

ΑΓΓΕΛΟΣ Α. ΑΒΡΑΜΟΠΟΥΛΟΣ

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

I. ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ	1
II. ΣΠΟΥΔΕΣ.....	1
III. ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ	1
IV. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ:.....	1
V. ΕΙΔΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ:.....	2
VI. ΣΥΝΕΔΡΙΑ – ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ.....	2
ΣΥΝΕΔΡΙΑ	2
ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ.....	4
ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΚΕΨΕΙΣ.....	6
ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ,ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑ.....	6
VII. ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ	7
VIII. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ	8
Συνοπτικός πίνακας ερευνητικής-επαγγελματικής προϋπηρεσίας.....	16
ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ.....	17
ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΩΝ	25
ΣΥΝΟΠΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ.....	25

ΑΓΓΕΛΟΣ Α. ΑΒΡΑΜΟΠΟΥΛΟΣ

I. ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΓΕΝΝΗΣΕΩΣ: 27.02.1973

ΕΘΝΙΚΟΤΗΤΑ: Ελληνική

II. ΣΠΟΥΔΕΣ

1992-1997 Πτυχίο Φυσικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

1998-2000 Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσεως (M.Sc) στη Φυσικοχημεία, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας. Τίτλος Διατριβής «Υπολογισμοί μοριακών πολωσιμοτήτων και υπερπολωσιμοτήτων»

2000-2004 Διδακτορικό στη Φυσικοχημεία, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας. Τίτλος Διατριβής «Πολωσιμότητες και υπερπολωσιμότητες μοριακών συστημάτων» .

2004 – Σήμερα Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών

(<http://www.eie.gr/nhrf/institutes/iopc/researchgroups/ccg-group/ccg-en.html>)

III. ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ : Αγγλικά (ΟΜΙΛΙΑ: Αρκετά καλά, ΑΝΑΓΝΩΣΗ, ΓΡΑΦΗ, Αρκετά καλά.

IV. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ:

Μοριακή Φυσική, υπολογιστική επιστήμη με εφαρμογές στην υπολογιστική φυσικοχημεία και στην επιστήμη των υλικών, σχεδιασμός και μελέτη υλικών για τεχνολογικές εφαρμογές μέσω υπολογισμών και μελέτη των μη γραμμικών οπτικών

ιδιοτήτων τους, πολωσιμότητας, πρώτης και δεύτερης υπερπολωσιμότητας, μικρών και μεγάλων μορίων στην αέρια φάση καθώς και σε συστήματα συγκροτημάτων (clusters), φουλερενίων, υπολογισμός μακροσκοπικών μη γραμμικών επιδεκτικότητας στερεών και υγρών με τη χρήση μοριακής δυναμικής, σχεδιασμός μοριακών συστημάτων-υλικών με μεγάλες μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες,. Τα κύρια ερευνητικά μου ενδιαφέροντα αφορούν τη συμβολή της δόνησης, της ηλεκτρονιακής συσχέτισης, όπως επίσης και την επίδραση της σχετικότητας, όπου απαιτείται, λόγω της ύπαρξης ατόμου με μεγάλο ατομικό αριθμό, στις προαναφερθείσες ιδιότητες, χρησιμοποιώντας ακριβείς μεθόδους της θεωρητικής χημείας (CCSD(T), CASSCF, CASPT2).

V. **ΕΙΔΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ:**

- 1) Πολύ καλή γνώση των προγραμμάτων της υπολογιστικής Χημείας
GAMESS, GAUSSIAN 98, MOPAC
MOLCAS, DALTON, CADPAC, SPECTRO, SIESTA(Basics), NWCHEM
- 2) Πολύ καλή χρήση των λειτουργικών συστημάτων Win95/98, WinNT4.0/2000, Unix (DEC Alpha σταθμούς εργασίας, HP-UX), Linux.
- 3) Πολύ Καλή γνώση της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN, Shell scripting (C, Bourne, Korn) σε UNIX/Linux.
- 4) Καλή γνώση των εργαλείων του Microsoft Office (Word, Excell, Powerpoint), όπως επίσης συγγραφή και επεξεργασία κειμένων χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα Latex.

VI. **ΣΥΝΕΔΡΙΑ – ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ**

ΣΥΝΕΔΡΙΑ

- i. Συμμετοχή με poster στο 18^ο Πανελλήνιο συνέδριο Χημείας, Μάρτιος 2000, με θέμα «*Δονητικές συμβολές στις ηλεκτρικές ιδιότητες των CuH, AgH και AuH.*».

ii. Συμμετοχή με poster στο διεθνές συνέδριο «Molecular Quantum Mechanics: The No Nonsense Path to Progress. An International Conference in Honour of Nicholas Handy” 27–29 Ιουλίου 2004, St John

College, Cambridge University. Τίτλος «The polarizabilities and Hyperpolarizabilities of HArF» P2.54

iii. Συμμετοχή στο συνέδριο «Central European Symposium in Theoretical Chemistry 2004», 30-09 έως 3-10 2004, Tihany, Hungary. Τίτλος : “On the molecular non – linear optical properties”, M. G. Papadopoulos and A. Avramopoulos

iv. Conformation dependence of the excitation spectrum and electro-optical properties of 3-aminoacroleine.

M. Jablonski, A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos and A. J. Sadlej, First European Symposium on Theoretical; Chemistry, 28-30 October 2002, Zwettl, Austria.

v. Συμμετοχή στην Ημερίδα Θεωρητικής και Υπολογιστικής Χημείας η οποία διεξήχθη στο Εθνικό Ιδρυμα Ερευνών στις 4/02/2005, με θέμα «Μοριακές πολωσιμότητες και υπερπολωσιμότητες»

vi. "A comparative study of the polarizability and hyperpolarizabilities of some Zn clusters. M. G. Papadopoulos, H. Reis, A. Avramopoulos, S. Erkoç and L. Amirouche. COST Meeting in Edinburgh, 5-8/5, 2005".

vii. Οργάνωση συμποσίου στο διεθνές συνέδριο «International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering 2006», Χανιά, Κρήτη, 27/10/06 – 1/11/06, με τίτλο « Computation of the linear and non-linear optical properties of molecules: recent developments. http://www.iccmse.org/Sessions_Minisymposia.htm.

viii. “Higher-order electric properties in a series of Rg-containing diacetylenes(Rg=Ar,Kr,Xe), T. Pluta, A. Avramopoulos, M.G. Papadopoulos, J. Leszczynski, 8th Southern School on Computational Chemistry and Materials Science, 25,26 April 2008, Jackson, Mississippi, USA. <http://sccc.ccmssi.us/>

viii Οργάνωση συμποσίου στο διεθνές συνέδριο «International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering 2008», Χερσόνησος, Κρήτη, 25/10/08 – 30/11/08, με τίτλο «Recent developments

of the calculation of nonlinear optical (NLO) properties: the NLO properties of fullerene derivatives and new approaches to the calculation of vibrational contributions»

