



وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة باجي مختار - عنابة
Université Badji Mokhtar – Annaba
كلية علوم الأرض
Faculté des Sciences de la terre



DEPARTEMENT DE GEOLOGIE

قسم الجيولوجيا

**Master1 Ressources minérales ,Géomatériaux et
environnement-Semestre 2**

Les Techniques d'analyse

Partie TD (Fiches ASTM-JCPDS)

Dr L SAYAD

sayadlamine@yahoo.fr

Année universitaire 2019-2020

Les bases de données de diffractogrammes de poudres utilisées

- L'identification du diagramme de diffraction de poudre d'une phase donnée pour être comparé aux diagrammes de diffraction du fichier ASTM (American Society for Testing Materials)
- Le fichier ASTM est constitué des diagrammes de poudres cristallines ayant fait l'objet de publication et peut être consulté sur des recueils tels (Xray powder Data base ou (Crystallography Open Database),
- Le fichier ASTM d'un composé donné contient la liste complète des d_{hk} indexées ainsi que le rapport de leurs intensités et peut contenir également d'autres renseignements relatifs au composé
- Après acquisition du spectre de diffraction et repérage des pics de diffraction, l'identification se fait sur ordinateur sur lequel est stockée une base de données constituée par des données cristallographiques des composés ayant fait l'objet de publication (l'équivalent des fichiers ASTM Numériques)

- **I.1 Les fichiers « PDF » (Powder Diffraction File)**

- 1941  Publication des premières fiches **ASTM(American Society of Testing Materials)**
- 1962  Les fiches sont introduites dans un ordinateur
- 1965  Les index sont édités à partir du fichier informatique
- 1969  Les différentes sociétés s'étant jointes à l'ASTM fondent le **JCPDS** ((Joint Committee on Powder Diffraction Standards)
- 1976 Début du projet de la mise en base de données informatique
- 1979  Première version de la base de données informatique
- 1978  Le **JCPDS** devient **l'ICDD** (([International Center for Diffraction Data](#))
- 1985  Extension du format des données (informations supplémentaires) avec le **format PDF-2**
- 1987  Abandon de la distribution sous forme de cartes

- **1998**  Intégration des fiches calculées à partir de la base de structure **ICSD** (Inorganic crystal structure database) du FIZ (Fachinformationszentrum, Karlsruhe-Allemagne)
- **2002**  Intégration des fiches calculées à partir de la base de structure du National Institute of Standards and Technology (**NIST**) , création du format **PDF-4** : les fiches sont mises dans une base de données relationnelle (Microsoft Access)
- intégration des fiches de la CSD (Cambridge structure database) du CCDC (Cambridge crystallographic data center) dans la base **PDF-4/Organics**

- **2003**  une nouvelle base de données en accès gratuit baptisée COD (Crystallography Open Database). Le principe est que les chercheurs qui déterminent de nouvelles structures cristallines alimentent cette base par simple envoi du fichier CIF via Internet.
- **2004**  Abandon du format **PDF-1**
- **2005**  Intégration des fiches calculées à partir de la base de structure Linus Pauling File (**LPF**) le format de base de données relationnelle devient Sybase ; PDF-2 devient elle aussi une base de données relationnelle
- **2007**  la base P2D2 (Predicted Powder Diffraction Database) ainsi créée comportait ~61000 fiches.
- **2011**  elle en avait plus de 150000.

- **I.2 Les différents fichiers "PDF "**

- Le **Powder diffraction file (PDF)**, littéralement «fichier de diffraction de poudre») est une base de données comprenant des phases (produits chimiques artificiels ou naturels cristallisés), et donnant la possibilité de le dépouillement des diagrammes de diffraction de rayons X.
- Après les supports papiers (cartes individuelles, livres), les microfiches, les bandes et disquettes magnétiques, l'année 1987 a vu l'avènement du CD-ROM et l'ouverture de perspectives nouvelles dans l'utilisation du P.D.F. Actuellement, le "J.C.P.D.S.-I.C.D.D." distribue sur CDROM
- les fichiers suivants : P.D.F.-2 et P.D.F.-4+ (composés inorganiques et quelques composés organiques de base), P.D.F.-4/Minéral (composés minéraux), P.D.F.-4/Organics (composés organiques).

- **P.D.F.-1.** : Le nom P.D.F.-1 avait été attribué à un fichier sur disque magnétique qui comportait des "fiches simplifiées" : colonnes "d", "I", symbole de qualité, formule chimique, valeur de I/I_{cor}, numéro de la fiche. Ce fichier, moins encombrant, permettait de reconstituer le "spectre en bâtonnets" pour une recherche de phases. Compte tenu de l'évolution de la puissance de l'outil informatique ce fichier simplifié a disparu.
- Les logiciels de recherche de phases recréent les "spectres en bâtonnets" à partir des fichiers complets.

- **P.D.F.-2.** : Fichier de base pour les composés inorganiques :
- ~230.000 fiches en 2010 (~200000 inorganiques ; ~30000 organiques)
- **Fiches expérimentales** : ~1500 fiches nouvelles pour l'année 2010 (~3/4 trouvées dans les publications scientifiques et ~1/4 par des actions spécifiques de l'ICDD).
- **Depuis 1998, fiches théoriques (avec le symbole "C")** : Elles sont simulées à partir des structures cristallines contenues dans la base de données ICSD (Inorganic Crystal Structure Data base) de FIZ (**F**ach**I**nformations**Z**entrum ; KARLSRUHE – ALLEMAGNE), ou de celle du NIST (**N**ational **I**nstitute of **S**tandards and **T**echnology ; GAITHERSBURG-MARYLAND).

