

Δρ. ΙΩΑΝΝΗΣ ΣΚΑΡΜΟΥΤΣΟΣ

Γεννηθείς στα Βασιλικά Φθιώτιδας, Ελλάδα

Ημερομηνία Γέννησης: 28 Μαρτίου 1977

Υπηκοότητα: Ελληνική

Email:

iskarmoutsos@uoi.gr

ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ

- 2003-2006** Διδακτορικό στη Χημεία, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Επιβλέπων: Καθ. Ιωάννης Σάμιος
“Θεωρητική-υπολογιστική μελέτη της επίδρασης θερμοδυναμικών παραμέτρων στις μακροσκοπικές, δομικές και δυναμικές ιδιότητες μοριακών συστημάτων στην υπερκρίσιμη κατάσταση”. <https://phdtheses.ekt.gr/eadd/handle/10442/20859>
- 2003** Μεταπτυχιακό στη Φυσικοχημεία, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Επιβλέπων: Καθ. Ιωάννης Σάμιος
“Στατιστική μηχανική μελέτη των ιδιοτήτων του υπερκρισίμου διοξειδίου του άνθρακα και του υγρού μίγματος cis-trans N-Μεθυλοφορμαμιδίου μέσω τεχνικών μοριακών προσομοιώσεων.”
- 2000** Πτυχίο στη Χημεία, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
Καταλυτικές αντιδράσεις με σύμπλοκα μετάλλων μεταπτώσεως σε υδατικά διαλύματα.”
Επιβλέπων: Καθ. Γεώργιος Παπαδογιαννάκης (Εργαστήριο Βιομηχανικής Χημείας)

ΕΡΓΑΣΙΑΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

Απρ. 2022-	Επίκουρος Καθηγητής (Επί Θητεία), Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Τμήμα Χημείας Γνωστικό Αντικείμενο: Θεωρητική Φυσικοχημεία
Απρ. 2019- Απρ. 2022	Ερευνητής, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών - Ινστιτούτο Φυσικής και Θεωρητικής Χημείας, Ίδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας (ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ) - Α.Π.Θ. (Τμήμα Χημείας) Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση νανοϋλικών με βάση το γραφένιο για εφαρμογές αποθήκευσης ενέργειας.
Ιαν. 2019 - Μαρτ. 2019	HPC-Europa 3 Υποτροφία. Universidad Pablo de Olavide, Seville, Spain. Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση μιγμάτων οργανικών ηλεκτρολυτών με ιοντικά υγρά. Μοντελοποίηση νανοποροδών υλικών (MOF) για διαχωρισμό υγρών μιγμάτων.
Οκτώβριος 2016- Δεκ. 2018	Ερευνητής, Institut Charles Gerhardt (UMR, CNRS 5253), University of Montpellier 2, Montpellier, France Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση νανοποροδών υλικών (MOF) για αποθήκευση και διαχωρισμό αερίων και υγρών.

Ιούνιος - Ιούλιος 2016	Επισκέπτης Ερευνητής, Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), Spain. Department of Physics Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση της πλαστικής κρυσταλλικής φάσης του νερού.
Μάιος - Ιούνιος 2016	Επισκέπτης Ερευνητής, University of Athens, Greece Department of Chemistry – Laboratory of Physical Chemistry Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση υγρών σε πολύ υψηλές πιέσεις.
Απρ. 2015- Μάιος 2016	Ερευνητής, University College London (UCL), London, UK. Department of Earth Sciences – Department of Physics and Astronomy Χρηματοδότηση: ERC European project Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση υδατικών συστημάτων μέσω κβαντικών μοριακών δυναμικών προσομοιώσεων.
Οκτ. 2013- Μάρτιος 2015	Ερευνητής, CEA, Grenoble, France. Institute for Nanoscience and Cryogenics (INAC-SPrAM) Χρηματοδότηση: ANR ALIBABA project Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση οργανικών ηλεκτρολυτών με εφαρμογές στην τεχνολογία μπαταριών.
Σεπτ. 2012 – Αυγ. 2013	Ερευνητής, University of Crete, Greece. Materials Modeling & Design Group, Department of Chemistry Χρηματοδότηση: THALES Research Project Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση της προσρόφησης και διαχωρισμού αερίων μιγμάτων σε νανοπορώδη υλικά με βάση τον άνθρακα.
Απρ. 2012 – Ιούνιος 2012	HPC-Europa 2 Υποτροφία, Univ. of Sassari, Italy. Χρηματοδότηση: HPC-Europa European Union fellowship Καθήκοντα: Χρήση Υπερυπολογιστικών συστημάτων του ευρωπαϊκού κέντρου CINECA για μελέτη ιδιοτήτων του νερού και υδατικών συστημάτων μέσω κβαντικών μοριακών δυναμικών προσομοιώσεων.
Σεπτ. 2009 – Σεπτ. 2011	Ερευνητής, Imperial College, London, UK Dept. of Chemistry, Webpage: http://www.huntresearchgroup.org.uk Χρηματοδότηση: ERC European Project. Καθήκοντα: Υπολογιστική μοντελοποίηση ιοντικών υγρών.
Apr.2008 – Apr. 2009	Ερευνητική Υποτροφία, Univ. Politècnica de Catalunya (UPC), Spain. Computer Simulation in Cond. Matt. Res. Group, http://simcon.upc.edu/people Χρηματοδότηση: Research Fellowship of the UPC Καθήκοντα: Υπολογιστική μελέτη των δεσμών υδρογόνου σε υπερκρίσιμα ρευστά.

ΥΠΟΧΡΕΩΤΙΚΗ ΣΤΡΑΤΙΩΤΙΚΗ ΘΗΤΕΙΑ

Φεβρουάριος 2007 – Φεβρουάριος 2008 (Σώμα Υλικού Πολέμου)

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΕΠΙΤΕΥΓΜΑΤΑ

Google Scholar Profile: <https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=CRCpodIAAAAJ>

- **54 Δημοσιεύσεις** σε Διεθνή περιοδικά με κριτές (βλ. Υπόμνημα)
- **h-index: 22** (Πηγή: Google Scholar)
- **i10-index: 34** (Πηγή: Google Scholar)
- **1** δημοσίευση σε κεφάλαιο επιστημονικού βιβλίου (βλ. Υπόμνημα)
- **4** Δημοσιεύσεις σε βιβλία πρακτικών συνεδρίων (βλ. Υπόμνημα)
- **2** Αναδημοσιευμένες εργασίες (βλ. Υπόμνημα)
- **19** Διαλέξεις έπειτα από πρόσκληση (βλ. Υπόμνημα)
- **19** Παρουσιάσεις Πόστερ σε συνέδρια (βλ. Υπόμνημα)
- **22** Ομιλίες σε συνέδρια (βλ. Υπόμνημα)
- **6** Εγκεκριμένα Ερευνητικά Προγράμματα
- **1** Εγκεκριμένη Διεθνής Ερευνητική Υποτροφία

ΕΓΓΕΚΡΙΜΕΝΑ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ (ΠΡΙΝ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΜΟΥ ΩΣ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ)

1. **HPC – Europa 2** πρόγραμμα για τη μελέτη ιδιοτήτων υδατικών συστημάτων με χρήση κβαντικών μοριακών δυναμικών προσομοιώσεων.

Φορέας: Ευρωπαϊκή Ένωση (2012).

