

High-pressure structural study of dolomite and ankerite

Nancy L. Ross, Richard J. Reeder

For deposit: Tables 5, 6

American Mineralogist, 77, 3-4, 412-421.

**High-pressure structural study  
of dolomite and ankerite**

Nancy L. Ross

Department of Geological Sciences  
University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, UK

Richard J. Reeder

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

Material for Deposit

August, 1991

Table 5a. Dolomite at 0 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC			
	5 -4	L		5 -2	L		-3 1	L		-5 2	L		3 2	L		0 3	L		0 4	L
0	93	96	4	118	114	2	123	121	2	84	84	10	123	122	6	49	43	8	178	182
			7	47	38	5	37	34	5	48	48	13	70	67	9	73	68			
	6 -4	L													12	156	153		1 4	L
				6 -2	L		-2 1	L		-4 2	L		-6 3	L						
4	91	97													1	3	L	12	116	116
			2	93	91	3	227	227	6	113	118	6	69	70						
	3 -3	L	5	72	68	6	177	176							13	62	65		-6 5	L
			8	45	48					-3 2	L		-5 3	L	16	134	131			
0	244	247					-1 1	L										1	32	25
				2 -1	L				4	134	134	1	102	105		2 3	L	4	76	70
	4 -3	L				1	37	37	7	127	127	4	66	62						
			3	133	132	4	339	339				7	47	44	8	89	95		-5 5	L
4	139	140	6	242	241	7	28	30		-2 2	L				14	75	68			
													-4 3	L				2	68	69
	5 -3	L		3 -1	L		0 1	L	5	27	28					-6 4	L	8	94	95
									8	141	141	2	100	103				11	51	43
2	117	115	1	115	115	2	65	62	11	60	66	5	66	64	5	45	41			
			4	162	164	5	101	101				8	112	111	8	83	82		-3 5	L
	6 -3	L	7	46	41	8	257	258		-1 2	L									
													-3 3	L		-5 4	L	10	54	62
0	88	88		4 -1	L		1 1	L	9	131	133									
6	61	65							12	66	63	3	39	39	6	87	87		-2 5	L
				5 43	46	9	93	89				6	38	34	9	43	36			
	2 -2	L	8	205	204	12	140	141		0 2	L	9	39	37				8	95	90
												12	164	165		-4 4	L	11	89	85
1	116	115		5 -1	L		2 1	L	4	134	135							14	54	55
									10	161	164		-2 3	L	4	207	206			
	3 -2	L	6	45	40	1	91	91	13	55	49				13	65	59		-1 5	L
			9	59	51	10	108	107												
2	196	198	12	103	106	13	42	38		1 2	L	10	117	117				12	79	81
5	132	132										13	68	70		-2 4	L			
				0 0	L		3 1	L	8	172	168		-1 3	L	12	102	104			
	4 -2	L																		
			0	0	828	14	81	80		2 2	L	11	43	37		-1 4	L			
0	129	128										14	132	136						
3	53	55		-4 1	L		4 1	L	9	45	49					7 50	50			
6	104	105							12	91	86					10 75	71			
			1	38	33	12	74	71								16 96	96			

Table 5b. Dolomite at 1.50 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC										
	5	-4	L		5	-2	L		0	0	L		2	1	L		0	2	L		-1	3	L		-1	4	L
0	91	94	4	112	112	0	0	828	10	106	108	4	132	135	11	47	38	7	45	48							
			7	45	36							10	153	161	14	128	132	10	76	70							
	6	-4	L	10	54	62	2	0	L	3	1	L					16	92	93								
												1	2	L	0	3	L										
4	86	94	6	-2	L	11	60	63	14	77	78								0	4	L						
												5	35	34	9	70	64										
	3	-3	L	2	88	89	3	0	L	4	1	L	8	168	165	12	152	151	8	171	178						
			5	73	64							11	59	57													
0	247	245	8	47	48	3	38	38	12	77	70					1	3	L	1	4	L						
						12	157	161					2	2	L												
	4	-3	L	1	-1	L				-6	2	L				13	59	59	12	110	112						
						4	0	L				9	46	46	16	126	127										
4	134	138	2	61	63				1	35	29	12	93	85					-6	5	L						
						13	61	54							2	3	L										
	5	-3	L	2	-1	L				-5	2	L	3	2	L				4	74	68						
						-3	1	L							8	94	93										
2	115	113	0	139	147				2	82	84	10	120	118	14	71	66		-5	5	L						
			3	134	132	2	125	121				13	64	63													
	6	-3	L	6	235	238				-4	2	L				-6	4	L	2	71	69						
						-2	1	L				-5	3	L				8	91	92							
0	88	86	3	-1	L				6	110	116				2	65	59	11	47	40							
3	28	29				3	224	226				1	98	100	5	38	38										
6	59	64	1	112	113				-3	2	L	4	63	62	8	74	80		-2	5	L						
			4	167	163	-1	1	L				7	43	44													
	2	-2	L	7	45	40				1	95	90				-5	4	L	8	89	87						
			10	112	115				4	137	133	-4	3	L				11	82	80							
1	108	114	4	-1	L	1	35	36	7	129	124				6	82	85	14	57	55							
						7	30	31				2	100	102													
	3	-2	L				0	1	L				8	114	110	-4	4	L		-1	5	L					
			5	49	42										1	32	27	12	74	78							
2	196	196	8	204	200				2	222	207	-3	3	L	4	203	202										
5	128	129				5	100	99	5	33	28								-5	6	L						
			5	-1	L	8	252	257	8	141	139	6	39	35													
	4	-2	L				1	1	L				9	41	34	-2	4	L									
			0	139	144				-1	2	L							4	63	62							
0	132	127	6	44	41							-2	3	L	12	108	101										
3	58	54	9	50	47	6	175	177	9	129	131																
6	104	105	12	98	103	9	88	88	12	70	65	13	67	67													
						12	136	137																			

