# ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

## Ειρήνη Μαργιωλάκη, Καθηγήτρια του Τμήματος Βιολογίας του Παν/μίου Πατρών με γνωστικό αντικείμενο «Βιοχημεία: Δομή & Λειτουργία Πρωτεϊνών»

*11/7/2022*

*Διεύθυνση εργασίας: Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Βιολογίας,Τομέας Γενετικής, Βιολογίας Κυττάρου & Ανάτυξης, Τηλ.: (2610) 997408 e-mail: imargiola@upatras.gr*

### Σύντομο Βιογραφικό

Related article & Web link

Η κ. Ειρήνη Μαργιωλάκη είναι Καθηγήτρια του Τμήματος Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Την περίοδο 2010-2015 εργάστηκε ως Λέκτορας στην θέση «Βιοχημεία: Δομή & Λειτουργία Πρωτεϊνών» και το 2015 εξελίχθηκε στην βαθμίδα της Επίκουρης Καθηγήτριας επί θητεία. Από το 2019 έως το 2023 υπηρέτησε ως Αναπληρώτρια Καθηγήτρια. Από το 2010, επιβλέπει 20μελή ερευνητική ομάδα. Το 2013, δημιούργησε ένα νέο εργαστήριο Βιοχημείας, Δομικής Βιολογίας και Κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ στο υπόγειο του Τμήματος Βιολογίας. Το 2015 εμπλούτισε τις υποδομές του Τμήματος με ένα εργαστήριο παραγωγής και κρυστάλλωσης πρωτεϊνών στον δεύτερο όροφο του Τμήματος. Την περίοδο 2003-2010 εργάστηκε αρχικά ως μεταδιδακτορική ερευνήτρια και κατόπιν ως ερευνήτρια (*Instrument Scientist*) στο Ευρωπαϊκό κέντρο ακτινοβολίας σύγχροτρον, *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)*, Grenoble, France. Όλο αυτό το διάστημα εργάστηκε στο εργαστήριο ID31 High resolution powder diffraction beamline (πρόσφατα μεταφέρθηκε στο ID22). Το κύριο μέρος της ερευνητικής της εργασίας έως σήμερα καθώς και της μελλοντικής της ερευνας αφορά στην ανάπτυξη νέων μεθοδολογιών για την δομική βιοχημεία εστιάζοντας στον δομικό χαρακτηρισμό νανο-/ μικρο-κρυσταλλικών πρωτεϊνών. Η δουλειά της έχει αναγνωριστεί από Διεθνείς οργανισμούς όσον αφορά στην ανάπτυξη και εφαρμογή της μεθόδου *X-ray Powder Diffraction (XRPD)* σε μικροκρυσταλλικά δείγματα πρωτεϊνών. Η διδακτορική της διατριβή εκπονήθηκε στο Τμήμα Φυσικής, Χημείας και Περιβαλλοντικών Επιστημών του Παν/μίου του Sussex (UK) υπό την επίβλεψη του Καθ. Κοσμά Πρασσίδη, εστιάζοντας στην μελέτη των δομικών, μαγνητικών και δυναμικών ιδιοτήτων των φουλλερενίων/ φουλεριδίων (1999-2004). Αποφοίτησε από το Τμήμα Φυσικής του Παν/μίου Κρήτης το 1999. Στα πλαίσια των προπτυχιακών της σπουδών εκπόνησε 12μηνη διπλωματική εργασία στο Ινστιτούτο Τεχνολογίας και Έρευνας (ΙΤΕ) υπό την επίβλεψη του Καθ. Σπύρου Αναστασιάδη, στην θεματική της μελέτης δημιουργίας μικυλλίων οργανικών πολυμερών με χρήση της μεθόδου *Small Angle X-ray Scattering (SAXS)*. Σήμερα έχει δημοσιεύσει 93 άρθρα; 2 προσκεκλημένα κεφάλαια βιβλίων, 11 δομικά μοντέλα πρωτεϊνών στην PDB; 1 *Science* (Ferey et al., 2005); 1 *Nature Comm.* (Georgiou *et al.*, 2015); 38 ως πρώτη/ τελευταία συγγραφέας; 25 ως corresponding author; 7 προσκεκλημένα άρθρα ανασκόπησης; 8,552 citations (8,242 without self-citations) & H-index: 27 (source: Isis web of Knowledge).

# Περιεχόμενα

Σύντομο Βιογραφικό ..... 1

I. ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ ..... 4

1. Προσωπικά Στοιχεία ..... 4

2. Τίτλοι Σπουδών ..... 4

3. Επαγγελματική Σταδιοδρομία ..... 4

4. Διακρίσεις/ Βραβεύσεις ..... 5

5. Ερευνητικές Δραστηριότητες - Εμπειρία ..... 6

5.1 Ερευνητικές Δραστηριότητες ..... 6

5.2 Πειραματικές Τεχνικές ..... 10

5.3 Συμμετοχή σε Ερευνητικά Προγράμματα ..... 10

6. Αναπτυξιακό Έργο στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών (20/03/2010 έως σήμερα) ..... 12

7. Εκπαιδευτικές Δραστηριότητες ..... 14

7.1 Διδασκαλία Μαθημάτων ..... 14

7.2 Διδακτορικές Διατριβές ..... 16

7.3 Ειδικές Μεταπτυχιακές Εργασίες στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών ..... 17

7.4 Διπλωματικές (Πτυχιακές) Εργασίες ..... 18

7.5 Συγγραφικό Έργο ..... 20

8. Άλλες Ακαδημαϊκές Δραστηριότητες ..... 21

8.1 Διοργάνωση Επιστημονικών Συνεδρίων ..... 21

8.2 Συμμετοχή σε Επιστημονικά Συνέδρια ως Προσκεκλημένη Ομιλήτρια ..... 22

8.3 Κριτής σε Περιοδικά ..... 23

8.4 Διοικητικό έργο: Συμμετοχή σε Διεθνείς, Εθνικές & Ενδοπανεπιστημιακές Επιτροπές/και Δίκτυα ..... 24

II. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ ..... 26

Α. Διεθνή Περιοδικά ..... 26

Α.1 Δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά σχετικά με Βιοχημεία, Δομική Βιολογία & την ανάπτυξη και χρήση της μεθόδου X-ray Powder Diffraction (XRPD) σε μικροκρυσταλλικά ιζήματα πρωτεϊνών ..... 26

Α.2 Δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά σχετικά με την ανάπτυξη μεθοδολογιών που εφαρμόζονται στην βιοχημεία για τον χαρακτηρισμό δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών σύνθετων υλικών ..... 29

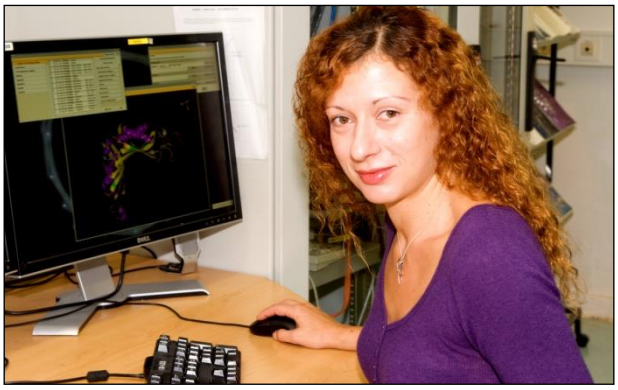
Β. Πρακτικά Διεθνών Συνεδρίων με κριτές ..... 32

Β.1 Δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές σχετικά με κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών & την ανάπτυξη και χρήση της μεθόδου X-ray Powder Diffraction (XRPD) σε μικροκρυσταλλικά ιζήματα πρωτεϊνών ..... 32

Β.2 Δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές σχετικά με την ανάπτυξη μεθοδολογιών που εφαρμόζονται στην βιοχημεία για τον χαρακτηρισμό δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών σύνθετων υλικών. 32

Γ. Προσκεκλημένα Κεφάλαια Βιβλίων σχετικά με την Βιοχημεία: Δομή και Λειτουργία πρωτεϊνών. 32

# I. ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ



**Web links:**
http://www.biology.upatras.gr/personel/margiolaki/?portfolioCats=80

https://sites.google.com/view/margiolaki-biology-upat/home

https://journals.iucr.org/a/services/editors.html

## 1. Προσωπικά Στοιχεία

Τόπος γεννήσεως: Ηράκλειο, Κρήτη
Υπηκοότης: Ελληνική
Οικογενειακή κατάσταση: Έγγαμη

## 2. Τίτλοι Σπουδών

**1. 1999 - 2003** School of Chemistry, Physics and Environmental Science, University of Sussex, Brighton, UK
**Διδακτορικό (DPhil)**
Τίτλος πτυχίου: "Δομικές, μαγνητικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες φουλλεριδίων, συστημάτων με βάση το $C_{60}$, με έμφαση στα υπεραγώγιμα παράγωγα.
"Structural, magnetic and electronic properties of fullerene based compounds with emphasis on the superconducting fullerides."
Διδακτορική διατριβή
Αναγνώριση από ΔΙΚΑΤΣΑ, Επιβλέπων Καθηγητής: Κοσμάς Πρασσίδης
**2. 1993 - 1999** Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Ηράκλειο, Κρήτη, Ελλάδα.
**Πτυχίο φυσικής**
Φυσική με κατεύθυνση στην στερεά κατάσταση.

## 3. Επαγγελματική Σταδιοδρομία

**1. 2023 – σήμερα** Καθηγήτρια του τμήματος Βιολογίας Παν/μίου Πατρών
(ημερομηνία ορκομωσίας- 25/09/2023)
**2. 2019 – 2023** Αναπληρώτρια Καθ. του τμήματος Βιολογίας Παν/μίου Πατρών
(ημερομηνία ορκομωσίας- 08/08/2019)
**3. 2015 – 2019** Επίκουρη Καθ. επί θητεία του τμήματος Βιολογίας Παν/μίου Πατρών
(ημερομηνία ορκομωσίας- 26/05/2015)
**4. 2010 - 2015** Λέκτορας του τμήματος Βιολογίας Παν/μίου Πατρών
(ημερομηνία ορκομωσίας- 22/03/2010) &
Συνεργαζόμενη ερευνήτρια στο Ευρωπαϊκό Σύγχροτρον, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF, Grenoble, France).
**5. 2003 - 2010** European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France:
2006 - 2010: Επιστήμονας οργάνων (Instrument scientist) &
2003 – 2006: Μεταδιδακτορική ερευνήτρια
Επιβλέπων Καθηγητής: Andrew N. Fitch
**6. 1998-1999** Διπλωματική εργασία στο Ινστιτούτο Έρευνας και Τεχνολογίας Ηλεκτρονικής Δομής και Λέϊζερ (FORTH), Ηράκλειο.
θέμα: «Διεπιφανειακή τάση πολυμερικών μιγμάτων παρουσία συμπολυμερών: Επίδραση επιπρόσθετου Μοριακού Βάρους.»
Επιβλέπων Καθηγητής: Σπύρος Αναστασιάδης.

## 4. Διακρίσεις/ Βραβεύσεις

**1.** Θερινό σχολείο προχωρημένης Φυσικής, Τμήμα Φυσικής Παν/μίου Κρήτης (Ηράκλειο- 1998). Έπαινος υψηλής επίδοσης σε γραπτές και προφορικές εξετάσεις που πραγματοποιήθηκαν κατά την ολοκλήρωση του σχολείου.

**2.** Βρετανική Κρυσταλλογραφική Ένωση (British Crystallographic Association). «Blue John Crystal Award»: Βραβείο για την λύση της πρώτης πρωτεϊνικης δομης από πολυκρυσταλλικά υλικά, απονεμημένο απο την ομάδα βιολογικών δομών & Cover article- BCA Crystallography News (Manchester -2003).

**3.** Προσκεκλημένη συνέντευξη για το περιοδικό ESRFNews, σελ. 16-17 (2005).

**4.** Ευρωπαϊκό συνέδριο περίθλασης από πολυκρυσταλλικά υλικά (European Powder Diffraction Conference – Geneva 2006). "EPDIC young scientist award".

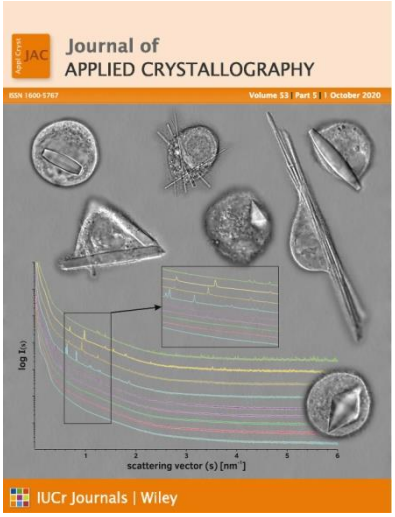
**5.** UNESCO - L'OREAL International Co-sponsored fellowship for Young Women in Life Sciences 2010 (Received on the 3d of March 2010 during the official ceremony in Paris). Η συγκεκριμένη υποτροφία εγκρίθηκε για την διετία **2010-2012**.

**6.** Ανάδειξη και στήριξη της Ακαδημαϊκής & Επιστημονικής Αριστείας στην Ελληνική Τριτοβάθμια Εκπαίδευση, Υπουργείο Παιδείας & Θρησκευμάτων. Παρουσίαση Ερευνητικής Δραστηριότητας στον Κόμβο Αριστείας με τίτλο ***«Ανάπτυξη Μεθόδων για την Δομική Βιολογία με Στόχο την Βελτίωση Γνωστών και την Δημιουργία Νέων Φαρμάκων.***

**7.** Εγκεκριμένη Χρηματοδότηση Δράσης **«ΑΡΙΣΤΕΙΑ ΙΙ»** στο πλαίσιο του 4ου Στρατηγικού Στόχου του Επιχειρησιακού Προγράμματος (Ε.Π.) «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» (ΕΠΕΔΒΜ), με τίτλο «Ενίσχυση του ανθρώπινου κεφαλαίου για την προαγωγή της έρευνας και της καινοτομίας». Τα στοιχεία της πρότασης δίνονται στην υποενότητα 5.3 Συμμετοχή σε Ερευνητικά Προγράμματα.

**8.** Προσκεκλημένη παρουσίαση ερευνητικών αποτελεσμάτων στο εξώφυλλο και σε σχετικό άρθρο (σελίδα 18) του περιοδικού ESRF newsletter (2015).

**9.** Προσκεκλημένη παρουσίαση ερευνητικών αποτελεσμάτων στο περιοδικό της εταιρείας επιστημονικού εξοπλισμού PANalytical X'Press (2/2016).

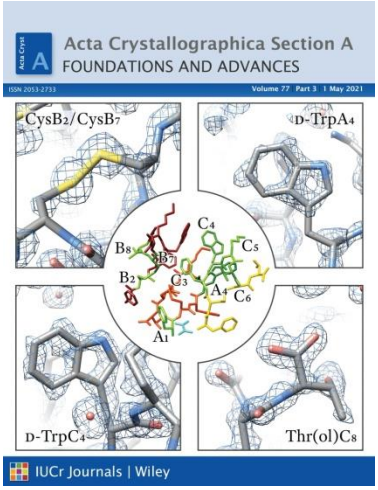



10. Προσκεκλημένο κεφάλαιο βιβλίου από την Διεθνή Ένωση Κρυσταλλογραφίας, International Tables of Crystallography- Volume H: Powder Diffraction, chapter 7.1, 718-736, "*Macromolecular Powder Diffraction*", (available online), I. Margiolaki (2019).

11. Co-editor του επιστημονικού περιοδικού «Acta Crystallographica section A:

Foundations and Advances». Ο ορισμός πραγματοποιήθηκε κατόπιν εκλογής από την Διεθνή ένωση κρυσταλλογραφίας - International Union of Crystallography, IUCr, (2020).

