UNIVERSITÀ DI PISA

CRISTALLOGRAFIA

ELENA BONACCORSI

Academic year	2023/24
Course	SCIENZE E TECNOLOGIE GEOLOGICHE
Code	037DD
Credits	6

Modules	Area	Type	Hours	Teacher(s)
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 (Cn), gruppi diedrici (Dn), 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

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 delle 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 Pratical 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