

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Πρόλογος.....	3
Ιστορικό Στόχοι και Κατευθύνσεις του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας,	
Α. Βασική Έρευνα.....	5
Β. Μεσοπρόθεσμη Έρευνα,	8
Γ. Εμπορική Αξιοποίηση Αποτελεσμάτων Έρευνας,	8
Δ. Εργαστήρια Παροχής Υπηρεσιών,	8
Ε. Μεταπτυχιακές Σπουδές.....	8
Στ. Προοπτικές.....	9
Επιστημονικές Δραστηριότητες.....	10
Οργανόγραμμα Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.....	11
Οικονομικός Απολογισμός.....	13

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ**1. Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά**

Δομική και υπερμοριακή χημεία.....	15
Νανο-υλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής.....	21
Μοριακή θερμοδυναμική και μοντελοποίηση υλικών.....	27
Φωταύγεια οργανικών ενώσεων και εφαρμογές στην αναλυτική χημεία.....	35
Φαινόμενα μεταφοράς ύλης σε πολυμερή.....	39
Στατιστική μηχανική και μη-γραμμική δυναμική.....	43

2. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια

Μεμβράνες και μικροπορώδη υλικά για περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς.....	49
Φωτοοξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση της ηλιακής ενέργειας – ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για ενεργειακές, και περιβαλλοντικές εφαρμογές.....	57
Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές διεργασίες (ηλιακή ενέργεια - περιβάλλον).....	65
Ηλεκτρονική φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε υπερμόρια και νανοδομές.....	71

3. Περιβαλλοντική Χημεία και Τεχνολογία

Ατμοσφαιρική χημεία.....	73
Ισοτοπική υδρολογία	77
Ο ρόλος των ιχνοστοιχείων στο περιβάλλον.....	79

4. Χημική Βιολογία

Σύνθεση φυσικών προϊόντων και βιοοργανική χημεία.....	83
---	----

Χημική Βιολογία φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων μορίων.....	87
--	----

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Συστημάτων.....	91
- Εργαστήριο Φασματοσκοπίας NMR.....	91
- Εργαστήριο Περιβαλλοντικής Χημείας.....	91
- Εργαστήριο Μικροσκοπίας Ατομικών Δυνάμεων.....	92
- Εργαστήριο Στοιχειακής Ανάλυσης.....	92
Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας.....	93
Εργαστήριο Περιβαλλοντικών Αναλύσεων.....	95

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ.....	99
-------------------------------------	-----------

ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ.....	103
-----------------------------------	------------

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Οι δραστηριότητες του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας καλύπτουν ευρύ φάσμα τόσο της σύγχρονης βασικής έρευνας όσο και της αναπτυξιακής. Το Ινστιτούτο συμμετέχει ή συντονίζει 2 Ευρωπαϊκά Δίκτυα Αριστείας ενώ παράλληλα συμμετέχει σε πληθώρα Ελληνικών και Ευρωπαϊκών προγραμμάτων επιδιώκοντας μεταξύ άλλων την αξιοποίηση των ερευνητικών του αποτελεσμάτων μέσω της δημιουργίας εταιρειών Έντασης Γνώσης (Spin-off). Οι ερευνητικές εργασίες, οι προερχόμενες από το Ινστιτούτο συνεχώς βελτιώνονται ποιοτικά με συνέπεια οι περισσότερες να δημοσιεύονται σε περιοδικά υψηλού βαθμού απηχήσεως και να λαμβάνουν μεγάλο αριθμό ετεροαναφορών.

Ενώ λήγει η δεύτερη πενταετής θητεία μου και με την υπερδεκαετή εμπειρία μου ως Διευθυντού του Ινστιτούτου είναι δυνατόν να εκτιμήσω ότι το Ινστιτούτο με το έμπειρο δυναμικό του, ερευνητικό, τεχνικό, διοικητικό, επιστημονικούς συνεργάτες όλων των βαθμίδων, ειδικό επιστημονικό προσωπικό αλλά και με την αναβάθμιση του εξοπλισμού του, που επιτυγχάνεται κυρίως μέσω ανταγωνιστικών προγραμμάτων, θα επιτύχει υψηλή ποιοτική αναβάθμιση σε όλο το φάσμα των δραστηριοτήτων του συμπεριλαμβανομένων των μεταπτυχιακών σπουδών. Η αναβάθμιση των τελευταίων αποτελεί βασικό στόχο μας. Η προσπάθεια για εξωτερική χρηματοδότηση είναι επιβεβλημένη και πρέπει να ενταθεί από όλους τους ερευνητές του γιατί είναι ο μόνος τρόπος να καλυφθούν τα κενά της ανεπαρκούς εσωτερικής χρηματοδότησης.

Περισσότερο από κάθε άλλη φορά πρέπει να τονισθεί η ανάγκη για ανανέωση και ενίσχυση του Ινστιτούτου με δύο ή τρία στελέχη μόνιμου ερευνητικού προσωπικού. Επιβάλλεται συγκεκριμένα η πρόσληψη νέων υψηλόβαθμων ερευνητών σε περιοχές αιχμής, για να διατηρήσει το Ινστιτούτο την θέση του και την ανταγωνιστικότητα τόσο στην Ελλάδα όσο και διεθνώς.

Δρ. Κ. Παλαιός

Δ/ντής Ινστ. Φυσικοχημείας

15 Ιανουαρίου 2007

Ινστιτούτο Φυσικοχημείας

Ιστορικό, Στόχοι και Κατευθύνσεις του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας ιδρύθηκε το 1987 με το Νόμο 1514/85 και στηρίχθηκε στο ερευνητικό δυναμικό και την υποδομή του Τμήματος Χημείας του τότε Κέντρου Πυρηνικών Ερευνών "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ". Ήταν ένα εκ των πρώτων τομέων του Δημοκρίτου και δημιούργησε παράδοση τόσο στην Χημική Έρευνα όσο και στις μεταπτυχιακές σπουδές στην Ελλάδα. Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας συνεχίζει αυτή την παράδοση και επειδή είναι δέκτης των σημερινών κατευθύνσεων και τάσεων της χημικής Έρευνας και Τεχνολογίας προσαρμόζει συνεχώς τις ερευνητικές του δραστηριότητες ώστε να καλύπτει περιοχές της σύγχρονης Χημικής Επιστήμης και Τεχνολογίας. Κατά συνέπεια οι στόχοι του Ινστιτούτου εστιάζονται στην διεξαγωγή υψηλής στάθμης βασικής και τεχνολογικής έρευνας στις περιοχές των προηγμένων λειτουργικών υλικών, της περιβαλλοντικής χημείας και τεχνολογίας, της ισοτοπικής υδρολογίας, της χημικής βιολογίας, των φιλικών προς το περιβάλλον τεχνολογιών, της ενεργείας, των φαρμάκων και φορέων φαρμάκων, των φυσικών προϊόντων, των καταλυτών, των τεχνικών έγκαιρης και αποτελεσματικής διάγνωσης. Γίνεται μάλιστα επιτυχής προσπάθεια κατά την επιδίωξη της εξωτερικής χρηματοδότησης, να μην θυσιάζεται η υψηλή ερευνητική στάθμη με ευκαιριακές ενασχολήσεις του ερευνητικού δυναμικού του Ινστιτούτου. Σ' αυτή την προσπάθεια ανταγωνιστικό πλεονέκτημα του Ινστιτούτου είναι η συγκέντρωση μέσων και εμπειρίας για την διεξαγωγή των ερευνητικών του προγραμμάτων.

Η επιτυχής πορεία του Ινστιτούτου αποδεικνύεται από τον μεγάλο αριθμό δημοσιεύσεων σε διεθνή περιοδικά υψηλού βαθμού απηχήσεως και τον εξαιρετικά μεγάλο αριθμό αναφορών και ετερο-αναφορών όπως εύγλωττα φαίνεται στον παρακάτω Πίνακα. Επίσης το Ινστιτούτο συμμετέχει ή συντονίζει 2 Ευρωπαϊκά Δίκτυα Αριστείας, έχει επιτύχει σημαντική εξωτερική χρηματοδότηση ενώ παράλληλα επιδιώκει και επιτυγχάνει την αξιοποίηση των ερευνητικών του αποτελεσμάτων μέσω της δημιουργίας εταιρειών Spin-offs

A. Βασική Έρευνα

Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας μέσω των τεσσάρων ερευνητικών του προγραμμάτων και των υπαγομένων σ' αυτά έργων δραστηριοποιείται στις ακόλουθες ερευνητικές περιοχές:

1. Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά

- **Δομική και υπερμοριακή χημεία**

Σύνθεση, μοριακή δομή, διαμοριακές αλληλεπιδράσεις και οργάνωση υπερμοριακών συστημάτων.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Ειρήνη Μαυρίδου

- **Νανο-υλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής**

Νανοϋλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής: Υγροί κρύσταλλοι, λιποσώματα, δενδριμερή.

Φορείς φαρμάκων με βάση τα λιποσώματα ή τα δενδριμερή.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Κων/νος Παλαιός

- **Μοριακή θερμοδυναμική και μοντελοποίηση υλικών**

Μοριακή μοντελοποίηση δομής και φυσικών ιδιοτήτων προηγμένων υλικών

Ανάπτυξη εξειδικευμένου λογισμικού για προσομοίωση φυσικοχημικών συστημάτων.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Ιωάννης Οικονόμου

- **Φωταύγεια οργανικών ενώσεων και εφαρμογές στην αναλυτική χημεία**

Ανάπτυξη χημειοφωταυγών και φθορίζοντων ανιχνευτών για την ανάλυση βιομορίων.

Αντιοξειδωτική δράση φυσικών προϊόντων.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος

- **Φαινόμενα μεταφοράς ύλης σε πολυμερή**

Διεργασίες διαχωρισμού αερίων μιγμάτων με μεμβράνες.

Πολυμερικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Μερόπη Σανοπούλου

- **Στατιστική μηχανική και μη-γραμμική δυναμική**

Μη-γραμμική δυναμική, θερμοδυναμικές ιδιότητες και σχεδιασμός πολυμερικών υλικών.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Αστέρω Προβατά

2. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια

- **Μεμβράνες και μικροπορώδη υλικά για περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς**

Ανάπτυξη και τροποποίηση πολυμερικών και ανοργάνων μεμβρανών και νανοπορωδών υλικών –

Εφαρμογές σε περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς.

Υπεύθ. Έργου: Δρ. Νικόλαος Κανελλόπουλος

- **Φωτοοξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση της ηλιακής ενέργειας – ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για ενεργειακές, και περιβαλλοντικές εφαρμογές**
*Φυλλόμορφα πορώδη υλικά για αναλυτικές και περιβαλλοντικές εφαρμογές.
 Φωτο-οξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση ηλιακής ενέργειας.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας*
- **Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές διεργασίες (ηλιακή ενέργεια - περιβάλλον)**
*Ανάπτυξη νέων υλικών για ενεργειακές και περιβαλλοντικές εφαρμογές.
 Υλικά για καθαρισμό του νερού.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Αναστασία Χισκιά*
- **Ηλεκτρονική φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε υπερμόρια και νανοδομές**
*Παρασκευή και χαρακτηρισμός μακρομοριακών και υπερμοριακών νανοδομών.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Γεώργιος Πιστόλης*

3. Περιβαλλοντική Χημεία και Τεχνολογία

- **Ατμοσφαιρική χημεία**
*Αποτίμηση ιδιοτήτων και σχεδίαση υλικών φιλικών προς το περιβάλλον.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Ιωάννης Λαζάρου*
- **Ισοτοπική υδρολογία**
*Μελέτη σταθερών και ραδιενεργών στοιχείων στο περιβάλλον.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Νικόλαος Ζουριδάκης*
- **Ο ρόλος των ιχνοστοιχείων στο περιβάλλον**
*Εύρεση και ταυτοποίηση των πηγών εκπομπής τοξικών ιχνοστοιχείων στην ατμόσφαιρα.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Κλάους Όξενκιουν*

4. Χημική Βιολογία

- **Σύνθεση φυσικών προϊόντων και βιοοργανική χημεία**
*Σύνθεση και μελέτη βιοδραστικών οργανικών φυσικών προϊόντων και αναλόγων τους.
 Παρασκευή οργανικών μορίων για τεχνολογικές εφαρμογές στην μικροηλεκτρονική και νανοτεχνολογία.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός*
- **Χημική Βιολογία φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων μορίων**
*Μελέτη βιολογικών συστημάτων και διεργασιών μέσω της αλληλεπίδρασής τους με συνθετικά οργανικά φυσικά προϊόντα και ανάλογά τους. Βελτιστοποίηση φαρμακολογικών ιδιοτήτων και δραστηριότητας.
 Υπεύθ. Έργου: Δρ. Διονύσιος Βουρλούμης*

B. Μεσοπρόθεσμη Έρευνα

Το σύνολον σχεδόν των έργων του Ινστιτούτου, όπως περιγράφονται παραπάνω, επεκτείνει την δραστηριότητα του σε επιλεγμένους τομείς μεσοπρόθεσμης έρευνας αποβλέποντας στην δημιουργία προϋποθέσεων για την μετάβαση, σε επόμενο στάδιο, δηλαδή στην εμπορική εκμετάλλευση επιλεγμένων προϊόντων και υπηρεσιών. Η έρευνα αυτή διεξάγεται σε συνεργασία με Ελληνικές και Ευρωπαϊκές βιομηχανίες.

Γ. Εμπορική Αξιοποίηση Αποτελεσμάτων Έρευνας

Για την αξιοποίηση των αποτελεσμάτων της μεσοπρόθεσμης κατά κύριο λόγο έρευνας αρκετά εργαστήρια του Ινστιτούτου εξετέλεσαν επιτυχώς προγράμματα Πράξε Α για την δημιουργία σε δεύτερη φάση νέων επιχειρήσεων εντάσεως γνώσεως (**Spin-offs**). Ένα μάλιστα εργαστήριο μετά την επιτυχή διεξαγωγή προγράμματος Πράξε Β ίδρυσε σε συνεργασία με την εταιρεία REGULON SA την spin-off εταιρεία DENDRIGEN SA..

Δ. Εργαστήρια Παροχής Υπηρεσιών

Τα εργαστήρια Παροχής Υπηρεσιών του Ινστιτούτου και συγκεκριμένα το **Εργαστήριο παρασκευής και χαρακτηρισμού μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων**, το **Εργαστήριο Μικροσκοπίας ατομικών Δυνάμεων**, το **Εργαστήριο μελέτης ατμοσφαιρικών ρυπαντών**, το **Εργαστήριο περιβαλλοντικής χημείας**, το **Εργαστήριο ισοτοπικής υδρολογίας** και το **Εργαστήριο Ατμοσφαιρικών Ρυπαντών**, παρέχουν υπηρεσίες τόσο στο Ινστιτούτο όσο και σε εξωτερικούς φορείς.

Ε. Μεταπτυχιακές Σπουδές

Οι μεταπτυχιακές σπουδές αποτελούν επίσης στόχο του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας. Τα τελευταία τριάντα χρόνια έχουν εκπονηθεί στα Εργαστήρια του Ινστιτούτου περισσότερες από 130 διδακτορικές διατριβές, σε διαφορετικές περιοχές της Χημείας, υπό την επίβλεψη των ερευνητών του Ινστιτούτου. Φέτος, για πρώτη φορά, έγινε απονομή βραβείου για την καλλίτερη διατριβή του Ινστιτούτου. Τα τελευταία χρόνια οι μεταπτυχιακές σπουδές του Ινστιτούτου, πέραν της ενισχύσεως από τον Κρατικό προϋπολογισμό, ενισχύονται και ενθαρρύνονται από συνεργασίες με Ακαδημαϊκούς φορείς του Εσωτερικού και Εξωτερικού αλλά και με Ελληνικές και Ευρωπαϊκές Βιομηχανίες.

Στ. Προοπτικές

Οι προοπτικές του Ινστιτούτου αποβλέπουν στην επιτυχή διεξαγωγή των παραπάνω δραστηριοτήτων που καλύπτουν ευρύ φάσμα βασικής, προσανατολισμένης και τεχνολογικής έρευνας. Μ' αυτή τη στρατηγική, το Ινστιτούτο στηριζόμενο στο αξιόλογο ερευνητικό δυναμικό του είναι βέβαιο ότι θα εξακολουθήσει να έχει ταχείς ρυθμούς ανάπτυξης επιτυγχάνοντας τους στόχους του. Πάντοτε επιδιώκεται προσαρμογή των προτεραιοτήτων του με γνώμονα τις εκάστοτε επικρατούσες ερευνητικές, τεχνολογικές ακόμα δε και κοινωνικές ανάγκες. Για την επίτευξη των στόχων του Ινστιτούτου θα απαιτηθούν την προσεχή πενταετία τα ακόλουθα:

Απαιτήσεις σε προσωπικό: Θέσεις 10 νέων ερευνητών, διατήρηση των 6 θέσεων μεταδιδακτορικών ερευνητών, αύξηση των 17 θέσεων υποτρόφων σε 20. Πλήρωση θέσεως ενός μόνιμου υαλουργού και 2 θέσεις τεχνικών. Επίσης 12-15 θέσεις μεταδιδακτορικών συνεργατών που θα προέλθουν από προγράμματα.

Ύψος Χρηματοδότησεως: Η προβλεπόμενη χρηματοδότηση για την προσεχή πενταετία για την βασική έρευνα, την μεσοπρόθεσμη και την εμπορική εκμετάλλευση προβλέπεται να ανέλθει στο ποσό των 7.5 εκ Ευρώ.

Διευθυντής : Δρ. Κωνσταντίνος Μ. Παλαιός

Τηλ. 210 6503666

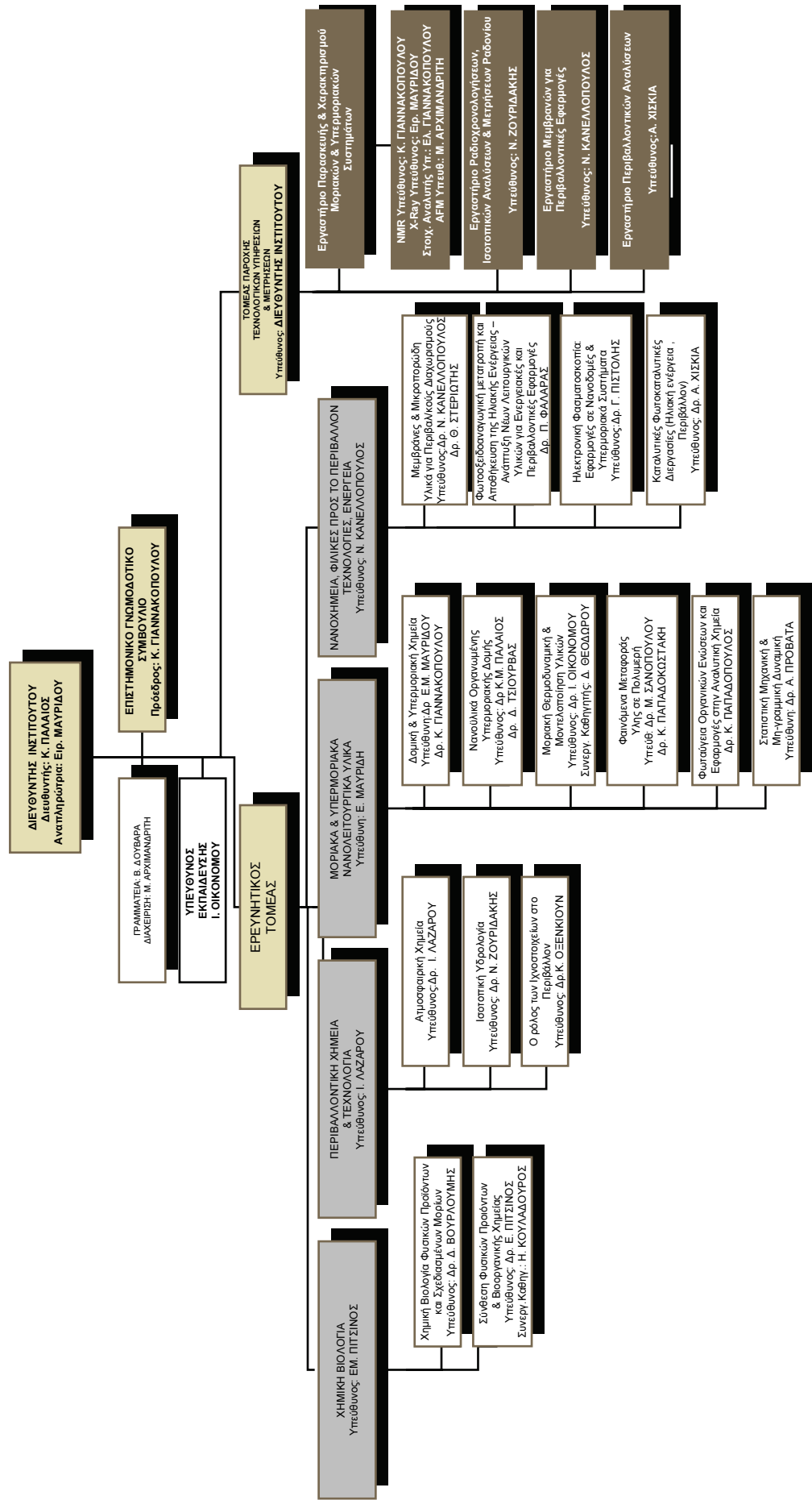
FAX: 210 6511766

e-mail: paleos@chem.demokritos.gr

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ 2006

Άρθρα σε περιοδικά με κριτές (υπό δημοσίευση)	69+(26)
Δημοσιεύσεις - Ανακοινώσεις σε Διεθνή Συνέδρια	51
Δημοσιεύσεις - Ανακοινώσεις σε Ελληνικά Συνέδρια	39
Διαλέξεις	45
Διαλέξεις κατόπιν προσκλήσεως	7
Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας	5
Διδακτορικές Διατριβές	10
Μεταπτυχιακά Διπλώματα Εξειδίκευσης	7

ΟΡΓΑΝΟΓΡΑΜΜΑ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ



III. ΟΙΚΟΝΟΜΙΚΑ ΣΥΝΟΠΤΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ 2006

ΕΡΓΑ	ΕΙΣΡΟΕΣ σε Ευρώ		
	Από Παροχή Υπηρεσιών	Από Ερευνητικά Προγράμματα	Χρηματοδότηση από το Ινστιτούτο
Δομική & Υπερμοριακή Χημεία (Ειρ. Μαυρίδου)		123.502,00	4.400,00
Νανο-υλικά Οργανωμένης Υπερμοριακής Δομής (Κ. Παλαιός)		73.000,00	4.400,00
Μοριακή Θερμοδυναμική και Μοντελοποίηση Υλικών (Ι. Οικονόμου)		97.884,00	3.000,00
Φωταύγεια Οργανικών Ενώσεων και Εφαρμογές στην Αναλυτική Χημεία (Κ. Παπαδόπουλος)		9.380,00	3.700,00
Φαινόμενα Μεταφοράς Ύλης σε Πολυμερή (Μ. Σανοπούλου)		32.681,00	4.400,00
Στατιστική Μηχανική Και Μη - γραμμική Δυναμική (Α. Προβατά)		---	3.000,00
Μεμβράνες και Μικροπορώδη Υλικά για Περιβαλλοντικούς Διαχωρισμούς (Ν. Κανελλόπουλος)		1.107.449,00	4.400,00
Φωτοοξειδοαναγωγική Μετατροπή και Αποθήκευση της Ηλιακής Ενέργειας – Ανάπτυξη Νέων Λειτουργικών Υλικών για Ενεργειακές και Περιβαλλοντικές Εφαρμογές (Π. Φαλάρας)		127.067,00	3.700,00
Καταλυτικές – Φωτοκαταλυτικές Διεργασίες (Ηλιακή Ενέργεια – Περιβάλλον) (Α. Χισκιά)	2.857,00	8.991,00	3.700,00
Εφαρμογές Ηλεκτρονικής Φασματοσκοπίας: Εφαρμογές στα Υπερμόρια και στις Νανοδομές (Γ. Πιστόλης)		---	3.000,00
Ατμοσφαιρική Χημεία (Ι. Λαζάρου)		---	3.000,00
Ισοτοπική Υδρολογία (Ν. Ζουριδάκης)	45.000	2.917	3.700,00
Ο Ρόλος των Ιχνοστοιχείων στο Περιβάλλον (Κ. Οξενκιουν)		---	3.000,00

Σύνθεση Φυσικών Προϊόντων & Βιοοργανική Χημεία (Εμμ. Πιτσινός)		---	3.700,00
Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων (Δ. Βουρλούμης)		---	4.100,00

<i>ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ</i> (Διοίκηση)		Έσοδα	Έξοδα
	Τακτικός Προϋπολογισμός	≈ 5.000,00 (Επιπλα Γραφείων)	≈ 5.000,00 (Επιπλα Γραφείων)
	Υποστήριξη Φυσικοχημείας (κωδ.:462)	42.482,64	50.757,22

1. Μοριακά & Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά



ΕΡΓΟ: ΔΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

STRUCTURAL AND SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

Προσωπικό

Δρ Ειρ. Μουστακαλή-Μαυρίδου, Ερευνητής Α, Υπεύθυνος έργου

Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου, Ερευνητής Α

Δρ. Ε. Χατζούδης, Επίτιμος Ερευνητής

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες:

Δρ. D. Maffeo, Ευρωπαϊκό πρόγραμμα “TASNANO”.

Δρ. Α. Παυλίδου, Συνεργαζόμενος ερευνητής με προσόντα Δ’

Δρ. Ε. Σαριδάκης, Εξωτερική χρηματοδότηση

Μεταπτυχιακοί Φοιτητές:

Χ. Αγγελίδου, MSc Παν. Αθηνών 2006, υποψήφια διδάκτωρ Παν. Αθηνών, υπότροφος «Δ»

L. Kyllonen, υποψήφιος διδάκτωρ, University of Birmingham, UK, Marie Curie RTN program, “UNINANOCUPS”

Μ. Λαμπροπούλου, υποψήφια διδάκτωρ, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών; ΠΕΝΕΔ 2006-2008

N. Μούρτζης, PhD Παν. Αθηνών, (Άνοιξη 2006), μέχρι τον Μάιο του 2006, άμισθος

Σ. Χατζηευθυμίου, MSc Παν. Αθηνών 2004, υποψήφιος διδάκτωρ, Πανεπιστήμιο Αθηνών, υπότροφος «Δ» από κοινού με τον Δρ Ι. Λαζάρου.

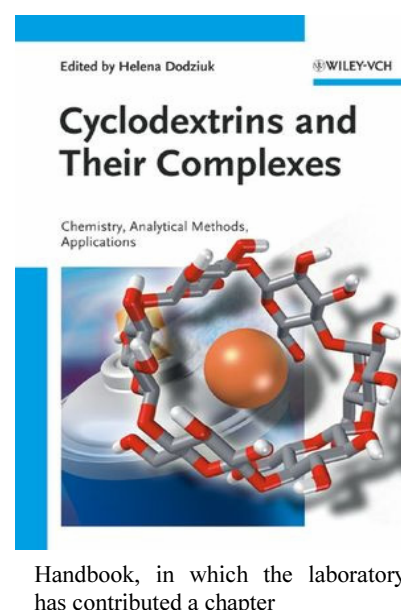
Αντικείμενο Έργου

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 και/ή στην στερεά κατάσταση με κρυσταλλογραφία ακτίνων-X. Κατ’ αυτόν τον τρόπο κατανοούνται διαδικασίες όπως της μοριακής αναγνώρισης, των μη-οποιοπολικών αλληλεπιδράσεων, της εναντιοεκλεκτικότητας, καθώς και δυναμικές διεργασίες όπου είναι δυνατόν). Δυνατές εφαρμογές περιλαμβάνουν επιλεκτική σύνδεση του ξενιζομένου μορίου, ελεγχόμενη αποδέσμευση και φαρμακευτικά έκδοχα.

2. *Σύνθεση νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών* τα οποία :

(α) συμπλέκονται με μέταλλα ή ιόντα (β) συνδέονται μή-ομοιοπολικά μεταξύ τους (γ) εγκλωβίζουν μικρά μόρια



(δ) συνδέονται με βιομόρια (ε) διαπερνούν τις κυτταρικές μεμβράνες
(στ) εναποτίθενται σε επιφάνειες.

3. *Μελέτη ιδιοτήτων των νέων παραγώγων κυκλοδεξτρινών*: διερεύνηση των δυνατοτήτων τους ως ξενιστές, αλληλεπιδράσεις με βιομόρια, μέταλλα ή κατάλληλες επιφάνειες για εφαρμογές στη νανοτεχνολογία.

4. *Κρυσταλλογραφία Μακρομορίων*. (α) Προσδιορισμός της δομής φυσικών και μεταλλαγμένων μελών της νέας οικογένειας Φερρεδοξινών από επιλεγμένα παθογόνα βακτήρια, (*Escherichia coli*, *Helicobacter pylori* και *Pseudomonas aeruginosa*), οι οποίες έχουν πολύ χαμηλά δυναμικά οξειδοαναγωγής και διαφορετικά μεταξύ των δύο πλειάδων τους. (β) Προσδιορισμός δομής συμπλόκων DNA και RNA και τροποποιημένων κυκλοδεξτρινών.

Objectives

The activities of the laboratory involve the determination of structure and intermolecular interactions in supramolecular systems comprised of cyclodextrins as well as of proteins and nucleic acids. Specifically, the areas of research are:

1. *Host-guest systems*. We study the inclusion of biologically active molecules and model compounds in the CD cavity and determine the structure and detailed host-guest interactions using NMR in aqueous solutions and X-ray crystallography in the crystalline state. Thus we gain insight in molecular recognition, self-assembly, non-bonding interactions, chiral discrimination and dynamics (when possible). Besides the fundamental understanding, applications such as controlled release, specific binding and drug formulations are of interest.

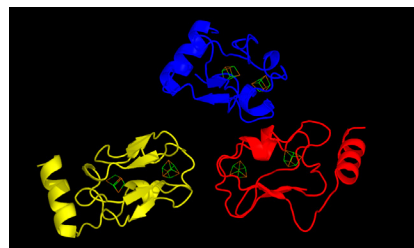
2. *Synthesis of novel, functional cyclodextrin derivatives*. Synthesis of derivatives that (a) bind to metals and/or ions (b) bind to each other (c) bind to biomolecules (d) bind small molecules (e) penetrate cells (f) attach onto surfaces.

3. *Study of properties of the new synthesized hosts*. Exploration of guest encapsulating ability using bioactive guests, exploration of interaction with biomolecules, metals and surface binding properties for nanotechnological applications.

(c) *Macromolecular Crystallography*.

(a) Structure determination of natural and mutated members of the new family of ferredoxins from selected pathogenic bacteria (*Escherichia coli*, *Helicobacter pylori* και *Pseudomonas aeruginosa*). The ferredoxins carry two [4Fe-4S] clusters with low and widely different reduction potentials (−460 and −650 mV).

(b) Structure determination of complexes of DNA and RNA with modified cyclodextrins.



