

Am-81-150

American Mineralogist, Volume 66, pages 324-333, 1981

High-pressure crystal structure and compressibility of coesite

LOUISE LEVIEN¹ AND CHARLES T. PREWITT

Department of Earth and Space Sciences
State University of New York
Stony Brook, New York 11794

Abstract

Unit-cell and crystal-structure parameters have been measured on a coesite single crystal at six pressures. Unit-cell parameters of coesite change from $a = 7.1356(3)$, $b = 12.3692(8)$, $c = 7.1736(3)\text{\AA}$ and $\beta = 120.34(02)^\circ$ at 1 atm to $a = 6.9897(4)$, $b = 12.233(2)$, $c = 7.1112(4)\text{\AA}$ and $\beta = 120.74(03)^\circ$ at 51.9 kbar. Both silicate tetrahedra compress significantly but do not distort over the 52 kbar pressure range. All unconstrained Si-O-Si angles and Si...Si distances decrease over the pressure range, with smaller angles and distances decreasing more than larger ones. Values for the bulk modulus [$K_T = 0.96(3)$ Mbar] and its pressure derivative [$K'_T = 8.4(1.9)$] have been calculated by fitting the P - V data to a Birch-Murnaghan equation of state. The compressibility of the coesite structure is highly anisotropic with the stiffest direction parallel to the chains of tetrahedra, which run \parallel to c , and the most flexible direction \perp to these chains in the a - c plane. The criss-crossing of silicate tetrahedral chains in the a - b planes, at different levels along c , gives b an intermediate compressibility.

The increasing temperature factor of O(1), the central anion in the 180° Si-O-Si angle, suggests that this angle becomes unstable at high pressures. Because substitution of Ge for Si has a similar effect on the structure as does increased pressure, GeO_2 may not exist in the coesite structure because the 180° Ge-O-Ge angle destabilizes the structure.

Introduction

The high-pressure crystal structure of SiO_2 (coesite) has been studied to help us better understand the structural elements which give rise to its single-crystal elastic moduli and to permit a comparison between coesite and SiO_2 (quartz), the low-pressure polymorph. We felt that investigations of these two silica polymorphs, because of their simple chemistry, would increase our understanding of the changes that silicate tetrahedra undergo at high pressure, and we would thus better understand the behavior of all silicates under pressure. We also hoped to gain some insight into why GeO_2 apparently is not stable in the coesite structure.

Experimental techniques

The coesite crystals were synthesized at 65 kbar and 1100°C [this temperature was reported incorrectly as 110°C in Gibbs *et al.* (1977)]. Observations made under the optical microscope and with pre-

cession and Weissenberg X-ray photographs showed the crystals to be untwinned. Crystal #1 was an elongated hexagonal plate with dimensions $90 \times 60 \mu\text{m}$ and thickness of $30 \mu\text{m}$. Intensity data were collected on this crystal at ambient conditions and two high pressures. Refinements of the high-pressure data gave reasonable R values, but very large errors on positional parameters; in addition, structural parameters did not show regular changes as a function of pressure. The combination of the small size of the crystal, coupled with the increased background caused by the diamond cell, resulted in very low peak-to-background ratios (42% of intensities were $<2\sigma_1$). A third high-pressure data set, collected with a higher-intensity X-ray beam, gave a refinement with smaller errors on the positional parameters, but the refinement still was not satisfactory. Therefore, we have included the unit-cell data collected on crystal #1 in this report, but not the structural refinements. We next selected a larger crystal ($160 \times 80 \times 60 \mu\text{m}$), and collected data until this crystal was broken in the diamond cell during an unsuccessful remounting attempt. The largest remaining fragment ($120 \times 80 \times$

¹ Present address: Exxon Production Research Company, P.O. Box 2189, Houston, Texas, 77001.

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 1 atm isotropic.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	
-10	0	L	-9	5	L	-8	2	L	-8	8	L	-7	3	L	-7	7	L	-6	0	L	
6	519	523	5	333	331	8	63	64	1	123	117	1	302	315	6	28	19	8	113	102	
-9	1	L	6	241	241	9	216	212	2	198	196	2	246	252	7	352	334	10	93	71	
1	118	117	-9	7	L	-8	4	L	4	134	138	4	364	373	8	64	68	-6	2	L	
2	68	84	3	200	93	92	0	348	352	5	636	639	5	208	220	-7	9	L	-6	0	L
3	202	16*	4	10	178	176	1	204	203	7	495	476	7	160	146	1	58	68	0	117	124
4	16*	510	5	502	73	52	2	470	471	3	112	116	8	266	262	2	613	618	1	609	617
5	178	183	6	14*	4	4	312	324	-8	10	L	9	346	354	3	27	32	2	233	238	
6	579	581	7	16*	3	-8	0	L	5	303	309	3	166	159	-7	5	L	4	268	279	
7	16*	3	0	666	680	6	356	355	4	42	44	1	92	85	6	76	74	6	47	59	
-9	3	L	2	809	838	7	237	220	5	270	261	2	213	203	7	15*	4	7	560	549	
1	306	302	4	586	621	-8	6	L	-7	1	L	3	179	173	-7	11	L	8	111	118	
2	244	246	6	268	258	0	230	229	1	393	392	4	60	57	1	382	368	-6	4	L	
3	59	64	8	327	307	1	353	361	2	96	84	6	285	290	2	15*	23	0	383	400	
4	276	285	5	188	169	-8	2	L	2	146	150	4	114	109	3	113	89	1	111	102	
6	79	77	7	292	285	0	100	102	5	602	620	5	149	142	5	29	33	2	60	63	
8	65	74	1	280	287	5	165	166	6	223	221	7	323	336	6	63	51	3	277	279	
-9	5	L	2	57	46	6	336	353	8	325	316	-7	7	L	-6	0	L	4	264	273	
2	225	237	4	13*	15	7	15*	14	9	99	94	1	361	382	5	57	46	6	162	166	
3	74	69	5	116	116	8	119	129	2	164	163	3	71	65	0	898	927	7	99	93	
4	126	116	6	51	51	7	55	51	4	180	180	4	72	70	8	433	447	8	56	35	
			7	39	50				5	48	62	5	40	43				9	44	20	

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-6	6	L	-6	10	L	-5	3	L	-5	7	L	-5	13	L	-4	2	L
0	207	221	4	505	516	1	51	45	6	31	30	1	34	22	6	50	53
1	312	324	5	202	196	2	749	765	7	677	685	2	33	10	7	379	383
2	546	568	6	217	206	3	131	133	8	133	136	3	21*	8	8	163	172
3	347	360	7	131	132	4	771	787	9	115	111	4	212	205	9	144	128
4	670	695	5	384	391	5	182	181	5	161	158	5	161	158	0	69	69
6	320	321	-6	12	L	6	244	251	-5	9	L	6	33	33	-4	4	L
7	419	422	0	212	196	8	194	191	1	88	72	-5	15	L	0	25	5
8	36	23	1	296	285	9	56	35	2	187	202	3	10*	5	1	68	68
9	503	491	2	345	345	3	417	415	-5	5	L	4	137	139	2	581	569
-6	8	L	4	204	203	5	23*	20	1	13*	17	5	209	210	3	228	236
0	121	132	6	136	139	2	477	475	7	255	253	-4	0	L	4	212	213
1	396	392	3	417	415	3	157	166	8	252	254	0	792	793	6	17*	10
2	159	163	-5	1	L	4	707	710	5	65	57	-4	0	L	5	31	28
3	645	657	6	234	20	1	13*	17	6	65	57	-4	0	L	6	197	195
4	158	166	1	257	255	6	218	236	1	237	220	8	189	198	-4	6	L
5	300	293	2	469	469	7	297	292	2	51	47	10	57	41	7	196	182
6	57	58	3	396	407	8	264	260	3	153	166	2	162	155	8	73	71
7	294	298	4	639	652	9	306	290	4	40	22	-4	2	L	4	844	914
8	203	185	5	527	526	6	106	110	-5	7	L	5	333	339	6	312	319
-6	10	L	7	222	220	6	110	110	6	20*	5	0	413	410	-4	6	L
0	97	82	8	404	412	1	160	157	7	548	543	1	241	234	0	784	795
1	292	285	9	420	417	2	512	516	2	490	488	2	356	356	1	78	98
2	300	316	10	483	461	3	221	222	3	1039	1040	3	972	993	6	182	186
3	490	485	4	401	407	4	401	407	4	100	97	4	100	97	7	207	296
			5	405	409	5	405	409	5	968	944	8	216	209			

