

ΔΩΡΟΣ (ΘΕΟΔΩΡΟΣ) ΝΙΚΟΛΑΟΥ ΘΕΟΔΩΡΟΥ

Καθηγητής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών
Σχολή Χημικών Μηχανικών
Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Ηρώων Πολυτεχνείου 9, Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου
157 80 Αθήνα
Τηλ. (210) 772 3157, Fax (210) 772 3112
E-mail: doros@central.ntua.gr
<http://comse.chemeng.ntua.gr>

*Ερευνητικά
ενδιαφέροντα*

Μοριακή προσομοίωση της ύλης με ηλεκτρονικούς υπολογιστές. Εφαρμογές της Στατιστικής Μηχανικής, της Θερμοδυναμικής και των Φαινομένων Μεταφοράς για την κατανόηση και πρόβλεψη σχέσεων δομής-επεξεργασίας-ιδιοτήτων υλικών. Στρατηγικές προτυποποίησης και προσομοίωσης υλικών σε πολλαπλές κλίμακες μήκους και χρόνου. Επιστήμη και τεχνολογία των πολυμερών. Νανοσύνθετα υλικά πολυμερικής μήτρας. Διεπιφανειακά φαινόμενα. Ζεόλιθοι και άλλα νανοπορώδη υλικά.

*Προσωπικά
Στοιχεία*

Γεννημένος στην Αθήνα, 29 Οκτωβρίου 1957
Έγγαμος, πατέρας ενός παιδιού

Εκπαίδευση

Δίπλωμα Χημικού Μηχανικού, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 1982.
Master of Science (Chem.Eng.), Massachusetts Inst. of Technology, 1983.
Ph.D. (Chem. Eng.), Massachusetts Institute of Technology, 1985.

Απασχόληση

1981-1985
Ανοιξη 1985

Massachusetts Institute of Technology Cambridge, MA, U.S.A
Βοηθός Ερευνητής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών.
Βοηθός διδασκαλίας, μεταπτυχιακό μάθημα Θερμοδυναμικής,
Τμήμα Χημικών Μηχανικών.

1985-1986

Σχολή Ναυτικών Δοκίμων Πειραιάς
Κελευστής Μηχανικός, υπεύθυνος υπολογιστικού κέντρου και βοηθός διδασκαλίας προγραμματισμού ηλεκτρονικών υπολογιστών (στρατιωτική θητεία).

1986-1990
1990-1994
1994-1995

University of California, Berkeley Berkeley, CA, U.S.A.
Assistant Professor of Chemical Engineering.
Associate Professor of Chemical Engineering.
Professor of Chemical Engineering.

1986-1995

Lawrence Berkeley Laboratory Berkeley, CA, U.S.A.
Associated Faculty, Polymers Program, Center for Advanced Materials,
Division of Materials Sciences. Project Leader, Polymer/Substrate
Interactions.

1991-1994
1994-2002

Πανεπιστήμιο Πατρών Ρίο Πατρών
Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών.
Καθηγητής, Έδρα Στατιστικής Θερμοδυναμικής και Μακρομορίων,
Τμήμα Χημικών Μηχανικών

- 2002- Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο Αθήνα
Καθηγητής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, Σχολή Χημικών Μηχανικών
- 1991-2007 E.I.X.H.M.Y.Θ.-I.T.E. Ρίο Πατρών
Συνεργαζόμενο μέλος Δ.Ε.Π.
- Ανοιξη 1992 E.K.E.Φ.Ε. Δημόκριτος Αθήνα
1993- Επισκέπτης Καθηγητής, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας.
1993-2005 Συνεργαζόμενος Ερευνητής, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας.
Διευθυντής Εργαστηρίου Μοριακής Μοντελοποίησης Υλικών.
- Διδασκαλία μαθημάτων στο U.C. Berkeley*
προπτυχιακά Θερμοδυναμική για Χημικούς Μηχανικούς (συνδιδ. με J.M. Prausnitz).
Φαινόμενα μεταφοράς (ενέργειας και μάζας). Επιστήμη και τεχνική των πολυμερών. Εργαστήριο χημικής μηχανικής.
μεταπτυχιακά Θερμοδυναμική για το σχεδιασμό χημικών προϊόντων και διεργασιών.
Εφαρμοσμένη μοριακή θεωρία για χημικούς μηχανικούς. (συνδιδ. με A.K. Chakraborty)
- Διδασκαλία μαθημάτων στο Πανεπιστήμιο Πάτρας*
υποχρ.προπτυχ. Ισοζύγια μάζας και ενέργειας. Φυσικοχημεία II, Χημική Θερμοδυναμική I και II.
κατεύθυνσης Θερμοδυναμική ενεργειακών μετατροπών.
μεταπτυχιακά Θερμοδυναμική, Στατιστική Μηχανική και Μοριακή Προσομοίωση.
Φυσικοχημεία Πολυμερών, Στατιστική Μηχανική Πολυμερών (συνδιδ. με A. Ντόντο, Δ. Φωτεινό, Μ. Κοσμά, Α. Τερζή).
- Διδασκαλία μαθημάτων στο E.M.Π.*
υποχρ.προπτυχ. Φυσικοχημεία II, Δομή και Καταστάσεις της Ύλης.
κατ' επιλογή: Σύνδεση μικροσκοπικών – μακροσκοπικών ιδιοτήτων μέσω H/Y.
εμβάθυνσης Σχέσεις Δομής – Ιδιοτήτων Υλικών, Επιστήμη Πολυμερών
μεταπτυχιακό Μοριακή Προσομοίωση Υλικών
- Διδασκαλία μαθημάτων στο E.K.E.Φ.Ε. «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ» (μεταπτυχιακά)*
Θέματα στατιστικής μηχανικής και θερμοδυναμικής μοριακών συστημάτων και εφαρμογές στη μοριακή προσομοίωση υλικών με τη χρήση υπερυπολογιστών.
Μοριακή προσομοίωση φυσικοχημικών συστημάτων (συνδιδ. με Α. Ζ. Παναγιωτόπουλο).
Φυσική και Φυσικοχημεία Πολυμερών (συνδιδ. με Ι. Οικονόμου, Χ. Τσενόγλου, Ν. Χατζηχρηστίδη, Ι. Πετρόπουλο).
- Διακρίσεις*
Salutatorian, μετά πλείστου επαίνου, βραβείο Αρχαίων Ελληνικών, βραβείο Δολασίκ, Κολλέγιο Αθηνών, 1976.
Πρώτο βραβείο πανελλήνιων εισαγωγικών εξετάσεων 1976, Ε.Μ.Π.
Βραβεία Κονδούλη και Θωμαΐδη, Ε.Μ.Π., 1978, 1979, 1980, 1981.
Βραβείο “17ης Νοεμβρίου 1973”, Τεχνικό Επιμελητήριο της Ελλάδας, 1977, 1978, 1979, 1980, 1981.
Βραβείο Χρυσοβέργη, Ε.Μ.Π., 1982.
Gilliland Fellowship, Massachusetts Institute of Technology, 1981-1982.
Υποτροφία Ιδρύματος Μποδοσάκη, 1981-1984.
Shell Faculty Career Initiation Grant, 1986-1988.
Du Pont Young Faculty Grant, 1989-1991.
Presidential Young Investigator Award, National Science Foundation, U.S.A., 1988-1992.

Allan P. Colburn Memorial Lectureship, Department of Chemical Engineering, University of Delaware, Newark, Delaware, U.S.A., Οκτώβριος 1992.

Ernest W. Thiele Lectureship, Department of Chemical Engineering, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana, U.S.A., Σεπτέμβριος 1993.

Robert W. Vaughan Lecture, Department of Chemical Engineering, California Institute of Technology, Pasadena, California, U.S.A., Μάρτιος 1994.

Επιστημονικό Βραβείο Μποδοσάκη 1996 στη Χημεία.

Πρόσκληση στο συνέδριο *Scientia Europaea* (οργανωτές: Institut de France και Fondation Rhône-Poulenc), Pornichet, Γαλλία, Σεπτέμβριος 1998.

Danckwerts Lecture, απονεμόμενη από τους οργανισμούς AIChE, IChemE, EFCE και τους εκδότες του *Chemical Engineering Science*, AIChE Meeting, San Francisco, California, U.S.A., Νοέμβριος 2006.

Βραβείο Dick Medema στην Επιστήμη και Τεχνολογία των Πολυμερών, απονεμόμενο από το Ολλανδικό PTN (Polymer Technology in the Netherlands), Φεβρουάριος 2009.

Bird-Stewart-Lightfoot Lectureship, Department of Chemical and Biological Engineering, University of Wisconsin-Madison, Μάιος 2013.

Τακτικό μέλος της Εθνικής Ακαδημίας Μηχανικών των Η.Π.Α. (National Academy of Engineering), Φεβρουάριος 2015.

Βραβείο John M. Prausnitz στην Εφαρμοσμένη Χημική Θερμοδυναμική, Συνέδριο “Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design” (PPEPPD 2016), Porto, Πορτογαλία, Μάιος 2016.

John M. Prausnitz AIChE Institute Lecture, Ετήσιο Συνέδριο του AIChE, San Francisco, California, ΗΠΑ, Νοέμβριος 2016.

European Materials Medal, απονεμηθέν από τη Federation of European Materials Research Societies (FEMS), συνέδριο Euromat 2017, Θεσσαλονίκη, Σεπτέμβριος 2017.

DSM Life Time Achievement Award in Materials Sciences, DYFP2018 Conference, Kerkrade, Ολλανδία, Μάρτιος 2018.

Διακεκριμένη Διάλεξη “Αλκιβιάδης Χ. Παγιατάκης”, ITE/ΙΕΧΜΗ, Πάτρα, Δεκέμβριος 2018.

Μετάλλιο Guggenheim 2018, απονεμηθέν από το Institution of Chemical Engineers, UK “for significant contribution to Thermodynamics and/or Complex Fluids”, συνέδριο Thermodynamics 2019, Punta Umbría, Ισπανία, Ιούνιος 2019.

Μετάλλιο 2022 FOMMS (Foundations of Molecular Modeling and Simulation), “for profound and lasting contributions to the development of computational methods and their application to the field of molecular-based modeling and simulation”, απονεμηθέν στο διεθνές συνέδριο FOMMS 2022, Delavan, Wisconsin, ΗΠΑ, Ιούλιος 2022.

Warren K. Lewis Lectureship, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Μάρτιος 2023.

“Doros N. Theodorou Festschrift”, [Ειδικό τεύχος](#) του περιοδικού *Journal of Physical Chemistry B* (vol. 127, Number 12, March 30, 2023) με συντάκτες τους Edward J. Maginn, Ioannis G. Economou, Randall Q. Snurr και Arup K. Chakraborty επ’ ευκαιρία των 65^{ων} γενεθλίων.

Περιληφθείς σε βιογραφικά λεξικά *Who's Who in the World*, *Who's Who in Science and Engineering*, *Men and Women of Science*, *Men of Achievement*, *Επίτομο Βιογραφικό Λεξικό Who's Who*, *European Biographical Directory*.

Επαγγελματικές Δραστηριότητες

Μέλος Εθνικού Συμβουλίου Έρευνας, Τεχνολογίας και Καινοτομίας (ΕΣΕΤΕΚ), 2020 – 2023

Μέλος Επιστημονικής Συντονιστικής Επιτροπής (Scientific Steering Committee), PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), 2020 – 2023.

Μέλος, Θεματική Επιτροπή Μηχανικής Προϊόντων και Διεργασιών (PE8) 2015, 2017, 2019 και Θεματική Επιτροπή Μηχανικής Υλικών (PE11) 2021, Advanced Grant Evaluation, Ευρωπαϊκό Συμβούλιο Έρευνας (ERC).

Μέλος (2011 –) και Αντιπρόεδρος (2021–) Διοικητικού Συμβουλίου Ιδρύματος Μποδοσάκη

Μέλος Επιστημονικού Συμβουλίου Διαγωνισμού «Η Ελλάδα Καινοτομεί!», που οργανώθηκε από τον ΣΕΒ και την Eurobank, 2012-2013.

Μέλος Εθνικού Συμβουλίου Έρευνας και Τεχνολογίας (ΕΣΕΤ), 2010-2013.

Μέλος Διοικητικού Συμβουλίου πανεπιστημιακού Ινστιτούτου Επιταχυντικών Συστημάτων και Εφαρμογών (ΙΕΣΕ), 2009-.

Μέλος Τομεακού Επιστημονικού Συμβουλίου (ΤΕΣ) Φυσικής-Χημείας-Υλικών, Εθνικό Συμβούλιο Έρευνας και Τεχνολογίας, 2003–2004.

Εθνικός Εκπρόσωπος, Πρόγραμμα "Human Resources and Mobility", Γ.Δ.12 της Ε.Ε., 2003-2004.

Εθνικός Εκπρόσωπος, Πρόγραμμα "Improving Human Potential", Γ.Δ.12 της Ε.Ε., 2000-2002.

Εθνικός Εκπρόσωπος, Πρόγραμμα "Training and Mobility of Researchers", Γ.Δ.12 της Ε.Ε., 1995-1998.

Επισκέπτης Ερευνήτης, Institute of Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara, U.S.A. (Program on Quantitative Methods in Materials Research), Απρίλιος- Μάιος 1997.

Διεθνής Συμβουλευτική Επιτροπή, *Molecular Systems Design and Engineering*, 2017-

Συντακτική επιτροπή, *Journal of Multiscale Modelling*, 2009-

Συντακτική επιτροπή, *Annual Review in Chemical and Biomolecular Engineering*, 2008-2015

Συντακτική επιτροπή, *Molecular Physics*, 2006-2012

Editorial Advisory Board, *Macromolecules*, 2005-2007

Συντακτική επιτροπή, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2004-2022

Συντακτική επιτροπή, *Soft Materials*, 2002-2009

International Advisory Board, *Chemical Engineering Science*, 2000-2018

Συντακτική επιτροπή, *Computational and Theoretical Polymer Science*, 1996-2002

Συντακτική επιτροπή, *Molecular Simulation*, 1994-2001

Συντακτική επιτροπή, *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 1993-2007

Συντακτική επιτροπή, *Die Makromolekulare Chemie: Theory and Simulation*, 1992-1995

Προσκεκλημένος συντάκτης, μαζί με τον Καθ. Βλάση Γ. Μαυραντζά, ειδικού τεύχους του περιοδικού *Polymers* με θέμα αδροποιημένα πρότυπα για πολυμερή (Coarse-Grained Models for Polymers), 2023.
https://www.mdpi.com/journal/polymers/special_issues/Cor_Gra_Mod_Poly

Προσκεκλημένος συντάκτης, μαζί με τον Mark J. Biggs, του ειδικού τεύχους Danckwerts Special Issue on Molecular Modelling in Chemical Engineering του περιοδικού *Chemical Engineering Science*, 2015.

Συντάκτης, *Diffusion in Micropores*, ειδικού τεύχους του περιοδικού *Microporous and Mesoporous Materials* που εκδόθηκε προς τιμήν του Καθηγητή Jörg Kärger του Πανεπιστημίου της Λειψίας, 2009.

Αρχισυντάκτης, Symposium in Print on Molecular Modelling, ειδικού τεύχους του περιοδικού *Chemical Engineering Science*, που δημοσιεύθηκε τον Οκτώβριο 1994.

Μέλος της Διεθνούς Συμβουλευτικής Επιτροπής, 9th Liquid Matter Conference, Ljubljana, Σλοβενία, Ιούλιος 2017.

Μέλος της Διεθνούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της 14^{ης} έκδοσης του διεθνούς συνεδρίου Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design (PPEPPD 2016), Porto Πορτογαλίας, 22-26 Μαΐου 2016 και της 13^{ης} έκδοσης του ιδίου συνεδρίου (PPEPPD 2013), Iguazu Falls Αργεντινής, 26-30 Μαΐου 2013.

Μέλος της επιτροπής επιλογής του διεθνούς βραβείου Ilya Prigogine Prize for Thermodynamics για την καλύτερη διδακτορική διατριβή στην περιοχή της Θερμοδυναμικής, 2023, 2021, 2019, 2017, 2015.

Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής της 13^{ης} έκδοσης του συνεδρίου Joint European Thermodynamics Conference (JETC 2015), Nancy Γαλλίας, 20-22 Μαΐου, 2015 και της 12^{ης} έκδοσης του ιδίου συνεδρίου (JETC 2013), Brescia Ιταλίας, 1-5 Ιουλίου 2013.

Μέλος της Διεθνούς Οργανωτικής Επιτροπής της 12^{ης} έκδοσης του διεθνούς συνεδρίου Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design (PPEPPD 2010), Suzhou Κίνας, 16-21 Μαΐου 2010 και της 10^{ης} έκδοσης του ιδίου συνεδρίου, Snowbird, Utah (PPEPPD 2004), Μάιος 2004.

Επιστημονικός σύμβουλος, Σχολείο και Συνέδριο “Multiscale Modelling and Simulations of Hard and Soft Materials”, Bangalore Ινδίας, Δεκέμβριος 2009.

Πρόεδρος, συνέδριο “Diffusion Fundamentals III”, Αθήνα, 23-26 Αυγούστου, 2009.

Συν-οργανωτής, Faraday Discussion 144, “Multiscale Modeling of Soft Matter”, Groningen Ολλανδίας, 20-22 Ιουλίου, 2009.

Πρόεδρος της Διεθνούς Οργανωτικής Επιτροπής της 11^{ης} έκδοσης του διεθνούς συνεδρίου Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design (PPEPPD 2007), Χεσόνησος, Κρήτη, 20-25 Μαΐου 2007.

Οργανωτής Συνεδρίας “Coarse-Grained Models for Polymers”, SIMU Conference “Bridging the Scales”, Genova, Ιταλία, Αύγουστος 2004.

Συν-οργανωτής, 19th European Seminar on Applied Thermodynamics, Σαντορίνη, Σεπτέμβριος 2002.

Συν-οργανωτής, SIMU-CECAM Workshop on Multiscale Modelling of Materials: Methods, Algorithms, and Unsolved Problems, Ηράκλειο Κρήτης, Ιούλιος 2001.

Συν-οργανωτής, CECAM-ESF Workshop on Computer Simulations of Polymer Blends and Copolymer Systems, Lyon, France, Σεπτέμβριος 1999.

