

AM-88-388

End-member villyaellenite from Mapimi, Durango, Mexico: Descriptive mineralogy, crystal structure, and implications for the ordering of Mn and Ca in type villyaellenite

Anthony R. Kampf, Charles R. Ross II

For deposit: Table 5

American Mineralogist, 73, 9-10, 1172-1178.

pp. (7)

Table 5. Observed and calculated structure factors for
villyaellenite from Mapimi. (To be deposited at the
Mineralogical Society of America headquarters)

H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	
				12	-4	144	148	3	-3	405	345	9	-8	45	60	
****	K	=	0	****	12	-2	250	243	3	-2	103	108	9	-7	245	236
0	2	266	268	12	0	856	829	3	-1	259	293	9	-6	184	180	
0	4	607	644	12	2	433	363	3	0	150	124	9	-5	520	491	
0	6	31	49	12	4	623	557	3	1	274	286	9	-4	311	316	
0	8	62	80	12	6	232	232	3	2	357	359	9	-3	292	304	
2	-10	67	54	12	8	211	190	3	3	174	184	9	-2	267	272	
2	-8	299	266	14	-8	160	147	3	4	256	257	9	-1	163	155	
2	-6	774	691	14	-6	401	380	3	5	283	291	9	0	27	33	
2	-4	460	422	14	-4	139	139	3	6	98	103	9	1	200	162	
2	-2	480	399	14	-2	325	312	3	7	403	414	9	2	22	26	
2	0	355	291	14	2	346	282	3	8	67	71	9	3	149	137	
2	2	172	164	14	6	42	41	3	9	76	80	9	4	28	35	
2	4	48	60	16	-8	165	158	3	10	85	95	9	5	160	153	
2	6	123	134	16	-6	137	140	3	11	235	248	9	6	32	31	
2	8	229	258	16	-4	239	231	5	-10	83	95	9	7	56	56	
2	10	70	94	16	0	30	42	5	-9	101	86	9	8	171	164	
4	-10	291	246	16	2	428	379	5	-8	337	296	9	9	32	47	
4	-8	180	150	16	4	214	192	5	-7	319	283	11	-10	40	52	
4	-6	174	160	16	6	53	55	5	-6	165	149	11	-9	245	221	
4	-4	529	465	18	-6	101	105	5	-5	146	132	11	-8	224	219	
4	-2	219	236	18	-4	54	68	5	-4	36	44	11	-7	169	153	
4	0	406	371	18	-2	243	252	5	-2	150	163	11	-6	246	229	
4	2	435	459	18	2	157	140	5	-1	560	583	11	-5	106	112	
