

Observed and calculated structure factors for Calcioantite										Observed and calculated structure factors for Calcioantite										Observed and calculated structure factors for Calcioantite									
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	1	0	1294	1275	7	-3	7	2	224	232	11	0	3	5	125	79	15	-4	7	7	597	593	8	-1	2	11	1538	1523	12
-1	2	0	293	311	11	-2	7	2	1061	1061	10	-3	4	5	729	724	5	-3	7	7	611	615	10	0	2	11	432	448	6
0	2	0	115	68	29	-1	7	2	296	296	11	-2	4	5	1823	1804	9	-2	7	7	874	888	7	-2	3	11	623	614	7
-1	3	0	792	765	13	0	7	2	108	95	21	-1	4	5	784	786	7	-1	7	7	815	804	10	-1	3	11	567	580	6
0	3	0	4086	4027	28	-7	8	2	868	865	10	0	4	5	213	206	7	-4	8	7	585	598	8	0	3	11	81	43	24
-2	4	0	86	26	26	-6	8	2	656	655	10	-4	5	5	1368	1348	8	0	0	8	3783	3765	49	-3	4	11	645	653	9
-1	4	0	1205	1186	16	-5	8	2	1170	1153	17	-3	5	5	530	537	6	0	1	8	688	668	4	-2	4	11	1328	1333	11
0	4	0	1092	1099	9	-4	8	2	1032	1049	16	-2	5	5	485	492	7	-1	2	8	201	220	9	-1	4	11	656	656	7
-2	5	0	266	265	7	-3	8	2	1160	1138	8	-1	5	5	1359	1362	10	0	2	8	85	57	16	0	4	11	506	515	7
-1	5	0	189	167	10	-2	8	2	656	662	10	0	5	5	301	301	7	-2	3	8	478	481	6	-4	5	11	1047	1053	11
0	5	0	750	751	12	-1	8	2	875	892	9	-5	6	5	698	688	7	-1	3	8	507	503	6	-3	5	11	423	441	13
-3	6	0	2219	2232	44	0	1	3	759	780	5	-4	6	5	921	937	12	0	3	8	2787	2838	12	-2	5	11	458	463	10
-2	6	0	893	914	10	-1	2	3	1935	1932	20	-3	6	5	184	168	12	-3	4	8	805	811	8	-1	5	11	1073	1064	7
-1	6	0	346	340	10	0	2	3	744	748	5	-2	6	5	907	922	7	-2	4	8	75	83	28	0	5	11	363	369	8
0	6	0	1814	1816	24	-2	3	3	882	897	5	-1	6	5	725	715	15	-1	4	8	796	802	7	-5	6	11	553	536	9
-3	7	0	841	838	6	-1	3	3	875	898	11	0	6	5	135	139	15	0	4	8	780	771	5	-4	6	11	685	680	18
-2	7	0	268	242	13	0	3	3	68	21	18	-6	7	5	800	793	14	-4	5	8	113	67	19	-3	6	11	143	134	19
-1	7	0	874	871	7	-3	4	3	762	755	12	-5	7	5	994	988	8	-3	5	8	216	198	11	-2	6	11	718	715	11
0	7	0	687	700	9	-2	4	3	1884	1866	16	-4	7	5	594	587	7	-2	5	8	251	240	12	-1	6	11	521	501	10
-4	8	0	195	160	20	-1	4	3	771	771	7	-3	7	5	540	535	9	-1	5	8	106	99	21	0	0	12	2919	2925	51
-3	8	0	574	567	16	0	4	3	490	504	7	-2	7	5	967	974	15	0	5	8	572	575	6	0	1	12	542	532	7
-2	8	0	119	119	25	-4	5	3	1474	1462	10	-1	7	5	824	828	7	-5	6	8	255	248	11	-1	2	12	302	264	24
-1	8	0	228	198	13	-3	5	3	616	617	6	0	7	5	253	242	10	-4	6	8	669	663	12	0	2	12	84	58	23
0	1	1	789	813	6	-2	5	3	630	643	5	-6	8	5	285	269	11	-3	6	8	1859	1854	12	-2	3	12	339	359	8
-1	2	1	2736	2710	34	-1	5	3	1451	1459	12	-5	8	5	211	206	14	-2	6	8	653	661	9	-1	3	12	338	345	8
0	2	1	524	536	5	0	5	3	442	449	6	-4	8	5	647	637	8	-1	6	8	246	258	11	0	3	12	2246	2257	11
-2	3	1	1014	998	14	-5	6	3	735	720	6	-3	8	5	247	217	12	0	6	8	1559	1562	12	-3	4	12	669	670	10