The trimer of *E. Coli* Ferredoxin

Δημοσιεύσεις

1. Zou, P.; Pinotsis, N.; Lange, S.; Song, Y-H.; Popov, A.; Mavridis, I.M.; Mayans, O. M.; Gautel, M.; Wilmanns M. "Palindromic assembly of the giant muscle protein titin in the sarcomeric Z-disk", *Nature*, **2006**, 439, 225-228.
2. Maffeo, D.; Leondiadis, L.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou K. "Positive Effect of Natural and Negatively Charged Cyclodextrins on the Stabilization of Penicillins towards β -Lactamase Degradation due to Inclusion and External Guest-Host Association. An NMR and MS Study", *Org. Biomol. Chem.*, **2006**, 4 (7), 1297-1304.
3. Giastas, P.; Pinotsis, N.; Efthymiou, G.; Wilmanns, M.; Kyritsis, P.; Moulis, J- M.; Mavridis I. M. "The structure of the 2[4Fe-4S] ferredoxin from *Pseudomonas aeruginosa* at 1.32 Å resolution. Comparison with other high resolution structures of ferredoxins and contributing structural features to reduction potential values", *J. Biol. Inorg. Chem.* **2006**, 11, 445-458.
4. Chatziefthimiou, S., Lazarou, Y. G., Hadjoudis, E., Dziembowska T., Mavridis I. M. "Stable cis-Keto Forms of Salicylaldehyde Schiff Bases:Structural and Theoretical Aspects", *J. Phys Chem.* **2006**, 110, 23701-23709.
5. De Luca, S., Saviano, M., Lassiani, L., Yannakopoulou K, Stefanidou, P., Aloj, L., Morelli, G., Varnavas, A. "Anthranilic acid based CCK1 receptor antagonists and CCK-8 have a common step in their "Receptor desmodynamic processes" *J. Med. Chem.* **2006**, 49 (8), 2456-2462.
6. Hotze, A. C. G., Faiz J. A, Mourtzis, N., Pascu G. I., Webber, P. R. A., Clarkson, G. J., Yannakopoulou, K., Pikramenou, Z., Hannon, M. J. "Far-red luminescent ruthenium pyridylimine complexes; building blocks for multinuclear arrays", *Dalton Trans* **2006**, 24, 3025-3034.
7. Douvas, A. M., Van Roey, F., Goethals, M.; Papadokostaki, K., Yannakopoulou, K., Niakoula, D., Gogolides, E., Argitis, P. "Partially Fluorinated, POSS-functionalized (meth)acrylate Resists for 193nm-bilayer Lithography". *Chem. Mater.*, **2006**, 18, 4040-4048.
8. Stolyarova, S., Saridakis, E., Chayen, N.E., Nemirovsky, Y. " A model for enhanced nucleation of protein crystals on a fractal porous substrate", *Biophysical J.*, **2006**, 91, 3857-3863.
9. Karathanos, V. T., Mourtzinou, I., Yannakopoulou, K. Andrikopoulos, K. N. K. "Study of the solubility, antioxidant activity and structure of inclusion complex of vanillin with β -cyclodextrin", *Food Chemistry*, in press.
10. "Synthesis and characterization of per(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins and studies of their effect on DNA", C. Aggelidou, N. Mourtzis, K. Eliadou, V. Sophianopoulou, I. M. Mavridis, K. Yannakopoulou, *Org. Biomol. Chem.*, in press.
11. Hadjoudis, E., Chatziefthimiou, S. D, Mavridis, I. M. "Anils: Photochromism by H-transfer", *Current Org. Chem*, invited review. In press..

Κεφάλαια Βιβλίων

Yannakopoulou, K., Mavridis I. M. “Rotaxane and Catenane Structures Involving Cyclodextrins”. Invited Chapter in the , H. Dodziuk, Ed., ISBN 3-527-31280-3 - Wiley-VCH, Weinheim, May **2006**, pp. 356-367.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Giastas, P., Pinotsis, N., Efthymiou, G., Wilmanns, M., Moulis, J-M., Kyritsis, P., Mavridis, I. M. “The structure of the 2[4Fe-4S]ferredoxin from *Pseudomonas aeruginosa* at 1.32 Å resolution” 3rd Conference of the Hellenic Crystallographic Association, Patras, Sept 22-24, **2006**. προσκεκλημένη ομιλία.
2. Chatziefthimiou, S. D., Mavridis, I. M. “Crystal structure of the γ -cyclodextrin/1,4-diphenylbutadiyne inclusion complex”, 3rd Conference of the Hellenic Crystallographic Association, Patras, Sept 22-24, **2006**.
3. Paulidou, A., Yannakopoulou, K., Mavridis, I. M. “Crystal structure determination of octakis(6-bromo-6-deoxy)- γ -cyclodextrin”, 3rd Conference of the Hellenic Crystallographic Association, Patras, Sept 22-24, **2006**.
4. Aggelidou, C., Mavridis, I.M., Yannakopoulou, K. “Study of the interaction of per(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins with nucleotides and nucleosides” 13th International Cyclodextrin Symposium CD2006, Torino, Italy, May 14th-17th **2006**.
5. Maffeo, D., Leondiades, L., Mavridis, I.M., Yannakopoulou, K., “Stabilization of penicillins towards β -lactamase degradation using γ -cyclodextrin and carboxylated derivatives” 13th International Cyclodextrin Symposium CD2006, Torino, Italy, May 14th-17th **2006**.
6. Aggelidou, C., Mourtzis, N., Eliadou, K., Sophianopoulou, V., Mavridis, I. M., Yannakopoulou, K., “Synthesis and characterization of per(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins and studies of their effect on DNA» 13th International Cyclodextrin Symposium CD2006, Torino, Italy, May 14th-17th **2006**.
7. Mourtzis, N., Paravatou, M., Mavridis, I.M., Yannakopoulou, K., “Synthesis and characterization of cell penetrating cyclodextrins (cpcds)» , 13th International Cyclodextrin Symposium CD2006, Torino, Italy, May 14th-17th **2006**.

Διαλέξεις

Κ. Γιαννακοπούλου , «Μοριακή δομή και ιδιότητες τροποποιημένων κυκλοδεξτρινών», 27 Φεβρουαρίου **2006**, Τμήμα Χημείας, Παν/μιο Αθηνών.

Διδακτικό Έργο

1. Ειρήνη Μ. Μαυρίδου, «Αρχές Προσδιορισμού Μοριακής Δομής με Περίθλαση Ακτίνων-X από Μονοκρυστάλλο», Μεταπτυχιακό μάθημα στο Διαπανεπιστημιακό Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗ ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ», Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Αθηνών, Δεκέμβριος **2006**.
2. Κ. Γιαννακοπούλου “Drug Inclusion in Cyclodextrins Monitored in situ by NMR spectroscopy”, 2nd International School on Nanobiotechnology “Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology” ΕΚΕΦΕ «Δ», 26 June -7 July **2006**.
3. Ειρήνη Μ. Μαυρίδου “X-ray diffraction characterisation of drug inclusion in Cyclodextrins and 3-D visualization” 2nd International School on Nanobiotechnology “Methods in micro –

nano technology and nanobiotechnology” ΕΚΕΦΕ «Δ», 26 June -7 July **2006**.

4. Κ. Γιαννακοπούλου, «κυκλοδεξτρίνες: αυτοοργάνωση, εγκλωβισμός και μεταφορά μορίων», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ «Δ», 10-21 Ιουλίου **2006**.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

1. Ν. Μούρτζης «Σύνθεση και μελέτη μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων σε διάλυμα», **PhD**, Τομέας Οργανικής Χημείας, Χημικό Τμήμα, Παν/μιο Αθηνών, **2006**.
2. Χ. Αγγελίδου “Σύνθεση θετικώς φορτισμένων κυκλοδεξτρινών και μελέτη της αλληλεπίδρασής τους με νουκλεοτίδια και νουκλεοζίτες σε διάλυμα με Φασματοσκοπία NMR”, **MSc**, Τομέας Οργανικής Χημείας, Χημικό Τμήμα, Παν/μιο Αθηνών, **2006**.

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 2006-2008, (Χρηματοδότηση ΙΦΧ: € 57528,2) σε συνεργασία με το Φαρμακευτικό Τμήμα, Πανεπιστήμιο Αθηνών.
2. EU Πρόγραμμα: Research Training Network *UNI-NANOCUPS* (“UNI-DIRECTIONAL NANOSCALE SUPRAMOLECULAR WIRES ASSEMBLED BY PHOTO- AND ELECTRO-ACTIVE METALLOCYCLODEXTRIN CUPS”). Διάρκεια: 1/1/2004 – 31/12/2007. Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: (ΙΦΧ και ΙΜΗΛ): € 202 000.
3. EU Πρόγραμμα, STREP: TASNANO (“Tools and Technologies for the Analysis and Synthesis of Nanostructures”). Διάρκεια: 1/1/2005 – 31/12/2007. (Χρηματοδότηση ΙΦΧ: € 50 000).
4. EU Πρόγραμμα “Networks of Excellence” Priority 3-NMP 3.4.1.2-1 Nanotechnology, *NANO2LIFE* (A Network for Bringing NANOTEchnologies TO LIFE”). Διάρκεια: 1/2/2004 – 31/1/2008 (Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: ΙΦΧ, ΙΜΗΛ, ΙΡΡΠ ποικίλει ανά έτος. Εισροή στον Δημόκριτο για το 2006: € 134. (<http://www.nano2life.de/029>)
5. Επιχορήγηση από το Εμπειρικό Ίδρυμα: “Αυτοοργανωμένα υπερμοριακά υλικά με ηλεκτρικές και οπτικές ιδιότητες”, 2004-. (Χρηματοδότηση € 12 000).
6. “Optical and electro-active molecular wires organised by aqueous cyclodextrin-assembly of metallounits”, COST, Action 31, 2005-2009.
7. Financial Support under the EU Community “Large Facilities Programme” for Access to the European Synchrotron Radiation Source DESY, Hamburg, Germany, EMBL Outstation for the projects “Natural and Derivatised Cyclodextrins and their Inclusion Complexes” and “Structure of Bacterial 2[4Fe-4S] Ferredoxins”. 2000 – σήμερα. (Χρηματοδότηση 2006, € 760).

Συνεργασίες

1. Δρ. Ι. Λαζάρου, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας: Δομή φωτοχρωμικών υλικών.
2. Δρ. Ν. Γλέζος, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής: Λειτουργικά υλικά για οπτοηλεκτρικές εφαρμογές.
3. Dr. Zoe Pikramenou, Prof. M. J. Hannon, University of Birmingham: Χηλικά παράγωγα κυκλοδεξτρινών.
4. Δρ. Π. Κυρίτσης, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών: Φερρεδοξίνες.

5. Dr. J.-M Moulis, CEA, Grenoble, France: Φερρεδοξίνες.
6. Αναπληρώτρια Καθηγήτρια Α. Αντωνιάδου-Βυζά, Τμήμα Φαρμακευτικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών: Εφαρμογή κυκλοδεξτρινών για αντιμικροβιακή δράση.
7. Drs. M. Wilmans και N. Πινότσης EMBL, Hamburg, Germany: Κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών.
8. Δρ. Μ. Παραβατού, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Ινστιτούτο ΡΡΠ: μελέτες σε κύτταρα
9. Δρ. Β. Σοφianoπούλου, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Ινστιτούτο Βιολογίας, βιολογικά πειράματα.
10. Δρ. Α. Λεοντιάδης, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Ινστιτούτο ΡΡΠ: Φασματοσκοπία Μάζης
11. Δρ. Β. Καραθάνος, Χαροκόπειο Παν., εφαρμογές κυκλοδεξτρινών σε θέματα τροφίμων

Άλλες Δραστηριότητες

Συνδιοργάνωση του 2nd International School on Nanobiotechnology “*Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology*” ΕΚΕΦΕ «Δ», 26 June -7 July, **2006**. Το σχολείο αποτελεί το επίσημο σχολείο του Δικτύου Αριστείας Nano2Life από το 2006.

Διοργάνωση του Prospective Strategic Workshop on Drug Delivery, Athens, November 13-14 2006. Το workshop διοργανώθηκε στα πλαίσια του δικτύου Αριστείας Nano2Life και συμμετείχαν 21 εμπειρογνώμονες από την Ευρωπαϊκή ακαδημαϊκή κοινότητα και τη βιομηχανία. Σκοπός του ήταν να περιγράψει την σημερινή κατάσταση, να αναδείξει τις προοπτικές και τα προβλήματα και να θέσει τους μελλοντικούς στόχους του *Drug Delivery*.

Επί πλέον

Ε. Μαυρίδου

1. Αντιπρόεδρος της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, 2006-2008.
2. Αντιπρόεδρος του Governing Board του Δικτύου Αριστείας Nano2Life
3. 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.
4. Αξιολογητής δημοσιεύσεων των περιοδικών της *Royal Society of Chemistry*, της *Am. Chem. Soc*, *Carb. Res.*, *J. Mol. Struct.*, *J. Inclusion Phenom. Macrocyclic. Chem.*
5. Αξιολογητής προγραμμάτων της Ευρωπαϊκής Ενώσεως.

Κ. Γιαννακοπούλου

1. Υπεύθυνη Εργαστηρίου NMR (500 MHz και NMR 250 MHz) για το ΙΦΧ.
2. Πρόεδρος Γνωμοδοτικού Συμβουλίου Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
3. Συντονίστρια Επιτροπής Ασφαλείας, υπεύθυνος πυρασφάλειας Κτιρίου Σχολής.
4. Αναπληρωτής Υπεύθυνος Εκπαιδεύσεως ΙΦΧ και μέλος της επιτροπής εξετάσεων υποτρόφων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας στο μάθημα της Οργανικής Χημείας.
5. Κριτής στα Περιοδικά *Carbohydrate Research*, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, *Tetrahedron Letters*, *Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP)*, *Journal of Physical Chemistry*.

Ε. Χατζούδης

Κριτής των διεθνών περιοδικών *J. Am. Chem. Soc.*, *J. Photochem. Photobiol.*, *J. Phys. Chem.*

ΕΡΓΟ: NANO-ΥΛΙΚΑ ΟΡΓΑΝΩΜΕΝΗΣ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

NANOMATERIALS OF ORGANIZED SUPRAMOLECULAR STRUCTURE

Υπεύθυνος έργου: Δρ. Κ. Παλαιός, Ερευνητής Α
Δρ. Δ. Τσιούρβας, Ερευνητής Α
Δρ. Ω. Σιδεράτου, Ερευνητής Γ
Δρ. Α. Τζιβελέκα, Συνεργαζόμενη Ερευνήτρια
Δρ. Θ. Θεοδοσίου, Μεταδιδακτορικός συνεργάτης
Χ. Κοντογιάννη, Μεταπτυχιακός υπότροφος
Ι. Τσόγκας, Μεταπτυχιακός υπότροφος
Α. Μ. Γαλανού Μεταπτυχιακός υπότροφος
Ν. Στεριώτη, Άμισθος υπότροφος
Μ. Αρκάς, Άμισθος Μεταπτυχιακός Συνεργάτης

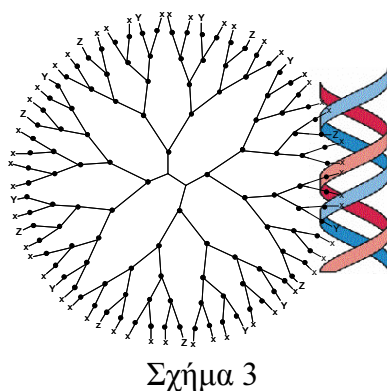
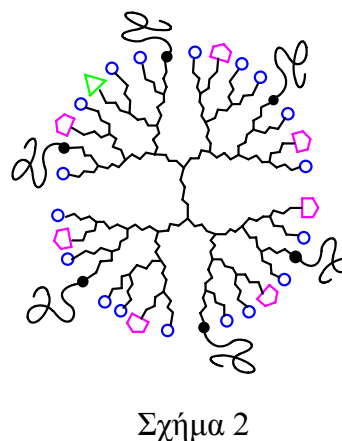
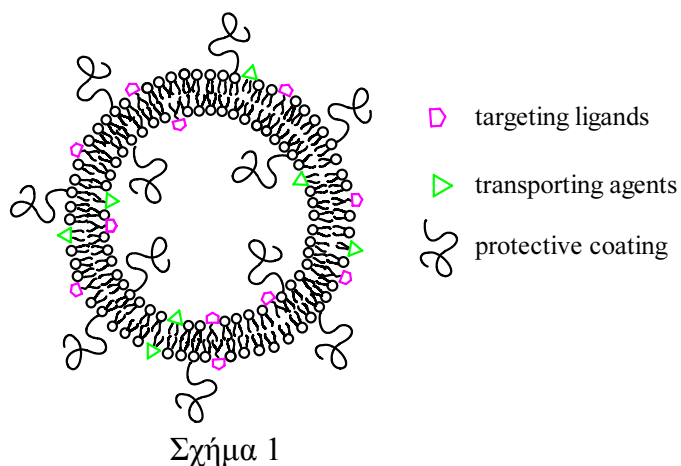
Αντικείμενο του Έργου

1. Μοριακή Αναγνώριση Λιποσωμάτων – Πολυ-λειτουργικά Λιποσώματα ως φορείς φαρμάκων. Λιποσώματα με αναγνωρίσιμες ομάδες χρησιμοποιούνται σε πειράματα μοριακής αναγνώρισης με συμπληρωματικά λιποσώματα ή απλά μόρια σε μια προσπάθεια προσομοίωσης 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 και γονιδιακού υλικού που συνδυάζουν σταθερότητα, ικανότητα στοχεύσεως και δυνατότητα διελύσεως δια μέσου των κυτταρικών μεμβρανών, Σχήμα 1.

2. Πολυ-λειτουργικά Δενδριμερικά και Υπερδιακλαδισμένα Πολυμερή (Δενδριτικά Πολυμερή) ως Φορείς Φαρμάκων και Γονιδιακού Υλικού. Πραγματοποιείται πολλαπλή εισαγωγή λειτουργικών ομάδων στα 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, ενώ το DNA σχηματίζει σύμπλοκα με αρνητικά φορτισμένα δενδριτικά πολυμερή, Σχήμα 3.

3. Δενδριτικά Πολυμερή με Εφαρμογή στον Παραγωγή Υπερκαθαρού Νερού. Αλκυλιωμένα δενδριτικά πολυμερή έχουν την ιδιότητα «νανοσπόγγων», στις κοιλότητες των οποίων μπορούν να εγκλεισθούν λιπόφιλες ενώσεις. Παράγεται υπερκαθαρό νερό στο οποίο οι παραμένοντες ρύποι βρίσκονται σε επίπεδο ppb. Περαιτέρω, έχουν αναπτυχθεί διασταυρωμένα υδρόφοβα δενδριτικά πολυμερή για την απομάκρυνση οργανικών ρύπων από το νερό. Έχουν επίσης παρασκευασθεί οργανοπυριτικά δενδριμερή τα οποία έχουν επικαλύψει κεραμικά φίλτρα για την παραγωγή υπερκαθαρού νερού.

4. **Ανάπτυξη Νέων Βιομημητικών Υγρών Κρυστάλλων.** Παρασκευάζονται και χαρακτηρίζονται νέοι υγροί κρύσταλλοι μέσω ομοιοπολικών και μη-ομοιοπολικών αντίστοιχα συνθέσεων. Συγκεκριμένα έχουν παρασκευασθεί και χαρακτηριστεί ιοντικοί, αμφιφιλικού χαρακτήρα, θερμοτροπικοί υγροί κρύσταλλοι με ευρύ φάσμα θερμοκρασιακής περιοχής.



Objectives

1. Molecular Recognition of Liposomes - Multifunctional Liposomes as Drug Delivery Systems. Liposomes bearing recognizable groups are employed in molecular recognition experiments with complementary liposomes or simple molecules in an attempt to simulate the behaviour of cells. The external surface of liposomes is modified with appropriate moieties for conducting the molecular recognition experiments with the final however objective to develop efficient drug delivery systems combining stability, targeting and transporting properties, Scheme 1.

2. Multifunctional Dendrimeric and Hyperbranched Polymers (Dendritic Polymers) as Drug and Gene Delivery Systems. Multifunctionalization of dendritic polymers is conducted aiming at developing drug and gene delivery systems exhibiting enhanced targeting, stability and transport properties through cell membranes, Scheme 2. Active drug ingredients are incorporated in the nanocavities of dendritic polymers, while DNA forms complexes with positively charged dendritic polymers as shown in Scheme 3.

3. Dendritic Polymers with Application in the Production of Ultrapure Water. Alkylated dendritic polymers have the property of behaving as "nanosponges", in the cavities of which hydrophobic water impurities are encapsulated. Ultrapure water is produced, in which the

remaining impurities are at the ppb level. Furthermore, cross-linked hydrophobic dendrimeric and hyperbranched polymers have been developed for water purification. Work has also been performed for the preparation of Organosilicon Dendrimers which were applied at the surface of ceramic filters for the production of ultrapure water.

4. Development of Novel Biomimetic Liquid Crystals. Novel liquid crystals are prepared through covalent and non-covalent synthesis. Specifically ionic, amphiphilic-type, thermotropic liquid crystals with broad temperature range have been prepared and characterized.

Δημοσιεύσεις

1. L. A. Tziveleka, C. Kontoyianni, Z. Sideratou, D. Tsiourvas and C. M. Paleos, Novel Functional Hyperbranched Polyester Polyols as Prospected Drug Delivery Systems, *Macromolecular Bioscience*, **6**, 161 (2006).
2. Z. Sideratou, L. A. Tziveleka, C. Kontoyianni, D. Tsiourvas and C. M. Paleos, Design of Functional Dendritic Polymers for Application as Drug and Gene Delivery, *Gene Therapy and Molecular Biology*, **10**, 71 (2006).
3. C. M. Paleos and D. Tsiourvas, Interaction between Complementary Liposomes: A Process Leading to Multicompartment Systems Formation, *J. of Molecular Recognition*, **19**, 60 (2006).
4. D. Koumbi, J.-C. Clementc, Z. Sideratou, J.-J. Yaouancc, D. Loukopoulos, P. Kollia, Factors Mediating Lipofection Potency of a Series of Cationic Phosphonolipids in Human Cell Lines *Biochim. Biophys. Acta - General Subjects*, **1760**, 1151 (2006).
5. I. Tsogas, D. Tsiourvas, G. Nounesis and C. M. Paleos, Modelling Cell Membrane Transport: Interaction of Guanidinylated Poly(propylene imine) Dendrimers with a Liposomal Membrane Consisting of Phosphate Based Lipids, *Langmuir*, **22**, 11322 (2006).
6. M. Arkas, R. Allabashi, D. Tsiourvas, E.-M. Mattausch, R. Perfler, "Organic/Inorganic Hybrid Filters Based on Dendritic and Cyclodextrin "Nanosponges" for the Removal of Organic Pollutants from Water", *Environ. Sci. Technol.*, **40**, 2771 (2006).
7. R. Allabashi, M. Arkas, G. Hörmann, D. Tsiourvas, "Removal of some Organic Pollutants in Water Employing Ceramic Membranes Impregnated with Cross-linked Silylated Dendritic and Cyclodextrin Polymers", *Water Research*, **41**, 476 – 486, *in press*
8. L. A. Tziveleka, A.-M. G. Psarra, D. Tsiourvas and C. M. Paleos, *Synthesis and Characterization of Guanidinylated Poly(propylene imine) Dendrimers as Gene Transfection Agents*, *Journal of Controlled Release*, *In Press*.
9. C. M. Paleos, D. Tsiourvas and Z. Sideratou, *Molecular Engineering of Dendritic Polymers and their Application as Drug and Gene Delivery Systems*, *Molecular Pharmaceutics*, *In Press*
10. C. M. Paleos and D. Tsiourvas, *Non-Covalent Interactions of Liposomes*, in "Bottom-up Nanofabrication: Supramolecules, Self-Assemblies and Organized Films", *American Scientific Publishers*, *In Press*.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. C. M. Paleos, D. Tsiourvas and Z. Sideratou, "Developing and Applying a Drug Delivery Model for Liposomal and Dendritic Multifunctional Nanoparticles", (Plenary Lecture). Presented at the "9th International Conference in "Drug and Gene-based Therapeutics", Crete, Greece, Sept. 2-8, 2006.

2. L.-A. Tziveleka, A.-M. Psarra, Z. Sideratou and C. M. Paleos, "Synthesis and Characterization of Functional Hyperbranched Polyether Polyols as Prospected Gene Carriers". Presented at the "9th International Conference in "Drug and Gene-based Therapeutics", Crete, Greece, Sept. 2-8, 2006.
3. C. M. Paleos, "Multifunctional Liposomal and Dendritic Drug Delivery Systems". Presented at the Third International Greek Biotechnology Forum, Athens, October 5-7, 2006.
4. D. Tsiourvas and C. M. Paleos, "Liquid Crystals Derived from Covalently and Non-covalently Functionalized Dendritic Polymers". Invited lecture presented at the "Euroconference on Dendrimer Soft Self-Assembled Systems", 17-21 May 2006, Obernai, France .
5. A. Pantos, D. Tsiourvas, Z. Sideratou and C. M. Paleos "Molecular Recognition and Polyvalency induce Interaction between Complementary Liposomes leading to Multicompartmentalization". Presented at COST D 27, Workshop on "Chembiogenesis", Barcelona Spain, Dec. 15-18, 2006.
6. I. Tsogas, D. Tsiourvas, G. Nounesis and C. M. Paleos "Modeling Cell Membrane Transport: Interaction of Guanidinylated Poly(propylene imine) Dendrimers with Phosphatidylcholine based Liposomes". Presented at COST D 27, Workshop on "Chembiogenesis", Barcelona Spain, Dec. 15-18, 2006.
7. I. Tsogas, T. Theodossiou, Z. Sideratou, D. Tsiourvas and C. M. Paleos, "Functional Poly(propylene imine) Dendrimer Internalization. Membrane Crossing in Liposomes and Cells". Presented at COST D 27, Workshop on "Chembiogenesis", Barcelona Spain, Dec. 15-18, 2006.
8. M. Dutour Sikiric, M. Vincekovic, M. Bujan, I. Smit, Lj. Tucek Bozik, D. Tsiourvas, N. Filipovic Vincekonic, "Influence of Cationic Surfactant on the Properties of Carrageenan Gels". Presented at COST D 27, Workshop on "Chembiogenesis", Barcelona Spain, Dec. 15-18, 2006.
9. R. Allabashi, D. Tsiourvas, J. P. Joulin, A. Tsetsekou, "Development of Organic/Inorganic Hybrid Filter Modules for Efficient Removal of Organic Pollutants from Water", Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, Fachgruppe in der Gesellschaft Deutscher Chemiker, 22 - 24 May 2006, Celle statt, Germany.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνιών

Κων/νος Παλαιός, Ωραιοζήλη Σιδεράτου, Δημήτριος Τσιούρβας και Ι. Τσόγκας "Μοριακοί Δενδριτικοί Φορείς με Προσαρμοζόμενη/Μεταβαλλόμενη Διαλυτότητα και Συμπληρωματικότητα προς Μεμβρανικούς Υποδοχείς". Αριθμ. Διπλωμ. 20060100424, Ημερομηνία κατάθεσης: 21/7/2006

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία Μεταπτυχιακών Μαθημάτων

Κ. Μ. Παλαιός, "Πολυμερισμοί σε Οργανωμένα Συστήματα", Παν. Αθηνών, Τμήμα Χημείας, στο πλαίσιο του ΕΠΕΑΕΚ "Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της", Μάιος 2006.

Δ. Τσιούρβας, Διδασκαλία μαθημάτων «Υγρά κρυσταλλικά πολυμερή» και «Δενδριμερή και εφαρμογές τους» στο πλαίσιο του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών "Επιστήμη

Πολυμερών και Εφαρμογές της’’ που εκπονείται από το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Αθήνας σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” και

Υπεύθυνος εργαστηριακών ασκήσεων «Εργαστηριακές ασκήσεις μηχανικών ιδιοτήτων και πολυμερικών διεργασιών» στο πλαίσιο του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών “Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της’’ που εκπονείται από το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Αθήνας σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”.

Διδασκαλία στο θερινό σχολείο

Κ. Μ. Παλαιός, “Multifunctional liposomal and dendritic nanoparticles as drug delivery systems”, ομιλία στο πλαίσιο του Θερινού Σχολείου “Methods in Micro – Nano-technology and Biotechnology”, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ιούνιος 2006.

Δ. Τσιούρβας και Ζ. Σιδεράτου, Laboratories on “Preparation and Characterization of liposomes” with “Dynamic Light scattering, ζ-potential, Video Enhanced Optical Microscopy, and AFM” in Nano2Life International Summer School, Micro – Nanotechnology and Nanobiotechnology, 26 June-7 July 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

Πρόγραμμα ΠABET-NE 2004 με τίτλο "Στοχεύοντα Φαρμακευτικά Προϊόντα με Βάση τα Λιποσώματα και τα Δενδριτικά Πολυμερή", ως σύμβουλοι της Εταιρίας REGULON SA. 1-2-2005 – 31-1-2007. Προϋπολογισμός: 70.000 Euros.

COST D27 “Preparation and Properties of Functionalized Vesicles as Protocell Models”, “Prebiotic Chemistry and Early Evolution”, 2002-2007. Προϋπολογισμός: 20.000 Ευρώ.

Πρόγραμμα ENTER με κωδικό 04EP 61 και με τίτλο "Ανάπτυξη Νέας Αντικαρκινικής Τεχνικής: Καταστροφή Καρκινικών Κυττάρων με Βιοχημειοφωταύγεια Χρησιμοποιώντας Στοχεύοντες Φορείς Γονιδίων με βάση τα Λιποσώματα και τα Δενδριτικά πολυμερή", 2006-2008. Προϋπολογισμός: 78.000 Ευρώ.

‘NMP’ INTEGRATED PROJECT, Contract No NMP4-CT-2006-026723 και με τίτλο "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", 2006-2010. Προϋπολογισμός: 537.000 Ευρώ.

Επιχειρησιακό πρόγραμμα Αττικής 2000-2006, Μέτρο 1.2, Κωδικός: ΑΤΤ_28, “Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία”, Προϋπολογισμός εργαστηρίου: 9.500 Ευρώ.

Έγκριση Δημιουργίας Εταιρείας Έντασης Γνώσης (spin-off)

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.

Συνεργασίες

Δρ. Γ. Νούνεσης, Ινστ. ΡΡΠ, ΕΚΕΦΕ "Δ", Θερμοδυναμική μελέτη μοριακής αναγνώρισης.
Καθ. Ι. Αναστασοπούλου, ΕΜΠ Πολυτεχνείο, Φασματοσκοπική μελέτη υγρών κρυστάλλων.

Άλλες Δραστηριότητες

1. Κ. Μ. Παλαιός, 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).
2. Κ. Μ. Παλαιός, Μέλος του Editorial Advisory Board του περιοδικού "Molecular Crystals and Liquid Crystals".
3. Κ. Μ. Παλαιός, Μέλος Επιτροπών Προαγωγής και προσλήψεως Επιστημόνων Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών. Κ. Μ. Παλαιός, Μέλος Επιτροπής για την επιλογή διευθυντού Ινστιτούτου στο ΕΚΕΤΑ.
4. Κ. Μ. Παλαιός, Συμμετοχή στο «Managment Committee» των Προγραμμάτων COST, Action D 27 και D 31.
5. Κ. Μ. Παλαιός, Αξιολογητής προγραμμάτων COST.
6. Δ. Τσιούρβας, Κριτής στα επιστημονικά περιοδικά Macromolecular Rapid Communications, Chemistry of Materials, Thin Solid Films, European Polymer Journal, Thermochimica Acta.

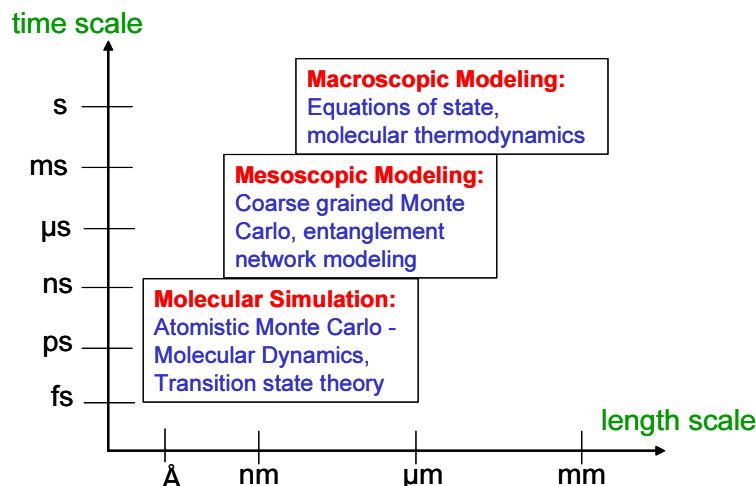
ΕΡΓΟ: ΜΟΡΙΑΚΗ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ

MOLECULAR THERMODYNAMICS AND MODELING OF MATERIALS

Προσωπικό

Δρ. Ιωάννης Γ. Οικονόμου	Ερευνητής Α', Επιστημονικός Υπεύθυνος Εργου
Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου	ΕΜΠ, Συνεργαζόμενος Ερευνητής
Δρ. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος	Συνεργαζόμενος Μεταδιδασκατορικός Ερευνητής με Προσόντα Ερευνητή Δ'
Δρ. Θεοδώρα, Σπυριούνη	Συνεργαζόμενη Ερευνήτρια
Δρ. Αναστασία Ρισάνου	Μεταδιδασκατορική Ερευνήτρια
Δρ. Νίκη Βέργαδου	Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια / Μεταδιδασκατορική ερευνήτρια
Δρ. Χάρη Λεοντιάδου	Μεταδιδασκατορική Ερευνήτρια
Δρ. Στέλιος Καρανίκας	Μεταδιδασκατορικός Ερευνητής
Δρ. Ευαγγελία-Γεωργία Λογοθέτη	Μεταδιδασκατορική Ερευνήτρια
Ειρήνη Καρακατσάνη	Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια
Ζωή Μακροδημήτρη	Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια
Μαριάννα Γιαννουράκου	Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια

Αντικείμενο Εργου



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 2006 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.

