



VNIVERSITAT  VALÈNCIA

Servei de Recursos Humans (PTGAS)

**PROVES SELECTIVES D'ACCÉS,
PEL TORN LLIURE, A L'ESCALA
TÈCNICA SUPERIOR
D'INVESTIGACIÓ (GRUP A,
SUBGRUP A1)**

Subescala de difracció de raigs X

3r exercici

9 de maig de 2025

CAS PRÀCTIC 1

Estudi estructural de materials híbrids polimérico-inorgànics mitjançant SAXS i WAXD

Un equip d'investigació està caracteritzant nous materials híbrids formats per una matriu polimèrica i dominis inorgànics basats en molibdè. A temperatura ambient, aquests materials presenten una **estructura cúbica primitiva simple (cP)** observable per SAXS, amb una ordenació de llarg abast (de diversos nanòmetres) atribuïble a l'autoorganització del sistema híbrid.

Després d'un tractament tèrmic a temperatures superiors a 600 °C, el polímer s'elimina per descomposició i oxidació, i el material resultant és principalment **òxid de molibdè(VI) (MoO_3)**, que cristal·litza en un sistema ortoròmbic amb patrons difractomètrics típics observables mitjançant WAXD.

Els patrons bidimensionals obtinguts per a una mostra representativa tal qual s'ha sintetitzat i després del tractament tèrmic es mostren a la figura 1.

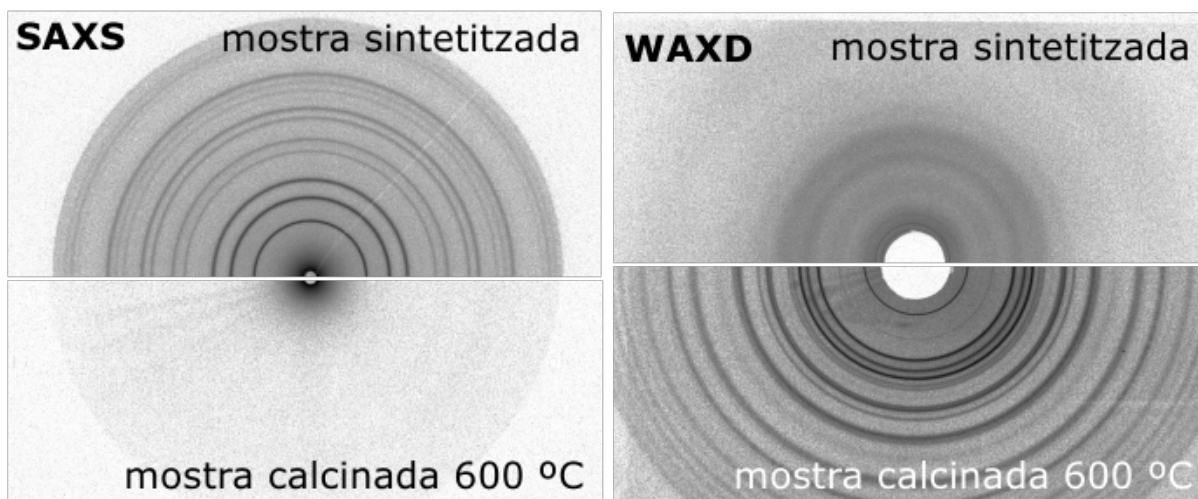


Figura 1. Patrons de SAXS i WAXD per a una mostra representativa de l'estudi.

Objectiu de la investigació: Estudiar els canvis estructurals associats a l'escalfament d'aquests materials utilitzant SAXS i WAXD.

QÜESTIONS:

1. Preparació de mostres (2 punts):

- a) Com preparàrieu les mostres en estat inicial (híbrid) i després del tractament tèrmic per a les tècniques de SAXS i WAXD?
- b) Com condicionàrieu les mostres per evitar la sublimació o descomposició parcial del MoO_3 durant la mesura?
- c) Quin format de mostra (film, pols compactada, capil·lar...) preferiríeu per a cada tècnica?

2. SAXS a temperatura ambient (2 punts):

- a) Quin tipus de senyals difractomètrics esperaríeu veure per una estructura cúbica primitiva? S'ajusten amb els patrons 2D observats?
- b) Com interpretàries la distància entre pics en termes de paràmetre de xarxa i periodicitat dels dominis ordenats?

3. WAXD després del tractament (>600 °C) (2 punts):

- a) Com confirmàrieu si la mostra és purament ortoròmbica o si coexisteixen altres fases (com MoO_2)?
- b) Com podríeu quantificar la cristal·linitat del MoO_3 obtingut?

4. Anàlisi complementària (2 punts):

- a) Si es volgués seguir *in situ* l'evolució de la transició estructural durant l'escalfament, quines opcions instrumentals oferirien SAXS/WAXD?
- b) Com podríeu controlar o estudiar possibles canvis d'oxidació de Mo durant el tractament (de Mo^{6+} a Mo^{5+} o Mo^{4+})?

5. Interpretació final (proposeu d'acord amb el vostre coneixement i opinió, no hi ha una única resposta correcta) (2 punts):

- a) Quina relació creus que podria haver-hi entre la desaparició dels pics SAXS i la formació de MoO_3 cristal·lí?
- b) Quines implicacions té la volatilitat del MoO_3 (punt de sublimació ~700–800 °C) per al processament tèrmic del material?
- c) Com modificàries la composició inicial o les condicions de tractament per tal de controlar millor la morfologia i cristal·linitat final?

