

# ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

Κωνσταντίνου Δ. Καρατάσου  
Αναπληρωτή Καθηγητή του Τμ. Χημικών Μηχανικών, Α.Π.Θ.

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

• Επαγγελματική πορεία	2
• Υποτροφίες	3
• Διδακτική πείρα	3
• Διοικητική Πείρα	7
• Επιπρόσθετη εμπειρία	7
• Δημοσιεύσεις	8
• Προσκεκλημένες Ομιλίες	19
• Κριτής σε Διεθνή περιοδικά/προγράμματα	21
• Επιστημονικά συνέδρια	22
• Συμμετοχή σε επιστημονικά προγράμματα	35
• Αναφορές	37
• Συνοπτικό υπόμνημα των ερευνητικών εργασιών σε διεθνή περιοδικά με κριτές	41

ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ Φεβρουάριος 2018

Διαθέσιμη επικαιροποιημένη έκδοση από τον σύνδεσμο  
<http://users.auth.gr/kkaratas/cvkaratasosgr.pdf>

## Επαγγελματική πορεία

- 1969 : Έτος γέννησης
- 1987 : Απολυτήριο 1ου Λυκείου Ηρακλείου, Βαθμός: 19<sup>6</sup>/<sub>11</sub>
- Ιούνιος -Ιούλιος 1990 : Παρακολούθηση 1ου Θερινού Σχολείου Φυσικής του Πανεπιστημίου Κρήτης.
- Απρίλιος -Ιούλιος 1991 : University of Amsterdam, Astronomical Institute “Anton Pannekoek” . Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας με θέμα : “*The two optical states in Scorpius X-1*”
- Σεπτέμβριος 1991 : Πτυχίο Φυσικής Πανεπιστημίου Κρήτης, Βαθμός:8.5
- 10/1991 - 1/1992: : Παρακολούθηση ειδικού κύκλου σεμιναρίων “ *Οι μικροεπεξεργαστές στις σύγχρονες διατάξεις ελέγχου και παραγωγής*” στο Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Ηρακλείου (Σχολή τεχνολογικών εφαρμογών) και εκπόνηση εργασίας με θέμα: “ *A/D Conversion, προγραμματισμός σε Pascal, γραφική απεικόνιση σε Προσωπικό Υπολογιστή και αποθήκευση σε σκληρό δίσκο*”
- Φεβρουάριος 1992 : Εισαγωγή στο Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα του Χημικού τμήματος Πανεπιστημίου Κρήτης.
- Νοέμβριος 1993 : Αποπεράτωση των υποχρεώσεων για λήψη Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στη Φυσικοχημεία, και παρουσίαση Μεταπτυχιακής εργασίας με θέμα: “*Δυναμική Πολυσυσταδικών Πολυμερικών Συστημάτων Κοντά στο Σημείο Μετάβασης Τάξης*”
- Νοέμβριος 1993-Νοέμβριος 1997 : αμοιβόμενη εργασία στα πλαίσια ερευνητικών προγραμμάτων του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας
- Ιούλιος 1994 : Λήψη Μεταπτυχιακού Διπλώματος ειδίκευσης στη Φυσικοχημεία, με μέσο όρο στα μαθήματα 8.5
- Δεκέμβριος 1993 –Νοέμβριος 1997 : Εκπόνηση Διδακτορικής Διατριβής με τίτλο “*Δυναμική Συσταδικών Συμπολυμερών και Πολυμερικών Μειγμάτων: Διηλεκτρική Φασματοσκοπία και Προσομοιώσεις Monte Carlo .*”  
Επιβλέποντες καθηγητές : Καθ. Γ. Φυτάς, Καθ. Σ. Αναστασιάδης
- Νοέμβριος 1997-Μάρτιος 2000 : Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Πανεπιστήμιο του Leeds (University of Leeds, Dept. of Physics and Astronomy and Interdisciplinary Research Center in Polymer Science and Technology).  
Επιβλέποντες καθηγητές : Dr. D.B. Adolf, Prof. G.R.Davies
- Μάρτιος 2000-Ιούνιος 2001: Μεταδιδακτορικός ερευνητής στο Πανεπιστήμιο Βρυξελλών (Universite Libre de Bruxelles, Unite de Physique des Polymeres – CP223)  
Επιβλέπων καθηγητής : Prof. Jean-Paul Ryckaert
- Ιούλιος 2001-Ιούλιος 2002 : Εκπλήρωση στρατιωτικών υποχρεώσεων
- Σεπτέμβριος 2002 – Φεβρουάριος 2003 : Διδάσκων (ΠΔ. 407, Βαθμίδα Αναπληρωτή Καθηγητή) στο τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών του Πανεπιστημίου Κρήτης
- Μάρτιος 2003-Απρίλιος 2008 : Λέκτορας του τμήματος Χημικών Μηχανικών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης (Τομέας Χημείας, Εργαστήριο Φυσικής Χημείας).
- Απρίλιος 2008 – Ιούνιος 2014 : Επίκουρος Καθηγητής του τμήματος Χημικών Μηχανικών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης (Τομέας Χημείας, Εργαστήριο Φυσικής Χημείας).
- Ιούλιος 2014 – τώρα : Αναπληρωτής Καθηγητής του τμήματος Χημικών Μηχανικών του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης (Τομέας Χημείας, Εργαστήριο Φυσικής

Χημείας).

### **Υποτροφίες**

- Λήψη υποτροφίας από το Ι.Κ.Υ σε όλα τα έτη προπτυχιακών σπουδών.
- Υποτροφία Erasmus από Απρίλιο-Ιούλιο 1991
- 1992-1997 : Μεταπτυχιακός υπότροφος του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Laser.

### **Διδακτική πείρα**

- Βοηθός Εργαστηρίων Φυσικοχημείας για 2 έτη, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας
- Επικουρικό διδακτικό έργο στο μάθημα της Φυσικοχημείας, για 1 έτος
- Σεπτέμβριος 2002-Φεβρουάριος 2003: Διδάσκων (ΠΔ 407 Βαθμίδα Αναπληρωτή Καθηγητή) στο μάθημα ΗΥ-0 (Εισαγωγή στους Η-Υ) του τμήματος Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών Πανεπιστημίου Κρήτης.
- Οκτώβριος 2002 : Διδάσκων στο μάθημα Φυσικοχημεία-I του Χημικού τμήματος Πανεπιστημίου Κρήτης.
- Μάρτιος 2003 – τώρα : Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Εργαστήρια Φυσικοχημείας, Φυσικοχημεία Ι-Ασκήσεις
- Φεβρουάριος-Απρίλιος 2005, Απρίλιος 2011, Απρίλιος 2013 : Διδάσκων στο μάθημα «Θερμοδυναμική και Κινητική των Υλικών» του Διατμηματικού Μεταπτυχιακού προγράμματος «Διεργασίες και Τεχνολογία Προηγμένων Υλικών», Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
- Οκτώβριος 2006 – τώρα : Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών , «Υπολογιστική Επιστήμη Υλικών»
- Οκτώβριος 2006 – τώρα : Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών , «Πρακτική Άσκηση (Κατεύθυνση: Υλικά)»
- Νοέμβριος 2013 : Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών , «Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών»
- Φεβρουάριος 2016 – τώρα: “Νανοτεχνολογία και χαλαρή ύλη”, προπτυχιακό μάθημα Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών
- Φεβρουάριος 2016 – τώρα: “Νανοδομές και φυσικοχημεία χαλαρής ύλης”, μεταπτυχιακό μάθημα, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών
- Οκτώβριος 2016 – τώρα: “Φυσικοχημεία Μοριακών και Μακρομοριακών Συστημάτων”, μεταπτυχιακό μάθημα, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών

### **Επίβλεψη φοιτητών**

#### **Διπλωματικές Εργασίες**

Επιστημονικός Επιβλέπων

1. Βαβέκης Κωνσταντίνος , Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας, 1992
2. Βλάχος Γεώργιος, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας, 1996
3. Κρυστάλλης Μάριος, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμ. Χημ. Μηχ., 2006
4. Λουφάκη Νέλλη, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμ. Χημ. Μηχ., 2009 (Συνεπίβλεψη με τον Καθ. Σ. Αναστασιάδη)
5. Ελευθερίου Ηλίας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμ. Χημ. Μηχ., 2011
6. Ρούσσου Ρόζα-Ελευθερία, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμ. Χημ. Μηχ. 2014

Συμμετοχή στην τριμελή εξεταστική επιτροπή των διπλωματικών εργασιών (Τμ. Χημ. Μηχανικών Α.Π.Θ.) των:

1. Κακκαλή Αθανάσιου
2. Αθανασίας Τσιμπλιάρη
3. Δαρδαγιαννοπούλου Άννας
4. Γεωργούλα Κων/νου
5. Τριανταφύλλου Απόστολου
6. Δρίτσα Γεώργιου
7. Σκούταρη Νικόλαου
8. Τσιόπτσια Κων/νου
9. Δημητρίου Ελένης
10. Κουτσόπουλου Κων/νου
11. Μέρκου Ιωάννη
12. Αγγελοπούλου Αναστασίας
13. Στυλιανού Χρυστάλλας
14. Παπαμιχαήλ Μαριάννας
15. Σωτηριάδου Αργυρώς
16. Φλώρου Στυλιανού
17. Χαλέβα Ελευθέριου
18. Κοκκινομάλλη Ιωάννη
19. Στεφόπουλου Απόστολου
20. Καραγεωργάκης Χρυσάνθης
21. Στουρνάρας Μαρίας-Ελευθερίας
22. Κράββας Μαρίας
23. Τατσούδης Δήμητρας
24. Ελ Αουρ Σαμι
25. Αισσα Γιανμά
26. Χατζηγεωργίου Προκόπη
27. Σπηλιώτη Αλέξιου
28. Φαίδωνος Σοφίας
29. Γαλλίκας Δέσποινας
30. Τασούλας Στυλιανής
31. Μιμίκου Νικολάου
32. Πλαχούρα Παναγιώτη
33. Χανδόλια Κωνταντίνου
34. Κυπριώτη Αναστασίου
35. Γαϊτανόπουλου Γεωργίου
36. Μινασίδη Βλαδίμηρου
37. Σαλλιακέλλη Παναγιώτη
38. Στεφανίδη Νικολάου
39. Σάββα Αχιλλέα
40. Ρούσσης Γεωργίας
41. Βαλοδήμου Κωνσταντίνας
42. Κοϊνη-Κυριακίδου Ίρις
43. Καλύβα Αγνή
44. Αγγελου Ζουμπούλη
45. Αλεξίου-Σπυρίδωνα Κυριακίδη
46. Παρασκευοπούλου Μιλτιάδη
47. Σακελλαρίου Κυριακής
48. Βασιλάκου Βύρωνα
49. Καδερίδη Κυριάκου
50. Παύλου Αλέξανδρου
51. Στουρνάρα Μαρία-Ελευθερία

52. Σερέτη Αντώνη
53. Σκαλτσογιάννη Αθανασίου
54. Δρυγιαννάκης Ηλέκτρας
55. Τσοχαταρίδου Σωτηρίας
56. Κιβωτίδη Σοφίας
57. Μιλτσανίδη Κωνσταντίνου
58. Στρατόπουλος Δημήτριος
59. Ανδριανάκη Μαρία
60. Τεμπερεκίδη Δημητρίου
61. Σαγξαρίδου Γεωργίας
62. Σδούγκου Φοίβου
63. Κριτσιβέλας Ειρήνης
64. Ματσιούδη Νικολάου
65. Μαριβής Μπελιώκα
66. Ρωμανού Φούκα
67. Αναστασίου Κουτιάν

### **Διατριβές για Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης**

Συμμετοχή στην τριμελή εξεταστική επιτροπή των

1. Κακκαλή Αθανάσιου Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτ. Σπουδών, 2006
2. Αθανασίας Τσιμπλιαράκη Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγρ. Μεταπτ. Σπουδών, 2006
3. Δρίτσα Γεώργιου, Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτ. Σπουδών, 2006
4. Καρκαντελίδου Φωτεινής , Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγρ. Μεταπτ. Σπουδών, 2006
5. Κλάδη Κωνσταντίνας , Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτ. Σπουδών, 2006
6. Παπανάνου Ελένης, Α.Π.Θ. , Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτ. Σπουδών, 2009
7. Στυλιανής Παπαδοπούλου, Α.Π.Θ., Διατμηματικό Πρόγρ. Μεταπτ. Σπουδών, 2012
8. Ρογκώτης Κωνσταντίνος, Α.Π.Θ., Διατμηματικό Πρόγρ. Μεταπτ. Σπουδών, 2016
9. Μάντζος Νικόλαος, Α.Π.Θ., Διατμηματικό Πρόγρ. Μεταπτ. Σπουδών, 2016

Επιβλέπων Μεταπτυχιακών Διπλωματικών Εργασιών

1. Συνεπιβλέπων της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας του Κ. Δημήτριου Τραγουδάρα, φοιτητή Διατμηματικού Προγρ. Μεταπτ. Σπουδών. *«Επιστήμη και Τεχνολογία Προηγμένων Υλικών»* (περάτωση Δεκέμβριος 2009)
2. Επιβλέπων της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας του Κ. Μάριου Κρυστάλλη, φοιτητή του Διατμηματικού Προγρ. Μεταπτ. Σπουδών *«Νανοεπιστήμες και Νανοτεχνολογίες»*, (περάτωση Οκτώβριος 2009)
3. Επιβλέπων της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας του Κ. Πρόδρομου Αρσενίδη, φοιτητή του Διατμηματικού Προγρ. Μεταπτ. Σπουδών *«Νανοεπιστήμες και Νανοτεχνολογίες»* (περάτωση Μάρτιος 2016)

### **Διδακτορικές Διατριβές**

Συνυπεύθυνος επιστημονικός επιβλέπων στην διδακτορική εργασία του Κ. Stewart Hotston , Πανεπιστήμιο του Leeds, Τμήμα Φυσικής και Αστρονομίας, 1998-2002

Μέλος τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των υποψηφίων διδακτόρων:

Karatasos K.

1. Κακκαλή Αθανάσιου – Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2008-2015
2. Φλώρου Στυλιανού - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2010-2017
3. Μαστρογεωργόπουλου Σπυρίδωνα - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2015 –
4. Βασιλειάδου Αθηνάς, - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2017 –
5. Μάντζου Νικολάου, - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2017 –
6. Ρογκώτη Κωνσταντίνου, - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2017 –
7. Κοντού Ιωάννη, - Α.Π.Θ. Τμ. Χημικών Μηχανικών, 2017 –

Κύριος Επιβλέπων Διδακτορικών διατριβών:

1. Τάνη Ιωάννη - Α.Π.Θ. Τμ. Χημ. Μηχανικών, 2005-2009
2. Δαλάκογλου Γεωγίου - Α.Π.Θ. Τμ. Χημ. Μηχανικών, 2005 –2009
3. Φωτιάδου Σαπφούς - Α.Π.Θ. Τμ. Χημ. Μηχανικών, 2008-2012  
(σε συνεργασία με τον Καθ. Σ. Αναστασιάδη)

Μέλους της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων :

1. Παντούλας Μαρίας Α.Π.Θ. Τμ. Χημ. Μηχανικών Ιούλιος 2006
2. Μειμάρογλου Δημητρίου, Α.Π.Θ. Τμ. Χημ. Μηχανικών, Ιούλιος 2008
3. Μανούδη Παναγιώτη, Α.Π.Θ. Γενικό Τμήμα, Ιούνιος 2009
4. Δρίτσα Γεωργίου, Α.Π.Θ, Τμ. Χημικών Μηχανικών, Οκτώβριος 2009
5. Κουμάκη Νικολάου, Παν. Κρήτης, Τμ. Επιστ. κ Τεχν. Υλικών, Φεβρουάριος 2011
6. Μαντούρλια Θεοφάνη, Α.Π.Θ., Τμ. Χημικών Μηχανικών, Ιούνιος 2011
7. Κοντογιαννόπουλου Κωνσταντίνου, Α.Π.Θ., Τμ. Χημικών Μηχανικών, Οκτώβριος 2011
8. Γεωργάκη Μιχαήλ, Τμ. Χημικών Μηχανικών, Ιούνιος 2012
9. Τσιμπλιαράκη Αθανασίας, Τμ. Χημικών Μηχανικών, Απρίλιος 2012
10. Παπαδοπούλου Στυλιανής, Τμ. Χημ. Μηχανικών ΑΠΘ, Ιούλιος 2012
11. Μελά Αναστασίου, Τμ. Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Ιούνιος 2015
12. Κορωναίου Μαρίας, Τμ. Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Σεπτέμβριος 2015
13. Κοντονικόλα Αικατερίνης, Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Νοέμβριος 2015
14. Μπουργάνη Βασιλείου, Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Νοέμβριος 2015
15. Λίτινα Ηρακλή, Τμ. Χημείας, ΕΚΠΑ, Ιανουάριος 2016
17. Παπανάνου Ελένης, Τμ Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Οκτώβριος 2017
18. Παπαδάκη Κρυσταλίας, Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Δεκέμβριος 2017
19. Μπόγρη Παναγιώτας, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Παν. Κρήτης, Απρίλιος 2018

Μέλος της 3μελούς εξεταστικής επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων

(Invited External Examiner, School of Nanotechnology University of Trieste, April 2010)

1. Matteo Maria Dalmiglio
2. PAOLO LACOVIG
3. Barbara Lorenzut
4. GIOVANNI MARIA PAVAN
5. PAOLA POSOCCO
6. ANDREA TRAVAN
7. ANDREA UMERI

Εξωτερικός αξιολογητής (external reviewer) υποψηφίων διδασκόντων από το εξωτερικό:

Karatasos K.

1. Mrs Francesca Santese (School of  
March 2014

Nanotechnology of the University of Trieste,

## **Επίβλεψη μεταδιδασκτόρων**

1. Δρ. Τάνης Ιωάννης, Τμ. Χημικών Μηχανικών Α.Π.Θ. (Νοέμβριος 2009 – Σεπτέμβριος 2011)
2. Δρ. Κρητικός Γεώργιος, Τμ. Χημικών Μηχανικών Α.Π.Θ. (Νοέμβριος 2015 – τώρα)

## **Διοικητική Πείρα**

### **1. Συμμετοχή σε επιτροπές του τμήματος Χημικών Μηχανικών ΑΠΘ**

- Επόπτης Κτιρίου Γ' της Πολυτεχνικής
- Επιτροπή Δημοσίων Σχέσεων, Σεμιναρίων, Εκδηλώσεων και Προβολής Τμήματος
- Επιτροπή Αξιολόγησης και Διασφάλισης Ποιότητας Σπουδών (συν-συντονιστής)
- Επιτροπή κτιριακών υποδομών του Τομέα Χημείας
- Επιτροπή διεξαγωγής κατατακτηρίων εξετάσεων
- Επιτροπή πληροφορικής

### **2. Συμμετοχή σε επιτροπές της Κοσμητείας**

- Επιτροπή εποπτών κτιρίων της Πολυτεχνικής
- Επιτροπή για την εξέταση θεμάτων του Μετρώ
- Επιτροπή για την συλλογή στοιχείων του επετειακού τόμου των 50 ετών της Πολυτεχνικής

### **3. Συμμετοχή σε μεταπτυχιακά προγράμματα σπουδών**

- Διδάσκων και Αναπληρωματικός αντιπρόσωπος του Τμήματος Χημικών Μηχανικών στο Διατμηματικό Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα «Διεργασίες και Τεχνολογία Προηγμένων Υλικών» ΑΠΘ (2005-2013)
- Διδάσκων στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα «Χημική Μηχανική» του Τμήματος Χημικών Μηχανικών ΑΠΘ (2015-τώρα )

## **Επιπρόσθετη εμπειρία**

**Ξένες γλώσσες:** Αγγλικά (άριστα), Γερμανικά (μέτρια)

### **Επισκέψεις με διαμονή σε Ιδρύματα του εξωτερικού:**

- 4/1991-7/1991 University of Amsterdam, Astronomical Institute "Anton Pannekoek", Amsterdam, The Netherlands
- 2/1994-3/1994 Max-Planck Institute fur PolymerForschung, Mainz, Germany
- 5/1995 National Institute of Standards and Technology, Washington DC, USA (1 week stay)
- 6/1995 University of Leipzig, Leipzig, Germany (2 weeks stay)
- 9/2000 Institute Laue-Langevin, Grenoble, France (1 week stay)
- 12/2000 Heriot-Watt University, Edinburgh, Scotland, UK (1 week stay)
- 9/2005 Technical University of Eindhoven, Applied Physics Department, Eindhoven, The Netherlands (2 weeks stay)
- 1/2007 Center for Self Organization of Molecular Species (SOMS), Leeds, United Kingdom (3 weeks stay)

Karatasos K.

