

**FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO CON LE INDICAZIONI SPECIFICHE PER  
CIASCUN CAMPO DA COMPILARE (DA PREDISPORRE SU CARTA INTESTATA DEL  
DIPARTIMENTO/SCUOLA)**

**CORSO DI STUDIO** (*Scienze della Natura*)

**ANNO ACCADEMICO** (*2023-2024*)

**DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO** (*Diffrazione per Polveri*)

<b>Principali informazioni sull'insegnamento</b>	
Anno di corso	<i>Il anno</i>
Periodo di erogazione	<i>Il semestre (05-03-24-30-05-23)</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	<i>3</i>
SSD	<i>GEO/06</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiano</i>
Modalità di frequenza	<i>facoltativa</i>

<b>Docente</b>	
Nome e cognome	<i>Ernesto Mesto</i>
Indirizzo mail	<i>ernesto.mesto@uniba.it</i>
Telefono	<i>0805442587</i>
Sede	<i>Dipartimento di Scienze della Terra e Geoambientali</i>
Sede virtuale	<i>-</i>
Ricevimento	<i>Orario d'ufficio previo prenotazione via e-mail</i>

<b>Organizzazione della didattica</b>			
<b>Ore</b>			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>75</i>	<i>16</i>	<i>15</i>	<i>44</i>
<b>CFU/ETC1S</b>			
<i>Es. 3</i>	<i>2</i>	<i>1</i>	

<b>Obiettivi formativi</b>	<i>Acquisire conoscenze di base di diffrazione X da polveri. Progettare e condurre un esperimento di diffrazione da polveri ed elaborarne i risultati in modo da derivare informazioni quali- quantitative.</i>
<b>Prerequisiti</b>	<i>Conoscenza di base di Chimica, fisica e matematica.</i>



	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Autonomia di giudizio</i> Valutare criticamente le informazioni quali e quantitative derivabili da un diffrattogramma rX.</li> </ul> <p>- <b>Descrittore di Dublino 4:</b> 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.</p> <p>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.</p> <p>- <b>Descrittore di Dublino 5:</b> 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.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Apprendimento, trasferimento e adattamento di procedure sperimentali di diffrazione X da polveri e di elaborazioni digitali di pattern di diffrazione di materiali policristallini.</i></li> </ul>
<b>Contenuti di insegnamento (Programma)</b>	<p><b>Fondamenti della diffrazione</b> Richiami sui concetti di stato cristallino e simmetria cristallina. Legge di Bragg. Origine di un pattern di diffrazione da polveri. Informazioni ricavabili da un diffrattogramma.</p> <p><b>Tecniche sperimentali</b> Cenni storici. Diffrattometri automatici per polveri. Geometria Bragg-Brentano. Scansioni a riflessione e a trasmissione. Sorgenti di raggi X. Monocromatizzazione di un fascio X. Collimazione di un fascio X: slitte di Soller, divergenti e di antiscattering. Detectors di raggi X. Preparazione del campione. Errori introdotti dal mal posizionamento del campione nel diffrattometro automatico. Errori strumentali. Strategia di raccolta dati.</p> <p><b>Interpretazione di un pattern di diffrazioni da polveri</b> 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.</p> <p><b>Analisi quantitativa sul pattern di diffrazione di una miscela polifasica</b> Intensità della diffrazione. Metodo dell'addizione standard. Metodo dello standard interno. Metodo RIR (Reference Intensity Ratio).</p>
<b>Testi di riferimento</b>	V. K. Pecharsky and P.Z. Zavaliy. <i>Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials, 2nd Edition, Springer, New York, 2009.</i>
<b>Note ai testi di riferimento</b>	Solo alcuni capitoli e/o sezioni indicati a lezione.
<b>Materiali didattici</b>	Slides delle lezioni
<b>Valutazione</b>	

---

Modalità di verifica dell'apprendimento	Esame orale
--	-------------

<p>Criteria di valutazione</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> <i>Livello minimo 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.</i></li>   <li><i>Livello superiore: 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</i></li>   <li>• <i>Autonomia di giudizio</i> <i>Per il livello intermedio: Discernere che informazioni qualitative sono derivabili da uno specifico diffrattogramma.</i> <i>Per il livello superiore: Analizzare criticamente le informazioni quantitative ottenute dall'analisi di un diffrattogramma.</i></li>   <li>• <i>Abilità comunicative</i> <i>Per tutti i livelli: 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></li>   <li>• <i>Capacità di apprendere</i> <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.</i></li> </ul>

<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Il raggiungimento del livello minimo si tradurrà in un voto finale tra 18 e 24. Il raggiungimento del livello superiore si tradurrà in un voto finale compreso tra 25 e 30.</i></p>
--	---