CAS PRÀCTIC 2

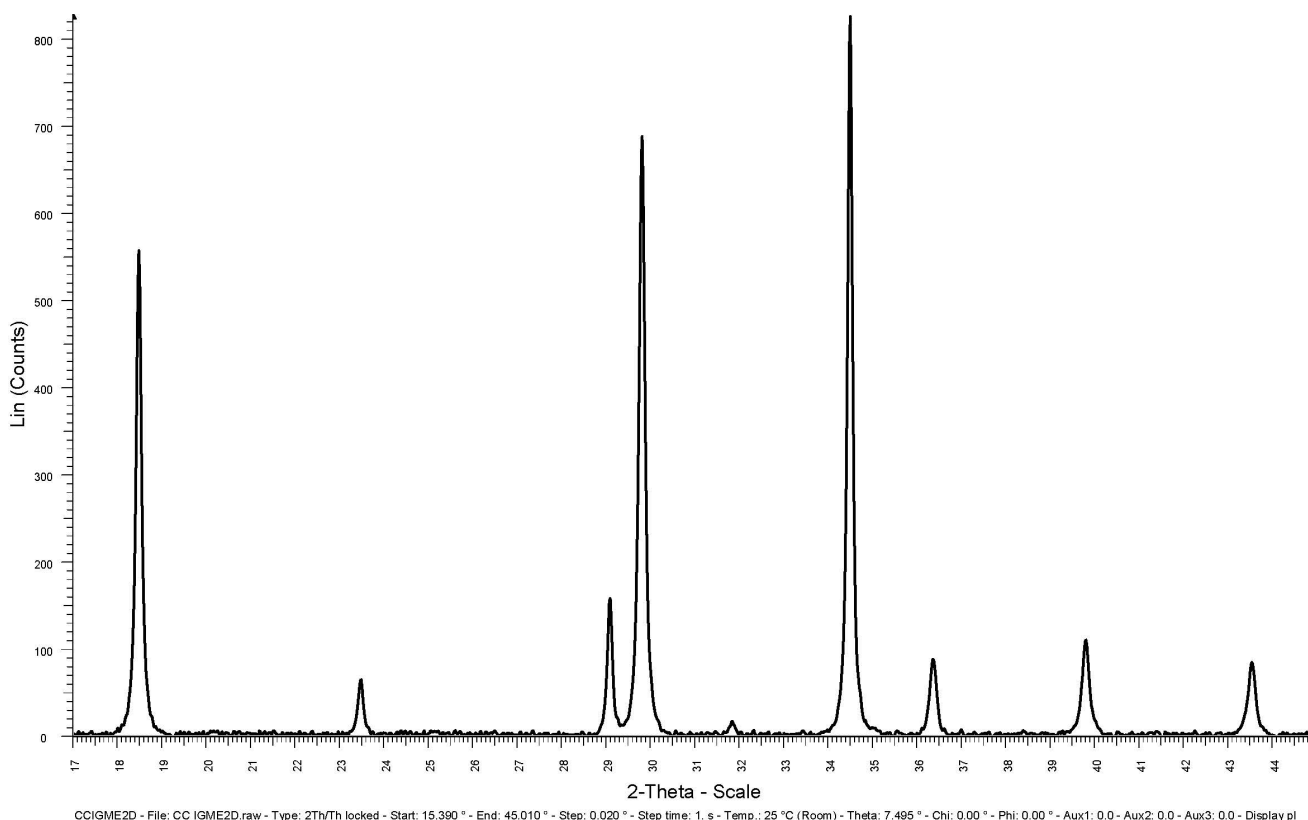
El difractograma adjunt correspon a una mostra anomenada CCIGME2D, barreja de portlandita amb un carbonat, i va ser obtingut amb radiació Cu $K\alpha_1$ $K\alpha_2$, efectuant-se correcció de Rachinger (eliminació del component $K\alpha_2$) i sostracció de fons. A continuació es mostren fitxes de portlandita, i possibles carbonats acompanyants. El registre presenta una desviació (*offset*) constant de 2θ a tot l'interval angular, i no es van observar pics a valors 2θ menors de 18° .

λ Cu $K\alpha_1$ = 1,5406 Å.

Es demana:

- 1) Identificar el carbonat present (7 punts).
- 2) Efectuar una estimació semiquantitativa dels dos constituents, utilitzant el mètode de les intensitats de referència, aplicat als pics de major intensitat, admetent que el valor de FWHM és constant per a tots els pics (3 punts).

