

AM-90-436

Single-crystal X-ray structure refinements of two biogenic magnesian calcite
crystals

Jeanne Paquette, Richard J. Reeder

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 75, 9-10, 1151-1158.

Structure factors* for magnesian calcite LB, 12.9 mol% MgCO₃

0 49 62 10	-5,-5,1	13 135 135 3	0,4,1	2,3,1
3 -26 23 31	-2,-4,1	16 272 281 4	2 31 5 5	2 327 330 4
6 80 70 7	0 241 239 3	19 68 62 3	8 574 589 7	5 144 155 3
	5 -25 28 6	22 167 160 3	14 59 56 4	8 277 276 4
	11 -24 22 7	-1,-1,1	20 258 257 5	11 101 103 3
	14 149 150 3	0 602 626 6	0,5,1	14 210 211 3
2 72 72 9	17 -26 14 10	3 616 585 6	4 314 324 5	17 66 57 4
5 -24 11 30	20 126 131 4	6 753 747 7	10 155 156 4	20 151 153 4
	23 -18 7 9	9 333 337 4	16 198 208 5	23 -32 27 12
	-2,-3,1	12 392 391 4	22 79 76 5	
	1 174 178 3	13 146 152 3	0,6,1	2,4,1
4 116 109 7	7 321 313 5	18 260 265 3	6 181 188 4	1 26 29 6
7 -26 15 32	10 249 248 3	21 69 66 4	7 -26 23 7	4 231 230 3
10 57 71 9	13 103 99 3	24 174 174 4	10 196 202 3	7 -26 23 7
13 -36 10 11	16 204 208 3	0,-8,1	12 148 151 5	10 196 202 3
16 85 72 8	19 61 55 4	2 -26 23 18	18 96 96 5	13 -26 15 7
	22 110 109 4	8 152 141 5	24 82 78 6	16 148 150 4
	-2,-2,1	14 -26 19 23	0,7,1	19 -26 8 13
0 247 246 4	0 454 453 5	0,7,1	2 65 66 6	22 92 95 4
3 -21 12 7	3 50 54 3	0,-7,1	8 190 179 5	2,5,1
6 35 32 6	6 373 373 4	4 204 197 5	16 54 52 6	3 78 72 4
9 -33 10 12	9 37 38 4	10 48 59 7	20 109 94 5	6 141 135 3
12 177 182 4	12 318 319 4	16 129 124 5	0,8,1	9 49 54 5
15 -31 6 14	15 -16 21 12	0,-6,1	4 144 151 5	12 153 160 4
18 -29 30 15	18 182 182 3	0 185 173 4	10 -33 27 9	15 -31 33 11
21 -26 3 12	21 -21 10 17	6 202 203 4	1,2,1	18 82 81 5
	24 144 145 4	12 133 130 5	2,6,1	21 -28 17 13
	-1,-8,1	18 116 116 5	2 601 594 6	24 77 74 5
0 85 93 6	1 50 8 9	24 71 66 6	5 315 316 3	
3 -40 37 11	4 87 92 8	0,-5,1	8 456 452 5	2 85 88 4
6 93 89 8	7 -26 8 31	2 206 201 4	11 179 186 3	5 -28 21 7
9 55 51 8	-1,-7,1	8 290 283 5	14 293 296 4	8 167 162 5
12 86 72 8	0 180 172 3	14 134 144 4	17 92 93 3	11 60 15 6
15 -27 21 32	3 -33 26 11	20 163 148 5	20 222 224 4	14 65 65 5
