

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΧΗΜΕΙΑΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	634	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	6 ^ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Κρυσταλλογραφία Ακτίνων Χ: Από κηλίδες και δακτυλίου σε μοριακές δομές - Θεωρία και Πρακτική		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <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>		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ
Θεωρία		3	
Εργαστηριακές Ασκήσεις		2	
		Σύνολο:5	6
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Επιστημονικής περιοχής, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΟΧΙ		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΚΑΙ ΑΓΓΛΙΚΗ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	https://eclass.uoa.gr/courses/CHEM333/		

(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

Στόχοι: Η κατανόηση των βασικών εννοιών της ελαστικής σκέδασης ακτίνων Χ από κρυσταλλικά στερεά και πως αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την διευκρίνιση της κρυσταλλικής δομής ενός στερεού και εν τέλει της μοριακής δομής μέσω της μοντελοποίησης της περιοδικής ηλεκτρονικής πυκνότητας. Κατά τη διάρκεια των μαθημάτων και των εργαστηριακών ασκήσεων (επίλυση και μοντελοποίηση από πραγματικά δεδομένα με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή στην αίθουσα ΣΣΑΤΕΣ) θα αναπτυχθούν θέματα όπως τι είναι περίθλαση, η αναλογία με τη σκέδαση από το φως, η έννοια του κρυσταλλικού πλέγματος (σημεία πλέγματος, επίπεδα κτλ), η έννοια του ανάστροφου χώρου και πως αυτός συνδέεται με το πείραμα της σκέδασης, ο νόμος του Bragg, η σφαίρα του Ewald, η ισοδυναμία τους και πως αυτά συνδέονται με τον ανάστροφο χώρο, η έννοια της μοναδιαίας κυψελίδας και της ασύμμετρης μονάδας, τα πλέγματα Bravais, οι ομάδες χώρου, σημείου και Laue σε συνδυασμό με τις πράξεις συμμετρίας σε στερεά και πως αυτές απεικονίζονται και τη σημασία τους στο πείραμα της σκέδασης, ο ατομικός και δομικός συντελεστής σκέδασης και η συσχέτιση τους με τη συμμετρία, το πρόβλημα της φάσης, των παραγόντων που επηρεάζουν την ένταση των σκεδαζόμενων κυμάτων από την περιοδική ηλεκτρονική πυκνότητα, διδυμία στους κρυστάλλους, τις ομοιότητες και τις διαφορές ανάμεσα σε περίθλαση από μονοκρυστάλλους και σκόνη (SC-XRD και PXRD αντίστοιχα), η εξίσωση Scherrer και η μέθοδος Rietveld, οργανολογία και λειτουργία ενός περιθλασόμετρου ακτίνων Χ, δυνατότητες-πλεονεκτήματα-μειονεκτήματα της τεχνικής και συμπληρωματικός της ρόλος με άλλες τεχνικές χαρακτηρισμού. Πρακτική εξάσκηση συμμετεχόντων στη μοντελοποίηση μοριακών δομών μικρών μορίων από δεδομένα σκέδασης και εξοικείωση τους με ορισμένα ευρέως χρησιμοποιούμενα προγράμματα για αυτόν το σκοπό.

Γνώσεις

- Γνώση των θεωρητικών βάσεων της κρυσταλλογραφίας
- Ικανότητα αναγνώρισης των διαφορετικών μερών ενός περιθλασόμετρου και του ρόλου που παίζουν
- Γνώση του νόμου του Bragg και την ισοδυναμία του με το κατασκεύασμα/σφαίρα του Ewald και πως αυτά συνδυάζονται με τον ανάστροφο χώρο και καθορίζουν σημαντικούς παράγοντες του πειράματος της ελαστικής σκέδασης ακτίνων Χ

