

AM-94-558

Low-Ca augite from experimental alkali basalt at 18 kbar: Structural variation  
near the miscibility gap

Sara Bertolo, Paolo Nimis, Alberto Dal Negro

For deposit: Tables 2 and 3

American Mineralogist, 79, 7-8, 668-674.

Table 2 - to be deposited

PARAMETER LIST AFTER LEAST SQUARES CYCLE 1

06/01/90 17:48

TITLE : ALKALIBASALT CPX1 6/12

SCALEFACTOR = 1.09785      EXTINCTION = 1.791E-06

NAME	OCCPY	X/A	Y/B	Z/C	U11	U22	U33	U12	U13	U23	UEQV
CA2	.7743 .0119	.0000 .0000	.2874 .0001	.2500 .0000	.0208 .0005	.0325 .0006	.0196 .0005	.0000 .0000	.0020 .0003	.0000 .0000	.0239
NA2	.2257 .0119	.0000 .0000	.2874 .0001	.2500 .0000	.0208 .0005	.0325 .0006	.0196 .0005	.0000 .0000	.0020 .0003	.0000 .0000	.0239
MG1	.9007 .0056	.0000 .0000	.9056 .0001	.2500 .0000	.0130 .0005	.0106 .0005	.0162 .0006	.0000 .0000	.0036 .0004	.0000 .0000	.0125
FE1	.0993 .0056	.0000 .0000	.9056 .0001	.2500 .0000	.0130 .0005	.0106 .0005	.0162 .0006	.0000 .0000	.0036 .0004	.0000 .0000	.0125
SI	1.0000 .0000	.2917 .0001	.0918 .0001	.2414 .0001	.0133 .0003	.0110 .0003	.0207 .0004	-.0002 .0003	.0056 .0003	-.0012 .0003	.0139
O1	1.0000 .0000	.1154 .0002	.0868 .0002	.1413 .0004	.0143 .0008	.0170 .0009	.0217 .0009	.0019 .0007	.0049 .0007	-.0010 .0008	.0167
O2	1.0000 .0000	.3679 .0002	.2522 .0002	.3329 .0004	.0269 .0010	.0145 .0010	.0334 .0012	-.0042 .0008	.0143 .0009	-.0064 .0009	.0221
O3	1.0000 .0000	.3534 .0002	.0174 .0003	.0088 .0005	.0147 .0009	.0368 .0013	.0366 .0012	-.0008 .0009	.0059 .0008	-.0191 .0011	.0282
M2'	.0106 .0017	.0000 .0000	.2229 .0000	.2500 .0000	.0250 .0000						

