

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

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ

ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ

Φαλάρας Πολύκαρπος

ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ

Προβατά Αστέρω

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΓΝΩΜΟΔΟΤΙΚΟ ΣΥΜΒΟΥΛΙΟ

Στεριώτης Θεόδωρος, (Πρόεδρος)
Χισκιά Αναστασία, (Αντιπρόεδρος)
Προβατά Αστέρω, (Μέλος)
Γιαννακοπούλου Κωνσταντίνα, (Μέλος)
Πιτσινός Εμμανουήλ, (Μέλος)

Διεύθυνση: Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ» ,Νεαπολέως και Πατριάρχου Γρηγορίου,
Αγία Παρασκευή Αττικής, 153 10

Επικοινωνία:

Γραμματεία: τηλ.: 210 650- 3652 & 3653, FAX: 210 6511 766, e-mail vdouvara@chem.demokritos.gr

Διευθυντής: τηλ. 210 650-3644 - 3652, e-mail papi@chem.demokritos.gr

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Εισαγωγικά.....	5
Οργανόγραμμα Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.....	7
Επιστημονικές Δραστηριότητες.....	8
Πατέντες, Μεταπτυχιακοί τίτλοι.....	9
Οικονομικά Στοιχεία.....	11
Προσωπικό Ινστιτούτου.....	13

A. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

Πρόγραμμα 1: Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά.....19

Έργα

1.1 Δομική και υπερμοριακή χημεία.....	21
1.2 Νανο-υλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής.....	26
1.3 Μοριακή θερμοδυναμική και μοντελοποίηση υλικών.....	31
1.4 Φωταύγεια – Ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για αναλυτικές και Βιοαναλυτικές αρμογές.....	36
1.5 Φαινόμενα μεταφοράς ύλης σε πολυμερή.....	39
1.6 Στατιστική μηχανική και μη-γραμμική δυναμική.....	43
1.7 Μοριακή Υπολογιστική Χημεία.....	47

Πρόγραμμα 2 :. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια.....49

Έργα

2.1 Μεμβράνες και μικροπορώδη υλικά για περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς.....	51
2.2 Φωτοοξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση της ηλιακής ενέργειας – ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για ενεργειακές, και περιβαλλοντικές εφαρμογές.....	60
2.3 Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές διεργασίες (ηλιακή ενέργεια - περιβάλλον).....	67
2.4 Ηλεκτρονική φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε υπερμόρια και νανοδομές.....	72
2.5 Ισοτοπική υδρολογία	74
2.6 Ο ρόλος των ιχνοστοιχείων στο περιβάλλον.....	76

Πρόγραμμα 3: Χημική Βιολογία.....77

Έργα

3.1 Σύνθεση φυσικών προϊόντων και βιοοργανική χημεία.....	79
3.2 Χημική Βιολογία φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων μορίων.....	83

B. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ.....89

B.1 Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Συστημάτων	
B.1.1 Εργαστήριο Φασματοσκοπίας NMR.....	91
B.1.2 Εργαστήριο X-RAY.....	91
B.1.3 Εργαστήριο Στοιχειακής Ανάλυσης.....	92
B.1.4 Εργαστήριο AFM, FT-IR, I.M.S.	92
B.1.5 Εργαστήριο Θερμικής Ανάλυσης Πολυμερών και άλλων υλικών.....	94
B.1.6 Εργαστήριο Φασματοσκοπίας MICRO – RAMAN.....	94
B.1.7 Υαλουργείο.....	96
B.2 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Ραδιοχρονολογήσεις, Ισοτοπικές Αναλύσεις και Μετρήσεις Ραδονίου».....	98
B.3 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Περιβαλλοντικές Αναλύσεις».....	100

Γ. ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ.....103

Εισαγωγικά

Το 2008 χαρακτηρίστηκε από την εντατικοποίηση της προσπάθειας του Ινστιτούτου για την επίτευξη των ερευνητικών και τεχνολογικών στόχων που τέθηκαν την προηγούμενη χρονιά, μέσω εφαρμογής μιας συγκροτημένης πολιτικής έρευνας και ανάπτυξης βασισμένης σε συγκεκριμένη στρατηγική και σαφώς καθορισμένους άξονες.

Η απόδοση των ερευνητικών ομάδων (εργασίες σε διεθνή περιοδικά και συνέδρια, βιβλιογραφικές αναφορές, διπλώματα ευρεσιτεχνίας, διδακτορικά, εξωτερική χρηματοδότηση, παροχή υπηρεσιών προς τρίτους) είναι λίαν υψηλή. Ειδικότερα για το 2008 δημοσιεύθηκαν περίπου 120 άρθρα σε διεθνή περιοδικά με κριτές, οι ερευνητικές εργασίες του Ινστιτούτου έλαβαν περισσότερες από 1900 ετεροαναφορές, κατατέθηκαν 3 διπλώματα ευρεσιτεχνίας και οργανώθηκαν 2 διεθνή συνέδρια. Το Ινστιτούτο παρουσίασε έντονη δραστηριότητα και στον τομέα της εκπαίδευσης με την οργάνωση 3 θερινών σχολείων, την πραγματοποίηση και συντονισμό μεταπτυχιακών μαθημάτων (COSA) και την ολοκλήρωση 6 διδακτορικών διατριβών, 5 μεταπτυχιακών διπλωμάτων ειδίκευσης και 5 διπλωματικών εργασιών.

Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας έχει πετύχει ισχυρή εξωτερική χρηματοδότηση. Τη στιγμή αυτή υλοποιούνται 8 ευρωπαϊκά προγράμματα στα πλαίσια του FP6, από τα οποία 2 είναι δίκτυα αριστείας (NoE) και στο ένα από αυτά το Ινστιτούτο έχει το συντονισμό. Παράλληλα, η αρχική συμμετοχή στο FP7 κρίνεται ιδιαίτερα επιτυχής αφού ήδη 6 προτάσεις έχουν εγκριθεί και έχει αρχίσει η υλοποίησή τους. Αναμένεται περαιτέρω σημαντική αύξηση των εισροών τόσο από ευρωπαϊκά, όσο και από Ελληνικά προγράμματα (κυρίως στα πλαίσια των προκηρύξεων του ΕΣΠΑ) καθώς και από συμβόλαια παροχής υπηρεσιών.

Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε στην προετοιμασία του Ινστιτούτου για την επικείμενη αξιολόγηση των Ερευνητικών Κέντρων από τη ΓΓΕΤ. Έτσι ξεκίνησε και βρίσκεται σε εξέλιξη η αναδιάρθρωση των ερευνητικών προγραμμάτων και η παράλληλη καθιέρωση ενός σύγχρονου και λειτουργικού οργανογράμματος, που θα δίνει ταυτότητα στο Ινστιτούτο, θα ενισχύει τη συνεργασία ανάμεσα στα έργα και θα επιτρέπει την βέλτιστη αξιοποίηση του ερευνητικού του δυναμικού.

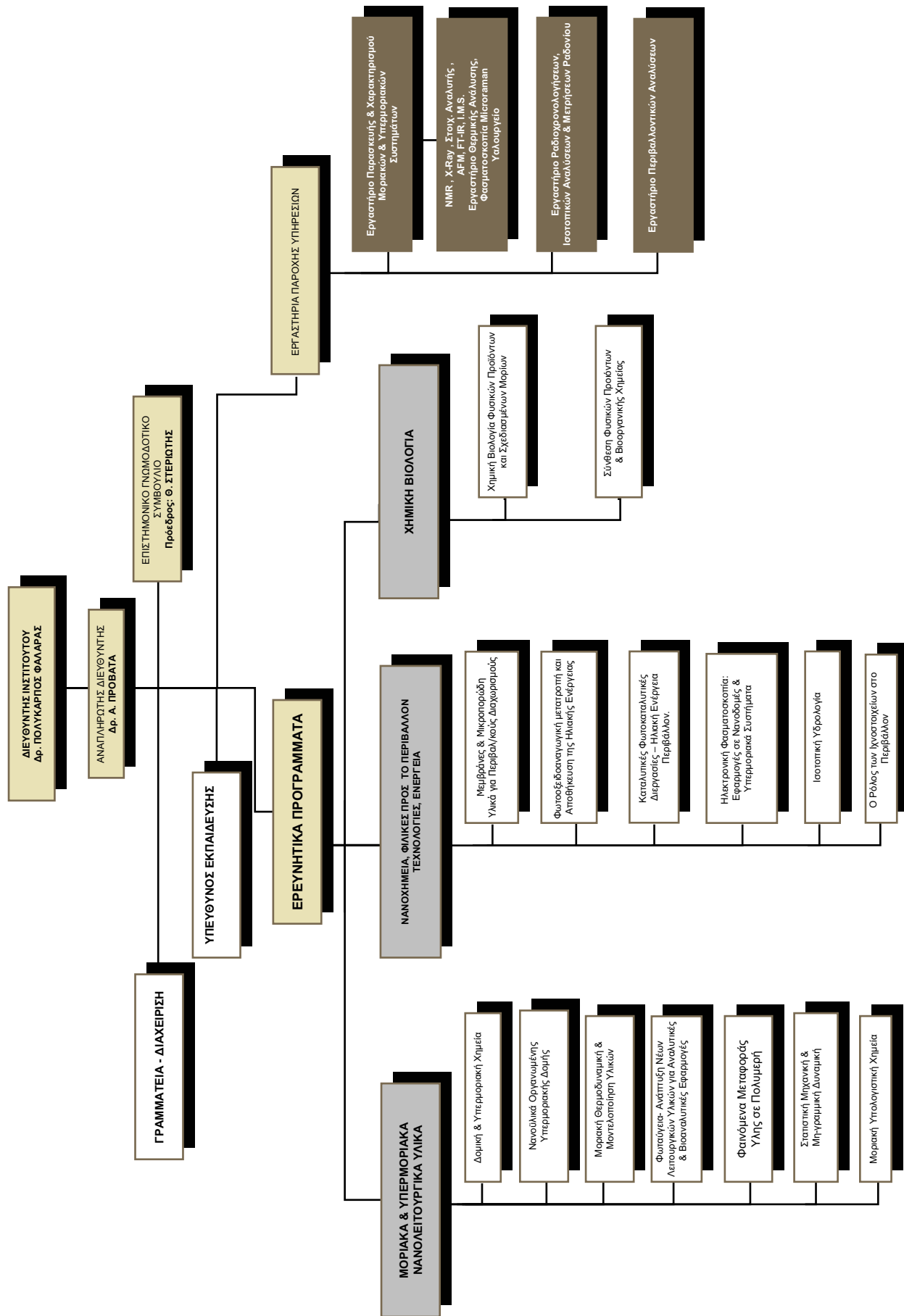
Μεγάλη προσπάθεια αναλώθηκε στη βελτίωση της υλικοτεχνικής υποδομής: αναπτύχθηκε νέα ερευνητική υποδομή (η μοναδική στην Ελλάδα) για την αξιολόγηση της ικανότητας νανοϋλικών στην αποθήκευση υδρογόνου. Αποκτήθηκαν νέα σύγχρονα όργανα και διατάξεις: SEM, νέο AFM, Electrochemical Impedance, διαμορφωμένη φασματοσκοπία έντασης και τάσης. Αναβαθμίσθηκε το εργαστήριο χαρακτηρισμού μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων με την ένταξη του Φασματομέτρου Raman και με την αναβάθμιση του μικροσκοπίου AFM. Πραγματοποιήθηκε η διαπίστευση του Εργαστηρίου περιβαλλοντικών αναλύσεων για το προσδιορισμό πολυαρωματικών υδρογονανθράκων σε πόσιμα και επιφανειακά νερά (μοναδική διαπιστευμένη αναλυτική μονάδα στον ελληνικό χώρο).

Τα παραπάνω δεδομένα αλλά και ο λεπτομερής απολογισμός που ακολουθεί αποδεικνύουν ότι πράγματι το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας βρίσκεται σε σταθερά ανοδική πορεία. Τα στοιχεία που παρατίθενται επιβεβαιώνουν την παραγωγή σημαντικού ερευνητικού αποτελέσματος, επιβραβεύοντας τη σκληρή προσπάθεια των συναδέλφων, παρά το γεγονός ότι το έργο αυτό πολλές φορές πραγματοποιείται κάτω από αντικειμενικά δύσκολες συνθήκες.

Αγία Παρασκευή, Μάρτιος 2009

Ο Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας



ΣΥΝΟΠΤΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ

Δημοσιεύσεις σε Περιοδικά με Κριτές	85+39*
Δημοσιεύσεις σε Πρακτικά Συνεδρίων	84
Τεχνικές Αναφορές	4
Citations	1905
Προσκεκλημένες Ομιλίες	16
Οργάνωση Συνεδρίων	2
Διδακτορικά/Masters/Διπλωματικές που ολοκληρώθηκαν το 2008	8 / 5 / 5
Πατέντες	3

*** in press**

Ινστιτούτο Φυσικοχημείας 2008

Διδακτορικές Διατριβές

1. **Σπυρίδων Χατζηευθυμίου**, «Κρυσταλλογραφική Μελέτη Δομής Βιολογικών Μακρομορίων. I. Ανοσοσφαιρινικού τύπου περιοχές 9 έως 11 της μυομεσίνης. II. Σύμπλοκα εγκλεισμού κυκλοδεξτρινών» Διδακτορική Διατριβή, Χημικό Τμήμα, Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιούλιος 2008.
2. **Χριστίνα Κοντογιάννη**, «Σύνθεση λειτουργικών δένδριτικών πολυμερών και μελέτη εγκλεισμού και ελεγχόμενης αποδέσμευσης βιοδραστικών μορίων», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Μάρτιος 2008.
3. **Θωμάς Οικονόμου**, "Βιολειτουργίες Ακολουθιών DNA", Ιατρική Σχολή, Παν. Αθηνών, Ιούνιος 2008.
4. **Βασιλική Νουσίου**, "Υπολογιστική Μελέτη Δημιουργίας Χωροχρονικών Ταλαντώσεων σε Ετερογενείς Καταλυτικές Αντιδράσεις", Τμήμα Χημείας, Παν. Αθηνών, Σεπτέμβριος 2008.
5. **Σταματία Αντωναράκη**. «Μελέτη Μηχανισμών Φωτοαποικοδόμησης Οργανοχλωριωμένων Ρύπων: Φωτολυτικά με Υπεροξειδίο του Υδρογόνου και φωτοκαταλυτικά με 12-βολφραμοφωσφορικό οξύ.» Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ, 2008.
6. **Μαριάννα Δακανάλη**, «Σύνθεση πολυκυκλικών συστημάτων, βασικών δομών βιοδραστικών φυσικών προϊόντων», Γενικό Τμήμα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Νοέμβριος 2008.
7. **Σέργιος Παπαγεωργίου**, «Ρόφηση βαρέων μεταλλών από απόβλητα ύδατα με μεταβολίτες θαλασσίου φύκους», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σεπτέμβριος 2008
8. **Ιωάννης Τσόγκας**, «Υπερμοριακά συστήματα σχηματιζόμενα από την αλληλεπίδραση λιποσωμάτων με δένδριτικά πολυμερή», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2008

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

1. **Νικολέττα Στεριώτη**, «Μοριακή αναγνώριση λιποσωμάτων σταθεροποιημένων με πολυ(αιθυλενογλυκόλη)», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Μάρτιος 2008.
2. **Μαρία Γαλανού**, «Λειτουργικά λιποσώματα για την μεταφορά βιοδραστικών ουσιών και εφαρμογή τους στην καταστροφή καρκινικών κυττάρων με φωτοδυναμική θεραπεία», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Οκτώβριος 2008.
3. **Σκανδάλη, Αικατερίνη** «Φωτοκαταλυτική Αποικοδόμηση Αερίων Ρύπων με χρήση Νανοδομημένης Τιτανίας», Διπλωματική Εργασία, Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, παρουσίαση 26 Μαρτίου 2008.
4. **Αικατερίνη Τσιμελή**. «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού κυανοτοξινών σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική LC-MS/MS. Διενέργεια έρευνας για την παρουσία κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά της Αθήνας», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2008.
5. **Ιωάννης Μαυρίδης**. «Χημική βιολογία μικρών μορίων που παρεμποδίζουν την πρωτεϊνική σύνθεση», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ (ΕΠΕΑΕΚ), Νοέμβριος 2008. Γ.

Διπλωματικές Εργασίες

1. Ελένη Ανδρουλάκη, «Θερμοδυναμική Ανάλυση Βασισμένη στην Στατιστική Μηχανική και στην Θεωρία Κόμβων», Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ, Μάρτιος 2008.
2. Ιωάννης Τσακόπουλος, Εκτίμηση αντιοξειδωτικής δράσης α-αμινοξέων με χημειοφωταυγειομετρικές τεχνικές, ΕΜΠ, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Ιούνιος 2008.
3. Ηλίας Παπαηλίας, Εκτίμηση αντιοξειδωτικής δράσης φαινολικών παραγώγων με φθορισμομετρικές τεχνικές, ΕΜΠ, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Νοέμβριος 2008.
4. Σ. Ζερβού «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού φαινολουριών σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική HPLC/UV και σύγκριση με την τεχνική ELISA.» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
5. Μ. Παπαδημητρίου. «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού φαινολουριών σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική HPLC/UV και σύγκριση με την τεχνική ELISA.» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Πατέντες 2008

1. "Τσιμεντοειδή λαφροεπιχρίσματα και ασβεστοκονιάματα με φωτοεπαγόμενες ιδιότητες αντιρρύπανσης και αυτοκαθαρισμού", Φαλάρας, Π.; Κοντός, Α.Ι. ΟΒΙ, Αριθμός αίτησης: 20080100568
2. "Χρήση νανοσωματιδίων οξειδίων μεταλλοειδών ή/και μετάλλων που παράγονται με φιλική προς το περιβάλλον διεργασία για την απομάκρυνση ανεπιθύμητων παραγόντων από το νερό, διαλύτες ή οποιοδήποτε ρευστό"
Δ. Τσιούρβας, Μ. Αρκάς, Αρ. Αίτησης: 20080100395
3. "Oxime Glucokinase Activators."
D. Vourloumis, D.E. Murphy, T.J. Prins, F. Ruebsam, C.V. Tran, S.J. Berthel, R.F. Kester, R. U.S. Provisional Patent Application No. 23198 US (pending).

ΟΙΚΟΝΟΜΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΤΟΥ ΙΦΧ ΓΙΑ ΤΟ 2008

Περιγραφή	ΕΣΟΔΑ σε €	Περιγραφή	ΕΞΟΔΑ σε €
Υποστήριξη Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (κωδ.:462)	Ταμειακό υπόλοιπο 2006	Κατανομή στις ομάδες	34.500
	Συγχρηματοδότηση 2007 Β' δόση ΓΓΕΤ	Δανεισμοί σε άλλα προγράμματα	14.366
	Οικονομική ενίσχυση αποφ. ΔΣ 407ης	Γραμμάτεια - Διαχείριση	17.290
	Μεταφορά από 459 για ενίσχυση συνεδρίου	Επισκευές	4.035
	Μεταφορές από λήξη έργων και επιστροφές δανείων από έργα	Ενίσχυση Διδακτορικών και Masters	956
		Σεμινάρια (Εξοδα επίτασης)	2.144
		Πολιτιστικά	480
		Άζωτο	7.772
		Δικτυακή υποστήριξη	7.613
		Υαλουργείο	352
	ΣΥΝΟΛΟ	130.394	

Εργαστήριο	ΕΣΟΔΑ σε €	ΕΞΟΔΑ σε €
Μικροσκοπία Ατομικών Δυνάμεων (AFM)		
Φασματοσκοπία Υπερύθρου FT-IR		
Φασματοσκοπία Μάζας		
Στοιχειακή Ανάλυση	2.060	2.266
NMR		
Ιστοπική Υδρολογίας	57.251	34.556
Περιβαλλοντικές Αναλύσεις	28.450	24.023
Εργαστήριο Θερμικής Ανάλυσης Πολυμερών και άλλων Υλικών	1.190	300
ΣΥΝΟΛΟ		

ΕΙΣΡΟΕΣ ΑΠΟ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΣΤΑ ΕΡΓΑ ΤΟΥ ΙΦΧ

ΕΡΓΟ	Ποσό σε €
1. Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά	
Δομική & Υπερμοριακή Χημεία (Ειρ. Μαυρίδου)	304.233
Νανο-υλικά Οργανωμένης Υπερμοριακής Δομής (Δ. Τσιούρβας)	70.555
Μοριακή Θερμοδυναμική και Μοντελοποίηση Υλικών (Ι. Οικονόμου)	93.554
Φωταύγεια Οργανικών Ενώσεων και Εφαρμογές στην Αναλυτική Χημεία (Κ. Παπαδόπουλος)	2.400
Φαινόμενα Μεταφοράς Ύλης σε Πολυμερή (Μ. Σανοπούλου)	6.843
Στατιστική Μηχανική και Μη -γραμμική Δυναμική (Α. Προβατά)	2.000
Μοριακή Υπολογιστική Χημεία (Ι. Λαζάρου)	2.000
2. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια	
Μεμβράνες και Μικροπορώδη Υλικά για Περιβαλλοντικούς Διαχωρισμούς (Ν. Κανελλόπουλος)	244.452
Φωτοξειδοαναγωγική Μετατροπή και Αποθήκευση της Ηλιακής Ενέργειας – Ανάπτυξη Νέων Λειτουργικών Υλικών για Ενεργειακές και Περιβαλλοντικές Εφαρμογές (Π. Φαλάρας)	101.317
Καταλυτικές – Φωτοκαταλυτικές Διεργασίες (Ηλιακή Ενέργεια – Περιβάλλον) (Α. Χισκιά)	4.900
Ηλεκτρονική Φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε Υπερμόρια και σε Νανοδομές (Γ. Πιστόλης)	2.400
Ισοτοπική Υδρολογία (Ν. Ζουριδάκης)	41.700
3. Χημική Βιολογία	
Σύνθεση Φυσικών Προϊόντων & Βιοοργανική Χημεία (Εμμ. Πιτσινός)	2.400
Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων (Δ. Βουρλούμης)	403.264

Προσωπικό Ινστιτούτου Φυσικοχημείας

users@chem.demokritos.gr

Ερευνητές

Ονοματεπώνυμο	Βαθμίδα	Ειδικότητα	τηλέφωνο	e-mail
1. Δρ. Βουρλούμης Διονύσιος	Α΄	Χημικός	210 650 3624-3795	vousloumis@chem.demokritos.gr
2. Δρ. Γιαννακοπούλου Κων/να	Α΄	Χημικός	210 650 3796-3617	dyanna@chem.demokritos.gr
3. Δρ. Ζουριδάκης Νικόλαος	Α΄	Φυσικός	210 650 3969-3959	nizouri@chem.demokritos.gr
4. Δρ. Κανελλόπουλος Νικόλαος	Α΄	Χημ. Μηχαν.	210 650 3973-3977	kanel@chem.demokritos.gr
5. Δρ. Κατσαρός Φώτης	Γ΄	Χημικός	210 650 3671	fkats@chem.demokritos.gr
6. Δρ. Κοντός Αθανάσιος	Γ΄	Φυσικός	210 650 3632	akontos@chem.demokritos.gr
7. Δρ. Λαζάρου Ιωάννης	Β΄	Χημικός	210 650 3623	lazarou@chem.demokritos.gr
8. Δρ. Μαυρίδου Ειρήνη	Α΄	Χημικός	210 650 3793-3617	mavridi@chem.demokritos.gr
9. Δρ. Οικονόμου Ιωάννης	Α΄	Χημ. Μηχαν.	210 650 3963	economou@chem.demokritos.gr
10. Δρ. Παπαδοκωστάκη Κυριακή	Β΄	Χημικός	210 650 3639-3661	krapadok@chem.demokritos.gr
11. Δρ. Παπαδόπουλος Κυριάκος	Α΄	Χημικός	210 650 3647-3646	kyriakos@chem.demokritos.gr
12. Δρ. Πιτσινός Εμμανουήλ	Α΄	Χημικός	210 650 3689-3654	pistolis@chem.demokritos.gr
13. Δρ. Πιστόλης Γεώργιος	Β΄	Χημικός	210 650 3637-3422	pitsinos@chem.demokritos.gr
14. Δρ. Προβατά Αστέρω	Α΄	Φυσικός	210 650 3964	aprovata@limnos.chem.demokritos.gr
15. Δρ. Ρωμανός Γεώργιος	Γ΄	Χημ. Μηχαν.	210 650 3981	groman@chem.demokritos.gr
16. Δρ. Σανοπούλου Μερόπη	Α΄	Χημικός	210 650 3785-3620	sanopoul@chem.demokritos.gr
17. Δρ. Σαρεϊδάκης Εμμανουήλ	Δ΄	Φυσικός	210 650 3628-3658	esaridak@chem.demokritos.gr
18. Δρ. Σιδεράτου Ωραιοζήλη	Γ΄	Χημικός	210 650 3616-3638	zili@chem.demokritos.gr
19. Δρ. Στεριώτης Θεόδωρος	Β΄	Χημικός	210 650 3614-3636	tster@chem.demokritos.gr
20. Δρ. Στεφανόπουλος Κων/νος	Γ΄	Φυσικός	210 650 3606	stefan@chem.demokritos.gr
21. Δρ. Τσιούρβας Δημήτρης	Α΄	Χημ. Μηχαν.	210 650 3616	tsiourvas@chem.demokritos.gr
22. Δρ. Φαλάρας Πολύκαρπος	Α΄	Φυσικός	210 650 3644-3632	papi@chem.demokritos.gr
23. Δρ. Χισκιά Αναστασία	Α΄	Χημικός	210 650 3643-3642	hiskia@chem.demokritos.gr

Υπάλληλοι Ιδιωτικού Δικαίου Αορίστου Χρόνου (ΙΔΑΧ)

24. Δρ. Αρκάς Μιχάλης	210 650 , 3639 - 3638	madchemist@chem.demokritos.gr
25. Δρ. Βέργαδου Νίκη	210 650 -3960, 3963	nvergad@chem.demokritos.gr
26. Δρ. Βιδάλη Βερονίκη	210 650 -3654, 3789	vidali@chem.demokritos.gr
27. Αθανασέκου Χρυσούλα	210 650 -3981, 3973	cathan@chem.demokritos.gr

28. Γκότζιας Αναστάσιος
29. Δρ. Κακίζης Νικόλαος
30. Δρ. Παπαγεωργίου Σέργιος
31. Πιλάτος Γιώργος
32. Σπαλιδής Ανδρέας
33. Φάββας Ευάγγελος

agotzias@chem.demokritos.gr
nkakizis@chem.demokritos.gr
spap@chem.demokritos.gr
gpilat@chem.demokritos.gr
asap@chem.demokritos.gr
favvas@chem.demokritos.gr

210 650 -3636, 3614
210 650 -3973, 3977
210 650 -3636,3614
210 650 -3973
210 650 -3973
210 650 -3636, 3614

Διοικητικό Προσωπικό

34. Αρχιμανδρίτη Μαρία - Διαχείριση
35. Δουβαρά Βασιλική - Γραμματεία

stratak@chem.demokritos.gr (συνταξιοδοτήθηκε 31.12.08)
vdouvara@chem.demokritos.gr

210- 650 3648
210 650 3653

Τεχνικό Προσωπικό

36. Γιαννακοπούλου Ελίνα
37. Λάκτεν Αικατερίνη
38. Σασσάλου Συμεώνη

elyan@chem.demokritos.gr

210 650-3646
210 650-3955
210-650-3805

(συνταξιοδοτήθηκε 31.12.08)

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας

39. Δρ. Βουγιουκαλάκης Γεώργιος
40. Δρ Παυλίδου Αναστασία
41. Δρ. Τριάντης Θεόδωρος
42. Δρ. Σούλας Δημήτριος
43. Δρ. Κατσαλούλης Παναγιώτης

vougouk@chem.demokritos.gr
paulidou@chem.demokritos.gr
triantis@chem.demokritos.gr
dsoulas@chem.demokritos.gr
pkatsaloulis@chem.demokritos.gr

210 650 3646, 3634
210 650 3617, 3628
210 650-3646, 3643
210 650 3639
210 650 3964

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι Δημοκρίτου

44. Αθηναίος Νικόλαος
45. Αλεξάκος Γεώργιος
46. Ανδρουλάκη Ελένη
47. Βαγγέλη Ολγα
48. Γασσαφάκη Δήμητρα
49. Ευθυμιάδου Ελένη
50. Καυγιάς Αλέξανδρος
51. Κόντη Γεωργία

chemnik@hotmail.com
galexakos@chem.demokritos.gr
eleandr@chem.demokritos.gr
ovangeli@chem.demokritos.gr
g.dimmy@chem.demokritos.gr
'elefth@chem.demokritos.gr'
al_kavgas@yahoo.gr
gkonti@chem.demokritos.gr

210 650 3789
210 650 3633
210 650 3961
210 650 3973
210 650 3636
210 650 3624
210 650 3959
210 650 3632

52. Κούβαρης Νίκος	210 650 3964	nkoub@chem.demokritos.gr
53. Μανουηλίδου Μαλαματένια	210 650 3617, 3628	mmanouil@chem.demokritos.gr
54. Μαυρίδης Ιωάννης	210 650 3611, 3795	gmavridis@chem.demokritos.gr
55. Μπαλωμένου Ιωάννα	210 650 3637	balomenou@chem.demokritos.gr
56. Νουσιού Βασιλική	210 650 3964	vnousiou@chem.demokritos.gr
57. Τσιμελή Αικατερίνη	210 650 3633	ksimeli@chem.demokritos.gr
58. Τσουνάκη Χριστίνα	210 650 3623, 3671	cris@chem.demokritos.gr

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες

59. Δρ. Ζαχαρόπουλος Νικόλαος	210 650 3961
60. Δρ. Ζωγράφος Αλέξανδρος	210 650 3611, 3795
61. Δρ. Θεοδοσίου Θεοδόσης	210 650 3669
62. Δρ. Οικονόμου Θωμάς	210 650 3964
63. Δρ. Καρανικολός Γεώργιος	210 650 3973
64. Δρ. Κατσαρού Μαρία	210 650 3611, 3795
65. Δρ. Κατσούλης Ιωάννης	210 650 3611
66. Δρ. Νάχμια Βικτώρια	210 650 3611
67. Dr. Nolan John	210 650 3973
68. Δρ. Κυθραιώτη Γεωργία	210 650 3611, 3795
69. Δρ Λεοντιάδου Χάρη	210 6503963
70. Δρ. Λογοθέτη Ευαγγελία	210 650 3632 - 3640
71. Δρ. Λυκοδήμος Βλάσσης	210 650 3611, 3795
72. Δρ. Παπακυριακού Αθανάσιος	210 650 3611
73. Δρ. Πυρκωτού Κων/να	210 650 3961 -3963
74. Δρ. Σπυριγιούνη Θεοδώρα	210 650 3632
75. Δρ. Στεργιόπουλος Θωμάς	210 650 3638, 3669
76. Δρ. Τζιβελέκα Αικατερίνη	

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα

77. Αγγελίδου Χρυσή	210 650 3617, 3628
78. Αναγνώστου Σοφία	210 650 3959
79. Αναστασοπούλου Πανούλα	210 650 3611, 3795

80. Αντωνοράκη Σταματία	210 650 3633
81. Βεζύρη Χαριτωμένη	210 650 3973
82. Βερμίσσολου Ελένη	210 650 3981
83. Γιαννουράκου Μαριάννα	210 650 3963
84. Δακανάλη Μαριάννα	210 650 3654 - 3789
85. Δημητράκοπουλος Ιωάννης	
86. Ζερβού Σεβαστή	210 650 3633
87. Παπαδημητρίου Μαρία	
88. Τριανταφυλλάκη Στέλλα	210 650 3633
89. Καλούδη Χατζέα Αντωνία	210 650 3667, 3422
90. Κόρμαλη Πηγή	210 650 3633
91. Λαμπροπούλου Μαρία	210 650 3617, 3628
92. Λαμπρόπουλος Αναστάσιος	210 650 3973
93. Λανίτου Οριάννα	210 650 3646
94. Μακροδημήτρη Ζωή	210 650 3960
95. Μανώλη Κυριακή	210 650 3639
96. Μητσοπούλου Κορνηλία	210 650 3654 - 3789
97. Κονιδάρη Μαύρα	210 650 3639
98. Παπαδοπούλου Άννα	210 650 3611
99. Στεριώτη Νικολέτα	210 650 3616
100. Τσιλιούκα Αικατερίνη	
101. Φωτιάδου Κατερίνα	210 650 3617, 3628
102. Χασίμη Αλμπάνα	210 650 3639
103. Χασιώτη Ειρήνη	210 650 3633
104. Χατζηευθυμίου Σπιριδών	210 650 3617, 3628
105. Χριστοδουλέας Διονύσιος	210 650 3646
106. Κοντός Αθανάσιος	210 650 3632 - 3640
107. Ρόζη Ευαγγελία	210 650 3632
108. Αλέξάκη Νίκη	210 650 3632
109. Καντώνης Γιώργος	210 650 3632-3658
110. Κατσανάκη Αντιγόνη	210 650 3632

Συνεργάτες σε Προγράμματα

111. Ακύλας Βίκτωρας	210 650 3973
112. Αρνίδη Ελένη	210 650 3959 - 3957
113. Γεωργιάκη Χριστίνα	210 650 3611, 3795
114. Ράπτης Νικόλαος	210 650 3973

115. Τσουκλέρης Δημήτριος	210 650 3635	
116. Πραγκασιτής Απόστολος	210 650 3656	Δικτυακός Υπεύθυνος
117. Φερδεριγός Μαρίνος	210 650 3794	Υαλουργός

admin@chem.demokritos.gr

Εξωτερικοί Συνεργάτες

118. Θεοδώρου Δώρος	210 772 3157
119. Καλούδης Τριαντάφυλλος	210 650 3633
120. Κανιάς Γεώργιος*	210 650 3665
121. Κατσαρός Νικόλαος *	210 650 3665
122. Κουλαδούρος Ηλίας	210 650 3654
123. Οξενκιουν Κλάους *	210 650 3665
124. Παλαιός Κων/νος *	210 650 3666
125. Παπακωνσταντίνου Ηλίας *	210 650 3642
126. Πετρόπουλος Ιωάννης*	210 650 3787
127. Φιλιππίδης Αθανάσιος	210 650 3632
128. Χατζούδης Ευγένιος*	210 650 3649

* Συνταξιούχος Ερευνητής του ΙΦΧ

Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

Πρόγραμμα 1

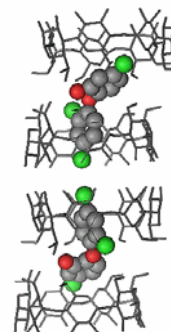
Μοριακά & Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά

1.1 ΔΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Αντικείμενο Έργου

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

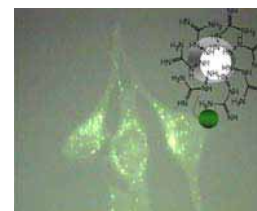
1. *Συστήματα ξενιστού-ξενιζομένου μορίου*. Μελετάται ο εγκλεισμός βιοδραστικών μορίων καθώς και προτύπων ενώσεων στη κοιλότητα των κυκλοδεξτρινών και προσδιορίζεται η δομή και οι λεπτομερείς αλληλεπιδράσεις, είτε σε υδατικά διαλύματα με φασματοσκοπία NMR είτε στην στερεά κατάσταση με κρυσταλλογραφία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



Δομή του συμπλόκου β-κυκλοδεξτρίνη triclosan

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

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



Επισημασμένες κυκλοδεξτρίνες διαπερνούν κυτταρικές μεμβράνες

3. *Σύνθεση νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για εφαρμογές στη νανοτεχνολογία*. Τα παράγωγα αυτά: (α) συνδέονται με επιφάνειες μετάλλων (π.χ. χρυσός) (β) εναποτιθέμενα σε επιφάνειες δημιουργούν νανοδομές με οργάνωση σε 2D (γ) αποτελούν το υπόστρωμα για την δημιουργία διδιάστατων υπερμοριακών δομών ικανών να μεταδίδουν ηλεκτρικό ή φωτεινό σήμα κατά συγκεκριμένη κατεύθυνση.