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Dr Ioannis Skarmoutsos

Συνεργάτης Φορέα Υποδοχής: Dr Marco Masia, University of Sassari, Department of Chemistry and Pharmacy.

2. **A joint experimental and theoretical study of supercritical mixtures.**

Πρόγραμμα εγκεκριμένο από το Science and Technology Facilities Council (STFC), United Kingdom (UK) (2016).

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Dr Sarantos Marinakis, Queen Mary University of London

Συνεργάτης: **Dr Ioannis Skarmoutsos**

Συνεργάτης: Professor Alan K. Soper, Science and Technology Facilities Council, UK

3. **FPMDCISTRANS: First Principles Molecular Dynamics studies of Cis- and Trans-N-Methylformamide liquid mixtures.**

Πρόγραμμα εγκεκριμένο από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (GRNET) (2016).

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Dr Ioannis Skarmoutsos

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Professor Jannis Samios, University of Athens, Greece, Department of Chemistry, Director of Laboratory of Physical Chemistry

4. **HPC – Europa 3 project: “Ab Initio Molecular Dynamics of Mixtures of Ionic Liquids with Organic Carbonate Electrolytes “.**

Φορέας: Ευρωπαϊκή Ένωση (2019).

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Dr Ioannis Skarmoutsos

Συνεργάτης Φορέα Υποδοχής: Professor Sofia Calero, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla, Spain, Department of Physical, Chemical and Natural Systems.

ΕΓΚΕΚΡΙΜΕΝΑ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ (ΜΕΤΑ ΤΗΝ ΕΚΛΟΓΗ ΜΟΥ ΩΣ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ)

Συμμετοχή σε Ευρωπαϊκά Συνεργατικά Ερευνητικά Προγράμματα ως επιστημονικός εταίρος

1. **MUSICODE project** (<https://musicode.eu/>), ” *An experimentally-validated multi-scale materials, process and device modeling & design platform enabling non-expert access to open innovation in the organic and large area electronics industry*”

European collaborative research and innovation project led by a multi-disciplinary consortium coordinated by University Ioannina. I started participating in the project on 2022.

Συμμετοχή σε Ελληνικά Συνεργατικά Ερευνητικά Προγράμματα ως επιστημονικός εταίρος

2. Εμβληματικές δράσεις σε διαθεματικές επιστημονικές περιοχές με ειδικό ενδιαφέρον για την σύνδεση με τον παραγωγικό ιστό: “7.1 Ανάπτυξη αποδοτικών ΦΒ υλικών και διατάξεων τρίτης γενιάς για την ενίσχυση της ανταγωνιστικότητας του παραγωγικού τομέα στην πράσινη ενέργεια”

Πρόγραμμα Εγκεκριμένο το 2023

<https://gsri.gov.gr/istoselides-enischyomenon-ergon/>

ΕΓΚΕΚΡΙΜΕΝΕΣ ΕΥΡΩΠΑΪΚΕΣ ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ

- Universitat Politecnica de Catalunya (UPC), Research Fellowship, **Project:** “*Theoretical-computational investigation of the structural and dynamic properties of molecular systems in condensed phases via computer simulations.*”, Department of Physics and Nuclear Engineering, 2008.

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΗ ΕΠΙΜΟΡΦΩΣΗ

2016 Annual CP2K-UK Users Meeting,
United Kingdom

Third annual CP2K-UK users meeting organized by University College London, Kings College London and EPCC (EPSRC funded).

2013 Summer School
Italy

International School of Physics “Enrico Fermi”: Water: Fundamental as a basis for understanding the environment and promoting technology.

2012 GPU workshop
Cyprus Institute

Organized by the Computation-based Science and Tech. Research Centre (CaSToRC), in the framework of LinkSCEEM-2 and Cy-Tera projects.

2005 Summer School
Cardiff University- UK.

CCP5 and Marie Curie Actions: Methods in Molecular Simulation Summer School, Advanced Courses in “ *First Principles Simulations* ”

2002 Winter School
Germany-Netherlands

Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, John von Neumann Institute for Computing (NIC)

2002 Summer School
Greece

NATO Advanced Study Institute (ASI): Novel Approaches to the Structure and Dynamics of Liquids: Experiments, Theories and Simulations.

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ

Επιστημονικός	Fortran 77/90, Python, experience in Unix systems, Linux, Mac OS, Windows.
Προγραμματισμός	Use of High Performance Computing Systems (HPC Imperial College, Grace-UCL, Mare Nostrum BSC Barcelona, CINECA, Julich Germany, Titan-USA)
MD-Monte Carlo κώδικες προσομοίωσης	Εκτεταμένη γνώση των προγραμμάτων μοριακής προσομοίωσης DL_POLY, Moscito, Moldy, Moliq-Dynamo, CADDs (Monte Carlo), RASPA (Monte Carlo), CPMD, CP2k, Gaussian, GaussView, Materials Studio.
Ανάπτυξη Επιστημονικού Λογισμικού	Ανάπτυξη επιστημονικού λογισμικού για την ανάλυση μοριακών τροχιών μοριακών δυναμικών και Monte Carlo προσομοιώσεων , για των υπολογισμό στατικών θερμοδυναμικών, δομικών αλλά και δυναμικών ιδιοτήτων μοριακών συστημάτων και νανοπορωδών υλικών.

ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

Πριν την εκλογή μου ως επίκουρου καθηγητή

- 1) Διδασκαλία Προπτυχιακών Φοιτητών Χημείας ΕΚΠΑ στη χρήση ηλεκτρονικών υπολογιστών, χρήση λειτουργικού συστήματος Windows, εκμάθηση του Office, πλοήγησης στο Internet καθώς και χρήσης εξειδικευμένων προγραμμάτων για τη Χημεία (Εφαρμογές της Πληροφορικής στη Χημεία) **(1 ακαδημαϊκό έτος)**.
- 2) Διδασκαλία Προπτυχιακών Φοιτητών (Χημείας-Φαρμακευτικής), Εργαστήριο Φυσικοχημείας, ΕΚΠΑ. **(2 ακαδημαϊκά έτη)**
- 3) Προπτυχιακών Φοιτητών (Χημείας), Theoretical Chemistry Laboratory (Imperial College London, UK) **(2 ακαδημαϊκά έτη)**
- 4) Σεμινάρια στατιστικής μηχανικής και τεχνικών μοριακής προσομοίωσης σε μεταπτυχιακούς φοιτητές, Τμήμα Φυσικής, Technical University of Catalonia (**1 ακαδημαϊκό έτος**)

Μετά την εκλογή μου ως επίκουρου καθηγητή στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Διδακτική Δραστηριότητα μετά το διορισμό μου ως επίκουρου καθηγητή στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

