

Νικόλαος Λεμπέσης

Επικ. Καθηγητής Υπολογιστικής Χημείας



Διεύθυνση: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Πανεπιστημιούπολη Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, Ιωάννινα 45110
Τηλ: + 30 2651008447
Emails: nlempesis@uoi.gr; nikolaos.lempesis@epfl.ch



[ResearchGate](#)



[ORCID ID](#)



[Google Scholar](#)



[Publons](#)

ΠΡΟΦΙΛ

Η περιοχή ερεύνης μου εντοπίζεται στην τομή των επιστημών **Χημικής Μηχανικής, Υπολογιστικής Χημείας και Επιστήμης Υλικών**. Είμαι εξαιρετικός γνώστης των τεχνικών μοντελοποίησης και προσομοίωσης της συμπεριφοράς των υλικών σε όλη την έκταση κλιμάκων χρόνου/διάστασης. Έχω εκτεταμένη εμπειρία στην μελέτη της μηχανικής απόκρισης υλικών, στην θερμοδυναμική μελέτη των υλικών σε ισορροπία και εκτός αυτής χρησιμοποιώντας και συνδυάζοντας καταλλήλως μεθόδους στατιστικής μηχανικής, κλασικής μηχανικής και κβαντομηχανικής.

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

Ενθουσιώδης να εργάζομαι πάνω σε μαθηματικές και υπολογιστικές επιστήμες με σκοπό την μοντελοποίηση και προσομοίωση νέων υλικών για καινοτόμες εφαρμογές. Ανάπτυξη και παράδοση θεωρητικών πλαισίων που περιγράφουν τις σχέσεις δομής-ιδιοτήτων-λειτουργίας με σκοπό την ανάπτυξη και προώθηση καινοτόμων επιστημονικών εγχειρημάτων. Διευκόλυνση του συνδυασμού θεωρίας και πειράματος δια μέσου έξυπνων και εύληπτων τεχνολογιών λογισμικού.

ΠΡΟΣΩΠΙΚΑ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

Ημερομηνία γέννησης: 28 Σεπτεμβρίου 1980
Τόπος γέννησης: Αθήνα, Ελλάδα
Υπηκοότητα: Ελληνική
Οικογενειακή κατάσταση: Έγγαμος

ΘΕΣΕΙΣ

Τρέχουσες:

28/1/2025 – παρόν

Επίκουρος Καθηγητής επί θητεία

Τομέας Φυσικοχημείας

Τμήμα Χημείας

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Ρόλος: Ανάπτυξη και εφαρμογή πολυεπίπεδων μεθόδων προσομοίωσης με πρακτικές εφαρμογές στους τομείς της ενέργειας, του περιβάλλοντος και της βελτίωσης της ποιότητας ζωής. Διδασκαλία προπτυχιακών και μεταπτυχιακών μαθημάτων, καθώς και εκπαίδευση νέων ερευνητών και μελλοντικών σκεπτόμενων ανθρώπων.

Παρελθούσες:

1/5/2021 – 31/12/2024

Επιστημονικός Συνεργάτης

Ινστιτούτο Χημικών Επιστημών και Μηχανικής

Σχολή Βασικών Επιστημών

Ελβετικό Ομοσπονδιακό Τεχνολογικό Ινστιτούτο Λοζάνης (EPFL)

Ρόλος: Σχεδιασμός μικτών κβαντικών/κλασικών υπολογιστικών

μεθόδων και εφαρμογή, προσαρμογή και επέκταση αυτών σε

συστήματα χημικού και βιολογικού ενδιαφέροντος

15/1/2018 – 30/4/2021

Επιστημονικός Συνεργάτης

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Σχολή Μηχανικής και Αρχιτεκτονικής Fribourg (HEIA-FR)

Ρόλος: Υπεύθυνος ερευνητικών προγραμμάτων για την γεφύρωση

του χάσματος μεταξύ ακαδημαϊκής βασικής και εφαρμοσμένης

έρευνας με τη βοήθεια τεχνικών μοντελοποίησης και προσομοίωσης.

