



**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΘΕΩΡΗΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ**

Ημερίδα: “Θεωρητική φυσικοχημεία / θεωρητική επιστήμη υλικών”

Πέμπτη 28 Ιουνίου 2018, Αμφιθέατρο ΕΙΕ

ΛΕΩΦ. ΒΑΣ. ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ 48, ΑΘΗΝΑ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΗΜΕΡΙΔΑΣ

- | | |
|---------------|--|
| 10:00 – 11:00 | Δρ. Ι. Κερκινές, “Θεωρητική Φυσικοχημεία: Από τα διατομικά μόρια στις βιοδιαγνωστικές εφαρμογές” |
| 11:00 – 12:00 | Δρ. Ε. Κλώντζας, “Μοντελοποίηση νανοδομημένων πορωδών υλικών για εφαρμογές σε ενέργεια και περιβάλλον” |
| 12:00 – 13:00 | Ελαφρύ γεύμα |
| 13:00 – 14:00 | Δρ. Δ. Τζέλη, “Υπολογιστική-Θεωρητική Χημεία: Από τα διατομικά μόρια στα υπερμοριακά συστήματα και τα υλικά” |
| 14:00 – 15:00 | Δρ. Γ. Φανουργάκης, “Molecular Simulations: Challenges and opportunities” |

Θεωρητική Φυσικοχημεία: Από τα διατομικά μόρια στις βιοδιαγνωστικές εφαρμογές

Δρ. Ιωάννης Κερκινές

Η ερμηνεία της μοριακής δομής, καθώς και η κατανόηση της αλληλεπίδρασης της ύλης με την ακτινοβολία σε θεωρητικό επίπεδο βρίσκονται βαθιά ριζωμένες στην περιοχή γόνιμης σύγκλισης της Φυσικής και της Χημείας, ειδικότερα τα τελευταία 120 χρόνια.

Στην ομιλία θα εκτεθούν τα πεπραγμένα ενός προσωπικού «ταξιδιού» εξερεύνησης των δύο αυτών συνιστωσών της Θεωρητικής Φυσικοχημείας τα τελευταία περίπου 20 χρόνια, καθώς και σχετικά μελλοντικά σχέδια.

Η ομιλία είναι δομημένη σε τρία μέρη:

- Το πρώτο μέρος της ομιλίας εστιάζεται στη Μοριακή Δομή. Θα δειχθεί πώς η κατανόηση του χημικού δεσμού σε μικρού και μεσαίου μεγέθους μόρια με σύγχρονες και ακριβείς υπολογιστικές κβαντομηχανικές μεθόδους έχει οδηγήσει στην καλύτερη κατανόηση διεργασιών όπως την αλληλεπίδραση των μετάλλων μεταπτώσεως με τον άνθρακα και την ενεργοποίηση του υδρογόνου στην κατάλυση, τη δόμηση υλικών υψηλής ενεργειακής πυκνότητας (HEDMs) και τις συνοδευόμενες ατμοσφαιρικές διεργασίες που σχετίζονται με χρήση προωθητικών σε αεροσκάφη, καθώς και στην αποκάλυψη ενός ολοκλήρου νέου πεδίου στην Ανόργανη Χημεία, της Χημείας του δισθενούς αζώτου και λοιπών αναλόγων της κύριας ομάδας του περιοδικού πίνακα.
- Το δεύτερο μέρος της ομιλίας αφορά στην αλληλεπίδραση του φωτός με οργανικά μόρια για οπτικές εφαρμογές. Θα περιγραφεί πώς ο ακριβής υπολογισμός διηγεμένων καταστάσεων σε μεσαίου μεγέθους μόρια οδηγεί σε καλύτερη κατανόηση θεμελιωδών διεργασιών, όπως η φωτοεπαγόμενη μεταφορά φορτίου, με σημαντικές προεκτάσεις σε οπτικές εφαρμογές όπως οργανικά και ανόργανα φωτοβολταϊκά, OLEDs, κτλ, αλλά και στην οπτική αντίχνευση αερίων νεύρων.
- Τέλος, στο τρίτο και τελευταίο μέρος της ομιλίας θα παρουσιαστούν οι αρχές ενός καινοτόμου πεδίου σύνδεσης της θεωρητικής φυσικοχημείας με τις βιοδιαγνωστικές εφαρμογές, το οποίο επιδιώκουμε για πρώτη φορά να θεμελιώσουμε. Μέσα από ένα συγκεκριμένο πλάνο, το οποίο βασίζεται στην τεχνογνωσία των προηγούμενων ετών, θα δειχθεί πώς η θεωρητική φυσικοχημεία μπορεί να βοηθήσει στην κατασκευή υλικών με απολύτως στοχευμένες ιδιότητες με τα οποία οι άνθρωποι θα μπορούν εύκολα να μετρούν τους δείκτες υγείας τους.

