

ΑΝΟΡΓΑΝΗ ΔΟΜΗ ΚΑΙ ΔΡΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑ

Στόχος του μαθήματος είναι μετάδοση γνώσης σχετικά με ένα ευρύ φάσμα σύγχρονων μεθοδολογιών που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση της δομής και στη συσχέτισή της με τη δραστικότητα ανοργάνων 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: διπόλου – διπόλου, δεσμός υδρογόνου, ιόντος – διπόλου, ιόντος ή διπόλου - διπόλου εξ επαγωγής, διπόλου εξ επαγωγής - διπόλου εξ επαγωγής.
- ✚ Η ηλεκτρική αρνητικότητα ως δείκτης της χημικής δραστικότητας: Ορισμοί.
- ✚ Παραδείγματα ημιαγωγών και νανοϋλικών: Συσχέτιση δομής και δραστικότητας.
- ✚ 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 δραστικότητα.
- ✚ Υπολογιστική μελέτη δομής και δραστικότητας.
- ✚ 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 (single ion magnets).