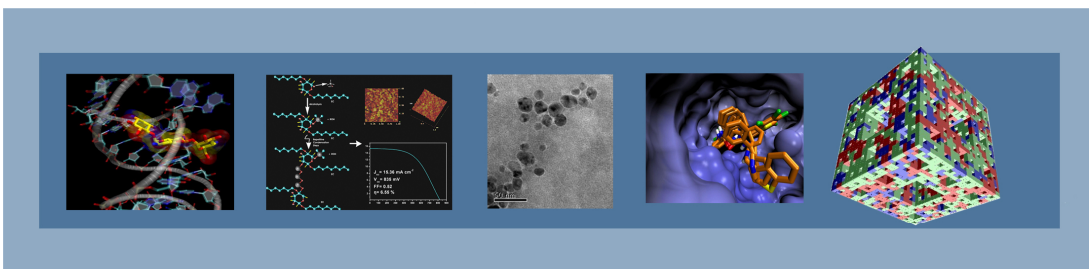
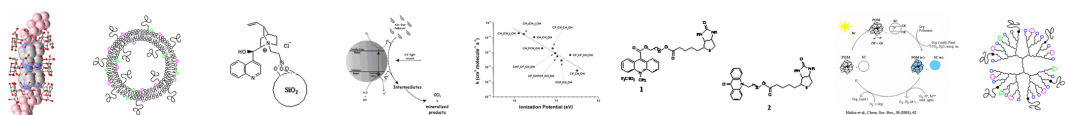




Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ"

# ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ



<http://ipc.chem.demokritos.gr/>

# ΑΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ

# 2007

**ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΕΡΕΥΝΑΣ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
«ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»**

**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ**

**ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ**

Φαλάρας Πολύκαρπος

**ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ**

Προβατά Αστέρω

**ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΓΝΩΜΟΔΟΤΙΚΟ ΣΥΜΒΟΥΛΙΟ**

Στεριώτης Θεόδωρος, Πρόεδρος  
Πιστόλης Γεώργιος, Αντιπρόεδρος  
Γιαννακοπούλου Κωνσταντίνα  
Πιτσινός Εμμανουήλ  
Χισκιά Αναστασία

Διεύθυνση: Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ» ,Νεαπόλεως και Πατριάρχου Γρηγορίου  
Αγία Παρασκευή Αττικής, 153 42

Επικοινωνία:

Γραμματεία: τηλ.: 210 650- 3652 - 3653, FAX: 210 6511 766, e-mail [vdouvara@chem.demokritos.gr](mailto:vdouvara@chem.demokritos.gr)  
Διευθυντής: τηλ. 210 650-3644 - 3652, e-mail [papi@chem.demokritos.gr](mailto:papi@chem.demokritos.gr)

**ΕΙΣΑΓΩΓΗ**

Εισαγωγικά.....	1
Οργανόγραμμα Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.....	6
Επιστημονικές Δραστηριότητες.....	7
Προσωπικό Ινστιτούτου.....	8

**A. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ****Πρόγραμμα 1: Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά.....13****Έργα**

1.1 Δομική και υπερμοριακή χημεία.....	14
1.2 Νανο-υλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής.....	19
1.3 Μοριακή θερμοδυναμική και μοντελοποίηση υλικών.....	24
1.4 Φωταύγεια – Ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για αναλυτικές και Βιοργανικές εφαρμογές.....	31
1.5 Φαινόμενα μεταφοράς ύλης σε πολυμερή.....	35
1.6 Στατιστική μηχανική και μη-γραμμική δυναμική.....	39
1.7 Μοριακή Υπολογιστική Χημεία.....	43

**Πρόγραμμα 2 :: Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια.....45****Έργα**

2.1 Μεμβράνες και μικροπορώδη υλικά για περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς.....	46.
2.2 Φωτοοξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση της ηλιακής ενέργειας – ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για ενεργειακές, και περιβαλλοντικές εφαρμογές.....	52
2.3 Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές διεργασίες (ηλιακή ενέργεια - περιβάλλον).....	59
2.4 Ηλεκτρονική φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε υπερμόρια και νανοδομές.....	63
2.5 Ισοτοπική υδρολογία .....	65
2.6 Ο ρόλος των ιχνοστοιχείων στο περιβάλλον.....	66

**Πρόγραμμα 3: Χημική Βιολογία.....69****Έργα**

3.1 Σύνθεση φυσικών προϊόντων και βιοοργανική χημεία.....	70
3.2 Χημική Βιολογία φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων μορίων.....	74

**B. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ.....77**

B.1 Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Συστημάτων	
B.1.1 Εργαστήριο Φασματοσκοπίας NMR	
B.1.2 Εργαστήριο X-RAY	
B.1.3 Εργαστήριο Στοιχειακής Ανάλυσης.	
B.1.4 Εργαστήριο AFM, FT-IR, I.M.S.	
B.1.5 Υαλουργείο	
B.2 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Ραδιοχρονολογήσεις, Ισοτοπικές Αναλύσεις και Μετρήσεις Ραδονίου».....	81
B.3 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Περιβαλλοντικές Αναλύσεις».....	83

**Γ. ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ.....85**

## Εισαγωγικά

Σκοπός του Ινστιτούτου είναι η ανάπτυξη της επιστημονικής και τεχνολογικής έρευνας στον τομέα της Φυσικοχημείας καθώς και η παροχή τεχνολογικών υπηρεσιών και η παραγωγή ειδικών τεχνολογικών προϊόντων στα πλαίσια της ερευνητικής δραστηριότητας.

Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας (ΙΦΧ) εστιάζει στη διεξαγωγή υψηλής στάθμης βασικής και τεχνολογικής έρευνας κυρίως στις περιοχές των νανολειτουργικών υλικών, των καταλυτικών και φωτοκαταλυτικών διεργασιών, της νανοχημείας, της περιβαλλοντικής τεχνολογίας, της ανανεώσιμης ενέργειας της υπολογιστικής φυσικοχημείας και της χημικής βιολογίας. Η ερευνητική δραστηριότητα περιλαμβάνει δεκατέσσερα ερευνητικά αναπτυξιακά έργα που οργανώνονται σε τρία προγράμματα. Το εξαιρετικό ανθρώπινο δυναμικό απαρτίζεται από λίαν έμπειρους ερευνητές αλλά και ικανότατους νεότερους επιστήμονες, μεταδιδακτορικούς συνεργάτες και μεταπτυχιακούς φοιτητές. Το Ινστιτούτο διαθέτει σημαντική υλικοτεχνική υποδομή που περιλαμβάνει φασματοόμετρα NMR, X-RAY, Raman, FT-IR, UV), μικροσκόπια AFM-STM, υποδομές ανόργανης και οργανικής σύνθεσης αλλά και μία πληθώρα από αναλυτικές διατάξεις και απαραίτητο/ συμπληρωματικό εξοπλισμό. Παράλληλα στο ΙΦΧ λειτουργούν εργαστήρια παροχής τεχνολογικών υπηρεσιών & μετρήσεων (Εργαστήριο Ραδιοχρονολογήσεων-Ισοτοπικές Αναλύσεις, Μετρήσεις Ραδονίου, Εργαστήριο Υλικών Μεμβρανών, Εργαστήριο Περιβαλλοντικών Αναλύσεων, Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Συστημάτων) που προσφέρουν υπηρεσίες και σε εξωτερικούς φορείς και χρήστες. Μεγάλο μέρος των ερευνητικών αναγκών καλύπτεται από εισροές από ανταγωνιστικά ερευνητικά προγράμματα.

Η πρόσφατη αξιολόγηση έδειξε ότι το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας βρίσκεται σήμερα σ' ένα μεταβατικό στάδιο και καλείται να πορευθεί σε περιβάλλον εξόχως ανταγωνιστικό, τόσο στον ελληνικό όσο και στον ευρωπαϊκό χώρο έρευνας. Σκοπός της νέας διεύθυνσης είναι η ανέλιξη του Ινστιτούτου και η καθιέρωσή του σε σύγχρονη και ανταγωνιστική ερευνητική μονάδα, η ανάδειξή του ως Ελληνικού και Ευρωπαϊκού Κέντρου Αριστείας στον κλάδο της Φυσικοχημείας μέσω: α) προσέλκυσης νέων ικανών ερευνητών, β) αύξησης κονδυλίων από ανταγωνιστικά προγράμματα, γ) ανανέωσης/συμπλήρωσης εξοπλισμού και δ) ανάπτυξης διμερών συνεργασιών με ιδρύματα του εξωτερικού. Για το σκοπό αυτό, με επίκεντρο τη θεματική περιοχή της Φυσικοχημείας ακολουθείται εξελισσόμενη ερευνητική πολιτική με σαφείς επιστημονικούς αλλά και τεχνολογικού στόχους, υποστηριζόμενη από συγκροτημένη και πρακτική διαχείριση, που βασίζεται στους ακόλουθους άξονες: Μακροπρόθεσμη Βασική Έρευνα, Μεσοπρόθεσμη Εφαρμοσμένη Έρευνα και Εμπορική Αξιοποίηση των Αποτελεσμάτων Έρευνας. Η πολιτική του Ινστιτούτου περιλαμβάνει:

-Καθιέρωση ενός λειτουργικού οργανογράμματος με τη δημιουργία θεματικά σύγχρονων, ισοδύναμων ερευνητικών προγραμμάτων που περιλαμβάνουν ερευνητικά έργα με παρεμφερές ή συμπληρωματικό αντικείμενο και την απαραίτητη κρίσιμη μάζα, ώστε να επιτευχθεί σταδιακά επικέντρωση έρευνας σε συγκεκριμένους τομείς αιχμής στους οποίους διακρίνεται το ΙΦΧ και να καταστεί βαθμηδόν εφικτή η εκμετάλλευση της προστιθέμενης αξίας που προκύπτει από κοινή δράση και εκτεταμένη συνεργασία ερευνητών. Παράλληλα προωθείται η οριζόντια διασύνδεση των προγραμμάτων. Τα αναμενόμενα πολλαπλασιαστικά οφέλη από μία τέτοια συνέργεια είναι πολλά με

κυριότερα την αντιμετώπιση της πολυδιάσπασης και τη συντεταγμένη και συγκλίνουσα πορεία του Ινστιτούτου στο κοντινό μέλλον.

-Προκήρυξη νέων θέσεων ερευνητικού προσωπικού καθώς και νέων θέσεων τεχνικού προσωπικού (ΠΕ, ΤΕ)

-Εφαρμογή πολιτικής προσέλκυσης μεταπτυχιακών σπουδαστών υψηλού επιπέδου. Συνεργασία με τμήματα ΑΕΙ στα πλαίσια προγραμμάτων ΕΠΕΑΕΚ και αντίστοιχων κοινών μεταπτυχιακών προγραμμάτων σπουδών.

-Εξασφάλιση ίσης μεταχείρισης για όλους τους ερευνητές με παράλληλη ενίσχυση των «αδύνατων ομάδων» αλλά και καθιέρωση κινήτρων αποδοτικότητας που περιλαμβάνουν:

- Χρηματοδότηση μετά από εσωτερική προκήρυξη/αξιολόγηση 1-2 προτάσεων το χρόνο από τα έσοδα του Ινστιτούτου.
- Ορθολογική κατανομή των μεταπτυχιακών υποτρόφων (ΜΥ) και συνεργαζομένων ερευνητών (ΣΕ) στα Προγράμματα και στα Έργα, ώστε κάθε εγκεκριμένο έργο να διαθέτει ένα τουλάχιστο ΜΥ. Οι υπόλοιποι διατίθενται με τρόπο ώστε να επιβραβεύεται η συνεργασία ανάμεσα στα έργα και στα προγράμματα

-Εφαρμογή εξωστρεφούς πολιτικής συνεργασιών επικεντρωμένης σε ερευνητικές ομάδες από χώρες ερευνητικά και τεχνολογικά προηγμένες. Αξιοποίηση πολυθεματικότητας του Κέντρου και στρατηγική προώθηση διονοτιστικής συνεργασίας τόσο σε ελληνικά (π.χ. ΠΕΠ Αττικής και ΕΠΑΝ με τα Ινστιτούτα Επιστήμης Υλικών και Βιολογίας) όσο και σε ευρωπαϊκά προγράμματα. Στόχος είναι η κάθε ερευνητική δραστηριότητα του Ινστιτούτου να είναι μακροπρόθεσμα ανταγωνιστική και αυτοσυντηρούμενη

-Προβολή του παραγόμενου έργου, διάχυση της παραγόμενης γνώσης στην κοινωνία.

-Αύξηση της ανταγωνιστικότητας του Ινστιτούτου με προσέλκυση νέων προγραμμάτων και σημαντικής εξωτερικής χρηματοδότησης. Εξοικονόμηση επιπλέον εσόδων νέων πόρων (συγχρηματοδότηση, έργα παροχής υπηρεσιών, αξιοποίηση διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας, εταιρίες έντασης γνώσης) και εξασφάλιση αναγκαίων σύγχρονων ερευνητικών υποδομών.

-Συντήρηση και ουσιαστική αναβάθμιση του κτιριακών εγκαταστάσεων σε επίπεδο υγιεινής, ασφάλειας και λειτουργικότητας. Αναβάθμιση των εργαστηριακών χώρων (πάγκοι, εστίες, νερό, ηλεκτρικό δίκτυο, εγκατάσταση συστήματος ασφαλείας, έλεγχος πρόσβασης). Ουσιαστική λειτουργία των χώρων οργανολογίας με την εγκατάσταση των μεγάλων/κοινών οργάνων και παράλληλη εξασφάλιση της λειτουργικότητας και της επισκεψιμότητας.

-Συνεργασία και υποστήριξη από το Τμήμα Προγραμμάτων και Αποτίμησης Ερευνών της Δ/σης Τεχνολογικών Εφαρμογών του Κέντρου όχι μόνο πάνω σε θέματα υποδομών αλλά και προγραμμάτων, διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας καθώς και νομικής κάλυψης.

-Κατοχύρωση των πνευματικών δικαιωμάτων με διπλώματα ευρεσιτεχνίας (ελληνικά ή/και διεθνή)-πέραν των δημοσιεύσεων σε διεθνή περιοδικά, ενθάρρυνση και παροχή κάθε είδους κινήτρου και διευκόλυνσης για την δημιουργία εταιριών έντασης γνώσης (spin-off) με την ενεργό συμμετοχή των ερευνητών του ΙΦΧ.

Με το παραπάνω πλαίσιο επιδιώκεται η συντεταγμένη πορεία και ουσιαστική λειτουργία του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας ως αυτόνομης και λειτουργικής ερευνητικής οντότητας με συγκεκριμένο αντικείμενο, σύγχρονη θεματολογία και υποδομή, και απώτερο στόχο την ανάδειξη και διατήρηση της επιστημονικής αριστείας

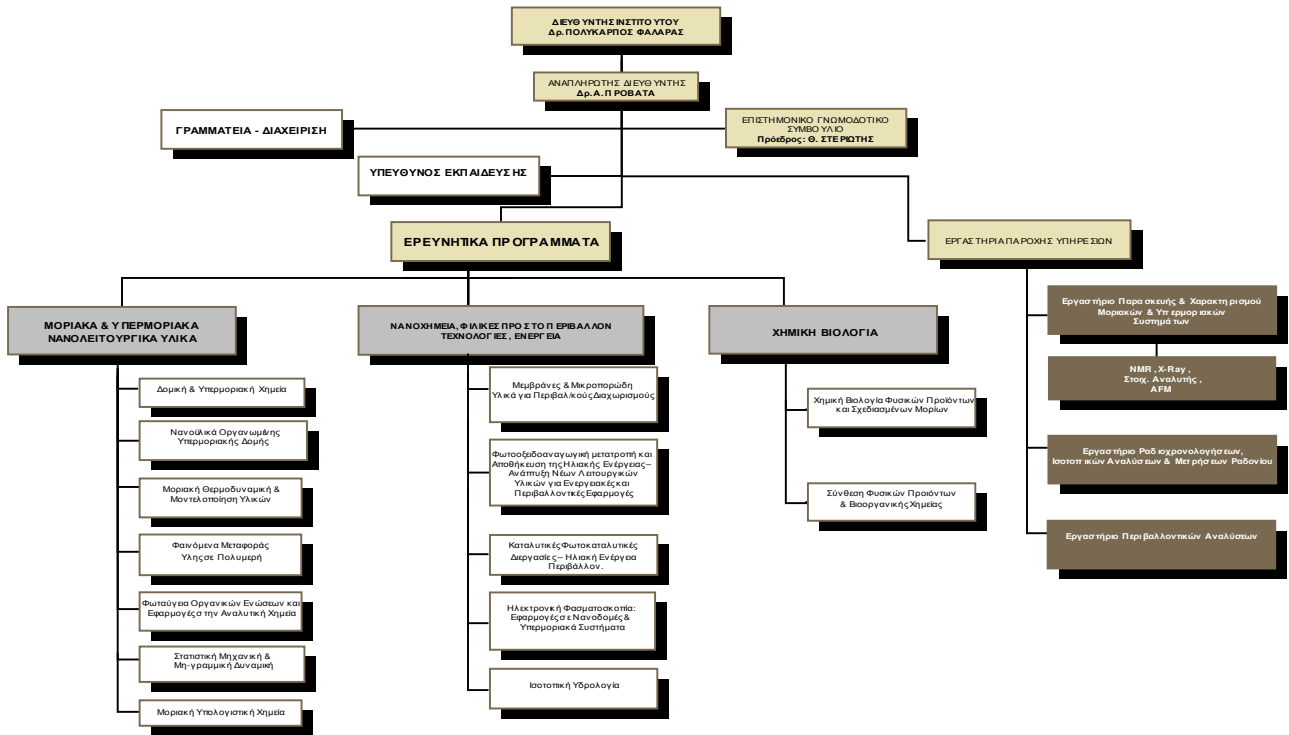
μέσα σ' ένα πολυθεματικό ερευνητικό κέντρο που ενισχύει την συνεργασία, την καινοτομία, την ανταγωνιστικότητα και την επιχειρηματικότητα.

Αγία Παρασκευή, Μάρτιος 2008

Ο Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας

# Εσωτερική Δομή και Οργάνωση Ινστιτούτου Φυσικοχημείας



**Συνοπτικά Στοιχεία απόδοσης  
της Ερευνητικής Δραστηριότητας  
του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας  
για το έτος 2007**

Δημοσιεύσεις σε διεθνή Περιοδικά / in press	82 / 31
Ανακοινώσεις σε συνέδρια	102
Διαλέξεις	44
Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας	5
Διδακτορικές Διατριβές	5
Μεταπτυχιακά Διπλώματα Εξειδίκευσης	5



## Προσωπικό Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

### Ερευνητές ΙΦΧ

Όνοματεπώνυμο	Βαθμίδα	Ειδικότητα	τηλέφωνο	e-mail
1. Δρ. Βουρλούμης Διονύσιος	A'	Χημικός	210 650 3624-3795	<a href="mailto:vourloumis@chem.demokritos.gr">vourloumis@chem.demokritos.gr</a>
2. Δρ. Γιαννακοπούλου Κων/να	A'	Χημικός	210 650 3796-3617	dyanna@chem.demokritos.gr
3. Δρ. Ζουριδάκης Νικόλαος	A'	Φυσικός	210 650 3969-3959	nizouri@chem.demokritos.gr
4. Δρ. Κανελλόπουλος Νικόλαος	A'	Χημ. Μηχαν.	210 650 3973-3977	kanel@chem.demokritos.gr
5. Δρ. Κατσαρός Φώτης	Γ'	Χημικός	210 650 3671	fkats@chem.demokritos.gr
6. Δρ. Κοντός Αθανάσιος	Γ'	Φυσικός	210 650 3632	akontos@chem.demokritos.gr
7. Δρ. Λαζάρου Ιωάννης	B'	Χημικός	210 650 3623	lazarou@chem.demokritos.gr
8. Δρ. Μαυρίδου Ειρήνη	A'	Χημικός	210 650 3793-3617	mavridi@chem.demokritos.gr
9. Δρ. Οικονόμου Ιωάννης	A'	Χημ. Μηχαν.	210 650 3963	economou@chem.demokritos.gr
10. Δρ. Παπαδοκωστάκη Κυριακή	B'	Χημικός	210 650 3639-3661	kpadok@chem.demokritos.gr
11. Δρ. Παπαδόπουλος Κυριάκος	A'	Χημικός	210 650 3647-3646	kyriakos@chem.demokritos.gr
12. Δρ. Πιτσινός Εμμανουήλ	A'	Χημικός	210 650 3689-3654	pistolis@chem.demokritos.gr
13. Δρ. Πιστόλης Γεώργιος	B'	Χημικός	210 650 3637-3422	pitsinos@chem.demokritos.gr
14. Δρ. Προβατά Αστέρω	A'	Φυσικός	210 650 3964	aprovata@limnos.chem.demokritos.gr
15. Δρ. Ρωμανός Γεώργιος	Γ'	Χημ. Μηχαν.	210 650 3981	groman@chem.demokritos.gr
16. Δρ. Σανοπούλου Μερόπη	A'	Χημικός	210 650 3785-3620	sanopoul@chem.demokritos.gr
17. Δρ. Σαρειδάκης Εμμανουήλ	Δ'	Φυσικός	210 650 3628-3658	esaridak@chem.demokritos.gr
18. Δρ. Σιδεράτου Ωραιοζήλη	Γ'	Χημικός	210 650 3616-3638	zili@chem.demokritos.gr
19. Δρ. Στεριώτης Θεόδωρος	B'	Χημικός	210 650 3614-3636	tster@chem.demokritos.gr

20. Δρ. Στεφανόπουλος Κων/νος	Γ'	Φυσικός	210 650 3606	stefan@chem.demokritos.gr
21. Δρ. Τσιούρβας Δημήτρης	Α'	Χημ. Μηχαν.	210 650 3616	tsiourvas@chem.demokritos.gr
22. Δρ. Φαλάρας Πολύκαρπος	Α'	Φυσικός	210 650 3644-3652	papi@chem.demokritos.gr
23. Δρ. Χισκιά Αναστασία	Α'	Χημικός	210 650 3643-3642	hiskia@chem.demokritos.gr

## ΙΑΧ

24. Δρ. Αρκάς Μιχάλης			210 650 , 3639 - 3638	madchemist@chem.demokritos.gr
25. Δρ. Βέργαδου Νίκη			210 650 -3960, 3963	nvergad@chem.demokritos.gr
26. Δρ. Βιδάλη Βερονίκη			210 650 -3654, 3789	vidali@chem.demokritos.gr cathan@chem.demokritos.gr
27. Αθανασέκου Χρυσούλα			210 650 -3981, 3973	
28. Γκότζιας Αναστάσιος			210 650 -3636, 3614	agotzias@chem.demokritos.gr
29. Κακιζής Νικόλαος			210 650 -3973, 3977	nkakizis@chem.demokritos.gr
30. Παπαγεωργίου Σέργιος			210 650 -3636,3614	spap@chem.demokritos.gr
31. Πιλάτος Γιώργος			210 650 -3973	gpilat@chem.demokritos.gr
32. Σαπαλίδης Ανδρέας			210 650 -3973	asap@chem.demokritos.gr
33. Φάββας Ευάγγελος			210 650 -3636, 3614	Favvas@chem.demokritos.gr

## Διοικητικό Προσωπικό

34. Αρχιμανδρίτη Μαρία - Διαχείριση			210- 650 3648	stratak@chem.demokritos.gr
35. Δουβαρά Βασιλική - Γραμματεία			210 650 3653	vdouvara@chem.demokritos.gr

## Τεχνικό Προσωπικό

36. Γιαννακοπούλου Ελίνα			210 650-3646	elyan@chem.demokritos.gr
37. Λάκτεν Αικατερίνη			210 650-3955	
38. Σασσάλου Σιμεώνη			210-650-3805	

## Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας

39. Δρ Τριάντης Θεόδωρος			210 650-3646, 3643	triantis@chem.demokritos.gr
40. Δρ. Παυλίδου Αναστασία			210 650 3617, 3628	paulidou@chem.demokritos.gr

41. Δρ. Ζαχαρόπουλος Νικόλαος	210 650 3961	nzacharo@chem.demokritos.gr
----------------------------------	--------------	-----------------------------

### Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι Δημοκρίτου

42. Αγγελίδου Χρυσή	210 650 3617, 3628	agelidou@chem.demokritos.gr
43. Αλεξάκος Γεώργιος	210 650 3633	galexakos@chem.demokritos.gr
44. Βαγγέλη Ολγα	210 650 3973	ovangeli@chem.demokritos.gr
45. Γαλανού Μαρία	210 650 3638, 3616	galanou@chem.demokritos.gr
46. Ευθυμιάδου Ελένη	210 650 3624	'elefth@chem.demokritos.gr'
47. Ζάρας Αριστοτέλης	210 650 3671, 3623	zaras@chem.demokritos.gr
48. Καλογιαννίδης Δημήτριος	210 650 3647, 3646	
49. Κόντη Γεωργία	210 650 3632	gkonti@chem.demokritos.gr
50. Κοντογιάννη Χριστίνα	210 650 3638	chrikon@chem.demokritos.gr
51. Κούβαρης Νίκος	210 650 3964	
52. Μαυρίδης Ιωάννης	210 650 3611, 3795	
53. Μπαλωμένου Ιωάννα	210 650 3637	balomenou@chem.demokritos.gr
54. Νουσίου Βασιλική	210 650 3964	vnousiou@chem.demokritos.gr
55. Τσιμελή Αικατερίνη	210 650 3633	ktsimeli@chem.demokritos.gr
56. Τσόγκας Ιωάννης	210 650 3638	tsogas@chem.demokritos.gr
57. Χατζηβασίλογλου Ευαγγελία	210 650 3632	evachatz@chem.demokritos.gr

### Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες

58. Ζωγράφος Αλέξανδρος	210 650 3611, 3795
59. Θεοδοσίου Θεοδόσης	210 650 3669
60. Καζατζής Αθανάσιος	
61. Καρανίκας Στέλιος	210 650 3961
62. Κατσαλούλης Παναγιώτης	210 650 3964
63. Κατσαρού Μαρία	210 650 3611, 3795
64. Κατσούλης Ιωάννης	
65. Κυθραιώτη Γεωργία	210 650 3611, 3795
66. Λεοντιάδου Χάρη	210 6503963
67. Λογοθέτη Ευαγγελία	
68. Λυκοδήμος Βλάσσης	210 650 3632 - 3640
69. Maffeo Davide	210 650 3973
70. Παπακυριακού Αθανάσιος	210 650 3611, 3795
71. Ρισάνου Αναστασία	210 650 3961,3963
72. Σπυριούνη Θεοδώρα	210 650 3961 -3963
73. Στεργιόπουλος Θωμάς	210 650 3632
74. Στρογγυλός Αλέξανδρος	210 650 3654 - 3789
75. Τζιβελέκα Αικατερίνη	210 650 3638, 3669
76. Χιωτέλης Αρης	210 650 3654 - 3789

### Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα

77. Αθηναίος Νικόλαος	210 650 3654 - 3789
-----------------------	---------------------

78. Αναγνώστου Σοφία	210 650 3959
79. Αναστασοπούλου Πανούλα	210 650 3611, 3795
80. Αντωνάρακη Σταματία	210 650 3633
81. Βεζύρη Χαριτωμένη	210 650 3973
82. Βερμισόγλου Ελένη	210 650 3981
83. Γιαννουράκου Μαριάννα	210 650 3963
84. Δακανάλη Μαριάννα	210 650 3654 - 3789
85. Δημητρακόπουλος Ιωάννης	
86. Kyllonen Lasse	
87. Καλούδη Χατζέα Αντωνία	
88. Κόρμαλη Πηγή	210 650 3633
89. Λαμπροπούλου Μαρία	210 650 3617, 3628
90. Λαμπρόπουλος Αναστάσιος	210 650 3973
91. Λανίτου Οριάννα	210 650 3646
92. Μακροδημήτρη Ζωή	210 650 3960
93. Μανώλη Κυριακή	210 650 3639
94. Μητσοπούλου Κορνηλία	210 650 3654 - 3789
95. Οικονόμου Θωμάς	210 650 3964
96. Παπαδοπούλου Άννα	
97. Σούλας Δημήτριος	210 650 3639
98. Στεριώτη Νικολέτα	
99. Τσιλούκα Αικατερίνη	
100. Φωτιάδου Κατερίνα	210 650 3617, 3628
101. Χασίμη Άλμπάνα	210 650 3639
102. Χασιώτη Ειρήνη	210 650 3633
103. Χατζηευθυμίου Σπυρίδων	210 650 3617, 3628
104. Χερουβείμ Μαρία	210 650 3639
105. Χριστοδουλέας Διονύσιος	210 650 3646
106. Κόντος Άθανάσιος	210 650 3632 - 3640
107. Ρόζη Ευαγγελία	210 650 3632
108. Αλέξάκη Νίκη	210 650 3632
109. Καντώνης Γιώργος	210 650 3632-3658
110. Κατσανάκη Αντιγόνη	210 650 3632

### Συνεργάτες σε Προγράμματα

111. Ακύλας Βίκτωρας	210 650 3973
112. Αρνίδη Ελένη	210 650 3959 - 3957
113. Γεωργάκη Χριστίνα	210 650 3611, 3795
114. Ζίνγκερ Εντουαρτ	210 650 3973

115. Τσούκληρης Δημήτριος	210 650 3635
116. Πάντος Αλέξανδρος	210 650 3638
117. Χρήστου Στέφανος	210 650 3973

#### **Εξωτερικοί Συνεργάτες**

118. Θεοδώρου Δώρος	
119. Καλούδης Τριαντάφυλλος	210 650 3633
120. Κανιάς Γεώργιος	
121. Κατσαρός Νικόλαος *	
122. Κουλαδούρος Ηλίας	210 650 3654
123. Οξενκιουν Κλάους *	
124. Παλαιός Κων/νος *	210 650 3666
125. Παπακωνσταντίνου Ηλίας *	210 650 3642
126. Πετρόπουλος Ιωάννης*	210 650 3787
127. Φιλιπόπουλος Αθανάσιος	
128. Χατζούδης Ευγένιος*	210 650 3649

\* Συνταξιούχος Ερευνητής του ΙΦΧ

# Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

## Πρόγραμμα 1

Μοριακά & Υπερμοριακά  
Νανολειτουργικά Υλικά

## 1.1 ΔΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

### Αντικείμενο Έργου

Η κύρια δραστηριότητα επικεντρώνεται στον προσδιορισμό της μοριακής δομής και των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων υπερμοριακών συστημάτων κυκλοδεξτρινών, πρωτεϊνών και νουκλεϊκών οξέων. Οι επί μέρους τομείς είναι:

1. *Συστήματα ξενιστού-ξενιζομένου μορίου*. Μελετάται ο εγκλεισμός βιοδραστικών μορίων καθώς και προτύπων ενώσεων στη κοιλότητα των κυκλοδεξτρινών και προσδιορίζεται η δομή και οι λεπτομερείς αλληλεπιδράσεις, είτε σε υδατικά διαλύματα με φασματοσκοπία NMR είτε στην στερεά κατάσταση με κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ. Κατ' αυτόν τον τρόπο κατανοούνται διαδικασίες όπως της μοριακής αναγνώρισης, των μη-οποιοπολικών αλληλεπιδράσεων, της εναντιοεκλεκτικότητας, καθώς και δυναμικές διεργασίες. Δυνατές εφαρμογές περιλαμβάνουν επιλεκτική σύνδεση του ξενιζομένου μορίου, ελεγχόμενη αποδέσμευση και φαρμακευτικά έκδοχα.

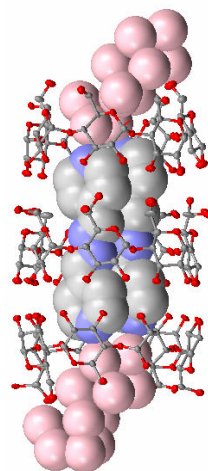
2. Σύνθεση και διερεύνηση των δυνατοτήτων νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για βιοιατρικές εφαρμογές. Τα παράγωγα αυτά:

(α) εγκλωβίζουν μικρά βιοδραστικά μόρια (β) αλληλεπιδρούν με μεγαλομόρια όπως DNA, RNA, πρωτεΐνες. (γ) διαπερνούν τις κυτταρικές μεμβράνες (δ) συμπλέκονται με ιόντα μετάλλων π.χ. *Gd(III)* (νέοι απεικονιστικοί παράγοντες) (ε) συνδέονται μη-ομοιοπολικά μεταξύ τους δημιουργώντας βιομιμητικές δομές

3. Σύνθεση νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για εφαρμογές στη νανοτεχνολογία. Τα παράγωγα αυτά:

(α) συνδέονται με επιφάνειες μετάλλων (π.χ. χρυσός) (β) εναποτιθέμενα σε επιφάνειες δημιουργούν νανοδομές με οργάνωση σε 2D (γ) αποτελούν το υπόστρωμα για την δημιουργία διδιάστατων υπερμοριακών δομών ικανών να μεταδίδουν ηλεκτρικό ή φωτεινό σήμα κατά συγκεκριμένη κατεύθυνση.

4. *Κρυσταλλογραφία Μακρομορίων*. (α) Προσδιορισμός της δομής φυσικών και μεταλλαγμένων μελών νέας οικογένειας φερρεδοξινών με δύο πλειάδες [4Fe4S] από επιλεγμένα παθογόνα βακτήρια, (*Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*). Οι φερρεδοξίνες αυτές έχουν πολύ χαμηλά δυναμικά οξειδοαναγωγής, τα οποία είναι διαφορετικά μεταξύ των δύο πλειάδων τους. (β) Προσδιορισμός δομής συμπλόκων DNA και RNA και τροποποιημένων κυκλοδεξτρινών. (γ) Προσδιορισμός δομής μυϊκών πρωτεϊνών.



### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ Ειρήνη Μουστακαλή-Μαυρίδου, Ερευνητής Α, Υπεύθυνος έργου, Δρ. Κωνσταντίνα Γιαννακοπούλου, Ερευνητής Α

**Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Αναστασία Παυλίδου  
**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Χρυσή Αγγελίδου (έως 9/2007)

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Davide Maffeo, (STREP "TASNANO" έως 6/2007, ΠΕΠ έως 30/11/2007), Δρ. Εμμανουήλ Σαριδάκης (εξωτερική χρηματοδότηση).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Lasse Kyllonen (MC RTN "UNINANOCUPS", έως 31/07/2007), Μαρία Λαμπροπούλου (ΠΕΝΕΔ), Σ. Χατζηευθυμίου (μερική χρηματοδότηση), Κατερίνα Φωτιάδου (μερική χρηματοδότηση)

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ευγένιος Χατζουδής

## Δημοσιεύσεις

1. Mourtzis, N.; Eliadou, K.; Aggelidou, C.; Sophianopoulou, V.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "Synthesis and characterization of *per*(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins and studies of their effect on DNA", *Org. Biomol. Chem.* **2007**, *5*, 125 - 131. [Hot article](#).
2. Paulidou, A.; Giastas, P.; Mourtzis, N.; Yannakopoulou, K.; Mavridis, I. M. "Crystal and Molecular Structure of *Octakis*(6-bromo-6-deoxy)- $\gamma$ -cyclodextrin. A novel stacking of a distorted macrocycle" *Carbohydr. Res.* **2007**, *342*(11), 1519-1524.
3. Chatziefthimiou, S. D.; Yannakopoulou, K.; Mavridis, I. M. "A novel packing of  $\beta$ -Cyclodextrin enclosing an unusual organization of guest: The inclusion complex  $\beta$ -Cyclodextrin/4-pyridinealdazine" *Cryst. Eng. Commun.* **2007**, *9*, 976-979. [Hot article](#).
4. Karathanos, V. T.; Mourtzinis, I.; Yannakopoulou, K.; Andrikopoulos, K. N. K. "Study of the solubility, antioxidant activity and structure of inclusion complex of vanillin with  $\beta$ -cyclodextrin", *Food Chem.* **2007**, *101*, 652-658.
5. Mourtzinis, I.; Salta, F.; Yannakopoulou, K.; Chiou, A.; Karathanos, V. T. "Encapsulation of olive leaf extract in  $\beta$ -Cyclodextrin" *J. Agr. Food Chem.* **2007**, *55*, 8088-8094.
6. Hadjoudis, E.; Chatziefthimiou, S. D.; Mavridis, I. M. "Anils: Photochromism by H-transfer", *Curr. Org. Chem*, invited review. *In print*.
7. Mourtzis, N.; Paravatou, M.; Mavridis, I. M.; Roberts, M. L.; Yannakopoulou, K. "Synthesis, characterisation, and remarkable biological properties of cyclodextrins bearing guanidino-alkylamino and aminoalkylamino groups on their primary side", *Chem. Eur. J.*, *in print*.
8. "Protein crystallization: from purified protein to diffraction-quality crystal", Chayen, N. E.; Saridakis, E. *Nature Methods*, *in print*.

## Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Maffeo, D.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "New ligands for lanthanide ions based on cyclodextrins", in COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3<sup>rd</sup> Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.
2. Paulidou, A.; Mavridis, I. M. "X-ray structure of the inclusion complex between  $\beta$ -cyclodextrin and tolbutamide", in COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3<sup>rd</sup> Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.
3. Aggelidou, C.; Yannakopoulou, K. "Study of the interaction of *per*(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins with nucleotides and nucleosides" COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3<sup>rd</sup> Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.
4. Maffeo, D.; Paulidou, A. ; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K.; Viswanathan, C.; Glezos, N. "Novel sulfur modified cyclodextrins able to form monolayers on gold", 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.
5. Paulidou, A. ; Mavridis, I. M. "The inclusion complex of  $\beta$ -cyclodextrin and the hypoglycemic agent tolbutamide" 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.
6. Maffeo, D.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "New ligands for lanthanide ions based on cyclodextrins", 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών
7. Lampropoulou, M.; Yannakopoulou, K. "Sugar Appended Cyclodextrins for Molecular Inclusion of Antimicrobial Agents" 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.
8. Kyllonen, L.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K.; Thanassoulas, A.; Nounesis, G.; Faiz, J. A.; Pikramenou, Z. "Semirotaxane formation between an anthracene octanoic acid axle and a trimeric, metal- assembled cyclodextrin: binding studies" 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.
9. Aggelidou, C.; Mourtzis, N.; Eliadou, K.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "Synthesis, characterisation and binding of *per*(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins with phosphorylated substrates" 2<sup>o</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.