- 2/2010-6/2010 University of Trieste, Department of Materials and Natural Resources, Chemical Engineering section (Sabbatical leave), Trieste, Italy
- 19/1/2013-26/1/2013 University of Trieste, MOSE Laboratory, Department of Engineering and Architecture
- 24/1/2016-30/1/2016, Institute of Macromolecular Compounds, St. Petersburg, Russia

#### **Επισκέψεις με διαμονή σε Ιδρύματα του εσωτερικού:**

- 1/9/2017-31/8/2018: Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας (ITE), Κρήτη, Ελλάδα (εκπαιδευτική άδεια)

#### **Τεχνικές-Υπολογιστικές Γνώσεις**

*Εμπειρία σε πειραματικές τεχνικές :* Διηλεκτρική Φασματοσκοπία, Δυναμική Σκέδαση Φωτός, Διαφορική Θερμιδομετρία Σάρωσης (DSC), Θερμοσταθμική Ανάλυση (TGA), Σκέδαση νετρονίων

*Εμπειρία στη χρήση λειτουργικών συστημάτων Ηλ. Υπολογιστών:* Unix, Ms-Windows, Linux (εγκατάσταση και διαχείριση νησίδας υπολογιστών στο εργαστήριο Φυσικής Χημείας)

*Εμπειρία στην χρήση πακέτων για προσομοιώσεις και υπολογισμούς :* Materials Studio, DL\_POLY, DL\_PROTEIN, NAMD, VMD, Mathematica

*Γλώσσες Προγραμματισμού :* C, FORTRAN, Pascal

*Σχολεία :* i) Como Summer School on Monte Carlo and Molecular Dynamics of condensed matter systems Como 1-31 July 1995,  
ii) METHODS IN MOLECULAR SIMULATION CCP5/SMTG Spring School 25--31 March 1998, Bristol, UK  
iii) Nato ASI School "Polymer & Colloid 99", Advanced Study Institute, Les Houches, France, 14-24 September 1999

#### **Επαγγελματικές Ενώσεις**

Μέλος της *American Physical Society*

Μέλος της *Hellenic Polymer Society* (Μέλος της Διοικούσας Επιτροπής)

#### **Δημοσιεύσεις**

**Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά με κριτές (Refereed Journals)**  
(Διαθέσιμες και στην ιστοσελίδα <http://users.auth.gr/~kkaratas>)

1. **"Coordinated X-ray and optical observation of Scorpius X-1"**  
T. Augusteijn, K. Karatasos, M. Papadakis, G. Paterakis, S. Kikuchi, N. Brosch, E. Leibowitz, P. Hertz, K. Mitsuda, T. Dotani, W.H.G Lewin, M. van der Klis, J. van Paradijs  
*Astron. & Astroph.* ,**265**, 117-182 (1992)
2. **"Local and Global Chain Dynamics in Diblock Copolymer Melts"**  
G .Fytas, S.H. Anastasiadis, K. Karatasos, and N. Hadjichristidis  
*Physica Scripta*, **T49** ,237 (1993)



3. **"Composition Fluctuation effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers. I Weak Segregation Regime"**  
K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G.Fytas, A. N. Semenov, M. Pitsikalis, and N. Hadjichristidis  
*Macromolecules* **27**, 3543 (1994)
  
4. **"Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers.II Disordered State in the proximity to the ODT and Ordered State"**  
K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Floudas, G.Fytas, S.Pispas, N. Hadjichristidis, T. Pakula  
*Macromolecules* ,**29**, 1326, (1996)
  
5. **"Computer Simulation of the Static and Dynamic Behavior of Diblock Copolymer Melts"**  
T. Pakula, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G. Fytas  
*Macromolecules* , **30**, 8463 (1997)
  
6. **"Ordering and viscoelastic relaxation in multiarm star polymer melts"**  
D. Vlassopoulos, T. Pakula, G. Fytas, J. Roovers, K. Karatasos, N. Hadjichristidis  
*Europhysics Letters*, **39**, 617(1997)
  
7. **"Segmental dynamics and incompatibility in Hard/Soft Binary Polymer Blends"**  
K. Karatasos, G. Vlachos, D. Vlassopoulos, G. Fytas ,G. Meier, A. Du Chesne  
*J. Chem. Phys.*, **108**, 5997 (1998)
  
8. **"Depolarized light scattering from critical polymer blends"**  
A.N. Semenov, A.E. Likhtman, D. Vlassopoulos, K. Karatasos, G. Fytas  
*Macromolecular Theory and Simulation* **8**(3), 179 (1999)
  
9. **"Segmental Dynamics of Miscible PI/PVE Blends: Comparison of the Predictions of a Concentration Fluctuation Model to Experiment"**  
S. Kamath, R. H. Colby, S. K. Kumar, K. Karatasos, G.Floudas, G. Fytas, J. Roovers  
*J. Chem. Phys.*, **111**, 6121 (1999)
  
10. **"On the Loops to Bridges Ratio in Ordered Triblock Copolymers: An investigation by Dielectric Relaxation Spectroscopy and Computer Simulations"**  
K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, H. Watanabe and T. Pakula  
*Macromolecules*, **33**, 523 (2000)
  
11. **"Nanosopic confinement effects on local dynamics"**  
S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, E. P. Giannelis  
*Phys. Rev. Lett.*, **84**(5), 915 (2000)
  
12. **"Effects of density on the local dynamics and conformational statistics in polyethylene: a Molecular Dynamics Study"**  
K. Karatasos, D. B. Adolf, S. Hotston  
*J. Chem. Phys.* (2000) **112**(19), 8695, (2000) (corresponding author)
  
13. **"Slow modes in local polymer dynamics"**  
K. Karatasos and D. B. Adolf  
*J. Chem. Phys. (Communication)* **112**(19), 8225,(2000) (corresponding author)
  
14. **"Short length-scale dynamics of Polyisobutylene by molecular dynamics simulations"**

K. Karatasos, F. Saija and J.-P. Ryckaert  
*Physica B* **301**, 119, (2001) (corresponding author)

15. **"Local Polyisobutylene dynamics revisited"**  
K. Karatasos, and J.-P. Ryckaert  
*Macromolecules* (Communication) **34**, 7232 (2001) (corresponding author)
16. **"An Investigation into the local segmental dynamics of Polyethylene: an isothermal/isobaric molecular dynamics study "**  
S. Hotston, D. B. Adolf, K. Karatasos  
*J. Chem. Phys.* **115**(5), 2359, (2001)
17. **"Statics and Dynamics of model dendrimers as studied by molecular dynamics simulations"**  
K. Karatasos, D. B. Adolf and G. R. Davies  
*J. Chem. Phys.* **115**, 5310 (2001) (corresponding author)
18. **"Methyl dynamics and  $\beta$ -relaxation in polyisobutylene: comparison between experiments and molecular dynamics simulations"**  
K. Karatasos, J. -P. Ryckaert, R. Ricciardi and F. Lauprêtre  
*Macromolecules* **35**, 1451 (2002) (corresponding author)
19. **"Segmental Dynamics of Atactic Polypropylene as Revealed by Molecular Simulations and Quasielastic Neutron Scattering"**  
O. Ahumada, D. Theodorou, A. Triolo, V. Arrighi, K. Karatasos, and J.-P. Ryckaert  
*Macromolecules*, **35**, 7110 (2002)

#### Δημοσιεύσεις στην Βαθμίδα του Λέκτορα

20. **" Local Dynamics of Polyethylene and its Oligomers : A Molecular Dynamics Interpretation of the Incoherent Dynamic Structure Factor "**  
G. Arialdi, K. Karatasos, J.-P. Ryckaert, V. Arrighi , F. Saggio, A. Triolo A. Desmedt, J. Pieper, and A. E. Lechner  
*Macromolecules* **36**, 8864 (2003)
21. **"Static and dynamic behavior in model dendrimer melts: toward the glass transition"**  
K. Karatasos  
*Macromolecules* **38**, 4472-4483 (2005)
22. **"Glass Transition in Dendrimers"**  
K. Karatasos  
*Macromolecules* **39**, 4619-4626 (2006)
23. **"Local Dynamics under severe Connectivity Constraints: the Dendrimer Case"**  
K. Karatasos, A.V. Lyulin  
*Journal of Chemical Physics* **125**, 184907 (2006) (corresponding author)
24. **"Computational polymer dynamics via DL\_POLY"**  
Adolf DB, Butler SN, Drew PM, Hotston S, Karatasos K  
*MOL SIMULAT* 32 (12-13): 1017-1023 OCT-NOV 2006 (invited Review)
25. **"Non-Gaussian nature of Glassy Dynamics by Cage-to-Cage Motion"**  
B. Vorselaars, A.V. Lyulin, K. Karatasos and M. A. J. Michels

26. **“Effects of Topology and Size on Statics and Dynamics of Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes”**  
G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin  
*Journal of Chemical Physics*, 127, 214903 (2007) (corresponding author)
27. **“Self Organization in Dendrimer Polyelectrolytes”**  
K.Karatasos  
*Macromolecules* 2008, 41, (3), 1025-1033
28. **“Structural Effects in Overcharging in Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes”**  
S.V. Lyulin, K. Karatasos, A. Darinskii, S. Larin, and A. Lyulin  
*Soft Matter* 2008, 4, (3), 453 (Communication)

**Δημοσιεύσεις στην Βαθμίδα του Επίκουρου Καθηγητή**

29. **“Shear induced effects in Hyperbranched-Linear Polyelectrolyte Complexes”**  
G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin  
*Journal of Chemical Physics*, 129, 034901 (2008) (corresponding author)
30. **“Brownian dynamics simulations of complexes of hyperbranched polymers with linear polyelectrolytes: Effects of the strength of electrostatic interactions on static properties”**  
G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin  
*Materials Science and Engineering: B* 2008, 152, 114 (corresponding author)
31. **“Investigation of Thermodynamic Properties of Hyperbranched Poly (ester amide) by Inverse Gas Chromatography”**  
G. S. Dritsas, K. Karatasos and C. Panayiotou  
*Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 2008, 46, 2166
32. **“Dynamics of counterions in Dendrimer Polyelectrolyte Solutions”**  
K. Karatasos and M. Krystallis  
*Journal of Chemical Physics* 2009, 130, 114903 (corresponding author)
33. **“Molecular dynamics simulations of a hyperbranched poly(esteramide) : statics, dynamics and hydrogen bonding”**  
I. Tanis, D. Tragoudaras, K.Karatasos and S. H. Anastasiadis  
*Journal of Physical Chemistry B*, 2009, 113 (16), 5356 (corresponding author)
34. **“Electrostatically-driven Ordering in Model Dendrimer Polyelectrolytes: Effects of Concentration”**  
K. Karatasos and M. Krystallis  
*Macromol. Symp.* , 2009, 278, 32–39 (corresponding author)
35. **“Association of a weakly acidic anti-inflammatory drug (ibuprofen) with a poly(amidoamine) dendrimer as studied by molecular dynamics simulations”**  
I. Tanis and K.Karatasos  
*Journal of Physical Chemistry B*, 2009, 113, 10984 (corresponding author)
36. **“Molecular dynamics simulations of polyamidoamine dendrimers and their complexes with linear poly(ethyleneoxide) at different pH conditions: static**

**properties and hydrogen bonding”**I. Tanis and K. Karatasos*Physical Chemistry Chemical Physics*, **2009**, 11, 10017–10028. (corresponding author)

37. **“Investigation of Thermodynamic Properties of Hyperbranched Aliphatic Polyesters by Inverse Gas Chromatography”**  
G. Dritsas, K. Karatasos and C. Panayiotou  
*Journal of Chromatography A*, 1216, (51), 8979-8985, **2009**
38. **Local Dynamics and Hydrogen Bonding in Hyperbranched Aliphatic Polyesters**  
I. Tanis and K. Karatasos  
*Macromolecules*, 42, 9581 , **2009** (corresponding author)
39. **Modeling of Hyperbranched Polyesters as Hosts for the Multifunctional Bioactive Agent Shikonin**  
I. Tanis, K. Karatasos, A. N. Assimopoulou and V. P. Papageorgiou  
*Physical Chemistry Chemical Physics*, 13, 10808, **2011** (corresponding author)
40. **Simulation of a symmetric binary mixture of charged dendrimers under varying electrostatic interactions: static and dynamic aspects**  
K. Karatasos and I. Tanis (corresponding author)  
*Macromolecules*, 44, pp 6605, **2011**
41. **Chimeric advanced drug delivery nano systems (chi-aDDnSs) for shikonin combining dendritic and liposomal technology**  
K. N. Kontogianopoulos, A. N. Assimopoulou, S. Hatziantoniou, K. Karatasos, C. Demetzos and V. P. Papageorgiou  
*International Journal of Pharmaceutics*, **2012**, 422, (1–2), 381-389
42. **Conformational effects in non-stoichiometric complexes of two hyperbranched molecules with a linear polyelectrolyte**  
G. Dalakoglou, K. Karatasos, S. Lyulin, S. Larin, A. Darinskii, A. Lyulin (corresponding author)  
*Polymers* **2012**. 4,(1), 240-255
43. **PAMAM-based Dendrimer/siRNA complexation as studied by computer simulations: effects of pH and generation on dendrimer structure and siRNA binding**  
K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini, and S. Pricl (corresponding author)  
*Macromolecular Bioscience*, 12, pp 225, **2012**
44. **Tell Me Something I Do Not Know. Multiscale Molecular Modeling of Dendrimer/Dendron Organization and Self-Assembly In Gene Therapy**  
Paola Posocco, Erik Laurini, Valentina Dal Col, Domenico Marson, Konstantinos Karatasos, Maurizio Fermeglia and Sabrina Pricl  
*Current Medicinal Chemistry*, 19(29), 5062-5087, **2012**
45. **Modeling the formation of ordered nano-assemblies comprised by dendrimers and linear polyelectrolytes: the role of Coulombic interactions**  
E. Eleftheriou and K. Karatasos  
*Journal of Chemical Physics*, 137, 144905, **2012** (corresponding author)

46. **Structure and Dynamics of Hyperbranched Polymer – Layered Silicate Nanocomposites**  
S. Fotiadou, C. Karageorgaki, K. Chrissopoulou, K. Karatasos, I. Tanis, D. Tragoudaras, B. Frick, and S. H. Anastasiadis  
*Macromolecules*, **2013**, 46, 2842–2855
47. **Self-association and Complexation of the Anti-Cancer Drug Doxorubicin with PEGylated Hyperbranched Polyesters in an Aqueous Environment**  
K. Karatasos  
*Journal of Physical Chemistry B*, 117, 2564-2575, **2013**.
48. **Complexes between poly(amido amine) dendrimers and poly(methacrylic acid): insight from molecular dynamics simulations**  
I. Tanis, K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini and S. Pricl (corresponding author)  
*MACROMOL SYMP* **2013**, 331-332, (1), 34-42.

**Δημοσιεύσεις στην Βαθμίδα του Αναπληρωτή Καθηγητή**

49. **Graphene/Hyperbranched-Polymer Nanocomposites: Insight from Molecular Dynamics Simulations**  
K. Karatasos, *Macromolecules*, 47, (24), 8833-8845, **2014**.
50. **Detailed study of the dielectric function of a lysozyme solution studied with molecular dynamics simulations**  
Stelios Floros, Maria Liakopoulou-Kyriakides, Kostas Karatasos and Georgios E. Papadopoulos  
*European Biophysics Journal*, 44, (8), 599-611 **2015**
51. **Graphene/ poly(ethylene glycol) nanocomposites as studied by molecular dynamics simulations**  
Roza-Eleftheria Roussou and Kostas Karatasos (corresponding author)  
*Materials & Design*, 97, 163-174, **2016**
52. **Characterization of a Graphene Oxide/Poly(acrylic acid) Nanocomposite by means of Molecular Dynamics Simulations**  
Kostas Karatasos and Georgios Kritikos  
*RSC Advances*, 6, 109267, **2016** (corresponding author)
53. **Frequency dependent non-thermal effects of oscillating electric fields in the microwave region on the properties of a solvated lysozyme system: a molecular dynamics study.**  
Stelios Floros; Maria Liakopoulou-Kyriakides; Kostas Karatasos; Georgios E Papadopoulos *PLoS ONE*, **2017**, 12(1): e0169505
54. **Temperature Dependence of Dynamic and Mechanical Properties in Poly(acrylic acid)/Graphene Oxide Nanocomposites**  
G. Kritikos and K. Karatasos  
*Materials Today Communications*, **2017**, 13, 359-366
55. **A microscopic view of graphene-oxide/poly(acrylic acid) physical hydrogels: effects of polymer charge and graphene oxide loading**  
K. Karatasos and G. Kritikos, *Soft Matter*, **2018**, 14, 614-627

## Κεφάλαια σε βιβλία

1. G.Fytas, K. Chrissopoulou, S. H. Anastasiadis, D. Vlassopoulos and K. Karatasos  
**"Photon Correlation Spectroscopy of Interactive Polymer Systems"**  
*NATO ASI, "Light Scattering and Photon Correlation Spectroscopy"* (E.R. Pike, ed.)  
*Kluwer, N.Y (1997)*
2. P P. Posocco, E. Laurini, V. Dal Col, D. Marson, L. Peng, D.K. Smith, B. Klajnert, M. Bryszewska, A.-M. Caminade, J.P. Majoral, M. Fermeglia, K. Karatasos and S. Prigl  
**"Multiscale modeling of dendrimers and dendrons for drug and nucleic acid delivery"**  
 in *"Dendrimers in Biomedical Applications"*, Royal Society of Chemistry,  
 ISBN: 978-1-84973-611-4 (2013), DOI:10.1039/9781849737296-00148, pp 148-166, 2013

## Δημοσιεύσεις σε πρακτικά συνεδρίων (με κριτή )

1. S.H. Anastasiadis, K. Karatasos, G.Fytas, S.Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis  
 A.N Semenov, J.E.L Roovers, and T.Pakula  
**"Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymer Melts"**  
*Polymer Prepr., Amer. Chem. Soc, Div. Polym. Chem. 35(1),608 (1994)*
2. S.H. Anastasiadis, K. Karatasos, G.Fytas, S.Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis  
 A.N Semenov, J.E.L Roovers, and T.Pakula  
*Polymer Prepr., Amer. Chem. Soc, Div. Polym. Chem. 35(1),615 (1994)*
3. S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
**"Confinement Effects on the Local Motion in Nanocomposites"**  
 In "Dynamics in Small Confining Systems IV", J. M. Drake, G. S. Grest, J. Klafter, and R. Kopelman, Eds., Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 543, p. 125-130, Pittsburgh, PA, (1999).
4. S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
**"Local Dynamics under Severe Confinement in Nanocomposites"**  
*Polym. Mater. Sci. Eng., Amer. Chem. Soc. 82, 211 (2000)*
5. K. Chrissopoulou, S. Fotiadou, K. Androulaki, I. Tanis, K. Karatasos, D. Prevosto, M. Labardi, B. Frick, and S. H. Anastasiadis  
**"Dynamics of Dendritic Polymers in the Bulk and Under Confinement"**  
*AIP Conference Proceedings 1599, 250 (2014); doi: 10.1063/1.4876825*
6. K. Karatasos and G. Kritikos  
**Effects of the filler's loading in features of poly(acrylic acid)/graphene oxide nanocomposites**  
*Materials Today Proceedings, in press, (2018)*

## Δημοσιεύσεις σε πρακτικά συνεδρίων (χωρίς κριτή)

- 1 K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, A.N Semenov, N.Hadjichristidis, G.Fytas, J.E.L Roovers, and T.Pakula  
*General meeting 94, American Physical Society, March 1994, Pittsburgh, P.A.U.S.A.*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 39, 696 (1994)*
2. K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, and T.Pakula

*General Meeting 95, American Physical Society, March 1995, San Jose, C.A, U.S.A,*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 52, (1995)*

3. G.Fytas, K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, D. Vlassopoulos, G. Floudas, A.N. Semenov, S Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis, H.Watanabe, and T.Pakula  
*General Meeting 95, American Physical Society, March 1995, San Jose, C.A, U.S.A,*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 614 (1995)*

4. T.Jian, K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, K. Chrissopoulou, K. Adamczyk, A.N. Semenov, S.Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis, and J.E.L Roovers  
*General Meeting 95, American Physical Society, March 1995, San Jose, C.A, U.S.A,*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 624, (1995)*

5. K. Karatasos, Spiros H. Anastasiadis, George Fytas Sanat K. Kumar, Ralph H. Colby  
*5<sup>th</sup> European symposium on Polymer Blends, Maastricht May 1996, The Netherlands*  
*Extended Abstracts, p. 383, 1996*

6. K. Karatasos, G. Vlachos, D. Vlassopoulos, G. Fytas, and S. H. Anastasiadis  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 42, 523 (1997)*

7. K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G. Vlachos, E. Manias and E. P. Giannelis  
*General Meeting 1998, APS, Los Angeles, March 1998*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 43, 811 (1998).*

8. K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, T. Pakula and H. Watanabe  
*General Meeting 1999, APS, Atlanta, March 1999, USA*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 44, 755 (1999).*

9. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, E.P. Giannelis, and B. Frick  
*4<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference Proceedings, Patras, p. 341,*  
*2003*

10. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, E.P. Giannelis, and B. Frick  
*4<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference Proceedings, Patras, p. 81,*  
*2003*

11. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, E.P. Giannelis and B. Frick,  
 "Dynamics in Intercalated Polymer-Clay Nanocomposites"  
*11th European Conference on Composite Materials May 31 - June 3, 2004 Phodes,*  
*Greece (Conference Proceedings, Vol 1/2 , p. 81)*

12. K. Karatasos  
*5<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference Proceedings, Thessaloniki,*  
*p. 285, 2005*

13. K. Karatasos  
*General Meeting 2006, APS, Baltimore, March 2006*  
*Bull. Amer. Phys. Soc. 51(1), 1574(2006).*

14. K. Karatasos  
*HPC-EUROPA Science and Supercomputing in Europe, 2005, p 719*

15. K.Karatasos  
*Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Hellenic Conference on Polymers, Patras, 2-5 November 2006,*

p. 100

16. K. Karatasos  
*HPC-EUROPA Science and Supercomputing in Europe, June 2007, pp937*
17. K. Karatasos  
3<sup>rd</sup> International Workshop on “Nanosciences & Nanotechnologies” (NN06)  
July 2006, Thessaloniki, Greece, Proceedings, pp 22
18. G.K. Dalakoglou, K. Karatasos, S. Lyulin, A. Lyulin  
6<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference Proceedings, Athens,  
p. 1269, 2007
19. G.K. Dalakoglou, K. Karatasos, S. Lyulin, A. Lyulin  
4th International Workshop on “Nanosciences & Nanotechnologies” (NN07)  
July 2007, Thessaloniki, Greece, Abstract Book, pp 136, 2007
20. G.S. Dritsas, I. Tanis, K. Karatasos, C. Panayiotou  
4th International Workshop on “Nanosciences & Nanotechnologies” (NN07)  
July 2007, Thessaloniki, Greece, Abstract Book, pp 171, 2007
21. K.Karatasos  
Soft, Complex, and Biological Matter Conference (SOCOBIM), Citta del Mare,  
Terrasini, Sicily, Italy,  
July 2007, Conference Proceedings, pp 124
22. I.Tanis and K. Karatasos  
Proceedings, XXII Panhellenic Conference in Solid State and Materials  
Science (Athens 23-26 Sep. 2007), pp 169
23. K. Karatasos, G. Dalakoglou, I. Tanis, M. Krystallis  
1st HellasGrid Forum,  
Athens, 10-11 January 2008, Book of Abstracts, p. 55-56
24. S. Lyulin, A. Lyulin, S. Larin, A. Darinskii, K. Karatasos  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece, Book of Abstracts, p.48
25. G.K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V. Lyulin, A.V. Lyulin  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece, Book of Abstracts, p.67
26. G.S. Dritsas, K. Karatasos, C. Panayiotou  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece, Book of Abstracts, p.68
27. D. Tragoudaras, I. Tanis, K. Karatasos, S. Anastasiadis  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece, Book of Abstracts, p.69
28. K. Karatasos  
6th International Symposium in Molecular Order and Mobility in Polymer Systems  
St. Petersburg, 2-6 June 2008, Russia. Book of Abstracts, L004
29. S.V. Lyulin, K. Karatasos, S.V. Larin, A.A. Darinskii, A.V. Lyulin  
6th International Symposium in Molecular Order and Mobility in Polymer Systems  
St. Petersburg, 2-6 June 2008, Russia. Book of Abstracts, P-067



30. G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V. Lyulin, A.V. Lyulin  
5<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies (N&N08)  
Thessaloniki 14-16 July 2008 , Book of Abstracts, P 39
31. K. Karatasos and M. Krystallis  
1<sup>st</sup> International Conference “From Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices  
& Nanosystems”  
Halkidiki, Greece, June 16-18, 2008
32. I.Tanis, K. Karatasos  
7<sup>th</sup> Hellenic Polymer Conference, Ioannina, September 28th - October 1st 2008  
Book of Abstracts, P. 28
33. G. S. Dritsas, I. Tanis, M. Stournara, K. Karatasos, C. Panayiotou  
7<sup>th</sup> Hellenic Polymer Conference, Ioannina, September 28th - October 1st 2008  
Book of Abstracts, P. 32
34. S. Fotiadou, D. Tragoudaras, I. Tanis, K. Chrissopoulou, K. Karatasos, B. Frick and  
S.H. Anastasiadis  
XXIV Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science  
Heraklion, Crete, September 21-24, 2008, Book of Abstracts, P. 62-63
35. K. Karatasos and M. Krystallis  
7<sup>th</sup> Panhellenic Scientific Conference in Chemical Engineering, Patras, 3-5 June 2009,  
Book of Abstracts, page
36. K. Karatasos and I. Tanis,  
6<sup>th</sup> International Dendrimer Symposium , Stockholm, June 14-18, 2009  
Electronic Abstracts, page 98
37. S. Pricl, P. Posocco, M. Fermeglia, K. Karatasos, L. Peng and D. K. Smith  
AIChE Annual Meeting, 2010, Salt Lake City, November 7-10, 2010  
<http://aicheproceedings.org/2010/Fall/?page=15933> (607g)
38. S. Pricl, P. Posocco, E. Laurini, M. Fermeglia, K. Karatasos, L. Peng and D. K.  
Smith  
NanoTechItaly 2010, Venice, October 20-22, 2010  
Book of Abstracts, page 103
39. KOSTAS KARATASOS, SABRINA PRICL , PAOLA POSOCCO,ERIK LAURINI  
**8<sup>TH</sup> HELLENIC POLYMER SOCIETY SYMPOSIUM** , HERSONISSOS CRETE, 24 – 29  
OCTOBER, 2010, BOOK OF ABSTRACTS, PAGE 15
40. K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini and S. Pricl  
8<sup>th</sup> Panhellenic Scientific Chemical Engineering Congress,  
Thessaloniki 26 - 28 May 2011, Greece, Electronic abstracts
41. K. Karatasos, I. Tanis  
9<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN12)  
3-6 July 2012, Thessaloniki, Greece, Electronic Abstracts
42. K. Karatasos, E. Eleftheriou  
9<sup>th</sup> Hellenic Polymer Society Conference  
November 20 – December 1, 2012, Thessaloniki, Greece