4. *Κρυσταλλογραφία Μακρομορίων*. (α) Προσδιορισμός της δομής φυσικών και μεταλλαγμένων μελών νέας οικογένειας φερρεδοξινών με δύο πλειάδες [4Fe4S] από επιλεγμένα παθογόνα βακτήρια, (β) Προσδιορισμός δομής συμπλόκων RNA και DNA, (γ) Προσδιορισμός δομής μυϊκών πρωτεϊνών και πρωτεϊνών που συνθέτουν/αποσυνθέτουν silica.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Ειρήνη Μουστακαλή-Μαυρίδου, Ερευνήτρια Α, Υπεύθυνος έργου,
Δρ. Κωνσταντίνα Γιαννακοπούλου, Ερευνήτρια Α,
Δρ. Εμμανουήλ Σαρειδάκης, Ερευνητής Δ.

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας: Δρ. Αναστασία Παυλίδου

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Μαλαματένια-Δήμητρα Μανουηλίδου (από 17/11/2008)

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Μαρία Λαμπροπούλου (ΠΕΝΕΔ), Σ. Χατζηευθυμίου (μερική χρηματοδότηση).

Άμισθοι Μεταπτυχιακοί Φοιτητές : Κατερίνα Φωτιάδου (μερική χρηματοδότηση, υποψήφια για μεταπτυχιακό δίπλωμα ειδίκευσης), Χρυσή Αγγελίδου (από 10/08, μερική απασχόληση, υποψήφια διδάκτωρ)

Εξωτερικοί συνεργάτες: Δρ. Ευγένιος Χατζούδης.

Δημοσιεύσεις

- 1.N. Mourtzis, M. Paravatou, I. M. Mavridis, M. L. Roberts, K. Yannakopoulou, "Synthesis, characterisation, and remarkable biological properties of cyclodextrins bearing guanidinoalkylamino and aminoalkylamino groups on their primary side", *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 4188-4200.
- 2.A. Paulidou, D. Maffeo, K. Yannakopoulou, I. M. Mavridis, "Crystal structure of the inclusion complex of the antibacterial agent Triclosan in β -cyclodextrin and NMR study of its molecular encapsulation in positively and negatively charged cyclodextrins", *Carbohydr. Res.* **2008**, *343*, 2634-2640.
- 3.D. Velessiotis, D. Maffeo, E. Makarona, C. Viswanathan, K. Yannakopoulou, I. Mavridis, Z. Pikramenou, and N. Glezos, Glezos, "Molecular Nanodevices based on Functionalized Cyclodextrins", *Physica Status Solidi A*, **2008**, *205*, (11), 2532–2535.
- 4.I. Mourtzinou, D. P. Makris, K. Yannakopoulou, N. Kalogeropoulos, I. Michali¹ V. T. Karathanos "Thermal stability of *Hibiscus sabdariffa* L. anthocyanins in the presence of β -cyclodextrin" *J. Agric. Food Chem.* **2008**, *56*, 10303–10310.
5. N. E. Chayen, E. Saridakis "Protein crystallization: from purified protein to diffraction-quality crystal", *Nature Methods* **2008**, *5*, 147-153.
- 6.E. Saridakis, N. E. Chayen, "Towards a 'universal' nucleant for protein crystallization" *Trends Biotechnol. in print, available online* **2008**. [Invited review](#)
- 7.E. Hadjoudis, S. D. Chatziefthimiou, I. M. Mavridis, "Anils: Photochromism by H-transfer" *Current Org. Chem.* **2009**, *13*, issue 3, in press. [Invited review](#)
- 8.C. Aggelidou, I. M. Mavridis, K. Yannakopoulou "Binding of nucleotides and nucleosides to per(6-guanidino-6-deoxy)cyclodextrins in solution», , *Eur. J. Org. Chem.*, in press.
- 9.E. Saridakis, P. Giastas, G. Efthymiou, V. Thoma, J.-M. Moulis, P. Kyritsis, I. M. Mavridis "Insight into the protein and solvent contributions to the reduction potentials of [4Fe-4S]^{2+/+} clusters: Crystal structures of the *Allochromatium vinosum* ferredoxin variants C57A and V13G and the homologous *Escherichia coli* ferredoxin" *J. Biol. Inorg. Chem.*, in press.

Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. "Evaluation of modified cyclodextrins as Inhibitors of Anthrax toxins" K. Yannakopoulou, V. Karginov, N. Mourtzis, C. Aggelidou, I. M. Mavridis, *4th Central European Conference Chemistry towards Biology*, September 8-11, **2008**, Dobogoko, Hungary. *Oral presentation*.
2. "The structure of the 360 Å long C-terminal muscle filament of myomesin, derived from a combined crystallographic and Small-Angle X-ray scattering analysis" S. D. Chatziefthimiou, D. Svergun, I. M. Mavridis, M. Wilmanns, N. Pinotsis, *4th Conference Hellenic Crystallographic Association*, The National Hellenic Research Foundation, September 26-27 **2008**, Athens, Greece. *Oral presentation*.
3. "High resolution X-ray structures of 2[4Fe-4S] ferredoxins: Influence of the protein and solvent environment on the reduction potential of [4Fe-4S] clusters", E. Saridakis, P. Giastas, G. Efthymiou, V. Thoma, P. Kyritsis, J.-M. Moulis, I. M. Mavridis, *4th Conference Hellenic Crystallographic Association*, The National Hellenic Research Foundation, September 26-27 **2008**, Athens, Greece. *Oral presentation*.
4. "The application of nanopores for protein crystallization", N.E. Chayen, E. Saridakis, R. El-Bahar, S. Stolyarova, Y. Nemirovsky, *International Conference 'Nanoscale Phenomena and Structures in Bulk and Surface Phases'*, Sofia, Bulgaria, 26th Feb – 2nd March, **2008**. *Oral presentation*.
5. "The structure of the 360 Å long C-terminal muscle filament of myomesin, derived from a combined crystallographic and small-Angle X-ray scattering analysis" S.D. Chatziefthimiou, J.A. Zoidberg, D.I.

- Svergun, I.M. Mavridis, M. Wilmanns, N. Pinotsis, XXI Congress of the Int. Union of Crystallography, Osaka, Japan, Aug. 23-31, **2008**. *Poster presentation*.
6. "Inclusion complexes of β -cyclodextrin with sulfonyl urea hypoglycemic drugs" A. Paulidou, K. Yannakopoulou, I. M. Mavridis, *4th Conference Hellenic Crystallographic Association*, The National Hellenic Research Foundation, September 26-27 **2008**, Athens, Greece. *Poster presentation*.
 7. "Supramolecular assembly of cyclodextrins through carboxylate-guanidinium pairs", K. Fotiadou, K. Yannakopoulou, *2nd European Chemistry Congress*, September 16-20, **2008**, Torino, Italy. *Poster presentation*.
 8. "Novel sugar-functionalised cyclodextrins and studies on molecular inclusion of model compounds, M. Lampropoulou, K. Yannakopoulou *2nd European Chemistry Congress*, September 16-20, **2008**, Torino, Italy. *Poster presentation*.
 9. "The merohedrally twin structure of the *Escherichia coli* ferredoxin at 1.65Å" P. Giastas,¹ G. Efthymiou, P. Kyritsis, J.-M. Moulis, I. M. Mavridis, *4th Conference Hellenic Crystallographic Association*, The National Hellenic Research Foundation, September 26-27 **2008**, Athens, Greece. *Poster presentation*
 10. "Encapsulation of Hypericum perforatum (St John's wort) methanolic extract in beta-cyclodextrin" N. Kalogeropoulos, I. Mourtzinou, K. Yannakopoulou, A. Gioxari, A. Chiou, V. T. Karathanos, *Planta Medica* 2008, 74 (9): 1095-1095: *7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF*, Athens, Greece, August, 3rd - 8th, **2008**. *Poster presentation*.
 11. "Characterization of surfaces and interactions of self-assembled cyclodextrin monolayers with STM and functionalized AFM probes", D. Maffeo, M. Woszczyzna, D. Velessiotis, V. Chinnuswamy, K. Yannakopoulou, A. Paulidou, I. Mavridis, Th. Gotszalk, J. Mileczarski, E. Mileczarski, N. Glezos, *34th International Conference on Micro & Nano Engineering*, Athens. Greece, Sept. 15-19, **2008**, *Poster presentation*.

Διαλέξεις

1. K. Γιαννακοπούλου, «Positively charged cyclodextrins and some of their biological functions», Workshop "Nikos Oikonomakos", Workshop of Marie Curie TOK program "Supragene", The National Hellenic Research Foundation, October 7-8 **2008**, Athens, Greece.

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

1. Ειρήνη Μ. Μαυρίδου, «Αρχές Προσδιορισμού Μοριακής Δομής με Περίθλαση Ακτίνων-Χ από Μονοκρυστάλλο», Μεταπτυχιακό μάθημα στο Διαπανεπιστημιακό Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «*ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΗ ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ*», Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιανουάριος **2008**.
2. K. Γιαννακοπούλου "Molecular drug release and delivery systems: methods of characterisation" *4th International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology"* ΕΚΕΦΕ «Δ», June 30 - July 10, **2008**.
3. K. Γιαννακοπούλου, "Drug Inclusion in Cyclodextrins Monitored in situ by NMR spectroscopy", *4th International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology"* ΕΚΕΦΕ «Δ», hands on laboratory, June 30 - July 10, **2008**.
4. E. M. Μαυρίδου, A. Παυλίδου "X-ray diffraction characterisation of drug inclusion in Cyclodextrins and 3-D visualization" hands on laboratory, *4th International School on Nanobiotechnology "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology"* ΕΚΕΦΕ «Δ», June 30 - July 10, **2008**
5. K. Γιαννακοπούλου, «Κυκλοδεξτρίνες: αυτοοργάνωση, εγκλωβισμός και μεταφορά μορίων», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ «Δ», 7-18 Ιουλίου **2008**.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Σπυριδών Δ. Χατζηευθυμίου, «Κρυσταλλογραφική Μελέτη Δομής Βιολογικών Μακρομορίων. I. Ανοσοσφαιρινικού τύπου περιοχές 9 έως 11 της μυομεσίνης. II. Σύμπλοκα εγκλεισμού κυκλοδεξτρινών» Διδακτορική Διατριβή, Χημικό Τμήμα, Πανεπιστημίου Αθηνών, Ιούλιος **2008**.

Διοργάνωση του **4th Summer School on Nanobiotechnology** "Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology" ΕΚΕΦΕ «Δ», June 30 - July 10, **2008**. Το σχολείο αποτελεί το επίσημο σχολείο του Δικτύου Αριστείας Nano2Life από το 2006. Για την πραγματοποίησή του συνεργάζονται τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος: Φυσικοχημείας, Μικροηλεκτρονικής, Ραδιοισοτόπων & Ραδιοδιαγνωστικών Προϊόντων και Υλικών, καθώς και το Ίδρυμα Ιατροβιολογικών Ερευνών της Ακαδημίας Αθηνών.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. ΠΕΝΕΔ 2006-2008. «Ανάπτυξη νέων φαρμακευτικών μορφών: μοριακός εγκλεισμός αντιμικροβιακών σε νέες ειδικά τροποποιημένες κυκλοδεξτρίνες με στόχο την επιλεκτική προσβολή παθογόνων πολυανθεκτικών βακτηριακών στελεχών» σε συνεργασία με το Φαρμακευτικό Τμήμα, Πανεπιστήμιο Αθηνών. Διάρκεια: 1/1/2006 – 30/6/2008. Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο/ΙΦΧ: € 57 528,2.
2. EU Πρόγραμμα: People-IAPP (Industry-Academia Partnerships and Pathways,) *TOPCRYST*, "Novel tools for crystallisation of macromolecules". Διάρκεια: 1/3/2008 – 29/2/2012. Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο/ΙΦΧ: € 241 349.
3. EU Πρόγραμμα: People- ITN (Networks for Initial Training), BIOMINTEC, "Biom mineralization: Understanding of basic mechanisms for the design of novel strategies in nanobiotechnology" , Διάρκεια: 1/9/2008 – 31/08/2012. Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο/ΙΦΧ: € 184 408.
4. EU Πρόγραμμα "Network of Excellence" NANO2LIFE, NMP4-CT-2003-500057, (A Network for Bringing NANOTEchnologies TO LIFE"). Διάρκεια: 1/2/2004 – 30/9/2008. Ο προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο, ΙΦΧ, ΙΜΗΛ, ΙΡΡΠ, ποικίλει ανά έτος. Εισροή στον Δημόκριτο για το 2008: € 71 872.
5. EU Πρόγραμμα: RTN (Research Training Network), UNI-NANOCUPS, "Uni-directional nanoscale supramolecular wires assembled by photo- and electroactive metallo-cyclodextrin cups"). Διάρκεια: 1/1/2004 - 31/12/2007. Προϋπολογισμός για τον Δημόκριτο/ΙΦΧ & ΙΜΗΛ: €202 000.
6. EU Πρόγραμμα: STREP, TASNANO ("Tools and Technologies for the Analysis and Synthesis of Nanostructures"). Διάρκεια: 1/1/2005 – 30/6/2008. Προϋπολογισμός για το ΙΦΧ: € 50 000.
7. Επιχορήγηση από το Εμπειρικό Ίδρυμα: "Αυτοοργανωμένα υπερμοριακά υλικά με ηλεκτρικές και οπτικές ιδιότητες", 2004 -. (Χρηματοδότηση € 12 000).
8. "Optical and electro-active molecular wires organised by aqueous cyclodextrin-assembly of metallounits", COST, Action 31, Διάρκεια: 2005-2009.
9. Συμμετοχή στο πρόγραμμα ΠΕΠ-Αττικής «Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία» του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (Χρηματοδότηση του εργαστηρίου € 10 000).

Ερευνητική Υποδομή

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

Συνεργασίες

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

τροφίμων και φυσικών εκχυλισμάτων). Drs. E. Urso and G. Torri, Institute for Chemical and Biochemical Research "G. Ronzoni", Milan, Italy (large modified cyclodextrins).

Άλλες Δραστηριότητες

E. Μαυρίδου

1. Αντιπρόεδρος του Governing Board του Δικτύου Αριστείας *Nano2Life*
2. Υπεύθυνος του έργου "Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων" που λειτουργεί με τη συμμετοχή τριών Ινστιτούτων από το Δημόκριτο (ΙΦΧ, ΙΒ και ΙΡΡΠ) και επτά άλλων ερευνητικών ή πανεπιστημιακών φορέων της χώρας.
3. Επιστημονική υπεύθυνη για την Ελλάδα του προγράμματος INSTRUCT (Integrated Structural Biology Infrastructure), ένα από τα εγκεκριμένα ευρωπαϊκά προγράμματα ESFRI (European Research Infrastructure), του οποίου η Ελλάδα είναι affiliated member και εκπροσωπείται από το ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
4. Αξιολογητής δημοσιεύσεων των περιοδικών της *Royal Soc. of Chemistry*, της *Am. Chem. Soc.*, των *Carbohydr. Res.*, *J. Mol. Struct.*, *J. Phys. Org. Chem.*, *J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem.*
5. Αντιπρόεδρος της Ελληνικής Κρυσταλλογραφικής Εταιρείας, 2006-2008.

K. Γιαννακοπούλου

1. Υπεύθυνη Εργαστηρίου NMR (500 MHz και NMR 250 MHz) για το ΙΦΧ.
2. Μέλος Γνωμοδοτικού Συμβουλίου Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
3. Υπεύθυνη πυρασφάλειας Κτιρίου Σχολής και μέλος επιτροπής ασφαλείας του ΙΦΧ.
4. Κριτής στα Περιοδικά *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, *Tetrahedron Letters*, *Physica Status Solidi*, *PCCP*, *Spectrochimica Acta*.

E. Σαρειδάκης

1. Επιστημονικός υπεύθυνος του Προγράμματος EU: FP7-People-IAPP (Industry-Academia Partnerships and Pathways,) *TOPCRYST* (βλ. άνω)
2. Κριτής ερευνητικής προτάσεως για το Israel Science Foundation
3. Κριτής στο περιοδικό *Journal of the American Chemical Society (JACS)*
4. Μέλος του Δ.Σ. της Διεθνούς Οργανώσεως Βιολογικής Κρυστάλλωσης (IOBC)

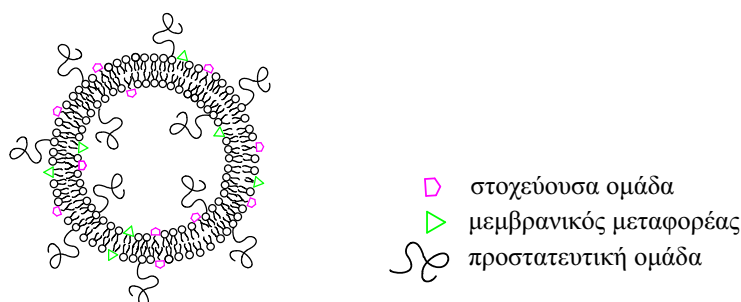
1.2 ΝΑΝΟ-ΥΛΙΚΑ ΟΡΓΑΝΩΜΕΝΗΣ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΤΟΥ ΕΡΓΟΥ

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

1. Πολυ-λειτουργικά Λιποσώματα ως φορείς φαρμάκων

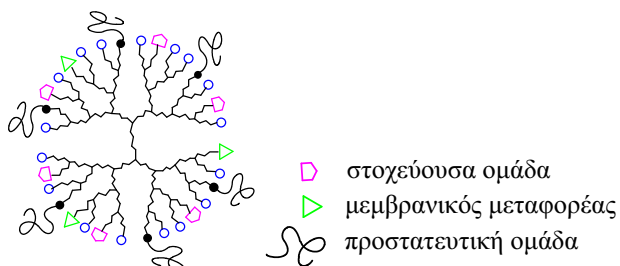
Λιποσώματα με αναγνωρίσιμες ομάδες χρησιμοποιούνται σε πειράματα μοριακής αναγνώρισης με συμπληρωματικά λιποσώματα ή απλά μόρια σε μια προσπάθεια προσομοίωσης της συμπεριφοράς των κυττάρων. Η εξωτερική επιφάνεια των λιποσωμάτων τροποποιείται με κατάλληλες ομάδες για την εκτέλεση αυτών των πειραμάτων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



Σχήμα 1. Σχηματική απεικόνιση πολυ-λειτουργικών Λιποσωμάτων

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

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



Σχήμα 2. Σχηματική απεικόνιση πολυ-λειτουργικών δενδριτικών πολυμερών

3. Δενδριτικά Πολυμερή με Εφαρμογή στη Παραγωγή Υπερκαθαρού Νερού

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

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Δημήτρης Τσιούρβας, Ερευνητής Α, υπεύθυνος έργου

Δρ. Ωραιοζήλη Σιδεράτου, Ερευνητής Γ

ΙΔΑΧ: Δρ Μ. Αρκάς

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Μαρία Γαλανού (μέχρι Μάρτιο 2008).

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. Αικατερίνη-Λητώ Τζιβελέκα (NCP-IP), Δρ. Θεοδόσης Θεοδοσίου (ENTEΡ, μέχρι 31-10-2008 και NCP-IP από 1-11-2008).

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Νικολέτα Στεριώτη (ΕΠΕΑΚ, άμισθη μέχρι 30-9-2008, NCP-IP από 1-10-2008).

Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. Κων/νος Παλαιός, επιστημονικός υπεύθυνος έργου NCP-IP, Δρ. Αλέξανδρος Πάντος (NCP-IP, άμισθος).

Δημοσιεύσεις

1. Theodossiou, T.A., Pantos, A., Tsogas, I., Paleos, C.M. "Guanidynylated Dendritic Molecular Transporters: Prospective Drug Delivery Systems and Application in Cell Transfection" *ChemMedChem* 2008, *3*, 1635-1643.
2. Pantos, A., Tsogas, I., Paleos, C.M. "Guanidinium group: A versatile moiety inducing transport and multicompartmentalization in complementary membranes" *Biochim. Biophys. Acta – Biomembr.* 2008, *1778*, 811-823.
3. Theodossiou, T.A., Papakyriakou, A., Hothersall, J.S. "Molecular modeling and experimental evidence for hypericin as a substrate for mitochondrial complex III; mitochondrial photodamage as demonstrated using specific inhibitors" *Free Radical Biol. Med.* 2008, *45*, 1581–1590.
4. Kontoyianni, C., Sideratou, Z., Theodossiou, T.A., Tziveleka, L.-A., Tsiourvas, D., Paleos, C.M. "A novel micellar PEGylated hyperbranched polyester as prospective drug delivery system for paclitaxel" *Macromol. Biosci.* 2008, *8*, 871-881.
5. Paleos, C.M., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Tziveleka, L.-A. "Multifunctional Dendritic Drug Delivery Systems: Design, Synthesis, Controlled and Triggered Release" *Curr. Top. Med. Chem.* 2008, *8*, 1204-1224.
6. Galanou, M.C., Theodossiou, T.A., Tsiourvas, D., Sideratou, Z., Paleos, C.M. "Interactive Transport, Subcellular Relocation and Enhanced Phototoxicity of Hypericin Encapsulated in Guanidynylated Liposomes via Molecular Recognition", *Photochem. Photobiol.* 2008, *84*, 1073-1083.
7. Vinceković, M., Bujan, M., Šmit, I., Tušek-Božić, Lj., Tsiourvas, D., Dutour Sikirić, M. "Influence of Dodecylammonium Chloride on the Properties of Carrageenan Gels" *J. Dispersion Sci. Technol.* 2008, *29*, 966 – 974.
8. Tziveleka, L.-A., Psarra, A.-M.G., Tsiourvas, D., Paleos, C.M. "Synthesis and evaluation of functional hyperbranched polyether polyols as prospected gene carriers" *Int. J. Pharm.* 2008, *356*, 314–324.

9. Tsetsekou, A., Arkas, M., Kritikaki, A., Simonetis, S., Tsiourvas, D. "Optimization of hybrid hyperbranched polymer/ceramic filters for the efficient absorption of polyaromatic hydrocarbons from water" *J. Membr. Sci.* 2008, *311*, 128-135.
10. Paleos, C.M., Tsiourvas, D. "Non-Covalent Interactions of Liposomes", in "Bottom-up nanofabrication: Supramolecules, self-assemblies and organized films", American Scientific Publishers (in press).
11. Paleos, C.M., Tziveleka, L.-A., Sideratou, Z., Tsiourvas, D. "Gene Delivery Using Functional Dendritic Polymers" *Expert Opin. Drug Delivery*, (in press).

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Sideratou, Z., Theodossiou, T., Tsiourvas, D., Fardis, M., Paleos, C.M. "Multifunctional hyperbranched polymers with protective coating and targeting character as MRI contrast agents", ESF Exploratory Workshop on "Hyperbranched polymers as novel materials for nanoscale applications: insight from experiment, theory and simulations (HYPER-NANO)", Fodele, Grete, Greece, May 25-28, 2008.

Διαλέξεις

1. Sideratou, Z. "Functional hyperbranched dendritic polymers as drug delivery systems", ESF Exploratory Workshop on "Hyperbranched polymers as novel materials for nanoscale applications: insight from experiment, theory and simulations (HYPER-NANO)", Fodele, Grete, Greece, May 25-28, 2008 (Invited lecture).
2. C. M. Paleos, D. Tsiourvas, Z. Sideratou, L.A. Tziveleka, "Targeted and Multifunctional Dendritic Polymers: Magic Bullets for Drug and Gene Delivery", Ehrlich II, 2nd World Conference on Magic Bullets, Nuernberg, Germany, October 3-5, 2008 (Invited lecture).
3. D. Tsiourvas, "Dendrimers and hyperbranched polymers as gene transfection agents", Workshop "Nikos Oikonomakos", Marie Curie TOK programme "SUPRAGENE", Athens, 7 – 8 October 2008 (Invited lecture).

Διπλώματα ευρεσιτεχνίας

1. Δ. Τσιούρβας, Μ. Αρκάς, "Χρήση νανοσωματιδίων οξειδίων μεταλλοειδών ή/και μετάλλων που παράγονται με φιλική προς το περιβάλλον διεργασία για την απομάκρυνση ανεπιθύμητων παραγόντων από το νερό, διαλύτες ή οποιοδήποτε ρευστό", Αρ. Αίτησης: 20080100395, Ημ/νία κατάθεσης: 09/06/2008.

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

1. Τσιούρβας, Δ., Υπεύθυνος εργαστηριακών ασκήσεων «Εργαστηριακές ασκήσεις μηχανικών ιδιοτήτων και πολυμερικών διεργασιών», Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ "Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της", Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτος: 2007-2008.
2. Τσιούρβας, Δ., Laboratories on "Preparation and Characterization of liposomes with Dynamic Light scattering, ζ-potential, Video Enhanced Optical Microscopy, and AFM", Nano2Life International Summer School, Micro – Nanotechnology and Nanobiotechnology, Ιούλιος 2008.
3. Σιδεράτου, Ω., Laboratories on "Preparation and Characterization of liposomes with Dynamic Light scattering, ζ-potential, Video Enhanced Optical Microscopy, and AFM", Nano2Life International Summer School, Micro – Nanotechnology and Nanobiotechnology, Ιούλιος 2008.
4. Δρ Θ. Θεοδοσίου, «Ιστορίες με φως: Τα βαμπίρ, το βάλαμο, η πυγολαμπίδα και τα μιτοχόνδρια», Θερινό Σχολείο 2008, ΕΚΕΦΕ «Δ», 11 Ιουλίου 2008.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Διδακτορικές Διατριβές

Χριστίνα Κοντογιάννη, «Σύνθεση λειτουργικών δενδριτικών πολυμερών και μελέτη εγκλεισμού και ελεγχόμενης αποδέσμευσης βιοδραστικών μορίων», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Μάρτιος 2008.

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

Νικολέττα Στεριώτη, «Μοριακή αναγνώριση λιποσωμάτων σταθεροποιημένων με πολυ(αιθυλενογλυκόλη)», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Μάρτιος 2008.

Μαρία Γαλανού, «Λειτουργικά λιποσώματα για την μεταφορά βιοδραστικών ουσιών και εφαρμογή τους στην καταστροφή καρκινικών κυττάρων με φωτοδυναμική θεραπεία», Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Οκτώβριος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Ανάπτυξη Νέας Αντικαρκινικής Τεχνικής: Καταστροφή Καρκινικών Κυττάρων με Βιοχημειοφωταύγεια Χρησιμοποιώντας Στοχεύοντες Φορείς Γονιδίων με βάση τα Λιποσώματα και τα Δενδριτικά πολυμερή", Πρόγραμμα ENTER, 04EP 61, 78 Κ€, 2006-2008.
2. "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", 'NMP' INTEGRATED PROJECT, Contract No NMP4-CT-2006-026723, 537 Κ€, 2006-2010.
3. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανο-υλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.

Ερευνητική Υποδομή

Optical and fluorescence microscopy with imaging facilities, Thermal analysis (DSC, TGA), Spectroscopic methods (NMR, FT-IR, UV-Vis, Fluorescence), Dynamic Light Scattering, Multi-angle static light scattering, ζ-potential.

Συνεργασίες

Psarra, A-M.G. (Foundation for Biomedical Research of the Academy of Athens, gene transfection), Allabashi, R. (Institute for Sanitary Engineering and Water Pollution Control, Austria, water pollutants), Tsetsekou, A. (ΕΜΠ, ceramic membranes), Δρ. Νούνεσης, Γ. (Ινστ. ΡΡΠ, ΕΚΕΦΕ "Δ", Θερμοδυναμική μελέτη μοριακής αναγνωρίσεως).

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Δ. Τσιούρβας κατά το έτος 2008 διατέλεσε κριτής στα επιστημονικά περιοδικά: European Polymer Journal και Liquid Crystals.

Η Δρ. Ζ. Σιδεράτου κατά το έτος 2008 διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Molecular Pharmaceutics και Langmuir.

Ο Δρ. Μ. Αρκάς κατά το έτος 2008 διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Journal of Environmental Management και Journal of Hazardous Materials.

Η Δρ. Λ. Α. Τζιβελέκα κατά το έτος 2008 διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Journal of Controlled Release, και European Journal of Medicinal Chemistry.

Ο Δρ. Θ. Θεοδοσίου κατά το έτος 2008 διετέλεσε

1. Κριτής σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά Photochemical and Photobiological Sciences. Chemical Research in Toxicology.

2. Κριτής της Society for Free Radical Biology & Medicine.
3. Αντιπρόεδρος της επιτροπής δημοσιεύσεων (Publications committee) της American Society for Photobiology.

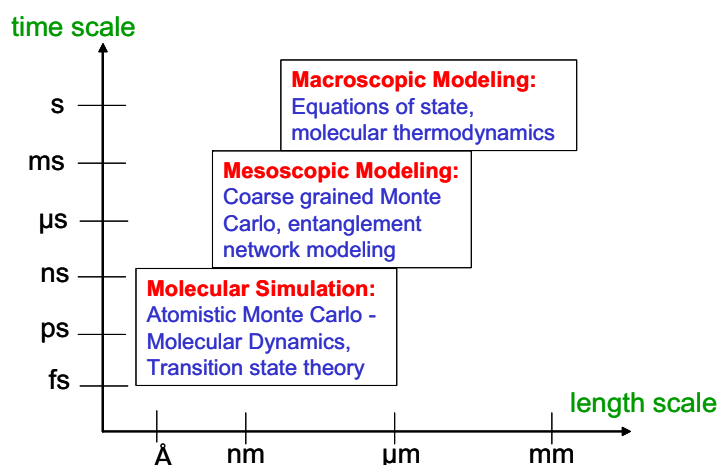
Ο Δρ Κ. Μ. Παλαιός κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. 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. Μέλος του Editorial Advisory Board του περιοδικού "Molecular Crystals and Liquid Crystals".
3. Member of the Management Committee των Προγραμμάτων COST, Action D 31 (μέχρι Μάιο 2008) και CM0703 (από Απρίλιο 2008).

Οι Κ. Μ. Παλαιός, Δ. Τσιούρβας, Ζ. Σιδεράτου και Μ. Αρκάς είναι επιστημονικοί σύμβουλοι της Εταιρείας Έντασης Γνώσης (spin-off) με την επωνυμία "DENDRIGEN A.E." που χρηματοδοτήθηκε από την ΓΓΕΤ στο πλαίσιο του προγράμματος ΠΡΑΞΕ Β' (Κωδικός 05 ΠΡΑΞΕ 01) και έχει στόχο την παραγωγή πολυλειτουργικών δενδριτικών πολυμερών για α) την ανάπτυξη φορέων φαρμάκων και β) την ανάπτυξη συστημάτων παραγωγής υπερκαθαρού νερού.

1.3 ΜΟΡΙΑΚΗ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΥΛΙΚΩΝ

Αντικείμενο Έργου



Η ερευνητική δραστηριότητα του ΕΜΘΜΥ εστιάζεται στην ανάπτυξη νέων ιεραρχικών μεθόδων, αλγορίθμων και θεωριών 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, προσομοιώσεις με αδρομερή μοντέλα) για τη μελέτη φαινομένων σε μεγαλύτερους χρόνους και μήκη. Τέλος, για το βέλτιστο σχεδιασμό νέων διεργασιών, κυρίως στη χημική βιομηχανία, τη βιομηχανία πολυμερών και τη φαρμακευτική βιομηχανία 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 2008 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 και πολυολεφίνες,*
- (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,*
- (η) Ανάπτυξη νέας καταστατικής εξίσωσης βασισμένη στη θεωρία πλέγματος για διαλύματα φαρμακευτικών ουσιών (νέα δραστηριότητα για το 2008),*
- (θ) Ανάπτυξη ενός νέου μοριακού μοντέλου για την πρόβλεψη διαλυτότητας φαρμάκων σε νερό και άλλους διαλύτες (νέα δραστηριότητα για το 2008).*

Τέλος, για την καλύτερη συνεργασία με βιομηχανικούς εταίρους δημιουργήθηκε ένα νέο έργο παροχής εξειδικευμένων ερευνητικών υπηρεσιών με τίτλο Μοριακή Προσομοίωση και Θερμοδυναμική Ρευστών και Προηγμένων Τεχνολογικών Υλικών με επιστημονικό υπεύθυνο τον Δρ. Ι. Οικονόμου. Το έργο αυτό έχει ήδη προσελκύσει τρία συμβόλαια ερευνητικών υπηρεσιών από τη βιομηχανία συνολικού ύψους € 53,700.