10. Chatziefthimiou S. D.; Mavridis, I. M. "Unusual organization of host and guest molecules in the inclusion complex  $\beta$ -Cyclodextrin/4-pyridinealdazine", The 39<sup>th</sup> crystallographic meeting at Erice, "Engineering of Crystalline Materials Properties: State-of-the-Art, Design and Applications", June 7-17, **2007**, Erice, Italy.
11. Faiz, J. A.; Kyllönen, L. E. P.; Pikramenou, Z.; Williams, R. M.; de Cola, L.; Thanassoulas, A. ; Nounesis, G.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "Light switched energy transfer and detailed binding studies between an anthracene guest and trimeric Ru(II) cyclodextrin" *RSC UK Macrocyclic and Supramolecular Chemistry Group Meeting*, Dec. 18-19, **2007**, Manchester, UK.

### Διαλέξεις

1. Κ. Γιαννακοπούλου, "Properties of Cyclodextrins as a Result of Structural Interventions", 23 Φεβρουαρίου **2007**, Τμήμα Χημείας, Παν/μιο Κρήτης.
2. Ειρ. Μ. Μαυρίδου, "Cyclodextrins: Molecular Containers of nanometer size" 18 Ιουλίου **2007**, Ινστιτούτο Χημικής Μηχανικής & Χημικών Διεργασιών Υψηλής Θερμοκρασίας, ΙΤΕ, Πάτρα.
3. Κ. Γιαννακοπούλου, "Modified Cyclodextrins for nano- and bio-technological applications", COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3<sup>rd</sup> Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.
4. Ειρ. Μ. Μαυρίδου, "Optical and electro-active molecular wires organised by aqueous cyclodextrin-assembly of metallo-units" COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3<sup>rd</sup> Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos" Athens, Greece.

### Διδακτικό Έργο

#### Διδασκαλία

1. Ειρήνη Μ. Μαυρίδου, «Αρχές Προσδιορισμού Μοριακής Δομής με Περίθλαση Ακτίνων-Χ από Μονοκρύσταλλο», Μεταπτυχιακό μάθημα στο Διαπανεπιστημιακό Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «*ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗ ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ*», Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Αθηνών, 30 Νοεμβρίου-7 Δεκεμβρίου **2007** (6 ώρες)
2. Κ. Γιαννακοπούλου, «NMR SPECTROSCOPY-Applications in Chemistry» (in English) Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, 10 May-28 June **2007** (17.5 ώρες).
3. Κ. Γιαννακοπούλου "Drug release and delivery systems: cyclodextrins as molecular carriers, tailoring structure towards specific molecular properties" 3<sup>rd</sup> International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology" ΕΚΕΦΕ «Δ», June 25 - July 6, **2007**.
4. Κ. Γιαννακοπούλου, "Drug Inclusion in Cyclodextrins Monitored in situ by NMR spectroscopy", 3<sup>rd</sup> International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology" ΕΚΕΦΕ «Δ», June 25 - July 6, **2007**.
5. Ειρήνη Μ. Μαυρίδου "X-ray diffraction characterisation of drug inclusion in Cyclodextrins and 3-D visualization" 3<sup>rd</sup> International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology" ΕΚΕΦΕ «Δ», 25 June -6 July **2007**.
6. Ε. Σαρειδάκης, Α. Παυλίδου & D. Maffeo: διδασκαλία εργαστηρίων στο 3<sup>rd</sup> International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology" ΕΚΕΦΕ «Δ», 25 June -6 July **2007**.
7. Κ. Γιαννακοπούλου, «Κυκλοδεξτρίνες: αυτοοργάνωση, εγκλωβισμός και μεταφορά μορίων», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ «Δ», 9-20 Ιουλίου **2007**.

### Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Πέτρος Γκιάστας, «Μοριακές δομές των βακτηριακών φερρεδοξινών *Pa Fd* και *Ec Fd*» Διδακτορική Διατριβή, Χημικό Τμήμα, Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιούλιος **2007**.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Ανάπτυξη νέων φαρμακευτικών μορφών: Μοριακός εγκλεισμός αντιμικροβιακών σε νέες ειδικά τροποποιημένες κυκλοδεξτρίνες με στόχο την επιλεκτική προσβολή παθογόνων πολυανθεκτικών βακτηριακών στελεχών", ΠΕΝΕΔ, 57528.2 €, 2006-2008.
2. "Uni-directional nanoscale supramolecular wires assembled by photo- and electro-active metallo-cyclodextrin cups", EU MC Research Training Network *UNI-NANOCUPS*, Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: (ΙΦΧ και ΙΜΗΛ): 202 000. €, 1/1/2004 – 31/12/2007.
3. "Tools and Technologies for the Analysis and Synthesis of Nanostructures" EU STREP: TASNANO, Χρηματοδότηση ΙΦΧ: € 50 000, 1/1/2005 – 31/6/2008.
4. "A Network for Bringing NANOTECHNOLOGIES TO LIFE", EU Networks of Excellence *NANO2LIFE*, Priority 3-NMP 3.4.1.2-1 Nanotechnology. Συνεργασία Ινστιτούτων ΙΦΧ, ΙΜΗΛ, ΙΡΡΠ. Ο προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: ποικίλει ανά έτος, για το 2007: 71.9 κ€, 1/2/2004 – 31/1/2008.
5. "Αυτοοργανωμένα υπερμοριακά υλικά με ηλεκτρικές και οπτικές ιδιότητες", επιχορήγηση από το Εμπειρικό Ίδρυμα, 12 κ€, 2004 -.
6. "Optical and electro-active molecular wires organised by aqueous cyclodextrin-assembly of metallounits", COST, Action 31, 2005-2009.
7. "Large Facilities Programme" for Access to the European Synchrotron Radiation Source DESY, Hamburg, Germany, EMBL Outstation. Financial Support under the EU Community for the projects "Natural and Derivatized Cyclodextrins and their Inclusion Complexes" and "Structure of Bacterial 2[4Fe-4S] Ferredoxins", 2000 – σήμερα, 1.317 κ€.

## Ερευνητική Υποδομή

NMR 250 (Bruker) και 500 MHz (Bruker) (όργανα ΙΦΧ), αυτόκλειστο (Parr), Περιθλασίμετρο 4-κύκλων, Συσκευή συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων μακρομορίων (Rigaku, R-axis IV) και συσκευή χαμηλών θερμοκρασιών (Oxford Cryosystems), φασματοφωτόμετρο Κυκλικού Διχρωϊσμού (JASCO) , στερεοσκοπικό μικροσκόπιο (Olympus).

## Συνεργασίες

Δρ. Ι. Λαζάρου, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Ινστιτούτο Φυσικοχημείας (υπολογισμοί σε κυκλοδεξτρίνες), Δρ. Ν. Γλέζος, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής (λειτουργικά υλικά για οπτοηλεκτρικές εφαρμογές), Dr. Zoe Pikramenou, Prof. M. J. Hannon, University of Birmingham (παράγωγα κυκλοδεξτρινών, Επ. Καθηγητής Π. Κυρίτσης, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών (φερρεδοξίνες), Dr. J.-M Moulis, CEA, Grenoble, France (φερρεδοξίνες), Αναπλ. Καθηγ. Α. Αντωνιάδου-Βυζά, Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών (εφαρμογή κυκλοδεξτρινών για αντιμικροβιακή δράση), Dr. Vladimir Karginov, Innovative Biologics, Inc., USA (βιολογικές μελέτες), Dr. M. Wilmans EMBL-Hamburg, Germany (κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών), Δρ. Μ. Παραβατού, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Ινστιτούτο ΡΡΠ (μελέτες σε κύτταρα), Δρ. Λ. Λεοντιάδης, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Ινστιτούτο ΡΡΠ: (φασματοσκοπία μάζας), Δρ. Β. Καραθάνος, Χαροκόπειο Παν. (εφαρμογές κυκλοδεξτρινών σε θέματα τροφίμων). Dr. M. Roberts, REGULON, Inc. (βιολογικές μελέτες).

## Άλλες Δραστηριότητες

**Συνδιοργάνωση του 3<sup>rd</sup> Summer School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology"** ΕΚΕΦΕ «Δ», 25 June -6 July, **2007**. Το σχολείο αποτελεί το επίσημο σχολείο του Δικτύου Αριστείας Nano2Life από το 2006.

### Ε. Μαυρίδου

1. Αντιπρόεδρος του Governing Board του Δικτύου Αριστείας *Nano2Life*
2. Υπεύθυνος του έργου "Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων" που λειτουργεί με τη συμμετοχή τριών Ινστιτούτων από το Δημόκριτο (ΙΦΧ, ΙΒ και ΙΡΡΠ) και επτά άλλων ερευνητικών ή πανεπιστημιακών φορέων της χώρας.

3. Αξιολογήτης δημοσιεύσεων των περιοδικών της Royal Soc. of Chemistry, της Am. Chem. Soc, Carbohydr. Res., J. Mol. Struct., J. Phys. Org. Chem., J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem.
4. Αντιπρόεδρος της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, 2006-2008.

*Κ. Γιαννακοπούλου*

1. Υπεύθυνη Εργαστηρίου NMR (500 MHz και NMR 250 MHz) για το ΙΦΧ.
2. Μέλος Γνωμοδοτικού Συμβουλίου Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
3. Υπεύθυνος πυρασφάλειας Κτιρίου Σχολής.
4. Μέλος της επιτροπής εξετάσεων υποτρόφων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας στο μάθημα της Οργανικής Χημείας.
5. Κριτής στα Περιοδικά J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem., Tetrahedron Lett., Phys. Chem. Chem. Phys. (PCCP), J. Org. Chem., Org. Biomol. Chem., Int. J. Molec. Sci.

*Ε. Σαριδάκης*

1. Του απενεμήθη ο τίτλος: Honorary Research Fellow, Imperial College London, Faculty of Medicine, Division of Biomedical Sciences, SORA Division
2. Κριτής στο Περιοδικό Crystal Growth & Design
3. Αξιολογητής ερευνητικών προτάσεων για Israel Science Foundation (Life Sciences & Medicine)

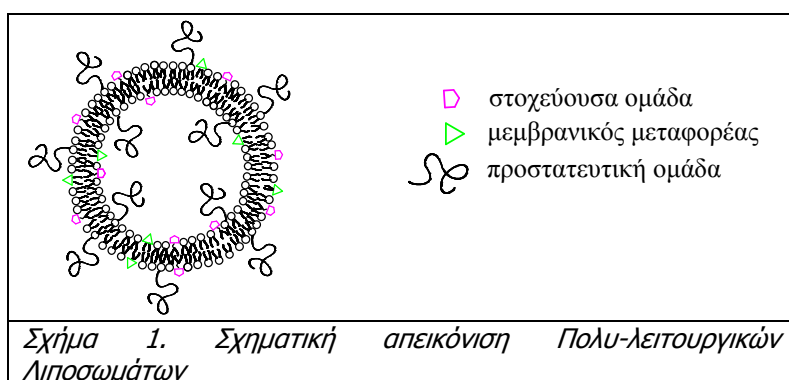
## 1.2 ΝΑΝΟ-ΥΛΙΚΑ ΟΡΓΑΝΩΜΕΝΗΣ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

### Αντικείμενο Έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην σύνθεση και μελέτη των φυσικοχημικών ιδιοτήτων λειτουργικών νανο-υλικών και συγκεκριμένα λιποσωμάτων και δενδριτικών πολυμερών, με έμφαση στις εφαρμογές τους ως φορείς φαρμάκων/γονιδιακού υλικού αλλά και στην απομάκρυνση οργανικών ρύπων από το νερό. Ειδικότερα περιλαμβάνει:

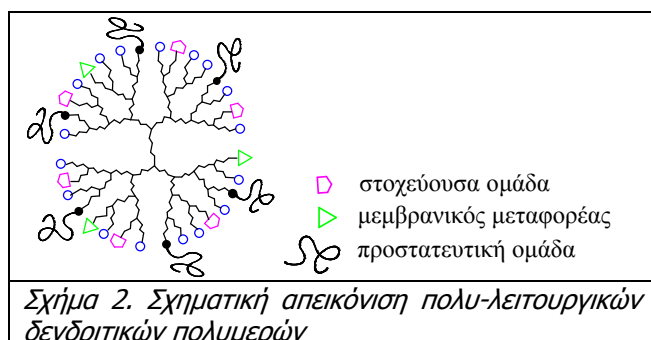
#### 1. Πολυ-λειτουργικά Λιποσώματα ως φορείς φαρμάκων

Λιποσώματα με αναγνωρίσιμες ομάδες χρησιμοποιούνται σε πειράματα μοριακής αναγνώρισης με συμπληρωματικά λιποσώματα ή απλά μόρια σε μια προσπάθεια προσομοιώσεως της συμπεριφοράς των κυττάρων. Η εξωτερική επιφάνεια των λιποσωμάτων τροποποιείται με κατάλληλες ομάδες για την εκτέλεση αυτών των πειραμάτων με απώτερο όμως στόχο την ανάπτυξη αποτελεσματικών φορέων φαρμάκων ή γονιδιακού υλικού που συνδυάζουν σταθερότητα, ικανότητα στοχεύσεως και δυνατότητα διελύσεως δια μέσου των κυτταρικών μεμβρανών, Σχήμα 1.



#### 2. Πολυ-λειτουργικά Δενδριμερικά και Υπερδιακλαδισμένα Πολυμερή ως Φορείς Φαρμάκων και Γονιδιακού Υλικού

Πραγματοποιείται πολλαπλή εισαγωγή λειτουργικών ομάδων σε Δενδριμερικά και Υπερδιακλαδισμένα (δενδριτικά) πολυμερή με σκοπό την ανάπτυξη φορέων φαρμάκων και γονιδιακού υλικού οι οποίοι να εμφανίζουν ταυτόχρονα ικανότητα στοχεύσεως, σταθερότητα στο βιολογικό περιβάλλον και δυνατότητα διελύσεως δια μέσου των κυτταρικών μεμβρανών, Σχήμα 2. Φαρμακευτικές ενώσεις διαλυτοποιούνται στις νανοκοιλότητες, και μελετάται η ικανότητα μεταφοράς τους είτε φυσικοχημικά χρησιμοποιώντας πολυστοιβαδικά λιποσώματα ως κυτταρικά μοντέλα είτε *in vitro* χρησιμοποιώντας καρκινικές κυτταρικές σειρές. Μελετάται επίσης η χρήση λειτουργικών δένδριτικών πολυμερών ως φορείς γονιδιακού υλικού καθώς το DNA σχηματίζει σύμπλοκα με κατάλληλα συντεθειμένα θετικά φορτισμένα δένδριτικά πολυμερή. Η μελέτη των συμπλόκων δένδριτικών πολυμερών-DNA γίνεται τόσο με φυσικοχημικές μεθόδους όσον και σε *in vitro* πειράματα χρησιμοποιώντας κατάλληλες κυτταρικές σειρές.



### 3. Δενδριτικά Πολυμερή με Εφαρμογή στη Παραγωγή Υπερκαθαρού Νερού

Κατάλληλα τροποποιημένα δενδριτικά πολυμερή έχουν την ιδιότητα «νανοσπόγγων», στις κοιλότητες των οποίων μπορούν να εγκλειστούν λιπόφιλες ενώσεις. Έχουν επίσης παρασκευασθεί οργανοπυριτικά δενδριμερή τα οποία έχουν επικαλύψει κεραμικά φίλτρα για την παραγωγή υπερκαθαρού νερού στο οποίο οι παραμένοντες ρύποι να βρίσκονται σε επίπεδο ppb. Πραγματοποιήθηκε η ανάπτυξη και η βελτιστοποίηση μεθόδων εναπόθεσής τους σε κεραμικές μεμβράνες για την επιτυχή εφαρμογή τους σε μονάδες καθαρισμού νερού.

#### **Προσωπικό**

**Ερευνητές: Δρ Κων/νος Παλαιός, Ερευνητής Α, υπεύθυνος έργου μέχρι 17/7/2007.**

**Δρ Δημήτρης Τσιούρβας, Ερευνητής Α, υπεύθυνος έργου από 17/7/07.**

**Δρ Ωραιοζήλη Σιδεράτου, Ερευνητής Γ**

**ΙΔΑΧ:** Δρ Μ. Αρκάς (από 15/3/2007).

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Χριστίνα Κοντογιάννη (μέχρι 16-2-2007), Ιωάννης Τσόγκας (μέχρι 8-5-2007), Μαρία Γαλανού.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ Αικατερίνη-Λητώ Τζιβελέκα (από 1/2/2007, NCP-IP), Δρ. Θεοδόσης Θεοδοσίου (ENTEP).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Νικολέτα Στεριώτη (ΕΠΕΑΚ, άμισθη).

**Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ Κων/νος Παλαιός, υπεύθυνος έργου (από 18/7/2007), Δρ. Αλέξανδρος Πάντος (NCP-IP, άμισθος).

#### **Δημοσιεύσεις**

1. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z. "Molecular engineering of dendritic polymers and their application as drug and gene delivery systems" *Mol. Pharm.* **2007**, *4*, 169-188.
2. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z. "Developing and applying a drug delivery model for liposomal and dendritic multifunctional nanoparticles" *Gene Therapy and Molecular Biology* **2007**, *11*, 117-131.
3. Tziveleka, L.A., Psarra, A-M.G., Tsiourvas, D., Paleos, C.M. "Synthesis and characterization of guanidinylated poly(propylene imine) dendrimers as gene transfection agents" *J. Controlled Release* **2007**, *117*, 137-146.
4. Tsogas, I., Sideratou, Z., Tsiourvas, D., Theodossiou, T.A., Paleos, C.M. "Interactive transport of guanidinylated poly(propylene imine) based dendrimers through liposomal and cellular membranes" *ChemBioChem* **2007**, *15*, 1865-1876.
5. Tsogas, I., Theodossiou, T., Sideratou, Z., Paleos, C.M., Collet, H., Rossi, J.C., Romestand, B., Commeyras, A. "Interaction and transport of poly(l-lysine) dendrigrafts through liposomal and cellular membranes: The role of generation and surface functionalization" *Biomacromolecules* **2007**, *8*, 3263-3270.
6. Allabashi, R., Arkas, M., Hörmann, G., Tsiourvas, D. "Removal of some organic pollutants in water employing ceramic membranes impregnated with cross-linked silylated dendritic and cyclodextrin polymers" *Water Research* **2007**, *41*, 476-486.
7. Pantos, A., Tsogas, I., Paleos, C.M. "Guanidinium group: A versatile moiety inducing transport and multicompartimentalization in complementary membranes", *Biochim. Biophys. Acta,- Biomembranes* (in press).
8. Tziveleka, L.A., Psarra, A-M.G., Tsiourvas, D., Paleos, C.M. "Synthesis and evaluation of functional hyperbranched polyether polyols as prospected gene carriers", *Int. J. Pharm.* (in press).

9. Tsetsekou, A., Arkas, M., Kritikaki, A., Simonetis, S., Tsiourvas, D. "Optimization of hybrid hyperbranched polymer/ceramic filters for the efficient absorption of polyaromatic hydrocarbons from water", *J. Membr. Sci.* (in press).
10. Kontoyianni, C., Sideratou, Z., Theodossiou, T., Tziveleka, L.-A., Tsiourvas, D., Paleos, C. M. "A novel micellar pegylated hyperbranched polyester as prospective drug delivery system for paclitaxel", *Macromolecular Bioscience* (in press).
11. Paleos, C. M., Tsiourvas, D., *Non-Covalent Interactions of Liposomes*, in "Bottom-up nanofabrication: Supramolecules, self-assemblies and organized films", American Scientific Publishers (in press).

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Tziveleka, L.-A., Psarra, A.-M.G., Tsiourvas, D., Paleos, C.M. "Guanidinium functionalized poly(propylene imine) dendrimers as gene delivery systems", COST D31, Workshop on "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions", Athens, Greece, March 28-31, 2007.
2. Pantos, A., Tsiourvas, D., Nounesis, G., Paleos, C.M. "Molecular recognition of guanidinylated dendrimers with complementary multilamellar liposomes", COST D31, Workshop on "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions", Athens, Greece, March 28-31, 2007.
3. Tsogas, I., Theodossiou, T., Sideratou, Z., Paleos, C.M. "Transport of dendrimers bearing guanidinium surface groups through liposomal membranes", COST D31, Workshop on "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions", Athens, Greece, March 28-31, 2007.
4. Tsogas, I., Theodossiou, T.A., Sideratou, Z., Tsiourvas, D., Paleos, C.M., Collet, H., Rossi, J.C., Romestand, B., Commeyras, A. "Interaction and transport of poly(L-lysine) dendrigrafts through liposomal and cellular membranes: the role of generation and surface functionalization", 5<sup>th</sup> International Dendrimer Symposium, Toulouse, France, August 28-September 1, 2007, p. P-99.
5. Koumbi, D., Clement, J.C., Psarra, A.M., Sideratou, Z., Yaouanc, J.J., Chatzouli, M., Samara, M., Loukopoulos, D., Kollia, P. "Detailed studies on the mechanism and factors mediating lipofection potency of cationic phosphonolipid-based gene transfer into human cells", 4<sup>th</sup> International Conference on Stem Cell Gene Therapy, Thessaloniki, Halkidiki, Greece, September 13-17, 2007, .
6. Koumbi, D., Clement, J.C., Psarra, A.M., Yaouanc, J.J., Sideratou, Z., Chatzouli, M., Chiotoglou, I., Vamvakopoulos, N., Kollia, P. "Impact of lipoplex physicochemical properties upon transgene incorporation, stability and mode of nuclear targeting in cationic phosphonolipid- and lipophosphoramidate-mediated transfection into human cells", 4<sup>th</sup> International Conference on Stem Cell Gene Therapy, Thessaloniki, Halkidiki, Greece, September 13-17, 2007.

## Διαλέξεις

1. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Tziveleka, L.-A. "Functional dendritic polymers as drug and gene delivery systems", International conference on Nanomedicine, Chalkidiki, Greece, September 9-11, 2007.
2. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Tziveleka, L.-A. "Multifunctional dendritic drug delivery systems: Design, synthesis, controlled and triggered release, Workshop on Solid Phase Phospholipid and Dendrimer Synthesis, Athens, Greece, December 3, 2007.(Invited Plenary Lecture).
3. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Theodossiou, T. "Modelling cellular membrane transport: Interaction and transport of guanidinylated dendritic polymers through liposomal membranes, International Liposome Society 2007, Liposome Advances: Progress in Drug and Vaccine Delivery, Annual Meeting, London, UK December 8-11, 2007.

## **Διεθνή διπλώματα ευρεσιτεχνίας**

1. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Tsogas, I., Theodossiou, T. "Molecular dendritic transporters". International Application Filing No.: PCT/GR07/000038, Filing date: 23/07/2007.

## **Διδακτικό Έργο**

### **Διδασκαλία**

1. Τσιούρβας, Δ., Διδασκαλία μαθημάτων «Υγρά κρυσταλλικά πολυμερή» και «Δενδριμερή και εφαρμογές τους», Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ "Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της", Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτη:2006-2007 και 2007-2008.
2. Αρκάς, Μ. "Πολυμερισμοί σε Οργανωμένα Συστήματα", Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ "Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της", Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτη:2006-2007 και 2007-2008.
3. Τσιούρβας, Δ., Υπεύθυνος εργαστηριακών ασκήσεων «Εργαστηριακές ασκήσεις μηχανικών ιδιοτήτων και πολυμερικών διεργασιών», Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ "Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της", Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτη:2006-2007 και 2007-2008.
4. Παλαιός, Κ. Μ., "Multifunctional liposomal and dendritic nanoparticles as drug delivery systems", Summer School "Methods in Micro – Nano-technology and Biotechnology", ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 2007.
5. Τσιούρβας, Δ., Laboratories on "Preparation and Characterization of liposomes with Dynamic Light scattering, ζ-potential, Video Enhanced Optical Microscopy, and AFM", Nano2Life International Summer School, Micro – Nanotechnology and Nanobiotechnology, 2007.
6. Σιδεράτου, Ω., Laboratories on "Preparation and Characterization of liposomes with Dynamic Light scattering, ζ-potential, Video Enhanced Optical Microscopy, and AFM", Nano2Life International Summer School, Micro – Nanotechnology and Nanobiotechnology, 2007.

## **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. «Στοχεύοντα Φαρμακευτικά Προϊόντα με Βάση τα Λιπосώματα και τα Δενδριτικά Πολυμερή» Πρόγραμμα ΠΑΒΕΤ-NE 2004, 04BEN4, 70 Κ€, 2005-2007.
2. «Ανάπτυξη Νέας Αντικαρκινικής Τεχνικής: Καταστροφή Καρκινικών Κυττάρων με Βιοχημειοφωταύγεια Χρησιμοποιώντας Στοχεύοντες Φορείς Γονιδίων με βάση τα Λιπосώματα και τα Δενδριτικά πολυμερή», Πρόγραμμα ENTEP, 04EP 61, 78 Κ€, 2006-2008.
3. "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", 'NMP' INTEGRATED PROJECT, Contract No NMP4-CT-2006-026723, 537 Κ€, 2006-2010.
4. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
5. "Preparation and Properties of Functionalized Vesicles as Protocell Models", COST D27 "Prebiotic Chemistry and Early Evolution", 2002-2007.

## **Ερευνητική Υποδομή**

Optical and fluorescence microscopy with imaging facilities, Thermal analysis (DSC, TGA), Spectroscopic methods (NMR, FT-IR, UV-Vis, Fluorescence), Size exclusion chromatography, Dynamic Light Scattering, Multi-angle static light scattering, Zeta-potential, AFM microscopy, X-ray diffraction.

## **Συνεργασίες**

Psarra, A-M.G. (Foundation for Biomedical Research of the Academy of Athens, gene transfection), Allabashi, R. (Institute for Sanitary Engineering and Water Pollution Control, Austria, studies on water pollutants), Tsetsekou, A. (ΕΜΠ, ceramic membranes), Δρ. Νούνεσης, Γ. (Ινστ. ΡΡΠ, ΕΚΕΦΕ "Δ", Θερμοδυναμική μελέτη μοριακής αναγνώρισης), Koumbi, D. (Fox Chase Cancer Center; Philadelphia, USA).

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ Κ. Μ. Παλαιός κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (μέχρι 17-7-2007).
2. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (μέχρι 17-7-2007).
3. Κριτής διεθνών ερευνητικών περιοδικών (Angew. Chem., J. Phys. Chemistry, J. Amer. Chem. Soc. , Chem. Reviews, Macromolecules, Biomacromolecules, Mol. Cryst. Liq. Cryst., J. Colloid and Interface Chemistry, Liquid Crystals, Chemistry, A European Journal, Langmuir, European Polymer Journal).
4. Μέλος του Editorial Advisory Board του περιοδικού "Molecular Crystals and Liquid Crystals".
5. Member of the Management Committee των Προγραμμάτων COST, Action D 27 και D 31.

Ο Δρ Δ. Τσιούρβας κατά το έτος 2007 διατέλεσε κριτής στα επιστημονικά περιοδικά: Chemistry of Materials, European Polymer Journal και Environmental Science and Technology.

Η Δρ Ζ. Σιδεράτου κατά το έτος 2007 διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: European Polymer Journal και Journal of Pharmacy and Pharmacology.

Ο Δρ Μ. Αρκάς κατά το έτος 2007 διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Desalination.

Η Δρ Λ.Α. Τζιβελέκα κατά το έτος 2007 διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Journal of Controlled Release.

*Ο Δρ Θ. Θεοδοσίου κατά το έτος 2007 διετέλεσε*

1. Κριτής σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Biomacromolecules, Biophysical Journal, Journal of the American Chemical Society, Journal of Orthopedic Research.
2. Κριτής της Society for Free Radical Biology & Medicine.
3. Αντιπρόεδρος της επιτροπής δημοσιεύσεων (Publications committee) της American Society for Photobiology.

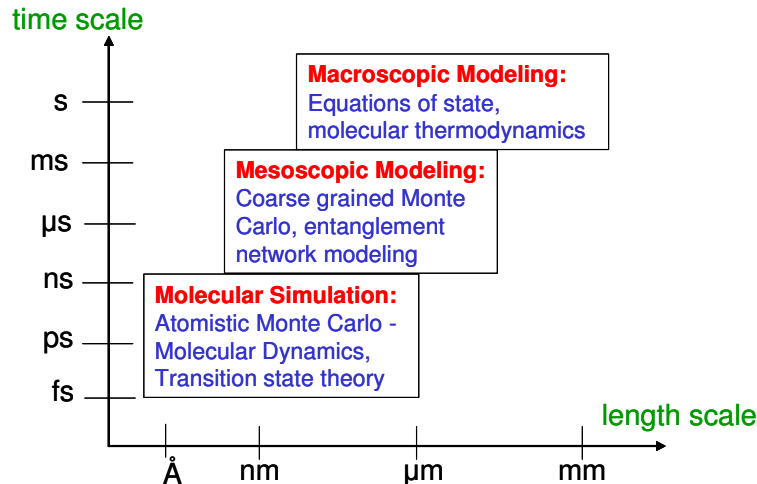
Δημιουργία Εταιρείας Έντασης Γνώσης (spin-off) με την επωνυμία "DENDRIGEN A.E.". Έγκριση επιχορήγησης από ΓΓΕΤ (Κωδικός 05 ΠΡΑΞΕ 01), ύψος επιχορήγησης: 836.381 Ευρώ.

Η εταιρία τεχνοβλαστός 'Dendrigen SA' ιδρύθηκε στο πλαίσιο του προγράμματος ΠΡΑΞΕ Β' με χρηματοδότηση από την ΓΓΕΤ και έχει στόχο την παραγωγή πολυ-λειτουργικών δενδριτικών πολυμερών για α) την ανάπτυξη φορέων φαρμάκων και β) την ανάπτυξη συστημάτων παραγωγής υπερκαθαρού νερού βρίσκεται στον δεύτερο χρόνο λειτουργίας της.



## 1.3 ΜΟΡΙΑΚΗ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ

### Αντικείμενο Έργου



Η ερευνητική δραστηριότητα του ΕΜΘΜΥ εστιάζεται στην ανάπτυξη νέων ιεραρχικών μεθόδων μοντελοποίησης και αλγορίθμων για την υπολογιστική μοντελοποίηση και τον υπολογισμό ιδιοτήτων προηγμένων υλικών σε μοριακό, μεσοσκοπικό και μακροσκοπικό επίπεδο. Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατός ο προσδιορισμός της ποσοτικής συσχέτισης μεταξύ χημικής σύστασης, συνθηκών επεξεργασίας και φυσικών (θερμικών, μηχανικών, ρεολογικών, μεταφοράς, διεπιφανειακών, οπτικών, διηλεκτρικών) ιδιοτήτων, οι οποίες είναι ιδιαίτερα κρίσιμες για το βέλτιστο σχεδιασμό βιομηχανικών διεργασιών και προσδιορίζουν την απόδοση των υλικών κατά την τελική τους χρήση. Παράλληλα, προσδιορίζονται οι μοριακοί μηχανισμοί που ελέγχουν τις σχέσεις δομής – ιδιοτήτων – διεργασιμότητας – απόδοσης και ποσοτικοποιούνται με σκοπό το σχεδιασμό νέων υλικών με προκαθορισμένες ιδιότητες. Η ιεραρχική προσέγγιση που αναπτύσσεται στο ΕΜΘΜΥ ξεκινάει με ατομιστικές προσομοιώσεις σε επίπεδο χαρακτηριστικών μηκών μερικών νανομέτρων και χαρακτηριστικών χρόνων μερικών νανοδευτερολέπτων (πχ. Monte Carlo, μοριακή δυναμική, θεωρία μεταβατικών καταστάσεων σπάνιων γεγονότων) και προχωράει σε μεσοσκοπικό επίπεδο (πχ. μοντελοποίηση δικτύων διαπλοκών, κινητικές προσομοιώσεις Monte Carlo, θεωρία αυτοσυνεπούς πεδίου μη ομογενών συστημάτων) για τη μελέτη φαινομένων σε μεγαλύτερους χρόνους και μήκη. Τέλος, για το βέλτιστο σχεδιασμό νέων διεργασιών, κυρίως στη χημική βιομηχανία και τη βιομηχανία πολυμερών, αναπτύσσονται ακριβή μακροσκοπικά μοντέλα υπό τη μορφή καταστατικών εξισώσεων για τον υπολογισμό της ισορροπίας ρευστών φάσεων και άλλων θερμοδυναμικών ιδιοτήτων πολυσυστατικών μιγμάτων. Οι εξισώσεις αυτές βασίζονται στη στατιστική μηχανική και μπορούν να χρησιμοποιηθούν με ασφάλεια σε συνθήκες για τις οποίες υπάρχουν ελάχιστα ή καθόλου πειραματικά δεδομένα.

*Η ερευνητική δραστηριότητα το 2007 εστιάστηκε κατά κύριο λόγο σε:*

- (α) Μοριακή προσομοίωση ελαστομερών και υαλωδών πολυμερών,
- (β) Διαλύματα και κράματα πολυμερών,
- (γ) Ρόφηση και διάχυση μικρομορίων σε πυριτικά πολυμερή,
- (δ) Μοριακή προσομοίωση πολικών ομοπολυμερών και συμπολυμερών,
- (ε) Μεσοσκοπική προσομοίωση πολυδιάσπαρτων κολλοειδών,
- (στ) Θερμοδυναμικές ιδιότητες πολικών ρευστών σε καθαρή κατάσταση και σε μίγμα,
- (ζ) Ιοντικά υγρά σε καθαρή κατάσταση και σε μίγμα με υπερκρίσιμο διοξείδιο του άνθρακα ή νερό.

## Προσωπικό

**Ερευνητής:** Δρ. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, Ερευνητής Α', Υπεύθυνος του Έργου

**ΙΔΑΧ:** Δρ. Νίκη Βέργαδου

**Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ' βαθμίδας:** Δρ. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος (μέχρι Μάιος 2007, μετά άμισθος συνεργαζόμενος ερευνητής)

### Μεταδιδακτορικοί συνεργάτες σε προγράμματα:

Δρ. Θεοδώρα, Σπυριούνη (STREP)

Δρ. Αναστασία Ρισάνου (ΓΓΕΤ)

Δρ. Ευαγγελία-Γεωργία Λογοθέτη (INTAS)

Δρ. Χάρη Λεοντιάδου (ΓΓΕΤ)

Δρ. Στέλιος Καρανίκας (ΓΓΕΤ – ENTER)

### Υποψήφιοι διδάκτορες σε προγράμματα:

Ζωή Μακροδημήτρη (ΓΓΕΤ – ΠΕΝΕΔ)

Μαριάννα Γιαννουράκου

### Διπλωματικοί προπτυχιακοί φοιτητές:

Ελένη Ανδρουλάκη (Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ)

Βασίλης Νιώτης (Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ)

### Εξωτερικός συνεργάτης:

Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

## Δημοσιεύσεις

1. Z.A. Makrodimitri, R. Dohrn and I.G. Economou, "Atomistic Simulation of Poly(dimethylsiloxane): Force Field Development, Structure and Thermodynamic Properties of Polymer Melt and Solubility of n-Alkanes, n-Perfluoroalkanes, Noble and Light Gases", *Macromolecules*, 40(5), 1720 – 1729 (2007).
2. Tsvintzelis, T. Spyriouni and I.G. Economou, "Modeling of Fluid Phase Equilibria with Two Thermodynamic Theories: Non-Random Hydrogen Bonding (NRHB) and Statistical Associating Fluid Theory (SAFT)", *Fluid Phase Equil.*, 253, 19 – 28 (2007).
3. C. Panayiotou, I. Tsvintzelis and I.G. Economou, "Nonrandom Hydrogen-Bonding Model of Fluids and Their Mixtures. 2. Multicomponent Mixtures", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 46(8), 2628 – 2636 (2007).
4. L.D. Peristeras, A.N. Rissanou, I.G. Economou and D.N. Theodorou, "Novel Monte Carlo Molecular Simulation Scheme Using Identity-Altering Elementary Moves for the Calculation of Structure and Thermodynamic Properties of Polyolefin Blends", *Macromolecules*, 40(8), 2904 – 2914 (2007).
5. A.N. Rissanou, M. Yiannourakou, I.G. Economou and I.A. Bitsanis, "Amorphous and Crystalline States of Ultrasoft Colloids: A Molecular Dynamics Study", *Rheol. Acta*, 46(5), 755 – 764 (2007).
6. A.N. Rissanou, L.D. Peristeras and I.G. Economou, "Calculation of the Effect of Macromolecular Architecture on Structure and Thermodynamic Properties of Linear – Tri-arm Polyethylene Blends from Monte Carlo Simulation", *Polymer*, 48(13), 3883 – 3892 (2007).
7. I.G. Economou, Z.A. Makrodimitri, G.M. Kontogeorgis and A. Tihic, "Solubility of Gases and Solvents in Silicon Polymers: Molecular Simulation and Equation of State Modeling", *Molec. Simul.*, 33(9-10), 851 – 860 (2007).
8. E.K. Karakatsani, I.G. Economou, M.C. Kroon, C.J. Peters and G.-J. Witkamp, "tPC-PSAFT Modeling of Gas Solubility in Imidazolium-Based Ionic Liquids", *J. Phys. Chem. C*, 111(43), 15487 – 15492 (2007).
9. E.K. Karakatsani and I.G. Economou, "Phase Equilibrium Calculations for Multi-Component Polar Fluid Mixtures with tPC-PSAFT", *Fluid Phase Equil.*, 261, 265 – 271 (2007).
10. T. Spyriouni, C. Tzoumanekas, D.N. Theodorou, F. Müller-Plathe and G. Milano, "Coarse-Grained and Reverse-Mapped United-Atom Simulations of Long-Chain Atactic Polystyrene Melts: Structure, Thermodynamic Properties, Chain Conformation, and Entanglements", *Macromolecules*, 40(10), 3876 – 3885 (2007).
11. Z. Kechagia, C. Kiparissides and I.G. Economou, "Determination of Liquid – Gas Partition Coefficients of BuA and MMA by Headspace-Gas Chromatography Utilizing the Phase Ratio Variation Method", *Fluid Phase Equil.*, in press.

