

AM-91-452

Substructure and superstructure of mullite by neutron diffraction

R. J. Angel, R. K. McMullan, C. T. Prewitt

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 76, 3-4, 332-342.

#5854
revised

Substructure and superstructure of mullite by neutron diffraction

R. J. Angel, R. K. McMullan, C. T. Prewitt

MATERIAL FOR DEPOSIT

Table 4: Observed and calculated structure factors for mullite (two models as described in text). Observed structure factors (F_o) have been corrected for absorption and extinction, and scaled to F_c . Both F_o and F_c have been multiplied by a factor of 100.

K	OBS	CALC	2 K -3	8 K -3	4 K -2	9 K -2	K	OBS	CALC	3 K -1	K	OBS	CALC	8 K -1
0	386	364	0	33	36	0	279	274	1	70	71	8	172	173
2	0*	7	1	16	14	1	32	31	2	126	130	9	22	11
4	66	68	2	84	88	2	187	185	3	51	52	10	40	38
1	K -4		3	112	117	3	39	37	4	152	155	11	170	170
4	17	15	4	182	190	4	105	103	5	79	79	4	208	207
5	275	272	5	93	88	6	121	124	6	121	124	5	179	178
1	112	107	6	40	37	6	214	209	10	K -2		0	68	65
2	115	123	7	111	111	7	75	77	0	201	196	1	14	11
3	36	34	8	23	21	8	160	157	2	36	37	3	32	29
4	154	149	9	165	166	9	49	50	4	133	139	5	74	72
5	20	21	10	63	62	10	63	62	0	201	196	6	28	25
2	K -4		3	K -3		5	K -2		2	36	37	4	243	239
0	22	5	1	173	170	0	362	377	3	152	157	5	74	72
1	120	120	2	145	138	4	110	113	4	133	139	6	28	25
2	95	98	3	265	256	6	61	60	1	33	33	7	44	44
3	260	255	4	73	73	8	83	85	2	211	210	8	50	51
4	91	91	5	163	162	10	69	67	3	101	101	9	109	105
5	122	121	6	82	81	5	18	13	4	196	195	10	63	66
3	K -4		7	14	17	6	44	44	2	223	237	11	42	42
1	85	95	8	147	146	7	161	163	4	257	264	5	K -1	
2	56	60	4	K -3		8	112	117	6	45	43	6	45	43
3	21	17	5	18	9	9	80	84	8	192	191	10	148	154
4	63	67	6	144	141	0	231	233	1	91	91	1	122	121
5	92	89	7	193	190	1	167	164	2	225	237	2	307	307
4	K -4		8	118	124	2	119	121	3	31	30	3	146	143
0	243	238	9	184	186	3	239	237	4	19	17	4	11	3
1	21	22	10	201	216	4	8	0	5	294	296	5	36	36
2	120	128	6	25	24	5	11	6	6	103	103	6	K -1	
3	36	38	7	39	37	6	89	93	7	93	90	7	89	91
4	96	94	8	36	39	7	88	90	8	110	108	8	65	62
5	K -4		5	K -3		8	34	24	9	131	131	9	193	184
1	15	13	0	28	23	0	28	23	10	46	51	0	119	117
