

# Νικόλας Δ. Χαριστός

Επίκουρος Καθηγητής επί θητεία  
Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας  
Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ

## Βιογραφικό Σημείωμα

Νοέμβρης 2024

# Νικόλαος Δ. Χαριστός

## Επίκουρος Καθηγητής επί θητεία

Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας  
Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ

## Βιογραφικό Σημείωμα

Νοέμβρης 2024

## Περιεχόμενα

Προσωπικά Στοιχεία .....	3
Εκπαίδευση.....	3
Εκπαιδευτικό Έργο .....	4
Διδασκαλία Μαθημάτων   Τμήμα Χημείας ΑΠΘ (2021 – 2024).....	4
Επίβλεψη Διατριβών και Εργασιών   Τμήμα Χημείας ΑΠΘ (2021 – 2024).....	4
Ερευνητικό Έργο.....	7
Α. Άρθρα σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά .....	8
Β. Άρθρα σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά από Συνέδρια.....	11
Γ. Κεφαλαία σε Διεθνή Επιστημονικά Βιβλία .....	12
Δ. Ανακοινώσεις σε Διεθνή Συνέδρια .....	12
Ε. Ανακοινώσεις σε Εθνικά Συνέδρια.....	14
ΣΤ. Διδακτικά Βιβλία και Σημειώσεις.....	17
Ζ. Λογισμικά Χημείας .....	18
Η. Ιστοσελίδες Χημείας.....	21
Διοικητικό Έργο .....	24

## Προσωπικά Στοιχεία

### Νικόλας Δ. Χαριστός

- 2021 – σήμερα **Επίκουρος Καθηγητής επί θητεία** (ΦΕΚ Γ' 2210/21.09.2021)  
Κβαντική και Υπολογιστική Χημεία και Εφαρμογές Πληροφορικής στη Χημεία
- 2014 - 2021 **ΕΔΙΠ** (ΦΕΚ Β' 1365/28.05.2014)  
Εφαρμοσμένη Κβαντική Χημεία – Χημική Εκπαίδευση

Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας      τηλ.    2310 997801  
Τομέας Γενικής και Ανόργανης Χημείας                      email   [nicharis@chem.auth.gr](mailto:nicharis@chem.auth.gr)  
Τμήμα Χημείας    web     <https://nicharis.webpages.auth.gr>  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

## Εκπαίδευση

- 2014 - 2016 MEd    **Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης**  
*Διδακτική της Χημείας και Νέες Εκπαιδευτικές Τεχνολογίες* (Δι.Χη.Ν.Ε.Τ.)  
Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ.  
**2DrawChem: Σχεδιασμός και ανάπτυξη ενός γνωστικού εργαλείου μοντελοποίησης συντακτικών τύπων**  
Επιβλέπων καθ. Μιχάλης Σιγάλας
- 2005 - 2006        **Μεταδιδακτορική Έρευνα**  
Postdoc            Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας  
Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.  
**Μελέτη μοριακών clusters και νανοδομών των νομισματοκοπικών μετάλλων (Cu, Ag, Au) με υπολογιστικές μεθόδους ηλεκτρονιακής δομής και διερεύνηση της χημικής και καταλυτικής τους δραστηριότητας**  
Επιβλέπων καθ. Κωνσταντίνος Τσίπης
- 2001 - 2005 PhD    **Διδακτορικό Δίπλωμα**  
Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας  
Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.  
**Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού Τρισδιάστατης Οπτικοποίησης Ιδιοτήτων της Μοριακής Δομής**  
Επιβλέποντες καθ. Κωνσταντίνος Τσίπης, καθ. Μιχάλης Σιγάλας
- 2000 - 2001 MSc    **Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης**  
*Κβαντική και Υπολογιστική Χημεία*  
Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας  
Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.  
**Αργιλοπυριτικές δομικές μονάδες στη διαδικασία σύνθεσης ζεολιθικών κρυστάλλων. Κβαντοχημική μελέτη στο επίπεδο DFT**
- 1996 BSc            **Πτυχίο**  
Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.

# Εκπαιδευτικό Έργο

## Διδασκαλία Μαθημάτων | Τμήμα Χημείας ΑΠΘ (2021 – 2024)

### Πρόγραμμα Προπτυχιακών Σπουδών

- **H10** Υπολογιστική Χημεία
- **Υ03** Εφαρμοσμένα Μαθηματικά στην Χημεία I
- **Υ11** Αρχές Κβαντικής Χημείας και Φασματοσκοπίας
- **K104** Δόμηση, Παρουσίαση και Διάδοση Χημικής Πληροφορίας
- **K107** Ανάπτυξη Πολυμεσικού Υλικού στη Χημεία και Διδασκαλία με Χρήση Τηλεκπαιδευτικών Διευτών

### Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

#### Μοριακός Σχεδιασμός και Μοντελοποίηση - Χημική Εκπαίδευση

- **M5Y2/1** Τεχνικές και εργαλεία οπτικοποίησης μοριακής δομής, χημικών ιδιοτήτων και δεδομένων
- **M5Y2/7** Εφαρμογές των Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνίας στη Διδασκαλία της Χημείας
- **M5Y1/5** Υπολογισμός μοριακών ιδιοτήτων
- **M5Y1/7** Ερευνητική μεθοδολογία στην Υπολογιστική Χημεία

## Επίβλεψη Διατριβών και Εργασιών | Τμήμα Χημείας ΑΠΘ (2021 – 2024)

Επίβλεψη	Πριν τον διορισμό συνεπίβλεψη	Μετά τον διορισμό (2021) (ολοκληρωμένα σε παρένθεση)
<b>Post Doc</b> – Μεταδιδακτορική Έρευνα	-	<b>1</b>
<b>PhD</b> – Διδακτορικά	4	<b>2 (1)</b>
<b>MSc</b> – Μεταπτυχιακά	12	<b>7 (0)</b>
<b>BSc</b> – Πτυχιακές	1	<b>17 (12)</b>
<b>Μέλος συμβουλευτικών/εξεταστικών επιτροπών</b>		
<b>PhD</b>	-	<b>10</b>
<b>MSc</b>	-	<b>6</b>

## Μεταδιδακτορικοί Ερευνητές (PostDoc): 1

- PostDoc.1 Παπαδόπουλος Αναστάσιος (2024 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Ανθρακικοί Νανοκρικοί και Υπερμοριακά Συστήματα: Αρωματικότητα, Ηλεκτρονικές και Οξειδοαναγωγικές Ιδιότητες

## Διδακτορικές Διατριβές (PhD): 2

- PhD.1 Λίγγας Ραφαήλ (2021-2024)** *Ολοκληρωμένη*  
 Ανάπτυξη λογισμικού ανάλυσης και οπτικοποίησης του επαγομένου μαγνητικού πεδίου και εφαρμογή στη μελέτη της μακροκυκλικής αρωματικότητας ανθρακικών νανοκρικών και υπερμοριακών συμπλόκων τους
- PhD.2 Αδραμερινά Αικατερίνη (2021 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Σχέσεις δομής-ιδιοτήτων χημικών ειδών στο νέο αναλυτικό πρόγραμμα σπουδών του λυκείου: Διερεύνηση δυσκολιών κατανόησης, ανάπτυξη, εφαρμογή και αξιολόγηση εκπαιδευτικού λογισμικού

## Μεταπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (MSc): 7

### Χημική Εκπαίδευση και Τεχνολογίες Πληροφορικής και Επικοινωνίας

- MSc.1 Καρατζιοβαλή Μαρία (2023 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Ανάπτυξη εκπαιδευτικού υλικού με πολλαπλές διασυνδεόμενες και διερευνησιμες αναπαραστάσεις μοριακών εννοιών για τη δομή του DNA
- MSc.2 Θεοφανίδου Αναστασία (2023 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Ανάπτυξη εκπαιδευτικού υλικού με πολλαπλές διασυνδεόμενες και διερευνησιμες αναπαραστάσεις μοριακών εννοιών στην οργανική χημεία του Λυκείου
- MSc.3 Καρακασίδης Θεόδωρος (2023 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Ανάπτυξη ψηφιακού εκπαιδευτικού υλικού πολλαπλών διασυνδεόμενων αναπαραστάσεων για τους υδατάνθρακες
- MSc.4 Μάρτσης Θεόφιλος (2023 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Η σχέση της Επικούρειας φυσικής και ηθικής φιλοσοφίας με τις σύγχρονες αντιλήψεις για το μοριακό και κβαντικό μικρόκοσμο

