

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

ΑΓΓΕΛΟΣ ΑΒΡΑΜΟΠΟΥΛΟΣ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ	3
2. ΣΠΟΥΔΕΣ.....	3
3. ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ	3
4. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ	4
I. <i>ΕΙΔΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ.....</i>	<i>5</i>
II. <i>ΕΜΠΕΙΡΙΑ ΣΤΗ ΧΡΗΣΗ ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ.....</i>	<i>6</i>
5. ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ	6
6. ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ	8
I. <i>Οργάνωση Συνεδρίων.....</i>	<i>8</i>
II <i>Οργάνωση εκπαιδευτικής διημερίδας</i>	<i>9</i>
III. <i>Κριτής Επιστημονικών Εργασιών σε Περιοδικά</i>	<i>9</i>
IV. <i>Μέλος Επιτροπής Σύνταξης.....</i>	<i>10</i>
V. <i>Αξιολόγηση Ερευνητικών Προτάσεων</i>	<i>10</i>
7. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΚΕΨΕΙΣ.....	11
8. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ	12
9. ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑ	13
10. ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΠΡΟΫΠΗΡΕΣΙΑ.....	14
I. ΔΙΔΑΚΤΙΚΟ ΕΡΓΟ	14
II. ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ	18
11. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ.....	19
I. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ	20
II. ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ:	27
III. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΕΚΤΕΤΑΜΕΝΑ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ	28
IV. ΑΡΙΘΜΟΣ ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΩΝ ΚΑΙ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ ΤΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ	30
12. ΕΞΩΦΥΛΛΟ ΠΕΡΙΟΔΙΚΩΝ.....	31
13. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑΣ	34

1. Ηλεκτρονικές Συμβολές	36
2. Δονητικές Συμβολές	37
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΣΤΗ ΕΡΕΥΝΑ	42
Α. Μελετη μη Γραμμικης Οπτικης Αποκρισης	45
Β. Σχεδιασμος Μοριακων Δομων με Ενισχυμενη μη Γραμμικη Οπτικη Αποκριση	47
Γ. Εφαρμογη Υπολογιστικων Τεχνικων για τη Μελετη Βιολογικων Συστηματων	48
Μελλοντικές Ερευνητικές Κατευθύνσεις	48

1. ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Όνοματεπώνυμο: Αβραμόπουλος Άγγελος
Τόπος και ημερομηνία γεννήσεως : Αθήνα, 27 Φεβρουαρίου 1973
Οικογενειακή Κατάσταση : Έγγαμος με 2 παιδιά
E-mail: aavram@eie.gr; aavramopoulos@uth.gr

2. ΣΠΟΥΔΕΣ

- 1992-1997 Πτυχίο Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.
- 1998-2000 Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσεως (M.Sc) στη Φυσικοχημεία 6-11-200), Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας. επιβλέπων: Καθηγητής Αριστείδης Μαυρίδης, Τίτλος Διατριβής «Υπολογισμοί μοριακών πολωσιμότητων και υπερπολωσιμότητων» . Η διατριβή εκπονήθηκε στο εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας (διευθυντής εργαστηρίου, Ματθαίος Παπαδόπουλος, διευθυντής ερευνών), Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών,
- 2000-2004 Διδακτορικό στη Φυσικοχημεία (17-5-2004), Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας, επιβλέπων: Καθηγητής Αριστείδης Μαυρίδης. Τίτλος Διατριβής «Πολωσιμότητες και υπερπολωσιμότητες μοριακών συστημάτων» . Η διατριβή εκπονήθηκε στο εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας (διευθυντής εργαστηρίου, Ματθαίος Παπαδόπουλος, διευθυντής ερευνών), Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών,
- <http://phdtheses.ekt.gr/eadd/handle/10442/22358>
<http://thesis.ekt.gr/thesisBookReader/id/22358#page/1/mode/2up>

3. ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

- 2004-2009, Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο εργαστήριο υπολογιστικής χημείας, Ινστιτούτο Βιολογίας, Φαρμακευτικής Χημείας και Βιοτεχνολογίας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών. <http://www.eie.gr/nhrf/institutes/iopc/cvs/cv-avramopoulos-gr.html>
- 15/06/2007 -17/08/2007, 4/07/2011-4/08/2011, Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Institute de Quimica Computational i Catalisi, University of Girona, Spain.
- 3/07/2008-3/08/2008, 14/06/2009-14/07/2009, Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Department of Earth Sciences, Laboratory of First Principles Simulations in Earth Sciences, University of Cambridge,

- 2009- σήμερα Μεταδιδακτορικός ερευνητής-συνεργάτης στο εργαστήριο υπολογιστικής χημείας, Ινστιτούτο Βιολογίας, Φαρμακευτικής Χημείας και Βιοτεχνολογίας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών.
- 2004 –2007 Εργαστηριακός συνεργάτης στο τμήμα πληροφορικής και τεχνολογίας υπολογιστών του ΤΕΙ Λαμίας.
- 2007-2019 Επιστημονικός/Εργαστηριακός συνεργάτης στη βαθμίδα του Επίκουρου καθηγητή ή/και Καθηγητή εφαρμογών στο τμήμα μηχανικών πληροφορικής της σχολής τεχνολογικών εφαρμογών του ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος.
- 18/04/2019 Διορισμός σε θέση μέλους ΔΕΠ, βαθμίδας Επίκουρου Καθηγητή, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Γενικό Τμήμα Λαμίας, με γνωστικό αντικείμενο «Προηγμένες Υπολογιστικές Μέθοδοι για τη Σχεδίαση Υλικών με Σημαντική μη Γραμμική Οπτική Απόκριση» (ΦΕΚ, 537/10-04-2019, τ. Γ', σελ. 2755).
- 15/4/2020 Μετακίνηση στο τμήμα Φυσικής, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, στη βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή (Φ.Ε.Κ. 410/τ.Γ'/10-04-2020, σελ. 2720)

http://www.uth.gr/files/cvs/aavramopoulos_sCV_gr.pdf

4. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

Αντικείμενο:

- ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ, ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΑΝΟΡΓΑΝΩΝ ΚΑΙ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΕΝΩΣΕΩΝ.
- ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΕΝΩΣΕΩΝ/ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΔΟΜΩΝ ΜΕ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ,
- ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΝΑΝΟ-ΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΧΗΜΕΙΑ.
- Μελέτη της αλληλεπίδρασης φωτός και ύλης στο μικροσκοπικό επίπεδο.
- Μοριακή Μοντελοποίηση-μοριακή σχεδίαση για εφαρμογές.

Θεωρητική μελέτη της δομής και ηλεκτρονιακής απεικόνισης ατόμων, μορίων και συσσωματωμάτων. Μοριακή δομή και μοριακές ιδιότητες. Εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων της κβαντικής φυσικής και χημείας, ανάπτυξη και εφαρμογή τεχνικών της υπολογιστικής χημείας για το σχεδιασμό νέων ενώσεων, μοριακών δομών, νανοδομών με ενισχυμένη πολωσιμότητα και (υπερ)πολωσιμότητα, με εφαρμογή στην επιστήμη των υλικών και μοριακών ηλεκτρονικών, επιστημονικοί υπολογισμοί για τον προσδιορισμό και τη μελέτη των μικροσκοπικών και μακροσκοπικών μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων, πολωσιμότητας, πρώτης και δεύτερης υπερπολωσιμότητας

I. Επιστήμη των υλικών

1. Θεωρητική μελέτη μοριακών δομών με ειδικές μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες.

2. Ανάπτυξη μεθοδολογίας για τη διερεύνηση των μηχανισμών μεταξύ των οπτικών μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων και των δομικών/μορφολογικών, ηλεκτρονιακών χαρακτηριστικών των μοριακών υλικών.
 3. Μελέτη δομικών, οπτικών και ηλεκτρονιακών ιδιοτήτων.
 4. Μελέτη της επίδρασης της υποκαταστάσης στις ηλεκτρικές ιδιότητες.
 5. Σχεδιασμός μορίων με αξιόλογες-ενισχυμένες μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες με εφαρμογές στη μοριακή ηλεκτρονική.
 6. Γραμμικές και μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες συσσωματωμάτων και νανοσωματιδίων.
 7. Μοριακές δονήσεις και ηλεκτρικές ιδιότητες.
 8. Ανάπτυξη και χρήση προηγμένων τεχνικών της υπολογιστικής Χημείας στον ακριβή προσδιορισμό των μοριακών γραμμικών και μη γραμμικών ηλεκτρικών ιδιοτήτων, ηλεκτρονιακού φάσματος, μοριακής δομής, ηλεκτρονιακής απεικόνισης.
 9. Σχέση δομής – πόλωσης, ηλεκτρονιακής απεικόνισης και ηλεκτρικών ιδιοτήτων.
 10. Θεωρητικός προσδιορισμός γραμμικών και μη γραμμικών επιδεκτικότητας στερεών και υγρών.
 11. Προσμίξεις οργανικών/ανοργάνων ενώσεων και ηλεκτρικές ιδιότητες.
- II. Μελέτη των αλληλεπιδράσεων σε συστήματα βιολογικού ενδιαφέροντος.**
12. Φυσικοχημικές ιδιότητες, αλληλεπιδράσεις και φαρμακολογική δράση νανοσωματίων (παραγώγων του φουλερενίου, γραφενίου, συσσωματώματα οξειδίου των μετάλλων)
 13. Μελέτη της γενετοξικότητας νανοσωματίων μέσω της δομής (ηλεκτρονιακής, μοριακής).
 14. Υπολογισμός-μοντελοποίηση επιλεγμένων φυσικοχημικών ιδιοτήτων οι οποίες συνδέονται με τη βιολογική ενεργότητα επιλεγμένων μοριακών προτύπων και νανοσωματίων. (σχήμα, μέγεθος, φάσμα, δόνηση, πόλωση, αρωματικότητα, ενέργεια αλλ/σης).

I. ΕΙΔΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ

1. Άριστη γνώση των ακολούθων πακέτων/λογισμικών της Υπολογιστικής Χημείας για την εκτέλεση κβαντομηχανικών υπολογισμών για τον προσδιορισμό οπτικών ιδιοτήτων, φασμάτων, δονήσεων (Raman και IR), μη γραμμικών οπτικών ηλεκτρικών ιδιοτήτων, δομικών χαρακτηριστικών, φυσικοχημικών ιδιοτήτων για νανοσωμάτια (PM3, PM6, MP2, CC2, CC3, CCSD(T), ONIOM, TDDFT, DFT, CASSCF, CASPT2, MSCASSF, MSCASPT2, RASSCF, RASPT2,): *GAMESS, GAUSSIAN 98/03/09, MOPAC, MOLCAS, DALTON, CADPAC, NWCHEM, Atoms in Molecules (AIM)*,
2. Πολύ καλή χρήση των λειτουργικών συστημάτων: Windows 98/XP/7, Win NT 4.0, Unix, Linux.
3. Εμπειρία στην ανάπτυξη και διαχείριση συστοιχίας υπολογιστικών συστημάτων (cluster) για την αξιοποίηση τους στην εκτέλεση παράλληλων κβαντομηχανικών υπολογισμών.

4. Πολύ καλή γνώση της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN. Συγγραφή (C, Bourne, Korn, awk) scripts για υπολογιστικές εφαρμογές.
5. Μέτρια γνώση Matlab.
6. Μέτρια γνώση του λογισμικού **AMBER** για την εκτέλεση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής.
7. Άριστη γνώση του ακολουθών λογισμικών απεικόνισης (visualization) αποτελεσμάτων κβαντομηχανικών υπολογισμών (π.χ δομών, οπτικού φάσματος, φορτίου, μοριακών τροχιακών, δονήσεων) : **GAUSSVIEW, VMD, ChemBioOffice, Mercury** (για την απεικόνιση και τη δημιουργία κρυσταλλικών δομών), **MOLEKEL, ARGUSLAB**

II. ΕΜΠΕΙΡΙΑ ΣΤΗ ΧΡΗΣΗ ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ

Η ερευνητική μου προσπάθεια έχει ενισχυθεί από χορηγίες σε χρόνο υπερ-υπολογιστή (High Performance Computing Resources) που έχουν εγκριθεί από:

1. **MareNostrum** (Spain, 3 grants, 2008; Total time allocated: 400.000 hours)
2. **Teragrid** (USA, 2 grants, 2008, 2009). First grant: 200.000 hours; second grant: 390.000 hours.
3. **Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications (DEISA)**. Allocated time: 960.000 hours (2009). Period: 01/01/2010-30/09/2010.
4. **LINKSCEEM/CY-TERA** Production Access, Cyprus (1/11/13 – 31/10/14) Computation of the linear and nonlinear optical properties of graphenes and carbon nanotubes.
5. **ARIS, GRNET**, Production Access (15/9/2015 – 30/4/2016), Conformational Diversity and Binding Mechanism of Fullerene-Albumin complexes.
6. **ARIS, GRNET**, 6th Call for Production Projects Accessing ARIS, (29/11/2018 – 29/11/2019), PHOTMAT (επιστημονικός υπεύθυνος), 2600000 core hours

ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ

Αγγλικά (Lower). Γραφή (αρκετά καλά), Ομιλία (αρκετά καλά), Ανάγνωση (αρκετά καλά)

5. ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ

ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ

ΤΙΤΛΟΣ ΕΡΓΟΥ << Ερευνητική δραστηριότητα >>

1. 1/6/2004 -28/2/2005 **02 ΠΡΑΞΕ44**, « συμμετοχή στη συγγραφή των υπομνημάτων και της

- πilotικής μορφής λογισμικού », **Μεταδιδακτορικός ερευνητής**
2. 1/3/2005- 31/5/2006 **HPMD-CT-2001-00091**, Computation of non-linear optical properties of condensed phases « υπολογισμός μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων », **Μεταδιδακτορικός ερευνητής**
 3. 1/6/2006-31/10/2006 **MEST-CT-2005-020575** « ενίσχυση των εκπαιδευτικών και ερευνητικών δραστηριοτήτων του προγράμματος *EURODESYS*» **Μεταδιδακτορικός ερευνητής**
 4. 1/11/2006 -31/7/2007 Σχεδιασμός και Σύνθεση Βιοδραστικών και Λειτουργικών Μορίων, Αριστεία σε ερευνητικά ινστιτούτα ΓΓΕΤ (2^{ος} κύκλος) , **Μεταδιδακτορικός ερευνητής**
 5. 1/8/2007- 30/9/2008 **MTKD-CT-2006-042488**, Fullerene Derivatives for Photonic Applications, Design, Synthesis and Measurements, Marie-Curie Actions, « υπολογισμός των μη γραμμικών ιδιοτήτων μορίων », **Συνεργάτης ερευνητής**
 6. 1/10/2008 -31/12/2008 **MEST-CT-2005-020575, EURODESYS**, «ανάπτυξη μεθόδων για τη
1/12/2009 -31/1/2010 **σχεδίαση φαρμάκων**», **Συνεργάτης ερευνητής**
 7. 1/1/2009 -30/11/2009 **MTKD-CT-2006-042488**, Fullerene Derivatives for Photonic
1/2/2010 -30/9/2010 Applications, Design, Synthesis and Measurements, Marie-Curie Actions, (FDPA), « υπολογισμός των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων φωτονικών υλικών », **Συνεργάτης ερευνητής**
 8. 1/10/2010-31/12/2010 **FP7 CAPACITIES, GA 261499**,“High performance computing
1/1/2011 -31/12/2011 infrastructure for South East Europe’s Communitie” « υπολογισμός
1/1/2012 -31/8/2012 των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων φωτονικών υλικών », **Συνεργάτης ερευνητής**
 9. 1/10/2012-31/1/2013 **FP7-PEOPLE-2011-IRSES, No PIR SES-GA-2011-295128**,
“Builiding bridges between specialists on computational and empirical risk assessment of engineered nanomaterials – **Nano BRIDGES**, << υπολογισμός των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων των νανοσωματιδίων >>, **Συνεργάτης ερευνητής**
 10. 1/2/2013-30/6/2015 **NM-P4-SL-2012-309837, Nanopuzzles**, “Modelling properties, interactions, toxicity and environmental behaviour of engineered nanoparticles, << Ανάπτυξη μεθόδων για την πρόβλεψη και εξήγηση των αλληλεπιδράσεων νανοσωματιδίων, που θα σχεδιασθούν με

βιολογικά συστήματα και μικρά μόρια >> Συνεργάτης ερευνητής,
μέλος ερευνητικής ομάδας

http://cordis.europa.eu/result/rcn/184823_en.html

<http://www.nanopuzzles.eu/consortium>

11. 1/9/2015-30/10/2015 **ΣΘΕΝΟΣ, ΚΡΗΠΙΣ**, research grant « *In silico* μελέτες με ιδιαίτερη έμφαση στην εκτέλεση κβαντομηχανικών υπολογισμών », Συνεργάτης ερευνητής
12. 1/11/2015-29/2/2016 **ARCADE**, *Advancement of Research Capability for the Development of New Functional Materials, FP7-REGPOT-2009-1* “ υπολογισμός των μη γραμμικών ιδιοτήτων επιλεγμένων μορίων ” Συνεργάτης ερευνητής
13. 1/3/2016-30/4/2016 **Υπολογιστική Χημεία**, « υπολογισμός μη γραμμικών ιδιοτήτων », Συνεργάτης ερευνητής
14. 1/10/2016-28/2/2017 **Υπολογιστική Χημεία**, « υπολογισμός μη γραμμικών ιδιοτήτων παραγώγων για φωτονικές εφαρμογές », Συνεργάτης ερευνητής
15. 1/4/2018-31/5/2018 **Υπολογιστική Χημεία**, « υπολογισμός των μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων βιομορίων », Συνεργάτης ερευνητής,

*Συμμετοχή στα ερευνητικά προγράμματα μέσω συμβάσεων έργου με αμοιβή.