Research work in the Molecular Thermodynamics and Modeling of Materials Laboratory (MTMML) focuses on the development and implementation of novel hierarchical methods and algorithms for the computer modelling and calculation of advanced material properties at the molecular, mesoscopic and macroscopic levels. Through this work, quantitative links are established between chemical constitution, processing conditions, and physical (thermal, mechanical, rheological, transport, interfacial, optical, dielectric) properties, which are critical for the optimal design of industrial processes and also govern the end-use performance of commercial products. In parallel, the molecular mechanisms underlying structure - property - processing - performance relations are elucidated with the objective of designing new, tailor-made materials.

The hierarchical approaches developed and implemented at MTMML start with atomistic simulations addressing length scales on the order of tens of nanometers and time scales on the order of tens of nanoseconds (e.g., Monte Carlo, molecular dynamics, transition-state theory analysis of infrequent events) and proceed with mesoscopic methods (e.g., entanglement network modelling, kinetic Monte Carlo simulation, self-consistent field theory of inhomogeneous systems) to address longer time- and length scale phenomena. Finally, for the efficient design of novel processes mainly for the chemical and polymer industry, accurate macroscopic models, mostly in the form of equations of state (eos), are developed for phase equilibria and other thermodynamic properties of multicomponent mixtures.

These eos are rooted to statistical mechanics and can be safely extrapolated to conditions where limited or no experimental data exist.

Research work in 2006 focused on:

- (a) Molecular simulation of elastomeric and glassy polymers,
- (b) Polymer solutions and blends,
- (c) Sorption and diffusion of small molecules in silicon-containing polymers,
- (d) Molecular simulation of polar homo- and co-polymers,
- (e) Mesoscopic simulation of polydisperse colloids,
- (f) Thermodynamic properties of polar fluids in pure and in mixture,
- (g) Ionic liquids in pure and in mixture with supercritical carbon dioxide or water.

Δημοσιεύσεις

1. A.N. Rissanou, M. Yiannourakou, I.G. Economou and I.A. Bitsanis, “Temperature Induced Crystallization in Concentrated Suspensions of Multi-Arm Star Polymers: A Molecular Dynamics Study”, *J. Chem. Phys.*, **124**(4), 044905-1 – 044905-11 (2006).
2. E.K. Karakatsani and I.G. Economou, “Perturbed Chain-Statistical Associating Fluid Theory Extended to Dipolar and Quadrupolar Molecular Fluids”, *J. Phys. Chem. B*, **110**(18), 9252 – 9261 (2006).
3. M.C. Kroon, E.K. Karakatsani, I.G. Economou, G.-J. Witkamp and C.J. Peters, “Modeling of the Carbon Dioxide Solubility in Imidazolium-Based Ionic Liquids with the tPC-PSAFT Equation of State”, *J. Phys. Chem. B*, **110**(18), 9262 – 9269 (2006).
4. E.K. Karakatsani, G.M. Kontogeorgis and I.G. Economou, “Evaluation of the Truncated Perturbed Chain – Polar Statistical Associating Fluid Theory for Complex Mixture Fluid Phase Equilibria”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **45**(17), 6063 – 6074 (2006).
5. Z.A. Makrodimitri, V.E. Raptis and I.G. Economou, “Molecular Dynamics Simulation of Structure, Thermodynamic and Dynamic Properties of Poly(dimethylsilamethylene), Poly(dimethylsilatri-methylene) and their Alternating Copolymer”, *J. Phys. Chem. B*, **110**(32), 16047 – 16058 (2006).
6. A.N. Rissanou, I.G. Economou and A.Z. Panagiotopoulos, “Monte Carlo Simulation of the Phase Behavior of Model Dendrimers”, *Macromolecules*, **39**(18), 6298 – 6305 (2006).
7. E.A. Tritopoulou and I.G. Economou, “Molecular Simulation of Structure and Thermodynamic Properties of Pure Tri- and Tetra-Ethylene Glycols and Their Aqueous Mixtures”, *Fluid Phase Equil.*, **248**(2), 134 – 146 (2006).
8. I.A. Bitsanis, A.N. Rissanou, M. Yiannourakou, I.G. Economou and D. Vlassopoulos, “Mesoscopic Simulations of T-Induced Solidification in Dense Suspensions of Ultrasoft Supramolecules”, *Lecture Series on Comp. and Comput. Sci.*, **6**, 1 – 4 (2006).
9. 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*, in press.
10. I. 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.*, in press.
11. C. Panayiotou, I. Tsivintzelis and I.G. Economou, “Nonrandom Hydrogen-Bonding Model of Fluids and Their Mixtures. 2. Multicomponent Mixtures”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, in press.

12. 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*, in press.
13. I.A. Bitsanis, A.N. Rissanou, M. Yiannourakou and I.G. Economou, "Temperature Induced Solidification of Multiarm Star Polymer Suspensions. From Amorphous to Crystalline Solids. A Molecular Dynamics Study", *Rheologica Acta*, in press.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. I.A. Bitsanis, A.N. Rissanou, D. Vlassopoulos and I.G. Economou, "Molecular Dynamics Studies of Temperature Induced Solidification in Suspensions of Multi-arm Star Polymers", *3rd Annual European Rheology Conference*, Hersonisos, Crete, Greece (2006).
2. I.G. Economou, A.N. Rissanou and L.D. Peristeras, "Molecular Simulation of Polymer Blends", *22nd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Helsingør, Denmark (2006).
3. E.K. Karakatsani and I.G. Economou, "Rigorous Extension of SAFT-Based Equations of State to Polar Molecular Fluids and Their Mixtures", *22nd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Helsingør, Denmark (2006).
4. M.C. Kroon, E.K. Karakatsani, I.G. Economou, G.-J. Witkamp and C.J. Peters, "Modeling of the Carbon Dioxide Solubility in Imidazolium-Based Ionic Liquids with the tPC-PSAFT Equation of State", *22nd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Helsingør, Denmark (2006).
5. I. Tsivintzelis, T. Spyriouni and I.G. Economou, "Modeling of Phase Equilibria with Non Random Hydrogen Bonding (NRHB) and Statistical Associating Fluid (SAFT) Theories", *22nd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Helsingør, Denmark (2006).
6. Z.A. Makrodimitri, V.E. Raptis and I.G. Economou, "Molecular Dynamics Simulation of Structure, Thermodynamic and Dynamic Properties of Poly(dimethylsilamethylene), Poly(dimethylsilatrime-thylene) and their Alternating Copolymer", *22nd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Helsingør, Denmark (2006).
7. M.C. Kroon, E.K. Karakatsani, I.G. Economou, G.-J. Witkamp and C.J. Peters, "Modeling of the Carbon Dioxide Solubility in Imidazolium-Based Ionic Liquids with the tPC-PSAFT Equation of State", *16th Symposium on Thermophysical Properties*, Boulder, Colorado, USA (2006).
8. I.G. Economou, A.N. Rissanou, L.D. Peristeras and D.N. Theodorou, "Structure and Thermodynamic Properties of Linear - Tri-Arm Polyolefin Blends Based on Novel Atomistic Monte Carlo Simulation Schemes", *AIChE Annual Meeting*, Session No 202, San Francisco, California, USA (2006).
9. I.G. Economou, M.C. Kroon, E. Karakatsani, C.J. Peters and G.-J. Witkamp, "Modeling Carbon Dioxide - Imidazolium-Based Ionic Liquid Phase Equilibria with the tPC-PSAFT Equation of State", *AIChE Annual Meeting*, Session No 28, San Francisco, California, USA (2006).
10. I.G. Economou and E. Karakatsani, "Perturbation Thermodynamic Theory for Polar Fluids: Pure Components and Mixtures", *AIChE Annual Meeting*, Session No 309, San Francisco, California, USA (2006).
11. I.G. Economou, Z.A. Makrodimitri and V.E. Raptis, "Molecular Dynamics Simulation of Structure, Thermodynamic, Dynamic and Hydrocarbon Permeability Properties of Silicon-

- Containing Elastomers with Promising Membrane Material Behavior”, *AIChE Annual Meeting*, Session No 437, San Francisco, California, USA (2006).
12. Z.A. Makrodimitri and I.G. Economou, “Atomistic Simulation of Silicon-Containing Polymers: Force Field Development, Structure and Thermodynamic Properties of Polymer Melts and Solubility of Organic Compounds”, *6th Hellenic Conference in Polymers*, Patras, Greece (2006).
 13. A.N. Rissanou, I.G. Economou and A.Z. Panagiotopoulos, “Monte Carlo Simulation of the Phase Behavior of Model Dendrimers”, *6th Hellenic Conference in Polymers*, Patras, Greece (2006).
 14. M. Yiannourakou, I.A. Bitsanis, A.N. Rissanou, I.G. Economou and D. Vlassopoulos, “Mesoscopic Simulations of T-Induced Solidification in Dense Suspensions of Ultrasoft Supramolecules”, *6th Hellenic Conference in Polymers*, Patras, Greece (2006).

Διαλέξεις μετά από πρόσκληση

1. “Prediction of Physical Properties of Polymer Systems Through Molecular Simulation and Macroscopic Models”, Bayer Technology Services, Leverkusen, Germany, Φεβρουάριος 2006.
2. “Molecular Simulation and Macroscopic Engineering Models for Complex Fluids”, Department of Chemical Engineering, Imperial College London, United Kingdom, Ιούλιος 2006.
3. “Atomistic Simulation of Silicon-Containing Rubbery Polymers”, Department of Chemical Engineering, IVC-SEP, Technical University of Denmark, Lyngby, Νοέμβριος 2006.
4. “Modeling the Ionic Liquid Binary and Ternary Mixture Phase Equilibria with the tPC-PSAFT”, Department of Chemical Engineering, IVC-SEP, Technical University of Denmark, Lyngby, Νοέμβριος 2006.

Διδακτικό Έργο

Διαλέξεις

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Επιστημονική Καριέρα στην Ελλάδα: Το Επάγγελμα του Χημικού", Ημερίδα Σταδιοδρομίας, 5^ο Γυμνάσιο Αγία Παρασκευής, Μάϊος 2006.
2. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Σύγχρονες Υπολογιστικές Μέθοδοι για τον Προσδιορισμό Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Προηγμένων Υλικών", Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Ιούλιος 2006.
3. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Από τη Δομή στις Ιδιότητες Υλικών: Ανελαστικότητα και Ιξωδοελαστικότητα", Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Ιούλιος 2006.

Διδασκαλία

A. Προπτυχιακά μαθήματα

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Φυσικοχημεία", Μάθημα 2^ο Έτους στις Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, 2005 – 06.
2. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Προσομοίωση", 7^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2005-2006.
3. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Εισαγωγή στις Πιθανότητες και την Στατιστική", 4^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2005 – 2006.

4. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Εργαστήριο Υλικών", 4^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2005 – 2006.
5. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Επιλογή Υλικών για Μελέτες Σχεδιασμού", 9^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2005 – 2006.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

A. Διδακτορικά

1. Νίκη Βέργαδου, "Πρόβλεψη Διαπερατότητας από Αέρια Αμορφων Δύσκαμπτων Πολυμερών με Μεθόδους Μοριακής Προσομοίωσης", Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Νοέμβριος 2006.

B. Μεταπτυχιακοί τίτλοι σπουδών (Masters)

1. Μαριάννα Γιαννουράκου, "Μεσοσκοπική μελέτη συστημάτων αστερωτών πολυμερών και κολλοειδών με τη χρήση Μοριακής Προσομοίωσης", Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Νοέμβριος 2006.

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. "Development of Novel Molecular Simulation Methods for Advanced Materials with Complex Molecular Architecture", *Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Επιστημονικής και Τεχνολογικής Συνεργασίας Ελληνικών Φορέων Ε & Τ με Φορείς Ε & Τ Τρίτων Χωρών*. Επιστημονικός Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική Χρηματοδότηση: 60.000 €. Διάρκεια: 1 / 10 / 2003 – 6 / 2 / 2006.
3. "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 / 10 / 2007.
4. "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.
5. "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.
6. "Μελέτη Δομικών, Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων και Ιδιοτήτων Μεταφοράς του Πολυ(στυρενίου-alt-ακρυλονιτριλίου) σε Υψηλές Πιέσεις", *Γενική Γραμματεία Ερευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα ΕΝΤΕΡ 2003*. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 78,000 €. Διάρκεια: 1 / 10 / 2006 – 30 / 9 / 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, 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 δενδριμερών.
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.

Άλλες Δραστηριότητες

Ιωάννης Οικονόμου

1. Υπεύθυνος εκπαίδευσης Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
2. Επιστημονικός Υπεύθυνος Γραφείου Διαμεσολάβησης, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».
3. Αντιπρόεδρος Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
4. 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*.
5. Αξιολογητής ερευνητικών έργων που υποβλήθηκαν για χρηματοδότηση στη ΓΓΕΤ και στο INTAS.
6. Επισκέπτης Καθηγητής, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πολυτεχνείο Δανίας (Technical University of Denmark), Lyngby, Δανία, Οκτώβριος 2006 - .

Νικόλαος Ζαχαρόπουλος

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

Ειρήνη Καρακατσάνη

10/2006-12/2006: Επισκέπτης Ερευνήτρια στο Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Delft University of Technology, Δανία. Μοντελοποίηση Μιγμάτων Ιονικών Ρευστών σε Διοξείδιο του Άνθρακα και Νερό.

ΕΡΓΟ: ΦΩΤΑΥΓΕΙΑ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΕΝΩΣΕΩΝ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗΝ ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

LUMINESCENCE LABORATORY

Προσωπικό

Υπεύθυνος: Δρ. Κ. Παπαδόπουλος, Ερευνητής Α

Συνεργάτες:

Δρ. Κ. Αγιαμαρνιώτη (Συνεργαζόμενη Επιστήμονας, Χημικός)

Ε. Γιαννακοπούλου (Ειδικός Τεχνικός Επιστήμονας, Βιολόγος)

Ο. Λανίτου, Δ. Χριστοδουλέας, Δ. Καλογιαννίδης (Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι)

Αντικείμενο Έργου - Επιτεύγματα

Βασικό αντικείμενο του εργαστηρίου είναι η σύνθεση, ο χαρακτηρισμός και η διερεύνηση εφαρμογής νέων φωταυγών ενώσεων στην Αναλυτική και Κλινική Χημεία. Το 2006 συνετέθησαν βιοτινυλιωμένα παράγωγα του 9-ακριδινικού οξέος και αξιοποιήθηκαν για την ανίχνευση βιομορίων, όπως της πρωτεΐνης IgG ποντικού με όριο ανίχνευσης μέχρι 1.3 ng ανά μέτρηση (δημοσίευση 1, ανακοίνωση 2). Επίσης αναπτύχθηκε χημειοφωταυγής μέθοδος για την εκτίμηση της ολικής αντιοξειδωτικής δράσης εδώδιμων ελαίων και α-αμινοξέων (δημοσίευση 4, ανακοινώσεις 3 και 4). Παράλληλα με τις παραπάνω δραστηριότητες το εργαστήριο μας συμμετείχε στην παρασκευή νέων όργανο-ανόργανων υβριδικών υλικών με σκοπό την εφαρμογή αυτών σε καταλυτικές χημειοφωταυγείς αντιδράσεις και καταλυτική σύνθεση νέων οπτικά ενεργών οργανικών μορίων (ανακοίνωση 1).

Στα πλαίσια προγράμματος του NATO και σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Φαρμακευτικής Χημείας του Πανεπιστημίου της Τιφλίδας (Γεωργία) συνετέθησαν και χαρακτηρίστηκαν νέες αντι-φυματικές και αντι-φλεγμονώδεις ενώσεις (δημοσίευσεις 2 και 3).

Objectives - Achievements

The main object of our research is the synthesis, characterization and applications of novel luminescent organic materials in Analytical and Clinical Chemistry. In 2006, we have shown that biotinylated acridine-derivatives can be used as novel fluorescent labels for (strept)avidin-biotin based assays (publication 1, conference announcement 2). Further, we developed a novel chemiluminescent method for the estimation of the antioxidant activity of edible oils as well as of α-amino acids (publication 4, conference announcement 3 and 4). Parallel to the above-mentioned activities our laboratory was active in the synthesis of organo-inorganic hybridized catalysts aiming their applications in catalytic chemiluminescent reactions and catalytic asymmetric synthesis of bio-organic molecules (conference announcement 1).

In the frame of a NATO project and in collaboration with the Institute of Farmacochemistry of Tbilisi University (Georgia) we synthesized and characterized novel anti-tuberculosis and anti-inflammatory compounds (publications 2 and 3).

Δημοσιεύσεις

1. K. Agiamarnioti, T. Triantis, K. Papadopoulos, A. Scorilas, 10-(2-biotinyloxyethyl)-9-acridone. A novel fluorescent label for (strept)avidin-biotin based assays, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, 181, 126-131 (2006).
2. M. I. Merlani, L. Sh. Amiranashvili, M. G. Davitishvili, E. P. Kemertelidze, K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, Synthesis of novel steroidal isonicotinoylhydrazones and thiosemicarbazones from tigogenin, *Chemistry of Natural Compounds*, 42, 194-197 (2006).
3. M. I. Merlani, L. Amiranashvili, E. P. Kemertelidze, K. Papadopoulos and E. Yannakopoulou, Synthesis of 17 α -amino-5 α -androst-2-ene from epiandrosterone, *Chemistry of Natural Compounds*, Vol. 42, 313-315 (2006).
4. T. Triantis, E. Yannakopoulou, A. Nikokavoura, D. Dimotikali, K. Papadopoulos, Chemiluminescent studies on the antioxidant activity of amino acids, *Anal Chim. Acta*, in press.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. O. Lanitou, D. Dimotikali, E. Yannakopoulou, K. Papadopoulos, Environmentally friendly novel hybridized chiral organo-inorganic catalysts for epoxidation and alkylation reactions, XVII International conference on chemical reactors, May 15-19, 2006, Athens-Crete, Greece, Proceedings pp. 282-285.
2. K. Agiamarnioti, O. Lanitou, D. Dimotikali, T. Triantis, E. Yannakopoulou, K. Papadopoulos, A novel fluorescent label for (strept)avidin-biotin based bioassays, 3rd International conference on oxidative stress in skin medicine and biology, 21- 24 September 2006, Andros, Greece, Book of abstracts, p. 100.
3. D. Christodouleas, K. Papadopoulos, T. Triantis, A. Calokerinos, Measurement of total antioxidant activity of olive oils by using chemiluminescence techniques, 5th Aegean Analytical Chemistry Days, 5-8 October 2006, Thessaloniki-Greece, Book of Abstracts, p.104.
4. K. Papadopoulos, D. Dimotikali, E. Yannakopoulou, D. Christodouleas, T. Triantis, Chemiluminescent studies on the antioxidant activity of amino acids, 5th Aegean Analytical Chemistry Days, 5-8 October, Thessaloniki-Greece 2006, Book of Abstracts, p.17.

Διδακτικό έργο

Πρακτική άσκηση φοιτητών

Οι φοιτητές του ΕΜΠ Αθηνών του Τμήματος Χημικών Μηχανικών, Νικόλαος Μένεγας και Άρτεμις Οικονόμου εργάστηκαν στα πλαίσια της πρακτικής τους άσκησης από 4 Οκτωβρίου μέχρι 11 Νοεμβρίου στο Εργαστήριο μας. Αντικείμενο της έρευνας ήταν η "εκτίμηση αντιοξειδωτικής δράσης α -αμινοξέων με τεχνικές χημειοφωταύγειας".

Διπλωματικές εργασίες

Διδακτορικές Διατριβές

Η υπότροφος *Καλομοίρα Αγιαμαρνιώτη* ολοκλήρωσε τη διδακτορική της διατριβή τον Ιούλιο του 2006. Ο τίτλος της διατριβής ήταν: *‘Σύνθεση και ιδιότητες νέων χημειοφωταυγών και φθορίζόντων ιχνηθετών για ανάλυση βιομορίων’*.

Η υπότροφος *Οριάνα Λανίτου* συνεχίζει με επιτυχία τη διδακτορική της διατριβή με θέμα: *"Σύνθεση, χαρακτηρισμός και εφαρμογή χειρόμορφων καταλυτών δύο φάσεων στην ασύμμετρη σύνθεση"*.

Ο υπότροφος *Διονύσης Χριστοδουλέας* ολοκλήρωσε το πειραματικό μέρος του διπλώματος ειδίκευσης και θα το παρουσιάσει στην επιτροπή αρχές του 2007. Ο τίτλος της εργασίας είναι *‘Ανάπτυξη χημειοφωταγειομετρικής μεθόδου για εκτίμηση της ολικής αντιοξειδωτικής δράσης εδώδιμων ελαίων’*.

Τον Νοέμβριο του 2006 ξεκίνησε τη διδακτορική του διατριβή στο εργαστήριο μας ο μεταπτυχιακός φοιτητής, *Δημήτρης Καλογιαννίδης*. Προταθείς τίτλος της διατριβής είναι: *Διερεύνηση εφαρμογής νανοδομημένων καταλυτών σε χημειοφωταυγείς αντιδράσεις*.

Διδασκαλία-Διαλέξεις

1. Ο. Λανίτου, ‘Environmentally friendly novel hybridized chiral organo-inorganic catalysts for epoxidation and alkylation reactions, XVII International conference on chemical reactors, May 15-19, 2006, Crete.
2. Κ. Παπαδόπουλος, ‘Chemiluminescent studies on the antioxidant activity of amino acids, 5th Aegean Analytical Chemistry Days, 5-8 October, 2006 Thessaloniki.
3. Κ. Παπαδόπουλος, Διάλεξη στα πλαίσια του Θερινού Σχολείου με θέμα: ‘Ασύμμετρη Σύνθεση Οργανικών Ενώσεων’, 10-21 Ιουλίου 2006, Αθήνα.

Προγράμματα

1. Ολοκληρώθηκε με επιτυχία τον Νοέμβριο του 2006 διετές πρόγραμμα διακρατικής συνεργασίας με το Πανεπιστήμιο του Βελιγραδίου με υπεύθυνο τον καθηγητή Prof. Radomir Sačić. Ο τίτλος του έργου ήταν: *‘Ανάπτυξη νέων μεθόδων παρασκευής φυσικών και μη φυσικών οπτικά ενεργών αμινοξέων και αμινοαλκοολών’*, 12000 ευρώ, κωδικός ΓΕΛ 1191..
2. Εγκρίθηκε στις 25.11. 2005 διετές πρόγραμμα διακρατικής συνεργασίας με το Πανεπιστήμιο του Ολομouc (Τσεχία) με υπεύθυνο τον καθηγητή Jan Hrbac. Ο τίτλος του έργου είναι: *«Ευαισθητοποιημένη Χημειοφωταύγεια με τη βοήθεια χρήσης νανοδομημένων σωματιδίων οξειδίου του σιδήρου – Προοπτικές εφαρμογής της μεθόδου στην Αναλυτική Χημεία»*, 12000 ευρώ, κωδικός ΓΕΛ 1400.
3. Εγκρίθηκαν μέσα στο 2006 δύο ερευνητικά προγράμματα στα πλαίσια της ΔΗΜΟΕΡΕΥΝΑΣ και ΠΕΠ Αττικής και αναμένεται η χρηματοδότηση τους αρχές του 2007.

Συνεργασίες

1. Αναπλ. Καθηγήτρια, Δ. Δημοτίκαλη, Ε.Μ.Π., Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Τομέας Επιστήμης και Τεχνικές των Υλικών. Ερευνητικό πεδίο: 'Εφαρμογές γνωστών και νέων φωταυγών οργανικών ενώσεων στην αναλυτική και διαγνωστική χημεία'.
2. Dr. Maia Merlani, Senior Researcher of Kutaladze Institut of Pharmacochimistry, Georgia. Θέμα συνεργασίας: "Synthesis of biologically active compounds on the basis of Tigogenin isolated from plant Jucca Gloriosa". Η κα Merlani φιλοξενήθηκε για δεύτερη φορά μέσα στο 2006 για τρεις μήνες στο εργαστήριο μας στα πλαίσια προγράμματος του NATO.
3. Επίκουρος Καθηγητής, Ανδρέας Σκορίλας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Βιοχημείας και Μοριακής Βιολογίας, Ερευνητικό πεδίο: "Εφαρμογές νέων βιοτινυλιωμένων φωταυγών οργανικών ενώσεων στην ανίχνευση βιομορίων".
4. Prof. Radomir N. Saicic, Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia. Αντικείμενο συνεργασίας: "Ανάπτυξη νέων μεθόδων παρασκευής φυσικών και μη φυσικών οπτικά ενεργών αμινοξέων και αμινοαλκοολών.
5. Assistant Prof. Jan Hrbac, Faculty of Inorganic Chemistry, University of Olomouc, Czech Republic. Αντικείμενο συνεργασίας: " Ευαισθητοποιημένη Χημειοφωταύγεια με τη βοήθεια χρήσης νανοδομημένων σωματιδίων οξειδίου του σιδήρου.

Άλλες Δραστηριότητες

Κ. Παπαδόπουλος

Κριτής επιστημονικών άρθρων στα διεθνή περιοδικά *Analytica Chimica Acta*, *Talanta*, *Journal of Organic Chemistry*, *Journal of Luminescence*.

Μέλος επιστημονικής επιτροπής αξιολόγησης ερευνητικών προτάσεων κυπρίων ερευνητών του Ιδρύματος Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.

Μέλος εξεταστικής επιτροπής για την επιλογή υποτρόφων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.

Μέλος επιτροπών για την πρόσληψη Συνεργαζομένων Ερευνητών με προσόντα Δ βαθμίδας.

Μέλος επιτροπής διαγωνισμού για την προμήθεια αναλώσιμου εργαστηριακού εξοπλισμού της κεντρικής αποθήκης χημικών.

Σύμβουλος της κεντρικής αποθήκης χημικών του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 2001- μέχρι σήμερα.

Μέλος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας 2001-2002 και 2005-2006.

ΕΡΓΟ: ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΥΛΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

TRANSPORT PHENOMENA IN POLYMERS

Προσωπικό

Δρ. Μ. Σανοπούλου, Ερευνήτρια Α΄, Υπεύθυνος Έργου

Δρ. Κ. Παπαδοκωστάκη, Ερευνήτρια Β΄

Δρ. Ι. Η. Πετρόπουλος, Ομότιμος Ερευνητής Α΄

Α. Σταυροπούλου, μεταπτυχιακή φοιτήτρια ΕΠΕΑΕΚ, Παν. Αθηνών (πρόγραμμα STREP 1/1/2006- 30/4/2006)

Δ. Σούλας, μεταπτυχιακός φοιτητής, ΕΠΕΑΕΚ, Παν. Αθηνών (πρόγραμμα STREP 1/1/2006- 31/12/2006)

Μ. Χερουβείμ, μεταπτυχιακή φοιτήτρια ΕΠΕΑΕΚ, Παν. Αθηνών (άμισθη)

Α. Χασίμη, μεταπτυχιακή φοιτήτρια ΕΠΕΑΕΚ, Παν. Αθηνών (άμισθη)

Κ. Μανώλη, μεταπτυχιακή φοιτήτρια ΕΠΕΑΕΚ, Παν. Αθηνών (άμισθη)

Αντικείμενο Έργου

Αντικείμενο του έργου είναι η θεωρητική και πειραματική μελέτη ροφήσεως και διαχύσεως μικρομοριακών ουσιών σε πολυμερικά υλικά.

Το θεωρητικό μέρος περιλαμβάνει την ανάπτυξη υποδειγμάτων ή προσομοιώσεων στον υπολογιστή, σε μακροσκοπικό ή σε μοριακό/νάνο επίπεδο που αποσκοπεί (α) στην πρόβλεψη των παραμέτρων ροφήσεως και διαχύσεως και (β) 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 (α) της κατά Fick ή μη κατά-Fick ροφήσεως ατμών ή υγρών σε πολυμερικά φιλμ με σταθμική και διάφορες οπτικές τεχνικές και (β) της επίδρασης διαφόρων παραγόντων στην κινητική αποδέσμευσης δραστικών ουσιών από πολυμερικά μονολιθικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, ενεργοποιούμενα με την είσοδο του νερού.

Οι μελέτες αυτές αποσκοπούν στην ανάπτυξη του κατάλληλου επιστημονικού υποβάθρου για τον ορθολογικό σχεδιασμό ευρέως φάσματος εφαρμογών (συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, διαπερατοεκλεκτικών μεμβρανών, υλικά συσκευασίας, λιθογραφικό στάδιο της παραγωγής ολοκληρωμένων κυκλωμάτων)

Objectives

The Laboratory of Transport of Matter Phenomena is concerned with the study of micromolecular sorption and transport in polymeric materials by a combination of theoretical and experimental approaches.

The theoretical part involves computer-assisted modelling at both the molecular/nano and macroscopic levels, aiming primarily at (i) the predictive evaluation of sorption and diffusivity parameters and (ii) the realistic simulation of complex transport phenomena (including diffusion in relaxing polymers, in nonhomogeneous or in composite, media, as well as diffusion coupled with chemical reaction or other concurrent diffusion processes).

The experimental part is primarily concerned with systematic investigation of (i) Fickian/nonFickian vapor or liquid sorption in polymer films, using gravimetric microbalance and various optical techniques and (ii) the effect of various factors on the kinetics of release obtained from matrix controlled release devices, activated by the ingress of solvent.

The aim of the work is to help create the basic scientific background for the optimization of the design of polymeric materials for important applications (controlled release systems, permselective membranes, packaging, microchip manufacture, etc).

Δημοσιεύσεις

1. Dimos V.; Sanopoulou M. "Determination of Sorption Kinetic Parameters Using the Relaxation Dependent Solubility Model in the Methanol Vapor – Poly(methyl methacrylate) System" *J. Applied Polym. Sci.* **2006**, 100, 2278-2288.
2. Manoli, K.; Goustouridis, D.; Chatzandroulis, S.; Raptis, J.; Valamontes, E. S.; Sanopoulou, M. "Vapor Sorption in Thin Supported Polymer Films Studied by White Light Interferometry" *Polymer* **2006**, 47, 6117-6122.
3. Papadokostaki, K.G.; Stavropoulou A.; Sanopoulou M.; Petropoulos, J.H. "A Model for the Prediction of the Performance of Multilayered Polymeric Matrix-Controlled Release Devices" *Desalination* **2006**, 199, 441-442.
4. Soulas, D.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Osmotically Enhanced Drug Release from Hydrophobic Elastomeric Matrices" *Desalination* **2006**, 200, 491-492.
5. Dimos V.; Sanopoulou M. "Experimental and theoretical investigation of anomalous sorption kinetics in the methanol vapor – poly(methyl methacrylate) system at 35 °C" *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.* **2006**, 44, 3173-3184.
6. Galiatsatou, G.; Kanellopoulos, N.K.; Petropoulos, J.H. "Characterization of the Transport Properties of Membranes of Uncertain Macroscopic Structural Homogeneity" *J. Membrane Sci.* **2006**, 280, 634-642.
7. Galiatsatou P.; Kanellopoulos, N.K.; Petropoulos, J.H. "Comprehensive time-lag measurement as a diagnostic and analytical tool for non-Fickian transport studies: a salient porous barrier-gaseous permeant test case" *Phys. Chem. Phys.* **2006**, 8, 3741-3748.
8. Douvas, A.M.; Van Roey F.; Goethals, M.; Papadokostaki, K.G.; Yannakopoulou K.; Niakoula, D.; Gogolides E.; Argitis, P. "Partially fluorinated, polyhedral oligomeric silsesquioxane- functionalized (meth)acrylate resists for 193 nm bilayer lithography" *Chem. Mater.* **2006**, 18, 4040-4048.
9. 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.* *in press*
10. Jaczewska, J.; Budkowski, A.; Raptis, I.; Raczowska, J.; Goustouridis, D.; Rysz, J.; Sanopoulou, M. "Humidity and Solvent Effects in Spin-Coated Polythiophene- Polystyrene Blends" *J. Appl. Polym. Sci.* *in press*

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Papadokostaki, K.G.; Stavropoulou A.; Sanopoulou M.; Petropoulos, J.H. "A Model for the Prediction of the Performance of Multilayered Polymeric Matrix-Controlled Release Devices" Euromembrane 2006, Giardini Naxos, Taormina (Messina), Italy, Sept 24-28, 2006.
2. Soulas, D.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Osmotically Enhanced Drug Release from Hydrophobic Elastomeric Matrices" Euromembrane 2006, Giardini Naxos, Taormina (Messina), Italy, Sept 24-28, 2006.

