

## ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

### (1) ΓΕΝΙΚΑ

<b>ΣΧΟΛΗ</b>	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
<b>ΤΜΗΜΑ</b>	ΧΗΜΕΙΑΣ		
<b>ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	Μεταπτυχιακό		
<b>ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	<b>18Α5</b>	<b>ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	<b>1</b>
<b>ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	Ανόργανη Δομή και Δραστικότητα		
<b>ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ</b> <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	<b>ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b>	<b>ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ</b>	
<i>Διαλέξεις</i>	6	8	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
<b>ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b> <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΗΣ ΠΕΡΙΟΧΗΣ, ΓΕΝΙΚΟΥ ΥΠΟΒΑΘΡΟΥ, ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΩΝ		
<b>ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:</b>	ΟΧΙ		
<b>ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:</b>	ΕΛΛΗΝΙΚΑ		
<b>ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS</b>	ΕΑΝ ΧΡΕΙΑΣΘΕΙ ΝΑΙ		
<b>ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)</b>	<a href="https://eclass.uoa.gr/courses/CHEM237/">https://eclass.uoa.gr/courses/CHEM237/</a>		

## (2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

### Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

Στόχος του μαθήματος είναι μετάδοση γνώσης σχετικά με ένα ευρύ φάσμα σύγχρονων μεθοδολογιών που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση της δομής και τη συσχέτισή της με τη δραστηριότητα ανοργάνων ενώσεων και υλικών.

Ειδικότερα, στα πλαίσια του συγκεκριμένου μαθήματος διδάσκονται:

- Συμμετρία και Δομή: Μοριακή απεικόνιση. Τι είναι ο πίνακας  $-Z$  και πώς μπορούμε να τον δημιουργήσουμε. Στοιχεία συμμετρίας. Ομάδα σημείου.
- Μοριακές αλληλεπιδράσεις.
- Θεωρίες και μοντέλα γύρω από τη δομή των ανόργανων στερεών: Μοντέλο σθένους δεσμού (bond-valence model). Συσχέτιση του σθένους δεσμού με φυσικές ιδιότητες και χημική δραστηριότητα.
- Η ηλεκτρική αρνητικότητα ως δείκτης της χημικής δραστηριότητας: Ορισμοί.
- Παραδείγματα ημιαγωγών και νανοϋλικών: Συσχέτιση δομής και δραστηριότητας.
- Υπολογιστική μελέτη δομής και δραστηριότητας.
- Βασικές αρχές κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ.
- Η κρυσταλλογραφική βάση δεδομένων του Cambridge: Χρήση, δυνατότητες και εφαρμογές στο σχεδιασμό νέων κρυσταλλικών στερεών.
- Μεταλλο-Οργανικές Κατασκευές - πορώδη κρυσταλλικά στερεά: συσχέτιση δομής - τοπολογίας με δραστηριότητα και ιδιότητες καθώς και εφαρμογές τους στη βιομηχανία.
- Διάσχιση μηδενικού πεδίου (zero-field splitting) σε παραμαγνητικά συστήματα με  $S > 1/2$  και μέθοδοι προσδιορισμού της αξονικής ( $D$ ) και ρομβικής ( $E$ ) συνιστώσας του.
- Σχέση δομής και μαγνητικών ιδιοτήτων σε μονοπυρηνικά σύμπλοκα με συμπεριφορά μονομοριακών μαγνητών (single ion magnets, SIMs).
- Βασικές αρχές για τον σχεδιασμό νέων SIMs.

### Γνώσεις

- Γνώση και κατανόηση των βασικών αρχών της κρυσταλλογραφίας.
- Γνώση και κατανόηση των Μεταλλο-Οργανικών Κατασκευών, του τρόπου σύνθεσης αυτών, της δομής και της τοπολογίας των δικτύων τους αλλά και των ιδιοτήτων και εφαρμογών τους καθώς και της συσχέτισης της δομής τους με τη δραστηριότητά τους.

- Γνώση και κατανόηση της χρήσης της κρυσταλλογραφικής βάσης δεδομένων του Cambridge, των δυνατοτήτων της και των εφαρμογών της.
- Γνώση και κατανόηση της πρόβλεψης της χημικής δραστηριότητας με βάση δομικά χαρακτηριστικά των μοριακών δομών (συμμετρία, ισχύς δεσμών, μοριακά τροχιακά σθένους, κλπ.), ηλεκτρικές ιδιότητες αυτών (ατομικά φορτία, ηλεκτραρνητικότητα, κλπ.) και διαμοριακών αλληλεπιδράσεων.
- Γνώση και κατανόηση της έννοιας της διάσχισης μηδενικού πεδίου σε παραμαγνητικά συστήματα με  $S > \frac{1}{2}$ , καθώς και τις επιπτώσεις της στη μαγνητική τους συμπεριφορά.
- Διερεύνηση της σχέσης δομής και μαγνητικών ιδιοτήτων μονοπυρηνικών μονομοριακών μαγνητών (SIMs).
- Γνώση των βασικών αρχών για τον σχεδιασμό νέων SIMs.

