

AM-89-412

Structural variations in natural F, OH, and Cl apatites

John M. Hughes, Maryellen Cameron, Kevin D. Crowley

For deposit: Table 5

American Mineralogist, 74, 7-8, 870-876. pp. [6]

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	151	163	5	0	8	0	516	524	9	0	8	1	66	67	6	3	6	2	407	415	8
1	1	0	119	108	2	1	8	0	152	154	4	1	8	1	112	107	7	4	6	2	126	122	5
2	1	0	148	149	2	2	8	0	350	350	4	2	8	1	222	208	6	5	6	2	88	83	6
3	1	0	753	745	7	0	9	0	322	325	11	3	8	1	147	144	4	0	7	2	345	342	5
4	1	0	691	711	4	1	9	0	142	149	5	0	9	1	241	240	4	1	7	2	408	413	4
6	1	0	389	402	4	0	10	0	183	180	5	1	9	1	151	155	4	4	7	2	110	106	5
7	1	0	636	667	13	0	1	1	120	117	2	0	0	2	849	796	2	0	8	2	645	678	16
8	1	0	54	46	8	1	1	1	201	206	3	0	1	2	341	339	6	1	8	2	98	95	5
9	1	0	217	207	4	2	1	1	562	586	13	1	1	2	628	676	7	2	8	2	126	122	4
0	2	0	263	253	3	3	1	1	316	316	4	2	1	2	179	163	2	0	9	2	174	170	4
1	2	0	518	523	3	4	1	1	124	124	3	3	1	2	502	498	5	0	1	3	105	92	3
2	2	0	102	110	4	5	1	1	243	233	4	4	1	2	50	41	6	1	1	3	384	359	7
3	2	0	483	484	5	6	1	1	218	218	6	5	1	2	351	345	5	2	1	3	590	591	9
4	2	0	644	665	16	8	1	1	82	81	6	6	1	2	272	281	3	3	1	3	297	287	4
5	2	0	335	341	3	0	2	1	138	132	3	7	1	2	210	208	4	4	1	3	265	266	4
6	2	0	225	219	3	1	2	1	755	764	10	8	1	2	404	403	8	5	1	3	85	75	8
7	2	0	267	264	3	2	2	1	255	261	3	9	1	2	111	98	5	6	1	3	203	204	3
8	2	0	187	182	9	3	2	1	524	532	12	0	2	2	567	567	7	7	1	3	149	150	5
0	3	0	850	870	3	4	2	1	356	361	6	1	2	2	329	301	3	8	1	3	75	73	6
1	3	0	431	434	9	5	2	1	255	251	4	2	2	2	769	817	10	0	2	3	355	333	5
3	3	0	306	296	3	6	2	1	140	145	3	3	2	2	127	122	3	1	2	3	781	817	5
5	3	0	362	364	3	8	2	1	248	240	4	4	2	2	192	187	4	3	2	3	198	191	5
6	3	0	102	102	8	0	3	1	281	264	6	5	2	2	654	697	9	4	2	3	533	549	7
7	3	0	98	91	13	1	3	1	251	226	3	6	2	2	102	107	6	5	2	3	250	246	5
8	3	0	184	182	4	2	3	1	545	544	9	7	2	2	65	62	6	6	2	3	132	131	8
0	4	0	293	284	3	3	3	1	479	486	4	8	2	2	373	377	11	7	2	3	98	96	5
1	4	0	635	666	12	4	3	1	97	90	5	0	3	2	186	180	2	8	2	3	257	250	4
2	4	0	141	143	6	6	3	1	249	247	4	1	3	2	432	423	8	0	3	3	230	218	4
3	4	0	251	255	4	7	3	1	210	208	4	2	3	2	557	566	4	1	3	3	327	316	5
