

Βιογραφικό Σημείωμα

Δρ. Γεώργιος Μπουλουγούρης *Επίκουρος Καθηγητής Χημείας-Φυσικοχημείας*

Υπηκοότητα : Ελληνική
Οικογενειακή κατάσταση: Έγγαμος
Ημερομηνία γεννήσεως : 15/02/1973
Τόπος γεννήσεως : Αθήνα
Τηλέφωνα Επικοινωνίας : ++30-25510-30637 (εργασία) , (6949473735 κινητό)
Διεύθυνση Εργασίας : Τμήμα Μοριακής Βιολογίας και Γενετικής Δ.Π.Θ. Πανεπιστημιούπολη, περιοχή Δραγάνα, 68100 Αλεξανδρούπολη
E-mail address : gbouloug@mbg.duth.gr

Εκπλήρωση Στρατιωτικών Υποχρεώσεων : Πλήρης (16^{μήν}) θητεία στο Τεχνικό Σώμα (2001-2002)

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΕΝΔΙΑΦΕΡΟΝΤΑ

Βασικός άξονας των ερευνητικών ενδιαφερόντων μου είναι η καλύτερη κατανόηση των μακροσκοπικά παρατηρούμενων φυσικοχημικών και δυναμικών ιδιοτήτων πολύπλοκων φυσικών συστημάτων και διεργασιών, μέσω της σύνδεσης τους με τους μοριακούς μηχανισμούς που τις διέπουν.

Ιδιαίτερο βάρος έχει δοθεί στην πρόρρηση μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ύλης ξεκινώντας από μοριακό επίπεδο, μέσω της χρήσης μοριακής προσομοίωσης και στατιστικής μηχανικής, με σκοπό τη σύνδεση και την καλύτερη κατανόηση της σχέσης χημικής σύστασης και της μοριακής δομής των υλικών, με τις παρατηρούμενες μακροσκοπικές ιδιότητες τόσο κατά την επεξεργασία όσο και κατά την χρήση των υλικών αυτών. Για παράδειγμα οι εργασίες που έχουν εκπονηθεί στον τομέα των πολυμερικών υαλωδών υλικών, από την μία μεριά, αποσκοπούσαν στη σύνδεση των μηχανικών, δυναμικών, και θερμοδυναμικών ιδιοτήτων με την μοριακή δομή τους, την φύση των διαμοριακών δυνάμεων, από την άλλη, ιδιαίτερο βάρος δόθηκε στην κατανόηση των μοριακών μηχανισμών που χαρακτηρίζουν την δυναμική απόκριση ως μία διεργασία πληθυσμιακής ανακατανομής μικροκαταστάσεων.

Ιδιαίτερη έμφαση έχει δοθεί και στην δημιουργία καινοτόμων τεχνικών, όπως η μέθοδος ολοκλήρωσης Μαρκοβιανού ιστού (Δ.8) που είναι βασισμένη σε «πρώτες» αρχές της στατιστικής και επιτρέπει την πραγματοποίηση τοπικής «στοχαστικής» ολοκλήρωσης σε συνδυασμό με την δημιουργία της Μαρκοβιανής αλυσίδας. Γενικότερα η ανάπτυξη μίας σειράς από πρότυπες μεθόδους έχει προκύψει αρχικά από ανάγκη αλλά τις περισσότερες φορές έχει οδηγήσει σε βαθύτερη κατανόηση των μοριακών μηχανισμών που διέπουν τον μικρόκοσμο με τον μακρόκοσμο. Ως κύρια παραδείγματα μπορούν να αναφερθούν οι μελέτες α) της αναμιξιμότητας των υλικών και κυρίως του υδροφοβικού φαινομένου, μέσω της ανάπτυξης μεθοδολογίας υπολογισμού του χημικού δυναμικού με αφαίρεση σωματιδίου, β) της διαδικασίας διαχωρισμού πρωτεϊνών μέσω μεθοδολογίας, που επέτρεψε την πραγματοποίηση μοριακών προσομοιώσεων στο εύρος των συνθηκών κατά τις οποίες η κρυστάλλωση των προτεϊνών επηρεάζεται από την παρουσία μίας μετασταθούς ισορροπίας φάσεων, γ) υπο-υαλώδων μηχανισμών χαλάρωσης στο υαλώδες πολυστυρένιο, μέσω της ανάπτυξης μεθοδολογίας ικανής να παρακολουθήσει την δυναμική εξέλιξη του υαλώδους πολυστυρενίου σε ατομιστική κλίμακα για παραπάνω από δέκα τάξεις μεγέθους στην κλίμακα του χρόνου, αλλά και μέσω της ανάπτυξης πρότυπης θεωρίας πιθανοτήτων όπου η στατιστική αλλά και η στατιστική μηχανική περιγράφεται από έναν ευκλείδειο χώρο κοινό για την πιθανότητα και τις μετρούμενες ιδιότητες.

