FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO CON LE INDICAZIONI SPECIFICHE PER CIASCUN CAMPO DA COMPILARE

CORSO DI STUDIO *Scienze Chimiche (LM-54)*
ANNO ACCADEMICO *2023-2024*
DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Cristallografia*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	I anno
Periodo di erogazione	I semestre (gg-mm-aa-gg-mm-aa)
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	5
SSD	Geo/06
Lingua di erogazione	Italiano
Modalità di frequenza	facoltativa

Docente	
Nome e cognome	Emanuela Schingaro
Indirizzo mail	emanuela.schingaro@uniba.it
Telefono	0805443578
Sede	Dipartimento di Scienze della Terra e Geoambientali
Sede virtuale	Teams Schingaro ricevimento studenti z78ivr0
Ricevimento	Su appuntamento sia in presenza che su Teams

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
125	*32*	*15*	*78*
CFU/ETCS			
5	*4*	*1*	

Obiettivi formativi	Acquisire i fondamenti per l'analisi strutturale di composti organici e inorganici allo stato solido cristallino
Prerequisiti	Conoscenze di base di Chimica e Fisica della Laurea Triennale

Metodi didattici	Lezione frontali mediante impiego di powerpoint e lavagna tradizionale Esercitazioni in aula e in laboratorio sia individuali che di gruppo.

Risultati di apprendimento previsti ***Da indicare per ciascun Descrittore di Dublino (DD=*** ***DD1* Conoscenza e capacità di comprensione** ***DD2* Conoscenza e capacità di comprensione applicate** ***DD3-5* Competenze trasversali**	- ***Descrittore di Dublino 1****: conoscenza e capacità di comprensione (che cosa lo/la studente/studentessa conosce al termine dell'insegnamento);* - Al termine dell'insegnamento lo studente conosce: o le leggi della simmetria che governa la materia allo stato solido cristallino o le leggi della diffrazione dei raggi X da composti cristallini o il percorso teorico/sperimentale che porta alla determinazione di una struttura cristallina - ***Descrittore di Dublino 2****: capacità di applicare conoscenza e comprensione (che cosa lo/la studente/studentessa sa fare al completamento dell'insegnamento ovvero quali sono le competenze che ha acquisito);* - Al termine dell'insegnamento lo studente sa: o utilizzare le leggi della simmetria attraverso l'uso dei gruppi spaziali o impostare un esperimento di diffrazione di raggi X su cristallo singolo o interpretare i dati dell'analisi strutturale - ***Descrittore di Dublino 3****: capacità critiche e di giudizio (occorre indicare le attività che concorrono allo sviluppo di tali abilità. Per es.: prove di laboratorio, redazione di relazioni scritte, e così via);*

	• *Autonomia di giudizio* *L'insegnamento è impartito secondo una rigorosa successione fra lezioni teoriche e esercitazioni. Queste ultime sono svolte sia in aula e in laboratorio con esercizi e test di complessità crescente svolte sia individualmente che in gruppo con un'interazione continua con il docente. A turno, gli studenti sono invitati a esporre e discutere in pubblico i risultati dei loro esercizi. Gli studenti sviluppano capacità di* o Valutare se raccogliere dati cristallografici o Scegliere le condizioni sperimentali migliori per il dato campione o Effettuare un'analisi critica dei risultati - ***Descrittore di Dublino 4****: capacità di comunicare quanto si è appreso (anche in questo caso si devono predisporre attività mirate allo sviluppo, nello/a studente/studentessa, della capacità di comunicare/trasmettere quanto appreso); gli studenti devono saper comunicare informazioni, idee, problemi e soluzioni a interlocutori specialisti e non specialisti.* • *Abilità comunicative* Le esercitazioni individuali e di gruppo con relativa discussione comune delle procedure e dei risultati degli esercizi favoriscono lo sviluppo della acquisizione di un linguaggio specialistico rigoroso. Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di o presentare i risultati di un esperimento con proprietà di linguaggio o lavorare in gruppo - ***Descrittore di Dublino 5****: capacità di proseguire lo studio in modo autonomo nel corso della vita (occorre indicare quali siano gli strumenti forniti affinché lo studente sappia, al termine dell'insegnamento, proseguire autonomamente nello studio). Gli/Le studenti/studentesse devono aver sviluppato quelle capacità di apprendimento che sono loro necessarie per intraprendere studi successivi con un alto grado di autonomia.* • Capacità di apprendere in modo autonomo Nel corso dell'insegnamento ai discenti sono forniti sia strumenti metodologici che materiale didattico (dispense, accesso a software cristallografici gratuiti e database) per affrontare in autonomia studi successivi Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di • Utilizzare software cristallografici gratuiti per l'analisi strutturale
Contenuti di insegnamento (Programma)	**La simmetria** Lo stato cristallino e le operazioni isometriche. Gli elementi di simmetria con e senza componente traslazionale. I reticoli e le loro proprieta' razionali. Vincoli delle periodicita' sulla simmetria e viceversa. Classi puntuali. Sistemi cristallini. Reticoli di Bravais. Gruppi spaziali. Rappresentazione matriciale degli operatori di simmetria. Esercitazioni in aula su: simmetria puntuale, simmetria planare, gruppi spaziali. **Il reticolo reciproco** Relazioni metriche fra reticolo diretto e reticolo reciproco. Il reticolo reciproco come trasformata di Fourier del reticolo diretto. Simmetria nello spazio reciproco **La diffrazione dei raggi X da parte dei cristalli** Analogie e differenze fra la diffrazione ottica e la diffrazione di raggi X. Generazione e monocromatizzazione dei raggi X. Scattering Thomspon. Scattering Compton. Fattore atomico di diffusione. Fattore di temperatura. Diffrazione di un cristallo.