- 1) Διδασκαλία προπτυχιακού μαθήματος “Φυσικοχημεία Ι” (Κλασική Θερμοδυναμική), Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων: **Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2024-2025** (Σημείωση: Λόγω αλλαγής του εξαμήνου διδασκαλίας του μαθήματος στο νέο πρόγραμμα σπουδών, το μάθημα δε διδάχθηκε κατά το ακαδημαϊκό έτος 2023-2024)
- 2) Δημιουργία και Διδασκαλία της νέας ύλης του προπτυχιακού μαθήματος, καθώς και δημιουργία εργαστηρίου “Η/Υ-Πληροφορικής” με έμφαση στον “Προγραμματισμό σε γλώσσα Python”, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (**Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025**) , σε συνεργασία με τον Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Απόστολο Γκάμα.
- 3) Διδασκαλία πειραματικών εργαστηριακών ασκήσεων στο πλαίσιο του προπτυχιακού “Εργαστηρίου Φυσικοχημείας Ι”, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, (**Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025**)
- 4) Εισαγωγή και διεξαγωγή νέων ασκήσεων Υπολογιστικής Φυσικοχημείας
Άσκηση 1: “Υπολογισμός Ενθαλπίας Εξάτμισης και Δεσμών Υδρογόνου του Υγρού νερού μέσω μοριακής δυναμικής προσομοίωσης.”
Άσκηση 2: Υπολογισμός Μερικών Γραμμομοριακών Όγκων και Δεσμών Υδρογόνου σε υγρά μίγματα νερού-προπανάλης-1.”
στο πλαίσιο του προπτυχιακού “Εργαστηρίου Φυσικοχημείας Ι”, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (**Ακαδημαϊκά Έτη 2023-2024, 2024-2025**)
- 5) Συμμετοχή στη διδασκαλία του προπτυχιακού μαθήματος επιλογής του 4ου έτους: “Εννοιες Χημείας” , Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (**Ακαδημαϊκό Έτος 2023-2024**)

Ακαδημαϊκός Επιβλέπων Μεταπτυχιακών και Προπτυχιακών Φοιτητών/τριών:

Επιβλέπων του μεταπτυχιακού φοιτητή κ. Ηλία Καρβούνη (Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Υποστήριξη Μεταπτυχιακής Διατριβής: Σεπτέμβριος 2024)

Τίτλος Μεταπτυχιακής Διατριβής: “Θεωρητική-Υπολογιστική μελέτη των θερμοδυναμικών, δομικών και δυναμικών ιδιοτήτων, καθώς και των μηχανισμών επιδιαλύτωσης ιόντων SCN^- σε μικτούς υγρούς διαλύτες N, N Διμεθυλοφορμαμίδιου-Υδατος.”

Επιβλέπων 7 προπτυχιακών φοιτητών/τριών για εκπόνηση πτυχιακής εργασίας (4 πτυχιακές εργασίες έχουν ολοκληρωθεί, 3 σε εξέλιξη).

Ολοκληρωθείσες Πτυχιακές Εργασίες που έχω επιβλέψει:

- 1) κ. Ανδρέας Καραδήμας, Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: “Χρήση πορωδών μεταλλο-οργανικών πλαισίων ως προσροφητικών μέσων για την κατακράτηση του διοξειδίου του άνθρακα: Μια βιβλιογραφική ανασκόπηση.”
- 2) κ. Στυλιανή Πλιακατήρα, Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: “Διερεύνηση μέσω μοριακών δυναμικών προσομοιώσεων των θερμοδυναμικών, δομικών και δυναμικών ιδιοτήτων του καθαρού υπερκρίσιμου CO_2 και της επιδιαλύτωσης του αντικού φαρμάκου φαβιπιραβίρης στο υπερκρίσιμο CO_2 .”
- 3) κ. Καλλιρόη-Μαρία Κάτσαρη, Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: “Διερεύνηση των δυναμικών αλληλεπίδρασης του νερού μέσω μοριακών προσομοιώσεων.”
- 4) κ. Ελισάβετ Παππά, Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: “Υγρά διογκωμένα από αέρια: Ιδιότητες και εφαρμογές.”

Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής 2 Υποψηφίων Διδασκτόρων

Μέλος της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής 3 Υποψηφίων Διδασκτόρων.

Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής 1 μεταπτυχιακής φοιτήτριας.

Συνεπιβλέπων ενός μεταδιδακτορικού ερευνητή (στο πλαίσιο του ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος Musicode, <https://musicode.eu/> , σε συνεργασία με τον καθηγητή κ. Ελευθέριο Λοιδωρίκη, Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων)

ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΟ ΕΡΓΟ ΜΕΤΑ ΤΟ ΔΙΟΡΙΣΜΟ ΜΟΥ ΩΣ ΕΠΙΚΟΥΡΟΥ ΚΑΘΗΓΗΤΗ

Μετά το διορισμό μου ως επίκουρου καθηγητή στο Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, συμμετείχα στις παρακάτω επιτροπές του τμήματος:

- 1) Επιτροπή ωρολογίου προγράμματος και εξετάσεων (Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025)
- 2) Επιτροπή Σεμιναρίων (Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2023-2024)
- 3) Επιτροπή Κατατάξεων (Ακαδημαϊκό Έτος 2024-2025)
- 4) Επιτροπή Απόσυρσης Οργάνων και Δημιουργίας Μουσείου (Ακαδημαϊκά Έτη 2022-2023, 2023-2024, 2024-2025)

ΛΟΙΠΕΣ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ

Κριτής σε 32 διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Journal of Physical Chemistry, Chemical Physics Letters, Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Fuel, Journal of the Brazilian Chemical Society, Journal of Molecular Liquids, International Journal of Modern Physics B, International Journal of Heat and Mass Transfer, Microporous and Mesoporous Materials, Advanced Theory and Simulations, Journal of Molecular Graphics and Modelling, New Journal of Chemistry, ACS Energy Letters, Fluid Phase Equilibria, Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Journal of Chemical Information and Modeling, Chinese Physics B, Entropy, Applied Surface Science, Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, Applied Thermal Engineering, Journal of CO₂ Utilization, Frontiers in Physics-Condensed Matter Physics, Materials Today Communications, ACS Omega, Langmuir, Computational and Theoretical Chemistry, Separation and Purification Technology, Physical Review Research, Scientific Reports*

Κριτής της Γενικής Γραμματείας Έρευνας και Τεχνολογίας (GRNET) για επιστημονικά προγράμματα που σχετίζονται με επιστημονικούς υπολογισμούς σε υπερυπολογιστικές εγκαταστάσεις Υψηλής Απόδοσης (High Performance Computing Services)

Κριτής της Εθνικής Επιτροπής Έρευνας της Γαλλίας (ANR: Agence Nationale de la Recherche, <https://anr.fr/en/>) για την αξιολόγηση ερευνητικών προτάσεων προς χρηματοδότηση.

Μέλος της *European Molecular Liquids Group* (EMLG) .

Μέλος της συντακτικής επιτροπής (editorial board) του *Frontiers in Physics, Condensed Matter Physics* (Frontiers Media, Lausanne, Switzerland) από τις 07-11-2020.

Μέλος της συντακτικής επιτροπής (editorial board) του *Journal of Theoretical Chemistry* (Hindawi Publishing Corporation) κατά την περίοδο 28-11-2012 έως 23-07-2017.