### Μοριακός Σχεδιασμός και Μοντελοποίηση

- MSc.5 Τσιντσάρ Νικολέττα (2024 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Η μαγνητική απόκριση αντιαρωματικών μονοκυκλικών, πολυκυκλικών και μακροκυκλικών μορίων και φουλερενίων υπό περιστροφή
- MSc.6 Φανάρα Χάιδω (2024 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Αρωματικότητα και φασματοσκοπία NMR ενδοεδρικών φουλερενίων
- MSc.7 Μελισσαροπούλου Δάφνη (2024 - )** *Σε εξέλιξη*  
 Υπερμοριακά σύμπλοκα ανθρακικών δακτυλιδίων με μέταλλα και νανοκρικούς

## Πτυχιακές Εργασίες (BSc): 17

- BSc.1 Φαρσαλιώτης Δημήτριος (2024 -) Σε εξέλιξη**  
Υπολογιστική Μελέτη αρωματικών ανθρακικών νανοκρίκων και υπερμοριακών τους συμπλοκών.
- BSc.2 Μπαντάκ Ιμπραήμ Σενέμ (2024 -) Σε εξέλιξη**  
Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού για τη μάθηση της Χημείας.
- BSc.3 Δαμιανίδης Νικόλαος (2024 -) Σε εξέλιξη**  
Υπολογιστική Μελέτη αρωματικών ανθρακικών νανοκρίκων και υπερμοριακών τους συμπλοκών.
- BSc.4 Ζαφείρη Δόμνα (2024 -) Σε εξέλιξη**  
Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού για τη μάθηση της Χημείας.
- BSc.5 Μπούτζιου Χρύσα (2024)**  
Ανάπτυξη διαδραστικού εκπαιδευτικού υλικού διασυνδεδεμένων αναπαραστάσεων για τη φασματοσκοπία υπερθύρου.
- BSc.6 Τσσουνίδου Λουίζα (2024)**  
Εφαρμογές νανοκρίκων και των υπερμοριακών τους συμπλοκών.
- BSc.7 Καρατζόγλου Έκτωρ Αθανάσιος (2024)**  
Κριτήρια αρωματικότητας και υπολογιστική μελέτη της επαγόμενης μαγνητικής απόκρισης του ουδέτερου και του διπλά φορτισμένου (6,7) ελικενίου - κυκλοπαραφαινουλενίου τοπολογίας Mobius.
- BSc.8 Τσουμάρα Μαρία (2023 -) Σε εξέλιξη**  
Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού για τη μάθηση της Χημείας.
- BSc.9 Γερογιάννη Ιωάννα (2023)**  
Υπολογιστική μελέτη αρωματικότητας διπλά και τετραπλά οξειδωμένου [4.4.4.] Ανθρακικού νανοκλωβού και πρόδρομων νανοκρίκων.
- BSc.10 Τσιντσάρ Νικολέττα (2023)**  
Υπολογιστική μελέτη αρωματικότητας δίπλα οξειδωμένων ισομερών του [12]CPP με έναν, δύο και τρεις διαδοχικούς μέτα-δακτυλίου.
- BSc.11 Αλευρά Ειρήνη (2023)**  
Υπολογιστική μελέτη αρωματικότητας των ουδέτερων και οξειδωμένων νανοβρόγχων [6]CPP, [11]CPP και του υπερμοριακού συμπλόκου [11]CPP<sub>2</sub>[6]CPP.
- BSc.12 Ντόντη Σοφία (2022)**  
Υπολογιστική μελέτη αρωματικότητας διπλά φορτισμένων ισομερών του [8]-CPP με έναν και δύο όρθο- και μέτα- δακτυλίου.
- BSc.13 Παναγιωτίδου Μαρία (2022)**  
Υπολογιστική μελέτη αρωματικότητας και ηλεκτρονιακού απεντοπισμού του αζουλενίου και του αζουπυρενίου.
- BSc.14 Καδρή Χασάν (2022)**  
Μελέτη σχέσης δομής-αρωματικότητας κατά την 1,2 και 2,3 συμπύκνωση πενταλενικής μονάδας στα μόρια του ναφθαλενίου και διφαινουλενίου.
- BSc.15 Μούργου Μαρία (2022)**  
Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού για από απόσταση τυπική και άτυπη εκπαίδευση. Άτομα, μόρια και χημικές αντιδράσεις.
- BSc.16 Καρατζιοβαλή Μαρία (2022)**  
Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού διαδραστικής οπτικοποίησης μοριακών ιδιοτήτων : ΟΞΕΑ -ΒΑΣΕΙΣ-ΑΛΑΤΑ.
- BSc.17 Γκόγκου Ευμορφίλη (2022)**  
Ανάπτυξη διαδικτυακών ερωτηματολογίων Χημείας σε περιβάλλον HTML5/JQUERY.

# Ερευνητικό Έργο

## Σύνοψη Ερευνητικού Συγγραφικού Έργου

Δημοσιεύσεις	Όλα	Μετά τον διορισμό (2021)
Άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές	26 (13*)	6 (5*)
Κεφάλαια σε διεθνή βιβλία	2	-
Άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές από συνέδρια	3	-
Διεθνή Συνέδρια	18	1
Εθνικά Συνέδρια	23	1
Διδακτικά βιβλία και σημειώσεις	5	1
Ιστοσελίδες Χημείας	7	2
Λογισμικά χημείας	9	1
Αναφορές <sup>†</sup>	387	236
<i>h</i> -index <sup>†</sup>	12	(+5)

<sup>†</sup>Πηγή: *Scopus, Journals*

\* συγγραφέας επικοινωνίας

Journals	IF 2023	Cite Score 2023	Papers
Chemistry—A European Journal	3.9	7.9	2 (1*)
Journal of Physical Chemistry C	3.5	6.5	2 (1*)
Journal of Computational Chemistry	3.4	6.6	1*
Physical Chemistry Chemical Physics	2.9	5.5	7 (5*)
Journal of Physical Chemistry A	2.7	5.2	2 (1*)
New Journal of Chemistry	2.7	5.3	1*
ChemPhysChem	2.3	4.6	2*
Chemistry Education Research and Practice	2.6	4.8	1
International Journal of Quantum Chemistry	2.3	4.7	2
Journal of Chemical Education	2.5	5.6	3
Education and Information Technologies	4.8		1
AIP Conference Proceedings			1
Procedia - Social and Behavioral Sciences			2
The Open Mechanical Engineering Journal			1

## Κριτής σε Περιοδικά

Journal of Physical Chemistry, *ACS* | Chemistry, *MDPI* | Molecules, *MDPI* | Physical Chemistry Chemical Physics, *RSC* | Chemistry – A European Journal, *Wiley* | ChemPhysChem, *Wiley* | International Journal of Quantum Chemistry, *Wiley* | International Journal of Molecular and Theoretical Physics, *Symbiosis* | Journal of Chemical Education, *ACS* | Computers and Education, *Elsevier* | International Online Journal of Educational Sciences | Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, *ENEΦΕΤ*

## Α. Άρθρα σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά

(\* συγγραφέας επικοινωνίας)

