



## Βαγγέλης Δασκαλάκης

**Ημερομηνία γέννησης:** 24/12/1978 | **Υπηκοότητα:** Ελληνική | **Φύλο:** Άντρας |

**Αριθμός τηλεφώνου:** (+30) 6942436906 (Κινητό τηλέφωνο) |

**Αριθμός τηλεφώνου:** (+30) 2610997820 (Εργασία) | **Ηλεκτρονική διεύθυνση:**

[vdaskalakis@upatras.gr](mailto:vdaskalakis@upatras.gr) | **Ηλεκτρονική διεύθυνση:** [vdas.pilot@gmail.com](mailto:vdas.pilot@gmail.com) | **ORCID**

**D:** <https://orcid.org/0000-0001-8870-0850> |

**Διεύθυνση:** Πανεπιστήμιο Πατρών, Καραθεοδωρή 1, Πανεπιστημιούπολη, GR 265 04, Πατρα, Ελλάδα (Εργασία)

### ● ΛΙΓΑ ΛΟΓΙΑ ΓΙΑ Μ'ΕΝΑ

Τόπος γέννησης / Ηράκλειο, Κρήτη-Ελλάδα

### ● ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

01/09/2023 – ΤΡΕΧΟΥΣΑ Πάτρα, Ελλάδα

**ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ** ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ

Βιομοριακή Μηχανική (ΦΕΚ 693/13-3-2023 τ.Γ')

Επιχορηγήσεις Έρευνας:

- Horizon Europe (HORIZON) Marie Skłodowska-Curie Actions Doctoral Networks (MSCA-DN) 2022, **101119442-PhotoCaM** - "*Photosynthetic Antennas in a Computational Microscope: Training a new generation of computational scientist*" (συνολικός προϋπολογισμός: **€2.589.847,19**, Βοηθός Συντονιστής UPAT **€240.098,39**; PI: Vangelis Daskalakis).
- Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας - ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. ερευνητική πρόταση No. 14775 SA3. Βιοεπιστήμες - Επιστήμες Ζωής, "SUNDIAL - Seeing Diatoms under a Computational Sunlight". Συντονιστής UPAT **€207.000**; PI: Vangelis Daskalakis
- Cyclone 2022A πρόσβαση παραγωγής: **pro22a103s1** - "*Fucoxanthin - chlorophyll protein (FCP): from monomers to tetramers*", **150.000 GLU-core hrs** στο Cyclone. PI: Vangelis Daskalakis
- Πρόσβαση παραγωγής No. EHPC-REG-2023R01-128 **EuroHPC Regular Access Call** "*Peptaibols: How to kill a bacterium*", **6.400.000 CPU-core hrs** on MeluXina. PI: Vangelis Daskalakis

01/05/2022 – 31/08/2023 Λεμεσός, Κύπρος

**ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ** ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ, ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ

Επιχορηγήσεις Έρευνας:

- European High-Performance Computing Joint Undertaking (**EuroHPC JU**) πρόγραμμα **EHPC-REG-2021R0021** "*Peptaibols: How to kill a bacterium*", στον Υπερυπολογιστή MeluXina (Λουξεμβούργο), 2.0 mn std-cpu-core hrs, ως συντονιστής (**Απρ 2022 – Οκτ 2022**)
- Erasmus+ Ατομική Κινητικότητα Εκμάθησης – Κινητικότητα μελών ΔΕΠ για διδασκαλία και εκμάθηση, Queen Mary University of London (**Μάης 2022**)

31/12/2014 – 30/04/2022 Λεμεσός, Κύπρος

**ΕΠΙΚΟΥΡΟΣ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ** ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ, ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ

Επιχορηγήσεις Έρευνας:

- 13th Call **Cyclone (Ινστιτούτο Κύπρου)** - "Molecular Dynamics of LHCII trimer complex at quenched and light harvesting states based on Free Energy Minima" (~1.0mn std-cpu core hrs), συντονιστής (**Απρ 2021 - Μαρ 2022**).
- GRnet 10th** Project ARIS CYP2D6-DYN "Correlation between CYP2D6 variants and their metabolic activity by Molecular Dynamics Simulations" (3.5mn std-cpu core hrs), συνεργάτης (**Μαρ 2021 - Φεβ 2022**)
- PRACE DECI-16 16DECI0015 DynLHCX** "The structure and dynamics of the photoprotective protein LHCX1 in diatoms" 5.0mn std-cpu core hrs, συντονιστής (**Ιουν 2020 - Μάη 2021**).
- PRACE COVID-19 COVID19-41** "Epitope vaccines based on the dynamics of mutated SARS-CoV-2 proteins at all atom resolution", επιχορήγηση σε υπολογιστικό χρόνο 18.0mn std-cpu core hrs @Joliot-Curie Rome (CEA/GENCI, France) (**Μάη 2020 - Νοε 2021**)
- COST Action CA18234: "Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements", Επιτροπή Διαχείρισης (**Απρ 2020 - 2024**), μέλος Δέσμης Ενεργειών 2 - Προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής.
- PRACE DECI-15 15DECI0328 LHCPSalt** "LHCII-PsbS complex conformations under varying salt content" ~4.0mn std-cpu core hrs, συντονιστής (**June 2019 - May 2020**).
- PRACE project 2018194641** επιχορήγηση σε υπολογιστικό χρόνο 17.0mn std-cpu core hrs @SuperMUC HPC (Leibniz Supercomputing Centre). "CDynLHCII - Clustering Dynamics of the major Light Harvesting Complexes (LHCII) of Photosystem II under Photoprotection", συντονιστής (**Απρ 2019 - Μαρ 2020**).
- Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας (Κύπρος) **POST-DOC/0916/0049 (~160.000 Ευρώ)** «Ενεργοποίηση της Φωτοπροστασίας στις πρωτεΐνες-κεραίες του Φωτοσυστήματος II με Μοριακές Προσομοιώσεις και Φασματοσκοπία Raman» συντονιστής (**Οκτ 2018 - Μαρ 2022**).
- Interreg Ελλάδας-Κύπρου, BIOMA «Αποκεντρωμένη διαχείριση των βιοαποβλήτων και αξιοποίησή τους με χρήση εναλλακτικών και καινοτόμων συστημάτων επεξεργασίας».
- Διεθνικό πρόγραμμα κινητικότητας HPC-Europa3 (HPC17K4FRZ, 672.000 std cpu-core hrs) και Ομάδα Ερευνητικής Εργασίας Προσομοίωσης Συστημάτων με Κβαντική Μηχανική (TRG-qm3, 2019) κατά τη Σαββατική άδεια (2018, 2019). Τμήμα Φυσικής και Επιστημών Γης (Τομέας Βιοφυσικής), Πανεπιστήμιο Jacobs, Βρέμη, Γερμανία (**Σεπτ 2018 - Φεβ 2019**).
- Cy-Tera-LinkSCEEM, PRACE HPC, GRnet ARIS επιχορηγήσεις σε υπολογιστικό χρόνο (*standard core-hours*) ~7.0mn συνολικά για τα ερευνητικά προγράμματα: pro14b114s1, pro14b105s1 and pro15a113s1, pro15b104, pro16a105, pro16b103, pro17a103, pro17b101, , Ispre400, Ispre410, , **PRACE DECI-13** LHCIFlex, **PRACE DECI-14** AIMDPSII, GRnet preparatory ARIS "ADHDyn" & "LHCIIpsbS" ως συντονιστής. **GRnet 7th Call** ARIS project "LHCIICRYSTAL" 3.0 mn std cpu-core hrs, συνεργάτης.
- COST Action CM1401: Our Astro-Chemistry History. Επιτροπή Διαχείρισης (Απρ 2015 - Μαρ 2020).
- Επιχορήγηση κινητικότητας Erasmus για εκπαίδευση (επισκέπτης στην Ακαδημία Επιστημών της Τσεχίας, Ινστιτούτο Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, Πράγα). Μάης 2015.