ΓΛΩΣΣΟΜΑΘΕΙΑ

Ελληνικά (μητρική), Αγγλικά (άπταιστα, εργασιακή εμπειρία), Ισπανικά (πολύ καλά, εργασιακή εμπειρία), Γαλλικά (καλά, εργασιακή εμπειρία)

ΣΥΣΤΑΤΙΚΕΣ ΕΠΙΣΤΟΛΕΣ

Συστατικές επιστολές μπορούν να ζητηθούν από τους κάτωθι ακαδημαϊκούς ερευνητές:

Dr Stefano Mossa

INAC/SPRAM (UMR 5819 UJF, CNRS, CEA), CEA-Grenoble, 17 Rue des Martyrs, 38054 Grenoble, France
Email: stefano.mossa@cea.fr

Prof. Elvira Guardia

Departament de Física i Enginyeria Nuclear, Universitat Politècnica de Catalunya, Edifici B4-B5, Campus Nord, Jordi Girona 1-3, 08034 Barcelona, Spain
Email: elvira.guardia@upc.edu
Web page : <http://simcon.upc.edu/usr/elvira.guardia>

Dr Marco Masia

Former Assistant Professor of Theoretical Chemistry, Dipartimento di Chimica, Università degli studi di Sassari, Via Vienna 2, 07100, Sassari, Italy
Currently: Head of Entrepreneurship, University of Vienna, Austria
Email: marco.masia@univie.ac.at

Prof. Jannis Samios

National & Kapodistrian University of Athens, Department of Chemistry, Physical Chemistry Laboratory, Panepistimiopolis 15771, Athens , Greece
Email: jsamios@chem.uoa.gr

Prof. Guillaume Maurin

Institut Charles Gerhardt (UMR, CNRS 5253), University of Montpellier 2, Montpellier, France
Email: guillaume.maurin@univ-montp2.fr

Prof. George E. Froudakis

Department of Chemistry, University of Crete, Voutes, Heraklion, 71003 Crete, Greece
Email: frudakis@chemistry.uoc.gr

Dr Patricia Hunt

Department of Chemistry, Exhibition Rd, Imperial College of Science, Technology and Medicine, South Kensington, London, SW7 2AZ , United Kingdom (Currently Professor at Victoria University of Wellington)
Email: p.hunt@imperial.ac.uk
Web page : <http://www.huntresearchgroup.org.uk/index.html>

Prof. Tom Welton

Former President of the Royal Society of Chemistry, former Dean of the Faculty of Natural Sciences, Imperial College of Science, Technology and Medicine, Exhibition Rd, South Kensington, London, SW7 2AZ, United Kingdom
Email : t.welton@imperial.ac.uk

Prof. Giancarlo Franzese

Departament de Física de la Matèria Condensada & Institut de Nanociència i Nanotecnologia (IN2UB), Universitat de Barcelona
Email: gfranzese@ub.edu
Web page : <https://spcmub.wordpress.com/>

ΥΠΟΜΝΗΜΑ

Δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά με κριτές

54) **Molecular dynamics of high-pressure liquid water: Going from ambient to near-critical temperatures.**

Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia, *Chem. Eur. J.* , e202500423 (2025)

<https://doi.org/10.1002/chem.202500423>

53) **Solvation structure and dynamics of the thiocyanate anion in mixed N,N-Dimethylformamide-water solvents: A molecular dynamics approach.**

Ioannis Skarmoutsos and Ilias G. Karvounis, *ChemPhysChem* **26**, e202400732 (2025)

<https://doi.org/10.1002/cphc.202400732>

52) **A comprehensive molecular dynamics simulation of plastic and liquid succinonitrile: Structural, dynamic, and dielectric properties.**

Manel Canales, Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia, *J. Chem. Phys.* **161**, 174503 (2024)

<https://doi.org/10.1063/5.0230695>

51) **Substantial breakdown of the hydrogen-bonding network, local density inhomogeneities and fluid-liquid structural transitions in supercritical octanol-1: A molecular dynamics investigation.**

Ioannis Skarmoutsos, *J. Chem. Phys.* **161**, 044506 (2024)

<https://doi.org/10.1063/5.0219417>

50) **Pillared graphene oxide frameworks for the adsorption and separation of polar protic and aprotic liquid solvents: The cases of pure water, methanol, dimethyl sulfoxide, and dimethyl sulfoxide–water mixtures.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras and Emmanuel Klontzas, *J. Chem. Phys.* **160**, 184701 (2024)

<https://doi.org/10.1063/5.0203165>

49) **Solvation structure and dynamics of favipiravir in supercritical CO₂. A molecular dynamics investigation.**

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.* **392**, 123512 (2023)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123512>

48) **Hydration structure and dynamics, ultraviolet–visible and fluorescence spectra of caffeine in ambient liquid water. A combined classical molecular dynamics and quantum chemical study.**

Ioannis Skarmoutsos, Demeter Tzeli and Ioannis D. Petsalakis, *J. Mol. Liq.* **391**, 123220 (2023)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123220>

47) **Local intermolecular structure, hydrogen bonding and related dynamics in the liquid cis/trans N-methylformamide mixture: A density functional theory based Born-Oppenheimer molecular dynamics study.**

Ioannis Skarmoutsos, Ricardo L. Mancera, Stefano Mossa and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.* **365**, 120085 (2022)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120085>

46) **Fingerprints of the Crossing of the Frenkel and Melting Line on the Properties of High-Pressure Supercritical Water.**

Ioannis Skarmoutsos, Jannis Samios and Elvira Guardia *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 7636 (2022)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.2c01477>

45) **Using Car-Parrinello simulations and microscopic order descriptors to reveal two locally favored structures with distinct molecular dipole moments and dynamics in ambient liquid water.**

Ioannis Skarmoutsos, Giancarlo Franzese and Elvira Guardia, *J. Mol. Liq.* **364**, 119936 (2022)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119936>

44) **A Computational Study on Phenylidiboronic Acid-Pillared Graphene Oxide Frameworks for Gas Storage and Separation.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras, and Emmanuel Klontzas, *ACS Appl. Nano Mater.* **5**, 9286-9297 (2022)

<https://doi.org/10.1021/acsanm.2c01617>

43) **CF₄ Capture and Separation of CF₄-SF₆ and CF₄-N₂ Fluid Mixtures Using Selected Carbon Nanoporous Materials and Metal-Organic Frameworks: A Computational Study.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras, and Emmanuel Klontzas, *ACS Omega* **7**, 6691 (2022)

<https://doi.org/10.1021/acsomega.1c06167>

42) **On the Different Faces of the Supercritical Phase of Water at a Near-Critical Temperature: Pressure-Induced Structural Transitions Ranging from a Gaslike Fluid to a Plastic Crystal Polymorph**

Ioannis Skarmoutsos, Andres Henao, Elvira Guardia and Jannis Samios, *J. Phys. Chem. B* **125**, 10260 (2021)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c05053>

41) **The Polar Cosolvent Effect on Caffeine Solvation in Supercritical CO₂-Ethanol Mixtures: A Molecular Modeling Approach.**

Ioannis Skarmoutsos, Ioannis D. Petsalakis and Jannis Samios, *Ind. Eng. Chem. Res.* **60**, 11834 (2021)

<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c00956>

40) **The Impact of Ionic Liquid Loading in Three-Dimensional Carbon Nanotube Networks on the Separation of CO₂/CH₄ Fluid Mixtures: Insights from Molecular Simulations.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras, and Emmanuel Klontzas, *J. Phys. Chem. C* **125**, 13508 (2021)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c00346>

39) **Confinement effects on the properties of polar hydrogen-bonded fluids: A showcase on methanol adsorbed in three-dimensional pillared graphene and carbon nanotube networks.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras, George E. Froudakis, Guillaume Maurin and Emmanuel Klontzas, *J. Phys. Chem. C* **124**, 22959 (2020)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c06289>

38) **Hydration structure and dynamics of the favipiravir antiviral drug: A molecular modelling approach.**

Ioannis Skarmoutsos, Guillaume Maurin, Elvira Guardia and Jannis Samios, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **93**, 1378 (2020)

<https://doi.org/10.1246/bcsj.20200163>

37) **Porous carbon nanotube networks and pillared graphene materials exhibiting high SF₆ adsorption uptake and separation selectivity of SF₆/N₂ fluid mixtures: A comparative molecular simulation study.**

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel N. Koukaras, Costas Galiotis, George Froudakis, Emmanuel Klontzas *Micropor. Mesopor. Mat.* **307**, 110464 (2020)

<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110464>

36) **Solvation Structure and Dynamics of the Dimethylammonium Cation Diluted in Liquid Water: A Molecular Dynamics Approach**

Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia *J. Chem. Phys.* **152**, 234501 (2020)

<https://doi.org/10.1063/5.0004204>

35) Highly efficient rare-earth based metal–organic frameworks for water adsorption: A molecular modelling approach.

