

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

Χ.Ε. ΛΕΚΚΑ

Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών

Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Ιωάννινα, Νοέμβριος 2020

Βιογραφικό Σημείωμα

Χριστίνα Ε. Λέκκα

Νοέμβριος 2020

Σπουδές

1. Πτυχίο Φυσικής (1996), Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.
2. Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης στη Φυσική (Ιούνιος 1999) με Διπλωματική Εργασία στην *Επιστήμη των Υλικών* με θέμα: "Μελέτη των ταλαντωτικών και των δομικών ιδιοτήτων των χαμηλών δεικτών των επιφανειών του κράματος Cu_3Au με ή χωρίς προσροφημένα άτομα Cu ή Au με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής", Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.
3. Διδακτορική διατριβή στη Φυσική (Νοέμβριος 2001) με θέμα: "Ιδιότητες διατεταγμένων επιφανειών κραμάτων τύπου A_3B (Cu_3Au , Ni_3Al): Μελέτη με προσομοιώσεις σε H/Y ", Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.

Επαγγελματικές θέσεις

- 1/1/2002 – 31/12/2002: Μεταδιδακτορικός Ερευνητής (post-doctor) στο Center for Computational Materials Science, Naval Research Laboratory, Washington D.C., USA σε κοινό ερευνητικό πρόγραμμα με το School of Computational Sciences, George Mason University, Fairfax VA, USA. Ερευνητικό αντικείμενο « First principles and tight binding electronic structure studies».
- 1/1/2003 – 30/8/2005: Διδάσκουσα στο Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, με σύμβαση εργασίας ιδιωτικού δικαίου ορισμένου χρόνου (σύμφωνα με τις διατάξεις του Π.Δ. 407/80).
- 31/8/2005 – 6/9/2009: Λέκτορας στο Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων
- 7/9/2009 – 7/7/2015: Επίκουρη Καθηγήτρια στο Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων (μετονομασία του Τμήματος έγινε κατά τη διάρκεια της θητείας)
- 8/7/2015 – σήμερα: Αναπληρώτρια Καθηγήτρια στο Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων
- 1/5/2017 - 30/6/2017: Επισκέπτης Καθηγήτρια στο Τμήμα Φυσικής του Πανεπιστημίου της Βιέννης, Αυστρία (Μάιος-Ιούνιος 2017): Διδασκαλία του μεταπτυχιακού μαθήματος "Computational Science of Nanoscaled Crystalline, Amorphous and Hybride Materials" (θεωρία και εργαστήριο με τα λογισμικά VASP (DFT) και LAMMPS (MD))

Διδακτική εμπειρία

1. Διδασκαλία των ακόλουθων μαθημάτων στο Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών/Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Πανεπιστημίου Ιωαννίνων (2003-σήμερα). Συγγραφή διαφανειών και ανάρτησή τους στο διαδίκτυο (<http://users.uoi.gr/chlekka>)
 - 1.1. Φυσική ΙΙ (2^ο εξάμηνο, υποχρεωτικό μάθημα, αυτοδύναμη διδασκαλία από 1/1/2003)
 - 1.2. Ατομική και ηλεκτρονιακή δομή των στερεών – Φυσική Στερεάς Κατάστασης (5^ο εξάμηνο, υποχρεωτικό μάθημα, αυτοδύναμη διδασκαλία από 31/8/2005)
 - 1.3. Εφαρμογές πληροφορικής (6^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, αυτοδύναμη διδασκαλία από 1/1/2006)
 - 1.4. Υπολογιστικές μέθοδοι στην επιστήμη των υλικών (7^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, αυτοδύναμη διδασκαλία από 1/10/2008)
 - 1.5. Τεχνικές Προσομοίωσης και Σχεδιασμού Υλικών σε Η/Υ. (8^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, συνδιδασκαλία, ενός εξαμήνου 1/1/2003, με το κ. Παπαγεωργίου)
 - 1.6. Εισαγωγή σε προχωρημένες μέθοδοι υπολογισμοί στην επιστήμη των υλικών (9^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, αυτοδύναμη διδασκαλία από 1/10/2003)
2. Μεταπτυχιακό πρόγραμμα σπουδών «Προηγμένα Υλικά» συν-διδασκαλία των μαθημάτων:
 - 2.1. Ατομική και ηλεκτρονιακή δομή των προηγμένων υλικών
 - 2.2. Προχωρημένες Υπολογιστικές Τεχνικές Επιστήμης Υλικών
3. Διατμηματικό Μεταπτυχιακό πρόγραμμα σπουδών «Χημεία και Τεχνολογία Υλικών», συν-διδασκαλία του μαθήματος «Δομή των Υλικών-Φυσική και Χημεία Στερεάς κατάστασης»

Συγγραφή διδακτικών σημειώσεων

- 1.1. Εισαγωγή σε προχωρημένες μέθοδοι υπολογισμοί στην επιστήμη των υλικών (9^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, Αριθμός κεφαλαίων 6 και σελίδων 85)
- 1.2. Υπολογιστικές μέθοδοι στην επιστήμη των υλικών (7^ο εξάμηνο, επιλεγόμενο μάθημα, Αριθμός κεφαλαίων 7 και σελίδων 77), Συν συγγραφέας Γ.Α. Ευαγγελάκης

Επίβλεψη διδακτορικών διπλωματικών εργασιών

1. Μ. Γιαλαμπούκη, «Υβρίδια οργανικών και ανόργανων νανο-υλικών με προκαθορισμένες ιδιότητες», (1-12-2010 – Υποστήριξη 28-1-2014)
2. Γ. Μπόκας, «Νέα νανοδομημένα σύνθετα υλικά από πρώτες αρχές και ημι-εμπειρικούς υπολογισμούς», (25.01.2011 – Υποστήριξη Μαρτίος 2014)
3. J.J. Gutierrez Moreno, “Σχεδιασμός εύκαμπτων κραμάτων τιτανίου από πρώτες αρχές και υπολογιστικές προσομοιώσεις”, (10.03.2011 - 11 -2014)
4. C. Cutrano, ‘ Computational design of functional Fe- and Cu- based coatings for environmentally sustainable applications’, (Oct 2015 – 11.05.2020)
5. Y. Fortouna, " Antibacteria coatings of metallic surfaces: From ab-initio to large scale simulations", (5.2020 - έως σήμερα)

Μέλος της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής του κ. Α. Κουτσοκέρα, Ιούλιος 2010

Μέλος της επταμελούς εξεταστικής επιτροπής των κ. Δ. Κηλύμη (2010), του κ. Γ. Τζιάτζος (Δεκέμβρης 2010), Χ. Ζούμπου (Ιανουάριος 2012), του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Παν/νιο Ιωαννίνων και της κ. Ε. Καλεσάκη, Τμήμα Φυσικής, Αριστοτέλειο Παν/μιο Θεσσαλονίκης (Φεβρουάριος 2012)

Επίβλεψη μεταπτυχιακών διπλωματικών εργασιών

1. Μ. Γιαλαμπούκη, «Δομικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες προσροφημένου Ti_N ($N=1, 2, 3, 7, 13$) σε νανοσωλήνες άνθρακα και γραφένιο με υπολογισμούς πρώτων αρχών» Οκτ. 2010
2. Α. Μπαλέρμπα, «Μελέτη των δομικών ιδιοτήτων και τη διάχυσης νιφάδων γραφενίου σε επιφάνειες Cu με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής» Υπό εξέλιξη
3. Μ. Μπούρη, « Εναπόθεση L-glutamin στην επιφάνεια Cu(111) με υπολογισμούς πρώτων αρχών», Ιαν. 2015
4. Μ. Ζέγκος «Εναπόθεση H_2O στην επιφάνεια Cu(111) με υπολογισμούς πρώτων αρχών », Φεβρ. 2016

Μέλος της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής των κ. Γ. Αλμύρας, 2009 κ. Α. Λαγογιάννη, 2009 και κ. Γ. Μπόκα, Νοέμβριος 2010 του Τμήματος Φυσικής, Παν/μιο Ιωαννίνων

Επίβλεψη προπτυχιακών διπλωματικών εργασιών

- 1.1. Μελέτη των Δομικών και Ηλεκτρονικών Ιδιοτήτων των Σιδηροδεσμευτικών Φλαβονοειδών (luteolin, 7,8 dihydroxyflavon, fisetin, quercetin) με υπολογισμούς DFTB, Βασιλείου Ηρώ (AM 4) Απρίλιος 2005
- 1.2. Μελέτη των Δομικών και Ηλεκτρονικών Ιδιοτήτων μη- Σιδηροδεσμευτικών Φλαβονοειδών (Chrysin, 7-Hydroxyflavon, Flavon, 5-Hydroxyflavon) με υπολογισμούς DFTB, Κιτσάκη Αναστασια (AM 33), Απρίλιος 2005
- 1.3. Δομικές, ηλεκτρονικές και ταλαντωτικές ιδιότητες νανοσυρμάτων Cu με υπολογισμούς TB και προσομοιώσεις ΜΔ, Σάλτα Ζωή (AM 76), Ιούνιος 2006
- 1.4. Μελέτη δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων εναποθετημένου Ti και TiO_x σε νανοσωλήνες άνθρακα και γραφίνη με υπολογισμούς DFT, Γιαλαμπούκη Μάρθα (AM 436), Οκτώβρης 2008
- 1.5. Μελέτη δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων νανοσυρμάτων Nb με υπολογισμούς TBMD, Γεωργιάδης Μάριος (AM 353) Ημ/νια υποστήριξης Απρίλης 2009
- 1.6. Μελέτη των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων οξειδίου του σιδήρου σε νανοσωλήνες άνθρακα με υπολογισμούς πρώτων αρχών, Γιώργη Σοφία (AM. 637), Ημ/νια υποστήριξης Νοέμβριος 2010
- 1.7. Μελέτη των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων νιτριδίων μετάλλων μετάβασης με υπολογισμούς πρώτων αρχών, Γκουτζιώτης Θανάσης (AM 443), Ημ/νια υποστήριξης Απρίλης 2011

- 1.8. Μελέτη των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων νανοσυρμάτων Ti σε νανοσωλήνες άνθρακα με υπολογισμούς πρώτων αρχών, Αθανασίας Μπαλέρμπα (ΑΜ. 678), Ημ/νια υποστήριξης Οκτώβριος 2011
- 1.9. Μελέτη των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων νανοσυρμάτων Cu σε νανοσωλήνες άνθρακα με υπολογισμούς πρώτων αρχών, Γκούμα Όλγας (ΑΜ. 640), Ημ/νια υποστήριξης Μάιος 2012
- 1.10. Μελέτη των δομικών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων συμπλόκων Φλαβονοειδών με Ψευδάργυρο II με υπολογισμούς πρώτων αρχών, Κωτσιόπουλος Αθανάσιος (ΑΜ. 374), Ημ/νια υποστήριξης Νοέμβριος 2012
- 1.11. Εναπόθεση νιφάδων γραφενίου στην επιφάνεια Cu (001) με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, Κοτανίδης Αλέξιος (ΑΜ. 951) Νοέμβριος 2013
- 1.12. Δομικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες κρυστάλλων τιτανίου με υπολογισμούς πρώτων αρχών. Αλέξανδρος Παπαντωνίου (ΑΜ. 687) Ιούλιος 2014
- 1.13. Εναπόθεση νιφάδων γραφενίου στην επιφάνεια Cu (111) με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, Paraskeuas Aggelos (ΑΜ. 688) Νοεμ 2019
- 1.14. Βιοσυμβατά κράματα Τιτανίου για ορθοπεδικές εφαρμογές με υπολογισμούς πρώτων αρχών., Α. Δήμου (ΑΜ. 1219) Σεπτ. 2019
- 1.15. Υβρίδια Κουρκουμίνης με Fe-O νανοσυσσωματώματα με υπολογισμούς πρώτων αρχών., Ε. Κίτσου (ΑΜ 1933) Νοεμ. 2019

Μέλος της τριμελούς επιτροπής αρκετών προπτυχιακών διπλωματικών εργασιών, υπό την επίβλεψη των συναδέλφων .Δ. Παπαγεωργίου, Ε. Λιδωρίκη και Π. Πατσαλά.

