

**Τίτλος**

**«Θεωρητική Μελέτη Αλκανοθειολών Προσροφημένων σε  
Περίπλοκες Επιφάνειες Χρυσού»**

**“Theoretical Study of Alkanethiols Absorbed on Complex  
Au Surfaces”**

**Κωτσοπούλου Παναγιώτα**

Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια

Τμήματος Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστημίου Κρήτης

**Επιβλέπων Καθηγητής κ. Ι. Ρεμεδιάκης**

**Τετάρτη, 26/03/2014,**

**ώρα 12:00πμ - 14:00 π.μ.**

**Αίθουσα A115,**

**Κτίριο Επιστήμης των Υπολογιστών, Πανεπιστήμιο Κρήτης**

**Περίληψη**

Στην παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή παρουσιάζεται μία σειρά υπολογιστικών προσομοιώσεων κβαντικής και μοριακής μηχανικής οι οποίες βασίζονται στη θεωρία συναρτησιακού πυκνότητας [Density Functional Theory(DFT)] και τη μέθοδο Simulated Annealing, με σκοπό τη μελέτη ιδιοτήτων των αλκανοθειολών σε επιφάνειες χρυσού και την παραμετροποίηση της αλληλεπίδρασης θείου-χρυσού.

Αρχικά μέσω της θεωρίας συναρτησιακού πυκνότητας (DFT) η οποία υλοποιήθηκε μέσω του υπολογιστικού πακέτου GPAW(Grid-based Projector-Augmented Wave method), προσομοιώθηκαν οι επιφάνειες χρυσού (100), (110), (111) και (211) και μελετήθηκαν ως προς τη δομή και τις ιδιότητες τους. Στη συνέχεια υπολογίστηκαν οι ενέργειες προσρόφησης της ρίζας -SH στις επιφάνειες (111) και (211) του χρυσού. Τέλος επιχειρήθηκε η ανάπτυξη ενός κλασσικού ατομιστικού πεδίου δυνάμεων για την δεσμική αλληλεπίδραση μεταξύ θείου-χρυσού χρησιμοποιώντας DFT δεδομένα. Η παραπάνω διαδικασία υλοποιήθηκε μέσω ενός αλγορίθμου βελτιστοποίησης ο οποίος βασίστηκε στη μέθοδο Simulated Annealing.