12. *Scientific Commentary* ερευνητικών αποτελεσμάτων για την ανάδειξη επιστημονικής δημοσίευσης και εξωφύλλου στο επιστημονικό περιοδικό στο επιστημονικό περιοδικό Journal of Applied Crystallography - International Union of Crystallography journals (2020).




13. Προσκεκλημένη παρουσίαση ερευνητικών αποτελεσμάτων Press release of the Paul Scherrer Institute (PSI- Switzerland) για την ανάδειξη επιστημονικής δημοσίευσης και εξωφύλλου στο επιστημονικό περιοδικό Acta Cryst. A - International Union of Crystallography journals (2022).

14. Εγκεκριμένη Χρηματοδότηση Δράσης **«1η Προκήρυξη Ερευνητικών Έργων ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. για την ενίσχυση των Μελών ΔΕΠ και Ερευνητών/τριών και την προμήθεια ερευνητικού εξοπλισμού μεγάλης αξίας»** με τίτλο «ΜΙΚΡΟΤΕΡΟΙ Κρύσταλλοι, ΤΑΧΥΤΕΡΑ Πειράματα, ΙΣΧΥΡΟΤΕΡΕΣ Δέσμες: Καινοτόμες προσεγγίσεις για το σχεδιασμό & την παραγωγή φαρμάκων». Τα στοιχεία της πρότασης δίνονται στην υποενότητα 5.3 Συμμετοχή σε Ερευνητικά Προγράμματα.

15. Προσκεκλημένη συνέντευξη για το περιοδικό ESRFNews, σελ. 25 (2022).

## 5. Ερευνητικές Δραστηριότητες - Εμπειρία

### 5.1 Ερευνητικές Δραστηριότητες

Τα ερευνητικά μου ενδιαφέροντα εστιάζονται στα παρακάτω πεδία:

- Βιοχημεία: Δομή και λειτουργία Πρωτεϊνών.
- Πρωτεϊνικός πολυμορφισμός και αλληλεπιδράσεις μεταξύ βιολογικών μακρομορίων.
- Έκφραση, απομόνωση και κρυστάλλωση πρωτεϊνών/ πεπτιδίων.
- Μελέτη πρωτεϊνών φαρμακευτικού ενδιαφέροντος και βιολογικών μακρομορίων προερχόμενων από ιούς με στόχο την δημιουργία φαρμάκων και εμβολίων.
- Κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ – Δομική ανάλυση υλικών συμπεριλαμβανομένων των βιολογικών μακρομορίων.
- Ανάπτυξη νέων πειραματικών μεθόδων για την δομική βιολογία.
- Χρήση ακτινοβολίας σύγχροτρον για δομική ανάλυση υλικών. Χρήση περίθλασης ακτίνων Χ απο μονοκρυστάλλους και πολυκρυσταλλικά υλικά (single crystal/ powder diffraction), συλλογή δεδομένων και ανάλυση δεδομένων για επίλυση πρωτεϊνικών δομών.

Η ερευνητική μου εργασία μπορεί να χωριστεί στις παρακάτω 3 διακριτές φάσεις.

- **1999-2003** Κατά την διάρκεια των προπτυχιακών μου σπουδών, διεκπεραίωσα διπλωματική εργασία στην ομάδα Επιστήμης Πολυμερών του Ινστιτούτου Έρευνας και Τεχνολογίας Ηλεκτρονικής Δομής και Λέϊζερ (FORTH, Ηράκλειο). Στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας χρησιμοποίησα την μέθοδο *Small Angle X-ray Scattering* για την

μελέτη της δημιουργίας μικκυλίων σε μίγματα οργανικών πολυμερών [**Δημοσίευση όπως παρουσιάζεται παρακάτω: A.2.1: 33**]. Η ερευνητική εργασία στα πλαίσια της διδακτορικής μου διατριβής (Department of Physical Chemistry, Univ. of Sussex, UK) εστιάστηκε κυρίως στον δομικό χαρακτηρισμό υλικών με βάση το $C_{60}$ χρησιμοποιώντας τις παρακάτω πειραματικές μεθόδους: Synchrotron X-ray Powder Diffraction, Elastic/ Inelastic Neutron Scattering και Muon Positive Spin Relaxation [**Δημοσιεύσεις: A.2.2: 34-36; B.2: 5**]. Το 2001 αναφέρθηκε για πρώτη φορά στην βιβλιογραφία η υπεραγώγιμη φύση του υλικού **$MgB_2$**, με μια χαρακτηριστικά υψηλή κρίσιμη θερμοκρασία (**$T_c$ ~ 39 K**). Λόγω της τεράστιας σημασίας αυτού του φαινομένου μέρος της έρευνας που διεξήγαγα αφορά στο $MgB_2$ **[Δημοσιεύσεις: A.2.2- 37, 38, 39, 45].**

- **2003-2010** Σε αυτό το διάστημα εργάστηκα ως μεταδιδακτορική ερευνήτρια και έπειτα ως Instrument Scientist στο εργαστήριο, High Resolution Powder Diffraction Beamline, ID31, ESRF, Grenoble, France. Το εργαστήριο αργότερα μετονομάστηκε ως ID22. Η εργασία μου αυτήν την 7ετία εστιάζεται σε 3 άξονες: **(α)** Ανάπτυξη και συνδυαστική χρήση μεθοδολογιών που εφαρμόζονται στην βιοχημεία για τον χαρακτηρισμό των δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών σύνθετων υλικών, **(β)** Κρυσταλλογραφική ανάλυση υλικών τα οποία παρουσιάζουν δυσκολία στον σχηματισμό μονοκρυστάλλων. Σε αυτό το πεδίο συνεργάστηκα με διάφορες ομάδες διεθνώς για την εφαρμογή των μεθόδων σε κατηγορίες υλικών οι οποίες παρουσιάζονται στις υποενότητες: A.2.3.2.1 Υλικά με ισχυρή σύζευξη μεταξύ μαγνητικής & κρυσταλλικής δομής, A.2.3.2.2 Υπεραγώγιμα υλικά, A.2.3.2.3 Φυσικά & Συνθετικά Ορυκτά. **(γ)** Η «προσωπική» μου έρευνα από το 2003 έως σήμερα αφορά στην ανάπτυξη νέων μεθόδων και αλγορίθμων σχετικών με τον δομικό χαρακτηρισμό πρωτεϊνών από μικροκρυσταλλικά ιζήματα και της μεθόδου X-ray Powder Diffraction - XRPD **[Δημοσιεύσεις: A.1: 1-32, B.1: 1-4]**. Για την επίτευξη του συγκεκριμένου ερευνητικού προγράμματος, διατηρώ πολυετή συνεργασία με ένα εκτενές διεπιστημονικό δίκτυο συνεργατών συμπεριλαμβανομένων συναδέλφων μου στο ESRF (Prof. Andrew N. Fitch & Dr. Jonathan P. Wright), ερευνητικών ομάδων σε διαφορετικές εγκαταστάσεις ακτινοβολίας σύγχροτρον και πυρηνικούς αντιδραστήρες (SLS, PSI), Ακαδημαϊκών Ιδρυμάτων (University of Manchester, University of Hamburg, EPFL, AFMB), φαρμακευτικών εταιρειών (Novo Nordisk, Sanofi-Aventis, CBL Patras) καθώς και εταιρειών επιστημονικού εξοπλισμού (Malvern PANalytical, Bruker, NanoMEGAS).

- **2010 - σήμερα** Ως Λέκτορας (2010 - 2015), Επίκουρη επί θητεία (2015 - 2019), Καθηγήτρια (2019 - 2023) και Καθηγήτρια (2023-σήμερα) του Τμήματος Βιολογίας του Παν/μίου Πατρών, συνεχίζω την παραπάνω ερευνητική δραστηριότητα (γ) εστιάζοντας περισσότερο στην ανάπτυξη και συνδυαστική χρήση νέων και παραδοσιακών μεθόδων για τον δομικό χαρακτηρισμό πρωτεϊνών φαρμακευτικού ενδιαφέροντος **[Δημοσιεύσεις: A.1: 1, 32, B.1: 1-4, Γ.1: 1-2].** Στα πλαίσια του συγκεκριμένου πεδίου συνεργάζομαι με ερευνητικές ομάδες των *R&D* τμημάτων 3 κυρίαρχων φαρμακευτικών εταιρειών: Sanofi Aventis (France) [A.1: 8], Novo Nordisk (Denmark) [A.1: 10, 12-14, 15, 18, 23-24, 27, 30, 31], CBL Patras (A.1: 21, 29). Από το 2008 έως σήμερα διατηρώ συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του κ. Bruno Canard (Research Director, AFMB, CNRS) "Ιϊκές πρωτεϊνες: Δομικός μηχανισμός και σχεδιασμός φαρμάκων" στην Μασσαλία (Γαλλία) [A.1: 13, 17, 19, 26; B.1: 3]. Το μεγαλύτερο μέρος των χρηματοδοτούμενων

προγραμμάτων όπως παρουσιάζονται σε παρακάτω υποενότητα αφορά σε αυτό το πεδίο. Όσον αφορά στην μελέτη της λειτουργίας των πρωτεϊνών, εστιάζουμε στην μελέτη των πρωτεινικών αλληλεπιδράσεων με άλλα πρωτεϊνικά μόρια καθώς και οργανικούς προσδέτες – φαρμακευτικούς στόχους για την βελτίωση διαθέσιμων φαρμάκων (drug delivery) και τον σχεδιασμό νέων φαρμάκων (drug deign) **[Ενδεικτικές δημοσιεύσεις: A.1: 8, 17-19, 21, 23]**. Για τον σκοπό αυτό συνδιάζουμε κρυσταλλογραφικά δεδομένα με **(α)** μελέτες μοριακής δυναμικής **[Ενδεικτικές δημοσιεύσεις: A.1: 26, 31**] **(β)** μετρήσεις πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (Nuclear Magnetic Resonance-NMR) **[Ενδεικτικές δημοσιεύσεις: A.1: 13, 30]** και πιο πρόσφατα **(γ)** μετρήσεις σκέδασης ακτίνων Χ σε μικρές γωνίες (Small Angle X-ray Scattering-SAXS) **(δ)** μετρήσεις φθορισμού και μικροκαλοριμετρίας (Differential Scanning Fluorimetry-DSF, Isothermal Titration Calorimetry-ITC) [Δημοσιεύσεις υπό προετοιμασία], **(ε)** μετρήσεις περίθλασης ακτίνων Χ από μονοκρυστάλλους πρωτεϊνικών συμπλόκων με την μέθοδο Fragment Screening [Ενδεικτικό κείμενο: Μεταπτυχιακή εργασία κ. Χ. Κοσίνα]. Όλα τα παραπάνω αποτέλεσαν το ερευνητικό έργο του εγκεκριμένου έργου ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. Μελών ΔΕΠ καθώς και νέα πρότασης η οποία υπεβλήθη στα πλαίσια της προκήρυξης χρηματοδότησης της βασικής έρευνας του ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. και βρίσκεται σε διαδικασία αξιολόγησης επί του παρόντος.

Προτεραιότητα μου είναι η εκπαίδευση νέων ερευνητών πάνω στο συγκεκριμένο ερευνητικό πεδίο και έως σήμερα έχουν ολοκληρωθεί 2 διδακτορικές διατριβές (3 υπό εξέλιξη), 10 μεταπτυχιακές διατριβές (3 υπό εξέλιξη) και 30 προπτυχιακές διπλωματικές εργασίες (7 υπό εξέλιξη) (υποενότητα βιογραφικού- 7. Εκπαιδευτικές Δραστηριότητες).

Επίσης στόχος μου είναι η ενίσχυση της βιοχημείας-δομικής βιολογίας μέσω δημιουργίας κατάλληλων υποδομών και διασύνδεσης με Διεθνείς υποδομές και οι σχετικές δράσεις περιγράφονται στην υποενότητα βιογραφικού 6. Αναπτυξιακό Έργο στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Από το 2010 έως σήμερα, δημιουργήσαμε δύο νέους ερευνητικούς χώρους παραγωγής, κρυστάλλωσης και κρυσταλλογραφίας πρωτεϊνών στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών (Συνολικό κόστος εξοπλισμού ≈ 2 εκατομμύρια ευρώ). Πιο συγκεκριμένα το εργαστήριο παραγωγής πρωτεϊνών και κρυστάλλωσης (επιφάνειας 100 $m^2$) διαθέτει ήδη τον ακόλουθο εξοπλισμό: Αυτοματοποιημένο ρομπότ κρυστάλλωσης πρωτεϊνών, ψυχρό θάλαμο, απαγωγό αερίων, μικροσκόπιο Leica DM2500, βιοχημικό εξοπλισμό όπως επωαστήρες, ανακινητές (Thermo Scientific), σύστημα υγρής χρωματογραφίας (ActaSTART FPLC), συσκευή υπερήχων, επιτραπέζιες φυγόκεντρους, συστήματα ηλεκτροφόρησης πρωτεϊνών (classic gel) και UV-Vis φωτόμετρα. Επίσης, το εργαστήριο παραγωγής ακτίνων Χ (επιφάνειας 200 $m^2$) διαθέτει ήδη δυο περιθλασίμετρα ακτίνων-Χ: Ένα περιθλασίμετρο κατάλληλο για τη συλλογή δεδομένων περίθλασης από μονοκρυσταλλικά υλικά (BRUKER, Kappa-CCD) με παροχή υγρού αζώτου (Oxford nitrogen Cryostream, 400 series) για την ψύξη του υπό μελέτη υλικού στους 80K, καθώς και ένα σύγχρονο περιθλασίμετρο κατάλληλο για τη μελέτη πολυκρυσταλλικών υλικών (Malvern Panalytical, X'Pert PRO), το οποίο έχει τροποποιηθεί κατάλληλα για τη συλλογή δεδομένων περίθλασης από πρωτεϊνικά δείγματα και διαθέτει επίσης αυτόματο σύστημα εναλλαγής των δειγμάτων λεπτών υμενίων και έναν ταχύτατο ανιχνευτή καταγραφής σήματος PIXcel (MEDIPIX). Και τα δύο περιθλασίμετρα χρησιμοποιούνται σε καθημερινή βάση για τη μελέτη μονοκρυστάλλων καθώς και

πολυκρυσταλλικών δειγμάτων βιολογικών μακρομορίων αντίστοιχα. Ένα σημαντικό κομμάτι του εξοπλισμού που δεν διατίθεται στο Πανεπιστήμιο Πατρών, αλλά ούτε και σε άλλο ερευνητικό εργαστήριο της χώρας, αφορά τη χρήση ενός θαλάμου ελεγχόμενης υγρασίας συνδυαστικά με ένα σύστημα περίθλασης ακτίνων Χ, το οποίο αποτέλεσε έναν από τους βασικούς άξονες της ερευνητικής πρότασης. Η εγκατάσταση ενός θαλάμου ελεγχόμενης μεταβολής της υγρασίας σε συμβατό περιθλασίμετρο ακτίνων-Χ (το οποίο διαθέτει ήδη το εργαστήριο μας), προς τη διεξαγωγή in situ μελετών υπό συνθήκες ελεγχόμενης μεταβολής της υγρασίας των δειγμάτων, αποτελεί ένα εξαιρετικά σημαντικό και καινοτόμο γεγονός στον τομέα του χαρακτηρισμού βιολογικών μακρομορίων [**Ενδεικτικές δημοσιεύσεις: A.1: 20, 22, σχετική παρουσίαση**]. Η χρήση της συγκεκριμένης τεχνικής συμβάλλει στον πληρέστερο χαρακτηρισμό των υπό μελέτη μορίων (πρωτεϊνών αλλά και μορίων που μπορούν ενδεχομένως να χρησιμοποιηθούν ως φαρμακευτικές συνθέσεις), παρέχει πληροφορίες για τη σταθερότητα τους, καθώς και για τις κατάλληλες συνθήκες αποθήκευσής τους και ως εκ τούτου θα αποτελέσει σημαντικό εργαλείο στις διαδικασίες παραγωγής φαρμακευτικών προϊόντων. Πιο συγκεκριμένα, ο θάλαμος Anton Paar MHC-trans chamber ελεγχόμενης μεταβολής υγρασίας και θερμοκρασίας, είναι ειδικά κατασκευασμένος ώστε να επιτρέπει τη συλλογή δεδομένων περίθλασης ακτίνων-Χ κατά τη διάρκεια μεταβολής των περιβαλλοντικών συνθηκών του υπό μελέτη υλικού. Ο εξοπλισμός πρόκειται να εγκατασταθεί την περίοδο 23-30 Ιανουαρίου 2022 σε συνεργασία με την εταιρεία Malvern Panalytical. **Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτή θα είναι η πρώτη υποδομή διεθνώς που θα παρέχει τη δυνατότητα εφαρμογής της XRPD μεθόδου σε πρωτεϊνικά δείγματα υπό συνθήκες ελεγχόμενης μεταβολής της υγρασίας.** Τέλος, από το 2011, γίνονται προσπάθειες συνδυασμού της μεθόδου περίθλασης ακτίνων Χ από πολυκρυσταλλικά,υλικά με τις αναπτυσσόμενες μεθόδους περίθλασης ηλεκτρονίων (Precession Electron Diffraction & Automated Diffraction Tomography Methods, συνεργασία με την εταιρεία NanoMEGAS) με στόχο τον δομικό χαρακτηρισμό νανο-κρυσταλλικών πρωτεϊνών καθώς και με την ευρέως πλέον αναγνωρισμένη μέθοδο φασματοσκοπίας NMR για τον δομικό χαρακτηρισμό και την μελέτη της δυναμικής πρωτεϊνών σε διάλυμα (συνεργασία με τον Δρ. Χρήστο Χασάπη, Ερευνητής Γ, ΕΙΕ).

