

Table 5. Rietveld results for runs at 400 MPa

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2 σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2	
2-98A 500 °C	mica 1M	5.205 (3)	8.989 (5)	10.340 (5)	101.60 (4)	0.10 (1)	0.197 (26)	0.082	1.81	1.091	
	mica 2M1	5.195 (2)	8.996 (8)	20.327 (13)	95.58 (7)	0.06 (1)					
	mica 2M2	8.998 (6)	5.229 (9)	20.529 (13)	100.00 (6)	<0.01					
	mica 3T	5.214 (7)		30.065 (94)		<0.01					
	fsp	8.658 (2)	13.048 (2)	7.185 (1)	116.02 (1)	0.57 (1)					0.243 (8)
	qtz	4.912 (1)		5.403 (1)		0.27 (1)					
4-98 500 °C	mica 1M	5.211 (2)	8.999 (4)	10.400 (4)	101.52 (2)	0.18 (1)	0.456 (21)	0.086	1.76	1.128	
	mica 2M1	5.197 (3)	9.010 (8)	20.489 (9)	95.90 (6)	0.10 (1)					
	mica 2M2	9.017 (4)	5.206 (7)	20.694 (9)	100.12 (6)	0.07 (1)					
	mica 3T	5.224 (6)		30.603 (41)		<0.01					
	fsp	8.739 (2)	13.053 (3)	7.192 (2)	116.11 (2)	0.25 (1)					0.597 (12)
	qtz	4.915 (1)		5.407 (1)		0.40 (1)					
5-98A 500 °C	fsp	8.621 (1)	13.034 (1)	7.177 (1)	116.03 (1)	0.94 (1)	0.077 (3)	0.054	1.60	1.236	
	qtz	4.914 (1)		5.405 (1)		0.06 (1)					
6-98 600 °C	mica 1M	5.206 (1)	8.995 (2)	10.395 (2)	101.51 (2)	0.28 (1)	0.422 (13)	0.097	1.60	1.227	
	mica 2M1	5.196 (2)	9.007 (3)	20.453 (6)	95.81 (4)	0.17 (1)					
	mica 2M2	9.010 (3)	5.201 (5)	20.686 (6)	100.17 (4)	0.10 (1)					
	mica 3T	5.225 (5)		30.374 (38)		<0.01					
	qtz	4.913 (1)		5.404 (1)		0.44 (1)					
7-98 600 °C	mica 1M	5.210 (2)	8.991 (4)	10.332 (4)	101.63 (3)	0.13 (1)	0.181 (19)	0.086	1.84	1.106	
	mica 2M1	5.196 (2)	9.009 (3)	20.333 (8)	95.81 (4)	0.14 (1)					
	mica 2M2	9.001 (5)	5.189 (4)	20.567 (8)	100.19 (4)	0.08 (1)					
	mica 3T	5.223 (6)		29.897 (78)		<0.01					
	fsp	8.658 (2)	13.050 (2)	7.189 (1)	116.02 (2)	0.31 (1)					0.247 (11)
	qtz	4.916 (1)		5.407 (1)		0.35 (1)					
8-98 600 °C	fsp	8.614 (1)	13.029 (1)	7.178 (1)	116.01 (1)	0.92 (1)	0.042 (4)	0.052	1.58	1.280	
	qtz	4.911 (1)		5.401 (1)		0.08 (1)					
9-98 500 °C	mica 1M	5.211 (4)	9.010 (7)	10.437 (6)	101.43 (5)	0.14 (2)	0.622 (31)	0.075	1.77	1.149	
	mica 2M1	5.203 (4)	9.018 (8)	20.572 (13)	95.74 (8)	0.11 (2)					
	mica 2M2	9.021 (7)	5.221 (7)	20.780 (18)	100.04 (9)	0.05 (1)					
	mica 3T	5.220 (4)		30.586 (66)		<0.01					
	fsp	8.744 (3)	13.068 (4)	7.189 (2)	116.05 (2)	0.25 (1)					0.624 (16)
	qtz	4.915 (1)		5.407 (1)		0.45 (1)					
10-98 500 °C	mica 1M	5.204 (4)	8.996 (9)	10.326 (7)	101.68 (6)	0.06 (1)	0.141 (37)	0.076	1.84	1.060	
	mica 2M1	5.184 (3)	9.001 (6)	20.313 (16)	95.83 (8)	0.05 (1)					
	mica 2M2	8.996 (8)	5.189 (6)	20.530 (21)	100.09 (9)	0.03 (1)					
	mica 3T	5.234 (4)		29.911 (63)		0.01 (1)					
	fsp	8.663 (2)	13.035 (2)	7.177 (1)	116.05 (1)	0.54 (1)					0.256 (8)
	qtz	4.911 (1)		5.402 (1)		0.31 (1)					