43. K. Karatasos  
10th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN13)  
9-12 July 2013, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, page 171
44. Chrissopoulou, K.; Fotiadou, S.; Androulaki, K.; Tanis, I.; Karatasos, K.; Prevosto, D.; Labardi, M.; Frick, B.; Anastasiadis, S. H. A.I.P. Conf. Proc. 2014, 1599, 250-253
45. K. Karatasos  
Workshop on Applications of Hybrid Interphases  
15-17 September 2014, Istanbul, Turkey  
Book of Abstracts, page 31
46. K. Karatasos  
11th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN14)  
8-11 July 2014, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, page 71
47. K. Karatasos  
*10th Hellenic Polymer Society Conference*, Patras, 4-6 December 2014, Greece  
Book of Abstracts, page 103
48. K. Karatasos and Roza-Eleftheria Roussou  
*Workshop on Nanostructured Hybrid Materials II: reinforced 3D structures, smart composites, self-healing*, 22-24 April 2015, Heraklion Crete, Greece  
Book of Abstracts, page 18
49. K. Karatasos and Roza-Eleftheria Roussou  
XXXI Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, 20-23 September 2015, Thessaloniki, Greece, Book of abstracts, page 341
50. S. Floros, M. Liakopoulou-Kyriakides, K. Karatasos and G. E. Papadopoulos  
XXXI Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, 20-23 September 2015, Thessaloniki, Greece, Book of abstracts, page 136
51. K. Karatasos  
Workshop on «Mathematical and Computational Techniques for Molecular Systems»  
Institute of Applied and Computational Mathematics, FORTH, Heraklion, Crete, Greece 16-18 September 2015, Book of Abstracts, page 1
52. Ioannis Tanis, Thomas Salez, Anthony Maggs, Kostas Karatasos  
StatPhys 2016, Lyon, July 18-22 2016  
Book of Abstracts, page 351.
53. Ioannis Tanis, Thomas Salez, Anthony Maggs, Kostas Karatasos  
Liquids@Interfaces, 17-19 October 2016, Paris, France  
Book of Abstracts, page 29
54. K. Karatasos and G. Kritikos  
11th HELLENIC POLYMER SOCIETY INTERNATIONAL CONFERENCE  
November 3-5, 2016, Heraklion, Crete, Greece  
Book of Abstracts, page 69-70
55. G. Kritikos and K. Karatasos  
11th HELLENIC POLYMER SOCIETY INTERNATIONAL CONFERENCE

November 3-5, 2016 Heraklion, Crete, Greece  
Book of Abstracts, page 155-156

56. K. Karatasos and G. Kritikos  
Eurofillers Polymer Blends 2017  
April 24-27, 2017, Hersonissos, Crete Greece  
Book of Abstracts, page 128
57. I. Tanis, T. Salez, K. Karatasos, A.C. Maggs  
11<sup>th</sup> Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017  
Electronic book of abstracts, P2-52
58. G. Kritikos and K. Karatasos  
11<sup>th</sup> Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017  
Electronic book of abstracts, O2-014
59. M. Belioka, K. Androulaki, I. Tsivintzelis, K. Chrissopoulou and K. Karatasos  
11<sup>th</sup> Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017  
Electronic book of abstracts, P2-05
60. M. Belioka, K. Androulaki, I. Tsivintzelis, K. Chrissopoulou and K. Karatasos  
14th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN17)  
4-7 July 2017, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, page 110
61. Stelios Floros, Maria Liakopoulou-Kyriakides, Kostas Karatasos and Georgios E. Papadopoulos  
14th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN17)  
4-7 July 2017, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, page 229

### Προσκεκλημένες ομιλίες

1. **"Segmental dynamics and morphology in phase separated binary polymer blends"**  
*DIELECTRICA 98, Monte de Caparica, Portugal, June 1998 (invited oral presentation)*
2. **"Short scale dynamics in Polyisobutylene"**  
Eindhoven University of Technology, The Netherlands, *June 2004 (invited seminar)*
3. **"Statics and dynamics of model dendrimers in dilute solutions : a molecular dynamics study "**  
Free University of Brussels, Physics Department, Polymer Physics Group  
*Belgium, June 2004 (invited seminar)*
4. **"Topological Aspects in Local Polymer Dynamics"**  
CECAM workshop on Simulating deformed glasses and melts: From simple liquids to polymers Organizers: A.V. Lyulin (Eindhoven), J.P. Wittmer (Strasbourg), D. Long (Paris) *CECAM, Lyon, France, 12-14 September 2005 (invited oral presentation)*
5. **"Local Dynamics and Glass Transition in Polymers: the dendrimer case"**  
*HPC-Europa, Third Translational Access and Mobility Workshop (TAM '06) , Barcelona, Spain, June 14-16, 2006 (invited oral presentation)*

6. **“Controlling Self Organization in Dendrimer Polyelectrolytes”**  
*HPC-Europa, Fourth Translational Access and Mobility Workshop (TAM ‘07),  
Bologna, June 13-15, 2007 (invited oral presentation)*
  
7. **“Electrostatically-Driven Self-Organization in Dendrimer Polyelectrolytes”**  
*6th International Symposium Molecular Order and Mobility in Polymer Systems  
June 2 - 6, 2008, St. Petersburg Russia (Invited oral presentation)*
  
8. **Glass transition in "soft colloidal" systems: the dendrimer case**  
*Workshop on “Colloidal Gels and Glasses”, (invited oral presentation)  
Crete, Aldemar Knossos Royal Village, Hersonissos, 13/6/2008*
  
9. **“Molecular Dynamics of Dendrimers”**  
*1<sup>st</sup> (ESF) International Training School in “Computer Simulation Methods of Dendrimers”  
12-14 April 2010, Eindhoven, The Netherlands (plenary talk)*
  
10. **Dendrimers and Hyperbranched Polymers: new insight from computer simulations**  
*Materials Science and Technology Department, University of Crete  
25 February 2011 (invited seminar)*
  
11. **Modeling Hyperbranched Polymers for Drug and Gene Delivery Applications**  
*8<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies 12-15 July, 2011  
Thessaloniki, Greece (invited oral presentation)*
  
12. **Computer experiments in biomedical research: dendrimers and hyperbranched systems for drug and gene delivery purposes**  
*International training school and workshop on “Dendrimers as Composites of Advanced Drug Delivery nano-Systems (aDDnSs). Biomedical Applications” October 3-7, 2011,  
Athens, Greece (invited tutorial)*
  
13. **Dendritic polymers as complexation agents for bioactive materials: a computational perspective**  
*Technical University of Eindhoven, Department of Applied Physics, March 25, 2013,  
Eindhoven, The Netherlands (invited departmental seminar)*
  
14. **Hyperbranched polymers in nano-complexes: insight from computer simulations**  
*10th Hellenic Polymer Society Conference, 4-6 December 2014, Patras, Greece  
(invited oral presentation)*
  
15. **Molecular Dynamics Simulations: a short introduction and applications in fully atomistic models of polymer-based systems for biomedical applications**  
*Workshop on «Mathematical and Computational Techniques for Molecular Systems»  
Institute of Applied and Computational Mathematics, FORTH, Heraklion, Crete, Greece  
16-18 September 2015  
(invited keynote speaker)*
  
16. **Polymer-graphene nanocomposites: a close view by molecular dynamics simulations**  
*Institute of Macromolecular Compounds, St. Petersburg, 26/1/2016 (invited seminar)*
  
17. **Graphene-based polymer nanohybrids from a computational perspective**

## **Κριτής σε περιοδικά / Προγράμματα**

### **Κριτής Διεθνών Προγραμμάτων**

Κριτής ερευνητικών προτάσεων της European Science Foundation (ESF)  
Κριτής ερευνητικών προτάσεων της Croatian Science Foundation (CSF)  
Κριτής ερευνητικών προτάσεων του National Research Council of Romania (CNCS)

### **Κριτής Εθνικών Προγραμμάτων**

Κριτής προγραμμάτων της Γενικής Γραμματείας Έρευνας και Τεχνολογίας  
Κριτής προτάσεων του Ε.Λ.Κ.Ε Πανεπιστημίου Κρήτης  
Κριτής προτάσεων Ε.Λ.Ι.Δ.Ε.Κ

### **Κριτής Διεθνών περιοδικών**

1. Macromolecules

Αναγνώριση από το περιοδικό “Macromolecules” (IF 5.9) ως κριτή, στο 25% των κορυφαίων κριτών παγκοσμίως

2. Journal of Chemical Physics, (επίσης Τελικός Κριτής (adjudicator) Άρθρων)
3. Nanotechnology
4. Macromolecular Theory & Simulations
5. Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics
6. Physica B
7. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering
8. Journal of Physics: Condensed Matter
9. J. Phys. D: Appl. Phys
10. Rheologica Acta
11. New Journal of Physics
12. European Polymer Journal
13. Journal of Organic Chemistry
14. Chemistry - A European Journal
15. Journal of Physical Chemistry B
16. Measurement Science and Technology
17. Journal of Materials Chemistry
18. Journal of Physical Chemistry Letters
19. Journal of Polymer Research
20. European Physical Journal E - Soft Matter & Biological Physics
21. Molecules
22. Polymers
23. Journal of Drug Delivery Science and Technology
24. Soft Matter
25. ACS Applied Materials & Interfaces
26. Journal of Chemical Information and Modeling
27. ACS Nano
28. Journal of Molecular Graphics and Modeling
29. Chemical Science
30. Journal of Applied Polymer Science

31. International Journal of Molecular Sciences
32. Pharmaceuticals
33. Industrial & Engineering Chemistry Research
34. Molecular Therapy
35. Applied Physics Letters
36. International Journal of Nanomedicine
37. Bioconjugate Chemistry
38. Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry
39. Analytica Chimica Acta
40. Arabian Journal of Chemistry
41. Polymer Composites
42. Current Pharmaceutical Analysis
43. Biotechnology Advances
44. Environmental Science & Technology
45. Langmuir
46. Physical Chemistry Chemical Physics
47. The Arabian Journal for Science and Engineering
48. RSC Advances
49. Journal of Theoretical Biology
50. Nanomaterials
51. Nanoscale Research Letters
52. Current Pharmaceutical Design
53. Journal of Modern Physics
54. Current Clinical Pharmacology
55. Polymer Chemistry
56. Journal of the Neurological Sciences
57. Fluid Phase Equilibria
58. Journal of Computational Science
59. Composite Structures

### **Επιστημονικά Συνέδρια**

#### **Προεδρεύων σε συνεδρίες :**

- προεδρεύων σε συνεδρία του 5<sup>ου</sup> Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, Μάιος 2005
- προεδρεύων σε συνεδρία του 6<sup>th</sup> international symposium in Molecular Order and Mobility in Polymers, St. Petersburg, 2-6 June, 2008
- προεδρεύων σε συνεδρία του 6<sup>th</sup> international Dendrimer symposium , Stockholm June 14-18, 2009
- προεδρεύων σε συνεδρία του 7<sup>ου</sup> Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Πάτρα, 3-5 Ιουνίου 2009
- προεδρεύων σε συνεδρία του 8<sup>ου</sup> Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, 26-28 Μαΐου 2011
- προεδρεύων σε συνεδρία του 10<sup>ου</sup> Πανελληνίου Συνεδρίου της Ελληνικής Εταιρίας Πολυμερών, Πάτρα, 4-6 Δεκεμβρίου 2014

- προεδρεύων σε συνεδρία του συνεδρίου εργασίας “Nanostructured Hybrid Materials II: reinforced 3D structures, smart composites, self-healing”, Ηράκλειο, 22-24 Απριλίου 2015
- προεδρεύων σε συνεδρία του 11<sup>ου</sup> Πανελληνίου Συνεδρίου της Ελληνικής Εταιρίας Πολυμερών, Ηράκλειο, 3-5 Νοεμβρίου 2016
- προεδρεύων σε συνεδρία του διεθνούς συνεδρίου «Eurofillers Polymer Blends 2017», Χερσόνησος, Κρήτη, 24-27 Απριλίου 2017
- προεδρεύων σε συνεδρία του 11<sup>ου</sup> Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, 25-27 Μαΐου 2017

#### **Διοργάνωση Συνεδρίων/Σχολείων :**

- Κύριος οργανωτής : *International Workshop*, under the auspices of the European Polymer Federation and the European Science Foundation (Funding Body) “*Hyperbranched polymers as novel materials for nanoscale applications : insight from experiment, theory and simulations (HYPER-NANO)*” May 26-28, 2008, Fodele, Grete, Greece (Προϋπολογισμός 14000€ από ESF και 5000€ από το Υπουργείο Παιδείας και Θρησκευμάτων)  
Web-site: <http://users.auth.gr/~kkaratas/workshop>  
Organizers: K.Karatasos (principal), A.V.Lyulin
- Συνδιοργανωτής : 1<sup>st</sup> International Training School “*Computer Simulation Methods for Dendrimers*” , 10-12 April 2010, Eindhoven, The Netherlands  
Organizers: A.V.Lyulin (principal), K.Karatasos (Προϋπολογισμός 40000€, χρηματοδότηση από ESF)  
Web-site:<http://physlamp.phys.tue.nl/COST/>
- Μέλος της Οργανωτικής και της Επιστημονικής επιτροπής, στο International training school and workshop on “ *Dendrimers as Composites of Advanced Drug Delivery nano-Systems (aDDnSs). Biomedical Applications*” October 3-7, 2011, Athens , Greece
- Μέλος της Οργανωτικής και της Επιστημονικής Επιτροπής του 9th Hellenic Polymer Society Conference, Θεσσαλονίκη, Νοέμβριος 2012
- Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 9th Hellenic Chemical Engineering Conference, Athens, May 23-25, 2013
- Μέλος της Οργανωτικής και της Επιστημονικής Επιτροπής του 10th Hellenic Polymer Society Conference, Πάτρα, Δεκέμβριος 2014
- Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 11th Hellenic Polymer Society Conference, Ηράκλειο, Νοέμβριος 2-5, 2016
- Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 11th Hellenic Chemical Engineering Conference, Thessaloniki, Μάιος 25-27, 2017
- Μέλος της οργανωτικής και Επιστημονικής Επιτροπής, του Διεθνούς Συνεδρίου «*Eurofillers Polymer Blends*» Απρίλιος 23-27, 2017, Κρήτη Ελλάδα

- Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 11th Hellenic Chemical Engineering Conference, Thessaloniki, May 25-27, 2017
- Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 12th Hellenic Polymer Society Conference, Ιωάννινα, Ελλάδα, 30/9-3/11 2018
- Μέλος της οργανωτικής επιτροπής του European Polymer Congress (EPF), 2019, Crete, Greece

### Συμμετοχή σε επιστημονικά συνέδρια

1. G.Fytas, S.H Anastasiadis, K.Karatasos, and N. Hadjichristidis  
**“Segmental and Chain Dynamics in Disordered Diblock Copolymers”**  
*13th General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society and The Deutsche Physikalische Gesellschaft, Μάρτιος 1993, Regensburg, Germany*
2. K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, N.Hadjichristidis, and J.E.L Roovers  
**“Dielectric Chain Relaxation in Poly(styrene-*b*-isoprene) Diblock Copolymer Melts near The Order-Disorder Transition”**  
*3rd International Discussion Meeting on Relaxation in Complex Systems, Ιούνιος 1993, Alicante, Spain*
3. K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, N.Hadjichristidis, A.N Semenov, and J.E.L Roovers  
**“Dielectric Chain Relaxation in Poly(styrene-*b*-isoprene) Diblock Copolymer Melts near The Order-Disorder Transition”**  
*6th International Symposium on Polymer Analysis and characterization, Ιούλιος 1993, Αγία Πελαγία Κρήτης, Ελλάδα*
4. S.H. Anastasiadis, K.Karatasos, G.Fytas, S.Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis, A.N Semenov, J.E.L Roovers, and T. Pakula  
**“Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers”**  
*20th National Meeting, American Chemical Society, Μάρτιος 1994, San Diego, C.A, U.S.A,*
5. K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, A.N Semenov, N.Hadjichristidis, G.Fytas, J.E.L Roovers, and T.Pakula  
**“Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers”**  
*General meeting 94, American Physical Society, Μόρτιος 1994, Pittsburgh, P.A.U.S.A. Bull. Amer. Phys. Soc. 39,696 (1994)*
6. K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, and T.Pakula  
**“Computer Simulation of the Static and Dynamic Behavior of Diblock Copolymers near The Ordering Transition”**  
*General Meeting 95, American Physical Society, Μάρτιος 1995, San Jose, C.A, U.S.A, Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 1995*
7. G.Fytas, K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, D. Vlassopoulos, G. Floudas, A.N. Semenov, S Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis, H.Watanabe, and T.Pakula  
**“Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers in the Disordered and in the Ordered State”**



*General Meeting 95, American Physical Society, Μάρτιος 1995, San Jose, C.A, U.S.A, Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 1995*

8. T.Jian, K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Fytas, K. Chrissopoulou, K. Adamczyk, A.N. Semenov, S.Pispas, M.Pitsikalis, N.Hadjichristidis, and J.E.L Roovers  
**"Relaxation of Composition Fluctuations in Diblock Copolymer Melts near the Order-Disorder Transition Investigated by Polarized Dynamic Light Scattering"**  
*General Meeting 95, American Physical Society, Μάρτιος 1995, San Jose, C.A, U.S.A, Bull. Amer. Phys. Soc. 40, 1995*
  
9. K.Karatasos, G.Floudas, G.Fytas, J.E.L Roovers  
**"Effect of Concentration Fluctuations on the Segmental Relaxation in homogeneous diblocks PIP-b-PVE"**  
*Workshop on Non Equilibrium Phenomena in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials, Pisa Fall 1995*
  
10. K. Karatasos , S.H. Anastasiadis, G. Fytas, A. N. Semenov , S. Pispas, M. Pitsikalis, N. Hadjichristidis, T. Pakula  
**"Chain relaxation in diblock copolymer melts investigated by Dielectric Spectroscopy and Monte Carlo computer simulations"**  
*Fourth mediteranean school and symposium on Science and Technology of advanced polymer based material. Fodele-Crete Greece 5-9 June 1995*
  
11. K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, G. Fytas  
*3rd Patras University Euroconference on Complex Materials, Patras ,Greece, September 22-26, 1995*
  
12. K.Karatasos, S.H Anastasiadis, F.Kremer, H. Watanabe  
**"Determination of Loops to Bridges Ratio in Triblock Copolymers by Dielectric Spectroscopy"**  
 March 96 Meeting of The American Physical Society
  
13. K.Karatasos, S.H Anastasiadis, F.Kremer, H. Watanabe  
*Nato-Asi Conference (Cambridge) March 1996 "Theoretical Challenges on Complex Systems"*
  
14. K. Karatasos, Spiros H. Anastasiadis, George Fytas Sanat K. Kumar, Ralph H. Colby  
**"Concentration Fluctuation Induced Dynamic Heterogeneities in Polymer Blends"**  
*5<sup>th</sup> European symposium on Polymer Blends, Maastricht May 1996, The Netherlands Extended Abstracts, p. 383, 1996*
  
15. K. Karatasos , S.H Anastasiadis, H.Watanabe, T. Pakula  
*XII Hellenic Conference in Solid State Physics , 15-18 September 1996*
  
16. K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, F. Kremer, H.Watanabe, T. Pakula  
**"On the Loops to Bridges Ratio in Ordered Triblock Copolymer Melts"**  
*The sixth European Polymer Federation Symposium, Crete Greece October 7-11 1996*
  
17. D. Vlassopoulos, K. Karatasos, G. Fytas, T. Pakula and J. Roovers  
**"Complex Viscoelastic Relaxation in Multiarm Star Polymers"**  
*67th Annual Meeting of the Society of Rheology, Galveston, TX, February 1997*
  
18. K. Karatasos, G. Vlachos, D. Vlassopoulos, G. Fytas, S. H. Anastasiadis  
**"Dielectric Studies on the Dynamics of Phase Separated Binary Polymer Blends"**

19. K. Karatasos , G. Vlachos, D. Vlassopoulos, G. Fytas and G. Meier  
*International Discussion on Relaxations in Complex Systems Vigo, Spain June 30 - July 11, 1997*
20. G. Fytas, G. Petekidis, D. Vlassopoulos, K. Karatasos, T. Pakula, A. N. Semenov, and J. Roovers  
**"Dynamics of Multiarm Star Polymers in the Ordering Region"** invited  
*3<sup>rd</sup> International Discussion on Relaxations in Complex Systems, Vigo, Spain June 30- July 11, 1997*
21. K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G. Vlachos, E. Manias and E. P. Giannelis  
**"Effects of confinement on the segmental dynamics"**  
*General Meeting 1998, APS, Los Angeles, March 1998*  
Bull. Amer. Phys. Soc. 43, 811 (1998).
22. K. Karatasos  
**"Segmental dynamics and morphology in phase separated binary polymer blends"**  
*Workshop, DIELECTRICA 98, Monte de Caparica, Portugal, June 1998*
23. S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
**"Confinement Effects on the Local Motion in nanocomposites"**  
*1998 Fall Meeting of the Materials Research Society, December 1998, Boston, MA, U.S.A.*
24. K. Karatasos, G. Floudas, G. Fytas, S. Kamath, R. H. Golby, S. K. Kamath and J. E. L. Roovers  
**"Component dynamics of miscible polymer blends : comparison of the predictions of a concentration fluctuation model to experiment"**  
*Polymer & Colloid 99, Advanced Study Institute, Les Houches, France, 1999*
25. K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, T. Pakula and H. Watanabe  
**"Bridges vs Loops in Ordered Triblocks : Dielectric Spectroscopy and Computer Simulations"**  
*General Meeting 1999, APS, Atlanta, March 1999, USA*  
Bull. Amer. Phys. Soc. 44, 755 (1999).
26. S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
**"Local Dynamics in Nanocomposites"**  
*International Workshop on Dynamics in Confinement, January 2000, Grenoble, France*
27. S. Hotston, K. Karatasos, and D. B. Adolf  
**"Effects of pressure and temperature on the static and dynamic properties via NPT Molecular Dynamics Simulations"**  
*General Meeting 2000, APS, Minneapolis, March 2000, USA*
28. S. H. Anastasiadis, K. Karatasos , G. Vlachos, E. Manias and E. P. Giannelis  
**"Local Dynamics Under Severe Confinement in Nanocomposites "**  
*ACS , Division of Polymeric Materials : Science and Engineering, San Francisco Spring Meeting , 2000 (invited)*  
Polym. Mater. Sci. Eng., Amer. Chem. Soc. 82, 211 (2000).
29. K. Karatasos, J-P. Ryckaert, V. Arrighi, A. Triolo  
**"Local Dynamics in PIB and aPP melts: Molecular Dynamics Simulations vs Experiment"**  
*QENS 2000, The 5<sup>th</sup> International Conference on Quasi-Elastic Neutron Scattering*

September 2000, Edinburgh, Scotland

- 30., G. Arialdi and K. Karatasos  
**“On the use of conic constraints to freeze hydrogen vibrations in full atomic simulations of polymers: local dynamics of Polypropylene and Polyisobutylene.”**  
*ESF workshop on Multiscale Modeling of Macromolecular Systems*  
 Mainz, Germany, 4-6 September 2000
31. K. Chrissopoulou, S. H. Anastasiadis, R. Krishnamoorti, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias and E. P. Giannelis  
**"Polymer Dynamics under Nanoscopic Confinement"**  
*Euroconference on Chains @ Interfaces 2001*, January 2001, Ivora, Portugal
32. K. Karatasos and J.-P. Ryckaert  
**"Local dynamics of polyisobutylene revisited"**  
*Belgian Polymer Group, General Meeting 2001*, 16-17 March, Sunparks Mol, Belgium
33. K. Karatasos, and D.B. Adolf  
**“Effect of Density on Local Segmental Polymer Dynamics: A Molecular Dynamics Study “**  
*General Meeting , American Physical Society*, March 2001, *Seattle, USA*
34. S. Hotston, D. B. Adolf and K. Karatasos  
**“An NPT molecular dynamics study simulation of the response of the local segmental dynamics of melt polyethylene to pressure as a function of temperature “**  
*General Meeting , American Physical Society*, March 2001, *Seattle, USA*
35. K. Karatasos, D.B. Adolf and G. R. Davies  
**“Dynamics of model dendrimers as studied by molecular dynamics simulations “**  
*Polymer '01 The New Polymer: Design, Development and Applications 9-11 April 2001*  
*Bath UK*
36. K. Karatasos and J.-P. Ryckaert  
*4th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems*  
**"Methyl dynamics and  $\beta$ -relaxation in polyisobutylene as studied by molecular dynamics simulations"**  
*June 17-24 2001, Hersonissos, Crete, Greece*
37. K. Karatasos and J.-P. Ryckaert  
*XVIII Hellenic Solid State and Material Science Conference, 15-18 September, 2002 Heraklion, Crete, Greece*  
**“Polyisobutylene local dynamics revisited”**
38. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, E. Giannelis and B. Frick  
*XVIII Hellenic Solid State and Material Science Conference, 15-18 September, 2002 Heraklion, Crete, Greece*  
**“Dynamics of polymeric chains under strong confinement: motion in the nanometer scale”**
39. O. Ahumada, V. Arrighi, D.B.N. Coutrot, K. Karatasos, J.-P. Ryckaert, D. Theodorou, A. Triolo  
**QENS 2002**. The 6th International Conference on Quasielastic Neutron Scattering.