Υποβολή Ερευνητικής Πρότασης ως Επιστημονικός Υπεύθυνος

1. ΕΛΙΔΕΚ, 31/3/2017, τίτλος πρότασης (αριθμός 24): *Design of Novel Derivatives for Photonic Applications: A Proof-of-concept study*, βαθμολογία, **82.5/100**.

<http://www.elidek.gr/2018/03/22/egkrisi-oristikon-pinakon-katataxis-kai-katalogoy-ton-pros-chrimatodotisi-protaseon-sto-plaisio-tis-lis-prokiryxis-ereynitikon-ergon-elidek-gia-tin-enischysi-metadidaktorou-ereynitontrion/>

6. ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ

I. Οργάνωση Συνεδρίων

Κατά τα έτη 2006, 2008, 2009,2010, συμμετείχα στη διοργάνωση των ακολούθων συμποσίων στο διεθνές συνέδριο «International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering »

1. **2006**, *International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering*, Chania, Greece, co-organization of the symposia: *Computation of the linear and non-linear optical properties of molecules: recent developments. A Theoretical Chemistry Symposium dedicated to Professor A. D. Buckingham*

(<http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2006/docs/Preliminary%20Program%20of%20ICCMSE%202006.pdf>)

2. **2008**, *International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering*, Hersonissos, Crete, Greece, co-organization of the symposia: *Recent developments of the calculation nonlinear optical (NLO) properties: the NLO properties of fullerene derivatives and new approaches to the calculation of vibrational contributions*

http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2008/docs/Preliminary_Program_ICCMSE_2008.pdf

3. **2009**, *International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering*, Hersonissos, Rhodes, Greece, co-organization of the following symposia: *i) Theory and applications of organometallic compounds, ii) Properties of Metal 1,2-dithiolene and related compounds*

http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2009/Sessions_Minisymposia.htm

4. **2010** *International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering*, Kos, Greece, co-organizations of the following symposia: *Non-Linear Optical Properties of Matter: From Molecules to Condensed Phases*,

http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2010/docs/Program_ICCMSE_2010_Draft.pdf

(σελ.21)

5. **2020**, *Guest Editor*, κατόπιν πρόσκλησης, στο περιοδικό: *International Journal of Molecular Sciences (I.F: 4.183)*, για την επιμέλεια ειδικής έκδοσης (Special Issue) με θέμα: *"Computational Design of Materials for Applications (Drugs, Photonics)"* (https://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/Drugs_Photonics)

II Οργάνωση εκπαιδευτικής διημερίδας

6,7/6/2016, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, σε μεταπτυχιακούς φοιτητές με αντικείμενο: *Εισαγωγή στη σχεδίαση φωτονικών και βιοφωτονικών υλικών με τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων*. Στα πλαίσια του συγκεκριμένου σεμιναρίου έδωσα τις ακόλουθες παρουσιάσεις –ομιλίες:

α) Έννοιες της Κβαντικής Μηχανικής για τον Υπολογισμό Μικροσκοπικών /Μακροσκοπικών Γραμμικών και μη Γραμμικών ιδιοτήτων.

β) Σχεδίαση Μοριακών Υλικών Μέσω Υπολογισμών Μοριακών (Υπερ) πολωσιμότητων.

γ) Θεωρητικοί Υπολογισμοί Μη Γραμμικών Οπτικών Ιδιοτήτων.

III. Κριτής Επιστημονικών Εργασιών σε Περιοδικά

Από το 2011 συμμετέχω ως κριτής στα περιοδικά

1. Journal of Computational Chemistry, Wiley (Impact Factor 3.601)
2. Journal of Physical Chemistry,ACS (Impact Factor 2.775)
3. Physical Chemistry Chemical Physics, RSC (Impact Factor 4.493)

4. Journal of Chemical Information and Modeling , ACS, (Impact Factor 3.738)
5. International Journal of Quantum Chemistry, Wiley (Impact Factor: 2.92)
6. Public Science Framework Journal (Chemistry, Physics, Biochemistry)
7. Materials Chemistry and Physics ,Elsevier (Impact Factor: 2.084)
8. Journal of Physical Chemistry Letters ,ACS (Impact Factor:9.353)
9. Current Applied Physics,Elsevier (Impact Factor: 1.971)
10. Journal of Computational Science, Elsevier (Impact Factor: 1.748)
11. Royal Society Open Science, Elsevier (Impact Factor: 2.243)
12. Spectrochimica Acta, Part A, Elsevier (Impact Factor: 2.536)
13. Journal of Materials Chemistry C, Royal Society of Chemistry (Impact Factor: 5.252)
14. New Journal of Chemistry Royal Society of Chemistry (Impact Factor: 3.269)
15. Chemical Physics Letters(Impact Factor: 1.835)
16. Journal of Computational Methods in Science and Engineering (JCMSE)
17. Computational Biology and Chemistry (Impact Factor: 1.412)
18. Computational and Structural Biology and Chemistry (Impact Factor: 3.94)

IV. Μέλος Επιτροπής Σύνταξης

Από το 2012 είμαι μέλος επιτροπής σύνταξης (**Editorial Board**) του περιοδικού The scientific World journal (<http://www.tswj.com/> Impact Factor 1.524)
<http://www.tswj.com/editors/physical.chemistry/> <http://www.tswj.com/15084283/>

2018, μέλος της συντακτικής επιτροπής (**Editorial Board**) του περιοδικού, *Modern Materials Science and Technology*, <http://ojs.whioce.com/index.php/mmst/about/editorialTeam>

V. Αξιολόγηση Ερευνητικών Προτάσεων

1. **Απρίλιος 2016**, Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας. Κρίση επιστημονικών τριών (3) προτάσεων έργων παραγωγής, για τη χορήγηση υπολογιστικού χρόνου και πόρων στο υπερ-υπολογιστικό σύστημα ARIS (<https://hpc.grnet.gr/>).
2. **Σεπτέμβριος 2016**. Κρίση επιστημονικών (3) προτάσεων για χρηματοδότηση από το Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία
3. **Ιούνιος 2017**, Εθνικό Δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας. Κρίση επιστημονικών τριών προτάσεων έργων παραγωγής, για τη χορήγηση

υπολογιστικού χρόνου και πόρων στο υπερ-υπολογιστικό σύστημα ARIS (<https://hpc.grnet.gr/>).

4. Αξιολογητής στη γενική γραμματεία έρευνας και τεχνολογίας (αριθμ. απόφασης: 211946/12/12/2016, Registration ID:14599
5. **Απρίλιος 2019 (29/03/2019-25/04/2019)**. Αξιολογητής τριών (3) ερευνητικών προτάσεων προς χρηματοδότηση από το **ΙΔΡΥΜΑ ΠΡΟΩΘΗΣΗΣ ΕΡΕΥΝΑΣ IRIS**, έργα Προγραμμάτων Έρευνας, Τεχνολογικής Ανάπτυξης και Καινοτομίας RESTART 2016-2020, Research Promotion Foudation, *THE RESEARCH PROMOTION FOUNDATION PROGRAMMES FOR RESEARCH, TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT AND INNOVATION*, “RESTART 2016 – 2020”, Κύπρος.
6. **Σεπτέμβριος 2019**, Μέλος της επιτροπής αξιολόγησης ακαδημαϊκών υποτρόφων, πρόγραμμα σπουδών Μηχανικών Πληροφορικής Τ.Ε, γενικό τμήμα Λαμίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
7. **Ιανουάριος, Φεβρουάριος 2020** . Κρίση επιστημονικών έντεκα (11) προτάσεων για χρηματοδότηση από το Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

7. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΚΕΨΕΙΣ

- i) Από 1/07/1999-31/07/1999, 1/06/2001-31/07/2001, 2/02/2002-30/02/2002, πανεπιστήμιο N. Copernicus University Torun, Poland, καθηγητής Andrej J. Sadlej.
- ii) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα:“ *FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” επισκέφτηκα το ινστιτούτο υπολογιστικής χημείας του πανεπιστημίου της Girona, Spain από 15/06/2007-17/08/2007 <http://stark.udg.edu/web/index.html>
- iii) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα:“ *FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” επισκέφτηκα το πανεπιστήμιο του Cambridge, Department of Earth Sciences, Laboratory of First Principles Simulations in Earth Sciences,Καθηγητής E. Artacho, από 3/07/2008-3/08/2008 (http://rock.esc.cam.ac.uk/~emilio/fpesc_group.html) .

- iv) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” επισκέφτηκα το πανεπιστήμιο του Cambridge, Department of Earth Sciences, Laboratory of First Principles Simulations in Earth Sciences, Καθηγητής E. Artacho, από 14/06/2009-14/07/2009 (http://rock.esc.cam.ac.uk/~emilio/fpesc_group.html).
- v) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*ARCADE, Advancement of Research Capability for the Development of New Functional Materials, FP7-REGPOT-2009-1 Support action (Grant Agreement Number 245866)*”, επισκέφτηκα το ινστιτούτο υπολογιστικής χημείας του πανεπιστημίου της Girona, Spain από 4/07/2011-4/08/2011 (<http://iqc.udg.edu/web/index.html>)
- vi) 25/7/2013 – 1/8/2013, University of Pau, France
- vii) February 15th - February 21st, 2015, στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα *NanoPuzzles* (FP7-NMP-2012-SMALL-6-309837), επισκέφτηκα το εργαστήριο του Prof. Tomasz Puzyn, Laboratory of Environmental Chemometrics, Faculty of Chemistry, **University of Gdansk**. Αντικείμενο της επίσκεψης ήταν η εκπαίδευση στην τεχνική QSAR (short course in analysis of large datasets of behavior of nanoparticles in biological systems.)

8. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ

1999 – 2003, Καθ.. Andrej J. Sadlej, Department of Quantum Chemistry, N. Copernicus University Torus, *for the study of the relativistic corrections and the vibrational contributions to the NLO properties.*

2004 – σήμερα, Καθ. Ματθαίος Παπαδόπουλος, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, *for the theoretical computation of the NLO properties of molecules and molecular materials.*

2007 – σήμερα, Αναπ. Καθ. Josep Maria Luis, Institute de Quimica Computational i Catalisi, University of Girona, Spain, *for the theoretical computation(application/development of methods and techniques) of the vibrational contributions to the NLO properties of molecules.*

2009-2013 Καθ. Bernard Kirtman, University of California, Santa Barbara, USA, *for the computation of the vibrational contributions (methods and techniques) to the NLO properties of molecules.*

2017- σήμερα, Καθ. Στέλιος Κουρής, Πανεπιστήμιο Πατρών, τμήμα Φυσικής,

2012 – σήμερα, Επικ. Καθ. Παναγιώτης Καραμάνης, University of Pau, France (νυν Επίκουρος Καθηγητής τμήματος Χημείας, ΑΠΘ), *for the design of novel molecular materials (graphene and related derivatives) with enhanced NLO properties.*

2013-2015, Καθ. Tomasz Puzyn, University of Gdansk, *for the effect of physicochemical properties on the behavior of nanoparticles in biological systems.*

9. ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑ

- i) *A study of the environmental effects on the microscopic and macroscopic non-linear optical properties of liquids, based on a multipolar approximation: Liquid acetonitrile., 30/10/2006, ICCMSE 2006, Χανιά, Κρήτη, <http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2006/docs/Preliminary%20Program%20of%20ICCMSE%202006.pdf> (page 44)*
- ii) *The influence of rare gas insertion on the (hyper)polarizabilities: Case studies of HArF, HXeC₂H, HOXeH, HSXeH, 19/07/2007, Institut de Quimica Computational, University of Girona, Spain (<http://iqc.udg.es/seminaris/abstracts/20070719.pdf>)*
- iii) *On the vibrational contributions to the Non-Linear optical properties of small and medium size molecules, 28/09/2008, ICCMSE 2008, Χερσόνησος, Κρήτη, http://www.iccmse.org/archives/ICCMSE2008/docs/Preliminary_Program_ICCMSE_2008.pdf (σελ. 36)*
- iv) *The effect of the vibrations to the non-linear optical properties. Cases of small and medium size molecules, 29/09/2009, ICCMSE, 2009, Ρόδος*
- v) *Designing molecules for NLO applications, 4/09/2010, ICCMSE, 2010.*
- vi) *Σχεδιασμός Φωτονικών υλικών με υπολογιστικές μεθόδους, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, 12/12/2011, <http://www.eie.gr/epistimiskoinonia/2011-2012/%CE%A0%CF%81%CF%8C%CE%B3%CF%81%CE%B1%CE%BC%CE%BC%CE%B1%CE%A3%CE%B5%CE%BC%CE%B9%CE%BD%CE%B1%CF%81%CE%AF%CF%89%CE%BD> 2011.pdf*
- vii) *Design of Novel Nano-Photonic Compounds, HPSEE User Forum, 17-19 October, 2012, Belgrade, Serbia, <http://slideplayer.com/slide/10592999/>*
- viii) *“Analyzing interactions between nanoparticles” 7th International Nanotoxicology Congress (NanoTox 2014), NanoPUZZLES Project Meeting, 23/10/2014, Antalya, Turkey,*

- viii) *Bridging the gap between Chemistry and Biology: Insights from Computational Chemistry*, Institute of Biology, Medicinal Chemistry & Biotechnology National Hellenic Research Foundation, 20/5/2015
- ix) *Simulating interactions between nanoparticles and biological systems with the aid of quantum chemistry*, 8th Swedish-Hellenic Life Science Research Conference, 12-13/09/2015, NHRF, Athens.
http://www.eie.gr/nhrf/news/2015/12-13_10_2015_8thSwedishHellenicConference.pdf (page 5)
- x) *Quantum mechanical simulations for the study of the interactions between Nanoparticles and Biological Systems*, European Conference, CompNanotox, 5/11/2015, Benahavis, Malaga, Spain.
- xi) *Design of Novel Third-Order Non-Linear Optical Materials: Hybrid Oligomers Based on Radiaannulenes, Tetrathia-Fulvalene, Nickel Dithiolene and their Lithiated Analogues*, Poster Presentation, 8th Mediterranean Conference on Nano-Photonics, 29-30 June 2016, Athens, Greece.
- xii) *Computational Science as a Diagnostic Tool for Medicine*, 3rd ENMF, 25/1/2018, Thessaloniki

10. ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΠΡΟΫΠΗΡΕΣΙΑ

I. ΔΙΔΑΚΤΙΚΟ ΕΡΓΟ

ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΟ ΕΤΟΣ

2004-2005

Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Εργαστηριακός Συνεργάτης με μεταπτυχιακό δίπλωμα

Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο

1. Ηλεκτρονική Φυσική (*Εργαστήριο*)
2. Μικροεπεξεργαστές-Μικροελεγκτές (*Εργαστήριο.*)
3. Εισαγωγή στα Ηλεκτρικά Κυκλώματα (*Εργαστήριο*)

2005-2006

Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Εργαστηριακός Συνεργάτης με μεταπτυχιακό δίπλωμα

Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο

1. Συνδυαστικά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (*Εργαστήριο*)
2. Εισαγωγή στα Ηλεκτρικά Κυκλώματα (*Εργαστήριο*)

2006-2007	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Εργαστηριακός Συνεργάτης με μεταπτυχιακό δίπλωμα</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (<i>Εργαστήριο</i>) 2. Εισαγωγή στα Ηλεκτρικά Κυκλώματα (<i>Εργαστήριο</i>)
2007-2008	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών.</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (Θεωρία και Εργαστήριο).
2008-2009	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών.</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (Θεωρία και Εργαστήριο).
2009-2010	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ψηφιακά Συστήματα II (Θεωρία και Εργαστήριο) <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ψηφιακά Συστήματα II (Θεωρία και Εργαστήριο) 2. Μικροεπεξεργαστές-Μικροελεγκτές (Θεωρία).
2010-2011	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ψηφιακά Συστήματα II (Θεωρία και Εργαστήριο)
2011-2012	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με διδακτορικό/μετα πτυχιακό δίπλωμα</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ψηφιακά Συστήματα II (<i>Εργαστήριο</i>) <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ψηφιακά Συστήματα I (Θεωρία και Εργαστήριο)

2012-2013	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με διδακτορικό/μεταπτυχιακό δίπλωμα</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p>
2013-2014	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία</i>)</p> <p>2. Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (<i>Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ολοκληρωμένα Κυκλώματα Μεγάλης Κλίμακας (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Ψηφιακά Συστήματα Ι (<i>Εργαστήριο</i>)</p>
2014-2015	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Φυσική (<i>Θεωρία</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ολοκληρωμένα Κυκλώματα Μεγάλης Κλίμακας (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Ψηφιακά Συστήματα Ι (<i>Εργαστήριο</i>)</p>
2015-2016	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p>

2016-2017	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα I (<i>Θεωρία</i>)</p> <p>2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (<i>Θεωρία και εργαστήριο</i>)</p>
2017-2018	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Ψηφιακά Συστήματα II (<i>Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα I (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (<i>Θεωρία</i>)</p>
2018-2019	<p>Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Εισαγωγή στα Συστήματα Η/Υ (<i>Θεωρία</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα I (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (<i>Θεωρία</i>)</p>
2019-2020	<p>Πρόγραμμα Σπουδών Μηχανικών Πληροφορικής, Γενικό Τμήμα, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας Επίκουρος Καθηγητής (Μέλος ΔΕΠ)</p> <p>Χειμερινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ηλεκτρονική Φυσική (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Εισαγωγή στα Συστήματα Η/Υ (<i>Θεωρία</i>)</p> <p>3. Ψηφιακά Συστήματα II (<i>Εργαστήριο</i>)</p> <p>Εαρινό Εξάμηνο</p> <p>1. Ψηφιακά Συστήματα I (<i>Θεωρία και Εργαστήριο</i>)</p> <p>2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (<i>Θεωρία</i>)</p>

➤ Στα πλαίσια της διδασκαλίας των ανωτέρω μαθημάτων ανέπτυξα εκπαιδευτικό υλικό (διαφάνειες παρουσιάσεων, βιβλιογραφία, ασκήσεις) για χρήση μέσω της πλατφόρμας e-class του ΤΕΙ ΛΑΜΙΑΣ/ΣΤΕΡΕΑΣ.

