

AM-93-520

Synthesis, stability, and properties of  $\text{Al}_2\text{SiO}_4(\text{OH})_2$ : A fully hydrated  
analogue of topaz

B. Wunder, D. C. Rubie, C. R. Ross II, O. Medenbach, F. Seifert, W. Schreyer

For deposit: Table 6

American Mineralogist, 78, 3-4, 285-297.

Table 6: Observed and final calculated structure factors.

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
2	0	0	1951	2530	12	8	0	220	197
4	0	0	5769	5079	2	9	0	3652	3866
6	0	0	789	924	4	9	0	491	507
8	0	0	5917	6312	6	9	0	1768	1795
10	0	0	3550	3693	8	9	0	190	160
12	0	0	312	351	10	9	0	352	350
14	0	0	902	891	0	10	0	1148	1204
2	1	0	1387	1331	2	10	0	377	383
4	1	0	2772	2974	4	10	0	1123	1175
6	1	0	4181	4418	6	10	0	2188	2245
8	1	0	1109	1221	8	10	0	1316	1314
10	1	0	2320	2538	10	10	0	1645	1656
12	1	0	1106	1181	2	11	0	677	768
14	1	0	199	43	4	11	0	912	977
0	2	0	344	271	6	11	0	1619	1656
2	2	0	4456	4635	8	11	0	729	725
4	2	0	3078	3137	0	12	0	3602	4173
6	2	0	2227	2324	2	12	0	747	867
8	2	0	4706	5054	4	12	0	156	145
10	2	0	971	987	8	12	0	1147	1300
14	2	0	455	419	2	13	0	231	195
2	3	0	7860	8465	4	13	0	626	664
6	3	0	4000	4089	6	13	0	744	766
8	3	0	260	266	2	14	0	1210	1200
10	3	0	760	809	1	0	1	1831	1759
12	3	0	3341	3457	2	0	1	6801	7241
14	3	0	2699	2722	3	0	1	4969	5413
0	4	0	1240	1353	4	0	1	3025	3011
2	4	0	411	436	5	0	1	1667	1658
4	4	0	2751	2746	7	0	1	5605	5917
6	4	0	3653	3681	8	0	1	2382	2419
8	4	0	3693	3716	9	0	1	2676	2873
10	4	0	1969	1995	10	0	1	2067	2204
14	4	0	887	847	11	0	1	980	1067
2	5	0	1662	1595	12	0	1	558	560
4	5	0	2421	2360	13	0	1	444	393
6	5	0	3866	3762	14	0	1	452	546
8	5	0	1265	1222	15	0	1	1007	981
10	5	0	2500	2461	0	1	1	353	425
12	5	0	1071	1014	1	1	1	3916	4287
0	6	0	12745	14087	2	1	1	2579	2526
2	6	0	1703	1701	3	1	1	3530	3578
4	6	0	689	729	4	1	1	2231	2232
6	6	0	377	396	5	1	1	374	427
8	6	0	4058	3841	6	1	1	636	654
10	6	0	2691	2529	7	1	1	386	376
12	6	0	316	339	8	1	1	1787	1787
4	7	0	1984	1935	9	1	1	921	908
6	7	0	2626	2479	10	1	1	209	240
8	7	0	553	517	11	1	1	1050	1071
10	7	0	1369	1296	12	1	1	910	968
12	7	0	937	832	13	1	1	1735	1787
0	8	0	298	311	14	1	1	603	650
2	8	0	2901	3012	15	1	1	703	668
4	8	0	2213	2187	1	2	1	6134	6358
6	8	0	677	657	3	2	1	555	604
8	8	0	3212	3002	4	2	1	2845	2870

