Atom coordinates and displacement parameters (Å2) for chinchorroite.

*x*/*a* *y*/*b* *z*/*c* *U*eq

Na 0.3654(2) 0.03356(18) 0.32975(16) 0.0370(4)

Mg1 0 0.5 0 0.0115(3)

Mg2 0.23336(12) 0.26516(11) 0.03262(11) 0.0115(2)

Mg3 0.58985(13) 0.41854(12) 0.29394(11) 0.0150(2)

As1 0.17196(4) 0.87375(3) 0.98592(3) 0.01206(9)

As2 0.58904(4) 0.35596(3) 0.94557(3) 0.01122(8)

As3 0.77150(4) 0.57445(3) 0.65993(3) 0.01326(9)

O1 0.2055(3) 0.0419(2) 0.0818(2) 0.0161(5)

O2 0.9857(3) 0.2645(2) 0.0017(2) 0.0144(4)

O3 0.1638(3) 0.8872(2) 0.8139(2) 0.0189(5)

O4 0.3560(3) 0.8162(2) 0.0835(2) 0.0172(5)

O5 0.4546(3) 0.3691(2) 0.7798(2) 0.0156(4)

O6 0.2338(3) 0.5022(2) 0.9897(2) 0.0140(4)

O7 0.4959(3) 0.3286(2) 0.0689(2) 0.0154(4)

O8 0.6457(3) 0.4540(3) 0.5117(2) 0.0191(5)

O9 0.8973(3) 0.4775(3) 0.7729(2) 0.0176(5)

O10 0.3295(3) 0.3372(2) 0.2579(2) 0.0149(4)

OH 0.8908(3) 0.7187(3) 0.5957(3) 0.0230(5)

H 0.964(4) 0.774(4) 0.662(4) 0.035

OW1 0.1729(3) 0.1914(3) 0.8095(3) 0.0188(5)

H1A 0.170(4) 0.099(3) 0.793(4) 0.023

H1B 0.243(4) 0.237(4) 0.779(4) 0.023

OW2 0.6373(3) 0.1907(3) 0.3324(3) 0.0215(5)

H2A 0.705(4) 0.186(4) 0.415(3) 0.026

H2B 0.680(5) 0.163(4) 0.280(3) 0.026

OW3 0.8360(3) 0.1763(3) 0.6289(3) 0.0296(6)

H3A 0.929(4) 0.157(5) 0.673(4) 0.035

H3B 0.842(5) 0.257(4) 0.676(4) 0.035

OW4 0.5265(4) 0.8364(3) 0.4370(3) 0.0330(6)

H4A 0.475(5) 0.745(3) 0.438(5) 0.040

H4B 0.588(5) 0.824(5) 0.392(5) 0.040

OW5 0.8442(3) 0.5106(3) 0.3364(3) 0.0265(6)

H5A 0.897(5) 0.568(4) 0.412(3) 0.032

H5B 0.904(5) 0.512(5) 0.290(4) 0.032

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

Na 0.0362(9) 0.0369(9) 0.0214(8) 0.0031(6) 0.0009(7) -0.0074(7)

Mg1 0.0109(7) 0.0105(7) 0.0132(7) 0.0015(5) 0.0045(6) 0.0028(5)

Mg2 0.0104(5) 0.0102(5) 0.0137(5) 0.0008(4) 0.0048(4) 0.0021(4)

Mg3 0.0153(5) 0.0148(5) 0.0130(5) 0.0023(4) 0.0035(4) 0.0029(4)

As1 0.01234(16) 0.00962(15) 0.01397(16) 0.00122(11) 0.00465(13) 0.00252(11)

As2 0.01069(16) 0.01088(15) 0.01240(16) 0.00166(11) 0.00447(12) 0.00285(11)

As3 0.01249(17) 0.01546(16) 0.01230(16) 0.00194(12) 0.00449(13) 0.00439(12)

O1 0.0202(12) 0.0106(10) 0.0164(11) 0.0006(8) 0.0057(10) 0.0030(8)

O2 0.0121(11) 0.0104(10) 0.0208(12) 0.0008(8) 0.0065(9) 0.0025(8)

O3 0.0246(12) 0.0177(11) 0.0141(11) 0.0012(9) 0.0086(10) 0.0026(9)

O4 0.0153(11) 0.0129(10) 0.0226(12) -0.0005(9) 0.0038(10) 0.0074(8)

O5 0.0165(11) 0.0157(11) 0.0129(11) 0.0025(8) 0.0021(9) 0.0055(8)