Μοντελοποίηση νανοδομημένων πορωδών υλικών για εφαρμογές σε ενέργεια και περιβάλλον

Δρ. Ε. Κλώντζας

Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης

Δύο από τις σημαντικότερες προκλήσεις που έχει να αντιμετωπίσει η ανθρωπότητα είναι η κάλυψη των αναγκών της σε ενέργεια και ο περιορισμός των επιπτώσεων της ανθρώπινης δραστηριότητας στο κλίμα του πλανήτη. Η συνεχής αύξηση του πληθυσμού της Γης σε συνδυασμό με την αύξηση του είδους εφαρμογών που χρησιμοποιεί ο άνθρωπος απαιτούν την ανάπτυξη μιας ποικιλίας τεχνολογιών παροχής ενέργειας, με έμφαση στις εύκολα προσβάσιμες, ανανεώσιμες και περιβαλλοντικά φιλικές πηγές ενέργειας. Χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιων τεχνολογιών αποτελεί το υδρογόνο, ενώ σημαντικό ενδιαφέρον υπάρχει και για τη χρήση μεθανίου. Παράλληλα, καθώς η κύρια πηγή ενέργειας και θερμότητας για τα προσεχή χρόνια θα εξακολουθεί να είναι η καύση υδρογονανθράκων, απαιτείται να ληφθούν μέτρα για τον περιορισμό των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου και ειδικότερα του διοξειδίου του άνθρακα, αφού έχει δειχθεί η άμεση σχέση που έχει η ποσότητα που εκλύεται με τη θερμοκρασία του πλανήτη. Και στις δυο περιπτώσεις υπάρχουν σημαντικά προβλήματα που σχετίζονται με ενδιάμεσα βήματα της διαδικασίας που πρέπει να ακολουθηθεί ώστε οι τεχνολογίες που θα χρησιμοποιηθούν να είναι «έξυπνες» και όσο το δυνατόν πιο οικονομικές σε σχέση με τη τωρινή κατάσταση, όπως για παράδειγμα η αποθήκευση αρκετής ποσότητας υδρογόνου για συγκεκριμένες εφαρμογές ή η αντιστρεπτή δέσμευση/αποδέσμευση του διοξειδίου του άνθρακα για μεγάλο κύκλο επαναλήψεων χωρίς σημαντικές επιπτώσεις στο μέσο που χρησιμοποιείται.

Τα νανοπορώδη είναι μια κατηγορία υλικών που προσφέρουν πιθανές λύσεις στις επιστημονικές και τεχνολογικές προκλήσεις που προαναφέρθηκαν. Ειδικότερα, τα μεταλλό-οργανικά πορώδη σκελετικά υλικά, γνωστά και ως Metal-Organic Frameworks (MOF), αποτελούν μια νέα κατηγορία υλικών και μπορούν να προσφέρουν σημαντικά λόγω της μεγάλης ποικιλίας δομικών χαρακτηριστικών, της δυνατότητας χημικής τροποποίησης τους και των ιδιαίτερων φυσικοχημικών χαρακτηριστικών τους. Η μελέτη των MOF για προσρόφηση αερίων επιβάλει τη χρήση διάφορων υπολογιστικών τεχνικών, όπως υπολογισμοί κβαντικής μηχανικής και προσομοιώσεις Monte Carlo, για τον υπολογισμό διάφορων φυσικών ποσοτήτων ώστε να εξαχθεί μια ολοκληρωμένη εικόνα για τις προσροφητικές ιδιότητές τους. Έχει αναγνωριστεί ότι η θεωρητική μελέτη των MOF συμβάλει τόσο στη καλύτερη κατανόηση φαινομένων που παρατηρούνται πειραματικά, όσο και στη δημιουργία στρατηγικών για το σχεδιασμό νέων υλικών MOF με βελτιωμένες προσροφητικές ικανότητες.

