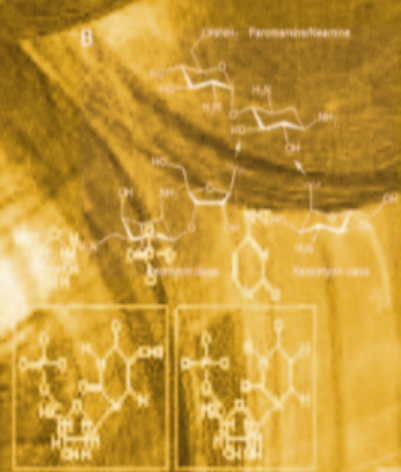
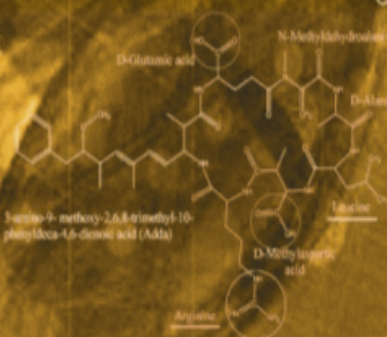


ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ  
ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ



# 2011 Απολογισμός



ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΕΡΕΥΝΑΣ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
«ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

ISBN: 978-960-99515-5-5



ΕΘΝΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΕΡΕΥΝΑΣ  
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
«ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»



**ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ**

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

**ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ**

Φαλάρας Πολύκαρπος

**ΑΝΑΠΛΗΡΩΤΗΣ ΔΙΕΥΘΥΝΤΗΣ**

Προβατά Αστέρω

**ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΓΝΩΜΟΔΟΤΙΚΟ ΣΥΜΒΟΥΛΙΟ**

Στεριώτης Θεόδωρος, (Πρόεδρος)

Βουρλούμης Διονύσιος, (Αντιπρόεδρος)

Ρωμανός Γεώργιος, (Μέλος)

Κατσαρός Φώτης, (Μέλος)

Πιστόλης Γεώργιος, (Μέλος)

**Διεύθυνση:**

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

**Επικοινωνία:**

Διευθυντής:  
τηλ.: 210 650 3644 - 3652,  
e-mail: [pari@chem.demokritos.gr](mailto:pari@chem.demokritos.gr)

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



## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

σελ.

Εισαγωγικά .....	7
Οργανόγραμμα Ινστιτούτου Φυσικοχημείας .....	8
Επιστημονικές Δραστηριότητες .....	9
Οικονομικά Στοιχεία .....	13

### Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ

<b>Πρόγραμμα 1: Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά – - Χημική Βιολογία .....</b>	<b>17</b>
Οικονομικά Στοιχεία Προγράμματος .....	19
Έργα	
1.1 Δομική και υπερμοριακή χημεία .....	20
1.2 Νανο-υλικά οργανωμένης υπερμοριακής δομής .....	29
1.3 Μοριακή Υπολογιστική Χημεία .....	37
1.4 Σύνθεση φυσικών προϊόντων και βιοοργανική χημεία .....	40
1.5 Χημική Βιολογία φυσικών προϊόντων και σχεδιασμένων μορίων .....	44
<b>Πρόγραμμα 2: Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια .....</b>	<b>51</b>
Οικονομικά Στοιχεία Προγράμματος .....	53
Έργα	
2.1 Φωτοοξειδοαναγωγική μετατροπή και αποθήκευση της ηλιακής ενέργειας – ανάπτυξη νέων λειτουργικών υλικών για ενεργειακές, και περιβαλλοντικές εφαρμογές .....	54
2.2 Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές διεργασίες (ηλιακή ενέργεια - περιβάλλον) .....	71
2.3 Φωταύγεια – Ανάπτυξη νέων φωταυγειομετρικών μεθόδων για αναλυτικές εφαρμογές .....	79
2.4 Ισοτοπική υδρολογία .....	83
2.5 Στατιστική μηχανική και μη-γραμμική δυναμική .....	85
<b>Πρόγραμμα 3: Μεμβράνες και Προχωρημένα Νανοδομημένα Υλικά, Χαρακτηρισμός, Μοντελοποίηση και Διεργασίες .....</b>	<b>93</b>
Οικονομικά Στοιχεία Προγράμματος .....	95
Έργα	
3.1 Φαινόμενα μεταφοράς ύλης σε πολυμερή .....	96
3.2 Μεμβράνες και μικροπορώδη υλικά για περιβαλλοντικούς διαχωρισμούς .....	103
3.3 Μοριακή θερμοδυναμική και μοντελοποίηση υλικών .....	123



3.4 Ηλεκτρονική φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε υπερμόρια και νανοδομές .....131

## **Β. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ**

Οικονομικά Στοιχεία Προγράμματος .....139

B.1 Εργαστήριο Παρασκευής και Χαρακτηρισμού Μοριακών και Υπερμοριακών Συστημάτων .....140

B.1.1 Εργαστήριο Φασματοσκοπίας NMR .....140

B.1.2 Εργαστήριο X-RAY .....141

B.1.3 Εργαστήριο Στοιχειακής Ανάλυσης.....142

B.1.4 Εργαστήριο AFM, FT-IR, I.M.S .....142

B.1.5 Εργαστήριο Θερμικής Ανάλυσης Πολυμερών και άλλων υλικών.....144

B.1.6 Εργαστήριο Φασματοσκοπίας MICRO – RAMAN .....145

B.1.7 Υαλουργείο .....147

B.2 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Ραδιοχρονολογήσεις, Ισοτοπικές Αναλύσεις και Μετρήσεις Ραδονίου» .....148

B.3 Εργαστήριο Παροχής Υπηρεσιών «Περιβαλλοντικές Αναλύσεις» .....150

**Γ. ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ .....155**

**Δ. ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ .....163**

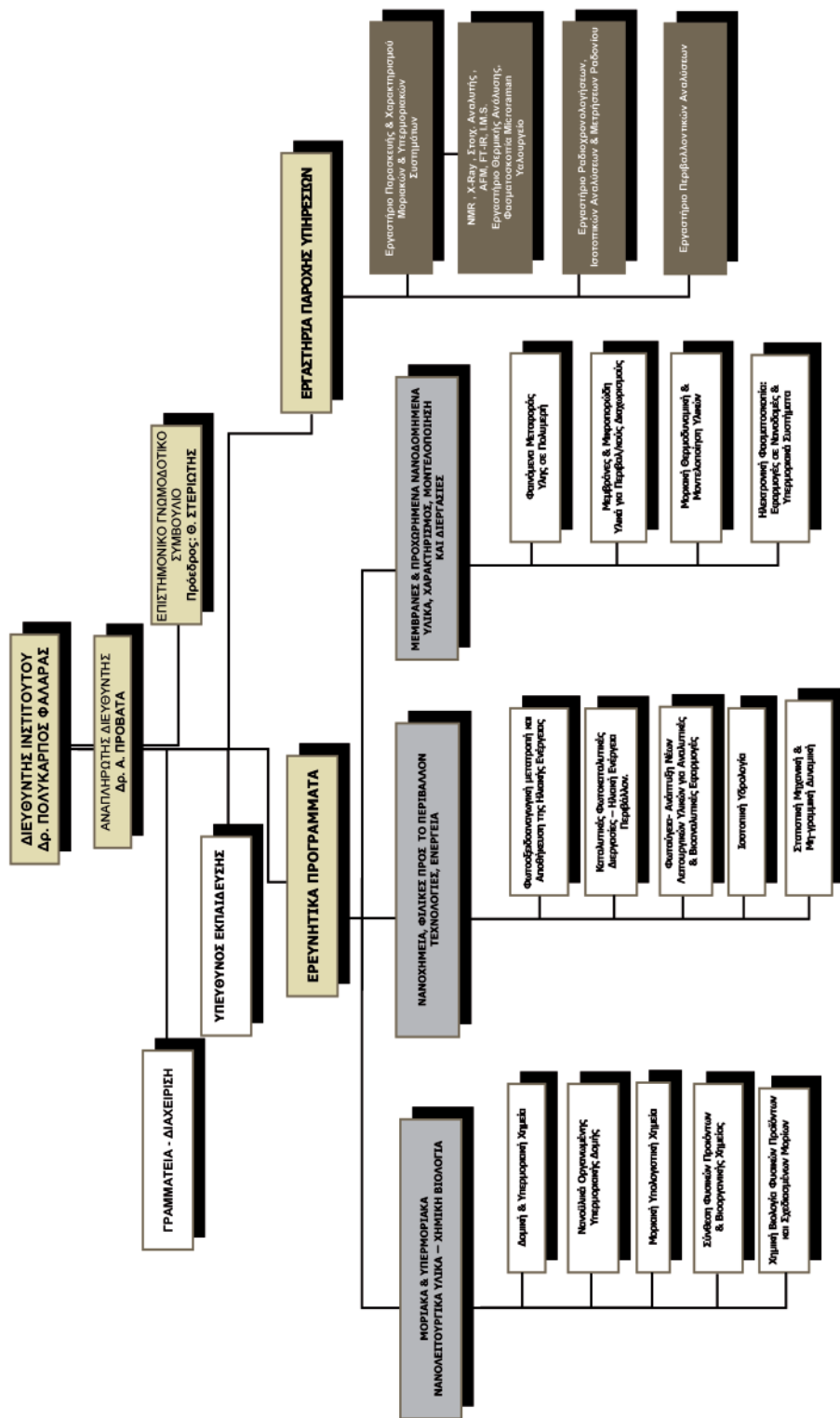
## Εισαγωγικά

Τα τελευταία πέντε χρόνια πραγματοποιήθηκε μία συντονισμένη και οργανωμένη προσπάθεια με στόχο την ανέλιξη του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και την καθιέρωσή του σε σύγχρονη και ανταγωνιστική ερευνητική μονάδα, την εξέλιξή του ως Ελληνικό και Ευρωπαϊκό Κέντρο Αριστείας στον κλάδο της Φυσικοχημείας μέσω: α) ανάδειξης μιας γενιάς νέων ικανών ερευνητών, β) αύξησης κονδυλίων από ανταγωνιστικά προγράμματα, γ) ανανέωσης/συμπλήρωσης εξοπλισμού και δ) ανάπτυξης διμερών συνεργασιών με κορυφαία ιδρύματα του εξωτερικού. Για το σκοπό αυτό, με επίκεντρο τη θεματική περιοχή της Φυσικοχημείας καθιερώθηκε ένα λειτουργικό οργανόγραμμα και ακολουθήθηκε εξωστρεφής πολιτική συνεργασιών με σαφείς επιστημονικούς αλλά και τεχνολογικούς στόχους, υποστηριζόμενη από συγκροτημένη και πρακτική διαχείριση. Παράλληλα αξιοποιήθηκε η πολυθεματικότητα του Κέντρου με τη στρατηγική προώθηση διανοητικής συνεργασίας τόσο σε ελληνικά όσο και σε ευρωπαϊκά ερευνητικά προγράμματα. Όλα αυτά είχαν ως αποτέλεσμα την αύξηση της ανταγωνιστικότητας του Ινστιτούτου με την παραγωγή επιστημονικού αποτελέσματος πολύ υψηλού επιπέδου (αξιόλογες εργασίες σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά, πατέντες, συνέδρια, εκπαίδευση υποψηφίων διδασκόντων και μεταδιδασκόντων) και με την προσέλκυση σημαντικής εξωτερικής χρηματοδότησης. Εξοικονομήθηκαν επιπλέον έσοδα (τα τρέχοντα 14 ευρωπαϊκά προγράμματα του ΙΦΧ ξεπερνούν το ποσό των 7.000.000 Ευρώ, ενώ το καθαρό ταμειακό/διαχειριστικό υπόλοιπο του ΙΦΧ στις 31-12-2011 ανήρχετο στα 128.000 Ευρώ) και αναβαθμίσθηκε ουσιαστικά η ερευνητική υποδομή.

Καλούμαστε εφεξής να λειτουργήσουμε σε ένα πρωτόγνωρο περιβάλλον όπου τρεις από τις πλέον σύγχρονες και παραγωγικές ερευνητικές μονάδες του Κέντρου και της χώρας έχουν συμπυκωθεί σε ένα ενιαίο Ινστιτούτο (Προηγμένων Υλικών, Φυσικοχημικών Διεργασιών, Νανοτεχνολογίας και Μικροσυστημάτων) με μέγεθος πρωτόγνωρο και δυσανάλογο (66 Ερευνητές) για τα Ελληνικά δεδομένα. Η πρόσφατη αναδιάρθρωση του Ερευνητικού Ιστού που αποφασίσθηκε ξαφνικά το Φεβρουάριο του 2012 και πραγματοποιήθηκε χωρίς κανόνες, κριτήρια, σχέδιο και προετοιμασία, δημιούργησε σημαντικά προβλήματα τόσο σε διοικητικό όσο και σε λειτουργικό επίπεδο. Στο όνομα μίας ανύπαρκτης εξοικονόμησης πόρων δεν έγινε αντιληπτό το μέγεθος της καταστροφής που προκλήθηκε και δυστυχώς οι καθ' ύλην αρμόδιοι δεν επέλεξαν τις ενδεικνυόμενες λύσεις. Αν όμως θέλουμε η έρευνα να έχει ουσιαστική συμβολή στην επιστημονική, τεχνολογική και οικονομική ανάπτυξη της πατρίδας μας πρέπει να απαντήσουμε σε ένα βασικό ερώτημα: ποιο είναι το μοντέλο που ακολουθούμε στο χώρο της έρευνας; και να πράξουμε ανάλογα.

Αγία Παρασκευή, Μάρτιος 2012

**Ο Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας**  
Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας





## Συνολικά Στοιχεία ΙΦΧ 2011

Άρθρα σε περιοδικά με κριτές / υπό δημοσίευση	83/26*
Ανακοινώσεις σε Συνέδρια: Διεθνή / Ελληνικά	71/49
Διαλέξεις	36
Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας	1
Διδακτορικές Διατριβές /Μεταπτυχιακά Διπλώματα Εξειδίκευσης/Διπλωματικές	5/5/3
Κεφάλαια σε βιβλία	8

\* In press

## Μεταπτυχιακές εργασίες που ολοκληρώθηκαν το 2011

### Διαδακτορικές Διατριβές

1. Χ. Αγγελίδου «Σύνθεση, χαρακτηρισμός και ιδιότητες κυκλοδεξτρινών με πιθανές βιολογικές εφαρμογές», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Μάιος 2011.
2. Α. Ζάρας. «Θεωρητική Κινητική Μελέτη Αντιδράσεων Ατόμων Cl και Ριζών OH με Κορεσμένες Πτητικές Οργανικές Ενώσεις, Παρουσία Συσσωματωμάτων Νερού», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών και Τεχνολογικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Φεβρουάριος 2011.
3. Ν. Κούβαρης, «Μελέτη συγχρονισμού σε διακριτά βιολογικά συστήματα», Γενικό Τμήμα, Πολυτεχνική Σχολή, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Ιούνιος 2011.
4. Α. Τιμελή, «Ανάπτυξη Προηγμένων Αναλυτικών Μεθόδων για τον Προσδιορισμό Πολυχλωριωμένων Διφαινυλίων, Αλογονομένων Υδρογονανθράκων, Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων και Κυανοτοξινών», Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας III: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ, 2011.
5. Nuno M. F. Garrido, «Prediction of Industrially Relevant Solvation and Partitioning Properties from Molecular Simulation», Laboratory of Separation and Reaction Engineering, University of Porto, Portugal, September 2011.

### Μεταπτυχιακές Εργασίες

1. Μ. Αγαθοκλέους, «Θερμοευαίσθητα υπερδιακλαδισμένα πολυμερή: μελέτη παραγώγων υπερδιακλαδισμένης πολυ(αιθυλενιμίνης)» Διατμηματικό πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών «Επιστήμη και τεχνολογία υλικών», Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούλιος 2011.
2. Ν. Διαμαντώνης, «Μοντελοποίηση Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Διοξειδίου

του Άνθρακα και Μιγμάτων του με Άλλα Αέρια», Διατμηματικό Πρόγραμμα στην Υπολογιστική Μηχανική, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Φεβρουάριος 2011.

3. Ε. Κούσουλας, «Νανοδομημένοι καταλύτες τιτανίας με φωτοκαταλυτική και υπερυδρόφιλη δράση στο ορατό φως», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών «Κατάλυση και Προστασία Περιβάλλοντος», Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Οκτώβριος 2011.
4. Χ. Τσιαμαντάς, «Εξετάζοντας το μηχανισμό της Αγγειογένεσης μέσω του σχεδιασμού και της σύνθεσης αναστολέων του VEGFR-2 για τη θεραπεία του καρκίνου», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών «Νεοπλασματική Νόσος στον Άνθρωπο: Σύγχρονη Κλινικοπαθολογοανατομική Προσέγγιση και Έρευνα», Τμήμα Παθολογικής Ανατομικής, Ιατρική Σχολή, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αύγουστος 2011.
5. Χ. Τσονάκη, «Θεωρητική Μελέτη Δομής και Σταθερότητας Προϊόντων Προσθήκης Ατόμων Αλογόνων σε Αλκυλαλογονίδια», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Δεκέμβριος 2011.

### **Διπλωματικές Εργασίες**

1. Ι. Καπογιάννη, «Ευαισθητοποίηση διοξειδίου του τιτανίου με κβαντικές τελείες PbS», Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούλιος 2011.
2. Λ. Πήλιουρης, «Βελτιστοποίηση φυσικοχημικών ιδιοτήτων αποστάγματος πετρελαίου με χρήση πρόσθετου πολυμερούς», Τμήμα Τεχνολογιών Αντιρρύπανσης, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, ΤΕΙ Δυτικής Μακεδονίας, 2011.
3. Ν. Mantes, “Matrici di silicone modificato con polietilenglicole: caratterizzazione e rolascio di pharmacy”, Università di Pavia, 2011.



## Πατέντες

1. "Per-6-guanidino-, -aminoalkylamino-and -guanidino-alkylamino-cyclodextrins, methods of their synthesis and their use for the compaction of DNA and intercellular delivery", Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K.; Mourtzis, N.; Eliadou, K.; Aggelidou, C. European patent: EP05731803.2, Jan. 19, 2011-03-04

## ΟΙΚΟΝΟΜΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΤΟΥ ΙΦΧ ΓΙΑ ΤΟ 2011

<b>Υποστήριξη Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (κωδ.:462)</b>	<b>Περιγραφή</b>	<b>ΕΣΟΔΑ σε €</b>	<b>Περιγραφή</b>	<b>ΕΞΟΔΑ σε</b>
	Ταμειακό υπόλοιπο 2010	190.533,49	Αμοιβές	0,00
	Χρηματοδότηση Ινστιτούτων από τον Πρόεδρο	60.000,00	Εξοπλισμός	6.781,42
	Παρακρατήσεις σε έργα παροχής υπηρεσιών	1.320,00	Αναλώσιμα	26.001,54
	Μεταφορές από άλλα έργα για από κοινού πληρωμή τιμολογίων.	1.519,15	Μετακινήσεις	10.552,87
			Λοιπά έξοδα	14.667,97
			Μεταφορές-Δάνεια	34.067,84
	<b>ΣΥΝΟΛΟ</b>	<b>253.372,64</b>	<b>ΣΥΝΟΛΟ</b>	<b>92.071,64</b>









# *Απολογισμός 2011*



**Α. ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ  
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΚΑΙ ΕΡΓΑ**

# **Πρόγραμμα 1**

*Μοριακά & Υπερμοριακά  
Νανολειτουργικά Υλικά - Χημική Βιολογία*

## ΕΙΣΡΟΕΣ ΑΠΟ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΣΤΑ ΕΡΓΑ ΤΟΥ ΙΦΧ

### 1. Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά – Χημική Βιολογία

ΕΡΓΟ	ΕΙΣΡΟΕΣ			
	ΙΦΧ	Παροχή Υπηρεσιών	Ευρωπαϊκά έργα	Έργα ΓΓΕΤ
Δομική & Υπερμοριακή Χημεία (Ειρ. Μαυρίδου)	2.800	7.798	217.297	0
Νανο-υλικά Οργανωμένης Υπερμοριακής Δομής (Δ. Τσιούρβας)	2.800	0	0	8.098
Μοριακή Υπολογιστική Χημεία (Ι. Λαζάρου)	2.000	0	0	0
Σύνθεση Φυσικών Προϊόντων & Βιοοργανική Χημεία (Εμμ. Πιτσινός)	2.400	0	0	0
Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων (Δ. Βουρλούμης)	2.400	0	33.749	0

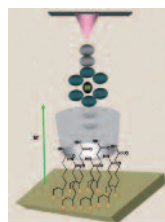
## 1.1 ΔΟΜΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

### Αντικείμενο Έργου

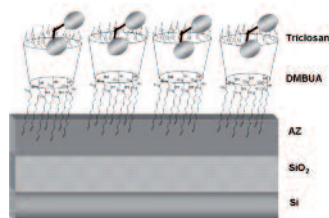
Το εργαστήριο μελετά υπερμοριακά συστήματα κυκλοδεξτρινών, εξειδικεύεται στην σύνθεση λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών και διερευνά την δομή κυκλοδεξτρινών και βιολογικών μακρομορίων, καθώς και συμπλόκων των. Συγκεκριμένως:

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 οι σχέσεις δομής - ιδιοτήτων και μπορούν να βελτιστοποιηθούν διαδικασίες όπως μοριακή αναγνώριση, εναντιοεκλεκτικότητα, μιομοιοπολικές αλληλεπιδράσεις, καθώς και δυναμικές διεργασίες. Εφαρμογές των μελετών αυτών περιλαμβάνουν επιλεκτική σύνδεση του ξενιζομένου μορίου, ελεγχόμενη αποδέσμευση και φαρμακευτικά έκδοχα.

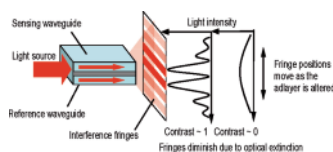
2. Σύνθεση και διερεύνηση των δυνατοτήτων νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για βιοιατρικές εφαρμογές. Τα παράγωγα αυτά: (α) εγκλωβίζουν μικρά βιοδραστικά μόρια (β) αλληλεπιδρούν με μεγαλομόρια όπως DNA, RNA, πρωτεΐνες, π.χ. επιφανειακές λεκτίνες επί κυτταρικής μεμβράνης (γ) διαπερνούν κυτταρικές μεμβράνες (δ) συμπλέκονται με ιόντα μετάλλων π.χ. Gd(III) (νέοι απεικονιστικοί παράγοντες) (ε) συνδέονται μή-ομοιοπολικά μεταξύ τους δημιουργώντας βιομιμητικές δομές (στ) συνδεόμενα με φωτοδραστικά μόρια λει-



*J. Phys. Org. Chem. 2011*



*J. Colloid. Interface Sci. 2011*



*Anal. Chem. 2011*

τουργούν συνδυαστικά ως φορείς φαρμάκων με επιπρόσθετες φωτοτοξικές ιδιότητες.

3. Σύνθεση νέων λειτουργικών παραγώγων κυκλοδεξτρινών για εφαρμογές στη νανοτεχνολογία. Τα παραγωγα αυτά: (α) συνδέονται με επιφάνειες μετάλλων (π.χ. χρυσός) (β) εναποτιθέμενα σε επιφάνειες (π.χ. πυρίτιο), δημιουργούν νανοδομές με οργάνωση σε δύο διαστάσεις (γ) αποτελούν το υπόστρωμα για την δημιουργία δισδιάστατων υπερμοριακών δομών ικανών να μεταδίδουν ηλεκτρικό ή φωτεινό σήμα κατά συγκεκριμένη κατεύθυνση ή να λειτουργούν ως αισθητήρες μικρών μορίων.

4. Δομή βιολογικών μακρομορίων με Κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ και μέθοδοι κρυστάλλωσης μακρομορίων: (α) Προσδιορισμός δομής συμπλόκων RNA με μικρά συνθετικά μόρια για ανάπτυξη νέων αντιβιοτικών (συνεργασία με το εργαστήριο Χημικής Βιολογίας και Σχεδιασμένων Μορίων, Δρ Δ. Βουρλούμης) (β) Προσδιορισμός δομής πρωτεϊνών που συνθέτουν/αποσυνθέτουν silica, silicateins (συνεργασία με το Institut für Physiologische Chemie und Pathobiochemie, Universitätsmedizin der Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, Germany, Professors W.E.G. Müller & H.C. Schröder). (γ) Προσδιορισμός δομής πρωτεϊνών αμινοπεπτιδασών (ERAP, PLAP, συνεργασία με το Εργαστήριο Πρωτεϊνικής Χημείας του Ινστ. Ινστιτούτο Ραδιοϊσοτόπων & Ραδιοδιαγνωστικών Προϊόντων, Δρ Σ. Στρατικός). (δ) Προσδιορισμός δομής μυϊκών πρωτεϊνών και συγκεκριμένα της μυομεϊσίνης (συνεργασία με το EMBL, Hamburg Outstation, Germany, Dr M. Wilmanns) (ε) Προσδιορισμός δομής πρωτεϊνών του οξειδοαναγωγικού συστήματος ωρίμανσης του κυττοχρώματος c (CCMS: cytochrome c maturation system, συνεργασία με το Βιοχημικό Τμήμα του Πανεπιστημίου της Οξφόρδης) (στ) φυσικοχημικές μελέτες κρυστάλλωσης που αποσκοπούν στην παραγωγή κρυστάλλων μακρομορίων υψηλής ποιότητας.

## Προσωπικό

### Ερευνητές:

Δρ. Ειρήνη Μουστακαλή-Μαυρίδου, Ερευνήτρια Α,  
Υπεύθυνη έργου έως 30/09/2011

Δρ. Κωνσταντίνα Γιαννακοπούλου, Ερευνήτρια Α Υπεύθυνη έργου από 1/10/2011

Δρ. Εμμανουήλ Σαρειδάκης, Ερευνητής Δ

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Μαλαματένια-Δήμητρα Μανουηλίδου.



**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Alberto Manfrin (05/2010 – 01/2011 & 04/2011 - 03/2012, Initial Training Network BIOMINTEC, συν-επιβλεψη της Διδακτορικής Διατριβής του στο Πανεπιστήμιο Johannes Gutenberg, Mainz, Germany). Antonio Ricardo Lopes Marouno Gonçaves (Early Stage Researcher, Marie Curie ITN CYCLON, από 1/4/2010).

**Άμισθοι Μεταπτυχιακοί Φοιτητές:** Χρυσή Αγγελίδου (έως 5/2011, μερική απασχόληση, υποψήφια διδάκτωρ).

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες (Post-docs) σε προγράμματα:** Δρ. Θεοδοσίος Θεοδοσίου (εν μέρει), Δρ. Μ. Λαμπροπούλου (CYCLON Project Manager Assistant, μερικής απασχόλησης), Δρ. Linda Piras (Experienced Researcher, Marie Curie ITN CYCLON, από 15/3/2011), Dr. James Birtley (Experienced Researcher Marie Curie IAPP TOPCRYST από 01/03/2010).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ευγένιος Χατζούδης.

## Δημοσιεύσεις

1. Fotiadou, K.; Thanassoulas, A.; Nounesis, G.; Yannakopoulou, K. "Cooperative Heterodimer Formation Between Per-Guadinylated and Carboxylated or Phosphated Cyclodextrins in DMSO and DMSO-Water Studied by NMR Spectroscopy and Microcalorimetry", *Supramol. Chem.* 2011, 23(17), 493-500.
2. Hadjoudis, E.; Yannakopoulou, K.; Hadjiefthimiou, S. D.; Paulidou, A.; Mavridis, I. M. "Supramolecular Control of Photochromism in a  $\beta$ -Cyclodextrin/Schiff Base System", *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.* 2011, 217, 293-298.
3. Lampropoulou, M.; Yannakopoulou, K. "Synthesis and characterisation of novel glycoclusters based on cell penetrating heptakis(6-aminoethylamino-6-deoxy)- $\beta$ -cyclodextrin" *J. Incl. Phen. Macrocyclic Chem.* 2011, 70, 345-352.
4. Maffeo, D.; Velkov, Z.; Misiakos, K.; Mergia, K.; Paulidou, A.; Zavali, M.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "Real Time Monitoring of Nanomolar Binding To a Cyclodextrin Monolayer Immobilised on a Si/SiO<sub>2</sub>/Novolac Surface Using White Light Reflectance Spectroscopy: The Case of Triclosan", *J. Colloid. Interface Sci.* 2011, 358, 369-375.
5. Yannakopoulou, K.; Jicsinszky, L.; Aggelidou, C.; Mourtzis, N.; Robinson, T. M.; Yohannes, A.; Nestorovich, E. M.; Bezrukov, S.; Karginov, V. A. "Symmetry requirements for the effective blocking of pore-forming tox-

- ins: Comparative study with  $\alpha$ -,  $\beta$ -, and  $\gamma$ -cyclodextrin derivatives", *Antimicrob. Agents Chemother. (AAC)* 2011, 55, 3594-3597.
6. Pistolis, G.; Kaloudi-Chantzea, A.; Balomenou, I.; Karakostas, N.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K. "Controlling the Stereospecificity of a Volume-Conserving Adiabatic Photoisomerization within a Nanotubular Self-Assembled Cage: A Reversible Light-Heat Torque Converter" *J. Phys. Chem. B* 2011, 115 (36), 10665-10681.
  7. Philippopoulos, A. I.; Kolovou, E.; Tsierkezos, N. G.; Paulidou, A.; Mavridis, I. M.; Batistatou, S.; Bakeas, E. "Synthesis and characterization of the ruthenium(II) triphenylphosphine complex  $\text{cis-}[\text{RuCl}_2(\text{PPh}_3)_2\text{L}]$  ( $\text{L} = 2$ -[2'-pyridyl]quinoxaline ligand) for the catalytic hydrogenation of ketones" *Global J. Inorg. Chem.* 2011, 2, 92-101.
  8. Boudjemline, A.; Saridakis, E.; Swann, M. J.; Govada, L.; Mavridis, I. M.; Chayen, N. E. "Use of Dual Polarisation Interferometry as a diagnostic tool for protein crystallisation", *Anal. Chem.* 2011, 83, 7881-7887.
  9. Mavridou, D. A. I.; Saridakis, E.; Kritsiligkou, P.; Goddard, A. D.; Stevens, J. M.; Ferguson, S. J.; Redfield, C. "Oxidation-state-dependent protein-protein interactions in disulfide cascades" *J. Biol. Chem.* 2011, 286, 24943-24956.
  10. Katsoulis, I. A.; Kythreoti, G.; Papakyriakou, A.; Koltsida, K.; Anastasopoulou, P.; Stathakis, C. I.; Mavridis, I. M.; Cottin, T.; Saridakis, E.; Vourloumis, D. "Synthesis of 5,6-spiroethers and evaluation of their affinities for the bacterial A-site" *ChemBioChem* 2011, 12, 1188-1192.
  11. Saridakis, E. "A novel Genetic Algorithm-inspired concept for macromolecular crystal optimisation" *Crystal Growth Des.* 2011, 11, 2993-2998.
  12. Saridakis, E.; Khurshid, S.; Govada, L.; Phan, Q.; Hawkins, D.; Crichlow, G. V.; Lolis, E.; Reddy, S. M.; Chayen, N. E. "Protein crystallization facilitated by molecularly imprinted polymers" *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2011, 108, 11081-11086.
  13. Birtley, J. R.; Saridakis, E.; Stratikos, E.; Mavridis, I. M. "Crystal Structure of Human ER Aminopeptidase 2 Reveals Atomic Basis for Distinct Roles in Antigen Processing" *Biochemistry*, [dx.doi.org/10.1021/bi201230p](https://doi.org/10.1021/bi201230p)
  14. Kyllönen, L. E. P.; Chinuswamy, V.; Maffeo, D.; Kefalas, E. T.; Haider, J. M.; Pikramenou, Z.; Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K.; Glezos, N. "Electronic transport between Au surface and STM tip via a multipodal cyclodextrin host - metallo-guest supramolecular system", *J. Phys. Org.*



Chem. in print (DOI 10.1002/proc.1889).

15. Pinotsis, N.; Chatziefthimiou, S. D.; Berkemeier, F.; Beuron, F.; Mavridis, I. M.; Konarev, P. V.; Svergun, D. I.; Morris, E.; Rief, M.; Wilmanns M. "Superhelical architecture of the myosin filament-linking protein myomesin with unusual elastic properties, PLoSBiology, in print.

## Newsletters

1. Irene M. Mavridis, "Crystallography in Greece", International Union of Crystallography Newsletter, 19(4), 17-19 (2011).
2. K. Yannakopoulou, Marie Curie ITN CYCLON Newsletter, September 2011.

## Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Manouilidou, M. D.; Fenyvesi, E.; Yannakopoulou, K. "Staudinger Ligation as a tool for the preparation of cyclodextrin dimers", 17th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC2011), Crete July 10-15, 2011.
2. Mavridis, I. M.; Chatziefthimiou, S. D.; Yannakopoulou K. "Molecular imprinting effect of the guest in  $\beta$ -cyclodextrin inclusion complexes", Acta Cryst. A67, C386-C387 (2011), XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 22 - 30 August, 2011.
3. Birtley, J. R.; Saridakis, E.; Stratikos, E.; Mavridis, I. M. "Crystal structure of an aminopeptidase important in antigenic peptide processing", Acta Cryst. (2011) A67, C549, XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 22 - 30 August, 2011.
4. Saridakis, E.; Mavridou, D. A. I.; Kritsiligkou, P.; Goddard, A. D.; Stevens, J. M.; Ferguson, S. J.; Redfield, C. "Reduced nDsbD sheds light on protein-protein interactions in disulfide cascades" Acta Cryst. (2011) A67, C350, XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, 22 - 30 August, 2011.

## Διαλέξεις

1. E. Saridakis. "Crystallisation of biological macromolecules: how to put methodology to good use" Invited lecture at the National Hellenic Research Foundation, April 2011.
2. I. M. Mavridis. "Introduction to macromolecular crystallography" Inter-



national Workshop on Macromolecular Crystal Growth and Optimisation Methods (31 October - 3 November 2011) N.C.S.R. "Demokritos", Athens.

3. E. Saridakis. "Dual Polarisation Interferometry as a diagnostic tool for protein crystallisation" " International Workshop on Macromolecular Crystal Growth and Optimisation Methods (31 October - 3 November 2011) N.C.S.R. "Demokritos", Athens.
4. E. Σαριδάκης. "Κρυστάλλωση πρωτεϊνών: από την τέχνη στην επιστήμη" Διάλεξη στο Τμήμα Βιοχημείας & Βιοτεχνολογίας Παν/μίου Θεσσαλίας, Λάρισα, Δεκέμβριος 2011.
5. T. Θεοδοσίου, «PDT: from vampire folklore to a modern clinical anti-cancer modality» 2nd CYCLON Summer School, "Photochemistry and Applications in Photosensitizable Anticancer Drugs", CNR-ISOF Bologna, Italy, September 26-28, 2011.

### **Παρουσιάσεις σε Συναντήσεις Προγραμμάτων**

- K. Yannakopoulou, Presentation of CYCLON project activity, Mid-term review meeting, CYCLON, CNR-ISOF Bologna, Italy, September 29, 2011.
- L. Piras «Synthesis of S-Nitroso-BCD Derivatives: Experimental Studies and Investigation on their Physical and Biological Properties», 5th CYCLON meeting, CNR-ISOF Bologna, Italy, September 29, 2011.
- A. R. Goncalves, "ALA and MLA interactions with cyclodextrins" 5th CYCLON meeting, CNR-ISOF Bologna, Italy, September 29, 2011.
- A. R. Goncalves "Efficient purification of Cyclodextrin-3-hydroxyprophyrin conjugates", 4th CYCLON meeting, March 25th 2011, Toledo, Spain.

### **Διπλώματα Ευρεσιτεχνίας**

1. "Per-6-guanidino-, -aminoalkylamino-and -guanidino-alkylamino-cyclodextrins, methods of their synthesis and their use for the compaction of DNA and intercellular delivery", Mavridis, I. M.; Yannakopoulou, K.; Mourtzis, N.; Eliadou, K.; Aggelidou, C. European patent: EP05731803.2, Jan. 19, 2011-03-04



## Διδακτικό Έργο

### Διδακτορικές Διατριβές

1. Χρυσή Αγγελίδου «Σύνθεση, χαρακτηρισμός και ιδιότητες κυκλοδεξτρινών με πιθανές βιολογικές εφαρμογές» Διδακτορική διατριβή, Χημικό Τμήμα Πανεπιστημίου Αθηνών, Μάιος 2011.

### Διοργανώσεις

Στα πλαίσια του προγράμματος Marie Curie Industry-Academia Partnerships and Pathways, TOPCRYST, διοργανώθηκε το Workshop: INTERNATIONAL WORKSHOP "Macromolecular Crystal Growth and Optimisation Methods", 31/10/ - 03/ 11/ 2011

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. 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, Programme coordinator και Επιστημονικός Υπεύθυνος: Ε. Σαρειδάκης.
2. EU Πρόγραμμα: People- ITN (Networks for Initial Training), BIOMINTEC, "Biomineralization: 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, Επιστημονικός Υπεύθυνος: Ε. Μαυρίδου
3. Επιχορήγηση από το Εμπειρικό Ίδρυμα: "Αυτοοργανωμένα υπερμοριακά υλικά με ηλεκτρικές και οπτικές ιδιότητες". (Συνολική χρηματοδότηση έργου € 12000), Επιστημονικός Υπεύθυνος: Ε. Μαυρίδου.
4. Portuguese R & T Development Project "Lung CYD-DDS (cyclodextrin-based drug delivery systems) for inhalation". Διάρκεια: 2010 – 2014. Προϋπολογισμός για τον «Δημόκριτο» ~ € 12500. Επιστημονικός Υπεύθυνος: Ε. Μαυρίδου.
5. EU Πρόγραμμα: People- ITN (Initial Training Network) «CYCLON», ITN237962: "Novel multifunctional cyclodextrin-based nanocarriers for drug encapsulation and delivery as a strategy to overcome current therapeutic drawbacks". Διάρκεια: 48 μήνες (1/10/2009–30/09/2013), προϋπολογισμός για τον «Δημόκριτο» € 411432, Network Co-ordinator και Επιστημονικός Υπεύθυνος για τον «Δημόκριτο»: Κ. Γιαννακοπούλου.

## Ερευνητική Υποδομή

Εξοπλισμός εργαστηρίου για οργανική σύνθεση και κρυστάλλωση μικρών μορίων και πρωτεϊνών. Αυτόκλειστο (Parr), οπτικά μικροσκόπια, περιθλασίμετρο 4-κύκλων. Ερευνητές του εργαστηρίου είναι υπεύθυνοι μεγάλων οργάνων και υποδομών του Κέντρου: Δρ Ε. Μ. Μαυρίδου & Δρ. Ε. Σαρειδάκης για τη συσκευή συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων μακρομορίων (Rigaku, R-axis IV), τη συσκευή χαμηλών θερμοκρασιών (Oxford Cryosystems) και στερεοσκοπικό μικροσκόπιο (Olympus). Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου για τα NMR 250 (Bruker) και 500 MHz (Bruker) (όργανα ΙΦΧ).

