

AM-91-482

Ordering of divalent cations in the apatite structure: Crystal structure
refinements of natural Mn- and Sr-bearing apatite

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

For deposit: Tables 3 & 6

American Mineralogist, 76, 11-12, 1857-1862.

Table 3. Anisotropic thermal parameters (\AA^2 , $\times 10^4$) for atoms in Mn- and Sr-bearing apatites.

(For Deposit)

	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca(1)						
Sr _{0.63}	37.1(4)	37.1	31(1)	31	0	0
Sr _{0.29}	32.5(4)	32.5	25(1)	32.5	0	0
Mn _{1.21}	37.6(5)	37.6	47(1)	37.6	0	0
Mn _{0.42}	35.5(4)	35.5	32.7(9)	35.5	0	0
Ca(2)						
Sr _{0.63}	30.5(4)	35.5(4)	37.4(7)	37.7(6)	0	0
Sr _{0.29}	25.2(4)	29.3(4)	33.7(8)	31.1(6)	0	0
Mn _{1.21}	32.8(5)	37.9(5)	44(1)	37.1(8)	0	0
Mn _{0.42}	27.6(4)	31.8(4)	37.9(7)	30.9(5)	0	0
P						
Sr _{0.63}	21.1(5)	23.9(5)	34(1)	24.8(7)	0	0
Sr _{0.29}	19.6(5)	20.4(5)	28(1)	23.6(7)	0	0
Mn _{1.21}	24.3(7)	25.2(7)	46(2)	26(1)	0	0
Mn _{0.42}	21.0(5)	21.6(5)	34(1)	23.2(7)	0	0
O(1)						
Sr _{0.63}	37(2)	44(2)	55(3)	59(2)	0	0
Sr _{0.29}	31(2)	44(2)	54(4)	56(2)	0	0
Mn _{1.21}	44(2)	56(2)	77(5)	78(3)	0	0
Mn _{0.42}	35(2)	51(2)	52(3)	62(2)	0	0

O(2)

Sr _{0.63}	35(2)	23(2)	93(4)	25(3)	0	0
Sr _{0.29}	31(2)	20(2)	80(4)	19(2)	0	0
Mn _{1.21}	41(2)	29(2)	224(9)	33(4)	0	0
Mn _{0.42}	33(2)	21(2)	125(4)	23(2)	0	0

O(3)

Sr _{0.63}	41(1)	76(1)	48(3)	70(2)	-37(3)	-53(4)
Sr _{0.29}	36(1)	69(1)	47(3)	63(2)	-28(3)	-46(4)
Mn _{1.21}	55(2)	133(2)	65(4)	123(2)	-43(5)	-79(5)
Mn _{0.42}	44(1)	93(1)	48(2)	89(2)	-37(3)	-58(3)

F

Sr _{0.63}	47(2)	47	186(8)	47	0	0
Sr _{0.29}	44(2)	44	182(9)	44	0	0
Mn _{1.21}	50(3)	50	230(10)	50	0	0
Mn _{0.42}	41(2)	41	184(7)	41	0	0

Note: The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + \beta_{12}hk + \beta_{13}hl + \beta_{23}kl)]$$

Values of 10*Fobs and 10*Fc alc			(Mn0.42)		
H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
10	1	3	208	210	6
0	2	3	352	342	7
1	2	3	931	933	9
3	2	3	188	192	4
4	2	3	558	562	10
5	2	3	257	257	4
6	2	3	140	144	8
7	2	3	100	95	12
8	2	3	260	259	8
9	2	3	391	387	5
0	1	3	212	212	8
1	2	3	321	312	2
2	3	3	626	622	9
3	2	3	202	201	2
4	3	3	203	205	3
5	3	3	207	207	6
6	3	3	243	241	5
7	3	3	241	239	5
8	3	3	137	139	5
9	3	3	137	135	7
0	1	2	653	670	11
1	2	2	226	229	5
2	3	3	234	237	5
3	4	3	152	150	10
4	3	3	134	135	7
5	4	3	605	600	13
6	4	3	388	394	5
7	3	3	165	165	5
8	4	3	166	166	5
9	3	3	209	209	3
0	1	2	181	183	8
1	2	4	209	210	6
2	3	3	196	199	9
3	4	3	302	294	6
4	3	3	318	321	6
5	6	3	208	208	5
6	7	3	164	167	6
7	3	3	388	395	5
8	7	3	171	170	8
9	3	3	171	170	7
0	1	2	70	72	10
1	2	6	248	254	5
2	6	3	250	248	6
3	7	3	164	167	6
4	7	3	3	3	7
5	6	3	208	208	3
6	7	3	166	162	9
7	3	3	171	170	9
8	3	3	107	108	9
9	3	3	6	6	3
0	10	3	6	6	6
1	10	3	554	555	6
2	10	3	1792	1795	6
3	11	4	89	97	6
4	11	4	662	142	0

