

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

2	0	0	428	434	3	1	19	0	75	75	2	2	8	1	344	349	1	-5	19	1	21	31	-16	2	6	2	445	441	1
4	0	0	786	786	6	3	19	0	56	56	3	4	8	1	257	262	1	-3	19	1	134	136	1	4	6	2	467	460	1
6	0	0	398	397	3	5	19	0	9	3	-9	6	8	1	339	341	2	-1	19	1	25	6	-5	6	6	2	320	317	1
8	0	0	219	220	3	0	20	0	489	485	3	8	8	1	245	241	2	1	19	1	49	55	3	8	6	2	266	263	2
1	1	0	0	4	-1	2	20	0	252	254	1	-9	9	1	19	18	-19	3	19	1	30	26	-8	-9	7	2	89	97	3
3	1	0	68	62	2	4	20	0	276	275	1	-7	9	1	0	2	-1	5	19	1	0	28	-1	-7	7	2	45	39	4
5	1	0	39	35	3	6	20	0	150	159	6	-5	9	1	46	35	4	-6	20	1	171	170	4	-5	7	2	144	146	1
7	1	0	37	34	-6	1	21	0	51	55	3	-3	9	1	190	189	1	-4	20	1	67	75	5	-3	7	2	327	323	1
9	1	0	24	17	-23	3	21	0	55	57	-7	-1	9	1	219	210	1	-2	20	1	205	200	1	-1	7	2	30	38	2
2	2	0	1084	1117	9	5	21	0	43	14	-14	1	9	1	174	163	1	0	20	1	132	134	1	1	7	2	36	27	1
4	2	0	190	185	1	0	22	0	16	4	-16	3	9	1	122	132	1	2	20	1	47	54	4	3	7	2	115	110	1
6	2	0	142	143	1	2	22	0	154	155	2	5	9	1	61	55	2	4	20	1	178	176	3	5	7	2	150	149	1
8	2	0	166	171	2	4	22	0	0	17	-1	7	9	1	32	43	-6	-5	21	1	42	37	-11	7	7	2	22	13	-17
1	3	0	197	201	1	1	23	0	26	4	-26	-8	10	1	314	312	2	-3	21	1	17	27	-16	-10	8	2	159	160	4
3	3	0	332	324	2	-9	1	1	12	16	-12	-6	10	1	441	436	2	-1	21	1	31	35	-6	-8	8	2	259	259	1
5	3	0	33	37	2	-7	1	1	41	41	-7	-4	10	1	661	657	2	1	21	1	51	53	-5	-6	8	2	158	160	2
7	3	0	125	126	1	-5	1	1	144	140	1	-2	10	1	902	899	2	3	21	1	86	92	4	-4	8	2	714	717	2
9	3	0	28	9	-15	-3	1	1	608	593	3	0	10	1	326	334	1	5	21	1	33	6	-20	-2	8	2	399	406	1
0	4	0	579	590	4	-1	1	1	112	110	1	2	10	1	566	571	5	-4	22	1	239	241	3	0	8	2	525	527	2
2	4	0	185	157	1	1	1	1	311	308	1	4	10	1	349	345	1	-2	22	1	283	283	2	2	8	2	548	538	1
4	4	0	428	437	1	3	1	1	62	61	1	6	10	1	410	402	2	0	22	1	302	296	1	4	8	2	100	99	1
6	4	0	315	317	1	5	1	1	44	46	2	8	10	1	321	313	2	4	22	1	259	254	3	6	8	2	354	343	2
8	4	0	86	98	3	7	1	1	151	152	2	-9	11	1	36	30	-8	-1	23	1	0	19	-1	8	8	2	117	120	3
1	5	0	135	134	1	9	1	1	23	26	-23	-7	11	1	79	78	-12	3	23	1	91	96	6	-9	9	2	31	33	-8
3	5	0	79	71	1	-10	2	1	246	251	5	-5	11	1	85	83	2	-10	0	2	256	260	3	-7	9	2	189	189	1
5	5	0	162	167	1	-8	2	1	214	219	2	-3	11	1	115	118	1	-8	0	2	523	519	4	-5	9	2	82	86	1
7	5	0	30	23	-5	-6	2	1	621	620	3	-1	11	1	416	412	1	-6	0	2	632	624	5	-3	9	2	19	7	-3
9	5	0	20	12	-19	-4	2	1	181	186	1	1	11	1	229	234	1	-4	0	2	430	437	4	-1	9	2	106	107	1
0	6	0	178	211	1	-2	2	1	1161	1201	9	3	11	1	188	183	1	-2	0	2	938	958	7	1	9	2	19	10	-2
2	6	0	1018	1036	4	0	2	1	1125	1117	6	5	11	1	49	51	4	0	0	2	373	406	3	3	9	2	266	267	1
4	6	0	597	594	2	2	2	1	515	535	3	7	11	1	18	14	-17	2	0	2	1118	1109	6	5	9	2	36	42	3
6	6	0	506	504	4	4	2	1	788	786	2	-8	12	1	59	62	5	4	0	2	668	668	4	7	9	2	31	37	-8
8	6	0	376	367	2	6	2	1	225	228	1	-6	12	1	184	187	1	6	0	2	378	377	2	-8	10	2	91	95	3
1	7	0	205	199	1	8	2	1	268	265	4	-4	12	1	354	355	1	8	0	2	275	274	3	-6	10	2	45	45	4
3	7	0	299	292	1	-9	3	1	56	65	5	-2	12	1	169	174	1	-9	1	2	61	63	6	-4	10	2	189	189	1
5	7	0	222	230	1	-7	3	1	34	32	-5	0	12	1	237	238	1	-7	1	2	52	52	4	-2	10	2	42	36	1
7	7	0	50	52	4	-5	3	1	248	246	1	2	12	1	27	21	-3	-5	1	2	18	14	-6	0	10	2	114	111	1
9	7	0	12	14	-11	-3	3	1	110	110	7	4	12	1	116	110	1	-3	1	2	458	457	2	2	10	2	226	231	1
0	8	0	436	441	2	-1	3	1	0	22	-1	6	12	1	186	184	3	-1	1	2	566	557	4	4	10	2	20	30	-6
2	8	0	460	457	1	1	3	1	188	172	1	8	12	1	94	97	3	1	1	2	585	565	4	6	10	2	114	114	2
4	8	0	454	450	1	3	3	1	430	413	1	-7	13	1	16	15	-16	3	1	2	168	169	1	-9	11	2	39	34	-7
6	8	0	320	315	1	5	3	1	127	134	1	-5	13	1	41	41	-4	5	1	2	21	19	-5	-7	11	2	90	94	3
8	8	0	253	255	1	7	3	1	19	18	-17	-3	13	1	8	16	-8	7	1	2	50	54	-5	-5	11	2	32	32	-4
1	9	0	475	470	1	9	3	1	72	69	5	-1	13	1	20	6	-4	-10	2	2	193	197	3	-3	11	2	146	150	1
3	9	0	176	181	1	-10	4	1	251	249	2	1	13	1	131	130	1	-8	2	2	272	272	2	-1	11	2	109	112	1
5	9	0	123	127	1	-8	4	1	382	384	2	3	13	1	20	8	-5	-6	2	2	403	407	2	1	11	2	24	15	-2
7	9	0	120	125	2	-6	4	1	319	317	1	5	13	1	40	48	-6	-4	2	2	201	212	3	3	11	2	128	135	1
9	9	0	48	48	-6	-4	4	1	767	771	3	7	13	1	0	7	-1	-2	2	2	70	91	1	5	11	2	38	50	-4

