Supplementary Materials

Elasticity and high pressure behavior of $Mg_2Cr_2O_5$ and $CaTi_2O_4$-type phases of magnesiochromite and chromite

Sean R. Shieh[a*], Tauhid Belal Khan[a], Zhongying Mi[a], Mauritz van Zyl[a], Ricardo Rodriguez[a], Clemens Prescher[b], Vitali B. Prakapenka[b],

[a] Department of Earth Sciences, University of Western Ontario, London, Canada

[b] Department of Physics and Astronomy, University of Western Ontario, London, Canada

[c] Center for Advanced Radiation Sources, The University of Chicago, Chicago, USA

Table S1: Unit-cell lattice parameters and volumes of CT phase of $MgCr_2O_4$ at different pressures

P (GPa)	*a* (Å)	*b* (Å)	*c* (Å)	V (Å^3)
0.0001	2.8646 (8)	9.5150 (5)	9.6981 (6)	264.3 (8)
2.3 (2)	2.8510 (7)	9.4802 (2)	9.6627 (5)	261.2 (5)
3.2 (3)	2.8453 (3)	9.4691 (6)	9.6495 (7)	259.9 (6)
3.7 (2)	2.8417 (5)	9.4650 (2)	9.6392 (4)	259.3 (6)
4.1 (2)	2.8400 (4)	9.4586 (3)	9.6345 (4)	258.8 (1)
7.9 (2)	2.8213 (2)	9.4110 (3)	9.5711 (7)	254.1 (7)
10.9 (2)	2.8084 (2)	9.3693 (6)	9.5261 (2)	250.6 (6)
12.9 (3)	2.8003 (7)	9.3429 (7)	9.4974 (6)	248.4 (3)
15.5 (3)	2.7908 (8)	9.3101 (7)	9.4633 (5)	245.8 (8)
17.5 (2)	2.7810 (2)	9.2924 (4)	9.4371 (4)	243.8 (8)
20.0 (2)	2.7729 (2)	9.2650 (5)	9.4106 (2)	241.7 (7)
20.8 (2)	2.7683 (3)	9.2547 (5)	9.4023 (7)	240.8 (7)
22.1 (2)	2.7645 (6)	9.2443 (3)	9.3817 (5)	239.7 (8)
23.6 (2)	2.7581 (4)	9.2222 (6)	9.3707 (6)	238.3 (9)
25.3 (2)	2.7538 (3)	9.2084 (6)	9.3467 (2)	237.0 (6)
27.3 (2)	2.7469 (3)	9.184 (8)	9.3201 (7)	235.1 (2)
29.8 (2)	2.7401 (5)	9.1635 (5)	9.2898 (3)	233.2 (4)
31.6 (2)	2.7326 (5)	9.1409 (4)	9.2789 (6)	231.7 (5)
33.6 (2)	2.7275 (7)	9.1261 (7)	9.2474 (7)	230.1 (6)
34.7 (2)	2.7230 (2)	9.1181 (6)	9.2376 (5)	229.3 (5)
38.7 (2)	2.7121 (7)	9.0807 (7)	9.2105 (3)	226.8 (4)

40.5 (3)	2.7099 (7)	9.0558 (3)	9.1915 (4)	225.5 (6)
43.0 (1)	2.7031 (2)	9.0331 (3)	9.1680 (5)	223.8 (6)
45.3 (3)	2.6971 (3)	9.0077 (4)	9.1548 (8)	222.4 (3)

*Numbers in the parenthesis are the errors at the last digit.

Table S2: Unit-cell lattice parameters and volumes of CT phase of natural $(Mg,Fe)(Al,Cr)_2O_4$ at different pressures.

P (GPa)	*a* (Å)	*b* (Å)	*c* (Å)	V (Å^3)
0.0001	2.8575 (6)	9.4506 (6)	9.6641 (7)	261.0 (1)
4.5 (2)	2.8254 (8)	9.4048 (8)	9.5855 (4)	254.7 (2)
5.4 (2)	2.8221 (2)	9.3840 (6)	9.5733 (5)	253.5 (2)
7.9 (2)	2.8111 (6)	9.3434 (2)	9.5314 (8)	250.3 (2)
12.4 (3)	2.7917 (7)	9.2854 (4)	9.4529 (5)	245.1 (4)
13.9 (3)	2.7843 (7)	9.2659 (8)	9.4412 (5)	243.6 (2)
15.3 (2)	2.7778 (5)	9.2553 (4)	9.4109 (4)	241.9 (1)
16.8 (2)	2.7700 (6)	9.2329 (4)	9.387 (6)	240.3 (2)
20.8 (3)	2.7553 (4)	9.1911 (7)	9.3433 (7)	236.9 (2)
22.1 (2)	2.7482 (4)	9.1771 (5)	9.3266 (8)	235.5 (3)
26.14 (2)	2.7339 (6)	9.1416 (5)	9.2781 (5)	231.8 (3)
26.9 (3)	2.7289 (2)	9.1282 (7)	9.2642 (4)	231.0 (2)
29.1 (3)	2.7231 (5)	9.1074 (4)	9.2412 (5)	229.4 (3)
32.0 (2)	2.713 (8)	9.0767 (8)	9.2101 (6)	227.0 (2)
34.2 (2)	2.7064 (8)	9.0561 (4)	9.1863 (4)	225.4 (3)

