AM-89-352

HIGH PRESSURE CRYSTAL CHEMISTRY OF ANDRADITE AND PYROPE: REVISED PROCEDURES FOR HIGH-PRESSURE DIFFRACTION EXPERIMENTS

ROBERT M. HAZEN, LARRY W. FINGER

FOR DEPOSIT: TABLES I AND II

AMERICAN MINERALOGIST, 74, 3-4, 352-359

Structure Factor Tables

I. ANDRADITE

A. Tabulated and observed structure factors for andradite in air.

B. Tabulated and observed structure factors for andradite at 2.0 GPa.

C. Tabulated and observed structure factors for andradite at 3.0 GPa.

D. Tabulated and observed structure factors for andradite at 5.0 GPa.

E. Tabulated and observed structure factors for andradite at 12.5 GPa.

F. Tabulated and observed structure factors for andradite at 19.0 GPa.

II. PYROPE

A. Tabulated and observed structure factors for pyrope in air.

B. Tabulated and observed structure factors for pyrope, 2.0 GPa, all data.

C. Tabulated and observed structure factors for pyrope, 2.0 GPa, optimized.

FACTOR = 10 00

H	OBS	CALC
H 0 0		
4	4598	4630
8	4868	4851
12	1837	1868
16	2662	2642
H 2 0		
2	1487	1566
4	3294	3354
6	2122	2113
8	278	259
10	218	250
12	1974	2002
14	536	528
16	228	239
H 4 0		
4	441	511
6	3240	3244
8	3499	3489
10	2304	2299
12	900	910
14	1514	1545
16	1678	1649
H 6 0		
6	749	739
8	38	62
10	233	216
12	1598	1614
14	215	194
H 8 0		
8	4880	4792
10	150	44
12	2134	2180
14	134	164
H 10 0		
10	1735	1755
12	1410	1433
H 1 1		
2	125	19
6	1825	1785
10	322	322
14	116	212
H 2 1		
3	191	99
5	1244	1205
7	160	166
9	360	340

H	OBS	CALC
H 2 1		
11	161	163
13	44	117
15	383	359
H 3 1		
4	1248	1176
6	91	66
8	143	131
10	189	173
12	254	244
14	366	368
16	127	160
H 4 1		
5	180	172
7	696	696
9	876	883
11	560	547
13	83	2
15	101	142
H 5 1		
6	308	286
8	643	645
10	184	200
12	99	72
14	144	159
16	51	33
H 6 1		
7	547	565
9	196	189
11	157	75
13	116	47
15	50	31
H 7 1		
8	97	89
10	425	413
12	44	51
14	423	439
H 8 1		
9	324	347
11	278	267
13	103	198
H 9 1		
10	217	139
12	48	72
14	147	61

H	OBS	CALC
H 10 1		
11	142	118
13	253	250
H 11 1		
12	191	157
H 2 2		
4	3305	3327
8	1294	1341
12	3118	3141
16	204	169
H 3 2		
3	1204	1157
5	1282	1264
7	102	89
9	418	422
11	153	183
13	263	254
15	462	506
H 4 2		
6	4137	4127
8	2456	2449
10	3158	3077
12	72	3
14	2371	2391
16	1536	1498
H 5 2		
5	516	534
7	324	301
9	39	60
11	251	209
13	393	395
15	81	59
H 6 2		
8	416	394
10	225	198
12	1862	1854
14	103	94
H 7 2		
7	539	555
9	40	34
11	282	337
13	442	454
15	51	63

H	OBS	CALC
H 8 2		
10	696	705
12	1652	1658
14	252	229
H 9 2		
9	364	371
11	191	173
13	49	90
H 10 2		
12	1889	1865
H 11 2		
11	248	214
H 3 3		
6	608	586
10	336	312
14	128	105
H 4 3		
5	354	363
7	274	289
9	470	498
11	41	43
13	113	71
15	317	275
H 5 3		
6	521	520
8	841	860
10	215	238
12	308	298
14	273	295
H 6 3		
7	167	161
9	353	375
11	622	628
13	113	64
15	90	93
H 7 3		
8	480	485
10	225	207
12	378	365
14	194	158

