

Crystal chemistry and symmetry of a birefringent tetragonal
pyralspite₇₅-grandite₂₅ garnet

Dana T. Griffen, Dorian M. Hatch, William Ravell Phillips, Seyfi Kulaksiz

For deposit: Tables 1, 4, 10, 11

American Mineralogist, 77, 3-4, 399-406.

Table 1.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR T-KAY-K-1 GARNET, 141/ACD REFINEMENT

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC					
0	2	2	14	2	5	6	1	53	51	0	4	2	400	404	0	14	2	21	14	4	13	3	20	15
2	2	0	42	44	2	7	1	27	26	2	4	2	188	200	4	14	2	172	171	6	13	3	20	2
0	4	0	417	410	4	7	1	61	61	1	5	2	139	139	8	14	2	41	40	8	13	3	26	25
2	4	0	399	401	6	7	1	32	36	3	5	2	132	130	1	15	2	33	36	1	14	3	43	44
4	4	0	140	141	3	8	1	13	7	5	5	2	89	87	3	15	2	42	46	3	14	3	26	24
2	6	0	48	49	5	8	1	57	62	0	6	2	49	48	2	16	2	44	44	5	14	3	26	30
4	6	0	368	372	7	8	1	17	12	4	6	2	311	314	1	2	3	37	36	7	14	3	26	27
6	6	0	43	39	2	9	1	33	32	1	7	2	27	27	2	3	3	89	86	2	15	3	43	46
0	8	0	491	488	4	9	1	75	77	3	7	2	16	9	1	4	3	113	110	0	0	4	420	411
0	8	0	43	39	6	9	1	41	41	5	7	2	14	13	2	5	3	132	131	0	2	4	406	404
2	8	0	256	256	8	9	1	36	35	7	7	2	55	52	4	5	3	30	30	2	2	4	189	199
4	8	0	15	5	8	9	1	18	21	0	8	2	38	41	1	6	3	15	12	1	3	4	113	110
6	8	0	407	406	1	10	1	32	28	4	8	2	257	258	3	6	3	58	55	1	4	4	139	140
8	8	0	122	121	5	10	1	41	41	6	8	2	59	56	5	6	3	21	25	4	4	4	448	449
2	10	0	243	244	7	10	1	48	48	1	9	2	34	31	2	7	3	13	8	1	5	4	12	13
4	10	0	70	70	9	10	1	18	20	3	9	2	.50	48	4	7	3	29	33	3	5	4	370	372
6	10	0	75	70	2	11	1	28	27	5	9	2	17	13	4	7	3	27	25	0	6	4	310	313
10	10	0	99	98	4	11	1	37	37	9	9	2	44	42	6	8	3	81	85	2	6	4	227	229
0	12	0	202	201	6	11	1	19	6	0	10	2	122	122	7	8	3	40	40	6	6	4	61	61
2	12	0	166	166	8	11	1	26	26	4	10	2	210	212	2	9	3	49	50	6	6	4	61	61
6	12	0	136	135	10	11	1	19	21	8	10	2	28	27	4	9	3	35	37	1	7	4	30	32
8	12	0	133	135	3	12	1	32	31	8	10	2	22	18	8	9	3	41	38	5	7	4	59	61
10	12	0	18	15	9	12	1	20	16	1	11	2	28	26	8	9	3	22	19	0	8	4	255	256
2	14	0	154	152	11	12	1	27	24	3	11	2	20	13	8	9	3	22	19	2	8	4	257	257
4	14	0	44	44	2	13	1	17	4	7	11	2	33	35	1	10	3	31	30	6	8	4	217	214
6	14	0	19	18	8	13	1	19	15	5	10	3	20	22	3	10	3	38	38	8	8	4	168	169
8	14	0	40	41	1	14	1	43	45	0	12	2	200	200	7	10	3	26	27	8	8	4	74	78
0	16	0	197	197	3	14	1	18	15	2	12	2	226	224	6	11	3	71	72	1	9	4	36	36
1	2	1	37	36	7	14	1	34	38	8	12	2	125	125	8	11	3	22	21	7	9	4	19	19
2	3	1	112	109	2	15	1	34	36	10	12	2	166	166	1	12	3	32	32	0	10	4	241	243
3	3	1	140	140	1	1	2	40	39	2	12	2	134	132	5	12	3	29	27	2	10	4	210	212
2	5	1	15	14	0	2	2	43	45	3	13	2	31	32	7	12	3	35	33	6	10	4	158	156
4	5	1	192	193	1	3	2	37	35	5	13	2	35	28	9	12	3	19	16	8	10	4	194	195
1	6	1	14	11	3	3	2	68	87	7	13	2	36	35	2	13	3	31	32	10	10	4	151	151

