

# ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΕ ΜΟΡΙΑ, ΥΛΙΚΑ, ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

**ΔΙΔΑΣΚΟΝΤΕΣ:** Μαρία Κανακίδου, Σταύρος Φαράντος, Γιώργος  
Φρουδάκης

## ΣΚΟΠΟΣ Ι

Σκοπός του μαθήματος είναι να εισαγάγει τον φοιτητή στην Υπολογιστική Χημεία, όπου μελετώνται χημικές αντιδράσεις που δύσκολα ή σχεδόν αδύνατον να πραγματοποιηθούν στο εργαστήριο ή σύνθετες αντιδράσεις των οποίων το τελικό αποτέλεσμα εξαρτάται από πολλές παραμέτρους. Ο τρόπος με τον οποίον οι χημικοί δεσμοί διασπώνται ή σχηματίζονται μπορεί πλέον να αναπαρασταθεί και να μελετηθεί σε πραγματικό χρόνο και μία εις βάθος κατανόηση των χημικών φαινομένων σε μικροσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο επιτυγχάνεται με τις σύγχρονες υπολογιστικές θεωρίες της Χημείας.

## ΣΚΟΠΟΣ II

Νέοι μηχανισμοί χημικών αντιδράσεων και νέα υλικά ανακαλύπτονται. Σύνθεση γνώσεων καθώς και επιβεβαίωση και κατανόηση των χημικών διεργασιών που συμβαίνουν στο περιβάλλον, φυσικά αλλά και υπό την επίδραση του ανθρώπου, επιτυγχάνονται με τη χρήση αριθμητικών μοντέλων. Το μάθημα με επιλεγμένα παραδείγματα σκιαγραφεί την αναγκαιότητα εφαρμογών Υπολογιστικής Χημείας σε μοντέρνους τομείς επιστημονικής έρευνας όπου η Χημεία έχει πρωτεύοντα ρόλο όπως Νανοτεχνολογία, Μοριακή Βιολογία, Υλικά, Περιβαλλοντική Χημεία και Κλιματικές αλλαγές, αλλά και γενικότερα στην Πλανητική Χημεία.

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- ▶ Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- ▶ Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- ▶ Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- ▶ Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- ▶ Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- ▶ Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- ▶ Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- ▶ Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- ▶ Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- ▶ Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- ▶ Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- ▶ Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΠΡΩΤΗ

- ▶ Σύγχρονη Υπολογιστική Χημεία: Επισκόπηση
- ▶ Μοριακές Θεωρίες και Μοντελοποίηση
- ▶ Σύγχρονες Υπολογιστικές Τεχνολογίες και Προγραμματισμός
- ▶ Λειτουργικό σύστημα Linux και γλώσσα προγραμματισμού Fortran

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΔΕΥΤΕΡΗ

- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΜΟΡΙΩΝ & ΝΑΝΟΎΛΙΚΩΝ (I)
- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ (I)
- ▶ ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΚΑΙ Η/Υ (I)



## ΕΝΟΤΗΤΑ ΔΕΥΤΕΡΗ

- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΜΟΡΙΩΝ & ΝΑΝΟΥΛΙΚΩΝ (I)
- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ (I)
- ▶ ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΚΑΙ Η/Υ (I)

## ΕΝΟΤΗΤΑ ΔΕΥΤΕΡΗ

- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΜΟΡΙΩΝ & ΝΑΝΟΎΛΙΚΩΝ (I)
- ▶ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ (I)
- ▶ ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΚΑΙ Η/Υ (I)

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- ▶ <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- ▶ “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”  
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- ▶ “Introduction to Computational Chemistry”  
Frank Jensen, 1999, Wiley  
QD455.3-E4, J46
- ▶ Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια  
έως βιοπολυμερή  
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός  
Σελίδων 700,  
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.  
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- ▶ <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- ▶ “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”  
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- ▶ “Introduction to Computational Chemistry”  
Frank Jensen, 1999, Wiley  
QD455.3-E4, J46
- ▶ Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια  
έως βιοπολυμερή  
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός  
Σελίδων 700,  
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.  
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

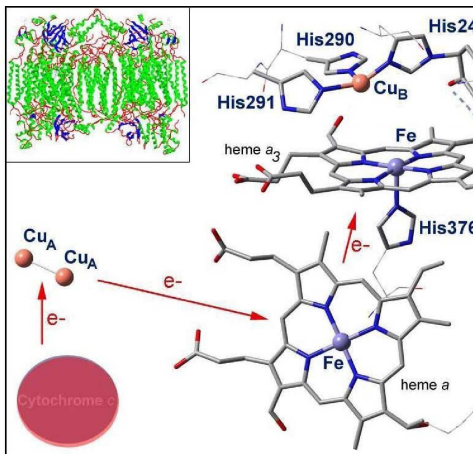
- ▶ <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- ▶ “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”  
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- ▶ “Introduction to Computational Chemistry”  
Frank Jensen, 1999, Wiley  
QD455.3-E4, J46
- ▶ Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια  
έως βιοπολυμερή  
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός  
Σελίδων 700,  
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.  
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