H	OBS	CALC
H 8 3		
9	160	145
11	263	277
13	421	401
H 9 3		
10	89	33
12	108	125
14	121	16
H 10 3		
11	115	71
13	51	91
H 11 3		
12	123	99
H 4 4		
4	2543	2480
8	1174	1150
12	893	904
H 5 4		
7	642	647
9	236	218
11	42	23
13	232	231
15	272	255
H 6 4		
6	3183	3162
8	2117	2082
10	2294	2316
12	115	65
14	1746	1743
H 7 4		
9	387	382
11	503	538
13	117	3
H 8 4		
8	2452	2447
10	1893	1912
12	214	177
14	1433	1442
H 9 4		
11	47	90
13	95	31

H	OBS	CALC
H 10 4		
10	2143	2162
12	50	20
H 5 5		
6	403	413
10	42	73
14	49	66
H 6 5		
7	531	525
9	206	176
11	223	222
13	334	370
15	51	29
H 7 5		
8	335	341
10	175	66
12	109	80
14	51	49
H 8 5		
9	273	284
11	479	431
13	422	428
H 9 5		
10	45	36
12	103	9
H 10 5		
11	49	57
H 6 6		
8	682	675
12	2155	2145
H 7 6		
7	243	183
9	624	644
11	135	177
13	152	52
H 8 6		
10	713	718
12	1610	1609

H	OBS	CALC
H 9 6		
9	541	530
11	255	235
13	135	196
H 10 6		
12	2049	2034
H 11 6		
11	305	261
H 7 7		
10	105	47
H 8 7		
9	123	62
11	137	120
13	223	187
H 9 7		
10	48	42
12	185	106
H 10 7		
11	52	79
H 8 8		
8	3925	3851
12	1897	1887
H 9 8		
11	50	34
H 10 8		
10	86	80
H 9 9		
10	358	326

ANDRADITE AT 2 GPA.

FACTOR = 10.00

H	OBS	CALC
H 0 0		
4	5195	4826
8	5509	4960
12	2069	1904
H 2 0		
2	1524	1565
4	3236	3428
6	2268	2125
10	418	235
12	2238	2007
14	734	529
H 4 0		
4	495	521
6	3326	3326
8	3381	3516
10	2220	2307
14	1406	1523
H 6 0		
12	1428	1582
H 1 1		
6	2118	1784
H 2 1		
5	1314	1210
15	789	350

H	OBS	CALC
H 3 1		
4	1242	1176
6	453	59
H 4 1		
7	756	684
9	951	870
11	491	547
H 5 1		
8	720	643
H 6 1		
7	433	571
H 7 1		
10	379	420
H 2 2		
4	3260	3416
8	1265	1337
12	3539	3156
H 3 2		
3	1390	1186
5	1344	1258
13	450	252

H	OBS	CALC
H 4 2		
6	4491	4219
8	2727	2453
10	3313	3094
14	2580	2371
H 5 2		
5	478	522
H 6 2		
6	674	0
8	595	393
12	1491	1855
H 7 2		
7	753	536
11	446	337
H 3 3		
6	659	581
H 4 3		
5	459	343
9	482	517
H 5 3		
6	551	510
8	961	850

H	OBS	CALC
H 5 3		
14	566	295
H 6 3		
11	763	623
H 7 3		
8	453	453
H 8 3		
13	385	405
H 0 4		
12	765	911
H 4 4		
4	2206	2470
8	1049	1150
12	846	913
H 5 4		
5	291	0
7	703	658
H 6 4		
6	2643	3182
8	2374	2067

H	OBS	CALC
H 6 4		
10	2581	2325
H 7 4		
9	507	381
H 8 4		
8	2788	2462
10	1304	1921
H 5 5		
6	538	442
H 6 5		
7	606	533
13	506	353
H 8 5		
5	370	0
H 0 6		
6	750	717
H 2 6		
10	429	219

H	OBS	CALC
H 6 6		
8	612	672
12	1398	2152
H 7 6		
9	437	642
H 8 6		
10	783	719
H 9 6		
9	771	524
H 8 7		
9	357	81
H 1 8		
11	510	251
H 2 8		
10	846	712
12	1321	1656
H 8 8		
0	4186	4971
8	3201	3879