	Equazioni di Laue e di Bragg. Sfera di Ewald. Il fattore di struttura. Esperimenti di diffrazione di raggi X. Il diffrattometro automatico per cristallo singolo. Misura delle intensita' di diffrazione. Riduzione dei dati. Fasi della determinazione del gruppo spaziale Esercitazione in laboratorio: fasi di una raccolta dati. Scelta dei parametri sperimentali. Determinazione della cella elementare. Misura delle intensita' di diffrazione. Analisi delle intensita' di diffrazione. Determinazione sperimentale del gruppo spaziale: analisi delle estinzioni sistematiche **Soluzione e affinamento delle strutture cristalline** Il problema della fase in cristallografia. Metodi di soluzione strutturale: metodo di Patterson, metodi diretti. Completamento e affinamento della struttura. Minimi quadrati non lineari. Sintesi di Fourier delle differenze Esercitazioni guidate in isola didattica su soluzione completamento e affinamento strutturale con software gratuiti
Testi di riferimento	*Appunti delle lezioni* *AAVV Fundamentals of Crystallography, Edited by C. Giacovazzo, Oxford Science Publications , 2nd edition*
Note ai testi di riferimento	Solo capitoli selezionati indicati dal docente
Materiali didattici	Materiale didattico disponibile sulla classe Teams dell'insegnamento

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Prova scritta *in itinere*(facoltativa) che determina il 33 % del voto finale, colloquio orale con impiego di lavagna tradizionale

Criteri di valutazione	Nel corso dell'esame saranno valutati i seguenti aspetti: padronanza e grado di approfondimento nella conoscenza delle tematiche dell'insegnamento; capacità di risolvere problemi/esercizi proposti; capacità di comunicare le proprie conoscenze durante l'esame collegando gli argomenti in modo logico; competenza nell'impiego del lessico specialistico; chiarezza nell'esposizione; capacità di effettuare autonomamente collegamenti fra le diverse parti del programma d'insegnamento; capacità di ragionamento critico sullo studio effettuato. In sintesi • *Conoscenza e capacità di comprensione:* lo studente deve dimostrare padronanza nell'uso degli operatori di simmetria; conoscenza dei fondamenti fisico-matematici della diffrazione dei raggi X e della loro interazione con la materia allo stato solido cristallino; • *Conoscenza e capacità di comprensione applicate:* lo studente deve dimostrare capacità di utilizzare la simmetria e pianificare un esperimento di diffrazione di raggi X; • *Autonomia di giudizio*: lo studente deve dimostrare capacità di interpretazione dei dati • Abilità comunicative: lo studente deve dimostrare proprietà di linguaggio e capacità sostenere un contraddittorio col docente durante l'esame collegando gli argomenti in modo logico. • Capacità di apprendere: lo studente deve dimostrare il livello di approfondimento raggiunto in relazione alle diverse parti nelle quali è suddiviso l'insegnamento
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18. L'esame parte con la verifica delle conoscenze dello studente sulla simmetria cristallina attraverso un esercizio con domande di approfondimento. Successivamente si affronteranno le diverse parti del programma di insegnamento. Saranno proposti argomenti con un grado di complessità e approfondimento crescente al fine di stabilire a quale livello di conoscenze, fondamentale, intermedio o elevato, sia pervenuto lo studente. Il raggiungimento del livello basico comporterà un voto finale tra 18-21.Il raggiungimento del livello intermedio comporterà un voto finale tra 22-26.Il raggiungimento del livello elevato comporterà un voto finale tra 27-30 . In caso di dimostrazione di completa padronanza della disciplina potrà essere attribuita la votazione massima con lode.

Altro	
	.

FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO IN LINGUA INGLESE

COURSE OF STUDY Chemical Sciences (LM-54)
ACADEMIC YEAR 2023-2024
ACADEMIC SUBJECT Crystallography

General information	
Year of the course	1st year
Academic calendar (starting and ending date)	1st semester (october 2023-january 2024)
Credits (CFU/ETCS):	5
SSD	Geo/06
Language	Italian
Mode of attendance	Not compulsory

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Emanuela Schingaro
E-mail	emanuela.schingaro@uniba.it
Telephone	0805443578
Department and address	Earth and Geoenvironmental Sciences
Virtual room	Teams Schingaro ricevimento studenti z78ivr0
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	By appointment both in presence and on line

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
125	*32*	*15*	*78*
CFU/ETCS			
5	*4*	*1*	

Learning Objectives	Fundamentals of structural analysis of crystalline organic and inorganic compunds
Course prerequisites	Basic knowledge of physics and chemistry from the bachelor degree

Teaching strategie	Lectures using power points presentations and traditional blackboard. Excercises and Laboratory classes
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	○ Symmetry rules govering the crystalline solid state ○ Laws of X-ray diffraction from crystalline solids ○ Theoretic/experimental routes leading to crystal structure determination

Applying knowledge and understanding on:	o Space groups symmetry analysis o Single crystal X-ray diffraction experiment design o Data analysis and interpretation o
Soft skills	• *Making informed judgments and choices* o Crystallographic screening o Optimize experimental conditions o Critical analysis of results

	• *Communicating knowledge and understanding*
	  ○ Capability to report on an experiment with property of language
	  ○ Capability to work in team
	
	• *Capacities to continue learning*
	  ○ Use of free crystallographic software and databases for structural analysis

Syllabus	
Content knowledge	**Symmetry** The crystalline state and isometric operations. Symmetry elements with and without translation components. Point Groups. Crystal Lattices. The seven crystal systems. The fourteen Bravais lattices. Space Groups. Matrix representations of symmetry operators. Exercises on: point symmetry, planar symmetry, space groups. **The reciprocal lattice** From the direct to the reciprocal lattice. The reciprocal lattice as Fourier Transform of the direct lattice. Symmetry in the reciprocal lattice. **X-ray diffraction of crystalline solids** Similarities and dissimilarities between diffraction of light and diffraction of X-rays. Generating and monochromatizating of X-rays. Thomspon Scattering. Compton Scattering. Atomic form factors. Atomic displacement factors. Structure Factors. Single crystal diffraction. Laue and Bragg equations. Ewald Sphere. X-ray diffraction experiments. The automated single crystal X-ray diffractometer. Measurement of diffraction intensities. Data reduction. Steps of the space group determination. Laboratory classes: Steps of the data collection. Experimental conditions. Unit cell determination. Intensity data collection. Data reduction and corrections. Space group determination: detection of symmetry elements from intensity statistics and analysis of the systematic extinctions. **Structure solution and refinement** The phase problem in crystallography. Structure solution methods: Patterson methods, direct methods. Crystal structure refinement. Non linear least squares. Difference Fourier synthesis Guided excercises on solution, completion and refinement of crystal structures using free crystallographic softwares
Texts and readings	Teacher'd handouts. AAVV Fundamentals of Crystallography, Edited by C. Giacovazzo, Oxford Science Publications , 2nd edition
Notes, additional materials	Only selected chapters of the suggested textbooks
Repository	Teams classes

Assessment	Optional mid-term test worth 33% of the final course score; oral examination
Assessment methods	The following criteria will be used: mastery and degree of knowledge of the topics covered by the teaching; ability to solve the proposed problems/exercises; ability to link different contents of the exam in a logical way; clarity of exposition; property of language; ability of critical reasoning on the topics to be discussed.

Assessment criteria	• *Knowledge and understanding* o Mastery in the use of symmetry operators; o Knowledge of physics amd mathematics of X—ray diffraction and of the X-ray-crystalline solids interaction; • *Applying knowledge and understanding* o Capability to handle symmetry and design an X-ray diffraction experiment • *Autonomy of judgment* o Ability to perform critical analysis of experimental data • *Communicating knowledge and understanding* o Ability to report and discuss the results of the experiment o Ability to show the depth of the knowledge over different topic covered by the teaching • *Communication skills* o Ability to rigorously communicate using specialistic language and to report and discuss in a logic way • *Capacities to continue learning* o Capability to exploit the methods, strategies and instruments provided during the teaching
Final exam and grading criteria	The evaluation will be in thirtieths. An exercise consisting a space group diagram will start the examination in order to assess the knowledge on crystal symmetry. A number of questions on the other parts of the program will follow. Topics with an increasing degree of depth will be proposed in order to establish the student's level of knowledge. The depth of the knowledge will be assessed as basic, intermediate, or advanced. The basic level will result in a final score in the range 18-21. The minimum score for a pass is 18. The intermediate level will result in a final score in the range 22-26. The advanced level will result in a final score in the range 27-30. A complete mastery of the topics covered will result in the maximum score *cum laude*
Further information	
	.