

AM-91-469

Ashburtonite, a new bicarbonate-silicate mineral from Ashburton Downs, Western
Australia: Description and structure determination

Joel D. Grice, Ernest H. Nickel, Robert A. Gault

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 76, 9-10, 1701-1707.

Table 4

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 14/M

Page 1

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	1	0	1763	1795	9	13	13	0	367	-53	-146	2	7	1	2682	-2619	13	8	15	1	788	780	54	2	10	2	1222	1129	24
0	2	0	1709	-1927	21	-12	14	0	238	28	-217	4	7	1	754	719	26	10	15	1	365	100	-127	4	10	2	2690	2600	15
2	2	0	2044	-2064	11	-10	14	0	1209	-1141	32	6	7	1	1720	-1604	15	12	15	1	709	658	58	6	10	2	623	-560	45
-1	3	0	1546	1542	26	-8	14	0	812	-777	47	-7	8	1	2040	2005	17	-11	16	1	472	403	-118	8	10	2	3163	3200	17
1	3	0	4137	-3984	15	-6	14	0	1606	1522	26	-5	8	1	2332	2216	15	-9	16	1	378	-433	-148	10	10	2	1864	-1909	21
3	3	0	1595	-1503	15	-4	14	0	202	-168	-245	-3	8	1	148	119	-245	-7	16	1	605	500	86	-9	11	2	2042	-1993	19
-2	4	0	142	-469	-567	-2	14	0	3474	3281	21	-1	8	1	1226	1138	21	-5	16	1	2018	-1959	24	-7	11	2	627	621	56
0	4	0	3596	3498	15	0	14	0	1104	-1079	34	1	8	1	3760	-3674	13	-3	16	1	442	326	-103	-5	11	2	2407	-2353	17
2	4	0	4236	-4116	15	2	14	0	3940	3636	21	3	8	1	644	731	41	-1	16	1	2038	-2014	26	-3	11	2	1542	-1499	21
4	4	0	4150	4191	13	4	14	0	1207	-1196	30	5	8	1	2720	-2685	15	1	16	1	298	-251	-165	-1	11	2	666	-696	43
-3	5	0	102	32	-408	6	14	0	1767	1792	26	7	8	1	1134	-1154	24	3	16	1	438	-177	-105	1	11	2	1447	-1320	24
-1	5	0	4618	4440	15	8	14	0	897	-875	41	-8	9	1	1052	-1057	28	5	16	1	459	-235	-97	3	11	2	1877	1822	19
1	5	0	113	-223	-453	10	14	0	1069	-1056	34	-6	9	1	3036	2950	17	7	16	1	1718	1702	26	5	11	2	1228	-1209	24
3	5	0	3903	3844	15	12	14	0	238	-461	-176	-4	9	1	356	154	-103	9	16	1	481	-369	-105	7	11	2	2823	2788	17
5	5	0	1842	1819	15	14	14	0	906	-987	43	-2	9	1	4470	4239	17	11	16	1	1643	1733	26	9	11	2	552	493	62
-4	6	0	5602	-5327	15	-13	15	0	341	379	-159	0	9	1	152	-38	-271	-10	17	1	253	16	-221	11	11	2	1162	1207	28
-2	6	0	462	418	-103	-11	15	0	537	-539	90	2	9	1	775	746	41	-8	17	1	1597	1484	30	-10	12	2	1351	1326	26
0	6	0	99	-67	-397	-9	15	0	1572	-1578	28	4	9	1	1677	1648	19	-6	17	1	348	-184	-159	-8	12	2	208	88	-213
2	6	0	1389	1500	24	-7	15	0	221	-85	-228	6	9	1	1567	-1541	19	-4	17	1	859	868	47	-6	12	2	1799	1723	21
4	6	0	1728	1594	17	-5	15	0	2074	-1989	24	8	9	1	337	187	-101	-2	17	1	367	81	-144	-4	12	2	2469	-2331	19
6	6	0	2465	2485	15	-3	15	0	1235	1254	32	-9	10	1	3210	-3191	17	0	17	1	1716	-1637	28	-2	12	2	1971	1957	21
-5	7	0	146	245	-275	-1	15	0	709	-784	60	-7	10	1	402	-284	-107	2	17	1	228	21	-183	0	12	2	4427	-4198	17
-3	7	0	4206	-3922	15	1	15	0	891	785	41	-5	10	1	736	-664	56	4	17	1	1879	-1882	26	2	12	2	578	521	71
-1	7	0	590	425	60	3	15	0	1634	1584	26	-3	10	1	670	488	67	6	17	1	779	713	56	4	12	2	2186	-2113	19
1	7	0	4189	-4123	17	5	15	0	732	668	54	-1	10	1	1851	1670	21	8	17	1	1082	-1123	37	6	12	2	305	285	-133