Όσον αφορά στην διασύνδεση της Ελλάδας με Διεθνείς ερευνητικές υποδομές, από το 2022 έως σήμερα, είμαι μέλος ως εκπρόσωπος του Πανεπιστημίου Πατρών του επί του παρόντος άτυπου, δικτύου Ελλήνων χρηστών ακτινοβολίας σύγχροτρον, επονομαζόμενου ως Greek Synchrotron User Network (GrSUN). Στόχος του δικτύου είναι η ένταξη της Ελλάδας ως συνεργαζόμενη χώρα στην Ευρωπαϊκή Εγκατάσταση Ακτινοβολίας Σύγχροτρον (ESRF). Το Δίκτυο GrSUN αποτελείται από μέλη που έχουν ως βάση τους την πλειοψηφία των Ελληνικών Ανωτάτων Εκπαιδευτικών Ιδρυμάτων και Ερευνητικών Κέντρων. Έως σήμερα, το Δίκτυο GrSUN έχει πραγματοποιήσει μία σειρά από δράσεις σχετικά με την ένταξη της Ελλάδας στο ESRF που παρατίθενται στον σύνδεσμο.

### 5.2 Πειραματικές Τεχνικές

- **Κρυσταλλογραφία - Δομική ανάλυση:** Κρυστάλλωση πρωτεϊνων, ανάπτυξη νέων πειραματικών μεθόδων για δομική βιολογία, τακτική χρήστρια των περισσοτέρων συγχρότρων στον κόσμο, εκτενής γνώση περίθλασης ακτίνων Χ απο πολυκρυσταλλικά υλικά και μονοκρυστάλλους (*powder diffraction/ single crystal diffraction*), συλλογή δεδομένων συμπεριλαμβανομένης της τεχνικής Multiple Anomalous dispersion (MAD) για επίλυση πρωτεϊνικών δομών, δομική ανάλυση οργανικών/ ανόργανων υλικών και πρωτεϊνων. Επίλυση και βελτιστοποίηση κρυσταλλικών δομών.
- **Παραγωγή πρωτεϊνών:** τεχνικές Μοριακής Βιολογίας όπως Μετασχηματισμός Δεκτικών Κυττάρων, Πολλαπλασιασμός- Προετοιμασία Πλασμιδίου (Plasmid minipreparation- miniprep), Ηλεκτροφόρηση Πρωτεϊνών (SDS-PAGE), Έκφραση ανασυνδυασμένων πρωτεϊνών με την χρήση επαγωγικών μέσων , Καλλιέργειες βακτηριακών κυττάρων, Καθαρισμός πρωτεϊνών μέσω Χρωματογραφίας (FPLC), Φασματοφωτομετρία με την μέθοδο Bradford (Bradford Protein Assay).
- **Περίθλαση ηλεκτρονίων** με χρήση των μεθόδων *Precession Electron Diffraction Method, PED & Automated Diffraction Tomography, ADT*. Ερμηνεία των δεδομένων με χρήση κρυσταλλογραφικών μεθόδων.
- **Περίθλαση νετρονίων.** Συλλογή δεδομένων σε πυρηνικούς αντιδραστήρες (ILL, France) και Neutron Spallation Sources (ISIS, UK). Ερμηνεία των δεδομένων με χρήση κρυσταλλογραφικών μεθόδων.
- **Άλλες πειραματικές τεχνικές** στις οποίες έχω αποκτήσει το βασικό υπόβαθρο γνώσεων κατά την διάρκεια των σπουδών και της επαγγελματικής μου πορείας έως σήμερα: Σκέδαση ακτίνων Χ σε μικρές γωνίες (*Small Angle X-ray Scattering*), μικροσκοπία ηλεκτρονίων, ανελαστική σκέδαση νετρονίων, φασματοσκοπία $\mu^+$SR (*Positive Muon Spin Relaxation*) σε μαγνητικά υλικά. Εκτενής γνώση και χρήση ερευνητικού εξοπλισμού εργαστηρίων και εγκαταστάσεων μεγάλης κλίμακας (synchrotron sources/ nuclear reactors).

### 5.3 Συμμετοχή σε Ερευνητικά Προγράμματα

| **RESEARCH GRANTS** | | | |
|---|---|---|---|
| **Project Title** | **Funding source** | **Period** | **Role** |
| Coordinated Research Project (CRP) on "Utilization of accelerator-based real-time and in-situ methods in investigation of materials for energy applications"<br><br>IAEA CRP code: F12024<br><br>PI:Dr. Andrej Zeman, IAEA | International Atomic Energy Agency (IAEA),<br><br>http://www.iaea.org/ | 2012-2015 | National Representative |
| Establishment of an X-ray Lab at the Department of Biology, UPAT | Companies: Malvern-Panalytical, BRUKER | 2010-present | PI |

| | | | |
|---|---|---|---|
| International Fellowship for Women in Life Sciences | Unesco - L'Oreal | 2010-2012 | PI |
| Electron Crystallography | Company: NanoMEGAS (Belgium) | 2011-2015 | PI |
| “SEE-DRUG ” is a FP7 - RESEARH POTENTIAL project that aims to the upgrade the Structural Biology capacities of UPAT and to the Establishment of a Center of Excellence for Structure-Based Drug Target characterization efforts in South-Eastern EU region.<br><br>PI: Prof. Georgios Spyroulias | FP7 (http://www.seedrug.upatras.gr/) | 2012-2015 | Participant |
| Structural Biology: Proteins associated with pharmaceutical interest.<br><br>Karatheodori Grant | Research Secretariat of the University of Patras | 2010-2013 | PI |
| Life Sciences: Diffraction and NMR experimental platform for drug screening.<br><br>Aristeia II Grant | General Secretariat for Research & Technology | 2014-2015 | PI |
| Understanding Movement and Mechanism in Molecular<br><br>Machines.<br><br>(COST Action: CM1306)<br><br>PI: Dr. Fraser McMillan, University of East Anglia, UK. | FP7 (http://www.cost.eu/domains_actions/cmst/Actions/CM1306?management) | 2014-2018 | National Representative |
| “Combinational use of X-ray Techniques for Structural Characterization of Biological Macromolecules of Pharmaceutical Interest” | H.F.R.I.<br><br>(Scholarship Code: 2467) | 08/2017-11/2018 | PhD supervisor for the thesis of Mr. Alexandros Valmas |

| | | | |
|---|---|---|---|
| Andreas Mentzelopoulos Scholarship for Postgraduate Studies at University of Patras | Research Secretariat of the University of Patras<br><br>(Scholarship Code: 14059) | 01/2017-08/2018 | PhD supervisor for the thesis of miss Maria Spiliopoulou |
| Investigation of the effect of Oxidative stress on Human Insulin. | IKY | 2015-2017 | Participant |
| Structural Studies of Pharmaceutical compounds. | Pharmaceutical industry<br><br>CBL Patras (Greece) | 2017-2024 | PI |
| Stability and Structural Screening of Pharmaceutical Peptides. | Pharmaceutical industry<br><br>(Switzerland) | 2020-2022 | PI |
| SMALLER crystals, FASTER experiments, BRIGHTER beams: Uprising methods for Drug Screening & Innovation. | 1st Call for H.F.R.I. Research Projects to Support Faculty<br><br>Members & Researchers and Procure High-Value<br><br>Research Equipment.<br><br>Project Code: 3150) | 2020-2023 | PI |

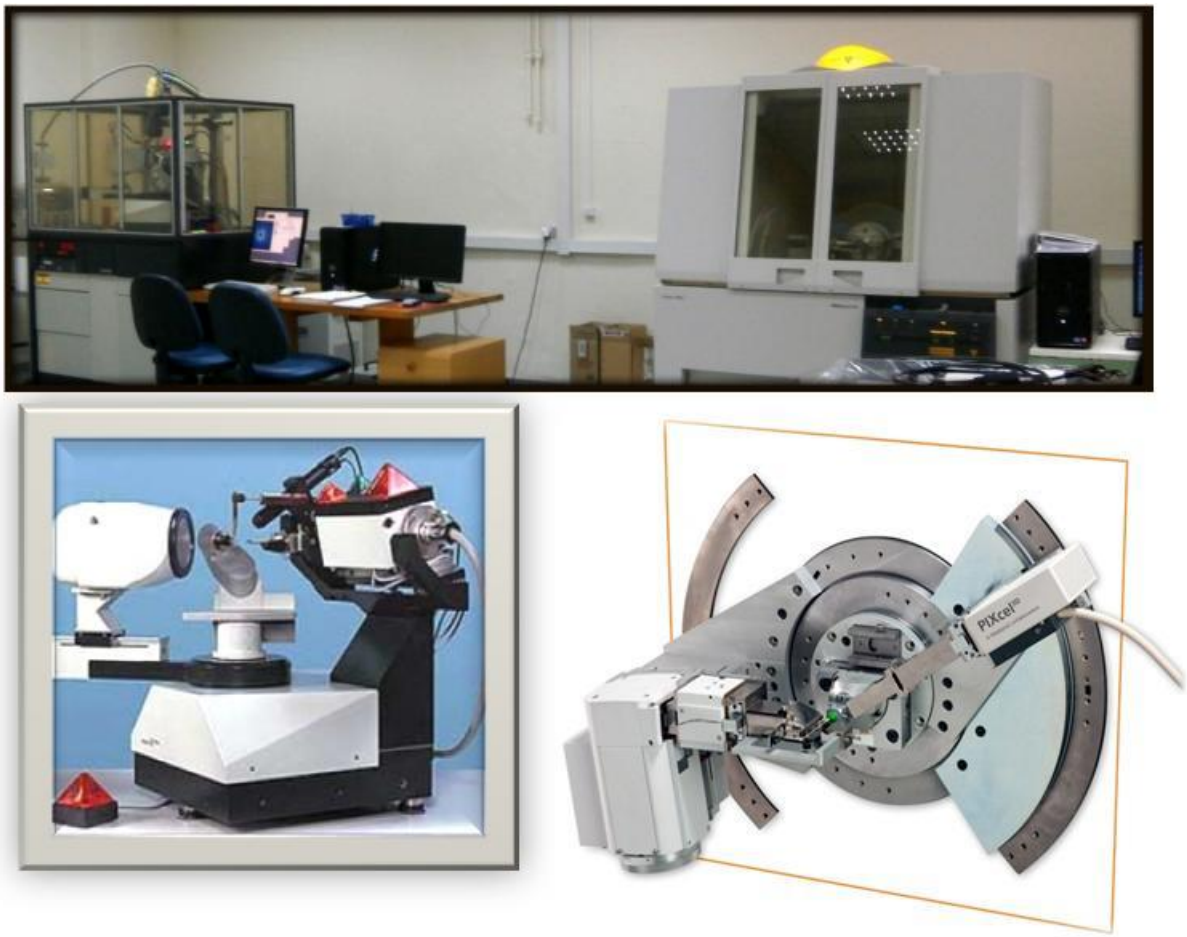
## 6. Αναπτυξιακό Έργο στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών (20/03/2010 έως σήμερα)

- Δημιουργία Εργαστηρίου Έκφρασης, Απομόνωσης και Κρυστάλλωσης Πρωτεϊνών (εργαστήριο 226, δεύτερος όροφος τμήματος βιολογίας). Η αγορά εργαστηριακού εξοπλισμού (cold room, fume-hood, Leica DM2500 Microscope, incubators, orbital shakers (Thermo Scientific), liquid chromatography system (ActaSTART FPLC), Oryx Nano protein crystallization robot, sonicator, bench-top centrifuges, classic gel electrophoresis system for analysis of protein samples and UV-Vis light absorption spectrometers. etc.), αναλώσιμων (proteins, solvents etc.), και μιας υπολογιστικής μονάδας πραγματοποιήθηκε με χρήση των ερευνητικών προγραμμάτων τα οποία αναφέρονται παραπάνω.

- Δημιουργία Εργαστηρίου Βιοχημείας, Δομικής Βιολογίας και Κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ (εργαστήριο Υ31, υπόγειο τμήματος βιολογίας). Το εργαστήριο λειτουργεί

από τον Απρίλιο 2013 και είναι διαθέσιμο για συλλογή δεδομένων σε όλα τα μέλη του Παν/μίου Πατρών και άλλων Ελληνικών Πανεπιστημίων/ Ερευνητικών κέντρων. Έως σήμερα έχει εξοπλιστεί με δύο συστήματα περίθλασης ακτίνων Χ τα οποία παρουσιάζονται στην εικόνα που ακολουθεί. Τα 2 όργανα παραχωρήθηκαν στην ομάδα μας μέσω συνεργασιών με τις εταιρείες BRUKER & Malvern-PANalytical καθώς και την ερευνητική ομάδα του Καθηγητή Henk Schenk (Group of X-ray Crystallography, University of Amsterdam, Netherlands). Η μεταφορά των οργάνων, η αναβάθμηση του χώρου καθώς και η αγορά βοηθητικού εξοπλισμού (UPS, water chiller, computers) υποστηρίχτηκε από τις Πρυτανικές αρχές του Παν/μιου Πατρών και την Επιτροπή Ερευνών. Το 2022-2023, το σύστημα περίθλασης ακτίνων Χ από πολυκρυσταλλικά δείγματα (Malvern-PANalytical) αναβαθμίστηκε με ένα σύστημα ελεγχόμενης υγρασίας και θερμοκρασίας (Anton Paar MHC humidity chamber). Η αγορά του συγκεκριμένου εξοπλισμού πραγματοποιήθηκε μέσω της χρηματοδότησης ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.

- Στα πλαίσια της αναβάθμισης του Διατμηματικού Εργαστηρίου Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας & Μικροανάλυσης της Σχολής Θετικών Επιστημών του Παν/μίου Πατρών, εγκαταστήσαμε εξοπλισμό που μας παραχωρήθηκε από την συνεργαζόμενη εταιρεία NanoMEGAS (Belgium) για την διεξαγωγή πειραμάτων περίθλασης ηλεκτρονίων με χρήση των μεθόδων *Precession Electron Diffraction Method, PED & Automated Diffraction Tomography, ADT.* Το σύστημα «*Spinning Star*» εγκαταστάθηκε στο υπάρχον ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διέλευσης του εργαστηρίου ((TEM/HRTEM) JEM-2100) και είναι διαθέσιμο σε όλα τα μέλη του Παν/μίου. Στα πλαίσια της ερευνητικής συναργασίας μας με την εταιρεία NanoMEGAS, το 2011 εξασφαλίσαμε 5ετή χρηματοδότηση του εργαστηρίου, ύψους 10,000 ευρώ ετησίως για την χρήση του συστήματος JEM-2100.