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

http://www.iccmse.org/ICCMSE2008/Sessions_Minisymposia.htm

ix Οργάνωση συμποσίου στο διεθνές συνέδριο «International Conference Of Computational Methods in Science and Engineering 2009», Ρόδος, 29/9/09 – 4/10/09, http://www.iccmse.org/Sessions_Minisymposia.htm

ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ

- (β). Κατά τα έτη 1999 – 2000 και 2000 – 2001 συμμετείχα στο ερευνητικό πρόγραμμα **TMR-CT96-0047** με τίτλο «**Design, sythesis and study of novel non – linear optical materials**» που συμφωνήθηκε μεταξύ του Ινστιτούτου Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών και της Ευρωπαϊκής Ένωσης με αντικείμενο τη μελέτη και τον υπολογισμό και μελέτη των πολωσιμοτήτων και υπερπολωσιμοτήτων επιλεγμένων μορίων.
- (γ). Από το 1999 – 2003, στα πλαίσια του χρηματοδοτούμενου ερευνητικού προγράμματος με τίτλο «**atoms and molecules in external fields**» το οποίο είχε συσταθεί μεταξύ Ελλάδος (Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών) και Πολωνίας με διάρκεια από 8/11/2000-31/3/2003, συνεργάστηκα με τον καθηγητή Andrej J. Sadlej, department of Quantum Chemistry, Faculty of Chemistry, N. Copernicus University Torun, με αντικείμενο τη μελέτη και τον υπολογισμό των ηλεκτρικών ιδιοτήτων των συστημάτων **CuH, AgH και AuH**, όπως επίσης και στη μελέτη των επαγομένων από την αλληλεπίδραση ηλεκτρικών ιδιοτήτων διμερών συστημάτων που περιέχουν άτομο με μεγάλο ατομικό αριθμό (HF...AuH, HF...AuOH). Στα πλαίσια της συνεργασίας αυτής έχω φιλοξενηθεί από τον καθηγητή Andrej J. Sadlej στο πανεπιστήμιο N. Copernicus University Torun, Poland, κατά τα έτη 1999, 2001 και 2002.

- (δ). Από το 1998 συνεργάζομαι με τον Ερευνητή Α του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών Δρ. Ματθαίο Παπαδόπουλο με αντικείμενο τη μελέτη τον υπολογισμό, και τη διερεύνηση ορισμένων φαινομένων που συνδέονται με τις ηλεκτρικές ιδιότητες – πολωσιμότητα και υπερπλωσιμότητες – μικρών και μεγάλων μοριακών συστημάτων στην αέρια φάση..
- (ε) Κατά το έτος 2004 συμμετείχα στο ερευνητικό πρόγραμμα «**The non-linear optical properties of advanced materials: clusters and nanotubes**», το οποίο είχε συσταθεί μεταξύ του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών και της Τουρκικής ερευνητικής ομάδας της οποίας υπεύθυνος είναι ο Καθηγητής Sakir Erkoç, Department of Physics, Middle East Technical University, 06531 Ankara. Αντικείμενο του προγράμματος αυτού ήταν η μελέτη και η επίλυση ορισμένων σημαντικών προβλημάτων με σκοπό τον ακριβή υπολογισμό των Μη Γραμμικών Οπτικών ιδιοτήτων μεγάλων συστάδων και νανο-σωλήνων. **Τίτλος πρότασης** «Μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες προηγμένων υλικών: Συγκροτήματα-συστάδες (Clusters) και νανο-σωλήνες»
- (στ) Από 1/03/05 – 31/05/06 συμμετοχή στο ερευνητικό πρόγραμμα: “Marie Curie Host Development Fellowship (HPMD-CT-2001-00091)”, με τίτλο: “**Computation of non-linear optical properties of condensed phases**”. Αντικείμενο του προγράμματος ήταν ο υπολογισμός και η μελέτη των μακροσκοπικών μη γραμμικών επιδεκτικότητας υγρών συστημάτων (ακετονιτρίλιο). Συνδυάζοντας μοριακή δυναμική και κβαντομηχανικούς υπολογισμούς, μελετήθηκε η επίδραση του τοπικού ηλεκτρικού πεδίου (Local field) στις μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες. Για την περιγραφή του χρησιμοποιήθηκε το πρότυπο του πολυπολικού αναπτύγματος μέσω του οποίου περιγράφονται οι ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις, ενώ στον υπολογισμό του ελήφθησαν υπόψη όροι ανωτέρας τάξεως πέραν του αντιστοίχου που περιγράφει την αλληλεπίδραση διπόλου – διπόλου.
- (ζ) Από 15/06/07 – σήμερα, συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*”

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΚΕΨΕΙΣ

- i) Από 1/07/1999-31/07/1999, 1/06/2001-31/07/2001, 2/02/2002-30/02/2002, πανεπιστήμιο N. Copernicus University Torun, Poland, καθηγητής Andrej J. Sadlej.
- ii) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” επισκέφτηκα το ινστιτούτο υπολογιστικής χημείας του πανεπιστημίου της Girona, Spain από 15/06/2007-17/08/1007 <http://stark.udg.edu/web/index.html> .
- iii) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” επισκέφτηκα το πανεπιστήμιο του Cambridge, Department of Earth Sciences, Laboratory of First Principles Simulations in Earth Sciences, Καθηγητής E. Artacho, από 3/07/2008-3/08/2008 (http://rock.esc.cam.ac.uk/~emilio/fpesc_group.html) .
- iv) Στα πλαίσια της συμμετοχής μου ως συνεργάτης ερευνητής στο ερευνητικό πρόγραμμα: “*FP6-Marie Curie Transfer of Knowledge, MKT-CT-2006-042488, Fullerene Derivatives for Photonic applications, design, synthesis and measurements*” θα επισκεφτώ το πανεπιστήμιο του Cambridge, Department of Earth Sciences, Laboratory of First Principles Simulations in Earth Sciences, Καθηγητής E. Artacho, από 14/06/2009-14/07/2009 (http://rock.esc.cam.ac.uk/~emilio/fpesc_group.html).

ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΑ

- i) *A study of the environmental effects on the microscopic and macroscopic non-linear optical properties of liquids, based on a multipolar approximation: Liquid acetonitrile., 30/10/2006, ICCMSE 2006, Χανιά, Κρήτη,*
- 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.edu/seminaris/seminaris_a.php)

- iii) *On the vibrational contributions to the Non-Linear optical properties of small and medium size molecules, 28/09/2008, ICCMSE 2008, Χερσόνησος, Κρήτη,*
- 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*

VII. ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

Το ακαδημαϊκό έτος 2004 –2005 δίδαξα ως εργαστηριακός συνεργάτης με ωριαία αντιμισθία (14 ώρες/εβδ.) στο τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας, τα ακόλουθα εργαστηριακά μαθήματα : Εισαγωγή στα Ηλεκτρικά κυκλώματα (1^ο Εξάμηνο), Ηλεκτρονική Φυσική (1^ο Εξάμηνο) και Μικροεπεξεργαστές – Μικροελεγκτές (4^ο Εξάμηνο).

