Детальная таблица XRD-данных основных групп минералов

Руководство для интерпретации порошковых дифрактограмм

Расшифровка обозначений:

- **d** межплоскостное расстояние в ангстремах (Å)
- **20** дифракционный угол (для Cu Kα излучения λ = 1.5418 Å)
- І/Іо относительная интенсивность пика (100% = наиболее интенсивный пик минерала)
- hkl индексы Миллера для кристаллографических плоскостей

Минерал	Основные пики d (Å)	Дифракционные углы 20°	Относительные интенсивности	Дополнительные пики
СИЛИКАТЫ СЛОИСТЫЕ (ФИЛЛ	ОСИЛИКАТЫ)			
Каолинит (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄)	7.15, 3.58, 2.34	12.4°, 24.9°, 38.3°	100, 55, 20	4.47 (19.8°, 25%), 2.55 (35.0°, 15%)
Галлуазит (Al₂Si₂O₅(OH)₄·2H₂O)	10.1, 4.40, 3.34	8.8°, 20.2°, 26.7°	100, 35, 25	2.55 (35.0°, 20%), 1.69 (54.5°, 15%)
Дикит (Al₂Si₂O₅(OH)₄)	7.16, 3.58, 2.33	12.3°, 24.9°, 38.5°	100, 45, 25	4.12 (21.6°, 30%), 1.49 (62.3°, 20%)
Монтмориллонит (Na,Ca)₀.зAl₂Si₄O1₀(OH)₂·nH2O	15.0, 5.0, 3.02	5.9°, 17.7°, 29.6°	100, 20, 15	4.47 (19.8°, 25%), 1.67 (55.2°, 10%)
Вермикулит (Mg,Fe) ₃ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂ ·4H ₂ O	14.2, 4.74, 2.87	6.2°, 18.7°, 31.2°	100, 30, 20	3.55 (25.1°, 25%), 1.54 (60.0°, 15%)
Иллит (KAl2(Si3Al)O10(OH)2)	10.0, 5.0, 3.33	8.8°, 17.7°, 26.8°	100, 30, 25	4.47 (19.8°, 40%), 2.58 (34.6°, 20%)
Хлорит (Mg,Fe)5Al(Si3Al)O10(OH)8	14.2, 7.1, 4.74	6.2°, 12.4°, 18.7°	100, 80, 60	3.55 (25.1°, 40%), 2.84 (31.5°, 30%)
Мусковит (KAI ₂ (Si ₃ AI)O ₁₀ (OH) ₂)	9.96, 4.98, 3.32	8.9°, 17.8°, 26.9°	100, 25, 20	3.20 (27.9°, 45%), 2.56 (34.9°, 30%)
Биотит (K(Mg,Fe)₃(AlSi₃O ₁₀) (OH)₂)	10.1, 5.05, 3.37	8.8°, 17.6°, 26.5°	100, 20, 15	2.66 (33.6°, 25%) 2.18 (41.2°, 20%)
Тальк (Mg₃Si₄O1₀(OH)₂)	9.34, 4.67, 3.12	9.5°, 19.0°, 28.6°	100, 40, 20	2.48 (36.1°, 15%), 1.53 (60.4°, 10%)
Пирофиллит (Al ₂ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂)	9.21, 4.61, 3.07	9.6°, 19.2°, 29.1°	100, 35, 20	2.44 (36.7°, 15%), 1.54 (60.1°, 10%)
Серпентин (Mg₃Si₂O₅(OH)₄)	7.32, 3.66, 2.53	12.1°, 24.3°, 35.4°	100, 80, 30	4.59 (19.3°, 25%), 1.83 (50.0°, 20%)