Page 2			Page		
H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
10	1	3	208	210	6
0	2	3	352	342	7
1	2	3	931	933	9
3	2	3	188	192	4
4	2	3	558	562	10
5	2	3	257	257	4
6	2	3	140	144	8
7	2	3	100	95	12
8	2	3	260	259	8
9	2	3	391	387	5
0	1	3	212	212	8
1	2	3	321	312	2
2	3	3	626	622	9
3	2	3	202	201	6
4	3	3	203	205	3
5	3	3	207	207	6
6	3	3	243	241	5
7	3	3	241	239	5
8	3	3	137	139	5
9	3	3	137	135	7
0	1	2	653	670	11
1	2	2	226	229	5
2	3	3	234	237	5
3	4	3	152	150	10
4	3	3	134	135	7
5	4	3	605	600	13
6	4	3	388	394	5
7	3	3	165	165	5
8	4	3	166	166	5
9	3	3	209	209	3
0	1	2	181	183	8
1	2	4	209	210	6
2	3	3	196	199	9
3	4	3	302	294	6
4	3	3	318	321	5
5	6	3	208	208	5
6	7	3	164	167	6
7	3	3	3	3	7
8	7	3	3	3	7
9	3	3	208	208	3
0	1	2	164	167	6
1	2	6	3	3	7
2	6	3	302	294	5
3	7	3	3	3	7
4	7	3	171	170	8
5	6	3	3	3	7
6	7	3	171	170	7
7	3	3	107	108	9
8	3	3	6	6	3
9	3	3	6	6	6
0	10	3	6	6	6
1	10	3	554	555	6
2	11	4	1792	1795	6
3	11	4	89	97	6
4	11	4	662	142	0

(Mn _{0.42})											
Values of 10*Fobs and 10*Fcalc											
H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	4	1	8	437	435	8	-	-	-
1	2	8	1	2	8	192	191	6	-	-	-
3	2	8	3	2	8	161	156	6	-	-	-
4	2	8	4	2	8	313	312	5	-	-	-
0	3	8	0	3	8	430	424	9	-	-	-
1	3	8	1	3	8	76	68	10	-	-	-
3	3	8	3	3	8	193	191	10	-	-	-
0	4	8	0	4	8	129	125	7	-	-	-
1	4	8	1	4	8	291	284	5	-	-	-
2	4	8	2	4	8	356	349	5	-	-	-
3	4	8	3	4	8	154	160	9	-	-	-
0	5	8	0	5	8	251	243	6	-	-	-
1	5	8	1	5	8	367	364	5	-	-	-
2	5	8	2	5	8	183	178	12	-	-	-
0	6	8	0	6	8	204	204	6	-	-	-
2	1	9	2	1	9	276	272	10	-	-	-
3	1	9	3	1	9	116	120	13	-	-	-
1	2	9	1	2	9	413	406	5	-	-	-
1	3	9	1	3	9	123	118	9	-	-	-

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

(Mn_{1.21})

