

TABLE 6. ANISOTROPIC THERMAL PARAMETERS FOR ESPERANZAITTE

	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
As	0.00161(7)	0.00158(7)	0.0062(2)	0	0.0015(2)	0
As	0.00214(7)	0.00145(6)	0.0048(2)	0	0.0021(2)	0
Ca	0.00243(9)	0.00180(8)	0.0082(3)	-0.0005(2)	0.0025(3)	-0.0007(3)
Al	0.0018(1)	0.0015(1)	0.0070(4)	0.0007(3)	0.0021(4)	0.0007(4)
Na	0.0077(5)	0.0016(3)	0.014(1)	0	0.003(1)	0
F1	0.0040(4)	0.0026(3)	0.012(1)	0.0003(6)	0.002(1)	0.004(1)
F2	0.0025(3)	0.0029(3)	0.010(1)	0.0006(5)	0.0026(9)	-0.001(1)
OH	0.0025(5)	0.0018(4)	0.007(2)	0	0.003(1)	0
Ow	0.0032(4)	0.0020(3)	0.011(1)	-0.0007(7)	0.001(1)	0.000(1)
O1	0.0013(5)	0.0028(5)	0.014(2)	0	-0.002(2)	0
O2	0.0020(4)	0.0021(3)	0.015(1)	0.0004(6)	0.003(1)	-0.003(1)
O3	0.0032(6)	0.0011(4)	0.007(2)	0	0.004(1)	0
O4	0.0055(7)	0.0022(5)	0.004(2)	0	-0.000(2)	0
O5	0.0030(4)	0.0017(3)	0.008(1)	-0.0003(6)	0.004(1)	-0.000(1)
O6	0.0049(7)	0.0037(6)	0.008(2)	0	0.004(2)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

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

TABLE 7.OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR  
ESPERANZAITE

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

Page 1

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
0	2	0	710	697	7	0	9	5	328	310	38
0	4	0	1064	1029	8	0	2	6	233	243	21
0	6	0	2173	2193	9	0	3	6	393	403	22
0	8	0	880	858	9	0	4	6	424	422	30
0	10	0	706	716	8	0	9	6	258	260	22
0	12	0	850	841	9	0	0	7	523	519	14
0	14	0	486	481	12	0	2	7	404	396	26
0	0	1	541	584	7	0	3	7	301	303	20
0	1	1	505	486	5	0	4	7	290	298	21
0	2	1	923	902	8	1	3	-7	244	226	22
0	3	1	918	951	8	1	6	-7	204	187	25
0	6	1	513	540	7	1	0	-6	240	227	20
0	7	1	350	371	14	1	1	-6	441	459	13
0	8	1	492	514	9	1	3	-6	472	479	12
0	9	1	457	471	11	1	5	-6	420	426	14
0	10	1	306	328	26	1	6	-6	200	207	24
0	12	1	262	263	16	1	7	-6	319	295	16
0	13	1	221	226	20	1	9	-6	437	470	16
0	0	2	1364	1379	16	1	0	-5	291	277	15
0	1	2	370	369	7	1	1	-5	444	452	11
0	2	2	345	333	17	1	3	-5	332	320	14
0	3	2	369	358	8	1	5	-5	415	427	12
0	4	2	254	241	10	1	7	-5	517	525	12
0	5	2	211	209	12	1	11	-5	437	422	14
0	6	2	831	858	9	1	1	-4	500	492	9
0	12	2	423	427	27	1	3	-4	361	383	12
0	1	3	611	619	6	1	5	-4	651	659	9
0	2	3	785	793	11	1	6	-4	180	190	21
0	3	3	854	841	8	1	7	-4	182	216	21
0	4	3	553	552	8	1	9	-4	292	288	16
0	5	3	185	179	19	1	11	-4	289	305	18
0	6	3	442	446	10	1	0	-3	158	149	16
0	7	3	419	427	13	1	1	-3	582	572	7
0	8	3	371	369	11	1	3	-3	225	215	13
0	9	3	298	303	15	1	5	-3	560	573	8
0	10	3	426	420	17	1	7	-3	310	316	12
0	12	3	299	293	24	1	8	-3	193	149	17
0	0	4	268	280	13	1	11	-3	247	288	19
0	2	4	636	639	9	1	13	-3	203	189	22
0	3	4	234	237	16	1	1	-2	1195	1180	8
0	4	4	1090	1083	11	1	3	-2	397	396	7
0	5	4	269	278	15	1	5	-2	1045	1063	10
0	8	4	502	494	12	1	6	-2	193	174	14
0	10	4	676	683	10	1	7	-2	549	559	8
0	11	4	195	123	21	1	9	-2	640	624	9
0	0	5	356	350	13	1	11	-2	501	505	11
0	1	5	256	261	16	1	12	-2	277	247	15
0	3	5	415	419	17	1	13	-2	330	342	16
0	5	5	247	238	18	1	0	-1	132	136	14
0	6	5	368	360	14	1	1	-1	691	695	7

