

ΑΓΓΕΛΟΣ ΑΒΡΑΜΟΠΟΥΛΟΣ
ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

1. ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

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

A. 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 πολωσιμοτήτων και υπερπολωσιμοτήτων» . 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://phdtheses.ekt.gr/eadd/handle/10442/22358)

<http://thesis.ekt.gr/thesisBookReader/id/22358#page/1/mode/2up>

B. Μετά την απόκτηση του διδακτορικού διπλώματος

1. 05/2004-/05/2018 μεταδιδακτορικός ερευνητής-συνεργάτης, μέσω συμβάσεων έργου με αμοιβή, στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, σ' έναν σημαντικό αριθμό ερευνητικών ανταγωνιστικών προγραμμάτων της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Στο χρονικό διάστημα από **15/06/2007 -17/08/2007** και **4/07/2011-4/08/2011** ως μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Institute de Quimica Computational i Catalisi, University of Girona, Spain, ενώ από **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.

2. Με το ΦΕΚ Γ 537/10-04-2019 διορισμός σε θέση μέλους Δ.Ε.Π., βαθμίδας Επίκουρου Καθηγητή με θητεία, στο γνωστικό αντικείμενο «Προηγμένες Υπολογιστικές Μέθοδοι για τη Σχεδίαση Υλικών με Σημαντική μη Γραμμική Οπτική Απόκριση», του πρώην Τμήματος Μηχανικών Πληροφορικής Τ.Ε. της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών (Σ.Τ.ΕΦ.) του πρώην

Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Στερεάς Ελλάδας και ένταξη στο Γενικό Τμήμα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας στη Λαμία. Με Πράξη του Πρύτανη του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, η οποία δημοσιεύτηκε στο Φ.Ε.Κ. 410/10-04-2020 τ. Γ', μετακίνηση από την οργανική θέση επί θητεία Επίκουρου Καθηγητή, του Γενικού Τμήματος με έδρα τη Λαμία του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, σε οργανική θέση επί θητεία του Τμήματος Φυσικής της Σχολής Θετικών Επιστημών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, στην ίδια βαθμίδα και με το ίδιο γνωστικό αντικείμενο και ανέλαβε καθήκοντα στις 15-04-2020.

Με το **ΦΕΚ 2114/31-08-2022** μονιμοποίηση στη Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή.

2. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑ

Ερευνητικά ενδιαφέροντα:

- Υπολογιστική κβαντική χημεία και ηλεκτρικές ιδιότητες ανόργανων και οργανικών ενώσεων.
- Σχεδιασμός ενώσεων/μοριακών δομών με ενισχυμένες μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες.
- Μοριακή Μοντελοποίηση-μοριακή σχεδίαση υλικών για εφαρμογές.
- Μελέτη της σχέσης δομής-πόλωσης μοριακών υλικών και των μηχανισμών που διέπουν τη συσχέτισή τους.

Το σύνολο του ερευνητικού έργου καλύπτει τη Θεωρητική μελέτη της δομής, της ηλεκτρονιακής απεικόνισης ατόμων, μορίων και συσσωματωμάτων (οργανικών ή/και ανόργανων) και του προσδιορισμού οπτικών ιδιοτήτων, φασμάτων (UV-Vis), δονήσεων (IR,Raman), με εφαρμογή προχωρημένων μεθόδων (μεθόδων πρώτης αρχής) της κβαντικής φυσικής και χημείας. Ιδιαίτερη βαρύτητα δίνεται στην ανάπτυξη και εφαρμογή τεχνικών της υπολογιστικής φυσικής-χημείας για τη μελέτη των μηχανισμών και συμβολών που οδηγούν στο σχεδιασμό νέων ενώσεων, μοριακών δομών, νανοδομών με ενισχυμένες μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες, αλλά και στη μελέτη της αλληλεπίδρασης δομών βιολογικού ενδιαφέροντος με φάρμακα.

Εκτεταμένη εμπειρία στην εφαρμογή *ab-initio* μεθόδων της υπολογιστικής χημείας (π.χ. DFT, CCSD, TDDFT, CASSCF/PT2), στη χρήση επιστημονικών λογισμικών (π.χ GAUSSIAN, GAMESS, NWCHEM, MOLCAS, DALTON, AIM) για τη διεξαγωγή επιστημονικών υπολογισμών, σημαντική εμπειρία στη χρήση υπολογιστικών συστημάτων υψηλής απόδοσης καθώς και δεξιότητες στην ανάπτυξη προγραμματιστικών εφαρμογών σε FORTRAN και περιβάλλον Linux (C, Bourne, Korn,) για υπολογιστικές εφαρμογές.