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
5	2	1	1320	1336	11	6	1	779	763
6	2	1	3498	3574	12	6	1	430	384
8	2	1	294	219	13	6	1	337	283
9	2	1	613	643	0	7	1	1551	1582
10	2	1	872	902	1	7	1	2704	2695
11	2	1	1935	2011	2	7	1	1116	1159
12	2	1	290	219	3	7	1	1141	1101
15	2	1	1002	960	4	7	1	1969	1901
0	3	1	2561	2807	5	7	1	1428	1296
1	3	1	2455	2035	6	7	1	546	483
2	3	1	7037	6819	7	7	1	729	657
3	3	1	5375	5105	8	7	1	442	364
4	3	1	5075	5026	9	7	1	885	797
5	3	1	8548	9007	11	7	1	1283	1190
6	3	1	4110	4178	12	7	1	1008	992
7	3	1	354	272	13	7	1	878	808
8	3	1	264	232	1	8	1	2907	2975
9	3	1	1391	1386	2	8	1	264	277
10	3	1	3182	3248	3	8	1	707	734
11	3	1	2678	2806	4	8	1	1608	1556
12	3	1	1186	1236	5	8	1	1112	1044
13	3	1	1545	1598	6	8	1	2331	2179
1	4	1	5031	4928	9	8	1	394	382
2	4	1	233	181	10	8	1	475	469
3	4	1	144	67	11	8	1	1543	1419
4	4	1	2219	2212	0	9	1	1556	1640
5	4	1	878	792	1	9	1	263	218
6	4	1	2738	2645	2	9	1	1463	1504
7	4	1	235	191	3	9	1	1259	1337
8	4	1	165	116	4	9	1	2207	2200
9	4	1	597	585	5	9	1	3822	3762
10	4	1	810	790	6	9	1	1661	1586
11	4	1	1537	1539	7	9	1	453	434
12	4	1	407	409	9	9	1	922	872
13	4	1	276	251	10	9	1	1779	1628
0	5	1	1941	1807	11	9	1	1491	1445
1	5	1	2175	2104	1	10	1	1689	1849
2	5	1	1398	1385	2	10	1	232	223
3	5	1	4089	3964	3	10	1	275	251
4	5	1	647	649	4	10	1	860	897
5	5	1	739	676	5	10	1	227	221
6	5	1	926	846	6	10	1	1027	1000
7	5	1	186	198	7	10	1	319	248
8	5	1	2499	2375	9	10	1	253	283
9	5	1	639	582	10	10	1	362	350
10	5	1	194	169	0	11	1	887	1025
11	5	1	507	454	1	11	1	854	945
12	5	1	496	469	2	11	1	254	270
13	5	1	1906	1850	3	11	1	1602	1725
14	5	1	505	458	5	11	1	370	388
1	6	1	920	904	6	11	1	599	627
2	6	1	4233	4109	8	11	1	1347	1395
3	6	1	3670	3574	9	11	1	350	304
4	6	1	1728	1700	1	12	1	206	210
5	6	1	1276	1121	2	12	1	1334	1430
6	6	1	181	120	3	12	1	1178	1308
7	6	1	4388	4020	4	12	1	636	640
8	6	1	1773	1627	5	12	1	312	406
9	6	1	2111	2045	6	12	1	177	4
10	6	1	1608	1559	7	12	1	1476	1532

