ΑΓΓΕΛΟΣ ΑΒΡΑΜΟΠΟΥΛΟΣ

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

1. ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Ονοματεπώνυμο: Αβραμόπουλος Άγγελος

Τόπος και ημερομηνία γεννήσεως : Αθήνα, 27 Φεβρουαρίου 1973

Οικογενειακή Κατάσταση : Έγγαμος με 2 παιδιά

E-mail: aavramopoulos@uth.gr;

Α. **ΣΠΟΥΔΕΣ**

1992-1997 Πτυχίο Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

1998-2000 Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδικεύσεως (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 Ιδρυμα Ερευνών,

http://phdtheses.ekt.gr/eadd/handle/10442/22358;
http://thesis.ekt.gr/thesisBookReader/id/22358#page/1/mode/2up

Β. 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.

15/06/2007 -17/08/2007 και **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.

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 ανάληψη καθηκόντων στις 15-04-2020.

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

11/10/23 Εκλογή στη βαθμίδα του Αναπληρωτή 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 κβαντικής 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 φυσικής-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 υψηλής ακρίβειας, 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.

Ι. 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 (2ος 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**, "Builiding 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- **NM-P4-SL-2012-309837**, **Nanopuzzles,** "Modelling properties, interactions, toxicity and environmental behaviour of engineered nanoparticles, << *Ανάπτυξη μεθόδων για την πρόβλεψη*

30/6/2015 *και εξήγηση των αλληλεπιδράσεων νανοσωματιδίων, που θα σχεδιασθούν με βιολογικά συστήματα και μικρά μόρια* >> **Συνεργάτης ερευνητής, μέλος ερευνητικής ομάδας (WP3: NanoiNTER) https://cordis.europa.eu/project/id/309837**
https://cordis.europa.eu/project/id/309837/reporting
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-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)** https://hpc.grnet.gr/awarded/production/6th-production-call/

17. 30/5/2022- **COST: Proposal Reference OC-2021-1-25045** Title*: CONFINED MOLECULAR SYSTEMS: FROM A NEW GENERATION OF MATERIALS TO THE STARS (***Ως Επίκουρος Καθηγητής του τμήματος Φυσικής** συμμετοχή ως μέλος της ερευνητικής ομάδας από την Ελληνική πλευρά στο πρόγραμμα)

https://www.cost.eu/actions/CA21101/#tabs+Name:Working%20Groups%20and%20Membership
https://www.cost.eu/actions/CA21101/
Μέλος των επιτροπών:
1.) STSM Review Committee for STSM applications to COSY, https://cost-cosy.eu/grants/conference-grants/; https://cost-cosy.eu/grants/short-term-scientific-missions/
2) Management Committee,
https://www.cost.eu/actions/CA21101/#tabs+Name:Management%20Committee
https://cost-cosy.eu/management-committee/

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 1ης 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).**

http://www.elidek.gr/2018/03/22/egkrisi-oristikon-pinakon-katataxis-kai-katalogoy-ton-pros-chrimatodotisi-protaseon-sto-plaisio-tis-1is-prokiryxis-ereynitikon-ergon-elidek-gia-tin-enischysi-metadidaktoron-ereynitontrion/

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

Ι. 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 Επικουρου 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 Επικουρου 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 ΙΙ (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο*)

Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (***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 ΙΙ (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο*)

2011-2012 Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με διδακτορικό/μεταπτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (*Εργαστήριο*)

Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο*)

2012-2013 Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, ΤΕΙ Στερεάς Ελλάδος
Επιστημονικός/Εργαστηριακός Συνεργάτης με διδακτορικό/μετα πτυχιακό δίπλωμα
Χειμερινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα ΙΙ (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο*)

Εαρινό Εξάμηνο
1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (***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 ΙΙ (*Εργαστήριο)*

Εαρινό Εξάμηνο

1. Ολοκληρωμένα Κυκλώματα Μεγάλης Κλίμακας (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο*
2. Ψηφιακά Συστήματα Ι (*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 Ι (*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 Ι (***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 Ι (***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 ΙΙ (*Εργαστήριο)*

Εαρινό Εξάμηνο

1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (***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

1. Ηλεκτρονική Φυσική (***Θεωρία*** *και Εργαστήριο)*
2. Εισαγωγή στα Συστήματα Η/Υ (*Θεωρία)*

Εαρινό Εξάμηνο

1. Ψηφιακά Συστήματα Ι (***Θεωρία*** και *Εργαστήριο)*
2. Σχεδιασμός κυκλωμάτων με Η/Υ (***Θεωρία*****)**

ΙΙ. ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

1. ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΩΝ.

