ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	**ΕΜΥ-424**	**ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ**	**7ο**
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Κρυσταλλοχημεία		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		**ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ**	**ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ**
		4	5
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΕΠΙΛΟΓΗΣ		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	-		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Μικτή: Διδασκαλία στα ΕΛΛΗΝΙΚΑ και εξέταση στα ΑΓΓΛΙΚΑ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	https://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY453/		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Η ύλη του μαθήματος περιλαμβάνει την μελέτη ανόργανων κρυσταλλικών στερών. Ανάλυση της κρυσταλλικής δομής της ύλης από τα στοιχεία του περιοδικού πίνακα έως τις δυαδικές, τριαδικές και πολύπλοκες σπονδυλωτές ενώσεις. Συσχέτιση της κρυσταλλικής δομής με την ηλεκτρονική δομή των στερεών με τη μέθοδο LCAO. Κρυσταλλικές ατέλειες και πώς επηρεάζουν τις ιδιότητες του στερεού. (ημιαγωγοί, σπινθηριστές, διαφανή αγώγιμα οξείδια, κλπ.). Μέθοδοι ανάπτυξης κρυστάλλων και δομικός χαρακτηρισμός με περίθλαση ακτίνων-Χ. Σύγχρονες τεχνολογικές εφαρμογές των ανόργανων υλικών. Οι βασικοί μαθησιακοί στόχοι, τους οποίους οι φοιτητές στο τέλος του μαθήματος θα πρέπει να έχουν επιτύχει είναι:

1. Η Δομή των Στερεών: Περιγραφή των κρυστάλλων και κατηγοριοποίηση των πολυεδρικών αναπαραστάσεων των Ανόργανων Κρυσταλλικών Δομών
2. Θεωρία Ταινιών: Η ηλεκτρονική δομή από την σκοπιά της κρυσταλλικής δομής. Συσχέτιση δομής-ιδιοτήτων
3. Μη-στοιχειομετρία και Κρυσταλλικές Ατέλειες: Έλεγχος ιδιοτήτων των στερεών
4. Συνθετικές Μέθοδοι στην Ανόργανη Χημεία και Δομικός Χαρακτηρισμός: Ανάπτυξη Μονοκρυστάλλων, Πολυκρυσταλλικά και Άμορφα στερεά.
5. Εφαρμογές Ανόργανων Ενώσεων στη Σύγχρονη Τεχνολογία

Το μάθημα σύμφωνα με το Ευρωπαϊκό Πλαίσιο Προσόντων Δια Βίου Μάθησης είναι επιπέδου 6 ως μάθημα πρώτου κύκλου σπουδών.

Γενικές Ικανότητες

-Συσχέτιση της δομής της ύλης με τις φυσικές ιδιότητες των στερεών
-Συσχέτισης της δομής της ύλης με τις τεχνολογικές εφαρμογές προηγμένων υλικών
-Πρακτική άσκηση στον προσδιορισμό της κρυσταλλικής δομής από δεδομένα περίθλασης ακτίνων-Χ
- Ανάπτυξη ικανότητας συγγραφής ενός επιστημονικού κειμένου στα Αγγλικά.
-Ανάπτυξη ικανότητας προφορικής παρουσίασης ενός επιστημονικού αντικειμένου.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. Δομικοί Τύποι στερεών
α) Μέταλλα και Αμέταλλα
β) Δυαδικές ενώσεις: AB, AB_2, AB_3, A_2B_3, A_xB_y
γ) Τριαδικές Ενώσεις: ABX_2, ABX_3, AB_3, AB_2X_4, A_2BX_4, AB_2X_2
δ) Διαμεταλλικές Ενώσεις και Φάσεις Zintl
ε) Σπονδυλωτές Κρυσταλλικές Δομές: Πολύτυπα, Ομόλογες Σειρές και Μη-προσαρμόσιμες Δομές

2. Θεωρία Δεσμού Σθένους (βασισμένη στο άρθρο του R. Hoffman).
α) Κατασκευή διαγραμμάτων «Spaghetti» ξεκινώντας από το Μοριακά Τροχιακά.
β) Ηλεκτρονική αστάθεια (Παραμόρφωση Peierls, φαινόμενο Jahn-Teller)
γ) Πυκνότητα καταστάσεων, Αναδίπλωση ταινιών, άμεσο και έμμεσο ενεργειακό χάσμα
δ) Χωρικός Περιορισμός: Χαμηλοδιάστατα Υλικά, Κβαντικά Πηγάδια, Κβαντικά Νήματα, Κβαντικές Τελείες

3. Μη-στοιχειομετρία και Κρυσταλλικές Ατέλειες
α) Μη-Στοιχειομετρία και διάχυση ιόντων. Θερμική απόσβεση, πυροσυσσωμάτωση και ανόπτηση.
β) Διαγράμματα φάσης, ευτηκτικά μείγματα, σπονδυλική αποσύνθεση και στερεά διαλύματα.
γ) Μεταβολές Φάσης. Ανόργανα υλικά με μεταβλητή φάση, Κρύσταλλοι και άμορφα στερεά.

