

Berikut contoh langkah-langkah menganalisis pola XRD dengan nama file “bajaST37.RD”. Ekstensi RD, merupakan file pola XRD dari mesin PANalytical. Tiap mesin XRD mempunyai tipe file tersendiri.

NOTE:

Untuk mengkonversi file pola XRD ke tipe yang lainnya dapat menggunakan aplikasi POWDLL.

Berikut langkah-langkah untuk menganalisis pola XRD menggunakan metode Rietveld dengan aplikasi GSAS.

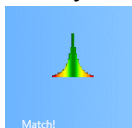
1. SEARCH-MATCH

Pada langkah ini, akan dilakukan pencocokan pola XRD dari sampel dengan pola XRD dari database. Database pola XRD ada beberapa, yaitu JCPDS/ICDD, COD dan lain-lain. Saat pencocokan pola XRD yang menjadi acuan adalah sudut/ d spacing puncak dengan intensitas tertinggi dan komposisi yang sebelumnya diperoleh dari XRF atau EDS (bila sampel batuan/ bahan yang tidak dikenal)

Dari database diperoleh data sistem kristal, space group, parameter kisi, posisi atom dan hkl dari puncak-puncak pola difraksi. Database ICDD PDF2 tidak menyediakan data posisi atom, sehingga diperlukan sumber lain, sedangkan COD sudah disertakan namun jumlah kartu pola difraksi lebih sedikit dibandingkan ICDD. Database ICDD yang menyediakan data posisi atom adalah PDF4, namun lisensinya hanya berlaku satu tahun saja, yang berbeda dengan PDF2.

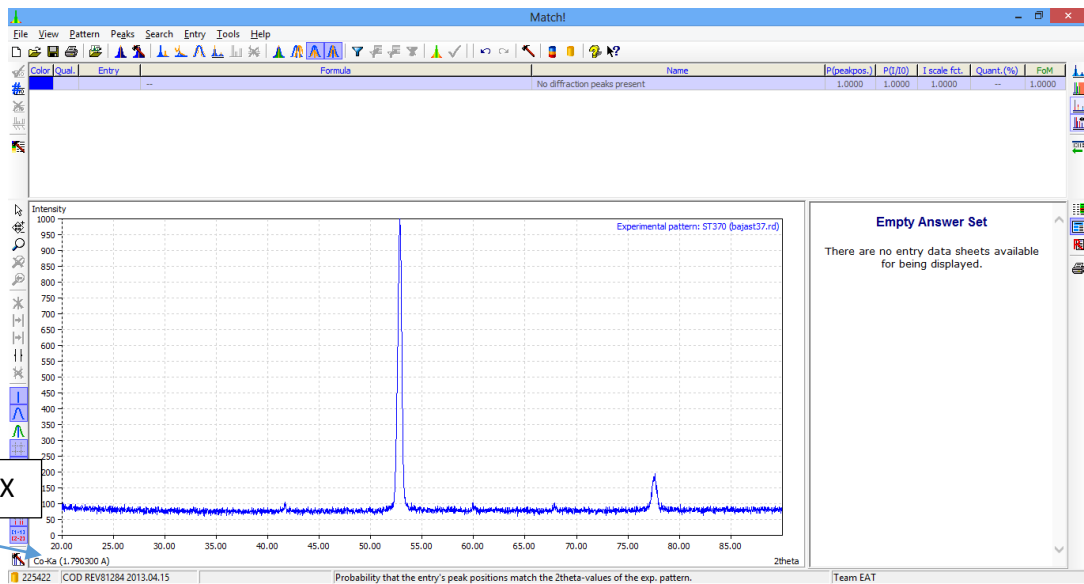
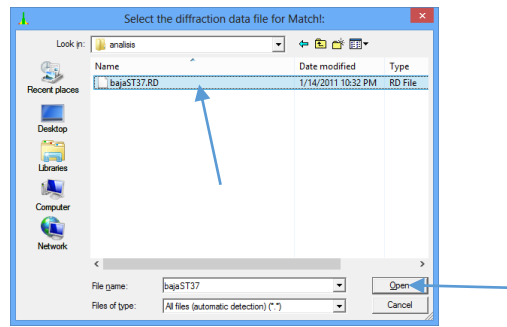
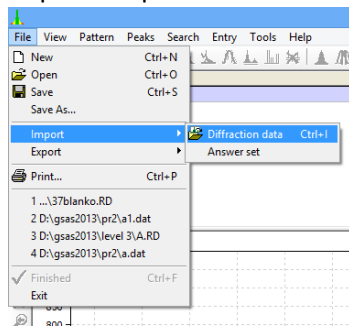
Program yang digunakan pada langkah ini adalah Crystalimpact MATCH!, database yang digunakan adalah COD 20130415.

- a. Menjalankan program Match!



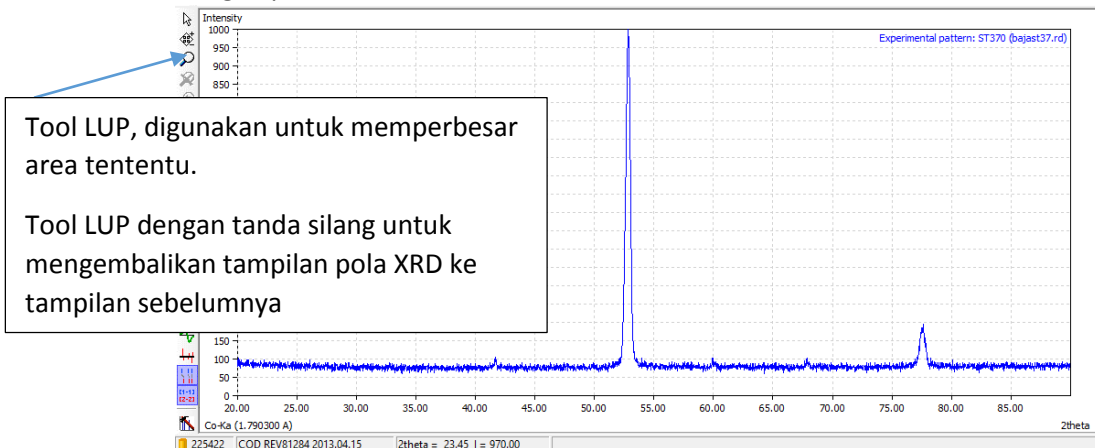
Klik dua kali pada icon tersebut pada desktop untuk menjalankan program Match!

b. Import file pola XRD



Sumber target sinar X

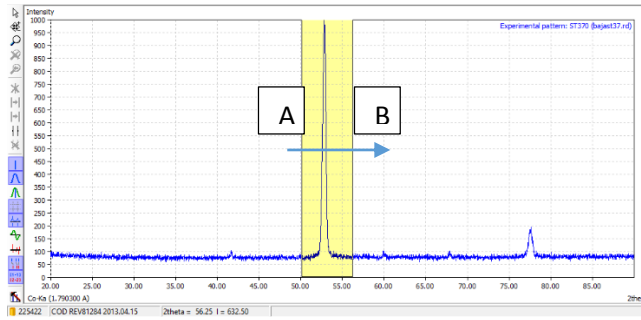
c. Menentukan puncak-puncak yang akan dijadikan acuan untuk pencocokan pola XRD sampel dengan pola XRD database.



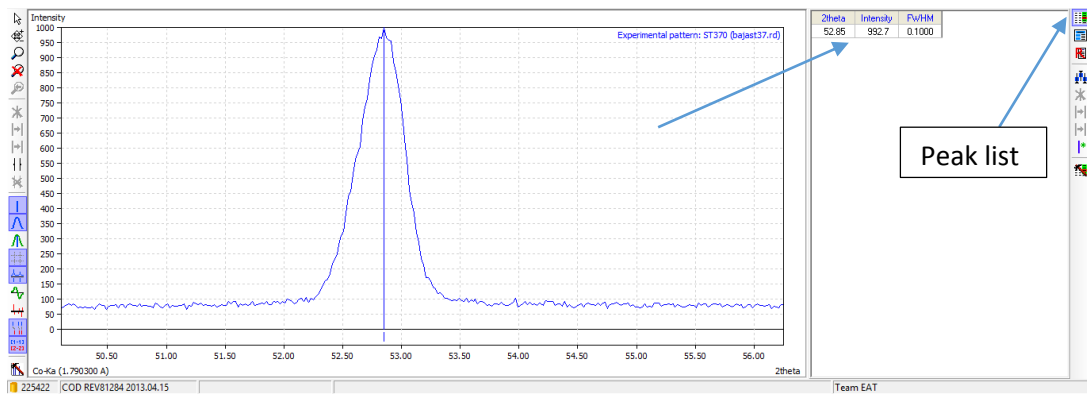
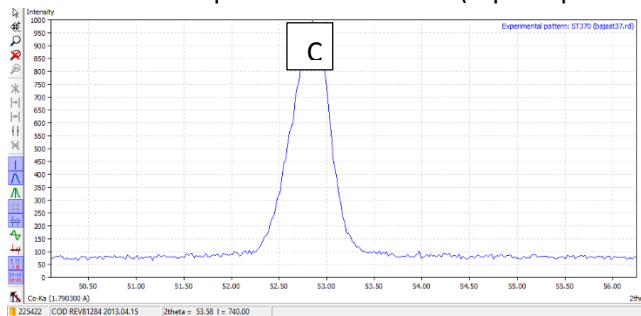
Tool LUP, digunakan untuk memperbesar area tertentu.
 Tool LUP dengan tanda silang untuk mengembalikan tampilan pola XRD ke tampilan sebelumnya

Memperbesar area dilakukan dengan cara,

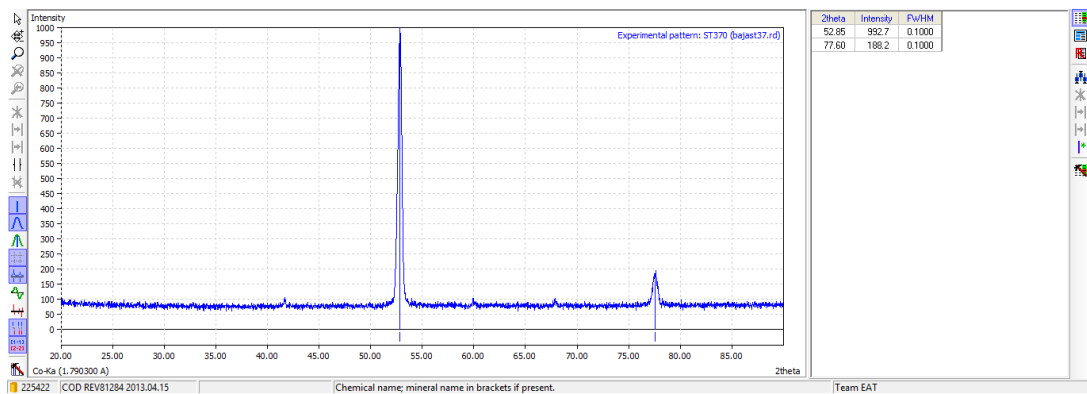
Tekan tombol LUP, lalu klik dan tahan tombol kiri dan pada lokasi A dan seret ke lokasi B lalu lepaskan tombol kiri.



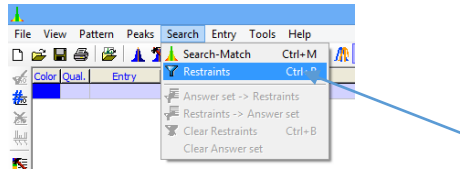
Langkah berikutnya menandai puncak, dengan cara
Klik kanan pada titik C satu kali (tepat dipuncak dengan intensitas yang tertinggi).



