

AM-93-537

Poldervaartite, $\text{Ca}(\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.5})(\text{SiO}_3\text{OH})(\text{OH})$, a new acid nesosilicate from the
Kalahari manganese field, South Africa: Crystal structure and
description

Yongshan Dai, George E. Harlow, Andrew R. McGhie

For deposit: Table 6

American Mineralogist, 78, 9-10, 1084-1089.



Table 6. Observed (F_O) and calculated (F_C) structure factors for poldervaartite

L	F_O	F_C	σ_F Code	L	F_O	F_C	σ_F Code	L	F_O	F_C	σ_F Code
				4	709	685	9	8	949	974	9
				5	651	660	9	10	921	918	10
		0,0,L		6	1303	1308	20	12	589	590	9
2	766	768	7	7	187	187	21	14	245	223	10
4	1952	2050	2	8	218	223	8				
6	1411	1413	13	9	315	311	7			1,1,L	
8	867	872	9	10	111	113	13				
10	103	111	16	11	360	349	6	1	145	131	9
12	365	375	6	12	35	39	25 -	2	353	341	7
14	195	182	13	13	223	218	10	3	264	264	7
		0,2,L						4	583	616	7
								5	64	48	9
0	335	348	9		0,8,L			6	690	666	7
1	864	867	14	0	199	203	15	7	420	411	9
2	386	370	6	1	117	93	10	8	593	613	8
3	933	925	13	2	27	39	17 -	9	412	405	16
4	986	960	18	3	473	469	21	10	228	219	8
5	362	368	5	4	369	369	10	11	59	95	25 -
6	508	507	7	5	879	891	9	12	279	276	7
7	629	645	14	6	57	85	32 -	13	290	292	7
8	1072	1050	15	7	363	373	9	14	141	152	38
9	385	369	10	8	367	374	7				
10	1025	1025	9	9	312	297	11			1,2,L	
11	659	641	29	10	366	356	10				
12	540	529	7	11	61	54	28 -	1	270	244	5
13	206	196	9					2	1790	1765	8
14	843	826	26		0,10,L			3	773	760	14
				0	289	270	10	4	458	443	9
		0,4,L		1	163	168	10	5	551	560	30
0	177	183	7	2	543	540	7	6	950	964	8
1	435	465	14	3	112	103	12	7	79	45	11 -
2	747	712	15	4	309	294	16	8	22	11	14 -
3	1392	1378	10	5	647	631	12	9	170	165	7
4	906	912	11	6	451	442	6	10	24	39	16 -
5	146	131	7	7	29	18	22 -	11	43	46	23 -
6	442	442	6	8	466	480	16	12	227	216	8
7	235	238	6	9	308	294	31	13	36	7	23 -
8	1179	1181	26					14	186	174	11
9	142	136	9		0,12,L					1,3,L	
10	389	392	10	0	374	374	9	1	960	981	17
11	821	827	10	1	120	117	15	2	280	254	5
12	248	240	8	2	501	496	21	3	256	260	24
13	38	26	27 -	3	148	141	13	4	432	407	6
14	618	610	8	4	222	232	9	5	947	956	8
		0,6,L		5	41	33	24 -	6	81	84	11
0	1614	1604	10					7	583	569	12
1	29	40	19 -		1,0,L			8	425	442	10
2	1139	1134	25	0	374	374	9	9	45	41	23 -
3	237	232	28	1	120	117	15	10	181	176	10
				2	268	295	8	11	195	195	8
				4	521	521	7	12	52	44	26 -
				6	824	852	8				

FOR DEPOSIT

Table 6. -- Continued ($F_O - F_C$ for poldervaartite)

