

AM-87-345

High-pressure crystal chemistry of monticellite, Ca MgSiO<sub>4</sub>

Sharp, et al.

American Mineralogist, 72, 7-8, 748-755

---

Table 4a--Monticellite at 1 bar in cell

FACTOR = 12.00

h	OBS		CALC		h	OBS		CALC		h	OBS		CALC		h	OBS		CALC				
	k	l	k	l		k	l	k	l		k	l	k	l		k	l	k	l			
1	50	69	2	371	391	1	530	622	3	578	623	3	427	447	1	164	177	9	279	255		
2	254	347	2	212	212	3	183	134	4	134	151	4	175	166	2	192	180					
3	217	204	3	774	387	4	55	54	5	134	91	5	158	172	4	227	329	1	k	7		
4	246	228	4	111	114	5	421	408	6	187	169	6	103	113	5	207	209					
5	230	221	5	181	157	7	206	312	8	109	138	7	226	313	2	95	70	1	175	164		
7	602	599	6	74	68	8	277	253				8	91	71	3	119	123	2	112	121		
																		3	338	330		
			2	k	1		2	k	2				2	k	4		3	k	5			
2	186	198	2	186	172	3	137	123	1	140	149								2	k	2	
3	186	193	4	465	438	4	227	244	2	138	140	1	208	227	4	145	111					
4	241	209	5	291	297	5	252	257	3	90	108	2	117	136	6	240	229	4	133	138		
5	142	129	6	163	175	6	265	269	4	242	240	3	139	137	8	154	128	5	137	142		
6	130	123	6	281	276	7	169	138	5	251	253	4	476	470	10	203	170	6	190	171		
8	298	304	9	108	94	9	212	204	6	291	282	5	117	141				8	254	236		
9	89	140	10	275	266	9	212	204	7	123	125	6	96	16		0	k	6				
10	415	448	10	275	266	10	197	141	8	358	378	7	118	103					3	k	7	
11	107	91	11	217	189	11	94	40	9	137	63	8	248	254	0	472	463					
												10	225	222	10	240	242	6	115	54		
												11	199	191								
			2	k	1		3	k	2										0	k	8	
			4	265	266	4	261	242				3	k	3								
4	447	467	5	217	213	5	491	471				4	283	284	1	375	386	0	470	484		
5	357	354	6	277	262	6	132	137	4	353	373	6	193	210	5	239	206	2	163	87		
7	486	492	7	124	106	8	176	179	5	249	261	7	337	347	7	208	190	4	251	244		
8	412	415	8	128	145	9	356	358	6	148	115	8	253	268	6	124	76					
9	507	495	10	159	163	12	222	204	7	117	108	10	110	96					1	k	9	
10	143	137	12	265	255	13	242	232	12	234	242	11	266	271					2	k	6	
11	318	312							13	119	77								3	198	189	
12	116	53										4	k	4		1	197	157				
												4	k	3		2	440	430		2	k	8
			8	212	232	8	143	168				8	114	133	3	132	99					
			9	121	128	9	130	88	7	128	27	9	98	128	5	132	114	4	146	158		
7	140	143	10	147	133	10	118	110	8	137	145				6	248	260					
8	184	197	11	155	197	12	282	234	10	179	135											
9	236	194																				
10	133	25																				
12	105	32																				
			0	689	644	0	161	159	0	1189	1216	0	268	279								
			4	136	135	1	354	351	2	207	207	4	175	176	4	165	192					
						2	270	259	4	328	336	5	94	106	5	291	288					

