



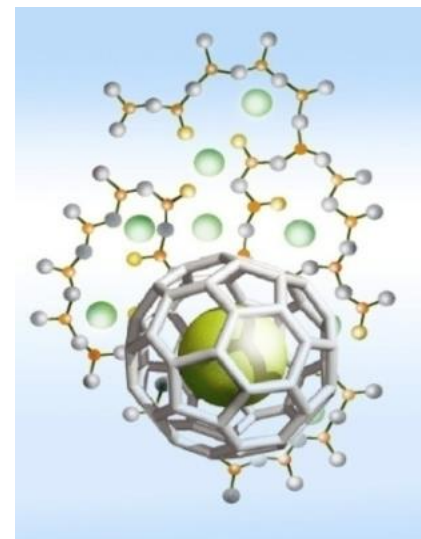
Θεωρητική και Υπολογιστική Χημεία και Φυσική

Υλικά και Φως.

Προσεγγίζοντας την λύση του προβλήματος των πολλών
σωμάτων

Δρ. Ιωάννης Δ. Πετσαλάκης
Διευθυντής Ερευνών

10 Οκτωβρίου 2018
60 χρόνια ΕΙΕ





Dr. N. C. Bacalis
Senior Researcher

Ph.D.: Physics,
Univ. of Illinois at Urbana-
Champaign, 1984



Dr. Y. Komninos
Emeritus Director of
Research

Ph.D.: Physics,
University of York, 1976



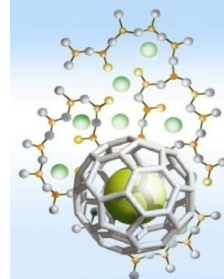
Dr. N. N. Lathiotakis
Senior Researcher

Ph.D.: Physics,
University of Crete, 1998



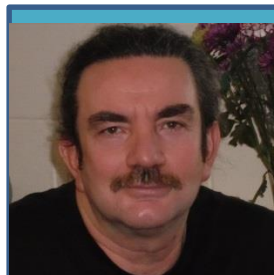
Dr. Th. Mercouris
Director of Research

Ph.D.: Physics,
University of Athens, 1982



Prof. C.A. Nicolaides
Emeritus Director of
Research

Ph.D.: Theoretical Chemistry,
Yale University, 1971



Dr. I.D. Petsalakis
Director of Research

Ph.D.: Physics,
University of Athens, 1986



Dr. E. Simandiras
Senior Researcher

Ph.D: Chemistry,
Cambridge University, 1987



Dr. G. Theodorakopoulos
Director of Research

Ph.D.: Chemistry,
University of Toronto, 1978



Prof. N. Theodorakopoulos
Emeritus Director of
Research

Ph.D: Theoretical Physics,
Brown University, 1971



Dr. A. Vegiri
Senior Researcher

Ph.D.: Physics,
University of Crete, 1989.