12. I.G. Economou, E.K. Karakatsani, G.E. Logotheti, J. Ramos and A. Vanin, "Multi-scale Modeling of Structure, Dynamic and Thermodynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids: *Ab initio* DFT Calculations, Molecular Simulation and Equation of State Predictions", *Oil & Gas Sci. Tech.*, in press.
13. Grenner, I. Tsivintzelis, G.M. Kontogeorgis, I.G. Economou and C. Panayiotou, "Evaluation of the Non-Random Hydrogen Bonding (NRHB) Theory and the simplified Perturbed Chain-Statistical Associating Fluid Theory (sPC-SAFT). I. Vapor – Liquid Equilibria", *Ind. Eng. Chem. Res.*, in press.
14. Tsivintzelis, A. Grenner, I.G. Economou and G.M. Kontogeorgis, "Evaluation of the Non-Random Hydrogen Bonding (NRHB) Theory and the simplified Perturbed Chain-Statistical Associating Fluid Theory (sPC-SAFT). II. Liquid – Liquid Equilibria and Prediction of Monomer Fraction in Hydrogen Bonding Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, in press.

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Z.A. Makrodimitri and I.G. Economou, "Atomistic Simulation of Silicon-Containing Elastomers: Force Field Development, Structure and Thermodynamic Properties of Polymer Melt and Solubility of n-Alkanes, n-Perfluoroalkanes, Noble and Light Gases", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
2. A.N. Rissanou, L.D. Peristeras and I.G. Economou, "Calculation of the Effect of Macromolecular Architecture on Structure and Thermodynamic Properties of Linear - Tri-arm Polyethylene Blends from Monte Carlo Simulation", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
3. E.K. Karakatsani and I.G. Economou, "Prediction of Thermodynamic Properties and Phase Equilibria of Polar Multicomponent Mixtures from Perturbation Theory", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
4. T. Spyriouni, C. Tzoumanekas, and D.N. Theodorou, "Coarse-Grained and Reverse-Mapped United-Atom Simulations of Long-Chain Atactic Polystyrene Melts: Structure, Thermodynamic Properties, Chain Conformation, and Entanglements", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
5. N. Vergadou and D.N. Theodorou, "Computational Study of Permeability of Glassy Polymers to Gases", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
6. M.C. Kroon, E.K. Karakatsani, M. Montero, I.G. Economou, G.-J. Witkamp and C.J. Peters, "Experimental Measurements and Modeling using tPC-PSAFT of the Phase Behavior of the Ternary Ionic Liquid System CO<sub>2</sub> + water + [bmim]NO<sub>3</sub>", 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, Hersonissos, Crete, Greece (2007).
7. E. Tritopoulou and I.G. Economou, "Molecular Simulation of Thermodynamic Properties of Glycols in Pure State and in Aqueous Solutions", 6th Greek Chemical Engineering Conference, Athens, Greece (2007).
8. M. Yiannourakou, I.G. Economou and I.A. Bitsanis, "Phase Equilibria of Polydisperse Colloidal Systems", 6th Greek Chemical Engineering Conference, Athens, Greece (2007).
9. N. Vergadou and D.N. Theodorou, "Molecular simulation towards the Prediction of Permeability of Glassy Polymers to gases", 6th Greek Chemical Engineering Conference, Athens, Greece (2007).
10. I.G. Economou, A. Grenner, I. Tsivintzelis, C. Panayiotou and G.M. Kontogeorgis, "Evaluation of Statistical Mechanics-Based Equations of State for Complex Fluid Mixtures", 6th European Congress of Chemical Engineering, Copenhagen, Denmark (2007).
11. I.G. Economou, E.K. Karakatsani, M.C. Kroon, C.J. Peters and G.-J. Witkamp, "Modeling of Ionic Liquid Binary and Ternary Mixture Phase Equilibria at Low and High Pressure With the tPC-PSAFT", 6th European Congress of Chemical Engineering, Copenhagen, Denmark (2007).
12. I.G. Economou, Z.A. Makrodimitri, A. Tihic and G.M. Kontogeorgis, "Molecular Simulation and Macroscopic Modeling of Thermodynamic and Transport Properties of Silicon-Containing Rubbery Polymer – Solvent Mixtures", 6th European Congress of Chemical Engineering, Copenhagen, Denmark (2007).
13. H. Leontiadou and I.G. Economou, "Structure and Thermodynamic Properties of Poly(ethylene oxide) from Molecular Dynamics Simulations", Thermodynamics 2007, Paris, France (2007).

14. G.-E. Logotheti, F.J. Ramos-Díaz and I.G. Economou, "Molecular Modelling of 1-n-hexyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide Ionic Liquid", Thermodynamics 2007, Paris, France (2007).
15. Z.A. Makrodimitri and I.G. Economou, "Molecular Modeling of Polydimethylsiloxane Mixtures", International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007, Corfu, Greece (2007).
16. M. Yiannourakou, I.A. Bitsanis and I.G. Economou, "Phase Equilibrium of Colloid Systems with Particle Size Dispersity: A Molecular Dynamics Study", International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007, Corfu, Greece (2007).
17. M. Yiannourakou, L. Marsella, F. de Meyer, B. Smit, "Clustering of Proteins Embedded in Lipid Bilayers: a Monte Carlo Study", International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007, Corfu, Greece (2007).
18. F. de Meyer, M. Venturoli, M. Yiannourakou, L. Marsella, B. Smit, "Mesoscopic Simulation Study of Lipid-Mediated Interactions Between Intrinsic Membrane Proteins", AIChE Annual Meeting, Salt Lake City, Utah, USA (2007).
19. I.A. Bitsanis, M. Yiannourakou and I.G. Economou, "Amorphous and Crystalline States of Ultrasoft Colloids: A Molecular Dynamics Study", APS Spring Meeting, Denver, Colorado, USA (2007).
20. A.N. Rissanou, M. Yiannourakou, I.A. Bitsanis, I.G. Economou, "Thermal Vitrification and Crystallization in Concentrated Suspensions of Ultrasoft Colloids", Soft, Complex, and Biological Matter Conference, Città del Mare, Terrasini, Sicily (2007).

## **Διαλέξεις μετά από πρόσκληση**

1. I.G. Economou, "Prediction of Structure and Physical Properties of Complex Fluids Using Molecular Simulation", Department of Chemical Engineering, Technical University of Denmark, Lyngby, January 2007.
2. I.G. Economou, "Structural and Physical Properties of Complex Fluids via Molecular Simulation Methods", Department of Materials Science and Technology, University of Crete, Heraklion, Crete, Greece, April 2007.
3. I.G. Economou, "Solubility of Gases and Solvents in Silicon Polymers: Molecular Simulation and Equation of State Modeling", IVC-SEP Discussion Meeting, Department of Chemical Engineering, Technical University of Denmark, Helsingør, Denmark, June 2007.
4. I.G. Economou, "Materials Property Predictions Using Equation of State Theories", 2nd Innovative Modeling Technology Consortium Meeting and Seminar, National Technical University of Athens, Greece, June 2007.
5. I.G. Economou, "Molecular Simulation of Ionic Liquids: Structure, Thermodynamic and Dynamic Properties", Department of Chemical Engineering, IVC-SEP, Technical University of Denmark, Lyngby, November 2007.

## **Εκπαιδευτικό Έργο**

### **Διδασκαλία**

#### **A. Προπτυχιακά μαθήματα**

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, «Φυσικοχημεία», Μάθημα 2ου Έτους στις Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, 2007 – 08.
2. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Corrosion and Selection of Materials", Department of Chemical Engineering, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark, Fall 2007
3. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, «Προσομοίωση», 7ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2006 – 2007.
4. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, «Εισαγωγή στις Πιθανότητες και την Στατιστική», 4ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2006 – 2007.
5. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, «Εργαστήριο Υλικών», 4ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2006 – 2007.
6. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, «Επιλογή Υλικών για Μελέτες Σχεδιασμού», 9ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2006 – 2007.

#### **B. Μεταπτυχιακά μαθήματα**

Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Molecular Simulation of Complex Chemical Systems with Emphasis to Practical Applications", PhD Program in Chemical Engineering, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark, January - February 2007.

Ιωάννης Γ. Οικονόμου, «Φυσική Πολυμερών Ι». Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθήνας, Οκτώβριος – Νοέμβριος 2007.

## **Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων**

### **Διδακτορικές Διατριβές**

Ειρήνη Καρακατσάνη, «Ανάπτυξη και Αξιολόγηση ενός Θερμοδυναμικού Μοντέλου Βασισμένου στη Θεωρία Διαταραχών για Συστήματα Πολικών Μορίων: Καθαρά Συστατικά και Πολυσυστατικά Μίγματα», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, Μάιος 2007.

## **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. "Computer Aided Molecular Design of Multifunctional Materials with Controlled Permeability Properties" [MULTIMAT], Ευρωπαϊκή Επιτροπή, Πρόγραμμα STREP FP6, Priority 3, NMP. Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δώρος Θεοδώρου. Συνολική χρηματοδότηση Ινστιτούτου Φυσικοχημείας από ΕΕ: 173.117 €, χρηματοδότηση ΕΜΘΜΥ: 86.308 €. Το έργο συγχρηματοδοτείται και από τη ΓΓΕΤ. Διάρκεια Έργου: 1 / 3 / 2005 – 28 / 2 / 2008.
2. «Αναδιοργάνωση Γραφείου Διαμεσολάβησης ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»», Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Γραφεία Διαμεσολάβησης – Τεχνοκαταλύτες. Υπεύθυνος έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 300.000 €. Διάρκεια: 1 / 1 / 2005 – 30 / 8 / 2008.
3. "Ανάπτυξη Νέων Μεθόδων Μοριακής Προσομοίωσης και Μακροσκοπικών Μοντέλων για τον Υπολογισμό της Μικροσκοπικής Δομής και των Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Πολύπλοκων Συστημάτων Πολυμερών", Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 2003. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 57.660 €. Διάρκεια: 1 / 12 / 2005 – 31 / 11 / 2008.
4. "Development of Sustainable Industrial Processes: Experimental, Theoretical and Computational Investigation of Thermodynamic Properties and Phase Equilibria of Ionic Liquid Mixtures", INTAS. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 150,000 €. Χρηματοδότηση για ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»: 12,500 €. Διάρκεια: 1 / 9 / 2006 – 28 / 2 / 2009.
5. "Μελέτη Δομικών, Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων και Ιδιοτήτων Μεταφοράς του Πολυ(στερενίου-alt-ακρυλονιτριλίου) σε Υψηλές Πιέσεις", Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα ENTER 2003. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 78,000 €. Διάρκεια: 1 / 10 / 2006 – 30 / 9 / 2008.
6. "Polymer Surfaces Responsive to Thermal and Chemical Stimuli: Towards the Micro-design of 'Intelligent' Materials", Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Συνεργασίας Ελλάδας – ΗΠΑ σε Έρευνα και Τεχνολογία στα Υλικά. Συνολική χρηματοδότηση: 50,000 €. Χρηματοδότηση για Ι. Οικονόμου: 25,000 €. Διάρκεια: 1 / 6 / 2006 – 31 / 5 / 2008.

## **Συνεργασίες**

1. Professor Γεώργιος Κοντογεώργης, Department of Chemical Engineering, Technical University of Denmark. Ανάπτυξη θερμοδυναμικών μοντέλων για μη ιδανικά συστήματα πολυμερών.
2. Δρ. Ιωάννης Μπιτσάνης, Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λείζερ, Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας, Ηράκλειο Κρήτης. Μεσοσκοπική προσομοίωση κολλοειδών και πολυμερών.
3. Professor Αθανάσιος Ζ. Παναγιωτόπουλος, Department of Chemical Engineering, Princeton University, USA. Μοριακή προσομοίωση δένδριμερών.
4. Καθηγητής Κωνσταντίνος Παναγιώτου, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ. Ανάπτυξη καταστατικών εξισώσεων για συστήματα μη ιδανικών ρευστών.
5. Professor Cor Peters, Department of Chemical Engineering, Delft University of Technology, The Netherlands. Μοντελοποίηση ιονικών υγρών.

6. Δρ. J. Ramos-Díaz, Department of Macromolecular Physics, Instituto de Estructura de la Materia - CSIC, Μαδρίτη, Ισπανία, Κβαντομηχανικοί υπολογισμοί ιονικών υγρών.
7. Καθηγήτρια Σοφία Λαμπροπούλου, ΕΜΠ, Στατιστική Μηχανική.

## **Άλλες Δραστηριότητες**

### *Ιωάννης Οικονόμου*

1. Επιστημονικός Υπεύθυνος Γραφείου Διαμεσολάβησης, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».
2. Επισκέπτης Καθηγητής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πολυτεχνείο Δανίας (Technical University of Denmark), Lyngby, Δανία.
3. Chairman, Working Group on Thermodynamics and Transport Properties, European Federation of Chemical Engineering.
4. Αντιπρόεδρος Διεθνούς Οργανωτικής Επιτροπής 11th International Conference on Properties & Phase Equilibria for Product and Process Design, 20 – 25 Μαΐου 2007, Χερσόνησος, Ηρακλείου Κρήτης.
5. Κριτής εργασιών για δημοσίευση στα περιοδικά AIChE Journal, Chemical Engineering Research and Design, European Polymer Journal, Fluid Phase Equilibria, Industrial and Engineering Chemistry Research, Journal of the American Chemical Society, Journal of Chemical and Engineering Data, Journal of Chemical Physics, Journal of Computational Chemistry, Journal of Physical Chemistry B, Macromolecular Rapid Communications, Macromolecules.
6. Αξιολογητής ερευνητικών έργων που υποβλήθηκαν για χρηματοδότηση στη ΓΓΕΤ και στο INTAS.
7. Μέλος επταμελούς εξεταστικής επιτροπής για αξιολόγηση διδακτορικής διατριβής στο Τμήμα Φυσικοχημείας, Université Paris-Sud 11, Orsay, Γαλλία.
8. Guest Editor, Fluid Phase Equilibria, 261, 2007.
9. Τεχνικός Σύμβουλος, Scienomics SARL, Παρίσι.

### *Νικόλαος Ζαχαρόπουλος*

Διδάσκων Π.Δ. 407/80, Τμήμα Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων, Πανεπιστήμιο Αιγαίου.

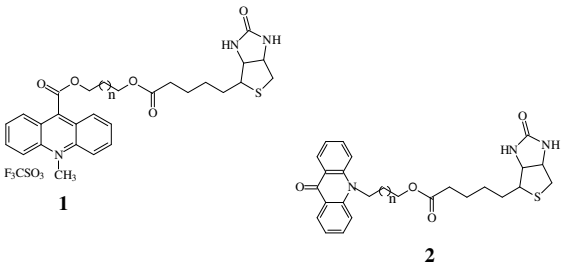
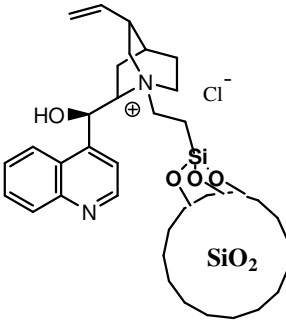
### *Μαριάννα Γιαννουράκου*

Επισκέπτης μεταπτυχιακή υπότροφος του Marie Curie EuroSim Programme, CECAM, Λυών, Δεκέμβριος 2006 – Δεκέμβριος 2007.

## 1.4 ΦΩΤΑΥΓΕΙΑ - ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### Αντικείμενο Έργου

Βασικό αντικείμενο του εργαστηρίου είναι η ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών και η εφαρμογή αυτών στην Αναλυτική και Κλινική Χημεία. Μεταξύ των σπουδαιότερων υλικών που αναπτύχθηκαν πρόσφατα στο εργαστήριο μας ήταν (α) νέα βιοτινυλιωμένα φωταυγή υλικά, (β) νέα παραμαγνητικά υλικά συμπλόκων του ευρωπαϊού με οργανικούς υποκαταστάτες παραγώγων του διαιθυλενοτριαμινοπενταοξεικού οξέος, (γ) νέοι νανοδομημένοι λειτουργικοί καταλύτες οξειδίων του τρισθενούς σιδήρου και (δ) νέοι υβριδικοί οργανο-ανόργανοι χειρόμορφοι καταλύτες. Τα μεν πρώτα υλικά αξιοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό των πρωτεϊνών αβιδίνης και στρεπταβιδίνης και μέσω αυτών της πρωτεΐνης IgG ποντικού. Η τελευταία πρωτεΐνη προσδιορίστηκε σε ποσότητες μέχρι μερικά femtomoles ( $9,2 \pm 1.8$  fmoles). Τα νέα παραμαγνητικά υλικά χαρακτηρίστηκαν με NMR και βρέθηκε να παρουσιάζουν χρόνους χαλάρωσης παρόμοιους με αυτούς που παρουσιάζει το εμπορικά διαθέσιμο Magnevist ( $4.34 \pm 0.27$  mM<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> και  $4.15 \pm 0.23$  mM<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> για τα νέα παράγωγα και  $3.93 \pm 0.12$  mM<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> για το Magnevist). Οι νανοδομημένοι φωταυγείς καταλύτες των οξειδίων του σιδήρου εφαρμόστηκαν σε χημειοφωταυγειομετρικούς προσδιορισμούς δραστικών μορφών του οξυγόνου. Το υπεροξείδιο του υδρογόνου μπόρεσε να ανιχνευθεί σε ποσότητες μερικών micromoles ( $2.08 \pm 0.16$  μmoles). Οι νέοι υβριδικοί οργανο-ανόργανοι χειρόμορφοι καταλύτες αξιοποιήθηκαν για την παραγωγή οπτικά ενεργών οργανικών μορίων, όπως α-αμινοξέων, με στερεοχημικές αποδόσεις που έφθασαν μέχρι και 62%. Εκτός της παρασκευής νέων λειτουργικών υλικών, αναπτύχθηκαν στο εργαστήριο μας επίσης νέες φωταυγείς τεχνικές με εμπορικά διαθέσιμα υλικά για την εκτίμηση της αντιοξειδωτικής δράσης βιομορίων ή φυσικών προϊόντων. Τα αποτελέσματα ήταν εντυπωσιακά και εφάμιλλα με αυτά της διεθνώς αναγνωρισμένης φασματοσκοπικής μεθόδου της διφαινυλο-πικρυλο-υδραζίνης (μέθοδος DPPH).

 <p>1</p> <p>2</p>	 <p>SiO<sub>2</sub></p>
Νέα βιοτινυλιωμένα φωταυγή υλικά	Χειρόμορφο οργανο-ανόργανο λειτουργικό υλικό

## Προσωπικό

*Ερευνητές: Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος, Ερευνητής Α΄, υπεύθυνος του έργου*

**Τεχνικό Προσωπικό:** Ελίνα Γιαννακοπούλου

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Δημήτριος Καλογιαννίδης,

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Καλομοίρα Αγιαμαρνιώτη (ΠΕΠ-Αττικής).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Διονύσιος Χριστοδουλέας (Δημοέρευνα), Οριάντα Λανίτου (άμισθη).

## Δημοσιεύσεις

1. T.M. Triantis, E. Yannakopoulou, A. Nikokavoura, D. Dimotikali and K. Papadopoulos, Chemiluminescent studies on the antioxidant activity of amino acids, *Anal. Chim. Acta*, 2007, 591 106-111.
2. O. Lanitou, D. Dimotikali, E. Yannakopoulou and K. Papadopoulos, Studies on the catalytic activity of novel hybridized chiral organo-inorganic catalysts for epoxidation and alkylation reactions, *Chem. Eng. Journal*, 2007, 134, 72-77.
3. J. Hrbac, V. Halouzka, R. Zboril, K. Papadopoulos and T. Triantis, Carbon electrodes modified by nanoscopic Iron (III) Oxides to assemble chemical sensors for the hydrogen peroxide amperometric detection, *Electroanalysis*, 2007, 19, 1850-1854.
4. K. Kasviky, I.E. Stamatelatos, E. Yannakopoulou, P. Papadopoulos, J. Kalef-Esra, The accuracy of protein determination in large biological samples by prompt gamma neutron activation analysis, *Nucl. Instr. & Methods in Phys. Res. Section B Beam Interactions with materials and atoms* 2007, 263, 132-135.

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. O. Lanitou, D. Dimotikali, K. Papadopoulos, Catalytic asymmetric synthesis of  $\alpha$ -aminoacids under phase-transfer conditions, 2nd Hellenic Symposium on Organic Synthesis, from Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Athens, Greece, April 19-21, 2007.
2. K. Agiamarnioti, T. Triantis, E. Yannakopoulou, K. Papadopoulos, Novel biotinylated fluorescent labels. Studies on the effect of spacer moieties upon binding to (strept)avidin, 2nd Hellenic Symposium on Organic Synthesis, from Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Athens, Greece, April 19-21, 2007.
3. O. Λανίτου, Δ. Δημοτικάλη, Κ. Παπαδόπουλος, Καταλυτική ασύμμετρη σύνθεση  $\alpha$ -αμινοξέων σε συνθήκες μεταφοράς φάσεων, 9<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδας-Κύπρου με θέμα Χημεία και Αειφόρος Ανάπτυξη, Λάρνακα-Κύπρος, 27-30 Απριλίου 2007.
4. Δ. Χριστοδουλέας, Κ. Παπαδόπουλος, Α. Καλοκαιρινός, Ανάπτυξη και επικύρωση χημειοφωταυγειομετρικής μεθόδου για την εκτίμηση της αντιοξειδωτικής ικανότητας εδώδιμων ελαίων, 2ο Πανελλήνιο Συνέδριο Λίπη, Έλαια, Λιπίδια, Παρόν και Μέλλον, Αθήνα, 7-8 Ιουνίου 2007.
5. K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, K. Agiamarnioti, D. Dimotikali, J. Hrbáč, R. Zbořil, Enhanced Chemiluminescence of Luminol-Hydrogen Peroxide using Nanometer-Sized Ferric Oxides, 4th International Workshop on Nanosciences and Nanotechnologies (NN07), Thessaloniki-Greece, 16-18 July 2007.
6. D. Christodouleas, K. Papadopoulos, A. Calokerinos, Antioxidant activity of edible oils using chemiluminescence, 5th international conference on instrumental methods of analysis, modern trends and applications, Rio Patras, Greece, 30 September-4 October 2007.

## Διαλέξεις

1. O. Λανίτου, Δ. Δημοτικάλη, Κ. Παπαδόπουλος, Καταλυτική ασύμμετρη σύνθεση  $\alpha$ -αμινοξέων σε συνθήκες μεταφοράς φάσεων, 9<sup>ο</sup> Συνέδριο Χημείας Ελλάδας-Κύπρου με θέμα Χημεία και Αειφόρος Ανάπτυξη, Λάρνακα-Κύπρος, 27-30 Απριλίου 2007.
2. D. Christodouleas, K. Papadopoulos, A. Calokerinos, Antioxidant activity of edible oils using chemiluminescence, 5th international conference on instrumental methods of analysis, modern trends and applications, Rio Patras, Greece, 30 September-4 October 2007.



3. Κ. Παπαδόπουλος, Ασύμμετρη σύνθεση οργανικών ενώσεων και εφαρμογές, ομιλία στο Θερινό Σχολείο του Δημοκρίτου, Ιούλιος 2007.

### **Διδακτικό Έργο**

#### **Πρακτική άσκηση φοιτητών**

Οι φοιτητές του ΕΜΠ Αθηνών του Τμήματος Χημικών Μηχανικών, *Ηλίας Παπαηλίας* και *Παναγιώτης Παπαδόπουλος* εργάστηκαν στα πλαίσια της πρακτικής τους άσκησης από 22 Οκτωβρίου μέχρι 30 Νοεμβρίου 2007 στο Εργαστήριο μας. Αντικείμενο της έρευνας ήταν η «Εκτίμηση της αντιοξειδωτικής δράσης α-αμινοξέων με τεχνικές χημειοφωταύγειας».

#### **Χορήγηση Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης**

1. *Διονύσιος Χριστοδουλέας*, Ανάπτυξη και επικύρωση χημειοφωταυγειομετρικής μεθόδου εκτίμησης αντιοξειδωτικής ικανότητας εδώδιμων ελαίων, Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ιούνιος 2007.

### **Ερευνητικά Προγράμματα - Επιχορηγήσεις**

1. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
2. Ευαισθητοποιημένη Χημειοφωταύγεια με τη βοήθεια χρήσης νανοδομημένων σωματιδίων οξειδίου του σιδήρου», Πρόγραμμα διακρατικής συνεργασίας Ελλάδας-Τσεχίας, 12 Κ€, 2006-2008.
3. Ευαισθητοποιημένη χημειοφωταύγεια με νανοδομημένους καταλύτες - Προοπτικές εφαρμογής της μεθόδου στην Αναλυτική και Κλινική χημεία, Πρόγραμμα Δημοκρίτου «ΔΗΜΟΕΡΕΥΝΑ», 14 Κ€, 2006-2008.

### **Ερευνητική Υποδομή**

Φασματοφωτόμετρο UV-Vis (Jasco V-560), 2 φθορισμόμετρα (Jasco FP-777 και Fluostar Optima BMG), 3 πλήρη συστήματα μετρήσεων χημειοφωταύγειας (Bio-Orbit 1250), πλήρες σύστημα φωτόλυσης 1000 watt (ORIEL), στοιχειακός αναλυτής οργανικών μορίων, Πηγή κοβαλτίου 60 (Gamma Chamber 4000A), πλήρες εξοπλισμένο εργαστήριο για την σύνθεση οργανικών ενώσεων και συμπλόκων αυτών με διάφορα μέταλλα (περιστροφικοί εξατμιστήρες οργανικών διαλυτών, αντλίες υψηλού κενού, γραμμές αδρανής ατμόσφαιρας κ.α.).

### **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις**

1. Στα πλαίσια διακρατικής συνεργασίας με την Τσεχία, επισκέφθηκε το εργαστήριο μας για μία εβδομάδα ο καθηγητής του Πανεπιστημίου Olomouc, Δρ Jan Hrbac (26-31 Μαρτίου 2007).
2. Στα πλαίσια συνεργασίας μας με το Ινστιτούτο Φαρμακευτικής Χημείας του Πανεπιστημίου της Τυφλίδας της Γεωργίας, επισκέφθηκε και εργάστηκε στο εργαστήριο μας για τρεις μήνες η Ερευνήτρια Dr Maia Merlani (Σεπτέμβριος-Νοέμβριος 2007).

### **Συνεργασίες**

Καθηγήτρια Δ. Δημοτικάλη (Ε.Μ.Π., Τμήμα Χημικών Μηχανικών), Επίκουρος Καθηγητής Ανδρέας Σκορίλας (ΕΚΠΑ, Τμήμα Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας), Dr. Maia Merlani (Institute of Pharmaceutical Chemistry, University of Tbilisi, Georgia), Prof. Radomir N. Saicic (Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia), Assistant Prof. Jan Hrbac (Faculty of Inorganic Chemistry, University of Olomouc, Czech Republic), Prof. A. Meghea (Polytechnic School of Bucharest, Romania).

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Luminescence, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Analytica Chimica Acta, Food Chemistry.

2. Μέλος επιτροπών για την πρόσληψη ερευνητών στις βαθμίδες Γ και Δ του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
3. Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων Δ. Καλογιαννίδη, Δ. Χριστοδουλέα και Ο. Λανίτου.
4. Αξιολογητής ερευνητικών προγραμμάτων στο Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.

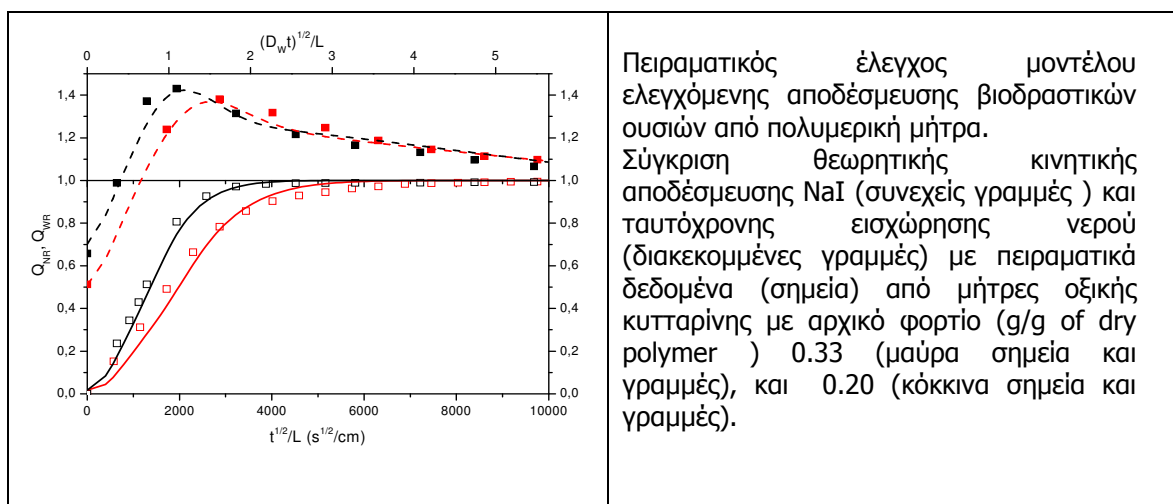
## 1.5 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΥΛΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

### Αντικείμενο Έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην μελέτη της ροφήσεως και διαχύσεως μικρομοριακών ουσιών σε πολυμερικά υλικά με τον συνδυασμό θεωρητικών και πειραματικών προσεγγίσεων. Στόχος είναι η ανάπτυξη του κατάλληλου επιστημονικού υποβάθρου για τον ορθολογικό σχεδιασμό ευρέως φάσματος εφαρμογών (συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, διαπερατοεκλεκτικές μεμβράνες, υλικά συσκευασίας, χημικοί αισθητήρες). Το *θεωρητικό* μέρος περιλαμβάνει την ανάπτυξη υποδειγμάτων ή προσομοιώσεων στον υπολογιστή, σε μακροσκοπικό ή σε μοριακό/νόνο επίπεδο που αποσκοπεί (i) στην πρόβλεψη των παραμέτρων ροφήσεως και διαχύσεως και (ii) στη ρεαλιστική προσομοίωση σύνθετων φαινομένων μεταφοράς (διάχυση υπό ταυτόχρονη χαλάρωση του πολυμερούς ή διάχυση σε ανομοιογενή ή σύνθετα υλικά, όπως επίσης και περιπτώσεις σύζευξης της διαχύσεως με χημική αντίδραση ή άλλα σύγχρονα φαινόμενα). Το *πειραματικό* μέρος αφορά κυρίως τη συστηματική μελέτη (i) ροφήσεως ατμών ή υγρών σε πολυμερικά φιλμ (ii) τη μελέτη πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης, τύπου μήτρας και (iii) φαινόμενα μεταφοράς σε λεπτά επιστρωμένα υμένα πολυμερών. Οι τρέχουσες ερευνητικές δραστηριότητες περιλαμβάνουν:

#### 1. Πολυμερικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης

Η ανάπτυξη των συστημάτων αυτών αποσκοπεί στην ελεγχόμενη και παρατεταμένη παροχή φαρμάκων, αγροχημικών ή άλλων βιοδραστικών ουσιών. Στα συστήματα τύπου μήτρας, τα οποία είναι ιδιαίτερα διαδεδομένα, η δραστική ουσία είναι ενσωματωμένη στην πολυμερική μήτρα, και η έκλυσή της στο περιβάλλον υδατικό μέσο ενεργοποιείται με την εισχώρηση του νερού. Η έρευνα του εργαστηρίου μας αποσκοπεί κυρίως στην βελτιστοποίηση του σχεδιασμού των συστημάτων αυτών ώστε να αρθεί το μειονέκτημα του μη σταθερού ρυθμού αποδέσμευσης που συνήθως τα χαρακτηρίζει. Από πλευράς θεωρίας αναπτύσσονται κατάλληλα υπολογιστικά μοντέλα για τη ρεαλιστική προσομοίωση της κινητικής αποδέσμευσης από μονοστρωματικές ή πολυστρωματικές μήτρες. Η πειραματική εργασία περιλαμβάνει (i) τον έλεγχο των μοντέλων αυτών με πειραματικά δεδομένα πρότυπων συστημάτων πολυμερούς-δραστικής ουσίας-διαλύτη (ii) την επίδραση χημικών ή φυσικών κατεργασιών στην αποδέσμευση φαρμάκων από μήτρες υδρογέλης (iii) την επίδραση ωσμωτικών ενεργών πρόσθετων για την προαγωγή της εκλύσεως από υδρόφοβες ελαστομερείς μήτρες (iv) την ανάπτυξη πολυστρωματικών πολυμερικών μητρών, οι οποίες αποτελούν μια στρατηγική σχεδιασμού για την επίτευξη σταθερού ρυθμού εκλύσεως.



#### 2. Μηχανισμοί μεταφοράς μικρομοριακών ουσιών σε υαλώδη πολυμερή

Η μεταφορά μικρομοριακών ουσιών σε υαλώδη πολυμερικά φιλμ είναι καθοριστικό φαινόμενο σε πλήθος εφαρμογών (υλικά συσκευασίας, ξήρανση πολυμερικών φιλμ, χημικοί αισθητήρες, κλπ). Η κινητική ροφήσεως σε αυτά τα συστήματα παρουσιάζει πληθώρα αποκλίσεων από την κατά - Fick συμπεριφορά που αποδίδεται είτε (i) σε μηχανισμό «ιξώδους χαλαρώσεως» του διογκούμενου

πολυμερούς, ή (ii) στην επίδραση των εσωτερικών μηχανικών τάσεων που αναπτύσσονται στο πολυμερές λόγω ανομοιογενούς κατανομής του διαχύτη κατά την διάρκεια της ροφήσεως. Στο εργαστήριο μας αναπτύσσονται μοντέλα βασισμένα και στους δύο μηχανισμούς, ικανά να αναπαράγουν όλα τα βασικά χαρακτηριστικά της παρατηρούμενης κινητικής συμπεριφοράς. Η πειραματική εργασία περιλαμβάνει (i) ρόφηση από την *αέριο* φάση. Στην περίπτωση αυτή, προσεκτικά σχεδιασμένα πειραματικά πρωτόκολλα ροφήσεως, συμπληρώνονται από παράλληλες μετρήσεις της κινητικής διαμήκους διογκώσεως των φιλμ, και επιτρέπουν την μελέτη διαφόρων τύπων μη κατά-Fick συμπεριφοράς. Σε συνδυασμό με την αντίστοιχη θεωρητική υπολογιστική διερεύνηση, διατυπώνονται σαφή «διαγνωστικά κριτήρια», τα οποία επιτρέπουν να διαπιστωθεί ασφαλώς ποιος μηχανισμός είναι υπεύθυνος για τις εκάστοτε παρατηρούμενες αποκλίσεις από την κατά Fick κινητική ροφήσεως. (ii) ρόφηση από την *υγρή* φάση. Εδώ, με την εφαρμογή διαφόρων οπτικών τεχνικών συγκεντρώνονται πληροφορίες όχι μόνον για την κινητική εισχωρήσεως αλλά και για την κατανομή της συγκεντρώσεως του διαχύτη στο πολυμερές όπως και για την κατανομή των παραμορφωτικών τάσεων και την χαλάρωση του διογκούμενου πολυμερούς. Ο συνδυασμός των τεχνικών επιτρέπει την λεπτομερή μελέτη διαφόρων τύπων μη κατά-Fick κινητικής, συμπεριλαμβανομένης της κινητικής Case II.

### **3. Φαινόμενα μεταφοράς σε λεπτά επιστρωμένα υμένια**

Σε συνεργασία με το Ινστ. Μικροηλεκτρονικής μελετάται η διόγκωση λεπτών επιστρωμένων πολυμερικών υμενίων κατά την έκθεση τους σε ελεγχόμενη ατμόσφαιρα οργανικών ατμών ή υγρασίας με στόχο την ανάπτυξη συστοιχιών χημικών αισθητήρων βασισμένων στην μεταβολή της χωρητικότητας.

### **Προσωπικό**

**Ερευνήτες:** Δρ. Μερóπη Σανοπούλου, Ερευνήτρια Α', Υπεύθυνος του έργου,  
Δρ. Κυριακή Παπαδοκωστάκη, Ερευνήτρια Β',

**Εξωτερικός Συνεργάτης:** Δρ. Ιωάννης Πετρόπουλος

**Τεχνικό Προσωπικό:** Σασσάλου Σιμώνη

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Δημήτριος Σούλας (STREP), Αλμπάνα Χασίμη (ΠΕΠ), Μαρία Χερουβείμ (άμισθη), Κυριακή Μανώλη (διακρατική).