Table 5c. Dolomite at 2.90 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC							
	5	-4 L		5	-2 L		3	0 L		-5	2 L		2	2 L		0	3 L		-1	4 L				
0	94	93	4	114	110	3	42	36	2	79	80	9	47	47	6	42	40	16	95	90				
			10	53	59				5	50	44	12	88	83	9	67	65							
	6	-4 L					-3	1 L							12	145	148		0	4 L				
				6	-2 L					-4	2 L		3	2 L										
4	87	93				2	115	118								1	3 L		8	168	175			
			2	88	85				6	110	113	10	113	115										
	3	-3 L	5	69	64		-2	1 L				13	65	63	13	61	60		1	4 L				
			8	46	46					-3	2 L				16	125	124							
0	241	243				3	219	223					-5	3 L					12	110	109			
				2	-1 L					1	94	89				2	3 L							
	4	-3 L					-1	1 L		4	137	132	1	98	99					-6	5 L			
			0	137	146				7	122	120	4	63	61	8	88	92							
4	137	136	3	138	133	1	34	36				7	38	46	14	64	63		1	24	26			
			6	234	235	4	333	332		-2	2 L							4	72	68				
	5	-3 L				7	30	29					-4	3 L		-6	4 L							
				3	-1 L					2	215	204								-5	5 L			
2	112	110				0	1 L		8	138	137	2	99	100	2	65	54							
5	52	56	1	111	112				11	59	60	5	67	62	5	42	37		2	69	66			
			4	160	163	2	64	63				8	115	108	8	82	80		8	86	90			
	6	-3 L	7	42	42	5	103	100		-1	2 L							11	34	38				
			10	110	111	8	254	252					-3	3 L		-5	4 L							
6	63	60							9	131	130								-4	5 L				
				4	-1 L		1	1 L	12	67	63	9	36	35	6	81	82							
	2	-2 L								0	2 L					-4	4 L		6	43	38			
			5	41	42	6	169	175																
1	111	114	8	198	198	9	90	86					-2	3 L					-2	5 L				
						12	134	134	4	136	134				1	27	26							
	3	-2 L		5	-1 L				10	158	158	13	67	67	4	200	199		8	78	86			
						2	1 L		13	51	48				13	58	54		11	84	77			
2	191	193	9	50	47								-1	3 L					14	52	52			
5	128	128	12	97	100	10	106	105		1	2 L					-2	4 L							
						13	36	36											-1	5 L				
	4	-2 L		0	0 L				5	39	33	8	83	79										
							3	1 L	11	42	40	12	107	100										
0	131	126	0	0	828				14	123	129					-1	4 L		12	72	76			
3	57	53				14	76	76	14	52	58													
6	100	101																						
																7	49	47						
																10	62	68						