Difractograma



FITXES POSSIBLES (1 i 2):

CALCITE

_database_code_amcsd 0000098

CELL PARAMETERS: 4.9900 4.9900 17.0615 90.000 90.000 120.000
 SPACE GROUP: R-3c
 X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
 Cell Volume: 367.916
 Density (g/cm3): 2.710
 MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 26.50717622
 RIR: 3.185

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
23.07	8.10	3.8550	0	1	2	6
29.42	100.00	3.0357	1	0	4	6
31.46	2.43	2.8436	0	0	6	2
36.00	13.71	2.4950	1	1	0	6
39.44	20.16	2.2848	1	1	3	12
43.19	14.26	2.0946	2	0	2	6
47.15	6.16	1.9275	0	2	4	6
47.54	19.67	1.9125	0	1	8	6
48.54	20.02	1.8754	1	1	6	12
56.61	3.73	1.6259	2	1	1	12
57.44	9.18	1.6042	1	2	2	12
60.72	5.28	1.5253	2	1	4	12
61.05	2.41	1.5179	2	0	8	6
61.43	3.18	1.5094	1	1	9	12
63.10	2.29	1.4733	1	2	5	12
64.71	6.84	1.4405	3	0	0	6
65.67	3.91	1.4218	0	0	12	2
69.24	1.51	1.3569	2	1	7	12
70.30	2.13	1.3390	0	2	10	6
72.95	2.69	1.2967	1	2	8	12
77.23	1.93	1.2353	1	1	12	12
81.60	2.24	1.1799	2	1	10	12
83.84	1.57	1.1539	1	3	4	12

Portlandite

_database_code_amcsd 0009875

CELL PARAMETERS: 3.5890 3.5890 4.9110 90.000 90.000 120.000
 SPACE GROUP: P-3m1
 X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
 Cell Volume: 54.783
 Density (g/cm3): 2.246
 MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 25.25582270
 RIR: 3.662

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
18.06	61.35	4.9110	0	0	1	2
28.72	16.95	3.1082	1	0	0	6
34.14	97.31	2.6264	1	0	1	6
34.14	2.69	2.6264	0	1	1	6
47.17	25.54	1.9268	1	0	2	6
47.17	19.26	1.9268	0	1	2	6
50.88	29.44	1.7945	1	1	0	6
54.44	16.27	1.6855	1	1	1	12
56.19	1.40	1.6370	0	0	3	2
59.48	2.31	1.5541	2	0	0	6
62.71	11.29	1.4817	0	2	1	6
64.29	1.17	1.4488	1	1	2	12
64.32	1.42	1.4484	1	0	3	6
64.32	11.11	1.4484	0	1	3	6
71.90	4.22	1.3132	2	0	2	6
71.90	5.63	1.3132	0	2	2	6
77.79	1.83	1.2277	0	0	4	2
79.20	2.84	1.2094	1	1	3	12
84.87	2.64	1.1425	2	1	1	12
84.93	1.57	1.1419	0	1	4	6
86.31	4.16	1.1271	2	0	3	6

FITXES POSSIBLES (3 i 4):

Ankerite
_database_code_amcsd 0001273

CELL PARAMETERS: 4.8240 4.8240 16.1217 90.000 90.000 120.000
SPACE GROUP: R-3
X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
Cell Volume: 324.905
Density (g/cm3): 3.091
MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 29.35603608
RIR: 3.093
RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
16.50	1.91	5.3739	0	0	3	2
23.99	13.10	3.7092	0	1	2	6
30.83	100.00	2.9006	1	0	4	6
33.35	1.55	2.6869	0	0	6	2
37.28	14.90	2.4120	1	1	0	6
41.02	10.32	2.2005	2	-1	3	6
41.02	9.67	2.2005	1	1	3	6
44.82	16.09	2.0221	2	0	2	6
49.12	6.67	1.8546	0	2	4	6
50.27	18.32	1.8151	0	1	8	6
50.87	9.11	1.7949	1	1	6	6
50.87	14.70	1.7949	2	-1	6	6
58.75	2.28	1.5715	2	1	1	6
59.67	6.95	1.5496	-1	3	2	6
59.67	3.57	1.5496	1	2	2	6
61.67	1.34	1.5041	1	0	10	6
63.25	4.26	1.4702	3	-1	4	6
63.25	3.30	1.4702	2	1	4	6
64.22	3.31	1.4503	2	0	8	6
64.83	1.69	1.4381	1	1	9	6
64.83	1.00	1.4381	2	-1	9	6
67.23	8.02	1.3926	3	0	0	6
70.03	3.53	1.3435	0	0	12	2
74.32	2.94	1.2763	0	2	10	6
76.67	1.02	1.2429	-1	3	8	6
76.67	2.85	1.2429	1	2	8	6
82.12	1.90	1.1737	1	1	12	6
86.22	1.21	1.1281	2	1	10	6
86.22	1.41	1.1281	3	-1	10	6
87.62	1.37	1.1136	1	3	4	6

Dolomite
_database_code_amcsd 0000086

CELL PARAMETERS: 4.8150 4.8150 16.1190 90.000 90.000 120.000
SPACE GROUP: R-3
X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
Cell Volume: 323.639
Density (g/cm3): 2.838
MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 24.14536753
RIR: 2.770
RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
22.02	2.05	4.0370	1	0	1	6
24.03	2.21	3.7036	0	1	2	6
30.86	100.00	2.8977	1	0	4	6
33.35	4.60	2.6865	0	0	6	2
35.19	5.19	2.5505	0	1	5	6
37.35	11.44	2.4075	1	1	0	6
41.08	17.99	2.1970	1	1	3	6
41.08	5.68	2.1970	2	-1	3	6
43.78	4.13	2.0677	0	2	1	6
44.91	13.87	2.0185	2	0	2	6
49.20	4.36	1.8518	0	2	4	6
50.29	18.07	1.8142	0	1	8	6
50.93	6.78	1.7929	1	1	6	6
50.93	12.85	1.7929	2	-1	6	6
50.99	1.24	1.7910	0	0	9	2
58.87	2.51	1.5686	3	-1	1	6
58.87	1.93	1.5686	2	1	1	6
59.79	3.00	1.5468	1	2	2	6
59.79	6.96	1.5468	-1	3	2	6
63.37	3.19	1.4678	3	-1	4	6
63.37	2.44	1.4678	2	1	4	6
64.29	2.68	1.4489	2	0	8	6
64.89	2.24	1.4370	2	-1	9	6
65.98	2.73	1.4159	-1	3	5	6
67.37	6.67	1.3900	3	0	0	6
70.05	3.72	1.3432	0	0	12	2
72.70	2.17	1.3006	2	1	7	6
74.39	2.92	1.2752	0	2	10	6
76.78	2.53	1.2414	1	2	8	6
82.17	1.87	1.1730	1	1	12	6
86.33	1.01	1.1269	2	1	10	6
86.33	1.43	1.1269	3	-1	10	6
87.81	1.52	1.1116	1	3	4	6