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 ακολούθων 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. 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 Design of Novel Photonic Materials (επιστημονικός υπεύθυνος), 2600000 core hours (<https://hpc.grnet.gr/awarded/production/6th-production-call/>)

Συμμετοχή σε ανταγωνιστικά ερευνητικά προγράμματα (2004-2018, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών), μετά τη λήψη του διδακτορικού διπλώματος:

1. 1/6/2004 -28/2/2005 **02 ΠΡΑΞΕ44**, « συμμετοχή στη συγγραφή των υπομνημάτων και της πιλοτικής 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 EURODESY*» **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-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
6. 1/10/2008 -31/12/2008 **MEST-CT-2005-020575, EURODESY**, «*ανάπτυξη μεθόδων για τη σχεδίαση φαρμάκων*», **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
1/12/2009 -31/1/2010
7. 1/1/2009 -30/11/2009 **MTKD-CT-2006-042488**, Fullerene Derivatives for Photonic Applications, Design, Synthesis and Measurements, Marie-Curie Actions, (FDPA), « *υπολογισμός των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων φωτονικών υλικών* », **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
1/2/2010 -30/9/2010
8. 1/10/2010-31/12/2010 **FP7 CAPACITIES, GA 261499**,“High performance computing infrastructure for South East Europe’s Communities” « *υπολογισμός των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων φωτονικών υλικών* », **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
1/1/2011 -31/12/2011
1/1/2012 -31/8/2012
9. 1/10/2012-31/1/2013 **FP7-PEOPLE-2011-IRSES, No PIR SES-GA-2011-295128**, “Building bridges between specialists on computational and empirical risk assessment of engineered nanomaterials – **Nano BRIDGES**, «*υπολογισμός των γραμμικών και μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων των νανοσωματίων*» , **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
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 (WP3: NanoiNTER)**

11. 1/9/2015-30/10/2015 **ΣΘΕΝΟΣ, ΚΡΗΠΙΣ**, research grant « *In silico* μελέτες με ιδιαίτερη έμφαση στην εκτέλεση κβαντομηχανικών υπολογισμών », **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
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-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
13. 1/3/2016-30/4/2016 **Υπολογιστική Χημεία**, «υπολογισμός μη γραμμικών ιδιοτήτων », **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
14. 1/10/2016-28/2/2017 **Υπολογιστική Χημεία**, «υπολογισμός μη γραμμικών ιδιοτήτων παραγώγων για φωτονικές εφαρμογές », **Συνεργάτης ερευνητής-Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
15. 1/4/2018-31/5/2018 **Υπολογιστική Χημεία**, «υπολογισμός των μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων βιομορίων», **Συνεργάτης ερευνητής, -Μέλος Ερευνητικής Ομάδας**
16. 29/11/2018-29/11/2019 **ARIS, GRNET**, 6th Call for Production Projects Accessing ARIS, PHOTMAT Design of Novel Photonic Materials (**επιστημονικός υπεύθυνος**), 2600000 core hours (**Στη Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή**)

Σε όλα τα ανωτέρω προγράμματα (1-15) συμμετοχή μέσω συμβάσεων έργου με αμοιβή, όπως προκύπτει από την υποβληθείσα βεβαίωση του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών με Α.Π: 1606/4/4/2018.

Υποβολή ως επιστημονικός υπεύθυνος, ερευνητικής πρότασης στα πλαίσια της 1^{ης} Προκήρυξης ερευνητικών έργων ΕΛΙΔΕΚ για την ενίσχυση Μεταδιδακτόρων Ερευνητών/τριών, 31/3/2017, με τίτλο (αριθμός 24): *Design of Novel Derivatives for Photonic Applications: A Proof-of-concept study*, (βαθμολογία, **82.5/100**).

Ως Επίκουρος Καθηγητής του τμήματος Φυσικής συμμετοχή ως μέλος της ερευνητικής ομάδας από την Ελληνική πλευρά στο πρόγραμμα **COST: Proposal Reference OC-2021-1-25045** Title: *CONFINED MOLECULAR SYSTEMS: FROM A NEW GENERATION OF MATERIALS TO THE STARS*, το οποίο έγινε δεκτό, κατόπιν αξιολόγησης, στις 30/5/2022 (βαθμολογία 46/50). <https://www.cost.eu/actions/CA21101/>

Στα πλαίσια της 2ης Προκήρυξη Ερευνητικών Έργων ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. για την ενίσχυση Μελών ΔΕΠ και Ερευνητών/τριών (8/1/2020), , ως Επίκουρος Καθηγητής επί Θητεία, συμμετοχή ως μέλος της Ερευνητικής Ομάδας και υπεύθυνος πακέτου εργασίας, στην πρόταση που υπεβλήθη με τίτλο: *A Computationally Guided Design of Light Induced Switches for Polarization and Conductance: A Proof-of-Concept Study* , όπως προκύπτει από την επιστολή προθέσεων της επιτροπής ερευνών του Π.Θ (Letter of Intent) , 14279/30/4/2020.

3. ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΕΡΓΟ

I. ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

- 2004-2005** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Εργαστηριακός Συνεργάτης με μεταπτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο
1. Ηλεκτρονική Φυσική (*Εργαστήριο*)
 2. Μικροεπεξεργαστές-Μικροελεγκτες (*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** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Εργαστηριακός Συνεργάτης με μεταπτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο
1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (*Εργαστήριο*)
 2. Εισαγωγή στα Ηλεκτρικά Κυκλώματα (*Εργαστήριο*)
- 2007-2008** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών.
Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο
1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (**Θεωρία και Εργαστήριο**).
- 2008-2009** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών.
Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο
1. Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (**Θεωρία και Εργαστήριο**).

