

Supplementary Material

Surface reconstructions and relaxation effects in a centre-symmetrical crystal: the {00.1} form of calcite (CaCO₃)

Marco BRUNO, Francesco Roberto MASSARO, Mauro PRENCIPE, Dino AQUILANO
Dipartimento di Scienze Mineralogiche e Petrologiche, Università degli Studi di Torino, Via Valperga Caluso 35, I-10125 Torino, Italy

Table SI. Cell parameters (a and b, in Å) of the (104) and (00.1) slabs, as determined in the optimizations at DFT and empirical level, respectively (see text for details).

	a	b	θ
(10.4)	5,026872	8,129833	90
(00.1)	9,962826	9,962826	60

Table SII. Atomic coordinates (x and y, fractional coordinates; z, absolute coordinates in Å) of the (10.4) slab of calcite (CaCO₃), as determined in the optimization at DFT level (see text for details).

	(10.4)		
	x	y	z
O	0,394090	-0,199693	8,454984
O	0,105910	0,300307	8,454984
Ca	-0,254102	-0,046956	7,632474
Ca	-0,245898	0,453044	7,632474
C	0,253718	-0,296677	7,751071
C	0,246282	0,203323	7,751071
O	-0,006191	-0,295048	7,814561
O	-0,493809	0,204952	7,814561
O	0,367509	-0,402165	6,937074
O	0,132491	0,097835	6,937074
O	-0,121525	0,418236	5,397974
O	-0,378475	-0,081764	5,397974
Ca	0,252612	-0,428682	4,645805
Ca	0,247388	0,071318	4,645805
C	-0,250809	0,320130	4,609677
C	-0,249191	-0,179870	4,609677
O	0,492187	0,319909	4,625348
O	0,007813	-0,180091	4,625348
O	-0,122806	0,222625	3,819361
O	-0,377194	-0,277375	3,819361
O	0,377154	0,037154	2,348948
O	0,122846	-0,462846	2,348948
Ca	-0,251152	0,188122	1,532768
Ca	-0,248848	-0,311878	1,532768
C	0,250516	-0,060333	1,550091
C	0,249484	0,439667	1,550091
O	-0,006925	-0,061323	1,541632
O	-0,493075	0,438677	1,541632

O	0,380685	-0,156703	0,753734
O	0,119315	0,343297	0,753734

Table SIII. Atomic coordinates (x and y, fractional coordinates; z, absolute coordinates in Å) of the (00.1)_{RI}^{Ca} and (00.1)_{RI}^{CO₃} slabs of calcite (CaCO₃), as determined in the optimization at empirical level (see text for details).

	(00.1) _{RI} ^{Ca}				(00.1) _{RI} ^{CO₃}		
	x	y	z		x	y	z
Ca	0,4659945	0,0057022	-1,2688330	O	0,8711874	0,6968395	-1,7323910
Ca	0,4659958	0,5056986	-1,2688760	O	0,6798534	0,9325768	-1,7710850
O	0,2642891	0,2539399	-1,5914650	O	0,9086394	0,8957908	-1,9296590
O	0,2329359	0,4928502	-1,6042670	C	0,8236680	0,8384558	-1,7121610
O	0,4458998	0,2976030	-2,1792090	O	0,3712045	0,6968499	-1,7324950
C	0,3062046	0,3501264	-1,8069920	O	0,1798510	0,9325785	-1,7711250
O	0,7390448	0,7963430	-1,3509690	O	0,4086289	0,8958167	-1,9296580
O	0,6835084	0,0235318	-0,8580870	C	0,3236678	0,8384696	-1,7122040
O	0,9062420	0,8745901	-1,7888690	Ca	0,2019585	0,1021171	-3,2598680
C	0,7862998	0,8914901	-1,2599440	Ca	0,6475606	0,7268264	-2,8844710
O	0,2642849	0,7539403	-1,5913270	Ca	0,1475716	0,7268276	-2,8845400
O	0,2329393	0,9928475	-1,6041130	Ca	0,7019653	0,1021090	-3,2598180
O	0,4459073	0,7975930	-2,1788870	O	0,0410389	0,6009794	-4,3530950
C	0,3062079	0,8501224	-1,8067710	O	0,1218902	0,3601129	-3,9002360
O	0,7390413	0,2963356	-1,3511010	O	0,8724326	0,5218211	-4,1619230
O	0,6835171	0,5235151	-0,8580070	C	0,0092117	0,4959620	-4,0741900
O	0,9062492	0,3745738	-1,7888220	O	0,4812419	0,1382171	-4,4756380
C	0,7863040	0,3914755	-1,2599490	O	0,6425661	0,8914288	-4,7044200
Ca	0,1131516	0,2055363	-3,0917060	O	0,3948752	0,9803858	-4,8830060
Ca	0,7154220	0,6399309	-2,9208780	C	0,5062409	0,0042052	-4,7459640
Ca	0,1131481	0,7055542	-3,0917030	O	0,9812385	0,1382172	-4,4756650
Ca	0,7154165	0,1399314	-2,9210720	O	0,1425697	0,8914314	-4,7044840
O	0,9562731	0,6431432	-4,4000270	O	0,8948791	0,9803789	-4,8829700
O	0,1403569	0,3995802	-4,3759530	C	0,0062418	0,0042038	-4,7459900
O	0,8990272	0,4630408	-4,5797400	O	0,5410409	0,6009739	-4,3531340
C	0,0012037	0,5013323	-4,5144620	O	0,6218933	0,3601087	-3,9001990
O	0,5547437	0,0861418	-4,4176950	O	0,3724351	0,5218174	-4,1618660
O	0,5956217	0,8535453	-4,5029830	C	0,5092150	0,4959570	-4,0741720
O	0,3582192	0,0463967	-4,3512290	Ca	0,3053167	0,3725935	-5,5834830
C	0,5007897	0,9963880	-4,4143940	Ca	0,8663806	0,7897586	-6,0248770
O	0,9562552	0,1431511	-4,4000600	Ca	0,3663892	0,7897573	-6,0248960
O	0,1403539	0,8995955	-4,3760000	Ca	0,8053134	0,3725944	-5,5835120
O	0,8990310	0,9630335	-4,5798770	O	0,1897116	0,0310151	-7,2049800
C	0,0011975	0,0013380	-4,5145500	O	0,0276292	0,2792657	-7,0432440
O	0,5547486	0,5861424	-4,4175060	O	0,2730656	0,1975187	-7,0959300
O	0,5956084	0,3535537	-4,5031150	C	0,1648900	0,1668020	-7,0669340
O	0,3582124	0,5464169	-4,3512740	O	0,6372620	0,5540170	-7,2264540
C	0,5007853	0,4963966	-4,4143700	O	0,5544545	0,7985250	-7,4284650
Ca	0,3677260	0,3204682	-5,6008540	O	0,8038998	0,6338287	-7,3244780
Ca	0,7977818	0,8469226	-5,9485800	C	0,6664512	0,6625145	-7,3828110
Ca	0,3677334	0,8204522	-5,6009290	O	0,1372649	0,5540161	-7,2264050
Ca	0,7977736	0,3469471	-5,9485290	O	0,0544476	0,7985262	-7,4284130
O	0,1876178	0,0324626	-7,0263970	O	0,3038951	0,6338367	-7,3244690