Nilai sudut dan intensitas dari puncak yang sudah ditandai ditampilkan data bagian “peak list”. Ulangi untuk puncak2 berikutnya dalam pola XRD dan hasil akhirnya adalah sebagai berikut:

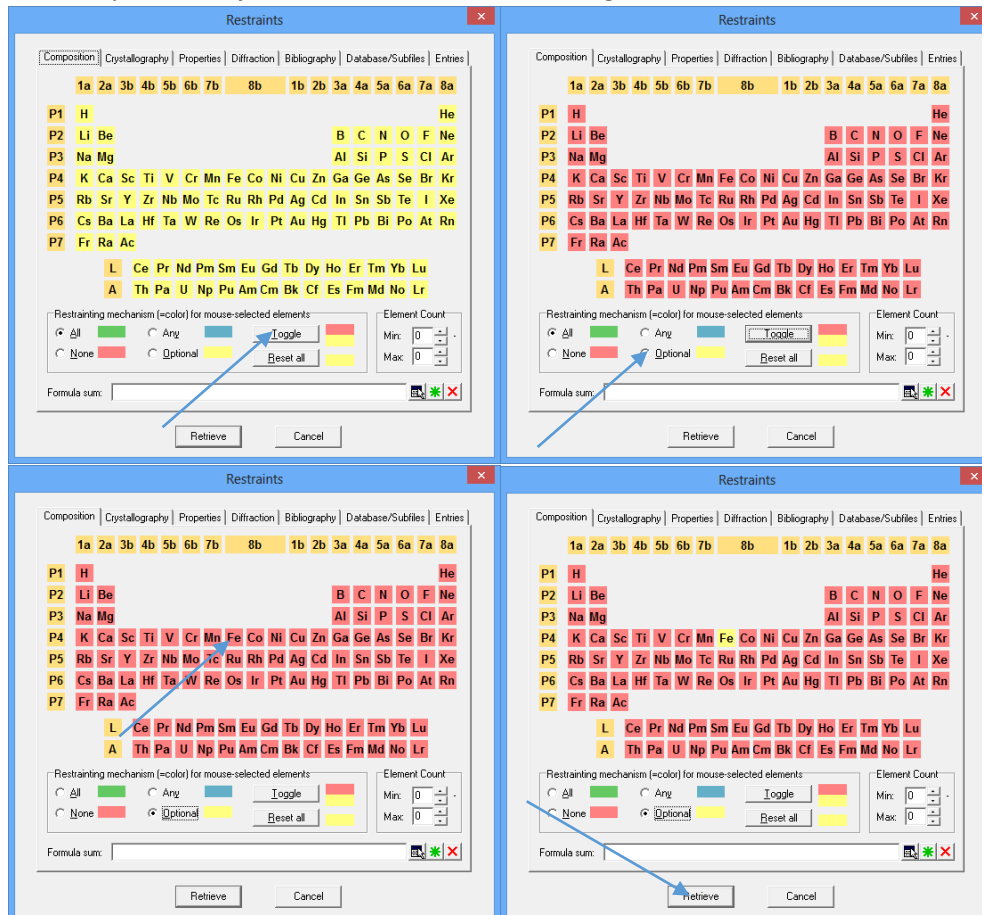


- d. Dari data XRF diketahui baja yang dianalisis unsur utamanya adalah Fe sehingga pencarian yang dilakukan hanya pada elemen Fe saja. Berikut langkah-langkahnya,

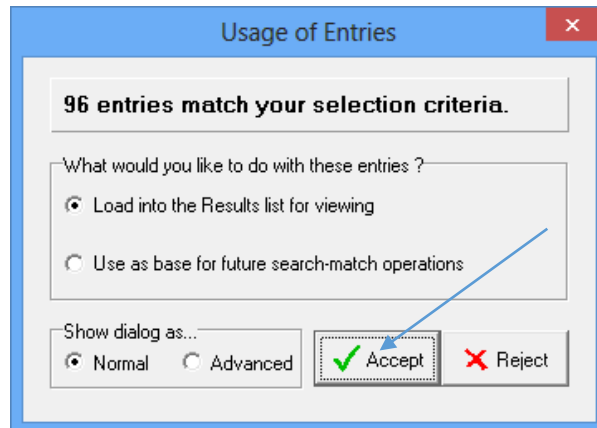


Klik menu Search → Restrains (atau gunakan shortcut CTRL + R), pilihan Search-Match, akan membuat program Match! Melakukan pencocokan dengan database dengan data puncak yang sudah ditandai, pencocokan ini akan memakan waktu dan mungkin tidak akan memperoleh hasil.

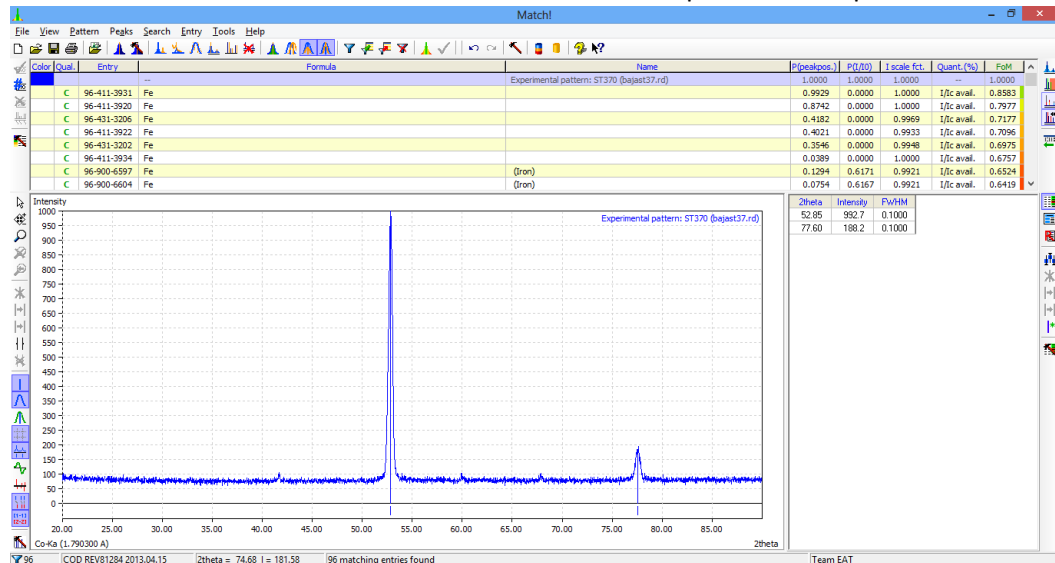
Berikutnya muncul jendela Restrains, lakukan langkah berikut,



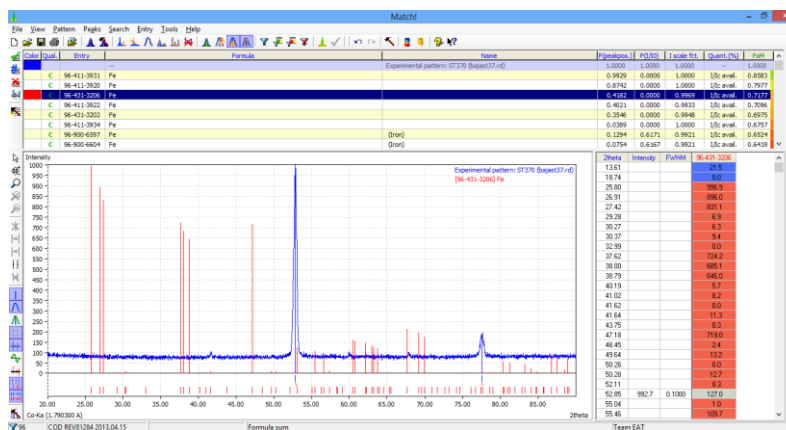
Bila ditemukan hasil, akan ditampilkan jendela berikut,



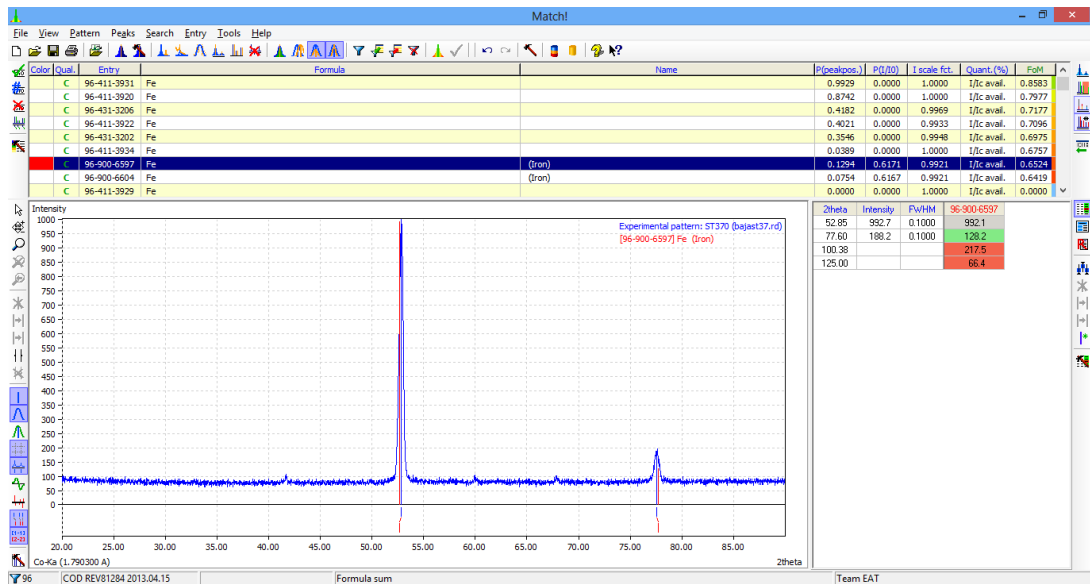
ditampilkan entries pada "entries list"



- e. Menentukan pola XRD database yang cocok dengan pola XRD sampel
Klik salah satu entry pada "entries list" dan lihat pada tampilan pola difraksi apakah ada kecocokan.

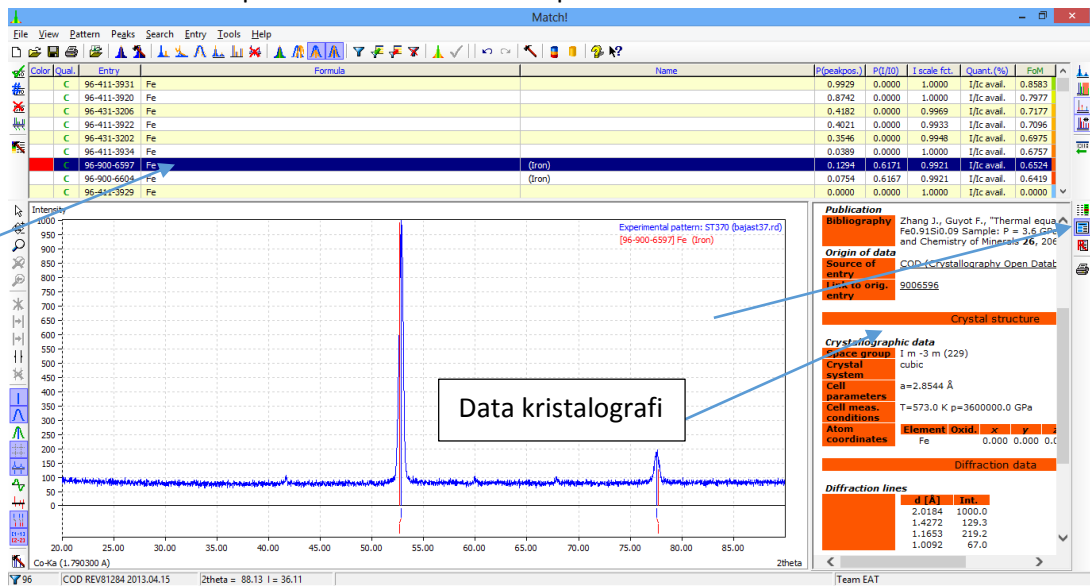


garis merah adalah pola difraksi database dan tidak sepenuhnya bertumpuk dengan pola difraksi sampel. → (tidak cocok)



garis merah adalah pola difraksi database dan sepenuhnya bertumpuk dengan pola difraksi sampel. → (cocok)

untuk melihat data pola difraksi database klik pada ikon “datasheet”



Data ini akan digunakan sebagai “Phase” pada aplikasi GSAS. Data ini dapat dicatat dan dientrikan pada aplikasi GSAS atau diekspor menjadi file CIF. Untuk mengekspornya sebagai berikut,

Pilih dahulu entri yang akan diekspor menjadi file CIF, lalu File → Export → Entry Data

The screenshot shows the Match! software interface. The main window displays an XRD pattern with a fitted curve. A table of peak data is visible at the top, listing parameters like P(peakpos), P(00), I scale, Quant. (%), and FoM. A context menu is open over the peak data table, with 'Entry data' selected. Below the main window, a 'Please enter filename for the file:' dialog box is open, showing the 'Save in:' location as 'analysis' and the 'File name:' as 'Entry 96-900-6597'. The 'Save as type:' is set to 'CIF File (*.cif)'. Blue arrows point from the 'Entry data' menu item to the 'analysis' folder and the 'File name' field in the dialog box.

| Name | P(peakpos) | P(00) | I scale | ft. | Quant. (%) | FoM |
|--------|------------|--------|---------|------|------------|-----|
| | 0.9929 | 0.0000 | 1.0000 | 1/1c | 0.8583 | |
| | 0.8742 | 0.0000 | 1.0000 | 1/1c | 0.7977 | |
| | 0.4182 | 0.0000 | 0.9969 | 1/1c | 0.7177 | |
| | 0.4021 | 0.0000 | 0.9933 | 1/1c | 0.7096 | |
| | 0.3546 | 0.0000 | 0.9948 | 1/1c | 0.6975 | |
| | 0.0389 | 0.0000 | 1.0000 | 1/1c | 0.5753 | |
| (Iron) | 0.1294 | 0.6171 | 0.9921 | 1/1c | 0.6524 | |
| (Iron) | 0.0754 | 0.6167 | 0.9921 | 1/1c | 0.6419 | |
| | 0.0000 | 0.0000 | 1.0000 | 1/1c | 0.0000 | |

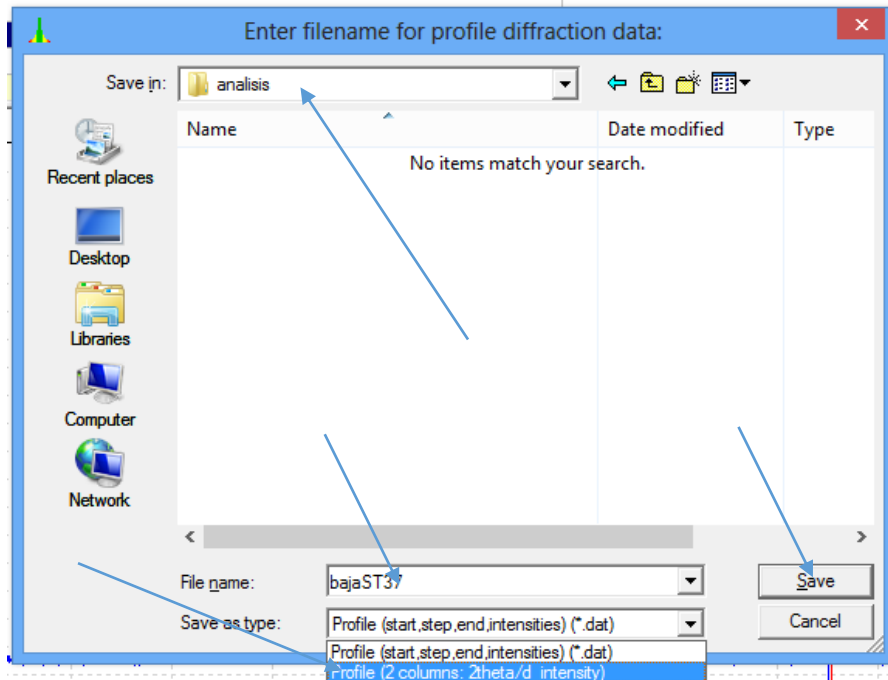
Perhatikan lokasi penyimpanan, entri yang diekspor sesuai dengan nomor dalam database, ada baiknya ditambahkan penanda bahwa file CIF tersebut mengandung elemen apa saja.