- 2009-2010** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα
προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή
Εφαρμογών
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα II (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα II (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
2. Μικροεπεξεργαστές-Μικροελεγκτές (**Θεωρία**).
- 2010-2011** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα
προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή
Εφαρμογών
Χειμερινό Εξάμηνο και Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα II (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- 2011-2012** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με
διδακτορικό/μεταπτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα II (**Εργαστήριο**)
Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα I (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- 2012-2013** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με
διδακτορικό/μεταπτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα II (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα I (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- 2013-2014** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα
προσόντα του Επικουρου Καθηγητή/Καθηγητή
Εφαρμογών
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ηλεκτρονική Φυσική (**Θεωρία**)
2. Ψηφιακά Συστήματα II (**Εργαστήριο**)
Εαρινό Εξάμηνο
1. Ολοκληρωμένα Κυκλώματα Μεγάλης Κλίμακας

(**Θεωρία και Εργαστήριο**)

2. Ψηφιακά Συστήματα I (**Εργαστήριο**)

- 2014-2015** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών
- Χειμερινό Εξάμηνο**
1. Ηλεκτρονική Φυσική (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
 2. Φυσική (**Θεωρία**)
- Εαρινό Εξάμηνο**
1. Ολοκληρωμένα Κυκλώματα Μεγάλης Κλίμακας (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
 2. Ψηφιακά Συστήματα I (**Εργαστήριο**)
- 2015-2016** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών
- Χειμερινό Εξάμηνο**
1. Ηλεκτρονική Φυσική (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- Εαρινό Εξάμηνο**
1. Ψηφιακά Συστήματα I (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- 2016-2017** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών
- Χειμερινό Εξάμηνο**
1. Ηλεκτρονική Φυσική (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
- Εαρινό Εξάμηνο**
1. Ψηφιακά Συστήματα I (**Θεωρία**)
 2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (**Θεωρία και εργαστήριο**)
- 2017-2018** Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών
- Χειμερινό Εξάμηνο**
1. Ηλεκτρονική Φυσική (**Θεωρία και Εργαστήριο**)
 2. Ψηφιακά Συστήματα II (**Εργαστήριο**)
- Εαρινό Εξάμηνο**
1. Ψηφιακά Συστήματα I (**Θεωρία και Εργαστήριο**)

2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (**Θεωρία**)

2018-2019	Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με τα προσόντα του Επίκουρου Καθηγητή/Καθηγητή Εφαρμογών Χειμερινό Εξάμηνο <ol style="list-style-type: none">1. Ηλεκτρονική Φυσική (Θεωρία και Εργαστήριο)2. Εισαγωγή στα Συστήματα Η/Υ (Θεωρία) Εαρινό Εξάμηνο <ol style="list-style-type: none">1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (Θεωρία και Εργαστήριο)2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (Θεωρία)
------------------	---

II. ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

1. Διδασκαλία Προπτυχιακών Μαθημάτων.

A. ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

2020-2021

Χειμερινό Εξάμηνο: Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ.

Εαρινό Εξάμηνο: Εργαστήριο Φυσικής ΙV

Ως μέλος ΔΕΠ του τμήματος Φυσικής ο Κος Αβραμόπουλος (σύμφωνα με το υποβληθέν υπόμνημα μονιμοποίησης) ανέπτυξε και υλοποίησε για τα εργαστήρια του τμήματος φυσικής ΙΙΙ,ΙV τις ακόλουθες ασκήσεις:

- **Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ:** Ανάπτυξη και υλοποίηση εργαστηριακών δραστηριοτήτων για τις ασκήσεις: Πηνία Helmholtz, Κυκλώματα Συνεχούς Ρεύματος, Κυκλώματα, RL, RL,RLC στο εναλλασσόμενο. <https://www.phys.uth.gr/mathimata/mathima-31005/>
- **Εργαστήριο Φυσικής ΙV:** Ανάπτυξη και υλοποίηση εργαστηριακών δραστηριοτήτων για τις ασκήσεις: Φάσμα Υδρογόνου και Υδρογονοειδών, Απειρόβαθο Πηγάδι Δυναμικού, Κβαντικός Αρμονικός Ταλαντωτής. <https://www.phys.uth.gr/mathimata/mathima-41005/>

2021-Σήμερα

Χειμερινό Εξάμηνο: Γενική Φυσική Ι, Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ

Εαρινό Εξάμηνο: Κβαντική Μηχανική ΙΙ, Εργαστήριο Φυσικής ΙV

B. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ Τ.Ε

2019-2020

Χειμερινό Εξάμηνο: Ηλεκτρονική Φυσική (Θεωρία και Εργαστήριο), Εισαγωγή στα Συστήματα Υπολογιστών (Θεωρία), Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (Εργαστήριο)

Εαρινό Εξάμηνο: Ψηφιακά Συστήματα Ι (Θεωρία και Εργαστήριο), Σχεδίαση Κυκλωμάτων με Η/Υ (Θεωρία)

2020-2021

Χειμερινό Εξάμηνο: Συστήματα Μετρήσεων (Θεωρία και Εργαστήριο), Ανάπτυξη Ψηφιακών Συστημάτων (Θεωρία)

Εαρινό Εξάμηνο: Σχεδίαση Κυκλωμάτων με Η/Υ (Θεωρία)

2021-2022

Χειμερινό Εξάμηνο: Ανάπτυξη Ψηφιακών Συστημάτων (Θεωρία)

2. Διδασκαλία Μεταπτυχιακών Μαθημάτων.