Ακαδημαϊκό έτος 2005-2006, εργαστηριακός συνεργάτης με ωριαία αντιμισθία (14 ώρες/εβδ.) στο τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας, διδασκαλία των ακολούθων μαθημάτων: Ηλεκτρικά κυκλώματα (1^ο Εξάμηνο), Συνδυαστικά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (2^ο Εξάμηνο).

Ακαδημαϊκό έτος 2006-2007, εργαστηριακός συνεργάτης (14 ώρες/εβδ.), τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας: Ηλεκτρικά κυκλώματα (1^ο Εξάμηνο), Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (3^ο Εξάμηνο).

Ακαδημαϊκό έτος 2007-2008, εργαστηριακός συνεργάτης στη βαθμίδα του καθηγητή εφαρμογών (10 ώρες/εβδ.), Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (3^ο Εξάμηνο), επιστημονικός συνεργάτης στη βαθμίδα του επίκουρου καθηγητή (3 ώρες/εβδ.), Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (3^ο Εξάμηνο, (θεωρία), τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας

Ακαδημαϊκό έτος 2008-2009, εργαστηριακός συνεργάτης στη βαθμίδα του καθηγητή εφαρμογών (10 ώρες/εβδ.), Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (3^ο Εξάμηνο), επιστημονικός συνεργάτης στη βαθμίδα του επίκουρου καθηγητή (3 ώρες/εβδ.), Ακολουθιακά Ψηφιακά Ηλεκτρονικά (3^ο Εξάμηνο, (θεωρία), τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας
Ακαδημαϊκό έτος 2009-2010, τμήμα Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, της Σχολής Τεχνολογικών Εφαρμογών του ΤΕΙ Λαμίας.

Ως συνεργάτης στο Τμήμα Πληροφορικής έχω επιβλέψει τις ακόλουθες πτυχιακές εργασίες: ι) Παπαμιχαήλ Κωνσταντίνα, «*Εφαρμογές της Ολογραφίας στην επιστήμη της Πληροφορικής*», ημερομηνία παρουσίασης, 20/06/2008, ιι) Ζαρκαλή Ιωάννα, Φραγκούλη Γεωργία, «*Ιστορική Αναδρομή στην Τεχνολογία των οπτικών μέσων αποθήκευσης*», ημερομηνία παρουσίασης, 16/10/2009
ιιι) Ζαμζάρας Σταύρος, «*Ανάπτυξη εφαρμογών στις θετικές επιστήμες με χρήση της γλώσσας προγραμματισμού FORTRAN*», συνεπίβλεψη με τον Δρ. Κων/νο Δημητρίου, ημερομηνία ανάθεσης, γενική συνέλευση τμήματος Πληροφορικής και Τεχνολογίας Υπολογιστών, αριθμ. Πρακτικού 111/8-4-2009 & 112/14-5-2009..

VIII. ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

1. Περιοδικά

2001 – 2002

1. A. Avramopoulos, V. E. Ingamell, M. G. Papadopoulos and A. J. Sadlej, “*Vibrational corrections to electric properties of relativistic molecules: The coinage metal hydrides*”. *J. Chem. Phys.* **114**, 198 (2001) [3.105/13]^a.
2. A Avramopoulos and M. G. Papadopoulos, “*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”, *Molecular Physics*, **100**, 821 (2002) [1.406/5].

3. A. Avramopoulos, M.G. Papadopoulos and A. J. Sadlej, “*Relativistic effects on interaction electric properties of weakly interacting systems: The HF...AuH dimmer*”, *J. Chem. Phys.*, **117**, 10026 (2002) [3.105/3].

2003

4. D. Kędziera, A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos and A. J. Sadlej, “*Electronic spectrum of the confined auride ion*”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **5**, 1096 (2003) [2.076/7].
5. A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej, “*Strong interactions through the $X^{\cdot\cdot}Au-Y$ ”*, *Chem. Phys. Lett.*, **370**, 765 (2003) [2.438/8].
6. K. Jug, S. Chiodo, P. Calaminici, A. Avramopoulos and M. G. Papadopoulos, “*Electronic and Vibrational Polarizabilities and Hyperpolarizabilities of Azoles: A comparative study of the Structure – Polarization relationship*”, *J. Phys. Chem. A*, **107**, 4172 (2003) [2.639/10].
7. H. Reis, M. G. Papadopoulos and A. Avramopoulos, “*Calculation of the Microscopic 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*, **107**, 3907 (2003) [2.639/12].

2004 - 2006

8. A. Avramopoulos, H. Reis, J. Li, and M. G. Papadopoulos, “*The Dipole moment, Polarizabilities, and First Hyperpolarizabilities of HARF. A Computational and Comparative study*”, *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 6179 (2004) [6.903/26].

9. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos, H Reis, S. Erkoc and L. Amirouche. "A comparative study of the dipole polarizability of some Zn clusters ", *J. Phys Chem B*, **109**, 18822 (2005) (<http://pubs.acs.org/cgi-bin/asap.cgi/jpcb/k/asap/html/jp050897s.html>) [3.834/10].
10. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos, H Reis, S. Erkoc and L. Amirouche. "Polarizabilities and second hyperpolarizabilities of Zn_mCd_n clusters", *Mol. Phys.*, **104**, 2027 (2006). (a special issue in honour of Prof. Andrzej J. Sadlej.), 2006 [1.406/3]. <http://dx.doi.org/10.1080/00268970600671607>
11. A. Avramopoulos, M. Jablonski, M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej, "Linear and nonlinear electric properties and their dependence on the conformation and intramolecular H-bonding. A model study" *Chem. Phys.*, **328**,33(2006) [2.316/3] <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemphys.2006.06.005>

2007

12. A. Avramopoulos, H, Reis, M.G. Papadopoulos, "Calculation of the Microscopic and Macroscopic Linear and Nonlinear Optical Properties of Liquid Acetonitrile: II. Local fields and nonlinear Optical Susceptibilities in quadrupolar approximation" *J.Phys.Chem B*, **111**, 2546 (2007) [3.843/6]. http://pubs3.acs.org/acs/journals/doilookup?in_doi=10.1021/jp066630q
13. A. Avramopoulos, M.G. Papadopoulos et. al., "Linear and nonlinear optical properties of some organoxenon derivatives" *J. Chem. Phys.*, **127**, 214102 (2007) [3.166].
14. 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, ISSN 15740404.<http://www.ingentaconnect.com/content/vsp/cole/2007/00000003/f0030002> <http://www.compulett.org/Search.htm#Volume4,N1>
http://www.compulett.org/Files/Stuff/v3n2-4/Paper%2025_new.pdf

2008

15. T. Pluta, A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos, J. Leszczynski “ *On the origin of the Large electron correlation contribution on the hyperpolarizabilities of some diacetylene rare gas compounds*” *J. Chem. Phys.* **129**,144308 (2008). [3.149/2]