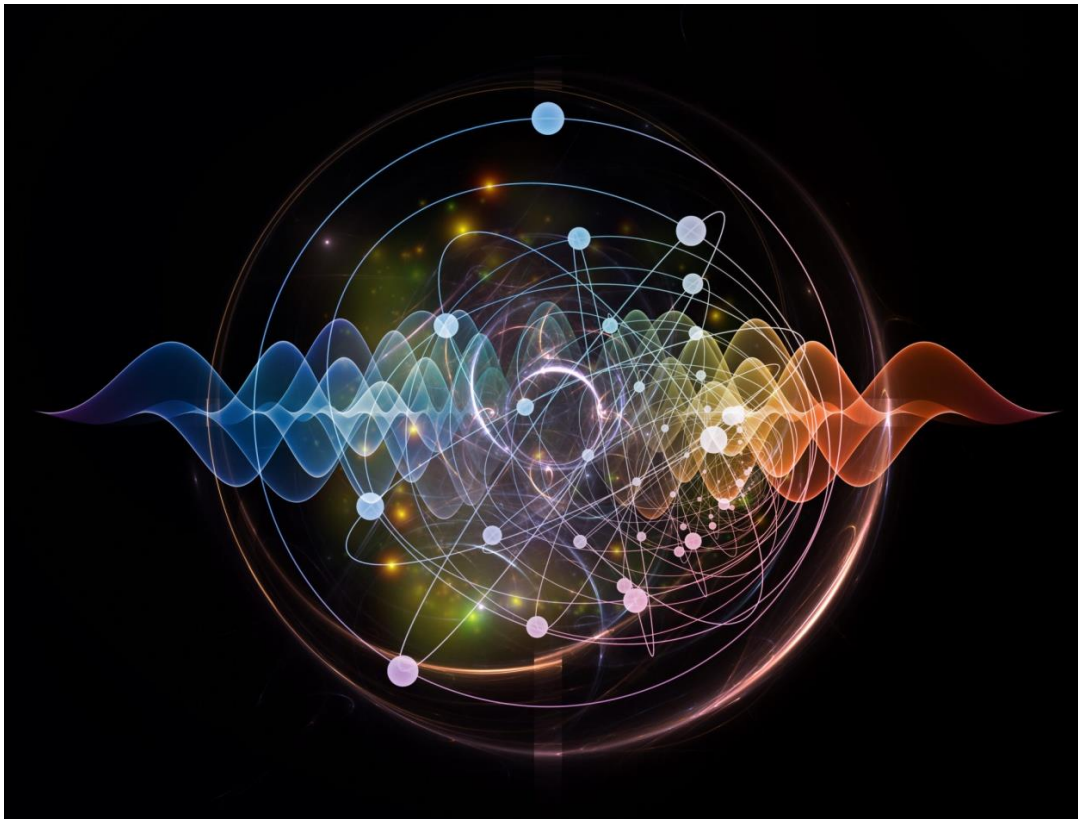
ΙΘΦΧ
Ινστιτούτο
Θεωρητικής
και Φυσικής
Χημείας

Φυσική σε attoseconds χρόνους

Θεωρητική προσέγγιση των φαινομένων της συσχέτισης των ηλεκτρονίων στον πραγματικό χρόνο των 10^{-18} του δευτερολέπτου και της αλληλεπίδρασής τους με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο λύνοντας την χρονοεξαρτώμενη εξίσωση του Schrödinger

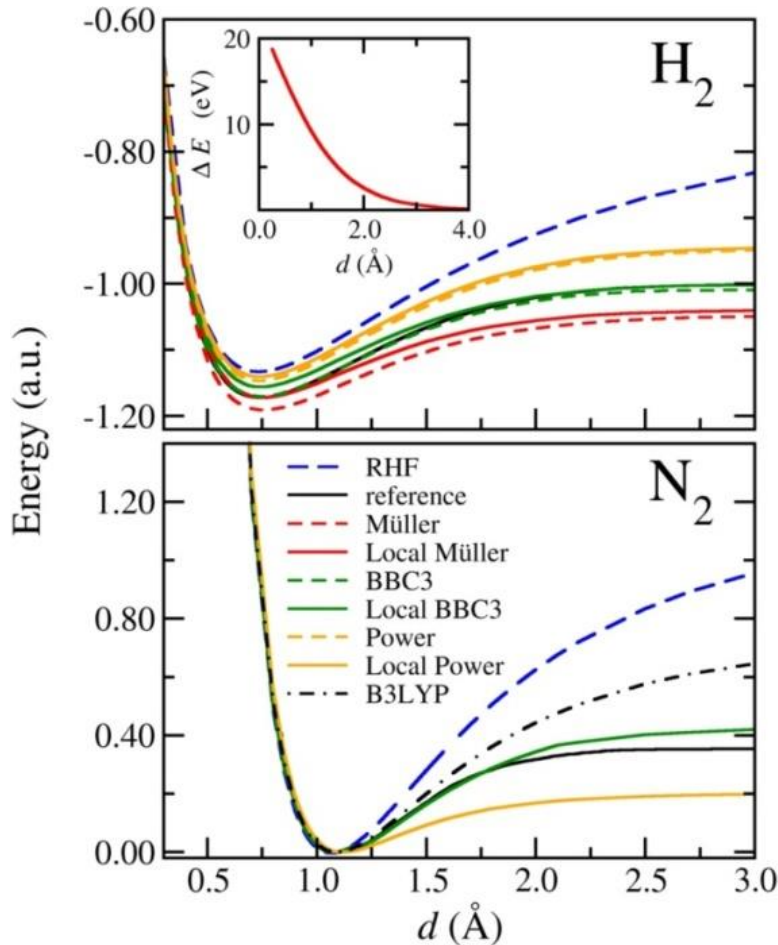
$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = [H_A + V(\omega, t)] \Psi(t)$$

Science 2010. Σε συνεργασία με τον Ferenc Krausz, Max Planck Institute for Quantumoptics



Παρακολουθώντας τα ηλεκτρόνια να περιστρέφονται γύρω από τον πυρήνα του ατόμου και να εγκαταλείπουν το άτομο το ένα μετά το άλλο όταν τα κτυπούν φωτόνια. Μία μελέτη του πλέον προσιτού στοιχειώδους σωματιδίου στον άνθρωπο, του ηλεκτρονίου, σε χρόνους μικρότερους των περιοδικών συμπεριφορών του.

