Σ. ΛΟΓΟΘΕΤΙΔΗΣ

1. **Βιοηλεκτρονικά βασισμένα σε αγώ γιμα πολυμερή. Ανατέθηκε**

Οι ηλεκτρονικοί αισθητήρες έχουν σχεδιαστεί για να λειτουργούν ως βασικά στοιχεία σε μικροσκοπικά, ενδεχομένως πλήρως ενσωματωμένα συστήματα, ικανά στην ανίχνευση μιας ουσίας και την παράδοση μιάς ψηφιακής πληροφορίας. Αρχές λειτουργίας ηλεκτρονικών αισθητήρων που βασίζονται σε οργανικά ημιαγωγικά τρανζίστορ επίδρασης πεδίου (OFETs) με εστίαση στους βιολογικούς αλλά και χημικούς αισθητήρες.

2. **Κατασκευή θερμοκηπίου και ενσωμάτωση Οργανικώ ν Φωτοβολταϊκώ ν (OPV) & Οργανικώ ν Διόδων Εκπομπής Φωτός (OLED). Ανατέθηκε**

Ένα σύγχρονο high-tech θερμοκήπιο έχει υψηλές απαιτήσεις κατανάλωσης ενέργειας. Η έρευνα έχει στραφεί στην εύρεση εναλλακτικών μεθόδων, για την κάλυψη των αναγκών, σε ενέργεια, των θερμοκηπιακών μονάδων. Στην παρούσα εργασία θα μελετηθεί η παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας, εγκαθιστώντας OPVs, λαμβάνοντας υπόψη τις επιπτώσεις στη βλαστική ανάπτυξη και στις τελικές αποδώσεις των καλλιεργειών, λόγω της μείωσης της έντασης της ακτινοβολίας, που καταφτάνει στα φυτά. Επιπλέων θα διερευνηθεί η δυνατότητα αύξησης της φωτοπεριόδου, χρησιμοποιώντας OLED.

3. **Τεχνοοικονομική μελέτη για την εφαρμογή εύκαμπτων ημιδιάφανων οργανικώ ν φωτοβολταϊκώ ν σε θερμοκήπια και υλοποίηση. Ανατέθηκε**

Στην εργασία αυτή θα μελετηθεί ο τρόπος εγκατάστασης εύκαμπτων ημιδιάφανων οργανικών φωτοβολταϊκών στην οροφή ενός θερμοκηπίου και το ενεργειακό και κατ' επέκταση οικονομικό όφελος που προκύπτει από μία τέτοια εφαρμογή. Επίσης θα γίνει υλοποίηση της εφαρμογής και πειραματική μελέτη όλων των παραγόντων για την βελτιστοποίηση της.

Σ. ΛΟΓΟΘΕΤΙΔΗΣ – Β. ΚΑΡΑΓΚΙΟΖΑΚΗ

1. **Πολυμερικά ικριώ ματα με αντιβακτηριδιακές ιδιότητες (νανοσωματίδια αργύρου) ως επικαλύψεις ορθοπεδικώ ν εμφυτευμάτων. Ανατέθηκε**

Γίνεται χρήση των επικαλύψεων σε νανοκλίμακα για περαιτέρω βελτίωση των ορθοπεδικών εμφυτευμάτων. Συγκεκριμένα, σε πρώτο στάδιο παρασκευάζονται νανοσωματίδια αργύρου με τη μέθοδο πολυόλης, τα οποία μετέπειτα θα χρησιμοποιηθούν ως επικαλύψεις σε πολυμερικά ικριώματα. Τα πολυμερικλα ικριώματα και συγκεκριμένα ικριώματα χιτοζάνης/PCL αναπτύσσονται με την τεχνική της ηλεκτροστατικής ινοποίησης

(Electrospinning). Η βελτιστοποίηση των τεχνικών ανάπτυξης και σύνθεσης είναι απαραίτητη για τα συγκεκριμένα υλικά. Κατόπιν, γίνεται μελέτη της κυτταροτοξικότητας και του κυτταρικού πολλαπλασιασμού με ινοβλάστες με τη βοήθεια βιολογικών πρωτοκόλλων και οπτικού μικροσκοπίου καθώς και μικροσκοπίου σάρωσης. Τα ικριώματα μελετώνται για τις μηχανικές (Nanoindentation), επιφανειακές (AFM & Raman), μορφολογικές (SEM, contact angle) ιδιότητες.