Table 5d. Dolomite at 3.70 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC			
	5 -4	L		2 -1	L		-3 1	L		-6 2	L		2 2	L		0 3	L		1 4	L
0	93	95	0	141	146	2	113	117	1	35	34	9	45	51	6	43	38	12	111	112
			3	142	136	5	35	32				12	90	83	9	69	67			
	3 -3	L	6	236	236					-5 2	L				12	153	151		-6 5	L
							-2 1	L				3	2	L	18	45	38			
0	243	246		3 -1	L				2	79	81							4	71	70
						3	221	222	5	48	46	10	116	118		1 3	L			
	5 -3	L	1	116	112	6	177	176				13	60	68					-5 5	L
			4	162	165					-4 2	L				13	60	63			
2	107	111	7	41	45		-1 1	L					-6 3	L	16	127	128	8	91	92
5	56	58							6	112	115							11	43	38
				4 -1	L	1	34	36					6 66	64		2 3	L			
	6 -3	L				4	329	328		-3 2	L								-4 5	L
			5	43	43	7	29	27					-5 3	L	14	70	65			
0	86	89	8	203	202				1	92	90							6	38	38
							0 1	L	4	133	132	1	100	102		-6 4	L			
	2 -2	L		5 -1	L				7	120	119	4	62	62					-3 5	L
						2	68	64				7	45	50	2	55	53			
1	111	114	9	53	50	5	100	101		-2 2	L				5	40	38	7	40	32
			12	106	102	8	250	251					-4 3	L	8	82	83	10	57	60
	3 -2	L							2	208	204									
				0 0	L	1	1	L	5	30	27	2	96	100		-5 4	L		-2 5	L
2	194	193							8	135	137	8	114	109						
5	130	130	0	0	828	9	81	87	11	61	59				6	81	83	14	50	54
						12	133	134					-3 3	L	9	39	34			
	4 -2	L		3 0	L					-1 2	L								-1 5	L
						2	1	L				6	37	30		-4 4	L			
0	134	127	3	39	35				12	67	61	9	37	37				12	71	77
3	52	54				10	99	106				12	162	162	4	200	203			
6	96	102		5 0	L	16	96	98		0 2	L				13	61	57			
													-2 3	L						
	5 -2	L	2	63	67		3 1	L	4	132	135					-2 4	L			
									10	158	159	10	118	112						
4	114	112		-4 1	L	5	72	64	13	53	51	13	71	71	12	105	101			
						14	76	78												
	6 -2	L	1	34	31					1 2	L		-1 3	L		-1 4	L			
							4 1	L												
2	90	87							8	169	165	8	79	79	7	50	47			
5	64	68				12	72	69	11	57	51	14	131	131	10	73	68			
8	44	47							14	59	59	17	57	58	16	94	92			

Table 5e. Dolomite at 4.69 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC										
	5	-5	L		4	-2	L		0	0	L		3	1	L		4	2	L		-6	4	L		-3	5	L
1	61	59	0	131	127	0	0	828	2	102	102	8	81	84	2	57	56	10	55	61							
	6	-5	L	6	104	103		3	0	L		-5	3	L		-5	4	L		-2	5	L					
2	75	80		5	-2	L	6	42	31		-5	2	L	1	101	102	6	87	85	8	91	88					
	5	-4	L	4	111	112		-4	1	L	2	80	83	4	63	62		-4	4	L	11	81	83				
0	97	94	7	46	36		4	231	230		-3	2	L		-4	3	L		-1	5	L						
3	41	33		6	-2	L		-3	1	L	1	97	89	5	70	63	4	202	202	12	75	78					
	3	-3	L	2	91	89		2	117	118	4	134	132		-3	3	L		-1	4	L		0	5	L		
0	245	245	5	73	67		2	117	118		-2	2	L		10	70	68		4	84	84						
	4	-3	L		1	-1	L		-2	1	L	2	212	204		0	4	L	10	81	72						
4	139	138	2	65	64	3	226	224		5	35	29		-2	3	L		5	42	40		-5	6	L			
	5	-3	L		2	-1	L		-1	1	L		-1	2	L	7	45	40	8	178	178		1	33	39		
5	59	57	0	139	145	1	36	35	6	230	235		-1	3	L		2	4	L	4	69	63					
	6	-3	L	3	136	132	4	325	325		0	2	L		8	84	80	4	72	72		-4	6	L			
0	87	88		3	-1	L		0	1	L	4	134	135		0	3	L	7	64	67		8	57	47			
6	68	62	1	113	112	5	97	97		1	2	L		6	41	39		-6	5	L		-2	6	L			
	2	-2	L	4	163	165		1	1	L	8	169	165	9	68	65	4	80	69		4	93	97				
1	114	114		4	-1	L	6	169	175		2	2	L		2	3	L		-5	5	L		-1	6	L		
	3	-2	L		8	196	201		2	1	L	6	112	115	5	51	45	2	72	69	8	91	92	5	67	62	
2	194	193		5	-1	L	7	122	123		9	52	49	8	93	93	8	91	92		3	3	L		-4	5	L
5	128	127	0	138	144		3	2	L		3	2	L		6	76	66		9	52	48						
			6	48	40					7	46	45															
										10	110	118															