0	10	0	184	184	1	-2	4	1	393	412	3	-8	14	1	221	217	2	0	2	2	538	547	2	7	11	2	28	7	-10
2	10	0	164	171	1	0	4	1	1346	1362	8	-6	14	1	87	95	3	2	2	2	415	412	1	-8	12	2	301	301	2
4	10	0	99	101	1	2	4	1	1008	991	4	-4	14	1	227	229	1	4	2	2	509	505	1	-6	12	2	282	287	1
6	10	0	56	56	-7	4	4	1	495	489	1	-2	14	1	202	204	1	6	2	2	215	218	1	-4	12	2	596	592	2
8	10	0	72	75	4	6	4	1	443	433	2	0	14	1	330	330	1	8	2	2	116	120	3	-2	12	2	419	418	1
1	11	0	214	215	1	8	4	1	208	210	2	2	14	1	498	497	1	-9	3	2	34	39	-9	0	12	2	586	585	2
3	11	0	25	18	-3	-9	5	1	109	108	5	4	14	1	158	165	2	-7	3	2	73	76	2	2	12	2	513	510	1
5	11	0	62	62	2	-7	5	1	22	10	-7	6	14	1	200	200	2	-5	3	2	153	149	1	4	12	2	275	272	1
7	11	0	76	84	3	-5	5	1	91	96	1	-7	15	1	28	23	-14	-3	3	2	166	161	1	6	12	2	348	341	2
0	12	0	486	483	2	-3	5	1	126	128	1	-5	15	1	116	113	6	-1	3	2	247	232	1	-9	13	2	59	70	5
2	12	0	572	574	2	-1	5	1	378	375	3	-3	15	1	36	37	2	1	3	2	239	232	1	-7	13	2	53	54	-5
4	12	0	440	439	1	1	5	1	880	854	3	-1	15	1	170	172	1	3	3	2	105	107	1	-5	13	2	32	42	-5
6	12	0	323	322	2	3	5	1	32	25	2	1	15	1	116	117	2	5	3	2	42	41	2	-3	13	2	241	244	1
8	12	0	287	286	2	5	5	1	57	57	1	3	15	1	15	6	-14	7	3	2	10	21	-9	-1	13	2	163	167	1
1	13	0	15	4	-4	7	5	1	20	9	-13	5	15	1	34	42	-6	-10	4	2	55	46	-7	1	13	2	23	25	-3
3	13	0	112	115	1	9	5	1	44	41	-9	7	15	1	0	10	-1	-8	4	2	56	67	4	3	13	2	32	21	-4
5	13	0	265	260	1	-8	6	1	152	151	1	-8	16	1	236	237	2	-6	4	2	237	241	1	5	13	2	50	59	-5
7	13	0	13	2	-13	-6	6	1	35	42	-5	-6	16	1	309	302	7	-4	4	2	187	188	2	7	13	2	31	34	-9
0	14	0	312	322	1	-4	6	1	0	8	-1	-4	16	1	318	318	1	-2	4	2	1004	970	4	-8	14	2	172	175	2
2	14	0	437	431	1	-2	6	1	167	170	1	-2	16	1	363	365	1	0	4	2	310	322	1	-6	14	2	349	350	3
4	14	0	327	325	1	0	6	1	16	24	-3	0	16	1	586	583	2	2	4	2	122	130	1	-4	14	2	277	282	1
6	14	0	319	320	2	2	6	1	612	590	3	2	16	1	425	428	1	4	4	2	173	176	1	-2	14	2	512	510	1
8	14	0	184	187	2	4	6	1	55	48	2	4	16	1	421	411	2	6	4	2	30	38	-6	0	14	2	471	471	1
1	15	0	71	75	1	6	6	1	69	70	3	6	16	1	244	242	3	8	4	2	174	173	4	2	14	2	233	234	1
3	15	0	112	112	1	8	6	1	25	20	-11	-7	17	1	31	15	-12	-9	5	2	95	93	5	4	14	2	376	369	3
5	15	0	47	51	4	-9	7	1	0	6	-1	-5	17	1	102	109	3	-7	5	2	28	16	-5	6	14	2	128	133	2
7	15	0	85	95	5	-7	7	1	32	37	-5	-3	17	1	128	129	1	-5	5	2	19	10	-5	-7	15	2	23	18	-22
0	16	0	92	94	2	-5	7	1	18	12	-6	-1	17	1	15	4	-14	-3	5	2	51	41	3	-5	15	2	99	99	3
2	16	0	187	188	1	-3	7	1	267	267	1	1	17	1	67	67	2	-1	5	2	656	636	2	-3	15	2	33	39	-3
4	16	0	64	62	2	-1	7	1	468	462	1	3	17	1	43	51	4	1	5	2	327	318	1	-1	15	2	249	248	1
6	16	0	43	41	-7	1	7	1	16	12	-2	5	17	1	56	62	4	3	5	2	67	75	1	1	15	2	46	48	2
1	17	0	77	78	3	3	7	1	176	179	1	-6	18	1	195	200	2	5	5	2	78	76	1	3	15	2	20	6	-8
3	17	0	32	37	-6	5	7	1	67	72	4	-4	18	1	35	42	-6	7	5	2	25	19	-13	5	15	2	21	5	-14
5	17	0	22	6	-12	7	7	1	84	86	2	-2	18	1	251	254	1	-10	6	2	251	254	2	-8	16	2	25	31	-24
7	17	0	55	62	-13	-8	8	1	237	238	3	0	18	1	225	229	1	-8	6	2	261	265	1	-6	16	2	21	26	-20
0	18	0	502	495	3	-6	8	1	317	319	2	2	18	1	188	188	1	-6	6	2	500	502	2	-4	16	2	8	20	-7
2	18	0	310	312	1	-4	8	1	699	697	2	4	18	1	255	251	1	-4	6	2	722	715	2	-2	16	2	123	128	1
4	18	0	258	258	1	-2	8	1	583	584	2	6	18	1	29	44	-22	-2	6	2	951	958	3	0	16	2	71	73	1
6	18	0	211	210	2	0	8	1	424	436	1	-7	19	1	42	44	-9	0	6	2	1032	1029	3	2	16	2	29	28	-5

Table 3a. Observed and calculated structure factors for gypsum Sp.G: C2/c in air

Page 2

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

4	16	2	68	71	4	1	7	3	76	78	1	2	18	3	145	146	2	-6	10	4	170	174	2	-5	5	5	99	102	2
6	16	2	38	43	-10	3	7	3	118	124	1	4	18	3	147	153	4	-4	10	4	61	52	2	-3	5	5	33	32	3
-7	17	2	66	77	5	5	7	3	9	6	-8	-7	19	3	78	84	-8	-2	10	4	148	144	1	-1	5	5	277	274	1
-5	17	2	26	26	-7	7	7	3	65	72	5	-5	19	3	74	80	7	0	10	4	100	103	1	1	5	5	101	105	1
-3	17	2	114	113	1	-10	8	3	213	217	4	-3	19	3	56	59	5	2	10	4	25	18	-5	3	5	5	19	21	-12
-1	17	2	66	62	2	-8	8	3	188	189	2	-1	19	3	115	114	2	4	10	4	116	122	11	-8	6	5	22	6	-20
1	17	2	101	100	1	-6	8	3	245	245	2	1	19	3	120	125	2	-9	11	4	47	36	-12	-6	6	5	94	97	2
3	17	2	108	110	1	-4	8	3	363	360	1	3	19	3	57	60	-8	-7	11	4	16	17	-16	-4	6	5	45	56	2
5	17	2	17	11	-16	-2	8	3	569	556	2	-6	20	3	70	78	-7	-5	11	4	87	90	2	-2	6	5	328	335	1