O6 0.0117(10) 0.0136(10) 0.0164(11) 0.0028(8) 0.0049(9) 0.0030(8)

O7 0.0140(11) 0.0191(11) 0.0154(11) 0.0028(9) 0.0085(9) 0.0034(8)

O8 0.0172(11) 0.0241(12) 0.0136(11) -0.0017(9) 0.0044(9) 0.0026(9)

O9 0.0186(12) 0.0216(11) 0.0141(11) 0.0023(9) 0.0042(9) 0.0108(9)

O10 0.0149(11) 0.0167(11) 0.0148(11) 0.0007(8) 0.0066(9) 0.0056(8)

OH 0.0208(13) 0.0271(13) 0.0194(13) 0.0045(10) 0.0087(11) 0.0004(10)

OW1 0.0182(12) 0.0166(11) 0.0217(13) 0.0037(9) 0.0090(10) 0.0015(9)

OW2 0.0254(14) 0.0258(13) 0.0169(12) 0.0020(10) 0.0094(11) 0.0105(10)

OW3 0.0242(14) 0.0253(14) 0.0313(15) -0.0010(11) 0.0014(12) 0.0056(11)

OW4 0.0410(17) 0.0308(14) 0.0320(16) 0.0024(12) 0.0191(13) 0.0091(12)

OW5 0.0240(14) 0.0317(14) 0.0280(15) 0.0011(11) 0.0163(12) 0.0041(11)

Atom coordinates and displacement parameters (Å2) for espadaite.

*x*/*a* *y*/*b* *z*/*c* *U*eq Occ.

Na 0.4594(4) 0.67011(18) 0.5416(2) 0.0448(18) Na 0.826(12), Mg 0.0625

Mg 0.5 0.58648(17) 0.25 0.0171(9)

Ca1 0.5 0.75 0.25 0.0182(8)

Ca2 0.25 0.5 0.25610(13) 0.0189(6)

As1 0.48492(7) 0.47973(4) 0.13260(5) 0.0188(3)

As2 0.67243(8) 0.64248(4) 0.36284(5) 0.0213(3)

As3 0.31629(8) 0.63803(4) 0.36132(5) 0.0228(3)

O1 0.3749(4) 0.4539(2) 0.1748(3) 0.0256(15)

O2 0.5692(4) 0.5204(2) 0.1839(3) 0.0156(13)

OH3 0.4484(5) 0.5157(2) 0.0546(3) 0.0262(15)

OH4 0.5524(5) 0.4171(2) 0.1010(3) 0.0230(14)

O5 0.6381(4) 0.5844(2) 0.3102(3) 0.0187(13)

O6 0.6340(5) 0.7113(2) 0.3370(3) 0.0289(15)

OH7 0.8085(5) 0.6432(3) 0.3744(4) 0.0337(17)

OH8 0.6167(5) 0.6312(3) 0.4483(3) 0.0370(18)

O9 0.2294(4) 0.5885(2) 0.3294(3) 0.0264(15)

O10 0.4272(5) 0.6540(2) 0.3136(3) 0.0202(14)

OH11 0.2446(6) 0.7025(3) 0.3761(4) 0.054(2)

OH12 0.3542(5) 0.6151(3) 0.4478(3) 0.0449(19)

OW1 0.5 0.75 0.4601(5) 0.049(3)

OW2 0.4741(15) 0.7600(18) 0.6258(7) 0.078(9) 0.5

OW3 0.25 0.5 -0.0139(6) 0.072(4)

OW4a 0.600(6) 0.736(5) 0.748(7) 0.09(4) 0.112(17)

OW4b 0.530(3) 0.6697(16) 0.741(3) 0.057(18) 0.178(18)

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

Na 0.057(4) 0.030(3) 0.048(3) 0.009(2) -0.003(2) -0.004(2)

Mg 0.016(2) 0.011(2) 0.024(2) 0 -0.0064(17) 0

Ca1 0.0177(19) 0.0152(18) 0.0216(19) 0 0 0

Ca2 0.0166(14) 0.0153(13) 0.0249(15) 0 0 0.0020(10)

As1 0.0170(5) 0.0182(5) 0.0211(6) -0.0031(3) -0.0002(4) -0.0005(4)

As2 0.0218(6) 0.0139(5) 0.0282(6) -0.0029(4) -0.0047(4) 0.0005(4)

As3 0.0208(6) 0.0183(5) 0.0292(6) -0.0038(4) 0.0052(4) -0.0038(4)