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC						
-4	12	L	-3	3	L	-3	7	L	-3	13	L	-2	2	L	-2	6	L	-2	12	L
0	197	200	1	26	41	6	45	44	1	211	216	4	82	76	7	97	95	0	367	388
1	14*	12	2	330	253	7	125	116	2	361	362	5	21	14	8	128	115	1	548	551
2	367	373	3	650	643	8	111	114	3	196	183	6	19*	11	9	25*	26	2	310	326
3	299	301	4	169	185	9	127	126	4	340	342	7	70	84				3	154	153
4	202	205	5	451	450				5	112	107	8	120	111	-2	8	L	4	30	32
5	139	132	6	292	298	-3	9	L	6	409	405	9	24*	29				5	348	342
6	143	140	7	104	101	1	118	126	-3	15	L	-2	4	L	0	285	291	6	64	64
7	129	121	8	109	107	2	729	743	3	121	115	1	147	122	0	536	482	2	124	118
8	259	245	9	259	245	4	679	674	2	409	412	1	516	535	4	442	442	-2	14	L
-4	14	L	-3	5	L	0	479	467	5	170	171	3	470	454	2	346	378	5	698	698
1	88	92	2	160	155	6	790	778	4	186	189	3	226	223	6	205	207	1	85	88
2	629	620	2	81	68	7	39	45	5	379	366	4	619	605	7	674	662	2	37	36
3	139	140	3	103	102	8	34	43	-2	0	L	5	351	338	8	200	186	3	345	351
4	105	85	4	93	87	5	316	307	-3	11	L	6	122	118				4	154	162
5	135	132	6	629	623	23	9	22*	1	101	95	0	725	739	7	344	328	-2	10	L
-3	1	L	7	307	302	2	95	94	2	1294	1303	9	742	222	0	394	394	-1	1	L
1	409	386	2	212*	170	9	278	264	3	582	586	6	486	487	-2	6	L	2	217	217
3	156	152	-3	7	L	4	22*	16	8	150	143				3	389	395	2	301	300
4	251	242	5	472	480	6	185	188	-2	2	L	0	881	872	4	313	310	3	329	360
5	351	353	1	119	118	7	155	151	0	571	565	2	269	270	6	156	166	4	225	224
6	749	744	2	298	310	3	747	740	1	1015	1043	3	82	72	7	440	442	6	109	108
7	565	574	8	199	211	4	162	160	2	225	223	4	106	104	5	12*	13	7	685	685
9	529	519	5	623	621	3	344	285	6	57	50				8	198	188	9	313	323

	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC					
-1	3	L	-1	7	L	-1	13	L	0	4	L	0	8	L	0	14	L	1	5	L
1	436	431	7	41	53	5	251	253	0	1501	1428	5	599	600	2	130	118	0	364*	312
2	478	461	6	99	88	6	132	129	1	377	381	6	273	277	3	235	231	1	653	641
3	364	318				2	280	315	7	439	491	4	265	259	2	132	136			
4	347	337	-1	9	L	-1	15	L	3	485	481	5	235	211	3	547	541			
5	758	746				4	107	111	0	10	L	4	17*	25	1	1	L	4	704	717
6	181	181	1	37	46	1	201	203	5	312	317	6	525	525	1	1	L	5	409	407
7	274	274	2	1052	1035	2	86	77	6	512	529	0	525	525	6	375	382			
8	79	84	3	68	70	3	215	216	7	265	253	1	78	79	0	55	55	7	139	123
9	16*	12	4	643	643	4	60	73	8	544	533	2	17*	25	1	886	894			
-1	5	L	6	15*	18	0	0	L	0	6	L	3	351	355	2	515	472	1	7	L
			7	113	114				4	135	138	4	187	187	4	425	428	0	680	675
1	108	102				0	0	0	0	43	40	5	194	196	6	96	104	5	483	489
2	41*	69	-1	11	L	2	1324	1298	1	58	57	7	208	205	6	89	79	2	387	399
3	240	253				4	602	583	2	564	564	3	107	107	7	38	47	3	352	348
4	63	56	1	275	276	6	242	244	3	440	441	0	12	L	8	160	145	4	181	180
5	661	661	2	218	219	8	471	460	5	269	286	0	71	68	5	264	264			
6	368	372	3	257	263	0	2	L	6	218	227	1	336	337	1	3	L	6	51	47
7	455	453	4	303	313	7	119	139	2	107	110	0	716	714	7	608	603			
8	518	510	5	252	253	0	217	223	8	109	105	3	559	555	1	818	813	1	9	L
-1	7	L	6	24	7	1	210	209	4	76	87	2	179	195						
						2	431	415	0	8	L	5	296	301	3	664	660	0	893	907
1	395	383	-1	13	L	3	105	108	6	179	182	4	443	437	1	217	223			
2	575	566				4	233	236	0	917	887	5	8*	8*	0	850	866			
3	386	376	1	36	18	5	452	450	1	524	515	0	14	L	6	66	57	3	45	43
4	474	477	2	570	561	6	74	80	2	234	234	7	435	430	4	79	74			
5	456	451	3	60	63	7	192	197	3	810	818	0	273	292	6	121	122	5	154	156
6	65	69	4	232	228	8	21*	4	4	9*	5	1	15*	7	6	74	73			

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
1 11 L	2 2 L	2 8 L	3 1 L	3 7 L	3 13 L	4 6 L								
0 140 141	1 61*	83	1 376	389	0 338	370	0 583	590	2 109	94	1 427	451		
1 409 409	2 491	482	2 556	572	1 242	237	1 40	47	3 71	51	2 369	393		
2 20*	3 195	197	3 332	345	2 609	617	2 406	412			3 348	358		
3 126 128	4 187	195	4 161	156	3 107	109	3 754	755	3 15 L	4 101	5 430	426		
4 221 220	5 474	482	5 289	281	4 229	234	4 284	292						
5 272 269	6 69	69	6 83	64	5 127	137	5 534	535	0 459	452	5 430	426		
6 153 151	7 491	470	6 302	291	6 57	51	1 35	53	4 8 L					
1 13 L	2 4 L	2 10 L	3 3 L	3 9 L	2 482	483	1 201	201						
0 434 435	1 309	315	1 192	206			4 0 L	29	36					
1 98 88	2 837	829	3 320	323	1 270	274	1 40	51	2 741	758	3 152	149		
2 369 375	3 231	237	4 153	159	2 695	697	2 25	23	4 544	573	4 167	187		
3 259 267	4 261	262	5 134	141	3 523	535	3 147	140						
4 186 172	5 188	181			4 345	345	4 70	56	4 2 L	2 L	4 10 L			
5 7*	28	297	288	2 12 L	5 305	303	5 215	207			1 162	166		
1 15 L	7 35	30	1 320	328	6 122	126			1 795	819	2 99	121		
0 239 229	2 6 L	2 452	471	3 5 L	3 11 L	2 215	224			3 621	635	3 49	34	
1 276 276	1 189	207	4 161	153	0 559	561	1 99	96	4 78	81	4 125	121		
2 301 287	2 861	868	5 26*	21	1 167	160	2 141	146	5 661	665	4 12 L			
3 19*	2 3	12*	8		2 765	782	3 668	674	4 4 L	4 L	1 239	240		
2 0 L	5 266	281	2 14 L	3 146	135	4 52	55			2 157	133			
2 58 53	6 157	152	1 135	133	4 396	411			3 13 L	2 137	144		3 20*	16
4 251 265	2 603	597	5 276	267	6 123	100			0 31	43	4 169	186		
6 72 48	3 379	371			1 211	236	5 108	106						