Συν-οργανωτής, ACS Workshop on Molecular Modeling of Polymers, Isle of Palms, South Carolina, USA, Μάρτιος 1998.

Πρόεδρος της Επιστημονικής Επιτροπής, 6th European Polymer Federation Symposium, Αγ. Πελαγία, Κρήτη, Οκτώβριος 1996.

Συν-οργανωτής, Symposium on Modelling and Computer Simulation of Polymers, Division of Polymer Chemistry, National Meeting of the American Chemical Society, San Francisco, California, Απρ. 1992.

Συν-οργανωτής, Symposium on Structure and Mobility in Polymer Solids, 2nd Topical Conference on Emerging Technologies in Materials, 1989 Annual Meeting of the American Institute of Chemical Engineers, San Francisco, California, Νοέμβριος 1989.

Επιστημονικός Σύμβουλος (Scientific Advisor), Molecular Simulations/Accelrys Inc., San Diego, CA, USA, και Cambridge, UK, 1999-2005. Μέλος της επιστημονικής συμβουλευτικής επιτροπής, Scienomics SARL, Paris, France, 2005-. Τεχνικός σύμβουλος, DSM Research, Geleen, The Netherlands, 2001-. Σύμβουλος, E.I. du Pont de Nemours & Co., W.R. Grace & Co.-Conn., BFGoodrich Co., Biosym Technologies, Inc., Oxford Molecular Ltd., 1989-1995.

Μέλος Επιτροπής Στρατηγικού Σχεδιασμού της Σχολής Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ, 2019 -.

Μέλος Συγκλητικής Επιτροπής Μεταπτυχιακών Σπουδών του ΕΜΠ, 2015-2019 και 2023-.

Μέλος της Επιτροπής Προπτυχιακών Σπουδών της Σχολής Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ, 2015-2016.

Μέλος Συγκλητικής Επιτροπής Βασικής Έρευνας του Ε.Μ.Π., 2006-2014.

Πρόεδρος Ε.Δ.Ε. (2018) και Διδάσκων (2006-), Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Υπολογιστική Μηχανική», Ε.Μ.Π., Αθήνα.

Διδάσκων, Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών», Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2014-.

Μέλος Ε.Δ.Ε. και διδάσκων, Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Μικροσυστήματα και Νανοδιατάξεις», Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2006-.

Μέλος Ε.Δ.Ε. και διδάσκων, Διαπανεπιστημιακό/Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Μαθηματική Προτυποποίηση στις Σύγχρονες Τεχνολογίες και τη Χρηματοοικονομική», Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2003-.

Μέλος της διοικούσας επιτροπής (steering committee) του Ευρωπαϊκού δικτύου “Challenges in Molecular Simulation: Bridging the Length- and Time-Scale Gap” (SIMU), υποστηριζόμενου από τη European Science Foundation, 1999-2004.

Μέλος συντονιστικής επιτροπής για την απόκτηση υπερυπολογιστικού συστήματος, Ε.Ι.Ε., 1999-2000.

Μέλος προσωρινής συνέλευσης Τμήματος Επιστήμης Υλικών στο Πανεπιστήμιο Πάτρας, 1999-2002

Διδάσκων στο Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών “Επιστήμη και Τεχνολογία των Πολυμερών”, Πανεπιστήμιο Πάτρας, 1998-2002.

Διδάσκων στο Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών “Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της”, Πανεπιστήμιο Αθηνών, 1998- 2002.

Διδάσκων στο Τρίτο Θερινό Σχολείο Χημείας (SSC-3) *Topics in Polymer Chemistry*, Πρόγραμμα «Σωκράτης», Πανεπιστήμιο Πατρών, Ιούλιος 2000.

Κριτικός αναγνώστης συγγραμμάτων για το Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, 1998-2000.

Μέλος εξεταστικής επιτροπής διδακτορικών διατριβών στο Imperial College London (UK), στο ETH Zürich (CH), στα Πανεπιστήμια Groningen (NL), Eindhoven (NL), Twente (NL), Delft (NL), Leipzig

(DE), Oslo (NO), Cagliari και Sassari (IT), στο Indian Institute of Science, Bangalore, στο Indian Institute of Technology, Bombay, στο Royal Melbourne Institute of Technology (RMIT) της Αυστραλίας, στα Πανεπιστήμια Wollongong και Deakin της Αυστραλίας, στο Εθνικό Πανεπιστήμιο της Σιγκαπούρης (NUS), στα Πανεπιστήμια Αθηνών, Θεσσαλονίκης, Πατρών, Κρήτης, Ιωαννίνων, και στο Ε.Μ.Π. Μέλος της επιτροπής κρίσης (jury) για την απονομή Habilitation á Diriger des Recherches στο Université de Savoie της Γαλλίας.

Κριτής ερευνητικών προτάσεων που υποβάλλονται για χρηματοδότηση στους οργανισμούς Ευρωπαϊκό Συμβούλιο Έρευνας (ERC Advanced και Consolidator Grants), National Science Foundation (USA), INTAS Programme, European Commission Marie Skłodowska-Curie Postdoctoral Fellowships, Netherlands Foundation for Chemical Research (SON), Dutch *Softlink* Programme, A.C.S. Petroleum Research Fund (U.S.A.), CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire), PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας της Ελλάδας, Research Commission of the ETH-Zürich, Επιτροπές Ερευνών των Πανεπιστημίων Ιωαννίνων και Κρήτης και του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου.

Κριτής (referee) ερευνητικών άρθρων που υποβάλλονται για δημοσίευση στα περιοδικά *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*, *Macromolecules*, *Journal of Chemical Physics*, *Journal of Physical Chemistry B*, *Langmuir*, *Accounts of Chemical Research*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *Chemical Communications*, *Molecular Physics*, *Microporous and Mesoporous Materials*, *Journal of Rheology*, *A.I.Ch.E. Journal*, *Chemical Engineering Science*, *Journal of Polymer Science B: Polymer Physics*, *Macromolecular Theory and Simulations*, *Theoretical and Computational Polymer Science*, *Polymers*, *Τεχνικά Χρονικά*.

Μέλος, American Institute of Chemical Engineers, American Chemical Society, Τεχνικό Επιμελητήριο της Ελλάδας, Σύλλογος Αποφοίτων Κολλεγίου Αθηνών.

Γλώσσες Ελληνικά, Αγγλικά, Γερμανικά, Γαλλικά.

Προσωπικά

Ενδιαφέροντα Μουσική (πιάνο), λογοτεχνία, ταξίδια, κολύμβηση

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

A. Ερευνητικά Αρθρα

1. Theodorou, D.N.; Wei, J. "Diffusion and Reaction in Blocked and High Occupancy Zeolite Catalysts" *J.Catal.* **1983**, 83, 205-224.
2. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. "Geometrical Considerations in Model Systems With Periodic Boundaries" *J.Chem.Phys.* **1985**, 82, 955-966.
3. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. "Shape of Unperturbed Linear Polymers; Polypropylene" *Macromolecules* **1985**, 18, 1206-1214.
4. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. "Detailed Molecular Structure of a Vinyl Polymer Glass" *Macromolecules* **1985**, 18, 1467-1478.
5. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. "Atomistic Modeling of Mechanical Properties of Polymeric Glasses" *Macromolecules* **1986**, 19, 139-154.
6. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. "Local Structure and the Mechanism of Response to Elastic Deformation in a Glassy Polymer" *Macromolecules* **1986**, 19, 379-387.
7. Theodorou, D.N. "Lattice Models for Bulk Polymers at Interfaces", *Macromolecules* **1988**, 21, 1391-1400.
8. Theodorou, D.N. "Structure and Thermodynamics of Bulk Homopolymer/Solid Interfaces: A Site Lattice Model Approach" *Macromolecules* **1988**, 21, 1400-1410.
9. Theodorou, D.N. "Structure and Thermodynamic Properties of Bulk Copolymers and Surface Active Polymers at Interfaces 1.Theory" *Macromolecules* **1988**, 21, 1411-1421.
10. Theodorou, D.N. "Structure and Thermodynamic Properties of Bulk Copolymers and Surface Active Polymers at Interfaces 2.Results for Some Representative Chain Architectures" *Macromolecules* **1988**, 21, 1422-1436.
11. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Interfacial Structure and Dynamics of Macromolecular Liquids: A Monte Carlo Simulation Approach" *Macromolecules* **1989**, 22, 3143-3152.
12. Theodorou, D.N. "Variable Density Model of Polymer Melt Surfaces: Structure and Surface Tension" *Macromolecules* **1989**, 22, 4578-4589.
13. Theodorou, D.N. "Variable Density Model of Polymer Melt/Solid Interfaces: Structure, Adhesion Tension, and Surface Forces" *Macromolecules* **1989**, 22, 4589-4597.
14. June, R.L.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Prediction of Low Occupancy Sorption of Alkanes in Silicalite" *J.Phys.Chem.* **1990**, 94, 1508-1516.
15. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Atomistic Simulation of a Glassy Polymer Surface" *Macromolecules* **1990**, 23, 4430-4445.
16. June, R.L.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics Study of Methane and Xenon in Silicalite" *J. Phys. Chem.* **1990**, 94, 8232-8240; erratum *J. Phys. Chem.* **1991**, 95, 1014.

17. Dodd, L.R.; Theodorou, D.N. "Analytical Treatment of the Volume and Surface Area of Molecules Formed by an Arbitrary Collection of Unequal Spheres Intersected by Planes" *Molec.Phys.* **1991**, 72, 1313-1345.
18. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Atomistic Simulation of a Glassy Polymer/Graphite Interface" *Macromolecules* **1991**, 24, 4295-4309.
19. Snurr, R.Q.; June, R.L.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulations of Methane Adsorption in Silicalite" *Molecular Simulation* **1991**, 8, 73-92.
20. June, R.L.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Transition State Studies of Xenon and SF₆ Diffusion in Silicalite" *J. Phys. Chem.* **1991**, 95, 8866-8878.
21. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics Simulation of a Glassy Polymer Surface" *Macromolecules* **1991**, 24, 6283-6294.
22. Lonsinger, S.R.; Chakraborty, A.K.; Theodorou, D.N.; Bell, A.T. "The Effects of Local Structural Relaxation on Aluminum Siting Within H-ZSM-5" *Catal. Lett.* **1991**, 11, 209-217.
23. June, R.L.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics Studies of Butane and Hexane in Silicalite" *J. Phys. Chem.*, **1992**, 96, 1051-1060.
24. Dodd, L.R.; Boone, T.D.; Theodorou, D.N. "A Concerted Rotation Algorithm for Atomistic Monte Carlo Simulation of Polymer Melts and Glasses" *Molec.Phys.* **1993**, 78, 961-996.
25. Theodorou, D.N.; Dodd, L.R.; Boone, T.D.; Mansfield, K.F. "Stress Tensor in Model Polymer Systems With Periodic Boundaries" *Makromol.Chem., Theory Simul.* **1993**, 2, 191-238.
26. Sevick, E.M.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "A Chain of States Method for Investigating Infrequent Event Processes Occurring in Multistate, Multidimensional Systems" *J. Chem. Phys.*, **1993**, 98, 3196-3212.
27. Maginn, E.J.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Transport Diffusivity of Methane in Silicalite from Equilibrium and Nonequilibrium Simulations" *J. Phys. Chem.* **1993**, 97, 4173-4181.
28. Cook, S.J.; Chakraborty, A. K.; Theodorou, D.N., Bell, A.T. "Structural and Electronic Features of the Brönsted Acid Site in H-ZSM-5" *J. Phys. Chem.* **1993**, 97, 6679-6685.
29. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Geometric Analysis of Diffusion Pathways in Glassy and Melt Atactic Polypropylene" *Macromolecules* **1993**, 26, 5461-5672.
30. Snurr, R.Q.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Prediction of Adsorption of Aromatic Hydrocarbons in Silicalite from Grand Canonical Monte Carlo Simulations With Biased Insertions", *J. Phys. Chem.* **1993**, 97, 13742-13752.
31. Rapold, R.F.; Suter, U.W.; Theodorou, D.N. "Static Atomistic Modeling of the Structure and Ring Dynamics of Bulk Amorphous Polystyrene" *Macromol. Theory Simul.* **1994**, 3, 19-43.
32. Snurr, R.Q.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Hierarchical Atomistic/Lattice Simulation Approach for the Prediction of Adsorption Thermodynamics of Benzene in Silicalite" *J. Phys. Chem.* **1994**, 98, 5111-5119.

33. Snurr, R.Q.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Investigation of the Dynamics of Benzene in Silicalite Using Transition-State Theory" *J.Phys.Chem.* **1994**, *98*, 11948-11961.
34. Maginn, E.J.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Sorption Thermodynamics, Siting and Conformation of Long *n*-Alkanes in Silicalite as Predicted by Configurational-Bias Monte Carlo Integration" *J.Phys.Chem.* **1995**, *99*, 2057-2079.
35. Kyrilidis, A.; Cook, S.J.; Chakraborty, A.C.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Electronic Structure Calculations of Ammonia Adsorption in H-ZSM-5 Zeolites" *J.Phys.Chem.* **1995**, *99*, 1505-1515.
36. Fischel, L.B.; Theodorou, D.N. "Self-Consistent Field Model of the Polymer/Diblock Copolymer/Polymer Interface" *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **1995**, *91*, 2381-2402.
37. Pant, P.V.K.; Theodorou, D.N. "Variable Connectivity Method for the Atomistic Monte Carlo Simulation of Polydisperse Polymer Melts" *Macromolecules* **1995**, *28*, 7224-7234.
38. Chassapis, C.S.; Petrou, J.K.; Petropoulos, J.H.; Theodorou, D.N. "Analysis of Computed Trajectories of Penetrant Micromolecules in a Simulated Polymeric Material" *Macromolecules* **1996**, *29*, 3615-3624.
39. Maginn, E.J.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Dynamics of Long *n*-Alkanes in Silicalite: A Hierarchical Simulation Approach" *J.Phys.Chem.* **1996**, *100*, 7155-7173.
40. Spyriouni, T.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Thermodynamics of Chain Fluids from Atomistic Simulation: A Test of the Chain Increment Method for Chemical Potential" *Macromolecules* **1997**, *30*, 4744-4755.
41. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Coupling of Penetrant and Polymer Motions During Small-Molecule Diffusion in a Glassy Polymer" *Molecular Simulation* **1997**, *19*, 329-361.
42. Provata, A.; Prassas, V.D.; Theodorou, D.N. "Surface Tension and Phase Coexistence Properties of the Lattice Fluid from a Virtual Site Removal Monte Carlo Strategy" *J. Chem. Phys.* **1997**, *107*, 5125-5140.
43. Fischel, L. B.; Newman, J.; Theodorou, D. N. "Segment Density of a Block Copolymer Chain Tethered at Both Ends" *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **1997**, *93*, 4355-4370.
44. Gray-Weale, A. A.; Henchman, R. H.; Gilbert, R. G.; Greenfield, M. L.; Theodorou, D. N. "Transition-State Theory Model for the Diffusion Coefficients of Small Penetrants in Glassy Polymers" *Macromolecules* **1997**, *30*, 7296-7306.
45. Spyriouni, T.; Economou, I. G.; Theodorou, D. N. "Molecular Simulation of the Pure *n*-Hexadecane Vapor-Liquid Equilibria at Elevated Temperature" *Macromolecules* **1998**, *31*, 1430-1431.
46. Boulougouris, G.C.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Engineering a Molecular Model for Water Phase Equilibrium over a Wide Temperature Range" *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 1029-1035.
47. Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Atomistic Simulation of Polymer Melt Elasticity: Calculation of the Free Energy of an Oriented Polymer Melt" *Macromolecules* **1998**, *31*, 6310-

6332.

48. Janssen, R.H.C.; Bomont, J.-M.; Theodorou, D.N., Raptis, S.; Papadopoulos, M.G. "Computer Simulation of the Linear and Nonlinear Optical Properties of Liquid Benzene: Its Local Fields, Refractive Index and 2nd Nonlinear Susceptibility" *J. Chem. Phys.* **1999**, *110*, 6463-6474.
49. Ullner, M., Staikos, G.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo Simulations of a Single Polyelectrolyte in Solution: Activity Coefficients of the Simple Ions and Application to Viscosity Measurements" *Macromolecules* **1998**, *31*, 7921-7933.
50. Spyriouni, T.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Phase Equilibria of Mixtures Containing Chain Molecules Through a Novel Simulation Scheme" *Phys. Rev. Lett.* **1998**, *80*, 4466-4469.
51. Harmandaris, V.A.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Atomistic Molecular Dynamics Simulation of Polydisperse Linear Polyethylene Melts" *Macromolecules* **1998**, *31*, 7934-7943.
52. Antoniadis, S.J.; Samara, C.T.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics of Atactic Polypropylene Melts" *Macromolecules* **1998**, *31*, 7944-7952.
53. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Molecular Modeling of Methane Diffusion in Glassy Atactic Polypropylene via Multidimensional Transition State Theory" *Macromolecules* **1998**, *31*, 7068-7090.
54. Errington, J.R.; Boulougouris, G.C.; Economou, I.G.; Panagiotopoulos, A.Z.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulation of Phase Equilibria for Water-Methane and Water-Ethane Mixtures" *J. Phys. Chem. B* **1998**, *102*, 8865-8873.
55. Kopsias, N.P.; Theodorou, D.N. "Elementary structural transitions in the amorphous Lennard-Jones solid using multidimensional transition-state theory" *J. Chem. Phys.* **1998**, *109*, 8573-8582.
56. Reis, H.; Raptis, S.; Papadopoulos, M.G.; Janssen, R.H.C.; Theodorou, D.N.; Munn, R.W. "Calculation of macroscopic first and third-order optical susceptibilities for the benzene crystal" *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *99*, 384-390.
57. Boulougouris, G.C.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "On the Calculation of the Chemical Potential Using the Particle Deletion Scheme" *Molec. Phys.* **1999**, *96*, 905-913.
58. Spyriouni, T.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulation of α -Olefins Using a New United Atom Potential: Vapor-Liquid Equilibria of Pure Compounds and Mixtures" *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 3407-3413.
59. Gergidis, L.N.; Theodorou, D.N. "Molecular dynamics simulation of *n*-butane - methane mixtures in silicalite" *J. Phys. Chem. B* **1999**, *103*, 3380-3390.
60. Mavrantzas, V.G.; Boone, T.D.; Zervopoulou, E.; Theodorou, D.N. "End-Bridging Monte Carlo: A Fast Algorithm for Atomistic Simulation of Condensed Phases of Long Polymer Chains" *Macromolecules* **1999**, *32*, 5072-5096.

61. Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Atomistic Simulation of the Birefringence of Uniaxially Stretched Polyethylene Melts” *Comp.Theor.Polym.Sci.* **2000**, *10*, 1-13.
62. Gaub, M.; Fritzsche, S.; Haberlandt, R.; Theodorou, D.N. “Van Hove Function for Diffusion in Zeolites” *J. Phys. Chem. B* **1999**, *103*, 4721-4729.
63. Antoniadis, S.J.; Samara, C.T.; Theodorou, D.N. “Effect of Tacticity on the Molecular Dynamics of Polypropylene Melts” *Macromolecules* **1999**, *32*, 8635-8644.
64. Janssen, J.H.C.; Theodorou, D.N.; Raptis, S.; Papadopoulos, M.G. “Molecular Simulation of Static hyper-Rayleigh Scattering: A Calculation of the Depolarization Ratio and the Local Fields for Liquid Nitrobenzene” *J. Chem. Phys.* **1999**, *111*, 9711-9719.
65. Terzis, A.F.; Theodorou, D.N.; Stroeck, A. “Entanglement Network of the Polypropylene/Polyamide Interface. 1. Self-Consistent Field Model” *Macromolecules* **2000**, *33*, 1385-1396.
66. Terzis, A.F.; Theodorou, D.N.; Stroeck, A. “Entanglement Network of the Polypropylene/Polyamide Interface. 2. Network Generation” *Macromolecules* **2000**, *33*, 1397-1410.
67. Doxastakis, M.; Kitsiou, M.; Fytas, G.; Theodorou, D.N.; Hadjichristidis, N.; Meier, G.; Frick, B. “Component Segmental Mobility in an Athermal Polymer Blend: Quasielastic Incoherent Neutron Scattering vs Simulation” *J. Chem. Phys.* **2000**, *112*, 8687-8694.
68. Gergidis, L.N.; Theodorou, D.N.; Jobic, H. “Dynamics of *n*-butane-methane mixtures in silicalite using quasielastic neutron scattering and molecular dynamics simulations” *J. Phys. Chem. B* **2000**, *104*, 5541-5552.
69. Harmandaris, V.A.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Atomistic Molecular Dynamics Simulation of Stress Relaxation Upon Cessation of Steady-State Elongational Flow” *Macromolecules* **2000**, *33*, 8062-8076.
70. Boulougouris, G.C.; Errington, J.R.; Economou, I.G.; Panagiotopoulos, A.Z.; Theodorou, D.N. “Molecular Simulation of Phase Equilibria for Water – *n*-Butane and Water – *n*-Hexane Mixtures” *J. Phys. Chem.B* **2000**, *104*, 4958-4963.
71. Karayiannis, N. Ch.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Diffusion of small molecules in disordered media: Study of the effect of kinetic and spatial heterogeneities” *Chem. Eng. Sci.* **2001**, *56*, 2789-2801.
72. Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Atomistic Monte Carlo simulation of steady-state uniaxial elongational flow of long-chain polyethylene melts: Dependence of the melt degree of orientation on stress, molecular length and elongational strain rate” *Macromol. Theory Simul.* **2000**, *9*, 500-515.
73. Reis, H.; Papadopoulos, M.G.; Theodorou, D.N. “Calculation of the refractive indices and third-harmonic generation susceptibilities of liquid benzene and water: Comparison of continuum and discrete local-field theories” *J. Chem. Phys.* **2001**, *114*, 876-881.
74. Makrodimitris, K.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. “Prediction of Permeation Properties of CO₂ and N₂ through Silicalite via Molecular Simulations” *J. Phys. Chem. B* **2001**, *105*, 777-788.
75. Faller, R.; Müller-Plathe, F.; Doxastakis, M.; Theodorou, D. “Local Structure and Dynamics in

- Trans-Polyisoprene Oligomers” *Macromolecules* **2001**, *34*, 1436-1448.
76. Zervopoulou, E.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “A new Monte Carlo simulation approach for the prediction of sorption equilibria of oligomers in polymer melts: Solubility of long alkanes in linear polyethylene” *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 2860-2875.
 77. Boulougouris, G.C.; Voutsas, E.C.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N.; Tassios, D.P. “Henry’s Constant Analysis for Water and Nonpolar Solvents from Experimental Data, Macroscopic Models, and Molecular Simulation” *J. Phys. Chem. B* **2001**, *105*, 7792-7798.
 78. Rabias, I.; Langlois, C.; Provata, A.; Howlin, B.J.; Theodorou, D.N. “Linking the atomistic scale and the mesoscale: molecular orbital and solid state packing calculations on poly(p-phenylene)” *Polymer* **2002**, *43*, 185-193.
 79. Boulougouris, G.C.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. “Calculation of the chemical potential of chain molecules using the staged particle deletion scheme” *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 8231-8237.
 80. Doxastakis, M.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Atomistic Monte Carlo simulation of *cis*-1,4 polyisoprene melts I. Single temperature end-bridging Monte Carlo simulations” *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 11339-11351.
 81. Doxastakis, M.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Atomistic Monte Carlo simulation of *cis*-1,4 polyisoprene melts II. Parallel tempering end-bridging Monte Carlo simulations” *J. Chem. Phys.* **2001**, *115*, 11352-11361.
 82. Harmandaris, V.A.; Doxastakis, M.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Detailed molecular dynamics simulation of the self-diffusion of n-alkane and *cis*-1,4 polyisoprene oligomer melts” *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 436-446.
 83. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. “Coarse-Grained Molecular Simulation of Penetrant Diffusion in a Glassy Polymer Using Reverse and Kinetic Monte Carlo” *Macromolecules* **2001**, *34*, 8541-8553.
 84. Terzis, A.F.; Theodorou, D.N.; Stroeks, A. “Entanglement Network of the Polypropylene/Polyamide Interface 3. Deformation to Fracture” *Macromolecules* **2002**, *35*, 508-521.
 85. Uhlherr, A.; Mavrantzas, V.G.; Doxastakis, M.; Theodorou, D.N. “Directed Bridging Methods for Atomistic Monte Carlo Simulations of Bulk Polymers” *Macromolecules* **2001**, *34*, 8554-8568.
 86. Uhlherr, A.; Doxastakis, M.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N.; Leak, S.J.; Adam, N.E.; Nyberg, P.E. “Atomic structure of a high polymer melt” *Europhys. Lett.* **2002**, *57*, 506-511.
 87. Uhlherr, A.; Leak, S.J.; Adam, N.E.; Nyberg, P.E.; Doxastakis, M.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “Large scale atomistic polymer simulations using Monte Carlo methods for parallel vector processors” *Comput. Phys. Commun.* **2002**, *144*, 1-22.
 88. Karayiannis, N.Ch.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. “A novel Monte Carlo scheme for the rapid equilibration of atomistic model polymer systems of precisely defined molecular architecture” *Phys. Rev. Lett.* **2002**, *88*, 105503.

89. Retsos, H.; Terzis, A.F.; Anastasiadis, S.H.; Anastassopoulos, D.L.; Toprakcioglu, C.; Theodorou, D.N.; Smith, G.S.; Menelle, A.; Gill, R.E.; Hadziioannou, G.; Gallot, Y. "Mushrooms and Brushes in Thin Films of Diblock Copolymer/Homopolymer Mixtures" *Macromolecules* **2002**, *35*, 1116-1132.
90. Harmandaris, V.A.; Angelopoulou, D.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Atomistic molecular dynamics simulation of diffusion in binary liquid *n*-alkane mixtures" *J. Chem. Phys.* **2002**, *116*, 7656-7665.
91. Ahumada, O.; Theodorou, D.N.; Triolo, A.; Arrighi, V.; Karatasos, C.; Ryckaert, J.-P. "Segmental dynamics of atactic polypropylene as revealed by molecular simulations and quasielastic neutron scattering" *Macromolecules* **2002**, *35*, 7110-7124.
92. Karayiannis, N.Ch.; Giannousaki, A.E.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Atomistic Monte Carlo of strictly monodisperse polyethylene melts through a generalized chain bridging algorithm" *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 5465-5479.
93. Makrodimitris, K.; Papadopoulos, G.K.; Philippopoulos, C.; Theodorou, D.N. "Parallel tempering method for reconstructing isotropic and anisotropic porous media" *J. Chem. Phys.* **2002**, *117*, 5876-5884.
94. Harmandaris, V.A.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N.; Kröger, M.; Ramírez, J.; Öttinger, H.C.; Vlassopoulos, D. "Crossover from the Rouse to the entangled polymer melt regime: Signals from long, detailed atomistic molecular dynamics simulations, supported by rheological experiments" *Macromolecules* **2003**, *36*, 1376-1387.
95. Ariedi, G., Ryckaert, J.-P.; Theodorou, D.N. "On the separation between torsion-vibration and conformational relaxation processes in the incoherent intermediate scattering function of polyethylene" *Chem. Phys.* **2003**, *292*, 371-382.
96. Doxastakis, M.; Theodorou, D.N.; Fytas, G.; Kremer, F.; Faller, R.; Müller-Plathe, F.; Hadjichristidis, N. "Chain and local dynamics of polyisoprene as probed by experiments and computer simulations" *J. Chem. Phys.* **2003**, *119*, 6883-6894.
97. Gestoso, P.; Nicol, E.; Doxastakis, M.; Theodorou, D.N. "Atomistic Monte Carlo simulation of polybutadiene isomers: *cis*-1,4-polybutadiene and 1,2-polybutadiene" *Macromolecules* **2003**, *36*, 6925-6938.
98. Eilmes, A.; Munn, R.W.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N.; Góra, A. "Microscopic calculation of the static electric susceptibility of polyethylene" *J. Chem. Phys.* **2003**, *119*, 11458-11466.
99. Raptis, V.E.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N.; Petrou, J.; Petropoulos, J.H. "Molecular dynamics simulation of structure and thermodynamic properties of poly(dimethylsilamethylene) and hydrocarbon solubility therein: Towards the development of novel membrane materials for hydrocarbon separation" *Macromolecules* **2004**, *37*, 1102-1112.
100. Daoulas, K. Ch.; Theodorou, D.N.; Roos, A.; Creton, C. "Experimental and self-consistent field theoretical study of styrene block copolymer self-adhesive materials" *Macromolecules* **2004**, *37*, 5093-5109.

101. Karayiannis, K. Ch.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Detailed atomistic simulation of the segmental dynamics and barrier properties of amorphous poly(ethylene terephthalate) and poly(ethylene isophthalate)" *Macromolecules* **2004**, *37*, 2978-2995.
102. Papadopoulos, G.K.; Jobic, H.; Theodorou, D.N. "Transport diffusivity of N₂ and CO₂ in silicalite: Coherent quasielastic neutron scattering measurements and molecular dynamics simulations" *J. Phys. Chem. B* **2004**, *108*, 12748-12756.
103. Wick, C.D. and Theodorou, D.N. "Connectivity-altering Monte Carlo simulations of the end group effects on volumetric properties of poly(ethylene oxide)" *Macromolecules* **2004**, *37*, 7026-7033.
104. Peristeras, L.D.; Economou, E.G.; Theodorou, D.N. "Structure and volumetric properties of linear and triarm star polyethylenes from atomistic Monte Carlo simulation using new internal rearrangement moves" *Macromolecules* **2005**, *38*, 386-397.
105. Tsolou, G.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Detailed atomistic molecular dynamics simulation of cis-1,4 polybutadiene" *Macromolecules* **2005**, *38*, 1478-1492.
106. Daoulas, K.Ch.; Theodorou, D.N.; Harmandaris, V.A.; Karayiannis, N. Ch.; Mavrantzas, V.G. "Self-consistent field study of compressible, semi-flexible melts, adsorbed on a solid substrate and comparison with atomistic simulations" *Macromolecules* **2005**, *38*, 7134-7149.
107. Kortunov, P.; Vasenkov, S.; Kärger, J.; Elia, M.F.; Perez, M., Stöcker, M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.; Drescher, B.; McElhiney, G.; Bernauer, B.; Krystl, V.; Kočirik, M.; Zikánová, A.; Jirglová, H.; Berger, C.; Gläser, R.; Weitkamp, J.; Hansen, E.W. "Diffusion in fluid catalytic cracking catalysts on various displacement scales and its role in catalytic performance" *Chem. Mater.* **2005**, *17*, 2466-2474.
108. Economou, I.G.; Raptis, V.E.; Melissas, V.S.; Theodorou, D.N., Petrou, J.; Petropoulos, J.H. "Molecular simulation of structure, thermodynamic and transport properties of polymeric membrane materials for hydrocarbon separation" *Fluid Phase Equilibria* **2005**, *228-229*, 15-20.
109. Kortunov, P.; Vasenkov, S.; Kärger, J.; Elia, M.F.; Perez, M., Stöcker, M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.; Drescher, B.; McElhiney, G.; Bernauer, B.; Krystl, V.; Kočirik, M.; Zikánová, A.; Jirglová, H.; Berger, C.; Gläser, R.; Weitkamp, J.; Hansen, E.W. "Pulsed-field gradient nuclear magnetic resonance study of transport properties of fluid catalytic cracking catalysts" *Magn. Reson. Imaging* **2005**, *23*, 233-237.
110. Zacharopoulos, N.; Vergadou, N.; Theodorou, D.N. "Coarse-graining using pre-tabulated potentials: Liquid benzene" *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 244111.
111. Wick, C.D.; Siepmann, J.I.; Theodorou, D.N. "Microscopic origins for the favorable solvation of carbonate ether copolymers in CO₂" *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 12338-12342.
112. Theodorou, D.N. "A reversible minimum-to-minimum mapping method for the calculation of free-energy differences" *J. Chem. Phys.* **2006**, *124*, 034109.
113. Jobic, H. and Theodorou, D.N. "Diffusion of long n-alkanes in silicalite. A comparison between neutron scattering experiments and hierarchical simulation results" *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 1964-1967.

114. Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "Topological analysis of linear polymer melts: A statistical approach" *Macromolecules* **2006**, *39*, 4592-4603.
115. Uhlherr, A.; Theodorou, D.N. "Accelerating molecular simulations by reversible mapping between local minima" *J. Chem. Phys.* **2006**, *125*, 084107.
116. Leyssale, J.-M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Sorption thermodynamics of CO₂, N₂, and their mixtures in the ITQ-1 zeolite as revealed by molecular simulations" *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 22742-22753.
117. Kamio, K.; Moorthi, K.; Theodorou, D.N. "Coarse-grained end bridging Monte Carlo simulations of poly(ethylene terephthalate) melt" *Macromolecules* **2007**, *40*, 710-722.
118. Rabias, I.; Howlin, B.J.; Provata, A.; Theodorou, D.N. "Modeling of structural and vibrational properties of poly(p-phenylene) and polypyrrole using molecular orbital methods" *Molecular Simulation* **2000**, *24*, 95.
119. Logotheti, G.E.; Theodorou, D.N. "Segmental and chain dynamics of isotactic polypropylene melts" *Macromolecules* **2007**, *40*, 2235-2245.
120. Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N.; Vasenkov, S.; Kärger, J. "Mesoscopic simulations of the diffusivity of ethane in beds of NaX zeolite crystals: Comparison with pulsed field gradient NMR measurements" *J.Chem.Phys.* **2007**, *126*, 094702.
121. Peristeras, L.D.; Rissanou, A.N.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Novel Monte Carlo molecular simulation scheme using identity-altering elementary moves for the calculation of structure and thermodynamic properties of polyolefin blends" *Macromolecules* **2007**, *40*, 2904-2914.
122. Spyriouni, T.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.; Müller-Plathe, F.; Milano, G. "Coarse-grained and reverse-mapped united-atom simulations of long-chain atactic polystyrene melts: structure, thermodynamic properties, chain conformation, and entanglements" *Macromolecules* **2007**, *40*, 3876-3885.
123. Johansson, E.; Bolton, K.; Theodorou, D.N.; Ahlström, P. "Monte Carlo simulations of equilibrium solubilities and structure of water in n-alkanes and polyethylene" *J. Chem. Phys.* **2007**, *126*, 224902.
124. Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Dynamical Integration of a Markovian Web: A first passage time approach" *J. Chem. Phys.* **2007**, *127*, 084903.
125. Johansson, E.; Bolton, K.; Theodorou, D.N.; Ahlström, P. "Formation of rodlike structures of water between oppositely charged ions in decane and polyethylene" *J. Chem. Phys.* **2007**, *127*, 191101.
126. Sant, M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "A second-order Markov process for modeling diffusion through spatial discretization" *J. Chem. Phys.* **2008**, *128*, 024504.
127. Ramos, J.; Peristeras, L.D.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo Simulation of Short Chain Branched Polyolefins in the Molten State" *Macromolecules* **2007**, *40*, 9640-9650.
128. Ramos, J.; Vega, J.F.; Theodorou, D.N. "Entanglement relaxation time in polyethylene: Simulation versus experimental data" *Macromolecules* **2008**, *41*, 2959-2962.

