

**ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ**

**Βιογραφικό Σημείωμα  
και Υπόμνημα  
Επιστημονικών Εργασιών**

**Φεβρουάριος 2014**

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

### ΔΙΕΥΘΥΝΣΗ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Τομέας Φυσικοχημείας  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων  
451 10 Ιωάννινα  
26-5100-8471  
26-5100-8682 fax  
melissas@chem.auth.gr

### ΤΟΠΟΣ ΚΑΙ ΧΡΟΝΟΛΟΓΙΑ ΓΕΝΝΗΣΕΩΣ

Θεσσαλονίκη

1<sup>η</sup> Αυγούστου 1963

### ΕΘΝΙΚΟΤΗΤΑ

Ελληνική

### ΟΙΚΟΓΕΝΕΙΑΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

Έγγαμος

### ΣΤΡΑΤΟΛΟΓΙΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

Εκπληρωμένες στρατιωτικές υποχρεώσεις 21<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1993–21<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1994

### ΣΠΟΥΔΕΣ

I. Πτυχίο, Χημεία

15<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1986

Τμήμα Χημείας

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη

Βαθμός: 7.40/10.00

Θέμα Διπλωματικής Εργασίας: Θεωρητική Μελέτη και Βελτιστοποίηση Γεωμετρικής

Δομής του Μονοξειδίου του Άνθρακα με Βάση τη Μεθοδολογία ΕΗΜΟ

Επιβλέποντες: Καθ. Κωνσταντίνος Α. Τσίπης και Καθ. Ευάγγελος Γ. Μπακάλμπασης

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

II. Ph.D., Φυσικοχημεία

31<sup>η</sup> Αυγούστου 1993

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο της Μιννεσότα, Μιννεάπολη, Μιννεσότα, ΗΠΑ

Cumulative GPA: 3.89/4.00

Θέμα Διατριβής: Improved Methods for Reaction Path Calculations in Chemical Dynamics and Rate Constants' Calculations for Reactions of OH with Alkanes

Επιβλέπων: Καθ. Donald G. Truhlar

### ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ

Αγγλικά – Άριστη γνώση

Γαλλικά - Πολύ καλή γνώση

### ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

- i. Ατμοσφαιρική Χημεία με έμφαση στις Αντιδράσεις Διάσπασης του Όζοντος,
- ii. Χημεία Καύσεων,
- iii. Θεωρητική Μελέτη Μη Γραμμικών Οπτικών Ιδιοτήτων Υλικών,
- iv. Εφαρμογή, Βελτίωση και Αξιολόγηση *Ab Initio* Υπολογιστικών Μεθόδων στη Διερεύνηση της Δομής και των Φυσικοχημικών Ιδιοτήτων των υπό μελέτη Ενώσεων,
- v. Θεωρητικοί Υπολογισμοί Σταθερών Ταχύτητας διαφόρων Αντιδράσεων με Εφαρμογή της Θεωρίας του Μεταβαλλόμενου Μεταβατικού Σταδίου (Variational Transition State Theory), και
- vi. Εισαγωγή, Βελτίωση και Αξιολόγηση Αριθμητικών Μεθόδων για Υπολογισμούς Διαδρομών Ελάχιστης Ενέργειας διαφόρων υπό μελέτη Αντιδράσεων.

### ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΣΤΑΔΙΟΔΡΟΜΙΑ

I. Επισκέπτης Ερευνητής

1<sup>η</sup> Αυγούστου 1984–31<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1984

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο του Όσλο, Όσλο, Νορβηγία

II. Διδάσκων/Βοηθός Διδασκαλίας

16<sup>η</sup> Μαρτίου 1987–15<sup>η</sup> Μαρτίου 1989

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο της Μιννεσότα, Μιννεάπολη, Μιννεσότα, ΗΠΑ

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- III. Μεταπτυχιακός Υπότροφος 16<sup>η</sup> Μαρτίου 1989–15<sup>η</sup> Ιουνίου 1993  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο της Μιννεσότα, Μιννεάπολη, Μιννεσότα, ΗΠΑ
- IV. Επιστημονικός Συνεργάτης 16<sup>η</sup> Μαρτίου 1989  
Υπερυπολογιστικό Ινστιτούτο  
Πανεπιστήμιο της Μιννεσότα, Μιννεάπολη, Μιννεσότα, ΗΠΑ
- V. Βοηθός Ερευνητή 23<sup>η</sup> Μαρτίου 1994–21<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1994  
Γενικό Επιτελείο Στρατού
- VI. Επιστημονικός Συνεργάτης 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1995–31<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1997  
Τμήμα Χημείας  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη
- VII. Εισηγητής 1<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1995–31<sup>η</sup> Δεκεμβρίου 1995  
Κέντρο Επαγγελματικής Κατάρτισης “Γαία”, Σέρρες
- VIII. Εισηγητής 1<sup>η</sup> Ιανουαρίου 1996–29<sup>η</sup> Φεβρουαρίου 1996  
Κέντρο Επαγγελματικής Κατάρτισης “Δημιουργική-Εκπαιδευτική”, Θεσσαλονίκη
- IX. Επιστημονικός Συνεργάτης 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1996–31<sup>η</sup> Αυγούστου 1998  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα
- X. Συνεργαζόμενος Ερευνητής 1<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1997–20<sup>η</sup> Ιουνίου 2001  
με προσόντα Ερευνητή Δ’  
Εργαστήριο Μοριακής Μοντελοποίησης Υλικών  
Ινστιτούτο Φυσικοχημείας  
Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. “Δημόκριτος”, Αγία Παρασκευή Αττικής
- XI. Επισκέπτης Ερευνητής 28<sup>η</sup> Μαΐου 1999–15<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2006  
CINECA Διαπανεπιστημιακό Υπερυπολογιστικό Κέντρο, Μπολόνια, Ιταλία

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- XII. Διδάσκων βάσει του Π.Δ. 407/1980 20<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2000–20<sup>η</sup> Ιουνίου 2001  
στη βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή  
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα
- XIII. Λέκτορας 20<sup>η</sup> Ιουνίου 2001–11<sup>η</sup> Απριλίου 2006  
Τομέας Φυσικοχημείας  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα
- XIV. Επίκουρος Καθηγητής 11<sup>η</sup> Απριλίου 2006–16<sup>η</sup> Ιουλίου 2012  
Τομέας Φυσικοχημείας  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα
- XV. Αναπληρωτής Καθηγητής 16<sup>η</sup> Ιουλίου 2012  
Τομέας Φυσικοχημείας  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

### ΚΡΙΤΗΣ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΩΝ ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΩΝ

- I. Κριτής Δημοσιεύσεων Ιανουάριος 1992  
Journal of the American Chemical Society  
American Chemical Society
- II. Κριτής Δημοσιεύσεων Μάιος 2003  
Chemical Physics  
Elsevier B. V.
- III. Κριτής Δημοσιεύσεων Σεπτέμβριος 2008  
Nitric Oxide: Biology and Chemistry  
Elsevier B. V.

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- IV. Κριτής Δημοσιεύσεων Μάιος 2009  
The Journal of Physical Chemistry  
American Chemical Society
- V. Κριτής Δημοσιεύσεων Ιανουάριος 2010  
Journal of Chemical & Engineering Data  
American Chemical Society
- VI. Κριτής Δημοσιεύσεων Σεπτέμβριος 2010  
International Journal of Chemical Kinetics  
John Wiley & Sons
- VII. Κριτής Δημοσιεύσεων Νοέμβριος 2011  
Chemical Physics Letters  
Elsevier B. V.

### ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΑΣΤΩΝ

- I. κ. Κωνσταντίνος Τερλίδης 1<sup>η</sup> Μαρτίου 2005–15<sup>η</sup> Δεκεμβρίου 2005  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Προχωρημένο Εργαστήριο Φυσικοχημείας και Βιβλιογραφική Έρευνα

### ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΑΣΤΩΝ

- I. κ. Αργυρώ Γ. Χατζοπούλου 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 1999–31<sup>η</sup> Οκτωβρίου 2000  
Ινστιτούτο Φυσικοχημείας  
Εθνικό Κέντρο Ερευνών Φυσικών Επιστημών “Δημόκριτος”, Αγία Παρασκευή Αττικής  
Τμήμα Φυσικής  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη  
Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας της κ. Αργυρούς Γ. Χατζοπούλου στο  
Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών “Φυσική Υλικών”  
Θέμα Εργασίας: Θεωρητική Μελέτη Δομής, Δονητικής Ενέργειας και Δυναμικών  
Στρέψης του Καρβοσιλανίου  $\text{CH}_3\text{-Si}(\text{CH}_3)_2\text{-CH}_2\text{-Si}(\text{CH}_3)_2\text{-CH}_3$ . Προσαρμογή  
Γεωμετρικών και Ενεργειακών Δεδομένων σε Συναρτήσεις Δυναμικής Ενέργειας

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

II. κ. Κωνσταντίνος Δ. Παπαβασιλείου 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2003–13<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2006

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας του κ. Κωνσταντίνου Δ. Παπαβασιλείου στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών με εξειδίκευση «Χημικές και Βιοχημικές Τεχνολογίες» και κατεύθυνση «Χημική, Περιβαλλοντική και Υπολογιστική Τεχνολογία-Προσομοίωση»

Θέμα Εργασίας: Θεωρητική Μελέτη Βιολογικού Μηχανισμού Προσβολής της Ρίζας της Τυροσίνης από το Μονοξειδίο του Αζώτου

III. κ. Θεοδώρα Δ. Τζίμα 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2003–13<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2006

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Τμήμα Χημείας

Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας της κ. Θεοδώρας Δ. Τζίμα στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών με εξειδίκευση «Χημικές και Βιοχημικές Τεχνολογίες» και κατεύθυνση «Χημική, Περιβαλλοντική και Υπολογιστική Τεχνολογία-Προσομοίωση»

Θέμα Εργασίας: Θεωρητική Κινητική Μελέτη του Ατμοσφαιρικού Συστήματος του Βρωμομεθανίου με τη Ρίζα Υδροξυλίου

IV. κ. Γεώργιο Π. Καρφάκη 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2009–8<sup>η</sup> Φεβρουαρίου 2013

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Τμήμα Χημείας

Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας του κ. Γεωργίου Π. Καρφάκη στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών με εξειδίκευση «Χημικές και Βιοχημικές Τεχνολογίες» και κατεύθυνση «Χημική, Περιβαλλοντική και Υπολογιστική Τεχνολογία-Προσομοίωση»

Θέμα Εργασίας: Θεωρητική Κινητική Μελέτη του Ατμοσφαιρικού Συστήματος του Δι- και Τρι- Χλωρομεθανίου με τη Ρίζα Υδροξυλίου

V. κ. Σπυρίδωνα Α. Διβάνη 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2013

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Τμήμα Χημείας

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας του κ. Σπυρίδωνα Α. Διβάνη στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών με εξειδίκευση «Χημικές και Βιοχημικές Τεχνολογίες» και κατεύθυνση «Χημική, Περιβαλλοντική και Υπολογιστική Τεχνολογία-Προσομοίωση»  
Θέμα Εργασίας: Θεωρητική Κινητική Μελέτη του Ατμοσφαιρικού Συστήματος του ClOO με τη Ρίζα Μονοξειδίου του Αζώτου

### ΕΠΙΒΛΕΨΗ ΥΠΟΨΗΦΙΩΝ ΔΙΔΑΚΤΟΡΩΝ

- I. Δρ. Κωνσταντίνος Δ. Παπαβασιλείου 14<sup>η</sup> Ιουλίου 2006–5<sup>η</sup> Μαρτίου 2010  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής του διδάκτορα κ. Κωνσταντίνου Δ. Παπαβασιλείου  
Θέμα Διδακτορικής Διατριβής: Κατασκευή Συναρτήσεων Δυναμικής Ενέργειας  
Δομικών Μορίων Ασύμμετρων Πολυμερικών Μεμβρανών και Άλλων Συστημάτων
- II. Δρ. Θεοδώρα Δ. Τζίμα 10<sup>η</sup> Νοεμβρίου 2006–22<sup>α</sup> Ιουνίου 2012  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Τμήμα Χημείας  
Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής της διδάκτορος κ. Θεοδώρας Δ. Τζίμα  
Θέμα Διατριβής: Κβαντομηχανική Μελέτη των Ιδιοτήτων Πολυπυρηνικών Μοριακών  
Μαγνητικών Υλικών με Βάση Μέταλλα Μετάπτωσης
- III. κ. Ματίνα Γ. Τσολάκη 8<sup>η</sup> Απριλίου 2009  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Τμήμα Χημείας  
Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής της υποψήφιας διδάκτορος κ. Ματίνας Γ. Τσολάκη  
Θέμα Διατριβής: Μελέτη Αντιδράσεων Ελευθέρων Ριζών CCN με Αλκάνια
- IV. κ. Όλγα Κ. Φαλαγκάρα 2<sup>α</sup> Ιουλίου 2009  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Τμήμα Χημείας  
Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής της υποψήφιας διδάκτορος κ. Όλγας Κ.  
Φαλαγκάρας  
Θέμα Διατριβής: Μελέτη της Ενεργειακής Υπερεπιφάνειας του Οξειδίου του Πυριτίου