Ioannis Skarmoutsos, Mohamed Eddaoudi and Guillaume Maurin (2019) *J. Phys. Chem. C* **123**, 26989 (2019)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b07402>

34) A study of Ar-N₂ supercritical mixtures using neutron scattering, molecular dynamics simulations and quantum mechanical scattering calculations.

Alan K. Soper, Ioannis Skarmoutsos, Jacek Klos, Jannis Samios and Sarantos Marinakis (2019) *J. Mol. Liq.* **290**, 111168 (2019)
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111168>

33) On the interplay between the local structure and dynamics in low concentration mixtures of H₂O and HOD in the [Emim⁺][TF₂N⁻] room temperature ionic liquid.

Ioannis Skarmoutsos, Leonidas Spyrogiannopoulos, Emmanouil Kainourgiakis and Jannis Samios *J. Mol. Liq.* **289**, 111135 (2019)
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111135>

32) The effect of polymorphism on the structural, dynamic and dielectric properties of plastic crystal water: A molecular dynamics simulation perspective.

Ioannis Skarmoutsos, Stefano Mossa and Elvira Guardia (2019) *J. Chem. Phys.* **150**, 124506 (2019)
<https://doi.org/10.1063/1.5084217>

31) Highly tunable sulfur hexafluoride separation by interpenetration control in metal organic frameworks.

Ioannis Skarmoutsos, Mohamed Eddaoudi and Guillaume Maurin, *Micropor. Mesopor. Mat.* **281**, 44 (2019)
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2019.02.035>

30) Solvent and Salt Effect on Lithium Ion Solvation and Contact Ion Pair Formation in Organic Carbonates: A Quantum Chemical Perspective.

Veerapandian Ponnuchamy, Stefano Mossa and Ioannis Skarmoutsos *J. Phys. Chem. C* **122**, 25930 (2018)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09892>

29) Peculiar Molecular Shape and Size Dependence of the Dynamics of Fluids confined in a Small-Pore Metal-Organic Framework.

Ioannis Skarmoutsos, Mohamed Eddaoudi and Guillaume Maurin, *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 3014 (2018)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b00855>

28) CO₂ capture using the SIFSIX-2-Cu-i metal-organic framework: A computational approach.

Ioannis Skarmoutsos, Youssef Belmabkhout, Karim Adil, Mohamed Eddaoudi and Guillaume Maurin, *J. Phys. Chem. C*, **121**, 27462 (2017)
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b08964>

27) Local structural fluctuations, hydrogen bonding and structural transitions in supercritical water.

Ioannis Skarmoutsos, Elvira Guardia and Jannis Samios, *J. Supercrit. Fluids* **130**, 156 (2017)
<https://doi.org/10.1016/j.supflu.2017.08.004>

26) Local Structure and Translational Dynamics of NMF (N-Methylformamide)– DMF (N, N-Dimethylformamide) Mixtures via Molecular Dynamics Simulation.

Nikolaos Elpidoforou, Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel Kainourgiakis, Vasilios Raptis and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.*, **226**, 16 (2017)
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2016.09.039>

25) Structure and dynamics of liquid CS₂: Going from ambient to elevated pressure conditions.

Ioannis Skarmoutsos, Stefano Mossa and Jannis Samios, *J. Chem. Phys.*, **145**, 154505 (2016)

<https://doi.org/10.1063/1.4964816>

24) The Anion Effect on Li⁺ Ion Coordination Structure in Ethylene Carbonate Solutions

Bo Jiang, Veerapandian Ponnuchamy, Yuneng Shen, Xueming Yang, Kaijun Yuan, Valentina Vetere, Stefano Mossa, Ioannis Skarmoutsos, Yufan Zhang and Junrong Zheng, *J. Phys. Chem. Lett.*, **7**, 3554 (2016)

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b01664>

23) Highly selective separation and adsorption-induced phase transition of SF₆-N₂ fluid mixtures in three-dimensional carbon nanotube networks.

Ioannis Skarmoutsos, George Tamiolakis and George E. Froudakis *J. Supercrit. Fluids* **113**, 89 (2016)

<https://doi.org/10.1016/j.supflu.2016.03.024>

22) Structural and dipolar fluctuations in liquid water: A Car-Parrinello molecular dynamics study.

Ioannis Skarmoutsos, Elvira Guardia and Marco Masia *Chem. Phys. Lett.*, **648**, 102 (2016)

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2016.02.008>

21) Li⁺ solvation in pure, binary and ternary mixtures of organic carbonate electrolytes.

Ioannis Skarmoutsos, Veerapandian Ponnuchamy, Valentina Vetere and Stefano Mossa *J. Phys. Chem. C*, **119**, 4502 (2015)

<https://doi.org/10.1021/jp511132c>

20) Hydrogen bonding and related properties in liquid water: A Car-Parrinello molecular dynamics simulation study.

Elvira Guardia, Ioannis Skarmoutsos and Marco Masia *J. Phys. Chem. B*, **119**, 8926 (2015)

<https://doi.org/10.1021/jp507196q>

19) The Importance of Timescale for Hydrogen Bonding in Imidazolium Chloride Ionic Liquids.

Ioannis Skarmoutsos, Tom Welton and Patricia A. Hunt *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 3675 (2014)

<https://doi.org/10.1039/C3CP54551B>

18) Separation of CO₂ / N₂ mixtures in 3D carbon-based porous nanotube networks: A molecular dynamics investigation.

Ioannis Skarmoutsos, George Tamiolakis and George E. Froudakis, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 876 (2014)

<https://doi.org/10.1039/C3CP54587C>

17) Carbon-based nanoporous networks as media for the separation of CO₂/CH₄ mixtures: A molecular dynamics approach.

Ioannis Skarmoutsos, George Tamiolakis and George E. Froudakis, *J. Phys. Chem. C*, **117**, 19373 (2013)

<https://doi.org/10.1021/jp401978m>

16) Hydrogen Bonding in 1-Butyl- and 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Chloride Ionic Liquids

Ioannis Skarmoutsos, Dimitris Dellis, Richard P. Matthews, Tom Welton and Patricia A. Hunt, *J. Phys. Chem. B*, **116**, 4921 (2012)

<https://doi.org/10.1021/jp209485y>

15) Solvation structure and Dynamics of cis- and trans- 1,2 Dichloroethene Isomers in Supercritical Carbon Dioxide. A molecular dynamics simulation study.