129. Tsalikis, D.G.; Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "On the role of inherent structures in glass-forming materials I. The vitrification process" *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 10619-10627.
130. Tsalikis, D.G.; Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "On the role of inherent structures in glass-forming materials II. Reconstruction of the mean square displacement by rigorous lifting of the inherent structure dynamics" *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 10628-10637.
131. Pantatosaki, E.; Jobic, H.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Combined atomistic simulation and quasielastic neutron scattering study of the low-temperature dynamics of hydrogen and deuterium confined in NaX zeolite" *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 11708-11715.
132. Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Simulation studies of methane, carbon dioxide, hydrogen, and deuterium in ITQ-1 and NaX zeolites" *Molecular Simulation* **2009**, *35*, 79-89.
133. Spyriouni, T.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Prediction of sorption of CO₂ in glassy atactic polystyrene at elevated pressures through a new computational scheme" *Macromolecules* **2009**, *42*, 1759-1769.
134. Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Probing subglass relaxation in polymers via a geometric representation of probabilities, observables, and relaxation modes in discrete stochastic systems" *J. Chem. Phys.* **2009**, *130*, 044905.
135. Sant, M.; Leyssale, J.-M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Molecular dynamics of carbon dioxide, methane and their mixtures in a zeolite possessing two independent pore networks as revealed by computer simulations" *J. Phys. Chem. B* **2009**, *113*, 13761-13767.
136. Tzoumanekas, C.; Lahmar, F.; Rousseau, B.; Theodorou, D.N. "Onset of entanglements revisited. Topological analysis" *Macromolecules* **2009**, *42*, 7474-7484.
137. Lahmar, F.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N.; Rousseau, B. "Onset of entanglements revisited. Dynamical analysis" *Macromolecules* **2009**, *42*, 7485-7494.
138. Megariotis, G.; Vyrkou, A.; Leygue, A.; Theodorou, D.N. "Systematic coarse-graining of 4-cyano-4'-pentylbiphenyl" *Ind. Eng. Chem.* **2011**, *50*, 546-556.
139. Sant, M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Diffusion via space discretization method to study the concentration dependence of self-diffusivity under confinement" *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 134108.
140. Tsalikis, D.G.; Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Efficient parallel decomposition of dynamical sampling in glass-forming materials based on an "on-the-fly" definition of metabasins" *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, *6*, 1307-1322.
141. De Angelis, M.G.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Prediction of infinite dilution benzene solubility in linear polyethylene melts via the Direct Particle Deletion method" *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 6233-6246.
142. Tsalikis, D.G.; Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Temperature-accelerated dynamics in glass-forming materials" *J. Phys. Chem. B* **2010**, *114*, 7844-7863.

143. Romanos, N.A.; Theodorou, D.N. "Crystallization and melting simulations of oligomeric α 1 isotactic polypropylene" *Macromolecules* **2010**, *43*, 5455-5469.
144. Boulougouris, G.C.; Peristeras, L.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Predicting phase equilibrium via histogram reweighting with Gibbs ensemble Monte Carlo simulations" *J. of Supercritical Fluids* **2010**, *55*, 503-509.
145. Vogiatzis, G.G.; Voyiatzis, E.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo simulations of a coarse-grained model for an athermal all-polystyrene nanocomposite system" *Eur. Polym. J.* **2011**, *47*, 699-712.
146. Ndoro, T.M.; Voyiatzis, E.; Ghanbari, A.; Theodorou, D.N.; Böhm, M.; Müller-Plathe, F. "Interface of grafted and ungrafted silica nanoparticles with a polystyrene matrix: Atomistic Molecular Dynamics simulations" *Macromolecules* **2011**, *44*, 2316-2327.
147. Panagiotou, E.; Tzoumanekas, C.; Lambropoulou, S.; Millett, K.C.; Theodorou, D.N. "A Study of the entanglement in systems with periodic boundary conditions" *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **2011**, *191*, 172-181.
148. Lempesis, N.; Tsalikis, D.G.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Lumping analysis for the prediction of long-time dynamics: From monomolecular reaction systems to inherent structure dynamics in glassy materials" *J. Chem. Phys.* **2011**, *135*, 204507.
149. Kolokathis, P.D.; Theodorou, D.N. "On solving the master equation in spatially periodic systems" *J. Chem. Phys.* **2012**, *137*, 034112.
150. Moorthi, K.; Kamio, K.; Ramos, J.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo simulation of short-chain branched polyolefins: Structure and Properties" *Macromolecules* **2012**, *45*, 8453-8466.
151. Anogiannakis, S.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "Microscopic description of entanglements in polyethylene networks and melts: Strong, weak, pairwise, and collective attributes" *Macromolecules* **2012**, *45*, 9475-9492.
152. Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. "Temporal disconnectivity of the energy landscape in glassy systems" *J. Chem. Phys.* **2013**, *138*, 12A545.
153. Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. "Structure of polymer layers grafted to nanoparticles in silica-polystyrene nanocomposites" *Macromolecules* **2013**, *46*, 4670-4683.
154. Morozinis, A.K.; Tzoumanekas, C.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. "Atomistic simulations of cavitation in a model polyethylene network" *Polym. Sci. – Ser. C* **2013**, *55*, 212-218.
155. Lempesis, N.; Vogiatzis, G.G.; Boulougouris, G.C.; van Breemen, L.C.A.; Hütter, M.; Theodorou, D.N. "Tracking a glassy polymer on its energy landscape in the course of elastic deformation" *Mol. Phys.* **2013**, *111*, 3430-3441.
156. Kolokathis, P.D.; Pantatosaki, E.; Gatsiou, C.-A.; Jobic, H.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Dimensionality reduction of free energy profiles of benzene in silicalite-1: calculation of diffusion coefficients using transition state theory" *Molec. Simul.* **2013**, *40*, 80-100.

157. Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. "Local segmental dynamics and stresses in polystyrene-C₆₀ mixtures" *Macromolecules* **2014**, *47*, 387-404.
158. Theodorou, D.N.; Vogiatzis, G.G.; Kritikos, G. "Self-consistent field study of adsorption and desorption kinetics of polyethylene melts on graphite and comparison with atomistic simulations" *Macromolecules* **2014**, *47*, 6964-6981.
159. Moorthi, K.; Kamio, K.; Ramos, J.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo simulations of structure and entanglements in polymer melts" *Molecular Simulation* **2014**, <http://dx.doi.org/10.1080/08927022.2014.931583>
160. Skountzos, E. N.; Anastasiou, A.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N. "Determination of the mechanical properties of a poly(methyl methacrylate) nanocomposite with functionalized graphene sheets through atomistic simulations" *Macromolecules* **2014**, *47*, 8072-8088.
161. Ziogos, O.G.; Theodorou, D.N. "Molecular dynamics simulations of alkyl substituted nanographene crystals" *Molec. Phys.* **2015**, *113*, 2776-2790.
162. Mathioudakis, I.G.; Vogiatzis, G.G.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "Molecular modeling and simulation of polymer nanocomposites at multiple length scales" *IEEE Trans. on Nanotech.* **2016**, *15*, 416-422.
163. Romanos, N.A.; Theodorou, D.N. "Melting point and solid-liquid coexistence properties of α_1 isotactic polypropylene as functions of its molar mass: A molecular dynamics study" *Macromolecules* **2016**, *49*, 4663-4673.
164. Kolokathis, P.D.; Kali, G.; Jovic, H.; Theodorou, D.N. "Diffusion of aromatics in silicalite-1: Experimental and Theoretical Evidence for Entropic Barriers" *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 21410-21426.
165. Mathioudakis, I.G.; Vogiatzis, G.G.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "Multiscale simulations of PS-SiO₂ nanocomposites: from melt to glassy state" *Soft Matter* **2016**, *12*, 7585-7605.
167. Vogiatzis, G.G.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. "Equation of state based slip spring model for entangled polymer dynamics" *Macromolecules* **2017**, *50*, 3004-3029.
168. Liossi, A.S.; Ntountaniotis, D.; Kellici, T.F.; Chatziathanasiadou, M.V.; Megariotis, G.; Mania, M.; Becker-Baldus, J.; Kriechbaum, M.; Krajnc, A.; Christodoulou, E.; Glaubitz, C.; Rappolt, M.; Amenitsch, H.; Mali, G.; Theodorou, D.N.; Valsami, G.; Pitsikalis, M.; Iatrou, H.; Tzakos, A.G.; Mavromoustakos, T. "Exploring the interactions of irbesartan and irbesartan-2-isopropyl β -cyclodextrin complex with model membranes" *Biochim. Biophys. Acta* **2017**, *1859*, 1089-1098.
169. Tzounis, P.-N.; Anogiannakis, S.; Theodorou, D.N. "General methodology for estimating the stiffness of polymer chains from their chemical constitution: A single unperturbed chain Monte Carlo algorithm" *Macromolecules* **2017**, *50*, 4575-4587.
170. Sgouros, A.P.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. "Slip-spring model for the linear and nonlinear viscoelastic properties of molten polyethylene derived from atomistic simulations" *Macromolecules* **2017**, *50*, 4524-4541.

171. Sgouros, A.P.; Vogiatzis, G.G.; Kritikos, G.; Boziki, A.; Nikolakopoulou, A.; Liveris, D.; Theodorou, D.N. "Molecular simulations of free and graphite capped polyethylene films: Estimation of the interfacial free energies" *Macromolecules* **2017**, *50*, 8827-8844.
172. Galata, A.A.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. "Thermodynamic analysis of Lennard-Jones binary mixtures using Kirkwood-Buff theory" *Fluid Phase Equilibria* **2018**, *470*, 25-37.
173. Ziogos, O.G.; Konstantinopoulos, S.; Tsetseris, L.; Theodorou, D.N. "Computational studies of nanographene systems: Extended discotics, covalently linked 'Supermolecules,' and functionalized supramolecular assemblies" *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 18715-18731.
174. Tzounis, P.-N.; Argyropoulou, D.V.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. "Tacticity effect on the conformational properties of polypropylene and poly(ethylene-propylene) copolymers" *Macromolecules* **2018**, *51*, 6878-6891.
175. Megariotis, G.; Vogiatzis, G.G.; Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Slip-Spring Based Mesoscopic Simulations of Polymer Networks: Methodology and the Corresponding Computational Code" *Polymers* **2018**, *10*, 1156.
176. Sgouros, A.P.; Lakkas, A.T.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. "Mesoscopic Simulations of Free Surfaces of Molten Polyethylene: Brownian Dynamics/Kinetic Monte Carlo Coupled with Square Gradient Theory and Compared to Atomistic Calculations and Experiment" *Macromolecules* **2018**, *51*, 9798-9815.
177. Chatzieleftheriou, S.; Anogiannakis, S.; Theodorou, D.N.; Lagaros, N.D. "SIMNANO: A Trust Region Strategy for Large Scale Molecular Systems Energy Minimization Based on Exact Second-Order Derivative Information". *J. Chem. Inf. Model.* **2019**, *59*, 190-205.
178. Petris, P. C.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. "Thermodynamic Analysis of n-Hexane–Ethanol Binary Mixtures Using the Kirkwood-Buff Theory". *J. Phys. Chem. B.* **2019**, *123*, 247-257.
179. Kallivokas, S.V.; Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics Simulations of EPON-862/DETDA Epoxy Networks: Structure, Topology, Elastic Constants, and Local Dynamics". *Soft Matter* **2019**, *15*, 721-733.
180. Lakkas, A.T.; Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Self-Consistent Field Theory Coupled with Square Gradient Theory of Free Surfaces of Molten Polymers and Compared to Atomistic Simulations and Experiment" *Macromolecules* **2019**, *52*, 5337-5356.
181. Sgouros, A.P.; Vogiatzis, G.G.; Megariotis, G.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "Multiscale simulations of graphite-capped polyethylene melts: Brownian dynamics/kinetic Monte Carlo compared to atomistic simulations and experiment" *Macromolecules* **2019**, *52*, 7503-7523.
182. Anogiannakis, S.D.; Petris, P.C.; Theodorou, D.N. "Promising Route for the Development of a Computational Framework for Self-Assembly and Phase Behavior Prediction of Ionic Surfactants Using MARTINI" *J. Phys. Chem. B* **2019**, *52*, 7503-7623.
183. Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Atomistic simulations of long-chain polyethylene melts flowing past gold surfaces: structure and wall-slip" *Molec. Phys.* **2020**, *118*, e1706775.

184. Nieto Simavilla, D.; Sgouros, A.P.; Vogiatzis, G.G.; Tzoumanekas, C.; Georgilas, V.; Verbeeten, W. M. H.; Theodorou, D.N. “Molecular Dynamics Test of the Stress-Thermal Rule in Polyethylene and Polystyrene Entangled Melts” *Macromolecules* **2020**, *53*, 789-802.
185. Vogiatzis, G.G.; Van Breemen, L.C.A.; Theodorou, D.N.; Hütter, M. “Free energy calculations by molecular simulations of deformed polymer glasses” *Comp. Phys. Commun.* **2020**, *249*, 107008.
186. Ricci, E.; Vergadou, N.; Vogiatzis, G.G.; De Angelis, M.G.; Theodorou, D.N. “Molecular Simulations and Mechanistic Analysis of the Effect of CO₂ Sorption on Thermodynamics, Structure, and Local Dynamics of Molten Atactic Polystyrene” *Macromolecules* **2020**, *53*, 3669-3689.
187. Kallivokas, S.V.; Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. “Kinetic concepts and local failure in the interfacial shear strength of epoxy-graphene nanocomposites” *Phys. Rev. E* **2020**, *102*, 030501.
188. Romanos, N.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. “Molecular dynamics simulations of stretch-induced crystallization in layered polyethylene” *Polymer Crystallization* **2021**, *4*, e10172.
189. Lakkas, A.T.; Sgouros, A.P.; Revelas, C.J.; Theodorou, D.N. “Structure and thermodynamics of grafted silica/polystyrene dilute nanocomposites investigated through self-consistent field theory” *Soft Matter* **2021**, *17*, 4077-4097.
190. Sgouros, A.P.; Revelas, C.J.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. “Potential of Mean Force between Bare or Grafted Silica/Polystyrene Surfaces from Self-Consistent Field Theory” *Polymers* **2021**, *13*, 1197.
191. Sgouros, A.P.; Knippenberg, S.; Guillaume, M.; Theodorou, D.N. “Multiscale simulations of polyelectrolytes in aqueous bulk solutions and brush array configurations” *Soft Matter* **2021**, *17*, 10873-10890.
192. Revelas, C.J.; Sgouros, A.P.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. “RuSseL: A Self-Consistent Field Theory Code for Inhomogeneous Polymer Interphases” *Computation* **2021**, *9*, 57.
193. Sgouros, A.P.; Tsagkalakis, D.; Theodorou, D.N. “Effect of Surface Nanopatterning on Slip: The Case of Couette Flow of Long-Chain Polyethylene Melt Flowing past Gold Surfaces” *J. Phys. Chem.* **2021**, *125*, 6681-6696.
194. Megariotis, G.; Romanos, N.; Avramopoulos, A.; Mikaelian, G.; Theodorou, D.N. “In silico study of levodopa in hydrated lipid bilayers at the atomistic level” *J. Mol. Graph. Model.* **2021**, *107*, 107972.
195. Sigalas, N.I.; Anogiannakis, S.A.; Theodorou, D.N.; Lyulin, A.V. “A coarse-grained model for capturing the helical behavior of isotactic polypropylene” *Soft Matter* **2022**, *18*, 3076-3086.
196. Venetsanos, F.; Anogiannakis, S.; Theodorou, D.N. “Mixing thermodynamics and Flory-Huggins interaction parameter of polyethylene oxide/polyethylene oligomeric blends from Kirkwood-Buff theory and molecular simulations” *Macromolecules* **2022**, *55*, 4852-4862.

197. Megariotis, G.; Mikaelian, G.; Avramopoulos, A.; Romanos, N.; Theodorou, D.N. "Molecular simulations of fluoxetine in lipid bilayers, as well as in aqueous solutions containing β -cyclodextrin" *J. Molec. Graph. Model.* **2022**, *117*, 108305.
198. Sgouros, A.P.; Revelas, C.J.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. "Solvation free energy of dilute grafted nanoparticles in polymer melts via self-consistent field theory" *J. Phys. Chem. B* **2022**, *126*, 7454-7474.
199. Revelas, C.J.; Sgouros, A.P.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. "Addressing Nanocomposite Systems via 3D-SCFT: Assessment of Smearing Approximation and Irregular Grafting Distributions" *Macromolecules* **2023**, *56*, 1731-1746.
200. Vogiatzis, G.G.; van Breemen, L.C.A.; Hütter, M.; Theodorou, D.N.; "Network dynamics: A computational framework for the simulation of the glassy state" *Mol. Syst. Des. Eng.* **2023**, *8*, 1013-1029.
201. Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Addressing the Folding of Intermolecular Springs in Particle Simulations: Fixed Image Convention" *Computation* **2023**, *11*, 106.
202. Sgouros, A.P.; Drougkas, E.; Kallivokas, S.V.; Theodorou, D.N. "Buckling kinetics of graphene membranes under uniaxial compression" *Phys. Rev. E* **2024**, *109*, L023001.
203. Mikaelian, G.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. "Interactions of a novel anthracycline with oligonucleotide DNA and cyclodextrins in an aqueous environment" *J. Phys. Chem. B* **2024**, *128*, 6291-6307.
204. Sgouros, A.P.; Theodorou, D.N. "Development of a meshless kernel-based scheme for particle-field Brownian Dynamics simulations" *J. Phys. Chem. B* **2024**, *128*, 6907-6921.
205. Gerakinis, D.P.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. "Equilibration of linear polyethylene melts with pre-defined molecular weight distributions employing united atom Monte Carlo simulations" *J. Chem. Phys.* **2024**, *161*, 044901. [προσκεκλημένο άρθρο για ειδική συλλογή "Monte Carlo methods, 70 years after Metropolis et al. (1953)"]
206. Anogiannakis, S.; Venetsanos, F.; Theodorou, D.N. "Simulating stretch-induced crystallization of polyethylene films: Strain rate and temperature effect on the kinetics and morphology" *Macromolecules* **2024**, *57*, 7331-7346.
207. Revelas, C.J.; Sgouros, A.P.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. "Tailoring nanoparticle orientation in polymer matrices via nonuniform grafting: Implications for nanoparticle dispersions and self-assembled nanocomposite morphologies" *ACS Appl. Nano Mater.* **2024**, *7*, 19329-19340.
208. Sigalas, N.I.; van Kraaij, S.A.T.; Venetsanos, F.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N.; Lyulin, A.V. "Measuring oxygen solubility in amorphous and semicrystalline polyolefins using test particle insertion: A comparative study of polyethylene and isotactic polypropylene" *J. Phys. Chem. B* **2024**, *128*, 9284-9296.
209. Theodorou, D.N. "Simple model for the fracture of a polymer chain: single-bond potential of mean force and tension-based rate constants for chain rupture" *J. Chem. Phys.* **2024**, in press.