Περισσότερες πληροφορίες για το ΕΜΘΜΥ δίνονται στην ιστοσελίδα του: www.mtmml.gr.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, Ερευνητής Α', Επιστημονικός Υπεύθυνος Έργου

ΙΔΑΧ: Δρ. Νίκη Βέργαδου

Αμισθος συνεργαζόμενος ερευνητής: Δρ. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος (ΠΔ 407/80, Πανεπιστήμιο Αιγαίου)

Μεταδιδακτορικοί συνεργάτες σε προγράμματα: Δρ. Θεοδώρα, Σπυριούνη (STREP μέχρι 28/2/2008 και μετά στο Έργο Παροχής Υπηρεσιών)

Δρ. Στέλιος Καρανίκας (ΓΓΕΤ – ENTER μέχρι 30 / 5 / 2008)

Υποψήφιοι διδάκτορες σε προγράμματα: Ζωή Μακροδημήτρη (ΓΓΕΤ – ΠΕΝΕΔ) Μαριάννα Γιαννουράκου

Υποψήφιοι διδάκτορες υπότροφοι «Δ»: Ελένη Ανδρουλάκη (από Νοέμβριο 2008)

Διπλωματικός προπτυχιακός φοιτητής: Βασίλης Νιοτής (Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ)

Επισκέπτες ερευνητές: Δρ. Stanislav Burov (1 / 10 – 21 / 12 / 2008, από το Τμήμα Χημείας του Πανεπιστημίου της Αγίας Πετρούπολης στη Ρωσία)

Nuno M.F. Garrido (1 / 9 – 20 / 12 / 2008, υποψήφιος διδάκτορας του Τμήματος Χημικών Μηχανικών του Πανεπιστημίου του Πόρτο στην Πορτογαλία)

Εξωτερικός συνεργάτης: Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ (Ιδρυτής του ΕΜΘΜΥ)

Δημοσιεύσεις

1. Z. Kechagia, C. Kiparissides and I.G. Economou, "Determination of Liquid – Gas Partition Coefficients of BuA and MMA by Headspace-Gas Chromatography Utilizing the Phase Ratio Variation Method", *Fluid Phase Equil.*, **266**, 21 – 30 (2008).
2. I.G. Economou, E.K. Karakatsani, G.-E. Logotheti, J. Ramos and A. Vanin, "Multi-scale Modeling of Structure, Dynamic and Thermodynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids: *Ab initio* DFT Calculations, Molecular Simulation and Equation of State Predictions", *Oil & Gas Sci. Tech.*, **63**(3), 283 – 293 (2008).
3. A. Grenner, I. Tsvintzelis, G.M. Kontogeorgis, I.G. Economou and C. Panayiotou, "Evaluation of the Non-Random Hydrogen Bonding (NRHB) Theory and the simplified Perturbed Chain-Statistical Associating Fluid Theory (sPC-SAFT). I. Vapor – Liquid Equilibria", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **47**(15), 5636 – 5650 (2008).
4. I. Tsvintzelis, A. Grenner, I.G. Economou and G.M. Kontogeorgis, "Evaluation of the Non-Random Hydrogen Bonding (NRHB) Theory and the simplified Perturbed Chain-Statistical Associating Fluid Theory (sPC-SAFT). II. Liquid – Liquid Equilibria and Prediction of Monomer Fraction in Hydrogen Bonding Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **47**(15), 5651 – 5659 (2008).
5. Z.A. Makrodimitri and I.G. Economou, "Atomistic Simulation of Poly(dimethylsiloxane) Permeability Properties to Gases and *n*-Alkanes", *Macromolecules*, **41**(15), 5899 – 5907 (2008).
6. G. Tsolou, V.G. Mavrantzas, Z.A. Makrodimitri, I.G. Economou and R. Gani, "Atomistic Simulation of the Sorption of Small Gas Molecules in Polyisobutylene", *Macromolecules*, **41**(16), 6228 – 6238 (2008).

7. E.K. Karakatsani, I.G. Economou, M.C. Kroon, M.D. Bermejo, C.J. Peters and G.-J. Witkamp, "Equation of State Modeling of the Phase Equilibria of Ionic Liquid Mixtures at Low and High Pressure", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **10**(40), 6160 – 6168 (2008).
8. T. Spyriouni, G.C. Boulougouris and D.N. Theodorou, "Prediction of Sorption of CO₂ in Glassy Atactic Polystyrene at Elevated Pressures Through a New Computational Scheme", *Macromolecules*, in press (2008)
9. I. Tsvintzelis, I.G. Economou and G.M. Kontogeorgis, "Modeling the Solid – Liquid Equilibrium in Pharmaceutical – Solvent Mixtures: Systems with Complex Hydrogen Bonding Behavior", *AIChE J.*, in press (2008).
10. I. Tsvintzelis, I.G. Economou and G.M. Kontogeorgis, "Modeling the Phase Behavior in Mixtures of Pharmaceuticals with Liquid or Supercritical Solvents", *J. Phys. Chem. B*, in press (2008).
11. G.E. Logotheti, J. Ramos, I.G. Economou, "Molecular Modeling of Imidazolium-Based [Tf₂N] Ionic Liquids: Microscopic Structure, Thermodynamic Properties and Segmental Dynamics", *J. Phys. Chem. B*, in press (2008).
12. M. Yiannourakou, I.G. Economou and I.A. Bitsanis, "Phase Equilibrium of Colloidal Suspensions with Particle Size Dispersity: A Monte Carlo Study", *J. Chem. Phys.*, in press (2008).
13. P. Ahlström, K. Aim, R. Dohrn, J.R. Elliott, G. Jackson, J.-N. Jaubert, M.E.R.A. Macedo, J.-P. Pokki, K. Reczey, A. Victorov, L. Fele Žilnik, and I.G. Economou, "A Survey of the Role of Thermodynamics and Transport Properties in Chemical Engineering University Education in Europe and the USA", *Chem. Eng. Ed.*, in press (2008).
14. H. Leontiadou, I.G. Economou, "Microscopic Structure and Thermodynamic Properties of Aqueous Glycol Mixtures", *Molec. Simul.*, in press (2008).

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. I.G. Economou, "Molecular Design of Rubbery Polymers for Membrane Applications", *International Workshop on Molecular Modeling and Simulation in Applied Material Science*, Frankfurt am Main, Germany (2008). Invited talk.
2. I.G. Economou, "Multi-Scale Modeling of Structure, Dynamic and Thermodynamic Properties of Ionic Liquids: *Ab initio* DFT Calculations, Molecular Simulation and Equation of State Predictions", *11th European Meeting on Supercritical Fluids*, Barcelona, Spain (2008). Invited talk.
3. I.G. Economou, "Molecular Simulation of Rubbery Polymer Membranes", *23rd European Symposium on Applied Thermodynamics*, Cannes, France (2008). Invited talk.
4. I.G. Economou, "Thermodynamic Properties and Phase Equilibria of Complex Fluid Mixtures: Equation of State Modeling", *Thermodynamic Colloquium*, Erlangen, Germany (2008).
5. I.G. Economou and Z.A. Makrodimitri, "Atomistic Simulation of Poly(dimethylsiloxane) Permeability Properties to Gases and *n*-Alkanes", *7th Greek Polymer Conference*, Ioannina, Greece (2008).
6. I.A. Bitsanis, A.N. Rissanou, M. Yannourakou, I.G. Economou and D.Vlassopoulos, "Simulations of Temperature Induced Ageing and Crystallization in Dense Suspensions of Ultrasoft Colloids", *7th Greek Polymer Conference*, Ioannina, Greece (2008).
7. G. Tsolou, V.G. Mavrantzas, Z.A. Makrodimitri, I.G. Economou and R. Gani, "Atomistic Simulation of the Sorption of Small Gas Molecules in Poly(isobutylene)", *7th Greek Polymer Conference*, Ioannina, Greece (2008). Award for best poster of the conference.
8. I.G. Economou and Z.A. Makrodimitri, "Atomistic Simulation of Poly(dimethyl siloxane): Structure, Thermodynamic and Diffusion Properties to Gases and *n*-Alkanes", *Centennial AIChE Annual Meeting*, Session No 519, Philadelphia, Pennsylvania, USA (2008).
9. I.G. Economou, G.-E. Logotheti, J. Ramos and A. Vanin, "Ab Initio Calculations and Molecular Dynamics Simulations for [Imidazolium][Tf₂N] Ionic Liquids: Microscopic Structure and Thermodynamic Properties", *Centennial AIChE Annual Meeting*, Session No 182, Philadelphia, Pennsylvania, USA (2008).

10. P. Ahlström, K. Aim, R. Dohrn, R. Elliott, L. Fele-Žilnik, G. Jackson, J.-N. Jaubert, M.E. Rebello de A. Macedo, J. Pekka Pokki, K. Reczey, A. Victorov and I.G. Economou, "A Survey of Thermodynamics and Transport Properties in Chemical Engineering Education in Europe and the USA", *Centennial AIChE Annual Meeting*, Session No 62, Philadelphia, Pennsylvania, USA (2008).

Διαλέξεις μετά από πρόσκληση

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Energy, Environment and Business: A Global Challenge", School of Business, Bifröst University, Iceland, July 2008.
2. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Molecular Simulation Prediction of Physical Properties of Complex Fluids", Shell Global Solutions International BV, Amsterdam, The Netherlands, October 2008.

Εκπαιδευτικό Έργο

Διδασκαλία

A. Προπτυχιακά μαθήματα

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Φυσικοχημεία", Μάθημα 2^{ου} Έτους στις *Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες*, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, 2007 – 08, 2008 - 09.
2. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Προσομοίωση", 7^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2008 – 2009.
3. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Υλικά", 4^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2007 – 2008.
4. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Νέα Υλικά", 7^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2008 – 2009.
5. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Επιλογή Υλικών για Μελέτες Σχεδιασμού", 9^ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2008 – 2009.

B. Μεταπτυχιακά μαθήματα

1. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Environmental Management", MBA Program, Graduate School, American College of Greece, Ιανουάριος - Απρίλιος 2008.
2. Ιωάννης Γ. Οικονόμου, "Technology and Innovation Management", MBA Program, Graduate School, American College of Greece, Απρίλιος – Ιούνιος 2008.
3. Ιωάννης Γ. Οικονόμου και Νίκη Βέργαδου, "Molecular Simulation of Complex Chemical Systems with Emphasis to Practical Applications", PhD Program in *Chemical Engineering*, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark, Ιούνιος 2008.
4. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, "Υλικά", 2^ο Εξάμηνο ΜΠΣ "Σχεδίαση διαδραστικών και βιομηχανικών προϊόντων και συστημάτων", Τμήμα Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2007 – 2008.

Χορήγηση Διπλωματικής Εργασίας

Ελένη Ανδρουλάκη, «Θερμοδυναμική Ανάλυση Βασισμένη στην Στατιστική Μηχανική και στην Θεωρία Κόμβων», Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ, Μάρτιος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

Προγράμματα Βασικής Έρευνας

1. "Computer Aided Molecular Design of Multifunctional Materials with Controlled Permeability Properties" [MULTIMAT], *Ευρωπαϊκή Επιτροπή, Πρόγραμμα STREP FP6, Priority 3, NMP*. Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δώρος Θεοδώρου. Συνολική χρηματοδότηση Ινστιτούτου Φυσικοχημείας από ΕΕ: 173.117 €, χρηματοδότηση ΕΜΘΜΥ: 86,308 €. Το έργο συγχρηματοδοτείται και από τη ΓΓΕΤ. Διάρκεια Έργου: 1 / 3 / 2005 – 28 / 2 / 2008.
2. "Ανάπτυξη Νέων Μεθόδων Μοριακής Προσομοίωσης και Μακροσκοπικών Μοντέλων για τον Υπολογισμό της Μικροσκοπικής Δομής και των Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Πολύπλοκων Συστημάτων Πολυμερών", *Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 2003*.

Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 57,660 €. Διάρκεια: 1 / 12 / 2005 – 31 / 11 / 2008.

3. "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.
4. "Μελέτη Δομικών, Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων και Ιδιοτήτων Μεταφοράς του Πολυ(στυρενίου-alt-ακρυλονιτριλίου) σε Υψηλές Πιέσεις", *Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα ENTEP 2003*. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 78,000 €. Διάρκεια: 1 / 10 / 2006 – 30 / 10 / 2008.
5. "Polymer Surfaces Responsive to Thermal and Chemical Stimuli: Towards the Micro-design of 'Intelligent' Materials", *Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Συνεργασίας Ελλάδας – ΗΠΑ σε Έρευνα και Τεχνολογία στα Υλικά. Συνολική χρηματοδότηση: 50,000 €*. Χρηματοδότηση για Ι. Οικονόμου: 25,000 €. Διάρκεια: 1 / 6 / 2006 – 31 / 5 / 2008.

Προγράμματα Εφαρμοσμένης Έρευνας

1. "Implementation of SAFT / PC-SAFT Computer Codes for Polymer and Non-Polymer Systems into MAPS", *Contract Research Services, Scienomics SARL, Paris, France*. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 20,500 €. Διάρκεια: 1 / 3 – 30 / 8 / 2008.
2. "Implementation of Computer Codes for Physical Properties of Polymer and Non-Polymer Systems into MAPS – Phase II", *Contract Research Services, Scienomics SARL, Paris, France*. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 18,200 €. Διάρκεια: 1 / 9 / 2008 – 28 / 2 / 2009.
3. "Molecular Simulation of Diffusion of Hydrogen, Carbon Monoxide and Water in Heavy *n*-Alkanes at High Temperatures and Pressures", *Contract Research Services, Shell Global Solutions, Amsterdam, The Netherlands*. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 15,000 €. Διάρκεια: 15 / 12 / 2008 – 15 / 4 / 2009.

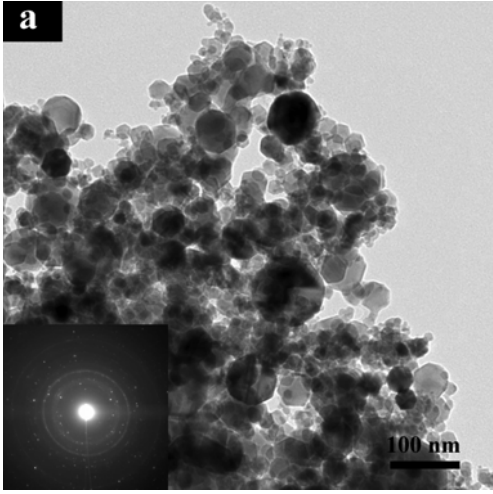
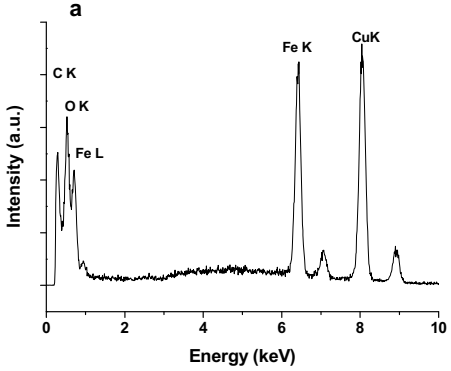
Πρόγραμμα Ανάπτυξης Υποδομών ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»

"Αναδιοργάνωση Γραφείου Διαμεσολάβησης ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»", *Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας, Πρόγραμμα Γραφεία Διαμεσολάβησης – Τεχνοκαταλύτες*. Υπεύθυνος έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 300,000 €. Διάρκεια: 1 / 1 / 2005 – 30 / 8 / 2008.

1.4 ΦΩΤΑΥΓΕΙΑ – ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Αντικείμενο Έργου

Βασικό αντικείμενο του εργαστηρίου είναι η ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών και η εφαρμογή αυτών στην Αναλυτική και Κλινική Χημεία. Μεταξύ των σπουδαιότερων υλικών που αναπτύχθηκαν πρόσφατα στο εργαστήριο μας ήταν (α) νέα βιοτινυλιωμένα φωταυγή υλικά, (β) νέα παραμαγνητικά υλικά συμπλόκων του ευρωπίου, (γ) νέοι υβριδικοί οργανο-ανόργανοι χειρόμορφοι καταλύτες, και (δ) νέοι νανοδομημένοι καταλύτες οξειδίων του τρισθενούς σιδήρου. Τα βιοτινυλιωμένα υλικά εφαρμόστηκαν για τον προσδιορισμό των πρωτεϊνών αβιδίνης και στρεπταβιδίνης και για τον προσδιορισμό της πρωτεΐνης IgG ποντικίου. Τα αποτελέσματα δημοσιεύθηκαν στο διεθνές περιοδικό *Clinica chimica Acta*. Τα φασματοσκοπικά χαρακτηριστικά των παραμαγνητικών συμπλόκων του ευρώπιου βρέθηκαν ότι είναι παρόμοια με αυτά του εμπορικής διαθέσιμου MRI αντιδραστηρίου *Magnevist*. Τα νέα λειτουργικά νανοσωματίδια του οξειδίου του σιδήρου χαρακτηρίστηκαν με τεχνικές TEM, SAD και EDS (Εικόνα 1) και εφαρμόστηκαν σε καταλυτικές χημειοφωταυγείς αντιδράσεις (δημοσίευση αριθ. 1). Σε αυτό το σημείο, πρέπει να σημειωθεί ότι εκτός από τη σύνθεση, χαρακτηρισμό και εφαρμογές των νέων υλικών, αναπτύχθηκε τα τελευταία χρόνια στο εργαστήριό μας, μια νέα χημειοφωταυγειομετρική τεχνική η οποία χρησιμοποιήθηκε για την εκτίμηση της αντιοξειδωτικής δράσης βιολογικών υλικών καθώς επίσης και φυσικών προϊόντων, όπως ελαιολάδων ή χυμών φρούτων. Τα αποτελέσματα είναι εντυπωσιακά και συγκρίσιμα με αυτά της διεθνώς αποδεκτής μεθόδου DPPH. Τα αποτελέσματα αυτά θα δημοσιευθούν συντόμως.

	
Εικόνες TEM και SAD νανοσωματιδίων οξειδίου του σιδήρου.	Φάσμα EDS νανοσωματιδίων οξειδίου του σιδήρου.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος, Ερευνητής Α', Υπεύθυνος του έργου

Τεχνικό Προσωπικό: Ελίνα Γιαννακοπούλου

Πτυχιακοί Συνεργάτες: Ηλίας Παπαηλίας, Ιωάννης Τσακόπουλος

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες: Δρ. Γεώργιος Βουγιουκαλάκης (από 01.10.2008)

Υποψήφιοι Διδάκτορες: Διονύσιος Χριστοδουλέας, Οριάννα Λανίτου (άμισθοι).

Δημοσιεύσεις

1. T.M. Triantis, K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, D. Dimotikali, J. Hrbáč, R. Zbořil, Sensitized chemiluminescence of enorma catalyzed by colloidal dispersions of nanometer-sized ferric oxides, *Chem Eng. J.*, 144 (2008) 483-488.
2. M. Merlani, V. Barbakadze, L. Gogilashvili, L. Amiranashvili, K. Mulkijanyan, E. Yannakopoulou, K. Papadopoulos, D. Christodouleas, Synthesis and antioxidant activity of 3-(3,4-dihydroxyphenyl)-glyceric acid. Monomer of a biologically active polyether isolated from *Symphytum asperum* and *S. caucasicum*, *J. Planta Medica*, 74 (2008) 1167-1168.
3. G.C. Vougioukalakis, R.H. Grubbs, *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (2008) 2234-2245, Synthesis and activity of ruthenium olefin metathesis catalysts coordinated with thiazol-2-ylidene ligands.
4. G.C. Vougioukalakis, R.H. Grubbs, *Chem. Eur. J.*, 14 (2008) 7545-7556, Ruthenium-based olefin metathesis catalysts coordinated with unsymmetrical *N*-heterocyclic enorma ligands: synthesis, structure and catalytic activity.
5. G.C. Vougioukalakis, M.M. Roubelakis, M.N. Alberti, M. Orfanopoulos, *Chem. Eur. J.* 14 (2008) 9697-9705, Solvent depended changes in the triazolinedione-alkene ene reaction mechanism.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, T. Triantis, D. Christodouleas T. Yannakopoulou, C. Trapalis, D. Dimotikali, Applications of colloidal nanosized ferric oxides in chemiluminescent reactions, 1st IC4N : from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, June 15-19, 2008, Halkidiki, Greece.
2. D. Dimotikali, K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, T. Triantis, D. Christodouleas, J. Hrbáč, R. Zbořil, Evaluation of antioxidant activities of organic oompounds using ohemiluminescence rections catalyzed by Ferric Oxide Nanoparticles, 5th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies – NN08, July 14-16, 2008, Thessaloniki-Greece,
3. A. Calokerinos, D. Christodouleas, K. Papadopoulos, Determination of hydrophilic and hydrophobic antioxidants and evaluation of antioxidant activity by chemiluminescence, XIII International Symposium on Luminescence Spectrometry, September 7-11, 2008, Bologna-Italy.
4. M. Merlani, Barbakadze, L. Gogilashvili, L. Amiranashvili, K. Mulkijanyan, E. Yannakopoulou, K. Papadopoulos, D. Christodouleas, Synthesis and antioxidant activity of 3-(3,4-dihydroxyphenyl) glyceric acid. Monomer of a biologically active polyether isolated from *Symphytum asperum* and *S. caucasicum*, 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE, SIF, August 3-8, 2008, Athens-Greece.
5. V. Barbakadze, R. Agarwal, G. Deep, K. Mulkijanyan, M. Merlani, K. Papadopoulos, L. Gogilashvili, L. Amiranashvili, E. Shaburishvili, Anticancer effects of poly-3(3,4-dihydroxyphenyl)-glyceric acid isolated from Caucasian species of comfrey and its synthetic monomer, 4th International Conference on Oxidative Stress in Skin Biology and Medicine, September 11-14, 2008, Andros-Creece.
6. G.C. Vougioukalakis, R.H. Grubbs, Synthesis, structure, and catalytic activity of ruthenium-based metathesis catalysts coordinated with thiazol-2-ylidene and unsymmetrical *N*-heterocyclic enorma ligands. NATO Advanced Study Institute: New smart materials via metal mediated macromolecular engineering; from complex to nano structures, Antalya, Turkey, September 2008.
7. G.C. Vougioukalakis, N. Petzetakis, M. Pitsikalis, N. Hadjichristidis, I. Stamatopoulos, P. Kyritsis, A. Terzis, C. Raptopoulou, Vinyl polymerization of norbornene with a novel nickel(II) diphosphinoamine/methylaluminumoxane catalytic system, 7th Hellenic Polymer Conference, Ioannina, Greece, September 2008.

Διαλέξεις

1. *From fullerene chemistry to olefin metathesis – A fascinating trip*, NCSR Demokritos, Institute of Physical Chemistry, Athens, Greece, February 29, 2008, G. Vougioukalakis.
2. *From fullerene chemistry to olefin metathesis – A fascinating trip*, National Hellenic Research Foundation, Institute of Organic and Pharmaceutical Chemistry, Athens, Greece, May 13, 2008, G.H. Vougioukalakis.

Διδακτικό Έργο

Πρακτική άσκηση φοιτητών

Η Μυρτώ Τζανουδάκη, φοιτήτρια του ΕΜΠ Αθηνών, του Τμήματος Χημικών Μηχανικών, διεξήγαγε την πρακτική της άσκηση στο εργαστήριο μας από τις 22 Οκτωβρίου μέχρι 30 Νοεμβρίου 2008. Το θέμα της έρευνας της ήταν: *Σύνθεση, χαρακτηρισμός και αναλυτικές εφαρμογές νανοδομημένων υβριδικών οργανο-ανόργανων υλικών.*

Πτυχιακές-Διπλωματικές Εργασίες

1. Ίωάννης Τσακόπουλος, Εκτίμηση αντιοξειδωτικής δράσης α-αμινοξέων με χημειοφωταυγειομετρικές τεχνικές, ΕΜΠ, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Ιούνιος 2008.
2. Ηλίας Παπαηλίας, Εκτίμηση αντιοξειδωτικής δράσης φαινολικών παραγώγων με φθορισμομετρικές τεχνικές, ΕΜΠ, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Νοέμβριος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

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

Ερευνητική Υποδομή

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

Συνεργασίες

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

Άλλες Δραστηριότητες

Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος είναι:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Luminescence, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Analytica Chimica Acta, Food Chemistry and Applied Catalysis, B: Environmental.
2. Μέλος επιτροπών για την πρόσληψη ερευνητών στις βαθμίδες Γ και Δ του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
3. Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των υποψηφίων διδακτόρων Δ. Χριστοδουλέα και Ο. Λανίτου.
4. Αξιολογητής ερευνητικών προγραμμάτων στο Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.

Ο Δρ. Γεώργιος Βουγιουκαλάκης είναι κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό European Polymer Journal.

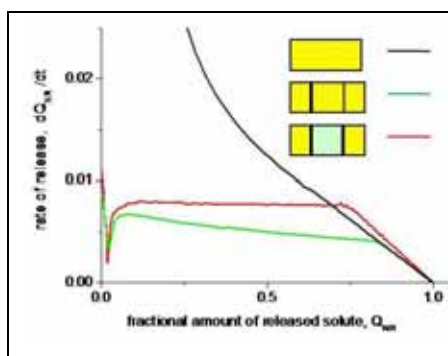
1.5 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΥΛΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

Αντικείμενο Έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην μελέτη της ροφήσεως και διαχύσεως μικρομοριακών ουσιών σε πολυμερικά υλικά με τον συνδυασμό θεωρητικών και πειραματικών προσεγγίσεων. Στόχος είναι η ανάπτυξη του κατάλληλου επιστημονικού υποβάθρου για τον ορθολογικό σχεδιασμό ευρέος φάσματος εφαρμογών (συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, διαπερατοεκλεκτικές μεμβράνες, υλικά συσκευασίας, χημικοί αισθητήρες). Οι τρέχουσες ερευνητικές δραστηριότητες περιλαμβάνουν:

1. Πολυμερικά συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης

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



Θεωρητική πρόβλεψη σταθεροποίησης του ρυθμού αποδέσμευσης δραστικής ουσίας με την χρήση πολυστρωματικών μητρών ελεγχόμενης αποδέσμευσης. Υπό τις συνθήκες του παραδείγματος, η απλή μονοστρωματική μήτρα με ομοιόμορφη συγκέντρωση ενσωματωμένης δραστικής ουσίας (—), χαρακτηρίζεται από φθίνοντα ρυθμό αποδέσμευσης, ενώ η μήτρα με τρία στρώματα από το ίδιο πολυμερικό υλικό αλλά με διαφορετικές συγκεντρώσεις στο εσωτερικό και στα εξωτερικά στρώματα (—), έχει πιο σταθερό ρυθμό. Επιπλέον, αν το υλικό του εσωτερικού στρώματος αντικατασταθεί από ένα πιο διαπερατό πολυμερές (—), το ~70% της ενσωματωμένης ουσίας αποδεσμεύεται με πλήρως σταθερό ρυθμό (*J. Membrane Sci.*, 2008)

2. Μηχανισμοί μεταφοράς μικρομοριακών ουσιών σε υαλώδη πολυμερή

Η κινητική ροφήσεως σε συστήματα υαλωδών πολυμερών παρουσιάζει πληθώρα αποκλίσεων από την κατά-Fick συμπεριφορά που αποδίδεται είτε (i) σε μηχανισμό «ιξώδους χαλαρώσεως» του διογκούμενου πολυμερούς, ή (ii) στην επίδραση των εσωτερικών μηχανικών τάσεων που αναπτύσσονται στο πολυμερές λόγω ανομοιογενούς κατανομής του διαχύτη κατά την διάρκεια της ροφήσεως. Αναπτύσσονται μοντέλα βασιζόμενα και στους δύο μηχανισμούς, ικανά να αναπαράγουν όλα τα βασικά χαρακτηριστικά της παρατηρούμενης κινητικής συμπεριφοράς. Η πειραματική εργασία περιλαμβάνει: (i) ρόφηση από την αέριο φάση. Στην περίπτωση αυτή, προσεκτικά σχεδιασμένα πειραματικά πρωτόκολλα ροφήσεως, σε συνδυασμό με παράλληλες μετρήσεις της κινητικής διαμήκου διογκώσεως των φιλμ, επιτρέπουν την μελέτη διαφόρων τύπων μη κατά-Fick συμπεριφοράς. Σε συνδυασμό με την αντίστοιχη θεωρητική υπολογιστική διερεύνηση, διατυπώνονται σαφή «διαγνωστικά κριτήρια», τα οποία επιτρέπουν να διαπιστωθεί ασφαλώς ποιος μηχανισμός είναι υπεύθυνος για τις εκάστοτε παρατηρούμενες αποκλίσεις από την κατά Fick κινητική ροφήσεως. (ii) ρόφηση από την υγρή φάση. Ο συνδυασμός διαφόρων οπτικών τεχνικών επιτρέπει τη λεπτομερή μελέτη διαφόρων τύπων μη κατά-Fick κινητικής, συμπεριλαμβανομένης της κινητικής Case II.

1. Φαινόμενα μεταφοράς σε λεπτά επιστρωμένα υμένα

Σε συνεργασία με το Ινστ. Μικροηλεκτρονικής αξιολογούνται πολυμερικά υλικά ως προς την διογκώση τους παρουσία ελεγχόμενης ατμόσφαιρας οργανικών ατμών ή υγρασίας, τα οποία στη συνέχεια χρησιμοποιούνται ως η αισθητήρια στοιβάδα χημικών αισθητήρων (τύπου χημειοκυκλωτών). Η

δραστηριότητα αυτή αποσκοπεί στην ανάπτυξη συστοιχιών αισθητήρων για συγκεκριμένες εφαρμογές ανίχνευσης αερίων μιγμάτων.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Μερóπη Σανοπούλου, Ερευνήτρια Α', υπεύθυνη του έργου
Δρ. Κυριακή Παπαδοκωστάκη, Ερευνήτρια Β'

Εξωτερικός Συνεργάτης: Δρ. Ιωάννης Πετρόπουλος

Τεχνικό προσωπικό: Σασσάλου Συμεώνη

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας: Σούλας Δημήτριος (από 12/6/2008)

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Αλμπάνα Χασίμη (άμισθη, ΕΠΕΑΕΚ), Μαύρα Κονιδάρη (άμισθη, ΕΠΕΑΕΚ), Κυριακή Μανώλη (συνεπίβλεψη με Δρ. Ι. Ράπτη, ΙΜΕΛ)

Δημοσιεύσεις

1. Papadokostaki, K.G.; Stavropoulou, A.; Sanopoulou, M.; Petropoulos, J.H. "An advanced model for composite planar three-layer matrix-controlled release devices. Part I. Devices of uniform material properties and non-uniform solute load" *J. Membrane Sci.* 2008, *312*, 193-206.
2. Hasimi, A.; Stavropoulou, A.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou M. "Transport of water in polyvinyl alcohol films: Effect of thermal treatment and chemical crosslinking" *Eur. Polym. J.* 2008, *44*, 4098-4107.
3. Sarantopoulou, E.; Kollia, Z.; Cefalas, A.C.; Manoli, K.; Sanopoulou, M.; Goustouridis, D.; Chatzandroulis, S. "Surface nano/micro functionalization of PMMA thin films by 157 nm irradiation for sensing application" *Appl. Surface Sci.* 2008, *254*, 1710-1719.
4. Dallas, P.; Bourlinos, A.B.; Petridis, D.; Boukos, N.; Papadokostaki, K.; Niarchos, D.; Guskos, N. "Synthesis and characterization of 2-D and 3-D covalent networks derived from triazine central cores and bridging aromatic diamines" *Polymer* 2008, *49*, 137-1144.
5. Vlachopoulou, M.E.; Tserepi, A.; Pavli, P.; Argitis, P.; Sanopoulou, M.; Misiakos, K. "A low temperature surface modification assisted method for bonding plastic" *J. Micromech. And Microeng.*, in press
6. Papadokostaki, K.G. "Experimental realization of sustained simple kinetic regimes of release of particulate solutes subject to slow dissolution in the containing matrix" *J. Membrane Sci.*, in press
7. Oikonomou, P. ; Manoli, K. ; Goustouridis, D. ; Raptis, I. ; Sanopoulou, M. "Polymer/BaTiO₃ nanocomposites based chemocapacitive sensors", *Microelectronic Eng.*, in press
8. Soulas, D.: Sanopoulou, M: Papadokostaki, K.G., "A comparative study on the release kinetics of osmotically active solutes from hydrophobic elastomeric matrices, combined with the characterization of the depleted matrices", *J. Appl. Polymer Sci.* in press

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. K. Manoli, P. Oikonomou, D. Goustouridis, E. Karonis, I. Raptis, M. Sanopoulou "Interdigital chemicapacitive sensors based on polymer/BaTiO₃ composites", EuroSensors 2008, Sept.7-10, 2008, Dresden, Germany, Book of Abstracts, p. 388.
2. K. Manoli, E. Karonis, M. Chatzichristidi, D. Goustouridis, S. Chatzandroulis, I. Raptis, M. Sanopoulou "Evaluation of a chemocapacitive sensor array for the detection of enorm analytes and their mixtures" IEEE Sensors 2008, October 26-29, Lecce, Italy, Book of Abstracts, p.423-426.

3. P. Oikonomou, K. Manoli, D. Goustouridis, I. Raptis, M. Sanopoulou "Polymer/BaTiO₃ nanocomposites based chemocapacitive sensors", Micro & Nano Engineering 2008, Sept. 15-18, 2008, Athens, Greece, Book of Abstracts, p. 511.
4. J.H. Petropoulos, "Of men, pores and heterogeneity" 1st International Workshop on Nanoporous Materials in Energy and Environment, NAPEN 2008, Chania, Crete, Greece, October 12-15, Book of Abstracts, p. 8 – 13
5. A. Hasimi, K. G. Papadokostaki, M. Sanopoulou, Study of the release kinetics of a drug and an MRI contrast agent from poly (vinyl alcohol) matrices, 7th Hellenic Polymer Conference, Ioannina, September 28-October 1 2008, Book of Abstracts, p. 229-230

Διαλέξεις

1. Papadokostaki, K. "Real and Simulated performance in matrix-controlled release systems" Final progress meeting of STREP project "Multimatdesign", GKSS, Teltow, Germany, March 29th-April 3rd, 2008
2. Πετρόπουλος, Ι. «Ένα ταξίδι στην απλοϊκότητα», στα πλαίσια σεμιναρίων της Ομάδας Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 19/05/2008
3. Πετρόπουλος, Ι. «Percolation: ένα απλό παιχνίδι με μέγα-εφαρμογές» Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7-18 Ιουλίου 2008

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 2008 (18 διδακτικές ώρες).
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 2008 (8 διδακτικές ώρες).
3. Μ. Σανοπούλου, Εργαστηριακή άσκηση «Προσδιορισμός καμπύλης τάσης-επιμήκυνσης κατά τον εφελκυσμό πολυμερούς» Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών
4. Κ. Παπαδοκωστάκη, Εργαστηριακή άσκηση «Προσδιορισμός συντελεστού διαχύσεως και κατανομής οπύ πείραμα ροφήσεως» Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών: «Επιστήμη των Πολυμερών και Εφαρμογές της», Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών

Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

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

Ερευνητική Υποδομή

Συσκευές κενού εφοδιασμένες με ηλεκτρονικούς μικροζυγούς (Cahn 2000 and MK2-M5 CI Electronics) και ελατήρια χαλαζία για μετρήσεις κινητικής ροφήσεως και διαμήκους διογκώσεως σε πολυμερή, Μικροσυμβολόμετρο και πολωτικό μικροσκόπιο, Οπτικό μικροπυκνόμετρο σάρωσης, Όργανο μηχανικού

εφελκυσμού εφοδιασμένο με οπτικά εξαρτήματα, Συσκευή Θερμικής ανάλυσης (TMDSC), home-made συσκευές μελέτης κινητικής αποδέσμευσης ουσιών από πολυμερικές μήτρες, διαθλασίμετρο Abbe, Αυτοματοποιημένη Συσκευή Διαλυτοποίησης φαρμακευτικών μορφών (Jasco).