11-98 500 °C	fsp	8.629 (1)	13.036 (1)	7.183 (1)	116.04 (1)	0.87 (1)	0.114 (6)	0.058	1.64	1.239	
	qtz	4.915 (1)		5.407 (1)		0.13 (1)					
1-99 500 °C	mica 1M	5.206 (4)	9.005 (5)	10.465 (6)	101.27 (5)	0.16 (2)	0.691 (27)	0.107	1.70	1.231	
	mica 2M1	5.201 (3)	9.016 (8)	20.580 (11)	95.65 (6)	0.16 (2)					
	mica 2M2	9.016 (6)	5.198 (7)	20.851 (16)	100.27 (12)	0.02 (1)					
	mica 3T	5.218 (5)		30.778 (33)		<0.01					
	fsp	8.779 (4)	13.057 (4)	7.184 (3)	116.05 (3)	0.07 (1)					0.769 (19)
	qtz	4.912 (1)		5.404 (1)		0.58 (1)					

Table 5. Rietveld results for runs at 400 MPa (continued)

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2 σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2
2-99 500 °C	mica 1M	5.204(3)	8.986(4)	10.377(4)	101.53(4)	0.10(1)	0.319(23)	0.088	1.84	1.084
	mica 2M1	5.196(3)	9.002(4)	20.381(10)	95.81(7)	0.10(1)				
	mica 2M2	9.011(6)	5.210(10)	20.665(11)	100.34(7)	0.04(1)				
	mica 3T	5.209(4)		30.411(67)		<0.01				
	fsp	8.715(2)	13.045(2)	7.184(1)	116.10(2)	0.38(1)	0.489(10)			
	qtz	4.912(1)		5.404(1)		0.38(1)				
3-99 500 °C	mica 1M	5.210(4)	8.985(6)	10.349(7)	101.50(6)	0.09(1)	0.238(34)	0.091	1.84	1.114
	mica 2M1	5.195(5)	8.999(17)	20.350(15)	95.73(8)	0.05(1)				
	mica 2M2	9.014(7)	5.214(8)	20.574(14)	100.15(7)	<0.01				
	mica 3T	5.211(6)		30.259(67)		<0.01				
	fsp	8.689(2)	13.044(2)	7.184(1)	116.08(1)	0.59(1)	0.376(7)			
	qtz	4.913(1)		5.405(1)		0.27(1)				
4-99 500 °C	mica 1M	5.211(6)	8.979(15)	10.341(8)	101.40(9)	0.04(1)	0.239(46)	0.081	1.79	1.126
	mica 2M1	5.203(4)	8.983(15)	20.378(24)	95.78(9)	<0.01				
	mica 2M2	9.010(11)	5.186(6)	20.605(34)	100.36(14)	<0.01				
	mica 3T	5.209(4)		29.986(47)		<0.01				
	fsp	8.648(1)	13.046(1)	7.188(1)	116.00(1)	0.79(1)	0.199(6)			
	qtz	4.913(1)		5.405(1)		0.17(1)				
5-99 500 °C	mica 1M	5.210(6)	8.983(10)	10.312(8)	101.51(6)	0.01(1)	0.075(43)	0.058	1.62	1.189
	mica 2M1	5.193(5)	8.988(5)	20.241(14)	95.96(8)	<0.01				
	mica 2M2	9.005(11)	5.189(6)	20.451(26)	100.10(11)	<0.01				
	mica 3T	5.224(3)		29.906(62)		<0.01				
	fsp	8.635(1)	13.038(1)	7.183(1)	116.04(1)	0.90(1)	0.137(4)			
	qtz	4.915(1)		5.406(1)		0.09(1)				
6-99 500 °C	fsp	8.606(1)	13.027(1)	7.180(1)	116.03(1)	0.94(1)	0.008(4)	0.053	1.55	1.240
	qtz	4.913(1)		5.403(1)		0.06(1)				
7-99 600 °C	mica 1M	5.208(2)	9.004(4)	10.471(5)	101.47(3)	0.28(3)	0.719(23)	0.111	1.72	1.237
	mica 2M1	5.204(3)	9.016(10)	20.604(9)	95.74(6)	0.15(1)				
	mica 2M2	9.024(5)	5.202(9)	20.827(13)	99.92(8)	0.05(2)				
	mica 3T	5.221(6)		30.784(24)		<0.01				
	qtz	4.913(1)		5.404(1)		0.52(2)				
8-99 600 °C	mica 1M	5.205(2)	8.991(3)	10.377(3)	101.55(3)	0.26(1)	0.351(14)	0.102	1.71	1.184
	mica 2M1	5.192(2)	8.999(3)	20.417(6)	95.80(4)	0.16(1)				