Επιτροπές Τμήματος

- 1.1. Οικονομικών (Πρόεδρος, 2009 – έως σήμερα)
- 1.2. Παραλαβής (2007-2009, Πρόεδρος 2009 -2011)
- 1.3. Τομέων (μέλος)
- 1.4. Κατατακτῆριων εξετάσεων (μέλος)

Ερευνητικά ενδιαφέροντα

- Μελέτη υλικών και συστημάτων στερεάς κατάστασης με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (MD) κάνοντας χρήση ημι-εμπειρικών δυναμικών με έμφαση σε επιφάνειες και σε νανο-διάστατα συστήματα.
- Υπολογισμοί ηλεκτρονικής δομής και ολικής ενέργειας μετάλλων με ατέλειες και νανο-συσσωματωμάτων με υπολογισμούς πρώτων αρχών βασισμένες στην προσέγγιση επαυξημένου επίπεδου κύματος (Augmented Plane Wave (APW)) και στη θεωρία Ισχυρού Δεσμού (Tight Binding TB) – Προσομοιώσεις βασισμένες στη θεωρία Ισχυρού Δεσμού (TBMD).
- Υπολογισμοί ολικής ενέργειας, ηλεκτρονικής δομής και οπτικής απορρόφησης ημι-αγωγών και νιτριδίων μετάλλων από πρώτες αρχές βασισμένοι στην μέθοδο συναρτησιακού πυκνότητας φορτίου (Density Functional theory (DFT)) και στην προσέγγιση επαυξημένου επίπεδου κύματος (Augmented Plane Wave (APW)).
- Μελέτη βιολογικών μορίων και αλληλεπίδρασης τους με μεταλλικά ιόντα με υπολογισμούς πρώτων αρχών (DFT) και προσομοιώσεις βασισμένες στην μέθοδο συναρτησιακού πυκνότητας φορτίου στη προσέγγιση ισχυρής δέσμευσης (DFTB).

Τιμητικές διακρίσεις :

1. Βραβείο καλύτερης αναρτημένης ανακοίνωσης στο XIX Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών στη Θεσσαλονίκη (21-24)-9-2003 στην εργασία: «Ηλεκτρονικές και οπτικές ιδιότητες βιολογικών μορίων (αδενίνης) επάνω σε γραφίτη», Χρ.Ε.Λέκκα, Γ.Ζώνιος, Ε.Καζίρας.
2. Βραβείο καλύτερης προφορικής παρουσίασης στο 14^ο Παγκόσμιο Συμπόσιο ISMANAM2007 στη Κέρκυρα (26-30)-8-2007 στην εργασία: «Microscopic aspects of the deformation accommodation in the Cu₄₆Zr₅₄ Metallic Glass» από τους Ch.E. Lekka, L. Tayebi, A.R. Yavari, G.A.Evangelakis
3. Βραβείο καλύτερης προφορικής παρουσίασης στο 6ο Πανελλήνιο Συνέδριο ελευθέρων ριζών και οξειδωτικού στρες στα Πράμαντα (18-21)-9-2008 στην εργασία: «Complexation of flavonoids with Fe and Cu: Structure and Optical Signatures από τους Ch.E. Lekka, Jun Ren, Sheng Meng, Efthimios Kaxiras.
4. Βραβείο καλύτερης αναρτημένης ανακοίνωσης στο 27^ο Panhellenic conference on solid state physics and materials science, Limassol, Cyprus, September 2011 στην εργασία «Structural and electronic properties of Ti-Nanowires/C-single wall nanotubes composites by Density functional theory calculations», M. Gialambouki, A. Balerba, Ch.E. Lekka
5. ISMANAM Best poster award, 19th International symposium on metastable, amorphous and nanostructured materials, 18-22 June 2012, Moscow, Russia, entitle «Structural, electronic and mechanical properties of Ti-Nbx (x<50) alloys», J.J. Gutiérrez Moreno, N. Panagiotopoulos, D.G. Papageorgiou, G.A.Evangelakis, Ch.E. Lekka, UoI and M. Bönisch, A. Helth, M. Calin, A. Gebert, M. Stoica, J. Eckert, IFW
6. Βραβείο καλύτερης αναρτημένης ανακοίνωσης στο 28ο Panhellenic conference on solid

state physics and materials science, Patra, September 2012 στην εργασία «Al/Nb Microalloying effect and bonding particularities in the microstructure of Cu-Zr Metallic Glasses by ab-initio calculations», G. Bokas, G.A.Evangelakis, Ch.E. Lekka

Πατέντα

A.T. Murdock, A.A. Koos, N. Grobert, C.E. Lekka, Process: Structural control of 2D nanomaterials produced by CVD on dedicated substrates, UK and US patent application filed March 2013, see Graphene Manufacture Technique: Isis Project No 8727 for further information.

Προσκεκλημένες ομιλίες

1. Συνέδρια:

- 1.1.** Conference on Applied Surface Modeling: Experiment, Theory and Simulations, (21-23 August 2002), NASA, Cleveland, Ohio, USA: «Structural and electronic properties of the $\text{Cu}_3\text{Au}(111)$ surface», Ch.E. Lekka, N. Bernstein, M.J. Mehl and D.A. Papaconstantopoulos
- 1.2.** NanoteC07, International Conference on carbon nanoscience and nanotechnology, 29th August - 1st September 2007, University of Sussex, Brighton, UK : «Metal (Nb, Cu) on C-nanotube by ab-initio calculations», Ch.E. Lekka
- 1.3.** Euronano BMG-Europe conference, Paris, 2-4 Dec, 2007 «Tensile deformation accommodation in microscopic metallic glasses via subnanocluster reconstructions», Ch.E. Lekka, A. Ibenskas, L. Tayebi, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis
- 1.4.** 16th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2009) Beijing, China, July 5 - 9, 2009, «On the origin of the short range order of the $\text{Cu}_{35}\text{Zr}_{65}$ and $\text{Cu}_{65}\text{Zr}_{35}$ metallic glass, Ch.E. Lekka, G. Almyras, N. Mattern, G.A. Evangelakis
- 1.5.** WPI-Europe Workshop on Metallic Glasses and Related Materials, 25-28 August 2009, Grenoble, France, «Bonding characteristics and strengthening of CuZr fundamental clusters upon small Al additions», Ch. E. Lekka, G. A. Evangelakis
- 1.6.** ISMANAM 2011, 26June-1July, Gijon, Spain, «Clustering and mechanical properties in Cu/Zr-based glassy models by Molecular Dynamics and ab-initio computations», Ch.E. Lekka, G.B. Bokas, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis
- 1.7.** ISMANAM 2013, 1-5 July, Torino, Italy, «Ti-Nb phase transitions from electronic structure calculations» Ch.E. Lekka , J.J. Gutierrez-Moreno , G.A.Evangelakis , M. Boenisch , M. Calin , J. Eckert
- 1.8.** Euromat 2013, 8-13 September, Sevilla, Spain, “Al/Nb Microalloying effect and bonding particularities in the microstructure of Cu-Zr Metallic Glasses by ab-initio calculations”, G. B. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka

- 1.9.** 2018 Materials Research Society MRS Spring Meeting & Exhibit , Phoenix, Arizona, 2-6 April 2018, “On the Design of Fe-X (X=Cu, Co, Mn) Nanoclusters and Coatings with Improve Magnetic Moment by Density Functional Theory Calculations”, C. Cutrano and Ch. E. Lekka
- 1.10.** 9th International Conference on Materials Scie & Cond Matter Physics (MSCMP2018), Chsinau, Moldavia, 25-28 September 2018, “Density functional theory on nanostructures with potential catalytic applications”, Ch. E. Lekka (Plenary speaker)
- 1.11.** 2018 Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition (SIPS2018), Rio de Janeiro, Brazil, 4-7 November 2018, “On The Computational Design Of Ti- and Fe-Based Advanced Materials For Biomedical Applications”, Ch. E. Lekka
- 1.12.** ISFOE19, 12th International Symposium on Flexible Organic Electronics, 1-4 July 2019, Thessaloniki, Greece, "Density functional theory on Nanostructures with potential catalytic applications" and "Women in Nano", Martha Gialampouki, Ch.E. Lekka

2. Πανεπιστήμιο ή Ερευνητικό Ινστιτούτο:

- 2.1.** Harvard University, Boston 25 August 2002, USA: «Structural, vibrational and electronic properties of Cu₃Au surfaces by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations», Ch.E. Lekka
- 2.2.** IFW Dresden, Germany 6 Nov. 2007, «Atomistic mechanisms of the deformation accommodation in microscopic CuZr Metallic Glasses», Ch.E. Lekka
- 2.3.** Naval Research Laboratory, Washington DC, Feb 22, 2008, USA: «Atomistic Mechanisms Of The Deformation Accommodation In Microscopic CuZr Metallic Glass», Ch.E. Lekka
- 2.4.** Εθνικό Ίδρυμα ερευνών, 10 June 2010, Αθήνα, «Short-Range order, bonding characteristics and mechanical properties of Cu-Zr Metallic Glass Models; effects of Al or Nb minor substitutions», Ch.E. Lekka
- 2.5.** Department of Materials, University of Oxford, Begbroke Science Forum, November 2011, «Ti_N decoration of Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene by Density Functional Theory Computations», M. A. Gialampouki and Ch.E. Lekka
- 2.6.** IFW Dresden, Germany 3 March 2014, “Metallic glasses and alloys from electronic structure calculations” Ch. E. Lekka
- 2.7.** Chemisch, Physikalische, Gesellschaft, Lise-Meitner-Hörsaal, Fakultät für Physik, Universität Wien, 13 June 2017, Metal - graphene / carbon nanotube hybrids by density functional theory, Ch.E. Lekka
- 2.8.** Materials Physics, University of Leoben, Austria 16 June 2017, Clustering and mechanical properties in Cu/Zr-based glassy models by Molecular Dynamics and ab-initio computations,