Τα τελευταία χρόνια έχει δοθεί ιδιαίτερο βάρος στην ανάπτυξη πρότυπων μεθόδων που επιτρέπουν τον υπολογισμό της συνολικής ελεύθερης ενέργειας ενός συστήματος πραγματοποιώντας σταδιακή αφαίρεση όλων των μορίων του συστήματος. Με εργαλεία πρώτων αρχών στατιστικής μηχανικής, ο υπολογισμός του χημικού έργου που συνδέεται με την εικονική ένθεση ή αφαίρεση ενός μορίου υπολογίζεται για τις στοχαστικές απεικονίσεις των φασικών χώρων του συστήματος αναφοράς και του διαταραγμένου συστήματος προσφέροντας νέες δυνατότητες εφαρμογής της θεωρίας διαταραχών.

Πέρα από την ανάπτυξη πρότυπων μεθοδολογιών σε επίπεδο βασικής έρευνας, αναπτύχθηκαν μία σειρά από εργαλεία μελέτης για τον σχεδιασμό φυσικοχημικών διεργασιών σε επίπεδο εφαρμοσμένης έρευνας, σχετικά με την μεταφορά και αποθήκευση CO₂.

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

2/2016-	Επίκουρος Καθηγητής, Χημείας-Φυσικοχημείας, Τμήμα Μοριακής Βιολογίας και Γενετικής, Πανεπιστήμιο Θράκης.
12/2013-2/2016	Λέκτορας, Χημείας-Φυσικοχημείας, Τμήμα Μοριακής Βιολογίας και Γενετικής, Πανεπιστήμιο Θράκης.

2010 2013	Μετα-διδασκατορικός συνεργάτης, Εθνικό Κέντρο Φυσικών Ερευνών “Δημόκριτος”, και Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
2008 2009	Μετα-διδασκατορικός συνεργάτης, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
2006 2008	Μετα-διδασκατορικός συνεργάτης, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. “ENTEP 2004”.
2005 2006	Μετα-διδασκατορικός συνεργάτης, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. Marie Curie (<i>Reintegration Grant</i>)
2002 2004	Μετα-διδασκατορικός συνεργάτης, FOM-Institute for Atomic and Molecular Physics, “AMOLF”, Ολλανδίας. Υποτροφία Marie Curie (<i>Individual Fellowship</i>)
1995–2001	Εκπόνηση Διδακτορικής διατριβής., τμήμα Χημικών μηχανικών, Εθνικό Κέντρο Φυσικών Ερευνών “Δημόκριτος”, και Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. Επιβλέποντες : Δημήτριος Τασιός (ΕΜΠ), Δώρος Θεοδώρου (Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»), Ιωάννης Οικονόμου (Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»),
7/ - 8/1998	Επισκέπτης ερευνητής, I.P.S.T. University of Maryland at College Park, USA. Επιβλέπων: A.Z. Panagiotopoulos.

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΗ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

7/ - 9/1994	Πειραματική Μελέτη χημικής κινητική με χρήση πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού NMR (στο ερευνητικό κέντρο V.T.T. της Φιλανδίας).
7/ - 8/1993	Πειραματική Μελέτη αντιδράσεων θειούχων ενώσεων που χρησιμοποιούνταν σε έναρξης και λήξης πολυμερισμού.

ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

2/2016-	Επίκουρος Καθηγητής, Χημείας-Φυσικοχημείας, Τμήμα Μοριακής Βιολογίας και Γενετικής, Πανεπιστήμιο Θράκης. «Φυσικοχημεία, με στοιχεία βιοφυσικής», «γενικής και ανόργανη χημεία», «Βιοστατιστική» (συνδιδασκαλία στα εργαστήρια για το χειμερινό εξάμηνο).
12/2013-2/2016	«Λέκτορας» στο Πανεπιστήμιο Θράκης, τμήμα μοριακής βιολογίας και γενετικής, μαθήματα : «Φυσικοχημεία, με στοιχεία βιοφυσικής», «γενικής και ανόργανη χημεία», «Βιοστατιστική» (συνδιδασκαλία στα εργαστήρια για το χειμερινό εξάμηνο του ακαδημαϊκού έτους 2013-2014). ΦΕΚ διορισμού 6/12/2013.
2010-2013	«Λέκτορας επί θητεία» (407/80) στο Πανεπιστήμιο Θράκης (407/80) στο τμήμα Μοριακής Βιολογίας και γενετικής, στα μαθήματα : «Φυσικοχημεία με στοιχεία βιοφυσικής» (Εαρινό εξάμηνο), «Γενική και ανόργανη χημεία» (χειμερινό εξάμηνο). Εκλεγμένος «Λέκτορας υπό διορισμό» στο ίδιο τμήμα. (Σύνολο 5 εξάμηνα).
2009-2011	«Λέκτορας επί θητεία» (407/80) στο Πανεπιστήμιο Πατρών (407/80) στο τμήμα Χημικής Μηχανικής, στα μαθήματα : «Εργαστηρίου Υπολογιστικών Εφαρμογών» και «Προγραμματισμός Η/Υ για Χημικούς Μηχανικούς» (χειμερινό εξάμηνο), «Αριθμητική Ανάλυση» και «προσομοίωση φαινομένων μεταφοράς» (Εαρινό εξάμηνο). (Σύνολο τέσσερα εξάμηνα)
2008-2009	«Λέκτορας επί θητεία» (407/80) στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών (Εαρινό εξάμηνο 2009, διδασκαλία μαθήματος «Λογικός και συναρτησιακός προγραμματισμός») (Σύνολο ένα εξάμηνο)

ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ

1995–2001	Εκπόνηση διδακτορικής διατριβής. τμήμα χημικών μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου σε συνεργασία με το Εθνικό Κέντρο Φυσικών Ερευνών “Δημόκριτος”, με τίτλο: “Μελέτη της ισορροπίας φάσεων του νερού με υδρογονάνθρακες μέσω μοριακής προσομοίωσης και μοριακής θεωρίας”
10/1999-11/1999	Δίμηνη εκπαίδευση σε παράλληλο προγραμματισμό TRACS Training Program, Εδιμβούργο.
1995-1996	Διπλωματική εργασία: «Μελέτη κετο-ενολικής ταυτομέρειας ετεροκυκλικών ενώσεων» Εργαστήριο Οργανικής χημείας Ε.Μ.Π.
1990 - 1996	Φοίτηση στο τμήμα Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου Αθηνών, Βαθμός πτυχίου 8.04

ΥΠΟΤΡΟΦΙΕΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΩΠΙΚΕΣ ΕΠΙΧΟΡΗΓΗΣΕΙΣ (Grants)

2006 - 2008	Έντερ. (<i>Grant από Γ.Γ.Ε.Τ.</i>)
2005 - 2006	Υποτροφία Marie Curie (<i>Reintegration Grant</i>)

2002 - 2004	Υποτροφία Marie Curie (<i>Individual Fellowship</i>)
1995 - 1999	Υποτροφία για την εκπόνηση διδακτορικής διατριβής, (Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. 'Δημόκριτος')
7/ - 9/1994	Υποτροφία C.O.M.M.E.T..
7/ - 8/1993	Υποτροφία I.A.E.S.T.E .

ΚΡΙΤΗΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

Macromolecules, Fluid Phase Equilibrium, J. Chem. Phys. , J. Phys. Chem. B., Canadian Journal of Chemical Engineering,

ΚΡΙΤΗΣ ΣΕ ΕΘΝΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ

Κριτής σε «Πράξη» της Ειδική Υπηρεσία Συντονισμού και Εφαρμογής Δράσεων στους τομείς της Έρευνας, της Τεχνολογικής Ανάπτυξης και της Καινοτομίας (ΕΥΣΕΔ ΕΤΑΚ) της γενικής γραμματείας έρευνας και τεχνολογίας.

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ

Λειτουργικά Συστήματα: Εκτενής γνώση LINUX-UNIX και X-WINDOWS. Άρτια κατάρτιση σε Microsoft Windows, DOS.

