

AM-91-452

Substructure and superstructure of mullite by neutron diffraction

R. J. Angel, R. K. McMullan, C. T. Prewitt

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 76, 3-4, 332-342.

revised

## Substructure and superstructure of mullite by neutron diffraction

R. J. Angel, R. K. McMullan, C. T. Prewitt

### MATERIAL FOR DEPOSIT

Table 4: Observed and calculated structure factors for mullite (two models as described in text). Observed structure factors ( $F_o$ ) have been corrected for absorption and extinction, and scaled to  $F_c$ . Both  $F_o$  and  $F_c$  have been multiplied by a factor of 100.

## MULLITE

FACTOR = 100.00

0 K-4		2 K-3		8 K-3		4 K-2		9 K-2		3 K-1		8 K-1	
K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS
0	389	0	98	0	33	0	282	1	70	8	173	0	53
2	0*	1	185	1	16	1	32	2	127	9	22	1	20
4	67	2	14	2	85	2	189	3	52	10	41	2	123
		3	51	3	113	3	39	4	164	11	172	3	127
1	K-4	4	17	4	183	4	106	5	79			4	210
		5	277			5	93	6	122	4	K-1	5	180
1	113	6	40	9	K-3	6	216	10	K-2			6	24
2	116	7	112			7	76			0	69	7	0*
3	37	8	24	1	53	8	161	0	203	2	265	8	59
4	156	9	166			9	50	1	75	3	32	9	K-1
5	20			0	K-2	10	64	2	37	4	245		
		3	K-3	0	366	5	K-2	3	153	5	74	1	65
2	K-4	1	174	2	15	6	216	7	76	6	212	2	221
		2	147	4	111	7	76	8	161	7	76	3	89
0	23	3	267	6	61	8	161	9	50	8	157	4	15
1	121	4	74	8	84	9	50	10	64	9	157	5	138
2	96	5	164	10	70	10	64			10	157	6	87
3	262	6	83							11	43	7	59
4	92	7	14	1	K-2								
5	123	8	149	1	102	1	102	0	140	10	151	10	64
		2	156	2	136	2	136	1	225	10	258	11	43
3	K-4	3	12	3	12	3	12	2	225				
1	86	4	K-3	4	184	4	184	4	260	5	K-1	5	K-1
2	56	5	25	5	25	5	25	6	45	6	45	6	45
3	21	6	146	6	146	6	146	7	162	7	162	7	162
4	64	7	195	7	195	7	195	8	113	8	113	8	113
5	93	8	119	8	119	8	119	9	81	9	81	9	81
		9	185	9	185	9	185	10	150	10	150	10	150
4	K-4	10	203	10	203	10	203						
		1	102	1	102	1	102	1	92	1	92	1	92
0	246	2	94	2	94	2	94	2	227	2	227	2	227
1	21	3	18	3	18	3	18	3	31	3	31	3	31
2	121	4	243	4	243	4	243	4	20	4	20	4	20
3	36	5	72	5	72	5	72	5	296	5	296	5	296
4	97	6	25	6	25	6	25	6	104	6	104	6	104
		7	39	7	39	7	39	7	93	7	93	7	93
		8	37	8	37	8	37	8	111	8	111	8	111
5	K-4								112				
1	15	0	28	0	28	0	28	0	46	0	46	0	46
2	187	1	171	1	171	1	171	1	76	1	76	1	76
3	92	2	136	2	136	2	136	2	95	2	95	2	95
4	97	3	313	3	313	3	313	3	131	3	131	3	131
		4	123	4	123	4	123	4	50	4	50	4	50
		5	135	5	135	5	135	5	78	5	78	5	78
		6	74	6	74	6	74	6	28	6	28	6	28
		7	63	7	63	7	63	7	30	7	30	7	30
		8	126	8	126	8	126	8	37	8	37	8	37
		9	123	9	123	9	123	9	18	9	18	9	18
		10	44	10	44	10	44	10	314	10	314	10	314
0	K-3								30				
0	145	1	130	1	130	1	130	1	127	1	127	1	127
2	190	2	60	2	60	2	60	2	19	2	19	2	19
4	243	3	0*	3	0*	3	0*	3	186	3	186	3	186
6	57	4	106	4	106	4	106	4	42	4	42	4	42
8	179	5	168	5	168	5	168	5	76	5	76	5	76
		6	57	6	57	6	57	6	49	6	49	6	49
		7	K-3	7	K-3	7	K-3	7	59	7	59	7	59
		8	121	8	121	8	121	8	136	8	136	8	136
		9	329	9	329	9	329	9	107	9	107	9	107
1	60	10	142	10	142	10	142	10	71	10	71	10	71
2	216								194				
3	33	1	19	1	19	1	19	1	159	1	159	1	159
4	13	2	31	2	31	2	31	2	53	2	53	2	53
5	262	3	99	3	99	3	99	3	305	3	305	3	305
6	84	4	24	4	24	4	24	4	94	4	94	4	94
7	91	5	274	5	274	5	274	5	181	5	181	5	181
8	95	6	98	6	98	6	98	6	98	6	98	6	98
9	102	7	13	7	13	7	13	7	98	7	98	7	98