Dimitris Dellis, Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Phys. Chem. B*, **115**, 12098 (2011)

<https://doi.org/10.1021/jp204202p>

14) Structural and dynamic properties of the new alternative refrigerant 2,3,3,3-Tetrafluoro-1-propene (HFO-1234yf) in the liquid state.

Ioannis Skarmoutsos and Patricia A. Hunt, *J. Phys. Chem. B*, **114**, 17120 (2010)

<https://doi.org/10.1021/jp108647p>

13) Hydrogen bond, electron donor acceptor dimer and residence dynamics in supercritical CO₂-ethanol mixtures and the effect of hydrogen bonding on single reorientational and translational dynamics. A molecular dynamics simulation study.

Ioannis Skarmoutsos, Elvira Guardia and Jannis Samios, *J. Chem. Phys.*, **133**, 014504 (2010)

<https://doi.org/10.1063/1.3449142>

12) Effect of the local hydrogen bonding network on the reorientational and translational dynamics in supercritical water.

Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia, *J. Chem. Phys.*, **132**, 074502 (2010)

<https://doi.org/10.1063/1.3305326>

11) Molecular simulations of benzene and hexafluorobenzene using new optimized effective potential models: Investigation of the liquid, vapor-liquid coexistence and supercritical fluid phases.

Dimitris Dellis, Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.*, **153**, 25 (2010)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2009.04.007>

10) On ion and molecular polarization of halides in water.

Elvira Guardia, Ioannis Skarmoutsos and Marco Masia, *J. Chem. Theory Comput.*, **5**, 1449 (2009)

<https://doi.org/10.1021/ct900096n>

9) Local structural effects and related dynamics in supercritical ethanol. 2. Hydrogen bonding network and its effect on single reorientational dynamics.

Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 8898 (2009)

<https://doi.org/10.1021/jp901489c>

8) Local structural effects and related dynamics in supercritical ethanol. 1. Mechanisms of local density reorganization and residence dynamics.

Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 8887 (2009)

<https://doi.org/10.1021/jp901020x>

7) The effect of intermolecular interactions on local density inhomogeneities and related properties in pure supercritical molecular fluids. A comparative molecular dynamics study.

Ioannis Skarmoutsos, Dimitris Dellis and Jannis Samios, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 2783 (2009)

<https://doi.org/10.1021/jp809271n>

6) Investigation of the local composition enhancement and related dynamics in supercritical CO₂-cosolvent mixtures via computer simulation. The case of ethanol in CO₂.

Ioannis Skarmoutsos, Dimitris Dellis and Jannis Samios, *J. Chem. Phys.*, **126**, 224503 (2007)

<https://doi.org/10.1063/1.2738476>

5) Local Density Augmentation and Dynamic Properties of Hydrogen- and non Hydrogen- Bonded Supercritical Fluids: A Molecular Dynamics Study

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Chem. Phys.*, **126**, 044503 (2007)

<https://doi.org/10.1063/1.2431370>

4) Local Density Inhomogeneities and Dynamics in Supercritical Water: A molecular dynamics simulation approach.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 21931 (2006)

<https://doi.org/10.1021/jp060955p>

3) Local intermolecular structure and dynamics in binary supercritical solutions. A molecular dynamics simulation study of methane in carbon dioxide.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.*, **125**, 181-186 (2006)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2005.11.023>

2) Investigation of the vapor-liquid equilibrium and supercritical phase of pure methane via computer simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Leonidas I. Kampanakis and Jannis Samios, *J. Mol. Liq.*, **117**, 33-41 (2005)

<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2004.08.014>

1) Molecular dynamics of cis/trans N-methylformamide (NMF) liquid mixture using an all atom optimized rigid force field

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *Chem. Phys. Lett.*, **384**, 108-113 (2004)

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.096>

Αναδημοσιευμένες Εργασίες:

1) Local Density Augmentation and Dynamic Properties of Hydrogen- and non Hydrogen- Bonded Supercritical Fluids: A Molecular Dynamics Study

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, **republished in the *Virtual Journal of Biological Physics Research*, 13 (Issue 3) (2007)**

2) Investigation of the local composition enhancement and related dynamics in supercritical CO₂-cosolvent mixtures via computer simulation. The case of ethanol in CO₂.

Ioannis Skarmoutsos Dimitris Dellis and Jannis Samios, **republished in the *Virtual Journal of Biological Physics Research*, 13 (Issue 12) (2007)**

Δημοσιεύσεις ως κεφάλαια επιστημονικών βιβλίων:

1) Molecular Dynamics Simulation of cis-trans N-Methylformamide (NMF) liquid mixture. Structure and Dynamics.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *Lecture Series on Computer and Computational Sciences* (VSP International), **1**, 479 (2004)

Εργασίες σε Βιβλία Πρακτικών συνεδρίων:

1) Molecular Dynamics simulation studies of supercritical carbon dioxide using available potential models. Investigation of the bulk thermodynamical, transport and dynamical properties.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, Winter School: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, *Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC Series)*, **Vol. 11**, 20, (2002)

2) Molecular dynamics studies of cis/trans N-methylformamide (NMF) liquid mixture using a new optimized all atom force field.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, NATO Advanced Study Institute (ASI): Novel Approaches to the Structure and Dynamics of Liquids: Experiments, Theories and Simulations, page 151 (2002)

3) Investigation of the Local Density Inhomogeneities and Dynamics in Neat Supercritical Fluids using MD simulation techniques: Comparison between Hydrogen- and Non Hydrogen-Bonded fluids.

Ioannis Skarmoutsos Nikolaos Elpidoforou and Jannis Samios, Winter School: Computational Nanoscience: Do It Yourself, *Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC Series)*, page 11, (2006)

4) Computational Modelling of Nanoporous Materials for Sustainable Energy and Environmental Applications.

Ioannis Skarmoutsos, Emmanuel Klontzas, Emmanuel N. Koukaras and Guillaume Maurin, *Conference Proceedings, 12th Panhellenic Conference of Chemical Engineering* (2019).

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ

ΔΙΑΛΕΞΕΙΣ ΕΠΕΙΤΑ ΑΠΟ ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ

19) Molecular Simulations: A computational toolbox to predict, understand and rationally tailor the physicochemical properties of liquid and supercritical solvents and materials for sustainable chemical applications.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland (2024)

18) Using classical and ab initio molecular dynamics, statistical mechanical theories and structural order parameters to study the phase-behavior of molecular systems: The unique case of water at ambient-pressure liquid up to extreme-pressure supercritical thermodynamic conditions.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Materials Science and Engineering, University of Ioannina, Workshop on Computational Materials Science organized by Department of Materials Science and Engineering, University of Ioannina and the Hellenic Society for the Science and Technology of Condensed Matter (HSSTCM).

17) Molecular Simulations: A computational physical chemistry toolbox to predict, understand and rationally tailor the properties of molecular/ionic solvents and materials for sustainable chemical applications

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Chemistry Department, University of Athens, Greece (2021)

16) Molecular modelling and simulation methods to predict and understand the properties of condensed matter: A physicochemical approach to develop modern chemical, environmental and engineering applications

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Chemistry Department, University of Ioannina, Greece (2020)

15) Understanding the properties of aqueous systems and their interactions with nanoporous materials and sustainable ionic liquid solvents to develop environmental, energy storage and geological applications: A computational modelling perspective.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the National Hellenic Research Foundation, Athens, Greece (2019).

