

# Νικόλας Δ. Χαριστός

---

Χημικός PhD



## Βιογραφικό Σημείωμα

Ιούλιος 2020

## Προσωπικά Στοιχεία

---

### Τρέχουσα Θέση Εργασίας

Ε.ΔΙ.Π

Τομέας Γενικής και Ανόργανης Χημείας

Τμήμα Χημείας - Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

τηλ.: 2310 99 78 01

email: [nicharis@chem.auth.gr](mailto:nicharis@chem.auth.gr)

web: [users.auth.gr/nicharis](https://users.auth.gr/nicharis)

## Εκπαίδευση

---

- 2016 MEd** **Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης** στη Διδακτική της Χημείας και Νέες Εκπαιδευτικές Τεχνολογίες (Δι.Χη.Ν.Ε.Τ.) με έμφαση στη «Σύγχρονες Μέθοδοι Διδασκαλίας της Χημείας», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ.  
*«2D/3D/Chem: Σχεδιασμός και ανάπτυξη ενός γνωστικού εργαλείου μοντελοποίησης συντακτικών τύπων»*
- 2005-2006 Postdoc** **Μεταδιδακτορική Έρευνα.** 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»*
- 2005 PhD** **Διδακτορικό Δίπλωμα** του Τμήματος Χημείας της Σχολής Θετικών Επιστημών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης με θέμα:  
*«Ανάπτυξη Εκπαιδευτικού Λογισμικού Τρισδιάστατης Οπτικοποίησης Ιδιοτήτων της Μοριακής Δομής».* Επιβλέποντες καθ. Κωνσταντίνος Τσίπης, καθ. Μιχάλης Σιγάλας
- 2001 MSc** **Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης** στη Χημεία με έμφαση στην **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** του Τμήματος Χημείας της Σχολής Θετικών Επιστημών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης με βαθμό «Λίαν Καλώς» (7,29)
- Ξένες Γλώσσες** Αγγλικά (First Certificate in English)

## Εκπαιδευτικό Έργο

### Διδασκαλία Μαθημάτων Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

#### Αυτοδύναμη συνδιδασκαλία σε μαθήματα του ΠΠΣ Τμήματος Χημείας ΑΠΘ

- H10 Υπολογιστική Χημεία
- K101 Μοριακή Μοντελοποίηση
- Y03 Εφαρμοσμένα Μαθηματικά στην Χημεία I
- H13 Πραγματικά, Εικονικά και Υβριδικά Εργαστήρια πάνω σε Αρχές και Νομούς της Χημείας στην Τυπική και Άτυπη Εκπαίδευση
- K104 Δόμηση, Παρουσίαση και Διάδοση Χημικής Πληροφορίας
- K107 Ανάπτυξη Πολυμεσικού Υλικού στη Χημεία και Διδασκαλία με Χρήση Τηλεκπαιδευτικών Δικτύων
- Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας

#### Αυτοδύναμη συνδιδασκαλία σε μαθήματα του ΜΠΣ Τμήματος Χημείας ΑΠΘ

- MX116 Εφαρμογές των Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνίας στη Διδασκαλία της Χημείας
- MX023 Υπολογισμός Φυσικοχημικών Μοριακών Ιδιοτήτων και Οπτικοποίησή τους
- M5Y1/1 Τεχνικές και εργαλεία οπτικοποίησης μοριακής δομής, χημικών ιδιοτήτων και δεδομένων
- ΔΠΜΣ «ΛιΧηNET»: Εργαλεία Ανάπτυξης Εκπαιδευτικού Λογισμικού

### Συνεπίβλεψη\* Διατριβών και Εργασιών

Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας | Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

- **4 PhD, 12 MSc, 1 BSc**

\* Συνεπίβλεψη ορίζεται ως η ουσιαστική συμμετοχή στην διαμόρφωση και την εκπόνηση της διατριβής όπως προκύπτει από κοινές δημοσιεύσεις ή/και την εφαρμογή/εξέλιξη λογισμικών και μεθοδολογιών που ανέπτυξα.