30/11/2010 – 30/12/2014 Λεμεσός, Κύπρος

**ΛΕΚΤΟΡΑΣ ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ , ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ**

Επιχορηγήσεις Έρευνας:

1. Εναρκτήρια Χρηματοδότηση, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου (40.000 €)
2. "Activation and reduction of Nitric Oxide (NO) to laughing gas (N<sub>2</sub>O) by Nitric Oxide Reductase (NOR) and heme-copper *cbb*<sub>3</sub> oxidase (Πηγή: Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας €133.181. ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ/ΘΕΠΙΣ/0609/05 (BE): (2011-2013), ως συνεργάτης (**Μαρ 2011 - Φεβ 2013**)
3. Cy-Tera & LinkSCEEM HPC επιχορηγήσεις υπολογιστικού χρόνου (860.000 ώρες, *standard core-hours*), για τα ερευνητικά προγράμματα: LinkSCEEM Isprob104s1, Ispro13a121s1, pro13b113s1, και pro14a120) ως συντονιστής.
4. The Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD)/ German Academic Exchange Service. Επιχορήγηση για Δικτύωση ASEMUNDUS (συνεργασία Πανεπιστημίων Ασίας/ Ευρώπης).
5. COST Action ES1206: Advanced Global Navigation Satellite Systems tropospheric products for monitoring severe weather events and climate (GNSS4SWEC) – Επιτροπή Διαχείρισης & Μέλος WG2 (λήξη Απρίλιος 2015)

Βαρκελώνη, Ισπανία

**ΜΕΤΑΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΟΣ ΕΠΙΣΚΕΠΤΗΣ ΥΠΕΡΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΤΗΣ ΒΑΡΚΕΛΩΝΗΣ (BSC), ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΖΩΗΣ**

GRID COMPUTATIONAL CHEMISTRY – GRID-COMP-CHEM – Marie-Curie Host Fellowship for the Transfer of Knowledge **EU ToK grant No. MTKD-CT-2005-029583 & Υποτροφία HPC-Europa2**

2006 – 2010 Ηράκλειο, Κρήτη, Ελλάδα

**ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΣ ΣΥΝΕΡΓΑΤΗΣ** ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ ΚΑΙ ΛΕΙΖΕΡ, ΣΤΟ ΙΔΡΥΜΑ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ (ΙΤΕ) – ΕΛΛΑΔΑ

## ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΚΑΤΑΡΤΙΣΗ

30/09/1996 – 20/07/2000 Ηράκλειο, Ελλάδα

**ΠΤΥΧΙΟ ΧΗΜΕΙΑΣ** ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

Υποτροφίες:

(1) Εισαγωγής στο Τμήμα Χημείας Βραβείο - Υποτροφία ΙΚΥ (1996), (2) 1<sup>ο</sup>, 2<sup>ο</sup>, 3<sup>ο</sup> & 4<sup>ο</sup> έτος Υποτροφία Αριστείας ΙΚΥ (1996-2000), (3) 3<sup>ο</sup> Έτος Βραβείο Αριστείας (Δήμος Ηρακλείου), (4) Βραβείο Αριστείας (Πτυχίο), Πανεπιστήμιο Κρήτης - Τμήμα Χημείας (2000).

**Διεύθυνση** Βούτες, 715 00, Ηράκλειο, Ελλάδα | **Τομέας σπουδών** Χημεία | **Τελικός βαθμός** 8.87/10

06/2000 – 07/2006 Heraklion, Ελλάδα

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΑ MASTER'S - PH.D** ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

**Τίτλος Msc:** «Ο μηχανισμός της σχάσης του δεσμού O-O στην κυτοχρωμική c Οξειδάση με τη εφαρμογή της Θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας και φασματοσκοπίας συντονισμού *Raman*».

**Τίτλος Ph.D:** «Βιοενεργητικοί μηχανισμοί του O<sub>2</sub> και του NO με την εφαρμογή της θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας».

(1) Grant-in-Aid for Scientific research (Grant-in-Aid for Specially Promoted Research) FY2005. **Επισκέπτης υποψήφιος διδάκτορας - Ινστιτούτο Βιοεπιστημών Εθνικού Ινστιτούτου Φυσικών Επιστημών, Υπερυπολογιστικό Κέντρο, Οκαζάκι, Αϊτσι / Ιαπωνία** (2005).

(2) **Υποτροφία ΙΚΥ** για την εισαγωγή στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα (2001-2002), (2) Υποτροφία **Μαρίας Μανασάκη** (2001-2002, 2002-2003).

(3) **Τίτλος Προγράμματος: Δυναμική και δραστηριότητα των ενζυμικών διεργασιών που περιλαμβάνουν την αα<sub>3</sub> αιμο-χάλκο οξειδάση από το P. denitrificans: Φασματοσκοπία και Θεωρητικοί Υπολογισμοί**

Χρηματοδότηση: **Υπουργείο Παιδείας (Ελλάδα) - Πυθαγόρας Ι (2006)**

(4) **Τίτλος Προγράμματος: Βιοενεργητικοί Μηχανισμοί του O<sub>2</sub> και του NO με την εφαρμογή της θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας**

Χρηματοδότηση: **Υπουργείο Παιδείας / Ε.Ε. Ηράκλειτος (2002-2005)**

(5) **Τίτλος Προγράμματος: Δομική μελέτη της αναγωγής του μονοξειδίου του αζωτού (no)**

Χρηματοδότηση: **Υπουργείο Παιδείας (Ελλάδα), Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας ΓΓΕΤ (2000-2001)**

**Διεύθυνση** Βούτες, Ηράκλειο, 715 00, Heraklion, Ελλάδα | **Τομέας σπουδών** Υπολογιστική Βιοφυσική Χημεία |

**Τελικός βαθμός** 9.75/10

## ΓΛΩΣΣΙΚΕΣ ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ

Μητρική γλώσσα/-ες: **ΕΛΛΗΝΙΚΑ**

Άλλη/-ες γλώσσα/-ες:

	ΚΑΤΑΝΟΗΣΗ		ΟΜΙΛΙΑ		ΓΡΑΦΗ
	Ακρόαση	Ανάγνωση	Παραγωγή λόγου	Επικοινωνία λόγου	
<b>ΑΓΓΛΙΚΑ</b>	C2			C2	C2
<b>ΓΑΛΛΙΚΑ</b>	B1			B1	B1

Επίπεδα: A1 και A2: Βασικός χρήστης· B1 και B2: Ανεξάρτητος χρήστης· C1 και C2: Έμπειρος χρήστης

## ΠΕΡΙΛΗΠΤΙΚΗ ΕΚΘΕΣΗ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΩΝ

### Ερευνητικοί Δείκτες

**49 δημοσιεύσεις** ως άρθρα σε περιοδικά με ομότιμη κρίση (**42**), κεφάλαια βιβλίων (**6**) και πρακτικά συνεδρίων (**1**). Πρώτος συγγραφέας σε **21/49** και αλληλογραφών συγγραφέας σε **21/49** δημοσιεύσεις, παρουσιάζοντας ισχυρή ερευνητική ανεξαρτηρία (h-index Scopus 16, Google Scholar 17). Δημοσιεύσεις σε

κορυφαία περιοδικά στους τομείς της βιοφυσικής χημείας, φυσικοχημείας και βιομοριακής Δυναμικής (π.χ. **J. Am. Chem. Soc. Proc. Natl. Acad. Sci USA, Biochim. Biophys. Acta, NPG Sci. Rep., J. Phys. Chem. B-C, Phys. Chem. Chem. Phys., Chem. Commun., J. Biomolecular Struct. and Dynamics**). Ομότιμος κριτής σε περιοδικά, όπως Nature Journals, ACS Physical Chemistry Journals, RSC Phys. Chem. Chem. Phys., RSC Advances, Springer J. Molecular Modeling (**220 κρίσεις σε περιοδικά**, Web of Science – publons). Ομότιμος κριτής για ερευνητικές προτάσεις σε κέντρα Υπερυπολογιστών (High Performance Computing, HPC) όπως CyTera και Cyclone στο Ινστιτούτο Κύπρου, GRNET ARIS HPC - the National Infrastructures for Research and Technology, CSCS-Swiss National Supercomputing Centre, Institute for Advanced Simulation (IAS), Jülich Supercomputing Centre (JSC), Gauss Centre for Supercomputing (GCS) and the John von Neumann Institute for Computing (NIC). Κριτής για το Biotechnology and Biological Sciences Research Council (BBSRC). **43 συμμετοχές σε Διεθνή Συνέδρια - Σεμινάρια**, περιλαμβανομένων **12** διαλέξεων με πρόσκληση. Η ερευνητική μου δραστηριότητα έχει περιληφθεί στο περιοδικό **PRACE DIGEST (Insight Publishers)** τα έτη **2017, 2020**.

