

ΕΠΩΝΥΜΟ:	Δασκαλάκης
ΟΝΟΜΑ:	Βαγγέλης
ΤΟΠΟΣ ΓΕΝΝΗΣΗΣ:	Ηράκλειο. Κρήτη – Ελλάδα
ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΓΕΝΝ:	24/12/1978
ΤΗΛ:	+30 6942436906 (GR), +357 96832613/ 25002458 (CY)
E-MAIL:	evangelos.daskalakis@cut.ac.cy



ORCID orcid.org/0000-0001-8870-0850

ΜΕΡΟΣ Α – ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ & ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ

1996 – 2000: Προπτυχιακές Σπουδές στο Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης (βαθμός πτυχίου: **8.87/10**, βραβείο Αριστείας).

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

ΜΕΡΟΣ Β – ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ & ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ

2006 – 2010: Ερευνητικός Συνεργάτης με υποτροφία (GRID COMPUTATIONAL CHEMISTRY – GRID-COMP-CHEM – Marie-Curie Host Fellowship for the Transfer of Knowledge **EU ToK grant No. MTKD-CT-2005-029583**) στο Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λέιζερ, στο Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας (ΙΤΕ, **IESL-FORTH**) – Ελλάδα.

2008 – 2009: *Μεταδιδακτορικός Επισκέπτης* στο Υπερ-υπολογιστικό κέντρο της Βαρκελώνης (**BSC**), Τμήμα Φυσικών Επιστημών και Επιστημών Ζωής (GRID COMPUTATIONAL CHEMISTRY – GRID-COMP-CHEM – Marie-Curie Host Fellowship for the Transfer of Knowledge **EU ToK grant No. MTKD-CT-2005-029583 & Υποτροφία HPC-Europa2**).

2005: *Επισκέπτης Υποψήφιος Διδάκτορας*, Grant-in-Aid for Scientific research (Grant-in-Aid for Specially Promoted Research) FY2005. Ινστιτούτο Οκαζάκι για Βιοεπιστήμες, Εθνικό Ινστιτούτο Φυσικών Επιστημών, Υπερ-υπολογιστικό κέντρο, Οκαζάκι, Αϊτσι / Ιαπωνία.

2000 – 2006: M.Sc. & Ph.D, Θεωρητική και Υπολογιστική Βιοφυσική-Χημεία, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης –

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

Τίτλος Ph.D: «Βιοενεργητικοί μηχανισμοί του O₂ και του NO με την εφαρμογή της Θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας».

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

(2) **Τίτλος Προγράμματος: Δυναμική και δραστικότητα των ενζυμικών διεργασιών που περιλαμβάνουν την αα₃ αιμο-χαλκο οξειδάση από το *P. denitrificans*: Φασματοσκοπία και Θεωρητικοί Υπολογισμοί**
Χρηματοδότηση: Υπουργείο Παιδείας (Ελλάδα) - Πυθαγόρας Ι (2006)

(3) **Τίτλος Προγράμματος: Βιοενεργητικοί Μηχανισμοί του O₂ και του NO με την εφαρμογή της θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας**
Χρηματοδότηση: Υπουργείο Παιδείας / Ε.Ε. Ηράκλειτος (2002-2005)

(4) **Τίτλος Προγράμματος: Δομική μελέτη της αναγωγάσης του μονοξειδίου του αζώτου (nor)**
Χρηματοδότηση: Υπουργείο Παιδείας (Ελλάδα), Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας ΓΓΕΤ (2000-2001)

Μεταπτυχιακά Μαθήματα (MSc/ Ph.D, βαθμός: 9.75/10):

(α) Ειδικά θέματα στη Βιοχημεία, (β) Φαρμακευτική Χημεία, (γ) Φασματοσκοπία Υπέρυθρου /*Raman* για Βιολογικά Μόρια, (δ) Υπολογιστική Περιβαλλοντική Χημεία, (ε) Πολυδιάστατη Φασματοσκοπία NMR, (f) Δονητική Φασματοσκοπία

ΜΕΡΟΣ C – ΕΡΓΟΔΟΤΗΣΗ & ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΕΙΣ

Ιαν 2015 – σήμερα:

Επίκουρος Καθηγητής, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος.

1. Διεθνικό πρόγραμμα κινητικότητας HPC-Europa3 (HPC17K4FRZ) για Σαββατική άδεια (2018). Τμήμα Φυσικής και Επιστημών Γης (Τομέας Βιοφυσικής), Πανεπιστήμιο Jacobs, Βρέμη, Γερμανία.
2. Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας (Κύπρος) **POST-DOC/0916/0049 (~160.000 Ευρώ)**
«Ενεργοποίηση της Φωτοπροστασίας στις πρωτεΐνες-κεραίες του Φωτοσυστήματος II με Μοριακές Προσομοιώσεις και Φασματοσκοπία *Raman*» ως συντονιστής.

3. Cy-Tera-LinkSCEEM, PRACE HPC επιχορηγήσεις σε υπολογιστικό χρόνο (*standard core-hours*) ~5mn συνολικά για τα ερευνητικά προγράμματα: pro14b114s1, pro14b105s1 and pro15a113s1, pro15b104, pro16a105, pro16b103, pro17a103, pro17b101, PRACE DECI-13 LHCflex, και PRACE DECI-14 AIMDPSII ως συντονιστής/PI.
4. COST Action CM1401: Our Astro-Chemistry History. Επιτροπή Διαχείρισης (έναρξη Απρίλιος 2015).
5. Επιχορήγηση κινητικότητας Erasmus για εκπαίδευση (επισκέπτης στην Ακαδημία Επιστημών της Τσεχίας, Ινστιτούτο Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, Πράγα). Μάης 2015.

Δεκ 2010 – Δεκ 2014:

Λέκτορας, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος.

1. Εναρκτήρια Χρηματοδότηση, Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου (40.000 €)
2. “Activation and reduction of Nitric Oxide (NO) to laughing gas (N₂O) by Nitric Oxide Reductase (NOR) and heme-copper *cbb₃* oxidase (Πηγή: Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας €133.181. ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ/ΘΕΠΙΣ/0609/05 (ΒΕ): (2011-2013), ως συνεργάτης.
3. Cy-Tera & LinkSCEEM HPC επιχορηγήσεις υπολογιστικού χρόνου (860.000 ώρες, *standard core-hours*), για τα ερευνητικά προγράμματα: LinkSCEEM Isprob104s1, Is-pro13a121s1, pro13b113s1, και pro14a120) ως συντονιστής.
4. The Deutscher Akademischer Austauschdienst (DAAD)/ German Academic Exchange Service. Επιχορήγηση για Δικτύωση ASEMUNDUS (συνεργασία Πανεπιστημίων Ασίας/ Ευρώπης).
5. COST Action ES1206: Advanced Global Navigation Satellite Systems tropospheric products for monitoring severe weather events and climate (GNSS4SWEC) – Επιτροπή Διαχείρισης & Μέλος WG2 (λήξη Απρίλιος 2015)

ΜΕΡΟΣ D – ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ/ ΚΟΙΝΟΤΗΤΕΣ

Ενεργό -

- (1) Μέλος Αμερικανικής Ένωσης Χημικών (ACS)
- (2) Μέλος Ένωσης Βιοφυσικών (BPS)
- (3) Μέλος Επιτροπής Κατανομής Υπολογιστικού Χρόνου LinkSCEEM/ Cytera-EM (Ινστιτούτο Κύπρου)
- (4) Συμβούλιο του φόρουμ Χρηστών Υπερ-υπολογιστικού Κέντρου (Ινστιτούτο Κύπρου)

Τέως -

- (1) Μέλος Βασιλικής Ένωσης Χημείας (RSC) (2014-2016)
- (2) Μέλος Αμερικανικής Ένωσης Γεωφυσικών (AGU) (2016)

Βοηθός Διδασκαλίας (MSc, Ph.D, postdoc: 2000-2008)

Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Χημείας

(α) Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας ΙΙ, 2001, (β) Εργαστήριο Γενικής Χημείας Ι, 2001, (γ) Γενική Χημεία Ι, 2002, (δ) Βιοχημεία Ι, 2003, 2006 & 2008.

Ανεξάρτητη Διδασκαλία (Λέκτορας, Επίκουρος Καθηγητής: 2011-σήμερα)

Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος

Τα τελευταία χρόνια (2011-2017), έχω/ είχα ανεξάρτητη **διδασκαλία** στα παρακάτω μαθήματα πανεπιστημιακής εκπαίδευσης, στο Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος, στο Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, σε **μεταπτυχιακό**: (1) **Υπολογιστική Περιβαλλοντική Χημεία, Βιοχημεία και Βιολογία** (Εαρινά εξάμηνα 2012-2017), (2) **Ειδικά Θέματα στην Περιβαλλοντική Βιοεπιστήμη** (Φθινοπωρινό εξάμηνο 2014), και **προπτυχιακό επίπεδο**: (3) **Υπολογιστικά Περιβαλλοντικά Μοντέλα & Εισαγωγή στο MATLAB** (Εαρινά εξάμηνα 2011-σήμερα) (4) **Μοντέλα Διασποράς** (Φθινοπωρινά εξάμηνα 2011-2017), (5) **Φυσική Περιβάλλοντος – Μετεωρολογία** (Φθινοπωρινό εξάμηνο 2011) και (6) **Αρχές Θερμοδυναμικής** (Εαρινά εξάμηνα 2011-2012).

Ακαδημαϊκά & Διοικητικά καθήκοντα:

Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος

1. Συγκλητική Επιτροπή Συστημάτων Πληροφορικής και Τεχνολογίας (ΣΠΤ)
(2012-σήμερα)

- (a) Αναθεωρήσεις του ετήσιου προϋπολογισμού του Πανεπιστημίου που αφορά την Υπηρεσία ΣΠΤ
- (b) Επιτροπή του Έργου IdM (IAM) για την ενσωμάτωση του "Identity Access Management" στα πληροφοριακά συστήματα του Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου
- (c) Επιτροπή για το Έργο «Λογισμικά Microsoft για φοιτητές»
- (d) Επιτροπή για την πολιτική και τους κανόνες πρόσβασης στο διαδίκτυο από τους χρήστες του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου

2. **Επιτροπή Προπτυχιακών & Μεταπτυχιακών Σπουδών** του Τμήματος (2011-σήμερα)
3. **Επιτροπή Διασφάλισης Ποιότητας** του Τμήματος (2011-20178)
4. Την *Ad hoc* **Επιτροπή Μονάδων ECTS** του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου (2014)
5. Την *Ad hoc* **Επιτροπή για το «Ανοιχτό Πανεπιστήμιο»** (2016-σήμερα)
6. Την **Επιτροπή Παγκύπριων Εξετάσεων** για την εισαγωγή στην Ανώτερη Εκπαίδευση Κύπρου-Ελλάδας (2014)
7. Μέλος της **εφορευτικής επιτροπής** για την εκλογή των Ακαδημαϊκών μελών του Συμβουλίου του Πανεπιστημίου (2012)

ΜΕΡΟΣ F – ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

Είμαι υπεύθυνος του Εργαστηρίου Υπολογιστικών Περιβαλλοντικών Μοντέλων (CEM) στο Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος (Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου). Οι ανεξάρτητες ερευνητικές μου δραστηριότητες επικεντρώνονται σε υπολογιστικές μελέτες (μοντέλα) μεγάλων βιολογικών ή μικρών αέριων μορίων που συμμετέχουν σε διαδικασίες βιολογικής και περιβαλλοντικής σημασίας. Μεταξύ άλλων, η έρευνά μου περιλαμβάνει τη βιοφυσική και βιοχημεία πίσω από τη δομή και λειτουργία των αιμο-πρωτεϊνών, όπως η μυοσφαιρίνη (Mb) ή η κυτοχρωμική c οξειδάση (CcO) στην αλληλεπίδρασή τους με ατμοσφαιρικά αέρια (COx, NOx). Με αυτό τον τρόπο παίρνουμε πληροφορίες σχετικά με τη λειτουργία τους σε ζωντανούς οργανισμούς ή τον πιθανό τους ρόλο ως περιβαλλοντικοί αισθητήρες. Οι μελέτες μου στο Φωτοσύνστημα II (PSII) σχετίζονται με το μηχανισμό απόσβεσης της περίσσειας ηλιακής ενέργειας (Μη Φωτοχημική Απόσβεση ή *Non Photochemical Quenching*, NPQ) και τη διαδικασία φωτοπροστασίας των φυτών που σχετίζεται άμεσα με ένα μεταβαλλόμενο κλίμα, την παραγωγή ανθεκτικών φυτών, την έκλυση O₂ και τον κύκλο του άνθρακα. Παράλληλα, οι ερευνητικές μου δραστηριότητες αφορούν και στη φυσικοχημεία της δυναμικής των μορίων νερού (δυναμική διάλυσης - *hydration dynamics*), που αποτελούν τη βάση για μελλοντικές

έρευνες στο πεδίο της αλληλεπίδρασης πρωτεϊνών και διαλύτη (*protein hydration dynamics*).

