



## Πρόγραμμα Ημερίδας

<b>Καλωσόρισμα</b>	9:45 – 10:00	Στόχοι και κατευθύνσεις του δικτύου ΘΕΩΣΥ.
<b><u>Συνεδρία Α</u></b>		
<b>Έδρα:</b> Αριστείδης Ζδέτσης		
Σταύρος Φαράντος	10:00 – 11:00	Μη-Γραμμική Μοριακή Δυναμική: Η θεωρία για την κατανόηση των χημικών αντιδράσεων και των μηχανισμών τους.
Χρήστος Κορδούλης	11:00 – 11:40	Η συνεισφορά των υπολογιστικών μεθόδων στη σύνθεση στερεών καταλυτών.
Εμμανουήλ Κουκάρας	11:40 – 12:05	Θεωρία Συναρτησιακού Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας: Η πορεία προς την χημική ακρίβεια.
Δημήτρης Τσαλίκης	12:05 – 12:30	Ιεραρχικές προσομοιώσεις ανάπτυξης λεπτών υμενίων νανοκρυσταλλικού πυριτίου για εφαρμογή σε φωτοβολταϊκά πάνελ.
<b>Διάλειμμα</b>	12:30 – 12:45	
<b><u>Συνεδρία Β</u></b>		
<b>Έδρα:</b> Αλέξης Λυκουργιώτης		
Αριστείδης Ζδέτσης	12:45 – 13:25	Σχεδιασμός καινοτόμων νανοϋλικών με βάση απλές χημικές αναλογίες και ιδιότητες.
Ορέστης Αλεξιάδης	13:25 – 13:50	Οργανικοί ημιαγωγοί για εφαρμογές στη μικροηλεκτρονική: Ατομιστική προσομοίωση της ημικρυσταλλικής δομής του Poly-3Hexyl-Thiophene (Rr-P3HT).
Γεώργιος Σπυρούλιας	13:50 – 14:30	Υψηλής ανάλυσης μελέτη της διαμόρφωσης, της δυναμικής και της αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών μέσω φασματοσκοπίας βιομοριακού NMR.
<b>Διάλειμμα</b>	14:30 – 16:00	
<b><u>Συνεδρία Γ – Αφίσας</u></b>	14:30 – 16:00	
<b><u>Συνεδρία Δ</u></b>		
<b>Έδρα:</b> Γεώργιος Μαρούλης		
Στέφανος Τραχανάς	16:00 – 17:00	Η Κβαντομηχανική είναι... εδώ : Προσδιορίζοντας τη σταθερά του Planck από καθημερινές παρατηρήσεις.
Μιχαήλ Σιγάλας	17:00 – 17:40	Υπολογιστική μελέτη φωτονικών και φωνονικών υλικών.
Γεώργιος Καλόσακας	17:40 – 18:20	Μοντελοποίηση μεταφοράς φορτίου στο DNA και σύγκριση με πειραματικές μετρήσεις ρυθμών μεταφοράς.
Κωνσταντίνος Παπαγγελής	18:20 – 19:00	Γραφένιο υπό την επίδραση μονοαξονικής και υδροστατικής πίεσης.

**Συζήτηση στρογγυλής τραπέζης.**