### Μετά τον διορισμό (2021)

- A26.** Nickolas D. Charistos\*, Samuel R. Lawrence and Alvaro Muñoz-Castro\*  
**Global and Local Shielding/Deshielding Variation in C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Fullerenes Upon Reduction: Evaluation of Aromaticity, <sup>13</sup>C-NMR and Anisotropy Patterns**  
 2024 *Submitted*
- A25.** R. Lingas, N. D. Charistos\* and A. Muñoz-Castro\*  
**BOROSPHERENE IN THE NANOHOOP: Complexation and Aromaticity of Neutral and Dioxidized Cycloparaphenylene Supramolecules with B<sub>40</sub> And C<sub>60</sub> Fullerenes**  
*Chemistry - A European Journal* **2024**, 30(49), e202402027  
 DOI: [10.1002/chem.202402027](https://doi.org/10.1002/chem.202402027)
- A24.** R. Lingas, N. D. Charistos\* and A. Muñoz-Castro\*  
**Charge Delocalization and Aromaticity of Doubly Reduced Double-walled Carbon Nano hoops**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2023**, 25, 19481-19491  
 DOI: [10.1039/D3CP01994B](https://doi.org/10.1039/D3CP01994B) **PCCP 2023 HOT ARTICLE**
- A23.** R. Lingas, N. D. Charistos\* and A. Muñoz-Castro\*  
**Local and Global Aromaticity under Rotation. Analysis of Two- and Three-Dimensional Representative Carbon Nanostructures**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2023**, 25, 14285-14293  
 DOI: [10.1039/D3CP00569K](https://doi.org/10.1039/D3CP00569K)
- A22.** Mesías Orozco-Ic,\* Nickolas D. Charistos, Alvaro Muñoz-Castro, Rafael Islas, Dage Sundholm,\* and Gabriel Merino\*  
**Core-electron contributions to the molecular magnetic response**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2022**, 24, 12158-12166  
 DOI: [10.1039/D1CP05713H](https://doi.org/10.1039/D1CP05713H)
- A21.** R. Lingas, N. D. Charistos\* and A. Muñoz-Castro\*  
**Aromaticity of *ortho* and *meta* 8-Cycloparaphenylene and their dications: Induced magnetic field analysis with localized and delocalized orbitals in strained nano hoops**  
*ChemPhysChem* **2021**, 22(8), 741-751  
 DOI: [10.1002/cphc.202100057](https://doi.org/10.1002/cphc.202100057)



## Πριν τον διορισμό

---

- A20.** P. L. Rodríguez-Kessler, **N. D. Charistos**, R. B. King\* and A. Muñoz-Castro\*  
**On the Formation of Spherical Aromatic Endohedral Buckminsterfullerene. Evaluation of M@C<sub>60</sub> (M=Cr, Mo, W) From Relativistic DFT Calculations**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2020**, *22*, 14268-14275  
 DOI: [10.1039/D0CP02475A](https://doi.org/10.1039/D0CP02475A)
- A19.** **Charistos\*** N. and Muñoz-Castro\* A.  
**Induced Magnetic Field in sp-Hybridized Carbon Rings: Analysis of Double Aromaticity and Antiaromaticity in Cyclo[2n]carbon Allotropes**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2020**, *22*, 9240-9249  
 DOI: [10.1039/D0CP01252A](https://doi.org/10.1039/D0CP01252A) **PCCP 2020 HOT ARTICLE**
- A18.** M. Orozco-Ic, J. Barroso, **N. D. Charistos**, A. Muñoz-Castro\* and G. Merino\*  
**Consequences of the curvature on the induced magnetic field: Case of helicenes**  
*Chemistry—A European Journal* **2020**, *26* (1), 326-330  
 DOI: [10.1002/chem.201904390](https://doi.org/10.1002/chem.201904390) **VERY IMPORTANT PAPER**
- A17.** Karamanis\* P., **Charistos N. D.**, Sigalas M. P. and Rérat M.  
**Polyaromatic Systems Combining Increasing Optical Gaps and Amplified Nonlinear Optical Properties. A Comprehensive Theoretical Study on B<sub>3</sub>N<sub>3</sub> Doped Nanographenes**  
*Journal of Physical Chemistry C* **2019**, *123*(34), 21135-21149  
 DOI: [10.1021/acs.jpcc.9b05543](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05543)
- A16.** **Charistos\*** N. and Muñoz-Castro\* A.  
**Double aromaticity of B<sub>40</sub> Fullerene: Induced magnetic field analysis of π and σ delocalization in boron cavernous structure**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2019**, *21*, 20232-20238  
 DOI: [10.1039/C9CP04223G](https://doi.org/10.1039/C9CP04223G)
- A15.** **Charistos\*** N. D., Muñoz-Castro A. and Sigalas M. P.  
**The pseudo-π model of the Induced Magnetic Field: Fast and Accurate Visualization of Shielding and Deshielding Cones in Planar Conjugated Hydrocarbons and Spherical Fullerenes**  
*Physical Chemistry Chemical Physics* **2019**, *21*, 6150-6159  
 DOI: [10.1039/C9CP00836E](https://doi.org/10.1039/C9CP00836E)
- A14.** **Charistos N. D.**, Jin P. and Muñoz-Castro\* A.  
**Aromatic Character of O<sub>h</sub>-C<sub>24</sub>N<sub>24</sub>. A Cavernous Nitride Fullerene Bearing N<sub>4</sub>-Macrocycle Motifs**  
*International Journal of Quantum Chemistry* **2019**, *119*(13), e25919  
 DOI: [10.1002/qua.25919](https://doi.org/10.1002/qua.25919)

- A13.** Ortolan O. A., **Charistos N. D.**, Guajardo-Maturana R., Olea C., Caramori G. F., Parreira R. and Muñoz-Castro A.  
**On the Cation- $\pi$  Capabilities of Small all  $sp^2$ -Carbon Host Structures. Evaluation of [6.8]<sub>3</sub>Cyclacene from Relativistic DFT Calculations**  
*International Journal of Quantum Chemistry* **2019**, 119(4), e25811  
 DOI: [10.1002/qua.25811](https://doi.org/10.1002/qua.25811)
- A12.** **Charistos\* N.** and Muñoz-Castro\* A.  
**The Induced Magnetic Field of Fullerenes. Role of  $\sigma$ - and  $\pi$ - contributions to Spherical Aromatic, Non-Aromatic and Antiaromatic Character in  $C_{60}^q$  ( $q = +10, 0, -6, -12$ ), and Related Alkali-Metal Decorated Building Blocks,  $Li_{12}C_{60}$  and  $Na_6C_{60}$**   
*Journal of Physical Chemistry C* **2018**, 122 (17), 9688-9698  
 DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b02419](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b02419)
- A11.** **Charistos\* N.**, Papadopoulos A., Nikopoulos T, Muñoz-Castro A. and Sigalas\* M.  
**Canonical Orbital Contributions to the Magnetic Fields Induced by Global and Local Diatropic and Paratropic Ring Currents**  
*Journal of Computational Chemistry* **2017**, 38 (30), 2594–2604  
 DOI: [10.1002/jcc.24917](https://doi.org/10.1002/jcc.24917)
- A10.** Papadopoulos A. G, **Charistos\* N. D.** and Muñoz-Castro\* A.  
**Magnetic Response of Aromatic Rings Under Rotation: Aromatic Shielding Cone of Benzene Upon Different Orientations of the Magnetic Field**  
*ChemPhysChem* **2017**, 18 (12), 1499–1502  
 DOI: [10.1002/cphc.201700279](https://doi.org/10.1002/cphc.201700279)
- A9.** Papadopoulos A. G., **Charistos\* N. D.** and Muñoz-Castro\* A.  
**On the Role of Heteroatoms in Aromatic Rings. Insights from  $10\pi$  Main Group Elements Heterorings [(EH)<sub>2</sub>S<sub>2</sub>N<sub>4</sub>]<sup>q</sup> (E = C, P, B, Si, Al and q = 0, -2)**  
*New Journal of Chemistry* **2016**, 40 (6), 5090–5098  
 DOI: [10.1039/C5NJ03573B](https://doi.org/10.1039/C5NJ03573B)
- A8.** A. G. Papadopoulos, **N. D. Charistos**, K. Kyriakidou and M.P. Sigalas\*  
**Study of Electron Delocalization in 1,2-, 1,3-, and 1,4-Azaborines Based on the Canonical Molecular Orbital Contributions to the Induced Magnetic Field and Polyelectron Population Analysis**  
*Journal of Physical Chemistry A* **2015**, 119(39), 10091–10100  
 DOI: [10.1021/acs.jpca.5b06027](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b06027)
- A7.** **N. D. Charistos\***, A. G. Papadopoulos and M. P. Sigalas\*  
**Interpretation of electron delocalization in benzene, cyclobutadiene, and borazine based on visualization of individual molecular orbital contributions to the induced magnetic field**  
*Journal of Physical Chemistry A* **2014**, 118(6), 1113–22  
 DOI: [10.1021/jp411410r](https://doi.org/10.1021/jp411410r)
- A6.** L.D. Antonoglou, **N.D. Charistos** and M.P. Sigalas\*  
**Design, development and implementation of a technology enhanced hybrid course on molecular symmetry: Students' outcomes and attitudes**  
*Chemistry Education Research and Practice* **2011**, 12(4), 454-468  
 DOI: [10.1039/C0RP90013C](https://doi.org/10.1039/C0RP90013C)

