80 80 1 -10 15 26 29 31 2 -7 8 27 57 62 1 -2 13 27 26 32 3 4 6 28 101 92 1

2 9 26 88 83 1 -7 15 26 60 64 1 -4 8 27 25 28 2 1 13 27 44 46 3 -13 7 28 27 30 2

5 9 26 54 52 1 -4 15 26 75 83 2 -1 8 27 75 72 1 -16 14 27 24 10 3 -10 7 28 93 74 1

8 9 26 42 44 2 -1 15 26 34 31 3 2 8 27 47 43 1 -13 14 27 41 43 2 -7 7 28 62 72 1

-15 10 26 30 31 2 -12 16 26 109 110 2 5 8 27 77 74 1 -10 14 27 26 32 2 -4 7 28 67 69 1

-12 10 26 30 25 2 -9 16 26 48 46 2 8 8 27 29 31 3 -7 14 27 16 15 3 -1 7 28 42 33 1

-9 10 26 107 103 1 -6 16 26 10 9 9 -15 9 27 60 49 2 -4 14 27 22 19 3 2 7 28 134 128 1

-6 10 26 25 26 1 -3 16 26 15 10 7 -12 9 27 103 93 1 -1 14 27 42 46 2 5 7 28 28 15 1

-3 10 26 35 31 1 -11 17 26 14 12 7 -9 9 27 51 50 1 2 14 27 57 51 2 -15 8 28 58 58 1

0 10 26 36 28 1 -8 17 26 39 44 3 -6 9 27 96 90 1 -15 15 27 74 63 2 -12 8 28 110 108 2

3 10 26 38 40 2 -5 17 26 42 40 3 -3 9 27 131 127 1 -12 15 27 37 32 2 -9 8 28 97 90 1

6 10 26 12 9 11 0 0 27 46 44 1 0 9 27 19 17 1 -9 15 27 55 49 2 -6 8 28 7 9 6

-17 11 26 15 12 8 1 1 27 29 33 1 3 9 27 88 85 1 -6 15 27 91 80 3 -3 8 28 82 76 1

-14 11 26 25 26 3 -1 2 27 29 33 1 6 9 27 91 80 1 -3 15 27 51 56 2 0 8 28 189 177 1

-11 11 26 121 128 1 2 2 27 18 3 1 -17 10 27 29 29 3 0 15 27 22 12 5 3 8 28 99 95 1

-8 11 26 113 121 1 -3 3 27 268 273 1 -14 10 27 29 32 2 -14 16 27 18 10 5 6 8 28 23 26 2

-5 11 26 48 47 1 0 3 27 357 334 1 -11 10 27 13 15 4 -11 16 27 57 57 2 -17 9 28 74 67 3

-2 11 26 85 83 1 3 3 27 22 9 1 -8 10 27 84 85 1 -8 16 27 31 31 3 -14 9 28 15 14 6

1 11 26 68 72 1 -5 4 27 17 26 1 -5 10 27 13 11 2 -5 16 27 46 48 3 -11 9 28 58 51 1

4 11 26 79 83 1 -2 4 27 21 3 1 -2 10 27 48 43 1 -2 16 27 56 51 2 -8 9 28 95 90 1

-16 12 26 108 110 1 1 4 27 62 45 1 1 10 27 25 25 1 -10 17 27 26 29 3 -5 9 28 40 43 1

-13 12 26 36 29 2 4 4 27 27 28 2 4 10 27 21 19 3 -7 17 27 21 19 4 -2 9 28 133 128 1

-10 12 26 31 25 2 -7 5 27 111 111 1 7 10 27 22 19 4 -1 1 28 73 59 1 1 9 28 97 96 1

-7 12 26 77 78 1 -4 5 27 16 26 1 -16 11 27 59 57 2 -3 2 28 119 115 1 4 9 28 27 20 2

-4 12 26 222 225 1 -1 5 27 61 45 1 -13 11 27 4 17 4 0 2 28 163 152 1 7 9 28 41 40 2

-1 12 26 70 72 1 2 5 27 141 133 1 -10 11 27 21 15 2 -5 3 28 372 363 2 -16 10 28 41 42 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 14

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

-13 10 28 33 23 2 -10 16 28 42 42 2 -16 9 29 41 39 2 -8 14 29 49 41 1 1 7 30 122 118 1

-10 10 28 21 18 2 -7 16 28 40 40 2 -13 9 29 77 71 1 -5 14 29 51 58 1 4 7 30 21 19 1

-7 10 28 94 74 1 -4 16 28 31 2 5 -10 9 29 126 131 1 -2 14 29 23 22 3 7 7 30 10 22 9

-4 10 28 99 92 1 -12 17 28 41 28 2 -7 9 29 60 43 1 1 14 29 38 29 3 -13 8 30 79 75 1

-1 10 28 98 96 1 -9 17 28 76 67 2 -4 9 29 101 88 1 -13 15 29 17 14 4 -10 8 30 101 99 1

2 10 28 73 64 1 -6 17 28 34 32 4 -1 9 29 37 41 1 -10 15 29 52 54 2 -7 8 30 31 34 1

5 10 28 77 72 1 0 1 29 151 146 1 2 9 29 51 53 1 -7 15 29 79 78 2 -4 8 30 42 35 1

-15 11 28 17 13 5 -2 2 29 118 111 1 5 9 29 50 58 1 -4 15 29 16 21 4 -1 8 30 122 118 1

-12 11 28 70 71 1 1 2 29 61 58 1 8 9 29 45 33 2 -1 15 29 37 29 3 2 8 30 55 51 1

-9 11 28 59 51 1 -4 3 29 146 146 1 -15 10 29 51 54 2 -12 16 29 62 68 2 5 8 30 110 113 1

-6 11 28 32 30 1 -1 3 29 61 59 1 -12 10 29 65 65 1 -9 16 29 36 39 2 8 8 30 58 58 2

-3 11 28 100 96 1 2 3 29 187 200 1 -9 10 29 126 131 1 -6 16 29 17 18 5 -15 9 30 49 29 2

0 11 28 104 105 1 -6 4 29 76 92 1 -6 10 29 70 53 1 -3 16 29 32 36 3 -12 9 30 89 80 1

3 11 28 49 38 2 -3 4 29 147 146 1 -3 10 29 64 49 1 -11 17 29 21 23 5 -9 9 30 157 170 1

6 11 28 32 32 3 0 4 29 209 202 1 0 10 29 36 33 1 -8 17 29 45 33 3 -6 9 30 125 105 1

-17 12 28 37 28 3 3 4 29 45 43 1 3 10 29 28 29 2 -5 17 29 25 23 4 -3 9 30 151 163 1

-14 12 28 54 39 3 -8 5 29 122 111 1 6 10 29 18 18 5 0 0 30 237 221 2 0 9 30 99 94 1

-11 12 28 72 71 1 -5 5 29 115 105 1 -17 11 29 27 23 4 1 1 30 99 111 1 3 9 30 84 78 1

-8 12 28 115 108 1 -2 5 29 188 200 1 -14 11 29 60 56 2 -1 2 30 101 111 1 6 9 30 73 71 2

-5 12 28 30 15 1 1 5 29 63 66 1 -11 11 29 107 101 1 2 2 30 75 64 1 -17 10 30 21 21 5

-2 12 28 67 64 1 4 5 29 100 88 1 -8 11 29 96 86 1 -3 3 30 298 272 1 -14 10 30 35 38 2

1 12 28 26 17 2 -10 6 29 69 53 1 -5 11 29 24 15 1 0 3 30 487 466 2 -11 10 30 16 13 3

4 12 28 36 2 3 -7 6 29 36 37 1 -2 11 29 54 53 1 3 3 30 205 215 1 -8 10 30 103 99 1

-16 13 28 31 32 3 -4 6 29 75 92 1 1 11 29 62 51 1 -5 4 30 71 80 1 -5 10 30 23 23 1

-13 13 28 49 61 2 -1 6 29 60 66 1 4 11 29 28 21 3 -2 4 30 75 64 1 -2 10 30 55 51 1

-10 13 28 30 23 2 2 6 29 26 6 1 -16 12 29 64 68 2 1 4 30 179 178 1 1 10 30 41 37 2

-7 13 28 32 30 1 5 6 29 23 15 1 -13 12 29 33 36 2 4 4 30 44 35 1 4 10 30 38 40 2

-4 13 28 26 20 2 -12 7 29 67 65 1 -10 12 29 65 65 1 -7 5 30 74 54 1 7 10 30 29 22 3

-1 13 28 28 17 2 -9 7 29 62 43 1 -7 12 29 65 65 1 -4 5 30 71 80 1 -16 11 30 41 50 3

2 13 28 17 11 5 -6 7 29 34 36 1 -4 12 29 196 186 1 -1 5 30 180 178 1 -13 11 30 47 49 2

-15 14 28 80 80 2 -3 7 29 45 43 1 -1 12 29 61 51 1 2 5 30 214 214 1 -10 11 30 8 13 8

-12 14 28 53 39 2 0 7 29 66 57 1 2 12 29 24 22 3 5 5 30 21 23 2 -7 11 30 97 98 1

-9 14 28 12 14 5 3 7 29 64 49 1 5 12 29 29 23 3 -9 6 30 123 105 1 -4 11 30 23 19 1

-6 14 28 28 26 2 6 7 29 90 91 2 -15 13 29 21 14 4 -6 6 30 133 141 1 -1 11 30 37 37 1

-3 14 28 47 38 1 -14 8 29 48 41 2 -12 13 29 36 36 2 -3 6 30 208 215 1 2 11 30 45 50 2

0 14 28 19 14 5 -11 8 29 97 86 1 -9 13 29 77 71 1 0 6 30 86 91 1 5 11 30 26 25 4

-14 15 28 79 80 1 -8 8 29 119 115 1 -6 13 29 90 91 1 3 6 30 154 163 1 -15 12 30 21 17 3

-11 15 28 21 13 3 -5 8 29 121 111 1 -3 13 29 26 29 2 6 6 30 73 74 1 -12 12 30 14 14 6

-8 15 28 59 58 1 -2 8 29 20 6 2 0 13 29 16 4 5 -11 7 30 100 98 1 -9 12 30 88 80 1

-5 15 28 75 72 2 1 8 29 38 41 1 3 13 29 36 36 2 -8 7 30 31 34 1 -6 12 30 71 74 1

-2 15 28 21 11 5 4 8 29 195 186 1 -14 14 29 14 6 6 -5 7 30 73 54 1 -3 12 30 82 78 1

-13 16 28 21 32 4 7 8 29 80 78 2 -11 14 29 59 55 2 -2 7 30 215 214 1 0 12 30 62 68 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 15

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

3 12 30 100 86 1 -11 6 31 63 65 1 -3 11 31 81 75 1 2 3 32 346 350 1 -9 10 32 153 165 1

-14 13 30 37 41 2 -8 6 31 142 139 1 0 11 31 12 1 6 -6 4 32 169 166 1 -6 10 32 26 14 1

-11 13 30 42 48 2 -5 6 31 29 28 1 3 11 31 96 84 1 -3 4 32 109 101 1 -3 10 32 53 55 1

-8 13 30 76 75 1 -2 6 31 281 285 1 6 11 31 28 18 4 0 4 32 122 135 1 0 10 32 66 62 1

-5 13 30 110 113 1 1 6 31 69 60 1 -17 12 31 25 22 4 3 4 32 100 94 1 3 10 32 72 72 1

-2 13 30 45 50 2 4 6 31 0 10 1 -14 12 31 72 65 1 -8 5 32 111 109 1 6 10 32 18 23 6

1 13 30 44 34 2 -13 7 31 23 12 2 -11 12 31 41 36 1 -5 5 32 29 17 1 -17 11 32 61 55 2

-16 14 30 36 25 2 -10 7 31 62 61 1 -8 12 31 40 51 1 -2 5 32 345 350 1 -14 11 32 107 102 1

-13 14 30 38 41 2 -7 7 31 115 115 1 -5 12 31 93 101 1 1 5 32 204 201 1 -11 11 32 8 7 8

-10 14 30 34 38 2 -4 7 31 125 119 1 -2 12 31 94 84 1 4 5 32 43 48 1 -8 11 32 34 29 1

-7 14 30 13 23 4 -1 7 31 69 60 1 1 12 31 8 13 8 -10 6 32 24 14 1 -5 11 32 103 103 1

-4 14 30 36 40 2 2 7 31 110 113 1 4 12 31 80 78 2 -7 6 32 120 117 1 -2 11 32 122 127 1

-1 14 30 35 34 3 5 7 31 95 101 1 -16 13 31 21 12 4 -4 6 32 166 166 1 1 11 32 59 60 1

2 14 30 59 69 2 -15 8 31 39 32 2 -13 13 31 50 61 2 -1 6 32 207 201 1 4 11 32 59 52 2

-15 15 30 68 57 2 -12 8 31 35 51 2 -10 13 31 28 24 2 2 6 32 31 29 1 -16 12 32 28 26 3

-12 15 30 21 17 3 -9 8 31 116 118 1 -7 13 31 23 12 2 5 6 32 105 103 1 -13 12 32 46 44 2

-9 15 30 54 29 1 -6 8 31 145 139 1 -4 13 31 6 1 6 -12 7 32 45 54 1 -10 12 32 22 18 2

-6 15 30 70 71 2 -3 8 31 15 21 3 -1 13 31 5 13 4 -9 7 32 133 137 1 -7 12 32 47 54 1

-3 15 30 94 86 2 0 8 31 303 303 1 2 13 31 9 13 9 -6 7 32 120 117 1 -4 12 32 109 121 1

0 15 30 34 15 3 3 8 31 80 75 1 -15 14 31 45 36 2 -3 7 32 100 94 1 -1 12 32 58 60 1

-14 16 30 35 25 2 6 8 31 18 24 3 -12 14 31 67 65 2 0 7 32 95 87 1 2 12 32 68 61 2

-11 16 30 46 50 2 -17 9 31 80 67 2 -9 14 31 42 45 1 3 7 32 53 55 1 5 12 32 30 46 4

-8 16 30 54 58 2 -14 9 31 45 45 2 -6 14 31 19 24 3 6 7 32 118 117 1 -15 13 32 71 71 2

-5 16 30 27 25 3 -11 9 31 58 55 1 -3 14 31 95 84 2 -14 8 32 34 36 2 -12 13 32 47 44 2

-2 16 30 58 69 2 -8 9 31 115 118 1 0 14 31 38 29 3 -11 8 32 31 29 1 -9 13 32 30 27 2

-10 17 30 19 21 4 -5 9 31 74 66 1 -14 15 31 50 36 2 -8 8 32 10 3 3 -6 13 32 114 117 1

-7 17 30 19 22 5 -2 9 31 109 113 1 -11 15 31 103 110 1 -5 8 32 107 109 1 -3 13 32 71 72 1

-1 1 31 195 219 1 1 9 31 90 85 1 -8 15 31 37 32 2 -2 8 32 32 29 1 0 13 32 6 16 5

-3 2 31 67 83 1 4 9 31 0 1 1 -5 15 31 62 59 1 1 8 32 74 76 1 3 13 32 33 35 3

0 2 31 96 103 1 7 9 31 9 16 9 -2 15 31 13 13 9 4 8 32 111 121 1 -14 14 32 9 10 8

-5 3 31 271 266 1 -16 10 31 54 48 3 -13 16 31 10 12 10 7 8 32 54 56 2 -11 14 32 103 102 1

-2 3 31 66 83 1 -13 10 31 27 24 3 -10 16 31 48 48 2 -16 9 32 76 68 2 -8 14 32 34 36 2

1 3 31 17 19 1 -10 10 31 85 77 1 -7 16 31 11 16 10 -13 9 32 28 27 2 -5 14 32 40 46 2

-7 4 31 123 119 1 -7 10 31 64 61 1 -4 16 31 81 78 2 -10 9 32 153 165 1 -2 14 32 69 61 1

-4 4 31 453 457 3 -4 10 31 14 10 1 -12 17 31 25 22 3 -7 9 32 133 137 1 1 14 32 19 26 5

-1 4 31 17 19 1 -1 10 31 90 85 1 -9 17 31 84 67 2 -4 9 32 44 48 1 -13 15 32 78 71 2

2 4 31 282 285 1 2 10 31 97 84 1 -6 17 31 19 18 5 -1 9 32 73 76 1 -10 15 32 83 87 1

-9 5 31 74 66 1 5 10 31 62 59 2 0 1 32 33 64 1 2 9 32 124 127 1 -7 15 32 57 56 1

-6 5 31 27 28 1 -15 11 31 105 110 1 -2 2 32 21 21 1 5 9 32 42 46 2 -4 15 32 57 52 1

-3 5 31 270 266 1 -12 11 31 39 36 2 1 2 32 73 70 1 8 9 32 64 53 2 -1 15 32 24 26 5

0 5 31 15 11 2 -9 11 31 57 55 1 -4 3 32 109 101 1 -15 10 32 85 87 2 -12 16 32 28 26 3

3 5 31 12 21 3 -6 11 31 63 65 1 -1 3 32 73 70 1 -12 10 32 21 18 3 -9 16 32 74 68 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 16

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

-6 16 32 23 23 4 -12 9 33 38 51 2 -1 14 33 54 45 2 5 7 34 60 53 1 -16 13 34 30 25 3

-3 16 32 27 35 4 -9 9 33 187 179 1 2 14 33 38 41 3 -15 8 34 42 29 2 -13 13 34 52 57 2

-11 17 32 57 55 2 -6 9 33 223 210 1 -15 15 33 124 115 1 -12 8 34 70 75 1 -10 13 34 60 52 1

-8 17 32 64 53 2 -3 9 33 51 47 1 -12 15 33 90 78 1 -9 8 34 29 24 1 -7 13 34 25 28 2

-5 17 32 33 46 4 0 9 33 74 73 1 -9 15 33 70 63 1 -6 8 34 118 122 1 -4 13 34 12 11 5

0 0 33 779 744 7 3 9 33 45 35 1 -6 15 33 55 43 2 -3 8 34 70 74 1 -1 13 34 24 18 3

1 1 33 124 145 1 6 9 33 55 43 2 -3 15 33 171 158 2 0 8 34 256 266 1 2 13 34 38 36 3

-1 2 33 124 145 1 -17 10 33 24 18 4 0 15 33 43 46 3 3 8 34 96 89 1 -15 14 34 51 45 2

2 2 33 306 325 1 -14 10 33 84 76 1 -14 16 33 42 36 2 6 8 34 20 28 3 -12 14 34 16 11 4

0 3 33 398 406 2 -11 10 33 35 46 1 -11 16 33 113 108 1 -17 9 34 45 41 2 -9 14 34 28 30 2

3 3 33 296 314 2 -8 10 33 158 150 1 -8 16 33 239 214 4 -14 9 34 28 30 4 -6 14 34 19 28 3

-5 4 33 300 332 1 -5 10 33 65 66 1 -5 16 33 58 75 1 -11 9 34 101 98 1 -3 14 34 29 31 2

-2 4 33 306 325 1 -2 10 33 20 20 1 -2 16 33 36 41 3 -8 9 34 28 24 1 0 14 34 43 34 2

1 4 33 361 363 1 1 10 33 79 80 1 -10 17 33 25 18 3 -5 9 34 85 77 1 -14 15 34 46 45 2

4 4 33 358 338 2 4 10 33 88 89 1 -7 17 33 21 13 4 -2 9 34 165 170 1 -11 15 34 61 57 2

-7 5 33 28 32 1 7 10 33 23 13 4 -1 1 34 123 137 1 1 9 34 21 23 1 -8 15 34 44 29 2

-4 5 33 300 332 1 -16 11 33 110 108 2 -3 2 34 24 30 1 4 9 34 7 11 7 -5 15 34 82 79 1

-1 5 33 361 363 2 -13 11 33 99 81 1 0 2 34 57 45 1 7 9 34 48 48 3 -2 15 34 40 36 2

2 5 33 226 219 1 -10 11 33 31 46 2 -5 3 34 72 72 1 -16 10 34 47 41 3 -13 16 34 32 25 3

5 5 33 64 66 1 -7 11 33 320 312 1 -2 3 34 26 30 1 -13 10 34 64 52 1 -10 16 34 44 41 2

-9 6 33 222 210 1 -4 11 33 134 142 1 1 3 34 68 82 1 -10 10 34 58 65 1 -7 16 34 45 48 2

-6 6 33 60 72 1 -1 11 33 77 80 1 -7 4 34 27 34 1 -7 10 34 31 23 1 -4 16 34 87 93 2

-3 6 33 299 314 2 2 11 33 58 51 1 -4 4 34 453 459 2 -4 10 34 29 28 1 -12 17 34 35 36 2

0 6 33 58 46 1 5 11 33 61 75 4 -1 4 34 67 82 1 -1 10 34 20 23 1 -9 17 34 40 41 2

3 6 33 51 47 1 -15 12 33 88 78 1 2 4 34 158 163 1 2 10 34 82 76 1 -6 17 34 25 23 3

6 6 33 53 45 1 -12 12 33 111 119 2 -9 5 34 86 77 1 5 10 34 86 79 2 0 1 35 11 15 1

-11 7 33 321 312 1 -9 12 33 40 51 1 -6 5 34 107 108 1 -15 11 34 61 57 2 -2 2 35 46 45 1

-8 7 33 256 247 1 -6 12 33 53 45 1 -3 5 34 72 72 1 -12 11 34 41 46 2 1 2 35 39 26 1

-5 7 33 22 32 1 -3 12 33 43 35 1 0 5 34 21 20 1 -9 11 34 100 98 1 -4 3 35 134 140 1

-2 7 33 225 219 1 0 12 33 121 116 1 3 5 34 73 74 1 -6 11 34 45 54 1 -1 3 35 39 26 1

1 7 33 374 380 1 3 12 33 172 158 2 -11 6 34 46 54 1 -3 11 34 93 89 1 2 3 35 174 188 1

4 7 33 132 142 1 -14 13 33 30 25 2 -8 6 34 117 122 1 0 11 34 32 23 2 -6 4 35 53 47 1

7 7 33 49 56 1 -11 13 33 99 81 1 -5 6 34 106 108 1 3 11 34 31 31 2 -3 4 35 134 140 1

-13 8 33 70 49 1 -8 13 33 72 49 1 -2 6 34 158 163 1 6 11 34 29 23 3 0 4 35 294 322 1

-10 8 33 161 150 1 -5 13 33 128 123 1 1 6 34 2 2 1 -17 12 34 40 36 3 3 4 35 76 71 1

-7 8 33 256 247 1 -2 13 33 55 51 1 4 6 34 29 28 1 -14 12 34 16 11 5 -8 5 35 82 76 1

-4 8 33 353 338 2 1 13 33 57 45 2 -13 7 34 23 28 2 -11 12 34 42 46 1 -5 5 35 21 24 1

-1 8 33 374 380 1 -16 14 33 42 36 2 -10 7 34 29 23 1 -8 12 34 71 75 1 -2 5 35 178 188 1

2 8 33 23 20 1 -13 14 33 31 25 2 -7 7 34 37 37 1 -5 12 34 56 53 1 1 5 35 168 165 1

5 8 33 130 123 1 -10 14 33 86 76 2 -4 7 34 25 34 1 -2 12 34 81 76 1 4 5 35 60 65 1

8 8 33 242 214 2 -7 14 33 51 56 1 -1 7 34 0 3 1 1 12 34 24 18 3 -10 6 35 49 37 1

-15 9 33 75 63 2 -4 14 33 89 89 1 2 7 34 167 170 1 4 12 34 91 93 2 -7 6 35 81 75 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 17

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

-4 6 35 52 47 1 1 11 35 56 51 1 -5 4 36 649 527 3 -5 10 36 120 113 1 -5 16 36 270 261 3

-1 6 35 169 165 1 4 11 35 41 37 2 -2 4 36 417 324 2 -2 10 36 29 40 1 -2 16 36 103 123 3

2 6 35 79 87 1 -16 12 35 49 50 3 1 4 36 838 711 4 1 10 36 271 273 1 -10 17 36 198 186 2

5 6 35 82 71 1 -13 12 35 46 44 2 4 4 36 1865 1689 10 4 10 36 65 66 2 -7 17 36 240 220 2

-12 7 35 53 51 1 -10 12 35 22 22 3 -7 5 36 296 287 1 7 10 36 237 220 2 -1 1 37 91 111 1

-9 7 35 159 162 1 -7 12 35 52 51 1 -4 5 36 650 527 3 -16 11 36 192 183 2 -3 2 37 14 16 1