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

### ΜΕΤΑΔΙΔΑΚΤΟΡΕΣ ΣΥΝΕΡΓΑΤΕΣ

I. Δρ. Βασίλειος Ε. Ράπτης 1<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2004

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Στο πλαίσιο των ερευνητικών προγραμμάτων «Πυθαγόρας» με τίτλο: Χημική Κατάληξη Ρύπων του Περιβάλλοντος: Χλωριωμένοι Υδρογονάνθρακες στην Ατμόσφαιρα και τα Υπόγεια Ύδατα και «Π.Ε.Ν.Ε.Δ.2003» με τίτλο: Μελέτη, ανάπτυξη και χαρακτηρισμός ασύμμετρων πολυμερικών μεμβρανών για την απομάκρυνση ανεπιθύμητων συστατικών του φυσικού αερίου

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Βασίλειος Σ. Μελισσάς

### ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΤΡΙΜΕΛΕΙΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΕΣ ΕΠΙΤΡΟΠΕΣ

I. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 13<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2006

για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από τον Δρ. Γεώργιο Ι. Καραδήμο

Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Θέμα Διατριβής: Ανάπτυξη και Χαρακτηρισμός Ασύμμετρων Πορωδών Μεμβρανών για την Απομάκρυνση Ανεπιθύμητων Συστατικών του Φυσικού Αερίου

II. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 27<sup>η</sup> Απριλίου 2007

για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από τον κ. Παναγιώτη Σ. Γκριτζάπη

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Θέμα Διατριβής: Μελέτες της Αντίδρασης photo-Fries Οργανοπυριτικών Ενώσεων

III. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 26<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2008

για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από τον Δρ. Παντελεήμονα Γ. Τάκη

Τμήμα Βιολογικών Εφαρμογών και Τεχνολογιών

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Θέμα Διατριβής: Ο Ρόλος των Διαλυτών στη Διαμόρφωση των Πεπτιδίων-Μελέτη της Αλληλεπίδρασης του H<sub>2</sub>O και του DMSO με Ενώσεις Μοντέλα, Αμινοξέα και Παράγωγα τους

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- IV. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 23<sup>η</sup> Απριλίου 2010  
για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από τον κ. Δημήτριο Ζώνη  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Φαινομενολογική Προσέγγιση της Διδασκαλίας και Μάθησης  
Εννοιών Δομής της Ύλης
- V. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 6<sup>η</sup> Απριλίου 2012  
για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από τον κ. Όθωνα Α. Μούλτο  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Μοριακή Προσομοίωση Διαλυμάτων Συμπολυμερών και  
Τριπολυμερών με Ποικίλη Αρχιτεκτονική
- VI. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 22<sup>α</sup> Απριλίου 2012  
για Εκπόνηση Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης από τον κ. Κωνσταντίνο Ν.  
Γεωργιάδη  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Μοριακή Προσομοίωση Διαλυμάτων Υβριδικών Δενδριτικών-  
Αστεροειδών
- VII. Μέλος Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 24<sup>η</sup> Ιανουαρίου 2014  
για Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής από την κ. Ελένη Θ. Παππά  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Ενδομοριακοί και Διαμοριακοί Δεσμοί: Ιεραρχίες μάθησης στη  
βιβλιογραφία της Γενικής Χημείας και στην Προσέγγιση Καταστάσεων της Ύλης  
(SOMA)–Αξιολόγηση των Ερωτήσεων των Αντίστοιχων Κεφαλαίων

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

### ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΠΤΑΜΕΛΕΙΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΕΣ ΕΠΙΤΡΟΠΕΣ

- I. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 25<sup>η</sup> Φεβρουαρίου 2004  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Βασιλείου Ε. Ράπτη  
Τμήμα Χημείας  
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Ζωγράφος  
Θέμα Διατριβής: Υπολογισμός Δομικών και Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Πολυμερών που περιέχουν Πυρίτιο και Ιδιοτήτων Μεταφοράς Υδρογονανθράκων στα Πολυμερή αυτά, με Μοριακή Προσομοίωση
- II. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 8<sup>η</sup> Οκτωβρίου 2004  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Αναστάσιου Π. Βαφειάδη  
Τμήμα Χημείας  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη  
Θέμα Διατριβής: «Θεωρητική Μελέτη της Δραστικότητας Ενώσεων με Αντιοξειδωτικές Ιδιότητες»
- III. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 14<sup>η</sup> Δεκεμβρίου 2004  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Αλεξάνδρας Τ. Λιθοξοΐδου  
Τμήμα Χημείας  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη  
Θέμα Διατριβής: Κβαντομηχανική Μελέτη με Μοντέλα SCRF της Επίδρασης του Διαλύτη σε Παραμέτρους που Σχετίζονται με την Αντιοξειδωτική Δραστικότητα Φαινολικών Ενώσεων
- IV. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 30<sup>η</sup> Μαΐου 2007  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Θεοφάνη Καλατζή  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Συμβολή στην Ενοποίηση Μεγάλης Κλίμακας Λογισμικών Προσομοιώσεων (software integration) με Εφαρμογές στην Βιοπληροφορική
- V. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 31<sup>η</sup> Μαΐου 2007  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Χρήστου Κρίνα

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

Θέμα Διατριβής: Τοπολογική Πολυπλοκότητα Μοριακών Δομών. Μελέτη με Υπολογιστικές Προσεγγίσεις

- VI. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 12<sup>η</sup> Ιουνίου 2009  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Βασιλικής Κοσμά  
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Πολυμερείς και Σύνθετες, Συμπαγείς και Πορώδεις Μεμβράνες και Ύνες από Ρευστό Πρόδρομο
- VII. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 27<sup>η</sup> Νοεμβρίου 2009  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Δημητρίου Κολιούλη  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Πειραματική Διδασκαλία της Έννοιας του Μορίου και του Ατόμου στη Β' Γυμνασίου: Έμφαση στην Εποικοδομητική και Νοηματική Προσέγγιση
- VIII. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 4<sup>η</sup> Ιουνίου 2010  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Παναγιώτη Κ. Βάρρα  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Μηχανιστική Μελέτη Φωτοδιάσπασης Αλλυλοσιλανίων και Φωτομετάθεσης Βενζυλοσιλανίου με CASSCF/CASPT2
- IX. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 8<sup>η</sup> Μαρτίου 2013  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Παναγιώτη Κ. Δεπάστα  
Τμήμα Χημείας  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη  
Θέμα Διατριβής: Μελέτη της Επίδρασης των Ligands στη Σταθερότητα, Διαμόρφωση και Διατροφική Ανταπόκριση Μεταλλικών Clusters των Μετάλλων Νομισμάτων (Cu, Ag, Au) με Υπολογιστικές Κβαντομηχανικές Μεθόδους

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- X. Μέλος Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής 15<sup>η</sup> Απριλίου 2013  
Διδακτορικής Διατριβής Δρ. Παναγιώτη Κ. Μούλτο  
Τμήμα Χημείας  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Θέμα Διατριβής: Μοριακή Προσομοίωση Διαλυμάτων Συμπολυμερών και  
Τριπολυμερών με Ποικίλη Αρχιτεκτονική

### ΔΙΔΑΚΤΙΚΟ ΕΡΓΟ

- I. Τμήμα Χημείας 16<sup>η</sup> Μαρτίου 1987–15<sup>η</sup> Μαρτίου 1989  
Πανεπιστήμιο της Μινнесότα, Μιννεάπολη, Μινнесότα, ΗΠΑ  
Διδασκαλία μαθημάτων, φροντιστηρίων και εργαστηρίων με τα εξής αντικείμενα:  
α) Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: i) Γενική Χημεία, ii) Φυσικοχημεία, και  
iii) Εισαγωγή στην Κβαντική Χημεία,  
β) Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: i) Κβαντομηχανική
- II. Κέντρο Επαγγελματικής Κατάρτισης 1<sup>η</sup> Οκτωβρίου 1995–31<sup>η</sup> Δεκεμβρίου 1995  
“Γαία”, Σέρρες  
Διδασκαλία μαθημάτων με τα εξής αντικείμενα: i) Διαχείριση και Προστασία  
Περιβάλλοντος και ii) Διαχείριση-Επεξεργασία Βιομηχανικών Λυμάτων
- III. Κέντρο Επαγγελματικής Κατάρτισης 1<sup>η</sup> Ιανουαρίου 1996–29<sup>η</sup> Φεβρουαρίου 1996  
“Δημιουργική-Εκπαιδευτική”, Θεσσαλονίκη  
Διδασκαλία μαθήματος με το εξής αντικείμενο: Εξοικονόμηση Ενέργειας, Προστασία  
Περιβάλλοντος Βιομηχανιών Τροφίμων
- IV. Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών 20<sup>η</sup> Σεπτεμβρίου 2000–20<sup>η</sup> Ιουνίου 2001  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα  
Διδασκαλία μαθημάτων με τα εξής αντικείμενα:  
α) Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: i) Φυσικοχημεία και ii) Κβαντομηχανική
- V. Τμήμα Χημείας 20<sup>η</sup> Ιουνίου 2001  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Ιωάννινα

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

Διδασκαλία μαθημάτων με τα εξής αντικείμενα:

- α) Προπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: i) Υπολογιστικές Μέθοδοι Χημείας, ii) Εισαγωγή στους Ηλεκτρονικούς Υπολογιστές, iii) Εργαστήριο Φυσικοχημείας I, iv) Θεωρητική Χημεία I και v) Μοντέλα στη Χημεία και Βιοχημεία
- β) Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: i) Μοριακή Προσομοίωση, ii) Υπολογιστικά Μαθηματικά, iii) Εργαστήριο Τεχνικών Υπολογιστικής Προσομοίωσης, iv) Υπολογιστική Χημεία, v) Τεχνολογία Χημικής Πληροφορίας και vi) Εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας

### ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΗ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΑ

Όργανα Διοίκησης του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων:

1. Μέλος της Επιτροπής Βιβλιοθήκης του Τμήματος Χημείας τα ακαδημαϊκά έτη 2002–2003, 2003–2004, 2004–2005, 2005–2006, 2006–2007, 2007–2008, 2008–2009, 2009–2010, 2010–2011 και 2011–2012.
2. Μέλος της Γ.Σ. του Τμήματος Χημείας τα ακαδημαϊκά έτη 2003–2004, 2004–2005, 2005–2006, 2006–2007, 2007–2008, 2008–2009 και 2009–2010.
3. Μέλος της Επιτροπής Σύνταξης του Οδηγού Σπουδών του Τμήματος Χημείας για το ακαδημαϊκό έτος 2004–2005.
4. Μέλος της Επιτροπής Παραλαβών Αγοραζόμενων Ειδών του Τμήματος Χημείας κατά το ακαδημαϊκό έτος 2002–2003.
5. Μέλος της Επιτροπής Άχρηστων Οργάνων-Επίπλων του Τμήματος Χημείας κατά το ακαδημαϊκό έτος 2002–2003.
6. Μέλος της Επιτροπής Επιλογής Μεταπτυχιακών Φοιτητών τα ακαδημαϊκά έτη 2006–2007 και 2009–2010.
7. Συντονιστής της Επιτροπής Φοιτητικού Αναγνωστηρίου-Υπολογιστικού Εργαστηρίου κατά το ακαδημαϊκό έτος 2009–2010 και 2010–2011.
8. Μέλος της Επιτροπής Socrates κατά το ακαδημαϊκό έτος 2009–2010.

Άλλες Επιτροπές και Συμβούλια:

1. Αναπληρωτής Εκπρόσωπος του Τμήματος Χημείας στην Κέντρο Δικτύων του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.
2. Ταμίας του Διοικητικού Συμβουλίου του Τεχνολογικού και Επιστημονικού Πάρκου Ηπείρου 2002–2011.

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

3. Συμμετοχή σε επιτροπές Δημόσιων Διαγωνισμών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

### ΤΙΜΗΤΙΚΕΣ ΔΙΑΚΡΙΣΕΙΣ

- i. Υποτροφία I.A.E.S.T.E., Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο του Όσλο, Όσλο, Νορβηγία, 1984
- ii. Υποτροφία Οίκου Union Carbide, , Πανεπιστήμιο της Μινнесότα, Μιννεάπολη, Μινнесότα, ΗΠΑ, 1987
- iii. Υποτροφία Εθνικού Ιδρύματος Επιστημών (National Science Foundation) ΗΠΑ, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο της Μινнесότα, Μιννεάπολη, Μινнесότα, ΗΠΑ, 1989–1991
- iv. Υποτροφία Οίκου Rohm and Haas, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο της Μινнесότα, Μιννεάπολη, Μινнесότα, ΗΠΑ, 1991–1992
- v. Υποτροφία Εκπαίδευσης και Κινητικότητας Ερευνητών (Training and Mobility for Researchers) Ευρωπαϊκής Ένωσης, CINECA Διαπανεπιστημιακό Υπερυπολογιστικό Κέντρο, Μπολόνια, Ιταλία, 1999–2006

### ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΟΡΓΑΝΩΣΕΙΣ

1. Μέλος της Ένωσης Ελλήνων Χημικών
2. Μέλος της American Chemical Society

### ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

#### ΔΙΕΘΝΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΣΥΣΤΗΜΑ ΚΡΙΤΩΝ

1. “Rotation of Methyl Groups in Hexamethylbenzene,” V. Melissas, K. Fægri, and J. Almlöf. *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 4640 (1985).
2. “Optimized Calculations of Reaction Paths and Reaction-Path Functions for Chemical Reactions,” V. S. Melissas, D. G. Truhlar and B. C. Garrett, *J. Chem. Phys.* **96**, 5758 (1992).
3. “POLYRATE 4: A New Version of a Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics,” D.-h. Lu, T. N. Truong, V. S. Melissas, G. C. Lynch, Y.-P. Liu, B. C. Garrett, R. Steckler, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **71**, 235 (1992).
4. “MORATE: A Program for Direct Dynamics Calculations of Chemical Reaction Rates by Semiempirical Molecular Orbital Theory,” T. N. Truong, D.-h. Lu, G. C. Lynch, Y.-