Α. ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

Ι. 2020-2021

Χειμερινό Εξάμηνο: Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ.

Εαρινό Εξάμηνο: Εργαστήριο Φυσικής ΙV

Ως μέλος ΔΕΠ του τμήματος Φυσικής ανέπτυξα και υλοποίησα για τα εργαστήρια του τμήματος φυσικής ΙΙΙ,IV 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/

ΙΙ. 2021-2022

Χειμερινό Εξάμηνο: Γενική Φυσική Ι (συνδιδασκαλία), Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ,

Εαρινό Εξάμηνο: Κβαντική Μηχανική ΙΙ (αυτοδύναμη διδασκαλία), Εργαστήριο Φυσικής ΙV

ΙΙΙ. 2022-2023

Χειμερινό Εξάμηνο: Γενική Φυσική Ι(συνδιδασκαλία), Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ, Εργαστήριο Δομής της Ύλης (αυτοδύναμη διδασκαλία)
Εαρινό Εξάμηνο: Κβαντική Μηχανική ΙΙ (αυτοδύναμη διδασκαλία), Ατομική και Μοριακή Φυσική (αυτοδύναμη διδασκαλία)

IV. 2023-2024
Χειμερινό Εξάμηνο: Γενική Φυσική Ι(αυτοδύναμη διδασκαλία), Εργαστήριο Φυσικής ΙΙΙ, Εργαστήριο Δομής της Ύλης (αυτοδύναμη διδασκαλία)

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

Β. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΠΟΥΔΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ Τ.Ε

I. 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)

II. 2020-2021
Χειμερινό Εξάμηνο: Συστήματα Μετρήσεων (Θεωρία και Εργαστήριο), Ανάπτυξη Ψηφιακών Συστημάτων (Θεωρία)
Εαρινό Εξάμηνο: Σχεδίαση Κυκλωμάτων με Η/Υ (Θεωρία)

III. 2021-2022
Χειμερινό Εξάμηνο: Ανάπτυξη Ψηφιακών Συστημάτων (Θεωρία)

2. ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΩΝ.

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ, Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών: Εφαρμοσμένη Φυσική.

I. 2021-2022

Χειμερινό Εξάμηνο: Φυσική-Χημεία των υλικών (αυτοδύναμη διδασκαλία, 13 Διαλέξεις), Υπολογιστικές Τεχνικές και Αλγόριθμοί (3 διαλέξεις)
Εαρινό Εξάμηνο: Επιστημονικοί Υπολογισμοί στην Επιστήμη των Υλικών (5 Διαλέξεις).

II. 2022-2023

Χειμερινό Εξάμηνο: Φυσική-Χημεία των υλικών (αυτοδύναμη διδασκαλία,13 Διαλέξεις)

III. 2023-2024

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

2. ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΠΤΥΧΙΑΚΩΝ, ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΩΝ ΔΙΑΤΡΙΒΩΝ

1. **ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΕΣ ΔΙΑΤΡΙΒΕΣ:** 2 (σε εξέλιξη)
2. **ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΔΙΑΤΡΙΒΕΣ:** 2, 1 (σε εξέλιξη), 1(Ολοκληρώθηκε)
3. **ΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΕΡΓΑΣΙΕΣ**: 43, 12 (σε εξέλιξη), 31 (ολοκληρωμένες)

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 12 πτυχιακών εργασιών. **Πριν το διορισμό ως μέλος ΔΕΠ**, και με την ιδιότητα του επιστημονικού/εργαστηριακού συνεργάτη στο πρώην τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής, έχω επιβλέψει συνολικά 29 πτυχιακές εργασίες