O	0,0324728	0,2826705	-7,1092040	C	0,1664478	0,6625178	-7,3827660
O	0,2824987	0,1875811	-7,1080590	O	0,6896998	0,0310187	-7,2049540
C	0,1673043	0,1676684	-7,0406290	O	0,5276299	0,2792726	-7,0432370
O	0,6451533	0,5549301	-7,3650800	O	0,7730700	0,1975096	-7,0959050
O	0,5489846	0,8043644	-7,2718470	C	0,6648877	0,1668026	-7,0669250
O	0,7986704	0,6524078	-7,3040520	Ca	0,0142332	0,4629696	-8,7091910
C	0,6647959	0,6699593	-7,3592310	Ca	0,4878123	0,0310966	-8,5039590
O	0,1876068	0,5324645	-7,0264940	Ca	0,9878221	0,0310916	-8,5039020
O	0,0324731	0,7826756	-7,1093000	Ca	0,5142218	0,4629762	-8,7092310
O	0,2825022	0,6875703	-7,1081870	O	0,3093540	0,4715934	-10,0232000
C	0,1673015	0,6676675	-7,0407630	O	0,4741445	0,2254186	-9,9919030
O	0,6451928	0,0549074	-7,3651850	O	0,2280039	0,3043631	-10,0872200
O	0,5489736	0,3043472	-7,2718690	C	0,3360082	0,3346457	-10,0820500
O	0,7986669	0,1524355	-7,3040040	O	0,8631708	0,9423618	-10,0279300
C	0,6648056	0,1699547	-7,3592190	O	0,9486257	0,6940250	-9,9561050
Ca	0,0266728	0,4828384	-8,4805890	O	0,6990901	0,8597235	-9,9677640
Ca	0,4711762	0,0188659	-8,7110480	C	0,8371620	0,8310104	-9,9388140
Ca	0,0266668	0,9828625	-8,4804500	O	0,3631618	0,9423665	-10,0280200
Ca	0,4711857	0,5188266	-8,7111520	O	0,4486314	0,6940267	-9,9561600
O	0,3105851	0,4666549	-10,0727000	O	0,1990922	0,8597141	-9,9678040
O	0,4677155	0,2157508	-10,0762400	C	0,3371616	0,8310092	-9,9388930
O	0,2190586	0,3094895	-10,0061300	O	0,8093627	0,4715919	-10,0231400
C	0,3331648	0,3308710	-10,0924400	O	0,9741422	0,2254146	-9,9918630
O	0,8539085	0,9460401	-9,9345750	O	0,7279994	0,3043716	-10,0871900
O	0,9483530	0,6968914	-9,9698350	C	0,8360082	0,3346472	-10,0819900
O	0,6979974	0,8507024	-9,9704230	Ca	0,1839807	0,1391533	-11,5124200
C	0,8324787	0,8318408	-9,9190330	Ca	0,6492373	0,6923916	-11,3156000
O	0,3106200	0,9666397	-10,0725900	Ca	0,1492207	0,6923942	-11,3156700
O	0,4677116	0,7157290	-10,0760600	Ca	0,6840005	0,1391451	-11,5123500
O	0,2190458	0,8095164	-10,0059900	O	0,8646446	0,6171617	-12,7918200
C	0,3331720	0,8308659	-10,0922400	O	0,0132567	0,3662457	-12,7424700
O	0,8538733	0,4460583	-9,9345560	O	0,1150789	0,5163334	-12,7406900
O	0,9483750	0,1968985	-9,9698940	C	0,9981275	0,4993962	-12,7231300
O	0,6980108	0,3506638	-9,9705710	O	0,3812611	0,1328906	-12,8744700
C	0,8324795	0,3318360	-9,9191550	O	0,4831480	0,8823542	-12,8920500
Ca	0,1433727	0,1747428	-11,4929000	O	0,6324614	0,9833904	-12,9362600
Ca	0,6891733	0,6583060	-11,3360400	C	0,4988697	0,0000127	-12,9390000
Ca	0,1433358	0,6748015	-11,4927000	O	0,8812719	0,1328954	-12,8745100
Ca	0,6892037	0,1582556	-11,3363100	O	0,9831313	0,8823630	-12,8921000
O	0,8830895	0,6336112	-12,8616100	O	0,1324695	0,9833725	-12,9363100
O	0,9844204	0,3832394	-12,9041800	C	0,9988713	0,0000108	-12,9390700
O	0,1336266	0,4855536	-12,8585500	O	0,3646386	0,6171491	-12,7917700
C	0,0009121	0,5003081	-12,9087800	O	0,5132783	0,3662373	-12,7423500
O	0,3665660	0,1197324	-12,7748500	O	0,6150678	0,5163534	-12,7406600
O	0,5156781	0,8678132	-12,7647600	C	0,4981286	0,4993959	-12,7230200
O	0,6178120	0,0162069	-12,8119700	Ca	0,3263362	0,3533155	-14,1557300
C	0,4994711	0,0014225	-12,7518600	Ca	0,8405284	0,8119232	-14,3247600
O	0,8831133	0,1336319	-12,8618000	Ca	0,3405584	0,8119013	-14,3246300
O	0,9843730	0,8832664	-12,9043100	Ca	0,8263042	0,3533336	-14,1558500
O	0,1336435	0,9855062	-12,8588300	O	0,1799653	0,2859053	-15,6150900
C	0,0009079	0,0003104	-12,9090700	O	0,2870612	0,0341454	-15,6193500
O	0,3665495	0,6197056	-12,7746900	O	0,0347562	0,1802323	-15,5920300
O	0,5157241	0,3677976	-12,7646300	C	0,1675595	0,1660933	-15,5792800
O	0,6177844	0,5162576	-12,8116900	O	0,6551911	0,7984356	-15,7108800
C	0,4994731	0,5014237	-12,7515600	O	0,8002047	0,5476353	-15,6793500
Ca	0,3513597	0,3212964	-14,1723800	O	0,5494067	0,6521737	-15,7286800

Ca	0,8153113	0,8448584	-14,3133900	C	0,6677229	0,6665686	-15,7373200
Ca	0,3513835	0,8212177	-14,1727100	O	0,1552152	0,7984266	-15,7107400
Ca	0,8152795	0,3449485	-14,3130800	O	0,3001932	0,5476235	-15,6792700
O	0,1786752	0,2855924	-15,6013400	O	0,0493923	0,6521983	-15,7286400
O	0,2873068	0,0342539	-15,6286200	C	0,1677210	0,6665709	-15,7371800
O	0,0353623	0,1764730	-15,6201800	O	0,6799325	0,2859239	-15,6152400
C	0,1666246	0,1657259	-15,5904900	O	0,7870795	0,0341577	-15,6194600
O	0,6549975	0,7973415	-15,7263700	O	0,5347677	0,1802021	-15,5921200
O	0,7983080	0,5451816	-15,6995900	C	0,6675592	0,1660927	-15,5794600
O	0,5469565	0,6541534	-15,6901700	Ca	0,0108731	0,4830317	-17,1328200
C	0,6671645	0,6655270	-15,7328800	Ca	0,4894681	0,0159791	-17,0143900
O	0,1786003	0,7856345	-15,6015000	Ca	0,9895160	0,0159695	-17,0142400
O	0,2873517	0,5342814	-15,6288100	Ca	0,5108240	0,4830551	-17,1330200
O	0,0353978	0,6763915	-15,6206200	O	0,3213227	0,2133450	-18,5112600
C	0,1666263	0,6657239	-15,5909200	O	0,2118754	0,4647140	-18,5192700
O	0,6550759	0,2973044	-15,7261500	O	0,4641012	0,3218819	-18,5459700
O	0,7982810	0,0451358	-15,6993900	C	0,3324206	0,3337179	-18,5510200
O	0,5469160	0,1542297	-15,6898400	O	0,8432546	0,7015765	-18,4611500
C	0,6671699	0,1655213	-15,7324700	O	0,7015621	0,9536423	-18,4734800
Ca	0,0143617	0,4947053	-17,0246500	O	0,9529591	0,8443295	-18,4454600
Ca	0,4857102	0,0047921	-17,1312500	C	0,8328409	0,8327092	-18,4355400
Ca	0,0142838	0,9948290	-17,0241500	O	0,3432011	0,7015996	-18,4614000
Ca	0,4857945	0,5046641	-17,1317300	O	0,2015802	0,9536714	-18,4736400
O	0,3238663	0,2124892	-18,5449700	O	0,4529863	0,8442804	-18,4455400
O	0,2125534	0,4640838	-18,5156700	C	0,3328394	0,8327102	-18,4358200
O	0,4642134	0,3245454	-18,5251200	O	0,8213605	0,2133252	-18,5110900
C	0,3339037	0,3333706	-18,5508700	O	0,7118524	0,4647018	-18,5191800
O	0,8430795	0,7027120	-18,4533300	O	0,9640815	0,3219220	-18,5458900
O	0,7027609	0,9552913	-18,4707800	C	0,8324166	0,3337213	-18,5508200
O	0,9550141	0,8424461	-18,4752000	Ca	0,1711409	0,1536276	-19,9595300
C	0,8331989	0,8336949	-18,4449600	Ca	0,6622396	0,6792924	-19,8639200
O	0,3239736	0,7124283	-18,5447600	Ca	0,1621638	0,6793326	-19,8641700
O	0,2124997	0,9640313	-18,5153600	Ca	0,6712072	0,1535743	-19,9592100
O	0,4641672	0,8246532	-18,5245300	O	0,0080338	0,6221592	-21,3134800
C	0,3339099	0,8333642	-18,5502600	O	0,1228433	0,3697852	-21,3051100
O	0,8429720	0,2027586	-18,4536000	O	0,8701778	0,5081134	-21,2916500
O	0,7028061	0,4553553	-18,4710800	C	0,0005238	0,4996745	-21,2844100
O	0,9550776	0,3423301	-18,4757300	O	0,4925307	0,1300308	-21,3555900
C	0,8331960	0,3336973	-18,4455900	O	0,6301785	0,8781282	-21,3539500
Ca	0,1556846	0,1736270	-19,9579400	O	0,3783698	0,9917381	-21,3776400
Ca	0,6778838	0,6593272	-19,8755900	C	0,5001037	0,0002678	-21,3821900
Ca	0,1556170	0,6738097	-19,9572900	O	0,9924834	0,1300525	-21,3559500
Ca	0,6779399	0,1591528	-19,8762300	O	0,1301994	0,8781504	-21,3541500
O	0,9930682	0,6291758	-21,3751000	O	0,8783944	0,9916939	-21,3778200
O	0,1298515	0,3766479	-21,3559600	C	0,0001060	0,0002665	-21,3825500
O	0,8778264	0,4924771	-21,3542200	O	0,5081039	0,6221197	-21,3131000
C	0,0005231	0,4993883	-21,3788600	O	0,6228096	0,3697552	-21,3048100
O	0,5072923	0,1220992	-21,3031600	O	0,3701526	0,5081742	-21,2914000
O	0,6229455	0,8700664	-21,3215100	C	0,5005256	0,4996730	-21,2839400
O	0,3704765	0,0062189	-21,3161000	Ca	0,3270246	0,3429734	-22,7165800
C	0,4999324	0,9996023	-21,2970800	Ca	0,8396663	0,8234865	-22,7906100
O	0,9929162	0,1292501	-21,3754600	Ca	0,3397648	0,8234371	-22,7901500
O	0,1299080	0,8767294	-21,3564500	Ca	0,8269205	0,3429967	-22,7169100
O	0,8779034	0,9923259	-21,3549600	O	0,1722839	0,0373794	-24,1569100
C	0,0005145	0,9993977	-21,3797300	O	0,0373978	0,2899405	-24,1592100
O	0,5074422	0,6220185	-21,3028500	O	0,2895370	0,1728510	-24,1448000