Table 6a. Ankerite at 0 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC						
	4	-6	L		2	-3	L		5	-1	L		3	1	L		1	3	L		0	5	L
-8	57	69	-1	51	49	-12	121	119	-16	105	106	-14	36	40	-8	104	104						
-2	98	98							-10	85	87				-2	72	82						
				5	-3	L		0	0	L					2	3	L						
	2	-5	L								4	1	L					-3	6	L			
				-10	118	123		0	0	918				-10	82	82							
-2	131	127	-7	76	73				-12	91	93				-6	85	82						
							1	0	L					-3	4	L		0	95	101			
	3	-5	L		1	-2	L					-1	2	L									
								-8	284	284					-4	228	227		-2	6	L		
-4	123	122	-6	259	259				-6	210	209					-2	4	L		-8	88	91	
				-3	181	180		2	0	L		0	190	190					-2	83	78		
	4	-5	L											0	146	143							
					3	-2	L	-10	173	176		0	2	L									
-12	108	112				-7	61	58											-1	6	L		
-6	58	64	-13	61	71	-4	177	174	-8	162	163		-1	4	L								
				-10	126	130				-5	73	71					-4	75	80				
	1	-4	L					3	0	L					-8	140	136						
					4	-2	L					1	2	L		-2	113	116					
-4	158	161				-12	164	165								0	4	L					
				-12	101	101	-6	80	74	-10	137	138											
	2	-4	L		-6	141	138																
								4	0	L		3	2	L		-4	208	211					
-6	132	130		5	-2	L																	
							-8	185	187	-14	81	73		-4	5	L							
	3	-4	L	-14	88	83				-8	93	101					0	150	151				
					-8	106	104		0	1	L												
-8	203	199								-2	3	L											
-2	39	41		2	-1	L	-4	382	383					-3	5	L							
							-1	40	40	-5	91	86											
	5	-4	L	-12	156	153				-2	159	159		-5	7	7							
								1	1	L					-2	113	107						
12	93	89		3	-1	L					-1	3	L										
							-12	100	98								-2	5	L				
	1	-3	L	-14	81	86					-7	57	58										
								2	1	L		-4	165	161		-4	89	86					
-5	67	62		4	-1	L					-1	130	130										
-2	217	214														-1	5	L					
				-16	133	131	-14	137	139														
	2	-3	L		-10	42	43	-8	115	114		0	3	L					-6	92	95		
																	0	110	115				
-7	88	85								-12	170	171											
-4	181	181								-6	71	68											
											0	259	259										



Table 6b. Ankerite at 1.90 GPa: Fobs vs. Fcalc

FACTOR = 3.00

L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC	L	OBS	CALC											
	2	-6	L		1	-4	L		4	-3	L		1	-1	L		2	0	L		4	1	L		-1	4	L	
-4	95	99	-4	158	158	-8	133	133	-4	380	380	-10	169	173	-12	89	89	-2	112	115								
	3	-6	L		3	-4	L		5	-3	L						-4	169	174		-1	2	L		-4	5	L	
									2	-1	L																	
-6	81	75	-8	197	196	-10	119	119						3	0	L		0	191	189		0	147	147				
	4	-6	L		-2	41	40		-7	75	74	-12	153	147														
					4	-4	L		2	-2	L		-9	123	124		-18	51	54		2	2	L		-3	5	L	
-8	67	67						-6	209	211		-6	209	211		-12	157	162										
-2	102	96	-4	208	206	-8	160	160		-3	133	135		-6	76	72		-12	110	109		-2	105	105				
					-5	64	69										-6	125	128									
	2	-5	L		5	-4	L		-2	236	237		3	-1	L		4	0	L						-1	5	L	
																					3	2	L					
									-14	88	86		-8	182	182						0	115	112					
-5	83	81	-6	96	94		3	-2	L		-5	87	84						-14	81	74							
-2	126	125														1	1	L		-8	99	97		0	5	L		
					1	-3	L		-16	102	106		4	-1	L													
	3	-5	L						-10	132	131						-12	99	98		-3	3	L		-2	87	82	
					-2	212	211		-7	62	53		-16	137	127		-9	66	67									
-10	79	81						-4	160	159						-6	252	256		0	255	258		-3	6	L		
-4	119	119		2	-3	L						5	-1	L		-3	189	181										
									4	-2	L										-1	3	L		0	106	99	
	4	-5	L		-10	133	134						-12	125	114		2	1	L									
					-7	80	86		-18	76	82										-1	129	128		-2	6	L	
12	113	107	-4	177	182	-12	102	98		0	0	L		-14	136	135												
-6	63	64	-1	52	47										-11	70	78		1	3	L		-8	90	89			
									5	-2	L		0	0	918		-8	115	114						-2	74	76	
	5	-5	L		3	-3	L										-5	64	61		-14	43	40					
									-14	86	81		1	0	L										-1	6	L	
-8	95	100	-12	163	168										3	1	L						-2	4	L			
					-6	65	67																					
									-11	50	57														-4	79	78	
									-8	279	280		-16	101	101		0	143	142									
									-2	130	124																	