Υπολογιστική-Θεωρητική Χημεία:
Από τα διατομικά μόρια στα υπερμοριακά συστήματα και τα υλικά

Δρ. Δήμητρα Τζέλη
Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών

Θα παρουσιαστούν θεωρητικές μελέτες διατομικών μορίων, πολυατομικών μορίων, υπερμοριακών συστημάτων όπως και μελέτες μηχανισμών αντιδράσεων. Τα υπολογισμένα συστήματα έχουν επιλεγεί εξαιτίας: α) των ιδιοτήτων τους, β) της ανάγκης να ερμηνευθούν ασυνήθιστα πειραματικά αποτελέσματα και γ) των εφαρμογών ή των δυνητικών εφαρμογών τους. Έτσι, παρουσιάζονται μοριακά συστήματα που έχουν ή μπορεί να έχουν εφαρμογές στην κατάλυση, σε οργανικά φωτοβολταϊκά, ως μοριακές ηλεκτρονικές συσκευές και στην φαρμακευτική χημεία. Επίσης, εξηγούνται και ερμηνεύονται ενδιαφέροντα πειραματικά αποτελέσματα. Τέλος, θα τονιστεί πώς η κατανόηση των ιδιοτήτων των μικρών μορίων οδηγεί στην επιτυχή πρόβλεψη, μελέτη και ερμηνεία ιδιοτήτων πολυατομικών και υπερμοριακών συστημάτων.

Molecular Simulations: Challenges and opportunities

Dr. George S. Fanourgakis

Chemistry Department, University of Crete

Over the last few decades, molecular simulations have emerged as a powerful computational tool for the study of a vast variety of systems with important implications in chemistry, biology and material science. Central to the ability to provide a fundamental understanding of the mechanisms of the processes occurring in a complex chemical system is the capability to describe the properties of the system at the molecular level. The mathematical and computational challenges in designing reliable models that encompass molecular level information and accurate simulation algorithms, demand the synergy between various physical, mathematical and computational methodologies such as statistical mechanics, quantum mechanics, molecular analysis and visualization, as well as high performance parallel computing.

In the first part of the talk, I will present a combination of methodological developments, simulation techniques [1] and parallelization approaches [2] used for the construction of a new generation interaction water model [3] appropriate for the study of small water clusters, liquid water and ice [4]. A series of quantum path integral molecular dynamics simulations demonstrates that, in contrast to previous models, the new water model is able to capture correctly many experimental observables, such as the water monomer bend angle θ , which in agreement with observations increases in a condensed environment compared to the gas phase, i.e. $\theta_{\text{ice}} > \theta_{\text{liquid}} > \theta_{\text{gas}}$ [3, 4].

In the second part of the talk, I will present results of theoretical studies on small atomic and molecular systems (clusters of the form Mg^+Ar_n and Sr^+Ar_n , and butanol clusters) that are aiming to interpret experimental findings, such as mass spectra and photoabsorption spectra. For these studies, a variety of first principle methods, molecular dynamics and Monte Carlo simulation techniques is employed (i.e. see Ref [5]). The validity and accuracy of the theoretical approaches are evaluated by direct comparisons with experimental measurements.

Finally, I will outline few of the challenges in the field of material science and physical chemistry on which my future research will focus on. In particular, I will present preliminary results for the application of machine-learning (ML) techniques in the prediction of MOFs (Metal-Organic frameworks) properties, as well as the application of ML techniques in the construction of accurate interaction potentials.

[1] "A fast path integral method for polarizable force fields" G. S. Fanourgakis, T. E. Markland and D. E. Manolopoulos, *J. Chem. Phys.* 131, 094102 (2009); "Comparison of path integral molecular dynamics methods for the infrared absorption spectrum of liquid water", S. Habershon, G. S. Fanourgakis and D. E. Manolopoulos, *J. Chem. Phys.* 129, 074501 (2008)

[2] "An efficient parallelization scheme for molecular dynamics simulations with many-body, flexible, polarizable empirical potentials: application to water", G. S. Fanourgakis, V. Tipparaju, J. Nieplocha, S. S. Xantheas, *Theor Chem Acc* 117, 73–84, (2007)

[3] "Development of transferable interaction potentials for water. V. Extension of the flexible, polarizable, Thole-type model potential (TTM3-F, v.3.0) to describe the vibrational spectra of water clusters and liquid water", G. S. Fanourgakis and S. S. Xantheas, *J. Chem. Phys.* 128, 074506 (2008)

[4] "The bend angle of water in ice Ih and liquid water: The significance of implementing the nonlinear monomer dipole moment surface in classical interaction potentials", G. S. Fanourgakis and S. S. Xantheas, *J. Chem. Phys.* 124, 174504 (2006)

[5] "Photofragmentation spectra and structures of Sr^+Ar_n , $n=2-8$ clusters: Experiment and theory", G. S. Fanourgakis, S. C. Farantos, Ch. Lüder, and M. Velegarakis and S. S. Xantheas, *J. Chem. Phys.* 109, 108 (1998)