	mica 2M2	9.007(3)	5.197(4)	20.652(5)	100.19(4)	0.10(1)				
	mica 3T	5.226(4)		30.084(52)		<0.01				
	qtz	4.912(1)		5.404(1)		0.48(1)				
9-99 600 °C	mica 1M	5.206(2)	8.988(2)	10.339(3)	101.61(2)	0.19(1)	0.194(14)	0.110	1.84	1.148
	mica 2M1	5.192(2)	9.004(3)	20.337(6)	95.89(3)	0.14(1)				
	mica 2M2	9.008(4)	5.172(4)	20.575(7)	100.23(4)	0.06(1)				
	mica 3T	5.215(6)		29.857(35)		<0.01				
	fsp	8.677(5)	13.039(4)	7.180(3)	116.08(3)	0.13(1)	0.322(24)			
	qtz	4.914(1)		5.405(1)		0.48(1)				
10-99 600 °C	mica 1M	5.204(5)	8.990(10)	10.322(8)	101.64(9)	0.05(1)	0.068(32)	0.079	1.89	1.099
	mica 2M1	5.190(2)	8.998(6)	20.258(11)	95.71(8)	0.08(1)				
	mica 2M2	8.989(9)	5.189(6)	20.514(15)	100.13(10)	0.03(1)				
	mica 3T	5.215(6)		29.854(91)		<0.01				
	fsp	8.645(1)	13.045(1)	7.185(1)	116.02(1)	0.62(1)	0.186(5)			
	qtz	4.914(1)		5.405(1)		0.23(1)				
12-99 600 °C	fsp	8.607(1)	13.041(1)	7.188(1)	115.98(1)	0.92(1)	0.021(3)	0.056	1.57	1.251
	qtz	4.914(1)		5.406(1)		0.08(1)				

Table 5. Rietveld results for runs at 400 MPa (continued)

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2 σ) fraction	x_{NH_4} (2 σ) ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2	
13-99 500 °C	mica 1M	5.210(3)	9.005(5)	10.542(8)	101.28(4)	0.40(3)	1.034(32)	0.089	0.81	2.528	
	mica 2M1	5.205(3)	9.018(6)	20.767(11)	95.50(7)	0.40(1)					
	mica 2M2	9.021(5)	5.202(7)	21.010(16)	99.94(10)	0.11(3)					
	mica 3T	5.222(5)		31.003(33)		0.06(3)					
	qtz	4.910(3)		5.402(5)		0.03(1)					
14-99 500 °C	mica 1M	5.207(4)	9.005(5)	10.471(8)	101.38(5)	0.41(4)	0.721(36)	0.078	0.69	2.920	
	mica 2M1	5.202(4)	9.016(7)	20.601(13)	95.69(8)	0.38(1)					
	mica 2M2	9.020(5)	5.200(6)	20.836(20)	99.93(11)	0.12(4)					
	mica 3T	5.217(5)		30.784(37)		0.04(3)					
	qtz	4.912(2)		5.404(4)		0.03(1)					
15-99 500 °C	mica 1M	5.211(3)	9.001(3)	10.416(3)	101.34(4)	0.38(1)	0.534(14)	0.069	1.02	1.993	
	mica 2M1	5.201(1)	9.015(3)	20.506(6)	95.58(4)	0.41(1)					
	mica 2M2	9.016(4)	5.202(4)	20.752(6)	100.19(5)	0.14(1)					
	mica 3T	5.223(3)		30.349(27)		0.04(1)					
	qtz	4.913(1)		5.404(2)		0.03(1)					
16-99 500 °C	mica 1M	5.206(2)	8.996(3)	10.385(3)	101.32(3)	0.41(1)	0.407(17)	0.061	1.05	1.860	
	mica 2M1	5.197(2)	9.008(3)	20.434(7)	95.52(5)	0.39(1)					
	mica 2M2	9.009(4)	5.210(7)	20.688(7)	100.22(5)	0.17(1)					
	mica 3T	5.220(3)		30.229(33)		0.01(1)					
	qtz	4.912(1)		5.403(3)		0.02(1)					
16-99A 500 °C	mica 1M	5.204(2)	8.993(3)	10.375(3)	101.35(3)	0.41(1)	0.376(15)	0.063	0.87	2.291	
	mica 2M1	5.195(1)	9.004(3)	20.423(7)	95.55(4)	0.40(1)					
	mica 2M2	9.005(3)	5.216(5)	20.671(5)	100.26(4)	0.17(1)					
	mica 3T	5.218(2)		30.232(32)		0.02(1)					