2. **Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοδιασπώ μενων νανοσωματιδίων με φάρμακο για την αντιμετώ πιση της επαναστένωσης των αρτηριώ ν μετά από αγγειοπλαστική. Ανατέθηκε**

3. **Χαρακτηρισμός πρόσληψης από κύτταρα και εκτίμηση τοξικότητας νανοσωματιδίων. Cellular uptake internalization pathway proliferation protein corona effect. Ανατέθηκε**

4. **Μελέτη της ανάπτυξης νανοπλατφόρμων από ίνες ικριωμάτων σε συνδυασμό με φάρμακα για ορθοπεδικές εφαρμογές μέσω electrospinning, κινητική απελευθέρωση και μελέτη της κυτταροτοξικότητάς τους. Ανατέθηκε**

5. **Σύνθεση νανοσωματιδίων για τη διάγνωση και τη θεραπεία της αθηρωματικής πλάκας μέσω της χρήσης νέων παραγόντων απεικόνισης στην αξονική τομογραφία και φαρμάκων με αντιοξειδωτικές και αντιφλεγμονώ δεις ιδιότητες. Ανατέθη κε**

6. **Προετοιμασία και χαρακτηρισμός βιοαποικοδομήσιμων πολυμερικώ ν ικριωμάτων, για καρδιοαγγειακά εμφυτεύματα, για διανομή φαρμάκου, μελέτες κινητικής απελευθέρωσης φαρμάκου και τοξικότητα της δόσης του φαρμάκου.**

7. **Σύνθεση αντιθρομβωτικώ ν νανοσωματιδίων.**

8. **Σύστημα διπλής σύριγγας Electrospinning των πολυμερώ ν PCL/PLA φορτωμένα με κουρκουμίνη και δεξαμεθαζόνη πάνω σε stent για καρδιοαγγειακές εφαρμογές. Ανατέθηκε**

Στην παρούσα διπλωματική θα γίνει σύνθεση βιοαποικοδομήσιμων πολυμερικών ικριωμάτων, όπως από PCL και από PLA με σύστημα διπλής σύριγγας Electrospinning, για καρδιαγγειακά εμφυτεύματα για μεταφορά φαρμάκων, όπως η κουρκουμίνη και η δεξαμεθαζόνη. Θα πραγματοποιηθεί μορφολογικός, βιολογικός, μηχανικός χαρακτηρισμός των ικριωμάτων, μελέτες κινητικής απελευθέρωσης φαρμάκων και βιοαποικοδόμησης των πολυμερών. Τέλος θα γίνει εκτίμηση της τοξικότητας σε συνάρτηση με την δόση του φαρμάκου και επιφανειακή επεξεργασία των stent με Plasma Treatment.

Σ. ΛΟΓΟΘΕΤΙΔΗΣ - Μ. ΓΙΩΤΗ

1. **Ανάπτυξη οργανικών διόδων εκπομπής φωτός (OLEDs) για φωτισμό και μελέτη των παραγόντων που επιδρούν στην απόδοσή τους. Ανατέθηκε**

Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα αναπτυχθούν οργανικοί δίοδοι εκπομπής φωτός σε εύκαμπτα και άκαμπτα υποστρώματα με τεχνικές υγρής χημείας και εκτύπωσης (gravure printing και inkjet). Αρχικά τα OLEDs θα αναπτυχθούν με τεχνικές υγρής χημείας προκειμένου να βρεθούν τα κατάλληλα υλικά και η βέλτιστη δομή τους. Στη συνέχεια τα OLEDs θα αναπτυχθούν με τεχνικές εκτύπωσης σε εύκαμπτα πολυμερικά υποστρώματα. Στόχος της εργασίας είναι η ανεύρεση των βέλτιστων υλικών και συνθηκών εκτύπωσης για την ανάπτυξη οργανικών διόδων εκπομπής φωτός με τις βέλτιστες ιδιότητες για εφαρμογές σε φωτισμό.