2009

16. O.Loboda, R. Zalesny, A. Avramopoulos, J. M. Luis, B. Kirtman, N. et. al. “ *Linear and NonLinear Optical Properties of [60] Fullerene derivatives*” *J. Phys. Chem A*, **113**, 1159,2009. [2.918/2]
17. F. Holka, A. Avramopoulos, O. Loboda, V.Kellö, M. G. Papadopoulos , “*The (hyper) polarizabilities of AuXeF and XeAuF.*”, *Chem. Phys. Lett* , **472**, 185,2009. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2009.03.024> [2.207/2]
18. R. Zalesny, G. Wojcik, I. Mossakowska, W. Bartkowiak, A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos, “*Static electronic and vibrational first hyperpolarizabilities of meta-dinitrobenzene as studied by quantum chemical calculations*” *J. Mol. Struct.(Theochem)*, **907**, 46, 2009, <http://dx.doi.org/10.1016/j.theochem.2009.04.011> [1.112]
http://www.sciencedirect.com/science?_ob=PublicationURL&_tockey=%23TOC%235263%239999%239999999999%23999999%23FLA%23&_cdi=5263&_pubType=J&_auth=v&_acct=C000059649&_version=1&_urlVersion=0&_userid=577933&md5=c9dedd1a88872eed683ba4766b9f2ac
19. G. Soras , N. Psaroudakis, G. A. Mousdis, M. J. Manos, A. J. Tasiopoulos, S. Couris, P. Aloukos, P. Labéguerie, J. Lipinski, A. Avramopoulos, M. G. Papadopoulos, “*Synthesis and nonlinear optical properties of some novel nickel derivatives*”, under revision in **Journal of Physical Chemistry A [2.918]**

20. L. Serrano-Andrés, A. Avramopoulos, J. Li, P. Labéguerie, D. Bégué, V. Kellö, M. G. Papadopoulos, “*Linear and nonlinear optical properties of a series of Ni-dithiolenes derivatives*” *Journal of Chemical Physics*, **131**, 134312 (2009). [3.149]. [<http://dx.doi.org/10.1063/1.3238234>]
21. Robert Zaleśny, Oleksandr Loboda, K. Iliopoulos, G. Chatzikyriakos, Stelios Couris, Georgios Rotas, Nikos Tagmatarchis, Aggelos Avramopoulos, and Manthos G. Papadopoulos, “*Linear and Nonlinear Optical Properties of Triphenylamine-functionalized C₆₀: Insights from Theory and Experiment*” accepted to *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2010**, [4.064]. <http://www.rsc.org/publishing/journals/CP/article.asp?doi=b917825b>

2. Δημοσιεύσεις σε συνέδρια (κατόπιν κρίσεως)

1. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos and H. Reis, “*On the Vibrational Polarizabilities and Hyperpolarizabilities. Analysis of some specific examples: Pyrrole and HARF*”, in “*Lecture Series on Computer and Computational Sciences, International Conference of Computational Methods in Science and Engineering 2004*”, **Vol.1**, p. 1108, Editors: T. Simos and G. Maroulis, VSP International Science Publishers, (2004), ISBN **90-6764-418-8**. (<http://www.vspub.com/books/mathe/cbk-IntConComMetSciEngICC200.html>).
2. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos, S. G. Raptis and A. J. Sadlej, “*On the electric polarizabilities and hyperpolarizabilities: The correlation, relativistic and vibrational contributions*” in “*In the frontiers of Computational Science: Lecture*

- Series on Computer and Computational Sciences, International Conference of Computational Methods in Science and Engineering 2005*) **Vol. 3**, p. 152 –158, Editors: George Maroulis and Theodore Simos, Brill Academic Publishers, 2005, ISBN 90-6764-442-0 (<http://www.brill.nl/default.aspx?partid=18&pid=25565>) [/1]
3. A. Avramopoulos, H. Reis, 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*”, in “*Recent Progress in Computational Sciences and Engineering*”, **Vol. 7 B**, p.1198 – 1199,2006 Eds “G. Maroulis, T. Simos, Brill Academic Publishers, **ISBN: 978 9004155 42 8 ISSN: 1573-4196**
<http://www.brill.nl/default.aspx?partid=18&searchtext=Computational&type=1>
 4. M. G. Papadopoulos, H. Reis, A. Avramopoulos and A. Alparone “*A systematic study of the linear and non-linear optical properties of small molecules and clusters: The correlation, vibrational and relativistic contributions*” in “*Trends and Perspectives in Modern Computational Science*”, **Vol. 6**, p. 294 – 307, 2006,Eds “G. Maroulis, T. Simos, Brill Academic Publishers, **ISBN: 978 9004155 411 ISSN:1573-4196**
<http://www.brill.nl/default.aspx?partid=18&searchtext=Computational&type=1>
 5. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos “*The Linear and Non-Linear Optical Properties of Some Noble Gas Compounds*”, in “*COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING: Theory and Computation: Old Problems and New Challenges*” Edited by G. Maroulis and T. Simos, **AIP Conference Proceedings Volume 963**, 316-328, (2007). [DOI:10.1063/1.2827015] {
<http://scitation.aip.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=APCPCS0009630000>

<http://proceedings.aip.org/dbt/dbt.jsp?KEY=APCPCS&Volume=963&Issue=1>

6. A. Avramopoulos, H. Reis, M. G. Papadopoulos “*On the effect of the vibrational contributions to the Non-Linear optical properties. Cases of small and medium size molecules*” to be appeared in *AIP Conference Proceedings Volume* <http://proceedings.aip.org/proceedings/confproceed/1108.jsp>
7. O. Loboda, R. Zalesny, A. Avramopoulos, H. Reis, M. G. Papadopoulos, E. Artacho, “*Linear Scaling calculations of linear and non-linear optical properties of [60] fullerene derivatives*” in “*Computational methods in modern science and engineering: Advances in Computational Science*” Edited by G. Maroulis and T. Simos **AIP Conference Proceedings Volume 1108**, 198-204,2009, ISBN: 978-0-7354-0644-5
<http://link.aip.org/link/?APCPCS/1108/198/1>

3. Κεφάλαια σε βιβλία

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

[http://ressign.com/UserBookDetail.aspx?bkid=263&catid=116;](http://ressign.com/UserBookDetail.aspx?bkid=263&catid=116)

<http://www.allbookstores.com/book/8177361635>

^a [α/β], α: ο συντελεστής απήχησης (Impact Factor) του περιοδικού, β: αριθμός ετεροαναφορών.
(Πηγή: wos.ekt.gr)

Σύνολο ετεροαναφορών 123, Δείκτης h: 7, Impact Factor(average value) = 3.068

d=1
http://apps.isiknowledge.com/CitationReport.do?product=WOS&search_mode=CitationReport&SID=U2fIKfjLkFkEC4CafMA&page=1&cr_pqj

ISI Web of Knowledge [v. 4.6] - Web of Science - Windows Internet Explorer

http://apps.isiknowledge.com/CitationReport.do?product=WOS&search_mode=CitationReport&SID=T1MpolkHa5@GDECCIO@c&page=1&cr_pqid=1

File Edit View Favorites Tools Help

in.gr | πρώτη σελίδα ScienceDirect - Journal of Mo... ISI Web of Knowledge [v... X