**Εικόνα:** Ο ερευνητικός χώρος του εργαστήριου Βιοχημείας, Δομικής Βιολογίας και Κρυσταλλογραφίας ακτίνων Χ, στο υπόγειο του κτιρίου του τμήματος Βιολογίας, του Πανεπιστημίου Πατρών όπου διακρίνονται τα παρακάτω δυο συστήματα περίθλασης ακτίνων Χ τα οποία εγκαταστάθηκαν τον Απρίλιο 2013: ***Αριστερά-*** Single crystal diffractometer, Model: KappaCCD, Company: BRUKER. ***Δεξιά-*** Powder diffractometer, Model: X' Pert PRO, Company: Malvern PANalytical.

## 7. Εκπαιδευτικές Δραστηριότητες

### 7.1 Διδασκαλία Μαθημάτων

#### *7.1.1 Στο Ευρωπαϊκό Σύγχροτρον, ESRF (Grenoble, France). Περίοδος-* 2003-2010

Σε Μεταπτυχιακό επίπεδο

Την περίοδο της μεταδιδακτορικής εργασίας (2003-2006) και της ερευνητικής θέσης (2006-2010) στο ερευνητικό ινστιτούτο ESRF, συμμετείχα μέσω διαλέξεων και εργαστηριακής εκπαίδευσης (*Practical Training*) μεταπτυχιακών φοιτητών & νέων ερευνητών στα πλαίσια του ερευνητικού δικτύου/ θερινού σχολείου, ***Hercules*** ***scientist network on neutron and synchrotron radiation, Grenoble, France.*** Λεπτομέρειες των ετών και θεματικών ενοτήτων δίνονται παρακάτω.

- **2004** Practical training & Seminar for young scientists on:
  *"Synchrotron Radiation in Structural Chemistry"*
- **2007** Practical training & Seminar for young scientists on:

*"The use of synchrotron X-ray powder diffraction in protein crystallography"*

- **2008** Practical training & Seminar for young scientists on:
  *"Complementary methods in protein crystallography"*
- **2009** Practical training & Seminar for young scientists on:
  *"Complementary methods in protein crystallography" & "Structural Chemistry using powder diffraction"*

### *7.1.2 Στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Περίοδος-* **2010-σήμερα.**

Σε Μεταπτυχιακό επίπεδο (Πρόγραμμα «Βιολογική Τεχνολογία» του τομέα Γενετικής, Βιολογίας Κυττάρου & Ανάπτυξης)

- "**Δομική Βιολογία**" (Επιλογής 1ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Χειμερινό εξάμηνο)

Σε Προπτυχιακό επίπεδο

- "**Βιοχημεία Ι**" (Υποχρεωτικό 2ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Εαρινό εξάμηνο)
  «**Εργαστήρια Βιοχημείας Ι**» (Υποχρεωτικό 2ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Εαρινό εξάμηνο).
  Συνδιδάσκοντες: Ε. Μαργιωλάκη, Επικ. Καθ. Γ. Καλλέργη
- "**Βιοχημεία ΙΙ**" (Υποχρεωτικό 3ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2018- σήμερα (Χειμερινό εξάμηνο)
  «**Εργαστήρια Βιοχημείας ΙΙ**» (Υποχρεωτικό 3ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2018- σήμερα (Χειμερινό εξάμηνο).
  Συνδιδάσκοντες: Ε. Μαργιωλάκη, Επικ. Καθ. Γ. Καλλέργη
- **«Μέθοδοι Ενόργανης Ανάλυσης Βιομορίων» (**Επιλογής 6$^{ου}$ Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Εαρινό εξάμηνο)
- «**Εργαστήριο Βιολογίας Κυττάρου Ι»**: Προσδιορισμός Συγκέντρωσης Πρωτεϊνών με χρηση φασματοφωτομετρίας» (Υποχρεωτικό 3ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- 2021 (Χειμερινό εξάμηνο)
  Συνδιδάσκοντες: Ε. Μαργιωλάκη & Σ. Τσάκας (Ε.ΔΙ.Π)

### *7.1.3 Στο Τμήμα Ιατρικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Περίοδος-* **2011-σήμερα.**

Σε Μεταπτυχιακό επίπεδο (Πρόγραμμα «Βασικές Ιατρικές Επιστήμες (**ΒΙΕ**)»)
Διαλέξεις με τίτλο «**Εισαγωγή στην Κρυσταλλογραφία Πρωτεϊνών**» του μαθήματος «**Μεθοδολογία Ι**» (eclass: *MED826*). Συντονίστρια Μαθήματος: Ζ. Λυγερού (Καθηγήτρια Τμήματος Ιατρικής). (Υποχρεωτικό 1ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Χειμερινό εξάμηνο).

Σε Μεταπτυχιακό επίπεδο (Πρόγραμμα «Πληροφορική Επιστημών Ζωής (**ΠΕΖ)**»)
Διαλέξεις με τίτλο «**Βιομόρια, ενέργεια, αρχές μεταβολισμού (κεφ 2,3, Alberts)»** Συντονίστρια Μαθήματος: Ζ. Λυγερού (Καθηγήτρια Τμήματος Ιατρικής). (Υποχρεωτικό 1ου Εξαμήνου), Ακ. Έτη 2011- σήμερα (Χειμερινό εξάμηνο).

### 7.2 Διδακτορικές Διατριβές

#### *7.2.1 Στο Ευρωπαϊκό Σύγχροτρον, ESRF (Grenoble, France). Περίοδος-* **2003-2010**

*Συνεπιβλέπουσα*

- «Etudes de diffraction de poudres de proteines», Yves Watier (ESRF, France). Ολοκληρώθηκε τον Απρίλιο του 2011. Εκπονήθηκε στο ESRF και στο Université de Grenoble. Επιβλέπων: Prof. Andrew Fitch (ESRF & University of Keele, UK).

#### *7.2.2 Στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Περίοδος-* **2010-σήμερα.**

*Επιβλέπουσα*

1. «Ανάπτυξη και συνδυασμός μεθόδων περίθλασης ακτίνων-Χ και ηλεκτρονίων για το δομικό χαρακτηρισμό νανοκρυσταλλικών υλικών.”, Φωτεινή Καραβασίλη. Ολοκληρώθηκε επιτυχώς τον Φεβρουάριο του 2018.
2. «Συνδυαστική Χρήση Τεχνικών Ακτίνων-Χ Για Τον Δομικό Χαρακτηρισμό Βιολογικών Μακρομορίων Φαρμακευτικού Ενδιαφέροντος.», Αλέξανδρος Βαλμάς. Ολοκληρώθηκε επιτυχώς τον Οκτώβριο του 2020.
3. «Δομική Μελέτη Βιολογικών Μακρομορίων για τη Δημιουργία Φαρμακευτικών Στόχων.», Μαρία Σπηλιοπούλου. Ημερομηνία έναρξης: Ιούνιος 2018.
4. «Ανάπτυξη κλινικών δεικτών αξιόπιστης εκτίμησης κινδύνου για εμφάνιση αθηροσκληρωτικών νόσων στον άνθρωπο.», Πολυξένη Παπαδέα. Ημερομηνία έναρξης: Μάρτιος 2019 (Συνεπίβλεψη με τον Ομότιμο Καθηγητή κ. Χ. Γεωργίου).
5. «Ανάπτυξη συστήματος τεχνητής παραγωγής βιογενών ελευθέρων ριζών για την προσομοιωμένη μελέτη των οξειδωτικών τροποποιήσεων σε κρίσιμα βιομόρια σε συνδυασμό με την αντιοξειδωτική κατάσταση των διαφόρων βιολογικών συστημάτων.», Μαριάννα Σκιπητάρη. Ημερομηνία έναρξης: Μάρτιος 2019 (Συνεπίβλεψη με τον Ομότιμο Καθηγητή κ. Χ. Γεωργίου).

*Μέλος 3μελούς και 7μελούς εξεταστικής επιτροπής*

- «Structure formation at solid/liquid interfaces. Understanding self-assembly and environmental challenges», Shirin Nouhi, Department of Physics, Uppsala University, Sweden (Δημόσια παρουσίαση διατριβής 14/12/2018.).
- «Ανάπτυξη μεθόδων για την in vivo ποσοτικοποίηση της ελεύθερης ρίζας του σουπεροξειδίου στους οργανισμούς», Δημήτρης Ζησιμόπουλος, Τμήμα Βιολογίας, Πανεπιστήμιο Πατρών (Δημόσια παρουσίαση διατριβής 14/04/2022.).
- «Ανάπτυξη μεθόδου για την in vivo ποσοτικοποίηση της ελεύθερης ρίζας υδροξυλίου στους οργανισμούς.», Ηλέκτρα Καλαϊτζοπούλου, Τμήμα Βιολογίας Πανεπιστημίου Πατρών, Ημερομηνία έναρξης: Μάρτιος 2017.
- «Μελέτη των βιολογικών επιδράσεων της ουσίας Tetraglyme σε υδρόβιους οργανισμούς και σε in vitro πειραματικά μοντέλα.», Νικολίνα Χαραλάμπους, Τμήμα Βιολογίας Πανεπιστημίου Πατρών, Ημερομηνία έναρξης: Οκτώρβιος 2020.
- «Η σημασία της γλουταρεδοξίνης 2 για το βακτηριακό κύτταρο.», Ελένη Πούλου Σιδηροπούλου, Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών, Ημερομηνία έναρξης: Σεπτέμβριος 2022.

### 7.3 Ειδικές Μεταπτυχιακές Εργασίες στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών.

#### *7.3.1 Στο Ευρωπαϊκό Σύγχροτρον, ESRF (Grenoble, France). Περίοδος-* 2003-2010

*Μέλος 3μελούς εξεταστικής επιτροπής*

- **2009**- "External examiner" για μεταπτυχιακή διατριβή (Mr. Surasak Kaenket- Supervisor: Prof. J. R. H. Helliwell, Title: "Progress with the M. Tb Structural Genomics Effort and Experiments towards Overcoming some Practical Limitations", Degree: Master of Science, Faculty of Engineering and Physical Sciences, University of Manchester, UK).
- **2010**- "External examiner" για μεταπτυχιακή διατριβή (Mr. Richard Prendergast- Supervisor: Prof. J. R. H. Helliwell, Title: "Structure Determination of Small & Large Macromolecules Using Single Crystal X-ray Crystallography", Degree: Master of Science, Faculty of Engineering and Physical Sciences, University of Manchester, UK).

#### *7.3.2 Στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Περίοδος-* 2010-σήμερα.

*Επιβλέπουσα*

1. "Δομικός χαρακτηρισμός πρωτεϊνών φαρμακευτικού ενδιαφέροντος", Αναστασία Ευδοκία Γιαννοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2012.
2. "Δομικός Χαρακτηρισμός πολυκρυσταλλικών συμπλόκων ανθρώπινης ινσουλίνης με τους οργανικούς προσδέτες: *4-(2-Pyridylazo) Resorcinol, Acetylsalicylic Acid, 3,5-Dihydroxybenzoic acid & 4-nitrophenol*", Αλέξανδρος Βαλμάς. Ολοκληρώθηκε τον Ιανουάριο του 2015.
3. "Δομική μελέτη πεπτιδίων και πρωτεϊνών φαρμακευτικού ενδιαφέροντος μέσω περίθλασης ακτίνων Χ από πολυκρυσταλλικά δείγματα.", Σταυρούλα Φίλη. Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2016.
4. "Παραγωγή και δομικός χαρακτηρισμός ιϊκών πρωτεϊνών και νέων πολυμόρφων ινσουλίνης.", Μαγδαληνή Χριστοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Σεπτέμβριο του 2017.
5. "Δομικός χαρακτηρισμός πολυμόρφων ινσουλίνης απουσία και παρουσία προσδετών πολλαπλής δράσης.", Παρασκευή Κοντού. Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2018.
6. "Παραγωγή και δομικός χαρακτηρισμός ιικών πρωτεϊνών και φαρμακευτικών στόχωντα.", Μαρία Σπηλιοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Απρίλιο του 2018.
7. "Παραγωγή και δομική μελέτη της πρωτεΐνης 3Cpro του ιού Coxsackie με στόχο τη δημιουργία αντί-ιικών φαρμάκων (drug design).", Χρήστος Κοσίνας. Ολοκληρώθηκε τον Μάϊο του 2020.
8. "Δομικός χαρακτηρισμός της ανθρώπινης ινσουλίνης παρουσία και απουσία οργανικών προσδετών και ανάπτυξη της πρώτης μακρομοριακής βάσης δεδομένων BioXRPD.", Δημήτρης Τριανταφυλλίδης. Ολοκληρώθηκε τον Νοέμβριο του 2021.

   Σήμερα, οι κ. Αθανασιάδου, Παπευθυμίου και Κονταρίνης εκπονούν τις μεταπτυχιακές τους εργασίες στην ερευνητική μας ομάδα. Αναμένεται να ολοκληρωθούν το 2023-2024.

*Συνεπιβλέπουσα*

1. "Μελέτη της πολυμορφικότητας πρωτεϊνών φαρμακευτικού ενδιαφέροντος: Η περίπτωση της ανθρώπινης ινσουλίνης.», Φωτεινή Καραβασίλη (Τμήμα Βιολογίας, Παν/μίου Πατρών). Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2012. Επιβλέπων Καθηγητής Τμήματος Φαρμακευτικής: Γ. Σπυρούλιας.
2. "Δομικός χαρακτηρισμός πολυμόρφων ινσουλίνης απουσία και παρουσία προσδετών πολλαπλής δράσης.», Παρασκευή Κοντού (Τμήμα Φυσικής, Παν/μίου Πατρών). Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2018. Επιβλέπων Καθηγητής Τμήματος Φυσικής: Δ. Αναστασόπουλος.

## 7.4 Διπλωματικές (Πτυχιακές) Εργασίες

### *7.4.1 Στο Ευρωπαϊκό Σύγχροτρον, ESRF (Grenoble, France). Περίοδος-* 2003-2010

Την περίοδο 2003-2010, σε συνεργασία με την Καθ. Andrew Fitch, ολοκληρώθηκαν υπό την κοινή μας καθοδήγηση επτά διπλωματικές εργασίες προπτυχιακών φοιτητών από το Πανεπιστήμιο του Bath (UK) οι οποίες είχαν ως αποτέλεσμα την εκπαίδευση αυτών των νέων ερευνητών εκ των οποίων οι έξι συνεχίσαν για μεταπτυχιακές σπουδές και την συγγραφή 6 δημοσιεύσεων [A.1: 2, 3, 8-10; B.1: 3].