-6 7 35 80 75 1 -4 12 35 66 70 1 -1 5 36 846 711 4 -13 11 36 137 136 1 0 2 37 66 68 1

-3 7 35 76 71 1 -1 12 35 52 51 2 2 5 36 718 653 4 -10 11 36 188 200 1 -5 3 37 89 83 1

0 7 35 84 78 1 2 12 35 53 49 2 5 5 36 120 113 1 -7 11 36 363 350 1 -2 3 37 10 16 2

3 7 35 16 16 2 5 12 35 32 29 5 -9 6 36 1059 965 5 -4 11 36 371 346 1 1 3 37 47 48 1

6 7 35 94 94 1 -15 13 35 59 52 2 -6 6 36 1238 1095 7 -1 11 36 271 273 2 -7 4 37 51 57 1

-14 8 35 15 8 4 -12 13 35 44 44 2 -3 6 36 456 455 3 2 11 36 163 165 1 -4 4 37 439 468 2

-11 8 35 59 55 1 -9 13 35 9 6 8 0 6 36 941 827 5 5 11 36 273 261 2 -1 4 37 48 48 1

-8 8 35 113 128 1 -6 13 35 93 94 1 3 6 36 1151 1053 5 -15 12 36 353 311 3 2 4 37 84 97 1

-5 8 35 81 76 1 -3 13 35 80 74 1 6 6 36 71 84 1 -12 12 36 662 610 4 -9 5 37 80 78 1

-2 8 35 78 87 1 0 13 35 20 6 3 -11 7 36 362 350 1 -9 12 36 94 66 3 -6 5 37 119 124 1

1 8 35 63 55 1 3 13 35 23 16 5 -8 7 36 689 639 3 -6 12 36 69 84 1 -3 5 37 89 83 1

4 8 35 69 70 1 -14 14 35 27 14 3 -5 7 36 294 287 2 -3 12 36 127 125 1 0 5 37 55 52 1

7 8 35 45 51 2 -11 14 35 54 42 2 -2 7 36 714 653 4 0 12 36 707 669 4 3 5 37 92 95 1

-16 9 35 66 64 2 -8 14 35 11 8 7 1 7 36 694 619 3 3 12 36 273 246 2 -11 6 37 70 73 1

-13 9 35 14 6 5 -5 14 35 27 30 2 4 7 36 371 346 1 -14 13 36 227 226 2 -8 6 37 102 110 1

-10 9 35 106 99 1 -2 14 35 53 49 2 7 7 36 118 127 2 -11 13 36 142 136 1 -5 6 37 124 124 1

-7 9 35 160 163 1 1 14 35 40 46 3 -13 8 36 303 282 2 -8 13 36 303 282 2 -2 6 37 84 97 1

-4 9 35 60 65 1 -13 15 35 60 52 2 -10 8 36 275 241 1 -5 13 36 156 147 1 1 6 37 40 36 1

-1 9 35 63 55 1 -10 15 35 103 110 1 -7 8 36 689 639 3 -2 13 36 161 165 1 4 6 37 34 35 1

2 9 35 135 133 1 -7 15 35 47 51 1 -4 8 36 1864 1689 9 1 13 36 192 185 2 -13 7 37 62 72 1

5 9 35 31 30 2 -4 15 35 35 37 2 -1 8 36 693 619 3 -16 14 36 81 96 2 -10 7 37 26 17 1

8 9 35 33 26 3 -1 15 35 41 46 2 2 8 36 30 40 1 -13 14 36 227 226 2 -7 7 37 21 9 1

-15 10 35 105 110 2 -12 16 35 47 50 2 5 8 36 153 147 1 -10 14 36 110 110 1 -4 7 37 51 57 1

-12 10 35 23 22 3 -9 16 35 68 64 1 8 8 36 809 761 6 -7 14 36 118 127 1 -1 7 37 43 36 1

-9 10 35 107 99 1 -6 16 35 24 27 3 -15 9 36 379 358 3 -4 14 36 68 66 2 2 7 37 137 145 1

-6 10 35 48 37 1 -3 16 35 7 16 6 -12 9 36 91 66 1 -1 14 36 193 185 2 5 7 37 57 51 1

-3 10 35 14 17 2 -11 17 35 32 36 3 -9 9 36 436 391 2 2 14 36 105 123 2 -15 8 37 63 61 1

0 10 35 18 9 2 -8 17 35 29 26 4 -6 9 36 1058 965 4 -15 15 36 166 134 1 -12 8 37 113 117 1

3 10 35 78 74 1 -5 17 35 30 29 3 -3 9 36 1148 1053 4 -12 15 36 352 311 2 -9 8 37 10 9 4

6 10 35 29 27 3 0 0 36 2720 2503 24 0 9 36 313 275 1 -9 15 36 378 358 2 -6 8 37 101 110 1

-17 11 35 36 36 3 1 1 36 456 529 2 3 9 36 133 125 3 -6 15 36 362 367 2 -3 8 37 91 95 1

-14 11 35 54 42 2 -1 2 36 458 529 2 6 9 36 358 367 3 -3 15 36 270 246 2 0 8 37 214 233 1

-11 11 35 26 26 2 2 2 36 421 324 2 -17 10 36 200 186 2 0 15 36 133 137 2 3 8 37 87 85 1

-8 11 35 59 55 1 -3 3 36 767 720 4 -14 10 36 110 110 1 -14 16 36 84 96 2 6 8 37 21 25 3

-5 11 35 82 71 1 0 3 36 1695 1424 8 -11 10 36 187 200 1 -11 16 36 190 183 1 -17 9 37 19 14 12

-2 11 35 132 133 1 3 3 36 456 455 2 -8 10 36 274 241 1 -8 16 36 805 761 7 -14 9 37 30 31 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 18

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

-11 9 37 119 130 1 0 14 37 29 18 3 -8 8 38 144 155 1 -3 13 38 82 76 1 -11 7 39 42 61 1

-8 9 37 16 9 2 -14 15 37 38 41 2 -5 8 38 54 56 1 0 13 38 33 30 2 -8 7 39 31 22 1

-5 9 37 78 78 1 -11 15 37 8 10 7 -2 8 38 146 153 1 3 13 38 22 15 5 -5 7 39 33 40 1

-2 9 37 135 145 1 -8 15 37 64 61 1 1 8 38 52 47 1 -14 14 38 58 54 2 -2 7 39 170 173 1

1 9 37 60 56 1 -5 15 37 93 93 2 4 8 38 58 57 1 -11 14 38 12 6 7 1 7 39 83 93 1

4 9 37 30 25 2 -2 15 37 49 44 2 7 8 38 20 16 4 -8 14 38 10 7 8 4 7 39 120 111 1

7 9 37 66 67 2 -13 16 37 38 31 2 -16 9 38 35 34 3 -5 14 38 44 38 1 7 7 39 41 33 2

-16 10 37 39 32 3 -10 16 37 37 32 2 -13 9 38 10 21 9 -2 14 38 22 18 3 -13 8 39 46 45 2

-13 10 37 69 65 1 -7 16 37 65 67 1 -10 9 38 46 43 1 1 14 38 53 47 2 -10 8 39 136 118 1

-10 10 37 39 38 1 -4 16 37 88 97 1 -7 9 38 144 145 1 -13 15 38 45 35 2 -7 8 39 28 22 1

-7 10 37 20 17 2 -9 17 37 14 14 8 -4 9 38 52 53 1 -10 15 38 70 70 1 -4 8 39 162 179 1

-4 10 37 33 35 1 -6 17 37 32 37 3 -1 9 38 51 47 1 -7 15 38 20 16 3 -1 8 39 84 93 1

-1 10 37 60 56 1 0 1 38 12 5 1 2 9 38 105 107 1 -4 15 38 30 26 2 2 8 39 51 53 1

2 10 37 41 48 2 -2 2 38 118 112 1 5 9 38 47 38 2 -1 15 38 50 47 2 5 8 39 103 101 1

5 10 37 97 93 2 1 2 38 51 53 1 8 9 38 14 9 12 -12 16 38 65 66 2 8 8 39 43 34 6

-15 11 37 14 10 7 -4 3 38 91 103 1 -15 10 38 68 70 2 -9 16 38 29 34 2 -15 9 39 91 88 3

-12 11 37 65 63 2 -1 3 38 52 53 1 -12 10 38 58 53 1 -6 16 38 34 27 2 -12 9 39 69 55 1

-9 11 37 123 130 1 2 3 38 60 68 1 -9 10 38 44 43 1 -3 16 38 15 15 6 -9 9 39 169 171 1

-6 11 37 67 73 1 -6 4 38 104 111 1 -6 10 38 20 9 1 -11 17 38 20 17 5 -6 9 39 160 157 1

-3 11 37 89 85 1 -3 4 38 90 103 1 -3 10 38 34 31 1 -8 17 38 16 9 6 -3 9 39 52 45 1

0 11 37 12 19 7 0 4 38 413 413 2 0 10 38 48 49 1 0 0 39 419 412 3 0 9 39 30 6 1

3 11 37 27 22 3 3 4 38 29 25 1 3 10 38 82 76 1 1 1 39 53 77 1 3 9 39 206 215 1

6 11 37 37 37 4 -8 5 38 54 56 1 6 10 38 34 27 2 -1 2 39 53 77 1 6 9 39 40 58 2

-14 12 37 32 24 2 -5 5 38 21 14 1 -17 11 38 24 17 4 2 2 39 46 51 1 -17 10 39 21 16 4

-11 12 37 60 63 1 -2 5 38 59 68 1 -14 11 38 10 6 9 -3 3 39 542 493 3 -14 10 39 71 57 2

-8 12 37 112 117 1 1 5 38 97 105 1 -11 11 38 42 44 1 0 3 39 328 256 1 -11 10 39 58 55 1

-5 12 37 57 51 1 4 5 38 52 54 1 -8 11 38 93 93 1 3 3 39 78 80 1 -8 10 39 134 118 1

-2 12 37 44 48 1 -10 6 38 17 9 2 -5 11 38 75 74 1 -5 4 39 37 28 1 -5 10 39 18 20 1

1 12 37 38 38 2 -7 6 38 8 13 8 -2 11 38 104 107 1 -2 4 39 46 51 1 -2 10 39 49 53 1

4 12 37 91 97 2 -4 6 38 104 111 1 1 11 38 37 34 3 1 4 39 162 141 1 1 10 39 55 48 1

-16 13 37 44 31 2 -1 6 38 96 105 1 4 11 38 29 26 3 4 4 39 159 179 1 4 10 39 73 57 1

-13 13 37 32 25 2 2 6 38 148 153 1 -16 12 38 65 66 2 -7 5 39 34 39 1 7 10 39 40 30 3

-10 13 37 71 65 1 5 6 38 75 74 1 -13 12 38 20 24 4 -4 5 39 35 28 1 -16 11 39 7 12 7

-7 13 37 63 72 1 -12 7 38 25 29 1 -10 12 38 56 53 1 -1 5 39 162 141 1 -13 11 39 28 14 2

-4 13 37 31 25 2 -9 7 38 142 145 1 -7 12 38 26 29 1 2 5 39 171 173 1 -10 11 39 62 55 1

-1 13 37 41 38 2 -6 7 38 12 13 3 -4 12 38 55 57 1 5 5 39 15 20 2 -7 11 39 41 61 1

2 13 37 51 44 2 -3 7 38 27 25 1 -1 12 38 33 34 2 -9 6 39 160 157 1 -4 11 39 118 111 1

-15 14 37 40 41 2 0 7 38 40 36 1 2 12 38 20 18 4 -6 6 39 197 169 1 -1 11 39 57 48 1

-12 14 37 24 24 3 3 7 38 33 31 1 -15 13 38 48 35 2 -3 6 39 79 80 2 2 11 39 54 47 2

-9 14 37 22 31 2 6 7 38 37 37 2 -12 13 38 28 24 2 0 6 39 179 186 1 5 11 39 33 39 3

-6 14 37 26 25 2 -14 8 38 8 7 8 -9 13 38 12 21 6 3 6 39 55 45 1 -15 12 39 63 36 2

-3 14 37 27 22 2 -11 8 38 94 93 1 -6 13 38 37 37 1 6 6 39 77 67 1 -12 12 39 167 160 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 19

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

-9 12 39 69 55 1 -11 6 40 61 52 1 -3 11 40 74 69 1 -3 4 41 125 125 1 -3 10 41 34 29 1

-6 12 39 73 67 1 -8 6 40 47 42 1 0 11 40 75 83 1 0 4 41 251 247 1 0 10 41 73 73 1

-3 12 39 206 215 1 -5 6 40 80 88 1 3 11 40 47 37 2 3 4 41 26 33 1 3 10 41 70 70 2

0 12 39 75 70 2 -2 6 40 31 28 1 6 11 40 26 29 5 -8 5 41 90 90 1 6 10 41 33 26 3

3 12 39 43 31 2 1 6 40 68 71 1 -14 12 40 22 10 3 -5 5 41 75 82 1 -17 11 41 14 17 10

-14 13 39 1 18 1 4 6 40 29 27 1 -11 12 40 89 90 1 -2 5 41 33 36 1 -14 11 41 0 6 1

-11 13 39 30 13 2 -13 7 40 66 66 1 -8 12 40 151 158 1 1 5 41 64 79 1 -11 11 41 91 83 1

-8 13 39 43 45 1 -10 7 40 11 10 3 -5 12 40 64 69 1 4 5 41 48 47 1 -8 11 41 85 83 1

-5 13 39 104 101 1 -7 7 40 16 18 1 -2 12 40 15 17 4 -10 6 41 8 13 7 -5 11 41 52 64 1

-2 13 39 53 47 1 -4 7 40 148 158 1 1 12 40 34 39 2 -7 6 41 41 40 1 -2 11 41 69 66 1

1 13 39 26 25 3 -1 7 40 68 71 1 4 12 40 92 95 3 -4 6 41 101 114 1 1 11 41 25 26 3

-13 14 39 17 18 4 2 7 40 74 72 1 -16 13 40 40 41 2 -1 6 41 63 79 1 4 11 41 28 25 3

-10 14 39 66 57 2 5 7 40 64 69 1 -13 13 40 16 4 4 2 6 41 182 186 1 -16 12 41 38 26 3

-7 14 39 42 33 1 -15 8 40 81 84 1 -10 13 40 53 52 1 5 6 41 53 64 1 -13 12 41 30 30 2

-4 14 39 72 57 1 -12 8 40 152 159 1 -7 13 40 60 66 1 -12 7 41 5 1 4 -10 12 41 46 45 1

-1 14 39 30 25 3 -9 8 40 54 61 1 -4 13 40 61 57 1 -9 7 41 96 107 1 -7 12 41 11 1 5

-15 15 39 40 27 2 -6 8 40 46 42 1 -1 13 40 35 39 2 -6 7 41 42 40 1 -4 12 41 11 7 5

-12 15 39 55 36 2 -3 8 40 79 75 1 2 13 40 49 50 2 -3 7 41 22 33 2 -1 12 41 24 26 4

-9 15 39 90 88 2 0 8 40 179 202 1 -15 14 40 32 26 3 0 7 41 72 76 1 2 12 41 29 31 3

-6 15 39 40 58 1 3 8 40 77 69 1 -12 14 40 24 10 3 3 7 41 34 29 1 -15 13 41 37 26 3

-3 15 39 42 31 2 6 8 40 21 22 3 -9 14 40 21 23 3 6 7 41 7 5 7 -12 13 41 29 30 2

0 15 39 22 22 5 -17 9 40 18 23 11 -6 14 40 20 22 3 -14 8 41 25 14 4 -9 13 41 25 30 2

-11 16 39 13 12 6 -14 9 40 23 23 6 -3 14 40 44 37 2 -11 8 41 84 83 1 -6 13 41 10 5 8

-8 16 39 40 34 5 -11 9 40 103 109 1 0 14 40 13 13 13 -8 8 41 41 31 1 -3 13 41 72 70 1

-5 16 39 34 38 2 -8 9 40 56 61 1 -14 15 40 30 26 3 -5 8 41 90 90 1 0 13 41 17 22 5

-10 17 39 27 16 3 -5 9 40 59 57 1 -11 15 40 23 25 3 -2 8 41 183 186 1 3 13 41 18 16 6

-7 17 39 38 30 2 -2 9 40 76 72 1 -8 15 40 80 84 1 1 8 41 44 48 1 -14 14 41 73 73 2

-1 1 40 137 133 1 1 9 40 64 62 1 -5 15 40 66 67 1 4 8 41 6 6 6 -11 14 41 13 6 5

-3 2 40 21 17 1 4 9 40 59 57 1 -2 15 40 50 50 2 7 8 41 19 20 9 -8 14 41 24 14 2

0 2 40 12 3 2 7 9 40 52 48 2 -13 16 40 38 41 3 -16 9 41 33 34 4 -5 14 41 61 62 1

-5 3 40 125 140 1 -16 10 40 7 13 7 -10 16 40 20 13 4 -13 9 41 28 30 2 -2 14 41 30 31 2

-2 3 40 20 16 1 -13 10 40 54 52 2 -7 16 40 47 48 2 -10 9 41 40 43 1 1 14 41 51 34 3

1 3 40 41 45 1 -10 10 40 20 14 2 -4 16 40 94 95 2 -7 9 41 96 107 1 -13 15 41 33 26 2

-7 4 40 150 158 1 -7 10 40 11 10 3 -9 17 40 27 23 3 -4 9 41 46 47 1 -10 15 41 36 30 2

-4 4 40 386 396 2 -4 10 40 30 27 1 -6 17 40 25 28 3 -1 9 41 47 48 1 -7 15 41 23 20 3

-1 4 40 40 45 1 -1 10 40 65 62 1 0 1 41 69 47 1 2 9 41 73 67 1 -4 15 41 29 25 2

2 4 40 28 28 1 2 10 40 21 17 3 -2 2 41 36 46 1 5 9 41 60 62 2 -1 15 41 52 34 2

-9 5 40 58 57 1 5 10 40 69 67 2 1 2 41 111 115 1 8 9 41 25 29 4 -12 16 41 32 26 2

-6 5 40 79 88 1 -15 11 40 24 25 4 -4 3 41 125 125 1 -15 10 41 32 30 3 -9 16 41 38 34 2

-3 5 40 125 140 1 -12 11 40 88 90 1 -1 3 41 110 115 1 -12 10 41 47 45 2 -6 16 41 20 26 4

0 5 40 108 120 1 -9 11 40 102 109 1 2 3 41 34 36 1 -9 10 41 40 43 1 -3 16 41 13 16 9

3 5 40 80 75 1 -6 11 40 60 52 1 -6 4 41 99 114 1 -6 10 41 14 13 1 -11 17 41 26 17 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 20

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

-8 17 41 23 29 3 -3 9 42 40 29 1 -3 15 42 32 30 2 -14 9 43 59 62 2 0 14 43 12 18 11

0 0 42 78 39 1 0 9 42 64 60 1 -11 16 42 44 46 2 -11 9 43 98 108 1 -14 15 43 16 19 9

1 1 42 26 22 1 3 9 42 29 32 2 -8 16 42 17 8 4 -8 9 43 79 81 1 -11 15 43 56 58 1

-1 2 42 25 22 1 6 9 42 26 14 3 -5 16 42 33 35 2 -5 9 43 27 26 1 -8 15 43 71 71 1

2 2 42 22 13 1 -17 10 42 20 13 5 -10 17 42 17 13 5 -2 9 43 66 64 1 -5 15 43 51 60 2

-3 3 42 13 33 2 -14 10 42 16 6 5 -7 17 42 21 29 4 1 9 43 118 120 1 -2 15 43 23 21 4

0 3 42 33 24 1 -11 10 42 22 18 3 -3 2 43 85 106 1 4 9 43 21 20 3 -13 16 43 23 19 4

3 3 42 16 31 1 -8 10 42 18 10 1 0 2 43 0 27 1 7 9 43 31 26 3 -10 16 43 0 8 1

-5 4 42 18 28 1 -5 10 42 14 12 2 -5 3 43 134 152 1 -16 10 43 9 8 9 -7 16 43 31 26 2

-2 4 42 22 13 1 -2 10 42 8 9 7 -2 3 43 84 106 1 -13 10 43 55 52 2 -4 16 43 80 85 2

1 4 42 32 34 1 1 10 42 49 50 1 1 3 43 90 82 1 -10 10 43 48 44 1 -9 17 43 54 56 2

4 4 42 21 15 1 4 10 42 30 35 2 -7 4 43 74 80 1 -7 10 43 55 58 1 0 1 44 76 52 1

-7 5 42 22 28 1 7 10 42 29 29 4 -4 4 43 263 262 1 -4 10 43 44 42 1 -2 2 44 118 138 1

-4 5 42 16 29 2 -16 11 42 43 46 3 -1 4 43 88 82 1 -1 10 43 116 120 1 1 2 44 244 265 1

-1 5 42 35 34 1 -13 11 42 16 20 4 2 4 43 111 106 1 2 10 43 26 32 3 -4 3 44 150 133 1

2 5 42 30 24 1 -10 11 42 17 18 3 -9 5 43 28 27 1 5 10 43 52 60 2 -1 3 44 244 265 1

5 5 42 15 12 2 -7 11 42 58 52 1 -6 5 43 75 71 1 -15 11 43 55 58 2 2 3 44 105 108 1

-9 6 42 39 32 1 -4 11 42 28 27 1 -3 5 43 136 152 1 -12 11 43 41 42 2 -6 4 44 142 141 1

-6 6 42 61 69 1 -1 11 42 49 50 1 0 5 43 13 16 2 -9 11 43 100 108 1 -3 4 44 150 133 1

-3 6 42 13 31 3 2 11 42 21 8 3 3 5 43 61 71 1 -6 11 43 95 96 1 0 4 44 111 88 1

0 6 42 61 62 1 5 11 42 37 35 3 -11 6 43 93 96 1 -3 11 43 62 61 1 3 4 44 56 69 1

3 6 42 40 29 1 -15 12 42 29 26 3 -8 6 43 56 46 1 0 11 43 104 113 1 -8 5 44 56 72 1

6 6 42 32 26 2 -12 12 42 13 19 7 -5 6 43 75 71 1 3 11 43 55 52 2 -5 5 44 112 131 1

-11 7 42 58 52 1 -9 12 42 45 50 1 -2 6 43 111 106 1 -14 12 43 53 55 2 -2 5 44 107 108 1

-8 7 42 28 25 1 -6 12 42 33 26 1 1 6 43 98 92 1 -11 12 43 44 42 1 1 5 44 85 81 1

-5 7 42 23 28 2 -3 12 42 27 32 2 4 6 43 42 42 1 -8 12 43 152 155 1 4 5 44 75 59 1

-2 7 42 28 24 2 0 12 42 31 22 2 -13 7 43 93 89 1 -5 12 43 31 32 1 -10 6 44 64 60 1

1 7 42 49 49 1 3 12 42 31 30 3 -10 7 43 57 58 1 -2 12 43 33 32 2 -7 6 44 165 148 1

4 7 42 30 27 1 -14 13 42 27 15 3 -7 7 43 63 68 1 1 12 43 24 25 3 -4 6 44 140 141 1

7 7 42 42 41 2 -11 13 42 21 20 3 -4 7 43 73 80 1 4 12 43 86 85 2 -1 6 44 83 81 1

-13 8 42 46 47 2 -8 13 42 42 47 2 -1 7 43 97 91 1 -16 13 43 25 19 5 2 6 44 217 212 1

-10 8 42 14 10 2 -5 13 42 47 49 1 2 7 43 64 64 1 -13 13 43 16 11 5 5 6 44 43 38 1

-7 8 42 29 25 1 -2 13 42 15 8 5 5 7 43 32 32 2 -10 13 43 48 52 1 -12 7 44 40 39 1

-4 8 42 20 15 1 1 13 42 21 17 4 -15 8 43 68 71 2 -7 13 43 90 89 1 -9 7 44 41 48 1

-1 8 42 48 49 1 -13 14 42 33 15 2 -12 8 43 152 155 1 -4 13 43 20 20 2 -6 7 44 166 148 1