Sign In | My EndNote Web | My ResearcherID | My Citation Alerts | My Saved Searches | Log Out | Help

ISI Web of KnowledgeSM *Take the next step*

Web of Science **Additional Resources**

Search Cited Reference Search Advanced Search Search History Marked List (0)

Web of Science®

<< Back to previous results list

Citation Report

Author=(Avramopoulos A) AND Address=(Natl)
Timespan=All Years. Databases=SC-EXPANDED, SSCI, A&HCI

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

Published Items in Each Year

Year	Published Items
2001	1
2002	2
2003	4
2004	1
2005	1
2006	2
2007	2
2008	1
2009	2

Citations in Each Year

Year	Citations
2002	3
2003	6
2004	12
2005	21
2006	23
2007	13
2008	29
2009	13

Results found: 16

Sum of the Times Cited [?]: 121
[View Citing Articles](#)
[View without self-citations](#)

Average Citations per Item [?]: 7.56

h-index [?]: 7

Results: 16

Page 1 of 2 Go

Sort by: Times Cited

Year	2005	2006	2007	2008	2009	Total	Average
Published Items	1	2	4	1	1	9	1.8
Citations	3	6	12	21	23	65	13

Internet 100%

Συνοπτικός πίνακας ερευνητικής-επαγγελματικής προϋπηρεσίας.

Α/Α	ΕΠΩΝΥΜΙΑ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ	ΔΙΑΡΚΕΙΑ		ΤΙΤΛΟΣ ΕΡΓΟΥ/«<<ΚΑΘΗΚΟΝΤΑ>> ^α	Αριθμός Συμβάσεων
		Από	Έως		
1.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	1/6/2004	28/2/2005	02 ΠΡΑΞΕ44, «συμμετοχή στη συγγραφή των υπομνημάτων και της πιλοτικής μορφής λογισμικού»	2
			9 ^β		
2.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	1/3/2005	31/5/2006	HPMD-CT-2001-00091, Computation of non-linear optical properties of condensed phases « υπολογισμός μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων»	5
			15 ^β		
3.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	1/6/2006	31/10/2006	MEST-CT-2005-020575 « ενίσχυση των εκπαιδευτικών και ερευνητικών δραστηριοτήτων του προγράμματος EURODESΥ»	3
			5 ^β		
4.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	1/11/2006	31/7/2007	Σχεδιασμός και Σύνθεση Βιοδραστικών και Λειτουργικών Μορίων, Αριστεία σε ερευνητικά ινστιτούτα ΓΓΕΤ (2 ^{ος} κύκλος)	3
			9 ^β		
5.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	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»	2
			14 ^β		
6.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	1/10/2008	31/12/2008	MEST-CT-2005-020575, «ανάπτυξη μεθόδων για τη σχεδίαση φαρμάκων»	1
			3 ^β		
7.	ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ	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»	2
			11 ^β		

^α Περιγραφή της απασχόλησης στο έργο.

^β Συνολική διάρκεια απασχόλησης (σε μήνες) στο έργο.

ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΕΣ

ΙΟΥΛΙΟΣ 2009, Cambridge.
ΠΗΓΗ, ISI, Web of Science

1. J.Am.Chem.Soc., 126 Issue: 19 Pages: 6179-6184 Published: MAY 19 2004

A/A	Citation
1.	Xu HL et. Al., CHEMICAL JOURNAL OF CHINESE UNIVERSITIES-CHINESE Volume: 30 Issue: 4 Pages: 786-788 Published: APR 10 2009
2.	Xu HL, et. Al., JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY Volume: 30 Issue: 7 Pages: 1128-1134 Published: MAY 2009
3.	Li ZJ et. Al., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 12 Pages: 2961-2966 Published: MAR 26 2009
4.	Xu HL et. Al., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C Volume: 113 Issue: 12 Pages: 4984-4986 Published: MAR 26 2009
5.	Li JB et. Al., JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY Volume: 7 Issue: 4 Pages: 853-867 Published: AUG 2008
6.	Ma F et. Al., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 112 Issue: 45 Pages: 11462-11467 Published: NOV 13 2008
7.	Maroulis G., JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 129 Issue: 4 Article Number: 044314 Published: JUL 28 2008
8.	Kirtman B, Luis JM, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 11 Article Number: 114101 Published: MAR 21 2008
9.	Xu HL et. Al., CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 454 Issue: 4-6 Pages: 323-326 Published: MAR 20 2008
10.	Wang FF et. Al. , JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 112 Issue: 4 Pages: 1090-1094 Published: JAN 31 2008
11.	Luis JM et. Al., JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 127 Issue: 8 Article Number: 084118 Published: AUG 28 2007
12.	Wang BQ, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 111 Issue: 28 Pages: 6378-6382 Published: JUL 19 2007
13.	Sun XY, et. Al., CHEMICAL JOURNAL OF CHINESE UNIVERSITIES-CHINESE Volume: 28 Issue: 6 Pages: 1110-1112 Published: JUN 2007
14.	Springborg M, Kirtman B, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 126 Issue: 10 Article Number: 104107 Published: MAR 14 2007
15.	Xu HL, et. Al., JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 129 Issue: 10 Pages: 2967-2970 Published: MAR 14 2007
16.	Christiansen O et. Al., JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 125 Issue: 21 Article Number: 214309 Published: DEC 7 2006
17.	Jing YQ et. Al., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 110 Issue: 24 Pages: 11725-11729 Published: JUN 22 2006
18.	Alparone A. et. Al., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 110 Issue: 17 Pages: 5909-5918 Published: MAY 4 2006
19.	McDowell SAC, CURRENT ORGANIC CHEMISTRY Volume: 10 Issue: 7 Pages: 791-803 Published: MAY 2006
20.	Chen W et. Al., JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 128 Issue: 4 Pages: 1072-1073

21.	Medved M et. Al., COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS Volume: 70 Issue: 8 Pages: 1055-1081 Published: 2005
22.	Torrent-Sucarrat M, et. Al., JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 122 Issue: 20 Article Number: 204108 Published: MAY 22 2005
23.	McDowell SAC, CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 396 Issue: 4-6 Pages: 346-349 Published: OCT 1 2004
24.	J. M. Luis, H. Reis, M. Papadopoulos, B. Kirtman, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 131 , 034116, 2009
25.	Bochenkova AV, Bochenkov VE, Khriachtchev L Source: JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 26 Pages: 7654-7659 Published: JUL 2 2009
26.	Liu ZB , Li ZR , Zuo MH ¹ , Li QZ , Ma F , Li ZJ , Chen GH , Sun CC JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 131 Issue: 4 Article Number: 044308 Published: JUL 28 2009
27.	B. Kirtman, J. M. Luis, in “ <i>Non-linear optical properties of matter: From molecules to condensed phases</i> ”, Editors: M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej and J. Leszczynski, Springer (2006), chap. 3, p. 101 (ISBN 1-4020-4849-1).
28.	Xu HL, Li ZR, Su ZM, Muhammad S, Gu FL, Harigayz K, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C Volume: 113 Issue: 34 Pages: 15380-15383 Published: AUG 27 2009
29.	Muhammad S (Muhammad, Shabbir) ¹ , Xu HL (Xu, Hongliang) ¹ , Liao Y (Liao, Yi) ¹ , Kan YH (Kan, Yuhe) ¹ , Su ZM (Su, Zhongmin) ¹ Source: JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 131 Issue: 33 Pages: 11833-11840 Published: AUG 26 2009