B. Κεφάλαια σε Βιβλία, Άρθρα ανασκόπησης, Editorials

1. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Molecular Mechanics Simulation of Glassy Polymers at Interfaces", in *Computer Simulation of Polymers*; Roe, R.-J., Ed; Prentice-Hall: Englewood Cliffs, 1991; pp 122-140.
2. Theodorou, D.N. "Molecular and Computer Modeling of Polymer Surfaces and Polymer/Solid Interfaces", in *Physics of Polymer Surfaces and Interfaces*; Sanchez, I.C., Ed; Butterworth-Heinemann, Boston and Manning, Greenwich, CT, 1992; pp 139-162.
3. Theodorou, D.N. "Modeling of Polymer Structure and Properties", in *Encyclopedia for Advanced Materials*; Bloor, D.; Brook, R.J.; Flemings, M.C.; Mahajan, S., Eds; Pergamon Press: Oxford, 1994.
4. Dodd, L.R.; Theodorou, D.N. "Atomistic Monte Carlo Simulation and Continuum Mean Field Theory of the Structure and Equation of State Properties of Alkane and Polymer Melts", in *Atomistic Modeling of Physical Properties*; Monnerie, L.M.; Suter, U.W., Eds.; Advances in Polymer Science No 116; Springer-Verlag: Berlin, 1994; pp 249-281.
5. Theodorou, D.N. "Molecular Simulations of Sorption and Diffusion in Amorphous Polymers", in *Diffusion in Polymers*; Neogi, P., Ed; Marcel Dekker, 1996; pp 67-142.
6. Theodorou, D.N. "Symposium in Print on Molecular Modeling", Editorial. *Chem.Eng.Sci.* **1994**, 49, 2715-2716.
7. Theodorou, D.N.; Snurr, R.Q.; Bell, A.T. "Molecular Dynamics and Diffusion in Microporous Materials", in *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Volume 7; Alberti, G. and Bein, T., Eds; Elsevier Science: Oxford, 1996; pp 507-548.
8. Bell, A.T.; Maginn, E.J.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulation of Adsorption and Diffusion in Zeolites", in *Handbook of Heterogeneous Catalysis*; Ertl, G.; Knözinger, H.; Weitkamp, J., Eds; VCH: Weinheim, 1997; Vol. 3, pp 1165-1188.
9. Theodorou, D.N. "Transition-state theory investigations of small molecule diffusion in glassy polymers", in *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*; Berne, B.J.; Ciccotti, G.; Coker, D.F., Eds; World Scientific: Singapore, 1998; pp 211-249.
10. Uhlherr, A.; Theodorou, D.N. "Hierarchical simulation approach to structure and dynamics of polymers" *Current Opinion in Solid State and Materials Science* **1998**, 3, 544-551.
11. Rutledge, G.C.; Theodorou, D.N. "Interdisciplinary Workshop on Molecular Modeling of Polymers," Preface, *Macromol. Symp.* **1998**, 133, 1-112
12. Theodorou, D.N. "Hierarchical Modeling of Polymers," SIMU Program Newsletter, Issue 1, Spring 2000, p 19-40. <http://simu.ulb.ac.be/newsletters/newsletter.html>
13. Theodorou, D.N. "Variable Connectivity Monte Carlo Algorithms for the Atomistic Simulation of Long-Chain Polymer Systems". In Nielaba, P. ; Mareschal, M. ; Ciccotti, G. (editors), *Bridging Time Scales : Molecular Simulations for the Next Decade*; Lecture Notes in Physics **605**; Springer-Verlag : Berlin, 2002 ; pp 67-127.
14. Theodorou, D.N. "Polymers at Surfaces and Interfaces", in *Computer Simulations of Surfaces and Interfaces*; Dünweg, B.; Landau, D.P.; Milchev, A., Eds.; Kluwer Academic Publishers

- (NATO Science Series II/114): Dordrecht, 2003; pp 329-419.
15. Theodorou, D.N. "Understanding and predicting structure-property relations in polymeric materials through molecular simulations" *Mol. Phys.* **2004**, *102*, 147-166.
 16. Theodorou, D.N. "Multiscale Modeling of Polymers", perspective 15 in *Handbook of Materials Modeling. Volume I: Methods and Models*; Yip, S., Ed.; Springer, 2005, pp 2757-2761.
 17. Theodorou, D.N. "Principles of molecular simulation of gas transport in polymers", in *Materials Science of Membranes for Gas and Vapor Separation*; Yampolskii, Yu.; Pinnau, I.; Freeman, B.D., Eds.; John Wiley: Hoboken, NJ, 2006; pp 49-94.
 18. Theodorou, D.N. "Hierarchical modeling of amorphous polymers", *Comp. Phys. Commun.* **2005**, *169*, 82-88.
 19. Theodorou, D.N. "Equilibration and coarse-graining methods for polymers", in *Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology*; Lecture Notes in Physics; Ferrario, M., Ciccotti, G., Binder, K., Eds.; Springer: Berlin, 2006, pp 419-448.
 20. Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. "Computer Simulation of Sorption and Transport in Zeolites", in *Handbook of Heterogeneous Catalysis*, 2nd Edition; Ertl, G.; Knözinger, H.; Schüth, F.; Weitkamp, J.; Eds.; Wiley-VCH: Weinheim, 2008; Chapter 5.5.2, pp 1662-1676.
 21. Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. "From atomistic simulations to slip-link models of entangled polymer melts: Hierarchical strategies for the prediction of rheological properties", *Current Opinion in Solid State and Materials Science* **2006**, *10*, 61-72.
 22. Jobic, H.; Theodorou, D.N. "Quasi-elastic neutron scattering and molecular dynamics simulation as complementary techniques for studying diffusion in zeolites" *Microp. Mesop. Mater.* **2007**, *102*, 21-50.
 23. Theodorou, D.N. "Hierarchical modeling of polymeric materials" *Chem. Eng. Sci.* **2007**, *62*, 5697-5714.
 24. Stallmach, F.; Snurr, R.Q.; Stöcker, M.; Theodorou, D.N. "Diffusion in Micropores", Editorial, *Microp. Mesop. Mater.* **2009**, *125*, 1-2.
 25. Theodorou, D.N. "Progress and outlook in Monte Carlo Simulations" *Ind. Eng. Chem. Res.* **2010**, *49*, 3047-3058.
 26. Theodorou, D.N. "Tracking the Dynamics of Systems Evolving through Infrequent Transitions in a Network of Discrete States", in *Hierarchical Methods for Dynamics in Complex Molecular Systems*; Grotendorst, J.; Sutmann, G.; Gompfer, G.; Marx, D.; Eds.; Schriften des Forschungszentrums Jülich, IAS Series Volume 10: Jülich, 2012; pp 347-389.
 27. Biggs, M.J.; Theodorou, D.N. "2013 Danckwerts special issue on molecular modelling in chemical engineering" (Editorial), *Chem. Eng. Sci.* **2015**, *121*, 1-2.
 28. Kärger, J.; Caro, J.; Cool, P.; Coppens, M.-O.; Jones, D.; Kapteijn, F.; Rodriguez-Reinoso, F.; Stöcker, M.; Theodorou, D.; Vansant, E.F.; Weitkamp, J. "Benefit of microscopic diffusion measurement for the characterization of nanoporous materials" *Chem. Eng. Tech.* **2009**, *32*, 1494-1511.

29. Papadopoulos, K.G.; Theodorou, D.N. “Hierarchical simulations of diffusion in zeolites,” in *Diffusion Fundamentals : Leipzig 2005*, Kärger, J.; Grinberg, F.; Heitjans, P.; Eds.; Leipziger Universitätsverlag, 2005; pp 80-104.
30. Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. “Multiscale molecular simulations of polymer-matrix nanocomposites, or What molecular simulations have taught us about the fascinating nanoworld” *Arch. Computat. Methods Engin.* **2018**, 25, 591-645.
31. Vergadou, N.; Theodorou, D.N. “Molecular Modeling Investigations of Sorption and Diffusion of Small Molecules in Glassy Polymers” *Membranes* **2019**, 9, 98.
32. Alexiadis, O.; Cheimarios, N.; Peristeras, L.D.; Bick, A.; Mavrantzas, V.G.; Theodorou, D.N.; Hill, J.-R.; Krokidis, X. “Chameleon: A generalized, connectivity-altering software for tackling the properties of realistic polymer systems” *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science* **2019**, 9, e1414.
33. Theodorou, D.N. “Autobiography of Doros N. Theodorou”, *J. Phys. Chem. B* **2023**, 127, 2643-2648.

C. Βιβλία, Διδακτικές Σημειώσεις, Τόμοι Πρακτικών Συνεδρίων

1. *Applied Molecular Theory for Chemical Engineers* (με τον Arup K. Chakraborty), διδακτικές σημειώσεις, U.C. Berkeley, 1993.
2. *Φυσικοχημεία Πολυμερών*, διδακτικές σημειώσεις, Πανεπιστήμιο Πατρών, 1999.
3. *Simulation Methods for Polymers* (co-edited with Michael J. Kotelyanskii), Marcel Dekker, 2004, ISBN: 0-8247-0247-6.
4. *Diffusion Fundamentals III – Athens 2009* (co-edited with Christian Chmelik, Nick Kanellopoulos, and Jörg Kärger), Leipziger Universitätsverlag, 2009, ISBN: 978-3-86583-387-7.
5. *Diffusion in Nanoporous Materials*, σε 2 τόμους (με τους Jörg Kärger και Douglas M. Ruthven), Wiley-VCH, 2012, ISBN: 978-3-527-31024-1.
6. *Algebraic Modeling of Topological and Computational Structures and Applications*, THALES, Athens, Greece, July 1-3, 2015 (co-edited with Sofia Lambropoulou, Petros Stefaneas, and Louis H. Kauffmann), Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, Springer International Publishing AG, 2017, ISBN 978-3-319-68102-3.

D. Πεπραγμένα Συνεδρίων, Ερευνητικές Αναφορές

1. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. “Molecular Structure of a Vinyl Polymer Glass” *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1984**, 25(1), 180.
2. Theodorou, D.N.; Suter, U.W. “Local Structure and the Response of a Polymeric Glass to Elastic Deformation” *Polym.Prepr., Am. Chem. Soc., Div. Polym. Chem.* **1985**, 26(2), 74-76.

3. Theodorou, D.N.; Ludovice, P.J.; Suter, U.W. "Detailed Modeling of Structure and Deformation of Glassy Polymers", in *Scattering, Deformation and Fracture in Polymers*; Crist, B.; Russell, T.P.; Wignall, G.D., Eds; Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol.79; Materials Research Society: Pittsburgh, Pennsylvania, 1987; p 387-396.
4. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulation of Glassy Polymer Surfaces" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1988**, 29(2), 402-403.
5. Theodorou, D.N. "Molecular Thermodynamics of Polymer Melts at Interfaces", LBL Report No 26018, September 1988.
6. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Molecular Modeling of Polymers at Interfaces" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1989**, 30(2), 76-77.
7. Mansfield, K.F.; Theodorou, D.N. "Molecular Dynamics of a Glassy Polymer Film" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1992**, 33(1), 691-692.
8. Dodd, L.R.; Theodorou, D.N. "Thermodynamic Properties of Alkanes and Polyethylene: Continuum Mean Field Theory and Monte Carlo Simulation" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1992**, 33(1), 645-646.
9. Boone, T.D.; Theodorou, D.N. "Monte Carlo Simulation of Bulk Glassy Polymers and Penetrant Sorption" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1992**, 33(1), 513-514.
10. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Geometric Analysis of Diffusion Paths in Glassy Polymers" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1992**, 33(1), 689-690.
11. Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Applications of Molecular Dynamics and Transition State Theory to the Simulation of Diffusion in Zeolites", in *Computer-Aided Innovation of New Materials II*; Doyama, M.; Kihara, J.; Tanaka, M.; Yamamoto, R., Eds.; Elsevier: Amsterdam, 1993; pp 991-996.
12. Snurr, R.Q.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Molecular Simulations of Low Occupancy Adsorption of Aromatics in Silicalite", in *Proceedings of the 9th International Zeolite Conference, Montreal 1992*; von Ballmoos, R; Higgins, J.G.; Treacy, M.M.J., Eds.; Butterworth-Heinemann: Stoneham, 1993; pp 71-78.
13. Theodorou, D.N. "Molecular Modeling of the Interfacial Behavior of Amorphous Polymers: A Method for the Simulation of Fracture of Polymer/Polymer Interfaces", in *ANTEC 93 Conference Proceedings, New Orleans, May 9-13, 1993*; Society of Plastics Engineers, 1993; Vol. III, pp 3094-3096.
14. Pant, P.V.K.; Theodorou, D.N. "A Strategy for Atomistic Monte Carlo Simulation of Polydisperse Polymer Systems" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1994**, 35(1), 165-166.
15. Maginn, E.J.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Low-Occupancy Sorption Thermodynamics of Long Alkanes in Silicalite Via Molecular Simulation", in *Zeolites and Related Microporous Materials: State of the Art 1994*; Weitkamp, J.; Karge, H.G.; Pfeifer, H.; Hölderich, W., Eds.; Studies in Surface Science and Catalysis, vol. 84; Elsevier Science B.V.: Amsterdam, 1994; pp 2099-2105.

16. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Description of Small Penetrant Jump Motions in a Polymer Glass Using Transition-State Theory", *Polymeric Materials: Science and Engineering* **1994**, 71, 407-408.
17. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. "Distribution of Jump Rate Constants Underlying Methane Diffusion in Glassy Atactic Polypropylene as Calculated With Transition-State Theory" *Polym.Prepr., Am.Chem.Soc., Div.Polym.Chem.* **1995**, 36, 687-688.
18. Maginn, E.J.; Snurr, R.Q.; Bell, A.T.; Theodorou, D.N. "Simulation of Hydrocarbon Diffusion in Zeolites", in *Progress in Zeolite and Microporous Materials*; Chon, H.; Ihm, S.-K.; Uh, Y.S., Eds.; Studies in Surface Science and Catalysis, vol. 105C; Elsevier Science B.V.: Amsterdam, 1997; pp 1851-1858.
19. Gaub, M.; Fritzsche, S.; Haberlandt, R.; Theodorou, D.N. "Transport and Self-Diffusion Coefficients in Zeolites: an MD Study" *Proceedings of the 12th International Zeolite Conference*, Baltimore, MD 1998. M.M. Treacy, B.K. Marcus, M.E. Bisher, J.B. Higgins, Eds. Materials Research Society: Warrendale, 1999; pp 371-378.
20. Gergidis, L.N.; Theodorou, D.N.; Jobic, H. "Dynamics of Alkane Mixtures in Silicalite Pores" *Proceedings of International workshop on Dynamics in Confinement*, Grenoble, France, Jan 26-29, 2000. B. Frick, R. Zorn, H. Büttner, Eds. *J. Phys. IV France* **2000**, 10, Pr7 143-146.
21. Theodorou, D.N. "Mobility of young researchers across Europe: Experiences from Participation in the TMR program" *Proceedings of the European Commission conference 'Investing in Europe's Human Research Potential' (4-7 October 2000, Crete, Greece)*, EU publication, Research Directorate - General, pp 48-52.
22. Theodorou, D.N. "Modeling Structure and Adhesion at Polymer/Polymer Interfaces", *Proceedings of the International Symposium on Chain Molecules at Interfaces: Self-consistent Field Theory and Experiment*, Wageningen, The Netherlands, August 2002, pp 52-54.
23. Peristeras, L.D.; Economou, I.G.; Theodorou, D.N. "Elementary Moves in Monte Carlo Simulation of Linear and Branched Polyolefins", poster presentation, *proceedings of the 19th European Seminar on Applied Thermodynamics*, Santorini, Greece, Sept. 2002, pp 169-172.
24. Raptis, V.E.; Melissas, V.E.; Economou, I.E.; Theodorou, D.N.; Sanopoulou, M.; Petrou, J.; Petropoulos, J.H.; Finkelshtein, E.Sh.; Alentiev, A.; Yampolskii, Y.P. "Development of Novel Polymeric Membranes for Natural Gas Hydrocarbon Separation Through Experimental Measurements, Quantum Mechanics, Molecular Simulation and Macroscopic Modeling", poster presentation, *proceedings of the 19th European Seminar on Applied Thermodynamics*, Santorini, Greece, September 2002, pp 173-177.
25. Jobic, H.; Makrodimitris, K.; Papadopoulos, G.K.; Schober, H.; Theodorou, D.N. "Diffusivities of CO₂ and N₂ in silicalite, comparison between quasielastic neutron scattering and molecular simulations", in *Recent Advances in the Science and Technology of Zeolites and Related Materials*, vol. 154(A-C); van Steen, E.; Callanan, L.H.; Claeys, M., Eds.; Studies in Surface Science and Catalysis, vol. 154(A-C); Elsevier: Amsterdam, 2004; pp 2056-2061
26. Λογοθέτη, Ε.Γ., Θεοδώρου, Θ. «Υπολογιστική πρόβλεψη ιδιοτήτων τηγμάτων πολυπροπυλενίου», Πρακτικά 5^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2005, σελ. 153-156.