- f. Selanjutnya untuk memperoleh file data yang bisa dianalisis GSAS diperlukan program konversi BELLA. Namun BELLA hanya menerima file UDF dan XY. Untuk itu dilakukan ekspor dari program Match! Untuk memperoleh file XY berikut langkahnya,

The screenshot shows the Match! software interface with the 'File' menu open and 'Export' selected. The 'Export' submenu is visible, showing options like 'Profile data', 'Peak data', 'Residual peaks', 'Reference pattern', 'Entry data', 'Pattern graphics', 'Results list', 'Peak list', 'Report', and 'Answer set'. Blue arrows point from the 'Export' menu item to the 'Profile data' option.

File → Export → Profile data

Proses ekspor ini tidak saling bergantung dengan proses Search-Match, sehingga bisa dilakukan meskipun tidak mengetahui komposisi pada sampel.



Pastikan lokasi penyimpanan, ubah “save as type” menjadi “Profile (2 columns: 2Thwtha/d intensity)” dan isikan nama file lalu klik “save” (contoh namafile adalah bajaST37, dan akan diperoleh file **bajaST37.dat**)

- g. Pada tahapan ini penggunaan Match! Sudah selesai dan program bisa ditutup.

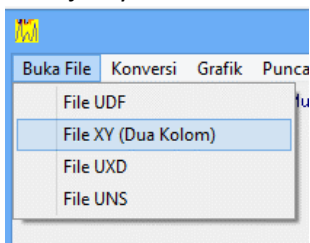
2. PERSIAPAN FILE GSAS DENGAN PROGRAM BELLA

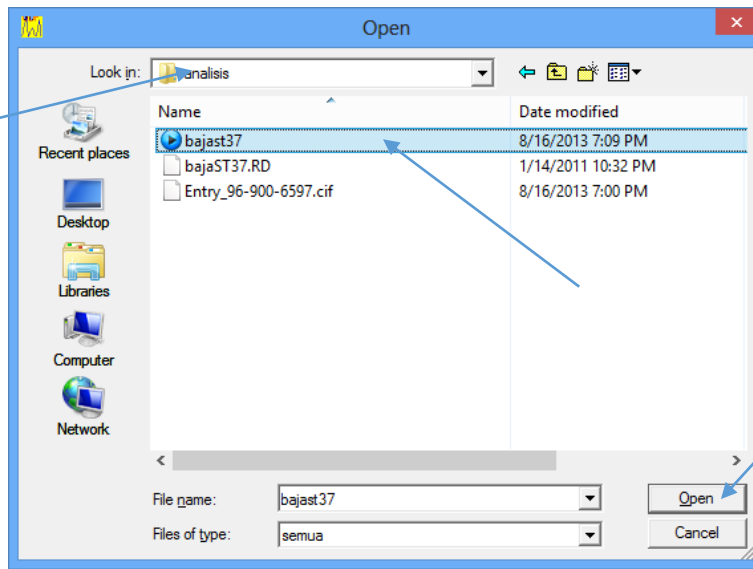
Pada langkah ini, akan dikonversi file XY yang sudah dibuat sebelumnya menjadi file data yang dapat diproses oleh aplikasi GSAS. Selain itu dibuat pula file “instrument parameter” dengan ekstensi PRM yang akan digunakan GSAS untuk mengenali parameter instrumen XRD yang digunakan untuk pengukuran. Program yang akan digunakan adalah BELLA yang dibuat oleh Dr. Muhammad Hikam, berikut langkah-langkahnya,

- a. Konversi file XY menjadi GSAS

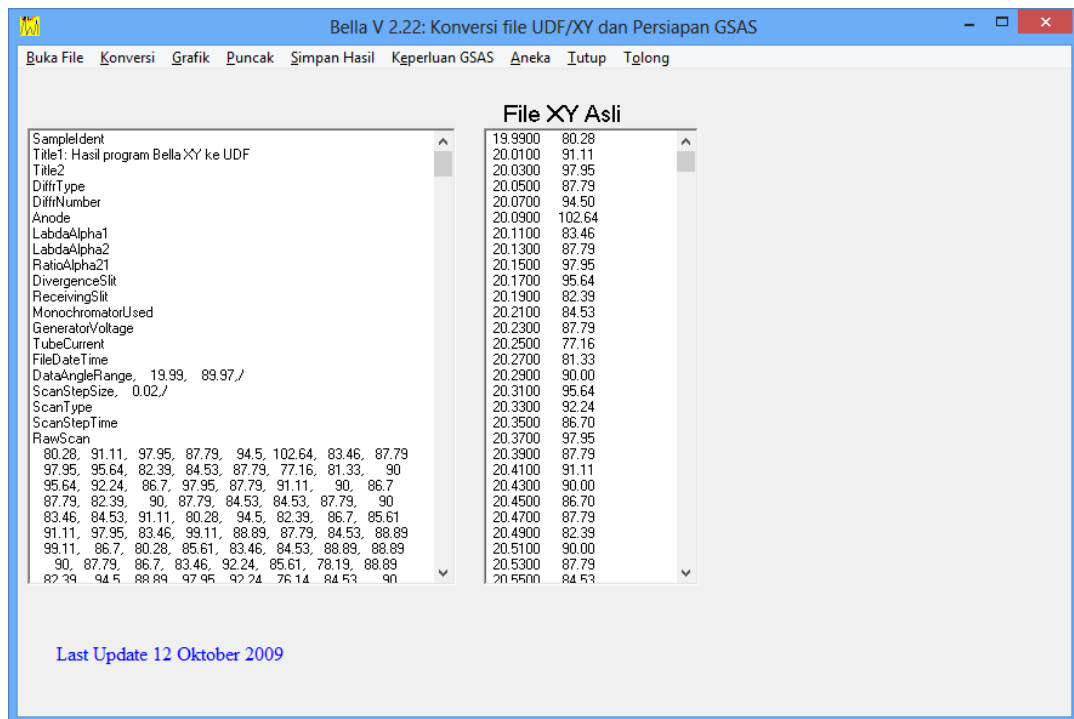


Klik dua kali pada icon tersebut pada desktop untuk menjalankan program Match!
Selanjutnya klik menu Buka File → File XY (dua kolom)

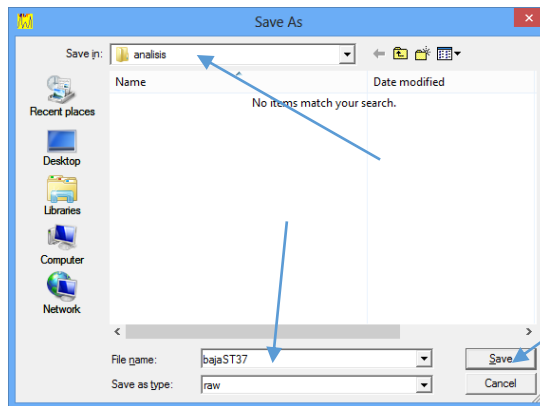




Pastikan lokasi file sudah benar, lalu klik file XY yang dibuat dari program Match! (contoh “bajaST37.dat” dan klik Open. Jendela file yang dibuka seperti gambar di bawah.



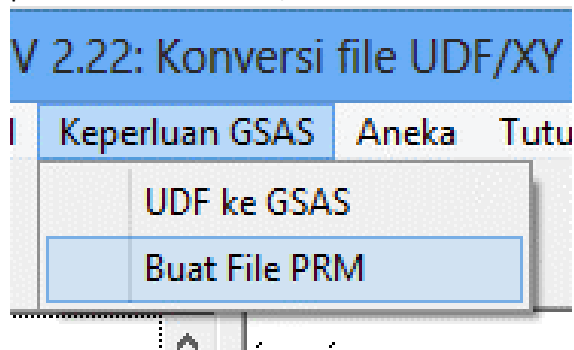
Untuk mengkonversi file XY ke file GSAS
 Klik menu Keperluan GSAS → UDF ke GSAS



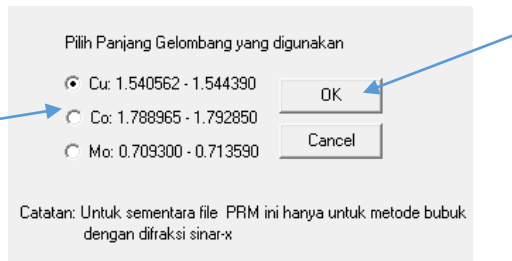
Pastikan lokasi penyimpanan file benar, lalu isikan nama file (contoh: bajaST37) dan klik Save. Pada langkah ini akan diperoleh file dengan nama "bajaST37.raw" yang akan menjadi inputan bagi aplikasi GSAS.

b. Membuat file PRM

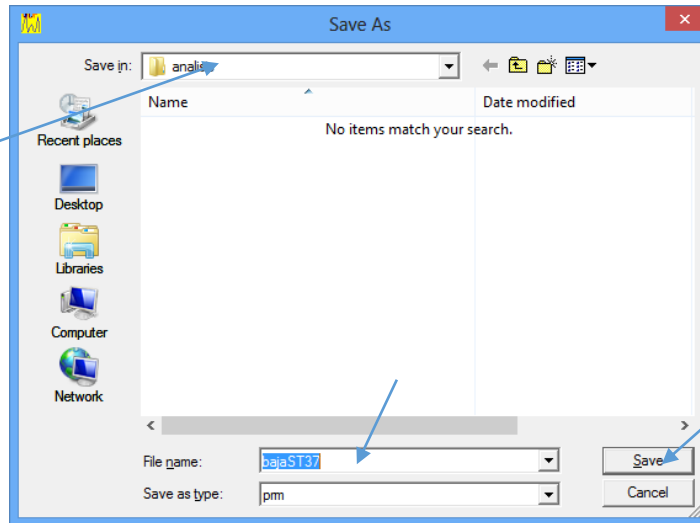
Sedangkan untuk membuat file PRM, ini tidak memerlukan membuka file XY. Langkah yang perlu dilakukan adalah,



Klik menu Keperluan GSAS → Buat File PRM



Pilih salah satu sumber target sinar X yang sesuai dengan file XRD yang dimiliki, lalu klik OK. Pada contoh ini menggunakan sumber Co.



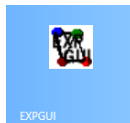
Pastikan lokasi penyimpanan file benar, lalu isikan nama file (contoh: bajaST37) dan klik Save. Pada langkah ini akan diperoleh file dengan nama "bajaST37.prm" yang akan menjadi inputan bagi aplikasi GSAS.

Setelah file raw dan prm terbentuk maka pada langkah ini penggunaan program Bella sudah selesai dan program bisa ditutup.

