



«Computational Chemistry Crete (3C)»



Δελτίο τύπου

Με μεγάλη επιτυχία ολοκληρώθηκε το 3ο θερινό σχολείο Υπολογιστικής Χημείας Computational Chemistry Crete Summer School στο Πανεπιστήμιο Κρήτης

Με μεγάλη επιτυχία πραγματοποιήθηκε το **3ο θερινό σχολείο Υπολογιστικής Χημείας**, που διοργάνωσε το **Materials Modeling and Design Group (MMDG)** του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Κρήτης, από τις **6-10 Ιουλίου 2025**, στις εγκαταστάσεις του Τμήματος Χημείας στο Ηράκλειο.

Για τρίτη συνεχή χρονιά, το θερινό σχολείο συγκέντρωσε υψηλού επιπέδου φοιτητές και νέους ερευνητές από διαφορετικά επιστημονικά πεδία, επιβεβαιώνοντας τον ρόλο του ως μια δυναμική εκπαιδευτική δράση που συνδυάζει την Υπολογιστική Χημεία, την Επιστήμη Υλικών και την Τεχνητή Νοημοσύνη. Στόχος της διοργάνωσης ήταν η εξοικείωση των συμμετεχόντων με τις πλέον σύγχρονες υπολογιστικές μεθόδους και η ανάπτυξη δεξιοτήτων που αποτελούν πλέον βασικό εργαλείο για την έρευνα και την καινοτομία.

Το πρόγραμμα απευθύνθηκε κυρίως σε τελειόφοιτους προπτυχιακούς και νέους μεταπτυχιακούς φοιτητές, οι οποίοι είχαν την ευκαιρία να αποκτήσουν ουσιαστική θεωρητική κατάρτιση αλλά και πρακτική εμπειρία στον προγραμματισμό, στις υπολογιστικές προσομοιώσεις και στις σύγχρονες τεχνικές μοντελοποίησης υλικών. Παράλληλα, γνώρισαν τις δυνατότητες που προσφέρουν οι υπολογιστικές μέθοδοι στην επιτάχυνση της επιστημονικής ανακάλυψης και στην ανάπτυξη νέων τεχνολογιών.

Κατά τη διάρκεια των πέντε ημερών, οι συμμετέχοντες παρακολούθησαν διαλέξεις από καταξιωμένους ερευνητές και επιστήμονες σε θέματα όπως η υπολογιστική σχεδίαση και ανακάλυψη νέων υλικών, η κβαντική χημεία, οι μοριακές προσομοιώσεις, οι εφαρμογές της μηχανικής μάθησης και της βαθιάς μάθησης στη Χημεία, οι αρχές της ηθικής στη χρήση της τεχνητής νοημοσύνης (AI Ethics), καθώς και η καινοτομία και η επιχειρηματικότητα στην επιστημονική έρευνα.

Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε στην πρακτική εκπαίδευση μέσα από εργαστήρια (hands-on sessions), κατά τη διάρκεια των οποίων οι συμμετέχοντες εργάστηκαν με σύγχρονα υπολογιστικά εργαλεία και λογισμικά που χρησιμοποιούνται διεθνώς στην ακαδημαϊκή και βιομηχανική έρευνα. Εφαρμόζοντας μεθόδους κβαντικής χημείας, κλασικής μοριακής μηχανικής, μοριακής δυναμικής, μηχανικής μάθησης (Machine Learning) και

βαθιάς μάθησης (Deep Learning), απέκτησαν πολύτιμη εμπειρία στην επίλυση πραγματικών επιστημονικών προβλημάτων.

Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε σε εφαρμογές των υπολογιστικών μεθόδων σε σύγχρονες προκλήσεις που σχετίζονται με την πράσινη μετάβαση και τη βιώσιμη ανάπτυξη. Οι συμμετέχοντες γνώρισαν πώς η υπολογιστική χημεία και η τεχνητή νοημοσύνη μπορούν να επιταχύνουν τον σχεδιασμό και την ανακάλυψη νέων υλικών για την **αποθήκευση υδρογόνου**, συμβάλλοντας στην ανάπτυξη τεχνολογιών καθαρής ενέργειας, καθώς και υλικών υψηλής απόδοσης για τη **δέσμευση και αποθήκευση διοξειδίου του άνθρακα (CO₂)**, μια από τις σημαντικότερες τεχνολογίες για τον περιορισμό των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου και την αντιμετώπιση της κλιματικής αλλαγής.