1/2/2017 – 30/6/2018

Μεταδιδακτορικός Ερευνητής

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Ελβετικό Ομοσπονδιακό Τεχνολογικό Ινστιτούτο Ζυρίχης (ETH)

Ρόλος: Ανάπτυξη υπολογιστικών εργαλείων για την διευκόλυνση

της έρευνας στην επιστήμη των υλικών και σε εμπορικές δραστηριότητες.

1/10/2013 – 30/9/2016

Μεταδιδακτορικός Ερευνητής

Τμήμα Χημικών Μηχανικών

Τεχνολογικό Ινστιτούτο Μασαχουσέτης (MIT)

Τίτλος εργασίας: “Θεωρητική πολυεπίπεδη προσομοίωση

Θερμοπλαστικών Πολυουρεθανών”

3/9/2012 – 14/9/2012

Επισκέπτης Υποψήφιος Διδάκτωρ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

Τεχνικό Πανεπιστήμιο Eindhoven (Eindhoven, Ολλανδία)

- Ανάπτυξη και βελτιστοποίηση στοχαστικών αλγορίθμων

1/10/2011 – 31/12/2011

Επισκέπτης Υποψήφιος Διδάκτωρ

Ινστιτούτο Φυσικής

Πανεπιστήμιο Pierre-et-Marie-Curie UPMC (Παρίσι, Γαλλία)

- Υπότροφος HPC-Ευρορα2
- Ανάπτυξη άκρως παραλληλοποιήσιμων κωδίκων

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ

14/1/2008 – 5/6/2013

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (Αθήνα, Ελλάδα)

Ph.D. στην Επιστήμη Υλικών

- Τίτλος Διατριβής: “Μοριακή Προσομοίωση Υαλωδών Υλικών”
- Επ. υπεύθυνος: Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου
- Επίκεντρο: Υπολογιστική Προσομοίωση της Μηχανικής Πολυμερών

9/5/2008 – 10/11/2008

Στρατιωτική Θητεία (Σάμος, Ελλάδα)

Εκπληρωθείσα

- Ειδικότητα: Χημικός Μηχανικός

1/3/2006 – 30/11/2007

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (Αθήνα, Ελλάδα)

M.Sc. στην Επιστήμη Υλικών

- Θέμα: “Υπολογιστική μελέτη της διαδικασίας υαλοποίησης δια μέσου μοριακών προσομοιώσεων: η ύπαρξη εγγενών δομών και η σημασία τους”
- Επ. υπεύθυνος: Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου
- Επίκεντρο: Προσομοίωση Δυναμικής Πολυμερών

10/9/2003 – 30/9/2005

Τεχνικό Πανεπιστήμιο Μονάχου (Μόναχο, Γερμανία)

B.Sc. στην Χημική Μηχανική, GPA – 1.8/6.0

- Κατεύθυνση: Βιοχημική Μηχανική
- Επ. υπεύθυνος: Καθηγητής Δρ. Johannes A. Lercher
- Επίκεντρο: Μηχανική Διεργασιών και Χημικής Τεχνολογίας

08/10/1999 – 30/11/2007

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (Αθήνα, Ελλάδα)

B.Sc. στην Χημική Μηχανική, GPA – 9.2/10

(Magna Cum Laude)

- Κατεύθυνση: Επιστήμη και Τεχνολογία Υλικών
- Επ. υπεύθυνος: Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου
- Επίκεντρο: Θερμοδυναμική, Μηχανική Στερεάς Κατάστασης και Ρεολογία

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

The Dow Chemical Company (Terneuzen, Ολλανδία)

Επιστημονικός Συνεργάτης/Σύμβουλος

Φεβ. 2017 – Φεβ. 2020

- Αριθμητική μοντελοποίηση και προσομοίωση αφρών πολυουρεθάνης
- Προσομοίωση πλήρωσης καλουπιού
- Διερεύνηση μέσης διαμέτρου φυσαλίδας και θερμικών ιδιοτήτων αφρού