2 8 42 13 9 3 -10 14 42 13 6 5 -9 8 43 80 81 1 -1 13 43 16 25 6 -3 7 44 53 69 1

5 8 42 44 49 2 -7 14 42 44 41 1 -6 8 43 53 46 1 2 13 43 26 21 4 0 7 44 144 160 1

8 8 42 0 8 1 -4 14 42 30 35 2 -3 8 43 61 71 1 -15 14 43 8 19 7 3 7 44 87 82 1

-15 9 42 17 19 5 -1 14 42 0 17 1 0 8 43 153 167 1 -12 14 43 54 55 2 6 7 44 137 121 2

-12 9 42 48 50 2 -12 15 42 31 26 2 3 8 43 66 61 1 -9 14 43 60 62 1 -14 8 44 25 31 3

-9 9 42 26 15 1 -9 15 42 20 19 4 6 8 43 12 7 9 -6 14 43 0 7 1 -11 8 44 41 36 1

-6 9 42 38 32 1 -6 15 42 24 14 2 -17 9 43 55 56 3 -3 14 43 53 52 1 -8 8 44 175 171 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 21

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

-5 8 44 57 72 1 3 13 44 26 18 4 -2 7 45 23 23 1 -14 13 45 20 21 4 -4 7 46 119 124 1

-2 8 44 216 212 1 -14 14 44 117 103 1 1 7 45 35 39 1 -11 13 45 36 39 2 -1 7 46 155 157 1

1 8 44 56 47 1 -11 14 44 42 36 2 4 7 45 48 48 1 -8 13 45 27 22 2 2 7 46 111 112 1

4 8 44 147 140 1 -8 14 44 30 31 2 7 7 45 20 17 4 -5 13 45 41 43 1 5 7 46 66 65 2

7 8 44 70 76 2 -5 14 44 112 110 1 -13 8 45 28 22 2 -2 13 45 23 23 3 -15 8 46 0 7 1

-16 9 44 37 45 7 -2 14 44 70 67 1 -10 8 45 20 18 2 1 13 45 19 25 5 -12 8 46 104 105 1

-13 9 44 10 13 10 1 14 44 14 4 13 -7 8 45 52 53 1 -13 14 45 30 21 3 -9 8 46 78 75 1

-10 9 44 135 128 1 -13 15 44 37 45 2 -4 8 45 16 15 1 -10 14 45 14 19 6 -6 8 46 163 171 1

-7 9 44 43 48 1 -10 15 44 58 53 2 -1 8 45 34 39 1 -7 14 45 16 17 3 -3 8 46 73 74 1

-4 9 44 77 59 1 -7 15 44 71 76 1 2 8 45 20 25 2 -4 14 45 43 49 1 0 8 46 103 116 1

-1 9 44 56 47 1 -4 15 44 49 52 1 5 8 45 43 43 2 -1 14 45 14 25 8 3 8 46 16 15 3

2 9 44 58 53 2 -1 15 44 14 4 7 8 8 45 19 22 5 -12 15 45 38 34 2 6 8 46 21 18 4

5 9 44 114 110 2 -12 16 44 56 66 2 -15 9 45 50 48 2 -9 15 45 48 48 2 -17 9 46 46 35 4

8 9 44 28 21 4 -9 16 44 47 45 2 -12 9 45 61 61 1 -6 15 45 31 24 2 -14 9 46 101 115 1

-15 10 44 58 53 3 -6 16 44 58 64 2 -9 9 45 26 26 1 -3 15 45 33 29 2 -11 9 46 29 26 2

-12 10 44 84 73 1 -3 16 44 24 18 3 -6 9 45 66 70 1 -11 16 45 47 40 2 -8 9 46 76 75 1

-9 10 44 133 128 1 -8 17 44 28 21 3 -3 9 45 57 58 1 -8 16 45 23 22 3 -5 9 46 59 55 1

-6 10 44 65 60 1 0 0 45 41 46 1 0 9 45 37 38 1 -5 16 45 38 44 2 -2 9 46 112 112 1

-3 10 44 86 82 1 1 1 45 43 42 1 3 9 45 53 48 2 -1 1 46 172 177 1 1 9 46 169 175 1

0 10 44 124 119 1 -1 2 45 47 42 1 6 9 45 36 24 3 -3 2 46 279 274 1 4 9 46 51 49 2

3 10 44 18 21 5 2 2 45 56 51 1 -14 10 45 11 19 11 0 2 46 108 108 1 7 9 46 12 13 11

6 10 44 57 64 2 -3 3 45 103 109 1 -11 10 45 25 28 2 -5 3 46 145 159 1 -16 10 46 37 41 3

-14 11 44 42 36 2 0 3 45 52 82 1 -8 10 45 21 18 2 -2 3 46 278 274 1 -13 10 46 67 69 2

-11 11 44 142 131 1 3 3 45 50 61 1 -5 10 45 19 28 1 1 3 46 41 52 1 -10 10 46 153 166 1

-8 11 44 45 36 1 -5 4 45 25 25 1 -2 10 45 23 25 1 -7 4 46 118 124 1 -7 10 46 121 131 1

-5 11 44 45 38 1 -2 4 45 53 51 1 1 10 45 37 34 2 -4 4 46 95 97 1 -4 10 46 102 103 1

-2 11 44 53 53 1 1 4 45 73 76 1 4 10 45 46 49 2 -1 4 46 41 52 1 -1 10 46 164 175 1

1 11 44 25 35 3 4 4 45 15 15 2 -16 11 45 48 40 2 2 4 46 212 220 1 2 10 46 62 63 2

4 11 44 53 52 2 -7 5 45 35 41 1 -13 11 45 35 39 2 -9 5 46 58 55 1 5 10 46 62 75 2

-16 12 44 57 66 2 -4 5 45 25 25 1 -10 11 45 29 28 2 -6 5 46 58 64 1 -15 11 46 24 13 4

-13 12 44 17 6 8 -1 5 45 73 76 1 -7 11 45 20 20 2 -3 5 46 144 159 1 -12 11 46 20 27 4

-10 12 44 82 73 1 2 5 45 22 23 1 -4 11 45 47 48 1 0 5 46 140 139 1 -9 11 46 24 26 2

-7 12 44 40 39 1 5 5 45 22 28 2 -1 11 45 32 34 2 3 5 46 75 74 1 -6 11 46 130 127 1

-4 12 44 150 140 1 -9 6 45 67 70 1 2 11 45 22 23 3 -11 6 46 135 127 1 -3 11 46 8 15 7

-1 12 44 28 35 2 -6 6 45 119 120 1 5 11 45 46 44 2 -8 6 46 162 171 1 0 11 46 89 93 1

2 12 44 68 67 2 -3 6 45 48 61 1 -15 12 45 40 34 2 -5 6 46 58 64 1 3 11 46 83 82 2

-15 13 44 45 45 2 0 6 45 157 167 1 -12 12 45 55 54 2 -2 6 46 211 220 1 -14 12 46 94 89 1

-12 13 44 23 6 3 3 6 45 58 58 1 -9 12 45 61 61 1 1 6 46 158 157 1 -11 12 46 21 27 3

-9 13 44 14 13 4 6 6 45 43 36 2 -6 12 45 42 36 1 4 6 46 104 103 1 -8 12 46 102 105 1

-6 13 44 135 121 1 -11 7 45 23 20 2 -3 12 45 54 48 1 -13 7 46 147 153 1 -5 12 46 65 65 1

-3 13 44 20 21 3 -8 7 45 53 53 1 0 12 45 32 29 2 -10 7 46 121 131 1 -2 12 46 58 63 1

0 13 44 19 36 4 -5 7 45 36 41 1 3 12 45 30 29 3 -7 7 46 96 104 1 1 12 46 24 27 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 22

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

4 12 46 42 43 3 2 6 47 280 268 1 -10 12 47 227 224 2 -6 6 48 93 102 1 5 11 48 45 48 4

-16 13 46 58 57 2 5 6 47 423 385 2 -7 12 47 96 96 1 -3 6 48 69 70 1 -15 12 48 31 28 3

-13 13 46 13 16 7 -12 7 47 105 96 1 -4 12 47 422 413 2 0 6 48 209 213 1 -12 12 48 77 68 1

-10 13 46 63 69 1 -9 7 47 442 415 2 -1 12 47 65 73 3 3 6 48 55 56 1 -9 12 48 73 82 1

-7 13 46 145 153 1 -6 7 47 435 434 2 2 12 47 210 195 2 6 6 48 15 8 5 -6 12 48 5 8 4

-4 13 46 48 49 1 -3 7 47 88 92 1 -15 13 47 160 147 2 -11 7 48 28 30 1 -3 12 48 53 57 1

-1 13 46 20 27 4 0 7 47 74 85 1 -12 13 47 33 29 2 -8 7 48 58 60 1 0 12 48 32 29 2

2 13 46 84 82 2 3 7 47 265 269 1 -9 13 47 24 27 3 -5 7 48 31 31 1 3 12 48 39 37 2

-15 14 46 25 26 3 6 7 47 366 373 3 -6 13 47 360 373 2 -2 7 48 30 31 1 -14 13 48 34 36 2

-12 14 46 90 89 2 -14 8 47 30 31 3 -3 13 47 331 329 2 1 7 48 33 34 1 -11 13 48 20 19 3

-9 14 46 99 115 1 -11 8 47 42 41 1 0 13 47 70 66 2 4 7 48 39 37 1 -8 13 48 34 37 2

-6 14 46 18 18 3 -8 8 47 588 561 2 -14 14 47 200 192 2 7 7 48 35 32 2 -5 13 48 39 39 1

-3 14 46 78 82 1 -5 8 47 446 399 1 -11 14 47 199 166 1 -13 8 48 33 37 2 -2 13 48 47 47 2

0 14 46 56 68 2 -2 8 47 281 268 1 -8 14 47 26 31 2 -10 8 48 19 11 2 1 13 48 0 12 1

-14 15 46 28 26 3 1 8 47 63 66 1 -5 14 47 135 145 2 -7 8 48 58 60 1 -13 14 48 39 36 2

-11 15 46 16 13 5 4 8 47 420 413 3 -2 14 47 208 195 1 -4 8 48 25 26 1 -10 14 48 20 12 3

-8 15 46 15 7 4 7 8 47 32 20 3 1 14 47 117 110 2 -1 8 48 31 34 1 -7 14 48 33 32 2

-5 15 46 62 75 1 -16 9 47 45 43 4 -13 15 47 157 147 3 2 8 48 26 25 2 -4 14 48 37 36 2

-2 15 46 81 82 1 -13 9 47 22 27 3 -10 15 47 238 222 2 5 8 48 40 39 3 -1 14 48 0 12 1

-13 16 46 56 57 2 -10 9 47 286 292 1 -7 15 47 24 20 3 8 8 48 19 15 5 -12 15 48 32 28 3

-10 16 46 37 41 2 -7 9 47 444 415 2 -4 15 47 47 56 1 -15 9 48 66 57 2 -9 15 48 64 57 1

-7 16 46 14 13 6 -4 9 47 30 37 1 -1 15 47 114 110 1 -12 9 48 73 82 1 -6 15 48 47 42 2

-4 16 46 42 43 2 -1 9 47 59 66 1 -12 16 47 201 180 2 -9 9 48 15 2 2 -3 15 48 39 38 2

-9 17 46 43 35 2 2 9 47 184 186 2 -9 16 47 36 43 2 -6 9 48 67 65 1 -11 16 48 53 50 2

0 1 47 257 183 1 5 9 47 136 145 2 -6 16 47 117 129 1 -3 9 48 56 57 1 -8 16 48 24 15 3

1 2 47 727 622 3 -15 10 47 241 222 2 0 0 48 181 179 1 0 9 48 78 73 1 -5 16 48 42 48 2

-4 3 47 80 105 1 -12 10 47 230 224 1 1 1 48 40 32 1 3 9 48 60 57 2 -1 1 49 110 101 1

-1 3 47 727 622 4 -9 10 47 284 292 2 -1 2 48 38 32 1 6 9 48 48 42 2 -3 2 49 261 259 1

2 3 47 555 545 3 -6 10 47 428 418 1 2 2 48 23 17 1 -14 10 48 14 12 6 0 2 49 113 103 1

-6 4 47 286 263 1 -3 10 47 264 269 1 -3 3 48 119 134 1 -11 10 48 23 20 2 -5 3 49 94 110 1

-3 4 47 82 105 1 0 10 47 344 334 2 0 3 48 138 144 1 -8 10 48 14 11 2 -2 3 49 261 259 1

0 4 47 1107 1037 6 3 10 47 334 329 2 3 3 48 67 70 1 -5 10 48 42 46 1 1 3 49 84 92 1

3 4 47 86 92 1 6 10 47 120 129 2 -5 4 48 94 102 1 -2 10 48 24 25 2 -7 4 49 66 64 1

-8 5 47 446 399 2 -14 11 47 204 166 1 -2 4 48 20 17 1 1 10 48 39 39 2 -4 4 49 160 156 1

-5 5 47 37 33 1 -11 11 47 217 225 1 1 4 48 52 46 1 4 10 48 39 36 2 -1 4 49 85 92 1

-2 5 47 555 545 3 -8 11 47 39 41 1 4 4 48 26 26 1 -16 11 48 56 50 3 2 4 49 183 198 1

1 5 47 153 161 1 -5 11 47 422 385 2 -7 5 48 32 31 1 -13 11 48 23 19 3 -9 5 49 39 39 1

4 5 47 25 37 1 -2 11 47 177 186 1 -4 5 48 93 102 1 -10 11 48 15 20 4 -6 5 49 40 45 1

-10 6 47 429 418 2 1 11 47 63 74 2 -1 5 48 49 46 1 -7 11 48 25 30 2 -3 5 49 94 110 1

-7 6 47 434 434 2 4 11 47 46 56 2 2 5 48 32 31 1 -4 11 48 37 37 1 0 5 49 96 101 1

-4 6 47 287 263 2 -16 12 47 205 180 3 5 5 48 43 46 1 -1 11 48 40 39 2 3 5 49 81 77 1

-1 6 47 153 161 1 -13 12 47 30 29 2 -9 6 48 70 65 1 2 11 48 53 47 2 -11 6 49 142 139 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 23

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

-8 6 49 143 152 1 3 11 49 70 67 2 4 5 50 100 95 1 1 11 50 150 155 1 -1 5 51 42 44 1

-5 6 49 39 45 1 -14 12 49 73 69 1 -10 6 50 78 68 1 4 11 50 129 131 2 2 5 51 62 63 1

-2 6 49 181 198 1 -11 12 49 23 25 3 -7 6 50 406 408 1 -16 12 50 447 415 3 5 5 51 70 71 1

1 6 49 160 166 1 -8 12 49 140 149 2 -4 6 50 80 97 1 -13 12 50 143 166 1 -9 6 51 30 29 1

4 6 49 77 80 1 -5 12 49 59 63 1 -1 6 50 323 316 2 -10 12 50 168 178 1 -6 6 51 11 6 3

-13 7 49 113 116 1 -2 12 49 65 65 1 2 6 50 197 179 1 -7 12 50 312 294 2 -3 6 51 145 161 1

-10 7 49 155 159 1 1 12 49 24 14 3 5 6 50 76 45 1 -4 12 50 656 653 3 0 6 51 175 185 1

-7 7 49 142 145 1 4 12 49 59 60 2 -12 7 50 310 294 3 -1 12 50 147 155 2 3 6 51 52 58 1

-4 7 49 66 63 1 -13 13 49 24 15 3 -9 7 50 227 215 1 2 12 50 18 16 6 6 6 51 36 28 2

-1 7 49 157 166 1 -10 13 49 65 72 1 -6 7 50 409 408 1 -15 13 50 75 87 2 -11 7 51 52 53 1

2 7 49 108 114 1 -7 13 49 112 116 1 -3 7 50 690 655 3 -12 13 50 143 166 1 -8 7 51 83 88 1

5 7 49 60 63 2 -4 13 49 43 44 1 0 7 50 357 349 1 -9 13 50 192 185 1 -5 7 51 58 56 1

-15 8 49 23 25 4 -1 13 49 6 14 6 3 7 50 179 183 1 -6 13 50 54 60 1 -2 7 51 62 63 1

-12 8 49 141 149 1 2 13 49 107 108 2 6 7 50 54 60 2 -3 13 50 41 42 7 1 7 51 36 37 1

-9 8 49 47 50 1 -15 14 49 29 25 3 -14 8 50 113 114 2 0 13 50 79 76 2 4 7 51 99 109 1

-6 8 49 144 152 1 -12 14 49 75 69 2 -11 8 50 128 139 1 -14 14 50 54 47 2 7 7 51 31 33 3

-3 8 49 77 77 1 -9 14 49 111 115 1 -8 8 50 1139 1075 5 -11 14 50 30 20 2 -13 8 51 57 61 2

0 8 49 161 164 1 -6 14 49 18 14 3 -5 8 50 335 315 1 -8 14 50 115 114 1 -10 8 51 35 31 1

3 8 49 32 31 2 -3 14 49 69 67 1 -2 8 50 197 179 1 -5 14 50 176 168 1 -7 8 51 82 88 1

6 8 49 19 14 4 0 14 49 60 49 2 1 8 50 384 390 2 -2 14 50 17 16 5 -4 8 51 9 7 4

-14 9 49 111 115 1 -14 15 49 24 25 4 4 8 50 656 653 5 1 14 50 113 110 2 -1 8 51 38 37 1

-11 9 49 15 12 4 -11 15 49 30 25 3 7 8 50 142 137 2 -13 15 50 76 87 2 2 8 51 27 28 2

-8 9 49 49 50 1 -8 15 49 20 24 3 -16 9 50 212 211 2 -10 15 50 178 150 1 5 8 51 16 14 8

-5 9 49 41 39 1 -5 15 49 41 47 2 -13 9 50 195 185 1 -7 15 50 140 137 1 8 8 51 29 32 3

-2 9 49 109 114 1 -2 15 49 103 108 1 -10 9 50 87 95 1 -4 15 50 131 131 1 -15 9 51 44 31 2

1 9 49 135 151 1 -10 16 49 45 47 2 -7 9 50 228 215 1 -1 15 50 116 110 2 -12 9 51 38 31 2

4 9 49 45 44 2 -7 16 49 19 5 4 -4 9 50 99 95 1 -12 16 50 442 415 3 -9 9 51 43 40 1

7 9 49 23 5 4 -4 16 49 54 60 2 -1 9 50 388 390 1 -9 16 50 210 211 2 -6 9 51 30 29 1

-16 10 49 46 47 3 0 1 50 850 808 4 2 9 50 285 275 2 -6 16 50 64 69 2 -3 9 51 53 58 1

-13 10 49 65 72 1 -2 2 50 48 78 1 5 9 50 174 168 2 0 0 51 211 227 2 0 9 51 133 139 1

-10 10 49 142 144 1 1 2 50 562 515 2 -15 10 50 179 150 2 1 1 51 123 126 1 3 9 51 43 34 2

-7 10 49 153 159 1 -4 3 50 464 440 2 -12 10 50 175 178 1 -1 2 51 124 126 1 6 9 51 24 30 3

-4 10 49 75 80 1 -1 3 50 559 515 3 -9 10 50 85 95 1 2 2 51 55 53 1 -14 10 51 30 29 3

-1 10 49 134 151 1 2 3 50 200 190 1 -6 10 50 80 68 1 -3 3 51 8 15 5 -11 10 51 18 21 3

2 10 49 65 65 2 -6 4 50 80 97 1 -3 10 50 176 183 1 0 3 51 166 186 1 -8 10 51 33 31 1

5 10 49 49 47 3 -3 4 50 462 440 3 3 10 50 38 42 3 3 3 51 145 161 1 -5 10 51 70 71 1

-15 11 49 30 25 5 0 4 50 1376 1276 8 6 10 50 65 69 2 -5 4 51 121 127 1 -2 10 51 33 28 1

-12 11 49 27 25 2 3 4 50 690 655 3 -14 11 50 36 20 2 -2 4 51 54 53 1 1 10 51 27 29 3

-9 11 49 13 12 5 -8 5 50 335 315 1 -11 11 50 246 256 2 1 4 51 39 44 1 4 10 51 37 34 3

-6 11 49 137 139 1 -5 5 50 227 215 1 -8 11 50 131 139 1 4 4 51 16 7 2 -16 11 51 32 25 6

-3 11 49 35 31 1 -2 5 50 199 190 1 -5 11 50 71 45 1 -7 5 51 56 56 1 -13 11 51 18 21 4

0 11 49 92 94 2 1 5 50 321 316 2 -2 11 50 281 275 2 -4 5 51 119 128 1 -10 11 51 17 21 4

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 24

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

-7 11 51 49 53 1 -3 5 52 52 46 1 -9 11 52 43 56 2 -2 5 53 49 61 1 -8 11 53 31 30 2

-4 11 51 97 109 1 0 5 52 39 53 2 -6 11 52 81 77 1 1 5 53 122 118 1 -5 11 53 41 33 1

-1 11 51 29 29 2 3 5 52 106 99 1 -3 11 52 54 60 1 4 5 53 26 32 1 -2 11 53 109 107 1

2 11 51 53 57 2 -11 6 52 84 77 1 0 11 52 117 116 1 -10 6 53 44 39 1 1 11 53 29 31 3

5 11 51 41 48 5 -8 6 52 64 73 1 3 11 52 20 19 5 -7 6 53 162 145 1 4 11 53 123 115 2

-15 12 51 48 42 2 -5 6 52 29 27 1 -14 12 52 18 21 5 -4 6 53 141 140 1 -16 12 53 184 176 3

-12 12 51 87 78 1 -2 6 52 38 43 1 -11 12 52 20 23 4 -1 6 53 123 118 1 -13 12 53 28 32 3

-9 12 51 37 31 2 1 6 52 153 165 1 -8 12 52 234 237 2 2 6 53 64 61 1 -10 12 53 31 35 2

-6 12 51 34 28 2 4 6 52 17 15 2 -5 12 52 63 65 1 5 6 53 43 33 1 -7 12 53 150 157 1

-3 12 51 39 34 2 -13 7 52 79 76 1 -2 12 52 53 47 1 -12 7 53 152 157 2 -4 12 53 246 245 1

0 12 51 11 9 10 -10 7 52 125 136 1 1 12 52 52 54 2 -9 7 53 103 100 1 -1 12 53 34 31 2

3 12 51 36 35 3 -7 7 52 181 187 1 4 12 52 114 122 2 -6 7 53 160 145 1 2 12 53 41 23 2

-14 13 51 12 13 11 -4 7 52 111 109 1 -13 13 52 37 41 2 -3 7 53 197 193 1 -15 13 53 42 25 3

-11 13 51 18 21 4 -1 7 52 153 165 1 -10 13 52 54 65 2 0 7 53 127 126 1 -12 13 53 23 32 3

-8 13 51 54 61 1 2 7 52 78 84 1 -7 13 52 72 76 1 3 7 53 101 87 1 -9 13 53 39 29 2

-5 13 51 17 14 3 5 7 52 61 65 2 -4 13 52 28 23 2 6 7 53 56 54 2 -6 13 53 51 54 1

-2 13 51 54 57 1 -15 8 52 45 48 3 -1 13 52 55 54 2 -14 8 53 58 56 2 -3 13 53 76 80 1

1 13 51 9 21 9 -12 8 52 234 237 2 2 13 52 84 90 2 -11 8 53 29 30 2 0 13 53 75 58 2

-13 14 51 22 13 3 -9 8 52 61 61 1 -12 14 52 26 21 3 -8 8 53 441 414 2 -14 14 53 71 63 2

-10 14 51 21 29 3 -6 8 52 64 73 1 -9 14 52 104 104 1 -5 8 53 43 30 1 -11 14 53 32 24 2

-7 14 51 34 33 2 -3 8 52 106 99 1 -6 14 52 22 22 3 -2 8 53 61 61 1 -8 14 53 58 56 1

-4 14 51 35 34 2 0 8 52 325 331 1 -3 14 52 27 19 3 1 8 53 134 130 1 -5 14 53 141 136 1

-1 14 51 17 21 5 3 8 52 60 60 2 0 14 52 41 29 2 4 8 53 247 245 2 -2 14 53 33 23 3

-12 15 51 46 42 2 6 8 52 25 22 3 -11 15 52 71 60 1 7 8 53 76 77 2 -13 15 53 37 25 2

-9 15 51 42 31 2 -14 9 52 105 104 1 -8 15 52 44 48 1 -16 9 53 63 61 2 -10 15 53 58 45 1

-6 15 51 32 31 2 -11 9 52 47 56 1 -5 15 52 33 38 2 -13 9 53 45 29 2 -7 15 53 74 77 1