2	185	186	1	169	164	1	169	164	11	75	74	1	175	172
3	92	92	2	155	133	2	155	133	2	K -1		2	33	30
0	K -3		3	310	307	3	310	307	3	36	35	3	36	35
1	15	13	4	121	119	4	121	119	4	109	109	4	109	109
2	185	186	5	133	130	5	133	130	5	89	89	5	188	183
3	92	92	6	74	75	6	74	75	6	210	217	6	55	54
0	K -3		7	63	59	7	63	59	7	155	155	7	155	155
1	60	63	8	125	120	8	125	120	8	12	8	8	69	67
2	214	208	9	122	120	9	122	120	9	152	153	9	152	153
3	33	33	10	44	47	10	44	47	10	150	145	10	150	145
4	13	3	0	93	99	0	93	99	11	75	74	11	75	74
5	260	252	1	148	144	1	148	144	12	33	30	12	33	30
6	83	85	2	22	17	2	22	17	13	36	35	13	36	35
7	90	87	3	0*	12	3	0*	12	14	10	10	14	10	10
8	94	89	4	105	109	4	105	109	15	34	34	15	34	34
9	101	107	5	167	163	5	167	163	16	115	113	16	115	113
0	143	142	6	57	59	6	57	59	17	9	6	17	9	6
1	112	107	7	120	116	7	120	116	18	306	304	18	306	304
2	115	123	8	120	116	8	120	116	19	64	64	19	64	64
3	36	34	9	326	321	9	326	321	20	191	187	20	191	187
4	154	149	10	41	41	10	41	41	21	197	197	21	197	197
5	20	21	1	19	21	1	19	21	22	158	156	22	158	156
6	83	85	2	31	26	2	31	26	23	303	303	23	303	303
7	90	87	3	98	102	3	98	102	24	46	46	24	46	46
8	94	89	4	24	7	4	24	7	25	183	180	25	183	180
9	101	107	5	271	269	5	271	269	26	97	97	26	97	97
0	143	142	6	K -3		6	K -3		27	7	7	27	29	29
1	112	107	7	K -3		7	K -3		28	126	123	28	126	123
2	115	123	8	129	129	8	129	129	29	19	16	29	19	16
3	36	34	9	60	59	9	60	59	30	184	182	30	184	182
4	154	149	10	32	27	10	32	27	31	42	35	31	42	35
5	20	21	11	84	81	11	84	81	32	115	113	32	115	113
6	83	85	12	67	71	12	67	71	33	9	6	33	9	6
7	90	87	13	120	116	13	120	116	34	306	304	34	306	304
8	94	89	14	120	116	14	120	116	35	64	64	35	64	64
9	101	107	15	326	321	15	326	321	36	191	187	36	191	187
0	143	142	16	41	41	16	41	41	37	197	197	37	197	197
1	112	107	17	19	21	17	19	21	38	158	156	38	158	156
2	115	123	18	31	26	18	31	26	39	34	34	39	34	34
3	36	34	19	98	102	19	98	102	40	303	303	40	303	303
4	154	149	20	24	7	20	24	7	41	46	46	41	46	46
5	20	21	21	5	271	269	5	271	269	97	97	21	97	97
6	83	85	22	271	269	22	271	269	22	7	13	22	7	13
7	90	87	23	7	13	7	7	13	23	7	13	23	7	13
8	94	89	24	7	13	24	7	13	24	7	13	24	7	13
9	101	107	25	7	13	25	7	13	25	7	13	25	7	13