- Γνώση της σχέσης μεταξύ του πραγματικού και του ανάστροφου χώρου και ποια η χρησιμότητα του στην κρυσταλλογραφία
- Γνώση των διαφόρων κρυσταλλικών συστημάτων και των πλεγμάτων Bravais και κατανόηση της αναπαράστασης τους με σημεία και επίπεδα πλέγματος και πως αυτά αναπαράσονται με τους δείκτες Miller.
- Γνώση των στοιχείων συμμετρίας, της ορολογίας και σημειολογίας που χρησιμοποιείται, των ομάδων χώρου και της σχέσης τους με τις ομάδες σημείου, τις ομάδες Laue, τα κρυσταλλικά συστήματα – κατανόηση των διαφορών μεταξύ κεντροσυμμετρικής, μη-κεντροσυμμετρικής και χειρικής ομάδας χώρου και οι επιπτώσεις που έχει στη συλλογή δεδομένων, την επεξεργασία του και εν’ τέλει την επίλυση και μοντελοποίηση των δεδομένων
- Γνώση της σχέσης του ατομικού και δομικού συντελεστή σκέδασης, των παραγόντων που τους επηρεάζουν και πως εξηγούν πτυχές του πειράματος της ελαστικής σκέδασης
- Γνώση και κατανόηση των παραγόντων και των φαινομένων που επηρεάζουν την ένταση των σκεδασμένων ακτίνων X
- Γνώση του φαινομένου της ανώμαλης σκέδασης
- Γνώση και κατανόηση στατιστικών συντελεστών ποιότητας ενός πειράματος περίθλασης όπως R_{int} , R_1 , wR_2 , I/σ , πληρότητα δεδομένων και γνώση των προβλημάτων που μπορεί να προκύψουν κατά τη διάρκεια της συλλογής δεδομένων σε ένα πείραμα σκέδασης, και πως αυτά αντικατοπτρίζονται σε αυτούς τους συντελεστές
- Κατανόηση των παραγόντων που επηρεάζουν τη μοντελοποίηση της περιοδικής ηλεκτρονικής πυκνότητας, γιατί είναι απαραίτητη λόγω του προβλήματος της φάσης, πως επιτυγχάνεται
- Γνώση του φαινομένου της διδυμίας, τα διάφορα είδη διδυμίας, που παρατηρούνται και τα προβλήματα που μπορούν να δημιουργήσουν
- Γνώση των διαφορών ανάμεσα σε ένα πείραμα ελαστικής σκέδασης από μονοκρύσταλλο και από κρυσταλλική σκόνη
- Γνώση των πλεονεκτημάτων της τεχνικής αλλά και των μειονεκτημάτων της
- Η εξίσωση Scherrer
- Γνώση της μεθόδου Rietveld
- Θεωρητικό υπόβαθρο για την πιο ικανή χρήση των νέων περιθλασομέτρων του ΕΚΠΑ (μονοκρυστάλλου και επί κόνεως)

Δεξιότητες

- Δεξιότητα επίλυσης δεδομένων από ελαστική σκέδαση ακτίνων X (μονοκρύσταλλος και σκόνη) και μοντελοποίηση της μοριακής δομής στη στερεά φάση βάση αυτών
- Δεξιότητα χειρισμού προγραμμάτων επίλυσης και μοντελοποίησης από δεδομένα ελαστικής σκέδασης ακτίνων X
- Δεξιότητα αξιοποίησης βιβλιογραφικών δεδομένων
- Δεξιότητα αξιοποίησης των χημικών γνώσεων για την κατανόηση και

επεξήγηση μετρικών παραμέτρων που βασίζονται στη μοντελοποίηση από δεδομένα περίθλασης ακτίνων Χ