2.9. Guest Professor in the Physics Dept., University of Vienna, Austria (May-June 2017): Teaching the course of "Computational Science of Nanoscaled Crystalline, Amorphous and Hybrid Materials" to undergraduate, MSc and Phd students also performing practical sessions in the Computer laboratory using the VASP (DFT) and the LAMMPS (MD) codes

Ερευνητικά προγράμματα

1. H2020-MSCA-ITN-2019, project No 861046, 2020 - 2023, BIOfilm-REsistant Materials for hard tissue Implant Applications (BIOREMIA)
2. H2020-MSCA-ITN-2014, project No 642642, 2015-2018, Smart ELECTrodeposited Alloys for environmentally sustainable applications: from advanced protective coatings to micro/nano-robotic platforms (SELECTA)
3. Πρόγραμμα e-COST, European Cooperation in the field of Scientific and Technical Research (044/13) TARGET Network 1301 (2013-2015): Next generation of Young Scientist: towards a contemporary spirit of R&I (Sci-Generation) Μέλος της Management committee
4. Ερευνητικό πρόγραμμα Ευρωπαϊκής Ένωσης FP7-PEOPLE-2010-ITN, (No 264635), 2011-2014, Academic-Industrial Initial Training Network on Innovative Biocompatible Titanium-based Structures for Orthopaedics (BioTiNet) (Υπεύθυνη τοπικής ομάδας, προϋπολογισμός 217787.50 ευρώ)
5. Ευρωπαϊκό πρόγραμμα Ευρωπαϊκής Ένωσης FP7-SiS-2008-1 (No 230253), 2009-2011, Science in Society, Improving the gender diversity management in materials research institutions (Diversity), (Υπεύθυνη τοπικής ομάδας, προϋπολογισμός 8300 ευρώ)
6. Ερευνητικό πρόγραμμα της Επιτροπής Ερευνών Παν/μίου Ιωαννίνων, 2007-2009 (No. 80018) «Nanowires and nanoclusters of catalytic metallic oxides from oxygen plasma: From ab-initio calculations to experimental synthesis», (Υπεύθυνη, προϋπολογισμός 6000 ευρώ)
7. Συμμετοχή σε Ευρωπαϊκά προγράμματα (RNT Marie Curie 2001, RNT Marie Curie 2003, European Space Agency 2007) και Ελληνικά προγράμματα (ΠΕΝΕΔ96, Πυθαγόρας 2003)

Διοργάνωση συνεδρίων

1. Gateway to Academics: Materials modelling for target applications, SELECTA workshop, 3-7 September 2017, Ioannina
2. XXXII Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, 18-21 September 2016, Ioannina
3. Workshop 'Science Communication & Presentation' 17-18 /9/ 2012 και BioTiNet MidTerm meeting, 19-21 /9/2012, (Διοργανώτρια) Chandris Dasia Hotel, Corfu, Greece

4. European Workshop: “Women in European Materials Science Research Institutions” (Διοργανώτρια), DIVANI, Corfu 19-20 May 2011
5. 28o Panhellenic conference on solid state physics and materials science, 26-29 September 2010, Ioannina (Financial Secretary)
6. 14th ISMANAM2007, International Symposium on Metastable and Nano Materials, 26-30 August 2007, Chandris Hotel, Corfu, Chandris, Greece (Μέλος της τοπικής επιτροπής) and Satellite meeting of WomenInNano (Διοργανώτρια), 28 August 2007– Corfu , Chandris, Greece
7. Workshop on “Recent developments on Bulk Metallic Glasses”, 25 June 2004 – Corfu, Hotel Corfu Palace, Greece (Μέλος της τοπικής επιτροπής)

Κύριες Ερευνητικές συνεργασίες

1. M. Calin, A. Gebert, J. Eckert, IFW, Dresden, Germany
2. Δ.Α. Παπακωνσταντόπουλος, George Mason University, Virginia, USA (Naval Research Laboratory, Washington D.C)
3. E. Καξίρας, Harvard University, Boston, USA
4. Γ.Α. Ευαγγελάκης, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
5. N. Grobert, Oxford, UK

Επισκέψεις σε Εργαστήρια του Εξωτερικού

1. Center for Computational Materials Science, Naval Research Laboratory, Washington D.C., Μάιος 2000. Σκοπός της επίσκεψης: Ερευνητική συνεργασία με το καθ. Δ.Α. Παπακωνσταντόπουλο και τον Δρ. M. Mehl με στόχο την εφαρμογή της NRL-tight-binding molecular dynamics σε bcc μέταλλα και κράματα Cu-Au.

2. CINECA High performance Systems Division, Casalecchio di Reno, Bologna, Italy. Ημ/νίες: 25 Σεπτεμβρίου - 20 Οκτωβρίου 2000 και 30 Απριλίου - 12 Μαΐου 2001 Στα πλαίσια του προγράμματος MINOS : Multidisciplinary Intensive Computing for Research Activities of European Scientists. Σκοπός της επίσκεψης: Εφαρμογή της μεθόδου NRL-tight-binding molecular dynamics simulations στο Nb bcc. Επιδόσεις του κώδικα TBMD στον Cray T3E και επαλήθευση της μεθόδου με υπολογισμό ιδιοτήτων όγκου και επιφάνειας για τη περίπτωση του Nb.

Τα αποτελέσματα των εργασιών δημοσιεύθηκαν στο CINECA's Icarus magazine "Daedalus":

1. "Vibrational properties of the Nb bcc metal by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations", Ch.E. Lekka, Daedalus (2001) 1.
2. "Vibrational and structural properties of the Nb (001) surface by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations", Ch.E. Lekka, Daedalus 5 (2002) 5.
3. School of Computational Sciences at George Mason University, Fairfax, Virginia, Ερευνητική συνεργασία με το καθ. Δ.Α. Παπακωνσταντόπουλο και τον Δρ. Mike Mehl:
 1. 26 Δεκεμβρίου – 9 Φεβρουαρίου 2004. Σκοπός επίσκεψης: Μελέτη της μεταφερσιμότητας των NRL-tight-binding σε bcc μέταλλα και στα κράματά τους.
 2. 24 Ιουλίου - 31 Αυγούστου 2005, Σκοπός της επίσκεψης: Εφαρμογή της NRL-tight-binding molecular dynamics σε bcc μέταλλα με ατέλειες και σε νανο-συσσωματώματα με εφαρμογές στη νανοτεχνολογία.
4. Harvard University, Boston, USA, 31 Ιαν – 13 Φεβρ 2006, Ερευνητική συνεργασία με το καθ. E.Καξίρα για την μελέτη της αλληλεπίδρασης βιολογικών μορίων με μεταλλικά ιόντα με υπολογισμούς πρώτων αρχών βασιζόμενες στη θεωρία συναρτησιωδούς πυκνότητας φορτίου (DFT).
5. IFW Dresden, Germany 4-8 Nov. 2007. Ερευνητική συνεργασία με τον καθ. J.Eckert και τον N.Mattern με σκοπό το συνδιασμό των θεωρητικών με τα πειραματικά τους αποτελέσματα της γωνιακής πυκνότητας κατανομής της μεταλλικής ύαλου CuZr.

6. 10-23 Feb. 2007, USA, George Mason University, Fairfax,VA και Harvard Univ. Boston. Σε συνέχεια των προηγούμενων επισκέψεων, συνεργασία με τους Δ.Α. Παπακωνταντόπουλος και Ε.Καζίρα.
7. November 2011 και Ιούνιος 2012, Department of Materials, Oxford University, Ερευνητική συνεργασία με τη Καθ. N. Grobert
8. IFW Dresden, Germany Ιούλιος 2012 και Μάρτιος 2014. Ερευνητική συνεργασία με τον καθ. J.Eckert και την καθ. M. Calin των θεωρητικών αποτελεσμάτων στα κράματα Ti με τα πειραματικά τους αποτελέσματα στα πλαίσια του ερευνητικού προγράμματος BioTiNet.

Δημοσιεύσεις σε διεθνή έγκριτα περιοδικά

1. Self-diffusion processes of Cu adatom on Cu(110) surface by Molecular Dynamics Simulations, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, G.D. Kallinteris, Ch.E. Lekka, N.I. Papanicolaou, Vacuum, **50**, 165 (1998) – (Impact factor (IF=0.909)), (Αναφορές =13)
2. Diffusion processes of Au and Cu adatoms on the Cu₃Au(001) surface, Ch. Lekka, G.A. Evangelakis, Surf. Sci. **473** (2001) 39. (IF=1.78), (Αναφορές =8)
3. Transferability of Slater-Koster parameters, Ch.E. Lekka, N.I. Papanicolaou, G.A. Evangelakis, D.A. Papaconstantopoulos, J. Phys. and Chem. Solids. **62** (2001) 753. (IF=1.41), (Αναφορές =1)
4. Molecular dynamics study of the ordered Cu₃Au. I Vibrational and structural properties of the low-indexed Cu₃Au surfaces by Molecular Dynamics Simulations, Ch.E.Lekka, N.I. Papanicolaou, G.A.Evangelakis, Surf. Sci. **479** (2001) 287. (IF=1.78), (Αναφορές =18)
5. Molecular dynamics study of the ordered Cu₃Au. II Vibrational properties of the Cu and Au adatoms on the ordered low-index Cu₃Au surfaces by Molecular Dynamics Simulations, Ch.E.Lekka, N.I. Papanicolaou, G.A.Evangelakis, Surf. Sci. **488** (2001) 269. (IF=1.78), (Αναφορές =10)
6. Vacancy diffusion driven Cu₃Au and Ni₃Al (001) surface re-arrangement, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, Appl. Surf. Sci. **9509** (2002) 1. (IF=1.263), (Αναφορές =5)
7. Molecular Dynamics study of the transport and structural properties of the Cu₃Au(110) and Ni₃Al(110) surface, Ch.E.Lekka, D.G.Papageorgiou, G.A.Evangelakis Surf. Sci. **518** (2002) 111. (IF=1.78), (Αναφορές =8)
8. Molecular Dynamics study of Cu and Au 2D adlayers on the Cu₃Au(110) surface, D.G.Papageorgiou, Ch.E.Lekka, G.A.Evangelakis, Appl. Surf. Sci. **219** (2003) 64. (IF=1.263), (Αναφορές =3)
9. Transport processes and structural properties of the Cu₃Au and Ni₃Al(111) surface by Molecular Dynamics, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou and G.A. Evangelakis, Surf. Sci. 541 (2003) 182. (IF=1.78), (Αναφορές =6)
10. Electronic structure of the Cu₃Au(111) surface, Ch.E. Lekka, N. Bernstein, M.J. Mehl and D.A. Papaconstantopoulos, Appl. Surf. Sci. 219 (2003) 158. (IF=1.263), (Αναφορές =11)
11. Tight binding molecular dynamics simulations of Nb surfaces and surface defects, Ch.E. Lekka, M.J. Mehl, N. Bernstein, D.A. Papaconstantopoulos, Phys. Rev. B68 (2003) 35422. (IF=3.185),