4	4	512	517	18	4	183	159	5	0	187	162	11	-4	122	137	
4	6	166	171	20	-2	90	110	5	1	335	314	11	-3	256	276	
4	10	115	108	20	0	93	113	5	2	305	277	11	-2	119	133	
6	-10	190	191	20	2	153	155	5	3	212	228	11	-1	65	65	
6	-8	271	253					5	4	53	67	11	0	156	156	
6	-6	324	293	****	K	=	1	****	5	5	308	311	11	1	262	233
6	-4	168	162	1	-11	138	111	5	6	135	139	11	2	29	36	
6	-2	430	467	1	-10	166	154	5	7	235	242	11	3	100	88	
6	0	497	439	1	-9	226	207	5	8	213	222	11	5	108	107	
6	2	238	223	1	-7	177	166	5	9	137	133	11	6	83	87	
6	4	270	266	1	-6	88	85	5	10	257	267	11	7	187	181	
6	6	175	170	1	-5	256	238	7	-11	40	32	11	8	114	118	
6	8	294	303	1	-4	90	96	7	-10	232	214	11	9	101	108	
6	10	112	124	1	-3	120	117	7	-9	101	99	13	-9	134	132	
8	-10	56	50	1	-2	18	11	7	-8	29	17	13	-8	111	116	
8	-8	260	238	1	-1	227	197	7	-7	278	261	13	-7	88	98	
8	-6	404	381	1	0	306	251	7	-6	418	379	13	-6	62	66	
8	-4	383	384	1	1	148	157	7	-5	110	103	13	-5	167	172	
8	-2	132	132	1	2	17	15	7	-4	89	87	13	-3	31	28	
8	0	743	683	1	3	587	613	7	-3	367	391	13	-2	155	162	
8	2	263	233	1	4	126	127	7	-2	331	345	13	-1	110	121	
8	4	404	376	1	5	24	32	7	-1	231	213	13	0	208	200	
8	10	266	265	1	6	499	516	7	0	44	36	13	1	111	99	
10	-6	62	52	1	7	119	122	7	1	633	571	13	2	63	61	
10	-4	76	92	1	8	199	216	7	3	62	68	13	3	193	165	
10	-2	227	235	1	9	270	274	7	4	206	201	13	4	56	66	
10	0	215	193	1	10	53	70	7	5	89	90	13	5	111	112	
10	2	183	155	1	11	56	75	7	6	97	98	13	6	191	180	
10	4	453	415	3	-10	71	60	7	7	254	268	13	7	119	106	
10	6	272	257	3	-8	263	211	7	8	97	108	15	-7	58	78	
10	8	383	371	3	-7	40	40	7	9	25	30	15	-6	216	212	
12	-10	38	56	3	-6	125	109	7	10	28	23	15	-4	206	210	
12	-8	155	153	3	-5	32	27	9	-10	149	135	15	-3	141	148	
12	-6	108	117	3	-4	263	230	9	-9	165	143	15	-1	99	109	