Table 3 - to be deposited

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	143	165	4	0	0	44	33	6	0	0	826	806	8	0	0	617	610	10	0	0	555	548
12	0	0	136	-126	1	1	0	85	70	3	1	0	886	874	5	1	0	542	-550	7	1	0	409	419
9	1	0	57	44	11	1	0	208	202	0	2	0	253	230	2	2	0	678	-669	4	2	0	247	-247
6	2	0	112	-116	8	2	0	216	-211	12	2	0	138	-144	1	3	0	42	-32	3	3	0	496	493
5	3	0	283	287	7	3	0	142	-143	9	3	0	163	172	11	3	0	120	122	0	4	0	58	44
2	4	0	267	250	4	4	0	516	-524	6	4	0	198	190	8	4	0	227	213	10	4	0	333	-338
12	4	0	136	139	1	5	0	856	-826	3	5	0	672	-679	5	5	0	166	180	7	5	0	915	-919
9	5	0	132	-126	11	5	0	212	-220	0	6	0	1215	-1191	2	6	0	105	111	4	6	0	259	-241
6	6	0	141	-126	8	6	0	160	-158	10	6	0	410	-424	3	7	0	72	62	5	7	0	440	440
7	7	0	253	-254	9	7	0	126	129	0	8	0	86	85	2	8	0	57	-51	4	8	0	195	-200
6	8	0	48	42	8	8	0	59	54	1	9	0	66	-69	3	9	0	102	109	5	9	0	165	-174
7	9	0	113	100	0	10	0	516	518	4	10	0	343	344	6	10	0	155	153	1	11	0	125	141
3	11	0	320	341	5	11	0	171	-155	0	12	0	368	364	2	12	0	154	-167	-13	1	1	57	-47
-11	1	1	169	-154	-7	1	1	313	-318	-5	1	1	157	152	-3	1	1	808	-821	-1	1	1	65	-69
1	1	1	39	-54	3	1	1	680	-692	5	1	1	72	68	7	1	1	280	-275	9	1	1	52	50
11	1	1	172	-172	-12	2	1	495	506	-10	2	1	67	-69	-8	2	1	354	358	-6	2	1	342	359
-4	2	1	572	581	-2	2	1	1318	1324	0	2	1	464	-437	2	2	1	953	958	4	2	1	283	279
6	2	1	521	526	8	2	1	420	412	10	2	1	136	-123	12	2	1	328	329	-13	3	1	133	132
-11	3	1	303	303	-9	3	1	543	557	-7	3	1	366	-381	-5	3	1	1173	1183	-3	3	1	984	992
-1	3	1	902	907	1	3	1	74	-66	3	3	1	290	280	5	3	1	1494	1486	7	3	1	66	-74
9	3	1	335	326	11	3	1	129	140	-12	4	1	258	265	-10	4	1	230	-236	-6	4	1	62	-61
-2	4	1	363	358	0	4	1	851	-827	2	4	1	269	272	4	4	1	204	-200	8	4	1	99	93
10	4	1	256	-258	-11	5	1	99	-109	-7	5	1	62	-53	-3	5	1	297	-290	-1	5	1	94	107
3	5	1	300	-289	5	5	1	54	69	7	5	1	92	-75	11	5	1	63	-68	-10	6	1	113	118
-6	6	1	193	201	-4	6	1	224	221	-2	6	1	110	-126	0	6	1	401	390	2	6	1	124	118
4	6	1	139	128	8	6	1	112	108	10	6	1	124	130	-11	7	1	47	-56	-9	7	1	182	-180
-7	7	1	79	86	-5	7	1	603	-612	-3	7	1	176	181	-1	7	1	284	-289	1	7	1	428	-433
3	7	1	76	78	5	7	1	346	-356	7	7	1	40	35	9	7	1	297	-287	-8	8	1	337	-354
-6	8	1	205	-202	-4	8	1	233	-221	-2	8	1	870	-878	0	8	1	153	155	2	8	1	574	-559
4	8	1	211	-204	6	8	1	404	-408	8	8	1	263	-261	-9	9	1	104	-101	-7	9	1	354	362
-5	9	1	445	-449	-1	9	1	80	-71	3	9	1	101	100	5	9	1	431	-425	7	9	1	184	180
-6	10	1	87	89	-4	10	1	53	50	-2	10	1	219	-205	0	10	1	258	271	4	10	1	58	23
-5	11	1	78	-75	1	11	1	162	-145	3	11	1	57	-36	-2	12	1	191	161	0	12	1	91	-116
2	12	1	227	202	-12	0	2	132	120	-10	0	2	607	-612	-8	0	2	264	-271	-6	0	2	934	-949
-4	0	2	1032	-1045	-2	0	2	368	369	0	0	2	1481	-1474	2	0	2	872	-870	4	0	2	1054	-1041
6	0	2	85	-63	8	0	2	173	-189	10	0	2	676	-662	-13	1	2	181	-186	-9	1	2	190	191
-7	1	2	921	-935	-5	1	2	258	259	-3	1	2	43	54	1	1	2	644	-638	3	1	2	399	-407
5	1	2	403	405	7	1	2	462	-460	9	1	2	107	110	11	1	2	124	-120	-12	2	2	222	228
-2	2	2	231	-221	-8	2	2	268	268	-6	2	2	473	467	-4	2	2	147	-156	-7	2	2	164	175
0	2	2	496	516	2	2	2	528	521	4	2	2	246	-264	6	2	2	234	239	8	2	2	311	306