2. J.Chem.Phys., Volume: 114 Issue: 1 Pages: 198-210 Published: JAN 1 2001

A/A	Citation
30.	Sun SL et. Al., JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY Volume: 694 Issue: 9-10 Pages: 1266-1272 Published: APR 15 2009
31.	Zeng W, Ding FJ, Zhao KQ ACTA CHIMICA SINICA Volume: 66 Issue: 17 Pages: 1935-1942 Published: SEP 14 2008
32.	Yang GC, Fang L, Tan K, et al. ORGANOMETALLICS Volume: 26 Issue: 8 Pages: 2082-2087 Published: APR 9 2007
33.	Pitonak M, Neogrady P, Kello V, et al. MOLECULAR PHYSICS Volume: 104 Issue: 13-14 Pages: 2277-2292 Published: JUL 10 2006
34.	Le Roy RJ, Appadoo DRT, Anderson K, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 123 Issue: 20 Article Number: 204304 Published: NOV 22 2005
35.	Yang GC, Su ZM, Qin CS, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 123 Issue: 13 Article Number: 134302 Published: OCT 1 2005
36.	Guitou-Guichemerre M, Chambaud G : JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 122 Issue: 20 Article Number: 204325 Published: MAY 22 2005
37.	Salek P, Helgaker T, Saue T CHEMICAL PHYSICS Volume: 311 Issue: 1-2 Pages: 187-201 Published: APR 25 2005
38.	Norman P, Jensen HJA JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 121 Issue: 13 Pages: 6145-6154 Published: OCT 1 2004
39.	Pykkko P ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 43

	Issue: 34 Pages: 4412-4456
40.	Wang XF, Andrews L, Manceron L, et al. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 107 Issue: 41 Pages: 8492-8505 Published: OCT 16 2003
41.	Cafiero M, Adamowicz L, Duran M, et al. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM Volume: 633 Issue: 2-3 Pages: 113-122 Published: AUG 29 2003
42.	Norman P, Schimmelpfennig B, Ruud K, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 116 Issue: 16 Pages: 6914-6923 Published: APR 22 2002

3. J.Phys.Chem. A Volume: 107 Issue: 20 Pages: 4172-4183 Published: MAY 22 2003

A/A	Citation
43.	Kwok SW, Hein JE, Fokin VV, et al. HETEROCYCLES Volume: 76 Issue: 2 Pages: 1141-1154 Published: NOV 1 2008
44.	Liang XQ, Pu XM, Liao XW, et al. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE- THEOCHEM Volume: 860 Issue: 1-3 Pages: 86-94
45.	Author(s): Pederson MR, Baruah T Conference Information: International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2005), OCT 21-26, 2005 Corinth, GREECE Source: In the Frontiers of Computational Science Book Series: LECTURE SERIES ON COMPUTER AND COMPUTATIONAL SCIENCES Volume: 3 Pages: 156-167 Published: 2005 Molecular polarizabilities from density-functional theory: From small molecules to light harvesting complexes
46.	Calaminici P, Koster AM, Jug K, et al. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE- THEOCHEM Volume: 762 Issue: 1-3 Pages: 87-91 Published: APR 2 2006
47.	Alparone A, Reis H, Papadopoulos MG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 110 Issue: 17 Pages: 5909-5918 Published: MAY 4 2006
48.	Pederson MR, Baruah T, Allen PB, et al. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION Volume: 1 Issue: 4 Pages: 590-596 Published: JUL-AUG 2005
49.	Wang DZ TETRAHEDRON Volume: 61 Issue: 30 Pages: 7125-7133 Published: JUL 25 2005
50.	Calaminici P CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 387 Issue: 4-6 Pages: 253- 257 Published: APR 1 2004
51.	Torrent-Sucarrat M, Sola M, Duran M, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 120 Issue: 14 Pages: 6346-6355 Published: APR 8 2004
52.	Alparone A, Millefiori A, Millefiori S CHEMICAL PHYSICS Volume: 298 Issue: 1-3 Pages: 75-86 Published: MAR 8 2004 Times Cited: 6
53.	B. Kirtman, J. M. Luis, in “ <i>Non-linear optical properties of matter: From molecules to condensed phases</i> ”, Editors: M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej and J. Leszczynski, Springer (2006), chap. 3, p. 101 (ISBN 1-4020-4849-1).

4. J.Phys.Chem B Volume: 109 Issue: 40 Pages: 18822-18830 Published: OCT 13 2005

A/A	Citation
54.	Li XB (Li, Xi-Bo) ² , Wang HY (Wang, Hong-Yan) ¹ , Lv R (Lv, Ran) ³ , Wu WD (Wu, Wei-Dong) ² , Luo JS (Luo, Jiang-Shan) ² , Tang YJ (Tang, Yong-Jian) ² , JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 38 Pages: 10335-

	10342 Published: SEP 24 2009
55.	Maroulis G JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE Volume: 6 Issue: 4 Special Issue: Sp. Iss. SI Pages: 886-893 Published: APR 2009
56.	Maroulis G, Haskopoulos A JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND THEORETICAL NANOSCIENCE Volume: 6 Issue: 2 Special Issue: Sp. Iss. SI Pages: 418-427 Published: FEB 2009
57.	Li L, Zhou ZW, Wang X, et al. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 10 Issue: 45 Pages: 6829-6835 Published: 2008
58.	Karamanis P, Xenides D, Leszczynski J JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 129 Issue: 9 Article Number: 094708 Published: SEP 7 2008
59.	Karamanis P, Leszczynski J JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 15 Article Number: 154323 Published: APR 21 2008
60.	: Electric dipole polarizability of aluminum phosphide clusters Al_nP_n ($n=2-9$) and electron delocalization Author(s): Karamanis P, Xenides D Conference Information: International Conference on Computational Methods in Science and Engineering, SEP 25-30, 2007 Corfu, GREECE : COMPUTATION IN MODERN SCIENCE AND ENGINEERING VOL 2, PTS A AND B Book Series: AIP CONFERENCE PROCEEDINGS Volume: 2 Pages: 68-71 Part: Part A - B Published: 2007
61.	Sen S, Seal P, Chakrabarti S PHYSICAL REVIEW B Volume: 76 Issue: 11 Article Number: 115414 Published: SEP 2007
62.	Karamanis P, Begue D, Pouchan C JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 127 Issue: 9 Article Number: 094706 Published: SEP 7 2007
63.	Gaston N, Schwerdtfeger P PHYSICAL REVIEW B Volume: 74 Issue: 2 Article Number: 024105 Published: JUL 2006
64.	Alparone A, Reis H, Papadopoulos MG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 110 Issue: 17 Pages: 5909-5918 Published: MAY 4 2006