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ, Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών: Εφαρμοσμένη Φυσική.

2021-2022

Χειμερινό Εξάμηνο: Φυσική-Χημεία των υλικών (13 Διαλέξεις), Υπολογιστικές Τεχνικές και Αλγόριθμοι (3 διαλέξεις)

Εαρινό Εξάμηνο: Επιστημονικοί Υπολογισμοί στην Επιστήμη των Υλικών (5 Διαλέξεις).

2. ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΩΝ ΔΙΑΤΡΙΒΩΝ

Κατά τη διάρκεια της θητείας μου ως μέλος ΔΕΠ (2009-σήμερα) έχω επιβλέψει επιτυχώς, στο πρόγραμμα σπουδών Μηχανικών Πληροφορικής, 2 πτυχιακές εργασίες, ενώ σε εξέλιξη είναι η επίβλεψη 14 πτυχιακών εργασιών. **Πριν το διορισμό ως μέλος ΔΕΠ**, και με την ιδιότητα του επιστημονικού/εργαστηριακού συνεργάτη στο πρώην τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, έχω επιβλέψει συνολικά 21 πτυχιακές εργασίες

Στο τμήμα της Φυσικής: 1.) κύριος Επιβλέπων της εν εξελίξει Διδακτορικής Διατριβής, του Ευθύμιου Μανταλόβα με τίτλο: *“Διδακτική της Φυσικής με Εφαρμογές Μεθόδων Γεφύρωσης του Φυσικού και Ψηφιακού Χώρου, Physical Computing”* Ημερομηνία Ανάθεσης: 25-01-2021 (Συνέλευση Τμήματος: 3^η/20-01-2021), **2.)** μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των ακολούθων, εν εξελίξει, διδακτορικών διατριβών:

1. Ιωάννου-Σουλγερίδη Ελένη: *Ενσωμάτωση Τεχνολογιών Τεχνικής Νοημοσύνης στη διδασκαλία των θετικών επιστημών σε μαθητές της Δευτεροβάθμιας Εκπαίδευσης*, Ημερομηνία Ανάθεσης 11-11-2020 (32^η/5-11-2020)

2. Τσιλιούκας Στυλιανός Αδάμ: *“Τροποποιημένες Θεωρίες Βαρύτητας και Κοσμολογία”* Ημερομηνία Ανάθεσης, 2-06-2021 (15^η/25-5-2021)

3. Ταχούλα Ασημούλα: *“Η διερεύνηση «σύγχρονων» στρατηγικών στη Διδασκαλία της Χημείας”* Ημερομηνία Ανάθεσης, 13-12-2021 (30^η /8-12-2021)

4. ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΗ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑ

A. ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΤΑΚΤΙΚΟ ΜΕΛΟΣ ΤΩΝ ΑΚΟΛΟΥΘΩΝ ΕΠΙΤΡΟΠΩΝ (38^η /2-03-22 Επικαιροποίηση της Συνέλευσης του Τμήματος Φυσικής, Θέμα 6^ο , Α.Π: 303/1/04/2022):

1. Προγράμματος οδηγού σπουδών, πιστοποίησης Οδηγού Σπουδών
2. Ομάδα Εσωτερικής Αξιολόγησης του Τμήματος / ΟΜΕΑ
3. Ετήσια επικουρική επιτροπή. εμ/νων για την αξιολόγηση διαγωνισμών
4. Ενημερώσεις αποφοίτων λυκείου πασχόντων από ΣΑ
5. Φοιτητικών θεμάτων (& υποδοχής πρωτοετών), ΔΣ
6. Προγράμματος Μεταπτυχιακών και Διδακτορικών Σπουδών (* Αποτελεί μετεξέλιξη της επιτροπής Μεταπτυχιακών Σπουδών)
7. Βιβλιοθήκης
8. Επιτροπή παρακολούθησης δημοσιευμάτων και εκδηλώσεων
9. Υπεύθυνος καταχώρισης των δεδομένων του τμήματος Φυσικής στο σύστημα ΟΠΕΣΠ
10. Αναπληρωματικό μέλος της επιτροπής καταγραφής των αναγκών για εκπαιδευτικούς και ερευνητικούς χώρους των τεσσάρων (4) Τμημάτων της Σχολής Θετικών Επιστημών, ορισθείσα κατά την 28η/15.12.2021 Συνεδρίαση της Κοσμητείας της Σχολής Θετικών Επιστημών.
11. **Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών Εφαρμοσμένη Φυσική:** Σύμφωνα με 335/15/04/2022 έγγραφο του τμήματος Φυσικής: **1.** Μέλος της Συντονιστικής Επιτροπής (Συνέλευση Τμήματος Φυσικής:13ης /21-04-2021, Θέμα 1^ο) , **2.** Μέλος της Επιτροπής Επιλογής Υποψηφίων (Συνέλευση Τμήματος Φυσικής: 17ης /16-06-2021, Θέμα 3.2)
12. **Συμμετοχή σε επιτροπές κρίσης και αξιολόγησης**
Τμήμα Φυσικής
 - I. Μέλος σε επιτροπές αξιολόγησης για την πρόσληψη διδασκόντων των ακόλουθων κατηγοριών: ακαδημαϊκών υποτρόφων, Π. Δ 407/80, πανεπιστημιακών υποτρόφων.
 - II. Μέλος σε επιτροπές αξιολόγησης επιλογής διδακτορικών φοιτητών και μεταδιδακτορικών ερευνητών στο τμήμα Φυσικής.