(<http://eclass2.teilam.gr/modules/auth/opencourses.php?fc=6>)

Π. ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ

Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος

(<https://ptyxiakes.pente.gr/>)

α/α	ΦΟΙΤΗΤΗΣ/ΤΙΤΛΟΣ	ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ/ΕΤΟΣ	
		ΑΝΑΘΕΣΗΣ	ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ
1.	ΦΡΑΓΚΟΥΛΗ ΓΕΩΡΓΙΑ (ΑΜ:437), ΖΑΡΚΑΛΗ ΙΩΑΝΝΑ (ΑΜ:443) Ιστορική αναδρομή στην τεχνολογία των οπτικών μέσων αποθήκευσης	07/05/2007	22/10/2009
2.	ΠΑΠΑΜΙΧΑΗΛ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΙΑ (ΑΜ:754) Εφαρμογές της ολογραφίας στην επιστήμη της Πληροφορικής	12/11/2007	20/06/2008
3.	ΣΤΑΡΦΑΣ ΑΝΔΡΕΑΣ (ΑΜ:174) Ανάπτυξη κώδικα με εφαρμογές στη Φυσική	03/06/2009	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2011
4.	ΚΑΣΤΡΙΩΤΗΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΣ (ΑΜ:1116) Υπολογιστικές Μέθοδοι και Εφαρμογές Αυτών στην Επίλυση Ολοκληρωμάτων	24/03/2010	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2011
5.	ΛΕΜΠΙΔΑΚΗ ΔΕΣΠΟΙΝΑ (ΑΜ:1497) Υπολογιστικές Μέθοδοι και Εφαρμογές της Υπολογιστικής Φυσικής	26/11/2010	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2012
6.	ΛΟΥΚΙΔΗΣ ΑΛΕΞΑΝΔΡΟΣ (ΑΜ:1671) Τεχνικές της Γλώσσας Προγραμματισμού Fortran για Εφαρμογές στις Θετικές Επιστήμες	26/11/2010	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2012
7.	ΦΙΛΙΟΣ ΑΠΟΣΤΟΛΟΣ (ΑΜ:1388) Μελέτη και Αναπτ**υξη Ψηφιακού Βιβλίου	29/10/2014	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2016
8.	ΤΖΙΟΒΑΡΑΣ ΜΑΡΙΟΣ (ΑΜ:2458) Νανοτεχνολογία Με Εφαρμογές Στην Τεχνολογία Υπολογιστικών Συστηματων	23/11/2016	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2018
9.	ΜΠΑΣΗΣ ΜΙΧΑΗΛ (ΑΜ:2998) Οπτικοί Υπολογιστες	23/11/2016	ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΗ 2018
Στη Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή (Γενικό Τμήμα Λαμίας, Πρόγραμμα Σπουδών Μηχανικών Πληροφορικής)			
10.	ΜΠΑΚΑΛΩΝΗ ΕΛΠΙΔΑ (ΑΜ:3046)	5/12/2018	ΣΕ ΕΞΕΛΙΞΗ

	Συστήματα Υπολογιστών Υψηλών Αποδόσεων		
11.	ΣΤΑΜΑΤΕΛΟΣ ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ (AM: 28 43) Σχεδίαση και Ανάπτυξη Πλατφόρμας με Εφαρμογές στη Νανοτεχνολογία	5/12/2018	ΣΕ ΕΞΕΛΙΞΗ
12.	ΜΑΤΡΑΚΑΣ ΑΝΔΡΕΑΣ (AM:2864) Σχεδίαση Εκπαιδευτικού Λογισμικού	17/10/2019	ΣΕ ΕΞΕΛΙΞΗ

11. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ: 47 δημοσιευμένες εργασίες σε περιοδικά με το σύστημα των κριτών (peer review), 2 δημοσιευμένες εργασίες σε περιοδικά με το σύστημα των κριτών χωρίς συντελεστή απήχησης (impact factor), 11 δημοσιευμένες εργασίες σε πρακτικά συνεδριών κατόπιν κρίσης, 5 εργασίες δημοσιευμένες σε κεφάλαια βιβλίων.

Περιοχή-γνωστικό αντικείμενο επιστημονικών εργασιών: 1) Υπολογιστική Φυσικοχημεία (θεωρητική και εφαρμοσμένη), εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων της κβαντικής μηχανικής (*ab-initio*), υπολογιστική χημεία, εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων για τον υπολογισμό μικροσκοπικών και μακροσκοπικών μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων μορίων και μοριακών υλικών, σχεδιασμός φωτονικών μοριακών υλικών με ενισχυμένη μη γραμμική οπτική απόκριση: 41 εργασίες [1-4,7,9,10,9,18-49]* ,3 εργασίες [1,2,4]* σε κεφάλαια βιβλίων, 2) Εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων για τη σχεδίαση φαρμάκων και τη μελέτη φυσικοχημικών ιδιοτήτων οι οποίες συνδέονται με τη βιολογική ενεργότητα επιλεγμένων μοριακών προτύπων και νανοσωματιδίων: 8 εργασίες [5,6,8,11-15]*, 2 κεφάλαια σε βιβλία [3,5]*. **Αριθμός ετεροαναφορών (non-self citations):** 851 (Scopus, 22/5/2020), h-index:18. **Μέση τιμή συντελεστή απήχησης:** 3.268. Πρώτος συγγραφέας σε **17** δημοσιευμένες εργασίες [1,3,9,10,18,20,24,27,36,37,38,39,42,45,47,48,49], σε **2** κεφάλαια βιβλίων, [2,4], συγγραφέας για αλληλογραφία (corresponding author) σε **13** εργασίες,[1,3,9,10,18,20,22,23,24,27,29,31,41] και **3** κεφάλαια βιβλίων [2,3,4] ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0916-8235>, Scopus ID:

<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56030091400>

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑ 2015-2020

Δημοσιεύσεις:14 (I1-I13,I5), **Αριθμός Ετεροαναφορών:** 115, **h-index:**6 μέσος **IF:** 2.664

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΜΕΤΑ ΤΟ ΔΙΟΡΙΣΜΟ: [I1,I2] (IF: I1(4.484), I2(1.901))

* Ο αριθμός αντιστοιχεί στην εργασία όπως παρατίθεται στον κατάλογο των δημοσιεύσεων σε περιοδικά (I) και στον αντίστοιχο των δημοσιεύσεων σε κεφάλαια βιβλίων (II)

I: ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΤΩΝ ΚΡΙΤΩΝ: 49

II: ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ: 5

III. ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ: 11

IV. ΑΡΙΘΜΟΣ ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΩΝ ΚΑΙ ΜΕΣΟΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ: 851/3.268

I. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

2020

1. **Avramopoulos A**, Zalesny R., Reis H., Papadopoulos M.G. --A computational strategy for the design of photochromic derivatives based on diarylethene and nickel dithiolene with large contrast in non-linear optical properties, , *J. Phys. Chem C*, 2020, 124,4221-4241 <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jpcc.9b10563>

2019

2. Banerjee P., Avramopoulos A., Nandi P.K., Static Second Hyperpolarizability of Diffuse Electron Cyclic Compounds M_2A_2 (M= Be, Mg, Ca; A=Li, Na, K): Effect of Basis Set and Electron Correlation., *Chem. Phys. Lett.*, 2019,16,92-98 <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.05.031>

2018

3. **Avramopoulos A**, Otero N, Reis H., Karamanis P, Papadopoulos MG. A computational study of photonic materials based on Ni bis(dithiolene) fused with benzene, with gigantic second hyperpolarizabilities. *J Mat. Chem C*. 2018,6,91-110; <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/tc/c7tc05047j#!divAbstract>.

2017

4. Miletić, T., Fermi A., Papadakis, I., Orfanos I., Karampitsos N., Avramopoulos, A., Demitri N., De Leo F., Pope, Simon J. A. Papadopoulos, M. G. Couris, S. Bonifazi, D. A Twisted Bay-Substituted Quaterylene Phosphorescing in the NIR Spectral Region, *Helvetica Chimica Acta*, 2017, 100 (11), <http://dx.doi.org/10.1002/hlca.201700192>

5. Papavasileiou KD, Avramopoulos A, Leonis G, Papadopoulos MG. Computational investigation of fullerene-DNA interactions: Implications of fullerene's size and functionalization on DNA structure and binding energetics. *J Mol Graph Model* 2017;74:177-92.
6. Jagiello K, Chomicz B, Avramopoulos A, Gajewicz A, Mikolajczyk A, Bonifassi P, Papadopoulos MG, Leszczynski J, Puzyn T. Size-dependent electronic properties of nanomaterials: How this novel class of nanodescriptors supposed to be calculated? *Struct Chem* 2017;28(3):635-43.
7. Miletić T, Fermi A, Orfanos I, Avramopoulos A, De Leo F, Demitri N, Bergamini G, Ceroni P, Papadopoulos MG, Couris S, Bonifazi D. Tailoring colors by O annulation of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Chem Eur J* 2017;23(10):2363-78. [3]

2016

8. Jagiello K, Grzonkowska M, Swirog M, Ahmed L, Rasulev B, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Leszczynski J, Puzyn T. Advantages and limitations of classic and 3D QSAR approaches in nano-QSAR studies based on biological activity of fullerene derivatives. *J Nanopart Res* 2016;18(9).
9. **Avramopoulos A**, Reis H, Otero N, Karamanis P, Pouchan C, Papadopoulos MG. A series of novel derivatives with giant second hyperpolarizabilities, based on radiannulenes, tetrathiafulvalene, nickel dithiolene, and their lithiated analogues. *J Phys Chem C* 2016;120(17):9419-35.
10. **Avramopoulos A**, Otero N, Karamanis P, Pouchan C, Papadopoulos MG. A computational study of the interaction and polarization effects of complexes involving molecular graphene and C₆₀ or a nucleobases. *J Phys Chem A* 2016;120(2):284-98.

2015

11. Leonis G, Avramopoulos A, Papavasileiou KD, Reis H, Steinbrecher T, Papadopoulos MG. A comprehensive computational study of the interaction between human serum albumin and fullerenes. *J Phys Chem B* 2015;119(48):14971-85.

12. Tzoupis H, Leonis G, Avramopoulos A, Reis H, Czyznikowska Z, Zerva S, Vergadou N, Peristeras LD, Papavasileiou KD, Alexis MN, Mavromoustakos T, Papadopoulos MG. Elucidation of the binding mechanism of renin using a wide array of computational techniques and biological assays. *J Mol Graph Model* 2015;62:138-49.
13. Vrontaki E, Leonis G, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Simčič M, Grdadolnik SG, Afantitis A, Melagraki G, Hadjikakou SK, Mavromoustakos T. Stability and binding effects of silver(I) complexes at lipoxygenase-1. *J Enzyme Inhib Med Chem* 2015;30(4):539-49.

2014

14. Leonis G, Avramopoulos A, Salmas RE, Durdagi S, Yurtsever M, Papadopoulos MG. Elucidation of conformational states, dynamics, and mechanism of binding in human κ -opioid receptor complexes. *J Chem Inf Model* 2014;54(8):2294-308.
15. Tzoupis H, Leonis G, Avramopoulos A, Mavromoustakos T, Papadopoulos MG. Systematic molecular dynamics, MM-PBSA, and ab initio approaches to the saquinavir resistance mechanism in HIV-1 PR due to 11 double and multiple mutations. *J Phys Chem B* 2014;118(32):9538-52.
16. Karamanis P, Otero N, Pouchan C, Torres JJ, Tiznado W, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Significant nonlinear-optical switching capacity in atomic clusters built from silicon and lithium: A combined ab initio and density functional study. *J Comput Chem* 2014;35(11):829-38.

2013

17. Coe BJ, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Pierloot K, Vancoillie S, Reis H. Theoretical modelling of photoswitching of hyperpolarisabilities in ruthenium complexes. *Chem Eur J* 2013;19(47):15955-63.
18. **Avramopoulos A**, Reis H, Mousdis GA, Papadopoulos MG. Ni dithiolenes - A theoretical study on structure-property relationships. *Eur J Inorg Chem* 2013(27):4839-50.
19. Bulik IW, Zaleśny R, Bartkowiak W, Luis JM, Kirtman B, Scuseria GE, Avramopoulos A, Reis H, Papadopoulos MG. Performance of density functional

theory in computing nonresonant vibrational (hyper)polarizabilities. *J Comput Chem* 2013;34(20):1775-84.

20. **Avramopoulos A**, Reis H, Luis JM, Papadopoulos MG. On the vibrational linear and nonlinear optical properties of compounds involving noble gas atoms: HXeOXeH, HXeOXeF, and FXeOXeF. *J Comput Chem* 2013;34(17):1446-55.

2012

21. Megariotis G, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Reis H. Computer simulation of the nonlinear optical properties of langmuir-blodgett films of a squaraine derivative. *J Phys Chem C* 2012;116(29):15449-57.
22. Koukaras EN, Zdetsis AD, Karamanis P, Pouchan C, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Structural and static electric response properties of highly symmetric lithiated silicon cages: Theoretical predictions. *J Comput Chem* 2012;33(10):1068-79.
23. Reis H, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. On the linear and nonlinear optical properties of molecules and molecular materials. *Nonlinear Opt Quantum Opt* 2012;43(1-4):167-85.

2011

24. **Avramopoulos A**, Li J, Holzmann N, Frenking G, Papadopoulos MG. On the stability, electronic structure, and nonlinear optical properties of HXeOXeF and FXeOXeF. *J Phys Chem A* 2011;115(36):10226-36.
25. Reis H, Loboda O, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Kirtman B, Luis JM, Zaleśny R. Electronic and vibrational linear and nonlinear polarizabilities of Li@C60 and [Li@C60]⁺. *J Comput Chem* 2011;32(5):908-14.

2010

26. Zaleśny R, Bulik IW, Bartkowiak W, Luis JM, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Krawczyk P. Electronic and vibrational contributions to first hyperpolarizability of donor-acceptor-substituted azobenzene. *J Chem Phys* 2010;133(24),244308.

27. **Avramopoulos A**, Serrano-Andrés L, Li J, Papadopoulos MG. On the electronic structure of H-Ng-Ng-F (Ng = ar, kr, xe) and the nonlinear optical properties of HXe₂F. *J Chem Theory Comput* 2010;6(11):3365-72.
28. Bégué D, Labéguerie P, Zhang-Negrerie DY, Avramopoulos A, Serrano-Andrés L, Papadopoulos MG. Theoretical investigations of the IR spectroscopy of ni(C₂S₂H₂)₂. A case study of the P-VMWCI₂ algorithm including anharmonic effects. *Phys Chem Chem Phys* 2010;12(41):13746-51.
29. Soras G, Psaroudakis N, Mousdis GA, Manos MJ, Tasiopoulos AJ, Aloukos P, Couris S, Labéguerie P, Lipinski J, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Synthesis and non-linear optical properties of some novel nickel derivatives. *Chem Phys* 2010;372(1-3):33-45.
30. Zalesny R, Loboda O, Iliopoulos K, Chatzikyriakos G, Couris S, Rotas G, Tagmatarchis N, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Linear and nonlinear optical properties of triphenylamine-functionalized C₆₀: Insights from theory and experiment. *Phys Chem Chem Phys* 2010;12(2):373-81.