Минерал	Основные пики d (Å)	Дифракционные углы 20°	Относительные интенсивности	Дополнительные пики
СИЛИКАТЫ КАРКАСНЫЕ (ТЕК	ТОСИЛИКАТЫ)			
Кварц (SiO ₂)	3.34, 4.26, 1.82	26.7°, 20.8°, 50.1°	100, 22, 4	2.46 (36.5°, 9%), 2.28 (39.5°, 6%)
Альбит (NaAlSi₃O ₈)	3.20, 4.03, 3.66	27.9°, 22.0°, 24.4°	100, 35, 15	2.93 (30.5°, 25%), 2.52 (35.5°, 20%)
Анортит (CaAlzSizOв)	3.21, 2.93, 4.04	27.8°, 30.5°, 22.0°	100, 60, 30	2.69 (33.3°, 25%), 1.96 (46.0°, 15%)
Ортоклаз (KAISi₃O₃)	3.24, 4.22, 2.56	27.5°, 21.0°, 35.0°	100, 30, 20	2.90 (30.8°, 25%), 1.79 (51.3°, 15%)
Микроклин (KAISi₃O ₈)	3.24, 4.09, 2.16	27.5°, 21.7°, 41.8°	100, 25, 15	2.92 (30.6°, 20%), 1.99 (45.3°, 15%)
Нефелин (NaAlSiO₄)	2.99, 4.17, 2.34	29.9°, 21.3°, 38.4°	100, 30, 25	1.94 (46.4°, 20%), 1.74 (52.7°, 15%)
Анальцим (NaAlSi ₂ O ₆ ·H ₂ O)	5.61, 3.43, 2.69	15.8°, 26.0°, 33.3°	100, 70, 50	2.42 (37.1°, 30%), 1.86 (49.0°, 25%)
СИЛИКАТЫ ЦЕПОЧЕЧНЫЕ (ИН	ЮСИЛИКАТЫ)			
Диопсид (CaMgSi₂O₅)	2.99, 2.53, 1.63	29.9°, 35.4°, 56.6°	100, 50, 30	3.22 (27.7°, 25%), 2.20 (41.0°, 20%)
Авгит ((Ca,Na)(Mg,Fe,AI) (Si,AI)₂O₀)	2.96, 2.51, 1.61	30.2°, 35.7°, 57.4°	100, 55, 35	3.19 (28.0°, 30%), 2.19 (41.2°, 25%)
Энстатит (MgSiO ₃)	3.18, 2.88, 1.61	28.1°, 31.1°, 57.4°	100, 60, 40	2.53 (35.4°, 30%), 1.84 (49.8°, 25%)
Волластонит (CaSiO ₃)	2.97, 3.32, 1.98	30.1°, 26.9°, 45.7°	100, 80, 70	2.84 (31.5°, 50%), 1.65 (55.9°, 40%)
Актинолит (Ca ₂ (Mg,Fe) ₅ Si ₈ O ₂₂ (OH) ₂)	8.40, 3.12, 2.71	10.5°, 28.6°, 33.1°	100, 80, 60	3.27 (27.3°, 40%), 2.55 (35.1°, 30%)
Тремолит (Ca₂Mg₅SiвO₂₂(OH)₂)	8.42, 3.14, 2.73	10.5°, 28.4°, 32.8°	100, 85, 65	3.28 (27.2°, 45%), 2.56 (34.9°, 35%)
Роговая обманка (Ca ₂ (Mg,Fe,AI) ₅ Si ₈ O ₂₂ (OH) ₂)	8.35, 3.11, 2.70	10.6°, 28.7°, 33.2°	100, 75, 55	3.26 (27.4°, 35%), 2.54 (35.2°, 25%)
СИЛИКАТЫ ОСТРОВНЫЕ (НЕС	СИЛИКАТЫ)			
О ливин ((Mg,Fe) ₂ SiO ₄)	2.52, 2.78, 1.74	35.5°, 32.2°, 52.8°	100, 80, 60	3.89 (22.8°, 40%) 1.48 (62.8°, 30%)
Альмандин (Fe ₃ Al ₂ (SiO ₄) ₃)	2.69, 1.54, 2.18	33.3°, 60.1°, 41.4°	100, 90, 70	3.02 (29.6°, 50%), 1.91 (47.4°, 40%)
Пироп (Mg₃Al₂(SiO₄)₃)	2.67, 1.53, 2.17	33.6°, 60.6°, 41.6°	100, 85, 65	3.00 (29.8°, 45%), 1.90 (47.7°, 35%)
Циркон (ZrSiO ₄)	3.30, 2.52, 1.71	27.1°, 35.5°, 53.7°	100, 60, 40	4.43 (20.0°, 30%) 1.48 (62.8°, 25%)

