

Table 2. Refined atomic positions and isotropic thermal displacement parameters ( $U_{\text{iso}}$ ,  $\times 100 \text{ \AA}^2$ ) of kyanite at different temperatures, and some parameters pertaining to the Rietveld refinements. Experiments performed increasing  $T$ . (Deposited)

	23°C*			23°C		
	$x$	$y$	$z$	$x$	$y$	$z$
Si1	0.292(3)	0.065(3)	0.697(4)	0.313(4)	0.077(2)	0.711(5)
Si2	0.294(3)	0.331(2)	0.197(4)	0.291(4)	0.339(2)	0.206(4)
Al1	0.326(2)	0.705(3)	0.447(4)	0.309(4)	0.709(3)	0.468(5)
Al2	0.299(2)	0.699(3)	0.954(3)	0.299(3)	0.700(3)	0.939(4)
Al3	0.092(2)	0.391(3)	0.644(4)	0.091(3)	0.389(4)	0.659(4)
Al4	0.106(2)	0.919(3)	0.167(4)	0.101(3)	0.916(4)	0.155(6)
O1	0.103(4)	0.155(3)	0.126(4)	0.107(5)	0.158(3)	0.132(6)
O2	0.118(2)	0.682(3)	0.171(4)	0.127(4)	0.682(4)	0.168(5)
O3	0.280(4)	0.450(2)	0.956(4)	0.286(6)	0.453(4)	0.962(5)
O4	0.275(4)	0.936(2)	0.928(5)	0.279(6)	0.940(3)	0.928(6)
O5	0.104(3)	0.149(2)	0.658(5)	0.118(5)	0.153(4)	0.678(7)
O6	0.126(2)	0.643(3)	0.639(3)	0.101(3)	0.636(4)	0.644(5)
O7	0.274(4)	0.450(3)	0.423(4)	0.279(5)	0.4554(3)	0.442(6)
O8	0.294(3)	0.940(3)	0.466(4)	0.280(6)	0.948(4)	0.467(5)
O9	0.504(2)	0.277(2)	0.244(4)	0.498(3)	0.282(4)	0.247(6)
O10	0.491(2)	0.234(3)	0.763(4)	0.513(4)	0.245(4)	0.756(5)
<i>U</i> <sub>iso</sub>	0.15(3)			0.17(5)		
Observations	850			675		
Refined parameters	53			56		
<i>R</i> <sub>p</sub> , <i>wR</i> <sub>p</sub>	0.0542,	0.0759		0.0398,	0.0548	
	600°C			650°C		
	$x$	$y$	$z$	$x$	$y$	$z$
Si1	0.311(4)	0.076(3)	0.710(5)	0.295(5)	0.067(4)	0.706(6)
Si2	0.293(5)	0.336(3)	0.207(5)	0.297(4)	0.333(4)	0.191(5)
Al1	0.309(5)	0.709(4)	0.469(5)	0.323(4)	0.707(5)	0.456(5)
Al2	0.297(3)	0.698(4)	0.941(4)	0.292(3)	0.696(4)	0.958(4)
Al3	0.092(2)	0.390(4)	0.657(5)	0.094(3)	0.389(5)	0.633(4)
Al4	0.102(3)	0.915(4)	0.152(6)	0.104(3)	0.916(4)	0.162(5)
O1	0.109(5)	0.157(4)	0.130(7)	0.106(5)	0.157(4)	0.123(6)
O2	0.124(4)	0.680(4)	0.168(5)	0.113(4)	0.677(4)	0.180(5)
O3	0.280(6)	0.452(4)	0.965(5)	0.265(6)	0.448(4)	0.951(5)
O4	0.276(6)	0.935(4)	0.923(7)	0.272(6)	0.933(4)	0.929(7)
O5	0.117(5)	0.152(4)	0.683(8)	0.106(5)	0.151(4)	0.662(8)
O6	0.101(3)	0.636(4)	0.645(5)	0.122(3)	0.637(5)	0.642(4)
O7	0.278(6)	0.456(4)	0.438(6)	0.283(6)	0.454(5)	0.422(6)
O8	0.273(7)	0.945(4)	0.469(5)	0.284(5)	0.940(5)	0.470(5)
O9	0.499(3)	0.278(4)	0.242(6)	0.507(3)	0.279(4)	0.233(5)
O10	0.517(4)	0.238(5)	0.757(5)	0.497(4)	0.233(6)	0.761(5)
<i>U</i> <sub>iso</sub>	0.19(5)			0.25(6)		
Observations	675			675		
Refined parameters	58			57		
<i>R</i> <sub>p</sub> , <i>wR</i> <sub>p</sub>	0.0380,	0.0505		0.0381,	0.0509	