2009

31. Serrano-Andrés L, Avramopoulos A, Li J, Labéguerie P, Bégué D, Kellö V, Papadopoulos MG. Linear and nonlinear optical properties of a series of ni-dithiolene derivatives. *J Chem Phys* 2009;131(13),134312.
32. Zalesny R, Wójcik G, Mossakowska I, Bartkowiak W, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Static electronic and vibrational first hyperpolarizability of meta-dinitrobenzene as studied by quantum chemical calculations. *J Mol Struct THEOCHEM* 2009;907(1-3):46-50.
33. Holka F, Avramopoulos A, Loboda O, Kellö V, Papadopoulos MG. The (hyper)polarizabilities of AuXeF and XeAuF. *Chem Phys Lett* 2009;472(4-6):185-9.
34. Loboda O, Zalesny R, Avramopoulos A, Luis J-, Kirtman B, Tagmatarchis N, Reis H, Papadopoulos MG. Linear and nonlinear optical properties of [60]fullerene derivatives. *J Phys Chem A* 2009;113(6):1159-70.

2008

35. Pluta T, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Leszczynski J. On the origin of the large electron correlation contribution to the hyperpolarizabilities of some diacetylene rare gas compounds. *J Chem Phys* 2008;129(14),144308.

2007

36. **Avramopoulos A**, Serrano-Andrés L, Li J, Reis H, Papadopoulos MG. Linear and nonlinear optical properties of some organoxenon derivatives. *J Chem Phys* 2007;127(21),214102.
37. **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Reis H. Calculation of the microscopic and macroscopic linear and nonlinear optical properties of liquid acetonitrile. II. local fields and linear and nonlinear susceptibilities in quadrupolar approximation. *J Phys Chem B* 2007;111(10):2546-53.
38. **A. Avramopoulos**, M. G. Papadopoulos , “ The effect of Xenon insertion on the Linear and non-linear optical properties of HXeOH and HxeSH.”, *Computing Letters*, **3**,359-366 (2007). Electric and Magnetic Properties of atoms and molecules. A special issue in honour of Prof. David Buckingham <https://doi.org/10.1163/157404007782913345>

2006

39. **Avramopoulos A**, Jabłoński M, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Linear and nonlinear electric properties and their dependence on the conformation and intramolecular H-bonding: A model study. *Chem Phys* 2006;328(1-3):33-44.
40. Papadopoulos MG, Reis H, Avramopoulos A, Erkoç S, Amirouche L. Polarizabilities and second hyperpolarizabilities of Zn_nCd_n clusters. *Mol Phys* 2006;104(13-14):2027-36.

2005

41. Papadopoulos MG, Reis H, Avramopoulos A, Erkoç S, Amirouche L. A comparative study of the dipole polarizability of some Zn clusters. *J Phys Chem B* 2005;109(40):18822-30.

2004

42. **Avramopoulos A**, Reis H, Li J, Papadopoulos MG. The dipole moment, polarizabilities, and first hyperpolarizabilities of HArF. A computational and comparative study. *J Am Chem Soc* 2004;126(19):6179-84.

2003

43. Jug K, Chiodo S, Calaminici P, Avramopoulos A, Papadopoulos MG. Electronic and vibrational polarizabilities and hyperpolarizabilities of azoles: A comparative study of the structure-polarization relationship. *J Phys Chem A* 2003;107(20):4172-83.
44. Reis H, Papadopoulos MG, Avramopoulos A. Calculation of the microscopic and macroscopic linear and nonlinear optical properties of acetonitrile: I. accurate molecular properties in the gas phase and susceptibilities of the liquid in onsager's reaction-field model. *J Phys Chem A* 2003;107(19):3907-17.
45. **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Strong interaction through the $X \cdots Au-Y$ bridge: The Au bond? *Chem Phys Lett* 2003;370(5-6):765-9.
46. Kędziera D, Avramopoulos A, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Electronic spectrum of the confined auride ion. *Phys Chem Chem Phys* 2003;5(6):1096-102.

2002

47. **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Relativistic effects on interaction-induced electric properties of weakly interacting systems: The $HF \cdots AuH$ dimer. *J Chem Phys* 2002;117(22):10026-38.
48. **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG. Trends in the electronic and vibrational contributions to the dipole moment, polarizabilities, and first and second hyperpolarizabilities of the hydrides of Li, Na and K. *Mol Phys* 2002;100(6):821-34.

2001

49. **Avramopoulos A**, Ingamells VE, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Vibrational corrections to electric properties of relativistic molecules: The coinage metal hydrides. *J Chem Phys* 2001;114(1):198-210

II. ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ:

2003

1. V. E. Ingamells, S. G. Raptis, A. Avramopoulos and M.G. Papadopoulos, “*The Unusual effect of lithium substitution in organic molecules: The polarizability and second hyperpolarizability of C₂H₂Li₂*” in “*Nonlinear optical responses of molecules, solids and liquids: Methods and applications*”, Editor: M. G. Papadopoulos, Research Singpost , 97-111,(2003), ISBN: **81-7736-163-5**.

2012

2. **A. Avramopoulos***, H. Reis, M. G. Papadopoulos, « *On the Electronic, Vibrational and Relativistic Contributions to the Linear and Nonlinear Optical Properties of Molecules* », in Practical Aspects of Computational Chemistry I: An Overview of the last two decades and Current trends, eds : J. Leszczynski and M. K. Shukla, Springer Science + Business Media, B. V 2012, ch. 5, pp 129-166, 2012, ISBN 978-94-007-0918-8
<http://www.springerlink.com/content/jk5u81p7335xwm62>, DOI: [10.1007/978-94-007-0919-5_5](https://doi.org/10.1007/978-94-007-0919-5_5)
(<http://www.springer.com/chemistry/book/978-94-007-0918-8> .
3. H. Tzoupis, **A. Avramopoulos***, H. Reis, G. Leonis, S. Durdagi, T. Mavromoustakos, G. Megariotis, M. G. Papadopoulos, “ *Theoretical Studies of Interactions in Nanomaterials and Biological Systems* ” in Towards Efficient Designing of Safe Nanomaterials Eds: Jerzy Leszczynski, Jackson State University, USA, Tomasz Puzyn, University of Gdansk, Poland, the RSC Nanoscience & Nanotechnology Series, Chap. 8, pp 148-186, **2012**, ISBN 9781849734530. <http://dx.doi.org/10.1039/9781849734530-00148>
<http://www.rsc.org/shop/books/2012/9781849734530.asp>
<http://pubs.rsc.org/en/content/chapter/bk9781849734530-00148/978-1-84973-453-0>

2014

4. **A. Avramopoulos***, H. Reis, M.G. Papadopoulos, “ *Mechanisms of Polarization*”, in High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities, Eds: Mihnea Dulea, Aneta Karainova, Anastasis Oulas, Ioannis Liabotis, Danica Stojiljkovic, Ognjen Prnjat, Springer,

Vol. 2, pp. 83 – 92, 2014, ISBN: 978-3-319-01519-4 (Print) 978-3-319-01520-0 (Online), doi:10.1007/978-3-319-01520-0-10

http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-01520-0_10

<http://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-01520-0>

2017

5. Richarz A.N., Avramopoulos A., Benfenati E., Gajewicz A., Leonis G., Marchese Robinson R.L., Papadopoulos M.G., Cronin M.T.D., Puzyn T. “ *Compilation of Data and Modeling of Nanoparticles and Toxicity and in the European NanoPUZZLES Project*” ch. 10, **2017** in *Modelling the Toxicity of Nanoparticles*, Springer (Book chapter in press), eds: L. Tang, M. A Banares, R Gallo. doi: 10.1007/978-3-319-47754-1, **ISBN**: 9783319477527
<http://www.springer.com/us/book/9783319477527#aboutBook>

III. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΕΚΤΕΤΑΜΕΝΑ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ

2015

1. **Avramopoulos, A.** and Papadopoulos, M. G., “A theoretical study of the non-linear optical properties of a series of Ni-dithiolene derivatives”
AIP Conference Proceedings, 1642, 102-109 (2015),
DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4906636>.

2014

2. N. Golbamaki, A. Avramopoulos, A. Golbamaki, B. Rasulev, M. Cronin, A. Cassano, E. Benfenati and J.Leszczynski, “Computational methods for predicting genotoxicity of metal oxide nanomaterials (A classification and regression tree model for predicting comet assay results)”, **4th International Conference on Nanotek & Expo**, San Fransisco, USA, 2014 <http://dx.doi.org/10.4172/2157-7439.S1.017>, p. 135

2012

3. Skwara, B. and Loboda, O. and Avramopoulos, A. and Luis, J.-M. and Reis, H. and Papadopoulos, M. G., “Electronic contributions to linear and nonlinear

electric properties in fullerene-based molecular systems” AIP Conference Proceedings, 1504, 406-413 (2012), DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4771734>

4. **Avramopoulos, Aggelos**, Reis, Heribert and Papadopoulos, Manthos G., “The effect of the vibrational contributions to the non-linear optical properties of small and medium size molecules” AIP Conference Proceedings, 1504, 616-626 (2012), DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4771772>
5. Zaleśny, R. and Bulik, I. W. and Mikołajczyk, M. and Bartkowiak, W. and Luis, J. M. and Kirtman, B. and Avramopoulos, A. and Papadopoulos, M. G., “Critical assessment of density functional theory for computing vibrational (hyper)polarizabilities” AIP Conference Proceedings, 1504, 655-658 (2012), DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.4771780>

2009

6. Loboda, O. and Zaleśny, R. and Avramopoulos, A. and Papadopoulos, M. G. and Artacho, E., “Linear—Scaling Calculations of Linear and Nonlinear Optical Properties of [60]fullerene Derivatives” AIP Conference Proceedings, 1108, 198-204 (2009), DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.3117129>

2007

7. Manthos G. Papadopoulos, and Avramopoulos, Aggelos, “The Linear and Non-Linear Optical Properties of Some Noble Gas Compounds” AIP Conference Proceedings, 963, 316-328 (2007), DOI:<http://dx.doi.org/10.1063/1.2827015>

2006

8. **A . Avramopoulos** , H . Reis and M . G . Papadopoulos, “A study of the environmental effects on the microscopic and macroscopic non linear-optical properties of liquids, based on a multipolar approximation Liquid acetonitrile”, Recent Progress in Computational Sciences and Engineering (2 vols) George Maroulis CRC Press 2006 Pages 1198–1199 ISBN: 978-90-04-15542-8, ISBN: 978-1-4665-6451-0 DOI: 10.1201/b12066-104.
9. M. G. Papadopoulos, H.Reis, A. Avramopoulos, A Alparone, “A systematic study of the linear and non-linear optical properties of small molecules and clusters: The correlation, vibrational and relativistic contributions”, Lecture

Series on Computer and Computational Sciences, Eds: George Maroulis, Theodore Simos, vol. 6, **2006**, pages 294-307,

2005

10. Papadopoulos, M. G., Avramopoulos, A. Raptis, S. G., Sadlej, A. J. “On electric polarizabilities and hyperpolarizabilities: The correlation, relativistic and vibrational contributions”, **In the Frontiers of Computational Science: Lectures presented in the International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering**, 2005, Pages 152-155 ISBN:90-6764-442-0, ISSN: 1573-4196.

2004

11. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos, and H. Reis, “On the vibrational polarizabilities and hyperpolarizabilities: analysis of some specific examples: pyrrole and HArF,”, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2004), Athens, 2004, pp. 1108-1111.

IV. ΑΡΙΘΜΟΣ ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΩΝ ΚΑΙ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ ΤΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ

22/05/2020	SCOPUS	Google Scholar ¹	Web of Science
ΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ¹	965/19	1037/20	917/18
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ²	851/18 ²		816/18 ²
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ³	722/16		

¹ Περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές; ² Δεν περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές; ³ Δεν περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές και οι αναφορές από ερευνητές οι οποίοι είναι συν-συγγραφείς.

<https://scholar.google.gr/citations?user=kGEfwn8AAAAJ&hl=el>

<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56030091400>

http://apps.webofknowledge.com/CitationReport.do?product=WOS&search_mode=CitationReport&SID=F4e6gy123MyPfuNJAyu&page=1&cr_pqid=4&viewType=summary&colName=WOS

V. ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ ΠΕΡΙΟΔΙΚΩΝ: Πηγή, Journal of Citation Reports, 2/2/2020,

<https://jcr.clarivate.com/JCRLandingPageAction.action?wsid=D5dyNOZsqN2lj9AOFK1&Init=Yes&SrcApp=IC2LS&SID=H2-C6oO8P0M4KtnS1ePwbNdfM9qfr0YaNLZ-18x2dmHDiqUckCOAKx2Fk5shoQ73Qx3Dx3DaC6GJT6Q8XsGsKhDZ5hL6Ax3Dx3D-zPfbrX1xxzMNxxaWmdbWNHIAx3Dx3D-VcCCLx2FbCUgfmogt3G9gw8gx3Dx3D#>

Συντελεστής	Αριθμός Δημοσιεύσεων	Συνολικός Συντελεστής	ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ/Quartile
-------------	----------------------	-----------------------	--------------------

Απήχησης (ΣΑ)		Απήχησης	
14.965	1	14.965	J. Am. Chem.Soc./Q1
5.160	2	10.320	Chem. Eur. J./Q1
6.641	1	6.641	J. Mat Chem.C/Q1
5.313	1	5.313	J. Chem.Theor.Comp./Q1
4.484	3	13.452	J. Phys. Chem. C/Q1+Q2
4.027	1	4.027	J. Enzyme Inhib.Med.Chem./Q1
3.567	3	10.701	Phys. Chem.Chem.Phys./Q1+Q2
3.966	1	3.966	J. Chem. Inf. Mod./Q1
3.224	5	16.120	J. Comp.Chem./Q2
2.923	4	11.692	J. Phys. Chem. B/Q2
2.997	6	17.892	J. Chem. Phys./Q2
2.641	5	13.205	J. Phys. Chem. A/Q2
2.581	1	2.581	Eur. J. Inorg. Chem./Q2
2.009	1	2.009	J. Nanopart. Res/Q3
1.571	2	3.142	Mol. Phys./Q4
1.901	3	5.703	Chem. Phys. Let./Q3
1.822	2	3.644	Chem. Phys./Q3
1.863	2	3.726	J. Mol.Graphics Modell./Q3
1.624	1	1.624	Struct. Chem./Q3
1.371	1	1.371	J. Mol. Struct./Q3
1.394	1	1.394	Helv. Chim. Acta/Q3
	47	153.584	
1.0≤ΣΑ<2.0	12		
2.0≤ΣΑ<3.0	17		
3.0≤ΣΑ<4.0	9		
4.0≤ΣΑ<6.0	7		
ΣΑ≥6.0	2		

Αριθμός δημοσιευμένων άρθρων και μέσος συντελεστής απήχησης για εργασίες που σχετίζονται: ι) με τη μελέτη και το μηχανισμό μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων μοριακών υλικών, υ) τη σχεδίαση φωτονικών υλικών: **39/3.394, h-index:16**
Ετεροαναφορές:781.

12. ΕΞΩΦΥΛΛΟ ΠΕΡΙΟΔΙΚΩΝ

1. *Structural and static electric response properties of highly symmetric lithiated silicon cages: Theoretical predictions*,

2. *Capacity in Atomic Clusters Built from Silicon and Lithium. A Combined *ab initio* and Density Functional Study*, *Journal of Computational Chemistry*, **35**, 829-838, 2014

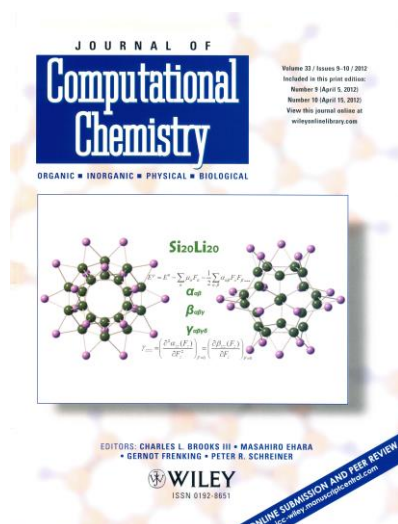
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.23549/full>

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.v35.1/issuetoc>

J. Comp. Chem. Volume: 33 Issue: 10 Pages: 1068-1079

DOI: 10.1002/jcc.22938 Published: APR 15 2012

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.v33.10/issuetoc>



TOP DOWNLOADED ARTICLE 2017-2018

CONGRATULATIONS TO

Aggelos Avramopoulos

whose paper has been recognized as
a top 20 most read paper in
Helvetica Chimica Acta

WILEY

22/5/2020

Web of Science

Clarivate Analytics

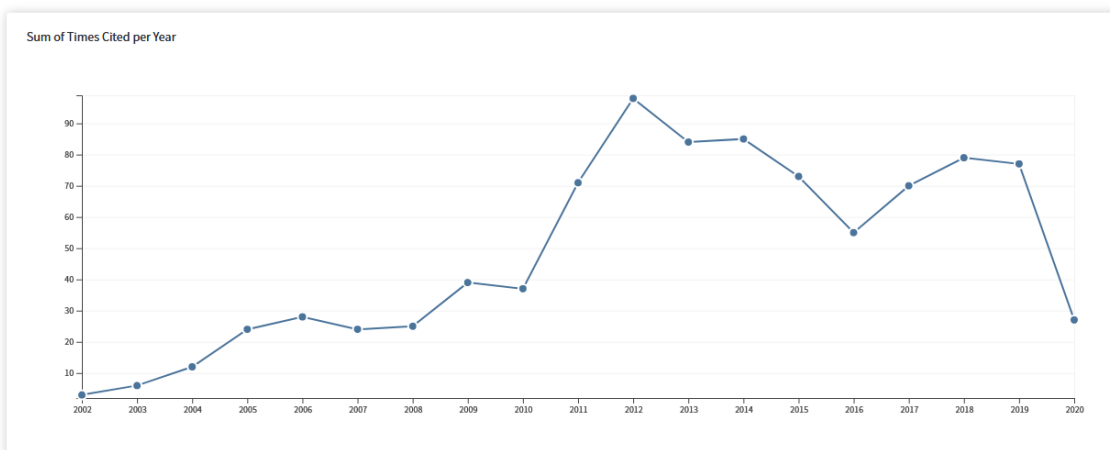
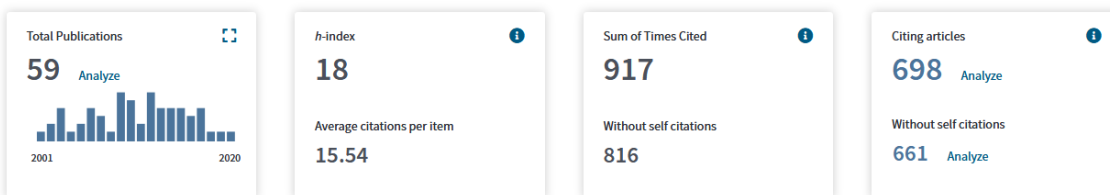
Search Search Results Tools Searches and alerts Search History Marked List

Citation report for 59 results from Web of Science Core Collection between 1900 and 2020 Go

You searched for: AUTHOR: (Avramopoulos A OR Avramopoulos A) AND ADDRESS: (Natl Hellen Res Fdn) ...More

This report reflects citations to source items indexed within Web of Science Core Collection. Perform a Cited Reference Search to include citations to items not indexed within Web of Science Core Collection.