O	0,6228627	0,3700054	-21,3210000	C	0,1665150	0,1664502	-24,1390100
O	0,3704020	0,5063823	-21,3153000	O	0,6603108	0,5437056	-24,1904200
C	0,4999307	0,4996041	-21,2961800	O	0,5430597	0,7958205	-24,1940700
Ca	0,3417416	0,3303730	-22,7266700	O	0,7956490	0,6604362	-24,2089800
Ca	0,8251746	0,8359578	-22,7900100	C	0,6663109	0,6668948	-24,2129100
Ca	0,3418929	0,8301344	-22,7276300	O	0,1603860	0,5436602	-24,1900500
Ca	0,8250077	0,3362011	-22,7890300	O	0,0430109	0,7957834	-24,1941600
O	0,1720889	0,0377884	-24,1533700	O	0,2956034	0,6605146	-24,2087700
O	0,0379476	0,2905178	-24,1638100	C	0,1663021	0,6668933	-24,2125700
O	0,2905474	0,1715799	-24,1659900	O	0,6721835	0,0374339	-24,1574100
C	0,1666375	0,1667660	-24,1484700	O	0,5374483	0,2900027	-24,1592900
O	0,6615138	0,5431372	-24,2082700	O	0,7895985	0,1727528	-24,1450800
O	0,5433675	0,7953089	-24,1938300	C	0,6665201	0,1664564	-24,1395300
O	0,7955810	0,6616705	-24,1954600	Ca	0,0025276	0,4927760	-25,6236700
C	0,6670220	0,6665344	-24,2121500	Ca	0,4974259	0,0071110	-25,5715900
O	0,1719133	0,5378704	-24,1540400	Ca	0,9975729	0,0070292	-25,5712400
O	0,0380309	0,7906154	-24,1647000	Ca	0,5024051	0,4928782	-25,6242300
O	0,2906528	0,6713861	-24,1672500	O	0,3292212	0,4617492	-27,0321500
C	0,1666377	0,6667689	-24,1498900	O	0,4616749	0,2094668	-27,0306700
O	0,6616991	0,0430367	-24,2077500	O	0,2094107	0,3289409	-27,0435400
O	0,5432822	0,2952167	-24,1930300	C	0,3332894	0,3335536	-27,0462500
O	0,7954971	0,1618551	-24,1942200	O	0,8375491	0,9574735	-27,0098400
C	0,6670316	0,1665242	-24,2108300	O	0,9576792	0,7048167	-27,0079400
Ca	0,0060562	0,4958850	-25,5803800	O	0,7049415	0,8377417	-26,9987900
Ca	0,4941303	0,0039099	-25,6231100	C	0,8335148	0,8331562	-26,9949900
Ca	0,0059489	0,9962078	-25,5792600	O	0,3373853	0,9575871	-27,0101100
Ca	0,4942563	0,5035775	-25,6243400	O	0,4577602	0,7049070	-27,0079900
O	0,3297962	0,4612249	-27,0430600	O	0,2050078	0,8376313	-26,9994000
O	0,4614622	0,2085952	-27,0335200	C	0,3335220	0,8331796	-26,9956300
O	0,2091403	0,3295412	-27,0331200	O	0,8293521	0,4616592	-27,0319200
C	0,3336025	0,3331153	-27,0455300	O	0,9616220	0,2093853	-27,0309500
O	0,8370827	0,9576263	-27,0065000	O	0,7093569	0,3290157	-27,0431100
O	0,9579927	0,7052249	-27,0148600	C	0,8332843	0,3335288	-27,0459000
O	0,7052946	0,8366909	-27,0137600	Ca	0,1696572	0,1619583	-28,4610300
C	0,8333049	0,8332137	-27,0029800	Ca	0,6636689	0,6713637	-28,4255600
O	0,3300672	0,9610701	-27,0422300	Ca	0,1634600	0,6714447	-28,4259300
O	0,4613263	0,7084322	-27,0334100	Ca	0,6698341	0,1618424	-28,4603600
O	0,2089837	0,8298186	-27,0321400	O	0,8724254	0,6251773	-29,8604700
C	0,3336017	0,8330907	-27,0441800	O	0,0024133	0,3724333	-29,8587900
O	0,8367965	0,4577941	-27,0070000	O	0,1249080	0,5026679	-29,8535800
O	0,9581571	0,2053725	-27,0150100	C	0,9999272	0,4999787	-29,8513900
O	0,7054524	0,3363898	-27,0148300	O	0,3749109	0,1274711	-29,8726300
C	0,8333136	0,3332273	-27,0042700	O	0,4973547	0,8750912	-29,8732600
Ca	0,1632079	0,1676739	-28,4604100	O	0,6275451	0,9973155	-29,8801400
Ca	0,6702653	0,6655148	-28,4323500	C	0,4999393	0,0000619	-29,8818100
Ca	0,1629271	0,6680826	-28,4590500	O	0,8748829	0,1275731	-29,8738700
Ca	0,6705178	0,1651131	-28,4337100	O	0,9973440	0,8751750	-29,8752900
O	0,8747191	0,6270281	-29,8745600	O	0,1275167	0,9973958	-29,8814900
O	0,9982458	0,3745805	-29,8778500	C	0,9999002	0,0001641	-29,8835900
O	0,1271205	0,4983421	-29,8720600	O	0,3724150	0,6250392	-29,8591500
C	0,0001191	0,4998842	-29,8790400	O	0,5024947	0,3723223	-29,8565900
O	0,3728392	0,1255225	-29,8631800	O	0,6248994	0,5026659	-29,8525100
O	0,5018355	0,8727916	-29,8603600	C	0,4999684	0,4998840	-29,8495100
O	0,6255991	0,0015549	-29,8660300	Ca	0,3325267	0,3357844	-31,2785800
C	0,4999954	0,0000506	-29,8591100	Ca	0,8341432	0,8308964	-31,3006800
O	0,8748969	0,1272063	-29,8743200	Ca	0,3342637	0,8306558	-31,2981800

O	0,9979925	0,8747363	-29,8796300	Ca	0,8323648	0,3359687	-31,2810600
O	0,1273133	0,9980105	-29,8741700	O	0,1677438	0,2922676	-32,7087100
C	0,0001274	0,9999161	-29,8811700	O	0,2923925	0,0395439	-32,7096100
O	0,3726604	0,6253097	-29,8635200	O	0,0397091	0,1676859	-32,7079200
O	0,5021140	0,3726189	-29,8590200	C	0,1666516	0,1664588	-32,7058100
O	0,6253943	0,5018883	-29,8637400	O	0,6655888	0,7936668	-32,7170100
C	0,4999895	0,5000071	-29,8570800	O	0,7935366	0,5412018	-32,7158700
Ca	0,3347692	0,3326027	-31,2849300	O	0,5410116	0,6656685	-32,7187600
Ca	0,8319416	0,8340299	-31,2985500	C	0,6666666	0,6668779	-32,7201300
Ca	0,3349480	0,8320534	-31,2863000	O	0,1659167	0,7931464	-32,7174300
Ca	0,8317652	0,3345621	-31,2968600	O	0,2933790	0,5407922	-32,7156700
O	0,1671198	0,2927383	-32,7089800	O	0,0408367	0,6656001	-32,7213800
O	0,2928241	0,0400779	-32,7108300	C	0,1666065	0,6665445	-32,7203400
O	0,0400706	0,1671785	-32,7115300	O	0,6673749	0,2928342	-32,7090900
C	0,1666855	0,1666193	-32,7092200	O	0,7925844	0,0399796	-32,7104600
O	0,6662179	0,7931766	-32,7196500	O	0,5399243	0,1677144	-32,7046700
O	0,7931549	0,5406349	-32,7174200	C	0,6667364	0,1668081	-32,7059900
O	0,5407043	0,6660958	-32,7168000	Ca	0,0005980	0,4989720	-34,1396700
C	0,6666773	0,6666816	-32,7192300	Ca	0,4993978	0,0010139	-34,1322700

Table SIV. Atomic coordinates (x and y, fractional coordinates; z, absolute coordinates in Å) of the (00.1)_{R2}^{Ca} and (00.1)_{R2}^{CO₃} slabs of calcite (CaCO₃), as determined in the optimization at empirical level (see text for details).