2 of 12

				13	374	367	20	8	415	407	18
1,3,L								9	267	256	12
				1,7,L				1,11,L			
13	18	13	17 -								
14	62	86	31 -	1	35	13	18 -				
				2	270	260	5	1	133	130	12
1,4,L				3	85	92	12 -	2	446	449	12
				4	537	527	7	3	63	69	36 -
1	97	92	6	5	408	406	8	4	356	366	6
2	1148	1131	11	6	385	396	6	5	203	186	9
3	376	383	13	7	157	157	9	6	62	33	33 -
4	628	620	8	8	48	57	25 -	7	241	231	9
5	234	184	31	9	435	440	16	1,12,L			
6	115	112	8	10	406	410	6				
7	288	290	5	11	72	105	27 -				
8	805	815	9	12	473	461	7	1	154	120	11
9	164	162	12					2	374	370	21
10	191	202	8	1,8,L				3	140	144	13
11	165	164	10					4	57	71	31 -
12	421	409	9	1	459	460	18	5	158	141	18
13	206	197	9	2	349	353	6	2,0,L			
14	288	282	8	3	611	637	8				
				4	99	91	15				
1,5,L				5	124	146	32	0	179	171	6
				6	411	418	6	2	1174	1156	6
1	114	110	6	7	77	94	21 -	4	507	511	12
2	891	884	16	8	104	99	29	6	1120	1118	8
3	834	815	10	9	153	155	11	8	655	651	8
4	605	607	10	10	185	181	14	10	289	292	6
5	165	167	8	11	29	83	20 -	12	92	71	14 -
6	28	54	17 -					14	553	549	13
7	418	403	6	1,9,L				2,1,L			
8	209	207	10								
9	434	444	10	1	907	927	10				
10	368	381	11	2	190	191	7	0	934	920	9
11	31	18	21 -	3	238	224	19	1	622	620	10
12	145	154	12	4	148	150	10	2	563	558	9
13	246	246	9	5	554	554	18	3	274	291	13
				6	34	43	21 -	4	77	34	8
				7	396	404	7	5	197	184	5
				8	201	188	9	6	414	422	5
1	294	300	6	9	93	81	21 -	7	523	514	7
2	563	570	18	10	82	87	26 -	8	95	66	11 -
3	384	392	5					9	128	94	14
4	319	322	17	1,10,L				10	349	369	5
5	110	90	12					11	517	518	13
6	455	462	14	1	60	21	31 -	12	126	128	28
7	160	149	8	2	212	204	14	13	51	83	27 -
8	118	111	10	3	231	232	8	14	180	153	11
9	273	271	6	4	466	467	5	2,2,L			
10	266	273	7	5	267	264	7				
11	55	50	27 -	6	111	152	57				
12	421	411	6	7	135	129	13	0	805	758	10

FOR DEPOSIT

Table 6. -- Continued ($F_0 - F_c$ for poldervaartite)

2,2,L				2,5,L				2,9,L			
1	181	190	4	0	188	171	7	2	186	183	19
2	394	404	14	1	299	284	24	3	613	621	20
3	1826	1821	6	2	356	348	9	4	192	200	10
4	66	51	22	3	564	573	32	5	369	387	12
5	1380	1366	6	4	215	215	12	6	347	344	5
6	708	732	16	5	427	435	6	7	351	344	6
7	124	99	18	6	387	398	7	8	56	98	29 -
8	160	173	15	7	859	897	16	9	379	391	13
9	484	486	7	8	149	157	10	10	148	130	12
10	247	238	6	9	175	184	11	11	638	632	8
11	645	663	9	10	240	235	13	2,9,L			
12	167	154	13	11	627	632	10	0	291	311	8
13	372	368	6	12	127	125	13	1	217	216	17
14	44	50	25 -	13	78	55	28 -	2	146	137	12
2,3,L				2,6,L				2,10,L			
0	1430	1383	8	0	730	729	11	3	272	268	14
1	480	488	10	1	412	425	23	4	216	222	7
2	633	612	7	2	311	299	15	5	102	118	38
3	938	925	7	3	423	415	6	6	60	19	33 -
4	429	429	16	4	90	96	39	7	583	600	8
5	594	599	8	5	24	11	18 -	8	219	218	12
6	283	293	5	6	238	245	11	9	191	183	10
7	338	339	5	7	67	12	21 -	10	82	101	27 -
8	31	3	18 -	8	722	718	9	2,10,L			
9	174	185	8	9	71	6	22 -	0	578	592	10
10	70	56	22 -	10	326	330	12	1	382	375	22
11	153	155	9	11	266	256	10	2	99	99	14 -
12	107	112	14 -	12	231	232	13	3	443	429	19
13	255	259	23	2,7,L				4	260	261	14
14	28	58	20 -	0	320	326	6	5	95	129	44
2,4,L				1	584	586	15	6	78	88	23 -
0	773	782	10	2	249	261	11	7	58	52	28 -
1	459	453	10	3	736	751	8	8	172	170	26
2	529	520	7	4	322	336	13	9	173	169	16
3	1203	1181	11	5	646	656	15	2,11,L			
4	463	466	9	6	274	280	6	0	150	141	16
5	946	933	8	7	317	321	13	1	472	472	8
6	339	329	9	8	122	126	46	2	147	140	19
7	17	54	13 -	9	71	103	30 -	3	517	515	17
8	90	90	14	10	102	96	16 -	4	53	63	27 -
9	593	599	8	11	69	76	37 -	5	208	214	18
10	195	197	10	12	36	10	23 -	6	134	144	14
11	322	315	11	2,8,L				7	254	233	8
12	131	131	13	0	519	525	10	2,12,L			
13	244	243	8	1	646	653	12	0	321	318	10
								1	108	112	16 -