Θεωρητική ανάπτυξη και εφαρμογές



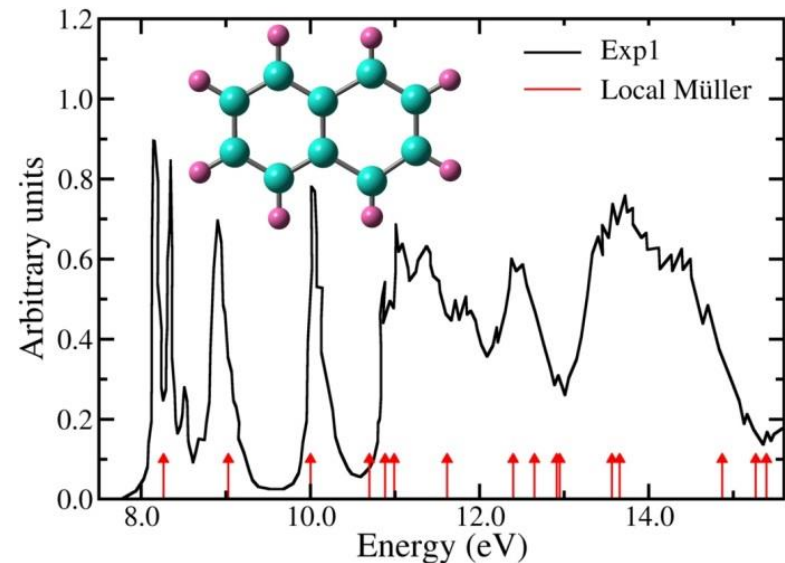
Σε συνεργασία με τους E.K.U. Gross, Max Planck Inst. for Microstructure Physics, Angel Rubio, Max Planck Inst. for the Structure and Dynamics of Matter και N. Gidopoulos, University of Durham.

Ανάπτυξη της RDMFT θεωρίας για επίλυση δυσκολιών της DFT μεθόδου, όπως της μοριακής διάσπασης και ιδιοτήτων ενός ηλεκτρονίου σαν του δυναμικού ιονισμού.

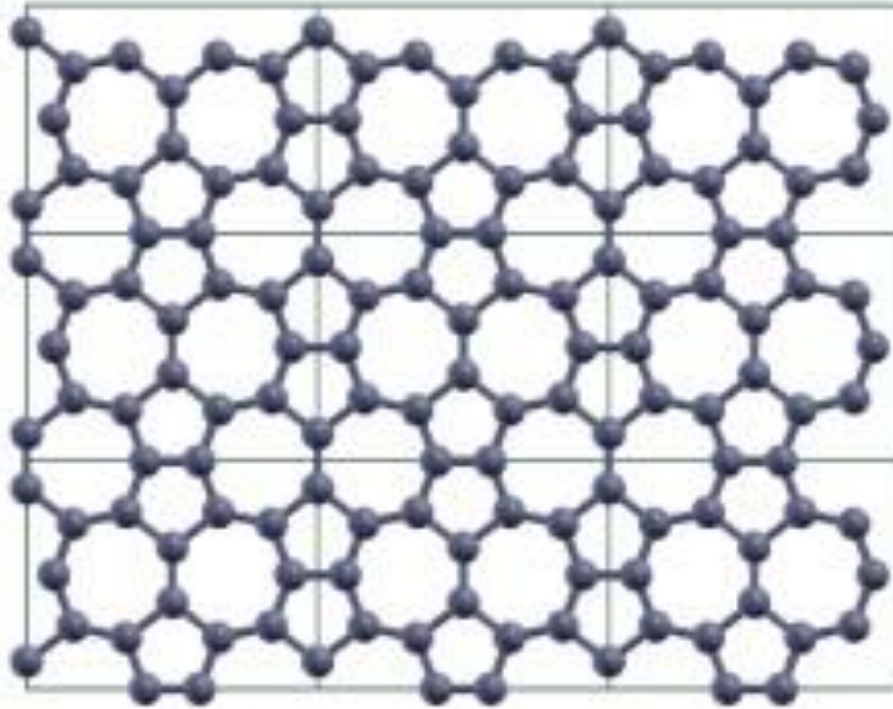
JCP 2014

Φωτοηλεκτρονικό φάσμα.