- Avec cette introduction massive de nouvelles fiches théoriques la base de données PDF-2 est passée de ~150000 cartes en 2002 (~90000 fiches expérimentales et ~60000 fiches calculées) à
- ~230000 cartes en 2010 (~105000 fiches expérimentales et ~125000 fiches calculées dont 114706 issues de l'ISCD et 10067 issues du NIST).
- Avec le CD-ROM du PDF-2 le "J.C.P.D.S.-I.C.D.D." distribue aussi un logiciel de recherche de phases qui utilise une "analyse booléenne" à partir de plusieurs entrées : sous-fichiers (minéraux, alliages, organiques...), éléments chimiques, les 3 raies les plus fortes...etc.
- L'affichage (ou l'impression) de la carte retenue est alors tout de suite possible. Jusqu'en 2004 ce programme associé ("PCPDFWIN") travaillait sur des fiches PDF dont la présentation et la numérotation étaient la continuité des anciennes fiches ASTM.

- Depuis 2004 le nouveau logiciel associé ("DDVIEW") fournit une nouvelle présentation des fiches (avec la possibilité d'impression du "spectre en bâtonnets") ainsi qu'une nouvelle
- numérotation rendue nécessaire par l'introduction des "fiches calculées".
- • **P.D.F.-4+** : depuis 2002 la base de données PDF-2 était proposée dans le nouveau format "relationnel" PDF-4. Dans ce format, la nature du produit (minéraux, métaux et alliages,
- composés pharmaceutiques, composés organiques, polymères, céramiques, produits de corrosion, ciments, explosifs, etc...), les informations contenues dans une fiche (données de diffraction, éléments chimiques, formule, température de fusion, maille cristalline, couleur,
- symbole de Pearson, groupe d'espace, positions atomiques, etc...) sont réparties en 31 champs de recherche.

- Une recherche de phases plus performante peut ainsi être effectuée avec des opérateurs booléens sur ces 31 champs.
- En 2005 un partenariat avec le MPDS (Material Phases Data System ; VITZNAU – SUISSE ; LPF Database) s'est rajouté aux collaborations de l'ICDD avec FIZ et NIST. Cette synthèse de 4 bases de données a donné naissance à P.D.F.-4+ qui, en 2010, comportait ~301000 fiches (ICDD : 105573 ; FIZ : 59802 ; NIST : 3635 ; MPDS : 132272).
- • **P.D.F.-4/organics** : cette nouvelle base de données (distribuée à partir de 2002) est proposée dans le format relationnel PDF-4 à l'intention des "chercheurs de phases" du domaine de la chimie organique et organo-métallique. Elle résulte d'un accord pour la réalisation de fiches "calculées" à partir des structures cristallines du CCDC (Cambridge Crystallographic Data Center ; CAMBRIDGE - ANGLETERRE). En 2011 elle comportait ~437000 fiches (ICDD :
- 32150 ; FIZ : 5060 ; CCDC : 399662 ; NIST : 29).

- **I.3. Présentation d'une carte imprimée du fichier PDF avec "PCPDFWIN" (→2004)**
- La base de données la plus complète à l'heure actuelle est la Powder Diffraction File (PDF) de « JCPDS – ICDD » (Joint Committee on Powder Diffraction Standards- International Centre of Diffraction Data) .
- PCPDFWIN est un logiciel de recherche et de tri des fichiers de la base de données PDF mise à jour et distribuée par l'ICDD. Cette base de données regroupe des diagrammes de diffraction des rayons X par des poudres monophasées. La figure II.1 présente un exemple de la carte 27-1402 du silicium.

b-0710

d	1.63	2.71	2.42	3.13	FeS ₂	★
I/I ₁	100	84	66	36		

Rad. Co	λ	Filter	d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Diag.	1.5405	Cut off	3.128	36	111	0.8565	7	620
		Coll.	2.709	84	200	.8261	4	533
		d corr. abs.?	2.423	66	210	.8165	4	622
Ref.	SWANSON ET AL., NBS CIRCULAR 539 VOL V (1955)		2.2118	52	211	.7981	5	631
			1.9155	40	220			
Syn. Cubic (F.C.)		S.G. T _H ^c - PAB	1.6332	100	311			
a ₀ 5.417 Å	b ₀	c ₀	1.5640	14	222			
a	β	γ	1.5025	20	230			
		Z 4	1.4448	24	321			
Ref. U.S.I.			1.2427	12	331			
E ₂	n α β	ε γ	1.2113	14	420			
2V	Dx5.01 mp	Color BLACK	1.1823	7	421			
Ref.			1.1548	6	332			
SPECT. ANAL. OF SAMPLES < 0.1% AL, CA, MG, Si; < 0.01% CO, CU, MO, NI, PB; < 0.001% CR, GE, MN; < 0.0001% AG. X-RAY PATTERN AT 25°C.			1.1057	6	422			
			1.0427	27	511			
			1.0060	8	432			
			0.9992	6	521			
			.9577	12	440			
			.9030	15	600			
REPLACES 1-1295, 2-1365, 2-1370, 3-0822			.8788	8	611			