Συνεργασίες

Καθ. A. Budkowski , M. Smoluchowski Institute of Physics, Jagellonian University, Krakow, Poland (Πρόγραμμα 4, ανωτέρω), Δρ. Ι. Ράπτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, Πρόγραμμα 4 ανωτέρω , κοινή επίβλεψη διατριβής της Κ. Μανώλη) –Δρ Π. Αργείτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής, DSC).

Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Μ. Σανοπούλου, κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά J. Polym. Sci., Part B : Polym. Phys., J. Appl. Polym. Sci., Measurement, J. Membrane Sci., Macromolecules.
2. Μέλος Επιτροπής επιλογής Υποτρόφων του Ινστιτούτου Μικροηλεκτρονικής

Η Δρ. Κ. Παπαδοκωστάκη, κατά το έτος 2008 διατέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά Eur. Polym. J., J. Membrane Sci., J. Appl. Polym. Sci., J. Pharm. Sci.

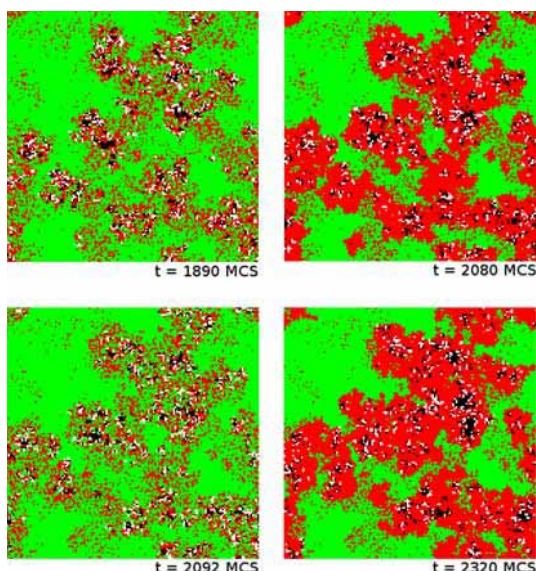
Ο Δρ. Ι. Πετρόπουλος, κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

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

1.6 ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΚΑΙ ΜΗ-ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

Αντικείμενο Έργου

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



Δημιουργία και εξέλιξη συσσωματωμάτων κατά την αντίδραση οξειδωσης μονοξειδίου του άνθρακα σε υψηλές πιέσεις.

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 Leví, θεωρία τυχαίου περιπάτου, κ.α. Για την μελέτη μηχανισμών ανάπτυξης μορφωμάτων χρησιμοποιούμε μη-γραμμικά μοντέλα ιεραρχημένης πολυπλοκότητας, θεωρίες μέσου πεδίου, μεθόδους ακριβούς απαρίθμησης, θεωρία Επανακανονικοποίησης Πραγματικού Χώρου (real space enormalization), θεωρία στοχαστικών διαδικασιών (stochastic processes) και υπολογιστικές μεθόδους τύπου Kinetic Monte Carlo.

Οι εφαρμογές στο Εργαστήριο περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, και μελέτες επιφανειών και συσσωματωμάτων που παρουσιάζουν μορφοκλασματικές (fractal) δομές, βιοπληροφορική, στατιστική μελέτη και μοντελοποίηση αλυσίδων DNA και βιολογικών μακρομορίων, και μη-

γραμμική περιγραφή και μοντελοποίηση κλειστών και ανοικτών χημικών αντιδράσεων σε καταλυτικές επιφάνειες καθώς και την επίδραση του μηχανισμού της διάχυσης στα συστήματα αυτά.

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Αστέρω Προβατά, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας: Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης (από 07/2008)

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Βασιλική Νουσίου (έως 03/2008) , Νικόλαος Κούβαρης.

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης (ΠΕΠ-Αττικής, έως 07/2008). Δρ. Βασιλική Νουσίου (από 10/2008) και Δρ. Θωμάς Οικονόμου (από 07/2008).

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Θωμάς Οικονόμου (άμισθος, έως 06/2008).

Δημοσιεύσεις

1. Oikonomou, Th.; Provata, A.; Tirnakli, U.; "Nonextensive statistical approach to non-coding human DNA", *Physica A*, 2008, 387 2653–2659
2. Noussiou, V.K.; Provata, A.; Kinetic Monte Carlo simulations of the oscillatory CO oxidation at high pressures: the surface oxide model", *Chem. Phys.* 2008, 384, 11-20.
3. Kouvaris, N.; and Provata, A.; "Trimolecular reactive system with spatial disorder", *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 2008, 11, 259-264.
4. Provata, A.; Sokolov, I.; Spagnolo, B.; "Editorial: Ecological Complex Systems", *Eur. Phys. Jour. B*, 2008, 65, 307-314.
5. Kouvaris, N.; and Provata, A.; "Dissipative oscillations in spatially restricted ecosystems due to long range migration", *Eur. Phys. J. B*, 2008, 66, 97-106.
6. Efimov, A.; Shabunin, A.; Provata, A.; "Synchronization of stochastic oscillations due to long-range diffusion", *Phys. Rev. E*, 2008, 78, 056201.
7. Katsaloulis, P.; Theoharis, Th.; Provata, A.; "Long range clustering of oligonucleotides containing the GC signal" *accepted to J. Theor. Bio.*
8. Katsaloulis, P.; Verganelakis, D.; Provata, A.; "Fractal Dimension and Lacunarity of Tractography Images of the Human Brain", *accepted to Fractals*.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Katsaloulis, P.; Theoharis, Th.; Provata, A.; "Non-linear clustering analysis of oligonucleotide size distribution", poster at 3rd Conference – Hellenic Society for Computational Biology & Bioinformatics, Thessaloniki, , Greece, 30-31 October 2008,
2. Kouvaris, N.; Provata, A.; "Diffusion in spatially extended reactive systems", poster at the 21th International Conference and Summer School on "Non Linear Science and Complexity", Athens, Greece, 21 July – 2 August 2008 .
3. Kouvaris, N.; Provata, A.; "Derivation of the Tsallis, Reny and Non-extensive Gaussian Entropy from Deformed Multinomial Coefficients", poster at the International Conference "Sigma-Phi: Statistical Physics", Kolympari, Chania, Crete, Greece, July 14-18 ,2008.

Διαλέξεις

1. Οικονόμου, Θ.; "Μη-εκτατική Στατιστική και Εφαρμογές σε Βιολογικά Δεδομένα", Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Αθήνα, 24/10/2008. ,

2. Νουσίου, Β.; "Υπολογιστική Μελέτη Δημιουργίας Χωροχρονικών Ταλαντώσεων σε Ετερογενείς Καταλυτικές Αντιδράσεις", Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Αθήνα, 28/11/2008. ,
3. Kouvaris, N.; "Diffusion in spatially extended reactive systems", in CHAOTIC MODELING AND SIMULATION International Conference, Chania, Crete, Greece, 3 – 6 June 2008.
4. Provata, A.; "Nonlinear Kinetics on Lattice, with Long Range Diffusion", International Conference "Sigma-Phi: Statistical Physics", Kolympari, Chania, Crete, Greece, July 14-18 ,2008.
5. Provata A.; "Diffusive Mixing Versus Reactive Mixing in Nonlinear Dynamical Systems", Greek-Turkish Conference on "Statistical Mechanics and Dynamical Systems", Rhodos_Greece, Marmaris-Turkey, September 11, 2008.
6. Κατσαλούλης Π.; "Δραστηριότητες του Εργαστηρίου Στατιστικής Μηχανικής και Μη-γραμμικής Δυναμικής", Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Αθήνα, Ιούλιος 2008.
7. Provata, A.; "Synchronization of Local Oscillators in a Lattice Model", 21th International Conference and Summer School on Non Linear Science and Complexity", NTUA, Athens, Greece, 24 July 2008.
8. Katsaloulis P.; "Fractal analysis of human brain tractography images", 21th Conference – Summer School. "Nonlinear Science and Complexity". 21 July – 2 August 2008, Athens, Greece.
9. Katsaloulis, P.; "Non-linear analysis of oligonucleotide distribution of evolutionary recent organisms", Greek-Turkish Conference "Statistical Mechanics and Dynamical Systems", 11-17 September 2008, Rhodos Greece, Marmaris Turkey

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

1. Προβατά Α. Ειδικά Κεφάλαια σε Πολύπλοκα Συστήματα (Κεφάλαιο Fractals), Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Χειμερινό Εξάμηνο 2008-2009.
2. Κατσαλούλης Π., Γλώσσα προγραμματισμού C, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Βιοπληροφορικής, Τμήμα Βιολογίας, Παν. Αθηνών, Χειμερινό Εξάμηνο 2008-2009.

Διδακτορικές Διατριβές

1. Οικονόμου Θωμάς, "Βιολειτουργίες Ακολουθιών DNA", Ιατρική Σχολή, Παν. Αθηνών, Ιούνιος 2008.
2. Νουσίου Βασιλική, "Υπολογιστική Μελέτη Δημιουργίας Χωροχρονικών Ταλαντώσεων σε Ετερογενείς Καταλυτικές Αντιδράσεις", Τμήμα Χημείας, Παν. Αθηνών, Σεπτέμβριος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

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

Ερευνητική Υποδομή

1. Υπολογιστικό Σύστημα Pentium IV, dual core + dual processor (Linux).
2. Υπολογιστικό Σύστημα Pentium IV, dual core (Linux).
3. Υπολογιστικά Συστήματα Pentium IV (Linux).
4. Προσωπικός Υπολογιστής (Windows).

Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό

1. Κούβαρης Ν.; Παν. Θεσσαλονίκης, 2 επαήμερες συνεργασίες με Καθ. Δ. Κουγιουμτζή, (Ιανουάριος και Ιούνιος 2008).

Συνεργασίες

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

Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Αστέρω Προβατά κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Guest Editor, στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό European Physical Journal B. Εκδότης (μαζί με τους Igor Sokolon and Bernardo Spagnolo) του "Special Issue on Ecological Complex Systems", European Physical Journal B, volume 65, October 2008.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Physical Review E, Physical Review Letters, Europhysics Letters, Physics Letters A, Physica A, Journal of Theoretical Biology, European Physical Journal B, European Journal of Physics E, International Journal of Non-linear Mechanics, Surface Science.
3. Μέλος της Επιτροπής "Experts" για το πρόγραμμα "ERA-Net on Complexity". Στα πλαίσια συναντήσεων της επιτροπής αυτής πραγματοποιήθηκε το εξής ταξίδι: Lisbon, Portugal (13-14 Νοεμβρίου 2008).
4. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Θωμά Οικονόμου (Παν/μιο Αθηνών), Βασιλικής Νουσίου (Πανεπιστήμιο Αθηνών), Νίκου Κούβαρη (Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης).
5. Διοικητικός Υπεύθυνος της Ομάδας Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".
6. Μέλος επιτροπής διοργάνωσης του 21 Συνεδρίου/Θερινού Σχολείου « Non Linear Science and Complexity», Αθήνα, 21 Ιουλίου – 2 Αυγούστου, 2008.
7. Member of the Advisory Committee of the International Conference "Sigma-Phi: Statistical Physics", Kolympari, Chania, Crete, Greece, 14-18 July 2008.
8. Κύριος Διοργανωτής του Ελληνοτουρκικού Συνεδρίου "Statistical Mechanics and Dynamical Systems", Rhodos-Greece and Marmaris-Turkey, 11-17 Σεπτεμβρίου 2008.
9. Αναπληρωτής Διευθυντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος".

Ο Δρ. Θωμάς Οικονόμου κατά το έτος 2008:

1. Κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Physics Letters A.

Ο κος Νίκος Κούβαρης κατά το έτος 2008:

1. Διετέλεσε κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: Central European Journal of Physics.
2. Έλαβε Υποτροφία Αριστείας Έτους 2008 από την Επιτροπή Ερευνών του Αριστοτέλειου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης (4 Κ€), 2008.

1.7 ΜΟΡΙΑΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Αντικείμενο Έργου

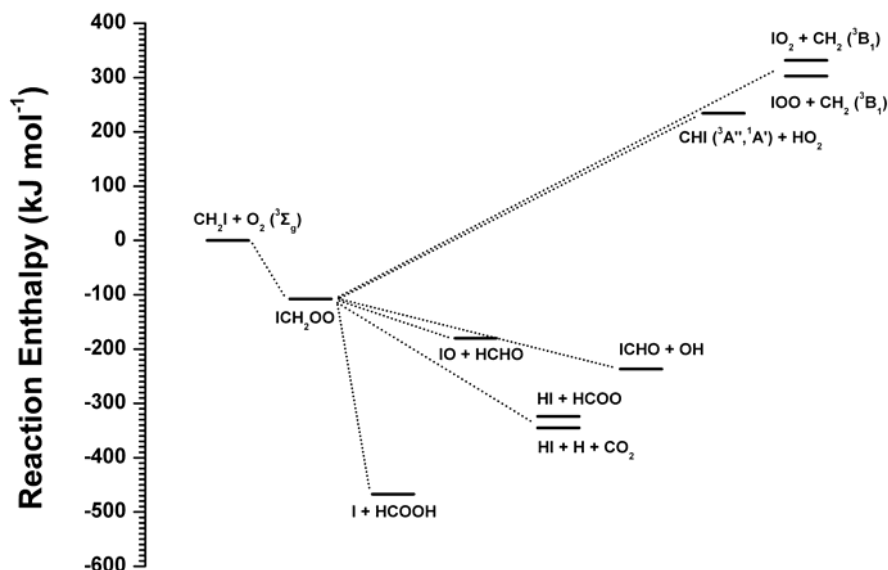
Η ερευνητική δραστηριότητα του Εργαστηρίου Μοριακής Υπολογιστικής Χημείας εστιάζεται στην μελέτη της χημικής δραστικότητας και του μηχανισμού αποικοδόμησης μορίων στην ατμόσφαιρα καθώς και την αξιόπιστη πρόβλεψη ιδιοτήτων μοριακών υλικών χρησιμοποιώντας θεωρητικές μεθόδους.

Ειδικότερα, ολοκληρώθηκε η μελέτη του μηχανισμού τροποσφαιρικής αποικοδόμησης του διιωδομεθανίου, CH_2I_2 (μία σημαντική βιογενής πηγή ατόμων ιωδίου στη φύση) μέσω της αντίδρασης με άτομα Cl καθώς και ο μηχανισμός οξειδωσης των παραγομένων ελευθέρων ριζών CH_2I και CHI_2 με μοριακό O_2 , χρησιμοποιώντας τις πειραματικές τεχνικές EI-MS και FT-IR καθώς και την θεωρία συναρτησιακής πυκνότητας (DFT).

Ο μηχανισμός της αποικοδόμησης φθοριομένων ακορέστων οργανικών ενώσεων (ως υποσχόμενοι αντικαταστάτες ορισμένων κατηγοριών Freons) μέσω χημικών αντιδράσεων με ρίζες υδροξυλίου, άτομα χλωρίου και μοριακό οξυγόνο μελετάται θεωρητικά με DFT, συνεισφέροντας στην εξήγηση των αντιστοιχών πειραματικών αποτελεσμάτων. Επιπροσθέτως, η θεωρία DFT χρησιμοποιείται στην διερεύνηση του μηχανισμού των αντιδράσεων του όζοντος με οργανικά μόρια, με σκοπό την κατανόηση των διαδικασιών αποικοδόμησης τους στο περιβάλλον και της επακόλουθης δημιουργίας αερολυμάτων (aerosols).

Η κινητική των αντιδράσεων μικρών οργανικών μορίων (CH_4 , CH_3F , CH_2F_2 , CHF_3 και CH_3OH) με άτομα χλωρίου και ρίζες υδροξυλίου παρουσία μορίων νερού και η εξάρτηση των κινητικών παραμέτρων από την δομή των ενύδρων συμπλόκων υπολογίζεται με μεθόδους *ab-initio* και DFT στα πλαίσια της Θεωρίας Μεταβατικής Κατάστασης. Η μελέτη αυτή σκοπεύει στην διαλεύκανση του ρόλου των νεφών καθώς και των στρατοσφαιρικών παγοκρυστάλλων στην κινητική των αντιδράσεων ατμοσφαιρικής αποικοδόμησης αλογονομένων μορίων, που σχετίζεται άμεσα με το πρόβλημα της καταστροφής του στρατοσφαιρικού όζοντος.

Η ικανότητα συναρμογής κατιόντων λανθανιδών από τροποποιημένες κυκλοδεξτρίνες μελετάται με τη χρήση ημιεμπειρικών θεωρητικών μεθόδων (AM1, PM3), αναζητώντας παραμαγνητικά μεταλλικά σύμπλοκα με ιδιότητες που επιτρέπουν την εφαρμογή τους σε τεχνικές μαγνητικής απεικόνισης (MRI).



Ενθαλπικό διάγραμμα των πορειών οξειδωσης της ρίζας CH_2I από μοριακό O_2 , υπολογισμένο στο επίπεδο θεωρίας B3P86/aug-cc-pVTZ-PP

Προσωπικό

Ερευνητής: Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου, Ερευνητής Β', υπεύθυνος του έργου

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Χριστίνα Τσονάκη (από 8-12-2008)

Δημοσιεύσεις

1. V.G. Stefanopoulos, V. C. Papadimitriou, Y.G. Lazarou and P. Papagiannakopoulos, "Absolute Rate Coefficient Determination and Reaction Mechanism Investigation for the Reaction of Cl Atoms with CH_2I_2 and the Oxidation Mechanism of CH_2I Radicals", J. Phys. Chem. A **2008**, 112, 1526 - 1535.
2. I. Morozov, S. Gligorovski, P. Barzagli, D. Hoffman, Y.G. Lazarou, E. Vasiliev and H. Herrmann, "Hydroxyl Radical Reactions with Halogenated Ethanol in Aqueous Solution: Kinetics and Thermochemistry", Int. J. Chem. Kinet. **2008**, 40, 174 - 188.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Papadimitriou, V.C., Lazarou, Y.G., Talukdar, R.K., Burkholder, J.B. "Pressure Dependent Rate Coefficients for the Cl + $\text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2$ and (Z)- $\text{CF}_3\text{CF}=\text{CHF}$ Reactions between 207 - 308 K", 20th International Symposium on Gas Kinetics, Manchester, UK, July 20 - 25, 2008.

Διαλέξεις

1. Λαζάρου, Ι. «Ανθρώπινες Παρεμβάσεις στη Χημεία της Ατμόσφαιρας», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7-18 Ιουλίου 2008.

Ερευνητική Υποδομή

Σύστημα προσωπικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών με λειτουργικά συστήματα Microsoft Windows XP, Linux RedHat και Fedora Core.

Συνεργασίες

Καθηγ. Π. Παπαγιαννακόπουλος και Δρ. Β. Χ. Παπαδημητρίου (Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, χημικές αντιδράσεις αλογονομένων μορίων, πειράματα χημικής κινητικής), Δρ. Ε. Μαυρίδου (Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δ", σύμπλοκα υποκατεστημένων κυκλοδεξτρινών), Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου (Ινστ. Φυσικοχημείας, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. "Δ", σύμπλοκα υποκατεστημένων κυκλοδεξτρινών), Dr. J. B. Burkholder (Earth System Research Laboratory, National Oceanic and Atmospheric Administration, Boulder, Colorado, USA, ακόρεστες φθοριωμένες οργανικές ενώσεις), Δρ. R. Prosmitti (Department of Atomic, Molecular and Cluster Physics, Institute of Fundamental Physics 'Blas Cabrera', Spanish National Research Council (CSIC), Madrid, Spain, ιωδιόμενες ενώσεις), Καθηγ. Ι. Ι. Morozov (Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, αλογονομένες αλκοόλες), Dr. Sasho Gligorovski (Universités d'Aix-Marseille, France, αντιδράσεις όζοντος με οργανικές ενώσεις).

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

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

Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

Πρόγραμμα 2

Νανοχημεία,
Φιλικές προς το Περιβάλλον
Τεχνολογίες, Ενέργεια

2.1 ΜΕΜΒΡΑΝΕΣ ΚΑΙ ΜΙΚΡΟΠΟΡΩΔΗ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΟΥΣ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΥΣ

Αντικείμενο Έργου

- Χαρακτηρισμός Πορώδους Δομής (κατανομή πόρων, ειδική επιφάνεια, όγκος πόρων, συνδετικότητα πόρων) : ποροσιμετρία αζώτου και υδραργύρου, απόλυτη και σχετική διαπερατότητα αερίων (μονο-πολυφασική), Μικροσκοπία / Φασματοσκοπία.
- Ανάπτυξη-Τροποποίηση μεμβρανών με τις τεχνικές: Χημική Εναπόθεση Ατμών [CVD], Απόθεση Langmuir-Blodgett, Επεξεργασία πλάσματος, Αναστροφή Φάσεων, Εξανθράκωση-Ενεργοποίηση.
- Αξιολόγηση / Έλεγχος συμπεριφοράς πορώδων υλικών (μεμβράνες, φίλτρα ενεργού άνθρακα κλπ.) σε διάφορες περιβαλλοντικές και βιομηχανικές εφαρμογές (διαχωρισμοί αερίων ρυπαντών, διαπερατότητα υγρών, αντίστροφη ώσμωση, συστήματα ελεγχόμενης αποδέσμευσης, διαδερμική χορήγηση φαρμάκων).
- Προσομοίωση διεργασιών μεταφοράς μάζας και θερμότητας σε πορώδη μέσα με συνεχείς (μακροσκοπικές) και διακριτά αριθμητικά μοντέλα (δίκτυα) μεθόδους.
- Οπτική αναπαράσταση ροής μέσα σε πορώδη μέσα με τη χρήση διαφορετικών τεχνικών και τάξεων μεγέθους πόρων.
- Αριθμητική και πειραματική προσομοίωση και οπτική αναπαράσταση τεχνικών ανάκτησης πετρελαίου με τη χρήση μαθηματικών και πειραματικών δομών επακριβώς γνωστής γεωμετρίας κάτω από συνθήκες περιβαλλοντικής και υψηλών πιέσεων.
- Παρασκευή και χαρακτηρισμός υβριδικών νανοσύνθετων υλικών (Polymer/clay nanocomposites)
- Χρήση και τροποποίηση φυσικών προϊόντων (πολυσακχαρίτες από θαλάσσια φύκια) σε περιβαλλοντικές εφαρμογές απομάκρυνσης βαρέων μετάλλων και οργανικών ρύπων (φυτοφαρμάκων) από το νερό.
- Παρασκευή και χαρακτηρισμός υλικών για βιοτεχνολογικές εφαρμογές και νέα υλικά συσκευασίας
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός υλικών για μονοστρωματικές και πολυστρωματικές διατάξεις υμενίων και κοίλων ινών
- Νανοδομικά Υλικά για Αποθήκευση Υδρογόνου
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός ζεολιθικών μεμβρανών
- Σύνθεση και χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων μετάλλων

Προσωπικό

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

Δρ. Στεριώτης Θεόδωρος, Ερευνητής Β'

Δρ. Στεφανόπουλος Κώσταντίνος, Ερευνητής Γ',

Δρ. Κατσαρός Φώτιος, Ερευνητής Γ',

Δρ. Ρωμανός Γεώργιος, Ερευνητής Γ

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

Υπότροφοι ΕΚΕΦΕ «Δ»: Βαγγέλη Όλγα, Γιασαφάκη Δήμητρα

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. Καρανικολός Γεώργιος, (ENTEP-2004), Δρ. Nolan John, (INSIDE-PORES)

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Λαμπρόπουλος Αναστάσιος (ΠΕΝΕΔ), Βερμίσσογλου Ελένη, Βεζύρη, Χαριτωμένη (ΒΙΟΦΥΚ), Χατζηδάκη Ελένη (άμισθη ΕΠΕΑΕΚ), Καρατζής Παναγιώτης, Τάτσιου Παναγιώτα

Συνεργάτες σε Προγράμματα: Χρήστου Στέφανος, Ακύλλας Βικτώρας, (ΒΙΟΦΥΚ), Ράπτης Βασίλης, Λεοντιάδου Χάρης, Μπουρλίνος Θανάσης, Γεωργακίλας Βασίλης (HYCONES)

Δημοσιεύσεις

1. Yoo W.C., Kumar S., Wang Z., Ergang N.S., Fan W., Karanikolos G.N., McCormick A.V., Penn R.L., Tsapatsis M., Stein A., "Nanoscale reactor engineering: Hydrothermal synthesis of uniform zeolite particles in massively parallel reaction chambers", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 47(47), 9096-9099 (2008). Παρουσιάστηκε στο Εξώφυλλο του περιοδικού.
2. Karanikolos G.N., García H., Corma A. and Tsapatsis M., "Growth of AlPO₄-5 and CoAPO-5 Films from Amorphous Seeds", *Microp. Mesop. Mater.*, 115(1-2), 11-22 (2008).
3. Veziri Ch. M., Pilatos G., Karanikolos G.N., Lambropoulos A., Kordatos K., Rigopoulou-Kaselouri V., Kanellopoulos N.K., "Growth and Optimization of Carbon Nanotubes in Activated Carbon by Catalytic Chemical Vapour Deposition", *Microp. Mesop. Mater.*, 110(1), 41-50 (2008).
4. Karanikolos G.N., Alexandridis P., and Mountziaris T.J., "Growth of ZnSe and CdSe Nanostructures in Self-Assembled Block Copolymer-Stabilized Templates", *Mater. Sci. Eng. B*, 152(1-3), 66-71 (2008).
5. Vermisoglou E. C., Pilatos G., Romanos G. E., Karanikolos G. N., Boukos N., Mertis K., Kakizis N.K., Kanellopoulos N. K., "Synthesis and Characterization of Carbon Nanotube-Modified Anodised Alumina Membranes", *Microp. Mesop. Mater.*, 110(1), 25-36 (2008).
6. Gamari-Seale, H.; Troyanchuk, I.O.; Sazonov, A.P.; Stefanopoulos, K.L.; Toebbens D.M. "Structure and magnetic order in La_{0.7}Ca_{0.3}Mn_{0.5}Co_{0.5}O₃ and La_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{0.5}Co_{0.5}O₃ perovskites", *Physica B*, 403, 2924-2929 (2008).
7. Labropoulos A.I., Romanos G.E., Karanikolos G.N., Katsaros F.K., Kakizis N.K. and Kanellopoulos N.K., "Comparative study of the rate and locality of silica deposition during the CVD treatment of porous membranes with TEOS and TMOS", *Microp. Mesop. Mater.*, doi:10.1016/j.micromeso.2008.08.063. (2008).
8. A. Labropoulos, G. E. Romanos, G. I. Pilatos, N. K. Kakizis, E. P. Favvas and N. K. Kanellopoulos, "Investigating the evolution of N₂ transport mechanism during the post treatment of silica membranes by application of a cyclic chemical vapour deposition method", *Microp. Mesop. Mater.*, 110, 11 – 24 (2008).
9. Nitodas S. F., Favvas E. P., Romanos G. E., Papadopoulou M. A., Mitropoulos A. Ch. and Kanellopoulos N. K. "Synthesis and Characterization of Hydrogen Selective Silica-based Membranes", *J. of Porous Mat.*, 15 (5), 551 – 557 (2008).
10. Favvas E. P., Kouvelos E. P., Romanos G. E., Pilatos G. I., Mitropoulos A. Ch. and Kanellopoulos N. K. "Characterization of highly selective microporous carbon hollow fibre membranes prepared from a commercial co-polyimide precursor", *J. of Porous Mat.*, 15 (6), 625 – 633 (2008).
11. Favvas E. P. and Mitropoulos A. Ch. "What is spinodal decomposition?", *J. of Engin. Sci. and Tech. Review*, 1, 25 – 27 (2008).
12. Lambropoulos A., Romanos G.E., Steriotis Th., Nolan J., Katsaros F., Kouvelos E.P., Kanellopoulos N.K., "Development of an Innovative Mercury intrusion technique to examine defects plugging after CVD treatment of NF composite membranes", *J. Porous Mat.*, 15, 83-91 (2008).
13. Papageorgiou S.K., Kouvelos E.P. and Katsaros F.K., "Calcium alginate beads from *Laminaria digitata* for the removal of Cu⁺² and Cd⁺² from dilute aqueous metal solutions", *Desalination*, 224, 293-306 (2008).
14. Steriotis Th.A., Stefanopoulos, K.L., Katsaros, F.K., Gläser, R., Hannon, A.C., Ramsay, J.D.F., "In situ neutron diffraction study of adsorbed carbon dioxide in a nanoporous material: Monitoring

the adsorption mechanism and the structural characteristics of the confined phase", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 78 (11), 115424 (2008). Η δημοσίευση αυτή επιλέχθηκε και για το περιοδικό *Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology*, October 6 (2008) issue.

15. Athanasekou C. P., Papageorgiou S.K., Kaselouri V., Katsaros F.K., Kakizis N.K., Sapalidis A.A. and N.K. Kanellopoulos, "Development of hybrid alginate/ceramic membranes for Cd²⁺ removal", *Microp. Mesop. Mater.*, in press.
16. Kakizis N. K., Pilatos G., Andrianopoulos P., Kartel N., Romanos G.E., Grigoriev A. and Kanellopoulos N.K., "Bactericidal and Catalytic Degradation properties of high specific-surface spherical carbon absorbents impregnated with metal salts for medical and packaging applications", *BIOMATERIALS*, in press
17. Todorova N., Giannakopoulou T., Romanos G., Vaimakis T., Yu J. and Trapalis C.C., "Preparation of fluorine-doped TiO₂ photocatalysts with controlled crystalline structure", *International Journal of Photoenergy*, in press,
18. Kakizis N.K., Pilatos G., Tsigonias M.K., Andrianopoulos P. and Kanellopoulos N.K., "Printing Process Optimisation of high specific surface carbon adsorbing microspheres in multilayer assemblies of improved gas-barrier properties for environmental and packaging applications", *J. of Imaging Science & Technology*, in press,
19. Vermisoglou E. C., Romanos G. E., Tzitzios V., Karanikolos G.N, Akylas V., Delimitis A., Pilatos G., Kanellopoulos N. K., "Synthesis of nanocrystalline gold-carbon nanotube composites and evaluation of their sorption and catalytic properties", *Microp. Mesop. Mater.*, in press,
20. Favvas E. P., Sapalidis A. A., Stefanopoulos K. L., Romanos G. E., Kanellopoulos N. K., Kargiotis E. K. and Mitropoulos A. Ch. "Characterisation of carbonate rocks by combination of scattering, porosimetry and permeability techniques", *Microp. Mesop. Mater.*, in press, DOI 10.1016/j.micromeso.
21. Romanos G. E., Vangeli O. C., Stefanopoulos K. L., Kouvelos E. P., Papageorgiou S. K., E. P. Favvas and Kanellopoulos N. K. "Methods of evaluating pore morphology in hybrid organic-inorganic porous materials", *Microp. Mesop. Mater.*, in press, DOI 10.1016/j.micromeso
22. Bourlinos A.; Steriotis Th.; Zboril R.; Georgakilas V.; Stubos A.; "Direct synthesis of carbon nanosheets by the solid-state pyrolysis of betaine", *J. Material Science*, in press.
23. Zlotea, C.: Moretto, P.: Steriotis, Th.: "A Round robin characterization of the hydrogen sorption properties of a carbon based material", *Int. J. Hydrogen Energy*, in press.
24. Bourlinos, A.B.: Georgakilas, V.: Zboril, R.: Steriotis, Th.A.: "Liquid – phase exfoliation of graphite towards solubilized graphenes", small accepted.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Karanikolos G.N., Vermisoglou E.C., Kanellopoulos N.K., Alexandridis P. and Mountziaris T.J., "Amphiphilic Block Copolymer Nanocontainers for Templated Growth of Nanostructures", 1st International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 16, 2008.
2. Vermisoglou E.C., Labropoulos A., Romanos G.E., Kouvelos E., Papageorgiou S., Karanikolos G.N., Katsaros F. and Kanellopoulos N.K., "Hydrogen Storage in Polymer-Assisted Pd-Decorated Single Walled Carbon Nanotubes", 1st International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 16, 2008.
3. Labropoulos A.I., Vermisoglou E.C., Kakizis N.K., Romanos G.E., Pilatos G.I., Karanikolos G.N. and Kanellopoulos N.K., "Controlling the Nanostructure of Nanoporous Solids and the Evaluation of

- their Performance", 1st International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 17, 2008.
4. Vermisoglou E.C., Karanikolos G.N., Pilatos G., Romanos G.E., Veziri Ch.M., Likodimos V. and N.K. Kanellopoulos, "Templated Growth of Aligned Carbon Nanotubes on Porous Supports", 1st International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 18, 2008.
 5. Vermisoglou E.C., Karanikolos G.N., Pilatos G., Romanos G.E. and Kanellopoulos N.K., "Growth and alignment of carbon nanotubes in porous templates", 34th International Conference on Micro & Nano Engineering, Athens, Greece, Sep. 17, 2008.
 6. Karanikolos G.N., Alexandridis P., Mountziaris T.J., "Self-assembled polymeric templates for confined growth of compound semiconductor nanostructures", 34th International Conference on Micro & Nano Engineering, Athens, Greece, Sep. 17, 2008.
 7. Karanikolos G.N., Veziri Ch.M., Palomino M. and Kanellopoulos N.K. and Tsapatsis M., "Seeded growth of AlPO₄-5 and CoAPO-5 films: Control over film morphology and pore orientation", 34th International Conference on Micro & Nano Engineering, Athens, Greece, Sep. 17, 2008.
 8. Veziri Ch.M., Karanikolos G.N., Kanellopoulos N.K. and Tsapatsis M., "Oriented Microporous Films by Seeded Growth", 1st International Workshop of Nanoporous Materials in Energy and Environment, Chania, Greece, Oct. 14, 2008.
 9. Vermisoglou E.C., Karanikolos G.N., Pilatos G., Romanos G.E., Zafiropoulou I., Kanellopoulos N.K., "Templated Growth Of Aligned Carbon Nanotubes in Anodized Alumina", 1st International Workshop of Nanoporous Materials in Energy and Environment, Chania, Greece, Oct. 14, 2008.
 10. Kakizis N.K., Pilatos G., Tsigonias M.K., Andrianopoulos P. and Kanellopoulos N.K., "Printing of high specific surface carbon adsorbing microspheres in multilayer assemblies of improved gas-barrier properties for environmental and packaging applications", 6th International Conference on Imaging Science and Hardcopy, ICISH'2008, Zhanjiang, China, January 10-13, 2008. (Invited Lecture)
 11. Kakizis N.K., Tsigonias M.K., Politis A., Nils E., Nomikos S., Kanellopoulou A., Trapalis C. C. and Kanellopoulos N.K. "Development of "micrograna" synthesis methodology for application in e-paper applications, Review of current technologies and Prospects", 6th International Conference on Imaging Science and Hardcopy, ICISH'2008, Zhanjiang, China, January 10-13, 2008.
 12. Massaras L. V., Mertzaniades I. K., Favvas E. P., Mitropoulos A. Ch. and Kargiotis E. K. "Fracture Entry Friction and Fracture Tip Dilatancy: Major Advances on the Design, Placement and Analysis of Propped Hydrofrac Treatments", STIMtech 2008, 3rd International Conference and Exhibition, 1-2 February, 2008, Mumbai, India.
 13. Favvas E. P., Romanos G. E., Papageorgiou S. K., Sapalidis A. A., Katsaros F. K, Mitropoulos A. Ch. and Kanellopoulos N. K. "High pressure gas permeability of carbon hollow fiber membranes", 1st International Workshop NAPEN 2008 "NANoPorous materials in ENergy and ENvironment", 12 - 15 October, 2008, Chania - Crete, Greece.
 14. Gamari-Seale, H. Sazonov, A.P.; Troyancuk, I.O.; Stefanopoulos, K.L.; Sikolenko V.V. "Evidence of Macroscopic Phase Separation of La_{0.2}Ba_{0.2}CoO₃ by Neutron Powder Diffraction Study", XXIV Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, Heraklion, Crete, 21-24 September 2008, Πρακτικά σελ.74.
 15. Τσιγώνιας Μ.Κ., Κακιζής Ν.Κ., Νομικός Σ.Ι., Πλούμη Ε., Ακύλας Β.Ν. και Κανελλόπουλος Ν.Κ., "Οι σύγχρονες περιβαλλοντικές απαιτήσεις της βιομηχανίας της συσκευασίας από τα εκτυπωτικά υποστρώματα. Πράσινα υλικά συσκευασίας". Συσκευασία 2008.
 16. Nomikos S., Politis A., Renieri D., Tsigonias M. K. and Kakizis N.K., "Printed Technologies for Intelligent Applications, [Market of Printed Electronics]", 6th International Conference on Imaging Science and Hardcopy, ICISH'2008, Zhanjiang, China, January 10-13, 2008. (Invited Lecture).