#### Διδακτορικές Διατριβές (PhD): 4

PhD.1. Νικόπουλος Θωμάς (2019)

*Μελέτη του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου και του ηλεκτρονικού απεντοπισμού σε μοριακά συστήματα δύο και τριών διαστάσεων.*

PhD.2. Κουταλάς Βασίλης (2017)

*Διερεύνηση με χρήση τεχνικών οφθαλμικών καταγραφών της ευχέρειας χειρισμού και κατανόησης πολλαπλών μοριακών αναπαραστάσεων από φοιτητές χημείας: ανάπτυξη και αξιολόγηση εκπαιδευτικού λογισμικού δυναμικά διασυνδεδεμένων αναπαραστάσεων.*

PhD.3. Παπαδόπουλος Αναστάσιος (2012)

*Μελέτη της δομής, του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου και του ηλεκτρονικού απεντοπισμού B- και N-ετεροκυκλικών οργανικών και οργανομεταλλικών ενώσεων.*

PhD.4. Αντώνηγλου Λεμονιά (2011)

*Σχεδιασμός, ανάπτυξη, εφαρμογή και αξιολόγηση του υβριδικού μοντέλου διδασκαλίας της μοριακής συμμετρίας.*

## Μεταπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (MSc): 12

- MSc.1. Ζωγράφου Δανάη (σε εξέλιξη)  
*Μελέτη του ηλεκτρονιακού απεντοπισμού πολυκυκλικών αντιαρωματικών ενώσεων (PAAHs) με την χρήση του ψευδο-π μοντέλου του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου.*
- MSc.2. Παπασούλη Αιμιλία (2020)  
*Ετεροκυκλικά και μακροκυκλικά παράγωγα του δικαλικενάνου με ετεροάτομα B, N, O, S και Se: Ανάλυση του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου και διερεύνηση της ικανότητας σύνδεσης ανιόντων αλογόνων.*
- MSc.3. Λίγγας Ραφαήλ (2020)  
*Ανάλυση του Επαγόμενου Μαγνητικού Πεδίου σε συνεισφορές Φυσικά Εντοπισμένων Μοριακών Τροχιακών.*
- MSc.4. Λ. Πασιτιάς (2020)  
*Εφαρμογή και Αξιολόγηση Ευχρηστίας του Γνωστικού Εργαλείου Σχεδίασης και Χειρισμού Συντακτικών Τύπων Οργανικών Ενώσεων 2DrawChemQuiz*
- MSc.5. Δ. Γανίτη (2020)  
*Εφαρμογή και Αξιολόγηση Αποτελεσματικότητας Γνωστικού Εργαλείου Σχεδίασης και Χειρισμού Συντακτικών Τύπων Οργανικών Ενώσεων 2DrawChemQuiz*
- MSc.6. Αρβανιτίδης Αθανάσιος (2013)  
*Μελέτη της επίδρασης του μαγνητικού πεδίου σε Β-υποκατεστημένα παράγωγα βοραζίνης ανά μοριακό τροχιακό. Θεωρητικοί υπολογισμοί και οπτικοποίηση.*
- MSc.7. Γιωργάς Νικόλαος (2013)  
*Διερεύνηση δυνατοτήτων ανάπτυξης εκπαιδευτικού λογισμικού στο σύστημα διαχείρισης περιεχομένου Drupal. Εφαρμογή στη Χημεία Γ' Γυμνασίου.*
- MSc.8. Παρασάκης Αθανάσιος (2012)  
*Ανάπτυξη διαδικτυακού εκπαιδευτικού υλικού με θέμα τη δονητική φασματοσκοπία.*
- MSc.9. Νικόπουλος Θωμάς (2011)  
*Θεωρητικός υπολογισμός και οπτικοποίηση της συνεισφοράς των μοριακών τροχιακών στο επαγόμενο μαγνητικό πεδίο επιπέδων κυκλικών ενώσεων για τη διερεύνηση της σήμα, διπλής, μεταλλικής και ακτινικής αρωματικότητας.*
- MSc.10. Κουταλάς Βασίλειος (2009)  
*Ανάπτυξη λογισμικού οπτικοποίησης της δομής και της συμμετρίας των συμπλόκων ενώσεων.*
- MSc.11. Παλασοπούλου Ι. Μαρία (2008)  
*Ανάπτυξη εκπαιδευτικού υλικού με θέμα τα μακρομόρια με βιολογικό ενδιαφέρον και χρήση μοριακής μοντελοποίησης.*
- MSc.12. Αντώνηλου Λεμονιά (2006)  
*Ανάπτυξη μαθησιακών αντικειμένων (Learning Objects) για το μάθημα της Χημείας του Γυμνασίου και δημιουργία εφαρμογής Director για τη διαχείρισή τους.*