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΕΣ ΔΙΑΤΡΙΒΕΣ

Στο τμήμα της Φυσικής: **Α. Κύριος Επιβλέπων:**

1.) **κύριος Επιβλέπων** της εν εξελίξει Διδακτορικής Διατριβής, του Ευθύμιου Μανταλόβα (3η/20-01-2021) με τίτλο: "*Διδακτική της Φυσικής με Εφαρμογές Μεθόδων Γεφύρωσης του Φυσικού και Ψηφιακού Χώρου,Physical Computing"* Ημερομηνία Ανάθεσης: 25-01-2021 (Συνέλευση Τμήματος: 3η/20-01-2021),

2.) **κύριος Επιβλέπων** της εν εξελίξει Διδακτορικής Διατριβής της Καλλιόπης Θεοδωροπούλου (53η/12-10-2022) με τίτλο "*¨Εξ αποστάσεως και ανοικτών τεχνολογιών ψηφιακά παίγνια για υποστήριξη πειραμάτων Μηχανικής και Σύγχρονης Φυσικής*"

Β.) 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 (32η/5-11-2020)

2. Τσιλιούκας Στυλιανός Αδάμ: "*Τροποποιημένες Θεωρίες Βαρύτητας και Κοσμολογία"* Ημερομηνία Ανάθεσης, 2-06-2021 (3η/20-01-2021)

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

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΕΡΓΑΣΙΕΣ

Στο τμήμα της Φυσικής (55η/10-11-2022) 1.) **κύριος Επιβλέπων** της εργασίας του φοιτητή, Κοσμά Σπύρου με θέμα: " *Περοβσκίτες με εφαρμογές στα φωτοβολταϊκά* " (ημερομηνία ολοκλήρωσης 24/2/2023), **2.) κύριος Επιβλέπων** της εργασίας της φοιτήτριας, Φαροπούλου Ειρήνης με θέμα: " Μελέτη ιδιοτήτων κβαντικών οπών με μεθόδους πρώτης αρχής" (σε εξέλιξη), **3.) Μέλος της τριμελούς επιτροπής εξέτασης** της εργασίας του μεταπτυχιακού φοιτητή Αγγελή Δημήτριου.

4. ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΗ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑ

Α. ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΤΑΚΤΙΚΟ ΜΕΛΟΣ ΤΩΝ ΑΚΟΛΟΥΘΩΝ ΕΠΙΤΡΟΠΩΝ (38η /2-03-22 Επικαιροποίηση της Συνέλευσης του Τμήματος Φυσικής, Θέμα 6ο , Α.Π: 50/14/09/2022):

1. Προγράμματος οδηγού σπουδών, πιστοποίησης Οδηγού Σπουδών
2. Ομάδα Εσωτερικής Αξιολόγησης του Τμήματος / ΟΜΕΑ (Μέλος της ΟΜΕΑ στην 1η πιστοποίηση του τμήματος Φυσικής από την ΕΘΑΑΕ). **Ως μέλος της ΟΜΕΑ συμμετείχα στη 1η διαδικασία πιστοποίησης του τμήματος Φυσικής από εξωτερικούς αξιολογητές ορισμένους από την ΕΘΑΑΕ, Σεπτέμβριος 2022.**
3. Ενημερώσεις αποφοίτων λυκείου πασχόντων από ΣΑ
4. Φοιτητικών θεμάτων (& υποδοχής πρωτοετών), ΔΣ
5. Βιβλιοθήκης
6. Επιτροπή παρακολούθησης δημοσιευμάτων και εκδηλώσεων
7. Υπεύθυνος καταχώρισης των δεδομένων του τμήματος Φυσικής στο σύστημα ΟΠΕΣΠ
8. Ωρολογίου προγράμματος
9. 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.
10. Υπεύθυνος διοργάνωσης σεμιναρίων και επιστημονικών ομιλιών.
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 1ο και 67ης/5-04-2023. Θέμα 8ο) , **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.

Β. Π.Σ Μηχανικών Πληροφορικής:

I. Μέλος της επιτροπής πρακτικής άσκησης των φοιτητών του (Πρακτικό 95/14-9-2021 (Θέμα 9.Ι)),

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).

5. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ

Α. 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 απο 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 Pol 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 Pol, 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.