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	3	-1	1231	1227	8	1	3	6	483	492	13
1	4	-1	212	214	11	1	5	6	553	546	13
1	5	-1	281	271	9	1	6	6	222	219	23
1	7	-1	893	904	9	1	7	6	284	280	20
1	9	-1	640	637	8	1	3	7	249	274	24
1	11	-1	185	230	21	2	0	-7	366	370	15
1	13	-1	212	194	20	2	2	-7	414	421	16
1	0	0	390	452	4	2	3	-7	271	279	19
1	2	0	187	203	11	2	4	-7	348	331	16
1	3	0	171	141	13	2	6	-7	356	368	17
1	5	0	236	233	10	2	0	-6	573	573	11
1	6	0	245	244	11	2	2	-6	195	148	21
1	9	0	278	279	13	2	4	-6	328	327	16
1	11	0	284	291	15	2	6	-6	416	430	14
1	1	1	595	604	6	2	0	-5	457	452	11
1	2	1	188	204	14	2	3	-5	493	492	11
1	3	1	817	810	8	2	9	-5	369	374	15
1	5	1	369	379	8	2	0	-4	997	1006	10
1	7	1	393	395	9	2	1	-4	453	466	10
1	9	1	549	551	9	2	2	-4	653	639	8
1	11	1	236	260	18	2	3	-4	174	144	18
1	13	1	200	174	21	2	4	-4	395	402	11
1	0	2	607	575	6	2	5	-4	305	295	13
1	1	2	639	658	7	2	6	-4	861	863	9
1	2	2	1000	975	10	2	7	-4	337	320	13
1	3	2	541	583	7	2	8	-4	484	497	11
1	4	2	358	357	9	2	10	-4	228	220	20
1	5	2	585	599	8	2	12	-4	531	541	13
1	6	2	208	197	15	2	0	-3	321	329	9
1	7	2	426	428	10	2	1	-3	216	205	11
1	8	2	751	765	8	2	2	-3	1399	1390	10
1	9	2	634	639	9	2	3	-3	428	423	8
1	10	2	275	251	16	2	4	-3	830	809	8
1	13	2	402	404	14	2	5	-3	333	335	11
1	14	2	278	274	19	2	6	-3	492	482	9
1	0	3	424	426	8	2	7	-3	200	163	16
1	1	3	488	511	8	2	8	-3	891	902	9
1	3	3	834	815	8	2	9	-3	298	301	15
1	5	3	386	373	12	2	10	-3	468	473	12
1	7	3	681	681	9	2	11	-3	192	183	21
1	8	3	244	229	17	2	12	-3	315	307	16
1	11	3	445	433	13	2	0	-2	445	407	6
1	13	3	327	342	18	2	3	-2	771	745	7
1	2	4	190	164	19	2	4	-2	379	392	8
1	8	4	230	209	21	2	5	-2	287	287	10
1	1	5	444	415	12	2	6	-2	344	323	10
1	3	5	545	541	11	2	8	-2	387	385	10
1	5	5	492	494	12	2	9	-2	247	251	15
1	7	5	373	385	16	2	10	-2	386	391	12
1	1	6	450	443	13	2	12	-2	285	309	17

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
2	14	-2	213	228	23	2	4	4	538	528	11
2	1	-1	481	480	5	2	5	4	363	363	14
2	2	-1	771	760	8	2	6	4	525	533	12
2	4	-1	1255	1213	9	2	7	4	310	297	17
2	5	-1	146	172	15	2	8	4	266	268	20
2	7	-1	483	498	9	2	9	4	226	242	23
2	8	-1	461	449	9	2	10	4	252	241	22
2	9	-1	241	230	15	2	11	4	260	235	20
2	10	-1	455	432	10	2	12	4	400	402	16
2	13	-1	205	224	23	2	0	5	340	334	14
2	14	-1	378	378	15	2	1	5	238	238	19
2	0	0	271	265	9	2	2	5	504	500	12
2	1	0	155	160	14	2	4	5	470	461	12
2	2	0	1386	1384	7	2	5	5	344	315	15
2	3	0	853	840	9	2	8	5	224	216	25
2	4	0	1059	1070	9	2	10	5	309	308	21
2	5	0	139	129	16	2	1	6	220	235	23
2	6	0	160	179	16	2	2	6	203	168	23
2	8	0	879	883	9	2	3	6	363	370	16
2	9	0	623	585	8	2	2	7	434	423	16
2	10	0	630	631	9	3	3	-7	404	400	15
2	14	0	397	393	15	3	0	-6	523	524	11
2	0	1	1326	1334	8	3	1	-6	320	307	15
2	2	1	902	875	9	3	3	-6	492	494	12
2	3	1	228	166	11	3	6	-6	356	359	15
2	6	1	1200	1195	12	3	7	-6	354	369	16
2	8	1	487	493	10	3	9	-6	338	332	17
2	9	1	390	386	12	3	1	-5	447	448	11
2	10	1	246	244	17	3	2	-5	220	227	18
2	12	1	686	683	10	3	3	-5	950	944	9
2	0	2	1206	1178	10	3	5	-5	403	380	12
2	1	2	419	393	8	3	7	-5	302	305	16
2	2	2	286	282	10	3	9	-5	759	767	11
2	3	2	915	926	9	3	10	-5	255	243	20
2	4	2	295	297	11	3	11	-5	228	226	22
2	6	2	549	550	9	3	0	-4	367	339	10
2	7	2	342	319	13	3	1	-4	592	589	8
2	9	2	434	438	12	3	2	-4	401	414	10
2	0	3	1178	1174	11	3	4	-4	482	492	10
2	2	3	336	336	11	3	5	-4	589	589	9
2	3	3	490	498	10	3	6	-4	204	227	18
2	4	3	366	374	12	3	7	-4	326	323	13
2	6	3	861	845	9	3	8	-4	239	232	17
2	8	3	324	298	15	3	10	-4	276	260	17
2	9	3	264	263	17	3	1	-3	258	267	10
2	12	3	490	503	13	3	2	-3	246	254	11
2	0	4	586	566	9	3	3	-3	731	709	7
2	1	4	405	407	12	3	6	-3	191	191	17
2	2	4	368	383	13	3	7	-3	335	350	12
2	3	4	454	445	11	3	8	-3	202	222	18

