AM-92-502

Crystal structure of superhydrous B, a hydrous magnesium silicate synthesized at 1400 ^{o}C and 20 GPa

Rosemary E. G. Pacalo, John B. Parise

For deposit: Table 1

American Mineralogist, 77, 5-6, 681-684.

Table 1. Observed and calculated structure factor amplitudes (x10) for Superhydrous B

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	0	0	773	784	4	0	0	545	543	6	0	0	137	1387	1	0	1	459	444	3	0	1	114	113	5	0	1	45	46	7	0	1	334	335
0	0	2	466	472	2	0	2	14	3	4	0	2	428	429	0	0	4	52	66	6	0	4	56	53	5	0	5	23	9	3	0	7	146	141
5	0	7	20	20	0	0	8	387	392	2	0	8	97	93	4	0	8	262	255	1	0	9	440	445	3	0	9	130	21307	0	0	10	197	194
2	0	10	72	68	4	0	10	254	259	1	0	11	161	159	3	0	11	291	286	0	0	12	968	964	1	1	0	71	70	3	1	0	153	158
4	1	0	434	431	5	1	0	159	159	6	1	0	251	251	7	1	0	79	77	0	1	1	229	234	1	1	1	30	25	2	1	1	207	210
4	1	1	279	282	5	1	1	39	42	6	1	1	88	86	7	1	1	78	79	2	1	2	104	106	3	1	2	247	249	4	1	2	20	5
5	1	2	36	38	6	1	2	68	69	7	1	2	81	81	0	1	3	217	220	2	1	3	111	110	4	1	3	73	75	6	1	3	25	16
1	1	4	435	434	2	1	4	217	214	3	1	4	39	41	4	1	4	119	118	5	1	4	97	95	6	1	4	96	96	0	1	5	301	307
1	1	5	207	205	2	1	5	19	19	3	1	5	56	53	4	1	5	54	50	5	1	5	134	130	6	1	5	159	158	1	1	6	22	10
2	1	6	220	216	3	1	6	63	59	4	1	6	308	310	5	1	6	105	108	6	1	6	214	207	0	1	7	83	83	1	1	7	189	196
2	1	7	247	242	3	1	7	79	80	4	1	7	297	293	5	1	7	149	147	1	1	8	35	30	2	1	8	226	228	3	1	8	213	214
4	1	8	75	72	5	1	8	9	3	0	1	9	34	16	1	1	9	218	219	2	1	9	59	59	3	1	9	141	138	4	1	9	16	8
2	1	10	177	179	3	1	10	122	124	4	1	10	126	124	0	1	11	175	174	1	1	11	163	167	2	1	11	34	35	3	1	11	23	19
1	1	12	40	43	0	2	0	399	360	3	2	0	77	75	4	2	0	417	422	5	2	0	80	79	6	2	0	118	118	7	2	0	222	223
1	2	1	11	5	2	2	1	482	491	3	2	1	184	181	4	2	1	222	227	5	2	1	110	110	6	2	1	151	148	7	2	1	40	38
0	2	2	66	64	2	2	2	315	299	3	2	2	111	108	4	2	2	91	87	5	2	2	367	367	6	2	2	77	76	7	2	2	56	59
2	2	3	198	198	3	2	3	211	204	4	2	3	273	270	6	2	3	100	101	0	2	4	245	237	2	2	4	31	31	3	2	4	171	173
4	2	4	117	118	5	2	4	219	217	6	2	4	122	125	2	2	5	543	557	3	2	5	19	9	4	2	5	248	242	5	2	5	140	140
6	2	5	46	55	0	2	6	185	182	1	2	6	222	227	2	2	6	267	274	3	2	6	92	92	4	2	6	331	329	5	2	6	62	66
6	2	6	74	73	1	2	7	145	148	3	2	7	157	159	4	2	7	91	89	0	2	8	102	106	1	2	8	394	392	2	2	8	222	222
3	2	8	15	16	4	2	8	159	161	5	2	8	328	321	1	2	9	250	250	2	2	9	109	111	3	2	9	76	74	4	2	9	162	162
0	2	10	115	120	1	2	10	86	87	2	2	10	87	83	3	2	10	109	107	4	2	10	170	164	1	2	11	184	183	2	2	11	316	313
3	2	11	98	90	0	2	12	28	30	1	2	12	113	110	3	3	0	582	587	4	3	0	614	622	5	3	0	270	268	6	3	0	8	4
