

Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	DIFFRAZIONE DI RAGGI X DA CAMPIONI POLICRISTALLINI
Corso di studio	CHIMICA INDUSTRIALE LM-71
Anno di corso	2022-2023
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	: 6
SSD	GEO/06
Lingua di erogazione	ITALIANO
Periodo di erogazione	
Obbligo di frequenza	No

Docente	
Nome e cognome	Ernesto Mesto
Indirizzo mail	ernesto.mesto@uniba.it
Telefono	+390805442597
Sede	Dipartimento di Scienze della Terra e Geoambientali
Sede virtuale	http://www.geo.uniba.it/mesto.html
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Orario di ufficio, previo appuntamento via e-mail

Syllabus	
Obiettivi formativi	Acquisire conoscenze di base di diffrazione X di materiali policristallini. Progettare e condurre un esperimento per la raccolta della figura di diffrazione di un materiale policristallino ed elaborarne i risultati in modo da derivare informazioni quali-, quantitative e strutturali. Caratterizzazione diffrattometrica di materiali policristallini di interesse industriale (es. materiali adsorbenti per il trattamento di reflui, catalizzatori solidi, macromolecole, materiali per l'edilizia, scorie industriali, etc.)
Prerequisiti	Concetti di base di: chimica generale, elettromagnetismo.
Contenuti di insegnamento (Programma)	<p>Fondamenti della diffrazione Stato cristallino, simmetria cristallina e reticolo reciproco. Legge di Bragg. Sfera di Ewald. Fattore di struttura. Origine di un pattern di diffrazione di un materiale policristallino. Informazioni ricavabili da un diffrattogramma.</p> <p>Tecniche sperimentali Cenni storici. Diffrattometri automatici per polveri. Geometria Bragg-Brentano. Scansioni a riflessione e a trasmissione. Sorgenti di raggi X: tubo a raggi X e luce di sincrotrone. Sorgenti di neutroni: continue e a spallazione. Monocromatizzazione di un fascio X. Collimazione di un fascio X: slitte di Soller, divergenti e di antiscattering. Detectors di raggi X: puntuali, lineari e areali. Rivelatori di neutroni: a gas, a scintillazione, a semiconduttore. Preparazione del campione. Errori introdotti dal mal posizionamento del campione nel diffrattometro automatico. Errori strumentali. Strategia di raccolta dati.</p> <p>Interpretazione di un pattern di diffrazioni da polveri Riduzione dati: sottrazione del background, smoothing, stripping Ka2. Metodi di Peak search. Identificazione delle fasi cristalline presenti in un diffrattogramma. Metodo di Hanawalt. Metodi automatici. Database cristallografici. Indicizzazione di un diffrattogramma e determinazione della cella unitaria. Determinazione del gruppo spaziale.</p> <p>Analisi quantitativa sul pattern di diffrazione di una miscela polifasica</p>

	<p><i>Intensità della diffrazione. Fattore di struttura. Metodo dell'addizione standard. Metodo dello standard interno. Metodo RIR (Reference Intensity Ratio). Raffinamento Rietveld. Quantificazione della componente amorfa in una miscela policristallina. Metodo indiretti e diretti. Metodo del picco singolo. Metodo dello Standard interno. Metodo dello standard esterno. Metodo PONKCS. Grado di cristallinità.</i></p> <p>Applicazione della diffrazione X</p> <p><i>Caratterizzazione XRD di materiali di interesse industriale: materiali adsorbenti per il trattamento di reflui, catalizzatori, materiali per l'edilizia, scorie industriali, etc. Analisi dei pattern di diffrazione di macromolecole. Esercizi guidati in laboratorio: raccolta dati con miscela polifasica di materiali policristallini di interesse industriale, identificazioni delle fasi e analisi quantitativa col metodo RIR e di Rietveld.</i></p>
Testi di riferimento	<p><i>V. K. Pecharsky and P.Z. Zavaliy. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials, 2nd Edition, Springer, New York, 2009.</i></p> <p><i>Immirzi A e Tedesco C. LA diffrazione dei cristalli. Cooperativa Universitaria Athena 2^a edizione, 2017.</i></p>
Note ai testi di riferimento	<i>Solo alcuni capitoli e/o sezioni indicati a lezione.</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
62	32	30	88
CFU/ETCS			
6	4	2	19