## Συνεργασίες

ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” : Δρ. Ν. Γλέζος & Δρ. Κ. Μισιακός, ΙΜΗΛ, και Δρ. Κ. Μεργιά, ΙΠΤΑ, (λειτουργικά υλικά για οπτοηλεκτρικές εφαρμογές), Δρ. Μ. Παραβατού, ΙΡΡΠ (μελέτες σε κύτταρα), Δρ. Λ. Λεοντιάδης, ΙΡΡΠ, (Φασματοσκοπία Μάζας), Δρ. Γ. Νούνεσης, ΙΡΡΠ, (μικροθερμιδομετρία). Δρ. Σ. Στρατικός, ΙΡΡΠ (παραγωγή πρωτεϊνών), Dr. Zoe Pikramenou, University of Birmingham (παράγωγα κυκλοδεξτρινών), Prof. N. E. Chayen, Imperial College, London (macromolecular crystallisation), Dr. Vladimir Karginov, Innovative Biologics, Inc., USA (βιολογικές μελέτες με κυκλοδεξτρίνες), Dr. M. Wilmanns EMBL-Hamburg, Germany (κρυσταλλογραφία μυϊκών πρωτεϊνών), Professors W.E.G. Müller & H.C. Schröder, Johannes Gutenberg-Universität, Mainz, Germany (κρυσταλλογραφία πρωτεϊνών από σπόγγους). Assoc. Prof H-M. Cabral Marques, Faculty of Pharmacy, U. of Lisbon, Portugal (pharmaceutical applications of cyclodextrins).

## Άλλες Δραστηριότητες

*Ε. Μαυρίδου*

1. Επιστημονικός υπεύθυνος 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.
2. Υπεύθυνος του έργου “Κέντρο Κρυσταλλογραφίας Μακρομορίων” που λειτουργεί με τη συμμετοχή τριών Ινστιτούτων από το Δημόκριτο (ΙΦΧ, ΙΒ και ΙΡΡΠ) και επτά άλλων ερευνητικών ή πανεπιστημιακών φορέων της χώρας.
3. Αξιολογήτης δημοσιεύσεων των περιοδικών της Royal Soc. of Chemistry;



της Am. Chem. Soc; των περιοδικών Acta Crystallogr., J. Biolog. Inorg. Chem., Chem. Eur. J., Carbohydr. Res. J. Mol. Struct., J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem. κ.α.

4. Αξιολογήτης προγραμμάτων του European Science Foundation, του Ministry of Science and Technological Development of the Republic of Serbia, καθώς και του Romanian Research Assessment.
5. Μέλος του Editorial Review Board του περιοδικού International Journal of Systems Biology and Biomedical Technologies.

*Κ. Γιαννακοπούλου*

1. Υπεύθυνη Εργαστηρίου NMR (500 MHz και NMR 250 MHz) για το ΙΦΧ.
2. Υπεύθυνη πυρασφαλείας Κτιρίου Σχολής και μέλος επιτροπής ασφαλείας του ΙΦΧ.
3. Κριτής στα Περιοδικά J. Incl. Phenom. Macrocyclic Chem., Org. Biomol. Chem., Eur. J. Org. Chem., Synthesis, J. Mol. Str. J. Haz. Mat.
4. Coordinator, CYCLON, <http://itn-cyclon.eu/>



*Ε. Σαρειδάκης*

1. Κριτής στα περιοδικά J Am Chem Soc (JACS), Crystal Growth & Design, J. Haz. Mat.
2. Μέλος του Δ.Σ. της Διεθνούς Οργανώσεως Βιολογικής Κρυστάλλωσης (IOBCr)
3. Coordinator Ευρωπαϊκού Προγράμματος IAPP-TOPCRYST

## 1.2 ΝΑΝΟ-ΥΛΙΚΑ ΟΡΓΑΝΩΜΕΝΗΣ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

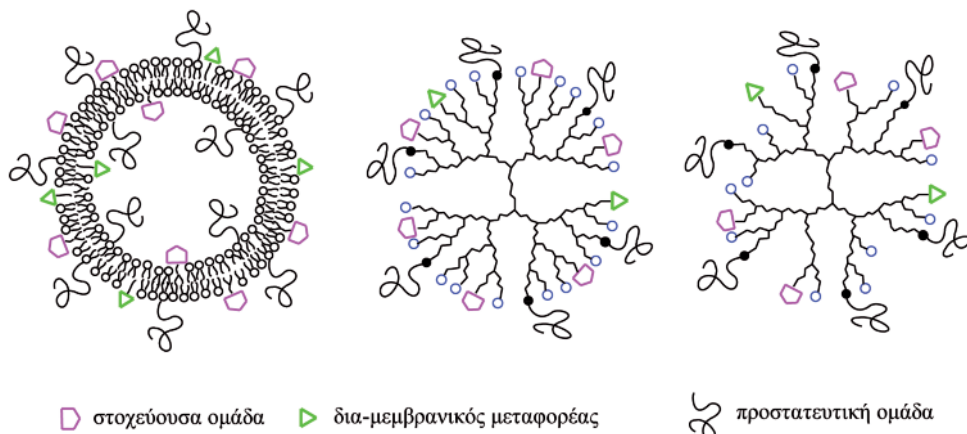
### Αντικείμενο έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην σύνθεση και χαρακτηρισμό λειτουργικών και πολυλειτουργικών νανοσωματιδίων και συγκεκριμένα λιποσωμάτων και δενδριτικών πολυμερών καθώς και στην εφαρμογή τους ως φορέων γονιδιακού υλικού ή φαρμακευτικών ενώσεων, είτε συμβατικών ή πρωτεϊνικής φύσης. Βασιζόμενοι στην ιδιότητα των δενδριτικών πολυμερών να εγκλείουν ενώσεις έχουν αναπτυχθεί λειτουργικά δενδριτικά πολυμερή για την απομάκρυνση ρύπων από το νερό. Παράλληλα χρησιμοποιούνται δενδριτικά πολυμερή για την βιομημική σύνθεση υβριδικών νανοσωματιδίων πολυμερούς/πυριτίας, υπό φιλικές προς το περιβάλλον συνθήκες, τα οποία μελετώνται ως προς την ικανότητά τους να απομακρύνουν ρύπους από το νερό. Επιπλέον δενδριτικά πολυμερή κατάλληλης χημικής δομής χρησιμοποιούνται ως μήτρες (templates) για περιβαλλοντικά φιλική σύνθεση νανοσωματιδίων υδροξυαπατίτη στο νερό υπό φυσιολογικές συνθήκες θερμοκρασίας και pH, ως βιομημικά ανάλογα αντίστοιχων βιολογικών διεργασιών.

Αναλυτικότερα οι δραστηριότητες του εργαστηρίου περιλαμβάνουν:

#### *1. Πολυλειτουργικά Λιποσώματα ως Φορείς Φαρμάκων*

Παρασκευάζονται και χαρακτηρίζονται λιποσώματα των οποίων η εξωτερική επιφάνεια τροποποιείται κατά τέτοιο τρόπο ώστε να καταστούν πολυλειτουργικά με την εισαγωγή λιπιδίων που φέρουν στο πολικό τους τμήμα διάφορες λειτουργικές ομάδες. Συγκεκριμένα εισάγονται ομάδες στόχευσης, προστατευτικές ομάδες, ομάδες που διευκολύνουν την διέλευση δια μέσου της κυτταρικής μεμβράνης ή/και ομάδες ιχνηθέτες. Τέτοια συστήματα στοχεύουν στην ανάπτυξη αποτελεσματικών φορέων φαρμάκων ή γονιδιακού υλικού καθώς συνδυάζουν ικανότητα στοχεύσεως προς συγκεκριμένα κύτταρα στόχους, σταθερότητα στο βιολογικό περιβάλλον, δυνατότητα διελεύσεως δια μέσου των κυτταρικών μεμβρανών και δυνατότητα εντοπισμού τους εντός του κυττάρου.



Σχηματική απεικόνιση πολυλειτουργικών λιποσωμάτων, δενδριμερών και υπερδιακλαδισμένων πολυμερών.

## 2. Πολυλειτουργικά Δενδριμερικά και Υπερδιακλαδισμένα Πολυμερή ως Φορείς Φαρμάκων και Γονιδιακού Υλικού

Πραγματοποιείται πολλαπλή εισαγωγή λειτουργικών ομάδων στην επιφάνεια δενδριμερικών και υπερδιακλαδισμένων πολυμερών (δενδριτικών πολυμερών) με σκοπό την ανάπτυξη πολυλειτουργικών δενδριτικών φορέων για να εφαρμοσθούν είτε ως φορείς φαρμάκων ή ως φορείς γονιδιακού υλικού. Οι νανοσωματιδιακοί αυτοί φορείς εμφανίζουν ταυτόχρονα ικανότητα στοχεύσεως, σταθερότητα στο βιολογικό περιβάλλον, δυνατότητα διελεύσεως δια μέσου των κυτταρικών μεμβρανών και δυνατότητα εντοπισμού εντός του κυτάρου.

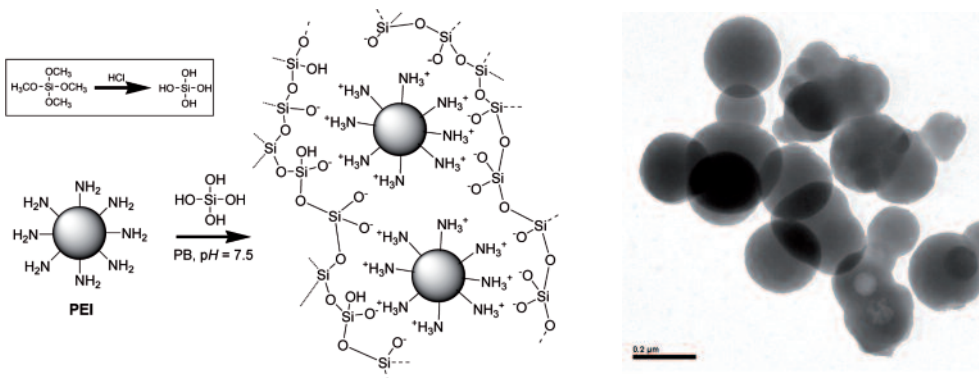
Χρησιμοποιώντας τους παραπάνω φορείς μελετάται η ικανότητα μεταφοράς βιοδραστικών ενώσεων είτε με την χρησιμοποίηση πολυστοιβαδικών λιποσωμάτων ως κυτταρικά μοντέλα ή με *in vitro* πειράματα χρησιμοποιώντας επιλεγμένες καρκινικές κυτταρικές σειρές. Μελετάται επίσης η χρήση λειτουργικών θετικά φορτισμένων δενδριτικών πολυμερών ως φορέων γονιδιακού υλικού μέσω σχηματισμού συμπλόκων τους με DNA. Η μελέτη των συμπλόκων δενδριτικών πολυμερών-DNA γίνεται τόσο με φυσικοχημικές μεθόδους όσον και *in vitro* με την χρήση κατάλληλων κυτταρικών σειρών.

### 3. Δενδριτικά Πολυμερή για την Παραγωγή Υπερκαθαρού Νερού

Κατάλληλως τροποποιημένα λιπόφιλα δενδριτικά πολυμερή έχουν την ιδιότητα να εγκλείουν λιπόφιλες ενώσεις στο εσωτερικό τους και κατά συνέπεια μπορούν να απομακρύνουν οργανικούς ρύπους από το νερό. Έχουν επίσης αναπτυχθεί οργανοπυριτικά δενδριμερή τα οποία επικαλύπτουν κεραμικά φίλτρα για την παραγωγή επίσης υπερ-καθαρού νερού του οποίου οι παραμένοντες ρύποι βρίσκονται σε επίπεδο ppb. Πραγματοποιήθηκε η ανάπτυξη και η βελτιστοποίηση μεθόδων εναπόθεσής των παραπάνω υλικών σε κεραμικές πορώδεις μεμβράνες για την παραγωγή συστημάτων ικανών να εφαρμοστούν εύκολα σε υπάρχουσες μονάδες καθαρισμού νερού.

### 4. Περιβαλλοντικά Φιλικά Βιομιμητική Σύνθεση Νανοσωματιδίων

4.1. Υβριδικά νανοσωματίδια δενδριτικών πολυμερών/πυριτίας παρασκευάστηκαν μέσω βιομιμητικής σύνθεσης στο νερό και σε φυσιολογικές συνθήκες θερμοκρασίας και pH με την χρήση υπερδιακλαδισμένης πολυ(αιθυλενιμίνης) και πυριτικού οξέος. Τα σωματίδια αυτά μελετήθηκαν κυρίως ως προς την ικανότητα συγκράτησης διαφόρων ρύπων νερού και συγκεκριμένα πολυαρωματικών ενώσεων αλλά και τοξικών βαρέων μετάλλων.



Διαδικασία παραγωγής υβριδικών νανοσφαιρών πυριτίας με την χρήση πολυ(αιθυλενιμίνης) και μικρογραφία τους από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο διέλευσης



4.2. Δενδριτικά πολυμερή έχουν επίσης χρησιμοποιηθεί ως βιομημητικές μήτρες (templates) για τον σχηματισμό νανοσωματιδίων υδροξυαπατίτη. Μελετήθηκε η ικανότητα χρησιμοποίησης τους ως υποστρώματων για την σύνδεση και πολλαπλασιασμό κυτταρικών σειρών οστεοβλαστών. Επιπλέον, έγινε δυνατή η ομοιοπολική πρόσδεση υπερδιακλαδισμένης πολυ(αιθυλενιμίνης) σε επιφάνεια τιτανίου και η ακόλουθη ανάπτυξη ενός βιοσυμβατού στρώματος υδροξυαπατίτη ισχυρά συνδεδεμένου στην επιφάνεια του που αναμένεται να βελτιώσει την βιοσυμβατότητα και εφαρμοσιμότητα εμφυτευμάτων τιτανίου.

## Προσωπικό

### Ερευνητές:

Δρ Δημήτρης Τσιούρβας, Ερευνητής Α', Υπεύθυνος έργου, Δρ Ωραιοζήλη Σιδεράτου, Ερευνητής Β'.

**Ειδικό Επιστημονικό Προσωπικό ΙΔΑΧ:** Δρ Μιχαήλ Αρκάς.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες:** Δρ. Θεοδόσιος Θεοδοσίου (μερική συμμετοχή, ως μεταδιδακτορικός συνεργάτης με όλα τα έργα του προγράμματος «Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά - Χημική Βιολογία» του Ινστιτούτου).

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Μαρία Αγαθοκλέους.

**Υποψήφιοι Διδάκτορες:** Νικολέτα Στεριώτη (άμισθος), Κλεοπάτρα Ελευθερίου (άμισθος)

**Επιστημονικοί συνεργάτες:** Δρ Κων/νος Παλαιός.

## Δημοσιεύσεις

1. Theodossiou, T. A.; Sideratou, Z.; Tsiourvas, D.; Paleos, C. M. "A Novel mitotropic oligolysine nanocarrier: Targeted delivery of covalently bound D-luciferin to cell mitochondria", *Mitochondrion*, 2011, 11, 982–986.
2. Tsiourvas, D.; Tsetsekou, A.; Kammenou, M.-I.; Boukos, N. "Controlling the Formation of Hydroxyapatite Nanorods with Dendrimers", *J. Am. Ceram. Soc.*, 2011, 94, 2023–2029.
3. Paleos, C. M.; Tsiourvas, D.; Sideratou, Z., "Interaction of Vesicles: Adhesion, Fusion and Multicompartment Systems Formation", *Chem-BioChem*, 2011, 12, 510 – 521.
4. Roussi, E.; Tsetsekou, A.; Tsiourvas, D.; Karantonis, A. "Novel hybrid organo-silicate corrosion resistant coatings based on hyperbranched polymers", *Surface & Coatings Technology*, 2011, 205, 3235–3244.



5. Tsiourvas, D.; Tsetsekou, A.; Arkas, M.; Diplas, S.; Mastrogianni, E. "Covalent attachment of a bioactive hyperbranched polymeric layer to titanium surface for the biomimetic growth of calcium phosphates", *J. Mater. Sci.: Mater. Med.*, 2011, 22, 85–96.
6. Paleos, C. M.; Tsiourvas, D.; Sideratou, Z.; "Preparation of Multicompartment Lipid-Based Systems Based on Vesicle Interactions", *Langmuir*, Invited Feature Article, in Press.

### **Κεφάλαια σε βιβλία**

1. Tsiourvas, D.; Arkas, M., Paleos, C.M. "Organic/inorganic hybrid materials based on functional dendrimers and hyperbranched polymers for water purification", In: *Water Treatment Processes*, Chapter 13, ISBN: 978-1-62100-352-6 Editor: Kostas Demadis., 2011 Nova Science Publishers, Inc. In Press.

### **Ανακοινώσεις σε συνέδρια**

1. Papavasiliou, A.; Tsetsekou, A.; Arkas M.; Tsiourvas, D. "Synthesis of highly porous silica with a novel hybrid sol-gel method using dendritic polymers as templates", 12th International Conference of the European Ceramic Society, Stockholm, Sweden, 19-23 June 2011.

### **Διαλέξεις**

1. C. M. Paleos D. Tsiourvas, Z. Sideratou, Formation of Lipid-based Multicompartment Systems and a Hypothesis on the Creation of Eukaryotic Cells, CHEMIOGENESIS, 2011, 27-30 October 2011, Heraklion, Greece.
2. Tsiourvas, D. "Triggered dendritic drug delivery systems", COST TRAINING SCHOOL AND WORKSHOP Dendrimers as Composites of Advanced Drug Delivery nano-Systems (aDDnSs). Biomedical Applications, October 3-8, 2011 Athens, Greece (invited lecture).
3. Z. Sideratou, Functional dendritic polymers as drug delivery systems, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, May 5, 2011, Athens, Greece (invited lecture).



## 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: 2010-2011, Εαρινό εξάμηνο.
2. Τσιούρβας, Δ. Διδασκαλία μαθημάτων «Υγρά κρυσταλλικά πολυμερή» και «Δενδριμερή και εφαρμογές τους», Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ “Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της”, Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτος: 2010-2011, Εαρινό εξάμηνο.
3. Αρκάς, Μ. “Πολυμερισμοί σε Οργανωμένα Συστήματα”, Πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών ΕΠΕΑΕΚ “Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της”, Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ, Ακαδ. Έτος: 2010-2011, Εαρινό εξάμηνο.

### Μεταπτυχιακά διπλώματα εξειδίκευσης (MSc)

1. Αγαθοκλέους Μαρία, «Θερμομειωμένα υπερδιακλαδισμένα πολυμερή: μελέτη παραγώγων υπερδιακλαδισμένης πολυ(αιθυλενιμίνης)», Ε. Μ. ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ, Διατμηματικό πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών “Επιστήμη και τεχνολογία υλικών”, υποστήριξη: Ιούλιος 2011.

## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. Ανάπτυξη σύνθετων νανοδομημένων βιοεμφυτευμάτων (BIOMINY), Δράση «Συνεργασία», ΠΡΑΞΗ Ι, ΕΠΑΝ-II: «Συνεργατικά έργα μικρής και μεσαίας κλίμακας», Ε & Τ Θεματικός τομέας προτεραιότητας: 4, Κωδικός Έργου: 09ΣΥΝ-41-757. Έναρξη 17-02-2011, Διάρκεια 3 έτη, Προϋπολογισμός για το εργαστήριο: 29.150 €.
2. “High-throughput development of carbon-polymer nanocomposites for marine applications – CARBONCOMP”, FP7-PEOPLE-2011-IAPP, Κωδικός Έργου: 286413. Έναρξη 01-09-2011, Διάρκεια 4 έτη, Total Budget: 1537194 €, Προϋπολογισμός “Δ”: 388.211 € [Σε συνεργασία με το εργαστήριο Μεμβρανών και μικροπορωδών υλικών].

## Ερευνητική Υποδομή

Το εργαστήριο είναι κατάλληλα εξοπλισμένο για σύνθεση οργανικών ενώσεων και για τον φυσικοχημικό χαρακτηρισμό των υλικών που αναπτύσσει. Ο εξοπλισμός περιλαμβάνει σύστημα οπτικής μικροσκοπίας και μικροσκοπίας φθορι-

σμού, σύστημα θερμικής ανάλυσης (DSC, TGA), φασματοφωτόμετρα UV-Visible και φθορισμού, σύστημα δυναμικής σκέδασης του φωτός, σύστημα Multi-angle light scattering, και συσκευή μέτρησης ζ-δυναμικού. Παράλληλα βρίσκεται σε λειτουργία εργαστήριο καλλιέργειας κυττάρων.

## **Συνεργασίες**

S. Cohen, Marian Gertner Institute for Medical Nanosystems, Tel-Aviv University (ανάπτυξη νέων δενδριτικών φορέων φαρμακευτικών ουσιών), Τσετσέκου, Α. (ΕΜΠ, ανάπτυξη υβριδικών δενδριτικών/κεραμικών νανο-υλικών), Δρ. Νούνεσης, Γ. (Ινστ. ΡΡΠ, ΕΚΕΦΕ "Δ", Θερμοδυναμική μελέτη μοριακής αναγνώρισης), Δρ. Μπούκος, Ν. (Ινστ. Επιστήμης υλικών, ΕΚΕΦΕ "Δ", ηλεκτρονική μικροσκοπία TEM).

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ Δ. Τσιούρβας κατά το έτος 2011 διατέλεσε

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά Journal of Crystal Growth, Colloids and Surfaces A.
2. Αξιολογητής υποψηφίων για μεταπτυχιακό δίπλωμα ειδίκευσης του ΙΚΥ.
3. Μέλος του Editorial Board του περιοδικού ISRN Chemical Engineering.

Η Δρ Ζ. Σιδεράτου κατά το έτος 2011 διετέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Langmuir, Biopolymers, Biomaterials, Acta Biomaterial, Recent Patents on Nanomedicine, Recent Patents on Chemical Engineering.
2. Αξιολογητής επιστημονικών προτάσεων του UEFISCDI (The Executive Agency for Higher Education, Research, Development and Innovation Funding), Romania.

Ο Δρ Μ. Αρκάς κατά το έτος 2010 διετέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Journal of Applied Polymer Science, Journal of Material sciences & Engineering, Journal of Hazardous Materials, Journal of the American Chemistry Society, Water Research.
2. Μέλος της American Nano Society.



Ο Δρ Κ. Μ. Παλαιός κατά το έτος 2010 διατέλεσε:

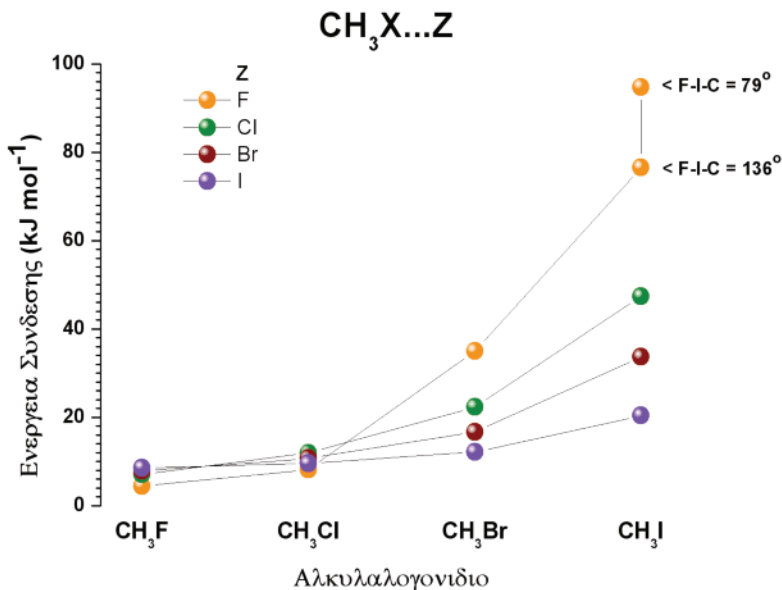
1. Κριτής στα επιστημονικά περιοδικά: *Angew. Chem.*, *J. Phys. Chemistry*, *J. Amer. Chem. Soc.*, *Chem. Reviews*, *Macromolecules*, *Biomacromolecules*, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, *J. Colloid and Interface Chemistry*, *Liquid Crystals*, *Chemistry, A European Journal*, *Langmuir*, *European Polymer Journal*.
2. Μέλος του Editorial Advisory Board του επιστημονικού περιοδικού *Molecular Crystals and Liquid Crystals*.
3. Μέλος του Editorial Board του επιστημονικού περιοδικού *NanoLIFE Journal*.
4. Member of the Management Committee του Προγράμματος COST ACTION CM0703.

## 1.3 ΜΟΡΙΑΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

### Αντικείμενο Έργου

Η ερευνητική δραστηριότητα του Εργαστηρίου Μοριακής Υπολογιστικής Χημείας περιλαμβάνει τη διερεύνηση της χημικής δραστηριότητας και του μηχανισμού χημικών αντιδράσεων, τον υπολογισμό μοριακών ιδιοτήτων (ενθαλπίες διάσπασης δεσμών, δυναμικά ιονισμού, ενθαλπίες σχηματισμού και συντελεστές ταχύτητας αντιδράσεων), καθώς και τη εξέταση και βελτίωση της αξιοπιστίας των θεωρητικών υπολογισμών, χρησιμοποιώντας μεθόδους υπολογιστικής χημείας (ημιεμπειρικές, συναρτησιακής πυκνότητας (DFT) και ab-initio).

Ειδικότερα, κατά το 2011, το ερευνητικό έργο του Εργαστηρίου εστιάστηκε στα θέματα: 1) Χημική δραστηριότητα μιάς σειράς αλογονομένων οργανικών οξέων (τοξικά προϊόντα της αποικοδόμησης των Freons), στην αέρια φάση καθώς και σε υδατικό διάλυμα και την συσχέτιση των αποτελεσμάτων με τα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Για το σκοπό αυτό, υπολογίστηκαν οι ενθαλπίες διάσπασης των δεσμών C-H και O-H και τα δυναμικά ιονι-



Ενέργειες σύνδεσης (σε kJ/mol) των προϊόντων προσθήκης  $\text{CH}_3\text{X}\dots\text{Z}$  (X,Z=F,Cl,Br,I) στο επίπεδο θεωρίας CCSD(T)/IB[DT]



σμού αλογονομένων οργανικών οξέων με 2-5 άτομα άνθρακα, περιέχοντα άτομα φθορίου ή χλωρίου με μεθόδους DFT. Η παρουσία του διαλύτη (νερό) προσομοιώθηκε με την μέθοδο Self-Consistent Reaction Field (SCRF). Επιπροσθέτως, υπολογίστηκαν οι μεταβατικές καταστάσεις των χημικών αντιδράσεων των οξέων με την ελεύθερη ρίζα του υδροξυλίου OH, με σκοπό την εφαρμογή της Θεωρίας Μεταβατικής Κατάστασης για τον υπολογισμό των συντελεστών ταχύτητας και του ρυθμού αποικοδόμησης των οξέων στο περιβάλλον.

2) Συστηματική περιγραφή των αλληλεπιδράσεων ατόμων αλογόνων (F,Cl,Br,I) με αλκυλαλογονίδια στο αρχικό βήμα των αντιστοιχών χημικών αντιδράσεων, με σκοπό την ερμηνεία κινητικών και μηχανιστικών ιδιομορφιών της ατμοσφαιρικής αποικοδόμησης ορισμένων αλογονομένων χημικών ενώσεων. Μελετήθηκε μία σειρά αλκυλαλογονιδίων  $CH_nX_iY_j$  ( $X,Y=F,Cl,Br,I$ ,  $i,j=0-2$ ,  $n=(4-(i+j))$ ), σε ab-initio επίπεδα θεωρίας περιλαμβάνοντα τις μεθόδους MP2 και CCSD(T) σε συνδυασμό με τα σύνολα βάσεων cc-pVXZ και aug-cc-pVXZ ( $X=D,T,Q$ ). Οι ενέργειες σύνδεσης των προϊόντων προσθήκης υπολογίστηκαν σε αξιόπιστα επίπεδα θεωρίας με την μέθοδο CCSD(T) στο όριο άπειρης βάσης.

## Προσωπικό

Ερευνητές: Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου, Ερευνητής Β', υπεύθυνος του έργου  
Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»: Χριστίνα Τσονάκη

## Δημοσιεύσεις

1. Lazarou, Y. G.; Talukdar, R. K.; Burkholder, J. B. Papadimitriou V. C. "Atmospheric Chemistry of  $CF_3CF_2=CH_2$  and (Z)- $CF_3CF=CHF$ : Cl and  $NO_3$  Rate Coefficients, Cl Reaction Product Yields, and Thermochemical Calculations", J. Phys. Chem A 2011, 115, 167 - 181.

## Διαλέξεις

1. Λαζάρου, Ι. «Η επίδραση του ανθρώπινου πολιτισμού στη χημεία της ατμόσφαιρας», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" (Ιούλιος 2011).
2. Τσονάκη, Χ. «Θεωρητική Μελέτη Δομής και Σταθερότητας Προϊόντων Προσθήκης Ατόμων Αλογόνων σε Αλκυλαλογονίδια», Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών (Δεκέμβριος 2011).

## **Διδακτικό Έργο**

### **Διδακτορικές Διατριβές**

1. Αριστοτέλης Ζάρας. “Θεωρητική Κινητική Μελέτη Αντιδράσεων Ατόμων Cl και Ριζών OH με Κορεσμένες Πτητικές Οργανικές Ενώσεις, Παρουσία Συσσωματωμάτων Νερού”, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, υποστήριξη: 25 Φεβρουαρίου 2011.

### **Μεταπτυχιακά διπλώματα εξειδίκευσης**

1. Χριστίνα Τσονάκη, “Θεωρητική Μελέτη Δομής και Σταθερότητας Προϊόντων Προσθήκης Ατόμων Αλογόνων σε Αλκυλαλογονίδια”, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών, υποστήριξη: 2 Δεκεμβρίου 2011.

## **Ερευνητική Υποδομή**

Σύστημα προσωπικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών με λειτουργικά συστήματα Microsoft Windows XP και διανομές Linux (RedHat, Fedora Core και Centos OS).

## **Συνεργασίες**

ΕΚΕΦΕ «Δ»: Δρ. Ε. Μαυρίδου, Δρ. Κ. Γιαννακοπούλου.

Ελλάδα: Καθηγ. Π. Παπαγιαννακόπουλος και Δρ. Β. Χ. Παπαδημητρίου (Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης), Καθηγ. Θ. Γέμτος και Επίκ. Καθηγ. Σ. Φουντάς (Τμήμα Γεωπονίας, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).

Εξωτερικό: Dr. J. B. Burkholder (Earth System Research Laboratory, National Oceanic and Atmospheric Administration, Boulder, Colorado, USA), Καθηγ. I. I. Morozov (Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia).

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Ιωάννης Γ. Λαζάρου κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Μέλος της Επιτροπής Διαλέξεων του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Υπεύθυνος Ξεναγήσεων στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
3. Μέλος της επταμελούς επιτροπής της διδακτορικής διατριβής του Δρ. Αριστοτέλη Ζάρα, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Φεβρουάριος 2011, Ηράκλειο.
4. Μέλος της τριμελούς επιτροπής του μεταπτυχιακού διπλώματος εξειδίκευσης του κ. Ευαγγέλου Τσιάρα, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Νοέμβριος 2011, Ιωάννινα.



## 1.4 ΣΥΝΘΕΣΗ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΒΙΟΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

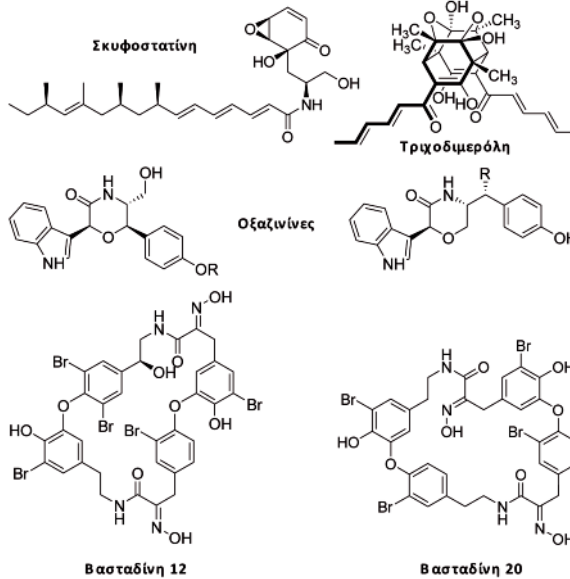
### Αντικείμενο Έργου

Τα φυσικά προϊόντα, με την ποικιλία και την πολυπλοκότητα των δομών τους αλλά και την πολυσιχιδή βιολογική τους δράση, εξακολουθούν να αποτελούν πρόκληση για την οργανική χημεία αλλά και πηγή έμπνευσης για το σχεδιασμό και τη μελέτη νέων ενώσεων με πιθανές εφαρμογές στη βιολογία και την ιατρική (52% των 1184 νέων φαρμάκων της περιόδου 1981-2006 προέρχονται από φυσικά προϊόντα. Την ίδια πηγή έχουν 77% των αντιβακτηριακών και 73% των αντικαρκινικών φαρμάκων. Βλέπε: D.J. Newman, G.M. Cragg "Natural products as sources of new drugs over the last 25 years" J. Nat. Prod. **2007**, 70, 461-477). Η χρήση των φυσικών προϊόντων για τη μελέτη βιολογικών διεργασιών και την πιθανή κλινική αξιοποίησή τους είναι ένας σημαντικός σύγχρονος τομέας έρευνας ο οποίος προϋποθέτει τη στενή διεπιστημονική συνεργασία. Λόγω των συχνά πολύ μικρών ποσοτήτων που μπορούν να απομονωθούν από την φύση, των πιθανών ανεπιθύμητων παρενεργειών τους και/ή της κακής φαρμακολογικής τους συμπεριφοράς, είναι συχνά απαραίτητη (τουλάχιστο κατά το στάδιο της διερεύνησης της φαρμακευτικής τους αξίας και των προκλινικών μελετών) η χημική παρασκευή τους και/ή τροποποίηση της δομής τους.

Ο σχεδιασμός, η σύνθεση, ο καθαρισμός και ο χαρακτηρισμός νέων οργανικών ενώσεων, ως επί το πλείστον φυσικών προϊόντων ή αναλόγων 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, N-SMase).

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

**Μεταδιδακτορικοί συνεργάτες:**

1) Δρ. Θεοδόσιος Θεοδοσιού, μερική συμμετοχή, ως συνεργάτης με όλα τα έργα του προγράμματος «Μοριακά και Υπερμοριακά Νανολειτουργικά Υλικά» και «Χημική Βιολογία» του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.

2) Δρ. Πολυξένη Αλεξίου

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:**

1) Νικόλαος Αθηναίος (διακοπή από 1/5/2011 λόγω στρατιωτικής θητείας).

2) Άννα Κάπελα (σε συνεργασία με το έργο «Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων»).



**Μεταπτυχιακοί φοιτητές:** Κορνηλία Μητσοπούλου (άμισθη)  
**Προπτυχιακοί φοιτητές:** Δημήτρης Καλοφωλιάς (1/7-15/10/2011)  
**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ηλίας Κουλαδούρος, Καθηγητής,  
Γενικό Τμήμα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

### Δημοσιεύσεις

1. Pitsinos, E.N.; Vidali, V.P.; Couladourous, E.A. "Diaryl Ether Formation in the Synthesis of Natural Products", *Eur. J. Org. Chem.*, 2011, 1207–1222.  
Η δημοσίευση αυτή συμπεριλήφθει στον κατάλογο των πλέον ανεγνώσμενων άρθρων (most accessed) του περιοδικού για την περίοδο 1/2011–12/2011.
2. Piroa, B.; Kapella, A.; Le, V.H.; Anquetin, G.; Zhang, Q.D.; Reisberg, S.; Noel, V.; Tran, L.D.; Duc, H.T.; Pham, M.C. "Towards the detection of human papillomavirus infection by a reagentless electrochemical peptide biosensor", *Electrochimica Acta*, 2011, 56, 10688–10693.

### Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Athinaios, N.; Vidali, V.P.; Pitsinos, E.N. "Total synthesis of Laurenditerpenol: Preparation of key intermediates and evaluation of end-game strategies", 17th European Symposium on Organic Chemistry, Crete, Greece, 10-15 July 2011.

### Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)", COST Action CM0602, 2007-2011.
2. "Chemical Biology with Natural Products", COST Action CM0804, 2009-2012

### Ερευνητική Υποδομή

Πολωσίμετρο, Συσκευή παράλληλης/συνδιαστικής σύνθεσης, HPLC.

### Συνεργασίες

Prof. A. Giannis (Universität Leipzig, Fakultät für Chemie und Mineralogie, Institut für Organische Chemie, Leipzig, Germany), Δρ. Π. Αργείτης (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής, Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. «Δ»).

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Εμμανουήλ Πιτσινός κατά το έτος 2011 διετέλεσε:

1. Μέλος του Management Committee της COST Action CM0602 “Inhibitors of angiogenesis: design, synthesis and biological exploitation (AngioKem)”.
2. Αναπληρωματικό μέλος του Management Committee της COST Action CM0804 “Chemical Biology with Natural Products”.
3. Μέλος του Editorial Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού Marine Drugs.
4. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψήφιου διδάκτορα Νικόλαου Αθηναίου (Τμήμα Χημείας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών).
5. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της υποψήφιας διδάκτορος Ελένης Πριτσιβέλη (Γενικό Τμήμα, Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών).