	Fobs	Fcalc	SigF		Fobs	Fcalc	SigF		Fobs	Fcalc	SigF	
H -	3 1 3 2 3 186	302	296	5	3 2 4	297	300	7	5 5 6	162	163	13
K -	3 3 3 3 232	227	9	8	3 3 4	294	294	6	5 1 5	213	220	10
L -	3 4 3 4 634	644	6	3	3 4 4	252	254	11	6 3 5	121	127	11
Mn _{1.21}	3 5 3 5 166	167	14	3	3 5 4	191	191	8	6 4 5	234	229	13
	3 6 3 6 305	303	9	4	3 7 4	265	266	8	6 5 5	227	228	9
	3 7 3 7 365	368	7	4	4 2 4	658	660	12	6 5 5	296	285	8
	4 1 4 1 254	253	7	4	4 4 4	487	481	8	7 3 5	204	210	14
	4 2 4 2 531	541	6	4	4 7 4	644	655	7	8 2 5	192	186	10
	4 5 4 5 196	199	8	5	5 3 4	228	227	12	0 0 6	945	961	7
	5 1 5 1 168	160	10	5	5 5 4	260	266	7	0 1 6	264	261	8
	5 2 5 2 97	99	11	5	6 4	248	243	9	0 2 6	148	140	9
	5 4 5 4 170	175	7	6	6 1 4	304	308	11	0 4 6	437	438	7
	6 1 6 2 270	272	6	6	1 2 4	476	482	6	0 5 6	435	432	7
	6 2 6 2 224	227	8	6	2 4	325	332	7	0 0 6	340	344	11
	6 3 6 3 178	171	10	6	4 4	230	225	8	0 7 6	124	127	12
	6 4 6 4 304	304	8	6	5 4	303	302	9	0 8 6	542	525	11
	6 5 6 5 170	175	7	7	1 4	601	608	8	0 1 6	668	671	6
	6 6 6 2 146	146	9	9	1 2 4	205	201	8	1 4 6	198	205	11
	6 7 6 2 148	148	8	8	2 4	362	364	14	1 1 6	110	108	13
	6 8 6 2 244	242	8	7	2 4	314	317	15	1 1 7	291	292	8
	6 9 6 2 206	212	9	8	2 4	312	320	8	1 1 8	233	235	10
	7 1 7 1 124	124	11	9	2 4	143	147	9	2 1 6	151	154	8
	7 2 7 3 106	106	12	0	0 5 5	165	164	10	2 2 6	168	171	10
	7 3 7 3 107	107	10	0	1 1 5	154	157	10	2 2 6	154	157	11
	7 4 8 2 238	244	8	0	0 5 5	159	157	9	2 1 6	540	544	6
	7 5 8 2 150	152	12	0	1 1 5	217	218	10	1 1 6	274	273	7
	7 6 9 2 381	373	7	1	1 1 5	217	218	9	1 1 6	101	97	15
	7 7 10 1 184	187	10	0	1 1 5	165	164	10	2 2 5	168	171	10
	7 8 10 0 1843	1885	5	1	1 1 5	154	157	10	2 2 6	154	157	11
	7 9 10 0 158	154	8	1	1 1 5	597	589	7	3 1 6	477	491	12
	8 0 9 0 92	92	10	0	1 1 5	124	122	10	3 1 6	377	378	6
	8 1 9 0 776	769	10	1	1 1 5	495	495	7	3 3 6	356	350	10
	8 2 9 0 188	192	7	0	1 1 5	154	151	9	3 4 6	369	370	8
	8 3 9 0 328	328	8	1	1 1 5	148	153	10	4 4 6	183	183	14
	8 4 9 0 279	281	6	1	1 1 5	417	415	5	4 4 5	225	224	10
	8 5 9 0 400	404	7	2	2 2 5	205	209	9	5 5 6	239	233	9
	8 6 9 0 260	259	15	2	2 2 5	312	311	6	6 6 6	161	164	12
	8 7 9 0 110	125	14	2	2 2 5	265	260	8	6 1 6	185	182	9
	8 8 9 0 110	125	14	2	2 2 5	192	196	15	2 2 6	320	321	7
	8 9 9 0 175	170	11	2	2 2 5	155	155	12	3 3 6	410	411	12
	9 0 9 0 313	316	9	3	3 1 5	209	206	7	4 5 6	154	149	11
	9 1 9 0 157	157	14	3	3 1 5	432	439	7	5 6 6	437	442	10
	9 2 9 0 524	525	9	3	3 1 5	389	389	6	8 1 6	225	223	9
	9 3 9 0 471	478	5	4	3 4 5	352	357	6	1 2 7	402	415	9
	9 4 9 0 361	361	6	4	3 5 5	382	382	7	1 1 5	357	359	7
	9 5 9 0 162	164	9	4	4 4 4	208	202	11	2 1 7	365	370	6
	9 6 9 0 183	189	10	4	4 4 4	247	240	7	2 2 7	118	117	17
	9 7 9 0 486	384	5	4	4 4 4	253	254	7	2 2 7	275	277	10
	9 8 9 0 283	279	11	4	4 4 4	204	210	9	2 2 5	230	238	10
	9 9 9 0 410	406	7	4	4 4 4	159	157	12	3 1 7	197	194	8
	9 0 9 0 365	360	8	4	4 4 4	177	178	10	3 2 7	207	14	7
	9 1 9 0 286	296	11	5	5 2 4	210	215	8	3 3 7	245	242	8
	9 2 9 0 283	279	8	5	5 4	206	205	9	3 4 7	342	346	7

Values of $10 \times F_{\text{obs}}$ and $10 \times F_{\text{calc}}$

(Sr 0.29)									
H	K	T _i	-	F _{obs}	F _{calc}	SigF	-	H	K
3	1	7	200	198	5				
4	1	7	116	116	10				
5	1	7	157	149	5				
6	1	7	113	114	7				
1	2	7	478	483	17				
2	2	7	142	142	5				
3	2	7	255	253	8				
4	2	7	266	264	7				
5	2	7	196	197	6				
6	2	7	114	111	8				
2	3	7	328	325	9				
3	3	7	266	264	7				
0	4	7	87	90	8				
1	4	7	99	104	7				
2	4	7	66	72	10				
3	4	7	402	397	11				
4	4	7	134	135	7				
5	4	7	156	156	7				
1	5	7	404	400	12				
2	5	7	266	260	10				
3	5	7	107	98	8				
4	5	7	178	172	10				
1	6	7	129	127	7				
1	7	7	104	99	9				
0	0	8	876	916	6				
1	1	8	99	96	11				
2	1	8	297	298	8				
3	1	8	72	78	11				
4	1	8	454	456	13				
1	2	8	210	208	5				
3	2	8	164	168	6				
4	2	8	334	329	10				
0	3	8	434	436	15				
3	3	8	208	205	5				
0	4	8	145	140	6				
1	4	8	301	302	11				
2	4	8	372	372	10				
3	4	8	165	165	8				
0	5	8	263	254	8				
1	5	8	388	388	13				
2	5	8	186	189	6				
0	6	8	204	200	11				
1	1	9	87	82	9				
2	1	9	290	283	10				
3	1	9	139	132	7				
1	2	9	436	427	12				
2	2	9	93	79	12				
1	3	9	118	115	8				

Page 3