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 1 atm anisotropic.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC						
-10	0	L	-9	5	L	-8	2	L	-8	8	L	-7	3	L	-7	7	L	-6	0	L
6	520	522	5	333	337	8	63	60	1	123	122	1	303	301	6	28	15	8	113	110
-9	1	L	6	241	240	9	216	214	2	198	196	2	246	243	7	352	354	10	93	91
1	118	118	-9	7	L	-8	4	L	3	369	372	3	112	109	8	64	62	-6	2	L
2	68	72	0	348	344	5	637	629	5	209	212	-7	9	L	-7	9	L	-6	2	L
3	202	199	3	93	97	1	204	203	6	234	236	6	305	307	1	58	49	0	117	117
4	16*	2	4	179	180	2	471	465	7	496	491	7	160	162	2	613	616	1	610	623
5	510	513	5	73	66	3	112	115	-8	10	L	8	266	261	2	233	233	2	233	233
6	178	176	6	14*	15	4	312	310	5	303	306	3	167	159	3	27	29	3	594	601
7	580	592	-8	0	L	6	356	355	4	42	39	-7	5	L	4	268	270	4	240	242
8	16*	1	7	237	233	5	270	263	5	270	263	1	92	91	6	76	80	5	491	490
-9	3	L	0	667	667	8	320	316	-7	1	L	2	214	212	7	15*	7	7	560	556
1	306	304	4	586	597	-8	6	L	1	393	390	4	179	173	-7	11	L	8	111	115
2	245	241	6	269	266	2	96	96	5	300	306	5	60	56	9	634	629	9	634	629
3	60	69	8	327	329	0	231	228	3	428	432	7	192	195	2	15*	4	-6	4	L
4	277	277	-8	2	L	2	146	143	4	114	108	8	497	495	3	113	104	0	383	383
5	188	188	3	63	52	5	603	613	9	149	148	4	14*	14	5	29	27	1	111	111
6	79	80	4	165	166	6	224	226	7	323	326	-7	7	L	6	63	55	2	60	65
7	293	296	0	100	101	5	29	29	8	326	326	-7	7	L	3	277	277	3	277	277
8	65	66	1	281	278	6	336	338	9	99	103	1	361	361	-6	0	L	4	265	258
-9	5	L	2	57	43	7	15*	5	2	164	165	2	164	165	5	57	54	6	162	160
2	225	217	4	13*	17	8	120	125	3	71	69	0	900	913	7	99	98	8	56	53
3	74	72	5	115	115	6	56	49	4	180	180	4	72	81	5	48	50	6	40	41
4	126	127	7	39	37	-	-	-	5	48	50	-	-	-	9	44	41	25	25	25

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC							
-6	6	L	-5	10	L	-5	3	L	-5	7	L	-5	13	L	-4	2	L	-4	6	L	
0	207	207	4	506	501	1	51	47	6	31	34	1	34	42	6	50	48	9	99	114	
1	312	323	5	202	199	2	750	770	7	678	688	2	33	12	7	379	389				
2	546	556	6	217	213	3	131	131	8	133	135	3	21*	6	8	163	169	-4	8	L	
3	347	357	7	131	133	4	772	790	9	115	106	4	212	206	9	144	148				
4	671	681	5	182	176	5	182	176	5	161	158							0	69	67	
5	384	-6	12	L	6	244	248	-5	9	L	6	33	29	-4	4	L	1	149	137		
6	321	322	7	472	483												2	372	373		
7	420	426	0	212	211	8	194	198	1	88	82	-5	15	L	0	25	11	3	26	30	
8	36	29	1	296	291	9	56	50	2	187	186	3	10*	7	2	350	342	1	68	68	
9	503	510	2	345	342											2	582	561	4	79	83
-6	8	L	3	417	410	-5	5	L	4	136	142	3	248	237	3	228	230	6	42	39	
0	121	119	5	23*	11	1	13*	6	6	209	214					4	213	212	7	458	459
1	397	395	6	136	137	2	477	489	6	65	62	-4	0	L	5	31	30	8	197	197	
2	159	159	-5	1	L	3	157	153	8	252	250	0	793	787	6	17*	17				
3	646	648	4	204	207	4	708	716		2	162	162	8	196	192	7	196	192	-4	10	L
4	159	160	1	257	256	5	389	394	-5	11	L	4	848	840	9	144	137	0	483	487	
5	301	300	2	470	480	6	218	227		1	237	227	6	313	303				1	79	89
6	57	56	3	396	406	8	264	265	2	52	51	10	189	189	-4	6	L	2	703	693	
7	294	300	4	640	665	9	307	309	3	153	163		57					3	105	107	
8	203	195	5	528	534				4	40	22	-4	2	L	1	351	358	4	26	15	
-6	10	L	6	106	111	-5	7	L	5	333	337					2	973	990	5	78	80
0	97	96	8	404	410	1	161	155	6	20*	0	0	414	410	3	875	869	7	225	225	
1	293	291	9	420	439	2	513	517	7	549	546	1	241	235	4	308	309	8	344	344	
2	301	300	10	483	476	3	221	224				2	490	487	5	805	814				
3	491	488				4	402	406	4	405	410	4	100	103	6	27	30				
						5	405	410				5	969	960	7	288	297				
												8	216	215							

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-4	12	L	-3	3	L	-3	7	L	-3	13	L	-2	2	L
0	197	202	1	26	43	6	45	46	1	211	208	4	83	79
1	14*	13	2	331	357	7	125	121	2	362	355	5	21	22
2	367	371	3	650	649	8	111	114	3	196	187	6	19*	4
3	299	296	4	189	183	9	127	128	4	340	339	7	70	73
4	202	203	5	452	450	5	292	307	-3	9	L	5	112	108
5	139	135	6	104	101	6	409	406	6	409	406	9	24*	27
6	143	144	7	109	110	1	118	120	-3	15	L	-2	4	L
7	129	125	8	260	254	2	729	745	3	121	119	1	147	137
-4	14	L	-3	5	L	4	680	679	5	170	174	2	410	412
0	479	473	1	88	93	1	160	146	6	791	786	3	471	454
2	630	623	2	81	68	7	39	46	5	380	364	4	186	184
3	139	132	3	103	103	8	34	34	8	34	34	-2	0	L
4	105	99	4	93	93	-3	11	L	5	316	312	6	122	118
5	135	130	6	630	637	6	308	308	1	101	104	0	726	738
-3	1	L	7	307	308	2	95	92	2	1296	1309	8	15*	20
1	410	387	8	22*	28	3	583	586	6	487	480	9	242	233
2	212*	171	-3	7	L	4	22*	24	8	150	155	-2	6	L
3	156	152	5	473	479	6	186	188	7	155	157	0	882	874
4	251	242	6	119	130	7	155	157	-2	2	L	1	807	805
5	351	359	1	119	130	2	298	302	0	572	565	2	269	272
6	750	752	3	748	746	1	1016	1044	1	1016	1044	3	82	72
7	566	582	4	162	161	2	225	224	2	225	224	5	106	104
8	200	203	5	624	622	3	345	290	6	345	290	6	12*	20
9	529	534	-	-	-	3	57	56	9	313	328	7	447	447
												6	110	115
												1	74	76
												2	217	221
												3	390	392
												4	313	315
												5	413	415
												6	156	164
												5	1131	1114
												7	441	447
												6	110	115
												7	686	691
												8	198	199
												9	313	328