3. Hasimi, A.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Effect of Polymer Degree of Swelling on the Controlled Release of Model drugs from Poly(vinyl Alcohol) Matrix Systems" 6^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, Πάτρα, 3-6 Νοεμβρίου 2006, Πρακτικά σελ. 310-311.
4. Soulas, D.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. " Regulation of Drug Release from Silicone Rubber Matrices by the Use of Osmotically Active Excipients and Multi-layer Devices" 6^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, Πάτρα, 3-6 Νοεμβρίου 2006, Πρακτικά, σελ.151-153.
5. Douvas, A.M.; Papadokostaki, K.G.; Yannakopoulou, K.; Niakoula, D.; Gogolides, E.; Argitis, P. "Polyhedral-Oligomeric-Silsesquioxane (POSS) Containing Resists for 193 nm Bilayer Lithography: the Effect of Partial Fluorination on the Lithographic Behaviour" 6^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, Πάτρα, 3-6 Νοεμβρίου 2006, Πρακτικά, σελ. 120.
6. Manoli, K.; Goustourides, D.; Chatzandroulis, S.; Raptis, I.; Sanopoulou, M. «Vapor Sorption in Thin Supported Films of Methacrylic Polymers» 6^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Πολυμερών, Πάτρα, 3-6 Νοεμβρίου 2006, Πρακτικά, σελ. 204-205.

Διαλέξεις

1. Α. Σταυροπούλου «Πειραματική και Θεωρητική Μελέτη Συστημάτων Ελεγχόμενης Αποδέσμευσης», Ημερίδα Παρουσιάσεων διδακτορικών Διατριβών Ινστ. Φυσικοχημείας, 1/12/2006, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»
2. Α. Χασίμη «Μελέτη της Επίδρασης του Βαθμού Διόγκωσης του Πολυμερούς στην Ελεγχόμενη Αποδέσμευση Προτύπων Φαρμάκων Διαφορετικής Διαλυτότητας από Μονολιθικά Συστήματα Πολυβινυλικής Αλκοόλης», Ημερίδα Παρουσιάσεων Μεταπτυχιακών Εργασιών Ινστ. Φυσικοχημείας, 8/12/2006, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία Μεταπτυχιακών Μαθημάτων

1. Μ. Σανοπούλου, Μεταπτυχιακό Μάθημα: «Ρόφηση και Διάχυση σε Πολυμερή. Εφαρμογές στους Διαχωρισμούς Μιγμάτων και σε Συστήματα Ελεγχόμενης Αποδέσμευσης», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών. Απρίλιος- Μάιος 2006.
2. Κ. Παπαδοκωστάκη, Μεταπτυχιακό Μάθημα: «Ρόφηση και Διάχυση σε Πολυμερή. Εφαρμογές σε Συστήματα Ελεγχόμενης Αποδέσμευσης», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιούνιος 2006.

Διδασκαλία σε Θερινό Σχολείο

1. Κ. Papadokostaki "Polymers in Controlled Drug Release", Nano2Life Summer School "Methods in Micro-Nano Technology and Biotechnology", NCSR "Demokritos", Athens, July 2006.
2. Κ. Παπαδοκωστάκη, «Πολυμερικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης βιοδραστικών ουσιών», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ιούλιος 2006

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

1. Α. Σταυροπούλου, "Πειραματική και θεωρητική μελέτη πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης», Διδακτορικό Δίπλωμα , Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου

Αθηνών, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. Πρόγραμμα STREP FP6, Priority 3, NMP “Computer aided molecular design of multifunctional materials with controlled permeability properties” [MULTIMAT] (Contract no.: 013644), Επιστημ. Υπεύθυνος Δ. Θεοδώρου, Διοικητικός Υπεύθυνος Μ. Σανοπούλου
Διάρκεια Έργου: 1/3/2005-28/2/2008 Συνολική χρηματοδότηση ΙΦΧ από ΕΕ: 173.117 ευρώ, Συνολική χρηματοδότηση Εργαστηρίου από ΕΕ: 86.308 ευρώ.
2. ΕΠΑΝ, Μέτρο 4.5, Δράση 4.4.1 «Αντιμετώπιση Παθολογικών Καταστάσεων με Συνδυαστική Χρήση Βιο-ιατρικών και Νανοτεχνολογικών Μεθόδων» Επιστημονικός Υπεύθυνος Δρ. Ε. Τσιλιμπάρη, Ινστιτούτο Βιολογίας ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Διάρκεια Έργου 2005-2007, Χρηματοδότηση Εργαστηρίου: 50.000 ευρώ
3. ΠΕΠ Αττικής, Μέτρο 1.2 «Ανάπτυξη Καινοτόμων Βιοενεργών Νανουλικών για Διάγνωση και Παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία» Επιστημονικός Υπεύθυνος Δρ. Ε. Τσιλιμπάρη, Ινστιτούτο Βιολογίας ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Διάρκεια Έργου 2006-2008, Συνολική χρηματοδότηση ΙΦΧ :133.000 ευρώ . Συνολική χρηματοδότηση Εργαστηρίου 9.500 ευρώ.
4. ΕΠΑΝ Μέτρο 4.3, Δράση 4.3.6.1 Πρόγραμμα Διακρατικής Συνεργασίας Ελλάδας-Πολωνίας –ΓΓΕΤ «Έλεγχος Μορφολογικών Χαρακτηριστικών Υπέρλεπτων Υμενίων Πολυμερικών Μιγμάτων για Εφαρμογές σε Οργανικές Οπτο-ηλεκτρονικές Διατάξεις» Επιστημονικός Υπεύθυνος για την Ελληνική Πλευρά : Μ. Σανοπούλου, Διάρκεια Έργου 2006-2008, Χρηματοδότηση Ελληνικής Πλευράς: 11.740 ευρώ

Συνεργασίες

1. Δρ. Ι. Ράπτης, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, Αξιολόγηση συστημάτων λιθογραφίας και χημικών αισθητήρων (Πρόγραμμα 4 ανωτέρω, κοινή επίβλεψη διατριβής της Κας Μανώλη)
2. Δρ Π. Αργεΐτης, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, Χαρακτηρισμός συστημάτων λιθογραφίας
3. Καθ. Α. Budkowski , Μ. Smoluchowski Institute of Physics, Jagellonian University, Krakow, Poland (Πρόγραμμα 4, ανωτέρω).
4. Δρ. Ι. Οικονόμου, Καθηγ. Δ. Θεοδώρου, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστ. Φυσικοχημείας {Πρόγραμμα 1, ανωτέρω)

Άλλες Δραστηριότητες

- Κριτές ερευνητικών άρθρων που υποβλήθηκαν το 2005 για δημοσίευση στα περιοδικά JZUS, J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys., J. Appl. Polym. Sci., Eur. Polym. J. (Μ. Σανοπούλου), Eur. Polym. J., Macromolecular Bioscience, Australian J. Chem. (Κ. Παπαδοκωστάκη) και Macromolecules, J. Membrane Sci., J. Polym. Sci. Polym. Phys., J. Colloid and Interface Sci., J. Chem. Soc. Faraday Trans., Eur. Polym. J. (Ι. Πετρόπουλος)
- Μέλος του Editorial Board του περιοδικού J. Membrane Sci. (Ι. Πετρόπουλος)

Μ. Σανοπούλου, Κ. Παπαδοκωστάκη, Μέλη της επιτροπής επιλογής υποτρόφων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

ΕΡΓΟ:ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΚΑΙ ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

STATISTICAL MECHANICS AND NON-LINEAR DYNAMICS LABORATORY

Προσωπικό

Δρ. Α. Προβατά, Ερευνητής Α

Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης, Μεταδιδακτορικός Ερευνητής

Βασιλική Νουσίου, Μεταπτυχιακός Υπότροφος

Θωμάς Οικονόμου, Μεταπτυχιακός Ερευνητής

Νικόλαος Κούβαρης, Μεταπτυχιακός Υπότροφος

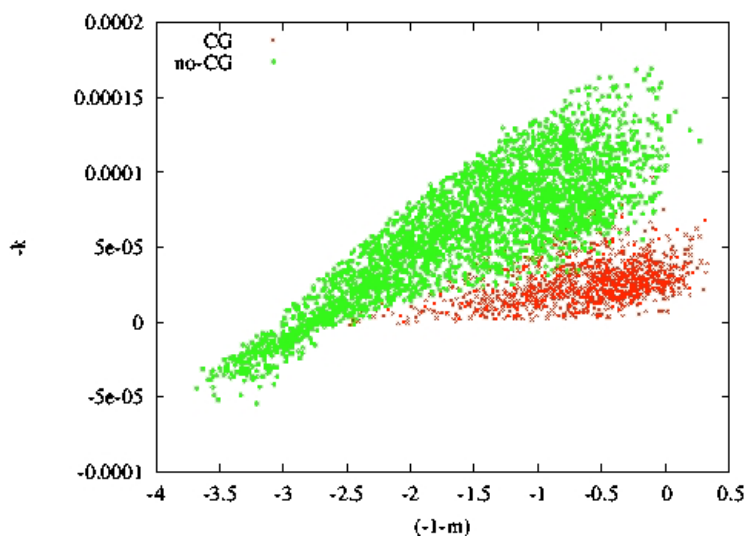
Αντικείμενο Έργου

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 ματαξύ 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.

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, κ.α. Για την μελέτη μηχανισμών ανάπτυξης μορφωμάτων χρησιμοποιούμε μη-γραμμικά μοντέλα ιεραρχικής πολυπλοκότητας, θεωρίες μέσου πεδίου, μέθοδοι ακριβούς απαρίθμησης, θεωρία Επανακανονικοποίησης Πραγματικού Χώρου (real space renormalisation), θεωρία στοχαστικών διαδικασιών (stochastic processes) και υπολογιστικές μέθοδοι τύπου 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.

The Laboratory of “Statistical Mechanics and Non-linear Dynamics” was formed in 02/2004 as part of the Institute of Physical Chemistry. Its research focuses on the development of Statistical Mechanical and Non-linear Dynamical methods for the study of development of mesoscopic and macroscopic patterns and correlations due to the local interactions between particles at the microscopic level. Such structures include spatiotemporal patterns, aggregates, spiral and stripe formations, helices, fractals etc which can be experimentally observed in material science, physics, chemistry and biology. Our studies in particular include research on fractal pattern formation and correlations near the critical point in phase transitions (eg the gas-liquid phase transition) but also in open systems in constant exchange with the environment, such as in the noncoding DNA. Away from the critical point and in closed, isolated systems (such as in coding DNA), short range correlations and spatiotemporal patterns with well-defined length and time scales are studied (eg. spiral and stripe formations, helices etc.). The study of these structures at the micro-, meso- and macro scale and the interaction between these three levels of description has major technological impact in materials science and physical, chemical and biological processes.



Εικ. 1: Διαχωρισμός ολιγονουκλεοτιδίων που εμπεριέχουν την διπλέττα CG (κόκκινο χρώμα) από όλα τα υπόλοιπα ολιγονουκλεοτίδια (πράσινο χρώμα), στο χρωμόσωμα 22 του ανθρώπου.

Fig. 1: Splitting between oligomers containing the CG doublet (red) from the non-CG ones (green) in the human chromosome 22.

For the study of such complex systems in the lab we develop a) statistical methods/tools describing complex morphologies and b) modelling of the dynamics of pattern formation. Statistical methods include thermodynamic approaches, entropic (extensive and non-extensive) approaches, theory of long and short range distributions, and Levi distributions. For the study of the mechanisms creating complex patterns, non-linear dynamical systems of hierarchical complexity are used, together with mean-field theories, exact enumeration methods, real space renormalisation theory, theory of stochastic processes and numerical Monte Carlo Methods.

Applications in the lab include, among others, studies of surface phenomena and aggregates with fractal morphology, bioinformatics, statistical analysis and modelling of biological macromolecules, non-linear studies of open and closed catalytic surface reactions etc.

Δημοσιεύσεις

1. P. Katsaloulis, T. Theoharis W. M. Zheng, B. L. Hao A. Bountis, Y. Almirantis and A. Provata, "Long Range Correlations of RNA Polymerase II Promoter Sequences Across Organisms", *Physica A*, **366**, 308-322 (2006).
2. Th. Oikonomou and A. Provata, "Nonextensive Trends in the Size Distributions of Coding and Noncoding DNA Sequences in the Human Genome", *European Physical Journal B*, **50**, 259-264 (2006).
3. G. A. Tsekouras and A. Provata, "Fractal Formations in the Lattice Limit Cycle Model", *European Physical Journal B*, **52**, 107-111 (2006).
4. O. Chichigina, G. A. Tsekouras and A. Provata, "Entropy, Free Energy and Phase Transitions in the Lattice Lotka-Volterra Model", *J. Exp. Theor. Phys.* +, **103**, 623-631 (2006).
5. V. K. Noussiou and A. Provata, "Fractal Pattern Formations in the Ziff-Gulari-Barshad Model", accepted to *J. Phys. C In press*.

Κεφάλαια σε πρακτικά συνεδρίων

1. Π. Κατσαλούλης, Θ. Θεοχάρης και Α. Προβατά, Τίτλος: "Συσσωμάτωση και κατανομές μακράς εμβέλειας σε κατανομές ολιγονουκλεοτιδίων χρωμοσωμάτων ανωτέρων οργανισμών", Πρακτικά 18ου Πανελλήνιου Συνεδρίου & Θερινού Σχολείου "Μη-γραμμική Επιστήμη και Πολυπλοκότητα", Βόλος, Ιούλιος 2005, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Θεσσαλίας (Εκδότες: Αναστάσιος Μπούνης και Νικόλαος Βλάχος), Βόλος 2006, σελ. 297-306.
2. Β. Κ. Νουσίου και Α. Προβατά, Τίτλος: "Επίδραση της γεωμετρίας του υποστρώματος και ταλαντώσεις λόγω αναδιάταξης στο μοντέλο Ziff-Gulari-Barshad", Πρακτικά 18ου Πανελλήνιου Συνεδρίου & Θερινού Σχολείου "Μη-γραμμική Επιστήμη και Πολυπλοκότητα", Βόλος, Ιούλιος 2005, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Θεσσαλίας (Εκδότες: Αναστάσιος Μπούνης και Νικόλαος Βλάχος), Βόλος 2006, σελ. 279-287.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια (posters)

V. K. Noussiou, A. Provata, "Simulating the oscillatory CO oxidation on reconstructing Pt surfaces", Gordon Research Conference on Oscillations & Dynamic Instabilities in Chemical Systems, Oxford, UK, July 30 - August 4 2006.

Διδακτικό Έργο

Masters & Διδακτορικά

B. K. Νουσίου, "Υπολογιστική Μελέτη Ταλαντώσεων κατά την Οξείδωση του CO σε Αναδιατασσόμενη Επιφάνεια του Καταλύτη Pt(100)", Διατριβή Μεταπτυχιακού Τίτλου Σπουδών (Master), Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Φεβρουάριος 2006.

Π. Κατσαλούλης, "Μη-γραμμική Ανάλυση και Οπτικοποίηση Γονιδιώματος Εξελικτικά Νεώτερων Οργανισμών", Διδακτορική Διατριβή, Τμήμα Πληροφορικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σεπτέμβριος 2006.

Διαλέξεις

1. Α. Προβατά, Ακαδημία Αθηνών, Ινστιτούτο Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Αστρονομίας, Αθήνα : “Χαρακτηριστικοί Εκθέτες στο Ανθρώπινο Γονιδίωμα”, 31 Ιανουαρίου 2006 (προσκεκλημένη ομιλία).
2. Α. Provata, Humbolt Universitat zu Berlin, Department of Physics, Berlin, Germany. Τίτλος: “Non-linear Dynamics on Low Dimensional Lattices”, 2 Μαΐου , 2006 (ομιλία με πρόσκληση).
3. Α. Provata, University of Hannover, Department of Electrochemistry, Hannover, Germany. Τίτλος: “Oscillatory Dynamics in the Ziff-Gulari-Barshad Model”, 4 Μαΐου, 2006 (ομιλία με πρόσκληση).
4. Π. Κατσαλούλης, 18^ο Πανελλήνιο Συνέδριο Μη-γραμμικής Δυναμικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη. Τίτλος: “Μη-γραμμική Ανάλυση και Οπτικοποίηση του Γονιδιώματος Εξελικτικά Νεώτερων Οργανισμών”, Ιούλιος 18-30, 2005 (ομιλία).
5. P. Katsaloulis, E. Floros, A. Provata, Y. Cotronis, T. Theoharis, International Special Topic Conference on 'Information Technology in Biomedicine' by IEEE and EMB, University of Ioannina, Ioannina. Title: "Gridification of the SHMap Biocomputational Algorithm", 26 October, 2006.
6. Π. Κατσαλούλης, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος», Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Αθήνα. Τίτλος “Μη Γραμμική Ανάλυση και Οπτικοποίηση του Γονιδιώματος Εξελικτικά Νεότερων Οργανισμών”, Νοέμβριος, 2006.
7. Α. Προβατά, Θερινό Σχολείο ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Αθήνα. Τίτλος: “Fractals και Εφαρμογές τους στις Φυσικές Επιστήμες”, 10-21 Ιουλίου, 2006 (ομιλία).
8. Α. Προβατά, 2ο Θερινό Σχολείο Μαθηματικής Προτυποποίησης-2005, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα. Τίτλος: “DNA: Δομή, Ιδιότητες και Λειτουργικότητα” 1-5 Σεπτεμβρίου, 2006 (ομιλία με πρόσκληση).
9. Θ. Οικονόμου, School of Medicine, Department of Medical Genetics, University of Athens, Athens. Τίτλος: “Βιολειτουργίες Αλληλουχιών του DNA» " (Biofunctionality of DNA Sequences)”, Φεβρουάριος 2006.
10. Θ. Οικονόμου, School of Medicine, Department of Biological Chemistry, University of Athens, Athens. Τίτλος: “Αθροιστική Ανάλυση Αλληλουχιών του DNA στο Ανθρώπινο Γονιδίωμα» (Cumulative Analysis of DNA Sequences in the Human Genome)”, Μάρτιος 2006.
11. Θ. Οικονόμου, 3rd Annual Scientific Conference, Medical School, University of Athens, Athens, Greece, Τίτλος: “Μη γραμμική Ανάλυση 6 Ανθρώπινων Χρωμοσωμάτων» (Non-Linear Analysis of 6 Human Chromosomes)”, Μάιος 2006.
12. Th. Oikonomou Conference in New Directions in Complex Systems, Istanbul, Turkey. Τίτλος: “Nonextensive Analysis of Human DNA”, 3-9 Σεπτεμβρίου 2006.
13. Th. Oikonomou, School and Conference on Complex Systems and Nonextensive Statistical Mechanics, Abdus Salam ICTP, Trieste, Italy. Τίτλος: “Nonextensivity in the Coding and Non-coding Size Distributions of Human DNA Sequences” 31 Ιουλίου – 8 Αυγούστου 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

2002-2006 Πρόγραμμα Ηράκλειτος, Υπουργείο Παιδείας.

Θέμα: <<Μη-γραμμική Ανάλυση και Οπτικοποίηση Ολιγονουκλεοτιδιακών Ακολουθιών στο Γονιδίωμα Ανώτερων Οργανισμών>>.

Συνεργασία με το Τμήμα Πληροφορικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών (Αναπλ. Καθ. Θ. Θεοχάρη). Προ υπολογισμός για τον Δημόκριτο: 3000 Ευρώ.

2004-2006 Πρόγραμμα Πυθαγόρας, Υπουργείο Παιδείας.

Θέμα: <<Πειραματική, Αριθμητική και Θεωρητική Ανάλυση Πολύπλοκων Συστημάτων>>.

Συνεργασία με το Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών (Αναπλ. Καθ. Κ. Ευταξίας). Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: 3000 Ευρώ.

Επιστημονικός Υπεύθυνος για τον Δημόκριτο : Α. Προβατά

2004-2008 COST Scientific Network.

Θέμα: <<MOLSIMU: Forging the Missing Link: From Molecular Simulations to Nanoscale Experiments>>.

Δίκτυο Ευρωπαϊκής Συνεργασίας. Coordinator: Καθ. Peter Nielaba, Konstanz, Germany. Συνολικός Προϋπολογισμός: 400.000 Euro.

Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο: ~10 000 Euro .

Συνεργασίες

1. Δρ. Ι. Αλμυράντη, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτούτο Βιολογίας, ‘Στατιστική Περιγραφή της Πρωτοταγούς Δομής του DNA’
2. Καθ. G. Nicolis, Free University of Brussels, Service de Chimie-Physique, Brussels, Belgium, ‘‘Entropic Representations of DNA’’
3. Dr. F. Baras, Universite de Bourgogne, Dijon, France, ‘‘Chemical Dynamics on Low Dimensional Supports’’.
4. Prof. B. J. Howlin, University of Surrey, Department of Chemistry, UK, ‘Modelling of Long DNA sequences using Monte-Carlo Annealing’
5. Prof. BaiLin Hao and Dr. Wei-Mou Zheng, Κινεζική Ακαδημία Επιστημών, Πεκίνο, Κίνα ‘Statistical Properties and Correlations of Genomic Data and Biological Time Series’
6. Καθ. Α. Μπούντη, Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μαθηματικών, Πάτρα, ‘Statistical Properties and Correlations of Genomic Data and Biological Time Series’
7. Καθ. Θ. Θεοχάρη, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής, Αθήνα, ‘Non-linear Dynamics in the Genome of Higher Eucaryotes’
8. Καθ. Δ. Φραντζεσκάκη και Δρ. Φ. Διάκονο, Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Φυσικής, Αθήνα, ‘Non-linear Dynamics on Low Dimensional Lattices’
9. Prof. V. Anischenko, Prof. Y. Astakhov and Dr. A. Shabunin, University of Saratov, Department of Physics, Saratov, Russia, ‘Μη-γραμμική Περιγραφή Χημικής Δυναμικής σε Πλέγματα Χαμηλής και Μορφοκλασματικής Διάστασης’.
10. Καθ. Α. Τσεκούρα και Α. Κούτσελο, Τμήμα Χημείας, Παν. Αθηνών, ‘Χημική Δυναμική Καταλυτικών Αντιδράσεων’.
11. Καθ. Δ. Κουγιουμτζή, Πολυτεχνική Σχολή, Παν. Θεσσαλονίκης, ‘‘Δημιουργία Μορφωμάτων σε Πλέγματα Χαμηλών Διαστάσεων’’.

Άλλες Δραστηριότητες

Α. Προβατά

1. Μέλος τριών τριμελών επιτροπών διδακτορικών διατριβών (Πανεπιστήμιο Αθηνών Τμήμα Πληροφορικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης Πολυτεχνική Σχολή).
2. Μέλος επταμελούς εξεταστικής επιτροπής διδακτορικής διατριβής (Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Πληροφορικής).
3. Επιστημονικός Υπεύθυνος, από την πλευρά του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, της Διδακτορικής Διατριβής της Β. Νουσίου, σε συνεργασία με το Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών.
4. Επιστημονικός Υπεύθυνος, από την πλευρά του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, της Διδακτορικής Διατριβής του Θ. Οικονόμου, σε συνεργασία με την Ιατρική Σχολή, Παν. Αθηνών.
5. Επιστημονικός Υπεύθυνος, από την πλευρά του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, της Διδακτορικής Διατριβής του Ν. Κούβαρη, σε συνεργασία με την Πολυτεχνική Σχολή, Παν. Θεσσαλονίκης.
6. Κριτής ερευνητικών άρθρων που υποβλήθηκαν για δημοσίευση στα περιοδικά Physical Review E, Physical Review Letters, Europhysics Letters, Physics Letters A , Physica A, Tectonophysics, Bulletin of Mathematical Biology.
7. Μέλος Επιτροπής Εκπαίδευσης Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και Ινστιτούτου Ραδιοϊσοτόπων και Ραδιενεργών Προϊόντων.
8. Μέλος επιτροπής διοργάνωσης του 19 Συνεδρίου/Θερινού Σχολείου "Μη-γραμμική Δυναμική: Τάξη και Χάος", Θεσσαλονίκη, Ιούλιος 2006.
9. Μέλος επιτροπής διοργάνωσης/προγράμματος ΑΝΟΙΚΤΕΣ ΘΥΡΕΣ του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».
10. Α. Προβατά: Επαγγελματική Επίσκεψη στο University of Hannover, Hannover, Germany, 04/05/2006.
11. Κριτής Ερευνητικών Προγραμμάτων για την Austrian Science Foundation (FWF).
12. Α. Προβατά: Επαγγελματική Επίσκεψη στο Humbolt University, Berlin, Germany, στο διάστημα 01/05/2006 έως 07/05/2006.
13. Ιδρυτικό μέλος και Διοικητικός Υπεύθυνος της Ομάδας Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”.

2. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια



ΕΡΓΟ: MEMBRANES ΚΑΙ ΜΙΚΡΟΠΟΡΩΔΗ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΟΥΣ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΥΣ

MATERIALS & MEMBRANES FOR ENVIRONMENTAL SEPARATIONS LABORATORY

Υπεύθυνος έργου: Δρ. Νικόλαος Κανελλόπουλος, Ερευνητής Α'

Δρ. Θοδωρής Στεριώτης, Ερευνητής Β'

Δρ. Κώστας Στεφανόπουλος, Ερευνητής Γ'

Δρ. Φώτης Κατσαρός, Ερευνητής Γ'

Δρ. Γιώργος Ρωμανός, Ερευνητής Γ'

Δρ. Νικόλαος Κακιζής, Ειδικό Επιστημονικό Προσωπικό

Ευάγγελος Κούβελος, Ειδικό Επιστημονικό Προσωπικό

Γιώργος Πιλάτος, Επιστ. Συνεργάτης

Στέφανος Χρήστου, Επιστ. Συνεργάτης

Αλέξανδρος Γιακουμάκης, Επιστ. Συνεργάτης

Edward Zinger, Επιστ. Συνεργάτης

Γιώργος Αβρονιδάκης, Επιστ. Συνεργάτης

Δρ. John Nolan, Μεταδιδακτορικός Επιστ. Συνεργάτης

Δρ. Σοφία Κληρονόμου, Μεταδιδακτορικός Επιστ. Συνεργάτης

Δρ. Βασίλης Δήμος, Μεταδιδακτορικός Επιστ. Συνεργάτης

Μεταπτυχιακοί Φοιτητές

Ανδρέας Σαπαλίδης

Ευάγγελος Φάββας

Σέργιος Παπαγεωργίου

Χρυσούλα Αθανασέκου

Ελένη Βερμίσογλου

Μάριος Τσιγώνιας

Αναστάσιος Λαμπρόπουλος

Ζαχαρίας Σπένδος

Χαριτωμένη Βεζίρη

Βίκτωρας Ακύλλας

Αναστάσιος Γκότζιας

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 πορωδών 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).
- Μελέτη δομής πορωδών υλικών και ροφημένης φάσης (σε υπο- και υπερ- κρίσιμες συνθήκες) με τεχνικές περίθλασης νετρονίων (ND), σκέδασης νετρονίων υπό μικρές γωνίες (SANS) και σκέδασης νετρονίων υπό πολύ μικρές γωνίες (USANS).
- Ανακατασκευή πορωδών μέσων βάσει δεδομένων τομογραφίας σάρωσης ή μικρογωνιακής σκέδασης και προσομοίωση διεργασιών ρόφησης και μεταφοράς μάζας στα ανακατασκευασμένα υλικά.
- Προσομοίωση ρόφησης σε υποδείγματα πόρων με τεχνικές Monte Carlo
- Ανάπτυξη νέων υλικών για αποθήκευση υδρογόνου (νανοσύνθετα υλικά άνθρακα μετάλλων)
- Χαρακτηρισμός υλικών για αποθήκευση υδρογόνου (πορώδη υλικά, μεταλλικά υδρίδια, υδατικές ενώσεις εγκλεισμού)

Objectives

- Characterization of Pore Structure (pore size distribution, surface area, pore volume, pore connectivity) : Nitrogen and Mercury porosimetry, absolute and relative permeability of gases (single – multi phase), Microscopy / Spectroscopy.
- Development – Modification of membranes with the following processes: Chemical Vapor Deposition [CVD], Deposition Langmuir-Blodgett, Plasma treatment, Phase Eversion, Carbonization – Activation
- Evaluation / Control of the behaviour of porous materials (membranes, activated carbon filters etc) in various environmental and industrial applications (gas pollutants separations, gas permeability, reversed osmosis, control release systems, transcutaneous drug dosing)
- Structural studies of porous media and/or sorbed phases by neutron diffraction, small angle neutron scattering and ultra small angle neutron scattering
- Reconstruction of porous media based on TEM or SANS data and simulation of sorption and mass transfer in the reconstructed media.
- Simulation of sorption in model pore systems by Monte Carlo techniques
- Development of new materials for hydrogen storage (carbon-metal nanocomposites)
- Characterization of materials for hydrogen storage (porous media, metal hydrides, clathrate hydrates)

Δημοσιεύσεις

1. S. S. Makridis, M. Konstantakou, Th. A. Steriotis, E. Pavlidou, K. G. Efthimiadis, M. Daniil, A. Ioannidou, E. S. Kikkinides, A. K. Stubos, “Structural and Magnetic Properties of New $Zr(Fe_{0.8}Cu_{0.2})_2$ and $Zr(Fe_{0.8}Cu_{0.1}Co_{0.1})_2$ Hydrogen Storage Materials”, *Materials Science Forum* **514-516**, 432-436 (2006).
2. S. S. Makridis, C. Christodoulou, M. Konstantakou, Th. A. Steriotis, M. Daniil, A. Ioannidou, E. S. Kikkinides, A. K. Stubos, “Intermetallic Hydrides Based on (Zr-Ti)(Fe-Cr)₂ Type of Compounds”, *Materials Science Forum* **514-516**, 666-671 (2006).
3. E. S. Kikkinides, M. Konstantakou, M. C. Georgiadis, Th. A. Steriotis, A. K. Stubos, “Multiscale Modeling and Optimization of H₂ Storage Using Nanoporous Adsorbents”, *AIChE Journal*, **52 (8)**, 2964-2977 (2006).