3	7	0	374	-176	-116	7	15	0	2042	2026	26	1	10	1	163	-112	-247	10	17	1	253	-40	-206	8	12	2	208	-382	-183
5	7	0	1600	-1573	19	9	15	0	571	-264	79	3	10	1	3878	3844	17	-7	18	1	1054	918	39	10	12	2	298	175	-137
7	7	0	612	607	49	11	15	0	1162	1207	32	5	10	1	505	531	69	-5	18	1	320	232	-174	12	12	2	1269	1264	28
-6	8	0	3107	2904	19	13	15	0	586	-598	82	7	10	1	2405	2469	17	-3	18	1	2519	2399	26	-11	13	2	1181	1075	34
-4	8	0	661	587	60	-10	16	0	1166	-1250	34	9	10	1	391	-324	-92	-1	18	1	623	-516	79	-9	13	2	281	-267	-165
-2	8	0	799	607	43	-8	16	0	1408	1485	30	-10	11	1	475	-315	82	1	18	1	953	886	43	-7	13	2	2349	2277	21
0	8	0	1376	1343	26	-6	16	0	1793	-1727	26	-8	11	1	1421	-1392	26	3	18	1	539	-460	103	-5	13	2	496	291	94
2	8	0	2478	-2160	21	-4	16	0	511	-352	84	-6	11	1	483	-134	-99	5	18	1	356	-160	-148	-3	13	2	2497	2299	21
4	8	0	148	175	-288	-2	16	0	1009	-935	39	-4	11	1	2926	-2675	19	7	18	1	249	-71	-217	-1	13	2	195	252	-238
6	8	0	5235	-5172	15	0	16	0	1235	-1082	32	-2	11	1	440	399	88	-4	19	1	1138	1212	39	3	13	2	1230	-1095	30
8	8	0	2177	2169	19	2	16	0	217	19	-234	0	11	1	2622	-2504	19	-2	19	1	764	642	62	3	13	2	539	517	75
-7	9	0	2229	2146	21	4	16	0	475	-339	-107	2	11	1	1078	997	32	0	19	1	346	323	-159	5	13	2	1688	-1637	21
-5	9	0	736	501	58	6	16	0	475	512	-105	4	11	1	640	623	62	2	19	1	1419	1356	34	7	13	2	329	-128	-125
-3	9	0	1316	1261	28	8	16	0	895	899	41	6	11	1	706	714	45	4	19	1	421	9	-120	9	13	2	1898	-1973	21
-1	9	0	4322	4121	17	10	16	0	792	723	60	8	11	1	2484	2565	21	0	0	2	4739	4662	6	11	13	2	232	-145	-195
1	9	0	331	-114	-142	-9	17	0	955	968	45	10	11	1	350	308	-107	1	1	2	1831	1823	9	13	13	2	444	-32	-110
3	9	0	3364	3115	19	-7	17	0	1718	1691	28	-11	12	1	2162	2211	21	0	2	2	2282	2265	9	-12	14	2	792	722	47
5	9	0	2012	-1900	21	-5	17	0	966	-968	41	-9	12	1	210	-50	-202	2	2	2	5492	-5483	9	-10	14	2	2227	-2151	24
7	9	0	339	-220	-110	-3	17	0	1198	1138	34	-7	12	1	2497	2336	21	-1	3	2	1649	1604	11	-8	14	2	928	940	41
9	9	0	782	-744	39	-1	17	0	1419	-1376	30	-5	12	1	1441	-1360	28	1	3	2	2413	-2393	9	-6	14	2	277	-509	-161
-8	10	0	2658	-2613	21	1	17	0	225	178	-234	-3	12	1	183	115	-245	3	3	2	3783	-3733	9	-4	14	2	1398	1328	28
-6	10	0	1430	1337	28	3	17	0	1009	-957	39	-1	12	1	691	-619	58	-2	4	2	3193	3271	9	-2	14	2	1935	1811	24
-4	10	0	3983	-3797	17	5	17	0	1552	-1512	28	1	12	1	2388	-2298	21	0	4	2	983	822	15	0	14	2	513	364	84
-2	10	0	3996	3825	19	7	17	0	571	276	90	3	12	1	402	260	-103	2	4	2	125	-18	-142	2	14	2	1621	1538	24
0	10	0	1456	-1314	26	9	17	0	882	-968	45	5	12	1	2688	-2623	21	4	4	2	550	542	26	4	14	2	687	627	52
2	10	0	3639	3556	19	-8	18	0	1411	1463	32	7	12	1	1001	960	30	-3	5	2	734	-795	21	6	14	2	238	125	-185
4	10	0	953	854	37	-6	18	0	648	495	73	9	12	1	384	-253	-101	-1	5	2	3824	3804	9	8	14	2	389	491	-125
6	10	0	1078	1065	32	-4	18	0	713	585	73	11	12	1	1284	1310	26	1	5	2	271	37	-75	10	14	2	2188	-2252	21
8	10	0	1205	1141	24	-2	18	0	1207	1160	37	-12	13	1	1099	1110	32	3	5	2	3656	3562	11	12	14	2	621	612	64
10	10	0	348	69	-120	0	18	0	543	-310	101	-10	13	1	354	214	-												

