

# ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ-ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

## 1. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΟΥ ΥΔΑΤΟΣ ΚΑΙ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΔΙΑΛΥΜΑΤΩΝ ΜΕ ΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ QM/MM

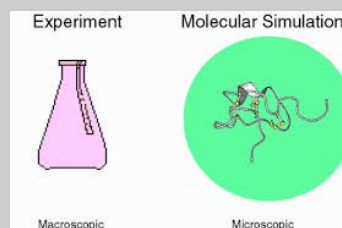
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: ΠΑΡΑΣΚΕΥΗ 2/6/2017

ΩΡΑ: 09:00-11:00

ΤΟΠΟΣ: ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΑΙΘΟΥΣΑ: ΣΕΜΙΝΑΡΙΩΝ

υπο του Δρος Δημητρίου Ξενίδη



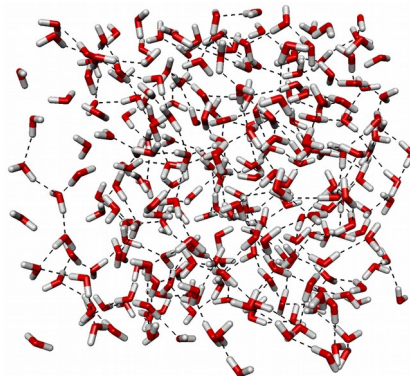
### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Προκειμένου να καταλάβουμε τις ιδιότητες συσσωματωμάτων μορίων σε σχέση με τη δομή τους αλλά και τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την υπολογιστική προσομοίωση. Οι δύο πιο διαδεδομένες τεχνικές προσομοίωσης είναι η *Μοριακή Δυναμική (molecular dynamics, MD)* και *Monte Carlo (MC)*. Η προσομοίωση είναι γεγονός ότι δρά ως “γέφυρα” μεταξύ μικροσκοπικών μεγεθών μήκους και χρονικής κλίμακας και του μακροσκοπικού κόσμου του εργαστηρίου.

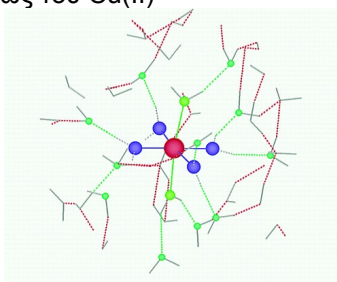
Στο παρόν σεμιναριακό μάθημα θα παρουσιάσουμε το απαραίτητο θεωρητικό τμήμα της μοριακής δυναμικής, καθώς και της εφαρμογής της στο πρότυπο *Quantum Mechanics/ Molecular Mechanics QM/MM MD*. Ενώ για την κατανόηση των αποτελεσμάτων θα παρουσιάσουμε συγκεκριμένα εργαλεία της στατιστικής μηχανικής προκειμένου να ερμηνεύσουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Τα παραπάνω θα χρησιμοποιηθούν για ερμηνεία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης του ύδατος καθώς και υδατικών διαλυμάτων ιόντων. Ειδικότερα:

- Θα μελετηθεί το πλήθος των δεσμών -H που δημιουργεί ένα μόριο νερού και θα γίνει κατανοητή η μεγάλη ποικιλία δεσμικών φαινομένων στην υγρή φάση.



- Θα δείξουμε το φαινόμενο Jahn-Teller και συγκεκριμένα την διαταραγμένη οκταεδρική συμμετρία στην πρώτη σφαίρα ενυδατώσεως του Cu(II)



- καθώς και άλλων υδατικών διαλυμάτων κοσμοτροπικών και χασοτροπικών ιόντων.