	qtz	4.911(4)		5.404(7)		0.01(1)					
17-99 500 °C	mica 1M	5.204(2)	8.990(3)	10.350(4)	101.48(2)	0.48(2)	0.254(18)	0.068	0.88	2.343	
	mica 2M1	5.191(2)	9.001(3)	20.361(8)	95.75(5)	0.33(1)					
	mica 2M2	9.003(4)	5.198(6)	20.610(8)	100.23(5)	0.17(2)					
	mica 3T	5.221(4)		30.100(35)		0.01(1)					
	qtz	4.911(3)		5.405(5)		0.01(1)					
18-99 500 °C	mica 1M	5.203(2)	8.986(3)	10.327(4)	101.56(2)	0.49(3)	0.156(20)	0.065	0.73	2.794	
	mica 2M1	5.190(2)	8.997(3)	20.312(8)	95.84(5)	0.30(1)					
	mica 2M2	9.002(4)	5.193(5)	20.551(9)	100.16(4)	0.20(3)					
	mica 3T	5.213(7)		30.043(69)		<0.01					
	qtz	4.912(4)		5.405(8)		0.01(1)					
19-99 500 °C	mica 1M	5.202(1)	8.983(2)	10.311(2)	101.63(1)	0.45(1)	0.085(10)	0.058	0.82	2.359	
	mica 2M1	5.188(1)	8.995(2)	20.277(4)	95.85(3)	0.32(1)					
	mica 2M2	8.999(2)	5.190(2)	20.513(4)	100.12(3)	0.22(1)					
	mica 3T	5.212(6)		29.930(53)		<0.01					
	qtz	4.912(3)		5.408(5)		0.01(1)					
20-99 500 °C	mica 1M	5.201(2)	8.982(3)	10.303(3)	101.66(2)	0.45(2)	0.050(15)	0.070	0.79	2.740	
	mica 2M1	5.188(2)	8.993(3)	20.261(6)	95.87(4)	0.32(1)					
	mica 2M2	8.998(3)	5.189(3)	20.494(7)	100.11(4)	0.22(2)					
	mica 3T	5.216(11)		29.891(91)		<0.01					
	qtz	4.910(4)		5.409(7)		0.02(1)					
21-99 500 °C	mica 1M	5.203(2)	8.983(3)	10.301(4)	101.65(2)	0.49(1)	0.046(19)	0.064	0.81	2.438	
	mica 2M1	5.189(2)	8.996(3)	20.258(9)	95.85(4)	0.29(1)					
	mica 2M2	8.999(5)	5.192(4)	20.487(9)	100.07(4)	0.17(2)					
	mica 3T	5.214(14)		29.873(87)		<0.01					
	fsp	8.606(15)	13.022(14)	7.180(8)	116.10(11)	0.02(1)					0.009(73)
	qtz	4.910(4)		5.411(8)		0.02(1)					

Table 5. Rietveld results for runs at 400 MPa (continued)

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2 σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2
22-99 500 °C	mica 1M	5.204(2)	8.984(3)	10.296(3)	101.68(2)	0.48(1)	0.022(17)	0.061	0.86	2.306
	mica 2M1	5.189(2)	8.995(3)	20.248(7)	95.87(4)	0.29(1)				
	mica 2M2	8.997(5)	5.192(4)	20.477(8)	100.06(5)	0.17(1)				
	mica 3T	5.215(15)		29.846(85)		<0.01				
	fsp	8.609(9)	13.030(10)	7.178(5)	116.06(6)	0.04(1)	0.025(44)			
	qtz	4.907(15)		5.417(28)		0.01(1)				
23-99 500 °C	mica 1M	5.206(1)	8.987(2)	10.291(3)	101.72(2)	0.47(1)	0.000(14)	0.056	0.91	2.159
	mica 2M1	5.190(2)	9.000(2)	20.239(6)	95.88(4)	0.28(1)				
	mica 2M2	9.003(4)	5.191(3)	20.460(7)	100.04(4)	0.15(1)				
	fsp	8.602(4)	13.044(6)	7.183(3)	115.99(3)	0.09(1)	0.000(22)			
	qtz	4.895(11)		5.422(22)		0.01(1)				
38-99 400 °C	mica 1M	5.215(13)	9.004(11)	10.404(9)	101.42(14)	0.01(1)	0.488(63)	0.071	1.31	1.553
	mica 2M1	5.203(17)	9.004(46)	20.488(33)	95.53(19)	0.01(1)				
	mica 2M2	9.017(12)	5.217(6)	20.720(16)	99.88(14)	<0.01				
	mica 3T	5.221(8)		30.475(39)		0.01(1)				