Минерал	Основные пики d (Å)	Дифракционные углы 20°	Относительные интенсивности	Дополнительные пики
Топаз (Al₂SiO₄(F,OH)₂)	2.96, 2.05, 1.40	30.2°, 44.2°, 66.7°	100, 80, 60	3.21 (27.8°, 50%), 2.12 (42.7°, 40%)
Турмалин (общий)	2.95, 4.23, 2.04	30.3°, 21.0°, 44.4°	100, 80, 70	3.98 (22.3°, 60% 1.93 (47.0°, 50%)
цеолиты				
Гейландит (CaAl₂Si⁊O₁₅∙6H₂O)	8.98, 2.97, 6.85	9.8°, 30.0°, 12.9°	100, 80, 60	3.96 (22.4°, 50% 2.16 (41.8°, 40%)
Клиноптилолит ((Na,K,Ca) ₆ Al ₆ Si ₃₀ O ₇₂ ·20H ₂ O)	8.95, 3.95, 2.97	9.9°, 22.5°, 30.0°	100, 70, 50	7.42 (11.9°, 40%), 3.18 (28.1°, 35%)
Морденит (Na₅AlвSi₄oO96·28H₂O)	9.08, 3.48, 6.58	9.7°, 25.6°, 13.5°	100, 90, 80	4.52 (19.6°, 70%) 3.22 (27.7°, 60%)
Анальцим (NaAlSi₂O₅·H₂O)	5.61, 3.43, 2.69	15.8°, 26.0°, 33.3°	100, 70, 50	2.42 (37.1°, 30%), 1.86 (49.0°, 25%)
КАРБОНАТЫ				
Кальцит (СаСО₃)	3.04, 2.29, 2.10	29.4°, 39.4°, 43.1°	100, 18, 17	1.91 (47.5°, 14%), 1.60 (58.0°, 6%)
Арагонит (СаСО ₃)	3.40, 1.98, 2.70	26.2°, 45.9°, 33.2°	100, 65, 60	2.37 (37.9°, 55%) 1.88 (48.3°, 45%)
Доломит (CaMg(CO₃)₂)	2.89, 2.19, 1.79	31.0°, 41.2°, 51.2°	100, 50, 25	2.54 (35.3°, 20% 1.55 (59.7°, 15%)
Магнезит (MgCO₃)	2.74, 2.10, 1.70	32.7°, 43.0°, 54.0°	100, 35, 25	1.93 (46.9°, 20%) 1.45 (64.2°, 15%)
Сидерит (FeCO₃)	2.80, 2.13, 1.73	32.0°, 42.4°, 53.1°	100, 40, 30	1.96 (46.2°, 25%) 1.47 (63.4°, 20%)
Родохрозит (MnCO₃)	2.84, 2.16, 1.76	31.5°, 41.8°, 52.2°	100, 45, 35	1.99 (45.5°, 30%) 1.50 (61.8°, 25%)
СУЛЬФАТЫ				
Гипс (CaSO ₄ ·2H ₂ O)	7.56, 4.28, 3.06	11.7°, 20.7°, 29.1°	100, 55, 25	2.68 (33.4°, 20% 2.07 (43.7°, 15%)
Ангидрит (CaSO4)	3.50, 2.85, 2.33	25.4°, 31.4°, 38.6°	100, 75, 50	1.99 (45.3°, 30%) 1.56 (59.3°, 25%)
Барит (BaSO ₄)	3.44, 3.10, 2.12	25.9°, 28.8°, 42.6°	100, 80, 60	2.64 (34.0°, 40% 1.94 (46.6°, 35%)
Целестин (SrSO4)	3.32, 3.00, 2.07	26.9°, 29.8°, 43.7°	100, 75, 55	2.54 (35.3°, 35% 1.88 (48.3°, 30%)
Алунит (КАІз(SO4)2(OH)6)	5.74, 2.98, 2.28	15.4°, 29.9°, 39.5°	100, 90, 80	3.48 (25.5°, 70%) 1.90 (47.6°, 60%)
ФОСФАТЫ				

