

**COSA CONTENGONO I CAMPIONI DI POLVERI MICROCRISTALLINE
PRELEVATE DALLA CASA DELLA FONTANA GRANDE DI POMPEI?
SCOPRIAMO IL SOFTWARE QUALX (A. Altomare, N. Corriero, C.
Cuocci, A. Falcicchio, A. Moliterni and R. Rizzi, *J. Appl. Cryst.* (2015), 48, 598-603)**

Per scaricare il software QUALX e il database POW_COD (registrarsi e scaricare gratuitamente):

<http://www.ba.ic.cnr.it/softwareic/qualx/>

Per eseguire il programma QUALX sui dati diffrattometrici:

- a) Fare doppio clic sull'icona QUALX per lanciare il programma;
 - b) Selezione '**File**' dal menu in alto a sinistra e dal menù a tendina scegliere '**Import Diffraction Data**' (importare lo spettro di diffrazione) e caricare il file **C14-220.dat**;
 - c) Selezionare dalla finestra di dialogo '**Set wavelength radiation**' (Definisci la lunghezza d'onda), **Cu** e **lambda** = 1.54056, quindi cliccare su '**OK**'.
 - d) Comparire lo spettro di diffrazione;
 - f) Calcolare il background scegliendo '**Pattern**' in alto a sinistra e successivamente '**Create Background**' e dopo da '**Pattern**' scegliere '**Subtract Background**'.
 - g) Il pattern di diffrazione sarà stato privato del background.
 - h) Selezionare '**Pattern**' e successivamente '**Peak Search**' per visualizzare tutti i picchi associati al pattern; quando il peak search automatico è inefficace, si può selezionare da '**Pattern**', '**Peak search option**' e '**Add peaks**' e usare il click destr del mouse per rimuovere i picchi individuati automaticamente in posizioni non corrette e il click destro per aggiungere nuovi picchi.
 - i) Selezionare '**Search**' e poi '**Search-Match**' (Cerca e confronta). Ovvero il programma che usa un database gratuito (POW_COD), confronta il pattern sperimentale con quelli presenti nel database POW_COD; il processo richiede pochi secondi; il programma elabora una lista di probabili fasi cristalline presenti, ordinate in base ad una figura di merito.
 - l) per accettare una fase selezionarla con .
- Nel caso specifico del campione C14-220.dat le fasi da considerare sono: gesso (Ca (S O4) (H2 O)2); calcite (CaCO3) ed ematite (Fe2O3).