Γλώσσες Προγραμματισμού: Εκτενής γνώση της FORTRAN, C, C++, καθώς και *γλωσσών παράλληλου προγραμματισμού*: MPI, OpenMP, HPF, καθώς και JavaScript, Prolog, Lisp

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΔΙΕΘΝΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ

Publications¹

[1] G.C Boulougouris, I.G Economou. and D.N Theodorou., "Engineering a Molecular Model for Water Phase Equilibrium over a Wide Temperature and Pressure Range", *J. Phys. Chem. B*, **1998**, *102*, 1029-1035

[2] J.R. Errington, G.C. Boulougouris, I.G. Economou, A.Z. Panagiotopoulos, and D.N. Theodorou "Molecular simulation of phase equilibria for water-methane and water-ethane mixtures". *J. Phys. Chem. B*, **1998**, *102*, 8865-8873

[3] G.C. Boulougouris, I.G. Economou and D.N. Theodorou, " On the Calculation of the Chemical Potential Using the Particle Deletion Scheme ", *Mol. Phys.*, **1999**, *96*, 905-913

[4] E.C. Voutsas, G.C. Boulougouris, I. G. Economou, and D.P. Tassios, "Water/Hydrocarbon Phase Equilibria Using the Thermodynamic Perturbation Theory", *Industrial & Engineering Chemistry Research*; **2000**; *39*(3); 797-804.

[5] G.C. Boulougouris, J.R. Errington, I.G. Economou, A.Z. Panagiotopoulos and D.N. Theodorou, "Molecular Simulation of Phase Equilibria for Water - n-Butane and Water - n-Hexane Mixtures", *J. Phys. Chem. B*, **2000**, *104*(20), 4958-4963.

[6] G.C. Boulougouris, I.G. Economou and D.N. Theodorou," Calculation of the Chemical Potential of Chain Molecules Using the Staged Particle Deletion Scheme" *J.Chem.Phys*, **2001**, *115*, 8231-8237

[7] G.C. Boulougouris, E.C. Voutsas, I.G. Economou, D. N. Theodorou, and D.P. Tassios ," Henry's constant analysis for water and non-polar solvents: What can we get from experimental data, molecular simulation and macroscopic models. " *J. Phys. Chem. B*, **2001**, *105*(32), 7792-7798

[8] G. C. Boulougouris, D. Frenkel, "Monte Carlo sampling of a Markov web", *J. Chem. Theory Comput.* **2005**, *1*, 389-393

[9] G. C. Boulougouris, D. Frenkel, , "Novel Monte Carlo scheme for systems with short-ranged interactions", *J.Chem.Phys*, **2005** *121* 244106-1, 244106-8.

¹ (σε 14 πρώτος συγγραφέας (με υπογράμμιση), σε 10 εργασίες υπεύθυνος για την αλληλογραφία συγγραφέας (με αστεράκι in italics), 4 των οποίων είναι μονογραφίες)