### **Δημοσιεύσεις**

1. Jaczewska, J.; Budkowski, A.; Bernasik, A.; Raptis, I.; Raczkowska, J.; Goustouridis, D.; Rysz, J.; Sanopoulou, M. "Humidity and Solvent Effects in spin-coated Polythiophene- Polystyrene Blends", *J. Appl. Polym. Sci.* **2007**, *105*, 67-79.
2. Jaczewska, J.; Raptis, I.; Budkowski, A.; Goustouridis, D.; Raczkowska, J.; Sanopoulou, M. Pamula, E.; Bernasik,; Rysz, J. "Swelling of Poly(3-alkylthiophene) Films Exposed to Solvent Vapors and Humidity: Evaluation of Solubility Parameters", *Synthetic Metals* **2007**, *157*, 726-732
3. Iijima, T.; Petropoulos, J.H. "A proposed novel approach to the study of the dual-mode mechanism of dyeing nylon with acid dyes" *J. Appl. Polym. Sci.* **2007**, *103*, 1055-1057
4. Papadopoulos, G.K., Petropoulos, J.H. Model study of the effect of pore structure and condensation on multilayer adsorbate transport in porous media *Langmuir* **2007** *23*, 12932-12936
5. Sarantopoulou, E.; Kollia, Z.; Cefalas, A.C.; Manoli, K.; Sanopoulou, M.; Goustouridis, D.; Chatzandroulis, S. "Surface nano/micro functionalization of PMMA thin films by 157 nm irradiation for sensing application" *Appl. Surface Sci.* (in press).
6. Dallas, P.; Bourlinos, A.B.; Petridis, D.; Boukos, N.; Papadokostaki, K.; Niarchos, D.; Guskos, N. "Synthesis and characterization of 2-D and 3-D covalent networks derived from triazine central cores and bridging aromatic diamines" *Polymer* (in press).
7. Papadokostaki, K.G.; Stavropoulou, A.; Sanopoulou, M.; Petropoulos, J.H. "An advanced model for composite planar three-layer matrix-controlled release devices. Part I. Devices of uniform material properties and non-uniform solute load" *J. Membrane Sci.* (in press).

## **Ανακοινώσεις σε συνέδρια**

1. Manoli, K.; Karonisa, E.; Chatzichristidi, M.; Goustouridis, D.; Chatzandroulis, S.; Raptis, I.; Sanopoulou, M. "A chemocapacitive sensor array for the detection of volatile organic compounds and humidity" 5<sup>th</sup> International Conference on Instrumental Methods of Analysis Modern Trends and Applications, IMA'07, 30 September-4 October 2007, Rio-Patras-Greece.
2. Σούλας Δ., Χερουβείμ Μ., Σανοπούλου Μ., Παπαδοκωστάκη Κ. «Συμβολή της Διαφορικής Θερμιδομετρίας Σάρωσης στη Μελέτη των Μηχανισμών Ελεγχόμενης Αποδέσμευσης Ουσιών με Ωσμωτική Δράση από Πολυμερή», ΘΕΡΜΑ 2007, 3<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Θερμικής Ανάλυσης, 7-9 Δεκεμβρίου 2007, Αθήνα.

## **Διαλέξεις**

1. Sanopoulou, M.; Papadokostaki, K. "Real and Simulated performance in matrix-controlled release systems" 2<sup>nd</sup> year progress meeting of STREP project "Multimatdesign", NCSR "Demokritos", Athens, 20-21 March 2007.
2. Papadokostaki K. "Polymers in Controlled Drug Release", Nano2Life Summer School "Methods in Micro-Nano Technology and Nanobiotechnology", NCSR "Demokritos", Athens, July 2007.
3. Παπαδοκωστάκη, Κ. «Πολυμερικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης βιοδραστικών ουσιών», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.
4. Sanopoulou, M. "Real and Simulated performance in matrix-controlled release systems" 30-month progress meeting of STREP project "Multimatdesign", Accelrys, Cambridge, UK, 10-11 September 2007.
5. Σούλας, Δ., «Χαρακτηρισμός και μελέτη κινητικής συμπεριφοράς πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης», Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 5/10/2007.

## **Διδακτικό Έργο**

### **Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων**

### **Διδακτορικές Διατριβές**

1. Χερουβείμ, Μαρία. «Μελέτη της σχέσεως μεταξύ κινητικής εισροφήσεως νερού και κινητικής συμπεριφοράς προτύπων μονολιθικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης» Τμήμα Χημείας ΕΚΠΑ, Μάρτιος 2007.
2. Σούλας, Δημήτριος. «Χαρακτηρισμός και μελέτη κινητικής συμπεριφοράς πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Σεπτέμβριος 2007.

## **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. "Computer aided molecular design of multifunctional materials with controlled permeability properties" [MULTIMATDESIGN] (Contract no.: 013644), Πρόγραμμα STREP FP6, Priority 3, NMP, Συνολική χρηματοδότηση ΙΦΧ: 173 Κ€, χρηματοδότηση Εργαστηρίου : 86 Κ€, 2005-2008.
2. "Αντιμετώπιση παθολογικών καταστάσεων με συνδυαστική χρήση βιο-ιατρικών και νανοτεχνολογικών μεθόδων", ΕΡΓΟ-ΥΠΟΔΟΜΩΝ, ΜΕΤΡΟ 4.5, Δράση 4.4.1, 50 Κ€, 2005-2008.
3. «Ανάπτυξη Καινοτόμων Βιοενεργών Νανοϋλικών για Διάγνωση και Παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία» ΠΕΠ Αττικής, Μέτρο 1.2, 9.5 Κ€, 2006-2008.
4. «Έλεγχος Μορφολογικών Χαρακτηριστικών Υπέρλεπτων Υμενίων Πολυμερικών Μιγμάτων για Εφαρμογές σε Οργανικές Οπτο-ηλεκτρονικές Διατάξεις» ΕΠΙΑΝ Μέτρο 4.3, Δράση 4.3.6.1 Πρόγραμμα Διακρατικής Συνεργασίας Ελλάδας-Πολωνίας –ΓΓΕΤ Επιστημονικός Υπεύθυνος: Μ. Σανοπούλου, 11.7 Κ€, 2006-2008.

## **Ερευνητική Υποδομή**

Συσκευές κενού εφοδιασμένες με ηλεκτρονικούς μικροζυγούς (Cahn 2000 and MK2-M5 CI Electronics) και ελατήρια χαλαζία για μετρήσεις κινητικής ροφήσεως και διαμήκους διογκώσεως σε πολυμερή, Μικροσυμβολόμετρο και πολωτικό μικροσκόπιο, Οπτικό μικροπυκνόμετρο σάρωσης, Όργανο μηχανικού εφελκυσμού εφοδιασμένο με οπτικά εξαρτήματα, Συσκευή Θερμικής ανάλυσης (TMDSC), home-made συσκευές μελέτης κινητικής αποδέσμευσης ουσιών από πολυμερικές μήτρες, διαθλασίμετρο Abbe.

## **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό και επισκέψεις συνεργατών στο Δημόκριτο**

Σανοπούλου Μ., επίσκεψη στην Εταιρία Accelrys (Cambridge, UK) στα πλαίσια του προγράμματος STREP "Multimatdesign" (10-11 Σεπτεμβρίου 2007)

Σανοπούλου Μ., Μανώλη Κ. επίσκεψη στο Ινστιτούτο Φυσικής Smoluczowski του Παν/μίου Jagellonian της Κρακοβίας Jagellonian University, Πολωνίας, στα πλαίσια της διακρατικής συνεργασίας Ελλάδας-Πολωνίας (18-23 Νοεμβρίου 2007)

Prof. G.C. Sarti, University of Bologna, Italy, επίσκεψη και ομιλία στο «Δ», στα πλαίσια του προγράμματος STREP "Multimatdesign" (5-7 Ιουνίου 2007)

Prof. D. Hofmann, GKSS Research Center, Teltow, Germany, επίσκεψη και ομιλία «Δ», στα πλαίσια του προγράμματος STREP "Multimatdesign" (10-12 Οκτωβρίου 2007)

### **Συνεργασίες**

Καθ. Α. Budkowski , Μ. Smoluchowski Institute of Physics, Jagellonian University, Krakow, Poland (Πρόγραμμα 4, ανωτέρω), Καθ. D. Hofmann (GKSS, Germany, STREP), Δρ. Ι. Ράπτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, Πρόγραμμα 4 ανωτέρω , κοινή επίβλεψη διατριβής της Κ. Μανώλη) -Δρ Π. Αργείτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, DSC)- Δρ. Ι. Οικονόμου, Καθηγ. Δ. Θεοδώρου, (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστ. Φυσικοχημείας, Πρόγραμμα 1, ανωτέρω).

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Διοργάνωση της Ετήσιας συνάντησης των εταίρων του προγράμματος STREP "Multimatdesign" στην Αθήνα (20-21 Μαρτίου 2007)

1. Η Δρ. Μ. Σανοπούλου, κατά το έτος 2007 διατέλεσε:
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά JZUS, J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys., J. Appl. Polym. Sci., Eur. Polym. J.
3. Μέλος της επιτροπής επιλογής υποτρόφων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
4. Μέλος Επιτροπής επιλογής Υποτρόφων του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής

Η Δρ. Κ. Παπαδοκωστάκη, κατά το έτος 2007 διατέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά Eur. Polym. J., Macromolecular Bioscience, J. Membrane Sci.

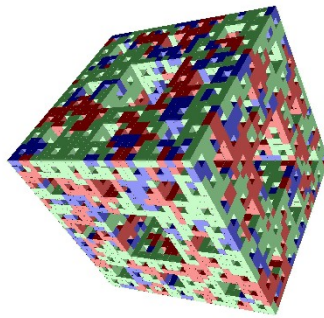
Ο Δρ. Ι. Πετρόπουλος, κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά Macromolecules, J. Membrane Sci., J. Polym. Sci. Polym. Phys., J. Colloid and Interface Sci., J. Chem. Soc. Faraday Trans., Eur. Polym. J.
2. Μέλος του Editorial Board του περιοδικού J. Membrane Sci. (Ι. Πετρόπουλος)

## 1.6 ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΚΑΙ ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

### Αντικείμενο Έργου

Το Έργο “Εργαστήριο Στατιστικής Μηχανικής και Μη-γραμμικής Δυναμικής” του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, ιδρύθηκε το 02/2004. Αντικείμενο του έργου είναι η ανάπτυξη μεθόδων Στατιστικής Μηχανικής και Μη-γραμμικής Δυναμικής για την μελέτη της δημιουργίας μεσοσκοπικών και μακροσκοπικών δομών και συσχετίσεων λόγω τοπικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ σωματιδίων στο μικροσκοπικό επίπεδο. Τέτοιες δομές είναι τα χωροχρονικά μορφώματα, συσσωματώματα, σπειροειδείς σχηματισμοί, ραβδοειδείς διαμορφώσεις, έλικες, μορφοκλασματικές δομές, κ.α. που παρατηρούνται τόσο στην επιστήμη των υλικών, όσο και σε φυσικά, χημικά και βιολογικά συστήματα. Μελετάται ειδικότερα η δημιουργία μορφωμάτων ειδικού τύπου (μορφοκλασματικές δομές, fractals) και συσχετίσεων μακράς εμβέλειας κοντά στα κρίσιμα σημεία αλλαγής φάσεων (πχ στην αλλαγή φάσεων υγρού-αερίου, κλπ) αλλά και σε συστήματα ανοικτά που είναι μονίμως σε αλληλεπίδραση με το περιβάλλον, όπως είναι το μη-κωδικοποιούν DNA. Μακριά από κρίσιμα σημεία και σε κλειστά, απομονωμένα συστήματα (όπως είναι μεταξύ άλλων και το κωδικοποιούν DNA) μελετώνται συσχετίσεις περιορισμένης εμβέλειας και χωροχρονικά μορφώματα με σαφώς καθορισμένες κλίμακες μήκους και χρόνου (πχ σπειροειδείς και ραβδοειδείς σχηματισμοί, έλικες κλπ). Η μελέτη τέτοιων δομών από το μικρο- στο μέσο- και μακρο- επίπεδο και η αλληλεπίδραση μεταξύ των τριών αυτών επιπέδων περιγραφής είναι μεγάλης τεχνολογικής σημασίας σήμερα, σε τομείς αιχμής όπως η ανάπτυξη νέων υλικών και οι φυσικοχημικές και βιολογικές διεργασίες.



### ***Χημικές αντιδράσεις πάνω σε μορφοκλασματική επιφάνεια***

(Τα διαφορετικά χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικά αντιδρώντα).

Για την μελέτη τέτοιων πολύπλοκων συστημάτων χρησιμοποιούμε στο Εργαστήριο στατιστικές μεθόδους δομικής περιγραφής αλλά και μοντέλα μηχανισμών ανάπτυξης μορφολογικών χαρακτηριστικών. Οι στατιστικές μέθοδοι περιλαμβάνουν θερμοδυναμικές προσεγγίσεις, εντροπία εκτατική και μη εκτατική, θεωρία κατανομών μακράς και περιορισμένης εμβέλειας, κατανομές Levi, θεωρία τυχαίου περιπάτου, κ.α. Για την μελέτη μηχανισμών ανάπτυξης μορφωμάτων χρησιμοποιούμε μη-γραμμικά μοντέλα ιεραρχημένης πολυπλοκότητας, θεωρίες μέσου πεδίου, μεθόδους ακριβούς απαρίθμησης, θεωρία Επανακανονικοποίησης Πραγματικού Χώρου (real space renormalisation), θεωρία στοχαστικών διαδικασιών (stochastic processes) και υπολογιστικές μεθόδους τύπου Kinetic Monte Carlo.

Οι εφαρμογές στο Εργαστήριο περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, και μελέτες επιφανειών και συσσωματωμάτων που παρουσιάζουν μορφοκλασματικές (fractal) δομές, βιοπληροφορική, στατιστική μελέτη και μοντελοποίηση αλυσίδων DNA και βιολογικών μακρομορίων, και μη-γραμμική περιγραφή και μοντελοποίηση κλειστών και ανοικτών χημικών αντιδράσεων σε καταλυτικές επιφάνειες καθώς και την επίδραση του μηχανισμού της διάχυσης στα συστήματα αυτά.

## Προσωπικό

**Ερευνητές Δρ. Αστέρω Προβατά, Ερευνητής Α', Υπεύθυνος του έργου**  
**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Βασιλική Νουσιού, Νικόλαος Κούβαρης.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης (ΠΕΠ-Αττικής).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Θωμάς Οικονόμου (άμισθος).

## Δημοσιεύσεις

1. Oikonomou, Th., "[Tsallis, Renyi and nonextensive Gaussian entropy derived from the respective multinomial coefficients](#)", *Physica A*, **2007**, 386, 119-134.
2. Provata, A.;, Oikonomou, T.;, "[Power law exponents characterizing human DNA](#)", *Phys. Rev. E*, **2007**, 75, Art. No. 056102.
3. Sellis, D.; Provata, A.; Almirantis, Y.; "Alu and LINE1 distributions in the human chromosomes: Evidence of global genomic organization expressed in the form of power laws", *Mol. Biol. & Evol.* **2007** 24 (11): 2385-2399.
4. Noussiou, V.K.; Provata, A.; "Surface reconstruction in reactive dynamics: A kinetic Monte Carlo approach", *Surface Science* **2007** 601 (14): 2941-2951.
5. Provata, A.; "Non-extensive block entropy statistics of Cantor fractal sets", *Physica A*, **2007**, 381, 148-154.
6. Provata, A.; Noussiou, V.K.; "Fractal pattern formation in the Ziff-Gulari-Barshad model", *J. Phys. C- Cond. Mat.* **2007**, 19 (6): Art. No. 065128.
7. Oikonomou, Th., "Properties of the "non-extensive Gaussian" entropy", *Physica A*, **2007**, 381, 381 155–163.
8. Oikonomou, Th.; Provata, A.; Tirnakli, U.; "Nonextensive statistical approach to non-coding human DNA", *Physica A*, *accepted*
9. Noussiou, V.K.; Provata, A.; *Kinetic Monte Carlo simulations of the oscillatory CO oxidation at high pressures: the surface oxide model*, *Chem. Phys.*, *accepted*.
10. Kouvaris, N.; and Provata, A.; "Trimolecular reactive system with spatial disorder", *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, *accepted*.

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Noussiou, V. K. ; Provata A.; "Kinetic Monte Carlo simulations of the oscillatory CO oxidation at high pressures: the surface oxide model", Summer School: Morphogenesis through the interplay of nonlinear chemical instabilities and elastic active media, 2 - 14 July 2007, Cargèse, France
2. Noussiou, V. K. ; Provata A.; "Kinetic Monte Carlo simulations of the oscillatory CO oxidation at high pressures: the surface oxide model", 20<sup>th</sup> International Conference / Summer School: NONLINEAR SCIENCE AND COMPLEXITY , 19 – 29 July 2007, Patras, Greece.
3. Oikonomou, Th; "Tsallis, Renyi and nonextensive Gaussian entropy derived from the respective multinomial coefficients", 20<sup>th</sup> International Conference / Summer School: NONLINEAR SCIENCE AND COMPLEXITY , 19 – 29 July 2007, Patras, Greece.
4. Kouvaris, N.; Provata,; "Complex Population Dynamics and Oscillations on Low Dimensional Lattices", Summer School on "Morphogenesis through the interplay of nonlinear chemical instabilities and elastic active media", Cargese, France (2007).
5. Kouvaris, N.; Provata,; "Complex population dynamics, coexistence of oscillatory steady state and frozen pattern", poster at 20<sup>th</sup> International Conference and Summer School on "Non Linear Science and Complexity", 19 – 29 July 2007, Patras, Greece.

## Διαλέξεις

1. Kouvaris N.; "Oscillatory dynamics on low-dimensinal lattice supports", Humboldt University, Department of Physics, Berlin , Germany, October 2007.
2. Provata, A.; "Complexity and Correlations in the Primary Structure of DNA", The Konrad Lorenz Institute, Vienna, Austria, June 14<sup>th</sup>, 2007.



3. Provata A.; "The Human Genome: Complexity and Organisation", ESF International Workshop on Ecological Complex Systems", Palermo, Italy, July 23, 2007.
4. Provata, A.; "Fractals και Εφαρμογές τους στις Φυσικές Επιστήμες", Demokritos Summer School, Athens, Greece, July 9, 2007.
5. Provata, A.; "Complexity in the Human Genome", 20<sup>th</sup> International Conference and Summer School on Non Linear Science and Complexity", Patras, Greece, 19 – 29 July 2007.
6. Provata A.; "DNA: Δομικές Ιδιότητες και Λειτουργικότητα", 1<sup>st</sup> meeting on Biological Physics, National Research Center (EIE), Athens, Greece, November 9, 2007.

### **Διδακτικό Έργο**

#### **Διδασκαλία**

1. Προβατά Α. Ειδικά Κεφάλαια Φυσικοχημείας, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Χειμερινό Εξάμηνο 2007-2008.

### **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
2. "MOLSIMU: Forging the Missing Link: From Molecular Simulations to Nanoscale Experiments", COST Scientific Network, 10 Κ€ (από ποσό 400 000 € συνολικού προϋπολογισμού), 2004-2008

### **Ερευνητική Υποδομή**

1 Υπολογιστικό Σύστημα Pentium IV, dual core + dual processor (Linux).

4 Υπολογιστικά Συστήματα Pentium IV (Linux).

1 Προσωπικός Υπολογιστής (Windows).

### **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό**

1. Προβατά, Α.; Universite Libre de Bruxelles (Belgium), συνεργασία με Καθ. G. Nicolis (13-19 Μαΐου 2007).
2. Provata, A.; The Konrad Lorenz Institute (Vienna, Austria), επίσκεψη, συνεργασία και συμμετοχή στην σειρά "The Altenberg Seminar Series: Biocomplexity", June 2007.
3. Κούβαρης Ν.. Humboldt Universtaet Berlin (Germany), 2-μηνη συνεργασία με Καθ. L. Schimansky-Geier και Καθ. I. Sokolon (Οκτώβριος-Δεκέμβριος 2007).
4. Shabunin A.; ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, επίσκεψη και συνεργασία με Δρ. Α. Προβατά (18-26 Νοεμβρίου 2007).

### **Συνεργασίες**

Δρ. Ι. Αλμυράντη (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτούτο Βιολογίας, 'Στατιστική Περιγραφή της Πρωτοταγούς Δομής του DNA), Καθ. G. Nicolis (Free University of Brussels, Service de Chimie-Physique, Brussels, Belgium, "Entropic Representations of DNA"), Καθ. Α. Μπούντη (Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μαθηματικών, Πάτρα, 'Statistical Properties and Correlations of Genomic Data and Biological Time Series'), Καθ. Θ. Θεοχάρη (Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής, Αθήνα, 'Non-linear Dynamics in the Genome of Higher Eucaryotes'), Dr. A. Shabunin (University of Saratov, Department of Physics, Saratov, Russia, 'Μη-γραμμική Περιγραφή Χημικής Δυναμικής σε Πλέγματα Χαμηλής και Μορφοκλασματικής Διάστασης'), Καθ. Α. Τσεκούρα και Α. Κούτσελο (Τμήμα Χημείας, Παν. Αθηνών, "Χημική Δυναμική Καταλυτικών Αντιδράσεων"), Καθ. Δ. Κουγιουμπζή (Πολυτεχνική Σχολή, Παν. Θεσσαλονίκης, "Δημιουργία Μορφωμάτων σε Πλέγματα Χαμηλών Διαστάσεων"), Καθ. Β. Spagnolo (Univ. of Palermo, Dept of Physics, "Ecological Complex Systems). Prof. I. Sokolon and Prof. L. Schimansky-Geier (humbolt Universitaet Berlin, Dept. of Physics, "Reactive Dynamics with Diffusion on Low Dimensional Supports")

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Η Δρ. Αστέρω Προβατά κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Guest Editor, στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό European Physical Journal B.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Physical Review E, Physical Review Letters, Europhysics Letters, Physics Letters A , Physica A, Tectonophysics, Bulletin of Mathematical Biology, European Physical Journal B, Surface Science.
3. Μέλος της Επιτροπής "Experts" για το πρόγραμμα "ERA-Net on Complexit". Στα πλαίσια συναντήσεων της επιτροπής αυτής πραγματοποιήθηκαν τα εξής ταξίδια: The Hague, Netherlands (18-20 Ιουλίου 2007), Copenhagen, Denmark (29-31 Μαρτίου 2007), Πάτρα, Ελλάς (27-28 Ιουλίου 2007) και Budapest Chechoslovakia (31 Οκτωβρίου – 2 Νοεμβρίου 2007).
4. Ιδρυτικό μέλος του δικτύου Βιολογικής Φυσικής που ιδρύθηκε στις 30 Νοεμβρίου 2007.
5. Μέλος της Επιτροπής "Ανοικτές Θύρες" του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".
6. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδακτόρων: Θωμάς Οικονόμου (Παν/μιο Αθηνών), Βασιλικής Νουσίου (Πανεπιστήμιο Αθηνών), Νίκου Κούβαρη (Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης).
7. Διοικητικός Υπεύθυνος της Ομάδας Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".
8. Μέλος επιτροπής διοργάνωσης του 20 Συνεδρίου/Θερινού Σχολείου « Non Linear Science and Complexity», Πάτρα, Ιούλιος 19 – 29 , 2007.
9. Κύριος Διοργανωτής του Διεθνούς Συνεδρίου "Ecological Complex Systems: Stochastic Dynamics and Patterns", Città del Mare - Terrasini, Palermo, Sicily, Italy, 22-26 July 2007.

Αναπληρωτής Διευθυντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος"

(από 22-10-07).

Ο κος Θωμάς Οικονόμου κατά το έτος 2007:

1. Διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Physics Letters A .

Ο Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης κατά το έτος 2007:

1. Διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: European Physical Journal B.

## 1.7 ΜΟΡΙΑΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

### Αντικείμενο Έργου

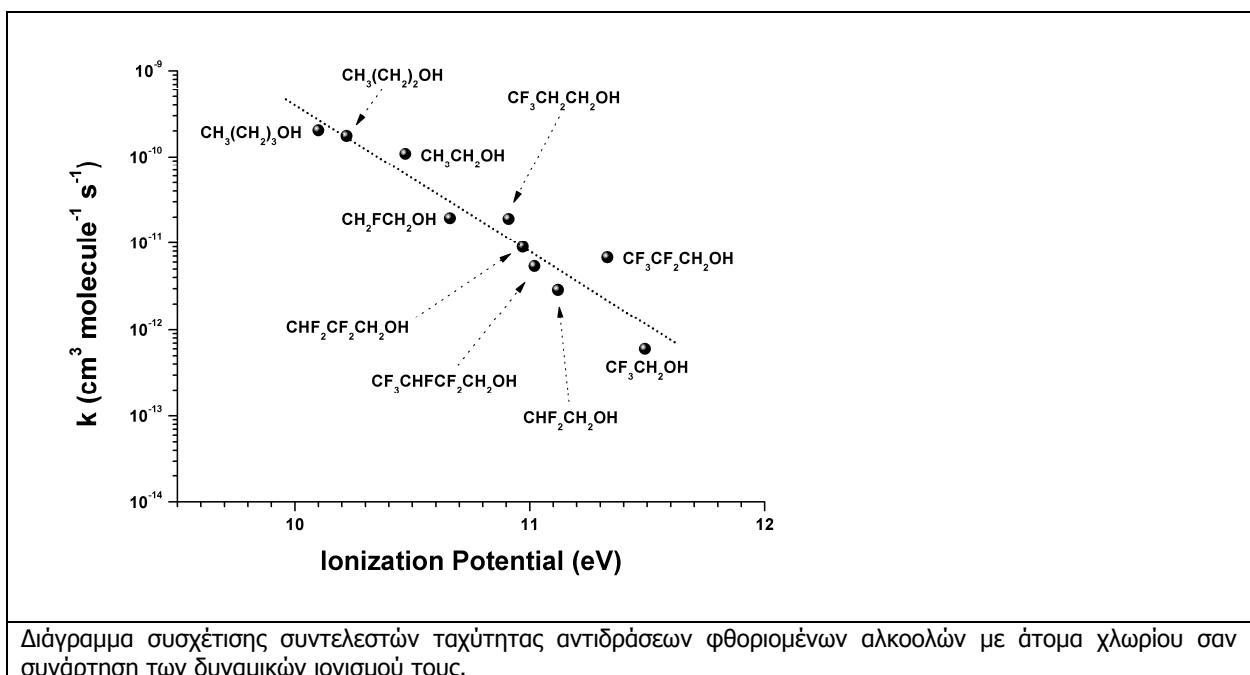
Η ερευνητική δραστηριότητα του Εργαστηρίου Μοριακής Υπολογιστικής Χημείας αφορά την μελέτη της χημικής δραστηριότητας και της τροποσφαιρικής αποικοδόμησης μορίων καθώς και την αξιόπιστη πρόβλεψη ιδιοτήτων μοριακών υλικών χρησιμοποιώντας θεωρητικές μεθόδους.

Ειδικότερα, έχει μελετηθεί η περιβαλλοντική συμπεριφορά μιάς σειράς φθοριομένων αλκοολών έναντι ατόμων χλωρίου και έχει επιτυχώς συσχετισθεί η δραστηριότητα τους με αξιόπιστα υπολογισμένες μοριακές ιδιότητες όπως ενέργειες διάσπασης δεσμών C-H και δυναμικά ιονισμού, με σκοπό την άμεση εκτίμηση της περιβαλλοντικής φιλικότητας των προτεινομένων αντικαταστατών των Freons. Επίσης, η δραστηριότητα χλωριομένων και φθοριομένων αιθανολών έναντι ριζών υδροξυλίου σε υδατικό διάλυμα μελετήθηκε σαν συνάρτηση των θεωρητικώς υπολογισμένων μοριακών ιδιοτήτων. Η δραστηριότητα του φυσικώς εκλυομένου διωδιομεθανίου  $\text{CH}_2\text{I}_2$  έναντι ατόμων χλωρίου όπως και ο μηχανισμός της οξειδωσης των ελευθέρων ριζών  $\text{CH}_2\text{I}$  και  $\text{CHI}_2$  διελευκάνθηκε με την βοήθεια κβαντομηχανικών υπολογισμών.

Ο ρυθμός της τροποσφαιρικής αποικοδόμησης μικρών οργανικών μορίων ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_3\text{F}$ ,  $\text{CH}_2\text{F}_2$ ,  $\text{CHF}_3$  και  $\text{CH}_3\text{OH}$ ) από άτομα χλωρίου και ρίζες υδροξυλίου και η εξάρτηση του από τον αριθμό και τη θέση πρόσδεσης μορίων νερού υπολογίζεται με μεθόδους *ab-initio* και DFT στα πλαίσια της Θεωρίας Μεταβατικής Κατάστασης.

Η ηλεκτρονιακή δομή και οι μοριακές ιδιότητες συμπλόκων  $\text{ML}_2$  της πρώτης σειράς στοιχείων μεταπτώσεως ( $\text{M} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$ ) με υποκαταστάτες L προσομοιάζοντες τη δομή των ενεργών κέντρων μεταλλοενζύμων μελετώνται με μεθόδους DFT, με σκοπό την διερεύνηση του ρόλου του κεντρικού μετάλλου στις δομικές, οπτικές και μαγνητικές ιδιότητες των συμπλόκων.

Η ικανότητα συναρμογής κατιόντων λανθανιδών από τροποποιημένες κυκλοδεξτρίνες μελετάται θεωρητικά χρησιμοποιώντας ημιεμπειρικές θεωρητικές μεθόδους (AM1, PM3) με σκοπό την εύρεση της δομής των συμπλόκων τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε τεχνικές μαγνητικής απεικόνισης (MRI).



## Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου, *Ερευνητής Β΄, υπεύθυνος του έργου*

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Αριστοτέλης Μ. Ζάρας (μέχρι 31-12-2007)

## Δημοσιεύσεις

1. V. C. Papadimitriou, D. K. Papanastasiou, V. G. Stefanopoulos, A. M. Zaras, Y. G. Lazarou and P. Papagiannakopoulos, «Kinetic Study for the Reactions of Cl Atoms with  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CHF}_2\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OH}$ , and  $\text{CF}_3\text{CHF}_2\text{CH}_2\text{OH}$ », *J. Phys. Chem. A* **2007**, 111, 11608 - 11617.
2. V.G. Stefanopoulos, V. C. Papadimitriou, Y.G. Lazarou and P. Papagiannakopoulos, "Absolute Rate Coefficient Determination and Reaction Mechanism Investigation for the Reaction of Cl Atoms with  $\text{CH}_2\text{I}_2$  and the Oxidation Mechanism of  $\text{CH}_2\text{I}$  Radicals", *J. Phys. Chem. A* **2007**, in press
3. I. Morozov, S. Gligorovski, P. Barzagli, D. Hoffman, Y.G. Lazarou, E. Vasiliev and H. Herrmann, "Hydroxyl Radical Reactions with Halogenated Ethanol in Aqueous Solution: Kinetics and Thermochemistry", *Int. J. Chem. Kinet.* **2007**, in press

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Zaras, A.M., Lazarou Y.G. "Interaction of  $\text{HNO}_3$  and  $\text{HO}_2$  with water clusters: A theoretical investigation", Computational Chemistry Workshop, LAL, Orsay, France, December 3-4, 2007.
2. Zaras, A.M., Stefanopoulos V.G., Papanastasiou D.K., Papadimitriou V.C., Romanias M.N., Lazarou Y.G., Papagiannakopoulos, P. "Interaction of  $\text{HNO}_3$  and  $\text{HO}_2$  with water clusters: A theoretical investigation", 2<sup>nd</sup> Accent Symposium, ATMOSPHERIC COMPOSITION CHANGE, 'Causes and Consequences-Local to Global', Urbino, Italy, July 23-27, 2007.
3. Zaras, A.M., Lazarou Y.G., "HCl uptake on ice", Third SCOUT-O3 Annual Meeting, Heraklion, Crete, Greece, May 7-11, 2007.

## Διαλέξεις

1. Λαζάρου, Ι. «Η Συνεισφορά της Θεωρητικής Χημείας στην Κατανόηση των Ατμοσφαιρικών Χημικών Διαδικασιών», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 5,0 Κ€ (από ποσό 126,0 Κ€ συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.

## Ερευνητική Υποδομή

Σύστημα προσωπικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών με λειτουργικό σύστημα Linux RedHat και Fedora Core.

## Συνεργασίες

Καθηγ. Π. Παπαγιαννακόπουλος (Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, χημικές αντιδράσεις αλογονομένων μορίων, διεξαγωγή πειραμάτων), Δρ. Ε. Μαυρίδου (Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ», σύμπλοκα υποκατεστημένων κυκλοδεξτρινών), Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου (Ινστ. Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ», σύμπλοκα υποκατεστημένων κυκλοδεξτρινών), Καθηγ. Ι. Ι. Morozov (Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, αλογονομένες αλκοόλες), Λέκτ. Π. Κυρίτσης (Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, υπολογισμοί σε μοντέλα μεταλλοενζύμων), Δρ. R. Prosmi (Department of Atomic, Molecular and Cluster Physics, Institute of Fundamental Physics 'Blas Cabrera', Spanish National Research Council (CSIC), Madrid, Spain, ιωδιομένες ενώσεις).

## Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

Μέλος της Επιτροπής Διαλέξεων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος,  
Υπεύθυνος Ξεναγήσεων στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

## Πρόγραμμα 2

Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον  
Τεχνολογίες, Ενέργεια

## 2.1 ΜΕΜΒΡΑΝΕΣ ΚΑΙ ΜΙΚΡΟΠΟΡΩΔΗ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΟΥΣ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΥΣ

### Αντικείμενο Έργου

- Χαρακτηρισμός Πορώδους Δομής (κατανομή πόρων, ειδική επιφάνεια, όγκος πόρων, συνδετικότητα πόρων) : ποροσιμετρία αζώτου και υδραργύρου, απόλυτη και σχετική διαπερατότητα αερίων (μονο-πολυφασική), Μικροσκοπία / Φασματοσκοπία.
- -Ανάπτυξη-Τροποποίηση μεμβρανών με τις τεχνικές: Χημική Εναπόθεση Ατμών [CVD], Απόθεση Langmuir-Blodgett, Επεξεργασία πλάσματος, Αναστροφή Φάσεων, Εξανθράκωση-Ενεργοποίηση.
- Αξιολόγηση / Έλεγχος συμπεριφοράς πορώδων υλικών (μεμβράνες, φίλτρα ενεργού άνθρακα κλπ.) σε διάφορες περιβαλλοντικές και βιομηχανικές εφαρμογές (διαχωρισμοί αερίων ρυπαντών, διαπερατότητα υγρών, αντίστροφη ώσμωση, συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, διαδερμική χορήγηση φαρμάκων).
- Προσομοίωση διεργασιών μεταφοράς μάζας και θερμότητας σε πορώδη μέσα με συνεχείς (μακροσκοπικές) και διακριτά αριθμητικά μοντέλα (δίκτυα).
- Οπτική αναπαράσταση ροής μέσα σε πορώδη μέσα με τη χρήση διαφορετικών τεχνικών και τάξεων μεγέθους πόρων.
- Αριθμητική και πειραματική προσομοίωση και οπτική αναπαράσταση τεχνικών ανάκτησης πετρελαίου με τη χρήση μαθηματικών και πειραματικών δομών επακριβώς γνωστής γεωμετρίας κάτω από συνθήκες περιβαλλοντικής και υψηλών πιέσεων.

### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Νικόλαος Κανελλόπουλος, Ερευνητής Α' Υπεύθυνος έργου

Δρ. Θοδωρής Στεριώτης, Ερευνητής Β'

Δρ. Κώστας Στεφανόπουλος, Ερευνητής Γ', Δρ. Φώτης Κατσαρός, Ερευνητής Γ',

Δρ. Γιώργος Ρωμανός, Ερευνητής Γ

### ΙΔΑΧ:

Ανδρέας Σαπαλίδης , Ευάγγελος Φάββας , Σέργιος Παπαγεωργίου , Χρυσούλα Αθανασέκου , Γιώργος Πιλάτος, Δρ. Νικόλαος Κακιζής, Ευάγγελος Κούβελος, Αναστάσιος Γκότζιας

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Ελένη Βερμίσογλου (ΙΚΥ μέχρι Ιούνιος 2007)

Αναστάσιος Λαμπρόπουλος(ΠΕΝΕΔ)

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. John Nolan,(INSIDE-PORES)

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Χαριτωμένη Βεζήρη (ΒΙΟΦΥΚ)

**Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Στέφανος Χρήστου, (INSIDE-PORES)

**Edward Zinger, (INSIDE-PORES), Βικτωρας Ακύλλας (ΒΙΟΦΥΚ)**

### Δημοσιεύσεις

1. E. Kouvelos, K. Kesore, T. Steriotis, H. Grigoropoulou, D. Bouloubasi, N. Theophilou, S. Tzintzos and N. Kanelopoulos, "High pressure N<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> adsorption measurements in clinoptilolites", *Microporous and Mesoporous Materials*, **99**, 106-111 (2007).
2. F.K. Katsaros, Th.A. Steriotis, G.E. Romanos, M. Konstantakou, A.K. Stubos and N.K. Kanelopoulos, "Preparation and characterisation of gas selective microporous carbon membranes", *Microporous and Mesoporous Materials*, **99**, 181-189 (2007)
3. A. Lambropoulos, G. Romanos, Th. Steriotis, J. Nolan, F. Katsaros, E. Kouvelos, G. Charalambopoulou and N. Kanelopoulos, "Application of an innovative mercury intrusion technique and relative permeability to examine the thin layer pores of sol-gel and CVD post-treated membranes" *Microporous and Mesoporous Materials*, **99**, 206-215 (2007).
4. A. De Stefanis, A.A.G. Tomlinson, Th.A. Steriotis, G.Ch. Charalambopoulou and U. Keiderling, "Study of structural irregularities of smectite clay systems by Small-Angle Neutron Scattering and adsorption", *Applied Surface Science*, **253**, 5633-5639(2007)

5. M. Konstantakou, Th.A. Steriotis, G.K. Papadopoulos, M. Kainourgiakis, E.S. Kikkinides and A.K. Stubos, "Characterization of nanoporous carbons by combining CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> sorption data with the Monte Carlo simulations", *Applied Surface Science*, **253** 5715–5720 (2007)
6. A.B. Bourlinos, Th. A. Steriotis, M. Karakassides, Y. Sanakis, V. Tzitzios, C. Trapalis, E. Kouvelos and A. Stubos, "Synthesis, characterization and gas sorption properties of a molecularly-derived graphite oxide-like foam", *Carbon*, **45 (4)**, 852-857 (2007).
7. A. Bakandritsos, A.B. Bourlinos, V. Tzitzios, N. Boukos, E. Devlin, T. Steriotis, V. Kouvelos, D. Petridis, Biopolymer networks for the solid-state production of porous magnetic beads and wires, *Advanced Functional Materials* 17 (8), 1409-1416 (2007).
8. G.N. Karanikolos, J.W. Wydra, J.A. Stoeger, H. García, A. Corma, and M. Tsapatsis "Continuous c-Oriented AlPO<sub>4</sub>-5 Films by Tertiary Growth", *Chem. Mater.*, 19, 792 (2007)
9. A. De Stefanis, A.A.G. Tomlinson, Th.A. Steriotis, G.Ch. Charalambopoulou and U. Keiderling, "Study of structural irregularities of smectite clay systems by Small-Angle Neutron Scattering and adsorption", *Applied Surface Science*, 2007,38 (3),398-404
10. N.I. Papadimitriou, G.E. Romanos, G.Ch. Charalambopoulou, M.E. Kainourgiakis, F.K. Katsaros and A.K. Stubos, "Experimental investigation of asphaltene deposition mechanism during oil flow in core samples", *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2007,57 (3-4),281-293
11. Papageorgiou, S.K.; Kouvelos, E.P.; Katsaros, F.K. "Calcium alginate beads from *Laminaria digitata* for the removal of Cu<sup>+2</sup> and Cd<sup>+2</sup> from dilute aqueous metal solutions" *Desalination in press*
12. A. Lambropoulos, G. E. Romanos, T. A. Steriotis, J. Nolan, F. K. Katsaros, E. Kouvelos, N. K. Kanellopoulos, *Development of an innovative mercury intrusion technique to examine defects plugging after CVD treatment of NF composite membranes*, *J Porous Mater*, DOI 10.1007/s10934-006-9055-5 (Available on line)

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Steriotis Th. "Study of pore confined CO<sub>2</sub> by sorption with in situ neutron diffraction" (Invited), 2nd BENSOC Adsorption Workshop, February 2, 2007, Berlin, Germany.
2. Lelong G.; Price D.L.; Bhattacharyya S.; Brady J.W.; Steriotis T.; Charalambopoulou G.; Brandt A.; Saboungi M.-L.; "Neutron Scattering: A tool to probe structure and dynamics in porous silica", 2nd International School & Workshop of INSIDE-PORes NoE, 24-28 February 2007, Thessaloniki, Greece.
3. De Stefanis A.; Tomlinson A.A.G.; Steriotis Th.A.; Charalambopoulou G.Ch.; Keiderling U.; "Characterisation of the nanostructure of smectite clay systems based on SANS and adsorption data", BENSOC User's Meeting, Hahn-Meitner Institute, Berlin-Germany, 23-24 May 2007.
4. Γκότζιας Α.; Καινουργιάκης Μ.; Στεριώτης Θ. "Συγκριτική μελέτη ρόφησης υδρογόνου σε απομονωμένους νανο-σωλήνες και νανο-κόνους άνθρακα", 3ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών υλικών, Θεσσαλονίκη, 1-2 Νοεμβρίου 2007.
5. Κωνσταντάκου Μ.; Στεριώτης Θ.Α.; Καινουργιάκης Μ.; Παπαδόπουλος Γ.Κ.; Κικκινίδης Ε.Σ.; Στούμπος Α.Κ. «Συνδυασμός πειραματικών ισοθέμων προσρόφησης με θεωρητικά αποτελέσματα προσομοίωσης monte carlo για το χαρακτηρισμό νανοπορωδών ανθράκων» 3ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών υλικών, Θεσσαλονίκη, 1-2 Νοεμβρίου 2007.
6. De Stefanis A.; Tomlinson A.A.G.; Στεριώτης Θ.Α.; Χαραλαμποπούλου Γ.Χ.; Keiderling U.; «Συνδυασμός δεδομένων ρόφησης και μικρογωνιακής σκέδασης νετρονίων για το χαρακτηρισμό της νανοδομής σμεκτιτών», 3<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών Θεσσαλονίκη, 1-2 Νοεμβρίου 2007.
7. Κατσαρός Φ.Κ.; Στεριώτης Θ.Α.; Παπαγεωργίου Σ.Κ.; Στούμπος Α.Κ.; Κανελλόπουλος Ν.Κ. «Χρήση αλγινικού νατρίου για την παρασκευή άνθρακα με ρυθμιζόμενο μέγεθος πόρων», 3<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών, Θεσσαλονίκη, 1-2 Νοεμβρίου 2007.
8. Γκότζιας Α.; Καινουργιάκης Μ.; Στεριώτης Θ. "Αποθήκευση υδρογόνου σε κωνικές νανοδομές άνθρακα", 3ο Εθνικό Συνέδριο Τεχνολογιών Υδρογόνου, Πάτρα, 19-20 Νοεμβρίου 2007.



9. Παπαδημητρίου Ν. Ι.; Κωνσταντάκου Μ.; Γκότζιας Α.; Τσιμπανογιάννης Ι.; Στεριώτης Θ.; Στούμπος Α. Αποθήκευση Υδρογόνου σε νανοπορώδη Υλικά 3ο Εθνικό Συνέδριο Τεχνολογιών Υδρογόνου, Πάτρα, 19-20 Νοεμβρίου 2007.
10. Κωνσταντάκου Μ.; Στεριώτης Θ.Α.; Καιουργιάκης Μ.; Παπαδόπουλος Γ.Κ.; Κικκινίδης Ε.Σ.; Στούμπος Α.Κ. «Χαρακτηρισμός νανοανθράκων από δεδομένα ρόφησης υδρογόνου», 3<sup>ο</sup> Εθνικό Συνέδριο Τεχνολογιών Υδρογόνου, Πάτρα, 19-20 Νοεμβρίου 2007.
11. Fotis Katsaros, Th. Steriotis, A. Stubos and N. Kanellopoulos. Preparation and Characterisation of carbon powders by pyrolysis of Phenolic resins, s, 2<sup>nd</sup> International School and Workshop on IN-Situ Study and DEvelopment of Processes Involving PORous Solids (INSIDE-PORes) CERTH, THESSALONIKI GREECE 24 -28<sup>th</sup> February 2007
12. S. Papageorgiou, F. Katsaros, E. Kouvelos, N. Kanellopoulos, Alginate Beads From Laminaria Digitata For Single And Binary Metal Sorption, Fundamentals of Adsorption (FOA) 09, May 20-25, 2007, Giardini Naxos, Sicily, Italy
13. F.K. Katsaros, S. Papageorgiou, T.A. Steriotis and N.K. Kanellopoulos. Preparation and characterization of carbon powders by pyrolysis of Alginate salts, 3<sup>rd</sup> International Workshop on IN-Situ Study and DEvelopment of Processes Involving PORous Solids (INSIDE-PORes) ALICANTE (SPAIN) 24 -26<sup>th</sup> September 2007

## Διαλέξεις

1. Steriotis Th. "Recent Advances in Hydrogen Storage Processes" (Invited), 2nd International School & Workshop IN-Situ Study and Development of Processes Involving PORous Solids, September 24-28 2007, Thessaloniki, Greece.
2. Στεριώτης Θ. "Προηγμένα Υλικά για Αποθήκευση Υδρογόνου" Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. EE 1195 – INSIDE\_PORES NMP3-CT-2004-500895, "In-Situ Study and Development of Processes Involving Nano-Porous Solids", Network of Excellence in nanotechnology FP6, Priority 3 – NMP, Thematic priority 3.4.1.1. Partners to NCSR "D": Centre Nationale de la Recherche Scientifique (France), Imperial College (United Kingdom), University of Leipzig (Germany), University of Antwerp (Belgium), University of Stuttgart (Germany), Institute of Energy and Technology (Norway), TuDelft (The Netherlands), University of Alicante (Spain), Istituto di Chimica dei Materiali (Italy), Centre for Research and Technology Hellas (Greece), University of Hannover (Germany), SINTEF(Norway),TNO (The Netherlands). Total Budget: 6.800.000 €, NCSR "D" Budget: 1.844834 €. (October 2004- October 2008).
2. EE 1399 - HYCONES NMP3-CT-2006-032970, "Hydrogen Storage in Carbon Cones", Partners to NCSR "D": Institute for Energy Technology (NO), The University of Nottingham (UK), Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences (PL), Scatec AS (NO) Total Budget 2.564.000 €, NCSR"D" Budget: 577.000 € (November 2006-September 2009).
3. EE 1112 - EPAN-HYDROCELL E-22 F.P. 39 14010/19-10-2003, "Development of Production Technologies for Hydrogen used in Fuel Cells", GREEK NATIONAL OPERATIONAL PROGRAMME "COMPETITIVENESS", AXIS 4 – MEASURE 4.5, CONCERTED PROGRAMME "RENEWABLE ENERGY SOURCES & ENERGY SAVING". Partners to NCSR "D": Silver & Baryte Co S.A., Phosphorous Fertilizers Industry, Motor Oil Hellas S.A., DEYAMV, ENOIA S.A. Total Budget 1.084,533 €, NCSR"D" Budget: 299.400 € (September 2003-August 2006).
3. EE 1242 - EPAN-NANOFOOD TP-21, "Development of ceramic membranes for applications in food industries", GREEK NATIONAL OPERATIONAL PROGRAMME "COMPETITIVENESS", AXIS 4 – MEASURE 4.5, CONCERTED PROGRAMME "Food Agriculture", Partners to NCSR "D": Tsantalis S.A., Greek Sugar Industry, Zenon S.A., Technological Educational Institute (T.E.I.) of Athens, EVGA S.A. Total Budget 600.200 €, NCSR"D" Budget: 112.800 € (November 2004-October 2007).
6. EE 1232 - HUNGARY–GREECE JOINT RESEARCH AND TECHNOLOGY PROGRAMMES 2003 – 2006, "Preparation of Highly Selective Carbon for CO<sub>2</sub>/CO Separation", Partners to NCSR "D": Department of Physical Chemistry Budapest University of Technology and Economics (Hungary), SUC Hellas (Greece). NCSR"D" Budget: 23.460 € (January 2005-December 2006)

7. EE 1290- EPAN – O3EΔ181, "Design and development of carbon and silicon nanostructures. Theoretical and experimental investigation of their application in hydrogen, or other gas, mixtures separation and storage processes." GREEK NATIONAL OPERATIONAL PROGRAMME "COMPETITIVENESS", MEASURE 8.3, CONCERTED PROGRAMME "Nanotechnology". Partners to NCSR "D": University of Athens, University of Illinois Chicago, SUC HELLAS Ltd (IPEL). Total Budget: 111.660 €, NCSR "D" Budget: 67.642 € (December 2005 – December 2008)
8. POLAND-GREECE 157-ε, Development and Testing of Ordered Porous Materials for Olefin-Paraffin Gas Separations, JOINT RESEARCH AND TECHNOLOGY PROGRAMMES 2005 – 2007, Partner to NCSR "D": Institute of Chemical Engineering-Polish Academy of Sciences (PO). Budget NCSR "D": 11.740 € (October 2006-March 2008).
9. Ανάπτυξη Πρωτότυπων Συστημάτων Αφαλάτωσης και Επεξεργασίας Υγρών Αποβλήτων με Χρήση Κοίλων Μεμβρανών Διπλής Στοιβάδας (ΑΦΕΠ)  
(Κωδ ΓΓΕΤ: ATT\_68)  
Προϋπολογισμός ΕΚΕΦΕ «Δ»: 141.500 (Δ.Δ 124.250)

β) Συνεργαζόμενος εταίρος:

1. FUSION "Fundamental Studies of Transport in Inorganic Nanostructures", FP6, Thematic priority 3.4.2.1-2. Partners to NCSR "D": University College Dublin (Ireland), University of Edinburgh (UK), Delft University of Technology (The Netherlands), Warsaw University of Technology (Poland), VTT Technical Research Centre of Finland, EcoCeramics B.V. (The Netherlands). Total budget: 2.137.000 €, NCSR "D" Budget: 180.000 €. (December 2004-November 2007).
2. ERA Pilot MiNa TSI "European Research Area Pilot Action on MicroNano Technology Systems Integration", FP6 Priority. Partners to NCSR "D": VDI/VDE Innovation + Technik GmbH (Germany), Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft (Austria), University Of Tartu (Estonia), Ministerio De Educacion Y Ciencia (Spain), Association Eurimus Office (France), Association For Pidea (France), Commissariat A L'Energie Atomique (France), Ente Per Le Nuove Tecnologie, L'Energia E L'Ambiente (Italy), Israeli Industry Centre For Research and Development (Israel), Fondazzjoni Temi Zammit (Malta), Slovenska Technicka Univerzita v Bratislave (Slovakia). Total Budget: 850.000 €. NCSR "D" Budget: 42.366 €. (July 2005-July 2007).

## Ερευνητική Υποδομή

Ποροσίμετρο Αζώτου με αναβάθμιση Κρυπτού – Quantachrome, Ποροσίμετρο Υδραργύρου – Quantachrome, Συσκευή διαπερατότητας χαμηλής πίεσης, Συσκευές (2) διαπερατότητας αερίων υψηλής πίεσης έως 70 bar, Συστήματα (2) υψηλής πίεσης εκλεκτικότητας αερίων, Σύστημα εκλεκτικότητας αερίων χαμηλής πίεσης, Αέριοι Χρωματογράφοι 3 με αυτόματη δειγματοληψία Αέριος Χρωματογράφος - Φασματογράφος μάζας – Pfeiffer, Σύστημα δυναμικής προσρόφησης αερίων, Υβριδικό σύστημα κλίσης –μεμβράνης για την απομάκρυνση πτητικών οργανικών ουσιών, Αυτόματη συσκευή σταθμικής ανάλυσης ρόφησης υψηλής πίεσης- HIDDEN IGA, Σταθμικό σύστημα μαγνητικής σύζευξης (2) – Rubotherm, Σταθμικές συσκευές ανάλυσης ρόφησης (3) – CI balances, Συσκευή παρασκευής υμενίων Langmuir-Blodgett, Αντιδραστήρας χημικής εναπόθεσης (Chemical Vapor Deposition reactor), Μονάδα μεταβλητής πρόσπτωσης υπέρυθρης ακτινοβολίας, Προηγμένο σύστημα απεικόνισης με σύστημα Video για τη μελέτη φαινομένων ροής, Εκτεταμένη υπολογιστική/δικτυακή υποδομή, Μικροζυγοί (2) κρυστάλλου Χαλαζία, Συστήματα υψηλού κενού, Ογκομετρική συσκευή προσρόφησης αερίων – VTI, Αυτόματη συσκευή μέτρησης διαπερατότητας οξυγόνου σε πολυμερικά υμένα – Dansensor PBI, Μικροσκόπιο ατομικών δυνάμεων - Veeco Innova, Φασματοφωτόμετρο υπέρυθρου - Nicolet 6700, Κελί υψηλών πιέσεων για Φασματοφωτόμετρο υπέρυθρου, Συσκευή παραγωγής υπερκαθαρού νερού, Ιοντικός χρωματογράφος - Dionex, Υγρός Χρωματογράφος - Dionex, Σύστημα μέτρησης προσρόφησης από υγρή φάση, Θερμιδόμετρο Calvet - Setaram, Θερμική ανάλυση - Setaram, Σύστημα χρωματογραφίας μηδενικού μήκους Zero length Chromatography.

## Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό Συνεργασίες

1. Συμφωνητικό ανάθεσης έργου με «S&B Βιομηχανικά Ορυκτά ΑΕ» στα πλαίσια του χρηματοδοτούμενου από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας έργου «Ανάπτυξη Τεχνολογιών Παραγωγής Υδρογόνου προς χρήση σε κυψελίδες καυσίμου».
2. Αθανάσιος Ρούσσης, Πανεπιστήμιο Αθηνών, στα πλαίσια του προγράμματος ΒΙΟΦΥΚ
3. Νικόλαος Θεοφίλου, Εταιρεία Αργυρομεταλευμάτων και Βαρυτίνης Α.Ε., στα πλαίσια του προγράμματος INSIDE\_PORES.
4. Άγγελος Δημητριάδης, ΤΣΑΝΤΑΛΗΣ ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ Α.Ε, στα πλαίσια του προγράμματος NANOFOOD.
5. Γ. Θεοδωρίδης, ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ ΦΩΣΦΟΡΙΚΩΝ ΛΙΠΑΣΜΑΤΩΝ Α.Ε, στα πλαίσια του προγράμματος HYDROCELL
6. Σοφία Ραβάνη, ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ ΖΑΧΑΡΗΣ Α.Ε., στα πλαίσια του προγράμματος NANOFOOD.
7. Χαράλαμπος Φωτεινόπουλος, ΜΟΤΟΡ ΟΙΛ Ελλάς, στα πλαίσια του προγράμματος HYDROCELL

## **Άλλες Δραστηριότητες**

### ***Νικόλαος Κανελλόπουλος***

1. Συντονιστής consortium τριών Ευρωπαϊκών Networks of Excellence του FP6 (INSIDE-PORES, NANOFUNPOLY and NANOMEMBRO) της nanotechnology priority του FP6 για τον συντονισμό των Εθνικών προγραμμάτων στον τομέα ενεργειακών και περιβαλλοντολογικών εφαρμογών των νανοϋλικών.
2. Ιδρυτικό μέλος consortium μεταξύ του INSIDE-PORES, του National Institute Microelectronics της Ρουμανίας και της United Nations Industrial Organization (UNIDO) με στόχο την δημιουργία Τεχνολογικού πάρκου νανοτεχνολογίας στην Ρουμανία.
3. Advisor for the National NMP Committee
4. Υπεύθυνος της ΕΤΕΠ Νανοτεχνολογίας

### ***Θ.Στεριώτης***

Ο Δρ. Θεόδωρος Στεριώτης κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Πρόεδρος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Microporous and Mesoporous Materials, Langmuir, Journal of Physical Chemistry B, Carbon, Journal of Applied Surface Science, Journal of Membrane Science, AIChE Journal
3. Προσκεκλημένος Αξιολογητής: Ευρωπαϊκή Ένωση (FP7-NMP), Science and Technology Foundation- Portugal (Fundação para a Ciência e a Tecnologia - FCT) - Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας Κύπρου
4. Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής BENSC, HMI, Berlin, Germany
5. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Α. Γκότζια (Πανεπιστήμιο Κρήτης - Χημικό Τμήμα)
6. Αναπληρωτής Συντονιστής του IP NESSHY (Novel Efficient Solid Storage for Hydrogen), FP7, ENERGY
7. Μέλος της Ελληνικής Αντιπροσωπείας στο ΔΙΕΘΝΗ ΟΡΓΑΝΙΣΜΟ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ (IEA- International Energy Agency) για τον τομέα της Αποθήκευσης Υδρογόνου

### ***Φ.Κατσαρός***

Κριτής σε περιοδικά: Composites Part B: Engineering, Journal of Hazardous Materials.

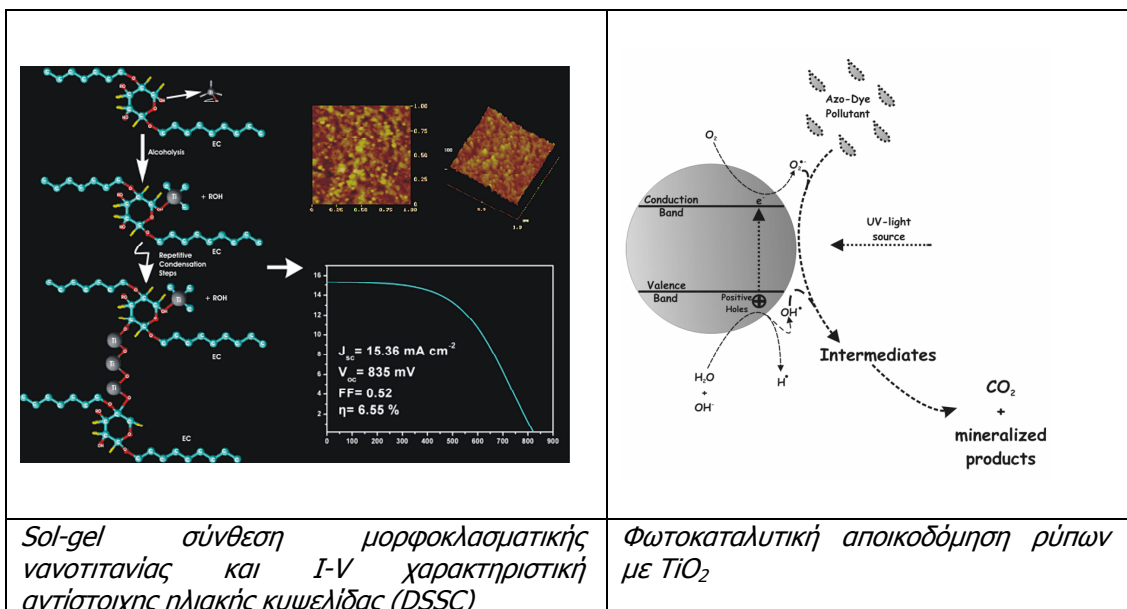
## 2.2 ΦΩΤΟΟΞΕΙΔΟΑΝΑΓΩΓΙΚΗ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΚΑΙ ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΤΗΣ ΗΛΙΑΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ – ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### Αντικείμενο Έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην μελέτη φωτοεπαγόμενων διεργασιών και στις εφαρμογές τους στην απευθείας μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική, στον καθαρισμό του περιβάλλοντος και την προστασία της υγείας. Ειδικότερα περιλαμβάνει:

#### 1. Φωτοευαισθητοποιημένες Ηλιακές Κυψελίδες (DSSCs)

Μελετάται η ευαισθητοποίηση νανοδομημένων ημιαγωγών (κυρίως  $\text{TiO}_2$ , σε μορφή σφαιρικών σωματιδίων ή νανοσωλήνων) για αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική. Με χρήση μεθόδων κολλοειδούς χημείας (sol-gel), όπου ελέγχονται κυρίως τα στάδια συμπύκνωσης και υδρόλυσης του πρόδρομου διαλύματος, ερευνάται η δυνατότητα ανάπτυξης νανοδομημένων υλικών (εναιωρήματα ή πάστες) με βέλτιστα μορφολογικά χαρακτηριστικά (κυρίως μεγάλο ανάπτυγμα επιφάνειας). Η περαιτέρω έρευνα στοχεύει στην κατασκευή σταθερών φωτοηλεκτροδίων, χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές εναπόθεσης (screen printing, doctor blade, spin coating, dip coating) και βελτιστοποιώντας τις σχετικές παραμέτρους των παραπάνω διεργασιών. Γίνεται επίσης συντονισμένη προσπάθεια σύνθεσης νέων χρωστικών (σύμπλοκες ενώσεις μετάλλων μεταπτώσεως), αναπτύσσονται σύνθετοι οξειδοαναγωγικοί πολυμερικοί ηλεκτρολύτες και μελετώνται αναλυτικά οι οπτικές, φωτοφυσικές και ηλεκτροχημικές ιδιότητες όλων αυτών των συστατικών που αποτελούν μια φωτοηλεκτροχημική κυψελίδα. Παράλληλα, η έρευνα περνά άμεσα στην πρακτική εφαρμογή με την κατασκευή πρότυπων ηλιακών κυψελίδων που παρουσιάζουν ικανοποιητικές αποδόσεις, σταθερότητα και μεγάλο χρόνο ζωής. Έχει αναπτυχθεί συνεργασία με ιδρύματα, ερευνητικούς φορείς και εταιρείες του εξωτερικού για την μεταφορά τεχνολογίας και τη δημιουργία μονάδας παραγωγής των νέων φωτοβολταϊκών στην Ελλάδα (κυψελίδες και πάνελς). Παράλληλα συμμετέχουμε σε πρωτοβουλίες επίδειξης των νέων φωτοβολταϊκών στο πεδίο εφαρμογής τους μέσω της ενσωμάτωσής τους σε δομικά στοιχεία κτιρίων.



#### 2. Φωτοκατάλυση

Η έρευνα εστιάζεται στη μελέτη φωτοεπαγόμενων (ετερογενών) αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στη διεπιφάνεια ημιαγωγού/υγρού, /στερεού ή /αέρα. Γίνεται ανάπτυξη καινοτόμων νανοδομημένων φωτοκαταλυτών τιτανίας ( $\text{TiO}_2$ ) και επιδιώκεται η εφαρμογή τους στην αποκατάσταση-καθαρισμό του περιβάλλοντος και την προστασία της υγείας. Ειδικότερα η

ερευνητική προσπάθεια στοχεύει στην βελτίωση της απόδοσης της φωτοκαταλυτικής διεργασίας μέσω: α) ελέγχου των ιδιοτήτων των φωτοκαταλυτικών υλικών σε επίπεδο νανοδιαστάσεων, β) αύξησης της ειδικής επιφάνειας του φωτοκαταλύτη, γ) αποδοτικού διαχωρισμού των φωτοεπαγόμενων φορέων (ηλεκτρονίων και οπών), δ) εισαγωγής προσμίξεων (doping) των φωτοκαταλυτών με μετατόπιση της απορρόφησης στο ορατό, ε) αρμονικής ρύθμισης των φωτοκαταλυτικών και υπερυδροφίλων ιδιοτήτων σε πολυδυναμικές νανοδομημένες επιφάνειες. Στα πλαίσια αυτά γίνεται συντονισμένη προσπάθεια ανάπτυξης αντιρρυπαντικής φωτονανοκαταλυτικής τεχνολογίας και εφαρμογής της σε αυτοκαθαριζόμενες επιφάνειες στην καταστροφή ρύπων (ανόργανων και οργανικών), στην αποικοδόμηση βακτηρίων, μυκήτων, και ιών αλλά και βιοϋμενίων. Παράλληλα μελετάται εντατικά η αντικαρκινική δράση του διοξειδίου του τιτανίου σε νεοπλασματικά κύτταρα και οι αντιπηκτικές/αντιθρομβωτικές/αντιφλεγμονώδεις ιδιότητες νέων φωτοκαταλυτικών υλικών βασισμένων στη νανοδομημένη τιτάνια.

## Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Ευαγγελία Χατζηβασίλογλου (μέχρι 16-2-2007), Γεωργία Κόντη.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Θωμάς Στεργιόπουλος (STREP), Δρ. Αθανάσιος Γ. Κόντος (STREP, μέχρι 15-5-2007), Δρ. Βλάσσης Λυκοδήμος (STREP, από 6-7-2007).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Αθανάσιος Ι. Κοντός (ΠΕΝΕΔ), Ευαγγελία Ρόζη (ΠΕΝΕΔ), Νίκη Αλεξάκη (ΠΕΝΕΔ), Γεώργιος Καντώνης (ΠΕΝΕΔ), Κατσανάκη Αντιγόνη (άμισθη).

**Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δημήτριος Τσουκλερης (STREP).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Αθανάσιος Φιλιππίδης, Λέκτορας, Χημικό Τμήμα, ΕΚΠΑ

## Δημοσιεύσεις

1. Faiz, J.; Philippopoulos, A.I.; Kontos, A.G.; Falaras, P.; Pikramenou, Z. "Functional supramolecular ruthenium cyclodextrin dyes for nanocrystalline solar cells" *Adv. Funct. Mater.* **2007**, *17*, 54-58.
2. Tsoukleris, D.S.; Kontos, A. I.; Aloupogiannis, P.; Falaras, P. "Photocatalytic properties of screen printed titania", *Catal. Today* **2007**, *124*, 110-117.
3. Kontos, A. I.; Kontos, A. G.; Tsoukleris, D. S.; Vlachos, G. D.; Falaras, P. "Superhydrophilicity and photocatalytic property of nanocrystalline Titania sol-gel films" *Thin Solid Films* **2007**, *515*, 7370-7375.
4. Krstajic, N.V.; Vracar, L.M.; Radmilovic, V.R.; Neophytides, S.G.; Labou, M.; Jaksic, J.M.; Tunold, R.; Falaras, P.; Jaksic, M.M. "Advances in Interactive Supported Electrocatalysts for Hydrogen and Oxygen Electrode Reactions" *Surface Science* **2007**, *601*, 1449-1966.
5. Ibhaddon, A.O.; Arabatzis, I.M.; Falaras, P. "The Design and Photoreaction Kinetic Modeling of a Gas-Phase Titania Foam Packed Bed Reactor", *Chem. Eng. J.* **2007**, *133*, 317-323.
6. Mitsopoulou, C.A.; Veroni, V.; Philippopoulos, A.I.; Falaras, P. "Synthesis, characterization and sensitization properties of two novel mono and bis carboxyl-dipyrido-phenazine ruthenium (II) charge transfer complexes", *J. Photochem. Photob. A: Chem.* **2007**, *191*, 6-12.
7. Tsoukleris, D.S.; Maggos, T.; Vassilakos, C.; Falaras, P. "Photocatalytic degradation of volatile organics on TiO<sub>2</sub> embedded glass spherules", *Catal. Today* **2007**, *129*, 96-101.
8. Hahn, R.; Stergiopoulos, T.; Macak, J.M.; Tsoukleris, D.; Kontos, A.G.; Albu, S.; Kim, D.; Ghicov, A.; Kunze, J.; Falaras, P.; Schmuki, P. "Efficient solar energy conversion using TiO<sub>2</sub> nanotubes produced by rapid breakdown anodization - a comparison", *Phys. Status Solidi (RRL)* **2007**, *1*, 135-137.
9. Chatzivasiloglou, E.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A.G.; Alexis, N.; Prodromidis, M.; Falaras, P. "The influence of the metal cation and the filler on the performance of dye-sensitized solar cells using polymer-gel redox electrolytes", *J. Photochem. Photob. A: Chem.* **2007**, *192*, 49-55.
10. Al-mutlaq, F.A.; Potvin, P.G.; Philippopoulos, A.I.; Falaras, P. "Catechol-Bearing Dipyrazinylpyridine Complexes of Ruthenium(II)", *Eur J. Inorg. Chem.* **2007**, 2121-2128.

11. Jaksic, J.M.; Krstajic, N.V.; Vracar, L.M.; Neophytides, S.G.; Labou, D.; Falaras, P.; Jaksic, M.M. "Spillover of primary oxides as a dynamic catalytic effect of interactive hypo-d-oxide supports", *Electrochim. Acta* **2007**, *53*, 349-361.
12. Maletin, M.; Kontos, A.G.; Devlin, E.; Cvejić, Ž.; Srdić, V.V.; Moshopoulou, E.G. "Synthesis and structural characterization of In-doped ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles", *J. Eur. Ceram. Soc.* **2007**, *27*, 4391-94.
13. Philippopoulos, A.I.; Terzis, A.; Raptopoulou, C.P.; Catalano, V.J.; Falaras, P. "Synthesis, characterization and sensitizing properties of heteroleptic Ru(II) complexes based on 2,6-bis(N-pyrazolyl)pyridine and 4,4'-dicarboxy-2,2'-bipyridine ligands", *Eur. J. Inorg. Chem.* **2007**, 5633-5644.
14. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Tsoukleris, D.S.; Bernard, M.; Spyrellis, N.; Falaras, P. "Nanostructured TiO<sub>2</sub> films for DSSCS prepared by combining doctor blade and sol gel techniques", *J. Mater. Process. Tech* (in press).
15. Kontos, A.G.; Stergiopoulos, T.; Tsiminis, G.; Raptis, Y.S.; Falaras, P. "In-situ micro- and macro- Raman investigation of the redox couple behavior in dsscs", *Inorg. Chim. Acta*, invited paper (in press).
16. Katsanaki, A.; Tsoukleris, D.S.; Falaras P; Karayianni, H.S. "Preparation and characterization of nanocrystalline Pt/TCG counter electrodes for dye-sensitized solar cells", *J. Sol. Energy Eng.* (in press).

### Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Fardis, M.; Kourkoulis, S.; Tsitsias, V.; Papavassiliou, G.; Falaras, P. "Modification of perlite cementitious samples with nanostructured titania", 23<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Επιστήμης Υλικών, Αθήνα., 23 - 26 Σεπτεμβρίου 2007, Πρακτικά σελ. 208,
2. Ghicov, A.; Hahn, R.; Albu, S.P.; Kim, D.; Macak, J.M.; Stergiopoulos, T.; Tsoukleris, D.; Kontos, A.G.; Kunze, J.; Falaras, P.; Schmuki, P. "Efficient solar energy conversion using TiO<sub>2</sub> nanotubes", EuroNanoForum 2007, Düsseldorf, Germany, June 19-21. Proceedings P279.
3. Hahn, R.; Stergiopoulos, T.; Ghicov, A.; Albu, S.P.; Kim, D.; Macak, J.M.; Tsoukleris, D.; Kontos, A.G.; Kunze, J.; Falaras, P.; Schmuki, P. "Use of Anodic TiO<sub>2</sub> Nanotubes in Dye-Sensitized Solar Cells", Nano Europe 2007, St. Gallen, Switzerland, 11-13 Σεπτεμβρίου 2007.
4. Alexaki, N.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A.G.; Tsoukleris, D.; Falaras, P. "Templated sol-gel synthesis of TiO<sub>2</sub> nanoparticles presenting nanowire-like structure for dye-sensitized solar cells", 23<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Αθήνα, 23-26 Σεπτεμβρίου 2007, Πρακτικά σελ. 210.
5. Καντώνης, Γ.; Στεργιόπουλος Θ.; Φαλάρας, Π. "Παρασκευή υμενίων νανοκρυσταλλικού TiO<sub>2</sub> με την μέθοδο screen-printing για φωτοευαίσθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες", 23<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συνέδριο Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Αθήνα, 23-26 Σεπτεμβρίου 2007, Πρακτικά σελ. 212.
6. Falaras, P.; Tulloch, G.; Harikisun, R.; Desilvestro, H.; Stergiopoulos, T.; Likodimos, V.; Kontos, A.G. " Micro-Raman analysis-Aged IV characteristics of DSC ", Abstract in Proceedings of Nano Europe 2007, St. Gallen, Switzerland, 11-13 Σεπτεμβρίου 2007, invited.
7. Vasilopoulou, M.; Stathopoulos, N.; Falaras, P.; Pistoris, G.; D. Davazoglou, D.; Argitis, P. "An all-organic optocoupler based on polymer light-emitting diodes (PLEDs)", P II.38, 3<sup>ο</sup> ΔΙΕΘΝΕΣ ΣΥΝΕΔΡΙΟ MICRO&NANO2007 on Micro-Nanoelectronics, Nanotechnology & MEMs, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 18-21 Νοεμβρίου 2007.
8. Maletin, M.; Moshopoulou, E.G.; Kontos, A.G.; Devlin, E.; Srdic, V.V. "Synthesis, characterization and magnetic properties of ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> and In-doped ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles", XXIII National Solid State and Material Science Conf., Athens (2007), p. 103.
9. Macak, J.; Hahn,R.; Stergiopoulos, T.; Ghicov, A.; Tsoukleris, D.; Albu, S.; Kunze, L.; Kim, D.; Falaras, P.; Schmuki, P. "Use of Anodic TiO<sub>2</sub> Nanotubes in Solar Cell", Symposium H: Nanostructured Solar Cells, 2007 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center and Sheraton Boston Hotel, Boston, MA, , November 26 - 30, 2007.

10. Κόντη, Γ.; Φιλιππόπουλος, Α.; Φαλάρας, Π. "Σύνθεση και χαρακτηρισμός συμπλόκων ενώσεων του δισθενούς ρουθηνίου και εφαρμογή τους σε εθαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες", 2<sup>ο</sup> Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, Αθήνα, Βιβλίο Περιλήψεων, σ. 145, 19-21 Απριλίου 2007.
11. Μητσοπούλου, Χ.Α.; Λάππα, Γ.; Φιλιππόπουλος, Α.; Φαλάρας, Π. "Φωτοευαισθητοποίηση υμενίων TiO<sub>2</sub> με Επίπεδα Τετραγωνικά Σύμπλοκα του Pt(II) Διμίνης-Διθειολενίου", Πράσινη Χημεία και Βιώσιμη Ανάπτυξη, 2<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο, Πάτρα, 8-10 Μαρτίου 2007.
12. Lagopati, N.; Kontos, A.I.; Venieratos, P.; Kitsiou, P.; Tsilibari, E.F.; Falaras P. "Photoinduced Cancer Treatment Using Nanostructured Titanium Dioxide Solution and Corresponding Molecular Mechanisms", International conference on nanomedicine, Porto Carras Grand Resort, Chalkidiki, Greece, September 9 –11, 2007.
13. Κύρκου, Α.; Κοντός, Α.; Χαριτίδης, Κ.Α.; Φαλάρας, Π. "Μελέτη δομικών ιδιοτήτων και έλεγχος φωτοκαταλυτικής ενεργότητας μονοδιάσπαρτων νανοσφαιρών τιτανίας (TiO<sub>2</sub>)", 6<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Επιστημονικό Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, Αθήνα, Πρακτικά, Τόμος Β', σελ. 1225-1228, 31 Μαΐου-2 Ιουνίου 2007.
14. Σακκάς, Β.Α.; Αραμπατζής, Ι.Μ.; Κωνσταντίνου, Ι.Κ.; Δήμου, Α.Δ.; Φαλάρας, Π.; Αλμπάνης "Μελέτη της φωτοκαταλυτικής διάσπασης του φυτοφαρμακού Metolachlor με τη χρήση διαφορετικών μορφών TiO<sub>2</sub>", Πράσινη Χημεία και Βιώσιμη Ανάπτυξη, 2<sup>ο</sup> Πανελλήνιο Συμπόσιο, Πάτρα, 8-10 Μαρτίου 2007.
15. Kyrkou, A.; Kontos, A.I.; Papavasileiou, G.; Charitidis, C.; Falaras, P. "Investigation of the Structural Properties and Photocatalytic Activity Control of Monodispersed TiO<sub>2</sub> Nanospheres", THE INTERNATIONAL CONFERENCE ON STRUCTURAL ANALYSIS OF ADVANCED MATERIALS - ICSAM, Session 8A-NANOMATERIALS, Lect. 8A-4, Patras, Greece, September 2-6, 2007.