36.4 (3)	2.7024 (6)	9.0415 (5)	9.1692 (8)	223.9 (2)
37.5 (2)	2.6979 (5)	9.0268 (4)	9.1593 (5)	223.2 (3)
38.1 (2)	2.6957 (7)	9.0099 (7)	9.1458 (7)	222.5 (2)
39.1 (3)	2.6943 (6)	9.0069 (3)	9.1416 (7)	222.1 (3)
39.9 (3)	2.6912 (4)	8.9922 (4)	9.1299 (4)	221.3 (2)
40.8 (2)	2.6891 (6)	8.9889 (5)	9.1212 (8)	220.9 (2)

*Numbers in the parenthesis are the errors at the last digit.

Table S3: Calculated and observed *d*-spacings of mLd-type $Mg_2Cr_2O_5$, Cr_2O_3 and CT phase of $MgCr_2O_4$ at ambient conditions.

	mLd-type $Mg_2Cr_2O_5$			Cr_2O_3			CT phase of $MgCr_2O_4$		
d_{obs}	hkl	d_{calc}	Δ(d)	hkl	d_{calc}	Δ(d)	hkl	d_{calc}	Δ(*d*)
5.2130 (1)	120	5.2092 (1)	0.0038						
4.8185 (2)	200	4.8161 (1)	0.0024						
4.2607 (1)							021	4.2654 (1)	-0.0047
3.8004 (1)	220	3.8018 (1)	-0.001						
3.6272 (1)				012	3.6306 (1)	-0.0033			
3.3918 (1)							022	3.3901 (1)	0.0016
3.1280 (2)	230	3.1345 (1)	-0.006						
3.0982 (2)	040	3.0965 (2)	0.0017						
2.9451 (1)	140	2.9479 (1)	-0.002						
2.7365 (1)							110	2.7364 (2)	0.0001

2.6643 (4)				104	2.6611 (1)	0.0032	023	2.6687 (1)	-0.0043
2.6344 (1)							111	2.6331 (1)	0.0012
2.6089 (1)	240	2.6046 (1)	0.0043						
2.5292 (1)	330	2.5345 (1)	-0.005						
2.4986 (1)	121	2.4931 (1)	0.0055						
2.4791 (2)				110	2.4826 (2)	-0.0035			
2.4529 (2)	201	2.4459 (1)	0.0069						
2.4041 (1)	150	2.3991 (2)	0.0050						
2.3789 (1)							040	2.3760 (1)	0.0029
2.2801 (1)	221	2.2749 (1)	0.0051						
2.2627 (1)				006	2.2585 (1)	0.0042			
2.2060 (1)	250	2.2028 (2)	0.0031						
2.1738 (1)				113	2.1756 (1)	-0.0018			
2.1573 (1)							024	2.1557 (1)	0.0015
2.1368 (3)							042	2.1327 (1)	0.0041
2.1175 (1)							130	2.1218 (1)	-0.0043
2.1001 (1)	231	2.1043 (1)	-0.004						
2.0828 (1)	041	2.0927 (1)	-0.009				113	2.0866 (1)	-0.0037
2.0708 (1)							131	2.0726 (2)	-0.0017
2.0134 (3)	160	2.0185 (1)	-0.0050						
1.9435 (1)							132	1.9431 (1)	0.0003
1.9109 (1)							043	1.9129 (1)	-0.0020
1.8935 (1)	260	1.8973 (1)	-0.0038						
1.8339 (2)	151	1.8325 (1)	0.0014						

