AM-90-441

Edgarbaileyite, $Hg_6Si_2O_7$: The crystal structure of the first mercury silicate

R. J. Angel, G. Cressey, A. Criddle

For deposit: Table 3

American Mineralogist, 75, 9-10, 1192-1196.

Edgarbaileyite, $Hg_6Si_2O_7$:
The crystal structure of the first mercury silicate

R.J. Angel, G. Cressey, A. Criddle

Material for Deposit

Table 3: Observed and calculated structure factors for $Hg_6Si_2O_7$ refined in space group C2/m. Reflections marked with an asterisk were excluded from the refinements. Observed structure factors (Fo) have been corrected for absorption, the contribution of a twin (refined twin fraction = 0.276(4)), and isotropic type I extinction ($g = 8(1)x10^{-7}$), and have been scaled to the calculated structure factors (Fc).

EDGARBAILEYITE (HG6SI207) REFINED IN C2/M FACTOR = 1.00

H 0 0

H	OBS	CALC
0	0	1128
2	137*	40
4	625	627
6	256*	160
8	434*	415
10	270*	246
12	284*	252
14	234	218

H 1 0

H	OBS	CALC
1	186*	152
3	84	80
5	236	237
7	43*	40
9	172	168
11	35*	4
13	126	124
15	36*	32

H 2 0

H	OBS	CALC
0	233*	187
2	70*	23
4	205	188
6	73	76
8	130	130
10	80	75
12	94	98
14	74	74

H 3 0

H	OBS	CALC
1	96	87
3	100	69
5	103	105
7	43*	6
9	77	92
11	48	9
13	80	83

H 4 0

H	OBS	CALC
0	591*	555
2	77	63
4	496	476
6	129	140
8	346	347
10	185	185
12	202	204
14	185	174

H 5 0

H	OBS	CALC
1	145	140
3	96	84
5	219	198
7	45*	39
9	158	159
13	111	122

H 6 0

H	OBS	CALC
0	128	88
2	58*	32
4	123	117
6	96	61
8	99	102
10	46*	44
12	74	70

H 7 0

H	OBS	CALC
1	62*	4
7	54*	7
9	37*	20

H 8 0

H	OBS	CALC
0	276	272
2	64*	30
4	238	239
6	76	69
8	180	187
10	94	99

H 9 0

H	OBS	CALC
1	85	87
3	68*	64
5	96	106

H 10 0

H	OBS	CALC
0	70*	52
4	77	57

H 0 1

H	OBS	CALC
-14	108	109
-12	55	36
-10	143	145
-8	75	57
-6	187	194
-4	91	98
-2	142	137
0	140	143
2	81	85
4	215	214
6	52*	46
8	156	161
10	48*	21
12	129	123
14	59	14

H 1 1

H	OBS	CALC
-15	54*	55
-13	104	104
-9	129	135
-7	37*	28
-5	179	182
-3	60*	38
-1	124	138
1	112	105
3	119	118
5	159	158
7	67	70
9	120	120
13	96	95

H 2 1

H	OBS	CALC
-14	267	267
-12	139	142
-10	361	357
-8	300	303
-6	389	392
-4	465	460
-2	337	333
0	632	631
2	214	199
4	570	564
6	73	75
8	409	409
10	76	60
12	275	271
14	107	107

H 3 1

H	OBS	CALC
-15	56*	78
-13	117	122
-11	65	63
-9	143	152
-7	34*	8
-5	232	239
-3	54*	55
-1	247	235
1	65*	71
3	140	140
5	175	170
7	80	81
9	163	161
11	81	59
13	113	120

H 4 1

H	OBS	CALC
-14	112	99
-10	101	108
-6	131	131
-4	98	111
-2	131	133
0	105	106
2	88	87
4	146	135
8	136	135
10	48*	11
12	108	113