- A5.** C. A. Tsipis\* and **N. D. Charistos**  
**How the Aromatic 4-Membered Hydrido-Bridged Copper Rings Respond to Successive Nucleophilic Attack?**  
*The Open Mechanical Engineering Journal* **2008**, *2*, 12  
 DOI: [10.2174/18741555X00802010012](https://doi.org/10.2174/18741555X00802010012)
- A4.** **N. D. Charistos**, C.A. Tsipis and M. P. Sigalas\*  
**3D Molecular Symmetry Shockwave: A Web Application for Interactive Visualization and Three-Dimensional Perception of Molecular Symmetry**  
*Journal of Chemical Education* **2005**, *82*, 1741  
 DOI: [10.1021/ed082p1741.2](https://doi.org/10.1021/ed082p1741.2)
- A3.** **N. D Charistos**, C.A. Tsipis and M. P. Sigalas\*  
**3DNormalModes Shockwave. Three-Dimensional Perception of Molecular Normal Modes on the Web**  
*Journal of Chemical Education* **2004**, *81*, 1231  
 DOI: [10.1021/ed081p1231.2](https://doi.org/10.1021/ed081p1231.2)
- A2.** **N. D. Charistos**, V.I. Teberekidis, C.A. Tsipis and M.P. Sigalas\*  
**Design and Development of a Multimedia Educational Tool for Interactive Visualization and Three Dimensional Perception of Vibrational Spectra Data of Molecules**  
*Education and Information Technologies* **2003**, *8*, 369  
 DOI: [10.1023/B:EAIT.0000008677.08249.98](https://doi.org/10.1023/B:EAIT.0000008677.08249.98)
- A1.** M. P. Sigalas\*, **N. D. Charistos**, V.I. Teberekidis and C. A. Tsipis  
**3DNormalModes 1.0**  
*Journal of Chemical Education* **2003**, *80*, 1222  
 DOI: [10.1021/ed080p1222.2](https://doi.org/10.1021/ed080p1222.2)

## B. Άρθρα σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά από Συνέδρια

### Πριν τον διορισμό

- B3.** Koutalas V. G., Antonoglou L. D., **Charistos N. D.**, Sigalas\* M. P.  
**Investigation of Students' Ability to Transform and Translate 2D Molecular Diagrammatic Representations and Its Relationship to Spatial Ability and Prior Chemistry Knowledge**  
*Procedia - Social and Behavioral Sciences* **2014**, *152*, 698–703  
 DOI: [10.1016/j.sbspro.2014.09.265](https://doi.org/10.1016/j.sbspro.2014.09.265)
- B2.** Antonoglou L. D., Kostelidou T. N., **Charistos N. D.**, Sigalas\* M. P.  
**Investigating Chemistry Students' Skills to Mentally Manipulate (Rotation & Reflection) 2D Symbolic Molecular Representations**  
*Procedia - Social and Behavioral Sciences* **2014**, *152*, 517–522  
 DOI: [10.1016/j.sbspro.2014.09.208](https://doi.org/10.1016/j.sbspro.2014.09.208)

- B1.** Papadopoulos A. G., Charistos N. D., Sigalas\* M. P.  
**Aromaticity Variation in BN Substituted Triphenylene: A Theoretical Study**  
*AIP Conference Proceedings* **2012**, 1504, 1223–1226  
DOI: [10.1063/1.4772148](https://doi.org/10.1063/1.4772148)

## Γ. Κεφαλαία σε Διεθνή Επιστημονικά Βιβλία

### Πριν τον διορισμό

- Γ2.** L. D. Antonoglou, N.D. Charistos, M.P. Sigalas\*  
**Design of Molecular Visualization Educational Software for Chemistry Learning**  
In T.B. Scott and J. I. Livingston (Eds) *Leading-Edge Educational Technology*, 55 – 81, Nova Publishers, New York, **2008**
- Γ1.** C. A. Tsipis\*, C. E. Kefalidis and N. D. Charistos.  
**Ligand-Effects on the Stability, Conformational Preference and Diatropic Response of 3-Membered Hydrocopper Rings**  
In T. W. Cartere and K. S. Verley (Eds), *Coordination Chemistry Research Progress*, 201 – 215, Nova Publishers, New York, **2008**

## Δ. Ανακοινώσεις σε Διεθνή Συνέδρια

### Μετά τον διορισμό

- Δ18.** R. Lingas, N. D. Charistos, M. P. Sigalas.  
**PyMAF: A Software Tool for the Analysis and Visualization of the Induced Magnetic Field**  
*1<sup>st</sup> Aristotle Conference on Chemistry, ACC2023*, November **2023**, Thessaloniki, Greece

### Πριν τον διορισμό

- Δ17.** A. G. Papadopoulos, N. D. Charistos, M. P. Sigalas.  
**Visualization of molecular orbitals contributions to the induced magnetic field of heterocyclic isocoronene analogues**  
*25th Conference on Current Trends in Computational Chemistry*, November **2017**, Jackson, MS, United States
- Δ16.** A. G. Papadopoulos, N. D. Charistos, A. Arvanitidis, M. P. Sigalas.  
**Visualization of the canonical molecular orbital contributions to the induced magnetic field of B-Trisubstituted Borazines**  
*15th International Congress of Quantum Chemistry*, June **2015**, Beijing, China

- Δ15.** N. D. Charistos, A. G. Papadopoulos, T. A. Nikopoulos, M. P. Sigalas.  
**Visualization of Differences and Similarities of the Magnetic Response of  $\pi$  and  $\sigma$ - Molecular Orbitals in Seven-Membered Boron Wheels**  
*10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC, October 2014, Santiago, Chile*
- Δ14.** A. G. Papadopoulos, N. D. Charistos, A. G. Arvanitidis, M. P. Sigalas.  
**Substituents' Effects on  $\pi$  Electron Delocalization in B-Trisubstituted Borazines Based on Visualization of Molecular Orbitals' Contributions to the Induced Magnetic Field**  
*10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC, October 2014, Santiago, Chile*
- Δ13.** V. G. Koutalas, L. D. Antonoglou, N. D. Charistos, M. P. Sigalas.  
**How students translate and transform molecular diagrammatic representations? A study based on matching items questionnaires, eye movements' patterns and verbal explanations**  
*12th European Conference on Research in Chemistry Education, ECRICE, July 2014, Jyväskylä, Finland*
- Δ12.** Nickolas D. Charistos, Maria Palassopoulou, and Michael P. Sigalas.  
**Teaching Structural Biochemistry Using Jmol Based Interactive Molecular Visualization Material and Protein Data Bank**  
*12th European Conference on Research in Chemistry Education, ECRICE, July 2014, Jyväskylä, Finland*
- Δ11.** M.P. Sigalas, N.D. Charistos, V. Koutalas, M. Palassopoulou and L.D. Antonoglou.  
**Molecular Visualization in Chemistry Education. From symmetry principles to platonic solids, transition metal complexes and proteins' structure**  
*First African Conference on Research In Chemistry Education [ACRICE-1], 2013 Adis Ababa, Ethiopia*
- Δ10.** L. D. Antonoglou, N. D. Charistos, M. P. Sigalas.  
**Exploring Criteria for Selecting Proper Orientations of 2D and 3D Molecular Representations in Chemistry Education**  
*11th European Conference on Research in Chemistry Education, ECRICE, July 2012, Rome, Italy*
- Δ9.** A. Papadopoulos, N. Charistos, M. Sigalas.  
**Molecular Orbital Contributions to the Induced Magnetic Field of Benzene, Cyclobutadiene, Borazine, 1,2-, 1,3- and 1,4-Azaborines**  
*9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC, July 2011, Sandiago de Compostela, Spain*
- Δ8.** L. D. Antonoglou, N.D. Charistos, M.P. Sigalas.  
**Design, Development, Implementaton and Assessment of a Hybrid Course on Molecular Symmetry — A pilot project**  
*The 4th International Conference Research in Didactics of the Sciences, DidSci, July 2010, Krakow, Poland*
- Δ7.** N. D. Charistos, L. D. Antonoglou, V. Koutalas and M. P. Sigalas.  
**Design of Molecular Visualization Educational Software for Learning and Teaching Molecular Symmetry: From Learning Objects to Online Course Material**  
*10th European Conference on Research in Chemistry Education, ECRICE, July 2010, Krakow, Poland*