• Figure 1 : fichier « PDF » b-0710 de la pyrite

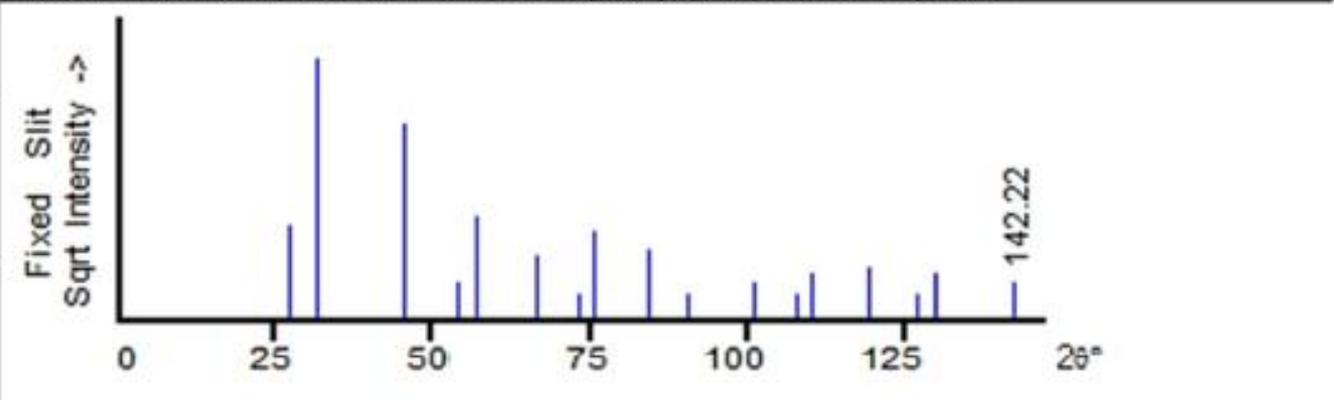
- **Indice 1**: Formule chimique et nom (dans la nomenclature IUPAC).
- **Indice 2**: Essentiellement : "formule structurale" et nom minéralogique (nomenclature de "International Mineralogical Association").
- **Indice 3** : Colonnes des distances réticulaires, intensités relatives et indices de Miller. On y trouve parfois des abréviations supplémentaires : b (raie large, diffuse), n (indices non autorisés par le groupe d'espace donné), + (d'autres indices possibles),...
- **Indice 4** : Conditions expérimentales de l'enregistrement

- **Indice 5-8** : Données cristallographiques ($A = a/b$, $C = c/b$, $Z =$ nombre de groupements formulaires par maille), masses volumiques, référence de la publication du diffractogramme et facteur de qualité de Smith et Snyder (Smith et Snyder Figure Of Merit : SS/FOM)
- **Indice 7** : Numéro d'identification de la carte constitué de 2 nombres :
 - -le numéro de fichier (un fichier supplémentaire est rajouté par an) qui s'obtient en retranchant
 - 1950 du numéro de l'année considérée (exemple : le numéro de fichier de 1994 est 44)- suivi du numéro de la carte dans le fichier (dans l'ordre d'enregistrement dans le fichier, jusqu'à 2500). Sur certaines cartes zone entre 5 et 6 : Données optiques.
- **Indice 9** : Commentaires généraux.

- **Symbole "O"** : pas indexé et de qualité moyenne (faible précision, ou mélange de phases, ou mauvaise caractérisation chimique,...)
- **Symbole "C"** : diffractogrammes calculés à partir des positions atomiques. Au début ces cartes ont été rajoutées dans les cas de structures cristallines connues mais de diffractogrammes de poudres expérimentaux de mauvaise qualité.
- Le symbole  peut figurer sur certains fichiers ASTM traduit que les données reportées sur ces fichiers sont **définitives**

05-0628 Quality: *
 CAS Number: 7647-14-5
 Molecular Weight: 58.44
 Volume[CD]: 179.43
 Dx: 2.163 Dm: 2.168
 S.G.: Fm3m (225)
 Cell Parameters:
 a 5.640 b c
 α β γ
 SS/FOM: F17=93(.0108, 17)
 I/|cor: 4.40
 Rad: CuKα1
 Lambda: 1.5405
 Filter: Ni
 d-sp:

NaCl
 Sodium Chloride
 Ref: Swanson, Fuyat, Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, II, 41 (1953)

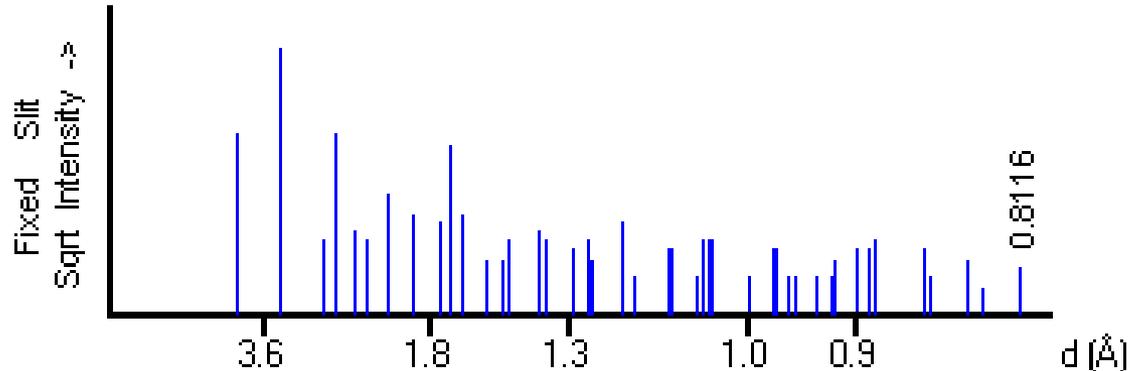


2θ	int-f	h	k	l	2θ	int-f	h	k	l	2θ	int-f	h	k	l
27.333	13	1	1	1	73.061	1	3	3	1	110.03	3	6	0	0
31.691	100	2	0	0	75.298	11	4	2	0	119.49	4	6	2	0
45.447	55	2	2	0	83.966	7	4	2	2	127.15	1	5	3	3
53.850	2	3	1	1	90.402	1	5	1	1	129.87	3	6	2	2
56.475	15	2	2	2	101.18	2	4	4	0	142.21	2	4	4	4
66.224	6	4	0	0	107.79	1	5	3	1					

Figure 2: Fiche "PDF" du composé NaCl)λKCu 1.54A&.