CAS PRÀCTIC 3

Identificació de filosilicats en argiles.

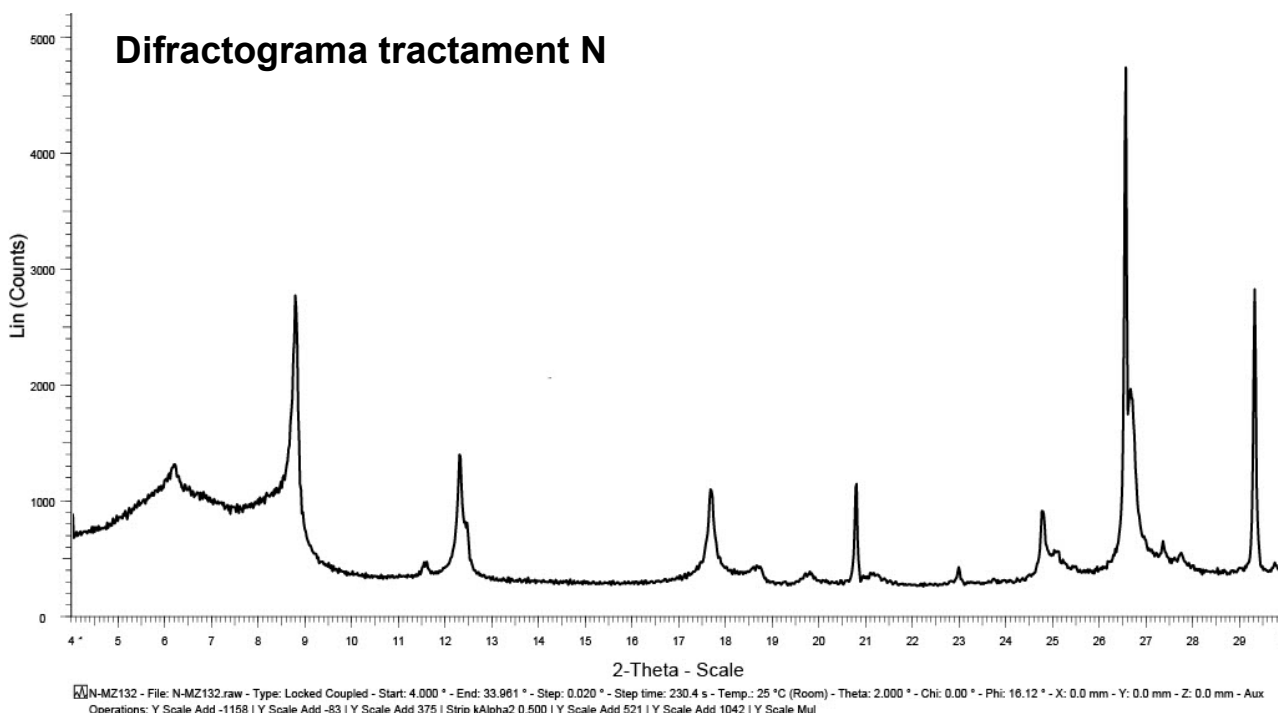
Les argiles són materials molt estudiats en geologia, ciències del sòl, ciències de materials, etc. Presenten com a constituents principals filosilicats, la identificació dels quals en difracció de raigs X de pols, utilitzant únicament registres de difracció de la mostra de pols desorientada no permet distingir els diferents grups de filosilicats en ser els difractogrames de pols molt semblants. Per a la determinació dels filosilicats es recorre a difractogrames de mostres orientades obtingudes a partir de suspensions aquoses de la fracció fina del material sotmeses a diversos tractaments, almenys tres: assecada a temperatura ambient (N), escalfada a 550 °C durant 2 hores (Q), i tractada amb etilenglicol durant 12 hores (E).

