

AM-95-585

High-temperature Fe-Mg cation partitioning in olivine: In-situ single-crystal  
neutron diffraction study

G. Artioli, R. Rinaldi, C. C. Wilson, P. F. Zanazzi

For deposit: Table 3

American Mineralogist, 80, 1-2, 197-200.

( To be deposited )

Table 3. Atomic coordinates and anisotropic displacement parameters for the neutron refinements.

Olivine - ISIS data - RT

Name	X	Y	Z	Ui/Ue*100	Site sym	Mult	Type	Seq	Fractn
mg1	0.000000	0.000000	0.000000	0.53*	-1	4	MG	1	0.879(11)
mg2	0.98973(26)	0.27879(30)	0.250000	0.61*	M(001)	4	MG	2	0.881(11)
fe1	0.000000	0.000000	0.000000	0.53*	-1	4	FE	3	0.121(11)
fe2	0.98973(26)	0.27879(30)	0.250000	0.61*	M(001)	4	FE	4	0.119(11)
si	0.42754(34)	0.0937(4)	0.250000	0.31*	M(001)	4	SI	5	1.0000
o1	0.76663(25)	0.09095(32)	0.250000	0.61*	M(001)	4	O	6	1.0000
o2	0.22066(28)	0.44866(30)	0.250000	0.53*	M(001)	4	O	7	1.0000
o3	0.27880(20)	0.16375(22)	0.03368(13)	0.63*	1	8	O	8	1.0000

Thermal parameters are multiplied by 100.0

Anisotropic thermal factors are defined by

$$T = \exp(h^{**2} * astr^{**2} * u11 + \dots + 2 * h * k * astr * bstr * u12 + \dots)$$

Name	U11	U22	U33	U12	U13	U23
mg1	0.53(5)	0.49(15)	0.58(4)	-0.12(7)	-0.038(26)	-0.05(6)
mg2	0.73(5)	0.49(17)	0.60(4)	0.06(7)	0.00	0.00
fe1	0.53(5)	0.49(15)	0.58(4)	-0.12(7)	-0.038(26)	-0.05(6)
fe2	0.73(5)	0.49(17)	0.60(4)	0.06(7)	0.00	0.00
si	0.39(5)	0.17(21)	0.39(4)	0.11(9)	0.00	0.00
o1	0.498(40)	0.72(17)	0.599(32)	0.07(7)	0.00	0.00
o2	0.692(40)	0.18(17)	0.714(34)	0.02(7)	0.00	0.00
o3	0.683(29)	0.58(11)	0.623(26)	0.02(5)	0.020(22)	0.10(5)

1 OLIVINE - ISIS data - 880 C

Name	X	Y	Z	Ui/Ue*100	Site sym	Mult	Type	Seq	Fractn
mg1	0.000000	0.000000	0.000000	2.43*	-1	4	MG	1	0.868(19)
mg2	0.9922(11)	0.2782(4)	0.250000	2.14*	M(001)	4	MG	2	0.892(19)
fe1	0.000000	0.000000	0.000000	2.43*	-1	4	FE	3	0.132(19)
fe2	0.9922(11)	0.2782(4)	0.250000	2.14*	M(001)	4	FE	4	0.108(19)
si	0.4266(11)	0.0944(4)	0.250000	1.11*	M(001)	4	SI	5	1.0000
o1	0.7671(9)	0.09132(32)	0.250000	1.79*	M(001)	4	O	6	1.0000
o2	0.2203(9)	0.45042(27)	0.250000	1.66*	M(001)	4	O	7	1.0000
o3	0.2813(7)	0.16305(20)	0.03563(34)	1.90*	1	8	O	8	1.0000

Thermal parameters are multiplied by 100.0

Anisotropic thermal factors are defined by

$$T = \exp(h^{**2} * astr^{**2} * u11 + \dots + 2 * h * k * astr * bstr * u12 + \dots)$$

Name	U11	U22	U33	U12	U13	U23
mg1	3.03(32)	2.29(19)	1.97(15)	0.22(15)	-0.50(15)	-0.23(13)
mg2	2.51(28)	1.41(15)	2.52(17)	0.29(12)	0.00	0.00
fe1	3.03(32)	2.29(19)	1.97(15)	0.22(15)	-0.50(15)	-0.23(13)

fe2	2.51(28)	1.41(15)	2.52(17)	0.29(12)	0.00	0.00
si	0.58(32)	0.81(15)	1.94(17)	0.37(15)	0.00	0.00
o1	1.39(29)	2.01(12)	1.96(12)	0.71(14)	0.00	0.00
o2	1.17(26)	0.90(10)	2.92(15)	-0.24(13)	0.00	0.00
o3	2.03(19)	1.70(9)	1.96(9)	-0.19(9)	-0.35(9)	0.89(8)

## 1 OLIVINE - ISIS data - 960 C

Name	X	Y	Z	Ui/Ue*100	Site sym	Mult	Type	Seq	Fractn
mg1	0.000000	0.000000	0.000000	2.37*	-1	4	MG	1	0.902(18)
mg2	0.9923(6)	0.2799(4)	0.250000	2.40*	M(001)	4	MG	2	0.858(18)
fe1	0.000000	0.000000	0.000000	2.37*	-1	4	FE	3	0.098(18)
fe2	0.9923(6)	0.2799(4)	0.250000	2.40*	M(001)	4	FE	4	0.142(18)
si	0.4270(6)	0.0938(5)	0.250000	1.39*	M(001)	4	SI	5	1.0000
o1	0.7650(5)	0.09115(42)	0.250000	2.07*	M(001)	4	O	6	1.0000
o2	0.2205(6)	0.45020(34)	0.250000	1.91*	M(001)	4	O	7	1.0000
o3	0.2825(4)	0.16342(26)	0.03554(23)	2.12*	1	8	O	8	1.0000