H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC
15	1	145	138	2	8	76	87	8	4	141	142	16	1	40	54
15	2	59	59	2	9	182	209	8	5	75	73	16	2	85	75
15	3	89	93	2	10	32	46	8	6	383	385	16	5	104	91
15	5	140	119	2	11	201	221	8	7	308	311	16	6	63	69
15	6	41	46	4	-11	58	81	8	8	121	128	18	-6	130	118
15	7	230	209	4	-10	294	250	8	9	72	82	18	-5	188	187
17	-7	83	98	4	-9	75	79	8	10	207	198	18	-4	49	66
17	-6	48	61	4	-8	228	199	10	-8	97	101	18	0	32	39
17	-5	103	113	4	-7	273	236	10	-7	238	219	18	2	43	59
17	-4	117	122	4	-6	368	321	10	-6	179	177	18	3	98	91
17	-3	41	53	4	-5	234	208	10	-5	43	53	20	-4	61	79
17	-2	65	75	4	-4	449	409	10	-4	203	215	20	-3	50	66
17	-1	167	180	4	-3	135	128	10	-3	33	40	20	0	36	46
17	1	157	150	4	-2	312	339	10	-2	395	406	20	1	151	147
17	2	190	172	4	-1	398	401	10	0	240	230	20	2	52	67
17	3	97	86	4	0	347	289	10	1	470	396				
17	4	38	30	4	1	18	25	10	2	695	626	****	K = 3	****	
17	5	290	241	4	2	175	184	10	3	242	218	1	-11	305	270
19	-6	99	110	4	3	128	125	10	4	50	56	1	-10	50	53
19	-4	102	109	4	4	147	158	10	5	35	49	1	-9	59	80
19	-3	116	130	4	5	332	350	10	6	354	349	1	-8	132	124
19	-2	193	200	4	6	134	145	10	7	120	129	1	-7	37	35
19	-1	91	97	4	7	108	119	10	8	89	97	1	-6	276	264
19	1	305	289	4	9	53	63	10	9	44	57	1	-5	58	51
19	3	50	53	4	10	178	191	12	-6	71	74	1	-4	39	48
19	4	70	73	6	-11	49	42	12	-5	169	174	1	-3	341	324
21	-1	168	173	6	-10	63	73	12	-4	266	269	1	-2	240	252
21	0	57	65	6	-9	243	211	12	-3	267	275	1	-1	35	33
				6	-8	154	139	12	-2	152	159	1	0	150	141
****	K = 2	****		6	-7	36	51	12	0	230	228	1	1	167	170
0	0	215	219	6	-6	71	79	12	1	78	80	1	2	99	108
0	1	114	117	6	-5	282	276	12	2	119	104	1	3	270	282
0	2	395	372	6	-4	33	42	12	3	143	131	1	5	523	563
0	3	431	428	6	-3	182	184	12	4	136	131	1	6	141	155
0	4	325	313	6	-2	144	151	12	5	69	72	1	7	162	171
0	5	93	90	6	-1	403	385	12	6	223	207	1	9	131	135
0	6	320	318	6	0	39	26	12	7	102	98	1	10	81	96
0	7	152	156	6	1	390	340	14	-9	244	222	3	-11	50	46
0	8	115	121	6	2	36	41	14	-7	160	154	3	-10	176	150
0	10	74	83	6	3	83	83	14	-6	201	210	3	-7	148	142
2	-11	90	75	6	4	29	37	14	-5	73	88	3	-6	24	16
2	-10	152	136	6	5	40	45	14	-4	48	73	3	-5	46	51
2	-9	239	226	6	8	80	90	14	-2	356	341	3	-4	50	54
2	-8	134	132	6	9	107	110	14	-1	42	13	3	-3	235	212
2	-7	310	282	8	-10	215	197	14	0	199	206	3	-2	34	19
2	-6	410	374	8	-9	110	110	14	1	127	129	3	-1	484	528
2	-5	77	85	8	-8	27	32	14	2	371	312	3	0	317	271
2	-4	151	141	8	-7	167	160	14	3	60	60	3	1	423	435
2	-3	151	151	8	-6	108	112	14	4	247	221	3	2	158	177
2	-2	999	871	8	-5	250	233	14	5	224	202	3	3	296	312
2	-1	223	225	8	-4	219	219	14	6	277	246	3	4	415	447
2	0	275	221	8	-3	117	129	16	-8	163	156	3	5	332	358
2	1	346	365	8	-2	62	75	16	-6	122	126	3	6	92	102
2	2	721	787	8	-1	163	165	16	-5	73	81	3	7	122	144
2	3	180	182	8	0	80	74	16	-4	261	271	3	8	301	336
2	5	125	130	8	1	266	222	16	-2	48	59	3	9	83	109
2	6	394	426	8	2	401	366	16	-1	276	286	5	-10	85	86
2	7	77	93	8	3	55	64	16	0	275	275	5	-8	127	118