Β. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ

Συνολικό δημοσιευμένο έργο (2001-/4/2023)

ΚΑΤΗΓΟΡΙΑ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΗΣ	ΣΥΝΟΛΟ
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	52 (I1-I4,I6-I42,I44-I54)
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΧΩΡΙΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	2 (I5,I43)
ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	5 (II1-II5)
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	15 (III1,III2,III3,III4, III5-

	III15)

I: ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΤΩΝ ΚΡΙΤΩΝ (Σ.Α: ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ, Π.Σ:ΠΛΗΘΟΣ ΣΥΝΣΥΓΓΡΑΦΕΩΝ ΜΟΥ]:

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

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

2023

I1. **A. Avramopoulos**, H. Reis, D. Tzeli, R. Zalesny, M, G. Papadopoulos, *Photoswitchable Molecular Units with Tunable Non-Linear Optical Activity: A Theoretical Investigation, Molecules* **2023**, *28*(15), 5646; https://doi.org/10.3390/molecules28155646 [Σ.Α: 4.6, Π.Σ :4]

2022

I2. 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 [Σ.Α: 2.942, Π.Σ:4]

I3. P. Aloukos, 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.[Σ.Α:4.778, Π.Σ:6]

2021

I4. 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.[Σ.Α:2.942, Π.Σ:4]

I5. Benedetta Squeo, **Aggelos Avramopoulos**, Alkmini Nega, Aristea 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 [Σ.Α:-, Π.Σ:9]

2020

I6. **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.[Σ.Α:4.177, Π.Σ:3]

2019

I7. Banerjee P., **Avramopoulos A**., Nandi P.K., Static Second Hyperporizability 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. [Σ.Α:2.719, Π.Σ:2]

ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

2018

I8. 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.[Σ.Α:8.067, Π.Σ:4]

2017

I9. 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 Quaterrylene Phosphorescing in the NIR Spectral Region, Helvetica Chimica Acta, **2017**, 100 (11), http://dx.doi.org/10.1002/hlca.201700192 [Σ.Α:2.201 Π.Σ:11]

I10. 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. [Σ.Α:2.942, Π.Σ:3]

I11. 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. [Σ.Α:1.795, Π.Σ:8]

I12. 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. [Σ.Α:5.020, Π.Σ:10]

2016

I13. 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). [Σ.Α:2.233 Π.Σ:8]

I14. **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.[Σ.Α:4.177, Π.Σ:5]

I15. **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 C60or a nucleobases. J Phys Chem A 2016;120(2):284-98.[Σ.Α:2.944, Π.Σ:4]

2015

I16. 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. [Σ.Α:3.466, Π.Σ:5]

I17. 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.[Σ.Α:2.942, Π.Σ:11]

I18. 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.[Σ.Α:5.756, Π.Σ:9]

2014

I19. 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.[Σ.Α:6.612, Π.Σ:5]

I20. 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.[Σ.Α:3.466, Π.Σ:4]

I21. 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.[Σ.Α:3.672 Π.Σ:6]

2013

I22. 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.[Σ.Α:5.020 Π.Σ:5]

I23. **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.[Σ.Α:2.551 Π.Σ:3]

I24. 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.[Σ.Α:3.672 Π.Σ:8]

I25. **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.[Σ.Α:3.672 Π.Σ:3]

2012

I26. 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.[Σ.Α:4.177 Π.Σ:3]

I27. 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.[Σ.A:3.672 Π.Σ:5]

I28. 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.[Σ.A:0.785 Π.Σ:2]

2011

I29. **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.[Σ.A:2.944 Π.Σ:4]

I30. 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.[Σ.A:3.672 Π.Σ:6]

2010

I31. 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.[Σ.A:4.304 Π.Σ:6]

I32. **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.[Σ.A:6.578 Π.Σ:3]

I33. Bégué D, Labéguerie P, Zhang-Negrerie DY, Avramopoulos A, Serrano-Andrés L, Papadopoulos MG. Theoretical investigations of the IR spectroscopy of $Ni(C_2S_2H_2)_2$. A case study of the P-VMWCI2algorithm including anharmonic effects. Phys Chem Chem Phys 2010;12(41):13746-51.[Σ.A:3.945 Π.Σ:5]

I34. 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.[Σ.A:2.552 Π.Σ:10]

I35. 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.[Σ.A:3.945 Π.Σ:8]

2009

I36. Serrano-Andŕes L, **Avramopoulos A**, Li J, Laḃguerie 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.[Σ.A:4.304 Π.Σ:6]