	6 44 43 6	0,-4,1	23 49 42 5	17 39 9 9
	9 55 24 5	4 690 692 8	1,3,1	20 73 76 5
	12 136 134 4	10 44 37 5	3 34 33 4	
17 -22 1 17	15 -27 18 19	16 369 360 6	4 611 618 6	1 46 35 11
20 107 94 4	18 -55 30 11	22 61 53 6	7 -24 23 5	4 90 92 8
	-1,-6,1	0,-3,1	10 161 161 3	7 -22 28 17
	2 137 134 4	0 818 825 7	13 -21 7 11	10 75 62 8
	5 -36 40 9	0 818 825 7	16 321 322 4	13 -39 19 11
	8 163 162 4	0 818 825 7	19 -24 0 12	
	11 -34 30 10	0 818 825 7	22 95 94 4	2 82 89 4
	14 103 95 4	4 690 692 8	1,4,1	5 28 30 6
	17 -28 18 15	10 44 37 5	3 -19 13 14	8 265 267 4
	20 84 89 5	16 369 360 6	6 184 180 3	11 35 19 5
	23 32 9 8	22 61 53 6	9 -24 5 8	14 86 73 5
	-1,-5,1	0,-2,1	12 295 296 4	17 -28 10 15
	1 101 94 3	2 855 816 10	15 -19 1 14	20 129 126 4
	4 191 195 3	8 454 455 5	18 112 112 4	23 37 4 9
	7 77 81 4	14 376 378 5	21 -29 2 12	
	10 189 195 4	20 222 220 4	24 129 128 4	3,5,1
	13 53 57 5	0,-1,1	1 5,5,1	1 -26 14 14
	16 128 133 4	0,-1,1	2 234 237 4	4 193 199 4
	19 39 33 9	4 1369 1374 15	5 92 86 3	7 -27 15 14
	22 86 90 5	10 289 286 4	8 177 188 3	10 49 57 6
	-1,-4,1	16 473 466 6	11 66 63 4	13 -26 13 18
	0 617 617 3	22 140 138 4	14 147 152 4	16 120 124 4
	3 -23 20 8	0,0,1	17 45 38 6	19 -28 9 14
	6 172 173 3	6 438 395 7	20 105 113 4	3,6,1
	9 33 20 7	12 1042 1030 18	23 44 19 6	3 -34 37 14
	12 306 306 4	18 79 64 5	1,6,1	6 90 85 7
	15 -26 15 12	24 282 282 7	1 40 46 6	9 -24 30 28
	18 99 104 4	0,1,1	4 181 179 4	12 75 78 8
	21 -26 9 14	0,1,1	7 36 39 6	15 -28 20 34
	24 138 133 4	6 438 395 7	10 95 109 6	4,5,1
	-1,-3,1	12 1042 1030 18	13 -30 28 12	6 73 82 8
	2 185 175 3	14 224 224 4	16 120 119 4	5 -8 18 34
	5 49 51 3	20 331 331 5	19 -19 17 9	8 106 104 7
	8 523 535 5	0,2,1	22 47 54 6	11 -11 14 22
	11 34 41 4	4 554 572 6	1,7,1	14 55 55 9
	14 138 134 3	10 487 493 6	3 -27 22 15	4,6,1
	17 34 26 5	16 317 313 5	6 38 48 7	1 -29 12 14
	20 243 243 4	22 171 169 4	9 -32 15 7	4 54 61 10
	23 33 14 6	0,3,1	12 130 126 4	
	-1,-2,1	6 187 187 3	15 -22 8 8	
	1 378 364 4	12 503 500 7	18 40 36 6	
	4 505 513 5	18 122 123 4	1,8,1	
	7 262 259 3	24 195 192 5	2 -39 49 13	
	10 411 413 4		5 54 6 8	
			8 102 84 7	