FOR DEPOSIT

Table 6. -- Continued ($F_0 - F_c$ for poldervaartite)

				3	92	118	24	-	3	452	443	5
	5,7,L			4	266	258	8		4	21	45	15 -
				5	37	52	25	-	5	47	49	22 -
2	360	364	5						6	309	316	6
3	22	39	16	-	6,0,L				7	173	184	39
4	627	651	11						8	71	94	23 -
5	241	251	15		0	1377	1391	11	9	142	152	11
6	65	45	22	-	2	265	255	5	10	62	28	27 -
7	46	19	25	-	4	987	983	27	11	31	31	21 -
8	145	150	11		6	20	22	19 -	12	49	52	27 -
9	452	457	7		8	104	105	12				
10	279	271	8		10	149	151	11	6,4,L			
11	68	78	29	-	12	274	282	9				
									0	690	689	9
	5,8,L				6,1,L				1	582	563	13
1	445	451	9		0	332	337	5	2	25	1	18 -
2	507	518	9		1	47	42	19 -	3	354	338	9
3	327	327	7		2	146	145	7	4	711	704	18
4	145	138	10		3	137	133	7	5	206	211	7
5	107	116	13		4	136	127	13	6	124	114	10
6	359	366	11		5	96	87	10	7	383	367	27
7	86	90	45		6	139	141	10	8	391	394	13
8	235	215	8		7	249	264	14	9	186	167	9
9	199	196	10		8	207	216	7	10	126	117	12
10	192	191	11		9	196	178	9	11	658	654	12
					10	84	112	22 -	12	71	0	29 -
					11	182	176	10	6,5,L			
					12	36	6	22 -				
					13	32	21	23 -	0	281	290	7
	5,9,L				6,2,L				1	427	425	5
1	441	447	13						2	124	116	10
2	94	103	25		0	76	100	20 -	3	92	94	12
3	73	70	23	-	1	801	809	23	4	228	235	6
4	45	21	24	-	2	51	26	19 -	5	276	281	11
5	296	307	26		3	792	796	7	6	170	180	12
6	26	3	19	-	4	39	11	20 -	7	74	105	21 -
7	142	131	20		5	282	279	5	8	52	3	34 -
8	61	12	29	-	6	479	484	9	9	48	28	25 -
9	450	449	27		7	47	43	23 -	10	95	85	25
	5,10,L				8	552	561	6	11	346	338	8
1	103	85	16		9	376	364	5	6,6,L			
2	47	42	26	-	10	657	655	7				
3	121	115	14		11	443	438	22	0	837	833	10
4	36	5	22	-	12	504	506	6	1	592	598	8
5	186	167	24		13	67	77	39 -	2	436	434	22
6	357	364	7						3	146	147	9
7	25	10	17	-	6,3,L				4	450	454	6
					0	150	131	11	5	380	370	15
	5,11,L				1	184	184	6	6	659	675	15
1	239	235	17		2	194	194	15	7	45	39	27 -
2	425	424	6						8	24	6	20 -

FOR DEPOSIT

Table 6. -- Continued ($F_0 - F_c$ for poldervaartite)