Οι όλο και αυξανόμενες ανησυχίες σχετικά με τα περιβαλλοντικά θέματα, οδηγούν τους επιστήμονες στην αναζήτηση ανανεώσιμων πηγών ενέργειας, ώστε να καλύψουν την αύξηση στην παγκόσμια ζήτηση. Στη φύση, ο κύκλος του οξυγόνου που διατηρεί τη ζωή: $O_2 + 4e^- + 4H^+ \rightleftharpoons 2H_2O$ υποκινείται από διεργασίες όπως η φωτοσύνθεση και η κυτταρική αναπνοή (οξειδωτική φωσφορυλίωση). Στις διεργασίες αυτές, η ενέργεια εκλύεται-συλλέγεται με σχάσεις δεσμών και καταναλώνεται-αποθηκεύεται σε διαδικασίες δημιουργίας δεσμών. Οι επιστήμονες στοχεύουν συνεχώς αυτές τις διαδικασίες σε έρευνες αιχμής, ώστε να σχεδιάσουν συνθετικά συστήματα που προσομοιώνουν τα βασικά χαρακτηριστικά τους, αναπαράγουν τη λειτουργία και δίνουν βασικές πληροφορίες του μηχανισμού τους. Επιπλέον, ειδικά για τη Φωτοσύνθεση και τα μοντέλα του Φωτοσυστήματος-II, ο σχεδιασμός μπορεί να οδηγήσει σε εφαρμογές όπως η τεχνητή φωτοσύνθεση και η αποδοτική συγκομιδή φωτός σε ηλιακά κελιά. Μπορεί να συσχετιστεί, σε βάθος χρόνου, με τη δημιουργία ανθεκτικών φυτών σε ένα μεταβαλλόμενο κλίμα (αυξανόμενη ηλιακή ακτινοβολία, κύματα καύσωνα, αύξηση της αλατότητας σε ένα συνεχώς φθίνον δίκτυο ύδρευσης). Ωστόσο, εμπόδιο για μια αποδοτικότερη διαδικασία Φωτοσύνθεσης αποτελεί το γεγονός πως σε συνθήκες υψηλής έκθεσης σε φως, οι φωτοσυνθετικοί οργανισμοί ενεργοποιούν τη φωτοπροστασία τους και μετατρέπουν ένα μεγάλο τμήμα της φωτονιακής ενέργειας σε θερμότητα. Πέρα από τις πρόσφατες μελέτες στο CP29 και τα μείζονα LHClI, από την ερευνητική μου ομάδα, υπάρχει έλλειψη στη βιβλιογραφία από σχετικές μελέτες σε ατομική κλίμακα, που θα μπορούσαν να παράσχουν τις κύριες αλλαγές στη διαμόρφωση των πρωτεϊνών που συμμετέχουν στη διαδικασία και είναι απαραίτητες για τη βιοχημεία της φωτοπροστασίας. Οι πρωτεΐνες αυτές μπορούν να στοχευτούν στη βιοτεχνολογία. Η έρευνα αιχμής σε Φωτοσύνθεση και Οξειδωτική Φωσφορυλίωση παρέχει (α) τη βαθύτερη κατανόηση του μοριακού μηχανισμού φωτοπροστασίας σε ατομική κλίμακα που είναι ακόμα υπό αναζήτηση, και (β) το σύνολο του βιοχημικού κύκλου του οξυγόνου, και τις μηχανιστικές ομοιότητες μεταξύ των οξειδοαναγωγικά ενεργών μεταβατικών μετάλλων (Fe, Cu, Mn) που δημιουργούν ή σχάζουν τον

ισχυρό δεσμό O–O. Η κυτοχρωμική c Οξειδάση (CcO) καθίσταται σε αυτή την οπτική ένα σημαντικό επίσης ένζυμο-στόχος. Μια διττή οπτική με συνδυασμό υπολογιστικών και πειραματικών τεχνικών βιοχημείας, βιοφυσικής και βιολογικής χημείας καθιστά την ομάδα μου μια από τις πιο κατάλληλες να μελετήσουν αντίστοιχους απαιτητικούς ερευνητικούς στόχους, καθώς είναι επίσης σημαντικό η Ανατολική Μεσόγειος να εμπλακεί στον τομέα αυτό.

Είμαι ομότιμος κριτής σε περιοδικά όπως ACS Physical Chemistry, RSC Phys. Chem. Chem. Phys., RSC Advances, Springer J. Molecular Modeling, περιοδικά OMICS Chemistry, Biochemistry & Pharmacology, και για ερευνητικές προτάσεις σε Υπερυπολογιστικά (High Performance Computing, HPC) Κέντρα (LinkSCEEM, CyTera-EM, GRNET HPC, CSCS-Εθνικό Κέντρο Υπερυπολογιστών Ελβετίας). Ανήκω στην Εκδοτική Ομάδα του περιοδικού Chemistry of Compounds (Verizona Publisher) και των περιοδικών SRL Biology του εκδοτικού οίκου SciRes Literature.

ΜΕΡΟΣ G – ΔΙΕΘΝΕΙΣ ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ

Καθ. Φαράντος Σταύρος, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης & Ίδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας, Ελλάδα

Prof. Teizo Kitagawa, Specially Appointed Professor; Graduate School of Life Science, University of Hyogo

Prof. Guallar Victor, ICREA Research Professor at Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS). Life & Medical Sciences.

Prof. Alexander Ruban, School of Biological and Chemical Sciences, Queen Mary, University of London

Prof. Ulrich Kleinekathöfer, Computational Physics and Biophysics Group, Jacobs University Bremen gGmbH, Department of Physics & Earth Sciences Focus Area Health

ΜΕΡΟΣ Η – ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΟ ΕΡΓΟ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ

Προπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (Πτυχίο)

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

Μεταπτυχιακές Διπλωματικές Εργασίες (Master's)

Ολοκληρωμένες (3): Χαραλάμπους Φεβρωνία, Ιωάννου Νεοφύτα, Παπαδάτος Σωτήρης

Διδακτορικές Εργασίες/ Υποψήφιοι Διδάκτορες (Ph.D):

Ενεργές (3): Σαλάμεχ Αναστασία, Παπαδάτος Σωτήρης, Κωνσταντίνου Αναστασία

Συμμετοχή στην Επιτροπή Αξιολόγησης για Διπλωματικές Εργασίες σε

Προπτυχιακό ή Μεταπτυχιακό Επίπεδο: 20

ΜΕΡΟΣ Ι – ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ ΜΕ ΟΜΟΤΙΜΗ ΚΡΙΣΗ

**Συγγραφέας Αλληλογραφίας*

01. V. Daskalakis V* *Protein-Protein Interactions within Photosystem II under Photo-protection: The Synergy between CP29 Minor Antenna, Subunit S (PsbS) and Zeaxanthin at all-atom resolution (2018) Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 11843 – 11855.*

02. Daskalakis V*, and Papadatos S *The Photosystem II Subunit S under Stress (2017) Biophys. J. (Cell) 113 (11), 2364-2372.*

03. Papadatos S, Charalambous C A, and Daskalakis V* *A pathway for protective*

quenching in antenna proteins of Photosystem II (2017) Scientific Reports (NPG) 7, 2523. doi: 10.1038/s41598-017-02892-w.

04. Ioannou A, **Daskalakis V**, and Varotsis C* *Detection of Maillard reaction products by a coupled HPLC-Fraction collector technique and FTIR characterization of Cu(II)-complexation with the isolated species (2017) J. Mol. Struct. 1141, 634–642.*

05. Ioannou A, Lambrou A, **Daskalakis V*** and Pinakoulaki E* *Coupling of helix E-F motion with the O-nitrito and 2-nitrovinyl coordination in myoglobin (2017) Biophys. Chem. 221, 10-16.*

06. Ioannou A, Lambrou A, **Daskalakis V** and Pinakoulaki E* *Nitrite coordination in myoglobin (2017) J. Inorg. Biochemistry (JIB), 166, 49-54.*

07. Ioannidis NE, Papadatos S, and **Daskalakis V*** *Energizing the Light Harvesting Antenna: Insight from CP29 (2016) BBA – Bioenergetics, 1857 (10), 1643-1650.*

08. Salameh A, Vorka, F, and **Daskalakis V*** *Correlation Between Surface Tension and the Bulk Dynamics in Salty Atmospheric Aquatic Droplets (2016) J. Phys. Chem. C, 120 (21), 11508-11518*

09. **Daskalakis V**, Ohta T, Kitagawa T, Varotsis C* *Structure and properties of the catalytic site of nitric oxide reductase at ambient temperature (2015) Biochim. Biophys. Acta – Bioenergetics, 1847(10), 1240–1244.*

10. **Daskalakis V***, Charalambous F, Demetriou DC, Georgiou AG *Surface-Active Organic Matter induces salt morphology transitions during new atmospheric particle formation and growth (2015) RSC Adv., 5, 63240–63251.*

11. **Daskalakis V***, Charalambous F, Panagiotou F, Nearchou I *Effects of Surface Activity on Carbon Dioxide Nucleation in Atmospheric Wet Aerosols: A Molecular Dynamics Study (2014) Phys. Chem. Chem. Phys., 16: 23723-23734.*

12. **Daskalakis V***, Hadjicharalambous M *Hexagonal Ice Stability and Growth in the presence of Glyoxal and Secondary Organic Aerosols (2014) Phys. Chem. Chem. Phys. 16(33): 17799-17810.*

13. Pinakoulaki E, **Daskalakis V**, Ohta T, Richter O M, Budiman K, Kitagawa T, Ludwig B, Varotsis C* *The protein effect in the structure of two ferryl-oxo intermediates at the same oxidation level in the heme-copper binuclear center of cytochrome c oxidase. (2013) J. Biol. Chem. 288(28): 20261-20266.*

14. Porrini M, **Daskalakis V**, Farantos SC* *Exploring the Topography of Free Energy Surfaces and Kinetics of Cytochrome c Oxidases interacting with small ligands (2012) RSC Adv. 2: 5828 - 5836.*