* Structure factors for 332 combined symmetry-averaged reflections, including reflections with intensities less than 2σ .

Structure factors * for magnesian calcite IS , 6.4 mol% $MgCO_3$.

-5,-5,1	18 103 103 3	4 528 533 5	0,4,1	2,3,1
0 80 81 5	21 42 41 3	7 281 277 3		
3 38 31 6	24 110 109 3	10 467 458 5	2 16 3 6	2 363 364 4
6 97 94 5	-2,-4,1	13 152 152 2	8 643 654 8	5 160 170 2
-4,-6,1	2 268 270 3	16 314 315 3	14 64 61 2	8 306 302 3
2 100 96 5	5 26 28 3	19 77 76 2	20 326 325 5	11 112 117 2
5 27 12 6	8 261 259 3	22 204 206 3	0,5,1	14 252 255 3
-4,-5,1	11 20 23 4	-1,-1,1		17 67 69 2
1 8 20 17	0 634 656 6	0 634 656 6	4 362 372 5	20 178 186 3
4 152 143 5	3 620 595 6	3 620 595 6	10 175 171 3	23 39 36 3
7 28 16 6	6 794 778 7	6 794 778 7	16 250 262 4	
10 86 91 5	9 359 357 3	9 359 357 3	22 100 96 3	2,4,1
13 -18 10 9	12 429 424 4	12 429 424 4	0,6,1	
16 102 99 5	15 171 174 2	15 171 174 2	6 212 216 3	1 32 28 2
-4,-4,1	18 312 313 3	18 312 313 3	12 188 190 3	4 255 257 3
0 301 300 4	21 81 83 2	21 81 83 2	18 120 121 3	7 23 22 3
3 -14 11 10	24 220 217 3	24 220 217 3	24 113 114 3	10 240 243 3
6 29 35 4	0,-8,1	0,-8,1	0,7,1	13 -16 14 4
9 -15 9 8	2 26 26 5	2 26 26 5	2 78 82 3	16 178 178 3
12 236 235 3	8 199 188 4	8 199 188 4	6 228 222 4	19 -18 8 8
15 -19 6 7	14 23 21 5	14 23 21 5	14 60 66 4	22 137 134 3
18 36 36 3	0,-7,1	0,-7,1	20 143 133 4	
21 -17 3 10	4 237 238 4	4 237 238 4	4 200 197 4	2,5,1
-3,-7,1	10 72 75 3	10 72 75 3	10 -18 32 12	
1 -17 4 20	16 163 163 4	16 163 163 4	1,2,1	3 83 85 2
-3,-6,1	12 348 350 4	0,-6,1	2 632 630 6	6 172 169 3
0 120 118 3	0 201 201 2	0 201 201 2	5 340 339 3	9 64 64 2
3 53 49 5	6 242 242 4	6 242 242 4	8 486 480 5	12 189 188 3
6 119 115 5	12 150 151 3	12 150 151 3	11 207 211 2	15 42 41 3
9 50 42 5	18 161 158 3	18 161 158 3	14 336 337 4	18 113 115 3
12 98 93 5	24 90 86 3	24 90 86 3	17 113 115 2	21 29 22 4
15 -19 30 22	0,-5,1	0,-5,1	20 265 268 3	24 93 100 3
-3,-5,1	4 128 124 5	4 128 124 5	23 58 59 3	
2 79 80 3	7 -17 12 20	7 -17 12 20	1,3,1	2,7,1
5 -12 6 10	10 45 53 6	10 45 53 6	3 37 38 2	1 43 47 6
8 226 222 3	-1,-7,1	-1,-7,1	4 650 657 6	4 122 117 5
11 -15 0 8	0 216 212 2	0,-4,1	7 -15 14 4	7 40 38 6
14 63 67 3	3 -22 30 7	3 -22 30 7	10 185 184 2	10 80 85 5
17 -15 4 8	6 49 54 3	6 49 54 3	13 -14 3 5	13 37 26 6
20 138 130 3	9 30 31 4	9 30 31 4	16 374 374 4	
-3,-4,1	12 176 174 3	12 176 174 3	19 -14 8 5	3,4,1
1 41 37 2	15 -22 27 7	15 -22 27 7	22 120 122 2	2 106 106 2