- P. Liu, V. S. Melissas, J. J. P. Stewart, R. Steckler, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, A. Gonzalez-Lafont, S. N. Rai, G. C. Hancock, T. Joseph, and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **75**, 143 (1993).
5. “Interpolated Variational Transition State Theory and Tunnelling Calculations of the Rate Constant of the Reaction  $\text{OH} + \text{CH}_4$  at 223–2400 K,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **99**, 1013 (1993).
  6. “Deuterium and Carbon-13 Kinetic Isotope Effects for the Reaction of OH with  $\text{CH}_4$ ,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **99**, 3542 (1993).
  7. “Interpolated Variational Transition State Theory and Semiclassical Tunnelling Calculations of the Rate Constant of the Reaction  $\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6$ ,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem.* **98**, 875 (1994).
  8. “POLYRATE 6.5: A New Version of a Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics,” R. Steckler, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, V. S. Melissas, D.-h. Lu, T. N. Truong, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **88**, 341 (1995).
  9. “MORATE 6.5: A New Version of a Computer Program for Direct Dynamics Calculations of Chemical Reaction Rate Constants,” W.-P. Hu, G. C. Lynch, Y.-P. Liu, I. Rossi, J. J. P. Stewart, R. Steckler, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, D.-h. Lu, V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **88**, 344 (1995).
  10. “*Ab Initio* Calculations for  $(\text{BrO})_2$  System and Quasiclassical Dynamics Study of BrO Self-Reaction,” D. Papayannis, A. M. Kosmas and V. S. Melissas, *Chem. Phys.* **243**, 249 (1999).
  11. “Dynamics of the  $\text{OH} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{HOCl} + \text{Cl}$  Reaction: *Ab Initio* Investigation and Quasiclassical Trajectory Calculations of Reaction Selectivity,” V. S. Melissas, E. Drougas, E. G. Bakalbassis and A. M. Kosmas, *J. Phys. Chem. A* **104**, 626 (2000).
  12. “Quantum Mechanical Studies on the  $\text{BrO} + \text{ClO}$  Reaction,” D. K. Papayannis, A. M. Kosmas and V. S. Melissas, *J. Phys. Chem. A* **105**, 2209 (2001).
  13. “*Ab Initio* and Density Functional Theory Studies for the Explanation of the Antioxidant Activity of Certain Phenolic Acids,” E. G. Bakalbassis, A. Chatzopoulou, V. S. Melissas, M. Tsimidou, M. Tsolaki and A. Vafiadis, *Lipids* **36**, 181 (2001).

14. "A Quantum Mechanical Study of the Structure, Vibrational Spectra, and Relative Energetics of XOOI, XIO<sub>2</sub>, and XOIO (X = Cl, Br, and I) Isomers," D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, Chem. Phys. Lett. **349**, 299 (2001).
15. "A Quantum Mechanical Study of IOX (X = Cl, Br, I) Isomers," D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, Chem. Phys. Lett. **363**, 99 (2002).
16. "Structural and Relative Stability Studies of IOOX Peroxides (X = Cl, Br, I) and their Isomers," V. S. Melissas, D. K. Papayannis and A. M. Kosmas, J. Mol. Struct.-Theochem **626**, 263 (2003).
17. "Quantum Mechanical Studies of Methyl Bromoperoxide Isomers and the CH<sub>3</sub>O + BrO Reaction," D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, Phys. Chem. Chem. Phys. **5**, 2976 (2003).
18. "An Extremely Stable Ni(II) Complex Derived from the Hydrolytic Cleavage of the C-Terminal Tail of Histone H2A," M. Mylonas, J. C. Plakatouras, N. Hadjiliadis, K. D. Papavasileiou and V. S. Melissas, J. Inorg. Biochem. **99**, 637 (2005).
19. "Molecular Simulation of Structure, Thermodynamic and Transport Properties of Polymeric Membrane Materials for Hydrocarbon Separation," I. G. Economou, V. E. Raptis, V. S. Melissas, D. N. Theodorou, J. Petrou and J. H. Petropoulos, Fluid Phase Equilibr. **228–229**, 15 (2005).
20. "An *Ab Initio* Study of the Kinetics of the CH<sub>3</sub>Cl + OH Reaction," T. D. Tzima, D. Papayannis and V. S. Melissas, Chem. Phys. **312**, 169 (2005).
21. "Theoretical kinetic study of the CH<sub>3</sub>Br + OH atmospheric system," T. D. Tzima, K. D. Papavasileiou, D. K. Papayannis and V. S. Melissas, Chem. Phys. **324**, 591 (2006).
22. "The photo-Fries rearrangement of 9-Trimethylsilyl Substituted Xanthenes," M. G. Siskos, A. K. Zarkadis, P. S. Gritzapis, O. Brede, R. Hermann, V. S. Melissas, G. G. Gurzadyan, A. S. Triantafyllou and V. Georgakilas, J. Photoch. Photobio. A **182**, 17 (2006).
23. "Force Field Development for Poly(dimethylsilylenemethylene) with the Aid of *Ab Initio* Calculations," V. E. Raptis and V. S. Melissas, J. Phys. Chem. B **110**, 14929 (2006).
24. "Resonance-Enhanced Multiphoton Ionization of Jet-Cooled 2-Methylfuran," J. G. Philis and V. S. Melissas, Chem. Phys. **336**, 136 (2007).

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

25. “An experimental and theoretical study of the  $S_1 \leftarrow S_0$  Transition of *p*Ethynyltoluene,” J. G. Philis and V. S. Melissas, *J. Chem. Phys.* **127**, 204310 (2007).
26. “A DFT Study of the Nitric Oxide and Tyrosyl Radical Interaction: A Proposed Radical Mechanism,” K. D. Papavasileiou, T. D. Tzima, Y. Sanakis and V. S. Melissas, *ChemPhysChem* **8**, 2595 (2007).
27. “Multifrequency Electron Paramagnetic Spectroscopic and Theoretical Studies of a Mn(II) ( $S = 5/2$ ) complex. The role of geometrical elements on the Zero Field Splitting Parameters,” T. D. Tzima, G. Sioros, D. Kovala-Demertzi, V. S. Melissas and Y. Sanakis, *Polyhedron* **28**, 3257 (2009).
28. “A two-Dimensional Magnetic Hybrid Material based on Intercalation of a Cationic Prussian blue analogue in Montmorillonite Nanoclay,” D. Gournis, C. Papachristodoulou, E. Maccallini, P. Rudolf, M. A. Karakassides, D. T. Karamanis, M.-H. Sage, T. T. M. Palstra, J.-F. Colomer, K. D. Papavasileiou, V. S. Melissas and N. H. Gangas, *J. Colloid Interf. Sci.* **348**, 393 (2010).
29. “A “hidden” role of amino and imino groups is unveiled during the micro-solvation study of three biomolecule groups in water,” P. G. Takis, V. S. Melissas and A. N. Troganis, *New J. Chem.* **36**, 1866 (2012).
30. “Electronic and magnetic properties of the binuclear  $[Mn_2\{(OPPh_2)_2N\}_4]$  complex, as revealed by magnetometry, EPR and density functional broken-symmetry studies,” T. D. Tzima, E. Ferentinos, D. Maganas, V. S. Melissas, Y. Sanakis and P. Kyritsis, *Polyhedron* **52**, 706 (2013).
31. “Probing microsolvation in “numbers”: the case of neutral dipeptides in water,” P. G. Takis, K. D. Papavasileiou, L. D. Peristeras, V. S. Melissas and A. N. Troganis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 7354 (2013).

## ΔΙΕΘΝΗ ΤΕΧΝΙΚΑ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

32. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 2.5),” D.-h. Lu, T. N. Truong, B. C. Garrett, R. Steckler, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph, V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *QCPE Bull.* **11**, 13 (1991).
33. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 4.0),” D.-h. Lu, T. N. Truong, V. S. Melissas, G. C. Lynch, Y.-P.

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- Liu, B. C. Garrett, R. Steckler, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, QCPE Bull. **12**, 35 (1992).
34. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 5.0),” Y.-P. Liu, G. C. Lynch, W.-P. Hu, V. S. Melissas, R. Steckler, B. C. Garrett, D.-h. Lu, T. N. Truong, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, QCPE Bull. **13**, 28 (1993).
35. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 5.0.1),” Y.-P. Liu, G. C. Lynch, W.-P. Hu, V. S. Melissas, R. Steckler, B. C. Garrett, D.-h. Lu, T. N. Truong, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, QCPE Bull. **13**, 56 (1993).
36. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 6.0),” R. Steckler, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, V. S. Melissas, D.-h. Lu, T. N. Truong, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, San Diego Supercomputer Center Technical Report No. GA-A21760 (1994).
37. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 6.5),” R. Steckler, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, V. S. Melissas, D.-h. Lu, T. N. Truong, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, QCPE Bull. **15**, 32 (1995).
38. “POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 7.3.1),” R. Steckler, Y.-Y. Chuang, P. L. Fast, E. L. Coitiño, J. C. Corchado, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, K. A. Ngyuen, C. F. Jackels, M. Z. Gu, I. Rossi, S. Clayton, V. S. Melissas, B. C. Garrett, A. D. Isaacson and D. G. Truhlar, QCPE Bull. **17**, 34 (1997).

## ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΒΙΒΛΙΩΝ

1. P. G. Takis, K. D. Papavasileiou, A. N. Troganis and V. S. Melissas, in *Betaine*, edited by V. R. Preedy (Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2014), pp. XX–XX.
2. P. G. Takis, K. D. Papavasileiou, A. N. Troganis and V. S. Melissas, in *Betaine*, edited by V. R. Preedy (Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2014), pp. XX–XX.

ΔΙΕΘΝΗ ΣΥΝΕΔΡΙΑ

1. “Improved Methods for Reaction Path Calculations in Chemical Dynamics,” V. S. Melissas, D. G. Truhlar, and B. C. Garrett, American Chemical Society, 199<sup>th</sup> National Meeting, April 22–27, 1990, Boston, MA, USA.
2. “Optimized Calculations of Reaction Paths and Reaction-Path Functions for Chemical Reactions,” V. S. Melissas, D. G. Truhlar, and B. C. Garrett, American Chemical Society, XXIII Midwest Theoretical Chemistry Conference, May 17–19, 1990, Madison, WI, USA.
3. “Direct Dynamics Calculations with NDDO Molecular Orbital Theory,” G. C. Lynch, Y.-P. Liu, W.-P. Hu, D.-h. Lu, V. S. Melissas, A. Gonzalez-Lafont, T. N. Truong, D. G. Truhlar, B. C. Garrett, and R. Steckler, American Chemical Society, 203<sup>rd</sup> National Meeting, April 5–10, 1992, San Francisco, CA, USA.
4. “*Ab Initio* Calculations on Four *p*-Hydroxy-Cinnamic Acid Derivatives: Geometries, Dipole Moments and Vibrational Frequencies,” E. Chatzopoulou, E. G. Bakalbassis, V. S. Melissas, M. Tsimidou and M. Tsolaki, Chemical Societies of the South-East European Countries, 1<sup>st</sup> International Conference, June 1–4, 1998, Halkidiki, Greece.
5. “Conformational Aspects of Poly(DimethylSilaneEthylene) Based on Quantum Chemistry Calculations,” V. E. Raptis, E. G. Hatzopoulou, V. S. Melissas, I. G. Economou and D. N. Theodorou, Chemical Societies of the South-East European Countries, 2<sup>nd</sup> International Conference, June 6–9, 2000, Halkidiki, Greece.
6. “Aqueous Aluminate, Silicate and Aluminosilicate Building-Blocks of Aluminosilicate Minerals Studied by Density Functional Computational Techniques,” N. D. Haristos, V. S. Melissas and A. C. Tshipis, Chemical Societies of the South-East European Countries, 2<sup>nd</sup> International Conference, June 6–9, 2000, Halkidiki, Greece.
7. “*Ab Initio* and DFT Theoretical Investigation of the Parameters Characterizing the Scavenging Activity of Four *p*-Hydroxy-Cinnamic Acid Derivatives,” E. G. Bakalbassis, V. S. Melissas, M. Tsimidou and A. Vafiadis, Chemical Societies of the South-East European Countries, 2<sup>nd</sup> International Conference, June 6–9, 2000, Halkidiki, Greece.
8. “Development of Novel Polymeric Membranes for Natural Gas Hydrocarbon Separation through Experimental Measurements, Quantum Mechanics, Molecular Simulation and Macroscopic Modelling,” V. E. Raptis, V. S. Melissas, I. G. Economou, D. N. Theodorou, M. Sanopoulou, J. Petrou and J. H. Petropoulos, E. Sh. Finkelshtein, A.