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	9	-3	526	510	11	3	7	2	363	362	13
3	10	-3	202	187	19	3	9	2	680	675	10
3	0	-2	368	391	7	3	10	2	256	236	18
3	1	-2	219	269	10	3	11	2	386	384	14
3	2	-2	423	433	6	3	12	2	300	301	18
3	4	-2	677	686	7	3	1	3	497	508	9
3	5	-2	401	392	8	3	2	3	682	674	8
3	7	-2	553	539	8	3	3	3	804	796	8
3	8	-2	420	424	11	3	4	3	543	544	10
3	9	-2	223	203	16	3	5	3	611	604	10
3	10	-2	465	459	12	3	7	3	389	387	13
3	11	-2	382	389	13	3	8	3	449	469	13
3	13	-2	322	356	18	3	9	3	420	416	14
3	14	-2	261	264	21	3	10	3	428	422	13
3	0	-1	1436	1408	7	3	11	3	386	383	16
3	1	-1	1341	1325	7	3	0	4	178	166	20
3	2	-1	377	378	7	3	2	4	352	346	14
3	4	-1	251	222	9	3	3	4	256	228	17
3	5	-1	1049	1079	10	3	5	4	362	367	15
3	6	-1	1031	1038	10	3	8	4	241	245	22
3	7	-1	806	801	8	3	1	5	258	242	17
3	8	-1	204	207	17	3	2	5	504	505	12
3	9	-1	210	213	18	3	4	5	368	368	15
3	11	-1	617	629	11	3	5	5	232	228	21
3	12	-1	447	467	13	3	8	5	314	319	20
3	13	-1	375	382	15	3	1	6	482	490	15
3	0	0	494	455	6	3	2	6	240	252	22
3	1	0	256	262	10	3	4	6	317	310	18
3	3	0	185	241	13	3	5	6	439	443	15
3	4	0	540	559	6	3	7	6	419	415	16
3	5	0	219	225	12	4	0	-7	544	558	12
3	6	0	238	246	13	4	1	-7	207	185	23
3	7	0	187	185	17	4	2	-7	346	325	15
3	9	0	633	637	9	4	3	-7	226	232	23
3	10	0	214	207	19	4	4	-7	342	352	17
3	0	1	481	508	7	4	6	-7	294	302	20
3	1	1	589	590	6	4	0	-6	361	377	14
3	3	1	231	228	11	4	2	-6	225	223	20
3	5	1	730	730	7	4	3	-6	210	218	21
3	6	1	800	794	8	4	6	-6	286	300	18
3	7	1	185	154	18	4	9	-6	220	221	24
3	8	1	183	193	20	4	6	-5	179	154	21
3	11	1	279	264	16	4	0	-4	424	424	9
3	12	1	527	524	12	4	1	-4	534	541	9
3	0	2	842	868	8	4	2	-4	613	601	8
3	1	2	455	478	8	4	3	-4	302	301	12
3	3	2	1090	1102	11	4	4	-4	432	455	10
3	4	2	372	369	11	4	5	-4	291	283	13
3	5	2	416	424	10	4	6	-4	566	559	10
3	6	2	513	491	10	4	7	-4	333	318	13