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-1	3	L	-1	7	L	-1	13	L	0	4	L	0	8	L	0	14	L
1	436	433	7	41	46	5	251	250	0	1503	1434	5	600	596	2	130	120
2	478	461	8	99	97	6	132	132	1	377	381	6	273	275	3	235	230
3	364	322							2	280	310	7	489	502	4	266	260
4	347	337	-1	9	L	-1	15	L	3	485	482	5	236	227	3	548	547
5	759	759							4	107	109	0	10	L			
6	181	180	1	37	41	1	201	199	5	312	310				1	1	L
7	274	271	2	1053	1043	2	86	80	6	512	522	0	525	530	5	410	412
8	79	80	3	68	68	3	215	211	7	265	260	1	78	79	0	55	56
9	16*	21	4	644	650	4	60	61	8	545	545	2	17*	16	1	888	895
-1	5	L	6	15*	19	0	0	L	0	6	L	3	351	350	2	515	474
1	108	99	7	113	113	0	0	0	0	43	42	4	135	138	3	921	915
2	41*	68	-1	11	L	2	1326	1306	1	58	58	7	208	219	6	484	490
3	240	254				4	603	583	2	565	564				6	89	84
4	63	60	1	275	273	6	242	236	3	107	107	0	12	L	7	38	46
5	662	672	2	218	222	8	472	476	4	441	450				8	160	158
6	369	375	3	257	259	5	269	285	0	71	61				5	264	264
7	455	460	4	304	309	0	2	L	6	219	222	1	336	335	1	3	L
8	518	521	5	252	254	6	24	16	0	218	222	7	119	123	2	115	115
-1	7	L	7	16*	12	1	210	210	8	109	106	3	559	555	1	819	813
1	396	383	-1	13	L	2	431	416	0	8	L	4	77	81	2	179	196
2	576	560				3	105	107	4	243	243	5	297	295	3	665	667
3	387	374	1	36	24	5	453	465	0	919	888	6	180	184	4	444	446
4	475	473	2	571	557	6	74	80	1	524	516	0	14	L	6	66	59
5	457	461	3	60	62	7	193	187	3	811	823	2	235	235	7	435	442
6	65	63	4	232	228	8	21*	6	4	9*	3	0	273	281	8	121	126
									1	15*	4				6	74	71

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC							
1	111	L	2	2	L	2	8	L	3	1	L	3	7	L	3	13	L	4	6	L	
0	140	143	1	61*	83	1	376	389	0	338	367	0	584	586	2	109	110	1	428	436	
1	409	408	2	492	487	2	557	557	1	242	234	1	40	52	3	71	69	2	370	377	
2	20*	20	3	195	207	3	333	332	2	610	620	2	406	415	4	112	112	3	349	353	
3	126	133	4	187	193	4	161	159	3	108	120	3	755	750	3	115	L	4	101	96	
4	221	217	5	474	478	5	289	289	4	230	228	4	284	288	5	535	539	5	430	428	
5	273	272	6	69	71	6	83	83	5	128	133	6	302	305	6	57	57	1	35	41	
6	153	151	7	492	489	7	210	L	8	3	3	L	3	9	L	2	482	480	1	201	202
7	113	L	8	4	L	9	192	198	9	192	198	9	198	202	10	4	0	L	2	29	26
0	435	429	1	310	311	1	565	563	0	738	751	0	342	350	2	742	762	3	153	155	
1	98	90	2	838	826	3	321	323	1	270	270	1	40	39	2	545	560	4	168	169	
2	369	360	3	232	221	4	154	152	2	696	703	2	25	22	3	10	L	4	10	L	
3	259	260	4	262	257	5	134	137	3	523	537	3	147	144	4	70	69	4	2	L	
4	186	187	5	188	184	6	297	304	7	345	343	4	313	313	5	216	212	1	162	161	
5	7*	18	6	36	33	7	320	324	8	122	129	9	1	796	816	2	99	100	3	49	46
6	115	L	7	6	L	8	452	456	9	3	5	L	10	311	L	2	215	216	3	125	130
0	239	231	1	189	209	2	135	133	3	165	165	0	559	562	1	99	95	5	662	667	
1	277	275	2	862	878	3	26*	26	4	161	165	1	168	169	2	142	135	3	622	628	
2	301	297	3	12*	9	4	364	366	5	214	L	3	766	786	3	669	676	4	78	80	
3	19*	12	5	267	274	6	156	156	7	135	133	4	396	403	5	56	56	4	4	L	
4	251	277	6	158	156	7	604	600	8	119	123	9	277	273	3	113	L	2	137	141	
5	73	64	8	379	379	9	379	379	10	119	119	11	31	31	1	211	211	5	108	107	

L	OBS	CALC												
4	14	L	5	5	L	5	13	L	6	8	L	7	7	L
1	89	88	4	279	276	0	11*	2	1	51	54	0	234	231
5	1	L	5	7	L	1	190	189	2	23*	22	1	5*	11
0	543	545	0	462	466	6	0	L	6	10	L	7	9	L
1	83	84	1	433	442	2	493	518	1	106	103	0	712	705
2	231	234	2	223	222									
3	140	139	3	337	339	6	2	L	7	1	L	8	2	L
4	363	371	4	86	86									
5	416	421	5	9	L	1	395	396	0	238	243	1	16*	8
5	3	L	0	165	168	2	107	108	1	120	119			
0	720	723	1	285	283	3	133	135	2	202	202			
1	247	250	2	659	655	6	4	L	7	3	L			
2	113	108	3	192	189	1	159	160	0	148	144			
3	110	110				2	109	114	1	142	144			
4	111	115	5	11	L	3	234	235	2	65	60			
5	5	L	0	14*	10	6	6	L	7	5	L			
0	528	547	1	430	431									
1	228	228	2	76	76	1	169	162	0	348	350			
2	228	221				2	176	173	1	181	175			
3	277	279				3	62	58	2	209	207			

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 21.8 kbar.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	
-12 0 L	-9 -1 L	-8 2 L	-6 -4 L	-5 -3 L	-4 -2 L	-3 -1 L									
4 11*	60	-3 107	118	-1 42*	54	-3 227	240	-6 178	202	-8 91	91	-9 201	227		
-11 -1 L	-2 167	164	0 32*	83	-2 113	117	-4 144	159	-6 43*	51	-8 208	213			
-12 12 L	8 79	31	7 46*	84	0 363	375	-2 85	87	-4 67	78	-6 314	297			
0 206	237	12 48*	51	8 59*	37			0 401	401	-2 640	644				
3 62*	72	-9 1 L	-7 -3 L	-6 -2 L	-5 -1 L										
6 57*	79	-1 315	330	-4 131	131	-6 233	247	-6 233	247	-4 0 L	-3 1 L				
-10 -2 L	-3 276	274	-6 20*	2	-4 402	380	-8 118	92	-7 262	257					
-9 3 L	-2 93	60	-5 77	27	-2 233	233	-6 242	254	-5 145	162					
0 41*	70	3 76	63	-7 -1 L	-4 34*	1	-4 470	486	-3 51*	61					
2 87	85			-2 82	103	-5 1 L	0 762	766							
-10 0 L	-8 -4 L	-4 121	122	-6 0 L	-7 177	192	-4 2 L		-3 3 L						
-2 62*	105	0 377	399	-2 209	203	-5 372	379	-7 125	117	-5 284	277				
0 106	103			2 39*	50	-6 61*	57	-3 88	113	-1 322	330				
-10 2 L	-8 -2 L	-7 1 L	-2 499	487	-5 3 L	-5 687	688	-2 4 L							
7 73	30	-3 52*	24	-5 234	262	-6 2 L	-5 242	227	-4 4 L	-7 42*	18				
-9 -3 L	-2 48*	72	-1 87	92	-5 44*	27	-3 153	149	-3 210	210	-6 294	287			
-1 403	418	-8 0 L	-7 3 L	-2 48*	103	-4 -4 L	-3 -3 L	-2 -2 L							
0 293	298	-4 58*	55	-1 121	120	-6 4 L	-5 101	99	-7 38*	24	-9 279	290			
-2 344	335	0 685	685	-1 176	177	-4 103	-4 124	-6 155	146	-8 108	103	-6 51*	65		
								-4 333	339	0 552	542				