## Το Εργαστήριο Βιομοριακής Δυναμικής και Μηχανικής

Η ανεξάρτητη ερευνητική μου δραστηριότητα επικεντρώνεται σε μελέτες βιοφυσικής χημείας μεγάλων βιολογικών μορίων που συμμετέχουν σε διαδικασίες σχετιζόμενες με τις επιστήμες ζωής (Βιολογία, Βιομοριακή Μηχανική). Στο εργαστήριο εφαρμόζουμε υπολογιστικές τεχνικές που βασίζονται στη μεθοδολογία της Μοριακής Δυναμικής (MD), όπως η μεταδυναμική πολλαπλών βημάτων, ή η μεταδυναμική παράλληλης ανταλλαγής στο ομαλά-συγκλίνον στατιστικό σύνολο, σε συνδυασμό με την κβαντική μέθοδο του Συναρτησιακού της Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας (DFT). Το στήσιμο των μοντέλων και η ανάλυση των αποτελεσμάτων (τροχιών MD) βασίζεται σε εργαλεία βιοπληροφορικής (αλγόριθμοι αλληλεπίδρασης πρωτεΐνης με πρωτεΐνη, δομική ευθυγράμμιση και αλληλουχική ομολογία, μοντέλα Markov State). Για την έρευνά μας, χρησιμοποιούμε υπερυπολογιστικά συστήματα (HPC, Joliot Curie - Irene ROME TGCC στη Bruyères-le-Châtel, Salomon iT4i στην Τσεχία, SuperMUC-NG LRZ στο Μόναχο, HLRS στη Στουτγάρδη, MareNostrum στο Υπερυπολογιστικό Κέντρο της Βαρκελώνης) στο πλαίσιο των επιχορηγούμενων προγραμμάτων PRACE/ DECI (<https://prace-ri.eu/>).

Η διττή οπτική που παρέχει ο συνδυασμός υπολογιστικών και πειραματικών τεχνικών βιοχημείας, βιοφυσικής και βιολογικής χημείας καθιστά την ομάδα μου μια από τις πιο κατάλληλες να μελετήσουν απαιτητικούς ερευνητικούς στόχους.

### (A) Οι πρωτεΐνες αίμης

**Πρωτεΐνες αίμης (19 δημοσιεύσεις)**, και ιδιαίτερα οι αλληλεπιδράσεις της μυοσφαιρίνης (Mb) και της Κυτοχρωμικής c Οξειδάσης (CcO) με ατμοσφαιρικά αέρια ( $O_2$ , CO, NO), ή η δυναμική των κυτοχρωμάτων στο μεταβολισμό φαρμάκων. Με αυτό τον τρόπο παίρνουμε πληροφορίες σχετικά με τη λειτουργία τους σε ζωντανούς οργανισμούς ή τον πιθανό τους ρόλο ως περιβαλλοντικοί αισθητήρες. Το νιτρώδες ανιόν αποτελεί ένα ισχυρό οξειδωτικό παράγοντα και μια βιολογική δεξαμενή για το NO που εμπλέκεται σε πληθώρα αερόβιων βιολογιών συστημάτων. Η Μυοσφαιρίνη (Mb) αντιδρά με το νιτρώδες και δημιουργεί μια πράσινη χρωστική. Η κινητική είναι αργή, και προχωρά με συναρμογή του  $NO_2^-$  τόσο στον αιμικό Fe μέσω του  $O1$  ( $O1-N=O2$ ), όσο και στη βινυλική ομάδα -2 της αίμης. Έχουμε δείξει πως η συναρμογή ή η απομάκρυνση του  $NO_2^-$  από τον αιμικό σίδηρο σχετίζεται κυρίως με μια κίνηση της έλικας E, ενώ η συναρμογή του  $NO_2^-$  στη βινυλική ομάδα -2 οδηγεί σε μια απόκριση από την έλικα F, και μια συγχρονισμένη κίνηση των ελίκων E-F. Η τελευταία αυτή συγχρονισμένη κίνηση οφείλεται στην αλληλεπίδραση των καταλοίπων Val68 και Ile107 με την νιτρο-βινυλική-2 ομάδα. Επιπλέον, η αναγωγή του μονοξειδίου του αζώτου (NO) είναι το τρίτο από τα τέσσερα ένζυμα της διαδικασίας της απονιτροποίησης στα βακτήρια, και υπεύθυνη για την καταλυτική παραγωγή του αερίου του γέλιου ( $N_2O$ ). Έχουμε κάνει αναφορά στην ανίχνευση του υπονιτρώδους ενδιάμεσου ( $HO-N=N-O^-$ ) στα  $\nu_{N-N} = 1332\text{ cm}^{-1}$ , στο ενεργό διπυρηνικό κέντρο αίμης  $b_3$  Fe-Fe<sub>B</sub> της NOR από το *Paracoccus denitrificans*. Τέλος, η ανίχνευση των ενδιάμεσων της αναγωγής του μοριακού οξυγόνου σε νερό από την κυτοχρωμική c οξειδάση (CcO), και ο προσδιορισμός της δομής τους, αποτελούν καίρια σημεία μελέτης για την κατανόηση του μηχανισμού της ενεργοποίησης του  $O_2$  και της άντλησης πρωτονίων από το ένζυμο. Έχουμε πρόσφατα προτείνει πως το εγγύς περιβάλλον της αίμης  $a_3$  ρυθμίζει τις φασματοσκοπικές ιδιότητες των ενδιάμεσων φερρύλ (Fe-IV) στην κυτοχρωμική c οξειδάση.

### (B) Οι κεραίες του Φωτοσυστήματος II

**Οι κεραίες του Φωτοσυστήματος II (15 δημοσιεύσεις)**, και συγκεκριμένα ο μηχανισμός μη φωτοχημικής απόσβεσης της περίσσειας ηλιακής ακτινοβολίας (Non-Photochemical Quenching, NPQ). Το NPQ αποτελεί ένα μηχανισμό φωτοπροστασίας των ανώτερων φυτών και αλγών που σχετίζεται άμεσα με το μεταβαλλόμενο κλίμα, την παραγωγή ανθεκτικών φυτών, την έκλυση  $O_2$  στην ατμόσφαιρα, τον κύκλο του άνθρακα, καθώς και την αύξηση της φυτικής παραγωγής. Ο σχεδιασμός βιο-μιμητικών μοντέλων που βασίζονται στη φωτοσύνθεση και το Φωτοσύστημα II μπορεί να οδηγήσει σε εφαρμογές όπως η τεχνητή φωτοσύνθεση και η αποδοτικότερη συγκομιδή φωτός σε ηλιακά κελιά. Μπορεί να συσχετιστεί, σε βάθος

χρόνου, με τη δημιουργία ανθεκτικών φυτών σε ένα μεταβαλλόμενο κλίμα (αυξανόμενη ηλιακή ακτινοβολία, κύματα καύσωνα, αύξηση της αλατότητας σε ένα συνεχώς φθίνον δίκτυο ύδρευσης), όπως και με την αύξηση της φυτικής παραγωγής. Ωστόσο, εμπόδιο για μια αποδοτικότερη διαδικασία Φωτοσύνθεσης αποτελεί το γεγονός πως σε συνθήκες υψηλής έκθεσης σε φως, οι φωτοσυνθετικοί οργανισμοί ενεργοποιούν τη φωτοπροστασία τους και μετατρέπουν ένα μεγάλο τμήμα της φωτονιακής ενέργειας σε θερμότητα. Η σχετική πληροφορία για το μηχανισμό αυτό, σε ατομική κλίμακα, απουσιάζει από τη διεθνή βιβλιογραφία. Οι μεταβάσεις μεταξύ πρωτεϊνικών διαμορφώσεων συνήθως οφείλονται σε εξωτερικούς παράγοντες. Η γνώση αυτή οδηγεί στον έλεγχο της πρωτεϊνικής δράσης. Πρόσφατα ολοκληρώσαμε μια μεγάλης κλίμακας προσομοίωση (150μs) του φασικού χώρου της μείζονας Φωτοσυνθετικής Κεραίας II, με βάση ένα εκτενές σύνολο από εξωτερικούς παράγοντες. Τα μοντέλα μας του LHCII σε ατομική κλίμακα παρέχουν το πλήρες υπολογιστικό πλαίσιο για τη μετάβαση του LHCII μεταξύ δύο καταστάσεων: την μέχρι πρότινος άγνωστη διαμόρφωση συγκομιδής φωτός σε ατομική κλίμακα, και την κατάσταση απόσβεσης (quenched) περίσσειας ενέργειας. Για το σκοπό αυτό μελετήσαμε σε μοντέλα όλους τους κύριους παράγοντες που σχετίζονται με το μηχανισμό NPQ, και προκαλούν αλλαγές στη διαμόρφωση του LHCII. Ωστόσο, ακόμα και μετά την εκτεταμένη ανάλυση των μεταβάσεων στη διαμόρφωση του LHCII, δεν κατέστη δυνατή η εύρεση ενός καθοριστικού διακόπτη μεταξύ των καταστάσεων συγκομιδής και απόσβεσης, αναφορικά με τις αλληλεπιδράσεις των χρωστικών (Χλωροφύλλες – Καροτενοειδή). Συμπερασματικά, οι μελέτες μας μετατόπισαν το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας στο πεδίο της φωτοπροστασίας, από την εκτεταμένη δειγματοληψία διαμορφώσεων του LHCII, στο πρόβλημα της σωστής περιγραφής των αλληλεπιδράσεων μεταξύ χρωστικών στην κεραία LHCII (π.χ. με ακριβείς μεθόδους Κβαντικής Χημείας).