4	4	0	614	632	5	0	4	1	86	91	3	3	3	2	310	319	6	2	3	3	583	592	4
5	4	0	78	79	10	1	4	1	162	160	2	4	3	2	461	468	4	3	3	3	186	183	6
6	4	0	277	279	3	2	4	1	178	174	3	5	3	2	598	624	11	7	3	3	103	104	5
7	4	0	392	394	8	3	4	1	574	590	4	6	3	2	465	476	8	0	4	3	50	51	6
0	5	0	193	192	2	4	4	1	333	332	8	7	3	2	92	85	5	1	4	3	232	234	4
1	5	0	409	400	7	5	4	1	280	284	3	0	4	2	666	679	9	2	4	3	143	144	4
2	5	0	628	650	8	6	4	1	313	310	8	1	4	2	167	172	2	3	4	3	615	645	7
3	5	0	211	211	5	0	5	1	314	302	3	2	4	2	230	233	3	5	4	3	227	225	4
4	5	0	139	138	4	1	5	1	608	621	11	3	4	2	66	62	5	6	4	3	227	226	4
5	5	0	426	433	7	2	5	1	370	372	7	4	4	2	214	209	5	0	5	3	130	128	3
6	5	0	355	350	4	3	5	1	123	118	3	5	4	2	236	232	4	1	5	3	576	587	5
0	6	0	226	229	3	4	5	1	286	280	4	0	5	2	737	764	7	2	5	3	379	379	4
1	6	0	463	461	7	5	5	1	224	223	4	1	5	2	274	277	5	3	5	3	158	155	4
2	6	0	61	60	7	6	5	1	328	334	4	2	5	2	276	279	3	4	5	3	228	223	4
4	6	0	63	61	6	1	6	1	204	200	6	3	5	2	546	558	7	5	5	3	190	191	8
5	6	0	83	79	5	3	6	1	470	480	9	4	5	2	236	233	5	2	6	3	192	197	7
0	7	0	99	96	4	5	6	1	280	278	7	5	5	2	262	262	5	3	6	3	301	302	6
1	7	0	175	174	3	1	7	1	138	134	4	6	5	2	85	87	8	0	7	3	218	214	7
2	7	0	319	317	7	2	7	1	241	239	3	0	6	2	289	289	3	1	7	3	64	60	6
3	7	0	387	386	7	3	7	1	291	290	4	1	6	2	45	37	7	2	7	3	165	167	4
4	7	0	248	245	3	4	7	1	205	208	5	2	6	2	371	369	4	3	7	3	391	394	4

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	190	201	2	0	8	0	523	527	7	1	7	1	93	92	3	5	5	2	303	301	4
1	1	0	132	136	4	1	8	0	112	115	4	2	7	1	246	251	6	6	5	2	81	75	3
2	1	0	127	138	5	2	8	0	344	346	3	3	7	1	259	254	3	0	6	2	311	310	5
3	1	0	904	835	3	0	9	0	249	255	5	4	7	1	196	197	6	2	6	2	359	362	4
4	1	0	715	713	4	1	9	0	170	173	3	0	8	1	65	66	4	3	6	2	462	465	4
6	1	0	382	400	7	0	10	0	204	200	4	1	8	1	141	136	2	4	6	2	101	104	3
7	1	0	690	693	13	0	1	1	121	122	2	2	8	1	164	157	2	5	6	2	97	94	3
9	1	0	262	262	8	1	1	1	192	193	2	3	8	1	179	176	5	0	7	2	377	386	7
0	2	0	270	270	5	2	1	1	643	633	2	0	9	1	227	226	3	1	7	2	400	406	5
1	2	0	545	569	7	3	1	1	341	345	5	1	9	1	187	191	7	2	7	2	60	60	4
2	2	0	86	88	3	4	1	1	98	97	3	0	0	2	1112	1121	5	4	7	2	71	69	4
3	2	0	551	543	8	5	1	1	264	264	6	0	1	2	301	301	2	0	8	2	677	684	6