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC						
-2	0	L	-1	1	L	0	0	L	1	3	L	2	2	L	3	3	L	4	4	L
-10	77*	112	-9	87	75	-2	1478	1428	-9	44*	5	-10	84	79	-9	257	243	-7	186	183
-8	198	212	-7	32*	41	0	0	0	-7	262	262	-9	42*	31	-7	101	111	-1	101	111
-6	101	85	-1	934	937	0	2	L	2	-4	L	-7	32*	71	4	-4	L	5	-3	L
-4	260	258	-1	3	L	0	2	L	-5	54	47	-1	1100	1112	-9	110	114	-8	91	92
0	746	773	-2	2	L	-9	385	361	-9	215	214	-8	239	247	-11	72*	62	-10	365	346
-7	506	486	-3	637	642	-7	123	140	-8	58*	12	2	4	L	-4	239	247	-8	211	210
-5	478	473	3	74	41	1	-3	L	2	-2	L	-7	308	316	4	-2	L	0	699	720
-3	166	166	0	-4	L	-10	169	165	-11	92	94	3	-3	L	-12	124	139	5	-1	L
-2	4	L	-8	513	554	-8	41*	41	-10	61*	79	-10	227	228	-10	227	228	-8	225	217
-5	177	178	-7	251	261	-4	338	337	-8	143	148	-10	107	69	-8	225	217	-12	196	197
8	76	12	-6	534	560	1	-1	L	-7	77	71	-8	91	101	-4	26*	30	-10	472	454
-1	-3	L	0	-2	L	-10	142	130	-2	195	195	3	-1	L	4	0	L	-8	433	430
-9	146	79	-10	104	98	0	54	53	-12	337	351	-12	54*	34	-12	238	252	5	1	L
-8	110	111	-8	46*	22	-2	306	310	2	0	L	-10	48*	38	-10	58*	70	-2	454	468
-6	47*	48	-4	200	205	1	1	L	-8	82	93	-8	179	186	-6	218	215	-9	406	396
-1	-1	L	-2	450	441	-11	38*	24	-6	467	462	3	1	L	-4	860	850	-3	429	422
-10	165	167	0	0	L	-9	308	312	10	112	112	-11	161	169	4	2	L	5	3	L
-8	137	115	-10	326	314	-7	716	705	-9	498	497	-11	374	366	-9	55*	59	-7	468	486
-6	85	83	-8	533	525	7	75	41	-5	375	375	-9	117	99	-5	208	208	2	62*	87

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 31.5 kbar.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-12	0	L	-9	-1	L	-7	-3	L	-6	-2	L	-5	-1	L	-4	0	L	-3	1	L	-3	1	L
4	4*	56	11	75	28	-4	132	122	-6	42*	4	-8	90	92	-7	105	86	-7	255	255	-5	155	172
-11	-1	L	-9	1	L	-3	290	281	-4	44*	4	-7	165	180	-6	226	226	-5	38*	38	-3	38*	38
0	234	242	-1	329	330	-7	-1	L	-6	0	L	-4	395	383	0	742	744	-3	3	L	-3	3	L
-11	1	L	-8	-4	L	-6	13*	11	-6	34*	72	-5	1	L	-6	80	52	-5	272	266	-1	334	350
3	75	67	0	392	409	-5	229	267	-4	463	450	-5	350	357	-5	693	678	-2	-4	L	-7	44*	15
5	39*	76	-8	-2	L	-4	102	113	-2	496	480	-3	83	95	-4	4	L	-7	287	284	-5	169	171
-10	-2	L	-4	43*	39	-7	1	L	-5	24*	21	-5	3	L	-3	221	222	-6	772	799	-2	-2	L
0	65*	58	-3	80	39	-2	82	66	-3	292	300	-2	81	99	-3	-3	L	-5	169	171	-5	169	171
-10	0	L	0	71	75	-1	60*	79	-1	403	404	-4	-4	L	-8	193	212	-2	-2	L	-7	44*	15
0	30	84	-8	0	L	9	80	38	-6	4	L	-5	98	96	-7	52*	26	-9	290	292	0	529	521
-9	-3	L	-4	48*	40	-2	332	321	-1	110	112	-1	181	179	-4	333	333	-8	98	106	-6	45*	61
-1	407	420	-2	699	679	-6	-4	L	-5	-3	L	-8	97	94	-3	-1	L	0	529	521	10	23*	88
0	274	279	-8	2	L	-3	228	236	-6	184	203	-6	40*	52	-8	208	223	-2	0	L	-9	188	211
-9	-1	L	-1	75	75	-2	140	123	-5	214	209	-4	80	74	-6	313	303	-8	185	191	-6	109	93
-3	100	113	5	66	74	0	350	364	-4	168	175	0	398	394	-2	638	647	0	751	0	751	0	

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC											
-2	0	L	-1	3	L	0	2	L	2	-4	L	2	4	L	4	-4	L	5	-3	L					
8	58*	65	-7	432	430	-9	354	336	-9	199	207	-7	300	309	-4	251	263	-11	81	59					
	-6	63	52	-7	104	116	-8	35*	7	-8	585	638	3	-3	L	4	-2	L	-10	361	343				
-2	2	L	-3	615	622	-4	27	1	-3	L	-11	32*	32	-12	123	142	-9	39*	67	-8	221	219			
-7	507	491	9	67	9	-10	166	164	2	-2	L	-10	92	61	-10	234	236	0	693	707					
-5	470	471	7	61	64	0	-4	L	-8	38*	27	-11	108	89	-8	102	97	-8	234	235	5	-1	L		
-1	-3	L	-8	530	553	-4	328	330	-10	83	88	-6	148	151	-4	23*	2	-13	62*	46	-12	191	193		
-9	128	172	-7	245	256	1	-1	L	-8	165	161	-2	183	186	3	-1	L	4	60*	74	-10	471	446		
-8	109	103	-6	546	567	-11	37*	6	2	0	L	-12	42*	31	-12	242	252	-8	436	435	-2	441	462		
-6	42*	52	0	-2	L	-8	144	134	-10	150	132	-10	346	361	-8	178	177	-10	53*	77					
-1	-i	L	-2	307	310	-11	37*	6	-2	307	310	-10	553	533	-8	139	124	5	1	L					
-10	130	156	-8	33*	36	0	53	52	-8	79	65	3	1	L	-6	184	178	-11	160	167					
-8	113	104	-4	183	189	1	1	L	-6	449	443	-2	1492	1480	-11	151	162	-4	844	829	-9	386	379		
-7	60*	39	-2	450	446	-9	294	297	2	2	L	-9	473	483	4	2	L	-3	432	421					
-6	86	87	0	0	L	-7	701	702	-7	57	58	-9	31*	33	3	3	L	-9	110	85	-9	74	67		
-1	1	L	-10	314	311	-1	9	69*	71	-7	42*	64	-9	250	244	4	4	L	-7	465	476	-5	223	220	
-9	90	71	-8	544	539	1	3	L	-1	1053	1092	4	-4	L	-7	186	183	-1	121	127					
-7	69	39	-4	520	501	0	0	0	-9	39*	9	-7	247	255	-9	115	107	-8	81	99	4	66	91		