06-0266 Quality: *
 CAS Number:
 Molecular Weight: 183.30
 Volume[CD]: 260.76
 Dx: 4.669 Dm: 4.600
 S.G.: 141/amd (141)
 Cell Parameters:
 a 6.604 b c 5.979
 α β γ
 SS/FOM: F30=56(.0118, 46)
 l/lcor: 4.30
 Rad: CuKα1
 Lambda: 1.5405
 Filter: Ni
 d-sp:

Zr Si O4
 Zirconium Silicate
 Ref: Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, 4, 68 (1955)



d(Å)	int-f	h	k	l	d(Å)	int-f	h	k	l	d(Å)	int-f	h	k	l
4.4340	45	1	0	1	1.3620	8	2	0	4	.95820	2	4	1	5
3.3020	100	2	0	0	1.2900	6	4	3	1	.95320	2	6	1	3
2.6500	8	2	1	1	1.2590	8	2	2	4	.93210	2	7	0	1
2.5180	45	1	1	2	1.2480	4	4	1	3	.92010	2	4	4	4
2.3360	10	2	2	0	1.1883	12	5	1	2	.91570	4	6	4	0
2.2170	8	2	0	2	1.1672	2	4	4	0	.89940	6	3	1	6
2.0660	20	3	0	1	1.1079	6	4	0	4	.89150	6	5	5	2
1.9080	14	1	0	3	1.1006	6	6	0	0	.88630	8	6	0	4
1.7510	12	3	2	1	1.0682	2	6	1	1	.85610	6	5	2	5
1.7120	40	3	1	2	1.0590	8	5	3	2	.85270	2	4	0	6
1.6510	14	4	0	0	1.0506	8	4	2	4	.83290	4	7	3	2
1.5470	4	4	1	1	1.0442	8	6	2	0	.82560	1	7	2	3
1.4950	4	0	0	4	1.0015	2	3	2	5	.82560	1	8	0	0
1.4770	8	4	2	0	.97450	6	1	1	6	.81160	3	7	4	1
1.3810	10	3	3	2	.97130	6	6	3	1					

Figure.3 : Fiche "PDF" du composé ZrSiO₄

2. Références

- Guinier A., (1956) Théorie et technique de la radiocristallographie Dunod, Paris.
- Ouahes R., (1984) Eléments de radiocristallographie, publisud-Paris, Office des Publications Universitaires Ben-Aknoun, Alger
- Christophe A, Erwann J, Catherine S., (2009). Diffraction des rayons X, Techniques et études des structures cristallines, École Normale Supérieure de Lyon
- Oumezzine M., Zemni S., 2008 Cristallographie géométrique et radiocristallographie, Centre de publication universitaire, Tunis,.
- Étude de matériaux cimentaires par diffraction des rayons x, Institut des matériaux laboratoire de matériaux de construction (2008).

- Lakel A., (2009).Etude de la microstructure de quelques kaolins avec la méthode de Warren et averbach, Thèse de Magister En Physique, Université MentouriConstantine
- Kittel Ch., (1983).Physique de l'état solide, Bordas, Paris
- Powder diffraction file "PDF" de « JCPDS ICDD » (Joint Committee on Powder Diffraction Standards-International Centre of Diffraction Data).
- Pierre G., (2012).Introduction à la pratique de la diffraction des rayons X par les poudres,Bordeaux
- Boudias. C, Monceau, D.,(1998).Manuel d'utilisation, CaRIne Cristallographie 3.1,
- Ansel D. , 2006 Cristallographie et radiocristallographie, Cours de 2ème Année Matériaux et Nano-Technologie, Université INSA Rennes.

ANNEXES

I/I_1	100	60	60	20	MAGNESIUM IRON SILICATE	FORSTERITE, FERROAN					
I/I_1						d Å	I/I_1	hkl	d Å	I/I_1	hkl
Rad. FeK α	λ 1.9373	Filter Mn		Dia.		5.15	20	020	1.894	10	150
Cut off		I/I_1 G-C	DIFFRACTOMETER (PEAK)			3.916	40	021	1.823	5	113
Ref.	GILLERY, COLL. OF MIN. IND., PENNSYLVANIA STATE UNIVERSITY, UNIVERSITY PARK, PA.					3.744	10	101	1.807	10	151
						3.516	30	111	1.761	50	222
Sys.	ORTHORHOMBIC		S.G. V_H^{16} - PBNM (62)			3.481	10	120	1.754	10	240
a_0	4.784	b_0	10.318	c_0	6.027	A0.4637	C	0.5841			
a		β		γ		Z 4	Dx	3.648			
Ref.	IBID.					3.030	10	121	1.743	10	123
						3.014	10	002	1.684	10	241
						2.791	100	130	1.654	10	061
						2.601	10	022	1.644	5	232
						2.578	5	040	1.631	20	133
ϵa	1.710	$n_{\alpha\beta}$	1.733	$f\gamma$	1.748	Sign	-				
2V	79°	D	3.69	mp		Color	WHITE-GREEN				
Ref.	WAGER AND DEER, MEDDELELSER OM GRONLAND 105 No 4 (1939)					2.533	60	131	1.604	10	152
						2.475	60	112	1.586	10	043
						2.391	5	200	1.523	5	213
						2.370	20	041	1.513	5	242
						2.330	5	210	1.508	20	004
						2.285	30	122	1.494	20	062
						2.270	30	140	1.408	10	170
						2.173	10	220,211	1.406		233
						2.048	5	132	1.397	10	312
						1.962	5	221,230+	1.359	10	322
SPECIMEN FROM EAST GREENLAND (No. 4077)											
COMP. (%): Mg_2SiO_4 64, Fe_2SiO_4 36.											
α_1 - α_2 RESOLUTION APPRECIABLE AT 2-3A.											
SEE ALSO OTHER CARDS IN OLIVINE SERIES.											

Tableau IV.3 — diagramme des rayons X de la kaolinite.

