

AM-89-352

HIGH PRESSURE CRYSTAL CHEMISTRY OF ANDRADITE AND PYRØPE:
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.

H OBS	CALC	H OBS	CALC	H OBS	CALC	H OBS	CALC	H OBS	CALC	H OBS	CALC	H OBS	CALC
4 4598	4630	11 161	163	10 696	705	9 160	145	10 2143	2162	9 541	530	10 2143	2162
8 4868	4851	13 44	117	12 1652	1658	11 263	277	12 50	20	11 255	239	12 50	20
12 1837	1868	15 383	359	14 252	229	13 421	401	H 5 5		13 135	196	H 5 5	
16 2662	2642	H 3 1		H 9 2		H 9 3				H 10 8			
H 2 0		4 1248	1176	9 364	371	10 89	33	6 403	413	H 10 8		6 403	413
2 1487	1566	6 91	66	11 191	173	12 108	125	10 42	73	12 2049	2034	10 42	73
4 3294	3354	8 143	131	13 49	90	14 121	16	14 49	66	H 11 5		14 49	66
6 2122	2113	10 189	173	H 10 2		H 10 3		H 6 5		H 11 5		H 6 5	
8 278	259	12 254	244	4 3305	3327	8 1294	1341	7 531	525	11 305	261	7 531	525
10 218	250	14 366	368	8 1294	1341	12 1889	1865	9 206	176	H 7 7		9 206	176
12 1974	2002	16 127	160	12 3118	3141	H 11 2		11 223	222	H 7 7		11 223	222
14 536	528	16 204	169	16 204	169	H 11 3		13 334	370	10 105	47	13 334	370
16 228	239	H 4 1		H 3 2		H 11 3		15 51	29	H 8 7		15 51	29
H 4 0		3 1204	1157	11 248	214	12 123	99	H 7 5		H 8 7		H 7 5	
4 441	511	5 1282	1264	H 3 3		H 4 4		8 335	341	9 123	62	8 335	341
6 3240	3244	7 102	89	6 608	586	7 542	647	10 175	66	11 137	120	10 175	66
8 3499	3489	9 418	422	10 336	312	9 236	218	12 109	80	13 223	187	12 109	80
10 2304	2299	11 153	183	14 128	105	4 2543	2480	14 51	49	H 9 7		4 2543	2480
12 900	910	13 263	254	H 4 3		8 1174	1150	H 8 5		H 9 7		8 1174	1150
14 1514	1545	15 462	506	5 354	363	12 893	904	10 49	36	H 8 8		10 49	36
16 1678	1649	H 4 2		7 274	289	H 5 4		12 103	9	8 3925	3851	12 103	9
H 6 0		6 4137	4127	9 470	498	7 542	647	H 10 5		12 1897	1887	9 470	498
6 749	739	8 2456	2449	10 3158	3077	9 236	218	11 49	37	H 9 8		11 49	37
8 38	62	12 72	3	11 41	43	11 41	43	H 6 6		H 9 8		11 41	43
10 233	216	14 2371	2391	13 113	71	13 232	231	10 49	36	8 3925	3851	13 232	231
12 1598	1614	16 1536	1498	15 317	275	15 272	259	12 103	9	12 1897	1887	15 317	275
14 215	194	H 5 2		H 5 3		H 6 4		H 10 5		H 9 8		H 6 4	
H 8 0		5 516	534	6 521	520	6 3183	3162	11 49	37	11 30	34	6 3183	3162
8 4880	4792	7 324	301	8 841	860	8 2117	2082	8 682	679	H 10 8		8 2117	2082
10 150	44	9 39	60	10 215	238	10 2294	2316	12 2155	2145	10 86	80	10 2294	2316
12 2134	2180	11 291	209	12 308	298	12 115	65	H 7 5		H 9 9		12 115	65
14 134	164	13 393	395	14 273	295	14 1746	1743	H 6 6		10 358	326	14 1746	1743
H 10 0		15 81	59	H 5 3		H 7 4		7 243	183	10 358	326	15 81	59
10 1735	1755	8 97	89	H 6 3		9 387	382	9 624	644	H 9 9		9 387	382
12 1410	1433	10 425	413	7 167	161	11 503	538	11 135	177	10 86	80	11 503	538
H 1 1		12 44	51	11 622	628	13 117	3	13 152	52	H 9 9		13 117	3
2 129	19	14 423	439	13 113	64	H 8 4		7 243	183	10 358	326	13 113	64
6 1825	1785	H 8 1		15 90	93	8 2452	2447	9 624	644	H 10 8		15 90	93
10 322	322	9 324	347	H 7 3		10 1873	1912	11 135	177	10 358	326	10 1873	1912
14 116	212	11 278	267	8 480	485	12 314	177	13 152	52	H 9 9		12 314	177
H 2 1		13 103	198	10 229	207	14 1433	1442	H 8 5		10 713	718	14 1433	1442
3 191	99	H 9 1		12 378	365	H 9 4		10 713	718	12 1610	1609	12 378	365
5 1344	1205	10 217	159	14 194	158	11 47	90	12 1610	1609	11 47	90	14 194	158
7 160	165	12 48	72	15 51	63	12 95	31	11 47	90	12 95	31	15 51	63