(Αναφορές =18)

12. Electronic, Structural and Thermodynamic properties of icosahedral free and supported Al clusters on Al surfaces from Tight Binding and classical Molecular Dynamics simulations, P. Mitev, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis, Surf.Sci. 566-568 (2004) 937. (IF=1.78), (Αναφορές =8)
13. Mechanical properties of nano-grained Zr_2Ni systems by molecular dynamics simulations, G.A. Evangelakis, D.G.Papageorgiou, Ch.E.Lekka, I.E. Lagaris, J.Alloys and Comp. 434-435 (2007) 546. (IF=2.289), (Αναφορές =2)
14. Structural, Thermodynamic and Mechanical properties of Zr based binary nanowires ($ZrCu$ and Zr_2Ni) by Molecular Dynamics, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis, Physica B37 (2007) 189 (IF=0.796), (Αναφορές =4)
15. Structure and dynamics of the Ni_3Al low index surfaces with and without Ni/Al adatoms from Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, Materials Chemistry and Physics 103, 2-3 (2007) 500. (IF=1.136), (Αναφορές =)Structural and electronic properties of V, Nb and Ta nano-clusters by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, D.A. Papaconstantopoulos, Surf.Sci. **601** (2007) 3937 (IF=1.78), (Αναφορές =2)Oxidation of the Nb(110) surface by ab-initio calculations” by D.A.Kilimis and Ch.E.Lekka, Materials Science and Engineering B144 (2007) 27 (IF=1.33), (Αναφορές =5)
18. Tensile deformation accommodation in microscopic metallic glasses via subnanocluster reconstructions, Ch.E. Lekka, A. Ibenskas, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis, Appl.Phys.Lett. 91 (2007) 214103 (IF=4.127), (Αναφορές =40)
19. Molecular Dynamic Simulations of $Zr_2Ni(100)$ surface in presence of Ni or Zr adatoms, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis, Surf. Sci 602, (2008) 590-596 (IF=1.78) (Αναφορές =1)
20. Complexation of Flavonoids with Iron, J.Ren, S. Meng, Ch.E. Lekka, E.Kaxiras, J. Phys. Chem. B, 112 (6), 1845 -1850, 2008 (IF=4.033), (Αναφορές =22)
21. Structural and vibrational properties of deposited Cu or Zr surface adlayers on $Cu_{46}Zr_{54}$ bulk metallic glass, D.G. Papageorgiou, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis, Rev.Adv.Mater.Sci.18(2008) 98 (IF=1.12), (Αναφορές =2)
22. Conducting transition metal nitride thin films with tailored cell sizes: the case of $\delta-Ti_xTa_{1-x}N$, L.E. Koutsokeras, G. Abadias, Ch.E. Lekka, G.M. Matenoglou, D.F. Anagnostopoulos, G.A. Evangelakis and P. Patsalas APL **93** (2008) 011904 (IF=4.127), (Αναφορές =20)
23. Poisson ratio under compressive and tensile strain; effect on the mechanical response of the $Cu_{46}Zr_{54}$ metallic glass, L. Tayebi Ch. E. Lekka and G. A. Evangelakis, Physica Status Solidi (A) Applications and Materials, 205 (2008) 2603 (IF = 1.214), (Αναφορές =1)
24. L.Tayebi, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis,Journal of alloys and compounds, 483 (2009) 570–572 (IF=2.289), (Αναφορές =3)
25. Structural characteristics of Cu_xZr_{1-x} metallic glasses by Molecular Dynamics Simulations, A.E. Lagogianni, G. Almyras, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, and G.A. Evangelakis, Journal of Alloys and Compounds 483 (2009) 658–661 (IF=2.289), (Αναφορές =15)

26. Static and Dynamic Tight-Binding Simulations of the Binary NbMo and CuZr alloys, Ch. E. Lekka, D. A. Papaconstantopoulos, M.J. Mehl, Daniel Finkenstadt, G. Evangelakis, *Journal of Alloys and Compounds* 483 (2009) 627–631 (IF=2.289), (Αναφορές =1)
27. Optical properties, structural parameters, and bonding of highly textured rocksalt tantalum nitride films, G. M. Matenoglou L. E. Koutsokeras, Ch. E. Lekka, G. Abadias, S. Camelio, G. A. Evangelakis, C. Kosmidis,³ and P. Patsalas, *JAP* 104 (2008) 124907 (IF=2.168), (Αναφορές =5)
28. Deformation induced directional amorphization in Zr₂Ni systems: a remedy for the mechanical failure of nano-crystalline alloys Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis *J. Nanosci. Nanotechnol.* 9 (2009) 1-7 (IF=1.987), (Αναφορές =-)
29. Structural, electronic and optical properties of representative Cu-flavonoid complexes, Ch. E. Lekka, Jun Ren, Sheng Meng, Efthimios Kaxiras, *J. Phys. Chem. B* 2009, 113, 6478–6483 (IF=4.033), (Αναφορές =7)
30. Properties of BCC Metals by Tight Binding Total Energy Simulations, Ch. E. Lekka, N. Bernstein, D. A. Papaconstantopoulos, M. J. Mehl, *Materials Science and Engineering B* 163 (2009) 8–16 (IF=1.33) , (Αναφορές =1)
31. Structure and electronic properties of conducting, ternary Ti_xTa_{1-x}N films, G.M. Matenoglou, Ch.E. Lekka, L.E. Koutsokeras, G. Karras, C. Kosmidis, G.A. Evangelakis and P. Patsalas, *Journal of applied physics* 105, 2009, 103714 - 103718 (IF=2.168), (Αναφορές =7)
32. Structure, stability and bonding of ternary transition metal nitrides, G. M. Matenoglou; Loukas E Koutsokeras, Ch. E. Lekka, G. Abadias, C. Kosmidis, G. A Evangelakis, P.A. Patsalas, *Surface Coating and Technology* 204 (2009) 911-914 (IF = 1.867), (Αναφορές =9)
33. Metal-containing Diamond Like Carbon (DLC:Ag) and AlN (AlN:Ag) metallo-dielectric Nanocomposites, G M Matenoglou, H Zoubos, A Lotsari, Ch E Lekka, Ph Komninou, G P Dimitrakopoulos, C Kosmidis, G A Evangelakis, P.A. Patsalas, *Thin Solid Films* 518 (2009) 1508 - 1511 (IF = 1.936), (Αναφορές =3)
34. Bonding characteristics and strengthening of CuZr fundamental clusters upon small Al additions from density functional theory calculations, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis, *Scripta Materialia* 61 (2009) 974–977 (IF = 2.699), (Αναφορές =5)
35. On the microstructure of the Cu₆₅Zr₃₅ and Cu₃₅Zr₆₅ metallic glasses, G.A. Almyras, Ch.E. Lekka, N. Mattern and G.A. Evangelakis, *Scripta Materialia* 62 (2010) 33-36 (IF = 2.699), (Αναφορές =20)
36. Cu–Zr and Cu–Zr–Al clusters: Bonding characteristics and mechanical properties, Ch.E. Lekka, *Journal of Alloys and Compounds* 504S (2010) S190–S193 (IF = 2.289), (Αναφορές =4)
37. Electronic and crystal structure and bonding in Ti-based ternary solid solution nitrides and Ti–Cu–N nanocomposite films, P. Patsalas, G. Abadias, G.M. Matenoglou, L.E. Koutsokeras, Ch.E. Lekka, *Surface & Coatings Technology* 205 (2010) 1324–1330 (IF = 1.867), (Αναφορές =4)
38. Atomic cluster arrangements in Reverse Monte Carlo and Molecular Dynamics structural models of binary CuZr Metallic Glasses, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka, N.

- Mattern, J. Eckert, G.A. Evangelakis, *Intermetallics* 19 (2011) 657-661 (IF = 1.649), (Αναφορές =5)
39. Electronic properties and bonding characteristics of AlN:Ag thin film nanocomposites, Ch. E. Lekka, P. Patsalas, Ph. Komninou, and G. A. Evangelakis, *Journal of applied physics* 109 (2011) 054310-054316 (IF = 2.168), (Αναφορές =1)
 40. Modifications of $Cu_xZr(12-x)Y$ Icosahedra upon ($0 < x < 12$, $Y = Be, Mg, Al, Si, P, Nb, Ag$) substitutions by density functional theory computations, G.B. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka, *Computational Materials Science* 50 (2011) 2658–2662 (IF = 1.574), (Αναφορές =1)
 41. Ti_N Decoration of Single-Wall Carbon Nanotubes and Graphene by Density Functional Theory Computations, M. A. Gialampouki and Ch. E. Lekka, *J. Phys. Chem. C* 115 (2011) 15172–15181 (IF = 4.805), (Αναφορές =2)
 42. Clustering, microalloying and mechanical properties in Cu/Zr-based glassy models by molecular dynamics simulations and ab-initio computations, Ch.E. Lekka, G.B. Bokas, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis, *Journal of Alloys and Compounds* 536 (2012) S65 – S 69 (IF = 2.289),
 43. Structural and electronic properties of Ti-nanowires/C-single wall nanotubes composites by density functional theory calculations, M.A. Gialampouki, A.V. Balerba, Ch.E. Lekka, *Materials Chemistry and Physics* 134 (2012) 214– 218 (IF = 2.234)
 44. Controlling the Orientation, Edge Geometry, and Thickness of Chemical Vapor Deposition Graphene, Adrian T. Murdock, Antal Koos, T. Ben Britton, Lothar Houben, Tim Batten, Tong Zhang, Angus J. Wilkinson, Rafal E. Dunin-Borkowski, Christina E. Lekka, and Nicole Grobert, *ACS Nano*, 2013, 7 (2), 1351–1359 (IF = 12.062)
 45. On the role of Icosahedral-like clusters in the solidification and the mechanical response of CuZr metallic glasses by Molecular Dynamics simulations and Density Functional Theory computations, G.B. Bokas, A.E. Lagogianni, G.A. Almyras, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis, *Intermetallics* 43 (2013) 138-141 (IF = 1.649)
 46. Controlled preparation of carbon nanotube–iron oxide nanoparticle hybrid materials by a modified wet impregnation method, Sheodoros Tsoufis, Alexios P. Douvalis, Christina E. Lekka, Pantelis N. Trikalitis, Thomas Bakas, Dimitrios Gournis, *J Nanopart Res* (2013) 15:1924
 47. Early Stages of Ti–O Cluster Growth on Carbon Nanotubes by ab-Initio Calculations, M. A. Gialampouki and C. E. Lekka, *Journal of Physical Chemistry A*, Vol.117, No.40, 10397-10406, 2013
 48. The role of Sn doping in the β -type Ti-25at%Nb alloys: experiment and ab initio calculations, J.J. Gutiérrez-Moreno, Y. Guo, K. Georgarakis, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka, *Journal of Alloys and Compounds*, JALCOM 615 (2014), S676-S679 (IF = 2.999)
 49. Elastic softening of β -type Ti-Nb alloys by indium (In) additions, Mariana Calina, Arne Helth, Julio J. Gutierrez Moreno, Matthias Bönisch, Varvara Brackmann, Lars Giebelera, Thomas Gemming, Christina E. Lekka, Annett Gebert, Reinhard Schnettler, Jürgen Eckert, *J. Mech Behav Biomedical Materials* 39 (2014) 162-174 (IF = 3.417)
 50. Understanding Zn(II) Chelation with Quercetin and Luteolin: a Combined NMR and Theoretical Study, A Primikyri, E Sicilia, Ch Lekka, A Tzakos, N Russo, I.P. Gerothanassis, J.