- [10] *G. C. Boulougouris* and D.N. Theodorou, "Dynamical integration of a Markovian web: A first passage time approach" *J.Chem.Phys*, **2007**, *127*, 084903
- [11] D. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou, "On the role of "inherent structures" in glass-forming materials: I. The vitrification process", *J. Phys. Chem. B.*, **2008**, *112*, 10619-10627
- [12] D. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou. "On the role of "inherent structures" in glass-forming materials: II. Reconstruction of the Mean Square Displacement by rigorous "lifting" of the inherent structure dynamics", *J. Phys. Chem. B*, **2008**, *112*, 10628-10637
- [13] *G. C. Boulougouris*, D.N. Theodorou. "Probing sub-glass relaxation in polymers via a geometric representation of probabilities, observables and relaxation modes for discrete stochastic systems.", *J.Chem.Phys*, **2009**, *130*, 044905
- [14] T. Spyriouni, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou. ;" Prediction of Sorption of CO₂ in Glassy Atactic Polystyrene at Elevated Pressures Through a New Computational Scheme", *Macromolecules*, **2009**, *42* (5), 1759–1769
- [15] D. Tsalikis, N. Lempesis, *G. C. Boulougouris*, D.N. Theodorou.; "Efficient parallel decomposition of dynamical sampling in glass forming materials based on an "on the fly" definition of metabasins.", *J. Chem. Theory Comput.*, **2010**, *6* (4), pp 1307–1322
- [16] *G. C. Boulougouris*, "Calculation of the chemical potential beyond the first order free energy perturbation: from deletion to reinsertion.", *Journal of Chemical & Engineering Data*, **2010**, *6*, 1307-1322 (2010)
- [17] Grazia De Angelis G., C. Boulougouris, D.N. Theodorou; "Prediction of infinite dilution benzene solubility in linear polyethylene melts via the Direct Particle Deletion method", *J. Phys. Chem. B*, **2010**, *114* (19), pp 6233–6246.
- [18] D. Tsalikis, N. Lempesis, *G. C. Boulougouris*, D.N. Theodorou.; "Temperature accelerated dynamics in glass forming materials", *J. Phys. Chem. B*, **2010** *114* (23), pp 7844-7853.
- [19] *G.C. Boulougouris*, L. Peristeras, I.G. Economou and D.N. Theodorou, "Predicting fluid phase equilibrium via histogram reweighting with Gibbs ensemble Monte Carlo simulations", *Journal of Supercritical fluids*, **2010**, *55*(2) pp. 503-509.
- [20] N. Lempesis, D. Tsalikis *G. C. Boulougouris*, D.N. Theodorou, "Lumping analysis for the prediction of long-time dynamics: from monomolecular reaction systems to inherent structure dynamics of glassy materials" *J.Chem.Phys*, **2011**, *135* pp. 204507.
- [21] *G.C. Boulougouris*, "On the Estimation of the Free Energy, From a Single Equilibrium Statistical Ensemble, via Particle Reinsertion" *J. Phys. Chem. B*, **2012**, *116*, 997
- [22] N. Lempesis, D. Tsalikis *G. C. Boulougouris*, D.N. Theodorou, "*Temporal disconnectivity of the energy landscape in glassy systems*", *J. Chem. Phys.*, **2013**, *138*, 12A545.
- [23] *G. C. Boulougouris*, "Multidimensional direct free energy perturbation", *J. Chem. Phys.*, **2013**, *138*, 114111
- [24] N. Diamantonis, G.C. Boulougouris, E. Mansoor, D. Tsangaris and I. G. Economou, "Evaluation of cubic, SAFT, and PC-SAFT equations of state for the vapor-liquid equilibrium modeling of CO₂ Mixtures with Other Gases", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **2013**, *52* (10), pp. 3933-3942
- [25] E. Panagakou, G. C. Boulougouris, and A. Provata "Effective Mean Field Approach of Kinetic Monte Carlo Simulations in Limit Cycle Dynamics with Stochastic Reactive and Diffusive Rewiring" *EPJ*, **2013**, *86*: 277.
- [26] N. Lempesis, G.G. Vogiatzis, G. C. Boulougouris, L. C.A van Breemenc, M. Hütterc and D. N. Theodorou, "Tracking a glassy polymer on its energy landscape in the course of elastic deformation", *Mol. Phys.* **2013**, *111*, 3430-3441
- [27] N. Diamantonis, G.C. Boulougouris, D. Tsangaris, M. J. El Kadib, H. Saadawib, S. Negahbanc and I. G. Economou, "Thermodynamic and transport property models for carbon capture and sequestration (CCS) processes with emphasis on CO₂ transport", *Chemical Engineering Research and Design*, **91**, *10*, 2013, 1793-1806.

[28] R.M. Woolley et al , “An integrated, multi-scale modelling approach for the simulation of multiphase dispersion from accidental CO₂ pipeline releases in realistic terrain”, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 27, 2014, 221–238

[29] G. C. Boulougouris “Free Energy Calculations, Enhanced by a Gaussian Ansatz, for the “Chemical Work” Distribution”, *Journal of Computational Chemistry*, 2014, 35 (13).

[30] I.K. Nikolaidis, I.G. Economou, G.C. Boulougouris and L.D. Peristeras, “Calculation of the Phase Envelope of Multicomponent Mixtures with the Bead Spring Method”, *AIChE J.*, 62(3), 868 – 879 (2016).

[31] S. Brown, L.D. et al, “Thermodynamic interpolation for the simulation of two-phase flow of non-ideal mixtures” *Computers & Chemical Engineering*, Volume 95, 2016, 49-57

[32] Richard T.J. Porter, et al, “Techno-economic assessment of CO₂ quality effect on its storage and transport: CO₂QUEST: An overview of aims, objectives and main findings, *International Journal of Greenhouse Gas Control*” 54, 2016, p 662-681

[33] Ilias K. Nikolaidis, Georgios C. Boulougouris, Loukas D. Peristeras, and Ioannis G. Economou, Equation-of-State Modeling of Solid–Liquid–Gas Equilibrium of CO₂ Binary Mixtures ,*Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2016, 55 (21), 6213-6226

