

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 βουκλειικών 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.

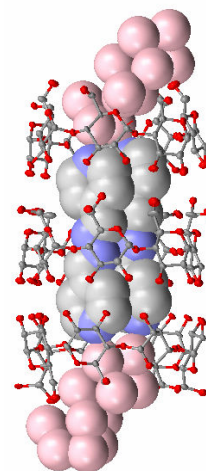
2. Σύνθεση και διερεύνηση των δυνατοτήτων νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για βιοιατρικές εφαρμογές. Τα παράγωγα αυτά:

(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 μή-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 Χατζουδης

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)- γ -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 β -Cyclodextrin enclosing an unusual organization of guest: The inclusion complex β -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 β -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 β -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 guanidinoalkylamino 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" 3rd Workshop, 28-31 March **2007**, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.
2. Paulidou, A.; Mavridis, I. M. "X-ray structure of the inclusion complex between β -cyclodextrin and tolbutamide", in COST D31, WG 0001-04, "Organising Non-Covalent Chemical Systems with Selected Functions" 3rd 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" 3rd 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^o 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 β -cyclodextrin and the hypoglycemic agent tolbutamide" 2^o 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^o 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^o 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^o Ελληνικό Συμπόσιο Οργανικής Σύνθεσης, από την Χημεία στην Βιολογία, στην Ιατρική και στην Επιστήμη Υλικών, 19 – 21 Απριλίου **2007**, Παν. Αθηνών.
9. Agelidou, 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^o 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 β -Cyclodextrin/4-pyridinealdazine", The 39th 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" 3rd 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" 3rd 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" 3rd 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", 3rd 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" 3rd 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 3rd 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. Κυρίσης, 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 **3rd 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. Αξιολογητής 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. Σαρειδάκης

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)

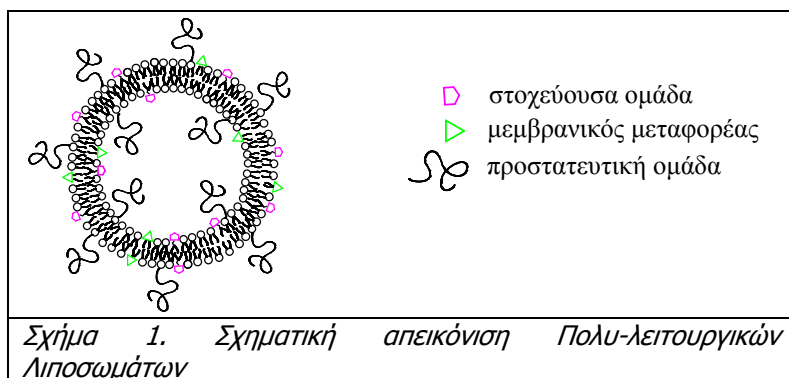
1.2 ΝΑΝΟ-ΥΛΙΚΑ ΟΡΓΑΝΩΜΕΝΗΣ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

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:

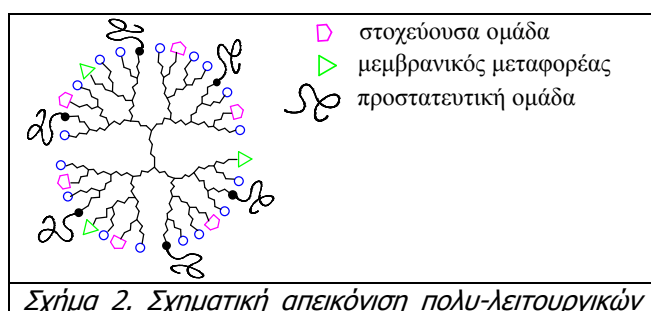
1. Πολυ-λειτουργικά Λιποσώματα ως φορείς φαρμάκων

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 διελεύσεως 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 διελεύσεως 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 δενδριτικών πολυμερών ως φορείς γονιδιακού υλικού καθώς το DNA σχηματίζει σύμπλοκα με κατάλληλα συντεθειμένα θετικά φορτισμένα δενδριτικά πολυμερή. Η μελέτη των συμπλόκων δενδριτικών 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., Theodosiou, 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", 5th 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", 4th 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", 4th 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., Theodossiου, 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 Λιπώματα 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 Λιπώματα και τα Δενδριτικά πολυμερή», Πρόγραμμα ENTER, 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 αναγνωρίσεως), 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