BASF SE (Ludwigshafen, Germany)

Επιστημονικός Συνεργάτης/Σύμβουλος

Οκτ. 2013 – Σεπ. 2016

- Θεωρητική πολυεπίπεδη προσομοίωση θερμοπλαστικών πολυουρεθανών
- Μοριακή μηχανική και δομική μοντελοποίηση
- Ατομιστική/μοριακή προσομοίωση μεγάλης εκτατικής/θλιπτικής παραμόρφωσης
- Σύζευξη με μικρομηχανική μοντελοποίηση και προσομοιώσεις συνεχούς κλίμακας

Evonik Industries AG (Hanau, Germany)

R & D Engineering Ειδικευόμενος

Νοε. 2005 – Φεβ. 2006

- Εργασία στο τμήμα Computer Aided Process Engineering (CAPE)
- Σχεδιασμός και βελτιστοποίηση χημικών διεργασιών μέσω ASPEN PLUS
- Dynamic simulation and optimization of a distillation column in the presence of chemical reactions
- Δυναμική προσομοίωση και βελτιστοποίηση μίας αποστακτικής στήλης παρουσία χημικών αντιδράσεων

ΒΡΑΒΕΙΑ, ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ ΚΑΙ ΧΟΡΗΓΙΕΣ

- | | |
|------|---|
| 2021 | 1 ^ο Βραβείο (CHF 500) στον διαγωνισμό επιστημονικής εικόνας του συνεδρίου Polymer Replication on Nanoscale (PRN) 2021 |
| 2012 | Βραβείο αριστείας από το Τεχνικό Επιμελητήριο Ελλάδος (Τ.Ε.Ε) για ακαδημαϊκή αριστεία στο ΕΜΠ |
| 2011 | Υποτροφία προγράμματος HPC-Europa2 Transnational Access για επίσκεψη στο GENCI-CINES στο Montpellier (Οκτ 1, 2011 – Δεκ 31, 2011) και παραμονή στο Παρίσι, Γαλλία |
| 2010 | Θωμαΐδειο βραβείο ΕΜΠ 2010 για επιστημονική δημοσίευση σε περιοδικό με |

- κριτές.
- 2010 Εθνικό Στρατηγικό Πλαίσιο Αναφοράς (NSRF), ΗΡΑΚΛΕΙΤΟΣ II/Ελληνικό Υπουργείο Εθνικής Εκπαίδευσης και Θρησκευμάτων: Υποτροφία εκπόνησης διδακτορικής διατριβής.
- 2008 Ασημένιο μετάλλιο «Προμηθεύς Πυρφόρος», έμβλημα του ΕΜΠ για την αποφοίτηση ως δεύτερος στην κατάταξη του έτους 2007 (*Magna Cum Laude*).
- 2007-2009 Υποτροφία Τομέα Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ
- 2007-2009 Υποτροφία Ιδρύματος Μποδοσάκη
- 2007 Υποτροφία και βραβείο αριστείας από το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (Ι.Κ.Υ) για ακαδημαϊκές επιδόσεις στο ΕΜΠ επί τρία συναπτά έτη (2000-2003)
- 2003 Ευρωπαϊκή υποτροφία για την συμμετοχή στο διαπολυτεχνειακό πρόγραμμα T.I.M.E Double Degree Program.
- 2000-2003 Βραβείο Κεφαλογιάννη επί τρία συναπτά έτη για εξαιρετικές ακαδημαϊκές επιδόσεις κατά την φοίτηση στο ΕΜΠ

ΕΠΙΤΡΟΠΕΣ ΚΑΙ ΣΥΜΒΟΥΛΙΑ

- 2021-παρόν Μέλος της Ελβετικής Κοινότητας Χημείας (SCS) (www.scg.ch)
- 2020-παρόν Επίτιμο Rosalind μέλος του London Journals Press (<http://journalspress.com>)
- 2018-παρόν Μέλος της Ευρωπαϊκού Συμβουλίου Μοντελοποίησης Υλικών (<https://emmc.eu/>)
- 2008-2013 Μέλος του συλλόγου Διδακτορικών Φοιτητών ΕΜΠ
- 2003-2007 Μέλος και Υπότροφος του Ευρωπαϊκού προγράμματος DOUPLE DIPLOMA Top Industrial Managers of Europe (T.I.M.E.)