Διδακτικό Έργο

Διαλέξεις

1. Karanikolos G.N., Veziri Ch.M., Kanellopoulos N.K. and M. Tsapatsis, "Seeded Growth of Nanoporous Materials: From Particles to Films", The Nano-multidisciplinary Symposium, 1st International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 18, 2008
2. Steriotis Th., "NESSHY - Novel Efficient Solid Storage for Hydrogen", (Invited) Materials Innovations in an Emerging Hydrogen Economy conference, 24-27 February 2008, Cocoa Beach, FL, USA.

3. Kainourgiakis M.E., Steriotis Th.A., Kikkinides E.S., Charalambopoulou G.Ch. and Ramsay J.D.F., "Digital reconstruction of porous materials: A tool to interpret in-situ sorption/SANS data", (Invited) 3rd BENS Adsorption Workshop, 1-2 October 2008, Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Lise-Meitner-Campus, Berlin, Germany.
4. Steriotis Th., "Recent Advances in Nanostructured Materials for Hydrogen Storage", (Invited) University of Crete - Symposium on Hydrogen Storage, 6 May 2008, Heraklion, Greece
5. Steriotis Th., "Synthesis and characterization of metal doped carbon foams for Hydrogen Storage", (Invited) International Energy Agency - Hydrogen Implementing Agreement - Expert Meeting of Hydrogen Storage - Task 22, 6-10 October 2008, Villa Mondragone, Castelli Romani (Roma), Italy
6. Steriotis Th., "Novel Materials for Hydrogen Storage", (Invited) 1st International Workshop NAPEN 2008, Nanoporous Materials in Energy & Environment, 12-15 October 2008, Chania, Greece.
7. Steriotis Th., Stubos A.K., "Metal doped carbon foams for hydrogen Storage", (Invited) 2009 Gordon Research Conference on Hydrogen-Metal systems, 12-17 July 2009, Barga, Italy.
8. Nomikos S. and Kakizis N.K., "Printed Technologies for Intelligent Applications, [Market of Printed Electronics]", 6th International Conference on Imaging Science and Hardcopy, ICISH'2008, Zhanjiang, China, January 10-13, 2008. (Invited Lecture).
9. Kakizis N.K., and Tsigonias M.K., "Printing of high specific surface carbon adsorbing microspheres in multilayer assemblies of improved gas-barrier properties for environmental and packaging applications", 6th International Conference on Imaging Science and Hardcopy, ICISH'2008, Zhanjiang, China, January 10-13, 2008. (Invited Lecture).
10. Steriotis Th., "Advanced Materials for Hydrogen Storage" Summer School 2008, 7-18 July 2008, NCSR "Demokritos", Athens, Greece
11. Στεφανόπουλος Κ.Λ. "Εκπαιδευτικές Δραστηριότητες του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος", Φεστιβάλ Επιστήμης και Τεχνολογίας, Ζάππειο Μέγαρο, 27/11 – 3/12 2008.
12. Σειρά προσκεκλημένων ομιλιών στα πλαίσια κλαδικών ημερίδων πληροφόρησης και δικτύωσης της ΕΕ, όπως επίσης και στα πλαίσια των εθνικών ημερίδων ενημέρωσης και πληροφόρησης οι οποίες διοργανώθηκαν, συν-διοργανώθηκαν ή στις οποίες προσκλήθηκε η ομάδα του Εθνικού Σημείου Επαφής του Προγράμματος "Περιβάλλον & κλιματική Αλλαγή". (Βλέπε παρακάτω τον επιμέρους απολογισμό).

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Διδακτορικά

Σέργιος Παπαγεωργίου, «Ρόφηση βαρέων μεταλλών από απόβλητα ύδατα με μεταβολίτες θαλασσίου φύκους», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σεπτέμβριος 2008

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. EE 1195 – INSIDE_PORES NMP3-CT-2004-500895, "In-Situ Study and Development of Processes Involving Nano-Porous Solids", Network of Excellence in nanotechnology FP6, Priority 3 – NMP, Thematic priority 3.4.1.1. Partners to NCSR "D": Centre Nationale de la Recherche Scientifique (France), Imperial College (United Kingdom), University of Leipzig (Germany), University of Antwerp (Belgium), University of Stuttgart (Germany), Institute of Energy and Technology (Norway), TuDelft (The Netherlands), University of Alicante (Spain), Istituto di Chimica dei Materiali (Italy), Centre for Research and Technology Hellas (Greece), University of Hannover (Germany), SINTEF(Norway),TNO (The Netherlands). Total Budget: 6.800.000 €, NCSR "D" Budget: 1.844834 €. (October 2004- October 2008).
2. EE 1399 - HYCONES NMP3-CT-2006-032970, "Hydrogen Storage in Carbon Cones", Partners to NCSR "D": Institute for Energy Technology (NO), The University of Nottingham (UK), Institute of Nuclear Physics, Polish Academy of Sciences (PL), Scatec AS (NO) Total Budget 2.564.000 €, NCSR"D" Budget: 577.000 € (November 2006-September 2009).
3. EE 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-July 2008).
4. 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).
 5. 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).
 6. Ανάπτυξη Πρωτότυπων Συστημάτων Αφαλάτωσης και Επεξεργασίας Υγρών Αποβλήτων με Χρήση Κοίλων Μεμβρανών Διπλής Στοιβάδας (ΑΦΕΠ), (Κωδ ΓΓΕΤ: ΑΤΤ_68), Προϋπολογισμός ΕΚΕΦΕ «Δ»: 141.500 (Δ.Δ 124.250), Οκτώβριος 2006-Μάιος 2008.
 7. G.N. Karanikolos, ENTEP 04 - Ένταξη στο ελληνικό σύστημα Ε&Τ ερευνητών από το εξωτερικό, Γ' κοινοτικό πλαίσιο στήριξης – επιχειρησιακό πρόγραμμα “Ανταγωνιστικότητα, ΓΓΕΤ, “Σύνθεση Μεμβρανών Ναυοπορώδων Μοριακών Ηθμών μέσω Βελτιστοποίησης των Μικροδομών τους”, Χρηματοδότηση: 78000€, Οκτώβριος 2006- Οκτώβριος 2008
 8. “Hydrogen Storage in Carbon Cones” (HYCONES), FP6-NMP-STREP (EU), 340.000 €, Συντονιστής: Θ. Στεριώτης, 2006-2009.
 9. “Ανάπτυξη και Αποτίμηση Οργανωμένων Πορώδων Υλικών για Αέριους Διαχωρισμούς Ολεφινών- Παραφινών”, ΚΟΙΝΑ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΛΛΑΔΑ-ΠΟΛΩΝΙΑ Συντονιστής: Θ. Στεριώτης, 11.740 €, 2006-2008.
 10. “Environment NCPs cooperating to improve their effectiveness”, (ENV-NCP-Together-21249), Coordination Support Action, N. Kakizis, Partners to NCSR“D” the Network of the 36 National Contact Point Organisations in Europe, Asia and N. Africa, Budget: 2997000€, NCSR“D” budget: 73.345€, 2008-2013.
 11. 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-October 2008).
 12. 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-November 2008).

Ερευνητική Υποδομή

Ποροσίμετρο Αζώτου με αναβάθμιση Κρυπτού - Quantachrome
 Ποροσίμετρο Υδραργύρου - Quantachrome
 Συσκευή διαπερατότητας χαμηλής πίεσης
 Συσκευές (2) διαπερατότητας αερίων υψηλής πίεσης έως 70 bar
 Συστήματα (2) υψηλής πίεσης εκλεκτικότητας αερίων
 Σύστημα εκλεκτικότητας αερίων χαμηλής πίεσης
 Αέριοι Χρωματογράφοι 3 με αυτόματη δειγματοληψία
 Αέριος Χρωματογράφος - Φασματογράφος μάζας - Pfeiffer
 Σύστημα δυναμικής προσρόφησης αερίων
 Υβριδικό σύστημα κλίνης –μεμβράνης για την απομάκρυνση πτητικών οργανικών ουσιών
 Αυτόματη συσκευή σταθμικής ανάλυσης ρόφησης υψηλής πίεσης- HIDEN IGA
 Σταθμικό σύστημα μαγνητικής σύζευξης (2) - Rubotherm
 Σταθμικές συσκευές ανάλυσης ρόφησης (3) – CI balances

Συσκευή παρασκευής υμενίων Langmuir-Blodgett
Αντιδραστήρας χημικής εναπόθεσης (Chemical Vapor Deposition reactor)
Μονάδα μεταβλητής πρόσπτωσης υπέρυθρης ακτινοβολίας
Προηγμένο σύστημα απεικόνισης με σύστημα Video για τη μελέτη φαινομένων ροής
Εκτεταμένη υπολογιστική/δικτυακή υποδομή
Μικροζυγοί (2) κρυστάλλου Χαλαζία
Συστήματα υψηλού κενού
Ογκομετρική συσκευή προσρόφησης αερίων - VTI
Αυτόματη συσκευή μέτρησης διαπερατότητας οξυγόνου σε πολυμερικά υμένα – Dansensor PBI
Μικροσκόπιο ατομικών δυνάμεων - Veeco Innova
Φασματοφωτόμετρο υπέρυθρου - Nicolet 6700
Κελί υψηλών πιέσεων για Φασματοφωτόμετρο υπέρυθρου
Συσκευή παραγωγής υπερκαθαρού νερού
Ιοντικός χρωματογράφος - Dionex
Υγρός Χρωματογράφος - Dionex
Σύστημα μέτρησης προσρόφησης από υγρή φάση
Θερμιδόμετρο Calvet - Setaram
Θερμική ανάλυση - Setaram
Σύστημα χρωματογραφίας μηδενικού μήκους Zero length Chromatography
Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο Σάρωσης (FE-SEM) Jeol –JSM-7401F
AFM –VeeCo, diInnova
Ογκομετρικό σύστημα ρόφησης υδρογόνου υψηλών πιέσεων(VTI,HPVA 100)

Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό Συνεργασίες

1. Prof. Michael Tsapatsis, Department of Chemical Engineering and Materials Science, University of Minnesota, Minneapolis, ΗΠΑ. Δευτεροταγής Ανάπτυξη Πορωδών Υμενίων και Μεμβρανών.
2. Prof. Avelino Corma, Instituto de Tecnologia Quimica (CSIC-UPV), Universidad Politecnica de Valencia, Ισπανία. Καταλυτική Ανάπτυξη Νανοσωληνών Άνθρακα στους Πόρους Μοριακών Ηθμών.
3. Prof. T.J. Mountziaris, Department of Chemical Engineering and UMass NanoMedicine Institute, University of Massachusetts, ΗΠΑ. Ανάπτυξη Νανοσωματιδίων σε Περιοριστικό Περιβάλλον.
4. Prof. P. Alexandridis, Department of Chemical and Biological Engineering, University at Buffalo, The State University of New York, ΗΠΑ. Αμφιφιλικά Συστήματα Συμπολυμερών.

Άλλες Δραστηριότητες

Νικόλαος Κανελλόπουλος

1. Συντονιστής consortium τριών Ευρωπαϊκών Networks of Excellence του FP6 (INSIDE-PORES, NANOFUNPOLY and NANOMEMPRO) 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 πάκου νανοτεχνολογίας στην Ρουμανία.
3. Advisor for the National NMP Committee
4. Υπεύθυνος της ΕΤΕΠ Νανοτεχνολογίας

Θ.Στεριώτης

Ο Δρ. Θεόδωρος Στεριώτης κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Πρόεδρος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Microporous and Mesoporous Materials, Langmuir, Journal of Physical Chemistry B, Carbon, Journal of Applied Surface Science, Journal of Membrane Science, AIChE Journal

3. Προσκεκλημένος Αξιολογητής: Ευρωπαϊκή Ένωση (FP7-NMP), Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας Κύπρου
4. Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής BENSC, HMI, Berlin, Germany
5. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Α. Γκότζια (Πανεπιστήμιο Κρήτης - Χημικό Τμήμα)
6. Αναπληρωτής Συντονιστής του IP NESSHY (Novel Efficient Solid Storage for Hydrogen), FP7, ENERGY
7. Project Leader/Expert στο ΔΙΕΘΝΗ ΟΡΓΑΝΙΣΜΟ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ (IEA-International Energy Agency) για τον τομέα της Αποθήκευσης Υδρογόνου (Task 22)
8. Εθνικό Σημείο Επαφής του FP7 για την Θεματική Προτεραιότητα 6 «Περιβάλλον και Κλιματική Αλλαγή»

Φ.Κατσαρός

Ο Δρ. Κατσαρός Φώτης κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

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

Κωνσταντίνος Στεφανόπουλος

Υπεύθυνος Εκπαίδευσης Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και μέλος του Συμβουλίου Εκπαίδευσης του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».

Γ.Ρωμανός

Ο Δρ. Ρωμανός Γεώργιος κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Κριτής: Microporous Mesoporous Materials, Journal of Hazardous Materials, Journal of Porous Materials
2. Μέλος της Οργανωτικής και επιστημονικής Επιτροπής του διεθνούς συνεδρίου Nanoporous Solids for Energy and the Environment – NAPEN-2008, Chania, Greece, Oct. 11-15, 2008

Ν. Κακιζής

Ο Δρ. Κακιζής Νικόλαος κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Υπεύθυνος του Εθνικού Σημείου Επαφής της ΕΕ στην Ελλάδα στα πλαίσια του Προγράμματος «Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή».
2. Προσκεκλημένος Αξιολογητής: Ευρωπαϊκή Ένωση (FP7 – ICT, NMP).
3. Ειδικός Αξιολογητής έργων του Ευρωπαϊκού Οργανισμού EuropeAid και του European Development Fund.
4. Κριτής επιχειρηματικών σχεδίων και καινοτομίας του Ελληνικού Αναπτυξιακού Νόμου.
5. Μέλος της Οργανωτικής και επιστημονικής Επιτροπής του διεθνούς συνεδρίου Nanoporous Solids for Energy and the Environment – NAPEN-2008, Chania, Greece, Oct. 11-15, 2008.
6. Μέλος της Οργανωτικής και επιστημονικής Επιτροπής του 1^{ου} Πανελληνίου Εργαστηρίου (WorkShop) «Έξυπνη Συσκευασία και Εκτυπωμένα Ηλεκτρονικά», 28-29 Νοεμβρίου, Αθήνα, 2008.
7. Κριτής: Microporous Mesoporous Materials, Intl. J. of Sci. Management, J. of Project Management.
8. Μέλος της επιτροπής ΕΤΕΠ Νανοτεχνολογίας και βασικός συγγραφέας της αντίστοιχης μελέτης.

Γ.Καρανικολός

Ο Δρ. Καρανικολός Γιώργος κατά το έτος 2008 διατέλεσε

1. Κριτής: Microporous Mesoporous Materials, Journal of Hazardous Materials.
2. Μέλος της οργανωτικής επιτροπής του συνεδρίου NAPEN-2008, "1st International Workshop of Nanoporous Materials in Energy and Environment", Chania, Greece, Oct. 11-15, 2008

Εθνικό Σημείο Επαφής του προγράμματος «Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή», 7^ο ΠΠ ΕΕ, Πρόγραμμα Συνεργασία.

Το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" διατελεί από το τέλος του 2006 Εθνικό Σημείο Επαφής (ΕΣΕ) της Ευρωπαϊκής Ένωσης στην Ελλάδα του Προγράμματος "Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή", (Πρόγραμμα Συνεργασία, 7^ο Πλαίσιο Πρόγραμμα για την Έρευνα & την Τεχνολογική Ανάπτυξη της Ευρωπαϊκής Ένωσης). Η ανάληψη του ΕΣΕ έλαβε χώρα μέσω ανταγωνιστικής διαδικασίας

υποβολής προτάσεων και στελεχώνεται από μέλη του επιστημονικού προσωπικού του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, Εργαστήριο Μεμβρανών & Μικροπορωδών Υλικών για Περιβαλλοντικούς Διαχωρισμούς. Στα περίπου δύο χρόνια λειτουργίας του το ΕΣΕ έχει προσφέρει τις υπηρεσίες του σε πάνω από 50 Ελληνικούς Οργανισμούς (Δημόσιους και Ιδιωτικούς), ενώ ένας αριθμός της τάξεως των 215+ ερευνητικών προτάσεων, οι οποίες συμπεριλάμβαναν τουλάχιστον 1 Ελληνικό φορέα, κατατέθηκαν στα πλαίσια των προσκλήσεων του Προγράμματος "Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή". Παράλληλα έχει προβεί στην παροχή υψηλού επιπέδου συμβουλευτικών και διαμεσολαβητικών υπηρεσιών προς την Ελληνική ερευνητική κοινότητα αναφορικά με την συγκρότηση ερευνητικών κοινοπραξιών και την ανάπτυξη, εξέλιξη, υποβολή και υλοποίηση ερευνητικών έργων και έργων ανάπτυξης και διερεύνησης τεχνολογίας και καινοτομιών.

Με σκοπό την πληρέστερη κάλυψη των υφιστάμενων αναγκών και την προώθηση της συμμετοχής Ελληνικών φορέων στα πλαίσια του Προγράμματος Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή, το ΕΣΕ έχει διοργανώσει ή συνδιοργανώσει 9 ημερίδες Πληροφόρησης και Ενημέρωσης στην Ελλάδα ενώ έχει συμμετάσχει σε 4 συνεδριάσεις του δικτύου των ΕΣΕ σε επίπεδο ΕΕ. Παράλληλα, έχει προσκληθεί και συμμετάσχει στις συνεδριάσεις των Τεχνολογικών Πλατφόρμων "Water Supply & Sanitation-WSSTP" και "Hydrogen and Fuel Cell Technology Platform-HFP" και να παρουσιάσει με την μορφή σύντομων ομιλιών τεχνολογικές και επιστημονικές εξελίξεις γενικότερου ενδιαφέροντος. Παρουσιάσεις δραστηριοτήτων και επιστημονικών προτάσεων ιδεών, τόσο εκ μέρους διαφόρων ερευνητικών ομάδων του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» όσο και άλλων ερευνητικών και ακαδημαϊκών φορέων έχουν λάβει χώρα και στα πλαίσια των εξαμηνιαίων ημερίδων ενημέρωσης και πληροφόρησης της ΕΕ, EU Infodays on Environmental Technologies.

Σε εθνικό επίπεδο, το ΕΣΕ έχει διοργανώσει περί τις 75 συνεδρίες εργασίας με ενδιαφερόμενους φορείς για την υποστήριξη και προετοιμασία ερευνητικών προτάσεων. Παράλληλα, έχει καταβληθεί προσπάθεια κάλυψης των αναγκών της Ελληνικής Περιφέρειας μέσω προγράμματος επισκέψεων και διοργάνωσης ημερίδων πληροφόρησης στις μεγαλύτερες Ελληνικές πόλεις.

Το ΕΣΕ "Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή" πέραν από την κάλυψη των συμβατικών του υποχρεώσεων απέναντι στην ΓΓΕΤ και το Υπ. Ανάπτυξης, έχει ως βασικό στόχο λειτουργίας την ενεργή υποστήριξη του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και την ανάδειξή του σε ενεργό πόλο έρευνας και καινοτομίας στον Ελληνικό και Ευρωπαϊκό χώρο.

Το ΕΣΕ "Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή" έχει υπεύθυνο τον Δρα. Κακίζή Νικόλαο σε συνεργασία με τον Δρα. Στεριώτη Θεόδωρο.

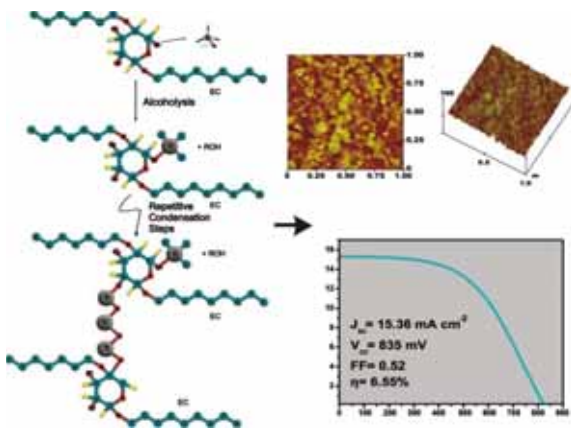
2.2 ΦΩΤΟΟΞΕΙΔΟΑΝΑΓΩΓΙΚΗ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΚΑΙ ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΤΗΣ ΗΛΙΑΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ – ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙΝΟΤΟΜΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Αντικείμενο Έργου

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

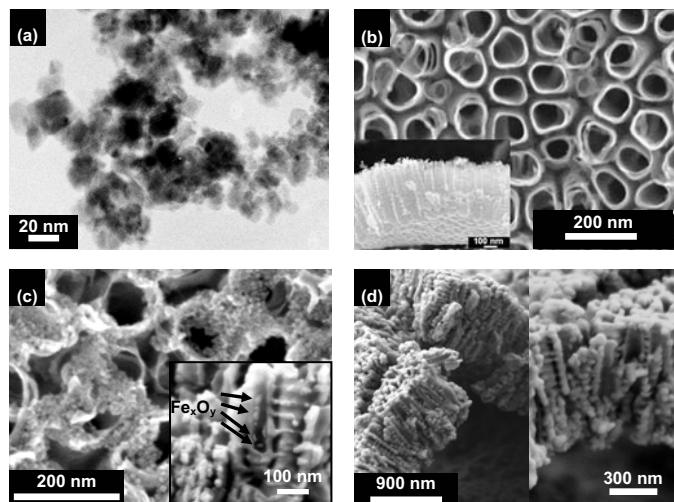
1. Φωτοευαίσθητοποιημένες Ηλιακές Κυψελίδες (DSSCs)

Μελετάται η ευαίσθητοποίηση νανοδομημένων ημιαγωγών (κυρίως TiO_2 , σε μορφή σφαιρικών σωματιδίων) για αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική. Με χρήση μεθόδων κολλοειδούς χημείας (sol-gel), όπου ελέγχονται κυρίως τα στάδια συμπύκνωσης και υδρόλυσης του πρόδρομου διαλύματος, ερευνάται η δυνατότητα ανάπτυξης νανοδομημένων υλικών (εναιωρήματα ή πάστες) με βέλτιστα μορφολογικά χαρακτηριστικά (κυρίως μεγάλο ανάπτυγμα επιφάνειας). Η περαιτέρω έρευνα στοχεύει στην κατασκευή σταθερών φωτοηλεκτροδίων, χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές εναπόθεσης (screen-printing, doctor-blade, spin-coating, dip-coating) και βελτιστοποιώντας τις σχετικές παραμέτρους των παραπάνω διεργασιών. Παράλληλα διερευνάται η δυνατότητα ανάπτυξης αυτοοργανωμένων νανοσωληνών τιτανίας με ανοδική οξειδωση του μετάλλου (Ti) σε διαβρωτικό περιβάλλον, υδατικό και οργανικό. Γίνεται επίσης συντονισμένη προσπάθεια σύνθεσης νέων χρωστικών (σύμπλοκες ενώσεις μετάλλων μεταπτώσεως), αναπτύσσονται σύνθετοι οξειδοαναγωγικοί πολυμερικοί ηλεκτρολύτες και μελετώνται αναλυτικά οι οπτικές, φωτοφυσικές και ηλεκτροχημικές ιδιότητες όλων αυτών των συστατικών που αποτελούν μια φωτοηλεκτροχημική κυψελίδα. Επιπρόσθετα, η έρευνα περνά άμεσα στην πρακτική εφαρμογή με την ανάπτυξη και βελτιστοποίηση πρότυπων ηλιακών κυψελίδων που παρουσιάζουν ικανοποιητικές αποδόσεις, σταθερότητα και χρόνο ζωής.



Small, 2008, 4, 770-776

Sol-gel σύνθεση μορφοκλασματικής νανοτιτανίας και I-V χαρακτηριστική αντίστοιχης ηλιακής κυψελίδας (DSSC)



Chemistry of Materials, in press

Φωτοκαταλυτική αποικοδόμηση ρύπων με TiO_2

2. Φωτοκατάλυση

Η έρευνα εστιάζεται στη μελέτη φωτοεπαγόμενων (ετερογενών) αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στη διεπιφάνεια ημιαγωγού/υγρού, /στερεού ή /αέρα. Γίνεται ανάπτυξη καινοτόμων νανοδομημένων φωτοκαταλυτών τιτανίας (TiO_2) και επιδιώκεται η εφαρμογή τους στην αποκατάσταση-καθαρισμό του περιβάλλοντος και την προστασία της υγείας. Ειδικότερα η ερευνητική προσπάθεια στοχεύει στη βελτίωση της απόδοσης της φωτοκαταλυτικής διεργασίας μέσω: α) ελέγχου των ιδιοτήτων των φωτοκαταλυτικών υλικών σε επίπεδο νανοδιαστάσεων, β) αύξησης της ειδικής επιφάνειας του φωτοκαταλύτη, γ) αποδοτικού διαχωρισμού των φωτοεπαγόμενων φορέων (ηλεκτρονίων και οπών), δ) εισαγωγής προσμίξεων (doping) των φωτοκαταλυτών με μετατόπιση της απορρόφησης στο ορατό, ε) αρμονικής ρύθμισης των φωτοκαταλυτικών και φωτο-υπερυδρόφιλων ιδιοτήτων σε πολυδυναμικές νανοδομημένες επιφάνειες. Στα πλαίσια αυτά γίνεται συντονισμένη προσπάθεια ανάπτυξης αντιρρυπαντικής τεχνολογίας και εφαρμογής της στην καταστροφή ρύπων (ανόργανων και οργανικών), στην αποικοδόμηση βακτηρίων, μυκήτων, και ιών αλλά και βιοϊμενίων. Ιδιαίτερη έμφαση δίδεται στην μελέτη προχωρημένων μεθόδων οξειδωσης με παράλληλη εφαρμογή της νανοτεχνολογίας για την επεξεργασία του νερού, η οποία στηρίζεται στην παρασκευή και χρήση νανοδομημένων υλικών τιτανίας καθώς και νανοσύνθετων μεμβρανών για το φωτοκαταλυτικό καθαρισμό επικίνδυνων υδατικών ρύπων με ακτινοβολία στο ορατό. Παράλληλα μελετάται εντατικά η αντικαρκινική δράση του διοξειδίου του τιτανίου σε νεοπλασματικά κύτταρα και οι αντιπηκτικές/αντιθρομβωτικές/αντιφλεγμονώδεις ιδιότητες νέων φωτοκαταλυτικών υλικών βασισμένων στη νανοδομημένη τιτάνια.

Προσωπικό

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

Δρ. Αθανάσιος Γ. Κόντος, Ερευνητής Γ'

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Γεωργία Κόντη.

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δρ. Θωμάς Στεργιόπουλος (STREP), Δρ. Βλάσσης Λυκοδήμος (STREP).

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

Συνεργάτες σε Προγράμματα: Δημήτριος Τσούκλερης (STREP).

Εξωτερικοί συνεργάτες: Δρ. Αθανάσιος Φιλιππόπουλος, Λέκτορας, Χημικό Τμήμα, ΕΚΠΑ

Δημοσιεύσεις

1. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Tsoukleris, D.S.; Bernard, M.; Spyrellis, N.; Falaras, P. "Nanostructured TiO_2 films for DSSCS prepared by combining doctor blade and sol gel techniques", *J. Mater. Process. Techn.* 2008, *196*, 243-248.
2. Kontos, A.G.; Stergiopoulos, T.; Tsiminis, G.; Raptis, Y.S.; Falaras, P. "In-situ micro- and macro- Raman investigation of the redox couple behavior in dsscs", *Inorg. Chim. Acta*, invited paper, 2008, *361*, 761-768.
3. Katsanaki, A.; Tsoukleris, D.S.; Falaras P; Karayianni, H.S. "Preparation and characterization of nanocrystalline Pt/TCG counter electrodes for dye-sensitized solar cells", *ASME J. Sol. Energy Engin.* 2008, *130*, 041008 (1-7).
4. Falaras, P.; Stergiopoulos, T.; Tsoukleris, D. "Enhanced efficiency in solid-state dye sensitized solar cells based on fractal nanostructured TiO_2 thin films prepared via sol-gel process in polymer matrix", *Small*, 2008, *4*, 770-776.
5. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Raptis Y.S.; Falaras P. "Nitrogen modified nanostructured titania: electronic, structural and visible-light photocatalytic Phase composition, Size, Orientation and Antenna Effects of Self-Assembled Anodized Titania Nanotube Arrays: A Polarized micro-Raman Investigation", *The Journal of Physical Chemistry C*, 2008, *112*, 12687-12696.

6. Ibhaddon, A.O.; Greenway, G.M.; Yue, Y.; Falaras, P.; Tsoukleris, D. "The photocatalytic activity and kinetics of the degradation of an properties" *Phys. Stat. Sol. (RRL)*, 2008, 2, 83-85.
7. Ibhaddon, A.O.; Greenway, G.M.; Yue, Y.; Falaras P.; Tsoukleris, D. "The photocatalytic activity of TiO₂ foam and surface modified binary oxide titania nanoparticles", *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 2008, 197, 321-328.
8. Stergiopoulos, T.; Ghicov, A.; Likodimos, V.; Tsoukleris, D.; Kunze, J.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Dye-sensitized solar cells based on thick highly ordered TiO₂ nanotubes produced by controlled anodic oxidation in non aqueous electrolytic media" *Nanotechnology*, 2008, 19, 235602 (7pp). *Highly accessed paper, among 10% of articles across all IOP journals. Selected for Nanotechweb (IOP) Journal Highlights Articles: Photoinduced applications of titania nanotubes: Self-assembled anodized titania nanotubes for light-induced environmental cleaning, health protection and solar energy conversion.* <http://nanotechweb.org/cws/article/lab/37280>.
9. Kyrkou, A.; Kontos, A.I.; Papavasileiou G.; Falaras P. "Highly Photoactive Monodisperse Titania Hollow Nanospheres", *J. Adv. Oxid. Technol.* 2008, 11, 402-410.
10. Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P. "anionic azo-dye in a UV irradiated porous titania foam", *Applied Catalysis B: Environmental*, 2008, 84, 351-355.
11. Stathopoulos, N.A.; Palilis L.C.; Vasilopoulou, M.; Botsialas, A.; Falaras, P.; Argitis P. "All-organic optocouplers based on polymer light-emitting diodes and photodetectors", *Phys. Stat. Sol. (a)*, 2008, 205, 2522–2525.
12. V.C. Stergiou, A.G. Kontos and Y.S. Raptis, "Anharmonic Effects and Faust-Henry coefficient of CdTe in the vicinity of the energy gap", *Phys. Rev. B*, 2008, 77, 235201.
13. Pandiyaraj, K.N.; Selvarajan, V.; Pavese, M.; Falaras, P.; Tsoukleris, D. "Investigation on surface properties of TiO₂ modified by DC glow discharge plasma", *Current Applied Physics*, (in press).
14. Kontos, A.G.; Kontos, A.I.; Tsoukleris, D.; V.Likodimos, V.; Kunze, J.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Photo-induced effects on self-organized TiO₂ nanotube arrays: Influence of surface morphology", *Nanotechnology*, (in press).
15. Kontos, A.I.; Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Tsoukleris, D.S; Falaras, P.; Rabias, I.; Papavassiliou, G.; Kim, D.; Kunze, J.; Schmuki, P. "Self-Organized Anodic TiO₂ Nanotube Arrays Functionalized by Iron Oxide Nanoparticles", *Chemistry of Materials*, accepted.
16. Pelaez, M.; de la Cruz, A.A.; Stathatos, E.; Falaras P.; Dionysiou D.D.; "Visible Light-activated N-F-codoped TiO₂ Nanoparticles for the Photocatalytic Degradation of Microcystin-LR in Water", *Catalysis Today*, accepted.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Falaras, P.; Stergiopoulos, T. "Advanced Materials with Tailored Properties and Innovative Functionalities for Nano Dye-Sensitized Solar Cells (NDSSCs)", International Symposium TOWARDS ORGANIC PHOTOVOLTAICS in the field of Organic and Dye Sensitized Solar Cells, Linz, Austria, February 6-8 2008, Abstract, p.101.
2. Καντώνης, Γ.; Στεργιόπουλος, Θ.; Φαλάρας, Π. "Βελτίωση της απόδοσης μετατροπής μεσοπορωδών υμενίων ναοκρυσταλλικής τιτανίας με αύξηση της τελικής θερμοκρασίας κατεργασίας". 1^ο Συνέδριο Μεταπτυχιακών Φοιτητών Χημείας Ελλάδας - Κύπρου, Πόλις Χρυσοχούς 3 – 7 Ιουλίου 2008, Κύπρος, Πρακτικά, σελ. 43.