ANDRADITE AT 2 GPA.

H OBS		CALC		H OBS		CALC		H OBS		CALC		H OBS		CALC		H OBS		CALC		H OBS		CALC	
H 0 0		H 3 1		H 4 2		H 5 3		H 6 4		H 7 5		H 8 6		H 9 7		H 10 8		H 11 9		H 12 10		H 13 11	
4	5195	4826	4	1242	1175	6	4491	4219	14	565	295	10	2581	2325	8	612	672	10	416	35	10	416	35
8	5509	4960	6	453	59	8	2727	2453	10	3313	3094	10	3313	3094	12	1398	2152	12	1398	2152	12	1398	2152
12	2069	1904	10	3313	3094	14	2580	2371	14	565	295	10	2581	2325	12	1398	2152	12	1398	2152	12	1398	2152
H 2 0		H 4 1		H 5 2		H 6 3		H 7 4		H 8 5		H 9 6		H 10 7		H 11 8		H 12 9		H 13 10		H 14 11	
7	756	684	7	756	684	11	763	623	11	763	623	9	507	381	9	437	542	9	437	542	9	437	542
9	951	870	5	478	522	5	478	522	5	478	522	9	507	381	9	437	542	9	437	542	9	437	542
11	491	547	8	453	453	8	453	453	8	453	453	8	2788	2462	8	2788	2462	8	2788	2462	8	2788	2462
10	418	235	12	1491	1855	12	1491	1855	12	1491	1855	10	1304	1921	10	1304	1921	10	1304	1921	10	1304	1921
12	2238	2007	6	674	0	6	674	0	6	674	0	8	2788	2462	8	2788	2462	8	2788	2462	8	2788	2462
14	734	529	8	720	643	8	720	643	8	720	643	13	385	405	13	385	405	13	385	405	13	385	405
H 4 0		H 6 1		H 7 2		H 8 3		H 9 4		H 10 5		H 11 6		H 12 7		H 13 8		H 14 9		H 15 10		H 16 11	
7	433	571	7	433	571	11	753	536	11	753	536	12	755	911	12	755	911	12	755	911	12	755	911
4	495	521	7	433	571	7	433	571	7	433	571	11	753	536	11	753	536	11	753	536	11	753	536
6	3226	3326	10	379	420	10	379	420	10	379	420	11	445	337	11	445	337	11	445	337	11	445	337
8	3381	3516	10	379	420	10	379	420	10	379	420	11	445	337	11	445	337	11	445	337	11	445	337
10	2220	2307	10	379	420	10	379	420	10	379	420	11	445	337	11	445	337	11	445	337	11	445	337
14	1406	1523	10	379	420	10	379	420	10	379	420	11	445	337	11	445	337	11	445	337	11	445	337
H 6 0		H 2 2		H 3 3		H 4 3		H 5 4		H 6 5		H 7 6		H 8 7		H 9 8		H 10 9		H 11 10		H 12 11	
12	1428	1582	4	3260	3416	4	3260	3416	4	3260	3416	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470
8	3381	3516	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150
10	2220	2307	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913
14	1406	1523	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913
H 1 1		H 3 2		H 4 3		H 5 4		H 6 5		H 7 6		H 8 7		H 9 8		H 10 9		H 11 10		H 12 11		H 13 12	
6	2118	1794	4	3260	3416	4	3260	3416	4	3260	3416	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470
8	3381	3516	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150
10	2220	2307	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913
14	1406	1523	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913
H 2 1		H 3 2		H 4 3		H 5 4		H 6 5		H 7 6		H 8 7		H 9 8		H 10 9		H 11 10		H 12 11		H 13 12	
3	1314	1210	4	3260	3416	4	3260	3416	4	3260	3416	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470	4	2206	2470
15	789	350	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1265	1337	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150	8	1049	1150
3	1314	1210	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913
15	789	350	12	3539	3156	12	3539	3156	12	3539	3156	12	846	913	12	846	913	12	846	913	12	846	913