	fsp	8.745(1)	13.043(1)	7.186(1)	116.10(1)	0.82(1)	0.615(5)			
	qtz	4.912(1)		5.404(1)		0.15(1)				
39-99 400 °C	mica 1M	5.201(9)	9.019(12)	10.415(11)	101.38(11)	0.02(1)	0.537(65)	0.075	1.52	1.332
	mica 2M1	5.203(10)	9.024(36)	20.523(44)	95.67(20)	0.01(1)				
	mica 2M2	9.011(7)	5.227(8)	20.735(21)	100.01(10)	0.02(1)				
	mica 3T	5.221(9)		30.490(29)		0.01(1)				
	fsp	8.740(1)	13.046(1)	7.190(1)	116.09(1)	0.78(1)	0.598(6)			
	qtz	4.914(1)		5.406(1)		0.17(1)				
40-99 400 °C	mica 1M	5.202(6)	8.998(8)	10.444(9)	101.32(6)	<0.01	0.541(38)	0.068	1.61	1.231
	mica 2M1	5.207(3)	8.997(12)	20.532(14)	95.64(7)	<0.01				
	mica 2M2	9.032(6)	5.200(6)	20.720(15)	100.00(8)	0.02(1)				
	mica 3T	5.216(4)		30.580(19)		0.01(1)				
	fsp	8.704(2)	13.047(2)	7.190(1)	116.07(1)	0.79(1)	0.441(7)			
	qtz	4.914(1)		5.406(1)		0.17(1)				
43-99 400 °C	fsp	8.647(1)	13.048(1)	7.184(1)	116.02(1)	0.87(1)	0.194(4)	0.068	1.70	1.168
	qtz	4.914(1)		5.406(1)		0.13(1)				
44-99 400 °C	fsp	8.625(1)	13.046(1)	7.183(1)	116.01(1)	0.89(1)	0.098(3)	0.061	1.74	1.177
	qtz	4.915(1)		5.406(1)		0.11(1)				
1-00 600 °C	mica 1M	5.208(2)	9.003(2)	10.432(3)	101.35(4)	0.23(1)	0.609(16)	0.082	1.19	1.726
	mica 2M1	5.200(1)	9.016(3)	20.547(7)	95.51(4)	0.23(1)				
	mica 2M2	9.019(3)	5.208(4)	20.795(7)	100.16(5)	0.11(1)				
	mica 3T	5.221(3)		30.352(28)		0.01(1)				
	qtz	4.914(1)		5.404(1)		0.16(1)				
	cor	4.757(1)		12.984(4)		0.27(1)				
2-00 600 °C	mica 1M	5.208(2)	8.993(2)	10.362(4)	101.48(2)	0.35(2)	0.310(23)	0.077	1.13	1.782
	mica 2M1	5.194(2)	9.007(3)	20.399(11)	95.74(5)	0.25(1)				
	mica 2M2	9.009(3)	5.200(6)	20.636(11)	100.26(5)	0.17(2)				
	mica 3T	5.226(4)		30.132(43)		0.01(1)				
	qtz	4.914(1)		5.405(1)		0.10(1)				
	cor	4.758(1)		12.988(5)		0.14(1)				

Table 5. Rietveld results for runs at 400 MPa (continued)

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2 σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2
3-00 600 °C	mica 1M	5.205 (1)	8.985 (1)	10.320 (2)	101.65 (1)	0.36 (1)	0.116 (8)	0.065	1.14	1.818
	mica 2M1	5.191 (1)	9.001 (1)	20.296 (4)	95.86 (2)	0.31 (1)				
	mica 2M2	9.004 (2)	5.190 (1)	20.528 (3)	100.13 (2)	0.24 (1)				
	mica 3T	5.220 (18)		30.140 (128)		<0.01				
	qtz	4.914 (1)		5.404 (1)		0.05 (1)				
	cor	4.758 (1)		12.990 (7)		0.06 (1)				
4-00 600 °C	mica 1M	5.202 (1)	8.982 (2)	10.298 (3)	101.68 (2)	0.50 (1)	0.033 (14)	0.074	0.76	2.620
	mica 2M1	5.188 (2)	8.992 (3)	20.254 (6)	95.89 (3)	0.30 (1)				
	mica 2M2	8.997 (3)	5.189 (4)	20.485 (6)	100.10 (4)	0.19 (1)				
	mica 3T	5.199 (25)		29.919 (237)		<0.01				
7-00 400 °C	mica 1M	5.214 (3)	9.007 (4)	10.445 (3)	101.29 (5)	0.36 (1)	0.664 (19)	0.082	0.81	2.497
	mica 2M1	5.205 (2)	9.020 (4)	20.577 (8)	95.54 (5)	0.42 (1)				