Phys. Chem. B119 (2015), 83-95 (IF=3.302)

51. Electronic origin and structural instabilities of Ti-based alloys suitable for orthopaedic implants, Ch.E. Lekka, J.J. Gutiérrez-Moreno, M. Calin, J. Phys. Chem. Solids 102 (2017) 49.
52. Ab-initio and experimental study of phase stability of Ti-Nb alloys, Gutiérrez Moreno, J.J., Bönisch, M., Panagiotopoulos, N.T., M. Calin, D.G. Papageorgiou, A. Gebert, J. Eckert, Evangelakis, G.A., Lekka, C.E., Journal of Alloys and Compounds, 2017, 696, pp. 481-489
53. Microalloying effects in ternary Cu-Zr-X (X = Be, Mg, Al, Si, P, Nb, Ag) icosahedral clusters and super-clusters from Density Functional Theory computations, Bokas, G.B., Lekka, C.E., Papageorgiou, D.G., Evangelakis, G.A., Polyhedron, 2017, 133, pp. 1-7
54. Structural, magnetic and electronic properties of Cu-Fe nanoclusters by density functional theory calculations, Cutrano, C.S., Lekka, C.E., Journal of Alloys and Compounds, 2017, 707, pp. 114-119
55. An ab initio study of the structural and mechanical properties of Ti-Nb alloys, J. J. Gutiérrez Moreno, D. G. Papageorgiou, G. A. Evangelakis, Ch. E. Lekka, J. Applied Phys. 124 (2018) 245102
56. Fe-Co magnetic nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka, Materials Science and Technology 34 (2018) 1575.
57. Conductive nitrides: Growth principles, optical and electronic properties, and their perspectives in photonics and plasmonics, Patsalas, P., Kalfagiannis, N., Kassavetis, S., G. Abadias, D.V. Bellas, Lekka, C., Lidorikis, E., Materials Science and Engineering R: Reports, 2018, 123, pp. 1-55
58. Electron beam induced rejuvenation in a metallic glass film during in-situ TEM tensile straining. C. Ebner, J. Rajagopalan, C. Lekka, C. Rentenberger, Acta Materialia 181 (2019) 148-159
59. Electronic origin of α to β phase transformation in Ti-Nb-based thin films upon Hf microalloying, Gutiérrez Moreno, J.J., Panagiotopoulos, N.T., Evangelakis, G.A., Lekka, C.E., Materials, 2020, 13(6), pp. 1-11, 1288
60. Graphene nano-flakes on Cu low-index surfaces by density functional theory and molecular dynamics simulations (Book Chapter) Balerba, A.K., Kotanidis, A., Paraskeuas, A., ...Evangelakis, G.A., Lekka, C.E., Frontiers of Nanoscience, 2020, 17, pp. 141-159

Δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές

1. Adatoms or Vacancies on the A_3B (001) surface, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, Atomistic Aspects of Epitaxial Growth, 51-61, Eds. M. Kortla, 2002 Kluwer Academic Publishers.
2. Vibrational and structural properties of the Nb(001) surface with or without a Nb adatom by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, N.I. Papanicolaou and D.A. Papaconstantopoulos, Atomistic Aspects of Epitaxial Growth, 43-49, Eds. M.Kortla, 2002 Kluwer Academic Publishers.

3. "Gender Diversity from the Slovak and Greek Perspective" D.Caganova, O.Moravcik, J.Stefankova, M.Cambal, M.Gialampouki, Ch.E.Lekka Proceedings of the 22nd EAEEIE Annual Conference EAEEIE2011, Maribor, Slovenia, June13-15, 2011, pages89-92

Ανακοινώσεις σε διεθνή συνέδρια

1. European research conference on: Total energy calculations to study the dynamics of surface processes, Corfu, Greece (25-27)-6-1997
2. European research conference on : Computational physics for nanotechnology, Il Ciocco, Tuscany , Italy (19-24)-9-1998 «Dynamical behavior and diffusion of the Cu(Au) adatoms on Cu₃Au by molecular dynamics simulations» Ch.E. Lekka, N.I. Papanicolaou, G.A. Evangelakis. (αφίσα)
3. International NATO School (ASI) of liquid crystal : Advances in the computer simulations of liquid crystals Erice ,Sicily (11-21)-6-1998 «Vibrational properties of the low index Cu₃Au surfaces with and without Cu(Au) adatoms by molecular dynamics» Ch.E. Lekka, N.I. Papanicolaou,G.A. Evangelakis (αφίσα)
4. European research conference on: Electronic structure of solids & surfaces, Lenggries, Germany (18-23) September 1999 «Rippling effect of the order low index Cu₃Au faces by Molecular Dynamics Simulations» Ch.E. Lekka, N.I. Papanicolaou, G.A. Evangelakis (αφίσα)
5. American Physical Society (APS) March 1999, Atlanta (USA) «On the transferability of the Slater Koster parameter» Ch. E. Lekka, G. A. Evangelakis, N.I Papanikolaou, D.A. Papaconstantopoulos (ομιλία)
6. European research conference on: Fundamental aspects of Surface Science, Epitaxial Growth and Nanostructures at Surfaces Castelvechio Pascoli, Tuscany , Italy (7-12)-10-2000 «Diffusion processes of Au and Cu adatoms on the Cu₃Au(001) surface», Ch. E. Lekka and G. A. Evangelakis(αφίσα)
7. Nato Advance Research Workshop on: "Atomistic Aspects of Epitaxial Growth", Corfu (25-30) June 2001 (αφίσα)
 - 7.1. Adatoms or vacancies on the A₃B (001) surface, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis
 - 7.2. Vibrational and structural properties of the Nb(001) surface with or without a Nb adatom by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, N.I. Papanicolaou and D.A. Papaconstantopoulos
8. American Physical Society (APS) , Indianapolis, Indiana, USA (March 2002), «Structural, vibrational and transport properties of ordered Cu₃Au and Ni₃Al low index surfaces», Christina E. Lekka (παρουσίαση ομιλίας)
9. Workshop on the WIEN2002 packet, State College, Pennsylvania, USA (22-25 July 2002), «Structural and electronic properties of Nb low index surfaces», Ch.E.Lekka, N. Bernstein, M. J. Mehl and D. A. Papaconstantopoulos (αφίσα)
10. Applied Surface Modeling: Experiment, Theory and Simulations, Cleveland, Ohio, USA (21-23 August 2002) «Structural and electronic properties of the Cu₃Au(111) surface», Ch.E.Lekka, N. Bernstein, M. J. Mehl and D. A. Papaconstantopoulos (παρουσίαση

προσκεκλημένης ομιλίας)

11. European research conference on Understanding and Improving Specific Interactions: Biological surfaces and interfaces, Il Ciocco, Castelvechio Pascoli , Italy (21-26)-6-2003
«Electronic and optical properties of adsorbed biomolecules (adenine) on graphite substrate»

Ch.E. Lekka, E. Kaxiras (αφίσα)

12. 22nd European conference on Surface Science, ECOSS, Praha (7-12)-9-2003:

12.1. “Electronic and optical properties of adsorbed biomolecules (adenine-cytosine)”,
Ch.E.Lekka, G.Zonios, E.Kaxiras. (αφίσα)

12.2. “Electronic, structural and thermodynamic properties of isohedral free and deposited Al clusters on Al surfaces from Tight Binding and Molecular Dynamics simulations”,
P.Mitev, D.G.Papageorgiou, Ch.E.Lekka, G.A.Evangelakis (αφίσα)

13. 12th International Symposium on Metastable and Nano Materials (ISMANAM), Paris (3-7 July 2005)

13.1. Mechanical properties of nano-grained Zr₂Ni systems by Molecular Dynamics simulations, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka, and I.E. Lagaris (ομιλία)

13.2. Molecular Dynamics study of nanograins-nanowires interfaces, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)

14. European Materials Research Society Spring Meeting (EMRS) 2006, 29May-2June, Nice, France, “Structural, Thermodynamic and Mechanical properties of Zr based binary nanowires (ZrCu and Zr₂Ni) by Molecular Dynamics”, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)

15. 12th International Symposium on Metastable and Nano Materials (ISMANAM), Warsove (3-7 Aug 2006)

15.1. Structural and vibrational properties of deposited Cu or Zr surface adlayers on Cu₄₆Zr₅₄ bulk metallic glass, D.G. Papageorgiou, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (ομιλία)

24nd European conference on Surface Science, ECOSS, Paris (3-8)-9-2006:

16.1. Molecular Dynamic Simulations of Zr₂Ni(100) surface in presence of Ni or Zr adatoms, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)

16.2. Structural and electronic properties of V, Nb and Ta nano-clusters by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, D.A. Papaconstantopoulos (αφίσα)

17. European Materials Research Society Spring Meeting (EMRS) 2007, 29 May-1 June Strasbourg

17.1. Oxidation of the Nb(110) surface by ab-initio calculations” by D.A.Kilimis and Ch.E.Lekka (αφίσα)

17.2. Structural and electronic properties of Nb adsorption on Carbon zig-zag nanotubes, Ch.E. Lekka (αφίσα)

18. Summer School on Women-in-nano: Career Development and Research Trends (Marvel hotel, Coma-ruga, Tarragona, Spain) from June 1st to 6th , 2007