4th - 7th September 2002, Potsdam - Berlin, Germany.

**"Effect of Tacticity on the Dynamics of Polypropylene Melts"**

40. K. Karatasos, J-P. Ryckaert  
Jülich Soft Matter Days 19 - 22 November 2002, Kerkrade, NL
41. Kahle, S.; Monkenbusch, M.; Richter, D.; Ryckaert, J. P.; Karatasos, K.; Koza, M.  
**Segmental dynamics in polyisobutylene: comparison between neutron scattering and computer simulations**  
Jülich Soft Matter Days 2002, Kerkrade, Niederlande, 19.11.2002 - 22.11.2002
42. Kahle, S.; Monkenbusch, M.; Richter, D.; Ryckaert, J. P.; Karatasos, K.; Koza, M.  
**Segmental dynamics in polyisobutylene: Comparison between neutron scattering and computer simulations**  
HGF Workshop Kondensierte Materie : Forschungszentrum Jülich, Jülich, 06.11.2002
43. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, E. P. Giannelis, B. Frick  
**"Dynamics under severe confinement in intercalated polymer-clay nanocomposites: Motion in the nanometer scale"**  
2nd International Workshop on 'DYNAMICS IN CONFINEMENT', January 2003, Grenoble, France
44. K. Karatasos, D. B. Adolf and G. Davies  
**"Static and dynamic properties of model dendrimers"**  
3<sup>rd</sup> Chemical Engineering Conference for Collaborative Research in Eastern Mediterranean, 13-15 May 2003, Sani, Chalkidiki
45. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, E. P. Giannelis, B. Frick  
« **Effects of strong spatial confinement in polymer chain dynamics** »  
4<sup>th</sup> Hellenic conference in Chemical Engineering, Patras, May 2003
46. Μαρράς Σ., Ζουμπουρτικούδης Ι., Καρατάσος Κ., Σικαλίδης Κ. και Παναγιώτου Κ.  
ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΩΝ ΒΙΟΠΟΙΚΟΔΟΜΗΣΙΜΩΝ ΚΑΙ ΒΙΟΣΥΜΒΑΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΜΕ ΟΡΥΚΤΑ ΤΗΣ ΑΡΓΙΛΟΥ  
XX Πανελλήνιο συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης-Επιστήμης Υλικών  
Ιωάννινα, Σεπτέμβριος 2004
47. K. Chrissopoulou, K. Karatasos, S.H. Anastasiadis, E.P. Giannelis and B. Frick,  
**"Dynamics in Intercalated Polymer-Clay Nanocomposites"**  
11th European Conference on Composite Materials May 31 - June 3 2004, Phodes, Greece  
(Conference Proceedings, Vol 1/2 , p. 81)
48. JP Ryckaert, G. Ariedi, K. Karatasos  
**"Local Dynamics in Polymer Melts : From Individual Jumps to Diffusive Coarse-Grained Dynamics"** (Invited)  
Conference on Computational Physics 2004 Genoa Italy, 1-4 September 2004
49. Ryckaert, J.-P., Ariedi G. , Karatasos K.  
**"From local dynamics to conformational diffusion in polymer melts well above Tg"**  
N2M2 Neutron and Numerical Methods 2, Institute Laue Langevin, September 2004, Grenoble, France (invited)
50. K. Karatasos

**“Statics and dynamics in model dendrimer melts: toward the glass transition”**

5<sup>th</sup> Panhellenic Scientific Conference in Chemical Engineering  
Thessaloniki, May 26-28 2005, Greece

51. K. Karatasos

**"Topological Aspects in Local Polymer Dynamics"**

CECAM workshop on Simulating deformed glasses and melts: From simple liquids to polymers Organizers: A.V. Lyulin (Eindhoven), J.P. Wittmer (Strasbourg), D. Long (Paris) *CECAM, Lyon, France, 12-14 September 2005 (invited)*

52. K. Karatasos

**"Statics and Dynamics in Model Dendrimer Melts"**

2006 APS March Meeting, March 13-17, Baltimore, Maryland, U.S.A.

53. AERC 2006, Third Annual European Rheology Conference, April 27-29, Hersonissos, Crete, 2006

54. K. Karatasos

**“Local Dynamics and Glass Transition in Polymers: the dendrimer case”**

HPC-Europa, Third Translational Access and Mobility Workshop (TAM ‘ 06) ,  
Barcelona, Spain, June 14-16, 2006 (*invited*)

55. K. Karatasos

**“Glassy Behavior in Nanoscale Dendritic Polymers”**

*3<sup>rd</sup> Workshop on Nanoscience & Nanotechnologies (N&N06), 10-12 July, 2006, Thessaloniki, Greece*

56. K. Karatasos

**“Local Scale Dynamics in Model Dendrimer Melts”**

6<sup>th</sup> Hellenic Conference on Polymers, Patras, 3-5 November 2006

57. G.K. Dalakoglou, K. Karatasos, S. Lyulin, A. Lyulin

**“Brownian Dynamics Simulations of Complexes of HYperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes”**

6<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference, Athens, May 2007

58. K. Karatasos

**“Controlling Self Organization in Dendrimer Polyelectrolytes”**

HPC-Europa, Fourth Translational Access and Mobility Workshop (TAM ‘ 07) ,  
Bologna, Italy, June 13-15, 2007 (*invited*)

59. I. Tanis, K. Karatasos

**“Atomistic molecular dynamics simulations of dendrimers and their complexes with linear polyelectrolytes”**

HPC-Europa, Fourth Translational Access and Mobility Workshop (TAM ‘ 07) ,  
Bologna, Italy, June 13-15, 2007

60. G.K. Dalakoglou, K.Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin

**“Brownian Dynamics Study of Hyperbranched Polymers and their Complexes with Linear Polyelectrolytes: Effects of Topology and Electrostatic Interactions”**

4th International Workshop on “Nanosciences & Nanotechnologies - NN07,  
July 16-18, Thessaloniki, Greece, 2007

61. G.S. Dritisas, I. Tanis, K. Karatasos, C. Panayiotou

**“Investigation of Thermodynamic Properties of a Poly(amidoamine) Dendrimer by Inverse Gas Chromatography and Computer Simulations”**  
4th International Workshop on “Nanosciences & Nanotechnologies - NN07,  
July 16-18, Thessaloniki, Greece, 2007

62. K. Karatasos  
**“Controlling self-organization in Dendrimer Polyelectrolytes”**  
Soft, Complex, and Biological Matter Conference Citta del Mare, Terrasini, Sicily  
July 2007
63. I. Tanis and K. Karatasos  
**“Atomistic molecular dynamics simulations of dendrimers and their complexes with linear polyelectrolytes”**  
XXIII Panhellenic Conference in Solid State and Materials Science,  
23-26 September 2007, Athens, Greece
64. K. Karatasos, G. Dalakoglou, I. Tanis and M. Krystallis  
**“Computer Simulations in Complex Polymeric Systems”**  
1<sup>st</sup> HellasGrid User Forum Meeting, Athens 10-11 Jan. 2008
65. S. Lyulin, A. Lyulin, S. Larin, A. Darinskii, K. Karatasos  
**“Charged dendrimers and their complexes with linear polyelectrolytes: insight from coarse-grained molecular dynamics simulations”**  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece
66. G.K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V. Lyulin, A.V. Lyulin  
**“Shear-induced effects in complexes formed by hyperbranched polymers and linear polyelectrolytes”**  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece
67. G.S. Dritsas, K. Karatasos, C. Panayiotou  
**“Investigation of thermodynamic properties of hyperbranched poly(ester amide) by inverse gas chromatography”**  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete, Greece
68. D. Tragoudaras, I. Tanis, K. Karatasos, S. Anastasiadis  
**“Molecular dynamics simulations of a hyperbranched poly(ester amide), Hybrane “**  
Hyper-Nano 2008, May 26-28, Fodele, Crete
69. K. Karatasos  
**“Electrostatically-driven self-organization in dendrimer polyelectrolytes”**  
6th International Symposium in Molecular Order and Mobility in Polymer Systems  
St. Petersburg, 2-6 June 2008, Russia.
70. S.V. Lyulin, K. Karatasos, S.V. Larin, A.A. Darinskii, A.V. Lyulin  
**“Charge inversion in complexes of hyperbranched polymers and oppositely charged linear polyelectrolytes”**  
6th International Symposium in Molecular Order and Mobility in Polymer Systems  
St. Petersburg, 2-6 June 2008, Russia.

**“Glass transition in "soft colloidal" systems: the dendrimer case”**

Workshop on “Colloidal Gels and Glasses”,

Crete, Aldemar Knossos Royal Village, Hersonissos, 13/6/2008

72. G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V. Lyulin, A.V. Lyulin  
**“Modelling of Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes in Shear Flows”**  
 5<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies (N&N08)  
 Thessaloniki 14-16 July 2008 ,
73. K. Karatasos and M. Krystallis  
**Self-Ordering in Model Dendrimer Polyelectrolytes**  
 1<sup>st</sup> International Conference “From Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices & Nanosystems”  
 Halkidiki, Greece, June 16-18, 2008
74. I.Tanis, K. Karatasos  
**Molecular dynamics of PAMAM dendrimers and their complexes with linear polymers in aqueous solutions**  
 7<sup>th</sup> Hellenic Polymer Conference, Ioannina, September 28<sup>th</sup> - October 1<sup>st</sup> 2008
75. G. S. Dritsas, I. Tanis, M. Stournara, K. Karatasos, C. Panayiotou  
**Investigation of thermodynamic properties of polyethylene glycol by inverse Gas chromatography and computer simulations**  
 7<sup>th</sup> Hellenic Polymer Conference, Ioannina, September 28<sup>th</sup> - October 1<sup>st</sup> 2008
76. S. Fotiadou, D. Tragoudaras, I. Tanis, K. Chrissopoulou, K. Karatasos, B. Frick and S.H. Anastasiadis  
**Structure and dynamics of hyperbranched polymers: A comparison between experiment and simulation**  
 XXIV Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science  
 Heraklion, Crete, September 21-24, 2008, Book of Abstracts, P. 62-63
77. Karatasos and M. Krystallis  
**STATICS AND DYNAMICS IN COULOMBIC-DRIVEN ORDERING IN MODEL DENDRIMER POLYELECTROLYTES: A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY**  
 7<sup>th</sup> Panhellenic Chemical Engineering Scientific Conference, Patras, 3-5 June 2009
78. K. Karatasos and I. Tanis  
**Complexes of Poly(amidoamine) dendrimers in aqueous solutions as studied by molecular dynamics simulations**  
 6<sup>th</sup> International Dendrimer Symposium 2009, Stockholm, Sweden, 14-18 June 2009
79. KOSTAS KARATASOS, SABRINA PRICL , PAOLA POSOCCO,ERIK LAURINI  
**A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY ON SI-RNA/TEA-PAMAM DENDRIMER COMPLEXATION**  
**8<sup>TH</sup> HELLENIC POLYMER SOCIETY SYMPOSIUM , HERSONISSOS CRETE, 24 – 29 OCTOBER, 2010**
80. S. Pricl, P. Posocco, M. Fermeglia, K. Karatasos, L. Peng and D. K. Smith  
**The Sound of Silence. Multiscale Molecular Simulations and Experiments in Developing Nanocarrier/Nucleic Acid Systems**  
 AIChE Annual Meeting, 2010, Salt Lake City, November 7-10, 2010

<http://aicheproceedings.org/2010/Fall/?page=15933>

81. S. Pricl, P. Posocco, E. Laurini, M. Fermeglia, K. Karatasos, L. Peng and D. K. Smith  
**When virtual and real meet: computational/experimental evidences for designing efficient nanovectors for siRNA/DNA delivery**  
 NanoTechItaly 2010, Venice, October 20-22, 2010
82. K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini and S. Pricl  
**Computational study of complexes of Dendrimers with siRNA for gene delivery applications**  
 8th Panhellenic Scientific Chemical Engineering Congress,  
 Thessaloniki 26 - 28 May 2011, Greece
83. K. Karatasos  
**Modeling Hyperbranched Polymers for Drug and Gene Delivery Applications**  
 8<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies 12-15 July, 2011  
 Thessaloniki, Greece
84. K. Karatasos  
**Modeling the formation of nanogels comprised by dendrimer polyelectrolytes under the influence of varying electrostatic interactions**  
 9<sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies 3-6 July, 2012  
 Thessaloniki, Greece
85. K. Karatasos  
**Modeling the Formation of Ordered Nano-Assemblies Comprised by Dendrimers and Linear Polyelectrolytes: the Role of Coulombic Interactions**  
 9th Hellenic Polymer Society Conference (Polymers 2012)  
 29 November - 1 December 2012, Thessaloniki, Greece
86. K. Karatasos  
**Self-Association and Complexation of the Anti-Cancer Drug Doxorubicin with PEGylated Hyperbranched Polyesters in an Aqueous Environment**  
 10th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN13)  
 9-12 July 2013, Thessaloniki, Greece
87. Anastasiadis, S. H.; Chrissopoulou, K.; Karatasos, K.; Fotiadou, S.; Karageorgaki, C.; Tanis, I.; Tragoudaras, D.; Frick, B.  
**Structure and dynamics of hyperbranched polymers in bulk and under nanoscopic confinement**  
*American Physical Society*, March 2013, Baltimore, MD, U.S.A.
88. Chrissopoulou, K.; Fotiadou, S.; Tanis, I.; Karatasos, K.; Frick, B.; Anastasiadis, S. H.  
**Dynamics of Dendritic Polymers in the Bulk and under Confinement**  
*European Polymer Congress 2013*, June 2013, Pisa, Italy
89. Chrissopoulou, K.; Fotiadou, S.; Androulaki, K.; Tanis, I.; Karatasos, K.; Prevosto, D.; Labardi, D.; Frick, B.; Anastasiadis, S. H.  
**Dynamics of Hyperbranched Polymers in the Bulk and Under Confinement**  
 QENS/WINS2014, May 2014, Autrans, France
90. Chrissopoulou, K.; Fotiadou, S.; Androulaki, K.; Tanis, I.; Karatasos, K.; Prevosto, D.; Labardi, M.; Frick, B.; Anastasiadis, S. H.  
**Dynamics of Dendritic Polymers Polymers in the Bulk and under Confinement**



91. K. Karatasos  
**Molecular Dynamics Simulations of Graphene/Hyperbranched-Polymer Nanocomposites**  
 11th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN14)  
 8-11 July 2014, Thessaloniki, Greece
92. K. Karatasos  
**Graphene/Polymer Nanocomposites: insight from Molecular Dynamics Simulations**  
 Workshop “Applications of Hybrid Materials Interfaces” of COST action MP1202,  
 “RATIONAL DESIGN OF HYBRID ORGANIC-INORGANIC INTERFACES: THE NEXT STEP TOWARDS ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS”  
 15-17 September 2014, Istanbul, Turkey
93. K. Karatasos  
**“Hyperbranched Polymers in Nano-Complexes: Insight from Computer Simulations”**  
*10th Hellenic Polymer Society Conference*, Patras, 4-6 December 2014, Greece
94. K. Karatasos and R.-E. Roussou  
**Characterization of the dispersion of graphene nanosheets in poly(ethylene glycol) by molecular dynamics simulations**  
 Workshop on “Nanostructured Hybrid Materials II: reinforced 3D structures, smart composites, self-healing” of COST action MP1202,  
 “RATIONAL DESIGN OF HYBRID ORGANIC-INORGANIC INTERFACES: THE NEXT STEP TOWARDS ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS”  
 22-24 April 2015, Heraklion, Crete, Greece
95. K. Karatasos and R.-E. Roussou  
**Effects of Macromolecular Architecture and Size on Polymer/Graphene Nanocomposites: Insight from Molecular Dynamics Simulations**  
 XXXI Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science  
 20-23 September 2015, Thessaloniki, Greece
96. S. Floros, M. Liakopoulou-Kyriakides, K. Karatasos and G. E. Papadopoulos  
**Dielectric study of a lysozyme solution with molecular dynamics simulations: Non thermal effects of low alternating electric fields**  
 XXXI Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science  
 20-23 September 2015, Thessaloniki, Greece
97. K. Karatasos  
**Molecular Dynamics Simulations: A short introduction and applications in fully atomistic models of polymer-based systems for biomedical applications**  
 Workshop on «Mathematical and Computational Techniques for Molecular Systems» Institute of Applied and Computational Mathematics, FORTH,  
 Heraklion, Crete, Greece 16-18 September 2015
98. Ioannis Tanis, Thomas Salez, Anthony Maggs, Kostas Karatasos  
**Static and dynamic aspects of a stepped liquid film as studied by MD simulations**  
 STATPHYS26 - PALAIS DES CONGRES - LYON 18-22 JULY 2016

99. Stelios Floros, Maria Liakopoulou-Kyriakides, Kostas Karatasos and Georgios E. Papadopoulos  
**Microwave non-thermal effects of a solvated lysozyme system: a molecular dynamics study**  
 Joint International Conference of the Hellenic Crystallographic Association and the Hellenic Society for Computational Biology and Bioinformatics  
 HeCrA-HSCBB16, October 7-9, 2016, Athens, Greece
100. K. Karatasos and G. Kritikos  
**Grapene oxide – Poly(acrylic acid) nanocomposites as studied by molecular dynamics simulations**  
*11th Hellenic Polymer Society Conference*, Heraklion, 3-5 November 2016, Greece
101. I.Tanis, T.Salez, K.Karatasos, A.C. Maggs,  
**Static and dynamic aspects of a liquid film bearing a nonconstant surface topography as studied by molecular dynamics simulation**  
 Liquids@Interfaces, 17-19 October 2016, Paris, France
102. K. Karatasos and G. Kritikos  
**Structure and Dynamics in Polymer/Graphene-based Nanocomposites as Studied by Molecular Dynamics Simulations**  
 Eurofillers Polymer Blends, 24-27 April 2017, Chersonissos, Crete, Greece
103. I. Tanis, T. Salez, K. Karatasos, A.C. Maggs  
**RELAXATION OF LIQUID FILMS BEARING A NON-CONSTANT SURFACE TOPOGRAPHY AS STUDIED BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS**  
 11th Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
 May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017
104. G. Kritikos and K. Karatasos  
**Study of poly(acrylic acid)/Graphene Oxide nanocomposites by means of molecular dynamics simulations**  
 11th Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
 May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017
105. M. Belioka, K. Androulaki, I. Tsvintzelis, K. Chrissopoulou and K. Karatasos  
**Preparation and characterization of poly(vinyl alcohol)/montmorillonite nanocomposite hydrogels**  
 11th Panhellenic Conference on Chemical Engineering  
 May 25-27, Thessaloniki, Greece, 2017
106. M. Belioka, K. Androulaki, I. Tsvintzelis, K. Chrissopoulou and K. Karatasos  
**Preparation and Characterization of Poly(Vinyl alcohol)/Na+Montmorillonite Nanocomposite Hydrogels**  
 14th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN17)  
 4-7 July 2017, Thessaloniki, Greece,
107. Stelios Floros, Maria Liakopoulou-Kyriakides, Kostas Karatasos and Georgios E. Papadopoulos  
**Dielectric properties and non thermal effects of microwaves on lysozyme studied with molecular dynamics simulations**

## Συμμετοχή σε επιστημονικά προγράμματα

### Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά προγράμματα συνεργασίας

1. Brite-Euram: “Reactive Blends : a new way for improved and recycled materials”
2. NATO’s Scientific Affairs: Science for Stability Programme
3. Brite-Euram: “Polymer Blends with optimized properties : influence of Processing and additives on phase behavior”
4. “Theoretical and Experimental Investigations of the Structure and Mobility of Polymer Networks”, INTAS Contract: 932502
5. TMR network “New routes to understanding polymer materials using experiments and realistic modeling”
5. Marie-Curie Host Fellowship for the Transfer of Knowledge (ToK) “*Colloidal Systems in Non-Ergodic States*” (COSINES),, 2006-2010
6. Πρόγραμμα COST της European Science Foundation (TD0802) “*Biomedical applications of Dendrimers*” (2009-2013) ( Εκπρόσωπος της Ελλάδας στο Management Committee)
7. Πρόγραμμα COST της European Science Foundation (MP1202) “*Rational Design of Hybrid Organic-Inorganic Interfaces: the next step towards Advanced Functional Materials*” 2013-2016

### Συμμετοχή σε άλλα επιστημονικά προγράμματα

1. Μικροπορώδη Σύνθετα Υλικά Βιοπολυμερών – Υδροξυαπατίτη για την Κατασκευή Υποκατάστατων Οστών και την Ελεγχόμενη Απελευθέρωση Φαρμακευτικών Ουσιών. ΥΠΕΠΘ, ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ Ι 2004
2. Μελέτη Νανοσυστημάτων Υπερδιακλαδισμένων Πολυμερών και Συμπλεγμάτων τους με Πολυηλεκτρολύτες, ως Παράγοντες Ενίσχυσης της Διαλυτότητας και Οχήματα Ελεγχόμενης Δέσμευσης/Αποδέσμευσης Φαρμάκων ή Βιοϋλικών. ΠΕΝΕΔ 2003, ΓΓΕΤ, 2005-2008 (ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ, Προϋπολογισμός 198000€)
3. Χρηματοδότηση από το Υπουργείο Παιδείας και Θρησκευμάτων (2008) ποσού 5000€ για τη διοργάνωση διεθνούς συνεδρίου συνεργασίας (HYPER-NANO 2008)
4. HPC-EUROPA project (RII3-CT-2003-506079) “**Topological Aspects of Polymer Glass Transition**”, with the support of the European Community - Research Infrastructure Action under the FP6 "Structuring the European Research Area" Programme (15000 CPU Hours - COMPUTER TIME GRANT, SARA Supercomputing Center, Amsterdam, The Netherlands) (ΠΡΟΣΩΠΙΚΗ ΕΠΙΧΟΡΗΓΗΣΗ) 2005
5. HPC-EUROPA project (RII3-CT-2003-506079) “*Controlling self-organization in Dendrimer Polyelectrolytes*”, with the support of the European Community - Research Infrastructure Action under the FP6 "Structuring the European Research Area" Programme (20000 CPU Hours, Edinburgh Supercomputing Center, Edinburgh, England - COMPUTER TIME GRANT) (ΠΡΟΣΩΠΙΚΗ ΕΠΙΧΟΡΗΓΗΣΗ) 2007
6. HPC-Europa 2 project, funded by the European Commission - DG Research in the 7<sup>th</sup> Framework Programme ( Grant agreement n° 228398) (100000 CPU Hours, COMPUTER

TIME GRANT , CINECA Supercomputing Center, Bologna, Italy) “A *fully atomistic molecular dynamics study of dendrimer/gene complexation in aqueous environment*” (ΠΡΟΣΩΠΙΚΗ ΕΠΙΧΟΡΗΓΗΣΗ) 2010

7. HPC-Europa 2 project, funded by the European Commission - DG Research in the 7<sup>th</sup> Framework Programme ( Grant agreement n° 228398) (150000 CPU Hours, COMPUTER TIME GRANT , CINECA Supercomputing Center, Bologna, Italy) « *Study of a novel polymer-based nanocarrier for the anticancer drug doxorubicin* » 2012

8. “*High performance nanocomposite materials: Reinforcement of polymers with advanced carbon and silica nanostructures*” “THALIS” ΕΣΠΑ 2010-2013 (εγκρίθηκε, συμμετοχή σε κύρια ομάδα, συντονιστής : Δρ. Κ. Τριανταφυλλίδης, Τμήμα Χημείας, Α.Π.Θ.)