3. Pefkianakis, E.K.; Tzanetos, N.P.; Stergiopoulos, T.; Falaras P.; and Kallitsis, J.K. "Synthesis and Characterization of Polymeric [Ru²⁺] Complexes and their Application as Dyes in Solar Cells" 1st International Symposium on Flexible Organic Electronics (IS-FOE), 9-11 July 2008, Halkidiki, Greece.
4. Katsiotis M.; Karatasios I.; Kontos A.I.; Likodimos V.; Papavasiliou G.; Falaras P.; Kilikoglou V.; "Study of Lime - TiO₂ Self-cleaning Repair Mortars", Historical Mortars Conference 2008-HMC08: Characterization, Diagnosis, Conservation, Repair and Compatibility, 24-26 September 2008, Lisbon, Portugal.
5. Pefkianakis, E.K.; Tzanetos, N.P.; Stergiopoulos, T.; Falaras P.; and Kallitsis, J.K. "Synthesis and characterization of polymeric [Ru²⁺] complexes and their application as dyes in solar cells", 7th Hellenic Polymer Conference, September 28- October 1 2008, Ioannina, Greece.
6. Τοπαλίδης, Α.Ν.; Πετράκης, Δ.Ε.; Λουκατζίκου, Λ.Α.; Φαλάρας, Π.; Πομώνης, Φ.Ι. "Φωτοκαταλυτική δραστηριότητα της περοβσκιτικής σειράς 0.5%Pt/Sr_{1-x}La_xTiO_{3±δ} (x=0.0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9, 1.0) στην αποικοδόμηση του αζωχρώματος methyl orange", 10^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Κατάλυσης, Μέτσοβο, 3 - 4 Οκτωβρίου 2008, Α16.
7. Κοντός, Ι.; Λυκοδήμος, Β.; Τσούκλερης, Δ.; Στεργιόπουλος, Θ.; Φαλάρας, Π.; Ράμπιας, Ι.; Παπαβασιλείου, Γ.; Kim, D.; Kunze J.; Schmuki, P. "Νανοσύνθετα υλικά ανοδιωμένων νανοσωλήνων τιτανίας με μαγνητικά νανοσωματίδια οξειδίων σιδήρου", 10^ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Κατάλυσης, Μέτσοβο, 3 - 4 Οκτωβρίου 2008, Α37.
8. Konti, G.H.; Chatzivasiloglou, E.; Lykodimos, V., Kantonis, G.; Kontos, A.G.; Philippopoulos, A.I.; Falaras, P. "Synthesis and Characterization of Ruthenium (II) Complexes for Dye Sensitized Solar Cells", 5th European Meeting on SOLAR CHEMISTRY AND PHOTOCATALYSIS: ENVIRONMENTAL APPLICATIONS - SPEA 5, 4-8 October 2008, Sicilia, Italy, Book of Abstracts, PP 1.13.
9. Tsoukleris, D. S.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A. I.; Likodimos, V.; Kim, D.; Ghicov, A.; Kunze, J.; Schmuki, P.; Kompitsas, M.; Falaras, P. "Photocatalytic Activity of Self-organised Anodic TiO₂ Nanotubes Modified by Au Nanoparticles", 5th European Meeting on SOLAR CHEMISTRY AND PHOTOCATALYSIS: ENVIRONMENTAL APPLICATIONS - SPEA 5, 4-8 October 2008, Sicilia, Italy, Book of Abstracts, PP 3.56.

Διαλέξεις

1. Falaras, P. "Raman investigation on Ti-nanotubes", 4th meeting of STREP project entitled as Ti-Nanotubes, University of Nuremberg-Erlangen, Dept. of Material.Sci, Erlangen, Germany, 12 Feb. 2008.
2. Stergiopoulos, T. "DSSCs using TiO₂ nanotubes", 4th meeting of STREP project entitled as Ti-Nanotubes, University of Nuremberg-Erlangen, 12 Φεβρουαρίου 2008
3. Falaras, P. "Innovative titania nanomaterials for light induced applications, Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων.", 29 Μαρτίου 2008, Ελληνο-Ισπανική συνάντηση στα πλαίσια υλοποίησης του ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ926, προσκεκλημένη διάλεξη.
4. Stergiopoulos, T. "TiO₂ nanotubes-based DSSCs", MTA meeting of STREP project: Ti-Nanotubes, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7 Μαΐου 2008.
5. Likodimos, V. "Doping and surface modification of TiO₂ Nanotubes-Self-cleaning ability", MTA meeting of STREP project: Ti-Nanotubes, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7 Μαΐου 2008.
6. Φαλάρας, Π. «Ηλιακές κυψελίδες ευαισθητοποιημένων νανοδομημένων ημιαγωγών», Θερινό Σχολείο του ΕΚΕΦΕ Δ, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 9 Ιουλίου 2008.
7. Stergiopoulos, T. "DSSCs based on different TiO₂ nanotubes", 5th meeting of STREP project entitled as Ti-Nanotubes, University of Nuremberg-Erlangen, 20 Νοεμβρίου 2008.
8. Kontos, A.G. "Morphology modeling of TiO₂ nanotubes", 5th meeting of STREP project entitled as Ti-Nanotubes, University of Nuremberg-Erlangen, 20 Νοεμβρίου 2008.

Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

1. Φαλάρας, Π.; Κοντός, Α.Ι. "Τσιμεντοειδή ελαφροεπιχρίσματα και ασβεστοκονιάματα με φωτοεπαγόμενες ιδιότητες αντιρρύπανσης και αυτοκαθαρισμού", ΟΒΙ, Αριθμός αίτησης: 20080100568, Ημερομηνία κατάθεσης: 05 Σεπ. 2008

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

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

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

1. Σκανδάλη, Αικατερίνη «Φωτοκαταλυτική Αποικοδόμηση Αερίων Ρύπων με χρήση Νανοδομημένης Τιτανίας», Διπλωματική Εργασία, ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΥΛΙΚΩΝ, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ, παρουσίαση 26 Μαρτίου 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Molecular Engineering of Interfaces of Photonic Devices based on Mesoscopic Oxide layers", COST Action D35- From Molecules to Molecular Devices, 2005-2009.
2. "Ti-nanotubes", FP6-NMP-STREP, 300 Κ€, 2006-2009.
3. "Αντιμετώπιση παθολογικών καταστάσεων με συνδυαστική χρήση βιο-ιατρικών και νανοτεχνολογικών μεθόδων", ΕΡΓΟ-ΥΠΟΔΟΜΩΝ, ΜΕΤΡΟ 4.5 Κοινοπραξίες έρευνας και τεχνολογικής ανάπτυξης σε τομείς Εθνικής προτεραιότητας, Δράση 4.4.1 «Κοινοπραξίες έρευνας και τεχνολογικής ανάπτυξης σε τομείς Εθνικής προτεραιότητας», Πράξη «Υποδομές υποστήριξης της μακροπρόθεσμης βιωσιμότητας των έργων έρευνας, τεχνολογικής ανάπτυξης και επίδειξης» 2050-4/2, 300 Κ€, 2005-2008.
4. "Οργανικές Ηλιακές Κυψελίδες" Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 118, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Π. Φαλάρας, : 144 Κ€, 2005-2008.
5. "Ανάπτυξη σύνθετων νανοδομημένων υλικών τιτανίας. Ενσωμάτωση σε πρότυπα φωτοκαταλυτικά δομικά υλικά και εφαρμογή στην αποικοδόμηση υγρών και αερίων ρύπων", Πρόγραμμα ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 963, 51 Κ€, 2005-2008.
6. "Ανάπτυξη Αναλυτικών Τεχνικών Ολοκληρωμένου Ελέγχου και Προχωρημένων Οξειδωτικών Διεργασιών για την απομάκρυνση Οργανικών Τοξικών Ουσιών – Ενδοκρινικών Διαταρακτών από τα Φυσικά Νερά και τα Επεξεργασμένα Λύματα", ΠΕΝΕΔ 03ΕΔ 926, 2005-2008.
7. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
8. "Ανάπτυξη επιχειρησιακού συστήματος αποτύπωσης (χαρτογράφησης) των επιπέδων συγκέντρωσης αιρουμένων σωματιδίων και της εκτιμημένης έκθεσης πληθυσμού στην Αττική", ΠΕΠ Αττικής, 30 Κ€, 2006-2008.
9. "OrgaPVNet – Coordination Action towards stable and low cost organic solar cell technologies and their application", FP6-Energy-CA, 2006-2009.
10. "Clean Water", FP7-ENV-NMP-2008-2 STREP, 580 Κ€, 2008-2012, Coordination of the project.

Παροχή Υπηρεσιών

"Τεκμηρίωση-βελτιστοποίηση της μείωσης εκλυόμενων αερίων ρύπων σε κάδο κομποστοποίησης". Σύμβαση συνεργασίας για επιστημονική υποστήριξη της εταιρίας Γ.Α. Μουλάς, 5 Κ€.

Ερευνητική Υποδομή

Φασματομετρο micro-Raman, Φασματοφωτόμετρο υπεριώδους-ορατού (UV-Vis) με σφαίρα ολοκλήρωσης, Αυτοματοποιημένη διάταξη κυκλικής βολταμμετρίας και γραμμικής βολταμμετρίας σάρωσης Autolab με δυνατότητα πραγματοποίησης Φασματοσκοπίας ηλεκτροχημικής εμπέδησης (EIS), φωτορεύματος-φωτοτάσης (IMPS, IMVS) διαμορφωμένης έντασης της φωτεινής ακτινοβολίας, Διάταξη φωτοηλεκτροχημείας, Διάταξη εκτύπωσης με διάτρητες μήτρες (screen-printer), Διάταξη spin-coating, Φωτοκαταλυτικοί αντιδραστήρες, Διάταξη μέτρησης γωνίας επαφής, Ιξωδόμετρο, Αυτόκλειστο τιτανίου.

Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό

1. Φαλάρας Π.; Στεργιόπουλος Θ. Linz Institute for Organic Solar Cells, Johannes Kepler University, Linz, Austria, February 6th-8th, 2008.
2. Φαλάρας Π.; Στεργιόπουλος Θ. Εργαστήριο "Surface Science and Corrosion" του Τμήματος Materials Science and Engineering, University of Erlangen Γερμανία) στα πλαίσια του προγράμματος STREP: Ti-Nanotubes, 11/02/2008-13/02/2008.
3. Στεργιόπουλος Θ.; Κόντος Α.Γ. Εργαστήριο "Surface Science and Corrosion" του Τμήματος Materials Science and Engineering, University of Erlangen Γερμανία) στα πλαίσια του προγράμματος STREP: Ti-Nanotubes, 20/11/2008-21/11/2008.

Συνεργασίες

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

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος .
3. Μέλος του Επιστημονικού Συμβουλίου του Εθνικού Κέντρου Τεκμηρίωσης (ΕΣΕΚΤ).
4. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου της EBETAM A.E.
5. Μέλος του Management Committee της COST Action D35 "From Molecules to Molecular Devices"
6. Μέλος του Editorial Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Open Inorganic Chemistry Journal".
7. Μέλος του Editorial Board (Editorial Advisory Board) του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Open Crystallography Journal, Bentham Open".
8. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Advanced Functional Materials, Advanced Materials, Applied Catalysis B: Environmental, Catalysis Today, Chemosphere, Comptes Rendus Chimie, Environmental Science & Technology, International Journal of Photoenergy, Journal of Hazardous Materials, Journal of Materials Processing Technology, Journal of Physical Chemistry, Journal of Physics and Chemistry of Solids, Microelectronics Engineering, Nanotechnology, Photochemical Photobiological Sciences, Semiconductor Science and Technology, The open Crystallography Journal, The Open Inorganic Chemistry Journal.
9. Αξιολογητής προτάσεων της National Research Foundation of Singapore CLEAN ENERGY RESEARCH PROGRAMME (CERP) Clean Energy Office Secretariat
10. Αξιολογητής προτάσεων της National Research Foundation of Singapore ENVIRONMENT & WATER RESEARCH PROGRAMME Environment & Water Industry Development Council (EWI)
11. Αξιολογητής-σύμβουλος για τη Γενική Γραμματεία Καταναλωτή.
12. Μέλος Συνεργαζόμενου Εκπαιδευτικού Προσωπικού (Σ.Ε.Π.) του Ελληνικού Ανοικτού Πανεπιστημίου (ΕΑΠ): Πρόγραμμα Σπουδών [ΦΥΕ] Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες – Θεματική Ενότητα [ΦΥΕ 22] Φυσικοχημεία.

13. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Α.Ι. Κοντού (ΕΜΠ), Ε. Ρόζη (ΕΜΠ), Ν. Αλεξάκη (ΕΜΠ), Γ. Καντώνη (ΕΜΠ), Α. Κατσανάκη (ΕΜΠ).
14. Εισηγητής και μέλος εξεταστικής επιτροπής στη Διδακτορική Διατριβή της Χριστοθέας Αττιπά, Τμήμα Χημείας Παν/μίου Κύπρου, Μάιος 2008, Λευκωσία, Κύπρος.
15. Μέλος επταμελούς εξεταστικής επιτροπής της διδακτορικής διατριβής Αυγερινού Τοπαλίδη, Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων, Νοέμβριος 2008, Ιωάννινα.
16. Μέλος της επιτροπής επιλογής υποτρόφων του Κοινοφελούς Ιδρύματος Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης.
17. Αντιπρόεδρος της Επιτροπής για θέματα Ρύπανσης-Προστασίας Περιβάλλοντος-Κοινόχρηστων Χώρων του Δήμου Αθηναίων.

Ο Δρ. Α.Γ. Κόντος κατά το έτος 2008:

1. Διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Journal of Physics and Chemistry of Solids, Journal of Chemical Technology & Biotechnology, Solid State Communications, Journal of Physical Chemistry B.

Ο Δρ. Θ. Στεργιόπουλος κατά το έτος 2008:

1. Διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Chemistry A-European Journal, Chem. Phys. Chem.
2. Έλαβε Υποτροφία από το Ι.Κ.Υ. για Μεταδιδακτορική έρευνα στις Επιστήμες Περιβάλλοντος (Συνολική χρηματοδότηση: 7200 ευρώ)

Ο Δρ. Β. Λυκοδήμος κατά το έτος 2008:

1. Διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Physical Review Letters, Physical Review B, Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Alloys and Compounds, Materials Chemistry and Physics.

ΔΙΑΚΡΙΣΕΙΣ-ΒΡΑΒΕΙΑ

The paper of "Silver-modified titanium dioxide thin films for efficient photodegradation of methyl orange", Applied Catalysis B: Environmental, 42 (2003) 187-201, as been recognized as a Best Paper 2005-2008. It is among the "Top-50 most cited articles" published in Elsevier Catalysis journals 2003-2007 and the authors awarded to Most Cited Author 2003-2007. The award was celebrated during the 14th International Congress on Catalysis (ICC 2008) in Seoul, Korea.

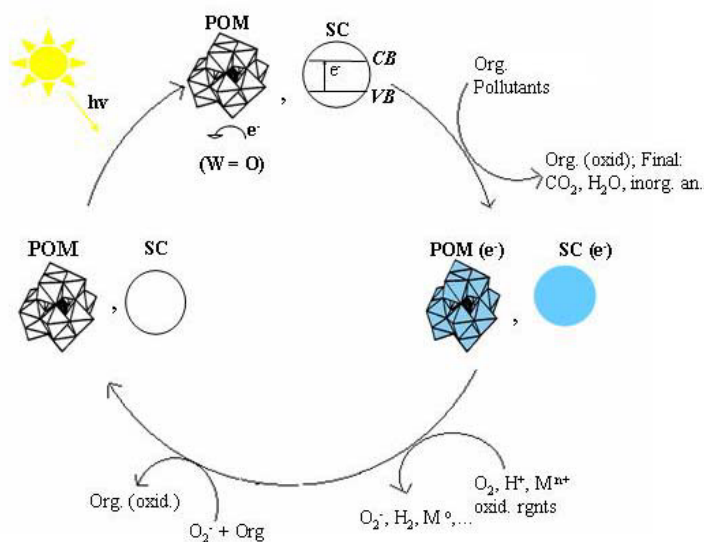
2.3 ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ-ΦΩΤΟΚΑΤΑΛΥΤΙΚΕΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ (ΗΛΙΑΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑ - ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ)

Αντικείμενο Έργου

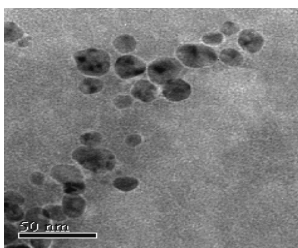
Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές αντιδράσεις με πολυοξειδία μετάλλων στοιχείων μεταπτώσεως, κυρίως TiO_2 , και πολυοξομεταλλικές ενώσεις (POM) κυρίως Mo και W με σκοπό την αξιοποίηση της φωτεινής (ηλιακής) ενέργειας, την απορρύπανση του περιβάλλοντος και την ανάπτυξη χημικών διεργασιών φιλικών προς το περιβάλλον.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

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

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



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



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



Προσωπικό

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

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας: Δρ. Θεόδωρος Τριάντης

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

Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα: Σταματία Αντωνάρακη (άμισθη), Πηγή Κόρμαλη (άμισθη), Ιωάννης Δημητρακόπουλος (άμισθος), Σοφία Αναγνώστου (άμισθη), Στέλλα Τριανταφυλλάκη (Συνεργασία με Παν. Αθηνών, ΠΕΝΕΔ 2005), Σεβαστή Ζερβού(άμισθη), Μαρία Παπαδημητρίου (άμισθη)

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

Δημοσιεύσεις

1. Tsimeli, K.; Triantis, T.M.; Dimotikali, D.; Hiskia, A. "Development of a rapid and sensitive method for the simultaneous determination of 1,2-Dibromoethane, 1,4-Dichlorobenzene and Naphthalene residues in honey using HS-SPME coupled with GC-MS." *Anal. Chim. Acta*, 2008, *617*, 64-71.
2. T. M. Triantis, A. Troupis, I. Chassiotou, E. Papaconstantinou and A. Hiskia, "Photochromic and Photocatalytic Inorganic-Organic Multilayer Films based on Polyoxometalates and Poly(ethylenimine)" *J. Adv. Oxid. Technol.*, 2008, *11*, 231-237.
3. A. Troupis, T. Triantis, A. Hiskia and E. Papaconstantinou, "Rate-Redox-Controlled Size-Selective Synthesis of Silver Nanoparticles Using Polyoxometalates" *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2008, 5579-5586.
4. T.M. Triantis, K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, D. Dimotikali, J. Hrbáč, R. Zbořil, "Sensitized chemiluminescence of luminol catalyzed by colloidal dispersions of nanometer-sized ferric oxides", *Chem. Eng. J.*, 2008, *144*, 483-488.
5. A. Troupis, T.M. Triantis, E. Gkika, A. Hiskia and E. Papaconstantinou, "Photocatalytic Reductive-Oxidative Degradation of Acid Orange 7 by Polyoxometalates" *Appl. Catal. B-Environ.*, (in press).
6. T. Triantis, A. Troupis, E. Gkika, G. Alexakos, N. Boukos, E. Papaconstantinou, A. Hiskia, "Photocatalytic Synthesis of Se Nanoparticles using Polyoxometalates", *Catal. Today*, (in press).
7. M. Pelaez, M.G. Antoniou, D.D. Dionysiou, A.A. de la Cruz, K. Tsimeli, T. Triantis, A. Hiskia, T. Kaloudis, C. Williams, M. Aubeil, A. Chapman, A. Foss, U. Khan, K.E. O'Shea, J. Westrick, "Sources and Occurrence of Cyanotoxins Worldwide" in D.F. Kassinou, K. Bester, K. Kümmerer (Eds), "Xenobiotics in the Urban Water Cycle", Springer, in press.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. A. Χισκιά, Θ. Τριάντης, Η. Παπακωνσταντίνου, "Φωτοκατάλυση με πολυοξομεταλλικές ενώσεις. Μια νέα προχωρημένη οξειδωτική διεργασία για την αποικοδόμηση φυτοφαρμάκων σε υδατικά συστήματα", 3^ο Περιβαλλοντικό Συνέδριο Μακεδονίας, Θεσσαλονίκη, 14-17 Μαρτίου 2008.
2. T. Kaloudis, N. Thanasoulis, L. Kousouris, E. Lytras, P. Tzoumerkis, T. Triantis, K. Tsimeli, A. Hiskia, "Laboratory Analysis of Cyanotoxins in Surface and Drinking Waters using ELISA, PPIA, HPLC/PDA AND LC-MS/MS", 3rd International Conference of Water Science and Technology, Integrated Water Resources Management with Emphasis on Climate Change Adaptation, AQUA 2008, Athens Hellas, 16-19 October, 2008.
3. K. Tsimeli, T. Triantis, T. Kaloudis, A. Hiskia, "Determination of cyanotoxins in surface and drinking water of Athens by LC-MS/MS", 3rd International Conference of Water Science and Technology, Integrated Water Resources Management with Emphasis on Climate Change Adaptation, AQUA 2008, Athens Hellas, 16-19 October, 2008.
4. E. Gkika, A. Troupis, T. Triantis, E. Papaconstantinou, A. Hiskia, "Photocatalytic Synthesis of Se Nanoparticles using Polyoxometalates", 5th European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications, Palermo, Italy, 4-8 October, 2008, pg. OP3.8.
5. D. Dimotikali, K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, T. Triantis, D. Christodouleas, J. Hrbac, R. Zboril, "Evaluation of antioxidant activities of organic compounds using chemiluminescence catalyzed by ferric oxide nanoparticles", 5th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies, Thessaloniki, Greece, July 14-16, 2008, pg 239.
6. K. Papadopoulos, E. Yannakopoulou, T. Triantis, D. Christodouleas, T. Yannakopoulou, C. Trapalis, D. Dimotikali, "Applications of colloidal solutions of nanosized ferric oxides in chemiluminescence reactions", 1st International Conference from Nanoparticles & Nanomaterials to Nanodevices & Nanosystems, Halkidiki, Greece, June 16-18, 2008, pg 263.

7. T. Kaloudis, K. Tsimeli, T. Triantis, N. Thanasoulas, L. Kousouris, E. Lytras, P. Tzoumerkas, A. Hiskia, "Development of an integrated laboratory system for the monitoring of cyanotoxins in surface and drinking waters", 5th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 11th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Marseille, France, 22-25 October, 2008.
8. K. Tsimeli, T. Triantis, T. Kaloudis, A. Hiskia, "Development of a new method for the determination of microcystins and nodularin in surface and drinking water by LC-MS/MS", 5th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 11th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Marseille, France, 22-25 October, 2008.

Διαλέξεις

1. Α. Χισκιά "Φωτοκατάλυση με πολυοξομεταλλικές ενώσεις. Μια νέα προχωρημένη οξειδωτική διεργασία για την αποικοδόμηση φυτοφαρμάκων σε υδατικά συστήματα", 3^ο Περιβαλλοντικό Συνέδριο Μακεδονίας, Θεσσαλονίκη, 15 Μαρτίου 2008.
2. Α. Χισκιά "Photocatalytic Synthesis of Se Nanoparticles using Polyoxometalates" 5th European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications, Palermo, Italy, 5 October, 2008.
3. Α. Χισκιά "Determination of cyanotoxins in surface and drinking water of Athens by LC-MS/MS", 3rd International Conference of Water Science and Technology Integrated Water Resources Management with Emphasis on Climate Change Adaptation, Aqua 2008, Athens Hellas, 17 October, 2008.
4. Α. Χισκιά "Development of a new method for the determination of microcystins and nodularin in surface and drinking water by LC-MS/MS", 5th European Conference on 4. Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 11th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Marseille, France, 23 October, 2008.

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

1. Α. Χισκιά, «Προχωρημένες Οξειδωτικές Μέθοδοι», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Φεβρουάριος-Μάρτιος 2008.
2. Α. Χισκιά, «Αναλυτικές μέθοδοι με εφαρμογή στην Περιβαλλοντική Χημεία», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας, Τμήμα Χημείας - Τομέας ΙΙΙ, Αθήνα, Μάιος- Ιούνιος 2008.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Διδακτορικές Διατριβές

1. Σ. Αντωνάρη. «Μελέτη Μηχανισμών Φωτοαποικοδόμησης Οργανοχλωριωμένων Ρύπων: Φωτολυτικά με Υπεροξειδίο του Υδρογόνου και φωτοκαταλυτικά με 12-βολφραμοφωσφορικό οξύ.» Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ, 2008.

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

2. Α. Τσιμελή. «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού κυανοτοξινών σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική LC-MS/MS. Διενέργεια έρευνας για την παρουσία κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά της Αθήνας», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2008.

Ανάθεση θέματος και επίβλεψη μεταπτυχιακών εργασιών

Διδακτορικές Διατριβές

1. Π. Κόρμαλη «Φωτολυτική και Φωτοκαταλυτική Αποικοδόμηση Οργανοφωσφορικών Εντομοκτόνων με Πολυοξειδία Μετάλλων» Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ.

2. Α. Τσιμελή «Προσδιορισμός και Μελέτη της Φωτοχημικής Σταθερότητας PCBs, PAHs, Χλωροφαινολών και Φυτοφαρμάκων με τη Μέθοδο της Εκχύλισης και Μικροεκχύλισης Στερεάς Φάσης» Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ.
3. Γ. Δημητρακόπουλος «Ανάπτυξη μεθόδων προσδιορισμού κυανοτοξινών σε περιβαλλοντικά δείγματα με υδροχρωματογραφία-φασματομετρία μαζών» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

1. Γ. Αλεξάκος. «Σύνθεση, χαρακτηρισμός και φωτοκαταλυτικές ιδιότητες νανοσωματιδίων σεληνίου με πολυοξομεταλλικές ενώσεις.» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
2. Σ. Αναγνώστου. «Παρασκευή, χαρακτηρισμός και ιδιότητες φωτοχρωμικών υμενίων βασισμένων στις πολυοξομεταλλικές ενώσεις και την πολυαιθυλιμίνη», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Διπλωματική Εργασία

1. Σ. Ζερβού και Μ. Παπαδημητρίου. «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού φαινολογικών σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική HPLC/UV και σύγκριση με την τεχνική ELISA.» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Ανάπτυξη ολοκληρωμένου συστήματος παρακολούθησης των κυανοτοξινών σε επιφανειακά και επεξεργασμένα ύδατα με συνδυασμό προηγμένων αναλυτικών μεθόδων", ΠΑΒΕΤ 2005, 27,5 Κ€, 2006-2008.
2. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 9,5 Κ€, 2006-2008.
3. "Ολοκληρωμένο Εθνικό Κέντρο Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας" ΕΠΑΝ, 36 Κ€, 2006-2008.
4. "Ανάπτυξη πολυϋπολειμματικής μεθόδου προσδιορισμού παρασιτοκτόνων σε νερά με LC-MS/MS. Παρακολούθηση επιπέδων συγκέντρωσης παρασιτοκτόνων και κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά", Σύμβαση με ΕΥΔΑΠ Α.Ε., 25 Κ€, 2008-2009.

Ερευνητική Υποδομή

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

Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό

1. Χισκιά Α., Τριάντης Θ. και Τσιμελή Κ., Department of Civil and Environmental Engineering, University of Cincinnati, USA καθώς και σε εργαστήρια του Οργανισμού Προστασίας του Περιβάλλοντος των ΗΠΑ (US EPA), 21-25 Ιουλίου 2008.
2. Χισκιά Α., 5th European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications, Palermo, Italy, 4-8 October, 2008.
3. Χισκιά Α., 5th European Conference on Pesticides and Related Organic Micropollutants in the Environment and 11th Symposium on Chemistry and Fate of Modern Pesticides, Marseille, France, 22-25 October, 2008.

Συνεργασίες

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

Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Σ. Αντωνάρη (ΕΜΠ), Π. Κόρμαλη (ΕΜΠ), Α. Τσιμελή (ΕΜΠ) και Ι. Δημητρακοπουλο (Παν. Αθηνών).
2. Συμμετοχή στην Εξεταστική Επιτροπή της υποψήφιας κατόχου Μεταπτυχιακού Τίτλου Εκπαίδευσης (M.Sc.), Α. Τσιμελή (Παν. Αθηνών).
3. Μέλος της Τριμελούς Επιτροπής για την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας της Σ. Ζερβού και Μ. Παπαδημητρίου (Παν. Αθηνών).
4. Κριτής στα περιοδικά *Langmuir*, *Environ. Sci. Technol.*, *Appl. Catal.: B: Environmental, Chemosphere*, *Analytica Chimica Acta*, *J. Photochem. Photobiol.*, *JAOAC*, *Intern. J. Environ. Anal. Chem.*, *Topics in Catalysis*, *Catalysis Today*, *Chemistry-A European Journal*.
5. Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής του 2nd European Conference on Environmental Applications of Advanced Oxidation Processes, Κύπρος, 9-11 Σεπτεμβρίου 2009.
6. Αξιολογήτρια Ερευνητικών Έργων της ΓΓΕΤ.
7. Γραμματέας του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ» (2007-2009).
8. Προϊσταμένη του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2008 διετέλεσε:

1. Κριτής στα περιοδικά *Advanced Functional Materials*, *Advanced Materials*, *Journal of European Chemistry*, *Environmental Science and Technology* και *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*.
2. Υπεύθυνος Ποιότητας του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»
3. Αξιολογητής Ερευνητικών Έργων του Ιδρύματος Προώθησης Έρευνας (ΙΠΕ) Κύπρου.
4. Μέλος του Δ.Σ. του Συλλόγου Συνεργαζόμενων Ερευνητών του ΕΚΕΦΕ «Δ».

2.4 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΑ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑ ΚΑΙ ΣΤΙΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

Αντικείμενο Έργου

- 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).
- Παρασκευή και φυσικοχημικός χαρακτηρισμός υπερμοριακών συναρμολογημάτων (nanotubes) τα οποία προκύπτουν μέσω μακρομοριακής αναγνώρισης απλών συμπλόκων εγκλεισμού συνιστάμενα από κυκλοδεξτρίνες και ορισμένα κυλινδρικά μόρια.
- Σύνθεση και φασματοσκοπική μελέτη υδατοδιαλυτών υλικών που παρουσιάζουν cis – trans ισομερισμό στη βασική και στη διεγερμένη κατάσταση.
- Ανάπτυξη μεθοδολογίας οπτικού χαρακτηρισμού λεπτών φωτοευαίσθητων πολυμερικών υμενίων και στην εφαρμογή της στον έλεγχο Νανο και Μικρο-λιθογραφικών διεργασιών καθώς και στην αξιολόγηση μοριακών χημικών συστημάτων για πιθανή χρήση σε οπτικές και ηλεκτρονικές διατάξεις.

Προσωπικό

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

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Ιωάννα Μπαλωμένου

Υποψήφιοι Διδάκτορες: Αντωνία Καλουδή-Χαντζέα

Δημοσιεύσεις

1. A. A. Stefanopoulos, C. L. Chochos, M. Prato, G. Pistolis, K. Papagelis, F. Petraki, S. Kenou and J. K. Kallitsis, "Novel Hybrid Materials Consisting of Regioregular Poly(3-octylthiophene) Covalently Attached to Single-Wall Carbon Nanotubes", *Chemistry-A European Journal* 14 (28), 2008, pp. 8715-8724.
2. D. Georgiadou, M. Vasilopoulou, G. Pistolis, D. Dimotikali and P. Argitis, "Energy transfer processes among emitters dispersed in a single polymer layer for colour tuning in OLEDs", *Physica Status Solidi (A) Applications and Materials* 205 (11), 2008, pp. 2526-2531.
3. M. Vasilopoulou, L. C. Palilis, A. Botsialas, D. Georgiadou, , P. Bayiati, N. Vourdas, P. S. Petrou, G. Pistolis, N. Stathopoulos, and P. Argitis, «Flexible Organic Light Emitting Diodes (OLEDs) based on blue emitting polymers», *Physica Status Solidi (C) Current Topics in Solid State Physics* 5 (12), 2008, pp. 3658-3662.A.

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. L.C.Palilis, M.Vasilopoulou, N.A.Stathopoulos, A.Botsialas, D.G.Georgiadou, G.Pistolis, D.Davazoglou, P.Falaras, P.Argitis, "Air-stable solution-processed polymer optocouplers", *1st International Symposium on Flexible Organic Electronics (IS-FOE), Halkidiki, Greece, 2008*
2. M.Vasilopoulou, D.G.Georgiadou, L.C.Palilis, G.Pistolis, P.Argitis, "Photochemical study of organic dyes for color tuning in dye-doped OLEDs", *1st International Symposium on Flexible Organic Electronics (IS-FOE), Halkidiki, Greece, 2008.*
3. D.G.Georgiadou, M.Vasilopoulou, L.C.Palilis, G.Pistolis, P.Argitis, "Improved charge injection in OLEDs via onium-salt addition inside polymer matrices", *1st International Symposium on Flexible Organic Electronics (IS-FOE), Halkidiki, Greece, 2008.*
4. D.G.Georgiadou, M. Vasilopoulou, L. Palilis, G.Pistolis, P.Argitis, "Photochemically Induced Emission tuning of fluorescent and phosphorescent emitters in full colour, single layer organic light emitting diodes", *IV International Krutyn Summer School, Masurian Lake District, Poland, 2008.*

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

Χρηματοδότηση από το «Περιφερειακό Επιχειρησιακό Πρόγραμμα Αττικής», 4000 Ευρώ.

Ερευνητική Υποδομή

Φασματοφωτόμετρο ορατού-υπεριώδους (UV - Visible spectroscopy), Φθορισμόμετρο (Fluorescence spectroscopy), Φασματοφωτόμετρο ανάλυσης χρόνου (Time - resolved spectroscopy), Διάταξη απαέρωσης freeze-pump-thaw.

Συνεργασίες

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

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Γεώργιος Πιστόλης κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Μέλος του Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Journal of Physical Chemistry B, Journal of Photochemistry Photobiology.
3. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της υποψήφιας Δρ Ι. Μπαλωμένου (Παν/μιο Πατρών) και Επιβλέπων Ερευνητής της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της υποψήφιας Δρ. Α. Καλουδή-Χαντζέα (Παν/μιο Πατρών).