15. Kampanarakis A, Farantos SC*, **Daskalakis V** and Varotsis C *Non-Linear Vibrational Modes in Biomolecules: a periodic orbits description*. (2012) **Chem. Phys. Elsevier**, 399: 258–263.
16. Pinakoulaki E, **Daskalakis V** and Varotsis C* (All authors have contributed equally to this work) *The origin of the $Fe^{IV}=O$ intermediates in cytochrome aa_3 oxidase*. (2012) **BBA Bioenergetics**, 1817: 552-557.
17. **Daskalakis V**, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C* *Regulation of Electron and Proton Transfer by the Protein Matrix of Cytochrome c Oxidase*. (2011) **J. Phys. Chem. B**, 115(13): 3648-3655.
18. **Daskalakis V***, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C *Vibrational Resonances and Cu_B displacement controlled by proton motion in Cytochrome c Oxidase*, (2010) **J. Phys. Chem. B**, 114(2): 1136-1143.
19. **Daskalakis V**, Varotsis C* *Binding and Docking Interactions of NO, CO and O_2 in Heme Proteins as Probed by Density Functional Theory, Review for the Special Issue on "Application of Density Functional Theory in Chemical Reactions"*. (2009) **Int. J. Mol. Sci.**, 10: 4137-4156.
20. Porrini M*, **Daskalakis V**, Farantos SC, Varotsis C *Heme Cavity Dynamics of Photodissociated CO from ba_3 -Cytochrome c Oxidase: The Role of Ring-D Propionate*, (2009) **J. Phys. Chem. B**, 113(35): 12129-12135.
21. **Daskalakis V**, Farantos SC*, Varotsis C *Assigning vibrational spectra of ferryl-oxo intermediates of cytochrome c oxidase by periodic orbits and Molecular Dynamics*, (2008) **J. Am. Chem. Soc** 130(37): 12385-12393.
22. **Daskalakis V**, Pinakoulaki E, Stavrakis S, Varotsis C* *Probing the environment of Cu_B in heme-copper oxidases*. (2007) **J. Phys. Chem. B** 111: 10502-10509.
23. Pinakoulaki E, Yoshimura H, **Daskalakis V**, Yoshioka S, Aono S, Varotsis C* *Two ligand binding sites in the O_2 -sensing signal transducer HemAT: Implications for ligand Recognition/ Discrimination and signaling*. (2006) **Proc. Natl. Acad. Sci. USA** 103: 14796-14801.
24. Pinakoulaki E, Koutsoupakis C, Stavrakis S, Marialena A, Papadopoulos G, **Daskalakis V**, Varotsis C* *Structural dynamics of Heme-copper oxidases and Nitric oxide reductases: Time-Resolved step-scan FTIR and Time-resolved Resonance Raman studies*. (2005) **J. Raman Spec.** 36: 337-349.
25. Koutsoupakis C, Pinakoulaki E, Stavrakis S, **Daskalakis V**, Varotsis C* *Time-resolved step-scan Fourier transform infrared investigation of heme-copper oxidases: implications for O_2 input and H_2O/H^+ output channels*. (2004) **Bioch. Biophys. Acta** 1655: 347-352.

ΚΕΦΑΛΑΙΑ ΣΕ ΒΙΒΛΙΑ, ΑΡΘΡΑ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗΣ

- 01.** Salameh A, and **Daskalakis V*** *Atmospheric Ice Nucleation by Glassy Organic Compounds: A Review* (2017), **Chem. Comp. J** 1(1): 13-23.
- 02.** **Daskalakis V**, Varotsis C* *Probing the Action of Cytochrome c Oxidase* (2014) *The Structural Basis of Biological Energy Generation, Advances in Photosynthesis and Respiration*, 39 (10): SBN 978-94-017-8742-0.
- 03.** **Daskalakis V***, Farantos S C, Varotsis C *Tuning heme functionality: the cases of Cytochrome c Oxidase and Myoglobin Oxidation* (2012), **LNCS – Springer-Verlag Berlin, Heidelberg**, p. 304-315. ISBN: 978-3-642-31124-6.
- 04.** **Daskalakis V**, Giatromanolakis M, Porrini M, Farantos, SC* and Gervasi O *Grid Computing Multiple Shooting Algorithms for Extended Phase Space Sampling and Long Time Propagation in Molecular Dynamics. Computer Physics*, Chapter 4 pp. 1-18, **2011** © Nova Science Publishers, Inc. Editors: B. S. Doherty, A. N. Molloy. ISBN 978-1-61324-790-7.

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΣΥΝΕΔΡΙΑ ΜΕ ΟΜΟΤΙΜΗ ΚΡΙΣΗ

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

ΜΕΡΟΣ J – ΣΥΜΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ – ΟΜΑΔΕΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΣΕΜΙΝΑΡΙΑ

- 1.** **Daskalakis V.** 62nd Annual Meeting Biophysical Society, **S(T)IMULATING THE INTERPLAY BETWEEN PHOTOSYSTEM II PROTEINS AND THE XANTHOPHYLL CYCLE IN PHOTOPROTECTION**, San Francisco, USA, 17-21 February 2018
- 2.** **Daskalakis V.** 3^d EMN Meeting on Computation and Theory – Molecular Dynamics and Its Applications, **The effect of proton and potential gradients on integral membrane proteins: Insights from Molecular Dynamics simulations**, Dubai UAE, 6-10 November 2017 (Invited Talk)
- 3.** **Daskalakis V**, Papadatos S. 42nd FEBS Congress (from molecules to cells and back) – **The Photosystem II Subunit S Dynamics under Stress**, Jerusalem Israel, 10-14 September 2017 (Poster).

4. **Daskalakis V**, Salameh A, AGU 2016 Fall Meeting – ***Correlation Between Surface Tension and the Bulk Dynamics in Salty Atmospheric Aquatic Droplets, San Francisco USA, 12-16 December 2016 (Poster).***

5. **Daskalakis V**, Ioannidis NE, Papadatos S. 79th Harden Conference – Oxygen Evolution and Reduction – Common Principles: **Tuning of a conformational change in CP29 from spinach: from Light Harvesting to Photoprotection**, Innsbruck Austria, 16-20 April 2016 (Poster+Talk).

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

7. Organizational Committee “12th Greece-Cyprus Conference on Chemistry 2015”, 8-10 May 2015, Thessaloniki Greece

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

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

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

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

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

13. **Daskalakis V**, Varotsis C ***Probing the effect of the proximal and distal to the heme a₃ environments in the Cytochrome c Oxidase dioxygen reaction***, 15th International Conference on Biological Chemistry (ICBIC15), 7-12 August, Vancouver, Canada, 2011.

14. CD-ADAPCO, STAR-CCM+ Training School, 10-12 May 2011, London, UK.
15. Daskalakis V, Farantos S C, Guallar V, Varotsis C ***QM/MM Calculations on Cytochrome c Oxidase: Probing of electron and proton pump coupling***, TAM 2010 MEETING, Helsinki 15-17 June 2010.
16. **Expanding the Frontiers of Molecular Dynamics Simulations in Biology**, 23-25 November, Institut d'Estudis Catalans, Barcelona – Spain, 2009 (Joint BSC - IRB Barcelona Conference).
17. Aug. 31 – Sept. 5 2009: Summer School on Simulation Approaches to Problems in Molecular and Cellular Biology, Miramar Palace, San Sebastian, Spain. **Cecam** (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire), *under Psi-K scholarship*.
18. Daskalakis V, Farantos S C, Guallar V, Varotsis C ***Towards the Understanding of His411-Fe^{IV}=O Spectroscopic Properties in Ferryl Intermediate of Cytochrome c Oxidase + O₂ Reaction: A Theoretical QM/MM, MD Approach***, 14th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (ICBIC14), 25-30 July, Nagoya, Japan, 2009. **SBIC (The Society of Biological Inorganic Chemistry)** *Poster Award for outstanding contribution*.
19. Porrini M, Daskalakis V, Farantos SC, Varotsis C ***Heme cavity dynamics of photo-dissociated CO from ba₃-cytochrome c oxidase: The role of ring-D propionate***, 10th Congress in Chemistry Greece – Cyprus, 2-4 July Heraklion, Greece, 2009.
20. a. Daskalakis V, Farantos C S, Varotsis C **Assigning Vibrational Spectra of Ferryl-Oxo Intermediates of Cytochrome c Oxidase by Periodic Orbits and Molecular Dynamics**,
b. Daskalakis V, Varotis C **Cytochrome c Oxidase + O₂ reaction intermediates as probed by Density Functional Theory: The Proximal and Distal to heme a₃ effects**,
c. Daskalakis V, Varotsis C **Theoretical Studies of Metal-NO_x species, isolated and in aqueous solutions: Raman bands**, 10th Congress in Chemistry Greece – Cyprus, 2-4 July Heraklion, Greece, 2009.
21. 15-18 Sept. 2008: **Cost Training School On Molecular And Material Science Grid Applications** - Trieste, Italy.
22. Gervasi O, Farantos S C, Daskalakis V, Giatromanolakis M ***The Study of cytochrome c Oxidase on the EGEE Grid***, 3d EGEE User Forum, Clermont-Ferrand, France, 2008.
23. Daskalakis V, Giatromanolakis M, Farantos SC, Gerbasi O ***EGEE: Applications in Classical and Quantum Molecular Dynamics***, First Hellas Grid User Forum, Athens, Greece, 2007.

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

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

25. Pinakoulaki E, Ohta T, **Daskalakis V**, Aggelaki M, Kitagawa T, Ludwig B, Varotsis C ***Diogen activation and bond cleavage in cell respiration as probed by resonance raman spectroscopy***, The second International Symposium on Biomolecular Chemistry (**ISBC2006**), Konan Fiber, Fiber, Konan University, Japan, 2006.

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

Αναλυτική λίστα με τις περιλήψεις των δημοσιευμένων εργασιών και τους δείκτες αντίκτυπου των αντίστοιχων περιοδικών για τα τελευταία 5 χρόνια (5-year Impact Factors).

*Συγγραφέας Αλληλογραφίας/ Υπεύθυνος

01. V. Daskalakis V* *Protein-Protein Interactions within Photosystem II under Photo-protection: The Synergy between CP29 Minor Antenna, Subunit S (PsbS) and Zeaxanthin at all-atom resolution (2018) Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 11843 – 11855.

Impact Factor: 4.216

Η δημιουργία πρωτεϊνικών συμπλόκων αποτελεί σημαντικό μέρος των διεργασιών υποστήριξης ζωής σε κυτταρικό επίπεδο. Στο Φωτοσυστήμα II (PSII) των ανώτερων φυτών, υπάρχει μια ευαίσθητη ισορροπία μεταξύ συγκομιδής φωτός και φωτο-προστασίας που περιλαμβάνει πρωτεϊνικά σύμπλοκα, σε συνθήκες μεταβαλλόμενης έντασης φωτός. Η ισορροπία αυτή βρίσκεται ακόμα υπό εξερεύνηση. Στη μελέτη αυτή, συνδυάζονται μεθοδολογίες αιχμής που βασίζονται στη Μοριακή Δυναμική (MD) και παρέχουν πληροφορίες σε δομικό και ενεργειακό επίπεδο για ένα τέτοιο σύμπλοκο – μεταξύ της CP29 ελάσσονας κεραίας συγκομιδής φωτός και της υπομονάδας S του PSII (PsbS). Το μικροσκοπικό μοντέλο CP29-PsbS περιλαμβάνει την εκτενή δειγματοληψία όλων των καταστάσεων του συμπλόκου, σε ατομική κλίμακα, παρουσία της φωτο-προστατευτικής Ζεαξανθίνης (Zea). Παρουσιάζεται, έτσι, μια καλά ορισμένη διεπιφάνεια αλληλεπίδρασης CP29-PsbS, που τοποθετείται στη δομή του υπερ-συμπλόκου PSII. Προκύπτουν μακροσκοπικές συνδέσεις και αλληλεπιδράσεις κατά μήκος των μονοπατιών μεταφοράς ενέργειας από τις κεραίες στον πυρήνα του PSII (PsbS-CP29-CP24-CP47). Οι αλληλεπιδράσεις αυτές δικαιολογούνται στο πλαίσιο της πειραματικής βιβλιογραφίας, καθώς οι προηγούμενα αφανείς λεπτομέρειες σε ατομικό επίπεδο, γίνονται τώρα γνωστές. Τα αποτελέσματα από αυτή τη μελέτη συζητούνται στο πλαίσιο της Μη-Φωτοχημικής Απόσβεσης (NPQ) του Φθορισμού της Χλωροφύλλης, ενός μηχανισμού προστασίας του Φωτοσυστήματος από την περίσσεια ενεργειακή φόρτιση (διέγερση). Η Zea βρίσκεται στη διεπιφάνεια μεταξύ των PsbS-CP29 και προτείνεται μια ισορροπία μεταξύ της μετάβασης της PsbS από διμερές σε μονομερές και της σταθερότητας του PsbS-CP29 συμπλόκου. Η ισορροπία αυτή εξαρτάται από το pH και μπορεί να στοχευτεί στη μηχανική νέων ειδών φυτών που εμφανίζονται ανθεκτικά στην έκθεση στο φως, αλλά παρουσιάζουν επιπλέον αύξηση σε βιομάζα και καρπούς. Τέλος, η νέα προσέγγιση που βασίζεται στη μέθοδο MD μπορεί να χρησιμοποιηθεί γενικά για τη μελέτη αλληλεπιδράσεων πρωτεΐνης με πρωτεΐνη, ενώ η δομή του PSII που προτείνεται μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως δομή εκκίνησης σε μοριακές προσομοιώσεις μεγάλης κλίμακας του φωτοσυνθετικού μηχανισμού σε συνθήκες NPQ.