				5	547	529	6	3	40	51	21	-
				6	48	53	27	4	91	95	12	-
								5	896	902	15	-
9	150	133	17					6	30	15	19	-
10	267	269	9					7	562	579	7	-
11	92	87	35	0	92	119	31	8	114	113	12	-
				1	57	39	31	9	163	163	10	-
				2	122	153	15	10	55	59	34	-
				3	69	63	39	11	38	80	27	-
0	53	2	27					12	203	197	10	-
1	60	74	23									-
2	205	214	7									-
3	286	284	10	2	768	770	9					-
4	66	71	32	4	266	267	10	1	712	727	14	-
5	65	69	29	6	408	427	5	2	88	93	12	-
6	187	199	9	8	264	253	6	3	188	182	7	-
7	232	222	8	10	433	436	6	4	414	421	15	-
8	159	156	24	12	449	442	6	5	440	439	14	-
9	24	13	16					6	45	36	25	-
10	208	193	10					7	43	48	27	-
								8	287	292	11	-
				1	224	193	5	9	402	400	6	-
				2	267	276	5	10	43	43	24	-
0	184	179	11	3	584	584	16	11	56	136	34	-
1	67	85	24	4	877	894	26					-
2	128	117	11	5	225	224	6					-
3	659	661	22	6	281	287	6					-
4	291	296	7	7	359	363	5	1	224	210	10	-
5	596	592	7	8	220	221	7	2	606	599	17	-
6	92	89	45	9	590	591	8	3	297	298	5	-
7	366	374	6	10	317	325	9	4	525	534	6	-
8	489	478	7	11	150	159	13	5	402	413	17	-
9	363	372	7	12	310	306	9	6	219	209	7	-
								7	396	396	5	-
								8	116	101	13	-
								9	387	396	6	-
0	296	301	9	1	609	600	24	10	339	337	10	-
1	261	265	9	2	733	750	11	11	31	34	23	-
2	23	34	17	3	29	32	20					-
3	418	421	6	4	199	198	19					-
4	58	47	33	5	128	130	9					-
5	109	103	14	6	18	52	16	1	122	117	18	-
6	129	116	13	7	280	276	6	2	214	211	7	-
7	239	241	19	8	111	104	41	3	208	206	9	-
8	52	78	28	9	554	550	8	4	271	263	6	-
				10	68	64	26	5	192	189	19	-
				11	112	69	15	6	314	312	10	-
				12	170	164	12	7	471	466	5	-
0	460	450	9					8	53	53	29	-
1	213	213	15					9	412	392	6	-
2	46	8	27					10	189	197	11	-
3	212	206	26	1	1083	1101	9					-
4	489	483	6	2	93	67	11					-

FOR DEPOSIT

Table 6. -- Continued ($F_0 - F_c$ for poldervaartite)

				0	39	20	25	-	8	143	144	12	
	7,7,L			1	377	368	5		9	254	261	8	
				2	262	258	5		10	215	208	10	
1	95	77	14	-	3	871	861	6					
2	245	241	22		4	271	280	17		8,5,L			
3	127	131	11		5	33	0	20	-				
4	220	220	7		6	603	590	10	0	379	391	7	
5	237	243	7		7	701	709	8	1	144	150	12	
6	306	313	7		8	138	141	11	2	141	145	9	
7	235	225	11		9	149	134	11	3	652	662	6	
8	33	26	22	-	10	141	119	13	4	146	147	16	
9	634	627	7		11	365	350	12	5	157	164	10	
									6	66	85	30	
	7,8,L				8,2,L				7	508	510	10	
1	74	52	37		0	48	51	25	-	8	250	239	8
2	419	428	11		1	203	209	6		9	260	251	8
3	452	453	13		2	177	183	16		10	150	154	15
4	195	199	9		3	181	179	12			8,6,L		
5	103	118	15	-	4	261	260	6					
6	140	141	12		5	275	273	6	0	620	613	7	
7	570	581	15		6	354	361	11	1	172	165	9	
8	206	214	10		7	127	118	14	2	217	216	8	
					8	259	251	7	3	88	65	19	
	7,9,L				9	47	61	27	-	4	173	171	9
					10	57	78	34	-	5	277	286	7
1	703	707	15		11	103	119	48		6	273	274	7
2	64	37	26	-						7	76	39	24
3	223	216	9			8,3,L			8	343	340	7	
4	48	17	26	-					9	119	129	45	
5	424	435	10		0	29	9	21	-		8,7,L		
6	193	205	10		1	588	593	13					
7	253	245	9		2	26	22	17	-				
					3	205	202	7		0	414	416	8
	7,10,L				4	227	218	11		1	647	646	5
					5	532	533	13		2	100	94	14
1	119	109	14		6	252	254	7		3	370	366	10
2	68	82	27	-	7	416	417	11		4	54	86	33
3	194	191	11		8	78	72	38		5	261	274	8
4	355	374	11		9	179	164	14		6	178	180	10
5	183	196	11		10	232	242	16		7	201	206	10
					11	521	513	6		8	189	186	11
	8,0,L					8,4,L				8,8,L			
0	307	317	9		0	208	196	9		0	198	206	14
2	515	519	9		1	38	19	20	-	1	354	345	6
4	65	28	21	-	2	127	143	10		2	126	122	12
6	844	819	8		3	314	319	7		3	122	139	13
8	161	172	16		4	143	126	11		4	47	26	26
10	173	162	11		5	366	371	5		5	75	52	27
					6	55	52	25	-	6	198	173	20
	8,1,L				7	117	112	13		7	165	183	23