## Πτυχιακές Εργασίες (BSc): 1

- BSc.1. Παπασούλη Αιμιλία (2017)  
*Κβαντοχημικοί Υπολογισμοί του Επαγόμενου Μαγνητικού Πεδίου για την Διερεύνηση της Αρωματικότητας των Βορολίου, Φουραζανίου, Τριαζολίου, Θειαδιαζολίου και των αντίστοιχων Πολυκυκλικών Ραδιαλλενίων.*

## Ερευνητικά προγράμματα

---

- 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, Μεταδιδακτορική 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

## Βραβεία - Διακρίσεις

---

- 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)

## Ψηφιακές Δεξιότητες

---

- Μοριακή Μοντελοποίηση • ADF, Gaussian, GaussView, ChemOffice, Jmol, VMD
- Ανάπτυξη Λογισμικού • Προγραμματισμός 3D και 2D γραφικών  
• Σχεδιασμός διάδρασης και ανάπτυξη GUI  
• Μεταεπεξεργασία δεδομένων υπολογιστικής χημείας  
• Adobe Director / Lingo  
• Canvas / Javascript
- Ανάπτυξη Ιστοσελίδων • HTML5, CSS3, Canvas, Javascript, Jmol, Shockwave
- Γραφικός Σχεδιασμός • Photoshop, Illustrator, InDesign

## Κριτής σε Περιοδικά και Συνέδρια

---

- 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, ΕΝΕΦΕΤ (Ένωση για την Εκπαίδευση στις Φυσικές Επιστήμες και την Τεχνολογία)

## Σύνοψη Συγγραφικού Έργου

	Όλα	Από το 2106
Άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές	20 (8*)	12 (7*)
Κεφάλαια σε διεθνή βιβλία	2	0
Άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές από συνέδρια	3	0
Διεθνή Συνέδρια	17	1
Εθνικά Συνέδρια	22	3
Διδακτικά βιβλία και σημειώσεις	4	2
Εκπαιδευτικές ιστοσελίδες	5	1
Λογισμικά χημείας	8	2
Αναφορές <sup>†</sup>	136	104
<i>h</i> -index <sup>†</sup>	7	

<sup>†</sup>Πηγή: *Scopus, Journals*

\* συγγραφέας επικοινωνίας

Journal	IF 2019	Papers
Chemistry—A European Journal	4.857	1
Journal of Physical Chemistry C	4.189	2 (1*)
Physical Chemistry Chemical Physics	3.430	4 (3*)
New Journal of Chemistry	3.288	1*
ChemPhysChem	3.144	1*
Journal of Computational Chemistry	2.976	1*
Journal of Physical Chemistry A	2.600	2 (1*)
Chemistry Education Research and Practice	2.285	1
Education and Information Technologies	2.010	1
International Journal of Quantum Chemistry	1.747	2
Journal of Chemical Education	1.385	3
AIP Conference Proceedings	0.40	1
Procedia - Social and Behavioral Sciences		2
The Open Mechanical Engineering Journal		1

## A. Άρθρα σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά με Κριτές

(\* συγγραφέας επικοινωνίας)

- 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: [10.2174/1874155X00802010012](https://doi.org/10.2174/1874155X00802010012)
- 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 με Κριτές από Συνέδρια**

---

- 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.  
**Atomicity 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

---

- 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

---

- 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, Santiago 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

---

- E22.** Δ. Γανίτη, Α. 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. Κατσαριδίου, 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 επαμελών 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-ηλεκτρονικό 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 Βελτίωσή 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**  
*8ο 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' Γυμνασίου «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**  
*21ο 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**  
*21ο 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**  
*7ο 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**  
*7ο 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**  
*5ο 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**  
*5ο 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*