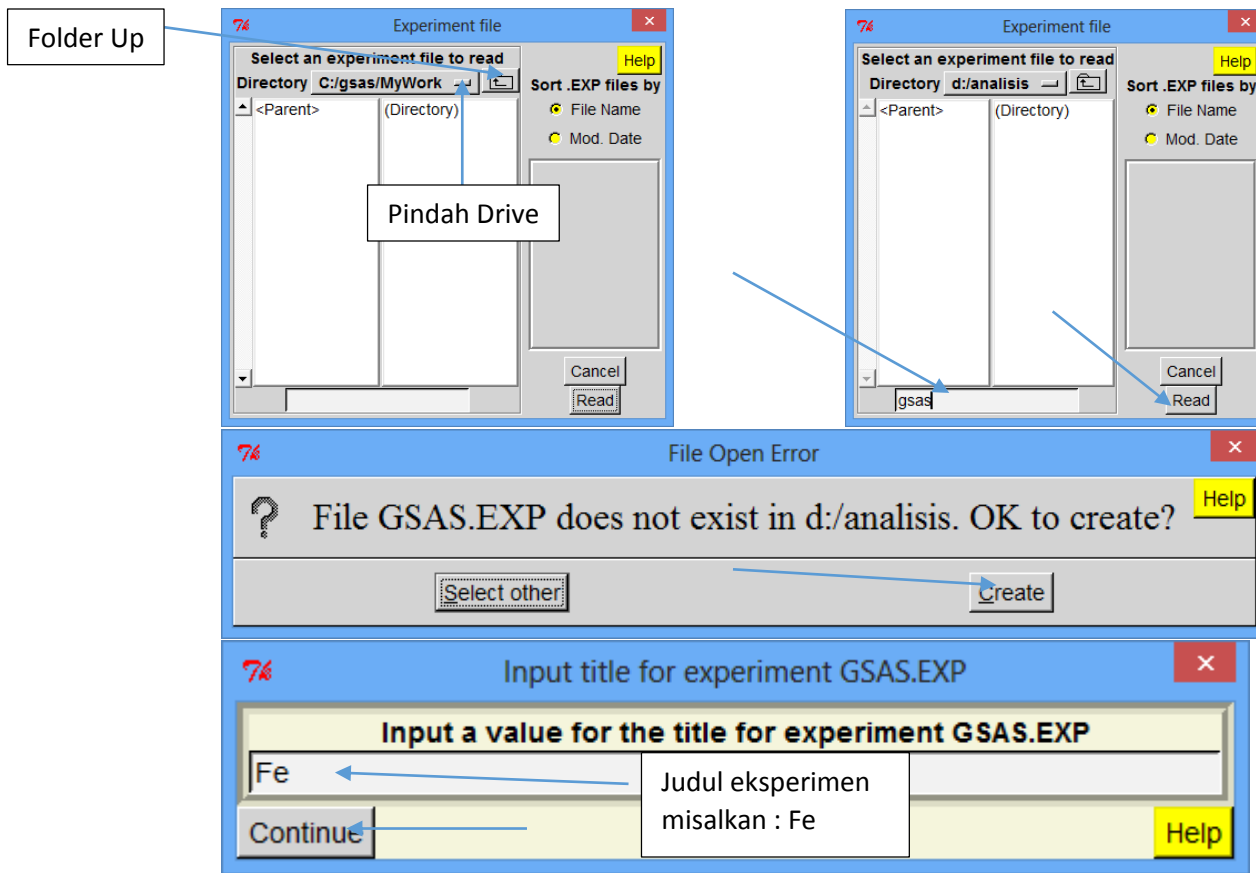
3. ANALISIS GSAS

Pada bagian ini akan dilakukan analisis pola XRD menggunakan aplikasi GSAS. Berikut langkah-langkahnya dengan file contoh dari pola XRD Fe.

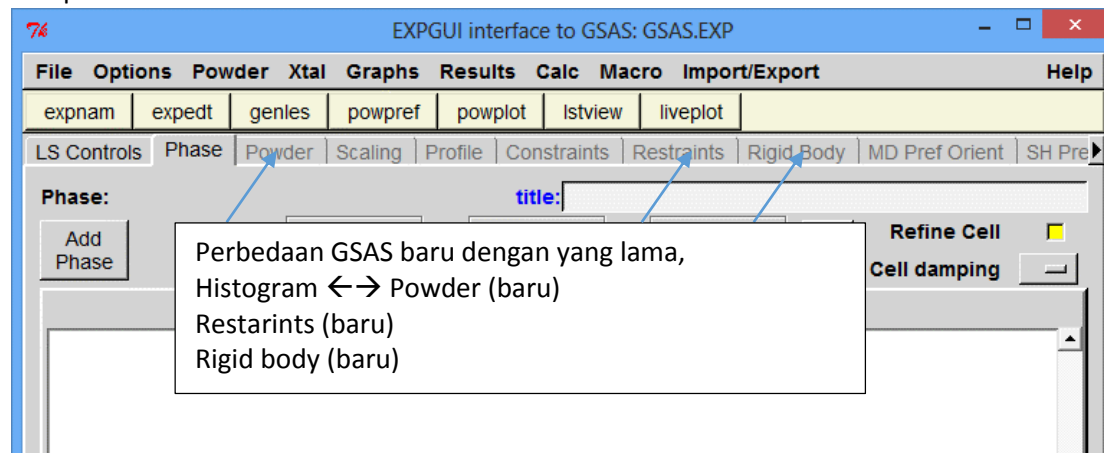
1. Klik dua kali pada icon EXPGUI seperti gambar berikut,



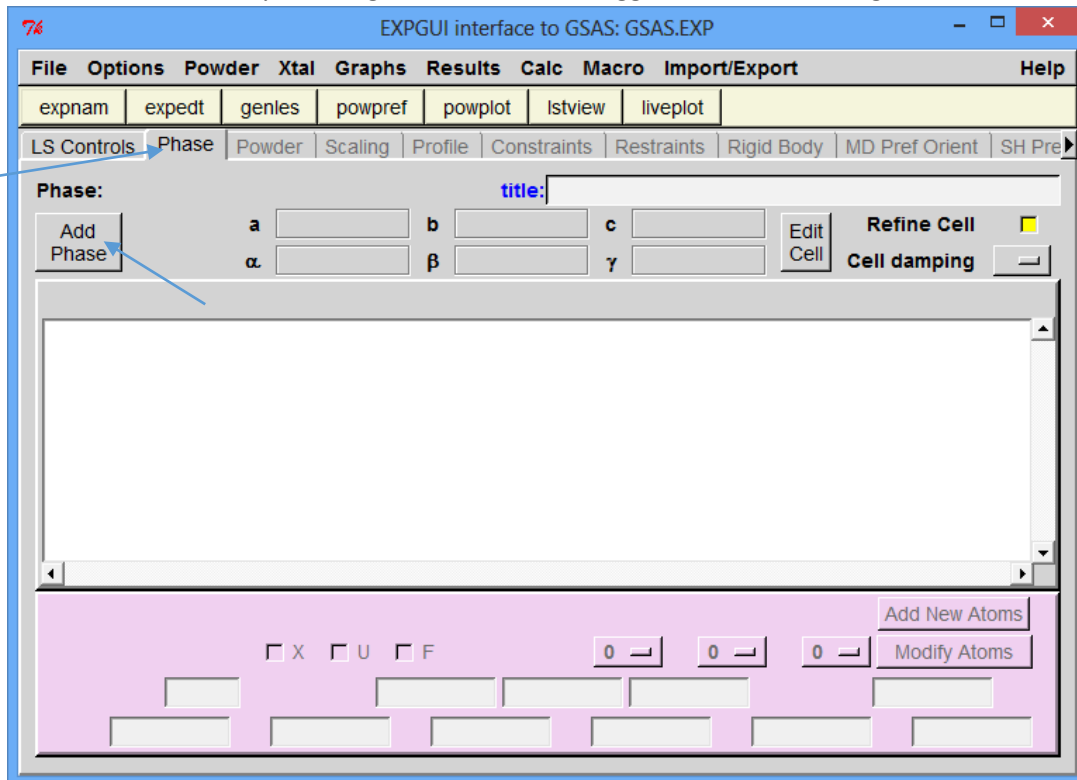
2. Berikutnya membuat file eksperimen GSAS untuk pertama kalinya, berikut langkah2nya



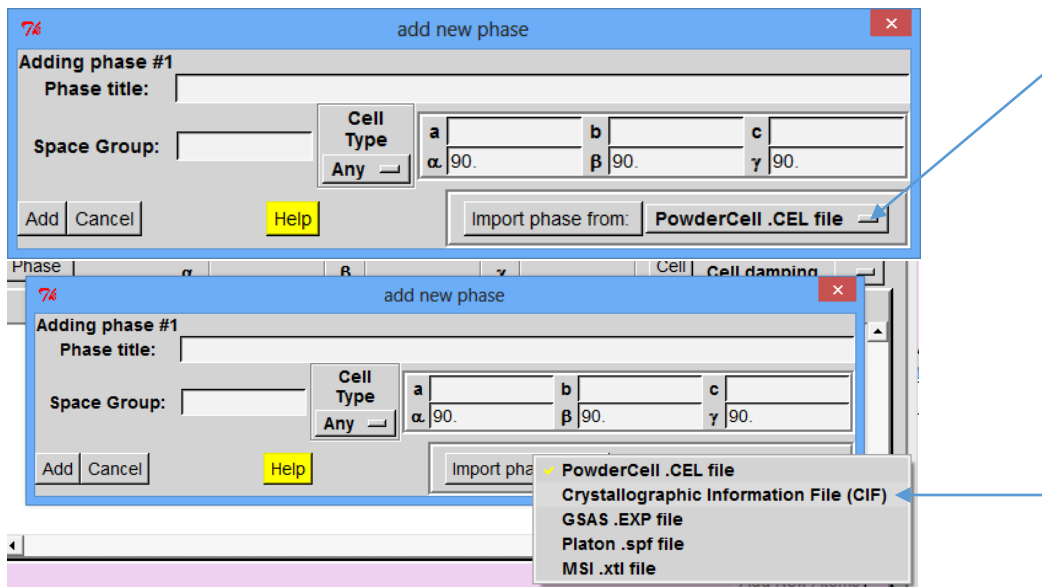
Tampilan awal GSAS



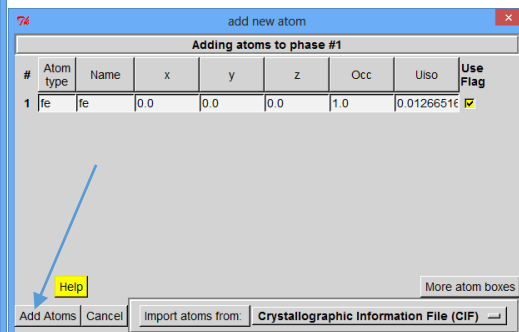
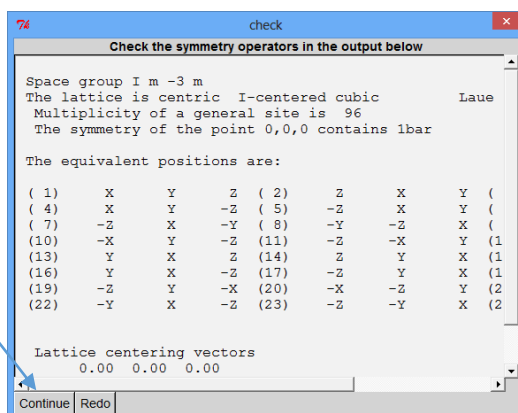
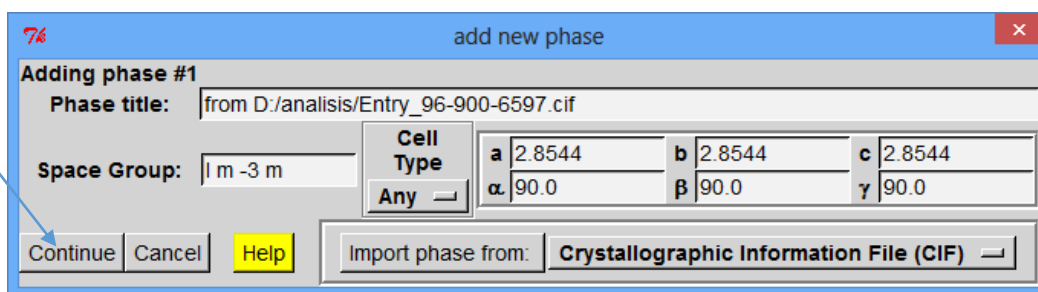
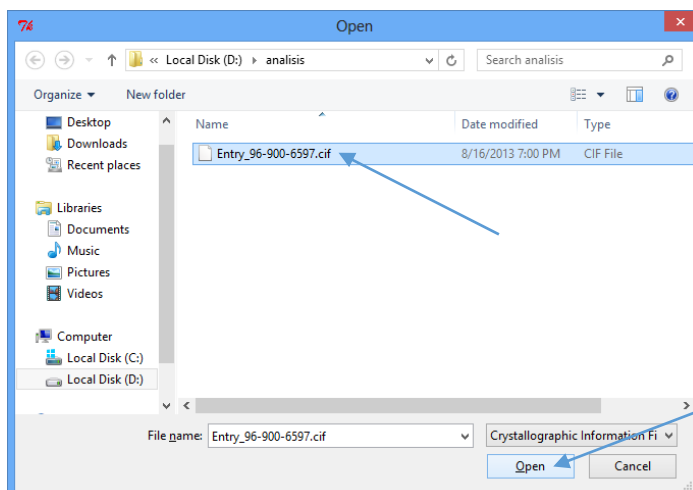
3. Langkah pertama setelah terbentuk file eksperimen adalah mengisikan fasa yang telah ditentukan sebelumnya. Sebagai contoh akan menggunakan file CIF dengan fasa Fe.