-6	18	2	283	283	4	0	8	3	659	655	2	-4	20	3	116	127	5	-3	11	4	133	133	1	0	6	5	24	23	-4
-4	18	2	221	218	2	2	8	3	425	426	1	-2	20	3	151	155	2	-1	11	4	65	66	1	2	6	5	65	61	2
-2	18	2	311	303	1	4	8	3	223	224	1	0	20	3	146	148	2	1	11	4	60	66	2	4	6	5	27	31	-19
0	18	2	247	254	1	6	8	3	185	181	2	2	20	3	103	109	5	3	11	4	68	64	6	-9	7	5	26	35	-26
2	18	2	323	316	2	-9	9	3	31	5	-14	4	20	3	82	83	6	-8	12	4	233	231	2	-7	7	5	80	84	4
4	18	2	324	317	2	-7	9	3	0	8	-1	-3	21	3	22	8	-21	-6	12	4	462	456	3	-5	7	5	69	74	3
-7	19	2	22	33	-22	-5	9	3	19	20	-8	-1	21	3	40	39	-6	-4	12	4	316	312	1	-3	7	5	155	153	2
-5	19	2	52	53	5	-3	9	3	46	58	1	3	21	3	0	15	-1	-2	12	4	468	461	1	-1	7	5	41	38	2
-3	19	2	25	13	-8	-1	9	3	79	83	1	-6	0	4	574	572	7	0	12	4	441	437	1	1	7	5	97	98	1
-1	19	2	30	36	-5	1	9	3	40	34	2	-4	0	4	804	797	5	2	12	4	295	294	1	3	7	5	69	71	5
1	19	2	42	41	4	3	9	3	28	20	-5	-2	0	4	947	942	4	4	12	4	348	352	3	-10	8	5	219	216	4
3	19	2	80	83	4	5	9	3	12	16	-11	0	0	4	307	313	1	-9	13	4	66	83	-7	-8	8	5	310	306	2
5	19	2	16	26	-16	7	9	3	0	2	-1	2	0	4	498	496	2	-7	13	4	29	32	-12	-6	8	5	378	371	2
-6	20	2	260	257	2	-8	10	3	216	217	2	4	0	4	309	316	3	-5	13	4	102	107	2	-4	8	5	227	221	1
-4	20	2	211	209	2	-6	10	3	333	333	5	-7	1	4	46	51	-10	-3	13	4	31	35	-4	-2	8	5	269	266	1
-2	20	2	272	273	1	-4	10	3	567	569	2	-5	1	4	58	56	2	-1	13	4	26	29	-4	0	8	5	297	300	1
0	20	2	219	217	1	-2	10	3	421	422	1	-3	1	4	217	216	1	1	13	4	105	108	1	2	8	5	274	274	1
2	20	2	342	334	2	0	10	3	1003	1000	3	-1	1	4	371	369	1	3	13	4	129	129	3	4	8	5	287	291	4
4	20	2	265	254	3	2	10	3	339	335	1	1	1	4	182	185	1	-8	14	4	288	288	3	-9	9	5	0	11	-1
-5	21	2	22	31	-21	4	10	3	379	373	2	3	1	4	115	118	1	-6	14	4	185	185	2	-7	9	5	31	42	-9
-3	21	2	90	89	4	6	10	3	239	233	2	-6	2	4	330	333	2	-4	14	4	394	393	1	-5	9	5	23	22	-8
-1	21	2	52	58	3	-9	11	3	33	29	-18	-4	2	4	640	635	2	-2	14	4	249	251	1	-3	9	5	93	91	1
1	21	2	148	152	3	-7	11	3	41	49	-7	-2	2	4	327	333	1	0	14	4	331	331	1	-1	9	5	89	96	2
3	21	2	9	6	-8	-5	11	3	21	22	-8	0	2	4	287	283	1	2	14	4	365	359	2	1	9	5	41	39	3
-2	22	2	54	63	-6	-3	11	3	84	92	1	2	2	4	157	157	1	-7	15	4	13	4	-13	3	9	5	74	73	4
0	22	2	60	66	4	-1	11	3	67	66	1	-7	3	4	22	9	-15	-5	15	4	37	31	-6	-8	10	5	405	402	3
3	23	2	0	18	-1	1	11	3	45	41	2	-5	3	4	41	37	3	-3	15	4	28	24	-6	-6	10	5	435	431	3
-5	1	3	80	78	1	3	11	3	51	45	4	-3	3	4	102	98	1	-1	15	4	19	19	-8	-4	10	5	293	292	1
-3	1	3	94	98	1	5	11	3	13	15	-13	-1	3	4	149	149	1	1	15	4	204	200	1	-2	10	5	436	436	2
-1	1	3	493	482	1	-8	12	3	108	111	3	1	3	4	97	95	1	3	15	4	34	5	-13	0	10	5	280	280	1
1	1	3	363	356	1	-6	12	3	31	35	-11	3	3	4	44	44	3	-8	16	4	44	33	-14	2	10	5	446	438	2
3	1	3	114	117	1	-4	12	3	61	56	6	5	3	4	48	57	-27	-6	16	4	36	47	-11	-9	11	5	76	89	-8
5	1	3	36	41	-4	-2	12	3	448	450	1	-8	4	4	252	252	3	-4	16	4	86	83	3	-7	11	5	14	13	-14
7	1	3	53	66	-6	0	12	3	125	128	1	-6	4	4	28	8	-7	-2	16	4	16	5	-16	-5	11	5	23	5	-11
-6	2	3	444	449	3	2	12	3	303	299	1	-4	4	4	183	171	2	0	16	4	38	41	-4	-3	11	5	145	149	1
-4	2	3	610	603	2	4	12	3	66	60	-8	-2	4	4	216	214	1	2	16	4	59	64	4	-1	11	5	109	111	2
-2	2	3	716	713	2	6	12	3	8	14	-8	0	4	4	233	230	1	-7	17	4	26	5	-26	1	11	5	188	184	2
0	2	3	485	488	1	-9	13	3	0	3	-1	2	4	4	418	421	1	-5	17	4	32	19	-10	3	11	5	29	19	-16
2	2	3	531	530	1	-7	13	3	77	79	4	4	4	4	76	83	6	-3	17	4	117	118	3	-8	12	5	151	149	4
4	2	3	398	397	2	-5	13	3	26	22	-7	-9	5	4	78	96	6	-1	17	4	127	128	2	-6	12	5	166	163	2
6	2	3	264	264	1	-3	13	3	98	102	1	-7	5	4	26	30	-9	1	17	4	29	26	-7	-4	12	5	89	95	2
-7	3	3	35	32	-5	-1	13	3	26	22	-4	-5	5	4	141	146	1	-6	18	4	233	230	3	-2	12	5	7	4	-6
-5	3	3	417	416	2	1	13	3	34	33	3	-3	5	4	101	97	1	-4	18	4	350	346	3	0	12	5	170	172	1
-3	3	3	368	359	1	3	13	3	62	66	3	-1	5	4	185	193	1	-2	18	4	324	320	2	2	12	5	118	123	2
-1	3	3	156	145	1	5	13	3	0	16	-1	1	5	4	242	250	1	0	18	4	202	205	2	-7	13	5	27	20	-17
1	3	3	4	7	-4	-8	14	3	168	175	4	3	5	4	24	13	-4	-7	19	4	52	45	-11	-5	13	5	48	51	-6
3	3	3	169	176	1	-6	14	3	297	295	3	5	5	4	27	14	-26	-3	19	4	62	58	-8	-3	13	5	22	18	-7
5	3	3	219	218	1	-4	14	3	304	303	1	-8	6	4	389	386	2	-1	19	4	0	8	-1	-1	13	5	88	91	2
7	3	3	41	29	-8	-2	14	3	146	146	1	-6	6	4	383	380	2	1	19	4	36	30	-10	1	13	5	22	25	-11
-8	4	3	393	396	3	0	14	3	217	220	1	-4	6	4	538	537	2	-6	20	4	243	243	4	-8	14	5	86	82	7
-6	4	3	571	573	3	2	14	3	148	151	2	-2	6	4	461	458	1	-2	20	4	315	307	3	-6	14	5	227	231	2
-4	4	3	579	579	2	4	14	3	251	247	2	0	6	4	727	727	2	-7	1	5	171	167	1	-4	14	5	198	200	1
-2	4	3	828	829	2	6	14	3	167	174	3	2	6	4	524	516	1	-5	1	5	76	80	1	-2	14	5	351	351	3
0	4	3	324	332	1	-7	15	3	43	34	-10	-9	7	4	17	14	-16	-3	1	5	88	89	1	0	14	5	193	198	1

