

DIFFRAZIONE DELLE POLVERI

Identificazione di fasi cristalline.

L'identificazione di fasi cristalline, avviene per confronto degli effetti di diffrazione con quelli di un apposito schedario, aggiornato dal J.C.P.D.S. (Joint Committee on Powder Diffraction Standards). Lo schedario è diviso in due grandi sezioni, una organica ed una inorganica. Da quest'ultima è stata estratta la sottosezione relativa alle fasi minerali.

Nello schedario relativo alle fasi minerali sono presenti:

- 1) Elenco alfabetico dei tipi mineralogici.
- 2) Elenco alfabetico secondo la composizione chimica.
- 3) Indice di ricerca secondo Hanawalt, basato sui tre effetti di diffrazione più intensi con $2\theta < 90^\circ$.

Descrizione ed uso dell'indice di Hanawalt.

L'indice è diviso in 87 sezioni: nella prima vi sono i minerali con $d_{(hkl)}$ di uno dei tre effetti di diffrazione più intensi compreso tra 999.99 e 10.00 Å, nella seconda tra 9.99 e 8.00 Å, nella terza tra 7.99 e 7.00 Å, ..., nella penultima tra 1.39 e 1.20 Å e nell'ultima tra 1.19 e 1.00 Å. Ad ogni minerale compete una riga, in cui è riportato nell'ordine:

- 1) un simbolo (*=dati molto buoni; c=dati calcolati; o=dati meno buoni dei precedenti; i=spettro indicizzato; nessun simbolo=dati peggiori rispetto ai precedenti).
- 2) In neretto i $d_{(hkl)}$ relativi ai tre effetti di diffrazione più intensi, seguiti, in carattere normale, dai successivi cinque effetti di diffrazione più intensi dell'intero spettro, in ordine decrescente d'intensità.
- 3) Le intensità relative (in basso a destra di ogni $d_{(hkl)}$) di ciascun effetto di diffrazione ($I_{max.}=10$ viene rappresentato con una X, se presente una "g" significa che l'intensità è superiore a 10; normalmente le intensità si rapportano a 100, ma per ragioni di spazio e semplicità le intensità vengono divise per dieci e approssimate all'intero).
- 4) Il codice d'identificazione della scheda contenente tutti i dati del minerale.
- 5) La formula del minerale.

L'indice di Hanawalt viene consultato in base ai $d_{(hkl)}$ dei tre effetti di diffrazione più intensi (quelli in neretto). Uno dei tre $d_{(hkl)}$, generalmente quello più intenso, serve per identificare una delle 87 sezioni, col secondo si cerca di identificare una o più righe scorrendo la seconda colonna dell'indice, che è l'unica ordinata per $d_{(hkl)}$ decrescenti. Trovata così una o più righe, s'identifica il minerale aiutandosi con il primo ed il terzo effetto di diffrazione più intensi, confrontati con quelli presenti nella prima e terza colonna. La conferma finale si ha dal confronto con gli altri cinque effetti di diffrazione presenti, tenuto conto anche delle intensità relative dei vari effetti di diffrazione.

Per considerare l'errore nella determinazione dei $d_{(hkl)}$, ogni sezione ha un certo grado di sovrapposizione con la sezione precedente e seguente. Per considerare anche dell'errore relativo alla determinazione dell'intensità degli effetti di diffrazione (causata da diversità di tecniche, da orientazioni particolari, ecc.), per ogni minerale sono presenti tre combinazioni delle sei possibili e relative a d_1, d_2, d_3 e cioè: $d_1-d_2, d_2-d_3, d_3-d_1$.

Individuato il minerale in esame si legge il relativo numero di scheda e si procede al confronto di tutti i $d_{(hkl)}$ misurati.