2. **Μελέτη των νανοτοπογραφικών και νανοδομικών ιδιοτήτων οργανικών και ανόργανων υμενίων σε διατάξεις οργανικών διόδων εκπομπής φωτός (OLEDs) με στόχο την βελτιστοποίηση της απόδοσης λειτουργίας. Ανατέθηκε**

Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα πραγματοποιηθεί η ενδελεχής μελέτη των νανοτογραφικών και νανοδομικών ιδιοτήτων των επάλληλων υμενίων που αναπτύσσονται με τεχνικές υγρής χημείας και εκτύπωσης, τα οποία αποτελούν τη τελική πολυστρωματική δομή των διατάξεων οργανικών διόδων εκπομπής φωτός σε εύκαμπτα και άκαμπτα υποστρώματα. Για το σκοπό αυτό θα εφαρμοστεί η τεχνική της Μικροσκοπίας Ατομικών Δυνάμεων καθώς και μέθοδοι Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας. Στόχος της εργασίας είναι η διερεύνηση των ιδιοτήτων αυτών αλλά και του πάχους των επάλληλων στρωμάτων των OLED διατάξεων και η συσχέτισή τους με την απόδοση λειτουργίας των ολοκληρωμένων διατάξεων.

3. **Μελέτη της βιοαποικοδόμησης και βιοσυμβατότητας πολυμερικών πολυστρωματικών δομών με οπτικές τεχνικές.**

Στην εργασία αυτή θα αναπτυχθούν πολυστρωματικές δομές από πολυμερικά υλικά που θα φέρουν φάρμακα κατάλληλα για διάφορες βιοϊατρικές εφαρμογές, με στόχο την ελεγχόμενη αποδέσμευση φαρμάκου. Η μελέτη της βιοαποικοδομησιμότητας και της βιοσυμβατότητάς τους θα πραγματοποιηθεί με την τεχνική της ελλειψομετρίας σε πραγματικό χρόνο. Η μελέτη θα εστιαστεί στην επίδραση του φαρμάκου και του υγρού περιβάλλοντος κυρίως για τα αρχικά στάδια της αλληλεπίδρασης των παραγόμενων δομών με πρωτεϊνικά διαλύματα.

Σ. ΛΟΓΟΘΕΤΙΔΗΣ - Σ. ΚΑΣΣΑΒΕΤΗΣ

1. **Κατασκευή και χαρακτηρισμός βιοσυμβατών νανοδομημένων επιφανειών με αντιμικροβιακές ιδιότητες. Ανατέθηκε**

Η αύξηση των λοιμώξεων, κυρίως λόγω ενδονοσοκομειακών μολύνσεων και εξαιτίας της ανθεκτικότητας των μικροβίων, έχει κάνει επιτακτική την ανάγκη για την κατασκευή αντιμικροβιακών επιφανειών με δομή στη νανοκλίμακα. Η κατασκευή τέτοιων επιφανειών μπορεί να γίνει είτε με την ενσωμάτωση αντιμικροβιακών ουσιών (π.χ. νανοσωματίδια αργύρου) σε νανοδομημένες επιφάνειες, όπως πολυμερικές ίνες, είτε με την κατασκευή επιφανειών με συγκεκριμένη νανοδομή (με τεχνικές όπως Nanoimprint Lithography, Laser Patterning), τέτοια που να μην επιτρέπει την ανάπτυξη των μικροβίων. Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα κατασκευαστούν και θα χαρακτηριστούν τέτοιου είδους επιφάνειες και θα μελετηθεί η αντιμικροβιακή τους δράση.

2. **Μορφολογικός και μηχανικός χαρακτηρισμός νανοδομημένων βιοσυμβατών επιφανειών με αντιμικροβιακές ιδιότητες. Ανατέθηκε**

Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα πραγματοποιηθεί χαρακτηρισμός βιοσυμβατών αντιμικροβιακών επιφανείων με δομή αναπτυγμένη στη νανοκλίμακα. Συγκεκριμένα, ο μορφολογικός χαρακτηρισμός θα πραγματοποιηθεί με Atomic Force Microscopy (AFM) ενώ ο χαρακτηρισμός μηχανικών ιδιοτήτων με τη μέθοδο της νανοεγχάραξης (διάταξη Nanoindenter).

Π. ΠΑΤΣΑΛΑΣ - Σ. ΛΟΓΟΘΕΤΙΔΗΣ - Σ. ΚΑΣΣΑΒΕΤΗΣ

1. **Χαρακτηρισμός κολλοειδών ημιαγωγών που αναπτύχθηκαν με αποδόμηση laser. Ανατέθηκε**

Στα πλαίσια της εργασίας αυτής θα μελετηθεί μια σειρά κολλοειδών ημιαγωγών (nano-Si, InN, GaN) που παρασκευάστηκαν με τη μέθοδο της αποδόμησης με laser (laser ablation) στο ΙΗΔΛ-ΙΤΕ (Κρήτη) και στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων. Θα μελετηθεί η δομή, μορφολογία, χημεία και οπτικές τους ιδιότητες με XRD, SEM, XPS και φασματοσκοπία οπτικής διαπερατότητας, αντίστοιχα.

