ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΥΛΙΚΩΝ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	**ΕΜΥ-445**	**ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ**	**8ο**
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Εισαγωγή στην Κρυσταλλογραφία		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		**ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ**	**ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ**
		4	5
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΕΠΙΛΟΓΗΣ		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	-		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Μικτή: ΕΛΛΗΝΙΚΑ και ΑΓΓΛΙΚΑ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	https://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY445/		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Οι φοιτητές με το πέρας του μαθήματος αναμένεται να:

1. Εξοικειωθούν με τις έννοιες και τις μεθόδους της Κρυσταλλογραφίας, τόσο στην πρακτική της της χρήση, όσο και στη βασική μαθηματική θεμελίωσή της.
2. Εξοικειωθούν με τα προγράμματα απεικόνισης των κρυσταλλικών δομών.
3. Εξοικειωθούν με τις μεθόδους δομικής ανάλυσης κρυσταλλικών στερεών στην Επιστήμη των Υλικών.
4.

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

Γενικές Ικανότητες

-Ανάπτυξη διεπιστημονικής και κριτικής σκέψης
-Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με την χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
-Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Διαλέξεις

1) Αρχές Περίθλασης Ακτίνων-Χ
2) Οργανολογία περίθλασης Ακτίνων-Χ
3) Συμμετρία, Ομάδες Σημείου και Ομάδες Χώρου
4) Ο Νόμος του Bragg και οι σταθερές πλέγματος
5) Συστηματικές απώλειες, θέσεις Wyckoff και πολλαπλότητα ειδικών θέσεων
6) Το αντίστροφο πλέγμα και η σφαίρα του Ewald
7) Ατομικοί παράγοντες δομής και ατομική μετατόπιση (παράγοντας Debye-Waller)

8) Παράγοντας δομής και το «πρόβλημα της φάσης»

Εργαστηριακές Ασκήσεις

A) Περίθλαση πολυκρυσταλλικών δειγμάτων
   i) Συλλογή δεδομένων
   ii) Απεικόνιση και ερμηνεία δεδομένων
   iii) Ταυτοποίηση φάσεων
   iv) Ανάλυση δεδομένων
      a) Ανάλυση LeBail (προσομοίωση πρότυπου διαγράμματος)
      b) Ανάλυση Rietveld

B) Περίθλαση μονοκρυστάλλων
   i) Συλλογή δεδομένων
   ii) Εύρεση δεικτών και αναγωγή δεδομένων
   iii) Προσδιορισμός Ομάδας Χώρου και επίλυση δομής
   iv) Βελτιστοποίηση δομής
   v) Οπτικοποίηση δομής και παρουσίαση των αποτελεσμάτων

C) Διαγράμματα περίθλασης σε 2 διαστάσεις και ολική σκέδαση
   i) Συλλογή δεδομένων
   ii) Απεικόνιση και ερμηνεία δεδομένων
   iii) Ανάλυση G(r) vs r

(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 (Jana2006, Vesta, CMPR, Platon)**
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	***Δραστηριότητα*** / ***Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου*** Διαλέξεις: 13 Εργαστηριακές Ασκήσεις: 39 Μελέτη στο σπίτι: 73 Σύνολο Μαθήματος: **125**
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Η αξιολόγηση των φοιτητών γίνεται με ασκήσεις για το σπίτι και μια τελική εργασία. Η τελική εργασία περιλαμβάνει την επίλυση μιας άγνωστης κρυσταλλικής δομής και την παρουσίαση της σε μια μονοσέλιδη αναφορά (εξαιρούνται οι απαραίτητοι κρυσταλλογραφικοί πίνακες)

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- *Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:*

1. *Π.Ι. Ρετζεπέρεης, Εισαγωγή στην Κρυσταλλοδομή και τη Φυσική των Ακτίνων-Χ, Εκδόσεις Γιαχούδη, Θεσσαλονίκη 1985.*
2. Χ. Β. Λιούτας. Μαθήματα για τη Δομή των Κρυσταλλικών Στερεών, *, Εκδόσεις Ροπή, Θεσσαλονίκη 2020*
3. X-Ray Structure Determination: A Practical Guide, 2nd Ed, G. H. Stout, L. H. Jensen, Wiley 1989
4. Structure Determination by X-ray Crystallography, 4th Ed, M. Ladd, R. Palmer, Kluwer Academic 2003

