

Cristallografia Avanzata, teorica e sperimentale
(Alberto Martinelli alberto.martinelli@spin.cnr.it –SPIN 20h)

1. Geometria dei cristalli
 - i. Assi cristallografici
 - ii. Indici di Miller – indici di Miller-Bravais
 - iii. Equazione dell'asse di zona
2. Simmetria del gruppo puntuale
 - i. Elementi di simmetria, operazioni di simmetria e operatori di simmetria
 - ii. Gruppi puntuali
 - iii. Simmetria in 2 dimensioni (rotazione e riflessione)
 - iv. Gruppi puntuali 3-dimensionali
3. richiami delle nozioni fondamentali di cristallografia (elementi di simmetria puntuale: identità, rotazione, inversione, riflessione, roto-riflessione; notazione Schoenflies ed Hermann-Mauguin; reticolo cristallino; cella unitaria; sistemi cristallini; reticoli di Bravais)
4. introduzione alla teoria dei gruppi
5. gruppi puntuali; gruppi spaziali;
6. utilizzo delle tavole internazionali (operazioni di simmetria, generatori, posizione, molteplicità, notazione di Wyckoff, simmetria del sito, condizioni di riflessione, sotto-gruppi e super-gruppi)
7. il reticolo reciproco; diffrazione al TEM
8. diffrazione da polveri (raggi X e neutroni)
9. raffinamento strutturale: il metodo di Rietveld
10. analisi del profilo del picco: strain reticolari (statici e dipendenti dalla temperatura), dimensione dei domini coerenti di diffrazione ed omogeneità chimica.
11. transizioni strutturali distorsive; relazioni di simmetria; modi soffici; strain spontaneo
12. Relazioni di simmetria tra strutture cristalline
13. operazione di anti-simmetria; gruppi spaziali bianco-neri; analisi delle rappresentazioni; ordinamento dei momenti magnetici (scattering magnetico)
14. Geometria molecolare e Cristallografia: teoria VSEPR; raggi ionici; poliedri di coordinazione; teoria BVS; regole di Pauling;