2. **Ανάπτυξη διάταξης παραγωγής πλασμονικών κολλοειδών με αποδόμηση laser.**

Στα πλαίσια της εργασίας αυτής θα αναπτυχθεί διάταξη παραγωγής πλασμονικών κολλοειδών (δηλ. νανοσωματίδια αργύρου η χρυσού σε νερό ή οργανικούς διαλύτες) με τη μέθοδο της αποδόμησης με laser (laser ablation) προκειμένου να χρησιμοποιθούν ως μελάνια στην τεχνολογία των εκτυπωμένων οργανικών φωτοβολταϊκών.

Σ. ΓΗΡΟΥΣΗ

Ανάπτυξη και Εφαρμογή Ηλεκτροχημικώ ν Βιοαισθητήρων ως εργαλείο στη διάγνωση ασθενειώ ν.

Επιδιωκόμενο στόχο του προτεινόμενου ερευνητικού θέματος αποτελεί η ανάπτυξη γρήγορων και φθηνών μεθόδων αναγνώρισης για τη διάγνωση ασθενειών σχετιζόμενων με την αλληλουχία των βάσεων του DNA καθώς και πρωτοποριακών αναλυτικών μεθόδων για τη διάγνωση κληρονομικών και λοιμωδών ασθενειών στη βάση της μοριακής αναγνώρισης. Η παρουσία εξειδικευμένων αλληλουχιών των βάσεων του DNA αναγνωρίζεται με την ανάλυση εξειδικευμένων τμημάτων DNA-στόχων και των προϊόντων της PCR. Η ανάπτυξη βιοαισθητήρων που βασίζονται σε διαφορετικές φυσικοχημικές αρχές μετάλλαξης σήματος (πιεζοηλεκτρικών και ηλεκτροχημικών) και νανοϋλικών για την αναγνώριση της αλληλουχίας των βάσεων του DNA, σχετιζόμενων με ασθένειες. Οι μέθοδοι ακινητοποίησης DNA τμημάτων σε αισθητήρες θα βελτιστοποιηθεί για την ανάπτυξη DNA βιοαισθητήρων. Αυτοί οι αισθητήρες θα εφαρμοστούν στην αναγνώριση κλινικά σημαντικών ιών όπως ο ιός της ηπατίτιδας Β, ο ιός TTV ή σημαντικών κληρονομικών ασθενειών όπως ο παράγοντας V που προκαλεί σημειακές μεταλλάξεις σε προϊόντα της PCR.

Χ. ΛΙΟΥΤΑΣ - Ν. ΒΟΥΡΟΥΤΖΗΣ

Επίδραση των φυσικώ ν παραμέτρων ανάπτυξης στα δομικά χαρακτηριστικά λεπτώ ν υμενίων πολυκρυσταλλικού Si για χρήση σε φωτοβολταϊκές διατάξεις.Ανα τέθηκε

Η παρούσα διπλωματική εργασία αφορά στον δομικό χαρακτηρισμό λεπτών υμενίων πολυκρυσταλλικού πυριτίου που αναπτύσσονται με την μέθοδο της επαγόμενης κρυστάλλωσης αμόρφου Si από αλουμίνιο. Το κύριο τεχνολογικό ενδιαφέρον των υμενίων αυτό εστιάζεται σε φωτοβολταϊκές εφαρμογές. Η ανάπτυξη έχει προγραμματιστεί να πραγματοποιηθεί στο Ινστιτούτο Νανοτεχνολογίας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Θα περιλαμβάνει σειρά υμενίων ανεπτυγμένων κάτω από διαφορετικές συνθήκες. Προτείνεται σε πρώτη φάση η μελέτη να αφορά σε διαφορετικό, πάχος καθώς και διαφορετικές

θερμοκρασίες και χρόνους ανόπτησης. Βασικός στόχος είναι η διακρίβωση της επίδρασης των παραπάνω παραμέτρων στην ποιότητα των παραγομένων υμενίων με μεθόδους ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. Αναμένεται να δοθούν απαντήσεις που θα αφορούν στο μέγεθος και την κατανομή των κρυσταλλιτών, τον προσανατολισμό την γεωμετρική μεταξύ των σχέση, την ομογένεια της δομής και τις ατέλειες δομής που τυχόν παρουσιάζουν καθώς και όποια άλλα δομικά στοιχεία τα οποία επηρεάζουν σημαντικά την απόδοση των σχεδιαζόμενων εφαρμογών.