9. “*NANO4HEALTH*” Standard HPC Grant 2012, CINECA Supercomputing Center, Bologna, Italy (March 2012 – March 2013) (coordinator: Prof. S. Pricl, University of Trieste, Dept. of Engineering and Architecture).

10. “*HERON-A : Hierarchical in-silico EngineRing of Optimized vectors for Nanomedical Applications* “ (coordinator, ISCRA C project, CINECA Supercomputing Center, Bologna, Italy, March 2013-March 2014)

11. “*Νανοπηκτές (nanogels) στην αναγεννητική ιατρική - οι μη επεμβατικές εφαρμογές τους στην εμβιομηχανική ιστών*” 1/1/2014-31/12/2014, (μέλος της ερευνητικής ομάδας) , Ίδρυμα Λάτση, προϋπολογισμός:12000€

12. “*GOPOLY*”, Molecular dynamics simulations of conductive hydrogels based on graphite oxide and poly(acrylic acid) (coordinator, 1500000 CPU hours computing time, ARIS Hellenic Supercomputing Center, Athens, 1/6/2016-1/6/2017)

14. “*NANOGRAPH*” Statics, dynamics and interfacial phenomena in polymer/Graphene-based nanocomposites (member of a collaborative team, 4000000 CPU hours computing time, ARIS Hellenic Supercomputing Center, Athens, 17/2/2017-now)

15. “*DENDRIGO*” Graphene oxide/dendrimer polyelectrolyte membranes:effects of dendrimer generation in their physical properties (coordinator, 1750000 CPU hours computing time, ARIS Hellenic Supercomputing Center, Athens, 2018)

16. «*NY2Π*» Καινοτόμοι Νάνο-ΥπερΠαραμαγνητικοί Πλοοδηγητές (NY2Πς) Ριβονουκλεοπρωτεϊνών για την εξατομικευμένη θεραπεία του καρκίνου του μαστού, «Ευρενώ-Δημιουργώ-Καινοτομώ, ΕΠΑνΕΚ 2014-2020», Κωδικός πρότασης Τ1ΕΔΚ-02775, 2018-2021, μέλος της ερευνητικής ομάδας

17. «*Αroma distil*» Αξιοποίηση αρωματικών και φαρμακευτικών φυτών της Ελληνικής χλωρίδας, «Ευρενώ-Δημιουργώ-Καινοτομώ, ΕΠΑνΕΚ 2014-2020», Κωδικός πρότασης Τ1ΕΔΚ-04174, 2018-2021, μέλος της ερευνητικής ομάδας

## Αναφορές

### Ειδικές Αναφορές

#### 1. Η εργασία

**"Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers. II Disordered State in the proximity to the ODT and Ordered State"**  
*Macromolecules* **29**, 1326 (1996)

αναφέρεται στο βιβλίο "*Block Copolymers: Synthetic Strategies, Physical Properties, and Applications*" των N. Hadjichristidis, S. Pispas and G. Floudas, Wiley Interscience 2003 όπου παρουσιάζεται εικόνα (Fig. 20.9) βασισμένη στα αποτελέσματα της παραπάνω εργασίας, ενώ αναφέρεται και στο βιβλίο "*Simulation Methods for Polymers*" (M. Kotelyanskii and D. N. Theodorou Eds, Dekker, New York 2004) (αναφορά 41, Κεφ. 5 )

#### 2. Η εργασία

**"Statics and Dynamics of model dendrimers as studied by molecular dynamics simulations"**  
*J. Chem. Phys.* **115**, 5310 (2001)

αναφέρεται στο άρθρο ανασκόπησης (Review) Pethrick RA "**Molecular motion in polymer systems**" CURR OPIN SOLID ST M 6 (3): 221-225 JUN 2002 και χαρακτηρίζεται ως "*of outstanding interest*" για το συγκεκριμένο ερευνητικό πεδίο

Αναφέρεται επίσης ως μια από τις εξέχουσες εργασίες στο πεδίο των μοριακών προσομοιώσεων των δένδριμερών, στο βιβλίο "**Dendrimer-Based Nanomedicine**" (ed. I. J. Majoros and J. R. Baker JR, Pan Stanford Publishing: Singapore, 2008; ) σελ 334.

#### 3. Ειδική μνεία γίνεται για τις εργασίες

**"Effects of density on the local dynamics and conformational statistics in polyethylene: a Molecular Dynamics Study"**  
*J. Chem. Phys.* (2000) **112**(19), 8695, (2000)

**"Slow modes in local polymer dynamics"**  
*J. Chem. Phys. (Communication)* **112**(19), 8225, (2000)

από το άρθρο ανασκόπησης *Molecular Simulation*, 2002 Vol. **28** (5), pp. 385–471 των W. SMITH, C.W. YONG and P.M. RODGER , όπου αφιερώνονται 4 σελίδες στην περιγραφή των αποτελεσμάτων των εργασιών αυτών (δείχνεται αυτούσια εικόνα , η Fig. 5. ) ενώ σημειώνεται

*"Overall the work of Karatasos et al. represents a revealing example of what MD can provide in understanding molecular processes."*

#### 4. Για την απήχηση της εργασίας

**"Nanoscale confinement effects on local dynamics"**  
*Phys. Rev. Lett.*, **84**(5), 915 (2000)

έγινε ειδική αναφορά από το Science Citation Index σημειώνοντας

“..the number of citations your article received places it in the top 1% within its field according to Essential Science Indicators. Your work is highly influential, and is making a significant impact among your colleagues in your field of study”

ενώ αφιερώνεται και ειδική παράγραφος στο βιβλίο “*Physical Properties of Polymers*” page 75, Cambridge University Press, 2003

#### 5. Η εργασία

##### **Computer simulation of static and dynamic behavior of diblock copolymer melts**

Pakula T, Karatasos K, Anastasiadis SH, Fytas G

*MACROMOLECULES* 30 (26): 8463-8472 DEC 29 1997

αναφέρεται εκτενώς στο Κεφ. 5 “*Simulations on the completely occupied Lattice*” στην παράγραφο “**C. Block Copolymers**” (σελ 175) του βιβλίου “*Simulation Methods for Polymers*” (M. Kotelyanskii and D. N. Theodorou Eds, Dekker, New York 2004) (αναφορά 38) , όπου και δείχνεται η εικόνα 1 της εργασίας (εικ. 6 του Κεφαλαίου) καθώς και μέρος της εικόνας 6 της εργασίας (εικ. 7 του Κεφαλαίου)

#### 6. Η εργασία

##### **On the loops-to-bridges ratio in ordered triblock copolymers: An investigation by dielectric relaxation spectroscopy and computer simulations**

Karatasos K, Anastasiadis SH, Pakula T, et al.

*MACROMOLECULES* 33 (2): 523-541 JAN 25 2000

αναφέρεται επανειλημμένα στο βιβλίο “*Development in Block Copolymer Science and Technology*” (John Wiley & Sons, 2004, I. Hamley) ενώ κάποια από τα αποτελέσματα αυτής παρουσιάζονται ως τα πλέον αποδεκτά

#### 7. Η εργασία

##### **"Non-Gaussian nature of Glassy Dynamics by Cage-to-Cage Motion"**

B. Vorselaars, A.V. Lyulin, K. Karatasos and M. A. J. Michels

*Physical Review E* **75**, 011504 (2007)

επιλέχθηκε να εμφανιστεί στο ηλεκτρονικό περιοδικό *Virtual Journal of Biological Physics Research* στον τομέα **FUNDAMENTAL POLYMER STATICS/DYNAMICS**. Παρατίθεται μέρος από την ηλεκτρονική επιστολή του εκδότη :

«We are pleased to inform you that your article, "Non-Gaussian nature of glassy dynamics by cage to cage motion," published in *Physical Review E* 75, 011504 (2007), has been selected for the February 1, 2007 issue of **Virtual Journal of Biological Physics Research**. The Virtual Journal, which is published by the American Physical Society and the American Institute of Physics in cooperation with numerous other societies and publishers, is an edited compilation of links to articles from..»

#### 8. Η εργασία “**Effects of Topology and Size on Statics and Dynamics of Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes**”

*Journal of Chemical Physics*, Art. No. 214903 (2007)

G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin

Επιλέχθηκε για επαναδημοσίευση σε 2 ηλεκτρονικά περιοδικά

A) «We are pleased to inform you that your article, "Effects of topology and size on statics and dynamics of complexes of hyperbranched polymers with linear polyelectrolytes," published in *The Journal of Chemical Physics* 127, 214903 (2007), has been selected for the December 24, 2007 issue of **Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology**. The Virtual Journal, which is published by the American Institute of Physics and the American Physical Society in cooperation

with numerous other societies and publishers, is an edited compilation of links to articles from participating publishers, covering a focused area of frontier research. You can access the Virtual Journal at <http://www.vjnano.org> – thank you for your contribution.»

B) «We are pleased to inform you that your article, "Effects of topology and size on statics and dynamics of complexes of hyperbranched polymers with linear polyelectrolytes," published in *The Journal of Chemical Physics* 127, 214903 (2007), has been selected for the December 15, 2007 issue of **Virtual Journal of Biological Physics Research**. The Virtual Journal, which is published by the American Physical Society and the American Institute of Physics in cooperation with numerous other societies and publishers, is an edited compilation of links to articles from participating publishers, covering a focused area of frontier research. You can access the Virtual Journal at <http://www.vjbio.org> -- thank you for your contribution.»

9. Τα αποτελέσματα της συνεργασίας σε πανευρωπαϊκό επίπεδο στα πλαίσια του συνεδρίου εργασίας HYPER-NANO 2008 (Κ. Καρατάσος, Κύριος οργανωτής) αποτέλεσαν ειδική δημοσίευση στην ιστοσελίδα της European Science Foundation [www.esf.org](http://www.esf.org). (24 Οκτωβρίου 2008) με τίτλο «*New molecules with many branches will help unleash potential of nanotechnology*» το οποίο αναδημοσιεύτηκε σε πολλές επιστημονικές ιστοσελίδες με θέμα την νανοτεχνολογία ([http://www.esf.org/research-areas/physical-and-engineering-sciences/news/ext-news-singleview.html?tx\\_ttnews\[pointer\]=1&tx\\_ttnews\[tt\\_news\]=510&tx\\_ttnews\[backPid\]=28&chash=6861dc8f5c](http://www.esf.org/research-areas/physical-and-engineering-sciences/news/ext-news-singleview.html?tx_ttnews[pointer]=1&tx_ttnews[tt_news]=510&tx_ttnews[backPid]=28&chash=6861dc8f5c))

10. Το HYPER-NANO 2008 επιλέχθηκε ανάμεσα από όλα τα άλλα Exploratory Workshops που χρηματοδοτήθηκαν από την ESF (τυπικά 50 κάθε χρόνο σε όλη την Ευρώπη), για να περιληφθεί στην έκδοση των “ESF-Highlights-2008” στην οποία τονίζεται η σπουδαιότητα των συμπερασμάτων του σε Πανευρωπαϊκό επίπεδο.

[http://www.esf.org/index.php?eID=tx\\_nawsecuredl&u=0&file=fileadmin/be\\_user/research\\_areas/PESC/Documents/Highlights/Highlights-08.pdf&t=1302691496&hash=781f4d495a5d85fd4c108aa926e2fc](http://www.esf.org/index.php?eID=tx_nawsecuredl&u=0&file=fileadmin/be_user/research_areas/PESC/Documents/Highlights/Highlights-08.pdf&t=1302691496&hash=781f4d495a5d85fd4c108aa926e2fc)

11. Η εργασία “**Dynamics of counterions in Dendrimer Polyelectrolyte Solutions**”

K. Karatasos and M. Krystallis

*Journal of Chemical Physics* **2009**, 130, 114903

επιλέχθηκε για αναδημοσίευση στο περιοδικό **Virtual Journal of Biological Physics Research** “We are pleased to inform you that your article, "Dynamics of counterions in dendrimer polyelectrolyte solutions," published in *The Journal of Chemical Physics* 130, 114903 (2009), has been selected for the April 1, 2009 issue of **Virtual Journal of Biological Physics Research**. The Virtual Journal, which is published by the American Physical Society and the American Institute of Physics in cooperation with numerous other societies and publishers, is an edited compilation of links to articles from participating publishers, covering a focused area of frontier research. You can access the Virtual Journal at <http://www.vjbio.org> -- thank you for your contribution”

12. Ειδική μνεία της εργασίας «**Association of a weakly acidic anti-inflammatory drug (ibuprofen) with a poly(amidoamine) dendrimer as studied by molecular dynamics simulations**» Tanis I and Karatasos K. *J. Phys. Chem. B* 2009;113:10984-10993. γίνεται στο βιβλίο *Dendrimer-Based Drug Delivery Systems: From Theory to Practice*, Yiyun Cheng, Ed., John Wiley & Sons Ltd 2012, ISBN: 9780470460054, όπου στη σελίδα 115 αναπαράγεται εικόνα από την παραπάνω δημοσίευση (εικ. 3.22) και αφιερώνεται ειδική παράγραφος με τα συμπεράσματα αλλά και την ευρύτερη σημασία αυτών στην μεταφορά και αποδέσμευση φαρμάκων από δενδριμερή

13. Στο άρθρο ανασκόπησης «Jain, V.; Bharatam, P. V., **Pharmacoinformatic approaches to understand complexation of dendrimeric nanoparticles with drugs**. *Nanoscale* **2013**, DOI: 10.1039/C3NR05400D» αφιερώνονται 2 σελίδες και αναπαράγονται 2 εικόνες (εικόνες 11 και 12) στα αποτελέσματα της εργασίας «**Association of a weakly acidic anti-inflammatory drug (ibuprofen) with a poly(amidoamine) dendrimer as studied by**

**molecular dynamics simulations»** Tanis I and Karatasos K. J. Phys. Chem. B 2009;113:10984-10993, όπου συζητούνται οι μηχανισμοί πρόσδεσης φαρμάκων σε δενδριτικά μόρια

**H-Factor** : (Scopus) 23, (Google Scholar) 25

**Αριθμός αναφορών από βιβλία (Πηγές : books.google.com) : 75**

**Αριθμός αναφορών από άρθρα περιοδικών (Πηγές : ISI Web of Science)**

Συνολικός αριθμός αναφορών (citations) από περιοδικά (τελευταία ενημέρωση 2/18): > **1470**

Συνολικός αριθμός ετεροαναφορών (non-self citations) από περιοδικά : > **1300**

**Πίνακας με τους παράγοντες απήχησης των περιοδικών όπου έγιναν οι δημοσιεύσεις**

Περιοδικό	Παράγοντας απήχησης (2014)	Αριθμός δημοσιεύσεων
Astron. & Astrophysics	4.378	1
J. Chem. Phys.	2.952	11
Macromolecules	5.800	15
Macr. Th. Simulation	1.667	1
Molecular Simulation	1.133	1
Europhysics Letters (EPL)	2.095	1
Physical Review E	2.288	1
Physical Review Letters	7.512	1
Physica B (cond. matter)	1.319	1
Soft Matter	4.029	2
Materials Science & Eng. B.	2.169	1
Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics	3.830	1
Physica Scripta	1.126	1
Macromolecular Symposia	0.913 (IF. 2006)	2
Physical Chemistry Chemical Physics	4.493	2
Journal of Chromatography A	4.169	1
Journal of Physical Chemistry B	3.302	3
Macromolecular Bioscience	3.851	1
International Journal of Pharmaceutics	3.650	1
Polymers-BASEL	3.681	1
Current Medicinal Chemistry	3.853	1
European Biophysics Journal with Biophysics Letters	2.219	1
Materials & Design	3.501	1
RSC Advances	3.840	1



## **Συνοπτικό υπόμνημα των δημοσιευμένων ερευνητικών εργασιών**

### **Περιγραφή της ερευνητικής εργασίας στα πλαίσια της Διδακτορικής Διατριβής**

Τα κύρια σημεία συνεισφοράς της διατριβής αφορούν την κατανόηση της σχέσης Δυναμική-Θερμοδυναμική κατάσταση-Μορφολογία σε ορισμένες κατηγορίες συσταδικών συμπολυμερών (copolymers), πολυμερικών μειγμάτων (blends), και συνθέτων (composites). Επίσης μελετήθηκε η δυναμική και τα μορφολογικά χαρακτηριστικά πολυμερικών υλικών ειδικού τύπου (αστεροειδή) στην κατάσταση τήγματος.

Παρακάτω δίνονται λεπτομέρειες για τις επί μέρους θεματικές ενότητες στις οποίες μπορεί να χωριστεί η διατριβή

#### **A) Συσταδικά συμπολυμερή**

Περιγράφηκε η δυναμική συμπεριφορά στα τήγματα δισυσταδικών συμπολυμερών σε μια ευρεία περιοχή της θερμοδυναμικής τους κατάστασης. Η ομογενής περιοχή, περιγράφηκε παίρνοντας υπόψη τις διακυμάνσεις στη σύσταση τόσο εξαιτίας της προσέγγισης στην περιοχή Μετάβασης Τάξης-Αταξίας (ODT), όσο και λόγω της διαφοράς στην τοπική δυναμική των συστατικών τους. Στην περιοχή κοντά στην μετάβαση τάξης, αλλά και μετά τον μικροφασικό διαχωρισμό, παρατηρήθηκαν και αναγνωρίστηκαν νέοι τρόποι χαλάρωσης στην δυναμική των αλυσίδων, ενώ δείχτηκε και η αλληλοεξάρτηση των χαρακτηριστικών της δυναμικής από τα ειδικά μορφολογικά χαρακτηριστικά της σχηματιζόμενης μικροδομής, στην κατάσταση τάξης. Για την ανάλυση των συχνά πολύπλοκων φασμάτων, αναπτύχθηκε μια νέα μεθοδολογία μέσω της οποίας κατέστη δυνατός ο υπολογισμός της κατανομής των χαρακτηριστικών τρόπων χαλάρωσης, παρακάμπτοντας έτσι την επιστράτευση καθαρά εμπειρικών (και συχνά ανεπαρκών) παλαιότερων μεθόδων.

Μέσω προσομοιώσεων Monte Carlo με τον αλγόριθμο CMA (Cooperative Motion Algorithm), έγινε η συστηματική μελέτη στατικών και δυναμικών ιδιοτήτων μοντέλων δισυσταδικών συμπολυμερών, σε ολόκληρη την θερμοδυναμική περιοχή στην κατάσταση τήγματος, τα αποτελέσματα της οποίας συγκρίθηκαν με επιτυχία με τα πειράματα.

#### **Σχετικές δημοσιεύσεις:**

- **"Local and Global Chain Dynamics in Diblock Copolymer Melts"**  
G .Fytas, S.H. Anastasiadis, K.Karatasos, and N. Hadjichristidis  
*Physica Scripta*, **T49**, 237 (1993)
- **"Composition Fluctuation effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers. I Weak Segregation Regime"**  
K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G.Fytas, A. N. Semenov, M. Pitsikalis, and N. Hadjichristidis  
*Macromolecules* **27**, 3543 (1994)
- **"Composition Fluctuation Effects on Dielectric Normal Mode Relaxation in Diblock Copolymers.II Disordered State in the proximity to the ODT and Ordered State"**  
K.Karatasos, S.H. Anastasiadis, G.Floudas, G.Fytas, S.Pispas, N. Hadjichristidis, T. Pakula  
Karatasos K.

*Macromolecules* ,**29**, 1326, (1996)

- **"Computer Simulation of the Static and Dynamic Behavior of Diblock Copolymer Melts"**

T. Pakula, K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, G. Fytas  
*Macromolecules* , **30**, 8463 (1997)

Στο πλαίσιο της προσπάθειας για την εξαγωγή πληροφορίας σχετιζόμενης με τα μορφολογικά χαρακτηριστικά στην κατάσταση τάξης από δυναμικές μελέτες, εξετάστηκε ένα ειδικά για τον σκοπό αυτό κατασκευασμένο σύστημα, συμμετρικού τρισυσταδικού συμπολυμερούς σε συνδυασμό με το ομόλογο δισυσταδικό συμπολυμερές του, τόσο πειραματικά όσο και με Monte Carlo (CMA) προσομοιώσεις. Ερευνήθηκε η σχέση των χαρακτηριστικών της μικροδομής (φυλλώδης δομή στην συγκεκριμένη περίπτωση ) και των διαφορετικών διαμορφώσεων (βρόγχοι ή γέφυρες) στην δυναμική των αλυσίδων, ενώ έγινε και υπολογισμός του (σημαντικού στον καθορισμό πολλών μακροσκοπικών ιδιοτήτων) σχετικού ποσοστού των γεφυρών και βρόγχων, με αποτελέσματα πολύ κοντά στις θεωρητικές προβλέψεις.

Σχετική δημοσίευση :

- **"On the Loops to Bridges Ratio in Ordered Triblock Copolymers: An investigation by Dielectric Relaxation Spectroscopy and Computer Simulations"**

K. Karatasos, S. H. Anastasiadis, H. Watanabe and T. Pakula  
*Macromolecules*, **33**, 523 (2000)

#### B) Δισυσταδικά πολυμερικά μείγματα

Στην ομογενή περιοχή (περιοχή ανάμειξης), εξετάστηκε η σχέση ειδικών θερμοδυναμικών χαρακτηριστικών των συστατικών πολυμερών (όπως η διαφορά στην χαρακτηριστική θερμοκρασία της υαλώδους μετάπτωσης) με την πειραματικά παρατηρηθείσα *δυναμική ανομοιογένεια* σε τοπική κλίμακα, και παρουσιάστηκε ένα θεωρητικό μοντέλο για την περιγραφή αυτού του φαινομένου.