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
6	-4	L	7	-3	L	7	3	L	8	0	L	9	-1	L	10	-2	L	11	-1	L
-9	38*	30	-11	156	150	-9	302	321	-4	516	513	-10	82	45	-10	121	139	-11	222	222
-8	45*	35	-10	102	80	-7	168	166	-2	842	836	-8	42*	43	-8	130	120	-10	118	119
-6	106	109	-8	262	257	-5	244	247	-7	99	99	8	2	L	-6	146	154	-7	83	31
-6	343	348	-3	115	99	-3	115	99	-1	331	331	-4	33*	53	-6	100	106	-7	63*	74
6	-2	L	-4	387	388	-1	318	331	-1	160	165	-2	36*	70	-4	57*	59	-6	86	86
-12	236	239	-2	281	285	0	178	182	8	-4	L	-9	206	202	-2	51*	72	-4	52*	21
-10	203	211	2	67*	62	-8	293	284	-5	47*	74	-7	91	101	9	1	L	10	0	L
-8	158	166	7	-1	L	-6	328	341	-3	119	124	-11	42*	28	-12	404	385	11	1	L
6	0	L	-13	43*	33	-6	307	318	-1	198	215	-10	37*	45	-10	291	266	-9	274	281
-12	39*	23	-12	159	165	8	-2	L	3	43*	39	-9	436	417	-8	88	57	-7	74	74
-10	141	132	-10	167	166	-12	148	155	-7	241	225	-5	503	481	-6	451	438	-5	88	86
-8	36*	3	-8	316	300	-10	126	132	-5	287	299	-3	177	180	-2	155	148	-3	55*	67
-4	39*	21	-6	255	251	-2	42*	35	-8	120	125	-1	116	126	0	44*	84	-1	42*	6
6	80	72	0	174	170	-6	38*	3	-3	135	150	9	3	L	10	2	L	12	0	L
6	2	L	-4	43*	23	-2	526	544	-7	340	333	-9	277	272	-8	163	162	-10	39*	42
-11	264	263	7	1	L	-2	37*	13	-1	208	210	-8	62*	92	-7	53*	31	-6	42*	26
-9	660	632	-11	40*	2	0	6*	75	9	-3	L	-7	340	333	-5	179	188	-4	77	56
-7	553	548	-9	57*	38	-7	263	272	8	0	L	-10	50*	13	-5	191	184	-4	80	59
6	4	L	-7	629	621	2	48*	66	-8	102	92	-3	80	64	-1	280	286	-2	45*	39
-7	136	137	-1	433	426	-12	177	191	-6	118	116	-7	330	318	-3	203	204	-1	45*	39

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 38.7 kbar.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-12	0	L	-9	1	L	-7	-1	L	-6	0	L	-5	1	L	-4	2	L
4	67*	48	-1	326	343	-4	104	111	-6	58*	79	-7	165	176	-7	113	99
-11	-1	L	2	77	69	-2	212	205	-4	457	466	-5	347	350	-6	78	54
0	255	258	-8	-4	L	-1	51*	75	-2	491	482	-3	85	83	-5	677	696
-11	1	L	0	426	433	-7	1	L	-6	2	L	-5	3	L	-3	701	710
7	93	67	-8	-2	L	-5	270	283	-3	326	308	-5	48*	9	-3	170	178
-10	-2	L	-3	42*	48	-1	77	75	-4	39*	8	-3	154	137	-4	44	L
0	48*	51	-2	57*	64	-7	3	L	-1	393	413	-5	100	95	-3	-3	L
-10	0	L	-1	113	112	-6	4	L	-4	16*	73	-7	36*	32	-9	321	311
0	41*	77	-4	42*	32	-6	-4	L	-1	183	184	-4	-2	L	-6	162	168
-9	-3	L	-2	311	315	-3	236	240	-5	-3	L	-6	55*	54	-3	-1	L
0	265	278	-1	92	94	-6	-2	L	-4	140	131	-5	223	207	-4	0	L
-9	-1	L	0	42*	70	-6	77	6	-2	81	71	-8	110	90	-2	648	658
-3	113	115	-7	-3	L	-4	75	8	-5	-1	L	-6	216	210	-3	1	L
-2	141	138	-3	78*	293	-2	89	99	-6	232	253	10	29*	80	-7	260	253
0	45*	68	-2	91	66	-4	404	389	-4	232	234	-3	39*	24	-5	170	182
8	70	53	-2	232	234	-2	91	66	-2	232	234	10	85	51	-2	2	L

L	OBS	CALC																					
-2	2	L	-1	3	L	0	2	L	2	-4	L	2	4	L	4	-4	L	5	-3	L			
11	68*	82	-3	621	623	10	105	107	-9	227	211	-7	304	311	-9	98	101	-11	48*	49			
-2	4	L	0	-4	L	1	-3	L	-8	52*	4			3	-3	L	-4	264	268	-8	222	226	
-5	179	176	-8	579	566	-10	183	170	-11	82	82	-8	96	99	-12	147	146	-10	368	356			
-1	-3	L	-6	567	587	-4	336	334	-10	50*	91	-4	141	143	-10	238	245	-13	87	40			
-9	146	170	-8	56*	97	0	-2	L	1	-1	L	-2	173	173	3	-1	L	-8	248	247	-12	204	201
-6	68	53	-6	10	75*	107	-8	134	123	-12	388	379	-10	46*	30	-4	23*	18	-10	478	455		
8	71	12	-8	51*	40	-2	310	310	-10	580	564	-6	734	756	-12	227	254	-8	444	442			
-1	-1	L	-4	178	181	0	53	57	-8	62*	57			3	1	L	-8	134	123	-2	457	461	
-10	158	157	-8	108	94	0	0	L	1	1	L	-6	446	446	-6	147	150	-11	145	150			
-6	109	89	-10	322	323	-9	282	301		10	73*	78	-11	147	166	-4	837	824	-9	389	375		
-1	1	L	-8	564	558	-7	691	710		2	2	L	-5	383	384	4	2	L	3	56*	83		
-9	54*	72	-4	512	495	-1	57	59	-10	84	91	3	3	L	-11	394	381	5	3	L			
-7	49*	39	0	0	0	9	105	72	-9	35*	31	-9	496	486	-9	104	84	-3	428	422			
-1	921	933							-7	41*	59	-9	261	250	-1	239	236	-9	28*	74			
-1	3	L				0	2	L	1	3	L	-5	95	80	-7	110	111	4	4	L	-5	231	226
-8	97	97	-9	352	333	-9	26*	3							-7	191	183						
-7	427	432	7	60*	99	-7	253	254	6	62*	53				-1	138	137						