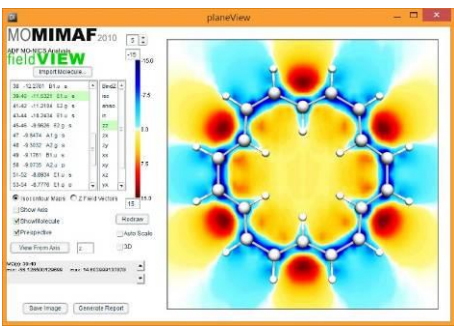
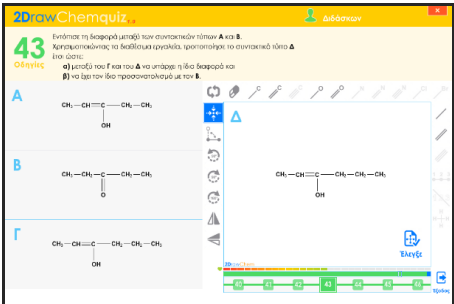
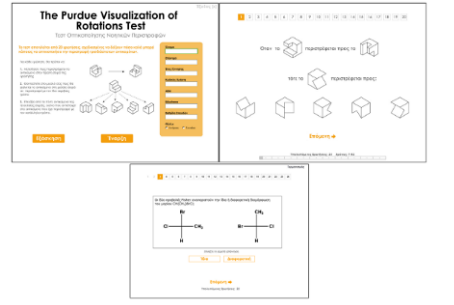
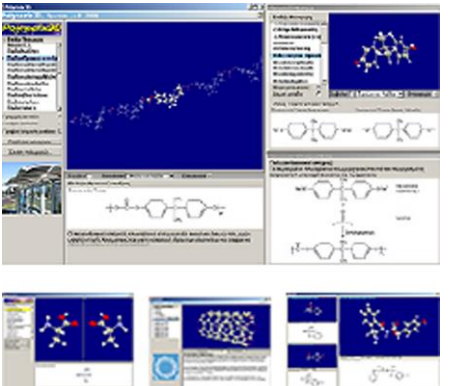
## ΣΤ. Διδακτικά Βιβλία και Σημειώσεις

---

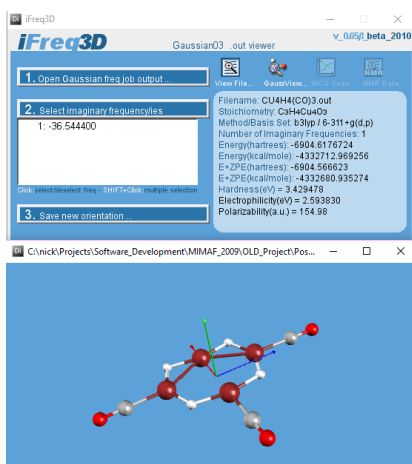
- ΣΤ4.** Ν. Χαριστός, Ε. Κουκάρας, Μ. Σιγάλας  
**Online Εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας**  
Video-tutorials Μαθήματος, Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ., 2020  
<https://www.youtube.com/playlist?list=PLZdnGm8BQINwDF74bc6tCSRKwwiqwXZjv>
- ΣΤ3.** Μ. Π. Σιγάλας, Λ. Αντώνογλου, Ν. Χαριστός.  
**Μοριακή Συμμετρία και Θεωρία Ομάδων**  
[ηλεκτρ. βιβλ.] Αθήνα: Σύνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών, 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.



## Z. Δημοσιευμένα Λογισμικά Χημείας

Z8.		<p>Τίτλος Είδος Έτος Κοινό Δημοσιεύσεις</p>	<p><b>MIMAF</b> Ερευνητικό λογισμικό οπτικοποίησης ισόπυκνων χαρτών και διανυσμάτων μοριακών μαγνητικών πεδίων. <b>2008-σήμερα</b> (συνεχής εξέλιξη &amp; αναβάθμιση) Ερευνητές Θεωρητικής και Υπολογιστικής Χημείας A7, A8, A9, A10, A11, A12, A14, A15, A16, A17, A18, A19, B1, Δ14, Δ15, Δ16, E15, E16</p>
Z7.		<p>Τίτλος Είδος Έτος Κοινό Δημοσιεύσεις</p>	<p><b>2DrawChem</b> Εκπαιδευτικό λογισμικό μοντελοποίησης και σχεδιασμού συντακτικών τύπων. <b>2013-2015</b> Δευτεροβάθμια εκπαίδευση E21, E22</p>
Z6.		<p>Τίτλος Είδος Έτος Κοινό Δημοσιεύσεις</p>	<p><b>Matching Items Environment</b> Ερευνητικό λογισμικό ανάπτυξης διαδραστικών ερωτηματολογίων. <b>2013</b> Ερευνητές Χημικής Εκπαίδευσης B2, B3, Δ13</p>
Z5.		<p>Τίτλος Είδος Έτος Κοινό Δημοσιεύσεις</p>	<p><b>Molix3D</b> Πακέτο εκπαιδευτικών λογισμικών μοριακής οπτικοποίησης πολυμερών, ισομερών, εναντιομερών, πεπτιδίων και λειτουργικών ομάδων οργανικών ενώσεων. <b>2007</b> Δευτεροβάθμια εκπαίδευση Γ2</p>

24.