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
4	8	-4	214	218	19	4	3	1	869	888	9
4	9	-4	462	469	12	4	4	1	652	640	7
4	10	-4	316	339	16	4	7	1	515	514	10
4	12	-4	400	410	15	4	8	1	441	439	11
4	0	-3	1080	1088	10	4	9	1	339	349	14
4	1	-3	582	590	7	4	10	1	452	439	12
4	2	-3	365	383	9	4	13	1	275	261	19
4	3	-3	582	570	7	4	14	1	309	296	19
4	4	-3	836	844	8	4	2	2	183	207	18
4	5	-3	303	301	12	4	3	2	380	384	11
4	6	-3	778	782	8	4	4	2	323	362	13
4	7	-3	587	556	9	4	9	2	331	334	15
4	8	-3	283	252	14	4	12	2	283	256	19
4	9	-3	305	310	15	4	0	3	416	418	11
4	10	-3	485	491	12	4	1	3	181	178	20
4	11	-3	347	342	14	4	3	3	620	627	10
4	12	-3	459	460	13	4	4	3	233	245	19
4	0	-2	366	375	7	4	7	3	321	319	16
4	1	-2	130	134	16	4	8	3	304	297	17
4	2	-2	530	549	6	4	9	3	283	280	18
4	4	-2	384	388	8	4	10	3	278	274	20
4	6	-2	277	294	12	4	0	4	485	474	11
4	7	-2	205	183	16	4	1	4	301	312	16
4	8	-2	468	478	10	4	2	4	424	422	13
4	10	-2	216	195	18	4	3	4	596	585	11
4	12	-2	190	175	22	4	4	4	236	239	20
4	14	-2	325	277	17	4	5	4	276	301	19
4	0	-1	539	539	6	4	6	4	449	470	14
4	2	-1	487	470	6	4	8	4	272	286	21
4	3	-1	283	295	9	4	9	4	529	531	15
4	4	-1	337	329	8	4	0	5	321	317	16
4	5	-1	297	296	10	4	1	5	298	311	17
4	6	-1	310	322	11	4	3	5	220	231	22
4	8	-1	304	294	12	4	5	5	314	333	18
4	11	-1	297	281	16	4	6	5	321	296	18
4	12	-1	213	200	21	4	7	5	299	302	21
4	0	0	341	371	8	5	0	-7	392	397	15
4	1	0	134	76	17	5	1	-7	233	215	21
4	2	0	1054	1060	10	5	6	-7	365	370	17
4	4	0	661	656	7	5	1	-6	340	335	15
4	5	0	457	441	8	5	2	-6	205	232	21
4	6	0	645	638	7	5	5	-6	266	256	17
4	8	0	502	497	10	5	7	-6	354	322	16
4	10	0	358	356	13	5	9	-6	211	196	24
4	12	0	394	392	14	5	0	-5	884	905	9
4	13	0	217	247	24	5	1	-5	412	427	12
4	14	0	240	267	24	5	2	-5	370	381	12
4	0	1	310	305	10	5	5	-5	415	427	12
4	1	1	281	291	10	5	6	-5	738	744	10
4	2	1	520	520	7	5	7	-5	266	263	17

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
5	8	-5	348	371	15	5	0	1	1019	986	10
5	9	-5	227	220	22	5	1	1	200	202	15
5	0	-4	541	555	9	5	2	1	459	486	9
5	3	-4	1221	1213	12	5	4	1	549	562	9
5	6	-4	209	221	19	5	6	1	588	580	9
5	7	-4	194	190	20	5	7	1	193	169	18
5	8	-4	197	197	20	5	8	1	279	263	15
5	9	-4	617	612	11	5	10	1	220	222	21
5	0	-3	615	622	7	5	0	2	1036	1032	11
5	2	-3	276	253	11	5	1	2	909	912	9
5	3	-3	159	155	17	5	2	2	486	495	10
5	4	-3	250	256	14	5	4	2	730	719	9
5	6	-3	468	449	10	5	5	2	390	407	13
5	10	-3	266	248	17	5	6	2	745	760	9
5	12	-3	311	335	18	5	7	2	865	871	9
5	0	-2	402	386	7	5	8	2	342	354	15
5	1	-2	384	378	8	5	10	2	390	389	15
5	2	-2	434	461	7	5	11	2	334	341	17
5	3	-2	1306	1296	11	5	12	2	483	455	14
5	4	-2	517	533	8	5	0	3	761	759	9
5	6	-2	291	295	13	5	1	3	330	311	13
5	8	-2	323	335	13	5	2	3	251	237	17
5	9	-2	539	509	10	5	3	3	545	543	11
5	10	-2	292	293	15	5	5	3	267	238	18
5	12	-2	212	202	22	5	6	3	795	770	10
5	0	-1	581	577	6	5	7	3	210	177	23
5	1	-1	378	365	7	5	9	3	526	518	13
5	2	-1	1333	1367	10	5	3	4	521	510	12
5	3	-1	560	566	7	5	4	4	296	287	18
5	4	-1	1109	1117	11	5	9	4	291	311	23
5	5	-1	594	591	8	5	10	4	220	206	27
5	7	-1	234	209	15	5	0	5	504	505	13
5	8	-1	638	636	9	5	3	5	238	263	22
5	9	-1	352	358	13	5	6	5	346	381	19
5	10	-1	621	612	10	5	0	6	277	272	21
5	11	-1	228	232	21	5	2	6	325	304	18
5	13	-1	322	327	18	5	3	6	442	447	16
5	14	-1	341	325	17	6	1	-7	372	361	15
5	0	0	1001	981	10	6	2	-7	331	325	17
5	1	0	741	752	7	6	3	-7	203	183	25
5	4	0	552	556	8	6	4	-7	348	347	17
5	5	0	466	473	9	6	5	-7	316	314	18
5	6	0	543	540	8	6	1	-6	359	330	13
5	7	0	698	715	8	6	2	-6	431	438	12
5	8	0	191	179	18	6	3	-6	344	342	15
5	9	0	220	212	18	6	4	-6	274	235	16
5	10	0	295	292	16	6	5	-6	261	259	19
5	11	0	350	351	15	6	8	-6	345	337	16
5	12	0	263	271	21	6	0	-5	373	386	12
5	13	0	389	392	16	6	2	-5	186	170	20