## --- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	2	2	81	-79	-13	3	2	82	-86	-9	3	2	58	-64	-7	3	2	174	-179	-5	3	2	234	-230
-3	3	2	153	145	-1	3	2	377	-392	1	3	2	360	-360	3	3	2	79	84	5	3	2	168	-164
7	3	2	146	-144	9	3	2	80	-78	-12	4	2	188	-177	-10	4	2	183	177	-8	4	2	84	-83
-6	4	2	102	106	-2	4	2	335	-313	0	4	2	520	528	2	4	2	402	-397	4	4	2	180	172
6	4	2	45	42	8	4	2	100	-97	10	4	2	80	80	-11	5	2	213	217	-9	5	2	132	129
-7	5	2	774	783	-5	5	2	44	14	-3	5	2	919	928	-1	5	2	171	164	1	5	2	486	472
3	5	2	992	995	7	5	2	434	435	9	5	2	77	86	-10	6	2	184	175	-8	6	2	87	81
-6	6	2	606	597	-4	6	2	229	214	-2	6	2	522	-550	0	6	2	997	999	2	6	2	149	145
4	6	2	271	272	8	6	2	84	93	-11	7	2	56	-49	-9	7	2	127	-133	-7	7	2	193	189
-5	7	2	306	-308	-3	7	2	91	92	-1	7	2	280	-271	1	7	2	93	-92	3	7	2	196	196
5	7	2	310	-303	7	7	2	34	12	9	7	2	110	-118	-10	8	2	50	60	-8	8	2	46	29
0	8	2	93	88	2	8	2	50	-34	4	8	2	78	64	6	8	2	75	73	-9	9	2	103	115
-7	9	2	168	-157	-5	9	2	128	131	-1	9	2	85	87	3	9	2	56	-39	5	9	2	170	175
7	9	2	124	-112	-6	10	2	144	-140	-4	10	2	319	-312	-2	10	2	57	-43	0	10	2	415	-409
4	10	2	374	-378	-5	11	2	93	68	-3	11	2	263	-281	1	11	2	145	-180	3	11	2	318	-341
-13	1	3	54	51	-11	1	3	52	56	-7	1	3	332	334	-5	1	3	247	-257	-3	1	3	568	570
-1	1	3	152	149	3	1	3	317	310	5	1	3	56	39	7	1	3	242	241	9	1	3	95	-88
-12	2	3	398	-392	-8	2	3	553	-543	-6	2	3	59	-62	-4	2	3	146	-154	-2	2	3	1112	-1124
2	2	3	617	-618	4	2	3	52	16	6	2	3	379	-381	8	2	3	328	-325	-11	3	3	310	-308
-9	3	3	659	-653	-7	3	3	188	204	-5	3	3	669	-675	-3	3	3	294	-290	-1	3	3	1087	-1102
1	3	3	411	-406	3	3	3	78	94	5	3	3	710	-726	7	3	3	131	-123	9	3	3	373	-372
-12	4	3	156	-151	-10	4	3	121	125	-8	4	3	196	-197	-6	4	3	278	278	-4	4	3	229	228
-2	4	3	514	-517	0	4	3	370	374	2	4	3	60	-82	4	4	3	245	246	6	4	3	85	-80
8	4	3	58	-53	-9	5	3	102	92	-7	5	3	111	110	-5	5	3	211	-218	-3	5	3	268	266
-1	5	3	137	130	1	5	3	127	-129	3	5	3	86	88	5	5	3	94	88	7	5	3	68	77
9	5	3	97	-85	-10	6	3	139	-139	-8	6	3	48	-41	-6	6	3	90	-91	-4	6	3	133	-129
-2	6	3	78	-67	0	6	3	247	-240	2	6	3	53	42	4	6	3	218	-205	6	6	3	79	-78
-11	7	3	56	64	-9	7	3	255	241	-7	7	3	106	-92	4	6	3	218	-205	6	6	3	79	-78
-1	7	3	332	332	1	7	3	182	189	5	7	3	315	302	-5	7	3	399	411	-3	7	3	85	-91
-4	8	3	152	155	-2	8	3	584	590	2	8	3	551	548	-8	8	3	340	340	-6	8	3	178	164
-7	9	3	262	-254	-5	9	3	101	106	-1	9	3	352	356	4	8	3	60	-35	6	8	3	248	257
5	9	3	297	303	-6	10	3	46	-70	-2	10	3	118	106	1	9	3	66	-54	3	9	3	241	-235
-3	11	3	51	41	-12	0	4	89	88	0	10	3	124	-139	0	10	3	124	-139	2	10	3	80	68
-2	0	4	145	-148	0	0	4	871	861	-10	0	4	361	350	-6	0	4	888	877	-4	0	4	806	800
8	0	4	127	132	-13	1	4	137	135	2	0	4	231	220	4	0	4	678	665	6	0	4	233	226
-5	1	4	113	-119	-3	1	4	642	656	-11	1	4	104	105	-9	1	4	103	-105	-7	1	4	309	308
5	1	4	62	-64	7	1	4	135	141	-1	1	4	269	-268	1	1	4	49	-60	3	1	4	459	459
-6	2	4	43	-30	-4	2	4	218	-229	-12	2	4	174	-174	-10	2	4	53	-30	-8	2	4	114	-117
4	2	4	92	-96	8	2	4	98	-96	-2	2	4	278	-278	0	2	4	148	156	2	2	4	379	-380
-5	3	4	133	129	-3	3	4	187	184	-11	3	4	82	84	-9	3	4	155	157	-7	3	4	57	-63
					-1	3	4	119	119	-1	3	4	119	119	3	3	4	140	137	5	3	4	159	153