- 18.1. Structural, Thermodynamic and Mechanical properties of Zr based binary nanowires (ZrCu and Zr₂Ni) by Molecular Dynamics”, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 18.2. Structural and electronic properties of V, Nb and Ta nano-clusters by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, D.A. Papaconstantopoulos (αφίσα)
19. 14th ISMANAM2007, International Symposium on Metastable and Nano Materials, 26-30 August 2007, Chandris Hotel, Corfu, Chandris, Greece
- 19.1. Microscopic aspects of the deformation accommodation in the Cu₄₆Zr₅₄ Metallic Glass, Ch.E. Lekka (ομιλία), L. Tayebi, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis
- 19.2. Realistic Tight-binding Methodologies, D.A. Papaconstantopoulos, M.J. Mehl, N. Bernstein, C. Lekka, M. Johannes, G. Evangelakis (ομιλία)
- 19.3. Structural and electronic properties of CuZr nanoclusters by ab-initio calculations, Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 19.4. Structural characteristics of CuxZr1-x metallic glasses by Molecular Dynamics Simulations, A.E. Lagogianni, Ch.E. Lekka, P.G. Papageorgiou and G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 19.5. Atomistic aspects of the Cu₄₆Zr₅₄ bulk metallic glass under compressive deformation by Molecular Dynamics Simulations, L. Tayebi, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)
20. NanoteC07, International Conference on carbon nanoscience and nanotechnology, 29th August - 1st September 2007, University of Sussex, Brighton, UK: «Metal (Nb, Cu) on C-nanotube by ab-initio calculations», Ch.E. Lekka (προσκεκλημένη ομιλία)
21. NATO Advanced Study Institute on Materials for Generation-IV Nuclear Reactors, 24 September - 6 October, 2007, Institut d'Etudes Scientifiques de Cargese - Cargese, CORSICA, FRANCE, “Structural and electronic properties of Nb adsorption on Carbon zig-zag nanotubes”, Ch.E. Lekka (αφίσα)
22. BulkMetallicGlass-Europe meeting, Paris, 2-4 Dec, 2007 «Tensile deformation accommodation in microscopic metallic glasses via subnanocluster reconstructions», Ch.E. Lekka, A. Ibenskas, L. Tayebi, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
23. Final European Workshop: Strengthening the role of women scientists in Nano-Science, 5-8 March, Dresden, Germany, Structural and electronic properties of CuZr nanoclusters by ab-initio calculations, Ch.E.Lekka (αφίσα)
24. 15th, ISMANAM2008, 10-15 July, Argentina, Atomistic aspects of the structure and the mechanical properties of the CuxZr100-x Metallic Glasses, A. Lagogianni, G.Almyras, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
25. Rapidly Quenched (RQ13), 24-29Aug, 2008, Dresden, Germany, Structural and electronic properties of CuZr and CuZrAl nanoclusters by ab-initio calculations, Ch.E. Lekka (ομιλία)
26. The International Conference On Metallurgical Coatings And Thin Films ICMCTF 2009, April 27-May 1, 2009, Town and Country Hotel, San Diego, California, USA
- 26.1. Structure, stability and bonding of ternary transition metal nitrides, G. M. Matenoglou; Loukas E Koutsokeras, Ch. E. Lekka, G. Abadias, C. Kosmidis, G. A

Evangelakis, P.A. Patsalas (ομιλία)

26.2. Metal-containing Diamond Like Carbon (DLC:Ag) and AlN (AlN:Ag) metallo-dielectric Nanocomposites, G M Matenoglou, H Zoubos, A Lotsari, Ch E Lekka, Ph Komninou, G P Dimitrakopoulos, C Kosmidis, G A Evangelakis, P.A. Patsalas

27. Women Scientists, Brussels 25-26 June 2009, DIVERSITY: Improving the gender diversity management in materials research institutions, Study case: Career Chances for Women in Science in Greece, M. Gialambouki, Ch. E. Lekka (αφίσα)
28. ISMANAM 2009, 5-9 July Beijing, China
- 28.1. On the origin of the short range order of the Cu₃₅Zr₆₅ and Cu₆₅Zr₃₅ metallic glasses, Ch.E. Lekka, G. Almyras, A. Lagogianni, G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
- 28.2. Cu-Zr and Cu-Zr-Al clusters: bonding characteristics and mechanical properties, Ch.E. Lekka¹, G.A. Evangelakis (αφίσα)
29. WPI-Europe Workshop on Metallic Glasses and Related Materials, 25-28 August 2009, Grenoble, Bonding Characteristics and Mechanical Properties of Cu-Zr and Cu-Zr-Al Clusters Ch. E. Lekka and G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
30. IDMRCS, 30 Aug-5 Sept, 2009, Rome,
- 30.1. Ultra Fine structure of the short range order of the Cu₆₅Zr₃₅ and Cu₃₅Zr₆₅ Metallic Glasses, G. Almyras, Ch. E. Lekka and G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
- 30.2. CuZr and Cu-Zr-Al clusters bonding characteristics and mechanical properties, Ch. E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)
31. Cnano 2009, 4-8 Oct. 2009, Santorini, Greece,
- 31.1. Ab-initio calculations of metallic nanowires templated on single-wall carbon nanotubes Ch.E. Lekka (ομιλία)
- 31.2. Structural and electronic properties of octahedral Titanium Oxide on Graphene by ab-initio calculations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
32. Leadership positions: how accessible are they for women in materials research? Barcelona, 19-21 May 2011, "CAREER CHANCES FOR WOMEN IN SCIENCE IN GREECE" M. Gialambouki, Ch. E. Lekka (ομιλία)
33. ISMANAM, Zurich 4-8 July 2010, Effects of Al or Nb Minor Substitutions on the Structure and the mechanical properties of Cu-Zr Metallic Glass Models by means of Molecular Dynamics Simulations and Density Functional Theory Computations", G. Bokas, G.A. Almyras, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, (προσκεκλημένη ομιλία)
34. EMRS 2010, Softening of Nanostructured Transition Metal Nitrides, L.E. Koutsokeras, A. Skarmoutsou, Th. Goutziotis, C.E. Lekka, C. Charitidis, P. Patsalas (αφίσα)
35. ICMCTF2010, The 37th International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films, "Transition metal nitride-based complex coatings: kinetic and thermodynamic effects resulting to ternary films or nanocomposites", P.A. Patsalas; G. Abadias; G.M. Matenoglou; L.E. Loutsokeras; Ch.E. Lekka (προσκεκλημένη ομιλία)
36. ISMANAM 2011, Cijon, Spain 26/6/2011 - 1/7/2011
- 36.1. Clustering and mechanical properties in Cu/Zr-based glassy models by Molecular Dynamics and ab-initio computations, Ch.E. Lekka, G.B. Bokas, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis (προσκεκλημένη ομιλία)
- 36.2. Ultra Thin Metallic Nanowires Templated on/in Single-Wall Carbon Nanotubes by Density Functional Theory Calculations, M.A. Gialabouki, A. Balerba, O. Gouma, Ch.E. Lekka (αφίσα)

- 36.3. On the growth of Ti-Nb and Ti-Nb-Hf thin films by magnetron sputtering, N.T. Panagiotopoulos, J.J. Gutierrez-Moreno, P. Patsalas, Ch. E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 36.4. Development of semi-empirical interatomic potentials for Ti, Zr, Hf and their binary and ternary solid solutions, G.A. Almyras, D.G. Papageorgiou, J. Gutierrez-Moreno, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis, (αφίσα)
37. Euromat 2011, 11-15Sept.2011, Montpellier, France
- 37.1.1. On the design of β Ti-based biocompatible alloys from ab-initio calculations, G. B. Bokas, G.A. Evangelakis and Ch.E. Lekka (ομιλία)
- 37.1.2. Chiral Rearrangements and Electronic properties of Y-centered $\text{Cu}_8\text{Zr}_4\text{Y}$ (Y=Be,Al,Nb) from Density Functional Theory Computations, G.B. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 37.1.3. Active iron and titanium oxides on single wall carbon nanotubes by ab-initio calculations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
38. SCIENCE: Passion, mission, responsibilities – Warsaw, Poland, 25-27 September 2011, «On the design of β Ti-based alloys from ab-initio computations» J.J. Gutierrez-Moreno, G. Bokas, N.T. Panagiotopoulos, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)
39. 1st. BioTiNet workshop – Advanced Methods for Materials Characterisation, Ljubljana, Slovenia, 23-27 October 2011, «Towards Ti-based alloys for biomedical applications by means of ab-initio calculations» J.J. Gutierrez-Moreno, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka (ομιλία)
40. 2nd. BioTiNet workshop – Research methodology and research project management, Leuven, Belgium, 5-9 March 2012, «Structural, electronic and mechanical properties of β -Ti alloys by means of ab-initio calculations » J.J. Gutierrez-Moreno, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka (ομιλία)
41. BioTiNet Summerschool – Titanium in medicine, Barcenola, Spain, 3-8 June 2012, «Structural, electronic and mechanical properties of β -Ti alloys by means of ab-initio calculations » J.J. Gutierrez-Moreno, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka (ομιλία)
42. 19th International symposium on metastable, amorphous and nanostructured materials, ISMANAM, 18-22 June 2012, Moscow, Russia, entitle «Structural, electronic and mechanical properties of Ti-Nbx ($x < 50$) alloys», J.J. Gutiérrez Moreno, N. Panagiotopoulos, D.G. Papageorgiou, G.A.Evangelakis, Ch.E. Lekka, UoI and M. Bönisch, A. Helth, M. Calin, A. Gebert, M. Stoica, J. Eckert, IFW (αφίσα)
43. INTERNATIONAL CONFERENCE ON EXTENDED DEFECTS IN SEMICONDUCTORS, 24-29 June, Thessaloniki 2012.
- 43.1. Electronic properties and bonding characteristics of AlN:Ag Thin Film Nanocomposites, Ch. E. Lekka, P.Patsalas, Ph. Komninou, G.A.Evangelakis (αφίσα)
- 43.2. Structural and Electronic Properties of Metal Oxide Clusters on Single Wall Carbon Nanotubes by Ab-initio calculations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
44. BioTiNet Workshop: Surface Science & Engineering, University of Cambridge, 9-11 January 2013, Clare College, Cambridge, UK Theory-guided bottom-up design of low-rigidity Ti-based alloys (ab initio and molecular dynamics calculations) J.J. Gutiérrez Moreno, G.A.Evangelakis, D. Papageorgiou, Ch.E. Lekka (ομιλία)
45. EMRS, Strasbourg 27-31 May 2013
- 45.1. Structural, electronic and mechanical properties of β -Ti-Nb-Sn alloy: Experiment vs. ab-initio calculations J.J. Gutiérrez Moreno, G.A.Evangelakis, Ch.E. Lekka, Y. Guo, A.R. Yavary (αφίσα)