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- Alentiev and Y. P. Yampolskii, 19<sup>th</sup> European Symposium on Applied Thermodynamics, September 6–10, 2002, Santorini, Greece.
9. “Direct Dynamics Study for Atmospheric Reactions,” T. D. Tzima, D. K. Papayannis and V. S. Melissas, Chemical Societies of the South-East European Countries, 4<sup>th</sup> International Conference, July 18–21, 2004, Belgrade, Serbia and Montenegro.
  10. “Studies Towards the Synthesis of Novel Pyrrolobenzodiazocine Ring System,” N. M. Karousis, K. P. Koriatopoulou, G. A. Tsakonas, K. D. Papavasileiou, T. D. Tzima, V. S. Melissas, A. Geronikaki and G. Varvounis, 20<sup>th</sup> International Congress of Heterocyclic Chemistry, July 31-August 5, 2005, Palermo, Italy.
  11. “*Ab Initio* Force Field Development and Further Application to MD Simulations of Organosilicon Polymer Materials,” V. E. Raptis, V. S. Melissas, Z. A. Makrodimitri and I. G. Economou, AccelrysWorld 2005, November 14-16, 2005, London, Great Britain.
  12. “An *Ab Initio* Dynamics Study of the  $\text{CH}_2\text{Cl}_2 + \text{OH}$  Reaction,” K. D. Papavasileiou, T. D. Tzima, V. E. Raptis and V. S. Melissas, 19<sup>th</sup> International Symposium on Gas Kinetics, July 22-27, 2006, Orléans, France.
  13. “Towards a Novel Atomistic Force Field Suitable for Poly(dimethylsiloxane) and its Derivatives: Quantum Mechanical Calculations of the Energy Hypersurface,” K. D. Papavasileiou, V. E. Raptis and V. S. Melissas, Conference on Computational Physics (CCP2007), September 5-8, 2007, Brussels, Belgium.
  14. “Towards a Novel Atomistic Force Field Suitable for Poly(dimethylsiloxane) and its Derivatives: Quantum Mechanical Calculations of the Energy Hypersurface,” K. D. Papavasileiou, V. E. Raptis and V. S. Melissas, 15<sup>th</sup> International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials, July 6-10, 2008, Buenos Aires, Argentina.
  15. “Theoretical Evaluation of the Spectroscopic Properties of mono- and di-nuclear Iron and Manganese Compounds,” T. D. Tzima, V. S. Melissas and Y. Sanakis, 10th European Biological Inorganic Chemistry Conference. (EUROBIC10), June 22-26, 2010, Thessaloniki, Greece.
  16. “DFT Evaluation of the Spectroscopic Properties of Iron and Manganese compounds,” T. D. Tzima, V. S. Melissas and Y. Sanakis, Fourth North America-Greece-Cyprus Workshop on Paramagnetic Materials (NAGC 2011), June 14-18, 2011, Patras, Greece.
  17. “Reaction Kinetic Studies of CCN Radical with a Series of Normal Alkanes,” M. G. Tsolaki and V. S. Melissas, 14<sup>th</sup> International Density Functional Theory Conference.

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

Applications in Physics, Chemistry, Biology, Pharmacy (DFT11), August 29-September 2, 2011, Athens, Greece.

18. “Potential Energy Surface Investigation of the  $\text{ClOO}^\bullet + \text{NO}$  Atmospheric System,” T. D. Tzima, D. K. Papayannis and V. S. Melissas, 14<sup>th</sup> International Density Functional Theory Conference. Applications in Physics, Chemistry, Biology, Pharmacy (DFT11), August 29-September 2, 2011, Athens, Greece.

### ΤΟΠΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ

19. “Αντιοξειδωτική Δράση Ορισμένων Υδροξυ-κινναμωμικών Οξέων: Σχέση Δομής-Δραστηκότητας,” Ν. Πάττα, Ε. Παπαντωνίου, Β. Σ. Μελισσάς, Μ. Τσιμίδου, Ε. Γ. Μπακάλμπασης, Πανεπιστήμιο Κύπρου, 5<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Κύπρου-Ελλάδας, 4–7 Σεπτεμβρίου 1996, Λευκωσία, Κύπρος.
20. “Διερεύνηση Μηχανισμού Νίτρωσης της Ρίζας  $\text{Tyr}^\bullet$  από το  $\text{NO}$ ,” Κ. Δ. Παπαβασιλείου, Θ. Δ. Τζίμα, Ι. Σανάκης και Β. Σ. Μελισσάς, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 8<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδας-Κύπρου με θέμα “Χημεία, Ποιότητα Ζωής και Εκπαίδευση”, 10–13 Δεκεμβρίου 2004, Θεσσαλονίκη.
21. “Θεωρητική Κινητική Μελέτη Αλογονομένων Υδρογονανθράκων  $\text{CH}_3\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ) με  $\text{OH}$  ( $^2\Pi_{1/2}$ ),” Θ. Δ. Τζίμα, Κ. Δ. Παπαβασιλείου και Β. Σ. Μελισσάς, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 8<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδας-Κύπρου με θέμα “Χημεία, Ποιότητα Ζωής και Εκπαίδευση”, 10–13 Δεκεμβρίου 2004, Θεσσαλονίκη.
22. “Development of a Novel United Atom Force Field Modelling an Organosilicon Polymer Class, with the aid of *Ab Initio* Calculations,” Κ. Δ. Παπαβασιλείου, V. E. Raptis and V. S. Melissas, 6<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, 3-5 Νοεμβρίου 2006, Πάτρα.
23. “A Poly(dimethylsiloxane) Quantum Mechanical Force-Field: Molecular Dynamics Calculations for the Prediction of Physical Properties,” Κ. Δ. Παπαβασιλείου, V. E. Raptis and V. S. Melissas, 7<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, 28 Σεπτεμβρίου-1 Οκτωβρίου 2008, Ιωάννινα.
24. “Νέοι Ορίζοντες στη Μελέτη Ενυδάτωσης Βιομορίων με Φασματοσκοπία NMR,” Π. Γ. Τάκης, Β. Σ. Μελισσάς και Α. Ν. Τρογκάνης, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 21<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας με θέμα “Η Χημεία στις συνθήκες κρίσης και οι προτάσεις της για την ανάπτυξη”, 9–12 Δεκεμβρίου 2011, Θεσσαλονίκη.
25. “Μελέτη Αντιδράσεων Ελευθέρων Ριζών  $\text{CCN}$  με Αλκάνια,” Μ. Γ. Τσολάκη και Β. Σ. Μελισσάς, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 21<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

Χημείας με θέμα “Η Χημεία στις συνθήκες κρίσης και οι προτάσεις της για την ανάπτυξη”, 9–12 Δεκεμβρίου 2011, Θεσσαλονίκη.

### ΠΡΟΣΚΕΚΛΗΜΕΝΟΣ ΟΜΙΛΗΤΗΣ

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων 13<sup>η</sup> Νοεμβρίου 1997  
Τμήμα Χημείας  
"Χημική Κινητική: Θεωρία και Πείραμα"

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης 18<sup>η</sup> Μαρτίου 1999  
Τμήμα Χημείας  
"Θεωρία Διαταραχών και Εφαρμογές στη Θεωρητική Χημεία"

### ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΡΕΥΝΑΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

- i.** Σύνθεση και Μελέτη Μοριακών Υλικών που Περιέχουν Ιόντα με Υλικά 4f και 4d Ηλεκτρόνια  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Ευάγγελος Γ. Μπακάλμπασης  
Π.Ε.Ν.Ε.Δ., Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 1994–1996
- ii.** Μελέτη Νέων Μορφών Μοριακών Μεταλλοξειδίων. Ο Ρόλος τους στην Καταλυτική Ενεργοποίηση Μικρών Μορίων  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Κωνσταντίνος Α. Τσίπης  
Π.Ε.Ν.Ε.Δ., Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 1996–1998
- iii.** Σύνθεση και Μελέτη της Δομής και της Βιοδραστικότητας Συμπλόκων του Γαλλίου με Πιθανή Κυτταροστατική Δραστικότητα  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Θεόδωρος Ζαφειρόπουλος  
Π.Ε.Ν.Ε.Δ., Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Πατρών, 1996–1998
- iv.** Modelling of Technologically Advanced Conducting Polymers, Ανάλυση και Σχεδιασμός με Μοριακά Ομοιότυπα για Τεχνολογικά Προηγμένα Αγωγή Πολυμερή  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Αστέρω Προβατά  
Διακρατική Επιστημονική και Τεχνολογική Συνεργασία Ελλάδας-Μ. Βρετανίας για τα έτη 1998–2000, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. “Δημόκριτος”

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

- v. Χημική Κατάληξη Ρύπων του Περιβάλλοντος: Χλωριωμένοι Υδρογονάνθρακες στην Ατμόσφαιρα και τα Υπόγεια Ύδατα  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Βασίλειος Σ. Μελισσάς  
ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ: Ενίσχυση Ερευνητικών Ομάδων στα Πανεπιστήμια, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 2004–2006
- vi. Ανάπτυξη Βιοενεργών Βιομημητικών Ανόργανων Υλικών μέσω της Μεθόδου Sol-Gel και της Ενεργοποίησης των Επιφανειών Αδρανών Υάλων και Άλλων Κεραμικών  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Μαρία Λουλούδη  
ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ II: Ενίσχυση Ερευνητικών Ομάδων στα Πανεπιστήμια, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 2005–2007
- vii. Μελέτη, ανάπτυξη και χαρακτηρισμός ασύμμετρων πολυμερικών μεμβρανών για την απομάκρυνση ανεπιθύμητων συστατικών του φυσικού αερίου  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Κωνσταντίνος Γ. Μπέλτσιος  
Π.ΕΝ.Ε.Δ.2003, Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 2005–2009
- viii. Μελέτη αντιδράσεων ελευθέρων ριζών CCN με αλκάνια  
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Βασίλειος Σ. Μελισσάς  
Ηράκλειτος II, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 2011–2015

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

### ΤΙΤΛΟΣ

Βελτιωμένες Μέθοδοι Υπολογισμού Διαδρομών Ελάχιστης Ενέργειας Αντιδράσεων στη Χημική Δυναμική και Υπολογισμός Σταθερών Ταχύτητας Αντιδράσεων του Υδροξυλίου με Αλκάνια

### ΚΕΙΜΕΝΟ

Η παρούσα διατριβή αποτελείται από έξι κεφάλαια. Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζεται η βελτίωση ενός ευρέος συνόλου αλγορίθμων για τον υπολογισμό ταχυτήτων αντιδράσεων—ο οποίος περιλαμβάνει τον υπολογισμό διαφόρων μεγεθών κατά μήκος της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της υπό μελέτη αντίδρασης—και εκτιμούνται οι υπολογιστικές δυνατότητες του κάθε αλγόριθμου. Η έρευνα στηρίζεται στον υπολογισμό σταθερών ταχυτήτων χημικών αντιδράσεων χρησιμοποιώντας τη θεωρία του μεταβαλλόμενου μεταβατικού σταδίου και τους πολυδιάστατους ημιεμπειρικούς συντελεστές μετάδοσης της αντίδρασης, περιλαμβανομένου αυτού της

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

καμπυλότητας της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας. Πληθώρα μεθόδων εκτιμήθηκαν και συγκρίθηκαν με συστηματικούς τρόπους εφαρμογής για να ελεγχθούν περιπτώσεις που αφορούν τις αντιδράσεις  $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$  και  $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$  με μεταφορά ατόμου υδρογόνου. Για κάθε μέθοδο παρουσιάζονται γενικές οδηγίες για την επιλογή των διαφόρων παραμέτρων εκτός από τον καθορισμό του μεγέθους του βήματος κλίσης, έτσι ώστε μελλοντικοί υπολογισμοί να μπορούν να διεξαχθούν με αποτελεσματικό τρόπο μεταβάλλοντας μόνο μια παράμετρο.

Στα κεφάλαια II–V παρουσιάζονται *ab initio* υπολογισμοί για τις αντιδράσεις  $\text{OH} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$  και  $\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5$  χρησιμοποιώντας δεύτερης τάξης Møller-Plesset θεωρία διαταραχών (MP2) μαζί με σύνολα βάσης πολύ μεγάλης έκτασης. Κλασσικά δυναμικά ενεργοποίησης που προέκυψαν από τους παραπάνω υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκαν για τη διεξαγωγή κινητικών αποτελεσμάτων των παραπάνω αντιδράσεων σε συνδυασμό με τη θεωρία του παρεμβολικά μεταβαλλόμενου μεταβατικού σταδίου και την κεντρομόλο μικρής καμπυλότητας προσέγγιση της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας, καθώς και με άλλες σχετικές πληροφορίες των αντιδρώντων, προϊόντων, μεταβατικού σταδίου και ενός ή και δυο ακόμη σημείων κατά μήκος της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας. Οι θεωρητικοί υπολογισμοί των σταθερών ταχυτήτων των παραπάνω αντιδράσεων βρίσκονται σε εξαιρετικά καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Περαιτέρω κινητικοί υπολογισμοί, βασισμένοι στην θεωρία του παρεμβολικά μεταβαλλόμενου μεταβατικού σταδίου με συντελεστές μικρής καμπυλότητας για τη συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας, επιτεύχθηκαν στις περιπτώσεις του κινητικά ισοτοπικού φαινομένου με δευτέριο για την αντίδραση  $\text{OH} + {}^{12}\text{CD}_4 \rightarrow \text{HDO} + {}^{12}\text{CD}_3$  και του κινητικά ισοτοπικού φαινομένου με  ${}^{13}\text{C}$  για την αντίδραση  $\text{OH} + {}^{13}\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + {}^{13}\text{CH}_3$ .

Στο τελευταίο κεφάλαιο, η γεωμετρία της ισοπροπυλικής ρίζας, *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, υπολογίζεται στο θεωρητικό επίπεδο MP2 με το 6–311G\*\* σύνολο βάσης. Τέλος, στο ίδιο θεωρητικό επίπεδο υπολογίζονται οι συχνότητες δόνησης της ισοπροπυλικής ρίζας και συγκρίνονται με τις ήδη υπάρχουσες σε πειραματικό επίπεδο.

### ΥΠΟΜΝΗΜΑ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ

1. “Rotation of Methyl Groups in Hexamethylbenzene,” V. Melissas, K. Fægri, and J. Almlöf. *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 4640 (1985).