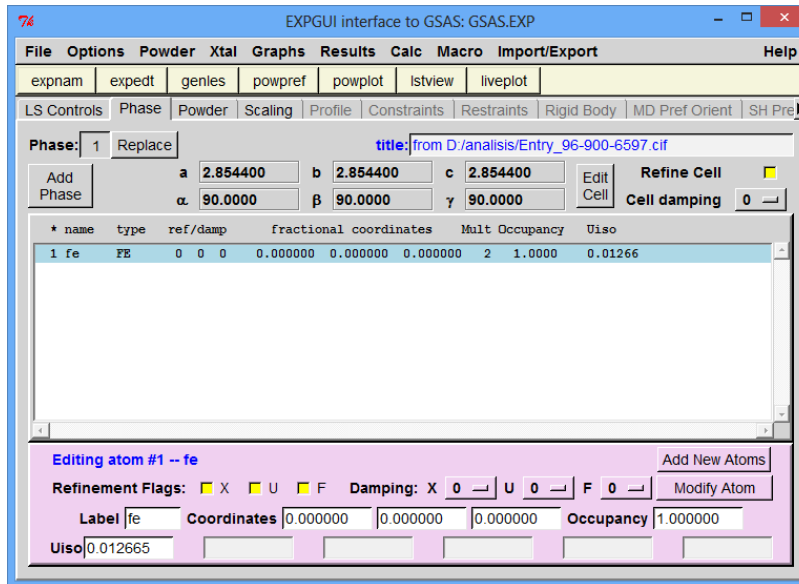


Pada Tab "Phase" klik tombol "Add Phase"

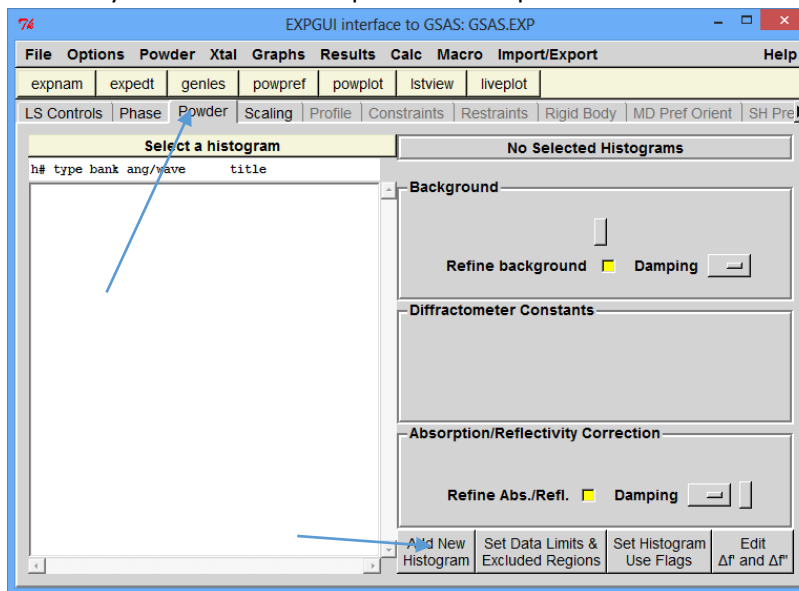


Pilih Crystallographic Information File (CIF), akan terbuka jendela OPEN.

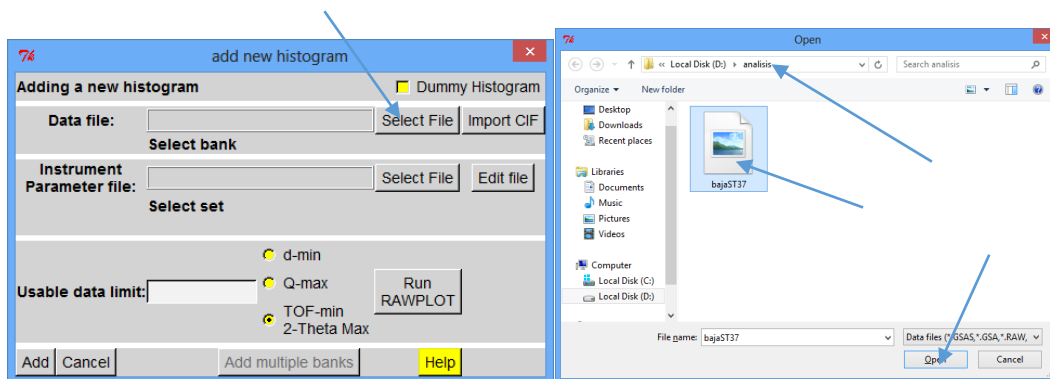


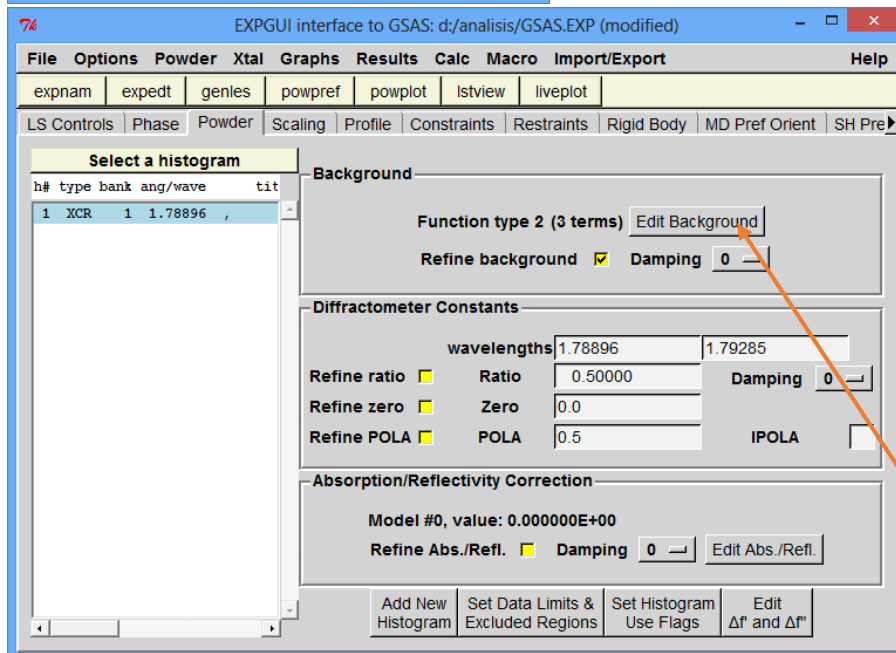
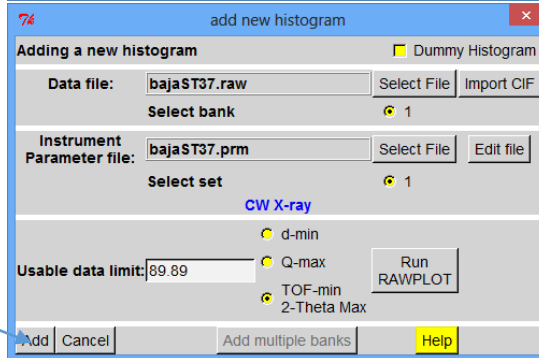
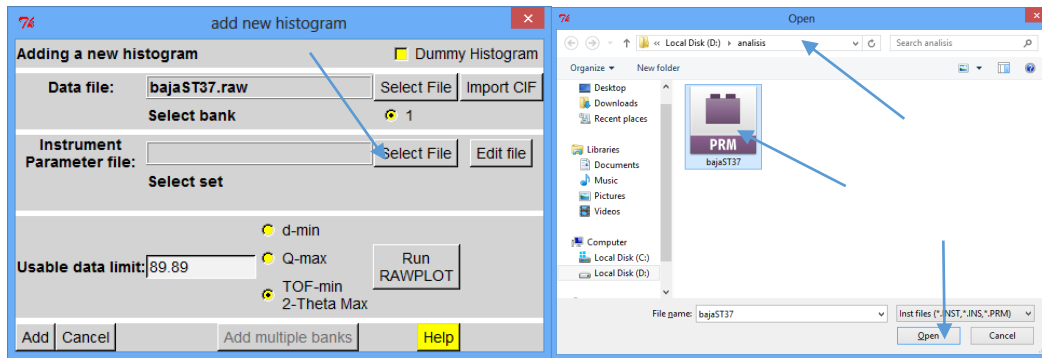


4. Berikutnya memasukkan file pola XRD dan parameter instrumen.



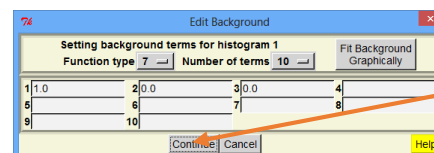
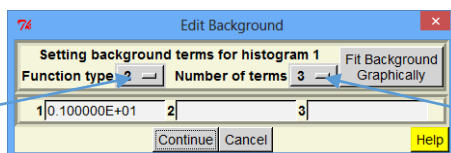
Klik tab "Powder", klik tombol "Add New Histogram"





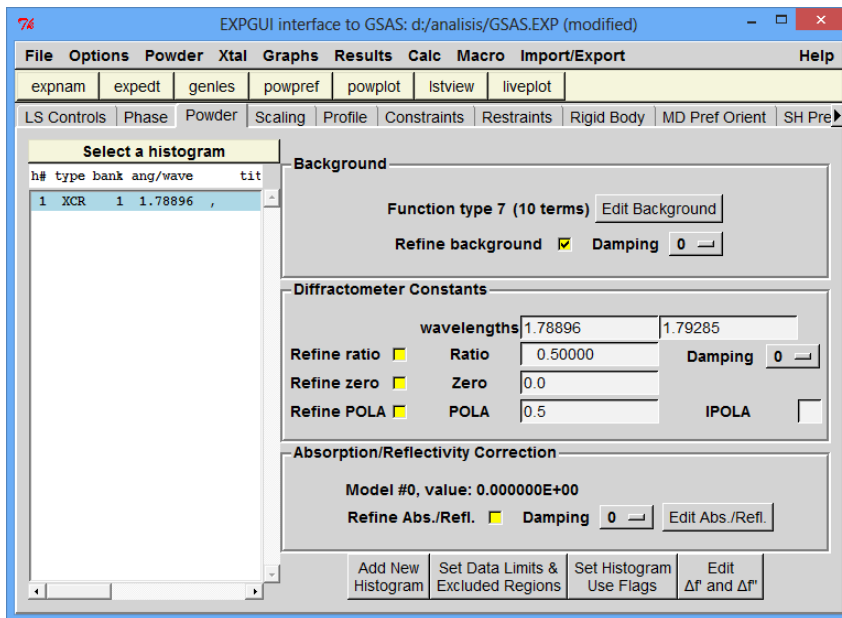
Berikutnya merubah fungsi background, klik tombol "EDIT BACKGROUND"

- 1 - Shifted Chebyshev
- 2 - Cosine Fourier series
- 4 - Power series in $Q^{2n}/n!$
- 5 - Power series in $n!/Q^{2n}$
- 6 - Power series in $Q^{2n}/n!$ and $n!/Q^{2n}$
- 7 - Linear interpolation function
- 8 - Reciprocal interpolation function

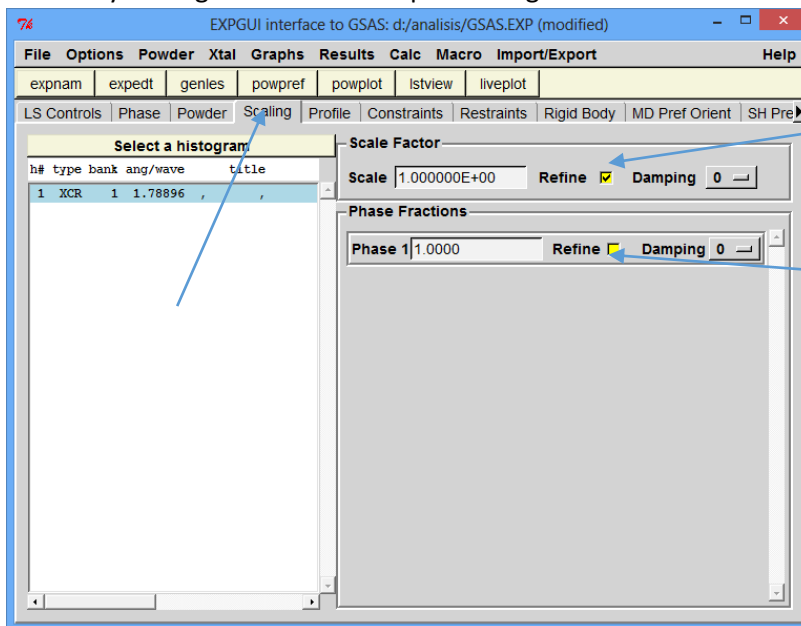


Pilih Function Type 7, gunakan Number of terms 10.