H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC
5	-7	63	72	11	-3	191	212	0	3	125	131	6	4	330	341
5	-6	82	89	11	-1	332	344	0	4	532	513	6	5	81	87
5	-5	490	457	11	0	78	77	0	5	84	86	6	6	87	96
5	-4	508	489	11	1	79	77	0	6	92	94	6	7	206	213
5	-3	259	262	11	2	116	110	0	7	98	101	6	8	171	171
5	-2	149	157	11	3	107	99	0	8	272	279	6	9	81	91
5	-1	128	160	11	4	112	115	0	9	217	223	8	-10	232	210
5	0	484	423	11	5	200	204	0	10	84	94	8	-9	184	176
5	1	53	54	11	6	195	190	2	-10	166	159	8	-8	260	258
5	2	185	178	11	7	96	115	2	-8	283	261	8	-7	232	229
5	3	165	166	11	8	98	101	2	-7	176	170	8	-6	94	97
5	4	177	182	13	-9	38	52	2	-6	42	42	8	-5	146	144
5	5	64	69	13	-8	34	44	2	-5	453	421	8	-3	32	39
5	6	109	115	13	-7	103	100	2	-4	67	71	8	-2	160	172
5	8	105	123	13	-6	202	196	2	-3	170	160	8	0	128	120
5	9	191	205	13	-5	88	107	2	-2	116	105	8	1	225	205
7	-9	119	121	13	-2	158	173	2	-1	161	190	8	2	196	193
7	-8	153	150	13	-1	84	84	2	0	116	114	8	3	205	212
7	-7	138	129	13	0	128	135	2	1	268	272	8	4	155	161
7	-6	110	108	13	1	48	46	2	2	203	219	8	5	53	64
7	-5	166	161	13	2	81	70	2	3	125	135	8	6	158	167
7	-4	65	76	13	3	162	140	2	4	120	130	8	7	67	77
7	-3	80	100	13	4	41	44	2	5	307	322	8	8	141	146
7	-2	106	118	13	5	188	180	2	6	203	231	8	9	163	172
7	-1	47	57	13	6	33	45	2	7	40	64	10	-7	38	42
7	0	383	349	13	7	50	67	2	8	154	178	10	-5	223	238
7	1	52	46	15	-7	101	104	2	9	138	156	10	-4	135	157
7	2	157	152	15	-4	60	56	2	10	35	54	10	-3	32	36
7	3	432	428	15	-3	132	142	4	-9	164	153	10	-1	303	297
7	4	394	391	15	-2	34	41	4	-8	119	113	10	0	374	358
7	5	370	390	15	-1	196	215	4	-7	249	226	10	1	86	86
7	6	143	148	15	0	111	119	4	-6	65	76	10	2	211	197
7	7	26	27	15	1	45	58	4	-5	75	76	10	3	45	50
7	8	94	98	15	2	41	45	4	-4	181	181	10	5	350	348
7	9	86	92	15	3	254	214	4	-3	157	158	10	6	24	23
7	10	126	131	15	4	210	183	4	-1	195	205	10	8	111	112
9	-9	110	98	15	5	144	133	4	0	439	370	12	-9	164	146
9	-8	287	272	17	-7	55	65	4	1	77	76	12	-8	67	76
9	-7	114	119	17	-5	133	148	4	2	199	205	12	-7	161	163
9	-6	127	126	17	-4	194	200	4	3	309	326	12	-6	262	252
9	-5	102	114	17	-3	46	55	4	6	70	75	12	-5	143	155
9	-4	274	298	17	-1	200	216	4	7	159	176	12	-4	284	315
9	-3	139	151	17	0	190	206	4	8	196	216	12	-3	56	67
9	-2	331	351	17	2	99	98	4	9	40	49	12	-2	69	86
9	-1	653	623	17	3	190	166	4	10	78	92	12	-1	165	174
9	0	266	255	17	4	102	94	6	-10	86	86	12	0	246	249
9	1	279	244	17	5	37	41	6	-9	47	58	12	1	48	48
9	2	154	153	19	-3	198	205	6	-8	211	195	12	2	91	89
9	3	242	238	19	-2	61	84	6	-7	100	107	12	3	209	197
9	5	202	206	19	-1	85	103	6	-6	27	44	12	4	245	229
9	6	30	30	19	0	67	80	6	-5	84	94	12	7	47	60
9	7	77	86	19	2	49	61	6	-4	383	372	14	-8	133	132
9	9	43	67	19	3	144	133	6	-3	458	487	14	-7	95	94
11	-10	139	121					6	-2	170	181	14	-6	35	53
11	-7	200	197	****	K = 4	****		6	0	305	276	14	-5	99	107
11	-6	149	151	0	0	218	229	6	1	38	48	14	-4	33	40
11	-5	189	198	0	1	205	214	6	2	310	298	14	-3	236	242
11	-4	58	77	0	2	178	178	6	3	261	261	14	-2	106	120