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
8	12	1	672	685	13	3	2	891	892
0	13	1	872	949	0	4	2	1651	1604
1	13	1	1003	1068	1	4	2	3459	3381
2	13	1	324	356	2	4	2	557	466
4	13	1	814	870	3	4	2	3429	3375
5	13	1	864	842	4	4	2	2240	2152
6	13	1	196	169	5	4	2	1629	1604
1	14	1	980	971	6	4	2	636	567
0	0	2	1584	1591	7	4	2	423	457
1	0	2	1804	1600	8	4	2	681	26
2	0	2	7582	7469	9	4	2	1421	1402
3	0	2	4833	4679	10	4	2	233	89
4	0	2	3281	3343	11	4	2	639	586
5	0	2	9250	10051	12	4	2	1014	1042
6	0	2	4018	4152	13	4	2	1162	1098
7	0	2	860	947	14	4	2	375	368
8	0	2	312	354	1	5	2	3539	3503
9	0	2	1643	1696	2	5	2	149	147
10	0	2	2682	2796	3	5	2	1817	1711
11	0	2	2768	2990	4	5	2	1361	1316
12	0	2	654	670	5	5	2	2248	2086
13	0	2	1463	1570	6	5	2	2051	1918
14	0	2	342	349	7	5	2	243	228
1	1	2	3147	3334	8	5	2	200	172
2	1	2	124	84	9	5	2	842	808
3	1	2	2600	2518	10	5	2	255	235
4	1	2	1501	1567	11	5	2	1926	1867
5	1	2	2789	2852	13	5	2	181	148
6	1	2	2091	2188	0	6	2	1409	1359
7	1	2	932	964	1	6	2	259	206
9	1	2	1250	1330	2	6	2	3218	3183
10	1	2	352	343	3	6	2	2180	2081
11	1	2	2039	2183	4	6	2	2277	2109
12	1	2	234	194	5	6	2	6523	6269
0	2	2	362	170	6	6	2	2551	2389
1	2	2	2739	2702	7	6	2	1001	972
2	2	2	328	330	8	6	2	235	197
3	2	2	5794	5756	9	6	2	1377	1324
4	2	2	1422	1380	10	6	2	2040	1960
5	2	2	191	130	11	6	2	2160	2089
6	2	2	798	788	12	6	2	522	510
7	2	2	1094	1087	13	6	2	1175	1116
8	2	2	945	931	1	7	2	1778	1766
9	2	2	1149	1189	2	7	2	165	119
11	2	2	202	164	3	7	2	1154	1065
12	2	2	756	763	4	7	2	878	807
13	2	2	1866	1869	5	7	2	1740	1634
14	2	2	293	335	6	7	2	1203	1132
1	3	2	471	376	7	7	2	1131	1032
2	3	2	3773	3604	9	7	2	1147	1075
3	3	2	5894	5884	10	7	2	244	200
4	3	2	1453	1440	11	7	2	1464	1377
5	3	2	2261	2261	12	7	2	370	276
6	3	2	363	307	0	8	2	760	813
7	3	2	4705	4649	1	8	2	1388	1443
8	3	2	1426	1432	3	8	2	3459	3389
9	3	2	2117	2177	4	8	2	297	281
10	3	2	1628	1660	5	8	2	412	412
11	3	2	1686	1754	6	8	2	739	697
12	3	2	398	193	7	8	2	770	698

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
8	8	2	1058	999	9	1	3	720	730
9	8	2	646	605	10	1	3	1079	1109
12	8	2	318	288	11	1	3	421	450
1	9	2	210	218	12	1	3	263	110
2	9	2	1517	1587	13	1	3	983	1013
3	9	2	2595	2669	14	1	3	415	423
4	9	2	671	647	1	2	3	2613	2624
5	9	2	953	966	2	2	3	1059	1070
7	9	2	2476	2379	3	2	3	1125	1112
8	9	2	764	755	4	2	3	2337	2395
9	9	2	1241	1182	5	2	3	301	333
10	9	2	955	916	6	2	3	3458	3488
11	9	2	956	960	7	2	3	452	469
0	10	2	1008	1134	8	2	3	847	863
1	10	2	1595	1693	9	2	3	174	86
3	10	2	833	907	10	2	3	1987	2062
4	10	2	1135	1212	11	2	3	273	279
5	10	2	1397	1402	12	2	3	847	863
6	10	2	256	264	0	3	3	12727	13605
8	10	2	441	425	1	3	3	992	917
9	10	2	926	931	2	3	3	874	880
1	11	2	1548	1717	3	3	3	138	129
2	11	2	170	94	4	3	3	391	456
3	11	2	597	646	5	3	3	1035	926
4	11	2	597	599	6	3	3	872	845
5	11	2	765	808	7	3	3	667	628
6	11	2	877	953	8	3	3	3838	3798
9	11	2	248	211	9	3	3	909	884
0	12	2	415	455	10	3	3	2744	2735
1	12	2	362	332	11	3	3	306	337
2	12	2	800	913	12	3	3	262	297
3	12	2	375	423	1	4	3	2569	2547
4	12	2	749	826	2	4	3	318	339
5	12	2	2024	2178	3	4	3	1428	1423
6	12	2	810	850	4	4	3	2182	2126
7	12	2	545	571	5	4	3	643	632
1	13	2	394	431	6	4	3	2965	2818
3	13	2	326	328	7	4	3	640	620
4	13	2	245	266	8	4	3	598	571
5	13	2	629	606	10	4	3	1492	1514
1	0	3	941	897	12	4	3	781	817
2	0	3	6567	6837	0	5	3	638	628
3	0	3	566	569	1	5	3	181	100
5	0	3	557	556	2	5	3	2951	2889
6	0	3	3076	2978	3	5	3	1211	1136
7	0	3	1739	1745	4	5	3	1994	1898
8	0	3	539	515	5	5	3	839	754
9	0	3	1445	1516	6	5	3	1036	989
10	0	3	810	864	8	5	3	3531	3365
12	0	3	2730	2802	9	5	3	511	503
13	0	3	519	571	10	5	3	275	208
14	0	3	2223	2254	11	5	3	243	228
0	1	3	147	120	13	5	3	893	843
1	1	3	459	300	1	6	3	455	408
2	1	3	1885	1979	2	6	3	4880	4692
3	1	3	1293	1213	3	6	3	559	513
4	1	3	2192	2226	4	6	3	719	692
5	1	3	939	959	5	6	3	305	286
6	1	3	2262	2299	6	6	3	2142	1999
8	1	3	3532	3638	7	6	3	1276	1192