27. Τζουμανέκας, Χ., Θεοδώρου Θ. «Τοπολογική ανάλυση διαπλοκών σε πολυμερικά τήγματα», Πρακτικά 5^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2005, σελ. 277-280.
28. Νταουλάς, Κ., Θεοδώρου, Θ., Roos, A., Creton, C. «Πρόβλεψη ιδιοτήτων αυτό-συγκολλητικών υλικών βασισμένων σε αδρομερή συμπολυμερή στυρενίου με μεθόδους αυτοσυνεπούς μέσου πεδίου», Πρακτικά 5^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Εκδόσεις Τζιόλα, Θεσσαλονίκη, 2005, σελ. 269-272.
29. Theodorou, D.N. “Hierarchical Simulations of Polymeric Materials”, *Abstr. Pap. Chem. Soc.* 230: 191 – PMSE, 2005.
30. Βέργαδου, Ν., Θεοδώρου, Δ.Ν. «Μοριακή προσομοίωση για την πρόβλεψη της διαπερατότητας υαλωδών πολυμερών από αέρια», Πρακτικά 6^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, ΕΜΠ, Αθήνα, 2007, σελ. 149-152.
31. Τσαλίκης, Δ., Περιστεράς, Λ., Μπουλουγούρης, Γ., Θεοδώρου, Δ. «Υπολογιστική μελέτη των δυναμικών ιδιοτήτων υαλωδών πολυμερών με χρήση της εικόνας των εγγενών δομών», Πρακτικά 6^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, ΕΜΠ, Αθήνα, 2007, σελ.153-156.
32. Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. “Mesoscopic Simulations of the Diffusivity of Ethane in Beds of NaX Zeolite Crystals: Comparison with Pulsed Field Gradient NMR Measurements”, Πρακτικά 6^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, ΕΜΠ, Αθήνα, 2007, σελ. 285-287.
33. Τσαλίκης, Δ., Περιστεράς, Λ., Μπουλουγούρης, Γ., Θεοδώρου, Δ. «Στρατηγικές παράλληλου προγραμματισμού στον υπολογισμό σαγματικών σημείων σε πολυδιάστατες δυναμικές επιφάνειες», Πρακτικά 6^{ου} Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, ΕΜΠ, Αθήνα, 2007, σελ. 1305-1308.
34. Greenfield, M.L.; Theodorou, D.N. “Structure, Rate, and Mechanism of Methane Diffusion in Glassy Atactic Polypropylene”, *Polymeric Materials: Science and Engineering* **1997**, 76, 429-430.
35. Vergadou, N.; Theodorou, D.N. “Microscopic Diffusion Mechanism of CO₂ in a Glassy Amorphous Polymer Matrix”, *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 11.
36. Pantatosaki, E.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, DN. “Simulation Studies of CH₄, CO₂, H₂, and D₂ in FAU and MWW Framework Type Zeolites”, *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 35.
37. Sant, M.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. “Diffusion via the Space Discretization (DSD) Method to Study the Concentration Dependence of Self-Diffusion under Confinement” *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 37.
38. Tsalikis, D.; Lempesis, N.; Boulougouris, G.C.; Theodorou, D.N. “Energy Landscape-Based Study of Atomic Displacements in Glass Forming Materials” *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 65.
39. Pantatosaki, E.; Papadopoulos, G.K.; Jobic, H.; Theodorou, D.N. “A Combined Atomistic Simulation and Quasielastic Neutron Scattering Study of the Low-Temperature Dynamics of Hydrogen and Deuterium Confined in NaX Zeolite”, *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 96.

40. Pazzona, F.G.; Sant, M.; Pantatosaki, E.; Papadopoulos, G.K.; Theodorou, D.N. “Analysis of Argon Diffusion in Zeolite Imidazolate Framework-8: Preliminary Calculations”, *diffusion-fundamentals.org* **2009**, 11, 97.
41. Kolokathis, P.D.; Theodorou, D.N. “Computing diffusivities in spatially periodic media from the rate constants of elementary jumps between sorption sites: Master Equation Solution by Recursive Reduction of Dimensionality”, *AIChE Annual Meeting Conference Proceedings* **2012**, paper 278a.
42. Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. “Chain conformations in polymer nanocomposites: A Field Theory-inspired Monte Carlo simulation approach”, *AIChE Annual Meeting Conference Proceedings* **2012**, paper 709a.
43. Moorthi, K.; Kamio, K.; Ramos, J.; Theodorou, D.N. “Structure and entanglements in short chain branched polyolefin melts”, *AIP Conference Proceedings* **2013**, 1518, 455-458.
44. Anogiannakis, S.D.; Tzoumanekas, C.; Georgilas, V.; Theodorou, D.N. “Molecular Modelling of Deformation and Fracture in Polymer Networks”, Proceedings of the 16th International Conference on Deformation, Yield, and Fracture of Polymers (DYFP2015), Rolduc, Kerkrade, The Netherlands, March/April 2015.
45. Ziogos, O.G.; Theodorou, D.N. “Structural and dynamical properties of nanographene molecular wires: A molecular dynamics study”, *IEEE 15th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO)* **2015**, 817-820.
46. Koutsoumaris, C.C.; Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N.; Tsamasphyros, G.J. “Application of bi-Helmholtz nonlocal elasticity and molecular simulations to the dynamical response of carbon nanotubes”, *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2015 (ICCMSE 2015)*, *AIP Conf. Proc.* **2015**, 1702, 190011.
47. Megariotis, G.; Ziogos, O.G.; Theodorou, D.N. “Multiscale simulations of hexa-peri-hexabenzocoronene and hexa-n-dodecyl-hexa-peri-hexabenzocoronene” *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2015 (ICCMSE 2015)*, *AIP Conf. Proc.* **2015**, 1702, 190010.
48. Megariotis, G.; Vogiatzis, G.G.; Schneider, L.; Müller, M.; Theodorou, D.N. “Mesoscopic simulations of crosslinked polymer networks” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, 738, 012063.
49. Kritikos, G.; Sgouros, A.; Vogiatzis, G.G.; Theodorou, D.N. “Molecular dynamics study of polyethylene under extreme confinement” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, 738, 012012.
50. Mathioudakis, I.; Vogiatzis, G.G.; Tzoumanekas, C.; Theodorou, D.N. “Molecular modeling and simulation of atactic polystyrene/amorphous silica nanocomposites” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, 738, 012021.
51. Ziogos, G.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. “Atomistic and coarse-grained simulations of hexabenzocoronene crystals” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, 738, 012019.
52. Romanos, N.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. “Molecular dynamics simulations of polyethylene bilayers” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2021**, 1730, 012039.

53. Evangelou, N.; Megariotis, G.; Sgouros, A.P.; Vogiatzis, G.G.; Romanos, N.A. “Coarse-grained simulations of bidisperse polymer melts” *AIP Conference Proceedings* **2021**, 2343, 130008.
54. Philippas, A.P.; Sgouros, A.P.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. “Mesoscopic simulations of star polyethylene melts at equilibrium and under steady flow” *AIP Conference Proceedings* **2021**, 2343, 130003.
55. Revelas, C.J.; Sgouros, A.P.; Lakkas, A.T.; Theodorou, D.N. “A three-dimensional finite element methodology for addressing heterogeneous polymer systems with simulations based on self-consistent field theory” *AIP Conference Proceedings* **2021**, 2343, 130002.
56. Megariotis, G.; Romanos, N.A.; Theodorou, D.N. “Molecular simulations of dopamine in a lipid bilayer” *AIP Conference Proceedings* **2021**, 2343, 130007.
57. Venetsanos, F.; Anogiannakis, S.D.; Theodorou, D.N. “Thermodynamic analysis of oligomeric blends by applying the Kirkwood-Buff theory of solutions” *J. Phys: Conf. Ser.* **2021**, 2090, 012079.
58. Nasikas, D.; Ricci, E.; Giannakopoulos, G.; Karkaletsis, V.; Theodorou, D.N.; Vergadou, N. “Investigation of machine learning-based coarse-grained schemes for organic molecules” SETN 2022, September 07-09, Corfu, Greece, Association for Computing Machinery 2022, <https://doi.org/10.1145/3549737.3549792>.
59. Ricci, E.; Giannakopoulos, G.; Karkaletsis, V.; Theodorou, D.N.; Vergadou, N. “Developing machine-learned potentials for coarse-grained molecular simulations: challenges and pitfalls” SETN 2022, September 07-09, Corfu, Greece, Association for Computing Machinery 2022, <https://doi.org/10.1145/3549737.35497923>.
60. Mikaelian, G.; Megariotis, G.; Theodorou, D.N. “Molecular simulations of doxorubicin complexed with native and modified cyclodextrins in water” *J. Phys.: Conf. Ser.* **2024**, 2701, 012007.

BIBΛIOMETPIKA ΔΕΔΟΜΕΝΑ (30 Οκτωβρίου 2024)

ORCID <https://orcid.org/0000-0002-4763-9739>

Scopus <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7005515056>
 267 έγγραφα, 15183 αναφορές, δείκτης h = 63
 13833 αναφορές, δείκτης h = 60 αποκλεισμένων των αυτοαναφορών

Google Scholar <https://scholar.google.gr/citations?user=leOswz4AAAAJ&hl=el>
 21803 αναφορές, δείκτης h = 75

Παρουσιάσεις 166 ομιλίες κατόπιν προσκλήσεως σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια,
 102 προσκεκλημένες ομιλίες σε πανεπιστήμια και εθνικά ερευνητικά εργαστήρια,
 31 προσκεκλημένες ομιλίες σε ερευνητικά εργαστήρια της βιομηχανίας,
 157 συμμετοχές κατόπιν υποβολής σε επιστημονικά συνέδρια.

ΠΡΩΗΝ ΜΕΛΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗΣ ΟΜΑΔΑΣ ΚΑΙ ΠΑΡΟΥΣΑ ΑΠΑΣΧΟΛΗΣΗ ΤΟΥΣ

Βασίλης Δενδρουλάκης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2004	Process Engineer (MSAT), Moderna, Boston, MA, USA
Δέσποινα Τζουλάκη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2005	Manager, Grant Thornton Greece, Αθήνα
Αντωνία Βύρκου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2005	Research Assistant in Industrial Symbiosis, Huddersfield University, UK
Στέφανος Ανωγιαννάκης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2006	Μεταδιδακτορικός ερευνητής, ΕΜΠ
Νικόλαος Λεμπέσης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2007	Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Χρυσάνθος Κωνσταντίνου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2008	M.S. Rutgers University, US, 2011
Μανόλης Χαλδούπης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2008	Data Management Specialist, BASF, Ludwigshafen, DE
Μανόλης Βασιλειάδης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2009	ERP/SCM Consultant, Oracle, Αθήνα
Ειρήνη Σιούγκρου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2009	Senior Applications Consultant, Oracle, Αθήνα
Μαρία Πίκουλα	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2009	Clinical Data Scientist, UCL, UK
Πολυδεύκης Διαμάντης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2009	Bioinformatician, Hengrui Europe Biosciences Ltd., Zürich, CH
Γιώργος Βογιατζής	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2010 Θωμάϊδείο Βραβείο Καλύτερης Διπλωματικής Εργασίας ΕΜΠ	Μεταδιδακτορικός ερευνητής, ΕΜΠ και Dutch Polymer Institute, Eindhoven, NL
Παναγιώτης Κολοκάθης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2010	Computational Scientist, Novamechanics Ltd, Κύπρος
Στυλιανός Καρόζης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2010	Διευθυντής Έργων/Συνεργαζόμ. Ερευνητής, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα
Χριστίνα-Άννα Γάτσιου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2011	Μεταδιδακτορική ερευνήτρια ΙΣΝ, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα
Φαίδων Μπροτζάκης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2012	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΚΕΒΕ «Αλέξανδρος Φλέμιγκ», Αθήνα και U. Cambridge, UK
Νίκος Στεφανόπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2012	Senior Process Engineer, McCormick & Co., Peterborough, England, UK

Ιωάννης Πετσαγκουράκης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2013	Researcher, RISE Institutes, Norrköping, SE
Ανδρέας Γαβριηλίδης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2014	Senior Postdoc/University Project Leader at imec, University of Antwerp, BE
Σπύρος Κουρνόπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2014	Numerics Software Developer, Siemens Digital Industries Software, London, UK
Αριάδνη Μποζίκη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2014	Post-doctoral Researcher, University of Luxembourg, LU
Αναστασία Νικολακοπούλου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2015	Scientist, Process Operation and Modeling, Sanofi, Waltham, MA, US
Στέφανος Κωνσταντινόπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2015	Διδακτορικός σπουδαστής, Imperial College London, UK
Κωνσταντίνος Μανίκας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2015	Design Engineer, ASML, Veldhoven, NL
Βιργινία Αμπντουλχάντι	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2017	
Μυρτώ Περδικάρη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2017	Ερευνήτρια, Dewpoint Therapeutics, Boston, MA, US
Μιχάλης Φράγκου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2017	Petrochemical Analyst, ICIS, London, UK
Κωνσταντίνος Ζηνέλης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2017	Διδακτορικός σπουδαστής, Imperial College London, UK
Κατερίνα Γαλατά	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	Διδάκτορας ETH Zürich, CH
Νικόλας Ευαγγέλου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	Διδάκτορας Johns Hopkins University, US
Βασίλης Παπασημακόπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	M.S., University of Chicago, US, 2021
Ματρώνα Πάνου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	Διδακτορική σπουδάστρια, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και ΕΜΠ
Βαγγέλης Κονιαλίδης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	Chemical Analyst, Bureau Veritas Group, Αθήνα
Φώτης Βενετσάνος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2018	Διδακτορικός σπουδαστής, ΕΜΠ
Ευγενία Κουντούπη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2019	Διδακτορική σπουδάστρια, ETH Zürich, CH
Ευάγγελος Τσοχαντάρης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2019	Μεταδιδακτορικός συνεργάτης, Heriot-Watt University, UK.
Αλέξανδρος Φίλιππας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2019	Διδακτορικός σπουδαστής, Georgia Institute of Technology, US
Νικόλαος Σιγάλας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2019	Διδακτορικός σπουδαστής, Technische Universiteit Eindhoven, NL

Χριστίνα Ζώη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2019	
Τζώρτζης Κουλαξίζης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2020	Διδακτορικός Σπουδαστής, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA
Κωνσταντίνα Καρανάσιου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2020	Process Engineer, Siemens Gamesa, Aalborg, DK
Ευάγγελος Πατούνας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2020	Quality Engineer, Philip Morris International
Λεωνίδα Κωνσταντόπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	
Ερμιόνη Χαραλαμποπούλου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	Διδακτορική σπουδάστρια, University of Southern California, USA
Γεώργιος Μικαελιάν	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	Διδακτορικός σπουδαστής, ΕΜΠ
Γεώργιος Σακελλίων	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	
Ευάγγελος Δρούγκας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	Διδακτορικός Σπουδαστής, DTU, DK
Δημοσθένης Χαλκιάπουλος	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	Guest Relations Agent, The Westin Resort, Costa Navarino, Πύλος
Δημήτριος Νασίκας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2021	Διδακτορικός σπουδαστής, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και ΕΜΠ
Μάγδα Καραβαγγέλη	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2022	Μεταπτυχιακή σπουδάστρια, Universiteit van Amsterdam, NL
Δημήτρης Τσαγκαλάκης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2022	Μεταπτυχιακός σπουδαστής, Johannes Kepler Universität Linz, AT
Αικατερίνη Αργυροπούλου	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2022	Μεταπτυχιακή σπουδάστρια, ΕΜΠ
Δήμος Ασλάνης	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2022	Μεταπτυχιακός σπουδαστής, ΕΜΠ
Αλέξανδρος Τιμόθεος Λούκας	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2022	Υποψήφιος διδάκτορας, ΠΑΔΑ
Ευαγγελία Γκατζόγια	Διπλωματ. ΕΜΠ, 2024	Πωλήσεις, Sarantis Group, Αττική
Sandra Maria Nelson	M.S. Berkeley, 1988	Process Engineer, Chevron Corporation, Richmond, CA, USA.
Δήμητρα Αγγελοπούλου	M.S. Π. Πατρών, 2000	Intracom Hellas, Πάτρα
Γεωργία Τσώλου	M.S. Π. Πατρών, 2000	Συνεργαζόμενη ερευνήτρια/διδάσκουσα, Πανεπιστήμιο Πατρών
Γεωργία Σχισμένου	M.S. Π. Πατρών, 2000	

Μιχάλης Αποστολάκης	M.S. Π. Πατρών, 2001	
Χρήστος Κυρούδης	M.S., ΕΜΠ, 2009	Ερευνητής, InSilico Oncology Group, ΕΠΙΣΕΥ, ΕΜΠ
Ζαχαρίας Πιτουράς	M.S., ΕΜΠ, 2009	
Αριστείδης Τρουπής	M.S., ΕΜΠ, 2010	Ph.D. Πανεπ. Πατρών
Ανδρέας Μόρφης	M.S., ΕΜΠ, 2012	
Γεώργιος Βογιατζής	M.S., ΕΜΠ, 2012	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΜΠ και Dutch Polymer Institute, Eindhoven, NL
Ιουλία Τζουβαδάκη	M.S., ΕΜΠ, 2012	Επίκουρη Καθηγήτρια, Universiteit Gent, BE
Στυλιανός Καρόζης	M.S. ΕΜΠ, 2013	Διευθυντής Έργων/Συνεργαζόμ. Ερευνητής, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα
Χρύσα Χαρίτογλου	M.S. ΕΜΠ, 2013	Full Stack Developer, Public Soft PC, Αθήνα
Παναγιώτης Νικ. Τζούνης	M.S. ΕΜΠ, 2014	Test analyst, ARHS Development Hellas
Άρης Σγούρος	M.S. ΕΜΠ, 2015	Εντεταλμένος Ερευνητής, Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα
Ανδρέας Μπαλαφούτης	M.S. ΕΜΠ, 2016	Information Technology Engineer, ELANET, Αθήνα
Λευτέρης Κουλιεράκης	M.S. ΕΜΠ, 2016	Data Scientist, ASML, Veldhoven, NL
Σπύρος Κουρνόπουλος	M.S. ΕΜΠ, 2016	Numerics Software Developer, Siemens Digital Industries Software, London, UK
Διονύσης Λιβέρης	M.S. ΕΜΠ, 2017	Διδακτορικός Σπουδαστής, ΕΜΠ
Γιώργος Κίσσας	M.S. ΕΜΠ, 2017	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ETH Zürich
Στέφανος Κωνσταντινόπουλος	M.S. ΕΜΠ, 2017	Διδακτορικός σπουδαστής, Imperial College London, UK
Πάνος Πετρήs	M.S. ΕΜΠ, 2018	Application Engineer, Siemens Digital Industries Software, The Hague, και Διδακτορικός Σπουδαστής, Univ. Leiden, NL
Δώρα Αργυροπούλου	M.S. ΕΜΠ, 2018	Βοηθός Ερευνήτρια, ΙΙΒΕΑΑ, Αθήνα
Κατερίνα Αβραμίδου	M.S. ΕΜΠ, 2018	
Γιάννης Χαλούλος	Ερευν. ΕΜΠ, 2016	Business Development Executive, Alfa Analytical Instruments, Αθήνα