Το παρόν άρθρο αποτελεί *ab initio* μελέτη της δομής του εξα-μεθυλο-βενζολίου με τη

μεθοδολογία Hartree-Fock. Η γεωμετρία ελάχιστης ενέργειας ανήκει στην ομάδα σημείου  $D_{3d}$  και το φράγμα ελάχιστης ενέργειας για την περιστροφή των μεθυλοομάδων είναι ίσο με 1.0 kcal/mol. Τα αποτελέσματα βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με πειραματικά δεδομένα σκέδασης πρωτονίων και διαφέρουν από τα αποτελέσματα περίθλασης ηλεκτρονίων και μοριακής μηχανικής.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 8,091*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 12*

2. “Optimized Calculations of Reaction Paths and Reaction-Path Functions for Chemical Reactions,” V. S. Melissas, D. G. Truhlar and B. C. Garrett, *J. Chem. Phys.* **96**, 5758 (1992).

Το συγκεκριμένο άρθρο παρουσιάζει τη βελτίωση ενός ευρέος συνόλου αλγορίθμων για τον υπολογισμό ταχυτήτων αντιδράσεων—ο οποίος περιλαμβάνει τον υπολογισμό διαφορών μεγεθών κατά μήκος της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της υπό μελέτη αντίδρασης—και εκτιμούνται οι υπολογιστικές δυνατότητες του κάθε αλγόριθμου. Η έρευνα στηρίζεται στον υπολογισμό σταθερών ταχυτήτων χημικών αντιδράσεων χρησιμοποιώντας τη θεωρία του μεταβαλλόμενου μεταβατικού σταδίου και τους πολυδιάστατους ημιεμπειρικούς συντελεστές μετάδοσης της αντίδρασης, περιλαμβανομένου αυτού της καμπυλότητας της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας. Πληθώρα μεθόδων εκτιμήθηκαν και συγκρίθηκαν με συστηματικούς τρόπους εφαρμογής για να ελεγχθούν περιπτώσεις που αφορούν τις αντιδράσεις  $\text{CH}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$  και  $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$  με μεταφορά ατόμου υδρογόνου. Για κάθε μέθοδο παρουσιάζονται γενικές οδηγίες για την επιλογή των διαφορών παραμέτρων εκτός από τον καθορισμό του μεγέθους του βήματος κλίσης, έτσι ώστε μελλοντικοί υπολογισμοί να μπορούν να διεξαχθούν με αποτελεσματικό τρόπο μεταβάλλοντας μόνο μια παράμετρο.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3,149*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 58*

3. “POLYRATE 4: A New Version of a Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics,” D.-h. Lu, T. N. Truong, V. S. Melissas, G. C. Lynch, Y.-P. Liu, B. C. Garrett, R. Steckler, A. D. Isaacson, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **71**, 235 (1992).

Η σουίτα προγραμμάτων POLYRATE υπολογίζει σταθερές ταχυτήτων πολυατομικών

μορίων. Η έκδοση 1.1 υποβλήθηκε στο CPC Program Library το 1987 και από τότε πολλές καινούριες δυνατότητες προστέθηκαν, παλαιότερες βελτιώθηκαν, και ο κώδικας έγινε πιο φιλικός και εύχρηστος στην 4 έκδοση του. Οι περιλαμβανόμενες μέθοδοι είναι αυτές της μεταβαλλόμενης και συμβατικής θεωρίας του μεταβατικού σταδίου, καθώς και οι αλγόριθμοι της πολυδιάστατης ημιεμπειρικής αδιαβατικής προσέγγισης και της μεγάλης καμπυλότητας προσέγγισης για τον υπολογισμό της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας. Οι σταθερές ταχυτήτων διαφόρων αντιδράσεων υπολογίζονται είτε στο κανονικό είτε στο μικροκανονικό στατιστικό σύνολο ή για προκαθορισμένες δονητικές καταστάσεις επιλεγμένων βαθμών ελευθερίας υιοθετώντας τη θερμική μεταχείριση για τις μεταφορικούς, περιστροφικούς και υπόλοιπους δονητικούς βαθμούς ελευθερίας. Διμοριακές και μονομοριακές αντιδράσεις καθώς και αντιδράσεις αέριας φάσης, στερεάς κατάστασης και αλληλεπίδρασης αέριας-στερεάς περιλαμβάνονται στις δυνατότητες του POLYRATE. Οι επιφάνειες δυναμικού περιγράφονται είτε από ενιαίες συναρτήσεις δυναμικού είτε από μερικές συναρτήσεις οριζόμενες από την παρεμβολή τιμών από υπολογισμούς ενέργειας, διανυσμάτων κλίσης και Χεσσιανών μητρών σε επιλεγμένα σημεία της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας. Η σουίτα προγραμμάτων υπολογίζει διαδρομές ελάχιστης ενέργειας χρησιμοποιώντας τις αριθμητικές μεθόδους του Euler, του Euler με σταθεροποίηση, καθώς και αυτή των Page-McIver. Οι μεταβαλλόμενες μεταβατικές καταστάσεις υπολογίζονται με μια μονοδιάστατη ανίχνευση γενικευμένων επιφανειών μεταβατικών σταδίων κάθετων στη διαδρομή ελάχιστης ενέργειας. Η συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας υπολογίζεται με την αριθμητική μέθοδο του πλέγματος χρησιμοποιώντας πολυδιάστατους ημιεμπειρικούς αλγόριθμους, περιλαμβανομένων των προσεγγίσεων μικρής και μεγάλης καμπυλότητας καθώς και άλλους παλαιότερους.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,120*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 179*

4. “MORATE: A Program for Direct Dynamics Calculations of Chemical Reaction Rates by Semiempirical Molecular Orbital Theory,” T. N. Truong, D.-h. Lu, G. C. Lynch, Y.-P. Liu, V. S. Melissas, J. J. P. Stewart, R. Steckler, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, A. Gonzalez-Lafont, S. N. Rai, G. C. Hancock, T. Joseph, and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **75**, 143 (1993).

Εδώ πρωτοπαρουσιάζεται η σουίτα προγραμμάτων MORATE (Molecular Orbital RATE calculations) για άμεσους υπολογισμούς σταθερών ταχυτήτων μονομοριακών

και διμοριακών αντιδράσεων στην αέρια φάση. Οι ζητούμενες τιμές δυναμικής ενέργειας, διανυσμάτων κλίσης και υψηλότερων παραγώγων της επιφάνειας δυναμικού υπολογίζονται άμεσα μέσω ημιεμπειρικών μεθόδων, χωρίς τη μεσολάβηση καμίας συνάρτησης δυναμικού. Οι μέθοδοι κινητικών υπολογισμών είναι η συμβατική και η μεταβαλλόμενη θεωρία μεταβατικού σταδίου με πολυδιάστατες ημιεμπειρικές προσεγγίσεις της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας. Το MORATE αποτελεί τη διασύνδεση της σουίτας προγραμμάτων POLYRATE, κατάλληλη για τον υπολογισμό σταθερών ταχυτήτων, και της σουίτας προγραμμάτων MOPAC, κατάλληλη για τον υπολογισμό ημιεμπειρικών ενεργειακών δεδομένων. Οι μεταβαλλόμενες μεταβατικές καταστάσεις υπολογίζονται με μια μονοδιάστατη ανίχνευση γενικευμένων επιφανειών μεταβατικών σταδίων κάθετων στη διαδρομή ελάχιστης ενέργειας και η συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την αριθμητική μέθοδο του πλέγματος.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,120*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 29*

5. “Interpolated Variational Transition State Theory and Tunnelling Calculations of the Rate Constant of the Reaction  $\text{OH} + \text{CH}_4$  at 223–2400 K,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **99**, 1013 (1993).

Η παρούσα εργασία παρουσιάζει αποτελέσματα *ab initio* υπολογισμών της αντίδρασης  $\text{OH} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$  χρησιμοποιώντας τη θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης Møller-Plesset με ένα πολύ μεγάλο σύνολο βάσης και κλιμακώνοντας μόνο την ενέργεια αλληλοσυσχέτισης του τελικού ενεργειακού υπολογισμού (MP-SAC2//MP2). Διαπιστώθηκε ότι η ενέργεια αλληλοσυσχέτισης διαδραματίζει πολύ σοβαρό ρόλο στην εύρεση της γεωμετρίας, του ενεργειακού φράγματος και των δονητικών συχνοτήτων του μεταβατικού σταδίου. Οι τελικές τιμές των ενεργειακών φραγμάτων της ευθείας και αντίστροφης αντίδρασης υπολογίσθηκαν ίσες με 7.4 και 20.6 kcal/mol αντίστοιχα, και χρησιμοποιήθηκαν στην κινητική μελέτη της αντίδρασης για ένα εύρος θερμοκρασιών από 223 έως 2400 K με την παρεμβολικά μεταβαλλόμενη θεωρία του μεταβατικού σταδίου σε συνδυασμό με την προσέγγιση μικρής καμπυλότητας για τον υπολογισμό της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας. Η άντληση δεδομένων οφείλεται αποκλειστικά στα αντιδρώντα, στα προϊόντα, στο μεταβατικό στάδιο, και σε δυο ακόμη σημεία της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της αντίδρασης. Οι θεωρητικές και πειραματικές τιμές των σταθερών ταχύτητας της υπό μελέτη αντίδρασης βρίσκονται

σε εξαιρετικά καλή μεταξύ τους συμφωνία.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3,149*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 99*

6. “Deuterium and Carbon-13 Kinetic Isotope Effects for the Reaction of OH with CH<sub>4</sub>,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **99**, 3542 (1993).

Η συγκεκριμένη μελέτη παρουσιάζει αποτελέσματα της παρεμβολικά μεταβαλλόμενης θεωρίας του μεταβατικού σταδίου, σε συνδυασμό με την προσέγγιση μικρής καμπυλότητας για τον υπολογισμό της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας, για την περίπτωση του δευτεριωμένου ισοτοπικού φαινομένου στην αντίδραση  $\text{OH} + {}^{12}\text{CD}_4 \rightarrow \text{HDO} + {}^{12}\text{CD}_3$  και του  ${}^{13}\text{C}$  ισοτοπικού φαινομένου στην αντίδραση  $\text{OH} + {}^{13}\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + {}^{13}\text{CH}_3$ . Τα παρεμβολικά μεταβαλλόμενα βελτιστοποιημένα μεταβατικά στάδια προσδιορίζουν διαφορετικού μεγέθους ισοτοπικά φαινόμενα σε σχέση με τα συμβατικά, και περαιτέρω ανάλυση των ισοτοπικών φαινομένων αιτιολογεί την προέλευση των διαφορών τους. Οι ενέργειες μηδενικού σημείου στα μεταβαλλόμενα μεταβατικά στάδια διαφέρουν από αυτές των συμβατικών μέχρι 0.19 kcal/mol για την αντίδραση  $\text{OH} + {}^{12}\text{CD}_4$  και μέχρι 0.34 kcal/mol για την αντίδραση  $\text{OH} + {}^{13}\text{CH}_4$ . Η συμμετοχή του φαινομένου της σήραγγας μερικώς ακυρώνει το αποτέλεσμα της μεταβαλλόμενης βελτιστοποίησης του μεταβατικού σταδίου.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3,149*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 51*

7. “Interpolated Variational Transition State Theory and Semiclassical Tunnelling Calculations of the Rate Constant of the Reaction  $\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6$ ,” V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *J. Phys. Chem.* **98**, 875 (1994).

Στο παρόν άρθρο εκτελέστηκαν *ab initio* υπολογισμοί για την αντίδραση  $\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{C}_2\text{H}_5$  χρησιμοποιώντας τη θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης Møller-Plesset με ένα πολύ μεγάλο σύνολο βάσης. Αποδείχθηκε ότι η ενέργεια αλληλοσυσχέτισης διαδραματίζει πολύ σοβαρό ρόλο στον προσδιορισμό του ενεργειακού φράγματος του μεταβατικού σταδίου, καθώς και στην εύρεση της γεωμετρίας και των δονητικών συχνοτήτων τόσο του μεταβατικού σταδίου αλλά και των σημείων ελάχιστης ενέργειας της αντίδρασης. Οι τελικές τιμές των ενεργειακών φραγμάτων της ευθείας και αντίστροφης αντίδρασης υπολογίσθηκαν ίσες με 4.0 και 21.6 kcal/mol αντίστοιχα, και χρησιμοποιήθηκαν στην κινητική μελέτη της αντίδρασης για ένα εύρος θερμοκρασιών από 200 έως 3000 K. Οι κινητικοί υπολογισμοί

βασίζονται στην παρεμβολικά μεταβαλλόμενη θεωρία του μεταβατικού σταδίου σε συνδυασμό με την προσέγγιση μικρής καμπυλότητας για τον υπολογισμό της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας, αντλώντας στοιχεία από τα αντιδρώντα, τα προϊόντα, το μεταβατικό στάδιο, και ένα ακόμη σημείο της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της αντίδρασης. Οι θεωρητικές και πειραματικές τιμές των σταθερών ταχύτητας της υπό μελέτη αντίδρασης βρίσκονται σε εξαιρετικά καλή συμφωνία μεταξύ τους.

*Impact Factor 1998 (ISI Journal Citation Reports): 4,173*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 60*

8. “POLYRATE 6.5: A New Version of a Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics,” R. Steckler, W.-P. Hu, Y.-P. Liu, G. C. Lynch, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, V. S. Melissas, D.-h. Lu, T. N. Truong, S. N. Rai, G. C. Hancock, J. G. Lauderdale, T. Joseph and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **88**, 341 (1995).