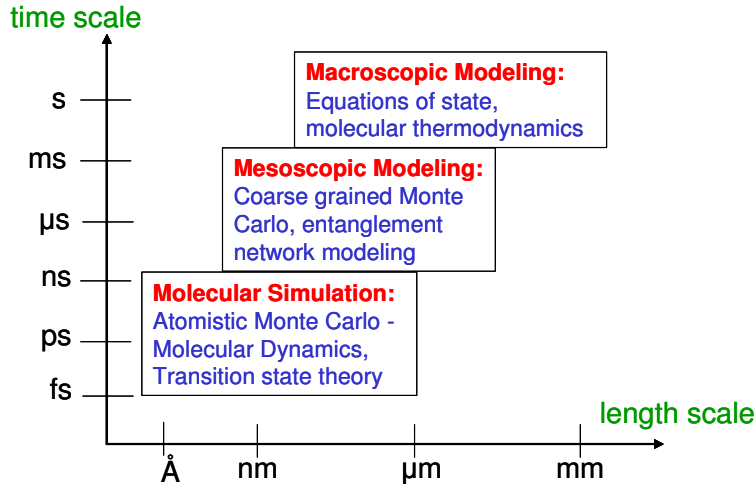
1. Κριτής σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Biomacromolecules, Biophysical Journal, Journal of the American Chemical Society, Journal of Orthopedic Research.
2. Κριτής της Society for Free Radical Biology & Medicine.
3. Αντιπρόεδρος της επιτροπής δημοσιεύσεων (Publications committee) της American Society 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. Tsivintzelis, 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. Tsivintzelis 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. Tsvintzelis, 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. Tsvintzelis, 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 CO₂ + water + [bmim]NO₃", 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. Tsvintzelis, 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 συγχρηματο-δοτείται 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(στυρενίου-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

Συνεργασία 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 Μπισσάνης, Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λείζερ, Ιδρυμα 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.

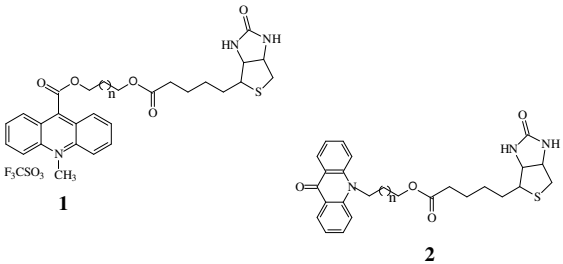
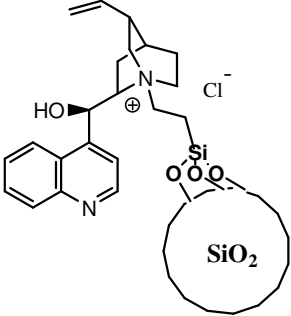
Μαριάννα Γιαννουράκου

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 διαιθυλενοτριαμινο-πενταοξικού 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 εμπορικός διαθέσιμο Magnevist ($4.34 \pm 0.27 \text{ mM}^{-1} \text{ s}^{-1}$ και $4.15 \pm 0.23 \text{ mM}^{-1} \text{ s}^{-1}$ για τα νέα παράγωγα και $3.93 \pm 0.12 \text{ mM}^{-1} \text{ s}^{-1}$ για το Magnevist). Οι νανοδομημένοι φωταυγείς καταλύτες των οξειδίων του σιδήρου εφαρμόστηκαν σε χημειοφωταυγειομετρικούς προσδιορισμούς δραστικών μορφών του οξυγόνου. Το υπεροξειδίο του υδρογόνου μπόρεσε να ανιχνευθεί σε ποσότητες μερικών micromoles ($2.08 \pm 0.16 \mu\text{moles}$). 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 εμπορικός 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>SiO₂</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 Αγιαμαρνώτη (ΠΕΠ-ΑΤΤΙΚΗΣ).

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Διονύσιος Χριστοδουλέας (Δημοέρευνα), Οριάννα 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 α-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 α-αμινοξέων σε συνθήκες μεταφοράς φάσεων, 9^ο 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. Ο. Λανιτου, Δ. Δημοτικάλη, Κ. Παπαδόπουλος, Καταλυτική ασύμμετρη σύνθεση α-αμινοξέων σε συνθήκες μεταφοράς φάσεων, 9^ο 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.