4. M. Konstantakou, S. Samios, Th. A. Steriotis, M. Kainourgiakis, G. K. Papadopoulos, E. S. Kikkinides and A.K. Stubos, "Determination of pore size distribution in microporous carbons based on CO₂ and H₂ sorption data", *Stud. Surf. Sci. & Catalysis*, **160**, 543-550 (2002).
5. J.D.F. Ramsay, M. Kainourgiakis, Th. A. Steriotis and A.K. Stubos, "Digital reconstruction of silica gels based on small angle neutron scattering data" *Stud. Surf. Sci. & Catalysis*, **160**, 137-144 (2006).
6. E.S. Kikkinides, K.L. Stefanopoulos, Th.A. Steriotis, A.Ch. Mitropoulos and N.K. Kanellopoulos, Characterisation of nanostructured materials by combination of neutron scattering and 3D stochastic reconstruction techniques" *Stud. Surf. Sci. & Catalysis*, **160**, 415-422 (2006).
7. F. K. Katsaros, Th.A. Steriotis, A.K. Stubos, N.K. Kanellopoulos and S.R. Tennison, "Effect of activation process on resin based activated carbons", *Stud. Surf. Sci. & Catalysis*, **160**, 599-606 (2006).
8. Galiatsatou, P. , Kanellopoulos, N.K. , Petropoulos, J.H., "Comprehensive time-lag measurement as a diagnostic and analytical tool for non-Fickian transport studies: A salient porous barrier-gaseous permeant test case", *Physical Chemistry Chemical Physics*, **8**, 3741-3748 (2006).
9. Papageorgiou, S.K., Katsaros, F.K., Kouvelos, E.P., Nolan, J.W., Le Deit, H., Kanellopoulos, N.K., "Heavy metal sorption by calcium alginate beads from *Laminaria digitata*", *Journal of Hazardous Materials*, **137**, 1765-1772 (2006).
10. Galiatsatou, P., Kanellopoulos, N.K., Petropoulos, J.H., "Characterization of the transport properties of membranes of uncertain macroscopic structural homogeneity", *Journal of Membrane Science*, **280**, 634-642 (2006)
11. E. Kouvelos, K. Kesore, T. Steriotis, H. Grigoropoulou, D. Bouloubasi, N. Theophilou, S. Tzintzos and N. Kanellopoulos, "High pressure N₂/CH₄ adsorption measurements in clinoptilolites", *Microporous and Mesoporous Materials* in press, Available online 16 November 2006
12. F.K. Katsaros, Th.A. Steriotis, G.E. Romanos, M. Konstantakou, A.K. Stubos and N.K. Kanellopoulos, "Preparation and characterisation of gas selective microporous carbon membranes", *Microporous and Mesoporous Materials* in press, Available online 31 October 2006
13. A. Lambropoulos, G. Romanos, Th. Steriotis, J. Nolan, F. Katsaros, E. Kouvelos, G. Charalambopoulou and N. Kanellopoulos, "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* in press, Available online 31 October 2006
14. E.C. Vermisoglou, V. Georgakilas, E. Kouvelos, G. Pilatos, K. Viras, G. Romanos and N.K. Kanellopoulos, "Sorption properties of modified single-walled carbon nanotubes", *Microporous and Mesoporous Materials*, in press, Available online 31 October 2006
15. A. B. Bourlinos, Th. A. Steriotis, M. Karakassides, Y. Sanakis, V. Tzitzios, C. Trapalis, E. Kouvelos, A. Stubos, "Synthesis, characterization and gas sorption properties of a molecularly derived graphite oxide-like nanofoam", *Carbon*, in press, Available online 18 December 2006
16. M. Konstantakou, Th.A. Steriotis, G.K. Papadopoulos, M. Kainourgiakis, E.S. Kikkinides and A.K. Stubos, "Characterization of nanoporous carbons by combining CO₂ and H₂ sorption data with the Monte Carlo simulations", *Applied Surface Science*, in press, Available online 27 December 2006

17. 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*, in press, Available online 8 January 2007
18. A.A. Sapalidis, F.K. Katsaros, G.E. Romanos, N.K. Kakizis and N.K. Kanellopoulos, "Preparation and characterization of novel poly-(vinyl alcohol)–Zostera flakes composites for packaging applications", *Composites Part B: Engineering*, in press, Available online 30 October 2006
19. 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*, in press, Available online 20 December 2006

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. E.S. Kikkinides, M. Konstantakou, M.C. Georgiadis, Th. Steriotis, A.K. Stubos, Multiscale heat and mass transfer modeling and optimization of hydrogen solid storage systems, Proceedings of "Advanced Materials for Energy Conversion III", Edited by D. Chandra, J. Petrovic, R. G. Bautista, A. Imam, pp 187-198, TMS 2006 Annual Meeting; March 12-16, 2006 — San Antonio, TX, USA.
2. M. Konstantakou, Th. A. Steriotis, G. K. Papadopoulos, M. Kainourgiakis, E. S. Kikkinides and A. K. Stubos, Characterization of nanoporous carbons by combining CO₂ and H₂ sorption data with Monte Carlo simulations, International Symposium on Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis 6, August 28-September 2, 2006, Zakopane, Poland.
3. 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, International Symposium on Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis 6, August 28-September 2, 2006, Zakopane, Poland.
4. A.P. Athanasekou, F.K. Katsaros, A.A. Sapalidis, N.K. Kakizis, and N.K. Kanellopoulos, Sorption and oil dispersion studies using quartz crystal microbalance, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
5. D. Bouloubasi, N. Theophilou, S. Tzintzos, E. Kouvelos, and N.K. Kanellopoulos, Development of selective zeolitic adsorbents through ion exchange for natural gas purification and biogas enrichment, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
6. S. Papageorgiou, E. Kouvelos, F.Katsaros, N. Kanellopoulos, Heavy metal sorption by calcium alginate beads from laminaria sp, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006

7. G. I. Pilatos, P. Andrianopoulos, H. Veziri, E. Kouvelos and N. K. Kanellopoulos, High surface spherical activated carbon absorbents, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
8. G. Pilatos, P. Andrianopoulos, G.E. Romanos, E. Kouvelos, N.K. Kakizis, N.K. Kanellopoulos, N. Kartel, V. Strelko, A. Grigoriev, D. Shvets, Study of the bactericidal and catalytic degradation properties of high surface spherical carbon absorbents impregnated with metal salts, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
9. M. Tsigonias, T. Travinskaya, Y. Savelyev, V. Dimos, K. Papadokostaki, N. Kanellopoulos, Preparation and characterization of polyurethane-alginate thin films, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
10. E. C. Vermisoglou, V. Georgakilas, E. Kouvelos, G. Pilatos and N. K. Kanellopoulos, Sorption properties of soluble single- walled carbon nanotubes, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
11. E. P. Favvas, G. I. Pilatos, E. P. Kouvelos, A. Ch. Mitropoulos, and N. K. Kanellopoulos Preparation and characterization of highly selective microporous carbon hollow fiber membranes, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
12. A. Labropoulos, G. Romanos, Th. Steriotis, J. Nolan, F. Katsaros, E. Kouvelos, G. Charalambopoulou and N.K. Kanellopoulos, Application of an innovative mercury intrusion technique and relative permeability to examine the thin layer pores of sol-gel and cvd derived membranes, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
13. E. C. Vermisoglou, G. Pilatos, G. Romanos N. Boukos, and N. K. Kanellopoulos Synthesis and characterization of carbon nanotube membranes, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
14. F.K. Katsaros, Th.A. Steriotis, G.E. Romanos, A.K. Stubos and N.K. Kanellopoulos Preparation and characterisation of gas selective microporous carbon membranes, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006
15. A.A. Sapalidis, F.K. Katsaros and N.K. Kanellopoulos, Preparation and characterization of novel poly(vinyl alcohol) – zostera flakes composites for packaging applications, 1st International Workshop of the European Network of Excellence INSIDE POREs (IN Situ

Study and DEvelopment of Processes Involving NanoPORous Solids), La Grande Motte, Montpellier, France, March 19th rd- 23, 2006

16. N.I. Papadimitriou, I.N. Tsimpanogiannis, A.G. Yiotis, Th.A. Steriotis, A.K. Stubos, “On the Use of the Kihara Potential for Hydrate Equilibrium Calculations”, 11th International Conference on the Physics and Chemistry of Ice, PCI 2006, 23-28 July 2006, Bremerhaven – Germany

Προσκεκλημένες Διαλέξεις

1. Theodore Steriotis, “Multiscale heat and mass transfer modeling and optimization of hydrogen solid storage systems”, TMS 2006 Annual Meeting;— San Antonio, TX, USA, March 12-16, 2006.
2. Th. Steriotis, “NESSHY: The European Integrated Project on Hydrogen Storage in Solids”, Invited Lecture, International Energy Agency Task 17 "Solid and Liquid State Hydrogen Storage Materials", Experts Workshop, 1-4 May 2006, Lake District - UK
3. Nick Kanellopoulos, “Use of SuperTool for in-situ characterisation of porous materials”, 1st International Workshop on IN-Situ Study and DEvelopment of Processes Involving PORous Solids, La Grande Motte, France, March 19-23rd, 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

(α) Κύριος ανάδοχος του έργου (coordinator):

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), Instituto di Chimica dei Mateiali (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 CO₂/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).

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).

3. BIOPAL (QLRT-2001-02431) “Algae as a Raw Material for Production of Bioplastics and Biocomposites Contributing to Sustainable Development of European Coastal Regions” Partners to NCSR “D”: CEVA (France), Solutions Plastiques (France), Centro Ricerche Fiat (Italy), Chemistry & Industrial Chemistry Department, University of Pisa (Italy), Organic Waste Systems (Belgium), Biomass Laboratory ENEA (Italy), Communauti de Communes (France), Amt Klötzler Winkel (Germany). NCSR”D” Budget: 207.000 €. (March 2003-February 2006).

4. PROTOP (EVK3-CT-2-2-30004) Craft-1999-71938 “Production of Tensioactives from Oleaginous Plants Chains and Polysaccharides from Ulva” Partners to NCSR “D”: Javenech S.A. (France), CEVA (France), ICP (Malta), Kavala Oil S.A. (Greece), EPE S.A. (Greece), ITERG (France). Total budget: 465.500 €, NCSR”D” Budget: 118.700 €. (March 2003-February 2006).

5. EPAN-BIMETAL F.P. 39 14010/19-10-2003, “Exploitation of Bioactive Metabolites from Marine Algae” NKUA-Dept. Pharmacy, Div. of Pharmacognosy & Chemistry of Natural Products, NKUA-Dept. Chemistry, Industrial Laboratory-Polymers, NCSR “DEMOKRITOS”, FAMAR S.A., Silver & Baryte Ores Mining Co. S. A., APIVITA S.A., INTERCHEM HELLAS S.A., SUC HELLAS Ltd. Total Budget: 1.858.155 €. NCSR”D” Budget: 245.400€. (June 2003-May 2006)

6. FOOD XME “Developing Crossflow Membrane Emulsification for the Food Industry” Partners to NCSR “D”: Disperse Technologies (UK), Aromex (France), Merry’s (Ireland), Spak Feinkost (Austria), AGFT (Poland), Microspun Products (Poland), Eleourgiki (Greece), Fairey Industrial Ceramics (UK), Institute of Food Research (UK), Dairy Products Research Centre (Ireland), LVA (Austria), Warsaw Institute of Technology (Poland). NCSR”D” Budget: 40.000 €. (December 2004-November 2006)

7. ΕΕ 1118 EPAN – 8.3.6 – Ανθρώπινα Δίκτυα Ε&Τ Επιμόρφωσης: Θεματικός Τομέας: «Εκμετάλλευση Βιοαερίου Χώρων Ταφής Απορριμάτων με Στόχο την Προστασία του Περιβάλλοντος», Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης - Ινστιτούτο Τεχνικής Χημικών Διεργασιών (ΕΚΕΤΑ/ΙΤΧΗΔ), Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Εργαστήριο Μηχανών Εσωτερικής Καύσης, Πανεπιστήμιο Πατρών, ΗΛΕΚΤΩΡ Ανώνυμος Εταιρεία Ενεργειακών & Περιβαλλοντικών Εφαρμογών, ΕΛΒΙΟ Α.Ε. Συστήματα Παραγωγής Υδρογόνου και Ενέργειας, Κέντρο Περιβάλλοντος Νομού Κοζάνης.

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. Θεοδορίδης, 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.

ΕΡΓΟ: ΦΩΤΟΟΞΕΙΔΟΑΝΑΓΩΓΙΚΗ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΚΑΙ ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΤΗΣ ΗΛΙΑΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ – ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ, ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

PHOTOREDOX CONVERSION AND STORAGE OF SOLAR ENERGY–DEVELOPMENT OF NEW FUNCTIONAL MATERIALS FOR ENERGY AND ENVIRONMENTAL APPLICATIONS

Προσωπικό

Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας, Διευθυντής Ερευνών, Υπεύθυνος του Έργου (ΕΚΕΦΕ Δ)
Δρ. Αθανάσιος Φιλιππόπουλος, Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ' Βαθμίδας (ΕΚΕΦΕ Δ)
Δρ. Θωμάς Στεργιόπουλος, Μεταδιδακτορικός συνεργάτης (Πρόγραμμα STREP)
Δρ. Αθανάσιος Γ. Κόντος, Μεταδιδακτορικός συνεργάτης (Πρόγραμμα STREP)
Ευαγγελία Χατζηβασίλογλου, Μεταπτυχιακός υπότροφος (ΕΚΕΦΕ Δ)
Γεωργία Κόντη, Μεταπτυχιακός υπότροφος (ΕΚΕΦΕ Δ)
Αθανάσιος Ι. Κοντός, Μεταπτυχιακός Συνεργάτης (Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ)
Ευαγγελία Ρόζη, Μεταπτυχιακός Συνεργάτης (Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ)
Νίκη Αλεξάκη, Μεταπτυχιακός Συνεργάτης (Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ)
Γεώργιος Καντώνης, Μεταπτυχιακός Συνεργάτης (Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ)
Δημήτριος Τσούκληρης, Τεχνική Υποστήριξη (Πρόγραμμα STREP)

Αντικείμενο Έργου

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

1. Φωτοευαισθητοποιημένες Ηλιακές Κυψελίδες

Ευαισθητοποίηση ημιαγωγών (κυρίως TiO_2 και SnO_2) για αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική. Με χρήση μεθόδων Χημείας sol-gel, ερευνάται η δυνατότητα ανάπτυξης νανοδομημένων υλικών (εναιωρήματα, πάστες, υμένια) και κατασκευής σταθερών φωτοηλεκτροδίων με μεγάλο ανάπτυγμα επιφάνειας. Η έρευνα στοχεύει σε έλεγχο των σταδίων συμπύκνωσης και υδρόλυσης του πρόδρομου διαλύματος, συγκρίνοντας διάφορες τεχνικές παρασκευής (screen printing, doctor blade, spin coating, dip coating) και βελτιστοποιώντας τις σχετικές παραμέτρους απόθεσης. Γίνεται επίσης συντονισμένη προσπάθεια σύνθεσης νέων χρωστικών (σύμπλοκα) καθώς και αναλυτική μελέτη των αποδόσεων των αντίστοιχων ευαισθητοποιημένων ηλεκτροδίων (νανοδομημένα υμένια, νανοσωλήνες, κλπ) με στόχο την άμεση πρακτική εφαρμογή με κατασκευή πρότυπης φωτοηλεκτροχημικής ηλιακής κυψελίδας. Παράλληλα μελετάται η δυνατότητα ανάπτυξης οργανικών ηλιακών κυψελίδων με τη χρήση συζυγών πολυμερών-οργανικών ημιαγωγών.

Εντατική έρευνα σε ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες για περαιτέρω ανάπτυξή τους (αποδόσεις, χρόνος ζωής), ενταγμένη σε ανταγωνιστικά προγράμματα, κατά κανόνα ευρωπαϊκά. Αξιοποίηση των δυνατοτήτων του FP7, ως συνέχεια και επέκταση των προγραμμάτων που υλοποιούνται στα πλαίσια του FP6. Συνεργασία με ελληνικές εταιρίες και φορείς του εξωτερικού (EPFL Lausanne-Switzerland και Dyesol- Australia) για την μεταφορά τεχνολογίας και τη δημιουργία μονάδας παραγωγής των νέων φωτοβολταϊκών στην Ελλάδα (κυψελίδες και πάνελς). 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 διεργασιών (ετερογενείς αντιδράσεις μεταφοράς φορτίου) που λαμβάνουν χώρα στη διεπιφάνεια ημιαγωγού/υγρού, /στερεού ή /αέρα. Γίνεται ανάπτυξη καινοτόμων νανοδομημένων φωτοκαταλυτών τιτανίας (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) ευαισθητοποίησης 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 στην καταστροφή ρύπων (ανόργανων και οργανικών), στην αποικοδόμηση βακτηρίων, μυκήτων, και ιών. 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.

Objectives

The research activities are mainly centered on the investigation of photoinduced processes involving semiconducting nanomaterials and their application to direct conversion of solar energy to electricity as well as to environmental cleaning and protection:

1. Dye-sensitization of large band-gap semiconductors

The direct conversion of solar energy to electricity is investigated by developing heterojunctions consisting of large band-gap semiconductors sensitized by light harvesting molecular antennas. The main objectives concern the investigation, tuning and optimization of photoinduced processes taking place at the semiconductor/dye/electrolyte interface. Essential emphasis is given to the design, synthesis/preparation, characterization, theoretical analysis/modeling and evaluation of performance of multifunctional inorganic photonic compounds [metal oxide thin films (nanoparticulate and nanotube), transition metal complexes) and redox nanocomposite polymer electrolytes as well as their efficient incorporation in photoelectrochemical devices.

Intensive research activity for development and optimization of dye-sensitized solar cells in terms of efficiency and life-time. Implementation of the FP6 research projects and further expansion into FP7. Collaboration with the private sector and foreign partners (EPFL Lausanne-Switzerland και Dyesol- Australia) for technology transfer and creation of DSSC manufacturing

facility in Greece (cells and panels). Demonstration activities in the field of building integrated photovoltaics.

2. Innovative nanostructured photocatalysts for environmental cleaning and health protection

Heterogeneous photocatalytic processes and related applications are investigated, involving functional photonic materials in the nanometer scale. The scientific effort aims at improving the efficiency of photocatalytic processes via: a) increase of the photocatalyst effective surface area; b) efficient separation of the photogenerated charge carriers (e^- and h^+); c) photocatalytic sensitization into the Vis light region-shift of the absorption onset; d) judicious balance of photocatalytic and superhydrophilic properties on multi-dynamic surfaces able to photochemically decompose harmful organics, kill bacteria and viruses and being easily self-cleaned; e) increased anticancer and anticoagulant action of titanium dioxide on neoplasm and inflammatory cells.

Δημοσιεύσεις

1. Arabatzis, I.M; Falaras, P. “Noble Metal Nanoclusters Function on Titania Photocatalytic Surfaces” In: *Frontiers in Catalysis Research*, Book edited by Lawrence P. Bevy, Nova Science Publishers, Inc. NY, 2006, Chapter 5, pp 135-147(invited).
2. Dinh, N.N; Bernard, M.C, Hugot-Le Goff, A; Stergiopoulos, T; Falaras, P. “Photoelectrochemical solar cells based on SnO_2 nanocrystalline films” *Comptes Rendus Chimie*, 9 (2006) 676-683.
3. Deslouis, C; Falaras, P; Gil, O; Jeannin, M ; Maillot, V; Tribollet, B. “Influence of clay on calcareous deposit in natural and artificial sea water” *Electrochimica Acta*, 51 (2006) 3173-3180.
4. Kontos, A.G.; Fardis, M; Stergiopoulos, T; Prodromidis, M; E. Chatzivasiloglou, G. Papavassiliou and P. Falaras, “Morphology, ionic diffusion and applicability of novel polymer gel electrolytes with LiI/I_2 ”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2006, 8, 767 – 776.
5. Ying Xu, Wen-Kai Chen, Mei-Juan Cao, Shu-Hong Liu, Jun-Qian Li, Athanassios. I. Philippopoulos and Polycarpus **Falaras**, “A TD-DFT study on the electronic spectrum of Ru(II)L_2 [L = bis(5'-methyl-2,2'-bipyridine-6-carboxylato)] in the gas phase and DMF solution”, *Chemical Physics*, 330 (2006) 204-211.
6. Adrian-Raul Tomşa, Aglaia Koutsodimou, Polycarpus Falaras, Marie-Claude Bernard, Vladimir Graban, Mariana Rusu, “Synthesis and Characterisation of New Rare-Earth Sandwich-Type Tungstoarsenates”, *Synthesis and Reactivity in Inorganic, Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry*, 36 (2006) 335–344.
7. Filippou AC, Weidemann N, Philippopoulos AI, Schnakenburg G, “Activation of aryl germanium(II) chlorides by $[\text{Mo}(\text{PMe}_3)(6)]$ and $[\text{W}(\eta^2\text{-CH}_2\text{PMe}_2)\text{H}(\text{PMe}_3)(4)]$: A new route to metal-germanium triple bonds”, *Angewandte Chemie-International Edition*, 45 (36): 5987-5991 2006.
8. Jonathan Faiz, Athanassios I. Philippopoulos, Athanassios G. Kontos, Polycarpus Falaras and Zoe Pikramenou, “Functional supramolecular ruthenium cyclodextrin dyes for nanocrystalline solar cells”, *Advanced Functional Materials*, in press.
9. A. I. Kontos, A. G. Kontos, D. S. Tsoukleris, G. D. Vlachos, Polycarpus Falaras, “Superhydrophilicity and photocatalytic property of nanocrystalline Titania sol-gel films”, *Thin Solid Films*, accepted.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. Modified nanostructured titania materials and methods of manufacture (P. Falaras), Patent Application, P17347WO/DJC/ejn, 19-12-2006.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. D.S. Tsoukleris, A. I. Kontos, P. Aloupogiannis, P. Falaras, 'Photocatalytic properties of screen-printing titania' EAAOP-1, 7-9 September 2006, Chania – Crete, Greece, Book of Abstracts, p. 311.
2. Stergiopoulos T.; Chatzivasiloglou E.; Kontos A. G.; Alexis N.; Prodromidis M.; Falaras P., "Filler, cation and solvent effects on poly(ethyleneoxide)-based nanocomposite electrolytes for dye-sensitized solar cells", 6th Hellenic Conference on Polymers, Patra, Greece, 3-5 November 2006, Book of Abstracts, p. 154-155.
3. Καντώνης Γ.; Στεργιόπουλος Θ.; Φαλάρας Π., «Θερμική κατεργασία πορωδών υμενίων νανοκρυσταλλικής τιτανίας» Πανελλήνιο Συνέδριο Μεταπτυχιακών Φοιτητών Χημείας, Σαντορίνη, 7-9 Ιουλίου 2006, Βιβλίο Πρακτικών, σ.17.
4. Katsanaki Antigoni, Karagianni Haido, D. S. Tsoukleris, P. Falaras, 'Preparation and characterization of nanocrystalline Pt/TCG counter electrodes for dye-sensitized solar cells' SPEA 4, 8-10 November 2006, Las Palmas de Gran Canaria, Spain, Book of Abstracts, p. 176-177.
5. D.S. Tsoukleris, T. Maggos, C. Vassilakos, P. Falaras, 'Photocatalytic degradation of volatile organics on TiO₂ embedded glass spherules' SPEA4, 8-10 November 2006, Las Palmas de Gran Canaria, Spain, Book of Abstracts, p. 218-219.
6. A. Ibhadon, D.S. Tsoukleris, P. Falaras, Gas-phase catalytic oxidations using titania nanocatalysts, The 10th Annual Green Chemistry and Engineering Conference (Washington, June 26 - 30, 2006). Book of Abstracts, p. 67.
7. Α.Ι. Κοντός και Π. Φαλάρας, Βελτιστοποίηση της φωτοκαταλυτικής δράσης και της υπερυδροφιλικότητας υμενίων τιτανίας, 9^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Κατάλυσης, Λευκάδα, 6-7 Οκτωβρίου 2006, Βιβλίο Περιλήψεων, 44.

Διαλέξεις

1. P. Falaras, "Raman: an accurate tool for evaluation of Titania and DSC Interfaces", Invited lecture to the "Industrialisation of DSC - from research to products" Conference, Canberra, Australia, 9 February 2006.
2. P. Falaras. 'Photocatalytic properties of screen-printing titania' EAAOP-1, 8 September 2006, Chania – Crete, Greece
3. Falaras P., "Filler, cation and solvent effects on poly(ethyleneoxide)-based nanocomposite electrolytes for dye-sensitized solar cells", 6th Hellenic Conference on Polymers, Patra, Greece, 5 November 2006.
4. T. Stergiopoulos, "Ti-nanotubes: surface analysis, surface modification and photoinduced applications" University of Nuremberg-Erlangen, 27 November 2006.
5. Α.Ι. Κοντός, "Βελτιστοποίηση της φωτοκαταλυτικής δράσης και της υπερυδροφιλικότητας υμενίων τιτανίας", 9^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Κατάλυσης, Λευκάδα, 7 Οκτωβρίου 2006

6. Katsanaki Antigoni, 'Preparation and characterization of nanocrystalline Pt/TCG counter electrodes for dye-sensitized solar cells' SPEA4, 9 November 2006, Las Palmas de Gran Canaria, Spain,

Παραμονή-Εργασία μελών της ομάδας στο Εξωτερικό

1. Πολύκαρπος Φαλάρας. Επίσκεψη/συνεργασία στην Εταιρία Dyesol Ltd, Queanbeyan, New South Wales, Australia, 9-10 February 2006
2. D. Tsoukleris. Επίσκεψη στο University of Hull (Hull - England) στα πλαίσια του προγράμματος της Ελληνο-Βρετανικής Συνεργασίας με τίτλο: 'Nano-titania catalysts for environmental applications' υπό την επίβλεψη του Dr. Alex Ibhadon (16-30 Μαρτίου).
3. T. Stergiopoulos and D. Tsoukleris. Επίσκεψη στο University of Erlangen-Nuremberg (Germany) στα πλαίσια του προγράμματος Strep «Ti-nanotubes» (25-28 Νοεμβρίου).

Διδακτορικές Διατριβές

1. Θωμάς Στεργιόπουλος, "Φασματοσκοπικός χαρακτηρισμός ευαισθητοποιημένων φωτοηλεκτροχημικών κυψελίδων", Γενικό Τμήμα του Παν/μίου Πατρών (**υποστήριξη 10-1-2006**).
2. Ευαγγελία Χατζηβασίλογλου, "Σύνθεση και χαρακτηρισμός νέων συμπλόκων του Ρουθηνίου με αζωαρωματικές ενώσεις. Εφαρμογές σε ευαισθητοποιημένες ηλιακές κυψελίδες", Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ (σε εξέλιξη).
3. Κοντός Αθανάσιος, "Ανάπτυξη φωτοκαταλυτικών και υπερυδρόφιλων υλικών με βάση το διοξείδιο του τιτανίου", Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ (σε εξέλιξη).
4. Γεώργιος Καντώνης, "Ανάπτυξη και βελτιστοποίηση ευαισθητοποιημένων ηλιακών κυψελίδων νανοκρυσταλλικής τιτάνιας", Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ (σε εξέλιξη 1^{ος} χρόνος).
5. Ευαγγελία Ρόζη, "Οργανικές ηλιακές κυψελίδες", Τμήμα Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ (σε εξέλιξη 1^{ος} χρόνος).
6. Νίκη Αλεξάκη, "Φασματοσκοπικός χαρακτηρισμός οργανικών ηλιακών κυψελίδων με Φασματοσκοπία RAMAN και Φασματοσκοπία Ηλεκτροχημικής Εμπέδησης", Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του ΕΜΠ (σε εξέλιξη 1^{ος} χρόνος).

Εκπόνηση Μεταπτυχιακών (Master)

1. Γεωργία Κόντη, "Σύνθεση και χαρακτηρισμός αρωματικών υποκαταστατών και αντίστοιχων συμπλόκων του δισθενούς ρουθηνίου. Εφαρμογές τους για φωτοευαισθητοποίηση ημιαγωγών", Τμήμα Χημείας Παν/μίου Αθηνών (**υποστήριξη 13-11-2006**).

Διπλωματικές εργασίες

1. Πρακτική άσκηση του Γεωργίου Καλογείτονα, φοιτητή της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ) του ΕΜΠ. Θέμα: "Φωτοβολατικά Συστήματα", Οκτώβριος-Δεκέμβριος 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. “Molecular Engineering of Interfaces of Photonic Devices based on Mesoscopic Oxide layers”, Πρόγραμμα COST Action D35- From Molecules to Molecular Devices, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Μ. Grätzel, 2005-2009.
2. “Ti-nanotubes”, STREP proposal (EU), Επιστημονικός Υπεύθυνος: J. Kunze (under negotiation), 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, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Ε. Τσιλιμπάρη, Ύψος συνολικής χρηματοδότησης: 1.300.000 Ευρώ, 2005-2007.
4. “Οργανικές Ηλιακές Κυψελίδες” Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 118, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Π. Φαλάρας, Ύψος χρηματοδότησης: 235.000 Ευρώ, 2005-2008.
5. “Ανάπτυξη σύνθετων νανοδομημένων υλικών τιτάνιας. Ενσωμάτωση σε πρότυπα φωτοκαταλυτικά δομικά υλικά και εφαρμογή στην αποικοδόμηση υγρών και αέριων ρύπων”, Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 963, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Γ. Παπαβασιλείου, Ύψος χρηματοδότησης: 211.500 Ευρώ, 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, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Τ. Αλμπάνης, 2005-2008.
7. “Ανάπτυξη μοντέλου Δομής-Ιδιοτήτων σε δις-θειο-υποκατεστημένα σύμπλοκα: Σύνθεση ενώσεων με προκαθορισμένες ιδιότητες στην κατάλυση και την φωτοκατάλυση”, Πυθαγόρας, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Χ. Μητσοπούλου 2004-2006.
8. “Δίκτυο Εργαστηρίων Παρακολούθησης Ποιότητας Περιβάλλοντος Ελληνικών Θαλασσών”, ΥΠΕΧΩΔΕ, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Μ. Σκούλος, Ύψος χρηματοδότησης: 30.000 Ευρώ. 2003-2006.
9. “Υπερμοριακά σύμπλοκα Ru κυκλοδεξτρινών για ευαισθητοποιημένες νανοκρυσταλλικές ηλιακές κυψελίδες”. Ελληνοβρετανική πρόταση συνεργασίας. Επιστημονικός υπεύθυνος: Αθ.Ι. Φιλιππόπουλος, Ύψος χρηματοδότησης: 11740 €, 2004-2006.
10. “Nano-titania catalysts for environmental applications”, Πρόγραμμα Ελληνο-Βρετανικής Συνεργασίας, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Π. Φαλάρας, Ύψος χρηματοδότησης: 11740 €, 2004-2006.
11. “Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία”, ΠΕΠ Αττικής, Επιστημονικός υπεύθυνος: Ε. Τσιλιμπάρη, Ύψος χρηματοδότησης (για το ΕΚΕΦΕ Δ): 400.000 Ευρώ.
12. “Ανάπτυξη επιχειρησιακού συστήματος αποτύπωσης (χαρτογράφησης) των επιπέδων συγκέντρωσης αιρουμένων σωματιδίων και της εκτιμημένης έκθεσης πληθυσμού στην Αττική”, ΠΕΠ Αττικής, Επιστημονικός υπεύθυνος: Κ. Ελευθεριάδης, Ύψος χρηματοδότησης (για το ΕΚΕΦΕ Δ): 591.490 Ευρώ.

Συνεργασίες

-M. Grätzel (EPFL Lausanne, Switzerland), J. Kunze (Erlangen, Germany), V. Catalano (Nevada, USA), P. Potvin (Toronto, Canada), Dr. A. Hugot-Le Goff (CNRS-Paris, France), P. Tisnes (Toulouse, France), Z. Picramenou (Birmingham, UK), I. Ράπτη (ΕΜΠ), Μ. Προδρομίδα (Ιωάννινα), G. Tulloch (Dyesol, Australia) σε θέματα νέων φωτοβολταϊκών διατάξεων.

A. Ibhandon (Hull University, UK), Τ. Αλμπάνη (Παν/μιο Ιαννίνων), Γ. Πούλιο (ΑΠΘ), Χ. Μητσοπούλου (Παν/μιο Αθηνών), και Δρ. Γ. Παπαβασιλείου (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος) σε θέματα κατάλυσης και φωτοκατάλυσης.

