

## **Υπολογιστικές μέθοδοι ηλεκτρονιακής δομής: Από μικρά μόρια σε υπερμοριακά συστήματα**

Δήμητρα Τζέλη

Αναπληρώτρια Καθηγήτρια, Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ  
Συνεργαζόμενη Ερευνήτρια, Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, ΕΙΕ  
e-mail: tzeli@chem.uoa.gr

Στο πρώτο μέρος της ομιλίας, παρουσιάζεται περιληπτικά μια ανασκόπηση διαφόρων *ab initio* μεθόδων υπολογιστικής χημείας μεγάλης ακρίβειας, οι οποίες χρησιμοποιούνται για μελέτες μορίων, των ιδιοτήτων τους και των αντιδράσεών τους. Επίσης, θα αναφερθούν επιγραμματικά μέθοδοι συνδυασμού διαφορετικών μεθοδολογιών (κβαντικής μηχανικής/μοριακής μηχανικής), οι οποίες χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν πολύ καλά μεγάλα μοριακά συστήματα όμως με μειωμένο υπολογιστικό κόστος. Στο δεύτερο μέρος της ομιλίας, παρουσιάζονται υπολογιστικές μελέτες διαφόρων μοριακών συστημάτων, διαφορετικών μεγεθών, με διαφορετικές ιδιότητες και εφαρμογές. Συγκεκριμένα παρουσιάζονται θεωρητικοί υπολογισμοί μικρών μορίων μετάλλων μετάπτωσης, μεταλλικών συμπλόκων, μοριακών λογικών πυλών, συστημάτων μεταφοράς φορτίου, υπερμοριακών συστημάτων, οργανικών αντιδράσεων, και προσρόφησης μορίων σε επιφάνειες.

## **Electronic structure methodology: From small molecules to supermolecular systems**

Demeter Tzeli

*Laboratory of Physical Chemistry, Department of Chemistry, NKUA  
Theoretical and Physical Chemistry Institute, NHRF  
e-mail: tzeli@chem.uoa.gr*

In the first part of the talk, a review of various *ab initio* computational chemistry methods which are used for the accurate study of molecules, their properties, and their reactions, is presented. Additionally, multiscale quantum mechanics/molecular mechanics approaches, that seek to describe large molecular systems with reduced computational cost yet achieving good quality results, are discussed in short. In the second part of the talk, computational studies of various molecular systems, of different sizes, with different properties and applications are reported. In particular, theoretical calculations on diatomic and triatomic molecules of transition metals, metal complexes, molecular logical gates, charge transfer systems, encapsulation complexes, reaction paths of organic reactions, and adsorption of molecules on surfaces are presented.

<http://jupiter.chem.uoa.gr/pchem/lab/tzeli.html>