Η. ΑΫΦΑΝΤΗΣ

Experimental and Theoretical Investigation of Mechanical Behavior of single crystals, thin films and nano-composite materials using ultra low depth Nanoindentation. Ανατέθηκε

Instrumented Nanoindentation is commonly used to extract the mechanical properties of thin films and small volumes. This project – research concerns the development and implementation of a number of analytical (i.e Aifantis Gradient Theory), numerical methods (i.e. Finite Element analysis and contour integral methods) as well as experimental (nanoindentation techniques, microtensile test and Atomic Force Microscopy) for the investigation of mechanical properties of advanced materials. In situations dominated by microstructure, the material does not behave as homogeneous, but rather as heterogeneous one. Finite Element Analysis and Strain Gradient Theories will be implemented in this project to describe the effect of microstructure on the macroscopic mechanical behavior of the material. Multiphysics approaches will also be conducted (i.e. Electromagnetic, Thermal).

Ο. ΚΑΛΟΓΗΡΟΥ

1. **Βιοϊατρικές εφαρμογές μαγνητικώ ν νανοσωματιδίων.**

Προτείνεται η περαιτέρω διερεύνηση της χρήσης μαγνητικών νανοσωματιδίων (ΝΜΣ) οξειδίων του σιδήρου στη διάγνωση και τη θεραπεία του καρκίνου. Η ανάπτυξη των νανοσωματιδίων γίνεται με τη μέθοδο της υγρής χημείας. Προβλέπεται η «λειτουργικοποίηση» των ΜΝΣ μέσω της σήμανσής τους με τις κατάλληλες βιολογικές

οντότητες. Η διπλωματική θα εκπονηθεί σε συνεργασία με το Τμήμα Μοριακής Βιολογίας & Γενετικής του ΔΠΘ.

2. **Ανάπτυξη νανοσύνθετων σκληρώ ν μαγνητικώ ν υλικώ ν για εφαρμογές μονίμων μαγνητώ ν (συνεπιβλέπων λέκτορας κ. Σαραφίδης).**

Προτείνεται η ανάπτυξη νανοσωματιδίων με την τεχνική high energy ball milling. Ο χαρακτηρισμός των προϊόντων θα γίνει με διάφορες τεχνικές και οι μαγνητικές ιδιότητες θα μελετηθούν με τη χρήση μαγνητομετρίας.

Γ. ΠΑΠΑΔΟΠΟΥΛΟΣ

Σχέση έντασης πεδίου και χρόνου έκθεσης των επιπτώ σεων των μικροκυμάτων σε πρωτε□νες. Μελέτη με Προσομοιώ σεις Μοριακής Δυναμικής.

Η διηλεκτρική συνάρτηση διαλύματος λυσοζύμης στην περιοχή των μικροκυμάτων έχει αναπαραχθεί με επιτυχία με την βοήθεια προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής. Εφαρμογή εναλλασσόμενου πεδίου σχετικά χαμηλής έντασης σε επιλεγμένες συχνότητες του φάσματος έδωσε τις ίδιες τιμές της μιγαδικής διηλεκτρικής συνάρτησης. Επίσης σε συγκεκριμένες συχνότητες παρατηρήθηκαν μεταβολές στην δομή της πρωτεΐνης καθώς και στην κινητικότητα συγκεκριμένων περιοχών της πρωτεϊνικής ακολουθίας. Στο πλαίσιο της προτεινόμενης διπλωματικής εργασίας θα συνεχισθεί αυτή η μελέτη με διαφορετικές εντάσεις πεδίου και διαφορετικούς χρόνους έκθεσης της πρωτεΐνης στο πεδίο, προκειμένου να διαπιστωθεί πιθανή σχέση των επιπτώσεων στην δομή της πρωτεΐνης από την ένταση και την διάρκεια εφαρμογής του πεδίου.

Α. ΔΕΝΔΡΙΝΟΥ-ΣΑΜΑΡΑ

Μαγνητικά νανοσωματίδια ως μεταφορείς φαρμάκων.

Inorganic nanoparticle drug carriers have potential applications in drug targeting, improving the release and bioavailability of drugs, and reducing the secondary effects of drugs. My interest is

on synthesis of magnetic nanoparticles, characterization, functionalization with anti-inflammatory drugs and biodistribution experiments.