	(00.1) _{R2} ^{Ca}			(00.1) _{R2} ^{CO₃}			
	x	y	z	x	y	z	
Ca	0,5003560	0,4964350	-0,7032070	O	0,9087300	0,4021920	-1,8050330
O	0,3541800	0,1843210	-1,5064240	C	0,8333340	0,3333110	-1,6921860
O	0,3539720	0,4017650	-1,9326740	O	0,9022150	0,1890350	-1,8050780
O	0,5382510	0,2367880	-0,8387300	O	0,6890580	0,4087070	-1,8050370
C	0,4093580	0,2692880	-1,3647740	Ca	0,0960670	0,1969720	-3,2963600
O	0,2405560	0,7189900	-0,7883720	Ca	0,7069390	0,5960510	-3,2962730
O	0,1899190	0,9557170	-1,4676440	Ca	0,6969930	0,2069210	-3,2963680
O	0,3985570	0,7356700	-1,9970800	O	0,9322420	0,4312140	-4,7434840
C	0,2712200	0,8148570	-1,3503950	O	0,9216380	0,6365850	-4,0618110
O	0,7447320	0,3458710	-1,8626790	O	0,1467030	0,4013440	-4,0807030
O	0,7175130	0,5422950	-0,9141280	C	0,0069770	0,4955990	-4,2908900
O	0,9564200	0,3598640	-1,5470680	O	0,3552750	0,0597390	-4,1670440
C	0,8170610	0,4107320	-1,3826610	O	0,5597550	0,0849500	-4,1670440
Ca	0,1655800	0,1648570	-2,6039890	O	0,5849670	0,8552580	-4,1670310
Ca	0,6335870	0,6664250	-3,0501960	C	0,4999990	0,9999820	-4,1099130
Ca	0,2031450	0,6372540	-3,0159370	O	0,9013580	0,9519200	-4,0808760
Ca	0,6611000	0,1986250	-3,0181370	O	0,9312260	0,1365150	-4,7435850
O	0,9980600	0,6240210	-3,9774560	O	0,1365990	0,9417420	-4,0619900
O	0,1146950	0,3738030	-4,2651160	C	0,9956130	0,9973910	-4,2910630
O	0,8607940	0,5129190	-4,2895500	O	0,4417580	0,4216240	-4,0618360
C	0,9914270	0,5016950	-4,1444490	O	0,4519330	0,6466890	-4,0806940
O	0,5046490	0,1305910	-4,2863890	O	0,6365250	0,4322300	-4,7434940
O	0,6285320	0,8819420	-3,9701810	C	0,4974040	0,5069640	-4,2909000
O	0,3786590	0,0016390	-4,2360420	Ca	0,3537260	0,3035330	-5,5734940
C	0,5018370	0,0068130	-4,1426610	Ca	0,8035470	0,8426980	-5,5735800
O	0,0077600	0,1163680	-4,2558870	Ca	0,3427300	0,8537060	-5,5735720

O	0,1276140	0,8624520	-4,2950660	Ca	0,8333260	0,3333290	-6,2920300
O	0,8788850	0,9945500	-3,9894070	O	0,0513330	0,2842720	-7,4917860
C	0,0060880	0,9914200	-4,1580350	C	0,1742410	0,1582210	-7,3042450
O	0,5011060	0,6253690	-4,7733080	O	0,1685430	0,0353380	-7,2020010
O	0,6277110	0,3740790	-4,7065790	O	0,3008160	0,1549410	-7,1328050
O	0,3758370	0,4987880	-4,7350430	O	0,5442370	0,8008100	-7,1328220
C	0,5014610	0,4991880	-4,8034430	C	0,6675190	0,6742250	-7,3042920
Ca	0,3209710	0,3200960	-5,7738240	O	0,6643560	0,5513270	-7,4918120
Ca	0,8358160	0,8311220	-5,5137990	O	0,7961120	0,6685020	-7,2020030
Ca	0,3175790	0,8580590	-5,7861040	O	0,0331050	0,7842610	-6,9087690
Ca	0,8592310	0,3245410	-5,7635630	C	0,1666670	0,6666490	-6,8601110
O	0,0567900	0,3040270	-7,2009390	O	0,1826160	0,5330870	-6,9087630
C	0,1668430	0,1666980	-7,2513050	O	0,2842800	0,6825970	-6,9087840
O	0,5410720	0,7865630	-7,1300320	O	0,5353570	0,2960840	-7,2019420
C	0,6703340	0,6635840	-7,0970580	C	0,6582400	0,1675030	-7,3042380
O	0,0359320	0,7926960	-7,0215990	O	0,6549610	0,0442080	-7,1328480
C	0,1661340	0,6703570	-7,1028960	O	0,7842890	0,1643640	-7,4917910
O	0,5327400	0,2861590	-7,1733550	Ca	0,0179660	0,5078920	-8,5266290
C	0,6639130	0,1665820	-7,0696430	Ca	0,4999940	0,9999970	-8,6889240
O	0,1395880	0,0566370	-7,1991990	Ca	0,0079160	0,9741120	-8,5265290
O	0,3041620	0,1393540	-7,1875020	Ca	0,4741220	0,5179290	-8,5266200
O	0,6824130	0,5322440	-7,2027000	O	0,3224340	0,4646730	-9,9792870
O	0,7917620	0,6732300	-7,0200890	O	0,4677890	0,2120330	-9,9941420
O	0,1708020	0,5418180	-7,1307550	O	0,2155830	0,3218720	-9,9640880
O	0,2865820	0,6803270	-7,2057690	C	0,3363630	0,3318280	-10,0011380
O	0,6737110	0,0354580	-6,9984340	O	0,8219090	0,9624970	-9,9640120
O	0,7867220	0,1732320	-7,1078230	O	0,9646780	0,7128440	-9,9792810
Ca	0,9914760	0,5199320	-8,5792330	O	0,7120350	0,8201620	-9,9940520
Ca	0,5210180	0,9881360	-8,5587710	C	0,8318420	0,8317720	-10,0010360
Ca	0,9863360	0,9940200	-8,5682270	O	0,3201810	0,9677620	-9,9940990
Ca	0,5011850	0,4986480	-8,4793680	O	0,4625120	0,7155520	-9,9640440
O	0,3403840	0,4548200	-9,9663420	O	0,2128570	0,8224430	-9,9792580
O	0,4552650	0,2029940	-9,9781590	C	0,3317880	0,8363460	-10,0010510
O	0,2026110	0,3403040	-9,9176090	O	0,8667260	0,4395860	-10,0031730
C	0,3325120	0,3325300	-9,9389290	O	0,9396030	0,1936500	-10,0032160
O	0,8087870	0,9698970	-9,9774400	O	0,6936690	0,3667080	-10,0032230
O	0,9698020	0,7212700	-9,9825520	C	0,8333330	0,3333150	-9,9525520
O	0,7212480	0,8089830	-9,9772220	Ca	0,1455140	0,1765510	-11,3625490
C	0,8333430	0,8333620	-10,0239170	Ca	0,6779020	0,6454980	-11,3624260
O	0,3422180	0,9562360	-9,9110750	Ca	0,1666560	0,6666640	-11,4992870
O	0,4537310	0,7041910	-9,9701020	Ca	0,6765950	0,1778790	-11,3625460
O	0,2019950	0,8440660	-9,9804730	O	0,8766240	0,6289050	-12,8040970
C	0,3324640	0,8351810	-9,9345880	O	0,9943930	0,3770150	-12,8882580
O	0,8413820	0,4555370	-9,9957690	O	0,1292400	0,4942480	-12,8371940
O	0,9574270	0,2029050	-9,9213630	C	0,0000990	0,5003510	-12,8583120
O	0,7052750	0,3395990	-9,9725580	O	0,3661110	0,1171540	-12,7354870
C	0,8350630	0,3325950	-9,9498250	O	0,5167180	0,8660900	-12,7355010
Ca	0,1679360	0,1655340	-11,2923090	O	0,6171750	0,0166960	-12,7355070
Ca	0,6611140	0,6572880	-11,4114960	C	0,5000010	0,9999810	-12,6969940
Ca	0,1819430	0,6631960	-11,4048650	O	0,8770450	0,1285670	-12,8883300
Ca	0,6559590	0,1811150	-11,4153470	O	0,9942440	0,8764890	-12,8373120
O	0,0064560	0,3709370	-12,7802200	O	0,1289350	0,9944120	-12,8042080
O	0,8717500	0,6235550	-12,7620170	C	0,0003710	0,9995140	-12,8584680
O	0,1244280	0,5050700	-12,7836630	O	0,3764940	0,6292200	-12,8372400
C	0,0006650	0,5001130	-12,7613980	O	0,4944540	0,3766040	-12,8041140
O	0,5028900	0,8719700	-12,7933000	O	0,6285740	0,4943750	-12,8882440