### Διαλέξεις

1. Falaras, P. "DSSCs and photocatalysis on Ti-nanotubes", University of Nuremberg-Erlangen, Dept. of Material.Sci, Erlangen, Germany, 8 March 2007,
2. Falaras, P. " Micro-Raman analysis-Aged IV characteristics of DSC ", Nano Europe 2007, St. Gallen, Switzerland, 12 Σεπτεμβρίου 2007.
3. Φαλάρας, Π. "Ποιότητα μέσω καινοτόμου έρευνας στο χώρο της Χημείας", Εσπερίδα με θέμα «Ποιότητα μέσω της Καινοτομίας και της Φροντίδας στο Χώρο της Χημείας», Εσπερίδα, Ένωση Ελλήνων Χημικών/Περιφερειακό Τμήμα Αττικής και Κυκλάδων, Park Hotel, Αθήνα, 19 Νοεμβρίου 2007.
4. Στεργιόπουλος, Θ. «Καινοτόμα υλικά για την αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική.», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.
5. Stergiopoulos, T. "Photoinduced applications involving TiO<sub>2</sub> nanotubes (Photoelectrochemistry)", 3<sup>rd</sup> meeting of STREP project entitled as Ti-Nanotubes, University of Nuremberg-Erlangen, 26 Ιουλίου 2007.
6. Στεργιόπουλος, Θ. "Φασματοσκοπικός Χαρακτηρισμός Φωτοηλεκτροχημικών Ηλιακών Κυψελίδων", Διάλεξη στα Πλαίσια του Βραβείου Καλύτερης Διατριβής 2006, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 28 Σεπτεμβρίου 2007.
7. Χατζηβασιλόγλου, Ε. "Σύνθεση και Χαρακτηρισμός Νέων Συμπλόκων του Ρουθηνίου με Ετεροκυκλικές Ενώσεις. Εφαρμογές σε Ευαισθητοποιημένες Ηλιακές Κυψελίδες", Ινστιτούτο Φυσικοχημείας ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 19-10-2007

### Διεθνή διπλώματα ευρεσιτεχνίας

1. Falaras, P., "Modified nanostructured titania materials and methods of manufacture", Pub. No.: WO/2007/085911, Publication Date: 02.08.2007, International Application No: PCT/IB2006/004163, International Filing Date: 19.12.2006

## **Διδακτικό Έργο**

### *Διδασκαλία*

1. Φαλάρας, Π., Φυσικοχημεία, Θεματική Ενότητα [ΦΥΕ 22]-Πρόγραμμα Σπουδών [ΦΥΕ] Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο (ΕΑΠ), Ακαδ. Έτη:2006-2007 και 2007-2008.
2. Κόντος, Α.Γ., Φυσική, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ) ΕΜΠ, Ακαδ. Έτος: 2007-2008.

## **Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων**

### **Διδακτορικές Διατριβές**

1. Χατζηβασιλογλου, Ευαγγελία. "Σύνθεση και χαρακτηρισμός νέων συμπλόκων του Ρουθηνίου με αζωαρωματικές ενώσεις. Εφαρμογές σε ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες", Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ, Ιούλιος 2007.

### **Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης**

1. Κακάτσου, Παναγιώτα. «Ανάπτυξη και βελτιστοποίηση πολυμερικών ηλεκτρολυτών για ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Νοέμβριος 2007.
2. Κύρκου, Αθηνά. "Βελτιστοποίηση σύνθεσης, χαρακτηρισμός και έλεγχος φωτοκαταλυτικής και αντιβακτηριακής δράσης νανοσφαιρών τιτανίας". Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ), ΕΜΠ, 2007)

### **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. "Molecular Engineering of Interfaces of Photonic Devices based on Mesoscopic Oxide layers", COST Action D35- From Molecules to Molecular Devices, 2005-2009.
2. "Ti-nanotubes", FP6-NMP-STREP, 300 Κ€, 2006-2009.
3. "Αντιμετώπιση παθολογικών καταστάσεων με συνδυαστική χρήση βιο-ιατρικών και νανοτεχνολογικών μεθόδων", ΕΡΓΟ-ΥΠΟΔΟΜΩΝ, ΜΕΤΡΟ 4.5 'Κοινοπραξίες έρευνας και τεχνολογικής ανάπτυξης σε τομείς Εθνικής προτεραιότητας', Δράση 4.4.1 «Κοινοπραξίες έρευνας και τεχνολογικής ανάπτυξης σε τομείς Εθνικής προτεραιότητας», Πράξη «Υποδομές υποστήριξης της μακροπρόθεσμης βιωσιμότητας των έργων έρευνας, τεχνολογικής ανάπτυξης και επίδειξης» 2050-4/2, 300 Κ€, 2005-2008.
4. "Οργανικές Ηλιακές Κυψελίδες" Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 118, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Π. Φαλάρας, : 144 Κ€, 2005-2008.
5. "Ανάπτυξη σύνθετων νανοδομημένων υλικών τιτανίας. Ενσωμάτωση σε πρότυπα φωτοκαταλυτικά δομικά υλικά και εφαρμογή στην αποικοδόμηση υγρών και αέριων ρύπων", Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 963, 51 Κ€, 2005-2008.
6. "Ανάπτυξη Αναλυτικών Τεχνικών Ολοκληρωμένου Ελέγχου και Προχωρημένων Οξειδωτικών Διεργασιών για την απομάκρυνση Οργανικών Τοξικών Ουσιών – Ενδοκρινικών Διαταρακτών από τα Φυσικά Νερά και τα Επεξεργασμένα Λύματα", ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 926, 2005-2008.
7. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
8. "Ανάπτυξη επιχειρησιακού συστήματος αποτύπωσης (χαρτογράφησης) των επιπέδων συγκέντρωσης αιρούμενων σωματιδίων και της εκτιμημένης έκθεσης πληθυσμού στην Αττική", ΠΕΠ Αττικής, 30 Κ€, 2006-2008.
9. "OrgaPVNet – Coordination Action towards stable and low cost organic solar cell technologies and their application", FP6-Energy-CA, 2006-2009.

### **Ερευνητική Υποδομή**

Φασματοόμετρο micro-Raman , Μικροσκόπιο Ατομικών Δυνάμεων (AFM), Διάταξη φωτοηλεκτροχημείας, Αυτοματοποιημένη διάταξη κυκλικής βολταμμετρίας και γραμμικής βολταμμετρίας σάρωσης, Διάταξη



εκτύπωσης με διάτρητες μήτρες (screen-printer), Διάταξη spin-coating, Φωτοκαταλυτικοί αντιδραστήρες, Διάταξη μέτρησης γωνίας επαφής, Ίξωδόμετρο

### **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό**

1. Φαλάρας Π. και Τσούκλερης Δ., University of Erlangen-Nuremberg (Germany) στα πλαίσια του προγράμματος STREP "Ti-Nanotubes" (7-9 Μαρτίου 2007).
2. Στεργιόπουλος Θ. και Τσούκλερης Δ., University of Erlangen-Nuremberg (Germany) στα πλαίσια του προγράμματος STREP "Ti-Nanotubes" (25-27 Ιουλίου 2007).
3. Κόντος Α.Γ. Επίσκεψη στα εργαστήρια της Renishaw στο Gloucestershire της Αγγλίας για 2 εβδομάδες, όπου έλαβε ειδική εκπαίδευση για τη τεχνική υποστήριξη φασματομέτρων Raman της εταιρίας, Μάιος 2007.

### **Συνεργασίες**

- M. Grätzel (EPFL Lausanne, Switzerland, DSSCs), G. Tulloch (Dyesol, Australia, Light ant Thermal Stress on DSSCs.), J. Kunze (Erlangen, Germany, Ti-Nanotubes), V. Catalano (Nevada, USA, Ligands for Ru-dyes), P. Potvin (Toronto, Canada, Dyes for DSSCs), Z. Picramenou (Birmingham, UK, Supramolecular Dyes), I. Ράπτης (ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ, Φασματοσκοπία Raman), Μ. Προδρομίδης (Τμήμα Χημείας Ιωάννινα, Ηλεκτροχημική Εμπέδηδη), Α. Ibandon (Hull University, UK, ΦωτοΑντιδραστήρες), Χ. Μητσοπούλου (Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Σύμπλοκα), Δρ. Γ. Παπαβασιλείου (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χαρακτηρισμός νανοϋλικών), Χ. Βασιλάκος (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, αέριοι ρύποι), Κ. Δημόπουλος (Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Βιοχημική αξιολόγηση υλικών, Ε. Τσιλιμπάρη (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Συνδασμένη χρήση νανοϋλικών και βιοτεχνολογίας στην αντιμετώπιση παθολογικών καταστάσεων).

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (από 28-8-2007).
2. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (από 28-8-2007).
3. Μέλος του Επιστημονικού Συμβουλίου του Εθνικού Κέντρου Τεκμηρίωσης (ΕΣΕΚΤ)
4. Μέλος του Management Committee της COST Action D35 "From Molecules to Molecular Devices"
5. Μέλος του Editorial Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Open Inorganic Chemistry Journal".
6. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Advanced Functional Materials, Advanced Materials, Applied Catalysis B: Environmental, Catalysis Today, Comptes Rendus Chimie, International Journal of Photoenergy, Journal of Hazardous Materials, Journal of Materials Processing Technology, Journal of Physical Chemistry, Journal of Physics and Chemistry of Solids, The Open Inorganic Chemistry Journal.
7. Μέλος Συνεργαζόμενου Εκπαιδευτικού Προσωπικού (Σ.Ε.Π.) του Ελληνικού Ανοικτού Πανεπιστημίου (ΕΑΠ): Πρόγραμμα Σπουδών [ΦΥΕ] Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες – Θεματική Ενότητα [ΦΥΕ 22] Φυσικοχημεία.
8. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Θ. Στεργιόπουλου (Παν/μιο Πατρών), Ε. Χατζηβασιλόγλου (ΕΜΠ), Α.Ι. Κοντού (ΕΜΠ), Ε. Ρόζη (ΕΜΠ), Ν. Αλεξάκη (ΕΜΠ), Γ. Καντώνη (ΕΜΠ), Α. Κατσανάκη (ΕΜΠ).
9. Εισηγητής και μέλος εξεταστικής επιτροπής στη Διδακτορική Διατριβή της Γεωργίας Κυριάκου, Τμήμα Χημείας Παν/μίου Κύπρου, Μάιος 2007, Λευκωσία, Κύπρος.
10. Μέλος της επιτροπής επιλογής υποτρόφων του Κοινοφελούς Ιδρύματος Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης.
11. Μέλος της επιτροπής αξιολόγησης προτάσεων του Προγράμματος Δημοσίων Επενδύσεων του Παν/μίου Ιωαννίνων 2007-2008.
12. Μέλος της επιτροπής αξιολόγησης του προγράμματος "Ανθρώπινα Δίκτυα Ερευνητικής και Τεχνολογικής Επιμόρφωσης-Β Κύκλος" της ΓΓΕΤ (2007).
13. Αξιολογητής Ερευνητικών Έργων στο Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.
14. Αντιπρόεδρος της Επιτροπής για θέματα Ρύπανσης-Προστασίας Περιβάλλοντος-Κοινόχρηστων Χώρων του Δήμου Αθηναίων.

Ο Δρ. Θ. Στεργιόπουλος κατά το έτος 2007:

1. Διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Advanced Materials* και *Physica Status Solidi (RRL)*.
2. Βραβεύτηκε με το Βραβείο Καλύτερης Διατριβής για το 2006 στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

Ο Δρ. Α.Γ. Κόντος κατά το έτος 2007 διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* και *J. Physical Chemistry*.

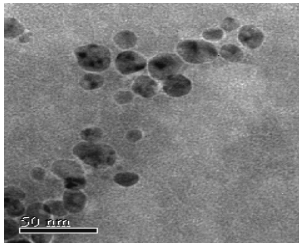
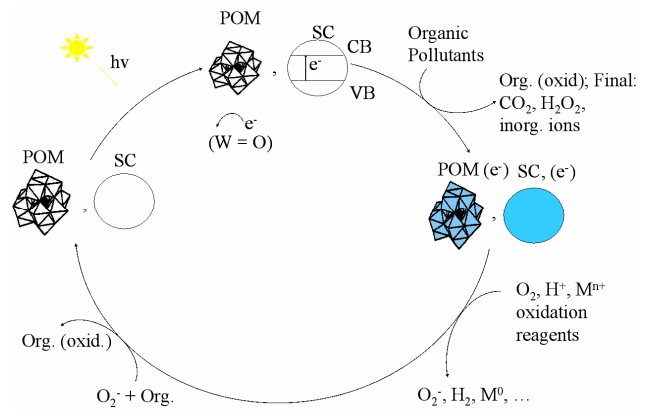
## 2.3 ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ-ΦΩΤΟΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ (ΗΛΙΑΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ - ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ)

### Αντικείμενο Έργου

Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές αντιδράσεις με πολυοξειδία μεταλλών στοιχείων μεταπτώσεως, κυρίως  $\text{TiO}_2$ , και πολυοξομεταλλικές ενώσεις (POM) κυρίως Mo και W με σκοπό την αξιοποίηση της φωτεινής (ηλιακής) ενέργειας, την απορρύπανση του περιβάλλοντος και την ανάπτυξη χημικών διεργασιών φιλικών προς το περιβάλλον. Επιτεύγματα του Έργου είναι:

(α) διάσπαση νερού (παραγωγή υδρογόνου), (β) φωτοηλεκτροχημική παραγωγή ρεύματος, (γ) διαμόρφωση ηλεκτροδίων, φωτοηλεκτροχημικές αντιδράσεις, (δ) ελεγχόμενη οξειδωση-σύνθεση οργανικών ουσιών, (ε) μη ελεγχόμενη οξειδωση (φωτοαποικοδόμηση) οργανικών ρύπων σε  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  και ανόργανα ιόντα, (στ) καταβύθιση-απομάκρυνση μεταλλικών ιόντων και (ζ) σύνθεση μεταλλικών νανοσωματιδίων.

Οι τρέχουσες ερευνητικές δραστηριότητες του Έργου εστιάζονται στα ακόλουθα: (α) ακινητοποίηση των φωτοκαταλυτών σε οπτικά ενεργά ή αδρανή υποστρώματα, (β) σύνθεση νανοδομημένων υμενίων πολυμερούς/POM με την τεχνική LbL, χαρακτηρισμός και μελέτη των φωτοκαταλυτικών τους ιδιοτήτων (γ) φωτοκαταλυτική σύνθεση μεταλλικών νανοσωματιδίων σε νανοδομημένες επιφάνειες (δ) ευαισθητοποίηση των καταλυτών στο ορατό φάσμα και (ε) ανάπτυξη μεθόδων ανάλυσης ρύπων σε ίχνη.



Hiskia et. al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 41 (2002) 1911-1914



Ag Au Pd Pt

### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Αναστασία Χισκιά, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου

**Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Θεόδωρος Τριάντης

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Αικατερίνη Τσιμελή, Γεώργιος Αλεξάκος.

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Σταματία Αντωνάρακη (άμισθη), Πηγή Κόρμαλη (άμισθη), Ειρήνη Χασιώτη (άμισθη), Ιωάννης Δημητρακόπουλος (άμισθος), Σοφία Αναγνώστου (άμισθη).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ηλίας Παπακωνσταντίνου, Δρ. Τριαντάφυλλος Καλούδης.

### Δημοσιεύσεις

1. Eliades, Th.; Hiskia, A.; Eliades, G.; Athanasiou, A. "Assessment of bisphenol-A release from orthodontic adhesives" *Am. J. Orthod. Dentofacial Orthop.* **2007**, *131*, 72-75.

2. Troupis, A.; Gkika, E.; Hiskia A.; Papaconstantinou E. "Photocatalytic Reductive Destruction of Azo Dyes by Polyoxometalates", *JAOT* **2007**, 10, 79-84.
3. Troupis, A.; Gkika, E.; Triantis, T.; Hiskia A.; Papaconstantinou E. "Photocatalytic Reductive Destruction of Azo Dyes by Polyoxometalates: Naphthol Blue Black." *J. Photochem. Photobiology A: Chemistry* **2007**, 188, 272-278.
4. Kormali, P.; Triantis, T.; Dimotikali, D.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photooxidative behavior of TiO<sub>2</sub> and Polyoxometalate PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub><sup>3-</sup>. A comparative study." *Catalysis Today* **2007**, 124, 149-155.
5. Hrbac, J.; Halouzka, V.; Zboril, R.; Papadopoulos, K.; Triantis, T. "Carbon Electrodes Modified by Nanoscopic Iron(III) Oxides to Assemble Chemical Sensors for the Hydrogen Peroxide Amperometric Detection", *Electroanalysis* **2007**, 19, 1850-1854.
6. Triantis, T.M.; Yannakopoulou, E.; Nikokavoura, A.; Dimotikali, D.; Papadopoulos, K. "Chemiluminescent studies on the antioxidant activity of amino acids", *Anal. Chim. Acta*, **2007**, 591, 106-111.
7. Hiskia, A.; Triantis, T.; Papaconstantinou, E. "Photocatalysis with polyoxometalates as a new advanced oxidation process for the destruction of pesticides in aquatic systems." *"Pesticide-Environment – 2007" (Quaderni GRIFA No. 27)*, in press.
8. Tsimeli, K.; Triantis, T.M.; Dimotikali, D.; Hiskia, A. "Development of a rapid and sensitive method for the simultaneous determination of 1,2-Dibromoethane, 1,4-Dichlorobenzene and Naphthalene residues in honey using HS-SPME coupled with GC-MS." *Anal. Chim. Acta*, in press.

### **Ανακοινώσεις σε συνέδρια**

1. Τριάντης, Θ. ; Παπακωνσταντίνου, Η.; Χισκιά, Α. «Φωτοκαταλυτική οξειδωση οργανικών ουσιών παρουσία πολυοξομεταλλικών ενώσεων» 2<sup>ο</sup> Πανελληνίου Συμποσίου Πράσινης Χημείας και Βιώσιμης Ανάπτυξης, Πάτρα, 8-10 Μαρτίου 2007.
2. Kaloudis, T.; Thanasoulas, N.; Kousouris, L.; Tzoumerkas, P.; Triantis, T.; Gkika, E; Tsimeli K.; Hiskia, A. "Development of an integrated laboratory system for the monitoring of cyanotoxins in surface and drinking waters." 5<sup>th</sup> International Conference on Instrumental Methods of Analysis, IMA, Πάτρα, 30 Σεπτεμβρίου-4 Οκτωβρίου 2007.
3. Tsimeli, K.; Triantis, T.M.; Dimotikali, D.; Hiskia, A. "Development of a rapid and sensitive method for the simultaneous determination of 1,2-Dibromoethane, 1,4-Dichlorobenzene and Naphthalene residues in honey using HS-SPME coupled with GC-MS." 3<sup>th</sup> International Symposium on Recent Advances in Food Analysis, Prague, Czech Republic, 7-9 November 2007.

### **Διαλέξεις**

1. Hiskia, A. "Polyoxometallate photocatalysis in decontamination of aquatic environment from organic pollutants." Department of Biochemistry and Pharmacy, Abo Akademi University, Turku, Finland, 7 March 2007
2. Hiskia, A. "Photocatalysis with polyoxometalates as a new advanced oxidation process for the destruction of pesticides in aquatic systems" International Summer School *"Pesticide-Environment – 2007"*, Metaponto, Matera, Italy, 13 September 2007
3. Kaloudis, T. "Development of an integrated laboratory system for the monitoring of cyanotoxins in surface and drinking waters." 5<sup>th</sup> International Conference on Instrumental Methods of Analysis, IMA, Πάτρα, 1 Οκτωβρίου 2007

### **Διδακτικό Έργο**

#### **Διδασκαλία**

1. Χισκιά, Α., «Προχωρημένες Οξειδωτικές Μέθοδοι», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Φεβρουάριος-Μάρτιος 2006.
2. Χισκιά, Α., «Αναλυτικές μέθοδοι με εφαρμογή στην Περιβαλλοντική Χημεία», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Μάιος- Ιούνιος 2006.

## **Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων**

### **Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης**

1. Χασιώτη Ειρήνη. «Παρασκευή, χαρακτηρισμός και ιδιότητες φωτοχρωμικών υμενίων βασισμένων στις πολυοξομεταλλικές ενώσεις και την πολυαιθυλιμίνη», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2007.

### **Διπλωματική Εργασία**

1. Αναγνώστου Σοφία. «Παρασκευή και χαρακτηρισμός φωτοχρωμικών ανόργανων – οργανικών πολυστρωματικών υμενίων βασισμένων στις πολυοξομεταλλικές ενώσεις και την πολυαιθυλιμίνη», Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 2007.

## **Ανάθεση θέματος και επίβλεψη μεταπτυχιακών εργασιών**

### **Διδακτορικές Διατριβές**

1. Σ. Αντωνάρακη. «Μελέτη Μηχανισμών Φωτοαποικοδόμησης Οργανικών Ρύπων με Πολυοξειδία Μετάλλων και Υπεροξειδίου του Υδρογόνου.» (ΕΜΠ)
2. Π. Κόρμαλη «Φωτολυτική και Φωτοκαταλυτική Αποικοδόμηση Οργανοφωσφορικών Εντομοκτόνων με Πολυοξειδία Μετάλλων.» (ΕΜΠ).
3. Α. Τσιμελή «Προσδιορισμός και Μελέτη της Φωτοχημικής Σταθερότητας PCBs, PAHs, Χλωροφαινολών και Φυτοφαρμάκων με τη Μέθοδο της Εκχύλισης και Μικροεκχύλισης Στερεάς Φάσης» (ΕΜΠ).

## **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. "Photocatalysis for the mild and selective Functionalization of non-activated C-H bonds", Πρόγραμμα COST Action D29, Διάρκεια 4 έτη, 2004-2008.
2. «Ανάπτυξη ολοκληρωμένου συστήματος παρακολούθησης των κυανοτοξινών σε επιφανειακά και επεξεργασμένα ύδατα με συνδυασμό προηγμένων αναλυτικών μεθόδων», ΠΑΒΕΤ 2005, 32,7 Κ€, 2006-2008.
3. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€, 2006-2008.
4. «Ολοκληρωμένο Εθνικό Κέντρο Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας» ΕΠΑΝ, 36 Κ€, 2006-2008.

## **Ερευνητική Υποδομή**

Συστήματα φωτόλυσης, Καταλυτικοί/ Φωτοκαταλυτικοί Αντιδραστήρες, Φασματοφωτόμετρο UV, ορατού, Φασματοφωτόμετρο UV, ορατού, εγγύς IR, Αέριος Χρωματογράφος με FID, ECD και TCD ανιχνευτές, HPLC με UV-VIS και FLD ανιχνευτές, Αέριος Χρωματογράφος/ Φασματοσκοπία Μάζας (GC/MS), Υγρή Χρωματογραφία/ Φασματοσκοπία Μάζας τεχνολογίας τριπλού τετραπόλου HPLC/MS/MS, Ιοντικός Χρωματογράφος, Πολαρογράφος, TOC, Σύστημα SPE, Σύστημα SPME, Φούρνοι, Λουτρό υπερήχων, Ζυγοί 4 και 5 δεκαδικών ψηφίων, Υδατόλουτρο, Πεχάμετρο, Περιστροφικός Εξατμιστήρας υπό κενό, Συσκευή υπερκάθαρου νερού.

## **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό**

1. Χισκιά Α., Τριάντης Θ. και Τσιμελή Κ., Department of Biochemistry and Pharmacy, Abo Akademi University, Turku, Finland, (4-14 Μαρτίου 2007).
2. Χισκιά Α., Παπακωνσταντίνου Η., Technical University of Delft, Holland (28 Ιουνίου-1 Ιουλίου 2007).
3. Tsimeli, K.; 3th International Symposium on Recent Advances in Food Analysis, Prague, Czech Republic, 7-9 November 2007.
4. Hiskia, A., International Summer School "Pesticide-Environment – 2007", Metaponto, Matera, Italy, 10-15 September 2007.

## Συνεργασίες

Prof. D. Dionysiou (University of Cincinnati, USA, Προχωρημένες Οξειδωτικές Διεργασίες για την καταστροφή κυανοτοξινών), Dr. S. Lacorte (Dep. of Environ. Chem., CID-CSIC, Barcelona, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων), Δρ. Τ. Καλούλης, (ΕΥΔΑΠ, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε πόσιμα νερά), Δρ. Δ. Τσίπη (ΓΧΚ, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων), Καθ. Δ. Δημοτικάλη (Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Ε.Μ.Π., Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών), Καθ. Ε. Δασενάκης (Χημικό Τμήμα, Παν. Αθηνών, Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών), Καθ. Τ. Αλμπάνης (Χημικό Τμήμα, Παν. Ιωαννίνων, Φωτοκαταλυτική οξείδωση ρύπων), Δρ. Β. Σακκάς (Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Παν. Ιωαννίνων, Εκπόνηση Διπλωματικών Εργασιών), Δρ. Δ. Κλέτσας, Ινστ. Βιολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Μελέτη αντικαρκινικών ιδιοτήτων πολυοξομεταλλικών ενώσεων), Καθ. Θ. Ηλιάδης (Οδοντιατρική Σχολή Παν. Θεσσαλονίκης, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε βιολογικά συστήματα), Δρ. Α. Τραυλός, (Ινστ. Επιστήμης Υλικών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων)

## Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Σ. Αντωναράκη (ΕΜΠ), Π. Κόρμαλη (ΕΜΠ), Α. Τσιμελή(ΕΜΠ) και Ι. Δημητρακοπουλο (Παν. Αθηνών).
2. Συμμετοχή στην Εξεταστική Επιτροπή της υποψήφιας κατόχου Μεταπτυχιακού Τίτλου Εκπαίδευσης (M.Sc.), Ε. Χασιώτη (Παν. Αθηνών).
3. Μέλος της Τριμελούς Επιτροπής για την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας της Σοφίας Αναγνώστου (Παν. Ιωαννίνων).
4. Κριτής στα περιοδικά *Langmuir*, *Environ. Sci. Technol.*, *Appl. Catal.: B: Environmental, Chemosphere*, *Analytica Chimica Acta*, *J. Photochem. Photobiol.*, *JAOAC*, *Intern. J. Environ. Anal. Chem.*, *Topics in Catalysis*, *Catalysis Today*, *Chemistry-A European Journal*.
5. Μέλος της Ευρωπαϊκής Επιτροπής Chemistry Action COST D29, Sustainable /Green Chemistry and Chemical Technology.
6. Μέλος της Επιτροπής ΕΤΕΠ (Ελληνικές Τεχνολογικές Επιστημονικές Πρωτοβουλίες) με θέμα «Περιβάλλον Κλιματικές Αλλαγές και Οικοσυστήματα».
7. Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 2<sup>ου</sup> Πανελληνίου Συμποσίου Πράσινης Χημείας και Βιώσιμης Ανάπτυξης, 8-10 Μαρτίου 2007.
8. Αξιολογήτρια Ερευνητικών Έργων της ΓΓΕΤ.
9. Γραμματέας του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ» (2007-2009).
10. Προϊσταμένη του υπό διαπίστευση Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2007 διετέλεσε:

1. Κριτής στα περιοδικά *Journal of European Chemistry*, *Environmental Science and Technology* και *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*.
2. Υπεύθυνος Ποιότητας του υπό διαπίστευση Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

## 2.4 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΑ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑ ΚΑΙ ΣΤΙΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

### Αντικείμενο Έργου

- Δυναμική διηγεμένων καταστάσεων σε συστήματα που παρουσιάζουν cis – trans ισομερισμό. Κινητική και θερμοδυναμική μελέτη των μηχανισμών ισομερίωσης σε διάφορα περιβάλλοντα (διαλύματα, υαλώματα, κρύσταλλοι, νανοκοιλότητες).
- Ανάπτυξη μεθοδολογίας οπτικού χαρακτηρισμού λεπτών φωτοευαίσθητων πολυμερικών υμενίων και στην εφαρμογή της στον έλεγχο Νανο και Μικρο-λιθογραφικών διεργασιών

### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Γεώργιος Πιστόλης, Ερευνητής Β', υπεύθυνος του έργου

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Ιωάννα Μπαλωμένου

**Υποψήφιοι Διδάκτορες:** Αντωνία Καλουδή-Χαντζέα (Άμισθη)

### Δημοσιεύσεις

1. Vasilopoulou, M.; Pistolis, G.; Georgiadou, D.; Argitis, P. "Tuning the emitting colour of Organic Light Emitting Diodes through photochemically induced transformations: towards single layer, patterned, full colour displays and white lighting applications", *Adv. Funct. Mater.* **2007**, *17*, 3477-3485.
2. Balomenou, I.; Pistolis, G. "Experimental evidence for a highly reversible excited state equilibrium between s-cis and s-trans rotational isomers of 2-methoxynaphthalene in solution", *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 13247.
3. Boukos, N.; Chandrinou, C.; Giannakopoulos, K.; Pistolis, G.; Travlos, A. "Growth of ZnO nanorods by a simple chemical method", *Appl. Phys. A* **2007**, *88*, 35.

### Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Vasilopoulou, M.; Pistolis, G.; Botsialas, A.; Stathopoulos, N.; Rangoussi, M.; Argitis, P.; Patterning scheme based on photoacid induced spectral changes for single layer, patterned full color light emitting diodes, in *Organic Electronics — Materials, Devices and Applications*, edited by F. So, G.B. Blanchet, Y. Ohmori (Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 965E, Warrendale, PA, 2007), paper no 0965-S03-24
2. Vasilopoulou, M.; Palilis, L.C.; Botsialas, A.; Georgiadou, D.; Bayiati, P.; Vourdas, N.; Petrou, P.S.; Pistolis, G.; Stathopoulos, N.; Argitis, P. "Flexible Organic Light Emitting Diodes (OLEDs) based on blue emitting polymers", *Micro&Nano 2007*, Αθήνα, 18-22 Νοεμβρίου 2007.
3. Georgiadou, D.; Vasilopoulou, M.; Pistolis, G.; Dimotikali D.; Argitis, P. "Energy transfer processes among emitters dispersed in a single polymer layer for colour tuning in OLEDs", *Micro&Nano 2007*, Αθήνα, 18-22 Νοεμβρίου 2007.
4. Vasilopoulou, M.; Stathopoulos, N.; Falaras, P.; Pistolis, G.; D. Davazoglou, D.; Argitis, P. "An all-organic optocoupler based on polymer light-emitting diodes (PLEDs)", P II.38, 3<sup>ο</sup> ΔΙΕΘΝΕΣ ΣΥΝΕΔΡΙΟ MICRO&NANO2007 on Micro-Nanoelectronics, Nanotechnology & MEMs, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 18-21 Νοεμβρίου 2007.
5. Vasilopoulou, M.; Georgiadou, D.; Palilis, L.C.; Pistolis, G.; Argitis, P. "Single layer white organic light-emitting diodes for lighting applications", 5<sup>th</sup> European Conference on Organic Electronics (ECOER07), Varenna, Italy, 01-04 October 2007.

### Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

"Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.

### Ερευνητική Υποδομή

Φθορισμόμετρο στατικής κατάστασης ( Static Fluorescence spectroscopy), Φασματοφωτόμετρο ανάλυσης χρόνου λάμπας υδρογόνου. (Time - resolved spectroscopy).

## **Συνεργασίες**

- Ι. Καλλίτσης (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Πατρών),
- Π. Αργείτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστ. Μικροηλεκτρονικής),

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Γεώργιος Πιστόλης κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Μέλος του Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του ΙΦΧ
2. Μέλος του ΔΣ του Συλλόγου Ερευνητών Δημοκρίτου
3. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: (J. Phys. Chem., Environmental Science and Technology)
4. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκτόρων: Ι. Μπαλωμένου (Παν/μιο Πατρών) και Α. Καλουδή-Χαντζέα (Παν/μιο Πατρών).



## 2.5 ΙΣΟΤΟΠΙΚΗ ΥΔΡΟΛΟΓΙΑ

### Αντικείμενο Έργου

Το πρόγραμμα ασχολείται με την ανάλυση των ισοτοπικών χαρακτηριστικών υπόγειων και επιφανειακών υδάτων και την αξιοποίηση των αντίστοιχων αποτελεσμάτων, για την επίλυση προβλημάτων σχετιζόμενων με την εκμετάλλευση των υδάτινων πόρων και της γεωθερμικής ενέργειας. Τέτοια προβλήματα είναι ο μηχανισμός τροφοδοσίας των υπόγειων οριζόντων, το δυναμικό τους, η ταχύτητα ροής του υπόγειου νερού, η σύνδεση υπόγειων οριζόντων μεταξύ τους ή με επιφανειακούς ταμιευτήρες, καθώς και η προέλευση των γεωθερμικών ρευστών.

Επίσης, αντικείμενο του έργου είναι η ανάπτυξη μεθόδων για τον προσδιορισμό της συγκεντρώσεως του φυσικού  $^{14}\text{C}$  στην ατμόσφαιρα και την μελέτη των μεταβολών των ισοτοπικών λόγων  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$  και  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$  στο ατμοσφαιρικό  $\text{CO}_2$ .

Ακόμη, στο Εργαστήριο αναπτύχθηκε και εφαρμόζεται μέθοδος προσδιορισμού της συγκέντρωσης του  $^{222}\text{Rn}$  σε υδατικά και ατμοσφαιρικά δείγματα με την τεχνική του Υγρού Σπινθηριστή.

Το Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας είναι επιφορτισμένο με τις ραδιενεργές ιχνηθετήσεις σε καθορισμένα στάδια ενός υδρολογικού συστήματος.



### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Ζουριδάκης Νικόλαος, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου

**Τεχνικό Προσωπικό:** Λάκτεν Αικατερίνη

**Συνεργάτες σε προγράμματα:** Αρνίδη Ελένη, Πτυχιούχος ΤΕΙ, σύμβαση έργου

### Διδακτικό Έργο

#### Διδασκαλία

1. Ζουριδάκης, Ν. «Ισοτοπική Υδρολογία», Γεωλογικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Εφαρμοσμένη Περιβαλλοντική Γεωλογία» Ακαδ. Έτος: 2007-2008
2. Ζουριδάκης, Ν. «Ραδιοάνθρακας: Ένα παράδειγμα της Ενότητας της Επιστήμης.», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.
3. Ζουριδάκης, Ν. «Εφαρμογές των Ισοτόπων στη Μελέτη του Περιβάλλοντος και του Παρελθόντος», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 9-20 Ιουλίου 2007.
4. Ζουριδάκης, Ν. , Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψήφιου διδάκτορα Ι. Ματιάτου (Γεωλογικό Τμήμα Παν/μίου Αθηνών)

### Συνεργασίες

Δρ. Γ. Παπαβασιλείου (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χρήση θερμικής κάμερας για την απεικόνιση φυσικών ιδιοτήτων νανοσωματιδίων οξειδίου του σιδήρου σε σύγκριση με θερμοκρασιακές μετρήσεις με άλλες μεθόδους, στα πλαίσια του προγράμματος ΠΕΠ), Δρ. Η. Δημητρίου (ΕΛΚΕΘΕ, Ισοτοπικές αναλύσεις στα πλαίσια του προγράμματος «Δράσεις για τη Διατήρηση των Μεσογειακών Εποχικών Λιμνιών της Δυτικής Κρήτης», Πρόγραμμα «Life-Natura 2004»), Δρ. Σ. Παυλίδου (ΙΓΜΕ Κρήτης, Ισοτοπικές αναλύσεις), Επικ. Καθ. Ε. Σαμπανίκου (Πανεπιστήμιο Αιγαίου, Ραδιοχρονολογήσεις ασβεστοκονιαμάτων

κτηρίων από τη Νήσο Λέσβο), Καθ. Ι. Διαμαντής (Πολυτεχνική Σχολή Ξάνθης, Μετρήσεις Ραδονίου σε πηγές και γεωτρήσεις του Νομού Ξάνθης).

## 2.6 Ο ΡΟΛΟΣ ΤΩΝ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

### Αντικείμενο Έργου

Το 2007 η μελέτη "Αιωρούμενα σωματίδια και βαρέα μέταλλα στο ατμοσφαιρικό αεροζόλ μιας βιομηχανικής και μιας αστικής περιοχής του Λεκανοπεδίου Αθηνών", μια συνεργασία του Εργαστηρίου Ανόργανης και Αναλυτικής Χημείας του ΕΜΠ με το Εργαστήριο Μελέτης Ιχνοστοιχείων και το Εργαστήριο Ραδιενέργειας Περιβάλλοντος του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, η οποία συγχρηματοδοτήθηκε από την Ευρωπαϊκή Ένωση (75%) και από Εθνικούς Πόρους (25%) – (ΕΠΕΑΕΚ ΙΙ) – ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ, ολοκληρώθηκε με επιτυχία.