FACTOR = 10.00

ANDRADITE AT 3 GPA.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC
2	K 0		4	K 1		7	K 2		10	K 3		12	K 6	
2	1430	1473	3	1177	1149	7	531	508	3	360	341	10	1905	1840
4	K 0		5	K 1		16	K 2		14	K 4		8	K 8	
0	3917	3936	2	1116	1179	4	1403	1395	8	1329	1334	12	1730	1708
2	2984	2994	7	K 1		5	K 3		6	K 5		0	K 10	
4	464	506	4	678	670	4	368	333	5	427	437	10	1593	1642
6	K 0		10	K 1		6	K 3		7	K 5				
6	708	677	1	391	348	3	585	562	6	535	518			
8	K 0		7	408	401	5	495	510	8	K 6				
0	4307	4240	3	K 2		8	K 3		6	659	627			
2	305	301	3	1218	1173	7	432	433	9	K 6				
14	K 0		5	K 2		9	K 3		9	532	531			
2	530	485	5	493	505	4	519	519						
						6	356	329						

ANDRADITE AT 5 GPA.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC
2	K 0		5	K 1		7	K 2		10	K 3		9	K 6	
2	1495	1523	2	1199	1203	7	542	510	3	447	387	9	555	499
4	K 0		7	K 1		16	K 2		3	K 4		12	K 6	
0	4812	4874	4	670	677	4	1479	1495	5	384	318	10	1933	2006
2	3513	3432	10	K 1		6	K 3		14	K 4		8	K 8	
4	506	549	1	243	338	3	628	610	8	1379	1439	12	1807	1851
6	K 0		7	565	434	5	501	511	6	K 5		0	K 10	
6	697	678	11	K 1		8	K 3		5	472	472	10	1654	1703
8	K 0		4	571	555	7	529	420	7	K 5				
0	4953	4906	3	K 2		9	K 3		6	541	529			
2	318	302	3	1245	1210	4	538	544	8	K 6				
4	K 1		5	K 2		6	487	332	6	651	675			
3	1206	1173	5	490	477									

ANDRADITE AT 12.5 GPA IN GAS CELL.

						FACTOR =			10.00						
K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	
	0	K 0		0	K 2		1	K 3		2	K 4		3	K 6	
4	4956	4997	2	1573	1569	4	1166	1177	6	4339	4327	12	2004	1891	
8	5143	5071	4	3564	3499				8	2477	2492				
12	1999	1965	6	2091	2082	2	K 3		10	3119	3158	4	K 6		
	4	K 0		1	K 2	3	1302	1197		4	K 4	6	3072	3195	
8	3558	3599	5	1309	1256	5	1291	1303	4	2441	2455	8	2109	2101	
	6	K 0		2	K 2	3	K 3	12	1058	1047	10	2275	2369		
8	920	626		4	3525	3539	10	649	491		8	K 4			
12	1570	1609	8	1256	1341	0	K 4	8	2479	2479		10	2032	2017	
	8	K 0	12	3248	3196	6	3413	3442		2	K 5				
8	5062	5049		8	K 2	10	2293	2351		5	554	532			
	1	K 1	10	723	693	12	993	893		3	K 5				
6	1791	1833				1	K 4		8	856	821				
						9	1028	866							

ANDRADITE AT 190 KBAR.