Kaolinite (JCPDS 012-0447)				Kaolinite purifiée	
hkl	d (Å)	Intensité	2θ	d (Å)	2θ
001	7.15	50	12.39	7.19	12.35
020	4.46	75	19.91	4.47	19.79
1 $\bar{1}$ 0	4.34	65	20.46	4.26	20.81
002	3.56	50	25.01	3.58	24.80
111	3.37	12	26.45	3.36	26.84
11 $\bar{3}$	2.33	95	38.61	2.37	38.61
$\bar{2}$ 02	2.28	65	39.41	2.28	39.45

19-770A

d	9.35	1.53	4.59	9.35	Mg ₃ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ Magnesium Silicate Hydroxide	Talc	★		
I/I ₁	100	55	45	100					
Rad.	λ	Filter	Dia.	d A	I/I ₁	hkl	d A	I/I ₁	hkl
Cut off				1.726	4b		1.315	6b	339,401+
Ref.	I/I ₁			1.714	4b	151,310+	1.304	6b	400,2213
				1.708	4b		1.300	10	405
				1.692	4	153	1.295	10b	1312,159
				1.684	6b		1.286	2b	
Sys.		S.G.		1.668	6b		1.277	2b	
a ₀	b ₀	c ₀	A	1.654	2b		1.270	4	
a	β	γ	Z	1.558	2	0012,317	1.268	2	3310,263
Ref.			C	1.540	<2	049	1.262	2	424,350+
			Dx	1.529	55	060	1.255	2	173
εα	nωβ	εγ	Sign	1.524	12b		1.248	2	1511
2V	D	mp	Color	1.511	12	330	1.243	2b	
Ref.				1.503	2b	334,245	1.233	2b	
				1.411	4b		1.219	<2	0413,175
				1.386	4b		1.187	4	428
				1.376	2b		1.169	2	0016,3110
				1.358	2b				
				1.336	2	0014,335			
				1.321	8	402,403+			
				1.318	8				

See preceding card

4-0787 MINOR CORRECTION

d	2.34	2.02	1.22	2.34	AL ALUMINUM	★			
4-0791									
I/I ₁	100	47	24	100					
4-0787									
Rad. CuKα ₁	λ 1.5405	Filter Ni		d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Dia.	Cut off	Coll.		2.338	100	111			
I/I ₁	G. C. DIFFRACTOMETER	d corr. abs.?		2.024	47	200			
Ref.	SWANSON AND TATGE, JC FEL. REPORTS, NBS			1.431	22	220			
		1950		1.221	24	311			
				1.1690	7	222			
Sys. CUBIC		S.G. O _H ⁵ - FM3M		1.0124	2	400			
a ₀ 4.0494	b ₀	A	C	0.9289	8	331			
c	β	Z 4		.9055	8	420			
Ref. IBID.				.8266	8	422			
δ ε	η θ β	ξ γ	Sign						
XV	D _x 2.697 mp	Color							
Ref. IBID.									
SAMPLE PREPARED AT NBS. 99.9+ % AL									
AT 23°C									
TO REPLACE 1-1176, 1-1179, 1-1180, 2-1109, 3-0932									

16-613

d	14.2	1.53	4.57	14.2	$(Mg_{2.37}Fe_{0.37}X_{0.26})(Al_{1.28}Si_{2.72})O_9(OH)_3 \cdot 4H_2O$						
I/I ₁	100	70	60	100							
Vermiculite											
Rad. CuK+FeK α	Filter	Dia. Guinier		d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl		
Cut off	I/I ₁ Microphotometer (in part)				14.2	100	002	2.04	10b	(0.0.14	
Ref. Mukherjee, Clay Minerals Bull. 5 194-202 (1963)					7.14	15	004	2.01		208 $\frac{1}{2}$	
Sys. Monoclinic						4.76	10	006	1.975	5	1.3.10
H.G. Cc (9)						4.57	60	020	1.82	5b	(2.0.12
a ₀ 5.24	b ₀ 9.17	c ₀ 28.60	A 0.5714	C 3.1189	4.41	10	112	1.79	1.3.12 ⁺		
α	β 94°36'	γ	Z 4	Dx 2.26	4.35	10b	022, 112	1.725	10b	(1.3.12	
Ref. Ibid.					4.25		10b			1.715	312 ⁺
Fa						3.56	25	008	1.695	5	314
n ω β						2.85	30	0.0.10	1.665	15	2.0.14
2V						2.615	50	132, 200 ⁺			1.3.14
D 2.28 mp						2.570	50	132	1.543	10	2.0.14
Ref. Ibid.						2.525	45	202, 204	1.528	70	2.0.16, 060
Sample from Ajmer-Marwar (Indian Museum, #8247).						2.430	5	134	1.514	25	332, 330
Analysis %: 34.92 SiO ₂ , 13.97 Al ₂ O ₃ , 6.25 Fe ₂ O ₃ ,						2.380	35b	(0.0.12	1.502	15	1.3.16, 334
0.52 FeO, 20.37 MgO, 2.15 CaO, 0.32 Na ₂ O, 21.00 H ₂ O.						2.365		206 ⁺			
						2.265	5	220, 136 ⁺			
						2.20b	5b	206, 208 ⁺			
						2.170					
						2.080	5b	138			

859

9-334

d	4.46	3.36	2.57	9.9	$1.3(K,Na)_2O \cdot 0.6(Mg,Fe)O \cdot 3.3(Fe,Al)_2O_3 \cdot 16(Si,Al)_2O_3 \cdot 5H_2O$
I/I ₁	100	100	100	80	
Rad. FEK α A Filter Dia. 9cm Cut off I/I, VISUAL ESTIMATE Ref. MACKENZIE, WALKER AND HART, MIN. MAG. 28 704-714 (1949)					ILLITE
Sys. MONOCLINIC S.G. a ₀ 5.2 b ₀ 9.0 c ₀ 20.0 A C α β 95°30' γ Z 1 Dx Ref. IBID.					0.0.16
n_x 1.568 n_y 1.590 n_z 1.593 Sign - 2V SMALL D mp Color LIGHT GREENISH Ref. IBID. YELLOW					
SAMPLE FROM BALLATER, ABERDEENSHIRE, FORMED BY ALTERATION FROM FELDSPAR, CHEMICAL ANALYSIS GIVEN.					
d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
9.9	80	002	1.345	50 _B	335
4.9	60	004	1.297	60	400
4.46	100	110	1.269	40	402
4.29	40	111	1.245	50	
4.11	40	022			
3.88	60	11 $\bar{3}$			
3.65	50	023			
3.36	100	006			
3.10	50 _B	025, 11 $\bar{5}$			
2.86	60 _B	115			
2.57	100	20 $\bar{2}$			
2.45	50	202, 13 $\bar{3}$			
2.39	60	20 $\bar{4}$, 133			
2.24	50	22 $\bar{1}$			
2.14	60	20 $\bar{6}$, 043			
1.992	60	0.0.10			
1.94	40	206			
1.650	60 _B	(2.0.10 312)			
1.500	80	060, 33 $\bar{1}$			