- 45.2. Biocompatible Ti-Nb and Ti-Nb-Hf thin films by magnetron sputtering and ab-initio calculations, N.T. Panagiotopoulos, J.J. Gutierrez-Moreno, P. Patsalas, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)
46. BioTiNet Workshop: Biomaterials for Orthopaedic Applications, PX Precimet / PX Group, 26-28 June 2013, Neuchâtel, Switzerland, On the design of Ti-Nb-X (X=In,Sn,Hf) alloys from ab-initio calculations, J.J. Gutiérrez Moreno, G.A.Evangelakis, Ch.E. Lekka (ομιλία)
47. ISMANAM 2013, 1-5 July, Torino, Italy:
- 47.1. «Ti-Nb phase transitions from electronic structure calculations» Ch.E. Lekka , J.J. Gutierrez-Moreno , G.A.Evangelakis , M. Boenisch , M. Calin , J. Eckert (προσκεκλημένη ομιλία)
- 47.2. Al-Nb bonding particularities upon microalloying Cu-Zr based Metallic Glasses by ab-initio calculations, G.B. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 47.3. On the role of Icosahedral-like clusters in the solidification and the mechanical response of Cu-Zr metallic glasses by Density Functional Theory, G.B. Bokas, G.A. Almyras, A.E. Lagogianni, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 47.4. Structural and electronic properties of β -Ti-40Nb-xIn ($x < 25$ w%), J.J. Gutierrez-Moreno, G.B. Bokas, Ch.E. Lekka, A. Helth, M. Bonisch, A. Gebert, M. Calin, J. Eckert(αφίσα)
- 47.5. Structural, electronic and mechanical properties of β -Ti-Nb-Sn alloy: Experiment versus ab-initio calculations, J.J. Gutierrez-Moreno, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka, Yaofeng Guo, A. R. Yavari (αφίσα)
48. Euro LightMat 2013, 03-05 September, Bremen, Germany, “Biocompatible Ti-xNb ($14 < x < 40$) alloys: Structural, electronic and mechanical properties”, J.J. Gutiérrez Moreno, G.A. Evangelakis, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka, M. Boenisch, M. Calin, A. Gebert, J. Eckert (ομιλία)
49. Euromat 2013, 8-13 September, Sevilla, Spain,
- 49.1. “Al/Nb Microalloying effect and bonding particularities in the microstructure of Cu-Zr Metallic Glasses by ab-initio calculations”, G. B. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E. Lekka (προσκεκλημένη ομιλία)
- 49.2. Biocompatible Ti-Nb and Ti-Nb-Hf thin films by magnetron sputtering and ab-initio calculations, N.T. Panagiotopoulos, J.J. Gutierrez-Moreno, P. Patsalas, Ch.E. Lekka, G.A. Evangelakis (αφίσα)
50. NT13, 14th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, 14-26 June 2013
- 50.1. Ti Decoration of Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene by Density Functional Theory Computations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 50.2. Early Stages of Ti-O Clusters’ Growth on CNTs by Ab-initio Calculations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
51. 14th International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials “ibb2013”, June 23-29, 2013 Halkidiki, Greece
- 51.1. Structural properties and diffusion processes of graphene flakes growing on Cu(110), A.V. Balerna, D.G. Papageorgiou, Ch.E. Lekka, Adrian T. Murdock, Antal Koos, Nicole Grobert (αφίσα)

- 51.2.** Phase transition processes in Ti, Zr, Hf and their Ti-based biocompatible alloys A.V. Balermpana, A.E. Lagogianni, J.J. Gutierrez Moreno, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, G.A. Evangelakis (αφίσα)
52. 8th Biotinet workshop, 4-8 Nov. 2014, Dresden , Ti-based alloys for orthopaedics, J.J.Gutierrez Moreno, Ch.E. Lekka (oral)
53. 'Fundamentals of electrodeposition of metallic alloys: state-of- the-art at European and International levels', Solaris Resort, Vrnjacka Banja, Serbia, November 2015, Fe-Cu coating on Cu surfaces by Density Functional Theory, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (oral)
54. 'Training on research methodologies, characterization techniques and reporting scientific results', IFW Dresden, Germany, March 2016, oral pres: 'Fe-Cu coating on Cu(001) by Density Functional Theory' C. Cutrano, Ch.E. Lekka (oral)
55. 'Micro and nano-electrodeposition for MEMS/NEMS and micro/nano-robotic platforms. Overview of lithography methods. Impact to society', HP, Wiener Neustadt, Austria, August 2016, oral pres: 'Cu-Fe nanoclusters and Fe/Cu(111) by density functional theory' C. Cutrano, Ch.E. Lekka (oral)
56. Selecta Mid-Term review meeting and Workshop, Göteborg Sweden, December 2016, oral pres: 'Design of functional dense and nanoporous Fe-, Al- and Cu-based coatings by molecular dynamics simulations and DFT calculations' C. Cutrano, Ch.E. Lekka (oral)
57. 10th International Summer Schools on N&N, OE & NM (ISSON16), 2-9 July 2016, Thessaloniki, Greece, 'Fe-Cu coating on Cu(001) by Density Functional Theory' C. Cutrano, Ch.E. Lekka
58. ISMANAM 3-8 July 2016, Nara, Japan,
- 58.1. Structural and electronic properties of biocompatible Ti-based alloys, Ch. E. Lekka, J.J.Gutierrez-Moreno, G.A. Evangelakis (oral)
- 58.2. Structural, magnetic and electronic properties of CuFe nanoclusters by density functional theory calculations, Ch. E. Lekka, C. S. Cutrano (poster)
59. Gateway to Academics: Materials modelling for target applications, University of Ioannina, 3-7 September 2017, Fe-X (X=Mn, Co, Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (poster)
60. CECAM summer school: Teaching the Theory in Density Functional Theory, Lausanne, 12-16 June 2017 Fe-X (X=Mn, Co, Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (poster)
61. EUROMAT 2017: "Nanoscale Materials Characterization and Modelling by Advanced Microscopy Methods", Thessaloniki Greece, September 2017
- 61.1. Electronic origin and structural instabilities of Ti-based alloys suitable for orthopaedic implants, Ch.E. Lekka, J.J. Gutiérrez-Moreno, M. Calin (oral)
- 61.2. Fe-X (X=Mn, Co, Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (Poster Presentation)
- 61.3. Nano-Hybrids of Curcumin And Fe-based clusters by density functional theory, K. N. Botsiou, D. G. Karantzinis, Ch. E. Lekka (poster)

62. Gateway to Industry: Introducing materials to market. Practical aspects, Cambridge, 7-12 January 2018, Fe-X (X=Mn, Co, Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (poster)
63. 'Advanced magnetic materials and devices for biomedical applications', Torino, 21-25/05/2018, Fe-X (X=Mn, Co, Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (Oral Presentation)
64. SPSSM 2018: 7Th International symposium on Structure-Property relationship in solid state materials, Pescara, 8-12/06/2018, Structural and magnetic properties of Fe-X (X=Co,Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C.Cutrano, C. Lekka (Poster Presentation)
65. ISMANAM 2018, Roma, 2-6/07/2018, Structural and magnetic properties of Fe-X (X=Co,Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C.Cutrano, C. Lekka (Poster Presentation)
66. 'Overview of the SELECTA achievement. Final Reporting', Barcelona, 26-29/08/2018, Structural and magnetic properties of Fe-X (X=Co,Cu) nanoclusters by density functional theory calculations, C.Cutrano, C. Lekka Oral presentation
67. EUFEPS Annual meeting 2018, 24-26 May 2018, Athens, Nano-Hybrids of Curcumin And Fe-based nano-clusters by density functional theory, Ch. E. Lekka
68. 2018 Materials Research Society MRS Spring Meeting & Exhibit , Phoenix, Arizona, 2-6 April 2018, "On the Design of Fe-X (X=Cu, Co, Mn) Nanoclusters and Coatings with Improve Magnetic Moment by Density Functional Theory Calculations", C. Cutrano and Ch. E. Lekka (invited)
69. 9th International Conference on Materials Scie & Cond Matter Physics (MSCMP2018), Chsinau, Moldavia, 25-28 September 2018, "Density functional theory on nanostructures with potential catalytic applications", Ch. E. Lekka (Plenary speaker)
70. 2018 Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition (SIPS2018), Rio de Janeiro, Brazil, 4-7 November 2018, "On The Computational Design Of Ti- and Fe-Based Advanced Materials For Biomedical Applications", Ch. E. Lekka (invited)
71. ISFOE19, 12th International Symposium on Flexible Organic Electronics, 1-4 July 2019, Thessaloniki, Greece, "Density functional theory on Nanostructures with potential catalytic applications" and "Women in Nano", Martha Gialampouki, Ch.E. Lekka (invited)
72. EETSY Workshop on Computational Materials Science, 14-15 Dec 2019, Thessaloniki, On The Computational Design Of Ti- and Fe-Based Advanced Materials For Biomedical Applications, Christina E. Lekka, J.J. Gutierrez Moreno, C. Cutrano, K. Ioannou, D. Papageorgiou, G. Evangelakis.

Παρουσιάσεις σε εθνικά συνέδρια

1. XII Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Ηράκλειο, Κρήτη (15-18)-9-1996 «Δυναμικές ιδιότητες του προσροφημένου ατόμου Au στις χαμηλών δεικτών επιφάνειες του Cu με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής», Γ.Χ.Καλλιντέρης, Χ.Ε.Λέκκα, Ν.Ι.Παπανικολάου, Γ.Α.Ευαγγελάκης (αφίσα)