H 5 1

H	OBS	CALC
-13	45*	47
-11	44*	15
-9	45*	50
-5	73	58
-3	21*	16
-1	31*	27
1	66*	42
3	63	26
5	66	72
9	69	51

H 6 1

H	OBS	CALC
-12	71	86
-10	229	223
-8	196	193
-6	207	224
-4	302	296
-2	224	213
0	369	358
2	140	131
4	320	319
8	266	267
10	49*	42

H 7 1

H	OBS	CALC
-11	47*	46
-9	123	127
-5	151	155
-1	158	137
1	92	74
3	114	117
5	129	119
7	69	77
9	115	110

H 8 1

H	OBS	CALC
-10	59*	64
-8	57*	28
-6	67*	73
-4	68*	59
-2	82*	66
2	47*	45
4	76	76
8	72	79

H 9 1

H	OBS	CALC
-9	38*	11
-7	57	4
-3	55*	6
1	58*	7
3	64*	24
5	61*	13
7	54*	21

H 10 1

H	OBS	CALC
-6	97	102
-4	123	119
-2	90	86
0	138	154
2	85	53
4	144	146

H 0 2

H	OBS	CALC
-16	86	77
-14	288	288
-12	42*	3
-10	403	422
-8	152	152
-6	503*	562
-4	250	261
-2	526*	569
0	366	393
2	355*	380
4	418	426
6	231	237
8	356	359
10	94	88
12	249	257

H 1 2

H	OBS	CALC
-15	92	98
-13	99	98
-11	102	106
-9	123	121
-7	79	77
-5	174	185
-3	40*	23
-1	234	222
1	59*	43
3	193	184
5	111	102
7	106	111
9	113	105
11	81	79
13	96	89

H 2 2

H	OBS	CALC
-16	56*	54
-14	95	99
-12	78	58
-10	131	128
-8	39*	51
-6	186	187
-4	19*	5
-2	224	208
0	35*	22
2	180	175
4	100	96
6	110	114
8	116	114
10	91	94
12	101	102

H 3 2

H	OBS	CALC
-15	72	60
-13	57*	58
-11	53*	45
-9	80	78
-7	17*	28
-5	113	127
-3	20*	2
-1	77	89
1	20*	38
3	66*	71
5	98	101
7	75	63
9	82	74
11	54	48

H 4 2

H	OBS	CALC
-14	249	242
-10	350	345
-8	86	97
-6	393	406
-4	210	203
-2	410	408
0	333	323
2	319	318
4	322	318
6	194	196
8	278	275
10	70	64
12	206	214

H 5 2

H	OBS	CALC
-13	86	89
-11	104	105
-9	99	114
-7	64	81
-5	163	164
-1	188	189
1	41*	28
3	167	170
5	75	81
7	118	116
9	91	92
11	94	83

H 6 2

H	OBS	CALC
-12	51*	39
-10	109	96
-8	47*	47
-6	96	105
-2	131	113
0	56*	40
2	117	125
4	63	60
6	82	82
8	75	69
10	59*	59

H 7 2

H	OBS	CALC
-11	49*	10
-9	50*	11
-7	61*	2
-3	55*	31
-1	61*	11
5	45*	38
9	60*	29

H 8 2

H	OBS	CALC
-10	183	188
-8	58*	51
-6	205	207
-4	106	101
-2	196	206
0	168	158
2	161	164
4	151	161
6	110	109
8	126	149

H 9 2

H	OBS	CALC
-9	67	74
-7	49*	52
-5	107	106
-3	59*	23
-1	110	103
1	71*	10
3	105	98
5	52*	53

H 10 2

H	OBS	CALC
-2	65*	56
0	85*	12
2	80	53

H 0 3

H	OBS	CALC
-14	62	55
-12	137	136
-10	105	70
-8	152	155
-6	128	120
-4	67*	86
-2	205	199
0	66*	80
2	212	215
6	149	151
8	46*	32
10	131	132
12	75	55

H 1 3

H	OBS	CALC
-15	95	97
-13	54*	52
-11	102	101
-9	74	67
-7	54*	74
-5	127	135
-3	22*	13
-1	161	166
1	18*	5
3	141	141
5	49*	50
7	102	97
9	63	57
11	87	76