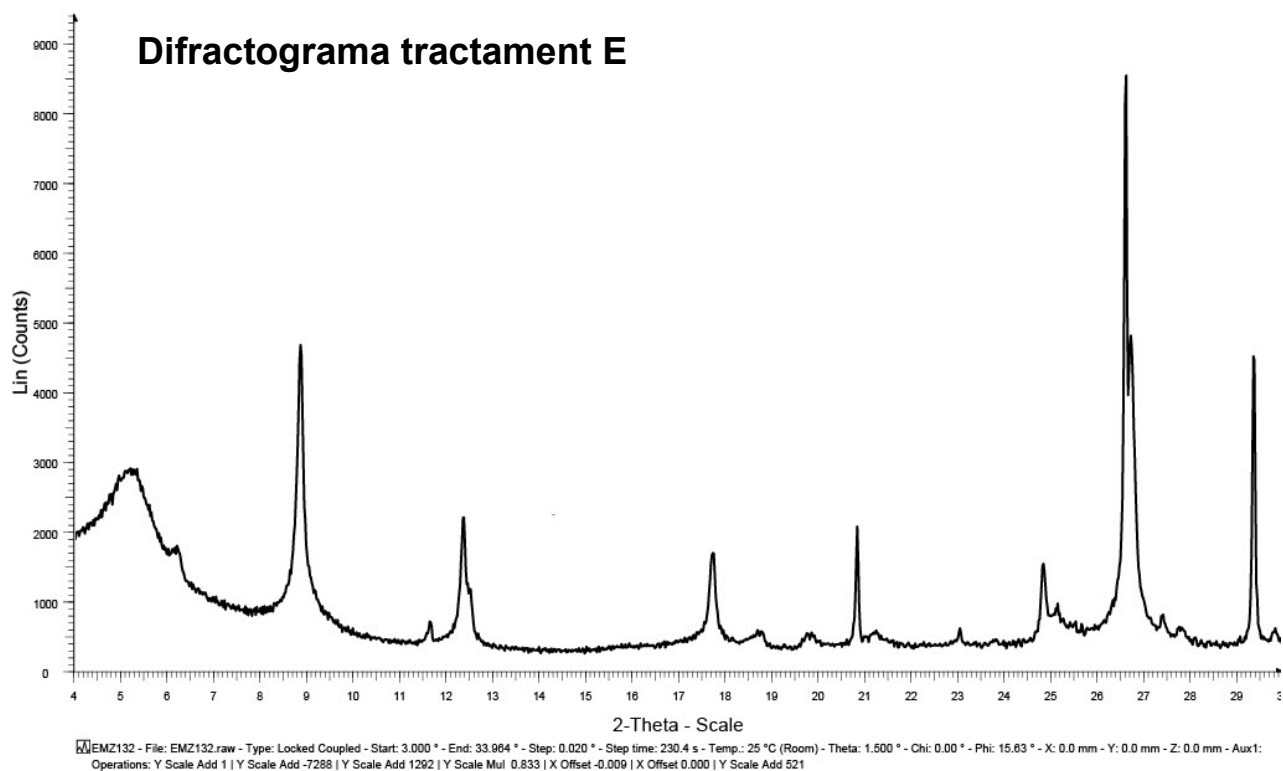
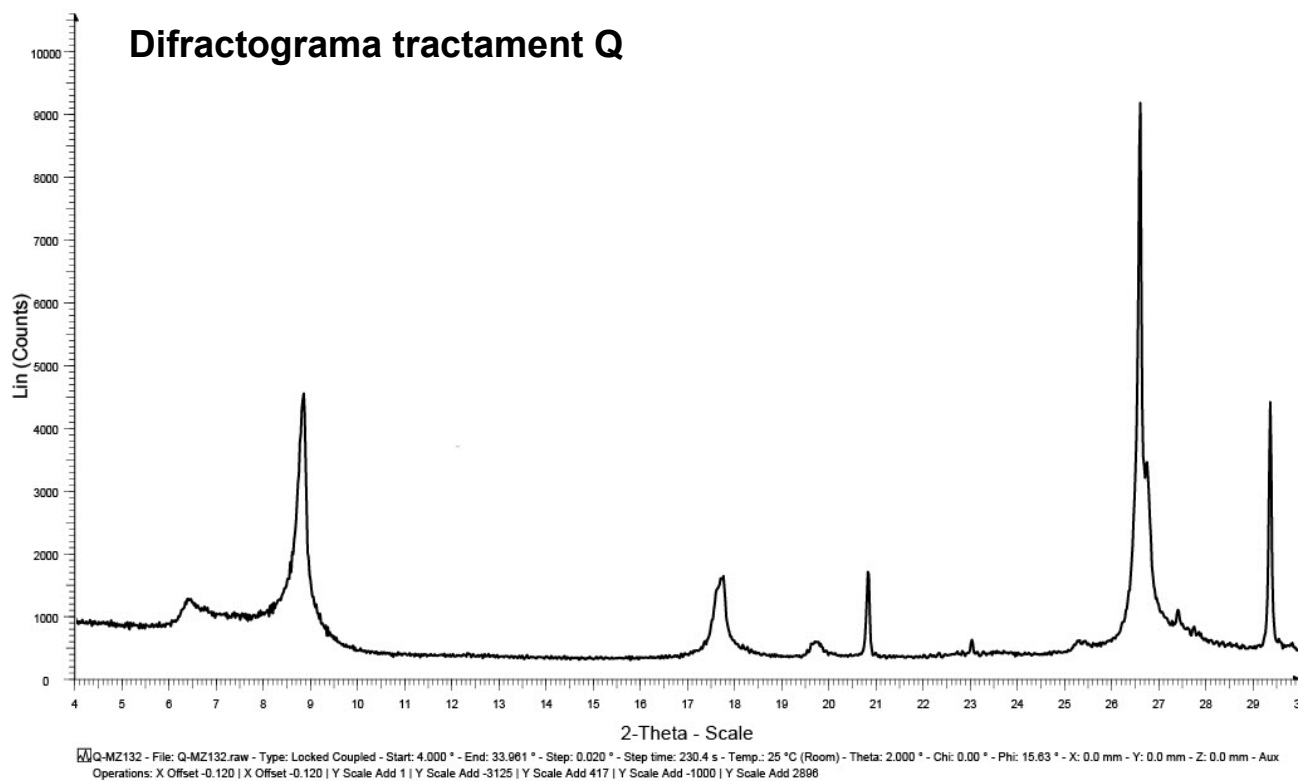
Exercici:

Es presenten difractogrames de les mostres MZ132, amb els tractaments N, Q i E esmentats, i s'aporten fitxes de la base de dades AMSD (American Mineralogical Society).