02. Daskalakis V*, and Papadatos S *The Photosystem II Subunit S under Stress (2017) Biophys. J. (Cell)* 113 (11), 2364-2372.

Impact Factor: 3.743

Η μη-φωτοχημική απόσβεση (NPQ) αποτελεί μηχανισμό προστασίας κατά την υπερδιέγερση του Φωτοσυστήματος II (PSI) που ενεργοποιείται με την περίσσεια ΔpH στις φωτοσυνθετικές μεμβράνες. Τα σύμπλοκα-πρωτεΐνες συγκομιδής φωτός (LHCs), η από-

εποξείδωση της Βιολαξανθίνης σε Ζεαξανθίνη, και η υπομονάδα S του PSII (PsbS) συνεργάζονται σε πολλαπλό βιοχημικό επίπεδο για μια οργανωμένη απόκριση στην υπερδιέγερση. Η κατανόηση αυτής της συνεργασίας, σε ατομικό επίπεδο, έχει αποδειχτεί ιδιαίτερα δύσκολη για την επιστημονική κοινότητα. Στην εργασία αυτή χρησιμοποιούμε μεγάλη κλίμακα μοριακές προσομοιώσεις σε ατομική ανάλυση και πέρα από την τωρινή πειραματική πληροφορία, προχωράμε ένα βήμα μπροστά στον προσδιορισμό της δυναμικής της PsbS που θα μπορούσε να συσχετιστεί με την προαναφερόμενη συνεργασία. Για πρώτη φορά, ανιχνεύουμε διακριτή συμπεριφορά της PsbS (α) υπό συνθήκες ΔpH που καθορίζει τη μετάβασή της από διμερές σε μονομέρες, και (β) υπό την παρουσία Βιολαξανθίνης/ Ζεαξανθίνης στη φωτοσυνθετική μεμβράνη. Προτείνουμε ότι τα αμινοξικά κατάλοιπα Θρεονίνη-162 και Γλουταμικό-173 που βρίσκονται εκτεθειμένα στο εσωτερικό του θηλακοειδούς (*lumen*), σχηματίζουν δεσμούς υδρογόνου μεταξύ των μονομερών της PsbS μόνο στην περίπτωση χαμηλού ΔpH, ενώ αν το pH στο εσωτερικό του θηλακοειδούς μειωθεί (μεγάλο ΔpH) η αλληλεπίδραση αυτή εξασθενεί και οδηγεί σε μεγαλύτερης κλίμακας διακυμάνσεις διαμόρφωσης στην πρωτεΐνη, που πιθανώς σχετίζεται με τη μετάβαση από διμερές σε μονομέρες. Συμπερασματικά, αναφερόμαστε στο ρόλο των αλλαγών στη διαμόρφωση της PsbS που παρατηρούμε παρουσία ΔpH, Βιολα/Ζεα-ξανθίνης, με βάση το προτεινόμενο μοντέλο NPQ. Προτείνουμε πως η δυναμική της PsbS σε ΔpH και η παρουσία Ζεαξανθίνης ευνοεί την αλληλεπίδραση της PsbS με το LHClI. Η αλληλεπίδραση αυτή πιθανώς να αλλάζει και την ευαισθησία του LHClI στο ΔpH με αλλαγές στις τιμές pKa των αμινοξικών καταλοίπων που είναι εκτεθειμένα στο εσωτερικό του θηλακοειδούς. Η μελέτη αυτή αποτελεί ένα σημαντικό παράδειγμα όπου αλλαγές στο pH και η παρουσία υποκαταστατών ενισχύει την αλληλεπίδραση πρωτεΐνης με πρωτεΐνη, φαινόμενα που βρίσκονται στο επίκεντρο πολλών βιολογικών διεργασιών.

03. Papadatos S, Charalambous C A, and Daskalakis V* *A pathway for protective quenching in antenna proteins of Photosystem II (2017) Scientific Reports 7, 2523.*
doi: 10.1038/s41598-017-02892-w.

Impact Factor: 4.847

Η Φωτοσύνθεση είναι μια διαδεδομένη διεργασία στη Φύση. Μετατρέπει την ηλιακή ενέργεια σε χημειωσμητική διαφορά δυναμικού και αναγωγική ισχύ. Οι χρωστικές που βρίσκονται στις πρωτεΐνες-κεραίες συγκομιδής φωτός (LHCs), (π.χ. χλωροφύλλες - Chls) χαρακτηρίζονται από ευρεία φάσματα απορρόφησης ηλιακής ακτινοβολίας, γεγονός που αποδεικνύεται σημαντικό σε συνθήκες χαμηλής έντασης ηλιακού φωτός. Ωστόσο, η έκθεσή τους σε συνθήκες υψηλής έντασης ηλιακού φωτός, οδηγεί σε οξειδωτικές αποικοδομήσεις και τελικά σε κυτταρικό θάνατο. Για το σκοπό αυτό έχει αναπτυχθεί ένας μηχανισμός φωτοπροστασίας (Μη φωτοχημική απόσβεση, NPQ). Οι μηχανιστικές λεπτομέρειες της κύριας συνιστώσας (qE) του μηχανισμού αυτού είναι άγνωστες σε ατομική κλίμακα. Η μελέτη αυτή βασίζεται σε εδραιωμένες αντιλήψεις από έρευνες αιχμής στο NPQ, και παρουσιάζει μια λεπτομερή του εικόνα σε ατομική κλίμακα με προσομοιώσεις μεγάλης κλίμακας Μοριακής Δυναμικής, Μετα-Δυναμικής και *Ab-Initio*. Τα αποτελέσματα καταδεικνύουν μια ολοκληρωμένη εικόνα ενός εκλεπτυσμένου κοινού μηχανισμού στις πρωτεΐνες-κεραίες. Όλες οι πρωτεΐνες που μελετήθηκαν (μείζονα LHClI από σπανάκι-αρακά, CP29 από σπανάκι) παρουσιάζουν μια σημαντική ελαστικότητα στην D-έλικα, σε συνθήκες NPQ. Η ελαστικότητα αυτή οδηγεί σε μετατοπίσεις στην Qy μάντα απορρόφησης του κοντινού ζεύγους χρωστικών (Chl613-614) που θα μπορούσε να αποτελέσει ένα νέο κέντρο απόσβεσης. Η Ζεαξανθίνη ενισχύει αυτή την ελαστικότητα (και πιθανότατα την απόσβεση) ακόμα και σε ήπιες συνθήκες NPQ.

04. Ioannou A, Daskalakis V, and Varotsis C* *Detection of Maillard reaction products by a coupled HPLC-Fraction collector technique and FTIR characterization of Cu(II)-*

complexation with the isolated species (2017) *J. Mol. Struct.* 1141, 634–642.

Impact Factor: 1.561

Σε αυτή την εργασία παρακολουθείται η απομόνωση των προϊόντων της αντίδρασης της ασπαραγίνης με αναγωγικά σάκχαρα σε αλκαλικό pH και υψηλές θερμοκρασίες με τη χρήση ενός συνδυασμού υγρής χρωματογραφίας υψηλής απόδοσης (HPLC) και ενός κλασματικού δέκτη (*Fraction Collector*). Τα φάσματα UV-VIS και FTIR των απομονωμένων προϊόντων της αντίδρασης *Maillard* δείχνουν αλλαγές ευαίσθητες στη δομή που προέρχονται από διεργασίες απαμίνωσης και δημιουργίας ενώσεων ασπαραγίνης-σακχάρου. Τα αρχικά ενδιάμεσα προϊόντα της αντίδρασης Asn-Glu χαρακτηρίστηκαν επιπλέον με τη Θεωρία του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT). Προτείνεται πως το μεταλλικό ιόν Cu (II) συναρμόζεται με ένα προϊόν της αντίδρασης *Maillard* με βάση τα φάσματα UV-VIS και FTIR.

05. Ioannou A, Lambrou A, Daskalakis V* and Pinakoulaki E* Coupling of helix E-F motion with the O-nitrito and 2-nitrovinyl coordination in myoglobin (2017) *Biophys. Chem.* 221, 10-16.

Impact Factor: 2.121

Η Μυοσφαιρίνη (Mb) αντιδρά με το νιτρώδες ανιόν και δημιουργεί μια πράσινη χρωστική. Η κινητική είναι αργή, και προχωρά με συναρμογή του NO_2^- τόσο στον αιμικό Fe μέσω του O_1 ($\text{O}_1\text{-N=O}_2$), όσο και στη βινυλική ομάδα -2 της αίμης, μεταβαίνοντας αντιστρεπτά από ένα είδος χαμηλού σε ένα είδος υψηλού *spin*. Το νιτρώδες αποτελεί ένα ισχυρό οξειδωτικό παράγοντα και μια βιολογική δεξαμενή για το NO που εμπλέκεται σε πληθώρα αερόβιων βιολογιών συστημάτων. Συνεπώς, είναι μεγάλης σημασίας η διερεύνηση της φύσης και της ποικιλίας των μηχανισμών αντίδρασης του NO_2^- με τη Mb. Σε αυτή τη μελέτη πραγματοποιούμε ανάλυση κύριων συνιστωσών (PCA, ή ουσιαστική δυναμική ανάλυση κινήσεων) σε τροχιές Μοριακής Δυναμικής όλων των καταστάσεων συναρμογής Mb- NO_2^- ώστε να διευκρινίσουμε τις κύριες και βιολογικά σημαντικές κινήσεις στην πρωτεΐνη στους 298K. Δείχνουμε πως η συναρμογή ή η απομάκρυνση του NO_2^- στο/ από τον αιμικό σίδηρο σχετίζεται κυρίως με μια κίνηση της έλικας E, ενώ η συναρμογή του NO_2^- στη βινυλική ομάδα -2 οδηγεί σε μια απόκριση από την έλικα F, και μια συγχρονισμένη κίνηση των ελίκων E-F. Η τελευταία αυτή συγχρονισμένη κίνηση οφείλεται στην αλληλεπίδραση των καταλοίπων Val68 και Ile107 με την νιτρο-βινυλική-2 ομάδα. Τα αποτελέσματα από Φασματοσκοπία Συντονισμού Raman δείχνουν επιπλέον πως η συναρμογή του NO_2^- στη βινυλική ομάδα -2 αυξάνεται σε pH 6.0, καταδεικνύοντας πως τα αμιδικά πρωτόνια στην έλικα F δεν προστατεύονται από την πρόσβαση από το διαλύτη-νερό. Αντίστοιχα, η κίνηση της έλικας F επιτρέπει στο διαλύτη την πρόσβαση στη βινυλική ομάδα -2, χωρίς να επηρεάζεται, ωστόσο, η κατάσταση συναρμογής του αιμικού Fe.

06. Ioannou A, Lambrou A, Daskalakis V and Pinakoulaki E* Nitrite coordination in myoglobin (2017) *J. Inorg. Biochemistry (JIB)*, 166, 49-54.