Table 4b--Monticellite at 11.1 kbar

h	OBS		k	CALC		h	OBS		k	CALC		h	OBS		k	CALC		h	OBS		k	CALC	
	1	2		1	2		1	2		1	2		1	2		1	2		1	2		1	2
1	65	64	4	117	123	3	179	175	5	196	140	6	83	95	1	173	166	4	172	164			
2	248	242	5	174	172	4	81	81	6	572	612	7	164	172	2	293	277	5	293	277			
3	701	679	6	408	404	5	408	404	7	257	203	8	313	330	3	131	122	6	131	122			
4	215	227	7	257	203	6	257	203	9	155	163	10	192	209	4	209	194	7	255	251			
5	311	293	8	251	234	7	155	163	10	140	126	11	100	99	5	154	144	8	154	144			
6	744	753	9	154	163	8	140	126	11	226	237	12	134	141	6	142	101	9	142	101			
7	68	54	10	446	434	9	134	124	12	140	126	13	140	126	10	216	217	11	216	217			
8			11	306	293	10	216	207	13	140	126	14	468	474	11	183	163	12	183	163			
9			12	172	154	11	132	115	14	236	257	15	153	157	13	136	130	13	136	130			
10			13	82	87	12	216	207	15	157	135	16	88	101	14	316	295	14	316	295			
11	176	187	14	255	242	13	274	275	16	157	135	17	268	263	15	156	108	15	156	108			
12	168	167	15	96	124	14	267	264	17	342	366	18	268	263	16	219	212	16	219	212			
13	857	836	16	267	275	15	139	137	18	258	234	19	146	130	17	146	130	17	146	130			
14	157	150	17	177	160	16	205	202	19	201	186	20	264	262	18	141	132	18	141	132			
15	117	120	18	174	164	17	174	164	20	190	169	21	190	169	19	94	92	19	94	92			
16	320	316	19			18			21			20			20	139	144	20	139	144			
17	113	108	20			19			22			21			21	144	156	21	144	156			
18	418	424	21	258	264	20	274	271	22	311	284	22	267	230	22	267	230	22	267	230			
19			22	181	201	21	250	242	23	193	226	23	210	215	23	210	215	23	210	215			
20			23	250	239	22	437	456	24	184	92	24	341	326	24	341	326	24	341	326			
21			24	106	115	23	145	155	25	106	69	25	278	269	25	278	269	25	278	269			
22	450	469	25	169	154	24	140	160	26	232	231	26	231	262	26	126	153	26	126	153			
23	374	370	26	176	169	25	256	251	27	463	484	27	463	484	27	463	484	27	463	484			
24	471	481	27	237	241	26	102	104	28	233	239	28	233	239	28	112	98	28	112	98			
25	469	420	28	228	238	27	228	238	29	93	86	29	93	86	29	93	86	29	93	86			
26	134	137	29			28	116	115	30	116	115	30	116	115	30	116	115	30	116	115			
27	317	303	30			29	142	156	31	142	156	31	136	141	31	456	479	31	456	479			
28	137	84	31	82	81	30	101	109	32	159	146	32	159	146	32	256	251	32	256	251			
29			32	208	222	31	89	94	33	263	263	33	263	263	33	263	263	33	263	263			
30			33	142	139	32	163	157	34	214	190	34	176	184	34	211	181	34	211	181			
31	174	136	34	119	107	33	146	141	35	122	90	35	122	90	35	122	90	35	122	90			
32	231	206	35			34	154	179	36	474	475	36	474	475	36	474	475	36	474	475			
33	154	179	36			35	154	161	37	180	181	37	180	181	37	180	181	37	180	181			
34	106	81	37			36	154	161	38	110	108	38	430	428	38	104	109	38	104	109			
35			38	673	655	37	282	272	39	99	63	39	179	95	39	179	95	39	179	95			
36			39	138	132	38	595	620	40	66	42	40	142	125	40	142	125	40	142	125			
37	371	407	40			39	144	143	41	423	432	41	262	260	41	262	260	41	262	260			
38	223	224	41			40	117	98	42	156	163	42	118	77	42	118	77	42	118	77			
39	776	776	42			41	156	161	43	156	172	43	156	172	43	156	172	43	156	172			

Table 4c--Monticellite at 11.1 kbar

FACTOR = 10 00  
Aperture closed to 4 mm.