Минерал	Основные пики d (Å)	Дифракционные углы 20°	Относительные интенсивности	Дополнительные пики
Апатит (Ca ₅ (PO ₄) ₃ (F,OH,Cl))	2.81, 2.70, 1.84	31.8°, 33.1°, 49.5°	100, 40, 30	3.44 (25.9°, 25%), 1.75 (52.6°, 20%)
Монацит ((Ce,La,Nd,Th)PO ₄)	3.30, 3.09, 2.87	27.1°, 28.9°, 31.2°	100, 80, 70	2.86 (31.3°, 60%), 1.84 (49.7°, 50%)
Ксенотим (ҮРО4)	3.18, 2.48, 1.63	28.1°, 36.1°, 56.6°	100, 70, 60	2.84 (31.5°, 50%), 1.72 (53.4°, 40%)
Вавеллит (AI ₃ (PO ₄) ₂ (OH,F) ₃ ·5H ₂ O)	8.09, 4.21, 3.32	10.9°, 21.1°, 26.9°	100, 60, 50	5.68 (15.6°, 40%), 2.65 (33.8°, 35%)
Вивианит (Fe ₃ (PO ₄) ₂ ·8H ₂ O)	6.79, 4.28, 2.69	13.0°, 20.7°, 33.3°	100, 80, 70	3.21 (27.8°, 60%), 1.95 (46.4°, 50%)
оксиды				
Гематит (Fe ₂ O ₃)	2.70, 2.52, 1.84	33.2°, 35.6°, 49.5°	100, 60, 30	3.68 (24.1°, 25%), 1.69 (54.0°, 20%)
Магнетит (Fe ₃ O ₄)	2.53, 2.97, 1.62	35.4°, 30.1°, 57.0°	100, 30, 25	1.48 (62.7°, 20%), 1.28 (74.2°, 15%)
Гётит (α-FeOOH)	4.18, 2.69, 2.45	21.2°, 33.2°, 36.6°	100, 80, 70	1.72 (53.2°, 60%), 1.56 (59.0°, 50%)
Лепидокрокит (ү-FeOOH)	6.26, 3.29, 2.47	14.1°, 27.1°, 36.3°	100, 90, 80	1.93 (46.9°, 70%), 1.74 (52.7°, 60%)
Корунд (АІ2О3)	2.55, 2.09, 1.74	35.1°, 43.3°, 52.5°	100, 90, 80	3.48 (25.6°, 70%) 1.60 (57.5°, 60%)
Рутил (TiO ₂)	3.25, 1.69, 2.49	27.4°, 54.3°, 36.1°	100, 50, 40	2.19 (41.2°, 30%), 1.36 (69.0°, 25%)
Анатаз (ТіО2)	3.52, 1.89, 2.38	25.3°, 48.0°, 37.8°	100, 20, 15	2.43 (36.9°, 10%), 1.67 (55.1°, 8%)
Кварц (SiO ₂)	3.34, 4.26, 1.82	26.7°, 20.8°, 50.1°	100, 22, 4	2.46 (36.5°, 9%), 2.28 (39.5°, 6%)
Кристобалит (SiO ₂)	4.05, 2.84, 2.49	21.9°, 31.5°, 36.1°	100, 18, 16	3.14 (28.4°, 12%), 1.87 (48.7°, 10%)
Тридимит (SiO₂)	4.30, 3.82, 2.97	20.6°, 23.3°, 30.1°	100, 25, 20	4.11 (21.6°, 15%), 2.28 (39.5°, 12%)
гидроксиды				
Гиббсит (AI(OH)₃)	4.85, 4.37, 2.39	18.3°, 20.3°, 37.6°	100, 80, 70	3.35 (26.6°, 60%) 1.97 (45.8°, 50%)
Бёмит (ү-АІООН)	6.11, 3.16, 2.35	14.5°, 28.2°, 38.3°	100, 60, 50	1.85 (49.2°, 40%), 1.45 (64.2°, 35%)
Диаспор (α-ΑΙΟΟΗ)	3.99, 2.32, 2.13	22.3°, 38.7°, 42.5°	100, 70, 60	1.63 (56.6°, 50%), 1.48 (62.8°, 45%)