6-0710

d	1.63	2.71	2.42	3.13	FeS ₂	7	★		
I/I ₁	100	84	66	36				IRON SULFIDE	(PYRITE)
Rad. Cu	λ 1.5405	Filter		d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Dia.	Cut off	Coll.		3.128	36	111	0.8565	7	620
I/I ₁		d corr. abs.?		2.709	84	200	.8261	4	533
Ref.	SWANSON ET AL., NBS CIRCULAR 539 VOL V (1955)			2.423	66	210	.8166	4	622
				2.2118	52	211	.7981	5	631
Sys. CUBIC (F.C.)		S.G. T _H ⁶ - PA3		1.9155	40	220			
a ₀ 5.417	b ₀	c ₀	A C	1.6332	100	311			
α	β	γ	Z 4	1.5640	14	222			
Ref. NBS.				1.5025	20	230			
				1.4448	24	321			
ε α	n ω β	ε γ	Sign	1.2427	12	331			
TV	Dx5.01 mp	Color BLACK		1.2113	14	420			
Ref.				1.1823	7	421			
				1.1548	6	332			
				1.1057	6	422			
				1.0427	27	511			
				1.0060	8	432			
				0.9892	6	521			
				.9577	12	440			
				.9030	15	600			
				.8788	8	611			
SPECT. ANAL. OF SAMPLE: <0.1% AL, CA, MG, SI; <0.01% CO, CU, MO, NI, PB; <0.001% CR, GE, MN; <0.0001% AG. X-RAY PATTERN AT 26°C.									
REPLACES 1-1295, 2-1366, 2-1370, 3-0822									

7-357

d	~ 12	4.54	2.62	24	$(\text{Mg}_{2.85}\text{Mn}_{0.02}\text{Fe}_{0.02})\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot (\text{Ca}, \text{Mg})_{0.07}$	
I/I ₁	100	100	90	27		STEVENSITE (<i>Rosenthalite</i>)
Rad. CuK α λ 1.542 Filter Ni Dia. 11.4 cm. Cut off I/I ₁ VISUAL Ref. BRINDLEY, AM. MIN. 40 239 (1955)						
Sys. S.G. $a = b/\sqrt{3}$ b_0 9.12 c_0 VARIABLE A C a β γ Z D _z Ref. <u>IBID</u> ; ALSO FAUST ET AL. AM. MIN. 38 973 (1953)						
$b \approx$ $n \approx \beta$ γ Sign 2V D mp Color PINK Ref.						
A MONTMORILLONITE-LIKE MINERAL, WITH INTERLAYERING OF TALC- AND SAPONITE-LIKE UNITS. SPECIMEN FROM SPRINGFIELD, N.J. FOR CHEMICAL ANALYSIS, SEE FAUST ET AL.						
	d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
	24	20?	-	0.910	1/2 ⁿ	((0,10)
	12.4	100	~ 001			(55)
	11.2			0.879	3	(39)(60)
	5.0	20	~ 002	0.815	1/2 ⁿ	(57)(64)
	4.9					(1,11)
	4.54	100	(02)(11)	0.759	4 ⁿ	((0,12)
	3.5	50	~ 003			(66)
	3.0			0.727	2 ⁿ	(2,12)
	2.62	90	(13)(20)			((59)(73)
	2.28	20	(04)(22)			
	1.725	40	(15)(24)	0.690	1/2 ⁿ	((1,13)
			(31)			(68)(75)
	1.520	90	(06)(33)	0.653	1 ⁿ	(4,12)
	1.314	70	(26)(40)			(80)
	1.265	20	(17)(35)			
			(42)			
	1.139	10 ⁿ	(08)(44)			
	1.047	10	(28)(37)			
			(51)			
	0.994	3	(19)(46)			
			(53)			
						ⁿ OBSERVED WITH ELECTRON DIFFRACTION, OOL AND HK INDICES ONLY.