Δημήτρης Παρασκ. Γερακίνης	M.S. EMPI, 2022	Διδακτορικός Σπουδαστής, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα
Kevin Francis Mansfield	Ph.D. Berkeley, 1991	Global Director of Product Care, Evonik, Allentown, PA, US
Raymond Lawrence June	Ph.D. Berkeley, 1991	Global Technology Manager, SMPO & PO Derivatives, Shell Oil Co., Houston, TX, US
Randall Quentin Snurr	Ph.D. Berkeley, 1994	John Searle Professor of Chemical and Biological Engineering, Northwestern University, Northwestern University, Evanston, IL, USA.
Travis David Boone	Ph.D. Berkeley, 1995	Biotechnology Development Consultant (SME), NASA Ames Res. Center, Mountain View, CA, US
Edward Joseph Maginn	Ph.D. Berkeley, 1995	Keough-Hesburgh Professor of Engineering and Associate Vice President for Research, Univ. of Notre Dame, Notre Dame, IN, US
Michael Lewis Greenfield	Ph.D. Berkeley, 1996	Associate Professor and ABET Coordinator of Chemical Engineering, University of Rhode Island, Providence, RI.
Lawrence Benjamin Fischel	Ph.D. Berkeley, 1997	Lead, Modeling and Simulation, The Clorox Company, Pleasanton, CA, US
Θεοδώρα Σπυριούνη	Ph.D. Π.Πατρών, 1998	Ερευνήτρια, Scienomics SARL, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα
Στέλιος Αντωνιάδης	Ph.D. Π.Πατρών, 1999	ASF Production Manager, Polyeco SA, Αθήνα
Ευαγγελία Ζερβοπούλου	Ph.D., Π.Πατρών, 2000	
Λεωνίδας Γεργίδης	Ph.D., Π.Πατρών, 2000	Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμ. Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Πανεπ. Ιωαννίνων
Χριστίνα Σαμαρά	Ph.D., Π.Πατρών, 2000	Διευθύντρια μεταποίησης, Eurofilm Μάντζαρης Α.Ε., Κόρινθος
Γιώργος Μπουλουγούρης	Ph.D., Ε.Μ.Π., 2001	Αναπληρωτής Καθηγητής, Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης, Αλεξανδρούπολη
Κώστας Χασάπης	Ph.D., Π. Αθηνών, 2001	Head of Software Engineering Department & Quality Management Director, Algosystems S.A., Αθήνα
Βαγγέλης Χαρμανδάρης	Ph.D., Π.Πατρών, 2001	ERA Chair Professor, The Cyprus Institute, CY, και Καθηγητής Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών, Πανεπ. Κρήτης

Μανόλης Δοξαστάκης	Ph.D., Π.Πατρών, 2001	Associate Professor, University of Tennessee, Knoxville, TN, U.S.A.
Κωνσταντίνος Μακροδημήτρης	Ph.D., ΕΜΠ, 2002	Senior Advisor, US Dept. of Health and Human Services and FDA, MD, US
Νικόλαος Καραγιάννης	Ph.D., Π.Πατρών, 2002	Professor, Research Profile I3, Universidad Politécnica de Madrid, ES
Λουκάς Περιστεράς	Ph.D., Π.Αθηνών, 2004	Ερευνητής Β', INN, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»
Βασίλειος Ράπτης	Ph.D., Π.Αθηνών, 2004	Επισκέπτης Αναπληρωτής Καθηγητής, European University Cyprus, CY
Νίκος Κοψιάς	Ph.D., Π.Πατρών, 2005	Business Development and Marketing Manager, Oxygen Broadband Ελλάς
Γεωργία-Ευαγγελία Λογοθέτη	Ph.D., ΕΜΠ, 2006	Associate Managing Consultant, Mastercard, Αθήνα
Νίκη Βέργαδου	Ph.D., Π.Αθηνών, 2006	Ερευνήτρια Β', INN, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»
Γρηγόριος Μεγαριώτης	Ph.D., ΕΜΠ, 2009	Εντεταλμένος Διδάσκων, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Δημήτρης Τσαλίκης	Ph.D., ΕΜΠ, 2009	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, Πανεπιστήμιο Πατρών
Νικόλαος Ρωμανός	Ph.D., ΕΜΠ, 2009	Καθηγητής Χημείας στη μέση εκπαίδευση, Αίγιο
Marco Sant	Ph.D., ΕΜΠ, 2010	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, Università di Sassari, IT
Στέφανος Ανωγιαννάκης	Ph.D., ΕΜΠ, 2012	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΜΠ
Αντωνία Βύρκου	Ph.D., ΕΜΠ, 2012	Research Assistant in Industrial Symbiosis, Huddersfield University, UK
Θανάσης Μοροζίνης	Ph.D, ΕΜΠ, 2013	R&D Scientist, Katradis Marine Ropes Industry SA, Πειραιάς
Νίκος Λεμπέσης	Ph.D., ΕΜΠ, 2013	Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Γεώργιος Βογιατζής	Ph.D., ΕΜΠ, 2015 Βραβείο καλύτερης Διδακτορικής Διατριβής σε Υπολογιστική Μηχανική, GRACM	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΜΠ και Dutch Polymer Institute, Eindhoven, NL

Παναγιώτης Κολοκάθης	Ph.D., EMPI, 2016	Computational Scientist, Novamechanics Ltd, Λευκωσία, CY
Ιωάννης Μαθιουδάκης	Ph.D., EMPI, 2016	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΚΕΤΑ και ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη
Ορέστης Γεώργιος Ζιώγος	Ph.D., EMPI, 2018	Full Stack Software Engineer, Nokia, Αθήνα
Άρης Σγούρος	Ph.D., EMPI, 2019 1 ^ο Βραβείο «Ιάκωβος Γκιουρουνλιάν» 2019, Βραβείο Δ. Χωραφά 2019	Εντεταλμένος Ερευνητής, Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα
Σπύρος Καλλιβωκάς	Ph.D., EMPI, 2020	Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, Cyprus Institute, Κύπρος
Απόστολος Λάκκας	Ph.D., EMPI, 2021	Συνταγματάρχης, Ελληνικός Στρατός
Κωνσταντίνος Ρέβελας	Ph.D., EMPI, 2023	Full-time Software Engineer, Teracloud Ελλάδος, Αττική
Lawrence Robert Dodd	Post-doc, Berkeley	Director, Robydodd Family Charitable Foundation, Ridgefield, CT, US
Edith Marie Seveck	Post-doc, Berkeley	Professor, Research School of Chemistry, Australian Nat. Univ., Canberra, AU
P.V. Krishna Pant	Post-doc, Berkeley	VP Bioinformatics, Deepcell, Inc., Mountain View, CA, US
Βλάσης Γ. Μαυραντζάς	Post-doc, Παν. Πατρών	Καθηγητής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών και Επισκέπτης Καθηγητής, ETH Zürich
Magnus Ullner	Post-doc, Παν. Πατρών	Senior Lecturer, Theoretical Chemistry, University of Lund, SE
Rob H.C. Janssen	Post-doc, Παν. Πατρών	Principal Scientist, DSM, Geleen, NL
Jean-Marc Bomont	Post-doc, Παν. Πατρών	Chercheur associé HDR, Université de Lorraine, FR
Ανδρέας Τερζής	Post-doc, Παν. Πατρών	Καθηγητής, Φυσικό Τμήμα, Πανεπ. Πατρών.
Oscar Ahumada	Post-doc, Παν. Πατρών	General Manager, Mecwins, Madrid, ES
Βασίλειος Μελισσάς	Post-doc, «Δημόκριτος»	Αναπλ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.
Erwan Nicol	Post-doc, Παν. Πατρών	Maître de Conférences, Le Mans Univ., FR

Patricia Gestoso-Souto	Post-doc, Παν. Πατρών	Global Head, Scientific and Technical Customer Support, BIOVIA – Dassault Systèmes, Manchester, UK
Γεώργιος Κ. Παπαδόπουλος	Post-doc, «Δημόκριτος»	Αναπλ. Καθηγητής, Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ
Νικόλαος Ζαχαρόπουλος	Post-doc, «Δημόκριτος»	Λέκτορας, Τμήμα Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων, Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Σύρος
Χρίστος Τζουμανέκας	Post-doc, ΕΜΠ	Καθηγητής Φυσικής στη Μέση Εκπαίδευση
Collin Wick	Post-doc, ΕΜΠ	Century Tel Professor of Chemistry and Associate Dean of Graduate Studies, Louisiana Tech University, US
Κώστας Νταουλάς	Post-doc, ΕΜΠ	Αναπληρωτής Καθηγητής, Φυσικό Τμήμα, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Jean-Marc Leyssale	Post-doc, ΕΜΠ	Research Scientist (HDR), Inst. des Sciences Moléculaires, CNRS Bordeaux, FR
Luigi Sanguigno	Post-doc, ΕΜΠ	Associate Researcher, Università di Napoli, IT
Francisco Javier Ramos-Díaz	Post-doc, ΕΜΠ	Ερευνητής, CSIC, Madrid, Spain
Adrien Leygue	Post-doc, ΕΜΠ	Chargé de Recherche, CNRS Nantes, FR
Ευάγγελος Βογιατζής	Post-doc, ΕΜΠ	Computational Scientist, Novamechanics Ltd, Λευκωσία, CY
Γρηγόριος Μεγαριώτης	Post-doc, ΕΜΠ	Εντεταλμένος διδάσκων, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Maxime Delhorme	Post-doc, ΕΜΠ	Release train engineer, ASML, Veldhoven, NL
David Nieto-Simavilla	Post-doc, ΕΜΠ	Profesor Ayudante Doctor, ETSIME, Universidad Politécnica de Madrid, ES
Kazunori Kamio	Επισκέπτης Ερευνητής, ΕΜΠ	Researcher, Mitsui Chemicals, Sodegaura, JP
Maria Grazia de Angelis	Επισκέπτis Ερευνήτρια, ΕΜΠ	Professor and Chair of Chem. Eng., University of Edinburgh, UK
Federico Pazzona	Επισκ. Post-doc, ΕΜΠ	Research Fellow, Università degli Studi di

		Sassari, IT
Lambert C.A. van Breemen	Επισκέπτης Ερευνητής ΕΜΠ	Assistant Professor, Eindhoven University of Technology, NL
Mark C. Thies	Marie Curie Internat. Incoming Fellow	Dow Chemical Professor of Chemical Engineering, Clemson University, SC, USA South Carolina, USA
Aaron Thornton	Επισκέπτης Ερευνητής ΕΜΠ	Senior Research Scientist, Materials Science and Engineering, CSIRO, AU
Piotr Kowalczyk	Επισκέπτης Ερευνητής ΕΜΠ	Assistant Professor, Murdoch University, Perth, AU
Αντώνης Βακής	Επισκέπτης Ερευνητής, ΕΜΠ	Professor, University of Groningen, NL
Γιάννης Χαλούλος	Ερευν. ΕΜΠ, 2016	Business Development Executive, Alfa Analytical Instruments, Αθήνα
Eleonora Ricci	Επισκέπτης διδακτορική φοιτήτρια, ΕΜΠ	Lecturer, Department of Chemical Engineering, University of Edinburgh, UK
Miguel Herranz Feito	Επισκέπτης διδακτορ. Φοιτητής, ΕΜΠ	Ερευνητής, Repsol SA, Madrid, ES
Sousa Javannikkhah	Επισκέπτης Ερευνήτρια, ΕΜΠ	Marie Skłodowska Curie Fellow, University of Limerick, IE
Stan van Kraaij	Επισκέπτης ερευνητής (πρακτ. άσκηση)	Μεταπτυχιακός φοιτητής, Eindhoven University of Technology, NL

ΠΑΡΟΝΤΑ ΜΕΛΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗΣ ΟΜΑΔΑΣ

Στο Ε.Μ.Π.:

Ομάδα Υπολογιστικής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών

Δρ. Στέφανος Ανωγιαννάκης
Δρ. Γεώργιος Βογιατζής
Δρ. Αριστοτέλης Σγούρος

Μεταδιδακτορικός Ερευνητής
Μεταδιδακτορικός Ερευνητής
Μεταδιδακτορικός Ερευνητής

Φώτης Βενετσάνος
Δημήτρης-Παρασκευάς Γερακίνης
Γεώργιος Μικαελιάν
Ματρώνα Πάνου

Υποψήφιος Διδάκτορας (Υπότροφος ΕΛΙΔΕΚ)
Υποψήφιος Διδάκτορας
Υποψήφιος Διδάκτορας (Υπότροφος ΕΛΙΔΕΚ)
Υποψήφια Διδάκτορας

Ανδρέας Κολίτσης

Μεταπτυχιακός Σπουδαστής

Χρυσάνθη Ντιμπ
Νικόλαος Παναγιωτόπουλος
Νικόλαος Παπαμαθθαίου
Δημήτρης Τρύφωνας
Δημήτρης Χρυσάφογεώργος

Διπλωματική Σπουδάστρια
Διπλωματικός Σπουδαστής
Διπλωματικός Σπουδαστής
Διπλωματικός Σπουδαστής
Διπλωματικός Σπουδαστής

Συνεργαζόμενα Μέλη

Dr. Francisco Javier Ramos Díaz
Dr. David Nieto Simavilla
Δρ. Νίκη Βέργαδου
Δρ. Γρηγόριος Μεγαριώτης
Δρ. Λουκάς Περιστεράς
Δρ. Σπύρος Καλλιβωκάς
Δρ. Κωνσταντίνος Ρέβελας
Δήμος Ασλάνης
Ευάγγελος Δρούγκας

Researcher, Inst. de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid, ES
Profesor Ayudante Doctor, ETSIME, UPM, ES
Κύρια Ερευνήτρια, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος»
Εντεταλμένος Διδάσκων, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας
Κύριος Ερευνητής, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»
Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, Ινστιτούτο Κύπρου, Λευκωσία
Μεταδιδακτορικός Ερευνητής, ΕΜΠ
Μεταπτυχιακός Σπουδαστής, ΕΜΠ
Υποψήφιος Διδάκτορας, DTU, Lyngby, DK

ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΗ ΤΡΕΧΟΝΤΟΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ

1. “Physical and Chemical Ageing of Amorphous Polymers by Molecular Simulation” (PEARL), Ερευνητικό έργο 829t19 αναληφθέν σε συνεργασία με το Eindhoven University of Technology και χρηματοδοτούμενο από το Ολλανδικό Ινστιτούτο Πολυμερών (Dutch Polymer Institute), Subtechnology Area PP2.1 Performance Polymers, 26 Ιουλίου 2019 – 31 Αυγούστου 2024, Προϋπολογισμός ΕΜΠ € 200 000.
2. “Molecular modelling of stretch-induced crystallization in polyethylene and polypropylene layers (PO-stretched), Ερευνητικό έργο 831 αναληφθέν σε συνεργασία με το Eindhoven University of Technology και χρηματοδοτούμενο από το Ολλανδικό Ινστιτούτο Πολυμερών (Dutch Polymer Institute), Subtechnology Area Polyolefins, 1 Απριλίου 2020 – 31 Μαρτίου 2024, Προϋπολογισμός ΕΜΠ € 252 000.
3. “Development of a multi-model for the simulation of the structural and mechanical properties of silica-rubber composites”, Βιομηχανικό σύμφωνο συνεργασίας με την εταιρεία Solvay SA, Βέλγιο, 1 Νοεμβρίου 2022 – 31 Οκτωβρίου 2024, μισθοδοσία του μεταδιδακτορικού συνεργάτη Δρος Γεωργίου Βογιατζή.
4. “Modeling reaction-induced phase separation for the production of thermoplastic-toughened thermosets”, Βιομηχανικό σύμφωνο συνεργασίας με την εταιρεία Solvay Specialty Polymers, USA, LLC/SyensQo SA, Βέλγιο, 1 Ιουλίου 2023 – 31 Δεκεμβρίου, 2024, € 110 000.

ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΗ ΠΑΡΕΛΘΟΝΤΟΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΕΡΓΟΥ ΣΤΗΝ ΕΛΛΑΔΑ

1. “Ανάπτυξη Νέων Τροποποιημένων Πολυμερών και Μειγμάτων για Υλικά Συσκευασίας και Αγροτικές Εφαρμογές”, ΕΠΕΤ II (No 623), ΓΓΕΤ, 1 Ιανουαρίου 1995 - 31 Δεκεμβρίου 1997. Εταίροι: ΑΡΓΩ Α.Ε.Β.Ε. (ανάδοχος), Ε.Ι.Τ.ΧΗ.Δ.-Ε.Μ.Α.Π. Θεσσαλονίκης, Πλαστικά Κρήτης Α.Ε., Ι.Η.Δ.Α.-Ι.Τ.Ε. Κρήτης, Πανεπιστήμιο Πατρών, Ε.Ι.ΧΗ.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε. Προϋπολογισμός ΔΝΘ: 69 270 ECU.
2. “Αύξηση της Εγχώριας Δυναμικότητας Ανακύκλωσης Χρησιμοποιημένων Ορυκτελαίων”, ΕΠΕΤ II (No 550), ΓΓΕΤ, 1 Ιανουαρίου 1995 - 31 Δεκεμβρίου 1997. Εταίροι: LPC Ελλάς (ανάδοχος), MOTOR OIL Ελλάς, Ε.Ι.ΧΗ.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε., Πανεπιστήμιο Αθηνών, Πολυτεχνείο Κρήτης. Προϋπολογισμός ΔΝΘ: 72 670 ECU.
3. “Molecular-Based Approach to the Simulation of Polymer Fluid Flows in Processing Operations” (MPFLOW), BRITE-EuRam BRPR-CT96-145, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Ιουνίου 1996 - 31 Μαΐου 1999. Εταίροι: ETSI Madrid (ES), Dow Benelux (NL), Repsol Petroleo (ES), Shell Research B.V. (NL), ΑΡΓΩ Α.Ε.Β.Ε., Ε.Ι.ΧΗ.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε. (GR), Université Catholique de Louvain (BE), T.U. Delft (NL), ETH Zürich (CH). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: 144 000 ECU.
4. “Υπολογισμός της Πυκνότητας, της Ελαστικότητας και του Ιξώδους Πολυμερικών Τηγμάτων από τη Χημική Σύσταση των Αλυσίδων”. ΠΕΝΕΔ 218-95ΕΔ, ΓΓΕΤ, 1 Ιουλίου 1996 - 31 Δεκεμβρίου 1998. Προϋπολογισμός: 8 εκατομ. δρχ.