O	0,3722110	0,1241890	-12,7807000	C	0,4995320	0,5000790	-12,8583300
O	0,6248840	0,0027490	-12,7648320	Ca	0,3384610	0,3184210	-14,1975360
C	0,5002600	0,9995570	-12,7708380	Ca	0,8184290	0,8430730	-14,1976620
O	0,0036390	0,8723820	-12,7619340	Ca	0,3431160	0,8384310	-14,1976710
O	0,8715080	0,1251560	-12,7874400	Ca	0,8333270	0,3333330	-14,3415960
O	0,1237550	0,0048500	-12,7843580	O	0,1633090	0,2947320	-15,6610310
C	0,9995170	0,0006530	-12,7670780	O	0,2957200	0,0428860	-15,6685950
O	0,4879590	0,3803760	-12,8756700	O	0,0431680	0,1621370	-15,6953820
O	0,3804810	0,6318510	-12,8764580	C	0,1669990	0,1666910	-15,6865370
O	0,6319140	0,4879630	-12,8746240	O	0,6613450	0,7957160	-15,6686510
C	0,5001480	0,5000140	-12,9087480	O	0,7946870	0,5431660	-15,6954870
Ca	0,3247320	0,3304580	-14,2428160	O	0,5419520	0,6632640	-15,6611450
Ca	0,8341890	0,8323270	-14,1539430	C	0,6662880	0,6669830	-15,6866940
Ca	0,3292090	0,8448470	-14,2502140	O	0,1794040	0,7861530	-15,5912160
Ca	0,8455870	0,3259500	-14,2402780	O	0,2861710	0,5344040	-15,5912290
O	0,1554550	0,2981900	-15,6851800	O	0,0344230	0,6793850	-15,5912510
O	0,2982270	0,0465370	-15,6842090	C	0,1666660	0,6666480	-15,5597750
O	0,0465820	0,1554510	-15,6833910	O	0,6621550	0,2946560	-15,6954070
C	0,1667750	0,1667100	-15,7113390	O	0,7947510	0,0419180	-15,6610360
O	0,6701730	0,7912460	-15,6186070	O	0,5429040	0,1613560	-15,6685500
O	0,7912410	0,5390140	-15,6418540	C	0,6667100	0,1662690	-15,6865300
O	0,5382340	0,6707520	-15,6309020	Ca	0,0042820	0,5075090	-17,0520790
C	0,6664320	0,6667480	-15,6216250	Ca	0,4999870	0,0000020	-17,1372990
O	0,1694480	0,7914240	-15,6438550	Ca	0,0075350	0,9881840	-17,0519270
O	0,2914770	0,5383700	-15,6310390	Ca	0,4881970	0,5042290	-17,0520770
O	0,0390880	0,6695220	-15,6220750	O	0,4614070	0,3295200	-18,4907810
C	0,1670550	0,6663550	-15,6248680	C	0,3334910	0,3329330	-18,5143140
O	0,6717120	0,2906890	-15,6249390	O	0,3294160	0,2088270	-18,5138060
O	0,7908690	0,0383360	-15,6160700	O	0,2094550	0,4614690	-18,5103660
O	0,5386390	0,1707660	-15,6352230	O	0,9614730	0,8290700	-18,5102470
C	0,6667870	0,1669720	-15,6142540	C	0,8329530	0,8335370	-18,5141250
Ca	0,9939930	0,5089780	-17,0847340	O	0,8295720	0,7090190	-18,4906580
Ca	0,5094530	0,9973270	-17,0771490	O	0,7088310	0,9617040	-18,5137090
Ca	0,9961480	0,9945640	-17,0798960	O	0,4617240	0,8294280	-18,5136610
Ca	0,5008230	0,4993030	-17,0160970	C	0,3335580	0,8334710	-18,5141130
O	0,3363650	0,2054330	-18,4696210	O	0,3290900	0,7094190	-18,5102800
O	0,2057640	0,4583140	-18,4870130	O	0,2090390	0,9613710	-18,4906460
O	0,4581570	0,3361200	-18,4745260	O	0,9535220	0,3448530	-18,4619410
C	0,3332420	0,3332330	-18,4700740	C	0,8333340	0,3333140	-18,4360190
O	0,8242790	0,7119710	-18,5158100	O	0,8448750	0,2015850	-18,4619150
O	0,7121000	0,9639230	-18,5142480	O	0,7016060	0,4535020	-18,4618930
O	0,9640050	0,8242050	-18,5136720	Ca	0,1576110	0,1723750	-19,8979920
C	0,8334660	0,8333440	-18,5365000	Ca	0,6699700	0,6576070	-19,8978140
O	0,3371430	0,7054500	-18,4722270	Ca	0,1666590	0,6666720	-19,9655000
O	0,2051570	0,9579570	-18,4680560	Ca	0,6724270	0,1699350	-19,8980020
O	0,4579970	0,8369360	-18,4838680	O	0,8752580	0,4971050	-21,3531900
C	0,3333420	0,8336880	-18,4658160	O	0,9971930	0,6277520	-21,3506990
O	0,8359400	0,2057990	-18,4890180	O	0,1274750	0,3750650	-21,3357100
O	0,7060860	0,4581450	-18,4755440	C	0,0000470	0,5001210	-21,3535120
O	0,9586140	0,3360020	-18,4728350	O	0,3697810	0,0081040	-21,3060590
C	0,8338010	0,3331580	-18,4730280	O	0,5081240	0,1220760	-21,3060260
Ca	0,1671350	0,1660780	-19,8690730	O	0,6220950	0,8697600	-21,3060190
Ca	0,6615260	0,6648050	-19,9208270	C	0,5000000	0,9999810	-21,2861160
Ca	0,1741340	0,6621900	-19,9193280	O	0,8751040	0,9973820	-21,3358580
Ca	0,6642550	0,1736810	-19,9243250	O	0,9970850	0,1276180	-21,3533380
O	0,0027860	0,6250420	-21,3158330	O	0,1277890	0,8750340	-21,3508110

O	0,1249230	0,3724890	-21,3187780	C	0,0001400	0,9997930	-21,3537440
O	0,8724830	0,5025400	-21,3276070	O	0,3750340	0,4971720	-21,3506460
C	0,9999490	0,5001990	-21,3140540	O	0,4974360	0,6274570	-21,3356780
O	0,5018170	0,1254920	-21,3306640	O	0,6276190	0,3752400	-21,3532380
O	0,6254940	0,8726710	-21,3183500	C	0,4998110	0,5000270	-21,3535040
O	0,3729510	0,0019120	-21,3217340	Ca	0,3376090	0,3266660	-22,7447540
C	0,5002700	0,9999700	-21,3189110	Ca	0,8266760	0,8356660	-22,7449660
O	0,0021760	0,1251580	-21,3198520	Ca	0,3357330	0,8375800	-22,7449550
O	0,1254620	0,8727360	-21,3297730	Ca	0,8333160	0,3333430	-22,7965730
O	0,8726490	0,0021030	-21,3183250	O	0,0413340	0,2939450	-24,1914610
C	0,0000140	0,9998940	-21,3174140	C	0,1665540	0,1667070	-24,1921410
O	0,4934760	0,6294200	-21,3570670	O	0,1648950	0,0412710	-24,1800020
O	0,6294940	0,3771830	-21,3567620	O	0,2939540	0,1645120	-24,1900550
O	0,3772690	0,4934230	-21,3557200	O	0,5415390	0,7939590	-24,1901800
C	0,5000940	0,4999980	-21,3732300	C	0,6667180	0,6665340	-24,1923630
Ca	0,3311910	0,3300760	-22,7627070	O	0,6646530	0,5413390	-24,1915110
Ca	0,8337450	0,8329660	-22,7233520	O	0,7938380	0,6648270	-24,1801640
Ca	0,3298530	0,8385960	-22,7653470	O	0,0375060	0,7899940	-24,1576690
Ca	0,8388420	0,3317720	-22,7618770	C	0,1666660	0,6666480	-24,1432390
O	0,0430200	0,2953140	-24,1946260	O	0,1724810	0,5374870	-24,1576680
C	0,1667370	0,1666680	-24,2068310	O	0,2900130	0,6724600	-24,1576920
O	0,5397140	0,7922890	-24,1754510	O	0,5412940	0,2937910	-24,1799870
C	0,6666520	0,6666230	-24,1663280	C	0,6667310	0,1666970	-24,1921270
O	0,0397880	0,7921950	-24,1679630	O	0,6645350	0,0414930	-24,1901360
C	0,1668780	0,6666040	-24,1672810	O	0,7939680	0,1646810	-24,1913680
O	0,5393500	0,2920500	-24,1664990	Ca	0,0029690	0,5016030	-25,5932370
C	0,6666730	0,1668180	-24,1640780	Ca	0,4999890	0,0000130	-25,6274160
O	0,1618170	0,0429510	-24,1948300	Ca	0,0016440	0,9954020	-25,5929930
O	0,2953660	0,1617700	-24,1937470	Ca	0,4953980	0,5029030	-25,5931910
O	0,6683640	0,5394900	-24,1674250	O	0,3318840	0,4602720	-27,0312940
O	0,7922220	0,6681730	-24,1677910	O	0,4602740	0,2076360	-27,0311490
O	0,1680570	0,5397090	-24,1762280	O	0,2076520	0,3321090	-27,0241540
O	0,2923460	0,6682170	-24,1683580	C	0,3333650	0,3332320	-27,0322090
O	0,6686470	0,0394880	-24,1663430	O	0,8321830	0,9601730	-27,0239780
O	0,7921450	0,1684880	-24,1739380	O	0,9602710	0,7077780	-27,0311450
Ca	0,9987000	0,5038140	-25,6070380	O	0,7076350	0,8320980	-27,0308840
Ca	0,5039840	0,9975910	-25,6050230	C	0,8332560	0,8333610	-27,0318800
Ca	0,9973120	0,9989040	-25,6055920	O	0,3321050	0,9602360	-27,0308540
Ca	0,5001760	0,4997790	-25,5778370	O	0,4601970	0,7076120	-27,0237770
O	0,3344100	0,4590760	-27,0160280	O	0,2078010	0,8319070	-27,0310420
O	0,4591780	0,2065350	-27,0216870	C	0,3333810	0,8333460	-27,0317650
O	0,2064290	0,3344820	-27,0158980	O	0,8370930	0,4577440	-27,0096810
C	0,3333140	0,3332900	-27,0151540	O	0,9577640	0,2051180	-27,0098160
O	0,8299380	0,9612970	-27,0340910	O	0,7051410	0,3370680	-27,0096820
O	0,9612870	0,7088430	-27,0337380	C	0,8333320	0,3333130	-27,0002490
O	0,7088400	0,8299530	-27,0335890	Ca	0,1640150	0,1675150	-28,4410010
C	0,8333600	0,8333610	-27,0423960	Ca	0,6684070	0,6640060	-28,4406290
O	0,3346830	0,9590730	-27,0150710	Ca	0,1666440	0,6666850	-28,4620550
O	0,4589910	0,7064950	-27,0155340	Ca	0,6676040	0,1683800	-28,4409650
O	0,2064330	0,8345690	-27,0209950	O	0,8740460	0,6265500	-29,8685360
C	0,3332940	0,8334730	-27,0140260	O	0,9993200	0,3740900	-29,8706950
O	0,8343610	0,4591750	-27,0220400	O	0,1266440	0,4994020	-29,8727200
O	0,9591510	0,2064260	-27,0163900	C	0,0000750	0,5000080	-29,8722210
O	0,7065950	0,3343890	-27,0170680	O	0,3726780	0,1253750	-29,8623030
C	0,8334650	0,3333170	-27,0159180	O	0,5019260	0,8726930	-29,8618550
Ca	0,1667500	0,1666210	-28,4313670	O	0,6253650	0,0019340	-29,8624630

