**Zadatak 11. Kvantitativna fazna analiza**

Priložen je difraktogram smjese vaterita i kalcita. Odredite (ručno) njihove udjele u smjesi.

**Uputa**: Površina (intenzitet) difrakcijskog maksimuma razmjerna je snazi po jedinici dužine difrakcijske kružnice *P*', za koju vrijedi sljedeće:

,

Gdje je *mhkl* multiplicitet difrakcijskog maksimuma *hkl*, *Fhkl* je strukturni faktor difrakcijskog maksimuma, *V* je volumen jedinične ćelije i je Lorentzova i polarizacijska korekcija za difraktometar. Pomoću te relacije možete izračunati površine (intenzitete) difrakcijskih maksumuma čistih faza te uspoređivanjem njihovih omjera s izmjerenim omjerima izračunati udjele faza.

Također su priloženi cifovi vaterita i kalcita, kao i izvadci iz *International Tables of Crystallography* gdje možete naći simetrijske ekvivalente za položaj svakog pojedinog atoma u cifu. Ovo je potrebno za računanje strukturnih faktora.

Za konverziju difrakcijskih podataka možete koristiti program PowDLL (<http://users.uoi.gr/nkourkou/powdll/>).