Σχετική δημοσίευση :

- **"Segmental Dynamics of Miscible PI/PVE Blends: Comparison of the Predictions of a Concentration Fluctuation Model to Experiment"**

S. Kamath, R. H. Colby, S. K. Kumar, K. Karatasos, G. Floudas, G. Fytas, J. Roovers  
*Journal of Chem. Phys.*, **111**, 6121 (1999)

Στην περιοχή κοντά στον μακροφασικό διαχωρισμό μελετήθηκε ο μηχανισμός της πολλαπλής σκέδασης λόγω των ισχυρών διακυμάνσεων στην σύσταση σε διαφορετικά πολυμερικά μείγματα., σε συνάρτηση τόσο των ειδικών χαρακτηριστικών των συστατικών (όπως το μοριακό βάρος και η ενυπάρχουσα οπτική ανισοτροπία), όσο και της ιδιαίτερης θερμοδυναμικής κατάστασης (απόσταση από το κρίσιμο σημείο διαχωρισμού) του κάθε μείγματος.. Επιχειρήθηκε η θεωρητική (αναλυτική και αριθμητική) περιγραφή του φαινομένου, τα αποτελέσματα της οποίας συγκρίθηκαν με επιτυχία με το πείραμα.

Σχετική δημοσίευση :

- **"Depolarized light scattering from critical polymer blends"**

A.N. Semenov, A.E. Likhtman, D. Vlassopoulos, K. Karatasos, G. Fytas  
*Macromolecular Theory and Simulation* **8**(3), 179 (1999)

Στην κατάσταση των δύο φάσεων, παρουσιάστηκε μια συστηματική μελέτη σε τήγματα δυσσταδικών πολυμερικών μείγμάτων, τόσο τύπου UCST (Upper Critical Solution Temperature), όσο και τύπου LCST (Lower Critical Solution Temperature) και περιγράφηκε πώς, μέσω της μελέτης της δυναμικής σε τοπική κλίμακα είναι δυνατόν, να γίνει μια λεπτομερής περιγραφή των χαρακτηριστικών των δύο φάσεων, δίνοντας πληροφορία, για την θερμοδυναμική κατάσταση του μείγματος και για την εξάρτηση της σχετιζόμενης μορφολογίας από τα ειδικά χαρακτηριστικά του μείγματος και των συστατικών του.

Σχετική δημοσίευση :

- **"Segmental dynamics and incompatibility in Hard/Soft Binary Polymer Blends"**  
K. Karatasos, G. Vlachos, D. Vlassopoulos, G. Fytas, G. Meier, A. Du Chesne  
*Journal of Chem. Phys.*, **108**, 5997 (1998)

Γ) Αστεροειδή πολυμερή

Μελετήθηκε η στατική και δυναμική συμπεριφορά τηγμάτων αστεροειδών πολυμερών με μεγάλο αριθμό βραχιόνων (arms), τόσο πειραματικά (σκέδαση ακτίνων X και ρεολογικές μετρήσεις) όσο και με Monte Carlo προσομοιώσεις. Δείχτηκε ότι τα συστήματα αυτά αυτοοργανώνονται σε μια μορφή "χαλαρής τάξης" (liquid-like ordering) επιδεικνύοντας χαρακτηριστικά απλών υγρών αλλά σε μακρομοριακή πλέον κλίμακα.

Σχετική δημοσίευση

- **"Ordering and viscoelastic relaxation in multiarm star polymer melts"**  
D. Vlassopoulos, T. Pakula, G. Fytas, J. Roovers, K. Karatasos, N. Hadjichristidis  
*Europhysics Letters*, **39**, 617(1997)

**Περιγραφή της ερευνητικής εργασίας σε μεταδιδακτορικό στάδιο**

A) Συνεργασία με Ι.Τ.Ε. - ΙΗΔΛ

Σύνθετα υλικά

Στον τομέα των συνθέτων υλικών μελετήθηκαν οι επιπτώσεις στην τοπικής κλίμακας δυναμική συμπεριφορά., πολυμερικών αλυσίδων σε συνθήκες περιορισμένης γεωμετρίας. Οι διαστάσεις περιορισμού ήταν της τάξης των 1.5 έως 2 nm. Βρέθηκε ότι ο νανοσκοπικός περιορισμός επέφερε σημαντικές αλλαγές στην δυναμική συμπεριφορά. Συγκεκριμένα ανιχνεύτηκε ένας νέος τρόπος δυναμικής χαλάρωσης, χαρακτηριστικής χρονικής κλίμακας πολύ μικρότερης, και εξάρτησης από την θερμοκρασία πολύ διαφορετικής από την αντίστοιχη της τοπικής κίνησης του μη περιορισμένου υλικού, προσφέροντας έτσι νέες προοπτικές για την κατανόηση θερμοδυναμικών και μικρορεολογικών ιδιοτήτων τεχνολογικά σημαντικών συστημάτων που βρίσκονται υπό παρόμοιες συνθήκες (όπως στην περίπτωση πολυμερικών υλικών σε λεπτά υμένια –films- )

Σχετικές δημοσιεύσεις

- **"Nanoscale confinement effects on local dynamics"**  
S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, E. P. Giannelis  
*Phys. Rev. Lett.*, **84**(5), 915 (2000)

- MRS PROCEEDINGS:

**"Confinement Effects on the Local Motion in Nanocomposites"**

S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
 In "*Dynamics in Small Confining Systems IV*", J. M. Drake, G. S. Grest, J. Klafter,  
 and R. Kopelman, Eds.,  
 Materials Research Society Symposium Proceedings  
 Vol. **543**, 125-130, Pittsburgh, PA, (1999).

- S. H. Anastasiadis, K. Karatasos, G. Vlachos, E. Manias, and E. P. Giannelis  
**"Local Dynamics under Severe Confinement in Nanocomposites"**  
*Polym. Mater. Sci. Eng., Amer. Chem. Soc.* **82**, 211 (2000)

B) Πανεπιστήμιο Leeds, Dept. of Physics and Astronomy, and IRC in Polymer Science and Technology, Leeds, UK (Νοέμβριος 1997 – Μάρτιος 2000)

Το γενικότερο πλαίσιο της εργασίας που πραγματοποιήθηκε στο Πανεπιστήμιο του Leeds και το IRC ήταν η λεπτομερής μελέτη στατικών και δυναμικών ιδιοτήτων πολυμερικών συστημάτων χρησιμοποιώντας προσομοιώσεις με την τεχνική της Μοριακής Δυναμικής.

i) *Γραμμικά πολυμερικά συστήματα :*

Το πρώτο μέρος της ερευνητικής προσπάθειας επικεντρώθηκε στον σκοπό της βαθύτερης κατανόησης της στατικής και δυναμικής συμπεριφοράς στην τοπική κλίμακα του ενός μονομερούς και/η της μιας στατιστικής μονάδας σε γραμμικά πολυμερικά μοντέλα. Με την ανάπτυξη μιας νέας μεθόδου δημιουργίας αρχικών διαμορφώσεων πολυμερικών δειγμάτων, κατέστη δυνατή η παραγωγή χαλαρωμένων (τόσο στην τοπική όσο και στην κλίμακα ολόκληρης της αλυσίδας) τηγμάτων πολυμερικών αλυσίδων διαφόρων μεγεθών, και σε διάφορες πυκνότητες. Εξετάστηκε η εξάρτηση της στατιστικής των μοριακών διαμορφώσεων από τα ιδιαίτερα μορφολογικά χαρακτηριστικά του μονομερούς αλλά και από την παραμετροποίηση της μεθόδου προσομοίωσης. Ερευνήθηκε με λεπτομέρεια η επίδραση ενδομοριακών (διαφορετικά μοριακά βάρη) και διαμοριακών (μεταβολή της πυκνότητας) παραγόντων στην δυναμική συμπεριφορά σε τοπική κλίμακα, ενώ έγινε για πρώτη φορά, μια ακριβέστερη περιγραφή των εμφανιζόμενων διαδικασιών χαλάρωσης. Η ανάλυση αυτή είχε σαν αποτέλεσμα την καλύτερη κατανόηση της συνεισφοράς αργών μηχανισμών κίνησης στον επαναπροσανατολισμό (reorientation) μερών της αλυσίδας, χαρακτηριστικού μήκους της τάξης της μιας στατιστικής μονάδας, βοηθώντας στην ερμηνεία προσφάτων πειραμάτων Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR) σε παρόμοια συστήματα.. Επιπλέον εξετάστηκε η επίδραση μιας άλλης θερμοδυναμικής παραμέτρου, αυτή της πίεσης, στην στατιστική των μοριακών διαμορφώσεων και στην δυναμική συμπεριφορά γραμμικών πολυμερικών μοντέλων.

Σχετικές δημοσιεύσεις

- **"Effects of density on the local dynamics and conformational statistics in polyethylene: a Molecular Dynamics Study"**  
K. Karatasos, D. B. Adolf, S. Hotston  
*J. Chem. Phys.* (2000) **112**(19), 8695, (2000) (corresponding author )
- **"Slow modes in local polymer dynamics"**  
K. Karatasos and D. B. Adolf  
*J. Chem. Phys.* **112**(19), 8225,(2000) (Communication) (corresponding author )
- **"An Investigation into the local segmental dynamics of Polyethylene: an isothermal/isobaric Molecular Dynamics "**  
 S. Hotston, D. B. Adolf, K. Karatasos  
*J. Chem. Phys.* **115**(5), 2359, (2001)

## ii) Πολυμερικά μοντέλα της τοπολογίας των δένδριμερών

Στο δεύτερο μέρος εξετάστηκε η επίδραση μιας διαφορετικής τοπολογίας, αυτής των δένδριμερών, στην δυναμική τόσο σε τοπική κλίμακα, όσο και στην κλίμακα ολόκληρου του μορίου, καθώς και η συσχέτιση των δυναμικών ιδιοτήτων με τις φυσικές ιδιότητες των υλικών αυτών. Δόθηκε έμφαση στην μελέτη της επίδρασης του μεγέθους (μοριακού βάρους) και της τοπολογίας, στους μηχανισμούς που καθορίζουν την δυναμική και τις ιδιότητες μεταφοράς και διάχυσης σε διαλύματα. Η αναγνώριση και η περιγραφή των μηχανισμών αυτών αναμένεται να οδηγήσει στην εκμετάλλευση τέτοιων υλικών ως οχήματα για μεταφορά και επιλεκτική αποδέσμευση φαρμακευτικών ουσιών σε βιολογικές εφαρμογές, αλλά και σε μια μεγάλη γκάμα εφαρμογών ως συμβατοποιητές άλλων πολυμερικών συστημάτων και ως εξειδικευμένων λιπαντικών με ελεγχόμενη δράση.

Σχετική δημοσίευση

- **"Statics and Dynamics of model dendrimers as studied by molecular dynamics simulations"**

K. Karatasos, D. B. Adolf and G. R. Davies

*J. Chem. Phys.* (2001) **115**, 5310, (2001) (corresponding author)

Γ) Πανεπιστήμιο Βρυξελλών, Τμήμα Φυσικής Πολυμερών ( Μάρτιος 2000-Ιούνιος 2001)

Στα πλαίσια του ευρωπαϊκού προγράμματος

«New Routes to Understanding Polymer Materials using Experiments and Realistic Modelling» η ερευνητική προσπάθεια στο Πανεπιστήμιο των Βρυξελλών επικεντρώνεται στην βαθιά κατανόηση των φυσικών ιδιοτήτων τεχνολογικά σημαντικών πολυμερών, όπως Πολυεθυλένιο (PE), Πολυισοβουτυλένιου (PIB), Πολυπροπυλένιου (PP), και Πολυβινυλοχλωρίδιου (PVC), χρησιμοποιώντας ρεαλιστικές (διατηρώντας όλη την ατομιστική λεπτομέρεια) τεχνικές μοριακών προσομοιώσεων. Στα πλαίσια αυτής της προσπάθειας, έγινε λεπτομερής μελέτη του PIB τα αποτελέσματα της οποίας συγκρίθηκαν με πειράματα από μετρήσεις Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR) σκέδασης νετρονίων και Διηλεκτρικής Φασματοσκοπίας. Με την δυνατότητα της επακριβούς μελέτης που προσφέρουν αυτού του είδους οι προσομοιώσεις, και με την ανάπτυξη νέων μεθόδων ανάλυσης της στατικής και δυναμικής συμπεριφοράς, ερευνήθηκαν τα χαρακτηριστικά των μηχανισμών που σχετίζονται με το φαινόμενο της υαλώδους μετάπτωσης, και κατέστη δυνατό να αναγνωριστούν οι βασικές αιτίες για τις ξεχωριστές ιδιότητες του πολυμερούς αυτού (πχ η πολύ χαμηλή θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης). Επίσης έγινε δυνατή η ερμηνεία φαινομενικά αντικρουομένων παρατηρήσεων από διαφορετικές πειραματικές τεχνικές τόσο όσον αφορά στην κλίμακα του μονομερούς, όσο και στην κίνηση της ομάδας του μεθυλίου, οδηγώντας σε μια γενικευμένη περιγραφή της δυναμικής του συμπεριφοράς. Η ερευνητική προσπάθεια συνεχίστηκε προχωρώντας συστηματικά σε μια απευθείας σύγκριση μεταξύ πειράματος και προσομοίωσης όσον αφορά τους μηχανισμούς που περιγράφουν το PP, το PE και το PVC, με σκοπό να αναγνωριστεί ο ρόλος των ατομιστικών διαφορών στην εκδήλωση των ιξωδοελαστικών ιδιοτήτων των πολυμερών αυτών. Μια τέτοια λεπτομερής κατανόηση των μηχανισμών που ευθύνονται για την εμφάνιση των ιδιοτήτων αυτών των υλικών, εντάσσεται στο γενικότερο πλαίσιο για την δυνατότητα εξαρχής συνθέσεως υλικών με επιθυμούμενες ιδιότητες.

Σχετικές δημοσιεύσεις

- **"Short length-scale dynamics of Polyisobutylene by molecular dynamics simulations"**

K. Karatasos, F. Saija and J.-P. Ryckaert

*Physica B* **301**, 119, (2001) (corresponding author)

- **"Local Polyisobutylene dynamics revisited"**

K. Karatasos, and J.-P. Ryckaert

- **"Methyl dynamics and  $\beta$ -relaxation in polyisobutylene: comparison between experiments and molecular dynamics simulations"**

K. Karatasos, J. -P. Ryckaert, R. Ricciardi and F. Lauprêtre  
*Macromolecules* **35**, 1451 (2002) (corresponding author)

- **"Segmental dynamics of atactic Polypropylene as revealed by molecular simulations and quasielastic neutron scattering"**

O. Ahumada, D. Theodorou, A. Triolo, V. Arrighi, K. Karatasos, and J.-P. Ryckaert  
*Macromolecules*, **35**, 7110 (2002)

**Φεβρουάριος 2003 – Απρίλιος 2008 (Λέκτορας στο τμ. Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ.)**

Στην εργασία

**"Local Dynamics of Polyethylene and its Oligomers : A Molecular Dynamics Interpretation of the Incoherent Dynamic Structure Factor"**

G. Arialdi, K. Karatasos, J.-P. Ryckaert, V. Arrighi, F. Saggio, A. Triolo A. Desmedt, J. Pieper, and A. E. Lechner

*Macromolecules* **36**, 8864, (2003)

γίνεται μια συνδυασμένη προσπάθεια περιγραφής της τοπικής δυναμικής του πολυεθυλενίου με χρήση μοριακών προσομοιώσεων και σκέδασης νετρονίων. Εξετάζονται τα όρια εφαρμογή παραδοσιακών μεθόδων ανάλυσης των φασμάτων στο χώρο των συχνοτήτων και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με την λεπτομερέστερη ανάλυση των αναλόγων δεδομένων από την μοριακή δυναμική. Στα πλαίσια αυτής της σύγκρισης, δείχνεται ότι η πειραματικά παρατηρούμενη συμπεριφορά, μπορεί να περιγραφεί με περισσότερη λεπτομέρεια αν θεωρηθεί η ύπαρξη δύο χαρακτηριστικών διαδικασιών χαλάρωσης σε χαμηλά μεγέθη του διανύσματος σκέδασης οι οποίες συνδυάζονται σε μία γρήγορη διαδικασία στο όριο των μεγάλων μεγεθών του διανύσματος σκέδασης (μικρές χωρικές κλίμακες).

Στην εργασία

**"Static and dynamic behavior in model dendrimer melts: toward the glass transition"**

K. Karatasos

*Macromolecules* **38**, 4472-4483 (2005)

πραγματοποιείται μια εκτεταμένη και λεπτομερή μελέτη τμημάτων υπερδιακλαδισμένων πολυμερών της δενδριμερούς τοπολογίας με σκοπό την κατανόηση της στατικής και δυναμικής συμπεριφοράς τους σαν συνάρτηση του μοριακού μεγέθους και της θερμοκρασίας. Παρατηρείται η ύπαρξη μιας μετάβασης που φέρει τα χαρακτηριστικά της υαλώδους μετάπτωσης πολυμερικών συστημάτων. Εξετάζονται οι επιδράσεις της μετάβασης αυτής στις στατικές και δυναμικές ιδιότητες των δενδριμερών και γίνεται προσπάθεια κατανόησης των μηχανισμών στους οποίους οφείλεται αυτή η συμπεριφορά.

Στην εργασία

**"Glass Transition in Dendrimers"**

K. Karatasos

*Macromolecules* **39**, 4619-4626 (2006)

επιχειρείται μια λεπτομερή περιγραφή των μηχανισμών που υπεισέρχονται στην εκδήλωση του φαινομένου της υαλώδους μετάβασης στα δενδριμερή στην κατάσταση τήγματος με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Εξετάζεται ο ρόλος της ειδικής τοπολογίας των μορίων αυτών, στην ανάπτυξη μορφολογικών αλλά και δυναμικών ετερογενειών κατά την προσέγγιση Karatasos K.

στην υαλώδη μετάβαση, ενώ μελετάται και η επίδραση του μοριακού βάρους. Τα αποτελέσματα της μελέτης είναι σε συμφωνία με πρόσφατες πειραματικές εργασίες στα υλικά αυτά, ενώ και οι μηχανισμοί που περιγράφονται φαίνεται να εξηγούν την παρατηρούμενη συμπεριφορά.

Στην εργασία

**“Segmental Dynamics under severe Connectivity Constraints: the Dendrimer Case”**

K. Karatasos, A.V. Lyulin

*Journal of Chemical Physics* **125**, 184907 (2006)

Εξετάζεται ο ειδικός ρόλος του τοπολογικού περιορισμού που επιβάλλεται από την δενδριτική δομή στην τοπικής κλίμακας κίνηση. Τα παρατηρούμενα χαρακτηριστικά συγκρίνονται με την συμπεριφορά που παρατηρείται σε γραμμικά πολυμερή αλλά και σε άλλα μοριακά συστήματα που παρουσιάζουν το φαινόμενο της υαλώδους μετάβασης (glass transition), ενώ επιχειρείται και ο προσδιορισμός του ρόλου διαφορετικών παραγόντων (μέγεθος μορίου, τοπολογία, θερμοδυναμική κατάσταση) στους μηχανισμούς πραγμάτωσης της κίνησης σε αυτήν την κλίμακα.

Στην εργασία

**“Computational polymer dynamics via DL\_POLY”** (άρθρο ανασκόπησης μετά από πρόσκληση του εκδότη)

Adolf DB, Butler SN, Drew PM, Hotston S, Karatasos K

*MOLECULAR SIMULATION* **32** (12-13): 1017-1023, (2006)

Παρουσιάζεται μια ανασκόπηση των εργασιών σε Μοριακή Δυναμική με τη χρήση του προγράμματος ανοικτού κώδικα DL\_POLY στο πεδίο της φυσικής πολυμερών. Σχολιάζονται συμπεράσματα που αφορούν τη στατική και τη δυναμική συμπεριφορά από προσομοιώσεις γραμμικών και πολυδιακλαδισμένων πολυμερικών συστημάτων, καθώς και από έρευνες για την διάχυση μικρών μορίων μέσα σε πολυμερικές μήτρες

Στην εργασία

**“Non-Gaussian nature of Glassy Dynamics by Cage-to-Cage Motion”**

B. Vorselaars, A.V. Lyulin, K. Karatasos and M. A. J. Michels

*Physical Review E* **75**, 011504 (2007)

Παρουσιάζεται ένα θεωρητικό μοντέλο με σκοπό την κατανόηση του μη-Gaussian χαρακτήρα της κίνησης κοντά στην περιοχή της υαλώδους μετάπτωσης για διαφορετικές κατηγορίες υλικών. Τα βασικά συμπεράσματα του μοντέλου φαίνεται να είναι συμβατά με την συμπεριφορά που παρατηρείται σε συστήματα πολύ διαφορετικής τοπολογίας όπως κολλοειδή, πολυμερή, δενδριμερή υποδεικνύοντας κάποιο κοινό πλαίσιο συμπεριφοράς κοντά στην υαλώδη μετάβαση.

Στην εργασία

**“Effects of Topology and Size on Statics and Dynamics of Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes”**

G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin

*Journal of Chemical Physics*, Art. No. 214903 (2007) (corresponding author)

Διεξάγεται μια συστηματική έρευνα των επιπτώσεων της μοριακής τοπολογίας καθώς και του μεγέθους, σε στατικές και δυναμικές ιδιότητες συμπλεγμάτων φορτισμένων υπερδιακλαδισμένων πολυμερών με αντίθετα φορτισμένες γραμμικές αλυσίδες, με την μέθοδο της Brownian δυναμικής. Διαπιστώνεται ότι με την χρήση μορίων διαφορετικής Karatasos K.

αρχιτεκτονικής, είναι δυνατόν να ελεγχθούν ιδιότητες όπως το μέσο μέγεθος, η ανισοτροπία του σχήματος καθώς και οι χαρακτηριστικοί χρόνοι χαλάρωσης σε τοπική και σε εκταταμένη κλίμακα. Οι ιδιότητες αυτές είναι κρίσιμες όσον αφορά τη χρήση πολυηλεκτρολυτικών συμπλεγμάτων σε μια πληθώρα τεχνολογικών και βιοϊατρικών εφαρμογών.

Στην εργασία

**“Self Organisation in Dendrimer Polyelectrolytes”**

K. Karatasos *Macromolecules* **2008**, 41, (3), 1025-1033

εξετάζεται με τη χρήση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής η συμπεριφορά αραιών πολυηλεκτρολυτικών διαλυμάτων δενδριμερών 3<sup>ης</sup> και 4<sup>ης</sup> γενεάς (με ύπαρξη διαλύτη και αντισταθμιστικών ιόντων), υπό συνθήκες μεταβαλλόμενης ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Παρατηρείται πέρα από ένα χαρακτηριστικό κατώφλι της ισχύος των αλληλεπιδράσεων Coulomb, τα δενδριμερή αυτοοργανώνονται σε κυβικές φάσεις της FCC και BCC μορφής. Επιπρόσθετα, μελετάται η διαδικασία συμπύκνωσης των αντισταθμιστικών ιόντων γύρω από τα δενδριμερή και διαπιστώνεται ότι η αυτοοργάνωση των δενδριμερών, επέρχεται σαν αποτέλεσμα του συνδυασμού χωρικών συσχετίσεων των ιόντων γύρω από αυτά, αλλά και της «απελευθέρωσης» σωματίων διαλύτη από το εσωτερικό της δενδριτικής δομής. Οι διεργασίες αυτές επηρεάζουν το ενεργό φορτίο των δενδριμερών, και δημιουργούν κατά μέσο όρο κατάλληλες ενεργές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δενδριμερών μορίων οι οποίες και οδηγούν στο φαινόμενο της αυτοοργάνωσής τους.