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
6	6	-5	255	258	18	6	5	1	536	541	10
6	2	-4	372	383	11	6	7	1	370	354	13
6	3	-4	511	519	9	6	8	1	351	322	14
6	4	-4	224	243	16	6	9	1	206	195	21
6	5	-4	167	124	20	6	10	1	261	240	18
6	8	-4	307	302	15	6	11	1	504	499	13
6	9	-4	349	337	14	6	0	2	264	241	16
6	0	-3	535	556	8	6	1	2	230	213	17
6	1	-3	358	374	10	6	3	2	295	305	15
6	2	-3	191	181	15	6	5	2	271	290	17
6	3	-3	353	361	10	6	6	2	212	178	20
6	4	-3	471	468	9	6	9	2	395	392	14
6	5	-3	290	275	12	6	1	3	199	168	21
6	6	-3	488	477	10	6	2	3	222	221	20
6	7	-3	362	379	13	6	5	3	284	249	16
6	9	-3	280	258	15	6	8	3	228	243	23
6	10	-3	187	170	22	6	1	4	447	446	13
6	11	-3	255	222	19	6	3	4	331	329	16
6	12	-3	378	391	16	6	5	4	269	305	20
6	0	-2	253	273	12	6	7	4	309	315	20
6	1	-2	790	775	7	6	9	4	406	410	17
6	2	-2	589	583	7	6	0	5	355	372	17
6	3	-2	183	165	15	6	1	5	384	396	16
6	4	-2	598	597	8	6	3	5	421	394	15
6	5	-2	962	967	10	6	5	5	246	201	23
6	6	-2	511	513	9	6	6	5	272	283	22
6	7	-2	322	343	13	7	2	-7	242	258	22
6	9	-2	251	239	16	7	5	-7	231	204	23
6	10	-2	326	339	15	7	0	-6	184	164	22
6	11	-2	417	432	14	7	7	-6	211	203	23
6	12	-2	420	418	15	7	0	-5	265	236	15
6	13	-2	312	342	19	7	1	-5	255	246	16
6	3	-1	156	129	18	7	2	-5	472	462	11
6	4	-1	190	201	16	7	4	-5	557	559	11
6	10	-1	194	194	21	7	5	-5	270	269	17
6	12	-1	204	131	23	7	8	-5	354	355	16
6	0	0	261	266	12	7	10	-5	403	391	14
6	1	0	598	587	7	7	0	-4	861	850	9
6	2	0	399	390	10	7	1	-4	372	360	11
6	3	0	228	265	15	7	2	-4	378	379	11
6	4	0	274	290	14	7	4	-4	414	415	11
6	5	0	773	772	8	7	5	-4	450	430	10
6	6	0	281	277	14	7	6	-4	625	618	10
6	7	0	377	378	12	7	7	-4	353	315	13
6	10	0	245	234	18	7	8	-4	315	310	15
6	11	0	514	492	12	7	10	-4	298	319	18
6	0	1	416	401	10	7	11	-4	366	332	16
6	1	1	388	379	11	7	2	-3	212	235	16
6	3	1	639	624	9	7	3	-3	429	439	10
6	4	1	245	221	15	7	6	-3	343	343	13