Με το πρακτικό της 29ης /25-11-2021 (Θέμα 3ο) συνέλευσης του τμήματος Φυσικής, ορίστηκε **συντονιστής του εργαστηρίου κατεύθυνσης:** Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης.

Β. Π.Σ Μηχανικών Πληροφορικής:

- I. Μέλος της επιτροπής πρακτικής άσκησης των φοιτητών του (Πρακτικό 95/14-9-2021 (Θέμα 9.1)),
- II Μέλος της τριμελούς επιτροπής για την αξιολόγηση των Ακαδημαϊκών Υποτρόφων για το Ακαδημαϊκό έτος 2019-20.
- III. Υπεύθυνος για την υλοποίηση του ωρολογίου προγράμματος σπουδών και του προγράμματος των εξεταστικών περιόδων (2020-σήμερα, σύμφωνα με το υποβληθέν υπόμνημα μονιμοποίησης).

5. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ

A. ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΤΙΤΛΟΣ: ΠΟΛΩΣΙΜΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΥΠΕΡΠΟΛΩΣΙΜΟΤΗΤΕΣ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

<http://thesis.ekt.gr/thesisBookReader/id/22358#page/1/mode/2up>

Στη διδακτορική διατριβή εξετάστηκαν με τη βοήθεια μεθόδων της κβαντικής φυσικής-χημείας ορισμένα ζητήματα που αφορούν την πολωσιμότητα και τις υπερπολωσιμότητες – πρώτη και δεύτερη – επιλεγμένων μοριακών συστημάτων. Σκοπός της μελέτης αυτής ήταν η κατανόηση αυτών των μοριακών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι ιδιαίτερα σημαντικές για τη δημιουργία μη γραμμικών οπτικών υλικών, τα οποία έχουν πολλές τεχνολογικές εφαρμογές. Χρησιμοποιώντας μερικές από τις πιο ακριβείς μεθόδους, όπως είναι οι CCSD(T), CASSCF, CASPT2 και η Douglas – Kroll προσέγγιση, μελετήθηκαν οι ηλεκτρονιακές συμβολές στην πολωσιμότητα και τις υπερπολωσιμότητες, ενώ οι δονητικές τους ιδιότητες εξετάστηκαν χρησιμοποιώντας τις μεθόδους των Bishop – Kirtmann και Numerov – Cooley.

Τα αποτελέσματα της διατριβής συνοψίζονται ως ακολούθως: i) Η ηλεκτρονιακή συσχέτιση (electron correlation) έχει ιδιαίτερα σημαντική επίδραση τόσο στις ηλεκτρονιακές όσο και στις δονητικές ιδιότητες. Η ηλεκτρονιακή συσχέτιση και το βασικό σύνολο αποτελούν τους δύο βασικούς παράγοντες από τους οποίους εξαρτάται η ποιότητα των θεωρητικών αποτελεσμάτων. ii) Η χρησιμοποίηση των βασικών συνόλων P_{01} του Sadlej και των συνεργατών του, όπως και τα αντίστοιχα του Dunning και των συνεργατών του (aug-cc-pVNZ, όπου N=D,T,Q,5 και d-aug-cc-pVDZ, N=D,T) δίνουν ικανοποιητικές τιμές ηλεκτρικών ιδιοτήτων. Ειδικότερα, προτείνονται τα βασικά σύνολα P_{01} , διότι ενώ είναι σχετικά μικρά δίνουν αξιόπιστες τιμές. iii) Διαπιστώθηκε ότι οι ηλεκτρονιακές ιδιότητες εξαρτώνται περισσότερο από τις αντίστοιχες δονητικές, από το βασικό σύνολο. Οι δονητικές συνιστώσες των ηλεκτρικών ιδιοτήτων είναι μεν συνήθως, μικρότερες από τις αντίστοιχες ηλεκτρονιακές, αλλά πρέπει να λαμβάνονται υπόψη όταν αποσκοπούμε στον ακριβή υπολογισμό των ηλεκτρικών ιδιοτήτων. iv) Στο σύνολο των υπολογισμών που διεξήχθησαν παρατηρήθηκε ότι οι ηλεκτρονιακές και οι δονητικές συνιστώσες των ηλεκτρικών ιδιοτήτων είναι ευαίσθητες στη δομή.

B. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ

Συνολικό δημοσιευμένο έργο (2001-/9/2022)

ΚΑΤΗΓΟΡΙΑ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΗΣ	ΣΥΝΟΛΟ
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	51 (I1-I3,I5-I41,I43-I53)
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΧΩΡΙΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	2 (I4,I42)
ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	5 (II1-II5)
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	11 (III1-III11)

I: ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΤΩΝ ΚΡΙΤΩΝ: 53

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ (11/07/2018)

- 11.** G. Megariotis, G. Mikaelian, A. Avramopoulos, N. Romanos, D. N. Theodorou , *Molecular simulations of fluoxetine in hydrated lipid bilayers, as well as in aqueous solutions containing β -cyclodextrin* J. Mol. Graphics Modell, 2022, 117, 108305
- 12.** P. Aloulos, I. Orfanos, I. Dalamaras, A.Kaloudi-Chantzea, **A. Avramopoulos**, G.Pistiolis, S. Couris, *Nonlinear optical response of some Boron-dipyrromethene dyes: An experimental and theoretical investigation*, Mat. Chem. Phys (2022) **128**, 126057.
- 13.** Grigorios Megariotis, Nikolaos Romanos, Aggelos Avramopoulos, George Mikaelian, Donor N. Theodorou *In Silico Study of Levodopa in Hydrated Lipid Layers at the Atomistic Level*, J. Mol. Graphics Modell., 2021,107,107972, Accepted, 11/6/2021.
- 14.** Benedetta Squeo, **Aggelos Avramopoulos**, Alkmini Nega, Aristeia Pavlou, Michael Siskos, Panagiota Koralli, Andriana Schiza, Antonia Dimitrakopoulou-Strauss, Vasilis Gregoriou, Christos Chochos, *Far-red to Near Infrared Emissive Aqueous Nanoparticles Based on a New Organic Material with Three BODIPY Dyes at the Periphery of the Core*, *Electron. Mater.* **2021**, 2, 24-38. <https://doi.org/10.3390/electronicmat2010003>
- 15.** **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.
- 16.** 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.

ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

- 17.** **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.
- 18.** 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 Quaternary Phosphorescing in the NIR Spectral Region, *Helvetica Chimica Acta*, **2017**, 100 (11), <http://dx.doi.org/10.1002/hlca.201700192>

- I9.** 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.
- I10.** 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.
- I11.** 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]
- I12.** 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).
- I13.** **Avramopoulos A**, Reis H, Otero N, Karamanis P, Pouchan C, Papadopoulos MG. A series of novel derivatives with giant second hyperpolarizabilities, based on radiaannulenes, tetrathiafulvalene, nickel dithiolene, and their lithiated analogues. *J Phys Chem C* 2016;120(17):9419-35.
- I14.** **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.
- I15.** 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.
- I16.** 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.
- I17.** 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.

- I18.** 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.
- I19.** 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.
- I20.** 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.
- I21.** 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.
- I22.** **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.
- I23.** 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.
- I24.** **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.
- I25.** 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.
- I26.** 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.
- I27.** 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.

- I28.** 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.
- I29.** 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.
- I30.** 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.
- I31.** 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.
- I32.** 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.
- I33.** 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.
- I34.** Zaleśny 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.
- I35.** 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.
- I36.** Zaleśny 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.
- I37.** 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.

- I38.** Loboda O, Zaleśny 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.
- I39.** 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.
- I40.** **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.
- I41.** **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.
- I42.** **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.
- I43.** **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.
- I44.** Papadopoulos MG, Reis H, Avramopoulos A, Erkoç S, Amirouche L. Polarizabilities and second hyperpolarizabilities of ZnCd n clusters. *Mol Phys* 2006;104(13-14):2027-36.
- I45.** 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.
- I46.** **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.
- I47.** 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.

- I48.** 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.
- I49.** **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Strong interaction through the X... Au-Y bridge: The Au bond? *Chem Phys Lett* 2003;370(5-6):765-9.
- I50.** Kędziera D, **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Electronic spectrum of the confined auride ion. *Phys Chem Chem Phys* 2003;5(6):1096-102.
- I51.** **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Relativistic effects on interaction-induced electric properties of weakly interacting systems: The HF...AuH dimer. *J Chem Phys* 2002;117(22):10026-38.
- I52.** **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.
- I53.** **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:

ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

- II1.** 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**.
- II2.** **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
- II3.** 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.

- II4.** **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
- II5.** 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, eds: L. Tang, M. A Banares, R Gallo. Doi: 10.1007/978-3-319-47754-1, **ISBN: 9783319477527**

**III. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΕΚΤΕΤΑΜΕΝΑ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ
ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ**

- III1.** **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.
- III2.** 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
- III3.** 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
- III4.** **Avramopoulos, Angelos**, 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>
- III5. 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>
- III6. 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>
- III7. 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>
- III8. **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.
- III9. 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
- III10. 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.
- III11. 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.

6. ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ

6.1. ΣΥΝΟΠΤΙΚΗ ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ

(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 μέχρι τις πιο προσεγγιστικές τεχνικές (ημιεμπειρικές μέθοδοι) που χρησιμοποιούνται σε μεγάλα μοριακά συστήματα τα οποία έχουν μεγάλο ενδιαφέρον στις εφαρμογές. Τα αποτελέσματα αυτά λαμβάνουν υπόψη τη συμβολή της ηλεκτρονιακής συσχέτισης, τη σχετικιστική διόρθωση και τις δονητικές συμβολές, στις ηλεκτρικές γραμμικές και μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες.