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 46.0 kbar.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	
-12 0 L			-9 -1 L			-8 2 L			-7 5 L			-6 4 L			-4 4 L
2 23*	10	-3 93*	118	10 81*	132	3 239	237	-1 199	190	-6 26*	5	9 84*	104		
-2 138			135			-7 -3 L			-6 -4 L			6 105	-5 102	104	10 2*
-12 2 L									10 105	29	-4 49*	60			2
10 125 115			-9 1 L			-4 78*	112	-3 229	243	-5 -3 L		-3 246	255		-3 -5 L
-11 -1 L			-1 331	346	-3 304	300	-2 170	146			-4 -2 L		-5 309	301	
2 95	58		-2 124	72	0 350	365	-6 209	219			-4 444	455			
-11 -1 L			-1 90*	103			-5 219	194			-8 94*	101			
4 100 28			-9 3 L			-7 -1 L		-6 -2 L		-4 190	193	-7 71*	99		-3 -3 L
-11 3 L	8	97	92	-6 67*	2	-6 58*	6	-5 63*	1	-5 -1 L		-6 68*	53		
12 97*	92		-5 244	291	-4 107	-2 74*	98		-6 242	249	-4 40*	77	-8 226	251	
6 61*	91		-8 -2 L	-4 60*	107	-2 209	199	-6 0 L		-4 402	369	-7 18*	35		
-10 -2 L			-3 59*	62			-6 125	90	-7 158	173	-4 0 L		-6 154	177	
0 72*	48	-2 66*	63	-7 1 L			-6 455	469	-6 222	226	-6 193	197			
2 104 64	0	48*	69			-4 310	313	-2 483	484	-4 369	-8 68*	84			
-10 0 L			-8 0 L			-3 63*	64		-5 336	336	10 69*	81	-6 329	312	
-2 120 114	-4 52*	18				-6 2 L		-3 58*	70	-4 2 L					
0 68*	60	-2 311	308	-7 3 L			-3 143	141	-5 3 L		-5 697	700	-3 1	L	
-10 2 L		0 680	694	-1 114	103	-2 88	98	-1 398	411	-3 185	189	-7 726	-7 261	253	
6 101 102		-8 2 L	10 162	84		13 148	118					-5 156	188		
	-1 110	103	7 92*	115								-3 43*	12		

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-3	3	L	-2	2	L	-1	1	L	0	0	L	1	-1	L
-5	256	253	-7	526	525	-9	55*	72	-10	320	324	-11	52*	15
-1	382	387	-5	490	485	-7	69*	43	-8	574	573	-10	157	134
10	83*	71	7	97	52	-6	76*	98	-4	503	484	-8	135	111
11	58*	59				-1	968	955	-2	1475	1453	-2	315	317
-2	-4	L	-2	4	L	-1	3	L	0	0	0	0	51	52
-8	54*	74	8	104	5	-3	625	617	0	2	L	9	100	72
-7	62*	19	-1	-5	L	11	96*	154	-8	62*	45	1	1	L
-6	318	290							-7	75*	84	-9	289	300
-5	181	182	-7	61*	84	0	-4	L	10	117	110	-7	723	719
-2	796	795	-6	401	405				11	119	95	-1	59	58
-2	-2	L	-4	720	733	-9	34*	68				0	110	82
-10	139	129	-1	-3	L	-7	264	270	1	-5	L	1	3	L
-9	334	320	-10	148	156	-6	579	590	-9	234	207	-7	251	251
-8	90*	107	-9	123	169	-4	153	157	-8	432	418	-8	86*	94
-6	52*	67	-8	105	94	0	-2	L	-7	506	501	-5	92	93
0	506	508	-7	423	426				-5	683	710	-1	1117	1132
9	90	31	-6	59*	57	-11	63*	95	1	-3	L	8	108	107
-2	0	L	-1	-1	L	-10	63*	110	-11	144	154	-10	491	464
-8	172	168	-10	148	147	-8	90	45	-10	180	176	-8	74*	5
-6	110	110	-8	74*	82	-4	168	176	-9	55*	2	-7	307	315
0	796	-6	119	98		-2	473	467	-8	40*	3	-4	660	659
									-4	334	331			
												-9	249	253
												-8	57*	26
												-7	107	114

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
4 -4	L	4 2	L	5 -1	L	6 -2	L	7 -3	L	7 3	L	8 -2	L				
-11	169	161	-9	68*	75	-12	211	206	-13	99*	118	-12	132	144	-7	176	173
-10	95	2	-1	240	238	-11	132	133	-12	243	248	-11	154	131	-5	260	274
-9	108	104	8	129	101	-10	461	450	-11	266	268	-10	90*	84	-3	114	106
-8	114	124				-8	448	446	-10	216	221	-9	256	304	-1	324	334
-7	200	184	4	4	L	-2	459	463	-8	163	173	-8	272	256	8 -4	L	-10
-4	281	273										-6	363	368	8	400	515
-3	204	200	5	57*	104	5	1	L	6	0	L	-4	394	401	-2	305	301
-2	458	437										-11	53*	33	-6	371	372
-1	143	147	5	-5	L	-9	376	366	-10	160	154	0	192	206	-10	366	358
4 -2	L	-10	289	296	-3	436	430	-8	46*	52	2	86*	72	-9	143	156	-2
-12	131	146	-9	258	256				6	92*	90				-8	294	285
-11	399	382	-8	327	336	5	3	L	6	2	L				-7	262	241
-10	235	249	-7	329	332							-12	161	162	-6	321	330
-9	92	75	-4	672	674	-7	468	476	-9	691	675	-11	57*	8	-5	294	308
-8	251	256				-5	241	238	-7	568	560	-10	168	170	-3	314	323
-4	41*	31										-8	307	300	-2	164	176
4	91	77	-12	214	207	6	-4	L	7	-5	L	-6	278	275	-1	225	215
			-11	63*	43	-11	57*	19	-9	134	134	0	146	138	8 -2	L	2
4	0	L	-10	384	365	-10	90*	29	-8	402	413						9 -3
-10	100	81	-9	54*	74	-9	45*	40	-7	193	194	7	1	L	-13	242	235
-8	141	117	-8	229	237	-8	55*	22	-6	260	263				-12	179	156
-6	117	121	0	691	708	-7	160	170	-5	312	310	-9	51*	28	-11	190	188
-4	763	814	2	87	68	-6	53*	95	-4	37*	7	-7	242	249	-10	139	132
												-5	635	630	-8	147	143
												-1	435	439	-6	51*	51*
												-4	37*	31	-7	372	366
												-2	51*	3	-6	144	128

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
9 -3	L		9 3	L		10 0	L		11 -1	L		12 -2	L	
-4	337	334	-5	209	196	-10	310	276	-10	66*	109	-4	40*	29
-3	53*	69	-3	94	69	-8	70*	57	-9	294	282			
-2	280	284	-1	277	279	-6	408	417	-8	139	167	12	0	L
0	265	273				-4	605	621	-7	79*	60			
9 -1	L		10 -4	L		-2	133	137	-6	120	94	-6	80*	39
-12	60*	60	-9	240	207	10	2	L	-4	74*	28	-4	68*	48
-11	60*	49	-8	144	124				-2	136	95	-2	105	10
-10	51*	35	-7	276	299	-7	52*	12	-1	54*	15	13	-1	L
-8	54*	61	-6	398	393	-5	158	170	11	1	L	-7	81*	76
-4	150	151	-5	103	98	-3	187	206				-6	113	89
-4	53*	65	-4	490	513	-1	81*	58	-7	112	60	-5	108	118
-2	52*	58				0	112	48	-5	72*	60			
0	60*	78		10 -2	L				-3	59*	66			
9 -1	L		-12	89*	111		11 -3	L	-2	88*	95			
-9	406	399	-9	177	179	-10	51*	42	-1	98	15			
-7	576	581	-8	129	122	-9	229	231	12 -2	L				
-5	487	481	-7	105	12	-7	171	146	-10	89*	115			
-3	164	165	-6	76*	102	-6	136	91	-9	149	122			
-1	125	133	-4	125	71	-5	133	124	-8	154	131			
0	104	78	-2	58*	64	-4	208	212	-7	277	272	-6	85*	61
3	106	118							-5	445	452			

Table A-3: Observed and calculated structure factors for coesite at 51.9 kbar.