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
7	9	-3	243	253	18	7	10	3	292	284	21
7	12	-3	329	303	17	7	0	4	696	709	11
7	0	-2	803	825	8	7	6	4	447	459	16
7	1	-2	395	387	10	7	0	5	249	243	22
7	2	-2	405	421	10	7	3	5	262	281	23
7	3	-2	326	347	11	7	4	5	214	216	25
7	4	-2	187	161	17	8	0	-7	368	361	15
7	5	-2	322	320	12	8	1	-7	280	289	20
7	6	-2	746	773	8	8	1	-6	516	537	12
7	7	-2	224	225	17	8	2	-6	245	208	19
7	8	-2	237	204	17	8	4	-6	211	206	22
7	10	-2	204	194	21	8	5	-6	458	460	14
7	12	-2	457	470	15	8	7	-6	506	513	14
7	0	-1	873	891	8	8	0	-5	201	212	20
7	1	-1	306	297	12	8	2	-5	303	341	15
7	2	-1	629	612	8	8	3	-5	483	473	11
7	3	-1	718	713	8	8	4	-5	447	438	12
7	4	-1	644	652	8	8	6	-5	201	171	20
7	5	-1	293	332	13	8	8	-5	216	247	23
7	6	-1	795	806	8	8	9	-5	318	330	17
7	8	-1	402	415	12	8	1	-4	240	214	15
7	9	-1	510	530	11	8	2	-4	173	164	21
7	10	-1	288	303	17	8	4	-4	193	182	19
7	12	-1	566	570	13	8	7	-4	346	338	13
7	2	0	697	690	8	8	8	-4	229	219	19
7	3	0	305	293	13	8	9	-4	241	234	20
7	4	0	965	955	9	8	10	-4	232	236	22
7	8	0	446	463	12	8	1	-3	346	334	11
7	9	0	223	227	19	8	2	-3	370	390	11
7	10	0	490	490	12	8	3	-3	774	784	8
7	0	1	567	566	9	8	4	-3	256	281	15
7	1	1	373	355	12	8	5	-3	336	334	12
7	2	1	351	335	12	8	7	-3	184	168	20
7	3	1	364	360	12	8	8	-3	312	325	15
7	5	1	191	191	21	8	9	-3	674	685	10
7	6	1	229	187	18	8	10	-3	201	208	23
7	7	1	290	254	15	8	0	-2	238	254	15
7	2	2	720	722	10	8	1	-2	272	265	13
7	4	2	513	519	11	8	3	-2	861	877	8
7	8	2	496	482	13	8	5	-2	320	317	13
7	10	2	385	362	16	8	6	-2	338	336	12
7	0	3	317	306	15	8	7	-2	274	252	15
7	1	3	535	539	12	8	9	-2	520	517	12
7	2	3	538	538	12	8	11	-2	211	233	24
7	3	3	224	194	21	8	12	-2	225	235	23
7	4	3	379	377	14	8	0	-1	298	303	13
7	5	3	334	364	17	8	5	-1	274	264	14
7	6	3	260	245	20	8	7	-1	239	254	17
7	7	3	382	414	17	8	9	-1	325	354	16
7	8	3	444	457	16	8	11	-1	246	246	21

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
8	0	0	310	295	13	9	10	-1	480	467	13
8	2	0	271	279	15	9	0	0	537	551	11
8	3	0	604	591	9	9	2	0	414	398	12
8	4	0	187	175	20	9	3	0	202	184	20
8	6	0	267	278	16	9	4	0	280	299	16
8	7	0	348	358	14	9	6	0	614	589	11
8	8	0	206	198	21	9	7	0	187	143	23
8	9	0	287	284	17	9	8	0	206	217	23
8	1	1	836	833	9	9	10	0	224	234	24
8	3	1	276	260	16	9	2	1	243	227	18
8	5	1	774	768	10	9	0	2	277	274	17
8	7	1	614	624	11	9	2	2	224	251	21
8	9	1	250	264	21	9	3	2	305	294	17
8	11	1	387	390	17	9	4	2	188	161	23
8	1	2	464	465	12	9	6	2	359	391	17
8	2	2	308	304	16	9	0	3	450	448	14
8	3	2	199	186	21	9	2	3	341	329	17
8	5	2	393	414	14	9	4	3	473	476	14
8	7	2	310	316	18	9	6	3	273	251	20
8	8	2	224	272	25	9	2	4	321	323	19
8	10	2	209	176	25	10	0	-6	404	432	14
8	3	3	270	257	18	10	1	-6	314	302	16
8	0	4	255	221	21	10	3	-6	495	491	13
8	1	4	224	240	24	10	4	-6	194	171	24
8	2	4	207	195	25	10	1	-5	550	534	11
8	3	4	251	302	22	10	5	-5	541	530	12
9	0	-7	212	244	23	10	7	-5	361	367	15
9	0	-5	436	457	12	10	0	-4	398	394	12
9	2	-5	370	384	13	10	2	-4	197	220	21
9	4	-5	513	525	12	10	4	-4	237	254	19
9	6	-5	298	304	17	10	6	-4	265	269	17
9	8	-5	343	360	16	10	1	-3	707	694	9
9	0	-4	315	330	14	10	3	-3	268	281	15
9	2	-4	581	596	10	10	4	-3	196	194	20
9	4	-4	403	407	12	10	5	-3	553	535	10
9	6	-4	354	372	13	10	7	-3	478	467	12
9	8	-4	374	408	15	10	0	-2	377	370	12
9	10	-4	292	321	20	10	1	-2	457	453	11
9	0	-3	436	436	11	10	2	-2	207	193	18
9	2	-3	258	240	15	10	3	-2	543	522	10
9	4	-3	396	390	12	10	4	-2	238	255	18
9	6	-3	356	368	13	10	6	-2	293	309	15
9	10	-3	307	276	17	10	7	-2	505	495	12
9	2	-2	464	459	11	10	9	-2	301	336	18
9	8	-2	405	414	13	10	2	-1	224	176	18
9	0	-1	967	1002	10	10	3	-1	662	658	10
9	2	-1	317	341	14	10	9	-1	544	533	12
9	4	-1	564	562	10	10	0	0	501	491	12
9	6	-1	570	574	11	10	3	0	225	208	19
9	8	-1	366	365	14	10	4	0	304	326	17