Διώχνοντας ένα οποιοδήποτε ηλεκτρόνιο από το μόριό μας και υπολογίζοντας την απαιτούμενη ενέργεια εξαγωγής

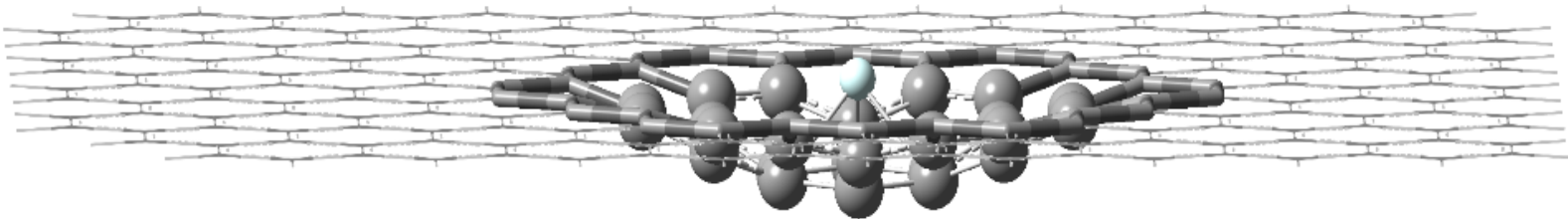


Θεωρητική ανάπτυξη και εφαρμογές



PCCP 2015

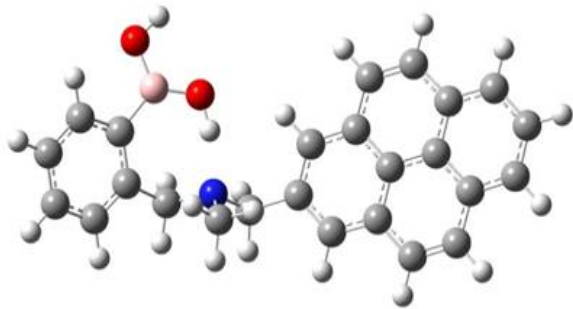
Μετατροπή του γραφενίου από ημιαγωγό σε αγωγό με μηχανική εφέλκυση μιας εκ των διαστάσεών του.



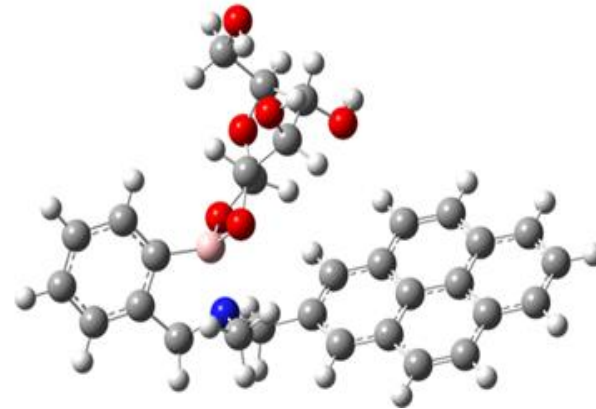
Το γραφένιο σαν φίλτρο αερίων. Μόριο He διαπερνά την επιφάνεια του γραφενίου και υπολογίζεται η απαιτούμενη ενέργεια διείσδυσης.

Φαινόμενα μεταφοράς φορτίου

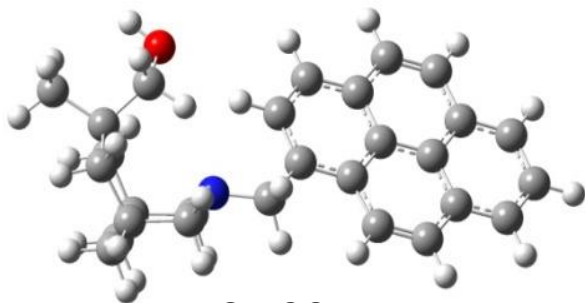
Μόριο για αισθητήρας μορίου γλυκόζης για διαβητικούς.