[34] P. G. Takis, K. D. Papavasileiou, Loukas D. Peristeras, Georgios C. Boulougouris, V.S. Melissas and Anastassios N. Troganis, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2017,19, 13710-13722

ΑΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΔΙΕΘΝΩΝ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ (ΑΡΘΡΑ)

[35] G. P. Lithoxoos, L. D. Peristeras, G.C. Boulougouris and I. G. Economou, “Monte Carlo simulation of CO₂ and CO adsorption on activated graphite” *Mol. Phys.* 2012, 110, 1153-1160. (peer reviewed conference paper, in *Special Issue*)

[36] Dimitrios Tsalikis, Nikolaos Lempesis, Georgios C. Boulougouris, Doros N. Theodorou , «Energy Landscape-Based Study of Atomic Displacements in Glass Forming Materials», Special Issue “Diffusion Fundamentals III” ,11 (2009) 65, pp 1-2 (peer reviewed conference paper in *Special Issue, OPEN-ACCESS*)

[37] Brown, S, et. al. CO₂QUEST: Techno-economic assessment of CO₂ quality effect on its storage and transport (2014) *Energy Procedia*, 63, pp. 2622-2629. (peer reviewed conference paper in *conference proceedings*)

[38] Woolley, R.M., et. al. CO₂PipeHaz: Quantitative hazard assessment for next generation CO₂ pipelines (2014) *Energy Procedia*, 63, pp. 2510-2529. (peer reviewed conference paper in *conference proceedings*)

ΑΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΔΙΕΘΝΩΝ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ (proceedings)

Economou, I.G., , et. al. Comprehensive thermophysical model development for CO₂ pipeline transport (2013) *Engineering Sciences and Fundamentals 2013 - Core Programming Area at the 2013 AIChE Annual Meeting: Global Challenges for Engineering a Sustainable Future*, 1, pp. 310-311. (proceedings)

ΑΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ ΣΕ ΠΡΑΚΤΙΚΑ ΔΙΕΘΝΩΝ ΣΥΝΕΔΡΙΩΝ (ΠΕΡΙΛΗΨΕΙΣ)

[1] Tsalikis, D., , et. al. On the role of inherent structure dynamics in glass-forming materials (2008) *AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings*, 1 p.

[2] Spyriouni, T., Boulougouris, G.C., Theodorou, D.N. Sorption equilibria of CO₂ in atactic polystyrene by molecular simulation, (2008) *AIChE Annual Meeting, Conference Proceedings*, 1 p.

ΣΥΝΕΔΡΙΑ

Ομιλίες:

(ο ομιλητής είναι υπογραμμισμένος)