### *7.4.2 Στο Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Πατρών. Περίοδος-* 2010-σήμερα.

*Επιβλέπουσα*

1. «Κρυστάλλωση και δομικός χαρακτηρισμός ανθρώπινης Ινσουλίνης με τους οργανικούς προσδέτες 4-(2-Pyridylazo)-Resorcinol και 3,5-Dihydroxybenzoic acid », Μαρίνα Παναγιώτα Καλαθά. Ολοκληρώθηκε τον Σεπτέμβριο του 2012.
2. "Έκφραση, Απομόνωση και Κρυστάλλωση του Macro Domain της μη δομικής πρωτεΐνης 3 (NSP3) του Ιού MAYARO", Αλέξανδρος Βαλμάς. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2012.
3. "Κρυστάλλωση και δομικός χαρακτηρισμός ανθρώπινης ινσουλίνης παρουσία του οργανικού προσδέτη m-cresol: Αλλαγή κρυσταλλικής φάσης με την αύξηση του pH και προσδιορισμός ενός νέου κρυσταλλικού πολυμόρφου μονοκλινούς συμμετρίας σε όξινο περιβάλλον.", Κωνσταντίνα Μαγιούφ. Ολοκληρώθηκε τον Μάρτιο του 2014.
4. "Επίδραση του οργανικού προσδέτη 4-ethylresorcinol στην δομή της ανθρώπινης ινσουλίνης.", Σταυρούλα Φίλη. Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2014.
5. "Επεκτείνοντας το διάγραμμα φάσης της ανθρώπινης ινσουλίνης με οργανικούς προσδέτες συναρτήσει του pH κρυστάλλωσης: Οι περιπτώσεις των Chlororesorcinol and Bromoresorcinol.", Δανάη Λαχανά. Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2015.
6. "Δομική μελέτη της επίδρασης της υγρασίας σε κρυστάλλους HEWL μέσω in situ και steady state πειραμάτων μεταβολής υγρασίας", Σουζάνα Λογοθέτη. Ολοκληρώθηκε τον Μάϊο του 2016.

7. “Δομικές μεταβολές της λυσοζύμης υπό συνθήκες ελεγχόμενα μεταβαλλόμενης υγρασίας.”, Στέφανος Σασλής. Ολοκληρώθηκε τον Μάϊο του 2016.
8. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Δομικός Χαρακτηρισμός του τομέα μεθυλτρανσφεράσης της πρωτεϊνης PROTEASE 3C του στελέχους B3 του ιού COXSACKIE.”, Μαρία Σπηλιοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Σεπτέμβριο του 2016.
9. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Δομικός Χαρακτηρισμός του τομέα μεθυλτρανσφεράσης της μη δομικής πρωτεϊνης 5 του Δαγκείου ιού 3.”, Νίκος Νικολόπουλος. Ολοκληρώθηκε τον Απρίλιο του 2017.
10. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Δομικός Χαρακτηρισμός της πρωτεϊνης PROTEASE 3C του στελέχους B3 του ιού COXSACKIE.”, Χρήστος Κοσινάς. Ολοκληρώθηκε τον Ιούνιο του 2018.
11. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και χρήση των πρωτεολυτικών ιδιοτήτων της πρωτεϊνης TEV PROTEASE του ιού TOBACCO ETCH.”, Σοφοκλής Βλάχος. Ολοκληρώθηκε τον Σεπτέμβριο του 2018.
12. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Πρωταρχικός Δομικός Χαρακτηρισμός της Πρωτεΐνης Protease 3C του Στελέχους B3 του ιού Coxsackie.”, Μαρία Μπαλάση. Ολοκληρώθηκε τον Σεπτέμβριο του 2018.
13. «Τομέας Μεθυλτρανσφεράσης της μη δομικής πρωτεϊνης 5 του Δαγκείου ιού 3: Βελτιστοποίηση έκφρασης, απομόνωσης, κρυστάλλωσης και πρωταρχική δομική ανάλυση.”, Κώστας Μπασταλιάς. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2018.
14. «Προσδιορισμός νέου κρυσταλλικού πολυμόρφου της ανθρώπινης ινσουλίνης παρουσία του προσδέτη trans-resveratrol.”, Νίκος Παρθένιος. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2018.
15. «Παραγωγή, κρυστάλλωση και πρωταρχικός δομικός χαρακτηρισμός της μη δομικής πρωτεϊνης NS5-μεθυλτρανσφεράση του οροτύπου 3 του δάγκειου ιού.», Μυρτώ Ντούνη. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2018.
16. «Δομικός χαρακτηρισμός φαρμακευτικών μορίων με τη μέθοδο της περίθλασης ακτίνων Χ από μονοκρύσταλλο.”, Αικατερίνη Παππά. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2019.
17. «Έκφραση, απομόνωση, κρυστάλλωση και έλεξχος λειτουργικότητας του ενζύμου PFU-SSO7D POLYMERASE.», Αναστασία Μπαζιώτη. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2019.
18. «Κρυσταλλικός πολυμορφισμός της ανθρώπινης ινσουλίνης συναρτήσει των συνθηκών κρυστάλλωσης και παρουσία των οργανικών προσδετών PTEROSTILBENE και 4-CHLORORESORCINOL.», Αικατερίνη Φιλοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2019.
19. «Κρυσταλλικός πολυμορφισμός της ανθρώπινης ινσουλίνης παρουσία του οργανικού προσδέτη p-coumaric acid.”, Δημήτρης Τριανταφυλλίδης. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2019.
20. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Δομικός Χαρακτηρισμός της 3’-5’ εξωνουκλεασικής περιοχής της Νουκλεοπρωτεΐνης του Mopeia Virus.”, Αναστασία Πισκόπου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2020.

21. «Ανάπτυξη και αξιολόγηση της πρλωτης βάσης δεδομένων περίθλασης ακτίνων Χ από πολυκρυσταλλικές πρωτεϊνες.”, Σπυρίδων Μιχελακάκης. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2020.
22. «Έκφραση, Απομόνωση, Κρυστάλλωση και Δομικός Χαρακτηρισμός της 3’-5’ EXONUCLEASE TOY LYMPHOCYTIC CHORIOMENINGITIS VIRUS (LCMV).”, Μαριάννα Γιαννοπούλου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2020.
23. «Μελέτη της επίδρασης του οργανικού μορίου gentisic acid στον μοριακό και τον κρυσταλλικό πολυμορφισμό της ανθρώπινης ινσουλίνης.”, Μαρία Αθανασιάδου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2021.
24. «Δημιουργία της πρώτης βάσης δεδομένων περίθλασης ακτινών Χ από πολυκρυσταλλικά πρωτεϊνικά δείγματα (BioXRPD).”, Ευφροσύνη Δρακούλη. Ολοκληρώθηκε τον Φεβρουάριο του 2022.
25. «Μελέτη της επίδρασης του οργανικού μορίου gentisic acid στον μοριακό και τον κρυσταλλικό πολυμορφισμό της ανθρώπινης ινσουλίνης.”, Χριστίνα Παπαευθυμίου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2022.
26. «Έκφραση, απομόνωση και κρυστάλλωση της 3’-5’ εξωνουκλεασικής περιοχής της Νουκλεοπρωτεΐνης του ιού ΜΟΡΕΙΑ.”, Κωνσταντίνος Παπακωνσταντίνου. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2022.
27. «Μελέτη της επίδρασης του μορίου m-nitrophenol στο μοριακό και κρυσταλλικό πολυμορφισμό της ανθρώπινης ινσουλίνης.”, Άγγελος Κονταρίνης. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2022.
28. «Μελέτη του δομικού πολυμορφισμού της ανθρώπινης ινσουλίνης παρουσία του οργανικού προσδέτη trans-resveratrol.”, Άγγελος Σπυριούνης. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2022.
29. «Έκφραση, απομόνωση και κρυστάλλωση της 3’-5’ εξωνουκλεασικής περιοχής της Νουκλεοπρωτεΐνης του LCMV.”, Γεώργιος Κεφάλας. Ολοκληρώθηκε τον Οκτώβριο του 2022.
30. «Παραγωγή, κρυστάλλωση και δομικός χαρακτηρισμός της ιϊκής πρωτεϊνης 3’-5’ EXONUCLEASE TOY LYMPHOCYTIC CHORIOMENINGITIS VIRUS (LCMV).”, Γεώργιος Νικολάρας. Θα ολοκληρωθεί τον Ιανουάριο του 2023.

Σήμερα, εκπονούν επτά φοιτητές διπλωματικές εργασίες στην ερευνητική μας ομάδα οι οποίοι αναμένεται να τις ολοκληρώσουν το 2023-2024.

### 7.5 Συγγραφικό Έργο

Προετοιμασία Διδακτικών Σημειώσεων και διαφανειών σε **ηλεκτρονική μορφή** για τα παρακάτω μαθήματα:

- Προπτυχιακό μάθημα επιλογής «*Μέθοδοι Ενόργανης Ανάλυσης Βιομορίων*» - *διδακτικό μέρος «Δομική Βιολογία»* (Κωδικός Μαθήματος eclass: *BIO286*),
- Προπτυχιακό υποχρεωτικό μάθημα «*Βιοχημεία Ι*» (eclass: *BIO255*) και *«Εργαστήρια Βιοχημείας Ι»* (eclass: *BIO270)*

- Προπτυχιακό υποχρεωτικό μάθημα «*Βιοχημεία ΙΙ*» (eclass: *BIO404*) και *«Εργαστήρια Βιοχημείας ΙΙ»* (eclass: *BIO404)*
- Προπτυχιακό υποχρεωτικό μάθημα «Εργαστήρια Βιολογίας Κυττάρου Ι», πείραμα με τίτλο *«Προσδιορισμός Συγκέντρωσης Πρωτεϊνών με χρήση φασματοφωτομετρίας»* (eclass: *BIO259)*
- Μεταπτυχιακό μάθημα επιλογής «*Δομική Βιολογία*» (eclass: *BIO264*) του μεταπτυχιακού προγράμματος «Βιολογική Τεχνολογία» του τομέα Γενετικής, Βιολογίας Κυττάρου & Ανάπτυξης του Τμήματος **Βιολογίας** του Πανεπιστημίου Πατρών.
- Προετοιμασία διδακτικού υλικού για διδακτικό μέρος «*Εισαγωγή στην Κρυσταλλογραφία Πρωτεϊνών*» του μαθήματος «*Μεθοδολογία Ι*» (eclass: *MED826*) του μεταπτυχιακού προγράμματος «Βασικές Ιατρικές Επιστήμες (BIE)» του Τμήματος Ιατρικής του Πανεπιστημίου Πατρών.
- Συμμετοχή στου συντελεστές του συγγράματος «Βιοχημεία, Reginald H. Garrett, Charles M. Grisham, Εκδόσεις Utopia". Το τελευταίο ανήκει στα συγγράμματα που προτείνονται στους προπτυχιακούς φοιτητές του Τμήματος Βιολογίας για τα υποχρεωτικά μαθήματα του ΠΠΣ Βιοχημεία Ι και ΙΙ.

## 8. Άλλες Ακαδημαϊκές Δραστηριότητες

### 8.1 Διοργάνωση Επιστημονικών Συνεδρίων

**2007** Workshop Organiser, Title: "Development and future directions of powder diffraction in protein crystallography", ESRF, Grenoble, France.

**2008** XXI- International Union of Crystallography (IUCr) meeting - Osaka, Japan

- Invited Keynote Lecturer on the use of powder diffraction in macromolecular research
- In the organising committee and lecturer for the Satellite Meeting:

"Powder Diffraction on Proteins- Current Status and Future Prospect"

- Invited Speaker for the Satellite Meeting:

"Future of Female Crystallographers"

**2008** 11th European Powder Diffraction Conference (EPDIC 11) - Warsaw, Poland
Session Organiser: "Powder Diffraction on Proteins"

**2010** 12th European Powder Diffraction Conference (EPDIC 12) – Darmstadt, Germany.
Session Organiser together with Fabia Gozzo (SLS) for session: "Biomaterials, supramolecular chemistry, pharmaceuticals"

**2011** XXII- International Union of Crystallography (IUCr) Congress – Madrid, Spain
Session Organiser together with Joel Sussman (Israel) for session: "Challenges of low-resolution crystallography".

**2012** 13th European Powder Diffraction Conference (EPDIC 12) – Grenoble, France
Session Organiser together with Jonathan Wright (ESRF) for session: "Molecular and Biomolecular Materials"

**2012** International Workshop on Electron Crystallography, Patras, Greece.

**2013** International Workshop on Fundamentals of Crystallography, Patras, Greece.

**2013** NMR Basics and Applications in Life Sciences, Patras, Greece.

**2013** International Workshop on Powder and Electron Crystallography, Patras, Greece.

**2013** Emerging Analytical Techniques in Protein Characterization, Patras, Greece.

**2013** 2nd Research Coordination Meeting (RCM) on Utilization of Accelerator – Based Real – Time Methods in Investigation of Materials with High Technological Importance (International Atomic Energy Agency, IAEA), Patras, Greece.

**2014** Current Trends in Structural Biology & 7th International Conference of the Hellenic Crystallographic Association, FORTH, Crete, Greece.

**2016** 15th European Powder Diffraction Conference (EPDIC 15), Bari, Italy. Session co-organiser together with C. Tedesco (Italy) for session: "Biological and molecular materials"

**2018** 16th European Powder Diffraction Conference (EPDIC 16) – Edinburgh, UK. Session co-organiser together with Fabia Gozzo (Excelsus) for session: " Pharmaceutical and biological materials"
**2018** 9th International Conference of the Hellenic Crystallographic Association (HeCrA9), UPAT, Patras, Greece.
**2022** 17th European Powder Diffraction Conference (EPDIC17) – Sibenik, Croatia. Session co-organiser together with Fabia Gozzo (Excelsus) for session: "Pharmaceutical and biological materials"
**2022 ESRF Information Day: The use of synchrotron radiation in science** – UPAT, Patras, Greece. The info day, co-organised by the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), the University of Patras and the Greek Synchrotron Users Network (GrSUN), took place at the Conference and Cultural Center of the University of Patras in Greece. This action is in the frame of the panhellenic effort for Greece to participate in the ESRF as an associate country. The youtube links for the distinct Sessions are listed below.
**Session 1:** ESRF Overview
**Session 2:** Biomedical imaging & Cultural heritage
**Session 3:** Life Sciences
**Session 4:** Energy – Catalysis – Environment
**Session 5:** Nanoscale matter & Quantum Materials & Session 6: Industrial Research & Activities
**2022 1st Greek Summer School on Synchrotron Radiation: Properties and Applications,** Aristotle University of Thessaloniki, Greece.
**2022 72$^{d}$ Panhellenic conference of the Hellenic Society of Biochemistry and Molecular Biology**, UPAT, Patras, Greece.

### 8.2 Συμμετοχή σε Επιστημονικά Συνέδρια ως Προσκεκλημένη Ομιλήτρια

## Παρουσιάσεις διαθέσιμες online

1. Protein Powder Diffraction at ESRF, Pharmaceutical Powder X-ray Diffraction Symposium (PPXRD-8), Scotland, 2009.
2. Proteins and Powders - An Overview, International Union of Crystallography (Erice School 2011, Italy).
3. Macromolecular Powder Diffraction, "International Year of Crystallography – IYCr2014" & "Annee Internationale de la Cristallographie en France – AICr2014" UNESCO, Paris, France, 2014.
4. The Power of Powder: Protein based Drug Screening, Pharmaceutical Powder X-ray Diffraction Symposium (PPXRD-13), Germany, 2015.
5. InnovCrete Seminar, IMBB, Heraklion, Crete, Greece, 2016.
6. Screening of protein-based pharmaceuticals, free webinar, PANalytical & UPAT, 2016.
7. 40 Years Anniversary Colloguium series at the Department of Physics, University of Crete, March 2018 "SMALLER crystals, FASTER experiments, BRIGHTER beams: Drug screening and innovation via X-ray powder diffraction".
9. The Power of Powder Humidity induced phase transitions of HEWLysozyme, Collaborative project between Malvern PANalytical and UPAT, 2016.
10. Women in Science, discussion organized by BiTUP (Bioscientific Team University of Patras) 2020 (Greek language).
10. Macromolecular Powder Diffraction: Ready for Genuine Biological Problems, Plenary lecture, European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) user meeting 2021.
11. Biotrends: Structural Biology and Bioinformatics, BiTUP (Bioscientific Team University of Patras) 2021 (Greek language).