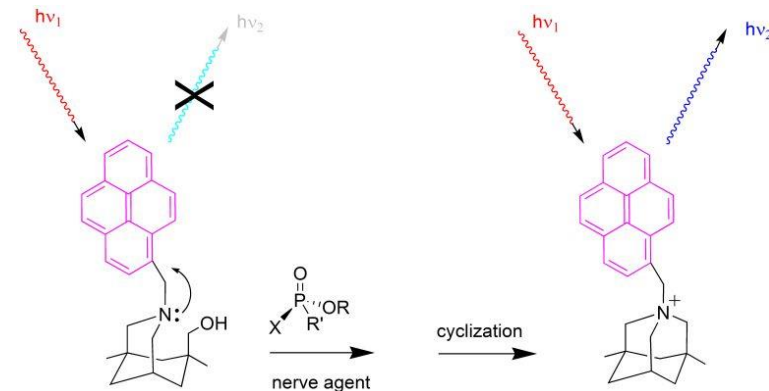
Γλυκόζη προσδεμένη στον ενεργοποιημένο αισθητήρα



Μόριο για αισθητήρας χημικού όπλου αερίου τύπου Sarin



JPCA 2011

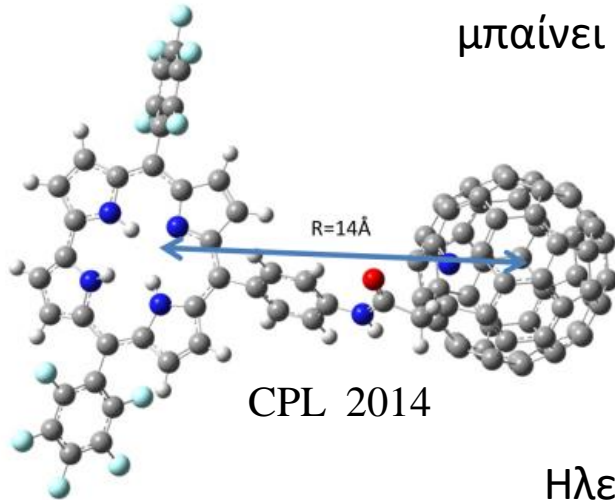


Οι αισθητήρες αυτοί εκπέμπουν φως όταν βρεθούν σε περιβάλλον όπου υπάρχει το προς αναγνώριση μόριο.

Φαινόμενα μεταφοράς φορτίου

Φωτοβολταϊκά

Φωτόνια διεγείρουν ηλεκτρόνια σε μόριο ή τμήμα μορίου που μεταφέρεται σε άλλη περιοχή του και από εκεί μπαίνει σε ηλεκτρικό κύκλωμα και μετατρέπεται σε ρεύμα.

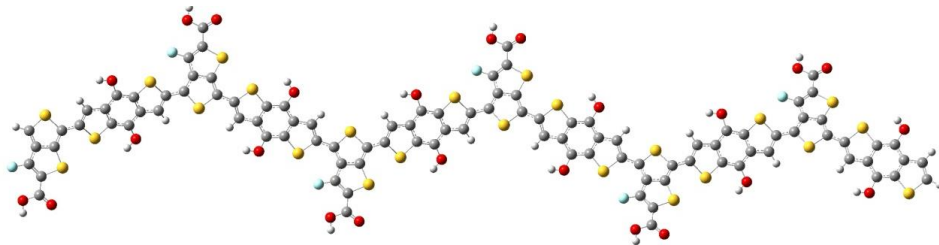


CPL 2014

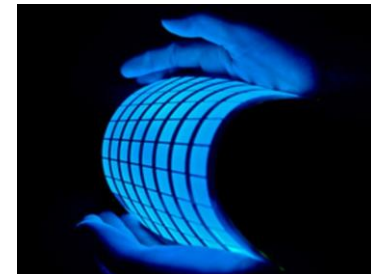


Ηλεκτρόνια από ηλεκτρικό κύκλωμα τοποθετούνται σε διεγερμένη κατάσταση μορίου το οποίο στην συνέχεια αποδιεγείρεται και δίνει φως.