### (C) Οι πρωτεΐνες του νέου κορωνοϊού SARS-CoV-2

---

Οι πρωτεΐνες του νέου κορωνοϊού **SARS-CoV-2 (3 δημοσιεύσεις)**, και ειδικά η δυναμική της κύριας πρωτεΐνης του, όπως και της πρωτεΐνης νουκλεοκαψιδίου (NC). Έχει προταθεί πως η διαμόρφωση μιας πρωτεΐνης σε ένα κρύσταλλο απέχει πολύ από τη διαμόρφωση που αποκτά σε διάλυμα ή σε ζώντες οργανισμούς και η οποία είναι ιδιαίτερα σημαντική στη φαρμακολογία. Η μέθοδος MD είναι ιδανική για τη διερεύνηση των διαμορφώσεων αυτών. Έχουμε καταφέρει να μετατρέψουμε τις στατικές κρυσταλλικές δομές των MPro/ NC σε διαμορφώσεις που απαντώνται στην παθολογία του ιού και σχετίζονται με την καταπολέμηση της COVID-19. Επιπλέον έχουμε προσδιορίσει τις δομές δύο φυσικών προϊόντων που προάγουν: (α) την εξασθένιση της ενεργούς μορφής του διμερούς της MPro και (β) την εξασθένιση της αλληλεπίδρασης της NC με τις ιμφορτίνες. Οι ιμφορτίνες μεταφέρουν πρωτεϊνικά μόρια από το κυτταρόπλασμα στον πυρήνα, ένα ιδιαίτερα σημαντικό στάδιο για τη μεταφορά του υικού γενετικού υλικού στον πυρήνα του κυττάρου – ξενιστή και του πολλαπλασιασμού του ιού.

### (D) Η θερμοσταθερότητα πρωτεϊνών

---

**Η θερμοσταθερότητα πρωτεϊνών (2 δημοσιεύσεις)** και ειδικότερα μιας ψυχρόφιλης αλκοολικής αφυδρογονάσης. Έχουμε αναπαράγει τη δυναμική της πρωτεΐνης υπό ακραίες θερμοκρασιακές συνθήκες, ώστε να ενισχύσουμε την πληροφορία από την επίλυση της δομής της αλκοολικής αφυδρογονάσης (MoADH) από το ψυχρόφιλο βακτήριο *Moraxella sp. TAE123* με κρυσταλλογραφία ακτίνων X σε ανάλυση 1.9 Å. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής που πραγματοποιήθηκαν έδειξαν εκτεταμένη κινητικότητα των καταλοίπων της MoADH σε υψηλές θερμοκρασίες. Η ανάλυση κύριων συνιστωσών των διακυμάνσεων στις κινήσεις των καταλοίπων της MoADH κατέδειξε μια μετάβαση ανοιχτής-κλειστής διαμόρφωσης κυρίως στους 280 K.

### (E) Οι Μελέτες στη δυναμική διάλυσης (σύστημα άλατος – οργανικών – νερού)

---

Οι **μελέτες στη δυναμική διάλυσης (σύστημα άλατος – οργανικών – νερού) (4 δημοσιεύσεις)** αφορούν στη φυσικοχημεία της δυναμικής των μορίων νερού και αποτελούν τη βάση για τρέχουσες μελέτες στο πεδίο της αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών με διαλύτες (*protein hydration dynamics*), αλλά και σε αυτό των βιομηχανικών μεμβρανών αφαλάτωσης.

### (F) Το σύστημα CRISPR-Cas9

---

**Το σύστημα CRISPR-Cas9 system (2 δημοσιεύσεις)** στοχεύει και επεξεργάζεται συγκεκριμένες αλληλουχίες DNA στο γενετικό υλικό, εκμεταλλευόμενο τους μηχανισμούς επιδιόρθωσης στα κύτταρα. Το σύστημα αποτελείται από δύο μέρη: το ένζυμο Cas9 και μια αλληλουχία-οδηγό RNA που είναι συμπληρωματική στο στόχο DNA. Η ερευνητική μας δουλειά επικεντρώνεται στη βελτιστοποίηση της εξειδίκευσης του συστήματος και στη μείωση του λειτουργικού μεγέθους της Cas9 για αποδοτικότερη χορήγηση.

**01. Electric Field Susceptibility of Chlorophyll c Leads to Unexpected Excitation Dynamics in the Major Light-Harvesting Complex of Diatoms**

---

Maity S, **Daskalakis V**, Jansen LCT, and Kleinekathöfer U\* (2024) *J. Phys. Chem. Lett.* 15, 9, 2499–2510

**02. The synergy between the PscC subunits for electron transfer to the P840 special pair in *Chlorobaculum tepidum***

---

**Daskalakis V**, Lyratzakis A, Xie H, and Tsiotis G\* (2024) *Photosynth Res*, doi: 10.1007/s1120-024-01093-7

**03. Engineering salt-tolerant Cas12f1 variants for gene-editing applications**

---

**Daskalakis, V\*** and Papapetros, S (2023) *J. Biomolecular Struct. and Dynamics*, , doi: 10.1080/07391102.2023.2240418

**04. Recognition motifs for Importin 4 [(L)PPRS(G/P)P] and Importin 5 [KP(K/Y)LV] binding, identified by bio-informatic simulation and experimental in vitro validation**

---

Panagiotopoulos AA, Kalyvianaki K, Tsodoulou PK, Darivianaki MN, Dellis D, Notas G, **Daskalakis V**, Theodoropoulos PA, Panagiotidis CA, Castanas E, Kampa M\* (2022) *Comp. Struct. Biotechnol. J.* doi: 10.1016/j.csbj.2022.10.015

**05. Deciphering the QR code of the CRISPR-Cas9 system: Synergy between Gln768 (Q) and Arg976 (R)**

---

**Daskalakis V\*** (2022) *Journal of Physical Chemistry Au*. doi: 10.1021/acspchemau.2c00041

**06. Trivial Excitation Energy Transfer to Carotenoids is an Unlikely Mechanism for Non-Photochemical Quenching in LHCII**

---

Gray C, Wei T, Polívka T, **Daskalakis V**, and Duffy CDP\* (2022) *Front. Plant Sci.* 12: 797373.

**07. Robust Strategy for Photoprotection in the Light-Harvesting Antenna of Diatoms: A Molecular Dynamics Study**

---

Chrysafoudi A, Maity S, Kleinekathöfer U and **Daskalakis V\*** (2021) *J. Phys. Chem. Lett.* 12, 9626–9633

**08. Natural polyphenols inhibit the dimerization of the SARS-CoV-2 main protease: the case of fortunellin and its structural analogs**

---

Panagiotopoulos AA, Karakasiliotis I, Kotzampasi D-M, Dimitriou M, Sourvinos G, Kampa M, Pirintsos S, Castanas E\* and **Daskalakis V\*** (2021), *Molecules (MDPI)*, 26, 6068.