7	3	0	73	78	0	3	1	29	32	1	3	1	67	67	3	3	1	366	359	4	3	1	512	514	5	3	1	93	98	6	3	1	33	26
7	3	1	91	86	3	3	2	92	99	5	3	2	444	449	6	3	2	239	245	0	3	3	692	709	3	3	3	14	8	4	3	3	168	169
5	3	3	337	304	6	3	3	297	294	3	3	4	61	60	4	3	4	104	105	5	3	4	277	278	6	3	4	285	294	0	3	5	116	123
1	3	5	221	214	3	3	5	169	180	4	3	5	637	637	5	3	5	36	35	6	3	5	18	10	1	3	6	270	266	2	3	6	501	510
3	3	6	436	443	4	3	6	399	385	5	3	6	224	228	6	3	6	25	24	0	3	7	40	30	1	3	7	122	130	2	3	7	256	250
3	3	7	227	234	4	3	7	189	186	1	3	8	706	712	2	3	8	163	173	3	3	8	31	21	4	3	8	97	93	5	3	8	387	384
0	3	9	401	395	1	3	9	361	351	2	3	9	246	243	3	3	9	42	45	4	3	9	147	145	1	3	10	117	118	2	3	10	100	98
3	3	10	30	14	4	3	10	95	88	0	3	11	13	2	1	3	11	186	182	2	3	11	461	462	0	4	0	347	311	3	4	0	183	182
4	4	0	805	800	5	4	0	210	210	6	4	0	137	142	7	4	0	67	65	1	4	1	627	617	3	4	1	426	419	4	4	1	299	310
5	4	1	186	188	6	4	1	89	89	7	4	1	228	233	0	4	2	634	624	2	4	2	348	343	3	4	2	82	81	4	4	2	405	399
5	4	2	336	339	6	4	2	182	178	3	4	3	212	201	4	4	3	33	37	5	4	3	599	590	6	4	3	168	170	0	4	4	506	501
1	4	4	423	423	3	4	4	91	99	4	4	4	394	390	5	4	4	276	275	6	4	4	157	153	2	4	5	442	445	3	4	5	352	350
4	4	5	317	311	5	4	5	137	136	6	4	5	35	28	0	4	6	168	162	1	4	6	129	126	3	4	6	107	106	4	4	6	529	516
5	4	6	111	109	6	4	6	107	105	1	4	7	362	365	2	4	7	269	266	3	4	7	262	266	4	4	7	133	128	5	4	7	138	132
0	4	8	335	335	1	4	8	328	327	2	4	8	166	162	3	4	8	11	9	4	4	8	193	197	5	4	8	217	206	1	4	9	490	488
2	4	9	53	57	3	4	9	81	80	4	4	9	29	21	0	4	10	237	238	1	4	10	106	102	2	4	10	179	179	3	4	10	54	50
1	4	11	106	113	2	4	11	201	193	0	4	12	35	42	1	5	0	641	657	2	5	0	110	41103	3	5	0	49	48	4	5	0	553	555
5	5	0	323	329	6	5	0	33	29	0	5	1	868	877	1	5	1	61	61	2	5	1	33	35	3	5	1	90	86	4	5	1	149	157
5	5	1	190	192	6	5	1	353	351	1	5	2	172	174	2	5	2	93	92	4	5	2	140	145	5	5	2	119	127	6	5	2	46	43
0	5	3	78	81	3	5	3	7	5	4	5	3	418	418	5	5	3	476	466	6	5	3	11	18	1	5	4	64	60	2	5	4	141	145
4	5	4	149	145	5	5	4	12	2	0	5	5	10251	046	1	5	5	114	113	2	5	5	199	206	3	5	5	40	39	4	5	5	159	158
5	5	5	111	106	6	5	5	428	427	1	5	6	453	463	2	5	6	612	613	3	5	6	80	73	4	5	6	389	377	5	5	6	263	263
0	5	7	309	316	1	5	7	59	54	2	5	7	19	22	3	5	7	35	41	4	5	7	96	93	5	5	7	154	152	1	5	8	204	197
2	5	8	13	15	3	5	8	671	668	4	5	8	105	104	5	5	8	189	186	0	5	9	86	94	1	5	9	392	378	2	5	9	303	307
3	5	9	17	16	4	5	9	302	297	1	5	10	20	22	2	5	10	36	44	3	5	10	141	141	0	5	11	601	605	1	5	11	83	87
2	5	11	192	188	1	6	0	41	38	3	6	0	113	109	4	6	0	119	112	5	6	0	113	105	6	6	0	299	321	2	6	1	13	2