Οργανικές δίοδοι εκπομπής φωτός



Appl.Mat.Interfaces 2018



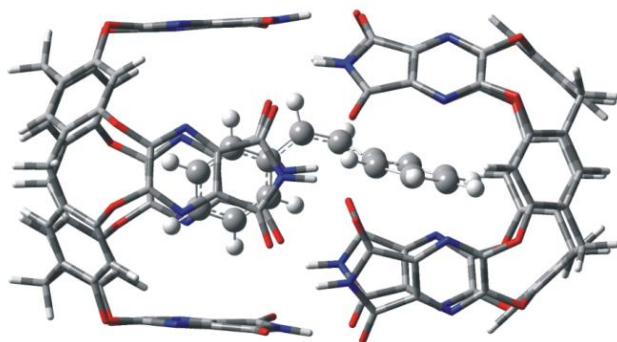
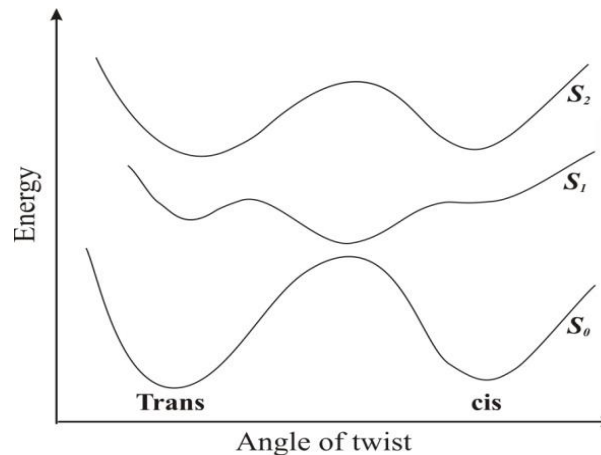
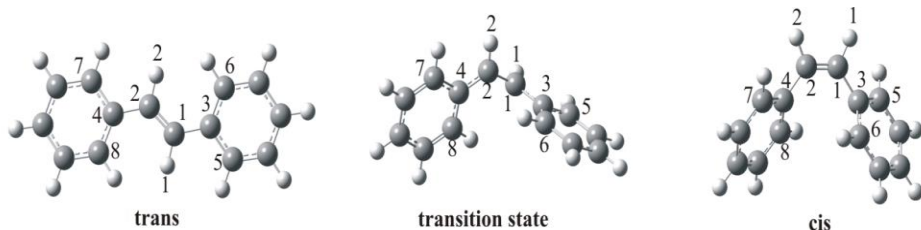
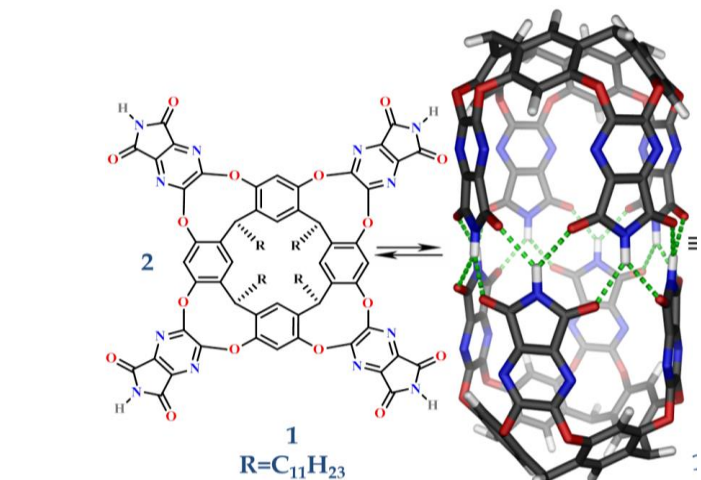
Χημεία σε περιορισμένο χώρο

Σε συνεργασία με τον Julius Rebek
The Skaggs Institute for Chemical Biology

Αυτοσυναρμολογούμενες κάψουλες
με δεσμούς υδρογόνου για μελέτη
συστημάτων χωρίς διαλύτες

JACS 2012

Angewandte Chemie 2018



Περιορισμός μορίου εντός κάψουλας
περιορίζει την εκπομπή φωτός.

Φυσική και Κοινωνία

If, in some cataclysm, all of scientific knowledge were to be destroyed, and only one sentence passed on to the next generation of creatures, what statement would contain

the most information in the fewest words? I believe it is the atomic hypothesis that

all things are made of atoms — little particles that move around in perpetual motion, attracting each other when they are a little distance apart, but repelling upon being squeezed into one another. In that one sentence, you will see,

there is an enormous amount of information about the world, if just a little imagination and thinking are applied.