Οι περιοχές που μελετήθηκαν ήταν ο Ασπρόπυργος (βιομηχανική περιοχή), το κέντρο των Αθηνών (Οδός Πατησίων, αστική περιοχή) και το ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (προαστιακή περιοχή)

Στη βιομηχανική περιοχή υπήρχε μια αφθονία σε χονδρόκοκκα σωματίδια ( $PM_{10-2.5}$ ), ενώ στην αστική περιοχή παρατηρήθηκαν περισσότερα λεπτόκοκκα σωματίδια ( $PM_{2.5}$ ). Η υψηλή συγκέντρωση των μετάλλων που βρέθηκε στη βιομηχανική περιοχή φαίνεται να οφείλεται σε τοπικούς παράγοντες. Παρόλο που οι συγκεντρώσεις σε Pb, Cd, Ni και Mn δεν υπερβαίνουν τα όρια του Παγκόσμιου Οργανισμού Υγείας (WHO) των 500, 5, 20 και 150 ng/m<sup>3</sup>, αντίστοιχα, αποτελούν ένα θέμα ανησυχίας για τον πληθυσμό που μένει στην περιοχή σχετικά με τις μακροχρόνιες επιπτώσεις στην υγεία. Επιπλέον, η συσχέτιση μεταξύ των μετρήσεων συγκέντρωσης μετάλλων και της κατεύθυνσης του ανέμου μελετήθηκε μέσω ζυγοσταθμισμένων τριαντάφυλλων ρύπανσης, ώστε να συλλεχθούν πληροφορίες για τις βασικές πηγές εκπομπής. Από τη στατιστική αξιολόγηση των αποτελεσμάτων μπορούσαν να εντοπιστούν μερικές από τις τοπικές πηγές ρύπανσης.

Η τελευταία δραστηριότητα του Εργαστηρίου ήταν η μελέτη «screen printed» ηλεκτροδίων για την εφαρμογή τους στην ανάλυση ιχνοστοιχείων.

Το Εργαστήριο Μελέτης Ιχνοστοιχείων, που αρχικά ονομαζόταν «Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας» (με νετρονική ενεργοποίηση), είναι ένα από τα παλαιότερα εργαστήρια όχι μόνο του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, αλλά και όλου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Ιδρύθηκε από τον Δρ. Α. Γρημάνη, ο οποίος χρησιμοποίησε τη νετρονική ενεργοποίηση για τις έρευνές του. Την εποχή εκείνη η ανάλυση νετρονικής ενεργοποίησης ήταν μια από τις ισχυρότερες αναλυτικές μεθόδους στον τομέα της Ανόργανης Χημείας. Η ανάλυση νετρονικής ενεργοποίησης επέτρεπε την επεξεργασία στοιχείων σε συγκεντρώσεις 1000 φορές μικρότερες σε σχέση με τις τότε συμβατικές μεθόδους ανάλυσης. Σε συνεργασία με τη σύζυγό του Μαρία, ο Δρ. Γρημάνης εργάστηκε με επιτυχία πάνω σε διάφορους επιστημονικούς τομείς, όπως το περιβάλλον, η αρχαιομετρία και τομείς σχετικούς με την υγεία, οι οποίοι παραμένουν ακόμα οι τομείς δράσης του Εργαστηρίου. Όταν ο Δρ. Γρημάνης συνταξιοδοτήθηκε το Εργαστήριο ανέλαβε ο Δρ. Γ. Κανιάς και έπειτα ο Δρ. Κ.Μ. Ώξενκιουν. Το έργο του Δρ. Γ. Κανιάς αφορούσε τη μελέτη των ημερησίως προτεινόμενων ποσοτήτων ιχνοστοιχείων, απαραίτητων για την ανάπτυξη και τη διατήρηση της ανθρώπινης ζωής. Με τον Δρ. Κ.Μ. Ώξενκιουν, το πεδίο έρευνας επεκτάθηκε στη γεωχημεία και στην ειδοταυτοποίηση (speciation analysis), ένα σημαντικό αλλά δύσκολο πεδίο στις περιβαλλοντικές έρευνες. Το 2004, τη χρονιά των Ολυμπιακών Αγώνων στην Ελλάδα, οι δραστηριότητες σχετικά με την νετρονική ενεργοποίηση έπρεπε να σταματήσουν, καθώς ο μοναδικός αντιδραστήρας στην Ελλάδα, αυτός του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, έπρεπε να παύσει τη λειτουργία του (για λόγους ασφαλείας, όπως ανακοινώθηκε). Εφόσον ο αντιδραστήρας δεν λειτουργεί πλέον μέχρι σήμερα, οι αναλύσεις συνεχίστηκαν χρησιμοποιώντας άλλες μεθόδους ανάλυσης όπως ηλεκτροαναλυτικές μεθόδους, ιδίως ανοδική αναδιαλυτική βολταμμετρία (anodic stripping voltammetry), αλλά και ιοντική χρωματογραφία και AAS. Η παύση λειτουργίας του αντιδραστήρα ήταν ο λόγος που το Εργαστήριο μετονομάστηκε σε «Εργαστήριο Μελέτης Ιχνοστοιχείων».

### Προσωπικό

*Ερευνητές: Δρ. Κ. Ώξενκιουν, Ερευνητής Α., υπεύθυνος του έργου*

## Δημοσιεύσεις

1. R.Argyropoulou, M.Ochsenkühn-Petropoulou, C.Dounis, P.Karaboulis, A.Alzoumailis, K.M.Ochsenkühn. "Comparison of the behavior of the three superconductors YBCO, Bi-2212 and MgB2 in different environmental conditions" *J.Mat.Process.Tech.* **181**, 2-5 (2007)
2. Klaus-Michael Ochsenkühn, Theopisti Lyberopoulou, G. Koumariou, M.Ochsenkühn-Petropoulou, "Ion chromatographic and spectrometric determination of water-soluble compounds in airborne particulates and their correlations in an industrial area in Attica, Greece", *Microchim.Acta* DOI 10.1007/s00604-007-0830-z (2007)
3. Klaus-Michael Ochsenkühn, Maria Ochsenkühn-Petropoulou, "Anodic Stripping Voltammetry a Tool for the Analysis of some Acid Leachable Heavy Metals in Airborne Particulate Matter", accepted for publication in *Fresenius Environ. Bull.* (2007)

## B. Ανακοινώσεις σε συνέδρια με πρακτικά

1. Ochsenkühn, K.M., Lyberopoulou, Th., Razos, P., Karagiannis, K., Ochsenkühn-Petropoulou, M. "Ionic composition of PM<sub>10</sub>/PM<sub>2.5</sub> in an industrial area in Greece", *4. Conference über Ionenanalyse*, 12.-14. March 2007, Berlin, Germany, p.75 (2007)
2. K.M. Ochsenkühn, M. Ochsenkühn-Petropoulou, "Spectroscopic investigation of airborne particulate matter on filters from low and high volume samplers of an industrial area in Greece", *Colloquium Spectroscopicum Internationale XXXV*, September 23-27, Xiamen, China p.428 (2007)  
K.M. Ώξενκιουν, Θ. Λυμπεροπούλου, Π.Ράζος, Γ. Κουμαριανού, Μ. Ώξενκιουν-Πετροπούλου, Α. Χρηστίδης, " Προσδιορισμός και σύγκριση της συγκέντρωσης των υδατοδιαλυτών ιόντων σε αιωρούμενα σωματίδια της ατμόσφαιρας μιας βιομηχανικής και μιας αστικής περιοχής του Λεκανοπεδίου Αττικής", Πρακτικά 6ου Πανελληνίου Επιστημονικού Συνεδρίου Χημικής Μηχανικής, Θεσσαλονίκη, 31 Μαΐου-2 Ιουνίου 2007, 589-592 (2007)
3. Μ. Ώξενκιουν-Πετροπούλου, Ν. Μαρκάτος, Μ. Χριστόλης, Κ. Ώξενκιουν, Κ. Ελευθεριάδης, Α. Χρηστίδης, "Αιωρούμενα σωματίδια (PM<sub>10</sub>/PM<sub>2.5</sub>) στην περιοχή του Λεκανοπεδίου Αθηνών. Χωροχρονική κατανομή, ειδοταυτοποίηση, ποιοτικοποσοτική σύσταση, εκτίμηση είδους πηγών", Πρακτικά του Επιστημονικού Συνεδρίου Πυθαγόρας, Προβολή της Επιστημονικής Έρευνας στο ΕΜΠ, ΥΠΕΠΘ, ΕΠΕΑΕΚ, Πλωμάρι Λέσβου 5-8 Ιουλίου 2007, 237-244 (2007)

## Διδακτικό έργο

### Μέλος της τριμελούς επιτροπής επίβλεψης διδακτορικών

1. Τσόπελας Φώτης «Προσδιορισμός διαφόρων ειδών οργανομεταλλικών ενώσεων στο περιβάλλον», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, ολοκληρώθηκε (Ιούλιος 2007)
2. Τσακανίκα Λαμπρινή-Αρετή «Διαχωρισμός και παραλαβή λανθανιδών από την ερυθρά ιλύ με εκχύλιση και χρωματογραφικές τεχνικές», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.
3. Ράζος Παναγιώτης «Κατανομή ιχνοστοιχείων σε αιωρούμενα σωματίδια κλασματικής δειγματοληψίας (PM<sub>10</sub>/PM<sub>25</sub>) της ατμόσφαιρας της Αθήνας», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.
4. Δούνης Κωνσταντίνος «Ειδοταυτοποίηση ιχνοστοιχείων σε διάφορους φορείς και μελέτη κατανομής τους», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.

## Ερευνητικά Προγράμματα

1. ΕΠΕΑΕΚ, ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ ΙΙ, «Αιωρούμενα Σωματίδια (PM<sub>10</sub>/PM<sub>25</sub>) στην περιοχή του Λεκανοπεδίου Αθηνών. Χωροχρονική κατανομή, ενδοταυτοποίηση, ποιοτικοποσοτική σύσταση, εκτίμηση είδους πηγών. Επιστημονικός Υπεύθυνος Μ. Ώξενκιουν-Πετροπούλου, ΕΜΠ, Κύριος Ερευνητής: Κ.Μ. Ώξενκιουν, 50.000€, 1/1/2005-31/12/2006.

## **Συνεργασίες**

- Με τον Ερευνητή Α! Βαθμίδα Νίκο Ζουριδάκη, Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
- Με την Καθηγήτρια Μ. Πετροπούλου-Όξενκιουν, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ. Πολυτεχνείου.
- Με την Δ/ση του Αναλυτικού Εργαστηρίου του Αναπτυξιακού Συνδέσμου Δήμων και Κοινοτήτων Θρασίου Πεδίου (κ.Α.Χρηστίδης)

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Μέλος του Εθνικού Συμβουλίου Υδάτων του Υπουργείου ΠΕΧΩΔΕ

# Πρόγραμμα 3

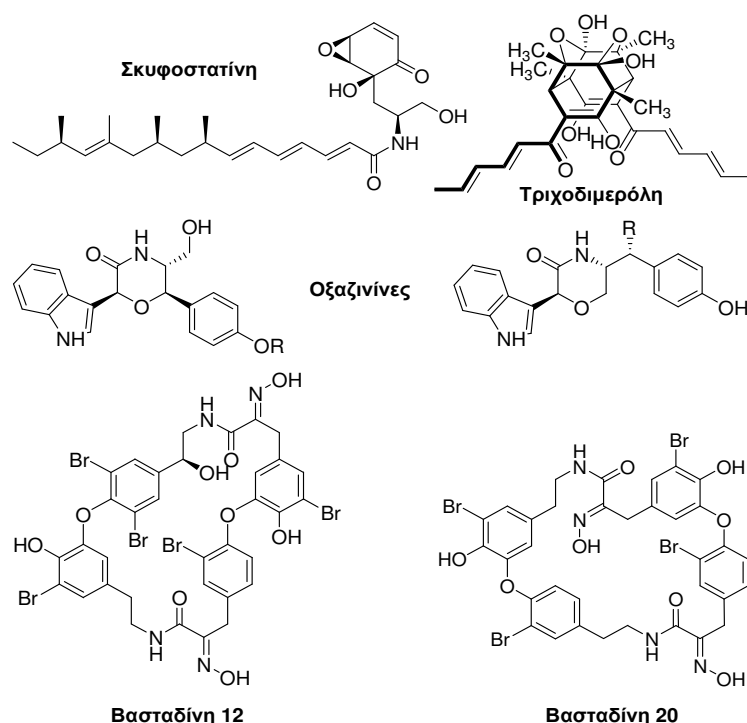
## Χημική Βιολογία

### 3.1 ΣΥΝΘΕΣΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΒΙΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

#### Αντικείμενο Έργου

Τα φυσικά προϊόντα, με την ποικιλία και την πολυπλοκότητα των δομών τους αλλά και την πολυσχιδή βιολογική τους δράση, εξακολουθούν να αποτελούν πρόκληση για την οργανική χημεία αλλά και πηγή έμπνευσης για το σχεδιασμό και μελέτη νέων ενώσεων με πιθανές εφαρμογές στη βιολογία και την ιατρική. Ο σχεδιασμός, η σύνθεση, ο καθαρισμός και ο χαρακτηρισμός νέων οργανικών ενώσεων, ως επί το πλείστον φυσικά προϊόντα ή ανάλογά τους, αποτελούν το κύριο αντικείμενο του έργου.

Απώτερος ερευνητικός στόχος είναι η Παρασκευή νέων ενώσεων με ενδιαφέρουσα και/ή βελτιωμένη βιολογική δράση και πιθανές φαρμακευτικές εφαρμογές. Η αξιολόγηση της βιολογικής δραστηριότητας των νέων ενώσεων γίνεται σε συνεργασία με ειδικευμένα εργαστήρια. Παράλληλα, η εμπειρία της ομάδας στο σχεδιασμό και τη σύνθεση πολύπλοκων οργανικών ενώσεων χρησιμοποιείται για την Παρασκευή οργανικών μορίων με τεχνολογικές εφαρμογές (π.χ. βελτιωτικών προσθέτων για τη μικρολιθογραφική ενχάραξη ηλεκτρονικών κυκλωμάτων, μορίων-συνδέσμων για την Παρασκευή πολυμερών) ή μορίων για τη μελέτη υπερμοριακών φαινομένων.



Το εργαστήριο δραστηριοποιείται επίσης στον τομέα της συνδυαστικής χημείας (combinatorial chemistry). Άλλες τρέχουσες ερευνητικές προσπάθειες περιλαμβάνουν την ολική σύνθεση των φυσικών προϊόντων Βασταδίνες, Ραδισκόλη και Adociasulfate-2 καθώς και την Παρασκευή αναλόγων της Σκυφοστατίνης και της Αλκανίνης.

#### Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός, Ερευνητής Β', υπεύθυνος του έργου

**ΙΔΑΧ:** Δρ. Βερονίκη Βιδάλη

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Όλγα Βαγγέλη (μέχρι 31-5-2007).

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Αθανάσιος Καζάντζης (ΓΕΠ), Δρ. Άρης Χιωτέλης (1-1-2007 μέχρι 30-6-2007, INTEL S.A.), Δρ. Αλέξανδρος Στρογγυλός (άμισθος).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Μαριάννα Δακανάλη (1-1-2007 μέχρι 30-6-2007, INTEL S.A.), Κορνηλία Μητσοπούλου (άμισθη), Κατερίνα Τσιλιούκα (άμισθη), Νικόλαος Αθηναίος (από 1-9-2007, άμισθος).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ηλίας Κουλαδούρος, Καθηγητής, Γενικό Τμήμα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

## Δημοσιεύσεις

1. Pitsinos, E.N.; Cruz, A.; Giannis, A.; Wascholowski, V. "Synthesis of novel scyphostatin analogues and evaluation as neutral sphingomyelinase inhibitors", *Naunyn-Schmiedeberg's Arch. Pharmacol.* **2007**, *374*, 322-323.
2. Pitsinos, E.N.; Moutsos, V.I.; Vageli, O. "Synthesis of enantiopure (*S*)-7-hydroxy-3-amino-3,4-dihydro-2*H*-1-benzopyran en route to (+)-schophostatin", *Tetrahedron Lett.* **2007**, *48*, 1523-1526.
3. Ziemińska, E.; Stafiej, A.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A.; Moutsos, V.; Kozłowska, H.; Toczyłowska B.; Łazarewicz, J.W. "Synthetic bastadins modify the activity of ryanodine receptors in cultured cerebellar granule cells", *NeuroSignals* **2006-07**, *15*, 283-292.
4. Ziemińska, E.; Stafiej, A.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A.; Moutsos, V.; Kozłowska, H.; Toczyłowska B.; Łazarewicz, J.W. "Synthetic bastadins modify the activity of ryanodine receptors in cultured cerebellar granule cells", *Pharmacological Reports* **2007**, *59*, 33-33.
5. Ciminiello, P.; Dell'Aversano, C.; Fattorusso, E.; Forino, M.; Grauso, L.; Santelia, F.U.; Tartaglione, L.; Moutsos, V.I.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A. "Stereo-structural determination of three novel oxazinins isolated from Adriatic mussels via a synthetic and NMR-based approach", *Eur. J. Org. Chem.* **2007**, 5434-5439.
6. Stathopoulos, G.T.; Kollintza, A.; Moschos, A.; Psallidas, I.; Sherrill, T.P.; Pitsinos, E.N.; Vassiliou, S.; Karatza, M.; Papis, S.A.; Graf, D.; Orphanidou, D.; Light, R.W.; Roussos, C.; Blackwell, T.S.; Kalomenidis, I. "Tumor necrosis factor- $\alpha$  promotes malignant pleural effusion", *Cancer Res.* **2007**, *67*, 9825-9834.
7. Couladouros, E.A.; Strongilos, A.T.; Neokosmidis, E. "Formal synthesis of the piperidine alkaloid (+/-)-prosophylline using polymer-supported dihydro-2*H*-pyridin-3-one", *Tetrahedron Lett.* **2007**, *48*, 8227-8229.
8. Michaelakis, A.; Mihou, A.P.; Koliopoulos, G.; Couladouros, E.A. "Attract-and-kill strategy. Laboratory studies on hatched larvae of *Culex pipiens*", *Pest Management Science* **2007**, *63*, 954-959.
9. Couladouros, E.A.; Moutsos, V.I.; Lampropoulou, M.; Little, J.L.; Hyatt, J.A. "A short and convenient chemical route to optically pure 2-methyl chromanmethanols. Total asymmetric synthesis of beta-, gamma-, and delta-tocotrienols", *J. Org. Chem.* **2007**, *72*, 6735-6741.
10. Drygiannakis, D.; Patsis, G.P.; Raptis, I.; Niakoula, D.; Vidali, V.; Couladouros, E.; Argitis, P.; Gogolides, E. "Stochastic simulation studies of molecular resists", *Microelectronic Engineering* **2007**, *84*, 1062-1065.
11. Mihou, A.P.; Michaelakis, A.; Krokos, F.D.; Mazomenos, B.E.; Couladouros, E.A. "Prolonged slow release of (Z)-11-hexadecenyl acetate employing polyurea microcapsules", *J. Appl. Entomol.* **2007**, *131*, 128-133.

## Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. "Molecular resists based on polycarbocycle derivatives", P. Argitis, E. Gogolides, D. Niakoula, V. Vidali, E. Couladouros, R. Gautam, Greek Patent (OBI) appl. 20050100472/16-9-2005, **GR no 1005438/14-2-2007**, PCT International Patent Application PCT/GR06/000050 19/9/2006.

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Pitsinos, E.N.; Cruz, A.; Moutsos, V.; Vageli, O.; Giannis, A.; Wascholowski, V.; Stathopoulos, G.; Kalomenidis, J. "From scyphostatin to kotylostatin: chemistry and biology of new inhibitors of neutral sphingomyelinases", 8<sup>th</sup> Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 15-17 Μαρτίου 2007, Πρακτικά σελ. 24.



- Couladouros, E.A. "Chemical synthesis of bioactive natural products; Early steps in the discovery of new drugs", 8<sup>th</sup> Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 15-17 Μαρτίου 2007, Πρακτικά σελ. 23.
- Dakanali, M.I.; Vidali, V.P.; Couladouros, E.A. "Development of a general method for the synthesis of polyprenylated acylphloroglucinols", 8<sup>th</sup> Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 15-17 Μαρτίου 2007, Πρακτικά σελ. 73.
- Maranti, A.G.; Bouzas, E.A.; Couladouros, E.A. "Studies of enone-ene ring closing metathesis. Total synthesis of monocillin II", 8<sup>th</sup> Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 15-17 Μαρτίου 2007, Πρακτικά σελ. 94.
- Pratsinis, H.; Kletsas, D.; Bouzas, E.A.; Mechaelakis, A.; Strongilos, A.T.; Couladouros, E.A. "Synthesis and in vitro activity of shikalkin derivatives", 8<sup>th</sup> Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 15-17 Μαρτίου 2007, Πρακτικά σελ. 107.
- Pitsinos, E.N.; Cruz, A.; Moutsos, V.; Vageli, O.; Giannis, A.; Wascholowski, V.; Stathopoulos, G.; Kalomenidis, J. "From scyphostatin to kotylostatin: chemistry and biology of new inhibitors of neutral sphingomyelinases", 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis; From Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Αθήνα, 19-21 Απριλίου 2007, Πρακτικά σελ. 54.
- Couladouros, E.A. "New routes towards the synthesis of natural products and designed derivatives", 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis; From Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Αθήνα, 19-21 Απριλίου 2007, Πρακτικά σελ. 34.
- Maranti, A.G.; Bouzas, E.A.; Couladouros, E.A. "Synthetic studies towards monocillins I, II and III", 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis; From Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Αθήνα, 19-21 Απριλίου 2007, Πρακτικά σελ. 67.
- Dakanali, M.I.; Vidali, V.P.; Couladouros, E.A. "Synthesis of the bicyclic common core of hyperforin and related polycyclic polyprenylated acylphloroglucinols", 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis; From Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Αθήνα, 19-21 Απριλίου 2007, Πρακτικά σελ. 68.
- Bouzas, E.A.; Magos, A.D.; Chiotellis, A.E.; Salama, T.A.; Couladouros, E.A. "Studies towards an improved synthesis of the new anti-MRSA & VRSA polyketide, abyssomicin C", 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis; From Chemistry to Biology, Medicine and Materials Science, Αθήνα, 19-21 Απριλίου 2007, Πρακτικά σελ. 69.

## Διαλέξεις

- Pitsinos, E.N. "Natural products: Challenges and opportunities for chemistry and biology", Biomedical Sciences Research Center "Alexander Fleming", Greece, 15 May 2007.
- Pitsinos, E.N. "Natural products: Challenges and opportunities for chemistry and biology", Medical Research Center, Polish Academy of Science, Department of Neurochemistry, Warsaw, Poland, 17 October 2007.
- Pitsinos, E.N. "Synthesis and biological evaluation of novel N-Smase inhibitors; Effect on TNF- $\alpha$  induced VEGF expression", CM0602 COST Action First Workshop, Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine, Hannover, Germany, 24 November 2007.

## Διδακτικό Έργο

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

*Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης*

- Βαγγέλη, Όλγα. «Σύνθεση εναντιομερικά καθαρού (S)-7-υδροξυ-3-αμινο-χρωμανίου», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ιούνιος 2007.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

- "Structure-related pharmacological effects of synthetic bastadins in neurons", Κοινά Ερευνητικά και Τεχνολογικά Προγράμματα Ελλάδας-Πολωνίας 2005-2007, 11,74 κ€.
- "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 10 κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
- "Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)", COST Action CM0602, 2007-2011.

## **Ερευνητική Υποδομή**

Πολωσίμετρο, Συσκευή παράλληλης/συνδιαστικής σύνθεσης, HPLC.

## **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό**

1. Πιτσινός Ε.Ν. και Αθηναίος Ν., Medical Research Center, Polish Academy of Science, Department of Neurochemistry (Warsaw, Poland), στα πλαίσια του προγράμματος Ελληνο-Πολωνικής συνεργασίας (15-20 Οκτωβρίου 2007).
2. Πιτσινός Ε.Ν. Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine (Hannover, Germany), στα πλαίσια του COST Action CM0602 (22-25 Νοεμβρίου 2007).

## **Συνεργασίες**

Prof. A. Giannis (Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Institut für Organische Chemie), Prof. E. Fattorusso (Dipartimento di Chimica delle Sostanze Naturali, Università degli Studi di Napoli "Federico II"), Prof. J.W. Lazarewicz (Medical Research Centre, Polish Academy of Sciences), Prof. E.-I. Negishi (Purdue University, Purdue University, West Lafayette, Indiana, USA), Καθ. Ν. Χατζηχρηστίδης (Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ), Δρ. Π. Αργεΐτης (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»), Δρ. Δ. Κλέτσας (Ινστιτούτο Βιολογίας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»).

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

1. Υπεύθυνος Εκπαίδευσης του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Μέλος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
3. Μέλος του Management Committee της COST Action CM0602 "Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)".
4. Μέλος επιστημονικής επιτροπής (scientific board) του "The Sphingolipid Club" (διεθνής επιστημονική οργάνωση με σκοπό την προώθηση και ανάδειξη της διακλαδικής έρευνας στον τομέα των σφιγκολιπιδίων).
5. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Organic Letters, Journal of Organic Chemistry, European Polymer Journal, Letters in Organic Chemistry.

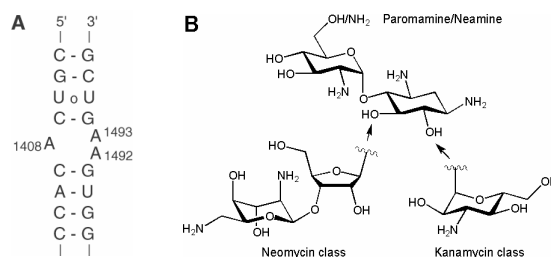
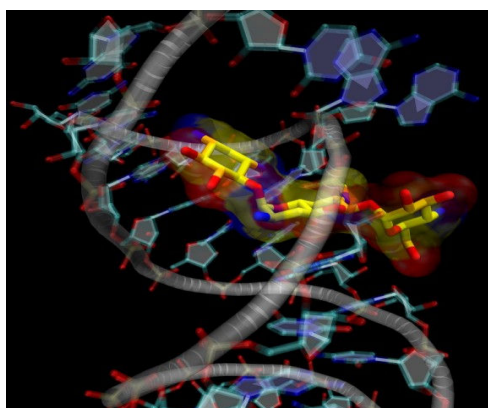
## 3.2 ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΕΝΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

### Αντικείμενο Έργου

Το εργαστήριό μας εκπροσωπεί μια νέα θεματική περιοχή του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας που ονομάζεται «Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων» και ξεκίνησε τον Ιούλιο του 2005. Η έρευνά μας επικεντρώνεται στη μελέτη βιολογικών συστημάτων, DNA, RNA και πρωτεϊνών, μέσω των αλληλεπιδράσεών τους με μικρά μόρια φυσικής ή συνθετικής προέλευσης και στοχεύει στην ανάπτυξη νέων, βελτιωμένων, φαρμάκων. Πιο συγκεκριμένα, το κύριο αντικείμενο του έργου μας είναι η σύνθεση φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων αναλόγων τους με βελτιωμένη δραστηριότητα και φαρμακολογικές ιδιότητες, καθώς επίσης και η ανάπτυξη νέας συνθετικής μεθοδολογίας σε διάλυμα και στερεή φάση. Επιπροσθέτως, βαρύτητα δίνεται και στην δημιουργία νέων *in vitro* βιολογικών διεργασιών για τη μελέτη των συνθετικών παραγώγων. Ο σχεδιασμός μας βασίζεται στην ύπαρξη κρυσταλλογραφικών πληροφοριών όπως επίσης και στη μελέτη μοριακών μοντέλων υπολογιστικής χημείας. Οι θεματικές περιοχές του άμεσου ενδιαφέροντός μας είναι ο Καρκίνος (τοποϊσομεράση II και απόπτωση), οι βακτηριδιακές μολύνσεις (αλληλεπίδραση αμινοσακχάρων και RNA) και οι ιώσεις (Ηπατίτιδα Γ, HIV).

#### 1. Μελέτη του RNA μέσω της αλληλεπίδρασής του με μικρά συνθετικά μόρια.

Η προτεινόμενη έρευνα αποσκοπεί στην εκμετάλλευση του RNA ως φαρμακευτικού στόχου μέσω της ορθολογικής σύνθεσης μικρών μορίων ως δομές-οδηγούς. Τα μόρια αυτά ενδεχομένως να αποτελέσουν στο μέλλον την νέα γενιά αντιβιοτικών. Η έρευνα αρχικά θα εστιάσει σε υποστρώματα που συνδέονται επιλεκτικά στα ριβοζονουκλεϊνικά (RNA) τμήματα του βακτηριακού ριβοσώματος, το οποίο αποτελεί στόχο μίας πληθώρας γνωστών αντιβιοτικών. Επιπλέον, εκμεταλλευόμενοι τις σύγχρονες τεχνολογίες ανάλυσης της λειτουργίας των πρωτεϊνών, π.χ. σύζευξη μικρών μορίων – βιοτίνης, θα εξερευνηθεί η δυνατότητα αναγνώρισης νέων συστατικών του RNA ως πιθανών στόχων αλληλεπίδρασης με μικρά μόρια θεραπευτικού ενδιαφέροντος. Τέλος, η διερεύνηση της τεταρτοταγούς δομής του RNA θα επιτευχθεί με τη σύνθεση «δυναμικών βιβλιοθηκών», στις οποίες το κάθε τελικό προϊόν θα παράγεται παρουσία του βιολογικού του στόχου, προσομοιάζοντας το αποτέλεσμα της φυσικής επιλογής. Η προσέγγισή μας θα είναι επεκτάσιμη και σε άλλες περιοχές του RNA, όπως η GTPase-συσχετιζόμενη περιοχή στο 23S ριβοσωμικό rRNA, η οποία είναι στόχος του αντιβιοτικού θειοστρεπτόνη (thiostrepton), ή όπως οι εσωτερικές ριβοσωμικές περιοχές εισόδου (IRES), οι οποίες είναι σημαντικοί στόχοι στη θεραπεία παθογόνων ιών, όπως η πολιομυελίτιδα και η ηπατίτιδα C. Η έρευνα αυτή αντιπροσωπεύει μια συνισταμένη προσέγγιση διαφορετικών επιστημονικών τομέων, αποτελούμενη από συνθετικές, φασματοσκοπικές, βιολογικές και υπολογιστικές μελέτες, που αναμένεται να διασαφηνίσουν το φαρμακολογικό προφίλ διαφόρων συστατικών του RNA και να εμπλουτίσουν την κατανόηση των επιμέρους λειτουργιών τους. Σε συνδυασμό με τις προφανείς



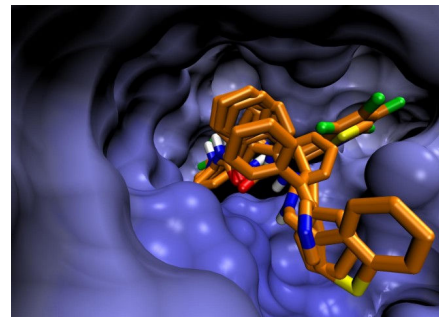
ευκαιρίες εκπαίδευσης των νέων ερευνητών στα διαφορετικά επιστημονικά πεδία που εμπλέκονται, η επιτυχής ολοκλήρωση του έργου θα τοποθετήσει την Ευρωπαϊκή Ένωση επικεφαλής στον τομέα του RNA παγκοσμίως, θα δημιουργήσει νέες ευκαιρίες ανάπτυξης της βιοτεχνολογίας και της φαρμακευτικής, και συνολικά θα καλυτερεύσει την ποιότητα ζωής μας.

## 2. *Στοχευόμενη μεταφορά βιοφαρμάκων διαμέσου συζυγών νανοδομών.*

Η παρούσα έρευνα στοχεύει στην ανάπτυξη καινοτόμων προσεγγίσεων που περιλαμβάνουν διαφορετικές αρχές για το σχεδιασμό, τη σύνθεση και την αξιολόγηση μοριακών συστημάτων που ανήκουν στην κλίμακα του νάνο- και μικρο-μέτρου, με σκοπό την στοχευόμενη μεταφορά θεραπευτικών πεπτιδίων και πρωτεϊνών (βιοφάρμακα) στον οργανισμό. Καθημερινά ανακαλύπτονται νέα φάρμακα βασισμένα σε πεπτίδια και πρωτεΐνες που παρέχουν νέους τρόπους αντιμετώπισης πολλών ασθενειών. Ωστόσο, η δομή, οι φυσικοχημικές ιδιότητες, η σταθερότητα, η φαρμακοδυναμική και η φαρμακοκινητική των νέων αυτών βιοφαρμάκων (βιολογικών φαρμάκων) θέτουν αυστηρούς περιορισμούς στον τρόπο με τον οποίο μεταφέρονται εντός του οργανισμού. Συστήματα μεταφοράς φαρμάκων που βασίζονται σε κάποιο «μόριο-μεταφορέα» είναι δυνατόν να βελτιώσουν την βιοδιαθεσιμότητα και να ελαχιστοποιήσουν την τοξικότητα των πεπτιδό/πρωτεϊνικών (P/P) φαρμάκων. Επιπροσθέτως, η εκλεκτικότητα του «συστήματος-μεταφορέα» δύναται να ενισχυθεί μέσω κατάλληλης ενεργοποίησης (προσθήκης λειτουργικών μονάδων), καθώς επίσης και να ρυθμιστεί κατά βούληση η απελευθέρωση του θεραπευτικού P/P παράγοντα. Οι τεχνητές νανοδομές που έχουν μέγεθος ανάλογο των βιολογικών μορίων, μπορούν να αλληλεπιδρούν απ' ευθείας με αυτά, είτε στην επιφάνεια, είτε στο εσωτερικό των κυττάρων. Συνεπώς η ανάπτυξη ενεργοποιημένων νανομεταφορέων και μικρομεταφορέων βασισμένων σε νανοσωματίδια για μεταφορά P/P φαρμάκων είναι αφ' ενός μια σημαντική επιστημονική πρόκληση, και αφ' ετέρου μια ενδεχόμενη επαναστατική πρόοδος της φαρμακευτικής βιομηχανίας.

## 3. *Σχεδιασμός και σύνθεση εκλεκτικών αναστολέων του VEGF-R2.*

Αγγειογένεση είναι η διεργασία με την οποία αναπτύσσονται νέα τριχοειδή αγγεία από ήδη υπάρχοντα, και έχει αναγνωριστεί ως ένας κυρίαρχος μηχανισμός στην ανάπτυξη όγκων και μεταστάσεων. Η πρόσφατη κλινική επιτυχία του Avastatin® έχει κατοχυρώσει την θεραπεία του καρκίνου με αναστολείς της αγγειογένεσης, που στοχεύουν συγκεκριμένα τον παράγοντα ανάπτυξης των αγγειακών ενδοθηλίων (vascular endothelial growth factor - VEGF). Η διμερική αυτή γλυκοπρωτεΐνη αλληλεπιδρά με δύο διαμεμβρανικούς υποδοχείς υψηλής συγγένειας που ανήκουν στην οικογένεια των τυροσινικών κινασών, τον VEGF-R1 (αρχικά Flt-1) και τον VEGF-R2 (ή KDR), με αποτέλεσμα τον πολλαπλασιασμό των ενδοθηλιακών κυττάρων και την ανάπτυξή τους σε νέα αγγεία. Συμπερασματικά, αξιοποίηση των αναστολέων των VEGF-R τυροσινικών κινασών, οι οποίοι στοχεύουν στην ενδοκυτταρική μετάδοση του σήματος, θα μπορούσε να αποδειχθεί σωτήρια για την θεραπεία διαφόρων μορφών καρκίνου. Εντός των 5 τελευταίων ετών έχει γίνει σημαντική προσπάθεια να παραχθούν εκλεκτικοί αναστολείς των VEGF-R, με σημαντικά αποτέλεσμα για την περίπτωση του VEGF-R2. Η ερευνητική μας προσπάθεια αποσκοπεί στην υπολογιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων αυτών για τον σχεδιασμό, τη σύνθεση και την βιολογική αξιοποίηση νέων αναστολέων του VEGF-R2.



### **Προσωπικό**

**Ερευνητές:** Δρ. Διονύσιος Βουρλούμης, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Ελένη Ευθυμιάδου, Γιάννης Μαυρίδης.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Αλέξανδρος Ζωγράφος (EXT), Δρ. Ιωάννης Κατσούλης (EXT), Δρ. Γεωργία Κυθραιώτη (EXT), Δρ. Αθανάσιος Παπακυριακού (ENTER 2004), Δρ. Μαρία Κατσαρού (άμισθη Συνεργαζόμενη Ερευνήτρια).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Πανούλα Αναστασοπούλου (EXT), Άννα Παπαδοπούλου (άμισθη).

## Δημοσιεύσεις

1. Psomas G., Tarushi A., Efthimiadou E.K., Sanakis Y., Raptopoulou C.P., Katsaros N., "Synthesis, Structure and Biological Activity of Copper(II) Complexes with Oxolinic Acid.", *J. Inorg. Biochem.* **2006**, *100*, 1764-1773. (Δεν περιλαμβάνεται δημοσιευμένη στον απολογισμό του **2006**)
2. Efthimiadou E.K, Thomadaki H., Sanakis Y., Raptopoulou C.P., Katsaros N., Scorilas A., Karaliota A., Psomas G., "Structure and biological properties of the copper(II) complex with the quinolone antibacterial drug N-propyl-norfloxacin and 2,2'-bipyridine." *J. Inorg. Biochem.* **2007**, *101*, 64-73.
3. Efthimiadou E.K, Sanakis Y., Katsaros N., Karaliota A., Psomas G., "Transition metal complexes with the quinolone antibacterial agent pipemidic acid: Synthesis, characterization and biological activity." *Polyhedron* **2007**, *26*, 1148-1158.
4. Efthimiadou E.K, Psomas G., Sanakis Y., Katsaros N., Karaliota A., "Metal complexes with the quinolone antibacterial agent N-propyl-norfloxacin: Synthesis, structure and bioactivity.", *J. Inorg. Biochem.* **2007**, *101*, 525-535.
5. Katsarou M.E., Efthimiadou E.K., Psomas G., Karaliota A., Vourloumis D., "Novel Copper(II) Complex of N-Propyl-norfloxacin and 1,10-Phenanthroline with Enhanced Antileukemic and DNA Nuclease Activities", *J. Med. Chem.* **2008**, *51*, 470-478. (Πρώτη ηλεκτρονική δημοσίευση το **2007**).