14) Computational Modeling of liquid electrolytes and porous materials for sustainable energy applications.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Physical, Chemical, and Natural Systems, Universidad Pablo de Olavide, Seville, Spain (2019).

13) Computational modeling of modern electrolytes for energy applications

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Chemistry of the École Normale Supérieure de Lyon, France (2018).

12) Gas adsorption and separation using metal-organic frameworks: A computational approach.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Physics, Technical University of Catalonia (UPC), Spain (2018)

11) Computational modeling of modern electrolytes for energy applications: Structure and dynamics in ionic liquids and their mixtures with water.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Physics, University of Barcelona (UB), Spain (2018)

10) Gas adsorption and separation using the SIFSIX-2-Cu-i and SIFSIX-2-Cu metal-organic frameworks: A computational approach.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Physical Chemistry Laboratory, Department of Chemistry, National and Kapodistrian University of Athens, Greece (2018)

9) Local structural and dipolar fluctuations in liquid water: Insights from ab initio molecular dynamics simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the University of Barcelona (UB) - Physics Department, Barcelona, Catalonia, Spain (2016)

8) Local structural and dipolar fluctuations in liquid water: Insights from ab initio molecular dynamics simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the Institut Laue-Langevin (ILL), Grenoble, France (2016)

7) Hydrogen Bonding Interactions in Ionic Liquids: Insights from molecular simulation.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at INAC/SPrAM, CEA-Grenoble, France (2013)

6) Hydrogen Bonding interactions and their effect on the properties of self-associating liquids: Insights from molecular simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the University of Crete, Department of Materials Science and Technology, Iraklio, Greece (2012)

5) Molecular Dynamics Simulation Techniques: A very useful tool to investigate the properties of condensed matter.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the University of Crete, Department of Chemistry, Iraklio, Greece (2012)

4) Hydrogen Bonding interactions and their effect on the properties of self-associating liquids: Insights from molecular simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the University of Sassari, Department of Chemistry and Pharmacy, Sassari, Italy (2012)

3) Molecular Dynamics Simulation: A useful tool to investigate the properties of gases confined in nanoporous materials.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the *European Technical School on Hydrogen and Fuel Cells*, Heraklion, Greece (2012).

2) Supercritical Fluids: An introduction to the physicochemical properties of a “peculiar” state of matter.

Ioannis Skarmoutsos, Invited Lecture at the Department of Chemical Engineering, Aristotle University of Thessaloniki, Greece (2011)

1) Supercritical Fluids: Investigation of local density inhomogeneities and related properties using computer simulations.

Ioannis Skarmoutsos, Invited lecture at the “Day of the research” of the Department of Physics & Nuclear Engineering (Technical University of Catalonia- UPC), Barcelona, Spain (2009)

ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ

22) The Unique Structural Features of Water, Ranging from Ambient Liquid up to Supercritical, Extreme-Pressure Conditions: Insights from Classical and ab initio Molecular Dynamics Simulations.

23rd Panhellenic Chemistry Conference, Athens-Greece (2024)

21) Pillared graphene oxide frameworks for the adsorption and separation of dimethylsulfoxide-water mixtures.

European/Japanese Molecular Liquids Group-EMLG/JMLG Conference entitled: "Structure and Dynamics of Hydrogen-Bonded Systems." in Trieste- Italy (2024)

20) The unique structural features of water, ranging from ambient liquid up to supercritical, extreme-pressure conditions: Insights from classical and ab initio molecular dynamics simulations.

2nd International Conference on Physical Chemistry and Spectroscopy (ICPCS), Patras, Greece (2023)

19) Solvation structure and dynamics of pharmaceutical compounds in liquid and supercritical solvents: The cases of caffeine and favipiravir.

European/Japanese Molecular Liquids Group-EMLG/JMLG Conference entitled: "Understanding Solvation in Molecular and Ionic Fluids: Towards a Sustainable Future." in Bordeaux- France (2023)

18) The unique structural features of water, ranging from ambient liquid up to supercritical, extreme-pressure conditions: Insights from classical and ab initio molecular dynamics simulations.

European Conference of Computational & Theoretical Chemistry, EuChems CompChem in Thessaloniki, Greece (2023)

17) The unique structural features of water, ranging from ambient liquid up to supercritical, extreme-pressure conditions: Insights from classical and ab initio molecular dynamics simulations.

European/Japanese Molecular Liquids Group-EMLG/JMLG Conference entitled: "Molecular liquids at interfaces." in Barcelona- Spain (2022)

16) Understanding the interactions of water with nanoporous materials to develop environmental 1) Gas storage and separation using three-dimensional pillared graphene oxide frameworks with phenyldiboronic acid linkers: A computational approach.

Graphene 2021 Conference, Grenoble, France (2021)

15) SF₆ Capture and Separation of SF₆-N₂ Fluid Mixtures Using Porous Carbon Nanotube Networks and Pillared Graphene Materials

35th Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, Athens, Greece (2021)

14) The different faces of the supercritical phase of water at a near-critical temperature.

1st International Conference on Physical Chemistry and Spectroscopy (ICPCS), Patras, Greece (2021)

13) Understanding the interactions of water with nanoporous materials to develop environmental applications: The case of water adsorption in metal-organic frameworks.

CECAM Workshop: WaterEurope: Multiscale simulations and coarse-grained models for water and aqueous systems, CECAM Headquarters, EPFL, Lausanne, Switzerland (2019)

12) Computational Modelling of Nanoporous Materials for Sustainable Energy and Environmental Applications.

12th Panhellenic Conference of Chemical Engineering, Athens-Greece (2019)

11) On the Peculiar Molecular Shape and Size Dependence of the Dynamics of Fluids Confined in a Small-Pore Metal-Organic Framework

Energy Landscapes 2018 Conference (organized by the University of Cambridge), Kalamata, Greece (2018)

10) Local structural fluctuations, hydrogen bonding and structural transitions in supercritical water.

WaterSpain 2017 Conference, The Zaragoza Scientific Center for Advanced Modeling (ZCAM), Zaragoza, Spain (2017)

9) Local structural and dipolar fluctuations in liquid water: Insights from ab initio molecular dynamics simulations.

European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Recent Progresses on the Experimental & Theoretical-Computational Techniques for the Study of Liquids and Supercritical Fluids." in Crete-Greece (2016)

8) Computational modeling of battery electrolytes: insights from molecular simulations.

European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Molecular Liquids and Soft Matter: From Fundamentals to Applications." in Roma Tre University- Italy (2014)

7) Local Structural Inhomogeneities, Hydrogen Bonding and Tetrahedral Structure in Supercritical Water: Insights from Molecular Simulations.

International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna, Italy (2013)

6) Local density inhomogeneities and related properties in supercritical fluids. A computer simulation study.

Ioannis Skarmoutsos, Dimitris Dellis* and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Understanding solvation from liquid to supercritical conditions." in Lisboa- Portugal (2008)

5) MD Simulation of cis-trans N-Methylformamide (NMF) liquid mixture. Structure and Dynamics.

Ioannis Skarmoutsos Ricardo L. Mancera and Jannis Samios, CCP5 and Marie Curie Actions: Methods in Molecular Simulation Summer School, Cardiff University- UK (2005)

4) Molecular Dynamics Simulation of cis-trans N-Methylformamide (NMF) liquid mixture. Structure and Dynamics.