Ca	0,6657590	0,6651270	-28,4491080	C	0,4999880	0,0000040	-29,8575280
Ca	0,1691510	0,6659000	-28,4489380	O	0,8741340	0,1265640	-29,8710260
Ca	0,6650500	0,1691350	-28,4498430	O	0,9993500	0,8739300	-29,8730740
O	0,0006230	0,3734280	-29,8650360	O	0,1265890	0,9992940	-29,8687800
O	0,8733310	0,6260180	-29,8638690	C	0,0000210	0,9998590	-29,8726910
O	0,1260590	0,5005860	-29,8669310	O	0,3739640	0,6266360	-29,8726170
C	0,9999980	0,5000740	-29,8636950	O	0,4993670	0,3740370	-29,8684420
O	0,5005470	0,8734020	-29,8671930	O	0,6266020	0,4992530	-29,8701540
O	0,3734060	0,1259780	-29,8653100	C	0,4999090	0,5000510	-29,8719810
O	0,6259770	0,0006940	-29,8638880	Ca	0,3336890	0,3323850	-31,2902080
C	0,5000440	0,9999620	-29,8638670	Ca	0,8323090	0,8338960	-31,2905920
O	0,0006800	0,8733540	-29,8640450	Ca	0,3339960	0,8336560	-31,2903730
O	0,8733100	0,1260520	-29,8686200	O	0,6664740	0,7930040	-32,7159460
O	0,1259100	0,0007020	-29,8650120	O	0,7930910	0,5403750	-32,7133950
C	0,9999180	0,0000360	-29,8641960	O	0,5405050	0,6664380	-32,7136630
O	0,4980440	0,3747610	-29,8749600	C	0,6667230	0,6665790	-32,7148040
O	0,3747190	0,6272740	-29,8747190	Ca	0,8333330	0,3333330	-31,2922670
O	0,6272220	0,4980780	-29,8747790	O	0,1666670	0,2929680	-32,7146430
C	0,4999880	0,5000420	-29,8797060	O	0,2929680	0,0403660	-32,7146430
Ca	0,3326020	0,3329080	-31,2931880	O	0,0403660	0,1666670	-32,7146430
Ca	0,8332840	0,8334410	-31,2845480	C	0,1666670	0,1666670	-32,7146430
Ca	0,3328790	0,8345820	-31,2927920	O	0,1666670	0,7929680	-32,7146430
Ca	0,8344320	0,3326060	-31,2934150	O	0,2929680	0,5403660	-32,7146430
O	0,1661520	0,2932010	-32,7172470	O	0,0403660	0,6666670	-32,7146430
O	0,2931460	0,0406810	-32,7173980	C	0,1666670	0,6666670	-32,7146430
O	0,0406140	0,1662010	-32,7172450	O	0,6666670	0,2929680	-32,7146430
C	0,1666320	0,1666970	-32,7186230	O	0,7929680	0,0403660	-32,7146430
O	0,6667290	0,7929660	-32,7112930	O	0,5403660	0,1666670	-32,7146430
O	0,7928430	0,5402940	-32,7138010	C	0,6666670	0,1666670	-32,7146430
O	0,5401860	0,6669530	-32,7115900	Ca	0,0000000	0,5000000	-34,1370190
C	0,6666270	0,6667040	-32,7118000	Ca	0,5000000	0,0000000	-34,1370190
O	0,1667980	0,7929100	-32,7131260	Ca	0,0000000	0,0000000	-34,1370190
O	0,2927890	0,5402500	-32,7118470	Ca	0,5000000	0,5000000	-34,1370190
O	0,0402310	0,6668110	-32,7115880	O	0,4596340	0,3333330	-35,5593940
C	0,1666040	0,6666920	-32,7116980	C	0,3333330	0,3333330	-35,5593940
Ca	0,4999150	0,5000910	-34,1346100	O	0,3333330	0,2070320	-35,5593940
C	0,6666670	0,1666670	-32,7146430	O	0,2070320	0,4596340	-35,5593940
C	0,3333330	0,3333330	-35,5593940	O	0,9596340	0,8333330	-35,5593940
O	0,3333330	0,2070320	-35,5593940	C	0,8333330	0,8333330	-35,5593940
O	0,2070320	0,4596340	-35,5593940	O	0,8333330	0,7070320	-35,5593940
O	0,4596340	0,3333330	-35,5593940	O	0,7070320	0,9596340	-35,5593940
O	0,6666670	0,2929680	-32,7146430	O	0,4596340	0,8333330	-35,5593940
O	0,7929680	0,0403660	-32,7146430	C	0,3333330	0,8333330	-35,5593940
O	0,5403660	0,1666670	-32,7146430	O	0,3333330	0,7070320	-35,5593940
Ca	0,0000000	0,5000000	-34,1370190	O	0,2070320	0,9596340	-35,5593940
Ca	0,5000000	0,0000000	-34,1370190	O	0,9596340	0,3333330	-35,5593940
Ca	0,0000000	0,0000000	-34,1370190	C	0,8333330	0,3333330	-35,5593940
O	0,8333330	0,7070320	-35,5593940	O	0,8333330	0,2070320	-35,5593940
O	0,7070320	0,9596340	-35,5593940	O	0,7070320	0,4596340	-35,5593940
O	0,9596340	0,8333330	-35,5593940	Ca	0,1666670	0,1666670	-36,9817700
C	0,8333330	0,8333330	-35,5593940	Ca	0,6666670	0,6666670	-36,9817700
O	0,3333330	0,7070320	-35,5593940	Ca	0,1666670	0,6666670	-36,9817700
O	0,2070320	0,9596340	-35,5593940	Ca	0,6666670	0,1666670	-36,9817700
O	0,4596340	0,8333330	-35,5593940	O	0,8736990	0,5000000	-38,4041460
C	0,3333330	0,8333330	-35,5593940	O	0,0000000	0,6263010	-38,4041460
O	0,8333330	0,2070320	-35,5593940	O	0,1263010	0,3736990	-38,4041460