4	2	0	720	717	2	6	1	1	207	209	2	1	1	2	793	807	2	1	8	2	76	73	4
5	2	0	320	330	3	7	1	1	51	49	7	2	1	2	193	182	2	2	8	2	111	113	3
6	2	0	232	221	9	8	1	1	101	100	5	3	1	2	529	517	5	0	9	2	228	225	5
7	2	0	268	267	6	0	2	1	142	137	3	5	1	2	293	290	5	0	1	3	94	86	2
8	2	0	154	149	2	1	2	1	909	906	2	6	1	2	251	256	2	1	1	3	384	369	3
0	3	0	1143	1168	5	2	2	1	188	198	3	7	1	2	217	219	3	2	1	3	616	618	6
1	3	0	434	437	3	3	2	1	575	571	6	8	1	2	355	350	7	3	1	3	313	314	4
2	3	0	43	37	6	4	2	1	386	392	3	9	1	2	53	48	4	4	1	3	246	247	3
3	3	0	316	311	3	5	2	1	237	238	5	0	2	2	600	578	4	5	1	3	109	106	2
4	3	0	84	86	2	6	2	1	68	72	3	1	2	2	308	286	4	6	1	3	180	183	2
5	3	0	339	347	7	8	2	1	202	195	2	2	2	2	963	946	4	7	1	3	178	182	2
6	3	0	121	124	2	0	3	1	288	270	3	3	2	2	84	82	2	8	1	3	47	40	4
7	3	0	73	71	5	1	3	1	204	185	3	4	2	2	225	225	5	0	2	3	346	334	2
8	3	0	197	196	2	2	3	1	585	577	8	5	2	2	732	736	3	1	2	3	907	892	5
0	4	0	260	255	3	3	3	1	448	453	2	6	2	2	94	92	2	3	2	3	197	202	2
1	4	0	680	683	8	4	3	1	120	116	3	7	2	2	42	44	5	4	2	3	574	574	3
2	4	0	158	155	6	6	3	1	260	266	4	8	2	2	407	403	7	5	2	3	234	235	2
3	4	0	225	234	4	7	3	1	175	178	2	0	3	2	177	165	2	6	2	3	65	65	3
4	4	0	654	659	12	8	3	1	53	54	5	1	3	2	446	435	6	7	2	3	114	109	6
5	4	0	132	136	5	0	4	1	81	87	4	2	3	2	556	557	2	8	2	3	210	209	2
6	4	0	271	278	8	1	4	1	133	133	2	3	3	2	302	309	3	0	3	3	226	221	4
7	4	0	451	448	7	2	4	1	216	216	2	4	3	2	503	508	3	1	3	3	348	342	2
0	5	0	114	115	2	3	4	1	583	582	4	5	3	2	621	630	5	2	3	3	622	616	8
1	5	0	451	454	4	4	4	1	321	324	3	6	3	2	501	505	10	3	3	3	151	151	2
2	5	0	647	667	3	5	4	1	276	282	6	7	3	2	88	91	3	4	3	3	51	49	4
3	5	0	185	183	8	6	4	1	267	268	4	0	4	2	706	703	7	6	3	3	60	55	4
4	5	0	67	68	3	0	5	1	314	300	6	1	4	2	223	228	3	7	3	3	78	76	3
5	5	0	359	373	6	1	5	1	693	690	9	2	4	2	241	242	5	0	4	3	47	49	3
6	5	0	341	340	8	2	5	1	368	372	3	3	4	2	98	98	2	1	4	3	206	212	3
0	6	0	199	201	5	3	5	1	106	105	3	4	4	2	208	204	4	2	4	3	176	180	3
1	6	0	456	463	11	4	5	1	298	299	9	5	4	2	180	179	3	3	4	3	637	644	3
2	6	0	65	67	9	5	5	1	251	257	5	6	4	2	51	48	4	4	4	3	37	36	5
5	6	0	76	73	3	6	5	1	327	322	4	7	4	2	82	80	4	5	4	3	218	221	2
0	7	0	49	41	4	0	6	1	33	33	4	0	5	2	749	746	7	6	4	3	204	197	2
