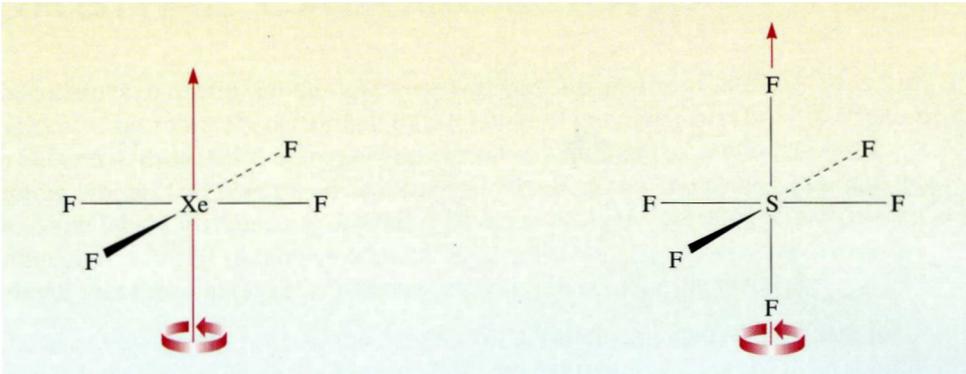


Tecniche di diffrazione

Programma del corso

- Operazioni ed elementi di simmetria puntuale. Simmetria e proprietà molecolari. Gruppi puntuali.



- Cristalli, impaccamenti, strutture ioniche. Sistemi cristallini e reticoli di Bravais.



- Elementi di simmetria cristallografici. Gruppi spaziali. Unità asimmetrica. Piani cristallografici e indici di Miller.



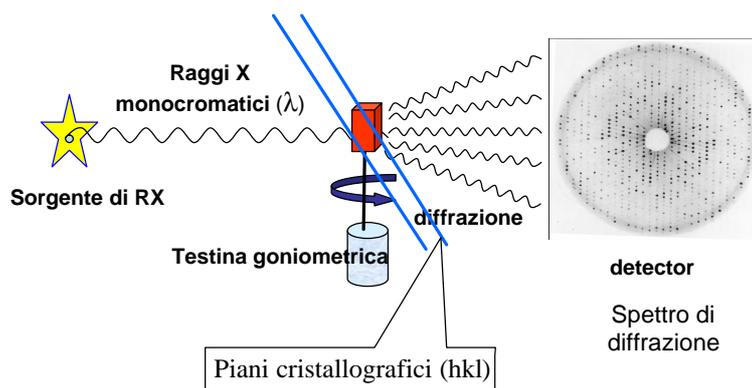
- Diffrazione raggi X: generatori, detector, monocromatori. Interpretazione di Bragg e di Laue. Sfera di Ewald.

- Rappresentazione onde con numeri complessi. Fattore di struttura e fattore atomico di diffusione.

Densità elettronica e sintesi Fourier. Problema della fase. Legge di Friedel.

- Simmetrie nello spazio reciproco, assenze sistematiche. Determinazione del gruppo spaziale.

Schema di esperimento di diffrazione RX



Risoluzione strutturale: metodo Patterson e cenno ai metodi diretti. Dati cristallografici. Spettri di polveri. Banche dati.

- Il corso prevede anche una *parte sperimentale* di montaggio dei cristalli, raccolta dati e risoluzione di una semplice struttura organica e di un complesso metallico.

Prof. Ennio Zangrando

Dip. Scienze Chimiche e Farmaceutiche

040 558 3932

ezangrando@units.it