3	6	1	24	2	4	6	1	120	116	6	6	1	77	84	0	6	2	399	390	1	6	2	123	125	2	6	2	16	14	3	6	2	94	86
4	6	2	199	192	5	6	2	17	4	6	6	2	48	52	1	6	3	253	250	2	6	3	70	72	3	6	3	355	348	4	6	3	59	60
5	6	3	255	250	6	6	3	101	102	0	6	4	225	219	1	6	4	8	3	2	6	4	69	70	3	6	4	36	46	4	6	4	286	290
5	6	4	71	72	6	6	4	143	141	1	6	5	33	35	2	6	5	100	98	3	6	5	337	347	4	6	5	158	155	5	6	5	21	5
6	6	5	105	104	0	6	6	289	290	1	6	6	15	10	2	6	6	261	254	3	6	6	62	67	5	6	6	89	89	1	6	7	191	197
2	6	7	66	73	3	6	7	264	260	4	6	7	42	46	5	6	7	42	23	0	6	8	466	481	1	6	8	150	148	2	6	8	47	45
3	6	8	80	78	4	6	8	14	3	1	6	9	88	86	2	6	9	61	60	3	6	9	214	222	4	6	9	34	37	0	6	10	284	290
1	6	10	36	27	2	6	10	22	24	3	6	10	32	25	1	6	11	66	68	2	6	11	92	86	1	7	0	93	94	3	7	0	6	2
4	7	0	493	491	5	7	0	79	82	6	7	0	140	141	0	7	1	16	18	1	7	1	53	50	2	7	1	62	63	3	7	1	151	151
4	7	1	46	42	5	7	1	21	17	6	7	1	19	9	1	7	2	60	56	2	7	2	40	35	3	7	2	129	129	5	7	2	8	2
6	7	2	162	164	0	7	3	26	24	1	7	3	912	928	2	7	3	26	24	3	7	3	128	129	4	7	3	66	65	5	7	3	605	612
6	7	3	36	38	1	7	4	44	42	2	7	4	49	51	3	7	4	97	98	4	7	4	41	46	5	7	4	125	126	6	7	4	117	122
0	7	5	270	272	1	7	5	17	24	2	7	5	62	60	3	7	5	138	140	4	7	5	44	46	6	7	5	114	110	1	7	6	15	11
3	7	6	28	28	4	7	6	356	336	5	7	6	61	63	0	7	7	171	175	1	7	7	102	103	2	7	7	165	168	3	7	7	75	77
4	7	7	26	23	1	7	8	55	56	2	7	8	34	39	3	7	8	213	214	4	7	8	46	40	0	7	9	43	41	1	7	9	417	413

Table 1. -Continued

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	7	9	41	32	3	7	9	83	83	4	7	9	12	18	1	7	10	108	115	2	7	10	79	80	3	7	10	127	124	0	7	11	219	225
1	7	11	16	24	0	8	0	258	249	1	8	0	18	11	3	8	0	56	62	5	8	0	10	13	6	8	0	211	218	1	8	1	98	93
2	8	1	198	203	3	8	1	215	217	4	8	1	126	123	5	8	1	249	247	6	8	1	75	73	0	8	2	210	210	1	8	2	208	211
3	8	2	64	65	5	8	2	150	152	6	8	2	162	157	2	8	3	18	14	3	8	3	265	269	4	8	3	58	64	5	8	3	927	915
6	8	3	69	63	0	8	4	229	226	1	8	4	124	125	2	8	4	243	241	3	8	4	80	79	4	8	4	15	5	5	8	4	100	105
6	8	4	154	146	1	8	5	175	180	2	8	5	205	200	3	8	5	182	184	4	8	5	142	146	5	8	5	220	217	0	8	6	283	280
1	8	6	29	27	3	8	6	36	29	4	8	6	966	970	5	8	6	11	14	1	8	7	126	121	2	8	7	78	73	3	8	7	155	158
4	8	7	25	29	5	8	7	217	217	0	8	8	160	159	1	8	8	153	155	2	8	8	248	244	3	8	8	23	19	4	8	8	113	114
1	8	9	901	911	2	8	9	27	31	3	8	9	220	230	0	8	10	117	118	1	8	10	29	1	2	8	10	188	191	1	8	11	201	202
1	9	0	358	352	2	9	0	138	135	3	9	0	172	170	4	9	0	276	280	5	9	0	30	32	6	9	0	62	63	0	9	1	842	836
1	9	1	43	43	2	9	1	82	83	3	9	1	111	115	4	9	1	84	86	5	9	1	148	148	6	9	1	301	304	1	9	2	202	204
2	9	2	56	52	3	9	2	516	530	4	9	2	132	134	5	9	2	88	90	6	9	2	65	59	0	9	3	201	203	1	9	3	325	322