O1 0.019(4) 0.022(3) 0.036(4) -0.008(3) 0.005(3) -0.004(3)

O2 0.007(3) 0.019(3) 0.021(3) -0.003(3) -0.003(2) -0.003(2)

OH3 0.026(4) 0.028(3) 0.025(4) 0.003(3) -0.003(3) 0.011(3)

OH4 0.026(4) 0.020(3) 0.023(3) -0.009(3) 0.004(3) 0.007(3)

O5 0.014(3) 0.016(3) 0.025(3) -0.004(2) -0.001(3) 0.002(3)

O6 0.026(4) 0.019(3) 0.042(4) -0.002(3) -0.011(3) -0.001(3)

OH7 0.027(4) 0.023(4) 0.051(4) -0.009(3) -0.009(3) 0.000(3)

OH8 0.049(5) 0.034(4) 0.028(4) -0.005(3) 0.005(3) -0.005(3)

O9 0.018(3) 0.019(3) 0.042(4) -0.009(3) 0.004(3) -0.007(3)

O10 0.014(3) 0.017(3) 0.030(4) -0.002(3) 0.008(3) -0.003(3)

OH11 0.044(5) 0.023(4) 0.094(6) -0.006(4) 0.036(4) 0.007(3)

OH12 0.039(4) 0.066(5) 0.030(4) 0.001(3) -0.001(3) -0.013(4)

OW1 0.059(7) 0.041(6) 0.047(6) 0 0 0.011(5)

OW2 0.032(19) 0.16(3) 0.043(8) 0.028(12) 0.010(8) -0.030(18)

OW3 0.083(9) 0.095(9) 0.038(7) 0 0 -0.037(7)

Atom coordinates and displacement parameters (Å2) for magnesiofluckite.

*x*/*a* *y*/*b* *z*/*c* *U*eq

Ca 0.17031(7) 0.10377(8) 0.86992(9) 0.01726(14)

Mg 0.57625(11) 0.14820(13) 0.34179(14) 0.0132(2)

As1 0.18830(3) 0.13107(4) 0.36669(4) 0.01479(10)

As2 0.57084(3) 0.22952(4) 0.83841(4) 0.01423(10)

OH1 0.0646(3) 0.2853(3) 0.4229(4) 0.0300(5)

H1 0.024(4) 0.236(6) 0.413(7) 0.045

O2 0.0905(2) 0.0300(3) 0.1805(3) 0.0209(5)

O3 0.2131(2) -0.0099(3) 0.5765(3) 0.0171(4)

O4 0.3522(2) 0.2580(3) 0.3053(3) 0.0205(5)

O5 0.3938(2) 0.3086(3) 0.8423(3) 0.0203(4)

O6 0.6442(3) 0.1290(3) 0.0595(3) 0.0192(4)

O7 0.5645(2) 0.0968(3) 0.6593(3) 0.0165(4)

OH8 0.7097(3) 0.4052(3) 0.7759(3) 0.0228(5)

H8 0.686(5) 0.506(4) 0.767(6) 0.034

OW9 0.0490(3) 0.3757(4) 0.8599(4) 0.0351(6)

H9A 0.048(3) 0.377(6) 0.833(6) 0.042

H9B 0.081(4) 0.478(4) 0.814(6) 0.042

OW10 0.7027(3) 0.3919(3) 0.3618(3) 0.0250(5)

H10A 0.736(4) 0.417(5) 0.474(4) 0.030

H10B 0.659(4) 0.485(4) 0.311(5) 0.030

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

Ca 0.0167(3) 0.0174(3) 0.0176(3) -0.0005(2) 0.0039(2) 0.0002(2)

Mg 0.0126(4) 0.0132(5) 0.0134(5) 0.0005(4) 0.0019(3) 0.0011(3)

As1 0.01582(16) 0.01358(16) 0.01386(16) 0.00133(11) 0.00151(11) 0.00000(11)

As2 0.01538(16) 0.01161(16) 0.01477(16) 0.00081(11) 0.00078(11) 0.00109(11)

OH1 0.0246(12) 0.0227(12) 0.0448(15) -0.0040(11) 0.0093(11) 0.0051(10)

O2 0.0213(11) 0.0259(12) 0.0138(10) -0.0028(8) -0.0006(8) -0.0039(9)

O3 0.0182(10) 0.0185(11) 0.0138(10) 0.0033(8) 0.0031(8) 0.0027(8)