Το POLYRATE αποτελεί μια σουίτα προγραμμάτων για τον υπολογισμό σταθερών ταχυτήτων πολυατομικών μορίων. Η έκδοση 1.1 υποβλήθηκε στο CPC Program Library το 1987 και η έκδοση 4.0.1 το 1992. Από τότε πολλές καινούριες δυνατότητες προστέθηκαν, παλαιότερες βελτιώθηκαν, και ο κώδικας έγινε πιο φιλικός και εύχρηστος στη σημερινή 6.5 έκδοση του. Οι περιλαμβανόμενες μέθοδοι είναι αυτές της μεταβαλλόμενης και συμβατικής θεωρίας του μεταβατικού σταδίου, καθώς και οι αλγόριθμοι της πολυδιάστατης ημιεμπειρικής αδιαβατικής προσέγγισης και της μεγάλης καμπυλότητας προσέγγισης για τον υπολογισμό της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας. Οι σταθερές ταχυτήτων διαφόρων αντιδράσεων υπολογίζονται είτε στο κανονικό είτε στο μικροκανονικό στατιστικό σύνολο ή για προκαθορισμένες δονητικές καταστάσεις επιλεγμένων βαθμών ελευθερίας υιοθετώντας τη θερμική μεταχείριση για τις μεταφορικούς, περιστροφικούς και υπόλοιπους δονητικούς βαθμούς ελευθερίας. Διμοριακές και μονομοριακές αντιδράσεις καθώς και αντιδράσεις αέριας φάσης, στερεάς κατάστασης και αλληλεπίδρασης αέριας-στερεάς περιλαμβάνονται στις δυνατότητες του POLYRATE. Οι επιφάνειες δυναμικού περιγράφονται είτε από ενιαίες συναρτήσεις δυναμικού είτε από μερικές συναρτήσεις οριζόμενες από την παρεμβολή τιμών από υπολογισμούς ενέργειας, διανυσμάτων κλίσης και Χεσσσιανών μητρών σε επιλεγμένα σημεία της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας. Τα απαιτούμενα δεδομένα για τους δυναμικούς υπολογισμούς μπορούν να αντληθούν και από ενιαίες

συναρτήσεις δυναμικού με επακριβή δεδομένα *ab initio* υπολογισμών των σταθερών δομών χαμηλής ενέργειας. Η σουίτα προγραμμάτων υπολογίζει διαδρομές ελάχιστης ενέργειας χρησιμοποιώντας τις αριθμητικές μεθόδους του Euler, του Euler με σταθεροποίηση, καθώς και αυτή των Page-McIver. Οι μεταβαλλόμενες μεταβατικές καταστάσεις υπολογίζονται με μια μονοδιάστατη ανίχνευση γενικευμένων επιφανειών μεταβατικών σταδίων κάθετων στη διαδρομή ελάχιστης ενέργειας. Η συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας υπολογίζεται με την αριθμητική μέθοδο του πλέγματος χρησιμοποιώντας πολυδιάστατους ημιεμπειρικούς αλγόριθμους, περιλαμβανομένων των προσεγγίσεων μικρής και μεγάλης καμπυλότητας καθώς και άλλων βελτιστοποιημένων πολυδιάστατων προσεγγίσεων.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,120*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 52*

9. “MORATE 6.5: A New Version of a Computer Program for Direct Dynamics Calculations of Chemical Reaction Rate Constants,” W.-P. Hu, G. C. Lynch, Y.-P. Liu, I. Rossi, J. J. P. Stewart, R. Steckler, B. C. Garrett, A. D. Isaacson, D.-h. Lu, V. S. Melissas and D. G. Truhlar, *Comput. Phys. Commun.* **88**, 344 (1995).

Το MORATE αποτελεί μια σουίτα προγραμμάτων για άμεσους υπολογισμούς σταθερών ταχυτήτων μονομοριακών και διμοριακών αντιδράσεων στην αέρια φάση. Οι μέθοδοι υπολογισμού περιλαμβάνουν τη συμβατική και μεταβαλλόμενη θεωρία μεταβατικού σταδίου και πολυδιάστατες ημιεμπειρικές προσεγγίσεις της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας. Οι μεταβαλλόμενες μεταβατικές καταστάσεις υπολογίζονται με μια μονοδιάστατη ανίχνευση γενικευμένων επιφανειών μεταβατικών σταδίων κάθετων στη διαδρομή ελάχιστης ενέργειας και η συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας υπολογίζεται με πολυδιάστατους ημιεμπειρικούς αλγόριθμους, περιλαμβανομένων των προσεγγίσεων μικρής και μεγάλης καμπυλότητας καθώς και αυτού της μικροκανονικής βελτιστοποιημένης πολυδιάστατης προσέγγισης. Το MORATE αποτελεί τη διασύνδεση της σουίτας προγραμμάτων POLYRATE, κατάλληλη για τον υπολογισμό σταθερών ταχυτήτων, και της σουίτας προγραμμάτων MOPAC, κατάλληλη για τον υπολογισμό ημιεμπειρικών ενεργειακών δεδομένων, και περιλαμβάνει δυο επίπεδα υπολογισμών. Στο πρώτο επίπεδο όλες οι διαθέσιμες ημιεμπειρικές μέθοδοι υπολογισμού ενεργειακών δεδομένων (MINDO/3, MNDO, AM1, και PM3) καλούνται κάθε φορά που απαιτούνται τιμές της ενέργειας, του διανύσματος κλίσης, καθώς και της Χεσσιανής μήτρας, σε διάφορα στάδια των

δυναμικών υπολογισμών κατά μήκος της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της αντίδρασης. Στο δεύτερο επίπεδο πραγματοποιείται αρχικά ο υπολογισμός της διαδρομής ελάχιστης ενέργειας της υπό εξέταση αντίδρασης και προστίθενται παρεμβολικά διορθώσεις της ενέργειας και της Χεσσιανής μήτρας από *ab initio* υπολογισμούς.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,120*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 3*

10. “*Ab Initio* Calculations for (BrO)<sub>2</sub> System and Quasiclassical Dynamics Study of BrO Self-Reaction,” D. Papayannis, A. M. Kosmas and V. S. Melissas, Chem. Phys. **243**, 249 (1999).

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκαν *ab initio* κβαντομηχανικοί υπολογισμοί επιπέδου MP2/6-311+G(2d) του υπεροξειδίου του BrOOBr και των ισομερών του και προέκυψαν τρεις σταθερές δομές ελάχιστης ενέργειας, οι οποίες βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με προηγούμενους υπολογισμούς της Θεωρίας της Συναρτησιακής Πυκνότητας. Με βάση τους MP2/6-311+G(2d) υπολογισμούς καταστρώθηκε μια απλή αναλυτική ενεργειακή επιφάνεια για την υλοποίηση ψευδοκλασσικών υπολογισμών τροχιών της αυτοαντίδρασης της ρίζας BrO. Οι υπολογισμοί ενεργών διατομών, σταθερών ταχυτήτων και αναλογιών διακλάδωσης των δυο ενεργών καναλιών για μια σειρά αρχικών τιμών κινητικής ενέργειας είναι απόλυτα συγκρίσιμοι με τις πειραματικές τιμές. Οι κβαντομηχανικοί υπολογισμοί και τα αποτελέσματα των διαφόρων τροχιών συμφωνούν με το πειραματικό εύρημα ότι η αντίδραση εξελίσσεται μέσω της ενεργειακά εμπλουτισμένης υπεροξειδικής δομής του BrOOBr. Επιπρόσθετα, η αυξανόμενη διάρκεια σύγκρουσης ελαττώνοντας την ενέργεια σύγκρουσης δηλώνει την πιθανή σταθερότητα ενός βραχύβιου συμπλόκου σύγκρουσης σε χαμηλές θερμοκρασίες, το οποίο πρέπει να ευθύνεται για την αυξανόμενη συμμετοχή της σταθεράς αντίδρασης του δεύτερου καναλιού της αντίδρασης με την ελάττωση της θερμοκρασίας και συμφωνεί με τα υπάρχοντα πειραματικά δεδομένα.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,961*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 5*

11. “Dynamics of the OH + Cl<sub>2</sub> → HOCl + Cl Reaction: *Ab Initio* Investigation and Quasiclassical Trajectory Calculations of Reaction Selectivity,” V. S. Melissas, E. Drougas, E. G. Bakalbassis and A. M. Kosmas, J. Phys. Chem. A **104**, 626 (2000). Το παρόν άρθρο εξετάζει την εκλεκτικότητα της περιστροφικής και δονητικής

ενέργειας των αντιδρώντων σε ενεργές διατομές της αντίδρασης  $\text{OH} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{HOCl} + \text{Cl}$ , υλοποιώντας ψευδοκλασσικούς υπολογισμούς τροχιών σε μια εξαδιάστατη αναλυτική επιφάνεια δυναμικού της υπό μελέτη αντίδρασης. Η κατασκευή της επιφάνειας δυναμικού στηρίζεται σε *ab initio* υπολογισμούς του συστήματος  $\text{HOClCl}$  χρησιμοποιώντας την προσέγγιση της θεωρίας διαταραχών δεύτερης τάξης (Møller-Plesset). Οι κβαντομηχανικοί υπολογισμοί καταλήγουν σε μια δομή μεταβατικού σταδίου και δυο σύμπλοκες ενώσεις του τύπου  $\text{HOCl}\cdots\text{Cl}$  σχετικές με τα αντιδρώντα, για τις οποίες δίνονται οι γεωμετρίες τους, οι ενέργειες τους, καθώς και οι δονητικές τους συχνότητες. Εκτενείς τρισδιάστατοι υπολογισμοί ψευδοκλασσικών τροχιών σε χαμηλές και ενδιάμεσες ενέργειες κρούσης καλύπτουν πληθώρα περιστροφικών και δονητικών καταστάσεων των αντιδρώντων αποδεικνύοντας την προαγωγή της αντίδρασης λόγω αύξησης της δονητικής ενέργειας του υπό διάσπαση δεσμού και την καταστολή της λόγω αύξησης της δονητικής ενέργειας του δεσμού  $\text{OH}$ . Η αρχική περιστροφική κατάσταση των αντιδρώντων δείχνει να επηρεάζει ελάχιστα τη δυναμική της αντίδρασης.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,871*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

12. “Quantum Mechanical Studies on the  $\text{BrO} + \text{ClO}$  Reaction,” D. K. Papayannis, A. M. Kosmas and V. S. Melissas, *J. Phys. Chem. A* **105**, 2209 (2001).

Η συγκεκριμένη μελέτη αφορά τον γεωμετρικό χαρακτηρισμό των μεταβατικών σταδίων και των minimum διαμορφώσεων της αντίδρασης μεταξύ των  $\text{BrO}$  και  $\text{ClO}$ , καθώς και των διαμορφωμένων του υπεροξειδίου  $\text{ClOOBr}$ , και τον περαιτέρω χαρακτηρισμό των δονητικών τους συχνότητων βάσει της θεωρίας διαταραχών δεύτερης τάξης (Møller-Plesset). Οι ενεργειακές διαφορές μεταξύ των διαφόρων σταδίων της αντίδρασης υπολογίστηκαν σε επίπεδο  $\text{CCSD(T)/6-311++G(3df)}$  με βάση τα γεωμετρικά δεδομένα των  $\text{MP2(full)/6-311++G(3df)}$  υπολογισμών. Τα αποτελέσματα είναι ιδιαίτερα χρήσιμα για τον ποιοτικό και ποσοτικό χαρακτηρισμό του μηχανισμού της αντίδρασης  $\text{BrO}$  και  $\text{ClO}$  στην περιοχή της στρατόσφαιρας, καθώς και για την περαιτέρω κινητική της μελέτη.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,871*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 4*

13. “*Ab Initio* and Density Functional Theory Studies for the Explanation of the Antioxidant Activity of Certain Phenolic Acids,” E. G. Bakalbassis, A. Chatzopoulou, V. S.

Melissas, M. Tsimidou, M. Tsolaki and A. Vafiadis, *Lipids* **36**, 181 (2001).

Το συγκεκριμένο άρθρο ασχολείται με *ab initio* υπολογισμούς, σε επίπεδα θεωρίας RHF/6-31+G(d) και B3LYP/6-31+G(d), τεσσάρων  $\pi$ -υδροξύ-κινναμωμικών οξέων, και συγκεκριμένα των  $\pi$ -κουμαρικού, καφεϊκού, φερουλικού, και σιναπικού.

Παρουσιάζονται οι βελτιστοποιημένες γεωμετρίες τους, οι διπολικές τους ροπές, καθώς και οι δονητικές τους συχνότητες με τις αντίστοιχες εντάσεις τους στο υπέρυθρο. Όλα τα υπό μελέτη οξέα αποτελούν μέλη της αλυσίδας των φυσικών αντιοξειδωτικών, και σχολιάζεται αναλυτικά τόσο η θεωρητική όσο και η πειραματική τους ικανότητα για αντιοξειδωτική συμπεριφορά. Η αποτελεσματικότητα των σχηματιζόμενων ριζών αποδίδεται κατά κύριο λόγο στη σταθερότητα του φαινολικού δακτυλίου, την οποία συνδράμει σε μεγάλο βαθμό η δημιουργία ενδομοριακών δεσμών υδρογόνου.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,888*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 40*

14. “A Quantum Mechanical Study of the Structure, Vibrational Spectra, and Relative Energetics of XOOI, XIO<sub>2</sub>, and XOIO (X = Cl, Br, and I) Isomers,” D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, *Chem. Phys. Lett.* **349**, 299 (2001).