H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC
14	-1	152	158	5	-9	117	108	11	6	111	118	4	-9	50	55
14	0	63	71	5	-8	157	156	11	7	149	147	4	-8	50	52
14	1	192	188	5	-7	123	125	13	-8	96	100	4	-6	252	230
14	2	84	96	5	-6	223	216	13	-7	105	110	4	-5	122	115
14	5	63	65	5	-4	35	34	13	-6	74	81	4	-4	148	148
14	6	181	169	5	-3	209	228	13	-4	68	84	4	-3	87	94
16	-7	206	195	5	-2	173	187	13	-3	265	266	4	-2	189	210
16	-5	32	39	5	-1	30	39	13	-2	69	86	4	-1	192	203
16	-4	59	84	5	1	370	350	13	0	146	148	4	0	30	30
16	-3	178	193	5	2	446	453	13	1	308	288	4	1	58	58
16	-2	39	50	5	3	104	110	13	2	284	260	4	2	176	184
16	0	178	193	5	5	64	63	13	4	125	121	4	3	300	305
16	1	41	50	5	6	408	434	13	5	182	168	4	4	297	317
16	2	90	87	5	7	130	135	13	6	124	119	4	6	305	332
16	3	136	122	5	8	51	78	15	-7	74	82	4	7	32	35
16	5	83	84	5	9	27	28	15	-6	65	66	4	8	101	111
18	-4	192	198	7	-7	175	164	15	-5	103	115	6	-9	203	189
18	-3	140	154	7	-6	228	237	15	-4	61	72	6	-8	29	26
18	-1	51	71	7	-5	38	44	15	-3	38	47	6	-6	126	127
18	0	160	168	7	-4	160	166	15	-2	213	220	6	-5	172	169
18	1	58	76	7	-3	132	145	15	-1	93	111	6	-4	130	133
18	2	81	86	7	-2	365	399	15	0	30	44	6	-3	96	104
18	3	92	84	7	-1	167	165	15	2	158	149	6	-2	109	117
				7	0	335	293	15	4	51	54	6	-1	117	123
****	K = 5	****		7	1	250	230	15	5	111	103	6	0	473	410
1	-9	60	64	7	2	399	377	17	-4	64	76	6	1	55	57
1	-8	206	200	7	3	245	245	17	-3	92	110	6	3	68	64
1	-7	239	230	7	5	73	82	17	-1	29	30	6	4	212	210
1	-5	130	129	7	6	104	107	17	1	148	144	6	5	84	95
1	-4	107	112	7	7	110	117	17	2	81	85	6	6	52	62
1	-3	442	446	7	8	57	76	17	3	32	31	6	7	56	64
1	-2	114	120	7	9	45	58	19	-2	67	74	8	-8	28	40
1	-1	291	289	9	-9	50	58					8	-7	37	51
1	0	22	20	9	-8	130	121	****	K = 6	****		8	-6	357	354
1	1	300	310	9	-7	105	107	0	0	339	327	8	-5	64	74
1	2	296	325	9	-6	102	110	0	1	411	389	8	-4	131	137
1	3	82	91	9	-4	342	364	0	2	218	212	8	-3	186	202
1	4	325	355	9	-3	68	84	0	3	164	167	8	-2	340	354
1	5	185	202	9	-1	100	103	0	4	52	53	8	-1	56	56
1	6	21	25	9	0	119	120	0	5	52	66	8	0	70	62
1	10	209	221	9	1	129	120	0	6	176	174	8	1	244	224
3	-10	64	56	9	2	227	210	0	7	124	126	8	2	141	130
3	-9	52	60	9	4	198	198	2	-9	130	112	8	3	104	98
3	-8	29	21	9	5	38	54	2	-8	223	214	8	4	122	124
3	-7	222	197	9	6	47	53	2	-7	35	46	8	5	108	118
3	-5	136	131	9	7	134	139	2	-6	311	288	8	6	47	56
3	-4	50	59	9	8	49	60	2	-5	206	211	8	7	45	44
3	-3	94	103	11	-6	48	56	2	-3	51	65	8	8	182	195
3	-2	417	448	11	-5	104	107	2	-1	55	72	10	-8	209	192
3	-1	67	78	11	-4	205	222	2	0	296	283	10	-7	92	109
3	0	347	311	11	-3	45	62	2	1	31	35	10	-6	243	231
3	1	171	178	11	-2	36	44	2	2	86	93	10	-4	191	197
3	2	66	73	11	-1	81	93	2	3	46	53	10	-2	138	150
3	4	200	214	11	0	171	179	2	4	203	220	10	-1	85	85
3	5	102	115	11	1	282	262	2	5	24	31	10	0	87	88
3	6	56	64	11	3	197	184	2	6	173	181	10	1	28	13
3	7	110	120	11	4	90	93	2	7	110	127	10	2	157	151
3	8	184	192	11	5	216	209	2	9	26	39	10	3	93	89