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
10	6	0	368	362	15	12	1	-2	624	607	11
10	9	0	209	204	25	12	2	-2	312	264	15
10	1	1	276	287	18	12	4	-2	203	213	24
10	2	1	261	250	17	12	5	-2	459	468	14
10	3	1	750	748	10	12	7	-2	511	496	13
10	5	1	378	392	16	12	0	-1	478	498	13
10	0	2	250	237	20	12	1	-1	380	370	15
10	1	2	500	496	13	12	5	-1	346	353	17
10	3	2	340	350	17	12	6	-1	337	369	18
10	4	2	245	237	21	12	1	0	222	189	22
10	5	2	353	361	17	12	3	0	209	251	25
10	6	2	237	226	24	12	0	1	506	523	14
10	7	2	555	552	14	12	1	1	320	304	18
10	0	3	212	229	24	12	3	1	319	294	18
10	1	3	270	293	22	13	0	-4	580	566	12
11	0	-6	285	257	17	13	1	-4	215	256	23
11	0	-5	318	324	16	13	2	-3	395	396	15
11	2	-5	289	276	17	13	4	-3	348	353	16
11	4	-5	258	249	19	13	2	-1	343	342	17
11	2	-4	604	617	11	13	4	-1	257	257	20
11	4	-4	414	399	13						
11	6	-4	208	226	22						
11	0	-3	475	462	11						
11	2	-3	256	242	17						
11	3	-3	203	217	21						
11	4	-3	250	260	18						
11	6	-3	211	203	21						
11	8	-3	386	362	14						
11	0	-1	305	333	15						
11	2	-1	317	327	16						
11	4	-1	205	202	23						
11	6	-1	218	228	22						
11	8	-1	364	350	16						
11	0	0	460	463	13						
11	2	0	517	527	12						
11	4	0	332	353	17						
11	6	0	522	522	13						
11	8	0	391	353	16						
11	0	1	203	219	25						
11	4	1	225	226	23						
11	0	2	243	213	22						
12	1	-5	216	192	21						
12	3	-5	321	294	16						
12	0	-4	197	157	22						
12	1	-4	276	270	18						
12	5	-4	192	137	23						
12	2	-3	221	172	19						
12	3	-3	412	414	14						
12	4	-3	261	241	18						
12	0	-2	194	172	22						

**ESPERANZAITÉ,  $\text{NaCa}_2\text{Al}_2(\text{As}^{5+}\text{O}_4)_2\text{F}_4(\text{OH})\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  
A NEW MINERAL SPECIES FROM THE LA ESPERANZA MINE, MEXICO:  
DESCRIPTIVE MINERALOGY AND ATOMIC ARRANGEMENT**

EUGENE E. FOORD<sup>1</sup>

*United States Geological Survey, MS 905, Box 25046, Denver Federal Center, Lakewood, Colorado 80225, U.S.A.*

JOHN M. HUGHES<sup>2</sup>

*Department of Geology, Miami University, Oxford, Ohio 45056, U.S.A.*

FORREST CURETON

*21267 Brewer Road, Grass Valley, California 95949, U.S.A.*

CHARLES H. MAXWELL

*950 Allison Street, Lakewood, Colorado 80215-5942, U.S.A.*

ALEXANDER U. FALSTER

*Department of Geology and Geophysics, University of New Orleans, New Orleans, Louisiana 70148, U.S.A.*

ANDRE J. SOMMER

*Department of Chemistry and Biochemistry, Miami University, Oxford, Ohio 45056, U.S.A.*

PAUL F. HLAVA

*Department 1822, MS-1405, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico 87185-1405, U.S.A.*