**09. Time-Dependent Atomistic Simulations of the CP29 Light-Harvesting Complex**

---

Maity S, Sarngadharan P, **Daskalakis V**, and Kleinekathöfer U\* (2021), *J. Chem. Phys.* 155, 055103

**10. Hydrogen gas as a central on-off functional switch of reversible metabolic arrest – New perspectives for biotechnological applications**

---

Zerveas S, Kydonakis E, Mente M-S, **Daskalakis V**, and Kotzabasis K (2021) *J. Biotechnology*, 335, 9 - 18

**11. p-cymene impairs SARS-CoV-2 and Influenza A (H1N1) viral replication: In silico predicted interaction with SARS-CoV-2 nucleocapsid protein and H1N1 nucleoprotein**

---

Panagiotopoulos A, Tseliou M, Karakasiliotis I, Kotzampasi D-M, **Daskalakis V**, Kesesidis N, Notas G, Lionis C, Kampa M, Pirintsos S, Sourvinos G, Castanas E. (2021) *Pharmacol Res Perspect.* 9:e00798

**12. Multiscale QM/MM Molecular Dynamics Simulations of the Trimeric Major Light-Harvesting Complex II**

---

Maity S, **Daskalakis V**, Elstner M and Kleinekathöfer U\* (2021) *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, 7407 – 7417

---

### 13. The conformational phase space of the photoprotective switch in the major Light Harvesting Complex II

---

**Daskalakis V\***, Papadatos S, Stergiannakos, (2020) *Chem. Commun.* 56, 11215 – 11218

### 14. Structure and Dynamics of a Thermostable Alcohol Dehydrogenase from the Antarctic Psychrophile *Moraxella* sp. TAE123

---

Petratos K\*, Gessmann R, **Daskalakis V**, Papadovasilaki M, Papanikolaou Y, Tsigos I, and Bouriotis V (2020) *ACS Omega*, 5, 24, 14523–14534

### 15. Structural Basis for Allosteric Regulation in the Major Antenna Trimer of Photosystem II

---

**Daskalakis V\***, Maity S, Hart CL, Stergiannakos T, Duffy CDP, and Kleinekathöfer U (2019) *J. Phys. Chem. B*, 123, 45, 9609-9615

### 16. Fine tuning of the photosystem II major antenna mobility within the thylakoid membrane of higher plants

---

**Daskalakis V\***, Papadatos S, Kleinekathoefer, U (2019) *Biochim. Biophys. Acta – Biomembranes*, 1861, 183059

### 17. On a Chlorophyll-Carotenoid Coupling in LHCII

---

Maity S, Gelessus A, **Daskalakis V**, Kleinekathoefer, U\* (2019) *Chem. Phys.* 526, 110439

### 18. Protein-Protein Interactions within Photosystem II under Photoprotection: The Synergy between CP29 Minor Antenna, Subunit S (PsbS) and Zeaxanthin at all-atom resolution

---

**Daskalakis V\*** (2018) *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 11843 – 11855

### 19. The Photosystem II Subunit S under Stress

---

**Daskalakis V\***, and Papadatos S (2017) *Biophys. J. (Cell)* 113 (11), 2364-2372.

### 20. A pathway for protective quenching in antenna proteins of Photosystem II

---

Papadatos S, Charalambous C A, and **Daskalakis V\*** (2017) *Scientific Reports (NPG)* 7, 2523. doi: 10.1038/s41598-017-02892-w.

### 21. Detection of Maillard reaction products by a coupled HPLC-Fraction collector technique and FTIR characterization of Cu(II)-complexation with the isolated species

---

Ioannou A, **Daskalakis V**, and Varotsis C\* (2017) *J. Mol. Struct.* 1141, 634–642.

### 22. Coupling of helix E-F motion with the O-nitrito and 2-nitrovinyl coordination in myoglobin

---

Ioannou A, Lambrou A, **Daskalakis V\*** and Pinakoulaki E\* (2017) *Biophys. Chem.* 221, 10-16.

### 23. Nitrite coordination in myoglobin

---

Ioannou A, Lambrou A, **Daskalakis V** and Pinakoulaki E\* (2017) *J. Inorg. Biochemistry (JIB)*, 166, 49-54.

### 24. Energizing the Light Harvesting Antenna: Insight from CP29

---

Ioannidis NE, Papadatos S, and **Daskalakis V\*** (2016) *BBA – Bioenergetics*, 1857 (10), 1643-1650.

### 25. Correlation Between Surface Tension and the Bulk Dynamics in Salty Atmospheric Aquatic Droplets

---

Salameh A, Vorka, F, and **Daskalakis V\*** (2016) *J. Phys. Chem. C*, 120 (21), 11508-11518

## 26. Structure and properties of the catalytic site of nitric oxide reductase at ambient temperature

---

**Daskalakis V**, Ohta T, Kitagawa T, Varotsis C\* (2015) *Biochim. Biophys. Acta – Bioenergetics*, 1847(10), 1240–1244.

## 27. Surface-Active Organic Matter induces salt morphology transitions during new atmospheric particle formation and growth

---

**Daskalakis V\***, Charalambous F, Demetriou DC, Georgiou AG (2015) *RSC Adv.*, 5, 63240–63251.

## 28. Effects of Surface Activity on Carbon Dioxide Nucleation in Atmospheric Wet Aerosols: A Molecular Dynamics Study

---

**Daskalakis V\***, Charalambous F, Panagiotou F, Nearchou I (2014) *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16: 23723–23734.

## 29. Hexagonal Ice Stability and Growth in the presence of Glyoxal and Secondary Organic Aerosols

---

**Daskalakis V\***, Hadjicharalambous M (2014) *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16(33): 17799–17810.

## 30. The protein effect in the structure of two ferryl-oxo intermediates at the same oxidation level in the heme-copper binuclear center of cytochrome c oxidase

---

Pinakoulaki E, **Daskalakis V**, Ohta T, Richter O M, Budiman K, Kitagawa T, Ludwig B, Varotsis C\* (2013) *J. Biol. Chem.* 288(28): 20261–20266.

## 31. Exploring the Topography of Free Energy Surfaces and Kinetics of Cytochrome c Oxidases interacting with small ligands

---

Porrini M, **Daskalakis V**, Farantos SC\* (2012) *RSC Adv.* 2: 5828 - 5836.

## 32. Non-Linear Vibrational Modes in Biomolecules: a periodic orbits description

---

Kampanarakis A, Farantos SC\*, **Daskalakis V** and Varotsis C (2012) *Chem. Phys. Elsevier*, 399: 258–263.

## 33. The origin of the FeIV=O intermediates in cytochrome aa3 oxidase

---

Pinakoulaki E, **Daskalakis V** and Varotsis C\* (2012) *BBA Bioenergetics*, 1817: 552–557.

## 34. Regulation of Electron and Proton Transfer by the Protein Matrix of Cytochrome c Oxidase

---

**Daskalakis V**, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C\* (2011) *J. Phys. Chem. B*, 115(13): 3648–3655

## 35. Vibrational Resonances and CuB displacement controlled by proton motion in Cytochrome c Oxidase

---

**Daskalakis V\***, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C (2010) *J. Phys. Chem. B*, 114(2): 1136–1143

## 36. Binding and Docking Interactions of NO, CO and O2 in Heme Proteins as Probed by Density Functional Theory

---

Review for the Special Issue on “Application of Density Functional Theory in Chemical Reactions”  
**Daskalakis V**, Varotsis C\* (2009) *Int. J. Mol. Sci.*, 10: 4137–4156

## 37. Heme Cavity Dynamics of Photodissociated CO from ba3-Cytochrome c Oxidase: The Role of Ring-D Propionate

---

Porrini M\*, **Daskalakis V**, Farantos SC, Varotsis C (2009) *J. Phys. Chem. B*, 113(35): 12129–12135

## 38. Assigning vibrational spectra of ferryl-oxo intermediates of cytochrome c oxidase by periodic orbits and Molecular Dynamics

---



**Daskalakis V**, Farantos SC\*, Varotsis C (2008) *J. Am. Chem. Soc* 130(37): 12385-12393

### 39. Probing the environment of CuB in heme-copper oxidases

---

**Daskalakis V**, Pinakoulaki E, Stavarakis S, Varotsis C\* (2007) *J. Phys. Chem. B* 111: 10502-10509

### 40. Two ligand binding sites in the O<sub>2</sub>-sensing signal transducer HemAT: Implications for ligand Recognition/ Discrimination and signaling

---

Pinakoulaki E, Yoshimura H, **Daskalakis V**, Yoshioka S, Aono S, Varotsis C\* (2006) *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 103: 14796-14801

### 41. Structural dynamics of Heme-copper oxidases and Nitric oxide reductases: Time-Resolved step-scan FTIR and Time-resolved Resonance Raman studies

---

Pinakoulaki E, Koutsoupakis C, Stavarakis S, Marialena A, Papadopoulos G, **Daskalakis V**, Varotsis C\* (2005) *J. Raman Spec.* 36: 337-349

### 42. Time-resolved step-scan Fourier transform infrared investigation of heme-copper oxidases: implications for O<sub>2</sub> input and H<sub>2</sub>O/H<sup>+</sup> output channels

---

Koutsoupakis C, Pinakoulaki E, Stavarakis S, **Daskalakis V**, Varotsis C\* (2004) *Bioch. Biophys. Acta* 1655: 347-352

### ΑΡΘΡΑ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗΣ/ ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΒΙΒΛΙΩΝ-----

---

### 43. From Traditional Ethnopharmacology to Modern Natural Drug Discovery: A Methodology Discussion and Specific Examples

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** Pirintsos S, Panagiotopoulos A, Bariotakis M, **Daskalakis V**, Lionis C, Sourvinos G, Karakasiliotis I, Kampa M, and Castanas E. (2022) *MDPI Molecules*, 27(13), 4060.