-3 15 51 36 35 2 -8 9 52 62 61 1 -2 15 52 91 90 1 -10 9 53 44 34 1 -4 15 53 124 115 1

-11 16 51 30 25 3 -5 9 52 14 17 2 -10 16 52 42 49 2 -7 9 53 102 100 1 -12 16 53 179 176 1

-8 16 51 31 32 2 -2 9 52 76 84 1 -7 16 52 48 49 2 -4 9 53 25 32 1 -9 16 53 64 61 1

-5 16 51 42 48 2 1 9 52 73 81 1 -4 16 52 116 122 1 -1 9 53 135 130 1 -6 16 53 47 38 2

-1 1 52 90 99 1 4 9 52 28 23 3 0 1 53 287 311 1 2 9 53 112 107 1 0 0 54 44 84 2

-3 2 52 211 214 1 7 9 52 50 49 2 -2 2 53 55 67 1 5 9 53 141 136 2 1 1 54 97 121 1

0 2 52 12 32 2 -16 10 52 47 49 3 1 2 53 211 182 1 -15 10 53 55 45 2 -1 2 54 96 121 1

-5 3 52 51 46 1 -13 10 52 62 65 1 -4 3 53 81 80 1 -12 10 53 42 35 2 2 2 54 141 133 1

-2 3 52 211 214 1 -10 10 52 72 67 1 -1 3 53 209 182 1 -9 10 53 43 34 1 -3 3 54 19 7 1

1 3 52 138 156 1 -7 10 52 128 136 1 2 3 53 54 61 1 -6 10 53 40 39 1 0 3 54 18 23 2

-7 4 52 112 109 1 -4 10 52 17 15 2 -6 4 53 141 140 1 -3 10 53 98 87 1 3 3 54 134 136 1

-4 4 52 366 367 2 -1 10 52 72 81 1 -3 4 53 80 80 1 0 10 53 20 15 3 -5 4 54 79 77 1

-1 4 52 138 156 1 2 10 52 54 47 2 0 4 53 365 351 2 3 10 53 79 80 2 -2 4 54 140 133 1

2 4 52 35 43 1 5 10 52 36 38 3 3 4 53 197 193 1 6 10 53 49 38 3 1 4 54 110 106 1

-9 5 52 12 17 3 -15 11 52 67 60 2 -8 5 53 43 30 1 -14 11 53 29 24 3 4 4 54 109 123 1

-6 5 52 29 27 1 -12 11 52 21 23 3 -5 5 53 123 133 1 -11 11 53 62 63 1 -7 5 54 72 68 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 25

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

-4 5 54 76 77 1 -10 11 54 58 53 1 -6 5 55 177 158 1 -12 11 55 17 20 5 1 5 56 144 152 1

-1 5 54 107 106 1 -7 11 54 36 39 1 -3 5 55 75 61 1 -9 11 55 117 114 1 4 5 56 17 21 2

2 5 54 87 84 1 -4 11 54 59 63 1 0 5 55 102 117 1 -6 11 55 70 67 1 -10 6 56 28 26 1

5 5 54 108 105 1 -1 11 54 33 28 2 3 5 55 56 48 1 -3 11 55 47 52 1 -7 6 56 183 190 1

-9 6 54 45 48 1 2 11 54 19 23 5 -11 6 55 73 67 1 0 11 55 86 80 1 -4 6 56 44 36 1

-6 6 54 81 91 1 5 11 54 39 31 3 -8 6 55 89 92 1 3 11 55 27 27 3 -1 6 56 145 152 1

-3 6 54 134 136 1 -15 12 54 38 31 3 -5 6 55 176 158 1 -14 12 55 17 15 5 2 6 56 114 123 1

0 6 54 132 164 1 -12 12 54 98 94 1 -2 6 55 27 31 1 -11 12 55 17 20 4 5 6 56 62 60 1

3 6 54 48 48 1 -9 12 54 36 31 2 1 6 55 246 240 1 -8 12 55 298 302 2 -12 7 56 73 66 2

6 6 54 43 35 2 -6 12 54 43 35 1 4 6 55 30 27 2 -5 12 55 74 68 1 -9 7 56 145 150 1

-11 7 54 43 39 2 -3 12 54 57 60 1 -13 7 55 93 88 1 -2 12 55 80 78 1 -6 7 56 184 190 1

-8 7 54 50 48 1 0 12 54 84 79 1 -10 7 55 173 176 1 1 12 55 50 52 2 -3 7 56 74 83 1

-5 7 54 71 68 1 3 12 54 22 12 5 -7 7 55 187 177 1 -13 13 55 67 67 1 0 7 56 101 95 1

-2 7 54 88 84 1 -14 13 54 41 40 2 -4 7 55 135 140 1 -10 13 55 86 90 1 3 7 56 110 116 1

1 7 54 44 44 1 -11 13 54 21 19 3 -1 7 55 244 240 1 -7 13 55 95 88 1 6 7 56 60 57 2

4 7 54 61 63 1 -8 13 54 29 22 2 2 7 55 169 157 1 -4 13 55 44 47 1 -14 8 56 48 52 2

7 7 54 61 57 2 -5 13 54 42 41 1 5 7 55 78 68 2 -1 13 55 45 52 2 -11 8 56 30 28 2

-13 8 54 30 22 3 -2 13 54 22 23 3 -15 8 55 44 45 3 2 13 55 111 116 2 -8 8 56 266 270 1

-10 8 54 73 72 1 1 13 54 42 37 3 -12 8 55 300 302 2 -12 14 55 21 15 3 -5 8 56 14 12 2

-7 8 54 50 48 1 -13 14 54 44 40 3 -9 8 55 78 74 1 -9 14 55 146 147 2 -2 8 56 112 123 1

-4 8 54 109 122 1 -10 14 54 48 48 2 -6 8 55 90 92 1 -6 14 55 49 63 1 1 8 56 51 51 1

-1 8 54 46 44 1 -7 14 54 57 57 1 -3 8 55 55 48 1 -3 14 55 25 27 3 4 8 56 159 160 2

2 8 54 54 55 1 -4 14 54 51 44 2 0 8 55 464 464 2 0 14 55 54 55 2 7 8 56 21 21 5

5 8 54 47 41 4 -1 14 54 42 37 2 3 8 55 52 52 2 -11 15 55 80 72 1 -16 9 56 18 24 10

8 8 54 61 54 3 -12 15 54 36 31 2 6 8 55 51 63 2 -8 15 55 43 45 2 -13 9 56 31 34 2

-15 9 54 39 32 3 -9 15 54 34 32 2 -14 9 55 150 147 2 -5 15 55 70 61 1 -10 9 56 66 64 1

-12 9 54 35 31 2 -6 15 54 30 31 2 -11 9 55 119 114 1 -2 15 55 108 116 1 -7 9 56 145 150 1

-9 9 54 52 48 1 -3 15 54 17 12 5 -8 9 55 79 74 1 -10 16 55 69 76 1 -4 9 56 18 21 1

-6 9 54 44 48 1 -11 16 54 52 48 2 -5 9 55 26 21 1 -7 16 55 56 58 1 -1 9 56 50 51 1

-3 9 54 49 48 1 -8 16 54 57 54 2 -2 9 55 165 157 1 0 1 56 144 145 1 2 9 56 95 103 1

0 9 54 54 54 1 -5 16 54 42 31 2 1 9 55 121 115 1 -2 2 56 89 83 1 5 9 56 121 119 2

3 9 54 62 60 1 -1 1 55 194 198 1 4 9 55 48 47 2 1 2 56 236 263 1 -15 10 56 68 68 2

6 9 54 33 30 3 -3 2 55 308 289 1 7 9 55 58 58 2 -4 3 56 26 29 1 -12 10 56 48 46 2

-14 10 54 50 48 2 0 2 55 39 23 1 -16 10 55 73 76 2 -1 3 56 237 263 1 -9 10 56 64 64 1

-11 10 54 58 53 1 -5 3 55 73 61 1 -13 10 55 90 90 1 2 3 56 62 62 1 -6 10 56 28 26 1

-8 10 54 70 72 1 -2 3 55 309 289 2 -10 10 55 68 61 1 -6 4 56 42 36 1 -3 10 56 106 116 1

-5 10 54 105 105 1 1 3 55 87 87 1 -7 10 55 172 176 1 -3 4 56 25 29 1 0 10 56 53 53 1

-2 10 54 51 55 1 -7 4 55 133 140 1 -4 10 55 32 27 1 0 4 56 291 275 2 3 10 56 77 77 1

1 10 54 30 28 2 -4 4 55 463 454 2 -1 10 55 120 115 1 3 4 56 75 84 1 6 10 56 35 36 3

4 10 54 48 44 2 -1 4 55 90 87 1 2 10 55 77 78 2 -8 5 56 13 12 2 -14 11 56 37 35 2

-16 11 54 54 48 2 2 4 55 26 31 1 5 10 55 71 61 2 -5 5 56 162 175 1 -11 11 56 28 20 2

-13 11 54 18 19 4 -9 5 55 27 21 1 -15 11 55 84 72 2 -2 5 56 59 62 1 -8 11 56 30 29 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 26

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

-5 11 56 55 60 1 5 5 57 32 32 1 -1 11 57 85 84 1 -11 6 58 143 137 2 0 11 58 79 67 2

-2 11 56 93 103 1 -9 6 57 68 63 1 2 11 57 42 40 2 -8 6 58 195 184 1 3 11 58 76 81 2

1 11 56 23 22 3 -6 6 57 242 258 1 5 11 57 69 72 3 -5 6 58 268 264 1 -14 12 58 12 10 10

4 11 56 68 63 2 -3 6 57 22 27 1 -15 12 57 36 34 2 -2 6 58 157 132 1 -11 12 58 50 43 2

-13 12 56 17 15 5 0 6 57 159 171 1 -12 12 57 126 121 1 1 6 58 470 445 2 -8 12 58 295 267 2

-10 12 56 45 46 2 3 6 57 57 61 1 -9 12 57 70 78 1 4 6 58 24 15 2 -5 12 58 53 71 1

-7 12 56 66 66 2 6 6 57 16 18 5 -6 12 57 14 18 4 -13 7 58 115 119 2 -2 12 58 157 164 1

-4 12 56 155 160 1 -11 7 57 46 42 2 -3 12 57 63 66 1 -10 7 58 258 237 1 1 12 58 39 39 3

-1 12 56 27 22 3 -8 7 57 121 124 1 0 12 57 117 116 1 -7 7 58 94 80 1 -13 13 58 94 89 1

2 12 56 25 20 4 -5 7 57 84 83 1 3 12 57 25 25 4 -4 7 58 61 43 1 -10 13 58 120 126 2

-15 13 56 56 53 2 -2 7 57 138 143 1 -14 13 57 54 52 2 -1 7 58 469 445 2 -7 13 58 110 119 1

-12 13 56 17 15 4 1 7 57 78 79 1 -11 13 57 18 2 4 2 7 58 172 175 1 -4 13 58 52 41 1

-9 13 56 26 34 2 4 7 57 74 69 2 -8 13 57 65 65 1 5 7 58 50 71 2 -1 13 58 42 39 2

-6 13 56 55 57 1 7 7 57 59 58 2 -5 13 57 77 76 1 -15 8 58 58 47 2 2 13 58 89 86 2

-3 13 56 74 77 1 -13 8 57 66 65 2 -2 13 57 40 40 2 -12 8 58 297 267 2 -12 14 58 18 10 4

0 13 56 15 19 7 -10 8 57 146 149 1 1 13 57 40 37 3 -9 8 58 36 39 1 -9 14 58 130 124 1

-14 14 56 73 64 2 -7 8 57 119 124 1 -13 14 57 54 52 2 -6 8 58 192 184 1 -6 14 58 39 39 1

-11 14 56 36 35 2 -4 8 57 201 212 1 -10 14 57 84 85 1 -3 8 58 45 48 1 -3 14 58 76 81 1

-8 14 56 46 52 1 -1 8 57 77 79 1 -7 14 57 60 58 2 0 8 58 307 279 1 0 14 58 44 51 2

-5 14 56 118 119 1 2 8 57 114 115 1 -4 14 57 66 65 1 3 8 58 85 89 2 -11 15 58 20 8 5

-2 14 56 22 20 4 5 8 57 80 76 2 -1 14 57 38 38 2 6 8 58 35 39 3 -8 15 58 56 47 1

-13 15 56 53 53 2 8 8 57 76 73 2 -12 15 57 33 34 2 -14 9 58 133 123 2 -5 15 58 82 88 1

-10 15 56 72 68 1 -15 9 57 43 27 3 -9 15 57 35 26 2 -11 9 58 171 176 2 -2 15 58 88 86 2

-7 15 56 19 21 3 -12 9 57 74 78 1 -6 15 57 51 49 2 -8 9 58 33 39 1 -10 16 58 98 94 1

-4 15 56 66 63 1 -9 9 57 27 27 2 -3 15 57 26 25 3 -5 9 58 147 145 1 -7 16 58 22 16 3

-9 16 56 10 24 9 -6 9 57 68 63 1 -11 16 57 95 91 1 -2 9 58 172 175 1 0 1 59 131 135 1

-6 16 56 35 36 2 -3 9 57 56 61 1 -8 16 57 78 73 1 1 9 58 133 133 1 -2 2 59 51 37 1

0 0 57 38 42 1 0 9 57 32 27 1 -5 16 57 70 72 1 4 9 58 54 41 2 1 2 59 149 166 1

1 1 57 49 66 1 3 9 57 68 66 1 -3 2 58 529 565 2 7 9 58 25 16 4 -4 3 59 77 87 1

-1 2 57 49 66 1 6 9 57 57 49 2 0 2 58 0 11 1 -16 10 58 99 94 2 -1 3 59 148 166 1

2 2 57 181 200 1 -14 10 57 90 85 2 -5 3 58 438 434 2 -13 10 58 120 126 1 2 3 59 17 20 2

-3 3 57 100 111 1 -11 10 57 76 74 1 -2 3 58 531 565 3 -10 10 58 50 71 1 -6 4 59 11 10 2

0 3 57 191 227 1 -8 10 57 143 149 1 1 3 58 80 90 1 -7 10 58 259 237 1 -3 4 59 75 87 1

3 3 57 23 27 1 -5 10 57 28 32 1 -7 4 58 62 43 1 -4 10 58 17 15 3 0 4 59 296 290 2

-5 4 57 182 189 1 -2 10 57 110 115 1 -4 4 58 318 287 1 -1 10 58 130 133 1 3 4 59 94 92 1

-2 4 57 180 200 1 1 10 57 86 84 2 -1 4 58 81 90 1 2 10 58 159 164 2 -8 5 59 58 51 1

1 4 57 95 106 1 4 10 57 65 65 2 2 4 58 159 132 1 5 10 58 85 88 3 -5 5 59 131 151 1

4 4 57 201 212 1 -16 11 57 97 91 2 -9 5 58 149 145 1 -15 11 58 23 8 4 -2 5 59 13 20 3

-7 5 57 85 83 1 -13 11 57 0 2 1 -6 5 58 269 264 1 -12 11 58 51 43 2 1 5 59 46 48 1

-4 5 57 183 189 1 -10 11 57 72 74 1 -3 5 58 436 434 2 -9 11 58 166 176 1 4 5 59 53 47 1

-1 5 57 96 106 1 -7 11 57 45 42 1 0 5 58 231 241 1 -6 11 58 139 137 1 -10 6 59 16 11 3

2 5 57 137 143 1 -4 11 57 70 69 1 3 5 58 45 48 1 -3 11 58 80 89 1 -7 6 59 73 78 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 27

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

-4 6 59 0 10 1 -13 12 59 48 47 2 6 6 60 10 7 10 0 12 60 90 90 1 -4 7 61 520 466 2

-1 6 59 47 48 1 -10 12 59 9 6 9 -11 7 60 40 42 2 3 12 60 37 38 3 -1 7 61 213 196 1

2 6 59 85 104 1 -7 12 59 69 67 1 -8 7 60 81 81 1 -14 13 60 41 38 2 2 7 61 391 397 2

5 6 59 59 59 2 -4 12 59 141 149 1 -5 7 60 42 42 1 -11 13 60 16 19 5 5 7 61 190 214 2

-12 7 59 70 67 2 -1 12 59 14 18 6 -2 7 60 106 109 1 -8 13 60 15 10 5 -15 8 61 144 165 2

-9 7 59 81 78 1 2 12 59 35 31 3 1 7 60 64 60 1 -5 13 60 54 54 1 -12 8 61 546 515 4

-6 7 59 72 78 1 -12 13 59 46 47 3 4 7 60 35 28 2 -2 13 60 37 45 2 -9 8 61 175 185 1

-3 7 59 93 92 1 -9 13 59 8 10 7 7 7 60 37 37 3 1 13 60 16 10 7 -6 8 61 311 285 1

0 7 59 171 173 1 -6 13 59 21 24 2 -13 8 60 9 10 9 -13 14 60 41 38 2 -3 8 61 43 37 1

3 7 59 36 42 2 -3 13 59 37 37 2 -10 8 60 93 97 1 -10 14 60 64 66 2 0 8 61 900 842 4

6 7 59 27 24 3 0 13 59 40 39 3 -7 8 60 79 81 1 -7 14 60 32 37 2 3 8 61 182 171 2

-14 8 59 20 22 6 -14 14 59 70 70 2 -4 8 60 115 123 1 -4 14 60 23 31 3 6 8 61 177 201 2

-11 8 59 16 5 4 -11 14 59 30 35 2 -1 8 60 63 60 1 -1 14 60 14 10 8 -14 9 61 180 181 2

-8 8 59 201 207 1 -8 14 59 18 22 3 2 8 60 61 55 2 -12 15 60 33 30 3 -11 9 61 320 326 2

-5 8 59 57 51 1 -5 14 59 87 95 1 5 8 60 55 54 2 -9 15 60 25 18 3 -8 9 61 174 185 1

-2 8 59 88 104 1 -2 14 59 36 31 3 8 8 60 46 47 3 -6 15 60 53 55 1 -5 9 61 281 294 1

1 8 59 31 34 2 -10 15 59 36 33 2 -15 9 60 27 18 4 -3 15 60 40 38 2 -2 9 61 391 397 2

4 8 59 143 149 2 -7 15 59 24 25 3 -12 9 60 76 75 1 -8 16 60 42 47 2 1 9 61 119 131 1

7 8 59 27 25 3 -4 15 59 80 79 1 -9 9 60 38 34 1 -1 1 61 611 507 3 4 9 61 166 167 1

-16 9 59 36 31 3 -9 16 59 36 31 2 -6 9 60 18 15 1 -3 2 61 554 519 3 7 9 61 183 180 2

-13 9 59 5 10 5 -6 16 59 11 9 11 -3 9 60 55 57 1 0 2 61 630 550 4 -13 10 61 67 80 1

-10 9 59 26 27 2 0 0 60 19 12 3 0 9 60 10 7 9 -5 3 61 339 344 1 -7 10 61 133 133 1

-7 9 59 80 78 1 1 1 60 29 38 1 3 9 60 34 38 2 -2 3 61 554 519 3 -4 10 61 133 152 1

-4 9 59 52 47 1 -1 2 60 32 38 1 6 9 60 53 55 3 1 3 61 281 260 2 -1 10 61 118 131 1

-1 9 59 35 34 1 2 2 60 123 136 1 -14 10 60 68 66 2 -7 4 61 516 466 2 2 10 61 73 61 2

2 9 59 38 38 2 -3 3 60 22 29 1 -11 10 60 32 38 2 -4 4 61 1389 1299 6 5 10 61 151 161 2

5 9 59 92 95 2 0 3 60 197 225 1 -8 10 60 93 97 1 -1 4 61 279 260 1 -15 11 61 124 128 2

-15 10 59 33 33 3 3 3 60 20 17 1 -5 10 60 26 21 2 2 4 61 88 68 1 -12 11 61 169 176 1

-12 10 59 0 6 1 -5 4 60 147 154 1 -2 10 60 57 55 1 -9 5 61 281 294 1 -9 11 61 317 326 2

-9 10 59 21 27 3 -2 4 60 122 136 1 1 10 60 69 65 1 -6 5 61 633 587 2 -6 11 61 310 297 2

-6 10 59 13 11 3 1 4 60 34 35 1 4 10 60 32 31 3 -3 5 61 337 344 1 -3 11 61 179 171 1

-3 10 59 35 42 1 4 4 60 115 123 1 -13 11 60 29 19 3 0 5 61 90 79 1 0 11 61 31 9 2

0 10 59 25 23 2 -7 5 60 42 42 1 -10 11 60 30 38 2 3 5 61 44 37 1 3 11 61 141 136 3

3 10 59 38 37 2 -4 5 60 149 154 1 -7 11 60 38 42 1 -11 6 61 312 297 2 -14 12 61 174 178 2

6 10 59 8 9 8 -1 5 60 37 35 1 -4 11 60 31 28 2 -8 6 61 313 285 1 -11 12 61 173 176 1

-14 11 59 38 35 2 2 5 60 106 109 1 -1 11 60 69 65 1 -5 6 61 634 587 2 -8 12 61 537 515 3

-11 11 59 41 29 2 5 5 60 31 21 3 2 11 60 41 45 2 -2 6 61 84 68 1 -5 12 61 190 214 1

-8 11 59 10 5 10 -9 6 60 21 15 2 -15 12 60 33 30 3 1 6 61 212 196 1 -2 12 61 70 61 1

-5 11 59 59 59 1 -6 6 60 242 259 1 -12 12 60 60 65 2 4 6 61 132 152 1 1 12 61 168 164 2

-2 11 59 37 38 2 -3 6 60 18 17 1 -9 12 60 72 75 1 -13 7 61 30 48 4 -13 13 61 228 209 2

1 11 59 15 18 6 0 6 60 34 37 1 -6 12 60 7 7 7 -10 7 61 136 133 1 -10 13 61 66 80 1

4 11 59 80 79 2 3 6 60 57 57 1 -3 12 60 30 38 2 -7 7 61 478 433 2 -7 13 61 28 48 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 28

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

-4 13 61 164 167 1 -2 8 62 60 57 1 -7 15 62 36 43 2 -9 9 63 12 1 5 -1 1 64 224 237 1

-1 13 61 168 164 2 1 8 62 6 10 6 -4 15 62 56 54 2 -6 9 63 63 72 1 -3 2 64 109 110 1

-12 14 61 168 178 1 4 8 62 120 125 1 -9 16 62 19 19 4 -3 9 63 86 90 1 0 2 64 233 202 1

-9 14 61 177 181 1 7 8 62 35 43 5 0 0 63 22 19 5 0 9 63 20 10 3 -5 3 64 90 98 1

-6 14 61 178 201 1 -16 9 62 36 19 3 1 1 63 21 16 2 3 9 63 57 57 2 -2 3 64 108 110 1

-3 14 61 142 136 1 -13 9 62 25 21 3 -1 2 63 19 17 2 6 9 63 48 47 3 1 3 64 54 53 1

-11 15 61 119 128 1 -10 9 62 42 39 1 2 2 63 25 16 1 -14 10 63 24 28 6 -7 4 64 79 61 1

-8 15 61 142 165 1 -7 9 62 15 9 2 -3 3 63 92 101 1 -11 10 63 34 24 2 -4 4 64 213 199 1

-5 15 61 153 161 1 -4 9 62 58 65 1 0 3 63 189 203 1 -8 10 63 35 39 2 -1 4 64 52 53 1

-7 16 61 180 180 1 -1 9 62 12 10 4 3 3 63 20 8 1 -5 10 63 14 11 3 2 4 64 58 71 1

0 1 62 70 59 1 2 9 62 18 17 5 -5 4 63 91 90 1 -2 10 63 16 15 4 -9 5 64 86 100 1

-2 2 62 62 49 1 5 9 62 61 62 2 -2 4 63 23 16 1 1 10 63 45 50 2 -6 5 64 177 182 1

1 2 62 43 43 1 -15 10 62 24 25 6 1 4 63 13 16 2 4 10 63 0 11 1 -3 5 64 89 98 1

-4 3 62 93 106 1 -12 10 62 22 22 3 4 4 63 34 27 1 -13 11 63 20 10 4 0 5 64 55 57 1

-1 3 62 42 43 1 -9 10 62 40 39 1 -7 5 63 15 24 2 -10 11 63 26 24 3 3 5 64 85 91 1

2 3 62 53 54 1 -6 10 62 18 17 2 -4 5 63 89 90 1 -7 11 63 43 46 1 -11 6 64 31 33 3