I37. 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.[Σ.A:1.371 Π.Σ:5]

I38. 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.[Σ.A:2.719 Π.Σ:4]

I39. 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.[Σ.A:2.944 Π.Σ:7]

2008

I40. 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.[Σ.A:4.304 Π.Σ:3]

2007

I41. **Avramopoulos A,** Serrano-Andŕes L, Li J, Reis H, Papadopoulos MG. Linear and nonlinear optical properties of some organoxenon derivatives. J Chem Phys 2007;127(21),214102.[Σ.A:4.304 Π.Σ:4]

I42. **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.[Σ.Α:3.466 Π.Σ:2]

I43. **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.[Σ.Α:- Π.Σ:1]

2006

I44. **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.[Σ.Α:2.552 Π.Σ:3]

I45. Papadopoulos MG, Reis H, Avramopoulos A, Erkoç S, Amirouche L. Polarizabilities and second hyperpolarizabilities of ZnmCd n clusters. Mol Phys 2006;104(13-14):2027-36.[Σ.Α:1.937 Π.Σ:4]

2005

I46. 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.[Σ.Α:3.466 Π.Σ:4]

2004

I47. **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.[Σ.Α:16.383 Π.Σ:3]

2003

I48. 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.[Σ.Α:2.944 Π.Σ:4]

I49. 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.[Σ.Α:2.944 Π.Σ:2]

I50. **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.[Σ.Α:2.719 Π.Σ:2]

I51. Kędziera D, **Avramopoulos A**, Papadopoulos MG, Sadlej AJ. Electronic spectrum of the confined auride ion. Phys Chem Chem Phys 2003;5(6):1096-102.[Σ.Α:3.945 Π.Σ:3]

2002

I52. **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.[Σ.Α:4.304 Π.Σ:2]

I53. **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.[Σ.Α:1.937 Π.Σ:1]

2001

I54. **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 [Σ.Α:4.304 Π.Σ:3]

*** ΣΕ 19/54 ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΤΟ ΠΛΗΘΟΣ ΤΩΝ ΣΥΝΣΥΓΓΡΑΦΕΩΝ ΜΟΥ ≤ 3**

II. ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ:
ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

2003

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* $C_2H_2Li_2$" 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**.[Π.Σ:3]

2012

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 Currect 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 [Π.Σ:2]

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.[Π.Σ:7]

2014

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 [Π.Σ:2]

2017

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 [Π.Σ:8]

III. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΕΚΤΕΤΑΜΕΝΑ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ

2023

III1. E. Tsoutsoumanos, D. Tzeli , A. Avramopoulos , P.G. Konstantinidis, N. Laskaris, N.Lathiotakis , G. Kitis, G.S. Polymeris , T. Karakasidis, "A preliminary Ab Initio study of Thermoluminescence properties in Beryllium Oxide: Theoretical investigation on the electronic states of BeO:Mg^{2+} , Si^{4+} and BeO:Cr^{3+} , Mg^{2+}", 20th International Conference on Solid State Dosimetry, SSD20, September 17-22, 2023. [Π.Σ:8]

III2. E. I. Sougleridi, S. Kopsidas, D. Vavougios, A. Avramopoulos, A. Kanapitsas,"Adopting AI in Education: Benefits, Challenges and Tools", 6th International Conference on Research in Teaching and Education (RTEConf), Oxford, the United Kingdom,December 16-18, 2022 [Π.Σ:4]

III3. A. Avramopoulos, "Polarization Mechanisms and Non-Linear Optical Response in Photochromic Molecular Materials: An ab-initio Study", XXXVII Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science 17-20 September 2023, Thessaloniki, Greece (Poster, Computational Materials Science)

III4. E. Tsoutsoumanos, D. Tzeli , A. Avramopoulos , N. Laskaris, P.G. Konstantinidis, N. Laskaris, N.Lathiotakis , G. Kitis, G.S. Polymeris , T. Karakasidis. "Investigating Thermoluminescence Signal Replication in BeO:Mg^{2+}, Si^{4+} via First Principles Computational Analysis "XXXVII Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science 17-20 September 2023, Thessaloniki, Greece (Poster, Computational Materials Science)

ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΘΕΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

2015

III5. **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. [Π.Σ:1]