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
8	6	3	387	373	4	0	4	3311	3232
9	6	3	1148	1078	5	0	4	5039	5093
10	6	3	609	581	6	0	4	2053	2052
11	6	3	245	143	7	0	4	240	195
12	6	3	2256	2105	8	0	4	477	494
0	7	3	1145	1060	9	0	4	660	689
1	7	3	140	45	10	0	4	2447	2524
2	7	3	190	152	11	0	4	1896	1975
3	7	3	602	557	12	0	4	1178	1191
4	7	3	1594	1481	13	0	4	1296	1304
5	7	3	471	429	1	1	4	4028	4091
6	7	3	2336	2222	2	1	4	134	138
7	7	3	232	159	3	1	4	754	830
8	7	3	1941	1795	4	1	4	2097	2131
9	7	3	623	579	5	1	4	195	172
10	7	3	1521	1459	6	1	4	2536	2517
11	7	3	451	444	7	1	4	547	539
1	8	3	1057	1048	8	1	4	157	24
2	8	3	812	832	10	1	4	1087	1101
3	8	3	231	193	11	1	4	900	935
4	8	3	1411	1386	12	1	4	387	374
6	8	3	2255	2152	13	1	4	304	232
8	8	3	725	677	0	2	4	843	852
10	8	3	1484	1470	1	2	4	1555	1522
11	8	3	348	348	2	2	4	2326	2325
0	9	3	5294	5709	3	2	4	1849	1807
1	9	3	439	448	4	2	4	926	850
2	9	3	749	782	5	2	4	560	527
4	9	3	268	250	6	2	4	545	498
5	9	3	434	410	7	2	4	537	507
6	9	3	262	247	8	2	4	2593	2556
7	9	3	311	337	11	2	4	830	814
8	9	3	1798	1783	12	2	4	255	266
9	9	3	525	543	13	2	4	1441	1430
10	9	3	1419	1383	1	3	4	1212	1149
1	10	3	1090	1179	2	3	4	4329	4252
3	10	3	740	814	3	3	4	2100	2012
4	10	3	963	978	4	3	4	1616	1569
5	10	3	410	446	5	3	4	368	377
6	10	3	1153	1174	6	3	4	797	745
7	10	3	461	415	7	3	4	3484	3429
8	10	3	230	205	8	3	4	1470	1410
9	10	3	220	123	9	3	4	1870	1876
0	11	3	184	203	10	3	4	1129	1146
2	11	3	1363	1520	12	3	4	813	785
3	11	3	473	540	0	4	4	551	506
4	11	3	985	1085	1	4	4	1901	1799
5	11	3	376	351	2	4	4	1842	1779
6	11	3	211	192	3	4	4	800	762
8	11	3	1440	1551	4	4	4	1296	1217
2	12	3	1634	1742	5	4	4	261	229
3	12	3	296	251	6	4	4	621	558
4	12	3	328	288	7	4	4	1004	922
6	12	3	730	795	8	4	4	1696	1569
0	13	3	829	749	9	4	4	218	165
2	13	3	364	377	11	4	4	1253	1202
0	0	4	4411	4548	12	4	4	508	487
1	0	4	599	621	1	5	4	2967	2894
2	0	4	1543	1559	2	5	4	380	350
3	0	4	2809	2824	3	5	4	132	47