Impact Factor: 3.207

Σε αυτή την εργασία χαρακτηρίζουμε τη συναρμογή του νιτρώδους στη Μυοσφαιρίνη (Mb) με φασματοσκοπία συντονισμού Raman. Οι συχνότητες δονήσεων του δεσμευμένου νιτρώδους στον αιμικό Fe, όπως και στη 2-vinyl ομάδα της αίμης υπολογίστηκαν με βάση τη θεωρία του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT). Η ανάλυση δεσμικών τροχιακών (Natural Bond Orbital, NBO) και η εκτενής ισοτοπική επισήμανση στη Mb στα πειράματα συντονισμού Raman, καταδεικνύουν πως το NO_2^- ($\text{O}_1\text{-N=O}_2$) συναρμόζεται στον αιμικό σίδηρο μέσω του O_1 . Με βάση το δονητικό χαρακτηρισμό της αντιστρεπτής

μετάβασης μεταξύ χαμηλού και υψηλού *spin* για το ενδιάμεσο Fe-O-N=O/2-nitrovinyl, προτείνουμε πως το βασικό βήμα που εκκινεί τη διαδικασία μετάβασης *spin* είναι η αύξηση του μήκους του εγγύς δεσμού Fe-NHis93. Οι συχνότητες των ευαίσθητων σε O και N δονήσεων στο ενδιάμεσο Fe-O-N=O/2-nitrovinyl παρέμειναν σε μεγάλο βαθμό ανεπηρέαστες σε αυτή τη μετάβαση. Συνεπώς, η διαδικασία «πρασινίσματος» στην αντίδραση του Fe^{III} στη Mb με NO₂⁻ προχωράει μέσω ενός ενδιαμέσου Fe-O-N=O/2-nitrovinyl, που μπορεί να υφίσταται σε κατάσταση χαμηλού ή υψηλού *spin*.

07. Ioannidis NE, Papadatos S, and Daskalakis V* *Energizing the Light Harvesting Antenna: Insight from CP29 (2016) BBA – Bioenergetics, 1857 (10), 1643-1650*

Impact Factor: 5.468

Η εργασία πραγματεύεται το ερώτημα: «πώς αντιδρούν τα φυτά στην περίσσεια φωτός». Η υγεία και η ανθεκτικότητα των φυτών στο στρες καθορίζεται από μοριακούς μηχανισμούς φωτοπροστασίας. Η προστατευτική απόσβεση εξιτονίου στα φυτά ξεκινά με την ενεργοποίηση της μεμβράνης στους χλωροπλάστες, μέσω μη καθορισμένων αλλαγών στη διαμόρφωση πρωτεϊνών που καλούνται αντένες. Στην εργασία αυτή, και χρησιμοποιώντας προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής σε ατομική κλίμακα, παρατηρούμε πως διαβαθμίσεις pH και αλάτων κινητοποιούν τις πρωτεΐνες-κεραίες/ αντένες του φωτοσυστήματος II σε συνθήκες χαμηλής και υψηλής μεμβρανικής ενεργοποίησης. Στα νέα ευρήματα ανήκει και η απόκριση της έλικας-5 (H5) σε χημειωσμοτικούς παράγοντες με αλλαγή διαμόρφωσης στην πρωτεΐνη CP29 από το σπανάκι. Αυτή η αλλαγή στη διαμόρφωση συσχετίζεται επιλεκτικά με την παραμόρφωση του μορίου της χλωροφύλλης chl-614 και με τις αλληλεπιδράσεις με τις γειτονικές χρωστικές. Αυτή η συμπεριφορά θα μπορούσε να συσχετιστεί με τη φωτοπροστασία. Συμβάλλοντας στη σημασία των ευρημάτων αυτών, η περιοχή της έλικας H5 διατηρείται μεταξύ των πρωτεϊνών – κεραίων (LHCB1–5). Τα αποτελέσματα αυτά καταδεικνύουν το γεγονός πως τα σύμπλοκα συγκομιδής φωτός στο Φωτοσύστημα II – από τις πιο άφθονες πρωτεΐνες στη γη – μπορούν να ανιχνεύουν χημειωσμοτικές διακυμάνσεις μέσω της περιοχής της έλικας H5 σε ένα αναβαθμισμένο ρόλο από απλοί συλλέκτες φωτός, επιπλέον ως χημειωσμοτικοί ανιχνευτές.

08. Salameh A, Vorka, F, and Daskalakis V* *Correlation Between Surface Tension and the Bulk Dynamics in Salty Atmospheric Aquatic Droplets (2016) J. Phys. Chem. C, 120 (21), 11508-11518*

Impact Factor: 4.693

Οι ιδιότητες της διεπιφάνειας μεταξύ υγρού-αερίου παρουσία τασιενεργών οργανικών ειδών, και στη συνέχεια η απόκριση του εσωτερικού όγκου του συστήματος στις αλλαγές της επιφανειακής τάσης είναι σημαντικοί παράγοντες στην κατανόηση διεργασιών που σχετίζονται με τη φυσική των νεφών, ή τη δυναμική της συμπύκνωσης/ εξάτμισης για τα ατμοσφαιρικά είδη, αλλά και πολλά βιολογικά συστήματα. Το βασικό ερώτημα παραμένει στο πως μπορούμε να επάγουμε αλλαγές στον εσωτερικό όγκο μιας υδάτινης σταγόνας με τη ρύθμιση της επιφανειακής της τάσης. Η πρόκληση έγκειται στο γεγονός πως το νερό παρουσιάζει ιδιαίτερη πολυπλοκότητα στις αλληλεπιδράσεις οδηγώντας σε ανωμαλία στις ιδιότητές του. Στην εργασία αυτή εφαρμόζουμε τη μεθοδολογία της Μοριακής Δυναμικής σε υδάτινες σταγόνες υψηλής αλατότητας που μπορούν να συσχετιστούν με τη διαδικασία της δημιουργίας νέων σωματιδίων στην ατμόσφαιρα. Παρουσιάζουμε μια συσχέτιση μεταξύ (α) της επιφανειακής τάσης και (β) μιας ιδιότητας του εσωτερικού όγκου των υδατινών σταγονιδίων, της διηλεκτρικής σταθεράς. Η τελευταία είναι άμεσα συνδεδεμένη με την ενεργότητα στη θεωρία Köhler πάνω στη δημιουργία και αύξηση του μεγέθους σταγονιδίων. Στην ουσία, συσχετίζουμε επιφανειακές ιδιότητες με ιδιότητες του εσωτερικού όγκου των σταγονιδίων. Τα σωματίδια που μελετώνται αποτελούνται από νερό, αλάτι (χλωριούχο

αμμώνιο), και επιφανειοδραστικές οργανικές ενώσεις. Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της παρούσας μελέτης αποτελεί το γεγονός πως οι επιφανειοδραστικές οργανικές ουσίες μπορούν να αλλάξουν την ιδιότητα του νερού ως διαλύτη σχετιζόμενη με τον προσανατολισμό και την ενεργότητά του στο διάλυμα και εκφραζόμενη ως διηλεκτρική σταθερά.

09. Daskalakis V, Ohta T, Kitagawa T, Varotsis C* Structure and properties of the catalytic site of nitric oxide reductase at ambient temperature (2015) *Biochim. Biophys. Acta – Bioenergetics*, 1847(10), 1240–1244.

Impact Factor: 5.468

Η αναγωγή του μονοξειδίου του αζώτου (Nor) είναι το τρίτο από τα τέσσερα ένζυμα της διαδικασίας της απονιτροποίησης στα βακτήρια, και υπεύθυνη για την καταλυτική παραγωγή του αερίου του γέλιου (N₂O). Στην εργασία αυτή αναφέρουμε την ανίχνευση του υπονιτρώδους ενδιάμεσου (HO–N=N–O–) στα $\nu_{N-N} = 1332\text{ cm}^{-1}$, στο ενεργό διπυρηνικό κέντρο αίμης $b_3\text{ Fe-Fe}_B$ της Nor από το *Paracoccus denitrificans*. Εφαρμόσαμε τη μέθοδο της Θεωρίας του Συναρτησιακού της Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας στο χαρακτηρισμό της διμεταλλικής γέφυρας στο υπονιτρώδες είδος που παράγεται στη διαδικασία της αναγωγής του NO σε N₂O από τη Nor και συγκρίναμε τα αποτελέσματα με αυτά που έχουν αναφερθεί στη βιβλιογραφία για τη δημιουργία του δεσμού N–N στις ba_3 και caa_3 οξειδοαναγωγάσες από το *Thermus thermophilus*.

10. Daskalakis V*, Charalambous F, Demetriou DC, Georgiou AG *Surface-Active Organic Matter induces salt morphology transitions during new atmospheric particle formation and growth* (2015) *RSC Adv.*, 5, 63240–63251.

Impact Factor: 3.30

Η δημιουργία νέων σωματιδίων μέσω πυρήνων είναι μια σημαντική πηγή νέων ειδών στην ατμόσφαιρα από την οποία προκύπτουν οι Πυρήνες Συμπύκνωσης Νεφών (CCN). Η διεργασία της δημιουργίας νέων σωματιδίων (NPF) μπορεί να επηρεάσει σημαντικά την κατανομή μεγέθους των ατμοσφαιρικών αερολυμάτων και κατά συνέπεια την ενεργοποίηση των CCN για την αύξηση του μεγέθους τους. Οι CCN σχετίζονται άμεσα με τη διαμόρφωση του οριακού στρώματος στην ατμόσφαιρα, τη δημιουργία νεφών, και τις ιδιότητες των νεφών, όπως τη φωταύγεια, ή το χρόνο ζωής τους. Οι υδρατμοί συμπυκνώνονται πάνω στα ατμοσφαιρικά σωματίδια που μεγαλώνουν σε μέγεθος για να δημιουργήσουν νεφοσταγονίδια. Παρά τη σημασία που λαμβάνει, η διεργασία NPF δεν έχει κατανοηθεί πλήρως σε ατομικό επίπεδο και στην νανο-χρονική κλίμακα, ιδιαίτερα στην παρουσία επιδράσεων από οργανικά είδη (OM). Στην εργασία αυτή εφαρμόσαμε τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής σε μοντέλα υδατικών αερολυμάτων με χλωριούχο αμμώνιο. Το άλας στο εσωτερικό των αερολυμάτων βρέθηκε να παρουσιάζει αλλαγές στη διαμόρφωση – από μορφή άλμης σε κρυσταλλική δομή – που εξαρτώνται από το οργανικό είδος στην επιφάνεια των αερολυμάτων. Ο αριθμός των σωματιδίων, το μέγεθός τους και η δυναμική αύξησης του μεγέθους τους, μπορούν να συσχετιστούν με αυτές τις αλλαγές στη διαμόρφωση. Τα ευρήματά μας διερευνούν τη δυναμική της διεργασίας NPF στην παρουσία οργανικών ειδών.

11. Daskalakis V*, Charalambous F, Panagiotou F, Nearchou I *Effects of Surface Activity on Carbon Dioxide Nucleation in Atmospheric Wet Aerosols: A Molecular Dynamics Study* (2014) *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16: 23723-23734.

Impact Factor: 4.216

Η πρόσληψη οργανικών ειδών (OM) στα νεφοσταγονίδια παράγει πληθώρα υδατοδιαλυτών δευτερογενών οργανικών αερολυμάτων (SOA) μέσω υδατικής χημείας. Τα οργανικά

προϊόντα αυτά παίζουν σημαντικό ρόλο στις ιδιότητες των αερολυμάτων. Στην εργασία αυτή αναφέρουμε τις επιδράσεις της πρόσληψης OM σε υδατικά αερολύματα, σε σχέση με την αναλογία του διαλυτοποιημένου προς αέριου διοξειδίου του άνθρακα, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής (MD). Το διοξείδιο του άνθρακα εμπλέκεται στην οξίνιση του βρόχινου αλλά και του θαλασσινού νερού. Διακυμάνσεις στο pH των νεφοσταγονιδίων και της βροχής υφίστανται στο χώρο και το χρόνο, καθώς οι τοπικές εκπομπές, οι ανθρώπινες δραστηριότητες και τα γεωφυσικά χαρακτηριστικά διαφέρουν. Η απόπλυση των SO_x, NO_x και NH₃ με τη βροχή παίζει σημαντικό ρόλο στην οξίνιση της βροχής μέσω της διάστασης οξέος-βάσεως, ωστόσο η διαλυτότητα του διοξειδίου του άνθρακα παραμένει μια καίρια παράμετρος. Με βάση προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής προτείνουμε πως η παρουσία τασιενεργού OM προάγει τη δημιουργία πυρήνων διοξειδίου του άνθρακα σε μια διαδικασία μετατροπής του διαλυμένου διοξειδίου του άνθρακα σε αέριο, ακόμα και σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αποτέλεσμα της διαδικασίας αυτής είναι η μείωση της διαλυτότητας του αερίου CO₂. Στην παρούσα εργασία γίνεται συζήτηση για το ρόλο των οργανικών ειδών στη ρύθμιση του pH των νεφοσταγονιδίων ή της βροχής, χωρίς την ύπαρξη διάστασης οξέος-βάσεως. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με τη βιβλιογραφία, σε πειραματικό και θεωρητικό πλαίσιο.