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	
-12 0 L	-9 1 L	-8 2 L	-6 -4 L	-5 -3 L	-4 -2 L	-3 -3 L									
8 111* 136	-1 337	341	-1 70*	108	-2 168	141	-7 39*	33	-8 133	102	-6 174	182			
	1 101*	129		-1 199	193	-6 178	220	-7 129	90	-4 323	328				
-11 -1 L	8 105	65	-7 -3 L	0 362	368	-5 230	197	-6 116	54						
0 245 261	11 125	61	-4 94*	107	-6 -2 L	-4 188	197	-4 42*	71	-3 -1 L					
6 113* 168	-9 3 L	-3 306	297	-2 50*	62	-2 50*	62	0 389	386						
-10 -2 L	8 105	96	-2 66*	67	-6 68*	8	-5 -1 L	4 73	4 77	-9 167	190				
	-1 78*	105	-5 71*	5	-4 103	10	-7 148	163	-4 0 L	-8 232	239				
-1 98* 120	-8 -4 L	-7 -1 L	-2 115	92	-6 234	250	-6 169	186	-6 336	319					
0 93* 37	0 440	443	-5 276	282	-6 0 L	-4 395	388	-4 371	396	-2 649	656				
6 162 103	-1 239	232	-4 121	101	-6 114	86	-5 1 L	10 127	86	-7 257	244				
-10 0 L	-8 -2 L	-2 219	205	-4 444	459	-2 216	226	0 724	711	-5 161	184				
0 46* 55	0 137	125	-4 55*	22	-7 1 L	-2 471	472	-5 322	328	-5 687	689	-3 3 L			
2 137 57	-3 53*	62	-3 62*	57	-3 324	304	-6 2 L	11 89*	117	-3 712	720				
-9 -3 L	-2 62*	60	-1 77*	62	-4 52*	10	-5 3 L		-5 322	328	-5 687	689	-3 3 L		
-1 403 435	10 86*	132	-7 3 L	-2 60*	92	-3 181	190	-6 139	109	-5 312	296	-2 -4 L			
0 261 268	-8 0 L	-1 108	105	-1 400	413	-4 -4 L	-4 438	458	-8 59*	68					
-9 -1 L	-2 294	290	-6 -4 L	-5 -5 L	-6 69*	15	-3 -3 L	-7 101	16						
-3 109* 109	0 662	679	-4 203	203	-3 266	276	-5 128	102	-6 331	297					
-2 94* 125	-3 228	242	-3 228	242	-2 188	200	-4 54*	54	-8 229	247	-5 190	175			
					-3 257	263	-7 66*	37	-2 821	793					

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC
-2 -2 L	-1 -3 L	0 -2 L	1 -3 L	2 -4 L	2 2 L	3 3 L								
-10 104*	127	-7 414	422	-11 117	85	-11 162	152	-10 484	463	10 159	127	-8 51*	96	
-9 332	310	-6 57*	53	-10 103*	111	-10 265*	170	-9 219	208			-7 110	117	
-8 97*	108			-9 324	313	-9 57*	2	-8 69*	1	3 -5 L				
-6 55*	63	-1 -1 L	-8 54*	53	-8 39*	3	-7 314	306					4 -4 L	
0 501	495			-4 162	166	-4 322	327	-4 667	657	-9 237	248			
-2 0 L	-8 98	85	-2 479	467	1 -1 L	2 -2 L	-7 292	282			-8 51*	27	-11 163	155
-2 0 L	-6 77*	90	0 0 L							-7 292	282	-10 70*	2	
-8 150	164			-11 69*	73	-12 130	120			3 -3 L		-9 105	95	
-6 118	118	-1 1 L	-10 298	320	-10 150	138	-11 66*	73			-8 96	124		
0 796	796			-8 590	568	-8 155	106	-10 63*	99	-11 48*	54	-7 176	181	
-2 2 L	-8 61*	65	-4 491	475	-2 318	320	-8 172	184	-10 113	67	-4 263	280		
-7 513	510	-7 77*	38	0 0	0	0 52	55	-2 157	159	-9 259	249	-3 192	195	
-5 482	482	-1 950	952	0 2 L		1 1 L	2 0 L			-8 97	96	4 -2 L		
12 66*	120			-7 44*	74	-9 288	290	-10 593	583	3 -1 L		-12 139	146	
-1 -5 L	-1 -3 L	10 115	111	-1 52	55	-8 33*	33			-11 390	383			
-7 110	77	-3 602	612	7 120	38	-6 435	433	-12 60*	28	-10 229	250			
-6 400	403	0 -4 L	1 -5 L	1 -3 L	1	-2 1592	1555	-11 167	159	-9 106	72			
-4 745	739			-8 404	414	6 93*	118	-10 121	58	-8 276	265			
-1 -3 L	-9 44*	76	-7 496	497	-7 243	243	2 2 L	-6 741	753	4 0 L				
-10 117	151	-7 570	563	-5 694	712	10 107*	151	-9 53*	36	3 1 L		-10 58*	86	
-9 135	160	-6 597	592			-7 50*	57			-8 116	110			
-8 72*	92	-4 138	160			-5 98	96	-10 79*	58	-6 117	102			
						-1 1072	1123	-9 476	471	-4 821	803			
						0 113	108	-5 393	388					

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC				
4	2	L	5	-1	L	6	-2	L	7	-1	L	8	-4	L	8	2	L	9	-1	L	
-9	56*	72	-8	440	444	-11	242	255	-12	155	157	-10	371	362	-9	200	198	-8	57*	65	
-1	236	237	-2	448	456	-10	228	222	-11	65*	19	-9	127	154	-7	120	116	-6	135	154	
6	46*	54				-8	179	180	-10	168	176	-8	275	281	-5	98	34	-4	62*	65	
8	46*	102	5	1	L				-8	309	291	-7	245	240	-3	142	152	-2	74*	59	
						6	0	L	-6	267	272	-6	321	326	-1	178	186	0	65*	72	
4	4	L	-11	111	117				-2	50*	18	-4	305	321		8	4	L	9	1	L
-1	148	156	-7	210	211	-10	177	157	0	134	131		6	-2	L	-5	293	301	-11	45*	61
5	76*	102	-3	425	430	-8	70*	61	4	83*	101		-11	149	155	-3	174	178	-7	548	565
			7	103*	163	6	97*	86	7	1	L	-11	195	184	-2	594	584	-5	480	468	
5	-5	L	5	3	L	6	2	L	-11	105	19	-10	134	132	-1	222	217	-3	170	154	
-9	258	250				-9	683	668	-7	225	234	-8	146	151				-1	127	129	
-8	331	332	-7	461	468	-7	537	550	-5	626	624	-6	55*	22	9	-3	L	2	136	125	
-7	318	329	-5	230	236				-1	431	435	-4	47*	34	-11	118	136	3	114	109	
5	-3	L	6	-4	L	7	-3	L				-2	61*	6	-10	43*	31	9	3	L	
-12	192	196	-11	57*	22	-12	144	136		7	3	L	0	70*	60	-9	269	276	-7	375	366
-11	45*	41	-10	76*	32	-11	158	124	-7	174	170	8	0	L	-6	145	130	-5	203	198	
-10	373	358	-9	61*	39	-10	116	82	-5	283	283	-4	341	335	-3	88*	71	-1	279	265	
-9	36*	82	-8	108	18	-9	273	290	-3	116	103	-12	147	174	-3	94	71	-1	279	265	
-8	239	234	-7	175	175	-8	260	255	-1	314	327	-10	533	514	-2	290	285				
2	87	62	-6	110	96	-6	366	370	2	105	67	-8	397	375	9	-1	L	10	-2	L	
5	-1	L	6	-2	L	-4	400	404	4	112	107	-6	381	375				-11	68*	2	
-12	215	200	-13	130	118	-2	294	302	-4	450	465	-2	831	838	-12	76*	60	-10	144	140	
-10	458	445	-12	260	246		0	192	207				-10	64*	29	-8	135	124	-9	396	381