5. J. Phys. Chem A Volume: 107 Issue: 19 Pages: 3907-3917 Published: MAY 15 2003

A/A	Citation
65.	Christiansen O, Kongsted J, Paterson MJ, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 125 Issue: 21 Article Number: 214309 Published: DEC 7 2006
66.	Suponitsky KY, Timofeeva TV, Antipin MY USPEKHI KHIMII Volume: 75 Issue: 6 Pages: 515-556 Published: 2006
67.	Alparone A, Reis H, Papadopoulos MG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 110 Issue: 17 Pages: 5909-5918 Published: MAY 4 2006v
68.	Reis H, Grzybowski A, Papadopoulos MG JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 109 Issue: 44 Pages: 10106-10120 Published: NOV 10 2005
69.	Medved M, Cernusak I, Kedzuch S, et al. COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS Volume: 70 Issue: 8 Pages: 1055-1081 Published: 2005
70.	Jensen L, van Duijnen PT JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 123

	Issue: 7 Article Number: 074307 Published: AUG 15 2005
71.	Bartkowiak W, Niewodniczanski W, Misiaszek T, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 411 Issue: 1-3 Pages: 8-13 Published: AUG 5 2005
72.	Jensen L, van Duijnen PT INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY Volume: 102 Issue: 5 Pages: 612-619 Published: APR 20 2005
73.	Jensen L, Swart M, van Duijnen PT JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 122 Issue: 3 Article Number: 034103 Published: JAN 15 2005
74.	Torrent-Sucarrat M, Sola M, Duran M, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 120 Issue: 14 Pages: 6346-6355 Published: APR 8 2004
75.	F. de Brito Mota and Roberto Rivelino, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, Volume: 113 Issue: 28 Pages: 9489-9492 Published: JUL 16 2009
76.	David Bugh in " <i>Chemical Modelling: Applications and Theory, Royal Society of Chemistry, 2004</i> ", chap. 5, p.184
77.	B. Kirtman, J. M. Luis, in " <i>Non-linear optical properties of matter: From molecules to condensed phases</i> ", Editors: M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej and J. Leszczynski, Springer (2006), chap. 3, p. 101.
78.	W. Bartkowiak in " <i>Non-linear optical properties of matter: From molecules to condensed phases</i> ", Editors: M. G. Papadopoulos, A. J. Sadlej and J. Leszczynski, Springer (2006), chap. 9, p. 299 (ISBN 1-4020-4849-1).
79.	Suponitsky, Kyrill Yu, Liao, Yi, Masunov, Artem E., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 113 Issue: 41 Pages: 10994-11001 Published: OCT 15 2009

6. ChemPhys.Lett. Volume: 370 Issue: 5-6 Pages: 765-769 Published: MAR 21 2003

A/A	Citation
80.	Ganesamoorthy C, Balakrishna MS, Mague JT, et al. INORGANIC CHEMISTRY Volume: 47 Issue: 7 Pages: 2764-2776 Published: APR 7 2008
81.	Grochala W CHEMICAL SOCIETY REVIEWS Volume: 36 Issue: 10 Pages: 1632-1655 Published: 2007
82.	Ghanty TK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 124 Issue: 12 Article Number: 124304 Published: MAR 28 2006
83.	Ghanty TK JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 123 Issue: 24 Article Number: 241101 Published: DEC 22 2005
84.	Pyykko P: INORGANICA CHIMICA ACTA Volume: 358 Issue: 14 Pages: 4113-4130 Published: NOV 15 2005
85.	Ghanty TK: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 123 Issue: 7 Article Number: 074323 Published: AUG 15 2005
86.	: Pyykko P ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 43 Issue: 34 Pages: 4412-4456 Published: 2004
87.	Mendizabal F, Zapata-Torres G, Olea-Azar C CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 382 Issue: 1-2 Pages: 92-99 Published: NOV 28 2003

7. MOL.PHYS. Volume: 100 Issue: 6 Pages: 821-834 Published: MAR 2002

A/A	Citation
88.	Santiago E, Castro MA, Fonseca TL, et al. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 6 Article Number: 064310 Published: FEB 14 2008
89.	Pessoa R, Castro MA, Amaral OAV, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 412 Issue: 1-3 Pages: 16-22 Published: AUG 25 2005
90.	Andrade OP, Aragao A, Amaral OAV, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 392 Issue: 1-3 Pages: 270-275 Published: JUL 1 2004
91.	Merawa M, Begue D, Dargelos A JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 107 Issue: 45 Pages: 9628-9633 Published: NOV 13 2003
92.	David Bugh in " <i>Chemical Modelling: Applications and Theory, Royal Society of Chemistry, 2004</i> ", chap. 5, p.174

8. J.Phys.Chem.B Volume: 111 Issue: 10 Pages: 2546-2553 Published: MAR 15 2007

A/A	Citation
93.	Ju Y, Huang JP JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 112 Issue: 26 Pages: 7865-7874 Published: JUL 3 2008
94.	Ray PC, Bonifassi P, Leszczynski J JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 112 Issue: 13 Pages: 2870-2879 Published: APR 3 2008
95.	Title: Multi-scale simulations for materials and life sciences Author(s): Caster F, Champagne B, Nakano M, et al. Conference Information: International Conference on Computational Methods in Science and Engineering, SEP 25-30, 2007 Corfu, GREECE Source: COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING VOL 1 - THEORY AND COMPUTATION: OLD PROBLEMS AND NEW CHALLENGES Book Series: AIP CONFERENCE PROCEEDINGS Volume: 963 Pages: 350-378 Published: 2007
96.	Luis JM, Torrent-Sucarrat M, Christiansen O, et al. Source: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 127 Issue: 8 Article Number: 084118 Published: AUG 28 2007
97.	Hammond JR, Kowalski K JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 130 Issue: 19 Article Number: 194108 Published: MAY 21 2009
98.	F. de Brito Mota and Roberto Rivelino, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B Volume: 113 Issue: 28 Pages: 9489-9492 Published: JUL 16 2009

9. Phys.Chem.Chem.Phys. Volume: 5 Issue: 6 Pages: 1096-1102 Published: 2003

A/A	Citation
99.	Kaczmarek A, Bartkowiak W PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS Volume: 11 Issue: 16 Pages: 2885-2892 Published: 2009
100.	Jablonski M, Sadlej AJ CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 463 Issue: 4-6 Pages: 322-326 Published: OCT 1 2008
101.	Kaczmarek A, Zalesny R, Bartkowiak W : CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 449 Issue: 4-6 Pages: 314-318 Published: DEC 5 2007
102.	Lo JMH, Klobukowski M CHEMICAL PHYSICS Volume: 328 Issue: 1-3 Pages: 132-138 Published: SEP 29 2006