1	7	0	211	200	9	1	6	1	165	162	4	1	5	2	314	320	4	0	5	3	122	123	3
2	7	0	329	333	7	2	6	1	60	55	3	2	5	2	269	269	5	1	5	3	629	632	5
3	7	0	368	364	7	3	6	1	495	506	5	3	5	2	527	534	5	2	5	3	376	384	7
4	7	0	285	281	4	5	6	1	259	255	4	4	5	2	152	153	4	3	5	3	142	143	5

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	146	155	2	3	7	0	145	143	2	6	5	1	116	113	7	7	4	2	87	79	3
1	1	0	29	29	2	4	7	0	530	511	3	0	6	1	99	100	2	0	5	2	584	579	7
2	1	0	445	455	6	0	8	0	537	545	4	1	6	1	174	178	4	1	5	2	83	81	2
3	1	0	239	239	2	1	8	0	136	141	2	3	6	1	211	218	2	2	5	2	791	799	4
4	1	0	856	862	2	2	8	0	239	230	5	4	6	1	44	50	4	3	5	2	542	551	8
5	1	0	431	438	2	3	8	0	229	224	2	5	6	1	318	313	3	5	5	2	373	373	3
6	1	0	313	315	4	0	9	0	173	173	3	0	7	1	50	45	3	6	5	2	84	78	5
7	1	0	398	398	5	1	9	0	155	157	3	1	7	1	89	90	2	0	6	2	439	440	6
8	1	0	166	171	2	2	9	0	190	183	2	2	7	1	119	120	4	1	6	2	286	297	3
9	1	0	135	140	2	0	10	0	94	95	3	3	7	1	140	144	2	2	6	2	125	129	3
0	2	0	81	75	1	0	1	1	157	151	1	1	8	1	88	92	2	3	6	2	546	548	3
2	2	0	156	168	2	1	1	1	141	143	1	2	8	1	181	174	2	5	6	2	171	165	2
3	2	0	109	120	2	2	1	1	957	952	1	3	8	1	57	57	6	0	7	2	386	389	7
4	2	0	106	101	3	3	1	1	105	91	1	0	9	1	246	243	3	1	7	2	90	96	4
5	2	0	733	749	2	5	1	1	720	723	5	1	9	1	114	110	2	2	7	2	118	112	3
6	2	0	51	54	3	6	1	1	86	90	3	2	9	1	354	341	4	3	7	2	139	138	3
7	2	0	197	200	2	7	1	1	146	145	2	0	10	1	55	58	5	4	7	2	63	65	5
8	2	0	394	395	6	8	1	1	162	161	2	0	0	2	1105	1095	4	0	8	2	552	556	6
9	2	0	162	167	3	9	1	1	216	216	4	0	1	2	75	74	1	1	8	2	84	87	3
0	3	0	1421	1428	16	0	2	1	210	202	2	1	1	2	1045	1034	4	2	8	2	463	454	6
1	3	0	913	863	4	1	2	1	671	668	5	2	1	2	164	138	4	3	8	2	178	178	2
2	3	0	578	570	2	2	2	1	76	84	2	3	1	2	410	394	3	0	9	2	368	358	6
3	3	0	401	402	3	3	2	1	526	527	4	4	1	2	345	356	2	0	1	3	64	55	2
4	3	0	156	159	2	4	2	1	290	294	3	5	1	2	437	448	3	1	1	3	438	408	2
5	3	0	41	42	3	5	2	1	318	327	2	6	1	2	33	25	4	2	1	3	863	837	5
7	3	0	214	219	5	6	2	1	119	121	2	7	1	2	416	425	3	3	1	3	411	400	2
8	3	0	60	54	3	7	2	1	196	200	4	8	1	2	39	35	4	4	1	3	42	45	3
0	4	0	262	270	2	9	2	1	62	59	4	0	2	2	468	438	3	5	1	3	618	621	6
1	4	0	663	671	4	0	3	1	272	263	4	1	2	2	433	404	2	6	1	3	46	47	7