EDGARBAILEYITE (HG6SI2O7) REFINED IN C2/M FACTOR = 1.00

H	OBS	CALC
H 2 3		
-14	245	230
-12	139	144
-10	365	359
-8	58*	67
-6	470	482
-4	20*	12
-2	536	533
0	119	115
2	420	420
4	174	177
6	288	289
8	205	204
10	161	159
H 3 3		
-15	115	111
-13	42*	57
-11	123	130
-9	99	91
-7	108	137
-5	134	131
-3	64*	55
-1	177	167
1	39*	5
3	196	191
7	131	138
9	47*	42
11	100	94
H 4 3		
-14	45*	44
-12	104	101
-10	66	73
-8	126	129
-6	99	108
-4	89	94
-2	126	127
0	45*	49
2	157	161
6	129	137
8	41*	22
10	101	113
H 5 3		
-13	53*	34
-11	65*	36
-5	86	58
-3	55*	28
-1	84*	65
1	31*	23
3	66	54
5	43*	46
9	47*	40
H 6 3		
-12	84	88
-10	229	244
-8	35*	48

H	OBS	CALC
H 6 3		
-6	296	306
-2	311	309
0	78*	73
2	257	259
4	114	120
6	205	202
8	125	129
H 7 3		
-11	93	104
-9	44*	53
-7	97	93
-5	118	101
-1	130	127
1	77	32
3	127	129
5	33*	13
7	93	103
H 8 3		
-10	43*	44
-8	74*	71
-6	66*	63
-4	79*	49
-2	70*	69
2	67*	89
4	53*	5
6	85	80
H 9 3		
-7	73*	10
-5	64*	3
H 10 3		
-2	139	145
H 0 4		
-14	152	150
-12	245	246
-10	270	271
-8	233	237
-6	355	366
-4	168	181
-2	442	436
0	65	75
2	388	386
4	6	5
6	296	291
8	75	74
10	180	185
H 1 4		
-15	116	107
-13	12	13
-11	115	117
-9	40	47

H	OBS	CALC
H 1 4		
-7	125	126
-5	95	104
-3	82	80
-1	125	133
1	46	48
3	137	149
5	8	7
7	115	114
9	10	8
H 2 4		
-14	20*	20
-12	123	137
-8	174	189
-6	26	26
-4	173	162
-2	66	76
0	113	129
2	145	147
4	87	92
6	139	136
8	66	56
10	119	119
H 3 4		
-15	60*	69
-13	30*	30
-11	73	78
-9	36	32
-7	65	60
-5	70	66
-1	99	111
1	9*	5
3	108	111
5	9	7
7	69	63
9	22*	22
H 4 4		
-14	114	114
-12	179	197
-10	186	212
-8	144*	175
-6	310	305
-4	150	155
-2	393*	345
0	81	79
2	306	290
4	7	6
6	247	235
8	72	65
H 5 4		
-11	118	114
-9	26	29
-7	106	125
-5	78	78
-3	102	94

H	OBS	CALC
H 5 4		
-1	129	109
1	58	65
3	128	130
5	29	25
7	103	109
H 6 4		
-12	82	92
-8	107	114
-6	40*	34
-4	120	111
-2	60	56
0	102	96
2	78	87
6	98	93
H 7 4		
-9	36*	25
-3	49*	25
3	57*	39
5	48*	31
H 8 4		
-10	94	115
-8	93	95
-6	170	160
-4	93	86
-2	198	181
0	57	47
2	154	154
4	4	4
H 9 4		
-7	87	82
-5	68	35
-3	73*	56
-1	110	66
1	68	52
H 0 5		
-12	117	99
-10	96	81
-8	173	168
-6	60*	53
-4	214	187
0	173	161
2	76	58
4	142	130
6	91	88
8	95	111
H 1 5		
-11	88	88
-7	118	106
-5	54*	57
-3	47*	65