Η παρούσα μελέτη ασχολείται με την κβαντομηχανική μελέτη των ενώσεων XOOI, XIO<sub>2</sub> και XOIO, όπου X = Cl, Br και I, χρησιμοποιώντας τη θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης (Møller-Plesset), καθώς και τη θεωρία συζευγμένων δεσμών (Coupled Cluster Theory). Αντί των παραδοσιακών συνόλων βάσης που υπεισέρχονται σε παρόμοιους υπολογισμούς, οι συγγραφείς προτίμησαν τη χρήση αποτελεσματικών δυναμικών του πυρήνα και των ηλεκτρονίων κατώτερων στοιβάδων, τα οποία ελαττώνουν σημαντικά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο (CPU), καθώς και τις γενικότερες υπολογιστικές ανάγκες (φυσική μνήμη (RAM), χρονισμός των επεξεργαστών, κλπ). Χρήση των ανωτέρω αποτελεσματικών δυναμικών πυρήνα, εφοδιασμένα με πρόσθετες συναρτήσεις πόλωσης, έδωσε αποτελέσματα σε άριστη συμφωνία με τα προυπάρχοντα για το Cl<sub>2</sub>O<sub>2</sub> σύστημα, ενώ αυτά διαφοροποιούνται σχετικά με την υπολογιζόμενη ενεργειακή σταθερότητα άλλων ισομερών.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,169*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 4*

15. “A Quantum Mechanical Study of IOX (X = Cl, Br, and I) Isomers,” D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, *Chem. Phys. Lett.* **363**, 99 (2002).

Η παρούσα μελέτη ασχολείται με την κβαντομηχανική μελέτη των ενώσεων XOI, XIO

και IXO, όπου X = Cl, Br και I, χρησιμοποιώντας τη θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης (Møller-Plesset), καθώς και τη θεωρία συζευγμένων δεσμών (Coupled Cluster Theory). Οι ανωτέρω μεθοδολογίες, σε συνάρτηση με τα δυο προτεινόμενα αποτελεσματικά δυναμικά του πυρήνα και των ηλεκτρονίων κατώτερων στοιβάδων, δοκιμάστηκαν πρώτα στις ενώσεις ClOCl, BrOBr, ClOBr και IOI, επιβεβαιώνοντας αποτελέσματα προηγούμενων θεωρητικών υπολογισμών για το σύνολο των ηλεκτρονίων του εκάστοτε υπό μελέτη συστήματος με λογική συνέπεια. Τα αποτελέσματα υποδεικνύουν ως ενεργειακά σταθερότερη μεταξύ των εκάστοτε ισομερών ενώσεων, αυτή με το λιγότερο ηλεκτραρνητικό άτομο στη μέση.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,169*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

16. “Structural and Relative Stability Studies of IOOX Peroxides (X = Cl, Br, I) and their Isomers,” V. S. Melissas, D. K. Papayannis and A. M. Kosmas, *J. Mol. Struct.-Theochem* **626**, 263 (2003).

Δυο διαφορετικά μεταξύ τους αποτελεσματικά δυναμικά του πυρήνα και των ηλεκτρονίων κατώτερων στοιβάδων, εφοδιασμένα με πρόσθετες συναρτήσεις πόλωσης, χρησιμοποιήθηκαν σε επίπεδο θεωρίας διαταραχών δεύτερης τάξης (Møller-Plesset) για τη διερεύνηση ισομερών υπεροξειδίων του I του τύπου XOOI, XIO<sub>2</sub>, IXO<sub>2</sub>, XOIO και IOXO, όπου X = Cl, Br και I. Τα αποτελέσματα μας ελέγχθηκαν ως προς την ορθότητα τους με άλλους διαθέσιμους υπολογισμούς των ανωτέρω ενώσεων, όπου συμμετέχουν όλα τα ηλεκτρόνια του εκάστοτε συστήματος. Αξιοσημείωτο γεγονός παραμένει η διαπίστωση ότι ενώσεις του τύπου XOOI δεν αποτελούν τη σταθερότερη δομή για κάθε κατηγορία των υπό μελέτη ενώσεων.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,167*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 2*

17. “Quantum Mechanical Studies of Methyl Bromoperoxide Isomers and the CH<sub>3</sub>O + BrO Reaction,” D. K. Papayannis, V. S. Melissas and A. M. Kosmas, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **5**, 2976 (2003).

Η χρήση *ab initio* κβαντομηχανικών μεθόδων επιστρατεύθηκε για τη μελέτη του μεθυλο-βρωμοϋπεροξειδίου και των ισομερών του, τα οποία αποτελούν ενδιαφέροντα ενδιάμεσα προϊόντα στην αντίδραση CH<sub>3</sub>O + BrO. Γεωμετρικές παράμετροι, δονητικές συχνότητες, καθώς και σχετικές ενέργειες ως προς τα αντιδρώντα, υπολογίστηκαν για όλες τις συμμετέχουσες ενώσεις και τα πιθανά ισομερή τους. Η δομή του CH<sub>3</sub>OBr

ισομερούς αποτελεί την πλέον ενεργειακά σταθερή, ακολουθούμενη από τις δομές των  $\text{CH}_3\text{OBrO}$  και  $\text{CH}_3\text{BrO}_2$ . Πληθώρα μεταβατικών καταστάσεων έτυχε ενδελεχούς μελέτης κατά τη διερεύνηση των πλέον ενδιαφερόντων ενεργειακών διαδρομών.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 4,064*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

- 18.** “An Extremely Stable Ni(II) Complex Derived from the Hydrolytic Cleavage of the C-Terminal Tail of Histone H2A,” M. Mylonas, J. C. Plakatouras, N. Hadjiliadis, K. D. Papavasileiou and V. S. Melissas, *J. Inorg. Biochem.* **99**, 637 (2005).

Τα τετραπεπτίδια SHHK– και SAHK– συνετέθησαν και μελετήθηκε η αλληλεπίδραση τους με ιόντα Ni(II) τόσο ποτενσιομετρικά, όσο και φασματοσκοπικά. Και τα δυο τετραπεπτίδια εμφανίζουν ισχυρή αλληλεπίδραση με τα ιόντα Ni(II), καταλήγοντας σε τετραγωνικά επίπεδα σύμπλοκες ενώσεις συναρμογής του τύπου  $4\text{N} \{ \text{NH}_2, 2\text{N}^-, \text{N}_{\text{im}} \}$ . Φασματοσκοπικές ενδείξεις σε συνάρτηση με κβαντομηχανικούς υπολογισμούς θέτουν τον ιμιδαζολικό δακτύλιο στο Ni–SHHK–σύμπλοκο άνωθεν του επιπέδου συναρμογής, επεξηγώντας πλήρως την πρόσθετα εμφανιζόμενη σταθερότητα της συμπλόκου ενώσεως.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3,133*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 4*

- 19.** “Molecular Simulation of Structure, Thermodynamic and Transport Properties of Polymeric Membrane Materials for Hydrocarbon Separation,” I. G. Economou, V. E. Raptis, V. S. Melissas, D. N. Theodorou, J. Petrou and J. H. Petropoulos, *Fluid Phase Equilibr.* **228–229**, 15 (2005).

Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής χρησιμοποιήθηκαν για τη μοντελλοποίηση της μικροσκοπικής δομής και των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων μιας ελαστικής μεμβράνης πυριτίου, η οποία παρουσιάζει ιδιαίτερα πλεονεκτήματα για τον διαχωρισμό υδρογονανθράκων. Για την επίτευξη του ανωτέρω σκοπού κατασκευάστηκε ένα δυναμικό τύπου «ενοποιημένων ατόμων» βασιζόμενο σε κβαντομηχανικούς υπολογισμούς. Περαιτέρω, υπολογισμοί μοριακής προσομοίωσης υλοποιήθηκαν για τη μοντελλοποίηση της διαλυτότητας και διάχυσης διαφόρων *ναλκανίων* στο υπό μελέτη πολυμερές. Η συμφωνία διαθέσιμων πειραματικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων είναι ιδιαίτερος ικανοποιητική.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,699*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

20. “An *Ab Initio* Study of the Kinetics of the  $\text{CH}_3\text{Cl} + \text{OH}$  Reaction,” T. D. Tzima, D. Papayannis and V. S. Melissas, *Chem. Phys.* **312**, 169 (2005).

Σειρά *ab initio* υπολογισμών εκτελέστηκε για την πλήρη περιγραφή των αντιδράσεων απόσπασης ατομικού υδρογόνου και χλωρίου από μονοχλωρομεθάνιο, συνοδευόμενη από την εκτενή παράθεση τόσο των γεωμετρικών παραμέτρων των αντιδρώντων, μεταβατικών καταστάσεων και προϊόντων των ενεργειακών διαδρομών αλλά και των δονητικών τους συχνοτήτων. Βασιζόμενοι στα ανωτέρω αποτελέσματα, προχωρήσαμε στην εκτέλεση κινητικών υπολογισμών σε ένα μεγάλο εύρος θερμοκρασιών, δηλ. 200–2000 K, υλοποιώντας ταυτόχρονα υπολογισμούς της συνεισφοράς του φαινομένου της σήραγγας αλλά και χρησιμοποιώντας την προσέγγιση του παρεμποδισμένου αρμονικού ταλαντωτή. Τα θεωρητικά αποτελέσματα βρίσκονται σε εξαιρετική συμφωνία με διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,961*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 4*

21. “Theoretical kinetic study of the  $\text{CH}_3\text{Br} + \text{OH}$  atmospheric system,” T. D. Tzima, K. D. Papavasileiou, D. K. Papayannis and V. S. Melissas, *Chem. Phys.* **324**, 591 (2006).

Η διερεύνηση των δυο εφικτών ενεργειακών διαδρομών της ατμοσφαιρικής αντίδρασης  $\text{CH}_3\text{Br}$  με  $\text{OH}$  επιτεύχθηκε με την εκτέλεση *ab initio* υπολογισμών. Τόσο το ενεργειακό προφίλ, αλλά και οι γεωμετρικές δομές και οι δονητικές συχνότητες, των δυο διαδρομών αποδίδονται πλήρως και οδηγούν στην περάτωση κινητικών υπολογισμών σε εύρος θερμοκρασιών 200-2000 K, συνυπολογίζοντας τη συνεισφορά του φαινομένου της σήραγγας. Τα υπάρχοντα πειραματικά αποτελέσματα αναδεικνύουν την ποιότητα των θεωρητικών υπολογισμών.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,961*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 2*

22. “The photo-Fries rearrangement of 9-Trimethylsilyl Substituted Xanthenes,” M. G. Siskos, A. K. Zarkadis, P. S. Gritzapis, O. Brede, R. Hermann, V. S. Melissas, G. G. Gurzadyan, A. S. Triantafyllou and V. Georgakilas, *J. Photoch. Photobio. A* **182**, 17 (2006).

Στο παρόν άρθρο παρουσιάζονται τα φάσματα απορρόφησης και φθορισμού του 9-τριμεθυλοσιλυλο-ξανθενίου και του 9-τριμεθυλο-9-τριμεθυλοσιλυλο-ξανθενίου και παρατίθεται λεπτομερής εξήγηση τους με τη βοήθεια CNDO/S και *ab initio* υπολογισμών. Ειδικότερα, οι *ab initio* υπολογισμοί προβλέπουν μια δομή “τύπου

σκεπής” για το 9-τριμεθυλοσιλυλο-ξανθένιο, με γωνία που ξεκινά από τις 30° για την S<sub>0</sub> κατάσταση και καταλήγει στις 20° για της S<sub>1</sub> κατάσταση.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,362*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

23. “Force Field Development for Poly(dimethylsilylenemethylene) with the Aid of *Ab Initio* Calculations,” V. E. Raptis and V. S. Melissas, *J. Phys. Chem. B* **110**, 14929 (2006).

Υψηλής ακρίβειας κβαντομηχανικοί υπολογισμοί αποδίδουν πλήρως τις γεωμετρικές παραμέτρους, την ενεργειακή κατάσταση και την ενέργεια μηδενικού σημείου για πληθώρα διαμορφώσεων του δι(τριμεθυλοσιλυλο)μεθυλενίου. Τα αποτελέσματα αξιοποιούνται για την κατασκευή επιφάνειας δυναμικής ενέργειας και τη μελέτη, μέσω υπολογισμών μοριακής προσομοίωσης, του αντίστοιχου πολυμερούς, δηλ. του πολυ(διτριμεθυλοσιλυλομεθυλενίου). Υπολογισμοί Monte Carlo σε πολυμερικές αλυσίδες και μοριακής δυναμικής για το μοντελοποιημένο διμερές καταλήγουν σε άκρως ικανοποιητικά αποτελέσματα σχετικά με τις διαθέσιμες πειραματικές δομικές και θερμοδυναμικές ιδιότητες του υπό μελέτη συστήματος.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 4,189*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

24. “Resonance-Enhanced Multiphoton Ionization of Jet-Cooled 2-Methylfuran,” J. G. Philis and V. S. Melissas, *Chem. Phys.* **336**, 136 (2007).

