



## UNIVERSITÀ DI PISA CRISTALLOGRAFIA

ELENA BONACCORSI

Anno accademico  
CdS

2018/19  
SCIENZE E TECNOLOGIE  
GEOLOGICHE  
037DD  
6

Codice  
CFU

|                 |           |         |     |                  |
|-----------------|-----------|---------|-----|------------------|
| Moduli          | Settore/i | Tipo    | Ore | Docente/i        |
| CRISTALLOGRAFIA | GEO/06    | LEZIONI | 54  | ELENA BONACCORSI |

### Obiettivi di apprendimento

#### Conoscenze

Gli studenti, al termine del corso, dovranno dimostrare una solida conoscenza della cristallografia geometrica e dei principali metodi sperimentali per la determinazione ed il raffinamento delle strutture cristalline. Dovranno inoltre essere a conoscenza della principali applicazioni della cristallografia nella Chimica (se studenti della LM in Chimica) e nelle scienze della Terra (se studenti della LM in Scienze e tecnologie geologiche).

#### Modalità di verifica delle conoscenze

Esame orale sui contenuti del corso

#### Capacità

Al termine del corso gli studenti dovranno dimostrare di essere in grado di comprendere i contenuti essenziali di articoli scientifici relativi a strutture cristalline. Dovranno essere in grado di progettare un esperimento per la raccolta di dati strutturali e di usare il relativo software in sessioni pratiche guidate

#### Modalità di verifica delle capacità

Discussione durante il corso e in sede di esame finale

#### Prerequisiti (conoscenze iniziali)

Conoscenze di base, incluse nella laurea triennale

#### Programma (contenuti dell'insegnamento)

Prima parte (comune):

##### Fondamenti di Cristallografia Strutturale

Cristallografia geometrica. Ripetizioni periodiche: traslazioni, rotazioni proprie e improprie. Simmetria. Cenni di teoria dei gruppi. La simmetria traslazionale dei cristalli. Reticolo. Cella elementare, cella primitiva e celle multiple. Gruppi di simmetria nello spazio bidimensionale. Gruppi di rotazioni proprie e improprie. Limitazioni alla simmetria rotazionale. Reticoli bidimensionali. I 17 gruppi del piano. Gruppi di simmetria nello spazio tridimensionale. Gruppi di rotazioni proprie: gruppi ciclici ( $C_n$ ), gruppi diedrici ( $D_n$ ), gruppi tetraedrico (T), ottaedrico (O) e icosaedrico (I). Introduzione delle rotazioni improprie: derivazione di tutti i gruppi finiti di rotazioni proprie e improprie nello spazio. Limitazioni alla simmetria rotazionale nei cristalli: ordine degli assi  $n = 1, 2, 3, 4, 6$ . I 32 gruppi cristallografici del punto o classi cristalline. I sette sistemi cristallini. Forma esterna dei cristalli: facce, indici delle facce, legge di razionalità degli indici. La simmetria traslazionale dei cristalli. I 14 reticoli bravaisiani. I gruppi spaziali bravaisiani (simmorfici). Introduzione di elicogire e slittopiani: gruppi spaziali asimmorfici.

Cristallografia a raggi X. Natura e produzione dei raggi X. Assorbimento dei raggi X. Metodi per la rivelazione dei raggi X. Generalità sui fenomeni di interferenza e diffrazione. Equazioni di Laue. Equazione di Bragg e corrispondenza con le equazioni di Laue. Il reticolo reciproco e la sfera di Ewald. Metodi sperimentali. Fotogrammi a raggi X e loro interpretazione: diffrattogrammi di polveri; fotogramma di cristallo oscillante e rotante, fotogramma di Weissenberg (strato equatoriale), fotogramma di precessione. Determinazione della simmetria di Laue.

Determinazione della cella elementare e assegnazione degli indici. Assenze sistematiche e determinazione del gruppo spaziale di un cristallo. Diffrattometro per cristallo singolo: centratura del cristallo e procedure per la raccolta dei dati. Cristallografia strutturale. Diffusione da parte di un elettrone; diffusione da parte di un atomo; il fattore di struttura. La riflessione integrata. Fattori di Lorentz, di polarizzazione, e di assorbimento. Estinzione primaria e secondaria. Simmetria della diffrazione. Assenze sistematiche. La funzione densità elettronica e la sua espansione in serie di Fourier. Il problema della fase. Funzione di Patterson. Metodo dell'atomo pesante. Raffinamento delle strutture cristalline. Sintesi delle



## UNIVERSITÀ DI PISA

---

differenze. Metodo dei minimi quadrati. Risultati dell'analisi: distanze ed angoli di legame; poliedri di coordinazione.

Seconda parte (per geologi):

### **Applicazioni alle Scienze della Terra**

Studi strutturali ad alta temperatura e alta pressione. Strumentazioni per alta e bassa temperatura, alta pressione. Studio in situ di trasformazioni (es. disidratazioni). Trasformazioni di fase. Trasformazioni ordine-disordine. Esempi.

Mineralogia del mantello. Mineralogia sperimentale di alta pressione e trasformazioni di fase nel mantello. Discontinuità a 400 km: trasformazione delle olivine. Trasformazione dei pirosseni. Discontinuità a 650 km. Discontinuità a 1050 km.

Seconda parte (per chimici):

### **Metodi Avanzati per la Cristallografia**

Metodi diretti. I metodi diretti per la soluzione delle strutture cristalline. Distribuzione statistica dell'intensità dei riflessi. Fattori di struttura unitari e normalizzati e loro distribuzioni. Relazioni di disuguaglianza di Harker e Kasper. Relazioni  $s(h)s(h')s(h+h')$ : probabilità che il relativo prodotto sia +1. Determinazione dei segni. Strategie relative.

Diffrazione di neutroni. Produzione di neutroni, reattori nucleari. Rivelatori di neutroni. Neutroni termici. Ampiezza di diffusione dei nuclei: diffusione di potenziale e diffusione di risonanza. Diffusione incoerente (diversi isotopi di un elemento, diversi stati di spin per ogni isotopo). Legami a idrogeno; ordinamenti; strutture magnetiche.

Diffrazione di elettroni e microscopia elettronica. Camera per diffrazione. Microscopio elettronico. Caratteristiche della diffrazione di elettroni. Diffusione di elettroni: diffusione da parte del nucleo, diffusione da parte degli elettroni dell'atomo. Confronto delle ampiezze di diffusione per elettroni, raggi X, neutroni. Utilizzazione combinata di diffrazione di raggi X e di elettroni per la soluzione di problemi strutturali. Microscopia elettronica a trasmissione in alta risoluzione.

### **Bibliografia e materiale didattico**

Appunti di cristallografia

consultabili [online](#)

scaricabili in formato pdf ([Area download](#))

- W. Clegg, A.J. Blake, R.O. Gould, Main P.: Crystal Structure Analysis. Principles and Practice. Oxford University Press (present in the students' library).

Testi per consultazione (in biblioteca):

- International Tables for X-ray Crystallography - Brief teaching edition.

- Stout G.H., Jensen L.H. - X-ray Structure Determination. A Practical Guide. John Wiley & Sons Inc. 1989 (REV).

### **Modalità d'esame**

Esame orale, partendo da un articolo scientifico

Pagina web del corso

<https://sites.google.com/site/cristallografia/>

Ultimo aggiornamento 17/09/2018 12:37