Άλλες Δραστηριότητες

Κατά το έτος 2006 ο Πολύκαρπος Φαλάρας διατέλεσε:

1. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος (εκλεγμένος εκπρόσωπος ερευνητών).
2. Μέλος του Επιστημονικού Συμβουλίου του Εθνικού Κέντρου Τεκμηρίωσης (ΕΣΕΚΤ)
3. Μέλος του Management Committee της COST Action D35 “From Molecules to Molecular Devices”
4. Εθνικός Εκπρόσωπος στο European Strategy Forum for Research Infrastructures (ESFRI)
5. Κριτής (evaluator) στο Ευρωπαϊκό πρόγραμμα Human Resources and Mobility-Marie Curie RTN του FP6.
6. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Advanced Functional Materials, Applied Catalysis B: Environmental, Applied Surface Science, Catalysis Today, Journal of Hazardous Materials, Journal of Materials Science, Journal of Molecular Catalysis A, Journal of Nanomaterials, Journal of Physical Chemistry, Journal of Photochemistry and Photobiology: A Chemistry, Materials Chemistry and Physics, Powder Technology, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Thin Solid Films, Χημικά Χρονικά.
7. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδακτόρων: Θ. Στεργιόπουλου (Παν/μιο Πατρών), Ε. Χατζηβασιλόγλου (ΕΜΠ), Α.Ι. Κοντού (ΕΜΠ), Π. Μπούρα (Παν/μιο Πατρών), Ευαγγελίας Ρόζη (ΕΜΠ), Νίκης Αξεξάκη (ΕΜΠ), Γεώργιου Καντώνη (ΕΜΠ).
8. Μέλος της επιτροπής επιλογής υποτρόφων του Κοινωφελούς Ιδρύματος Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης
9. Μέλος της επιστημονικής επιτροπής του Διεθνούς Συνεδρίου EAAOP-1, 7-9 September 2006, Chania – Crete, Greece.

ΕΡΓΟ: ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ-ΦΩΤΟΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ (ΗΛΙΑΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ, ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ)

CATALYTIC-PHOTOCATALYTIC PROCESSES (SOLAR ENERGY- ENVIRONMENT)

Προσωπικό

Υπεύθυνη έργου: Δρ. Α. Χισκιά, Ερευνήτρια Β

Δρ. Παπακωνσταντίνου Ηλίας, Επιστημονικός Συνεργάτης, ομότιμος Ερευνητής

Δρ. Θ. Τριάντης, Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ' Βαθμίδας

Τσιμελή Αικατερίνη, Μεταπτυχιακή Υπότροφος "Δ", Υποψήφια Διδάκτωρ ΕΜΠ

Αλεξάκος Γεώργιος, Μεταπτυχιακός Υπότροφος "Δ", εκπόνηση Μεταπτυχιακού (Master) στο Παν/μιο Αθηνών.

Γκίκα Ελένη, MSc, Υποψήφια Διδάκτωρ Παν/μιου Αθηνών, αμειβόμενη από πρόγραμμα

Κόρμαλη Πηγή, Υποψήφια Διδάκτωρ ΕΜΠ, μερικής απασχόλησης, Γενικό Χημείο του Κράτους

Αντωναράκη Σταματία, Υποψήφια Διδάκτωρ ΕΜΠ (άμισθη)

Χασιώτη Ειρήνη, Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια, εκπόνηση Μεταπτυχιακού (Master) στο Παν/μιο Αθηνών (άμισθη)

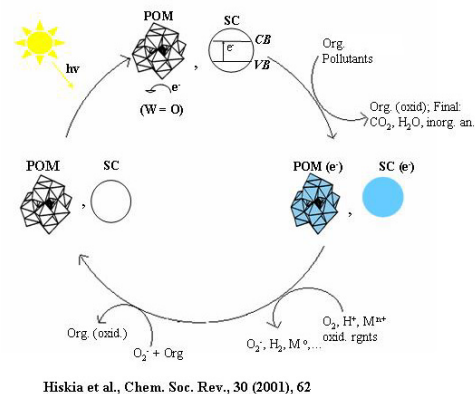
Παρασκευή Γαρυφαλίδη, εκπόνηση Διπλώματος εξειδίκευσης (Master) στο Παν/μιο Αθηνών (άμισθη)

Αναγνώστου Σοφία, Εκπόνηση Διπλωματικής Εργασίας, Παν/μιο Ιωαννίνων

Αντικείμενο Έργου

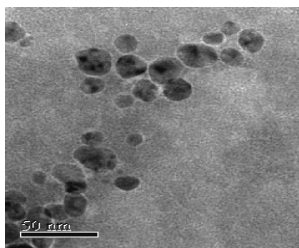
Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές αντιδράσεις με πολυοξειδία μετάλλων στοιχείων μεταπτώσεως, κυρίως TiO_2 , και πολυοξομεταλλικές ενώσεις (POM) κυρίως Mo και W με σκοπό την αξιοποίηση της φωτεινής (ηλιακής) ενέργειας, την απορρύπανση του περιβάλλοντος και την ανάπτυξη χημικών διεργασιών φιλικών προς το περιβάλλον. Επιτεύγματα του Έργου είναι:

(α) διάσπαση νερού (παραγωγή υδρογόνου), (β) φωτοηλεκτροχημική παραγωγή ρεύματος, (γ) διαμόρφωση ηλεκτροδίων, φωτοηλεκτροχημικές αντιδράσεις, (δ) ελεγχόμενη οξείδωση-σύνθεση οργανικών ουσιών, (ε) μη ελεγχόμενη οξείδωση (φωτοαποικοδόμηση) οργανικών ρύπων σε CO_2 , H_2O και ανόργανα ιόντα, (στ) καταβύθιση-απομάκρυνση μεταλλικών ιόντων και (ζ) σύνθεση μεταλλικών νανοσωματιδίων.



Hiskia et al., Chem. Soc. Rev., 30 (2001), 62

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

Objectives

Catalytic photocatalytic reactions for solar energy utilization, environmental detoxification and environmentally friendly processes. In particular aggregates of metal oxides, mainly TiO_2 , and polyoxometallates (POM) mainly of W, are used in thermal and photochemical reactions for: (a) Water splitting (hydrogen production), (b) photoelectrochemical production of electricity, (c) modification of electrodes (photoelectrochemical reactions), (d) selective oxidation-synthesis of organic chemicals, (e) non-selective oxidation (photodegradation) of organic pollutants to CO_2 , H_2O and inorganic anions, (f) reduction-removal of metallic ions and (g) synthesis of metal nanoparticles

Current research interests: (a) immobilization of photocatalysts in optically active and/or inert substrates, (b) synthesis of nanocomposite films of polymer/POM with layer by layer (LbL) technique, characterization and investigation of their photocatalytic properties (c) photocatalytic synthesis of metallic nanoparticles deposited in nanostructured multilayer films (d) sensitisation of photocatalysts towards the visible light and (e) development of new methods of analysis for trace organic pollutants.

Δημοσιεύσεις

1. Kormali, P.; Triantis, T.; Dimoticali, D.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "On the Photooxidative behavior of TiO_2 and Polyoxometalate $\text{PW}_{12}\text{O}_{40}^{3-}$. OH radicals vs holes.", *Applied Catalysis B: Environmental* **2006**, 68, 139-146.
2. Troupis, A.; Gika, E.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalytic Reduction of Metals using Polyoxometallates: Recovery of Metals or Synthesis of Metal Nanoparticles." *Comptes Rendus Chimie* **2006**, 9, 851-857.
3. Hiskia, A.; Troupis, A.; Antonaraki, S.; Gkika, E.; Kormali, P.; Papaconstantinou, E. "Polyoxometallate photocatalysis for decontaminating the aquatic environment from organic and inorganic pollutants.", *Inter. J. Environ. Anal. Chem.* **2006**, 86, 233-242.
4. Gkika, E.; Troupis, A.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalytic Reduction of Chromium and Oxidation of Organics by Polyoxometalates" *Applied Catalysis B: Environmental* **2006**, 62, 28-34.
5. Agiamarnioti K., Triantis T., Papadopoulos K., Scorilas A., "10-(2-Biotinyloxyethyl)-9-acridone: A novel fluorescent label for (strept)avidin-biotin based assays", *J. Photochem. Photobiology A: Chemistry*, **2006**, 181, 126-131.
6. Eliades, Th.; Hiskia, A.; Eliades G.; Athanasiou, A. "Assessment of bisphenol-A release from orthodontic adhesives" *American Journal of Orthodontics and Dentofacial Orthopedics*, in press.
7. Troupis, A.; Gkika, E.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalytic Reductive Destruction of Azo Dyes by Polyoxometalates", *JAOT*, in press.

8. Troupis, A.; Gkika, E.; Triantis, T.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalytic Reductive Destruction of Azo Dyes by Polyoxometallates: Naphthol Blue Black.", *J. Photochem. Photobiology A: Chemistry*, in press.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας (Πατέντες)

1. "Size-Selective Synthesis of Metal Nanoparticles", A. Hiskia, E. Papaconstantinou, International Patent, WO **2006**/038045, PCT/GR2004/000049.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Kormali, P.; Triantis, T.; Dimoticali, D.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalysis by polyoxometallates and TiO₂. A comparative study" First European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes (EAAOP-1), Chania, Greece, 7-9 September 2006.
2. Chassiotou, I; Troupis, A.; Triantis, T.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photochromic Inorganic-Organic Multilayer Film based on Polyoxometallate and Polyethylimine" 16th International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-16), Uppsala, Sweden, July 2-7, 2006.
3. Gkika, E.; Troupis, A.; Triantis, T.; Dasenakis, E.; Hiskia, A.; Papaconstantinou, E. "Photocatalytic Reduction of a typical Azo Dye, Metanil Yellow by the Use of Polyoxometallates", 16th International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy (IPS-16), Uppsala, Sweden, July 2-7, 2006.
4. Agiamarnioti K., Lanitou O., Dimotikali D., Triantis T., Yannakopoulou E., Papadopoulos K., "A novel fluorescent label for (Strept)avidin-biotin based bioassays", 3rd International Conference on Oxidative Stress in Skin Medicine and Biology, Andros, Greece, 21-24 September, 2006.
5. Tsimeli K., Dimotikali D., Hiskia A., "Development of a rapid and sensitive SPME-GC-ECD method for the determination of polychlorinated biphenyls in water", 4th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 10th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Almeria, Spain, 26-29 November, 2006.

Διαλέξεις

1. Hiskia, A., "Photocatalysis by polyoxometallates and TiO₂. A comparative study", First European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes (EAAOP-1), Chania, 7-9 Sep 2006.
2. Triantis T., "Photocatalytic properties of polyoxometallates. Contribution to green chemistry", NATO-ASI Summer School on Green Chemistry, Lecce – Otranto (Italy), 29 October- 10 November 2006.
3. Tsimeli K., "Development of a rapid and sensitive SPME-GC-ECD method for the determination of polychlorinated biphenyls in water", 4th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 10th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Almeria, Spain, 26-29 November, 2006.
4. Τσιμελή Κ., "Χρήση της Τεχνικής Μικροεκχύλισης Στερεάς Φάσης (SPME) σε Συνδυασμό με Αέρια Χρωματογραφία- Φασματομετρία Μάζας (GC-MS) για τον Προσδιορισμό Τοξικών Υπολειμμάτων σε Πολύπλοκα Δείγματα Τροφίμων", Ινστιτούτο Φυτικοχημείας ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 8 Δεκεμβρίου 2006.

5. Γκίκα Ε., “Φωτοκαταλυτική Διάσπαση Οργανικών Ρύπων και Αναγωγή Μετάλλων σε υδατικά διαλύματα παρουσία Πολυοξομεταλλικών Ενώσεων”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 8 Δεκεμβρίου 2006.

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

Δρ. Α. Χισκιά «Προχωρημένες Οξειδωτικές Μέθοδοι», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Φεβρουάριος-Μάρτιος 2006.

Δρ. Α. Χισκιά, «Αναλυτικές μέθοδοι με εφαρμογή στην Περιβαλλοντική Χημεία», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Μάϊος- Ιούνιος 2006.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Διδακτορικές Διατριβές

Γκίκα Ελένη, «Φωτοκαταλυτική Διάσπαση Οργανικών Ρύπων και Αναγωγή Μετάλλων σε υδατικά διαλύματα παρουσία Πολυοξομεταλλικών Ενώσεων», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. «Φωτοαποικοδόμηση υφαντουργικών χρωμάτων με ηλιακό φως και βολφραμικούς καταλύτες», Διμερής επιστημονική συνεργασία Ελλάδος-ΗΠΑ, Επιστ. Υπεύθυνος Η. Παπακωνσταντίνου, 59.850 €, Διάρκεια 32 μήνες, Έναρξη 16/10/2003.
2. «Ακινητοποιημένες ΠΟΜ σε αδρανή και ενεργά υποστρώματα ως ετερογενείς φωτοκαταλύτες στην απορρύπανση υδατικών συστημάτων», Διμερής επιστημονική συνεργασία Ελλάδος-Κίνας, Επιστ. Υπεύθυνος Η. Παπακωνσταντίνου, 12.327 €, Διάρκεια 32 μήνες, Έναρξη 1/8/2003.
3. «Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία», ΠΕΠ Αττικής 2000-2006, Επιστ. Υπεύθυνος: Φ. Τσιλιμπάρη, 9.900 €, Διάρκεια 18 μήνες, Έναρξη 1/9/2006.
4. «Ανάπτυξη ολοκληρωμένου συστήματος παρακολούθησης των κυανοτοξινών σε επιφανειακά και επεξεργασμένα ύδατα με συνδυασμό προηγμένων αναλυτικών μεθόδων», ΠΑΒΕΤ -2005 (σε συνεργασία με την ΕΥΔΑΠ), Επιστ. Υπεύθυνος Έργου: Λ. Κουσουρή, για το ΕΚΕΦΕ "Δ", Δρ. Α. Χισκιά, 27.500 €, Διάρκεια 18 μήνες, Έναρξη 7/2006.
5. «Photocatalysis for the mild and selective Functionalization of non-activated C-H bonds», Πρόγραμμα COST Action D29, Επιστ. Υπεύθυνος: Prof. Angelo Albini, Διάρκεια 4 έτη, Έναρξη 1/1/2004.

Συνεργασίες

Prof. C. Tanielian, Strasbourg, France στο πλαίσιο του Προγράμματος COST D29 με τίτλο "Photocatalysis for the mild and selective Functionalization of non-activated C-H bonds"

Dr. S. Navaratnam, Daresbury, England, Fast Reaction Techniques
 Prof. P.V. Kamat, Notre Dome University, USA, «Φωτοαποικοδόμηση υφαντουργικών χρωμάτων με ηλιακό φως και βολφραμικούς καταλύτες.», στο πλαίσιο της Ελληνο-Αμερικανικής Συνεργασίας.
 Prof. D. Dionysiou, University of Cincinnati, Department of Civil and Environmental Engineering Cincinnati, Ohio, USA, Προχωρημένες Οξειδωτικές Διεργασίες για την καταστροφή κυανοτοξινών.
 Prof. B. Yue, Fudan University, Department of Chemistry, Shanghai, China, “Immobilized Polyoxometalates On Inert And Active Supports Employed As Heterogeneous Photocatalysts For Decontamination Of Aqueous Media”, στο πλαίσιο της Ελληνο-Κινεζικής Συνεργασίας.
 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, Γενικό Χημείο του Κράτους, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων.
 Καθ. Δ. Δημοσικάλη, 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
 Καθ. Ι. Πούλιος, Χημικό Τμήμα, ΑΠΘ, Φωτοκαταλυτικές Διεργασίες.
 Δρ. Δ. Κλέτσα, Ινστ. Βιολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Μελέτη αντικαρκινικών ιδιοτήτων πολυξομεταλλικών ενώσεων.
 Καθ. Θ. Ηλιάδης, Οδοντιατρική Σχολή Παν. Θεσσαλονίκης, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε βιολογικά συστήματα.
 Δρ. Α. Τραυλός, Ινστ. Επιστήμης Υλικών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων.
 Δρ. Π. Φαλάρας, Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Φωτοκαταλυτική οξείδωση ρύπων.
 Δρ. Κ. Παπαδόπουλος, Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Εκλεκτική σύνθεση οργανικών ουσιών φωτοκαταλυτικά.

Άλλες Δραστηριότητες

Δρ. Α. Χισκιά:
 Επίβλεψη 4 Διδακτορικών Διατριβών (Σ. Αντωναράκη, Ε. Γκίκα, Π. Κόρμαλη, Α. Τσιμελή) και 3 Μεταπτυχιακών Τίτλων Εκπαίδευσης (M.Sc.) (Π. Γαρυφαλίδη, (Ε. Χασιώτη, Αντωνάκος Γεώργιος, συνεπίβλεψη Θ. Τριάντης)
 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*.
 Μέλος της Ευρωπαϊκής Επιτροπής Chemistry Action COST D29, Sustainable /Green Chemistry and Chemical Technology.
 Μέλος της Επιτροπής Ερευνών του ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».
 Μέλος της Επιτροπής ΕΤΕΠ (Ελληνικές Τεχνολογικές Επιστημονικές Πρωτοβουλίες) με θέμα «Περιβάλλον Κλιματικές Αλλαγές και Οικοσυστήματα».

Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 2^{ου} Πανελλήνιου Συμποσίου Πράσινης Χημείας και Βιώσιμης Ανάπτυξης, 8-10 Μαρτίου 2007.

Δρ. Θ. Τριάντης:

Απρίλιος 2006 – Ιούνιος 2006: Επισκέπτης Ερευνητής στο Radiation Laboratory - University of Notre Dame – Notre Dame – Indiana – USA στα πλαίσια Προγράμματος Διακρατικής συνεργασίας Ελλάδας - ΗΠΑ. Εκπαίδευση σε τεχνικές Transient Absorption Spectroscopy και μελέτη της φωτοκαταλυτικής αποικοδόμησης χρωστικών παρουσία νανοδομημένων ημιαγωγικών υλικών με χρήση τεχνικών όπως: femto and nanosecond laser flash photolysis. Επιβλέπων Καθηγητής: Prashant Kamat.

29 Οκτωβρίου – 10 Νοεμβρίου 2006: Συμμετοχή, κατόπιν χορήγησης υποτροφίας από τους Διοργανωτές, στο Διεθνές Σχολείο με τίτλο: "New Organic Chemistry Reactions and Methodologies for Green Production". Η διοργάνωσή του έγινε από το Ιταλικό Δίκτυο Πανεπιστημίων «Interuniversity National Consortium "Chemistry for the Environment" (INCA)» στις πόλεις Lecce και Otranto της Ιταλίας και με χρηματοδότηση του NATO Advanced Study Institute (ASI).

Κριτής στα περιοδικά Journal of European Chemistry, Environmental Science and Technology και Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry.

Επίβλεψη Διπλωματικής Εργασίας Σ. Αναγνώστου

Ε. Γκίκα MSc :

19/9/006-15/10/2006, Επίσκεψη, στα πλαίσια του προγράμματος COST - Action D29, στο Εργαστήριο «Ecole européenne de chimie, polymères et matériaux (ECPM)», ULP (Universite Louis Pasteur), Strasbourg, France. Διεξαγωγή πειραμάτων σταθερής κατάστασης με στόχο τον προσδιορισμό της κβαντικής απόδοσης κατανάλωσης οξυγόνου κατά τις φωτοχημικές αντιδράσεις μιας σειράς επιλεγμένων πολυοξομεταλικών ενώσεων. Υπεύθυνοι/επιβλέποντες Καθηγητές: Charles Tanielian/Georges Hadziioannou.

ΕΡΓΟ: ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΑ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑ ΚΑΙ ΣΤΙΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

(ELECTRONIC SPECTROSCOPY LABORATORY: APPLICATION TO SUPRAMOLECULES AND NANOSTRUCTURES)

Υπεύθυνος έργου: Δρ. Γ. Πιστόλης, Ερευνητής Β

Δρ. Α. Μάλλιαρης, Συνεργάτης, τέως Ερευνητής Α

Ι. Μπαλωμένου, Μεταπτυχιακή Υπότροφος

Αντικείμενο Έργου:

- Παρασκευή και φυσικοχημικός χαρακτηρισμός υπερδιακλαδισμένων πολυμερών και δενδριμερών κατάλληλα επισημασμένων με αισθητήρες φθορισμού (sensors) με σκοπό την διερεύνηση θεμελιωδών ιδιοτήτων των πολυμερών, όπως διαστάσεις, διαμορφώσεις, εσωτερική πυκνότητα κ.α..
- Σχεδιασμός παρασκευή και χαρακτηρισμός νέων φωτονικών υλικών υπερμοριακής αρχιτεκτονικής με βάση υπερδιακλαδισμένα πολυμερή και δενδριμερή μόρια κατάλληλα σχεδιασμένα να δρουν σαν μοριακές διατάξεις μεταφοράς ενέργειας σε κατάλληλους υποδοχείς (antenna effect).
- Μελέτη χημικών ισορροπιών σε *Νανοσύνθετα χημικά και βιοχημικά συστήματα*. α) Υπολογισμός σταθερών ισορροπίας, στοιχειομετρίας και δυναμικής συμπεριφοράς συμπλόκων τα οποία συμμετέχουν σε σχήματα πολλαπλών χημικών ισορροπιών. β) Ελεγχόμενη αποδέσμευση φαρμάκων από κατάλληλους υποδοχείς με ρύθμιση του pH.
- Ανάπτυξη μεθοδολογίας οπτικού χαρακτηρισμού λεπτών φωτοευαίσθητων πολυμερικών υμενίων και στην εφαρμογή της α) στον έλεγχο *Nano* και *Μικρο-λιθογραφικών* διεργασιών και β) στην αξιολόγηση μοριακών χημικών συστημάτων για πιθανή χρήση σε οπτικές και ηλεκτρονικές διατάξεις.
- Μελέτες φωτοφυσικών και φωτοχημικών διεργασιών χρωμοφόρων με μεθόδους ηλεκτρονικής φασματοσκοπίας.
- Παρασκευή και φυσικοχημικός χαρακτηρισμός Υπερμοριακών συναρμολογημάτων (nanotubes) τα οποία προκύπτουν μέσω μακρομοριακής αναγνώρισης απλών συμπλόκων εγκλεισμού συνιστάμενα από κυκλοδεξτρίνες και ορισμένα κυλινδρικά μόρια.
- Μελέτη του περιβάλλοντος και ιδιοτήτων Νανοδομών, όπως τα μικύλια, λιπίδια, κυκλοδεξτρίνες και δενδροειδή μόρια με χρήση καταλλήλων ιχνηθετών φθορισμού.
- Μελέτη υπερμοριακών δομών χημικών και βιοχημικών συστημάτων, οι οποίες προέρχονται από μοριακή αναγνώριση συμπληρωματικών μορίων μέσω κατευθυνόμενων δεσμών υδρογόνου.

Objectives

1. Guest stability and Dynamics in Nanocavities
2. Probing of Hydrophobic Nanocavities in Chemical and Biological Systems with Fluorescent Sensors
3. Formation of Noncovalent Nanoarcitectures through π - π^* stacks and Directed Hydrogen Bonding
4. Organized Supramolecular Assemblies: Non-covalently bonded Nanotubes
5. Photophysics and Dynamics of Linear and Dendronized Photonic Polymers: Applications to Organic Light Emission Diodes (OLEDs) and Optical Lithography

Δημοσιεύσεις

- 1 G. Pistolis and I. Balomenou , “Cyclodextrin cavity size effect on the complexation and rotational dynamics of the laser dye 2,5-diphenyl-1,3,4-oxadiazole: From singly occupied complexes to their nanotubular self-assemblies” *J. Phys. Chem. B*, **2006**, 110 (33), 16428
- 2 Vergadou V, **Pistolis G**, Michaelides A, Varvounis G, Siskos M, Boukos N, Skoulika S, “Self-organization of four symmetric tri-phenyl-benzene derivatives ”*Crystal Growth & Design*, **2006** (11): 2486-2492

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Γ. Πιστόλης:

Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής παρακολούθησης της Διδακτορικής Διατριβής της κ. Ιωάννας Μπαλωμένου. Τίτλος: “*Αυτοοργάνωση Νανοδομών βασισμένες σε κυκλοδεξτρίνες*”. Πανεπιστήμιο Πατρών 2005-Σχολή Θετικών Επιστημών- Τμήμα Χημείας.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

“Ανάπτυξη τεχνολογίας ελέγχου του φάσματος οργανικών διόδων εκπομπής φωτός (OLED) και εφαρμογές σε προχωρημένες οπτοηλεκτρονικές διατάξεις” Πρόγραμμα “ΑΡΧΙΜΗΔΗΣ” 2005, Διάρκεια 2 έτη. Υπευθ. Σταθόπουλος Νικόλαος, Αναπλ. Καθηγητής, ΤΕΙ Πειραιά. Ποσόν 3500 Euro για το 2005.

Συνεργασίες

Καθ. Ι. Καλλίτσης, Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Πατρών.

Δρ. Π. Αργεΐτης Ινστ. Μικροηλεκτρονικής ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος

3. Περιβαλλοντική Χημεία και Τεχνολογία



ΕΡΓΟ: ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

ATMOSPHERIC CHEMISTRY

Προσωπικό

Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου, Ερευνητής Β

Αριστοτέλης Μ. Ζάρας, Μεταπτυχιακός Φοιτητής (Υπότροφος, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος")

Σπυρίδων Δ. Χατζηευθυμίου, Μεταπτυχιακός Φοιτητής (Υπότροφος, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος", από κοινού με το Εργαστήριο "Δομική και Υπερμοριακή Χημεία" της Δρ. Ε. Ι. Μαυρίδου)

Αντικείμενο Έργου

Οι ερευνητικές δραστηριότητες του Εργαστηρίου Ατμοσφαιρικής Χημείας κατευθύνονται σε τρεις περιοχές: α) πειραματική μελέτη χημικών αντιδράσεων ατμοσφαιρικής αποικοδόμησης μορίων, β) πρόβλεψη μοριακών ιδιοτήτων υλικών χρησιμοποιώντας μεθόδους υπολογιστικής χημείας και γ) εκτίμηση και βελτίωση της αξιοπιστίας καθώς και μείωση του κόστους των θεωρητικών κβαντομηχανικών υπολογισμών.

Η προσρόφηση των υδροϋπεροξοριζών (HO_2) καθώς και του νιτρικού οξέος HONO_2 σε επιφάνειες πάγου και συσσωματώματα μορίων νερού αποτελεί μία σημαντική πτυχή της στρατοσφαιρικής χημείας και της διαδικασίας καταστροφής του στρατοσφαιρικού όζοντος. Η δομή και η θερμοχημεία των προϊόντων πρόσθεσης των μορίων HO_2 και HONO_2 με συσσωματώματα μορίων νερού $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=1-6$) μελετώνται θεωρητικά χρησιμοποιώντας μεθόδους DFT, MP2 και CCSD(T).

Η πρόσδεση οργανικών ενώσεων με ατμοσφαιρικό ενδιαφέρον σε μικρά συσσωματώματα μορίων νερού και η επίδραση της πρόσδεσης στην κινητική των αντιδράσεων ατμοσφαιρικής αποικοδόμησης των ενώσεων από ρίζες υδροξυλίου και άτομα χλωρίου, μελετάται θεωρητικά με μεθόδους DFT και ab-initio, στα πλαίσια της Θεωρίας Μεταβατικής Κατάστασης.

Η ηλεκτρονιακή δομή και οι μοριακές ιδιότητες συμπλόκων ML_2 της πρώτης σειράς στοιχείων μεταπτώσεως ($M = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) με υποκαταστάτες L προσομοιάζοντες τα ενεργά κέντρα μεταλλοενζύμων μελετώνται με μεθόδους DFT. Η μελέτη αποσκοπεί στην διερεύνηση της εξάρτησης διαφόρων μοριακών ιδιοτήτων από το μέγεθος του κεντρικού μετάλλου.

Research Objectives

The research activities of the Laboratory of Atmospheric Chemistry are directed toward three areas: a) the study of chemical reactions involved in the atmospheric degradation of molecules, b) the prediction of molecular properties of materials using theoretical chemistry methods, and c) the assessment and improvement of reliability, as well as the reduction of the cost of quantum mechanical theoretical calculations.

The adsorption of hydroperoxy radicals HO_2 and nitric acid HONO_2 on ice surfaces and

water clusters constitutes an important aspect of stratospheric chemistry and stratospheric ozone depletion. The structure and thermochemistry of the adducts of HO_2 and HONO_2 molecules with water clusters $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=1-6$) are being theoretically studied by using DFT, MP2 and CCSD(T) methods.

The binding of atmospherically important compounds on small water clusters and its effect on the kinetics of atmospheric degradation reactions by hydroxyl radicals and chlorine atoms is theoretically studied by DFT and ab-initio methods, in the framework of Transition State Theory.

The electronic structure and the molecular properties of first-row transition metal complexes ML_2 ($\text{M} = \text{Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn}$) with ligands L bearing similar functional units as the active sites of certain metalloenzymes are studied by DFT methods. The study aims at the investigation of various molecular properties dependence on the central metal atom size.

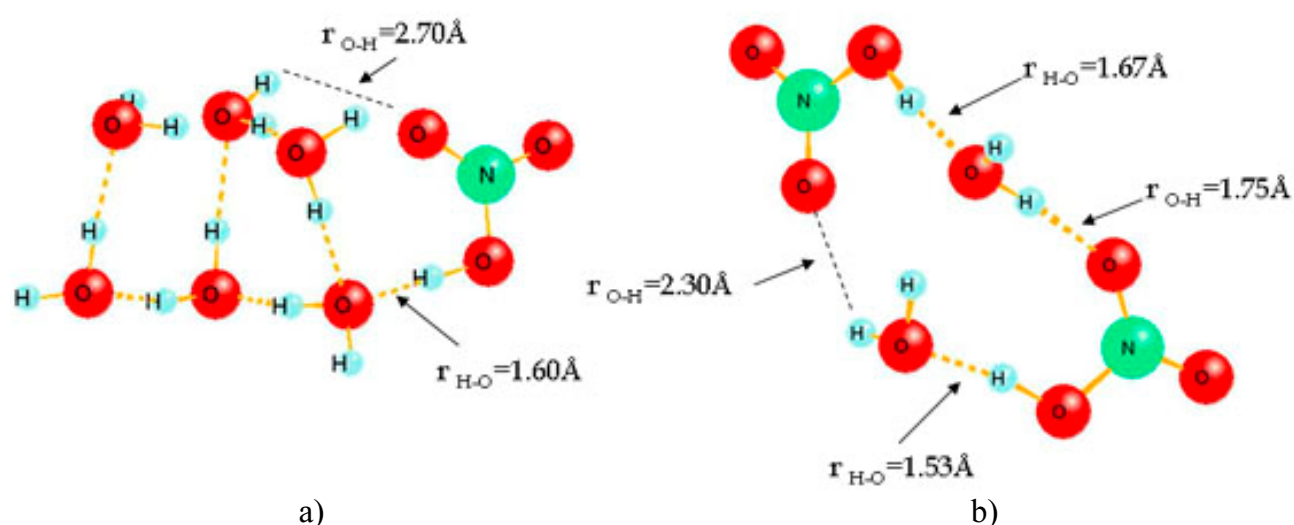


Figure. The most stable conformations of the adducts of a) a nitric acid HONO_2 molecule with a cluster of six water molecules and b) two molecules of nitric acid with two molecules of water, computed at the B3P86/aug-cc-pVDZ level of theory.