## Επιλεγμένες προσκεκλημένες ομιλίες σε διεθνή συνέδρια

**2005** XX International Union of Crystallography (IUCr) Meeting- Florence, Italy
Title: “Powder Diffraction- A complementary tool in Macromolecular Research”
**2005** European Molecular Biology Laboratory (EMBL- Hamburg)

Title: “High Resolution Powder Diffraction: A useful tool for structural biology”
**2006** Pharmaceutical Powder X-ray Diffraction Symposium 5- New Jersey, USA
Title: “Synchrotron Powder Diffraction: applications in macromolecular crystallography”
**2006** Annual Meeting of the crystallographic society of Japan- Tokyo (Japan)
Title: “Complementary techniques in structural biology”
**2006** European Powder Diffraction Conference (EPDIC 10)- Geneva, Switzerland
Plenary lecture: “Synchrotron X-ray powder diffraction as it begins to make an impact in structural biology” & “***EPDIC young scientist award***”
**2007** 1st Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA), Italy
Title: “Biocrystallography via powder diffraction; an emerging method in structural biology”
**2009** MX-Frontiers at the One Micron Scale, NSLS2, US
Title: "Complementary methods for structural biology"
**2010** 13th International Conference on the Crystallisation of Biological Macromolecules (ICCBM13)- Dublin, Ireland
Title:"Protein Powder Diffraction: Stories of Success and Dreams for the Future”

The year **2014** was announced as the **International Year of Crystallography** (IYCr). During this year, the PI participated as invited speaker at the following international conferences in the frame of IYCr. **(a)** IYCr- Opening Ceremony & Annual Meeting of the French Crystallographic Assdociation, Unesco, Paris, France. Title: “Macromolecular Powder Diffraction”. **(b)** *One day Symposium on Recent Applications of X-ray Crystallography*, Collegio Nacional, Mexico City, Mexico. Title: "Macromolecular Powder Diffraction: Current status & Future prospects". **(c)** Invited Seminar at UNAM, Mexico city, Mexico. Title: “Protein Poly-crystallography: Why, What & How”

**2015** Invited Seminar Series, ANSTO, Sydney, Australia.
Title: " "The Power of Powder: Protein-based drug screening"
**2017** First International Mexican Meeting on Diffraction and the VII Meeting of Synchrotron Light Users, Merida, Mexico. Title: “Macromolecular Powder Diffraction: Ready for Genuine Biological Problems.”
**2017** Invited Seminar Series, University of Puebla, Mexico. Title: “SMALLER crystals, FASTER experiments, BRIGHTER beams: Uprising methods for Drug Screening & Innovation.”
**2018** 3rd Joint AIC-SILS conference, Rome, Italy, Title: “Uprising methodologies for structural biology.”
**2018** Energy Materials Nanotechnology (EMN) Greece Meeting, Heraklion, Crete, Title: “In Quest for Improved Drugs against Diabetes: The Added Value of X-ray Powder Diffraction (XRPD) Methods.”
**2018** Working group on Biology regarding the construction of the new synchrotron source PETRA IV, Hamburg, Germany.
**2019** FEBS, Biomolecules in Action II, Title: “Hybrid methods in protein poly-crystallography”, Hamburg, Germany.
**2020** XXIV International School of Pure and Applied Biophysics, Title: “X-ray Powder Diffraction on Biological Macromolecules”, Venice, Italy.
**2021** ESRF User Meeting, Plenary lecture, Grenoble, France.
**2022** Invited Seminar Series, University of Milan, Italy. Title: “The role of structural biology in biological sciences: case studies of microcrystalline proteins characterised via X-ray powder diffraction methods.”
**2022** FEBS, Biomolecules in Action III, Title: “Macromolecular Powder Diffraction: Ready for Genuine Biological Problems", Hamburg, Germany.
**2022** SASBDB, Workshop on the the database of small-angle scattering data and models for biology and soft matter, EMBL Hamburg, Germany.
**2022** 10 Years celebration of Excelsus Structural Solutions**,** Title: “The Protein Powder Diffraction Challenge”, Park Innovaare, Villigen, Switzerland.

### 8.3 Κριτής σε Περιοδικά

Journal of Physics: Condensed Matter, Journal of Synchrotron Radiation, Zeitschrift für Kristallographie, Acta Crystallographica D (Biological Crystallography), Acta Crystallographica B, European Physical Journal B, Solid State Sciences, Journal of Physics and Chemistry of Solids,

IUCrJ, Journal of Applied Crystallography, Molecular Biotechnology, Biomolecules, Journal of Molecular Sciences, Crystals, Molecules.

### 8.4 Διοικητικό έργο: Συμμετοχή σε Διεθνείς, Εθνικές & Ενδοπανεπιστημιακές Επιτροπές/και Δίκτυα

#### *8.4.1 Διεθνείς Επιτροπές*

**2005-2008:** Σύμβουλος της διεθνούς ένωσης κρυσταλλογραφίας (IUCr) – Επιτροπή περίθλασης από πολυκρυσταλλικά υλικά, Commission of Powder Diffraction (CPD), International Union of Crystallography (IUCr).

**2009 - σήμερα:** Εκλεγμένο μέλος της Ευρωπαϊκής Επιτροπής Περίθλασης Πολυκρυσταλλικών υλικών, EPDIC (ημερομηνία εκλογής- 04/05/2009).

**2008 - σήμερα:** Μέλος του παγκόσμιου δικτύου κρυσταλλογράφων (World Directory of Crystallographers) της διεθνούς ένωσης κρυσταλλογραφίας.

**2012 - σήμερα:** Μέλος των Ευρωπαϊκών δικτύων Δομικής Βιολογίας INEXT & Biostruct-X.

**2020 - σήμερα:** Co-editor του επιστημονικού περιοδικού «Acta Crystallographica section A: Foundations and Advances». Ο ορισμός πραγματοποιήθηκε κατόπιν εκλογής από την Διεθνή ένωση κρυσταλλογραφίας (International Union of Crystallography, IUCr).

**2021 – σήμερα:** Μέλος επιτροπής κρίσης προτάσεων για πραγματοποίηση πειραμάτων στο Ευρωπαϊκό σύγχροτρον (ESRF beamtime allocation panel).

#### *8.4.2 Εθνικές Επιτροπές*

**2012 – 2018:** Μέλος Δ. Σ. της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας.

**2016 - 2021:** Μέλος Δ. Σ. του Επιστημονικού Πάρκου Πατρών.

**2020**: Υποψήφια Αντιπρύτανης στο σχήμα του Καθ. κ. Θ. Χριστόπουλου για τις Πρυτανικές εκλογές του Πανεπιστημίου Πατρών.

**2019 – σήμερα:** Μέλος επιτροπής κρίσης ερευνητικών προτάσεων στο Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.).

##### 8.4.2.1 Εθνικό Δίκτυο (GrSUN) για την Συμμετοχή της Ελλάδας στο ESRF.

**2022- σήμερα:** Μέλος ως εκπρόσωπος του Πανεπιστημίου Πατρών του επί του παρόντος άτυπου, δικτύου Ελλήνων χρηστών ακτινοβολίας σύγχροτρον, επονομαζόμενου Greek Synchrotron User Network (GrSUN). Στόχος του δικτύου είναι η ένταξη της Ελλάδας ως συνεργαζόμενη χώρα στην Ευρωπαϊκή Εγκατάσταση Ακτινοβολίας Σύγχροτρον. Το Δίκτυο GrSUN αποτελείται από μέλη που έχουν ως βάση τους την πλειοψηφία των Ελληνικών Ανωτάτων Εκπαιδευτικών Ιδρυμάτων και Ερευνητικών Κέντρων. Έως σήμερα, το Δίκτυο GrSUN έχει πραγματοποιήσει μία σειρά από δράσεις σχετικά με την ένταξη της Ελλάδας στο ESRF που παρατίθενται στον σύνδεσμο. Στις 29/06/2022 υπεβλήθη επισήμως στα Υπουργεία Ανάπτυξης & Επενδύσεων, Παιδείας & Θρησκευμάτων και στην Γενική Γραμματεία Έρευνας και Καινοτομίας (ΓΓΕΚ) τεκμηριωμένη πρόταση για την Εθνική συμμετοχή της Ελλάδας στην Ευρωπαϊκή Εγκατάσταση Ακτινοβολίας Σύγχροτρον (ESRF) που συντάχθηκε από το τους εκπροσώπους του δικτύου GrSUN. Στην εκτενή πρόταση των 40 σελίδων παρουσιάζονται αναλυτικά τα οφέλη της συμμετοχής

της χώρας στο ESRF και αναδεικνύεται η προστιθέμενη αξία στους τομείς της έρευνας, της εκπαίδευσης και της βιομηχανίας. Επιπρόσθετα, υποβλήθηκαν όλες οι επιστολές στήριξης αυτής της δράσης. Έως σήμερα, την προσπάθεια στηρίζουν: 31 εκπρόσωποι από 20 ακαδημαϊκά ιδρύματα, 6 επιστημονικούς οργανισμούς, 4 επιστημονικές εταιρίες, 2 τεχνολογικά πάρκα, 2 μουσεία, 3 συνδέσμους βιομηχανιών (ΣΕΒ, ΣΕΒΠΔΕ, ΣΒΣΕ) και 23 φορείς της βιομηχανίας. Η συνημμένη πρόταση αποτελεί συνέχεια της συνοπτικής πρότασης η οποία υπεβλήθη στους παραπάνω φορείς στις 28/2/2022. Η πρόταση αξιολογήθηκε θετικά από το Εθνικό Συμβούλιο Έρευνας, Τεχνολογίας και Καινοτομίας (57η Συνεδρίαση της Ολομέλειας του ΕΣΕΤΕΚ, 4 Νοεμβρίου 2022). Σήμερα, το δίκτυο συνεχίζει με διάφορες δράσεις ανά την Ελλάδα προκειμένου να επιτευχθεί αυτός ο στόχος.

### *8.3.3 Ενδοπανεπιστημιακές Επιτροπές/ Δίκτυα*

**2012-σήμερα.** Μέλος (ως εκπρόσωπος του Τμήματος Βιολογίας) της Επιτροπής Προγραμματισμού του Διατμηματικού Εργαστηρίου Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας και Μικροανάλυσης της Σχολής Θετικών Επιστημών του Πανεπιστημίου Πατρών (http://www.electronmicroscopylab.upatras.gr). Η επιτροπή είναι αρμόδια για την εύρυθμη λειτουργία και συντήρηση του Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Διέλευσης (TEM/HRTEM) JEM-2100 και του Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (SEM) JEOL 6300 της Σχολής και για την συντήρηση όσων οργάνων παραλαμβάνει κατά καιρούς το Εργαστήριο. Είναι επίσης αρμόδια για τις προτάσεις προμήθειας νέου εξοπλισμού, την πρόσληψη τεχνικού προσωπικού και για την εξοικονόμηση πόρων για τη συντήρηση του Εργαστηρίου. Η θητεία των μελών είναι τριετής.

**2014-σήμερα.** Μέλος (ως εκπρόσωπος του Τμήματος Βιολογίας) της Επιτροπής Ανάπτυξης Ερευνητικής Υποδομής της Σχολής Θετικών Επιστημών του Πανεπιστημίου Πατρών. Προτεραιότητα της Επιτροπής είναι η συλλογή και αξιολόγηση προτάσεων ερευνητικού εξοπλισμού τόσο από τα Τμήματα όσο και από τα τρία Διατμηματικά Εργαστήρια της Σχολής (Το Εργαστήριο Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας και Μικροανάλυσης, Το Εργαστήριο Ενόργανης Ανάλυσης και το Εργαστήριο Περιβαλλοντικών Επιστημών) με στόχο την έγκαιρη συγκρότηση ενός πλήρως τεκμηριωμένου φακέλου, ο οποίος θα επικαιροποιείται σε ετήσια βάση, ώστε εάν ενεργοποιηθεί οποιαδήποτε στιγμή οποιαδήποτε διαδικασία οικονομικής ενίσχυσης του Πανεπιστημίου, η Σχολή να είναι έτοιμη και να παρουσιαστεί με πρόγραμμα και στόχο.

**2012-σήμερα.** Μέλος του Ενδοπανεπιστημιακού Ερευνητικού Δικτύου ***Cancernet*** του Πανεπιστημίου Πατρών (http://www.istomedia.gr/stavros/?q=node/1). Τα Ενδοπανεπιστημιακά Δίκτυα συγκροτήθηκαν στο Πανεπιστήμιο Πατρών μετά από πρόσκληση της Επιτροπής Ερευνών τον Δεκέμβριο του 2008 για υποβολή σχετικών προτάσεων.Οι προτάσεις αξιολογήθηκαν από επιτροπή, με αποτέλεσμα να χρηματοδοτηθεί η συγκρότηση συγκεκριμένου αριθμού Δικτύων ενώ ανά τακτά χρονικά διαστήματα εγκρίνονται νέα Ενδοπανεπιστημιακά Δίκτυα. Απώτερος στόχος του δικτύου είναι η δημιουργία στο Παν/μιο Πατρών ενός δυναμικού κέντρου έρευνας και ανάπτυξης σε τομείς που σχετίζονται με τον καρκίνο όπως: η καρκινογένεση σε μοριακό επίπεδο, ανάπτυξη νέων μοριακών στόχων για προγνωστικά/ διαγνωστικά τεστ και φαρμακευτική αγωγή. Αποτελείται από μέλη και εργαστήρια των Τμημάτων Ιατρικής, Βιολογίας, Φαρμακευτικής, και Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Πατρών. Η επίσημη έναρξη της δραστηριότητας του Δικτύου έγινε το 2012.

**2016-2017** Μέλος (ως εκπρόσωπος του Τμήματος Βιολογίας) της Επιτροπής EU mobility program, Erasmus+.

**2018-σήμερα.** Μέλος της επιτροπής "Στρατηγικού σχεδιασμού και Ανάπτυξης"του Τμήματος Βιολογίας.

**2017-2018** Συντονίστρια του Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών του Τμήματος Βιολογίας στην κατεύθυνση «Βιολογική Τεχνολογία».

**2017-2020.** Μέλος της επιτροπής "Προγράμματος Σπουδών"του Τμήματος Βιολογίας.

**2016-2020.** Μέλος της επιτροπής "Ωρολογίου Προγράμματος Μαθημάτων"του Τμήματος Βιολογίας.

**2020-2022.** Διευθύντρια του Τομέα Γενετικής, Βιολογίας κυττάρου και Ανάπτυξης του Τμήματος Βιολογίας,

# ΙΙ. ΔΗΜΟΣΙΕΥΜΕΝΟ ΕΡΓΟ

## Α. Διεθνή Περιοδικά

### Α.1 Δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά σχετικά με Βιοχημεία, Δομική Βιολογία & την ανάπτυξη και χρήση της μεθόδου X-ray Powder Diffraction (XRPD) σε μικροκρυσταλλικά ιζήματα πρωτεϊνών.

**1.** "Synchrotron X-ray powder diffraction study of Turkey egg-white Lysozyme", Acta Cryst. D61, 423-432 (2005) & ESRF Scientific Highlights, p. 30-31 (2004), I. Margiolaki*, J. P. Wright*, A. N. Fitch, G. C. Fox & R. B. Von Dreele (article available online). Cover of the British Crystallographic Association News (2004).

**2.** "High Throughput Phase Diagram Mapping via Powder Diffraction: A case-study of HEWL versus pH.", Acta Cryst. D 61, 1612-1625 (2005), S. Basso, A. N. Fitch, G. C. Fox, I. Margiolaki* & J. P. Wright* (article available online).

**3.** "Successful protein cryocooling for powder diffraction.", J. Appl. Cryst. 40, 121 (2007), M. Jenner, J. P. Wright*, I. Margiolaki and A. N. Fitch (article available online)

**4.** "Powder diffraction studies for proteins: An overview of data collection approaches", **Invited Review Article associated with the EPDIC Young Scientist Award 2006, (Related ESRF article).** Z. Kristallogr. Suppl. 26, 1-13 (2007), I. Margiolaki*, J. P. Wright, A. N. Fitch, G. C. Fox, A. Labrador, R. B. Von Dreele, K. Miura, F. Gozzo, M. Schiltz, C. Besnard, F. Camus, P. Pattison, D. Beckers, T. Degen (article available online).

