

Scuola	Scienze di Base ed Applicate
ANNO ACCADEMICO	2015/2016
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE	SCIENZE E TECNOLOGIE GEOLOGICHE – cod. 2062 – Classe LM 74
INSEGNAMENTO	Cristallografia
TIPO DI ATTIVITÀ	Insegnamento opzionale
AMBITO DISCIPLINARE	Strutturistica chimica
CODICE INSEGNAMENTO	02259
ARTICOLAZIONE IN MODULI	NO
NUMERO MODULI	0
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	GEO/06
DOCENTE RESPONSABILE	Marcello Merli Professore Associato Università di Palermo
DOCENTE COINVOLTO	
CFU	6
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	102
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	48
PROPEDEUTICITÀ	Nessuna
ANNO DI CORSO	Secondo
SEDE	http://portale.unipa.it/facolta/sc.mat.fis.natur./cds/scienzeetecnologiegeologiche2062/home-corso/
ORGANIZZAZIONE E DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali e semplici dimostrazioni al computer
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Prova orale finale: discussione approfondita degli argomenti trattati nel corso.
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO	http://portale.unipa.it/facolta/sc.mat.fis.natur./cds/scienzeetecnologiegeologiche

DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	2062/calendari/
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Mercoledì Ore 10-12 ufficialmente. In pratica ogniqualvolta lo studente necessita di aiuto

<p>RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI</p> <p>Conoscenza e capacità di comprensione Acquisizione dei principi fondamentali alla base della cristallografia, per quanto concerne sia le basi teoriche della disciplina sia l'applicazione pratica ovvero i prodromi del calcolo cristallografico.</p> <p>Capacità di applicare conoscenza e comprensione Capacità di utilizzare le tecniche analitiche e soprattutto gli strumenti informatici di calcolo cristallografico.</p> <p>Autonomia di giudizio Essere in grado di scegliere le tecniche opportune sia di raccolta dati sperimentale sia di trattamento computazionale degli stessi.</p> <p>Abilità comunicative Capacità di descrivere con proprietà di linguaggio e in modo sufficiente circostanziato il lavoro cristallografico.</p> <p>Capacità d'apprendimento Capacità di aggiornamento con la consultazione delle pubblicazioni scientifiche proprie del settore della Cristallografia, anche con l'ausilio della navigazione web.</p>
--

<p>OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO FRONTALE DI CRISTALLOGRAFIA</p> <p>Obiettivo fondamentale è quello di fornire allo studente le basi teoriche per l'utilizzo delle tecniche analitiche cristallografiche e, soprattutto, per la effettuazione in modo autonomo di procedure di calcolo cristallografico votate alla risoluzione ed al raffinamento di strutture inorganiche (in particolare minerali), organiche e metallorganiche. In particolare, la preparazione di base prevede l'utilizzo in termini di calcolo cristallografico degli operatori di simmetria, le basi teoriche della diffrazione (legge di Bragg, costruzione di Ewald), il modello matematico cristallografico (fattore di struttura, trasformate di Fourier), la correzione dei dati sperimentali. Il corso prevede una rassegna delle tecniche di raccolta di dati di diffrazione X principali, ed una rassegna delle tecniche di risoluzione e raffinamento della struttura sia da un punto di vista teorico (distribuzione statistica degli effetti di diffrazione, metodi diretti e funzione di Patterson) sia pratico (uso dei più diffusi programmi di calcolo cristallografico quali WINGX, SHELX e SIR). Il corso si conclude con la risoluzione ed il raffinamento condotto dagli studenti stessi di alcune strutture.</p>
--

Corso di CRISTALLOGRAFIA	
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
1	Obiettivi della disciplina e sua suddivisione.
4	Operatori di simmetria
4	Diffrazione: legge di Bragg, costruzione di Ewald
6	Il fattore di struttura nell'approssimazione sferica degli atomi ed armonica per il moto termico
4	Legge di Friedel, proprietà dei fattori di struttura
1	Produzione e filtraggio dei RX
4	Tecniche di raccolta dati cristallografica: diffrazione RX per polveri e cristallo singolo, diffrattometri ad area. Cenni sulle sorgenti non convenzionali
1	Statistica delle intensità dei riflessi, Wilson plot
1	Ricerca della simmetria
4	Risoluzione di una struttura con i metodi diretti
4	Risoluzione di una struttura con la sintesi di Patterson
6	Raffinamento cristallografico
4	Analisi della struttura e della densità elettronica
4	Prove pratiche di risoluzione e raffinamento di alcune strutture

totale	
48	
TESTI CONSIGLIATI	Giacovazzo et al. (2002). Introduzione alla cristallografia. Ed. Laterza, Bari (prima edizione in lingua italiana del testo "Introduction to crystallography, Oxford University Press, Oxford).