ΚΟΙΝΩΝΙΚΗ ΕΝΑΣΧΟΛΗΣΗ

- Νοε 2019 Οργανωτική Επιτροπή, 4^ο Συνέδριο Πλαστικών 2019, Fribourg, Ελβετία
- Νοε 2018 Οργανωτική Επιτροπή, 3^ο Συνέδριο Πλαστικών 2018, Fribourg, Ελβετία
- 2014-2016 Οργανωτής του Σεμιναρίου 10.975 πάνω στην Επιστήμη και Μηχανική Υλικών, MIT
- Αυγ 2009 Οργανωτική Επιτροπή Συνεδρίου Diffusion Fundamentals III 2007, Αθήνα, Ελλάδα
- Μάιος 2007 Οργανωτική Επιτροπή Συνεδρίου Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design (PPEPPD 2007), Χερσόνησος Κρήτης, Ελλάδα

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

Software

1. N. Lempesis, A. Janka, O. Gnatiuk, S. J. L. van Eijndhoven, R. J. Koopmans, "Improved wetting model for the prediction of topography and dimensionality of superomniphobic surfaces", *Materials Cloud Archive*, 2021, www.doi.org/10.24435/materialscloud:z5-ec

Άρθρα

2. G. AISabeh, V. Slama, M. Ren, M. Almalki, L. Pfeifer, D. J. Kubicki, P. Zimmermann, A. Hinderhofer, F. Faini, D. Moia, M. Othman, F. T. Eickemeyer, V. Carnevali, N. Lempesis, A. Vezzosi, F. Ansari, F. Schreiber, J. Maier, C. M. Wolff, A. Hessler-Wyser, C. Ballif, G.