Ενδεικτικές Εργασίες: I4, I5, I6, I7, I8, I11, I13, I14, I20, I21, I22, I31, I35, I39, I46, I51, I53, II4, III1, III5, III7

(β) **Ανάπτυξη και εφαρμογή μεθόδων για τον ακριβή προσδιορισμό της δονητικής συμβολής διατομικών και μεγαλύτερου μεγέθους μορίων.** Τα αποτελέσματα της μεθόδου αυτής μπορεί να χρησιμοποιηθούν για να υπολογισθεί η ακρίβεια τιμών που έχουν υπολογισθεί με προσεγγιστικές μεθόδους. Επίσης παρουσιάστηκε ανάπτυξη τεχνικών για τον υπολογισμό της δονητικής συμβολής στις γραμμικές και μη γραμμικές οπτικές (Γ&ΜΓΟ) ιδιότητες μεσαίου και μεγάλου μεγέθους μορίων (π.χ. φουλερενικών παραγώγων, διθειολενικών παραγώγων) και ιδιαίτερα τεχνικών που είναι κατάλληλες για μόρια που περιλαμβάνουν δονήσεις μεγάλου εύρους.

Ενδεικτικές Εργασίες: I5, I6, I7, I13, I24, I28, I29, I32, I36, I38, I41, I52, I53, II2, III4, III5, III9, III10, III11

(γ) **Υπολογισμός της σχετικιστικής διόρθωσης στις Γ&ΜΓΟ ιδιότητες και στις οπτικές ιδιότητες (φάσμα).** 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. Οι μελέτες που δημοσιεύτηκαν (π.χ διμερή του AuH, CuH)

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

Ενδεικτικές Εργασίες: I37, I44, I45, I50, I51, I12, I1110

(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) ή που απαιτούν ειδικό θεωρητικό χειρισμό (δι-ριζικές (diradicals) δομές).

Ενδεικτικές Εργασίες: I2, I4, I5, I7, I8, I13, I20, I21, I22, I35, I38, I15, I111, I115

(ε) **Συσχέτιση της πολωσιμότητας και των υπερπλωσιμοτήτων 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)

Ενδεικτικές Εργασίες: I25, I40, I41, I48, I118

(στ) **Διερεύνηση μηχανισμών για τη σχεδίαση καινοτόμων φωτονικών δομών, σε μοριακό επίπεδο, με αξιόλογη ή ελεγχόμενη μη γραμμική οπτική απόκριση.** Εξετάζονται οι μηχανισμοί και οι παράμετροι οι οποίοι οδηγούν στο σχεδιασμό δομών με ενισχυμένη μη γραμμική οπτική απόκριση. Ειδικότερα εξετάστηκε σε μοριακό επίπεδο ο ορθολογικός σχεδιασμός μοριακών δομών με αξιόλογες-ενισχυμένες μη γραμμική οπτική απόκριση με εφαρμογές στη μοριακή ηλεκτρονική, μελετάται η της επίδρασης της υποκαταστάσης στις ηλεκτρικές ΜΓΟ ιδιότητες καθώς και η σχέση δομής – πόλωσης, ηλεκτρονιακής απεικόνισης

Ενδεικτικές Εργασίες: I2, I4, I5, I7, I11, I13, I14, I20, I21, I26, I31, I35, I46, I11, I14, I111, I113, I116, I117, I119,

(ζ) **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 μοριακών προτύπων και νανοσωματίων. (σχήμα, μέγεθος, φάσμα, δόνηση, πόλωση, αρωματικότητα, ενέργεια αλλ/σης, δεσμοί υδρογόνου) και το σχεδιασμό φαρμάκων

Ενδεικτικές Εργασίες: I1, I3, I9, I10, I15, I16, I17, I18, I19, I13, I15, I112

6.2. ΠΟΙΟΤΙΚΗ ΚΑΙ ΠΟΣΟΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ.

Συντελεστής Απήχησης (ΣΑ) ¹	Αριθμός Δημοσιεύσεων	Συνολικός Συντελεστής Απήχησης	ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ/Quartile ³
15.419	1	15.419	J. Am. Chem.Soc./Q1
7.393	1	7.393	J. Mat Chem.C/Q1
6.006	1	6.006	J. Chem.Theory Comp./Q1
5.236	2	10.472	Chem. Eur. J./Q1

5.051	1	5.051	J. Enzyme Inhib.Med.Chem./Q1
4.956	1	4.956	J. Chem. Inf. Mod./Q1
4.126	3	12.378	J. Phys. Chem. C/Q1
4.094	1	4.094	Mater.Chem.Phys/Q2
3.676	3	11.028	Phys. Chem.Chem.Phys./Q1
3.488	6	20.298	J. Chem. Phys./Q1
3.376	5	16.188	J. Comp.Chem./Q1
2.991	4	11.964	J. Phys. Chem. B/Q1
2.781	5	13.905	J. Phys. Chem. A/Q2
2.524	1	2.524	Eur. J. Inorg. Chem./Q2
2.518	4	7.554	J. Mol.Graphics Modell./Q2
2.348	2	4.696	Chem. Phys./Q2
2.328	3	6.984	Chem. Phys. Let./Q2
2.253	1	2.253	J. Nanopart. Res/Q2
2.164	1	2.164	Helv. Chim. Acta/Q2
1.964	2	3.924	Mol. Phys./Q3
1.887	1	1.887	Struct. Chem./Q3
1.371	1	1.371	J. Mol. Struct./Q2
	1		Comp. Lett.
0.82	1	0.82	Nonlinear Opt. Quantum Opt./Q4
	1		Electr,Mat.
ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ			
1.0≤ΣΑ<2.0	4		
2.0≤ΣΑ<3.0	21		
3.0≤ΣΑ<4.0	14		
4.0≤ΣΑ<6.0	8		
ΣΑ≥6.0	3		
Σ.Σ.Α¹	175,847		
Μ.Σ.Α²	3,448		

¹ <https://jcr.clarivate.com/jcr/home>; Συνολικός Συντελεστής Απήχησης Δημοσιευμένου Έργου σε περιοδικά με κριτές

² Μέσος Συντελεστής Απήχησης σε σύνολο 51 εργασιών.