## 1.5 ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ ΦΥΣΙΚΩΝ ΠΡΟΪΟΝΤΩΝ ΚΑΙ ΣΧΕΔΙΑΣΜΕΝΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

### Αντικείμενο Έργου

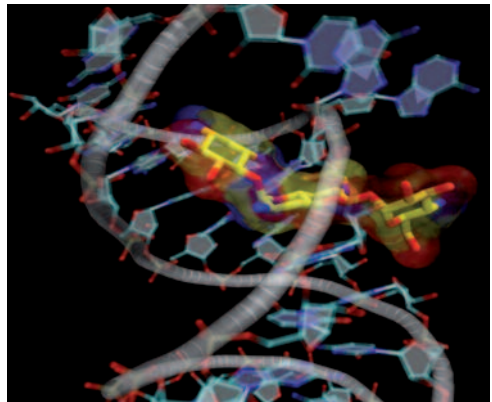
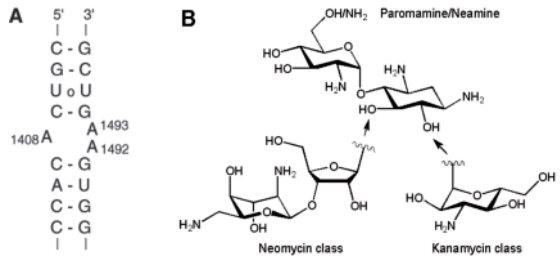
Το εργαστήριό μας εκπροσωπεί μια νέα θεματική περιοχή του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας που ονομάζεται «Χημική Βιολογία Φυσικών Προϊόντων και Σχεδιασμένων Μορίων» και ξεκίνησε τον Ιούλιο του 2005. Η έρευνά μας επικεντρώνεται στη μελέτη βιολογικών συστημάτων, DNA, RNA και πρωτεϊνών, μέσω των αλληλεπιδράσεών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

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

Η 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 εστιάζει σε υποστρώματα που συνδέονται επιλεκτικά στα ριβοζονουκλεϊνικά (RNA) τμήματα του βακτηριακού ριβοσώματος, το οποίο αποτελεί στόχο μίας πληθώρας γνωστών αντιβιοτικών. Επιπλέον, εκμεταλλευόμενοι τις σύγχρονες τεχνολογίες ανάλυσης της λειτουργίας των πρωτεϊνών, π.χ. σύζευξη μικρών μορίων – βιοτίνης, εξερευνάται η δυνατότητα αναγνώρισης νέων συστατικών του RNA ως πιθανών στόχων αλληλεπίδρασης με μικρά μόρια θεραπευτικού ενδιαφέροντος. Τέλος, η διερεύνηση της



τεταρτοταγούς δομής του RNA θα επιτευχθεί με τη σύνθεση «δυναμικών βιβλιοθηκών», στις οποίες το κάθε τελικό προϊόν θα παράγεται παρουσία του βιολογικού του στόχου, προσομοιάζοντας το αποτέλεσμα της φυσικής επιλογής. Η προσέγγισή μας θα είναι επεκτάσιμη και σε άλλες περιοχές του RNA, όπως η GTPase-συσχετιζόμενη περιοχή στο 23S ριβοσωμικό rRNA, η οποία είναι στόχος του αντιβιοτικού θειοστρεπτόν (thiostrepton), ή όπως οι εσωτερικές ριβοσωμικές περιοχές εισόδου (IRES), οι οποίες είναι σημαντικοί στόχοι στη θεραπεία παθογόνων ιών, όπως η πολιομυελίτιδα, το AIDS 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.



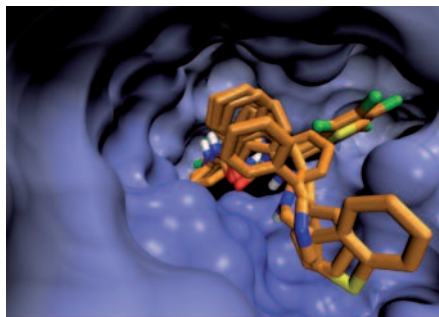
## 2. Στοχευόμενη μεταφορά βιοφαρμάκων διαμέσου συζυγών νανοδομών.

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 νανο- και μικρο-μέτρου, με σκοπό την στοχευόμενη μεταφορά θεραπευτικών πεπτιδίων και πρωτεϊνών (βιοφάρμακα) 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 πεπτιδίο/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 απ' ενός μια σημαντική επιστημονική πρόκληση, και απ' ετέρου μια ενδεχόμενη επαναστατική πρόοδος της φαρμακευτικής βιομηχανίας.

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

Αγγειογένεση είναι η διεργασία με την οποία αναπτύσσονται νέα τριχοειδή αγγεία από ήδη υπάρχοντα, και έχει αναγνωριστεί ως ένας κυρίαρχος μηχανισμός στην ανάπτυξη όγκων και μεταστάσεων. Η πρόσφατη κλινική επιτυχία του Avastatin® έχει κατοχυρώσει την θεραπεία του καρκίνου με αναστολείς της αγγειογένεσης, που στοχεύουν συγκεκριμένα τον παράγοντα ανάπτυξης των αγγειακών ενδοθηλίων (vascular endothelial growth factor - VEGF). Η διμερική αυτή γλυκοπρωτεΐνη αλληλεπιδρά με δύο διαμεμβρανικούς υποδοχείς υψηλής συγγένειας που ανήκουν στην οικογένεια των τυροσινικών κινασών, τον VEGF-R1 (αρχικά Flt-1) και τον VEGF-R2 (ή KDR), με αποτέλεσμα τον πολλαπλασιασμό των ενδοθηλιακών κυττάρων και την ανάπτυξή τους σε νέα αγγεία. Συμπερασματικά, αξιοποίηση των αναστολέων των VEGF-R τυροσινικών κινασών, οι οποίοι στοχεύουν στην ενδοκυτταρική μετάδοση του σήματος, θα μπορούσε να



αποδειχθεί σωτήρια για την θεραπεία διαφόρων μορφών καρκίνου. Εντός των 5 τελευταίων ετών έχει γίνει σημαντική προσπάθεια να παραχθούν εκλεκτικοί αναστολείς των VEGF-R, με σημαντικά αποτελέσματα για την περίπτωση του VEGF-R2. Η ερευνητική μας προσπάθεια αποσκοπεί στην υπολογιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων αυτών για τον σχεδιασμό, τη σύνθεση και την βιολογική αξιοποίηση νέων αναστολέων του VEGF-R2.

## Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Διονύσιος Βουρλούμης, Ερευνητής Α', υπεύθυνος του έργου  
**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Άννα Παπαδοπούλου, Άννα Καπέλλα (σε συνεργασία με το εργαστήριο Σύνθεσης Φυσικών Προϊόντων και Βιοοργανικής Χημείας)

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Χρήστος Σταθάκης (EXT), Δρ. Ιωάννης Κατσούλης (EXT), Δρ. Γεωργία Κυθραιώτη (EXT), Δρ. Thomas Cottin (EXT), Δρ. Αθανάσιος Παπακυριακού (EXT), Δρ. Θεοδόσιος Θεοδοσίου (μερική συμμετοχή, ως συνεργάτης με όλα τα έργα του προγράμματος «Μοριακά και Υπερμοριακά Ναυλοειτουργικά Υλικά» και «Χημική Βιολογία» του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας).

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Πανούλα Αναστασοπούλου (EXT), Κωνσταντίνα Κολτσιδα, Γιάννης Μαυρίδης, Χρήστος Τσιαμαντάς (ΕΚΠΑ, Ιατρική).

**Συνεργάτες Ερευνητές:** Τηλέμαχος Κοσμίδης (B.Sc., ΕΚΠΑ).

## Δημοσιεύσεις

1. Cottin, T.; Pyrkotis, C.; Stathakis, C.I; Mavridis, I.; Katsoulis, I.A.; Anastasopoulou, P.; Kythreoti, G.; Zografos, A.L.; Nahmias, V.R.; Papakyriakou, A.; Vourloumis, D. "Designed spiro-bicyclic analogues targeting the ribosomal decoding center", *ChemBioChem* 2011, 12, 71-87.
2. Kythreoti, G.; Vourloumis, D., "A Homo sapiens Cytoplasmic Ribosomal Decoding A-site Affinity Screen Evaluating Aminoglycoside- and Analogues-Binding", *Anal. Biochem.* 2011, 412, 102-107.
3. Zervoudi, E.; Papakyriakou, A.; Georgiadou, D.; Evnouchidou, I.; Gajda, A.; Poreba, M.; Salvesen, G. S.; Drag, M.; Hattori, A.; Swevers, L.; Vourloumis, D.; Stratikos, E. "Probing the S1 specificity pocket of the aminopeptidases that generate antigenic peptides", *Biochem. J. Structure* 2011, 435, 411-420.
4. Katsoulis, I. A.; Kythreoti, G.; Papakyriakou, A.; Koltzida, K.; Anastasopoulou, P.; Stathakis, C. I; Mavridis, I.; Cottin, T.; Saridakis, E.; Vourloumis, D. "Synthesis of 5,6-spiroethers and evaluation of their affinity



- for the bacterial A-site”, ChemBioChem 2011, 12, 1188-1192.
5. Androutsopoulos, V.; Papakyriakou, A.; Vourloumis, D.; Spandidos, D. A. “Comparative CYP1A1 and CYP1B1 Substrate and Inhibitor Profile of Dietary Flavonoids”, Bioorg. Med. Chem. 2011, 19, 2842-2849.
  6. Androutsopoulos, V.P.; Ruparelia, K.C.; Papakyriakou, A.; Filippakis, H.; Tzatsakis, A.M., Spandidos, D.A. “Anticancer effects of the metabolic products of the resveratrol analogue, DMU-212: Structural requirements for potency”, European Journal of Medicinal Chemistry 2011, 46, 2586-2595.

### Διαλέξεις/Συνέδρια

1. Dionisios Vourloumis, “Chemical Biology of Small Molecules that Target the Bacterial Ribosome” invited lecturer, Aristotle University of Thessaloniki, Department of Chemistry, Thessaloniki, Greece, May 27, 2011.
2. Dionisios Vourloumis, “Synthesis of 5,6-spiroethers and evaluation of their affinity for the bacterial A-site”, 17th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 2011), Crete, Greece, July 10-15 2011.

### Διδακτικό Έργο

Επίβλεψη και καθοδήγηση 5 υποψηφίων διδασκόντων.

### Μεταπτυχιακές Διατριβές

1. Τσιαμαντάς Χρήστος. “Εξετάζοντας το μηχανισμό της Αγγειογένεσης μέσω του σχεδιασμού και της σύνθεσης αναστολέων του VEGFR-2 για τη θεραπεία του καρκίνου”, ΜΠΣ: Νεοπλασματική Νόσος στον Άνθρωπο: Σύγχρονη Κλινικοπαθολογοανατομική Προσέγγιση και Έρευνα, Τμήμα Παθολογικής Ανατομικής, Ιατρική Σχολή Εθνικού & Καποδιστριακού Παν/μίου Αθηνών, υποστήριξη: 18 Αυγούστου 2011.

### 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€, 2007-2011).
2. COST action CM0804, Chemical Biology with Natural Products, 2008-2012.
3. ΘΑΛΗΣ, «H2S BIOLOGY: Hydrogen Sulfide a new endogenous regulator



*of angiogenesis: signaling, physiology/pathophysiology and development of pharmacological inhibitors.»*, Υπεύθυνος Ομάδας 3, Πανεπιστήμιο Πατρών, 2012-2016.

## Συνεργασίες

Prof. T. Hermann (UCSD, San Diego USA, Βιοχημεία του RNA), Prof. E. Theodorakis (UCSD, San Diego USA, Οργανική Σύνθεση), Prof. A. Giannis (University of Leipzig, Germany, Αγγειογένεση), Dr. Eric Ennifar (Institut de Biologie Moleculaire et Cellulaire – CNRS, Strasbourg, FRANCE, HIV), Δ. Γεωργιάδης (ΥΟΑ, Athens Greece, Οργανική Σύνθεση/ Φασματοσκοπία), Σ. Στρατικός (ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», ΙΡΡΠ, Ανοσοτροποποίηση).

## Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Διονύσιος Βουρλούμης κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Αναπληρωτής Εθνικός Εκπρόσωπος COST action CM0804, Chemical Biology with Natural Products.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, Bioorganic and Medicinal Chemistry, ChemBioChem, ChemMedChem, Inorganic Chemistry, Journal of Medicinal Chemistry, Organic Chemistry International, European Journal of Medicinal Chemistry, Organic Letters, European Journal of Organic Chemistry.
3. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Ιωάννης Μαυρίδης (ΕΚΠΑ), Χρήστος Τσιαμαντάς (ΕΚΠΑ), Άννα Παπαδοπούλου (ΠΠ), Πανούλα Αναστασοπούλου (ΕΚΠΑ), Κωνσταντίνα Κολτσιδα (ΕΚΠΑ).
4. Αντιπρόεδρος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (2011-2012).

## Διακρίσεις-Βραβεία

1. Δύο υποψήφιοι διδάκτορες του εργαστηρίου μας, η Πανούλα Αναστασοπούλου και ο Ιωάννης Μαυρίδης, έλαβαν δύο από τα τρία βραβεία «Λεωνίδας Ζέρβας» για το 2011 στην Οργανική Σύνθεση.
2. Η πρόταση «Exploit Aminoglycoside Mimics as Therapeutic Agents» AMGMIMICS (Protocol Number 17088/6.12.10) του μεταδιδακτορικού μας συνεργάτη Χρήστου Σταθάκη επιλέχθηκε για χρηματοδότηση στα εργαστήριά μας.



3. Η πρόταση «Rational Design and Development of Inhibitors for Endoplasmic Reticulum Aminopeptidases that Regulate Antigen Processing and Presentation» IMMUNOREG (Protocol Number 16719/6.12.10) του μεταδιδακτορικού μας συνεργάτη Αθανάσιου Παπακυριακού επιλέχθηκε για χρηματοδότηση.

### **Επικοινωνία**

Δρ. Δ. Βουρλούμης

vourloumis@chem.demokritos.gr, Tel. +30 210 6503624,

Fax. +30 210 6511766

Web site: [http://vourloumis\\_group.chem.demokritos.gr/](http://vourloumis_group.chem.demokritos.gr/)

## **Πρόγραμμα 2**

*Νανοχημεία, Φιλικές προς  
το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια*



## ΕΙΣΡΟΕΣ ΑΠΟ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΣΤΑ ΕΡΓΑ ΤΟΥ ΙΦΧ

### 2. Νανοχημεία, Φιλικές προς το Περιβάλλον Τεχνολογίες, Ενέργεια

ΕΡΓΟ	ΕΙΣΡΟΕΣ			
	ΙΦΧ	Παροχή Υπηρεσιών	Ευρωπαϊκά Έργα	Έργα ΓΓΕΤ
Φωτοξειδοαναγωγική Μετατροπή και Αποθήκευση της Ηλιακής Ενέργειας (Π. Φαλάρας)	2.800	1.530	407.487	0
Καταλυτικές – Φωτοκαταλυτικές Διεργασίες (Ηλιακή Ενέργεια – Περιβάλλον) (Α. Χισκιά)	2.400	10.000	0	0
Φωταύγεια – Ανάπτυξη νέων φωτοσυστοιμιετρικών μεθόδων για αναλυτικές εφαρμογές (Κ. Παπαδόπουλος)	2.400	859	0	0
Ισοτοπική Υδρολογία (Ν. Ζουριδάκης)	1.200	0	0	0
Στατιστική Μηχανική και Μη – γραμμική Δυναμική (Α. Προβατά)	2.000	0	0	0



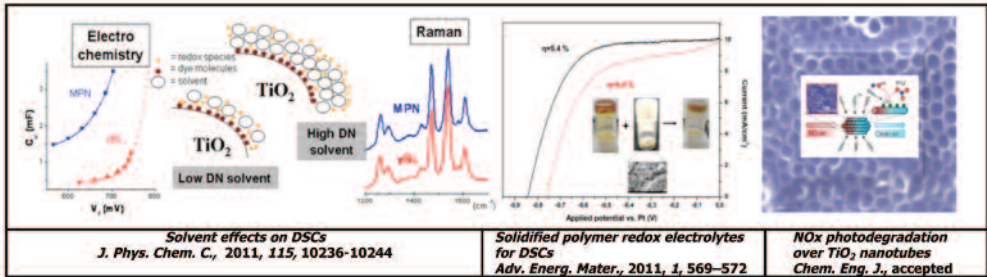
## 2.1 ΦΩΤΟΟΞΕΙΔΟΑΝΑΓΩΓΙΚΗ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΚΑΙ ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΤΗΣ ΗΛΙΑΚΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ - ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙΝΟΤΟΜΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΓΙΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### 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  $\text{TiO}_2$ , σε μορφή σφαιρικών σωματιδίων) για αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική. Με χρήση μεθόδων κολλοειδούς χημείας (sol-gel), όπου ελέγχονται 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 με τη χρήση τεχνικών εναπόθεσης (screen-printing, doctor-blade, spin-coating, dip-coating) καθώς και στη βελτιστοποίηση των παραπάνω διεργασιών. Παράλληλα διερευνάται η δυνατότητα ανάπτυξης αυτοοργανωμένων νανοσωληνών τιτανίας μέσω υδροθερμικής κατεργασίας (αυτόκλειστο) καθώς και με ανοδική οξείδωση του μετάλλου (Ti) σε διαβρωτικό περιβάλλον, υδατικό και οργανικό. Γίνεται επίσης συντονισμένη προσπάθεια σύνθεσης νέων χρωστικών (σύμπλοκες ενώσεις μετάλλων μεταπτώσεως) και νανοκρυστάλλων ημιαγωγών (κβαντικές τελείες) με ισχυρή απορρόφηση στο ορατό φάσμα για την συν-ευαίσθητοποίηση φωτοηλεκτροδίων τιτανίας, αναπτύσσονται σύνθετοι οξειδοαναγωγικοί πολυμερικοί ηλεκτρολύτες και ηλεκτρολύτες με βάση ιοντικά υγρά, ενώ παράλληλα μελετώνται αναλυτικά οι οπτικές, φωτοφυσικές και ηλεκτροχημικές ιδιότητες των νέων καινοτόμων υλικών. Επιπρόσθετα, η έρευνα περνά άμεσα στην πρακτική εφαρμογή με την προσπάθεια ανάπτυξης και βελτιστοποίησης πρότυπων φωτοηλεκτροχημικών ηλιακών κυψελίδων που παρουσιάζουν υψηλές αποδόσεις. Ιδιαίτερη έμφαση δίνεται στην πρωτοπόρα μελέτη προ-βιομηχανικών ηλιακών κελιών συνδυάζοντας φασματοσκοπικές (in situ micro-Raman) και προχωρημένες φωτοηλεκτροχημικές τεχνικές (EIS, IMPS, IMVS) με σκοπό την μελέτη της σταθερότητας και του χρόνου ζωής τους.



## 2. Φωτοκατάλυση

Η έρευνα εστιάζεται στη μελέτη φωτοεπαγόμενων (ετερογενών) αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στη διεπιφάνεια ημιαγωγού/υγρού, /στερεού ή /αέρα. Γίνεται ανάπτυξη καινοτόμων νανοδομημένων φωτοκαταλυτών τιτανίας ( $\text{TiO}_2$ ) και επιδιώκεται η εφαρμογή τους στην αποκατάσταση-καθαρισμό του περιβάλλοντος και την προστασία της υγείας. Ειδικότερα η ερευνητική προσπάθεια στοχεύει 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-υπερδρόφιλων ιδιοτήτων σε πολυδυναμικές νανοδομημένες επιφάνειες, στ) ακινητοποίησης νανοσωματιδίων σε σύνθετα φωτοκαταλυτικά υλικά με αυξημένη χημική και μηχανική σταθερότητα. 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 βιοϋμενίων (biofilms). Ιδιαίτερη έμφαση δίδεται στη μελέτη προχωρημένων μεθόδων οξειδωσης με παράλληλη ανάπτυξη φωτοκαταλυτικών αντιδραστήρων και εφαρμογή της φωτοκαταλυτικής νανοτεχνολογίας για την επεξεργασία του νερού και το καθαρισμό του αέρα, η οποία στηρίζεται στην παρασκευή και χρήση εμπλουτισμένων με ανιόντα νανο-υλικών τιτανίας σε συνδυασμό με νανοσωλήνες άνθρακα και τεχνολογία μεμβρανών για το φωτοκαταλυτικό καθαρισμό επικίνδυνων οργανικών ρύπων με ακτινοβολία στο ορατό. Παράλληλα εντατικά μελετάται η αλληλεπίδραση νέων καινοτόμων υλικών και νανοϋλικών με νεοπλασματικά κύτταρα και εξετάζεται η πιθανή αντικαρκινική τους δράση.



## Προσωπικό

### Ερευνητές:

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

Δρ. Αθανάσιος Γ. Κόντος, Ερευνητής Γ'

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες:** Δρ. Θωμάς Στεργιόπουλος (ΕΕ/FP7), Δρ. Βλάσης Λυκοδήμος (ΕΕ/FP7)

**Υποψήφιοι Διδάκτορες:** Ναούμ Βαενάς (ΕΚΕΦΕ Δ), Νικόλαος Μουστάκας (ΕΚΕΦΕ Δ, συνεργασία Α. Κόντου με Φ. Κατσαρό), Μαρία Μπιδικουδή (ΕΕ/FP7), Γεωργία Κόντη (άμισθη), Αντιγόνη Κατσανάκη (άμισθη, σε συνεργασία με το ΙΠΤΑ), Δημήτριος Τσουκλερής (άμισθος)

**Μεταπτυχιακοί Φοιτητές:** Δωροθέα Περγαντή (υποτροφία REVOIL)

**Συνεργάτες:** Δέσποινα Αγγελάκη (γραμματειακή υποστήριξη, ΕΕ/FP7)

## Δημοσιεύσεις

1. Makris, T.; Dracopoulos, V.; Stergiopoulos, T.; Lianos, P. "A quasi solid-state dye-sensitized solar cell made of polypyrrole counter electrodes" *Electrochimica Acta* 2011, 56, 2004-2008.
2. Chorianopoulos, N.G.; Tsoukleris, D.S.; Panagou, E.Z.; Falaras, P.; Nychas, G.-J.E. "Use of titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) photocatalysts as alternative means for *Listeria monocytogenes* biofilm disinfection in food processing" *Food Microbiology*, 2011, 28, 164-170.
3. Kantonis, G.; Stergiopoulos, T.; Katsoulidis, A. P.; Pomonis, P. J.; Falaras, P. "Electron dynamics dependence on optimum dye loading for an efficient dye-sensitized solar cell", *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 2011, 217, 236-241.
4. Vougioukalakis, G. C.; Philippopoulos, A. I.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P. "Contributions to the development of ruthenium-based sensitizers for dye-sensitized solar cells", *Coordination Chemistry Reviews*, 2011, 255, 2602-2621.
5. Stergiopoulos, T.; Rozi, E.; Karagianni, C. -S.; Falaras, P. "Influence of electrolyte co-additives on the performance of dye-sensitized solar cells", *Nanoscale Res. Lett.* 2011, 6, 307-313.
6. Stergiopoulos, T.; Hahn, R.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Enhanced open-circuit photopotential in quasi-solid-state dye-sensitized solar cells based on polymer redox electrolytes filled with anodic titania nanotubes", *Adv.*



- Energ. Mater. 2011, 1, 569–572.
7. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; O'Shea, K.; Dionysiou, D. D. "Innovative visible light-activated sulfur doped TiO<sub>2</sub> films for water treatment", *Applied Catalysis B: Environmental* 2011, 107, 77-87.
  8. Pelaez, M.; de la Cruz, A.A.; O'Shea, K. E.; Falaras, P.; Dionysiou, D.D. "Effects of water parameters on the degradation of microcystin-LR under visible light-activated TiO<sub>2</sub> photocatalyst", *Water Research* 2011, 45, 3787-3796.
  9. Stergiopoulos, T.; Kontos, A. G.; Likodimos, V.; Perganti, D.; Falaras, P. "Solvent effects at the photoelectrode/electrolyte interface of a DSC: A combined spectroscopic and photoelectrochemical study", *The Journal of Physical Chemistry C* 2011, 115, 10236-10244.
  10. Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Marques, R. R. N.; Steriotis, T. A.; Papa-georgiou, S. K.; Faria, J. L.; Figueiredo, J. L.; Silva, A. M. T.; Falaras, P. "Controlling and quantifying oxygen functionalities on hydrothermally and thermally treated single wall carbon nanotubes", *The Journal of Physical Chemistry C* 2011, 115, 8534–8546.
  11. Chen, Y.; Lunsford, S. K.; Song, Y.; Ju, H.; Falaras, P.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Dionysiou, D. D. "Synthesis, characterization and electrochemical properties of mesoporous zirconia nanomaterials prepared by self-assembling sol gel method with Tween 20 as a template", *Chemical Engineering Journal* 2011, 170, 518-524.
  12. Kontos, A. G.; Likodimos, V.; Vassalou, E.; Kapogianni, I.; Raptis, Y. S.; Raptis, C.; Falaras, P. "Nanostructured titania films sensitized by quantum dot chalcogenides", *Nanoscale Research Letters* 2011, 6, 266.
  13. Kontos, A. G.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Vaenas, N.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Visible light induced wetting of nanostructured N–F co-doped titania films", *Photochemical & Photobiological Sciences* 2011, 10, 350-354.
  14. Nikolić, L.M.; Milanović, M.; Nedić, S.; Giannakopoulos, K.; Kontos, A. G. "Hydrothermal conversion of Nb-anatase nanoparticles into layered titanates", *Ceramics International* 2011, 37, 111-117.
  15. Stergiopoulos, T.; Likodimos, V.; Hahn, R.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Front-side illuminated dye-sensitized solar cells based on bundle shaped titania anotube membranes", *Phys. Status Solidi A*, accepted.



16. Vaenas, N.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A. G.; Likodimos, V.; Boukos, N.; Falaras, P. "Sensitizer activated solar cells based on self-organized TiO<sub>2</sub> nanotubes", *Microelectronic Engineering*, accepted.
17. Kontos, A. G.; Katsanaki, A.; Likodimos, V.; Maggos, T.; Kim, D.; Vasilakos, C.; Dionysiou, D. D.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Continuous flow photocatalytic oxidation of nitrogen oxides over anodized nanotubular titania films", *Chemical Engineering Journal*, accepted.
18. Hiskia, A.; Triantis, T.M.; Fotiou, T.; Kaloudis, T.; Kontos, A.; Falaras, P.; Dionysiou, D.D. "Photocatalytic degradation of microcystin-LR using visible light-activated nanostructured TiO<sub>2</sub> materials", *Journal of Hazardous Materials*, accepted.
19. Balis, N.; Makris, T.; Dracopoulos, V.; Stergiopoulos, T.; Lianos, P. "Quasi-solid-state dye-sensitized solar cells made with poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT)-functionalized counter-electrodes", *Journal of Power Sources*, accepted.
20. Liu, G.; Han, C.; Pelaez, M.; Zhu, D.; Liao, S.; Likodimos, V.; Ioannidis, N.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dunlop, P. S. M.; Byrne, J. A.; Dionysiou, D. D. "Synthesis, characterization and photocatalytic evaluation of visible light-activated C-doped TiO<sub>2</sub> nanoparticles", *Nanotechnology*, accepted.
21. Romanos, G. E.; Athanasekou, C. P.; Katsaros, F. K.; Kanellopoulos, N. K.; Dionysiou, D. D.; Likodimos, V.; Falaras, P. "Double-side active TiO<sub>2</sub>-modified nanofiltration membranes in continuous flow photocatalytic reactors for effective water purification", *Journal of Hazardous Materials*, accepted.
22. Athanasekou, C. P.; Romanos, G. E.; Katsaros, F. K.; Kordatos, K.; Likodimos, V.; Falaras, P. "Very efficient composite titania membranes in hybrid ultrafiltration/photocatalysis water treatment processes", *Journal of Membrane Science*, accepted.

### Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Vaenas, N.; Kontos, A.G.; Stergiopoulos, T.; Likodimos, V.; Boukos, N.; Falaras, P. "Self-assembled and vertically alligned titania nanotubes for dye-sensitized solar cells", Dematen final workshop, "Processing of Nanostructured Ceramics and Nanocomposites" March 3-5, 2011, Brno, Czech Rep (I-O(07)-abst). (N. Vaenas oral presentation)
2. Milanovic, M.; Yannakopoulos, K.; Stamopoulos, D.; Devlin, E.; Kontos,

- A.G.; Srdic, V.V.; Moshopoulou, E. G. "Evolution of structure and magnetism as a function of size and doping in the ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles", Dematen final workshop, "Processing of Nanostructured Ceramics and Nanocomposites" March 3-5, 2011, Brno, Czech Rep. (I-0(09)-abst).
3. Kontos, A.G.; Milanovic, M.; Giannakopoulos, K.; Stamopoulos, D.; Devlin, E.; Srdic, V.V.; Moshopoulou, E. G. "Structural characterization of sol-gel ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> annealed at variable temperatures via Raman spectroscopy", Dematen final workshop, "Processing of Nanostructured Ceramics and Nanocomposites" March 3-5, 2011, Brno, Czech Rep. (I-0(010)-abst). (A.G.Kontos, oral presentation).
  4. Χισκιά, Α.; Τριάντης, Θ.; Φωτίου, Θ.; Καλούδης, Τ.; Φαλάρας, Π.; Διονυσιού Δ. Φωτοκαταλυτική αποικοδόμηση της μικροκυστίνης-LR με χρήση τροποποιημένων νανοδομημένων καταλυτών TiO<sub>2</sub>, 4ο Περιβαλλοντικό Συνέδριο Μακεδονίας, 18-20 Μαρτίου 2011, Θεσσαλονίκη. Ελλάδα, Πρακτικά.
  5. Pelaez, M.; Falaras, P.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; de la Cruz, A. A.; Dionysiou, D. D. "Novel NF-TiO<sub>2</sub>-P25 composite photocatalyst for the removal of microcystins and cylindrospermopsin under visible and solar light", ACS 241st National Meeting & Exposition, March 27-31, 2011 Anaheim, California, USA, (oral presentation), ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 241 Meeting Abstract: 41-IEC, Published: MAR 27 2011.
  6. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Synthesis, characterization, and evaluation of visible light-activated sulfur-doped TiO<sub>2</sub> for the treatment of cyanotoxins in water", ACS 241st National Meeting & Exposition, March 27-31, 2011 Anaheim, California, USA, (poster presentation), ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY Volume: 241 Meeting Abstract: 234-ENVR, Published: MAR 27 2011.
  7. Pelaez, M.; Falaras, P.; Bandala, E. R.; Dunlop, P.; Byrne, J.; de la Cruz, A. A.; Dionysiou, D. D. "TiO<sub>2</sub>-based enhanced photocatalytic degradation and disinfection of water under solar light irradiation", Ozone and UV: Leading-edge science and technologies, IOA 20/IUVA 6, 23-27 May 2011, Paris, France (oral presentation).
  8. Stergiopoulos, T.; Rozi, E.; Karagianni, C.S.; Falaras, P. "Ionic liquid-based electrolyte solified by the PVdF-HFP polymer for dye-sensitized photoelectrochemical solar cells", 9th ESEE – European Symposium on



- Electrochemical Engineering, 19 -23 June, Chania, Greece, BOOK OF ABSTRACTS, P2.11.
9. Pelaez, M.; Falaras, P.; Kontos, A. G.; de la Cruz, A. A.; Dionysiou, D. D. "Novel and Sustainable TiO<sub>2</sub>-based Nanotechnology for the Removal of Cyanotoxins", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR), Oral presentation, BOOK OF ABSTRACTS, p. 27.
  10. Vaenas, N.; Stergiopoulos, T.; Kontos, A.G.; Likodimos, V.; Falaras, P. "TiO<sub>2</sub> nanotubes for dye sensitized solar cells", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR), Oral presentation by P. Falaras-invited, BOOK OF ABSTRACTS, p. 30
  11. Moustakas, N.; Kontos, A. G.; Fotiou, T.; Katsaros, F.; Likodimos, V.; Triantis, T. M.; Hiskia, A.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Tuning Sol-Gel Growth of Nitrogen Doped TiO<sub>2</sub> for Microcystine-LR Degradation Under Visible Light", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation). BOOK OF ABSTRACTS, p. 31.
  12. Alexaki, N.; Stergiopoulos, T.; and Falaras, P. "Sol-gel derived titania pastes for efficient solar energy conversion to electricity", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR), Poster presentation, BOOK OF ABSTRACTS, p. 32
  13. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Visible Light Activated Sulphur-Doped TiO<sub>2</sub> Films for the Degradation of Microcystin-LR in Water", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), NSF Graduate Student Poster Competition Award attributed to C. HAN, BOOK OF ABSTRACTS, p. 44.
  14. Han, C.; Doepke, A.; Cho, W.; de la Cruz, A. A.; Heineman, W. R.; Halsall, H. B.; Shanov, V. N.; Schulz, M. J.; Likodimos, V.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Carbon Nanotubes-Based Biosensor for Detecting Cyanotoxins in Water", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), BOOK OF ABSTRACTS, p. 45.

15. Katsanaki, A.; Falaras, P.; Maggos, T.; Pelaez, M.; Kontos, A. G.; Likodimos, V.; Dionysiou, D. D. "Photocatalytic Degradation of Nitrogen Oxides on N-F Co-doped Titania Films Under Visible Light", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), BOOK OF ABSTRACTS, p. 70.
16. Falaras, P.; Miranda, S. M.; Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Silva, A. M. T.; Vilar, V. J. P.; Faria, J. L. "Single Wall Carbon Nanotube/TiO<sub>2</sub> Composite Photocatalysts", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR), Oral presentation, BOOK OF ABSTRACTS, p. 81.
17. Falaras, P.; Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Marques, R. R. N.; Steriotis, T. A.; Papageorgiou, S. K.; Faria, J. L.; Figueiredo, J. L.; Silva, A. M. T. "Control and Quantification of Oxygen Functional Groups on Single Wall Carbon Nanotubes, 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems", (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), BOOK OF ABSTRACTS, p. 111.
18. Romanos, G.E.; Miranda, S.M.; Athanasekou, C.P.; Katsaros, F. K.; Pilatos, G.; Kanellopoulos, N. K.; Falaras, P. "Development of Titania Decorated Multi Wall Carbon Nanotubes with CVD techniques", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), BOOK OF ABSTRACTS, p. 112.
19. Tsoukleris, D. S.; Pavlatou, E. A.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Chemical and Mechanical Stability of Nanoengineered Titania Thin Films", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems, (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation) , BOOK OF ABSTRACTS, p. 138.
20. Marques, R. R. N.; Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Figueiredo, J. L.; Faria, J. L.; Falaras, P.; Silva, A.M.T. "Controlled activation of MWCNT surface upon HNO<sub>3</sub> oxidation", XXII Encontro Nacional SPQ Braga, no Parque de Exposições, 3-6 Julho 2011, Book of abstracts QI-CP 47 (poster presentation)
21. Segundo, R. A.; Marques, R.R.N.; Portillo-Carrizo, D.; Romanos, G. E.; Fernández-Rodríguez, C.; Likodimos, V.; Faria, J. L.; Doña-Rodríguez, J.



- M.; Falaras, P.; Silva, A. M. T. "TiO<sub>2</sub>-CNT composite photocatalysts for solar degradation of caffeine", XXII Encontro Nacional SPQ Braga, no Parque de Exposições, 3-6 Julho 2011, Book of abstracts QF-CP 52 (poster presentation).
22. Pelaez, M.; de la Cruz, A. A.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Novel TiO<sub>2</sub>-based Nanotechnology Process Utilizing Solar Light to Treat Drinking Water in a Sustainable Way", Poster Presentation at The 2011 Association of Environmental Engineers and Science Professors (AEESP) Research and Education Conference, July 10-12, 2011, Tampa, Florida.
  23. Falaras, P., "Sensitizer Activated Nanostructured Solar Cells", 8th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies – NN11, oral presentation (invited), 12-15 July 2011, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, p. 59.
  24. Vaenas, N.; Mpidikoudi, M.; Kontos, A. G.; Likodimos, V.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P. "Self-ordered TiO<sub>2</sub> nanotubes grown in NH<sub>4</sub>F/ethylene glycol electrolytes: parameters variation in anodic oxidation and application in dye sensitized solar cells", 8th International Conference on Nanosciences and Nanotechnologies - NN11, poster presentation, 12-15 July 2011, Thessaloniki, Greece, Book of Abstracts, p. 258.
  25. Pelaez, M.; de la Cruz, A. A.; O'Shea, K.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D., "Influence of NOM in the photocatalytic degradation of microcystins and cylindrospermopsin with visible and solar light activated NF-TiO<sub>2</sub>", Fourth IWA Specialty Conference on Natural Organic Matter: From Source to Tap and Beyond, July 27-29, 2011, California, USA, Poster Presentation.
  26. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Romanos, G. E.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Implication of composite photocatalysts incorporating carbon-based nanomaterials with potential use in drinking water treatment: Mechanical and chemical stability", 242nd ACS National Meeting & Exposition, Aug. 28-Sept. 1, 2011, Denver, Colorado (poster presentation).
  27. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; de la Cruz, A. A.; Dionysiou, D. D. "Solvent effects on sulfur doped TiO<sub>2</sub> films synthesized by a sol-gel method", 242nd ACS National Meeting & Exposition, Aug. 28-Sept. 1, 2011, Denver, Colorado (poster presentation).
  28. Liu, G.; Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Zhu,

- D.; Dionysiou, D. D. "Heterogeneous photocatalytic degradation of microcystin-LR by visible light-activated C-doped TiO<sub>2</sub> nanoparticles in water", 242nd ACS National Meeting & Exposition, Aug. 28-Sept. 1, 2011, Denver, Colorado (poster presentation).
29. Pelaez, M.; de la Cruz, A. A.; O'Shea, K.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Effects of water parameters on the degradation of microcystin-LR under visible light-activated TiO<sub>2</sub> photocatalyst", 242nd ACS National Meeting & Exposition, Aug. 28-Sept. 1, 2011, Denver, Colorado (oral presentation).
  30. Falaras, P., "Redox-active Electrolytes for dye-sensitized Solar Cells", BIOSOL 2011 conference - Bioinspired materials for solar energy utilization, September 12-17 2011, Crete, Greece, 13 Sep 2011, Keynote invited lecture, Book of abstracts, p 23.
  31. Konti, G.; Chatzivassiloglou, E.; Falaras, P.; Philippopoulos, A.I. Development of ruthenium sensitizers for Dye Sensitized Solar Cells, ", BIOSOL 2011 conference - Bioinspired materials for solar energy utilization, September 12-17 2011, Crete, Greece, 13 Sep 2011, Book of abstracts, p 60.
  32. Pelaez, M.; Falaras, P.; de la Cruz, A. A.; Dionysiou, D. D. "Synthesis and Performance of Visible and Solar Light-activated NF-TiO<sub>2</sub>-P25 Composite Films for the Removal of Cyanotoxins in Water", Poster Presentation at the 73rd Annual Ohio American Water Works Association, September 20-23, 2011, Cincinnati, Ohio.
  33. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Development of Visible Light-activated Sulfur Doped TiO<sub>2</sub> Film for Drinking Water Treatment", Poster Presentation at the 2011 Student Paper Competition, 73rd Annual Ohio American Water Works Association, September 20-23, 2011, Cincinnati, Ohio.
  34. Vaenas, N.; Kontos, A. G.; Katsaros, F.; Stergiopoulos, T.; Likodimos, V.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Synthesis, characterization and photocatalytic activity of hydrothermally grown nanotubular titanates", 2nd European Symposium on Photocatalysis, JEP 2011, Bordeaux, Cité Mondiale Sept 29-30, 2011, Proceedings, P. 3.42.
  35. Pastrana-Martínez, L. M.; Morales-Torres, S.; Likodimos, V.; Romanos, G. E.; Figueiredo, J. L.; Faria, J. L.; Falaras, P.; Silva, A. M. T. "Design of photocatalysts based on graphene oxide", 2nd European Symposium on Photocatalysis, JEP 2011, Bordeaux, Cité Mondiale Sept 29-30, 2011, Pro-



- ceedings, P. 4.32.
36. Katsanaki, A.; Maggos, T.; Vasilakos, C.; Kontos, A. G.; Falaras, P. "Application of  $TiO_2$  containing construction materials to the photocatalytic removal of urban air pollutants", 2nd European Symposium on Photocatalysis, JEP 2011, Bordeaux, Cité Mondiale Sept 29-30, 2011, Proceedings, P. 5.14.
  37. Kontos, A. G.; Katsanaki, A.; Likodimos, V.; Maggos, T.; Kim, D.; Vasilakos, C.; Dionysiou, D. D.; Vlachos, G. D.; Schmuki, P.; Falaras, P. "Photocatalytic decomposition of atmospheric pollutants using anodized  $TiO_2$  nanotubes", 2nd European Symposium on Photocatalysis, JEP 2011, Bordeaux, Cité Mondiale Sept 29-30, 2011, Proceedings, P. 5.24.
  38. Pelaez, M.; de la Cruz, A. A.; O'Shea, K.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D.; "Scavenger study on the mechanisms of NF- $TiO_2$  radical formation under visible light irradiation for the degradation of cyanotoxins", The 17th International Conference on Advanced Oxidation Technologies for Treatment of Water, Air and Soil (AOTs-17), Town & Country Resort, San Diego, California, Nov 7-10, 2011, (oral presentation).
  39. Maroga Mboula, V.; Héquet, V.; Andrès, Y.; Doña-Rodríguez, J. M.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Novel Efficient Photocatalysts for Effective Removal of Endocrine Disruptors in Water", The 16th International Conference on  $TiO_2$  Photocatalysis: Fundamentals and Applications (TiO2-16) Town & Country Resort, San Diego, California, November 7-10, 2011, (oral presentation).
  40. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "The Influence of Solvent Choice in a Sol-gel Based Approach for the Synthesis of Sulfur Doped  $TiO_2$  Films for Water Treatment", The 16th International Conference on  $TiO_2$  Photocatalysis: Fundamentals and Applications (TiO2-16) Town & Country Resort, San Diego, California, November 7-10, 2011, (poster presentation).
  41. Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A. G.; Falaras, P.; Dionysiou, D. D. "Synthesis of Monodispersed  $TiO_2$  Nanoparticles by a Sol-Gel Method", The 16th International Conference on  $TiO_2$  Photocatalysis: Fundamentals and Applications (TiO2-16) Town & Country Resort, San Diego, California, November 7-10, 2011, (poster presentation).
  42. Tsoukleris, D.; Pavlatou, E.A.; Dionysiou, D.D.; Falaras, P.; "Chemical and mechanical stability of nanoengineered titania thin films", The Ninth Stu-



dents' Meeting, SM-2011 and The Second ESR Workshop, COST MP0904, Novi Sad, Serbia, November 16-18, 2011, Book of Abstracts-A13, p. 35 (oral presentation by D. Tsoukleris).