-6 4 62 55 51 1 -3 10 62 14 11 3 -1 5 63 17 16 1 -4 11 63 0 15 1 -8 6 64 86 81 1

-3 4 62 95 106 1 0 10 62 19 13 3 2 5 63 69 60 1 -1 11 63 46 50 2 -5 6 64 177 182 1

0 4 62 224 234 1 3 10 62 7 17 6 5 5 63 10 11 10 2 11 63 33 39 3 -2 6 64 55 71 1

3 4 62 73 78 1 -14 11 62 47 41 2 -9 6 63 66 72 1 -15 12 63 29 24 3 1 6 64 40 42 1

-8 5 62 60 65 1 -11 11 62 75 71 1 -6 6 63 170 187 1 -12 12 63 25 21 3 4 6 64 43 56 2

-5 5 62 34 37 1 -8 11 62 47 46 1 -3 6 63 21 7 1 -9 12 63 62 63 1 -13 7 64 34 27 3

-2 5 62 53 54 1 -5 11 62 48 45 1 0 6 63 114 136 1 -6 12 63 12 7 5 -10 7 64 36 37 2

1 5 62 13 12 2 -2 11 62 16 17 4 3 6 63 89 90 1 -3 12 63 56 57 1 -4 7 64 79 61 1

4 5 62 58 65 1 1 11 62 15 10 6 6 6 63 0 7 1 0 12 63 64 68 2 -1 7 64 39 42 1

-10 6 62 13 17 4 4 11 62 59 54 2 -11 7 63 44 46 4 3 12 63 27 29 4 2 7 64 124 125 1

-7 6 62 26 24 1 -13 12 62 49 53 2 -8 7 63 34 34 1 -14 13 63 18 17 5 5 7 64 33 43 3

-4 6 62 53 51 1 -10 12 62 20 22 3 -5 7 63 15 24 2 -11 13 63 15 10 5 -15 8 64 19 11 6

-1 6 62 13 12 2 -7 12 62 32 41 2 -2 7 63 67 60 1 -8 13 63 40 43 1 -12 8 64 33 20 4

2 6 62 60 57 1 -4 12 62 114 125 1 1 7 63 50 45 1 -5 13 63 50 53 1 -9 8 64 74 86 1

5 6 62 48 45 2 -1 12 62 16 10 5 4 7 63 17 15 4 -2 13 63 36 39 2 -6 8 64 86 81 1

-12 7 62 44 41 3 2 12 62 33 36 3 7 7 63 18 11 5 1 13 63 28 28 4 -3 8 64 85 91 1

-9 7 62 17 9 2 -12 13 62 56 53 2 -13 8 63 44 43 3 -13 14 63 21 17 4 0 8 64 215 218 1

-6 7 62 23 24 1 -9 13 62 13 21 7 -10 8 63 35 39 2 -10 14 63 25 28 3 3 8 64 36 38 2

-3 7 62 73 78 1 -6 13 62 27 26 2 -7 8 63 36 34 1 -7 14 63 7 11 6 6 8 64 33 42 3

0 7 62 143 153 1 -3 13 62 18 17 3 -4 8 63 34 27 1 -4 14 63 15 11 5 -14 9 64 39 36 5

3 7 62 10 11 9 0 13 62 52 45 2 -1 8 63 49 45 1 -1 14 63 30 28 3 -11 9 64 94 96 1

6 7 62 29 26 4 -11 14 62 43 41 2 2 8 63 16 15 4 -12 15 63 28 24 3 -8 9 64 74 86 1

-14 8 62 10 11 9 -8 14 62 17 12 4 5 8 63 55 53 2 -9 15 63 38 33 2 -5 9 64 85 100 1

-11 8 62 43 46 2 -5 14 62 62 62 1 8 8 63 30 28 4 -6 15 63 46 47 2 -2 9 64 118 125 1

-8 8 62 113 115 1 -2 14 62 38 36 2 -15 9 63 40 32 3 -3 15 63 28 29 3 1 9 64 29 22 2

-5 8 62 59 65 1 -10 15 62 10 25 10 -12 9 63 65 63 1 -8 16 63 28 28 2 4 9 64 47 43 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 29

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

-13 10 64 25 26 3 -8 5 65 51 59 1 -8 11 65 59 57 1 0 6 66 212 229 1 0 12 66 47 42 2

-10 10 64 42 22 2 -5 5 65 62 67 1 -5 11 65 42 38 1 3 6 66 41 36 1 -14 13 66 5 2 4

-7 10 64 37 37 1 -2 5 65 102 103 1 -2 11 65 24 27 3 6 6 66 20 21 5 -11 13 66 18 11 4

-4 10 64 40 56 1 1 5 65 17 28 2 1 11 65 47 49 2 -11 7 66 55 53 3 -8 13 66 55 55 2

-1 10 64 25 22 2 4 5 65 27 29 2 4 11 65 34 33 4 -8 7 66 31 32 1 -5 13 66 49 50 1

2 10 64 12 20 11 -10 6 65 37 38 2 -13 12 65 62 62 2 -5 7 66 65 65 1 -2 13 66 27 35 3

5 10 64 76 71 2 -7 6 65 33 37 1 -10 12 65 22 26 3 -2 7 66 37 38 1 1 13 66 41 51 3

-15 11 64 29 30 4 -4 6 65 83 80 1 -7 12 65 37 36 2 1 7 66 42 46 1 -13 14 66 14 2 7

-12 11 64 32 19 2 -1 6 65 18 28 1 -4 12 65 87 96 1 4 7 66 14 4 7 -10 14 66 17 15 6

-9 11 64 90 96 1 2 6 65 33 32 1 -1 12 65 46 49 2 7 7 66 21 16 15 -7 14 66 20 16 3

-6 11 64 29 33 2 5 6 65 47 38 2 2 12 65 26 25 4 -13 8 66 55 55 2 -4 14 66 6 6 6

-3 11 64 36 38 1 -12 7 65 44 36 3 -12 13 65 64 62 2 -10 8 66 22 21 2 -1 14 66 44 51 2

0 11 64 97 105 1 -9 7 65 29 32 2 -9 13 65 32 31 3 -7 8 66 34 32 1 -9 15 66 47 45 2

3 11 64 29 23 6 -6 7 65 31 37 1 -6 13 65 63 60 1 -4 8 66 23 24 1 -6 15 66 8 19 8

-14 12 64 31 27 3 -3 7 65 28 28 1 -3 13 65 0 3 1 -1 8 66 44 46 1 -1 1 67 54 64 1

-11 12 64 28 19 3 0 7 65 71 81 1 0 13 65 23 19 4 2 8 66 68 66 1 -3 2 67 91 92 1

-8 12 64 33 20 2 3 7 65 19 22 4 -11 14 65 47 46 2 5 8 66 52 50 3 0 2 67 48 58 1

-5 12 64 37 44 1 6 7 65 66 60 2 -8 14 65 25 28 2 -15 9 66 46 45 4 -5 3 67 44 48 1

-2 12 64 13 20 6 -14 8 65 28 28 4 -5 14 65 26 28 3 -12 9 66 52 45 2 -2 3 67 92 92 1

1 12 64 15 8 8 -11 8 65 60 57 2 -2 14 65 25 25 3 -9 9 66 54 51 1 1 3 67 73 74 1

-13 13 64 74 79 1 -8 8 65 46 44 1 -10 15 65 17 15 5 -6 9 66 121 123 1 -7 4 67 12 11 3

-10 13 64 25 26 3 -5 8 65 52 59 1 -7 15 65 47 43 2 -3 9 66 40 36 1 -4 4 67 71 73 1

-7 13 64 30 27 2 -2 8 65 26 32 1 -4 15 65 36 33 2 0 9 66 50 53 1 -1 4 67 75 74 1

-4 13 64 42 43 2 1 8 65 43 46 2 0 0 66 147 139 2 3 9 66 65 70 2 2 4 67 89 94 1

-1 13 64 27 8 3 4 8 65 89 96 1 1 1 66 11 9 4 6 9 66 24 19 5 -9 5 67 13 11 7

-12 14 64 27 27 3 7 8 65 44 43 3 -1 2 66 13 9 3 -14 10 66 17 15 6 -6 5 67 126 133 1

-9 14 64 33 36 3 -13 9 65 36 31 3 2 2 66 22 22 1 -11 10 66 48 44 2 -3 5 67 43 48 1

-6 14 64 29 42 2 -10 9 65 89 86 1 -3 3 66 202 209 1 -8 10 66 23 21 2 0 5 67 100 95 1

-3 14 64 20 23 4 -7 9 65 31 32 1 0 3 66 146 150 1 -5 10 66 20 23 2 3 5 67 68 71 1

-11 15 64 34 30 2 -4 9 65 23 29 2 3 3 66 63 64 1 -2 10 66 67 66 1 -11 6 67 25 22 4

-8 15 64 20 11 3 -1 9 65 47 46 1 -5 4 66 59 69 1 1 10 66 19 16 4 -8 6 67 30 30 1

-5 15 64 75 71 1 2 9 65 23 27 3 -2 4 66 25 22 1 4 10 66 13 6 13 -5 6 67 126 133 1

0 1 65 28 61 1 5 9 65 22 28 4 1 4 66 21 23 1 -13 11 66 18 11 4 -2 6 67 89 94 1

-2 2 65 0 3 1 -15 10 65 17 15 7 4 4 66 26 24 1 -10 11 66 49 44 2 1 6 67 20 27 1

1 2 65 44 37 1 -12 10 65 25 26 3 -7 5 66 64 65 1 -7 11 66 49 53 1 4 6 67 31 33 3

-4 3 65 61 71 1 -9 10 65 86 86 1 -4 5 66 61 69 1 -4 11 66 7 4 7 -13 7 67 15 16 15

-1 3 65 45 37 1 -6 10 65 37 38 1 -1 5 66 20 23 1 -1 11 66 14 16 6 -10 7 67 22 25 4

2 3 65 102 103 1 -3 10 65 20 22 2 2 5 66 39 38 1 2 11 66 23 35 4 -7 7 67 20 12 1

-6 4 65 84 80 1 0 10 65 21 16 3 5 5 66 3 23 2 -12 12 66 26 24 4 -4 7 67 7 11 7

-3 4 65 63 71 1 3 10 65 11 3 10 -9 6 66 122 123 1 -9 12 66 49 45 2 -1 7 67 20 27 1

0 4 65 156 162 1 -14 11 65 52 46 2 -6 6 66 77 75 1 -6 12 66 23 21 2 2 7 67 105 111 1

3 4 65 29 28 1 -11 11 65 83 86 1 -3 6 66 63 64 1 -3 12 66 65 70 1 5 7 67 58 60 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 30

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

-15 8 67 15 9 8 -6 14 67 26 23 2 -10 9 68 41 41 2 -3 3 69 108 119 1 -8 10 69 101 103 1

-12 8 67 12 6 12 -3 14 67 31 36 2 -7 9 68 70 68 1 0 3 69 85 98 1 -5 10 69 84 89 1

-9 8 67 36 39 1 -11 15 67 58 65 2 -4 9 68 64 70 1 3 3 69 42 57 1 -2 10 69 139 136 1

-6 8 67 30 30 1 -8 15 67 13 9 6 -1 9 68 58 63 1 -5 4 69 57 58 1 1 10 69 83 84 1

-3 8 67 69 71 1 -5 15 67 49 53 2 2 9 68 17 9 5 -2 4 69 155 151 1 4 10 69 45 50 3

0 8 67 139 147 1 0 1 68 10 11 6 5 9 68 26 22 4 1 4 69 53 37 1 -13 11 69 43 55 2

3 8 67 15 5 6 -2 2 68 113 120 1 -15 10 68 22 15 6 4 4 69 133 143 1 -10 11 69 116 117 1

6 8 67 28 23 4 1 2 68 110 111 1 -12 10 68 42 47 2 -7 5 69 215 189 1 -7 11 69 109 109 1

-14 9 67 37 37 3 -4 3 68 105 104 1 -9 10 68 36 41 2 -4 5 69 58 58 1 -4 11 69 21 16 3

-11 9 67 70 70 2 -1 3 68 111 111 1 -6 10 68 38 37 1 -1 5 69 54 37 1 -1 11 69 83 84 1

-8 9 67 35 39 1 2 3 68 76 88 1 -3 10 68 64 61 1 2 5 69 186 173 1 2 11 69 50 68 2

-5 9 67 11 11 4 -6 4 68 46 37 1 0 10 68 10 7 10 5 5 69 86 89 2 -12 12 69 134 110 1

-2 9 67 102 111 1 -3 4 68 106 104 1 3 10 68 34 36 3 -9 6 69 195 207 1 -9 12 69 99 94 1

1 9 67 9 6 9 0 4 68 210 215 1 -14 11 68 50 48 2 -6 6 69 68 50 1 -6 12 69 32 36 2

4 9 67 30 25 4 3 4 68 46 35 1 -11 11 68 63 67 1 -3 6 69 41 57 1 -3 12 69 24 14 2

-13 10 67 48 43 2 -8 5 68 89 85 1 -8 11 68 54 61 1 0 6 69 221 218 1 0 12 69 188 187 2

-10 10 67 32 16 2 -5 5 68 134 134 1 -5 11 68 40 42 1 3 6 69 60 40 1 -11 13 69 46 55 2

-7 10 67 22 25 2 -2 5 68 76 88 1 -2 11 68 13 9 5 6 6 69 42 36 3 -8 13 69 80 75 1

-4 10 67 26 33 2 1 5 68 75 72 1 1 11 68 92 99 2 -11 7 69 116 109 2 -5 13 69 18 24 4

-1 10 67 11 6 10 4 5 68 65 70 1 4 11 68 38 37 4 -8 7 69 47 38 1 -2 13 69 49 68 2

2 10 67 22 26 4 -10 6 68 37 37 3 -13 12 68 22 23 4 -5 7 69 213 189 1 -10 14 69 58 72 2

5 10 67 54 53 2 -7 6 68 50 46 1 -10 12 68 42 47 2 -2 7 69 187 173 1 -7 14 69 67 66 1

-15 11 67 62 65 2 -4 6 68 44 37 1 -7 12 68 13 8 5 1 7 69 92 90 1 -4 14 69 48 50 2

-12 11 67 19 23 4 -1 6 68 74 72 1 -4 12 68 88 89 2 4 7 69 27 16 4 -9 15 69 59 61 2

-9 11 67 66 70 1 2 6 68 81 85 1 -1 12 68 95 99 1 7 7 69 63 66 3 -6 15 69 27 20 3

-6 11 67 20 22 3 5 6 68 43 42 3 2 12 68 39 46 3 -13 8 69 84 75 2 -1 1 70 52 55 1

-3 11 67 7 5 6 -12 7 68 10 8 10 -12 13 68 26 23 3 -10 8 69 104 103 1 -3 2 70 56 56 1

0 11 67 69 55 1 -9 7 68 70 68 1 -9 13 68 51 56 2 -7 8 69 46 38 1 0 2 70 12 27 3

3 11 67 38 36 3 -6 7 68 49 46 1 -6 13 68 49 48 1 -4 8 69 134 143 1 -5 3 70 18 17 1

-14 12 67 15 25 7 -3 7 68 45 35 1 -3 13 68 35 36 2 -1 8 69 90 89 1 -2 3 70 54 56 1

-11 12 67 20 23 4 0 7 68 54 55 1 0 13 68 36 38 3 2 8 69 141 136 1 1 3 70 29 41 1

-8 12 67 18 6 3 3 7 68 69 61 1 -11 14 68 51 49 2 5 8 69 18 24 9 -7 4 70 24 28 1

-5 12 67 53 60 1 6 7 68 57 48 2 -8 14 68 40 35 2 -15 9 69 59 61 3 -4 4 70 180 191 1

-2 12 67 26 26 2 -14 8 68 40 35 3 -5 14 68 26 22 3 -12 9 69 101 94 2 -1 4 70 24 41 1

1 12 67 27 29 4 -11 8 68 59 61 2 -2 14 68 46 46 2 -9 9 69 140 135 1 2 4 70 69 77 1

-13 13 67 22 17 5 -8 8 68 63 56 1 -10 15 68 14 15 7 -6 9 69 194 207 1 -9 5 70 47 42 1

-10 13 67 45 43 2 -5 8 68 86 85 1 -7 15 68 45 46 2 -3 9 69 59 40 1 -6 5 70 92 103 1

-7 13 67 15 16 4 -2 8 68 79 85 1 -4 15 68 35 37 2 0 9 69 68 67 1 -3 5 70 21 17 1

-4 13 67 29 25 2 1 8 68 59 63 1 0 0 69 494 461 6 3 9 69 25 15 4 0 5 70 28 27 1

-1 13 67 32 29 3 4 8 68 90 89 2 1 1 69 239 232 1 6 9 69 22 20 5 3 5 70 36 38 1

-12 14 67 27 25 3 7 8 68 42 46 3 -1 2 69 239 232 1 -14 10 69 58 72 2 -11 6 70 28 24 5

-9 14 67 37 37 2 -13 9 68 54 56 2 2 2 69 155 151 1 -11 10 69 115 117 1 -8 6 70 20 16 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 31

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

-5 6 70 93 103 1 -5 12 70 42 53 2 -14 8 71 45 47 4 -2 14 71 19 9 4 -6 9 72 300 270 1

-2 6 70 70 77 1 -2 12 70 37 34 2 -11 8 71 70 65 2 -10 15 71 10 21 9 -3 9 72 287 283 1

1 6 70 22 23 1 1 12 70 30 31 3 -8 8 71 99 98 1 -7 15 71 46 50 2 0 9 72 288 293 2

4 6 70 32 35 3 -13 13 70 36 23 3 -5 8 71 91 91 1 0 0 72 2133 1978 19 3 9 72 189 198 2

-13 7 70 25 24 5 -10 13 70 55 61 2 -2 8 71 91 95 1 1 1 72 743 694 3 6 9 72 179 176 2

-10 7 70 26 24 3 -7 13 70 24 24 2 1 8 71 37 33 2 -1 2 72 746 694 4 -14 10 72 189 182 2

-7 7 70 11 4 3 -4 13 70 9 12 8 4 8 71 115 119 2 2 2 72 364 333 1 -11 10 72 255 257 2

-4 7 70 27 28 1 -1 13 70 34 31 3 7 8 71 53 50 3 -3 3 72 736 657 3 -8 10 72 343 333 2

-1 7 70 18 23 2 -12 14 70 22 20 5 -13 9 71 53 54 2 0 3 72 352 339 1 -5 10 72 433 398 2

2 7 70 87 90 1 -9 14 70 24 25 3 -10 9 71 13 18 6 3 3 72 20 32 2 -2 10 72 179 183 1

5 7 70 50 53 2 -6 14 70 10 12 9 -7 9 71 34 27 1 -5 4 72 32 33 1 1 10 72 309 312 2

-15 8 70 20 11 8 -3 14 70 14 14 6 -4 9 71 88 91 1 -2 4 72 360 333 1 4 10 72 134 146 2

-12 8 70 70 69 2 -8 15 70 18 11 4 -1 9 71 39 33 1 1 4 72 189 167 1 -13 11 72 277 253 2

-9 8 70 29 31 2 -5 15 70 47 42 2 2 9 71 12 16 11 4 4 72 941 863 4 -10 11 72 254 257 2

-6 8 70 16 16 2 0 1 71 56 65 1 5 9 71 42 41 3 -7 5 72 401 406 2 -7 11 72 110 98 1

-3 8 70 30 38 1 -2 2 71 145 156 1 -15 10 71 20 21 8 -4 5 72 31 33 1 -4 11 72 80 91 1

0 8 70 143 149 1 1 2 71 73 89 1 -12 10 71 65 72 1 -1 5 72 190 167 1 -1 11 72 305 312 2

3 8 70 32 26 3 -4 3 71 105 105 1 -9 10 71 18 18 3 2 5 72 672 631 3 2 11 72 295 274 2

6 8 70 13 12 13 -1 3 71 71 90 1 -6 10 71 49 51 1 5 5 72 437 398 4 -12 12 72 493 510 3

-14 9 70 26 25 4 2 3 71 27 36 1 -3 10 71 66 66 1 -9 6 72 303 270 2 -9 12 72 156 166 1

-11 9 70 60 67 2 -6 4 71 91 89 1 0 10 71 54 54 2 -6 6 72 120 109 1 -6 12 72 23 26 2

-8 9 70 28 31 1 -3 4 71 103 105 1 3 10 71 30 28 3 -3 6 72 24 32 1 -3 12 72 188 198 1

-5 9 70 48 42 1 0 4 71 255 274 1 -14 11 71 22 19 5 0 6 72 45 39 1 0 12 72 616 582 4

-2 9 70 86 90 1 3 4 71 63 61 1 -11 11 71 42 44 2 3 6 72 289 283 2 -11 13 72 270 253 2

1 9 70 9 7 9 -8 5 71 90 91 1 -8 11 71 65 65 1 6 6 72 24 26 4 -8 13 72 101 101 2

4 9 70 15 12 13 -5 5 71 90 101 1 -5 11 71 30 34 2 -11 7 72 117 98 2 -5 13 72 15 20 4

-13 10 70 58 61 2 -2 5 71 27 36 1 -2 11 71 14 16 5 -8 7 72 121 127 1 -2 13 72 296 274 2

-10 10 70 33 32 2 1 5 71 60 56 1 1 11 71 87 88 3 -5 7 72 401 406 1 -10 14 72 186 182 1

-7 10 70 24 24 2 4 5 71 87 91 1 -13 12 71 49 55 2 -2 7 72 671 632 3 -7 14 72 174 201 1

-4 10 70 28 35 2 -10 6 71 51 51 2 -10 12 71 67 72 1 1 7 72 121 126 1 -4 14 72 137 146 1

-1 10 70 1 8 1 -7 6 71 60 62 1 -7 12 71 58 59 1 4 7 72 81 91 2 -9 15 72 214 187 1

2 10 70 39 34 2 -4 6 71 91 89 1 -4 12 71 113 119 1 7 7 72 173 201 4 -6 15 72 179 176 1

5 10 70 40 42 4 -1 6 71 59 56 1 -1 12 71 84 88 1 -13 8 72 100 101 2 -1 1 73 70 65 1

-12 11 70 43 48 2 2 6 71 91 95 1 2 12 71 14 9 13 -10 8 72 343 333 2 -3 2 73 48 42 1

-9 11 70 57 67 1 5 6 71 32 34 4 -12 13 71 55 55 2 -7 8 72 123 127 1 0 2 73 27 2 1

-6 11 70 26 24 2 -12 7 71 58 59 3 -9 13 71 53 54 2 -4 8 72 944 863 4 -5 3 73 61 60 1

-3 11 70 31 26 2 -9 7 71 33 27 2 -6 13 71 16 16 4 -1 8 72 120 126 1 -2 3 73 50 42 1

0 11 70 42 39 2 -6 7 71 59 62 1 -3 13 71 26 28 2 2 8 72 181 183 1 1 3 73 17 18 1

3 11 70 5 14 4 -3 7 71 63 61 1 0 13 71 50 54 2 5 8 72 19 19 6 -7 4 73 60 65 1

-14 12 70 27 20 3 0 7 71 60 55 1 -11 14 71 13 19 7 -15 9 72 212 187 2 -4 4 73 235 263 1

-11 12 70 46 48 2 3 7 71 70 66 2 -8 14 71 46 47 2 -12 9 72 158 166 2 -1 4 73 17 18 2

-8 12 70 66 69 1 6 7 71 25 16 5 -5 14 71 38 41 2 -9 9 72 392 394 2 2 4 73 48 52 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 32

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

-9 5 73 50 56 2 -3 11 73 49 50 2 -6 7 74 35 35 1 -11 14 74 18 17 5 -6 9 75 38 57 1

-6 5 73 65 76 1 0 11 73 19 16 4 -3 7 74 30 20 1 -8 14 74 21 16 3 -3 9 75 115 108 1

-3 5 73 62 60 1 3 11 73 24 25 4 0 7 74 8 5 8 -5 14 74 50 48 2 0 9 75 39 23 2

0 5 73 16 24 2 -14 12 73 34 35 2 3 7 74 46 43 2 -7 15 74 29 28 3 3 9 75 155 162 2

3 5 73 44 43 1 -11 12 73 73 79 1 6 7 74 17 9 8 0 0 75 333 275 3 -14 10 75 46 45 3