2	4	3	634	623	1	-5	15	3	83	89	4	-7	7	4	20	3	-19	-1	1	5	48	53	2	2	14	5	100	106	3
4	4	3	404	399	1	-3	15	3	89	94	1	-5	7	4	192	198	1	1	1	5	15	5	-8	-7	15	5	19	4	-18
6	4	3	336	331	2	-1	15	3	57	55	2	-3	7	4	129	136	1	3	1	5	144	145	2	-5	15	5	32	43	-10
-7	5	3	112	115	2	1	15	3	24	29	-5	-1	7	4	24	25	-3	-8	2	5	345	342	4	-3	15	5	33	15	-9
-5	5	3	137	136	1	3	15	3	88	90	3	1	7	4	23	16	-5	-6	2	5	257	254	1	-1	15	5	82	86	2
-3	5	3	58	65	1	5	15	3	51	59	-9	3	7	4	97	103	2	-4	2	5	675	667	2	1	15	5	89	90	3
-1	5	3	117	108	1	-8	16	3	318	312	3	5	7	4	45	70	-19	-2	2	5	405	403	1	-6	16	5	276	274	2
1	5	3	79	85	1	-6	16	3	378	373	3	-10	8	4	239	236	3	0	2	5	430	428	1	-4	16	5	418	412	2
3	5	3	86	84	1	-4	16	3	362	355	2	-8	8	4	162	164	2	2	2	5	431	425	1	-2	16	5	355	349	2
5	5	3	79	79	2	-2	16	3	453	453	1	-6	8	4	436	435	3	4	2	5	134	144	4	0	16	5	341	338	2
7	5	3	36	52	-8	0	16	3	216	216	1	-4	8	4	107	113	1	-7	3	5	25	25	-11	-7	17	5	45	60	-13
-8	6	3	34	35	-7	2	16	3	407	403	1	-2	8	4	502	507	1	-5	3	5	80	76	1	-5	17	5	71	76	5
-6	6	3	212	218	1	4	16	3	304	295	2	0	8	4	453	450	1	-3	3	5	254	258	1	-3	17	5	53	57	-6
-4	6	3	290	300	1	-7	17	3	46	35	-11	2	8	4	235	234	1	-1	3	5	65	68	2	-1	17	5	57	57	3
-2	6	3	327	316	1	-5	17	3	36	44	-8	4	8	4	342	354	14	1	3	5	48	50	2	-6	18	5	70	83	-8
0	6	3	316	315	1	-3	17	3	87	96	3	-9	9	4	18	7	-18	3	3	5	28	12	-6	-4	18	5	244	245	5
2	6	3	141	145	1	-1	17	3	79	86	2	-7	9	4	66	70	-8	-8	4	5	252	254	2	-2	18	5	153	156	3
4	6	3	168	163	1	1	17	3	92	91	2	-5	9	4	75	75	4	-6	4	5	480	478	3	-3	19	5	34	13	-33
6	6	3	126	131	2	3	17	3	70	74	3	-3	9	4	251	253	1	-4	4	5	481	480	2	-8	0	6	226	228	3
-9	7	3	24	8	-23	5	17	3	20	25	-20	-1	9	4	27	18	-3	-2	4	5	586	582	2	-6	0	6	327	329	2
-7	7	3	140	141	1	-6	18	3	171	174	3	1	9	4	89	91	1	0	4	5	575	568	2	-4	0	6	573	571	4
-5	7	3	23	24	-5	-4	18	3	199	201	3	3	9	4	28	30	-8	2	4	5	245	245	1	-2	0	6	340	345	2
-3	7	3	147	152	1	-2	18	3	125	126	2	5	9	4	33	20	-13	-9	5	5	70	72	6	0	0	6	733	722	4
-1	7	3	107	112	1	0	18	3	155	159	1	-8	10	4	40	40	-14	-7	5	5	0	5	-1	2	0	6	240	243	2