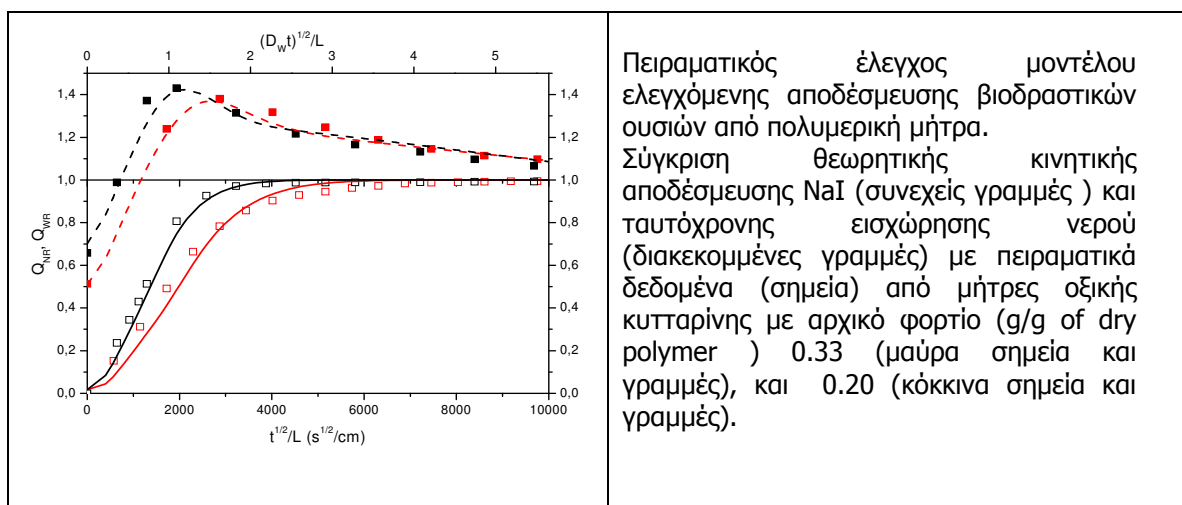
1.5 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΥΛΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

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, διαπερατοελεγκτικές 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 ωσμωτικώς 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,

κλη). 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 βασιζόμενα 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 διαμήκου 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 βασιζόμενων στην μεταβολή της χωρητικότητας.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Μερόπη 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. Pamuła, 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" 5th 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^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Θερμικής Ανάλυσης, 7-9 Δεκεμβρίου 2007, Αθήνα.

Διαλέξεις

1. Sanopoulou, M.; Papadokostaki, K. "Real and Simulated performance in matrix-controlled release systems" 2nd 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 нанοτεχνολογικών 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» ΕΠΑΝ Μέτρο

4.3, Δράση 4.3.6.1 Πρόγραμμα Διακρατικής Συνεργασίας Ελλάδα-Πολωνίας –ΓΓΕΤ
Επιστημονικός Υπεύθυνος: Μ. Σανοπούλου, 11.7 Κ€, 2006-2008.

Ερευνητική Υποδομή

Συσκευές κενού εφοδιασμένες με ηλεκτρονικούς μικροζυγούς (Cahn 2000 and ΜΚ2-Μ5 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 (ΤΜDSC), 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 Smolucjowski του Παν/μίου Jagellonian της Κρακοβίας Jagellonian University, Πολωνίας, στα πλαίσια της διακρατικής συνεργασίας Ελλάδα-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. Αργεΐτης (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 εταιρών 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.

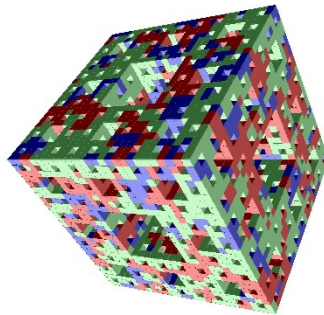
Ο Δρ. Ι. Πετρόπουλος, κατά το έτος 2007 διατέλεσε:

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 ιεραρχικής 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-ΑΤΤΙΚΗΣ).

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Θωμάς Οικονόμου (άμισθος).

Δημοσιεύσεις

1. Οικονόμου, Th., "[Tsallis, Renyi and nonextensive Gaussian entropy derived from the respective multinomial coefficients](#)", *Physica A*, **2007**, 386, 119-134.
2. Provata, A.; Οικονόμου, 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. Οικονόμου, Th., "Properties of the "non-extensive Gaussian" entropy", *Physica A*, **2007**, 381, 381 155–163.
8. Οικονόμου, 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", 20th International Conference / Summer School: NONLINEAR SCIENCE AND COMPLEXITY , 19 – 29 July 2007, Patras, Greece.
3. Οικονόμου, Th; "Tsallis, Renyi and nonextensive Gaussian entropy derived from the respective multinomial coefficients", 20th International Conference / Summer School: NONLINEAR SCIENCE AND COMPLEXITY , 19 – 29 July 2007, Patras, Greece.
4. Kouvaris, N.; Provata, A.; "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, A.; "Complex population dynamics, coexistence of oscillatory steady state and frozen pattern", poster at 20th 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-dimensional 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 14th, 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", 20th 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", 1st 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.; Université 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 Universität Berlin (Germany), 2-μηνη συνεργασία με Καθ. L. Schimansky-Geier και Καθ. I. Sokolov (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. Μπούνη (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-