Ioannis Skarmoutsos, Ricardo L. Mancera and Jannis Samios, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE), organized by the European Society of Computational Methods in Sciences and Engineering (ESCMSE), Athens-Greece (2004)

3) Is the hydrogen-bonding network around the cis and trans N-Methylformamide (NMF) conformers responsible for the observation of different diffusion coefficients? A temperature dependent molecular dynamics approach.

Ioannis Skarmoutsos, Ricardo L. Mancera and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Complex Liquids: Fundamental Properties to Industrial Applications." in Sheffield Hallam University- UK (2004)

2) Molecular Dynamics simulations of cis-trans N-Methylformamide liquid mixture. Structure, dynamics and hydrogen bonding analysis.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Molecular Liquids. Routes from Local Order to Large-Scale Cooperativity." in Castelvechio Pascoli- Italy (2003)

1) Molecular dynamics studies of cis/trans N-methylformamide (NMF) liquid mixture using a new optimized all atom force field.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, NATO Advanced Study Institute (ASI): Novel Approaches to the Structure and Dynamics of Liquids: Experiments, Theories and Simulations. Rhodes- Greece (2002)

19) Fingerprints of the crossing of the Frenkel and Melting lines in high-pressure supercritical water.

Elvira Guardia, [Ioannis Skarmoutsos](#), Jannis Samios

European/Japanese Molecular Liquids Group-EMLG/JMLG Conference entitled: "Molecular liquids at interfaces." in Barcelona- Spain (2022)

18) Confined Ionic Liquids (IL) in carbon-based materials for CO₂/CH₄ separation: insights from computer simulations.

[Ioannis Skarmoutsos](#), Emmanuel Klontzas, Emmanuel N. Koukaras

Graphene 2021 Conference, Grenoble, France (2021)

17) F-gas adsorption in pillared graphene materials. Insights from molecular simulations.

[Ioannis Skarmoutsos](#), Emmanuel Klontzas, Emmanuel N. Koukaras

Graphene 2021 Conference, Grenoble, France (2021)

16) Role of the Loading of Ionic Liquid [EMIM]⁺[BF₄]⁻ on the Separation of CO₂/CH₄ in 3D Carbon Nanotube Networks

[I. Skarmoutsos](#), R. Lingas, E.N. Koukaras, E. Klontzas

35th Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, Athens, Greece (2021)

15) Molecular Dynamics Study of H₂O and HOD dissolved in the Room Temperature Ionic Liquid Emim⁺ Tf₂N⁻: Dynamical and Structural properties

Leonidas Spyrogiannopoulos, Emmanouil Kainourgakis, [Ioannis Skarmoutsos](#) and Jannis Samios

Athens Conference of Advances in Chemistry (acac2018), organised on the occasion of the centennial anniversary of the Chemistry Department of the National and Kapodistrian University of Athens.

14) CO₂ capture and separation from methane using the SIFSIX-2-Cu-i metal-organic framework: A computational approach.

[Ioannis Skarmoutsos](#), Youssef Belmabkhout, Karim Adil, Mohamed Eddaoudi and Guillaume Maurin

11th International Symposium on the Characterization of Porous Solids (COPS-XI), Avignon-France (2017)

13) Structure and dynamics of liquid CS₂: Going from ambient to elevated pressure conditions.

[Ioannis Skarmoutsos](#), Stefano Mossa and Jannis Samios

European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Recent Progresses on the Experimental & Theoretical-Computational Techniques for the Study of Liquids and Supercritical Fluids." in Crete-Greece (2016)

12) Short range order and rotational dynamics in plastic crystal phases of water.

Andres Henao, [Ioannis Skarmoutsos](#), Luis Carlos Pardo and Elvira Guardia

European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Recent Progresses on the Experimental & Theoretical-Computational Techniques for the Study of Liquids and Supercritical Fluids." in Crete-Greece (2016)

11) Local Structural Inhomogeneities, Hydrogen Bonding and Local Orientational Structure in Supercritical Water: Insights from Molecular Simulations.

[Ioannis Skarmoutsos](#), Elvira Guardia and Jannis Samios

European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Recent Progresses on the Experimental & Theoretical-Computational Techniques for the Study of Liquids and Supercritical Fluids." in Crete-Greece (2016)

10) Carbon-based nanoporous networks as media for the separation of CO₂/CH₄ mixtures: A molecular dynamics approach.

Ioannis Skarmoutsos, George Tamiolakis and George E. Froudakis

30th Panhellenic Conference on Solid-State Physics and Materials Science, Heraklion, Crete-Greece (2014)

9) Local Structural Inhomogeneities, Hydrogen Bonding and Tetrahedral Structure in Supercritical Water: Insights from Molecular Simulations.

International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna, Italy (2013)

8) Carbon based nanoporous networks as media for the separation of CO₂/CH₄ mixtures: A molecular dynamics approach.

International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna, Italy (2013)

7) Solvation properties of alkali and halide ions in water from Car-Parinello molecular dynamics simulations

Ausias-March Calvo, Marco Masia, Ioannis Skarmoutsos and Elvira Guardia

CPMD meeting 2011: Extending the limits of Ab Initio Molecular Dynamics Simulations for Chemistry, Materials Science and Biophysics, Barcelona-Spain (2011)

6) Investigation of the Local Density Inhomogeneities and Dynamics in Neat Supercritical Fluids using MD simulation techniques: Comparison between Hydrogen- and Non Hydrogen-Bonded fluids.

Ioannis Skarmoutsos Nikolaos Elpidoforou and Jannis Samios, Winter School: *Computational Nanoscience: Do It Yourself*, John von Neumann Institute for Computing (NIC) Julich-Germany (2006)

5) Local density inhomogeneities and dynamic properties in supercritical fluids. A MD simulation study of neat sc CO₂ and of the binary mixture CH₄-CO₂.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, *CCP5 and Marie Curie Actions: Methods in Molecular Simulation Summer School*, Cardiff University- UK (2005)

4) Is the hydrogen-bonding network around the cis and trans N-Methylformamide (NMF) conformers responsible for the observation of different diffusion coefficients? A temperature dependent molecular dynamics approach.

Ioannis Skarmoutsos, Ricardo L. Mancera and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Complex Liquids: Fundamental Properties to Industrial Applications." in Sheffield Hallam University- UK (2004)

3) Molecular Dynamics simulations of cis-trans N-Methylformamide liquid mixture. Structure, dynamics and hydrogen bonding analysis.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Molecular Liquids. Routes from Local Order to Large-Scale Cooperativity." in Castelveccchio Pascoli- Italy (2003)

2) Supercritical Methane. Investigation of the bulk thermodynamic, structural and dynamic properties.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, European Molecular Liquids Group-EMLG Conference entitled: "Molecular Liquids. Routes from Local Order to Large-Scale Cooperativity." in Castelveccchio Pascoli- Italy (2003)

1) Molecular dynamics studies of cis/trans N-methylformamide (NMF) liquid mixture using a new optimized all atom force field.

Ioannis Skarmoutsos and Jannis Samios, NATO Advanced Study Institute (ASI): Novel Approaches to the Structure and Dynamics of Liquids: Experiments, Theories and Simulations. Rhodes- Greece (2002)