43. Στεργιόπουλος Θ.; Μπιδικούδη Μ.; Λυκοδήμος Β.; Κόντος Α.; Φαλάρας Π., «Οξειδοαναγωγικοί ηλεκτρολύτες με ιοντικά υγρά: Εφαρμογή σε φωτοηλεκτροχημικές κυψελίδες», 21ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, Θεσσαλονίκη, 9-12 Δεκεμβρίου 2011, Γραπτή ανακοίνωση, Βιβλίο Περιλήψεων (CD).
44. Φαλάρας Π., “Χημεία και νανοτεχνολογία για αποδοτική μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική”, 21ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, , Θεσσαλονίκη, 10 Δεκεμβρίου 2011, προσκεκλημένη εναρκτήρια ομιλία της ενότητας «Χημεία και Τεχνολογία Υλικών», Βιβλίο Περιλήψεων (CD).

#### **Διαλέξεις** (επιπλέον των προφορικών ανακοινώσεων σε συνέδρια)

1. Falaras, P., “Current state of the art on DSSCs at IPC-NCSR-D-GREECE”, Physics Department Clarendon Laboratory, Oxford, 17 March 2011.
2. Στεργιόπουλος Θ., “Μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική με τη χρήση φωτοηλεκτροχημικών κυψελίδων”, Θερινό Σχολείο ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 11 Ιουλίου 2011.
3. Stergiopoulos, T., “Solvent-free ionic liquid-based redox electrolytes”, 2nd ‘SANS’ project meeting, Perugia, 26 September 2011.
4. Kontos, A.G., “Micro Raman investigation of long term stability of aged cells”, ‘2nd ‘SANS’ project meeting, Perugia, 26 September 2011.

#### **Διδακτικό Έργο**

##### **Διδασκαλία**

1. Φαλάρας, Π. Φυσικοχημεία, Θεματική Ενότητα [ΦΥΕ 22]-Πρόγραμμα Σπουδών [ΦΥΕ] Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο (ΕΑΠ).

##### **Διατριβές Μάστερ**

2. Κούσουλας Ευάγγελος, Νανοδομημένοι καταλύτες τιτανίας με φωτοκαταλυτική και υπερυδρόφιλη δράση στο ορατό φως, Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών «Κατάλυση και Προστασία Περιβάλλοντος», Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, υποστήριξη: 1 Οκτωβρίου 2011, Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας



### Διπλωματικές Εργασίες

1. Καπογιάννη Ιωάννα, Ευαισθητοποίηση διοξειδίου του τιτανίου με κβαντικές τελείες PbS, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ, υποστήριξη: 14 Ιουλίου 2011

### Πρακτική Άσκηση

1. Νικολάου Βασίλειος, Επιστημονική Προσέγγιση της απόδοσης φωτοβολταϊκών συστημάτων με στόχο την ανάπτυξη προτύπων για τη βιομηχανία και την αγορά, Τμήμα Εκπαιδευτικών Ηλεκτρολογίας, Α.Σ.ΠΑΙ.Τ.Ε., 1-4-2011 μέχρι 30-9-2011, παρουσίαση: 6-10-2011
2. Ζούπας Παντελής, Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, 26-9-2011 μέχρι 28-10-2011
3. Καββαθά Τερψιχόρη, Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ, 10-10-2011 μέχρι 9-11-2011

### Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. "Clean Water-Water detoxification using innovative vi-nanocatalysts", FP7-ENV-NMP-2008-2 STREP, 580 Κ€, 2009-2012, Coordination of the project.
2. "SANS- Sensitizer Activated Nanostructured Solar Cells", FP7-NMP-2009 SMALL-3, 466 Κ€, 2010-2013.
3. "IOLICAP- Novel ionic liquid and supported ionic liquid solvents for reversible capture of CO<sub>2</sub>", FP7-ENERGY-2011-1, Project number: 283077, 2011-2014 (συνεργασία με Γ. Ρωμανό).

### Ερευνητική Υποδομή

Φασματοόμετρο 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 διαμορφωμένης έντασης της φωτεινής ακτινοβολίας (IMPS, IMVS), Προσομοιωτής ηλιακού φωτός AM 1.5G και οπτική διάταξη εφοδιασμένη με μονοχρωμάτορα για μετρήσεις εξωτερικής κβαντικής απόδοσης (IPCE), Διάταξη εκτύπωσης με διάτρητες μήτρες (screen-printer), Διάταξη spin-coating, Φωτοκαταλυτικοί αντιδραστήρες, Διάταξη μέτρησης γωνίας επαφής, Ιξωδόμετρο, Αυτόκλειστο τιτανίου.

## **Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών συνεργαζόμενων ομάδων από το Εξωτερικό**

Η Sandra Miranda, ερευνήτρια στο Τμήμα Μηχανικής του Πανεπιστημίου του Πόρτο (Faculty of Engineering, University of Porto – FEUP) εργάστηκε από τις 17-1-2011 μέχρι τις 30-3-2011 στο Εργαστήριο Φωτοοξειδοαναγωγικής Μετατροπής και Αποθήκευσης της Ηλιακής Ενέργειας του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας υπό την επίβλεψη του Δρ. Π. Φαλάρα.

Ο Dr. Gavin Tulloch ιδρυτής και γενικός διευθυντής της Dyesol Ltd επισκέφθηκε στις 12 Απριλίου 2011 το Εργαστήριο Φωτοοξειδοαναγωγικής Μετατροπής και Αποθήκευσης της Ηλιακής Ενέργειας στα πλαίσια της υλοποίησης του έργου SANS.

Ο καθηγητής G. Demopoulos από το Department of Mining and Materials Engineering του Πανεπιστημίου McGill του Καναδά, πραγματοποίησε επίσκεψη στο Ινστιτούτο Φυσικοχημείας στις 12 Ιουλίου 2011.

Ο Καθηγητής D.D. Dionysiou (University of Cincinnati) επισκέφθηκε το Ινστιτούτο Φυσικοχημείας στις 5 - 6 Σεπτεμβρίου 2011 και έδωσε ομιλία με τίτλο: «Destruction of Cyanotoxins in Water Using Homogeneous and Heterogeneous Advanced Oxidation Technologies and Nanotechnologies», στις 6-9-2011, στο Αμφιθέατρο του Ινστιτούτου Επιστήμης Υλικών.

## **Συνεργασίες**

**ΕΚΕΦΕ «Δ»:** Δρ. Α. Χισκιά, Δρ. Κ. Παπαδόπουλος, Δρ. Θ. Στεριώτης, Δρ. Γ. Ρωμανός, Δρ. Κ. Παπαδοκωστάκη, Δρ. Φ. Κατσαρός, Δρ. Ε. Τσιλιμπάρη, Δρ. Γ. Παπαβασιλείου, Δρ. Β. Πετρουλέας, Δρ. Β. Κυλικογλου, Δρ. Α. Τραυλός, Δρ. Ν. Μπούκος, Δρ. Π. Αλουπογιάννης, Δρ. Θωμάς Μάγγος.

**Ελλάδα:** Καθ. Τ. Αλμπάνης, Καθ. Φ. Πομώνης και Δρ. Μ. Προδρομιδης (Παν/μιο Ιωαννίνων), Καθ. Π. Λιανός και Καθ. Ι. Καλλιτσας (Παν/μιο Πατρών), Καθ. Ι. Μπάρτζης (Παν/μιο Μακεδονίας), Δρ. Α. Φιλιππόπουλος (Τμήμα Χημείας, ΕΚΠΑ), Δρ. Ι. Ράπτης και Δρ. Ε. Παυλάτου (ΕΜΠ), Δρ. Σ. Πίσσας (ΕΙΕ), Α. Κατσιφός (Χάλυψ Α.Ε., Italcementi Group).

**Εξωτερικό:** Prof. M. Grätzel (EPFL Lausanne), Prof. D. Dionysiou (Univ. Cincinnati), Dr. G. Tulloch (Dyesol Ltd., Australia), Dr. H. Snaith (Oxford), Prof. G. Thompson and Prof. P. Skeldon (Univ. Manchester), Prof. A. Ibbandon (Hull),



Prof. V. Catalano (Nevada), Prof. P. Schmuki (Univ. Erlagen), Prof. P. Potvin (Toronto), Prof. J. Bisquert (Un. Jaume I, Castello) and Prof. J. Dona Rodriguez (ULPGC-Canaria), Dr. V. Hequet (Armines, Nantes), Dr. A. Silva (FEUP, Porto), Dr. E. Kantilaftis (Osmosistemi, Fano), IRT (London).

Στις 7-6-2011 υπογράφηκε Memorandum of Understanding μεταξύ του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και του Center for Blue Gold Cluster of Korea.

Στις 7-6-2011 υπογράφηκε Memorandum of Understanding μεταξύ του Clean Water Consortium (που συντονίζεται από το Δρ. Π. Φαλάρα) και του Center for Blue Gold Cluster of Korea.

Στις 10-6-2011 υπογράφηκε Memorandum of Understanding μεταξύ του Korea Basic Science Institute (KBSI) και του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.

Στις 20-6-2011 πραγματοποιήθηκε στην Αθήνα το meeting (24 months) του προγράμματος Clean Water (συντονιστής: Δρ. Π. Φαλάρας).

Ο Δρ. Π. Φαλάρας και ο Δρ. Τ. Στεργιόπουλος συμμετείχαν στο SANS kick off meeting, Oxford, 16-18 Μαρτίου 2011.

Ο Δρ. Α. Κόντος και ο Δρ. και ο Δρ. Τ. Στεργιόπουλος συμμετείχαν στο 2ο SANS meeting, Perugia, 26-27 Σεπτεμβρίου 2011

## Άλλες Δραστηριότητες

Ο Δρ. Πολύκαρπος Φαλάρας κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Δ/ντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Μέλος του Διοικητικού Συμβουλίου του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος .
3. Μέλος του Management Committee της COST Action D35 "From Molecules to Molecular Devices"
4. Μέλος του International Editorial Advisory Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Journal of Advanced Oxidation Technologies".
5. Μέλος του Editorial Board του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Open Inorganic Chemistry Journal".
6. Μέλος του Editorial Board (Editorial Advisory Board) του διεθνούς επιστημονικού περιοδικού "The Open Crystallography Journal, Bentham Open".
7. Guest Editor in the "Special Issue of Journal of Hazardous Materials: Nan-

otechnologies for the treatment of Water, Air and Soil”

8. Συντονιστής του Ευρωπαϊκού Προγράμματος “Clean Water”
9. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Advanced Energy Materials*, *Advanced Materials*, *Applied Catalysis B Environmental*, *Bioorganic Chemistry and Applications*, *Coordination Chemistry Reviews*, *Electrochimica Acta* (3), *Hazardous Materials*, *Journal of Physical Chemistry* (3), *Photochemical Photobiological Sciences* (2).
10. Κριτής στο 9th European Symposium on Electrochemical Engineering (9th ESEE, [www.9thesee.gr](http://www.9thesee.gr)) (4)
11. Μέλος Συνεργαζόμενου Εκπαιδευτικού Προσωπικού (Σ.Ε.Π.) του Ελληνικού Ανοικτού Πανεπιστημίου (ΕΑΠ): Πρόγραμμα Σπουδών [ΦΥΕ] Σπουδές στις Φυσικές Επιστήμες – Θεματική Ενότητα [ΦΥΕ 22] Φυσικοχημεία και Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών “ΚΑΤΑΛΥΣΗ ΚΑΙ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ”.
12. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής υποψηφίων διδασκόντων: Γ. Κόντη (ΕΚΠΑ), Α. Κατσανάκη (ΕΜΠ), Ν. Βαενά (ΕΜΠ), Μ. Μπιδικούδη (ΕΜΠ), Δ. Τσούκληρη (ΕΜΠ).
13. Ακαδημαϊκός Σύμβουλος στο Κοινωνικό Ίδρυμα «Αλέξανδρος Σ. Ωνάσης».

Ο Δρ. Α.Γ. Κόντος κατά το έτος 2011, διετέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Applied Surface Science*, *Electrochimica Acta*, *J. Hazardous Materials*, *Environmental Science Technol.*, *Nanoscale Research Letters*, *Advanced Oxid. Technol.*, *J. Raman spectroscopy*.
2. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα: Ν. Μουστάκα (Πα/μιο Ιωαννίνων).

Ο Δρ. Β. Λυκοδήμος κατά το έτος 2011, διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Physical Review Letters*, *Physical Review B*, *Chemical Engineering Journal*, *J. Hazardous Materials*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Materials Chemistry and Physics*.

Ο Δρ. Θ. Στεργιόπουλος κατά το έτος 2011, διετέλεσε κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Angewante Chemie*, *Physica Status Solidi (Rapid Research Letters)*, *Advanced Materials*, *Advanced Energy Materials*, *Advanced Functional Materials*, *ChemSusChem*, *Langmuir*, *Electrochimica Acta*, *Reaction Kinetics Mechanisms and Catalysis*, *Journal of Solid State Chemistry*, *Journal*



of Photochemistry and Photobiology A:Chemistry, Journal of Alloys and Compounds, International Journal of Photoenergy, Advanced Oxidation Technologies.

### Διακρίσεις-Βραβεία

Η εργασία των Vougioukalakis, G. C.; Philippopoulos, A. I.; Stergiopoulos, T.; Falaras, P. "Contributions to the development of ruthenium-based sensitizers for dye-sensitized solar cells", *Coordination Chemistry Reviews*, 2011, 255, 2602-2621, συμπεριλήφθηκε στις 25 πιο πολυδιαβασμένες εργασίες (Top 25 Hottest Articles) για την περίοδο «July to September 2011», έτσι όπως προκύπτει από την καταμέτρηση της πρόσβασης και αποθήκευσης εργασιών στο SciVerse Science Direct.

Η εργασία των Pelaez, M.; Falaras, P.; Likodimos, V.; Kontos, A.G.; de la Cruz, A.A.; O'shea, K.; Dionysiou, D.D. "Synthesis, structural characterization and evaluation of sol-gel-based NF-TiO<sup>2</sup> films with visible light-photoactivation for the removal of microcystin-LR" *Applied Catalysis B: Environmental*, 2010, 99, 378-387 συμπεριλήφθηκε στις 25 πιο πολυδιαβασμένες εργασίες (Top 25 Hottest Articles) για το τελευταίο τετράμηνο του 2010, έτσι όπως προκύπτει από την καταμέτρηση της πρόσβασης και αποθήκευσης εργασιών στο SciVerse Science Direct.

Η εργασία των Han, C.; Pelaez, M.; Likodimos, V.; Kontos, A.G.; Falaras, P.; O'Shea, K.; Dionysiou, D.D. "Innovative visible light-activated sulfur doped TiO<sup>2</sup> films for water treatment" *Applied Catalysis B: Environmental*, 2011, 107, 77-87 συμπεριλήφθηκε στις 25 πιο πολυδιαβασμένες εργασίες (Top 25 Hottest Articles) για το τρίτο τετράμηνο του 2011, έτσι όπως προκύπτει από την καταμέτρηση της πρόσβασης και αποθήκευσης εργασιών στο SciVerse Science Direct.

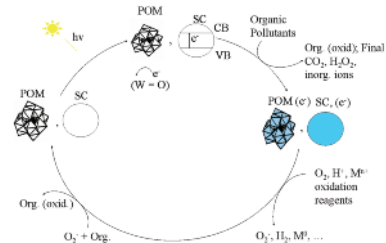
Η εργασία των A.G. Kontos et. al. PPS, 10(2011)350 παρουσιάζεται ως πρωτόπορα στο J. Krysa, S. Malato "Introduction by the guest editors" PPS,10(2011)331.

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

### Αντικείμενο έργου

#### Α. Καταλυτικές-Φωτοκαταλυτικές Διεργασίες

Καταλυτικές-φωτοκαταλυτικές αντιδράσεις με πολυοξειδία μεταλλών στοιχείων μεταπτώσεως, κυρίως  $TiO_2$  και πολυοξομεταλλικές ενώσεις (POM) με σκοπό την αξιοποίηση της φωτεινής (ηλιακής) ενέργειας, την απορρύπανση του περιβάλλοντος και την ανάπτυξη χημικών διεργασιών φιλικών προς το περιβάλλον.



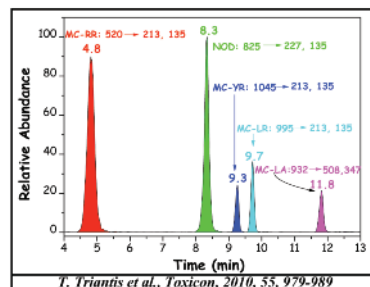
A. Hiskia, A. Mylonas and E. Papaconstantinou, *Chemical Society Reviews*, 2001, 30, 62-69

Επιτεύγματα του Έργου είναι:

(α) η μη ελεγχόμενη οξειδωση (φωτοαποικοδόμηση) οργανικών ρύπων σε  $CO_2$ ,  $H_2O$  και ανόργανα ιόντα, (β) η καταβύθιση - απομάκρυνση μεταλλικών ιόντων (γ) η φωτοκαταλυτική σύνθεση μεταλλικών νανοσωματιδίων και (δ) η ελεγχόμενη οξειδωση-σύνθεση οργανικών ουσιών. 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, (ε)



T. Triantis et al., *J. Hazardous Materials*, 2011, in press.



T. Triantis et al., *Toxicol.*, 2010, 55, 979-989



φωτοκαταλυτική αποικοδόμηση οργανικών ρύπων με χρήση νανοδομημένων καταλυτών  $TiO_2$ , διερεύνηση μηχανισμών αποικοδόμησης, ταυτοποίηση ενδιάμεσων και τελικών προϊόντων, (στ) ανάπτυξη προηγμένων οξειδωτικών διεργασιών για την απορρύπανση του περιβάλλοντος.

### ***B. Περιβαλλοντική Αναλυτική Χημεία***

Η ρύπανση των υδάτων με οργανικούς ρύπους όπως πολυκυκλικοί αρωματικοί υδρογονάνθρακες (PAHs), πολυχλωριωμένα διφαινύλια (PCBs), φυτοφάρμακα και τοξικές ενώσεις βιολογικής προέλευσης όπως οι κυανοτοξίνες αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα ρύπανσης σε παγκόσμιο επίπεδο. Πρόσφατες οδηγίες της Ευρωπαϊκής Ένωσης αναφέρονται στην ανάγκη προσδιορισμού των παραπάνω ρύπων σε πόσιμα και επιφανειακά ύδατα και θέτουν όρια για την μέγιστη αποδεκτή συγκέντρωσή τους. Στο πλαίσιο αυτό είναι επιθυμητή η παρακολούθηση της ύπαρξης των ενώσεων αυτών στα νερά με την χρήση κατάλληλων μεθόδων. Η ανάπτυξη νέων, προηγμένων αναλυτικών μεθόδων αναμένεται να προσφέρει αξιοπιστία, ευαισθησία και δυνατότητα ανίχνευσής τους σε επίπεδα συγκεντρώσεων της τάξεως των ppt. Η δραστηριότητες του έργου σε αυτή την ερευνητική περιοχή συνοψίζονται στα ακόλουθα:

(α) ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων για τον προσδιορισμό κυανοτοξινών σε επιφανειακά και πόσιμα νερά με τη χρήση SPE and LC/MS-MS, (β) ανάπτυξη προηγμένης αναλυτικής μεθόδου ταυτοποίησης και ποσοτικού προσδιορισμού πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων σε νερά με τη χρήση LC/APPI/MS-MS και (γ) ανάπτυξη προηγμένων μεθόδων ανάλυσης οργανικών ρύπων σε ίχνη, σε νερά, τρόφιμα και περιβαλλοντικά δείγματα (κυανοτοξίνες, φυτοφάρμακα, PCBs, επιβραδυντές καύσης, ουσίες που προσδίδουν οσμή στα νερά κλπ).

### **Προσωπικό**

**Ερευνητές:** Δρ. Αναστασία Χισκιά, Ερευνήτρια Α', υπεύθυνη του έργου

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

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Θεοδώρα Φωτίου

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:**

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Δρ. Αικατερίνη Τσιμελή (άμισθη), Ιωάννης Δημητρακόπουλος (άμισθος), Μούκας Αθανάσιος (άμισθος).

**Μεταπτυχιακοί:** Σεβαστή Ζερβού (άμισθη), Μαρία Γραμμένου (άμισθη),



Αικατερίνη Τσόκου (άμισθη).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Ηλίας Παπακωνσταντίνου, Δρ. Τριαντάφυλλος Καλούλης, ΕΥΔΑΠ

### **Δημοσιεύσεις**

1. de la Cruz A.A., Antoniou M.G., Hiskia A., Pelaez M., Song W., O'Shea K.E., He X., Dionysiou D.D., "Can we effectively degrade microcystins? - implications on human health", *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*, 2011, 11(1), 19-37.
2. He X., Pelaez M., Westrick J.A., O'Shea K.E., Hiskia A., Triantis T., Kaloudis T., Stefan M.I., de la Cruz A.A., Dionysiou D.D., "Efficient removal of microcystin-LR by UV-C/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> in synthetic and natural water samples", *Water Research*, 2011, in press.
3. Triantis T.M., Fotiou T., Kaloudis T., Kontos A.G., Falaras P., Dionysiou D.D., Pelaez M., Hiskia A., "Photocatalytic degradation and mineralization of microcystin-LR under UV-A, solar and visible light using nanostructured nitrogen doped TiO<sub>2</sub>", *Journal of Hazardous Materials*, 2011, in Press.
4. Sharma V.K., Triantis T.M., Antoniou M.G., He X., Pelaez M., Han C., Song W., O'Shea K.E., de la Cruz A.A., Kaloudis T., Hiskia A., Dionysiou D.D., "Destruction of Microcystins by Conventional and Advanced Oxidation Processes: A Review", *Separation and Purification Technology*, submitted.
5. Antoniou M.G., Pelaez M.A., Song W., O'Shea K., Ho L., Newcombe G., Teixeira M.R., de La Cruz A.A., Triantis T.M., Kaloudis T., Hiskia A., Balasubramanian R., Pavagadhi S., Han C., Sharma V., Dixon M., He X., Dionysiou D.D., "Practices that prevent the formation of cyanobacterial blooms in water resources and cyanotoxins during water treatment" in the Series "Comprehensive Water Quality and Purification", Elsevier, Oxford, UK, submitted.

### **Ανακοινώσεις σε συνέδρια**

1. Hiskia A., Triantis T.M., Fotiou T., Kaloudis T., Falaras P., Dionysiou D.D., "Photocatalytic degradation of MC-LR using modified nanostructured TiO<sub>2</sub> catalysts", 4rd Environmental Conference of Macedonia, March 18-20, 2011, Thessaloniki, Greece.



2. Hiskia A., Triantis T., Fotiou T., Kaloudis T., Falaras P., Dionysiou D., "Photocatalytic Degradation of Taste and Odour Causing Compounds in Water Using Visible Light-Activated Nanostructured TiO<sub>2</sub> Materials", International Conference on Photocatalytic and Advanced Oxidation Technologies for the Treatment of Water, Air, Soil and Surfaces, July 4-8, 2011, Gdansk University of Technology, Gdansk, Poland.
3. Moustakas N., Kontos A.G., Fotiou T., Katsaros F., Likodimos V., Triantis T.M., Hiskia A., Dionysiou D.D. and Falaras P., "Tuning sol-gel growth of nitrogen doped TiO<sub>2</sub> for Microcystine-LR degradation under Visible-light", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N-3), June 26-30, 2011, Crete Island, Greece.
4. Tsimeli K., Triantis T., Kaloudis T., Hiskia A., "Development of a new analytical method for the determination of PAHs in surface and drinking water by using LC-APPI/MS/MS", Workshop on "Recent developments of mass spectrometry in food analysis", November 3, 2011, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.

## Διαλέξεις

1. Hiskia A., "Photocatalytic degradation of MC-LR using modified nanostructured TiO<sub>2</sub> catalysts", 4rd Environmental Conference of Macedonia, March 18-20, 2011, Thessaloniki, Greece.
2. Hiskia A., "Development of a new analytical method for the determination of PAHs in surface and drinking water by using LC-APPI/MS/MS", Workshop on "Recent developments of mass spectrometry in food analysis", November 3, 2011, NCSR "Demokritos", Athens, Greece.

## Διδακτικό Έργο

### Διδασκαλία

2. Α. Χισκιά, «Προχωρημένες Οξειδωτικές Μέθοδοι» και «Αναλυτικές μέθοδοι με εφαρμογή στην Περιβαλλοντική Χημεία», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Μεταπτυχιακό Χημείας και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος.

## **Χορήγηση Μεταπτυχιακών Τίτλων**

### **Διδακτορικά Διπλώματα**

1. Α. Τσιμελή, «Ανάπτυξη Προηγμένων Αναλυτικών Μεθόδων για τον Προσδιορισμό Πολυκλωρωμένων Διφαινυλίων, Αλογονομένων Υδρογονανθράκων, Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων και Κυανοτοξινών», Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ, 2011.

### **Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης**

1. Σ. Ζερβού, «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού φυτοφαρμάκων σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική HPLC/MS/MS», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Μεταπτυχιακό Χημικής Ανάλυσης, Ελέγχου Ποιότητας, 2011.

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

### **Διδακτορικές Διατριβές**

1. Γ. Δημητρακόπουλος «Ανάπτυξη μεθόδων προσδιορισμού κυανοτοξινών σε περιβαλλοντικά δείγματα με υδροχρωματογραφία-φασματομετρία μαζών», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
2. Θ. Φωτίου, «Μελέτη της φωτοκαταλυτικής αποικοδόμησης κυανοτοξινών με οξειδία του μετάλλων» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.
3. Θ. Μούκας, «Ανάπτυξη μεθόδων προσδιορισμού ρύπων με υδροχρωματογραφία-φασματομετρία μάζας με φωτοϊονισμό» Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

### **Μεταπτυχιακά Διπλώματα Ειδίκευσης**

1. Μ. Γραμμένου, «Ανάπτυξη μεθόδου προσδιορισμού Cylindrospermopsis σε πόσιμο και επιφανειακό νερό με την τεχνική HPLC/MS/MS», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Μεταπτυχιακό Χημείας και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος, 2010.
2. Α. Τσόκου, «Προσδιορισμός τοξικότητας νανοσωματιδίων μετάλλων», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Μεταπτυχιακό Χημείας και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος, 2010.



## Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

1. «Development of Advanced Oxidation Processes (AOPs) with the use of nanomaterials and sunlight, for the removal of various organic toxic micropollutants, endocrine disrupters and cyanotoxins from natural waters and sewages», ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση», Πράξη «ΘΑΛΗΣ», Επιστ. Υπεύθυνος: Καθ. Τ. Αλμπάνης, 60 Κ€, Διάρκεια 36 μήνες.
2. «Cyanobacterial blooms and toxins in water resources: Occurrence, impacts and management», COST Action ES1105, Α. Hiskia: Member of Management Committee, Διάρκεια 48 μήνες, Έναρξη 11/4/2012.
3. «Water detoxification using innovative V-Nanocatalysts» FP7-ENV-NMP-2008-2, Επιστ. Υπεύθυνος: Π. Φαλάρας, 117 Κ€, Διάρκεια 36 μήνες, Έναρξη 2/6/2009.
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€, Επιστ. Υπεύθυνος: Α. Χισκιά.
5. «Προσδιορισμός ουσιών που προσδίδουν γεύση και οσμή σε νερά», Σύμβαση με ΕΥΔΑΠ Α.Ε., 20 Κ€, Επιστ. Υπεύθυνος: Α. Χισκιά.

## Ερευνητική Υποδομή

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

## Παραμονή-Εργασία-Επισκέψεις μελών της ομάδας στο Εξωτερικό καθώς και μελών συνεργαζόμενων ομάδων από το Εξωτερικό

1. Χισκιά Α., 2nd European Symposium on Photocatalysis (JEP 2011), 28 September – 1 October 2011, Bordeaux, France.
2. Χισκιά Α., Υποστήριξη υποβληθέντος προγράμματος COST κατά την τελική φάση αξιολόγησής του, 21-23 September, 2011, Brussels, Belgium.
3. Χισκιά Α., Επιθεώρηση Εργαστηρίου Lebanese Atomic Energy Commission, LAEC – National Council for Scientific Research, CNRS, σύμφωνα με το πρότυπο ELOT EN ISO/IEC 17025.
4. Prof. Dionysios D. Dionysiou (University of Cincinnati, USA), στο πλαίσιο του προγράμματος “Clean Water”, 6/9/2011.
5. Alina Comanescu, (University POLITEHNICA of Bucharest, Romania), Επίσκεψη μικρής διάρκειας (29/3/2011 – 8/7/2011) με σκοπό την διενέργεια πειραμάτων στα πλαίσια εκπόνησης της διδακτορικής της διατριβής με τίτλο: “New nanostructured materials based on metal oxides in silica matrix with photo-oxidative properties”.

## Συνεργασίες

Prof. D. Dionysiou (University of Cincinnati, USA, Προχωρημένες Οξειδωτικές Διεργασίες για την καταστροφή κυανοτοξινών), Dr. Bineta Keita (Laboratoire de Chimie Physique, UMR 8000, CNRS, Equipe d'Electrochimie et Photoelectrochimie, Universite Paris-Sud, France), Dr. John Errington (School of Chemistry, Newcastle University, UK), Δρ. Τ. Καλούδης, (ΕΥΔΑΠ, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων σε πόσιμα νερά), Δρ. Δ. Τσίππ (ΓΧΚ, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων), Καθ. Δ. Δημοτικάλη (Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Ε.Μ.Π., Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών), Καθ. Ε. Δασενάκης (Χημικό Τμήμα, Παν. Αθηνών, Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών), Αν. Καθ. Ν. Θωμαΐδης (Χημικό Τμήμα, Παν. Αθηνών, Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών), Καθ. Τ. Αλμπάνης (Χημικό Τμήμα, Παν. Ιωαννίνων, Φωτοκαταλυτική οξειδωση ρύπων), Επικ. Καθ. Ι. Κωνσταντίνου (Χημικό Τμήμα, Παν. Ιωαννίνων, Φωτοκαταλυτική οξειδωση ρύπων και ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων), Αν. Καθ. Μ. Μουστάκα (Τμήμα Βιολογίας, Παν. Θεσσαλονίκης, Συνεργασία στο πλαίσιο Ερευνητικών Προγραμμάτων), Δρ. Π. Φαλάρας (ΙΦΧ, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Εκπόνηση Ερευνητικών Προγραμμάτων), Δρ. Α. Κόντος (ΙΦΧ, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, χαρακτηρισμός Υλικών με φασματοσκοπία RAMAN), Δρ. Δ. Κλέτσας (Ινστ. Βιολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Μελέτη αντικαρκινικών ιδιοτήτων πολυοξομεταλλικών ενώσεων), Δρ. Α. Τραυλός, (Ινστ. Επιστή-



μης Υλικών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων), Δρ. Ν. Μπούκος, (Ινστ. Επιστήμης Υλικών, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων)

### Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Ι. Δημητρακόπουλο (Παν. Αθηνών).
2. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Α. Μούκα (Παν. Αθηνών).
3. Μέλος της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής της υποψήφιας διδάκτορος Α. Τιμελή (Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ)
4. Μέλος της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής της υποψήφιας κατόχου Μεταπτυχιακού Τίτλου Εκπαίδευσης (M.Sc.), Σ. Ζερβού (Παν. Αθηνών).
5. 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.
6. Μέλος του Εθνικού Συμβουλίου Υδάτων
7. Αξιολογήτρια Ερευνητικών Έργων της ΓΓΕΤ
8. Προσκεκλημένη εκδότρια του Journal of Hazardous Materials Special Issue: "Nanotechnologies".
9. Προϊσταμένη του Διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2011 διετέλεσε:

1. Κριτής στα ακόλουθα επιστημονικά περιοδικά: International Journal of Photoenergy, Advanced Functional Materials, Inorganica Chimica Acta και Journal of Hazardous Materials.
2. Υπεύθυνος Ποιότητας του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

## 2.3 ΦΩΤΑΥΓΕΙΑ - ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΩΝ ΦΩΤΑΥΓΕΙΟΜΕΤΡΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΓΙΑ ΑΝΑΛΥΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### Αντικείμενο Έργου - Επιτεύγματα

Αντικείμενο του εργαστηρίου είναι η ανάπτυξη νέων φωταυγειομετρικών μεθόδων για τον προσδιορισμό δεικτών ποιότητας φυσικών προϊόντων. Μεταξύ άλλων, αναπτύχθηκαν και δημοσιεύθηκαν σε διεθνή περιοδικά χημειοφωταυγειομετρικές και φθορισμομετρικές μέθοδοι για τη νοθεία ελαιολάδων με φθηνά σπορέλαια, για τον προσδιορισμό της ολικής αντιοξειδωτικής δράσης υδρόφιλων και υδρόφοβων φυσικών προϊόντων, όπως φρούτων, λαχανικών και εδώδιμων ελαίων. Σε εξέλιξη βρίσκεται ανάπτυξη χημειοφωταυγειομετρικής μεθόδου για τον ποσοτικό προσδιορισμό υπεροξειδίων σε εδώδιμα έλαια. Αντιδράσεις χημειοφωταύγειας χρησιμοποιήθηκαν και για τον προσδιορισμό δραστικών ουσιών σε φαρμακευτικά σκευάσματα. Στα πλαίσια των εργασιών αυτών χρησιμοποιήθηκαν για πρώτη φορά νανοδομημένοι ανόργανοι καταλύτες οι οποίοι αυξάνουν τις αποδόσεις και εντάσεις των χημειοφωταυγών αντιδράσεων μέχρι και δέκα φορές.

### Προσωπικό

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

**Τεχνικό Προσωπικό:** Ελίνα Γιαννακοπούλου

**Μεταδιδασκαστορικοί Συνεργάτες:** Δρ. Γεώργιος Χ. Βουγιουκαλάκης

**Υποψήφιοι Διδάκτορες:** Διονύσιος Χριστοδουλέας (άμισθος)

**Υποψήφιοι διδάκτορες υπότροφοι «Δ»:** Αφροδίτη Πινακά (Υποτροφία)

**Πτυχιακοί Συνεργάτες:** Κωνσταντίνος Ανουσάκης (ΕΜΠ)

### Δημοσιεύσεις

1. Nikokavoura, A; Christodouleas, D.; Papadopoulos, K.; Calokerinos, A., Evaluation of antioxidant activity of hydrophilic and lipophilic compounds in edible oils by a novel fluorimetric method, *Talanta*, 84 (2011) 874-880.
2. Christodouleas, D.; Fotakis, C.; Economou, A.; Papadopoulos, K.; Calokerinos, A. Flow-based methods with chemiluminescence detection for food and environmental analysis, *Anal. Lett.*, 44 (2011) 176-215.
3. Christodouleas, D.; Papadopoulos, K.; Calokerinos, A., Determination of



- Total Antioxidant Activity of Edible Oils as well as Their Aqueous and Organic Extracts by Chemiluminescence, *Food Anal. Methods*, 4 (2011) 475-484.
4. Vougioukalakis, G.C.; Philippopoulos, A.I; Stergiopoulos, T.; Falaras, P., Contributions to the Development of Ruthenium-Based Sensitizers for Dye-Sensitized Solar Cells, *Coord. Chem. Rev.* 255 (2011) 2602-2621.
  5. Kourti, M.E.; Vougioukalakis, G.C.; Hadjichristidis, N.; Pitsikalis, M., Metallocene-Mediated Cationic Ring-Opening Polymerization of 2-Methyl- and 2-Phenyl-oxazoline, *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* 49 (2011) 2520-2527.
  6. Fotakis C.; Christodouleas, D., Zervou M.; Papadopoulos, K.; Calokerinos, A., Classification of wines based on different antioxidant responses to spectrophotometric, analytical methods, *Anal. Lett.* 2012, in press.

### Κεφάλαια σε Βιβλία

1. Roubelakis M.M.; Vougioukalakis, G.C. "Surgery at the Molecular Level: Synthesis and Modifications of Open-Cage Fullerene Derivatives" in *Handbook of Carbon Nano Materials, Volume 4*, D'Souza, F.; Kadish, K. M., Eds., World Scientific Publishing, in press. (Invited).

### Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Κ. Παπαδόπουλος, Α. Πινακά, Γ. Χ. Βουγιουκαλάκης, Ε. Γιαννακοπούλου, Α.Τερζής, Δ. Δημοτικάλη, Σύνθεση καινοτόμων, σταθερών σε υδατικό περιβάλλον Ν-βορανίων των β-αμινοαλκοολών μέσω της αντίδρασης αναγωγής α-αμινοξέων με βοροϋδρίδιο του νατρίου παρουσία πυκνού θειικού οξέος, 21ο ΠΑΝΕΛΛΗΝΙΟ ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΧΗΜΕΙΑΣ, ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ, 9-12 ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΥ 2011.

### Διαλέξεις

1. Παπαδόπουλος Κ.: Σύνθεση καινοτόμων, σταθερών σε υδατικό περιβάλλον Ν-βορανίων β-αμινοαλκοολών. Θεσσαλονίκη, 10 Δεκεμβρίου 2011.
2. Vougioukalakis, G. C.: Fullerene Chemistry, Olefin Metathesis and Other Fairy Tales" National and Kapodistrian University of Athens, Department of Chemistry, Athens, Greece (March 3, 2011, Invited).
3. Vougioukalakis, G. C.: Fullerenes, Polymers, Dye-Sensitized Solar Cells



and Other Fairy Tales” Italian Institute of Technology, Centre for Nanoscience and Technology, Milan, Italy (November 14, 2011, Invited).

## **Διδασκαλία**

1. Βουγιουκαλάκης Γ. Χ.: Μεταπτυχιακό Μάθημα «Οργανικοί Μετασχηματισμοί στη Σύνθεση Πολυμερών: Αρχές και Εφαρμογές» στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα «Επιστήμη Πολυμερών και Εφαρμογές της» (Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας).
2. Γ. Χ. Βουγιουκαλάκης: Μεταπτυχιακό Μάθημα «Οι Οργανομεταλλικοί Καταλύτες των Μετάλλων Μετάπτωσης στην Οργανική Σύνθεση» στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα «Οργανική Σύνθεση και Εφαρμογές στη Χημική Βιομηχανία» (Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας).

## **Βραβεία / Διακρίσεις / Υποτροφίες**

1. Vougioukalakis, G.C.: Foundation for Education and European Culture Research Scholarship (Sept. 2011 – Aug. 2012).

## **Ερευνητική Υποδομή**

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

## **Συνεργασίες**

Καθηγήτρια Δ. Δημοτικάλη (Ε.Μ.Π., Τμήμα Χημικών Μηχανικών), Καθηγητής Αντώνιος Καλοκαρινός (ΕΚΠΑ, Τμήμα Αναλυτικής Χημείας), 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, Uni-



versity of Olomouc, Czech Republic), Prof. A. Meghea (Polytechnic School of Bucharest, Romania).

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Κυριάκος Παπαδόπουλος είναι:

6. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Luminescence, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, Analytica Chimica Acta, Food Chemistry and Applied Catalysis, B: Environmental.
7. Μέλος επιτροπών για την πρόσληψη ερευνητών στις βαθμίδες Γ και Δ του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.
8. Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων Δ. Χριστοδουλέα και Α. Πινακά.
9. Αξιολογητής ερευνητικών προγραμμάτων στο Ίδρυμα Προώθησης Έρευνας της Κύπρου.

Ο Δρ. Γεώργιος Χ. Βουγιουκαλάκης είναι:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Chemical Reviews, Organometallics, European Polymer Journal, The Scientific World JOURNAL.
2. Κριτής σε συγγράμματα του εκδοτικού οίκου Wiley-Blackwell και κεφάλαια βιβλίων του εκδοτικού οίκου Wiley-Interscience.
3. Μέλος του Συμβουλίου Έκδοσης (Editorial Board) του Διεθνούς Επιστημονικού Περιοδικού "The Scientific World JOURNAL" (από Αύγ. 2011).

## 2.4 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 υδατινών πόρων και της γεωθερμικής ενέργειας. Τέτοια προβλήματα είναι: ο μηχανισμός τροφοδοσίας των υπόγειων οριζόντων, το δυναμικό τους, η ταχύτητα ροής του υπόγειου νερού, η σύνδεση υπόγειων οριζόντων μεταξύ τους ή με επιφανειακούς ταμιευτήρες, καθώς και η προέλευση των γεωθερμικών ρευστών. Επίσης, αντικείμενο του έργου είναι η ανάπτυξη μεθόδων για τον προσδιορισμό της συγκεντρώσεως του φυσικού  $^{14}\text{C}$  στην ατμόσφαιρα και την μελέτη των μεταβολών των ισοτοπικών λόγων  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$  και  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$  στο ατμοσφαιρικό  $\text{CO}_2$ .

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

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



### Προσωπικό

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

**Άμισθος Μεταπτυχιακός Σπουδαστής:** Ματιάτος Ιωάννης,

Άμισθος Υποψήφιος Διδάκτωρ



## Διδακτικό Έργο

### Διδασκαλία

1. Ζουριδάκης, Ν. «Ραδιοάνθρακας: Ένα παράδειγμα της Ενόπτητας της Επιστήμης.», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ιούλιος 2011.
2. Ζουριδάκης, Ν. «Εφαρμογές των Ισοτόπων στη Μελέτη του Περιβάλλοντος και του Παρελθόντος», Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ιούλιος 2011.
3. Ζουριδάκης, Ν. , Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψήφιου διδάκτορα Ι. Ματιάτου (Γεωλογικό Τμήμα Παν/μίου Αθηνών).

### Συνεργασίες

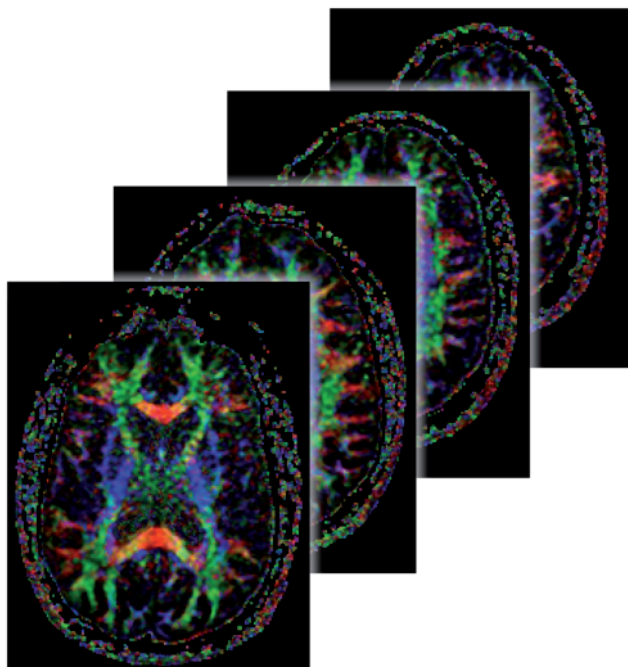
Π.Σαμπατακάκης, (ΙΓΜΕ Ιστοπικές αναλύσεις Πελοπόννησος), Ε.Νικολάου (ΙΓΜΕ Ηπείρου, Ιστοπικές αναλύσεις), Δρ. Η. Δημητρίου (ΕΛΚΕΘΕ,), Δρ. Σ. Παυλίδου (ΙΓΜΕ Κρήτης, Ιστοπικές αναλύσεις), Καθ. Ι. Διαμαντής (Πολυτεχνική Σχολή Ξάνθης, Μετρήσεις Ραδονίου σε πηγές και γεωτρήσεις του Νομού Ξάνθης), Α.Αραβαντινός Καθ. ΤΕΙ Αθήνας (χρήσεις της υπέρυθρης κάμερας IR 805)

## 2.5 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, Μη-γραμμικής Δυναμικής και Πολύπλοκων Συστημάτων για την μελέτη της δημιουργίας μεσοσκοπικών και μακροσκοπικών δομών και συσχετίσεων λόγω τοπικών ή/και μακράς εμβέλειας 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 πολύπλοκων μορφωμάτων ειδικών τύπων (μορφοκλασματικές δομές, fractals, δίκτυα) και συσχετίσεων μακράς εμβέλειας κοντά σε 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 οι αντιδράσεις ανοικτού τύπου και 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 πολύπλοκων δομών από το μικρο- στο μέσο- και μακρο- επίπεδο και η αλληλεπίδραση μεταξύ των τριών αυτών επιπέδων περιγραφής είναι μεγάλης τεχνολογικής σημασίας σήμερα, σε τομείς αιχμής όπως η ανάπτυξη νέων υλικών και οι φυσικοχημικές και βιολογικές διεργασίες.

Για την μελέτη τέτοιων πολύπλοκων συστημάτων χρησιμοποιούμε στο Εργαστήριο στατιστικές μεθόδους δομικής και δυναμικής περιγραφής αλλά και μοντέλα μηχανισμών ανάπτυξης μορφολογικών χαρακτηριστικών. Οι στατιστικές μέθοδοι περιλαμβάνουν θερμοδυναμικές προσεγγίσεις, εντροπία (εκτατική και μη εκτατική), θεωρία κατανομών μακράς και πεπερασμένης εμβέλειας, δίκτυα, κατανομές Levy, θεωρία τυχαίου περιπάτου, κ.α.. Για την μελέτη μηχανισμών ανάπτυξης μορφωμάτων χρησιμοποιούμε μη-γραμμικά μοντέλα ιεραρχημένης



*Πολύπλοκα μορφοκλασματικά δίκτυα νευρωνικών αξόνων στον ανθρώπινο εγκέφαλο  
 (από αναπαράσταση DTI, 2010)*

πολυπλοκότητας, θεωρίες μέσου πεδίου, μεθόδους ακριβούς απαρίθμησης, θεωρία Επανακανονικοποίησης Πραγματικού Χώρου (real space renormalisation), θεωρία στοχαστικών διαδικασιών (stochastic processes) και υπολογιστικές μεθόδους τύπου Kinetic Monte Carlo.

Οι εφαρμογές στο Εργαστήριο περιλαμβάνουν, μεταξύ άλλων, και μελέτες επιφανειών, και συσσωματωμάτων που παρουσιάζουν μορφοκλασματικές (fractal) δομές, βιοπληροφορική, στατιστική μελέτη και μοντελοποίηση αλυσίδων DNA και βιολογικών μακρομορίων, δίκτυα νευρώνων στον εγκέφαλο, 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, Ερευνήτης Α', υπεύθυνος του έργου  
**Συεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης  
**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Νικόλαος Κούβαρης (μέχρι 08/2011),  
Ευαγγελία Παναγάκου.

**Προπτυχιακοί Φοιτητές (διπλωματικές εργασίες):** Ιάσων Μπάσσετ, Μιχάλης Κο-  
βάνης, Ορέστης Τουργέλης.

**Εξωτερικοί Συνεργάτες:** Δρ. Θωμάς Οικονόμου και Δρ. Ιωάννα Χιτζανίδη.

## Δημοσιεύσεις

1. Kouvaris N., Kugiumtzis D. and Provata A., "Species mobility induces synchronization in chaotic population dynamics", *Phys. Rev. E*, 2011, 84, 036211.
2. Beck C., Provata A., "Multifractal information production of the human genome", *Europhys. Letts.*, 2011, 95, 58002.
3. Provata A., Beck C., "Multifractal analysis of nonhyperbolic coupled map lattices: Application to genomic sequences", *Phys. Rev. E*, 2011, 83, 066210.
4. Kouvaris N., Schimansky-Geier L., Scholl E., "Control of coherence in excitable systems by the interplay of noise and time-delay", *Eur. Phys. J. Special Topics*, 2010, 191, 29–51 (published in 2011).
5. Oikonomou Th.: "Comment on "Critique of multinomial coefficient method for evaluating Tsallis and Renyi entropies" by A.S. Parvan", *Physica A*, 2011, 390, 781–784.
6. Provata A., Katsaloulis P., Verganelakis D. A., "Dynamics of chaotic maps for modelling the multifractal spectrum of human brain Diffusion Tensor Images", *Chaos, Solitons & Fractals*, 2012, 45, 174-180.

## Ανακοινώσεις σε συνέδρια

1. Kouvaris N., Kugiumtzis D. and Provata A., "Synchronization and bulk oscillations in auto-catalytic reactions", International Conference "Engineering of Chemical Complexity", Berlin, Germany, July 2011.
2. Βεργανελάκης Δ. Α., Κατσαλούλης Π., Προβατά Α., Γκότσος Ε., Τούλας Π., "Μορφοκλασματική ανάλυση-μελέτη νευρώνων εγκεφάλου από εικόνες Tractography", Διαπανεπιστημιακό Συνέδριο Ακτινολογίας, Λάρισα, Οκτώβριος 2011.
3. Panagakou E., Kouvaris N., Provata A. «Complex Reactive Dynamics», "European Conference on Complex Systems September 12-16 2011" (ECCS '11 Vienna), Βιέννη, Αυστρία.



## Διαλέξεις

1. Προβατά Α., “Δημιουργία Δομών και Κλιμάκων στη Μορφογένεση”, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Ιανουάριος 2011.
2. Μπάσσετ Γ. Ι.; “A Study of the SIR and SIRS Epidemiological Models”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, Αθήνα, 11/01/2011.
3. Kouvaris N., “Control of coherence in excitable systems by the interplay of noise and time-delay”, Technische Universitaet, Berlin, 2011.
4. Κούβαρης Ν.; “Μελέτη συγχρονισμού σε διακριτά βιολογικά συστήματα”, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Αθήνα, 2011.
5. Κούβαρης Ν.; “Study of synchronization in discrete biological models”, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πολυτεχνική Σχολή, Θεσσαλονίκη, 2011 (υποστήριξη διδακτορικής διατριβής).
6. Προβατά Α. , “Πολυμορφοκλασματικές Ιδιότητες ακολουθιών DNA”, Σειρά Σεμιναρίων “Στατιστική Δυναμικής και Μη-γραμμικών Δυναμικών Συστημάτων”, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, Αθήνα, 01/04/2011.
7. Οικονομου Th.: “Is Shannon entropy always additive?”, ΣΦ-International Conference on Στατιστική Φυσική, Larnaca – Cyprus, 11/07 – 15/07 2011.
8. Κατσαλούλης Π., “Fractals: από το DNA στον εγκέφαλο”, Θερινό σχολείο 2011, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα, Ιούλιος 2011.
9. Κοβάνης Μ.; “Study of the FitzHugh-Nagumo model for the dynamical representation of neural networks”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, Αθήνα, 06/05/2011.
10. Παναγάκου Ε.; “Kinetic Monte Carlo Simulations in Reaction - Diffusion Systems”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, Αθήνα, 18/05/2011.
11. Οικονόμου Θ.: “Derivation of the Sackur-Tetrode entropy within classical thermodynamics”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα, 07/11/2011.
12. Παναγάκου Ε.; “ Limit Cycle Reaction - Diffusion Dynamics”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, Αθήνα, 21/11/2011.
13. Μπάσσετ Γ. Ι.; “The Deterministic and Stochastic Epidemiological Model SIRS: A Case of Population Dynamics”, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’, Αθήνα, 11/12/2011.



## **Διδακτικό Έργο**

### **Διδασκαλία**

1. Προβατά Α. Ειδικά Κεφάλαια σε Πολύπλοκα Συστήματα (Κεφάλαιο “Δημιουργία Χωροχρονικών Δομών”), Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” και Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα “Μαθηματική Προτυποποίηση στις Μοντέρνες Τεχνολογίες και στην Οικονομία”, Σχολή ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ, Χειμερινό Εξάμηνο 2010-2011.
2. Κατσαλούλης Π., “Γλώσσες Προγραμματισμού και Εργαλεία Λογισμικού στη Βιοπληροφορική Ι”, Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Βιοπληροφορικής, Τμήμα Βιολογίας, Παν. Αθηνών, Χειμερινό Εξάμηνο 2010-2011.

### **Διατριβές – Πρακτικές Εργασίες**

1. Κούβαρης Ν., Διδακτορική Διατριβή. Τίτλος: “Μελέτη συγχρονισμού σε διακριτά βιολογικά συστήματα”. Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 10 Ιουνίου 2011.

### **Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις**

1. “Molecular Simulations in Biosystems and Material Science (Sim-BioMa)”, ESF Research Networking Programme, 05/2006-05/2011.

### **Ερευνητική Υποδομή**

1. 3 Υπολογιστικά Συστήματα Intel, Core 2 Quad (Linux).
2. 3 Υπολογιστικά Συστήματα Pentium IV (Linux).
3. 1 Προσωπικός Υπολογιστής (Windows).

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

1. Κούβαρης Ν.; Παραμονή και συνεργασία με τον καθ. L. Schimansky-Geier στο Humboldt Universitaet Berlin, Dept. of Physics, το διάστημα 20/02/2011 – 20/03/2011.
2. Κούβαρης Ν.; Ερευνητική συνεργασία με τον καθ. A. S. Mikhailov στο ίδρυμα Fritz Haber Intsitute of the Max Planck Society του Βερολίνου για το διαστήματα 07/2011 – 08/2011.
3. Προβατά Α.; Ερευνητική Άδεια (Sabbatical) και συνεργασία με τον Καθ. Christian Beck, στην Αγγλία, University of London, Queen Mary College, 1/6/2011-31/09/2011.



## 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. Δ. Κουγιουμτζή (Πολυτεχνική Σχολή, Παν. Θεσσαλονίκης, "Δημιουργία Μορφωμάτων σε Πλέγματα Χαμηλών Διαστάσεων"); Καθ. B. Spagnolo (Univ. of Palermo, Dept of Physics, "Ecological Complex Systems, "); Prof. U. Tirnakli, (Ege University, "Entropic Forms"); Prof. I. Sokolov and Prof. L. Schimansky-Geier (Humboldt Universitaet Berlin, Dept. of Physics, "Reactive Dynamics with Diffusion on Low Dimensional Supports" and "Stochastic dynamics of excitable systems – Neuronal Networks"); Prof. Eckehard Schöll (Technische Universität, Berlin) "Control of coherence in excitable systems by the interplay of noise and time-delay"; Prof. Christian Beck (Queen Mary College, University of London, "Complex Pattern Formation – Superposition of Statistics"); Καθ. Κ. Ευταξία (Τμήμα Φυσικής, Παν. Αθηνών "Μελέτη του μοντέλου Fitzhugh-Nagumo για τη δυναμική αναπαράσταση συστοιχίας διεγερσίμων στοιχείων & Ντετερμινιστικά και Στοχαστικά Μοντέλα Δυναμικής Πληθυσμών SIRS και SEIRS"); Καθ. Δ. Φραντζεσκάκη και Καθ. Φ. Διάκονο (Τμήμα Φυσικής, Παν. Αθηνών, "Φαινόμενα Συντονισμού σε Συνεχή και Διακριτά Δυναμικά Συστήματα"); Dr. N. Kouvaris (Fritz Haber Institute of the Max Planck Society, "Nonequilibrium pattern formation on complex chemical networks", από 09/2011); Prof. C. Davatzikos (University of Pennsylvania, "Bio-medical Image Analysis").

## Άλλες Δραστηριότητες

Η Δρ. Αστέρω Προβατά κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. 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.

2. Αναπληρωτής Διευθυντής του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”.
3. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της υποψηφίου διδάκτορα Μαρίας Παπαπέτρου, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πολυτεχνική Σχολή, Θεσσαλονίκη.
4. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Παναγιώτη Κουρδή, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
5. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Ν. Κούβαρη, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πολυτεχνική Σχολή και της υποψηφίου διδάκτορα Ευαγγελίας Παναγάκου, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών.
6. Μέλος της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Ν. Κούβαρη, Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πολυτεχνική Σχολή (10 Ιουνίου 2011).
7. Μέλος της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής του υποψηφίου διδάκτορα Π. Ρέππα, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (Δεκέμβριος 2011).
8. Μέλος Επιτροπής Παρακολούθησης των διπλωματικών εργασιών των προπτυχιακών φοιτητών Ιάσονα Μπάσσετ, Μιχάλη Κοβάνη και Ορέστη Τουργέλη, Τμήμα Φυσικής, Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Ο Δρ. Θωμάς Οικονόμου είναι κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Physics Letters A*, *Physica B*, *Modern Physics Letters B*, *Journal of Mathematical Physics*, *Central European Journal of Physics*.

Ο Δρ. Παναγιώτης Κατσαλούλης:

1. Είναι κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: *Journal of Theoretical Biology*.
2. Έλαβε το 3ο βραβείο στο διαγωνισμό “HTC GrAnd”-2011, στην κατηγορία «Brains and Puzzles» για την εφαρμογή «Matches».

Ο Δρ. Νικόλαος Κούβαρης είναι κριτής στο διεθνές επιστημονικό περιοδικό: *Central European Journal of Physics*.



Η Ε. Παναγάκου κατά το έτος 2011:

1. Έλαβε χρηματοδότηση από την "European Society for Complex Systems" (πλαίσια ASSYST and Futur ICT) για την παρακολούθηση του συνεδρίου European Conference on Complex Systems (ECCS '11 Vienna), 12/09/2011-16/09/2011.
2. Παρακολούθησε το First European Ph.D. School on "Mathematical Modelling of Complex Systems", Πάτρα, Ελλάδα, 18/07/2011 – 29/07/2011.

Ο Ι. Μπάσσετ παρακολούθησε το First European Ph.D. School on "Mathematical Modelling of Complex Systems", Πάτρα, Ελλάδα, 18/07/2011 – 29/07/2011.

## **Πρόγραμμα 3**

*Μεμβράνες και προχωρημένα Νανοδομημένα υλικά,  
Χαρακτηρισμός, Μοντελοποίηση και Διεργασίες*



## ΕΙΣΡΟΕΣ ΑΠΟ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΣΤΑ ΕΡΓΑ ΤΟΥ ΙΦΧ

### 3. Μεμβράνες και προχωρημένα Νανοδομημένα υλικά, Χαρακτηρισμός, Μοντελοποίηση και Διεργασίες

ΕΡΓΟ	ΕΙΣΡΟΕΣ			
	ΙΦΧ	Παροχή Υπηρεσιών	Ευρωπαϊκά έργα	Έργα ΓΓΕΤ
Φαινόμενα Μεταφοράς Ύλης σε Πολυμερή (Μ. Σανοπούλου)	2.800	560	0	0
Μεμβράνες και Μικροπορώδη Υλικά για Περιβαλλοντικούς Διαχωρισμούς (Ν. Κανελλόπουλος)	2.800	675	219.000	1.367
Μοριακή Θερμοδυναμική και Μοντελοποίηση Υλικών (Ι. Οικονόμου)	2.000	207.650	136.656	0
Ηλεκτρονική Φασματοσκοπία: Εφαρμογές σε Νανοδομές και Υπερμμοριακά Συστήματα (Γ. Πιστόλης)	2.400	0	0	0

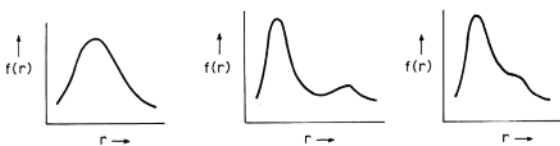
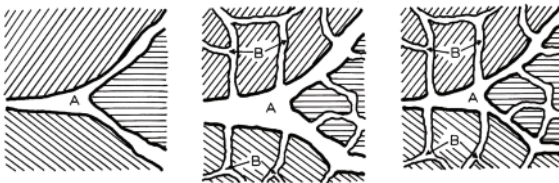
### 3.1 ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΥΛΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΗ

#### Αντικείμενο Έργου

Η έρευνα εστιάζεται στην μελέτη της ρόφησης και διαχύσεως μικρομοριακών ουσιών σε πολυμερικά κυρίως υλικά με το 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 στη 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



Σχηματική αναπαράσταση πορώδων μέσων και της αντίστοιχης συνάρτησης κατανομής ακτίνας πόρων σε πορώδες μέσο που προέρχεται από (a) συμπίεση μη πορώδων σωματιδίων (b) σχετικά χαλαρή συμπίεση πορώδων σωματιδίων και (c) ισχυρότερη συμπίεση απ' ό,τι στην περίπτωση b. A=πόροι μεταξύ των σωματιδίων, B=πόροι των σωματιδίων. [Petrooulos and Papadokostaki in "Nanoporous materials for energy and the environment", Rios, Centi and Kanellopoulos (Eds), 2011, Pan Stanford Publishing, Chap. 5.]



ή φυσικών κατεργασιών στην αποδέσμευση φαρμάκων από μήτρες υδρογέλης (ιι) την επίδραση ωσμωτικώς ενεργών προσθέτων για την προαγωγή της έλκυσσης από υδρόφοβες ελαστομερείς μήτρες (ιν) την ανάπτυξη πολυστρωματικών πολυμερικών μητρών, οι οποίες αποτελούν μια στρατηγική σχεδιασμού για την επίτευξη σταθερού ρυθμού εκλύσεως.

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

Η κινητική ροφήσεως σε συστήματα υαλωδών πολυμερών παρουσιάζει πληθώρα αποκλίσεων από την κατά-Fick συμπεριφορά που αποδίδεται είτε (ι) σε μηχανισμό «ιξώδους χαλαρώσεως» του διογκούμενου πολυμερούς, ή (ιι) στην επίδραση των εσωτερικών μηχανικών τάσεων που αναπτύσσονται στο πολυμερές λόγω ανομοιογενούς κατανομής του διαχύτη κατά την διάρκεια της ροφήσεως. Αναπτύσσονται μοντέλα βασισμένα και στους δύο μηχανισμούς, ικανά να αναπαράγουν όλα τα βασικά χαρακτηριστικά της παρατηρούμενης κινητικής συμπεριφοράς. Η πειραματική εργασία περιλαμβάνει:

(α) ρόφηση από την αέριο φάση. Στην περίπτωση αυτή, προσεκτικά σχεδιασμένα πειραματικά πρωτόκολλα ροφήσεως, σε συνδυασμό με παράλληλες μετρήσεις της κινητικής διαμήκους διόγκωσης των φιλμ, επιτρέπουν τη 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.

(β) 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 .

### *3. Χημικοί αισθητήρες*

Σε συνεργασία με το Ινστ. Μικροηλεκτρονικής αξιολογούνται πολυμερικά υλικά ως προς την διόγκωσή τους παρουσία ελεγχόμενης ατμόσφαιρας οργανικών ατμών ή υγρασίας, τα οποία στη συνέχεια χρησιμοποιούνται ως αισθητήρια υμένια χημικών αισθητήρων (τύπου χημειοπυκνωτών). Η δραστηριότητα αυτή αποσκοπεί στην ανάπτυξη συστοιχιών αισθητήρων για συγκεκριμένες εφαρμογές ανίχνευσης αερίων.



#### 4. Ρόφηση και διάχυση αερίων σε πορώδη υλικά

Στον τομέα των πορώδων υλικών η δραστηριότητα αφορά κυρίως τη θεωρητική μελέτη των ιδιοτήτων μεταφοράς και τη χρήση τους για το δομικό χαρακτηρισμό των υλικών αυτών. Με κατάλληλη αξιολόγηση και ανάλυση πειραματικών δεδομένων βάσει θεωρητικών μοντέλων, προσδιορίζονται και συσχετίζονται τα βασικά χαρακτηριστικά των μηχανισμών μεταφοράς και της δομής των μεσοπορώδων υλικών.

#### Προσωπικό

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

**Εξωτερικός Συνεργάτης:** Δρ. Ιωάννης Πετρόπουλος, ομότιμος Ερευνητής Α'

**Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Δημήτριος Σούλας

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Αθανασία Πάνου

**Προπτυχιακοί φοιτητές:** Νικόλαος Μαντές (Σχολή Φαρμακευτικής και Χημικής Τεχνολογίας, Παν/μιο Παβίας, Ιταλία)

#### Δημοσιεύσεις

1. Soulas, D. N.; Sanopoulou, M.; Papadokostaki, K.G. "Performance of three-layer controlled release devices with uniform or non-uniform material properties: Experiment and computer simulation". *J. Membrane Sci.* 2011, 372, 1-10.
2. Petropoulos, J.H; Sanopoulou, M.; Papadokostaki, K.G. "Physically insightful modeling of non-Fickian kinetic regimes encountered in fundamental studies of isothermal sorption of swelling agents in polymeric media" *Eur. Polym. J.* 2011, 47, 2053-2062.
3. Soulas, D. N.; Papadokostaki, K.G. "Regulation of proxyphylline's release from silicone rubber matrices by the use of osmotically active excipients and a multi-layer system" *Int. J. Pharm.* 2011, 408, 120-129.
4. Soulas, D. N.; Papadokostaki, K.G. "Experimental investigation of the release mechanism of proxyphylline from silicone rubber matrices", *J. Appl. Polym. Sci.* 2011, 120, 821-830.
5. Konidari, M.V.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Moisture-induced effects on tensile mechanical properties and glass transition temperature of polyvinyl alcohol films", *J. Appl. Polymer Sci.* 2011, 120, 3381-3386.

6. Oikonomou, P.; Patsis, G.P.; Botsialas, A.; Manoli, K.; Goustouridis, D.; Pantazis, N.A.; Kavadias, A.; Valamontes, E.; Ganetsos, T.; Sanopoulou, M.; Raptis, I.; "Performance simulation, realization and evaluation of capacitive sensor arrays for the real time detection of volatile organic compounds", *Microelectronic Eng.* 2011, 88, 2359-2363.
7. Oikonomou, P.; Manoli, K.; Goustouridis, D.; Botsialas, A.; Valamontes, E.; Raptis, I.; Sanopoulou, M. "Polymer coated microfabricated interdigitated electrodes arrays for gas sensing applications, *Key Engineering materials*, in press
8. Konidari, M.V.; Soulas, D.N.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Study of the effect of modified and pristine carbon nanotubes on the properties of poly(vinyl alcohol) nanocomposite films" *J. Appl. Polym. Sci.*, in press
9. Manoli, K.; Oikonomou, P.; Valamontes, E.; Raptis, I.; Sanopoulou, M. "Polymer-BaTiO<sub>3</sub> composites: dielectric constant and vapor sensing properties in chemocapacitor applications" *J. Appl. Polym. Sci.*, in press
10. Soulas D.N.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Proxiphylline release kinetics from symmetrical three-layer silicone rubber matrices: effect of different excipients in the outer rate-controlling layers", *Int. J. Pharm.*, in press.
11. Petropoulos, J.H.; Papadokostaki, K.G. "May the Knudsen equation be legitimately, or at least usefully, applied to dilute adsorbable gas flow in mesoporous media?", *Chem. Eng. Sci.*, in press.

## Κεφάλαια σε βιβλία

1. Petropoulos, J.H.; Papadokostaki, K.G. "Characterization of Macroscopically Non-Homogeneous Porous Media through Transient Gas Sorption or Permeation Measurements" in "Nanoporous Materials: Advanced Techniques for Characterization, Modeling, and Processing", N. Kanellopoulos Ed., 2011, CRC Press, Chap. 7.
2. Petropoulos, J.H.; Papadokostaki, K.G. "Modeling of gas transport properties, and its use for structural characterization, of mesoporous solids" in "Nanoporous materials for energy and the environment", G. Rios, G. Centi and N. Kanellopoulos (Eds), 2011, Pan Stanford Publishing, Chap. 5.



## Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Petropoulos, J.H.; Papadokostaki, K.G. "Characterization of Macroscopically Non-Homogeneous Porous Media through Transient Gas Sorption or Permeation Measurements", 2nd International NAPEN 2011 Workshop NAnoPorous materials for ENvironmental and ENergy applications, June 9-11, 2011, Rhodes, Greece, Abstracts pp. 49-53 (invited lecture).
2. Oikonomou, P.; Botsialas, A.; Patsis, G.; Manoli, K.; Goustouridis, D.; Valamontes, E.; Pantazis, N.; Sanopoulou, M.; Raptis, I. "Hybrid integration of microfabricated chemocapacitor arrays with miniaturized read-out electronics towards low-power gas sensing module" Eurosensors XXV, September 4-7, 2011, Athens, Greece, Procedia Engineering 25 (2011) 1117-1120.
3. Oikonomou, P.; Salapatas, A.; Manoli, K.; Misiakos, K.; Goustouridis, D.; Valamontes, E.; Sanopoulou, M.; Raptis, I.; Patsis G. "Chemocapacitance response simulation through polymer swelling and capacitor modeling" Eurosensors XXV, September 4-7, 2011, Athens, Greece, Procedia Engineering 25 (2011) 423 - 426.
4. Hasimi, A.; Papadokostaki, K.G.; Sanopoulou, M. "Structural relaxations of swelling poly(vinyl alcohol) films: Effect of thermal treatment and chemical crosslinking" 7th International Symposium "Molecular mobility and order in Polymer Systems" June 6-10, 2011, St Petersburg, Russia.
5. Pantazis, N.A.; Patsis, G.P.; Valamontes, E.; Raptis, I.; Goustouridis, D.; Sanopoulou, M. "Capacitive sensor arrays for the real time detection of volatile organic compounds" 5th International Conference on Sensing Technology, Nov. 28th - Dec. 1st, 2011, Palmerston North, New Zealand
6. Σούλας, Δ.Ν.; Πάνου, Α.; Σανοπούλου, Μ.; Παπαδοκωστάκη, Κ. «Βελτιστοποίηση της λειτουργίας συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης με τη χρήση πολυστρωματικών διατάξεων» 8ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, 26-28 Μαΐου, 2011, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα, CD περιεχομένων 163\_150. (Πρώτο βραβείο Αναρτημένης Εργασίας).
7. Πάνου, Α.; Σανοπούλου, Μ.; Παπαδοκωστάκη, Κ.; Ταραντίλη, Μ. «Τροποποίηση ελαστομερών σιλικόνης με υδρόφιλα πρόσθετα: μελέτη συστημάτων ελεγχόμενης αποδέσμευσης» 8ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημικής Μηχανικής, 26-28 Μαΐου, 2011, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα, CD περιεχομένων 159\_150.
8. Πάνου, Α.; Σανοπούλου, Μ.; Παπαδοκωστάκη, Κ. «Μήτρες ελεγχόμενης

αποδέσμευσης με βάση τις πολυ(σιλοξάνες): επίδραση υδρόφιλων πρόσθετων στην αποδέσμευση πρότυπων φαρμάκων» 6η Διημερίδα Ελληνικής Εταιρείας Βιοϋλικών, 18-19 Νοεμβρίου, 2011, Αθήνα, Ελλάδα.

## **Διαλέξεις**

1. Ι. Πετρόπουλος «Η σύγχρονη μέθοδος παραγωγής της γνώσης στις φυσικές επιστήμες: Πως λειτουργεί; Πότε και από πού προήλθε και γιατί είναι αυτή που είναι;» Θερινό Σχολείο, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, 4-15 Ιουλίου 2011.

## **Διδακτικό Έργο**

### **Διπλωματικές εργασίες**

Mantes, N. "Matrici di silicone modificato con polietilenglicole: caratterizzazione e rilascio di pharmacy", Università di Pavia, 2011, εκπόνηση στο ΙΦΧ, συνεπιβλεψη Δρ. Μ. Σανοπούλου, Καθ. Μ. C. Bonferoni.

## **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**

Δρ. Ι. Ράπτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστιτ. Μικροηλεκτρονικής), Δρ. Π. Φαλάρας (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστ. Φυσικοχημείας), Καθ. Α. Ανδρεόπουλος και Επικ. Καθ. Π. Ταραντίλη (Χημ. Μηχαν. ΕΜΠ), Καθ. Μ. C. Bonferoni (Παν/μιο Παβίας, Ιταλία), Αναπλ. Καθ. Ε. Κοντακιώτης (Οδοντιατρική Σχολή Πανεπ. Αθηνών)

## **Άλλες Δραστηριότητες**

Η Δρ. Μ. Σανοπούλου, κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά *Macromolecules*, *Colloid and Surfaces B: Biointerfaces*, *J. Chem. Eng. Data*, *Environmental Eng. and Management J*,



2. Μέλος της επιτροπής του συνεδρίου Eurosensors XXV, September 4-7, 2011, Athens, Greece

Η Δρ. Κ. Παπαδοκωστάκη, κατά το έτος 2011 διατέλεσε

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά J. Hazardous Mat., J. Appl. Polym. Sci., J. Pharm. Sci., Int. J. Pharm., Polymer.
2. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής της υποψήφιας διδάκτορος Αθανασίας Πάνου (ΕΜΠ).

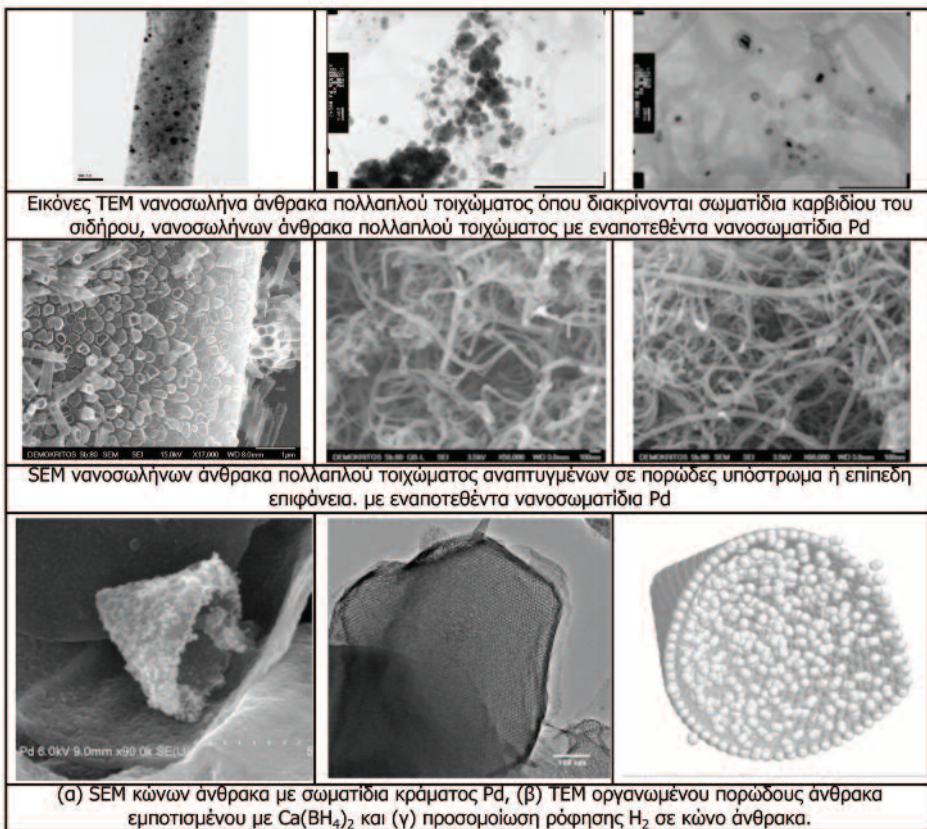
Ο Δρ. Ι. Πετρόπουλος, κατά το έτος 2011 διατέλεσε

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 της Επιτροπής εορτασμού των 50 χρόνων του «Δ».