**Μάϊος 2008 – Νοέμβριος 2011 (Επ. Καθηγητής επί θητεία στο τμ. Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ.)**

Στην εργασία

**“Structural Effects in Overcharging in Complexes of Hyperbranched Polymers with Linear Polyelectrolytes”**

S.V. Lyulin, K. Karatasos, A. Darinskii, S. Larin, and A. Lyulin  
*Soft Matter* **2008**, 4, (3), 453 (Communication)

μελετάται με την μέθοδο της Brownian δυναμικής, το φαινόμενο της «υπερφόρτισης» (overcharging) σε συμπλέγματα γραμμικών πολυηλεκτρολυτών με υπερδιακλαδισμένα πολυμερή. Εξετάζεται η επίδραση της τοπολογίας των υπερδιακλαδισμένων πολυμερών και του μήκους της γραμμικής αλυσίδας στο παραπάνω φαινόμενο, ενώ επιχειρείται και η θεωρητική περιγραφή των συστημάτων αυτών. Τα αποτελέσματα της παρούσας μελέτης, μπορεί να ληφθούν υπόψη σε εφαρμογές όπου τέτοια συστήματα πολυηλεκτρολυτικών συμπλεγμάτων παίζουν σημαντικό ρόλο, όπως για παράδειγμα στην μεταφορά και αποδέσμευση ουσιών βιολογικού ενδιαφέροντος στα κύτταρα.

Στην εργασία

**“Shear induced effects in Hyperbranched-Linear Polyelectrolyte Complexes”**

G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin  
*Journal of Chemical Physics*, 129, 034901 (2008)

Εξετάζεται η επίδραση της εφαρμογής διατμητικής τάσης σε συστήματα συμπλεγμάτων φορτισμένων υπερδιακλαδισμένων πολυμερών με γραμμικούς πολυηλεκτρολύτες. Τα μελετούμενα συστήματα φέρουν διαφορετικά μοριακά βάρη και τοπολογία ώστε να εξαχθούν Karatasos K.



επιπλέον συμπεράσματα για την επηρροή του μεγέθους και της γεωμετρίας στην απόκρισή τους σε διατμητική τάση. Η μελέτη γίνεται με την μέθοδο της προσομοίωσης με Brownian δυναμική. Η εφαρμογή διατμητικής τάσης καλύπτει ένα ευρύ πεδίο παραμορφώσεων, μέχρι το σημείο διαχωρισμού των συστατικών των συμπλεγμάτων, φανερώνοντας έτσι τα όρια μέσα στα οποία τα συμπλέγματα παραμένουν ανέπαφα υπό την επίδραση διάτμησης. Η εξέταση των δυναμικών τους ιδιοτήτων δείχνει την ύπαρξη μια σχέσης κλίμακας (scaling) στις δυναμικές ιδιότητες τόσο σε τοπική όσο και σε ολόκληρη την μοριακή κλίμακα. Η τοπολογία φαίνεται να παίζει σημαντικό ρόλο στον βαθμό απόκρισης των συστημάτων αυτών (παραμόρφωση σχήματος, δυναμική στην κλίμακα του μορίου) αποκαλύπτοντας έτσι τρόπους ελέγχου των μηχανικών τους ιδιοτήτων για την επίτευξη επιθυμούμενης συμπεριφοράς σε συνθήκες υδροδυναμικής παραμόρφωσης.

Στην εργασία

**“Brownian dynamics simulations of complexes of hyperbranched polymers with linear polyelectrolytes: Effects of the strength of electrostatic interactions on static properties”**

G. K. Dalakoglou, K. Karatasos, S.V.Lyulin, A.V.Lyulin  
*Materials Science and Engineering: B* **2008**, 152, 114

μελετάται η επίδραση της εφαρμογής μεταβαλλόμενης έντασης ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων στις στατικές ιδιότητες συμπλεγμάτων μεταξύ γραμμικών πολυηλεκτρολυτών και υπερδιακλαδισμένων πολυμερών διαφορετικών τοπολογιών με την μέθοδο της Brownian Δυναμικής. Από την παρούσα εργασία υποδυκνείται ότι με κατάλληλη επιλογή της εσωτερικής δομής (τοπολογίας) του υπερδιακλαδισμένου πολυμερούς και με την εφαρμογή ενός εξωτερικού παράγοντα (εδώ της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλλ/σεων) καθίσταται δυνατόν να ελεγχθούν ιδιότητες όπως τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά, η κατανομή πυκνότητας και το μέγεθος των συμπλεγμάτων, ιδιότητες κρίσιμες για μια ευρεία γκάμα εφαρμογών στις οποίες μπορεί να χρησιμοποιηθούν τα εξεταζόμενα συστήματα.

Στην εργασία

**“Investigation of Thermodynamic Properties of Hyperbranched Poly (ester amide) by Inverse Gas Chromatography”**

G. S. Dritsas, K. Karatasos and C. Panayiotou  
*Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* **2008**, 46, 2166

περιγράφεται η μελέτη θερμοδυναμικών χαρακτηριστικών ενός υπερδιακλαδισμένου πολυεστεραμιδίου με την μέθοδο της αναστροφής αέριας χρωματογραφίας. Με την εφαρμογή της μεθόδου αυτής κατέστη δυνατόν να υπολογιστούν οι Flory-Huggins παράμετροι αλληλεπίδρασης καθώς και οι μερικές και ολικές παράμετροι διαλυτότητας σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας. Η εφαρμογή αυτής της μεθοδολογίας για πρώτη φορά σε τέτοιου είδους συστήματα, αποδείχτηκε κατάλληλη για να περιγράψει τις μερικές αλληλεπιδράσεις λόγω δεσμών υδρογόνου, δυνάμεων διασποράς και ηλεκτροστατικών δυνάμεων με σχετικά μεγάλη ακρίβεια.

Στην εργασία

**“Dynamics of counterions in Dendrimer Polyelectrolyte Solutions”**

K. Karatasos and M. Krystallis  
*Journal of Chemical Physics* **2009**, 130, 114903

μελετάται διεξοδικά με την χρήση μοριακών προσομοιώσεων η δυναμική συμπεριφορά των αντισταθμιστικών ιόντων σε διαλύματα δενδριτικών πολυηλεκτρολυτών, σε συστήματα με διαφορετική ισχύ των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Περιγράφονται οι δυναμικές διαδικασίες που υπεισέρχονται στον σχηματισμό αλλά και στην συμπεριφορά της ιοντικής ατμόσφαιρας γύρω από τα φορτισμένα δενδριμερή, τόσο στην αυτόνομη όσο και στην συνεργαστική κίνηση των ιόντων. Δείχνεται για πρώτη φορά μια σχέση κλίμακας που συνδέει τον συντελεστή διάχυσης των ιόντων αλλά και των δενδριμερών με την ένταση των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων αλλά και ο συσχετισμός των διαφορετικών χρονικών κλιμάκων στην δυναμική των ιόντων. Γίνεται ποιοτική σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα σε συστήματα φορτισμένων κολλοειδών αλλά και άλλων πολυμερικών πολυηλεκτρολυτικών συστημάτων και διαπιστώνεται καλό επίπεδο συμφωνίας.

Στην εργασία

**“Molecular dynamics simulations of a hyperbranched poly(esteramide) : statics, dynamics and hydrogen bonding”**

I. Tanis, D. Tragoudaras, K. Karatasos and S. H. Anastasiadis

*Journal of Physical Chemistry B*, **2009**, 113 (16), 5356

παρουσιάζεται για πρώτη φορά μια λεπτομερές εξέταση ενός υπερδιακλαδισμένου πολύ(εστεραμιδίου) σε κατάσταση τήγματος μέσω πλήρως ατομιστικού μοριακού μοντέλου. Μελετώνται στατικές, δυναμικές και θερμοδυναμικές ιδιότητες και συγκρίνονται με πειράματα διαφορικής θερμιδομετρίας σάρωσης, αναστροφής αέριας χρωματογραφίας και ρεολογίας, όπου διαπιστώνεται πολύ καλή συμφωνία. Με βάση την πολύ καλή συμπεριφορά του μοριακού μοντέλου στις παραπάνω ιδιότητες, η μελέτη επεκτείνεται στον χαρακτηρισμό του πολυμερούς ως προς τον σχηματισμό διαφορετικού είδους δεσμών υδρογόνου. Λαμβάνοντας υπόψη όλα τα αποτελέσματα της στατικής και δυναμικής συμπεριφοράς, καθίσταται δυνατή η ταυτοποίηση των μηχανισμών σε τοπική κλίμακα που είναι υπεύθυνοι για την εκδήλωση της μακροσκοπικής συμπεριφοράς του συστήματος και τίθεται η βάση για τον σχεδιασμό σε μοριακό επίπεδο παρόμοιων συστημάτων με επιθυμητές ιδιότητες.

Στην εργασία

**“Electrostatically-driven Ordering in Model Dendrimer Polyelectrolytes: Effects of Concentration”**

K. Karatasos and M. Krystallis

*Macromol. Symp.*, **2009**, 278, 32–39

εξετάζεται με την μέθοδο της μοριακής προσομοίωσης η επίδραση της αλλαγής της συγκέντρωσης των φορτισμένων δενδριμερών στην συμμετρία της δομής που προκύπτει από την αυτοοργάνωση των δενδριμερών με την επίδραση ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Μελετάται ο ρόλος της οργάνωσης των αντισταθμιστικών ιόντων γύρω από τα δενδριμερή, αλλά και η κινητική συμπεριφορά των δενδριμερών (διάχυση) σαν συνάρτηση της συγκέντρωσης και της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Διαπιστώνεται καλή συμφωνία με θεωρητικές προβλέψεις σε παρόμοια συστήματα πολυμερικών ηλεκτρολυτών ενώ συζητείται και ο ρόλος της κινητικής στον σχηματισμό της τελικής δομής.

Στην εργασία

**“Association of a weakly acidic anti-inflammatory drug (ibuprofen) with a poly(amidoamine) dendrimer as studied by molecular dynamics simulations ”**

I. Tanis and K. Karatasos  
*Journal of Physical Chemistry B.* , 113, 10984–10993, **2009**

εξετάσθηκαν οι μηχανισμοί που είναι υπεύθυνοι για την μη-ομοιοπολική πρόσδεση/εγκλεισμό ενός μη-στεροειδούς αντιφλεγμονώδους φαρμάκου, με δενδριμερές πολυ(αμιδο-αμινικού) τύπου 3<sup>ns</sup> και 4<sup>ns</sup> γενεάς, με την βοήθεια πλήρως ατομιστικών μοριακών προσομοιώσεων. Διαπιστώθηκε ότι η αποτελεσματικότητα του σχηματισμού συμπλεγμάτων δενδριμερούς/φαρμάκου εξαρτάται δραστικά από το pH του διαλύματος, ενώ διαπιστώθηκε και η μεταβολή της φύσης του μηχανισμού πρόσδεσης από ηλεκτροστατική σε κυριαρχούμενη από δεσμούς υδρογόνου. Επιπλέον, μελετήθηκε για 1<sup>η</sup> φορά η δυναμική συμπεριφορά των μορίων του φαρμάκου και εκτιμήθηκαν οι χρονικές κλίμακες τόσο της κίνησης των ξεχωριστών μορίων, όσο και της συλλογικής κίνησης αυτών. Τα συμπεράσματα από την εργασία αυτή, βοηθούν στην ερμηνεία σχετικών πειραμάτων σε αυτά τα συστήματα, ενώ θέτουν και το γενικότερο πλαίσιο της αντίστοιχης συμπεριφοράς μιας μεγαλύτερης οικογένειας υδρόφοβων και ασθενώς όξινων φαρμακευτικών ουσιών.

Στην εργασία

**“Investigation of Thermodynamic Properties of Hyperbranched Aliphatic Polyesters by Inverse Gas Chromatography”**

G. Dritsas, K. Karatasos and C. Panayiotou  
*Journal of Chromatography A*, 1216 (51), 8979-8985, **2009**

Μελετώνται για πρώτη φορά με την μέθοδο της ανάστροφης αέριας χρωματογραφίας μια σειρά από αλειφατικού υπερδιακλαδισμένους πολυεστέρες (Boltorn® H20, H30 and H40) κάνοντας χρήση 13 διαφορετικών διαλυτών ως μόρια ανιχνευτές. Δεδομένα του όγκου κατακράτησης αναλύθηκαν για τον θερμοδυναμικό χαρακατηρισμό των πολυμερικών αυτών υλικών, οδηγώντας στον υπολογισμό ποσοτήτων όπως ο παράγοντας αλληλεπίδρασης Flory-Huggins, ο κατά βάρος συντελεστής ενεργότητας, καθώς και ο συνολικός αλλά και οι επιμέρους παράγοντες διαλυτότητας και η εξάρτησή τους από τη θερμοκρασία. Τα αποτελέσματα της εν λόγω μελέτης εκτός του ότι παρέχουν νέα πληροφορία για τα συγκεκριμένα συστήματα, εκτιμάται ότι δείχνουν και τις τάσεις που ενδέχεται να ακολουθούν και άλλα πολυμερή της δενδριτικής τοπολογίας που φέρουν ανάλογες ενεργές ομάδες αλληλεπίδρασης.

Στην εργασία

**“Local Dynamics and Hydrogen Bonding in Hyperbranched Aliphatic Polyesters”**

I. Tanis and K. Karatasos  
*Macromolecules*, 42, 9581 , **2009**

εξετάζονται για πρώτη φορά σε πλήρως ατομιστικό επίπεδο με την βοήθεια προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, οι μηχανισμοί που σχετίζονται με την σύζευξη της τοπικής δυναμικής με το σχηματιζόμενο δίκτυο υδρογονικών δεσμών, για αλειφατικούς υπερδιακλαδισμένους πολυεστέρες 2 διαφορετικών γενεών. Αποκαλύπτεται και περιγράφεται με λεπτομέρεια ο μηχανισμός σύζευξης των τοπικών κινήσεων (σε επίπεδο δεσμού) με τους σχηματιζόμενους υδρογονικούς δεσμούς, σε σχέση με την τοπολογία των υπερδιακλαδισμένων μορίων. Οι μηχανισμοί που περιγράφονται από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, παρέχουν ένα ικανοποιητικό πλαίσιο ερμηνείας σχετικών πειραμάτων διηλεκτρικής φασματοσκοπίας και φασματοσκοπίας υπερύθρου, τόσο ως προς την φύση των σχηματιζόμενων υδρογονικών δεσμών, όσο και στην δυναμική κλίμακα που σχετίζεται με αυτούς και την σύζευξή της με τις κινήσεις των πολυμερών σε τοπική κλίμακα.

Νοέμβριος 2011 – Ιούλιος 2014 (Μον. Επ. Καθηγητής στο τμ. Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ.)

Στην εργασία

**“Modeling of Hyperbranched Polyesters as Hosts for the Multifunctional Bioactive Agent Shikonin”**

I. Tanis, K. Karatasos, A. N. Assimopoulou and V. P. Papageorgiou  
*Physical Chemistry Chemical Physics*, 2011, **13**, pp 10808

γίνεται για πρώτη φορά προσπάθεια μοντελοποίησης μιας οικογένειας υπερδιακλαδισμένων πολυεστέρων οι οποίοι είναι και διαθέσιμοι εμπορικά, ως παράγοντες δέσμησης του βιοδραστικού μορίου της Σικονίνης, σε πλήρη ατομιστική αναπαράσταση με την μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής. Σε αυτή την εργασία εξετάζονται λεπτομερώς οι μηχανισμοί και οι συνθήκες κάτω από τις οποίες ευνοείται η δημιουργία συμπλέγματος μεταξύ των πολυεστέρων και της Σικονίνης, ενώ διερευνούνται και οι επιδράσεις του μοριακού βάρους και των ιδιαίτερων τοπολογικών χαρακτηριστικών των πολυμερών καθώς και της συγκέντρωσης των πολυεστέρων στην διαδικασία της δέσμησης.

Στην εργασία

**“Simulation of a symmetric binary mixture of charged dendrimers under varying electrostatic interactions: static and dynamic aspects”**

K. Karatasos and I. Tanis (corresponding author)  
*Macromolecules*, **2011**, 44, pp 6605

μελετάται η απόκριση των μορφολογικών και δυναμικών χαρακτηριστικών ενός συμμετρικού ως προς τη σύσταση μείγματος περιφερειακά φορτισμένων δενδριμερών 3<sup>ης</sup> και 4<sup>ης</sup> γενεάς σε αναπαράσταση ενωμένων ατόμων, στις αλλαγές της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Εξετάζεται υπό ποιες συνθήκες τα συστατικά του μείγματος αυτοοργανώνονται σε πλεγματικές δομές διαφορετικών χαρακτηριστικών, ενώ καθορίζεται και η αντίστοιχη δυναμική συμπεριφορά των συστατικών στην μοριακή κλίμακα. Με την παρούσα μελέτη δείχνεται πως, με τον έλεγχο της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων, είναι δυνατόν να ελεγχθούν οι ιδιότητες αυτοοργάνωσης τέτοιων «χαλαρών» κolloειδών συστημάτων

Στην εργασία

**“Aspects of PAMAM-based Dendrimer/siRNA complexation as studied by computer simulations: effects of pH and generation on dendrimer structure and siRNA binding”**

K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini, and S. Priol  
*Macromolecular Bioscience*, 12,pp 225,2012

εξετάζονται με τη χρήση πλήρως ατομιστικών μοντέλων και σε συνθήκες που προσομοιάζουν ρεαλιστικά συστήματα, συμπλέγματα δενδριμερών μορίων της πολυ(αμιδοαμιδικής) οικογένειας με μικρού μήκους RNA διπλής έλικας, σε υδατικό περιβάλλον με διαφορετικές τιμές pH. Εξετάζεται η επίδραση της τοπολογίας των δενδριμερών μορίων, της γενεάς (μέγεθος) του δενδριμερούς, καθώς και της τιμής του pH στις δομικές αλλαγές που επέρχονται στα συστατικά του συμπλέγματος αλλά και στην αποτελεσματικότητα της πρόσδεσης μεταξύ των δύο μορίων. Εξάγονται συμπεράσματα για τη σχετική συνεισφορά εντροπικών και ενθαλπικών παραγόντων στην αποτελεσματικότητα της πρόσδεσης και επισημαίνονται εκείνοι οι παράγοντες που ευνοούν τον σχηματισμό περισσότερο ευσταθών συμπλεγμάτων. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται ποιοτικά με σχετικά πειράματα σε παρόμοια συστήματα.

Karatasos K.

Στην εργασία

**Chimeric advanced drug delivery nano systems (chi-aDDnSs) for shikonin combining dendritic and liposomal technology**

K. N. Kontogiannopoulos, A. N. Assimopoulou, S. Hatziantoniou, K. Karatasos, C. Demetzos and V. P. Papageorgiou

*International Journal of Pharmaceutics*, **2012**, 422, (1–2), 381-389

ο κύριος σκοπός ήταν η μελέτη των συμπλεγμάτων του βιοενεργού μορίου shikonin με μια ειδική κατηγορία υπεδιακλαδισμένων αλιφατικών πολυεστέρων, και η εξέταση της δυνατότητας εγκλεισμού των σχηματιζόμενων συμπλεγμάτων σε νέους «χημεικούς» λιποσωμιακούς φορείς, με τελικό σκοπό την χρήση τους ως οχήματα μεταφοράς για θεραπευτικούς σκοπούς. Μιας και είναι η πρώτη φορά που μελετώνται αυτά τα υβριδικά συστήματα ως φορείς παράδοσης του shikonin, δόθηκε έμφαση στην αποτελεσματικότητα και την επαναληψιμότητα του πρωτοκόλου παραγωγής τους, στο βαθμό αποδοτικότητάς τους όσον αφορά το ποσοστό παγίδευσης των συμπλεγμάτων μέσα στην λιποσωμιακή κοιλότητα, στην σταθερότητά τους, αλλά και στην *in vitro* μελέτη του ρυθμού απελευθέρωσης της φαρμακευτικής ουσίας από αυτούς τους φορείς. Τα αποτελέσματα της παρούσας μελέτης δείχνουν ότι πρόκειται για πολλά υποσχόμενα συστήματα στην παγίδευση και ελεγχόμενη αποδέσμευση της πολλαπλά βιοδραστικής ουσίας shikonin

Στην εργασία

**Conformational effects in non-stoichiometric complexes of two hyperbranched molecules with a linear polyelectrolyte**

G. Dalakoglou, K. Karatasos, S. Lyulin, S. Larin, A. Darinskii, A. Lyulin  
*Polymers* **2012**, 4,(1), 240-255

εξετάζονται χαρακτηριστικά των διαμορφώσεων των συστατικών πολυηλεκτρολυτικών συμπλεγμάτων αποτελούμενων από γραμμικές αλυσίδες διαφορετικών μηκών, με 2 υπεδιακλαδισμένα πολυμερή τα οποία κατά προτίμηση φέρουν μεγαλύτερο ποσοστό διακλαδώσεων στην περιφέρειά τους. Τα χαρακτηριστικά της φυσικής προσρόφησης των γραμμικών αλυσίδων συσχετίζονται με τις αντίστοιχες διαμορφώσεις των γραμμικών πολυμερών και μελετώνται σαν συνάρτησης του μήκους της αλυσίδας τους. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά προηγούμενων εργασιών που αναφέρονται σε αντίστοιχα στοιχειομετρικά συμπλέγματα, καθώς και με αυτά από στοιχειομετρικά και μη στοιχειομετρικά συμπλέγματα στα οποία συμμετέχουν υπεδιακλαδισμένα πολυμερή τέλειαις δένδριτικής τοπολογίας. Επισημαίνεται ο πολύ σημαντικός ρόλος της τοπολογίας των υπεδιακλαδισμένων μορίων στις παρατηρούμενες διαφορές, παρέχοντας έτσι πληροφορία για τον καλύτερο έλεγχο των φυσικών ιδιοτήτων τέτοιων συστημάτων.

Στην εργασία

**Tell Me Something I Do Not Know. Multiscale Molecular Modeling of Dendrimer/Dendron Organization and Self-Assembly In Gene Therapy**

Paola Posocco, Erik Laurini, Valentina Dal Col, Domenico Marson, Konstantinos Karatasos, Maurizio Fermeglia and Sabrina Pricl

*Current Medicinal Chemistry*, 19(29), 5062-5087, **2012**

γίνεται μια ανασκόπηση στην περιοχή της μοριακής προσομοίωσης πολλαπλών κλιμάκων νανοφορέων γενετικού υλικού (πχ DNA, RNA), βασισμένων σε δένδριτικά πολυμερικά συστήματα. Παρουσιάζονται οι νέες υπολογιστικές τεχνικές που έχουν αναπτυχθεί για την Karatasos K.

αναπαράσταση και την μελέτη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων των υλικών αυτών με έμφαση στην αυτοοργάνωσή τους και την δυνατότητα σχηματισμού συμπλεγμάτων με μόρια βιοϊατρικού ενδιαφέροντος, και γίνεται σύγκριση με τα διαθέσιμα σχετικά πειραματικά δεδομένα. Από τους κύριους σκοπούς της ανασκόπησης αυτής είναι και η ανάδειξη της χρησιμότητας των μεθόδων προσομοίωσης πολλαπλών κλιμάκων και των ορίων των δυνατοτήτων τους στην ερμηνεία και την βαθύτερη κατανόηση της πειραματικής συμπεριφοράς τέτοιων συστημάτων.