2	4	0	597	592	4	1	3	1	417	423	3	2	2	2	1120	1095	2	7	1	3	93	91	4
3	4	0	354	360	3	2	3	1	613	615	2	3	2	2	438	441	4	8	1	3	139	140	3
4	4	0	722	728	2	3	3	1	389	397	3	4	2	2	414	416	4	9	1	3	302	294	3
5	4	0	116	118	2	4	3	1	464	470	2	5	2	2	258	263	3	0	2	3	300	276	4
6	4	0	105	108	2	5	3	1	96	93	3	6	2	2	224	231	4	1	2	3	663	641	5
7	4	0	368	362	5	6	3	1	566	579	3	7	2	2	88	84	5	2	2	3	92	88	1
0	5	0	123	129	1	7	3	1	124	125	3	8	2	2	139	142	2	3	2	3	555	545	5
1	5	0	57	49	2	8	3	1	200	196	2	0	3	2	335	314	4	4	2	3	256	258	4
2	5	0	438	444	7	0	4	1	119	128	4	1	3	2	378	357	5	5	2	3	365	370	7
3	5	0	358	365	4	1	4	1	32	36	3	2	3	2	79	83	2	6	2	3	56	62	3
4	5	0	115	121	2	2	4	1	356	366	2	3	3	2	433	433	2	7	2	3	171	172	2
5	5	0	379	375	3	3	4	1	103	102	3	4	3	2	40	37	3	0	3	3	250	242	2
0	6	0	227	237	3	4	4	1	328	338	2	5	3	2	247	251	2	1	3	3	396	388	6
1	6	0	286	298	4	5	4	1	230	235	2	6	3	2	611	610	5	2	3	3	183	187	3
2	6	0	189	189	2	7	4	1	130	130	2	8	3	2	110	109	2	3	3	3	152	148	2
3	6	0	44	37	3	0	5	1	324	319	4	0	4	2	581	571	5	4	3	3	568	574	4
4	6	0	182	186	2	1	5	1	290	292	2	1	4	2	239	242	2	5	3	3	174	172	2
5	6	0	324	321	3	2	5	1	123	123	2	2	4	2	341	345	6	6	3	3	445	442	6
0	7	0	150	158	3	3	5	1	96	100	2	3	4	2	604	605	6	7	3	3	263	265	3
1	7	0	673	676	7	4	5	1	251	257	2	4	4	2	75	78	2	0	4	3	35	42	3
2	7	0	251	252	3	5	5	1	296	294	3	6	4	2	109	109	3	1	4	3	189	190	2

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	4	3	512	520	9	4	4	4	604	607	5	4	5	5	230	217	4	0	1	8	155	146	2
4	4	3	81	84	3	5	4	4	105	108	2	0	6	5	55	52	3	2	1	8	226	218	2
5	4	3	188	189	3	6	4	4	60	60	4	1	6	5	114	117	2	0	2	8	82	76	3
0	5	3	92	93	4	0	5	4	169	165	2	3	6	5	224	216	2	1	2	8	319	314	3
1	5	3	178	176	2	1	5	4	136	134	5	2	7	5	68	73	3						
2	5	3	129	124	2	2	5	4	47	33	4	0	0	6	985	1015	2						
3	5	3	78	82	2	3	5	4	241	239	4	0	1	6	215	222	2						
4	5	3	176	176	2	4	5	4	168	167	4	1	1	6	666	675	3						
5	5	3	248	245	5	5	5	4	141	135	3	3	1	6	143	144	4						
6	5	3	176	177	3	0	6	4	182	186	2	4	1	6	164	167	3						
0	6	3	233	236	3	1	6	4	442	449	3	5	1	6	108	102	8						
1	6	3	131	133	2	2	6	4	343	342	4	0	2	6	211	212	2						
4	6	3	57	56	3	3	6	4	37	27	5	1	2	6	168	175	2						