## --- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-12	4	4	186	185	-10	4	4	259	-263	-8	4	4	117	113	-4	4	4	137	-144	-2	4	4	76	54
0	4	4	161	-157	2	4	4	303	305	4	4	4	255	-246	-11	5	4	149	-152	-7	5	4	644	-637
-5	5	4	108	-105	-3	5	4	630	-625	-1	5	4	116	-102	1	5	4	333	-336	3	5	4	477	-490
5	5	4	69	-64	7	5	4	363	-392	-10	6	4	272	-268	-8	6	4	177	170	-6	6	4	315	-306
-4	6	4	490	-482	-2	6	4	183	169	0	6	4	286	-278	4	6	4	462	-461	-9	7	4	233	227
-7	7	4	166	-161	-5	7	4	130	135	-1	7	4	237	232	3	7	4	57	-62	5	7	4	182	181
-8	8	4	61	-66	-6	8	4	55	51	-2	8	4	106	-98	4	8	4	92	-77	-7	9	4	78	62
-5	9	4	117	-129	-3	9	4	125	114	-1	9	4	87	-90	3	9	4	63	46	-4	10	4	206	199
0	10	4	329	337	-7	1	5	253	-253	-5	1	5	142	143	-3	1	5	282	-280	-1	1	5	67	-68
1	1	5	77	-84	3	1	5	115	-119	-12	2	5	271	260	-10	2	5	63	-58	-8	2	5	464	457
-6	2	5	158	157	-4	2	5	74	60	-2	2	5	429	427	2	2	5	531	525	4	2	5	51	-58
6	2	5	159	149	-11	3	5	87	89	-9	3	5	512	508	-7	3	5	111	96	-5	3	5	403	414
-3	3	5	86	-94	-1	3	5	642	639	1	3	5	350	360	5	3	5	335	330	-10	4	5	168	-166
-8	4	5	186	179	-6	4	5	61	-60	-4	4	5	184	-173	-2	4	5	92	97	0	4	5	159	-157
2	4	5	201	201	4	4	5	226	-223	-7	5	5	118	-122	-3	5	5	59	-66	-1	5	5	42	-35
1	5	5	53	-50	-10	6	5	86	90	-6	6	5	146	137	-4	6	5	125	117	0	6	5	160	160
2	6	5	57	46	4	6	5	107	97	-5	7	5	385	-371	-3	7	5	113	105	-1	7	5	150	-140
1	7	5	182	-158	3	7	5	74	-56	-6	8	5	90	-95	-4	8	5	55	-59	-2	8	5	374	-372
-3	9	5	231	213	-1	9	5	159	-176	-10	0	6	495	-491	-8	0	6	99	93	-6	0	6	215	-226
-4	0	6	524	-522	-2	0	6	209	-221	0	0	6	338	-346	4	0	6	431	-443	-9	1	6	87	86
-7	1	6	232	-221	-5	1	6	128	125	-3	1	6	289	-288	1	1	6	61	-48	3	1	6	79	-69
-10	2	6	59	-58	-8	2	6	109	108	-6	2	6	98	100	-2	2	6	104	103	2	2	6	202	204
-7	3	6	76	-72	-5	3	6	107	-113	-1	3	6	117	-107	1	3	6	105	-101	-8	4	6	79	-78
-6	4	6	102	97	-2	4	6	79	-104	0	4	6	213	204	2	4	6	155	-157	-7	5	6	268	263
-5	5	6	53	-33	-3	5	6	494	521	-1	5	6	113	112	1	5	6	109	110	-6	6	6	142	146
-4	6	6	242	247	0	6	6	218	212	-5	7	6	157	-160	-3	7	6	150	138	-7	1	7	143	149
-5	1	7	78	-71	-3	1	7	141	140	-6	2	7	97	-108	-4	2	7	106	-102	-2	2	7	194	-187
-5	3	7	371	-382	-3	3	7	104	96	-1	3	7	217	-219	-4	4	7	64	60					