2.5 ΙΣΟΤΟΠΙΚΗ ΥΔΡΟΛΟΓΙΑ

Αντικείμενο Έργου

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

Επίσης, αντικείμενο του έργου είναι η ανάπτυξη μεθόδων για τον προσδιορισμό της συγκεντρώσεως του φυσικού ^{14}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.



Προσωπικό

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

Τεχνικό Προσωπικό: Αρνίδη Ελένη, Πτυχιούχος ΤΕΙ, σύμβαση έργου
Λάκτεν Αικατερίνη, Παρασκευάστρια

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ» : Καυγάς Αλέξης, Φυσικός ΑΠΘ

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

1. Ζουριδάκης, Ν. «Ισοτοπική Υδρολογία», Γεωλογικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Εφαρμοσμένη Περιβαλλοντική Γεωλογία» Ακαδ. Έτος: 2008-2009.
2. Ζουριδάκης, Ν. «Ραδιοάνθρακας: Ένα παράδειγμα της Ενότητας της Επιστήμης.», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7-18 Ιουλίου 2008.
3. Ζουριδάκης, Ν. «Εφαρμογές των Ισοτόπων στη Μελέτη του Περιβάλλοντος και του Παρελθόντος», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 7-18 Ιουλίου 2008.
4. Ζουριδάκης, Ν. , Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψήφιου διδάκτορα Ι. Ματιάτου (Γεωλογικό Τμήμα Παν/μίου Αθηνών).

Πρακτική Άσκηση

Ολοκλήρωσαν την πρακτική τους άσκηση οι σπουδαστές Ευαγγελία Λιάκου και Ιωσήφ Σκούλλος, της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Πολυτεχνείου (διάρκεια 6 βδομάδες).

Τεχνικές Αναφορές

1. Ν.Ζουριδάκης, Ε.Αρνίδη, Μ.Στεφούλη, Π.Σαμπατακάκης, Ισοτοπική και υδρογεωλογική μελέτη των υπόγειων νερών λεκάνης Ευρώτα, demo 2008/ 8G, Αθήνα 2008.
2. Ε.Αρνίδη, Δ.Ραπτόπουλος, Μ.Κωνσταντοπούλου, Ν.Ζουριδάκης, Θερμογραφική κάμερα: νέο εργαλείο για έναν παλιό εχθρό, demo 2008/ 7G, Αθήνα 2008.
3. Α.Αραβαντινός, Ε.Αρνίδη, Κ.Ποτηριάδης, Λ.Πρελορέντζος, Χ.Α. Σταθοπούλου, Δ.Χ. Τσαματσούλης, Ν.Ζουριδάκης, Μελέτη της θερμοκρασιακής συμπεριφοράς δειγμάτων τσιμέντου με τη χρήση υπέρυθρης κάμερας, demo 2008/ 6G, Αθήνα 2008.

Συνεργασίες

Π.Σαμπατακάκης, Κ.Νίκας, Π.Γιαννουλόπουλος (ΙΓΜΕ Ισοτοπικές αναλύσεις Πελοπόννησος, Νησιά Αιγαίου), Ε.Νικολάου (ΙΓΜΕ Ηπείρου, Ισοτοπικές αναλύσεις), Δρ. Η. Δημητρίου (ΕΛΚΕΘΕ, Ισοτοπικές αναλύσεις στα πλαίσια του προγράμματος «Δράσεις για τη Διατήρηση των Μεσογειακών Εποχικών Λιμνίων της Δυτικής Κρήτης», Πρόγραμμα «Life-Natura 2004»), Δρ. Σ. Παυλίδου (ΙΓΜΕ Κρήτης, Ισοτοπικές αναλύσεις), Καθ. Ι. Διαμαντής (Πολυτεχνική Σχολή Ξάνθης, Μετρήσεις Ραδονίου σε πηγές και γεωτρήσεις του Νομού Ξάνθης), Δρ. Γ. Παπαβασιλείου (ΕΚΕΦΕ «Δ», Χρήση θερμικής κάμερας για την απεικόνιση φυσικών ιδιοτήτων νανοσωματιδίων οξειδίου του σιδήρου σε σύγκριση με θερμοκρασιακές μετρήσεις με άλλες μεθόδους, στα πλαίσια του προγράμματος ΠΕΠ), Α.Αραβαντινός Καθ. ΤΕΙ Αθήνας (χρήσεις της υπέρυθρης κάμερας IR 805)

2.6 Ο ΡΟΛΟΣ ΤΩΝ ΙΧΝΟΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ

Αντικείμενο Έργου

Μελέτη αιωρούμενων σωματιδίων και βαρέων μετάλλων στο ατμοσφαιρικό αεροζόλ μιας βιομηχανικής και μιας αστικής περιοχής του Λεκανοπεδίου Αθηνών. Στις βιομηχανικές περιοχές υπάρχει μια αφθονία σε χονδρόκοκκα σωματίδια ($PM_{10-2.5}$), ενώ στην αστική περιοχή παρατηρούνται περισσότερα λεπτόκοκκα σωματίδια ($PM_{2.5}$). Η υψηλή συγκέντρωση των μετάλλων στη βιομηχανική περιοχή φαίνεται να οφείλεται σε τοπικούς παράγοντες. Παρόλο που οι συγκεντρώσεις σε Pb, Cd, Ni και Mn δεν υπερβαίνουν τα όρια του Παγκόσμιου Οργανισμού Υγείας (WHO) των 500, 5, 20 και 150 ng/m^3 , αντίστοιχα, αποτελούν ένα θέμα ανησυχίας για τον πληθυσμό που μένει στην περιοχή σχετικά με τις μακροχρόνιες επιπτώσεις στην υγεία. Επιπλέον, η συσχέτιση μεταξύ των μετρήσεων συγκέντρωσης μετάλλων και της κατεύθυνσης του ανέμου μελετάται μέσω ζυγοσταθμισμένων τριαντάφυλλων ρύπανσης, ώστε να συλλεχθούν πληροφορίες για τις βασικές πηγές εκπομπής. Από τη στατιστική αξιολόγηση των αποτελεσμάτων μπορούν να εντοπιστούν μερικές από τις τοπικές πηγές ρύπανσης.

Προσωπικό

*Υπεύθυνος : Δρ. Κ. Οξενκιούν, Ερευνητής Α (συνταξιοδοτήθηκε στις 31 12 2007)

Δημοσιεύσεις

1. K. M. Ochsenkuhn, Maria Ochsenkuhn – Petropoulou, Arsenic "Heavy Metals in Airborne Particulate Matter of an Industrial Area in Attika, Greece and Their Possible Sources". 6th Aegean Analytical Chemistry Days, 6-13 October 2008, Turkey Fresenius Environmental Bulletin, PSP volume 17 – No 4. 2008 (p. 1-9)

Ανακοινώσεις σε συνέδρια με πρακτικά

1. K. M. Ochsenkuhn, Fotis Tsopelas, Maria Ochsenkuhn – Petropoulou, "Arsenic Speciation in Aerosol Samples from an Industrial Area in Greece". 6th Aegean Analytical Chemistry Days, 6-13 October 2008, Turkey Book of abstracts, p. 363
2. M. Ochsenkuhn, P. Razos, L. A. Tsakanika, M. Ochsenkuhn – Petropoulou, "Particulate Matter and Heavy Metals in the Atmospheric Aerosol of an Industrial and an Urban Area in Athens, Greece". Abstract of European Aerosol Conference 24-26 August 2008 Thessaloniki, Greece.

Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

Πρόγραμμα 3

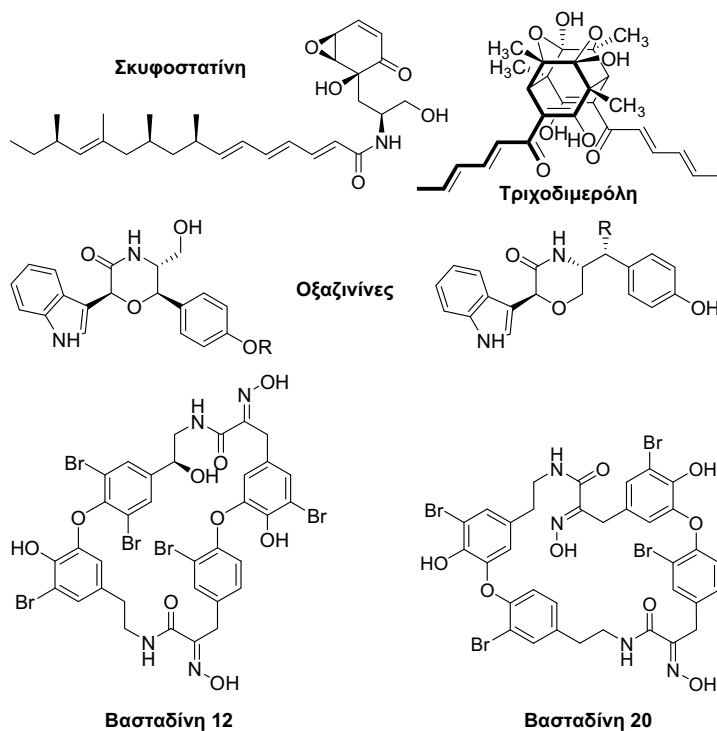
Χημική Βιολογία

3.1 ΣΥΝΘΕΣΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΒΙΟΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Αντικείμενο Έργου

Τα φυσικά προϊόντα, με την ποικιλία και την πολυπλοκότητα των δομών τους αλλά και την πολυσχιδή βιολογική τους δράση, εξακολουθούν να αποτελούν πρόκληση για την οργανική χημεία αλλά και πηγή έμπνευσης για το σχεδιασμό και μελέτη νέων ενώσεων με πιθανές εφαρμογές στη βιολογία και την ιατρική. Ο σχεδιασμός, η σύνθεση, ο καθαρισμός και ο χαρακτηρισμός νέων οργανικών ενώσεων, ως επί το πλείστον φυσικών προϊόντων ή ανάλογών τους, αποτελούν το κύριο αντικείμενο του έργου. Πέρα από τις μεθόδους κλασικής οργανικής σύνθεσης (σε διάλυμα), το εργαστήριο έχει τη δυνατότητα (υποδομή και εμπειρία) να πραγματοποιήσει παράλληλες συνθέσεις (συνδιαστική χημεία).

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. Ενδεικτικά επιτεύγματα του εργαστηρίου αποτελούν η ολική σύνθεση των φυσικών προϊόντων **Τριχοδιμερόλη** (αναστολέας της δράσης του TNF-α με πιθανή εφαρμογή στη θεραπεία πολλών ασθενειών όπως π.χ. η νόσος του Crohn), **Βασταδίνες** (οικογένεια θαλασσιών φυσικών προϊόντων που επιδρούν στην ομοίωση των ιόντων Ca και έχουν αντικαρκινική και αντιαγγειογενετική δράση), **Οξαζινίνες** (τοξίνες θαλασσιών φυκών που επιμολύνουν καλλιεργούμενα οστρακοειδή) καθώς και η παρασκευή του φαρμακοφορικού τμήματος και αναλόγων της **Σκυφοστατίνης** (αναστολέας του ενζύμου ουδέτερη σφιγγομυελινάση). 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.



Προσωπικό

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

ΙΔΑΧ: Δρ. Βερονίκη Βιδάλη

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Νικόλαος Αθηναίος

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες: Δρ. Άρης Χιωτέλης (άμισθος).

Μεταπτυχιακοί φοιτητές: Μαριάννα Δακανάλη (1-1-2008 μέχρι 29-2-2008, Πρόγραμμα διακρατικής συνεργασίας Ελλάδα-Πολωνίας), Κορνηλία Μητσοπούλου (άμισθη), Κατερίνα Τσιλιούκα (άμισθη).

Προπτυχιακοί φοιτητές: Ελένη Χρυσοχού

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

Δημοσιεύσεις

1. Koulocheri, S.D.; Pitsinos, E.N.; Haroutounian, S.A. "Stereoselective syntheses of 2,6-disubstituted piperidin-3-oles (alkaloid lipids)", *Current Organic Chemistry* **2008**, *12*, 1454-1467.
2. Zieminska, E.; Lazarewicz, J.W.; Couladouros, E.A.; Moutsos, V.I.; Pitsinos, E.N. "Open-chain half-bastadins mimic the effects of cyclic bastadins on calcium homeostasis in cultured neurons", *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* **2008**, *18*, 5734-5737.
3. Efthimiadou, E.K.; Katsarou, M.E.; Fardis, M.; Zikos, C.; Pitsinos, E.N.; Kazantzis, A.; Leondiadis, L.; Sagnou, M.; Vourloumis, D. "Synthesis and characterization of novel natural product-Gd(III) MRI contrast agent conjugates" *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* **2008**, *18*, 6058-6061.
4. Michaelakis, A.; Mihou, A.P.; Koliopoulos, G.; Couladouros, E.A. "Influence of the microencapsulated pheromone from aged infusion as an oviposition medium of the West Nile virus vector *Culex pipiens*", *Parasitology Research*, in press **2008**
5. Michaelakis, A.; Strongilos, A.T.; Bouzas, E.A.; Koliopoulos, G.; Couladouros, E.A. "Larvicidal activity of naturally occurring naphthoquinones and derivatives against the West Nile virus vector *Culex pipiens*", *Parasitology Research*, in press **2008**

Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Couladouros, E.A. "Research at the cutting edge and spin-offs", 9th Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 26-28 Μαρτίου 2008, Πρακτικά σελ. 31.
2. Dakanali, M.I.; Vidali, V.P.; Couladouros, E.A. "Synthesis of the bicyclic common core of polycyclic polyprenylated acylphloroglucinols; Synthetic studies towards Hyperforin", 9th Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 26-28 Μαρτίου 2008, Πρακτικά σελ. 56.
3. Efthimiadou, E.; Katsarou, M.; Fardis, M.; Zikos, C.; Pitsinos, E.N.; Kazantzis, A.; Leondiadis, L.; Vourloumis, D. "New Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging targeting Cancer Cells", 2nd price Award, 9th Conference Medicinal Chemistry: Drug discovery and design, Πάτρα, 26-28 Μαρτίου 2008, Πρακτικά σελ. 61.
4. Pitsinos, E.N.; Athinaios, N.; Kazantzis, A. "Synthetic studies towards Laurenditerpenol, a novel HIF-1 inhibitor", 9th Conference Medicinal Chemistry: Drug Discovery and Design, Πάτρα, 26-28 Μαρτίου 2008, Πρακτικά σελ. 74.
5. Zieminska, E.; Stafiej, A.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A.; Moutsos, V.I.; Kozłowska, H.; Toczyłowska, B.; Lazarewicz, J. "Effect of synthetic Bastadins and analogues on the activity of ryanodine receptors in cultured cerebellar granule cells", 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical Interest, Αθήνα, 3-8 Αυγούστου 2008, Πρακτικά σελ. 50.
6. Pitsinos, E.N.; Leontiadis, L.; Giannis, A.; Wacholowski, V. "Novel Scyphostatin analogues: Synthesis and biological evaluation as inhibitors of neutral sphingomyelinase (N-SMase)", 7th

- Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical Interest, Αθήνα, 3-8 Αυγούστου 2008, Πρακτικά σελ. 51.
7. Ciminiello, P.; Dell'Aversano, C.; Fattorusso, E.; Forino, M.; Grauso, L.; Santelia, F.U.; Tartaglione, L.; Moutsos, V.I.; Pitsinos, E.N.; Couladouros, E.A. "Stereostructural determination of Oxazinins based on a combination of synthetic and NMR studies", 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical Interest, Αθήνα, 3-8 Αυγούστου 2008, Πρακτικά σελ. 51.
 8. Pitsinos, E.N.; Athinaios, N.; Kazantzis, A. "Synthetic studies towards Laurenditerpenol, a novel HIF-1 inhibitor", 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical Interest, Αθήνα, 3-8 Αυγούστου 2008, Πρακτικά σελ. 51.
 9. Efthimiadou, E.; Katsarou, M.; Fardis, M.; Zikos, C.; Pitsinos, E.N.; Kazantzis, A.; Leondiadis, L.; Vourloumis, D. "New Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging targeting Cancer Cells", 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical Interest, Αθήνα, 3-8 Αυγούστου 2008, Πρακτικά σελ. 52.
 10. Efthimiadou, E.; Katsarou, M.; Fardis, M.; Zikos, C.; Pitsinos, E.N.; Kazantzis, A.; Leondiadis, L.; Vourloumis, D. "New Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging targeting Cancer Cells", XXth International Symposium on Medicinal Chemistry, Vienna, Austria, August 31 - September 4, 2008. Abstract published in *Drugs of the Future* 2008, 33, Suppl. A, P226.
 11. Efthimiadou, E.; Katsarou, M.; Fardis, M.; Zikos, C.; Pitsinos, E.N.; Kazantzis, A.; Leondiadis, L.; Vourloumis, D. "New Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging targeting Cancer Cells", 8th International Conference of Anticancer Research, Kos, Greece, October 17-22, 2008. Abstract published in *Anticancer Research* 2008, 28, 3272-3273.

Διαλέξεις

1. Pitsinos, E.N. "Natural products inhibiting hypoxia-inducible factor-1 (HIF-1)", Combined workshop of working groups 3 and 4 of CM0602 Cost Action: Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)", Certosa di Pontignano, University of Siena, Italy, 16 February 2008.
2. Athinaios, N. "Synthetic studies towards Laurenditerpenol, a novel HIF-1 inhibitor", Combined workshop of working groups 3 and 4 of CM0602 Cost Action: Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)", Certosa di Pontignano, University of Siena, Italy, 16 February 2008.

Διδακτικό Έργο

Διδακτορικές Διατριβές

1. Δακανάλη, Μαριάννα. «Σύνθεση πολυκυκλικών συστημάτων, βασικών δομών βιοδραστικών φυσικών προϊόντων», Γενικό Τμήμα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Νοέμβριος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Structure-related pharmacological effects of synthetic bastadins in neurons", Κοινά Ερευνητικά και Τεχνολογικά Προγράμματα Ελλάδας-Πολωνίας 2005-2007 (λήξη 3/2008), 11,74 κ€,.
2. "Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία", ΠΕΠ Αττικής, 10 κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.
3. "Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)", COST Action CM0602, 2007-2011.

Ερευνητική Υποδομή

Πολωσίμετρο, Συσκευή παράλληλης/συνδιαστικής σύνθεσης, HPLC.

Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό

1. Πιτσινός Ε.Ν. και Αθηνάιος Ν., Certosa di Pontignano, University of Siena, Ιταλία (15-17 Φεβρουαρίου 2008), στα πλαίσια του COST Action CM0602.

2. Πιτσινός Ε.Ν., Favignana, Ιταλία (23-27 Οκτωβρίου 2008), στα πλαίσια του COST Action CM0602 (22-25 Νοεμβρίου 2007).

Συνεργασίες

Prof. A. Giannis (Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Institut für Organische Chemie, Leipzig, Germany), Dr. Joe Lewis (Chemical Biology Core Facility, EMBL Heidelberg, Heidelberg, Germany), Prof. J.W. Lazarewicz (Medical Research Centre, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland), Prof. E.-I. Negishi (Purdue University, Purdue University, West Lafayette, Indiana, USA), Καθ. Ν. Χατζηχρηστίδης (Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ), Δρ. Π. Αργείτης (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»).

Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός κατά το έτος 2008 διατέλεσε:

1. Μέλος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Μέλος του Management Committee της COST Action CM0602 "Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)".
3. Μέλος επιστημονικής επιτροπής (scientific board) του "The Sphingolipid Club" (διεθνής επιστημονική οργάνωση με σκοπό την προώθηση και ανάδειξη της διακλαδικής έρευνας στον τομέα των σφιγκολιπιδίων).
4. Κριτής για την αξιολόγηση ερευνητικών προτάσεων που υποβλήθηκαν στα πλαίσια των προγραμμάτων του Ιδρύματος Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.
5. Μέλος του Editorial Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού Marine Drugs.
6. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Letters in Organic Chemistry, Natural Product Research (NPR).

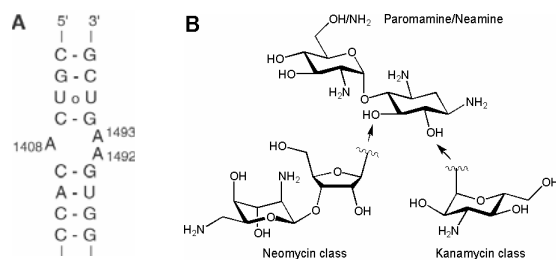
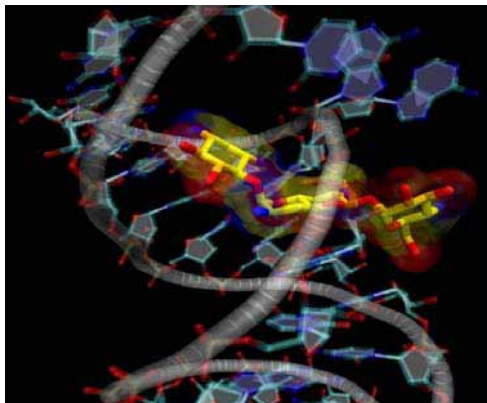
3.2 ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΙΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΕΝΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

Αντικείμενο Έργου

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

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

Η προτεινόμενη έρευνα αποσκοπεί στην εκμετάλλευση του RNA ως φαρμακευτικού στόχου μέσω της ορθολογικής σύνθεσης μικρών μορίων ως δομές-οδηγούς. Τα μόρια αυτά ενδεχομένως να αποτελέσουν στο μέλλον την νέα γενιά αντιβιοτικών. Η έρευνα αρχικά θα εστιάσει σε υποστρώματα που συνδέονται επιλεκτικά στα ριβοζονουκλεϊνικά (RNA) τμήματα του βακτηριακού ριβοσώματος, το οποίο αποτελεί στόχο μίας πληθώρας γνωστών αντιβιοτικών. Επιπλέον, εκμεταλλεόμενοι τις σύγχρονες τεχνολογίες ανάλυσης της λειτουργίας των πρωτεϊνών, π.χ. σύζευξη μικρών μορίων – βιοτίνης, θα εξερευνηθεί η δυνατότητα αναγνώρισης νέων συστατικών του RNA ως πιθανών στόχων αλληλεπίδρασης με μικρά μόρια θεραπευτικού ενδιαφέροντος. Τέλος, η διερεύνηση της τεταρτοταγούς δομής του RNA θα επιτευχθεί τη σύνθεση «δυναμικών βιβλιοθηκών», στις οποίες το κάθε τελικό προϊόν θα παράγεται παρουσία του βιολογικού του στόχου, προσομοιάζοντας το αποτέλεσμα της φυσικής επιλογής. Η προσέγγισή μας θα



με

είναι επεκτάσιμη και σε άλλες περιοχές του RNA, όπως η GTPase-συσχετιζόμενη περιοχή στο 23S ριβοσωμικό rRNA, η οποία είναι ο στόχος του αντιβιοτικού θειοστρεπτόνη (thiostrepton), ή όπως οι εσωτερικές ριβοσωμικές περιοχές εισόδου (IRES), οι οποίες είναι σημαντικοί στόχοι στη θεραπεία παθογόνων ιών, όπως η πολιοιωμαλίτιδα και η ηπατίτιδα C. Η έρευνα αυτή αντιπροσωπεύει μια συνισταμένη προσέγγιση διαφορετικών επιστημονικών τομέων, αποτελούμενη από συνθετικές, φασματοσκοπικές, βιολογικές και υπολογιστικές μελέτες, που αναμένεται να διασαφηνίσουν το φαρμακολογικό προφίλ διαφόρων συστατικών του RNA και να εμπλουτίσουν την κατανόηση των επιμέρους λειτουργιών τους. Σε συνδυασμό με τις προφανείς ευκαιρίες εκπαίδευσης των νέων ερευνητών στα

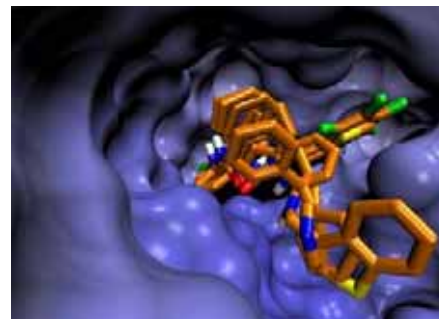
διαφορετικά επιστημονικά πεδία που εμπλέκονται, η επιτυχής ολοκλήρωση του έργου θα τοποθετήσει την Ευρωπαϊκή Ένωση επικεφαλής στον τομέα του RNA παγκοσμίως, θα δημιουργήσει νέες ευκαιρίες ανάπτυξης της βιοτεχνολογίας και της φαρμακευτικής, και συνολικά θα καλυτερεύσει την ποιότητα ζωής μας.

2. Στοχευόμενη μεταφορά βιοφαρμάκων διαμέσου συζυγών νανοδομών.

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

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

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



Προσωπικό

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

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

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

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

Προπτυχιακοί Φοιτητές: Νίκη Λυμπερέα (ΕΜΠ, πρακτική άσκηση), Κλεάνθης Ξανθόπουλος (ΤΕΙ Αθηνών, διπλωματική εργασία).

Δημοσιεύσεις 2008

1. Katsarou M.E., Efthimiadou E.K., Psomas G., Karaliota A., Vourloumis D., "Novel Copper(II) Complex of *N*-Propyl-norfloxacin and 1,10-Phenanthroline with Enhanced Antileukemic and DNA Nuclease Activities", *J. Med. Chem.* 2008, *51*, 470-478.
2. Psomas G, Alketa Tarushi, Efthimiadou E.K., Synthesis, characterization and DNA-binding of the mononuclear dioxouranium(VI) complex with ciprofloxacin. *Polyhedron* 2008, *27*, 133-138.
3. Efthimiadou E.K., Karaliota A., Psomas G., Mononuclear dioxomolybdenum(VI) complexes with the quinolones enrofloxacin and sparfloxacin: Synthesis, structure, antibacterial activity and interaction with DNA. *Polyhedron* 2008, *27*, 349-356.
4. Evnouchidou I., Momburg F., Papakyriakou A., Chroni A., Leondiadis L., Chang S-C., Goldberg A. L., Stratikos E. "The Internal Sequence of the Peptide Determines N-Terminus Cleavage by ERAP1" *PLoS ONE*, 2008, *3*, e3658.
5. Efthimiadou E.K., Katarou M.E., Karaliota A., Psomas G., Copper(II) complexes with sparfloxacin and nitrogen-donor heterocyclic ligands: Structure-activity relationships *J. Inorg. Biochem.* 2008, *102*, 910-920.
6. Theodossiou T. A., Papakyriakou A., Hothersall J. S. "Molecular modeling and experimental evidence for hypericin as a substrate for mitochondrial complex III; mitochondrial photodamage as demonstrated using specific inhibitors" *Free Radic. Biol. Med.* 2008, *45*, 1581-1590.
7. Efthimiadou E.K., Karaliota A., Psomas G., Mononuclear metal complexes of the second-generation quinolone antibacterial agent enrofloxacin: Synthesis, structure, antibacterial activity and interaction with DNA. *Polyhedron* 2008, *27*, 1729-1738.
8. Efthimiadou E.K., Karaliota A., Psomas G., Structure, antimicrobial activity and DNA-binding properties of the cobalt(II)-sparfloxacin complex. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008, *18*, 4033-4037.
9. E.K. Efthimiadou, M.E. Katsarou, M. Fardis, C. Zikos, E.N. Pitsinos, A. Kazantzis, L. Leondiadis, M. Sagnou, D. Vourloumis, "Synthesis and characterization of novel natural product-Gd(III) MRI contrast agent conjugates." *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2008, *18*, 6058-6061.
10. A. Papakyriakou, D. Vourloumis, F. Tzortzatos-Stathopoulou, M. Karpusas, "Conformational dynamics of the EGFR kinase domain reveals structural features involved in activation." *Proteins* 2008, in press.
11. Evnouchidou I., Papakyriakou A., Stratikos E. "A new role for Zn(II) aminopeptidases: Antigenic peptide generation and destruction" *Curr. Pharm. Design* 2008, in press.

Διεθνή Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας

D. Vourloumis, D.E. Murphy, T.J. Prins, F. Ruebsam, C.V. Tran, S.J. Berthel, R.F. Kester, R. "Oxime Glucokinase Activators." U.S. Provisional Patent Application No. 23198 US (pending).

Διαλέξεις/Συνέδρια

1. Dionisios Vourloumis, "Chemical Biology of Small Molecules Interfering with Protein-Synthesis" 13th National Conference in Medicinal Chemistry, Athens, Greece, March 14–15, 2008.
2. Dionisios Vourloumis et al. "Chemical Biology of Small Molecules Interfering with Protein-Synthesis" 9th International Conference in Medicinal Chemistry: Drug discovery and design, University of Patra, Greece, March 26–28, 2008.
3. Dionisios Vourloumis et al. "New Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging targeting Cancer Cells", 2nd price Award, 9th International Conference in Medicinal Chemistry: Drug discovery and design, University of Patra, Greece, March 26–28, 2008.

4. Dionisios Vourloumis et al. "Rational Design of Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2 (VEGFR-2) Inhibitors based on Molecular Dynamics Simulations" 9th International Conference in Medicinal Chemistry: Drug discovery and design, University of Patra, Greece, March 26–28, 2008.
5. Dionisios Vourloumis et al. "Chemical Biology of Small Molecules Interfering with Protein-Synthesis" ESF-COST High-Level Research Conference: Natural Products Chemistry, speaker and session chair, Biology and Medicine, Acquafredda di Maratea, Italy, May 18–23, 2008. Book of Abstracts 2008, pages 60 – 61.
6. Anastasopoulou Panoula, Zografos Alexandros L., Katsoulis Ioannis, Athanasios Papakyriakou, Kythreoti Georgia, Mavridis Ioannis, Vourloumis Dionisios* "Chemical Biology of Small Molecules Interfering with Protein-Synthesis", BOSS XI, 11th Belgian Organic Synthesis Symposium, Ghent, Belgium, July 13 - 18, 2008. Book of Abstracts 2008, P26.
7. E. Efthimiadou, M. Katsarou, M. Fardis, C. Zikos, E.N. Pitsinos, A. Kazantzis, L. Leondiadis, D. Vourloumis* "New contrast agents exploiting natural products for targeted magnetic resonance imaging", 7th Joint Meeting of AFERP, ASP, GA, PSE & SIF: Natural Products with Pharmaceutical, Nutraceutical, Cosmetic and Agrochemical interest, Athens, Greece, August 3 – 8, 2008. Book of Abstracts 2008, PG103.
8. E. Efthimiadou, M. Katsarou, M. Fardis, C. Zikos, E.N. Pitsinos, A. Kazantzis, L. Leondiadis, D. Vourloumis* "New contrast agents exploiting natural products for targeted magnetic resonance imaging", XXth International Symposium on Medicinal Chemistry, Vienna, Austria, August 31 - September 4, 2008. Abstract published in *Drugs of the Future* 2008, 33, Suppl. A, P226.
9. Kythreoti Georgia, Zografos Alexandros L., Katsoulis Ioannis, Athanasios Papakyriakou, Anastasopoulou Panoula, Mavridis Ioannis, Vourloumis Dionisios* "Chemical Biology of Small Molecules Interfering with Protein-Synthesis", XXth International Symposium on Medicinal Chemistry, Vienna, Austria, August 31 - September 4, 2008. Abstract published in *Drugs of the Future* 2008, 33, Suppl. A, P249.
10. E. Efthimiadou, M. Katsarou, M. Fardis, C. Zikos, E.N. Pitsinos, A. Kazantzis, A. Karaliota, L. Leondiadis, D. Vourloumis* "New contrast agents for magnetic resonance imaging targeting cancer cells", 8th International Conference of Anticancer Research, Kos, Greece, October 17-22, 2008. Abstract published in *Anticancer Research* 2008, 28, 3272-3273, P183.

Διδακτικό Έργο

Διδασκαλία

Dionisios Vourloumis, "RNA as a Drug Target: A Case Study" Nano2life Summer School on Methods in Micro-Nanotechnology and Nanobiotechnology, 2007, Athens, Greece, June 30 - July 10, **2008**.

Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων

Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης

Μαυρίδης Ιωάννης. «ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ ΜΙΚΡΩΝ ΜΟΡΙΩΝ ΠΟΥ ΠΑΡΕΜΠΟΔΙΖΟΥΝ ΤΗΝ ΠΡΩΤΕΪΝΙΚΗ ΣΥΝΘΕΣΗ», Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ (ΕΠΕΑΕΚ), Νοέμβριος 2008.

Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. Marie Curie Excellence Grants, "Study of RNA components by the Synthesis of Small Molecules", Contract No. MEXT-CT-2006-039149, Dr. Dionisios Vourloumis, € 1.620 k€, 2/2007–1/2011).
2. 'NMP' INTEGRATED PROJECT, "Nanoscale Functionalities for Targeted Delivery of Biopharmaceutics", Contract No. NMP4-CT-2006-026723, € 537 k€, 10/2006-9/2010).
3. ENTER2004, GSRT, "Design of Selective Inhibitors of Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2 (VEGF-R2) Using Structural Methods for the Treatment of Cancer." Contract No. 04EP63, Dr. Dionisios Vourloumis, € 58.5 k€, 2/07-10/08)

4. “Ανάπτυξη καινοτόμων βιοενεργών μαγνητικών νανοϋλικών για διάγνωση και παρακολούθηση παθολογικών καταστάσεων με Μαγνητική Τομογραφία”, ΠΕΠ Αττικής, 10 Κ€ (από ποσό 126.000 συνολικά για το ΙΦΧ), 2006-2008.

Συνεργασίες

T. Hermann (UCSD, San Diego USA, βιοχημεία του RNA), E. Theodorakis (UCSD, San Diego USA, Οργανική Σύνθεση), Δ. Γεωργιάδης (UOA, Athens Greece, Οργανική Σύνθεση/Φασματοσκοπία), Α. Καραλιώτα (UOA, Athens Greece, Ανόργανη Χημεία), Σ. Στρατικός (ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος, ΙΡΡΠ).

Β. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

B.1 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

B.1.1. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ NMR

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

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

nmr@chem.demokritos.gr ; <http://ipc.chem.demokritos.gr/Projects/nmr/nmr.html>

(τηλ. 210-6503062)

Το εργαστήριο NMR υγρών δειγμάτων υποστηρίζει τα ερευνητικά προγράμματα κυρίως των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας, Βιολογίας και ΡΡΠ αλλά και άλλων Ινστιτούτων (Υλικών, Μικροηλεκτρονικής) 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 2008 οι εισροές ήταν στα περυσινά επίπεδα (περίπου 5400 €), οι δε δαπάνες ανήλθαν στα ~4400 €.