Δημοσιεύσεις

S. D. Chatziefthimiou, Y. G. Lazarou, E. Hadjoudis, T. Dziembowska, and I. M. Mavridis, "Keto Forms of Salicylaldehyde Schiff Bases: Structural and Theoretical Aspects", *J. Phys. Chem. B* **2006**, 110, 23701 - 23709

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. V.G. Stefanopoulos, M.N. Romanias, V.C. Papadimitriou, Y.G. Lazarou, A.M. Zaras, P. Papagiannakopoulos, "Heterogeneous interactions of HNO_3 , HO_2 and $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$ with ice surfaces: An experimental and theoretical study", 19th International Symposium on Gas Kinetics, Orléans, France, July 22-27, 2006

2. V.C. Papadimitriou, D.K. Papanastasiou, Y.G. Lazarou, A.M. Zaras, P. Papagiannakopoulos, "Kinetic and Mechanistic Investigation for the Reactions of OH Radicals with a Series of Fluorinated Alcohols in the Gas Phase and SAR Assessment", 19th International Symposium on Gas Kinetics, Orléans, France, July 22-27, 2006

3. D.K. Papanastasiou, V.C. Papadimitriou, Y.G. Lazarou, P. Papagiannakopoulos, "Absolute Rate Determination and Mechanistic Analysis for the Reactions of Cl atoms and OH radicals with $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ and the Major Secondary Oxidation Product, $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{CHO}$ ", 19th International Symposium on Gas Kinetics, Orléans, France, July 22-27, 2006

4. Stefanopoulos, V.G., V.C. Papadimitriou, Y.G. Lazarou, A.M. Zaras and P. Papagiannakopoulos, "Heterogeneous interactions of HNO_3 , HO_2 and $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$ with ice surfaces: An experimental and theoretical study", Second SCOUT-O3 Annual Meeting, FZJ, Jülich, Germany, 20-24 March 2006

Διαλέξεις

Ιωάννης Γ. Λαζάρου, "Η Συνεισφορά της Θεωρητικής Χημείας στην Κατανόηση των Ατμοσφαιρικών Χημικών Διαδικασιών", Θερινό Σχολείο, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε "Δημόκριτος", Αθήνα, Ιούλιος 2006.

Συνεργασίες

Καθηγ. Παναγιώτης Παπαγιαννακόπουλος, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης.

Διεξαγωγή των πειραμάτων στο "Εργαστήριο Φωτοχημείας Laser και Χημικής Κινητικής"

Συμμετοχή του Εργαστηρίου Ατμοσφαιρικής Χημείας στο Πρόγραμμα "Stratospheric Climate Links with Emphasis on the UTLS", (SCOUT-O3), European Commission Research DG's Global Change and Ecosystems Programme.

Ερευνήτρια Δρ. Ειρήνη Μαυρίδου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος".

Φωτοχρωμικά/Θερμοχρωμικά Υλικά.

Ερευνήτρια Δρ. Κωνσταντίνα Γιαννακοπούλου, Ινστ. Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δημόκριτος".

Φωτοχρωμικά/Θερμοχρωμικά Υλικά.

Καθηγ. Igor I. Morozov, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia.

Χημικές αντιδράσεις φθοριομένων αιθέρων και φθοριομένων/χλωριομένων αλκοολών.

Λέκτ. Παναγιώτης Κυρίτσης, Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Δρ. Rita Prosmiti, IMFF, Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, Madrid. Spain.

Θεωρητική μελέτη αντιδράσεων ιωδιομένων ενώσεων.

ΕΡΓΟ: ΙΣΟΤΟΠΙΚΗ ΥΔΡΟΛΟΓΙΑ

ISOTOPE HYDROLOGY

Προσωπικό

Δρ. Ζουριδάκης Νικόλαος, Υπεύθυνος έργου, Ερευνητής Α' Βαθμίδας

Αρνίδη Ελένη, Πτυχιούχος Τ.Ε.Ι., Σύμβαση Έργου

Ματιάτος Ιωάννης, MSc Γεωλόγος, Άμισθος Υποψήφιος Διδάκτωρ

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}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 CO_2 .

Ακόμη, στο εργαστήριο αναπτύχθηκε και εφαρμόζεται μέθοδος προσδιορισμού της συγκέντρωσης του ^{222}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.

Objectives

The program deals with the analysis of the isotopic characteristics of the underground and surface waters and the use of the corresponding results, for the resolution of problems related with the exploitation of aquatic resources and geothermal energy. Such problems are the supply mechanism of aquatic horizons, their potential, the underground water flow speed, the interconnection of aquatic horizons and their interaction with surface reservoirs, as well as the origin of geothermal fluids.

Another research activity is the development of a methodology for the determination of the concentration of natural ^{14}C in the atmosphere and the study of the change of the isotopic ratios $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ and $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ in the atmospheric CO_2 .

Furthermore, a method for the determination of the concentration of ^{222}Rn in water and atmospheric samples using the Liquid Scintillation technique was developed and applied in the laboratory.

The laboratory of Isotope Hydrology is responsible for radioactive tracing in assessed stages of a hydrologic system.

ΕΡΓΟ: Ο ΡΟΛΟΣ ΤΩΝ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

THE ROLE OF TRACE ELEMENTS IN THE ENVIRONMENT

Προσωπικό

Δρ. Κ.Μ. Οξενκιουν, Υπεύθυνος Έργου, Ερευνητής Β΄

Δρ. Γ. Κανιάς, Επίτιμος Ερευνητής

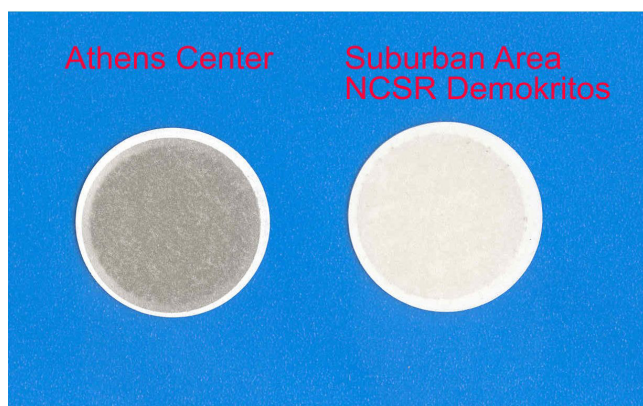
Η μεταβολή της περιβαλλοντικής ισορροπίας από τις ανθρώπινες δραστηριότητες οδηγεί στην ανάγκη για την παρακολούθηση και την βελτίωση του περιβάλλοντος μέσα στο οποίο συμβαίνουν οι μεταβολές αυτές.

Τα ιχνοστοιχεία τοξικά και άλλα βρίσκονται στο περιβάλλον σε διάφορες φυσικοχημικές μορφές και κάθε ποιοτική και ποσοτική αλλαγή τους είναι δείκτης των μεταβολών που συμβαίνουν σε αυτό.

Το εργαστήριο αναπτύσσει και εφαρμόζει διάφορες αναλυτικές μεθόδους για την παρακολούθηση των πιο πάνω μεταβολών στο ατμοσφαιρικό, θαλασσινό περιβάλλον και τη ποιότητα ζωής και συγκεκριμένα :

- α) Την μελέτη των επιπέδων συγκέντρωσης των ιχνοστοιχείων ιδιαίτερα στα αιωρούμενα σωματίδια της ατμόσφαιρας
- β) Την εύρεση των πηγών εκπομπής τους στο περιβάλλον
- γ) Την καταγραφή και τον έλεγχο συμμετοχής κάθε πηγής εκπομπής στο περιβάλλον
- δ) Την μελέτη και τον περιοδικό έλεγχο των Ελληνικών θαλασσών από τοξικά ιχνοστοιχεία και πετρελαιοειδή.
- ε) Την συμμετοχή τους στις περιβαλλοντικές διεργασίες και το βαθμό επίδρασης του περιβάλλοντος αυτού στον άνθρωπο
- ζ) Τη διερεύνηση του τρόπου κάλυψης των ημερησίων αναγκών του ανθρώπου σε ιχνοστοιχεία που θεωρούνται απαραίτητα για την ανάπτυξη και διατήρηση της ζωής
- στ) Την συμπεριφορά διαφόρων υλικών, π.χ. υπεραγωγών σε διάφορες περιβαλλοντικές συνθήκες

Ακόμα το εργαστήριο κάνει μελέτες που αφορούν τη προέλευση ορισμένων αρχαιολογικών αντικειμένων.



Filter samples from the center of Athens and the suburban area of NCSR Demokritos

Sampling device for the fractionated sampling of airborne particulate matter

The alteration of the environmental equilibrium from human activities leads to the necessary of monitoring and the improvement of the environment in which these variations take place.

The toxic elements and other compounds can be found in the environment at different physicochemical forms and any qualitative and quantitative change of them is an indicator of any kind of environmental alteration.

The laboratory develops and applies different analytical (nuclear and non-nuclear) techniques for the following and monitoring of every trace element variation carried out in the atmospheric and marine environment. and especially:

1. The study of their concentration level in the environment and especially in the airborne particulate matter
 2. The isolation and identification of their emission sources
 3. The apportionment of each emission source contribution to the environment
 4. The study and periodic control of Greek seas from toxic trace elements
 5. The study of the way of covering of trace elements Recommended Daily Allowances required for the growth and the maintenance of human life
 6. The behavior of some materials, e.g. superconductors in different environmental conditions
- Moreover, the laboratory contributes to provenance studies of archaeological objects.

Δημοσιεύσεις

1. Kanas,G.D., Ghitakou,S., Papaefthymiou,H. “Nutritional value of trace elements in spaghetti dauces and their classification according to the labelled taste using pattern recognition techniques”*J.Radioanal.Nucl.Chem.* **2006** ,267(2), 327-335
2. I.Argyropoulou,R., Ochsenkühn-Petropoulou,M., Dounis,C., Karaboulis,P., Alzoumailis,A., K.M.Ochsenkühn,K.M. “Comparison of the behavior of the three superconductors YBCO, Bi-2212 and MgB_2 in different environmental conditions” *J.Mat.Process.Tech.*, In Press.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Ochsenkühn,K.M., Tsopeles,F., Tsakanika,L., Razos,P., Christidis,A., Ochsenkühn-Petropoulou,M.“Speciation of selenium and arsenic in airborne particulate matter and

Διδακτικό Έργο

1. Ν.Ζουριδάκης. «Ραδιοάνθρακας: Ένα Παράδειγμα της Ενότητας της Επιστήμης». Θερινό Σχολείο ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (Ιούλιος 2006).
2. Ν.Ζουριδάκης. «Ραδιοάνθρακας Εφαρμογές των Ισοτόπων στη Μελέτη του Περιβάλλοντος και του Παρελθόντος». Θερινό Σχολείο ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (Ιούλιος 2006).

Ερευνητικά Προγράμματα

1. «ΑΠΟΤΙΜΗΣΗ ΥΔΑΤΙΚΟΥ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ Κ ΚΑΙ Ν. ΠΕΛΟΠΟΝΝΗΣΟΥ ΚΑΙ ΠΟΙΟΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ ΑΥΤΩΝ (Υ.Δ.01,03)» του Έργου 7.3.2.1 που χρηματοδοτείται από το Γ' ΚΠΣ, Υπεύθυνος Δρ. Π.Σαμπατακάκης σε συνεργασία με το ΙΓΜΕ. Εισροή για το 2006 40.000 €
2. «ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΥΠΕΡΥΘΡΗΣ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ ΜΕΣΩ ΘΕΡΜΟΓΡΑΦΙΚΗΣ ΚΑΜΕΡΑΣ» Ερευνητικό Πρόγραμμα «ΑΘΗΝΑ 2004» Υπεύθυνος Δρ. Α.Αραβαντινός σε συνεργασία με το Τ.Ε.Ι. Αθήνας. Εισροή για το 2006 1.000 €.
3. «ΔΡΑΣΕΙΣ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΜΕΣΟΓΕΙΑΚΩΝ ΕΠΟΧΙΚΩΝ ΛΙΜΝΙΩΝ ΣΤΗ ΝΗΣΟ ΚΡΗΤΗ», Πρόγραμμα Life-Φύση 2004, Υπεύθυνος Δρ. Η.Δημητρίου σε συνεργασία με το ΕΛΚΕΘΕ. Εισροή για το 2006 6.000 €.

Παροχή Υπηρεσιών

1. Πολυτεχνική Σχολή Ξάνθης. Αναπλ. Καθηγητής Ι. Διαμαντής. Ισοτοπικές Αναλύσεις (^{18}O , T) και Μετρήσεις Ραδονίου στην περιοχή Νέστου.
2. Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Γεωλογίας και Γεωπεριβάλλοντος Αναπλ. Καθηγητής Α. Αλεξόπουλος. Ραδιοχρονολογήσεις δειγμάτων θαλάσσιων οστράκων από νήσο Γαύδο.
3. ΙΓΜΕ Δρ.Γ. Βουγιουκαλάκης. Ραδιοχρονολογήσεις Ηφαιστειακού υλικού.

- distribution of other toxic metals in PM₁/PM_{2.5} in an industrial area in Greece”. 5th *International Symposium on Speciation of Elements in Biological, Environmental and Toxicological Sciences*, Bialowieza, Poland, **2006**, 21-25 June
2. Ochsenkühn, K.M., Lyberopoulou, Th., Tsakanika, L., Razos, P., Koumariannou, G., Ochsenkühn-Petropoulou, M. “Comparison of ion chromatography with other spectrometric methods for the determination of water soluble compounds in airborne particulate matter of different fractions in an industrial area in Attika, Greece”. 5th *Aegean Analytical Chemistry Days*, Thessaloniki, Greece, **2006**, 5-8 Oct.
 3. Tsakanika, L., Ochsenkühn, K.M., Ochsenkühn-Petropoulou, M. “Quantitative separation of Sc/Lu and Y/Dy from rare earth elements mixtures using reversed-phase HPLC”. 5th *Aegean Analytical Chemistry Days*, Thessaloniki, Greece, **2006**, 5-8 Oct.
 4. Ochsenkühn, K.M. “To the question of Cadmium in drinking water of water coolers”, 2nd *International Conference, Water Science and Technology-Integrated Management of Water Resources*, Athens, Greece, **2006**, 23-26 November
 5. Eleftheriadis, K., Ochsenkühn, K.M., Lyberopoulou, Th., Razos, P., Ochsenkühn-Petropoulou, M. “Size distribution of inorganic water soluble species in the Mediterranean suburban background atmospheric aerosol”, *Joint CACGP/IGAC/WMO Symposium, Atmospheric chemistry at the interface*, Cape Town, South Africa, **2006** 17-23 September 2006
 6. Ochsenkühn, K.M., Lyberopoulou, Th., Razos, P., Karagiannis, K., Ochsenkühn-Petropoulou, M. “Ionic composition of PM₁₀/PM_{2.5} in an industrial area in Greece”, 4. *Conference über Ionenanalyse*, Berlin, Germany, **2007** 12.-14. March

Εκπαιδευτική Δραστηριότητα

A. Διδακτορικές Διατριβές

1. Παναγιώτης Ράζος ” Περιβαλλοντική μελέτη σε αιωρούμενα σωματίδια της ατμόσφαιρας (PM₁₀/PM_{2.5}), Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, σε εξέλιξη
2. Λαμπρινή Τσακανίκα, «Διαχωρισμός και παραλαβή λανθανιδών από την ερυθρά ιλύ με εκλεκτική εκχύλιση και χρωματογραφικές τεχνικές», Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, βρίσκεται στο στάδιο της συγγραφής
3. Φώτης Τσόπελας, «Προσδιορισμός διαφόρων ειδών οργανομεταλλικών ενώσεων στο περιβάλλον (speciation), Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, έχει ορισθεί η επταμελής επιτροπή για την τελική εξέταση

B. Διπλωματική Εργασία

1. Γεωργία Κουμαριανού, « Προσδιορισμός και σύγκριση της συγκέντρωσης των υδατοδιαλυτών ιόντων σε αιωρούμενα σωματίδια της ατμόσφαιρας μιας βιομηχανικής και μιας αστικής περιοχής του λεκανοπεδίου Αττικής», παρουσιάστηκε στη Σχολή ΧΜ ΕΜΠ τον Οκτώβριο του 2006 (επίβλεψη Κ.Μ.Οξενκιουν)
2. Αικατερίνη Κόκκοτου, «Ιχνοστοιχειακή θρεπτική αξία μερικών αφεψημάτων ευρείας κατανάλωσης», πτυχιακή εργασία Πανεπιστημίου Πατρών (επίβλεψη Γ.Κανιάς)

Γ. Μεταπτυχιακές Εργασίες

1. Κωνσταντίνος Κωνσταντάς, «Προσδιορισμός Cu και Zn με την εφαρμογή της ανοδικής αντίστροφης βολταμμετρίας για πρώτη φορά σε παστεριωμένους χυμούς – Εκτίμηση της

θρεπτικής αξίας χυμών της Ελληνικής αγοράς», μεταπτυχιακή εργασία για την απόκτηση διπλώματος Master (επίβλεψη Γ.Κανιάς-Κ.Μ.Όξενκιουν)

2. Ματίνα Παπαδιά, « Διερεύνηση της ποιοτικής και ποσοτικής σύστασης αιωρούμενων σωματιδίων της ατμόσφαιρας με μη καταστροφικές φασματομετρικές μεθόδους ανάλυσης» ΔΠΜΣ ΕΜΠ, σε εξέλιξη (επίβλεψη Κ.Μ.Όξενκιουν)

Συνεργασίες

Με τους Επικ. Καθηγητές Σιμεόπουλο Β, Παπαευθυμίου Ελ., Σουπιώνη Μαγ.. Εργαστήριο Ραδιοχημείας του Πανεπιστημίου Πατρών

Με την Καθηγήτρια Μ. Πετροπούλου-Όξενκιουν, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας του Ε.Μ. Πολυτεχνείου.

Με τους καθηγητές των Πολυτεχνείων Μονάχου (D.Knopp, B. Michalke), Βιέννης(H. Puxbaum, E. Rosenberg) και Βερολίνου (W. Frenzel), στα πλαίσια εκπαιδευτικών και ερευνητικών δραστηριοτήτων.

Ερευνητικά Προγράμματα

1. «Αιωρούμενα σωματίδια PM10/PM2.5 στην περιοχή του λεκανοπεδίου Αθηνών. Χωροχρονική κατανομή, ειδοταυτοποίηση, ποιοτικοποσοτική σύσταση, εκτίμηση είδους πηγών», ΕΠΕΑΕΚ, ΠΥΘΑΓΟΡΑΣ ΙΙ, 2005-2007 σε εξέλιξη, Κύριος Ερευνητής σε συνεργασία με την Σχολή ΧΜ ΕΜΠ
2. Πρόγραμμα Πλαίσιο για χημικές αναλύσεις διαφόρων δειγμάτων από επιχειρήσεις του Ιδιωτικού και Δημόσιου Τομέα

Στα πλαίσια του προγράμματος αυτού έγιναν περίπου 300 αναλύσεις καδμίου σε πόσιμα νερά που προέρχονταν από ψύκτες Σχολείων, Νοσοκομείων, Βιοτεχνιών και τα αποτελέσματα ανακοινώθηκαν στο “2nd International Conference, Water Science and Technology-Integrated Management of Water Resources ”, που έγινε στην Αθήνα από 23 μέχρι 26 Νοεμβρίου 2006.

Γενικά ο Δρ. Όξενκιουν ασχολείται με χημικές αναλύσεις ανοργάνων ουσιών σε δείγματα που έρχονται από τρίτους στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Κ.Μ. Όξενκιουν ήταν μέλος της Διεθνούς Επιστημονικής Επιτροπής του Διεθνούς Συνεδρίου με τίτλο “2nd International Conference, Water Science and Technology-Integrated Management of Water Resources ”, που έγινε στην Αθήνα από 23 μέχρι 26 Νοεμβρίου 2006.

Ο Δρ. Κ.Μ. Όξενκιουν είναι μέλος της Οργανωτικής Επιτροπής του Διεθνούς Συνεδρίου με τίτλο “ 5th International Conference “Instrumental Methods of Analysis-Modern Trends and Applications”, που θα γίνει στην Πάτρα από 2 μέχρι 6 Οκτ. 2007.

Ο Δρ Γ. Κανιάς είναι ειδικός κριτής για θέματα ανάλυσης με νετρονική ενεργοποίηση του Περιοδικού Journal of Analytical Chemistry .

4. Χημική Βιολογία



ΕΡΓΟ: ΣΥΝΘΕΣΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΒΙΟΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Προσωπικό

Δρ. Ε. Ν. Πιτσινός, Υπεύθυνος έργου, Ερευνητής Β΄
Καθηγητής Η. Α. Κουλαδούρος, Επισκέπτης Καθηγητής-Ακαδημαϊκός Υπεύθυνος
Δρ. Β. Μούτσος, Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ΄
Δρ. Α. Στρογγυλός, Μεταδιδακτορικός Συνεργάτης
Δρ. Β. Βιδάλη, Μεταδιδακτορική Συνεργάτης
Δρ. T. Salama, Μεταδιδακτορικός Συνεργάτης
Α. Μάγκος, Μεταπτυχιακός Υπότροφος (έως 9/2006)
Σ. Νεοκοσμίδης, Μεταπτυχιακός Υπότροφος
Ο. Βαγγέλη, Μεταπτυχιακή Υπότροφος (από 2/2006)
Ε. Μπούζας, Α. Μιχαηλάκης, Γ. Πλατανάκη,
Μ. Δακανάλη, Α. Μαράντη Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι (άμισθοι)
J. Herttuainen, University of Helsinki, Ιούνιος–Ιούλιος 2006, πρακτική εξάσκηση

Αντικείμενο του Έργου

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.

Πρόσφατα το εργαστήριο δραστηριοποιήθηκε στον τομέα της συνδυαστικής χημείας (combinatorial chemistry). Άλλες τρέχουσες ερευνητικές προσπάθειες περιλαμβάνουν την ολική σύνθεση των φυσικών προϊόντων Βασταδίνες, Ραδισικόλη και Adociasulfate-2 καθώς και την παρασκευή αναλόγων της Σκυφοστατίνης και της Αλκανίνης.

Objectives

Our group is involved in the design and synthesis of organic compounds. The targeted molecules are mainly natural products or designed analogues with the aim to prepare and study novel compounds with interesting and/or improved biological activity and possible pharmaceutical applications. The evaluation of their biological activity is performed through collaboration with specialized laboratories. In parallel, the expertise of the team in the design and synthesis of complex organic molecules is exploited for the preparation of organic molecules with possible technological applications (e.g. photoresist etch enhancement additives, linkers for the preparation of polymers) or molecules with interesting supramolecular behavior.

Recently the team has initiated research in the area of combinatorial chemistry introducing the use of polymorphic scaffolds for the generation of libraries of pharmacophoric structures. Other current research activities include the total synthesis of the natural products Bastadins, Radicicol and Adociasulfate-2 as well as the design and synthesis of Scyphostatin and Alkanin analogues.

Δημοσιεύσεις

1. Wascholowski, V.; Giannis, A.; Pitsinos, E.N. "Influence of the scyphostatin side-chain on the mode of inhibition of neutral sphingomyelinase" *ChemMedChem* **2006**, 1, 718–721.
2. Ciminiello, P.; Dell'Aversano, C.; Fattorusso, E.; Forino, M.; Magno, S.; Santelia, F.U.; Moutsos, V.I.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A. "Oxazinins from toxic mussels: isolation of a novel oxazinin and reassignment of the C-2 configuration of oxazinin-1 and -2 on the basis of synthetic models" *Tetrahedron* **2006**, 62, 7738–7743.
3. Couladouros, E.A.; Bouzas, E.A.; Magos, A.D. "Formal synthesis of Abyssomicin C" *Tetrahedron* **2006**, 62, 5272–5279.
4. Pitsinos, E.N.; Moutsos, V.I.; Vageli, O. "Synthesis of enantiopure (S)-7-hydroxy-3-amino-3,4-dihydro-2H-1-benzopyran en route to (+)-scyphostatin" *Tetrahedron Letters* **2007**, in press (doi: 10.1016/j.tetlet.2007.01.006).

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. Pitsinos, E. N., «Ανάλογα της σκυφοστατίνης και ενδιάμεσα για την παραγωγή αυτών», "Scyphostatin analogues and intermediates in the production thereof", *Greek patent: 1005093* issued January 13, **2006**.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. E.N. Πιτσινός, A. Cruz, A. Giannis, V. Wascholowski, Σ. Καραλιώτα, Χ. Ρήγου, Ο. Βαγγέλη, Η. Α. Κουλαδούρος, «Σύνθεση αναλόγων της σκυφοστατίνης και αξιολόγησή τους ως παρεμποδιστών της ουδέτερης σφιγγομυελινάσης (N-SMase)», Ομιλία που παρουσιάστηκε στο «12^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακοχημείας», 27–28 Ιανουαρίου **2006**, Πάτρα.
2. Pitsinos, E.N.; Cruz, A.; Wascholowski, V.; Giannis, A. "Novel scyphostatin analogues; Synthesis and biological evaluation as inhibitors of neutral sphingomyelinase (N-SMase)", Poster που παρουσιάστηκε στο "International Symposium on Chemistry, Biology and Medicine", Μάιος **2006**, Πάφος, Κύπρος.
3. E. N. Pitsinos, A. Cruz, A. Giannis, V. Wascholowski "Synthesis of novel scyphostatin analogues and evaluation as neutral sphingomyelinase inhibitors", Ομιλία που παρουσιάστηκε στο "5th International Meeting of the Sphingolipid Club", 2-4 Νοεμβρίου 2006, Calella, Spain.
Τα πρακτικά του συνεδρίου δημοσιεύθηκαν στο περιοδικό *Naunyn-Schmiedeberg's Arch Pharmacol* **2007**, 374, 317–346.
4. E.A. Couladouros; A. Magkos, E. Bouzas, A. Strongilos, E. Neokosmidis, V. Moutsos, M. Lampropoulou, M. Dakanali, V. Vidali "New routes towards the synthesis of natural products and designed derivatives", Poster που παρουσιάστηκε στο "International Symposium on Chemistry, Biology and Medicine", Μάιος **2006**, Πάφος, Κύπρος.
5. E.A. Νεοκοσμιδής, Α.Θ. Στρογγυλός, Σ. Χαρουτουνιάν, Ε.Α. Κουλαδούρος «Σύνθεση σε στερεά φάση ενδιάμεσων για την παρασκευή αζασακχάρων και πιπεριδινικών

αλκαλοειδών», Ομιλία που παρουσιάστηκε στο «12^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Φαρμακοχημείας», 27–28 Ιανουαρίου **2006**, Πάτρα.

Διαλέξεις

1. Ε.Ν. Πιτσινός, «Σύντομη, αποτελεσματική και ευέλικτη συνθετική οδός προς τη σκυφοστατίνη», Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημείας, Επιστημονική ημερίδα «Η Οργανική Χημεία στην Ελλάδα των αρχών του 21ου αιώνα: Τάσεις και προοπτικές», αφιερωμένη στους Καθηγητές Οργανικής Χημείας Αναστάσιο Βάρβογλη και Δημήτριο Νικολαΐδη, 14 Μαρτίου 2006.
2. Η.Α. Κουλαδούρος, «Ιστορίες συνθετικής τρέλας», Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημείας, Επιστημονική ημερίδα «Η Οργανική Χημεία στην Ελλάδα των αρχών του 21ου αιώνα: Τάσεις και προοπτικές», αφιερωμένη στους Καθηγητές Οργανικής Χημείας Αναστάσιο Βάρβογλη και Δημήτριο Νικολαΐδη, 14 Μαρτίου 2006.

Διδακτικό Έργο

Ηλίας Κουλαδούρος, Διδασκαλία Προχωρημένης Οργανικής Χημείας στο Μεταπτυχιακό Τμήμα "Φυσικά Προϊόντα και Βιοτεχνολογία" του Ινστιτούτου ΜΑΙΧ του Κέντρου Προχωρημένων Μεσογειακών Αγρονομικών Σπουδών (CIHEAM), 2006.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Ph.D., Α. Μιχαηλάκης, «Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοδραστικών φυσικών προϊόντων με εφαρμογή στη γεωργία», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 1/2006.
Ph.D., Α. Μάγκος, «Σύνθεση βιοδραστικών φυσικών προϊόντων και αναλόγων τους με συνδιαστική χημεία», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 9/2006.
M.Sc., Α. Μαράντη, «Ανάπτυξη γενικής μεθόδου σύνθεσης ρεσορκιλιδίων. Ασύμμετρη σύνθεση της μονοκιλίνης II», Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 12/2006.
M.Sc., Σ. Νεοκοσμίδης, «Σύνθεση βιβλιοθηκών αζα-πυρανονών με χρήση πολυμορφικών μητρών», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 6/2006.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. «Συσχέτιση δομής-φαρμακολογικής επίδρασης συνθετικών βασταδινών σε νευρώνες», Πρόγραμμα E+T συνεργασίας Ελλάδας-Πολωνίας, Ε.Ν. Πιτσινός, 11.740 €, 2006–2008.
2. Συμμετοχή στο πρόγραμμα “Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία” (Επιχειρησιακό πρόγραμμα Αττικής 2000-2006, Μέτρο 1.2, Κωδικός: ΑΤΤ_28), σε συνεργασία με άλλες ερευνητικές ομάδες του Ινστιτούτου. Προϋπολογισμός για το εργαστήριο: 10.000 € Διάρκεια του έργου: 2006–2008.
3. “Novel molecules for euv lithography: a new approach to photoresist design, coupled with fractal description and molecular simulation or roughness”, άμεση επιχορήγηση από την εταιρία INTEL, Καθ. Η.Α. Κουλαδούρος, 40.000 USD/έτος 2003–2006.

Συνεργασίες

1. Prof. K.C. Nicolaou, The Scripps Research Institute, σύνθεση φυσικών προϊόντων και αναλόγων τους.
2. Prof. A. Giannis, Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Institut für Organische Chemie, αξιολόγηση της βιολογικής δράσης νέων αναλόγων της σκυφοστατίνης.
3. Prof. E. Fattorusso, Dipartimento di Chimica delle Sostanze Naturali, Università degli Studi di Napoli "Federico II".
4. Prof. J.W. Lazarewicz, Medical Research Centre, Polish Academy of Sciences, Πρόγραμμα E&T Συνεργασίας Ελλάδα-Πολωνία.
5. Δρ. Π. Αργεΐτης, Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ», σύνθεση πρωτότυπων προσθέτων για την βελτίωση της λιθογραφικής ενχάραξης μικροκυκλωμάτων.
6. INTEL USA s.a., σύνθεση πρωτότυπων προσθέτων για την βελτίωση της λιθογραφικής ενχάραξης μικροκυκλωμάτων.

Άλλες Δραστηριότητες

1. Ε. Ν. Πιτσινός, Κριτής στα περιοδικά Organic Letters, Journal of Organic Chemistry, European Polymer Journal.
2. Ε. Α. Κουλαδούρος, Συμμετοχή στο «Management Committee» του Προγράμματος COST, Action D 28.

ΕΡΓΟ: ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΙΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΕΝΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

CHEMICAL BIOLOGY OF NATURAL PRODUCTS AND DESIGNED MOLECULES

Προσωπικό

Ερευνητές :

Δρ. Δ. Βουρλούμης, Υπεύθυνος έργου, Ερευνητής Α

Δρ. Γ. Ψωμάς, Άμισθος Συνεργαζόμενος Ερευνητής

Δρ. Α. Παπακυριακού, Άμισθος Συνεργαζόμενος Ερευνητής

Δρ. Μ. Κατσαρού, Άμισθη Συνεργαζόμενη Ερευνήτρια

Π. Χριστοφής, Υπότροφος Υποψήφιος Διδάκτορας (έως 30/11/2006)

Ε. Ευθυμιάδου, Άμισθη Υποψήφια Διδάκτορας

Α. Παπαδοπούλου, Άμισθη Υποψήφια Διδάκτορας

Ι. Μαυρίδης, Υπότροφος Υποψήφιος Διδάκτορας

Αντικείμενο Έργου

Το εργαστήριό μας αντιπροσωπεύει μια καινούργια 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. Το κύριο αντικείμενο του έργου μας είναι η σύνθεση φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων αναλόγων τους με βελτιωμένη δραστηριότητα και φαρμακολογικές ιδιότητες, η ανάπτυξη νέας συνθετικής μεθοδολογίας σε διάλυμα και στερεή φάση και η δημιουργία καινούργιων *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).

Research Objectives

Our laboratory represents a new function within the Institute of Physical Chemistry, namely the “Chemical Biology of Natural Products and Designed Molecules”, which was initiated in July, 2005. Our research focuses in the study of biological systems, DNA, RNA and proteins, through their interaction with small molecules of natural or synthetic origin, targeting the development of new and improved pharmaceutical entities. We will be targeting the total synthesis of natural products and designed analogs with improved potencies and pharmacological profiles, the development of new synthetic methodologies in solution and solid phase and the development of new *in vitro* biological assays for the evaluation of the new synthetic entities. Our design will be

based on crystallographic information and molecular modeling studies. Currently, we are involved in the areas of Cancer (topoisomerase II inhibitors, apoptosis), bacterial infections (aminoglycosides and A-site RNA) and anti-virals (Hepatitis C virus, HIV).