Thermal parameters are multiplied by 100.0

Anisotropic thermal factors are defined by

$$T = \exp(h^{**2} * astr^{**2} * u11 + \dots + 2 * h * k * astr * bstr * u12 + \dots)$$

Name	U11	U22	U33	U12	U13	U23
mg1	1.97(12)	3.26(24)	1.90(9)	-0.39(13)	-0.29(7)	-0.48(10)
mg2	2.53(12)	2.07(22)	2.59(10)	0.28(12)	0.00	0.00
fe1	1.97(12)	3.26(24)	1.90(9)	-0.39(13)	-0.29(7)	-0.48(10)
fe2	2.53(12)	2.07(22)	2.59(10)	0.28(12)	0.00	0.00
si	0.84(11)	1.91(26)	1.40(8)	0.22(12)	0.00	0.00
o1	1.33(10)	2.75(21)	2.12(7)	0.14(10)	0.00	0.00
o2	2.14(12)	1.25(21)	2.33(8)	-0.01(10)	0.00	0.00
o3	2.00(8)	2.28(15)	2.08(6)	0.03(8)	-0.09(5)	0.66(7)

## 1 OLIVINE - ISIS data - 1030 C

Name	X	Y	Z	Ui/Ue*100	Site sym	Mult	Type	Seq	Fractn
mg1	0.000000	0.000000	0.000000	2.45*	-1	4	MG	1	0.907(18)
mg2	0.9915(6)	0.2804(4)	0.250000	2.47*	M(001)	4	MG	2	0.853(18)
fe1	0.000000	0.000000	0.000000	2.45*	-1	4	FE	3	0.093(18)
fe2	0.9915(6)	0.2804(4)	0.250000	2.47*	M(001)	4	FE	4	0.147(18)
si	0.4276(5)	0.0941(5)	0.250000	1.51*	M(001)	4	SI	5	1.0000
o1	0.7641(5)	0.09094(40)	0.250000	1.92*	M(001)	4	O	6	1.0000
o2	0.2217(6)	0.45153(35)	0.250000	2.04*	M(001)	4	O	7	1.0000
o3	0.2820(4)	0.16348(26)	0.03593(23)	2.14*	1	8	O	8	1.0000

Thermal parameters are multiplied by 100.0

Anisotropic thermal factors are defined by

$$T = \exp(h^{**2} * astr^{**2} * u11 + \dots + 2 * h * k * astr * bstr * u12 + \dots)$$

Name	U11	U22	U33	U12	U13	U23
mg1	2.55(14)	2.82(22)	1.99(9)	-0.55(13)	-0.39(7)	-0.58(10)
mg2	2.99(13)	1.75(21)	2.68(9)	0.13(13)	0.00	0.00
fe1	2.55(14)	2.82(22)	1.99(9)	-0.55(13)	-0.39(7)	-0.58(10)
fe2	2.99(13)	1.75(21)	2.68(9)	0.13(13)	0.00	0.00
si	1.08(11)	1.81(27)	1.65(9)	0.25(12)	0.00	0.00
o1	1.50(9)	1.91(20)	2.36(7)	0.14(10)	0.00	0.00
o2	2.43(12)	1.08(21)	2.62(8)	0.10(11)	0.00	0.00
o3	2.55(9)	1.65(15)	2.23(5)	0.05(7)	-0.13(5)	0.78(7)

## 1 OLIVINE - ISIS data - 1060 C

Name	X	Y	Z	Ui/Ue*100	Site sym	Mult	Type	Seq	Fractn
mg1	0.000000	0.000000	0.000000	3.13*	-1	4	MG	1	0.914(28)
mg2	0.9939(12)	0.2785(5)	0.250000	3.27*	M(001)	4	MG	2	0.846(28)
fe1	0.000000	0.000000	0.000000	3.13*	-1	4	FE	3	0.086(28)
fe2	0.9939(12)	0.2785(5)	0.250000	3.27*	M(001)	4	FE	4	0.154(28)
si	0.4269(11)	0.0951(6)	0.250000	1.38*	M(001)	4	SI	5	1.0000
o1	0.7640(10)	0.09257(50)	0.250000	2.60*	M(001)	4	O	6	1.0000
o2	0.2206(11)	0.45131(37)	0.250000	2.40*	M(001)	4	O	7	1.0000
o3	0.2806(7)	0.16237(33)	0.0361(5)	2.86*	1	8	O	8	1.0000

Thermal parameters are multiplied by 100.0

Anisotropic thermal factors are defined by

$$T = \exp(h^{**2}*astr^{**2}*u11+... +2*h*k*astr*bstr*u12+... )$$

Name	U11	U22	U33	U12	U13	U23
mg1	2.56(32)	3.84(33)	3.00(27)	0.64(23)	-0.18(20)	-0.39(19)
mg2	3.83(34)	2.04(25)	3.94(28)	-0.39(18)	0.00	0.00
fe1	2.56(32)	3.84(33)	3.00(27)	0.64(23)	-0.18(20)	-0.39(19)
fe2	3.83(34)	2.04(25)	3.94(28)	-0.39(18)	0.00	0.00
si	0.95(30)	1.73(26)	1.47(21)	0.08(20)	0.00	0.00
o1	2.04(30)	2.65(20)	3.10(22)	0.22(18)	0.00	0.00
o2	2.91(28)	0.68(21)	3.61(22)	-0.24(17)	0.00	0.00
o3	1.84(17)	2.94(19)	3.82(18)	0.06(14)	-0.09(13)	0.93(14)