Η υποδομή απαρτίζεται από το φασματόμετρο Bruker **AVANCE 500** MHz (1^ο έτος λειτουργίας 2000), το φασματόμετρο Bruker AC 250 MHz (1^ο έτος λειτουργίας 1991), και τα περιφερειακά όργανα. Βασική επιδίωξη για το 2008 ήταν η αντικατάσταση των ηλεκτρονικών του AC 250. Ο στόχος εκπληρώθηκε με **ολική αντικατάσταση της κονσόλας** με την τελευταίας τεχνολογίας **AVANCE III** και εγκατάσταση του συνοδευτικού λογισμικού λειτουργίας και επεξεργασίας δεδομένων. Το κόστος καλύφθηκε από το ΕΠΑΝ υποδομών του ΙΒ και από προγράμματα ερευνητών του ΙΦΧ (Δ. Βουρλούμης, Κ. Γιαννακοπούλου), του ΙΡΡΠ (Λ. Λεοντιάδης) και ΙΒ (Μ. Πελεκάνου). Το συνολικό κόστος ανήλθε στις 82 000 €, πλέον ΦΠΑ. Το ΙΦΧ επωμίσθηκε το κόστος εγκατάστασης.



α. AVANCE 500 MHz β. AVANCE III 250 MHz

B.1.2 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΑΚΤΙΝΩΝ-Χ

Υπέυθυνη: Δρ. Ε. Μ. Μαυρίδου (τηλ. 210 650 3793)
<http://ipc.chem.demokritos.gr/raxis/index.html>

Το Εργαστήριο λειτουργεί στον Δημόκριτο από το 1998 όταν δημιουργήθηκε το "Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων" (1997) το οποίο είναι δίκτυο 10 Ερευνητικών-Ακαδημαϊκών φορέων

και εγκαταστάθηκαν (α) πλήρες σύστημα συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων μακρομορίων (β) φασματοπολωσίμετρο κυκλικού διχρωϊσμού. Στην οργάνωση του Κέντρου Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων συμμετέχουν τρία Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» με Επιστημονικούς Υπεύθυνους τους Ερευνητές: Δρ. Ε. Μ. Μαυρίδου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Δρ. Μ. Βλάση, Ινστιτούτο Βιολογίας, Δρ. Γ. Νούνεσης, Ινστιτούτο Ραδιοϊσοτόπων-Ραδιοδιαγνωστικών Προϊόντων.

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

Για το 2008 οι εισροές ήσαν € 4157.34, εκ των οποίων € 791.30 προήλθαν από παροχή υπηρεσιών εκτός Δημοκρίτου (δαπάνη τιμολογίων 134.29 σε ΦΠΑ & έξοδα ΓΕΛ). Οι δαπάνες ανήλθαν σε € 2852.92, εκ των οποίων € 2623.29 σε επισκευές και ανταλλακτικά.

B.1.3 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΣΤΟΙΧΕΙΑΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ

Υπεύθυνη: Ε. Γιαννακοπούλου (Χειρίστρια Στοιχειακού Αναλυτή)

elyan@chem.demokritos.gr – (210-6503646 - 3634

Αντικείμενο: Στοιχειακές αναλύσεις οργανικών ενώσεων.

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

Αντικείμενο: Στοιχειακές αναλύσεις οργανικών ενώσεων.
Παροχή υπηρεσιών προς τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και προς τρίτους.

Επιτεύγματα: Από 1/1/2008 μέχρι 31/12/2008 αναλύθηκαν 81 δείγματα επί πληρωμή και 34 δείγματα χωρίς πληρωμή έναντι άλλων υπηρεσιών από τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (ΙΡΡΠ, ΙΕΥ)

Έσοδα-Έξοδα: Ετήσια έσοδα2060,60 ευρώ
Μεταφορά εσόδων από το 2007.....1376,60 ευρώ
Σύνολο.....3437,20 ευρώ

Ετήσια έξοδα λειτουργίας του οργάνου.....2266,54 ευρώ

Κοστολόγιο Στοιχειακών Αναλύσεων για το 2008

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

B.1.4 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ AFM, FT-IR, I.M.S.

Μικροσκοπία Ατομικών Δυνάμεων (AFM)

Υπεύθυνοι: κα Μαρία Αρχιμανδρίτη , κος Ανδρέας Σαπαλίδης
stratak@chem.demokritos.gr, asap@chem.demokritos.gr (τηλ. 210 650 3648)

ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ: Μικροσκόπιο Ατομικών Δυνάμεων AFM της DIGITAL INSTRUMENTS

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

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

		Μέθοδος Contact	Μέθοδος Tapping
1	Φορείς Δημοσίου	80 €	50 €
2	Ιδιωτικός Φορέας	120 €	90 €

* Στην κοστολόγηση όλων των υπηρεσιών δεν συμπεριλαμβάνεται το ΦΠΑ

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

Φασματοσκοπία Υπερύθρου FT-IR

Υπεύθυνος: Δρ. Φώτης Κατσαρός
fkats@chem.demokritos.gr (τηλ. 210 650 3671)

ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ

FT-IR Nicolet Magna 550 – Δεν λειτουργήσει το 2008 λόγω βλάβης

ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

Χαρακτηρισμός υλικών με φασματοσκοπία υπερύθρου (FT-IR)

ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ

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

Κοστολόγηση

Ινστ. Φυσικοχημείας	1€ / Δείγμα
Άλλα Ινστιτούτα ΕΚΕΦΕ «Δ»	2€ / Δείγμα
Φορείς Δημοσίου	5€ / Δείγμα
Ιδιωτικός Τομέας	10 € / Δείγμα

Φασματοσκοπία μάζας

ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ

GC-MS Micromass Platform II - Δεν λειτουργήσει το 2008 λόγω βλάβης

ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ

Χαρακτηρισμός υλικών με Φασματογράφο Μάζας – Αέριο Χρωματογράφο (GC-MS)
Μελέτη και ταυτοποίηση χημικών ενώσεων

ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ

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

Κοστολόγηση

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

B.1.5. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΚΑΙ ΑΛΛΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Υπεύθυνη: Δρ. Κυριακή Παπαδοκωστάκη
krapadok@chem.demokritos.gr (τηλ. 650 3661)

Διαθέσιμη υποδομή

Σύστημα Διαμορφούμενης Διαφορικής Θερμιδομετρίας Σαρώσεως (Temperature Modulated DSC, TA Instruments 2920 MDSC)

Αντικείμενο

Θερμικός χαρακτηρισμός πολυμερών και άλλων υλικών (θερμοκρασία υάλου, κρυσταλλικότητα κλπ). Παροχή υπηρεσιών προς τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» και προς τρίτους

ΚΟΣΤΟΛΟΓΗΣΗ

Φορείς Δημοσίου: 30.00 Ευρώ ανά δείγμα

Ιδιωτικός τομέας: 40.00 Ευρώ ανά δείγμα

B.1.6 ΦΑΣΜΑΤΟΚΟΠΙΑΣ MICRO-RAMAN

Υπεύθυνοι: Δρ. Π. Φαλάρας, Δρ. Α. Κόντος, Δρ. Β. Λυκοδήμος
likodimo@chem.demokritos.gr

Το εργαστήριο (Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, χώρος Υ28), διαθέτει ερευνητικό φασματόμετρο micro-Raman τύπου RENISHAW- InVia που παρέχει τη δυνατότητα χρήσης:

α) Διαφορετικών πηγών laser στα 514.5 nm (ορατό) και 785 nm (εγγύς υπέρυθρο) και διαφορετικής ισχύος που επιτυγχάνεται με ουδέτερα φίλτρα οπτικής πυκνότητας που έχουν εγκατασταθεί στο σύστημα.

β) Διαφορετικών φραγμάτων περίθλασης, 1800 γρ/mm και 1200 γρ/mm, και φίλτρων αποκοπής της ελαστικά σκεδαζόμενης ακτινοβολίας Rayleigh (NOTCH-EGDE filters) σε διάφορες φασματικές περιοχές εύρους 100-3200 cm^{-1} , με υψηλή διακριτική ικανότητα.

γ) Ειδικού φίλτρου αποκοπής Rayleigh (Tunable New Excitation filter-NEXT) που επιτρέπει τη λήψη μετρήσεων στην περιοχή μικρών κυματιομετρικών (10 cm^{-1} από τη γραμμή laser) απαραίτητων για τη μελέτη νανοδομημένων υλικών.

δ) Διαφορετικών τρόπων εστίασης (normal-confocal) με τη χρήση αντικειμενικών φακών $\times 5$, $\times 20$, $\times 50$, $\times 50$ (μακριάς εστιακής απόστασης), και $\times 100$ που έχουν εγκατασταθεί στο οπτικό μικροσκόπιο του συστήματος.

ε) Συστήματος πολωτών-αναλυτών που επιτρέπουν τη λήψη φασμάτων πόλωσης για την ταυτοποίηση και μελέτη των δονητικών κορυφών των υλικών.



Το σύστημα αυτό αποκτήθηκε με χρήματα (130.000 Ευρώ) από πρόγραμμα της ομάδας του Δρ. Π. Φαλάρα και η συντήρηση και γενικότερη διαχείριση γίνεται από την ίδια ομάδα. Την λειτουργία του έχουν αναλάβει δύο έμπειροι ερευνητές με ειδικές επιστημονικές γνώσεις πάνω στο αντικείμενο: ο Δρ. Αθανάσιος Κόντος (ερευνητής Γ' βαθμίδας του ΙΦΧ) και ο Δρ. Βλάσης Λυκοδήμος (επιστημονικός συνεργάτης, αμοίβεται από το ευρωπαϊκό πρόγραμμα STREP Ti-Nanotubes ΓΕΛ-1394). Το 2008 εντάχθηκε οργανωτικά στο εργαστήριο παρασκευής και χαρακτηρισμού μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων.

Για το 2008, το φασματομέτρο micro-Raman χρησιμοποιήθηκε για το φασματοσκοπικό χαρακτηρισμό και τη μελέτη των δονητικών ιδιοτήτων διαφόρων υλικών καλύπτοντας τις ανάγκες του ΙΦΧ και γενικότερα του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Ειδικότερα, παραγματοποιήθηκαν μετρήσεις σε περισσότερα από 100 δείγματα που αφορούν, συνοπτικά, σε

- Υλικά ναοκρυσταλλικής τιτανίας σε μορφή σκόνης, υμενίων και νανοσωλήνων για φωτοκαταλυτικές και φωτοηλεκτροχημικές εφαρμογές.
- Χρωστικές οργανικές ουσίες και οι υποκαταστάτες τους.
- Φωτοευαίσθητοποιημένες ηλεκτροχημικές κυψελίδες με in situ μετρήσεις του ημιαγωγίμου υποστρώματος, της χρωστικής ουσίας και του ηλεκτρολύτη σε συνθήκες λειτουργίας ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης καθώς και του βάθους.
- Ημιαγώγιμα ναοκρυσταλλικά οξειδία του ενδιαφέροντος του Κέντρου, όπως νανοσωματίδια οξειδίων Fe και νανοσωλήνες ZnO.
- Ταυτοποίηση της ανάπτυξης και ποιότητας νανοσωλήνων άνθρακα σε κεραμικές μεμβράνες και πολυμερή υλικά.

Κοστολόγηση

	ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος	Άλλοι φορείς
Κόστος/Δείγμα/15'	30 €	60 €

Επιστημονική συνεργασία και ειδικές μετρήσεις (μετρήσεις με πολωμένες δέσμες ή μετρήσεις σε χαμηλές συχνότητες πλησίον του laser) γίνονται κατόπιν ειδικής συμφωνίας.

Δημοσιεύσεις (όπου χρησιμοποιήθηκαν μετρήσεις του εργαστηρίου Raman):

1. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Tsoukleris, D.S.; Bernard, M.; Spyrellis, N.; Falaras, P. "Nanostructured TiO₂ films for DSSCS prepared by combining doctor blade and sol gel techniques", *J. Mater. Process. Techn.* 2008, *196*, 243.
2. Kontos, A.G.; Stergiopoulos, T.; Tsiminis, G.; Raptis, Y.S.; Falaras, P. "In-situ micro- and macro- Raman investigation of the redox couple behavior in dsscs", *Inorg. Chim. Acta*, invited paper, 2008, *361*, 761.
3. Kontos, A.I.; Kontos, A.G.; Raptis Y.S.; Falaras P. "Nitrogen modified nanostructured titania: electronic, structural and visible-light photocatalytic properties" *Phys. Stat. Sol. (RRL)*, 2008, *2*, 83.
4. Stergiopoulos, T.; Ghicov, A.; Likodimos, V.; Tsoukleris, D.; Kunze, J.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Dye-sensitized solar cells based on thick highly ordered TiO₂ nanotubes produced by controlled anodic oxidation in non aqueous electrolytic media" *Nanotechnology*, 2008, *19*, 235602 (7pp).
5. Kyrkou, A.; Kontos, A.I.; Papavasileiou G.; Falaras P. "Highly Photoactive Monodisperse Titania Hollow Nanospheres", *J. Adv. Oxid. Technol.* 2008, *11*, 402.

6. Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P. "Phase composition, Size, Orientation and Antenna Effects of Self-Assembled Anodized Titania Nanotube Arrays: A Polarized micro-Raman Investigation", *The Journal of Physical Chemistry C*, 2008, *112*, 12687.
7. Kontos, A.I.; Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Tsoukleris, D.S; Falaras, P.; Rabias, I.; Papavassiliou, G.; Kim, D.; Kunze, J.; Schmuki, P. "Self-Organized Anodic TiO₂ Nanotube Arrays Functionalized by Iron Oxide Nanoparticles", *Chemistry of Materials*, 2009, *21*, 662.
8. Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P.; Harikisun, R.; Desilvestro, J.; Gulloch, G. "Prolonged light and thermal stress effects on industrial dye-sensitized solar cells: a micro-Raman investigation on the long term stability of aged cells" *The Journal of Physical Chemistry C*, 2009, *In Press*.
9. Veziri, Ch. M.; Pilatos, G.; Karanikolos, G. N.; Labropoulos, A.; Kordatos, K.; Kasselouri-Rigopoulou, V.; Kanellopoulos, N. K.; "Growth and optimization of carbon nanotubes in activated carbon by catalytic chemical vapor deposition" *Microporous and Mesoporous Materials*, 2008, *110*, 41.
10. Vermisoglou, E. C.; Romanos, G. E.; Tzitzios, V.; Karanikolos, G. N.; Akylas, V.; Delimitis, A.; Pilatos, G.; Kanellopoulos, N. K. "Synthesis of nanocrystalline gold-carbon nanotube composites and evaluation of their sorption and catalytic properties" *Microporous and Mesoporous Materials*, *In Press*.
11. Veziri, Ch. M.; Karanikolos, G. N.; Pilatos, G.; Vermisoglou, E. C.; Giannakopoulos, K.; Stogios, Ch.; Kanellopoulos N. K. "Growth and morphology manipulation of carbon nanostructures on porous supports" *Carbon*, *In Press*.
12. Maniatakou, A.; Karaliota, S.; Mavri, M.; Raptopoulou, C.; Terzis, A.; Karaliota, A. "Synthesis, characterization and crystal structure of novel mononuclear peroxotungsten(VI) complexes. Insulinomimetic activity of W(VI) and Nb(V) peroxo complexes" *Journal of Inorganic Biochemistry*, *In Press*.
13. Konti, G.; Chatzivasiloglou, E.; Likodimos, V.; Kantonis, G.; Kontos, A. G.; Philippopoulos, A. I.; Falaras, P. "Influence of pyridine ligand nature and the corresponding ruthenium(II) dye molecular structure on the performance of dye-sensitized solar cells" *Photochem. Photobiol. Sci.*, *In Press*.
14. Alexaki, N.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A. G.; Tsoukleris, D. S.; Katsoulidis, A. P.; Pomonis, P. J.; LeClere, D. J.; Skeldon, P.; Thompson, G. E.; Falaras, P. "Mesoporous titania nanocrystals prepared using hexadecylamine surfactant template: crystallization progress monitoring, morphological characterization and application in dye-sensitized solar cells" *Microporous and Mesoporous Materials*, *In Press*.
15. Philippopoulos, A. I.; Tsantila, N.; Demopoulos, C. A.; Raptopoulou, C. P.; Likodimos, V.; Falaras, P.; "Synthesis, characterization and crystal structure of the *cis*-[RhL₂Cl₂]Cl complex with the bifunctional ligand (L) 2-(2'-pyridyl)quinoxaline. Biological activity towards PAF (Platelet Activating Factor) induced platelet aggregation" *Polyhedron*, *In Press*.

B.1.7 Υαλουργείο

Υπεύθυνος: Κος Φερδερικός Μαρβίνος

Τηλ. 210 650 3794

Το Υαλουργείο του ΕΚΕΦΕ «Δ» λειτουργεί υπο την αιγίδα του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και παρέχει υαλουργικές υπηρεσίες στα Ερευνητικά Εργαστήρια όλου του Κέντρου. Το Εργαστήριο Υαλουργείας ανέλαβε και περάτωσε 161 υαλουργικές εργασίες για το έτος 2008. Λεπτομερής καταγραφή των εργασιών αυτών τηρείται στο Ινστιτούτο .

ΚΟΣΤΟΛΟΓΙΟ ΥΑΛΙΝΩΝ ΣΥΣΚΕΥΩΝ ΓΙΑ ΧΗΜΙΚΑ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ

A/A	ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ	ΚΟΣΤΟΣ ΑΝΑ ΤΕΜ (€)
1	Ψυκτήρας με σπύρα	95,60
2	Συσκευή Soxhlet	90,20

3	Γραμμή κενού	560,00
4	Στηλη χρωματογραφίας	95,00
5	Επίθεμα κενού	35,92
6	Δίλαιομη σφαιρική 250ml	32,00
7	Τρίλαιομη σφαιρική 250ml	47,68
8	Παγίδα για rotary evaporator	74,00
9	Επίθεμα αναγωγής	23,90
10	Χωνί με επίθεμα κενού και ιθμό	72,00
11	Επίθεμα με στροφ. 3-way	55,00
12	Bubbler	187,04
13	Φίλτρο με ιθμό 60ml	41,00

- Οι προσφερόμενες τιμές δεν περιλαμβάνουν ΦΠΑ 19% και αφορούν εμπόρευμα ελεύθερο από κάθε άλλη επιβάρυνση.

B.2 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Ραδιοχρονολογήσεις, Ισοτοπικές Αναλύσεις και Μετρήσεις Ραδονίου»

Προσωπικό

Υπεύθυνος Έργου: Δρ.Ν.Ζουριδάκης

Μέλη: Ε.Αρνίδη, Πτυχιούχος ΤΕΙ, σύμβαση έργου

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

Εργασίες

Το 2008 με τη μορφή παροχής υπηρεσιών και για τις διάφορες επιστημονικές συνεργασίες (Πανεπιστήμιο Αθηνών, ΕΛΚΕΘΕ, Πολυτεχνική Σχολή Ξάνθης, Ε.Μ.Πολυτεχνείο κλπ.) έγιναν ισοτοπικές αναλύσεις ^{18}O σε 880 δείγματα νερού και 260 αναλύσεις Τριτίου.

Έσοδα-Έξοδα 2008

Ετήσια έσοδα Εργαστηρίου

57.251,4 €

Ετήσια έξοδα Εργαστηρίου

34.556,38 €

Το Εργαστήριο Ισοτοπικής Υδρολογίας υλοποιεί Συμβάσεις Έργου Παροχής Υπηρεσιών με το ΙΓΜΕ ύψους 110.000 ευρώ κατά τα έτη 2006, 2007, 2008.

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

B.3 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ «ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΕΙΣ»

Αντικείμενο Έργου

Η ρύπανση των υδάτινων συστημάτων από οργανικούς ρύπους όπως οι πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs), πολυχλωριωμένα διφαινύλια (PCBs) και οι κυανοτοξίνες αποτελούν ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα σε διεθνές επίπεδο. Η Ευρωπαϊκή Ένωση έχει θεσπίσει αυστηρότητα 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 (2005-2009). Το γεγονός αυτό παρέχει την δυνατότητα αναβάθμισης του υπάρχοντος εξοπλισμού του Εργαστηρίου (HPLC/UV-Vis ή FL ή CD, IC, GC/ECD ή FID και GC/MS) με την προμήθεια ενός συστήματος LC/MS/MS ενώ παράλληλα με την παροχή υπηρεσιών προς τρίτους δημιουργούνται και νέες ερευνητικές δυνατότητες.



Ειδικότερα οι δραστηριότητες του Εργαστηρίου εστιάζονται στους ακόλουθους τομείς:

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

Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Αναστασία Χισκιά, Ερευνητής Α΄, Προϊσταμένη εργαστηρίου

Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ΄ Βαθμίδας: Δρ. Θεόδωρος Τριάντης, Υπεύθυνος Ποιότητας

Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Αικατερίνη Τσιμελή

Συνεργάτες σε Προγράμματα: Σ. Ζερβού (Άμισθη υποψήφια διδάκτωρ), Γ. Δημητρακόπουλος (Άμισθος υποψήφιος διδάκτωρ)

Εξωτερικοί συνεργάτες: Δρ. Τριαντάφυλλος Καλούλης, ΕΥΔΑΠ.

Προγράμματα – Εισροές από Παροχή Υπηρεσιών

1. «Ενίσχυση της υφιστάμενης υποδομής του Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Εθνικού Κέντρου Έρευνας Φυσικών Επιστημών (ΕΚΕΦΕ) «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ» για την παροχή υπηρεσιών δοκιμών», Υπουργείο Ανάπτυξης, Επιστ. Υπευθ.: Α. Χισκιά, 311,3 Κ€, 2005-2009.
2. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων βυθοκορημάτων λιμένων για εντοπισμό βαρέων μετάλλων και αλογονούχων οργανικών ενώσεων» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην Εταιρεία ΕΔΡΑΣΟΜΗΧΑΝΙΚΗ Α.Ε., 3,6 Κ€.
3. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων σε δείγματα χρώματος για τον προσδιορισμό πολυχλωριωμένων διφαινυλίων (PCBs)» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην Εταιρεία ΕΛ.ΠΕ. ΑΕ, 4,0 Κ€.
4. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων σε δείγματα φίλτρων αέρα για τον προσδιορισμό Βενζο(α)πυρένιου» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην Εταιρεία ΠΛΙΝΙΟΣ ΑΕ, 7,31 Κ€.
5. «Εκτέλεση χημικών αναλύσεων σε δείγματα νερού και χρώματος για τον προσδιορισμό Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην Νομαρχιακή Αυτοδιοίκηση Δράμας – Καβάλας-Ξάνθης, Νομαρχιακό Διαμέρισμα Δράμας, 3,0 Κ€.

Υποδομή

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

Συνεργασίες

Dr. S. Lacorte, Dep. of Environ. Chem., CID-CSIC, Barcelona, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων.
Dr. Jussi Meriluoto, Department of Biochemistry and Pharmacy, Abo Akademi University, Turku, Finland, Method development for the determination and identification of cyanotoxins in surface and drinking water by using SPE and LC/MS-MS.
Prof. D. Dionysiou, University of Cincinnati, Department of Civil and Environmental Engineering Cincinnati, Ohio, USA, Method development for the determination and identification of cyanotoxins in surface and drinking water.
Δρ. Τ. 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.
Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2008 διατέλεσε Προϊσταμένη του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».
Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2008 διετέλεσε Υπεύθυνος Ποιότητας του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

Γ. ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΣΤΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ

Υπεύθυνος Εκπαίδευσης: Δρ. Κ.Λ. Στεφανόπουλος

Αναπληρωτής: Δρ. Γ. Ρωμανός

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 πτυχιικών εργασιών προπτυχιακών φοιτητών
- (ε) στην οργάνωση σεμιναρίων με ομιλητές από την Ελλάδα και το εξωτερικό
- (στ) στη διοργάνωση του Θερινού Σχολείου του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»

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, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
- (β) «Οργανική Σύνθεση και Εφαρμογές στη Χημική Βιομηχανία», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
- (γ) «Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Μεταπτυχιακοί φοιτητές

Οι μεταπτυχιακοί φοιτητές που απασχολούνται στο Ινστιτούτο διακρίνονται σε:

- (α) Υποτρόφους με οικονομική ενίσχυση από τον Δημόκριτο
- (β) Υποτρόφους χωρίς οικονομική ενίσχυση από τον 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 τον Δημόκριτο και 30 περίπου μεταπτυχιακοί φοιτητές που χρηματοδοτούνται από άλλες πηγές.

Μεταπτυχιακές εργασίες που ολοκληρώθηκαν το 2008

Οι Διδακτορικές Διατριβές, τα Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης και οι Διπλωματικές Εργασίες που εκπονήθηκαν στο Ινστιτούτο, αναφέρονται αναλυτικά στα εισαγωγικά του Απολογισμού του Ινστιτούτου

Σεμινάρια Μεταπτυχιακών Φοιτητών

Στα πλαίσια των σεμιναρίων του Ινστιτούτου, νέοι διδάκτορες, οι οποίοι εκπόνησαν τη διδακτορική τους διατριβή στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, παρουσίασαν τις ερευνητικές τους εργασίες. Συγκεκριμένα, έγιναν παρουσιάσεις από τους Δρ. Σ. Παπαγεωργίου (26/9), Δρ. Θ. Οικονόμου (24/10) και Δρ. Β. Νουσιού (28/11).

Σεμινάρια Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (Ιανουάριος 2008 – Δεκέμβριος 2008)

Ημερομηνία	Ομιλητής	Τίτλος
29 / 02 / 2008 12:00	Δρ. Γεώργιος Βουγιουκαλάκης, Εργαστήριο Βιομηχανικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών	From Fullerene Chemistry to Olefin Metathesis: A Fascinating Trip
18 / 03 / 2008 12:00	Καθ. Αθανάσιος Γιάννης, Institut für Organische Chemie, Universität Leipzig, Germany	The Hedgehog Signaling Pathway: Chemical Biology and Medical Perspectives
19 / 05 / 2008 13:00	Δρ. Ιωάννης Πετρόπουλος, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»	Ένα ταξίδι στην απλοϊκότητα
06 / 06 / 2008 12:00	Δρ. Καλλιόπη Κουζέλη, Προϊσταμένη του Κέντρου Λίθου, Υπουργείο Πολιτισμού	Η φθορά των λίθων στις αρχαιότητες
24 / 06 / 2008 12:00	Dr. Werner E.G. Müller, Institut für Physiologische Chemie, Abteilung Angewandte Molekularbiologie, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, Germany	Biofabrication of biosilica glass by sponges
25 / 06 / 2008 11:00	Δρ. Σταματία Αντωνάρακη, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»	Μελέτη μηχανισμών αποικοδόμησης οργανοχλωριωμένων ρύπων: Φωτολυτικά με υπεροξειδίο του υδρογόνου και φωτοκαταλυτικά με 12-βολφραμοφωσφορικό οξύ
27 / 06 / 2008 12:00	Δρ. Κωνσταντίνος Τριψιάνης, Biomolecular NMR-Spectroscopy, Technische Universität München, Germany	Evolution of XPF function through de facto formation of dimers and degenerative mutations
26 / 09 / 2008 12:00	Δρ. Σέργιος Παπαγεωργίου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»	Μελέτη ρόφησης βαρέων μετάλλων από αλγινικό ασβέστιο προερχόμενο από το φαιοφύκος <i>Laminaria Digitala</i>
24 / 10 / 2008 12:00	Δρ. Θωμάς Οικονόμου, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»	Μη-εκτατική Στατιστική και εφαρμογή σε βιολογικά δεδομένα
28 / 11 / 2008 14:00	Δρ. Βασιλική Νουσιού, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»	Υπολογιστική Μελέτη Δημιουργίας Χωροχρονικών Ταλαντώσεων σε Ετερογενείς Καταλυτικές Αντιδράσεις

Όλες οι ομιλίες έλαβαν χώρα στη κοινή αίθουσα σεμιναρίων των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας και Βιολογίας στο ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».

Οργανωτική Επιτροπή: Ι. Λαζάρου, Ε. Μαυρίδου, Θ. Στεριώτης.

Ημερίδα Μεταπτυχιακών Σπουδών (Ζάππειο Μέγαρο)

Το Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος» διοργάνωσε επιτυχώς εκδήλωση με θέμα Μεταπτυχιακές Σπουδές στο ΕΚΕΦΕ «Δ». Η εκδήλωση πραγματοποιήθηκε στο Ζάππειο Μέγαρο (Αίθουσα 6), την Παρασκευή 28 Νοεμβρίου και ώρα 12:00-14:00, στα πλαίσια του Φεστιβάλ Επιστήμης και Τεχνολογίας 2008 που διοργανώθηκε από τη ΓΓΕΤ.

Σκοπός της εκδήλωσης ήταν να ενημερώσει τους προπτυχιακούς/μεταπτυχιακούς φοιτητές και απόφοιτους ΑΕΙ/ΤΕΙ για τα Μεταπτυχιακά Προγράμματα Σπουδών που συμμετέχει το ΕΚΕΦΕ «Δ» και για τη δυνατότητα να πραγματοποιήσουν τη μεταπτυχιακή τους εργασία ή/και τη διδακτορική τους διατριβή στο ΕΚΕΦΕ «Δ», σε συνεργασία με Πανεπιστήμια της Ελλάδας και του εξωτερικού. Οι Υπεύθυνοι Εκπαίδευσης παρουσίασαν τις εκπαιδευτικές και ερευνητικές δραστηριότητες των Ινστιτούτων και ενημέρωσαν τους συμμετέχοντες για τις υποτροφίες που χορηγεί το ΕΚΕΦΕ «Δ» για την εκπόνηση διδακτορικής διατριβής.

4th Summer School on Nanobiotechnology (ΕΚΕΦΕ «Δ»)

Η Δρ. Ε. Μαυρίδου ήταν μέλος της οργανωτικής επιτροπής για τη διοργάνωση του 4th Summer School on Nanobiotechnology "*Methods in micro – nano technology and nanobiotechnology*" ΕΚΕΦΕ «Δ», June 30 - July 10, 2008. Το σχολείο αποτελεί το επίσημο σχολείο του Δικτύου Αριστείας Nano2Life από το 2006. Για την πραγματοποίησή του συνεργάζονται τα ακόλουθα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δ»: Φυσικοχημείας, Μικροηλεκτρονικής, Ραδιοισοτόπων & Ραδιοδιαγνωστικών Προϊόντων και Υλικών, καθώς και το Ίδρυμα Ιατροβιολογικών Ερευνών της Ακαδημίας Αθηνών.

Οργάνωση μαθήματος «Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια Ι»

Η Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων & Εφαρμογών (ΟΠΣΕ), μέλος της οποίας είναι η Δρ. Α. Προβατά, οργανώνει το μάθημα «*Πολύπλοκα Συστήματα: Ειδικά Κεφάλαια Ι*» με σκοπό να εισάγει τους μεταπτυχιακούς φοιτητές στις βασικές έννοιες και τη μαθηματική μεθοδολογία της Πολυπλοκότητας αφ' ενός, και στις Εφαρμογές της στις Φυσικές Επιστήμες αφ' ετέρου. Γ' αυτό και περιλαμβάνει κεφάλαια μεθοδολογίας όπως Μη-γραμμική Δυναμική, Χάος και Fractals και κεφάλαια που αφορούν στις εφαρμογές όπως Διακριτά και Συνεχή Μέσα, Επεξεργασία Βιολογικής Πληροφορίας, Πολύπλοκα Συστήματα στη Βιολογία κ.α. Το μάθημα εντάσσεται μεταξύ των άλλων:

α) στα πλαίσια του Διαμεταπτυχιακού – Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών (ΔΠΜΣ) «*Μαθηματική Προτυποποίηση στις Σύγχρονες Τεχνολογίες και την Οικονομία*», της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών (ΣΕΜΦΕ), του ΕΜΠ, σαν μεταπτυχιακό μάθημα επιλογής και

β) στον εξαμηνιαίο κύκλο μαθημάτων των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας, Βιολογίας και Πυρηνικής Φυσικής του ΕΚΕΦΕ «Δ».

Περιλαμβάνει 48-50 διδακτικές ώρες και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν μεταπτυχιακό μάθημα 4 διδακτικών μονάδων σε Μεταπτυχιακά Τμήματα Θετικών Επιστημών και Πολυτεχνικών Σχολών μετά από συνεννόηση με τους ενδιαφερόμενους. Τα μαθήματα λαμβάνουν χώρα στη κοινή αίθουσα σεμιναρίων των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας και Βιολογίας στο ΕΚΕΦΕ «Δ».

Σεμινάρια: Άνοιξη 2008

Ομάδα Πολύπλοκων Συστημάτων και Εφαρμογών (ΟΠΣΕ)

- Δευτέρα, 18/02/2008 @ 13:00
Ομιλητής: Μανώλης Φλωράτος Τμήμα Φυσικής, Παν. Αθηνών
Τίτλος: **Aspects of Quantum Complexity Theory II**
- Δευτέρα, 24/03/2008 @ 13:00
Ομιλητής: Γρηγόρης Νίκολης Center for Nonlinear Phenomena and Complex Systems
Universite Libre de Bruxelles
Τίτλος: **Μη-γραμμική δυναμική και αυτο-οργάνωση παρουσία μετασταθών φάσεων.**
- Δευτέρα, 14/04/2008 @ 13:00
Ομιλητής: Βασίλης Κωσταντούδης Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, ΕΚΕΦΕ «Δ»
Τίτλος: **Fractals in Nanoelectronics**
- Δευτέρα, 19/05/2008 @ 13:00
Ομιλητής: Γιάννης Πετρόπουλος Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δ»
Τίτλος: **Ένα ταξίδι στην απλοϊκότητα.**
- Δευτέρα, 09/06/2008 @ 13:00
Ομιλητής: Φώτης Διάκονος Τμήμα Φυσικής, Παν. Αθηνών
Τίτλος: **The intermittent dynamics of critical fluctuations**

Όλες οι ομιλίες έλαβαν χώρα στη κοινή αίθουσα σεμιναρίων των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας και Βιολογίας στο ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος».

Οργανωτική Επιτροπή: Γ. Αλμυράντης, Μ. Αξενίδης, Τ. Μπούνης Α. Προβατά, Θ. Στούμπος, Γ. Τσιρώνης, Κ. Χιτζανίδης.

Υποβολή Πρότασης για Διοργάνωση Θερινού Σχολείου

Έγινε υποβολή πρότασης (Ίδρυμα Λάτση) για διοργάνωση Θερινού Σχολείου με τίτλο "Περιβάλλον και Τεχνολογία: Ο Επιστήμονας του Αύριο μπροστά στις νέες Προκλήσεις" με τη συμμετοχή του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, το οποίο έχει να επιδείξει μεγάλη δραστηριότητα σε περιβαλλοντικά θέματα.