	mica 2M2	9.025 (4)	5.214 (5)	20.804 (8)	100.09 (7)	0.16 (1)				
	mica 3T	5.230 (3)		30.413 (31)		0.04 (1)				
	qtz	4.913 (2)		5.404 (3)		0.03 (1)				
8-00 400 °C	mica 1M	5.210 (3)	8.995 (4)	10.384 (6)	101.39 (3)	0.43 (2)	0.407 (27)	0.071	1.01	2.008
	mica 2M1	5.199 (3)	9.012 (4)	20.449 (11)	95.69 (6)	0.38 (1)				
	mica 2M2	9.011 (5)	5.215 (7)	20.680 (13)	100.27 (6)	0.18 (2)				
	mica 3T	5.229 (4)		30.152 (41)		0.01 (1)				
	qtz	4.908 (7)		5.410 (12)		0.01 (1)				
9-00 400 °C	mica 1M	5.206 (2)	8.992 (4)	10.345 (5)	101.47 (3)	0.44 (2)	0.217 (23)	0.059	0.98	1.997
	mica 2M1	5.196 (2)	9.007 (3)	20.332 (9)	95.67 (5)	0.41 (1)				
	mica 2M2	9.003 (5)	5.206 (6)	20.598 (11)	100.27 (5)	0.14 (2)				
	mica 3T	5.225 (5)		29.908 (46)		<0.01				
	qtz	4.911 (3)		5.406 (6)		0.01 (1)				
10-00 400 °C	mica 1M	5.204 (2)	8.986 (4)	10.316 (5)	101.53 (3)	0.42 (2)	0.100 (23)	0.061	0.98	2.120
	mica 2M1	5.194 (2)	9.002 (3)	20.272 (9)	95.72 (5)	0.41 (1)				
	mica 2M2	8.998 (5)	5.201 (5)	20.539 (11)	100.18 (5)	0.16 (2)				
	mica 3T	5.223 (5)		30.078 (65)		<0.01				
	qtz	4.912 (5)		5.408 (9)		0.01 (1)				

Table 6. Rietveld results for runs at 1500 MPa

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2	
28-99 500 °C	mica 1M	5.218 (7)	8.989 (6)	10.313 (8)	101.41 (7)	0.04 (1)	0.079 (25)	0.100	1.68	1.227	
	mica 2M1	5.187 (4)	8.997 (4)	20.255 (10)	95.36 (6)	0.05 (1)					
	mica 2M2	8.985 (11)	5.178 (7)	20.465 (14)	99.98 (11)	<0.01					
	mica 3T	5.194 (5)		30.098 (31)		0.03 (1)					
	mica 2Or	5.197 (5)	9.004 (5)	20.085 (18)		<0.01					
	fsp	8.660 (1)	13.043 (1)	7.183 (1)	116.06 (1)	0.63 (1)					0.250 (5)
	qtz	4.914 (1)		5.406 (1)		0.25 (1)					
41-99 500 °C	mica 1M	5.222 (11)	8.987 (10)	10.335 (8)	101.38 (11)	0.05 (1)	0.281 (31)	0.076	1.32	1.554	
	mica 2M1	5.197 (6)	9.003 (4)	20.367 (11)	94.96 (10)	0.11 (2)					
	mica 2M2	9.001 (7)	5.188 (6)	20.589 (16)	100.17 (6)	0.04 (1)					
	mica 3T	5.204 (5)		29.763 (46)		<0.01					
	mica 2Or	5.217 (6)	9.007 (8)	19.843 (33)		<0.01					
	fsp	8.730 (1)	13.053 (2)	7.190 (1)	116.06 (1)	0.59 (1)					0.552 (5)
	qtz	4.914 (1)		5.406 (1)		0.21 (1)					
42-99 500 °C	mica 1M	5.212 (7)	8.975 (9)	10.329 (9)	101.71 (11)	0.04 (1)	0.141 (32)	0.079	1.39	1.405	
	mica 2M1	5.191 (4)	8.992 (4)	20.289 (13)	95.20 (7)	0.10 (1)					
	mica 2M2	9.024 (7)	5.204 (5)	20.535 (15)	100.03 (6)	0.02 (1)					
	mica 3T	5.191 (4)		29.998 (50)		0.03 (1)					
	mica 2Or	5.211 (10)	9.000 (8)	20.240 (41)		0.01 (1)					
	fsp	8.683 (1)	13.045 (1)	7.184 (1)	116.06 (1)	0.73 (1)					0.349 (5)
	qtz	4.912 (1)		5.404 (1)		0.07 (1)					
45-99 500 °C	mica 1M	5.205 (3)	9.012 (7)	10.261 (9)	101.69 (8)	0.03 (1)	-0.043 (37)	0.082	1.64	1.284	