Export Data: Save to Excel File





Aggelos Avramopoulos

FOLLOW

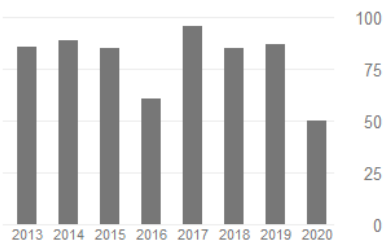
National Hellenic Research Foundation - Assistant Professor, University of Thessaly
Verified email at eie.gr

Computational Chemistry Molecular Physics Quantum Chemistry Non-linear optical properties

GET MY OWN PROFILE

Cited by VIEW ALL

	All	Since 2015
Citations	1037	464
h-index	20	14
i10-index	33	20



Search Sources Lists SciVal

Citation overview

Self citations of selected authors are excluded.

[Back to author details](#)

Export Print

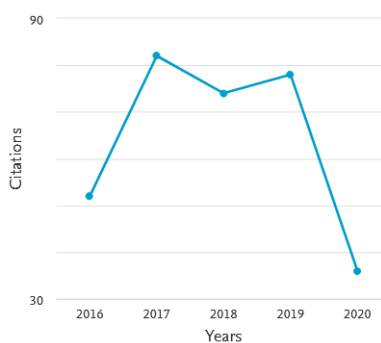
This is an overview of citations for this author.

Author h-index: 18 View h-graph

59 Cited Documents from "Avramopoulos, Aggelos" [+ Save to list](#)

Author ID:56030091400

Date range: 2016 to 2020 Exclude self citations of selected author Exclude self citations of all authors Exclude citations from books [Update](#)



Sort on: Date (newest)

Page Remove

Documents	Citations	<2016	2016	2017	2018	2019	2020	Subtotal	>2020	Total
	Total	529	52	82	74	78	36	322	0	851

13. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑΣ

Κεντρικός στόχος του έργου μου είναι η ανάπτυξη και χρήση προηγμένων υπολογιστικών μεθόδων για τον υπολογισμό των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών (Γ&ΜΓΟ) ιδιοτήτων, και η αξιοποίηση τους για τη σχεδίαση φωτονικών υλικών. **Υλικά με σημαντική με γραμμική οπτική απόκριση βρίσκουν εφαρμογή στη φωτονική και οπτοηλεκτρονική.** Οι προαναφερθείσες Γ&ΜΓΟ ιδιότητες χαρακτηρίζονται και με το **όνομα πολωσιμότητες και υπερπολωσιμότητες.** Η μη γραμμικότητα οφείλεται στο γεγονός ότι η απόκριση του υλικού δεν εξαρτάται γραμμικά από τη ένταση του πεδίου (όπως αυτό που παράγεται από δέσμη Laser).

Οι ιδιότητες αυτές ρυθμίζουν τη συμπεριφορά των Γ&ΜΓΟ φαινομένων (φαινόμενο Kerr, Pockels, ανάπτυξη δεύτερης και τρίτης αρμονικής κλπ), τα οποία αποτελούν ουσιώδεις ιδιότητες για την κατανόηση της **αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας με την ύλη.** Επιπροσθέτως στα φαινόμενα αυτά στηρίζεται η σχεδίαση των φωτονικών (ή ΜΓΟ) υλικών τα οποία συνδέονται με εφαρμογές μεγάλης τεχνολογικής σημασίας, όπως είναι η μεταφορά και αποθήκευση δεδομένων. Μη γραμμικά οπτικά φαινόμενα όπως η παραγωγή δεύτερης αρμονικής, τρίτης αρμονικής, η άθροιση εισερχομένων Η/Μ κυμάτων διαφορετικών συχνοτήτων (Sum Frequency Generation), η πολυφωτονική απορρόφηση (multiphoton absorption), έχει βρεθεί ότι μπορούν να έχουν σημαντικές εφαρμογές σε περιοχές όπως η επεξεργασία σήματος και οπτικής πληροφορίας (οπτικές πύλες, οπτικοί διακόπτες) στις τηλεπικοινωνίες, στη βιολογία (biological imaging), στη προστασία ευαίσθητων ανιχνευτών από δέσμες υψηλής έντασης (οπτικοί περιοριστές).

Για την σχεδίαση φωτονικών υλικών και γενικά υλικών για σύγχρονες τεχνολογικές εφαρμογές (π.χ. βιοϋλικών, φαρμάκων) χρησιμοποιούμε αρχές και μοντέλα βασιζόμενα σε θεωρητικές και υπολογιστικές μεθόδους πρώτης αρχής, τα οποία έχουν αναπτυχθεί με τη βοήθεια της φυσικής/χημείας και προχωρημένων υπολογιστικών τεχνικών (<http://www.rh.gatech.edu/features/cyber-forged>). Η ανάπτυξη των τεχνικών αυτών βασίζεται στη κβαντική χημεία, ένα διεπιστημονικό επιστημονικό πεδίο που βρίσκεται στη

διεπιφάνεια της χημείας, της φυσικής, των εφαρμοσμένων μαθηματικών και της επιστήμης των υπολογιστών (Aspuru-Gusik et al. *ACS Cent. Sci.*, 2018, 4 (2), 144–152, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscentsci.7b00550>). Συγκεκριμένα από την επιστήμη της φυσικής χρησιμοποιούνται οι νόμοι της κβαντικής μηχανικής και η **αλληλεπίδραση της ύλης με την ακτινοβολία**, από τη χημεία οι μηχανισμοί συγκρότησης της μοριακής δομής, από τα εφαρμοσμένα μαθηματικά η γραμμική άλγεβρα και από την επιστήμη των υπολογιστών αξιοποιούνται τα συστήματα υπερυψηλών αποδόσεων (high-performance computing) και η αρχιτεκτονική αυτών (παράλληλη επεξεργασία δεδομένων, χρήση GPU) για την διεξαγωγή υπολογισμών.

Καθίσταται προφανές ότι ο συνδυασμός της ανωτέρω τεχνολογίας επιτρέπει τον ακριβή προσδιορισμό των Γ&ΜΓΟ ιδιοτήτων σε μικροσκοπικό επίπεδο. Αυτό απαιτεί: **i)** τον υπολογισμό συμβολών που οφείλονται στη συσχέτιση των ηλεκτρονίων, τις δονήσεις και τη σχετικιστική διόρθωση (αν άτομα με μεγάλο ατομικό αριθμό συμπεριλαμβάνονται), **ii)** τη διερεύνηση μηχανισμών οι οποίοι οδηγούν στο σχεδιασμό βέλτιστων δομών-υλικών με ενισχυμένη μη γραμμική οπτική απόκριση. Επίσης χρησιμοποιούνται τεχνικές για τον μετασχηματισμό των μικροσκοπικών ιδιοτήτων σε μακροσκοπικές. Αυτό απαιτεί επαρκή προσδιορισμό των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων (π.χ. επίδραση περιβάλλοντος).

Θα ήταν σκόπιμο να δοθούν μερικοί βασικοί ορισμοί. **Οι μακροσκοπικές ΜΓΟ ιδιότητες** ενός υλικού μπορούν να ορισθούν από το ανάπτυσμα της πόλωσης P_α , συναρτήσεως της έντασης του εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου E_α :

$$P_\alpha = \chi_{\alpha\beta} E_\beta + (1/2)\chi_{\alpha\beta\gamma} E_\beta E_\gamma + (1/6)\chi_{\alpha\beta\gamma\delta} E_\beta E_\gamma E_\delta + \dots$$

όπου $\chi_{\alpha\beta}$, $\chi_{\alpha\beta\gamma}$ και $\chi_{\alpha\beta\gamma\delta}$ είναι η πρώτη, δεύτερης και τρίτης τάξης επιδεκτικότητα (susceptibility) του υλικού, αντιστοίχως. Η σύνδεση των **μακροσκοπικών όρων** οι οποίοι χαρακτηρίζονται από τους τανυστές επιδεκτικότητας με τους **μικροσκοπικούς όρους** οι οποίοι χαρακτηρίζονται από την **πολωσιμότητα (α) και τις υπερπολωσιμότητες, πρώτη (β) και δεύτερη (γ)**, δίνεται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\chi_{\alpha,b}^{(1)}(\omega) = \sum_p \sum_{i,j} N_{\alpha,i}^{(p)}(\omega) N_{b,j}^{(p)}(\omega) \alpha_{i,j}^{(p)}(\omega)$$

$$\chi_{\alpha,b,c}^{(2)}(\omega_\sigma = \omega_2 + \omega_1) = \sum_p \sum_{i,j,k} N_{\alpha,i}^{(p)}(\omega_\sigma) N_{b,j}^{(p)}(\omega_2) N_{c,k}^{(p)}(\omega_1) \beta_{i,j,k}^{(p)}(\omega_\sigma = \omega_2 + \omega_1)$$

$$\chi_{\alpha,b,c,d}^{(3)}(\omega_\sigma = \omega_3 + \omega_2 + \omega_1) = \sum_p \sum_{i,j,k,l} N_{\alpha,i}^{(p)}(\omega_\sigma) N_{b,j}^{(p)}(\omega_3) N_{c,k}^{(p)}(\omega_2) N_{d,l}^{(p)}(\omega_1) \gamma_{i,j,k,l}^{(p)}(\omega_\sigma = \omega_3 + \omega_2 + \omega_1)$$

όπου $\alpha^{(p)}_{ij}(\omega)$ είναι η πολωσιμότητα στο μικροσκοπικό τμήμα p και $N^{(p)}_{b,j}$ είναι το τοπικό πεδίο (Local Field, anisotropic Lorentz Field Factor $= (n(\omega)^2 + 2)/3$, n : δείκτης διάθλασης) το οποίο δημιουργείται από το εφαρμοζόμενο πεδίο συχνότητας ω στο ίδιο τμήμα p . Ανάλογα ορίζονται και οι υπόλοιπες ιδιότητες.

1. Ηλεκτρονικές Συμβολές

Οι μικροσκοπικές πολωσιμότητες και υπερπολωσιμότητες των ατόμων, μορίων, συσσωματωμάτων, ιόντων ή μοριακών υλικών, από τα οποία συντίθεται το υλικό, μπορούν να ορισθούν χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor της επαγόμενης διπολικής ροπής, μ_α , συναρτήσει του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου F_α :

$$\mu_\alpha = \alpha_{\alpha\beta} F_\beta + (1/2) \beta_{\alpha\beta\gamma} F_\beta F_\gamma + (1/6) \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta} F_\beta F_\gamma F_\delta + \dots$$

όπου $\alpha_{\alpha\beta}$, $\beta_{\alpha\beta\gamma}$ και $\gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}$, είναι η πολωσιμότητα, η πρώτη και δεύτερη υπερπολωσιμότητα αντίστοιχα, των μικροσκοπικών μονάδων από τις οποίες αποτελείται το υλικό. Η μέση τιμή της πολωσιμότητας (α) και των υπερπολωσιμοτήτων (β και γ) ορίζονται από τις σχέσεις:

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_{a=x,y,z} \alpha_{aa}$$

$$\beta = \sum_{a=x,y,z} \frac{\mu_a \beta_a}{\|\mu\|}$$

$$\text{όπου } \beta_\alpha = \frac{1}{5} \sum_{\beta=x,y,z} (\beta_{\alpha\beta\beta} + \beta_{\beta\alpha\beta} + \beta_{\beta\beta\alpha})$$

$$\gamma = \frac{1}{5} \sum_{\alpha\beta=x,y,z} \gamma_{\alpha\alpha\beta\beta}$$

Οι ανωτέρω μικροσκοπικές Γ&ΜΓΟ ιδιότητες υπολογίζονται **αναλυτικά**, χρησιμοποιώντας την χρονοεξαρτώμενη θεωρία διαταραχών (Time Dependent Perturbation Theory) ή **αριθμητικά** μέσω των παραγώγων της ενέργειας ως προς το εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό

πεδίο: $\left(\frac{\partial^{(n)} E(F)}{\partial F^n}\right)$, όπου $n=1,2,3,4$ και αντιστοιχούν στη διπολική ροπή, την πολωσιμότητα, πρώτη και δεύτερη υπερπολωσιμότητα, αντιστοίχως.

Ακολουθεί καταγραφή των γραμμικών και των μη γραμμικών φαινομένων με τα οποία συνδέονται οι (υπερ)πολωσιμότητες:

$\alpha(-\omega;\omega)$ Δείκτης διάθλασης (Refractive index)

$\beta(0;\omega,-\omega)$ Οπτική ανόρθωση (Optical Rectification)

$\beta(-\omega;0,\omega)$ Φαινόμενα Pockels και Kerr (γραμμικό ηλεκτροοπτικό φαινόμενο)

$\beta(-2\omega;\omega,\omega)$ Παραγωγή δεύτερης αρμονικής (Second Harmonic Generation (SHG))

$\gamma(0;0,-\omega,\omega)$ Οπτική ανόρθωση (Optical Rectification)

$\gamma(-\omega;0,0,\omega)$ Φαινόμενο Kerr

$\gamma(-\omega;\omega,-\omega,\omega)$ Δείκτης διάθλασης εξαρτώμενος από την ένταση (Intensity dependent refractive index)

$\gamma(-2\omega;0,\omega,\omega)$ dc – field induced SHG

$\gamma(-3\omega;\omega,\omega,\omega)$ Παραγωγή τρίτης αρμονικής (Third Harmonic Generation (THG))

2. Δονητικές Συμβολές

Οι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό των δονητικών συμβολών στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες ήταν αυτές που αναπτύχθηκαν από τους Bishop - Kirtman και των Numerov-Cooley. Η δονητική συμβολή μπορεί να χωρισθεί σε δύο μέρη με βάση δύο διαφορετικές προσεγγίσεις

$$I. p^{vib} = p^{nr} + p^{curv}$$

όπου $p = \mu, \alpha, \beta, \gamma$. Το πρώτο μέρος αναφέρεται στην αλλαγή της γεωμετρίας ισορροπίας p^{nr} από την παρουσία του πεδίου (nuclear relaxation) και το δεύτερο στην αλλαγή του σχήματος της καμπύλης της δυναμικής ενέργειας (curvature) p^{curv} .

$$II. p^{vib} = p^{ZPVA} + p^{PV}$$

Τό πρώτο μέρος δηλώνει την συμβολή που προέρχεται από την αλλαγή της ενέργειας του μηδενός (zero point energy) p^{ZPVA} και το δεύτερο αναφέρεται στην αμιγή δονητική συμβολή p^{PV} (pure vibrational) που προέρχεται μόνο από τη δόνηση.