O	0,7070320	0,4596340	-35,5593940	C	0,0000000	0,5000000	-38,4041460
O	0,9596340	0,3333330	-35,5593940	O	0,3736990	0,0000000	-38,4041460
C	0,8333330	0,3333330	-35,5593940	O	0,5000000	0,1263010	-38,4041460
Ca	0,1666670	0,1666670	-36,9817700	O	0,6263010	0,8736990	-38,4041460
Ca	0,6666670	0,6666670	-36,9817700	C	0,5000000	0,0000000	-38,4041460
Ca	0,1666670	0,6666670	-36,9817700	O	0,8736990	0,0000000	-38,4041460
Ca	0,6666670	0,1666670	-36,9817700	O	0,0000000	0,1263010	-38,4041460
O	0,0000000	0,6263010	-38,4041460	O	0,1263010	0,8736990	-38,4041460
O	0,1263010	0,3736990	-38,4041460	C	0,0000000	0,0000000	-38,4041460
O	0,8736990	0,5000000	-38,4041460	O	0,3736990	0,5000000	-38,4041460
C	0,0000000	0,5000000	-38,4041460	O	0,5000000	0,6263010	-38,4041460
O	0,5000000	0,1263010	-38,4041460	O	0,6263010	0,3736990	-38,4041460
O	0,6263010	0,8736990	-38,4041460	C	0,5000000	0,5000000	-38,4041460
O	0,3736990	0,0000000	-38,4041460	Ca	0,3333330	0,3333330	-39,8265220
C	0,5000000	0,0000000	-38,4041460	Ca	0,8333330	0,8333330	-39,8265220
O	0,0000000	0,1263010	-38,4041460	Ca	0,3333330	0,8333330	-39,8265220
O	0,1263010	0,8736990	-38,4041460	Ca	0,8333330	0,3333330	-39,8265220
O	0,8736990	0,0000000	-38,4041460	O	0,0403660	0,2929680	-41,2488970
C	0,0000000	0,0000000	-38,4041460	C	0,1666670	0,1666670	-41,2488970
O	0,5000000	0,6263010	-38,4041460	O	0,1666670	0,0403660	-41,2488970
O	0,6263010	0,3736990	-38,4041460	O	0,2929680	0,1666670	-41,2488970
O	0,3736990	0,5000000	-38,4041460	O	0,5403660	0,7929680	-41,2488970
C	0,5000000	0,5000000	-38,4041460	C	0,6666670	0,6666670	-41,2488970
Ca	0,3333330	0,3333330	-39,8265220	O	0,6666670	0,5403660	-41,2488970
Ca	0,8333330	0,8333330	-39,8265220	O	0,7929680	0,6666670	-41,2488970
Ca	0,3333330	0,8333330	-39,8265220	O	0,0403660	0,7929680	-41,2488970
Ca	0,8333330	0,3333330	-39,8265220	C	0,1666670	0,6666670	-41,2488970
O	0,0403660	0,2929680	-41,2488970	O	0,1666670	0,5403660	-41,2488970
C	0,1666670	0,1666670	-41,2488970	O	0,2929680	0,6666670	-41,2488970
O	0,5403660	0,7929680	-41,2488970	O	0,5403660	0,2929680	-41,2488970
C	0,6666670	0,6666670	-41,2488970	C	0,6666670	0,1666670	-41,2488970
O	0,0403660	0,7929680	-41,2488970	O	0,6666670	0,0403660	-41,2488970
C	0,1666670	0,6666670	-41,2488970	O	0,7929680	0,1666670	-41,2488970
O	0,5403660	0,2929680	-41,2488970	Ca	0,0000000	0,5000000	-42,6712730
C	0,6666670	0,1666670	-41,2488970	Ca	0,5000000	0,0000000	-42,6712730
O	0,1666670	0,0403660	-41,2488970	Ca	0,0000000	0,0000000	-42,6712730
O	0,2929680	0,1666670	-41,2488970	Ca	0,5000000	0,5000000	-42,6712730
O	0,6666670	0,5403660	-41,2488970	O	0,3333330	0,4596340	-44,0936490
O	0,7929680	0,6666670	-41,2488970	O	0,4596340	0,2070320	-44,0936490
O	0,1666670	0,5403660	-41,2488970	O	0,2070320	0,3333330	-44,0936490
O	0,2929680	0,6666670	-41,2488970	C	0,3333330	0,3333330	-44,0936490
O	0,6666670	0,0403660	-41,2488970	O	0,8333330	0,9596340	-44,0936490
O	0,7929680	0,1666670	-41,2488970	O	0,9596340	0,7070320	-44,0936490
Ca	0,0000000	0,5000000	-42,6712730	O	0,7070320	0,8333330	-44,0936490
Ca	0,5000000	0,0000000	-42,6712730	C	0,8333330	0,8333330	-44,0936490
Ca	0,0000000	0,0000000	-42,6712730	O	0,3333330	0,9596340	-44,0936490
Ca	0,5000000	0,5000000	-42,6712730	O	0,4596340	0,7070320	-44,0936490
O	0,3333330	0,4596340	-44,0936490	O	0,2070320	0,8333330	-44,0936490
O	0,4596340	0,2070320	-44,0936490	C	0,3333330	0,8333330	-44,0936490
O	0,2070320	0,3333330	-44,0936490	O	0,8333330	0,4596340	-44,0936490
C	0,3333330	0,3333330	-44,0936490	O	0,9596340	0,2070320	-44,0936490
O	0,8333330	0,9596340	-44,0936490	O	0,7070320	0,3333330	-44,0936490
O	0,9596340	0,7070320	-44,0936490	C	0,8333330	0,3333330	-44,0936490
O	0,7070320	0,8333330	-44,0936490	Ca	0,1666670	0,1666670	-45,5160250
C	0,8333330	0,8333330	-44,0936490	Ca	0,6666670	0,6666670	-45,5160250
O	0,3333330	0,9596340	-44,0936490	Ca	0,1666670	0,6666670	-45,5160250

O	0,4596340	0,7070320	-44,0936490	Ca	0,6666670	0,1666670	-45,5160250
O	0,2070320	0,8333330	-44,0936490	O	0,8736990	0,6263010	-46,9384000
C	0,3333330	0,8333330	-44,0936490	O	0,0000000	0,3736990	-46,9384000
O	0,8333330	0,4596340	-44,0936490	O	0,1263010	0,5000000	-46,9384000
O	0,9596340	0,2070320	-44,0936490	C	0,0000000	0,5000000	-46,9384000
O	0,7070320	0,3333330	-44,0936490	O	0,3736990	0,1263010	-46,9384000
C	0,8333330	0,3333330	-44,0936490	O	0,5000000	0,8736990	-46,9384000
Ca	0,1666670	0,1666670	-45,5160250	O	0,6263010	0,0000000	-46,9384000
Ca	0,6666670	0,6666670	-45,5160250	C	0,5000000	0,0000000	-46,9384000
Ca	0,1666670	0,6666670	-45,5160250	O	0,8736990	0,1263010	-46,9384000
Ca	0,6666670	0,1666670	-45,5160250	O	0,0000000	0,8736990	-46,9384000
O	0,0000000	0,3736990	-46,9384000	O	0,1263010	0,0000000	-46,9384000
O	0,8736990	0,6263010	-46,9384000	C	0,0000000	0,0000000	-46,9384000
O	0,1263010	0,5000000	-46,9384000	O	0,3736990	0,6263010	-46,9384000
C	0,0000000	0,5000000	-46,9384000	O	0,5000000	0,3736990	-46,9384000
O	0,5000000	0,8736990	-46,9384000	O	0,6263010	0,5000000	-46,9384000
O	0,3736990	0,1263010	-46,9384000	C	0,5000000	0,5000000	-46,9384000
O	0,6263010	0,0000000	-46,9384000	Ca	0,3333330	0,3333330	-48,3607760
C	0,5000000	0,0000000	-46,9384000	Ca	0,8333330	0,8333330	-48,3607760
O	0,0000000	0,8736990	-46,9384000	Ca	0,3333330	0,8333330	-48,3607760
O	0,8736990	0,1263010	-46,9384000	Ca	0,8333330	0,3333330	-48,3607760
O	0,1263010	0,0000000	-46,9384000	O	0,1666670	0,2929680	-49,7831520
C	0,0000000	0,0000000	-46,9384000	O	0,2929680	0,0403660	-49,7831520
O	0,5000000	0,3736990	-46,9384000	O	0,0403660	0,1666670	-49,7831520
O	0,3736990	0,6263010	-46,9384000	C	0,1666670	0,1666670	-49,7831520
O	0,6263010	0,5000000	-46,9384000	O	0,6666670	0,7929680	-49,7831520
C	0,5000000	0,5000000	-46,9384000	O	0,7929680	0,5403660	-49,7831520
Ca	0,3333330	0,3333330	-48,3607760	O	0,5403660	0,6666670	-49,7831520
Ca	0,8333330	0,8333330	-48,3607760	C	0,6666670	0,6666670	-49,7831520
Ca	0,3333330	0,8333330	-48,3607760	O	0,1666670	0,7929680	-49,7831520
Ca	0,8333330	0,3333330	-48,3607760	O	0,2929680	0,5403660	-49,7831520
O	0,1666670	0,2929680	-49,7831520	O	0,0403660	0,6666670	-49,7831520
O	0,2929680	0,0403660	-49,7831520	C	0,1666670	0,6666670	-49,7831520
O	0,0403660	0,1666670	-49,7831520	O	0,6666670	0,2929680	-49,7831520
C	0,1666670	0,1666670	-49,7831520	O	0,7929680	0,0403660	-49,7831520
O	0,6666670	0,7929680	-49,7831520	O	0,5403660	0,1666670	-49,7831520
O	0,7929680	0,5403660	-49,7831520	C	0,6666670	0,1666670	-49,7831520
O	0,5403660	0,6666670	-49,7831520	Ca	0,0000000	0,5000000	-51,2055280
C	0,6666670	0,6666670	-49,7831520	Ca	0,5000000	0,0000000	-51,2055280
O	0,1666670	0,7929680	-49,7831520	Ca	0,0000000	0,0000000	-51,2055280
O	0,2929680	0,5403660	-49,7831520	Ca	0,5000000	0,5000000	-51,2055280
O	0,0403660	0,6666670	-49,7831520	O	0,4596340	0,3333330	-52,6279040
C	0,1666670	0,6666670	-49,7831520	C	0,3333330	0,3333330	-52,6279040
O	0,6666670	0,2929680	-49,7831520	O	0,3333330	0,2070320	-52,6279040
O	0,7929680	0,0403660	-49,7831520	O	0,2070320	0,4596340	-52,6279040
O	0,5403660	0,1666670	-49,7831520	O	0,9596340	0,8333330	-52,6279040
C	0,6666670	0,1666670	-49,7831520	C	0,8333330	0,8333330	-52,6279040
Ca	0,0000000	0,5000000	-51,2055280	O	0,8333330	0,7070320	-52,6279040
Ca	0,5000000	0,0000000	-51,2055280	O	0,7070320	0,9596340	-52,6279040
Ca	0,0000000	0,0000000	-51,2055280	O	0,4596340	0,8333330	-52,6279040
Ca	0,5000000	0,5000000	-51,2055280	C	0,3333330	0,8333330	-52,6279040
O	0,3333330	0,2070320	-52,6279040	O	0,3333330	0,7070320	-52,6279040
O	0,2070320	0,4596340	-52,6279040	O	0,2070320	0,9596340	-52,6279040
O	0,4596340	0,3333330	-52,6279040	O	0,9596340	0,3333330	-52,6279040
C	0,3333330	0,3333330	-52,6279040	C	0,8333330	0,3333330	-52,6279040
O	0,8333330	0,7070320	-52,6279040	O	0,8333330	0,2070320	-52,6279040