5. “Modelling Polymer Adhesion”, Research Contract with DSM Research B.V., The Netherlands, 1 Μαρτίου 1998 - 1 Μαρτίου 2000. Προϋπολογισμός: 46 000 ECU.
6. “Design, Synthesis and Study of Novel Nonlinear Optical Materials”, TMR Network Contract ERB-FMRX- CT96-0047, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Οκτωβρίου 1996 - 30 Σεπτεμβρίου 2000. Εταίροι: ΕΙΕ-ΙΟΦΧ (συντονιστής), Ε.Ι.Χ.Η.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε. (GR), UMIST (UK), University of Lund (SE), Universität Hannover (DE), University of Bristol (UK), Trinity College Dublin (IE), Commissariat à l' Energie Atomique (FR). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 198 000.
7. “New Routes to Understanding Polymer Materials Using Experiments and Realistic Modelling”, TMR Network Contract ERB-FMRX-CT98-0176, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Μαρτίου 1998 - 28 Φεβρουαρίου 2002. Εταίροι: UMIST (UK, συντονιστής), Université Libre de Bruxelles (BE), E.S.P.C.I. Paris (FR), Universidad Complutense de Madrid (ES), Heriot-Watt University (UK), Ε.Ι.Χ.Η.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε. (GR), Max-Planck Institut für Polymerforschung (DE). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 182 000.
8. “Predictive Modelling of Polyester Barrier Properties”, Research Contract with BP-Amoco Chemical Company, U.S.A., 1 Ιανουαρίου 2000 – 31 Δεκεμβρίου 2002. Προϋπολογισμός: \$60 000.
9. “Πειραματική και θεωρητική μελέτη της κρυστάλλωσης πολυμερών από στάσιμα και ρέοντα τήγματα”. Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 99 (99ΕΔ 95), ΓΓΕΤ, 1 Ιανουαρίου 2000 – 30 Ιουνίου 2001. Εταίροι: Πανεπιστήμιο Πατρών (ανάδοχος), Ι.Η.Δ.Α.-Ι.Τ.Ε. Κρήτης, Πανεπιστήμιο Αθηνών. Προϋπολογισμός ΔΝΘ: 19 εκατομ. δρχ.
10. “Design of New, Environmentally Friendly Self-Adhesive Materials” (DEFSAM), Competitive and Sustainable Growth programme G5RD-CT-2000-00202, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Μαρτίου 2000-28 Φεβρουαρίου 2003. Εταίροι: E.S.P.C.I. Paris (FR, συντονιστής), Exxon Chemical Europe (BE), Beiersdorf AG (DE), Universidad Politécnica de Madrid (ES), Ε.Ι.Χ.Η.Μ.Υ.Θ.-Ι.Τ.Ε. (GR). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 429 915, από τα οποία € 214 958 παρασχέθηκαν από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Full cost basis).
11. “Molecular Modelling for the Competitive Molecular Design of Polymer Materials With Controlled Permeability Properties” (PERMOD), Competitive and Sustainable Growth Programme G5RD-CT-2000-00200, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Μαρτίου 2000 – 31 Οκτωβρίου 2003. Εταίροι: GKSS Forschungszentrum Geesthacht GmbH (DE), Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος» (GR), CNR-IRMERC (IT), MSI Ltd. (UK), Air Liquide (FR). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 336 830, από τα οποία € 168 415 παρασχέθηκαν από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Full cost basis).
12. “Transport-optimised catalysts for crude oil conversion” (TROCAT), Competitive and Sustainable Growth Programme G5RD-CT-2001-00520, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Σεπτεμβρίου 2001 – 31 Αυγούστου 2004. Εταίροι: Universität Leipzig (DE, coordinator), Grace-Davison Europe GmbH (DE), Cepsa S.A. (ES), SINTEF (NO), WITEGA S.A. (DE), Universität Stuttgart (DE), Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic (CZ), Chemopetroleo S.A. (CZ), Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος» (GR). Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 366 730, από τα οποία € 183 365 παρασχέθηκαν από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Full cost basis).

13. “Polymer Molecular Modelling at Integrated Length/Time Scales” (PMILS), Competitive and Sustainable Growth Programme G5RD-CT-2001-40319, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Μαΐου 2002 – 30 Απριλίου 2005. Εταίροι: ETSI Madrid (ES), CPERI-CERTH (GR), Borealis S/A (DK), Rhodia Recherches (FR), Imperial College of Science, Technology and Medicine (UK), ICE/HT-FORTH (GR). Προϋπολογισμός ΔΝΘ – Βλάση Μαυραντζά: € 422 953, από τα οποία € 203 977 παρασχέθηκαν από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Full cost basis).
14. “Hierarchical Modelling of Deformation and Failure of Polymer Glasses”, Dutch Polymer Institute Project No 430, 1 Μαρτίου 2003 – 28 Φεβρουαρίου, 2006. Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 260 741, από τα οποία 75% παρασχέθηκαν από το DPI.
15. “Πειραματική και Θεωρητική Μελέτη Πολυπροπυλενίου για Βιομηχανικές Εφαρμογές σε Κάδους Συσκευασίας”, Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 2001 (01ΕΔ529), Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, 1 Σεπτεμβρίου 2002 – 31 Αυγούστου 2005. Εταίροι: Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (συντονιστής), Πανεπιστήμιο Πατρών, Ε.Μ.Π., Πλαστικά Θράκης. Προϋπολογισμός ΔΝΘ: € 40 122.
16. “Molecular Simulation Study of Ageing and Plasticity in Glassy Materials (SIMGLASS)”, Human Resources and Mobility (Marie Curie) European Reintegration Grant 006674, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Φεβρουαρίου 2005 – 31 Ιανουαρίου 2006. Προϋπολογισμός € 40 000.
17. “Υπολογιστική Μελέτη Φυσικής Γήρανσης και Πλαστικής Παραμόρφωσης Υαλωδών Υλικών”, Πρόγραμμα ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ, χρηματοδοτούμενο από το Υπουργείο Εθνικής Παιδείας και Θρησκευμάτων, 1 Μαρτίου 2004 – 31 Αυγούστου 2006. Προϋπολογισμός € 85 000.
18. “Intelligent Design of Nanoporous Sorbents (INDENS)”, Human Resources and Mobility (Marie Curie) Research Training Network MRTN-CT-2004-005503, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Ιανουαρίου 2005 – 31 Δεκεμβρίου 2008. Εταίροι: CNRS/MADIREL (FR, coordinator), University of Edinburgh (UK), J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry (CZ), University of St. Andrews (UK), Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (GR), Universität Leipzig (DE), SINTEF (NO), Institut Français du Pétrole (FR). Προϋπολογισμός Ε.Μ.Π. € 273 765.
19. “Computer-aided molecular design of multifunctional materials with controlled permeability properties (MULTIMATDESIGN)”, NMP Specific Targeted Research Project (STREP) 013644, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Μαρτίου 2005 – 28 Φεβρουαρίου 2007. Εταίροι: GKSS (DE, coordinator), ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (GR), L’Air Liquide S.A. (FR), Research Institute on Membrane Technology (IT), Accelrys Ltd (UK), Universiteit Leiden (NL), MatSim GmbH (CH), A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis (RU), Politecnico di Milano (IT), Università di Bologna (IT), Mesodyn BV (NL). Προϋπολογισμός «Δημοκρίτου» € 173 117.
20. «Μελέτη της επίδρασης εξωτερικής πίεσης (κατά τη θερμοπλαστική έγχυση) στη μορφολογία και δυναμική βιομηχανικού πολυπροπυλενίου», πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 2003 (03ΕΔ856), Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, 1 Οκτωβρίου 2005 - 30 Ιουλίου 2009. Εταίροι: Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (συντονιστής), ΕΜΠ, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Πλαστικά Θράκης ABEE. Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 62 518.
21. «Υπολογιστική μελέτη της επίδρασης του ρυθμού υαλοποίησης στις ιδιότητες υαλωδών υλικών»,

πρόγραμμα «Καραθεοδωρή», Συγκλητική Επιτροπή Βασικής Έρευνας Ε.Μ.Π., 1 Φεβρουαρίου 2007 – 31 Ιανουαρίου 2009. Προϋπολογισμός € 15 000.

22. “Multiscale Modelling of Nanostructured Interfaces for Biological Sensors (MNIBS)”, EU-NSF Specific Targeted Research Project (STREP) NMP3-CT-2005-016375 χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Δεκεμβρίου 2005-31 Αυγούστου 2008. Εταίροι: Universidad Politécnica de Madrid (ES, EU coordinator), Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (GR), ETH-Zürich (CH), University of Wisconsin (US coordinator), Northwestern University, Purdue University. Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 283 800.
23. “Molecular Modelling of Cavitation in Polymer Melts and Rubbers” (MOCAVIPOL), Dutch Polymer Institute (Engineering Plastics/Rubber Technology) Project Number 650, 1 Νοεμβρίου 2007 – 31 Οκτωβρίου 2011. Προϋπολογισμός € 331 899.
24. “Multi-Scale Modelling of Nano-Structured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance” (NANOMODEL), FP7-NMP-2007-SMALL-1 Collaborative Project No 211778, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Νοεμβρίου 2008 – 31 Οκτωβρίου 2011. Εταίροι: BASF SE (DE, coordinator), Technische Universität Darmstadt (DE), ΕΜΠ (GR), Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg (DE), Gritche Technologies SARL (FR), Forschungszentrum Jülich GmbH (DE), Culgi BV (NL), Centro Ricerche Plast-Optica SPA (IT), Université de Fribourg (FR), Università degli Studi di Trieste (IT), Robert Bosch GmbH (DE). Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 294 000.
25. “Advanced Materials as CO₂ Removers: A Computational Study of CO₂ Sorption Thermodynamics and Kinetics” (AMCOS), FP7-NMP-2008-EU-India-2 Collaborative Project No 233402, χρηματοδοτούμενο από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, 1 Ιανουαρίου 2009 – 31 Δεκεμβρίου 2012. Εταίροι: ΕΜΠ (GR, συντονιστής: ΕΕ), Universität Leipzig (DE), Università degli Studi di Sassari (IT), Institut de Recherches sur la Catalyse et l’ Environnement de Lyon - CNRS (FR), National Environmental Engineering Research Institute, Nagpur (Συντονιστής : Ινδία), Institute of Chemical Technology Mumbai, Indian Institute of Technology Madras, Indian Institute of Chemical Technology Hyderabad. Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 150 000.
26. “Predicting the Properties of Carbonaceous Pitches via Molecular Modeling” (AdvCarbonMatls), FP7-PEOPLE-IEF-2008 Marie Curie International Incoming Fellowship No 234999, χρηματοδοτούμενη από τη Γενική Διεύθυνση Έρευνας της Ευρωπαϊκής Επιτροπής, με αποδέκτη τον Καθηγητή Mark Thies, Clemson University, ΗΠΑ, 1 Μαρτίου 2009 – 31 Αυγούστου 2011. Προϋπολογισμός € 100 110.
27. “Μοριακή Προσομοίωση Υαλωδών Υλικών”, Πρόγραμμα «Ηράκλειτος II» παρέχον υποτροφία για τη διδακτορική διατριβή Υποψήφιου Διδάκτορα Νικολάου Λεμπέση, συμβ. ΜΙ8346725, Υπουργείο Παιδείας, δια Βίου Μάθησης και Θρησκευμάτων, 1 Φεβρουαρίου 2011 – 31 Αυγούστου 2013. Προϋπολογισμός € 38 750.
28. “Multiscale Computational Approach to the Design of Polymer Matrix Nanocomposites” (COMPANANOCOMP-DPI), Επιπρόσθετη οικονομική υποστήριξη παρεχόμενη από το συντονιστή Dutch Polymer Institute προς το ΕΜΠ σε σχέση με το πρόγραμμα COMPANANOCOMP για τη μισθοδοσία ενός μεταδιδακτορικού ερευνητή εργαζόμενου στο ΕΜΠ για το πρόγραμμα, 1 Οκτωβρίου 2012 – 31 Μαρτίου 2013. Προϋπολογισμός: € 27 741.
29. “Multiscale Computational Approach to the Design of Polymer Matrix Nanocomposites” (COMPANANOCOMP), FP7-NMP-2011-RUSSIA Collaborative Project No 295355, πρόγραμμα συνεργασίας ΕΕ-Ρωσίας, του οποίου το Ευρωπαϊκό σκέλος χρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση, 1 Οκτωβρίου 2011 – 30 Σεπτεμβρίου 2014. Ευρωπαίοι Εταίροι: Stichting Dutch

- Polymer Institute (NL, coordinator), Rhodia S.A. (FR), NTU Athens (GR), Eindhoven University of Technology (NL), CNRS-LPMA (FR), General Electric (DE), European Centre for Nanostructured Polymers s.c.a.r.l. (IT), University of Ulm (DE). Ρώσοι Εταίροι: Lomonosov Moscow State University (coordinator), Institute of Macromolecular Compounds St. Petersburg, National Research Centre Kurchatov Institute, Software Company PhysChem Ltd. Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 181 030.
30. “Mesoscopic Simulations of Viscoelastic Properties of Networks (MSVIS)”, 1 Ιανουαρίου 2014 – 31 Δεκεμβρίου 2014, Volkswagen Stiftung μέσω Πανεπιστημίου Göttingen, Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 50 000.
 31. “Molecular Simulation of Polymer Networks: Stress-Strain Relations, Cavitation, and Dynamics in Confinement”, Ερευνητικό Έργο 744, χρηματοδοτούμενο από το Dutch Polymer Institute, 1 Ιουλίου 2012 – 30 Ιουνίου 2016. Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 647 479.
 32. “Computational Lithography for Directed Self-Assembly: Materials, Models and Processes (CoLiSA-MMP), FP7-ICT-2013-11 Collaborative Project No 619793, 1 Νοεμβρίου 2013 – 31 Οκτωβρίου 2016. Εταίροι: Fraunhofer Gesellschaft zur Förderung der Angewandten Forschung E.V., DE (coordinator), Arkema France S.A. (FR), Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Cientificas (ES), Université Bordeaux I (FR), Commissariat à l' Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (FR), Georg-August Universität Göttingen Stiftung Öffentlichen Rechts (DE). Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 320 837.
 33. “Multiscale Simulations of Complex Polymer Systems” (MuSiComPS), Ερευνητικό έργο σε συνεργασία με το Πανεπιστήμιο Πατρών, 1 Μαρτίου 2015 – 30 Νοεμβρίου 2020 (ανανεούμενο κατ’ έτος), Limmat Stiftung, Zürich, CH (συντονιστής). Προϋπολογισμός ΕΜΠ: € 377 387.
 34. Molecular Simulations of Surfactant Self-Assembly” (MSiSSA), “Coarse-Grained Simulations of Nonionic Surfactants” (CGSiNIS) και “Coarse-Grained Simulations of Surfactants” (CGSS), Βιομηχανικά Συμφωνητικά Ερευνητικής Συνεργασίας με τη Rhodia Operations, France, μέρος της εταιρείας Solvay, 1 Οκτωβρίου 2017 – 17 Οκτωβρίου 2020 (ανανεούμενα κατ’ έτος), € 215 000.
 35. “Multiscale Modelling for the Design of Antifouling Copolymers”, Βιομηχανικό Σύμφωνο Ερευνητικής Συνεργασίας με τη Rhodia Operations, France, μέρος της εταιρείας Solvay, 1 Ιουνίου 2019 – 1 Ιουνίου 2021, € 130 000.
 36. «Προσομοιώσεις, σε Πολλαπλές Κλίμακες Μήκους και Χρόνου, Πολυμερών σε Διεπιφάνειες» (Multiscale Simulations of Polymers at Interfaces - MuSiPolI), Ερευνητικό έργο χρηματοδοτούμενο από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.), 23 Δεκεμβρίου 2019 – 22 Δεκεμβρίου 2022, € 188 000.
 37. “Coarse-grained Modeling Investigations of Polymer Adhesion for Solid State Batteries” Βιομηχανικό Σύμφωνο Ερευνητικής Συνεργασίας με την εταιρεία Solvay SA, Βέλγιο, 21 Σεπτεμβρίου 2021 – 20 Οκτωβρίου 2023, € 120 000.

ΣΥΣΤΑΣΕΙΣ

Professor Pablo G. Debenedetti
Department of Chemical Engineering
Princeton University
A-217 Engineering Quadrangle
Princeton, NJ 08544
U.S.A.
pdebene@princeton.edu

Professor Alexis T. Bell
Department of Chemical Engineering
University of California, Berkeley
107 Gilman Hall
Berkeley, CA 94720
U.S.A.
bell@cchem.berkeley.edu

Professor Arup K. Chakraborty
Department of Chemical Engineering
Massachusetts Institute of Technology
Room 66-544
77 Massachusetts Ave.
Cambridge, MA 02139, U.S.A.
arupc@mit.edu

Professor Jean-Paul Ryckaert
Laboratoire de Physique des Polymères
CP-223, Université Libre de Bruxelles
Boulevard du Triomphe
B-1050 Brussels, BELGIUM
jryckaer@ulb.ac.be

Professor Masao Doi
Center of Soft Matter Physics and its Applications
New Main Building Room H 1114
Beihang University
37 Xueyuan Road, Haidian District
Beijing, CHINA 100191
masao.doi@buaa.edu.cn

Καθηγητής Κώστας Βαγενάς
Τμήμα Χημικών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Πατρών
26500 Πάτρα
cat@chemeng.upatras.gr

Professor Randall Q. Snurr
John G. Searle Professor of Chemical
and Biological Engineering
Northwestern University
2145 Sheridan Road, CAT 121
Evanston, IL 60208-3109, USA
snurr@northwestern.edu

Professor Morton M. Denn
Levich Institute, Steinman Hall #1M
City College of New York
140th Street and Convent Ave
New York, NY 10031
U.S.A.
denn@levdec.engr.ccny.cuny.edu

Professor Manuel Laso
Escuela Técnica Superior de Ingenieros
Industriales
Universidad Politécnica de Madrid
C. José Gutiérrez Abascal 2,
28006 Madrid, SPAIN
manuel.laso@upm.es

Professor Dr. Jörg Kärger
Fakultät für Physik und Geowissenschaften
Abteilung Grenzflächenphysik
Universität Leipzig
Linnéstraße 5
D-04103 Leipzig, GERMANY
kaerger@rz.uni-leipzig.de

Professor Keith E. Gubbins
Department of Chemical and Biomolecular
Engineering
North Carolina State University
Raleigh, NC 27695-7905
U.S.A.
keg@ncsu.edu

Καθηγητής Ανδρέας Μπουντουβής,
Καθ. Σχ. Χημ. Μηχανικών, πρώην Πρύτανης
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Ηρώων Πολυτεχνείου 9
Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου
157 80 Ζωγράφου
boudouvi@chemeng.ntua.gr