- 1) Es tracta de mesurar els espaiats en l'interval angular 2 theta entre 4 i 22°, identificar els constituents entre els minerals, les fitxes dels quals s'aporten (6 punts).
- 2) Es tracta d'identificar els filosilicats presents entre les fitxes aportades d'illita, caolinita, clorita, montmorillonita i vermiculita. La mostra conté a més altres constituents com a quars, guix, calcita i altres (3 punts).
- 3) Si escau, proposa algun criteri addicional per a una identificació més precisa (1 punt).

Els registres corresponen a radiació Cu K α ₁, després de l'eliminació de component K α ₂. λ Cu K α ₁ = 1,5406 Å.





Kaolinite

Gruner W

Zeitschrift fur Kristallographie 83 (1932) 75-88

The crystal structure of kaolinite

_cod_database_code 1011045

_database_code_amcsd 0017947

CELL PARAMETERS: 5.1480 8.9200 14.5350 90.000 100.200 90.000

SPACE GROUP: Cc

X-RAY WAVELENGTH: 1.541838

Cell Volume: 656.901

Density (g/cm3): 2.569

MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 8.502879376

RIR: 1.078

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
12.37	100.00	7.1526	0	0	2	1
20.16	19.70	4.4055	1	1	0	2
20.16	28.35	4.4055	-1	1	1	2
20.86	25.36	4.2579	0	2	1	2
22.01	21.61	4.0391	1	1	1	2
22.01	28.36	4.0391	-1	1	2	2
23.51	26.35	3.7845	0	2	2	2
24.90	56.10	3.5763	0	0	4	1
25.32	6.20	3.5171	1	1	2	2
25.32	13.95	3.5171	-1	1	3	2
27.38	10.50	3.2573	0	2	3	2
29.65	7.83	3.0129	1	1	3	2
32.08	3.55	2.7901	0	2	4	2
34.65	7.73	2.5884	1	1	4	2
34.66	4.38	2.5884	-1	1	5	2
34.99	8.86	2.5644	1	3	0	2
35.43	9.01	2.5333	2	0	0	1
35.43	12.10	2.5333	-2	0	2	1
36.13	20.53	2.4857	-1	3	2	2
37.34	3.11	2.4082	0	2	5	2
37.73	10.27	2.3842	0	0	6	1
38.34	67.42	2.3480	1	3	2	2
39.80	1.92	2.2651	2	0	2	1
39.80	29.09	2.2651	-2	0	4	1
40.14	2.22	2.2467	1	1	5	2
40.14	4.82	2.2466	-1	1	6	2
40.45	1.50	2.2300	0	4	0	2
40.97	1.06	2.2028	2	2	0	2
40.97	3.19	2.2028	-2	2	2	2
41.45	1.87	2.1785	-1	3	4	2
42.47	1.16	2.1284	2	2	1	2
43.02	1.54	2.1026	0	2	6	2
44.87	1.36	2.0200	0	4	3	2
44.88	2.92	2.0195	2	2	2	2
45.33	14.76	2.0008	1	3	4	2
45.99	1.20	1.9735	-1	1	7	2
47.52	3.54	1.9136	2	0	4	1
47.52	6.37	1.9136	-2	0	6	1

Illite

Drits V A, Zviagina B B, McCarty D K, Salyn A L

American Mineralogist 95 (2010) 348-361

Factors responsible for crystal-chemical variations in the solid solutions from illite to aluminoceladonite and from glauconite to celadonite