Table 3a. Observed and calculated structure factors for gypsum Sp.G: C2/c in air

Page 3

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

-7	1	6	31	37	-7	-6	8	6	281	280	2	-5	17	6	0	7	-1	-5	9	7	35	28	-11	-6	6	8	318	312	3
-5	1	6	15	16	-14	-4	8	6	301	302	1	-6	18	6	150	166	5	-3	9	7	60	65	4	-4	6	8	359	356	2
-3	1	6	28	25	-4	-2	8	6	240	244	1	-7	1	7	39	60	-10	-1	9	7	63	70	4	-2	6	8	311	308	2
-1	1	6	22	7	-6	0	8	6	223	225	1	-5	1	7	71	77	3	-8	10	7	280	282	3	-7	7	8	0	20	-1
1	1	6	11	12	-11	2	8	6	217	218	2	-3	1	7	125	126	3	-6	10	7	347	348	3	-5	7	8	55	59	-7
3	1	6	0	15	-1	-9	9	6	47	45	-11	-1	1	7	35	30	-6	-4	10	7	390	385	2	-3	7	8	84	85	3
-8	2	6	150	148	5	-7	9	6	135	138	3	1	1	7	33	39	-14	-2	10	7	380	376	2	-8	8	8	200	193	3
-6	2	6	143	145	4	-5	9	6	82	89	6	-8	2	7	200	196	2	0	10	7	185	185	2	-6	8	8	135	139	4
-4	2	6	180	185	1	-3	9	6	42	42	4	-6	2	7	419	414	4	-7	11	7	56	60	-9	-4	8	8	313	309	2
-2	2	6	430	429	1	-1	9	6	122	125	1	-4	2	7	200	204	2	-5	11	7	75	77	7	-2	8	8	181	183	3
0	2	6	242	245	1	1	9	6	136	140	2	-2	2	7	361	359	2	-3	11	7	68	67	4	-7	9	8	117	115	5
2	2	6	237	241	1	-8	10	6	46	61	-9	0	2	7	321	326	1	-1	11	7	115	125	3	-5	9	8	51	37	-9
-7	3	6	120	122	4	-6	10	6	55	62	-6	-7	3	7	22	2	-21	-8	12	7	46	72	-11	-3	9	8	18	10	-17
-5	3	6	29	23	-6	-4	10	6	94	93	2	-5	3	7	120	125	3	-6	12	7	153	150	4	-1	9	8	22	6	-21
-3	3	6	94	92	1	-2	10	6	108	111	2	-3	3	7	22	15	-8	-4	12	7	211	211	2	-6	10	8	13	16	-13
-1	3	6	26	27	-4	0	10	6	77	81	3	-1	3	7	23	37	-11	-2	12	7	61	68	5	-4	10	8	70	72	-8
1	3	6	27	32	-6	2	10	6	57	52	4	1	3	7	32	22	-6	-7	13	7	0	17	-1	-2	10	8	41	47	-12
3	3	6	75	80	4	-9	11	6	9	5	-9	-8	4	7	340	337	3	-5	13	7	0	14	-1	-7	11	8	55	56	-11
-8	4	6	139	139	3	-7	11	6	93	89	4	-6	4	7	248	245	2	-3	13	7	32	6	-8	-5	11	8	14	30	-13
-6	4	6	272	264	2	-5	11	6	28	38	-11	-4	4	7	396	390	1	-6	14	7	55	59	-10	-3	11	8	37	49	-12
-4	4	6	257	256	1	-3	11	6	19	3	-13	-2	4	7	279	281	1	-4	14	7	147	151	4	-6	12	8	174	179	4
-2	4	6	9	9	-9	-1	11	6	99	99	2	0	4	7	340	339	1	-5	15	7	82	75	8	-4	12	8	295	289	3
0	4	6	190	196	1	1	11	6	32	40	-8	-9	5	7	78	88	7	-6	16	7	198	209	4	-5	13	8	11	11	-11
2	4	6	50	54	3	-8	12	6	290	289	3	-7	5	7	23	19	-22	-6	0	8	359	357	3	-4	14	8	156	162	4

-9	5	6	31	26	-18	-6	12	6	302	302	2	-5	5	7	68	68	6	-2	0	8	324	327	3	-7	1	9	84	85	7
-7	5	6	34	27	-7	-4	12	6	350	346	2	-3	5	7	62	63	2	-7	1	8	32	15	-16	-5	1	9	39	36	-8
-5	5	6	105	107	2	-2	12	6	371	366	2	-1	5	7	41	45	-5	-5	1	8	21	10	-20	-6	2	9	230	230	2
-3	5	6	42	45	3	0	12	6	254	256	2	1	5	7	148	148	3	-3	1	8	94	97	3	-4	2	9	227	229	3
-1	5	6	45	51	2	-7	13	6	27	19	-27	-8	6	7	115	117	5	-1	1	8	65	67	4	-7	3	9	19	6	-19
1	5	6	30	13	-5	-5	13	6	184	184	2	-6	6	7	15	21	-15	-8	2	8	192	203	3	-5	3	9	106	109	4
3	5	6	17	12	-16	-3	13	6	66	72	3	-4	6	7	24	12	-9	-6	2	8	203	203	2	-3	3	9	69	69	-7
-8	6	6	402	397	3	-1	13	6	29	19	-8	-2	6	7	79	80	2	-4	2	8	128	123	3	-6	4	9	289	284	3
-6	6	6	479	469	5	1	13	6	16	37	-16	0	6	7	38	42	-4	-2	2	8	92	100	4	-4	4	9	224	229	3
-4	6	6	387	381	1	-8	14	6	202	201	4	-9	7	7	0	8	-1	-7	3	8	28	34	-22	-7	5	9	57	69	-10
-2	6	6	484	482	2	-6	14	6	288	286	3	-7	7	7	0	7	-1	-5	3	8	54	60	5	-5	5	9	39	45	-12
0	6	6	230	232	1	-4	14	6	275	274	1	-5	7	7	32	12	-9	-3	3	8	37	46	-8	-3	5	9	21	3	-21
2	6	6	369	363	1	-2	14	6	273	274	2	-3	7	7	78	81	2	-1	3	8	25	29	-12	-6	6	9	94	89	6
-9	7	6	34	26	-15	0	14	6	189	187	2	-1	7	7	112	113	2	-8	4	8	51	47	-10	-4	6	9	85	97	7
-7	7	6	29	29	-11	-7	15	6	112	111	5	1	7	7	16	18	-15	-6	4	8	164	164	2	-2	6	9	56	49	-10
-5	7	6	150	145	1	-5	15	6	34	37	-12	-8	8	7	218	220	3	-4	4	8	112	116	5	-5	7	9	26	10	-26
-3	7	6	134	137	1	-3	15	6	29	31	-13	-6	8	7	264	261	2	-2	4	8	221	224	2	-3	7	9	24	26	-24
-1	7	6	78	81	2	-1	15	6	13	10	-13	-4	8	7	361	359	2	-7	5	8	0	5	-1	-4	8	9	169	173	4
1	7	6	33	29	-5	-6	16	6	0	35	-1	-2	8	7	259	259	2	-5	5	8	32	25	-32	-3	9	9	19	22	-18
3	7	6	76	78	-12	-4	16	6	53	55	5	0	8	7	171	168	2	-3	5	8	26	3	-9						
-8	8	6	286	285	2	-2	16	6	107	111	4	-7	9	7	26	19	-20	-8	6	8	217	211	3						

Table 3b. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 0.25 GPa (Sp.G. C2/c)
Page 1