Hasil akhir pada tab "Powder" (Histogram)

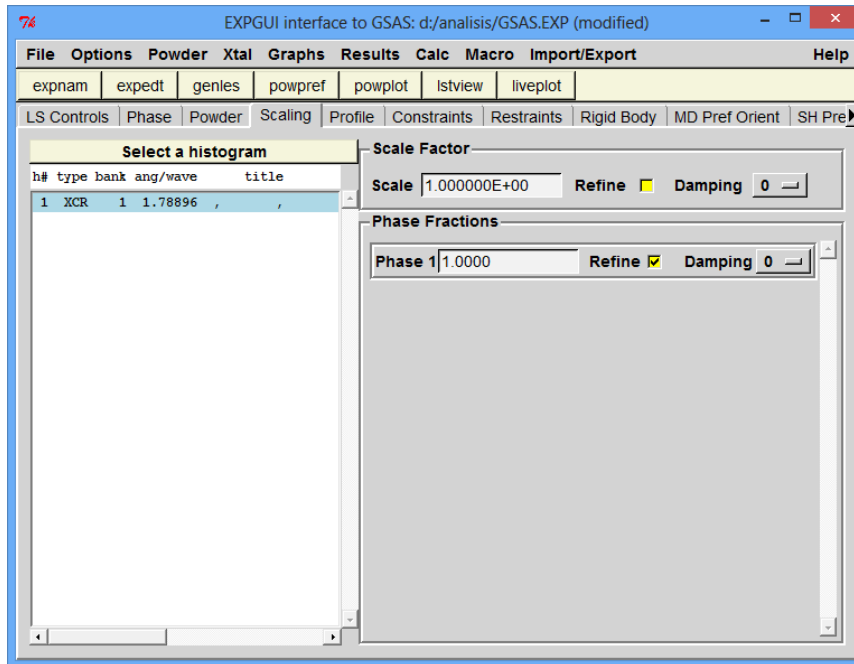


5. Berikutnya mengatur faktor skala pola fitting

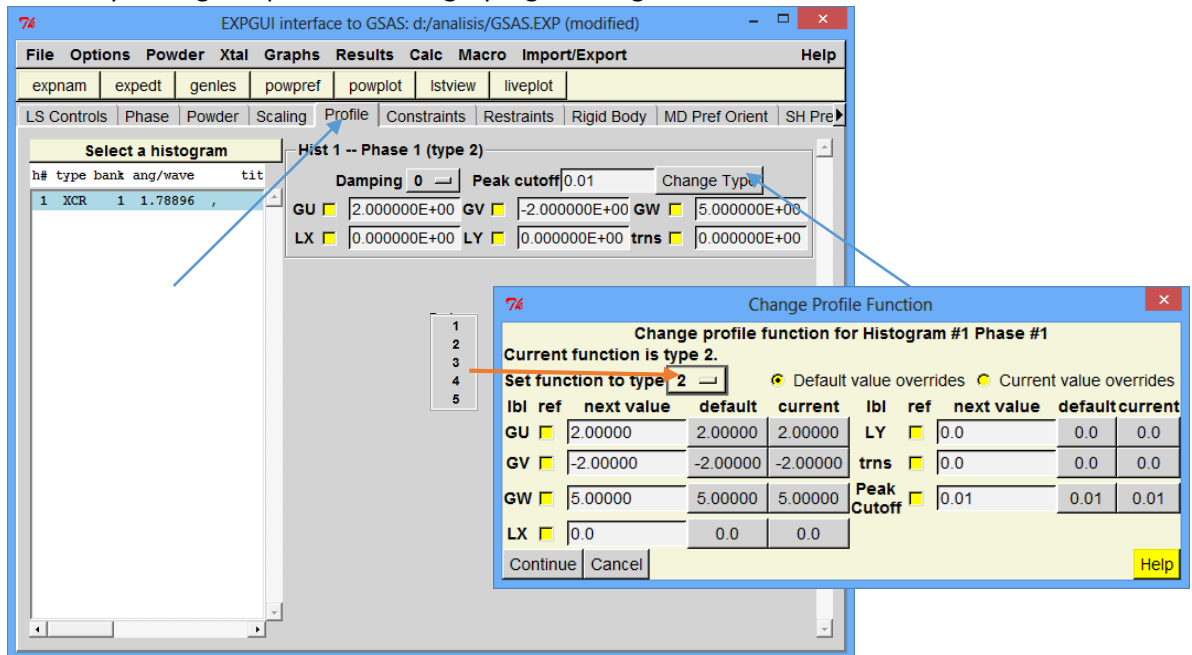


Klik untuk menghilangkan tanda centang

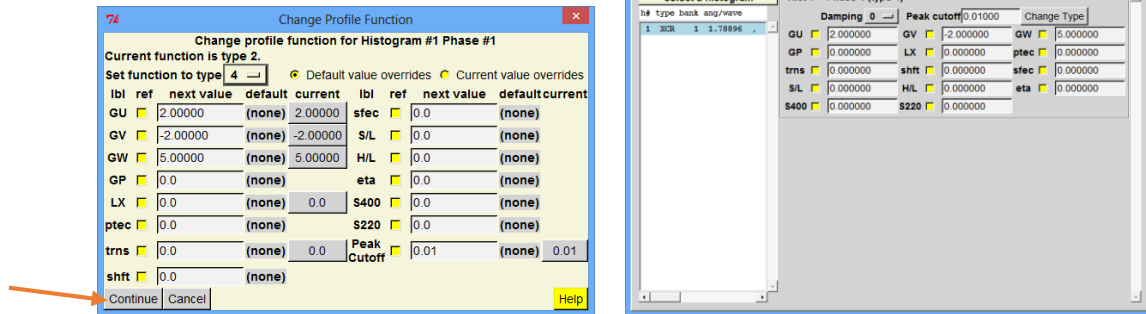
Klik untuk memunculkan tanda centang



6. Berikutnya mengatur profile dari fungsi yang akan digunakan

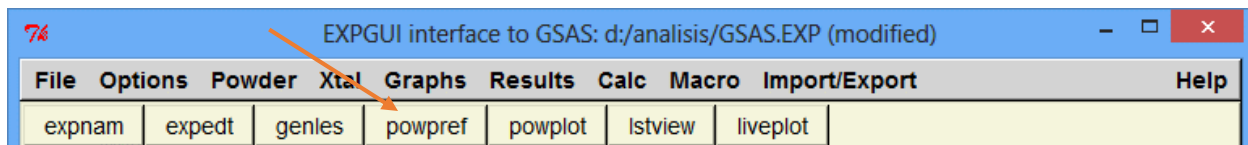


Untuk merubah tipe fungsi, klik "Change Type", klik tombol "Set function type" yang berisi angka (2) dua dan pilih angka empat (4).



Setelah langkah ini proses Refining pola difraksi XRD siap dilakukan.

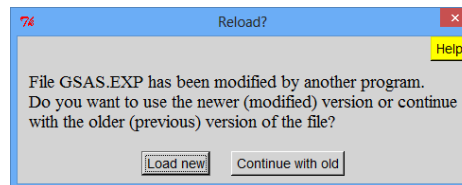
7. Proses refining diawali dengan menekan tombol POWPREF



```

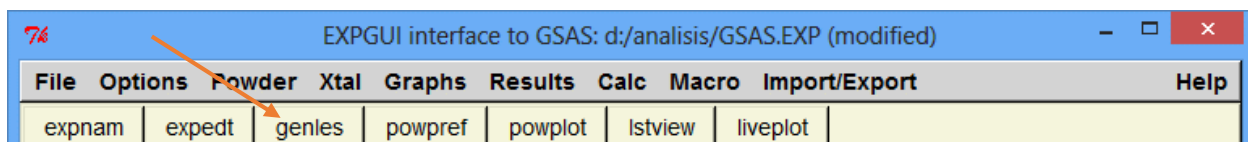
C:\Windows\system32\cmd.exe - C:/gsas/expgui/gsascl.bat C:/gsas/exe/powpr...
D:\analysis>REM a batch file to a DOS command and pause
D:\analysis>if "C:\gsas" == "" set gsas=c:\gsas
D:\analysis>set PGPLOT_FONT=C:\gsas\pgl\grfont.dat
D:\analysis>set SYMOP=C:\gsas\data\synop.dat
D:\analysis>C:\gsas\exe\powpref.exe GSAS
Histogram no. 1 Bank no. 1 Lambda1,lambda2 = 1.78896 1.79285
Title:
Histogram is not ready to be used in least-squares
Histogram needs to be processed by POWPREF
Header on file:
STOP POWPREF terminated successfully statement executed
D:\analysis>pause
Press any key to continue . . .
  
```

Tekan sembarang tombol pada keyboard



Jawab "LOAD NEW"