Metodi didattici	
	<i>Lezioni frontali con slide ed esperienze di laboratorio collettive e individuali.</i>

Risultati di apprendimento previsti	
Conoscenza e capacità di comprensione	<i>Conoscenza della definizione di materiale policristallino, degli aspetti di base della diffrazione X da polveri. Conoscenza sui parametri descrittivi di un diffrattogramma e delle informazioni derivabili da esso.</i>
Conoscenza e capacità di comprensione applicate	<i>Capacità di effettuare autonomamente una determinazione strutturale su un materiale policristallino. Capacità di progettare e condurre una misura di diffrazione X su una polvere. Abilità informatiche in rapporto alla elaborazione di pattern di diffrazioni X da materiali policristallini.</i>
Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Autonomia di giudizio</i> <i>Valutare criticamente le informazioni quali e quantitative derivabili da un diffrattogramma rX.</i> • <i>Abilità comunicative</i> <i>Capacità di espressione nella presentazione e divulgazione delle proprie conoscenze con linguaggio scientifico appropriato in lingua italiana;</i> <i>Presentazione dei risultati ottenuti dall'analisi di un diffrattogramma rX; capacità di inserirsi in modo rapido ed efficace negli ambienti di lavoro e in laboratori di ricerca scientifica.</i> • <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> <i>Apprendimento, trasferimento e adattamento di procedure sperimentali di</i>

	<i>diffrazione X da polveri e di elaborazioni digitali di pattern di diffrazione di materiali policristallini.</i>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Esame orale (100%)
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> <u>Livello minimo per il superamento dell'esame:</u> conoscenza dell'origine di un diffrattogramma. Legge di Bragg. Identificazione di una fase policristallina dal suo diffrattogramma: Metodo di Hanawalt. <u>Livello intermedio:</u> Analisi qualitativa di una miscela polifasica: algoritmi Search and Match. Analisi quantitativa di una miscela polifasica. Conoscenza degli apparati sperimentali utilizzati per raccogliere la figura di diffrazione X di un materiale policristallino. Progettazione e conduzione di un esperimento per misurare il diffrattogramma di un materiale policristallino <u>Livello superiore:</u> Determinazione del gruppo spaziale e risoluzione del problema della fase problema della fase usando dati di diffrazione da polveri. Metodo di Rietveld: determinazione strutturale di una fase policristallina e derivazione dei rapporti ponderali delle fasi di una miscela policristallina. Determinazione del contenuto di amorfo in una miscela policristallina. • <i>Autonomia di giudizio</i> <u>Per il livello intermedio:</u> Discernere che informazioni quali-quantitative sono derivabili da uno specifico diffrattogramma. <u>Per il livello superiore:</u> Analizzare criticamente le informazioni strutturali ottenute dall'analisi di un diffrattogramma e relazionarle con alcune proprietà del materiale. • <i>Abilità comunicative</i> <u>Per tutti i livelli:</u> utilizzo della corretta terminologia scientifica, relativa alle conoscenze richieste per i tre livelli. Possedere la proprietà di linguaggio per discutere gli argomenti trattati nel corso. • <i>Capacità di apprendere</i> Nello svolgimento dell'esame saranno proposti argomenti con un grado di approfondimento crescente al fine di stabilire a quale livello di conoscenze, fondamentale, intermedio e superiore, sia pervenuta la capacità di apprendimento dello studente.
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	<p><i>Il raggiungimento del livello minimo comporterà un voto finale tra 18-20.</i></p> <p><i>Il raggiungimento del livello intermedio comporterà un voto finale tra 21-26.</i></p> <p><i>Il raggiungimento del livello superiore comporterà un voto finale tra 27-30.</i></p>
Altro	