O4 0.0190(10) 0.0150(10) 0.0265(11) 0.0039(9) 0.0059(9) -0.0005(8)

O5 0.0177(10) 0.0163(11) 0.0268(11) 0.0012(9) 0.0042(8) 0.0040(8)

O6 0.0247(11) 0.0179(11) 0.0139(10) 0.0012(8) -0.0002(8) 0.0039(8)

O7 0.0199(10) 0.0152(10) 0.0140(10) -0.0013(8) 0.0022(8) 0.0003(8)

OH8 0.0197(10) 0.0129(10) 0.0347(13) 0.0012(9) 0.0055(9) -0.0015(8)

OW9 0.0282(13) 0.0258(14) 0.0510(17) 0.0022(12) 0.0075(12) 0.0057(11)

OW10 0.0294(12) 0.0203(12) 0.0232(12) 0.0018(9) 0.0000(10) 0.0027(9)

Atom coordinates and displacement parameters (Å2) for picaite.

*x*/*a* *y*/*b* *z*/*c* *U*eq

Ca 0.85740(8) 0.60607(4) 0.49404(7) 0.01202(13)

Na 0.46345(19) 0.62447(9) 0.12974(17) 0.0244(3)

As1 0.37655(4) 0.60975(2) 0.59968(4) 0.01269(10)

As2 0.92955(4) 0.64139(2) 0.02255(3) 0.01124(9)

O1 0.5296(3) 0.60755(15) 0.4561(3) 0.0189(5)

O2 0.1753(3) 0.55496(13) 0.5377(3) 0.0154(4)

OH3 0.3288(3) 0.72090(16) 0.6468(4) 0.0308(6)

H3 0.214(4) 0.727(3) 0.611(6) 0.046

OH4 0.4843(3) 0.56909(16) 0.8143(3) 0.0211(5)

H4 0.602(4) 0.572(3) 0.807(5) 0.032

O5 0.7861(3) 0.62262(15) 0.1732(3) 0.0196(5)

O6 0.9870(3) 0.75005(14) 0.0007(3) 0.0200(5)

O7 0.8434(3) 0.59136(14) 0.8172(3) 0.0166(4)

OH8 0.1434(3) 0.59007(14) 0.1012(3) 0.0194(5)

H8 0.134(5) 0.5372(18) 0.138(5) 0.029

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

Ca 0.0124(3) 0.0117(3) 0.0121(3) 0.00027(19) 0.0025(2) 0.0000(2)

Na 0.0168(8) 0.0384(8) 0.0180(6) -0.0003(5) 0.0026(5) -0.0007(5)

As1 0.01050(17) 0.01306(16) 0.01445(16) -0.00143(10) 0.00186(11) -0.00037(10)

As2 0.01233(17) 0.01050(15) 0.01078(16) 0.00034(9) 0.00161(11) -0.00068(10)

O1 0.0133(12) 0.0279(12) 0.0161(10) 0.0039(8) 0.0036(8) -0.0006(9)

O2 0.0114(11) 0.0140(10) 0.0202(10) -0.0018(8) 0.0012(8) -0.0011(8)

OH3 0.0155(13) 0.0168(12) 0.0577(16) -0.0139(10) -0.0006(11) 0.0020(9)

OH4 0.0141(12) 0.0341(13) 0.0141(10) 0.0012(9) -0.0001(8) -0.0019(9)

O5 0.0179(12) 0.0294(12) 0.0124(10) 0.0005(8) 0.0050(8) -0.0039(9)

O6 0.0217(13) 0.0100(10) 0.0277(11) 0.0022(8) 0.0022(9) -0.0005(8)

O7 0.0189(12) 0.0201(11) 0.0109(10) -0.0018(7) 0.0029(8) -0.0027(8)

OH8 0.0154(12) 0.0147(10) 0.0272(11) 0.0048(8) 0.0006(9) 0.0015(9)

Atom coordinates and displacement parameters (Å2) for ríosecoite.