Η αναλυτική μέθοδος των **Bishop και Kirtman** στηρίζεται στη θεωρία διαταραχών με την χρήση των SOS(sum-over-state) εκφράσεων οι οποίες απαιτούν τον προσδιορισμό των διηγεμένων καταστάσεων. Με βάση την παραπάνω μορφή η γενική έκφραση που δίνει την συνιστώσα του τανυστή της υπερπολωσιμότητας $X_{\alpha\beta..}^n(-\omega_\sigma; \omega_1, \dots, \omega_n)$ δίνεται απο την παρακάτω σχέση:

$$X_{\alpha\beta..}^n(-\omega_\sigma; \omega_1, \dots, \omega_n) = \hbar^{-n} P_{\alpha,\beta,\dots} \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} \dots \sum_{\alpha_n} \left\langle g \left| \hat{\mu}_\alpha \right| \alpha_1 \right\rangle \left\langle \alpha_1 \left| \hat{\mu}_\beta \right| \alpha_2 \right\rangle \dots \left\langle \alpha_n \left| \hat{\mu}_\alpha \right| \gamma \right\rangle \times \left[(\omega_{\alpha_1} - \omega_\sigma) \times (\omega_{\alpha_2} - \omega_\sigma + \omega_1) \dots (\omega_{\alpha_n} - \omega_n) \right]^{-1}$$

με $\omega_\sigma = \sum_n \omega_n$, $P_{\alpha,\beta..}$ περιγράφει τον τελεστή αντιμετάθεσης, $|\alpha_i\rangle = \psi_i$ αποτελεί την κυματοσυνάρτηση της ηλεκτρονιακής κατάστασης i με ενέργεια E_i , $|g\rangle$ η βασική κατάσταση και ω_i είναι η συχνότητα μετάβασης απο την βασική στην διηγεμένη κατάσταση i . Για $n=1,2,3$ προκύπτει η πολωσιμότητα $X_{\alpha\beta}^1 = \alpha_{\alpha\beta}$, πρώτη υπερπολωσιμότητα $X_{\alpha\beta\gamma}^2 = \beta_{\alpha\beta\gamma}$ και την δεύτερη υπερπολωσιμότητα $X_{\alpha\beta\gamma\delta}^3 = \gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}$ αντιστοίχως. Με την εφαρμογή μιας σειράς προσεγγίσεων και αναπτύσσοντας μέχρι την τέταρτη παράγωγο της ενέργειας ως προς τις καρτεσιανές συντεταγμένες (δεύτερης τάξης μηχανική αναρμονικότητα) και την τρίτη παράγωγο της ηλεκτρικής ιδιότητας ως προς τις καρτεσιανές συντεταγμένες (δεύτερης τάξης ηλεκτρική αναρμονικότητα) προκύπτουν οι παρακάτω εκφράσεις (Bishop et al., *J. Chem. Phys.*, 108, 10013,1998):

$$\alpha^{p\nu} = [\mu^2]^{(0,0)} + [\mu^2]^{(2,0)} + [\mu^2]^{(1,1)} + [\mu^2]^{(0,2)}$$

$$\beta^{p\nu} = [\mu\alpha]^{(0,0)} + [\mu\alpha]^{(2,0)} + [\mu\alpha]^{(1,1)} + [\mu\alpha]^{(0,2)} + [\mu^3]^{(1,0)} + [\mu^3]^{(0,1)}$$

$$\gamma^{p\nu} = [\alpha^2]^{(0,0)} + [\alpha^2]^{(2,0)} + [\alpha^2]^{(1,1)} + [\alpha^2]^{(0,2)} + [\mu\beta]^{(0,0)} + [\mu\beta]^{(2,0)} + [\mu\beta]^{(1,1)} + [\mu\beta]^{(0,2)} + [\mu^2\alpha]^{(1,0)} + [\mu^2\alpha]^{(0,1)} + [\mu^4]^{(2,0)} + [\mu^4]^{(1,1)} + [\mu^4]^{(0,2)},$$

όπου οι εκθέτες n και m στους όρους $[A]^{(n,m)}$ δηλώνουν την τάξη της ηλεκτρικής (παράγωγοι ιδιοτήτων) και της μηχανικής αναρμονικότητας (παράγωγοι της δυναμικής ενέργειας), αντιστοίχως.

Ακολούθως θα παρουσιαστούν οι σχέσεις (στατικές($\omega=0$) και δυναμικές($\omega\neq 0$)) που χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό των συμβολών αυτών για την πολωσιμότητα, την πρώτη και δεύτερη υπερπολωσιμότητα [Kirtman et al. *J. Comp. Chem.* 2000, 21, 1572]:

$$\alpha^{nr} = [\mu^2]^{(0,0)} \quad (\text{αρμονική προσέγγιση})$$

$$\alpha^{curv} = \alpha^{zpv} + [\mu^2]^{(2,0)} + [\mu^2]^{(1,1)} + [\mu^2]^{(0,2)}$$

$$\beta^{nr} = [\mu\alpha]^{(0,0)} + [\mu^3]^{(1,0)} + [\mu^3]^{(0,1)}$$

$$\beta^{curv} = \beta^{zpv} + [\mu\alpha]^{(2,0)} + [\mu\alpha]^{(1,1)} + [\mu\alpha]^{(0,2)}$$

$$\gamma^{nr} = [\alpha^2]^{(0,0)} + [\mu\beta]^{(0,0)} + [\mu^2\alpha]^{(1,0)} + [\mu^2\alpha]^{(0,1)} + [\mu^4]^{(2,0)} + [\mu^4]^{(1,1)} + [\mu^4]^{(0,2)}$$

$$\gamma^{curv} = \gamma^{zpv} + [\alpha^2]^{(2,0)} + [\mu\beta]^{(2,0)} + [\alpha^2]^{(1,1)} + [\mu\beta]^{(1,1)} + [\alpha^2]^{(0,2)} + [\mu\beta]^{(0,2)}$$

$$\beta^{nr}(-\omega; \omega, 0)_{\omega \rightarrow \infty} = \frac{1}{3} [\mu\alpha]^{(0,0)}_{\omega=0}$$

$$\gamma^{nr}(-\omega; \omega, 0, 0)_{\omega \rightarrow \infty} = \frac{1}{3} [\alpha^2]^{(0,0)}_{\omega=0} + \frac{1}{2} [\mu\beta]^{(0,0)}_{\omega=0} + \frac{1}{6} ([\mu^2\alpha]^{(1,0)} + [\mu^2\alpha]^{(0,1)})$$

$$\gamma^{nr}(-2\omega; \omega, \omega, 0)_{\omega \rightarrow \infty} = \frac{1}{4} [\mu\beta]^{(0,0)}_{\omega=0}$$

$$\gamma^{nr}(-\omega; \omega, -\omega, \omega)_{\omega \rightarrow \infty} = \frac{2}{3} [\alpha^2]^{(0,0)}_{\omega=0}$$

Η διόρθωση p^{zpv} (zero – point vibrational averaging) ορίζεται απο τη διαφορά:

$$p^{zpv} = \langle 0 | p(r) | 0 \rangle - p^{el}(r_e),$$

όπου $|0\rangle$ είναι η δονητική κυματοσυνάρτηση της βασικής κατάστασης, $p^{el}(r)$ είναι η ηλεκτρονιακή συμβολή στην ιδιότητα p και r_e συμβολίζει τη γεωμετρία ισορροπίας. Η σχέση δια της οποίας υπολογίζεται η διόρθωση p^{zpv} είναι η εξής

$$p^{zpv} = [p]^{(0,1)} + [p]^{(1,0)}.$$

Ο πρώτος όρος στη περιλαμβάνει τη μηχανική αναρμονικότητα πρώτης τάξης και ο δεύτερος όρος την αντίστοιχης τάξης ηλεκτρική αναρμονικότητα. Ακολούθως παρουσιάζονται οι εκφράσεις των δύο όρων της σχέσης p^{zpv}

$$[p]^{(0,1)} = \frac{-\hbar}{4} \sum_a \left(\sum_b \frac{F_{abb}}{\omega_b} \right) \left(\frac{\partial p / \partial Q_a}{\omega_a^2} \right)$$

$$[p]^{(1,0)} = \frac{\hbar}{4} \sum_a \frac{\partial^2 p / \partial Q_a^2}{\omega_a}$$

όπου F_{abb} είναι η τρίτη παράγωγος της ενέργειας ως προς τις κανονικές συντεταγμένες (normal coordinates) και $\frac{\partial p}{\partial Q_a}$, $\frac{\partial^2 p}{\partial Q_a^2}$ είναι η πρώτη και η δεύτερη παράγωγος της ιδιότητας, αντιστοίχως. Από τις σχέσεις $[p]^{(0,1)}$ και $[p]^{(1,0)}$ προκύπτει ότι ο υπολογισμός της διόρθωσης p^{zpv} απαιτεί τον προσδιορισμό της πρώτης και δεύτερης παραγώγου της ιδιότητας p ως προς τις κανονικές συντεταγμένες καθιστώντας τον υπολογισμό ιδιαίτερα χρονοβόρο.

Η αριθμητική μέθοδος των Numeron-Coolley [J Chem Phys 2001;114(1):198-210] στηρίζεται στην παραγωγή των δονητικών κυματοσυναρτήσεων και των ηλεκτρονικών ενεργειών ενός μονοδιάστατου μοριακού συστήματος ως προς το εφαρμοζόμενο εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο. Συγκεκριμένα η κ-τάξης παράγωγος της ενέργειας $(\frac{\partial^k E}{\partial F^k})_{F=0}$ περιλαμβάνει την ολική τιμή της ιδιότητας p , για δεδομένη τιμή του k . Με τον όρο ολική τιμή εννοούμε το άθροισμα της ηλεκτρονιακής και της δονητικής συμβολής. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι για τον υπολογισμό της δονητικής συμβολής στη δεύτερη υπερπολωσιμότητα χρησιμοποιήθηκε η ακόλουθη σχέση:

$$\begin{aligned} \gamma^{\text{tot}} = & (\frac{\partial^4 \epsilon(F)}{\partial F^4})_{F=0} = 2 \langle (\frac{\partial^3 y(r, F)}{\partial F^3})_{F=0} | \mu(r, 0) | \gamma(r, 0) \rangle + 6 \langle (\frac{\partial^2 y(r, F)}{\partial F^2})_{F=0} | \mu(r, 0) \\ & | (\frac{\partial y_v(r, F)}{\partial F})_{F=0} \rangle + 6 \langle (\frac{\partial^2 y(r, F)}{\partial F^2})_{F=0} | (\frac{\partial \mu(r, F)}{\partial F})_{F=0} | \gamma(r, 0) \rangle + 6 \langle (\frac{\partial y_v(r, F)}{\partial F})_{F=0} | \\ & (\frac{\partial \mu(r, F)}{\partial F})_{F=0} | (\frac{\partial y_v(r, F)}{\partial F})_{F=0} \rangle + 6 \langle (\frac{\partial y_v(r, F)}{\partial F})_{F=0} | (\frac{\partial^2 \mu(r, F)}{\partial F^2})_{F=0} | \gamma(r, 0) \rangle + \langle \gamma(r, 0) | \\ & (\frac{\partial^3 \mu(r, F)}{\partial F^3})_{F=0} | \gamma(r, 0) \rangle \end{aligned}$$

Παρατηρείται ότι ο τελευταίος όρος περιλαμβάνει το ολοκλήρωμα $\langle 0 | p(r) | 0 \rangle$ της ιδιότητας p , το οποίο ισούται με το άθροισμα της ηλεκτρονιακής τιμής και της αντίστοιχης z ρα διορθωσής της. Οι υπόλοιποι όροι που εμφανίζονται σε κάθε μια από τις παραπάνω σχέσεις και οι οποίοι συνδέονται με τις παραγώγους της κυματοσυναρτήσεως $y_v(r, F)$, αντιστοιχούν στην αμιγή δονητική συμβολή (pure vibrational) στην ιδιότητα p . Έτσι η ολική τιμή της ιδιότητας $p = \mu, \alpha, \beta, \gamma$ μπορεί να γραφεί ως το άθροισμα τριών όρων:

$$p^{\text{tot}} = p^{\text{pv}} + p^{\text{el}} + p^{\text{zpv}}$$

Λεπτομέρειες για την υπολογιστική διαδικασία προσδιορισμού των επιμέρους όρων οι οποίοι εμφανίζονται στη σχέση γ^{tot} παρουσιάζονται λεπτομερώς στην εργασία [J Chem Phys 2001;114(1):198-210]

Όλες οι ανωτέρω σχέσεις οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό των ηλεκτρονιακών και δονητικών συμβολών στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες, υλοποιήθηκαν σε συνεργασία με εταίρους, με τη χρήση της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN, σε λογισμικό(α) τα οποία αναπτύχθηκαν γι' αυτόν το σκοπό. Σημειώνεται ότι για τον υπολογισμό των ηλεκτρονιακών συμβολών στις ηλεκτρικές Γ&ΜΓΟ ιδιότητες χρησιμοποιήθηκαν τα ακόλουθα λογισμικά: **GAUSSIAN, DALTON, GAMESS, NWCHEM, MOPAC, MOLCAS.**

Για τον αριθμητικό υπολογισμό των ηλεκτρονιακών συμβολών (στατικών και δυναμικών τιμών) στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος **Romberg** [W. Romberg, Kgl. Norske Vid. Selsk. Forsk, 1955, 28, 30–36;H. Rutishauser, Num. Math., 1963, 5, 48–54.], για τον ακριβή προσδιορισμό: **i)** της πρώτης, δεύτερης, τρίτης και τέταρτης τάξης παραγώγων

της ενέργειας ως προς το πεδίο, $(\frac{\partial^{(n)} E(F)}{\partial F^n})$, n=1-4 , **ii)** της πρώτης, δεύτερης, και τρίτης

τάξης παραγώγων της διπολικής ροπής ως προς το πεδίο, $(\frac{\partial^{(n)} \mu(F)}{\partial F^n})$, n=1-3, **iii)** της

πρώτης και δεύτερης τάξης παραγώγου, $\alpha(-\omega; \omega)$ ως προς το πεδίο $(\frac{\partial^{(n)} \alpha(-\omega; \omega)[F]}{\partial F^n})$,

n=1($\beta(-\omega; \omega, 0)$), n=2($\gamma(-\omega; \omega, 0, 0)$),

iv) της πρώτης τάξεως παραγώγου του $\beta(-2\omega; \omega, \omega, 0)$ ως προς το πεδίο,

$(\frac{\partial \beta(-2\omega; \omega, \omega)[F]}{\partial F}) = \gamma(-2\omega; \omega, \omega, 0)$ Οι σχετικές μαθηματικές εκφράσεις υλοποιήθηκαν

προγραμματιστικά, για το σκοπό αυτό, με τη χρήση της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN.

Η πλειονότητα των υπολογισμών πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας υπολογιστικούς πόρους (συστοιχία υπολογιστών) στο εργαστήριο υπολογιστικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών. Επίσης χρησιμοποιήθηκαν και υπερυπολογιστικά συστήματα υψηλών αποδόσεων τα οποία είναι εγκατεστημένα σε κέντρα της Ευρώπης (**MareNostrum/Spain, DEISA, LinkSceem/CY-TERA, Cyprus**)

Το υπόμνημα αυτό παρουσιάζει λεπτομερή ανάλυση του επιστημονικού μου έργου, όπως αυτό προκύπτει από τα επιστημονικά δημοσιεύματα και παρουσιάζεται με την εξής δομή: **πρώτον**, παραθέτω αναλυτικά το σύνολο των ερευνητικών μου δραστηριοτήτων και το αντικείμενο των επιστημονικών μου δημοσιευμάτων, **δεύτερον**, παραθέτω μελλοντικές ερευνητικές κατευθύνσεις με έμφαση στη σχεδίαση μοριακών υλικών ή/και νανοϋλικών για εφαρμογές στη φωτονική. Σημειώνεται ότι οι αριθμοί σε αγκύλες αντιστοιχούν στις εργασίες όπως αυτές παρατίθενται στην ενότητα, **11.1**, του βιογραφικού σημειώματος.