- Δ6.** L. Antonoglou, V. Koutalas, M. Palassopoulou, N. Charistos, M. Sigalas.  
**Molecular Visualization in Chemistry Education. From symmetry principles to platonic solids, transition metal complexes and proteins' structure**  
*Gordon Research Conference on Visualization in Science and Education, GRC, July 2009, Magdalen College, Oxford, UK*
- Δ5.** M. P. Sigalas and N. D. Charistos.  
**3DMolSym - Chemistry Classic Award Winner**  
*MERLOT International Conference, August 2008, Minneapolis USA*
- Δ4.** N. D. Charistos and M. P. Sigalas.  
**Standalone and Web Applications for Interactive Visualization and Three-Dimensional Perception of Molecular Symmetry Elements and Normal Modes**  
*International Conference on Computational Methods in Sciences and Engineering, ICCMSE, October 2005, Lutraki, Greece*
- Δ3.** N. D. Charistos and M. P. Sigalas.  
**Standalone and Web Applications for Interactive Visualization and Three-Dimensional Perception of Molecular Symmetry Elements and Normal Modes**  
*Gordon Research Conference on Visualization in Science and Education, GRC, July 2005, Queen's College, Oxford, UK*
- Δ2.** N. D. Charistos, V.I. Teberekidis, C.A. Tsipis, M.P. Sigalas.  
**Development of Educational Programs for Visualization and Three-Dimensional Perception of Symmetry Elements and Normal Modes of Vibration**  
*4th European Conference on Computational Chemistry, EUCCO-CC4, 2002, Assisi, Italy*
- Δ1.** N. D. Charistos, V.I. Teberekidis, C.A. Tsipis, M.P. Sigalas.  
**3DNormalModes: A program for Three-Dimensional Perception of Normal Modes**  
*6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists, WATOC, 2002, Lugano, Switzerland*

## Ε. Ανακοινώσεις σε Εθνικά Συνέδρια

### Μετά τον διορισμό

---

- E23.** Κ. Αδραμερινά, Β. Κουταλάς, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας  
**Η διδασκαλία της Χημείας στα νέα προγράμματα σπουδών με το περιβάλλον του ιστοχώρου ChemNoesis**  
*13<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Ιωάννινα, 2023*  
DOI: [10.12681/codiste.5456](https://doi.org/10.12681/codiste.5456)

### Πριν τον διορισμό

---

- E22.** Δ. Γανίτη, Λ. Πασσιάς, Μ.-Π. Βλαχολιά, Β. Κουταλάς, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας  
**Αξιολόγηση Ευχρηστίας και Αποτελεσματικότητας Γνωστικού Εργαλείου Σχεδίασης και Χειρισμού Συντακτικών Τύπων Οργανικών Ενώσεων**  
*11<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Φλώρινα, 2019*
- E21.** Ν. Χαριστός, Β. Κουταλάς, Μ. Βλαχολιά, Κ. Σάλτα, Χ. Τζουγκράκη, Μ. Σιγάλας  
**2DrawChemQuiz: Σχεδιασμός, ανάπτυξη και εφαρμογή ενός γνωστικού εργαλείου εξάσκησης στη σχεδίαση και χειρισμό συντακτικών τύπων**  
*10<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Ρέθυμνο, 2017*
- E20.** Β. Κουταλάς, Π. Καττικαρίδου, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας  
**Εφαρμογή Τεχνικών Οφθαλμικών Καταγραφών για τη Μελέτη Χειρισμού και Επεξεργασίας της Πληροφορίας από Χρήστες Πολυαναπαραστασιακού Εκπαιδευτικού Περιβάλλοντος με Αντικείμενο τις Προβολές Fischer & Newman**  
*10<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Ρέθυμνο, 2017*
- E19.** Β. Γ. Κουταλάς, Ν. Δ. Χαριστός, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Σχεδιασμός και Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού Χειρισμού Τρισδιάστατων Μοριακών Μοντέλων και Δισδιάστατων Διαγραμματικών Αναπαραστάσεων με Αντικείμενο τις Προβολές Fischer και Newman**  
*9<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Θεσσαλονίκη, 2015*
- E18.** Α. Βουκλής, Ε. Παρισσοπούλου, Ν. Χαριστός, Α. Γιαννακουδάκης, Π. Γιαννακουδάκης.  
**Διερεύνηση των Απόψεων των Φοιτητών Σχετικά με τη Μελέτη και την Κατανόηση Της Ηλεκτροχημείας μέσω Χρήσης Εκπαιδευτικού Ισοτόπου και Κατάλληλα Σχεδιασμένων Ερωτήσεων Αυτοαξιολόγησης**  
*9<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Θεσσαλονίκη, 2015*
- E17.** Β. Γ. Κουταλάς, Λ. Δ. Αντώνογλου, Ν. Δ. Χαριστός, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Διερεύνηση των δυσκολιών που αντιμετωπίζουν οι φοιτητές στην κατανόηση και το νοητικό χειρισμό δισδιάστατων διαγραμματικών μοριακών αναπαραστάσεων**  
*9<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Θεσσαλονίκη, 2015*
- E16.** Ν. Δ. Χαριστός, Α. Γ. Παπαδόπουλος, Θ. Νικόπουλος, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Οπτικοποίηση και ανάλυση της μαγνητικής απόκρισης των π- και σ- μοριακών τροχιακών επταμελών μοριακών τροχών βορίου**  
*12<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδος Κύπρου, Θεσσαλονίκη, 2015*
- E15.** Α. Γ. Παπαδόπουλος, Ν. Δ. Χαριστός, Α. Αρβανιτίδης, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Οπτικοποίηση και ανάλυση της επίδρασης της υποκατάστασης στον π- ηλεκτρονιακό απεντοπισμό σε Β-τριυποκατεστημένες βοραζίνες**  
*12<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδος Κύπρου, Θεσσαλονίκη, 2015*