H	OBS		CALC		K	OBS		CALC		K	OBS		CALC		K	OBS		CALC		K	OBS		CALC	
	1	2	1	2		1	2	1	2		1	2	1	2		1	2	1	2		1	2		
1	18	0	0	265	213	3	450	481	0	121	96	6	40	98	4	301	309	6	128	129	6	128	129	
				761	735	3	164	131	5	178	169	7	378	376	5	177	189	8	171	166	8	171	166	
	1	0	0	111	113	4	58	55	7	17	34	9	127	101	9	225	216	9	225	216				
				176	173	5	401	394	3	146	140	8	4	4	10	205	195							
				51	52	4	61	56										1	1					
	30	62	0	81	81	7	300	296	2	1	3	1	202	214	5	1	3							
	340	333				8	265	270				2	122	121				1	151	149				
	289	266										3	149	133	4	103	94	2	102	111				
	216	218		2	1				2	123	141				5	97	94	3	287	296				
	304	296				2	111	126	3	238	231	4	496	465	6	231	203	6	93	92				
	452	465		3	148	160			4	242	245	5	107	109	6	231	203	7	91	88				
	71	55		4	61	52	3	111	126	5	242	245	7	102	95	7	91	88						
				5	435	428	4	311	205	6	237	239	8	223	228	8	120	120	2	1	1			
				6	291	292	5	251	253	7	122	120	9	134	123	10	152	146						
				7	167	160	6	258	258	8	338	344	10	237	238				1	72	66			
				8	90	95	7	129	132	9	80	75	11	84	82			4	127	121				
				9	243	238	8	189	191	10	220	216						5	127	127				
				10	93	105	10	145	140	11	155	165	3	1	4	9	202	195	6	165	148			
				11	249	258							4	271	268	9	104	70	7	105	66			
				12	71	71		3	1	3	1	4	271	268				8	212	201				
				13	108	119						5	193	197		0	1							
				14	284	287	3	1	1	4	228	230	7	303	317				3	1	1			
				15	143	138	4	427	426	5	232	227	8	260	247	0	437	446						
				16	398	396	5	145	136	6	89	78	10	118	90	2	236	229	5	111	129			
				17	95	76	6	192	187	8	161	162	7	123	106	4	76	72						
							7	250	240	9	315	326	12	239	262				0	1	1			
				8	114	107	10	89	97				4	1	4	1	1	6						
				9	138	142	12	206	192				4	1	3				0	408	423			
				10	164	142	13	237	208				5	128	124	1	358	255	2	108	71			
				11	226	214						8	116	109	5	172	185	4	210	211				
				12	107	78	4	1	2	4	1	9	132	124	3	181	174							
												10	105	110										
				13	120	131	7	118	81	11	127	127				2	1	6						
				14	269	269	8	120	140				0	259	266				3	167	159			
				15	61	6	9	69	68				0	202	186	1	123	145	5	109	46			
							10	99	97				2	76	77	2	391	387						
				16	122	116	12	205	138	0	1139	1199	3	457	445	3	107	91	2	1	2			
				17	163	175				2	193	193	4	159	168	6	221	233						
				18	121	112	1	1	3	4	320	318	5	83	102	8	94	32	2	114	95			
												6	73	23	9	95	94	4	157	137				
				19	138	138	0	1	2			1	1	4				5	108	88				
				20	80	9	1	354	348				2	1	5			3	1	1				
							2	289	284	3	411	418												
				21	134	134	3	365	602	4	152	157	1	199	178	4	183	170						
							4	148	142	5	151	159	2	182	165	5	236	244						



Table 4e--Monticellite at 29.1 kbar

FACTOR = 10.00

h	OBS		k	CALC		l	OBS		CALC		m	OBS		CALC		n	OBS		CALC			
	1	2		1	2		1	2	1	2		1	2	1	2		1	2	1	2		
1	64	64	0	192	172	0	408	393	1	101	138	1	218	218	4	304	218	4	195	185		
2	349	341	0	93	92	0	48	48	2	119	149	2	76	114	5	202	186	3	269	252		
3	99	855					312	283	3	104	111	3	93	123	6	107	124	5	110	141		
4	177	213	2	k	1	0	276	257	4	178	239	4	457	469	10	213	219	6	162	164		
5	209	312							5	253	256	5	154	182				9	304	235		
6	182	274	3			2	k	2	6	241	247	7	125	112	3	k	5					
7			4			5			7	114	108	6	255	249				1	k	0		
8	2	2	0	5	285	272	3	131	134	8	341	370	9	117	138	3	191	125				
9			6	144	157	4	215	214	10	248	248	10	249	234	4	148	119	1	135	146		
10	263	158	7	109	89	5	249	236	11	230	191	11	111	84	6	224	206	2	139	117		
11	181	182	8	267	264	6	272	260							7	112	74	3	304	305		
12	337	796	9	110	103	7	155	149	3	k	3		3	k	4	8	128	121				
13	124	142	10	281	284	8	175	148							10	184	164		2	k	7	
14	152	191	11	194	199	10	111	147	8	348	344	3	290	273								
15	284	305							9	238	247	4	263	276		4	k	5	3	99	69	
16	154	150	3	k	1		3	k	2	7	105	126	6	212	229			4	140	133		
17	408	413							12	231	250	7	337	321	6	232	196	5	144	131		
18			4	239	263	4	243	237				8	264	268	6	159	141					
19			5	210	198	5	443	430		4	k	3	10	130	108	0	k	6	8	226	227	
20			6	248	240	6	154	141				11	252	260								
21	436	245	7	92	117	6	191	192	9	115	126				0	458	468		3	k	7	
22	362	354	10	166	158	7	334	326	9	170	175		4	k	4	2	207	222				
23	464	472	13	242	235	10	105	98	10	120	104				5	319	307	4	168	192		
24	413	418				12	226	242	11	159	152	7	96	91				5	141	132		
25	103	92	4	k	1	13	213	244				8	128	137		1	k	8				
26	159	137								6	k	4	9	119	110			0	k	8		
27	304	305	8	224	225		4	k	2						1	377	371					
28			9	140	150				0	1182	1188		1	k	9	3	191	200	0	474	475	
29			11	214	203	9	165	157	2	217	220				7	173	177	4	256	232		
30			12	166	132				4	323	325	0	257	254								
31	138	136				1	k	3				1	204	180		2	k	6		1	k	6
32	283	290		0	k	2				1	k	4	2	113	91							
33	204	176				0	143	143				3	465	461	0	85	23	3	171	168		
34	94	95	0	680	635	1	336	341	2	332	416	4	157	168	1	153	162	5	104	53		
35			4	159	150	2	279	266	4	165	180	5	102	108	2	409	409					
36						3	377	317	5	159	164	6	122	70					2	k	8	
37			1	k	2	4	134	130	7	338	397				6	266	238					
38	258	283				5	119	88				2	k	5	7	110	73	1	106	-80		
39	215	219	1	621	674	6	204	169										4	182	159		
40	299	263	2	470	422	7	93	42				1	162	166								
41	123	129	3	160	155	8	126	132				2	179	147								