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΣΤΗ ΕΡΕΥΝΑ

Με τη λήψη του διδακτορικού μου διπλώματος αρχίζει μια περίοδος στην οποία χρησιμοποιήθηκε η εμπειρία που απέκτηθη κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Κύριοι άξονες της ερευνητικής δραστηριότητας αποτελούν: **ι) η ανάπτυξη και χρήση υπολογιστικών τεχνικών για εφαρμογές** και συγκεκριμένα για τη μελέτη των Γ&ΜΓΟ ιδιοτήτων, μορίων/μοριακών δομών, **στοχεύοντας σε ακριβή αποτελέσματα** και μοριακών υλικών, όπου αξιοποιείται η τεχνογνωσία που αναπτύχθηκε στα μόρια, **ιι) η ανάπτυξη και εφαρμογή μεθοδολογίας** που στοχεύει στη **σχεδίαση νέων φωτονικών υλικών**, καθώς και στην κατανόηση ενός συνόλου από παραμέτρους οι οποίες **επηρεάζουν τον ακριβή προσδιορισμό των Γ&ΜΓΟ ιδιοτήτων και τον ορθολογικό σχεδιασμό μη γραμμικών οπτικών υλικών**, **ιιι) η μέλετη μακροσκοπικών ΜΓΟ ιδιοτήτων** σε υγρά, υμένια (φιλμ) **ιιιι) η εφαρμογή προηγμένων υπολογιστικών τεχνικών** για τη μελέτη δομών βιολογικού ενδιαφέροντος. Η εργασία της περιόδου αυτής αποτελεί συνέχεια, επέκταση και εμπάθυνση του έργου που εκπονήθηκε στη διδακτορική μου διατριβή. Θα ήθελα να επισημάνω ότι το σύνολο της μεταδιδακτορικής/ερευνητικής μου εμπειρίας, **14 έτη (2004-2018)**, έχει προέλθει από τη συμμετοχή μου ως συνεργάτης ερευνητής σε ευρωπαϊκά ανταγωνιστικά προγράμματα, στα πλαίσια των οποίων έχω φιλοξενηθεί σε πανεπιστήμια και ερευνητικά ινστιτούτα, όπως αναλυτικά παρατίθεται στο βιογραφικό μου σημείωμα.. Τέλος θα ήθελα να σημειώσω ότι σε σύνολο **49 επιστημονικών εργασιών οι 42 έχουν παραχθεί κατά τη διάρκεια της περιόδου 2004-2018. Ως μέλος ΔΕΠ (ημερομηνία διορισμού, 18/4/2019) έχω δημοσιεύσει 2 ερευνητικές εργασίες.**

Συνοπτικά τα αντικείμενα τα οποία εξετάζονται στις ερευνητικές μου δημοσιεύσεις, οι οποίες προέκυψαν κατά τη διάρκεια του διδακτορικού μου και της μεταδιδακτορικής περιόδου συνοψίζονται ως ακολούθως. Σε αγκύλη δίνεται ο αριθμός της δημοσίευσης, όπως εμφανίζεται και αντιστοιχεί στον κατάλογο των δημοσιεύσεων του βιογραφικού σημειώματος (**11.1**):

(α) Εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων της κβαντικής μηχανικής για τον υπολογισμό ηλεκτρικών μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια (state-of-the-art results). Χρησιμοποιήθηκε μια ευρεία ποικιλία μεθόδων από τις πιο ακριβείς-προηγμένες υπολογιστικές τεχνικές: **ι)** Coupled Cluster Singles and Doubles (CCSD), Coupled Cluster Singles and Doubles με τη συμβολή των τριπλών υποκαταστάσεων να λαμβάνεται υπόψη διαταρακτικά (perturbatively triples correction, (CCSD(T)), **ιι)** Μέθοδος πλήρους ενεργού χώρου (Complete Active Space Self Consistent Field, **CASSCF**), και μέθοδος **CASPT2**, η οποία υπολογίζει ένα ουσιώδες τμήμα της δυναμικής συσχέτισης (dynamic correlation) στην ενέργεια και συνεπώς στην ιδιότητα. Η μέθοδος αυτή ανήκει στην κατηγορία θεωριών διαταραχής, **ιιι)** Μέθοδος του συναρτησιοειδούς πεδίου (Density Functional Theory, **DFT**). Οι προαναφερθείσες τεχνικές αξιοποιήθηκαν σε πιλοτικές μελέτες μετρίου μεγέθους συστημάτων, [1,3,4,6,7,10,16,17,19,20,22,24,27,31,32,33,35,38,40-46] μέχρι τις πιο προσεγγιστικές τεχνικές (ημιεμπειρικές μέθοδοι) που χρησιμοποιούνται σε μεγάλα μοριακά συστήματα τα οποία έχουν μεγάλο ενδιαφέρον στις εφαρμογές. [3,4,5,6,7,9,10,18,21,25,29,30,34,37]

Τα αποτελέσματα αυτά λαμβάνουν υπόψη τη συμβολή της ηλεκτρονιακής συσχέτισης, τη σχετικιστική διόρθωση και τις δονητικές συμβολές.

(β) Ανάπτυξη και εφαρμογή μεθόδων για τον ακριβή προσδιορισμό της δονητικής συμβολής διατομικών [48,49] και μεγαλύτερου μεγέθους μορίων. [1,3,9,20,25,26,28,32,34,47,49] Τα αποτελέσματα της μεθόδου αυτής μπορεί να χρησιμοποιηθούν για να υπολογισθεί η ακρίβεια τιμών που έχουν υπολογισθεί με προσεγγιστικές μεθόδους. Επίσης ανάπτυξη τεχνικών για τον υπολογισμό της δονητικής συμβολής στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες μεσαίου και μεγάλου μεγέθους μορίων (π.χ. φουλερενικών παραγώγων, [36], διθειολενικών παραγώγων [1,3,9,18,31] και ιδιαίτερα τεχνικών που είναι κατάλληλες για μόρια που περιλαμβάνουν δονήσεις μεγάλου εύρους.

(γ) Υπολογισμός της σχετικιστικής διόρθωσης στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες και στις οπτικές ιδιότητες (φάσμα). [33,40,41,46, 47, 49] Είναι γνωστό ότι οι χημικές και φυσικές ιδιότητες μορίων και υλικών εξαρτώνται από τη σχετικιστική διόρθωση. Η σημασία της διόρθωσης αυτής αυξάνεται με τον ατομικό αριθμό του βαρέως μετάλλου. Για τις ΜΓΟ ιδιότητες η επίδραση αυτή υπολογίστηκε και τεκμηριώθηκε για πρώτη φορά. Από τη βιβλιογραφία προκύπτει, ότι όλες οι προηγούμενες θεωρητικές/υπολογιστικές μελέτες των ΜΓΟ ιδιοτήτων είχαν διεξαχθεί χωρίς τη σχετικιστική διόρθωση. Οι εργασίες που δημοσιεύτηκαν

αποκαλύπτουν τη μεγάλη σημασία της συμβολής της σχετικιστικής διόρθωσης για τις ΜΓΟ ιδιότητες παραγώγων με βαριά μέταλλα.

(δ) Αξιοποίηση τεχνικών με την εφαρμογή της μεθόδου του συναρτησιοειδούς πεδίου (Density Functional Theory) για τον υπολογισμό αξιόπιστων Γ&ΜΓΟ ιδιοτήτων δομών μεγάλου μοριακού μεγέθους οι οποίες έχουν μεγάλο ενδιαφέρον στις εφαρμογές (π.χ. παραγώγων του φουλερενίου, πολυαρωματικών υδρογονανθράκων, γραφενίου) που απαιτούν ειδικό χειρισμό, δι-ριζικών (diradicals) κλπ [π.χ 1,3,5,7,9,10,16,18,19,25,31,30].

(ε) Συσχέτιση των ιδιοτήτων α , β και γ μορίων που αποτελούν μέρος ενός στερεού ή υγρού με τις αντίστοιχες των ιδίων παραγώγων που βρίσκονται στην αέριο κατάσταση. Λεπτομερής ανάλυση και υπολογισμός του τοπικού πεδίου υπό την επίδραση του οποίου βρίσκονται τα μόρια (π.χ. ακετονιτρίλιο) έχει διεξαχθεί. [21,36, 37,44]

(στ) Διερεύνηση μηχανισμών για τη σχεδίαση καινοτόμων φωτονικών δομών, σε μοριακό επίπεδο, με αξιόλογη μη γραμμική οπτική απόκριση. [1,3,4,7,9,10,16,17,20, 22,23,26,27,31,36,42, 11.11.4]

(ζ) Σχεδιασμός δομών με ενισχυμένη μη γραμμική οπτική απόκριση. [1,3,4,7,9,10,15,18,25,27,29,30,31,34,42]

(η) Εφαρμογή εξ' υπαρχης (*ab initio*) μεθοδων της κβαντικής φυσικής/χημείας για τη μελέτη συστημάτων βιολογικού ενδιαφέροντος στα οποία εξετάστηκαν επιλεγμένες φυσικοχημικές ιδιότητες οι οποίες συνδέονται με τη βιολογική ενεργότητα επιλεγμένων μοριακών προτύπων και νανοσωματίων. (σχήμα, μέγεθος, φάσμα, δόνηση, πόλωση, αρωματικότητα, ενέργεια αλλ/σης) [5,6,8,11,12,13,14,15]

Επιπλέον στόχος, κατ' αρχάς, ήταν να αναπτυχθεί/εφαρμοστεί περαιτέρω η θεωρία των δονητικών ιδιοτήτων και δεύτερον, να δείξουμε ότι Γ&ΜΓΟ ιδιότητες παραγώγων με αυξανόμενη πολυπλοκότητα θα μπορούσαν να προσδιορισθούν με επαρκή ακρίβεια λαμβάνοντας υπόψη όλες τις σημαντικές συμβολές. Κατά τη μελέτη των συμπεκνωμένων φάσεων (μοριακά υγρά) [37,44] ασχοληθήκαμε με την επίδραση του περιβάλλοντος στα μόρια, χρησιμοποιώντας διάφορες προσεγγίσεις. Συγκεκριμένα, εξετάστηκε πως οι ιδιότητες α , β και γ μορίων που αποτελούν μέρος ενός στερεού ή υγρού με τις αντίστοιχες των ιδίων παραγώγων που βρίσκονται στην αέριο κατάσταση. Δείξαμε πως πρέπει να λυθούν πολλά προβλήματα που συναντώνται κατά την μετάβαση από τις μικροσκοπικές στις μακροσκοπικές ιδιότητες, που απαιτούνται για την σχεδίαση και μελέτη φωτονικών υλικών. **Οι μέθοδοι για τον υπολογισμό των μακροσκοπικών επιδεκτικότητων $\chi^{(1)}$, $\chi^{(2)}$,**

$\chi^{(3)}$] των συμπυκνωμένων φάσεων που αναπτύξαμε στηρίζονται στην «μικροηλεκτροστατική» (microelectrostatic) προσέγγιση, η οποία υπολογίζει τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις με κλασσική ηλεκτροστατική, λαμβάνοντας υπόψη τη διακριτή (discrete) φύση του υλικού. Στην τεχνική που αναπτύχθηκε και χρησιμοποιήθηκε, οι μοριακές ιδιότητες υπολογίζονται με ακρίβεια χρησιμοποιώντας κβαντομηχανικές μεθόδους. Η τεχνική μας απαιτεί επίσης την δομή του υλικού. Οι μοριακές ιδιότητες και η δομή επιτρέπουν τον υπολογισμό των τοπικών ηλεκτρικών πεδίων επί των μορίων στη φάση που μελετάμε, εκ των οποίων υπολογίζουμε τις «τροποποιημένες» (effective) μοριακές ιδιότητες, δηλαδή τις ιδιότητες του μορίου υπό την επίδραση των πεδίων, που ασκούνται μέσα στο υλικό. Τελικά χρησιμοποιώντας τις τροποποιημένες (effective) ιδιότητες και τη δομή υπολογίζουμε τις μακροσκοπικές ιδιότητες.

Επιπλέον, διερευνήθηκαν μηχανισμοί οι οποίοι συνδέονται με την ενίσχυση της ΜΓΟ συμπεριφοράς των μοριακών υλικών [1,3,4,7,9,17,27,31,42,11.11.4] τα οποία αποτελούν τις βασικές μονάδες επί τη βάση των οποίων αναπτύσσονται τα φωτονικά υλικά.

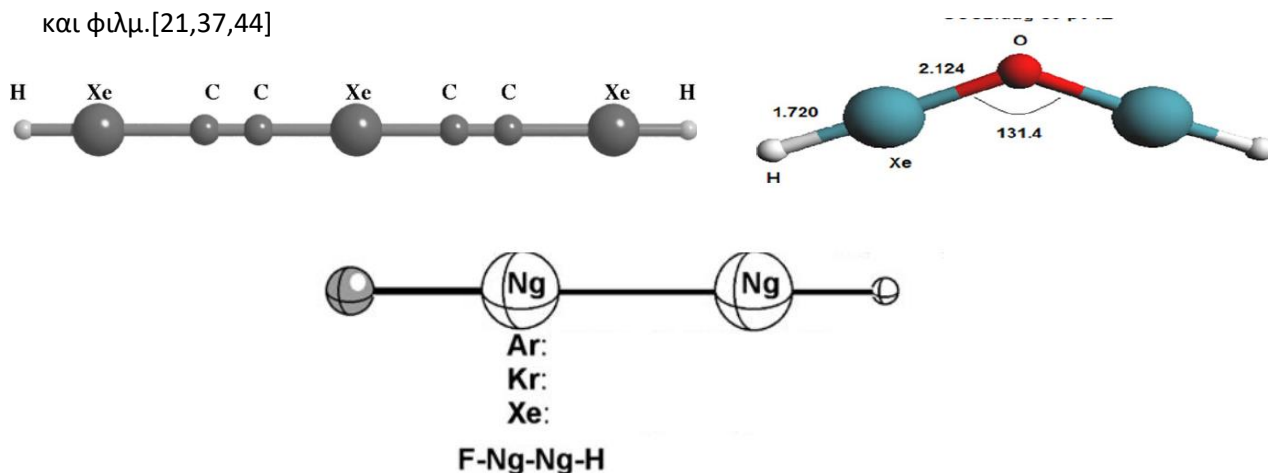
Τα αποτελέσματα των υπολογισμών των επιστημονικών εργασιών μου επιβεβαιώνουν ότι είναι δυνατόν να υπολογισθούν οι Γ&ΜΓΟ ιδιότητες μορίων, συγκροτημάτων (clusters), πολυκυκλικών αρωματικών υδρογοναθράκων, φουλερενίων, παραγώγων του γραφενίου και συμπυκνωμένων φάσεων (μοριακά υγρά, υμένια-φιλμ) με ικανοποιητική ακρίβεια και με αποδεκτό υπολογιστικό κόστος. Είναι γνωστό ότι ο πειραματικός προσδιορισμός των ΜΓΟ ιδιοτήτων είναι δαπανηρός και πολύπλοκος, ενώ συχνά οι πειραματικές μετρήσεις χαρακτηρίζονται από μεγάλο σφάλμα. **Οι υπολογιστικές τεχνικές που αναπτύχθηκαν** σε συνεργασίες με συνεργάτες-ερευνητές και χρησιμοποιούνται επιτρέπουν τον έλεγχο της τιμής μεγάλου αριθμού παραγώγων σε σχετικά μικρό χρόνο και ακολούθως τον περισσότερο αξιόπιστο υπολογισμό των συστημάτων που θα επιλεγούν.

Ακολούθως παρατίθενται οι θεματικές περιοχές των επιστημονικών δημοσιευμάτων επί τη βάση των οποίων θα δοθεί η παρουσίαση και ανάλυση του επιστημονικού έργου:

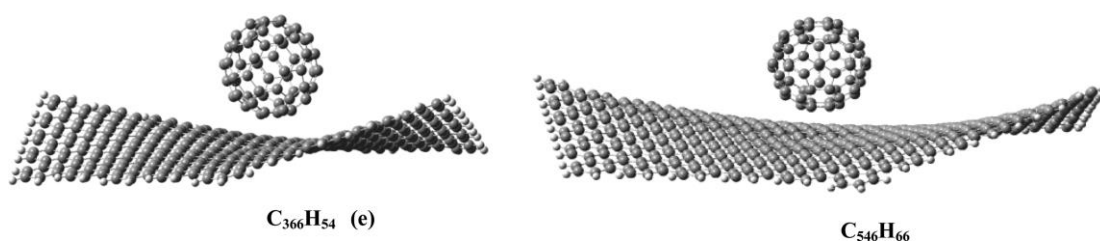
A. Μελέτη μη Γραμμικής Οπτικής Αποκρισης

1. Μοριακές δονήσεις και μη γραμμικές ηλεκτρικές ιδιότητες. [π. χ 1,3,9,20,25,26,30]
2. Σχετικιστική διόρθωση στις ΜΓΟ ιδιότητες [π.χ 33,41,40,49]
3. **Ανάπτυξη και χρήση προηγμένων τεχνικών της υπολογιστικής Φυσικής/Χημείας** στον ακριβή προσδιορισμό των μοριακών γραμμικών και μη γραμμικών ηλεκτρικών ιδιοτήτων, ηλεκτρονικού φάσματος, μοριακής δομής, ηλεκτρονικής απεικόνισης. [π.χ 17, 24, 25,27,31,33,35,37,42,45,46,49]

4. Διαμοριακές αλληλεπιδράσεις και μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες. [10,39,40,41,47].
5. Εφαρμογή της θεωρίας του συναρτησιοειδούς πεδίου για τη θεωρητική μελέτη μοριακών δομών με ειδικές μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες. [π.χ 1,16,17,18,25,31,32,34,36,38]
6. Ανάπτυξη μεθοδολογίας για τη διερεύνηση των μηχανισμών μεταξύ των οπτικών μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων και των δομικών/μορφολογικών, ηλεκτρονικών χαρακτηριστικών των μοριακών υλικών. [π. χ 3, 9, 24, 27,31,36,37,42]
7. Μελέτη δομικών, οπτικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων.[π.χ. 1,3,4,6,9,16,18,26,34,36,39-43]
8. Γραμμικές και μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες συσσωματωμάτων και νανοσωματιδίων.[3,9,10,16,22,40,41]
9. Θεωρητικός προσδιορισμός γραμμικών και μη γραμμικών επιδεκτικότητας υγρών και φιλμ.[21,37,44]



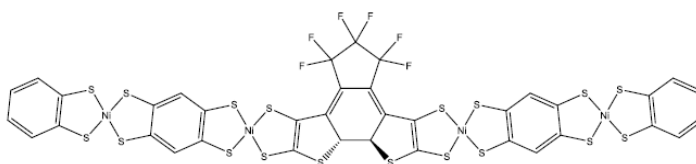
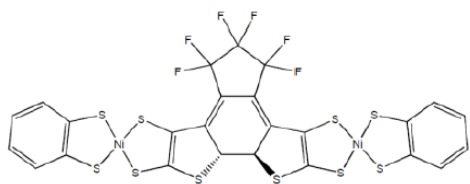
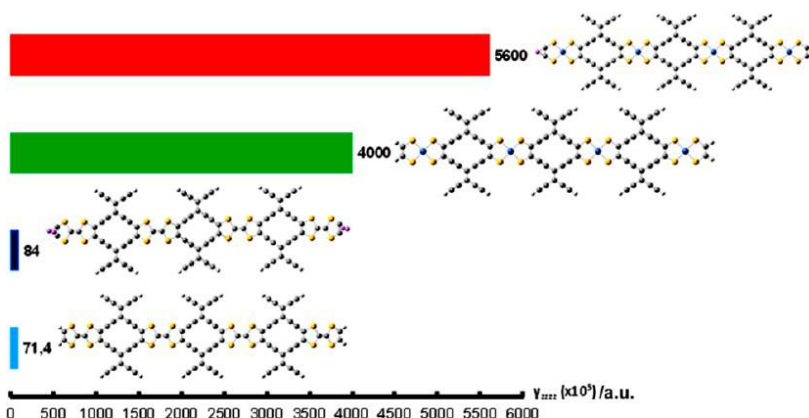
Δομές μοριακών παραγώγων με άτομα ευγενούς αερίου.