### 44. A perspective on the Major Light Harvesting Complex Dynamics Under the Effect of pH, Salts and the Photoprotective PsbS Protein

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** Navakoudis E, Stergiannakos T, and **Daskalakis V\*** (2022) *Quantum and classical computational methods in photosynthesis: from the atom to the mesoscale* in *Photosynthesis Research*, in press

### 45. Atmospheric Ice Nucleation by Glassy Organic Compounds: A Review

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** Salameh A, and **Daskalakis V\*** (2017), *Chem. Comp. J* 1(1): 13-23

### 46. Probing the Action of Cytochrome c Oxidase (2014) The Structural Basis of Biological Energy Generation

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** **Daskalakis V**, Varotsis C\* *Advances in Photosynthesis and Respiration*, 39 (10): SBN 978-94-017-8742-0

### 47. Tuning heme functionality: the cases of Cytochrome c Oxidase and Myoglobin Oxidation

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** **Daskalakis V\***, Farantos S C, Varotsis C (2012), *LNCS – Springer-Verlag Berlin, Heidelberg*, p. 304-315. ISBN: 978-3-642-31124-6

### 48. Grid Computing Multiple Shooting Algorithms for Extended Phase Space Sampling and Long Time Propagation in Molecular Dynamics

---

**Κεφάλαιο σε Βιβλίο/ Ανασκόπηση:** **Daskalakis V**, Giatromanolakis M, Porrini M, Farantos, SC\* and Gervasi O *Computer Physics, Chapter 4 pp. 1-18, 2011* © Nova Science Publishers, Inc. Editors: B. S. Doherty, A. N. Molloy. ISBN 978-1-61324-790-7

### 49. Protein Dynamics and Spectroscopy for Ferryl Intermediate of Cytochrome c Oxidase: A Molecular Dynamics Approach

---

## ● ΔΙΚΤΥΑ ΚΑΙ ΣΥΝΔΡΟΜΕΣ ΜΕΛΟΥΣ

---

### ΔΙΕΘΝΕΙΣ ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ

---

#### Πρωτεΐνες Αίμης

**Καθ. Βαρώτσης Κωνσταντίνος**, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, Κύπρος  
**Καθ. Φαράντος Σταύρος**, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης & Ίδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας, Ελλάδα  
**Prof. Teizo Kitagawa**, Specially Appointed Professor; Graduate School of Life Science, University of Hyogo  
**Prof. Guallar Victor**, ICREA Research Professor at Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS). Life & Medical Sciences

#### Φωτοσύνθεση

**Prof. Alexander Ruban**, School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary, University of London  
**Prof. Ulrich Kleinekathöfer**, Computational Physics and Biophysics Group, Jacobs University Bremen gGmbH, Department of Physics & Earth Sciences Focus Area Health  
**Dr. Christopher Duffy**, Cellular and Molecular Biology, School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary, University of London

#### Θερμοσταθερότητα Πρωτεϊνών - IDPs

**Δρ. Κυριάκος Πετράτος**, Ερευνητής, Εργαστήριο Κρυσταλλογραφίας II, Ινστιτούτο Μοριακής Βιολογίας και Βιοτεχνολογίας, Ίδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας, Ελλάδα (ΙΤΕ)  
**Καθ. Κοτζαμπάσης Κυριάκος**, Τμήμα Βιολογίας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ελλάδα.

#### SARS-CoV-2

**Καθ. Ηλίας Καστανάς**, Ιατρική Σχολή, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ελλάδα  
**Καθ. Στέργιος Πυρίντσος**, Τμήμα Βιολογίας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ελλάδα

#### Πρωτεΐνες - Μεταφορείς

**Καθ. Στάθης Φριλίγγος**, Ιατρική Σχολή, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

## ● ΣΥΝΕΔΡΙΑ ΚΑΙ ΣΕΜΙΝΑΡΙΑ

---

2023 - 2024

### Συνέδρια - Σεμινάρια - Ομάδες Εργασίας

---

**1. Daskalakis V\***, Maity S, Kleinekathöfer U. "Diatoms under Computational Sunlight". Second European Congress on Photosynthesis Research (ePS2 2024), Padova, Italy, 25-28 June 2024.

**2. Karampa P, Makryniotis K, Nikolaivits E, Daskalakis V, Topakas E, Dimarogona M\***. "Investigation of Structural Determinants of Plastic Degrading Enzymes via x-ray Crystallography and Molecular Docking". 14ο Πανελλήνιο Επιστημονικό Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα, 29-31 Μάη 2024.

**3. Daskalakis V.** "CRISPR-Cas proteins: Engineering of "silver-bullets" in the arsenal of gene editing". International Society of Quantum Biology and Pharmacology (ISQBP2024) President's Meeting, Athens, Greece, 19-23 May 2024.

**4. Daskalakis V.** "Βιομοριακές Προσομοιώσεις: Από τη Δυναμική στη Μηχανική". Σεμινάριο στο Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας / Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής (ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ), 17 Απρίλη 2024 (προσκεκλημένη ομιλία)

**5. Daskalakis V.** "Biomolecular Engineering: Structures and Dynamics". Seminar at the Department of Physics, Constructor University, Bremen, Germany, 27 April 2023 (*invited talk*)

**6. Daskalakis V.** "Biomolecular Engineering: Structures and Dynamics". Σεμινάριο στο Ελληνικό Κέντρο Θαλάσσιων Ερευνών (ΕΛ.ΚΕ.Θ.Ε) στο Ινστιτούτο Θαλάσσιας Βιολογίας, Βιοτεχνολογίας και Υδατοκαλλιεργειών (Ι.Θ.Α.Β.Β.ΥΚ), Ηράκλειο, Ελλάδα, 03 Μάη 2023 (*προσκεκλημένη ομιλία*)

**7. Daskalakis V.** "Biomolecular Engineering: Structures and Dynamics". Σεμινάριο στο Τμήμα Χημείας του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης, Ελλάδα, 15 May 2023 (*προσκεκλημένη ομιλία*)

2020 - 2022

### Συνέδρια - Σεμινάρια - Ομάδες Εργασίας

---

1. **Daskalakis V.** "CRISPR-Cas9: From Biomolecular Engineering to Dynamics". Joint Seminar Series in Biotechnology, Biosciences, and Biomedical Research of the University of Ioannina (School of Medicine), co-organized by IIPPS - Mol Cell Biol Biotechnol, URCl - Institute of Biosciences, IMBB-FORTH, Biomedical Research Dept. (BRI-FORTH), 16 December 2022 (online, [invited talk](#))
2. **Daskalakis V.** "From Rigid Crystal Structures to Conformational Sampling: A tale of two Light Harvesting Complexes". Virtual international conference Computational methods in photosynthesis: From atoms to the mesoscale, from theory to experiment (ComPhot2021), November 8-11, 2021 (online, [invited talk](#))
3. **Daskalakis V.** "From Rigid Crystal Structures to Conformational Sampling: A tale of two Light Harvesting Complexes". Virtual HPC-Europa3 TAM Meeting, November 3-4, 2021 (online talk)
4. **Daskalakis V.** "The mechanics of photoprotection in the major antenna of Photosystem II: let there be light...". SuperMUC-NG Status and Results Workshop, 8-10 June 2021 (online, [invited talk](#)).
5. **Daskalakis V.** "High Performance Computing in Structural Biology", CaSToRC - The Cyprus Institute, 19 January 2021 (online, [invited talk](#))
6. **Daskalakis V.** "Epitope vaccines based on the dynamics of mutated SARS-CoV-2 proteins at all atom resolution", EuroHPC Summit Week, 22-26 March 2021 (online, [invited talk](#))