## MULLITE

FACTOR = 100.00

2 K 0		6 K 0		12 K 0		K OBS CALC		4 K 1		8 K 1		3 K 2		8 K 2						
K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS	K	OBS					
0	37	3	242	0	68	5	72	73	1	53	66	1	131	127	0	303	300			
1	167	4	15	1	21	6	26	22	2	223	216	2	57	61	1	49	49			
2	149	5	13	0		7	43	46	3	91	90	3	25	27	2	57	59			
3	317	6	162	0	K 1	8	56	52	4	13	8	4	87	84	3	131	134			
4	137	7	95	0	92	9	103	106	5	133	135	5	58	71	4	105	106			
5	135	8	21	0	141	10	66	64	6	89	83	6	116	118	5	192	194			
6	84	9	99	2	221	11	36	35	7	56	63	7	326	316	6	25	32			
7	59	10	33	4	261	4	41	44	5	K 1	10	K 1	8	45	42	7	70	71		
8	136	7	K 0	6	41	8	191	184	10	K 1	10	K 1	9	79	81	9	K 2	9	K 2	
9	130	10	152	10	152	150	1	120	124	0	255	249	10	135	141	10	K 2	10	K 2	
10	53	1	182	1	182	181	2	287	300	1	178	175	4	K 2	4	K 2	1	64	70	
11	70	2	35	1	35	36	3	142	145	2	94	94	0	274	278	2	125	128		
12	54	3	68	3	68	65	4	18	2	3	52	55	0	274	278	3	43	50		
		4	135	1	91	92	5	38	37	4	35	34	1	32	34	4	146	155		
		5	17	2	227	240	6	200	197	5	107	104	2	191	186	5	81	81		
		6	99	3	30	30	7	152	150	6	37	27	3	37	38	6	114	115		
		7	300	4	20	19	8	107	104	11	K 1	11	K 1	4	103	104				
		8	69	5	297	234	9	27	12	1	86	93	5	88	86	10	K 2	10	K 2	
		9	149	6	104	102	10	60	71	1	86	93	6	211	209	0	203	196		
		9	K 0	7	92	92	6	K 1	6	K 1	2	64	67	7	77	76	1	77	76	
		9	K 0	8	111	112	9	126	128	3	139	181	8	156	156	2	38	32		
		9	K 0	9	126	128	10	48	50	4	47	47	10	61	65	3	151	153		
		9	K 0	10	48	50	11	80	77	2	29	31	0	K 2	5	K 2	4	131	135	
		9	K 0	11	80	77	2	29	31	3	39	34	0	K 2	5	K 2	0	K 3	0	K 3
		9	K 0	2	K 1	2	K 1	4	107	110	0	359	384	1	34	37				
		9	K 0	3	91	86	4	107	110	2	10	5	2	212	210	0	147	141		
		9	K 0	4	122	122	5	184	184	4	114	109	3	103	100	2	191	185		
		9	K 0	5	203	204	6	59	55	6	57	58	4	200	194	4	241	236		
		9	K 0	6	32	32	7	152	155	8	83	85	5	24	14	6	58	58		
		9	K 0	7	73	74	8	69	71	10	74	69	6	43	43	8	176	177		
		9	K 0	8	48	58	9	152	146	10	135	149	7	181	181	1	K 3	1	K 3	
		9	K 0	9	58	39	5	314	308	1	102	103	8	113	119	9	83	89		
		9	K 0	9	K 0	6	30	30	7	K 1	1	K 2	9	83	89	1	61	64		
		9	K 0	7	123	125	8	23	13	2	133	133	6	K 2	6	K 2	2	217	209	
		9	K 0	8	23	13	1	19	11	3	9	7	0	231	232	3	35	34		
		9	K 0	9	181	179	2	30	33	4	185	179	0	231	232	4	13	6		
		9	K 0	10	33	34	3	115	113	5	23	24	1	166	164	5	259	251		
		9	K 0	11	80	78	4	18	7	6	145	143	2	121	119	6	85	83		
		9	K 0	3	K 1	3	K 1	5	289	288	7	194	191	3	208	206	7	85	88	
		9	K 0	4	167	165	6	58	55	8	123	122	4	11	2	8	90	91		
		9	K 0	5	88	83	7	186	186	9	185	186	5	19	7	9	102	105		
		9	K 0	6	125	127	8	110	112	10	209	210	6	90	91	2	K 3	2	K 3	
		9	K 0	7	26	17	9	142	144	0	25	24	7	89	88	0	101	95		
		9	K 0	8	27	91	8	K 1	8	K 1	2	K 2	8	32	26	1	188	173		
		9	K 0	10	K 0	3	295	306	0	49	49	0	25	24	2	21	10			
		9	K 0	4	98	94	1	24	14	2	135	135	7	K 2	7	K 2	3	52	47	
		9	K 0	5	185	181	1	21	121	3	313	306	1	177	176	4	31	12		
		9	K 0	6	93	98	2	121	121	4	118	121	2	36	34	5	272	267		
		9	K 0	7	0*	1	3	124	130	5	134	130	3	69	72	6	34	38		
		9	K 0	8	170	171	4	203	200	6	76	76	4	123	125	7	113	112		
		9	K 0	9	27	10	5	130	177	7	10	6	5	0*	3	8	13	19		
		9	K 0	10	46	41	6	27	21	8	127	121	6	94	94	9	166	165		
		9	K 0	11	160	161	7	10	6	9	117	121	7	277	259	0	246	249		
		9	K 0	11	K 0	4	K 1	8	57	63	10	45	49	8	68	64	1	179	181	
		9	K 0	1	41	42	0	66	66	1	13	11	2	128	129	2	128	129		
		9	K 0	2	99	103	1	13	11	2	255	260	3	29	27	4	29	22		
		9	K 0	3	32	28	2	255	260	3	29	27	4	241	241	5	60	63		
		9	K 0	4	29	22	3	29	27	4	241	241	5	60	63	5	60	63		
		9	K 0	5	60	63	4	241	241	5	60	63	4	241	241	5	60	63		







