



**Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας  
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**

**Βασ. Κωνσταντίνου 48, Αθήνα**

**ΔΙΑΛΕΞΗ**

**“Θεωρητικές μελέτες υπερμοριακών συστημάτων”**

**Δρ. Δήμητρα Τζέλη**

**Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας**

**Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**

**Πέμπτη 2 Ιουλίου 2015, ώρα 12:00**

**Αίθουσα σεμιναρίων στο ισόγειο του ΕΙΕ**

## **Theoretical studies on supramolecular systems**

Theoretical studies on supramolecular systems such as fullerene crown ethers, complexes of porphyrins, and encapsulated complexes are presented. Their stability, complexation energies, absorption and emission spectra and formation energies are computed.

The calculated systems have been chosen because of: a) their properties, b) some unusual experimental findings c) the need to interpret the experimental results and d) their potential applications.

Thus, complexes that may serve as a candidate for organic photovoltaics and molecular electronics applications are presented. Interesting experimental findings are explained and interpreted.

## **Θεωρητικές μελέτες υπερμοριακών συστημάτων**

Θα παρουσιαστούν θεωρητικές μελέτες σε υπερμοριακά συστήματα όπως αιθέρες στέμματα με φουλερένια, σύμπλοκα πορφυρινών και εγκλωβισμένα σύμπλοκα σε περιορισμένο χώρο. Γι' αυτά τα συστήματα εξετάστηκαν η σταθερότητά τους, οι ενέργειες συμπλοκοποίησης, τα φάσματα απορρόφησης και εκπομπής και οι ενέργειες σχηματισμού τους.

Τα υπολογισμένα συστήματα έχουν επιλεγεί εξαιτίας: α) των ιδιοτήτων τους, β) της ανάγκης να ερμηνεύθουν ασυνήθιστα πειραματικά αποτελέσματα και γ) των δυνητικών εφαρμογών τους.

Έτσι, παρουσιάζονται σύμπλοκα που μπορεί να έχουν εφαρμογές σε οργανικά φωτοβολταϊκά και μοριακές ηλεκτρονικές συσκευές. Τέλος, εξηγούνται και ερμηνεύονται ενδιαφέρουσες πειραματικές διαπιστώσεις.