## 3.2 ΜΕΜΒΡΑΝΕΣ ΚΑΙ ΜΙΚΡΟΠΟΡΩΔΗ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΟΥΣ ΔΙΑΧΩΡΙΣΜΟΥΣ

### Αντικείμενο Έργου

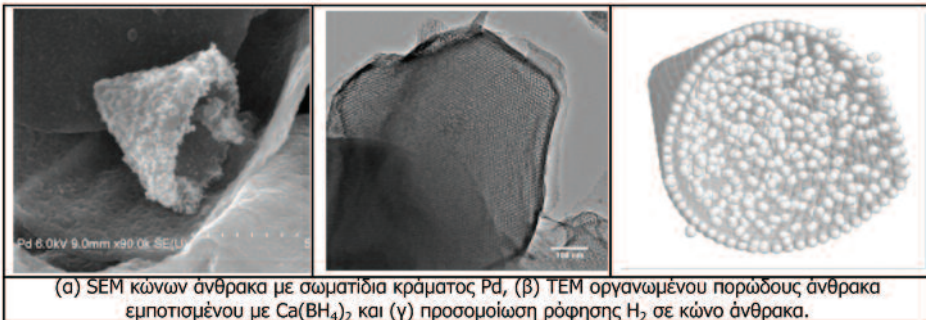
Η έρευνα εστιάζεται στην ανάπτυξη και φυσικοχημικό χαρακτηρισμό νανοπορωδών υλικών και μεμβρανών και στις εφαρμογές τους σε προηγμένες φυσικοχημικές διεργασίες με περιβαλλοντικό, ενεργειακό και βιομηχανικό ενδιαφέρον (αποθήκευση και διαχωρισμοί αερίων, επεξεργασία υδάτων, ετερογενής κατάλυση, κλπ). Η ομάδα βρίσκεται διεθνώς στο προσκήνιο πειραματικών τεχνικών στον τομέα της ρόφησης, διάχυσης και σκέδασης (νετρονίων και ακτίνων Χ) και κυρίως στον συνδυασμό των ανωτέρω μεθόδων. Επιπλέον υπάρ-



χουν σημαντικές δραστηριότητες σε υπολογιστικές προσεγγίσεις για την προσομοίωση υλικών και διεργασιών μέσω μοριακών ή μεσοσκοπικών τεχνικών. Ορισμένα παραδείγματα ερευνητικών θεμάτων για το 2011 παρατίθενται:

### 1. Τεχνολογίες Αποθήκευσης Υδρογόνου (*Hydrogen Storage*).

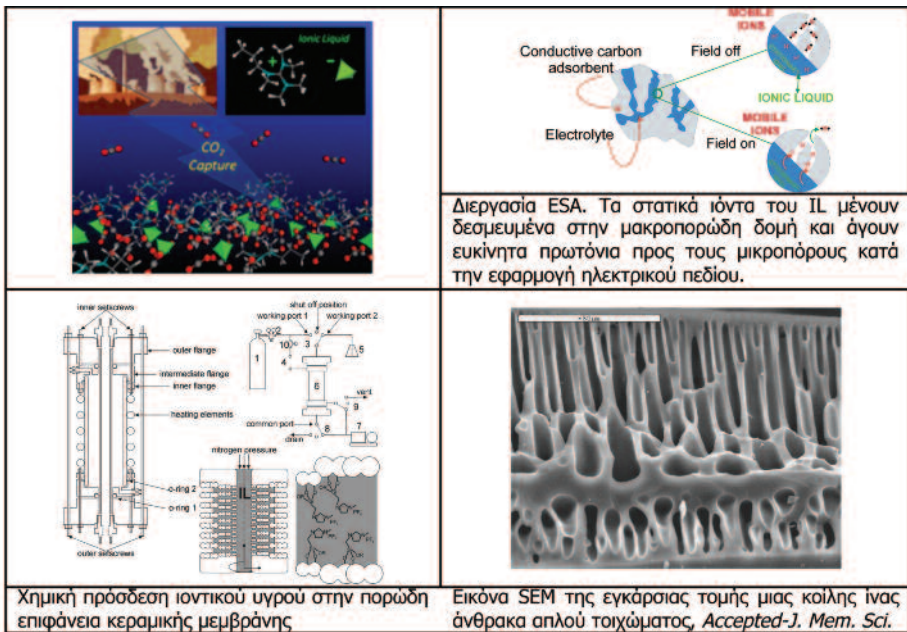
Αναπτύσσονται νανοπορώδη υλικά γραφιτικής δομής όπως νανοσωλήνες άνθρακα μονού και πολλαπλού τοιχώματος, γραφιτικοί νανοκώννοι, οργανωμένοι πορώδεις άνθρακες και νανο-αφροί άνθρακα και μελετάται η απόδοσή τους σε διεργασίες αποθήκευσης υδρογόνου. Η μελέτη αυτή πραγματοποιείται με προηγμένα αναλυτικά συστήματα προσδιορισμού της ροφητικής ικανότητας αερίων όπως σταθμικές και ογκομετρικές συσκευές υψηλής πίεσης, θερμοσταθμικά και θερμιδομετρικά συστήματα και φασματοσκοπία μάζας. Αξίζει να σημειωθεί ότι η οργανολογία του εργαστηρίου στον τομέα αποθήκευσης υδρογόνου (και άλλων αερίων, πχ. μεθανίου) είναι μοναδική στον Ελλαδικό χώρο. Περαιτέρω γίνονται προσπάθειες συνεχούς βελτίωσης της απόδοσης μέσω τροποποίησης της επιφανειακής χημείας των υλικών (*functionalisation*) και της ελεγχόμενης εναπόθεσης μεταλλικών νανοσωματιδίων ή του «εγκλεισμού» συμπλόκων υδριδίων στο πορώδες σύστημα. Ταυτόχρονα η πειραματική έρευνα ενισχύεται και μέσω της ανάπτυξης μοντέλων προσομοίωσης της ρόφησης αερίων και ατμών σε στερεά με μεθόδους Monte-Carlo.





## 2. Τεχνολογίες δέσμευσης CO<sub>2</sub> από τα αερία καύσης φυσικού αερίου και λιγνίτη.

Στον τομέα αυτό η έρευνα εστιάζει στην σύνθεση και εφαρμογή νέων βελτιωμένων διαλυτών όπως τα ιοντικά υγρά (Ionic Liquids, ILs) τα οποία έχουν την προοπτική να αντικαταστήσουν τις αμίνες επιφέροντας σημαντικό ενεργειακό και περιβαλλοντικό όφελος στην υπάρχουσα τεχνολογία ρόφησης/αναγέννησης με ατμό (absorption/stripping process). Ταυτόχρονα γίνονται προσπάθειες ανάπτυξης λιγότερο ενεργοβόρων διεργασιών δέσμευσης (άνευ χρήσης ατμού ως μέσου αναγέννησης) μέσω της σύνθεσης κεραμικών μεμβρανών και κοίλων ιών ελεγχόμενης νανοπορώδους δομής, με τεχνικές όπως η Χημική Εναπόθεση Ατμών [CVD], και η Υγρά / Ξηρή Αναστροφή Φάσεων ακολουθούμενη από Εξανθράκωση-Ενεργοποίηση. Σημαντική καινοτομία του εργαστηρίου στον τομέα αυτό αποτελεί η ανάπτυξη μεμβρανών ιοντικού υγρού (Supported IL Membranes) μέσω της χημικής πρόσδεσης (grafting) σιλανοποιημένων ιοντικών υγρών στην πορώδη επιφάνεια των μεμβρανών. Περαιτέρω εξετάζονται εναλλακτικοί τρόποι αναγέννησης όπως η τεχνολογία ηλεκτρικής μετάπτωσης (Electrical Swing Adsorption-ESA) όπου τα ILs χρησιμοποιούνται ως ηλεκτρολύτες που φέρουν ευκίνητα ιόντα (πρωτόνια) και δεσμεύονται στην μεσο-μάκρο πο-

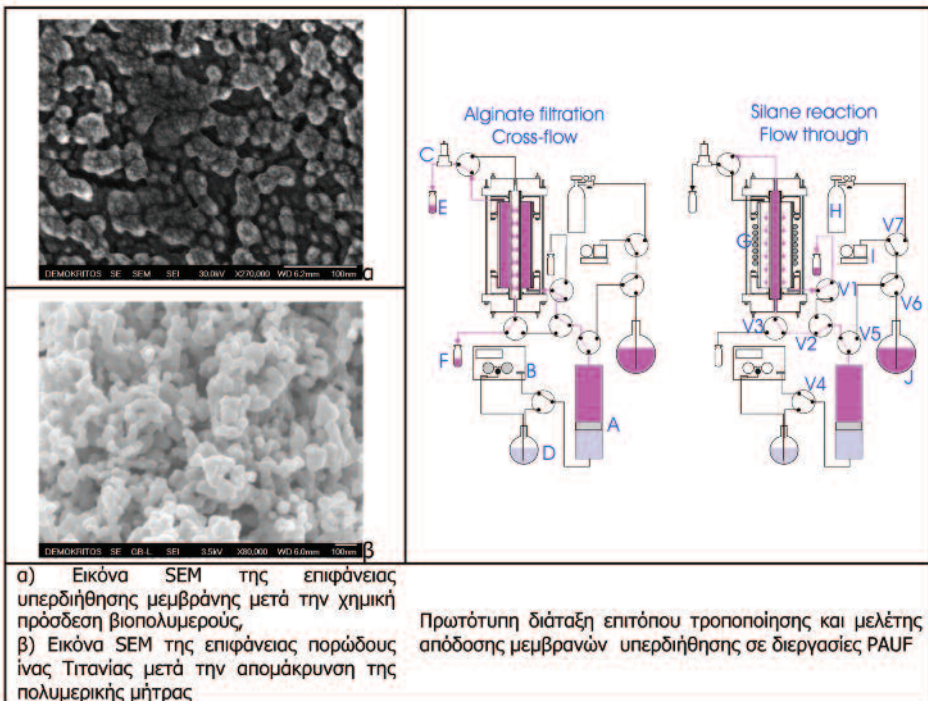


ρώδη δομή ηλεκτρικά αγώγιμων υλικών και μεμβρανών. Με επιβολή ηλεκτρικού πεδίου τα περισσότερα ευκίνητα ιόντα του ηλεκτρολύτη μεταπίπτουν προς την μικροπορώδη δομή του αγώγιμου υλικού προκαλώντας την εκρόφηση του προσροφημένου CO<sub>2</sub>.

3. Τεχνολογίες επεξεργασίας εκμετάλλευσης Φυσικού αερίου και προϊόντων πετρελαίου - Ετερογενείς καταλυτικές διεργασίες.

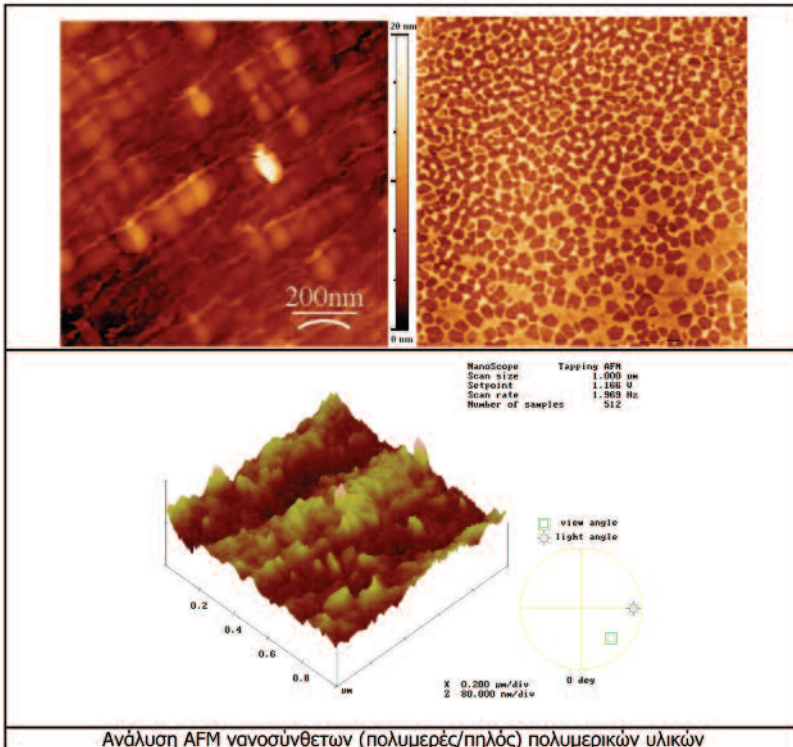
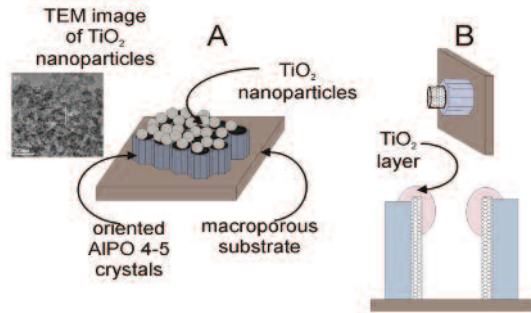
Για εφαρμογές Βελτίωσης και εκμετάλλευσης του φυσικού αερίου αναπτύσσονται μεμβράνες διαχωρισμού CH<sub>4</sub>/N<sub>2</sub> (Ζεολιθικές μεμβράνες, κοίλες ίνες άνθρακα ασύμμετρου υμενίου) και απομάκρυνση των ρύπων που συνήθως υφίστανται σε μικροποσότητες όπως H<sub>2</sub>S και μερκαπτάνες (Απόθεση υπέρλεπτων υμενίων Langmuir-Blodgett, πολυμερικές κοίλες ίνες με Αναστροφή Φάσεων).

Σημαντικό αντικείμενο έρευνας στους τομείς φυσικού αερίου και πετρελαίου αποτελούν η σύνθεση και ο χαρακτηρισμός νανοσωματιδίων μετάλλων για εφαρμογή σε ετερογενείς καταλυτικές διεργασίες όπως, η οξειδωση του CO, CH<sub>4</sub>WGS και η αναμόρφωση HC ενώ οι καταλύτες εξετάζονται και σε περιβαλλοντικές εφαρμογές όπως deNOx.



4. Τεχνολογίες επεξεργασίας νερού (βαρέα μέταλλα / οργανικοί ρύποι / αφαλάτωση).

Στον τομέα της απομάκρυνσης βαρέων μετάλλων και οργανικών ρύπων από το νερό το εργαστήριο έχει αναπτύξει με επιτυχία και εξελίσσει συνεχώς τεχνολογίες βασισμένες στην χρήση και τροποποίηση φυσικών προϊόντων (πολυσακχαρίτες από θαλάσσια φύκια). Η εφαρμογή τους γίνεται είτε σε διεργασίες διαλείποντος έργου (batch) όπου τα βιοπολυμερή μορφοποιούνται σε σχήμα χάνδρας (beads) μέσω σταυρο-δέσμησης (cross-linking) με ιόντα ασβεστίου είτε σε διεργασίες συνεχούς ροής όπου η μορφοποίηση έχει λάβει χώρα υπό την μορφή κοίλης ίνας σε κατάλληλες διατάξεις ινοποίησης/σταυροδέσμησης.





Ταυτόχρονα έχουν αναπτυχθεί με επιτυχία πορώδης κοίλες ίνες αλγινικού μέσω ελεγχόμενης απομάκρυνσης του διαλύτη με υπερκρίσιμο διοξείδιο του άνθρακα ( $sc\text{-CO}_2$ ). Η χημική πρόσδεση των βιοπολυμερών στην εξωτερική επιφάνεια μεμβρανών υπερδιήθησης αποτελεί επίσης ένα αντικείμενο έρευνας για εφαρμογή σε τεχνολογίες Υπερδιήθησης με την υποστήριξη πολυμερών ως μέσων δέσμευσης μετάλλων (Polymer Assisted Ultrafiltration PAUF).

Ταυτόχρονα με στόχο την αποικοδόμηση οργανικών ρύπων που περιέχονται στο νερό αναπτύσσονται μεμβράνες Τιτανίας (Υπερδιήθησης ή Νανοδιήθησης) είτε με μεθόδους εναπόθεσης σωματιδίων από την αέρια φάση (Particle assisted metal organic CVD), είτε με μεθόδους διαδοχικής εναπόθεσης υπέρλεπτων επιστρωμάτων  $\text{TiO}_2$  (Layer by Layer CVD) ενώ παράλληλα αναπτύσσονται μήτρες σταθεροποιημένων φωτοκαταλυτικών κόννεων μέσω εγκλωβισμού τους σε ίνες βιοπολυμερών για εφαρμογές σε δραστικές υβριδικές διεργασίες Φωτοκατάλυσης/Μεμβράνης, συνεχούς ροής.

Σε ότι αφορά την τεχνολογία αφαλάτωσης στόχο και αντικείμενο έρευνας του εργαστηρίου αποτελεί η επιτυχής ανάπτυξη μεμβρανών νανοσωλήνων άνθρακα απλού τοιχώματος. Για την επίτευξη του στόχου αυτού η μελέτη επικεντρώνεται αρχικά στην σύνθεση ζεολιθικών μεμβρανών προσανατολισμένων μονοκάναλων κρυστάλλων c-oriented  $\text{AlPO}_4$  και στην περαιτέρω ανάπτυξη νανοσωλήνων άνθρακα (SWNTs) στα παράλληλα διευθετημένα κανάλια με τεχνικές CVD.

#### 5. Τεχνολογίες προηγμένων υλικών συσκευασίας.

Αντικείμενο είναι η παρασκευή και χαρακτηρισμός πολυμερικών και νανοσύνθετων (πολυμερές/πηλός) πολυμερικών υλικών ως υλικά συσκευασίας και εξέταση κρίσιμων ιδιοτήτων τους όπως μηχανικές ιδιότητες και διαπερατότητες αερίων και ατμών σε εμπορικά αναλυτικά συστήματα που εφαρμόζουν μεθόδους ASTM.

## Προσωπικό

### Ερευνητές:

Δρ. Κανελλόπουλος Νικόλαος, Ερευνητής Α' Υπεύθυνος έργου, Δρ. Στεριώτης Θοδωρής, Ερευνητής Α', Δρ. Στεφανόπουλος Κώστας, Ερευνητής Β', Δρ. Κατσάρος Φώτης, Ερευνητής Β', Δρ. Ρωμανός Γιώργος, Ερευνητής Β'

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

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Δρ. Καρανικολός Γεώργιος, (ENTEP-2004), Δρ. Λαμπρόπουλος Αναστάσιος (STREP), Δρ. Βερμίσσογλου Ελένη

(STREP).

**Μεταπτυχιακοί:** Νικόλαος Ηλιόπουλος, Ευαγγελία Ντεζέ.

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Δήμητρα Γιασαφάκη, Βαγγέλη Όλγα, Περδικάκη Άννα

**Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα:** Βεζύρη Χαριτωμένη (STREP), , Άσση Αμπουμογλι (FP7-small).

**Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Ουρανία Τζιάλλα

### Δημοσιεύσεις

1. Amproumogli, A.; Steriotis, Th.; Trikalitis, P.; Giasafaki, D.; Bardaji, E.G.; Fichtner, M.; Charalambopoulou, G.; Nanostructured composites of mesoporous carbons and boranates as hydrogen storage materials, *Journal of Alloys and Compounds*, 2011, 509S, 705–708.
2. Bourlinos, A.B. ; Zbořil, R.; Kubala, M.; Stathi, P.; Deligiannakis, Y.; Karakassides, M.A.; Steriotis, T.A.; Stubos, A.K.; “Fabrication of fluorescent nanodiamond@C core-shell hybrids via mild carbonization of sodium cholate-nanodiamond complexes”, *Journal of Materials Science*, 2011, 46, 7912-7916.
3. Bourlinos, A.B.; Karakassides, M.A.; Stathi P.; Deligiannakis Y.; Zboril R.; Dallas P.; Steriotis T.A.; Stubos A.K.; Trapalis, C.; “Pyrolytic formation of a carbonaceous solid for heavy metal adsorption”, *Journal of Materials Science* 2011, 46, 975-982.
4. Dural, M.U.; Cavas, L.; Papageorgiou. S.K.; Katsaros, F.K. “Methylene blue adsorption on activated carbon prepared from *Posidonia oceanica* (L.) dead leaves: Kinetics and equilibrium studies”, *Chemical Engineering Journal* 2011, 168, 77-85.
5. Favvas, E.P.; Romanos, G.E.; Papageorgiou, S.K.; Katsaros, F.K.; Mitropoulos, A.Ch.; Kanellopoulos, N.K. “A Methodology for the morphological and physicochemical characterisation of asymmetric carbon hollow fiber membranes”, *Journal of Membrane Science* 2011, 375, 113-123
6. Favvas, E.P.; Stefanopoulos K.L.; Mitropoulos, A.Ch. “A simple equation for accurate mesopore size calculations”, *Microp. Mesop. Mater.* 2011, 145, 9 – 13.
7. Giasafaki, D.; Bourlinos, A.; Charalambopoulou, G.; Stubos, A.; Steriotis, Th.; “Nanoporous carbon - metal composites for hydrogen storage”, *Cent. Eur. J. Chem.* 2011, 9, 948-952 .



8. Giasafaki, D.; Bourlinos, A.; Charalambopoulou, G.; Stubos, A.; Steriotis, Th.; "Synthesis and characterisation of nanoporous carbon-metal composites for hydrogen storage", *Microporous and Mesoporous Materials*, 2011, article in press.
9. Gotzias, A.; Heiberg-Andersen, H.; Kainourgiakis, M.; Steriotis, Th.; "A grand canonical Monte Carlo study of hydrogen adsorption in carbon nanohorns and nanocones at 77 K", *Carbon* 2011, 49, 2715-2724.
10. Gotzias, A.; Tyllianakis, E.; Froudakis, G.; Steriotis, Th.; "Theoretical study of hydrogen adsorption in oxygen functionalized carbon slit pores". *Microporous and Mesoporous Materials*, 2011, article in press.
11. Papageorgiou, S.K.; Favvas, E.P.; Sapalidis, A.A.; Romanos, G.E.; Katsaros, F.K. "Facile synthesis of carbon supported copper nanoparticles from alginate precursor with controlled metal content and catalytic NO reduction properties", *Journal of Hazardous Materials* 2011, 189, 384-390.
12. Pasadakis, N.; Romanos, G.; Perdikatsis, V.; Foscolos, A.E. "The production of activated carbons using greek lignites by physical and chemical activation methods: A comparative study, *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* 2011, 33, 713-723.
13. Psfogiannakis, G.M.; Steriotis, Th.A.; Bourlinos, A.B.; Kouvelos, E.P.; Charalambopoulou, G.Ch.; Stubos, A.K.; Froudakis, G.E.; "Enhanced hydrogen storage by spillover on metal-doped carbon foam: an experimental and computational study", *Nanoscale* 2011, 3, 933-936.
14. Romanos, G.E.; Athanasekou, C.P; Katsaros, F.K.; Kanellopoulos, N.K.; Dionysiou, D.D. Likodimos, V.; Falaras, P. "Double-side active TiO<sub>2</sub>-modified nanofiltration membranes in continuous flow photocatalytic reactors for effective water purification", *Journal of Hazardous Materials* 2011 in press
15. Romanos, G.E.; Likodimos, R.R.N.; Marques, V.; Steriotis, T.A.; Papageorgiou, S.K.; Faria, J.L.; Figueiredo, J.L.; Silva, A.M.T.; Falaras, P.; "Controlling and quantifying oxygen functionalities on hydrothermally and thermally treated single-wall carbon nanotubes", *Journal of Physical Chemistry C*, 2011, 115, 8534-8546.
16. Romanos, G.E.; Likodimos, V.; Marques, R.R.N.; Steriotis, T.A.; Papageorgiou, S.K.; Faria, J.L.; Figueiredo, J.L.; Falaras, P. "Controlling and quantifying oxygen functionalities on hydrothermally and thermally treated

- single-wall carbon nanotubes” *Journal of Physical Chemistry C* 2011, 115, 8534-8546.
17. Sapalidis, A.A.; Katsaros, F.K.; Steriotis Th.A.; Kanellopoulos, N.K. “Properties of Poly(vinyl alcohol) - bentonite clay nanocomposite films in relation to polymer-clay interactions”, *Journal of Applied Polymer Science* 2011 in press
  18. Stefanopoulos, K.L.; Romanos, G.E.; Vangeli, O.C.; Mergia, K.; Kanellopoulos, N.K.; Koutsioubas, A.; Lairez, D. “Investigation of confined ionic liquid in nanostructured materials by a combination of SANS, contrast-matching SANS, and nitrogen adsorption” *Langmuir* 2011, 27, 7980-7985.
  19. Tziotziou, M.; Karakosta, E.; Karatasios, I.; Diamantopoulos, G.; Sapalidis, A.; Fardis, M.; Maravelaki-Kalaitzaki, P.; Papavassiliou, G.; Kilikoglou, V. “Application of <sup>1</sup>H NMR to hydration and porosity studies of lime-pozzolan mixtures”, *Microporous and Mesoporous Materials* 2011, 139, 16-24.
  20. Vermisoglou, E.C.; Pilatos, G.; Romanos, G.E.; Devlin, E.; Kanellopoulos, N.K.; Karanikolos, G.N. “Magnetic carbon nanotubes with particle-free surfaces and high drug loading capacity”, *Nanotechnology* 2011, 22 (35), art. no. 355602.
  21. Vermisoglou, E.C.; Romanos, G.E.; Karanikolos, G.N.; Kanellopoulos, N.K. “Catalytic NO<sub>x</sub> removal by single-wall carbon nanotube-supported Rh nanoparticles” *Journal of Hazardous Materials* 2011, 194, 144-155.

## Βιβλία

1. Karanikolos, G.N.; Katsaros, F.K.; Romanos, G.E.; Stefanopoulos, K.L.; Kanellopoulos, N.K. “The Combination of In Situ and Ex Situ Techniques for Monitoring and Controlling the Evolution of Nanostructure of Nanoporous Materials”, in *Nanoporous Materials: Advanced Techniques for Characterization, Modeling, and Processing*, Ed. N.K. Kanellopoulos, CRC Press, 2011, p165-220,
2. Sapalidis, A.A.; Katsaros, F.K.; Kanellopoulos, N.K. “PVA / Montmorillonite nanocomposites: Development and properties”, in *Nanocomposites and Polymers with Analytical Methods*, Ed. J. Cuppoletti, Chapter 2, pp 29-50, Intech, 2011
3. Steriotis, Th.A.; Charalambopoulou, G.C.; Stubos, A.K., “Advanced Materials for Hydrogen Storage” in *Nanoporous Materials: Advanced Tech-*



niques for Characterization, Modeling, and Processing , Ed. N. Kanelopoulos, CRC Press, 2011

4. Konstantakou, M.; Gotzias, A.; Kainourgiakis, M.; Stubos, A.K.; Steriotis, Th.A. "GCMC Simulations of Gas Adsorption in Carbon Pore Structures in Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering", Ed. Shaul Mordechai, InTech, 2011

### Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Ampoumogli, A.; Steriotis, Th.; Trikalitis, P.; Charalambopoulou, G.; "Thermal decomposition properties of boranates confined in nanoporous carbons", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS IX, Dresden-Germany, 5-8 June 2011.
2. Charalambopoulou, G.; Bourlinos, A.; Giasafaki, D.; Ampoumogli, A.; Trikalitis, P.; Stubos, A.; Steriotis, Th.; "Hydrogen Storage with the use of Nanoporous Carbon Supports and Scaffolds", 2nd International Workshop on NAnoPorous Materials for ENvironmental and ENergy Applications (NAPEN 2011), Rhodes-Greece, 9-13 June 2011.
3. Charalambopoulou, G.; Bourlinos, A.; Giasafaki, D.; Ampoumogli, A.; Trikalitis, P.; Stubos, A.; Steriotis, Th.; "Hydrogen Storage based on Nanoporous Carbon Supports and Scaffolds", Processes in Isotopes and Molecules (PIM 2011), Cluj Napoca-Romania, 29 September-1 October 2011.
4. Dural, M.U.; Cavas, L.; Papageorgiou, S.K.; Katsaros, F.K. "Preparation of activated carbon from Posidonia oceanica (L.) dead leaves", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS 9, June 5-8, 2011, Dresden, Germany.
5. Falaras, P.; Miranda, S. M.; Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Silva, A. M. T.; Vilar, V. J. P.; Faria, J. L. "Single Wall Carbon Nanotube/TiO<sub>2</sub> Composite Photocatalysts", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR), Oral presentation, BOOK OF ABSTRACTS, p. 81Vangeli, O.C.; Romanos, G.E., Beltsios, K.G. "Temperature dependence of CO<sub>2</sub>/CO selectivity in hybrid Ionic Liquid/Ceramic membranes", (Poster presentation), Thermodynamics 2011, September 1-3, Athens-Greece.
6. Falaras, P.; Romanos, G. E.; Likodimos, V.; Marques, R. R. N.; Steriotis,



- T. A.; Papageorgiou, S. K.; Faria, J. L.; Figueiredo, J. L.; Silva, A. M. T. "Control and Quantification of Oxygen Functional Groups on Single Wall Carbon Nanotubes, 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems", (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation), BOOK OF ABSTRACTS, p. 111.
7. Favvas, E.P., Heliopoulos, N.S.; Papageorgiou, S.K.; Katsaros, F.K.; Stefanopoulos, K.L. Mitropoulos, A.Ch.; Kanellopoulos, N.K. "The pyrolysis conditions effect on structure and properties of BTDA-TDI/MDI co-polyimide based carbon hollow fiber membranes", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS 9, June 5-8, 2011, Dresden, Germany.
  8. Favvas, E.P.; Stefanopoulos, K.L.; Mitropoulos, A.Ch.; Kanellopoulos, N.K. "Structural characterization of microporous carbon hollow fiber membranes by in situ SAXS during C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> adsorption", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS IX, 5 – 9 June, 2011, Dresden, Germany.
  9. Giasafaki, D.; Bourlinos, A.; Charalambopoulou, G.; Stubos, A.; Steriotis, Th.; "Synthesis and characterisation of nanoporous carbon - metal composites for hydrogen storage applications", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS IX, Dresden-Germany, 5-8 June 2011.
  10. Gotzias, A.; Steriotis, Th.; "D<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> sieving dependence on carbon pore size and on pressure", Thermodynamics 2011 conference, Athens, Greece, September 1-3, 2011.
  11. Gotzias, A.; Tyllianakis, E.; Froudakis, G.; Steriotis, Th.; "Theoretical study of hydrogen adsorption in oxygen functionalized carbon slit pores", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS IX, Dresden-Germany, 5-8 June 2011.
  12. Karanikolos, G.N., "Nanotechnology for Targeted Cancer Therapy: The Case of Multifunctional Carbon Nanotubes", German-Greek Forum, "Capital & Vision", Athens, Sept. 2011
  13. Karanikolos, G.N.; Vermisoglou, E.C.; Pilatos, G.; Romanos, G.E.; Kanellopoulos, N.K. "Carbon Nanotube Membranes by Templated Growth in Porous Media", 5th International FEZA Conference, Valencia, Spain, July 3-7, 2011.



14. Katsaros, F.K.; Steriotis, Th.A.; Stefanopoulos, K.L.; Glasser, R.; Hannon, A.C.; Ramsay, J.D.F. "Structural characterisation of subcritical carbon dioxide confined in nanoporous materials by in situ neutron diffraction" 5th European Conference On Neutron Scattering, 17-22 July 2011, Prague, Czech Republic
15. Moustakas, N.; Kontos, A. G.; Fotiou, T.; Katsaros, F.; Likodimos, V.; Triantis, T. M.; Hiskia, A.; Dionysiou, D. D.; Falaras, P. "Tuning Sol-Gel Growth of Nitrogen Doped TiO<sub>2</sub> for Microcystine-LR Degradation Under Visible Light", 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (3rd IC4N), 26-29 June 2011, Herakleion (GR) (poster presentation). BOOK OF ABSTRACTS, p. 31.
16. Papageorgiou, S.K.; Favvas, E.P.; Sapalidis, A.A.; Romanos, G.E.; Katsaros, F.K. "Synthesis and properties of carbon supported copper nanoparticles from alginate precursor", NAPEN 2011, June 9-13, 2011, Rhodos. Greece.
17. Papageorgiou, S.K.; Favvas, E.P.; Sapalidis, A.A.; Romanos, G.E.; Katsaros, F.K. "Synthesis of alginate based carbon / metal nanoparticles composite with controlled metal content and catalytic properties", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS 9, June 5-8, 2011, Dresden, Germany.
18. Papageorgiou, S.K.; Favvas, E.P.; Tatsiou, P.G.; Katsaros, F.K.; Kanellopoulos, N.K. "Preparation and characterisation of alginate based porous hollow fiber membranes", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS 9, June 5-8, 2011, Dresden, Germany.
19. Romanos, G.E.; Miranda, S.M.; Athanasekou, C.P.; Katsaros, F.K.; Pilatos, G.; Kanellopoulos, N.K.; Falaras, P. "Development of Titania Decorated Multi Wall Carbon Nanotubes with CVD Techniques" (Poster presentation), 3rd International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N) Crete Island, Greece, June 26-29, 2011, BOOK OF ABSTRACTS, p. 112
20. Romanos, G.E.; Stefanopoulos, K.L.; Vangeli, O.C.; Mergia, K.; Beltsios, K.G.; Kanellopoulos, N.K.; Lairez, D. "Investigation of physical and chemical ionic liquid confinement in nanoporous materials by SANS, contrast matching SANS, XRD and nitrogen adsorption" 5th EUROPEAN CONFER-

ENCE ON NEUTRON SCATTERING, 17-22 July 2011 - Prague, Czech Republic.

21. Romanos, G.E.; Vangeli, O.C.; Stefanopoulos, K.L.; Beltsios, K.G.; Katsaros, F.K.; Kanellopoulos N.K. "Study of ionic liquid confinement into the pores of ordered nanoporous silicas" (Oral presentation), ILSEPT 2011, 1st International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology 4-7 September 2011, Sitges, Spain.
22. Romanos, G.E.; Vangeli, O.C.; Beltsios, K. G.; Fokas, D.; Kanellopoulos N.K. "Friedel-crafts alkylation with [BMIM][AlCl<sub>4</sub>] catalyst supported in NF membranes" (Poster presentation) ILSEPT 2011, 1st International Conference on Ionic Liquids in Separation and Purification Technology 4-7 September 2011, Sitges, Spain.
23. Sapalidis, A.A.; Katsaros, F.K.; Steriotis, Th.A.; Kanellopoulos, N.K.; Hauss, T.; Dante, S. "Neutron diffraction on polymer nanocomposites - A tool for structural and orientational studies", 5th European Conference On Neutron Scattering, 17-22 July 2011, Prague, Czech Republic.
24. Stefanopoulos, K.L.; Steriotis, Th.A.; Katsaros, F.K.; Glasser, R., Kanellopoulos, N.K.; Hannon, A.C.; Ramsay, J.D.F. "Structural study of supercritical carbon dioxide confined in a nanoporous material by in situ neutron diffraction", 5th European Conference On Neutron Scattering, 17-22 July 2011, Prague, Czech Republic.
25. Steriotis, Th.; Charalambopoulou, G.; Bourlinos, A.; Giasafaki, D.; Ampoumogli, A.; Trikalitis, P.; Stubos, A.; "Hydrogen storage with the use of nanoporous carbon supports and scaffolds", International Conference on Hydrogen Production (ICH2P-11), Thessaloniki-Greece, 19-22 June 2011.
26. Steriotis, Th.; Charalambopoulou, G.; Stubos, A.; "Advanced Materials for Hydrogen Storage", 2nd International Workshop on NANOPorous Materials for ENVIRONMENTAL and ENERGY Applications (NAPEN 2011), Rhodes-Greece, 9-13 June 2011.
27. Steriotis, Th.A.; Stefanopoulos, K.L.; Katsaros, F.K.; Glässer, R.; Hannon, A.C.; Ramsay, J.D.F. "Structural characterisation of adsorbed carbon dioxide by in situ neutron diffraction in nanoporous materials", 9th International Symposium on the Characterisation of Porous Solids - COPS 9, June 5-8, 2011, Dresden, Germany.
28. Stoeger, J.A.; Palomino, M.; Veziri, C.M.; Corma, A.; Kanellopoulos,



- N.K.; Karanikolos, G.N.; Tsapatsis, M. "Stability and Separation Performance of Highly c-Oriented AFI-Type Aluminophosphate Membranes", AIChE Annual Meeting, Minneapolis, MN, Oct. 16-21, 2011
29. Vermisoglou, E.C., Labropoulos, A.; Veziri, C.M.; Pilatos, G.; Romanos, G.E.; Karanikolos, G.N.; Kanellopoulos, N.K. "Structure evolution of Ionic liquid-Carbon Nanotube-Porous Matrix nanocomposites", Diffusion Fundamentals IV, Troy, NY, Aug. 21st - 24th, 2011
30. Αμπουμόγλι, Α.; Στεριώτης, Θ.; Τρικαλίτης, Π.; Χαραλαμποπούλου, Γ.; "Μελέτη Νανοσύνθετων Υλικών Άνθρακα-Βοροϋδριδίου του Ασβεστίου για Αποθήκευση Υδρογόνου", 5ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών, Ηράκλειο Κρήτης, 30 Ιουνίου - 1 Ιουλίου 2011.
31. Γιασαφάκη, Δ.; Μπουρλίνος, Α.; Χαραλαμποπούλου, Γ.; Στούμπος, Α.; Στεριώτης, Θ.; "Σύνθεση και Χαρακτηρισμός Νανοπορωδών Σύνθετων Υλικών Άνθρακα-Μετάλλου για Αποθήκευση Υδρογόνου", 5ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών, Ηράκλειο Κρήτης, 30 Ιουνίου - 1 Ιουλίου 2011.
32. Γκότζιας, Α.; Τυλλιανάκης, Ε.; Φρουδάκης, Γ.; Στεριώτης, Θ.; "Θεωρητική μελέτη ρόφησης υδρογόνου σε πόρους άνθρακα με ομάδες οξυγόνου", 5ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών, Ηράκλειο Κρήτης, 30 Ιουνίου - 1 Ιουλίου 2011.
33. Τσανακτσίδης, Κ.; Χρησιδης, Σ.; Φάββας Ε.; Τζηλαντώνης, Γ. "Αξιοποίηση υδρόφιλων πολυμερών στην ανάπτυξη μιας νέας μεθόδου απομάκρυνσης της υγρασίας σε συμβατικά και μη καύσιμα" 21ο Πανελλήνιο Συνέδριο Χημείας, 9 - 12 Δεκεμβρίου 2011, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
34. Φάββας, Ε. Π.; Στεφανόπουλος, Κ. Λ.; Μητρόπουλος, Α. Χ. "Μία εύχρηστη εξίσωση για τον υπολογισμό του μεγέθους των μεσοπόρων" 5ο Πανελλήνιο Συμπόσιο Πορωδών Υλικών, ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ, 30 Ιουνίου - 1 Ιουλίου 2011, Ηράκλειο Κρήτης, Ελλάδα.