ABSTRACT

Esperanzaité, ideally  $\text{NaCa}_2\text{Al}_2(\text{As}^{5+}\text{O}_4)_2\text{F}_4(\text{OH})\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $Z=2$ , is a new mineral species from the La Esperanza mine, Durango State, Mexico. The mineral occurs as blue-green botryoidal crystalline masses on rhyolite, with separate spheres up to 1.5 mm in diameter. The Mohs hardness is  $4\frac{1}{2}$ , and the specific gravity, 3.24 (obs.) and 3.36(3) (calc.). Optical properties were measured in 589 nm light. Esperanzaité is biaxial (-),  $X=Y=Z$  colorless,  $\alpha$  1.580(1),  $\beta$  1.588(1), and  $\gamma$  1.593(1);  $2V_{\text{obs}}$  is  $74(1)^\circ$  and  $2V_{\text{calc}}$  is  $76.3^\circ$ . The dispersion is medium,  $r < v$ , and the optic axes are oriented according to  $a \wedge Z = +50.5^\circ$ ,  $b = Y$ ,  $c \wedge X = +35^\circ$ . The strongest five X-ray-diffraction maxima in the powder pattern [ $d$  in  $\text{\AA}(\text{I})(hkl)$ ] are: 2.966(100)(13 $\bar{1}$ , 31 $\bar{1}$ , 031), 3.527(90)(220), 2.700(90)(221,002,040), 5.364(80)(001,020) and 4.796(80)(011). Esperanzaité is monoclinic,  $a$  9.687(5),  $b$  10.7379(6),  $c$  5.5523(7)  $\text{\AA}$ ,  $\beta$  105.32(1) $^\circ$ , space group  $P2_1/m$ . The atomic arrangement of esperanzaité was solved by direct methods and Fourier analysis ( $R = 0.032$ ). The Fundamental Building Block (FBB) is formed of [001] stacks of heteropolyhedral tetramers; the tetramers are formed of two arsenate tetrahedra and two Al octahedra, corner-linked in four-member rings. The FBBs are linked by irregular  $\text{Na}\phi_5$  and  $\text{Ca}\phi_8$  polyhedra.

*Keywords:* esperanzaité, new mineral species, crystal structure, La Esperanza mine, Durango, Mexico.

SOMMAIRE

La espéranzaité, dont la composition idéale serait  $\text{NaCa}_2\text{Al}_2(\text{As}^{5+}\text{O}_4)_2\text{F}_4(\text{OH})\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $Z=2$ , est une espèce minérale nouvelle découverte à la mine La Esperanza, dans l'état de Durango, au Mexique. Il s'agit d'un minéral bleu-vert se présentant en amas

<sup>1</sup> Deceased January 1998.

<sup>2</sup> E-mail address: hughesjm@muohio.edu

TABLE 7.OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR  
ESPERANZAITE

h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$	h	k	l	Fobs	Fcalc	$\sigma(F)$
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
0	2	0	710	697	7	0	9	5	328	310	38
0	4	0	1064	1029	8	0	2	6	233	243	21
0	6	0	2173	2193	9	0	3	6	393	403	22
0	8	0	880	858	9	0	4	6	424	422	30
0	10	0	706	716	8	0	9	6	258	260	22
0	12	0	850	841	9	0	0	7	523	519	14
0	14	0	486	481	12	0	2	7	404	396	26
0	0	1	541	584	7	0	3	7	301	303	20
0	1	1	505	486	5	0	4	7	290	298	21
0	2	1	923	902	8	1	3	-7	244	226	22
0	3	1	918	951	8	1	6	-7	204	187	25
0	6	1	513	540	7	1	0	-6	240	227	20
0	7	1	350	371	14	1	1	-6	441	459	13
0	8	1	492	514	9	1	3	-6	472	479	12
0	9	1	457	471	11	1	5	-6	420	426	14
0	10	1	306	328	26	1	6	-6	200	207	24
0	12	1	262	263	16	1	7	-6	319	295	16
0	13	1	221	226	20	1	9	-6	437	470	16
0	0	2	1364	1379	16	1	0	-5	291	277	15
0	1	2	370	369	7	1	1	-5	444	452	11
0	2	2	345	333	17	1	3	-5	332	320	14
0	3	2	369	358	8	1	5	-5	415	427	12
0	4	2	254	241	10	1	7	-5	517	525	12
0	5	2	211	209	12	1	11	-5	437	422	14
0	6	2	831	858	9	1	1	-4	500	492	9
0	12	2	423	427	27	1	3	-4	361	383	12
0	1	3	611	619	6	1	5	-4	651	659	9
0	2	3	785	793	11	1	6	-4	180	190	21
0	3	3	854	841	8	1	7	-4	182	216	21
0	4	3	553	552	8	1	9	-4	292	288	16
0	5	3	185	179	19	1	11	-4	289	305	18
0	6	3	442	446	10	1	0	-3	158	149	16
0	7	3	419	427	13	1	1	-3	582	572	7
0	8	3	371	369	11	1	3	-3	225	215	13
0	9	3	298	303	15	1	5	-3	560	573	8
0	10	3	426	420	17	1	7	-3	310	316	12
0	12	3	299	293	24	1	8	-3	193	149	17
0	0	4	268	280	13	1	11	-3	247	288	19
0	2	4	636	639	9	1	13	-3	203	189	22
0	3	4	234	237	16	1	1	-2	1195	1180	8
0	4	4	1090	1083	11	1	3	-2	397	396	7
0	5	4	269	278	15	1	5	-2	1045	1063	10
0	8	4	502	494	12	1	6	-2	193	174	14
0	10	4	676	683	10	1	7	-2	549	559	8
0	11	4	195	123	21	1	9	-2	640	624	9
0	0	5	356	350	13	1	11	-2	501	505	11
0	1	5	256	261	16	1	12	-2	277	247	15
0	3	5	415	419	17	1	13	-2	330	342	16
0	5	5	247	238	18	1	0	-1	132	136	14
0	6	5	368	360	14	1	1	-1	691	695	7