Richard Feynman

Φυσική και Κοινωνία

Γενικευμένο πρόβλημα πολλών αλληλοεπιδρώντων μονάδων (ενοτήτων)

Φύση

Ελαχιστοποίηση εντροπίας

Νόμοι της φύσης

Δυνάμεις μεταξύ των σωμάτων
για **στιγμιαία επικοινωνία**

Επιβίωση στο περιβάλλον



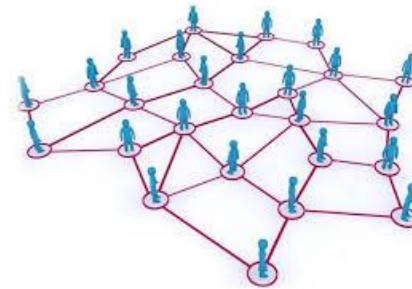
Άνθρωπος

Απαιτείται έλεγχος της εντροπίας

Ύπαρξη **κανόνων** (για την δημιουργία δομής)

Δικτύωση (για την δυνατότητα επικοινωνίας)

Έλεγχος παραμέτρων (για διορθωτικές κινήσεις)



Οι τεχνικές **προσεγγιστικών λύσεων** του άλυτου αναλυτικά προβλήματος των πολλών σωμάτων μεταφέρονται στην **καθημερινότητα**.

Φυσική και Κοινωνία

Κάθε τι βιώσιμο απαιτεί



- Ταυτότητα βιώσιμου συστήματος. Καλό, κακό, αριστερό, δεξιό, ηθικό ή ανήθικο δεν έχει να κάνει με την βιωσιμότητα του συστήματος.



- Κανόνες, υποστήριξη βασικών μονάδων, βελτιστοποίηση λειτουργιών και αποτελέσματος άμεσα συνδεδεμένοι με την ταυτότητα του συστήματος.



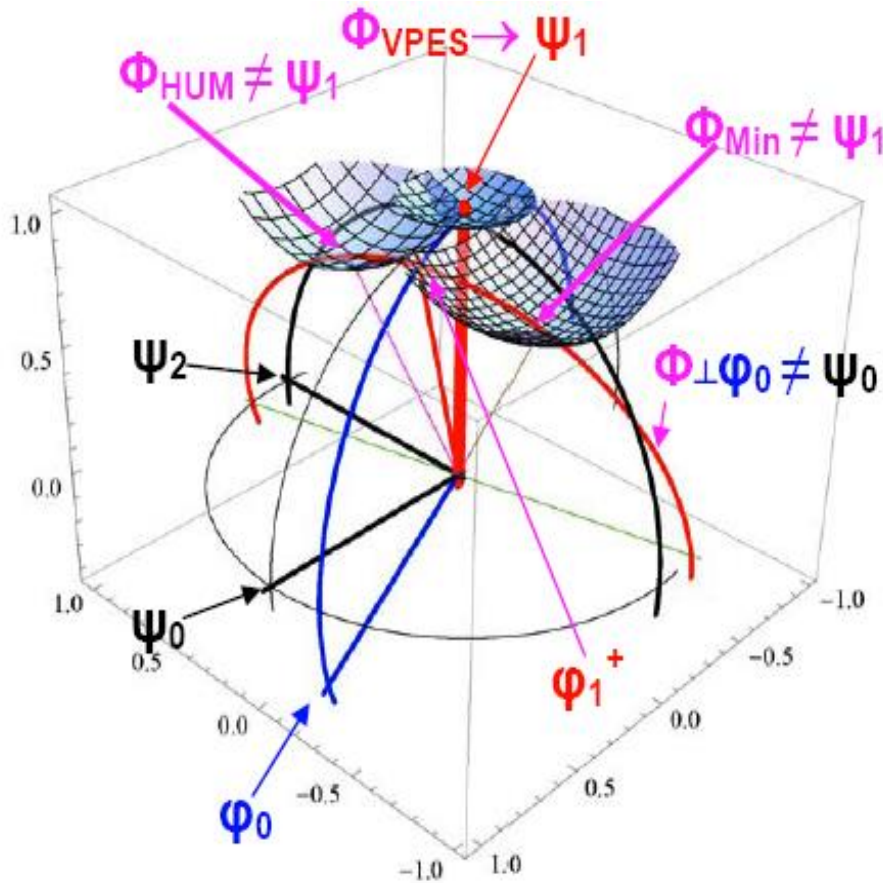
- Απαραίτητη η ύπαρξη διασύνδεσης όλων των λειτουργικών και μη μονάδων.