### Ερευνητικά Προγράμματα - Επιχορηγήσεις

1. NANOTUBEMEM, "Carbon Nanotube Membranes by Templated Growth in Oriented Molecular Sieve Films", FP7 Marie Curie International Reintegration Grant, NCSRD 100.000 Euro 1-11-2008 - 31-10-2012. (coordination of the project)
2. NEXT-GTL, NMP-2008-4.0-2, Innovative catalytic technologies & materials for next gas to liquid processes (NEXT-GTL), Start Date: 2009-11-01, 48 months, Project Cost: 12.57 million euro, Contract Type:

Large-scale integrating project, End Date: 2013-10-31, Project Funding: 8.39 million euro, NCSR D(480,000€)

3. "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.
4. NANOHY, FP7- ENERGY-2007-1.2-04 (Project 210092): "Novel nanocomposites for hydrogen storage applications" Contract Type: Small/medium-scale collaborative project, Start Date: 2008-01-01, End Date: 2011-09-30, Project Budget: 3.14 million euro, NCSR D(285800€). In collaboration with Inst. Nuclear Technology & Radiation Protection
5. "H2FC-European Infrastructure (Integrating European Infrastructure to support science and development of Hydrogen- and Fuel Cell Technologies towards European Strategy for Sustainable, Competitive and Secure Energy)" FP7-INFRASTRUCTURES 2011-1, Grant Agreement No 284522, Start Date: 2011-11-01, End Date: 31/10/2015, Project Budget: 10,147,583.60.70 euro, NCSR "D" Budget 371.195,00 (EC Funding: 304,931.25 €).
6. NANOSTHYS - Nanostructured Materials for Solid-State Hydrogen Storage, Cost Action MP1103, Start Date: 25/10/2011, End Date: 24/10/2015.
7. FP7-PEOPLE-2011-IAPP (286413): "High-throughput development of carbon-polymer nanocomposites for marine applications - CARBON-COMP", Global Nanotechnologies S.A (Gr), NCSR D (Gr), Moravia Boya ve Kimya San. Tic. Ltd (Tr), Dokuz Eylül University (Tr). Total Budget: 1537194 €, NCSR D budget: 388211 €.
8. "Αξιοποίηση βιομάζας και μεταβολικών θαλάσσιων φυκών σε περιβαλλοντικές εφαρμογές καθαρισμού υδάτων και διαχωρισμού αερίων" (20NEW2009) ΕΣΠΑ 2007-2013, Δράση Εθνικής εμβέλειας: «Ενίσχυση Νέων και Μικρομεσαίων Επιχειρήσεων» σε συνεργασία με την εταιρεία Μεσογειακή Βιοεπιστημονική Ανώνυμη Συμβουλευτική Παραγωγική και Τεχνολογική Εταιρεία Στήριξης & Ανάπτυξης Έρευνας - MEDBIO.
9. FP7-ENERGY-2011-1 (283077): Novel Ionic Liquid and supported ionic liquid solvents for reversible CAPture of CO<sub>2</sub> -IoLiCAP. 1. NCSR "Demokritos"-IPC (GR) Coordinator, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen Nurnberg (Ge), Scienomics Sarl (Fr), Iolitec Ionic Liquids Tech-



nologies Gmbh (Ge), The University Of Manchester (Uk), Technische Universiteit Eindhoven (Nl), Public Power Corporation S.A. (Gr), N & K Konstantinos Goliopoulos Ate (Gr), The Petroleum Institute (Ae), Enditech Anonymos Eteria Meletes Ke Efarmoges (Gr). Project Budget 3,978,128.00 € total, NCSR Demokritos Budget: 832,470.00 €

### Πρακτικές – πτυχιακές

1. Λουκάς Πήλιουρης, εξαμηνιαία Πρακτική Άσκηση για την απόκτηση του τίτλου του Μηχανικού Αντιρρύπανσης στο εργαστήριο Υλικών & Μεμβρανών για Περιβαντολογικούς Διαχωρισμούς (MESL), Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», 1 Νοεμβρίου 2010 – 30 Απριλίου 2011.
2. Λουκάς Πήλιουρης, Πτυχιακή εργασία με τίτλο: «Βελτιστοποίηση φυσικοχημικών ιδιοτήτων αποστάγματος πετρελαίου με χρήση πρόσθετου πολυμερούς», Τμήμα Τεχνολογιών Αντιρρύπανσης, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, ΤΕΙ Δυτικής Μακεδονίας, 2011.

### Οργάνωση Συνεδρίων

Οργάνωση συνεδρίου NAPEN 2011 June 9th to 13th Rodos, Greece

### Ερευνητική Υποδομή

Ποροσίμετρο Αζώτου με αναβάθμιση Κρυπτού – Quantachrome (2), 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, Μικροζυγοί (2) κρυστάλλου Χαλαζία, Συστήματα υψηλού κενού, Ογκομετρική συσκευή προσρόφησης αερίων – VTI HPVA 100, Αυτόματη συσκευή μέτρησης διαπερατότητας οξυγόνου σε πολυμερικά φιλμ – Dansensor PBI, Μικροσκόπιο ατομικών δυνάμεων - Veeco In-

νονα , Φασματοφωτόμετρο υπερύθρου - Nicolet 6700 , Κελί υψηλών πιέσεων για Φασματοφωτόμετρο υπερύθρου , Συσκευή παραγωγής υπερκαθαρού νερού, Ιοντικός χρωματογράφος - Dionex, Υγρός Χρωματογράφος - Dionex, Συσκευή μέτρησης προσρόφησης από υγρή φάση, Θερμιδόμετρο Calvet - Setaram C80, Θερμική ανάλυση - Setaram Setsys 1700, Σύστημα χρωματογραφίας μηδενικού μήκους Zero length Chromatography, Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο Σάρωσης (FE-SEM) Jeol - JSM-7401F με στοιχειακό αναλυτή EDS (Oxford), Ογκομετρικό σύστημα ρόφησης υδρογόνου υψηλών πιέσεων (Hy Energy PCT - Pro), Συσκευή εκχύλισης με υπερκρίσιμο CO<sub>2</sub>, Συσκευή μέτρησης μηχανικών ιδιοτήτων - Thumler- 250N, Ατομικό φασματοσκόπιο απορρόφησης με φούρνο γραφίτη GBC- Avanta S, Φούρνοι πυρόλυσης (3) - 1200°C.

### **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 Νανοσωλήνων Άνθρακα στους Πόρους Μοριακών Ηθμών.
3. Prof. Paschalis Alexandridis, Department of Chemical Engineering, University at Buffalo (UB), The State University of New York. Συνεργασία στον τομέα ανάπτυξης καταλυτικών νανοσωματιδίων με την χρήση ιοντικών υγρών.

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Ο Δρ. Νικόλαος Κανελλόπουλος κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Συντονιστής consortium τριών Ευρωπαϊκών Networks of Excellence του FP6 (INSIDE-PORES, NANOFUNPOLY and NANOMEMBRO) της nanotechnology priority του FP6 για τον συντονισμό των Εθνικών προγραμμάτων στον τομέα ενεργειακών και περιβαλλοντολογικών εφαρμογών των νανοϊλικών.
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

Ο Δρ. Θεόδωρος Στεριώτης κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Πρόεδρος του Επιστημονικού Γνωμοδοτικού Συμβουλίου του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος.
2. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: *Advanced Energy Materials*, *Carbon*, *Microporous and Mesoporous Materials*, *Journal of Physical Chemistry*, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *J. Hazardous Materials*, *Chem. Eng. Sci.*, *Int Journal Hydrogen Energy*
3. Προσκεκλημένος αξιολογητής (ΓΓΕΤ)
4. Μέλος της Επιστημονικής Επιτροπής BENSC, HMI, Berlin, Germany
5. Εθνικό Σημείο Επαφής του FP7 για την θεματική Προτεραιότητα 6 «Περιβάλλον και Κλιματική Αλλαγή»
6. Project Leader/Expert στο ΔΙΕΘΝΗ ΟΡΓΑΝΙΣΜΟ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ (IEA-International Energy Agency) για τον τομέα της Αποθήκευσης Υδρογόνου (Task 22)
7. Εθνικός εκπρόσωπος στο Cost Action MP1103, Nanostructured Materials for Solid-State Hydrogen Storage

Ο Δρ. Κατσαρός Φώτης κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

Κριτής σε περιοδικά: *Composites Part B: Engineering*, *Journal of Hazardous Materials*, *Desalination*, *Journal of Applied Clay Science*, *Journal of Applied Polymer Science*, *Desalination*

Ο Δρ. Στεφανόπουλος Κωνσταντίνος κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

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

Ο Δρ. Ρωμανός Γεώργιος κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Κριτής: *J. Phys. Chem. B*, *Microporous Mesoporous Materials*, *Journal of Hazardous Materials*, *Journal of Porous Materials*, *Environmental Engineering*, *Journal of membrane Science*.
2. Μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής των υποψήφιων διδασκόντων Όλγας Βαγγέλη και Χρυσούλας Αθανασέκου.
3. Αναπληρωτής Υπεύθυνος Εκπαίδευσης Ινστιτούτου Φυσικοχημείας



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

Το ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος” διατελεί από το τέλος του 2006 Εθνικό Σημείο Επαφής (ΕΣΕ) της Ευρωπαϊκής Ένωσης στην Ελλάδα του Προγράμματος “Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή”, (Πρόγραμμα Συνεργασία, 7ο ΠΠ της Ευρωπαϊκής Ένωσης). Κατά την διάρκεια του 2011 το ΕΣΕ προσέφερε τις υπηρεσίες του σε 11 Ελληνικούς Οργανισμούς (Δημόσιους και Ιδιωτικούς), ενώ ένας αριθμός της τάξεως των 18 ερευνητικών προτάσεων, οι οποίες συμπεριλάμβαναν τουλάχιστον 1 Ελληνικό φορέα και στην ανάπτυξη των οποίων το ΕΣΕ είχε μεγαλύτερη ή μικρότερη συνδρομή, κατατέθηκαν το 2011 στα πλαίσια των προσκλήσεων του Προγράμματος “Περιβάλλον & Κλιματική Αλλαγή” (συμπεριλαμβανομένων διαπρογραμματικών και δράσεων τεχνολογικής επίδειξης). Παράλληλα προέβη 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.

Κατά την διάρκεια του 2011 το ΕΣΕ, μετά από αντίστοιχες επαφές και διαβουλεύσεις κατέστη παρατηρητής στην United Nations Framework Convention on Climate Change (UNFCCC), συνεργαζόμενος φορέας στο πλαίσιο του Global Campaign for Climate Change (GC-CA) και του United Nations Environmental Programme (UNEP). Τέλος και μετά από σχετικές ενέργειες, το ΕΣΕ, και κατ’ επέκταση το ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», αποτελεί μέλος της ομάδος εμπειρογνομόνων φορέων στο πλαίσιο της πρωτοβουλίας Climate & Development Knowledge Network (CDKN).

Σε εθνικό επίπεδο, το ΕΣΕ έχει διοργανώσει περί τις 42 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.

### **Επικοινωνία**

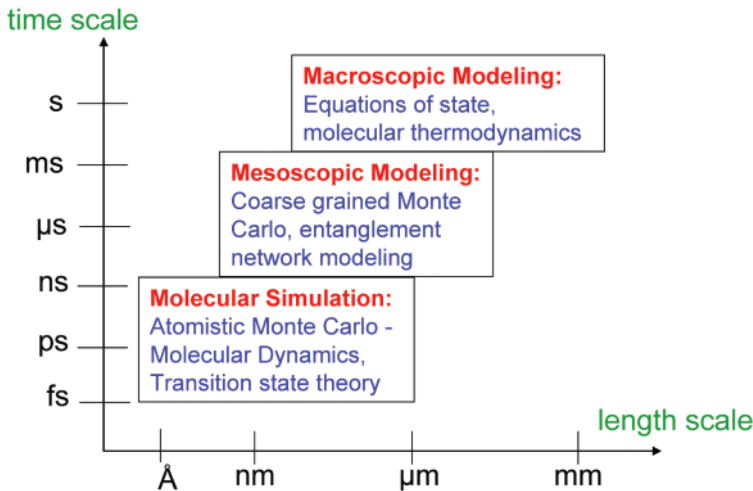
Δρ. Νικόλαος Κακιζής, Δρ. Θεόδωρος Στεριώτης  
Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών “Δημόκριτος”  
15310 Αγία Παρασκευή, Αθήνα, Ελλάδα

URL: <http://www.demokritos.gr>

ΤΗΛ: 0030-210-6503972, fax: 0030-210-6511766, mobile: 0030-6937124865

e-mail: [ncp\\_env@chem.demokritos.gr](mailto:ncp_env@chem.demokritos.gr), [nkakizis@chem.demokritos.gr](mailto:nkakizis@chem.demokritos.gr)

### 3.3 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 μικρών 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 2011 εστιάστηκε κατά κύριο λόγο σε:*

1. Μοριακή Μοντελοποίηση και Προσομοίωση:
  - 1.1. Μοριακή προσομοίωση ελαστομερών και υαλωδών πολυμερών,
  - 1.2. Μοριακή προσομοίωση πολικών ομοπολυμερών και συμπολυμερών,
  - 1.3. Ιονικά υγρά σε καθαρή κατάσταση και μίγμα με υπερκρίσιμο CO<sub>2</sub>,
  - 1.4. Ρόφηση και διάχυση μικρών μορίων (CO, H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O) σε βαρείς υδρογονάνθρακες, που σχετίζονται με τη διεργασία Gas-To-Liquid για την παραγωγή καυσίμων υψηλής προστιθέμενης αξίας,
  - 1.5. Μοριακή μοντελοποίηση της ρόφησης αερίων από ενεργό άνθρακα.
2. Μοριακή Θερμοδυναμική και Ανάπτυξη Καταστατικών Εξισώσεων:
  - 2.1. Θερμοδυναμικές ιδιότητες πολικών ρευστών σε καθαρή κατάσταση και μίγματα,
  - 2.2. Μοντελοποίηση κύριων και παράγωγων θερμοδυναμικών ιδιοτήτων συστημάτων CO<sub>2</sub>,
  - 2.3. Μοντελοποίηση της ισορροπίας φάσεων μιγμάτων CO<sub>2</sub>,
  - 2.4. Ανάπτυξη μίας νέας μεθοδολογίας για την πρόβλεψη της διαλυτότητας φαρμακευτικών ουσιών σε νερό και άλλους διαλύτες.

*Το έργο παροχής εξειδικευμένων ερευνητικών υπηρεσιών με τίτλο Μοριακή Προσομοίωση και Θερμοδυναμική Ρευστών και Προηγμένων Τεχνολογικών Υλικών και επιστημονικό υπεύθυνο τον Δρ. Ι. Οικονόμου (έργο ΓΕΛ 1491) διατήρησε την προσέλκυση συμβολαίων από την Ευρωπαϊκή Βιομηχανία και άλλους οργανισμούς. Κατά την περίοδο 2008 – 2011, το έργο έχει προσελκύσει συμβόλαια ερευνητικών υπηρεσιών συνολικού ύψους € 750,000.*

Περισσότερες πληροφορίες για το ΕΜΘΜΥ δίνονται στην ιστοσελίδα του: [www.mtmml.gr](http://www.mtmml.gr).

## **Προσωπικό**

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

**ΙΔΑΧ:** Δρ. Νίκη Βέργαδου

**Συνεργαζόμενοι ερευνητές:** Σπυριούνη (πλήρης απασχόληση στο Έργο Παροχής Ερευνητικών Υπηρεσιών 1491), Δρ. Δημήτριος Τσαγκάρης (χρηματοδότηση από πρόγραμμα CO2PipeHaz της ΕΕ), Δρ. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος (μέλος ΔΕΠ, Πανεπιστήμιο Αιγαίου).

**Μεταδιδασκατορικοί συνεργάτες σε προγράμματα:** Δρ. Γεώργιος Λιθοξόος (πλήρης απασχόληση στο Έργο Παροχής Ερευνητικών Υπηρεσιών 1491), Ζωή Μακροδημήτρη (πλήρης απασχόληση στο Έργο Παροχής Ερευνητικών Υπηρεσιών 1491).

**Υποψήφιοι διδάκτορες σε προγράμματα:** Νίκος Διαμαντώνης (χρηματοδότηση από πρόγραμμα CO2PipeHaz της ΕΕ).

**Υποψήφιοι διδάκτορες υπότροφοι «Δ»:** Ελένη Ανδρουλάκη.

**Ιδρυτής ΕΜΘΜΥ και εξωτερικός συνεργάτης:** Καθηγητής Δώρος Ν. Θεοδώρου, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

## **Δημοσιεύσεις**

1. Makrodimitri Z.A., Unruh D.J.M. and Economou I.G., "Molecular Simulation of Diffusion of Hydrogen, Carbon Monoxide, and Water in Heavy n-Alkanes", J. Phys. Chem. B, 115(6), 1429 – 1439 (2011).
2. Spyriouni T., Krokidis X. and Economou I.G., "Thermodynamics of Pharmaceuticals: Prediction of Solubility in Pure and Mixed Solvents with PC-SAFT", Fluid Phase Equil., 302, 331 – 337 (2011).



3. Karanikas S. and Economou I.G., “Molecular Simulation of Structure, Thermodynamic and Transport Properties of Polyacrylonitrile, Polystyrene and Their Alternating Copolymers in High Temperatures”, *Eur. Pol. J.*, 47(4), 735 – 745 (2011).
4. Garrido N.M., Jorge M., Queimada A.J., Macedo M.E.A. and Economou I.G., “Using Molecular Simulation to Predict Solvation and Partition Coefficients in Solvents of Different Polarity”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13(20), 9155 – 9164 (2011).
5. Breure B., Straver E.J.M., Florusse L.J., Rijkers M.P.W.M., Economou I.G., Vargas F.M. and Peters C.J., “Phase Equilibria in Binary Mixtures of Propane and Phenanthrene: Experimental Data and Modeling with the GC-EoS”, *J. Chem. Eng. Data*, 56(4), 1407 – 1413 (2011).
6. Lundsgaard R., Kontogeorgis G.M. and Economou I.G., “Partition Coefficients of Organic Molecules in Squalane and Water / Ethanol Mixtures by Molecular Dynamics Simulations”, *Fluid Phase Equil.*, 306, 162 – 170 (2011).
7. Diamantonis N. and Economou I.G., “Evaluation of Statistical Associating Fluid Theory (SAFT) and Perturbed Chain-SAFT Equations of State for the Calculation of Thermodynamic Derivative Properties of Fluids Related to Carbon Capture and Sequestration”, *Energy & Fuels*, 25(7), 3334 – 3343 (2011).
8. Garrido N.M., Jorge M., Queimada A.J., Gomes J.R.B., Economou I.G. and Macedo E.A., “Predicting Hydration Gibbs Energies of Alkyl-aromatics Using Molecular Simulation: A Comparison of Current Force Fields and the Development of a New Parameter Set for Accurate Solvation Data”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13(38), 17384 – 17394 (2011).

### Δημοσιεύσεις σε πεπραγμένα συνεδρίων

1. Androulaki E., Vergadou N., Ramos J. and Economou I.G., “Molecular Dynamics Simulation of Imidazolium-Based [Tf2N-] Ionic Liquids”, 7th GRACM International Congress on Computational Mechanics, Αθήνα, 30 Ιουνίου – 2 Ιουλίου 2011. (Πεπραγμένα συνεδρίου)

## Ανακοινώσεις σε Συνέδρια

1. Androulaki E., Vergadou N., Ramos J. and Economou I.G., "Molecular Dynamics Simulation of Imidazolium-Based [Tf<sub>2</sub>N<sup>-</sup>] Ionic Liquids", 7th GRACM International Congress on Computational Mechanics, Αθήνα (2011).
2. Kontogeorgis G.M., Economou I.G., and Coutisikos P., "On the True Value of Cubic Equations of State", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
3. Spyriouni T., X. Krokidis and Economou I.G., "Thermodynamics of Pharmaceuticals: Prediction of Solubility in Pure and Mixed Solvents with PC-SAFT", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
4. Diamantonis N., Spyriouni T., Boulougouris G., Peristeras L., Tsangaris D.M. and Economou I.G., "Prediction and Regression of CO<sub>2</sub> Physical Properties from Equations of State and Molecular Simulation", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
5. Makrodimitri Z.A., Economou I.G. and Unruh D.J. M., "Molecular Simulation of Diffusion of Hydrogen, Carbon Monoxide and Water in Heavy n-Alkanes", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
6. Garrido N., Jorge M., Queimada A., Economou I.G. and Macedo E.A., "Prediction of Partition Coefficients of Compounds Relevant to Environmental Applications Based on Molecular Simulation", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
7. Diamantonis N. and Economou I.G., "Modeling of H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> Vapor - Liquid Equilibrium with the Use of SAFT and PC-SAFT EoS", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
8. Lithoxoos G.P., Peristeras L.D., Boulougouris G. and Economou I.G., "Adsorption of CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S Gases in Activated Graphite via Monte Carlo Simulation", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
9. Androulaki E., Vergadou N., Ramos J. and Economou I.G., "Structural, Thermodynamic and Transport Properties of Imidazolium-based [Tf<sub>2</sub>N<sup>-</sup>] Ionic Liquids: A Computational Study", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
10. Koller T., Fröba A.P., Economou I.G., and Ramos J., "Molecular Simulation of a Tetracyanoborate Ionic Liquid: Thermodynamic and Transport Properties", Thermodynamics 2011, Αθήνα (2011).
11. Economou I.G., Garrido N.M., Queimada A.J., Jorge M. and Macedo E.A., "Accurate Prediction of the n-Hexane/Water and 1-Octanol/Water Parti-



- tion Coefficients of Complex Chemicals Using Molecular Simulation”, AIChE Annual Meeting, Minneapolis, Minnesota, USA (2011).
12. Economou I.G. and Diamantonis N.I., “Evaluation of SAFT and PC-SAFT EoS for the Calculation of Thermodynamic Derivative Properties of Fluids Related to Carbon Capture and Sequestration”, AIChE Annual Meeting, Minneapolis, Minnesota, USA (2011).
  13. Peters C.J., Breure B., Economou I.G. and Vargas F., “Phase Equilibria In Binary Mixtures of Propane and Phenanthrene: Measurements and Modeling”, AIChE Annual Meeting, Minneapolis, Minnesota, USA (2011).
  14. Tsangaris D.M. and Economou I.G., “Calculation of CO<sub>2</sub> Physical Properties and Phase Equilibria from Cubic and Advanced Equations of State”, ICAP CO<sub>2</sub> EU-China Workshop on Innovative CCS Technologies, Beijing, China (2011)

## Διαλέξεις μετά από πρόσκληση

Ιωάννης Γ. Οικονόμου

1. “Prediction of Physical Properties of Complex Fluids for Chemical Process and Product Design Based on Molecular Simulation”, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, The University of Manchester, Manchester, Ηνωμένο Βασίλειο, Δεκέμβριος 2011.

## Εκπαιδευτικό Έργο

### Διδασκαλία

1. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, “Προσομοίωση”, 7ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2010 – 2011.
2. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, “Νέα Υλικά”, 7ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2010 – 2011.
3. Νικόλαος Ζαχαρόπουλος, “Επιλογή Υλικών για Μελέτες Σχεδιασμού”, 9ο Εξάμηνο Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων Πανεπιστημίου Αιγαίου, 2010 – 2011.

Ολοκλήρωση Μεταπτυχιακών Εργασιών

1. Ν. Διαμαντώνης, Φεβρουάριος 2011. “Μοντελοποίηση Θερμοδυναμικών Ιδιοτήτων Διοξειδίου του Ανθρακα και Μιγμάτων του με Άλλα Αέρια”, M.Sc. από το Διατμηματικό Πρόγραμμα στην Υπολογιστική Μηχανική, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.



### Ολοκλήρωση Διδακτορικών Διατριβών

1. N.M.F. Garrido, Σεπτέμβριος 2011. "Prediction of Industrially Relevant Solvation and Partitioning Properties from Molecular Simulation", PhD από το Τμήμα Χημικών Μηχανικών, University of Porto, Portugal. Κύριος επιβλέπων: Professor M.E.A. Macedo, University of Porto, Πορτογαλία.

### Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

#### Προγράμματα Βασικής Έρευνας

1. "Quantitative Failure Consequence Hazard Assessment for Next Generation CO<sub>2</sub> Pipelines: The Missing Link", European Commission 7th Framework Programme: Energy. Χρηματοδότηση για ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος»: 307,476 €. Διάρκεια: 1 / 12 / 2009 – 30 / 4 / 2013.
2. "Novel Ionic Liquid and Supported Ionic Liquid Solvents for Reversible Capture of CO<sub>2</sub> (IOLICAP)", European Commission 7th Framework Programme: Energy. Χρηματοδότηση για ΕΜΘΜΥ: 259,014 €. Διάρκεια: 1 / 12 / 2011 – 30 / 11 / 2014.

#### Προγράμματα Εφαρμοσμένης Έρευνας

1. "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: 146,150 €. Διάρκεια: 15 / 12 / 2008 – 29 / 2 / 2012.
2. "Quantitative Materials Informatics Systems for Virtual High-Throughput Screening for Industrial R & D Applications", Contract Research Services, Scienomics SARL and OSEO, Paris, France. Υπεύθυνος Έργου: Ιωάννης Οικονόμου. Συνολική χρηματοδότηση: 635,352 €. Διάρκεια: 1 / 3 / 2009 – 30 / 6 / 2012.

### Συνεργασίες

1. Δρ. Ξενοφών Κροκίδης, Scienomics SARL, France. Ανάπτυξη εξειδικευμένου λογισμικού για πρόβλεψη ιδιοτήτων υλικών και σχεδιασμό χημικών διεργασιών.
2. Dr. Dominik Unruh, Shell Global Solutions, Ολλανδία, Μοριακή προσομοίωση της διάχυσης αερίων σε βαρείς κ-υδρογονάνθρακες.



3. Καθηγήτρια Σοφία Λαμπροπούλου, Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, ΕΜΠ. Θεωρία στατιστικής μηχανικής.
4. Καθηγήτρια Maria Eugénia Rebello de A. Macedo, Department of Chemical Engineering, University of Porto, Portugal. Μοριακή προσομοίωση της διαλυτότητας φαρμακευτικών ουσιών στο νερό.
5. Καθηγητής Cor Peters, Department of Chemical Engineering, Petroleum Institute, Abu Dhabi, UAE, The Netherlands. Μοντελοποίηση ιονικών υγρών.
6. Δρ. J. Ramos-Díaz, Department of Macromolecular Physics, Instituto de Estructura de la Materia - CSIC, Μαδρίτη, Ισπανία, Κβαντομηχανικοί υπολογισμοί ιονικών υγρών.
7. Καθηγητής Andreas Fröba, University of Erlangen, Γερμανία. Μοριακή προσομοίωση και πειραματική μελέτη ιονικών υγρών.

### Άλλες Δραστηριότητες

Ιωάννης Οικονόμου

1. Σε άδεια στην Abu Dhabi National Oil Company, HAE, από 1 / 11 / 2009.
2. Chairman, Working Group on Thermodynamics and Transport Properties, European Federation of Chemical Engineering.
3. Πρόεδρος Επιστημονικής Επιτροπής Διεθνούς Συνεδρίου Thermodynamics 2011, Αθήνα, 31 Αυγούστου – 3 Σεπτεμβρίου 2011 (220 συμμετέχοντες).
4. Guest editor, Molecular Physics, special issue devoted to Thermodynamics 2011.
5. Μέλος εξεταστικής επιτροπής διδακτορικών διατριβών :
  - (a) Department of Chemical and Biological Engineering, Universidade do Porto, Portugal, September 2011.
  - (b) Department of Chemical Engineering, Imperial College London, United Kingdom, November 2011.
6. Τεχνικός Σύμβουλος, Scienomics SARL, Παρίσι.

Νίκη Βέργαδου

1. Μέλος Επιστημονικής Επιτροπής Διεθνούς Συνεδρίου Thermodynamics 2011, Αθήνα, 31 Αυγούστου – 3 Σεπτεμβρίου 2011 (220 συμμετέχοντες).

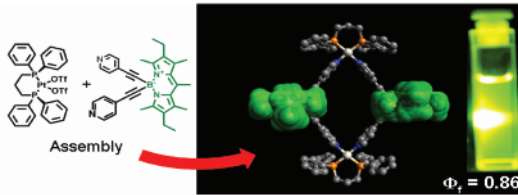
Νικόλαος Ζαχαρόπουλος

1. Λέκτορας, Τμήμα Μηχανικών Σχεδίασης Προϊόντων και Συστημάτων, Πανεπιστήμιο Αιγαίου.

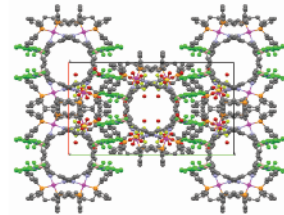
### 3.4 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΣΤΑ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑ ΚΑΙ ΣΤΙΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

#### Αντικείμενο Έργου

- Σχεδιασμός, Σύνθεση, Χαρακτηρισμός - Ιδιότητες νέων φωτονικών υλικών υπερμοριακής αρχιτεκτονικής σχήματος κλωβού κατάλληλα σχεδιασμένα να δρουν σαν μοριακές διατάξεις μεταφοράς ενέργειας σε κατάλληλους υποδοχείς (antenna effect).

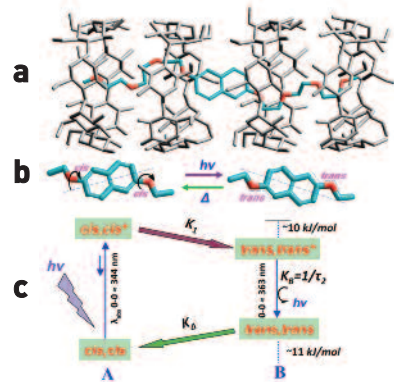


Coordination-Driven Self Assembly of a Brilliantly Fluorescent Rhomboid Cavitand Composed of Bodipy-Dye Subunits



Crystal packing of the porous

- 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 Μικρολιθογραφικών διεργασιών καθώς και στην αξιολόγηση μοριακών χημικών συστημάτων για πιθανή χρήση σε οπτικές και ηλεκτρονικές διατάξεις.





- Κατάλληλα σχεδιασμένες μοριακές μονάδες μπορούν να συναρμολογηθούν μέσω κατευθυνόμενων χημικών αλληλεπιδράσεων δίνοντας υπερδομές οι οποίες αφενός μεν είναι μη προσπελάσιμες με κλασσικές μεθόδους σύνθεσης, αφετέρου δε, μπορούν να προκαλέσουν την ανάδυση νέων ιδιοτήτων που δεν χαρακτηρίζουν τα απομονωμένα συστατικά τους. Για την περίπτωση φωτοενεργών/φωτοδραστικών χημικών συστημάτων, η δημιουργία συμπαγών και ακλόνητων υπερμοριακών συγκροτημάτων αποτελεί πρόκληση αφού θα μπορούσε να επιτρέψει να αποκτήσουμε ακριβή έλεγχο πάνω στην οργάνωση και χωροταξική διευσθέτηση των φωτοσυλλεκτών, όπως ακριβώς συμβαίνει στα φωτοβολταϊκά της φύσης. Συνέπεια αυτού, θα είναι δυνατόν να προγραμματίσουμε με ακρίβεια επιθυμητές φωτοεπαγόμενες διεργασίες. Στο πλαίσιο των αυτό διερευνούμε πρωτόκολλα συναρμολόγησης φωτοενεργών νανοδομών με έμφαση σε αυτά που επιτελούνται μέσω συναρμογής οργανικών μοριακών υπομονάδων (δότες ηλεκτρονίων) και οργανομεταλλικών ενώσεων (δέκτες ηλεκτρονίων) προκαθορισμένης γεωμετρίας.
- Εμπνευσμένοι από πρόσφατα ευρήματα μας όπου πλήρως αντιστρεπτές περιστροφικές κινήσεις μπορούν να τεθούν σε συνεχή λειτουργία, μπορέσαμε πολύ πρόσφατα να αποκτήσουμε ακριβή έλεγχο – στο εσωτερικό ενός αυτοοργανωμένου νανοσωλήνα κυκλοδεξτρινών - πάνω σε μια νέα και ασυνήθιστη φωτοεπαγόμενη στερεοεκλεκτική περιστροφή ικανή (α) να μην καταλαμβάνει όγκο και (β) να λειτουργεί συνεχόμενα και αντιστρεπτά. Τέτοιου είδους περιστροφές μέχρι σήμερα μπορούσαν να γίνουν μόνο θερμικά. Τα πρόσφατα ευρήματά μας δείχνουν το δρόμο για την δημιουργία φωτοεπαγόμενων Μοριακών Μηχανών απαρτιζόμενες από υπομονάδες οι οποίες θα εκτελούν αντιστρεπτές μηχανικές κινήσεις χωρίς να απαιτούν χώρο.

## Προσωπικό

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

**Συνεργαζόμενος Ερευνητής Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Νικόλαος Καρακώστας

**Υποψήφιοι διδάκτορες:** Αντωνία Καλουδή-Χαντζέα (Υπότροφος ΕΚΕΦΕ «Δ»)

## Δημοσιεύσεις

1. Balomenou I., Kaloudi-Chantzea A., Karakostas N., Yannakopoulou K., Mavridis I. M. and Pistolis G. "Controlling the Stereospecificity of a Volume-Conserving Adiabatic Photoisomerization within a Nanotubular Self-Assem-

bled Cage: A Reversible Light - Heat Torque Converter”

J. Phys. Chem. B 2011, 115, 10665

- Georgiadou DG, Palilis LC, Vasilopoulou M., Pistolis G., Dimotikali D., Argitis P. “Incorporating triphenyl sulfonium salts in polyfluorene PLEDs: an all-organic approach to improved charge injection”  
J. Mat. Chem. 2011, 21, 9296

### Διεθνή Συνέδρια

- “19th International Symposium on the Photochemistry and Photophysics of Coordination Compounds”, 3-7 Ιουλίου 2011, Στρασβούργο, Γαλλία, παρουσίαση poster: “Unquenched Fluorescent Coordination-Driven Self Assemblies Consisting of Bodipy Dyes and Transition Metal Complexes”, A. Kaloudi-Chantzea, N. Karakostas, G. Pistolis
- “1st International Conference on Bioinspired Materials for Solar Energy Utilization “BIOSOL2011” 12-17 Σεπτεμβρίου 2011, Χανιά, Κρήτη, Ελλάδα, παρουσίαση poster: “Improved Performance PLEDs by controlling charge distribution via sulfonium salt addition in the emitting layer”, D. G. Georgiadou L. C. Palilis, G. Pistolis, M. Vasilopoulou, D. Dimotikali and P. Argitis

### Ερευνητικά Προγράμματα – Επιχορηγήσεις

Εγκρίθηκαν

- Φωτονικά Πολυμερικά Συστήματα για Εφαρμογές Τεχνολογιών της Πληροφορίας” Πρόγραμμα ΘΑΛΗΣ. Διδρυματική πρόταση μεταξύ Πανεπιστημίου Πατρών, ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’ και Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΜΠ) 2012-
- Καινοτόμες υβριδικές διόδους εκπομπής φωτός (HyLEDs) χαμηλής κατανάλωσης με βελτιωμένα χαρακτηριστικά λειτουργίας” Πρόγραμμα ΑΡΧΙΜΗΔΗΣ. Διδρυματική πρόταση μεταξύ ΤΕΙ Πειραιώς και ΕΚΕΦΕ ‘Δημόκριτος’ (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής και Φυσικοχημείας) 2012-
- Καινοτόμες υβριδικές οργανικές φωτοβολταϊκές κυψελίδες υψηλής απόδοσης” Πρόγραμμα ΑΡΧΙΜΗΔΗΣ. Διδρυματική πρόταση μεταξύ ΤΕΙ Πειραιώς και ΕΚΕΦΕ ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ (Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής και Φυσικοχημείας) 2012.



## Ερευνητική Υποδομή

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

## Συνεργασίες

- Καθ. Ι. Καλλιτσης (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Πατρών)
- Επικ. Καθ. Γ. Μπόκας (Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών)
- Δρ. Π. Αργείτης (ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Ινστ. Μικροηλεκτρονικής)
- Επικ. Καθ. Α. Ζαρκάδης (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων)
- Επικ. Καθ. Μ. Σίσκος, (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων)
- Αναπλ. Καθ. Α. Μιχαηλίδης (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων)
- Αναπλ. Καθ. Β. Σκούλικα (Τμήμα Χημείας Παν/μίου Ιωαννίνων)
- Αναπ. Καθ. Χ. Μητσοπούλου  
(Τμήμα Χημείας Εθνικού και Καποδιστριακού Παν/μίου Αθηνών)
- Dr. Ralf Hermann  
(Faculty of Chemistry and Mineralogy, University of Leipzig, Germany)

## Άλλες Δραστηριότητες

### Διακρίσεις:

Το πρόσφατο άρθρο στο επιστημονικό περιοδικό JACS (2010), βραβεύτηκε από το SYNFACTS SYNFACTS (Highlights in Current Synthetic Organic Chemistry) ως μία από τις πιο σημαντικές ανακαλύψεις στο πεδίο των οργανομεταλλικών φωτοβόλων κλωβών (Unquenched Fluorescent Metal Nanocages) που θα μπορούσε να προωθήσει την ανάπτυξη μεγάλων και άκαμπτων φωτοδραστικών μοριακών δικτύων. (Synfacts, 2011, 02, 0151)

### Προσκεκλημένος ομιλητής:

Ο Δρ. Πιστόλης έχει προσκληθεί και έδωσε τις ακόλουθες ομιλίες

1. «Αυτοοργανωμένα Φωτονικά Μοριακά Δίκτυα. Από την κατανόηση των Φυσικών Διεργασιών ως τις Εφαρμογές», Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας (Μάρτιος 2011)
2. «Αυτοοργανωμένοι Υβριδικοί κλωβοί, συλλέκτες φωτός: Από την κατανόηση

Πολύπλοκων Φυσικών Φωτονικών Διαδικασιών ως την εκμετάλλευση», Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών & ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ (Δεκέμβριος 2011)

Ο Δρ. Γεώργιος Πιστόλης κατά το έτος 2011 διατέλεσε:

1. Κριτής στα διεθνή επιστημονικά περιοδικά: Journal of Physical Chemistry B
2. Κριτής ερευνητικής πρότασης η οποία κατατέθηκε για την "American Chemical Society Petroleum Research Fund"
3. Μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής των υποψηφίων διδασκόντων: Α. Καλουδή-Χαντζέα (Παν/μιο Πατρών- επιβλέπων), Μ. Καπλάνη (Εθνικό και Καποδιστριακό Παν/μιο Αθηνών) και Μ. Αραβιά (Παν/μιο Ιωαννίνων).