Table 1 (cont.).

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR T-KAY-K-1 GARNET, 141/ACD REFINEMENT PAGE 2

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	11	4	37	37	3	12	5	26	26	5	11	6	23	24	6	11	7	19	19
7	11	4	48	46	9	12	5	19	2	7	11	6	21	18	8	11	7	23	16
9	11	4	22	18	2	13	5	31	27	9	11	6	23	16	1	12	7	21	9
2	12	4	22	6	4	13	5	24	20	0	12	6	164	166	3	12	7	34	33
4	12	4	170	170	6	13	5	34	33	2	12	6	125	126	5	12	7	17	5
6	12	4	19	13	8	13	5	37	34	4	12	6	19	15	2	13	7	32	36
8	12	4	47	46	3	14	5	29	32	6	12	6	136	137	1	14	7	32	39
3	13	4	21	16	1	14	5	194	193	8	12	6	158	157	3	14	7	23	25
5	13	4	20	19	0	2	6	48	48	5	13	6	34	34	0	0	8	495	487
0	14	4	150	153	1	3	6	15	11	0	14	6	41	43	2	2	8	37	38
2	14	4	173	171	3	3	6	58	54	4	14	6	107	108	0	4	8	257	256
6	14	4	109	108	0	4	6	372	372	1	15	6	21	2	2	4	8	260	258
1	2	2	142	140	2	4	6	314	314	1	2	7	29	27	1	5	8	58	60
2	3	3	132	131	1	5	6	53	51	1	4	7	62	62	3	5	8	83	84
1	4	5	17	14	3	5	6	23	27	3	4	7	31	30	2	6	8	58	56
3	4	5	29	28	5	5	6	52	49	2	5	7	13	14	4	6	8	218	215
2	5	5	87	88	0	6	6	39	38	4	5	7	58	61	4	6	8	36	36
1	6	6	51	51	4	6	6	227	228	1	6	7	31	36	1	7	8	15	12
3	6	6	24	26	1	7	6	31	36	3	6	7	27	26	3	7	8	40	40
5	6	6	50	48	3	7	6	27	25	5	6	7	61	61	5	7	8	19	20
2	7	7	15	13	5	7	6	61	61	2	7	7	56	54	0	8	8	410	408
4	7	7	58	61	7	7	6	22	21	6	7	7	20	22	4	8	8	168	169
6	7	7	62	61	2	8	6	56	56	1	8	7	15	12	8	8	8	335	326
1	8	8	56	60	4	8	6	215	214	3	8	7	39	41	1	9	8	35	37
3	8	8	82	84	6	8	6	37	35	5	8	7	20	19	3	9	8	20	18
7	8	8	18	21	1	9	6	38	42	4	9	7	17	17	0	9	8	22	21
2	9	9	20	14	3	9	6	39	39	6	9	7	61	62	5	9	8	19	12
6	9	9	28	29	5	9	6	28	31	1	10	7	46	49	2	10	8	17	18
8	9	9	26	22	7	9	6	63	62	3	10	7	25	28	4	10	8	195	195
1	10	5	40	41	9	9	6	47	40	5	10	7	17	11	10	10	8	37	40
3	10	5	42	43	0	10	6	69	69	7	10	7	19	23	1	11	8	25	25
5	10	5	23	26	2	10	6	24	25	9	10	7	20	14	3	11	8	24	22
6	11	5	23	24	4	10	6	154	154	5	11	7	32	34	1	11	8	33	34
8	11	5	32	31	3	11	6	71	72	4	11	7	43	46	7	11	8	22	16