Τα παράγωγα του φουρανίου αποτελούν ενδιαφέρουσες δομικές μονάδες στην οργανική χημεία, μοριακή βιολογία και στην επιστήμη των υλικών. Η παρούσα εργασία ασχολείται με τη φασματοσκοπική μελέτη των διεγέρσεων σε καταστάσεις Rydberg του 2-μεθυλοφουρανίου (CH<sub>3</sub>-C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>O), και επιπλέον, με τη θεωρητική μελέτη, μέσω κβαντομηχανικών υπολογισμών, της γεωμετρίας του μορίου και του ιόντος, καθώς και των κανονικών τρόπων δόνησης των. Οι θεωρητικοί υπολογισμοί της βασικής κατάστασης του ιόντος εξυπηρετούν στον έλεγχο της δονητικής ανάλυσης των καταστάσεων Rydberg που ανιχνεύσαμε (διφωτονικά και τριφωτονικά φάσματα), και του φωτοηλεκτρονιακού φάσματος της βιβλιογραφίας. Η φασματοσκοπική συμπεριφορά του μορίου ακολουθεί τους κανόνες επιλογής της C<sub>2v</sub> συμμετρίας, αντί αυτής της C<sub>s</sub> που χαρακτηρίζει το μόριο, με αποτέλεσμα τα τροχιακά του μεθυλίου να μένουν απομονωμένα από τα τροχιακά του δακτυλίου.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 1,961*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

25. “An experimental and theoretical study of the  $S_1 \leftarrow S_0$  Transition of *p*Ethynyltoluene,”

J. G. Philis and V. S. Melissas, *J. Chem. Phys.* **127**, 204310 (2007).

Για πρώτη φορά μελετάται η μετάβαση ( $^1L_b$ )  $S_1 \leftarrow S_0$  του παρααιθινιλοτολουενίου ( $\text{CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{-C}\equiv\text{CH}$ ), το οποίο είναι ένα μονομεθυλιωμένο παράγωγο του φαινυλοακετυλενίου. Το ενδιαφέρον πηγάζει εκ του γεγονότος ότι το φαινυλοακετυλένιο παρουσιάζει ιδιαίζουσα φασματοσκοπική «συμπεριφορά» σχετικά με άλλα παράγωγα του βενζολίου. Επιπλέον, η ύπαρξη του μεθυλίου εισαγάγει νέα φασματοσκοπικά χαρακτηριστικά. Μετρήθηκε και αναλύθηκε το μονοφωτονικό και το διφωτονικό φάσμα της μετάβασης. Οι *ab initio* κβαντομηχανικοί υπολογισμοί αναφέρονται στον προσδιορισμό της γεωμετρίας του μορίου στις καταστάσεις  $S_0$  και  $S_1$ , και στον προσδιορισμό των συχνοτήτων των κανονικών τρόπων δόνησης των (μελέτη φασμάτων IR ή Raman δεν εντοπίστηκε στη βιβλιογραφία). Οι θεωρητικοί υπολογισμοί έδειξαν ότι η καλυπτική (eclipsed) διαμόρφωση αποτελεί ελάχιστο στην επιφάνεια δυναμικής ενέργειας, ενώ η διαμορφωμένη (staggered) χαρακτηρίζεται ως μεταβατική κατάσταση (saddle point). Τα πειραματικά αποτελέσματα καταλήγουν ότι η  $S_1$  δομή χαρακτηρίζεται ως διαμορφωμένη και ότι το φράγμα δυναμικού (περιστροφή του  $\text{CH}_3$ ) είναι  $V_6' = -12 \text{ cm}^{-1}$ , με  $B_{\text{CH}_3} = 5,55 \text{ cm}^{-1}$ .

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3.149*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

26. “A DFT Study of the Nitric Oxide and Tyrosyl Radical Interaction: A Proposed Radical

Mechanism,” K. D. Papavasileiou, T. D. Tzima, Y. Sanakis and V. S. Melissas,

*ChemPhysChem* **8**, 2595 (2007).

Ο μηχανισμός σχηματισμού νιτροτυροσίνης, με την αλληλεπίδραση ριζών τυροσίνης και μονοξειδίου του αζώτου και με ενδιάμεση εμφάνιση άλλων ριζών, αποκαλύπτεται λεπτομερώς με τη χρήση κβαντομηχανικών μεθόδων. Αρχικά, το μονοξείδιο του αζώτου και η τυροσινική ρίζα οδηγούν στον σχηματισμό ενός ενδιάμεσου συμπλόκου, το οποίο καταλήγει στην ιμινοξυλική ρίζα, και τέλος, η ιμινοξυλική ρίζα, παρουσία υδροξυλίων, σχηματίζει τη νιτροτυροσίνη.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 3,636*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 1*

27. “Multifrequency Electron Paramagnetic Spectroscopic and Theoretical Studies of a Mn(II) ( $S = 5/2$ ) complex. The role of geometrical elements on the Zero Field Splitting Parameters,” T. D. Tzima, G. Sioros, D. Kovala-Demertzi, V. S. Melissas and Y. Sanakis, *Polyhedron* **28**, 3257 (2009).

Οι παράμετροι διάσπασης σε μηδενικό πεδίο του μονοπυρηνικού συμπλόκου του Mn(II) ( $S = 5/2$ ) [Mn(Ac4Ph)<sub>2</sub>], όπου ως Ac4Ph συμβολίζεται ο υποκαταστάτης 4-φαινυλ-2-ακετυλ-πυριδιν-θειοσεμικαρβαζόνη, προσδιορίζονται με φασματοσκοπία Ηλεκτρονιακού Παραμαγνητικού Συντονισμού (EPR) διπλού τρόπου (dual-mode) σε μικροκυματική ζώνη X και Υψηλού Μαγνητικού Πεδίου/Υψηλής Μικροκυματικής Συχνότητας. Υπολογισμοί Θεωρίας Συναρτησιοειδών Πυκνότητας αναπαράγουν ορθά τόσο το πρόσημο, όσο και την απόλυτη τιμή της παραμέτρου D του τανυστή διάσπασης σε μηδενικό πεδίο, του οποίου η κατανομή του φάσματος τιμών του σχετίζεται ποσοτικά με κατανομές των γεωμετρικών παραμέτρων του συμπλόκου.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,057*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

28. “A two-Dimensional Magnetic Hybrid Material based on Intercalation of a Cationic Prussian blue analogue in Montmorillonite Nanoclay,” D. Gournis, C. Papachristodoulou, E. Maccallini, P. Rudolf, M. A. Karakassides, D. T. Karamanis, M.-H. Sage, T. T. M. Palstra, J.-F. Colomer, K. D. Papavasileiou, V. S. Melissas and N. H. Gangas, *J. Colloid Interf. Sci.* **348**, 393 (2010).

Στην εργασία αυτή περιγράφεται η σύνθεση και η ένθεση ενός κατιονικού συμπλόκου του Κυανού του Βερολίνου με αργίλιο σε ένα κατιονικό φυλλόμορφο άργιλο, με σκοπό τον σχηματισμό ενός υψηλής τάξης δισδιάστατου υβριδικού μαγνητικού νανοςύνθετου υλικού. Οι δομικές και χημικές του ιδιότητες εξετάστηκαν τόσο με θεωρητικές μεθόδους σε επίπεδο θεωρίας BLYP/DND, αλλά και σε πειραματικό επίπεδο με περίθλαση ακτίνων X, ηλεκτρονική μικροσκοπία, θερμοσταθμική και διαφορική θερμική ανάλυση, καθώς και με φασματοσκοπίες IR, ακτίνων X και Mössbauer. Οι μαγνητικές ιδιότητες του υλικού εξετάστηκαν με μαγνητομετρία SQUID. Τα αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι 1) το παράγωγο του Κυανού του Βερολίνου αποτελείται από κατιονικά υδροξείδια του αργιλίου τοποθετημένα εντός μονοστρωματικού δισδιάστατου φύλλου δισθενούς και τρισθενούς σιδήρου, και 2) η δομή του νανουβριδικού υλικού περιλαμβάνει τις ανωτέρω συστοιχίες ανάμεσα σε φύλλα πηλού.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 2,443*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

29. “A “hidden” role of amino and imino groups is unveiled during the micro-solvation study of three biomolecule groups in water,” P. G. Takis, V. S. Melissas and A. N. Troganis, *New J. Chem.* **36**, 1866 (2012).

Η συγκεκριμένη μελέτη ενυδάτωσης πραγματοποιήθηκε μέσω της πυρηνικής αποκατάστασης των πυρήνων  $^{13}\text{C}_\alpha$  των ακόλουθων βιομοριακών ομάδων: αμινοξέων, ακετυλο-αμινοξέων και βεταϊνών και των πυρήνων  $^{14}\text{N}$  των ακετυλο-αμινοξέων και βεταϊνών σε υδατικά διαλύματα όξινου και ουδέτερου pH. Παράλληλα, επαληθεύτηκε η σύγκριση των φασματοσκοπικών δεδομένων με τη θεωρητική μελέτη της αλανίνης, της ακετυλο-αλανίνης και της βεταϊνής της αλανίνης μέσω υπολογισμών της Θεωρίας Συναρτησιοειδών (Density Functional Theory). Τοιουτοτρόπως διαπιστώθηκε ότι τα αμινοξέα και τα ακετυλο-αμινοξέα χαρακτηρίζονται από τον ίδιο βαθμό ενυδάτωσης, ενώ η πρωτονιομένη κατάσταση των αμινοξέων και των ακετυλο-αμινοξέων αλληλεπιδρά με ένα επιπλέον μόριο νερού σε σχέση με αυτή του ουδέτερου pH. Τέλος, ο βαθμός ενυδάτωσης των βεταϊνών παραμένει σταθερός ανεξαρτήτως της ιοντικής τους κατάστασης.

*Impact Factor 2011 (ISI Journal Citation Reports): 2,610*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

30. “Electronic and magnetic properties of the binuclear  $[\text{Mn}_2\{(\text{OPPh}_2)_2\text{N}\}_4]$  complex, as revealed by magnetometry, EPR and density functional broken-symmetry studies,” T. D. Tzima, E. Ferentinos, D. Maganas, V. S. Melissas, Y. Sanakis and P. Kyritsis, *Polyhedron* **52**, 706 (2013).

Μελέτες μαγνητομετρίας και φασματοσκοπίας EPR του διπυρηνικού Mn(II) συμπλόκου  $[\text{Mn}_2\{(\text{OPPh}_2)_2\text{N}\}_4]$  κατέδειξαν αντισιδηρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δύο  $S = 5/2$  κέντρων, τα οποία βρίσκονται σε απόσταση 3.378 Å μεταξύ τους. Η αντισιδηρομαγνητική φύση της σύζευξης μεταξύ του διπυρηνικού  $\text{Mn}_2\text{O}_4$  κέντρου επιβεβαιώνεται και από μελέτες EPR σε παγωμένα διαλύματα  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  σε διάφορες θερμοκρασίες. Υπολογισμοί Θεωρίας Συναρτησιοειδών (Density Functional Theory) επιβεβαιώνουν τα ανωτέρω πειραματικά αποτελέσματα και προσδιορίζουν  $J_{AB}$  τιμές σύζευξης σε πολύ καλή συμφωνία με το πείραμα.

*Impact Factor 2011 (ISI Journal Citation Reports): 2,057*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

- 31.** “Probing microsolvation in “numbers”: the case of neutral dipeptides in water,” P. G. Takis, K. D. Papavasileiou, L. D. Peristeras, V. S. Melissas and A. N. Troganis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 7354 (2013).

Στην παρούσα εργασία αναδύεται η πειραματική και θεωρητική μεθοδολογία εύρεσης του ακριβούς αριθμού μορίων νερού που αλληλεπιδρούν άμεσα με διάφορα βιομόρια. Ακριβέστερα, η πειραματική μας μέθοδος περιλαμβάνει την εφαρμογή συγκεκριμένης τεχνικής NMR, ενώ το θεωρητικό μέρος εστιάζει στη χρήση τόσο μεθόδων μοριακών προσομοίωσης όσο και εφαρμογών της Θεωρίας Συναρτησιοειδών (Density Functional Theory), για τον προσδιορισμό των μορίων νερού που αλληλεπιδρούν άμεσα με το υπό μελέτη βιομόριο.

*Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports): 4,064*

*Αριθμός Ετεροαναφορών (ISI Web of Science και Scopus): 0*

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

### Σύντομη Αξιολόγηση Δημοσιευμένου Έργου

Συντόμευση Ονομασίας Περιοδικού	Impact Factor Περιοδικού 2008 <sup>a</sup>	Αριθμός Δημοσιεύσεων ανά Περιοδικό	Συνολικό Impact Factor ανά περιοδικό
J. Am. Chem. Soc.	8,091	1	8,091
J. Chem. Phys.	3,149	4	12,596
Comput. Phys. Commun.	2,120	4	8,480
J. Phys. Chem.	4,173 <sup>b</sup>	1	4,173
Chem. Phys.	1,961	4	7,844
J. Phys. Chem. A	2,871	2	5,742
Lipids	1,888	1	1,888
Chem. Phys. Lett.	2,169	2	4,338
J. Mol. Struct.-Theochem	1,167	1	1,167
Phys. Chem. Chem. Phys.	4,064	2	8,128
J. Inorg. Biochem.	3,133	1	3,133
Fluid Phase Equilib.	1,699	1	1,699
J. Photoch. Photobio. A	2,362	1	2,362
J. Phys. Chem. B	4,189	1	4,189
ChemPhysChem	3,636	1	3,636
Polyhedron	2,057 <sup>c</sup>	2	4,114
J. Colloid Interf. Sci.	2,443	1	2,443
New J. Chem.	2,610 <sup>c</sup>	1	2,610
<b>Συνολικός Αριθμός Δημοσιεύσεων</b>			<b>31</b>
<b>Συνολικό Impact Factor</b>			<b>86,633</b>
<b>Μέσος Όρος Impact Factor/Δημοσίευση</b>			<b>2,795</b>
<b>Συνολικός Αριθμός Ετεροαναφορών</b>			<b>~900</b>

## ΒΑΣΙΛΕΙΟΣ ΣΤΕΡΓΙΟΥ ΜΕΛΙΣΣΑΣ

<sup>a</sup> *Impact Factor 2008 (ISI Journal Citation Reports)*

<sup>b</sup> *Impact Factor 1998 (ISI Journal Citation Reports)–Τέλος έκδοσης*

<sup>c</sup> *Impact Factor 2011 (ISI Journal Citation Reports)–Τέλος έκδοσης*