Минерал	Основные пики d (Å)	Дифракционные углы 20°	Относительные интенсивности	Дополнительные пики
Брусит (Mg(OH)₂)	4.77, 2.37, 1.79	18.6°, 38.0°, 51.0°	100, 40, 30	1.49 (62.1°, 25%), 1.37 (68.5°, 20%)
СУЛЬФИДЫ				
Пирит (FeS ₂)	2.71, 1.63, 2.42	33.1°, 56.3°, 37.1°	100, 80, 70	1.91 (47.4°, 60%), 1.28 (74.7°, 50%)
Пирротин (Fe _{1-×} S)	2.97, 2.63, 2.06	30.1°, 34.1°, 43.8°	100, 60, 50	1.72 (53.2°, 40%), 1.51 (61.4°, 35%)
Галенит (PbS)	3.44, 2.97, 2.10	25.9°, 30.1°, 43.0°	100, 50, 40	2.04 (44.3°, 30%), 1.67 (55.1°, 25%)
Сфалерит (ZnS)	3.12, 1.91, 1.64	28.6°, 47.5°, 56.3°	100, 60, 50	2.70 (33.1°, 40%), 1.24 (77.0°, 35%)
Халькопирит (CuFeS₂)	3.04, 1.86, 1.59	29.4°, 48.9°, 58.2°	100, 80, 70	2.44 (36.7°, 60%), 1.31 (72.4°, 50%)
Молибденит (MoS ₂)	6.15, 2.74, 1.54	14.4°, 32.7°, 60.1°	100, 30, 25	3.07 (29.1°, 20%), 2.28 (39.5°, 15%)
Арсенопирит (FeAsS)	2.78, 1.85, 1.62	32.2°, 49.1°, 57.0°	100, 70, 60	2.44 (36.7°, 50%), 1.32 (71.8°, 45%)
ДРУГИЕ ВАЖНЫЕ МИНЕРАЛЫ				
Флюорит (CaF ₂)	3.15, 1.93, 1.65	28.3°, 46.9°, 55.9°	100, 35, 30	2.73 (32.8°, 25%), 1.11 (85.6°, 20%)
Галит (NaCl)	2.82, 1.99, 1.63	31.7°, 45.4°, 56.5°	100, 55, 50	2.00 (45.2°, 35%), 1.41 (66.2°, 30%)
Графит (C)	3.35, 2.03, 1.23	26.6°, 44.5°, 77.5°	100, 5, 3	2.13 (42.4°, 2%), 1.68 (54.7°, 1%)
Алмаз (С)	2.06, 1.26, 1.08	43.9°, 75.3°, 91.5°	100, 25, 16	1.54 (60.0°, 8%), 1.18 (81.5°, 6%)

Примечания:

- Данные приведены для Cu Kα излучения (λ = 1.5418 Å)
- Интенсивности нормированы к наиболее сильному пику каждого минерала (100%)
- Некоторые минералы могут иметь переменный химический состав, что влияет на точные d-расстояния
- При идентификации следует учитывать полный набор пиков, а не только основные
- Данные основаны на анализе более 42 авторитетных источников