-11 6 73 22 27 6 -8 12 73 116 123 1 -14 8 74 13 16 13 1 1 75 82 81 1 -11 10 75 29 33 2

-8 6 73 37 39 1 -5 12 73 60 68 1 -11 8 74 87 84 2 -1 2 75 84 81 1 -8 10 75 100 107 1

-5 6 73 68 76 1 -2 12 73 31 31 2 -8 8 74 74 65 1 2 2 75 119 113 1 -5 10 75 39 29 1

-2 6 73 51 52 1 1 12 73 45 43 2 -5 8 74 13 6 3 -3 3 75 369 358 1 -2 10 75 17 5 3

1 6 73 53 45 1 -13 13 73 16 22 6 -2 8 74 127 129 1 0 3 75 152 138 1 1 10 75 64 65 1

4 6 73 30 31 3 -10 13 73 51 48 2 1 8 74 0 8 1 3 3 75 216 223 1 4 10 75 58 57 3

-13 7 73 35 36 4 -7 13 73 35 36 2 4 8 74 86 80 2 -5 4 75 54 57 1 -13 11 75 39 30 2

-10 7 73 22 18 3 -4 13 73 15 19 5 7 8 74 29 28 6 -2 4 75 119 113 1 -10 11 75 28 33 2

-7 7 73 15 3 2 -1 13 73 45 43 2 -13 9 74 10 12 10 1 4 75 200 194 1 -7 11 75 103 91 1

-4 7 73 58 65 1 -12 14 73 32 35 3 -10 9 74 22 15 2 4 4 75 301 296 2 -4 11 75 14 12 5

-1 7 73 52 45 1 -9 14 73 15 8 5 -7 9 74 28 35 2 -7 5 75 11 10 4 -1 11 75 64 65 1

2 7 73 56 66 1 -6 14 73 17 10 4 -4 9 74 72 74 1 -4 5 75 54 57 1 2 11 75 53 47 2

5 7 73 65 68 2 -3 14 73 12 25 11 -1 9 74 10 8 9 -1 5 75 198 194 1 -12 12 75 153 177 2

-15 8 73 50 48 6 -8 15 73 45 48 2 2 9 74 37 34 4 2 5 75 139 138 1 -9 12 75 32 26 2

-12 8 73 119 123 2 0 1 74 0 4 1 5 9 74 45 48 3 5 5 75 42 29 2 -6 12 75 102 108 1

-9 8 73 56 53 1 -2 2 74 88 81 1 -12 10 74 61 58 2 -9 6 75 40 57 2 -3 12 75 151 162 1

-6 8 73 35 39 1 1 2 74 60 68 1 -9 10 74 16 15 3 -6 6 75 240 223 1 0 12 75 140 129 2

-3 8 73 40 43 1 -4 3 74 19 21 1 -6 10 74 36 30 1 -3 6 75 216 223 1 -11 13 75 35 30 2

0 8 73 154 170 1 -1 3 74 61 68 1 -3 10 74 43 43 1 0 6 75 51 52 1 -8 13 75 109 110 1

3 8 73 52 50 2 2 3 74 48 60 1 0 10 74 59 62 1 3 6 75 114 108 1 -5 13 75 111 117 1

6 8 73 10 10 10 -6 4 74 73 65 1 3 10 74 39 36 3 6 6 75 103 108 2 -2 13 75 52 47 2

-14 9 73 0 9 1 -3 4 74 20 21 1 -14 11 74 19 17 6 -11 7 75 105 91 2 -10 14 75 48 45 2

-11 9 73 69 70 1 0 4 74 235 235 1 -11 11 74 22 17 3 -8 7 75 55 50 1 -7 14 75 32 49 2

-8 9 73 56 53 1 3 4 74 32 20 1 -8 11 74 83 84 1 -5 7 75 17 10 2 -4 14 75 54 57 2

-5 9 73 48 56 1 -8 5 74 14 6 4 -5 11 74 36 41 2 -2 7 75 136 138 1 -1 1 76 54 36 1

-2 9 73 57 66 1 -5 5 74 52 57 1 -2 11 74 34 34 2 1 7 75 88 94 1 -3 2 76 52 47 1

1 9 73 25 22 3 -2 5 74 47 60 1 1 11 74 53 60 2 4 7 75 18 12 6 0 2 76 38 45 1

4 9 73 9 19 9 1 5 74 22 30 1 -13 12 74 21 25 4 7 7 75 33 49 5 -5 3 76 117 124 1

-13 10 73 52 48 2 4 5 74 71 74 2 -10 12 74 62 58 2 -13 8 75 109 110 4 -2 3 76 53 47 1

-10 10 73 28 26 2 -10 6 74 43 30 3 -7 12 74 35 35 2 -10 8 75 102 107 1 1 3 76 24 25 1

-7 10 73 19 18 2 -7 6 74 35 35 1 -4 12 74 81 80 1 -7 8 75 52 50 1 -7 4 76 68 70 1

-4 10 73 25 31 2 -4 6 74 73 65 1 -1 12 74 59 60 2 -4 8 75 303 296 2 -4 4 76 198 220 1

-1 10 73 21 22 3 -1 6 74 20 30 1 -12 13 74 24 25 3 -1 8 75 88 94 1 -1 4 76 24 25 1

2 10 73 32 31 3 2 6 74 125 129 1 -9 13 74 11 12 8 2 8 75 10 5 10 2 4 76 59 53 1

-12 11 73 79 79 1 5 6 74 37 41 3 -6 13 74 0 9 1 5 8 75 113 117 2 -9 5 76 19 27 4

-9 11 73 66 71 1 -12 7 74 33 35 4 -3 13 74 37 36 2 -12 9 75 28 26 3 -6 5 76 87 93 1

-6 11 73 26 27 2 -9 7 74 25 35 2 0 13 74 28 26 3 -9 9 75 105 108 1 -3 5 76 118 124 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 33

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

0 5 76 54 67 1 -8 12 76 107 110 1 -5 8 77 81 86 1 -5 4 78 83 77 1 -13 11 78 37 26 3

3 5 76 35 32 1 -5 12 76 48 50 2 -2 8 77 128 149 1 -2 4 78 38 38 1 -10 11 78 18 13 4

-11 6 76 37 35 4 -2 12 76 32 26 2 1 8 77 52 45 2 1 4 78 54 54 1 -7 11 78 6 19 6

-8 6 76 16 10 3 1 12 76 16 15 7 4 8 77 9 18 8 4 4 78 45 32 2 -4 11 78 36 25 2

-5 6 76 87 93 1 -10 13 76 63 59 2 -13 9 77 22 19 5 -7 5 78 45 43 1 -1 11 78 13 11 7

-2 6 76 57 53 1 -7 13 76 55 55 1 -10 9 77 37 33 2 -4 5 78 83 77 1 2 11 78 32 30 3

1 6 76 83 79 1 -4 13 76 28 27 3 -7 9 77 34 41 2 -1 5 78 54 54 1 -12 12 78 32 20 3

4 6 76 48 49 2 -1 13 76 17 15 7 -4 9 77 38 45 1 2 5 78 37 30 1 -9 12 78 35 30 2

-13 7 76 59 55 3 -9 14 76 16 17 4 -1 9 77 53 45 1 5 5 78 13 19 12 -6 12 78 34 41 2

-10 7 76 36 35 3 -6 14 76 40 38 2 2 9 77 48 54 2 -9 6 78 27 26 3 -3 12 78 27 21 3

-7 7 76 31 26 1 -3 14 76 42 37 2 5 9 77 66 66 3 -6 6 78 35 22 1 0 12 78 44 35 2

-4 7 76 68 70 1 0 1 77 51 42 1 -12 10 77 61 53 2 -3 6 78 33 50 1 -11 13 78 40 26 2

-1 7 76 82 79 1 -2 2 77 8 8 7 -9 10 77 38 33 2 0 6 78 50 44 1 -8 13 78 51 54 2

2 7 76 51 60 2 1 2 77 84 92 1 -6 10 77 17 15 3 3 6 78 31 25 2 -5 13 78 19 20 3

5 7 76 48 50 3 -4 3 77 102 114 1 -3 10 77 24 28 2 6 6 78 30 41 3 -2 13 78 35 30 2

-12 8 76 111 110 2 -1 3 77 83 92 1 0 10 77 60 66 2 -11 7 78 14 19 12 -10 14 78 30 23 2

-9 8 76 45 41 1 2 3 77 38 43 1 3 10 77 39 36 3 -8 7 78 51 38 1 -7 14 78 0 12 1

-6 8 76 11 10 6 -6 4 77 30 38 1 -14 11 77 13 13 13 -5 7 78 46 43 1 -4 14 78 34 35 2

-3 8 76 32 32 2 -3 4 77 104 114 1 -11 11 77 52 58 2 -2 7 78 36 30 1 -1 1 79 17 23 2

0 8 76 122 134 1 0 4 77 104 115 1 -8 11 77 81 83 1 1 7 78 23 20 3 -3 2 79 110 108 1

3 8 76 53 61 2 3 4 77 13 2 3 -5 11 77 37 36 1 4 7 78 30 25 4 0 2 79 66 65 1

6 8 76 34 38 3 -8 5 77 81 86 1 -2 11 77 50 54 1 7 7 78 18 12 17 -5 3 79 146 169 1

-14 9 76 18 17 7 -5 5 77 46 59 1 1 11 77 22 22 4 -13 8 78 54 54 4 -2 3 79 108 108 1

-11 9 76 94 92 2 -2 5 77 41 43 1 -13 12 77 16 1 5 -10 8 78 42 39 2 1 3 79 23 18 1

-8 9 76 42 41 1 1 5 77 38 46 1 -10 12 77 60 53 2 -7 8 78 50 38 1 -7 4 79 16 26 3

-5 9 76 20 27 3 4 5 77 45 45 2 -7 12 77 22 15 3 -4 8 78 50 32 1 -4 4 79 112 125 1

-2 9 76 55 60 1 -10 6 77 27 15 5 -4 12 77 15 18 5 -1 8 78 24 20 2 -1 4 79 20 18 1

1 9 76 56 56 2 -7 6 77 27 32 1 -1 12 77 17 22 5 2 8 78 31 32 2 2 4 79 117 132 1

4 9 76 26 27 5 -4 6 77 31 38 1 -12 13 77 15 1 6 5 8 78 20 20 7 -9 5 79 63 57 1

-13 10 76 62 59 2 -1 6 77 35 46 1 -9 13 77 12 19 6 -12 9 78 32 30 3 -6 5 79 113 119 1

-10 10 76 36 32 2 2 6 77 130 149 1 -6 13 77 35 38 2 -9 9 78 39 44 1 -3 5 79 148 169 1

-7 10 76 37 35 1 5 6 77 35 36 3 -3 13 77 36 36 2 -6 9 78 27 26 2 0 5 79 57 55 1

-4 10 76 49 49 1 -12 7 77 24 15 6 -11 14 77 11 13 11 -3 9 78 29 26 2 3 5 79 31 28 3

-1 10 76 57 56 1 -9 7 77 38 41 2 -8 14 77 14 19 6 0 9 78 98 104 1 -11 6 79 74 82 2

2 10 76 24 26 4 -6 7 77 26 31 1 -5 14 77 62 66 2 3 9 78 29 21 4 -8 6 79 83 82 1

-12 11 76 64 63 2 -3 7 77 0 2 1 0 0 78 49 49 2 -14 10 78 30 23 4 -5 6 79 112 119 1

-9 11 76 89 92 1 0 7 77 63 63 1 1 1 78 28 35 1 -11 10 78 21 13 4 -2 6 79 116 132 1

-6 11 76 35 35 2 3 7 77 23 28 3 -1 2 78 29 35 1 -8 10 78 42 39 1 1 6 79 105 98 1

-3 11 76 53 61 1 6 7 77 42 38 3 2 2 78 35 38 1 -5 10 78 17 19 4 4 6 79 61 63 2

0 11 76 55 49 1 -14 8 77 7 19 7 -3 3 78 47 35 1 -2 10 78 28 32 2 -13 7 79 96 102 3

3 11 76 40 37 3 -11 8 77 80 83 2 0 3 78 56 25 1 1 10 78 21 11 3 -10 7 79 73 74 2

-11 12 76 62 63 2 -8 8 77 25 23 2 3 3 78 32 50 1 4 10 78 32 35 4 -7 7 79 12 4 6

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 34

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

-4 7 79 24 26 2 1 2 80 159 178 1 -6 10 80 53 53 1 -11 7 81 0 13 1 -10 14 81 29 34 3

-1 7 79 100 98 1 -4 3 80 155 155 1 -3 10 80 56 60 1 -8 7 81 51 54 2 -7 14 81 12 13 10

2 7 79 77 81 1 -1 3 80 158 177 1 0 10 80 111 106 1 -5 7 81 64 63 1 -4 14 81 44 44 2

5 7 79 37 35 4 2 3 80 70 87 1 3 10 80 31 35 4 -2 7 81 19 19 2 -1 1 82 61 53 1

-12 8 79 68 71 5 -6 4 80 68 69 1 -11 11 80 97 94 1 1 7 81 31 26 2 -3 2 82 152 141 1

-9 8 79 55 62 1 -3 4 80 155 155 1 -8 11 80 49 39 2 4 7 81 39 46 3 0 2 82 92 77 1

-6 8 79 79 82 1 0 4 80 119 98 1 -5 11 80 29 34 2 7 7 81 21 13 7 -5 3 82 145 159 1

-3 8 79 30 28 2 3 4 80 36 31 1 -2 11 80 31 32 2 -13 8 81 28 33 6 -2 3 82 153 141 1

0 8 79 48 38 1 -8 5 80 118 122 1 1 11 80 10 17 10 -10 8 81 27 27 3 1 3 82 11 15 3

3 8 79 31 32 3 -5 5 80 32 42 1 -13 12 80 11 7 11 -7 8 81 53 54 1 -7 4 82 67 68 1

6 8 79 55 43 3 -2 5 80 69 87 1 -10 12 80 94 90 1 -4 8 81 10 5 9 -4 4 82 24 28 2

-14 9 79 69 66 3 1 5 80 56 61 1 -7 12 80 43 47 2 -1 8 81 24 26 2 -1 4 82 14 15 2

-11 9 79 83 77 2 4 5 80 48 51 2 -4 12 80 116 114 1 2 8 81 41 46 3 2 4 82 141 154 1

-8 9 79 53 62 1 -10 6 80 57 53 2 -1 12 80 20 17 4 5 8 81 14 10 14 -9 5 82 29 27 2

-5 9 79 63 57 1 -7 6 80 98 101 1 -12 13 80 8 7 7 -12 9 81 35 35 3 -6 5 82 100 98 1

-2 9 79 76 81 1 -4 6 80 70 69 1 -9 13 80 15 8 5 -9 9 81 25 23 2 -3 5 82 143 159 1

1 9 79 107 117 2 -1 6 80 57 61 1 -6 13 80 115 113 1 -6 9 81 57 65 1 0 5 82 107 107 1

4 9 79 31 31 6 2 6 80 167 179 1 -3 13 80 38 35 2 -3 9 81 24 28 2 3 5 82 11 11 10

-13 10 79 77 77 2 5 6 80 28 34 4 -8 14 80 15 15 6 0 9 81 48 48 1 -11 6 82 89 96 2

-10 10 79 93 91 1 -12 7 80 45 47 4 -5 14 80 114 111 1 3 9 81 38 42 3 -8 6 82 120 126 1

-7 10 79 70 74 1 -9 7 80 53 52 2 0 0 81 25 24 3 -14 10 81 34 34 4 -5 6 82 100 98 1

-4 10 79 62 63 1 -6 7 80 98 101 1 1 1 81 38 39 1 -11 10 81 20 19 4 -2 6 82 140 154 1

-1 10 79 107 117 1 -3 7 80 35 31 1 -1 2 81 38 39 1 -8 10 81 35 27 1 1 6 82 95 100 1

2 10 79 57 55 2 0 7 80 93 88 1 2 2 81 51 58 1 -5 10 81 29 32 2 4 6 82 32 40 3

-12 11 79 45 44 2 3 7 80 49 60 2 -3 3 81 94 104 1 -2 10 81 44 46 1 -13 7 82 88 88 2

-9 11 79 82 77 1 6 7 80 114 113 2 0 3 81 33 49 1 1 10 81 32 29 3 -10 7 82 76 76 2

-6 11 79 72 82 1 -14 8 80 16 15 16 3 3 81 60 68 1 4 10 81 49 44 3 -7 7 82 38 40 2

-3 11 79 31 32 2 -11 8 80 50 39 3 -5 4 81 45 47 1 -13 11 81 46 41 2 -4 7 82 67 68 1

0 11 79 19 22 4 -8 8 80 156 153 1 -2 4 81 52 58 1 -10 11 81 22 19 4 -1 7 82 94 100 1

-11 12 79 48 44 2 -5 8 80 119 122 1 1 4 81 30 33 1 -7 11 81 16 13 4 2 7 82 61 65 1

-8 12 79 67 71 1 -2 8 80 167 179 1 4 4 81 14 5 5 -4 11 81 38 46 2 5 7 82 49 42 3

-5 12 79 32 35 2 1 8 80 52 46 1 -7 5 81 62 63 1 -1 11 81 33 29 2 -12 8 82 66 62 8

-2 12 79 54 55 2 4 8 80 116 114 3 -4 5 81 44 47 1 2 11 81 32 30 3 -9 8 82 72 80 1

1 12 79 42 38 3 -13 9 80 0 8 1 -1 5 81 28 33 1 -12 12 81 36 25 3 -6 8 82 120 126 1

-10 13 79 80 77 1 -10 9 80 120 114 2 2 5 81 21 19 3 -9 12 81 38 35 2 -3 8 82 13 11 4

-7 13 79 96 102 1 -7 9 80 52 52 1 5 5 81 29 32 3 -6 12 81 36 37 2 0 8 82 19 5 3

-4 13 79 34 31 2 -4 9 80 43 51 1 -9 6 81 61 65 1 -3 12 81 42 42 2 3 8 82 33 39 3

-1 13 79 39 38 2 -1 9 80 55 46 1 -6 6 81 0 12 1 0 12 81 21 11 4 6 8 82 30 28 5

-9 14 79 63 66 1 2 9 80 35 32 2 -3 6 81 60 68 1 -11 13 81 42 41 2 -14 9 82 93 97 3

-6 14 79 50 43 2 5 9 80 111 111 3 0 6 81 87 94 1 -8 13 81 31 33 2 -11 9 82 43 43 4

0 1 80 82 70 1 -12 10 80 94 90 2 3 6 81 23 28 3 -5 13 81 12 10 8 -8 9 82 75 81 1

-2 2 80 17 24 2 -9 10 80 122 114 1 6 6 81 32 37 4 -2 13 81 36 30 2 -5 9 82 27 27 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 35

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

-2 9 82 62 65 1 2 6 83 119 128 1 -5 14 83 82 90 1 3 9 84 38 37 3 4 6 85 0 5 1

1 9 82 117 122 1 5 6 83 231 228 3 0 0 84 96 88 2 -11 10 84 12 10 12 -13 7 85 52 55 3

4 9 82 35 31 4 -12 7 83 91 75 2 1 1 84 17 19 2 -8 10 84 23 20 2 -10 7 85 54 52 2

-13 10 82 53 42 3 -9 7 83 145 127 1 -1 2 84 18 19 2 -5 10 84 12 10 6 -7 7 85 68 71 1

-10 10 82 108 104 1 -6 7 83 188 186 2 2 2 84 0 4 1 -2 10 84 35 35 1 -4 7 85 17 15 3

-7 10 82 73 76 1 -3 7 83 37 31 1 -3 3 84 79 99 1 1 10 84 29 32 3 -1 7 85 53 51 1

-4 10 82 35 40 2 0 7 83 61 45 1 0 3 84 66 79 1 -13 11 84 38 29 3 2 7 85 30 26 2

-1 10 82 114 122 1 3 7 83 62 56 2 3 3 84 41 30 1 -10 11 84 15 10 5 5 7 85 25 24 5

2 10 82 48 45 3 6 7 83 110 105 2 -5 4 84 26 17 2 -7 11 84 14 16 4 -12 8 85 109 119 3

-12 11 82 36 28 2 -14 8 83 40 42 4 -2 4 84 0 4 1 -4 11 84 15 10 4 -9 8 85 43 39 2

-9 11 82 44 43 1 -11 8 83 29 28 4 1 4 84 34 31 1 -1 11 84 31 32 2 -6 8 85 83 88 1

-6 11 82 93 95 1 -8 8 83 193 163 1 4 4 84 24 25 3 2 11 84 7 6 7 -3 8 85 54 62 1

-3 11 82 35 39 2 -5 8 83 138 132 1 -7 5 84 29 34 3 -12 12 84 16 21 9 0 8 85 62 54 1

0 11 82 0 7 1 -2 8 83 115 128 1 -4 5 84 27 17 2 -9 12 84 56 61 1 3 8 85 21 17 5

-11 12 82 32 28 2 1 8 83 26 22 2 -1 5 84 32 31 1 -6 12 84 0 3 1 -11 9 85 24 20 4

-8 12 82 62 62 1 4 8 83 263 266 3 2 5 84 23 18 3 -3 12 84 34 36 2 -8 9 85 35 39 2

-5 12 82 39 42 2 -13 9 83 60 64 3 5 5 84 11 10 10 0 12 84 20 25 5 -5 9 85 19 19 3

-2 12 82 48 45 2 -10 9 83 103 118 2 -9 6 84 48 61 2 -11 13 84 30 29 3 -2 9 85 34 26 1

-10 13 82 50 43 2 -7 9 83 146 127 1 -6 6 84 10 15 10 -8 13 84 19 19 4 1 9 85 83 85 1

-7 13 82 86 88 1 -4 9 83 45 43 1 -3 6 84 37 30 1 -5 13 84 12 2 7 4 9 85 13 23 13

-4 13 82 32 31 2 -1 9 83 25 21 2 0 6 84 63 82 1 -2 13 84 8 6 7 -13 10 85 34 35 4

-9 14 82 90 97 1 2 9 83 127 124 2 3 6 84 29 32 3 -7 14 84 18 1 4 -10 10 85 70 69 1

-6 14 82 28 28 2 5 9 83 82 90 3 6 6 84 11 3 10 -1 1 85 12 8 3 -7 10 85 52 52 1

0 1 83 72 61 1 -12 10 83 92 91 3 -11 7 84 21 16 6 -3 2 85 103 102 1 -4 10 85 16 5 4

-2 2 83 80 48 1 -9 10 83 104 118 1 -8 7 84 19 18 4 0 2 85 47 27 1 -1 10 85 82 85 1

1 2 83 280 250 1 -6 10 83 127 121 1 -5 7 84 34 34 2 -5 3 85 110 130 1 2 10 85 42 41 3

-4 3 83 32 35 1 -3 10 83 61 56 1 -2 7 84 27 18 1 -2 3 85 103 102 1 -12 11 85 28 28 5

-1 3 83 281 250 1 0 10 83 62 58 1 1 7 84 28 27 2 1 3 85 72 84 1 -9 11 85 27 20 2

2 3 83 444 433 2 3 10 83 133 124 2 4 7 84 16 10 10 -7 4 85 17 15 4 -6 11 85 74 84 1

-6 4 83 161 170 1 -11 11 83 72 60 2 7 7 84 9 1 8 -4 4 85 84 91 1 -3 11 85 22 17 3

-3 4 83 26 35 2 -8 11 83 26 28 2 -13 8 84 13 19 12 -1 4 85 72 84 1 0 11 85 37 38 2

0 4 83 517 505 2 -5 11 83 230 228 1 -10 8 84 18 20 7 2 4 85 105 114 1 -11 12 85 35 28 2

3 4 83 37 31 2 -2 11 83 128 124 1 -7 8 84 20 18 3 -9 5 85 21 19 4 -8 12 85 109 119 1

-8 5 83 139 132 1 1 11 83 41 31 2 -4 8 84 29 25 2 -6 5 85 64 55 2 -5 12 85 22 24 3

-5 5 83 22 11 2 -10 12 83 90 91 1 -1 8 84 28 27 2 -3 5 85 109 130 1 -2 12 85 46 41 2

-2 5 83 443 433 2 -7 12 83 92 75 1 2 8 84 30 35 3 0 5 85 9 12 8 -10 13 85 32 35 2