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
4	5	4	1883	1773	1	12	4	207	66
5	5	4	429	341	2	12	4	209	151
6	5	4	2453	2301	3	12	4	516	553
7	5	4	363	330	2	0	5	835	806
9	5	4	219	162	3	0	5	4043	4016
10	5	4	974	947	4	0	5	161	69
11	5	4	1100	1053	5	0	5	1625	1645
12	5	4	259	200	7	0	5	2685	2705
0	6	4	3180	3080	8	0	5	257	229
2	6	4	847	743	9	0	5	1251	1236
3	6	4	1749	1682	10	0	5	662	664
4	6	4	2483	2335	11	0	5	1664	1686
5	6	4	3713	3413	0	1	5	381	446
6	6	4	1457	1343	1	1	5	1620	1650
7	6	4	180	62	2	1	5	316	262
8	6	4	279	249	3	1	5	3378	3366
9	6	4	617	583	4	1	5	796	810
10	6	4	1916	1806	5	1	5	676	633
11	6	4	1532	1453	6	1	5	375	354
1	7	4	2629	2611	7	1	5	1033	1097
2	7	4	166	164	9	1	5	966	971
3	7	4	950	907	11	1	5	243	175
4	7	4	1333	1308	12	1	5	454	473
5	7	4	488	457	1	2	5	1869	1864
6	7	4	1469	1387	3	2	5	1539	1554
7	7	4	377	384	4	2	5	175	181
9	7	4	173	192	5	2	5	2051	1985
10	7	4	707	680	6	2	5	481	465
11	7	4	471	432	7	2	5	649	635
0	8	4	924	1003	9	2	5	1021	989
1	8	4	772	787	11	2	5	1451	1478
2	8	4	1262	1275	0	3	5	881	878
3	8	4	1393	1376	1	3	5	374	368
4	8	4	251	277	2	3	5	1664	1678
5	8	4	514	544	3	3	5	1327	1279
6	8	4	392	352	4	3	5	387	196
8	8	4	1974	1962	5	3	5	5026	4934
1	9	4	409	442	6	3	5	1298	1247
2	9	4	2068	2131	7	3	5	914	935
3	9	4	1067	1099	8	3	5	444	494
4	9	4	847	841	9	3	5	1105	1064
5	9	4	245	224	10	3	5	1077	1057
6	9	4	337	344	11	3	5	1737	1740
7	9	4	1771	1787	1	4	5	1099	1065
8	9	4	810	792	3	4	5	1486	1472
9	9	4	1017	1043	4	4	5	180	112
0	10	4	759	822	5	4	5	2020	1946
1	10	4	957	1074	6	4	5	421	397
2	10	4	603	684	7	4	5	1115	1076
4	10	4	764	794	9	4	5	1235	1204
5	10	4	503	500	11	4	5	1402	1377
6	10	4	374	343	1	5	5	1082	1055
7	10	4	722	803	2	5	5	254	204
1	11	4	1050	1128	3	5	5	3437	3277
2	11	4	228	221	4	5	5	458	402
3	11	4	203	227	6	5	5	290	300
4	11	4	773	830	7	5	5	1129	1092
5	11	4	314	342	9	5	5	575	576
6	11	4	1095	1187	2	6	5	558	569
0	12	4	1004	1037	3	6	5	2909	2812