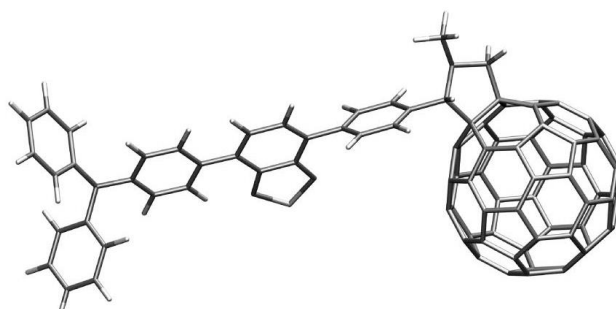
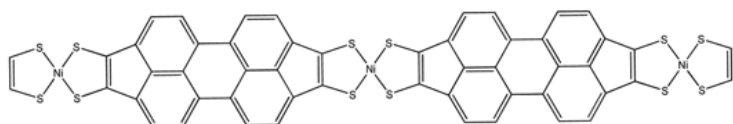
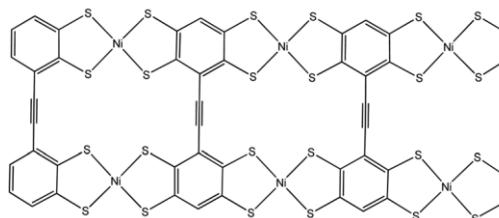
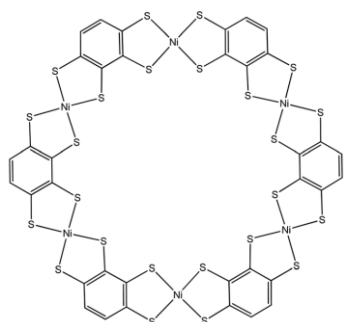
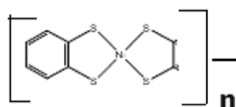
Μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες αλληλεπιδρώντων νανοσωματιδίων.

Β. Σχεδιασμός Μοριακών Δομών με Ενισχυμένη μη Γραμμική Οπτική Απόκριση

1. Ορθολογικός σχεδιασμός μοριακών δομών με αξιόλογες-ενισχυμένες μη γραμμική οπτική απόκριση με εφαρμογές στη μοριακή ηλεκτρονική. [1,3,4,7,9,16,22,29,30,34]
2. Μελέτη της επίδρασης της υποκαταστάσης στις ηλεκτρικές ΜΓΟ ιδιότητες.[1,4,7,9,16,30,31,34, 38,42]
3. Σχέση δομής – πόλωσης, ηλεκτρονικής απεικόνισης (περιγραφή της κυματοσυνάρτησης της δομής) και ηλεκτρικών ιδιοτήτων.[π.χ 1,3,9,10,16,18,22,30,31,35,36,39,40,41,43]



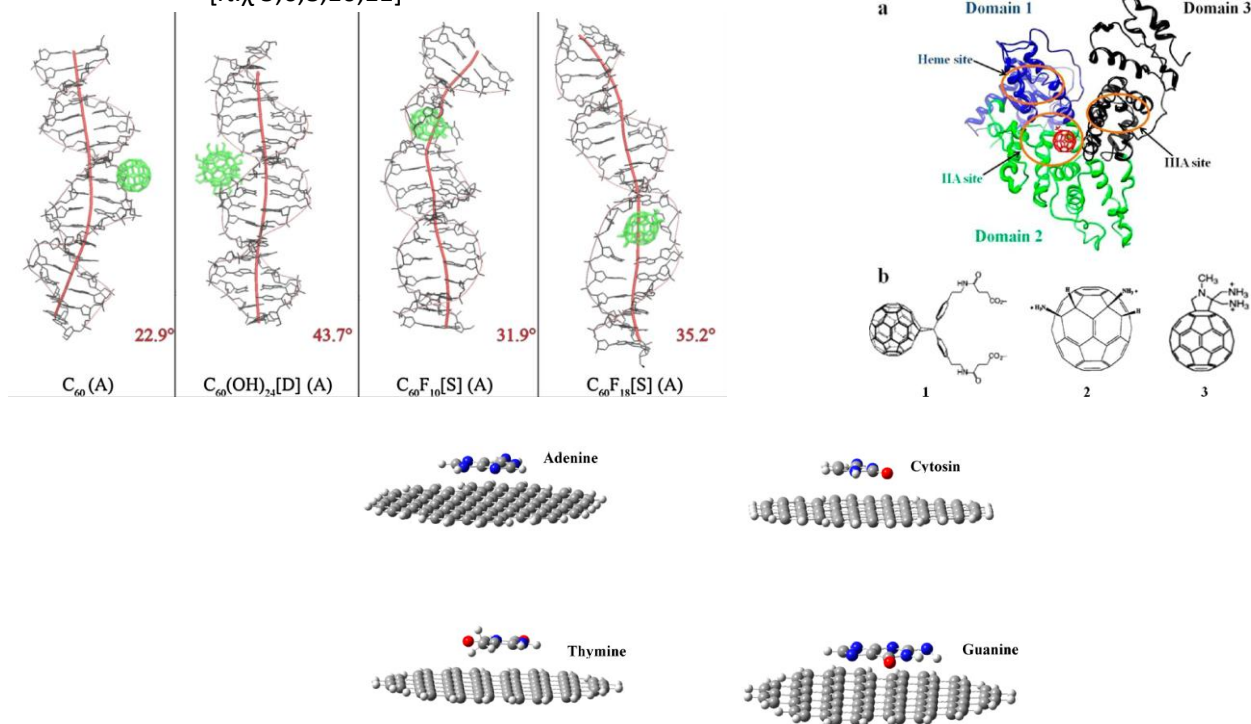
B-NiBDT



Δομές Μοριακών Υλικών με υψηλές μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες.

Γ. Εφαρμογή Υπολογιστικών Τεχνικών για τη Μελέτη Βιολογικών Συστημάτων

1. Φυσικοχημικές ιδιότητες, αλληλεπιδράσεις και φαρμακολογική δράση νανοσωματίων (παραγώγων του φουλερενίου, γραφενίου, συσσωματώματα οξειδίου των μετάλλων) [π.χ 5,6,8,10,11]



Αλληλεπιδράσεις νανοσωματιδίων με βιολογικά συστήματα.

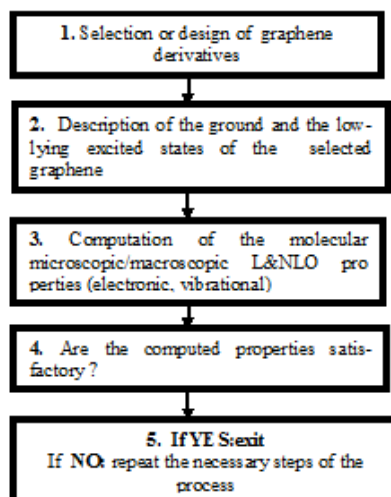
Μελλοντικές Ερευνητικές Κατευθύνσεις

A. Στόχος των μελλοντικών ερευνητικών δραστηριοτήτων είναι η ανάπτυξη μιας ολοκληρωμένης μεθοδολογίας/πρωτοκόλλου για τη συστηματική μελέτη και τον ακριβή προσδιορισμό των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων του γραφενίου και των παραγώγων του (Gs). Το πρωτόκολλο αυτό θα αξιοποιηθεί για τη σχεδίαση νέων Gs, με βελτιστοποιημένες ιδιότητες, ώστε να χρησιμοποιηθούν σε φωτονικές εφαρμογές.

Η ανάπτυξη του υπολογιστικού πρωτοκόλλου θα περιλαμβάνει μια σειρά από βήματα, τα οποία συνοψίζονται ως ακολούθως: **1) Επιλογή κατάλληλων δομών που θα έχουν ως βάση το γραφένιο.** Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί σε δομές οι οποίες θα περιλαμβάνουν: **α)** δότη/δέκτη (π.χ NH₂/NO₂, NH₂/CN), **β)** παράγωγα πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων τα οποία περιέχουν ετεροάτομα (π.χ. O, S, Se), **γ)** γραφένιο

το οποίο αλληλεπιδρά με μεταλλικό νανοσωματίδιο (Ni, Cu), **δ**) δομές nanoribbons γραφενίου των οποίων τα άκρα θα εμφανίζουν έντονα zig-zag ή armchair τμήματα. **2)** Επιλογή και ανάπτυξη κατάλληλης υπολογιστικής μεθόδου για την περιγραφή της βασικής κατάστασης και των χαμηλά κείμενων διηγεμένων καταστάσεων. **3)** Επιλογή κατάλληλων υπολογιστικών τεχνικών, στηριζόμενων σε εξ' ύπαρξης μεθόδους της κβαντικής φυσικής-χημείας, για τον ακριβή υπολογισμό των μικροσκοπικών και μακροσκοπικών γραμμικών και μη γραμμικών ιδιοτήτων (πρώτη/δεύτερη υπερπολωσιμότητα). Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στην επίδραση της δόνησης και του περιβάλλοντος καθώς και στον υπολογισμό της σχετικιστικής διόρθωσης (όπου χρειάζεται). **4)** Τα παραγόμενα θεωρητικά αποτελέσματα θα συγκριθούν με αντίστοιχα πειραματικά, προκειμένου να ελεγχθεί η αξιοπιστία της υπολογιστικής προσέγγισης.

Το προαναφερθέν πρωτόκολλο θα χρησιμοποιηθεί για το σχεδιασμό των παραγώγων με φωτονικές εφαρμογές, όπως οι οπτικοί περιοριστές (optical limiters) και ο κορεσμένος απορροφητής (saturable absorber). Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί σε παράγωγα: **1)** γραφενίων καθώς και στη χημική τροποποίησή τους, με στόχο την μεγιστοποίηση των αποκρίσεων και την ρύθμιση των ιδιοτήτων τους σε επιθυμητές και τεχνολογικά ενδιαφέρουσες φασματικές περιοχές, **2)** πρότυπα συστήματα πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων, **3)** και μονομεταλλικό νανοσωματίδιο (συστάδα) (π.χ Ni,Cu) το οποίο αλληλεπιδρά με την επιφάνεια γραφενίου.



Περιγραφή του προτεινόμενου υπολογιστικού πρωτοκόλλου

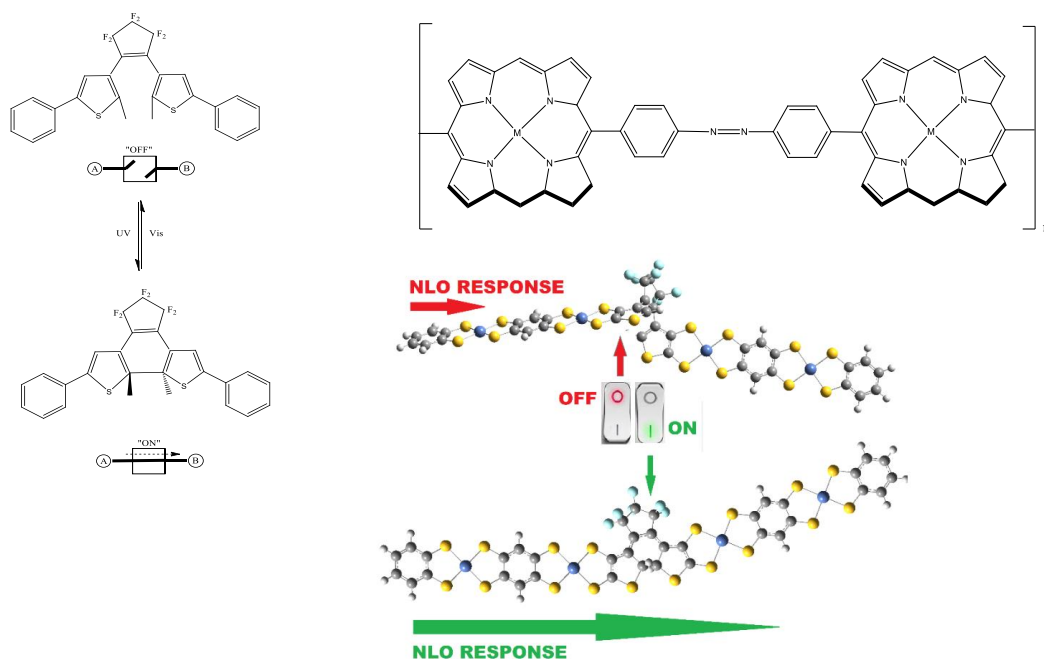
Όλες οι προαναφερθείσες δομές παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον ως προς την εν δυνάμει εφαρμογή τους για μη γραμμικά οπτικά υλικά καθώς και στην εφαρμογή τους σε οπτο-ηλεκτρονικές διατάξεις.

Στόχος του σχεδιασμού παραγώγων είναι η μελέτη των μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων τους και οι μηχανισμοί ρύθμισης αυτών με αποτέλεσμα το σχεδιασμό των νέων παραγώγων τα οποία αναμένεται να έχουν εξαιρετικά ενισχυμένη μη γραμμική οπτική απόκριση, χαρακτηριστικό το οποίο αποτελεί σημαντική παράμετρο σε διατάξεις με εφαρμογές στη σύγχρονη φωτονική τεχνολογία.

B. Non-Linear Optical switching: Υπολογιστικός Σχεδιασμός δομών με ελεγχόμενη μη γραμμική οπτική συμπεριφορά. Θεωρητική Σχεδίαση Μοριακών Φωτοδιακοπών για Εφαρμογή σε μη Γραμμικά Οπτικά Υλικά

Για το σχεδιασμό των δομών ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στη μεταβολή των υπερπολωσιμοτήτων: 1) στην επίδραση ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου (electric field induced open-shell NLO switch), 2) στη αλλαγή του φορτίου (RedOx) της δομής/υλικού, [π.χ 1,16,17]) εφαρμογή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε επιλεγμένη φασματική περιοχή, 3) σύνδεση αγωγιμότητας και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων.

Η σχεδίαση μιας σειράς παραγώγων τα οποία θα λειτουργούν ως μοριακοί διακόπτες είναι ιδιαίτερως σημαντική διότι υπό την επίδραση του φωτός θα λειτουργούν μεταξύ δύο



Δομές μοριακών διακοπών

καταστάσεων και δια αυτού του τρόπου θα μπορεί να μεταβληθεί σημαντικά η μη γραμμική οπτική συμπεριφορά των φωτονικών υλικών.

Τα υλικά θα αποτελούνται από δομές που παρουσιάζουν ενισχυμένη ΜΓΟ συμπεριφορά (molecular wires), οι οποίες προηγουμένως θα έχουν σχεδιασθεί. Τα πρώτα αποτελέσματα της σχεδίασης τέτοιων μοριακών υλικών, με υψηλή ΜΓΟ απόκριση και έντονη αντίθεση στη μη γραμμική οπτική συμπεριφορά τους, παρουσιάζονται στην εργασία με τίτλο: “*A Computational Strategy for the Design of Photochromic Derivatives Based on Diarylethene and Nickel Dithiolene with Large Contrast in Non-Linear Optical Properties*, *J. Phys. Chem C.*, **2020**”

Έμφαση θα δοθεί: **i)** Χαρακτηριστικά του μοριακού διακόπτη (switching characteristics) (π.χ οι ενέργειες διέγερσης, δομές και ιδιότητες στις διεγερμένες καταστάσεις, ομάδες με ενισχυμένη ΜΓΟ απόκριση) **ii)** επίδραση του περιβάλλοντος στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες των σχεδιασθέντων μοριακών διακοπτών, **iii)** υλοποίηση-ανάπτυξη της μεθοδολογίας και υπολογιστική μελέτη για τη σχεδίαση παραγώγων (επιλογή μεθόδων, βασικών συνόλων, συναρτησιοειδών).

Γ. Μελέτη δομών βιολογικού ενδιαφέροντος. Τοξικότητα νανοσωματιδίων και φυσικοχημικές ιδιότητες ,συνδυασμός κβαντομηχανικών ιδιοτήτων και μηχανικής μάθησης για την πρόβλεψη της τοξικότητας, ανάπτυξη βιο-φωτονικών δομών για την έγκαιρη διάγνωση ορισμένων μορφών καρκίνου αξιοποιώντας τον φθορισμό (fluorescence).