	mica 2M1	5.200 (3)	9.034 (5)	20.231 (14)	95.74 (8)	0.03 (1)					
	mica 2M2	9.004 (6)	5.199 (4)	20.448 (14)	100.25 (6)	<0.01					
	mica 3T	5.204 (3)		29.936 (51)		0.01 (1)					
	mica 2Or	5.186 (4)	9.019 (6)	19.933 (43)		<0.01					
	fsp	8.635 (1)	13.036 (1)	7.182 (1)	116.05 (1)	0.80 (1)					0.139 (4)
	qtz	4.914 (1)		5.405 (1)		0.12 (1)					
46-99 500 °C	mica 1M	5.193 (10)	9.015 (17)	10.266 (21)	101.37 (15)	<0.01	-0.083 (40)	0.070	1.52	1.271	
	mica 2M1	5.193 (7)	9.023 (8)	20.194 (15)	95.89 (9)	0.03 (1)					
	mica 2M2	8.981 (12)	5.208 (10)	20.424 (28)	100.16 (17)	<0.01					
	mica 3T	5.215 (5)		29.887 (99)		<0.01					
	mica 2Or	5.207 (12)	8.973 (10)	19.857 (53)		<0.01					
	fsp	8.616 (1)	13.030 (1)	7.180 (1)	116.05 (1)	0.87 (1)					0.054 (3)
	qtz	4.912 (1)		5.404 (1)		0.08 (1)					
5-00 500 °C	mica 1M	5.204 (4)	9.010 (8)	10.366 (9)	101.61 (10)	0.16 (3)	0.414 (17)	0.120	0.84	2.391	
	mica 2M1	5.193 (2)	8.999 (3)	20.449 (12)	95.51 (5)	0.57 (1)					
	mica 2M2	9.004 (8)	5.202 (4)	20.625 (15)	100.11 (10)	0.13 (3)					
	mica 3T	5.214 (3)		30.435 (26)		0.06 (2)					
	mica 2Or	5.196 (4)	8.976 (9)	20.101 (30)		0.08 (3)					
6-00 500 °C	mica 1M	5.204 (3)	8.990 (4)	10.334 (5)	101.55 (6)	0.18 (1)	0.199 (12)	0.073	1.11	1.748	
	mica 2M1	5.191 (1)	8.999 (1)	20.334 (5)	95.61 (3)	0.58 (1)					
	mica 2M2	9.002 (3)	5.194 (2)	20.561 (6)	100.16 (5)	0.13 (1)					
	mica 3T	5.212 (1)		30.338 (9)		0.06 (1)					
	mica 2Or	5.196 (3)	8.994 (14)	20.105 (28)		0.05 (1)					
11-00 500 °C	mica 1M	5.195 (2)	8.975 (3)	10.278 (5)	101.46 (6)	0.17 (1)	-0.035 (12)	0.082	0.90	1.816	
	mica 2M1	5.185 (1)	8.988 (1)	20.203 (5)	95.47 (3)	0.59 (1)					
	mica 2M2	8.989 (3)	5.186 (1)	20.469 (6)	100.15 (4)	0.16 (1)					
	mica 3T	5.204 (1)		30.226 (9)		0.04 (1)					
	mica 2Or	5.194 (3)	8.955 (4)	20.018 (26)		0.04 (1)					

Table 6. Rietveld results for runs at 1500 MPa (continued)

run	phase	$a(2\sigma)$ (Å)	$b(2\sigma)$ (Å)	$c(2\sigma)$ (Å)	$\beta(2\sigma)$ (°)	wt(2σ) fraction	$x_{NH_4}(2\sigma)$ ss	w_{Rp}	Durbin- Watson	χ^2
12-00 500 °C	mica 1M	5.195 (2)	8.987 (4)	10.262 (5)	101.60 (6)	0.16 (1)				
	mica 2M1	5.187 (1)	8.992 (1)	20.178 (4)	95.73 (2)	0.60 (1)				
	mica 2M2	8.990 (4)	5.188 (2)	20.428 (6)	100.16 (4)	0.13 (1)	-0.103 (7)	0.068	1.07	1.856
	mica 3T	5.205 (1)		30.167 (9)		0.09 (1)				
	mica 2Or	5.189 (4)	8.987 (12)	20.051 (24)		0.02 (1)				
13-00 600 °C	mica 1M	5.206 (4)	8.989 (6)	10.369 (9)	101.37 (11)	0.08 (1)				
	mica 2M1	5.196 (3)	9.002 (3)	20.344 (8)	95.62 (6)	0.21 (2)				
	mica 2M2	9.004 (7)	5.190 (5)	20.595 (23)	100.25 (8)	0.07 (2)	0.231 (24)			
	mica 3T	5.213 (4)		30.352 (36)		0.05 (1)		0.074	1.57	1.318
	mica 2Or	5.177 (7)	9.002 (9)	20.291 (23)		0.01 (1)				