103.	Pyykko P ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION Volume: 43 Issue: 34 Pages: 4412-4456
104.	Holka F, Neogrady P, Kello V, et al. MOLECULAR PHYSICS Volume: 103 Issue: 20 Pages: 2747-2761 Published: OCT 20 2005
105.	Timo Fleig, <i>Habilitationsschrift</i> , p.41, Düsseldorf, 2006, http://www.theochem.uniduesseldorf.de/download/fleig.timo.habil.pdf

10. **J.ChemPhys**, Volume: 117 Issue: 22 Pages: 10026-10038 Published: DEC 8 2002

A/A	Citation
106.	Skwara B, Bartkowiak W, Da Silva DL THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS Volume: 122 Issue: 3-4 Pages: 127-136 Published: MAR 2009
107.	Pitonak M, Neogrady P, Kello V, et al. MOLECULAR PHYSICS Volume: 104 Issue: 13-14 Pages: 2277-2292 Published: JUL 10 2006
108.	Salek P, Helgaker T, Saue T CHEMICAL PHYSICS Volume: 311 Issue: 1-2 Pages: 187-201 Published: APR 25 2005

11. **Chem.Phys.** Volume: 328 Issue: 1-3 Pages: 33-44 Published: SEP 29 2006

A/A	Citation
109.	Kirtman B, Luis JM JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 11 Article Number: 114101 Published: MAR 21 2008
110.	Kishi R, Umezaki SY, Fukui H, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 454 Issue: 1-3 Pages: 91-96 Published: MAR 10 2008
111.	Jablonski M JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM Volume: 820 Issue: 1-3 Pages: 118-127 Published: OCT 15 2007

12. **MOLPHYS** Volume: 104 Issue: 13-14 Pages: 2027-2036 Published: JUL 10 2006

A/A	Citation
112.	Karamanis P, Pouchan C, Leszczynski J JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 112 Issue: 51 Pages: 13662-13671 Published: DEC 25 2008
113.	Karamanis P, Leszczynski J JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 128 Issue: 15 Article Number: 154323 Published: APR 21 2008
114.	Karamanis P, Begue D, Pouchan C JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 127 Issue: 9 Article Number: 094706 Published: SEP 7 2007

13. **Chem.Phys.Lett.** Volume: 472 Issue: 4-6 Pages: 185-189 Published: APR 20 2009

A/A	Citation
115.	Cukras J, Antusek A, Holka F, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 474 Issue: 4-6 Pages: 258-262 Published: JUN 4 2009

116.	Liu ZB , Li ZR , Zuo MH¹ , Li QZ , Ma F , Li ZJ , Chen GH , Sun CC JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 131 Issue: 4 Article Number: 044308 Published: JUL 28 2009
-------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

14. J.ChemPhys. Volume: 129 Issue: 14 Article Number: 144308 Published: OCT 14 2008

A/A	Citation
117.	Cukras J, Antusek A, Holka F, et al. CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 474 Issue: 4-6 Pages: 258-262 Published: JUN 4 2009
118.	Liu ZB , Li ZR , Zuo MH¹ , Li QZ , Ma F , Li ZJ , Chen GH , Sun CC JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 131 Issue: 4 Article Number: 044308 Published: JUL 28 2009

15. J.Chem.Phys. Volume: 127 Issue: 21 Article Number: 214102 Published: DEC 7 2007

A/A	Citation
1.	
2.	
3.	

16. J.Phys.Chem.A Volume: 113 Issue: 6 Pages: 1159-1170 Published: FEB 12 2009

A/A	Citation
119.	J. M. Luis, H. Reis, M. Papadopoulos, B. Kirtman, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 131 , 034116, 2009
120.	Bradshaw DS, Andrews DL, JOURNAL OF NONLINEAR OPTICAL PHYSICS & MATERIALS Volume: 18 Issue: 2 Pages: 285-299 Published: JUN 2009
121.	Czyznikowska Z, Kurzawa J, Zalesny R, et al, CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 480 Issue: 1-3 Pages: 37-40 Published: SEP 28 2009

17. J.MOL.STRUCT.(Theochem), 907, 46-50,2009.

A/A	Citation
1.	
2.	
3.	

18. [On electric polarizabilities and hyperpolarizabilities: The correlation, relativistic and vibrational contributions](#)

Author(s): Papadopoulos MG, Avramopoulos A, Raptis SG, et al.
Conference Information: International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2005), OCT 21-26, 2005 Corinth, GREECE
Source: In the Frontiers of Computational Science Book Series: LECTURE SERIES ON COMPUTER AND COMPUTATIONAL SCIENCES Volume: 3
Pages: 152-155 Published: 2005

A/A	Citation
1.	

122.	Zeng W, Ding FJ, Zhao KQ ACTA CHIMICA SINICA Volume: 66 Issue: 17 Pages: 1935-1942 Published: SEP 14 2008
------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

19. M. G. Papadopoulos, A. Avramopoulos “*The Linear and Non-Linear Optical Properties of Some Noble Gas Compounds*”, in “*COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING: Theory and Computation: Old Problems and New Challenges*” Edited by G. Maroulis and T. Simos, *AIP Conference Proceedings Volume 963*, 316-328, (2007).

A/A	Citation
123.	Liu ZB , Li ZR , Zuo MH¹ , Li QZ , Ma F , Li ZJ , Chen GH , Sun CC JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 131 Issue: 4 Article Number: 044308 Published: JUL 28 2009

ΑΝΑΛΥΣΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΩΝ

ΣΥΝΟΛΟ ΕΤΕΡΟΑΝΑΦΟΡΩΝ: 123

Impact Factor(average value) = 3.073 (Sum of IF = 55.313), h-index: 7

Journal/IF	Num. of Publications
------------	----------------------

JACS/ 8.091	1
JCP/3.149	5
JPCA/2.871	3
JPCB/4.189	2
CP/1.961	1
CPL/2.169	2
PCCP/4.064	2
MOLPHYS/1.478	2
JMOLSTRUCT(Theo)/1.167	1

ΣΥΝΟΠΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΟΥ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ.

1. ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΑΞΙΟΛΟΓΕΣ ΜΓΟ [6, 8, 9, 10, 13, 14, 15, 10, 16,17, 19,20]

2. ΜΕΛΕΤΗ ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΟΠΤΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ (ΜΓΟ)

A) ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΗΣ ΔΟΝΗΣΗΣ [1, 2, 6, 7, 8, 13, 14, 18]

B) ΕΠΑΓΟΜΕΝΕΣ ΑΠΟ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗ ΜΓΟ [3]

Γ) ΜΕΛΕΤΗ ΜΑΚΡΟΣΚΟΠΙΚΩΝ ΜΓΟ [12]

Δ) ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΜΓΟ ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΜΕ ΜΕΓΑΛΟ ΑΤΟΜΙΚΟ ΑΡΙΘΜΟ

[1, 3, 4, 17]

**3. ΧΡΗΣΗ ΕΞ' ΥΠΑΡΧΗΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΤΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ ΓΙΑ
ΤΗ ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΔΙΑΦΟΡΩΝ ΖΗΤΗΜΑΤΩΝ [4, 5, 20]**