H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC	H	L	F0	FC
10	4	131	125	3	3	212	219	13	3	126	114	8	4	36	40
10	5	142	142	3	4	157	170	13	4	101	96	8	5	163	156
10	6	83	91	3	5	28	43	15	-3	47	63	8	6	46	54
10	7	63	65	3	6	60	77	15	-2	68	79	10	-6	65	71
12	-7	59	69	3	7	60	67	15	-1	171	169	10	-4	244	230
12	-5	46	54	3	8	105	106	15	0	41	47	10	-3	180	185
12	-4	139	152	5	-6	99	105	15	1	95	97	10	0	135	125
12	-3	41	54	5	-5	31	35	15	2	104	104	10	1	277	236
12	-2	154	170	5	-4	168	168					10	2	96	84
12	-1	257	261	5	-3	103	119	****	K = 8	****		10	3	156	144
12	0	37	51	5	-2	129	144	0	1	190	171	10	4	34	42
12	1	130	120	5	0	317	281	0	2	66	70	12	-5	87	76
12	2	58	66	5	3	104	107	0	3	50	56	12	-4	53	64
12	3	238	213	5	5	92	110	0	4	22	27	12	-3	94	103
12	4	57	65	5	7	70	75	0	6	81	83	12	-2	82	75
12	6	62	64	5	8	58	67	0	7	27	37	12	-1	118	115
14	-6	94	95	7	-8	46	46	2	-5	120	123	12	1	32	29
14	-5	173	171	7	-6	131	126	2	-3	210	201	12	3	39	52
14	-4	119	136	7	-5	180	179	2	-2	89	92	14	-2	88	83
14	-1	43	42	7	-3	77	91	2	-1	102	110	14	-1	54	60
14	0	50	58	7	-2	43	50	2	0	109	101	14	1	111	105
14	1	51	59	7	-1	26	28	2	1	179	175				
14	2	106	105	7	0	84	79	2	2	34	35	****	K = 9	****	
14	3	49	61	7	1	31	35	2	3	220	234	1	-6	70	68
14	4	166	153	7	3	138	139	2	4	236	240	1	-5	216	196
16	-3	34	30	7	4	217	214	2	5	97	101	1	-4	74	72
16	-2	173	172	7	7	61	69	2	6	137	143	1	-3	133	117
16	-1	54	72	9	-8	139	120	2	7	161	168	1	-2	154	140
16	0	38	46	9	-7	36	45	4	-7	130	117	1	-1	49	51
16	1	69	76	9	-6	35	35	4	-3	203	200	1	0	118	119
16	3	174	165	9	-5	206	198	4	-2	263	283	1	1	260	242
				9	-4	94	98	4	-1	111	122	1	2	86	82
****	K = 7	****		9	-3	219	223	4	1	189	182	1	3	86	92
1	-8	31	37	9	-2	145	148	4	2	215	212	1	4	196	199
1	-7	96	98	9	-1	35	48	4	3	248	251	1	5	189	185
1	-6	50	60	9	0	151	138	4	4	93	90	1	6	79	91
1	-5	34	42	9	1	149	138	4	5	32	36	3	-5	88	82
1	-4	29	30	9	2	46	59	4	6	120	123	3	-4	110	102
1	-3	307	311	9	3	122	113	6	-7	65	67	3	-3	111	115
1	-1	94	90	9	4	155	147	6	-6	105	104	3	-2	152	155
1	0	100	91	9	5	189	177	6	-4	168	162	3	-1	197	186
1	1	390	391	9	6	27	37	6	-3	190	197	3	0	177	153
1	2	32	36	11	-7	160	163	6	-2	36	46	3	2	34	39
1	3	73	86	11	-6	150	140	6	-1	179	170	3	4	25	23
1	4	105	115	11	-5	86	102	6	0	329	280	3	5	30	48
1	6	158	171	11	-3	128	133	6	1	104	94	5	-6	163	150
1	7	270	288	11	-2	127	127	6	2	62	64	5	-5	86	92
3	-8	35	37	11	-1	228	214	6	4	96	100	5	-3	180	178
3	-7	167	147	11	0	53	66	6	5	103	105	5	0	74	66
3	-6	100	92	11	3	184	167	6	6	188	187	5	1	41	49
3	-5	460	410	11	4	35	45	8	-6	182	169	5	2	73	68
3	-4	89	85	11	5	163	154	8	-4	65	78	5	3	34	46
3	-3	188	189	13	-6	64	65	8	-3	113	123	5	4	37	40
3	-2	137	143	13	-5	43	57	8	-2	168	165	5	5	40	45
3	-1	203	212	13	-3	88	92	8	0	42	49	7	-5	47	48
3	0	305	283	13	-1	148	143	8	1	193	175	7	-4	54	64
3	1	93	98	13	1	268	240	8	2	273	243	7	-2	48	58
3	2	81	90	13	2	92	92	8	3	56	52	7	-1	68	75