Σας ευχαριστώ για
την προσοχή σας



Θεωρητική ανάπτυξη και εφαρμογές

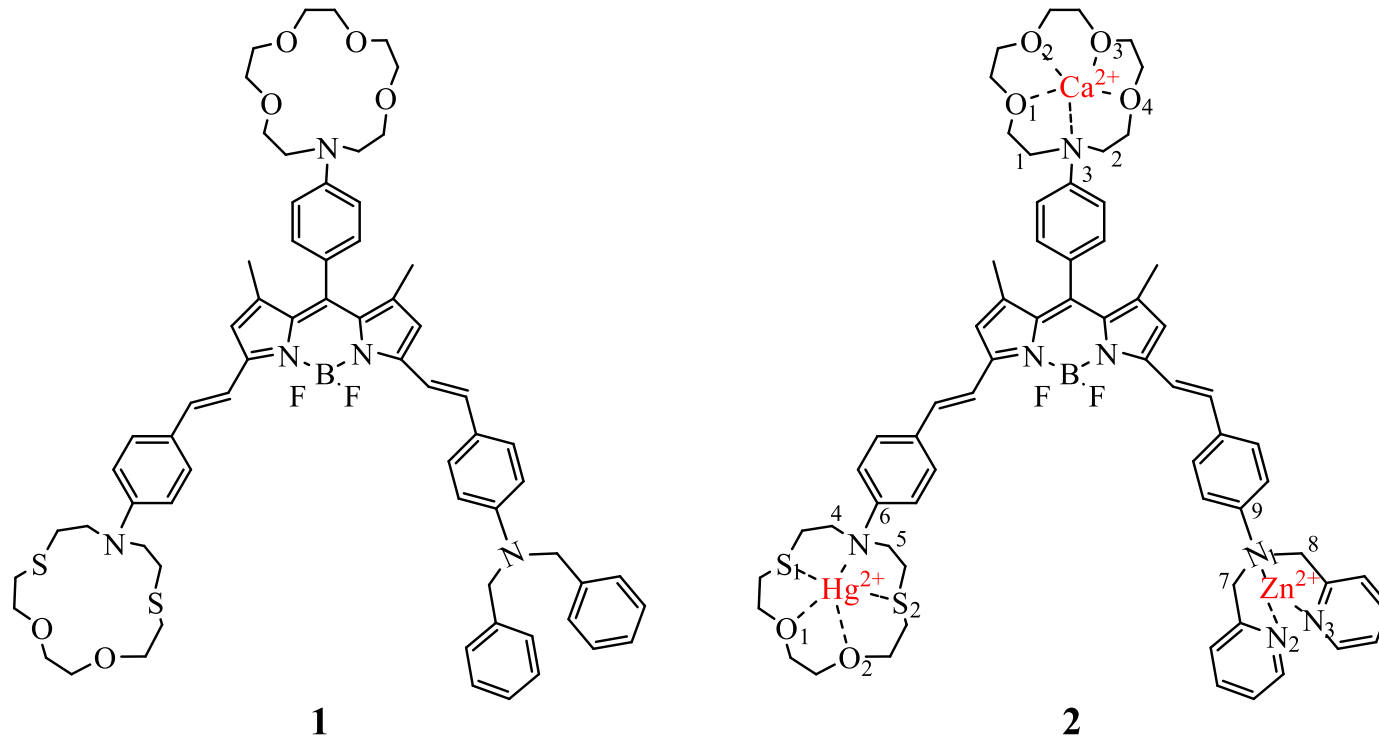
JPCC 2012



Ανάπτυξη θεωρίας για ακριβείς υπολογισμούς διεγερμένων καταστάσεων που λαμβάνουν χώρα σε διάφορες αντιδράσεις.

Φαινόμενα μεταφοράς φορτίου

Λογικές πύλες PCCP 2016



Μοριακό σύστημα που μπορεί να έχει για έξοδο ένα σήμα που να αντιστοιχεί σε συγκεκριμένο χημικό ή οπτικό σήμα εισόδου ή συνδυασμό τους. Το ανωτέρω σύστημα απαιτεί την ύπαρξη και των τριών κατιόντων για να δώσει φως.