H	OBS	CAL
H 3 9		
10	416	35
H 9 9		
2	444	394
H 4 10		
4	363	0
10	1765	2161
H 10 10		
0	1642	1736
H 5 12		
5	384	0
H 8 12		
0	2046	2179
H 9 12		
1	617	62

ANDRADITE AT 3 GPA.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC
2	K	0
2	1430	1473
4	K	0
0	3917	3936
2	2984	2994
4	464	506
6	K	0
6	708	677
8	K	0
0	4307	4240
2	305	301
14	K	0
2	530	485

K	OBS	CALC
4	K	1
3	1177	1149
5	K	1
2	1116	1179
7	K	1
4	678	670
10	K	1
1	391	348
7	408	401
3	K	2
3	1218	1173
5	K	2
5	493	505

K	OBS	CALC
7	K	2
7	531	508
16	K	2
4	1403	1395
5	K	3
4	368	333
6	K	3
3	585	562
5	495	510
8	K	3
7	432	433
9	K	3
4	519	519
6	356	329

K	OBS	CALC
10	K	3
3	360	341
14	K	4
8	1329	1334
6	K	5
5	427	437
7	K	5
6	535	518
8	K	6
6	659	627
9	K	6
9	532	531

K	OBS	CALC
12	K	6
10	1805	1840
8	K	8
12	1730	1708
0	K	10
10	1593	1642

ANDRADITE AT 5 GPA.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC
2	K	0
2	1495	1523
4	K	0
0	4812	4879
2	3513	3432
4	506	549
6	K	0
6	697	678
8	K	0
0	4953	4906
2	318	302
4	K	1
3	1206	1173

K	OBS	CALC
5	K	1
2	1199	1203
7	K	1
4	670	677
10	K	1
1	243	338
7	565	434
11	K	1
4	571	555
3	K	2
3	1245	1210
5	K	2
5	490	477

K	OBS	CALC
7	K	2
7	542	510
16	K	2
4	1479	1495
6	K	3
3	628	610
5	501	511
8	K	3
7	529	420
9	K	3
4	538	544
6	487	332

K	OBS	CALC
10	K	3
3	447	387
3	K	4
5	384	318
14	K	4
8	1379	1439
6	K	5
5	472	472
7	K	5
6	541	529
8	K	6
6	651	675

K	OBS	CALC
9	K	6
9	555	499
12	K	6
10	1933	2006
8	K	8
12	1807	1851
0	K	10
10	1664	1703

ANDRADITE AT 12.5 GPA IN GAS CELL.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC
0 K 0		
4	4956	4997
8	5143	5071
12	1999	1965
4 K 0		
8	3558	3599
6 K 0		
6	920	626
12	1570	1609
8 K 0		
8	5062	5049
1 K 1		
6	1791	1833

K	OBS	CALC
0 K 2		
2	1573	1569
4	3564	3499
6	2091	2082
12	2160	2099
1 K 2		
5	1309	1256
2 K 2		
4	3525	3539
8	1256	1344
12	3248	3196
8 K 2		
10	723	693

K	OBS	CALC
1 K 3		
4	1166	1177
2 K 3		
3	1302	1197
5	1291	1303
3 K 3		
10	649	491
0 K 4		
6	3413	3442
10	2293	2351
12	993	893
1 K 4		
9	1028	866

K	OBS	CALC
2 K 4		
6	4339	4327
8	2477	2492
10	3119	3158
4 K 4		
4	2441	2455
12	1058	1047
8 K 4		
8	2479	2479
10	2032	2017
2 K 5		
5	554	532
3 K 5		
8	856	821

K	OBS	CALC
2 K 6		
12	2004	1891
4 K 6		
6	3072	3195
8	2109	2101
10	2275	2369

ANDRADITE AT 190 KBAR.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC
0 K 0		
4	5308	5278
8	5118	5099
12	2013	1929
6 K 0		
6	746	823
8 K 0		
8	5119	4863
1 K 1		
6	1504	1698
8 K 1		
9	306	330
0 K 2		
2	1488	1503
4	3475	3482
6	1996	2203
12	2051	1912