4. Συνθετικές Μέθοδοι
α) Σύνθεση στη Στερεά Κατάσταση, Υγρή σύνθεση, Διαλυτοθερμική σύνθεση
β) Μέθοδοι Ανάπτυξης Κρυστάλλων
Ανάπτυξη από τήγματα, διαλύματα και με μεταφορά στην αέρια φάση.
γ) Δομικός Χαρακτηρισμός
Μέθοδοι επίλυσης κρυσταλλικών δομών από μονοκρυστάλλους και κρυσταλλικές σκόνες. Χαρακτηρισμός άμορφων υλικών (Συνάρτηση Κατανομής Ζευγών (PDF))

5. Εφαρμογές Ανόργανων Ενώσεων στη Σύγχρονη Τεχνολογία
- Ανόργανοι Ημιαγωγοί στην Οπτοηλεκτρονική
Φωτο-δίοδοι σε Φωτοβολταϊκά, Ανιχνευτές, Διόδους Εκπομπής Φωτός
- Πορώδη Υλικά
Διαχωρισμός αερίων και καταλυτική δράση
- Τεχνολογία Υδρογόνου
Παραγωγή, Αποθήκευση και Καύση
- Αποθήκευση Ενέργειας
Μπαταρίες Στερεάς Φάσης

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Χρήση Power Point, Υποστήριξη της μαθησιακής διδασκαλίας με χρήση έγκυρων επιστημονικών διαδικτυακών βάσεων δεδομένων, πχ database of ionic radii, physical properties of semiconductors, ICSD, CSD Χρήση προγραμμάτων απεικόνισης και επεξεργασίας κρυσταλλικής δομής
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	***Δραστηριότητα*** / ***Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου*** Διαλέξεις: 39 Μελέτη βιβλιογραφίας στο σπίτι: 90 Σύνολο Μαθήματος: **129**
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Ο βαθμός καθορίζεται από την συγγραφή ενός άρθρου (40%) (στα Αγγλικά, τύπου JACS Communication) με θέματα σχετικά με την εφαρμογή ανόργανων υλικών στη σύγχρονη τεχνολογία, καθώς και την προφορική του παρουσίαση (40%). Το υπόλοιπο (20%) αξιολογείται με

	βάση την συμμετοχή και την κατανόηση εννοιών στο μάθημα. Το θέμα της παρουσίαση επιλέγεται από τον φοιτητή σε συνεννόηση με τον Διδάσκοντα.

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- 1) Ulrich Müller, «*Inorganic Structural Chemistry*», 2nd Edition, Wiley 2006.
- 2) Alexander F. Wells, «*Structural Inorganic Chemistry*», 5th Edition, Oxford University Press 1984.
- 3) Roald Hoffmann, «*How Chemistry and Physics Meet in the Solid State*», *Angew. Chem. Int. Ed. Engl*. (1987) 846-878
- 4) Anthony R. West. «*Solid State Chemistry and Its Applications*», 2nd Edition, Wiley 2014.
- 5) Richard J. D. Tiley, «*Defects in Solids*», Wiley 2008
- 6) Giovanni Ferraris, Emil Mackovicky, Stefano, Merlino, «*Crystallography of Modular Materials*», IUCr 2004.
- 7) Erwin Parthé «*Crystal Chemistry of Tetrahedral Structures*» CRC Press 1964

- Συναφή επιστημονικά περιοδικά:

Chemistry of Materials
Materials Horizons
Nature Materials
Advanced Materials
Journal of Solid State Chemistry

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCIENCES AND ENGINEERING		
ACADEMIC UNIT	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	**EMY-424**	**SEMESTER**	**7th**
COURSE TITLE	Crystal Chemistry		
INDEPENDENT TEACHING ACTIVITIES		**WEEKLY TEACHING HOURS**	**CREDITS**
		4	5
COURSE TYPE	ELECTIVE		
PREREQUISITE COURSES:	-		
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	Mixed: Lectures in GREEK exams in ENGLISH		
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	YES		
COURSE WEBSITE (URL)	https://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY453/		