4 321 324 4	18 44 39 3	18 44 39 3	1,4,1	5 31 28 3
7 35 39 3	-1,-6,1	-1,-6,1	3 37 38 2	8 290 290 4
10 82 90 2	2 165 165 3	2 165 165 3	6 202 199 3	11 25 16 3
13 30 32 3	5 50 52 3	5 50 52 3	9 -12 2 8	14 94 94 2
16 225 223 3	8 185 189 3	8 185 189 3	12 338 343 4	17 -15 6 7
19 26 22 4	11 47 40 3	11 47 40 3	15 13 8 9	20 170 167 3
22 58 59 3	14 133 127 3	14 133 127 3	18 141 140 2	23 -16 1 10
-3,-3,1	17 32 27 4	17 32 27 4	21 17 9 4	3,5,1
0 282 279 3	20 114 117 3	20 114 117 3	24 171 171 3	1 -18 14 8
3 71 77 2	23 28 15 4	23 28 15 4	1,5,1	4 238 241 3
6 257 262 3	-1,-5,1	-1,-5,1	2 271 270 3	7 -15 18 7
9 62 63 2	1 111 110 2	1 111 110 2	5 108 102 2	10 77 73 3
12 228 230 3	4 224 223 3	4 224 223 3	8 215 219 3	13 22 19 4
15 44 45 3	7 98 97 2	7 98 97 2	11 78 79 2	16 164 164 3
18 157 159 3	10 233 233 3	10 233 233 3	14 186 185 3	19 -18 15 5
21 34 28 3	13 73 72 2	13 73 72 2	17 55 53 3	3,6,1
24 132 130 3	16 161 163 3	16 161 163 3	20 149 147 3	2 75 80 5
-2,-7,1	19 51 46 3	19 51 46 3	23 38 31 3	4,5,1
2 100 94 5	22 127 126 3	22 127 126 3	0,0,1	2 102 98 4
5 61 49 5	-1,-4,1	-1,-4,1	6 440 385 7	5 -17 20 20
8 110 113 5	0 456 463 3	0 456 463 3	12 1105 1103 18	8 138 140 5
11 51 43 5	3 17 20 3	3 17 20 3	18 73 73 3	11 -18 17 9
14 76 69 5	6 190 187 2	6 190 187 2	24 354 357 7	14 75 69 5
-2,-6,1	9 24 23 3	9 24 23 3	0,1,1	17 -16 12 19
1 25 25 4	12 360 359 4	12 360 359 4	2 316 307 4	4,6,1
4 183 187 3	15 18 20 4	15 18 20 4	8 1060 1060 12	2 102 98 4
7 -18 24 5	18 121 125 2	18 121 125 2	14 250 245 3	5 -17 20 20
10 102 98 3	21 -19 14 7	21 -19 14 7	20 401 394 5	8 138 140 5
13 -19 20 9	24 182 182 3	24 182 182 3	0,2,1	11 -18 17 9
16 134 132 3	-1,-3,1	-1,-3,1	4 595 606 7	14 75 69 5
19 -17 13 10	2 203 193 2	2 203 193 2	10 519 524 6	17 -16 12 19
-2,-5,1	5 49 53 2	5 49 53 2	16 367 359 5	4,6,1
0 237 240 2	8 575 582 6	8 575 582 6	22 203 208 3	1 -16 13 10
3 94 92 2	11 46 48 2	11 46 48 2	18 43 51 3	4 87 82 5
6 159 161 3	14 160 155 2	14 160 155 2	1,8,1	7 -14 12 11
9 84 84 2	17 35 35 2	17 35 35 2	6 202 203 3	
12 197 200 3	20 295 300 4	20 295 300 4	8 116 113 5	
15 66 64 3	23 22 22 4	23 22 22 4	2 63 63 5	
	-1,-2,1	-1,-2,1	5 -15 7 9	
	1 391 382 4	1 391 382 4	8 116 113 5	
	6 202 203 3	6 202 203 3		
	12 559 557 7	12 559 557 7		
	18 142 145 3	18 142 145 3		
	24 250 251 4	24 250 251 4		

* Structure factors for 338 combined symmetry-averaged reflections, including reflections with intensities less than 2σ .