Ικανότητες

- Ικανότητα εξαγωγής συμπερασμάτων από τη μοντελοποίηση της μοριακής δομής ενός κρυσταλλικού στερεού
- Ικανότητα αναγνώρισης φαινομένων διαταραχής στην κρυσταλλική δομή και μοντελοποίησης τους και η τελική δημιουργία ενός μοντέλου της περιοδικής ηλεκτρονικής πυκνότητας με στατιστική πιστότητα και φυσικό/χημικό νόημα, το οποίο θα είναι δημοσιεύσιμο με βάση τα κριτήρια της IUCr
- Ικανότητα κρίσης της ορθότητας τόσο ενός μοντέλου κρυσταλλικής δομής όσο και της δυνατότητας της τεχνικής να δώσει τις απαραίτητες πληροφορίες
- Ικανότητα αντιπαραθέσεως πειραματικών αποτελεσμάτων, βιβλιογραφικών πληροφοριών και αποτελεσμάτων από πειράματα σκέδασης ακτίνων Χ.
- Ικανότητα χρήσης και κατανόησης λειτουργίας των περιθλασόμετρων (μονοκρυστάλλου και κόνεως) στο core facility του ΕΚΠΑ και χρήση τους στις επόμενες προπτυχιακές και μεταπτυχιακές δραστηριότητες
- Ικανότητα συνδυαστικής χρήσης της τεχνικής με άλλες μεθόδους χαρακτηρισμού για τη μελέτη συστημάτων σε μοριακό επίπεδο
- Λήψη αποφάσεων για την καταλληλότητα της τεχνικής βασισμένοι σε περιγράμματα περίθλασης

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/φοιτήτρια και στις οποίες αποσκοπεί το μάθημα είναι:

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών.
- Αυτόνομη εργασία.
- Ομαδική εργασία.
- Ικανότητα εφαρμογής γνώσεων στην επίλυση προβλημάτων.
- Λήψη αποφάσεων.
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης
- Παραγωγή νέων ερευνητικών ιδεών.

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

ΘΕΩΡΙΑ: Η θεωρία του μαθήματος καλύπτει έννοιες όπως: τι είναι περίθλαση - αναλογία με το φως –χρησιμότητα. Οργανολογία - Τι είναι ένα περιθλασόμετρο και πώς δουλεύει. Τι είναι ένας κρύσταλλος - Σημεία πλέγματος - Κυψελίδα - ασύμμετρη μονάδα. Κρυσταλλικά πλέγματα - Πλέγματα Bravais Συμμετρία και πράξεις συμμετρίας. ομάδες σημείου και χώρου. Ανάστροφος χώρος, δείκτες Miller, η εξίσωση του Bragg, η σφαίρα του Ewald. Δομικός και ατομικός συντελεστής σκέδασης, συστηματικές απουσίες. Διδυμία στην κρυσταλλογραφία. Διαφορές μεταξύ ελαστικής σκέδασης από μονοκρύσταλλο και από σκόνη. Η εξίσωση Scherrer. Η μέθοδος Rietveld.

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ: Πρακτική άσκηση λύσης και μοντελοποίησης δεδομένων από πειράματα περίθλασης που έχουν συλλεχθεί στο core-facility του ΕΚΠΑ από ερευνητικούς μονοκρυστάλλους – επίδειξη και συζήτηση των δυνατοτήτων αλλά και των ατελειών της τεχνικής. Μοντελοποίηση δεδομένων από ελαστική σκέδαση από κρυσταλλικές σκόνες.

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i>	Πρόσωπο με πρόσωπο: Διδασκαλία ζωντανή με εξαγωγή σχέσεων στον πίνακα διατηρώντας διαρκή αλληλεπίδραση με το ακροατήριο, η οποία συνεχίζεται στο διάλειμμα των διαλέξεων και στο γραφείο. Επίσης γίνεται επίλυση ασκήσεων και θεμάτων που πραγματεύονται θέματα κρυσταλλογραφίας (workshops). Οι φοιτητές/τριές εξασκούνται στην επίλυση και μοντελοποίηση μοριακών δομών από πραγματικά δεδομένα ελαστικής σκέδασης ακτίνων Χ όπου και κατανοούν πως εφαρμόζεται η θεωρία στην πράξη. Τα δεδομένα επιλύονται με τη βοήθεια και την καθοδήγηση του διδάσκοντα (με επικουρική χρήση ΤΠΕ) και είναι κλιμακωτής δυσκολίας πραγματευόμενα διάφορες πτυχές της θεωρίας του μαθήματος στην πράξη. Τα δεδομένα πάνω στα οποία στηρίζονται οι εργαστηριακές ασκήσεις είναι επίσης διαθέσιμα μέσω της παραπάνω ιστοσελίδας του μαθήματος επιτρέποντας την εξάσκησή τους στον προσωπικό τους υπολογιστή μια και τα προγράμματα είναι δωρεάν για ακαδημαϊκή χρήση.
--	---

ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές	Χρήση Τ.Π.Ε στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση και στην Επικοινωνία με τους φοιτητές. Συγκεκριμένα: Διδασκαλία και Εργαστηριακή Εκπαίδευση: Παρουσιάσεις με πολυμεσικό περιεχόμενο (εικόνες, βίντεο) τόσο για τη θεωρία, όσο και για τις εργαστηριακές ασκήσεις εξάσκησης στην επίλυση δεδομένων και τη μοντελοποίηση μοριακών δομών. Διάθεση δεδομένων. Στην επικοινωνία με τους φοιτητές: - Υποστήριξη της μαθησιακής διαδικασίας μέσω της ηλεκτρονικής πλατφορμας e-class (σημειώσεις διδάσκοντα, ανακοινώσεις, πληροφορίες, έγγραφα, σημειώσεις, μηνύματα) - Ηλεκτρονικό Ταχυδρομείο																								
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας. Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & 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	<table><tr><th>Δραστηριότητα</th><th>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th></tr><tr><td>Διαλέξεις</td><td>39</td></tr><tr><td>Εργαστηριακή άσκηση</td><td>26</td></tr><tr><td>Ατομική μελέτη</td><td>85</td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td>Σύνολο Μαθήματος</td><td>150</td></tr></table>	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου	Διαλέξεις	39	Εργαστηριακή άσκηση	26	Ατομική μελέτη	85															Σύνολο Μαθήματος	150
Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου																								
Διαλέξεις	39																								
Εργαστηριακή άσκηση	26																								
Ατομική μελέτη	85																								
Σύνολο Μαθήματος	150																								
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.	Γλώσσα Αξιολόγησης: Ελληνική και αγγλική (για φοιτητές Erasmus) Μέθοδοι αξιολόγησης: Γραπτή εξέταση στο τέλος του εξαμήνου επίλυσης προβλημάτων και ερωτήσεων κρίσης βασισμένες πάνω στη θεωρία του μαθήματος καθώς και στην επίλυση/μοντελοποίηση δομών από δεδομένα σκέδασης που γίνεται στα πλαίσια του εργαστηρίου του μαθήματος.																								

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

-Προτεινόμενη Βιβλιογραφία : -Συναφή επιστημονικά περιοδικά: Νικόλαος Γλυκός, Μία μη μαθηματική εισαγωγή στην κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών (https://repository.kallipos.gr/handle/11419/3924).
--

- Αναγνώστης Χ. Στεργίου, Μέθοδοι Κρυσταλλοδομής, Εκδόσεις Ζήτη, 2003 (Κωδικός Εύδοξου: 11104).
- Walter Borchardt-Ott, Crystalloraphy – An Introduction, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2011 (Κωδικός Εύδοξου: 73234195).
- Mark Ladd and Rex Palmer, Structure Determination by X-ray Crystallgraphy, Springer US, 5th Edition, 2013 (Κωδικός Εύδοξου: 73255855).
- Yoshio Waseda, Eiichiro Matsubara, Kozo Shinoda, X-ray Diffraction Crystallography, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2011 (Κωδικός Εύδοξου: 73261156).
- William Clegg, X-ray Crystallography, 2nd Edition, Oxford University Press, 2015.