12. Daskalakis V*, Hadjicharalambous M *Hexagonal Ice Stability and Growth in the presence of Glyoxal and Secondary Organic Aerosols (2014) Phys. Chem. Chem. Phys.* 16(33): 17799-17810.

2014/2015 **Impact Factor: 4.216**

Η παρουσία πάγου κυριαρχεί στη φυσική της δημιουργίας των θυσάνων σε μεγάλα ύψη, των πολικών στρατοσφαιρικών νεφών, καθώς επίσης και στην ωρίμανση των καταιγίδων. Στην εργασία αυτή αναφερόμαστε στη σταθερότητα και ανάπτυξη του εξαγωνικού πάγου (I_h) σε αερολύματα δύο ή περισσότερων συστατικών στοιχείων σε διαμορφώσεις συμβατές με ατμοσφαιρικές συνθήκες. Το ατμοσφαιρικό αέριο γλυοξάλη, μαζί με τα δευτερογενή είδη (SOA) που προκύπτουν από αυτή και την υδατική χημεία σε δράση στην ατμόσφαιρα, αλληλεπιδρά με μεγάλους κρυστάλλους πάγου I_h των 1300–2000 μορίων νερού. Οι κρύσταλλοι υπόκεινται σε κύκλους θέρμανσης και ψύξης, με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, με αποτέλεσμα να συμβαίνουν κύκλοι αλλαγών φάσης του νερού. Χρησιμοποιείται επιπλέον η Θεωρία του Συναρτησιακού της Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας (DFT) και υπολογισμοί του δονητικού φάσματος σε κελιά εξαγωνικού πάγου I_h δώδεκα μορίων νερού σε αλληλεπίδραση με τα οργανικά είδη. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές καθορίζουν το εύρος της μηχανικής κόπωσης που υφίσταται η κρυσταλλική δομή του πάγου. Η πλήρης ενυδάτωση της γλυοξάλης προάγει τη σταθερότητα και ανάπτυξη της δομής του πάγου I_h στα υδάτινα αερολύματα, ενώ η μερική ή η πλήρης οξειδωσή της οδηγεί σε αποσταθεροποίηση του κρυσταλλικού πλέγματος του πάγου I_h. Η συμπεριφορά αυτή συσχετίζεται με την ικανότητα κάθε οργανικού να προσαρμόζει τη διαμόρφωση των συσσωματωμάτων του στη δομή του κρυσταλλικού πάγου (I_h). Προτείνουμε πως η υδατική χημεία παίζει σημαντικό ρόλο στη φυσική της δημιουργίας των νεφών.

13. Pinakoulaki E, Daskalakis V, Ohta T, Richter O M, Budiman K, Kitagawa T, Ludwig B, Varotsis C* *The protein effect in the structure of two ferryl-oxo intermediates at the same oxidation level in the heme-copper binuclear center of cytochrome c oxidase. (2013) J. Biol. Chem. (JBC)* 288(28): 20261-20266.

Impact Factor: 4.441

Η ανίχνευση των ενδιάμεσων της αναγωγής του μοριακού οξυγόνου σε νερό από την κυτοχρωμική c οξειδάση (CcO), και ο προσδιορισμός της δομής τους, αποτελούν καίρια σημεία μελέτης για την κατανόηση του μηχανισμού της ενεργοποίησης του O₂ και της

άντλησης πρωτονίων από το ένζυμο. Σε αυτή την εργασία, αναφερόμαστε στα προϊόντα της γρήγορης αντίδρασης του O_2 με το ένζυμο σε κατάσταση μικτού σθένους (Cu_A^{2+} , αίμη a^{3+} , αίμη a_3^{2+} - Cu_B^{1+}). Τα αποτελέσματα από τα πειράματα συντονισμού *Raman* δείχνουν τη δημιουργία δύο οξο-φερρυλ ειδών με χαρακτηριστικές δονήσεις τάσης $Fe(IV)=O$ στα 790 και 804 cm^{-1} στην οξειδωτική κατάσταση περόξυ (PM). Υπολογισμοί με βάση τη θεωρία του Συναρτησιακού της Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας δείχνουν πως το πρωτεϊνικό περιβάλλον της εγγύς His-411 – μέσω δεσμών υδρογόνου – προσδιορίζει την ισχύ του δεσμού $Fe(IV)=O$. Σε αντίθεση με προηγούμενες μελέτες, το PM ενδιάμεσο σχηματίζεται στην αντίδραση της Y167F με το O_2 . Τα αποτελέσματα αυτά οδηγούν στο συμπέρασμα πως στο πλήρως ανηγμένο ένζυμο, η μετάβαση μέσω άντλησης πρωτονίων από το $\nu_{Fe(IV)=O}=804\text{ cm}^{-1}$ στο $\nu_{Fe(IV)=O}=790\text{ cm}^{-1}$ ($P \rightarrow F$, όπου P είναι περόξυ και F φερρύλ ενδιάμεσα) ενεργοποιείται όχι μόνο με μεταφορά ηλεκτρονίου από την αίμη a στην heme a_3 αλλά και από τη δημιουργία μιας νέας διαμόρφωσης μέσω αλληλεπίδρασης δεσμού υδρογόνου στην εγγύς περιοχή του His-411- $Fe(IV)=O$ τμήματος της αίμης a_3 . Παρουσιάζονται οι επιπτώσεις αυτών των αποτελεσμάτων σε σχέση με το ρόλο του δεσμού υδρογόνου στο $O=Fe(IV)$ -His-411 τμήμα σε συνέργεια με την περιοχή: προπιονική ομάδα του A δακτυλίου της αίμης a_3 -Asp-399- H_2O . Επιπλέον, εμπλέκονται στη συζήτηση τα κανάλια μεταφοράς πρωτονίων που σχηματίζουν τα νερά (H_2O) στο ένζυμο, κατά τη μεταφορά πρωτονίου στην μετάβαση $P \rightarrow F$. Τέλος, προτείνουμε πως το εγγύς περιβάλλον της αίμης a_3 ρυθμίζει τις φασματοσκοπικές ιδιότητες των φερρύλ ενδιάμεσων στην κυτοχρωμική c οξειδάση.

14. Porrini M, Daskalakis V, Farantos SC* *Exploring the Topography of Free Energy Surfaces and Kinetics of Cytochrome c Oxidases interacting with small ligands* (2012) *RSC Adv.* 2: 5828 - 5836.

Impact Factor: 3.30

Στην εργασία αυτή πραγματοποιείται ο προσδιορισμός της επιφάνειας ελεύθερης ενέργειας της κυτοχρωμικής c οξειδάσης aa_3 από το *Paracoccus denitrificans* και της ba_3 από το *Thermus thermophilus*, καθώς αλληλοεπιδρά με αέρια μικρού μοριακού βάρους (CO , NO , O_2), όπως επίσης και Xe . Οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν με τη θερμοδυναμική θεωρία διαταραχών, η αξιοπιστία της οποίας ελέγχεται σε προηγούμενους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής στη βιβλιογραφία. Η προσέγγιση αυτή μας επιτρέπει να παρακάμψουμε την απαίτηση σε μεγάλο υπολογιστικό χρόνο που απαιτείται για τα ενζυμικά συστήματα. Οι επιφάνειες ελεύθερης ενέργειας περιγράφονται ως συναρτήσεις τριών Καρτεσιανών συντεταγμένων του κέντρου μάζας του εκάστοτε αερίου και του μέσου όρου της γωνίας προσανατολισμού του μορίου στο εσωτερικό του ενζύμου. Ανιχνεύτηκαν υδρόφοβες και υδρόφιλες κοιλότητες ή κανάλια γύρω από την απομακρυσμένη (*distal*) περιοχή της αίμης- a_3 και υπολογίστηκαν τα ελάχιστα και τα ενεργειακά φράγματα σε κάθε περίπτωση. Η τοπολογία της επιφάνειας ελεύθερης ενέργειας μας οδηγεί στον υπολογισμό κινητικών παραμέτρων και στη συζήτηση πάνω στη βιοχημική λειτουργία του ενζύμου βασισμένοι και σε πειραματικά αποτελέσματα στη βιβλιογραφία. Οι περιοχές (κοιλότητες, κανάλια) που διατηρούνται και στα δύο ένζυμα, όπως και στη μυοσφαιρίνη, καταδεικνύουν πως τα τοπολογικά χαρακτηριστικά στην απομακρυσμένη (*distal*) περιοχή της αίμης στα ενεργά κέντρα και των τριών ενζύμων/ πρωτεϊνών είναι δομικά σταθερά.

15. Kampanarakis A, Farantos SC*, Daskalakis V and Varotsis C *Non-Linear Vibrational Modes in Biomolecules: a periodic orbits description.* (2012) *Chem. Phys. Elsevier*, 399: 258–263.

Impact Factor: 1.747

Οι αρμονικές δονήσεις ενός μορίου, που υφίστανται σε ενέργειες κοντά στην κατάσταση ισορροπίας (ένα ελάχιστο, μέγιστο ή σημείο καμπής της δυναμικής ενεργειακής επιφάνειας),

επεκτείνονται με περιοδικές τροχιές σε υψηλότερες ενέργειες όπου η μη αρμονικότητα και η σύζευξη μεταξύ των βαθμών ελευθερίας αποτελούν σημαντικές διαδικασίες. Με αυτόν τον τρόπο, επιτυγχάνεται ο προσδιορισμός κορυφών σε ένα δονητικό φάσμα, και περιγράφεται η δυναμική σε διεγερμένα μόρια. Νέες δονήσεις που προέρχονται από αλληλεπιδράσεις περιοδικών τροχιών και τροχιών με μεγάλο χρόνο ζωής, σηματοδοτούν τη γέννηση και τον εντοπισμό νέων κβαντικών καταστάσεων. Σε αυτή την εργασία μελετάμε τις μη γραμμικές δονήσεις βιομορίων-μοντέλων όπως του διπεπτιδίου της αλανίνης, και του ενεργού κέντρου στην οξο-φερρύλ οξειδωτική κατάσταση του ενζύμου της κυτοχρωμικής *c* οξειδάσης. Προσδιορίζουμε περιοδικές τροχιές που εκφράζουν μη αρμονικότητα και οδηγούν σε κεντρικά σημεία καμπίς με αλληλεπίδραση μεταξύ τροχιών. Αυτές οι δονήσεις συσχετίζονται με διαδικασίες ισομερισμού στο διπεπτίδιο της αλανίνης και σε μετατοπίσεις συχνотήτων στο οξο-φερρύλ ενδιάμεσο που παρατηρούνται με την αλλαγή του πεδίου Coulomb γύρω από το σύστημα-μοντέλο Ιμιδαζόλιο- $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ του ενεργού κέντρου της κυτοχρωμικής *c* οξειδάσης.

16. Pinakoulaki E, Daskalakis V and Varotsis C* (All authors have contributed equally to this work) *The origin of the $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ intermediates in cytochrome aa_3 oxidase. (2012) BBA Bioenergetics*, 1817: 552-557.