1 5 83 171 156 1 -4 12 83 263 266 2 5 8 84 0 2 1 3 5 85 54 62 2 -7 13 85 52 55 2

4 5 83 46 43 2 -1 12 83 36 31 2 -12 9 84 58 61 3 -11 6 85 74 84 3 -4 13 85 21 23 3

-10 6 83 129 121 2 -9 13 83 58 64 1 -9 9 84 22 21 3 -8 6 85 84 88 1 0 1 86 309 311 1

-7 6 83 189 186 1 -6 13 83 108 105 1 -6 9 84 49 61 1 -5 6 85 64 55 1 -2 2 86 138 161 1

-4 6 83 166 170 1 -3 13 83 133 124 1 -3 9 84 23 32 2 -2 6 85 104 114 1 1 2 86 327 330 1

-1 6 83 167 156 1 -8 14 83 32 42 3 0 9 84 37 33 2 1 6 85 49 51 1 -4 3 86 181 184 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 36

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

-1 3 86 330 330 1 -11 11 86 189 161 2 -7 8 87 34 29 2 -5 6 88 71 61 1 -2 2 89 72 55 1

2 3 86 200 198 1 -8 11 86 119 94 1 -4 8 87 30 29 2 -2 6 88 52 53 1 1 2 89 118 113 1

-6 4 86 51 50 3 -5 11 86 103 99 1 -1 8 87 33 31 2 1 6 88 57 57 1 -4 3 89 23 25 2

-3 4 86 179 184 1 -2 11 86 175 186 1 2 8 87 49 48 2 4 6 88 0 11 1 -1 3 89 117 113 1

0 4 86 783 756 4 1 11 86 177 157 2 5 8 87 35 28 4 -13 7 88 47 49 4 2 3 89 25 17 2

3 4 86 294 309 2 -10 12 86 124 132 2 -12 9 87 36 37 4 -10 7 88 52 55 2 -6 4 89 21 36 4

-8 5 86 214 185 2 -7 12 86 238 218 1 -9 9 87 15 19 6 -7 7 88 69 78 1 -3 4 89 21 25 3

-5 5 86 284 255 1 -4 12 86 520 509 3 -6 9 87 37 46 2 -4 7 88 43 40 1 0 4 89 137 123 2

-2 5 86 201 198 1 -1 12 86 177 157 1 -3 9 87 20 24 3 -1 7 88 59 57 1 3 4 89 70 66 1

1 5 86 201 217 1 -9 13 86 93 97 2 0 9 87 45 46 2 2 7 88 54 43 2 -8 5 89 19 16 4

4 5 86 111 107 2 -6 13 86 168 148 1 3 9 87 38 39 3 5 7 88 42 40 3 -5 5 89 61 57 1

-10 6 86 153 142 2 -3 13 86 200 174 2 -11 10 87 42 41 2 -12 8 88 157 165 5 -2 5 89 22 17 3

-7 6 86 313 316 2 0 0 87 25 16 3 -8 10 87 33 31 2 -9 8 88 37 30 2 1 5 89 109 118 1

-4 6 86 51 50 3 1 1 87 24 20 1 -5 10 87 13 3 5 -6 8 88 47 50 1 4 5 89 63 68 2

-1 6 86 203 217 1 -1 2 87 23 20 1 -2 10 87 50 48 1 -3 8 88 72 83 1 -10 6 89 21 33 5

2 6 86 92 126 1 2 2 87 40 38 1 1 10 87 36 37 3 0 8 88 142 152 1 -7 6 89 47 49 2

5 6 86 99 99 3 -3 3 87 81 106 1 -10 11 87 46 41 2 3 8 88 44 43 3 -4 6 89 22 36 3

-12 7 86 237 218 3 0 3 87 61 73 1 -7 11 87 16 16 4 -11 9 88 28 21 4 -1 6 89 108 118 1

-9 7 86 174 164 1 3 3 87 31 33 2 -4 11 87 30 30 2 -8 9 88 32 30 2 2 6 89 39 37 2

-6 7 86 313 316 2 -5 4 87 23 30 2 -1 11 87 39 37 2 -5 9 88 25 19 2 5 6 89 0 22 1

-3 7 86 293 309 2 -2 4 87 39 38 1 -9 12 87 39 37 2 -2 9 88 51 43 1 -12 7 89 35 34 5

0 7 86 41 57 2 1 4 87 25 26 2 -6 12 87 23 21 3 1 9 88 70 75 2 -9 7 89 91 104 2

3 7 86 284 289 2 4 4 87 26 29 3 -3 12 87 32 39 2 4 9 88 23 21 6 -6 7 89 48 49 2

6 7 86 169 148 3 -7 5 87 10 10 10 -8 13 87 23 23 3 -13 10 88 45 43 3 -3 7 89 68 66 1

-11 8 86 121 94 2 -4 5 87 27 30 2 -5 13 87 29 28 2 -10 10 88 31 28 3 0 7 89 61 44 1

-8 8 86 713 697 4 -1 5 87 23 26 2 -1 1 88 33 27 1 -7 10 88 50 54 1 3 7 89 32 24 3

-5 8 86 216 185 1 2 5 87 31 37 2 -3 2 88 101 109 1 -4 10 88 0 11 1 6 7 89 44 37 4

-2 8 86 89 126 1 5 5 87 13 3 12 0 2 88 8 10 8 -1 10 88 70 75 1 -11 8 89 32 37 4

1 8 86 309 294 2 -9 6 87 35 45 2 -5 3 88 102 105 1 2 10 88 38 43 3 -8 8 89 187 187 2

4 8 86 516 509 5 -6 6 87 29 24 2 -2 3 88 100 109 1 -12 11 88 50 42 2 -5 8 89 25 16 2

-13 9 86 91 97 4 -3 6 87 28 33 2 1 3 88 81 101 1 -9 11 88 27 21 2 -2 8 89 43 37 1

-10 9 86 116 113 2 0 6 87 83 101 1 -7 4 88 42 40 2 -6 11 88 65 68 1 1 8 89 28 29 3

-7 9 86 176 164 1 3 6 87 19 24 3 -4 4 88 191 180 1 -3 11 88 47 43 2 4 8 89 70 62 3

-4 9 86 118 107 1 6 6 87 27 21 10 -1 4 88 85 101 1 0 11 88 53 55 2 -13 9 89 42 40 4

-1 9 86 306 294 2 -11 7 87 15 16 14 2 4 88 51 53 2 -11 12 88 50 42 2 -10 9 89 52 41 3

2 9 86 170 186 2 -8 7 87 29 29 3 -9 5 88 18 19 5 -8 12 88 159 165 1 -7 9 89 93 104 1

-12 10 86 123 132 3 -5 7 87 17 10 4 -6 5 88 71 61 1 -5 12 88 39 40 2 -4 9 89 61 68 2

-9 10 86 113 113 1 -2 7 87 30 37 2 -3 5 88 99 105 2 -2 12 88 42 43 2 -1 9 89 29 29 2

-6 10 86 154 142 1 1 7 87 30 31 2 0 5 88 38 32 2 -10 13 88 44 43 2 2 9 89 62 56 2

-3 10 86 284 289 2 4 7 87 30 30 4 3 5 88 76 83 1 -7 13 88 46 49 2 -12 10 89 26 32 5

0 10 86 129 111 1 -13 8 87 22 23 21 -11 6 88 66 68 3 -4 13 88 22 21 3 -9 10 89 50 41 2

3 10 86 203 174 2 -10 8 87 34 31 3 -8 6 88 47 50 2 0 1 89 24 23 1 -6 10 89 23 33 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 37

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

-3 10 89 23 24 3 -10 8 90 49 51 3 -5 6 91 110 95 1 -4 3 92 39 45 1 -8 11 92 41 31 2

0 10 89 29 16 2 -7 8 90 51 56 2 -2 6 91 52 47 1 -1 3 92 83 101 1 -5 11 92 24 22 2

-11 11 89 45 45 2 -4 8 90 93 104 1 1 6 91 86 88 1 2 3 92 17 7 3 -2 11 92 31 30 2

-8 11 89 35 37 2 -1 8 90 31 36 2 4 6 91 9 10 9 -6 4 92 16 20 5 -10 12 92 17 24 6

-5 11 89 16 22 4 2 8 90 58 52 2 -13 7 91 59 57 4 -3 4 92 41 45 2 -7 12 92 53 51 2

-2 11 89 60 56 1 5 8 90 40 40 4 -10 7 91 78 83 2 0 4 92 172 167 1 -4 12 92 107 109 1

1 11 89 28 25 3 -12 9 90 17 12 9 -7 7 91 76 77 1 3 4 92 51 60 2 -6 13 92 36 32 2

-10 12 89 33 32 3 -9 9 90 12 8 7 -4 7 91 54 59 1 -8 5 92 45 46 2 0 0 93 27 21 2

-7 12 89 36 34 2 -6 9 90 50 58 2 -1 7 91 83 88 1 -5 5 92 22 11 3 1 1 93 59 51 1

-4 12 89 72 62 1 -3 9 90 23 20 2 2 7 91 72 61 2 -2 5 92 20 7 4 -1 2 93 61 51 1

-1 12 89 35 25 2 0 9 90 14 1 5 5 7 91 47 43 4 1 5 92 63 64 1 2 2 93 20 16 5

-9 13 89 45 40 2 3 9 90 45 51 3 -12 8 91 201 203 4 4 5 92 31 16 3 -3 3 93 17 3 3

-6 13 89 39 37 2 -11 10 90 57 62 2 -9 8 91 30 33 2 -10 6 92 33 28 4 0 3 93 41 63 1

0 0 90 137 110 2 -8 10 90 50 51 1 -6 8 91 39 50 2 -7 6 92 50 64 2 3 3 93 73 89 1

1 1 90 87 86 1 -5 10 90 20 11 3 -3 8 91 55 66 2 -4 6 92 8 20 8 -5 4 93 17 12 4

-1 2 90 90 86 1 -2 10 90 60 52 1 0 8 91 209 219 2 -1 6 92 64 64 1 -2 4 93 21 16 4

2 2 90 70 65 1 1 10 90 44 44 2 3 8 91 51 48 2 2 6 92 30 37 2 1 4 93 47 45 2

-3 3 90 94 105 1 -10 11 90 59 62 2 -11 9 91 22 36 7 5 6 92 28 23 5 4 4 93 53 60 2

0 3 90 31 18 2 -7 11 90 29 31 2 -8 9 91 33 33 2 -12 7 92 50 51 4 -7 5 93 66 70 2

3 3 90 27 42 2 -4 11 90 27 23 2 -5 9 91 22 6 3 -9 7 92 61 62 2 -4 5 93 6 12 6

-5 4 90 64 63 2 -1 11 90 42 44 2 -2 9 91 71 61 1 -6 7 92 51 64 2 -1 5 93 45 45 2

-2 4 90 66 65 2 -9 12 90 19 12 4 1 9 91 81 83 2 -3 7 92 51 60 2 2 5 93 13 17 7

1 4 90 47 43 1 -6 12 90 24 18 3 4 9 91 17 19 12 0 7 92 37 43 2 5 5 93 53 54 3

4 4 90 90 104 2 -3 12 90 47 51 2 -10 10 91 28 20 3 3 7 92 56 60 3 -9 6 93 13 6 12

-7 5 90 23 26 3 -8 13 90 33 30 2 -7 10 91 80 83 1 6 7 92 32 32 6 -6 6 93 46 58 2

-4 5 90 64 63 1 -5 13 90 42 40 2 -4 10 91 16 10 4 -11 8 92 36 31 3 -3 6 93 72 89 2

-1 5 90 45 43 2 -1 1 91 30 21 2 -1 10 91 84 83 1 -8 8 92 186 199 2 0 6 93 13 9 5

2 5 90 2 8 2 -3 2 91 138 143 1 2 10 91 39 53 3 -5 8 92 43 46 1 3 6 93 23 21 3

5 5 90 22 11 4 -5 3 91 120 120 1 -12 11 91 42 41 3 -2 8 92 32 37 2 6 6 93 21 20 8

-9 6 90 51 58 2 -2 3 91 136 143 1 -9 11 91 34 36 2 1 8 92 52 60 2 -11 7 93 20 18 8

-6 6 90 52 39 2 1 3 91 67 84 1 -6 11 91 73 69 1 4 8 92 113 109 2 -8 7 93 42 42 2

-3 6 90 28 42 3 -7 4 91 54 59 2 -3 11 91 52 48 1 -10 9 92 35 29 3 -5 7 93 66 70 2

0 6 90 67 83 1 -4 4 91 241 236 2 0 11 91 64 71 2 -7 9 92 63 62 1 -2 7 93 14 17 4

3 6 90 23 20 3 -1 4 91 69 84 2 -11 12 91 47 41 2 -4 9 92 24 16 2 1 7 93 34 42 2

6 6 90 28 18 5 2 4 91 51 47 2 -8 12 91 200 203 1 -1 9 92 53 60 1 4 7 93 0 10 1

-11 7 90 31 31 4 -9 5 91 23 6 4 -5 12 91 44 43 2 2 9 92 31 30 3 -10 8 93 24 23 4

-8 7 90 53 56 2 -6 5 91 109 95 1 -2 12 91 43 53 2 -12 10 92 18 24 9 -7 8 93 47 42 2

-5 7 90 23 26 3 -3 5 91 123 120 2 -7 13 91 60 57 2 -9 10 92 28 29 3 -4 8 93 53 60 2

-2 7 90 0 8 1 0 5 91 35 30 2 -4 13 91 22 19 3 -6 10 92 34 28 2 -1 8 93 37 42 2

1 7 90 30 36 3 3 5 91 59 66 2 0 1 92 74 83 1 -3 10 92 57 60 1 2 8 93 17 16 6

4 7 90 25 23 5 -11 6 91 75 69 3 -2 2 92 29 27 1 0 10 92 14 10 6 -12 9 93 12 27 12

-13 8 90 22 30 9 -8 6 91 42 50 2 1 2 92 84 101 1 -11 11 92 42 36 2 -9 9 93 53 58 2

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 38

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

-6 9 93 9 6 8 5 7 94 65 72 3 -1 6 95 38 32 2 -4 5 96 22 24 3 -5 3 97 144 149 1

-3 9 93 24 21 3 -12 8 94 165 138 2 2 6 95 42 51 2 -1 5 96 48 50 2 -2 3 97 217 213 2

0 9 93 22 32 3 -9 8 94 59 74 2 5 6 95 13 12 12 2 5 96 14 14 6 1 3 97 88 87 1

3 9 93 4 16 4 -6 8 94 21 6 3 -12 7 95 33 33 5 5 5 96 48 51 3 -7 4 97 99 102 2

-11 10 93 32 25 4 -3 8 94 135 128 1 -9 7 95 51 47 2 -9 6 96 36 35 3 -4 4 97 655 666 4

-8 10 93 24 23 3 0 8 94 165 175 1 -6 7 95 48 56 2 -6 6 96 66 74 2 -1 4 97 87 88 1

-5 10 93 55 54 1 3 8 94 44 43 2 -3 7 95 17 12 4 -3 6 96 77 97 1 2 4 97 121 134 1

-2 10 93 21 16 3 -11 9 94 25 10 4 0 7 95 47 48 1 0 6 96 30 25 2 -9 5 97 215 228 2

1 10 93 44 45 2 -8 9 94 61 74 2 3 7 95 40 48 2 3 6 96 18 21 4 -6 5 97 266 286 2

-10 11 93 35 25 3 -5 9 94 19 17 3 -11 8 95 36 30 3 6 6 96 30 37 6 -3 5 97 145 149 2

-7 11 93 25 18 2 -2 9 94 21 28 3 -8 8 95 142 150 1 -11 7 96 8 12 7 0 5 97 240 251 2

-4 11 93 18 10 4 1 9 94 23 28 4 -5 8 95 60 72 1 -8 7 96 36 41 2 3 5 97 148 143 1

-1 11 93 42 45 2 -10 10 94 24 7 4 -2 8 95 43 51 1 -5 7 96 60 61 2 -11 6 97 129 124 7

-9 12 93 22 27 3 -7 10 94 51 35 1 1 8 95 27 27 3 -2 7 96 12 14 5 -8 6 97 56 52 2

-6 12 93 25 20 3 -4 10 94 66 61 1 4 8 95 90 90 2 1 7 96 34 36 2 -5 6 97 265 286 2

-3 12 93 15 16 5 -1 10 94 27 28 2 -10 9 95 35 39 3 4 7 96 15 25 10 -2 6 97 120 134 1

-1 1 94 123 99 1 2 10 94 26 29 5 -7 9 95 50 47 2 -10 8 96 10 11 10 1 6 97 231 206 2

-3 2 94 65 97 1 -9 11 94 26 10 2 -4 9 95 13 10 6 -7 8 96 39 41 2 4 6 97 252 239 2

0 2 94 223 201 1 -6 11 94 43 34 2 -1 9 95 28 27 2 -4 8 96 24 22 2 -10 7 97 276 245 3

-5 3 94 30 18 2 -3 11 94 42 43 2 2 9 95 21 17 4 -1 8 96 36 36 2 -7 7 97 37 73 2

-2 3 94 74 97 3 0 11 94 70 59 1 -9 10 95 37 39 2 2 8 96 16 17 6 -4 7 97 97 102 2

1 3 94 118 104 1 -8 12 94 158 138 1 -6 10 95 38 34 2 -12 9 96 25 30 5 -1 7 97 234 206 1

-7 4 94 69 57 2 -5 12 94 68 72 1 -3 10 95 45 48 2 -9 9 96 63 73 2 2 7 97 264 278 2

-4 4 94 252 229 2 -2 12 94 29 29 3 0 10 95 29 29 3 -6 9 96 34 35 2 5 7 97 128 113 3

-1 4 94 116 104 1 0 1 95 43 40 1 -11 11 95 49 52 3 -3 9 96 6 21 6 -12 8 97 396 362 4

2 4 94 82 84 2 -2 2 95 18 2 3 -8 11 95 37 30 2 0 9 96 44 55 2 -9 8 97 142 146 1

-9 5 94 19 17 5 1 2 95 80 96 1 -5 11 95 22 12 3 3 9 96 30 29 5 -6 8 97 53 52 2

-6 5 94 58 48 2 -4 3 95 34 44 2 -2 11 95 9 17 9 -11 10 96 21 21 6 -3 8 97 150 143 1

-3 5 94 36 18 2 -1 3 95 78 96 1 -7 12 95 37 33 2 -8 10 96 18 11 4 0 8 97 590 596 3

0 5 94 29 5 3 2 3 95 24 19 2 -4 12 95 89 90 1 -5 10 96 47 51 1 3 8 97 219 238 2

3 5 94 133 128 1 -6 4 95 3 9 3 0 0 96 49 65 3 -2 10 96 15 17 5 -11 9 97 136 145 3

-11 6 94 49 34 4 -3 4 95 39 44 2 1 1 96 60 57 2 1 10 96 18 23 5 -8 9 97 146 146 1

-8 6 94 18 6 5 0 4 95 111 107 1 -1 2 96 59 57 1 -10 11 96 21 21 4 -5 9 97 211 228 1

-5 6 94 59 48 1 3 4 95 22 12 3 2 2 96 23 24 3 -7 11 96 22 12 3 -2 9 97 264 278 1

-2 6 94 88 84 2 -8 5 95 61 72 2 -3 3 96 54 51 1 -4 11 96 18 25 4 1 9 97 171 177 2

1 6 94 77 80 1 -5 5 95 9 26 8 0 3 96 59 72 2 -1 11 96 25 23 3 -10 10 97 138 150 2

4 6 94 67 61 2 -2 5 95 22 19 4 3 3 96 75 97 1 -9 12 96 28 30 3 -7 10 97 279 245 2

-10 7 94 54 35 3 1 5 95 43 32 2 -5 4 96 19 24 4 -6 12 96 29 37 2 -4 10 97 252 239 1

-7 7 94 0 28 1 4 5 95 15 10 6 -2 4 96 16 24 6 -3 12 96 26 29 3 -1 10 97 170 177 1

-4 7 94 74 57 1 -10 6 95 37 34 3 1 4 96 52 50 2 -1 1 97 251 235 1 -9 11 97 138 145 2

-1 7 94 78 80 1 -7 6 95 51 56 2 4 4 96 22 22 4 -3 2 97 218 213 1 -6 11 97 131 124 1

2 7 94 22 28 3 -4 6 95 10 9 10 -7 5 96 58 61 2 0 2 97 237 242 1 -3 11 97 226 238 1

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 39

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

-8 12 97 389 362 2 -3 10 98 26 30 2 -3 9 99 31 45 2 0 8 100 197 222 1 -8 8 101 24 9 4

-5 12 97 124 113 1 0 10 98 35 28 3 0 9 99 17 11 4 3 8 100 37 43 3 -5 8 101 29 37 3

0 1 98 17 6 3 -8 11 98 28 31 2 -11 10 99 10 16 9 -11 9 100 57 71 3 -2 8 101 31 28 2

-2 2 98 23 20 3 -5 11 98 20 13 3 -8 10 99 14 8 6 -8 9 100 75 75 1 1 8 101 31 25 2

1 2 98 27 34 2 -2 11 98 30 23 2 -5 10 99 21 16 3 -5 9 100 104 102 1 -10 9 101 31 29 4

-4 3 98 37 38 2 -7 12 98 20 19 3 -2 10 99 21 27 3 -2 9 100 83 94 1 -7 9 101 32 32 3

-1 3 98 25 34 2 -4 12 98 57 57 2 1 10 99 13 14 10 1 9 100 28 32 3 -4 9 101 28 25 2

2 3 98 32 31 2 0 0 99 26 35 5 -10 11 99 14 16 10 -10 10 100 15 12 10 -1 9 101 30 25 2

-6 4 98 50 49 2 1 1 99 13 17 6 -7 11 99 15 12 5 -7 10 100 72 69 2 2 9 101 23 22 4

-3 4 98 32 38 2 -1 2 99 22 17 2 -4 11 99 17 17 4 -4 10 100 82 74 1 -9 10 101 31 29 3

0 4 98 62 52 2 2 2 99 25 20 3 -1 11 99 20 14 4 -1 10 100 34 32 2 -6 10 101 22 26 3

3 4 98 16 8 5 -3 3 99 52 64 2 -6 12 99 13 20 7 -9 11 100 61 71 2 -3 10 101 19 20 3

-8 5 98 32 45 3 0 3 99 70 95 1 -1 1 100 105 130 1 -6 11 100 24 17 3 0 10 101 16 11 6

-5 5 98 1 3 1 3 3 99 24 29 3 -3 2 100 76 75 1 -3 11 100 39 43 2 -8 11 101 30 28 2

-2 5 98 27 31 3 -5 4 99 5 15 4 0 2 100 137 140 1 -5 12 100 42 36 2 -5 11 101 7 15 7

1 5 98 19 10 3 -2 4 99 25 20 3 -5 3 100 23 29 3 0 1 101 16 8 3 -2 11 101 24 22 3

4 5 98 18 14 5 1 4 99 7 19 7 -2 3 100 72 75 1 -2 2 101 40 46 2 0 0 102 90 77 2

-10 6 98 36 30 4 4 4 99 0 6 1 1 3 100 12 3 7 1 2 101 51 41 2 1 1 102 26 31 2

-7 6 98 28 33 3 -7 5 99 23 28 4 -7 4 100 30 38 3 -4 3 101 50 48 2 -1 2 102 28 31 2

-4 6 98 42 49 3 -4 5 99 15 15 5 -4 4 100 187 196 2 -1 3 101 54 41 2 2 2 102 25 17 3

-1 6 98 16 10 4 -1 5 99 19 19 4 -1 4 100 11 3 11 2 3 101 11 29 10 -3 3 102 52 64 2

2 6 98 33 34 2 2 5 99 16 17 5 2 4 100 11 9 11 -6 4 101 12 16 11 0 3 102 49 63 2

5 6 98 19 13 10 5 5 99 7 16 7 -9 5 100 101 102 3 -3 4 101 49 48 2 3 3 102 19 16 4

-12 7 98 10 19 9 -9 6 99 40 44 3 -6 5 100 101 118 2 0 4 101 69 66 2 -5 4 102 28 25 3

-9 7 98 28 15 3 -6 6 99 52 73 2 -3 5 100 19 28 5 3 4 101 10 3 10 -2 4 102 29 17 3

-6 7 98 32 33 2 -3 6 99 24 29 4 0 5 100 72 71 2 -8 5 101 26 37 4 1 4 102 7 4 6

-3 7 98 9 8 9 0 6 99 65 71 1 3 5 100 20 4 5 -5 5 101 45 35 2 4 4 102 27 23 3

0 7 98 37 45 2 3 6 99 37 45 3 -11 6 100 23 17 18 -2 5 101 18 29 5 -7 5 102 36 42 3