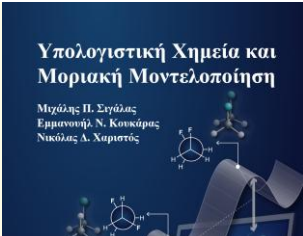
- E14.** Β. Γ. Κουταλάς, Λ. Δ. Αντώνογλου, Ν. Δ. Χαριστός, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Βαθμός Κατανόησης και Ευχέρεια Χειρισμού Δισδιάστατων Διαγραμματικών Μοριακών Αναπαραστάσεων και Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού για τη Βελτίωση τους**  
*12<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδος Κύπρου, Θεσσαλονίκη, 2015*
- E13.** Β. Γ. Κουταλάς, Ν. Δ. Χαριστός, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Σχεδιασμός και Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Ιστότοπου με Δυναμικά Διασυνδεδεμένες Μοριακές Αναπαραστάσεις για την Κατανόηση των Προβολών Fischer και Newman**  
*8<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο των Εκπαιδευτικών για τις ΤΠΕ, 26-28 Ιουνίου, Σύρος, 2015.*
- E12.** Α. Βουκλής, Ε. Παρισσοπούλου, Ν. Χαριστός, Α. Γιαννακουδάκης, Π. Γιαννακουδάκης  
**Η Χρησιμοποίηση των Δυνατοτήτων του CMS Joomla στο Σχεδιασμό και Υλοποίηση Ιστότοπου με Θέμα την Ηλεκτροχημεία**  
*8<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο των Εκπαιδευτικών για τις ΤΠΕ, 26-28 Ιουνίου, Σύρος, 2015.*
- E11.** Β. Κουταλάς, Ν. Γιωργάς, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας.  
**Επανασχεδιασμός του εκπαιδευτικού λογισμικού για το μάθημα της Χημείας Γ' Γυμνάσιου «Ο Θαυμαστός Κόσμος της Χημείας» με την αξιοποίηση των δυνατοτήτων ενός σύγχρονου συστήματος διαχείρισης περιεχομένου**  
*10<sup>ο</sup> Συνέδριο Ε.Ε.Ε.Π. - Δ.Τ.Π.Ε - Η Εκπαίδευση στην Εποχή των ΤΠΕ, Αθήνα, 2013*
- E10.** Λ. Αντώνογλου, Θ. Κωστελίδου, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας.  
**Διερεύνηση Οπτικοχωρικής Ικανότητας Φοιτητών Χημείας. Εργαλεία Εκτίμησης Δεξιοτήτων Νοητικής Οπτικοποίησης και Χειρισμού της Τρισδιάστατης Μοριακής Δομής**  
*8<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Βόλος, 2013*
- E9.** Λ. Αντώνογλου, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας.  
**Διερεύνηση της ικανότητας φοιτητών χημείας στο νοητικό χειρισμό και τη μετάφραση 2D και 3D μοριακών οπτικοποιήσεων**  
*21<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Θεματική Ενότητα: Χημεία και Εκπαίδευση, Θεσσαλονίκη, 2011*
- E8.** Ν. Δ. Χαριστός, Α.Γ. Παπαδόπουλος, Θ. Νικόπουλος, Μ.Π. Σιγάλας.  
**Οπτικοποίηση της Συνεισφοράς των Μοριακών Τροχιακών στο Επαγόμενο Μαγνητικό Πεδίο Επίπεδων Κυκλικών Μορίων**  
*21<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Θεματική Ενότητα: Φυσική και Θεωρητική Χημεία, Θεσσαλονίκη, 2011*
- E7.** Λ.Δ. Αντώνογλου, Ν.Δ. Χαριστός, Μ.Π. Σιγάλας.  
**Διερεύνηση της δεξιότητας της νοητικής μεταφοράς ανάμεσα σε Τρισδιάστατες & Δισδιάστατες αναπαραστάσεις της τετραεδρικής μοριακής δομής από φοιτητές Χημείας**  
*7<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση (ΚΟΔΙΦΕΕΤ), Αλεξανδρούπολη, 2011*
- E6.** Λ.Δ. Αντώνογλου, Ν.Δ. Χαριστός, Μ.Π. Σιγάλας.  
**Σχεδιασμός, ανάπτυξη, εφαρμογή και αξιολόγηση της αποτελεσματικότητας του υβριδικού μοντέλου διδασκαλίας της μοριακής συμμετρίας**  
*7<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο με Διεθνή Συμμετοχή, Οι ΤΠΕ στην Εκπαίδευση - Ελληνική Επιστημονική Ένωση Τεχνολογιών Πληροφορίας & Επικοινωνιών στην Εκπαίδευση (ΕΤΠΕ), Κόρινθος, 2010*



- E5.** Μ. Παλασοπούλου, Ν. Χαριστός, Μ. Σιγάλας  
**Τρισδιάστατη Οπτικοποίηση των Πρωτεϊνών ως Εκπαιδευτικό Εργαλείο σε Περιβάλλον WWW**  
 6ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, (ΚΟΔΙΦΕΕΤ), Φλώρινα, 2009
- E4.** Λ.Δ. Αντώνογλου, Ν.Δ. Χαριστός, Μ.Π. Σιγάλας.  
**Σχεδιασμός & Ανάπτυξη Υβριδικού Μοντέλου Διδασκαλίας της Μοριακής Συμμετρίας με Χρήση Τρισδιάστατης Μοριακής Οπτικοποίησης**  
 6ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών και Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, (ΚΟΔΙΦΕΕΤ), Φλώρινα, 2009
- E3.** Ν. Δ. Χαριστός και Μ. Π. Σιγάλας.  
**Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού Μοριακής Μοντελοποίησης και Εφαρμογή του σε Θέματα Συμμετρίας και Κανονικών Τρόπων Δόνησης των Μορίων**  
 5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Ε.Τ.Π.Ε., “Οι Τεχνολογίες της Πληροφορίας και των Επικοινωνιών στην Εκπαίδευση”, Θεσσαλονίκη, 2006
- E2.** Μ. Σιγάλας, Α. Γιαννακουδάκης, Χ. Τσουγκράκη, Β. Αγγελόπουλος, Α. Τζαμτζής, Ν. Χαριστός και Λ. Δ. Αντώνογλου.  
**Υποστηρικτικό Εκπαιδευτικό Λογισμικό για το Μάθημα της Χημείας Γυμνασίου**  
 5<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Ε.Τ.Π.Ε., “Οι Τεχνολογίες της Πληροφορίας και των Επικοινωνιών στην Εκπαίδευση”, Θεσσαλονίκη, 2006
- E1.** Ν. Δ. Χαριστός, Κ.Α. Τσίπης, Μ. Π. Σιγάλας.  
**Χρήση Τεχνολογιών Τρισδιάστατων Γραφικών για τη Μοντελοποίηση και Τρισδιάστατη Απεικόνιση των Κανονικών Τρόπων Δόνησης και της Συμμετρίας των Μορίων**  
 2ο Πανελλήνιο Συνέδριο “Πληροφορική και Εκπαίδευση”, Θεσσαλονίκη, 2004

## ΣΤ. Διδακτικά Βιβλία και Σημειώσεις

### Μετά τον διορισμό

- ΣΤ5.**  Σιγάλας, Μ., Κουκάρας, Ε., Χαριστός, Ν.  
**Υπολογιστική Χημεία και Μοριακή Μοντελοποίηση**  
 Κάλλιπος, Ανοιχτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις  
 2024  
<http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-1024>

### Πριν τον διορισμό

- ΣΤ4.** Ν. Χαριστός, Ε. Κουιάρας, Μ. Σιγάλας  
**Online Εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας**  
 Video-tutorials Μαθήματος, Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ., 2020  
<https://www.youtube.com/playlist?list=PLZdnGm8BQINwDF74bc6tCSRKwwiqwXZjv>
- ΣΤ3.** Μ. Π. Σιγάλας, Λ. Αντώνογλου, Ν. Χαριστός  
**Μοριακή Συμμετρία και Θεωρία Ομάδων**  
 Κάλλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις, 2016  
 Διαθέσιμο στο: <http://hdl.handle.net/11419/4019>.
- ΣΤ2.** Μ. Π. Σιγάλας και Ν. Δ. Χαριστός.  
**Ανάπτυξη Πολυμεσικών Εφαρμογών στο Περιβάλλον Ανάπτυξης Macromedia Director**  
 Σημειώσεις Μαθήματος, Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. - ΔιΧηNET, Θεσσαλονίκη, 2003.
- ΣΤ1.** Κ. Τσίπης, Π. Παλαμιτζόγλου, Δ. Δερπάνης, Π. Καριπίδης, Α. Τσίπης, Ν. Χαριστός.  
**Λεξικό της Χημείας**  
 Μαλλιάρης - Παιδεία, Θεσσαλονίκη, 2003.

## Ζ. Λογισμικά Χημείας

### Μετά τον διορισμό

**Ζ9.** 

**Τίτλος PyMAF**

**Είδος** Ερευνητικό λογισμικό CMO και NBO ανάλυσης και 2D/3D οπτικοποίησης του επαγόμενου μοριακού μαγνητικού πεδίου.

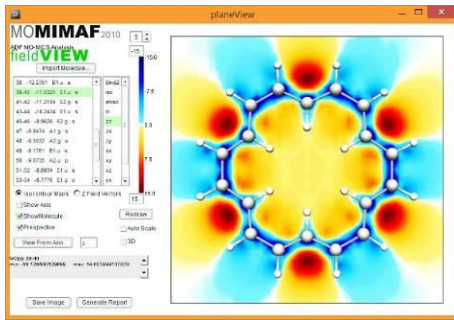
**Έτος 2021-2024**

**Κοινό** Ερευνητές Υπολογιστικής Χημείας

**Δημοσιεύσεις** A21, A22, A24, A25, A26, Δ18

## Πριν τον διορισμό

28.



Τίτλος **MIMAF**

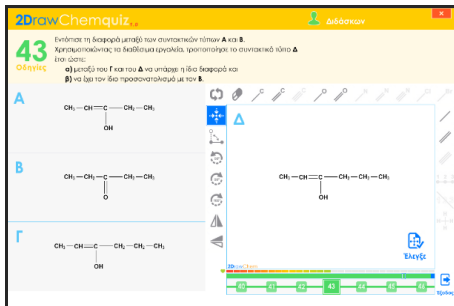
Είδος Ερευνητικό λογισμικό οπτικοποίησης ισόπυκνων χαρτών και διανυσμάτων μοριακών μαγνητικών πεδίων.