K	OBS	CALC
1 K 2		
5	1108	1168
2 K 2		
4	3348	3425
12	3290	3180
8 K 2		
10	580	704
1 K 3		
4	1053	1139
2 K 3		
3	1241	1147
5	1233	1203
0 K 4		
4	568	547
6	3302	3354
8	3505	3380
10	2387	2305
12	1003	878

K	OBS	CALC
1 K 4		
7	769	739
9	1120	808
2 K 4		
6	4157	4253
8	2396	2431
10	3161	3002
3 K 4		
7	265	246
4 K 4		
4	2300	2521
8	1334	1063
12	725	847
8 K 4		
8	2429	2499
10	2020	1858

K	OBS	CALC
1 K 5		
6	264	244
8	738	640
2 K 5		
7	271	197
3 K 5		
6	481	542
8	826	868
4 K 5		
7	677	668
7 K 5		
8	284	271
8 K 5		
9	313	215

K	OBS	CALC
0 K 6		
12	1282	1541
2 K 6		
12	2031	1816
4 K 6		
6	3164	3198
8	1727	2000
10	2451	2266
2 K 7		
11	302	346
4 K 7		
9	298	349
11	633	496

KAKANUI PYROPE IN AIR -- FULL DATA SET.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC
2 K 0		
2	99	46
4 K 0		
0	2633	2732
2	2475	2457
4	985	962
6 K 0		
2	833	808
4	2730	2670
6	176	165
8 K 0		
0	3203	3261
2	419	432
4	2083	2087
8	3050	2973
10 K 0		
2	952	966
4	1912	1898
6	462	484
10	834	843
12 K 0		
0	857	861
2	1479	1511
4	175	163
6	1191	1208
8	1150	1141

K	OBS	CALC
14 K 0		
4	1127	1118
1 K 1		
2	93	103
6	1463	1445
10	448	431
2 K 1		
3	148	119
5	1024	979
13	262	249
3 K 1		
4	1101	1039
6	198	209
8	119	104
12	320	314
14	238	249
4 K 1		
5	174	159
7	585	596
9	735	745
11	356	372
5 K 1		
6	203	199
8	578	600
10	211	208
14	264	253

K	OBS	CALC
6 K 1		
7	571	588
9	150	157
13	177	156
7 K 1		
8	121	148
10	287	284
8 K 1		
9	367	365
11	254	243
9 K 1		
12	179	140
2 K 2		
4	1464	1493
8	234	242
12	1872	1911
3 K 2		
3	1337	1254
5	920	902
7	361	370
9	247	236
11	123	60
13	173	118
4 K 2		
6	2461	2475
8	1922	1920

K	OBS	CALC
4 K 2		
10	1804	1801
14	1448	1421
5 K 2		
5	552	564
7	358	367
11	195	204
13	465	451
6 K 2		
8	334	335
10	315	299
12	1032	1027
7 K 2		
7	296	292
9	166	181
11	121	150
13	151	150
8 K 2		
12	1256	1228
9 K 2		
9	254	251
3 K 3		
6	262	242
10	174	182

K	OBS	CALC
4 K 3		
5	246	245
7	297	313
9	379	382
13	181	155
5 K 3		
6	491	503
8	808	823
10	215	194
12	303	280
6 K 3		
9	164	148
11	511	517
13	223	174
7 K 3		
8	338	352
12	347	343
8 K 3		
9	203	179
11	194	201
9 K 3		
10	135	112
4 K 4		
4	2818	2813
8	282	280
12	1089	1090

K	OBS	CALC
5 K 4		
7	605	623
9	129	110
13	221	194
6 K 4		
6	1907	1902
8	1610	1610
10	1296	1320
12	179	132
7 K 4		
9	212	194
11	467	455
8 K 4		
8	1399	1435
10	1501	1508
12	281	243
9 K 4		
11	176	166
10 K 4		
10	1283	1282
5 K 5		
6	277	282

K	OBS	CALC
6 K 5		
7	396	395
7 K 5		
8	179	187
8 K 5		
9	218	216
11	327	331
9 K 5		
10	156	134
6 K 6		
8	192	174
12	1130	1121
7 K 6		
7	406	393
9	409	408
9 K 6		
9	593	580
8 K 8		
8	2449	2425