Locality: Silver caldera, San Juan Mountains, Colorado

Sample Name: RM30

_database_code_amcsd 0005015

CELL PARAMETERS: 5.2021 8.9797 10.2260 90.000 101.570 90.000

SPACE GROUP: C2/m

X-RAY WAVELENGTH: 1.541838

Cell Volume: 467.984

Density (g/cm3): 2.820

MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 7.451790421

RIR: 0.860

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
8.83	39.54	10.0182	0	0	1	2
17.71	17.67	5.0091	0	0	2	2
19.77	50.68	4.4899	0	2	0	2
20.45	27.88	4.3433	-1	1	1	4
21.69	21.03	4.0972	0	2	1	4
23.32	3.23	3.8146	1	1	1	4
24.38	100.00	3.6504	-1	1	2	4
26.66	30.93	3.3434	0	2	2	4
26.69	30.40	3.3394	0	0	3	2
29.14	81.94	3.0647	1	1	2	4
30.58	20.47	2.9234	-1	1	3	4
33.44	29.99	2.6795	0	2	3	4
34.54	9.91	2.5971	-2	0	1	2
34.76	22.12	2.5810	1	3	0	4
35.01	48.96	2.5631	-1	3	1	4
35.22	22.25	2.5482	2	0	0	2
35.85	5.52	2.5046	0	0	4	2
36.20	6.38	2.4812	-2	0	2	2
36.40	2.33	2.4682	1	1	3	4
36.83	11.95	2.4402	1	3	1	4
37.55	14.50	2.3955	-1	3	2	4
38.06	1.55	2.3643	-1	1	4	4
38.15	11.08	2.3591	2	0	1	2
39.97	1.64	2.2557	-2	0	3	2
40.11	2.74	2.2481	-2	2	1	4
40.17	5.13	2.2449	0	4	0	2
40.71	7.21	2.2162	2	2	0	4
40.93	2.55	2.2050	1	3	2	4
41.21	6.24	2.1906	0	4	1	4
41.59	4.82	2.1717	-2	2	2	4
42.01	19.75	2.1506	-1	3	3	4
42.93	9.94	2.1068	2	0	2	2
43.33	8.38	2.0884	2	2	1	4
44.97	4.33	2.0156	-2	2	3	4
45.26	17.62	2.0036	0	0	5	2
45.40	7.37	1.9977	-2	0	4	2

Chlorite

Lister J S, Bailey S W
American Mineralogist 52 (1967) 1614-1631
Chlorite polytypism: IV. Regular two-layer structures
refined structure
_database_code_amcsd 0000162

CELL PARAMETERS: 5.3350 9.2400 28.7350 90.000 90.000 90.000

SPACE GROUP: C1

X-RAY WAVELENGTH: 1.541838

Cell Volume: 1416.503

Density (g/cm3): 2.561

MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 7.069927399

RIR: 0.899

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
6.15	100.00	14.3675	0	0	2	1
12.32	71.11	7.1838	0	0	4	1
18.53	65.38	4.7892	0	0	6	1
19.21	8.64	4.6202	1	1	0	1
19.21	9.94	4.6202	-1	1	0	1
19.21	8.01	4.6200	0	2	0	1
19.46	5.17	4.5616	1	-1	1	1
19.46	3.75	4.5616	1	1	1	1
19.46	3.99	4.5616	-1	-1	1	1
19.46	3.56	4.5616	-1	1	1	1
20.19	1.16	4.3984	1	-1	2	1
20.19	7.74	4.3984	1	1	2	1
20.19	1.50	4.3984	-1	-1	2	1
20.19	6.24	4.3984	-1	1	2	1
20.19	6.07	4.3982	0	-2	2	1
20.19	16.20	4.3982	0	2	2	1
21.35	2.82	4.1614	1	-1	3	1
21.35	2.54	4.1614	1	1	3	1
21.35	2.77	4.1614	-1	-1	3	1
21.35	3.22	4.1614	-1	1	3	1
22.89	7.22	3.8859	1	-1	4	1
22.89	2.39	3.8859	1	1	4	1
22.89	8.16	3.8859	-1	-1	4	1
22.89	2.24	3.8859	-1	1	4	1
22.89	10.97	3.8858	0	-2	4	1
24.72	1.65	3.6008	1	-1	5	1
24.72	1.98	3.6008	1	1	5	1
24.72	2.20	3.6008	-1	-1	5	1
24.72	1.80	3.6008	-1	1	5	1
24.79	59.24	3.5919	0	0	8	1
26.81	3.62	3.3251	1	1	6	1
26.81	3.62	3.3251	-1	1	6	1
26.81	7.31	3.3250	0	2	6	1
29.10	1.61	3.0687	1	-1	7	1
29.10	1.72	3.0687	1	1	7	1
29.10	1.35	3.0687	-1	1	7	1
31.12	17.25	2.8735	0	0	10	1
31.55	1.93	2.8357	1	-1	8	1

Montmorillonite

Viani A, Gualtieri A, Artioli G

American Mineralogist 87 (2002) 966-975

The nature of disorder in montmorillonite by simulation of X-ray powder patterns

Note: Structural simulation model

_database_code_amcsd 0002868

CELL PARAMETERS: 5.1800 8.9800 15.0000 90.000 90.000 90.000

SPACE GROUP: P1

X-RAY WAVELENGTH: 1.541838

Cell Volume: 697.746

Density (g/cm3): 1.801

MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 103.9485592

RIR: 18.798

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
5.89	100.00	15.0000	0	0	1	1
17.74	2.93	5.0000	0	0	3	1
19.77	2.29	4.4900	0	2	0	1
20.65	1.28	4.3014	0	-2	1	1
20.65	1.28	4.3014	0	2	1	1
20.66	1.36	4.2988	-1	-1	1	1
20.66	1.37	4.2988	-1	1	1	1
23.10	1.71	3.8505	-1	-1	2	1
23.10	1.71	3.8505	-1	1	2	1
29.78	1.07	3.0000	0	0	5	1

=====

XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107.

Vermiculite

Gruner J W

American Mineralogist 19 (1934) 557-575

The structures of vermiculites and their collapse by dehydration

Locality: Structure results from data of many samples

_database_code_amcsd 0000012

CELL PARAMETERS: 5.3100 9.2000 28.4600 90.000 97.140 90.000

SPACE GROUP: Cc

X-RAY WAVELENGTH: 1.541838

Cell Volume: 1379.546

Density (g/cm3): 1.816

MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 120.7170254

RIR: 21.644

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
6.26	100.00	14.1197	0	0	2	1
12.54	1.13	7.0598	0	0	4	1
19.33	1.82	4.5922	-1	1	1	2
21.50	1.30	4.1329	0	2	3	2
22.52	1.19	3.9487	1	1	3	2
25.23	1.27	3.5299	0	0	8	1
31.69	1.10	2.8239	0	0	10	1
35.42	2.06	2.5340	-1	3	4	2
35.43	1.01	2.5336	2	0	2	1
37.90	2.06	2.3737	-1	3	6	2
37.91	1.00	2.3734	2	0	4	1

=====

XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107.