24-1035

24-1034



d	3.45	3.10	2.12	5.58	BaSO ₄																																																																																																																														
I/I ₁	100	95	80	2		Barium Sulfate																																																																																																																													
(Barite)																																																																																																																																			
Rad. CuKα ₁ λ 1.54056 Filter Mono. Dia. Cut off 1/1 ₁ Diffractometer 1/1 cor. = 2.6 Ref. NBS Monograph 25, Sec. 10 (1972)					<table border="1"> <thead> <tr> <th>d Å</th> <th>I/I₁</th> <th>hkl</th> <th>d Å</th> <th>I/I₁</th> <th>hkl</th> </tr> </thead> <tr> <td>5.58</td> <td>2</td> <td>110</td> <td>2.106</td> <td>75</td> <td>212, 231</td> </tr> <tr> <td>4.440</td> <td>16</td> <td>020</td> <td>2.057</td> <td>19</td> <td>041</td> </tr> <tr> <td>4.339</td> <td>30</td> <td>101</td> <td>1.9486</td> <td>1</td> <td>222</td> </tr> <tr> <td>3.899</td> <td>50</td> <td>111</td> <td>1.9317</td> <td>7</td> <td>132</td> </tr> <tr> <td>3.773</td> <td>12</td> <td>120</td> <td>1.8575</td> <td>18</td> <td>330</td> </tr> <tr> <td>3.577</td> <td>30</td> <td>200</td> <td>1.7889</td> <td>4</td> <td>400</td> </tr> <tr> <td>3.445</td> <td>100</td> <td>021</td> <td>1.7616</td> <td>8</td> <td>103</td> </tr> <tr> <td>3.319</td> <td>70</td> <td>210</td> <td>1.7584</td> <td>10</td> <td>312, 331</td> </tr> <tr> <td>3.103</td> <td>95</td> <td>121</td> <td>1.7540</td> <td>8</td> <td>410</td> </tr> <tr> <td>2.836</td> <td>50</td> <td>211</td> <td>1.7284</td> <td>4</td> <td>113</td> </tr> <tr> <td>2.735</td> <td>15</td> <td>130</td> <td>1.7239</td> <td>5</td> <td>150</td> </tr> <tr> <td>2.729</td> <td>45</td> <td>002</td> <td>1.6823</td> <td>8</td> <td>023</td> </tr> <tr> <td>2.482</td> <td>13</td> <td>221</td> <td>1.6741</td> <td>14</td> <td>142</td> </tr> <tr> <td>2.447</td> <td>2</td> <td>112, 131</td> <td>1.6699</td> <td>11</td> <td>411</td> </tr> <tr> <td>2.325</td> <td>14</td> <td>022</td> <td>1.6596</td> <td>2</td> <td>420</td> </tr> <tr> <td>2.305</td> <td>6</td> <td>310</td> <td>1.6440</td> <td>3</td> <td>151</td> </tr> <tr> <td>2.282</td> <td>8</td> <td>230</td> <td>1.6378</td> <td>8</td> <td>123</td> </tr> <tr> <td>2.211</td> <td>25</td> <td>122</td> <td>1.6258</td> <td>1</td> <td>340</td> </tr> <tr> <td>2.169</td> <td>3</td> <td>202</td> <td>1.5944</td> <td>8</td> <td>213</td> </tr> <tr> <td>2.121</td> <td>80</td> <td>311, 140</td> <td>1.5906</td> <td>6</td> <td>250</td> </tr> </table>	d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl	5.58	2	110	2.106	75	212, 231	4.440	16	020	2.057	19	041	4.339	30	101	1.9486	1	222	3.899	50	111	1.9317	7	132	3.773	12	120	1.8575	18	330	3.577	30	200	1.7889	4	400	3.445	100	021	1.7616	8	103	3.319	70	210	1.7584	10	312, 331	3.103	95	121	1.7540	8	410	2.836	50	211	1.7284	4	113	2.735	15	130	1.7239	5	150	2.729	45	002	1.6823	8	023	2.482	13	221	1.6741	14	142	2.447	2	112, 131	1.6699	11	411	2.325	14	022	1.6596	2	420	2.305	6	310	1.6440	3	151	2.282	8	230	1.6378	8	123	2.211	25	122	1.6258	1	340	2.169	3	202	1.5944	8	213	2.121	80	311, 140	1.5906	6	250
d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl																																																																																																																														
5.58	2	110	2.106	75	212, 231																																																																																																																														
4.440	16	020	2.057	19	041																																																																																																																														
4.339	30	101	1.9486	1	222																																																																																																																														
3.899	50	111	1.9317	7	132																																																																																																																														
3.773	12	120	1.8575	18	330																																																																																																																														
3.577	30	200	1.7889	4	400																																																																																																																														
3.445	100	021	1.7616	8	103																																																																																																																														
3.319	70	210	1.7584	10	312, 331																																																																																																																														
3.103	95	121	1.7540	8	410																																																																																																																														
2.836	50	211	1.7284	4	113																																																																																																																														
2.735	15	130	1.7239	5	150																																																																																																																														
2.729	45	002	1.6823	8	023																																																																																																																														
2.482	13	221	1.6741	14	142																																																																																																																														
2.447	2	112, 131	1.6699	11	411																																																																																																																														
2.325	14	022	1.6596	2	420																																																																																																																														
2.305	6	310	1.6440	3	151																																																																																																																														
2.282	8	230	1.6378	8	123																																																																																																																														
2.211	25	122	1.6258	1	340																																																																																																																														
2.169	3	202	1.5944	8	213																																																																																																																														
2.121	80	311, 140	1.5906	6	250																																																																																																																														
Sys. Orthorhombic S.G. Pbnm (62) a ₀ 7.1565 b ₀ 8.8811 c ₀ 5.4541 A 0.8058 C 0.6141 α β γ Z 4 Dx 4.472 Ref. Ibid.																																																																																																																																			
εα nωβ εγ Sign 2V D mp Color Colorless Ref. Ibid.																																																																																																																																			
BaCO ₃ was treated with H ₂ SO ₄ . Excess H ₂ SO ₄ was then fumed off and the sample was annealed overnight at 690°C. Pattern at 25°C.																																																																																																																																			
See following card																																																																																																																																			

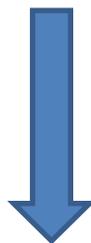
79-1441		Wavelength= 1.54184						C			
Cu4Bi4S9		2 θ	Int	h	k	l	2 θ	Int	h	k	l
Copper Bismuth Sulfide		5.515	344	0	2	0	24.783	765	2	7	0
		8.113	1	1	1	0	25.131	207	0	4	1
		9.418	32	1	2	0	25.232	259	1	3	1
		11.042	2	0	4	0	25.600	520	3	4	0
		11.265	3	1	3	0	26.179	58	1	9	0
		13.435	427	1	4	0	26.299	182	1	4	1
		15.291	222	2	0	0	26.948	131	3	5	0
		15.540	249	2	1	0	27.464	711	2	1	1
		15.799	751	1	5	0	27.836	562	0	10	0
		16.596	61	0	6	0	27.836		2	2	1
		17.411	20	2	3	0	28.091	999*	0	6	1
		18.288	57	1	6	0	28.515	407	3	6	0
		18.900	142	2	4	0	28.593	598	2	3	1
		20.663	15	2	5	0	28.904	118	1	10	0
		20.861	30	1	7	0	29.150	248	1	6	1
		22.189	59	0	8	0	29.440	115	2	9	0
		22.640	9	2	6	0	30.271	18	3	7	0
		23.192	246	0	2	1	30.737	491	2	5	1
		23.192		3	1	0	30.863	561	4	0	0
		23.495	485	1	8	0	30.863		1	7	1
		23.692	500	3	2	0	31.376	81	4	2	0
		23.957	157	1	1	1	31.665	531	1	11	0
		24.442	461	1	2	1	31.810	710	0	8	1
		24.442		3	3	0	31.910	489	2	10	0