Table 4 (cont'd)

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 14/M Page 2

Observed					Calculated					Observed					Calculated					Observed					Calculated										
h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	18	2	743	811	60	-4	13	3	417	24	-90	-7	9	4	1662	1685	19	0	3	5	674	663	28	-4	15	5	829	-826	47	-4	15	5	829	-826	47
2	18	2	672	718	69	-2	13	3	1821	1784	21	-5	9	4	361	480	-75	2	3	5	3049	-2921	13	-2	15	5	749	621	54	-2	15	5	749	621	54
4	18	2	1016	-986	41	0	13	3	818	-765	41	-3	9	4	623	726	43	-3	4	5	320	-233	-71	0	15	5	696	-576	62	0	15	5	696	-576	62
6	18	2	363	-339	-146	2	13	3	1299	1277	26	-1	9	4	2924	2930	15	-1	4	5	3184	3091	13	2	15	5	1739	1727	26	2	15	5	1739	1727	26
-3	19	2	1172	1172	37	4	13	3	2010	-1939	21	1	9	4	187	61	-163	1	4	5	511	503	45	4	15	5	249	-99	-206	4	15	5	249	-99	-206
-1	19	2	311	-111	-183	6	13	3	1112	-1090	30	3	9	4	2076	2103	17	3	4	5	185	115	-133	6	15	5	1265	1207	34	6	15	5	1265	1207	34
-1	19	2	1801	1706	28	8	13	3	498	-447	90	5	9	4	1698	-1658	17	-4	5	5	713	-729	28	-1	16	5	1524	-1457	30	-1	16	5	1524	-1457	30
3	19	2	442	226	-122	10	13	3	1286	-1256	30	7	9	4	249	-112	-140	-2	5	5	1211	1207	19	1	16	5	468	-118	-112	1	16	5	468	-118	-112
0	1	3	2482	2397	9	12	13	3	627	566	77	9	9	4	818	-644	34	0	5	5	2420	2370	15	0	0	6	2671	2573	15	0	0	6	2671	2573	15
-1	2	3	893	-939	15	-11	14	3	316	-271	-170	-8	10	4	2023	-1975	19	2	5	5	532	603	45	1	1	6	887	875	26	1	1	6	887	875	26
1	2	3	2596	-2500	11	-9	14	3	915	-871	43	-6	10	4	1037	-1048	26	4	5	5	2791	2730	15	0	2	6	1153	1088	19	0	2	6	1153	1088	19
-2	3	3	550	-466	26	-7	14	3	1262	1284	30	-4	10	4	2750	-2779	15	-5	6	5	887	-866	26	2	2	6	2965	-2858	15	2	2	6	2965	-2858	15
0	3	3	638	734	21	-5	14	3	696	-701	49	-2	10	4	2972	2901	17	-3	6	5	2214	-2165	15	-1	3	6	711	627	30	-1	3	6	711	627	30
2	3	3	3835	-3756	9	-3	14	3	1737	1656	24	0	10	4	844	-792	30	-1	6	5	1123	1132	21	1	3	6	1625	-1589	17	1	3	6	1625	-1589	17
-3	4	3	410	376	52	-1	14	3	855	820	39	2	10	4	2778	2734	15	1	6	5	1449	-1393	17	3	3	6	1424	-1357	19	3	3	6	1424	-1357	19
-1	4	3	3852	3784	9	1	14	3	1492	1441	26	4	10	4	801	729	30	3	6	5	1907	1900	15	-2	4	6	1718	1669	17	-2	4	6	1718	1669	17
1	4	3	298	58	-67	3	14	3	1445	1389	26	6	10	4	900	897	28	5	6	5	728	787	30	0	4	6	505	434	56	0	4	6	505	434	56
3	4	3	558	467	30	5	14	3	940	-877	34	8	10	4	1013	954	28	-6	7	5	807	801	28	2	4	6	204	-149	-148	2	4	6	204	-149	-148
-4	5	3	895	-842	19	7	14	3	1048	1013	34	10	10	4	225	45	-176	-4	7	5	1739	-1659	17	4	4	6	290	316	-107	4	4	6	290	316	-107
-2	5	3	1559	1557	13	9	14	3	1445	-1432	28	-9	11	4	1226	-1146	28	-2	7	5	371	-325	64	-3	5	6	322	-252	-97	-3	5	6	322	-252	-97
0	5	3	3510	3485	11	11	14	3	271	120	-187	-7	11	4	412	260	-94	0	7	5	1703	-1662	17	-1	5	6	2143	2043	15	-1	5	6	2143	2043	15
2	5	3	975	995	17	-10	15	3	1604	-1548	30	-5	11	4	2012	-2053	19	2	7	5	1720	-1665	17	1	5	6	206	-76	-148	1	5	6	206	-76	-148