(2) LEARNING OUTCOMES

Learning outcomes
The course discusses the study of inorganic crystalline solids. The crystal structures of the elements, binary, ternary and modular compounds is presented. Correlation between electronic structure and crystal structure using the LCAO approach. Defects in crystals and how those affect the physical properties of the solids (semiconductors, scintillators, transparent conducting oxides, etc.). Methods of crystal growth and structural characterization with X-ray diffraction. Modern technological applications of inorganic materials. The main educational goals that the students will achieve upon completion of the course include: 1. The structure of solids: Description and classifications of crystals through polyhedral representations of inorganic crystal structures. 2. Band structure: Electronic structure derived from crystal structure. Structure-property relations. 3. Non-stoichiometry and defects in crystals: Manipulation and control of the physical properties of solids. 4. Synthetic methods and characterization in inorganic solids: Crystal Growth of single-crystals, polycrystalline and amorphous solids *5.* Application of Inorganic compounds in technology *The course according to the European Qualifications Framework for Lifelong Learning belongs to level 6*.
-Relating the structure of matter with the physical properties of solids. -Relating the structure of matter with technological applications of advanced materials. -Practical exercise on crystal structure determination from X-ray diffraction data. -Skill development in writing scientific manuscripts in English - Skill development in public presentation of a scientific topic.

(3) SYLLABUS

1. Structure types of Solids
α) Metals and Nonmetals
β) Binary compounds: AB, AB_2, AB_3, A_2B_3, A_xB_y
γ) Ternary compounds: ABX_2, ABX_3, AB_3, AB_2X_4, A_2BX_4, AB_2X_2
δ) Intermetallics and Zintl Phases
ε) Modular compounds: Polytypes, Homologous series and misfit layered compounds

2. Band structure (based on R. Hoffmann review).
α) Contructing "Spaghetti" diagrams starting from molecular orbitals.
β) Electronic instability(Peierls distortion, Jahn-Teller effect)
γ) Density of states, band folding, direct and indirect bandgap
δ) Quantum confinement: Low-dimensional materials, Quantum wells, Quantum wires, Quantum dots

3. Non-Stoichiometry and Defects in Crystals
α) Nonstoichiometry and diffusion. Thermal quenching, sintering, and annealing.
β) Phase diagrams, eutectics, spinodal decomposition and solid solutions.
γ) Phase transitions. Phase transitions in inorganic solids, crystals and amorphous solids.

4. Synthesis methods
α) Solid-state synthesis, wet synthesis, solvothermal synthesis
β) Crystal Growth
Growth from melts, solutions and vapor transport.
γ) Structural characterization
Structure determination from single-crystals and crystalline powders. Characterization of amorphous solids (Pair Distribution Functions (PDF))

5. Applications of Inorganic Compounds in Modern Era Technology
- Inorganic Semiconductors in Optoelectronics
Photodiodes in Photovoltaics, Detectors and LED's
- Porous Materials
Gas Separation and Catalysis
- Hydrogen Technology
Production, Storage and Reactivity
- Energy Storage
Solid State Batteries

(4) TEACHING and LEARNING METHODS - EVALUATION

DELIVERY.	Face-to-Face
USE OF INFORMATION AND COMMUNICATIONS TECHNOLOGY	Use of Power Point, Use of interactive online databases, eg database of ionic radii, physical properties of semiconductors, ICSD, CSD Use of visualization and analysis software of the crystal structure.
TEACHING METHODS	
STUDENT PERFORMANCE EVALUATION	Successful completion of the course involves the writing of a scientific manuscript in English (40%) (JACS Communication format) on a topic related with the technological application of inorganic materials, and its oral presentation in the class (40%). The remaining (20%) is evaluated based on the class participation and understanding throughout the course. The topic will be chosen by the student after consultation with the instructor.

Activity	***Semester workload***
Lectures	39
Homework	90
Course total	**129**

(5) ATTACHED BIBLIOGRAPHY

- Suggested bibliography:

- 1) Ulrich Müller, «*Inorganic Structural Chemistry*», 2nd Edition, Wiley 2006.
- 2) Alexander F. Wells, «*Structural Inorganic Chemistry*», 5th Edition, Oxford University Press 1984.
- 3) Roald Hoffmann, «*How Chemistry and Physics Meet in the Solid State*», *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* (1987) 846-878
- 4) Anthony R. West. «*Solid State Chemistry and Its Applications*», 2nd Edition, Wiley 2014.
- 5) Richard J. D. Tiley, «*Defects in Solids*», Wiley 2008
- 6) Giovanni Ferraris, Emil Mackovicky, Stefano, Merlino, «*Crystallography of Modular Materials*», IUCr 2004.
- 7) Erwin Parthé «*Crystal Chemistry of Tetrahedral Structures*» CRC Press 1964

- Related Scientific Journals:

Chemistry of Materials
Materials Horizons
Nature Materials
Advanced Materials
Journal of Solid State Chemistry