Δημοσιεύσεις

1. Efthimiadou E.K., Sanakis Y., Katsarou M., Raptopoulou C.P., Karaliota A., Katsaros N. and Psomas G., "Neutral and Cationic Mononuclear Copper(II) Complexes with Enrofloxacin: Structure and Biological Activity." *J. Inorg. Biochem.* **2006**, *100*, 1378-88.
2. Efthimiadou E.K., Sanakis Y., Raptopoulou K., Karaliota A., Katsaros N. and Psomas G., "Crystal Structure, Spectroscopic and Biological Study of the Copper(II) Complex with Third-Generation Quinolone Antibiotic Sparfloxacin." *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2006**, *14*, 3864-3867.
3. 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.* **2007**, in press.
4. 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**, in press.
5. 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**, in press.
6. Efthimiadou E.K., Psomas G., Sanakis Y., Katsaros N., Karaliota A., "Metal complexes with the quinolone antibacterial agent N-propylnorfloxacin: Synthesis, structure and bioactivity.", *J. Inorg. Biochem.* **2007**, in press.
7. Efthimiadou E.K., Katsaros N., Karaliota A., Psomas G., "Synthesis, structure, antibacterial activity and interaction with DNA of the vanadyl-enrofloxacin complex.", *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2007**, in press.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. **D. Vourloumis**, D.E. Murphy, T.J. Prins, F. Ruebsam, C.V. Tran, S.J. Berthel, R.F. Kester, R. Ramakanth, "Pyrazole Glucokinase Activators." U.S. Provisional Patent Application No. **23161 US** (pending).

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. **Dionisios Vourloumis**, "RNA as a Drug Target." 12th National Conference in Medicinal Chemistry, University of Patra, Greece, January 27–28, **2006**.
2. **Eleni Efthimiadou**, Yannis Sanakis, Catherina Raptopoulou, Aris Terzis, Alexandra Karaliota, Nikos Katsaros, George Psomas. «Σύνθεση και μελέτη μονοπυρηνικών συμπλόκων με το κινολονικό αντιμικροβιακό φάρμακο Enrofloxacin» 12^ο Συμπόσιο Φαρμακευτικής Χημείας, Πάτρα, 27-28 Ιανουαρίου **2006**. Π-22.

3. **Eleni Efthimiadou**, Yannis Sanakis, Catherina Raptopoulou, Aris Terzis, Alexandra Karaliota, Nikos Katsaros, George Psomas.: «Copper complexes with quinolones: Synthesis, Structure and Bioactivity». 5th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries. 10-14 Σεπτεμβρίου **2006**. PLE-9.

Διδακτικό Έργο

1. **Dionisios Vourloumis**, “RNA as a Drug Target: A Case Study” Nano2life Summer School on Methods in Micro-Nanotechnology and Nanobiotechnology, 2006, Athens, Greece, June 26 - July 7, **2006**.
2. **Dionisios Vourloumis**, “RNA as a Drug Target.” Summer School 2006, NCSR “Demokritos”, Athens, Greece, July 10–21, **2006**.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

1. **Ευθυμιάδου Ελένη**, χημικός, «Μελέτη της Δομής και της Βιολογικής Δράσης Συμπλόκων Cu-Αντιμικροβιακών Φαρμάκων με Διάφορες Φασματοσκοπικές Μεθόδους.», Μεταπτυχιακό Δίπλωμα ειδίκευσης, Τομέας Ανόργανης Χημείας και Τεχνολογίας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας, 7/**2006**.
2. **Χριστοφής Πέτρος**, χημικός, «Σύνθεση, Βιοφυσική και Βιοχημική μελέτη συμπλόκων ενώσεων Pt(II) και συμπλόκων μετάλλων του NSID Piroxicam.», Διδακτορικό Δίπλωμα, Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 11/**2006**.

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, € 1.619.960, 2/2007–1/2011.
2. ENTER 2004, «Σχεδιασμός αναστολέων της κινάσης του υποδοχέα του αγγειακού ενδοθηλιακού αναπτυξιακού παράγοντα (VEGF-R2) με χρήση δομικών μεθόδων, για θεραπεία του καρκίνου.», programme 2004-04EP63, Dr. Dionisios Vourloumis, € 58.500, 11/2006–5/2008.
3. 'NMP' INTEGRATED PROJECT, "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", Contract No. NMP4-CT-2006-026723, Dr. Dionisios Vourloumis, € 537.000, 10/2006-9/2010.
4. Επιχειρησιακό πρόγραμμα Αττικής 2000-2006, Μέτρο 1.2, Κωδικός: ATT_28, “Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία”, Προϋπολογισμός εργαστηρίου: €10.000.

Εργαστήρια Παροχής Υπηρεσιών

1. Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Υλικών

Υπεύθυνος Έργου: Δρ Κ. Μ. Παλαιός, Διευθυντής Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

1.1 Εργαστήριο Περιβαλλοντικής Χημείας

Υπεύθυνος : Δρ Φ. Κατσαρός – Χημικός (Υπευθ. Φασματογράφου Μάζας και FT-IR)

Αντικείμενο

Το ως άνω εργαστήριο έχει ως αντικείμενο την επίβλεψη, συντήρηση και λειτουργία του Φασματογράφου Μάζας και του FT-IR καθώς επίσης και την παροχή υπηρεσιών προς τα μέλη του Ινστιτούτου και προς τρίτους.

Επιτεύγματα

Το εργαστήριο, μέσω της συμμετοχής του εργαστηρίου στη πρόταση με τίτλο «ΟΛΟΚΛΗΡΩΜΕΝΟ ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ» στα πλαίσια του ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ «ΑΝΤΑΓΩΝΙΣΤΙΚΟΤΗΤΑ», Μέτρο 4.5, Δράση 4.5.1 «Υποδομές υποστήριξης της μακροπρόθεσμης βιωσιμότητας των έργων έρευνας, τεχνολογικής ανάπτυξης και επίδειξης», κατάφερε να εξασφαλίσει πόρους για:

- 1) την αγορά ενός FT –IR (Nicolet 6700 - κόστος 31000 €)
- 2) την αγορά συστημάτων μέτρησης Attenuated Total Reflection (ATR) και Diffuse Reflectance (DRIFTS) (κόστος 18000 €)

1.2 Εργαστήριο NMR

nmrlab@chem.demokritos.gr <http://philippi.chem.demokritos.gr/Projects/nmr/nmr.html>

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

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

Το εργαστήριο NMR υγρών δειγμάτων αποτελείται από το Φασματόμετρο Bruker Avance 500 MHz, το φασματόμετρο Bruker AC 250 MHz, και τα περιφερειακά όργανα. Το εργαστήριο υποστηρίζει τα ερευνητικά προγράμματα κυρίως των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας, Βιολογίας και ΡΡΠ αλλά και άλλων Ινστιτούτων του "Δημοκρίτου" συμμετέχοντας καθοριστικά στο ερευνητικό και αναπτυξιακό έργο του Κέντρου. Επίσης παρέχει υπηρεσίες σε εξωτερικούς χρήστες, ακαδημαϊκούς και ιδιωτικούς φορείς, βάσει τιμολογίων.

Για το 2006 οι εισροές: ήταν 3800 € εκ των οποίων 750 € προέρχονται από παροχή υπηρεσιών εκτός «Δημοκρίτου», οι δε δαπάνες ανήλθαν στα 8060 €, εκ των οποίων 7900 € ήταν επισκευές. Δεν υπήρξε καθόλου χρηματοδότηση για την ετήσια δαπάνη υγρού ηλίου (~ 400 λίτρα).

1.3 Εργαστήριο Μικροσκοπίας Ατομικών Δυνάμεων

Υπεύθυνος Έργου: Δρ Κ. Μ. Παλαιός, Διευθυντής Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

Μέλη: Μαρία Αρχιμανδρίτη (υπεύθυνος μετρήσεων AFM-STM, Εργοδηγός Χημικός)

Αντικείμενο

Το ως άνω εργαστήριο έχει ως αντικείμενο την λειτουργία και συντήρηση του Μικροσκοπίου Ατομικών Δυνάμεων ή Μικροσκοπίου Σάρωσης με Ακίδα (AFM-STM).

Παροχή υπηρεσιών προς τα μέλη του Ινστιτούτου και προς τρίτους.

Έσοδα – Έξοδα 2005

Έξοδα 455,00 Ευρώ

Έσοδα 850,00 Ευρώ

Κοστολόγηση

	Χρέωση ανά δείγμα σε Ευρώ	
	Contact Mode	Tapping Mode
Ινστ. Φυσικοχημείας	35	30
Άλλα Ινστιτούτα ΕΚΕΦΕ «Δ»	65	45
Φορείς Δημοσίου	95	60
Ιδιωτικός Τομέας	120	95

1.4 Εργαστήριο Στοιχειακής Ανάλυσης

Υπεύθυνη: Ε. Γιαννακοπούλου (Χειρίστρια Στοιχειακού Αναλυτή)

Αντικείμενο: Στοιχειακές αναλύσεις οργανικών ενώσεων.

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

Επιτεύγματα: Από 1/1/2006 μέχρι 31/12/2006 αναλύθηκαν 60 δείγματα επί πληρωμή και 80 δείγματα χωρίς πληρωμή έναντι άλλων υπηρεσιών από τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (ΙΡΡΠ, ΙΠΤΑ, ΙΕΥ)

Έσοδα-Έξοδα: Ετήσια έσοδα1550 ευρώ
Μεταφορά εσόδων από το 2005..... 330,85 ευρώ

Ετήσια έξοδα λειτουργίας του οργάνου....1120 ευρώ

Κοστολόγιο Στοιχειακών Αναλύσεων για το 2006

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

2. Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας

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}O , ^2H , ^{15}N , ^{13}C , ^3H , ^{14}C , ^{222}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 οριζόντων
- Ταχύτητα ροής και χρόνος παραμονής του νερού στο υπέδαφος.
- Ποσοστό ανάμειξης διαφορετικών υδροφόρων οριζόντων 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 παλαιοδιαίτας.
- 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 2006 με τη μορφή παροχής υπηρεσιών έγιναν ισοτοπικές αναλύσεις ^{18}O σε 330 δειγμάτων νερού και 48 αναλύσεις Τριτίου.

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

Ισοτοπικές αναλύσεις ^{18}O σε 500 δείγματα νερού

Προσδιορισμός συγκέντρωσης Τριτίου σε 433 δείγματα νερού

Προσδιορισμός συγκέντρωσης Ραδονίου σε 150 δείγματα νερού

Έσοδα-Έξοδα 2006

Ετήσια έσοδα	45.000 ευρώ
Ετήσια έξοδα εργαστηρίου	15.000 ευρώ
Κρατήσεις Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δημόκριτος»	6.750 ευρώ
Φ.Π.Α.	8.550 ευρώ

Κοστολόγιο Ισοτοπικών Αναλύσεων

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

Ραδιοχρονολογήσεις κάρβουνου, ξύλου, τύρφης	250 ευρώ
Ραδιοχρονολογήσεις κοχυλίων, χόρτων, CaCO_3	280 ευρώ
Ραδιοχρονολογήσεις ασβεστοκονιαμάτων	350 ευρώ
Ραδιοχρονολογήσεις οστών	500 ευρώ
Ραδιοχρονολογήσεις νερού	600 ευρώ
Ισοτοπικές αναλύσεις ^{18}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 ^{18}O σε στερεά δείγματα	100 ευρώ

3. Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Περιβαλλοντικές Αναλύσεις»

Προσωπικό

Υπεύθυνη Έργου: Δρ. Α. Χισκιά, Ερευνήτρια Β

Μέλη: Δρ. Θ. Τριάντης, Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ' Βαθμίδας

Γκίκα Ελένη, MSc, Υποψήφια Διδάκτωρ Παν/μιου Αθηνών, αμειβόμενη από πρόγραμμα

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 αυστηρότατα ανώτατα επιτρεπτά όρια για τους παραπάνω ρύπους στα νερά, ενώ αποτελεί επιτακτική ανάγκη η ανάπτυξη νέων, γρήγορων, υψηλής ακρίβειας και ευαισθησίας αναλυτικών μεθόδων για τον προσδιορισμό τους. Τα μειονεκτήματα των συμβατικών μεθόδων στον προσδιορισμό των ανωτέρω ρύπων μπορούν να παρακαμφθούν με την συνδυασμένη χρήση HPLC και φασματοσκοπίας μάζας τεχνολογίας τριπλού τετραπόλου (LC/MS/MS). Στα πλαίσια της διαπίστευσης του Εργαστηρίου για τον προσδιορισμό PAHs σε 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 οργανοφωσφορικά 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 προσδιορισμού PBBs και PBDEs σε απόβλητα με χρήση SPME 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.

Objectives

Contamination of water supplies with organic pollutants such as PAHs, PCBs and cyanotoxins is one of the most important global problems. Recent EU Directives propose the determination of

these target pollutants in drinking and surface water and set their maximum concentration. Resulting from the above, it is mandatory to monitor these analytes using appropriate methods. The availability of rapid, reliable screening method is prerequisite when a large number of samples must be analyzed, but on the other hand there is an urgent need of a confirmatory method for the analysis of these contaminants which belong to the priority pollutants list. Disadvantages of conventional methods of analysis can be overcome by using liquid chromatography-mass spectrometry (LC/MS/MS). In the frame of the accreditation of our laboratory in PAHs determination in potable and surface water by using LC/MS/MS it has been funded (2005-2008) by Antagonistikotita (Ministry of Development) with 311,300 Euro. This will upgrade the instrumentation of our laboratory (HPLC/UV-Vis or FL or CD, IC, GC/ECD or FID and GC/MS), mainly by the purchase of the LC/MS/MS analytical device and will give new opportunity to our research and service activities.

Current interests of our Laboratory are focused into the following:

- Method Development for the determination of toxic pollutants in trace level in water, foodstuff and environmental samples (pesticides, PCBs, PBRBs, chlorophenols, PAHs, BTX, VOCs, drug residues, cyanotoxins, organic halides)
- Method Development for the determination of Polychlorinated Biphenyls (PCBs) in water and Organic Halides in foodstuff (honey) by Solid Phase Microextraction (SPME) in combination with GC/ECD and GC/MS.
- Method Development for the determination of PBBs and PBDEs in waste water by using SPME with combination of GC/ECD και GC/MS.
- Method Development for the determination of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in potable and surface water by using LC/MS/MS.
- Method Development for the determination and identification of cyanotoxins in surface and drinking water by using SPE and LC/MS-MS.
- Elaboration of MSc and PhD Thesis.
- Accreditation of the laboratory in PAHs determination in potable and surface water by using LC/MS/MS (being the only Laboratory in Greece for that purpose).
- Services for the determination of toxic organic residues in trace level.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Διπλώματα Ειδίκευσης (Master)

Γαρυφαλλίδη Παρασκευή, «Έλεγχος Νοθείας σε Προϊόντα Αλόης», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2006.

Διαθέσιμη Υποδομή

- Φασματοσκοπία μάζα σε συνδυασμό με αέρια χρωματογραφία (GC-MS)
- Φασματοσκοπία μάζα σε συνδυασμό με υγρή χρωματογραφία (HPLC-MS-MS).
- Υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης HPLC (ανιχνευτής UV,
- φθορισμομετρικός, αγωγιμομετρικός)
- Αέρια χρωματογραφίας GC (FID, ECD, TCD)
- Ιοντική χρωματογραφία IC
- Φασματοφωτομετρία UV-VIS
- Εκχύλιση στερεάς φάσης (SPE)
- Μικροεκχύλιση στερεάς φάσης (SPME)

- Ατομική απορρόφηση
- Συσκευή παραγωγής υπερκαθαρού νερού.
- Συσκευή μέτρησης ολικού οργανικού άνθρακα (TOC).

Προγράμματα – Εισροές από Παροχή Υπηρεσιών

«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, 311.300 €, Διάρκεια 18 μήνες, Έναρξη 6/2005.

«Πρόγραμμα χημικών αναλύσεων στερεών καυσίμων για εντοπισμό βαρέων μετάλλων και αλογονούχων οργανικών ενώσεων σύμφωνα με την Οδηγία 2000/76/Ε.Κ.» στο πλαίσιο ιδιωτικού συμφωνητικού ανάθεσης έργου με την SHELMAN Α.Ε., 6.000 €, Διάρκεια 18 μήνες, Έναρξη 6/2005.

«Ανάλυση δειγμάτων λάσπης εμπλουτισμένης με CS₂ και υδάτινης στιβάδας από τις δεξαμενές του εργοστασίου της ΕΤΜΑ Α.Ε.», 1.500 €, Διάρκεια 18 μήνες, Έναρξη 6/2005.

«Εσωτερική Παροχή Υπηρεσιών στο ΙΠΤΑ» (Δρ. Ελευθεριάδης και Δρ. Μάγγος), 1100 €.

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. Καλούλης 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.

Μεταπτυχιακή Εκπαίδευση

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΣΤΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ

Υπεύθυνος Εκπαίδευσης: Δρ. Ιωάννης Οικονόμου.

Αναπληρωτής: Δρ. Κωνσταντίνα Γιαννακοπούλου.

Η θητεία των παραπάνω έληξε στις 31 / 12 / 2006, οπότε ανέλαβε υπεύθυνος Εκπαίδευσης ο Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός.

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 επίβλεψη διδακτορικών διατριβών και μεταπτυχιακών ερευνητικών εργασιών που εκπονούνται στο ΙΦΧ,
- (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 πτυχιακών εργασιών προπτυχιακών φοιτητών,
- (ε) στην οργάνωση σεμιναρίων με ομιλητές από την Ελλάδα και το εξωτερικό

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) «Βιοανόργανη Χημεία», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων,

Μεταπτυχιακοί φοιτητές

Οι μεταπτυχιακοί φοιτητές που απασχολούνται στο Ινστιτούτο διακρίνονται σε:

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

Σήμερα, στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας απασχολούνται 17 υπότροφοι με οικονομική ενίσχυση από το Δημόκριτο και 30 περίπου μεταπτυχιακοί φοιτητές που χρηματοδοτούνται από άλλες πηγές.

Θεσμοθέτηση ετήσιου βραβείου καλύτερης διδακτορικής διατριβής Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

Στα τέλη του 2005 θεσμοθετήθηκε το ετήσιο βραβείο για την καλύτερη διδακτορική διατριβή που εκπονήθηκε στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας. Την άνοιξη του 2006, απονεμήθηκε το βραβείο αυτό για πρώτη φορά στον Δρα Αλέξανδρο Πάντο, για τη διδακτορική του διατριβή με τίτλο: «Αναγνώριση Λιποσωμάτων Επικαλυμμένων με Πολυμερή», η οποία εκπονήθηκε υπό την επίβλεψη τους Δρος. Κωνσταντίνου Παλαιού.

Μεταπτυχιακές εργασίες που ολοκληρώθηκαν το 2006

Διδακτορικές διατριβές

2. Νίκη Βέργαδου, "Πρόβλεψη Διαπερατότητας από Αέρια Αμορφων Δύσκαμπτων Πολυμερών με Μεθόδους Μοριακής Προσομοίωσης", Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθήνας, 2006. Επιβλέπων: Καθηγητής Δ. Θεοδώρου.
3. .Α. Μιχαηλάκης, «Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοδραστικών φυσικών προϊόντων με εφαρμογή στη γεωργία», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 1/2006. Επιβλέποντες: Δρ. Ε.Ν. Πιτσινός, Καθ. Η. Κουλαδούρος
4. Α. Μάγκος, «Σύνθεση βιοδραστικών φυσικών προϊόντων και αναλόγων τους με συνδιαστική χημεία», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 9/2006. Επιβλέποντες: Δρ. Ε.Ν. Πιτσινός, Καθ. Η. Κουλαδούρος
5. Ν. Μούρτζης «Σύνθεση και μελέτη μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων σε διάλυμα», PhD, Τομέας Οργανικής Χημείας, Χημικό Τμήμα, Παν/μιο Αθηνών, 2006.
6. Η υπότροφος *Καλομοίρα Αγιαμαρνιώτη* ολοκλήρωσε τη διδακτορική της διατριβή τον Ιούλιο του 2006. Ο τίτλος της διατριβής ήταν: 'Σύνθεση και ιδιότητες νέων χημειοφωταυγών και φθορίζοντων ιχνηθετών για ανάλυση βιομορίων'.
7. Χριστοφής Πέτρος, χημικός, «Σύνθεση, Βιοφυσική και Βιοχημική μελέτη συμπλόκων ενώσεων Pt(II) και συμπλόκων μετάλλων του NSID Piroxicam.», Διδακτορικό Δίπλωμα, Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 11/2006
8. Γκίκα Ελένη, «Φωτοκαταλυτική Διάσπαση Οργανικών Ρύπων και Αναγωγή Μετάλλων σε υδατικά διαλύματα παρουσία Πολυοξομεταλλικών Ενώσεων», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2006.
9. Α. Σταυροπούλου, "Πειραματική και θεωρητική μελέτη πολυμερικών συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης», χορήγηση Διδακτορικού Διπλώματος , Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», 2006.

Μεταπτυχιακές εργασίες

1. Μαριάννα Γιαννουράκου, "Μεσοσκοπική Μελέτη Συστημάτων Αστερωτών Πολυμερών και Κολλοειδών με τη Χρήση Μοριακής Προσομοίωσης", Μεταπτυχιακός Τίτλος Σπουδών, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθήνας, Νοέμβριος 2006. Επιβλέποντες: Δρ. Ι. Οικονόμου, Δρ. Ι. Μπιτσάνης (ΙΗΔΛ/ΙΤΕ).
2. Α. Μαράντη, «Ανάπτυξη γενικής μεθόδου σύνθεσης ρεσορκιλιδίων. Ασύμμετρη σύνθεση της μονοκιλίνης II», Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 12/2006. Επιβλέποντες: Δρ. Ε.Ν. Πιτσινός, Καθ. Η. Κουλαδούρος.

3. Σ. Νεοκοσμίδης, «Σύνθεση βιβλιοθηκών αζα-πυρανονών με χρήση πολυμορφικών μητρών», Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 6/2006. Επιβλέποντες: Δρ. Ε.Ν. Πιτσινός, Καθ. Η. Κουλαδούρος.
4. Χ. Αγγελίδου “Σύνθεση θετικώς φορτισμένων κυκλοδεξτρινών και μελέτη της αλληλεπίδρασής τους με νουκλεοτίδια και νουκλεοζίτες σε διάλυμα με Φασματοσκοπία NMR”, MSc, Τομέας Οργανικής Χημείας, Χημικό Τμήμα, Παν/μιο Αθηνών, 2006
5. Ευθυμιάδου Ελένη, χημικός, «Μελέτη της Δομής και της Βιολογικής Δράσης Συμπλόκων Cu-Αντιμικροβιακών Φαρμάκων με Διάφορες Φασματοσκοπικές Μεθόδους.», Μεταπτυχιακό Δίπλωμα ειδίκευσης, Τομέας Ανόργανης Χημείας και Τεχνολογίας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας, 7/2006.

Σεμινάρια Μεταπτυχιακών Φοιτητών

Διοργανώθηκαν τρεις ημερίδες στις 1, 8 και 20 Δεκεμβρίου 2006 όπου παρουσιάστηκαν οι ερευνητικές εργασίες νέων διδασκόντων και μεταπτυχιακών φοιτητών καθώς και μεταδιδακτορικών συνεργατών. Πιο συγκεκριμένα, έγιναν παρουσιάσεις από τους: Δ. Χριστοδουλέα, Μ. Γιαννουράκου, Ε. Χατζιδάκη, Π. Κατσαλούλη, Α. Σταυροπούλου, Α. Ρισάνου, Ι. Τσόγκα (1/12), Γ.Χ. Κόντη, Ο. Βαγγέλη, Β. Χασίμη, Ε. Γκίκα, Π. Χριστοφή, Ν. Βέργαδου, Κ. Τσιμελή (8/12) και Χ. Λεοντιάδου, D. Maffeo, Ε. Τριτοπούλου και Λ. Τζιβελέκα (20 / 12).

ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ

ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ

Κωνσταντίνος Μ. Παλαιός

ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ

Μαυρίδου Ειρήνη

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΓΝΩΜΟΔΟΤΙΚΟ ΣΥΜΒΟΥΛΙΟ

Γιαννακοπούλου Κωνσταντίνα, Πρόεδρος
Οικονόμου Ιωάννης, Αντιπρόεδρος
Λαζάρου Ιωάννης, μέλος
Παπαδόπουλος Κυριάκος, μέλος
Πιτσινός Εμμανουήλ, μέλος

ΕΡΕΥΝΗΤΕΣ

Α' Βαθμίδα

1. Βουρλούμης Διονύσιος
2. Γιαννακοπούλου Κων/να
3. Ζουριδάκης Νικόλαος
4. Κανελλόπουλος Νικόλαος
5. Μαυρίδου Ειρήνη
6. Οικονόμου Ιωάννης
7. Παλαιός Κων/νος
8. Παπαδόπουλος Κυριάκος
9. Προβατά Αστέρω
10. Σανοπούλου Μερόπη
11. Τσιούρβας Δημήτριος
12. Φαλάρας Πολύκαρπος
13. Χισκιά Αναστασία

Β' Βαθμίδα

14. Οξενκιουν Κλάους
15. Παπαδοκωστάκη Κυριακή
16. Λαζάρου Ιωάννης
17. Πιτσινός Εμμανουήλ
18. Πιστόλης Γεώργιος
19. Στεριώτης Θεόδωρος

Γ' Βαθμίδα

20. Κατσαρός Φώτιος
21. Ρωμανός Γεώργιος
22. Σιδεράτου Ωραιοζήλη
23. Στεφανόπουλος Κων/νος

ΕΠΙΤΙΜΟΙ ΕΡΕΥΝΗΤΕΣ

- 24. Κατσαρός Νικόλαος
- 25. Παπακωνσταντίνου Ηλίας
- 26. Πετρόπουλος Ιωάννης
- 27. Χατζούδης Ευγένιος
- 28. Κανιάς Γεώργιος
- 29. Μάλλιαρης Αγγελος

ΣΥΝΕΡΓΑΖΟΜΕΝΟΙ ΚΑΘΗΓΗΤΕΣ

- 30. Θεοδώρου Δώρος, ΕΜΠ
- 31. Κουλαδούρος Ηλίας, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο

ΕΙΔΙΚΟ ΤΕΧΝΙΚΟ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ (ΙΔΑΧ)

- 32. Κακιζής Νικόλαος
- 33. Αθανασέκου Χρυσούλα
- 34. Γκότζιας Αναστάσιος
- 35. Κρητικάκη Μαρία
- 36. Παπαγεωργίου Σέργιος
- 37. Πιλάτος Γεώργιος
- 38. Σαπαλίδης Ανδρέας
- 39. Φάββας Ευάγγελος
- 40. Αρκάς Μιχαήλ
- 41. Βιδάλη Βερονίκη

ΣΥΝΕΡΓΑΖΟΜΕΝΟΙ ΕΡΕΥΝΗΤΕΣ ΜΕ ΠΡΟΣΟΝΤΑ ΕΡΕΥΝΗΤΗ Δ' ΒΑΘΜΙΔΟΣ

- 42. Ζαχαρόπουλος Νικόλαος
- 43. Μούτσος Βασίλης
- 44. Παυλίδου Αναστασία
- 45. Τζιβελέκα Αικατερίνη
- 46. Τριάντης Θεόδωρος
- 47. Φιλιππόπουλος Αθανάσιος

ΜΕΤΑΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΟΙ ΕΡΕΥΝΗΤΕΣ ΜΕ ΕΞΩΤΕΡΙΚΗ ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΗ

- 48. Δήμος Βασίλειος
- 49. Θεοδοσίου Θεοδόσης
- 50. Καρανίκας Στέλιος
- 51. Κατσαλούλης Παναγιώτης
- 52. Κληρονόμου Σοφία
- 53. Κόντος Αθανάσιος
- 54. Λεοντιάδου Χάρη
- 55. Λογοθέτη Ευαγγελία – Γεωργία
- 56. Maffeo Davide
- 57. Nolan John

- 58. Ρισάνου Αναστασία
- 59. Σαριδάκης Εμμανουήλ
- 60. Σπυριούνη Θεοδώρα
- 61. Ψωμάς Γεώργιος

ΔΙΟΙΚΗΤΙΚΟ & ΤΕΧΝΙΚΟ ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ

- 62. Αρχιμανδρίτη Μαρία
- 63. Δουβαρά Βασιλική
- 64. Βαρβέρης Αλέξανδρος (μερική απασχόληση)
- 65. Γιαννακοπούλου Ελίνα
- 66. Λάκτεν Αικατερίνη
- 67. Σασσάλου Σιμεώνη

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΙ ΦΟΙΤΗΤΕΣ

Υπότροφοι ΕΚΕΦΕ «Δ»

- 68. Αγγελίδου Χρυσή
- 69. Αλεξάκος Γεώργιος
- 70. Βαγγέλη Ολγα
- 71. Γαλανού Μαρία
- 72. Ζάρας Αριστοτέλης
- 73. Καρακατσάνη Ειρήνη
- 74. Κόντη Γεωργία-Χάρη
- 75. Καλογιαννίδης Δημήτριος
- 76. Κοντογιάννη Χριστίνα
- 77. Κούβαρης Νικόλαος
- 78. Μάγγος Αλέξανδρος
- 79. Μπαλωμένου Ιωάννα
- 80. Νεοκοσμίδης Ευστράτιος
- 81. Νούσιου Βασιλική
- 82. Τσιμελή Αικατερίνη
- 83. Τσόγκας Ιωάννης
- 84. Φλώρος Κωνσταντίνος
- 85. Χατζηβασιλόγλου Ευαγγελία
- 86. Χατζηευθυμίου Σπυρίδων
- 87. Χριστοδουλέας Διονύσιος
- 88. Χριστοφής Πέτρος

Με Εξωτερική Χρηματοδότηση

- 89. Ακύλας Βίκτωρας
- 90. Αλεξάκη Νίκη
- 91. Βέργαδου Νίκη
- 92. Βερμισσόγλου Ελένη
- 93. Γιαννουράκου Μαριάννα
- 94. Γκιάστας Πέτρος
- 95. Γκίκα Ελένη
- 96. Kyllonen Lasse

97. Καντώνης Γιώργος
98. Κατσαλούλης Παναγιώτης
99. Κοντός Αθανάσιος
100. Λαμπροπούλου Μαρία
101. Λαμπρόπουλος Αναστάσιος
102. Μακροδημήτρη Ζωή
103. Μούρτζης Νικόλας
104. Οικονόμου Θωμάς
105. Ρόζη Ευαγγελία
106. Σούλας Δημήτριος
107. Σταυροπούλου Αριστέα
108. Τσιγώνιας Μάριος

Άμισθοι Φοιτητές

109. Αναγνώστου Σοφία
110. Αντωνάρακη Σταματία
111. Αγιαμαρνιώτη Καλομοίρα
112. Γαριφαλίδη Παρασκευή
113. Ευθυμιάδου Ελένη
114. Κόρμαλη Πηγή
115. Λανίτου Οριάννα
116. Ματιάτος Ιωάννης
117. Μανώλη Κυριακή
118. Παπαδοπούλου Α.
119. Στεριώτη Νικολέτα
120. Τριτοπούλου Ευθυμία
121. Χερουβείμ Μαρία
122. Χασίμη Αλμπάνα
123. Χασιώτη Ειρήνη
124. Μιχαηλάκης Α.
125. Δακανάλη Μαριάννα
126. Μαράντη Α.

ΣΥΝΕΡΓΑΤΕΣ ΜΕ ΣΥΜΒΑΣΗ ΑΠΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ

127. Αβρονιδάκης Γεώργιος
128. Γιακουμάκης Αλέξανδρος
129. Δεληγιάννη Αγλαΐα
130. Zinger Edward
131. Μπουλούμπαση Διονυσία
132. Σπένδος Ζαχαρίας
133. Χρήστου Στέφανος
134. Χρυσοχόου Μαρία
135. Αρνίδη Ελένη
136. Κατσαρού Μαρία
137. Παπακυριακού Αθανάσιος