### **Επικοινωνία**

Δρ. Γ. Πιστόλης (pistolis@chem.demokritos.gr, Τηλ.. +30 210 6503637,  
Fax. +30 210 6511766)

Ιστοσελίδα: Δρ. Γ. Πιστόλης







# *Απολογισμός 2011*



**Β. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑ  
ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ**

## ΕΙΣΡΟΕΣ ΑΠΟ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΣΤΑ ΕΡΓΑ ΤΟΥ ΙΦΧ

Εργαστήρια Παροχής Υπηρεσιων	Εργαστήριο	ΕΙΣΡΟΕΣ σε €	ΕΚΡΟΕΣ σε €
	Μικροσκοπία Ατομικών Δυνάμεων (AFM) (EE857)		
	Φασματοσκοπία Υπερύθρου FT-IR (EE857)	675,00	0,00
	Στοιχειακή Ανάλυση (EE857)	859,35	1.304,20
	Φασματοσκοπίας Micro-Raman (EE857)	1.530,000	662,48
	Εργαστήριο Θερμικής Ανάλυσης Πολυμερών και άλλων Υλικών (EE857)	560,00	1.319,00
	NMR (EE949)	7.096,38	6.319,40
	Ισοτοπικής Υδρολογίας (EE798)	0,00	0,00
	Περιβαλλοντικές Αναλύσεις (EE1043)	0,00	3.249,36
	Εργαστήριο Ακτίνων Χ (EE658)	701,58	12.078,27
	Μοριακής προσομοίωσης και Θερμοδυναμικής Ρευστών και προηγμένων τεχνολογικών υλικών (EE1491)	207.650,00	162.253,10
	<b>ΣΥΝΟΛΟ</b>	<b>219.072,31</b>	<b>187.185,81</b>

## Β.1 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΜΟΥ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΚΑΙ ΥΠΕΡΜΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

### Β.1.1. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ NMR

#### Υπεύθυνοι:

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

[nmrmlab@chem.demokritos.gr](mailto:nmrmlab@chem.demokritos.gr)

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

#### Υπεύθυνοι:

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

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

Το εργαστήριο NMR υγρών δειγμάτων συμπλήρωσε 21 χρόνια λειτουργίας του και 11 χρόνια συνεταγμένης παροχής υπηρεσιών σε εξωτερικούς χρήστες.

Η υποδομή απαρτίζεται από το φασματόμετρο Bruker AVANCE 500 MHz (1ο έτος λειτουργίας 2000) και το φασματόμετρο Bruker AVANCE III 250 MHz (1ο έτος λειτουργίας 1991), και τα περιφερειακά όργανα.

Το εργαστήριο υποστηρίζει τα ερευνητικά προγράμματα κυρίως των Ινστιτούτων Φυσικοχημείας, Βιολογίας και ΡΡΠ αλλά και άλλων Ινστιτούτων (Υλι-



α. AVANCE 500 MHz β. AVANCE III 250 MHz

κών, 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 2011 οι συνολικές εισροές ήταν περίπου 7096 €, (από εσωτερικούς χρήστες 2431 €, από Φορείς Δημοσίου και Ιδιωτικό τομέα, 4665 €), οι δε δαπάνες ανήλθαν στα 8275 € (επισκευές 6950 €, αναλώσιμα και μεταφορικά 662 €, απόδοση στην ΓΕΛ 663 €). Τα έξοδα εξυπηρετήθηκαν και από προηγούμενο ταμειακό υπόλοιπο και εν μέρει από το έργο 1568.

### **B.1.2. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΑΚΤΙΝΩΝ-Χ**

#### **Υπεύθυνη:**

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), ένα δίκτυο 10 Ερευνητικών-Ακαδημαϊκών φορέων, οπότε εγκαταστάθηκαν: (α) πλήρες σύστημα συλλογής κρυσταλλογραφικών δεδομένων μακρομορίων (β) Σύστημα Χαμηλής Θερμοκρασίας, προσφορά του Ελληνικού Ινστιτούτου Pasteur (γ) φασματοπωλόμετρο 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. Η λειτουργία του εργαστηρίου υποστηρίζει ενεργά τη δομική βιολογία στην Ελλάδα, διότι παρέχει τη δυνατότητα συλλογής δεδομένων περιθλάσεως μακρομορίων προς προσδιορισμό της κρυσταλλικής δομής των.

Το εργαστήριο είναι εξοπλισμένο επίσης με Περιθλασίμετρο Ακτίνων-Χ Τεσσάρων-Κύκλων και άλλα περιφερειακά όργανα και εξυπηρετεί ανάγκες του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας.

Για το 2010 οι εισροές ήσαν € 2676.19 και οι δαπάνες σε αναλώσιμα και ανταλλακτικά ανήλθαν σε € 2406.19.



### Β.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.

**Επιτεύγματα:**

Από 1/1/2010 μέχρι 31/12/2010 αναλύθηκαν 75 δείγματα επί πληρωμή και 36 δείγματα χωρίς πληρωμή έναντι άλλων υπηρεσιών από τα Ινστιτούτα του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (ΙΡΡΠ, ΙΕΥ)

Έσοδα.....	2255 ευρώ
Έξοδα λειτουργίας του οργάνου.....	1508 ευρώ
Υπόλοιπο το οποίο μεταφέρεται για το 2011.....	747 ευρώ

**Κοστολόγιο Στοιχειακών Αναλύσεων για το 2010**

1. ΙΦΧ.....	25ευρώ/δείγμα
2. Άλλα Ινστιτούτα του «Δημόκριτου».....	25ευρώ/δείγμα
3. Ακαδημαϊκοί Φορείς.....	30ευρώ/δείγμα
4. Ιδιωτικός τομέας.....	35ευρώ/δείγμα

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

**Μικροσκοπία Ατομικών Δυνάμεων (AFM)**

**Υπεύθυνος:**

Κος Ανδρέας Σαπαλίδης  
asar@chem.demokritos.gr (τηλ. 210 650 3973)

**ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ:** Μικροσκόπιο Ατομικών Δυνάμεων AFM Nanoscope III της εταιρίας DIGITAL INSTRUMENTS

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

**ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ:** ΕΚΕΦΕ «Δ», Φορείς δημοσίου και ιδιωτικός τομέας.

**Κοστολόγηση:** ΧΡΕΩΣΗ ΑΝΑ ΔΕΙΓΜΑ\*

		Μέθοδος <b>contact</b>	Μέθοδος <b>tapping</b>
1	Φορείς δημοσίου	80€	50€
2	Ιδιωτικός φορέας	120€	90€

\*στην κοστολόγηση των δειγμάτων δεν συμπεριλαμβάνεται ο Φ.Π.Α.

### Φασματοσκοπία Υπερύθρου FT-IR

**Υπεύθυνος:**

Δρ. Φώτης Κατσαρός

fkats@chem.demokritos.gr (τηλ. 210 650 3671)

**ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ:** FT-IR Nicolet 6700

**ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ:** Χαρακτηρισμός υλικών με φασματοσκοπία υπερύθρου (FT-IR)

**ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ:** Βιομηχανίες Τσιμέντου, Βιομηχανίες Φαρμάκων, Βιομηχανίες Τροφίμων, Μεταλλουργικές και Εξορυκτικές Βιομηχανίες, Επιχειρήσεις που ασχολούνται με το Περιβάλλον

**Κοστολόγηση:**

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

## Φασματοσκοπία μάζας

**ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ:** GC-MS Micromass Platform II

**ΠΑΡΟΧΗ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ:** Χαρακτηρισμός υλικών με Φασματογράφο Μάζας – Αέριο Χρωματογράφο (GC-MS)

Μελέτη και ταυτοποίηση χημικών ενώσεων

**ΠΑΡΑΓΩΓΙΚΟΙ ΦΟΡΕΙΣ ΠΟΥ ΑΦΟΡΑ:** Βιομηχανίες Τσιμέντου, Βιομηχανίες Φαρμάκων, Βιομηχανίες Τροφίμων, Μεταλλουργικές και Εξορυκτικές Βιομηχανίες, Επιχειρήσεις που ασχολούνται με το Περιβάλλον

### Κοστολόγηση:

	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

## Β.1.5. ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΚΑΙ ΑΛΛΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

### Υπεύθυνη:

Δρ. Κυριακή Παπαδοκωστάκη

krapadok@chem.demokritos.gr Τηλ. 2106503661

**ΔΙΑΘΕΣΙΜΗ ΥΠΟΔΟΜΗ:** Σύστημα Διαμορφούμενης Διαφορικής Θερμιδομετρίας Σαρώσεως (Temperature Modulated DSC, TA Instruments 2920 MDSC)

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

Κατά το έτος 2011 εκτός των δειγμάτων που προέρχονται από το ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», μετρήθηκαν και δείγματα από τη βιομηχανία.



Εισροές 2011: 560 Ευρώ

Διαθέσιμο υπόλοιπο: 726 Ευρώ

**Κοστολόγηση:**

Φορείς Δημοσίου: 30 Ευρώ ανά δείγμα

Ιδιωτικός τομέας: 40 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 φασματομετρο 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  $\text{cm}^{-1}$ , με υψηλή διακριτική ικανότητα.

γ) Ειδικού φίλτρου αποκοπής Rayleigh (Tunable New Excitation filter-NEXT) που επιτρέπει τη λήψη μετρήσεων στην περιοχή μικρών κυματαριθμών (10  $\text{cm}^{-1}$  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 αγοράσθηκε 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

τος (ερευνητής Γ' βαθμίδας του ΙΦΧ) και ο Δρ. Βλάσης Λυκοδήμος (επιστημονικός συνεργάτης, αμοιβεται από το ευρωπαϊκό πρόγραμμα CLEAN WATER ΓΕΛ-1557). Το 2008 εντάχθηκε οργανωτικά στο εργαστήριο παρασκευής και χαρακτηρισμού μοριακών και υπερμοριακών συστημάτων.

Για το 2011, το φασματοόμετρο 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, πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις σε περισσότερα από 250 δείγματα που αφορούν, συνοπτικά, σε

- Νανοδομημένα υλικά νανοκρυσταλλικής τιτανίας σε μορφή σκόνης, υμενίων και νανοσωλήνων για φωτοκαταλυτικές και φωτοηλεκτροχημικές εφαρμογές.
- Μοριακές χρωστικές ουσίες και οι οργανικοί υποκαταστάτες τους.
- Φωτοευαισθητοποιημένες ηλεκτροχημικές κυψελίδες με in situ μετρήσεις του ημιαγωγίμου υποστρώματος, της χρωστικής ουσίας και του ηλεκτρολύτη σε συνθήκες λειτουργίας ως συνάρτηση της εφαρμοζόμενης τάσης.
- Νανοκρυστάλλους ημιαγωγών (κβαντικές τελείες) CdSe/ZnS, PbS, CdS και σύνθετα συστήματα μοριακών συμπλόκων/CdSe/TiO<sub>2</sub>.
- Νανοσωλήνες άνθρακα πριν και μετά την τροποποίηση τους με διάφορες μεθόδους.
- Ταυτοποίηση της ανάπτυξης και ποιότητας νανοσωλήνων άνθρακα σε κεραμικές μεμβράνες.
- Διάφορα νανοκρυσταλλικά υλικά: οξειδία, φερριτές, τιτανίδια, κ.λ.π.

#### Κοστολόγηση:

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

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

Τα έσοδα του εργαστηρίου από παροχή υπηρεσιών σε τρίτους ανέρχονται το 2011 στο ποσό των 1875 €.

### **B.1.7 Υαλουργείο**

**Υπεύθυνος:**

Κος Φερδερίγος Μαρίνος

Τηλ. 210 650 3794

Το Υαλουργείο του ΕΚΕΦΕ «Δ» λειτουργεί υπο την αιγίδα του Ινστιτούτου Φυσικοχημείας και παρέχει υαλουργικές υπηρεσίες στα Ερευνητικά Εργαστήριο όλου του Κέντρου. Το Εργαστήριο Υαλουργείας ανέλαβε και περάτωσε περίπου 200 υαλουργικές εργασίες για το έτος 2011. Λεπτομερής καταγραφή των εργασιών αυτών τηρείται στο Ινστιτούτο.

## Β.2 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ «ΡΑΔΙΟΧΡΟΝΟΛΟΓΗΣΕΙΣ, ΙΣΟΤΟΠΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΕΙΣ ΚΑΙ ΜΕΤΡΗΣΕΙΣ ΡΑΔΟΝΙΟΥ»

### 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 ( $^{18}\text{O}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^3\text{H}$ ,  $^{14}\text{C}$ ,  $^{222}\text{Rn}$  κ.ά.) στον κύκλο του νερού στη φύση. Οι συγκεκριμένες αναλύσεις μπορούν να δώσουν απαντήσεις σε σημαντικά ζητήματα που αφορούν την εφαρμοσμένη έρευνα για την αξιοποίηση και την ορθολογική διαχείριση του υδάτινου δυναμικού όπως:

- Εκτίμηση του υψόμετρου τροφοδοσίας των υπόγειων υδροφόρων οριζόντων
- Ταχύτητα ροής και χρόνος παραμονής του νερού στο υπέδαφος.
- Ποσοστό ανάμιξης διαφορετικών υδροφόρων οριζόντων καθώς και της ανάμιξης 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 υπαλμύρωσης των παράκτιων πηγών.
- Προσδιορισμός της βασικής ροής σε υδρογεωλογικές λεκάνες.
- κ.α.

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

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

## Β.3 ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΠΑΡΟΧΗΣ ΥΠΗΡΕΣΙΩΝ «ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΑΝΑΛΥΣΕΙΣ»

### Αντικείμενο έργου

Το Εργαστήριο Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του ΙΦΧ διαπιστεύθηκε στις 17/7/2009 από τον ΕΣΥΔ (Αριθμ. Πιστ. 580) σύμφωνα με το ISO 17025 και επαναξιολογήθηκε επιτυχώς στις 7/7/2010 και 24/11/2011. Επίσημο πεδίο εφαρμογής της διαπίστευσης είναι ο προσδιορισμός PAHs σε πόσιμα και επιφανειακά νερά με χρήση SPE σε συνδυασμό με HPLC/FL και LC/MS-MS. Οι δραστηριότητες του Εργαστηρίου εστιάζονται στον ακόλουθο τομέα:



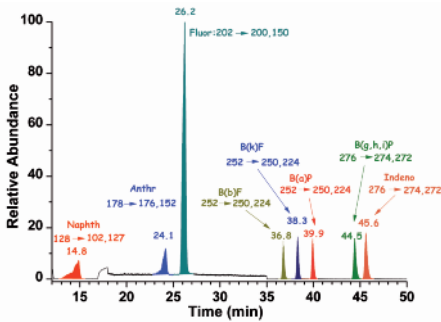
Ανάπτυξη νέων προηγμένων αναλυτικών μεθόδων για τον προσδιορισμό τοξικών οργανικών, σε ίχνη, σε τρόφιμα, νερά και περιβαλλοντικά δείγματα (οργανοχλωριωμένα και οργανοφωσφορικά εντομοκτόνα, τριαζίνες, πολικά ζιζανιοκτόνα, PCBs, PBRBs, χλωροφαινόλες, PAHs, BTX, VOCs, υπολείμματα φαρμακευτικών ουσιών, κυανοτοξίνες, ουσίες που προσδίδουν οσμή και γεύση στο νερό, αλογονούχα οργανικά κλπ).

### Διαθέσιμη Υποδομή

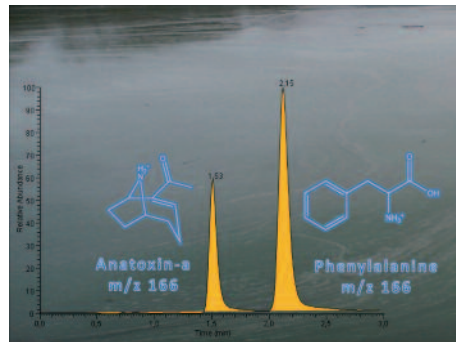
Αέριος Χρωματογράφος με FID, ECD και TCD ανιχνευτές, HPLC με UV-VIS και FLD ανιχνευτές, Αέριος Χρωματογράφος/ Φασματοσκοπία Μάζας (GC/MS), Υγρή Χρωματογραφία/ Φασματοσκοπία Μάζας τεχνολογίας τριπλού τετραπόλου HPLC/MS/MS, Ιοντικός Χρωματογράφος, Πολαρογράφος, TOC, Φασματοφωτόμετρο UV, ορατού, Φασματοφωτόμετρο 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.

## Παροχή Υπηρεσιών/Προϊόντα

- Ανάπτυξη νέας προηγμένης μεθόδου 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 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 για τον προσδιορισμό και την ταυτοποίηση κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά με χρήση SPE σε συνδυασμό με LC/MS-MS
- Ανάπτυξη προηγμένης μεθόδου για τον προσδιορισμό και την ταυτοποίηση ουσιών που προσδίδουν οσμή και γεύση στο νερό με χρήση SPME σε συνδυασμό με GC/MS, όπως geosmin και 2-methylisoborneol.
- Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών και MSc.
- Παροχή Υπηρεσιών προς τρίτους.



LC-MS/MS SRM chromatograms of a standard solution of the eight PAHs ( $100 \mu\text{g L}^{-1}$  for the six target compounds and  $1000 \mu\text{g L}^{-1}$  for Naphth, Fluor).



I.K. Dimitrakopoulos et al. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2010, 397(6) 2245-2252.

## Προσωπικό

**Ερευνητές:** Δρ. Αναστασία Χισκιά, Ερευνήτρια Α', Προϊσταμένη Εργαστηρίου **Συνεργαζόμενοι Ερευνητές Δ' Βαθμίδας:** Δρ. Θεόδωρος Τριάντης, Υπεύθυνος Ποιότητας.

**Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι «Δ»:** Αικατερίνη Τσιμελή, Θ. Φωτίου.

**Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα: Συνεργάτες σε Προγράμματα:** Α. Μούκας, Γ. Δημητρακόπουλος (Άμισθοι υποψήφιοι διδάκτορες), Σ. Ζερβού, Μ. Γραμμένου, Α. Τσόκου (Άμισθες Μεταπτυχιακές Φοιτήτριες).

**Εξωτερικοί συνεργάτες:** Δρ. Τριαντάφυλλος Καλούδης, ΕΥΔΑΠ.

## Προγράμματα – Εισροές από Παροχή Υπηρεσιών

1. «Διενέργεια χημικών αναλύσεων σε δείγματα πόσιμου νερού για τον προσδιορισμό πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στην Δημοτική Επιχείρηση Υδρευσης – Αποχέτευσης Καβάλας (ΔΕΥΑΚ), 1,5 Κ€.
2. «Διενέργεια χημικών αναλύσεων σε δείγματα επιφανειακών και επεξεργασμένων νερών για τον προσδιορισμό μικροκυστινών και ουσιών που προσδίδουν οσμή στο νερό όπως Geosmin και 2-Methylisoborneol» στο πλαίσιο παροχής υπηρεσιών στο Τμήμα Ανάπτυξης Υδάτων του Υπουργείου Γεωργίας και Φυσικών Πόρων της Κύπρου, 4 Κ€.
3. «Προσδιορισμός ουσιών που προκαλούν οσμή στο νερό», Σύμβαση με ΕΥΔΑΠ Α.Ε., 20 Κ€, Επιστ. Υπεύθυνος: Α. Χισκιά.

## Συνεργασίες

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.

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.

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



Δρ. Δ. Τσίπη, Γενικό Χημείο του Κράτους, Ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων.  
Δρ. Α. Τραυλός, ΙΕΥ ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Συνεργασία σε παροχές υπηρεσιών.  
Δρ. Στούμπος, Δρ. Ελευθεριάδης και Δρ. Μάγγος, ΙΠΤΑ ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος, Συνεργασία σε παροχές υπηρεσιών.  
Καθ. Ε. Δασενάκης, Χημικό Τμήμα, Παν. Αθηνών, Εκπόνηση Διδακτορικών Διατριβών.  
Αν. Καθ. Μ. Μουστάκα, Τμήμα Βιολογίας, Παν. Θεσσαλονίκης, Συνεργασία στο πεδίο του προσδιορισμού και της ταυτοποίησης κυανοτοξινών σε νερά.

### **Άλλες Δραστηριότητες**

Προετοιμασία του Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων για την διαπίστευση του στον προσδιορισμό κυανοτοξινών σε πόσιμα και επιφανειακά νερά με χρήση SPE σε συνδυασμό με LC/MS-MS.

Η Δρ. Α. Χισκιά κατά το έτος 2011 διετέλεσε Προϊσταμένη του Διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

Ο Δρ. Θ. Τριάντης κατά το έτος 2011 διετέλεσε Υπεύθυνος Ποιότητας του Διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».

Η κ. Τιμελή, MSc, κατά το έτος 2011 διετέλεσε αναλύτρια του διαπιστευμένου Εργαστηρίου Περιβαλλοντικών Αναλύσεων του Ινστ. Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ».





# *Απολογισμός 2011*



**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) στη παρακολούθηση εξειδικευμένων μεταπτυχιακών μαθημάτων που παρέχονται στο Ινστιτούτο, το Κέντρο και σε προγράμματα μεταπτυχιακών σπουδών ΑΕΙ
- (γ) στην εκπαίδευση μεταδιδακτορικών συνεργατών
- (δ) στην εκπόνηση διπλωματικών και πτυχιακών εργασιών προπτυχιακών φοιτητών
- (ε) στην οργάνωση σεμιναρίων με ομιλητές από την Ελλάδα και το εξωτερικό
- (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 Χη-

μείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

(γ) «Μεταπτυχιακό Ωκεανογραφίας», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

(δ) «Αναλυτικές μέθοδοι με εφαρμογή στην Περιβαλλοντική Χημεία», 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. Στη διάρκεια του 2010 ολοκληρώθηκαν επτά (4) διδακτορικές διατριβές, πέντε (5) μεταπτυχιακές εργασίες, τρεις (3) πτυχιακές εργασίες και επτά (7) πρακτικές ασκήσεις. Αναλυτικά:

### Εκπαιδευτικές δραστηριότητες που ολοκληρώθηκαν το 2011

#### Διδακτορικές διατριβές (5)

1. Χ. Αγγελίδου «Σύνθεση, χαρακτηρισμός και ιδιότητες κυκλοδεξτρινών με πιθανές βιολογικές εφαρμογές», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Μάιος 2011.
2. Α. Ζάρας. «Θεωρητική Κινητική Μελέτη Αντιδράσεων Ατόμων Cl και Ριζών OH με Κορεσμένες Πτητικές Οργανικές Ενώσεις, Παρουσία Συσσωματωμάτων Νερού», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών και Τεχνολογικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Φεβρουάριος 2011.
3. Α. Τιμελή, «Ανάπτυξη Προηγμένων Αναλυτικών Μεθόδων για τον Προσδιορισμό Πολυχλωριωμένων Διφαινυλίων, Αλογονομένων Υδρογονανθρά-

κων, Πολυκυκλικών Αρωματικών Υδρογονανθράκων και Κυανοτοξινών», Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας ΙΙΙ: Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ, 2011.

4. Ν. Κούβαρης, «Μελέτη συγχρονισμού σε διακριτά βιολογικά συστήματα», Γενικό Τμήμα, Πολυτεχνική Σχολή, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Ιούνιος 2011.
5. Nuno M. F. Garrido, «Prediction of Industrially Relevant Solvation and Partitioning Properties from Molecular Simulation», Laboratory of Separation and Reaction Engineering, University of Porto, Portugal, September 2011.

### Μεταπτυχιακές εργασίες (5)

1. Μ. Αγαθοκλέους, «Θερμοευαίσθητα υπερδιακλαδισμένα πολυμερή: μελέτη παραγώγων υπερδιακλαδισμένης πολυ(αιθυλενιμίνης)» Διατμηματικό πρόγραμμα μεταπτυχιακών σπουδών «Επιστήμη και τεχνολογία υλικών», Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούλιος 2011.
2. Ν. Διαμαντώνης, «Μοντελοποίηση θερμοδυναμικών ιδιοτήτων Διοξειδίου του Άνθρακα και Μιγμάτων του με Άλλα Αέρια», Διατμηματικό Πρόγραμμα στην Υπολογιστική Μηχανική, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Φεβρουάριος 2011.
3. Ε. Κούσουλας, «Νανοδομημένοι καταλύτες τιτανίας με φωτοκαταλυτική και υπερυδρόφιλη δράση στο ορατό φως», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών «Κατάλυση και Προστασία Περιβάλλοντος», Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Οκτώβριος 2011.
4. Χ. Τσιαμαντάς, «Εξετάζοντας το μηχανισμό της Αγγειογένεσης μέσω του σχεδιασμού και της σύνθεσης αναστολέων του VEGFR-2 για τη θεραπεία του καρκίνου», Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών «Νεοπλασματική Νόσος στον Άνθρωπο: Σύγχρονη Κλινικοπαθολογοανατομική Προσέγγιση και Έρευνα», Τμήμα Παθολογικής Ανατομικής, Ιατρική Σχολή, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αύγουστος 2011.
5. Χ. Τσονάκη, «Θεωρητική Μελέτη Δομής και Σταθερότητας Προϊόντων Προσθήκης Ατόμων Αλογόνων σε Αλκυλαλογονίδια», Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Δεκέμβριος 2011.



### Διπλωματικές εργασίες (3)

1. Ι. Καπογιάννη, «Ευαισθητοποίηση διοξειδίου του τιτανίου με κβαντικές τελείες PbS», Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ιούλιος 2011.
2. Λ. Πήλιουρης, «Βελτιστοποίηση φυσικοχημικών ιδιοτήτων αποστάγματος πετρελαίου με χρήση πρόσθετου πολυμερούς», Τμήμα Τεχνολογιών Αντιρρύπανσης, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, ΤΕΙ Δυτικής Μακεδονίας, 2011.
3. Ν. Mantes, “Matrici di silicone modificato con polietilenglicole: caratterizzazione e rilascio di pharmacy”, Università di Pavia, 2011.

### Πρακτικές ασκήσεις (7)

1. Π. Ζούπας, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
2. Τ. Καββαθά, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
3. Δ. Καλοφωλιάς, Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Κρήτης.
4. Λ. Πήλιουρης, Τμήμα Τεχνολογιών Αντιρρύπανσης, Σχολή Τεχνολογικών Εφαρμογών, ΤΕΙ Δυτικής Μακεδονίας, 2011.
5. Β. Νικολάου, Τμήμα Εκπαιδευτικών Ηλεκτρολογίας, Ανώτατη Σχολή Παιδαγωγικής & Τεχνολογικής Εκπαίδευσης (Α.Σ.ΠΑΙ.Τ.Ε.).
6. Ι. Πετσαγκουράκης, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο.
7. Ο. Τζιάλλα, Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Σχολή Επιστημών και Τεχνολογιών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων



## Σεμινάρια Ινστιτούτου Φυσικοχημείας (Ιανουάριος 2011 – Δεκέμβριος 2011)

Ημερομηνία	Ομιλητής	Τίτλος
11 / 03 / 2011 11:00	Δρ. Αριστοτέλης Μ. Ζάρας Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δ"	Θεωρητική Μελέτη της Κινητικής των Αντιδράσεων Ατόμων Cl και Ριζών OH με Κορεσμένες Πηπτικές Οργανικές Ενώσεις, παρουσία συσσωματωμάτων νερού
15 / 04 / 2011 13:00	Καθηγ. William J. Koros, Georgia Institute of Technology, School of Chemical & Biomolecular Engineering, Atlanta, Georgia, USA	Carbon Molecular Sieve Membranes: Their Special Nature and Applicability for Large Scale Challenging Gas Separations
26 / 05 / 2011 11:00	Δρ. Π. Ε. Κεϊβανίδης, Ινστιτούτο Τεχνολογίας της Ιταλίας, Κέντρο Νανοεπιστήμης και Τεχνολογίας, Μιλάνο.	Active layer microstructure of organic photovoltaics devices: Implications of blend film morphology on device performance
27 / 05 / 2011 12:00	Δρ. Νικόλαος Κούβαρης, Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δ"	Μελέτη συγχρονισμού σε διακριτά Βιολογικά συστήματα
23 / 06 / 2011 12:00	Δρ. James Birtley, (επιστημονικός συνεργάτης Marie-Curie του προγράμματος TOPCRYST), Ινστιτούτο Φυσικοχημείας, ΕΚΕΦΕ "Δ"	Crystal structure of the human endoplasmic reticulum aminopeptidase 2

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



# *Απολογισμός 2011*



**Δ. ΠΡΟΣΩΠΙΚΟ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ  
ΦΥΣΙΚΟΧΗΜΕΙΑΣ**



## Προσωπικό Ινστιτούτου Φυσικοχημείας users@chem.demokritos.gr

### Ερευνητές

Όνοματεπώνυμο	Βαθμίδα	Ειδικότητα	τηλέφωνο / e-mail
1. Δρ. Βουρλούμης Διονύσιος	Α΄	Χημικός	210 650 3624-3795 vourloumis@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	Β΄	Χημικός	210 650 3671 fkats@chem.demokritos.gr
5. Δρ. Κοντός Αθανάσιος	Γ΄	Φυσικός	210 650 3632 – 3668 - 3640 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. Πιστόλης Γεώργιος	Α΄	Χημικός	210 650 3637-3422 pitsinos@chem.demokritos.gr
13. Δρ. Πιτσινός Εμμανουήλ	Α΄	Χημικός	210 650 3689-3654 pistolis@chem.demokritos.gr
14. Δρ. Προβατά Αστέρω	Α΄	Φυσικός	210 650 3964 aprovata@limnos.chem.demokritos.gr
15. Δρ. Ρωμανός Γεώργιος	Β΄	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 Ωριαιοζήλη	Β΄	Χημικός	210 650 3616-3638 zili@chem.demokritos.gr

Όνοματεπώνυμο	Βαθμίδα	Ειδικότητα	τηλέφωνο / e-mail
19. Δρ. Στεριώτης Θεόδωρος	Α΄	Χημικός	210 650 3614-3636 tster@chem.demokritos.gr
20. Δρ. Στεφανόπουλος Κων/νος	Β΄	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)

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	Τηλέφωνο
1. Δρ. Αρκάς Μιχάλης	210 650 3669 - 3638	210 650 3669 - 3638
2. Δρ. Αθανασέκου Χρυσούλα	210 650 -3981, 3973	210 650 -3981, 3973
3. Δρ. Βέργαδου Νίκη	210 650 -3960, 3963	210 650 -3960, 3963
4. Δρ. Βιδάλη Βερονίκη	210 650 -3654, 3789	210 650 -3654, 3789
5. Δρ. Γκότζιας Αναστάσιος	210 650 -3636, 3614	210 650 -3636, 3614
6. Δρ. Κακιζής Νικόλαος	210 650 -3973, 3977	210 650 -3973, 3977
7. Δρ. Παπαγεωργίου Σέργιος	210 650 -3636,3614	210 650 -3636,3614
8. Πιλάτος Γιώργος	210 650 -3973	210 650 -3973
9. Δρ. Σαπαλίδης Ανδρέας	210 650 -3973	210 650 -3973
10. Δρ. Φάββας Ευάγγελος	210 650 -3636, 3614	210 650 -3636, 3614

### Διοικητικό Προσωπικό

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	e-mail
1. Δουβαρά Βασιλική - Γραμματεία	210 650 3653	vdouvara@chem.demokritos.gr



## Τεχνικό Προσωπικό

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	e-mail
1. Γιαννακοπούλου Ελίνα	210 650-3646	elyan@chem.demokritos.gr

## Συνεργαζόμενοι Ερευνητές – με προσόντα ερευνητή Δ' Βαθμίδας

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	e-mail
1. Δρ. Βουγιουκαλάκης Γεώργιος	210 6503646, 3634	vougouk@chem.demokritos.gr
2. Δρ. Θεοδόσιου Θεοδόσης	210 650 3669	theo@chem.demokritos.gr
3. Δρ. Καρακώστας Νικόλαος	210 6503637, 3422	nkarakos@chem.demokritos.gr
4. Δρ. Κατσαλούλης Παναγιώτης	210650 3964	pkatsaloulis@chem.demokritos.gr
5. Δρ. Σούλας Δημήτριος	210650 3639	dsoulas@chem.demokritos.gr
6. Δρ. Τριάντης Θεόδωρος	210 6503646, 3643	triantis@chem.demokritos.gr

## Μεταπτυχιακοί Υπότροφοι Δημοκρίτου

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	e-mail
1. Αγαθοκλέους Μαρία		maria_chem@chem.demokritos.gr
2. Αθηναίος Νικόλαος	210 650 3789	chemnik@hotmail.com
3. Ανδρουλάκη Ελένη	210 650 3961	eleandr@chem.demokritos.gr
4. Βαενάς Ναούμης	210 650 3632	naoumisvaenas@chem.demokritos.gr
5. Γασσαφάκη Δήμητρα	210 650 3636	g.dimmy@chem.demokritos.gr
6. Κάπελλα Άννα	210 650 3789-3611	calimdil@hotmail.com
7. Καλούδη – Χατζέα Αντωνία	210 650 3637	kaloudi@chem.demokritos.gr
8. Κούβαρης Νίκος	210 650 3964	nkoub@chem.demokritos.gr
9. Μανουηλίδου Μαλαματένια	210 650 3617, 3628	mmanouil@chem.demokritos.gr
10. Μουστάκας Νικόλαος	210 650 3640	nmoustakas@chem.demokritos.gr

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο	e-mail
11. Παναγάκου Ευαγγελία	210 650 3964	epanagakou@chem.demokritos.gr
12. Παπαδοπούλου Άννα	210 650 3611- 3795	apapadopoulou@chem.demokritos.gr
13. Περδικάκη Άννα	210 650 3973	aperdikaki@chem.demokritos.gr
14. Πάνου Αθανασία	210 650 3639	athpanou@chem.demokritos.gr
15. Πινακά Αφροδίτη	210 650 3646	afropin@chem.demokritos.gr
16. Τσονάκη Χριστίνα	210 650 3623, 3671	cris@chem.demokritos.gr
17. Φωτίου Θεοδώρα	210 650 3633	thedorafwtiou@hotmail.com

## Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες σε Προγράμματα

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο
1. Δρ. Βερμίσσγλου Ελένη	210 6503981
2. Dr. Birtley James	210 650 3617 - 3628
3. Δρ. Cottin Thomas	210 650 3611
4. Δρ. Ζαχαρόπουλος Νικόλαος	210 650 3961
5. Δρ. Καρανικολός Γεώργιος	210 650 3973
6. Δρ. Κατσαρού Μαρία	210 650 3611, 3795
7. Δρ. Κατσούλης Ιωάννης	210 650 3611
8. Δρ. Κυθραιώτη Γεωργία	210 650 3611, 3795
9. Δρ Λαμπρόπουλος Αναστ.	210 6503973
10. Δρ. Λυκοδήμος Βλάσσης	210 650 3632 - 3640
11. Δρ. Μακροδημήτρη Ζωή	210 650 3961
12. Δρ. Μπουλουγούρης Γεώργιος	210 650 3963
13. Dr. Nolan John	210 650 3973
14. Δρ. Οικονόμου Θωμάς *	210 650 3964
15. Δρ. Παπακυριακού Αθανάσιος	210 650 3611, 3795
16. Δρ. Σπυριούνη Θεοδώρα	210 650 3961 -3963
17. Δρ. Σταθάκης Χρήστος	210 650 3611



Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο
18. Δρ. Στεργιόπουλος Θωμάς	210 650 3632
19. Δρ. Τζιβελέκα Αικατερίνη	210 650 3638, 3669
20. Δρ. Τσαγκάρης Δημήτρης	210 650 3963
21. Δρ. Λιθοξόος Γεώργιος	210 650 3960
22. Μακροδημήτρη Ζωή	210 650 3960

\* Άμισθος Συνεργάτης

### Υποψήφιοι Διδάκτορες σε Προγράμματα

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο
1. Salazar Baquero Eduard	210 650 3617, 3628
2. Gonzalves Ricardo	210 650 3617, 3628
3. Manfrin Alberto	210 650 3617, 3628
4. Αγγελίδου Χρυσή	210 650 3617, 3628
5. Αλέξάκη Νίκη	210 650 3632
6. Αναγνώστου Σοφία	210 650 3959
7. Αναστασοπούλου Πανούλα	210 650 3611, 3795
8. Βεζύρη Χαριτωμένη	210 650 3973
9. Δημητρακόπουλος Ιωάννης	
10. Διαμαντώνης Νικόλαος	210 650 3963
11. Ελευθερίου Κλεοπάτρα	210 650 3638
12. Ζερβού Σεβαστή	210 650 3633
13. Ηλιόπουλος Νίκος	210 650 3611
14. Καρατζής Παναγιώτης	
15. Κατσανάκη Αντιγόνη	210 650 3632
16. Κολτσιδα Κων/να	210 650 3611
17. Κονιδάρη Μαύρα	210 650 3639



Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο
18. Κόντη Γεωργία	210 650 3632
19. Κοριατοπούλου Κων/να	210 650 3422
20. Λαμπροπούλου Μαρία	210 650 3617, 3628
21. Μανώλη Κυριακή	210 650 3639
22. Μαυρίδης Ιωάννης	210 650 3611
23. Ματιάτος Ιωάννης	210 650 3969
24. Μησσοπούλου Κορνηλία	210 650 3654 - 3789
25. Ντεζέ Ευαγγελία	210 650 3636
26. Στεριώτη Νικολέτα	210 650 3616
27. Τιμελή Αικατερίνη	210 650 3633
28. Τσιαμαντάς Χρήστος	
29. Τάτσιου Παναγιώτα	210 650 3611
30. Τριανταφυλλάκη Στέλλα	210 650 3633
31. Φωτιάδου Κατερίνα	210 650 3617, 3628
32. Χασίμη Αλμπάνα	210 650 3639
33. Χριστοδουλέας Διονύσιος	210 650 3646

## Συνεργάτες σε Προγράμματα

Όνοματεπώνυμο	Ειδικότητα	τηλέφωνο	e-mail
1. Αρνίδη Ελένη		210 650 3959, 3957	
2. Γεωργάκη Χριστίνα		210 650 3611, 3795	
3. Καλοκαιρέτης Φίλιππος	Διαχειριστής	210 650 3648	kalos@chem.demokritos.gr
4. Πραγκασιτής Απόστολος	Δικτυακός Υπεύθυνος	210 650 3656	admin@chem.demokritos.gr
5. Τσούκληρης Δημήτριος		210 650 3635	
6. Φερδερίγος Μαρίνος	Υαλουργός	210 650 3794	



## Εξωτερικοί Συνεργάτες

Όνοματεπώνυμο	Τηλέφωνο
1. Θεοδώρου Δώρος	210 772 3157
2. Καλούδης Τριαντάφυλλος	210 650 3633
3. Κανιάς Γεώργιος*	210 650 3665
4. Κατσαρός Νικόλαος *	210 650 3665
5. Κουλαδούρος Ηλίας	210 650 3654
6. Μούρτζης Νικόλαος	210 650 3617, 3628
7. Οξενκιουν Κλάους *	210 650 3665
8. Παλαιός Κων/νος *	210 650 3666
9. Παπακωνσταντίνου Ηλίας *	210 650 3642
10. Πετρόπουλος Ιωάννης*	210 650 3787
11. Φιλιπόπουλος Αθανάσιος	210 650 3632
12. Χατζούδης Ευγένειος*	210 650 3649

\* Συνταξιούχος Ερευνητής του ΙΦΧ