						FACTOR =			10.00							
K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC		
	0	K 0		1	K 2		1	K 4		1	K 5		0	K 6		
4	5308	5278	5	1108	1168	7	769	739	6	264	244	12	1282	1541		
8	5118	5099		2	K 2	9	1120	808	8	738	640					
12	2013	1929		4	3348	3425	2	K 4		2	K 5		9	K 6		
	6	K 0	12	3290	3180	6	4157	4253	7	271	197		12	2031	1816	
6	746	823		8	K 2	8	2396	2431		3	K 5		4	K 6		
	8	K 0	10	580	704	10	3161	3002		6	481	542	5	3164	3198	
8	5119	4863		1	K 3	3	K 4	6	826	868	8	826	868	8	1727	2000
	1	K 1	4	1053	1139	7	265	246		4	K 5		10	2451	2266	
6	1504	1698		2	K 3	4	K 4		7	677	658		2	K 7		
	8	K 1	3	1241	1147	4	2300	2521		7	K 5		4	K 7		
9	306	330	5	1233	1203	8	1334	1063		8	284	271	9	298	349	
	0	K 2		0	K 4	12	725	847		8	K 5		11	533	496	
2	1488	1503		4	568	547		8	K 4		8	K 5				
4	3475	3482	4	568	547	8	2429	2499		9	313	215				
6	1996	2203	6	3302	3354	10	2020	1858								
12	2051	1912	8	3505	3380											
			10	2397	2305											
			12	1003	878											

KAKAMUI PYROPE IN AIR -- FULL DATA SET.

FACTOR = 10.00

K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC		
2	99	46	4	1127	1118	7	571	588	10	1804	1801	5	246	245	7	605	623	7	396	393		
4	K 0	1	K 1	1	K 1	9	150	157	14	1448	1421	7	297	313	9	122	110	13	221	194		
0	2633	2732	2	93	103	13	177	156	5	K 2	5	131	155	13	179	132	6	K 4	8	179	187	
2	2475	2457	6	1463	1445	7	K 1	7	552	564	5	K 3	5	K 3	6	1907	1902	6	1907	1902		
4	985	962	10	448	431	8	121	148	7	358	367	5	491	503	8	1610	1510	8	218	216		
6	K 0	2	K 1	2	K 1	10	287	284	11	195	204	8	208	823	10	1296	1320	11	327	331		
2	833	808	3	148	119	8	K 1	8	6	K 2	6	303	280	10	215	194	7	K 4	9	K 5		
4	2730	2670	5	1024	979	9	367	365	8	334	335	5	K 3	5	K 3	9	212	194	10	156	134	
6	176	165	13	262	249	11	254	243	10	315	299	9	164	148	11	467	455	10	156	134		
8	K 0	3	K 1	3	K 1	9	K 1	9	7	K 2	7	K 2	7	K 2	13	223	174	8	K 4	6	K 6	
0	3203	3261	4	1101	1039	12	179	140	8	334	335	7	K 3	7	K 3	7	K 3	8	1399	1435		
2	419	432	6	198	209	12	179	140	10	315	299	10	511	517	11	467	455	8	192	174		
4	2083	2087	8	119	104	2	K 2	2	12	1032	1027	13	223	174	13	223	174	12	1130	1121		
8	3050	2973	12	320	314	4	1464	1493	7	295	292	7	K 3	7	K 3	7	K 3	10	1501	1508		
10	K 0	14	238	249	249	8	234	242	11	121	150	8	338	352	12	281	243	12	281	243		
2	952	966	4	K 1	4	K 1	12	1872	1911	13	151	150	12	347	343	9	K 4	7	406	393		
4	1912	1898	5	174	159	3	K 2	3	8	K 2	8	K 2	8	K 2	8	K 2	8	K 2	9	409	408	
6	462	484	7	585	596	3	1337	1254	12	1256	1228	9	203	179	11	176	166	11	176	166		
10	834	843	9	735	745	3	920	902	9	K 2	9	K 2	11	194	201	10	K 4	9	K 6	9	593	580
12	K 0	11	356	372	372	5	920	902	12	1256	1228	9	K 3	9	K 3	9	K 3	10	1283	1282		
0	857	861	5	K 1	5	K 1	7	361	370	8	K 2	8	K 2	8	K 2	9	K 3	10	1283	1282		
2	1479	1511	8	203	199	9	247	235	9	254	251	9	254	251	10	135	112	5	K 5	8	K 8	
4	175	163	8	578	600	11	123	60	10	135	112	10	135	112	10	135	112	5	K 5	8	K 8	
6	1191	1203	10	211	208	13	173	118	6	262	242	6	262	242	4	K 4	4	K 4	6	271	282	
8	1150	1141	14	264	253	4	K 2	4	10	174	182	10	174	182	4	K 4	4	K 4	6	271	282	
						6	2461	2475	4	2318	2313	4	2318	2313	4	2318	2313	4	2318	2313		
						8	1922	1920	8	282	280	8	282	280	8	282	280	8	282	280		
						8	1922	1920	12	1087	1090	12	1087	1090	12	1087	1090	12	1087	1090		