5	6	3	201	197	2	4	6	4	198	196	2	2	2	6	526	533	3						
0	7	3	221	224	3	0	7	4	105	106	6	3	2	6	325	325	3						
1	7	3	245	246	5	1	7	4	549	553	3	4	2	6	55	66	6						
2	7	3	179	179	2	2	7	4	284	273	4	0	3	6	117	118	3						
3	7	3	63	67	3	0	8	4	340	338	3	1	3	6	477	487	6						
0	8	3	48	52	4	1	8	4	125	120	3	3	3	6	318	317	4						
2	8	3	172	173	2	0	1	5	72	74	3	4	3	6	108	113	3						
0	9	3	282	280	5	1	1	5	127	132	2	5	3	6	206	203	2						
1	9	3	193	191	2	2	1	5	616	606	6	0	4	6	405	411	5						
0	0	4	1841	1880	6	3	1	5	49	60	3	1	4	6	152	159	3						
0	1	4	288	280	4	5	1	5	565	562	5	2	4	6	167	168	4						
1	1	4	48	48	3	6	1	5	73	74	3	3	4	6	427	420	3						
2	1	4	347	343	2	7	1	5	128	127	2	4	4	6	45	41	4						
3	1	4	116	114	2	0	2	5	189	189	2	0	5	6	367	363	4						
4	1	4	471	471	7	1	2	5	397	398	4	1	5	6	165	170	2						
5	1	4	569	575	6	2	2	5	97	96	2	2	5	6	272	274	6						
6	1	4	289	282	7	3	2	5	315	317	4	3	5	6	443	437	4						
7	1	4	216	212	2	4	2	5	162	167	2	0	6	6	354	353	3						
8	1	4	87	89	3	5	2	5	216	215	4	0	7	6	282	276	4						
0	2	4	99	104	2	6	2	5	134	126	2	0	1	7	52	45	6						
1	2	4	447	436	4	7	2	5	166	163	2	1	1	7	40	35	6						
2	2	4	34	31	4	0	3	5	97	98	2	2	1	7	399	400	3						
3	2	4	72	71	2	1	3	5	278	275	3	3	1	7	83	75	3						
4	2	4	467	464	6	2	3	5	496	499	6	5	1	7	380	388	6						
5	2	4	375	368	7	3	3	5	311	300	5	1	2	7	359	367	4						
6	2	4	49	45	4	4	3	5	268	271	3	3	2	7	279	278	3						
7	2	4	263	265	3	5	3	5	37	32	5	4	2	7	162	160	5						
0	3	4	747	743	6	6	3	5	454	447	8	0	3	7	94	91	3						
2	3	4	424	421	5	0	4	5	139	146	3	1	3	7	266	263	3						
3	3	4	273	275	3	2	4	5	282	276	6	2	3	7	207	216	3						
4	3	4	233	230	2	3	4	5	86	88	2	3	3	7	197	198	2						
6	3	4	63	61	3	4	4	5	268	266	4	0	4	7	104	104	2						
7	3	4	194	192	2	5	4	5	201	197	2	1	4	7	68	70	3						
0	4	4	109	107	2	0	5	5	242	244	3	2	4	7	234	229	2						
1	4	4	482	484	5	1	5	5	207	208	4	0	5	7	40	41	5						
2	4	4	528	525	4	2	5	5	100	102	3	1	5	7	193	197	2						
3	4	4	243	239	3	3	5	5	87	83	2	0	0	8	854	896	3						

Because of orientation in a different r.h. cell, h and k indices should be reversed to compare Cl-apatite structure factors with OH-, F-apatite.