Table 1 (cont.): OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR T-KAY-K-1 GARNET, 141/ACD REFINEMENT PAGE 3

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC					
3	3	10	37	38	0	10	10	74	71	2	9	11	23	22	5	7	12	17	6	5	8	13	35	34
0	4	10	245	243	4	10	10	150	150	4	9	11	23	17	0	8	12	135	135	1	3	14	44	45
2	4	10	211	212	8	10	10	39	39	6	9	11	24	17	2	8	12	167	167	3	3	14	22	24
1	5	10	40	41	1	11	10	20	23	1	10	11	23	23	4	8	12	44	46	0	4	14	154	155
3	5	10	44	44	0	12	10	131	136	5	10	11	18	6	6	8	12	157	158	2	4	14	172	172
5	5	10	25	25	2	12	10	131	131	2	11	11	20	17	1	9	12	18	16	3	5	14	31	33
0	6	10	72	71	1	2	11	25	27	1	12	11	26	22	3	9	12	19	15	0	6	14	44	44
2	6	10	26	26	2	3	11	17	14	0	0	12	98	98	0	10	12	131	136	4	6	14	107	108
4	6	10	156	155	1	4	11	36	37	0	2	12	202	199	2	10	12	133	132	1	7	14	35	40
1	7	10	45	48	3	6	11	72	71	2	2	12	228	224	1	11	12	26	22	3	7	14	24	27
3	7	10	25	27	5	6	11	21	23	1	3	12	33	32	2	3	13	32	32	2	8	14	40	40
5	7	10	17	11	2	7	11	32	34	4	4	12	171	170	2	3	13	19	32	1	2	15	36	37
7	7	10	20	23	4	7	11	46	47	3	5	12	26	28	3	4	13	19	14	1	2	15	45	47
2	8	10	19	18	6	7	11	19	20	0	6	12	146	166	4	5	13	29	27	2	3	15	45	47
4	8	10	196	195	1	8	11	25	26	2	6	12	125	125	5	6	13	32	34	1	3	15	20	20
4	8	10	19	19	3	8	11	24	22	4	6	12	20	15	2	7	13	34	36	4	4	15	17	15
6	8	10	17	19	5	8	11	33	32	6	6	12	137	136	4	7	13	18	9	4	5	15	17	15
1	9	10	22	13	7	8	11	21	17	3	7	12	35	33	4	7	13	18	25	0	0	16	194	199
7	9	10	33	39	7	8	11	21	17	3	7	12	35	33	4	7	13	18	25	2	2	16	44	45

8

Table 4. Anisotropic temperature-factor coefficients and equivalent isotropic temperature factors for the refinement of garnet T-KAY-K-1 in the average space group, $Ia\bar{3}d$

	U_{11}^{**}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}	U_{eq}
X	70(5)*	127(4)	(U_{22})	13(4)	0	0	108(2)
Y	79(5)	(U_{11})	(U_{11})	-1(5)	(U_{23})	(U_{23})	79(3)
Si	98(8)	82(5)	(U_{22})	0	0	0	87(4)
O	126(10)	123(10)	121(10)	9(8)	-1(8)	9(8)	123(6)

** U_{ij} are coefficients in the expression $\exp[-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)]$.

Table 10. Correspondence between $Ia\bar{3}d$ and $I4_1/acd$ Wyckoff points occupied by X cations

