



Supplement of

The oxidation of Fe in riebeckite at 0.7 GPa

Giancarlo Della Ventura et al.

Correspondence to: Giancarlo Della Ventura (giancarlo.dellaventura@uniroma3.it)

The copyright of individual parts of the supplement might differ from the article licence.

Table S1 (to be deposited). Fractional atom coordinates and atom displacement parameters (B_{eq} , Å²; β_{ij}) for the riebeckite crystals used in this work.

Site	x/a	y/b	z/c	B_{eq}	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
<i>T = 25 °C; IGG-Pv Code 1272</i>										
O(1)	0.11069(13)	0.09175(7)	0.2052(2)	0.60(3)	0.00155(12)	0.00049(3)	0.0059(4)	-0.00006(5)	0.0009(2)	0.00005(9)
O(2)	0.11953(13)	0.17263(7)	0.7377(2)	0.65(3)	0.00162(12)	0.00055(4)	0.0061(4)	-0.00008(5)	0.0007(2)	-0.00010(10)
O(3)	0.1110(2)	0	0.7082(4)	0.81(5)	0.0022(2)	0.00063(6)	0.0079(7)	0	0.0011(3)	0
O(4)	0.36633(14)	0.24870(7)	0.7997(3)	0.78(3)	0.00263(13)	0.00053(3)	0.0067(4)	-0.00038(5)	0.0010(2)	-0.00021(9)
O(5)	0.34963(14)	0.12928(8)	0.0813(3)	0.80(3)	0.00211(12)	0.00076(4)	0.0064(4)	0.00000(5)	0.0012(2)	0.00065(10)
O(6)	0.34006(14)	0.12143(8)	0.5752(3)	0.77(3)	0.00201(12)	0.00072(4)	0.0060(4)	0.00003(5)	0.0009(2)	-0.00061(10)
O(7)	0.3302(2)	0	0.2988(4)	0.85(4)	0.0023(2)	0.00036(5)	0.0112(6)	0	0.0007(3)	0
T(1)	0.28158(5)	0.08588(3)	0.28989(9)	0.490(10)	0.00150(5)	0.00036(2)	0.0042(2)	-0.00003(2)	0.00043(6)	-0.00006(3)
T(2)	0.29087(5)	0.17036(3)	0.80133(9)	0.492(10)	0.00147(5)	0.00038(2)	0.0043(2)	-0.00011(2)	0.00065(6)	-0.00005(3)
M(1)	0	0.09093(2)	½	0.577(9)	0.00207(4)	0.00040(2)	0.00458(13)	0	0.00101(5)	0
M(2)	0	0.18346(2)	0	0.549(9)	0.00161(4)	0.00040(2)	0.00517(13)	0	0.00075(5)	0
M(3)	0	0	0	0.564(14)	0.00205(6)	0.00032(2)	0.0049(2)	0	0.00063(8)	0
M(4)	0	0.27836(6)	½	1.11(3)	0.0038(2)	0.00070(4)	0.0125(5)	0	0.0047(2)	0
A(m)	0.050(3)	½	0.103(5)	2.0						
H	0.192(7)	0	0.758(10)	1.5						
<i>T = 650 °C ; Sample code RHP5; IGG-Pv Code 1345</i>										
O(1)	0.1110(2)	0.09183(10)	0.2053(3)	0.75(4)	0.0020(2)	0.00066(5)	0.0065(6)	-0.00003(7)	0.0010(3)	0.00003(13)
O(2)	0.1198(2)	0.17270(10)	0.7374(3)	0.81(4)	0.0020(2)	0.00077(5)	0.0064(6)	-0.00010(7)	0.0006(3)	-0.00011(13)
O(3)	0.1110(3)	0	0.7088(5)	0.98(7)	0.0028(3)	0.00081(8)	0.0082(10)	0	0.0012(4)	0

O(4)	0.3663(2)	0.24875(10)	0.7999(3)	0.93(4)	0.0032(2)	0.00063(5)	0.0077(6)	-0.00034(8)	0.0013(3)	-0.00010(13)
O(5)	0.3494(2)	0.12877(11)	0.0802(3)	0.96(4)	0.0025(2)	0.00095(5)	0.0073(6)	-0.00006(8)	0.0012(3)	0.00066(14)
O(6)	0.3398(2)	0.12121(11)	0.5736(3)	0.94(4)	0.0025(2)	0.00088(5)	0.0069(6)	0.00001(7)	0.0009(3)	-0.00077(14)
O(7)	0.3291(3)	0	0.2988(5)	1.00(6)	0.0033(3)	0.00043(7)	0.0117(9)	0	0.0015(4)	0
T(1)	0.28126(7)	0.08587(4)	0.28923(13)	0.61(2)	0.00184(7)	0.00047(2)	0.0050(2)	-0.00002(3)	0.00043(9)	-0.00004(5)
T(2)	0.29074(7)	0.17024(7)	0.80069(13)	0.62(2)	0.00177(7)	0.00052(2)	0.0049(2)	-0.00010(3)	0.00062(9)	-0.00003(5)
M(1)	0	0.09092(3)	½	0.716(14)	0.00235(6)	0.00057(2)	0.0054(2)	0	0.00107(7)	0
M(2)	0	0.18365(3)	0	0.666(11)	0.00183(5)	0.00054(2)	0.0059(2)	0	0.00074(7)	0
M(3)	0	0	0	0.70(2)	0.00237(8)	0.00049(2)	0.0056(3)	0	0.00068(11)	0
M(4)	0	0.27808(9)	½	1.28(5)	0.0042(2)	0.00091(6)	0.0132(7)	0	0.0046(3)	0
A(m)	0.045(3)	½	0.098(5)	2.0						
H	0.193(7)	0	0.744(11)	1.0						