³ <https://www.scimagojr.com/>

6.3. ΧΡΟΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ.

ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ			2001-07/2018 ¹	ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	ΜΕ	ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ	46	5
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	ΧΩΡΙΣ	ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ	1	1

ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	5	-
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	11	-
ΜΕΣΟΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	3,466	3,270

¹ Ημερομηνία Εκλογής στη Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή

6.4. ΑΥΤΟΔΥΝΑΜΙΑ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ.

ΑΥΤΟΔΥΝΑΜΟ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ	2001-07/2018 ¹	ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	20 (17 ³ ,113 ³ ,114 ³ ,122 ³ ,124 ³ ,126 ³ ,127 ³ 128 ³ ,131 ³ ,133 ³ ,135 ³ , 140,141,143,145 ³ ,146,149,151,152,153)	2 (12 ² , 15 ³)
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΧΩΡΙΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	1 (142)	1 (14 ³)
ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	3 112 ³ ,113 ³ ,114 ³	
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	3 1111,1114,1118	

¹ Ημερομηνία Εκλογής στη Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή

² Μοναδικός Θεωρητικός Συγγραφέας

³ Υπεύθυνος ή συνυπεύθυνος συγγραφέας για Αλληλογραφία.

6.5. ΑΠΗΧΗΣΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ (Ημερομηνία καταγραφής των δεδομένων 9/2022)

9/2022	ΒΑΣΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ	
	SCOPUS	Google Scholar ¹
ΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ²	1113/20	1250/21
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ³	996/19	
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index ⁴	855/17	

¹ <https://scholar.google.gr/citations?user=bMSxGDQAAAAJ&hl=el>

² Περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές;

³ Δεν περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές;

⁴ Δεν περιλαμβάνονται οι αυτοαναφορές και οι αναφορές από ερευνητές οι οποίοι είναι συν-συγγραφείς.

ORCID: 0000-0002-0916-8235

7. ΛΟΙΠΗ ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ

7.1 Κριτής σε επιστημονικά περιοδικά

Κριτής αξιολόγησης επιστημονικών εργασιών σ' έναν σημαντικό αριθμό επιστημονικών περιοδικών (**ACS**: ACS Omega, Journal of Chemical Information and Modelling, Journal of Physical Chemistry Letters, **Elsevier**: Chemical Physics Letters, Royal Society Open Science, Current Applied Physics, Materials Chemistry and Physics, Journal of Molecular Structure, International Journal of Biological Macromolecules **RSC**: Journal of Materials Chemistry C, Advanced of Functional Materials, **Wiley**: Chemistry Select, **MDPI**: Molecules, Materials, Applied Sciences, International Journal of Molecular Sciences, Condensed Matter, Energies, Nanomaterials, Symmetry)

Το 2020 διάκριση ως κριτής στο περιοδικό, *J. Mat. Chem C.*(*J. Mater. Chem. C*, 2021, 9, 7242, DOI: 10.1039/d1tc90099d), I.F:7.393, κατόπιν επιλογής από τους εκδότες.



7.2 Αξιολογητής ερευνητικών προγραμμάτων

Κατά τα έτη 2016,2019,2020,2021, αξιολογητής ερευνητικών προτάσεων για χρηματοδότηση (Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία, Ίδρυμα Προώθησης Ερευνας, Iris, Κύπρος), είναι καταχωρισμένος αξιολογητής στη Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας και στο ΕΛΙΔΕΚ.

7.3 Μέλος συντακτικής επιτροπής περιοδικών

Μέλος της συντακτικής επιτροπής σε τρία περιοδικά (Scientific World Journal, MDPI:International Journal of Molecular Sciences, PhysChem) και επιμελείται, κατόπιν πρόσκλησης, στο περιοδικό *International Journal of Molecular Sciences (I.F 5.924)* ειδικής έκδοσης (*Special Issue*) με θέμα: "*Computational Design of Materials for Applications (Drugs, Photonics)*" (https://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/Drugs_Photonics).

7.4 Προσκεκλημένες ομιλίες

Ομιλίες σε συνέδρια και Πανεπιστήμια και κατά τα έτη 2006-2010, συμμετείχε στη διοργάνωση συμποσίων στο διεθνές συνέδριο: *International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering* .

- 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
- xiii)** *Ηλεκτρισμός: Μια Βουτιά στον Κόσμο των Κυκλωμάτων*, 1^ο Θερινό σχολείο, «ΗΡΩΝ» (Ηλεκτρομαγνητισμός: Εφαρμογές στη σύγχρονη τεχνολογία) Πύργος Ηλείας, 1/9/2021

7.5 Εξώφυλλα Περιοδικών