-1	3	1	1101	1085	12	-4	6	3	943	941	9	-2	8	5	247	235	12	-6	7	8	735	753	9	-2	4	12	148	115	15
0	3	1	148	84	21	-3	6	3	211	218	10	0	0	6	2538	2471	6	-5	7	8	177	150	15	-1	4	12	663	676	7
-3	4	1	996	988	12	-2	6	3	935	946	9	-1	1	6	319	306	4	-4	7	8	699	702	12	0	4	12	662	663	9
-2	4	1	2039	1996	23	-1	6	3	700	706	12	0	2	6	2648	2605	6	-3	7	8	727	724	9	-4	5	12	84	66	37
-1	4	1	1014	1017	11	0	6	3	73	31	30	0	2	6	1180	1185	6	-2	7	8	153	163	18	-3	5	12	245	230	11
0	4	1	647	663	4	-6	7	3	863	849	8	-2	3	6	463	453	5	-1	7	8	723	743	10	-2	5	12	233	210	12
-4	5	1	1484	1452	10	-5	7	3	1096	1100	11	-1	3	6	461	467	7	0	1	9	461	466	5	-1	5	12	52	39	51
-3	5	1	605	613	5	-4	7	3	598	602	12	0	3	6	1326	1351	11	-1	2	9	1586	1585	7	0	5	12	518	531	10
-2	5	1	575	573	6	-3	7	3	607	612	8	-3	4	6	84	80	22	0	2	9	372	382	6	-4	6	12	550	567	11
-1	5	1	1478	1439	20	-2	7	3	1087	1103	16	-2	4	6	1962	1928	7	-2	3	9	550	537	9	-3	6	12	1476	1487	8
0	5	1	444	443	11	-1	7	3	861	843	7	-1	4	6	106	85	17	-1	3	9	585	582	6	-2	6	12	565	568	13
-5	6	1	693	684	6	0	7	3	317	318	9	0	4	6	102	85	15	0	3	9	101	34	21	0	1	13	399	384	7
-4	6	1	963	972	9	-6	8	3	337	340	10	-4	5	6	1516	1492	16	-3	4	9	575	584	10	-1	2	13	1510	1497	10
-3	6	1	188	170	20	-5	8	3	364	359	9	-3	5	6	1056	1072	7	-2	4	9	1452	1464	8	0	2	13	365	356	7
-2	6	1	919	919	9	-4	8	3	676	682	8	-2	5	6	1052	1059	6	-1	4	9	592	595	6	-2	3	13	565	574	10
-1	6	1	735	739	6	-3	8	3	346	329	16	-1	5	6	1499	1482	8	0	4	9	405	414	6	-1	3	13	616	624	7
0	6	1	136	128	16	-2	8	3	354	350	10	0	5	6	1398	1418	14	-4	5	9	1180	1182	9	0	3	13	109	4	22
-6	7	1	876	867	9	0	0	4	4619	4605	31	-5	6	6	386	382	9	-3	5	9	435	448	8	-3	4	13	582	586	14
-5	7	1	1011	1010	13	0	1	4	795	794	5	-4	6	6	121	92	18	-2	5	9	398	409	8	-2	4	13	1207	1196	12
-4	7	1	698	688	8	-1	2	4	99	40	12	-3	6	6	563	560	14	-1	5	9	1178	1174	6	-1	4	13	617	624	8
-3	7	1	671	669	8	0	2	4	388	364	6	-2	6	6	85	92	27	0	5	9	320	313	10	0	4	13	314	318	9
-2	7	1	1013	1023	11	-2	3	4	689	676	5	-1	6	6	370	386	8	-5	6	9	496	506	10	-4	5	13	918	918	8
-1	7	1	890	888	12	-1	3	4	673	658	8	0	6	6	379	383	7	-4	6	9	745	751	10	-3	5	13	396	381	9
0	7	1	287	274	9	0	3	4	3446	3436	16	-6	7	6	229	215	13	-3	6	9	170	164	15	-2	5	13	356	350	10
-1	7	1	553	564	9	-3	4	4	918	916	6	-5	7	6	1016	1009	12	-2	6	9	715	703	14	-1	5	13	922	917	7
-6	8	1	354	361	10	-2	4	4	95	30	17	-4	7	6	171	148	15	-1	6	9	556	554	8	0	5	13	265	268	11
-5	8	1	331	321	10	-1	4	4	921	923	7	-3	7	6	135	134	19	0	6	9	139	72	18	0	0	14	1053	1046	12
-4	8	1	668	670	11	0	4	4	849	845	5	-2	7	6	1018	1017	9	-5	7	9	925	911	7	0	1	14	257	242	10
-3	8	1	316	309	10	-4	5	4	132	103	14	-1	7	6	237	219	12	-4	7	9	500	501	11	-1	2	14	1557	1553	7
-2	8	1	364	355	13	-3	5	4	183	176	10	0	7	6	103	101	26	-3	7	9	493	479	9	0	2	14	695	693	