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

2	0	0	399	506	3	-6	0	2	645	613	13	-3	1	3	101	97	2	-8	2	4	206	211	9	2	4	5	240	273	6
5	1	0	46	61	10	-4	0	2	448	436	5	1	1	3	353	364	2	-6	2	4	347	303	5	-1	5	5	291	300	38
7	1	0	35	13	18	-2	0	2	959	987	4	5	1	3	25	35	25	0	2	4	281	283	3	-2	6	5	331	327	7
2	2	0	1134	1076	6	0	0	2	361	402	2	0	2	3	512	505	2	4	2	4	153	181	4	-7	7	5	90	82	33
5	3	0	26	39	16	2	0	2	1078	1158	5	2	2	3	535	558	5	-3	3	4	122	92	6	-7	1	6	18	19	18
7	3	0	120	148	6	-7	1	2	52	37	9	-7	3	3	21	72	20	1	3	4	93	108	10	-6	2	6	166	145	13
6	6	0	529	547	91	-1	1	2	580	519	2	-3	3	3	401	372	4	3	3	4	46	43	26	-7	3	6	139	145	28
-1	1	1	113	125	1	3	1	2	169	186	2	5	3	3	214	257	5	-8	4	4	279	271	9	-1	3	6	32	33	32
1	1	1	301	303	1	-6	2	2	415	425	3	-8	4	3	426	406	6	-2	4	4	245	226	5	-6	4	6	279	282	8
3	1	1	71	61	2	-4	2	2	210	208	2	-4	4	3	618	548	10	-5	5	4	147	146	5	-4	4	6	281	272	11
5	1	1	15	43	14	-2	2	2	70	75	1	-2	4	3	847	833	5	-3	5	4	111	126	7	-2	6	6	534	505	13
7	1	1	163	182	9	0	2	2	540	544	3	0	4	3	346	339	8	-1	5	4	180	191	4	0	6	6	321	253	33
-8	2	1	212	218	12	2	2	2	417	424	2	-5	5	3	181	117	16	-4	6	4	582	554	12	-5	7	6	153	155	11
-4	2	1	192	190	3	-7	3	2	51	80	12	-3	5	3	42	85	6	-2	6	4	415	466	3	-3	1	7	129	145	4
-2	2	1	1229	1168	9	-1	3	2	263	218	2	-1	5	3	138	125	3	0	6	4	752	765	13	-1	1	7	63	44	18
0	2	1	1185	1192	3	3	3	2	89	105	4	-4	6	3	285	286	3	-3	7	4	149	140	14	-4	2	7	207	204	6
4	2	1	696	820	39	2	4	2	136	153	2	-2	6	3	371	361	11	-7	1	5	204	186	15	-5	3	7	94	136	20
1	3	1	231	214	6	4	4	2	181	186	8	-7	7	3	121	145	15	-3	1	5	89	82	4	-4	6	7	33	3	32
3	3	1	417	425	3	6	4	2	45	49	45	-8	0	4	457	407	7	-1	1	5	35	52	29	-2	6	7	70	86	16
7	3	1	18	18	18	-3	5	2	32	43	8	-4	0	4	870	776	8	-2	2	5	490	398	32						
-2	4	1	447	440	14	5	5	2	54	86	15	0	0	4	296	302	3	-7	3	5	27	45	26						
-5	5	1	89	92	7	-4	6	2	795	744	15	4	0	4	321	341	8	-5	3	5	80	107	40						
-3	5	1	137	123	12	-7	1	3	191	194	8	-5	1	4	50	59	6	-6	4	5	508	508	7						

Table 3c. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 0.33GPa (Sp.G. C2/c)

Page

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

```

2 0 0 423 513 3   5 5 1  9 51 8   3 3 2 105 127 6  -4 6 3 298 308 2   3 3 5 15 24 15
5 1 0 35 40 7  -4 6 1 12 14 12  -8 4 2 80 53 18  -8 0 4 436 404 13  -6 4 5 487 487 4
7 1 0 21 28 21  4 6 1 28 49 20  2 4 2 137 131 2  -4 0 4 850 800 7   2 4 5 253 280 16
2 2 0 1139 1078 4   6 6 1 74 66 15  4 4 2 155 163 7   0 0 4 305 300 4  -1 5 5 264 281 7
5 3 0 34 41 7  -7 7 1 13 33 12  -3 5 2 58 58 4   4 0 4 301 304 12  -7 7 5 72 114 15
7 3 0 104 130 16  -8 0 2 535 544 6   5 5 2 92 108 9  -5 1 4 61 37 5   2 0 6 253 263 11
2 4 0 187 158 1  -6 0 2 644 617 6  -4 6 2 787 721 1  -8 2 4 182 186 8  -7 1 6 26 31 25
3 5 0 89 75 3  -4 0 2 440 438 1  -7 7 2 43 47 34  -6 2 4 342 317 4  -6 2 6 71 125 14
4 6 0 623 596 8  -2 0 2 933 965 6  -7 1 3 217 204 12  0 2 4 289 291 2  -7 3 6 126 125 9
6 6 0 520 519 3   0 0 2 375 393 1  -3 1 3 98 124 1   4 2 4 176 182 12  -1 3 6 41 59 13
-1 1 1 114 123 1   2 0 2 1120 1138 5   1 1 3 368 356 2  -3 3 4 106 117 2   1 3 6 40 42 40
1 1 1 314 302 1   6 0 2 290 392 9   0 2 3 490 469 1  -1 3 4 146 169 9  -6 4 6 271 276 7
3 1 1 63 79 1  -7 1 2 60 67 12  2 2 3 546 557 4   1 3 4 105 90 5   0 4 6 15 188 14
7 1 1 152 173 10  -5 1 2 10 8 9  -7 3 3 45 50 11  3 3 4 46 41 22  -2 6 6 511 476 24
-8 2 1 236 209 8  -1 1 2 566 508 2  -3 3 3 365 371 2  -2 4 4 211 181 4  -5 7 6 241 157 11
-4 2 1 187 174 1   3 1 2 181 191 4  -1 3 3 7 120 6  -5 5 4 143 155 4  -3 1 7 127 148 7
-2 2 1 1214 1156 4  -8 2 2 357 273 10  5 3 3 225 254 6  -3 5 4 85 98 3  -1 1 7 53 67 8
0 2 1 1154 1175 21  -6 2 2 423 427 3  -8 4 3 427 396 6  -1 5 4 188 202 4  -6 2 7 444 418 5
4 2 1 809 808 15  -4 2 2 207 216 1  -4 4 3 567 579 2  -4 6 4 514 521 7  -4 2 7 220 184 20
1 3 1 207 225 6  -2 2 2 74 95 2  -2 4 3 893 810 4  -7 1 5 153 180 24  -5 3 7 127 142 7
3 3 1 435 412 2   0 2 2 557 540 2   0 4 3 339 351 2  -3 1 5 111 97 5  -5 5 7 70 68 19
-2 4 1 419 440 1   2 2 2 421 440 1  -5 5 3 133 126 5  -1 1 5 73 70 16
-5 5 1 74 90 6  -7 3 2 55 100 11  -3 5 3 52 86 9  -2 2 5 410 368 2
-3 5 1 133 103 3  -1 3 2 259 227 1  -8 6 3 36 25 36  -7 3 5 31 31 31

```

Table 3d. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 0.56 GPa (Sp.G. C2/c)

Page

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

```

2 0 0 395 510 6  -2 0 2 970 986 5   1 1 3 352 357 3  -8 2 4 214 215 9  -7 5 5 10 30 10
5 1 0 50 44 9   0 0 2 347 394 3  -8 2 3 414 427 70  -6 2 4 348 337 6  -1 5 5 65 253 18
7 1 0 16 27 16  2 0 2 1117 1156 6   0 2 3 516 488 2   0 2 4 287 296 6  -7 7 5 90 84 30
2 2 0 1171 1102 7  -7 1 2 31 43 31  2 2 3 545 558 7   4 2 4 160 192 7  -7 1 6 18 30 17
5 3 0 21 10 20  -5 1 2 32 35 15  -7 3 3 51 68 14  -3 3 4 120 105 3  -5 1 6 19 15 19
7 3 0 149 143 12  -1 1 2 585 507 2  -3 3 3 382 391 3  -1 3 4 133 166 6   1 1 6 17 6 16
4 4 0 370 460 118  3 1 2 183 213 5   5 3 3 203 245 40  1 3 4 101 107 9  -6 2 6 49 143 26
-1 1 1 114 107 1  -6 2 2 273 408 8  -8 4 3 447 418 6   3 3 4 53 62 12  -7 3 6 131 137 10
1 1 1 303 301 1  -4 2 2 227 230 3  -4 4 3 770 576 16  -8 4 4 277 261 11  -1 3 6 46 60 14
3 1 1 88 86 3  -2 2 2 56 65 2  -2 4 3 875 785 7  -2 4 4 243 223 5  -6 4 6 288 281 4
7 1 1 164 177 7   0 2 2 537 544 4   0 4 3 326 355 3  -5 5 4 162 172 6  -4 4 6 267 269 13
-8 2 1 208 226 10  2 2 2 426 438 2  -5 5 3 144 88 7  -3 5 4 93 127 5  -3 5 6 80 69 25
-4 2 1 198 188 2  -7 3 2 44 87 22  -3 5 3 54 79 6  -1 5 4 182 195 7   1 5 6 17 28 16
-2 2 1 1256 1148 7  -1 3 2 264 245 2  -1 5 3 131 124 4  -4 6 4 567 562 10  -2 6 6 557 530 4
0 2 1 1193 1185 7   3 3 2 102 120 6   1 5 3 71 88 8   0 6 4 748 769 11  0 6 6 286 257 13
1 3 1 246 204 8   2 4 2 140 188 2  -4 6 3 302 295 3  -7 1 5 178 180 52  -5 7 6 200 161 8
3 3 1 433 399 2   4 4 2 168 160 20  -8 0 4 464 426 9  -3 1 5 80 93 5  -3 1 7 137 146 6

