

Principali informazioni sull'insegnamento	
Titolo insegnamento	Diffrazione di Raggi-x per Polveri
Corso di studio	SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI L-30
Crediti formativi	3
Denominazione inglese	X-Ray Powder Diffraction
Obbligo di frequenza	Secondo regolamento didattico
Lingua di erogazione	ITALIANO

Docente responsabile	<i>Ernesto Mesto</i>	<i>ernesto.mesto@uniba.it</i>
-----------------------------	----------------------	-------------------------------

Dettaglio crediti formativi	Ambito disciplinare	SSD	Crediti
	Autonomamente scelte dallo studente	GEO/06	3

Modalità di erogazione	Periodo di erogazione	Anno di corso	Modalità di erogazione
	II° semestre	2°	Laboratorio (45h)

Organizzazione della didattica	Ore totali	Ore di corso	Ore di studio individuale
	120	90	30

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche
	Secondo Reg. Didattico	Secondo Reg. Didattico

Syllabus	
Obiettivi	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.
Prerequisiti	Conoscenza dettagliata dei principi fondamentali della diffrazione X da cristallo singolo.
Risultati di apprendimento previsti	<ul style="list-style-type: none"> <i>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>Autonomia di giudizio</i> Valutare criticamente le informazioni quali e quantitative derivabili da un diffrattogramma rX.

	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Abilità comunicative</i> Capacità di espressione nella presentazione e divulgazione delle proprie conoscenze con linguaggio scientifico appropriato in lingua italiana; 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>Capacità di apprendere</i> Apprendimento, trasferimento e adattamento di procedure sperimentali di diffrazione X da polveri e di elaborazioni digitali di pattern di diffrazione di materiali policristallini.
Contenuti in breve	Principi e applicazione della diffrazione X di materiali policristallini. Analisi quali-quantitativa di una miscela policristallina. Determinazione strutturale usando dati di diffrazione da polveri.
Programma in dettaglio	<p>Fondamenti della diffrazione</p> <p>Richiami sui concetti di stato cristallino, simmetria cristallina e reticolo reciproco. Legge di Bragg. Sfera di Ewald. Origine di un pattern di diffrazione da polveri. Informazioni ricavabili da un diffrattogramma.</p> <p>Tecniche sperimentali</p> <p>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</p> <p>Riduzione dati: sottrazione del background, smoothing, stripping $K\alpha_2$. 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</p>

	<p>polifasica</p> <p>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.</p> <p>Applicazione della diffrazione X</p> <p>Caratterizzazione XRD di materiali di interesse industriale nel settore dell'edilizia: il caso del clinker nella preparazione del cemento Portland. 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.</p>
Testi di riferimento	V. K. Pecharsky and P.Z. Zavaliy. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials, 2nd Edition, Springer, New York, 2009 (Cap. da 1 a 3);
Note ai testi di riferimento	Solo alcuni capitoli
Metodi didattici	Lezioni frontali con slide ed esperienze di laboratorio collettive ed individuali.
Metodi di valutazione	Esame orale (100%)
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> <p><u>Livello minimo</u> per il superamento dell'esame: conoscenza dell'origine di un diffrattogramma. Legge di Bragg. Identificazione di una fase policristallina dal suo diffrattogramma: Metodo di Hanawalt.</p> <p><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 materiali policristallino. Progettazione e conduzione di un esperimento per misurare il diffrattogramma di un materiale policristallino</p> <p><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.</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Autonomia di giudizio</i> <p><u>Per i livelli intermedio</u>: Discernere che informazioni quali-</p>

	<p>quantitative sono derivabili da uno specifico diffrattogramma. <u>Per i livelli superiore:</u> Analizzare criticamente le informazioni strutturali ottenute dall'analisi di un diffrattogramma e relazionarle con alcune proprietà del materiale.</p> <ul style="list-style-type: none"> • <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.
Altro	<p>Saranno elargiti 2 punti di «premio velocità» sul voto finale per gli studenti che supereranno l'esame entro la sessione di Luglio 2020. 1 punto di «premio velocità» per coloro che supereranno l'esame entro la sessione di Settembre 2020.</p>