<b>Altro</b>	



**FAC.SIMILE SCHEDA DI INSEGNAMENTO IN LINGUA INGLESE**
**COURSE OF STUDY**
**natural sciences**
**ACADEMIC YEAR**
**2023-2024**
**ACADEMIC SUBJECT**
**Powder diffraction**

General information	
Year of the course	2 <sup>nd</sup> year
Academic calendar (starting and ending date)	2 <sup>nd</sup> semester
Credits (CFU/ETCS):	3
SSD	GEO/06
Language	Italian
Mode of attendance	Not required

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Ernesto Mesto
E-mail	<a href="mailto:ernesto.mesto@uniba.it">ernesto.mesto@uniba.it</a>
Telephone	+390805442597
Department and address	<i>Department of Earth Sciences and Geoenvironmental</i>
Virtual room	
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	Office hours, by appointment via email

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
75	16	15	44
CFU/ETCS			
3	2	1	

<b>Learning Objectives</b>	<i>Acquiring fundamental knowledge about the X-ray Powder diffraction by natural powders. Carrying out an X-ray data collection from a powder and derive qualitative-quantitative information.</i>
<b>Course prerequisites</b>	<i>Basic knowledge of physic, chemistry and mathematic.</i>

<b>Teaching strategie</b>	
<b>Expected learning outcomes in terms of</b>	

<b>Knowledge and understanding on:</b>	Definition of ideal and real powders. Fundamental aspects of X-ray powder. Knowledge of the descriptive parameters of a diffractogram and of the information that can be derived from it.
<b>Applying knowledge and understanding on:</b>	X-ray data collection of powder samples. Elaboration of diffraction patterns of powder samples.
<b>Soft skills</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Making informed judgments and choices</i></li> </ul> Critic analysis of a diffraction powder pattern.

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Communicating knowledge and understanding</i> Presentation and dissemination of the crystallographic knowledge with an appropriate scientific language.</li> </ul> <p>Presentation of the results obtained from the interpretation of a powder diffraction pattern.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Capacities to continue learning</i> Learning and transfer of experimental X-ray powder diffraction protocol and of data analysis of powder diffraction patterns.</li> </ul>
<b>Syllabus</b>	
<b>Content knowledge</b>	<p><b>Fundamentals of diffraction</b> <i>Recalls on the crystals and symmetry. Bragg's law. Origin of a powder diffraction pattern. Information derived from a diffractogram.</i></p> <p><b>Experimental techniques</b> <i>Automatic X-ray diffractometers for powder analyses. Bragg-Brentano geometry. Reflection and transmission scans. X-ray sources: Monochromatizing of X-rays. Collimators, Soller Slits, divergent and antiscattering slits. X-ray detectors. Sample preparation. Instrumental errors. Data collection strategy.</i></p> <p><b>Interpretation of a powder diffraction pattern</b> <i>Data reduction: background subtraction, smoothing, <math>K\alpha_2</math> stripping. Peak search methods. Identification of crystal phases: Hanawalt and automatic method. Crystallographic databases. Indexing of a powder diffraction pattern. Determination of the unit cell.</i></p> <p><b>Quantitative analysis of polyphasic mixtures</b> <i>Intensity of Bragg Peak. Standard addition method. Internal standard method. RIR method (Reference Intensity Ratio).</i></p>
<b>Texts and readings</b>	<i>V. K. Pecharsky and P.Z. Zavaliy. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials, 2nd Edition, Springer, New York, 2009.</i>
<b>Notes, additional materials</b>	
<b>Repository</b>	

<b>Assessment</b>	
<b>Assessment methods</b>	<i>Oral examination</i>
<b>Assessment criteria</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>Knowledge and understanding</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Minimum level: Knowledge about the origin of a powder diffraction pattern, Bragg's Law, Phase identification. Hanawalt method.</li> <li>○ Upper level: Qualitative analysis of a powder diffraction pattern: Search and Match algorithms. Quantitative analysis of a powder diffraction pattern of a polyphasic mixture. Knowledge of the experimental apparatus used to collect the X diffraction pattern of a powder material. Data acquisition.</li> <li>○ <i>Autonomy of judgment</i></li> <li>○ For the upper level: Qualitative and quantitative analysis of a powder diffraction.</li> </ul> </li> <li>• <i>Communicating knowledge and understanding</i> <ul style="list-style-type: none"> <li>○ For all levels: The student should properly discuss about the X-ray powder diffraction in an oral examination. Topics with an increasing degree of depth will be proposed in order to establish the student's level of knowledge.</li> </ul> </li> <li>• <i>Communication skills</i> use of correct scientific terminology. Language skills required to discuss the topics of the course.</li> </ul>
<b>Final exam and grading criteria</b>	<i>Reaching the minimum level will result in a final grade between 18-24.</i>

---

	<i>Reaching the Upper level will result in a final grade between 25-30.</i>
<b>Further information</b>	
	.