Τίτλος

**iFreq3D**

Είδος

Ερευνητικό λογισμικό μοριακής οπτικοποίησης και δημιουργίας διαγραμμάτων NICS-scan.

Έτος

**2005-2006**

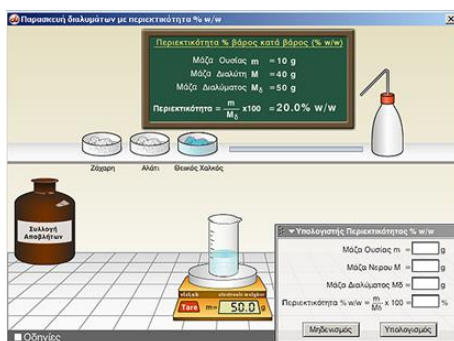
Κοινό

Ερευνητές Θεωρητικής και Υπολογιστικής Χημείας

Δημοσιεύσεις

A5, Γ1

23.



Τίτλος

**juniorLAB**

Είδος

Εκπαιδευτικό λογισμικό προσομοίωσης Χημικού Εργαστηρίου.

Έτος

**2005**

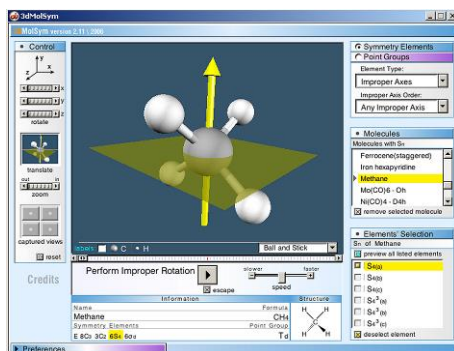
Κοινό

Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

Δημοσιεύσεις

E2, E11

22.



Τίτλος

**3DMolSym**

Είδος

Εκπαιδευτικό λογισμικό οπτικοποίησης μοριακής συμμετρίας.

Έτος

**2004**

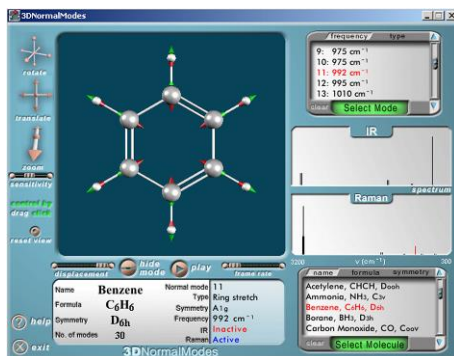
Κοινό

Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Δημοσιεύσεις

A4, A6, Γ2, Δ8, Δ7, Δ6, Δ5, Δ4, Δ3, E6, E4, E3, E1, ΣΤ3

21.



Τίτλος

**3DNormalModes**

Είδος

Εκπαιδευτικό λογισμικό μοριακής οπτικοποίησης κανονικών τρόπων δόνησης.

Έτος

**2003**

Κοινό

Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Δημοσιεύσεις

A1, A2, A3, Γ2, Δ4, Δ3, Δ2, Δ1, E3, E1, ΣΤ3

# H. Εκπαιδευτικές Ιστοσελίδες Χημείας

**H5.** JSmol Tutorial | Μάθημα 1 | Μάθημα 2 | Μάθημα 3  
 Βήμα 3: Εισαγωγή κουμπιών επιλογής Radio Buttons

**Μάθημα 3  
 Επιλογή ατόμων**  
 Δημιουργία εκπαιδευτικού σεναρίου για τους δεσμούς υδρογόνου στο νερό

👍 Στόχος

👍 Βήμα 1. Δημιουργία αρχικής ιστοσελίδας με 14 μόρια νερού

👍 Βήμα 2. Επιλογή ατόμων ενός μορίου και απόκρυψη των υπόλοιπων ατόμων

👍 Βήμα 3. Εισαγωγή κουμπιών επιλογής Radio Buttons

1. Σε αυτό το βήμα θα επιλέγουμε κοινά επιλογή radio buttons τα οποία θα καθορίζουν τον αριθμό των μορίων νερού που θα παρατηρούμε.