	fsp	8.715 (2)	13.048 (2)	7.185 (1)	116.06 (2)	0.20 (1)	0.486 (8)			
	qtz	4.913 (1)		5.404 (1)		0.38 (1)				
14-00 600 °C	mica 1M	5.182 (4)	8.995 (6)	10.309 (5)	101.55 (9)	0.07 (1)				
	mica 2M1	5.191 (2)	9.001 (2)	20.260 (5)	95.46 (4)	0.24 (1)				
	mica 2M2	8.997 (5)	5.193 (2)	20.502 (8)	100.01 (6)	0.05 (1)	0.071 (13)			
	mica 3T	5.209 (4)		29.910 (31)		0.01 (1)		0.065	1.45	1.375
	mica 2Or	5.209 (8)	8.996 (5)	19.913 (44)		0.01 (1)				
	fsp	8.674 (1)	13.045 (1)	7.185 (1)	116.06 (1)	0.42 (1)	0.308 (4)			
	qtz	4.913 (1)		5.405 (1)		0.20 (1)				
15-00 600 °C	mica 1M	5.198 (3)	8.978 (6)	10.266 (5)	101.51 (6)	0.05 (1)				
	mica 2M1	5.187 (2)	8.996 (2)	20.202 (5)	95.75 (3)	0.16 (1)				
	mica 2M2	8.983 (3)	5.194 (2)	20.428 (7)	100.10 (5)	0.03 (1)	-0.061 (13)			
	mica 3T	5.208 (3)		29.616 (25)		<0.01		0.073	1.37	1.539
	mica 2Or	5.199 (3)	9.027 (4)	19.692 (24)		<0.01				
	fsp	8.633 (1)	13.032 (1)	7.184 (1)	116.03 (1)	0.680	0.127 (4)			
	qtz	4.915 (1)		5.406 (1)		0.07 (1)				
16-00 600 °C	mica 1M	5.204 (3)	8.977 (5)	10.288 (6)	101.63 (6)	0.04 (1)				
	mica 2M1	5.196 (2)	8.986 (2)	20.206 (11)	95.75 (6)	0.06 (1)				
	mica 2M2	8.993 (5)	5.190 (2)	20.463 (10)	100.26 (5)	<0.01	-0.040 (26)			
	mica 3T	5.202 (3)		29.801 (47)		<0.01		0.061	1.38	1.403
	mica 2Or	5.199 (4)	8.997 (6)	19.699 (42)		<0.01				
	fsp	8.621 (1)	13.032 (1)	7.182 (1)	116.04 (1)	0.85 (1)	0.077 (3)			
	qtz	4.914 (1)	4.914 (1)	5.405 (1)		0.05 (1)				
17-00 500 °C	mica 1M	5.194 (4)	9.002 (5)	10.442 (6)	101.42 (7)	0.14 (1)				
	mica 2M1	5.203 (3)	9.014 (3)	20.525 (11)	95.51 (5)	0.26 (2)				
	mica 2M2	9.015 (6)	5.200 (4)	20.769 (14)	99.93 (8)	0.08 (2)	0.583 (27)			
	mica 3T	5.218 (3)		30.706 (32)		<0.01		0.070	1.48	1.334
	mica 2Or	5.206 (7)	8.977 (10)	20.436 (28)		0.02 (1)				
	fsp	8.776 (4)	13.058 (6)	7.193 (2)	116.06 (3)	0.12 (1)	0.755 (19)			
	qtz	4.914 (1)		5.405 (1)		0.38 (1)				
19-00 500 °C	mica 1M	5.209 (5)	9.005 (6)	10.432 (8)	101.44 (10)	0.17 (2)				
	mica 2M1	5.201 (3)	9.012 (4)	20.522 (15)	95.49 (6)	0.33 (2)				
	mica 2M2	9.022 (8)	5.205 (6)	20.765 (16)	99.99 (11)	0.10 (2)	0.572 (35)			
	mica 3T	5.218 (4)		30.643 (40)		0.01 (1)		0.094	1.10	1.872
	mica 2Or	5.207 (6)	8.986 (11)	20.439 (33)		0.02 (1)				
	fsp	8.779 (9)	13.062 (15)	7.193 (6)	115.98 (8)	0.04 (2)	0.771 (45)			
	qtz	4.915 (1)		5.407 (1)		0.33 (1)				
20-00 500 °C	mica 1M	5.207 (4)	8.992 (7)	10.411 (8)	101.32 (8)	0.21 (1)				
	mica 2M1	5.196 (2)	9.001 (2)	20.494 (10)	95.35 (5)	0.54 (1)				
	mica 2M2	9.003 (7)	5.203 (3)	20.708 (11)	100.14 (10)	0.14 (1)	0.519 (29)			
	mica 3T	5.216 (2)		30.704 (23)		0.04 (1)		0.103	0.80	2.558
	mica 2Or	5.195 (3)	8.974 (5)	20.366 (21)		0.05 (1)				
	qtz	4.912 (2)		5.402 (4)		0.02 (1)				