- Grancini, U. Rothlisberger, M. Grätzel, J. V. Milić, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202417432
3. Liu, Z., Lin, R., Wei, M. *et al.* All-perovskite tandem solar cells achieving >29% efficiency with improved (100) orientation in wide-bandgap perovskites. *Nat. Mater.* 2025, 24, 252–259
 4. J. Jeong, T. Chawanpunyawat, M. Kim, V. Sláma, N. Lempesis, L. Agosta, V. Carnevali, Q. Zhang, F. T. Eickemeyer, L. Pfeifer, Y. Kim, J. W. Song, H. Lu, M. Almalki, S.-I. Mo, S. M. Zakeerudin, U. Rothlisberger, D. S. Kim, P. J. Dyson, M. Grätzel, Carbazole Treated Waterproof Perovskite Films with Improved Solar Cell Performance. *Adv. Energy Mater.* 2025, 15, 2401965
 5. W. Luo, S. Kim, N. Lempesis, L. Merten, E. Kneschaurek, M. Dankl, V. Carnevali, L. Agosta, V. Slama, Z. VanOrman, M. Siczek, W. Bury, B. Gallant, D. J. Kubicki, M. Zalibera, L. Piveteau, M. Deconinck, L. A. Guerrero-León, A. T. Frei, P. A. Gaina, E. Carteau, P. Zimmermann, A. Hinderhofer, F. Schreiber, J. Moser, Y. Vaynzof, S. Feldmann, J.-Y. Seo, U. Rothlisberger, J. V. Milić, From Chalcogen Bonding to S–π Interactions in Hybrid Perovskite Photovoltaics. *Adv. Sci.* 2024, 11, 2405622
 6. L. Li, M. Wei, V. Carnevali, H. Zeng, M. Zeng, R. Liu, N. Lempesis, F. T. Eickemeyer, L. Luo, L. Agosta, M. Dankl, S. M. Zakeeruddin, U. Rothlisberger, M. Grätzel, Y. Rong, X. Li, Buried-Interface Engineering Enables Efficient and 1960-Hour ISOS-L-2I Stable Inverted Perovskite Solar Cells. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2303869
 7. Park, S.M., Wei, M., Lempesis, N. *et al.* Low-loss contacts on textured substrates for inverted perovskite solar cells. *Nature*, 2023, 624, 289–294
 8. E. A. Alharbi, A. Krishna, N. Lempesis, M. Dankl, I. Mosquera-Lois, M. A. Hope, T. P. Baumeler, G. Kakavelakis, A. Mishra, F. Eickemeyer, O. Ouellette, T. Chawanpunyawat, A. Hagfeldt, S. M. Zakeeruddin, L. Emsley, L. Pfeifer, U. Rothlisberger and M. Grätzel, “Cooperative passivation of perovskite solar cells by alkyltrimethylammonium halide amphiphiles”, *Joule*, 2023, 7, 183-200
 9. N. Lempesis, R. J. Koopmans, R. Diez-Ahedo, P. M. Kristiansen, “Extension and validation of a revised Cassie-Baxter model for tailor-made surface topography design and controlled wettability”, *Surf. Topogr.: Metrol. Prop.*, 2021, 9, 025021
 10. N. Lempesis, A. Janka, O. Gnatiuk, S. J. L. van Eijndhoven, R. J. Koopmans, “Predicting Bio-inspired Candidate Surfaces with Superomniphobic Characteristics”, *Surf. Topogr.: Metrol. Prop.*, 2020, 8, 025021
 11. S. Zhu, N. Lempesis, P. J. in ‘t Veld, G. C. Rutledge, “Molecular Simulation of Thermoplastic Polyurethanes under Large Compressive Deformation” *Macromolecules*, 2018, 51 (22), 9306-9316
 12. N. Lempesis, N. Smatsi, V. G. Mavrantzas, S. E. Pratsinis, “Temperature- and pressure-induced monoclinic to orthorhombic phase transition in silicalite-1”, *J. Phys. Chem. C*, 2018, 122(11), 6217-6229
 13. S. Zhu, N. Lempesis, P. J. in ‘t Veld, G. C. Rutledge, “Molecular Simulation of Thermoplastic Polyurethanes under Large Tensile Deformation”, *Macromolecules*, 2018, 51 (5), 1850-1864
 14. N. Lempesis, P. J. in ‘t Veld, G. C. Rutledge, “Atomistic Simulation of a Thermoplastic Polyurethane and Micromechanical Modeling”, *Macromolecules*, 2017, 50(18), 7399-7409
 15. N. Lempesis, P. J. in ‘t Veld, G. C. Rutledge, “Simulation of the structure and mechanics of crystalline 4,4'-diphenylmethane diisocyanate (MDI) with n-butanediol (BDO) as chain extender”, *Polymer*, 2016, 107, 233-239
 16. N. Lempesis, P. J. in ‘t Veld, G. C. Rutledge, “Atomistic simulation of the structure and mechanics of a semicrystalline polyether”, *Macromolecules*, 2016, 49(15), 5714-5726