4	5	3	3330	3320	11	-8	15	3	238	-51	-232	-3	11	4	998	-972	28	4	7	5	612	533	41	3	5	6	2016	1994	17	3	5	6	2016	1994	17
-5	6	3	1020	-983	19	-6	15	3	1177	-1141	34	-1	11	4	563	-495	52	6	7	5	1136	-1107	21	5	5	6	1119	1100	24	5	5	6	1119	1100	24
-3	6	3	3111	-3088	11	-4	15	3	1037	-1007	37	1	11	4	1166	-1164	24	-7	8	5	1381	1335	21	-4	6	6	822	-819	28	-4	6	6	822	-819	28
-1	6	3	1859	1820	13	-2	15	3	887	799	41	3	11	4	1484	1450	21	-5	8	5	1406	1400	19	-2	6	6	1108	-1058	24	-2	6	6	1108	-1058	24
1	6	3	1690	-1676	13	0	15	3	829	-794	52	5	11	4	730	-750	39	-3	8	5	202	129	-144	0	6	6	786	741	30	0	6	6	786	741	30
3	6	3	2463	2411	13	2	15	3	2106	2068	21	7	11	4	2209	2162	19	-1	8	5	859	864	26	2	6	6	1123	-1126	21	2	6	6	1123	-1126	21
5	6	3	1166	1168	19	4	15	3	225	59	-208	9	11	4	689	620	54	1	8	5	2377	-2377	15	4	6	6	3004	2940	15	4	6	6	3004	2940	15
-6	7	3	1527	1511	17	6	15	3	1488	1445	26	10	11	4	782	700	52	3	8	5	513	432	52	6	6	6	638	-661	45	6	6	6	638	-661	45
-4	7	3	2566	-2522	13	8	15	3	698	647	62	-10	12	4	236	-187	-206	5	8	5	1799	-1745	17	-5	7	6	316	-72	-110	-5	7	6	316	-72	-110
-2	7	3	1065	-1097	19	10	15	3	462	160	-110	-8	12	4	1378	1350	26	7	8	5	700	-693	37	-3	7	6	1643	-1612	19	-3	7	6	1643	-1612	19
0	7	3	1846	-1828	13	-9	16	3	404	-308	-148	-6	12	4	219	149	-187	-8	9	5	694	-774	47	-1	7	6	354	167	-84	-1	7	6	354	167	-84
2	7	3	2312	-2293	13	-7	16	3	530	475	94	-4	12	4	599	-457	56	-6	9	5	2111	2088	17	1	7	6	2345	-2238	17	1	7	6	2345	-2238	17
4	7	3	264	132	-105	-5	16	3	2003	-1928	26	-2	12	4	507	-253	69	-4	9	5	260	156	-122	3	7	6	419	297	69	3	7	6	419	297	69
6	7	3	1460	-1401	19	-3	16	3	449	422	-101	0	12	4	1752	1627	19	-2	9	5	2634	2592	15	5	7	6	915	-936	28	5	7	6	915	-936	28
-7	8	3	1857	1869	17	-1	16	3	1866	-1738	26	2	12	4	1059	-1043	28	0	9	5	204	105	-161	7	7	6	228	260	-165	7	7	6	228	260	-165
-5	8	3	1922	1944	15	1	16	3	459	-383	-103	4	12	4	614	-574	54	2	9	5	599	602	45	-6	8	6	2701	2633	17	-6	8	6	2701	2633	17
-3	8	3	432	323	60	3	16	3	404	-179	-103	6	12	4	1069	-1091	30	4	9	5	983	962	28	-4	8	6	1228	-1194	24	-4	8	6	1228	-1194	24
-1	8	3	1127	1115	19	5	16	3	331	-63	-150	8	12	4	1316	1282	28	6	9	5	1009	-970	28	-2	8	6	1939	1903	19	-2	8	6	1939	1903	19
1	8	3	3178	-3179	13	7	16	3	1378	1374	28	10	12	4	1387	-1366	28	8	9	5	223	252	-163	0	8	6	1116	-1067	24	0	8	6	1116	-1067	24
3	8	3	659	675	32	9	16	3	316	-362	-165	12	12	4	2141	2146	26	-9	10	5	2373	-2358	19	2	8	6	301	199	-99	2	8	6	301	199	-99
5	8	3	2192	-2109	15	-6	17	3	344	-222	-165	-11	13	4	1282	1221	32	-7	10	5	361	-108	-107	4	8	6	1374	-1345	24	4	8	6	1374	-1345	24
7	8	3	1162	-1171	21	-4	17	3	990	754	49	-9	13	4	676	-716	62	-5	10	5	599	-433	58	6	8	6	1490	-1431	24	6	8	6	1490	-1431	24
-8	9	3	928	-958	30	-2	17	3	485	164	-112	-7	13	4	2261	2203	21	-3	10	5	247	196	-140	8	8	6	277	-42	-146	8	8	6	277	-42	-146
-6	9	3	2602	2546	15	0	17	3	1531	-1487	28	-5	13	4	399	447	-105	-1	10	5	1132	1064	24	-7											