- *Συναφή επιστημονικά περιοδικά:*
Zeitschrift für Kristallographie
Acta Crystallographica

COURSE OUTLINE

(1) GENERAL

SCHOOL	SCIENCES AND ENGINEERING		
ACADEMIC UNIT	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING		
LEVEL OF STUDIES	UNDERGRADUATE		
COURSE CODE	**EMY-445**	**SEMESTER**	**7th**
COURSE TITLE	Introduction to Crystallography		

INDEPENDENT TEACHING ACTIVITIES	**WEEKLY TEACHING HOURS**	**CREDITS**
	4	5

COURSE TYPE	ELECTIVE
PREREQUISITE COURSES:	-
LANGUAGE OF INSTRUCTION and EXAMINATIONS:	Mixed: GREEK and ENGLISH
IS THE COURSE OFFERED TO ERASMUS STUDENTS	YES
COURSE WEBSITE (URL)	https://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/EMY445/

(2) LEARNING OUTCOMES

Learning outcomes

After the successful completion of the course, students are expected to:

1. Familiarize themselves with the basic principles and methods of Crystallography so much in its practical use as much as in the basic understanding of the underlying mathematical principles.
2. Familiarize themselves with the crystal structure visualization visualization software.
3. Familiarize themselves with the methodology of structural analysis of crystalline materials in Materials Science

The course according to the European Qualifications Framework for Lifelong Learning belongs to level 6.

- Develop interdisciplinary and judicial thinking.
- Research, analyze and compile data and information using the appropriate software.
- Promote free, creative and out-of-the-box thinking

(3) SYLLABUS

Lectures

1) Principles of X-ray diffraction
2) X-ray diffraction Instrumentation
3) Symmetry, Point groups and Space Groups
4) Bragg's Law and Lattice Parameters
5) Systematic absences, Wyckoff positions and point multiplicity
6) Reciprocal Space and the Ewald sphere
7) Atomic structure factors and atomic displacement (Debye-Waller factor)
8) Structure Factor and the Phase problem

Laboratory exercises

A) Powder diffraction
i) Data Collection
ii) Data plotting and interpretation
iii) Phase identification
iv) Data Analysis
a) Pattern Matching
b) Rietveld refinement

B) Single-Crystal diffraction
i) Data collection**
ii) Data indexing and data reduction
iii) Space group determination and Structure solution
iv) Structure refinement
v) Crystal structure visualization and presentation

C) 2D X-ray diffraction patterns and Total Scattering
i) Data Collection
ii) Data plotting and interpretation
iii) G(r) vs r refinement

(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(Jana2006, Vesta, CMPR, Platon).
TEACHING METHODS	
STUDENT PERFORMANCE EVALUATION	Students will be evaluated with homework exercises and a final exam. The final exam will deal with the structure determination of an unknown crystal structure and a 1-page structure report (without taking into account supplementary crystallographic tables).

Activity	***Semester workload***
Lectures	13
Laboratory	39
Homework	73
Course total	**125**

(5) RECOMMENDED BIBLIOGRAPHY

- Suggested bibliography:

1. *Π.Ι. Ρετζεπέρεης, Εισαγωγή στην Κρυσταλλοδομή και τη Φυσική των Ακτίνων-Χ, Εκδόσεις Γιαχούδη, Θεσσαλονίκη 1985.*
2. Χ. Β. Λιούτας. Μαθήματα για τη Δομή των Κρυσταλλικών Στερεών, *, Εκδόσεις Ροπή, Θεσσαλονίκη*

2020

3. X-Ray Structure Determination: A Practical Guide, 2nd Ed, G. H. Stout, L. H. Jensen, Wiley 1989
4. Structure Determination by X-ray Crystallography, 4th Ed, M. Ladd, R. Palmer, Kluwer Academic 2003

- *Relevant Scientific Journal:*
Zeitschrift für Kristallographie
Acta Crystallographica