## Διεθνή Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. K.C. Nicolaou, Y. He, S. Ninkovic, J. Pastor, F. Roschangar, F. Sarabia, H. Vallberg, D. Vourloumis, N. Winssinger, Z. Yang, N.P. King, M.R.V. Finlay, «Epothilone Analogs.» *US 7,173,137 B2*, publication date: Feb. 6, 2007.
2. D. Vourloumis, D.E. Murphy, T.J. Prins, F. Ruebsam, C.V. Tran, S.J. Berthel, R.F. Kester, R. "Oxime Glucokinase Activators." U.S. Provisional Patent Application No. **23198 US** (pending).

## Διαλέξεις

1. Dionisios Vourloumis, "Targeting RNA with small molecules." EMBO Conference on "Viral RNA: Structure, Function and Targeting", Invited speaker, EMBL Heidelberg, Germany, March 5–7, **2007**.
2. Dionisios Vourloumis, "Targeting RNA with small molecules." 2<sup>nd</sup> Hellenic Symposium on Organic Synthesis, University of Athens, Invited speaker, Athens, Greece, April 19–21, **2007**.

## Διδακτικό Έργο

Dionisios Vourloumis, "RNA as a Drug Target: A Case Study" Nano2life Summer School on Methods in Micro-Nanotechnology and Nanobiotechnology, 2007, Athens, Greece, June 25 - July 6, **2007**.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. Marie Curie Excellence Grants, "Study of RNA components by the Synthesis of Small Molecules", Contract No. MEXT-CT-2006-039149, Dr. Dionisios Vourloumis, € 1.620 k€, 2/2007–1/2011).
2. 'NMP' INTEGRATED PROJECT, "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", Contract No. NMP4-CT-2006-026723, € 537 k€, 10/2006-9/2010).
3. ENTER2004, GSRT, "Design of Selective Inhibitors of Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2 (VEGF-R2) Using Structural Methods for the Treatment of Cancer." Contract No. 04EP63, Dr. Dionisios Vourloumis, € 58.5 k€, 2/07-10/08)
4. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 10 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.

## Συνεργασίες

T. Hermann (UCSD, San Diego USA, βιοχημεία του RNA), E. Theodorakis (UCSD, San Diego USA, Οργανική Σύνθεση), Δ. Γεωργιάδης (UOA, Athens Greece, Οργανική Σύνθεση/Φασματοσκοπία).

## **Β. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ**

## **B.1 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ**

### **B.1.1. Εργαστήριο NMR**

[nmrlab@chem.demokritos.gr](mailto:nmrlab@chem.demokritos.gr) ; <http://ipc.chem.demokritos.gr/Projects/nmr/nmr.html>

**Υπεύθυνοι : Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου (ΙΦΧ), Δρ. Μ. Πελεκάνου (ΙΒ), Δρ. Λ. Λεοντιάδης (ΙΡΡΠ).**

*Ειδικός Τεχνικός Επιστήμων: Δρ. Α. Παναγιωτοπούλου, (ΙΒ)*

Το εργαστήριο NMR υγρών δειγμάτων, απαρτίζεται από το φασματόμετρο Bruker Avance 500 MHz (1<sup>ο</sup> έτος λειτουργίας 2000), το φασματόμετρο Bruker AC 250 MHz (1<sup>ο</sup> έτος λειτουργίας 1991), και τα περιφερειακά όργανα.

Το εργαστήριο υποστηρίζει τα ερευνητικά προγράμματα κυρίως των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας, Βιολογίας και ΡΡΠ αλλά και άλλων Ινστιτούτων του «Δημοκρίτου» (Υλικών, Μικροηλεκτρονικής) συμμετέχοντας καθοριστικά στο ερευνητικό και αναπτυξιακό έργο του Κέντρου.

Επίσης παρέχει υπηρεσίες σε εξωτερικούς χρήστες, ακαδημαϊκούς και ιδιωτικούς φορείς, βάσει τιμολογίων. Για το 2007 οι εισροές ήταν 5870 € εκ των οποίων 686 € προέρχονται από παροχή υπηρεσιών εκτός «Δημοκρίτου», οι δε δαπάνες ανήλθαν στα 5450 €, εκ των οποίων 4980 € ήταν επισκευές.



Βασική επιδίωξη για το 2008 είναι η ολική αντικατάσταση των ηλεκτρονικών του AC250 τα οποία δυσλειτουργούν.

### **B.1.2 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΑΚΤΙΝΩΝ-Χ**

**Υπεύθυνος Δρ. Ε. Μ. Μαυρίδου**

Το Εργαστήριο <http://ipc.chem.demokritos.gr/raxis/index.html> λειτουργεί στον Δημόκριτο από το 1998 όταν δημιουργήθηκε το "Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων" (1997) το οποίο είναι δίκτυο 10 Ερευνητικών-Ακαδημαϊκών φορέων και εγκαταστάθηκαν (α) πλήρες σύστημα συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων μακρομορίων (β) φασματοπολωσίμετρο κυκλικού διχρωϊσμού. Στην οργάνωση του Κέντρου Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων συμμετέχουν τρία Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» με Επιστημονικούς Υπεύθυνους τους Ερευνητές: Δρ. Ε. Μ. Μαυρίδου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Δρ. Μ. Βλάση, Ινστιτούτο Βιολογίας, Δρ. Γ. Νούνεσης, Ινστιτούτο Ραδιοϊσοτόπων-Ραδιοδιαγνωστικών Προϊόντων.

Το εργαστήριο είναι εξοπλισμένο επίσης με Περιθλασίμετρο Ακτίνων-Χ Τεσσάρων-Κύκλων και άλλα περιφερειακά όργανα και εξυπηρετεί ανάγκες των εργαστηρίων του δικτύου, αλλά και άλλα, ακαδημαϊκά κυρίως εργαστήρια, κατόπιν συνεννοήσεως.

Για το 2007 οι εισροές ήσαν € 5779, εκ των οποίων € 551 προήλθαν από παροχή υπηρεσιών εκτός Δημοκρίτου με έκδοση τιμολογίων για τα οποία δαπανήθηκαν 159 σε ΦΠΑ & έξοδα ΓΕΛ. Οι δαπάνες ανήλθαν σε € 4830, εκ των οποίων € 4661 σε επισκευές και ανταλλακτικά.

### **B.1.3 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ**

Υπεύθυνη Ε. Γιαννακοπούλου (Χειρίστρια Στοιχειακού Αναλυτή)

**Αντικείμενο:** Στοιχειακές αναλύσεις οργανικών ενώσεων.

Παροχή υπηρεσιών προς τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και προς τρίτους.

**Επιτεύγματα:** Από 1/1/2007 μέχρι 31/12/2007 αναλύθηκαν 80 δείγματα επί πληρωμή και 28 δείγματα χωρίς πληρωμή έναντι άλλων υπηρεσιών από τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (ΙΡΡΠ, ΙΕΥ)

**Έσοδα-Έξοδα: Ετήσια έσοδα .....1950 ευρώ**

Μεταφορά εσόδων από το 2006..... 850,27 ευρώ

Σύνολο.....2800,27 Ξ

Ετήσια έξοδα λειτουργίας του οργάνου.....1423,67 ευρώ

### **Κοστολόγιο Στοιχειακών Αναλύσεων για το 2005**

1. ΙΦΧ.....20ευρώ/δείγμα.
2. Άλλα Ινστιτούτα του «Δημόκριτου».....25ευρώ/δείγμα
3. Ακαδημαϊκοί Φορείς.....30ευρώ/δείγμα
4. Ιδιωτικός τομέας.....30ευρώ/δείγμα

### **B.1.4 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ AFM, FT-IR, I.M.S.**

#### **A. Μικροσκοπία Ατομικών Δυνάμεων (AFM)**

Υπεύθυνοι κα Αρχιμανδρίτη Μ. , κος Σαπαλίδης Αν.

**ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ:** Μικροσκόπιο Ατομικών Δυνάμεων AFM της DIGITAL INSTRUMENTS

**ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ:** Σάρωση επιφανείας με τις μεθόδους Contact και Tapping

**ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ:** ΕΚΕΦΕ «Δ», Φορείς Δημοσίου και Ιδιωτικός Φορέας

**Κοστολόγηση:** ΧΡΕΩΣΗ ΑΝΑ ΔΕΙΓΜΑ \*

		Μέθοδος <b>Contact</b>	Μέθοδος <b>Tapping</b>
<b>1</b>	Φορείς Δημοσίου	80 €	50 €
<b>2</b>	Ιδιωτικός Φορέας	120 €	90 €

\* Στην κοστολόγηση όλων των υπηρεσιών δεν συμπεριλαμβάνεται το ΦΠΑ

Μετρήθηκαν 30 δείγματα (από Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος) και εισπράχθηκαν 990 €

#### **B) Φασματοσκοπία Υπερύθρου FT-IR**

Υπεύθυνος Δρ. Φώτης Κατσαρός

#### **ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ**

FT-IR Nicolet Magna 550 – Δεν λειτούργησε το 2007 λόγω βλάβης



### **ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ**

Χαρακτηρισμός υλικών με φασματοσκοπία υπερύθρου (FT-IR)

### **ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ**

Βιομηχανίες Τσιμέντου, Βιομηχανίες Φαρμάκων, Βιομηχανίες Τροφίμων, Μεταλλουργικές και Εξορυκτικές Βιομηχανίες, Επιχειρήσεις που ασχολούνται με το Περιβάλλον

### **Κοστολόγηση**

Ινστ. Φυσικοχημείας	1€ / Ώρα
Άλλα Ινστιτούτα ΕΚΕΦΕ «Δ»	2€ / Ώρα
Φορείς Δημοσίου	10€ / Ώρα
Ιδιωτικός Τομέας	20 € / Δείγμα

### **Γ) Φασματοσκοπία μάζας**

Υπεύθυνος Δρ. Φώτης Κατσαρός

### **ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ**

GC-MS Micromass Platform II - Δεν λειτουργήσε το 2007 λόγω βλάβης

### **ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ**

Χαρακτηρισμός υλικών με Φασματογράφο Μάζας – Αέριο Χρωματογράφο (GC-MS)

Μελέτη και ταυτοποίηση χημικών ενώσεων

### **ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ**

Βιομηχανίες Τσιμέντου, Βιομηχανίες Φαρμάκων, Βιομηχανίες Τροφίμων, Μεταλλουργικές και Εξορυκτικές Βιομηχανίες, Επιχειρήσεις που ασχολούνται με το Περιβάλλον

### **Κοστολόγηση**

	<b>MS</b>	
	<b>GC-MS</b>	<b>Direct Probe</b>
Ινστ. Φυσικοχημείας	5 € / Δείγμα	8 € / Δείγμα
Άλλα Ινστιτούτα ΕΚΕΦΕ «Δ»	10 € / Δείγμα	15 € / Δείγμα
Φορείς Δημοσίου	15 € / Δείγμα	50 € / Δείγμα
Ιδιωτικός Τομέας	50 € / Δείγμα	80 € / Δείγμα

### **B.1.5 Υαλουργείο**

Υπεύθυνος Κος Φερδερίγος Μαρίνος

Το Υαλουργείο του ΕΚΕΦΕ «Δ» λειτουργεί υπο την αιγίδα του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και παρέχει υαλουργικές υπηρεσίες στα Ερευνητικά Εργαστήριο όλου του Κέντρου. Το Εργαστήριο Υαλουργείας ανέλαβε και περάτωσε 166 υαλουργικές εργασίες για το έτος 2007

## **B.2 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Ραδιοχρονολογήσεις,**

### ***Ισοτοπικές Αναλύσεις και Μετρήσεις Ραδονίου»***

#### **Προσωπικό**

**Υπεύθυνος Έργου:** Δρ. Ν. Ζουριδάκης

**Μέλη:** Ε. Αρνίδη, Πτυχιούχος ΤΕΙ

#### **Αντικείμενο**

Ισοτοπική Υδρολογία είναι ο διεπιστημονικός κλάδος που ασχολείται με τη ανίχνευση των σταθερών και ραδιενεργών ισοτόπων ( $^{18}\text{O}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^3\text{H}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{222}\text{Rn}$  κ.ά.) στον κύκλο του νερού στη φύση. Οι συγκεκριμένες αναλύσεις μπορούν να δώσουν απαντήσεις σε σημαντικά ζητήματα που αφορούν την εφαρμοσμένη έρευνα για την αξιοποίηση και την ορθολογική διαχείριση του υδάτινου δυναμικού όπως:

- Εκτίμηση του υψόμετρου τροφοδοσίας των υπόγειων υδροφόρων οριζώντων
- Ταχύτητα ροής και χρόνος παραμονής του νερού στο υπέδαφος,
- Ποσοστό ανάμειξης διαφορετικών υδροφόρων οριζώντων καθώς και της ανάμειξης επιφανειακών και υπόγειων νερών.
- Προσδιορισμός της προέλευσης της ρύπανσης των επιφανειακών και υπόγειων νερών από διάφορες ρυπογόνες εστίες (πχ. Νιτρορύπανση από αγροτικές και αστικές δραστηριότητες).
- Προσδιορισμός της ενθαλπίας των γεωθερμικών πεδίων.
- Εκτίμηση του δυναμικού των υπόγειων αποθεμάτων νερού.
- Επίδραση των κλιματικών αλλαγών στα υδατικά συστήματα.
- Μελέτη της υφαλμύρωσης των παράκτιων πηγών.
- Προσδιορισμός της βασικής ροής σε υδρογεωλογικές λεκάνες.
- κ.α.

Πέραν των εφαρμογών στην Υδρολογία και Υδρογεωλογία ο εξοπλισμός του Εργαστηρίου μπορεί να αξιοποιηθεί και σε άλλα πεδία έρευνας όπως:

- Προσδιορισμός της ηλικίας κάθε μορφής δειγμάτων για την αρχαιολογική έρευνα και την έρευνα του παλαιοπεριβάλλοντος,
- Μελέτες παλαιοδίαιτας,
- Έρευνα των μεταβολών της στάθμης της θάλασσας στο παρελθόν.
- Παλαιοκλιματολογικές έρευνες.
- Προσδιορισμό της συγκέντρωσης του ραδιενεργού ραδονίου σε εσωτερικούς χώρους και στα συστήματα ύδρευσης.
- Καθοριστική ανίχνευση της νοθείας των αλκοολούχων ποτών.
- Προσδιορισμό του ποσοστού προέλευσης του εκλυόμενου διοξειδίου του άνθρακα από την καύση των πετρελαιοειδών (αυτοκίνητα, κεντρική θέρμανση, βιομηχανία) στις αστικές περιοχές.
- Μελέτες της ραδιενέργειας της ατμόσφαιρας εξαιτίας των πυρηνικών δοκιμών την δεκαετία του '60.
- κ.α.

#### **Εργασίες**

Το 2007 με τη μορφή παροχής υπηρεσιών έγιναν ισοτοπικές αναλύσεις  $^{18}\text{O}$  σε 129 δειγμάτων νερού και 109 αναλύσεις Τριτίου.

Ακόμη έγιναν για τις διάφορες επιστημονικές συνεργασίες (Πανεπιστήμιο Αθηνών, ΕΛΚΕΘΕ, ΙΓΜΕ Κρήτης κλπ.) του εργαστηρίου οι εξής ισοτοπικές αναλύσεις:

Ισοτοπικές αναλύσεις  $^{18}\text{O}$  σε 256 δείγματα νερού

Προσδιορισμός συγκέντρωσης Τριτίου σε 75 δείγματα νερού

### **Έσοδα-Έξοδα 2007**

Δανεισμός	3.000 ευρώ
Ετήσια έξοδα Εργαστηρίου	11.000 ευρώ
Φ.Π.Α.	2.865,20 ευρώ

Το Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας υπέγραψε Σύμβαση Παροχής Υπηρεσιών με το ΙΓΜΕ κατά το 2007 ύψους 70.000 ευρώ.

Τα έτη 2006-2007 οι Συμβάσεις Παροχής Υπηρεσιών προς τρίτους που έχει υπογράψει το Εργαστήριο ανέρχονται στο ύψος 115.000 ευρώ.

### **Κοστολόγιο Ισοτοπικών Αναλύσεων**

Οι τιμές για παροχή υπηρεσιών χωρίς Φ.Π.Α. των αναλύσεων δειγμάτων που πραγματοποιούνται στο εργαστήριο είναι οι παρακάτω:

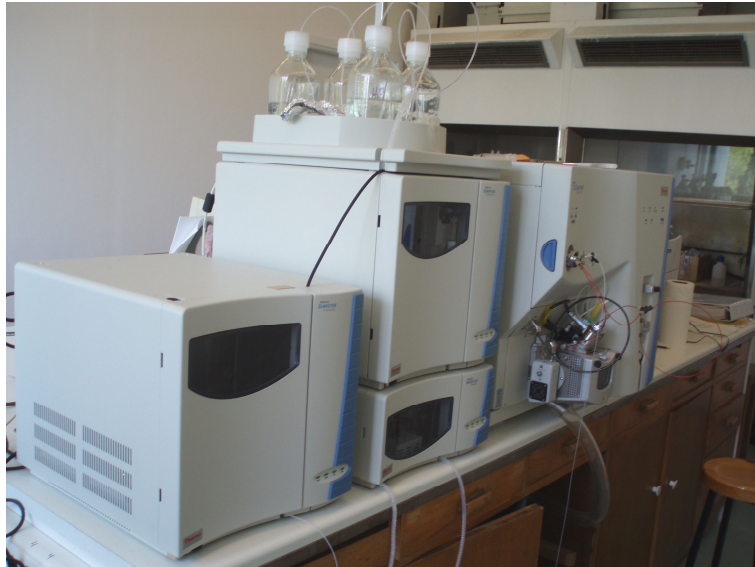
Ραδιοχρονολγήσεις κάρβουνου, ξύλου, τύρφης	250 ευρώ
Ραδιοχρονολγήσεις κοχυλιών, χόρτων, CaCO <sub>3</sub>	280 ευρώ
Ραδιοχρονολγήσεις ασβεστοκονιαμάτων	350 ευρώ
Ραδιοχρονολγήσεις οστών	500 ευρώ
Ραδιοχρονολγήσεις νερού	600 ευρώ
Ισοτοπικές αναλύσεις <sup>18</sup> O σε δείγματα νερών	80 ευρώ
Ισοτοπικές αναλύσεις D σε δείγματα νερών	100 ευρώ
Προσδιορισμός συγκέντρωσης Ραδονίου στα νερά	60 ευρώ
Προσδιορισμός συγκέντρωσης Ραδονίου σε κλειστούς χώρους	80 ευρώ
Προσδιορισμός συγκέντρωσης Τριτίου σε δείγματα νερών	150 ευρώ
Ισοτοπικές αναλύσεις <sup>18</sup> O σε στερεά δείγματα	100 ευρώ

## Β.3 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ «ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ

### ΑΝΑΛΥΣΕΙΣ»

#### Αντικείμενο Έργου

Η ρύπανση των υδάτινων συστημάτων από οργανικούς ρύπους όπως οι πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs), πολυχλωριωμένα διφαινύλια (PCBs) και οι κυανοτοξίνες αποτελούν ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα σε διεθνές επίπεδο. Η Ευρωπαϊκή Ένωση έχει θεσπίσει αυστηρότερα ανώτατα επιτρεπτά όρια για παραπάνω ρύπους στα ενώ αποτελεί επιτακτική ανάγκη η ανάπτυξη νέων, γρήγορων, υψηλής ακρίβειας και ευαισθησίας αναλυτικών μεθόδων για προσδιορισμό τους. Τα μειονεκτήματα των συμβατικών μεθόδων στον προσδιορισμό των ανωτέρω μπορούν να παρακαμφθούν συνδυασμένη χρήση HPLC φασματοσκοπίας μάζας τετραπλού (LC/MS/MS). πλαίσια της διαπίστευσης Εργαστηρίου για τον προσδιορισμό PAHs σε



τους  
νερά,

ΤΟΝ

ρύπων  
με την  
και

Στα  
ΤΟΥ

επιφανειακά και πόσιμα ύδατα με χρήση LC/MS/MS επιτεύχθηκε η χρηματοδότησή του από το Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Ανταγωνιστικότητα του Υπουργείου Ανάπτυξης με το ποσό των 311.300 € για το διάστημα (2005-2008). Το γεγονός αυτό παρέχει την δυνατότητα αναβάθμισης του υπάρχοντος εξοπλισμού του Εργαστηρίου (HPLC/UV-Vis ή FL ή CD, IC, GC/ECD ή FID και GC/MS) με την προμήθεια ενός συστήματος LC/MS/MS ενώ παράλληλα με την παροχή υπηρεσιών προς τρίτους δημιουργούνται και νέες ερευνητικές δυνατότητες.

Ειδικότερα οι δραστηριότητες του Εργαστηρίου εστιάζονται στους ακόλουθους τομείς:

- Ανάπτυξη μεθόδων για τον προσδιορισμό τοξικών οργανικών, σε ίχνη, σε τρόφιμα, νερά και περιβαλλοντικά δείγματα (οργανοχλωριωμένα και οργανοφωσφωρικά εντομοκτόνα, τριαζίνες, πολικά ζιζανιοκτόνα, PCBs, PBRBs, χλωροφαινόλες, PAHs, BTX, VOCs, υπολείμ. φαρμακευτικών ουσιών, κυανοτοξίνες, αλογονούχα οργανικά).
- Ανάπτυξη νέας προηγμένης μεθόδου προσδιορισμού PCBs σε νερά καθώς και αλογονούχων οργανικών σε τρόφιμα (μέλι) με χρήση SPME (Solid Phase Microextraction) σε συνδυασμό με GC/ECD και GC/MS.
- Ανάπτυξη νέας προηγμένης μεθόδου, με σκοπό τη διαπίστευση, για τον προσδιορισμό και την ταυτοποίηση PAHs σε πόσιμα και επιφανειακά νερά με χρήση SPE σε συνδυασμό με HPLC/FL και LC/MS-MS
- Ανάπτυξη νέας προηγμένης μεθόδου για τον προσδιορισμό και την ταυτοποίηση κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά με χρήση SPE σε συνδυασμό με LC/MS-MS
- Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών και MSc.
- Διαπίστευση Εργαστηρίου (Πρόγραμμα EPAN, 311.300 €.)
- Παροχή Υπηρεσιών προς τρίτους.

#### Προσωπικό

**Ερευνητές: Δρ. Αναστασία Χισκιά, Ερευνητής Α', υπεύθυνη εργαστηρίου**

**Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας: Δρ. Θεόδωρος Τριάντης**

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Αικατερίνη Τσιμελή  
**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Τριαντάφυλλος Καλούδης, ΕΥΔΑΠ.

### **Προγράμματα – Εισροές από Παροχή Υπηρεσιών**

1. «Ενίσχυση της υφιστάμενης υποδομής του Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Εθνικού Κέντρου Έρευνας Φυσικών Επιστημών (ΕΚΕΦΕ) «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ» για την παροχή υπηρεσιών δοκιμών», Υπουργείο Ανάπτυξης, Επιστ. Υπευθ. Α. Χισκιά, 311,3 Κ€, 2006-2008.
2. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων βυθοκορημάτων λιμένων για εντοπισμό βαρέων μετάλλων και αλογονούχων οργανικών ενώσεων» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην ΕΔΡΑΣΟΜΗΧΑΝΙΚΗ, 3,3 Κ€.
3. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων βυθοκορημάτων λιμένων για εντοπισμό βαρέων μετάλλων και αλογονούχων οργανικών ενώσεων» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην ΑΛΤΕΚ, 3,3 Κ€.

### **Υποδομή**

Αέριος Χρωματογράφος με FID, ECD και TCD ανιχνευτές, HPLC με UV-VIS και FLD ανιχνευτές, Αέριος Χρωματογράφος/ Φασματοσκοπία Μάζας (GC/MS), Υγρή Χρωματογραφία/ Φασματοσκοπία Μάζας τεχνολογίας τριπλού τετραπόλου HPLC/MS/MS, Ιοντικός Χρωματογράφος, Πολαρογράφος, TOC, Φασματοφωτόμετρο UV, ορατού, Φασματοφωτόμετρο UV, ορατού, εγγύς IR, Σύστημα SPE, Σύστημα SPME, Φούρνοι, Λουτρό υπερήχων, Ζυγοί 4 και 5 δεκαδικών ψηφίων, Υδατόλουτρο, Πεχάμετρο, Περιστροφικός Εξαμιστήρας υπό κενό, Συσκευή υπερκάθαρου νερού.

### **Συνεργασίες**

Dr. S. Lacorte, Dep. of Environ. Chem., CID-CSIC, Barcelona, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων.

Dr. Jussi Meriluoto, Department of Biochemistry and Pharmacy, Abo Akademi University, Turku, Finland, Method development for the determination and identification of cyanotoxins in surface and drinking water by using SPE and LC/MS-MS.

Prof. D. Dionysiou, University of Cincinnati, Department of Civil and Environmental Engineering Cincinnati, Ohio, USA, Method development for the determination and identification of cyanotoxins in surface and drinking water.

Δρ. Τ. Καλούδης και Δρ. Ν. Θανασούλιας ΕΥΔΑΠ, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε πόσιμα νερά.

Δρ. Δ. Τσίπη, Γενικό Χημείο του Κράτους, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων.

Καθ. Θ. Ηλιάδης, Οδοντιατρική Σχολή Παν. Θεσσαλονίκης, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε βιολογικά συστήματα.

Δρ. Στούμπος, Δρ. Ελευθεριάδης και Δρ. Μάγγος, ΙΠΤΑ ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Συνεργασία σε παροχές υπηρεσιών.

Καθ. Ε. Δασενάκης, Χημικό Τμήμα, Παν. Αθηνών, Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών.

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Διαπίστευση του Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων στον προσδιορισμό PAHs σε επιφανειακά και πόσιμα ύδατα με χρήση LC/MS/MS, γεγονός που θα το καταστήσει το μοναδικό Διαπιστευμένο Εργαστήριο στον Ελλαδικό χώρο για την ανωτέρω δοκιμή.

Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2007 διατέλεσε Προϊσταμένη του υπό διαπίστευση Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2007 διετέλεσε Υπεύθυνος Ποιότητας του υπό διαπίστευση Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

# Γ. ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ

## **ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΣΤΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ**

**Υπεύθυνος Εκπαίδευσης:** Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός.

**Αναπληρωτής:** Δρ. Ιωάννης Λαζάρου.

### **Γενικά**

Η εκπαίδευση νέων επιστημόνων αποτελεί μία από τις σημαντικότερες δραστηριότητες του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας. Η εκπαίδευση που παρέχεται στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας είναι προσανατολισμένη σε υψηλής ποιότητας έρευνα και συνίσταται:

- (α) στην εκπόνηση διδακτορικών διατριβών και μεταπτυχιακών διατριβών σε συνεργασία με ΑΕΙ,
- (β) στην παρακολούθηση εξειδικευμένων μεταπτυχιακών μαθημάτων που παρέχονται στο Ινστιτούτο, το Κέντρο και σε προγράμματα μεταπτυχιακών σπουδών ΑΕΙ,
- (γ) στην εκπαίδευση μεταδιδακτορικών συνεργατών,
- (δ) στην εκπόνηση διπλωματικών και πτυχιικών εργασιών προπτυχιακών φοιτητών,
- (ε) στην οργάνωση σεμιναρίων με ομιλητές από την Ελλάδα και το εξωτερικό.
- (στ) στην οργάνωση του Θερινού Σχολείου του ΕΚΕΦΕ «Δ»

Οι μεταπτυχιακοί φοιτητές που εκπονούν τις ερευνητικές τους εργασίες στο Ινστιτούτο είναι εγγεγραμμένοι σε προγράμματα μεταπτυχιακών σπουδών διαφόρων ΑΕΙ της χώρας, δεδομένου ότι το ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» δεν χορηγεί τίτλους σπουδών.

Το Ινστιτούτο συμμετέχει επίσης ενεργά σε προγράμματα μεταπτυχιακών σπουδών Τμημάτων ΑΕΙ της χώρας που χρηματοδοτούνται από το ΕΠΕΑΕΚ του Υπουργείου Παιδείας. Ερευνητές του Ινστιτούτου διδάσκουν μεταπτυχιακά μαθήματα στα προγράμματα αυτά και επιβλέπουν την εκπόνηση μεταπτυχιακών και διδακτορικών εργασιών. Τέτοια προγράμματα είναι:

- (α) «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών,
- (β) «Οργανική Σύνθεση και Εφαρμογές στη Χημική Βιομηχανία», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών,
- (γ) «Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών.

### **Μεταπτυχιακοί φοιτητές**

Οι μεταπτυχιακοί φοιτητές που απασχολούνται στο Ινστιτούτο διακρίνονται σε:

- (α) Υποτρόφους με οικονομική ενίσχυση (υποτροφία) από το Δημόκριτο,
- (β) Υποτρόφους χωρίς οικονομική ενίσχυση από το Δημόκριτο οι οποίοι στην πλειοψηφία τους χρηματοδοτούνται από ερευνητικά προγράμματα, (Ελληνικά, Ευρωπαϊκά, Διεθνή)
- (γ) Μεταπτυχιακούς φοιτητές που εκπονούν την ερευνητική τους εργασία στα πλαίσια ενός αναγνωρισμένου προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών σε κάποιο ΑΕΙ της χώρας.

Κατά το 2007, στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας απασχολήθηκαν 16 υπότροφοι με οικονομική ενίσχυση από το Δημόκριτο και 34 μεταπτυχιακοί φοιτητές που χρηματοδοτήθηκαν από άλλες πηγές.

### **Βραβείο καλύτερης διδακτορικής διατριβής Ινστιτούτου Φυσικοχημείας**

Στα τέλη του 2005 θεσμοθετήθηκε το ετήσιο βραβείο για την καλύτερη διδακτορική διατριβή που εκπονήθηκε στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας. Τον Ιούνιο του 2007, απονεμήθηκε το βραβείο για το έτος 2006 στον Δρα Θωμά Στεργιόπουλο, για τη διδακτορική του διατριβή με τίτλο: «Φασματοσκοπικός Χαρακτηρισμός Φωτοηλεκτροχημικών Ηλιακών Κυψελίδων», η οποία εκπονήθηκε υπό την επίβλεψη τους Δρος. Πολύκαρπου Φαλάρα.

## **Μεταπτυχιακές εργασίες που ολοκληρώθηκαν το 2007**

### **Διδακτορικές διατριβές**

**Πέτρος Γκιάστας**, «Μοριακές δομές των βακτηριακών φερρεδοξινών *Pa Fd* και *Ec Fd*» Διδακτορική Διατριβή, Χημικό Τμήμα, Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιούλιος 2007.

**Ειρήνη Καρακατσάνη**, «Ανάπτυξη και Αξιολόγηση ενός Θερμοδυναμικού Μοντέλου Βασισμένου στη Θεωρία Διαταραχών για Συστήματα Πολικών Μορίων: Καθάρια Συστατικά και Πολυσυστατικά Μίγματα», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, Μάιος 2007.

**Χερουβείμ, Μαρία**. «Μελέτη της σχέσεως μεταξύ κινητικής εισροφήσεως νερού και κινητικής συμπεριφοράς προτύπων μονολιθικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης» Τμήμα Χημείας ΕΚΠΑ, Μάρτιος 2007.

**Σούλας, Δημήτριος**. «Χαρακτηρισμός και μελέτη κινητικής συμπεριφοράς πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Σεπτέμβριος 2007.

**Χατζηβασιλόγλου, Ευαγγελία**. «Σύνθεση και χαρακτηρισμός νέων συμπλόκων του Ρουθηνίου με αζωαρωματικές ενώσεις. Εφαρμογές σε ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες», Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ, Ιούλιος 2007.

### **Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης**

**Διονύσιος Χριστοδουλέας**. «Ανάπτυξη και επικύρωση χημειοφωταυγειομετρικής μεθόδου εκτίμησης αντιοξειδωτικής ικανότητας εδώδιμων ελαίων», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ιούνιος 2007.

**Κακάτσου, Παναγιώτα**. «Ανάπτυξη και βελτιστοποίηση πολυμερικών ηλεκτρολυτών για ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Νοέμβριος 2007.

**Κύρκου, Αθηνά**. «Βελτιστοποίηση σύνθεσης, χαρακτηρισμός και έλεγχος φωτοκαταλυτικής και αντιβακτηριακής δράσης νανοσφαιρών τιτανίας», Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ), ΕΜΠ, 2007.

**Χασιώτη Ειρήνη**. «Παρασκευή, χαρακτηρισμός και ιδιότητες φωτοχρωμικών υμενίων βασισμένων στις πολυοξομεταλλικές ενώσεις και την πολυαιθυλιμίνη», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2007.

**Βαγγέλη, Όλγα**. «Σύνθεση εναντιομερικά καθαρού (S)-7-υδροξυ-3-αμινο-χρωμανίου», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ιούνιος 2007.

### **Σεμινάρια Μεταπτυχιακών Φοιτητών**

Στα πλαίσια των σεμιναρίων του Ινστιτούτου, νέοι διδάκτορες, οι οποίοι εκπόνησαν τη διδακτορική τους διατριβή στο Ινστιτούτο Φυσιχοχημείας, παρουσίασαν τις ερευνητικές τους εργασίες. Πιο συγκεκριμένα, έγιναν παρουσιάσεις από τους: Δ. Σούλα (5/10), Ε. Χατζηβασιλόγλου (19/10) και Ε. Καρακατσάνη (30/11).



## Κατάλογος Σεμιναρίων Ινστιτούτου Φυσικοχημείας 2007

α/α	Ημερομηνία	Ομιλητής	Τίτλος
1	29 / 01 / 2007 12:00	Δρ. Τ. Μπουλίκας, CEO, "Regulon and Dendrigen"	Regulon and Dendrigen: Research, Clinical and Business Development
2	13 / 02 / 2007 12:00	Καθηγ. Πασχάλης Αλεξανδρίδης, Department of Chemical and Biological Engineering, University at Buffalo - The State University of New York	Self-Assembly: Fundamentals and Applications in Structured Fluids and Nanomaterials Synthesis
3	06 / 06 / 2007 12:00	Prof. Giulio C. Sarti, Department of Chemical, Mining and Environmental Engineering, School of Engineering, University of Bologna	Predictive Thermodynamic Models for the Solubility of Gases and Vapours in Glassy Polymers, Blends and Composites
4	15 / 06 / 2007 12:00	Prof. Antony N. Beris, Department of Chemical Engineering, University of Delaware, Newark	Multiscale modeling of Strong Extensional Flows of Polymer Melts
5	25 / 06 / 2007 11:00	Prof. Dionysios D. Dionysiou, Department of Civil & Environmental Engineering, University of Cincinnati	Advanced Oxidation Technologies and Nanotechnologies for Water Treatment: Fundamentals, Development and Application in the Destruction of Cyanobacterial Toxins
6	10/09/2007	Constantino Tsallis	<b>Nonextensive Statistical Mechanics – An approach to Complexity</b>
7	28 / 09 / 2007 12:00	Δρ. Θωμάς Στεργιόπουλος, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας	Φασματοσκοπικός Χαρακτηρισμός Φωτοηλεκτροχημικών Ηλιακών Κυψελίδων
8	05 / 10 / 2007 12:00	Δρ. Δημήτρης Σούλας, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας	Χαρακτηρισμός και μελέτη κινητικής συμπεριφοράς πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης
9	12 / 10 / 2007 12:00	Dr. Dieter Hofmann, Institute of Polymer Research, GKSS Research Center, Teltow, Germany	Molecular Modelling, a tool for the knowledge-based design of polymer-based materials with tailored transport/interface properties
10	19 / 10 / 2007 12:00	Δρ. Ευαγγελία Χατζηβασιλογλου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας	Σύνθεση και Χαρακτηρισμός Νέων Συμπλόκων του Ρουθηνίου με Ετεροκυκλικές Ενώσεις. Εφαρμογές σε Ευαισθητοποιημένες Ηλιακές Κυψελίδες
11	05 / 11 / 2007 14:00	Καθηγ. Μανώλης Φλωράτος, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών	Aspects of Quantum Complexity Theory

	09 / 11 / 2007 12:00	Καθηγ. Milan M. Jaksic, Faculty of Agriculture, University of Belgrade, Belgrade, Serbia	Interactive Supported Electrocatalysts and Spillover Effect in Electrocatalysis for Hydrogen and Oxygen Electrode Reactions
13	19/11/20078	Prof. Giorgos Kalosakas	<b>Nonlinear bubble openings in DNA</b>
14	30 / 11 / 2007 12:00	Δρ. Ειρήνη Καρακατσάνη Ινστιτούτο Φυσικοχημείας	Ανάπτυξη και Αξιολόγηση ενός Θερμοδυναμικού Μοντέλου Βασισμένου στη Θεωρία Διαταραχών για Συστήματα Πολικών Μορίων: Καθαρά Συστατικά και Πολυσυστατικά Μίγματα
15	03 / 12 / 2007 12:30	Prof. Gregoire Nicolis, Universite Libre de Bruxelles & Center for Nonlinear Phenomena and Complex Systems	Nonlinear dynamics and self-organization in the presence of metastable phases
16	03 / 12 / 2007 14:00	Καθηγ. John Nicolis, Πανεπιστήμιο Πατρών	Chaotic Dynamics in Biological Information Processing

Τα σεμινάρια γίνονται στο αμφιθέατρο του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος».

Πληροφορίες: Ε. Μαυρίδου (3793), Θ. Στεριώτης (3614), Ι. Λαζάρου (3623).