



Σύντομο Βιογραφικό Σημείωμα: Γεώργιος Μπουλουγούρης

Θέση:

Αναπληρωτής Καθηγητής,
Διευθυντής Εργαστηρίου Υπολογιστικής Φυσικοχημείας

Προπτυχιακή Εκπαίδευση

Χημικός Μηχανικός Ε.Μ.Π.

Μεταπτυχιακή Εκπαίδευση

Διδακτορικό από τη σχολή Χημικός Μηχανικός Ε.Μ.Π.

Ερευνητικά ενδιαφέροντα

- Πρόβλεψη φυσικοχημικών και δυναμικών ιδιοτήτων φυσικών και βιολογικών συστημάτων με την χρήση υπολογιστικών εργαλείων.
- Μοριακή προσομοίωση, Στατιστική μηχανική. (Πρόβλεψη Χημικού δυναμικού, Ελεύθερης ενέργειας πρόσδεσης, in silico σχεδιασμός φράκων)
- Μαθηματική μοντελοποίηση (μελέτη δυναμικής ενζυμικών αντιδράσεων βιοχημικών δικτύων)

Βραβεία-Διακρίσεις

- Υποτροφία Marie Curie (Individual Fellowship)
- Marie Curie European Reintegration Grant

Ενδεικτικές Δημοσιεύσεις

- *Boulougouris G.C.*, (2024) “Event horizon kinetic Monte Carlo” *Journal of Chemical Physics*, 161(4), 044109.
- *Boulougouris G.C.*, (2023) “Accessible Molecular System Creator: Building Molecular Configurations Based on the Inaccessible Molecular Volume and Accessible Molecular Surface via Static Monte Carlo Sampling,” *Journal of Physical Chemistry B*, 127(44), pp. 9520–9531
- Boulougouris, G.C.,(2021) “On the geometrical representation of classical statistical mechanics” , *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, (2),023207
- Konstantinidis, K., Karakasiliotis, I., Anagnostopoulos, K., Boulougouris, G.C. (2021), “On the estimation of the molecular inaccessible volume and the molecular accessible surface of a ligand in protein-ligand systems”, *Molecular Systems Design and Engineering*, 6(11), pp. 946–963
- Ritis, D., Boulougouris, G.C. ,(2021)“On the hierarchical design of biochemical-based digital computations”, *Computers in Biology and Medicine* , 135, 104630
- Boulougouris, G.C. (2012) “On the Estimation of the Free Energy, From a Single Equilibrium Statistical Ensemble, via Particle Reinsertion” *J. Phys. Chem. B*, 116 , 997