2014

III6. 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 [Π.Σ:7]

2012

III7. 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 [Π.Σ:5]

III8. **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 [Π.Σ:2]

III9. 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 [Π.Σ:7]

2009

III10. 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 [Π.Σ:4]

2007

III11. 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 [Π.Σ:1]

2006

III12. **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 2**006** Pages 1198–1199 ISBN: 978-90-04-15542-8, ISBN: 978-1-4665-6451-0 DOI: 10.1201/b12066-104. [Π.Σ:2]

III13. 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** [Π.Σ:3]

2005

III14. 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.[Π.Σ:3]

2004

III15. 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.[Π.Σ:2]

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

υπ'οψιν 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 Fuctional Theory, DFT), ιν) Excitation Energy Transfer (EET),μεταφορά ενέργειας λόγω συντονισμού Förster (Förster resonance energy transfer) για τη μελέτη της επίδρασης της μεταφοράς ενέργειας μεταξύ διηγερμένων καταστάσεων δοτη-δέκτη και την διαμόρφωση των (υπερ)πολωσιμοτήτων. 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: I1,I6, I7, I8, I9, I10, I12, I14, I15, I16,I21, I22, I23, I24, I25,I29,I32,I36, I40, I41,I42,I44,I47,I50,I51, I52, I54,II4,III3,III7,III9

(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: I6, I7, I8, I14, I25, I29, I30, I31,I33, I37, I39, I41,I42, I47,I48,I49,I53, I54,II2, III6,III7, III11, III12,III13

(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: I38,I45,I46,I50,I51,I52,II2,III12

(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: I1,I3, I5, I6, I8, I9, I14, I15,I21, I22, I23, I36, I39,II5,III3,III7

(ε) **Συσχέτιση της πολωσιμότητας και των υπερπολωσιμοτήτων 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: I26, I41, I42, I49,III10

(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 σχεδιασμός δομών με ενισχυμένη ή/και ελεγχόμενη 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 επίδρασης της υποκατάστασης στις ηλεκτρικές ΜΓΟ ιδιότητες, μοριακοί διακόπτες,μεταφορά ενέργειας λόγω συντονισμού Förster και μεταβολή της δεύτερης υπερπολωσιμότητας καθώς και η σχέση δομής – πόλωσης, ηλεκτρονιακής απεικόνισης

Ενδεικτικές Εργασίες: I1, I3, I5,I6,I8,I12,I14,I15,I21,I22,I27,I32,I35,I36,I47,I48,II1, II4,III1,III5, III8,III9, III13,

(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: I2,I4, I10, I11, I16, I17, I18, I19, I20,II3,II5,III4

6.2. ΠΟΙΟΤΙΚΗ ΚΑΙ ΠΟΣΟΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ.

Συντελεστής Απήχησης (ΣΑ)[1]	**Αριθμός Δημοσιεύσεων**	**Συνολικός Συντελεστής Απήχησης**	**ΠΕΡΙΟΔΙΚΟ/Quartile[3]**
16.383/15	1	16,383	J. Am. Chem.Soc./**Q1/Q1**
8.067/6.4	1	8,067	J. Mat Chem.C/**Q1/Q1**
6.578/5.5	1	6.578	J. Chem.Theory Comp./**Q1/Q2**
5.020/4.3	2	10.040	Chem. Eur. J./**Q1/Q2**
5.756/5.6	1	5.756	J. Enzyme Inhib.Med.Chem./**Q1/Q2**
6.162/5.6	1	6.162	J. Chem. Inf. Mod./**Q1/Q1**
4.177/3.7	3	12.531	J. Phys. Chem. C/**Q1/Q2**
4.778/4.6	1	4.778	Mater.Chem.Phys/**Q1/Q2**
4.6	1	4.6	Molecules/**Q1**
3.945/3.3	3	11.835	Phys. Chem.Chem.Phys./**Q1/Q2**
4.304/4.4	6	25.824	J. Chem. Phys./**Q1/Q2**