MULLITE MODEL2

FACTOR = 100.00

K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC
2	K 0	6	K 0	12	K 0	4	K 1	9	K 1	3	K 2	8	K 2				
0	37	34	3	239	246	5	71	71	68	64	1	130	129	0	306	297	
1	166	186	4	15	5	6	28	25	2	227	217	2	56	59	1	49	48
2	148	150	5	13	2	7	42	44	3	90	89	3	25	27	2	56	59
3	314	341	6	101	105	8	55	51	4	13	15	4	86	81	3	130	132
4	136	133	7	94	95	9	107	104	5	137	136	5	98	70	4	104	101
5	134	133	8	20	21	10	65	65	6	88	79	6	115	116	5	191	188
6	83	84	9	98	100	11	35	42	7	55	57	7	323	312	6	24	34
7	59	59	10	33	33	4	259	257	4	44	41	8	44	41	7	69	74
8	135	129	6	40	43	5	K 1	10	K 1	9	78	80	9	78	80		
9	129	122	8	189	184	10	161	149	10	194	140	10	194	140	9	K 2	
10	53	51	1	181	180	1	119	120	0	262	244	0	262	244	1	64	71
11	70	79	2	36	36	2	284	298	1	177	174	1	177	174	2	124	129
12	53	53	3	67	64	3	141	142	2	94	89	2	94	89	3	49	52
3	K 0	4	134	134	1	90	91	9	51	50	0	271	275	3	49	52	
1	138	145	5	17	3	2	225	236	4	35	41	1	32	31	4	145	152
2	58	58	6	98	100	3	29	30	5	106	101	2	189	184	5	80	79
3	35	33	7	297	291	4	20	17	6	37	22	3	36	37	6	113	122
4	88	87	8	68	71	5	294	289	11	K 1	11	K 1	5	87	87	10	K 2
4	88	87	9	148	151	6	103	103	10	60	67	6	209	206			
5	61	60	7	91	90	7	91	90	1	85	91	7	76	77	0	201	191
6	131	129	8	110	107	8	110	107	2	64	62	8	155	156	1	77	73
7	331	330	9	125	129	9	125	129	3	188	178	9	57	50	2	35	37
8	48	48	10	48	51	0	115	116	4	46	39	10	60	62	3	149	154
9	94	95	11	79	74	1	169	169	0	K 2	5	K 2	4	130	137		
10	153	151	2	61	67	2	29	30	0	K 2	0	K 2	0	130	137		
11	69	77	3	140	140	3	38	34	1	85	91	3	34	33	0	K 3	
4	K 0	4	121	116	4	106	108	0	356	376	1	34	33				
5	201	199	5	201	199	5	182	179	2	10	4	2	210	209	0	145	142
6	32	33	6	32	33	6	59	54	4	113	112	3	102	101	2	189	186
7	72	78	7	72	78	7	151	153	6	57	60	4	198	193	4	239	232
8	47	50	8	47	50	8	68	67	8	83	85	5	24	13	6	57	59
9	64	52	9	57	39	4	15	2	10	73	67	6	43	44	8	174	178
3	35	36	5	311	307	5	311	307	7	160	161	7	160	161			
4	110	108	6	30	29	6	30	29	1	K 2	8	112	117	1	K 3		
5	91	90	7	122	122	7	122	122	1	K 2	9	82	84				
6	230	226	8	23	16	8	23	16	1	101	103	1	101	103	1	61	63
7	85	84	9	180	177	1	19	10	2	132	132	6	K 2	2	215	207	
8	168	168	10	33	35	2	29	34	3	9	8	0	229	230	3	35	33
9	64	52	11	60	76	3	114	112	4	183	178	0	229	230	4	13	3
10	69	67	5	87	81	4	18	6	5	23	26	1	164	163	5	257	247
11	19	8	6	124	136	5	286	285	6	144	140	2	120	120	6	84	84
5	K 0	7	25	13	8	68	64	7	192	197	3	236	233	7	84	87	
8	86	89	8	86	89	7	184	180	8	122	123	4	11	0	8	89	88
10	K 0	10	K 0	211	201	1	193	197	9	183	182	5	19	6	9	101	107
1	43	44	1	85	84	4	97	96	10	207	209	6	89	93			
2	206	217	2	211	201	5	184	179	2	K 2	7	88	90	2	K 3		
3	101	102	1	46	43	6	97	97	8	K 1	8	52	24				
4	211	207	2	46	43	7	0*	4	0	25	23	9	91	96	0	100	96
5	26	26	3	165	166	8	168	170	0	48	49	0	25	23	1	187	179
6	47	51	4	146	147	9	27	11	1	167	164	1	167	164	2	21	10
7	168	170	4	146	147	9	27	11	2	134	132	2	134	132	3	52	46
8	136	131	5	48	46	10	45	37	3	310	303	1	176	175	4	21	15
9	99	99	6	68	73	11	156	162	4	117	119	2	35	33	5	270	265
10	228	227	11	K 0	11	156	162	4	201	200	4	117	119	2	35	33	
11	77	72	11	K 0	11	156	162	4	179	173	5	133	130	3	68	70	
6	K 0	1	44	41	41	0	66	65	5	178	173	6	76	75	4	122	123
2	98	100	2	98	100	1	13	11	6	26	27	6	76	75	4	122	123
3	32	34	3	32	34	2	252	259	7	10	12	7	62	59	5	0*	2
4	29	33	4	29	33	3	29	29	8	125	119	8	125	119	6	93	93
5	59	64	5	59	64	4	238	238	9	116	119	7	274	267	7	112	110
0	244	247	0	244	247	0	244	247	10	45	47	8	68	61	8	18	21
1	178	181	1	178	181	0	66	65	9	116	119	8	125	119	9	164	163
2	127	130	2	127	130	1	13	11	10	45	47	10	45	47	8	68	61