1.8137 (1)				024	1.8153 (1)	-0.0015	114	1.8123 (1)	0.0013
1.7948 (1)							025	1.7922 (2)	0.0025
1.7716 (1)							133	1.7726 (1)	-0.0010
1.7596 (2)	421	1.7607 (2)	-0.0011						
1.7440 (1)	530	1.7457 (1)	-0.0017						
1.7008 (1)							044	1.6950 (1)	0.0057
1.6705 (1)				116	1.6706 (2)	-0.0001			
1.6498 (1)	161	1.6451 (1)	0.0047						
1.6157 (1)	351	1.6137 (1)	0.0019	211	1.6137 (1)	0.0020	006	1.6126 (1)	0.0030
1.6033 (2)	600	1.6053 (2)	-0.0020				134	1.5951 (1)	0.0082
1.5805 (2)	511	1.5811 (1)	-0.0005	122	1.5804 (1)	0.0001	115	1.5800 (1)	0.0005
1.5588 (1)	620	1.5540 (1)	0.0048				151	1.5618 (2)	-0.0031
1.5413 (1)	521	1.5438 (1)	-0.0025						
1.5184 (1)	550	1.5207 (2)	-0.0022						
1.5032 (2)							152	1.5042 (1)	-0.0009
1.4863 (1)	531	1.4871 (1)	-0.0008						
1.4729 (1)	280	1.4739 (1)	-0.0010						
1.4642 (2)				214	1.4653 (1)	-0.0012			
1.4296 (1)	470	1.4258 (1)	0.0037	300	1.4333 (1)	-0.0037	135	1.4298 (1)	-0.0002
1.4206 (1)	002	1.4197 (2)	0.0009				153	1.4208 (1)	-0.0002
1.4083 (2)	560	1.4084 (1)	-0.0001						
1.3910 (1)	380	1.3945 (2)	-0.0035	125	1.3938 (2)	-0.0028	116	1.3893 (1)	0.0017
1.3747 (2)	461	1.3721 (1)	0.0025				202	1.3702 (1)	0.0037
1.3638 (1)	621	1.3632 (1)	0.0006				220	1.3682 (1)	-0.0044

1.3340 (1)							046	1.3343 (1)	-0.0003
1.3175 (1)							222	1.3165 (1)	0.0010
1.3029 (1)	570	1.3031 (1)	-0.0002						
1.2935 (2)	232	1.2932 (1)	0.0002	1010	1.2924 (1)	0.0010			
1.2851 (1)				119	1.2874 (1)	-0.0023	136	1.2839 (2)	0.0012
1.2706 (1)	322	1.2708 (1)	-0.0002						
1.2594 (2)	740	1.2574 (2)	0.0019				223	1.2595 (2)	-0.0002
1.2503 (1)				217	1.2448 (2)	0.0055			
1.2393 (1)	0100	1.2386 (1)	0.0007	220	1.2413 (1)	-0.0019			
1.2299 (1)	191	1.2283 (2)	0.0015				204	1.2301 (1)	-0.0003
1.2244 (2)	402	1.2229 (1)	0.0014				155	1.2251 (1)	-0.0005
1.2122 (2)	721	1.2142 (1)	-0.0020	306	1.2102 (1)	0.0020			
1.2027 (1)	750	1.2029 (1)	-0.0002						
1.1928 (1)	252	1.1933 (1)	-0.0005	131	1.1880 (2)	0.0048			
1.1668 (1)	062	1.1697 (1)	-0.0029				028	1.1721 (1)	-0.0054

Table S4: Unit-cell lattice parameters of mLd-type $Mg_2Cr_2O_5$ at different pressures.

P (GPa)	*a* (Å)	*b* (Å)	*c* (Å)	V (Å^3)
0.0001	9.6203 (4)	12.3873 (7)	2.8429 (6)	338.9 (8)
0.2 (1)	9.6192 (6)	12.3796 (6)	2.8425 (2)	338.5 (5)
0.5 (1)	9.6134 (4)	12.3727 (8)	2.8410 (8)	337.9 (5)
0.8 (2)	9.6056 (5)	12.3671 (5)	2.8399 (8)	337.4 (6)
3.4 (2)	9.5668 (5)	12.3031 (5)	2.8301 (7)	333.1 (4)

4.2 (3)	9.5481 (4)	12.2866 (7)	2.8269 (6)	331.6 (4)
6.2 (2)	9.5120 (8)	12.2408 (5)	2.8202 (5)	328.4 (5)
7.5 (2)	9.4962 (3)	12.2143 (5)	2.8145 (2)	326.5 (7)
8.2 (3)	9.4855 (5)	12.2012 (6)	2.8119 (7)	325.4 (8)
9.5 (2)	9.4645 (6)	12.1768 (7)	2.8064 (8)	323.4 (6)
10.4 (2)	9.4502 (8)	12.1626 (8)	2.8029 (9)	322.2 (7)
12.7 (2)	9.4225 (8)	12.1193 (8)	2.7928 (7)	318.9 (2)
14.3 (3)	9.4066 (2)	12.0824 (3)	2.7873 (8)	316.8 (8)
16.2 (2)	9.3888 (7)	12.0456 (8)	2.7796 (5)	314.4 (4)