K	OBS		K	OBS		K	OBS		K	OBS		K	OBS		K	OBS		K	OBS	
	1	0		1	1		1	2		2	3		3	4		4	5		5	6
1	39	56	3	810	760	5	392	401	1	160	173	1	247	247	5	105	99	0	80	49
2	263	341	4	130	136	7	259	261	2	156	166	2	103	112	5	126	104	1	196	164
3	723	676	5	187	178	8	270	255	3	141	121	3	125	132	10	235	232	5	116	126
4	130	234							4	247	241	4	485	487				3	337	306
5	295	293		2 K 1		5	264	265	5	264	265	5	176	164		3 K 5		6	118	107
6	164	287							6	268	268	7	107	106						
7			3	151	142	3	102	112	7	154	132	6	274	261	3	165	165		2 K 7	
8			4	441	434	4	223	217	8	337	343	9	140	134	4	102	114			
9			5	315	312	5	265	262	9	105	96	10	257	265	5	141	101	5	168	152
10	163	176	6	179	165	6	289	287	10	268	249				6	191	211	6	184	167
11	174	167	7	105	92	7	134	144				3 K 4			5	134	146	8	243	219
12	279	333	8	236	242	9	203	204		3 K 3				10	188	161				
13	176	165	9	149	125	10	181	172				3	300	293					3 K 7	
14	95	130	10	281	291				3	245	254	4	294	283		4 K 5				
15	311	318				3 K 2			4	362	372	6	216	229				4	227	219
16	118	145		3 K 1					5	230	237	7	361	353	6	210	219	5	123	148
17	421	421				3	72	36	7	117	114	8	290	288						
18			4	273	269	4	247	235	10	225	226	9	104	65		0 K 6			0 K 8	
19			5	188	191	5	452	439				10	148	98						
20			6	248	233	6	162	155		4 K 3		11	280	261	0	446	469	0	495	496
21	438	465	7	97	114	8	195	182							2	287	247	3	105	9
22	374	373	8	162	168	9	355	354	6	151	151		4 K 4				4	238	249	
23	472	494	10	130	147	10	101	103	9	113	121					1 K 5				
24	435	433	12	253	237	12	244	241	9	158	160	7	124	111					1 K 8	
25	136	139							11	177	164	8	153	152	1	385	392			
26	318	300		4 K 1		4 K 2								5	197	204	1	127	16	
27	103	92								0 K 4			1 K 5	7	207	188	3	210	188	
28			6	210	246	6	336	328												
29			7	81	26	7	134	110	0	1225	1270	0	283	271		2 K 6			2 K 8	
30			8	219	223	8	172	159	2	217	204	1	203	193						
31	160	179	9	137	146	10	120	117	4	341	341	2	81	68	1	165	170	1	130	105
32	77	144	11	317	314	11	131	78	5	67	0	3	474	482	2	411	424	2	129	95
33	177	214	12	113	137							4	199	188	5	138	135	3	146	55
34	171	173				1 K 3				1 K 4		5	124	109	5	265	275	4	187	176
35				0 K 2								6	87	55	7	119	68			
36			0	684	691	0	152	153	2	78	72									
37			1	251	353	1	251	353	3	420	435		2 K 5			3 K 6				
38	151	136	4	156	141	2	267	264	4	163	165									
39						3	601	625	5	180	181	1	204	190	4	174	165			
40						4	140	122	7	630	620	2	177	160	5	258	271			
41						5	113	100				4	339	330	6	170	156			
42	376	411	1	648	694	6	167	175				5	210	214	8	194	203			
43	218	220	3	185	177	8	152	152				6	97	64						