	700°C			750°C		
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Si1	0.295(5)	0.067(3)	0.707(6)	0.295(5)	0.066(4)	0.708(6)
Si2	0.293(4)	0.329(3)	0.193(5)	0.292(4)	0.329(3)	0.197(5)
Al1	0.327(3)	0.706(4)	0.454(5)	0.329(3)	0.709(5)	0.452(6)
Al2	0.294(3)	0.696(4)	0.956(4)	0.295(3)	0.694(4)	0.954(5)
Al3	0.092(2)	0.389(4)	0.634(4)	0.092(3)	0.389(4)	0.637(5)
Al4	0.105(3)	0.916(4)	0.164(5)	0.106(3)	0.913(4)	0.161(5)
O1	0.101(5)	0.155(4)	0.126(6)	0.103(5)	0.153(4)	0.127(6)
O2	0.116(3)	0.678(4)	0.179(5)	0.116(3)	0.676(4)	0.177(5)
O3	0.260(5)	0.446(4)	0.954(5)	0.263(6)	0.445(4)	0.955(5)
O4	0.274(6)	0.934(3)	0.930(7)	0.276(6)	0.930(4)	0.928(7)
O5	0.107(5)	0.152(4)	0.660(7)	0.108(5)	0.152(4)	0.666(8)
O6	0.125(3)	0.637(4)	0.641(4)	0.127(3)	0.638(4)	0.637(5)
O7	0.283(5)	0.451(4)	0.425(6)	0.281(5)	0.453(5)	0.427(6)
O8	0.287(5)	0.941(4)	0.472(5)	0.288(5)	0.942(4)	0.470(6)
O9	0.505(3)	0.279(4)	0.234(5)	0.503(3)	0.278(4)	0.236(5)
O10	0.496(3)	0.233(5)	0.764(5)	0.494(3)	0.234(5)	0.769(6)
<i>U</i> <sub>iso</sub>	0.32(5)			0.36(4)		
Observations	670			670		
Refined parameters	58			58		
<i>R</i> <sub>p</sub> , <i>wR</i> <sub>p</sub>	0.0366,	0.0485		0.0351,	0.0490	
	800°C			900°C		
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Si1	0.292(4)	0.067(4)	0.706(6)	0.292(5)	0.066(4)	0.708(6)
Si2	0.292(4)	0.329(3)	0.193(5)	0.292(4)	0.331(3)	0.197(5)
Al1	0.329(3)	0.708(4)	0.454(5)	0.329(3)	0.710(5)	0.455(5)
Al2	0.296(3)	0.696(4)	0.955(4)	0.295(3)	0.694(4)	0.954(4)
Al3	0.091(2)	0.389(4)	0.636(4)	0.090(2)	0.390(4)	0.635(5)
Al4	0.107(3)	0.913(4)	0.159(5)	0.105(3)	0.913(4)	0.161(5)
O1	0.103(5)	0.153(4)	0.127(6)	0.105(5)	0.154(4)	0.125(6)
O2	0.118(3)	0.676(4)	0.178(5)	0.118(3)	0.676(4)	0.179(5)
O3	0.262(5)	0.446(4)	0.954(5)	0.258(5)	0.444(4)	0.954(5)
O4	0.282(6)	0.934(4)	0.930(6)	0.275(6)	0.931(4)	0.929(7)
O5	0.105(5)	0.151(4)	0.664(7)	0.107(5)	0.153(4)	0.663(7)
O6	0.127(3)	0.638(4)	0.639(4)	0.127(3)	0.638(4)	0.638(4)
O7	0.278(5)	0.452(4)	0.424(6)	0.282(5)	0.454(5)	0.428(6)
O8	0.286(5)	0.941(4)	0.471(5)	0.287(5)	0.943(5)	0.471(5)
O9	0.502(3)	0.278(4)	0.235(5)	0.502(3)	0.278(4)	0.235(5)
O10	0.495(3)	0.232(5)	0.766(5)	0.496(3)	0.229(5)	0.767(5)
<i>U</i> <sub>iso</sub>	0.44(5)			0.57(6)		
Observations	670			670		
Refined parameters	58			60		
<i>R</i> <sub>p</sub> , <i>wR</i> <sub>p</sub>	0.0347,	0.0475		0.0344,	0.0470	
	1050°C			1200°C		
	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Si1	0.293(5)	0.066(3)	0.707(6)	0.309(5)	0.073(4)	0.718(7)
Si2	0.292(4)	0.331(3)	0.196(5)	0.311(5)	0.340(4)	0.191(7)
Al1	0.330(3)	0.708(4)	0.452(6)	0.312(5)	0.714(5)	0.452(7)
Al2	0.294(3)	0.693(4)	0.954(4)	0.278(4)	0.697(5)	0.951(6)
Al3	0.091(2)	0.389(4)	0.637(5)	0.107(4)	0.393(5)	0.638(6)
Al4	0.105(3)	0.914(4)	0.160(5)	0.091(4)	0.922(4)	0.157(6)
O1	0.104(5)	0.154(3)	0.126(6)	0.121(6)	0.166(4)	0.125(8)
O2	0.117(3)	0.677(4)	0.178(5)	0.101(5)	0.684(4)	0.173(6)
O3	0.265(6)	0.444(4)	0.954(5)	0.277(7)	0.457(5)	0.954(6)
O4	0.273(6)	0.929(3)	0.925(7)	0.269(7)	0.934(4)	0.932(8)
O5	0.108(5)	0.152(3)	0.665(7)	0.122(6)	0.157(5)	0.673(9)
O6	0.127(3)	0.638(4)	0.637(4)	0.111(4)	0.636(5)	0.637(6)
O7	0.278(5)	0.453(4)	0.425(6)	0.291(7)	0.460(5)	0.421(8)
O8	0.287(5)	0.942(4)	0.469(5)	0.282(7)	0.954(5)	0.465(6)
O9	0.504(3)	0.282(4)	0.236(5)	0.518(4)	0.282(6)	0.238(7)
O10	0.494(3)	0.231(5)	0.769(5)	0.511(4)	0.238(6)	0.768(7)
<i>U</i> <sub>iso</sub>	0.62(6)			1.23(8)		
Observations	670			670		
Refined parameters	58			52		
<i>R</i> <sub>p</sub> , <i>wR</i> <sub>p</sub>	0.0339,	0.0452		0.0555,	0.0715	