2014 – 2020

## Συνέδρια - Σεμινάρια - Ομάδες Εργασίας

---

7. **Daskalakis V.** COVID-19 pandemic – What have we learned and what does the future hold? Online Seminar, The Cyprus Institute, December 5 2020 ([invited talk](#))
8. **Daskalakis V.**, Stergiannakos T., Papadatos, S. **The Synergy between LHCII and PsbS under Photoprotection**, Biophysics of Photosynthesis 2019, Accademia dei Lincei, Rome Italy, October 2-4, 2019
9. **Daskalakis V.**, Stergiannakos T., Papadatos, S. **The Photosynthetic Apparatus under Stress by Molecular Simulations**, Photosynthesis Gordon Research Conference, Grand Summit Hotel at Sunday River in Newry, ME United States, July 21-16, 2019 ([by invitation only](#)).
10. **Daskalakis V.** Lecture, **Fine Tuning of the Photosynthetic Apparatus**, Department of Materials Science and Technology, Heraklion, Greece, 20 May 2019 ([invited talk](#)).
11. **Daskalakis V.** Lecture, **The Photosynthetic Apparatus under Stress by Molecular Simulations**, National Hellenic Research Foundation, Athens, Greece, 17 December 2018 ([invited talk](#)).
12. **Daskalakis V.** Molife Research Seminar, **Triggering Photoprotection in Photosystem II Light Harvesting Complexes by Molecular Simulations**, Bremen, Germany GmbH, 25 September 2018 ([invited talk](#)).
13. **Daskalakis V.** 62<sup>nd</sup> Annual Meeting Biophysical Society, **S(T)IMULATING THE INTERPLAY BETWEEN PHOTOSYSTEM II PROTEINS AND THE XANTHOPHYLL CYCLE IN PHOTOPROTECTION**, San Francisco, USA, 17-21 February 2018
14. **Daskalakis V.** 3<sup>d</sup> EMN Meeting on Computation and Theory – Molecular Dynamics and Its Applications, **The effect of proton and potential gradients on integral membrane proteins: Insights from Molecular Dynamics simulations**, Dubai UAE, 6-10 November 2017 ([Invited Talk](#))
15. **Daskalakis V.**, Papadatos S. 42<sup>nd</sup> FEBS Congress (from molecules to cells and back) – **The Photosystem II Subunit S Dynamics under Stress**, Jerusalem Israel, 10-14 September 2017 (Poster).
16. **Daskalakis V.**, Salameh A, AGU 2016 Fall Meeting – **Correlation Between Surface Tension and the Bulk Dynamics in Salty Atmospheric Aquatic Droplets**, San Francisco USA, 12-16 December 2016 (Poster).
17. **Daskalakis V.**, Department of Chemistry University of Crete Seminars, **Oxygen Evolution and Reduction: Common Principles**, Heraklion-Crete, Greece, 25 November 2017 ([invited talk](#)).
18. **Daskalakis V.**, Ioannidis NE, Papadatos S. 79<sup>th</sup> Harden Conference – Oxygen Evolution and Reduction – Common Principles: **Tuning of a conformational change in CP29 from spinach: from Light Harvesting to Photoprotection**, Innsbruck Austria, 16-20 April 2016 (Poster+Talk).

19. **Daskalakis V** and Pinakoulaki E. New Biological Frontiers Illuminated by Molecular Sensors and Actuators meeting being held in Taipei, Taiwan, June 28 – July 1, 2015. Abstract titled “Globin Nitrito Heme Fe-O-N=O/ 2-Nitrovinyl Species: Implications for Myoglobin Helices Dynamics”, fixed-participants meeting.

20. Organizational Committee “12<sup>th</sup> Greece-Cyprus Conference on Chemistry 2015”, 8-10 May 2015, Thessaloniki Greece

2009 – 2014

### Συνέδρια - Σεμινάρια - Ομάδες Εργασίας

---

21. **Daskalakis V**, Hadjicharalambous M, Charalambous F *Ice 1<sub>n</sub> crystal stability and growth in the presence of glyoxal Secondary Organic Aerosol and Carbon Dioxide*. 13th Quadrennial IGACGP Symposium 13th IGAC Science Conference on Atmospheric Chemistry (IGACGP, IGAC 2014), Brazil, Natal, 22-26 September, 2014.

22. **Daskalakis V**, Hadjicharalambous M *Probing the Effects of Atmospheric Pollutants on Ice Nucleation*. International Conference on Scientific Computing 2013 (CSC 2013), Paphos, Cyprus, 3 - 6 December 2013. (Invited talk).

23. **Daskalakis V**, Varotsis C **The structure of the Hyponitrite in Nitric Oxide Reductase (NOR)**. Biophysical Society (BPS) 57th Annual Meeting in Philadelphia, Pennsylvania, February 2-6, 2013.

24. **Daskalakis V**, ASEMUNDUS Networking seminar in Korea. Erasmus Mundus programme to enhance quality in higher education through scholarships and academic cooperation between Europe and the rest of the world. Seoul, Korea, May 15-16, 2012.

25. **Daskalakis V**, Farantos S C, Varotsis C *Tuning heme functionality: the cases of Cytochrome c Oxidase and Myoglobin Oxidation*, 12th International Conference on Computational Science and Applications (ICCSA 2012), June 18-21, Salvador de Bahia, Brazil, 2012. (*Best paper Award*)

26. **Daskalakis V**, Varotsis C *Probing the effect of the proximal and distal to the heme a<sub>3</sub> environments in the Cytochrome c Oxidase dioxygen reaction*, 15<sup>th</sup> International Conference on Biological Chemistry (ICBIC15), 7-12 August, Vancouver, Canada, 2011.

27. CD-ADAPCO, STAR-CCM+ Training School, 10-12 May 2011, London, UK.

28. **Daskalakis V**, Farantos S C, Guallar V, Varotsis C *QM/MM Calculations on Cytochrome c Oxidase: Probing of electron and proton pump coupling*, TAM 2010 MEETING, Helsinki 15-17 June 2010.

2001 – 2010

### Συνέδρια - Σεμινάρια - Ομάδες Εργασίας

---

29. **Expanding the Frontiers of Molecular Dynamics Simulations in Biology**, 23-25 November, Institut d'Estudis Catalans, Barcelona – Spain, 2009 (Joint BSC - IRB Barcelona Conference).

30. Aug. 31 – Sept. 5 2009: Summer School on Simulation Approaches to Problems in Molecular and Cellular Biology, Miramar Palace, San Sebastian, Spain. **Cecam** (Centre Europeen de Calcul Atomique et Moleculaire), under **Psi-K scholarship**.

31. **Daskalakis V**, Farantos S C, Guallar V, Varotsis C *Towards the Understanding of His411-Fe<sup>IV</sup>=O Spectroscopic Properties in Ferryl Intermediate of Cytochrome c Oxidase + O<sub>2</sub> Reaction: A Theoretical QM/MM, MD Approach*, 14<sup>th</sup> International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBIC14), 25-30 July, Nagoya, Japan, 2009. **SBIC (The Society of Biological Inorganic Chemistry) Poster Award for outstanding contribution**.

32. **Porrini M, Daskalakis V**, Farantos SC, Varotsis C *Heme cavity dynamics of photodissociated CO from ba<sub>3</sub> cytochrome c oxidase: The role of ring-D propionate*, 10<sup>th</sup> Congress in Chemistry Greece – Cyprus, 2-4 July Heraklion, Greece, 2009.

33. a. **Daskalakis V**, Farantos S C, Varotsis C **Assigning Vibrational Spectra of Ferryl-Oxo Intermediates of Cytochrome c Oxidase by Periodic Orbits and Molecular Dynamics**,

b. **Daskalakis V**, Varotis C **Cytochrome c Oxidase + O<sub>2</sub> reaction intermediates as probed by Density Functional Theory: The Proximal and Distal to heme a<sub>3</sub> effects**,

c. **Daskalakis V**, Varotsis C **Theoretical Studies of Metal-NO<sub>x</sub> species, isolated and in aqueous solutions: Raman bands**, 10<sup>th</sup> Congress in Chemistry Greece – Cyprus, 2-4 July Heraklion, Greece, 2009.

34. 15-18 Sept. 2008: **Cost Training School On Molecular And Material Science Grid Applications** - Trieste, Italy.

35. Gervasi O, Farantos S C, **Daskalakis V**, Giatromanolakis M *The Study of cytochrome c Oxidase on the EGEE Grid, 3d EGEE User Forum, Clemont-Ferrand, France, 2008.*

36. **Daskalakis V**, Giatromanolakis M, Farantos SC, Gerbasi O *EGEE: Applications in Classical and Quantum Molecular Dynamics, First Hellas Grid User Forum, Athens, Greece, 2007.*

37. **Daskalakis V**, Farantos S, Varotsis C *Protein dynamics and spectroscopy for ferryl intermediate of Cytochrome c Oxidase: A molecular dynamics approach*, International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (**ICCMSE 2007**), Corfu, Greece, 2007. (*Award for Best Presentation, by the Organizing Committee of ICCMSE*)

Publication: *Protein Dynamics and Spectroscopy for Ferryl Intermediate of Cytochrome c Oxidase: A Molecular Dynamics Approach, AIP Computation in Modern Science and Engineering, Proc.* 963(2): 31-34 (2007).

38. Pinakoulaki E, Ohta T, **Daskalakis V**, Aggelaki M, Kitagawa T, Ludwig B, Varotsis C, **ISBC2006**, Konan Fiber, Fiber, Konan University, Japan, 2006.