h	k	l	100*Fo	100*Fc	h	k	l	100*Fo	100*Fc
5	6	5	1165	1134	2	3	6	2899	2900
7	6	5	2077	1981	3	3	6	707	663
8	6	5	177	183	4	3	6	680	671
9	6	5	942	934	5	3	6	428	364
10	6	5	524	506	6	3	6	925	929
0	7	5	615	624	7	3	6	1520	1540
1	7	5	1405	1398	8	3	6	550	566
2	7	5	276	251	9	3	6	1468	1451
3	7	5	1576	1585	0	4	6	310	296
4	7	5	798	788	2	4	6	646	642
5	7	5	1179	1148	3	4	6	962	922
6	7	5	368	298	4	4	6	903	876
7	7	5	541	524	5	4	6	576	533
8	7	5	518	431	6	4	6	950	966
9	7	5	952	966	8	4	6	1301	1304
1	8	5	1429	1495	9	4	6	688	701
3	8	5	771	814	1	5	6	1514	1570
5	8	5	1054	1044	2	5	6	364	385
6	8	5	326	324	3	5	6	435	436
8	8	5	175	5	4	5	6	1107	1095
0	9	5	400	411	6	5	6	1582	1550
1	9	5	316	353	7	5	6	270	233
2	9	5	741	858	8	5	6	196	228
3	9	5	411	438	0	6	6	3574	3706
5	9	5	2406	2528	1	6	6	577	595
6	9	5	664	682	4	6	6	518	496
7	9	5	685	694	5	6	6	781	750
1	10	5	247	164	6	6	6	659	634
3	10	5	694	812	7	6	6	485	522
5	10	5	1018	1111	8	6	6	1185	1223
1	11	5	417	454	1	7	6	1557	1676
2	11	5	201	194	3	7	6	995	1026
0	0	6	4956	5235	4	7	6	814	831
1	0	6	701	757	5	7	6	478	503
2	0	6	329	276	6	7	6	1009	1035
4	0	6	546	578	7	7	6	506	526
5	0	6	1172	1103	0	8	6	546	582
6	0	6	968	966	2	8	6	1049	1090
7	0	6	698	676	3	8	6	889	916
8	0	6	1667	1715	4	8	6	435	414
9	0	6	976	957	5	8	6	479	557
10	0	6	1760	1792	1	9	6	243	193
1	1	6	2119	2200	2	9	6	1423	1585
2	1	6	240	229	3	9	6	421	404
3	1	6	1026	989	1	0	7	635	644
4	1	6	1308	1296	2	0	7	2080	2206
5	1	6	374	344	3	0	7	398	446
6	1	6	1737	1703	4	0	7	693	706
7	1	6	517	498	6	0	7	745	799
8	1	6	267	214	7	0	7	1445	1567
10	1	6	882	902	1	1	7	480	494
0	2	6	430	448	2	1	7	1270	1384
2	2	6	1353	1355	3	1	7	267	307
3	2	6	1260	1270	4	1	7	322	347
4	2	6	731	737	5	1	7	227	296
5	2	6	656	720	6	1	7	302	242
6	2	6	626	600	7	1	7	482	498
8	2	6	1933	1961	1	2	7	1349	1485
9	2	6	634	668	3	2	7	415	442
1	3	6	459	458	4	2	7	982	1038



h	k	l	100*Fo	100*Fc
5	2	7	233	241
6	2	7	1191	1249
7	2	7	407	421
0	3	7	2600	2852
1	3	7	257	257
2	3	7	351	360
3	3	7	947	1040
4	3	7	932	972
5	3	7	1539	1621
6	3	7	320	397
1	4	7	1402	1567
3	4	7	684	719
4	4	7	891	935
5	4	7	510	524
6	4	7	922	997
0	5	7	428	519
1	5	7	228	253
2	5	7	1288	1425
3	5	7	432	539
4	5	7	188	211
5	5	7	374	471
1	6	7	414	458
2	6	7	1469	1645
3	6	7	338	358
4	6	7	535	536
0	7	7	290	262
1	7	7	436	545
0	0	8	372	496
2	0	8	206	274
1	1	8	419	502
0	2	8	187	173