2	9	3	158	161	3	9	3	27	26	4	9	3	276	279	6	9	3	75	73	1	9	4	12	1	2	9	4	173	173	3	9	4	563	569
4	9	4	18	6	5	9	4	30	33	0	9	5	493	500	1	9	5	250	249	2	9	5	214	207	3	9	5	37	33	4	9	5	162	160
5	9	5	15	3	1	9	6	201	209	2	9	6	28	28	3	9	6	89	88	4	9	6	214	208	5	9	6	28	20	0	9	7	583	578
1	9	7	106	109	2	9	7	91	92	3	9	7	109	109	4	9	7	44	53	1	9	8	199	196	2	9	8	177	182	3	9	8	251	246
4	9	8	197	198	0	9	9	43	42	1	9	9	122	117	2	9	9	66	66	3	9	9	14	1	1	9	10	115	117	2	9	10	160	161
0	10	0	650	615	1	10	0	157	154	2	10	0	175	168	3	10	0	63	65	4	10	0	241	249	5	10	0	203	202	6	10	0	268	273
1	10	1	25	26	2	10	1	243	237	3	10	1	66	65	4	10	1	329	336	5	10	1	44	45	6	10	1	60	62	0	10	2	84	85
1	10	2	466	466	2	10	2	102	105	3	10	2	77	75	4	10	2	23	7	5	10	2	142	140	6	10	2	73	75	1	10	3	215	214
2	10	3	207	207	3	10	3	455	446	4	10	3	62	65	5	10	3	114	113	0	10	4	31	20	1	10	4	251	247	2	10	4	21	10
3	10	4	18	11	4	10	4	58	58	5	10	4	14	1	1	10	5	58	67	2	10	5	366	367	3	10	5	76	76	4	10	5	360	352
5	10	5	80	83	0	10	6	423	428	1	10	6	123	124	2	10	6	128	130	3	10	6	38	38	4	10	6	169	178	5	10	6	179	177
1	10	7	65	65	2	10	7	27	31	3	10	7	20	7	4	10	7	187	183	0	10	8	54	53	1	10	8	377	380	3	10	8	103	99
4	10	8	22	10	1	10	9	107	110	2	10	9	156	150	3	10	9	245	243	0	10	10	45	44	1	10	10	75	71	1	11	0	428	433
2	11	0	67	69	3	11	0	207	215	5	11	0	151	156	0	11	1	640	656	1	11	1	38	39	2	11	1	235	248	3	11	1	33	22
4	11	1	107	106	5	11	1	183	188	1	11	2	225	235	2	11	2	64	59	3	11	2	622	642	4	11	2	89	88	5	11	2	199	205
0	11	3	226	233	1	11	3	59	55	2	11	3	307	317	3	11	3	27	19	4	11	3	320	322	5	11	3	14	6	1	11	4	146	153
2	11	4	205	211	3	11	4	373	371	4	11	4	15	17	5	11	4	161	161	0	11	5	769	768	1	11	5	110	116	2	11	5	264	266
3	11	5	20	22	4	11	5	141	148	5	11	5	43	41	1	11	6	331	327	2	11	6	10	12	3	11	6	204	211	4	11	6	15	6
0	11	7	239	239	1	11	7	104	104	2	11	7	151	150	3	11	7	24	31	4	11	7	61	63	1	11	8	208	215	2	11	8	89	90
3	11	8	554	549	0	11	9	204	215	1	11	9	9	5	2	11	9	211	209	1	11	10	93	94	0	12	0	163	0	1618	1	12	0	257	256
2	12	0	45	49	3	12	0	112	113	4	12	0	74	80	5	12	0	204	209	1	12	1	331	319	2	12	1	305	306	3	12	1	281	281
4	12	1	204	202	5	12	1	312	328	0	12	2	269	266	1	12	2	302	308	2	12	2	436	429	3	12	2	17	5	5	12	2	173	168
1	12	3	58	63	2	12	3	252	256	3	12	3	110	7110	5	4	12	3	115	118	5	12	3	54	50	0	12	4	299	306	1	12	4	276	278
2	12	4	380	388	3	12	4	27	19	4	12	4	82	80	5	12	4	166	164	1	12	5	282	285	2	12	5	212	218	3	12	5	154	158
4	12	5	167	167	0	12	6	10	651	069	1	12	6	154	154	2	12	6	14	22	3	12	6	75	78	4	12	6	63	73	1	12	7	213	217