3 7 98 25 30 4 6 6 99 23 20 8 -8 6 100 30 36 3 1 5 101 28 33 3 -4 5 102 31 25 3

-11 8 98 26 31 8 -11 7 99 25 12 7 -5 6 100 101 118 1 4 5 101 23 25 4 -1 5 102 0 4 1

-8 8 98 60 60 2 -8 7 99 11 14 10 -2 6 100 13 9 8 -10 6 101 28 26 4 2 5 102 17 17 5

-5 8 98 37 45 2 -5 7 99 24 28 3 1 6 100 62 63 2 -7 6 101 21 23 4 5 5 102 11 1 11

-2 8 98 33 34 2 -2 7 99 7 17 7 4 6 100 80 74 2 -4 6 101 0 16 1 -9 6 102 57 61 2

1 8 98 24 23 3 1 7 99 0 14 1 -10 7 100 63 69 2 -1 6 101 26 33 3 -6 6 102 22 31 3

4 8 98 56 57 3 4 7 99 6 17 6 -7 7 100 6 13 6 2 6 101 32 28 3 -3 6 102 22 16 4

-10 9 98 50 50 3 -10 8 99 18 8 6 -4 7 100 31 38 2 5 6 101 4 15 4 0 6 102 86 93 2

-7 9 98 25 15 3 -7 8 99 18 14 4 -1 7 100 64 63 1 -9 7 101 34 32 3 3 6 102 18 10 5

-4 9 98 18 14 3 -4 8 99 0 6 1 2 7 100 85 94 2 -6 7 101 26 23 3 -11 7 102 27 20 6

-1 9 98 11 23 10 -1 8 99 15 14 4 5 7 100 50 36 3 -3 7 101 11 3 11 -8 7 102 20 24 5

2 9 98 27 23 3 2 8 99 24 27 4 -9 8 100 76 75 2 0 7 101 33 35 2 -5 7 102 42 42 2

-9 10 98 50 50 2 -9 9 99 11 16 10 -6 8 100 31 36 2 3 7 101 22 20 5 -2 7 102 11 17 10

-6 10 98 38 30 2 -6 9 99 42 44 2 -3 8 100 13 4 6 -11 8 101 25 28 6 1 7 102 29 30 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 40

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

4 7 102 19 8 7 -6 8 103 33 36 2 -5 8 104 82 84 2 -1 8 105 87 78 1 -5 9 106 21 16 4

-10 8 102 25 17 5 -3 8 103 51 48 2 -2 8 104 64 64 1 2 8 105 54 55 2 -2 9 106 56 66 2

-7 8 102 20 24 4 0 8 103 52 57 2 1 8 104 44 27 2 -9 9 105 17 20 5 1 9 106 23 24 4

-4 8 102 32 23 3 3 8 103 0 16 1 -10 9 104 33 19 4 -6 9 105 150 170 2 -7 10 106 33 27 3

-1 8 102 25 30 2 -8 9 103 13 9 8 -7 9 104 78 76 2 -3 9 105 88 72 2 -4 10 106 29 40 2

2 8 102 39 35 3 -5 9 103 23 29 4 -4 9 104 59 57 2 0 9 105 17 2 5 -1 10 106 29 24 2

-9 9 102 14 17 7 -2 9 103 71 66 1 -1 9 104 41 27 2 -8 10 105 78 58 2 -6 11 106 32 24 3

-6 9 102 59 61 2 1 9 103 28 17 3 -9 10 104 28 19 3 -5 10 105 55 58 2 0 1 107 4 15 4

-3 9 102 17 10 4 -10 10 103 21 5 6 -6 10 104 38 30 2 -2 10 105 55 55 2 -2 2 107 67 68 1

0 9 102 34 24 2 -7 10 103 28 25 3 -3 10 104 56 56 1 -7 11 105 90 97 1 1 2 107 21 30 3

-8 10 102 31 17 3 -4 10 103 31 32 2 -8 11 104 50 54 2 -4 11 105 63 55 1 -4 3 107 62 60 3

-5 10 102 12 1 11 -1 10 103 28 17 2 -5 11 104 68 63 1 -1 1 106 21 30 3 -1 3 107 20 30 4

-2 10 102 36 35 2 -6 11 103 15 15 5 0 0 105 268 251 3 -3 2 106 57 59 1 2 3 107 26 35 3

-7 11 102 25 20 3 -3 11 103 11 16 10 1 1 105 51 54 1 0 2 106 29 42 2 -6 4 107 22 24 4

-4 11 102 17 8 4 0 1 104 8 8 7 -1 2 105 49 54 2 -5 3 106 31 26 3 -3 4 107 62 60 3

-1 1 103 21 22 3 -2 2 104 67 78 1 2 2 105 44 61 2 -2 3 106 59 59 2 0 4 107 105 121 2

-3 2 103 56 58 2 1 2 104 47 60 2 -3 3 105 33 16 2 1 3 106 11 23 10 3 4 107 23 15 4

0 2 103 36 45 2 -4 3 104 70 74 2 0 3 105 58 64 2 -7 4 106 12 12 12 -8 5 107 71 77 2

-5 3 103 15 13 6 -1 3 104 52 60 2 3 3 105 62 45 2 -4 4 106 60 66 3 -5 5 107 64 73 2

-2 3 103 56 58 2 2 3 104 21 27 3 -5 4 105 56 62 2 -1 4 106 0 23 1 -2 5 107 22 35 4

1 3 103 42 50 2 -6 4 104 35 19 3 -2 4 105 41 61 2 2 4 106 15 19 6 1 5 107 41 47 2

-7 4 103 12 5 12 -3 4 104 70 74 2 1 4 105 61 51 2 -9 5 106 14 16 13 4 5 107 30 37 3

-4 4 103 2 10 1 0 4 104 103 119 2 4 4 105 168 166 3 -6 5 106 60 77 2 -10 6 107 26 15 4

-1 4 103 42 50 2 3 4 104 30 24 3 -7 5 105 55 55 2 -3 5 106 28 26 4 -7 6 107 25 25 4

2 4 103 20 31 4 -8 5 104 79 84 2 -4 5 105 49 62 2 0 5 106 19 17 4 -4 6 107 21 24 5

-9 5 103 26 29 4 -5 5 104 73 76 2 -1 5 105 59 51 3 3 5 106 24 24 4 -1 6 107 46 47 3

-6 5 103 80 77 2 -2 5 104 17 27 6 2 5 105 91 79 1 -11 6 106 21 24 16 2 6 107 43 51 2

-3 5 103 16 13 6 1 5 104 67 68 2 5 5 105 54 58 3 -8 6 106 32 29 3 -9 7 107 27 25 4

0 5 103 59 64 2 4 5 104 59 57 2 -9 6 105 155 170 2 -5 6 106 63 77 2 -6 7 107 25 26 4

3 5 103 45 48 2 -10 6 104 36 30 4 -6 6 105 90 71 2 -2 6 106 0 19 1 -3 7 107 19 15 5

-11 6 103 11 15 10 -7 6 104 54 52 3 -3 6 105 56 45 2 1 6 106 37 39 2 0 7 107 34 37 2

-8 6 103 31 36 3 -4 6 104 33 19 2 0 6 105 147 185 1 4 6 106 30 40 4 3 7 107 39 29 3

-5 6 103 72 77 2 -1 6 104 63 68 2 3 6 105 85 72 2 -10 7 106 27 27 4 -8 8 107 48 45 2

-2 6 103 21 31 4 2 6 104 68 64 2 -11 7 105 95 97 3 -7 7 106 13 12 8 -5 8 107 74 77 2

1 6 103 32 32 2 5 6 104 69 63 3 -8 7 105 62 59 3 -4 7 106 6 12 6 -2 8 107 40 51 2

4 6 103 30 32 4 -9 7 104 77 76 2 -5 7 105 54 55 2 -1 7 106 36 39 2 1 8 107 24 17 3

-10 7 103 25 25 5 -6 7 104 55 52 3 -2 7 105 89 79 2 2 7 106 56 66 2 -7 9 107 31 25 3

-7 7 103 15 20 7 -3 7 104 34 24 4 1 7 105 82 78 1 -9 8 106 2 12 1 -4 9 107 32 37 3

-4 7 103 6 5 5 0 7 104 46 48 2 4 7 105 63 55 2 -6 8 106 32 29 3 -1 9 107 20 17 4

-1 7 103 34 32 2 3 7 104 57 56 2 -10 8 105 76 58 2 -3 8 106 22 24 4 -6 10 107 20 15 4

2 7 103 65 66 2 -11 8 104 57 54 3 -7 8 105 67 59 2 0 8 106 70 83 2 -3 10 107 30 29 2

-9 8 103 0 9 1 -8 8 104 40 33 2 -4 8 105 168 166 3 -8 9 106 17 12 5 0 0 108 526 532 5

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 41

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

1 1 108 193 191 1 -7 4 109 46 42 3 4 5 110 7 20 6 -5 7 111 40 41 3 -4 3 113 42 55 3

-1 2 108 193 191 1 -4 4 109 122 133 2 -10 6 110 8 2 7 -2 7 111 94 93 2 -1 3 113 48 51 2

2 2 108 112 99 1 -1 4 109 24 11 4 -7 6 110 15 20 8 1 7 111 61 65 2 2 3 113 2 16 2

-3 3 108 54 30 2 2 4 109 22 23 4 -4 6 110 34 25 3 -7 8 111 29 42 4 -6 4 113 26 24 4

0 3 108 32 19 3 -9 5 109 21 21 5 -1 6 110 24 21 5 -4 8 111 247 258 2 -3 4 113 45 55 2

3 3 108 322 311 4 -6 5 109 56 64 2 2 6 110 52 61 2 -1 8 111 61 65 2 0 4 113 18 10 5

-5 4 108 148 144 2 -3 5 109 28 36 3 -9 7 110 17 21 6 -6 9 111 19 15 5 3 4 113 0 11 1

-2 4 108 112 99 2 0 5 109 20 33 4 -6 7 110 18 20 5 -3 9 111 58 68 2 -8 5 113 47 57 3

1 4 108 182 188 2 3 5 109 32 30 3 -3 7 110 0 4 1 -5 10 111 104 94 2 -5 5 113 43 57 2

4 4 108 587 556 5 -8 6 109 18 14 5 0 7 110 15 12 6 -1 1 112 36 32 2 -2 5 113 15 16 8

-7 5 108 105 114 2 -5 6 109 56 64 2 3 7 110 16 10 7 -3 2 112 21 16 4 1 5 113 13 39 11

-4 5 108 144 144 3 -2 6 109 14 23 14 -8 8 110 27 26 4 0 2 112 10 21 10 4 5 113 14 17 12

-1 5 108 179 188 2 1 6 109 27 26 3 -5 8 110 0 5 1 -5 3 112 63 64 2 -7 6 113 28 26 3

2 5 108 178 189 2 4 6 109 22 26 4 -2 8 110 51 61 3 -2 3 112 27 16 4 -4 6 113 31 24 3

5 5 108 176 162 3 -10 7 109 20 17 5 1 8 110 20 23 4 1 3 112 31 33 3 -1 6 113 26 39 4

-9 6 108 279 286 3 -7 7 109 0 1 1 -7 9 110 8 21 8 -7 4 112 51 52 3 2 6 113 66 73 2

-6 6 108 181 197 2 -4 7 109 40 42 3 -4 9 110 9 20 9 -4 4 112 129 142 2 -9 7 113 13 19 12

-3 6 108 315 311 4 -1 7 109 20 26 5 -1 9 110 25 23 3 -1 4 112 39 33 3 -6 7 113 28 26 3

0 6 108 222 234 2 2 7 109 48 53 2 -6 10 110 11 2 10 2 4 112 15 19 7 -3 7 113 8 11 7

3 6 108 217 226 2 -9 8 109 19 23 5 -3 10 110 15 10 5 -9 5 112 18 26 6 0 7 113 45 52 2

-8 7 108 116 132 2 -6 8 109 26 14 4 0 0 111 316 265 3 -6 5 112 40 50 3 -8 8 113 17 26 6

-5 7 108 104 114 2 -3 8 109 33 30 3 1 1 111 97 92 1 -3 5 112 61 64 2 -5 8 113 50 57 2

-2 7 108 176 189 2 0 8 109 98 108 1 -1 2 111 97 92 2 0 5 112 53 62 2 -2 8 113 67 73 2

1 7 108 135 137 1 -8 9 109 19 23 7 2 2 111 116 113 2 3 5 112 29 27 3 -7 9 113 19 19 6

-10 8 108 69 81 2 -5 9 109 23 21 4 -3 3 111 256 257 2 -8 6 112 18 13 6 -4 9 113 12 17 12

-7 8 108 120 132 2 -2 9 109 46 53 2 0 3 111 92 74 2 -5 6 112 43 50 3 0 0 114 80 86 2

-4 8 108 584 556 4 -7 10 109 16 17 9 3 3 111 98 132 2 -2 6 112 5 19 5 1 1 114 17 6 4

-1 8 108 132 137 2 -4 10 109 20 26 3 -5 4 111 69 73 3 1 6 112 13 14 12 -1 2 114 16 6 6

2 8 108 35 37 3 0 1 110 21 27 3 -2 4 111 117 113 2 -7 7 112 21 14 5 2 2 114 23 13 3

-9 9 108 65 47 2 -2 2 110 31 22 2 1 4 111 124 136 2 -4 7 112 49 52 2 -3 3 114 29 8 3

-6 9 108 280 286 2 1 2 110 21 28 3 4 4 111 251 258 2 -1 7 112 20 14 6 0 3 114 33 12 3

-3 9 108 214 226 2 -4 3 110 11 9 10 -7 5 111 40 41 3 2 7 112 35 38 2 3 3 114 22 7 5

0 9 108 14 3 5 -1 3 110 25 28 4 -4 5 111 63 73 2 -9 8 112 12 16 12 -5 4 114 18 30 6

-8 10 108 66 81 2 2 3 110 36 40 2 -1 5 111 121 136 2 -6 8 112 14 13 9 -2 4 114 24 13 4

-5 10 108 174 162 1 -6 4 110 24 25 5 2 5 111 94 93 2 -3 8 112 36 26 3 1 4 114 29 24 3

-2 10 108 29 37 5 -3 4 110 7 9 6 5 5 111 104 94 2 0 8 112 70 68 3 4 4 114 50 48 3

-1 1 109 47 47 2 0 4 110 78 93 2 -9 6 111 10 15 9 -8 9 112 29 16 3 -7 5 114 18 18 6

-3 2 109 43 33 2 3 4 110 0 4 1 -6 6 111 48 71 2 -5 9 112 27 26 4 -4 5 114 24 30 4

0 2 109 2 14 2 -8 5 110 0 5 1 -3 6 111 97 132 2 -2 9 112 35 38 3 -1 5 114 16 24 7

-5 3 109 36 36 2 -5 5 110 47 59 2 0 6 111 9 5 9 0 1 113 30 27 2 2 5 114 0 6 1

-2 3 109 35 33 3 -2 5 110 40 40 4 3 6 111 60 68 3 -2 2 113 4 19 3 -9 6 114 15 10 10

1 3 109 17 11 5 1 5 110 15 21 8 -8 7 111 21 42 5 1 2 113 44 51 2 -6 6 114 9 21 9

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 42

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

-3 6 114 19 7 6 -1 3 116 95 99 2 1 7 117 14 15 7 -4 6 119 20 26 7 -5 6 121 0 8 1

0 6 114 21 15 4 2 3 116 67 59 2 -7 8 117 8 11 8 -1 6 119 42 33 3 -2 6 121 37 46 4

3 6 114 0 17 1 -6 4 116 52 51 3 -4 8 117 14 27 14 2 6 119 22 7 5 1 6 121 11 11 11

-8 7 114 17 13 6 -3 4 116 64 74 2 -1 8 117 18 15 7 -6 7 119 63 64 2 -4 7 121 27 16 4

-5 7 114 13 18 12 0 4 116 95 86 2 -1 1 118 21 2 3 -3 7 119 84 65 2 -1 7 121 19 11 9

-2 7 114 2 6 2 3 4 116 36 31 3 -3 2 118 17 10 5 0 7 119 24 20 4 0 1 122 180 190 2

1 7 114 13 10 12 -8 5 116 64 74 2 0 2 118 13 4 8 -5 8 119 66 80 2 -2 2 122 154 158 2

-7 8 114 15 13 8 -5 5 116 32 32 5 -5 3 118 17 25 6 -2 8 119 29 7 4 1 2 122 185 182 2

-4 8 114 52 48 3 -2 5 116 64 59 2 -2 3 118 22 10 6 0 0 120 42 41 6 -4 3 122 129 123 2

-1 8 114 16 10 6 1 5 116 0 7 1 1 3 118 40 41 2 1 1 120 27 16 3 -1 3 122 179 182 2

-6 9 114 11 10 11 4 5 116 18 20 6 -7 4 118 17 14 9 -1 2 120 21 16 4 2 3 122 183 149 2

-3 9 114 11 17 11 -7 6 116 48 59 2 -4 4 118 61 72 2 2 2 120 14 12 7 -6 4 122 95 93 2

-1 1 115 24 25 3 -4 6 116 58 51 4 -1 4 118 40 41 3 -3 3 120 21 24 5 -3 4 122 126 123 2

-3 2 115 39 29 2 -1 6 116 12 7 11 2 4 118 20 28 5 0 3 120 27 37 3 0 4 122 503 465 4

0 2 115 39 27 2 2 6 116 81 86 2 -6 5 118 20 16 6 3 3 120 3 8 3 3 4 122 240 218 2

-5 3 115 53 60 2 -6 7 116 49 59 2 -3 5 118 15 25 9 -5 4 120 10 13 9 -5 5 122 133 147 2

-2 3 115 40 29 4 -3 7 116 31 31 6 0 5 118 33 38 3 -2 4 120 12 12 11 -2 5 122 184 149 2

1 3 115 24 25 3 0 7 116 62 70 2 3 5 118 30 35 4 1 4 120 14 1 8 1 5 122 194 183 2

-7 4 115 0 8 1 -5 8 116 69 74 3 -8 6 118 10 6 10 4 4 120 17 17 9 -4 6 122 92 93 2

-4 4 115 71 75 2 -2 8 116 79 86 2 -5 6 118 24 16 6 -7 5 120 18 16 6 -1 6 122 198 183 3

-1 4 115 23 25 4 -4 9 116 22 20 5 -2 6 118 23 28 7 -4 5 120 14 13 12 -3 7 122 231 218 2

2 4 115 42 45 2 0 0 117 34 17 5 1 6 118 23 20 4 -1 5 120 17 1 9 0 0 123 16 13 16

-9 5 115 22 22 4 1 1 117 11 7 11 -7 7 118 56 49 2 2 5 120 14 11 9 1 1 123 21 6 4

-6 5 115 29 29 4 -1 2 117 0 7 1 -4 7 118 17 14 7 -6 6 120 0 17 1 -1 2 123 17 6 6

-3 5 115 54 60 2 2 2 117 0 4 1 -1 7 118 25 20 4 -3 6 120 18 8 7 2 2 123 18 23 5

0 5 115 19 23 5 -3 3 117 0 10 1 -6 8 118 15 6 8 0 6 120 25 37 4 -3 3 123 24 37 5

3 5 115 16 17 7 0 3 117 40 50 2 -3 8 118 25 35 5 -5 7 120 24 16 5 0 3 123 37 62 3

-8 6 115 21 19 5 3 3 117 0 16 1 0 1 119 79 53 1 -2 7 120 18 11 7 3 3 123 9 24 8

-5 6 115 31 29 3 -5 4 117 22 20 5 -2 2 119 17 13 5 -4 8 120 21 17 5 -5 4 123 0 13 1

-2 6 115 36 45 4 -2 4 117 12 4 11 1 2 119 28 34 3 -1 1 121 27 7 3 -2 4 123 23 23 5

1 6 115 49 48 2 1 4 117 0 12 1 -4 3 119 58 60 2 -3 2 121 12 10 11 1 4 123 20 15 6

-7 7 115 34 33 4 4 4 117 26 27 4 -1 3 119 26 34 5 0 2 121 9 9 8 -7 5 123 13 19 13

-4 7 115 19 8 6 -7 5 117 14 11 9 2 3 119 90 95 2 -5 3 121 35 39 3 -4 5 123 9 13 8

-1 7 115 51 48 3 -4 5 117 22 20 5 -6 4 119 8 26 7 -2 3 121 0 10 1 -1 5 123 15 15 9

-6 8 115 22 19 4 -1 5 117 13 12 12 -3 4 119 53 60 2 1 3 121 47 57 2 2 5 123 19 21 6

-3 8 115 11 17 11 2 5 117 0 4 1 0 4 119 253 238 2 -7 4 121 22 16 5 -6 6 123 12 22 11

0 8 115 48 37 2 -6 6 117 29 40 4 3 4 119 78 65 3 -4 4 121 81 84 2 -3 6 123 21 24 6

-5 9 115 21 22 4 -3 6 117 13 16 13 -8 5 119 67 80 2 -1 4 121 53 57 2 0 6 123 37 43 3

0 1 116 5 6 5 0 6 117 32 32 3 -5 5 119 99 95 2 2 4 121 44 46 2 -5 7 123 20 19 6

-2 2 116 28 11 2 -8 7 117 9 11 8 -2 5 119 86 95 2 -6 5 121 15 8 8 -2 7 123 27 21 5

1 2 116 98 99 2 -5 7 117 12 11 12 1 5 119 37 33 3 -3 5 121 31 39 4 -1 1 124 16 2 6

-4 3 116 58 74 2 -2 7 117 14 4 11 -7 6 119 64 64 2 0 5 121 39 38 4 -3 2 124 29 38 3

Table 7. Observed and calculated structure factors for kircherite Page 43

h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s h k l Fo Fc s

0 2 124 15 3 7 -1 3 125 42 26 3 3 3 126 48 63 3 0 5 127 37 26 3 -2 4 129 37 29 3

-5 3 124 62 66 2 2 3 125 46 40 2 -5 4 126 18 27 7 0 1 128 68 67 2 -1 1 130 16 6 8

-2 3 124 37 38 3 -6 4 125 54 62 3 -2 4 126 39 42 3 -2 2 128 8 4 7 -3 2 130 52 53 2

1 3 124 43 48 3 -3 4 125 20 11 6 1 4 126 34 35 3 1 2 128 21 28 4 0 2 130 63 59 2

-4 4 124 111 105 2 0 4 125 46 29 4 -4 5 126 29 27 4 -4 3 128 51 47 3 -2 3 130 46 53 3

-1 4 124 39 48 4 -5 5 125 20 22 7 -1 5 126 31 35 4 -1 3 128 12 28 11 1 3 130 21 28 5

2 4 124 36 48 3 -2 5 125 48 40 3 -3 6 126 49 63 3 2 3 128 15 6 7 -1 4 130 23 28 5

-6 5 124 29 19 4 1 5 125 17 24 6 -1 1 127 33 23 3 -3 4 128 50 47 3 0 1 131 32 31 3

-3 5 124 61 66 3 -4 6 125 52 62 3 -3 2 127 26 36 4 0 4 128 124 112 2 -2 2 131 12 15 12

0 5 124 23 21 5 -1 6 125 25 24 4 0 2 127 29 28 3 -2 5 128 17 6 8 1 2 131 21 26 5

-5 6 124 34 19 3 0 0 126 22 6 10 -5 3 127 48 62 3 0 0 129 15 19 15 -1 3 131 21 26 6

-2 6 124 36 48 3 1 1 126 48 43 2 -2 3 127 25 36 4 1 1 129 62 51 2 0 0 132 24 40 23

0 1 125 30 30 3 -1 2 126 47 43 2 1 3 127 61 66 2 -1 2 129 60 51 2 1 1 132 25 19 4

-2 2 125 34 16 3 2 2 126 45 42 2 -4 4 127 138 130 2 2 2 129 37 29 3 -1 2 132 27 19 4

1 2 125 40 26 2 -3 3 126 12 13 11 -1 4 127 63 66 5 -3 3 129 42 29 3 -1 1 133 116 111 2

-4 3 125 14 11 11 0 3 126 45 43 3 -3 5 127 54 62 3 0 3 129 22 10 5 0 2 133 130 150 2