

## CORSO DI CRISTALLOGRAFIA PER DOTTORANDI

## Scuola di Dottorato in Scienze e Tecnologie

DIPARTIMENTO DI SCIENZE CHIMICHE, DELLA VITA E DELLA SOSTENIBILITÀ AMBIENTALE

	29 maggio	30 maggio	31 maggio	1 giugno
9:00-10:45		DIFFRAZIONE DA POLVERI (Mantovani)  Il diffrattometro e i suoi componenti. La preparazione del campione. L'acquisizione dei dati.		METODI TEM ELECTRON DIFFRACTION NEUTRON DIFFRACTION (Mezzadri)  Richiamo degli aspetti teorici. Come funziona l'esperimento.
11.15-13:00	INTRODUZIONE ALLA CRISTALLOGRAFIA - PARTE I (Mantovani)  I minerali come solidi cristallini. I cristalli e i loro elementi di simmetria. I sistemi cristallini. Simmetria e classe cristallina. Indici di Miller. Abito e forma.	INTERPRETAZIONE DI UN DIFFRATTOGRAMMA (Mantovani)  Indicizzazione di un diffrattogramma. Identificazione di una fase. Analisi qualitativa con EVA. Casi di singole fasi e multi-fasi.	DIFFRAZIONE DA CRISTALLO SINGOLO (Marchiò)  Esercitazione sullo strumento. Raccolta dati. Risoluzione e affinamento strutturale. Analisi strutturale.	
14:30-16:00	INTRODUZIONE ALLA CRISTALLOGRAFIA - PARTE II (Massera)  Raggi X e loro interazione con la materia. Gruppi spaziali, teoria della diffrazione, legge di Bragg. Spazio diretto e spazio reciproco. Fattori di struttura.	ANALISI QUANTITATIVA (Mantovani)  L'analisi semi quantitativa, quantitativa e strutturale.  Il metodo Rietveld applicato allo studio dei materiali.  L'utilizzo del programma di affinamento GSAS e l'interfaccia grafica EXPGUI. Esempi di raffinamento strutturale da polveri	DIFFRAZIONE DA POLVERI: LA RISOLUZIONE STRUTTURALE (Mazzeo)  Richiamo degli aspetti teorici. Affinamento dei parametri di cella: metodo Pawley. Metodi di risoluzione ed esempi. Software. Validazione	
16.30-18.00		di sistemi di medio-bassa difficoltà. Esempi di raffinamento per l'analisi quantitativa di sistemi di medio-alta complessità con eventuale presenza di fase amorfa.	della struttura: metodo Rietveld.	