2	12	7	195	195	3	12	7	209	211	0	12	8	71	66	1	12	8	161	162	2	12	8	265	272	3	12	8	19	17	1	12	9	33	36
2	12	9	99	100	1	13	0	250	251	2	13	0	363	354	3	13	0	312	312	4	13	0	217	218	5	13	0	88	85	0	13	1	223	221
1	13	1	24	26	2	13	1	236	230	3	13	1	54	55	4	13	1	128	130	5	13	1	84	86	1	13	2	298	299	2	13	2	30	11
3	13	2	193	199	4	13	2	72	72	5	13	2	193	199	0	13	3	346	347	1	13	3	314	309	2	13	3	191	189	3	13	3	108	107
4	13	3	195	194	5	13	3	236	229	1	13	4	111	104	2	13	4	84	85	3	13	4	149	151	4	13	4	15	11	0	13	5	206	208
1	13	5	95	96	2	13	5	314	316	3	13	5	35	36	4	13	5	262	268	1	13	6	196	196	2	13	6	245	242	3	13	6	281	279
4	13	6	157	152	0	13	7	120	122	1	13	7	62	57	2	13	7	80	81	3	13	7	48	44	1	13	8	338	332	2	13	8	54	57
0	13	9	287	277	1	13	9	145	142	0	14	0	29	8	1	14	0	61	60	2	14	0	291	301	3	14	0	36	34	4	14	0	275	285
5	14	0	156	160	1	14	1	34	28	2	14	1	113	114	3	14	1	93	92	4	14	1	169	174	5	14	1	71	75	0	14	2	12	7
1	14	2	181	181	2	14	2	142	136	3	14	2	23	15	4	14	2	62	60	1	14	3	315	318	2	14	3	123	124	3	14	3	13	6
4	14	3	12	6	0	14	4	161	154	1	14	4	176	177	2	14	4	15	9	3	14	4	19	3	1	14	5	170	176	2	14	5	90	88
3	14	5	50	53	4	14	5	135	135	0	14	6	27	23	1	14	6	39	44	2	14	6	204	214	3	14	6	32	25	1	14	7	110	113
2	14	7	93	91	0	14	8	136	132	1	14	8	104	105	1	15	0	62	58	2	15	0	502	494	3	15	0	42	45	4	15	0	530	527
0	15	1	36	35	1	15	1	27	23	2	15	1	63	63	3	15	1	85	87	4	15	1	57	61	1	15	2	159	160	2	15	2	63	62
3	15	2	54	51	4	15	2	76	77	0	15	3	39	43	1	15	3	605	598	2	15	3	25	21	3	15	3	64	62	4	15	3	64	73
1	15	4	18	23	2	15	4	74	75	3	15	4	18	11	4	15	4	60	54	0	15	5	79	78	1	15	5	60	59	2	15	5	169	170
3	15	5	53	56	1	15	6	43	42	2	15	6	371	351	3	15	6	14	16	0	15	7	10	8	1	15	7	18	17	2	15	7	57	58
0	16	0	891	851	1	16	0	99	97	2	16	0	731	742	3	16	0	87	91	4	16	0	471	481	1	16	1	171	160	2	16	1	267	263
3	16	1	69	67	4	16	1	156	150	0	16	2	60	54	1	16	2	245	249	2	16	2	175	171	3	16	2	21	14	4	16	2	120	119
1	16	3	656	672	2	16	3	105	105	3	16	3	668	663	0	16	4	75	74	1	16	4	197	196	2	16	4	131	133	3	16	4	36	30
1	16	5	171	171	2	16	5	230	223	0	16	6	635	634	1	16	6	44	44	2	16	6	585	588	1	17	0	57	49	2	17	0	257	252
3	17	0	295	303	0	17	1	202	195	1	17	1	28	27	2	17	1	295	302	3	17	1	73	76	1	17	2	267	265	2	17	2	51	47
3	17	2	213	205	0	17	3	312	321	1	17	3	177	174	2	17	3	18	14	3	17	3	51	55	1	17	4	305	312	2	17	4	42	41
0	17	5	272	267	1	17	5	102	98	2	17	5	190	191	0	18	0	142	141	1	18	0	35	32	2	18	0	272	275	1	18	1	20	9
2	18	1	83	79	0	18	2	27	31	1	18	2	87	80	2	18	2	51	51	1	18	3	214	218	2	18	3	17	22	0	18	4	116	111
1	18	4	43	41	1	19	0	127	134	0	19	1	104	109	1	19	1	75	72	1	19	2	320	322	0	19	3	293	291					