Α. ΚΩΝΣΤΑΝΤΟΠΟΥΛΟΣ

Synthesis and characterization of mixed bismuth oxide nanostructured particles for environmental and energy applications.
Bismuth oxide has a number of interesting features and properties that make it a promising candidate for modifying the oxidation reduction properties of mixed oxides that are employed in a number of clean energy (e.g. solar fuels) and environmental (e.g.catalytic emissions control) applications. In this master thesis we will perform synthesis of mixed bismuth oxide nanoparticles through aerosol and combustion techniques.

Ι. ΑΡΒΑΝΙΤΙΔΗΣ

Μελέτη φουλεριδίων του C60 με τη χρήση της τεχνικής της φασματοσκοπίας Raman. Ανατέθηκε
Τα φουλερίδια του C60 -οι ενώσεις που προκύπτουν από την παρένθεση μεταλλικών ατόμων στο πλέγμα του φουλερίτη- προσέλκυσαν το έντονο επιστημονικό ενδιαφέρον για περισσότερο από δύο δεκαετίες λόγω των ιδιαίτερων δομικών και ηλεκτρονικών τους ιδιοτήτων (εμφάνιση υπεραγωγιμότητας, μαγνητική τακτοποίηση, μεταβάσεις μετάλλου-μονωτή, γιγαντιαία αρνητική μαγνητοαντίσταση, αρνητική θερμική διαστολή). Η ευαισθησία των ενδομοριακών τρόπων δόνησης του C60 στις μεταβολές των δομικών και ηλεκτρονικών χαρακτηριστικών που επάγουν η αλλαγή της θερμοκρασίας, η εφαρμογή της πίεσης ή/και η αντικατάσταση των μεταλλικών ιόντων από άλλα καθιστά την τεχνική της φασματοσκοπίας Raman ένα ισχυρότατο εργαλείο για τη μελέτη των συστημάτων αυτών.

Χ. ΠΟΛΑΤΟΓΛΟΥ

Μελέτη νανοδομώ ν με τη μέθοδο DFT. Ανατέθηκε

Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζετε τελευταία για τα 2D υλικά, μετά την διαπίστωση ότι μπορούν να υπάρχουν σε ελεύθερη μορφή. Το γραφένιο υπήρξε το πρώτο τέτοιο υλικό το οποίο παρασκευάστηκε με την μέθοδο του μικρομηχανικού σχισμού ή απολέπισης. Κατόπιν παρήχθηκε μια πλειάδα υλικών με διαφορετικές ιδιότητες που καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών. Το θεωρητικό πεδίο ξεκινώντας από υπολογισμούς DFT στη επιλύοντας ηλεκτρονικές και οπτικές ιδιότητες αλλά και τις φωνονιακές καταστάσεις από απλούς μέχρι υψηλών απαιτήσεων υπολογισμούς εφαρμόζει μοντέλα για την καλύτερη μοντελοποίηση των συσκευών και των μεθόδων παραγωγής. Μάλιστα για την καλύτερη πρόοδο απαιτείται η συσσώρευση γνώσης από τις μεθόδους ώστε το πείραμα και η θεωρία να βρίσκονται σε διαρκή αλληλεπίδραση. Η εφαρμογή τέτοιων υπολογιστικών μεθόδων ανέδειξε υλικά όπως Τα διαλογονίδια μετασταθών μετάλλων (TMDCs) με κυριότερα τα MoS2, MoSe2, WS2 και WSe2 τα οποία έχουν ευμεγέθη ενεργειακά χάσματα και μεταβάλλονται από αμέσα σε έμμεσα και αντίστροφα με αποτέλεσμα τις καλύτερες εφαρμογές σε τρανζίστορ, φωτοανιχνευτές και ηλεκτροφωτοβόλερς συσκευές. Ο σκοπός της διπλωματικής εργασίας είναι να εφασμόσουμε μεθόδους υπολογιστικής φυσικής για να μελετήσουμε πιθανούς μηχανισμούς ανάπτυξης, ξεκινώντας από το μοριακό επίπεδο. Πιο συγκεκριμένα θα χρησιμοποιήσουμε την μέθοδο DFT για να υπολογίσουμε την ολική ενέργεια συμπλεγμάτων ατόμων μαζί με τις ηλεκτρονικές και οπτικές τους ιδιότητες.