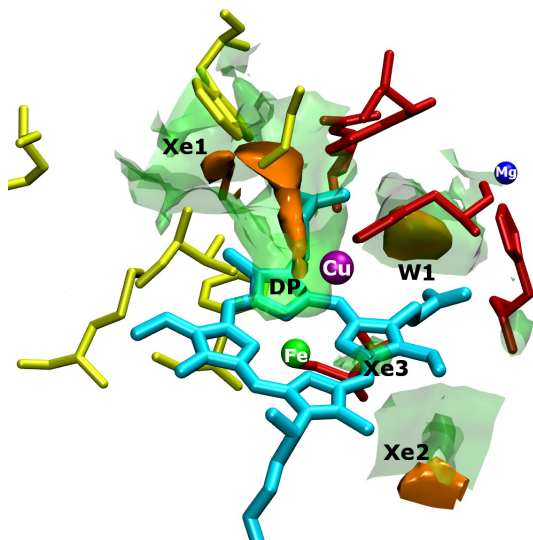
- ▶ <http://tccc.iesl.forth.gr/education/local.html>
- ▶ “Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models”  
Ch. J. Cramer, 2002, Wiley, QD455.3, E4, C73
- ▶ “Introduction to Computational Chemistry”  
Frank Jensen, 1999, Wiley  
QD455.3-E4, J46
- ▶ Υπολογιστική Χημεία: Θεωρίες και εφαρμογές για μικρά μόρια  
έως βιοπολυμερή  
Αντώνης Κολοκούρης, 2017, ISBN 9789605833220, Αριθμός  
Σελίδων 700,  
Εκδόσεις ΠΑΡΙΣΙΑΝΟΥ Α.Ε.  
Κωδικός Βιβλίου στον Εύδοξο: 68406297

## Κυτοχρωμική c οξειδάση

[http://en.wikipedia.org/wiki/Cytochrome\\_c\\_oxidase](http://en.wikipedia.org/wiki/Cytochrome_c_oxidase)

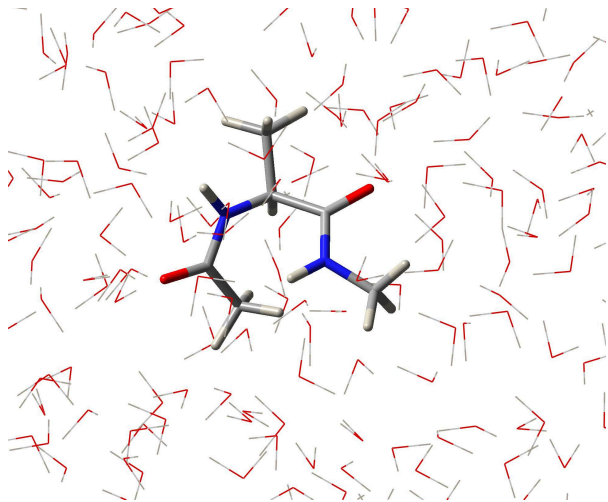


## Κυτοχρωμική c οξειδάση

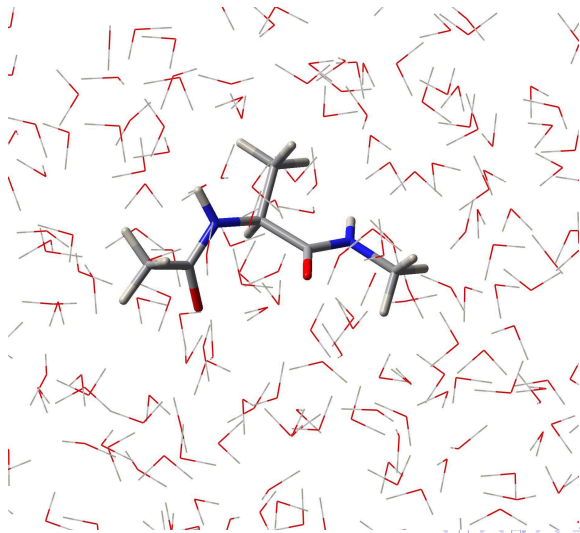




## Cis-Διαλανίνη σε υδατικό διάλυμα



## Trans-Διαλανίνη σε υδατικό διάλυμα



# Υδρογόνο προσροφημένο σε Νανοσωλήνες άνθρακα

[http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon\\_nanotubes](http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_nanotubes)

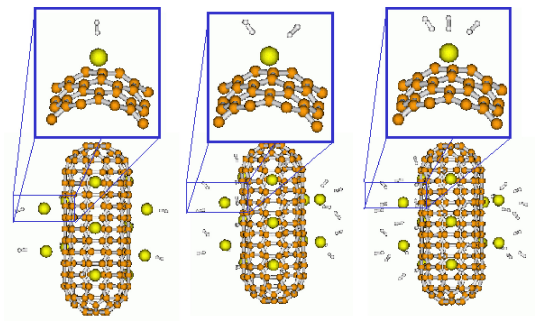


Fig.6

## Ατμοσφαιρική Χημεία και κλίμα

[http://en.wikipedia.org/wiki/Atmospheric\\_chemistry](http://en.wikipedia.org/wiki/Atmospheric_chemistry)