T = 700 °C; Sample code RHP6; IGG-Pv Code 1346

O(1)	0.1111(2)	0.09185(11)	0.2044(4)	0.58(4)	0.0016(2)	0.00051(5)	0.0047(6)	-0.00007(8)	0.0003(3)	0.00008(14)
O(2)	0.1197(2)	0.17260(11)	0.7373(4)	0.64(4)	0.0016(2)	0.00053(5)	0.0060(6)	-0.00005(8)	0.0006(3)	-0.00019(14)
O(3)	0.1109(3)	0	0.7077(6)	0.74(7)	0.0022(3)	0.00055(9)	0.0069(10)	0	0.0013(4)	0
O(4)	0.3663(2)	0.24868(11)	0.8003(4)	0.77(4)	0.0030(2)	0.00049(5)	0.0058(6)	-0.00038(8)	0.0012(3)	-0.00022(14)
O(5)	0.3493(2)	0.12891(12)	0.0807(4)	0.80(4)	0.0021(2)	0.00092(6)	0.0047(6)	0.00000(8)	0.0013(3)	0.0007(2)
O(6)	0.3397(2)	0.12124(12)	0.5746(4)	0.74(4)	0.0019(2)	0.00088(6)	0.0040(6)	-0.00010(8)	0.0009(3)	-0.0006(2)
O(7)	0.3287(3)	0	0.2989(6)	0.84(6)	0.0029(3)	0.00031(7)	0.0102(10)	0	0.0013(5)	0
T(1)	0.28127(8)	0.08584(4)	0.28922(14)	0.46(2)	0.00148(8)	0.00039(2)	0.0031(2)	0.00000(3)	0.00058(10)	-0.00001(5)
T(2)	0.29072(8)	0.17024(4)	0.80108(14)	0.45(2)	0.00143(7)	0.00040(2)	0.0032(2)	-0.00010(3)	0.00072(10)	-0.00002(5)

<i>M</i> (1)	0	0.09092(3)	½	0.554(14)	0.00201(6)	0.00045(2)	0.0036(2)	0	0.00105(8)	0
<i>M</i> (2)	0	0.18361(3)	0	0.495(14)	0.00147(6)	0.00040(2)	0.0042(2)	0	0.00075(8)	0
<i>M</i> (3)	0	0	0	0.54(2)	0.00190(9)	0.00037(2)	0.0040(3)	0	0.00055(12)	0
<i>M</i> (4)	0	0.27815(10)	½	1.13(5)	0.0040(2)	0.00080(6)	0.0115(8)	0	0.0049(3)	0
<i>A</i> (<i>m</i>)	0.047(3)	½	0.097(6)	2.0						
H	0.205(7)	0	0.730(11)	1.0						

T = 750 °C; Sample code RHP7; IGG-Pv Code 1347

O(1)	0.1115(3)	0.09184(14)	0.2060(5)	0.61(5)	0.0018(2)	0.00044(6)	0.0059(8)	-0.00007(10)	0.0013(4)	0.0000(2)
O(2)	0.1199(3)	0.17228(14)	0.7370(5)	0.74(5)	0.0023(3)	0.00059(7)	0.0059(8)	-0.00003(10)	0.0009(4)	-0.0002(2)
O(3)	0.1115(4)	0	0.7087(7)	0.84(9)	0.0025(4)	0.00062(11)	0.0078(13)	0	0.0012(6)	0
O(4)	0.3663(3)	0.24864(14)	0.7994(5)	0.85(6)	0.0031(3)	0.00046(7)	0.0080(8)	-0.00047(11)	0.0012(4)	-0.0001(2)
O(5)	0.3501(3)	0.12851(14)	0.0800(5)	0.88(5)	0.0025(3)	0.00083(7)	0.0064(8)	-0.00007(11)	0.0013(3)	0.0008(2)
O(6)	0.3405(3)	0.12132(14)	0.5743(5)	0.82(5)	0.0024(3)	0.00078(7)	0.0055(8)	-0.00004(10)	0.0010(3)	-0.0008(2)
O(7)	0.3306(4)	0	0.2980(8)	0.97(8)	0.0030(4)	0.00044(9)	0.0115(13)	0	0.0012(6)	0
<i>T</i> (1)	0.28172(10)	0.08584(5)	0.2890(2)	0.47(2)	0.00157(9)	0.00031(3)	0.0044(3)	-0.00002(3)	0.00087(13)	-0.00006(6)
<i>T</i> (2)	0.29100(10)	0.17015(5)	0.8001(2)	0.51(2)	0.00162(9)	0.00037(3)	0.0046(3)	-0.00016(4)	0.00084(13)	-0.00003(7)
<i>M</i> (1)	0	0.09045(4)	½	0.61(2)	0.00215(8)	0.00046(2)	0.0047(3)	0	0.00126(10)	0
<i>M</i> (2)	0	0.18350(4)	0	0.53(2)	0.00168(8)	0.00035(2)	0.0051(3)	0	0.00097(10)	0
<i>M</i> (3)	0	0	0	0.58(3)	0.00222(12)	0.00029(3)	0.0052(4)	0	0.0007(2)	0
<i>M</i> (4)	0	0.27713(13)	½	1.28(7)	0.0043(3)	0.00091(8)	0.0134(10)	0	0.0050(4)	0
<i>A</i> (<i>m</i>)	0.054(3)	½	0.113(6)	2.0						
H	0.205(10)	0	0.751(14)	1.0						