39. **Daskalakis V**, Frudakis G, Varotsis C *DFT Study of endoperoxides and their intermediates in Fe(II) cleavage of the endoperoxy bridge*, 19<sup>th</sup> National Conference in Chemistry, Heraklion, Crete, Greece, 2002.

## ● **ΑΚΑΔΗΜΑΙΚΑ ΚΑΙ ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΑ ΚΑΘΗΚΟΝΤΑ**

---

01/09/2023 – ΤΡΕΧΟΥΣΑ

**Πανεπιστήμιο Πατρών**

---

1. Associate Editor, *Frontiers in Chemistry*, Theoretical and Computational Chemistry section

01/12/2010 – 31/08/2023

**Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου**

---

1. Μέλος του **Συμβουλίου της Σχολής** Γεωτεχνικών Επιστημών και Διαχείρισης Περιβάλλοντος (2022-2023)

2. **Συγκλητική Επιτροπή Συστημάτων Πληροφορικής και Τεχνολογίας (ΣΠΤ)** (2012-2018)

(a) Αναθεωρήσεις του ετήσιου προϋπολογισμού του Πανεπιστημίου που αφορά την Υπηρεσία ΣΠΤ

(b) Επιτροπή του Έργου IdM (IAM) για την ενσωμάτωση του "Identity Access Management" στα πληροφοριακά συστήματα του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου

(c) Επιτροπή για το Έργο «Λογισμικά Microsoft για φοιτητές»

(d) Επιτροπή για την πολιτική και τους κανόνες πρόσβασης στο διαδίκτυο από τους χρήστες του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου

3. **Επιτροπή Προπτυχιακών & Μεταπτυχιακών Σπουδών** του Τμήματος (2011-2023)

4. **Επιτροπή Διασφάλισης Ποιότητας** του Τμήματος (2011-2018)

4. Την *Ad hoc* **Επιτροπή Μονάδων ECTS** του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου (2014)

5. Την *Ad hoc* **Επιτροπή για το «Ανοιχτό Πανεπιστήμιο»** (2016-2023)

6. Την **Επιτροπή Παγκύπριων Εξετάσεων** για την εισαγωγή στην Ανώτερη Εκπαίδευση Κύπρου-Ελλάδας (2014)

7. Μέλος της **εφορευτικής επιτροπής** για την εκλογή των Ακαδημαϊκών μελών του Συμβουλίου του Πανεπιστημίου (2012)

8. Μέλος της επιτροπής RAC για κατανομή υπολογιστικού χρόνου στο Cyclone (**Ινστιτούτο Κύπρου**)

## ● **ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΕΡΓΟ**

---

**Ανεξάρτητη Διδασκαλία**

---

**Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Χημικών Μηχανικών (Προπτυχιακά):** (1) CHM-163 Εργαστήριο Υπολογιστών (Χειμερινό Εξάμηνο 2023-2024), (2) CHM-363 Εισαγωγή στον Προγραμματισμό - Θεωρία & Εργαστήριο (Χειμερινό εξάμηνο 2023-2024)

**Πανεπιστήμιο Πατρών, Ιατρική Σχολή:** (1) Μεθοδολογία στην Έρευνα Βιοεπιστημών BIE (2024) - Προσομοιώσεις Βιομοριακών αλληλεπιδράσεων.

**Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου (Μεταπτυχιακά):** (1) **Υπολογιστική Περιβαλλοντική Χημεία, Βιοχημεία και Βιολογία** (Εαρινά εξάμηνα 2012-2017), (2) **Ειδικά Θέματα στην Περιβαλλοντική Βιοεπιστήμη** (Φθινοπωρινό εξάμηνο 2014)

**Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Βιολογίας (επισκέπτης): «ΦΩΤΟΣΥΝΘΕΣΗ: Η φωτοσυνθετική μηχανή στο μικροσκόπιο της Μοριακής Δυναμικής»,** στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα «Μοριακή και Εφαρμοσμένη Βιολογία Φυτών – Πράσινη Βιοτεχνολογία» (Χειμερινό Εξάμηνο 2023/ Εαρινά Εξάμηνα 2019-2022)

**Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ιατρική Σχολή (επισκέπτης): «Στο μικροσκόπιο της Μοριακής Δυναμικής»,** στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα «Βιοπληροφορική» (Φθινοπωρινό Εξάμηνο 2021)

**Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου (Προπτυχιακά):** (3) **Υπολογιστικά Περιβαλλοντικά Μοντέλα & Εισαγωγή στο MATLAB** (Εαρινά εξάμηνα 2011-2020) (4) **Μοντέλα Διασποράς** (Φθινοπωρινά εξάμηνα 2011-2020), (5) **Φυσική Περιβάλλοντος** (Φθινοπωρινό εξάμηνο 2011), (6) **Αρχές Θερμοδυναμικής & Χημικής Κινητικής** (Εαρινά εξάμηνα 2011-2012), (7) **Εφαρμοσμένη Θερμοδυναμική II** (Εαρινά Εξάμηνα 2020-2022), (8) **Δυναμική Προσομοίωση Συστημάτων με τη βοήθεια Η/Υ** (Φθινοπωρινά εξάμηνα 2019-2022), (9) **Μαθηματικά III** (Διαφορικές Εξισώσεις) (Φθινοπωρινά Εξάμηνα 2021-2022), και (10) **Φυσική II** (Ηλεκτρισμός - Μαγνητισμός - Ηλεκτρομαγνητισμός) (Εαρινό Εξάμηνο 2022).

#### **ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ:**

Ενδεικτική λίστα μαθημάτων που μπορώ να διδάξω ανεξάρτητα: Γενική Χημεία, Βιοχημεία I-II, Βιο-Μαθηματικά, Φυσικοχημεία - Θερμοδυναμική, Φασματοσκοπία, Βιοστατιστική, Υπολογιστική Βιολογία, Δομική Βιολογία, Προγραμματισμός, Δομή και Λειτουργία Πρωτεϊνών, Προσομοίωση Βιολογικών Συστημάτων: μέθοδοι πρόβλεψης δομής.

### **ΔΕΞΙΟΤΗΤΕΣ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ ΚΑΙ ΗΓΕΣΙΑΣ**

---

#### **Ακαδημαϊκή Καθοδήγηση**

---

##### **Πανεπιστήμιο Πατρών (2023 - σήμερα)**

##### **Διδακτορικές Εργασίες/ Υποψήφιοι Διδάκτορες (Ph.D):**

**Ενεργοί (1):** Θεοφάνη Ιωσηφίνα Σουσάνη

##### **Ερευνητικοί Συνεργάτες:**

**Ενεργοί (2):** Αριάδνη Κωνσταντοπούλου (μεταδιδακτορικός), Κωνσταντίνος Χατζηκυριάκος (ερευνητικός συνεργάτης)

##### **Προπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (Πτυχίο)**

**Ενεργοί (1):** Αναστασία Ιακώβου

##### **Συμμετοχή στην Επιτροπή Αξιολόγησης Διδακτορικών Διατριβών:**

1. Σωτήρης Ζερβέας (Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Βιολογίας)
2. Μαρία Πολυχρονάκη (Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας)

##### **Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου (2010 - 2023)**

##### **Προπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (Πτυχίο)**

**Ολοκληρωμένες (9):** Χαραλάμπους Φεβρωνία, Ιωάννου Νεοφύτα, Παναγιώτου Φωστήρα, Νεάρχου Ειρήνη, Δημητρίου Δ. Κωνσταντίνος, Γεωργίου Α. Γεωργία, Ελευθερίου Αντώνης, Βορκά Φλώρα, Χαραλάμπους Ανδρέας, Παλαζής Κ. Ανδρέας, Κατσώνη Παναγιώτα

##### **Μεταπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (δίπλωμα Master's)**

**Ολοκληρωμένες (5):** Χαραλάμπους Φεβρωνία, Ιωάννου Νεοφύτα, Παπαδάτος Σωτήρης, **Ανθή Χρυσουφούδη** (σε συνεργασία με το Τμήμα Βιολογίας, Πανεπιστήμιο Κρήτης), **Δανάη Μαρία Κοτζαμπάση** (σε συνεργασία με την Ιατρική Σχολή του Πανεπιστημίου Κρήτης και το Ινστιτούτο Πληροφορικής του Ιδρύματος Έρευνας και Τεχνολογίας).

##### **Διδακτορικές Εργασίες/ Υποψήφιοι Διδάκτορες (Ph.D):**

**Ολοκληρωμένες (1):** Σαλάμεχ Αναστασία