

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ - ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝ

Βασικός στόχος του μαθήματος είναι η γνωριμία με τις υπολογιστικές μεθόδους επίλυσης προβλημάτων της επιστήμης της Χημείας.

Στο πρώτο μέρος θα παρουσιαστούν:

- ✚ μέθοδοι που βασίζονται στη θεωρία των μοριακών τροχιακών (ab-initio) και στο
- ✚ συναρτησιακό ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT) και η
- ✚ εφαρμογή τους σε προβλήματα που αφορούν υλικά με τεχνολογικές εφαρμογές.

Ταυτόχρονα θα παρουσιαστούν:

- ✚ υπολογιστικά πακέτα (Gaussian, MOPAC, κ.α.) και θα
- ✚ αναλυθούν οι δυνατότητές τους.

Στο δεύτερο μέρος γίνεται:

- ✚ εξάσκηση στον υπολογιστή πάνω σε προβλήματα υπολογισμού ενέργειας και βελτιστοποίησης της δομής μοριακών συστημάτων και παρουσιάζονται
- ✚ τεχνικές μελέτης της τοπικής δομής συστημάτων που εκτείνονται σε μεγαλύτερη έκταση (κρυσταλλικά και άμορφα υλικά, επιφάνειες, νανοϋλικά, κ.α.).
- ✚ Θα μελετηθεί επίσης η επίδραση της παρουσίας διαλύτη,
- ✚ η αλληλεπίδραση (ισχυρή ή ασθενής) μεταξύ των μορίων,
- ✚ οι ηλεκτρικές ιδιότητες (διπολική ροπή, πολωσιμότητα, πολυπολικές ροπές),
- ✚ τα φορτία και η ηλεκτροστατική επιφάνεια,
- ✚ τα φάσματα απορρόφησης,
- ✚ δόνησης και
- ✚ NMR.

Τα παραπάνω θα συνδεθούν με τα ερευνητικά projects (Διπλωματικές Εργασίες) των φοιτητών.