**5.** "Second SH3 domain of ponsin solved from powder diffraction.", J. Am. Chem. Soc. 129, 11865 (2007) & ESRF Press release. I. Margiolaki*, J. P. Wright, M. Wilmanns, A. N. Fitch & N. Pinotsis* (article available online).

**6.** "Molecular envelopes derived from X-ray diffraction on polycrystalline protein powders.", J. Appl. Cryst. 41, 329-339 (2008) & ESRF Scientific Highlights, p. 61-62 (2006), J. P. Wright, C. Besnard, I. Margiolaki, S. Basso, F. Camus, A. N. Fitch, G. Fox, P. Pattison, M. Schiltz (article available online).

**7.** "Powder Crystallography on Macromolecules", Acta Cryst. A64, 169-180 (2008). I. Margiolaki* & J. P. Wright*, **Invited Review Article for Special Issue of International Union of Crystallography (IUCr)[3]**

**8.** "Polymorphism of microcrystalline Urate Oxidase from Aspergillus flavus", Acta Cryst. D 66, 539-548 (2010), I. Collings, Y. Watier, M. Giffard, S. Dagogo, R. Kahn, F. Bonnete, J. P. Wright, A. N. Fitch, I. Margiolaki*[4] (article available online). ESRF press release.

**9.** "Features of the Secondary Structure of the Protein Molecule from Powder Diffraction data", Acta Cryst. D 66, 756-761 (2010)- Cover article, S. Basso, C. Besnard, J. P. Wright, I. Margiolaki, A. N. Fitch, P. Pattison, M. Sciltz (article available online).

**10.** “Structural studies of human insulin co-crystallized with phenol or resorcinol via powder diffraction.”, Acta Cryst. D68, 1632-1641 (2012), F. Karavassili, A. E. Giannopoulou, E. Kotsiliti, L. Knight, M. Norrman, G. Schluckebier, L. Drube, A. N. Fitch, J. P. Wright & I. Margiolaki* (article available online).

**11.** “X-ray resonant powder diffraction”, Eur. Phys. J. Special Topics 208, 275–289 (2012) – Invited Review article, H. Palancher, S. Bos, J.F. Berar, I. Margiolaki & J. L. Hodeau.

**12**. “High-resolution powder X-ray data reveal the T6 hexameric form of bovine insulin.”, Acta Cryst. D69, 978-990 (2013), I. Margiolaki*, A. E. Giannopoulou, J. P. Wright, L. Knight, M. Norrman, G. Schluckebier, A. N. Fitch & R. B. Von Dreele (article available online).

**13.** "NMR study of non-structural proteins—part I: 1H, 13C, 15N backbone and side-chain resonance assignment of macro domainfrom Mayaro virus (MAYV)" Biomolecular NMR Assignments 9, 1, 191–195 (2015), E. Melekis, A. C. Tsika, J. Lichière, C. T. Chasapis, I. Margiolaki, N. Papageorgiou, B. Coutard, D. Bentrop, G. A. Spyroulias (article available online).

**14.** “Novel crystalline phase and first-order phase transitions of human insulin complexed with two distinct phenol derivatives”, Acta Cryst. D71, 819-828 (2015), A. Valmas, K. Magiouf, S. Fili, M. Norrman, G. Schluckebier, D. Beckers, T. Degen, J. P. Wright, A. Fitch, F. Gozzo, A. E. Giannopoulou, F. Karavassili & I. Margiolaki* (article available online).

**15.** “Human insulin polymorphism upon ligand binding and pH variation: the case of 4-ethylresorcinol”, IUCrJ. 4, 2:534-44 (2015) – open access, S. Fili, A. Valmas, M. Norrman, G. Schluckebier, D. Beckers, T. Degen, J. P. Wright, A. Fitch, F. Gozzo, A. E. Giannopoulou, F. Karavassili & I. Margiolaki*.

**16.** “Macromolecular Powder Diffraction: Ready for Genuine Biological Problems”, Protein & Peptide Letters, 23 (3):232-41 (2016) - **Invited review article**, F. Karavassili & I. Margiolaki*.

**17.** “Coxsackievirus B3 protease 3C: expression, purification, crystallization and preliminary structural insights”, Acta Cryst. F72, 877-884 (2016), S. Fili, A. Valmas, M. Christopoulou, M. Spiliopoulou, N. Nikolopoulos, J. Lichiere, S. Logotheti, F. Karavassili, E. Rosmaraki, A. Fitch, J. Wright, D. Beckers, T. Degen, G. Nenert, R. Hilgenfeld, N. Papageorgiou, B. Canard, B. Coutard & I. Margiolaki* (article available online).

**18.** “In Quest for Improved Drugs against Diabetes: The Added Value of X-ray Powder Diffraction Methods” (**Invited review article for Biomolecules: Special Issue “Protein Crystallography**”), Biomolecules 2017, 7 (3), 63 (OPEN ACCESS), F. Karavassili, A. Valmas, S. Fili, C. Georgiou & I. Margiolaki*.

**19.** "Dengue Virus 3 NS5 methyltransferase domain: expression, purification, crystallization and first structural data from microcrystalline specimens.", Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials 2017, 233 (5), 309-316 (Available online), A. Valmas , S. Fili, N. Nikolopoulos, M. Spiliopoulou, M. Christopoulou, F. Karavassili, C. Kosinas, K. Bastalias, E. Rosmaraki, J. Lichiére, A. Fitch, D. Beckers, T. Degen, N. Papageorgiou , B. Canard, B. Coutard & I. Margiolaki*.

**20.** "In situ detection of a novel lysozyme monoclinic crystal form upon controlled relative humidity variation." Journal of Applied Crystallography 2018, 51, 1-13 (article available online), S. Trampari, A. Valmas, S. Logotheti, S. Saslis, S. Fili, M. Spiliopoulou, D. Beckers, T. Degen, G. Nenert, A. Fitch, M. Calamiotou, F. Karavassili and I. Margiolaki*.

**21.** "Revisiting the structure of a synthetic Somatostatin analogue for peptide drug design." Acta Cryst. B75, 611-620 (2019): Structural Science, Crystal Engineering and Materials (article available online) S. Fili, A. Valmas, M. Spiliopoulou, P. Kontou, A. Fitch, D. Beckers, T. Degen, Kl. Barlos*, K. Barlos, F. Karavassili and I. Margiolaki*.

**22.** "Unit Cell Response of Tetragonal Hen-Egg White Lysozyme upon Controlled Relative Humidity Variation." Journal of Applied Crystallography 52, 816-822 (2019) (article available online), S. Logotheti, A. Valmas, S. Trampari, S. Fili, S. Saslis, M. Spiliopoulou, D. Beckers, T. Degen, G. Nenert , A. Fitch, F. Karavassili and I. Margiolaki*.

**23.** "Applications of X-ray Powder Diffraction in Protein Crystallography and Drug Screening ." Crystals 10, 54 (2020) (**Invited review article for Crystals Special Issue "Crystallization under special and physical environments"**), M. Spiliopoulou, A. Valmas, D. P. Triandafillidis, C. Kosinas, A. Fitch, F. Karavassili and I. Margiolaki* (article available online).

**24.** "Exploring the complex map of insulin polymorphism: A novel crystalline form in the presence of m-Cresol.." Acta Cryst. D76, 4, 375-384 (2020), F. Karavassili, A. Valmas, M. Dimarogona, A. E. Giannopoulou, S. Fili, M. Norrman, G. Schluckebier, D. Beckers, A. N. Fitch and I. Margiolaki* (article available online).

**25.** "Rapid screening of in cellulo grown protein crystals via a small-angle X-ray scattering/X-ray powder diffraction synergistic approach." Journal of Applied Crystallography 53, 1169-1180 (2020) & **Cover article**, J. M. Lahey-Rudolph, R. Schonherr, C. Michael Jeffries, C. E. Blanchet, J. Boger, A. S. Ferreira Ramos, W. M. Riekehr, D. P. Triandafillidis, A. Valmas, I. Margiolaki, D. Svergun and L. Redecke* (article available online) & Scientific Commentary by T. Bergfors & S. Mayumdar.

**26.** "Brothers in Arms: Structure, Assembly and Function of Arenaviridae Nucleoprotein." Viruses 12, 772 (2020), N. Papageorgiou, M. Spiliopoulou, T. Van Nguyen, A. Vaitsopoulou, E. Yekwa Laban, K. Alvarez, I. Margiolaki, B. Canard and F. Ferron* (article available onlne).

**27.** "Insulin polymorphism induced by two polyphenols: New crystal forms and advances in macromolecular powder diffraction." Acta Cryst. D76, 1065-1079 (2020), D. Triandafillidis, N. Parthenios, M. Spiliopoulou, A. Valmas, F. Gozzo, M. Reinle-Schmitt, D. Beckers, T. Degens, M. Pop, A. N. Fitch, J. Wollenhaupt, M. S. Weiss, F. Karavassili and I. Margiolaki* (article available online).

**28.** "Rietveld refinement for macromolecular powder diffraction." Crystal Growth and Design 20, 12, 8101–8123 (2020), Invited review article for the Virtual Special Issue entitled "The Rietveld Refinement Method – Half of a Century Anniversary." M. Spiliopoulou, D. Triandafillidis, A. Valmas, C. Kosinas, A. N. Fitch, R. B. Von Dreele and I. Margiolaki* (article available online).

**29.** "New perspectives in macromolecular powder diffraction using single photon counting strip detectors: High resolution structure of the pharmaceutical peptide, Octreotide." Acta Cryst. A77, 186-195 (2021) & **Cover article**, M. Spiliopoulou, F. Karavassili, D. Triandafillidis, A. Valmas, C. Kosinas, K. Barlos, K. K. Barlos, M. Morin , M. L. Reinle-Schmitt, F. Gozzo* and I. Margiolaki* (article available online) & **Scientific Highlights of the Paul Scherrer Institute** (PSI-Switzerland).

**30.** "High throughput macromolecular polymorph screening via NMR and X-ray powder diffraction synergistic approach: The case of human insulin co-crystallized with resorcinol derivatives." J. Appl. Cryst. 54, 963-975 (2021)., M. Spiliopoulou, A. Valmas, D. Triandafillidis, S. Fili, M. Christopoulou, A. J. Filopoulou, A. Piskopou, P. Papadea, A. N. Fitch, D. Beckers, T. Degen, F. Gozzo, M. Morin, M. L. Reinle-Schmitt, F. Karavassili, E. Rosmaraki, C. T. Chasapis and I. Margiolaki* (article available online).

**31.** "The T2 structure of polycrystalline cubic human insulin." Acta Cryst. D (in press)., D. P. Triandafillidis, F. Karavassili, M. Spiliopoulou, A. Valmas, M. Athanasiadou, G. Nikolaras, S. Fili, P.i Kontou, M. W. Bowler, C. T. Chasapis, R. B. Von Dreele, A. N. Fitch and . Margiolaki*.

**32.** "Methods on LDL particle isolation, characterization and component fractionation for the development of novel specific oxidized LDL status markers for atherosclerotic disease risk assessment." Frontiers in Medicine, Section - Translational Medicine (published online 5/1/2023), doi: 10.3389/fmed.2022.1078492., P. Papadea, M. Skipitari, E. Kalaitzopoulou, A. Varemmenou, M.

Spiliopoulou, M. Papasotiriou, E. Papachristou, D. Goumenos, A. Onoufriou, E. Rosmaraki, I. I. Margiolaki, C. D. Georgiou (open access).

### Α.2 Δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά σχετικά με την ανάπτυξη μεθοδολογιών που εφαρμόζονται στην βιοχημεία για τον χαρακτηρισμό δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών σύνθετων υλικών.

**33.** Macromolecules, 34, 5295-5305 (2001), H. Retsos, I. Margiolaki, A. Messaritaki, S. H. Anastasiadis (article available online).

**34.** Physica B, 318, 372-377 (2002). I. Margiolaki, S. Margadona, K. Prassides, I. Tsilika, K. P. Meletov, G. A. Kourouklis, T. J. S. Dennis, H. Shinohara (article available online).

**35.** Phys. Rev. B, 65, 184514-1:5 (2002), M. Pissas, G. Papavassiliou, M. Karayanni, M. Fardis, I. Maurin, I. Margiolaki, K. Prassides (article available online).

**36.** Journal of American Chemical Society, 124, 11288-11289, (2002). I.Margiolaki, S. Margadonna, K. Prassides, T. Hansen, K. Ishii and H. Suematsu. ILL-Grenoble Highlights, (article available online).

**37.** *Physic*a B, 326, 572-576 (2003), J. Arvanitidis, K. Papagelis, T. Takenobu, I. Margiolaki, K. Brigatti, K. Prassides, Y. Iwasa and A. Lappas (article available online).

**38.** Physica B, 326, 346-349 (2003), K. Papagelis, J. Arvanitidis, I. Margiolaki, K. Brigatti, K. Prassides, A. Schenck, A. Lappas, A. Amato, Y. Iwasa and T. Takenobu (article available online).

**39.** J. Phys. Soc. Japan., 71, Suppl. 338-340, (2002), T. Muranaka, T. Yokoo, M. Arai, I. Margiolaki, K. Brigatti, K. Prassides, O. Petrenko, and J. Akimitsu (article available online).

**40.** Angew. Chem. Int. Ed. 43, 6296-6301 (2004) & ESRF Scientific Highlights, p. 25-26 (2004), G. Ferey, C. Serre, C. Merlot-Draznieks, F. Millange, S. Surble, J. Dutour & I. Margiolaki (article available online).

**41.** Phys. Rev. B71, 220406(R)-1:4 (2005)- *Rapid Communications*, A. Bombardi, L.C. Chapon, I. Margiolaki, C. Mazzoli, F. Duc and P. G. Radaelli (article available online).

**42.** Phys. Rev. B72, 064425-1:15 (2005) & ESRF Scientific Highlights, M. Pissas, I. Margiolaki, G. Papavasiliou, D. Stamopoulos and D. Argyriou (article available online).

**43.** Phys. Rev. B72, 064426-1:10 (2005), M. Pissas, I. Margiolaki, K. Prassides and E. Suard (article available online).

**44.** J. Appl. Cryst.38, 906-911 (2005), J. Rius, I. Peral, I. Margiolaki & X. Torrelles (article available online).

**45.** J. Superconductivity 18, 737 (2005), V. Palmisano, S. Agrestini, G. Campi, M. Filippi, L. Simonelli, M. Fratini, A. Bianconi, S. De Negri, M. Giovannini, A. Saccone, A. N. Fitch, M. Brunelli, & I. Margiolaki (article available online).

**46.** Science 309, 2040-2042 (2005) [In Reports], G. Ferey, C. Merlot-Draznieks, C. Serre, F. Millange, J. Dutour, S. Surble & I. Margiolaki [5]. ESRF Press release; Materials Word Press release.

**47.** J. Solid State Chem. 179, 2443-2451 (2006), W. Slawinski, R. Przenioslo, I. Sosnowska, M. Bieringer, I. Margiolaki, A. N. Fitch, & E. Suard (article available online).

**48.** Phys. Rev. B 74, 054406-1:10 (2006), C. Frontera, JL. Garcia-Munoz, I. Margiolaki, M. Aranda (article available online).

**49.** Solid State communications 140, 359-363 (2006), A. Palewicz, T. Szumiata, R. Przenioslo, I. Sosnowska, I. Margiolaki (article available online).

**50.** Phys. Rev. B 74, 144406-1:10 (2006), C. Yaicle, C. Frontera, J. L. García-Muñoz, C. Martin, A. Maignan, G. André, F. Bourée, C. Ritter, and I. Margiolaki (article available online).

**51.** Chem. Comm. 27, 2820-2822 (2007), P. Horcajada, S. Surblé, C. Serre, D. Y. Hong, Y. K. Seo, J. S. Chang, J. M. Grenèche, I. Margiolaki & G. Férey (article available online).