8. Tekan tombol GENLES



```

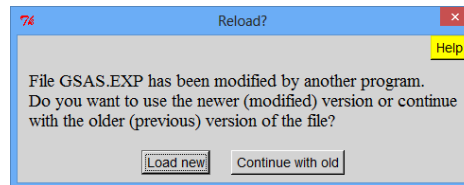
C:\Windows\system32\cmd.exe - C:/gsas/expgui/gasstcl.bat C:\gsas\exe\genle...
CPU times for matrix build 0.02 sec; matrix inversion 0.00 sec
Final variable sum<<shift/esd>>**2 for cycle 1: 1875.05 Time: 0.02 sec
Restraint data statistics:
No restraints used

Powder data statistics
Bank Mdata Sun(u*d**2) Fitted Rp -Bknd Rp Dwd Average
                                uRp          Rp          Rp          Dwd Integral
Hstgm 1 PXC 1 3495 17752. 0.2407 0.1243 0.7372 0.4608 0.206 0.995
Powder totals 3495 17752. 0.2407 0.1243 0.7372 0.4608 0.206
Cycle 2 There were 3495 observations.
Total before-cycle CHI**2 <offset/sig> = 1.7752E+04 < 1.7093E+02>

Reduced CHI**2 = 5.095 for 11 variables
Histogram 1 Type PXC Nobs = 4 R(F**2) = 0.6748

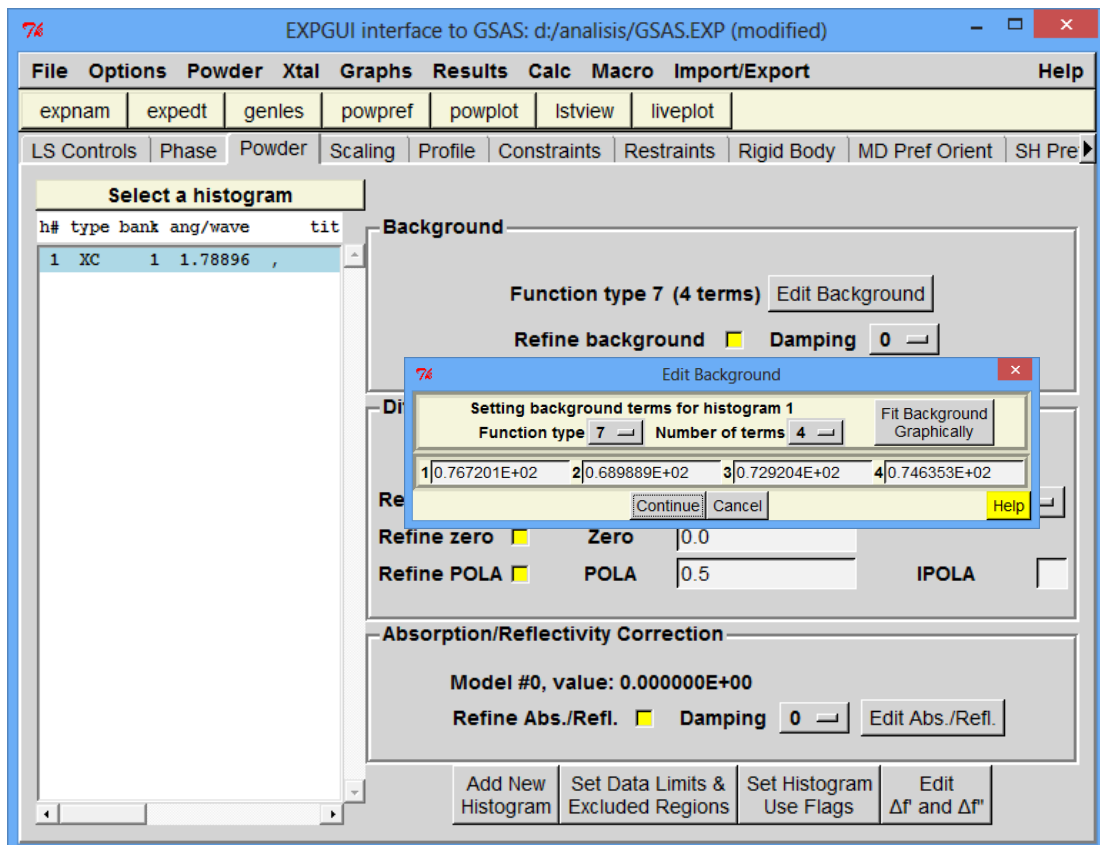
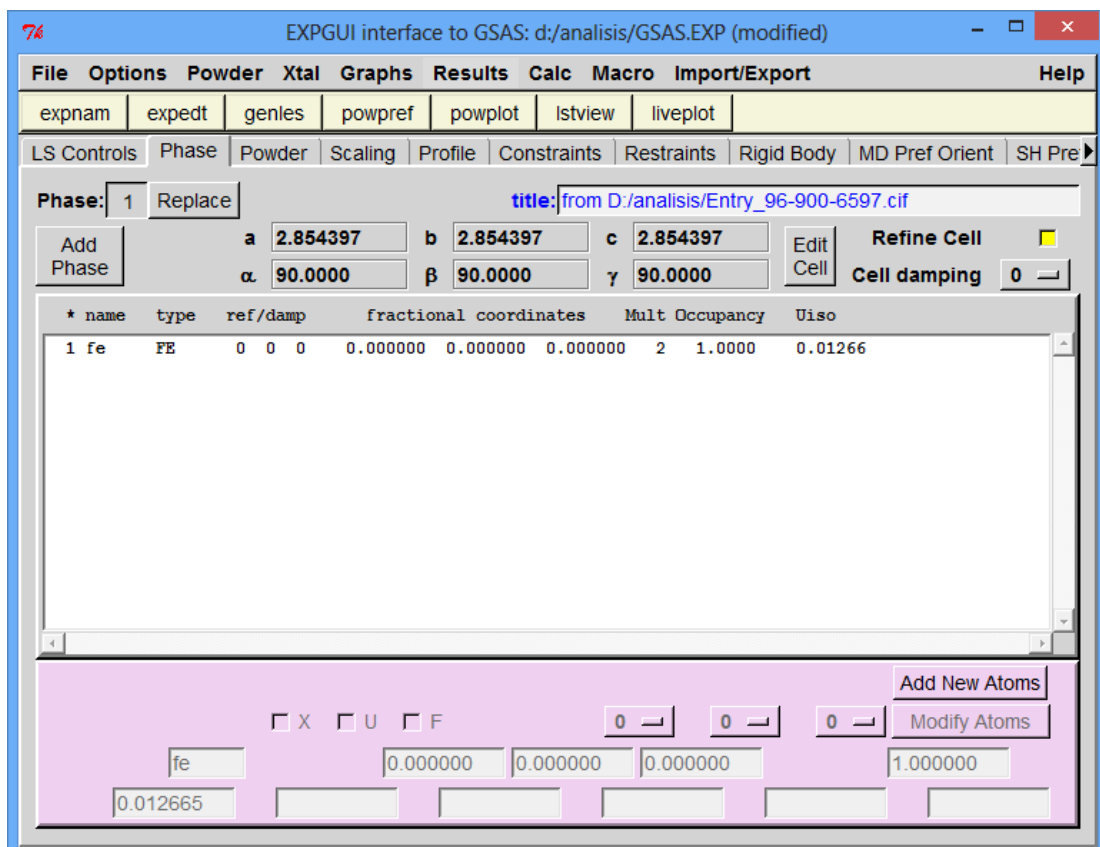
CPU times for matrix build 0.02 sec; matrix inversion 0.00 sec
Final variable sum<<shift/esd>>**2 for cycle 2: 0.00 Time: 0.02 sec
Convergence was achieved and
STOP GENLES terminated successfully statement executed
D:\analysis>pause
Press any key to continue . . .

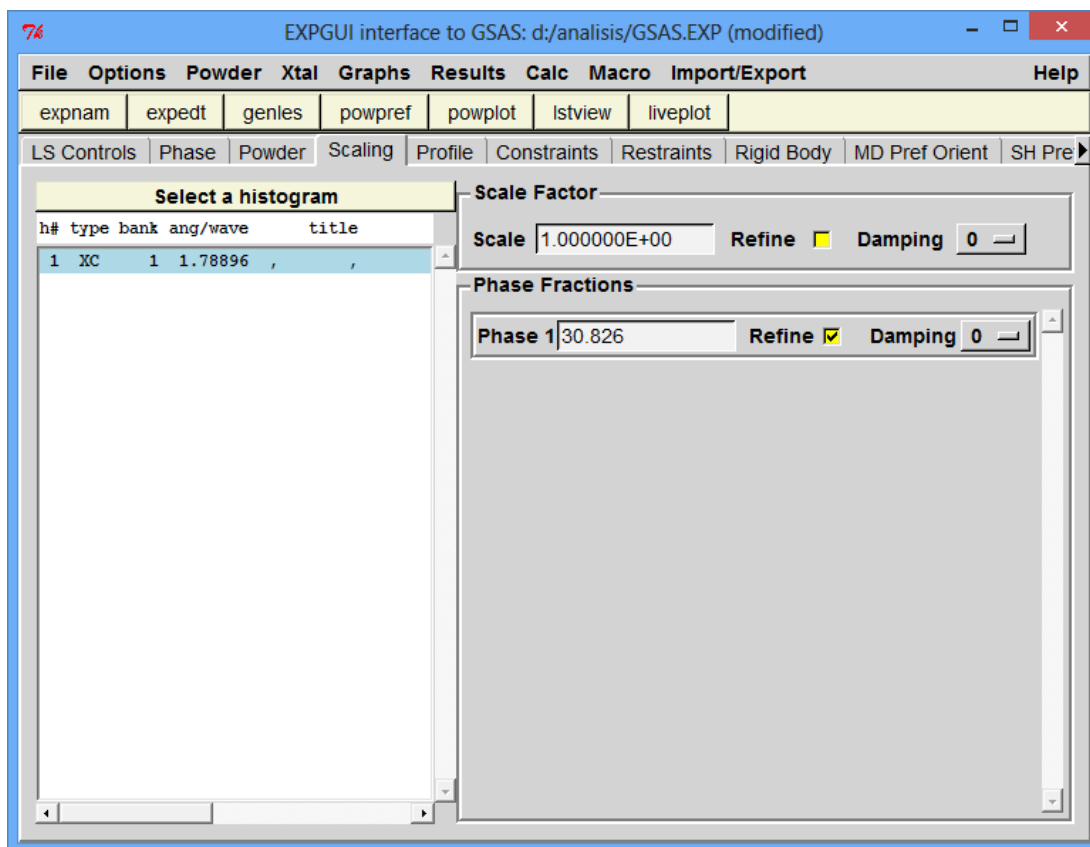
```

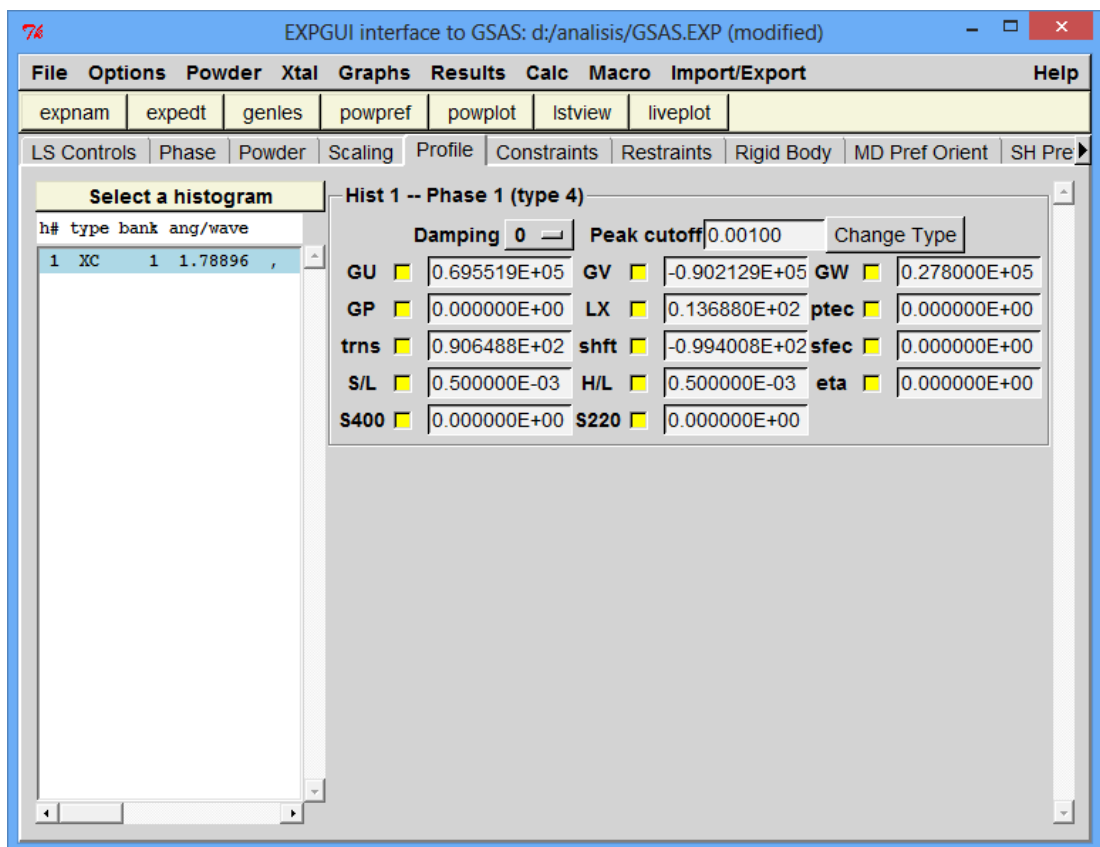


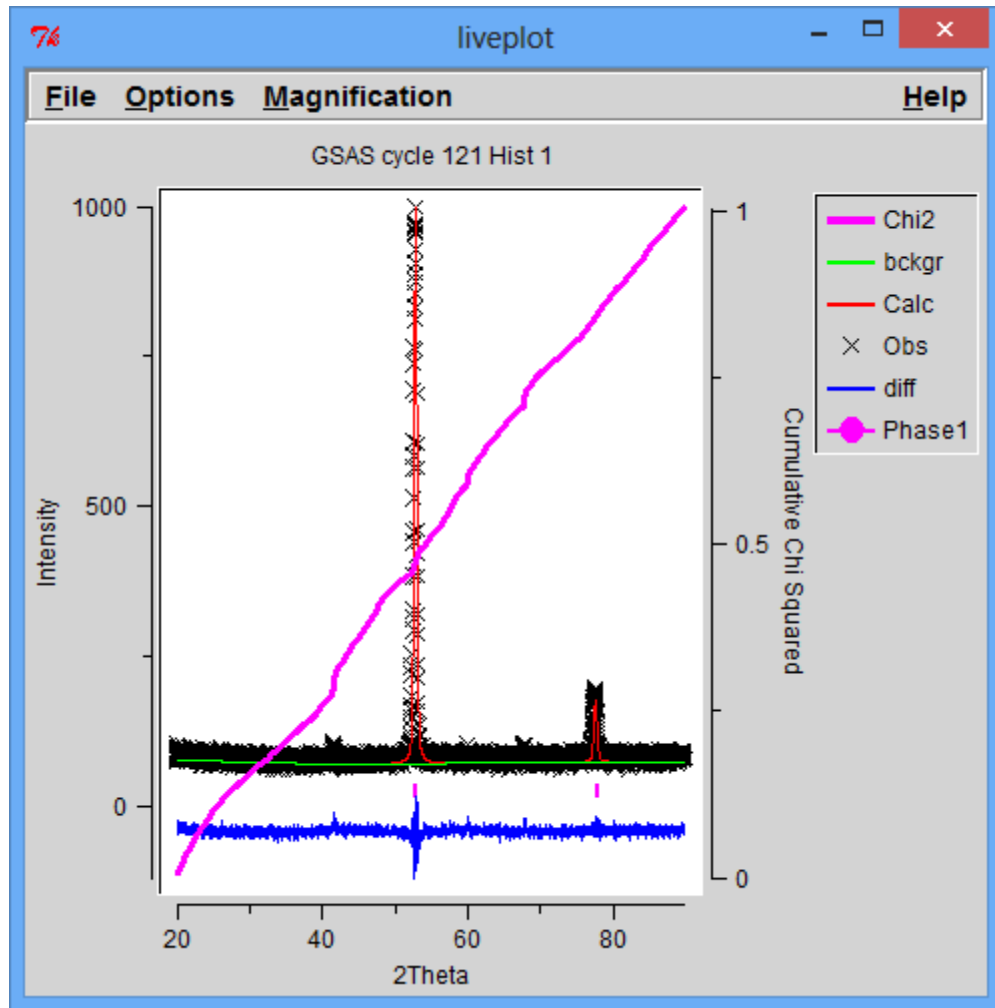
Jawab "LOAD NEW" pada saat pertama kali dan bila nilai CHI**2 saat ini lebih kecil dari nilai sebelumnya dan masih lebih dari satu (>1). Nilai CHI**2 yang baik berkisar antara 1 sampai 1.3 dan hasil yang bisa diterima bila nilai wRp dan Rp kurang dari 0.1000. bila tidak terpenuhi jawab "CONTINUE WITH OLD"

9. Ulang langkah 7 dan 8 dengan merubah2 parameter pada aplikasi GSAS untuk merefining. Berikut hasil proses refining GSAS,