1. Μπουλουγούρης Γ., Οικονόμου Ι. και Θεοδώρου Δ.Ν., "Θερμοδυναμικές ιδιότητες υδατικών συστημάτων μέσω μοριακής προσομοίωσης", 1^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, Πάτρα, Ελλάδα (1997)
2. Boulougouris G., Economou I.G. and Theodorou D.N., "Molecular Simulation of the Phase Equilibria of Aqueous Systems", *AICHE Annual Meeting*, Los Angeles, California, USA (1997).
3. Boulougouris G., Economou I.G. and Theodorou D.N., "Monte Carlo Simulation of Aqueous Systems Using Novel Simulation Methodologies", *AICHE Annual Meeting*, Los Angeles, California, USA (2000).
4. Boulougouris G., Economou I.G. and Theodorou D.N., "Aqueous Systems and Free Energy Calculations in Molecular Simulation", C.E.C.A.M., Lyon, (2001)
5. Boulougouris G.C., Frenkel D., "Speed-up Monte Carlo simulation via waste recycling", *CECAM Workshop on Novel Approaches to Efficient Simulation of Soft Matter Systems* (2004)
6. Boulougouris G.C., Frenkel D., "Πρότυπες μέθοδοι Monte Carlo εφαρμοσμένες στον υπολογισμό του διαγράμματος φάσεων μοριακών συστημάτων με αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας.", 5^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα (2005)
7. George Boulougouris, Christos Tzoumanekas, Dimitris Tsalikis, Nikos Kopsias and Doros N. Theodorou, "Energy landscape and entanglement network – based simulation schemes for understanding ageing and plasticity in polymer glasses", *CECAM Workshop on Simulating deformed glasses and melts: From simple liquids to polymers* (2005)
8. Dimitris Tsalikis, George Boulougouris, Christos Tzoumanekas, Christos Tzoumanekas, and Doros N. Theodorou, « Atomistic and mesoscopic simulations of relaxation and plastic deformation in amorphous polymers», 13th International Conference on Deformation, Yield and Fracture of Polymers 10-13 april (2006) Rolduc Abbey, Kerkrade, The Netherlands.
9. Dimitris Tsalikis, George Boulougouris, L. Peristeras and Doros N. Theodorou « Bridging time scale in amorphous glassy polymers» *4th International workshop on nonequilibrium thermodynamics and complex fluids*, 3-7 september (2006), Rhodes, Greece
10. Dimitris Tsalikis, George Boulougouris, L. Peristeras and Doros N. Theodorou, 6ο Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών Πάτρα 3 - 5 Νοεμβρίου 2006 με τίτλο ομιλίας "Ageing in atomistic simulations of Amorphous glassy Polymers"(2006)
11. Dimitrios Tsalikis, Georgios C. Boulougouris, Loukas D. Peristeras, Doros N. Theodorou, "Plastic Deformation in Amorphous Polymers : a Free Energy Landscape Approach", *AICHE Annual Meeting*, San Francisco, California, USA (2006).
12. Δ. Τσαλίκης, Λουκάς Περιστεράς, Γεώργιος Μπουλουγούρης, Δώρος Θεοδώρου. «Υπολογιστική μελέτη των δυναμικών ιδιοτήτων υαλώδων πολυμερών με χρήση της εικόνας εγγενών δομών», 6ο Πανελλήνιο συνέδριο Χημικής Μηχανικής Αθήνα, Ελλάδα, 31/5 – 2/6, 2007.
13. Δ. Τσαλίκης, Λουκάς Περιστεράς, Γεώργιος Μπουλουγούρης, Δώρος Θεοδώρου. «Στρατηγικές παράλληλου προγραμματισμού στον υπολογισμό σαγματικών σημείων σε πολυδιάστατες δυναμικές επιφάνειες.», 6ο Πανελλήνιο συνέδριο Χημικής Μηχανικής Αθήνα, Ελλάδα, 31/5 – 2/6, 2007.
14. Γεώργιος Μπουλουγούρης, Λουκάς Περιστεράς, Δώρος Θεοδώρου. Υπολογιστική μελέτη φυσικής γήρανσης και πλαστικής παραμόρφωσης υαλώδων υλικών. Ημερίδες για την προβολή της επιστημονικής έρευνας στο Εθνικό Μέτσοβο πολυτεχνείο. 5-8 Ιουλίου, Πλωμάρι Λέσβου.
15. George C. Boulougouris and Doros N. Theodorou, Alfred Uhlherr, "Accelerating Molecular Simulations by Mapping onto Local Energy Minima" CCP2007, Brussels, September 5-8, 2007, Belgium
16. D. Tsalikis, N. Lempesis, G. C. Boulougouris, D.N. Theodorou. "On the role of "inherent structures" in glass-forming materials" *AICHE Annual Meeting*, Philadelphia, PA November 16-21, 2008.