Impact Factor: 5.468

Ο μηχανισμός της αναγωγής του μοριακού οξυγόνου στις κυτοχρωμικές οξειδάσες βασίζεται στον έλεγχο της διαδικασίας της μεταφοράς ηλεκτρονίων μέσω της μεταφοράς πρωτονίων. Στην παρούσα εργασία πραγματεύονται η παροχή πρωτονίων και τα κανάλια πρωτονίων στην πρωτεΐνη που σχετίζονται με την αναγωγή του υποστρώματος και την άντληση πρωτονίων, και αναφέρεται περιληπτικά η πρόσφατη βιβλιογραφία. Επιπλέον, προτείνουμε ένα μηχανισμό όπου η σύζευξη της αναγωγικής χημείας στο οξυγόνο με τη μετατόπιση πρωτονίων (μετάβαση $\text{P} \rightarrow \text{F}$) σχετίζεται με τις ιδιότητες δύο ομάδων αμινοξικών καταλοίπων που διατηρούνται στην οικογένεια των οξειδάσων, His411/G386-T389 και της αλυσίδας αίμη a_3 -προπιονική ομάδα-A-D399-H403. Το άρθρο αυτό αποτελεί τμήμα ενός ειδικού τεύχους με τίτλο: Αναπνευστικές Οξειδάσες.

17. Daskalakis V, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C* *Regulation of Electron and Proton Transfer by the Protein Matrix of Cytochrome *c* Oxidase. (2011) J. Phys. Chem. B*, 115(13): 3648-3655.

Impact Factor: 3.33

Η κυτοχρωμική *c* οξειδάση (CcO) καταλύει την αναγωγή του μοριακού οξυγόνου σε νερό κατά τέσσερα ηλεκτρόνια και συζευγνύει την αναγωγή αυτή με την άντληση τεσσάρων πρωτονίων διαμέσου της πρωτεϊνικής μήτρας. Τα μόρια νερού στην πρωτεΐνη συμμετέχουν στην άντληση πρωτονίων ως μεταφορείς πρωτονίων. Ένα συγκεκριμένο μόριο νερού διατηρείται στις κρυσταλλοδομές μεταξύ διαφορετικών CcO ενζύμων, και βρίσκεται μεταξύ των προπιονικών ομάδων της αίμης a_3 . Σε αυτή την εργασία δείχνουμε με τη χρήση προσομοιώσεων συνδυασμού κβαντικής και κλασικής μηχανικής ((QM/MM), πως αυτό το μόριο νερού μπορεί να μεταφέρει το επιπλέον πρωτόνιο του στην προπιονική ομάδα του δακτυλίου A της αίμης a_3 . Το κατάλοιπο His403 συναρμόζεται στο κέντρο Mg κοντά στο συσσωμάτωμα μορίων νερού, που ονομάζεται «water pool». Χρησιμοποιώντας τις μεθόδους QM/MM και Μοριακής Δυναμικής (MD), προτείνουμε πως επιπλέον το κατάλοιπο His403 δίπλα στην προπιονική ομάδα του δακτυλίου A της αίμης a_3 , αποκτά ρόλο βαλβίδας που ελέγχει την κατάσταση πρωτονίωσης του ζεύγους: προπιονική ομάδα του δακτυλίου A/Asp399. Το ζεύγος αυτό, στη συνέχεια, ελέγχει την οξειδωτική κατάσταση του αιμικού σιδήρου a_3 , συνδέοντας με αυτόν τον τρόπο, το κανάλι μεταφοράς πρωτονίων D με το «water pool».

18. Daskalakis V*, Farantos SC, Guallar V, Varotsis C *Vibrational Resonances and Cu_B displacement controlled by proton motion in Cytochrome c Oxidase*, (2010) *J. Phys. Chem. B*, 114(2): 1136-1143.

Impact Factor: 3.33

Η κυτοχρωμική *c* οξειδάση (CcO), που βρίσκεται στην εσωτερική μιτοχονδριακή μεμβράνη ή σε πολλά βακτήρια, καταλύει την κατά τέσσερα ηλεκτρόνια αναγωγή του μοριακού οξυγόνου σε νερό. Τέσσερα πρωτόνια αντλούνται επιπλέον εγκάρσια της εσωτερικής μιτοχονδριακής μεμβράνης μέσω της CcO. Σε αυτή την εργασία, υπολογισμοί κβαντικής/ μοριακής μηχανικής και δυναμικής χρησιμοποιούνται στην ανίχνευση των φασματοσκοπικών χαρακτηριστικών των ενδιάμεσων φερρύλ στην αντίδραση της aa_3 CcO με το O_2 . Αυτοί οι ιδιαίτερα περίτεχνοι υπολογισμοί, που ενισχύονται με υπολογισμούς και σε μικρότερα συστήματα, καταδεικνύουν την ευαισθησία των δονητικών συχνοτήτων στο πεδίο *Coulomb* της αίμης a_3 και την εξάρτησή τους από την απόσταση του γειτονικού Cu_B από το άτομο του αιμικού σιδήρου a_3 . Η απόσταση αυτή παρουσιάζεται να συσχετίζεται με την κατάσταση πρωτονίωσης της προπιονικής ομάδας του δακτυλίου A της αίμης a_3 , και προτείνουμε πως αναλαμβάνει ένα σημαντικό ρόλο στο μηχανισμό δράσης της CcO. Συγκεκριμένα, συνδέουμε την άντληση πρωτονίων στη CcO (α) με ένα συντονισμό (1:1:2) μεταξύ των συχνοτήτων της δόνησης τάσης του δεσμού $Fe^{IV}=O$, μιας δόνησης αναπνοής της His-411, και της δόνησης κάμψης του συστήματος His411- $Fe^{IV}=O$ (αρίθμηση καταλοίπων από aa_3 *P. denitrificans*) και (β) με την μετατόπιση του Cu_B μέσω ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων προς τον αιμικό σίδηρο a_3 . Διαπιστώνουμε πως οι δονήσεις του συστήματος His411- $Fe^{IV}=O$ συζευγνύονται ισχυρά και αυτή η σύζευξη εξαρτάται από την κατάσταση πρωτονίωσης της προπιονικής ομάδας του δακτυλίου A της αίμης a_3 και του Asp399. Προτείνουμε ένα μηχανισμό για την ενίσχυση του σήματος της δόνησης κάμψης δ (His411- $Fe^{IV}=O$) στη φασματοσκοπία συντονισμού *Raman*. Υπολογισμοί σε μικρότερα συστήματα-μοντέλα καταδεικνύουν πως η θέση του Cu_B σε σχέση με την αίμη a_3 παίζει ένα σημαντικό ρόλο στη ρύθμιση του συντονισμού. Επιπλέον, συζητάται η αιτία της σύζευξης μεταξύ της δόνησης κάμψης, δ (His411- $Fe^{IV}=O$) και των δονήσεων τάσης ν ($Fe=O$), καθώς επίσης, και το ρόλο που παίζουν αυτές οι συζεύξεις ή η θέση του Cu_B στη ρύθμιση των λειτουργικών ιδιοτήτων του ενζύμου, περιλαμβανομένης της σύζευξης ηλεκτρονίου/ πρωτονίου στα πειραματικά φάσματα.

19. Daskalakis V, Varotsis C* *Binding and Docking Interactions of NO, CO and O_2 in Heme Proteins as Probed by Density Functional Theory, Review for the Special Issue on "Application of Density Functional Theory in Chemical Reactions"*. (2009) *Int. J. Mol. Sci.*, 10: 4137-4156.

Impact Factor: 3.482

Η δυναμική και δραστηριότητα των αιμο-πρωτεϊνών χαρακτηρίζεται από την άμεση αλληλεπίδραση των πρωτεϊνών αυτών με υποκαταστάτες/ υποστρώματα όπως CO, NO και O_2 . Άμεσες ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις προκύπτουν ως αποτέλεσμα των πλευρικών αλυσίδων των αμινοξικών καταλοίπων σε διάφορες καταστάσεις πρωτονίωσης που σχηματίζουν κοιλότητες στην πρωτεΐνη ή μέσω της συναρμογής στα ενεργά κέντρα, όπου έμμεσες αλληλεπιδράσεις προκύπτουν μεταξύ υποκαταστατών στην ίδια σφαίρα συναρμογής. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές παίζουν σημαντικό ρόλο στη σταθεροποίηση μεταβατικών καταστάσεων του καταλυτικού κύκλου ή στην αλλαγή της χημείας συναρμογής. Χρησιμοποιώντας τη θεωρία του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας (DFT), προσδιορίζουμε το μέγεθος της διαταραχής στις δονητικές συχνότητες των μορίων CO, NO και O_2 παρουσία ισχυρών ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων ή δεσμών υδρογόνου, σε συνθήκες που προσομοιώνουν τις εσωτερικές κοιλότητες των πρωτεϊνών. Επιπλέον, μελετώνται τα φασματοσκοπικά χαρακτηριστικά της διαμόρφωσης δέσμευσης στην αίμη των

υποκαταστατών CO και NO αλλάζοντας τη χημεία του εγγύς υποκαταστάτη στην αίμη a_3 . Τα μόρια CO, NO και O₂ πολώνονται εξαιρετικά εύκολα και εκφράζουν μετατοπίσεις στις δονητικές συχνότητες μέχρι 80, 200 και 120 cm⁻¹, αντίστοιχα, σε σύγκριση με απουσία αλληλεπιδράσεων που να οδηγούν σε πόλωση. Η παρούσα μελέτη καταδεικνύει τη σημασία της θεωρίας του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας στην ανάδειξη των αλληλεπιδράσεων μεταξύ ενεργών κέντρων ή πρωτεϊνικών κοιλιοτήτων με υποκαταστάτες/υποστρώματα.

20. Porrini M*, Daskalakis V, Farantos SC, Varotsis C *Heme Cavity Dynamics of Photodissociated CO from ba_3 -Cytochrome c Oxidase: The Role of Ring-D Propionate*, (2009) *J. Phys. Chem. B*, 113(35): 12129-12135.

Impact Factor: 3.33

Η μελέτη αφορά στον προσδιορισμό της δυναμικής του φωτοδιασπώμενου μονοξειδίου του άνθρακα καθώς μεταβαίνει μεταξύ κοιλιοτήτων της ba_3 -κυτοχρωμικής c οξειδάσης. Ο προσδιορισμός βασίζεται στη δειγματοληψία του φασικού χώρου από εκατοντάδες τροχιές που η κάθε μία ολοκληρώνεται μέχρι 100 ps. Προτείνεται πως η *cis* διαμόρφωση της πρωτονιωμένης προπιονικής ομάδας του δακτυλίου D της αίμης a_3 και η *trans* διαμόρφωση της αποπρωτονιωμένης της μορφής ελέγχουν τη θέση και μετανάστευση του CO δημιουργώντας δύο διακριτές διαμορφώσεις ισορροπίας για το CO που περιορίζεται χωρικά σε μια εσωτερική κοιλότητα στην απομακρυσμένη (*distal*) περιοχή της αίμης. Κατά συνέπεια, οι διαμορφώσεις *cis* (κλειστή πύλη) και *trans* (ανοιχτή πύλη) της προπιονικής ομάδας της αίμης a_3 στο δακτύλιο D παίζουν το ρόλο διακόπτη που ανοίγει ή κλείνει μια πύλη για τον εγκλεισμό του CO στην εσωτερική κοιλότητα ή την έκλυσή του σε μια ευρύτερη ανοιχτή περιοχή. Η γεωμετρία της εσωτερικής κοιλότητας και η αξιοπιστία του δυναμικού περιγραφής των αλληλεπιδράσεων αναλύεται επιπλέον με τη μέθοδο του Συναρτησιακού της Ηλεκτρονιακής Πυκνότητας για το ενεργό κέντρο και τη μέθοδο του «*potential of mean force*» (PMF) κατά την κατεύθυνση του δεσμού χαλκός-CO, καθώς επίσης και με υπολογισμούς Κβαντικής/Μοριακής Μηχανικής. Η παρούσα εργασία, πραγματεύεται τις πιθανές τροχιές του CO και αναθεωρούνται συμπεράσματα από προηγούμενες μελέτες που υπάρχουν στη βιβλιογραφία.

21. Daskalakis V, Farantos SC*, Varotsis C *Assigning vibrational spectra of ferryl-oxo intermediates of cytochrome c oxidase by periodic orbits and Molecular Dynamics*, (2008) *J. Am. Chem. Soc* 130(37): 12385-12393.