2. ΙΓ Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Θεσσαλονίκη (15-18)-9-1997 «Διαδικασίες διάχυσης των προσροφημένων ατόμων Cu στην επιφάνεια Cu(110) με προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής», Γ.Α.Ευαγγελάκης, Δ.Γ. Παπαγεωργίου, Γ.Χ. Καλλιντέρης, Χ.Ε. Λέκκα, Ν.Ι. Παπανικολάου. (αφίσα)
3. XIV Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Ιωάννινα, (15-18)-9-1998:
 - 3.1. «Ταλαντωτικές ιδιότητες των χαμηλών δεικτών των επιφανειών του Cu_3Au με ή χωρίς προσροφημένα άτομα Cu/Au με προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής», Χ.Ε.Λέκκα, Γ.Α.Ευαγγελάκης, Ν.Ι.Παπανικολάου (αφίσα)
 - 3.2. «Δυνατότητα μεταφοράς των παραμέτρων της θεωρίας ισχυρού δεσμού σε ένα μεταβατικό στοιχείο (Nb)», Χ.Ε. Λέκκα, Ν.Ι. Παπανικολάου, Γ.Α. Ευαγγελάκης, Δ.Α. Παπακωνσταντόπουλος (αφίσα)
4. XVI Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Ναύπλιο, (17-20)-9-2000, «Διαδικασίες διάχυσης των προσροφημένων ατόμων Au και Cu στην επιφάνεια $\text{Cu}_3\text{Au}(001)$ », Χ.Ε. Λέκκα, Γ.Α. Ευαγγελάκης (αφίσα)
5. XVII Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Θράκη, (6-9)-9-2001:
 - 5.1. «Διάχυση οπών και ατομική τάξη στην επιφάνεια $\text{Cu}_3\text{Au}(001)$ », Χ.Ε.Λέκκα, Γ.Α.Ευαγγελάκης (παρουσίαση ομιλίας).
 - 5.2. «Μελέτη της συμπεριφοράς σημειακών ατελειών (προσροφημένα άτομα ή οπές) στην επιφάνεια (001) των κραμάτων τύπου A_3B », Χ.Ε. Λέκκα, Γ.Α. Ευαγγελάκης. (αφίσα)
6. XIX Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Θεσ/ικη,(21-24) – 9 -2003:
 - 6.1. «Προσομοιώσεις θεωρίας ισχυρής δέσμωσης επιφανειών Nb με ή χωρίς επιφανειακές ατέλειες», Χ.Ε.Λέκκα, M.J.Mehl, N.Bernstein, D.A.Papacostantopoulos (παρουσίαση ομιλίας)
 - 6.2. «Ηλεκτρονιακές, δομικές και θερμοδυναμικές ιδιότητες ελευθέρων και προσροφημένων εικοσαεδρικών νανοσυσσωματωμάτων Al σε επιφάνειες Al με θεωρία ισχυρής δέσμωσης και προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής», P.Mitev, Δ.Γ.Παπαγεωργίου, Χ.Ε.Λέκκα, Γ.Α. Ευαγγελάκης. (αφίσα)
 - 6.3. «Οπτικές και ηλεκτρονιακές ιδιότητες προσροφημένων βιολογικών μορίων (αδενίνη, κυτοσίνη) σε φύλλο γραφίτη» Χ.Ε. Λέκκα, Γ. Ζώνιος, Ε. Καξίρας. (αφίσα)
7. XX Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Ιωάννινα, (26-29)-9-2004
 - 7.1. Structural and electronic properties of flavonoids, H. Basileiou, A. Kitsaki, Ch. E. Lekka, D. Galaris, E. Kaxiras (αφίσα)
 - 7.2. Structural and electronic properties of C nanotubes, P. Theodorakis, Ch.E. Lekka, E. Kaxiras (αφίσα)
 - 7.3. Molecular dynamics simulation of $\text{Ni}_x\text{Al}_{(1-x)}$ nanocluster deposited on Al(111) surface, P. Euthimiopoulos, D.G. Papageorgiou, Ch. E. Lekka, E. Kaxiras (αφίσα)
 - 7.4. Structural and electronic properties of Ni, Al, NiAl, Ni_3Al and NiAl_3 nanoclusters, D. Kilimis, Ch.E. Lekka, D. G. Papageoriou, E. Kaxiras (αφίσα)
8. XXII Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Πάτρα (24-27)-9-2006
 - 8.1. Molecular Dynamic Simulations of $\text{Zr}_2\text{Ni}(100)$ surface in presence of Ni or Zr adatoms, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)

- 8.2. Structural, Thermodynamic and Mechanical properties of Zr based binary nanowires (ZrCu and Zr₂Ni) by Molecular Dynamics, A. Ibenskas, Ch.E. Lekka and G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 8.3. Structural and electronic properties of V, Nb and Ta nano-clusters by Tight Binding Molecular Dynamics Simulations, Ch.E. Lekka, D.A. Papaconstantopoulos (ομιλία)
9. 6ο Πανελλήνιο Συνέδριο Ελευθέρων Ριζών και Οξειδωτικού Στρες, Πράμαντα (18-21)-9-2008, «Complexation of flavonoids with iron and Copper: Structure and Optical Signatures από τους Ch.E. Lekka, Jun Ren, Sheng Meng, Efthimios Kaxiras (ομιλία)
10. XXIV Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Κρήτη 21-24 Σεπτ. 2008
- 10.1. Atomistic Mechanisms Of The Deformation Accommodation In Microscopic CuZr Metallic Glass, Ch.E.Lekka, A.R. Yavari, G.A. Evangelakis (ομιλία)
- 10.2. Structural And Electronic Properties Of Ti And TiO₂ On C Nanotubes By Ab-Initio Calculations, M.Gialampouki and Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 10.3. Structural and Electronic Properties Of Nb Nanowires By Tight Binding Molecular Dynamics Calculations, M. Iakovidis, Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 10.4. Complexation of Flavonoids with Iron and Copper: Structure and Optical Signatures, Ch. E. Lekka, Jun Ren, Sheng Meng, Efthimios Kaxiras (αφίσα)
11. 6^ο Πανελλήνιο Πολυμερών, Ιωάννινα 28 Σεπτ.-1 Οκτ. 2008
- 11.1. Structural And Electronic Properties Of Ti And TiO₂ On C Nanotubes By Ab-Initio Calculations, M.Gialampouki and Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 11.2. Structural and Electronic Properties Of Nb Nanowires By Tight Binding Molecular Dynamics Calculations, M. Iakovidis, Ch.E.Lekka (αφίσα)
12. XXIV Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Θεσσαλονίκη 21-24 Σεπτ. 2009
- 12.1. Ultra Fine Structure of the Short Range Order of the Cu₆₅Zr₃₅ and Cu₃₅Zr₆₅ Metallic Glasses, Ch. E. Lekka, G. Almyras, G.A. Evangelakis (ομιλία)
- 12.2. CuZr nanoclusters by ab-initio calculations, G. Bokas, Ch.E. Lekka, G. A. Evangelakis (αφίσα)
- 12.3. Structural and electronic properties of octahedral Titanium Oxide on Graphene by ab-initio calculations, M.Gialampouki and Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 12.4. Structural and Electronic Properties of Metal Nitrides, Th. A. Goutziotis, L. E. Koutsokeras, P. Patsalas and Ch. E. Lekka (αφίσα)
13. Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και επιστήμης των υλικών, 26-29 Σεπτεμβρίου, Ιωάννινα
- 13.1. Structural and Electronic Properties of Ti adatom and Clusters on C Nanotubes and Graphene by ab-initio Calculations, M. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 13.2. Structural and electronic properties of C_xZr_{12-x}Y (Y=Be, Mg, Al, Si, P, Nb, Ag) clusters by ab-initio calculations, G. Bokas, G.A. Evangelakis, Ch.E.Lekka (αφίσα)
- 13.3. Ti Nanowires on and inside Carbon Nanotubes by ab-initio Calculations: A Structural and Electronic Properties study, A. Mbalerba and Ch. E. Lekka (αφίσα)
- 13.4. Structural and Electronic Properties of Fe Nanowires on and inside Carbon Nanotubes by Ab-Initio Calculations, S. Giorgi and Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 13.5. Ab-Initio Calculations of Cu Nanowires on and inside Carbon Nanotubes: A study of the Structural and Electronic Properties, O. Gouma and Ch. E. Lekka (αφίσα)
- 13.6. Fine structure of short range order in C_xZr_{100-x} metallic glasses by Molecular

- Dynamics Simulations, G.A. Almyras, Ch.E. Lekka, D.G. Papageorgiou, N. Mattern and G.A. Evangelakis (αφίσα)
- 13.7. Complexation of Flavonoids with Zn: Structural and Electronic Properties, A.P. Kotsiopoulos and Ch.E. Lekka (αφίσα)
14. Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και επιστήμης των υλικών, ΚΥΠΡΟΣ
- 14.1. Ti_N decoration of Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene by Density Functional Theory Computations, M. Gialampouki and Ch.E. Lekka (ομιλία)
- 14.2. Ultra Thin Metallic Nanowires Templated on/in Single-Wall Carbon Nanotubes by Density Functional Theory Calculations, M.A. Gialabouki, A. Balerba, O. Gouma, Ch.E. Lekka (αφίσα)
15. Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και επιστήμης των υλικών, ΠΑΤΡΑ 2012
- 15.1. Stability and Bonding Characteristics of Fe and Ti Oxides on Single Wall Carbon Nanotube by Density Functional Theory Computations, M.A. Gialampouki and Ch.E. Lekka (αφίσα)
- 15.2. Al/Nb Microalloying effect and bonding particularities in the microstructure of Cu-Zr Metallic Glasses by ab-initio calculations, G.B. Bokas, G.A. Evangelakis and Ch.E. Lekka (αφίσα)
16. XXIX Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και επιστήμης των υλικών, 22-25 Σεπτεμβρίου Αθήνα 2013
- 16.1. On the role of Icosahedral-like clusters in the solidification and mechanical response of Cu-Zr metallic glasses by Density Functional Theory, G. B. Bokas, G. A. Almyras, A. E. Lagogianni, Ch. E. Lekka, D. G. Papageorgiou, G. A. Evangelakis (ομιλία)
- 16.2. Early Stages of Ti-O clusters growth on SWCNTs by Density Functional Theory Calculations, M. A. Gialampouki, Ch. E. Lekka (ομιλία)
- 16.3. CO₂ adsorption on TiN/Graphene systems (N=1, 3, 13) by ab-initio Calculations, M. A. Gialampouki, Ch. E. Lekka (αφίσα)
- 16.4. Biocompatible Ti-xNb (14<x<40) alloys: Structural, electronic and mechanical properties, J. J. Gutierrez Moreno, D. G. Papageorgiou, G. A. Evangelakis, Ch. E. Lekka, M. Boenisch, A. Helth, A. Gebert, M. Calin, J. Eckert (αφίσα)
17. XXIX Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και επιστήμης των υλικών, 22-25 Σεπτεμβρίου Αθήνα 2013
- 17.1. On the role of Icosahedral-like clusters in the solidification and mechanical response of Cu-Zr metallic glasses by Density Functional Theory, G. B. Bokas, G. A. Almyras, A. E. Lagogianni, Ch. E. Lekka, D. G. Papageorgiou, G. A. Evangelakis (ομιλία)
- 17.2. Early Stages of Ti-O clusters growth on SWCNTs by Density Functional Theory Calculations, M. A. Gialampouki, Ch. E. Lekka (ομιλία)
- 17.3. CO₂ adsorption on TiN/Graphene systems (N=1, 3, 13) by ab-initio Calculations, M. A. Gialampouki, Ch. E. Lekka (αφίσα)
- 17.4. Biocompatible Ti-xNb (14<x<40) alloys: Structural, electronic and mechanical properties, J. J. Gutierrez Moreno, D. G. Papageorgiou, G. A. Evangelakis, Ch. E. Lekka, M. Boenisch, A. Helth, A. Gebert, M. Calin, J. Eckert (αφίσα)
18. 30th Panhellenic Conference on Solid-State Physics and Materials Science, September 21-24, 2014, Heraklion, Biocompatible Titanium-based alloys for orthopaedics, Ch.E. Lekka (invited)
19. XXXI Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, Thessaloniki, 20-23, September 2015
- 19.1. L-glutamine on Cu(111) surface by Density Functional Theory Calculations, M. G. Bouri and Ch. E. Lekka (poster presentation)

- 19.2. Density Functional Theory Calculations of H₂O Adsorption on Cu(111), Manos Zegkos and Ch.E. Lekka (poster presentation)
20. XXXII Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, 18-21 September 2016, Ioannina, Structural, magnetic and electronic properties of CuFe nanoclusters by density functional theory calculations, C. Cutrano, Ch.E. Lekka (poster presentation)