17. N. Lempesis, G. G. Vogiatzis, G. C. Boulougouris, L. C. A. van Breemen, M. Hütter, and D. N. Theodorou, “Tracking a glassy polymer on its energy landscape in the course of elastic deformation”, *Molecular Physics*, 2013, *111*, 3430-3441
18. N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D. N. Theodorou, “Temporal disconnectivity of the energy landscape in glassy systems”, *J. Chem. Phys.*, 2013, *138*, 12A545
19. N. Lempesis, D. G. Tsalikis, G. C. Boulougouris, D. N. Theodorou, “Lumping analysis for the prediction of long-time dynamics: from monomolecular reaction systems to inherent structure dynamics of glassy materials”, *J. Chem. Phys.*, 2011, *135*, 204507
20. D. G. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D. N. Theodorou, “Efficient parallel decomposition of dynamical sampling in glass forming materials based on an “on the fly” definition of metabasins.”, *J. Chem. Theory Comput.*, 2010, *6*(4), 1307-1322
21. D. G. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D. N. Theodorou, “Temperature accelerated dynamics in glass forming materials”, *J. Phys. Chem. B*, 2010, *114*, 7844-53
22. D. G. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou, “On the role of “inherent structures” in glass-forming materials: II. Reconstruction of the Mean Square Displacement by rigorous “lifting” of the inherent structure dynamics”, *J. Phys. Chem. B*, 2008, *112*, 10628-10637
23. D. G. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou, “On the role of “inherent structures” in glass-forming materials: I. The vitrification process”, *J. Phys. Chem. B*, 2008, *112*, 10619-10627

ΕΠΙΛΕΓΜΕΝΕΣ ΟΜΙΛΙΕΣ ΣΕ ΣΥΝΕΔΡΙΑ ΚΑΙ ΠΟΣΤΕΡ

1. **N. Lempesis**, A. Alexiu, U. Röthlisberger, “*Atomistic simulation of grain boundaries in metal-halide perovskites*”, 10th Annual National Centre of Competence in Research (NCCR) Molecular Ultrafast Science and Technology (MUST) Meeting, Sep 13-15 2021, Dorfstrasse 168, CH-3818, Grindelwald, Switzerland
2. **N. Lempesis**, “*Controlling wettability through modeling-based surface topography engineering*”, 7th Polymer Replication on Nanoscale (PRN) Conference, May 27-28 2021, online conference
3. **N. Lempesis**, “*Predicting Bio-inspired Surfaces*”, Swiss Plastics Expo, Halle 2, Jan 21 2020, Messe Luzern AG, Horwerstrasse 87, CH-6005 Luzern **[invited talk]**
4. **N. Lempesis**, “*Ceramic Injection Molding: A Multiscale Modeling Paradigm*”, 4th Plastics Update Conference, Nov 14 2019, School of Engineering and Architecture, Boulevard de Pérolles 80, CH-1700 Fribourg, Switzerland
5. **N. Lempesis**, “*Predicting Bio-inspired Surfaces with Superomniphobic Traits*” & “*Modeling of Ceramic Injection Molding for Medical Applications: A Multiscale Modeling Paradigm*”, ExxonMobil R&D Days, Nov 4-7 2019, ExxonMobil – European Technology Center, Hermeslaan 2, B-1831 Machelen, **[invited contribution]**
6. **N. Lempesis**, “*Understanding the Behavior and Tailor-making the Properties of Thermoplastic Polyurethanes: A Multiscale Modeling Paradigm*”, 3rd Plastics Update Conference, Nov 15 2018, School of Engineering and Architecture, Boulevard de Pérolles 80, CH-1700 Fribourg, Switzerland **[invited talk]**
7. **N. Lempesis**, “*Bio-inspired wetting models with superomniphobic traits*”, IMX talk, July 2018, Institute of Materials, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (EPFL), Route Cantonale, CH-1015 Lausanne, Switzerland **[invited talk]**
8. **N. Lempesis**, “*Mechanics of composite materials from its constituent parts: A simulation study*”, NORA Advanced Composites Group Meeting, Jan 14 2016, Harvard Pierce Hall Rm 213, 29 Oxford Street, Cambridge MA 02138, USA **[invited talk]**