MULLITE MODEL2

FACTOR = 100.00

K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC	K	OBS	CALC
3	K	3	5	K	3	7	K	3	1	K	4	4	K	4			
1	173	169	1	100	102	4	21	7	1	111	107	0	242	235			
2	143	138	2	273	269	5	259	268	2	119	123	1	23	22			
3	261	251	3	119	115				3	30	34	2	120	127			
4	69	73	4	15	6	8	K	3	4	146	147	3	41	38			
5	163	160	5	29	35				5	27	21	4	92	93			
6	79	81	6	161	163	0	27	36									
7	10	17	7	122	116	1	17	14	2	K	4	5	K	4			
8	144	144				2	59	88									
4	K	3	6	K	3	3	112	116	0	27	5	1	23	13			
0	88	92	0	89	99	4	179	135	1	121	120	2	174	182			
1	21	9	1	146	143	9	K	3	2	98	98	3	90	92			
2	235	231	2	17	17				3	250	251						
3	30	31	3	8	12	1	51	54	4	89	91						
4	194	193	4	100	108				5	122	120						
5	70	70	5	163	161	0	K	4	3	K	4						
6	28	24	6	57	59	0	383	363	1	59	94						
7	37	37	7	K	3	2	20	7	2	61	60						
8	33	39	8	25	21	4	59	68	3	15	17						
			1	28	26				4	64	67						
			2	102	101				5	77	86						