### **Δεξιότητες**

- Δεξιότητα στην αποτίμηση βασικών αποτελεσμάτων της κρυσταλλογραφίας.
- Δεξιότητα στο σχεδιασμό και τη χρήση κατάλληλης συνθετικής μεθόδου για συνθέσεις Μεταλλο-Οργανικών Κατασκευών.
- Δεξιότητα στην ανάλυση των κρυσταλλικών δομών και των υποκείμενων δικτύων των Μεταλλο-Οργανικών Κατασκευών και συσχέτιση αυτών με τις ιδιότητές τους.
- Δεξιότητα στη χρήση της κρυσταλλογραφικής βάσης δεδομένων του Cambridge.
- Δεξιότητα στη χρήση προγραμμάτων σχεδιασμού μορίων και μέτρηση δομικών χαρακτηριστικών αυτών.
- Δεξιότητα στην πρόβλεψη της δομής ανόργανων στερεών με τη βοήθεια του μοντέλου σθένους δεσμού (bond-valence model).
- Δεξιότητα στη βιβλιογραφική αναζήτηση πρωτότυπων άρθρων και άρθρων ανασκόπησης στο πεδίο του μοριακού μαγνητισμού.
- Δεξιότητα στην αξιοποίηση της κρυσταλλογραφικής βάσης δεδομένων του Cambridge για τη διερεύνηση της σχέσης δομής και ιδιοτήτων σε SIMs.
- Δεξιότητα στην παρουσίαση από τους φοιτητές στην τάξη τους, των αποτελεσμάτων της βιβλιογραφικής τους έρευνας σε θέματα που άπτονται στη δομή και τη μαγνητική συμπεριφορά των SIMs.

### **Ικανότητες**

- Ικανότητα εφαρμογής των γνώσεων που αποκόμισαν οι φοιτητές στην αντιμετώπιση προβλημάτων που άπτονται της κρυσταλλογραφίας.
- Ικανότητα να ερμηνεύουν πειραματικά δεδομένα από τη σύνθεση Μεταλλο-Οργανικών Κατασκευών και να τα συσχετίζουν με τις δομές τους και τα υποκείμενα δίκτυά τους.
- Ικανότητα στη χρήση της κρυσταλλογραφικής βάσης δεδομένων του Cambridge και συσχέτιση των κρυσταλλικών δομών με τις ιδιότητες των αντίστοιχων ενώσεων.

- Ικανότητα στον σχεδιασμό μορίων σε 3-D με τη βοήθεια υπολογιστικών προγραμμάτων και τη μέτρηση των δομικών χαρακτηριστικών αυτών.
- Ικανότητα στην πρόβλεψη της δομής ανόργανων στερεών με τη βοήθεια του μοντέλου σθένους δεσμού (bond-valence model).
- Ικανότητα στην ερμηνεία των πειραματικών δεδομένων από τη μελέτη της δομής και των ιδιοτήτων μονομοριακών μαγνητών (SIMs).
- Ικανότητα αξιοποίησης της μέχρι τώρα γνώσης στο πεδίο του μοριακού μαγνητισμού, για τον σχεδιασμό πρωτότυπων SIMs.

#### Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα:

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας

και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

.....

Άλλες...

.....

Οι γενικές ικανότητες που θα πρέπει να έχει αποκτήσει ο φοιτητής και στις οποίες αποσκοπεί το μάθημα είναι:

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών.
- Αυτόνομη εργασία.
- Ομαδική εργασία.
- Ικανότητα εφαρμογής γνώσεων στην επίλυση προβλημάτων.
- Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών.
- Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον.
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης.
- Λήψη αποφάσεων.

### (3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Συμμετρία και Δομή: Μοριακή απεικόνιση. Τι είναι ο πίνακας  $-Z$  και πώς μπορούμε να τον δημιουργήσουμε. Στοιχεία συμμετρίας. Ομάδα σημείου. Μοριακές αλληλεπιδράσεις: διπόλου – διπόλου, δεσμός υδρογόνου, ιόντος – διπόλου, ιόντος ή διπόλου - διπόλου εξ επαγωγής, διπόλου εξ επαγωγής - διπόλου εξ επαγωγής. Η ηλεκτραρνητικότητα ως δείκτης της χημικής δραστηρότητας: Ορισμοί. Παραδείγματα ημιαγωγών και νανοϋλικών: Συσχέτιση δομής και δραστηρότητας. Θεωρίες και μοντέλα γύρω από τη δομή των ανόργανων στερεών: Μοντέλο σθένους δεσμού (bond-valence model). Συσχέτιση του σθένους δεσμού με φυσικές ιδιότητες και χημική δραστηρότητα. Υπολογιστική μελέτη δομής και δραστηρότητας. Βασικές αρχές κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ. Η κρυσταλλογραφική βάση δεδομένων του Cambridge: Χρήση, δυνατότητες και εφαρμογές στο σχεδιασμό νέων κρυσταλλικών στερεών.