Quartz

Glinnemann J, King H E, Schulz H, Hahn T, La Placa S J, Dacol F
Zeitschrift fur Kristallographie 198 (1992) 177-212
Crystal structures of the low-temperature quartz-type phases of SiO₂ and
GeO₂ at elevated pressure
P = 0.0 GPa
_database_code_amcsd 0011007

CELL PARAMETERS: 4.9210 4.9210 5.4163 90.000 90.000 120.000
SPACE GROUP: P3₁21
X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
Cell Volume: 113.590
Density (g/cm³): 2.635
MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 35.49608771
RIR: 4.387

RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
20.84	20.26	4.2617	1	0	0	6
26.61	30.19	3.3492	0	1	1	6
26.61	69.81	3.3492	1	0	1	6
36.52	6.99	2.4605	1	1	0	3
39.42	6.17	2.2857	0	1	2	6
40.26	3.28	2.2402	1	1	1	6
42.42	5.36	2.1309	2	0	0	6
45.76	2.22	1.9829	0	2	1	6
45.76	1.05	1.9829	2	0	1	6
50.09	12.89	1.8211	1	1	2	6
54.82	3.27	1.6746	2	0	2	6
55.26	1.66	1.6624	1	0	3	6
59.91	5.05	1.5439	2	1	1	6
59.91	4.24	1.5439	1	2	1	6
63.96	1.81	1.4556	1	1	3	6
67.68	1.48	1.3844	1	2	2	6
67.68	4.44	1.3844	2	1	2	6
68.06	5.58	1.3775	0	2	3	6
68.06	1.46	1.3775	2	0	3	6
68.26	4.38	1.3741	3	0	1	6
73.36	1.83	1.2905	0	1	4	6
75.59	2.03	1.2580	0	3	2	6
79.79	2.51	1.2019	1	2	3	6
81.06	2.63	1.1863	1	1	4	6

=====

XPOW Copyright 1993 Bob Downs, Ranjini Swaminathan and Kurt Bartelmehs
For reference, see Downs et al. (1993) American Mineralogist 78, 1104-1107.

Gypsum
Boeyens J C A, Ichharam V V H
Zeitschrift für Kristallographie 217 (2002) 9-10
Redetermination of the crystal structure of calcium sulphate dihydrate,
CaSO₄*2H₂O
Locality: synthetic
_database_code_amcsd 0011093

CELL PARAMETERS: 6.2840 15.2000 6.5230 90.000 127.410 90.000
SPACE GROUP: C2/c
X-RAY WAVELENGTH: 1.541838
Cell Volume: 494.899
Density (g/cm³): 2.310
MAX. ABS. INTENSITY / VOLUME**2: 12.00207308
RIR: 1.691
RIR based on corundum from Acta Crystallographica A38 (1982) 733-739

2-THETA	INTENSITY	D-SPACING	H	K	L	Multiplicity
11.64	77.51	7.6000	0	2	0	2
18.71	1.41	4.7423	1	1	0	4
20.75	100.00	4.2811	0	2	1	4
23.41	10.56	3.8000	0	4	0	2
23.43	2.59	3.7970	-1	3	1	4
28.15	4.09	3.1702	-1	1	2	4
29.14	71.18	3.0642	0	4	1	4
31.13	47.99	2.8730	-2	2	1	4
31.19	3.09	2.8674	-2	0	2	2
32.11	9.31	2.7875	1	1	1	4
32.80	1.09	2.7305	-1	3	2	4
33.40	35.89	2.6828	-2	2	2	4
34.55	3.75	2.5964	1	5	0	4
34.62	2.12	2.5906	0	0	2	2
35.99	11.05	2.4957	2	0	0	2
36.31	1.15	2.4744	1	3	1	4
36.65	6.87	2.4521	0	2	2	4
37.41	3.76	2.4036	-2	4	1	4
40.69	13.18	2.2174	-1	5	2	4
42.22	1.79	2.1405	0	4	2	4
43.38	15.19	2.0860	2	4	0	4
43.52	4.40	2.0796	-2	2	3	4
43.65	6.20	2.0736	1	5	1	4
43.66	5.57	2.0731	-3	1	2	4
44.26	4.65	2.0465	-1	1	3	4
45.56	3.03	1.9912	1	7	0	4
46.47	2.91	1.9541	-3	1	1	4
47.88	1.15	1.9000	0	8	0	2
47.92	13.69	1.8985	-2	6	2	4
48.44	12.46	1.8792	-2	4	3	4
48.83	2.77	1.8652	1	1	2	4
50.38	12.68	1.8113	0	6	2	4
50.76	5.59	1.7987	2	2	1	4
51.07	1.18	1.7885	-3	3	3	4
51.21	2.03	1.7838	0	8	1	4
51.39	9.81	1.7779	2	6	0	4
53.65	1.03	1.7083	-1	5	3	4