Impact Factor: 12.226

Η πολυπλοκότητα αποτελεί χαρακτηριστικό των βιολογικών συστημάτων όχι μόνο λόγω του μεγάλου αριθμού ατόμων, αλλά επίσης επειδή υπάρχουν μη γραμμικές αλληλεπιδράσεις που οδηγούν σε χαοτική συμπεριφορά, εντοπισμένες κινήσεις, και φαινόμενα αλληλεπίδρασης περιοδικών τροχιών. Κατά συνέπεια, έχουν αναπτυχθεί ιδιαίτερα ευέλικτες φασματοσκοπικές τεχνικές ώστε να έχουμε τόσο χωρική, όσο και χρονική ανάλυση, και να μειωθεί η αβεβαιότητα στον προσδιορισμό των κορυφών σε φάσματα πολύπλοκων μορίων. Μπορούμε να συσχετίσουμε φασματικές γραμμές με συγκεκριμένους χημικούς δεσμούς ή χημικά είδη σε μεγάλα μόρια; Μπορεί η ενέργεια να παραμείνει εντοπισμένη σε ένα δεσμό για μια σημαντική χρονική περίοδο, ώστε να αφήσει το φασματοσκοπικό της αποτύπωμα; Αυτά τα ερωτήματα απαντώνται στην παρούσα μελέτη που αναφέρεται στα φάσματα συντονισμού Raman των οξο-φερρύλ ενδιάμεσων της κυτοχρωμικής c οξειδάσης. Τα φάσματα διαφοράς των ισοτοπικά επισημασμένων φερρύλ οξυγόνων (¹⁶O μείον ¹⁸O) στην κυτοχρωμική c οξειδάση έχουν καταγραφεί σε διάφορα εργαστήρια και παρουσιάζουν μια ή δύο κορυφές που η πηγή τους δεν έχει προσδιοριστεί πλήρως ακόμα. Χρησιμοποιώντας τεχνικές όπως τη μη γραμμική μηχανική, και ιδιαίτερα τη μελέτη περιοδικών τροχιών, στο ενεργό κέντρο του

ενζύμου, σε συνδυασμό με υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής σε μεγαλύτερα μοντέλα, που περιλαμβάνουν το ενεργό κέντρο της πρωτεΐνης, σε επιλεγμένες καταστάσεις πρωτονίωσης/ αποπρωτονίωσης αμινοξικών καταλοίπων, μεταφράζουμε τα δονητικά αποτυπώματα στα φάσματα του ενζύμου σε μοριακές κινήσεις. Αποδεικνύουμε πως υπάρχουν σταθερές περιοδικές τροχιές για μεγάλο εύρος ενεργειών του ενεργού κέντρου. Ομάδες περιοδικών τροχιών που συσχετίζονται με τις δονήσεις τάσης του δεσμού $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ αναδεικνύουν τις περιοχές του φασικού χώρου όπου οι γειτονικές τροχιές παραμένουν εντοπισμένες και προσδιορίζουν τις φασματικές μπάντες του ενεργού κέντρου μέσα στην πρωτεϊνική μήτρα. Αποδεικνύουμε πως η κίνηση πρωτονίων κοντά στο ενεργό κέντρο, που συμβαίνει κατά τη μετάβαση $\text{P} \rightarrow \text{F}$, μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικές μετατοπίσεις της δόνησης τάσης του δεσμού $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ σε φάσματα διαφοράς ισοτοπικά επισημασμένων φερρύλ οξυγόνων, χωρίς καμία αλλαγή στην κατάσταση οξειδωσης των μετάλλων του ενεργού κέντρου. Η εργασία αυτή συνδέει τα φασματικά χαρακτηριστικά με την άντληση/ μεταφορά πρωτονίων στον ενζυματικό κύκλο της κυτοχρωμικής *c* οξειδάσης.

22. Daskalakis V, Pinakoulaki E, Stavarakis S, Varotsis C* *Probing the environment of Cu_B in heme-copper oxidases. (2007) J. Phys. Chem. B 111: 10502-10509.*

Impact Factor: 3.30

Η χρονο-εξαρτώμενη φασματοσκοπία μετασχηματισμού Fourier-Υπερύθρου ($\text{TRIS}^2\text{-FTIR}$) και η θεωρία του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας εφαρμόστηκαν στην ανίχνευση της δυναμικής της δομής του Cu_B στις αιμο-χαλκο οξειδάσες σε θερμοκρασία δωματίου. Τα $\text{TRIS}^2\text{-FTIR}$ πειραματικά δεδομένα για τη *cbb3* από το *Pseudomonas stutzeri* παρουσιάζουν μια μικρή διακύμανση στη συχνότητα του μεταβατικού συμπλόκου $\text{Cu}_B\text{-CO}$ σε εύρος pH/pD 7-9. Η παρατήρηση αυτή, σε συνδυασμό με υπολογισμούς με βάση τη θεωρία του συναρτησιακού της ηλεκτρονιακής πυκνότητας, στους οποίους εμφανίζονται σημαντικές μετατοπίσεις της συχνότητας $\nu(\text{CO})$ κατά την αποπρωτονίωση ή και απομάκρυνση ενός υποκαταστάτη του Cu_B καταδεικνύει ότι οι ιδιότητες των υποκαταστατών του Cu_B συμπεριλαμβανομένης και της διασυνδεμένης (*cross-linked*) τυροσίνης παραμένουν αναλλοίωτες σε εύρος pH/pD 7-9, σε αντίθεση με προηγούμενες βιβλιογραφικές αναφορές. Προτείνουμε ότι οι μικρές διακυμάνσεις της $\nu(\text{CO})$ του Cu_B οφείλονται σε αλλαγές στην πρωτεϊνική διαμόρφωση στην περιοχή του Cu_B . Κατά συνέπεια, η σχάση των Fe-CO δονήσεων (α -, β -, και γ -μορφές) δεν οφείλεται σε αλλαγές στη δέσμευση ή και κατάσταση πρωτονίωσης των υποκαταστατών του Cu_B ή στην παρουσία ενός ή περισσότερων ομάδων που μπορούν να ιονιστούν, όπως έχει προταθεί παλιότερα, αλλά αντικατοπτρίζει το αποτέλεσμα αλλαγών διαμόρφωσης της πρωτεΐνης στη «γειτονιά» του Cu_B , οι οποίες, στη συνέχεια, επηρεάζουν τη θέση του Cu_B σε σχέση με τον αιμικό Fe .

23. Pinakoulaki E, Yoshimura H, Daskalakis V, Yoshioka S, Aono S, Varotsis C* *Two ligand binding sites in the O_2 -sensing signal transducer HemAT: Implications for ligand Recognition/ Discrimination and signaling. (2006) Proc. Natl. Acad. Sci. USA 103: 14796-14801.*

Impact Factor: 10.4

Στην εργασία αυτή προσδιορίζουμε την κοιλότητα παραμονής του υποκαταστάτη CO στην πρωτεΐνη-αισθητήρα επαγωγής σήματος HemAT (αεροτακτικός επαγωγός με βάση την αίμη) που μας επιτρέπει να αποκτήσουμε πρόσβαση στο μοριακό μηχανισμό των αεροτακτικών πρωτεϊνών. Σχεδιάστηκαν συγκεκριμένες μεταλλάξεις που είναι εγγύς και μακρινές στην αίμη, με σκοπό τη διαταραχή στο ηλεκτροστατικό πεδίο κοντά στον υποκαταστάτη που είναι δεσμευμένος στην αίμη και κοντά στο κέντρο παραμονής του υποστρώματος σε κοιλότητα.

Στα αποτελέσματα προσδιορίζεται ένα δεύτερο κέντρο στις αιμο-πρωτεΐνες στο οποίο ο εξωγενής υποκαταστάτης παραμένει σε μια εσωτερική κοιλότητα. Ανιχνεύεται επίσης η διαμόρφωση της πύλης που ελέγχει το μονοπάτι μετανάστευσης του υποκαταστάτη από την μακρινή στην εγγύς περιοχή της αίμης, όπου και τελικά παγιδεύεται ο υποκαταστάτης. Τα αποτελέσματα παρέχουν την απόδειξη ότι η κοιλότητα της αίμης αποτελεί την «παγίδα» για τον υποκαταστάτη και προτείνουμε ότι ο μηχανισμός ελέγχου της μετανάστευσης μπορεί να ρυθμιστεί σε περισσότερες από μια θέσεις στην πρωτεΐνη. Βασίζόμενοι στα αποτελέσματα, προτείνουμε μια δυναμική σύζευξη μεταξύ των δύο διακριτών θέσεων δέσμευσης καθώς ο αλλοστερικός μηχανισμός για την αναγνώριση / διάκριση αερίων πυροδοτεί και την αλλαγή στη διαμόρφωση που οδηγεί στην επαγωγή σήματος από την πρωτεΐνη-αισθητήρα οξυγόνου HemAT.

24. Pinakoulaki E, Koutsoupakis C, Stavrakis S, Marialena A, Papadopoulos G, **Daskalakis V**, Varotsis C* *Structural dynamics of Heme-copper oxidases and Nitric oxide reductases: Time-Resolved step-scan FTIR and Time-resolved Resonance Raman studies. (2005) J. Raman Spec. 36: 337-349.*

Impact Factor: 2.647

Από τις φασματοσκοπικές μεθόδους που είναι διαθέσιμες για το χαρακτηρισμό της δυναμικής των ενεργών κέντρων με αίμη, η χρονο-εξαρτώμενη φασματοσκοπία συντονισμού *Raman* (TR^3) είναι μια πολύ δυνατή τεχνική καθώς η ηλεκτρονική διέγερση στις μεταπτώσεις $\pi-\pi^*$ της αίμης ενισχύει επιλεκτικά τις δονήσεις της αίμης και των δεσμευμένων – εγγύς/μακρινών υποκαταστατών χωρίς την αλληλεπίδραση από δονήσεις που σχετίζονται με την πρωτεϊνική μήτρα. Από την άλλη, η χρονο-εξαρτώμενη φασματοσκοπία (TRS^2) μετατροπής Fourier-Υπέρυθρου (FTIR) έχει την ευαισθησία και τη διακριτική ικανότητα να ανιχνεύει, επιπλέον με τους δεσμευμένους στα μεταλλικά κέντρα υποκαταστάτες και την κινητική της φωτοδιάσπασης του υποκαταστάτη, όπως και μεταβατικές αλλαγές σε επίπεδο ξεχωριστών αμινοξέων κατά την πρωτεϊνική δράση. Η παρούσα εργασία εστιάζεται στην εφαρμογή των δύο μεθόδων (TR^3/ TRS^2 –FTIR) στις αιμο-χαλκο οξειδάσες και αναγωγάσες του μονοξειδίου του αζώτου.

25. Koutsoupakis C, Pinakoulaki E, Stavrakis S, Daskalakis V, Varotsis C* *Time-resolved step-scan Fourier transform infrared investigation of heme-copper oxidases: implications for O₂ input and H₂O/H⁺ output channels. (2004) Bioch. Biophys. Acta 1655: 347-352.*

Impact factor: 5.468

Σε αυτή την εργασία εφαρμόζουμε φασματοσκοπία υπέρυθρου μετασχηματισμού *Fourier* FTIR (TRS^2 -FTIR) στη διερεύνηση της δυναμικής του διπυρηνικού κέντρου αίμης-Cu_B και γενικά της δυναμικής των πρωτεϊνών που ανήκουν στην κατηγορία των κυτοχρωμικών οξειδασών από θηλαστικό (*aa₃*), της *cbb₃* από *Pseudomonas stutzeri*, και των *caa₃* και *ba₃* από *Thermus thermophilus*. Οι επιπτώσεις αυτών των αποτελεσμάτων συζητώνται σε σχέση με (1) τις μοριακές κινήσεις που είναι γενικές στη φωτοδυναμική του διπυρηνικού κέντρου στις αιμο-χαλκο οξειδάσες, και (2) των μονοπατιών πρωτονίων που βρίσκονται στην περιοχή του συστήματος: προπιονικής ομάδας του δακτυλίου A της αίμης *a₃*-Asp372-H₂O που διατηρείται στην αλληλουχία όλων των γνωστών οξειδασών.