Έτος 2008-2021

Κοινό Ερευνητές Υπολογιστικής Χημείας

Δημοσιεύσεις A7, A8, A9, A10, A11, A12, A14, A15, A16, A17, A18, A19, B1, Δ14, Δ15, Δ16, E15, E16

27.



Τίτλος **2DrawChem**

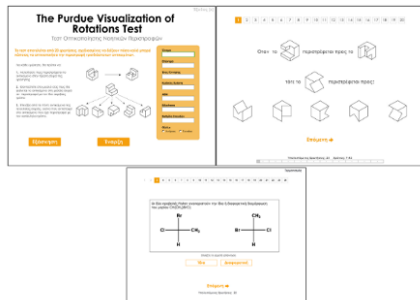
Είδος Εκπαιδευτικό λογισμικό μοντελοποίησης και σχεδιασμού συντακτικών τύπων.

Έτος 2013-2015

Κοινό Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

Δημοσιεύσεις E21, E22

26.



Τίτλος **Matching Items Environment**

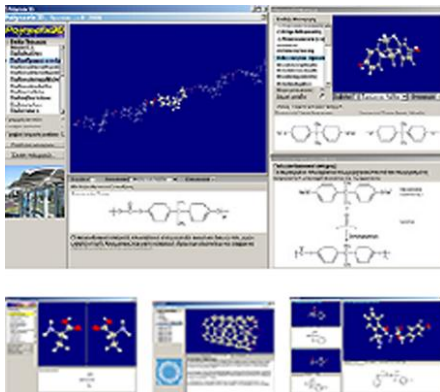
Είδος Ερευνητικό λογισμικό ανάπτυξης διαδραστικών ερωτηματολογίων.

Έτος 2013

Κοινό Ερευνητές Χημικής Εκπαίδευσης

Δημοσιεύσεις B2, B3, Δ13

25.



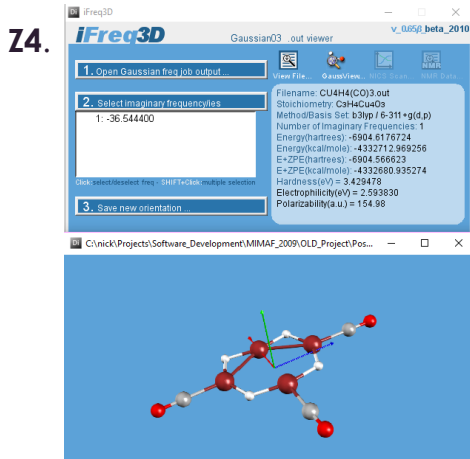
Τίτλος **Molix3D**

Είδος Πακέτο εκπαιδευτικών λογισμικών μοριακής οπτικοποίησης πολυμερών, ισομερών, εναντιομερών, πεπτιδίων και λειτουργικών ομάδων οργανικών ενώσεων.

Έτος 2007

Κοινό Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

Δημοσιεύσεις Γ2



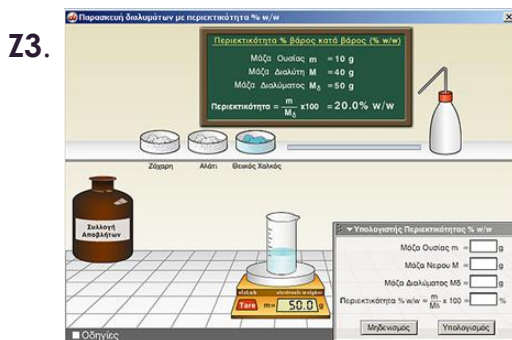
**Τίτλος iFreq3D**

**Είδος** Ερευνητικό λογισμικό μοριακής οπτικοποίησης και δημιουργίας διαγραμμάτων NICS-scan.

**Έτος** 2005-2006

**Κοινό** Ερευνητές Θεωρητικής και Υπολογιστικής Χημείας

**Δημοσιεύσεις** Α5, Γ1



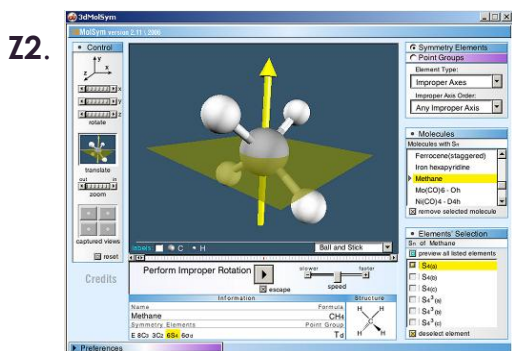
**Τίτλος juniorLAB**

**Είδος** Εκπαιδευτικό λογισμικό προσομοίωσης Χημικού Εργαστηρίου.

**Έτος** 2005

**Κοινό** Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

**Δημοσιεύσεις** Ε2, Ε11



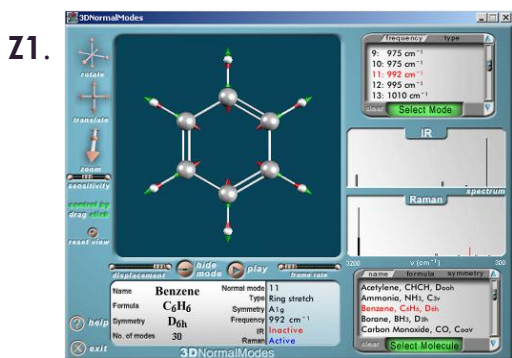
**Τίτλος 3DMolSym**

**Είδος** Εκπαιδευτικό λογισμικό οπτικοποίησης μοριακής συμμετρίας.

**Έτος** 2004

**Κοινό** Τριτοβάθμια εκπαίδευση

**Δημοσιεύσεις** Α4, Α6, Γ2, Δ8, Δ7, Δ6, Δ5, Δ4, Δ3, Ε6, Ε4, Ε3, Ε1, ΣΤ3



**Τίτλος 3DNormalModes**

**Είδος** Εκπαιδευτικό λογισμικό μοριακής οπτικοποίησης κανονικών τρόπων δόνησης.

**Έτος** 2003

**Κοινό** Τριτοβάθμια εκπαίδευση

**Δημοσιεύσεις** Α1, Α2, Α3, Γ2, Δ4, Δ3, Δ2, Δ1, Ε3, Ε1, ΣΤ3

## Η. Ιστοσελίδες Χημείας

### Μετά τον διορισμό



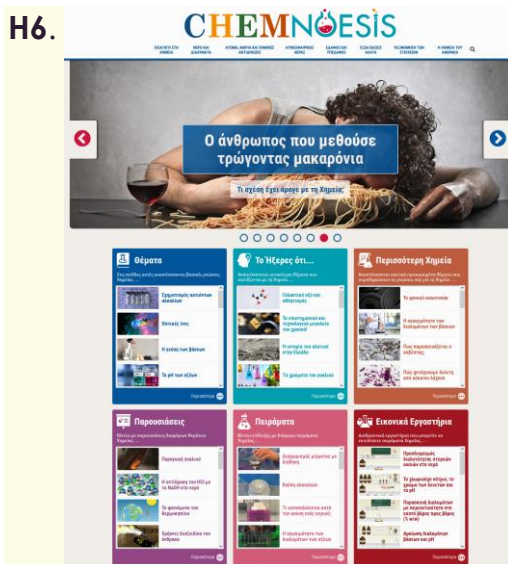
Τίτλος **ACC2023**

Είδος Ιστοσελίδα Συνεδρίου Χημείας

Έτος 2023

Κοινό Λαοδημαϊκή κοινότητα

Link <https://acc2023.chem.auth.gr>



Τίτλος **CHEMNOESIS**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

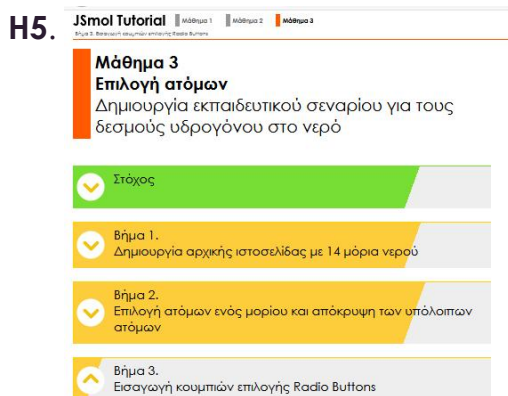
Έτος 2022

Κοινό Δευτεροβάθμια εκπαίδευση, Ευρύ κοινό

Link <https://chem.noesis.edu.gr>

Δημοσιεύσεις E23

### Πριν τον διορισμό



Τίτλος **Jmol Tutorial**

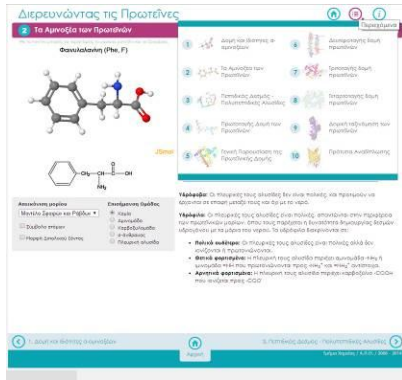
Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα - Tutorial JSmol

Έτος 2019

Κοινό Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Link <https://nicharis.webpages.auth.gr/jmoltutorial/>

H4.