17. G. C. Boulougouris, C. Tzoumanekas and D.N. Theodorou. "Energy landscapes and entanglement networks: molecular simulations of the relaxation properties of amorphous polymers". 14 International Conference on Deformation. Yield and Fracture of polymers, April, 6-9, 2009
18. Stefanos Anogiannakis, Christos Tzoumanekas, George C. Boulougouris, and Doros N. Theodorou «Meeting the challenge of long time scales in molecular simulations of polymers». . Soft Matter Days 2009, 10 - 13 November 2009, Bonn, Germany
19. Δ. Τσαλίκης, Ν. Λεμπέσης, Γ. Μπουλουγούρης « Ο ρόλος της δυναμικής των εγγενών δομών στα υαλώδη υλικά», 7ο Πανελλήνιο Επιστημονικό, Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, 3-5 Ιουνίου, Πάτρα. (2009)
20. Γ. Μπουλουγούρης, Θ. Θεοδώρου, «Ανάπτυξη υπολογιστικής μεθοδολογίας για την πρόβλεψη ρόφησης του CO₂ στο υαλώδες ατακτικό πολυστυρενίο σε υψηλές πιέσεις, 7ο Πανελλήνιο Επιστημονικό, Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, 3-5 Ιουνίου, Πάτρα. (2009)
21. G. C. Boulougouris, L. Peristeras, I. G. Economou and D. N. Theodorou "Bridging length scale in fluid phase equilibrium via histogram reweighting of Gibbs ensemble monte carlo simulations", 7 GRACM-12, 2011, Athens, Greece.
22. N. Diamantonis ,Γ. Spyriouni , G.Boulougouris , L. Peristeras , D.M. Tsangaris and I.G. Economou, "Prediction and regression of CO₂ physical properties from equations of state and molecular simulation", Thermodynamics 2011, , Athens, Greece.
23. R.M. Woolley, M. Fairweather, C.J. Wareing, S.A.E.G. Falle, I. Economou, D.Tsangaris, G. Boulougouris, C. Proust, D. Jamois, J. Hebrard, "Turbulence and Thermodynamic Interaction Modelling of CO₂" 10th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements 17-19 September 2014, Marbella, Spain
24. Π. Γ. Τάκης, Δ. Παπαβασιλείου, Δ. Περιστεράς, Γ. Κ. Μπουλουγούρης, Β. Σ. Μελισσάς και Α. Ν. Τρογκάνης, Διερεύνηση των αλληλεπιδράσεων του DMSO με μόρια βιολογικού ενδιαφέροντος-συνδυάζοντας πείραμα με μοριακή προσομοίωση. 22 Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας Θεσσαλονίκης 2016.

Πόστερ :

1. Boulougouris G., Economou I.G. and Theodorou D.N., "Molecular Simulation of Pure Water Vapor -Liquid Equilibrium Over a Wide Temperature and Pressure Range", *NATO-ASI on Recent Theoretical and Experimental Advances in Hydrogen Bonded Clusters*, Heraklion, Crete, Greece (1997).
2. Boulougouris G. , Errington J.R., Economou I.G., Panagiotopoulos A.Z., and Theodorou D.N."Molecular simulation of phase equilibria for water-methane and water-ethane mixtures", *AIChE Annual Meeting*, Session 52, Miami, FL, USA (1998).
3. Boulougouris G., Voutsas E.C. , Economou I. G., Theodorou D.N. and Tassios D. P. "Phase equilibria of water/hydrocarbon systems from two equations of state CAFT and CPA" 17 ESAT, Vialmoura Portugal (1999)
4. Boulougouris G., Voutsas E.C. , Economou I. G., Theodorou D.N. and Tassios D. P. "Phase Equilibria of Aqueous Systems" 18 ESAT, Goudna Hora, Czech republic (2000)
5. Boulougouris G., Frenkel D. "Chemical potential via particle deletion in molecular simulation", *Annual Meeting of Statistical Physics FOM*. Lunteren, Netherlands (2003).
6. Boulougouris G., Frenkel D. 'A numerical study of the phase behavior of protein solutions.', *Marie Curie Workshop*, Petten, The Netherlands (2003).
7. Boulougouris G.C., Frenkel D., "A numerical study on the effect of the interaction range in fluid-fluid, fluid-solid equilibrium", *NATO ASI on Soft Condensed Matter Physics in Molecular and Cell Biology*, Edinburgh, UK (2004)

8. Boulougouris G.C., Frenkel D. “Novel Monte Carlo schemes for systems with short-ranged interactions”, SIMU, Geneva (2004)
9. Boulougouris G. C., Tsalikis D., Peristeras L., and Theodorou D. N., “Atomistic simulations of polymeric glasses over a wide time scale”, Eleventh International Conference on Properties and Phase Equilibria, PPEPPD, May 20-25, 2007, Hersonissos, Crete, Greece.
10. Boulougouris G.C and Theodorou D. N., “Probing sub-glass relaxation of a-PS, via atomistic simulations”, Workshop on “Metastability and Rare Events in Complex Systems”, Erwin Schrödinger Institute, Vienna, 18-22 Feb 2008.
11. Tsalikis D., Lempesis N., Boulougouris G.C. , Theodorou D. N. “Energy Landscape–Based Study of Atomic Displacements in Glass Forming Materials” Diffusion Fundamentals III, 23-26 Aug. 2009 Athens, Greece.
12. G.P. Lithoxoos , L.D. Peristeras , G. Boulougouris and I.G. Economou, "Adsorption of CO₂, CO, CH₄, H₂S gases in activated graphite via Monte Carlo simulation", Thermodynamics 2011, , Athens, Greece.