



UNIVERSITÀ DI PISA

CRISTALLOGRAFIA

ELENA BONACCORSI

Anno accademico

2023/24

CdS

SCIENZE E TECNOLOGIE

GEOLOGICHE

Codice

037DD

CFU

6

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, AJ Blake, RO 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

Note

Commissione di esame:

Elena Bonaccorsi (presidente)

Cristian Biagioni (membro)

Marco Pasero (membro)

Ultimo aggiornamento 31/08/2023 09:03