*x*/*a* *y*/*b* *z*/*c* *U*eq

Mg 0.30129(17) 0.42079(15) 0.85564(10) 0.0086(2)

Ca1 0.37036(10) 0.32557(10) 0.31902(6) 0.01159(15)

Ca2 0.07916(10) 0.30608(10) 0.61923(6) 0.01165(15)

As1 0.54806(5) 0.23082(5) 0.62373(3) 0.00915(9)

As2 0.19324(5) 0.65485(5) 0.09162(3) 0.01039(9)

As3 0.09897(5) 0.76709(5) 0.66292(3) 0.00925(9)

O1 0.7298(4) 0.3494(3) 0.6351(2) 0.0133(5)

O2 0.4046(4) 0.3022(3) 0.5156(2) 0.0143(5)

O3 0.3889(4) 0.2162(3) 0.7412(2) 0.0126(5)

OH4 0.6640(4) 0.0019(3) 0.6080(2) 0.0131(5)

H4 0.721(6) -0.001(6) 0.546(3) 0.020

O5 0.4017(4) 0.5249(3) 0.1387(2) 0.0136(5)

O6 0.0071(4) 0.6194(4) 0.1798(2) 0.0156(5)

O7 0.1757(4) 0.6389(4) 0.9522(2) 0.0156(5)

OH8 0.2100(5) 0.8895(4) 0.0887(3) 0.0263(7)

H8 0.169(8) 0.925(7) 0.149(3) 0.039

O9 0.1507(4) 0.9718(3) 0.6035(2) 0.0157(5)

O10 0.2957(3) 0.6151(3) 0.7072(2) 0.0125(5)

O11 0.0306(4) 0.6568(3) 0.5860(2) 0.0119(5)

OH12 0.0644(4) 0.8130(4) 0.7843(2) 0.0183(6)

H12 0.017(7) 0.766(6) 0.841(3) 0.027

OW13 0.3073(5) 0.2219(4) 0.9906(2) 0.0232(6)

H13A 0.381(6) 0.212(6) 1.042(3) 0.028

H13B 0.265(6) 0.126(5) 0.994(4) 0.028

OW14 0.5445(4) 0.1348(4) 0.1679(2) 0.0183(6)

H14A 0.645(5) 0.168(5) 0.137(4) 0.022

H14B 0.575(6) 0.023(4) 0.188(4) 0.022

*U*11 *U*22 *U*33 *U*23 *U*13 *U*12

Mg 0.0067(5) 0.0095(5) 0.0096(6) -0.0012(4) -0.0003(4) -0.0015(4)

Ca1 0.0104(3) 0.0115(3) 0.0128(3) -0.0017(3) 0.0010(3) -0.0025(3)

Ca2 0.0099(3) 0.0122(3) 0.0124(3) -0.0018(3) 0.0001(3) -0.0009(3)

As1 0.00809(17) 0.00900(17) 0.01037(17) -0.00152(13) -0.00009(13) -0.00144(13)

As2 0.00947(17) 0.01024(17) 0.01091(18) -0.00062(13) 0.00045(13) -0.00115(13)

As3 0.00818(17) 0.00880(16) 0.01082(18) -0.00134(13) -0.00032(13) -0.00162(13)

O1 0.0111(12) 0.0124(12) 0.0171(13) -0.0022(10) -0.0001(10) -0.0035(10)

O2 0.0128(12) 0.0186(13) 0.0119(12) -0.0013(10) -0.0038(10) -0.0022(10)

O3 0.0140(12) 0.0132(12) 0.0102(12) -0.0009(10) 0.0031(10) -0.0038(10)

OH4 0.0154(13) 0.0100(11) 0.0121(12) -0.0019(10) 0.0040(10) 0.0005(10)

O5 0.0088(12) 0.0157(12) 0.0158(13) -0.0007(10) -0.0024(10) -0.0005(10)

O6 0.0147(13) 0.0214(13) 0.0102(12) -0.0024(10) 0.0028(10) -0.0037(10)

O7 0.0171(13) 0.0187(13) 0.0104(12) -0.0016(10) -0.0018(10) -0.0006(10)

OH8 0.0381(18) 0.0109(13) 0.0297(17) -0.0041(12) 0.0079(14) -0.0078(12)

O9 0.0164(13) 0.0111(12) 0.0201(14) -0.0009(10) -0.0002(11) -0.0046(10)

O10 0.0092(12) 0.0143(12) 0.0136(12) 0.0010(10) -0.0017(10) -0.0017(10)

O11 0.0110(12) 0.0120(12) 0.0135(12) -0.0006(10) -0.0017(10) -0.0038(10)

OH12 0.0199(14) 0.0170(13) 0.0140(13) 0.0012(11) 0.0014(11) 0.0048(11)

OW13 0.0322(17) 0.0216(15) 0.0181(14) 0.0022(12) -0.0085(12) -0.0105(13)

OW14 0.0218(15) 0.0138(13) 0.0185(14) 0.0011(11) 0.0010(12) -0.0039(11)