```

-2 4 1 514 444 9 6 4 2 16 49 15 -4 0 4 850 803 10 -1 1 5 28 74 27 -1 1 7 50 54 17
-5 5 1 91 105 6 -3 5 2 64 71 6 0 0 4 307 317 4 -2 2 5 400 410 6 -4 2 7 204 205 10
-3 5 1 116 101 4 -4 6 2 820 774 15 4 0 4 317 323 5 -7 3 5 31 39 30 -5 3 7 115 149 21
-6 0 2 680 636 7 -7 1 3 201 211 8 -5 1 4 58 54 5 -5 3 5 107 107 11 -3 3 7 16 14 15
-4 0 2 452 414 3 -3 1 3 102 88 2 1 1 4 171 180 8 -6 4 5 514 515 3

Table 3e. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 1.01 GPa (Sp.G. C2/c)

Page 1

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

2 0 0 410 498 2 7 3 1 40 53 40 -2 2 2 54 80 2 -8 4 3 403 392 16 -2 4 4 208 192 5
5 1 0 35 33 9 -6 4 1 349 303 5 0 2 2 552 541 2 -4 4 3 560 550 3 -5 5 4 155 167 5
7 1 0 20 29 19 -2 4 1 419 455 3 2 2 2 424 418 1 -2 4 3 889 843 3 -3 5 4 35 114 34
2 2 0 1137 1086 3 -5 5 1 111 99 7 -1 3 2 267 228 1 0 4 3 342 352 3 -1 5 4 218 215 14
5 3 0 50 65 9 -3 5 1 147 158 2 3 3 2 98 115 4 4 4 3 415 428 4 -4 6 4 532 537 11
7 3 0 100 144 39 5 5 1 52 74 31 5 3 2 32 36 32 -5 5 3 145 138 3 -7 7 4 18 16 17
2 4 0 169 124 2 -4 6 1 39 26 14 -8 4 2 46 71 45 -3 5 3 52 81 11 -7 1 5 191 185 7
4 4 0 447 439 7 4 6 1 11 17 11 2 4 2 138 136 2 1 5 3 89 68 10 -3 1 5 124 86 12
3 5 0 99 111 4 6 6 1 58 74 24 -5 5 2 13 19 13 -4 6 3 261 318 56 3 1 5 104 165 21
4 6 0 603 599 5 -8 0 2 547 544 4 -3 5 2 56 44 4 -7 7 3 118 129 8 -2 2 5 417 378 4
6 6 0 540 540 7 -6 0 2 662 638 10 -4 6 2 770 748 8 -4 0 4 838 795 5 -7 3 5 89 73 18
-1 1 1 112 130 1 -4 0 2 420 414 1 -7 1 3 200 200 7 0 0 4 315 316 5 -5 3 5 82 111 7
1 1 1 304 286 1 -2 0 2 960 1010 4 -3 1 3 96 117 2 4 0 4 292 306 13 -6 4 5 491 497 3
3 1 1 66 72 2 0 0 2 362 388 1 1 1 3 351 355 1 -5 1 4 87 74 4 -6 4 6 275 277 7
7 1 1 148 174 23 2 0 2 1114 1124 9 5 1 3 18 43 18 1 1 4 201 185 4 -4 4 6 254 272 4
-4 2 1 195 191 1 -7 1 2 54 50 10 -8 2 3 417 435 7 -6 2 4 329 299 3 -3 1 7 203 149 22
-2 2 1 1196 1146 4 -5 1 2 25 24 16 0 2 3 480 474 2 0 2 4 295 301 5 -2 4 7 289 308 11
0 2 1 1173 1191 17 -1 1 2 554 511 2 2 2 3 537 574 7 4 2 4 178 187 13
-7 3 1 17 45 17 3 1 2 181 198 2 -7 3 3 20 73 19 -3 3 4 91 106 2
1 3 1 218 237 5 -8 2 2 267 258 4 -3 3 3 351 341 2 -1 3 4 141 166 2
3 3 1 432 420 2 -4 2 2 219 229 1 3 3 3 149 168 5 1 3 4 103 88 3

Table 3f. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 2.03 GPa (Sp.G. C2/c)

Page

1

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

2 0 0 391 496 2 -8 0 2 511 551 5 -5 5 2 12 3 11 0 0 4 330 329 3 -5 3 5 104 111 4
5 1 0 48 41 4 -6 0 2 415 629 5 -4 6 2 825 786 9 -5 1 4 117 86 5 -6 4 5 478 481 5
2 2 0 1142 1103 5 -4 0 2 401 376 1 4 6 2 497 462 4 1 1 4 197 187 2 1 5 5 167 98 10
5 3 0 42 38 14 -2 0 2 1002 1029 5 -7 7 2 22 31 22 3 1 4 132 140 8 -4 6 5 16 41 15
2 4 0 158 127 2 0 0 2 344 365 1 -7 1 3 204 205 5 -6 2 4 331 310 12 -6 0 6 310 314 6
4 4 0 471 446 7 2 0 2 1119 1135 6 -3 1 3 94 88 1 0 2 4 302 278 8 -5 1 6 37 10 28
3 5 0 126 117 4 -5 1 2 36 41 35 1 1 3 305 345 17 -3 3 4 83 77 2 -6 2 6 183 152 6
6 6 0 584 559 14 -1 1 2 542 493 1 -8 2 3 442 429 4 -1 3 4 140 154 2 0 2 6 198 279 20
-1 1 1 108 125 1 3 1 2 195 202 2 0 2 3 484 490 1 1 3 4 105 97 4 -7 3 6 144 135 9
1 1 1 293 289 1 5 1 2 49 52 35 -3 3 3 324 333 2 3 3 4 42 46 41 -1 3 6 37 47 11
3 1 1 76 89 1 -8 2 2 283 271 7 -1 3 3 146 132 1 -2 4 4 200 188 2 -6 4 6 297 294 6
-4 2 1 214 201 1 -4 2 2 242 233 1 3 3 3 152 145 14 2 4 4 396 459 34 -4 4 6 250 252 3
-2 2 1 1169 1142 4 -2 2 2 37 37 3 -8 4 3 405 374 20 4 4 4 78 102 12 -5 5 6 116 114 13
0 2 1 1244 1178 25 0 2 2 559 546 2 -4 4 3 554 517 3 -5 5 4 170 178 3 -3 5 6 69 101 10
1 3 1 264 256 4 2 2 2 423 417 1 -2 4 3 898 830 5 -1 5 4 239 216 6 -5 1 7 97 101 12