2. Θα χρησιμοποιήσουμε εξωτερικά αρχεία για τον κώδικα που θα εκτελείται με κάθε επιλογή.

1. Εισάγετε τον παρακάτω κώδικα για την δημιουργία κουμπιών επιλογής:

```

<code>
<math>H_2O</math>
</code>

```

Τίτλος **Nick's Jmol Tutorial**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα - Tutorial JSmol

Έτος 2019

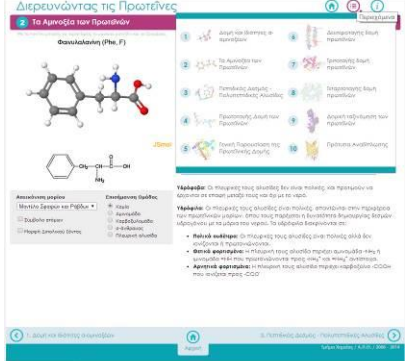
Κοινό Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Link [users.uth.gr/nicharis/jmoltutorial](https://users.uth.gr/nicharis/jmoltutorial)

Δημοσιεύσεις

**H4.** Διερευνώντας τις Πρωτεΐνες

2. Το Αμινοξύ των Πρωτεϊνών



1. Αρχική κατάσταση αμινοξέως

2. Το αμινοξύ των πρωτεϊνών

3. Παράδειγμα αμινοξέως (αμινοξέως πρωτεΐνης)

4. Εφαρμογή Δομής των Πρωτεϊνών

5. Αρχική Παρασκευή της Πρωτεΐνης (αμινοξέως)

6. Δομή των Πρωτεϊνών

7. Τρισδιάστατη δομή πρωτεΐνης

8. Δομή των Πρωτεϊνών

9. Αρχική κατάσταση των πρωτεϊνών

10. Εφαρμογή Αλληλεπίδρασης

Μηνόματρο: Ο πομπός της αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί και η αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί.

Μηνόματρο: Ο πομπός της αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί και η αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί.

Μηνόματρο: Ο πομπός της αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί και η αμινοξέως του νερού παύει να λειτουργεί.

Τίτλος **Διερευνώντας τις Πρωτεΐνες**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

Έτος 2008, 2014

Κοινό Τριτοβάθμια εκπαίδευση

Link [molwave.chem.uth.gr/proteins](https://molwave.chem.uth.gr/proteins)

Δημοσιεύσεις Δ12, Δ6, Ε5

**H3.** Θαυμαστός Κόσμος της Χημείας

Καλωσήρθατε στον Θαυμαστό Κόσμο της Χημείας!



Οξέα, Βάσεις, Εξουδετέρωση και Αλάτι

Τοξίνες των Εισαγωγών

Η Χημεία του Ανθρώπου

• Τα οξέα  
 • Οξείδια  
 • Τα οξέα, οι βάσεις και τα αλάτια  
 • Τα οξείδια

• Τα οξείδια  
 • Τα οξείδια  
 • Τα οξείδια

• Η Ηλεκτροχημεία και τα Αλάτι  
 • Η Ηλεκτροχημεία και τα Αλάτι  
 • Η Ηλεκτροχημεία και τα Αλάτι

• Ο Τοξικολογικός Κόσμος  
 • Ο Τοξικολογικός Κόσμος  
 • Ο Τοξικολογικός Κόσμος

• Η Χημεία του Ανθρώπου  
 • Η Χημεία του Ανθρώπου  
 • Η Χημεία του Ανθρώπου

Τίτλος **Ο Θαυμαστός Κόσμος της Χημείας**

Είδος Εκπαιδευτική Ιστοσελίδα

Έτος 2013

Κοινό Δευτεροβάθμια εκπαίδευση

Link [molwave.chem.uth.gr/fabchem](https://molwave.chem.uth.gr/fabchem)

Δημοσιεύσεις Ε11

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)