



## ΙΔΡΥΜΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ  
Οδός Σταδίου, Ρίο, Τ.Θ. 1414, 265 04 Πάτρα  
Τηλ.: 2610 965 300 & 3, Fax: 2610 990 987  
[www.iceht.forth.gr](http://www.iceht.forth.gr)

### ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ

- ΟΜΙΛΗΤΗΣ:** Professor Per Olof Astarnd  
Department of Chemistry, Physical Chemistry  
Norwegian University of Science and Technology
- ΘΕΜΑ:** **ELECTROSTATIC INTERACTION MODEL FOR  
MOLECULAR (HYPER)POLARIZABILITIES**
- ΤΟΠΟΣ:** Αίθουσα Σεμιναρίων ΕΙΧΗΜΥΘ-ΙΤΕ
- ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ:** Δευτέρα, 12 Μαΐου 2003
- ΩΡΑ:** 12:00

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

We will discuss an interaction model based on classical electrostatics for calculating molecular electronic properties. In particular, results are presented for molecular polarizabilities of carbon and boron nitride nanotubes and C<sub>60</sub> fullerene clusters as well as molecular second hyperpolarizabilities of carbon nanotubes. Extensions of the model to other properties such as atomic charges and molecular dipole moments will be discussed briefly.