3.672/3.0	5	18.360	J. Comp.Chem./**Q1/Q2**
3,466/3.3	4	13.864	J. Phys. Chem. B/**Q1/Q3**
2.944/2.9	5	14.720	J. Phys. Chem. A/Q2/Q2
2.551/2.3	1	2.551	Eur. J. Inorg. Chem./Q2/Q2
2.942/2.9	4	11.768	J. Mol.Graphics Modell./Q2/Q3
2.552/2.3	2	5.104	Chem. Phys./Q2/Q3
2.719/2.8	3	8.157	Chem. Phys. Let./Q2/Q3
2.533/2.5	1	2.233	J. Nanopart. Res/Q3/Q3
2.201/1.8	1	2.201	Helv. Chim. Acta/Q2/Q3
1.937/1.7	2	3.874	Mol. Phys./Q3/Q4
1.795/1.7	1	1.795	Struct. Chem./Q3/Q3
1.371	1	1.371	J. Mol. Struct.Theochem/Q2 (**Συνεχίζει με την Ονομασία:Comp and Theor. Chem. IF:2.292**)
	1		Comp. Lett.
0.785/1.0	1	0.785	Nonlinear Opt. Quantum Opt./Q4/Q4
	1		Electr,Mat.
ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ			
1.0≤ΣΑ<2.0	**5/6**		
2.0≤ΣΑ<3.0	**17/16**		
3.0≤ΣΑ<4.0	**12/18**		
4.0≤ΣΑ<6.0	**14/10**		
ΣΑ≥6.0	**4/2**		
Σ.Σ.Α[1]	**195.037/181.971**		
Μ.Σ.Α[2]	**3,824/3,499**		

[1] **https://jcr.clarivate.com/jcr/home;** Συνολικός Συντελεστής Απήχησης Δημοσιευμένου Έργου σε περιοδικά με κριτές, Μάιος 2023. /Ιουλιος 23

[2] Μέσος Συντελεστής Απήχησης σε σύνολο 52 εργασιών.

[3] A/B https://www.scimagojr.com/ ; ISI Web of Science, Journal Citation Reports

6.3. ΧΡΟΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟΥ ΕΡΓΟΥ.

ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ	**2001-07/2018[1]**	**ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΣΤΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΟΥ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ**
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	46	6
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΧΩΡΙΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	1	1
ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	5	-
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	11	2
ΜΕΣΟΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	3,858/3.488	3,511/3,38

[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 (I8[3],I14[3],I15[3],I23[3],I25[3],I27[3],I28[3] I29[3],I32[3],I34[3],I36[3] , I41,I42,I44,I46[3],I47,I50,I52,I53,I54)	3 (I1[3],I3[2], I6[3])
ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΧΩΡΙΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΑΠΗΧΗΣΗΣ	1 (I43)	1 (I5[3])
ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ	3 II2[3],II3[3],II4[3]	
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	3 III3,III6,III10	

[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 11/2023)

21/6/2023	**ΒΑΣΗ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ**		
	SCOPUS	**Google Scholar[1]**	**Web of Science**
ΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index[2]	1206/21	1353/21	1144/21
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index[3]	1082/20		1064
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ/h-index[4]	935/18		

[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.