(Top 25 most-downloaded ChemComm articles January–March 2016)

**52.** J. Phys. Cond. Mater. 19, 406212- 406220 (2007), J.L. García-Muñoz, C. Frontera, P. Beran, N. Bellido, J.S. Lord , C. Ritter, I. Margiolaki (article available online).

**53.** J. Phys: Cond. Mater. 20, 104239:1-7 (2008), Slawinski, R. Przenioslo, I. Sosnowska, M. Bieringer, I. Margiolaki, A. N. Fitch, & E. Suard (article available online).

**54.** Acta Physica Polonica A 113, 1225-1230 (2008), W. Slawinski, R. Przenioslo, I. Sosnowska, M. Bieringer, I. Margiolaki (article available online).

**55.** J. Phys.: Cond. Matter 20, 395224 (2008), M. Calamiotou, A. Gantis, I. Margiolaki, D. Palles, E. Siranidi & E. Liarokapis (article available online).

**56.** Chem. Mater. 20, 9, 3068-3075 (2008), C. Frontera, J. L. García-Muñoz, N. Bellido, I. Margiolaki and C. Ritter (article available online).

**57.** Chem. Commun., 4732-4734 (2008) - Communication, F. Millange, N. Guillou, R. I. Walton, J.M. Grenèche, I. Margiolaki & G. Férey (article available online).

**58.** American Mineralogist 93,10, 1659-1665 (2008), M. Tribaudino, M. Bruno, G. Iezzi, G. Della Ventura , I. Margiolaki (article available online).

**59.** J. Am. Chem. Soc.; 130, 15967–15981 9 (2008), S. R. Miller, G. M. Pearce, P. A. Wright, F. Bonino, S. Chavan, S. Bordiga, I. Margiolaki, N. Guillou, G. Ferey, S. Bourrelly & P. L. Llewellyn (article available online).

**60.** Phys. Rev. B 79, 064423 (2009), F. Yokaichiya, A. Krimmel, V. Tsurkan, I. Margiolaki, P. Thompson, H. N. Bordallo, A. Buchsteiner, N. Stüßer, D. N. Argyriou & A. Loid (article available online).

**61.** Europhysics Letters 85, 26004 (2009), M. Calamiotou, A. Gantis, D. Lampakis, E. Siranidi, E. Liarokapis, I. Margiolaki & K.Conder (article available online).

**62.** Acta Cryst. B 65, 5, 535-542 (2009), W. Slawinski, R. Przenioslo, I. Sosnowska, M. Bieringer, I. Margiolaki & E. Suard (article available online).

**63.** Crystal growth & Design, 9, 2927-2936 (2009), C. Volkringer, T. Loiseau, N. Guillou, G. Ferey, M. Haouas, F. Taulelle, N. Audebrand, I. Margiolaki, D. Popov, M. Burghammer, C. Riekel (article available online).

**64.** Chem. Materials, 21, 1602-1611 (2009), G. de Combarieu, M. Morcrette, F. Millange, N. Guillou, J. Cabana, C. P. Grey, I. Margiolaki, G. Ferey, J. M. Tarascon (article available online).

**65.** Angew. Chem. Int. Ed., 48, 5163-5166 (2009), T. Ahnfeldt, N. Guillou, D. Gunzelmann, I. Margiolaki, T. Loiseau, G. Ferey, J. Senker, N. Stock (article available online).

**66.** American Mineralogist 95, 369-381 (2010), G. Iezzi, G. Della Ventura , M. Tribaudino, P. Nemeth, I. Margiolaki, A. Cavallo, F. Gaillard, H. Behrens (article available online).

**67.** Contrib. Mineral Petrol. 160, 899 (2010), M. Tribaudino, R.J. Angel, F. Camara, F. Nestola, D. Pasqual, I. Margiolaki (article available online).

**68.** Phys. Rev. B 81, 6, 064511 (2010), A. Marcinkova, D. Grist, I. Margiolaki, T. C. Hansen, S. Margadonna, J. W. G. Bos (article available online).

**69.** Dalton Transactions, 39, 28, 6389-91M. (2010), T. Wharmby, S. R. Miller, J. A. Groves, I. Margiolaki, S. E. Ashbrook & P. A. Wright (article available online).

**70.** Inorganic Chemistry, 49, 6865 (2010), M. Abrantes, T. R. Amarante, M. M. Antunes, S. Gago, F. A. Almeida Paz, I. Margiolaki, A. E. Rodrigues, M. Pillinger, A. A. Valente, and I. S. Goncalves (article available online).

**71.** Europhysics Letters 91, 57005 (2010), M. Calamiotou, I. Margiolaki, A. Gantis, E. Siranidi, Z. A. Ren, Z. X. Zhao and E. Liarokapis (article available online).

**72.** J. Supercond. Nov. Magn. 24, 3, 1181 (2011), M. Calamiotou , I. Margiolaki, Z.A. Ren · Z.X. Zhao , E. Siranidi, E. Liarokapis (article available online).

**73.** American Mineralogist 96, 353 (2011), G. Iezzi, M. Tribaudino, G. Della Ventura , I. Margiolaki (article available online).

**74.** Chem. Materials, 23, 39 (2011), R. Hajjar, C. Volkringer, T. Loiseau, N. Guillou, J. Marrot, G. Ferey, I. Margiolaki, G. Fink, C. Morais, F. Taulelle (article available online).

**75.** Chem. Materials, 23, 85 (2011), M. Poienar, C. Vecchini, G. Andre, A. Daoud-Aladine, I. Margiolaki, A. Maignan, A. Lappas, L. Chapon, M. Hervieu, F. Damay, C. Martin (article available online).

**76.** AMERICAN MINERALOGIST, 97, 2-3, 291 (2012), K. R. Whittle, N. C. Hyatt, I. Margiolaki, F. J. Berry, K. S. Knight, G. R. Lumpkin (article available online).

**77.** MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS Volume: 157 Special Issue: SI Pages: 18-23 (2012), A. Lieb, H. Leclerc, T. Devic, C. Serre, I. Margiolaki, F. Mahjoubi, J. S. Lee, A. Vimont, M. Daturi, J. S. Chang (article available online).

**78.** Microscopy and Analysis, vol. 27, 2, 24-29 (2013), M. Gemmi, A. Galanis, F. Karavassili, P. P. Das, M. Calamiotou, A. Gantis, I. Margiolaki & S. Nicolopulos (article available online).

**79.** Angew. Chem. Int. Ed. 53, 1 – 7 (2014), A. Douvali, A. Tsipis, S. V. Eliseeva, S. Petoud, G. S. Papaefstathiou, C. D. Malliakas, I. Papadas, G. S. Armatas, I. Margiolaki, M. G. Kanatzidis, T. Lazarides, M. J. Manos (article available online).

**80.** Nature Communications 6, 7100, (2015), C. D. Georgiou, H. J. Sun, C. P. McKay, K. Grintzalis, I. Papapostolou, D. Zisimopoulos, K. Panagiotidis, G. Zhang, E. Koutsopoulou, G. E. Christidis & I. Margiolaki (article available online).

**81.** American Mineralogist 101, 11, 2498 - 2513 (2016), G. Iezzi, G. D. Bromiley, A. Cavallo, P. P. Das, F. Karavassili, I. Margiolaki, A. A. Stewart, M. Tribaudino, J. P Wright (article available online).

**82.** ACS Inorganic Chemistry, 56, 762−772 (2017), A. Georgopoulou, I. Margiolaki, V. Psycharis, A. Boudalis (article available online).

**83.** Microchemical Journal, 138, 19–25 (2018). N. Zacharias, F. Karavassili, P. Das, S. Nicolopoulos, A. Oikonomou, A. Galanis, E. Rauch, R. Arenal, J. Portillo, i, J. Roque, J. Casablanca & I. Margiolaki (article available online).

**84.** Heritage Science 6:64 (2018), S. Nicolopoulos, P. P. Das, P. J. Bereciartua, F. Karavasili, N. Zacharias, A. Gómez Pérez, At. S. Galanis, E. F. Rauch, R. Arenal, J. Portillo, J. Roqué-Rosell, M. Kollia & I. Margiolaki (open access).

**85.** Journal of Materials Chemistry A 9(6), 3379-3387 (2021), A. D Pournara, S. Rapti, A. Valmas, I. Margiolaki, E. Andreou, G. S Armatas, A. C Tsipis, J. C Plakatouras, D. L Giokas & M. J Manos (article available online).

**86.** Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry 435, 114290 (2023, online publication 2022), M. Skipitari, E. Kalaitzopoulou, P. Papadea, A. Varemmenou, V. E. Gavriil, E. Sarantopoulou, A. C. Cefalas, S. Tsakas, E. Rosmaraki, I. Margiolaki, T. Grune, C. D. Georgiou (article available online).

**87.** Symmetry, *14*, 2355 (2022), Special Issue "Electron Diffraction and Structural Imaging II", P. P. Das, S. Plana-Ruiz, A. Galanis, A. Stewart, F.i Karavassili, S. Nicolopulos, . Margiolaki, M. Calamiotou, H. Putz, G. Iezzi (article available online).

## Β. Πρακτικά Διεθνών Συνεδρίων με κριτές

### Β.1 Δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές σχετικά με κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών & την ανάπτυξη και χρήση της μεθόδου X-ray Powder Diffraction (XRPD) σε μικροκρυσταλλικά ιζήματα πρωτεϊνών.

**1.** *"Exploiting X-ray induced anisotropic lattice changes to improve intensity extraction in protein powder diffraction: application to heavy atom detection."*, Z. Kristallogr. Suppl. 26, 39-44 (2007), C. Besnard, F. Camus, M. Fleurant, A. Dahlström, J. P. Wright, I. Margiolaki, P. Pattison, M. Schiltz (article available online).

**2.** *"Likelihood Methods With Protein Powder Diffraction Data."*, Z. Kristallogr. Suppl. 26, 27-32 (2007), J. P. Wright, A. Markvardsen and I. Margiolaki (article available online).

**3.** *"Preliminary insights into the non structural protein 3 macro domain of the Mayaro virus by powder diffraction.",* Z. Kristallogr. 225, 576–580 (2010), N. Papageorgiou, J. P. Wright , A. N. Fitch, Y. Watiers, L. Saunders, B. Coutard , V. Lantez, E. A. Gould, B. Canard, I. Margiolaki (article available online).

**4.** *"Time-dependent analysis of $K_2PtBr_6$ binding to lysozyme studied by protein powder and single crystal X-ray analysis.",* Z. Kristallogr. 225, 570–575 (2010), J R Helliwell, A M T Bell, P Bryant , S Fisher, J Habash , M Helliwell, I Margiolaki , K Surasak , Y Watier, J Wright & S Yalamanchilli (article available online).

### Β.2 Δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές σχετικά με την ανάπτυξη μεθοδολογιών που εφαρμόζονται στην βιοχημεία για τον χαρακτηρισμό δομικών και δυναμικών χαρακτηριστικών σύνθετων υλικών.

**5.** High Pressure Research, 22, 63-67, (2002), S. Assimopoulos, K. P. Meletov, G. A. Kourouklis, I. Margiolaki, S. Margadonna, K. Prassides, T. J. S. Dennis and H. Shinohara (article available online).

**6.** Acta Physica Polonica A , 117, 2, 323-327 (2010), W. Paszkowicz, P. Piszora, W. Lasocha, I. Margiolaki, M. Brunelli, A. Fitch (article available online).

## Γ. Προσκεκλημένα Κεφάλαια Βιβλίων σχετικά με την Βιοχημεία: Δομή και Λειτουργία πρωτεϊνών.

**1.** *"Macromolecular Powder Diffraction",* Book Chapter for the International Tables of Crystallography- Volume H: Powder Diffraction, chapter 7.1, 718-736, 2019, (available online), I. Margiolaki

**2.** "Proteins and Powders: An Overview", I. Margiolaki In: *Uniting Electron Crystallography and Powder Diffraction*, Eds. U. Kolb, K. Shankland, L. Meshi, A. Avilov & W. David. (2012). Springer Netherlands, 137-147.

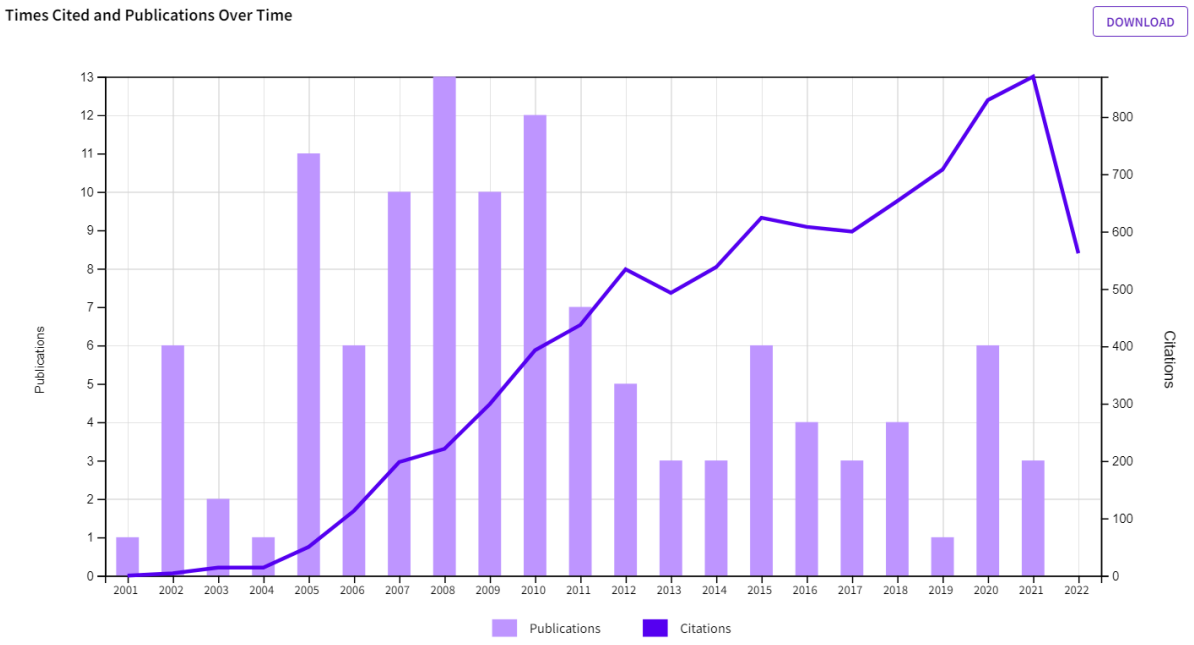
## ΙΙΙ. ΒΙΒΛΙΟΜΕΤΡΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

93 άρθρα; 2 προσκεκλημένα κεφάλαια βιβλίων; 11 δομικά μοντέλα πρωτεϊνών στην PDB; 1 *Science* (Ferey et al., 2005); 1 *Nature Comm.* (Georgiou *et al.*, 2015); 38 ως πρώτη/ τελευταία συγγραφέας; 25

ως corresponding author; 7 προσκεκλημένα άρθρα ανασκόπησης; 8,552 citations (8,242 without self-citations) & H-index: 27 (source: Isis web of Knowledge).

Ο σχετικά υψηλός αριθμός ετερεοαναφορών δεν επιτρέπει την αναλυτική περιγραφή τους σε αυτήν την υποενότητα. Τα παρακάτω στατιστικά αποτελέσματα (*bibliometrics*) καθώς και η ανάλυση των δημοσιεύσεων σε διακριτά επιστημονικά πεδία είναι προσβάσιμα από την βάση δεδομένων

ISIS Web of Knowledge.



54
Crystallography
20
Materials Science Multidisciplinary
11
Biophysics
10
Biochemical Research Methods
17
Physics Condensed Matter
10
Chemistry Physical
10
Physics Applied
45
Chemistry Multidisciplinary
12
Biochemistry Molecular Biology
7
Physics Multidisciplinary