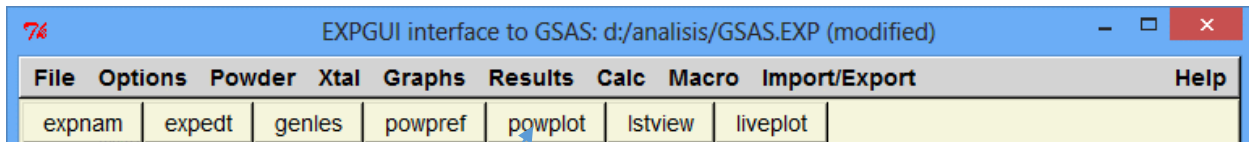


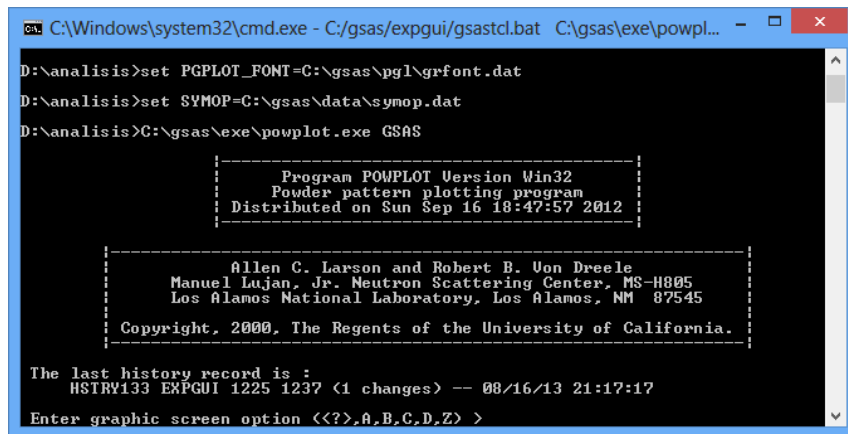


LIVEPLOT

10. Mencetak laporan dapat dilakukan melalui POWPLOT, LSTVIEW dan LIVEPLOT.

a. POWPLOT





```
C:\Windows\system32\cmd.exe - C:/gsas/expgui/gasstcl.bat C:\gsas\exe\powpl...
D:\analisis>set PGPLOT_FONT=C:\gsas\pg1\grfont.dat
D:\analisis>set SYMOP=C:\gsas\data\symop.dat
D:\analisis>C:\gsas\exe\powplot.exe GSAS

      Program POWPLOT Version Win32
      Powder pattern plotting program
      Distributed on Sun Sep 16 18:47:57 2012

      Allen C. Larson and Robert B. Von Dreele
      Manuel Lujan, Jr. Neutron Scattering Center, MS-H805
      Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545
      Copyright, 2000, The Regents of the University of California.

The last history record is :
HSTRY133 EXPGUI 1225 1237 (<1 changes> -- 08/16/13 21:17:17
Enter graphic screen option (<<?>,A,B,C,D,Z) >
```

Urutan perintahnya adalah

- c, enter
- n, enter
- h, enter
- 1, enter
- d, enter
- e, enter
- m, enter
- o, enter
- keluaran di layar lanjutkan perintah p, enter atau keluaran file lanjutkan perintah a, enter.

```

C:\Windows\system32\cmd.exe - C:/gsas/expgui/gasctcl.bat C:\gsas\exe\powpl...
D:\analysis>REM a batch file to a DOS command and pause
D:\analysis>if "C:\gsas" == "" set gsas=c:\gsas
D:\analysis>set PGPLOT_FONT=C:\gsas\pgl\grfont.dat
D:\analysis>set SYMOP=C:\gsas\data\symop.dat
D:\analysis>C:\gsas\exe\powplot.exe GSAS

-----
Program POWPLOT Version Win32
Powder pattern plotting program
Distributed on Sun Sep 16 18:47:57 2012
-----

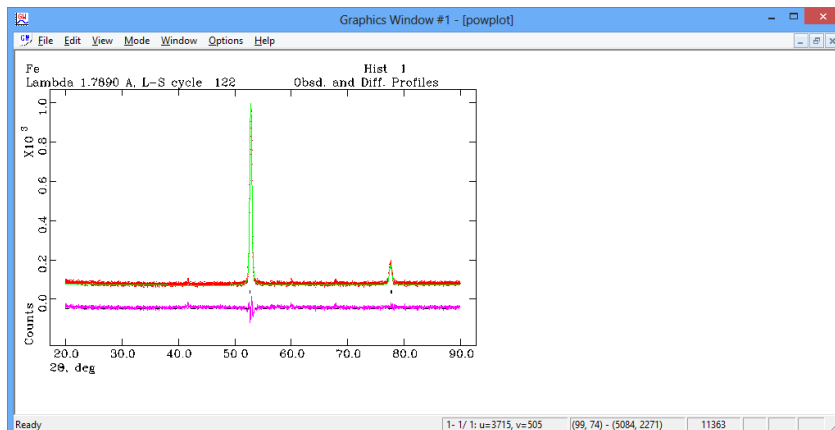
Allen C. Larson and Robert B. Von Dreele
Manuel Lujan, Jr. Neutron Scattering Center, MS-H805
Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545

Copyright, 2000, The Regents of the University of California.

The last history record is :
HSTRY134 POWPREF Win32 Aug 16 21:22:47 2013

Enter graphic screen option (<<?>,A,B,C,D,Z) >c
Do you want to save graphics output (Y,<N>)? >n
Experiment title:
Fe
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >h
Enter histogram number >1
New histogram selected
The selected histogram is:
Histogram no. 1 Bank no. 1 Lambda1,lambda2 = 1.78896 1.79285
Title:
**** Histogram will be used in least-squares
Reading histogram - please wait
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >d
Difference curves will be plotted
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >e
Plot in high resolution mode (slow)
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >m
Reflection positions will be marked
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >o
Points will be plotted as " "
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >

```



Tampilan pilihan "p"

```

Do you wish to see error analysis (Y/<N>)? >n
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >a
Enter name for ascii plot file (<= 8 char., no extension) >plot
Output file name is: plot.TXT
Enter command (<<?>,A,B,C,D,E,G,H,I,L,M,N,O,P,R,S,T,U,W,X) >

```

Tampilan pilihan "a"

b. LSTVIEW

The screenshot shows the EXPGUI interface to GSAS. The main window displays the LSTVIEW output, which includes various statistics and fit parameters. A dialog box is open over the LSTVIEW window, showing the 'Phase Fractions' section where the 'Phase 1' fraction is set to 30.826 and the 'Refine' checkbox is checked. A blue arrow points from the 'Wt. Frac.: 1.0000' line in the LSTVIEW output to the 'Phase 1' field in the dialog box.

Restraint data statistics:
No restraints used

Powder data statistics

| | Bank | Ndata | Sum(w*d**2) | wRp | Rp | -Bknd | wRp | Rp | pFree | wRp | Rp | Npfree | Dwd | Average |
|-------------------|------|--------|-------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|---------|
| Histogram 1 PXC 1 | 3495 | 3518.6 | | 0.1072 | 0.0921 | 0.0827 | 0.0909 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0 | 0.623 | 0.986 |
| Powder totals | 3495 | 3518.6 | | 0.1072 | 0.0921 | 0.0827 | 0.0909 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0 | 0.623 | |

No serial correlation in fit at 90% confidence for 1.895 < Dwd < 2.105
Cycle 122 There were 3495 observations.
Total before-cycle χ^2 (offset/sig) = 3.5186E+03 (2.9468E-01)
Reduced χ^2 = 1.007 for 1 variables

Reflection data statistics
Histogram 1 Type PXC Nobs = 4 R(F**2) = 0.3052
After matrix normalization and Marquardt modification:
Full matrix recip. condition value & -log10 = 1.000 0.00
The value of the determinant is 10.0000*10.0**(-1)

Atom parameters for phase no. 1

| frac | x | y | z | 100*Uiso | 100*U11 | 100*U22 | 100*U33 | 100*U12 | 100*U13 | 100*U23 |
|--------------------------------------|----------|----------|---------------|----------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| Calculated unit cell formula weight: | 111.694, | density: | 7.975gm/cm**3 | | | | | | | |

Phase/element fractions for phase no. 1

| Hist Elem: | 1 | 1 | PXC |
|--|--------------|---|-----|
| Fraction : | 30.8260 | | |
| Sigmat : | 0.210179 | | |
| Shift/esd : | 0.00 | | |
| Wt. Frac. : | 1.0000 | | |
| Sigmat : | 0.438074E-10 | | |
| Phase/element fraction sum(shift/error)**2 : | 0.00 | | |

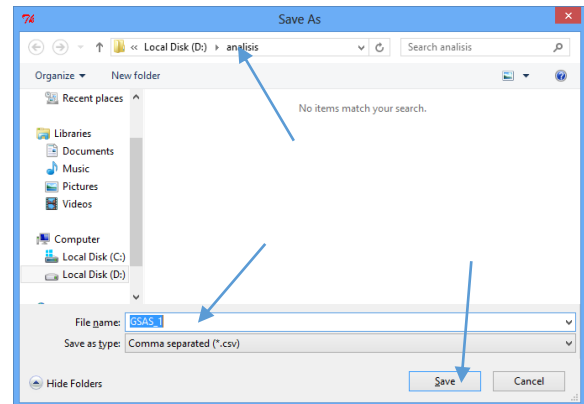
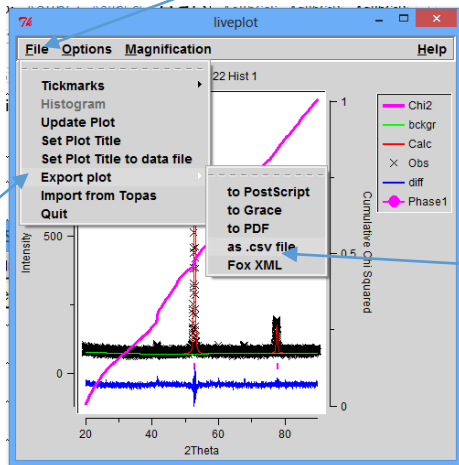
Cycle 122 | χ^2 1.007 | Shift/SU 0.00

Keluaran dari LSTVIEW. Wt. Fraction hanya akan muncul bila

Phase fraction tiap fasa di refine. Begitu pula untuk parameter lain bila ingin dimunculkan dalam LSTVIEW, berikan tanda centang refine pada parameter tersebut.

c. LIVEPLOT

The screenshot shows the EXPGUI interface to GSAS. The main window displays the LIVEPLOT window, which is currently empty. A blue arrow points to the 'liveplot' button in the menu bar.



GSAS_1 - Excel

| Columns are X | I (obs) | I (calc) | I (bkg) | Obs-Calc | cum-chi**2 | repos | ref-phase | ref-hkl |
|---------------|---------|----------|----------|----------|------------|----------|-----------|---------|
| 1 | 19.99 | 80.28 | 76.7201 | 76.7201 | -45.0293 | 4.52E-05 | 52.61275 | 1 |
| 2 | 20.01 | 91.11 | 76.71346 | 76.71346 | -34.1926 | 0.000696 | 52.73596 | 1 |
| 3 | 20.03 | 97.95 | 76.70683 | 76.70683 | -27.346 | 0.002014 | 77.61978 | 1 |
| 4 | 20.05 | 87.79 | 76.70019 | 76.70019 | -37.4994 | 0.002415 | 77.82033 | 1 |
| 5 | 20.07 | 94.5 | 76.69355 | 76.69355 | -30.7827 | 0.003375 | | {} |
| 6 | 20.09 | 102.64 | 76.68691 | 76.68691 | -22.6361 | 0.005253 | | {} |
| 7 | 20.11 | 83.46 | 76.68028 | 76.68028 | -41.8094 | 0.00541 | | {} |
| 8 | 20.13 | 87.79 | 76.67364 | 76.67364 | -37.4728 | 0.005813 | | {} |
| 9 | 20.15 | 97.95 | 76.66699 | 76.66699 | -27.3062 | 0.007136 | | {} |
| 10 | 20.17 | 95.64 | 76.66035 | 76.66035 | -29.6095 | 0.008214 | | {} |
| 11 | 20.19 | 82.39 | 76.65372 | 76.65372 | -42.8529 | 0.008328 | | {} |
| 12 | 20.21 | 84.53 | 76.64708 | 76.64708 | -40.7062 | 0.008539 | | {} |
| 13 | 20.23 | 87.79 | 76.64044 | 76.64044 | -37.4396 | 0.008944 | | {} |
| 14 | 20.25 | 77.16 | 76.6338 | 76.6338 | -48.063 | 0.008945 | | {} |
| 15 | 20.27 | 81.33 | 76.62717 | 76.62717 | -43.8863 | 0.009023 | | {} |
| 16 | 20.29 | 90 | 76.62053 | 76.62053 | -35.2097 | 0.009592 | | {} |
| 17 | 20.31 | 95.64 | 76.61389 | 76.61389 | -29.5631 | 0.010675 | | {} |
| 18 | 20.33 | 92.24 | 76.60725 | 76.60725 | -32.9564 | 0.011433 | | {} |

Daftar puncak tiap fasa dan HKL-nya.

Data pola difraksi