

ΘΕΡΙΝΟ ΣΧΟΛΕΙΟ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟΥ ΔΟΜΗΣ-ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΣΥΜΠΛΟΚΩΝ ΕΝΩΣΕΩΝ ΚΑΙ ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

ΕΙΣΗΓΗΤΕΣ

Σ. Κοϊνης, Αναπλ Καθηγητής, Τμήμα Χημείας
 Γ. Μήτρικας, Ερευνητής Β' ΕΚΕΦΕ 'Δημόκριτος'
 Α. Ραπποπούλου, Ερευνήτρια Α' ΕΚΕΦΕ 'Δημόκριτος'
 Β. Ψυχάρης, Ερευνητής Α' ΕΚΕΦΕ 'Δημόκριτος'
 Α. Χρυσανθόπουλος, Επικ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας



ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΑΝΟΧ 19-22/6/2017

ΗΜΕΡΑ	ΩΡΑ	ΕΙΣΗΓΗΤΗΣ	ΘΕΜΑ
ΔΕΥΤΕΡΑ 19/6/2017	9.00-11.00	Γ. Μήτρικας	Εισαγωγή στη φασματοσκοπία EPR (βασικές αρχές)
	12.00-14.00	Σ. Κοϊνης	Χαρακτηρισμός μεταλλικών συμπλόκων με EPR (παραδείγματα) Εμπειρικές Ηλεκτρονικές Παράμετροι Υποκαταστατών
ΤΡΙΤΗ 20/6/2017	9.00-10.00	Γ. Μήτρικας	Προχωρημένες τεχνικές παλμικού EPR και εφαρμογές στη Χημεία και τη Φυσική
	10.30-14.00	Α. Χρυσανθόπουλος	Υπολογιστική Χημεία: Εισαγωγή και θεωρία 1. Μοριακή απεικόνιση σε υπολογιστή: καρτεσιανές συντεταγμένες - εσωτερικές συντεταγμένες. 2. Σύντομη εισαγωγή στις ab-initio μεθόδους που βασίζονται στη θεωρίαμοριακών τροχιακών και στις DFT μεθόδους που βασίζονται στο συναρτησιακό ηλεκτρονιακής πυκνότητας. 3. Χρήση υπολογιστικού πακέτου μοριακής προσομοίωσης Gaussian.
ΤΕΤΑΡΤΗ 21/6/2017	9.00-12.00	Β. Ψυχάρης	Μελέτη κρυσταλλικής δομής: Θεωρία και πειραματικές τεχνικές.
	12.30-15.30	Α. Ραπποπούλου	Επίλυση και refinement κρυσταλλικής δομής με δεδομένα από μονοκρυστάλλους. Παραδείγματα με χρήση του GUI WINGX και των προγραμμάτων SHELXS/SHELXL.
ΠΕΜΠΤΗ 22/6/2017	9.00-14.00	Α. Χρυσανθόπουλος	Υπολογιστική Χημεία: Εφαρμογή στον υπολογιστή 1. Διατομικά μόρια και σύμπλοκα μετάλλων μετάπτωσης: πρακτική εξάσκηση ✓ υπολογισμού της βέλτιστης γεωμετρίας-δομής και της συνολικής ενέργειας, ✓ απεικόνισης τροχιακών και υπολογισμού της ενέργειάς τους, ✓ υπολογισμού του φάσματος δόνησης. 2. Υπολογισμός βασικών μοριακών ιδιοτήτων (πχ διπολική ροπή, πολωσιμότητα).

Το Θερινό Σχολείο απευθύνεται στους φοιτητές του ΠΜΣ 'Ανόργανη Χημεία και Εφαρμογές της στη Βιομηχανία'. Τα έξοδα καλύπτονται από το ΠΜΣ. Για κάθε άλλο μεταπτυχιακό φοιτητή / Υ.Δ. που θα ήθελε να το παρακολουθήσει, απαραίτητη προϋπόθεση είναι η εγγραφή του μέχρι 15 Ιουνίου με το συμβολικό ποσό των 5 €
Εγγραφές: μέχρι 15/6 στη Γραμματεία Εργ. Ανόργανης Χημείας (κ. Π. Μαριολάκου) ή στη διεύθυνση cmitsop@chem.uoa.gr (Χ. Α. Μητσοπούλου- Διευθ. ΠΜΣ).