γραμματική 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. Κουγιουμτζή (Πολυτεχνική Σχολή, Παν. Θεσσαλονίκης, "Δημιουργία Μορφωμάτων σε Πλέγματα Χαμηλών Διαστάσεων"), Καθ. B. Spagnolo (Univ. of Palermo, Dept of Physics, "Ecological Complex Systems). Prof. I. Sokolov 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 διδασκτόρων: Θωμά 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

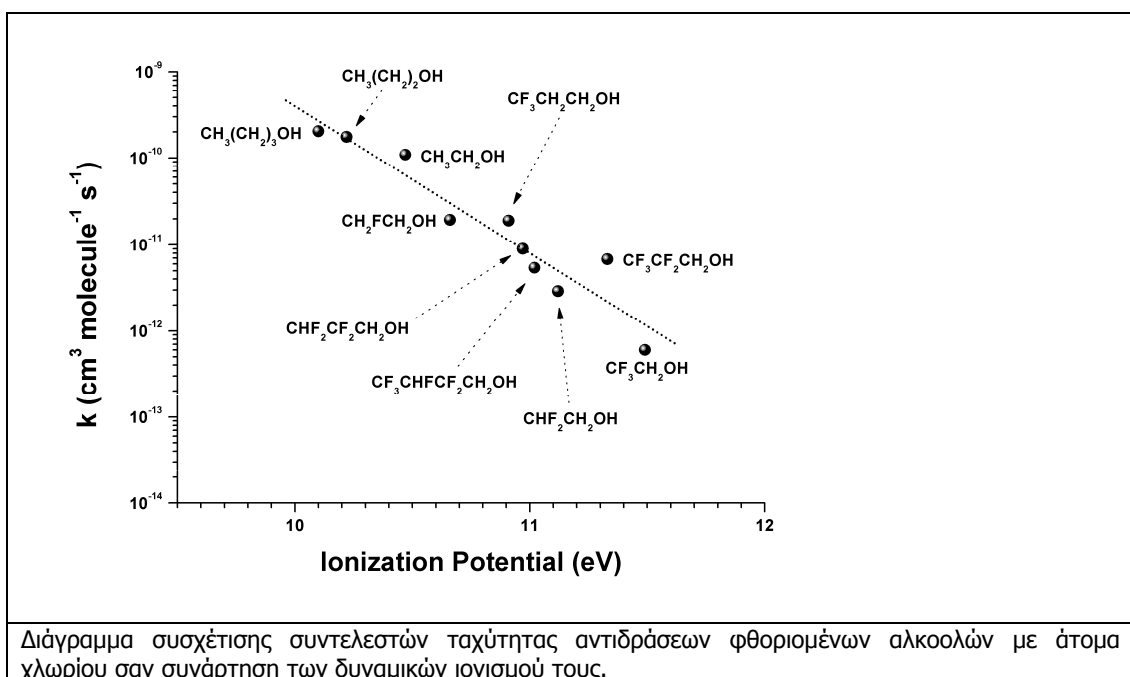
Η ερευνητική δραστηριότητα του Εργαστηρίου Μοριακής Υπολογιστικής Χημείας αφορά την μελέτη της χημικής δραστηριότητας και της τροποσφαιρικής αποικοδόμησης μορίων καθώς και την αξιόπιστη πρόβλεψη ιδιοτήτων μοριακών υλικών χρησιμοποιώντας θεωρητικές μεθόδους.

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 CH_2I_2 έναντι ατόμων χλωρίου όπως και ο μηχανισμός της οξειδωσης των ελευθέρων ριζών CH_2I και CHI_2 διελευκάνθηκε με την βοήθεια κβαντομηχανικών υπολογισμών.

Ο ρυθμός της τροποσφαιρικής αποικοδόμησης μικρών οργανικών μορίων (CH_4 , CH_3F , CH_2F_2 , CHF_3 και CH_3OH) από άτομα χλωρίου και ρίζες υδροξυλίου και η εξάρτησή 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 ML_2 της πρώτης σειράς στοιχείων μεταπτώσεως ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) με υποκαταστάτες L προσομοιάζοντας 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 ημ εμπειρικές 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 CH_2I_2 and the Oxidation Mechanism of CH_2I 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 HNO_3 and 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 HNO_3 and HO_2 with water clusters: A theoretical investigation", 2nd 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. Prosmiiti (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