9. **N. Lempesis**, P. J. in 't Veld, G. C. Rutledge, “*Atomistic simulation of the structure and mechanics of semicrystalline and heterogeneous polymer systems*”, 2015 AIChE Annual Meeting, November 10 2015, Salt Lake City, Utah, USA
10. **N. Lempesis**, “*Multiscale modelling of composite polymeric materials*”, NORA Meets BASF Challenges, Nov 4-5 2015, Norton Woods Conference Center at the American Academy of Arts & Sciences, 136 Irving Street, Cambridge, MA 02138, USA
11. **N. Lempesis**, P. J. in 't Veld, G. C. Rutledge, “*Atomistic simulation of a semicrystalline polyether*”, 7th International Workshop and Summer School on Nonequilibrium Thermodynamics, July 2015, Hilvarenbeek, the Netherlands
12. **N. Lempesis**, “*Simulation study on the mechanical behavior of heterogeneous materials*”, NORA All Projects Day, May 5 2015, Harvard School of Engineering & Applied Sciences, 20 University Road, Cambridge MA 02138, USA **[invited talk]**
13. **N. Lempesis**, “*Atomistic simulations of a common thermoplastic polyurethane*” NORA Advanced Composites Group Meeting, Jan 22 2015, MIT, 55 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA USA **[invited talk]**
14. **N. Lempesis**, “*Atomistic simulation of the mechanics of composite materials*”, NORA Advanced Composites Group Meeting, Nov 19 2014, Harvard Pierce Hall Rm 213, 29 Oxford Street, Cambridge MA 02138, USA **[invited talk]**
15. **N. Lempesis**, “*Atomistic simulation of the structure and mechanics of a polyether*”, Advanced Composites Meeting, Sep 16 2014, Umass Amherst, MA USA **[invited talk]**
16. **N. Lempesis**, “*Atomistic modelling of heterogeneous composite materials*”, Advanced Composites Retreat, June 29 – July 1, Woodstock Inn, Woodstock Vermont, USA
17. **N. Lempesis**, “*Theoretical Multiscale Modelling of thermoplastic Polyurethanes*”, May 28 2014 NORA All Project Day, MIT Media Lab, Cambridge MA, USA **[invited talk]**
18. N. Lempesis, G. C. Boulougouris, **D. N. Theodorou**, “*Energy landscape analysis of atomic and polymer glasses*”, September 19th-21st 2012, Mainz Germany
19. N. Lempesis, G. C. Boulougouris, **D. N. Theodorou**, “*Tracking the Dynamics of Systems Evolving through Infrequent Transitions in a Network of Discrete States*”, IAS Series 10 Hierarchical Methods for Dynamics in Complex Molecular Systems Lecture Notes, IAS Winter School, 5-9 March 2012, Jülich, Germany edited by J. Grotendorst, G. Sutmann, G. Gompper, D. Marx (2012)
20. D. Tsalikis, **N. Lempesis**, G. C. Boulougouris, D. N. Theodorou , “[Energy Landscape-Based Study of Atomic Displacements in Glass Forming Materials](#)”, *Special Issue “Diffusion Fundamentals III”* , **11** (2009) 65, pp 1-2
21. D. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, **D. N. Theodorou**. “*On the role of inherent structure dynamics in glass forming materials*”, AIChE Annual Meeting, Philadelphia, PA November 16-21, 2008

ΓΛΩΣΣΕΣ

- **Ελληνικά:** (μητρική)
- **Αγγλικά:** Επίπεδο ανώτατο (C2)
- **Γερμανικά:** Επίπεδο υψηλό (C1)
- **Γαλλικά:** Επίπεδο ενδιάμεσο (B1)

ΑΞΙΟΛΟΓΗΤΗΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

Αξιολογητής άρθρων υποβληθέντων προς δημοσίευση στα ακόλουθα διεθνή επιστημονικά περιοδικά:

- **Nature**
- **Macromolecules**
- **The Journal of Physical Chemistry B**
- **The Journal of Physical Chemistry C**
- **The Journal of Chemical Physics**
- **Polymers**
- **Molecular Physics**
- **Sensors**
- **Powder Technology**