Παράλληλα, παρουσιάστηκαν εφαρμογές στον σχεδιασμό προηγμένων πορωδών υλικών για την εκλεκτική προσρόφηση και τον διαχωρισμό αερίων, σε τεχνολογίες καθαρισμού του περιβάλλοντος, στην ανάπτυξη καταλυτικών υλικών, καθώς και στη χρήση αλγορίθμων τεχνητής νοημοσύνης για την ταχεία διερεύνηση εκατομμυρίων πιθανών υλικών, μειώνοντας δραστικά τον χρόνο και το κόστος που απαιτούνται για την εργαστηριακή ανάπτυξη νέων υλικών. Μέσα από χαρακτηριστικά παραδείγματα αναδείχθηκε ο τρόπος με τον οποίο οι υπολογιστικές προσομοιώσεις λειτουργούν συμπληρωματικά με το πείραμα, οδηγώντας σε ταχύτερη και πιο στοχευμένη ανάπτυξη καινοτόμων υλικών για ενεργειακές και περιβαλλοντικές εφαρμογές.

Ο έντονα διεπιστημονικός χαρακτήρας του σχολείου έφερε σε επαφή τη Χημεία, τη Φυσική, την Επιστήμη Υλικών, την Πληροφορική και την Τεχνητή Νοημοσύνη, δημιουργώντας ένα δημιουργικό περιβάλλον ανταλλαγής γνώσεων και εμπειριών μεταξύ φοιτητών, νέων ερευνητών και έμπειρων επιστημόνων. Οι συμμετέχοντες είχαν την ευκαιρία να συζητήσουν τις τελευταίες επιστημονικές εξελίξεις, να ανταλλάξουν ιδέες και να δημιουργήσουν νέες συνεργασίες, αποκτώντας πολύτιμες εμπειρίες για τη μελλοντική ακαδημαϊκή και επαγγελματική τους πορεία.

Η επιτυχής ολοκλήρωση του 3ου θερινού σχολείου Υπολογιστικής Χημείας επιβεβαίωσε τη σημασία αντίστοιχων εκπαιδευτικών πρωτοβουλιών για την καλλιέργεια σύγχρονων επιστημονικών δεξιοτήτων και την ανάδειξη της Υπολογιστικής Χημείας ως βασικού πυλώνα της έρευνας του μέλλοντος. Μέσα από τη σύνδεση της θεμελιώδους επιστήμης με την υπολογιστική τεχνολογία και την τεχνητή νοημοσύνη, το σχολείο ανέδειξε τον καθοριστικό ρόλο που μπορούν να διαδραματίσουν οι νέοι επιστήμονες στην ανάπτυξη καινοτόμων λύσεων για την ενεργειακή μετάβαση, την αντιμετώπιση της κλιματικής αλλαγής και την οικοδόμηση ενός περισσότερο βιώσιμου μέλλοντος.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η συμμετοχή στο 3ο θερινό σχολείο Υπολογιστικής Χημείας ήταν δωρεάν για όλους τους συμμετέχοντες, με στόχο την παροχή ίσων ευκαιριών πρόσβασης σε εκπαίδευση υψηλού επιπέδου. Η υλοποίηση του θερινού σχολείου κατέστη δυνατή χάρη στην πολύτιμη υποστήριξη της **Περιφέρειας Κρήτης**, η οποία κάλυψε τα έξοδα διοργάνωσης, συμβάλλοντας ουσιαστικά στην ενίσχυση της

εκπαίδευσης, της καινοτομίας και της ανάπτυξης ανθρώπινου δυναμικού υψηλής
εξειδίκευσης στον τόπο μας.

Με εκτίμηση,

Γεώργιος Φρουδάκης
Καθηγητής, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης
Email: frudakis@uoc.gr
Tel: 2810-545055