O	0,7070320	0,9596340	-52,6279040	O	0,7070320	0,4596340	-52,6279040
O	0,9596340	0,8333330	-52,6279040	Ca	0,1666670	0,1666670	-54,0502790
C	0,8333330	0,8333330	-52,6279040	Ca	0,6666670	0,6666670	-54,0502790
O	0,3333330	0,7070320	-52,6279040	Ca	0,1666670	0,6666670	-54,0502790
O	0,2070320	0,9596340	-52,6279040	Ca	0,6666670	0,1666670	-54,0502790
O	0,4596340	0,8333330	-52,6279040	O	0,8736990	0,5000000	-55,4726550
C	0,3333330	0,8333330	-52,6279040	O	0,0000000	0,6263010	-55,4726550
O	0,8333330	0,2070320	-52,6279040	O	0,1263010	0,3736990	-55,4726550
O	0,7070320	0,4596340	-52,6279040	C	0,0000000	0,5000000	-55,4726550
O	0,9596340	0,3333330	-52,6279040	O	0,3736990	0,0000000	-55,4726550
C	0,8333330	0,3333330	-52,6279040	O	0,5000000	0,1263010	-55,4726550
Ca	0,1666670	0,1666670	-54,0502790	O	0,6263010	0,8736990	-55,4726550
Ca	0,6666670	0,6666670	-54,0502790	C	0,5000000	0,0000000	-55,4726550
Ca	0,1666670	0,6666670	-54,0502790	O	0,8736990	0,0000000	-55,4726550
Ca	0,6666670	0,1666670	-54,0502790	O	0,0000000	0,1263010	-55,4726550
O	0,0000000	0,6263010	-55,4726550	O	0,1263010	0,8736990	-55,4726550
O	0,1263010	0,3736990	-55,4726550	C	0,0000000	0,0000000	-55,4726550
O	0,8736990	0,5000000	-55,4726550	O	0,3736990	0,5000000	-55,4726550
C	0,0000000	0,5000000	-55,4726550	O	0,5000000	0,6263010	-55,4726550
O	0,5000000	0,1263010	-55,4726550	O	0,6263010	0,3736990	-55,4726550
O	0,6263010	0,8736990	-55,4726550	C	0,5000000	0,5000000	-55,4726550
O	0,3736990	0,0000000	-55,4726550	Ca	0,3333330	0,3333330	-56,8950310
C	0,5000000	0,0000000	-55,4726550	Ca	0,8333330	0,8333330	-56,8950310
O	0,0000000	0,1263010	-55,4726550	Ca	0,3333330	0,8333330	-56,8950310
O	0,1263010	0,8736990	-55,4726550	Ca	0,8333330	0,3333330	-56,8950310
O	0,8736990	0,0000000	-55,4726550	O	0,0403660	0,2929680	-58,3174070
C	0,0000000	0,0000000	-55,4726550	C	0,1666670	0,1666670	-58,3174070
O	0,5000000	0,6263010	-55,4726550	O	0,1666670	0,0403660	-58,3174070
O	0,6263010	0,3736990	-55,4726550	O	0,2929680	0,1666670	-58,3174070
O	0,3736990	0,5000000	-55,4726550	O	0,5403660	0,7929680	-58,3174070
C	0,5000000	0,5000000	-55,4726550	C	0,6666670	0,6666670	-58,3174070
Ca	0,3333330	0,3333330	-56,8950310	O	0,6666670	0,5403660	-58,3174070
Ca	0,8333330	0,8333330	-56,8950310	O	0,7929680	0,6666670	-58,3174070
Ca	0,3333330	0,8333330	-56,8950310	O	0,0403660	0,7929680	-58,3174070
Ca	0,8333330	0,3333330	-56,8950310	C	0,1666670	0,6666670	-58,3174070
O	0,0403660	0,2929680	-58,3174070	O	0,1666670	0,5403660	-58,3174070
C	0,1666670	0,1666670	-58,3174070	O	0,2929680	0,6666670	-58,3174070
O	0,5403660	0,7929680	-58,3174070	O	0,5403660	0,2929680	-58,3174070
C	0,6666670	0,6666670	-58,3174070	C	0,6666670	0,1666670	-58,3174070
O	0,0403660	0,7929680	-58,3174070	O	0,6666670	0,0403660	-58,3174070
C	0,1666670	0,6666670	-58,3174070	O	0,7929680	0,1666670	-58,3174070
O	0,5403660	0,2929680	-58,3174070	Ca	0,0000000	0,5000000	-59,7397820
C	0,6666670	0,1666670	-58,3174070	Ca	0,5000000	0,0000000	-59,7397820
O	0,1666670	0,0403660	-58,3174070	Ca	0,0000000	0,0000000	-59,7397820
O	0,2929680	0,1666670	-58,3174070	Ca	0,5000000	0,5000000	-59,7397820
O	0,6666670	0,5403660	-58,3174070	O	0,3333330	0,4596340	-61,1621580
O	0,7929680	0,6666670	-58,3174070	O	0,4596340	0,2070320	-61,1621580
O	0,1666670	0,5403660	-58,3174070	O	0,2070320	0,3333330	-61,1621580
O	0,2929680	0,6666670	-58,3174070	C	0,3333330	0,3333330	-61,1621580
O	0,6666670	0,0403660	-58,3174070	O	0,8333330	0,9596340	-61,1621580
O	0,7929680	0,1666670	-58,3174070	O	0,9596340	0,7070320	-61,1621580
Ca	0,0000000	0,5000000	-59,7397820	O	0,7070320	0,8333330	-61,1621580
Ca	0,5000000	0,0000000	-59,7397820	C	0,8333330	0,8333330	-61,1621580
Ca	0,0000000	0,0000000	-59,7397820	O	0,3333330	0,9596340	-61,1621580
Ca	0,5000000	0,5000000	-59,7397820	O	0,4596340	0,7070320	-61,1621580
O	0,3333330	0,4596340	-61,1621580	O	0,2070320	0,8333330	-61,1621580

O	0,4596340	0,2070320	-61,1621580	C	0,3333330	0,8333330	-61,1621580
O	0,2070320	0,3333330	-61,1621580	O	0,8333330	0,4596340	-61,1621580
C	0,3333330	0,3333330	-61,1621580	O	0,9596340	0,2070320	-61,1621580
O	0,8333330	0,9596340	-61,1621580	O	0,7070320	0,3333330	-61,1621580
O	0,9596340	0,7070320	-61,1621580	C	0,8333330	0,3333330	-61,1621580
O	0,7070320	0,8333330	-61,1621580	Ca	0,1666670	0,1666670	-62,5845340
C	0,8333330	0,8333330	-61,1621580	Ca	0,6666670	0,6666670	-62,5845340
O	0,3333330	0,9596340	-61,1621580	Ca	0,1666670	0,6666670	-62,5845340
O	0,4596340	0,7070320	-61,1621580	Ca	0,6666670	0,1666670	-62,5845340
O	0,2070320	0,8333330	-61,1621580	O	0,8736990	0,6263010	-64,0069100
C	0,3333330	0,8333330	-61,1621580	O	0,0000000	0,3736990	-64,0069100
O	0,8333330	0,4596340	-61,1621580	O	0,1263010	0,5000000	-64,0069100
O	0,9596340	0,2070320	-61,1621580	C	0,0000000	0,5000000	-64,0069100
O	0,7070320	0,3333330	-61,1621580	O	0,3736990	0,1263010	-64,0069100
C	0,8333330	0,3333330	-61,1621580	O	0,5000000	0,8736990	-64,0069100
Ca	0,1666670	0,1666670	-62,5845340	O	0,6263010	0,0000000	-64,0069100
Ca	0,6666670	0,6666670	-62,5845340	C	0,5000000	0,0000000	-64,0069100
Ca	0,1666670	0,6666670	-62,5845340	O	0,8736990	0,1263010	-64,0069100
Ca	0,6666670	0,1666670	-62,5845340	O	0,0000000	0,8736990	-64,0069100
O	0,5000000	0,8736990	-64,0069100	O	0,1263010	0,0000000	-64,0069100
O	0,3736990	0,1263010	-64,0069100	C	0,0000000	0,0000000	-64,0069100
O	0,6263010	0,0000000	-64,0069100	O	0,3736990	0,6263010	-64,0069100
C	0,5000000	0,0000000	-64,0069100	O	0,5000000	0,3736990	-64,0069100
O	0,0000000	0,8736990	-64,0069100	O	0,6263010	0,5000000	-64,0069100
O	0,8736990	0,1263010	-64,0069100	C	0,5000000	0,5000000	-64,0069100
O	0,1263010	0,0000000	-64,0069100	Ca	0,8333330	0,8333330	-65,4292850
C	0,0000000	0,0000000	-64,0069100	Ca	0,3333330	0,8333330	-65,4292850
O	0,5000000	0,3736990	-64,0069100	Ca	0,8333330	0,3333330	-65,4292850
O	0,3736990	0,6263010	-64,0069100	O	0,6666670	0,7929680	-66,8516610
O	0,6263010	0,5000000	-64,0069100	O	0,7929680	0,5403660	-66,8516610
C	0,5000000	0,5000000	-64,0069100	O	0,5403660	0,6666670	-66,8516610
Ca	0,3333330	0,8333330	-65,4292850	C	0,6666670	0,6666670	-66,8516610