H	OBS	CALC
H 1 5		
-1	92	87
1	68	47
3	106	111
5	38*	30
7	90	77
H 2 5		
-12	271	251
-10	116	117
-8	268	273
-6	182	190
-4	251	265
-2	235	243
0	185	185
2	216	232
4	108	99
6	192	208
8	52*	21
H 3 5		
-13	64	33
-11	116	104
-7	119	115
-3	102	104
-1	83	86
1	83	96
3	96	98
5	56*	53
7	79	81
H 4 5		
-12	97	91
-10	78	77
-8	119	130
-4	130	137
0	124	140
2	69*	50
4	108	115
6	70	65
H 5 5		
-13	55*	17
-11	55*	39
-9	51*	32
-7	55*	42
-5	82*	49
-3	58*	9
-1	56*	61
1	41*	2
3	82	72
5	47*	5
H 6 5		
-12	182	177
-10	66	67
-8	162	175
-6	100	118

H	OBS	CALC
H 6 5		
-4	157	165
-2	142	167
0	124	132
2	159	151
4	73	77
H 7 5		
-7	89	98
-3	96	83
-1	90	44
1	80	74
3	69*	72
H 8 5		
-8	80	76
-4	92*	76
0	73*	81
H 0 6		
-12	248	225
-10	17*	8
-8	259	255
-6	66*	49
-4	283	270
-2	115	101
0	224	219
2	113	111
4	148	143
6	120	126
H 1 6		
-11	75*	80
-9	24*	19
-7	101	102
-5	48*	21
-3	104	90
-1	61*	48
1	90	86
3	77	68
5	76	60
H 2 6		
-12	54*	38
-10	132	130
-8	82	84
-6	99	101
-4	133	123
-2	73*	78
0	143	142
2	47*	25
4	123	125
6	27*	11
H 3 6		
-11	75	49
-7	63*	73

H	OBS	CALC
H 3 6		
-5	55*	47
-3	75*	63
-1	61*	46
1	18*	42
3	64	63
5	46*	21
H 4 6		
-12	189	190
-8	206	215
-4	205	212
-2	68*	79
0	171	172
2	94	97
4	117	125
H 5 6		
-11	71	68
-9	54*	37
-7	105	91
-5	23*	4
-3	70*	87
-1	38*	23
1	90	88
H 6 6		
-10	82	89
-8	71*	66
-6	82*	76
-4	85*	77
-2	77*	52
0	94	93
2	68	9
H 7 6		
-7	37*	25
-5	70*	41
-3	62*	9
-1	81	43
H 0 7		
-10	138	145
-8	12	11
-6	136	126
-4	65	53
-2	115	108
0	83	100
2	81	77
H 1 7		
-9	33*	19
-7	75	74
-5	21*	15
-3	84	79
-1	33*	19
1	76	71

EDGARBAILEYITE (HG6SI2O7) REFINED IN C2/M FACTOR = 1.00

H 1 7

H	OBS	CALC
3	39*	32

H 2 7

H	OBS	CALC
-10	86	84
-8	171	176
-6	61	61
-4	185	185
-2	8	8
0	160	163
2	20	20

H 3 7

H	OBS	CALC
-9	18*	39
-7	72	82

H 3 7

H	OBS	CALC
-5	47*	21
-3	83	79
1	84	75

H 4 7

H	OBS	CALC
-10	113	112
-8	13*	17
-6	110	105
-4	58	50
-2	88	98
0	86	77

H 5 7

H	OBS	CALC
-9	22*	8
-7	63*	48
-5	53*	34
-3	54*	45
-1	54*	31

H 0 8

H	OBS	CALC
-6	133	109
-4	129	111
-2	53*	64

H 1 8

H	OBS	CALC
-3	79*	66

H 2 8

H	OBS	CALC
-6	114	107
-4	16*	6
-2	113	107

H 3 8

H	OBS	CALC
-5	56*	3