UNIVERSITÀ DI PAVIA

Anno Accademico 2019/2020

CRISTALLOGRAFIA

Anno immatricolazione	2018/2019
Anno offerta	2019/2020
Normativa	DM270
SSD	GEO/06 (MINERALOGIA)
Dipartimento	DIPARTIMENTO DI SCIENZE DELLA TERRA E DELL'AMBIENTE
Corso di studio	SCIENZE GEOLOGICHE APPLICATE
Curriculum	PERCORSO COMUNE
Anno di corso	2°
Periodo didattico	Primo Semestre (01/10/2019 - 15/01/2020)
Crediti	6
Ore	48 ore di attività frontale
Lingua insegnamento	ITALIANO
Tipo esame	ORALE
Docente	TARANTINO SERENA CHIARA (titolare) - 3 CFU ZEMA MICHELE - 3 CFU
Prerequisiti	Conoscenze di base di Matematica, Chimica e Fisica, come fornite dai corsi della laurea triennale in Scienze Geologiche.
Obiettivi formativi	Acquisizione dei concetti e degli strumenti necessari per la descrizione delle sostanze cristalline e quindi per la comprensione della complessità strutturale dei solidi estesi e molecolari. Capacità di analizzare ed interpretare la struttura tridimensionale di un cristallo, in termini di geometria, simmetria ed energia.
Programma e contenuti	Lo stato cristallino. Operazioni di simmetria cristallografiche. Elementi di simmetria: elementi geometrici e set di elementi. Reticolo cristallino vs. motivo cristallino e struttura cristallina. Direzioni di simmetria in un reticolo. Celle elementaru: celle primitive, celle multiple, celle convenzionali in 2D e 3D. Famiglie cristalline. Gruppi di simmetria e tipi di simmetria nello spazio diretto: simmetria dei reticoli; simmetria del

	contenuto della cella unitaria; simmetria dei pattern cristallografici, simboli di Hermann-Mauguin dei gruppi puntuali. Tipi di gruppi di simmetria puntuali cristallografici attraverso la proiezione stereografica. Gruppi spaziali e loro descrizione nelle International Tables for Crystallography, Vol. A (ITA). Classificazione dei gruppi spaziali: sistemi reticolari e sistemi cristallini. Simboli di Hermann-Mauguin per i gruppi spaziali. Gruppi spaziali e loro descrizione in ITA. Tabelle sinottiche di piani e gruppi spaziali. Introduzione alla teoria della diffrazione. Equazioni di Laue e relazione tra vettori di diffrazione e vettori del reticolo reciproco. Condizione di Bragg. Sfera di Ewald. Fattori di scattering atomici. Fattore di struttura e densità elettronica. Legge di Friedel. Simmetria del pattern di diffrazione. Il problema della fase. Metodi per la risoluzione di strutture cristalline. Diffrazione come trasformata di Fourier di una funzione densità. Modello strutturale e suo raffinamento. Dispersione anomala e determinazione della configurazione assoluta. Diffrazione da polveri. Reticolo reciproco associato a una polvere cristallina. Genesi di un diffrattogramma: posizione, intensità e forma dei picchi. Indicizzazione di un pattern di diffrazione. Raffinamento strutturale: Metodo di Rietveld. Dimensione dei cristalliti e relazione di Scherrer. Applicazioni della diffrazione da polveri.
Metodi didattici	Il corso si compone di lezioni frontali, di esercitazioni pratiche guidate mirate all’applicazione dei concetti teorici presentati nonché di lezioni interattive che prevedono l'utilizzo di software e database cristallografici.
Testi di riferimento	Materiale e dispense fornite dal docente. Per le basi di cristallografia: - C. Hammond, The Basics of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press. - M. Glazer and G. Burns, Space Groups for Solid State Scientists, Academic Press; 3 edition. Per i metodi di analisi strutturale di solidi cristallini: - J.P. Glusker & K.N. Trueblood, Crystal Structure Analysis - A Primer, Oxford University Press. - M.F.C. Ladd & R.A. Palmer, Structure Determination by X-ray Crystallographym, Plenum Press, New York and London. - G.H. Stout & L.H. Jensen, X-ray Structure Determination – A Practical Guide, Wiley. Per lo studio dei solidi molecolari: -A. Gavezzotti, Molecular aggregation, Oxford University Press. Per un approfondimento: - C. Giacovazzo, Fundamentals of Crystallography Altre Letture M.A. Glazer, Crystallography: A Very Short Introduction, Oxford University Press, 2016.
Modalità verifica	L’esame consiste di un esame orale. La prova verterà su almeno tre

apprendimento	argomenti distinti. Lo studente dovrà dimostrare di aver integrato le conoscenze acquisite nelle sezioni in cui si articola il corso, di essere in grado di discuterne criticamente e di aver così raggiunto gli obiettivi formativi proposti. La valutazione si baserà sul grado di approfondimento e comprensione degli argomenti proposti e terrà conto dell'uso del linguaggio scientifico appropriato.
Altre informazioni	
Obiettivi Agenda 2030 per lo sviluppo sostenibile	$lbl_legenda_sviluppo_sostenibile