Μεταλλο-Οργανικές Κατασκευές - πορώδη κρυσταλλικά στερεά: συσχέτιση δομής - τοπολογίας με δραστικότητα και ιδιότητες καθώς και εφαρμογές τους στη βιομηχανία.

Διάσχιση μηδενικού πεδίου (zero-field splitting) σε παραμαγνητικά συστήματα με  $S > 1/2$  και μέθοδοι προσδιορισμού της αξονικής ( $D$ ) και ρομβικής ( $E$ ) συνιστώσας του. Σχέση δομής και μαγνητικών ιδιοτήτων σε μονοπυρηνικά σύμπλοκα με συμπεριφορά μονομοριακών μαγνητών (SIMs). Βασικές αρχές για τον σχεδιασμό νέων SIMs.

#### (4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p><b>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ</b> Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο</p>													
<p><b>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ</b> Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</p>	<p>Στη Διδασκαλία:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Παρουσιάσεις με πολυμεσικό περιεχόμενο (power point).</li> </ul> <p>Στην Επικοινωνία με τους φοιτητές:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Υποστήριξη της μαθησιακής διαδικασίας μέσω της ηλεκτρονικής πλατφόρμας e-class (ανακοινώσεις, πληροφορίες, μηνύματα, έγγραφα, ομάδες χρηστών, κ.λπ.).</li> <li>▪ Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο.</li> </ul>													
<p><b>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b> Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας. Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη &amp; ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.  Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th data-bbox="646 1121 971 1171">Δραστηριότητα</th> <th data-bbox="979 1121 1304 1171">Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td data-bbox="646 1182 971 1213">Διαλέξεις</td> <td data-bbox="979 1182 1304 1213">78</td> </tr> <tr> <td data-bbox="646 1224 971 1287">Μη καθοδηγούμενη μελέτη</td> <td data-bbox="979 1224 1304 1287">62</td> </tr> <tr> <td data-bbox="646 1297 971 1329">Συγγραφή εργασίας</td> <td data-bbox="979 1297 1304 1329">50</td> </tr> <tr> <td data-bbox="646 1339 971 1402">Προετοιμασία αξιολόγησης</td> <td data-bbox="979 1339 1304 1402">10</td> </tr> <tr> <td data-bbox="646 1413 971 1444">Σύνολο Μαθήματος</td> <td data-bbox="979 1413 1304 1444">200</td> </tr> </tbody> </table>		Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου	Διαλέξεις	78	Μη καθοδηγούμενη μελέτη	62	Συγγραφή εργασίας	50	Προετοιμασία αξιολόγησης	10	Σύνολο Μαθήματος	200
Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου													
Διαλέξεις	78													
Μη καθοδηγούμενη μελέτη	62													
Συγγραφή εργασίας	50													
Προετοιμασία αξιολόγησης	10													
Σύνολο Μαθήματος	200													
<p><b>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ</b> Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης  Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμών, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</p>	<p>Η αξιολόγηση των φοιτητών γίνεται στα Ελληνικά και περιλαμβάνει:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• γραπτή εξέταση που περιλαμβάνει ερωτήσεις πολλαπλής επιλογής, σύντομης ανάπτυξης θεωρητικών θεμάτων, κρίσης, καθώς και επίλυσης προβλημάτων.</li> <li>• αξιολόγηση της βιβλιογραφικής εργασίας.</li> <li>• αξιολόγηση της παρουσίας της βιβλιογραφικής εργασίας.</li> </ul>													

Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.

## (5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

### -Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- <https://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/educationalresources/>
- W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer-Verlag, 2004. ISBN 978-3-642-05841-7
- S. Kaskel (ed), The Chemistry of Metal–Organic Frameworks, Synthesis, Characterization, and Applications, Wiley, 2016. ISBN 978-3-527-33874-0
- Bond Valences, Editors I. David Brown, Kenneth R. Poeppelmeier, Series Title Structure and Bonding, DOI<https://doi.org/10.1007/978-3-642-54968-7>, Publisher Springer Berlin, Heidelberg, eBook Packages Chemistry and Materials Science, Chemistry and Material Science (R0), Copyright Information Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014, Hardcover ISBN978-3-642-54967-0, Softcover ISBN978-3-662-51076-6, eBook ISBN978-3-642-54968-7
- L. Pauling, The Nature of the Chemical Bond, Cornell Univ., USA, 3rd ed., 1960.
- M. Feng, M. L. Tong, Chem. Eur. J., 2018, **24**, 7574-7594.
- J. Krzystek, J. Telsler, Dalton Trans., 2016, **45**, 16751-16763.
- J. M. Frost, K. L. M. Harriman and M. Murugesu, Chem. Sci., 2016, **7**, 2470-2491.