Τίτλος **Διερευνώντας τις Πρωτεΐνες**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

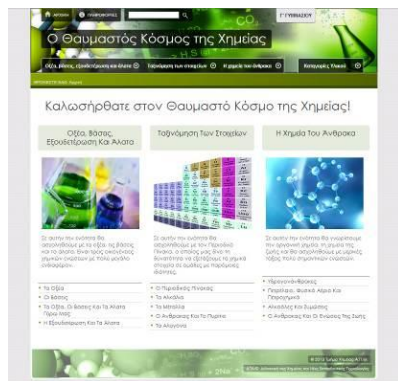
Έτος 2008, 2014

Κοινό Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Link [molwave.chem.auth.gr/proteins](http://molwave.chem.auth.gr/proteins)

Δημοσιεύσεις Δ12, Δ6, E5

H3.



Τίτλος **Ο Θαυμαστός Κόσμος της Χημείας**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

Έτος 2013

Κοινό Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

Link [molwave.chem.auth.gr/fabchem](http://molwave.chem.auth.gr/fabchem)

Δημοσιεύσεις E11

H2.



Τίτλος **Θέματα Ιστορίας της Χημείας**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

Έτος 2012

Κοινό Δευτεροβάθμια – Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Link [molwave.chem.auth.gr/chemhistory](http://molwave.chem.auth.gr/chemhistory)

H1.



Τίτλος **Διεθνές Έτος Χημείας 2011**

Είδος Ιστοσελίδα για το ευρύ κοινό

Έτος 2011

Link [molwave.chem.auth.gr/iyc2011](http://molwave.chem.auth.gr/iyc2011)

## Συμμετοχή σε Ερευνητικά προγράμματα

### Πριν τον διορισμό

- 2018 – 2021**      **Ανάπτυξη, έλεγχος και αποσφαλμάτωση λογισμικού Χημείας. Αναβάθμιση και επέκταση ιστοτόπου. Δημοσιεύσεις-Παρουσιάσεις για τη Χημεία στην τυπική και άτυπη εκπαίδευση.**  
 Επιστημονικός Υπεύθυνος  
 Μελέτη της ανάπτυξης όψεων του επιστημονικού εγγραμματισμού μαθητευομένων σε συνθήκες τυπικής και άτυπης εκπαίδευσης με τη χρήση εικονικών εργαστηρίων και την αξιοποίηση γεωγραφικών δεδομένων.  
*Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ., ΝΟΗΣΙΣ Κέντρο Διάδοσης Επιστημών & Μουσείο Τεχνολογίας*
- 2012 - 2015**      **Έργο Θαλής**  
 MolVisEdu: Οπτικοχωρικές Ικανότητες των Διδασκομένων και Κατανόηση - Μάθηση Εννοιών Σχετιζόμενων με τη Μοριακή Δομή. Σχεδιασμός, Ανάπτυξη και Αξιολόγηση Εκπαιδευτικού Λογισμικού Μοριακής Οπτικοποίησης και Επαυξημένης Πραγματικότητας για τη Δευτεροβάθμια και Τριτοβάθμια Εκπαίδευση.  
*Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.*
- 2006 - 2007**      **Έργο Πλειάδες/ Νηρηίδες, Γ' ΚΠΣ, ΕΑ.ΙΤΥ / Υπ.Ε.Π.Θ.**  
 Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού και Ολοκληρωμένων Εκπαιδευτικών Πακέτων για τα Ελληνικά σχολεία της Πρωτοβάθμιας και Δευτεροβάθμιας Εκπαίδευσης & Διάθεση Προϊόντων Εκπαιδευτικού Λογισμικού στα Σχολεία  
*Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.*
- 2005 - 2006**      **Έργο Πυθαγόρας ΙΙ, Μεταδιδασκτορική Έρευνα**  
 Μελέτη μοριακών clusters και νανοδομών των νομισματοκοπικών μετάλλων (Cu, Ag, Au) με υπολογιστικές μεθόδους ηλεκτρονιακής δομής και διερεύνηση της χημικής και καταλυτικής τους δραστηριότητας  
*Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.*
- 2004 - 2005**      Υποστηρικτικό Εκπαιδευτικό Λογισμικό για το Μάθημα της Χημείας Γυμνασίου:  
**«Ο Θαυμαστός κόσμος της Χημείας»**  
 Υπ.Ε.Π.Θ, Παιδαγωγικό Ινστιτούτο

# Διοικητικό Έργο

## Μέλος Επιτροπών Τμήματος Χημείας

- Ιστοσελίδας (Επικεφαλής της Επιτροπής)
- Προπτυχιακού Προγράμματος Σπουδών
- Υποστηρίξης Εξωστρέφειας
- Κοινωνικής Μέριμνας, Ψυχολογικής Υποστηρίξης και Παρατηρητηρίου Φοιτητών

## Σχεδιασμός – Υλοποίηση Οπτικής Ταυτότητας Τμήματος Χημείας ΑΠΘ

### 80 Χρόνια Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ - 2023

- Σχεδιασμός Λογότυπων



- Σχεδιασμός – Υλοποίηση Banners (85cm x 200cm) και Γιγαντοαφισών (300cm x 900cm)





## ACC2023 – 1<sup>st</sup> Aristotle Conference on Chemistry - <https://acc2023.chem.auth.gr>

- Σχεδιασμός, ανάπτυξη, υλοποίηση και διαχείριση οπτικής ταυτότητας, ψηφιακών και έντυπων μέσων και υλικών διάχυσης και επικοινωνίας του ACC2023.

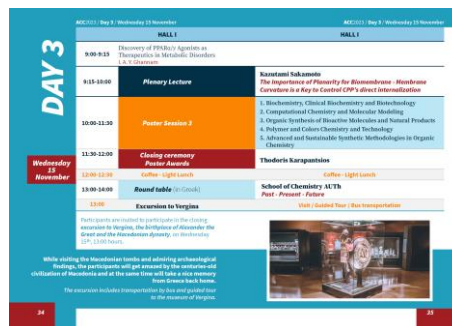
Σχεδιασμός  
Λογότυπου



Σχεδιασμός, Ανάπτυξη και  
Διαχείριση Ιστοσελίδας



Σχεδιασμός και Υλοποίηση  
Έντυπου και Ψηφιακού υλικού  
(Πρόγραμμα, Αφίσες, Banners κτλ)



## Βραβεία – Διακρίσεις

### Πριν τον διορισμό

- 2012 **Βραβείο Αριστείας**  
Υπουργείο Παιδείας και Θρησκευμάτων, Αθήνα
- 2010 **Β' Πανελλήνιο Βραβείο Ποίησης «Κούρος Ευρωπού»**  
Υπουργείο Πολιτισμού, «Τέχνη» Μακεδονική Καλλιτεχνική Εταιρεία, Κιλκίς
- 2009 **Βραβείο Καινοτομίας**  
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
- 2008 **MERLOT - Chemistry Classics 2008** (Minneapolis, USA)  
Multimedia Educational Resource for Learning and Online Teaching
- 2004 **Exemplarchem** (London, UK)
  - **Overall Winner 1999-2004**, awarded by Royal Society of Chemistry (RSC)
  - **Winner 2004**, awarded by Chemical Abstracts Service (CAS)