Rad.: CuK α λ : 1.54060 Filter: d-sp: Calculated
Cut off: 17.7 Int.: Calculated I/Icor.: 1.62
Ref: Calculated from ICSD using POWD-12++
Ref: Takeuchi, Y., Ozawa, T., Z. Kristallogr., Kristallgeom.,
Kristallphys., Kristallchem., 141, 217 (1975)

Sys.: Orthorhombic S.G.: Pbnm (62)
a: 11.589(5) b: 32.05(1) c: 3.951(5) A: 0.3616 C: 0.1233
 α : β : γ : Z: 4 mp:
Ref: Ibid.

Dx: 6.240 Dm:

Peak height intensity. This entry was previously Y Ba2 Cu2.742
Fe.255 07.294, ICSD 066435 R-factor: 0.080. PSC: oP68. Mwt:
1378.65. Volume[CD]: 1467.51.



2 θ	Int	h	k	l	2 θ	Int	h	k	l	2 θ	Int	h	k	l	2 θ	Int	h	k	l
32.135	213	2	6	1	41.426		5	5	0	49.050	52	2	2	2	55.508	40	2	9	2
32.135		3	8	0	41.545	271	2	11	1	49.107	93	1	15	1	55.508	40	7	1	0
32.413	546	3	0	1	41.545		1	12	1	49.107		0	6	2	55.795	126	4	16	0
32.537	390	3	1	1	42.218	78	4	6	1	49.273	56	6	5	0	55.795	126	7	2	0
32.760	169	1	8	1	42.456	67	2	14	0	49.561	10	2	3	2	56.008	68	3	7	2
32.872	261	4	4	0	42.456		5	6	0	49.561		3	13	1	56.370	168	4	0	2
32.872		3	2	1	43.240	383	3	10	1	49.767	72	5	7	1	56.370	168	4	1	2
33.510	72	3	3	1	43.485	151	4	7	1	49.767		1	6	2	56.500	93	5	14	0
33.510		0	12	0	43.485		3	13	0	50.041	60	4	11	1	56.689	39	4	2	2
33.721	67	2	7	1	43.795	108	5	7	0	50.041		2	4	2	56.689	39	6	7	1
33.956	11	4	5	0	43.795		2	12	1	50.303	95	6	6	0	56.869	138	1	11	2
34.247	94	3	9	0	44.079	17	4	11	0	50.303		5	11	0	56.869	138	3	18	0
34.342	200	3	4	1	44.912	33	4	8	1	50.937	104	2	17	0	57.023	98	2	10	2
34.454	156	2	11	0	45.270	154	2	15	0	50.937	104	1	7	2	57.023		4	3	2
34.454		1	12	0	45.270	154	0	16	0	51.125	109	2	15	1	57.223	31	6	11	0
34.787	31	1	9	1	45.364	122	5	0	1	51.125	109	0	16	1	57.223		3	8	2
35.386	206	3	5	1	45.457	135	5	1	1	51.312	56	0	18	0					
35.472	126	2	8	1	45.736	135	5	2	1	51.312		6	7	0					
36.085	400	0	10	1	45.939	591	0	0	2	51.584	14	0	8	2					
36.626	354	3	6	1	45.939		1	16	0	51.774	33	1	16	1					
36.708	213	4	7	0	46.140	354	3	14	0	51.774		2	6	2					
36.938	32	1	10	1	46.140		2	13	1	51.874	25	3	14	1					
37.064	47	2	12	0	46.197	162	5	3	1	51.874		1	18	0					
37.289	9	1	13	0	46.197		4	12	0	52.076	44	4	12	1					
37.371	6	2	9	1	46.307	85	0	2	2	52.076		3	1	2					
38.047	20	3	7	1	46.512	187	4	9	1	52.258	174	1	8	2					
38.341	5	4	8	0	46.512		1	14	1	52.258		5	12	0					
38.709	83	4	1	1	46.763	37	1	1	2	52.328	134	3	2	2					
38.709		3	11	0	46.763		5	9	0	52.892	131	6	1	1					
38.956	213	4	2	1	46.836	40	5	4	1	52.892		2	7	2					
38.956		5	1	0	47.004	24	1	2	2	53.086	75	6	2	1					
39.275	81	5	2	0	47.048	24	6	0	0	53.326	99	4	15	0					
39.358	75	0	14	0	47.138	20	6	1	0	53.326		3	4	2					
39.358		2	10	1	47.409	22	6	2	0	53.499	73	6	3	1					
39.481	55	4	3	1	47.409	22	1	3	2	53.685	36	1	9	2					
39.633	24	3	8	1	47.649	27	5	5	1	53.685		2	16	1					
39.732	22	2	13	0	47.857	59	6	3	0	53.866	34	2	18	0					
39.796	22	5	3	0	48.200	582	4	10	1	54.075	176	3	5	2					
40.151	18	1	14	0	48.481	146	6	4	0	54.075	176	6	4	1					
40.151	18	4	4	1	48.481	146	4	13	0	54.279	108	3	15	1					
40.516	60	5	4	0	48.628	170	5	6	1	54.570	75	1	17	1					
40.780	70	0	12	1	48.628	170	3	15	0	54.570		0	10	2					
41.087	96	3	12	0	48.786	93	2	1	2	54.962	65	3	6	2					
41.087		4	5	1	48.879	86	1	5	2	54.962		1	19	0					
41.426	161	3	9	1	48.879		1	17	0	55.190	30	1	10	2					