Equivalent points of the $Ia\bar{3}d$ $24c$ position	Equivalent points of the $I4_1/acd$ $8b$ position
$\underline{c}(5)$ 0, 1/4, 1/8	$\underline{b}(1)$ 0, 1/4, 1/8
$\underline{c}(6)$ 0, 3/4, 3/8	$\underline{b}(2)$ 0, 3/4, 3/8
$\underline{c}(11)$ 0, 3/4, 7/8	$\underline{b}(3)$ 0, 3/4, 7/8
$\underline{c}(12)$ 0, 1/4, 5/8	$\underline{b}(4)$ 0, 1/4, 5/8
$\underline{c}(17)$ 1/2, 3/4, 5/8	$\underline{b}(5)$ 1/2, 3/4, 5/8
$\underline{c}(18)$ 1/2, 1/4, 7/8	$\underline{b}(6)$ 1/2, 1/4, 7/8
$\underline{c}(23)$ 1/2, 1/4, 3/8	$\underline{b}(7)$ 1/2, 1/4, 3/8
$\underline{c}(24)$ 1/2, 3/4, 1/8	$\underline{b}(8)$ 1/2, 3/4, 1/8

Equivalent points of the $Ia\bar{3}d$ $24c$ position	Equivalent points of the $I4_1/acd$ $16e$ position
$\underline{c}(1)$ 1/8, 0, 1/4	$\underline{e}(1)$ \underline{x} , 0, 1/4
$\underline{c}(2)$ 3/8, 0, 3/4	$\underline{e}(2)$ $-\underline{x}+1/2$, 0, 3/4
$\underline{c}(3)$ 1/4, 1/8, 0	$\underline{e}(4)$ 1/4, $-\underline{x}+1/4$, 0
$\underline{c}(4)$ 3/4, 3/8, 0	$\underline{e}(11)$ 3/4, $\underline{x}+1/4$, 0
$\underline{c}(7)$ 7/8, 0, 3/4	$\underline{e}(5)$ $-\underline{x}$, 0, 3/4

$$\underline{c}(8) \quad 5/8, 0, 1/4$$

$$\underline{c}(9) \quad 3/4, 7/8, 0$$

$$\underline{c}(10) \quad 1/4, 5/8, 0$$

$$\underline{c}(13) \quad 5/8, 1/2, 3/4$$

$$\underline{c}(14) \quad 7/8, 1/2, 1/4$$

$$\underline{c}(15) \quad 3/4, 5/8, 1/2$$

$$\underline{c}(16) \quad 1/4, 7/8, 1/2$$

$$\underline{c}(19) \quad 3/8, 1/2, 1/4$$

$$\underline{c}(20) \quad 1/8, 1/2, 3/4$$

$$\underline{c}(21) \quad 1/4, 3/8, 1/2$$

$$\underline{c}(22) \quad 3/4, 1/8, 1/2$$

$$\underline{e}(6) \quad x+1/2, 0, 3/4$$

$$\underline{e}(8) \quad 3/4, \underline{x}+3/4, 0$$

$$\underline{e}(15) \quad 1/4, -\underline{x}+3/4, 0$$

$$\underline{e}(9) \quad \underline{x}+1/2, 1/2, 3/4$$

$$\underline{e}(10) \quad -\underline{x}, 1/2, 1/4$$

$$\underline{e}(12) \quad 3/4, -\underline{x}+3/4, 1/2$$

$$\underline{e}(3) \quad 1/4, \underline{x}+3/4, 1/2$$

$$\underline{e}(13) \quad -\underline{x}+1/2, 1/2, 1/4$$

$$\underline{e}(14) \quad \underline{x}, 1/2, 3/4$$

$$\underline{e}(16) \quad 1/4, \underline{x}+1/4, 1/2$$

$$\underline{e}(7) \quad 3/4, -\underline{x}+1/4, 1/2$$

Table 11. Basis functions for the E_g IR

Wyckoff 24c point*	$I4_1/a\bar{c}d$ Wyckoff position	φ_1	φ_2
1	16e	1	1
2	16e	1	1
3	16e	1	-1
4	16e	1	-1
5	8b	-2	0
6	8b	-2	0
7	16e	1	1
8	16e	1	1
9	16e	1	-1
10	16e	1	-1
11	8b	-2	0
12	8b	-2	0

* In order listed in the International Tables for Crystallography (1983) for space group $Ia\bar{3}d$. The same basis functions are repeated for body-centered equivalent points 13 through 24.