Στην εργασία

**Modeling the formation of ordered nano-assemblies comprised by dendrimers and linear polyelectrolytes: the role of Coulombic interactions**

E. Eleftheriou and K. Karatasos

*Journal of Chemical Physics*, 137, 144905, 2012

μελετάται με την μέθοδο της μοριακής δυναμικής η θερμοδυναμική συμπεριφορά μειγμάτων δενδριτικών με γραμμικούς πολυηλεκτρολύτες σε διάλυμα, ως συνάρτηση της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων, και για δύο αρκετά διαφορετικά μήκη των γραμμικών πολυμερών. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης δείχνουν τον προοδευτικό σχηματισμό δομημένων νανο-συσσωματωμάτων με την αύξηση της ισχύος των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων, τα χαρακτηριστικά των οποίων αναλύονται τόσο από στατικής όσο και από δυναμικής πλευράς. Τα συμπεράσματα που προκύπτουν προσφέρουν νέα ενόραση όσον αφορά τον έλεγχο των δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών των σχηματιζόμενων νανοδομών αλλά και της αγωγιμότητάς τους, συμβάλλοντας έτσι στην πορεία προς την κατασκευή ηλεκτρολυτικών συστημάτων με στοχευμένες ιδιότητες για μια ευρεία γκάμα εφαρμογών που εκτείνεται από την δημιουργία αποκρίσιμων («έξυπνων») υλικών για επικαλύψεις μέχρι την δημιουργία βιοσυμβατών ικριωμάτων για ιατρικές εφαρμογές.

Στην εργασία

**Self-association and Complexation of the Anti-Cancer Drug Doxorubicin with PEGylated Hyperbranched Polyesters in an Aqueous Environment**

K. Karatasos

*Journal of Physical Chemistry B*, 2013, 117, 2564-2575.

μελετάται με την βοήθεια πλήρως ατομιστικών προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, σε ρεαλιστικές συνθήκες (συγκέντρωση, ιοντική ισχύς, pH) η συμπεριφορά αυτοοργάνωσης των μορίων Δοξορουβικίνης (Doxorubicin), ενός ευρέως χρησιμοποιούμενου αντικαρκινικού φαρμάκου, σε υδατικό περιβάλλον με, η χωρίς την παρουσία ενός πολυμερικού νανοφορέα που αποτελείται από ένα υδροφοβικό «πυρήνα» από υδερδιακλαδισμένο πολυεστέρα ο οποίος είναι συζευγμένος με υδατοδιαλυτούς κλάδους πολυ(αιθυλενογλυκόλης). Εξετάζεται η επίδραση της παρουσίας του πολυμερικού νανοσωματίου στον σχηματισμό συσσωματωμάτων από τα μόρια φαρμάκου καθώς και στην φυσική πρόσδεση αυτών στην επιφάνεια του πολυμερικού νανοφορέα. Επιπλέον γίνεται διάκριση μεταξύ της συμπεριφοράς των ουδετέρων και των ιονισμένων μορίων της φαρμακευτικής ουσίας και καθορίζεται η φύση των μηχανισμών που δρουν κάθε φορά (ανάλογα με το φορτίο) για το σχηματισμό, την δομική ακεραιότητα, και τις ιδιότητες διάχυσης των συσσωματωμάτων του φαρμάκου, αλλά και του συμπλέγματος φαρμάκου-νανοφορέα. Τα συμπεράσματα της παρούσας μελέτης προσφέρουν μια λεπτομερή γνώση για την σχετική συνεισφορά του κάθε μηχανισμού στην συμπεριφορά τέτοιων συστημάτων, και δημιουργούν τη βάση για την καλύτερη κατανόηση των πειραματικών αποτελεσμάτων, αλλά και για τον σχεδιασμό πιο αποτελεσματικών νανοφορέων για την γενικότερη κατηγορία των φαρμάκων που ανήκουν στην οικογένεια των ανθρακυκλινών.

Karatasos K.

Στην εργασία

### **Structure and Dynamics of Hyperbranched Polymer – Layered Silicate Nanocomposites**

S. Fotiadou, C. Karageorgaki, K. Chrissopoulou, K. Karatasos, I. Tanis, D.

Tragoudaras, B. Frick, and S. H. Anastasiadis

*Macromolecules*, **2013**, 46, 2842-2855

μελετήθηκε η δομή και η δυναμική ενός υπερδιακλαδισμένου πολυ(εστεραμιδίου) (Hybrane 1200) και νανοσυνθέτων αυτού με φυσικό μοντομοριλλονίτη, ώστε να κατανοηθεί η συμπεριφορά του σε κατάσταση τήγματος αλλά και υπό χωρικό περιορισμό. Χρησιμοποιήθηκαν πειραματικές τεχνικές όπως ελαστική και οιωνεί-ελαστική σκέδαση νετρονίων (QENS), περίθλαση ακτίνων X (XRD) και διαφορική θερμιδομετρία σάρωσης (DSC). Για την καλύτερη κατανόηση των μηχανισμών που παρατηρήθηκαν στην δυναμική συμπεριφορά του υλικού, πραγματοποιήθηκαν και πλήρως ατομιστικές προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής τα αποτελέσματα των οποίων συγκρίθηκαν με αυτά των σχετικών πειραμάτων (QENS). Οι προβλέψεις των μοριακών προσομοιώσεων στο τήγμα όσον αφορά τις κινήσεις σε τοπική κλίμακα (που είναι ενεργές και σε θερμοκρασίες χαμηλότερες αυτής της υαλώδους μετάπτωσης), έδωσαν την δυνατότητα ερμηνείας των αντιστοίχων πειραμάτων, τα αποτελέσματα των οποίων διέφεραν σημαντικά από προηγούμενες παρατηρήσεις σε γραμμικά πολυμερή. Επιπλέον, παρατηρήθηκαν πολλές διαφορές στην δυναμική του πολυμερούς που σχετίζεται με την διαδικασία υαλώδους μετάπτωσης, στην κατάσταση διασποράς (exfoliation) του τελευταίου στην ανόργανη μήτρα του πηλού. Τα παραπάνω αποτελέσματα παρείχαν για πρώτη φορά πληροφoρία για τον ρόλο της τοπολογίας και των ειδικών χαρακτηριστικών του υπερδιακλαδισμένου πολυμερούς στην δυναμική συμπεριφορά του σε τοπική κλίμακα τόσο σε τήγμα όσο και στο σύνθετο υλικό.

στην εργασία

### **Complexes between poly(amido amine) dendrimers and poly(methacrylic acid): insight from molecular dynamics simulations**

I. Tanis, K. Karatasos, P. Posocco, E. Laurini and S. Pricl

*Macromolecular Symposia*, 331-332, (1), 34-42, 2013

παρουσιάζονται αποτελέσματα πλήρως ατομιστικών μοριακών προσομοιώσεων αραιών υδατικών διαλυμάτων πολυ(αμινοαμιδικών) δενδριμερών και πολυ(μεθακρυλικού) οξέος σε συνθήκες χαμηλής ιοντικής ισχύος και σε φυσιολογικά επίπεδα pH, όπου τα πολυμερικά υλικά είναι αντιθετα φορτισμένα. Μελετώνται στοιχειομετρικά (1:1) και μη στοιχειομετρικά (1:2) συστήματα αποτελούμενα από δενδριμερή 2 διαφορετικών γενεών και δυό διαφορετικών μοριακών βαρών των γραμμικών αλυσίδων. Για όλα τα μελετηθέντα συστήματα σχηματίζεται μια φάση πλούσια σε πολυμερή και μία πλούσια σε διαλύτη. Η πλούσια σε πολυμερή φάση αποτελείται από συσσωματώματα συζευγμάτων δενδριμερών και γραμμικών πολυηλεκτρολυτών με μορφολογία που θυμίζει φυσικές νανογέλες. Εξετάζονται μορφολογικά χαρακτηριστικών των 2 πολυμερικών συστατικών καθώς και ο βαθμός ιοντικής σύζευξης μεταξύ των φορτισμένων μερών, με σκοπό την εξαγωγή πληροφορίας σχετικά με το ποσοστό της φυσικής προσρόφησης των γραμμικών αλυσίδων στην επιφάνεια των δενδριτικών μορίων και αυτής μεταξύ των φορτισμένων μονομερών και των αντίθετα φορτισμένων αντισταθμιστικών ιόντων. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας μπορεί να φανούν ιδιαίτερα χρήσιμα στο σχεδιασμό αποκρίσιμων υδρογελών αποτελουμένων από τα βιοσυμβατά και βιοαποικοδομίσιμα αυτά πολυμερή, για βιοϊατρικές εφαρμογές.

**Ιούλιος 2014 - τώρα (Αν. Καθηγητής στο τμ. Χημικών Μηχανικών του Α.Π.Θ.)**

στην εργασία

### **Graphene/Hyperbranched-Polymer Nanocomposites: Insight from Molecular Dynamics Simulations**

K. Karatasos, *Macromolecules* 2014, 47(24), 8833-8845

παρουσιάζονται για πρώτη φορά αποτελέσματα από προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής στην πλήρως ατομιστική αναπαράσταση νανοσυνθέτων αποτελούμενων από πολλαπλά φύλλα γραφενίου και υπεδριακλαδισμένους πολυεστέρες, σε μια ευρεία γκάμα θερμοκρασιών, από 700K έως και 300K. Οι συνθήκες της προσομοίωσης μιμούνται ρεαλιστικές συνθήκες συμπεριφοράς συνθέτων συστημάτων γραφενίου/υπερδιακλαδισμένου πολυμερούς τα οποία έχουν προέλθει από ανάμιξη στην μορφή τήγματος σε υψηλές θερμοκρασίες. Η επίδραση του μεγέθους του πολυμερούς εξετάζεται με την προσομοίωση πολυεστέρων 2 διαφορετικών γενεών. Λεπτομέρειες της χωρικής διευθέτησης των φύλλων γραφενίου περιγράφονται ως συνάρτηση της θερμοκρασίας, ενώ μελετάται και η επίδραση της παρουσίας του γραφενίου σε στατικές και δυναμικές ιδιότητες του πολυμερούς. Η παρούσα μελέτη προβλέπει την ύπαρξη μιας υψηλής θερμοκρασίας υαλώδη μετάπτωση και στα 2 νανοςύνθετα υλικά, της οποίας η προέλευση αποδίδεται στις ιδιαιτερότητες της δενδριτικής δομής του πολυμερούς και στον χωρικό περιορισμό που επιβάλλει η παρουσία του γραφενίου στην δυναμική του, τόσο σε τοπική όσο και στην κλίμακα ολόκληρου του μορίου, καθώς μειώνεται η θερμοκρασία. Επιπλέον, διαπιστώνεται η οργάνωση των φύλλων γραφενίου σε στοίβες που αποτελούνται κυρίως από 2-3 φυλλίδια διατεταγμένα παράλληλα μεταξύ τους. Τα συμπεράσματα της παρούσα μελέτης μπορεί να βοηθήσουν στην ερμηνεία της συμπεριφοράς και την πρόβλεψη δυσικών ιδιοτήτων παρομοίων συνθέτων υλικών με βάση το γραφένιο και άλλα υπερδιακλασμένα πολυμερή.

στην εργασία

### **Detailed Study of the Dielectric Function of a Lysozyme Solution Studied with Molecular Dynamics Simulations**

Stelios Floros, Maria Liakopoulou-Kyriakides, Kostas Karatasos and Georgios E. Papadopoulos, *European Biophysics Journal*, 44, (8), 599-611 **2015**

επιστρατεύτηκε η προσέγγιση Fröhlich-Kirkwood καθώς και η θεωρία γραμμικής απόκρισης (Linear response theory) σε συνδυασμό με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής για την μελέτη της διηλεκτρικής απόκρισης της λυσοζύμης σε υδατικό διάλυμα. Με την προσέγγιση αυτή κατέστη δυνατή η αναπαραγωγή της διηλεκτρικής συμπεριφοράς του εν λόγω συστήματος όχι μόνο κατά ποιοτικό αλλά και κατά ποσοτικό τρόπο, μέσω κατάλληλου διαχωρισμού των κελυφών ενυδάτωσης (hydration shells) κοντά στην λυσοζύμη. Η λεπτομερής ανάλυση των αποτελεσμάτων οδήγησε στην ταυτοποίηση 2 δ-διαδικασιών σε συχνότητες 200 MHz ( $\delta_1$ ) και κοντά στο 1 GHz ( $\delta_2$ ). Η πρώτη ( $\delta_1$ ) σχετίζεται κυρίως με το πρώτο κέλυφος ενυδάτωσης, ενώ η δεύτερη ( $\delta_2$ ) με το δεύτερο κέλυφος ενυδάτωσης καθώς και με το νερό μακριά από την διαλυμένη ουσία. Επιπλέον, για πρώτη φορά βρέθηκαν ενδείξεις για την ύπαρξη μιας ακόμη γρηγορότερης διαδικασίας με χαρακτηριστική συχνότητα κοντά στα 0.1 THz. Τέλος, υπολογίστηκε η στατική διηλεκτρική σταθερά της λυσοζύμης με βάση τη προσέγγιση Fröhlich-Kirkwood και την θεωρία γραμμικής απόκρισης.

στην εργασία

### **Graphene/ poly(ethylene glycol) nanocomposites as studied by molecular dynamics simulations**

Roza-Eleftheria Roussou and Kostas Karatasos

Karatasos K.



Μελετήθηκαν με την μέθοδο προσμοιώσεων της μοριακής δυναμικής, διασπορές νανοφυλλιδίων γραφενίου σε πολυμερική μήτρα πολυ(αιθυλενοξειδίου), σε ένα ευρύ θερμοκρασιακό φάσμα. Βρέθηκε ότι τα φυλλίδια του γραφενίου οργανώνονται σε ολιγομερή συσσωματώματα αποτελούμενα από 2-3 φυλλίδια το καθένα. Στα εξετασθέντα συστήματα δεν παρατηρήθηκε κρυστάλλωση του πολυμερούς. Παρατηρήθηκε όμως μια ασθενής θερμική μετάβαση σε μια θερμοκρασία υψηλότερη από την θερμοκρασία υαλώδους μετάβασης που αντιστοιχεί το καθαρό πολυμερές. Η μετάβαση αυτή συσχετίστηκε με τον σχηματισμό ενός κινητικά «παγωμένου» δικτύου των συσσωματωμάτων γραφενίου. Κοντά και χαμηλότερα από την θερμοκρασία της μετάβασης, οι πολυμερικές αλυσίδες έλαβαν ακινητοποιημένες διαμορφώσεις με ένα μεγάλο ποσοστό να αντιστοιχεί σε διαμορφώσεις με μικρής απόσταση τέλους-τέλους των αλυσίδων. Οι αλυσίδες του μεγαλύτερου μοριακού βάρους παρουσίασαν μεγαλύτερο βαθμό παραμόρφωσης στο σχήμα τους. Η δυναμική του πολυμερούς έγινε αργότερη στα νανοςύνθετα, τόσο σε τοπική κλίμακα, όσο και στην κλίμακα ολόκληρης της αλυσίδας, ενώ και η θερμοκρασιακή εξάρτηση των χαρακτηριστικών χρόνων τους παρουσιάστηκε αισθητά διαφοροποιημένη σε σχέση με αυτήν του καθαρού πολυμερούς.

στην εργασία

### **Characterization of a Graphene Oxide/Poly(acrylic acid) Nanocomposite by means of Molecular Dynamics Simulations**

Kostas Karatasos and Georgios Kritikos, *RSC Advances*, 6, 109267–109277, 2016

Εξετάζεται με την μέθοδο των προσμοιώσεων μοριακής δυναμικής τα δομικά, δυναμικά και θερμοδυναμικά χαρακτηριστικά ενός νανοσυνθέτου πολύ(ακρυλικού οξέος)/οξειδίου του γραφενίου, καθώς και ένα σύστημα αμιγούς πολύ(ακρυλικού οξέος) ως σύστημα αναφοράς για σύγκριση. Η μελέτη της θερμικής συμπεριφοράς του συνθέτου έδειξε ότι η παρουσία του οξειδίου του γραφενίου είχε σαν αποτέλεσμα την μετατόπιση της θερμοκρασίας υαλώδους μετάβασης σε υψηλότερη θερμοκρασία (περίπου 40 βαθμούς) σε σχέση με το αμιγές πολυμερές, υποδεικνύοντας την αύξηση της θερμικής σταθερότητας του υλικού. Η μελέτη των υδρογονικών δεσμών μεταξύ των πολυμερικών αλυσίδων έδειξε ότι η παρουσία του πληρωτικού επιφέρει μια μικρή μείωση στους διαμοριακούς δεσμούς υδρογόνου, ενώ δεν φαίνεται να επιδρά στο ποσοστό των ενδο-πολυμερικών δεσμών. Ο αριθμός των διαμοριακών δεσμών υδρογόνου μεταξύ των πολυμερικών αλυσίδων φαίνεται να αυξάνεται με την μείωση της θερμοκρασίας λόγω της αύξησης της πυκνότητας. Μεταξύ του πολυμερούς και του πληρωτικού, ο κύριος τύπος υδρογονικών δεσμών είναι αυτός μεταξύ των οξυγόνων και των υδροξυλίων του πολυμερούς και του οξειδίου του γραφενίου. Ο χρόνος ζωής των υδρογονικών δεσμών μεταξύ των πολυμερικών αλυσίδων αυξάνεται με την μείωση της θερμοκρασίας αλλά δεν φαίνεται να επηρεάζεται σημαντικά από την παρουσία του πληρωτικού. Ο αντίστοιχος χρόνος ζωής των δεσμών μεταξύ του πολυμερούς και του πληρωτικού παρουσιάζει ισχυρότερη εξάρτηση από τη θερμοκρασία και είναι πολύ μεγαλύτερος από αυτήν των δεσμών μεταξύ των πολυμερικών αλυσίδων. Η δυναμική του πολυμερούς γίνεται αργότερη στο νανοςύνθετο, τόσο στην κλίμακα ολόκληρης της αλυσίδας όσο και στην τοπική κλίμακα (κλίμακα δεσμού). Ειδικότερα, η επιβράδυνση των τοπικών κινήσεων του πολυμερούς, γίνεται μεγαλύτερη όσο πλησιέστερα βρίσκονται οι εξεταζόμενοι δεσμοί στην επιφάνεια του πληρωτικού υλικού, ενώ φαίνεται να ακολουθούν μια σημαντική ισχυρότερη εξάρτηση από τη θερμοκρασία, ένδειξη για την αλλαγή του μηχανισμού τοπικής κίνησης προς την κατεύθυνση μιας πιο συνεργαστικής τοπικής δυναμικής κοντά στην διεπιφάνεια πολυμερούς/πληρωτικού υλικού.

στην εργασία

### **Frequency dependent non-thermal effects of oscillating electric fields in the microwave region on the properties of a solvated lysozyme system: a molecular dynamics study.**

Karatasos K.

μελετάται με την μέθοδο της μοριακής δυναμικής η διηλεκτρική απόκριση της πρωτεΐνης λυσοζύμης σε υδατικό περιβάλλον, με την εφαρμογή εναλασσόμενου ηλεκτρικού πεδίου στην περιοχή των μικροκυμάτων. Εξετάζονται με λεπτομέρεια δομικές και δυναμικές αλλαγές που μπορεί να προκληθούν από την εφαρμογή του πεδίου, ενώ γίνεται σύγκριση με θεωρητικές προβλέψεις και πειραματικά αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα φαίνεται να περιγράφονται ικανοποιητικά από την προσέγγιση Frohlich-Kirkwood στα πλαίσια της θεωρίας γραμμικής απόκρισης. Αξιόλογες δομικές αλλαγές της πρωτεΐνης παρατηρούνται μόνο σε συχνότητες κοντά στο μέγιστο της απορρόφησής της. Σε αυτή την περιοχή συχνοτήτων διαπιστώθηκε ότι διαφορετικές συχνότητες επηρεάζουν διαφορετικά τμήματα της πρωτεΐνης. Επιπλέον, έγινε διεξοδική μελέτη της κινητικής του σχηματισμού δεσμών υδρογόνου μεταξύ των μορίων νερού αλλά και μεταξύ του νερού και της λυσοζύμης στο πρώτο κέλυφος ενυδάτωσης, το οποίο έχει βρεθεί ότι παίζει σημαίνοντα ρόλο στις δομικές αλλαγές της πρωτεΐνης. Βρέθηκε ότι μια πιο ακριβής περιγραφή αυτής της διαδικασίας μπορεί να επιτευχθεί με την τροποποίηση του κινητικού μοντέλου των Luzar-Chandler κάτι το οποίο οδηγεί σε μια πιο ακριβή εκτίμηση των μέσων χρόνων επιβίωσης των δεσμών υδρογόνου, σε σχέση με την προϋπάρχουσα βιβλιογραφία.

στην εργασία

**Temperature Dependence of Dynamic and Mechanical Properties in Poly(acrylic acid)/Graphene Oxide Nanocomposites**

G. Kritikos and K. Karatasos, *Materials Today Communications*, 2017, 13, 359-366

περιγράφεται η εισαγωγή μιας νέας κατασταστικής εξίσωσης η οποία σε συνδυασμό με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής επιτρέπει την πρόβλεψη δυναμικών και μηχανικών ιδιοτήτων πολυμερικών νανοσυνθέτων υλικών κοντά στην υαλώδη περιοχή. Η νέα προτεινόμενη εξίσωση προβλέπει δύο συνιστώσες για τη διάχυση, αμέσως πάνω και αμέσως κάτω από τη θερμοκρασία υαλώδους μετάβασης. Εφαρμογή της νέας μεθοδολογίας δίνεται σε νανοςύνθετα οξειδίου του γραφενίου/πολύ (ακρυλικού οξέος), όπου και προβλέπει την μετατόπιση της θερμοκρασίας υαλώδους μετάβασης του νανοςυνθέτου σε σχέση με αυτήν του καθαρού πολυμερούς, η οποία οδηγεί σε σημαντική ενίσχυση των μηχανικών ιδιοτήτων του συνθέτου υλικού.

στην εργασία

**A microscopic view of graphene-oxide/poly(acrylic acid) physical hydrogels: effects of polymer charge and graphene oxide loading**

K. Karatasos and G. Kritikos, *Soft Matter*, 2018, 14, 614-627

εξετάζεται με λεπτομέρεια μέσω πλήρως ατομιστικών προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, φυσικές υδρογέλες που σχηματίζονται από πολυμερικό ηλεκτρολύτη (πολύ ακρυλικό οξύ) και οξείδιο του γραφενίου, σε 2 διαφορετικές καταστάσεις φόρτισης του ηλεκτρολύτη και σε 2 διαφορετικές συγκεντρώσεις του οξειδίου του γραφενίου. Βρέθηκε ότι οι διαφοροποιήσεις αυτών των παραμέτρων επέφεραν δραστικές αλλαγές στα γενικά μορφολογικά χαρακτηριστικά των συνθέτων υλικών, στο βαθμό της φυσικής προσρρόφησης των πολυηλεκτρολυτικών αλυσίδων στην επιφάνεια του οξειδίου του γραφενίου, στην δυναμική απόκριση του πολυμερούς σε τοπική και εκτεταμένη κλίμακα, στις κατανομές των φορτίων γύρω από τα υλικά, καθώς και στην κινητικότητα των ιόντων. Όλα αυτά τα μικροσκοπικά χαρακτηριστικά αναμένεται να επιδράσουν σημαντικά σε μακροσκοπικές φυσικές ιδιότητες των υδρογελών, όπως στην μηχανική και την ηλεκτρική τους συμπεριφορά.