3	3	1	430	430	2	4	2	2	508	542	11	0	4	3	341	351	3	-4	6	4	543	516	11	-3	1	7	152	135	34
-2	4	1	441	464	7	6	2	2	191	226	5	4	4	3	414	415	13	-7	7	4	32	45	32	-1	1	7	43	52	11
-7	5	1	15	5	15	-1	3	2	278	239	1	-5	5	3	161	136	4	-7	1	5	195	190	4	-5	3	7	85	107	9
-5	5	1	122	121	3	3	3	2	64	99	8	1	5	3	102	88	6	-3	1	5	85	86	3	-1	3	7	63	26	17
-3	5	1	179	155	2	5	3	2	29	27	29	5	5	3	91	96	20	3	1	5	139	173	3	-2	4	7	299	300	5
-4	6	1	62	54	4	2	4	2	152	158	2	-7	7	3	135	134	5	-2	2	5	424	399	4	-3	5	7	18	63	18
4	6	1	12	26	12	6	4	2	55	33	54	-6	0	4	597	600	16	2	2	5	417	413	9						
6	6	1	62	59	16	-7	5	2	15	3	15	-4	0	4	851	803	4	-7	3	5	136	75	12						

Table 3g. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 3.15 GPa (Sp.G. C2/c)

Page

1

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
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	360	437	2	5	5	1	101	117	9	-5	5	2	16	25	15	0	0	4	354	339	2	-1	1	5	45	71	19
5	1	0	15	27	15	-4	6	1	61	74	4	5	5	2	126	141	9	4	0	4	287	289	10	-2	2	5	421	393	4
2	2	0	1122	1092	5	-6	0	2	684	686	13	-6	6	2	307	420	6	-7	1	4	15	22	14	-3	3	5	279	292	2
5	3	0	15	33	15	-4	0	2	369	364	1	-4	6	2	830	803	10	-5	1	4	149	131	6	-6	4	5	442	449	4
7	3	0	128	144	8	-2	0	2	993	1057	4	-7	1	3	197	186	9	1	1	4	198	196	2	-4	4	5	493	480	4
2	4	0	138	87	2	0	0	2	325	347	1	-3	1	3	88	106	1	3	1	4	153	155	10	-7	5	5	41	53	13
4	4	0	471	481	7	2	0	2	1114	1142	8	1	1	3	316	320	2	-4	2	4	622	625	9	-6	6	5	13	84	12
3	5	0	143	130	4	-5	1	2	63	66	14	0	2	3	480	485	2	0	2	4	302	278	11	1	1	6	32	26	32
4	6	0	612	563	2	-1	1	2	513	489	2	-7	3	3	45	63	10	4	2	4	234	189	10	-7	3	6	127	136	7
6	6	0	590	561	4	3	1	2	199	220	3	-3	3	3	282	269	3	-5	3	4	28	28	27	-5	3	6	26	24	26
-1	1	1	103	102	1	-8	2	2	258	265	8	3	3	3	123	111	11	-3	3	4	68	60	2	-1	3	6	37	37	12
1	1	1	278	280	1	-4	2	2	251	290	1	-8	4	3	383	324	19	-1	3	4	125	137	3	-6	6	6	475	492	6
3	1	1	84	87	1	0	2	2	560	548	2	-4	4	3	536	506	8	1	3	4	100	95	5	-4	6	6	374	394	11
-4	2	1	227	232	1	2	2	2	414	417	2	-2	4	3	873	832	7	3	3	4	38	46	16	-3	1	7	105	142	10
-2	2	1	1133	1100	4	-7	3	2	72	93	6	0	4	3	345	366	4	-2	4	4	190	169	8	-1	1	7	14	45	14
1	3	1	289	306	3	-1	3	2	286	255	2	4	4	3	395	399	8	-3	5	4	74	111	9	-4	2	7	198	191	3
3	3	1	406	399	2	3	3	2	56	83	10	-5	5	3	172	165	6	-1	5	4	243	239	9	-2	2	7	393	382	3
-6	4	1	251	270	6	5	3	2	40	43	19	1	5	3	97	81	3	-4	6	4	514	485	13	-3	3	7	15	21	15
-5	5	1	132	125	5	2	4	2	162	160	2	-4	6	3	317	333	5	-7	7	4	24	52	23						
-3	5	1	203	169	5	6	4	2	54	46	18	-4	0	4	843	800	4	-3	1	5	82	75	4						

Table 3h. Observed and calculated structure factors for gypsum in DAC at 3.94 GPa (Sp.G. C2/c)

Page

1

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
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

2	0	0	351	444	2	-2	4	1	450	484	2	2	2	2	420	408	2	4	4	3	380	410	8	4	4	4	86	115	20
5	1	0	33	36	10	4	4	1	564	541	5	4	2	2	540	545	9	-5	5	3	221	164	4	-3	5	4	37	75	19
2	2	0	1142	1107	5	-5	5	1	123	149	4	-7	3	2	61	109	9	-3	5	3	37	78	11	-4	6	4	513	532	19
5	3	0	19	36	18	-3	5	1	223	230	3	-1	3	2	303	264	3	1	5	3	95	78	6	-3	1	5	79	74	4
7	3	0	120	135	13	-4	6	1	110	90	6	5	3	2	15	21	15	-4	6	3	339	346	8	-2	2	5	439	431	5
2	4	0	124	102	1	-6	0	2	680	708	2	-5	5	2	13	15	12	-4	0	4	869	817	3	-3	3	5	297	325	13
4	4	0	482	480	8	-4	0	2	359	350	2	-4	6	2	863	817	22	0	0	4	387	386	2	-6	4	5	442	467	5
3	5	0	155	142	4	-2	0	2	1025	1084	5	4	6	2	496	496	6	-5	1	4	144	139	5	-4	4	5	524	538	5
6	6	0	610	604	4	0	0	2	323	330	1	-7	1	3	190	204	6	1	1	4	207	208	3	-7	5	5	52	65	12
-1	1	1	103	114	1	2	0	2	1140	1166	8	-3	1	3	88	95	1	3	1	4	142	175	10	1	5	5	138	89	13
1	1	1	274	266	1	-7	1	2	20	32	20	3	1	3	14	91	13	-4	2	4	640	639	25	-1	1	6	34	49	33
3	1	1	93	112	1	-5	1	2	86	89	15	0	2	3	505	507	2	0	2	4	333	293	13	-7	3	6	110	121	11

-4 2 1 243 253 1 -1 1 2 516 466 2 -7 3 3 54 42 9 -3 3 4 59 64 3 -5 3 6 34 32 33
-2 2 1 1141 1091 3 1 1 2 373 557 87 -3 3 3 261 247 2 -1 3 4 125 128 4 -1 3 6 63 59 6
0 2 1 1332 1165 10 3 1 2 208 231 3 -8 4 3 365 356 7 1 3 4 101 86 6 -6 6 6 533 536 8
1 3 1 317 308 4 5 1 2 102 96 13 -4 4 3 533 497 2 3 3 4 33 41 33 -3 1 7 103 107 8
3 3 1 408 412 3 -4 2 2 270 295 1 -2 4 3 900 862 5 -2 4 4 187 168 7 -4 2 7 207 216 5
-6 4 1 307 286 5 0 2 2 582 548 3 0 4 3 405 342 17 2 4 4 453 432 6