Table 4 (cont'd)

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 14/M

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
1	2	7	1215	-1179	21	-3	6	7	1872	-1806	19	-3	8	7	468	91	82	-3	10	7	359	329	-114	1	3	8	1185	-1165	26
-2	3	7	352	-366	-90	-1	6	7	829	881	32	-1	8	7	530	614	67	-1	10	7	865	826	34	3	3	8	874	-793	34
0	3	7	221	172	-146	1	6	7	794	-722	32	1	8	7	1668	-1615	21	1	10	7	438	-333	-97	-2	4	8	417	77	-88
-2	3	7	1954	-1897	17	3	6	7	1157	1105	26	3	8	7	380	269	-94	3	10	7	1988	1903	21	0	4	8	1445	1330	24
-3	4	7	225	126	-163	5	6	7	629	471	56	5	8	7	1259	-1139	26	5	10	7	440	267	88	2	4	8	1284	-1194	26
-1	4	7	2020	1958	17	-6	7	7	930	891	32	7	8	7	575	-612	67	-2	11	7	511	263	86	4	4	8	1516	1399	24
1	4	7	223	115	-152	-4	7	7	1359	-1304	24	-6	9	7	1351	1343	28	0	11	7	1282	-1207	28	-3	5	8	249	-175	-165
3	4	7	266	218	-120	-2	7	7	543	-483	60	-4	9	7	359	162	-125	2	11	7	565	439	69	-1	5	8	1464	1356	24
-4	5	7	494	-496	75	0	7	7	975	-904	30	-2	9	7	1997	1951	21	0	0	8	3072	2949	17	1	5	8	438	-40	-90
-2	5	7	816	833	30	2	7	7	1192	-1162	26	0	9	7	256	-141	-144	1	1	8	627	651	47	3	5	8	1385	1336	26
0	5	7	1761	1710	19	4	7	7	236	165	-165	2	9	7	530	428	69	0	2	8	653	-533	52	-2	6	8	414	294	-92
2	5	7	367	429	-82	6	7	7	745	-734	41	4	9	7	928	904	37	2	2	8	678	-711	49	0	6	8	608	-502	60
4	5	7	1711	1684	21	-7	8	7	1134	1082	30	6	9	7	846	-801	39	-1	3	8	386	317	-101	2	6	8	481	250	75
-5	6	7	500	-473	62	-5	8	7	1003	1021	32	-5	10	7	502	-465	79												

Notes: Structure factors and deviation (s) are all multiplied by 10. Fc's are phased + or - .