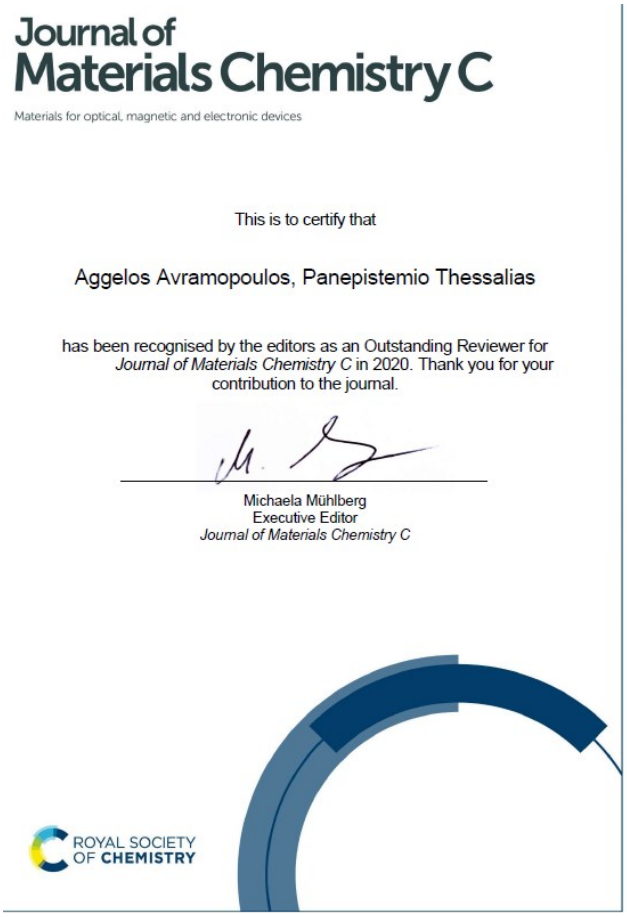
ORCID: 0000-0002-0916-8235

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, Physical Chemistry Chemical Physics, Advanced of Functional Materials, **Wiley:** Chemistry Select, ChemPhysChem **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.



Journal of
Materials Chemistry C

Materials for optical, magnetic and electronic devices

This is to certify that

Aggelos Avramopoulos, Panepistemio Thessalias

has been recognised by the editors as an Outstanding Reviewer for *Journal of Materials Chemistry C* in 2020. Thank you for your contribution to the journal.

Michaela Mühlberg
Executive Editor
Journal of Materials Chemistry C

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

7.2 Αξιολογητής ερευνητικών προγραμμάτων

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 και στο ΕΛΙΔΕΚ(Α.Π.26775/16-07-2020)

5. **Απρίλιος 2019 (29/03/2019-25/04/2019).** Αξιολογητής τριών (3) ερευνη- τικών 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. (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

7. **Ιούλιος 2020,2021,2022** Μέλος της επιτροπής αξιολόγησης υποψηφίων διδασκόντων Π.Δ 407 και απόκτησης ακαδημαϊκής εμπειρίας, τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

8. **Ιανουάριος, Φεβρουάριος, Σεπτέμβριος 2020 .** Κρίση επιστημονικών δεκατεσσάρων (14) προτάσεων για χρηματοδότηση από το Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

9. **Αύγουστος, Σεπτέμβριος 2021,** Κρίση επιστημονικών τριών (3) προτάσεων για χρηματοδότηση από το Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

10. **Νοέμβριος 2023** Κρίση επιστημονικών τεσσάρων (6) προτάσεων για χρηματοδότηση από το Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding, Ρουμανία (Ως Επίκουρος Καθηγητής)

7.3 Μέλος συντακτικής επιτροπής περιοδικών

Μέλος της συντακτικής επιτροπής σε τρια περιοδικά (Scientific World Journal, MDPI:International Journal of Molecular Sciences, PhysChem) και **επιμελητής, κατόπιν πρόσκλησης**, στο περιοδικό *International Journal of Molecular Sciences (I.F 5.924)* ειδικής έκδοσης *(Special Issue) με θέμα:*

1. *"Computational Design of Materials for Applications (Drugs, Photonics)" (https://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/Drugs_Photonics).*

2. "Recent Advances in Organic and Semiorganic Nonlinear Optical Materials" https://www.mdpi.com/journal/ijms/special_issues/C8I03Q7967

3. 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/ https://www.hindawi.com/journals/tswj/editors/ (Physical Chemistry)

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

2019, μέλος της συντακτικής επιτροπής (Editorial Board) του περιοδικού, *International Journal of Molecular Sciences,* https://www.mdpi.com/journal/ijms/topic_editors

2020 μέλος της συντακτικής επιτροπής (Editorial Board) του περιοδικού, *PhysChem, mdpi* https://www.mdpi.com/journal/physchem/editors

7.4 Οργάνωση Συνεδρίων

I.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)

ΙΙ 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) πολωσιμοτήτων.

γ) Θεωρητικοί Υπολογισμοί Μη Γραμμικών Οπτικών Ιδιοτήτων.

7.5 Προσκεκλημένες ομιλίες

Ομιλίες σε συνέδρια και Πανεπιστήμια (2006-2021) και κατά τα έτη 2006-2010,συμμετείχα 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, 1ο* Θερινό σχολείο, «ΗΡΩΝ» (Ηλεκτρομαγνητισμός: Εφαρμογές στη σύγχρονη τεχνολογία) Πύργος Ηλείας, 1/9/2021

7.6 Εξώφυλλα Περιοδικών

